

amsmath

Vorwort

Die vorliegende Dokumentation beschreibt die aktuelle Version von ENVI-met inklusive der vorgenommenen Änderungen.

(Einzelne Abschnitte können hierbei noch von der aktuellen Version abweichen)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Entwicklung numerischer Simulationsmodelle in den letzten Jahren . . .	2
1.2	Zielsetzung dieser Arbeit	4
1.3	Aufbau der Arbeit	5
1.4	Allgemeine redaktionelle Anmerkungen	5
2	Das ENVI-met Modellkonzept	7
2.1	Aufbau des Modells	7
2.1.1	Berücksichtigung großskaliger Prozesse	8
2.1.2	Berücksichtigung subskaliger Prozesse	8
2.2	Gültigkeitsbereich des Modells	9
2.3	Behandlung der räumlichen Randbedingungen	9
2.3.1	Einströmränder	9
2.3.2	Ausströmränder	10
2.3.3	Modelloberrand	10
2.3.4	Bodengrenzfläche und Gebäudewände	11
2.4	Initialisierung des Modells	11
2.5	Simulationsablauf und Ergebnisse	11
3	Das Atmosphärenmodell	13
3.1	Bestimmung des Strömungsfeldes	13
3.1.1	Die Grundgleichungen	13
3.1.2	Die Boussinesq-Approximation	14
3.1.3	Verfahren zur Lösung der Bewegungsgleichungen	15
3.1.4	Die verkürzten Bewegungsgleichungen	16
3.1.5	Randbedingungen des Strömungsmodells	17
3.1.5.1	Einströmränder	17
3.1.5.2	Ausströmränder	18
3.1.5.3	Bodengrenzfläche und Hindernisflächen	21
3.1.5.4	Modelloberrand	21
3.1.6	Initialisierung	22
3.1.7	Prognose des Windfeldes im Gesamtmodell	24
3.2	Das Temperatur- und Feuchtefeld	24
3.2.1	Die Grundgleichungen	24
3.2.2	Randbedingungen des Temperatur- und Feuchtefeldes	25

3.2.2.1	Einströmränder	25
3.2.2.2	Ausströmränder	26
3.2.2.3	Bodengrenzfläche und Hinderniswände	26
3.2.2.4	Modelloberrand	27
3.2.3	Initialisierung	28
3.3	Modellierung der turbulenten Austauschprozesse in der Atmosphäre .	29
3.3.1	Turbulenzparameterisierung im mikroskaligen Modell	29
3.3.1.1	Lokale Schließungen erster Ordnung (Mischungswegansatz)	30
3.3.1.2	Lokale Schließungen zweiter und höherer Ordnung	30
3.3.1.3	Nicht-lokale Schließungen erster und höherer Ordnung	31
3.3.1.4	Lokale Schließungen 1.5 Ordnung (E- ϵ Ansatz) . .	31
3.3.2	Die prognostischen Gleichungen zur Beschreibung der lokalen Turbulenz	31
3.3.2.1	System I: Prognose der lokalen turbulenten Energie (E)	32
3.3.2.2	System II: Prognose der lokalen Energiedissipation (ϵ)	34
3.3.3	Probleme bei der Anwendung des Turbulenzmodells	35
3.3.4	Bestimmung der Austauschkoeffizienten im turbulenten Luftkörper	38
3.3.5	Bestimmung der Austauschkoeffizienten an festen Oberflächen	40
3.3.5.1	Austauschkoeffizienten bei erzwungener Konvektion	40
3.3.5.2	Austauschkoeffizienten bei molekularem Austausch	43
3.3.5.3	Austauschkoeffizienten bei freier Konvektion	43
3.3.6	Randbedingungen des Turbulenzmodells	43
3.3.6.1	Einströmränder	43
3.3.6.2	Ausströmränder	44
3.3.6.3	Bodengrenzfläche und Hinderniswände	45
3.3.6.4	Modelloberrand	46
3.3.7	Initialisierung	47
3.3.8	Turbulenzprognose in der Hauptzeitschleife	47
3.3.9	Besonderheiten des Turbulenzmodells bei Schwachwindlagen	48
3.4	Die langwelligen und kurzwelligen Strahlungsflüsse	48
3.4.1	Langwellige Strahlung	48
3.4.1.1	Bestimmung der Erwärmung/ Abkühlung durch langwellige Strahlungsdivergenz	50
3.4.2	Kurzwellige Strahlung	52

3.4.3	Modifikation der Strahlung durch Vegetation	54
3.4.4	Modifikation der Strahlung durch Gebäude	56
3.5	Bestimmen der Gitterweite im eindimensionalen Randmodell	57
4	Das Boden- und Grenzflächenmodell	59
4.1	Hydrologischer Komplex des Bodenmodells	59
4.1.1	Die Grundgleichungen	60
4.1.2	Randbedingungen des hydrologischen Teilmodells	62
4.1.3	Initialisierung	63
4.2	Thermodynamischer Komplex des Bodenmodells	63
4.2.1	Die Grundgleichungen	63
4.2.2	Randbedingungen des thermodynamischen Komplexes	64
4.2.3	Initialisierung	65
4.3	Behandlung von Wasserflächen	65
4.4	Bestimmung von Temperatur und Feuchte an Boden- und Gebäudeoberflächen	66
4.4.1	Temperatur der Bodenoberfläche	66
4.4.2	Temperatur der Dach- und Wandflächen	68
4.4.3	Feuchte an der Bodenoberfläche	70
4.4.4	Bestimmung der Feuchte an den Dach- und Wandflächen der Gebäude	71
4.4.5	Bestimmung der Oberflächentemperatur von Gewässern	71
5	Das Vegetationsmodell	73
5.1	Vegetationsparameterisierung im mikroskaligen Modell	73
5.2	Bestimmung der turbulenten Flüsse an der Blattoberfläche	74
5.2.1	Turbulenter Impulsaustausch	74
5.2.2	Turbulenter Austausch sensibler Wärme	74
5.2.3	Turbulenter Wasserdampffluß	75
5.2.3.1	Einfluß der Strahlung auf r_s	77
5.2.3.2	Einfluß der Jahreszeit auf r_s	77
5.2.4	Einfluß des pflanzenverfügbaren Bodenwassers auf r_s	77
5.2.5	Sonderfall Dachbegrünung	78
5.2.5.1	Verteilung des flüssigen Wassers auf der Pflanze	78
5.3	Bestimmung der Blattoberflächentemperatur	79
5.4	Koppelung mit dem Atmosphärenmodell	80
5.5	Koppelung mit dem Bodenmodell	80

6	Numerische Verfahren in ENVI-met	81
6.1	Diskretisierung der Differentialgleichungen	81
6.1.1	Aufbau des Rechengitters und Bezeichnungen im Gitter	82
6.1.1.1	Struktur des Rechengitters	82
6.1.1.2	Definition der Hinderniskenngrößen	83
6.1.1.3	Definition der Vegetationskenngrößen	84
6.1.1.4	Bestimmung der Zellgrößen	85
6.1.2	Diskretisierung der Zeitableitung	86
6.1.3	Diskretisierung des Diffusionsterms	86
6.1.4	Diskretisierung des Advektionsterms	88
6.1.5	Diskretisierung der übrigen Terme	90
6.1.5.1	Bewegungsgleichungen	91
6.1.5.2	Turbulenzgleichungen	91
6.1.6	Besonderheiten im Rahmen des Bodenmodells	93
6.2	Numerische Lösung der prognostischen Gleichungen	94
6.2.1	Faktorisierung der Gleichungen	94
6.2.2	Formulierung der Gleichungen im ADI-Verfahren	96
6.2.3	Korrektur der Advektionsgleichung im nicht-divergenzfreien Windfeld	98
6.2.4	Formulierung der Randbedingungen	99
6.2.5	Lösung des Gleichungssystem durch Matrixinversion	100
6.3	Lösung der Filterbedingung des Strömungsmodells	103
6.3.1	Bestimmung des Stördruckes p'	104
6.3.1.1	Diskretisierung der Stördruckgleichungen mit dem SOR-Verfahren	104
6.3.1.2	Lösung der Poisson-Gleichung	105
6.3.1.3	Initialisierung und Randbedingungen des Stördruckfeldes	106
6.3.2	Anpassen des Windfeldes an das Druckfeld	109
6.3.3	Ablauf der Windfeldberechnung	110
6.4	Wahl der Zeitschritte im Modell	111
6.4.1	Zeitschritte bei der Turbulenzprognose	111
6.4.2	Zeitschritte bei der Windfeldprognose	112

7	Überblick über den Ablauf einer Simulation	113
7.1	Modulstruktur	113
7.2	Kurzbeschreibung der einzelnen Schritte	114
7.2.1	Allgemeine Vorbereitungen	114
7.2.2	Initialisierung	114
7.2.3	Hauptprognose	115
7.2.4	Ende der Simulation	116
8	Zusammenfassung und Schlußbemerkungen	117

Abbildungsverzeichnis

1	Schematischer Aufbau des Modells ENVI-met	7
2	Definition der Prognosegrößen an Wänden	46
3	Vertikale Integration der Wasserdampfmenge zur Bestimmung der langwelligen Strahlungsdivergenz	52
4	Lage und Aufbau des Hilfgitters bei nicht-zentrierten Prognosegrößen	82
5	Differenzenbildung neben Hinderniszellen	84

Tabellenverzeichnis

3	Aufbau des vertikalen Gitters im Bodenmodell	59
4	Hydrologische und thermodynamische Parameter verschiedener natürlicher Böden und Versiegelungsmaterialien.	61
5	Wärmedurchgangskoeffizienten k für verschiedene Materialien	71
6	Zusammenstellung verschiedener im Modell verwendeter Vegetationstypen	74
7	Albedo und minimaler Stomatawiderstand verschiedener Vegetationstypen	77

Symbolverzeichnis

Das Symbolverzeichnis enthält nur die wichtigsten Symbole mit übergeordneter Bedeutung. Die Bedeutung aller übrigen Symbole geht aus dem jeweiligen Kontext eindeutig hervor.

a) Lateinische Buchstaben

Lateinische Buchstaben		
Symbol	Einheit	Bedeutung
α_f	-	Albedo der Blattoberfläche
α_s	-	Albedo der Bodenoberfläche
α_w	-	Albedo der Wandflächen
C	-	Courant-Zahl
c_{1e}, c_{2e}, c_{3e}	-	Konstanten für das Turbulenzmodell
$c_{\mu e}$	-	Konstante für das Turbulenzmodell (=0.09) ($c_{1e} = 1.44, c_{2e} = 1.92, c_{3e} = 1.44$)
$c_{d,p}$	1	Dragkoeffizient an Pflanzen
$c_{d,N}$	1	Dragkoeffizient an Oberflächen (neutrale Schichtung)
c_p	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	spezifische Wärme der Luft bei konst. Druck (=1847)
$D_{\eta(s)}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	hydrologische Diffusität des Bodens (s: bei Sättigung)
E	$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$	turbulente kinetische Energie
e	hPa	Dampfdruck
f	s^{-1}	Coriolis-Parameter
$f_{rel,s}$	%	relative Feuchte des Bodens
f_{rel}	%	relative Feuchte der Luft
f_w	-	Anteil der feuchten Blattoberflächen
f_{wilt}	-	Bodenfeuchtefaktor für Vegetationsmodell
f_s	-	jahreszeitlicher Faktor für Vegetationsmodell
g	ms^{-2}	Erdbeschleunigung (=9.81)
G	W m^{-2}	Bodenwärmestrom an der Bodenoberfläche
H	m	Vertikale Ausdehnung des Randmodells in Metern
H	W m^{-2}	sensibler Wärmestrom an der Bodenoberfläche
H_f	W m^{-2}	sensibler Wärmestrom an der Blattoberfläche
H_w	W m^{-2}	sensibler Wärmestrom an der Wand- oder Dachfläche
h	Grad	Höhenwinkel der Sonne
i, j, k	-	Kartesische Koordinaten in Gitterpunkten
I, J, K	-	Ausdehnung des Kernmodellgebietes in Gitterpunkten
$J_{f, evap}$	ms^{-1}	Feuchtefluß an der Blattoberfläche durch Evaporation
$J_{f, trans}$	ms^{-1}	Feuchtefluß an der Blattoberfläche durch Transpiration
$J_{h,0}$	Kms^{-1}	turbulenter Wärmestrom an der Bodengrenzfläche
$J_{v,0}$	ms^{-1}	turbulenter Wasserdampfstrom an der Bodengrenzfläche
$j_{v,0}^{es}$	$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$	Summe der Wasserflüsse an der Bodengrenzfläche
$j_{w(s)}^s$	$\text{kg s}^{-1} \text{m}^{-2}$	Wasserfluß im Boden (s: bei Sättigung)
j_h^s	W m^{-2}	molekularer Wärmefluß im Boden
k	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$	Wärmedurchgangskoeffizient der Wand oder des Daches
K_h^0	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Austauschkoeffizient Wärme an der Bodenoberfläche
K_v^0	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Austauschkoeffizient Wasserdampf an der Bodenoberfläche
K_h^w	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Austauschkoeffizient Wärme an der Wand- oder Dachfläche
K_ϕ	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	turbulenter Austauschkoeffizient für ϕ
$K_{\eta(s)}$	ms^{-1}	hydrologische Leitfähigkeit des Bodens (s: bei Sättigung)
L	J kg^{-1}	spezifische Verdampfungswärme von Wasser
LAD	$\text{m}^2 \text{m}^{-3}$	Blattflächendichte (Leaf Area Density)
LAI	$\text{m}^3 \text{m}^{-3}$	Blattflächenindex
LE	W m^{-2}	latenter Wärmestrom an der Bodenoberfläche
LE _f	W m^{-2}	latenter Wärmestrom an der Blattoberfläche
(Fortsetzung nächste Seite)		

Fortsetzung lateinische Buchstaben		
Symbol	Einheit	Bedeutung
n	m	in den Boden gerichtete Normalkoordinate ($n = -z$)
N_{ges}	1/8	Gesambewölkungsgrad
N_t, N_m, N_h	1/8	Bewölkungsgrad mit tiefen, mittlen und hohen Wolken
P_{\downarrow}	$\text{kgm}^{-2}\text{s}^{-1}$	von oben abtropfendes Wasser
P_{\uparrow}	$\text{kgm}^{-2}\text{s}^{-1}$	nach unten abtropfendes Wasser
p'	Pa	Dynamischer Stördruck
p_0	hPa	Luftdruck im Normalzustand (=1013)
PMV	-	Predicted-Mean-Vote Wert
Q_w	Wm^{-2}	Wärmestrom durch Wand oder Dach
Q_{ϕ}	$[\phi]\text{s}^{-1}$	lokale Quelle einer Größe ϕ
$Q_{\eta,0}$	s^{-1}	Quellterm für Bodenhydrologie
q	kgkg^{-1}	spezifische Feuchte der Luft
q^*	kgkg^{-1}	spezifische Feuchte bei Sättigung
q_0	kgkg^{-1}	spezifische Feuchte der Bodenoberfläche
q_H	kgkg^{-1}	spezifische Feuchte am Modelloberrand $z = H$
q_w	kgkg^{-1}	spezifische Feuchte der Wand- Dachfläche
$R_{kw,dif}^{(0)}$	Wm^{-2}	kurzwellige diffuse Strahlung (0: am Modelloberrand)
$R_{kw,dir}^{(0)}$	Wm^{-2}	kurzwellige direkte Strahlung (0: am Modelloberrand)
$R_{lw}^{(0)}$	Wm^{-2}	abwärtsgerichteter lw. Strahlungsfluß (0: am Modelloberrand)
$R_{lw}^{(\leftrightarrow)}$	Wm^{-2}	horizontaler langwelliger Strahlungsfluß
R_{lw}^{\uparrow}	Wm^{-2}	aufwärtsgerichteter langwelliger Strahlungsfluß
$R_{kw,net}$	Wm^{-2}	kurzwellige Nettostrahlung
$R_{lw,net}$	Wm^{-2}	langwellige Nettostrahlung
R_f	$\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$	Gaskonstante trockene Luft (=287)
r_a	sm^{-1}	aerodynamischer Transferwiderstand an der Blattoberfläche
r_s	sm^{-1}	stomatärer Transferwiderstand an der Blattoberfläche
$r_{s,min}$	sm^{-1}	pflanzenabh. minimaler stomatärer Transferwiderstand
RAD	m^2m^{-3}	Wurzeloberflächendichte
RAI	m^3m^{-3}	Wurzeloberflächenindex
Ri	1	Richardson-Zahl
Ri_b	1	Bulk-Richardson-Zahl
S_{η}	s^{-1}	lokaler Wassersenkterm durch Wurzeln im Boden
S_u, S_v, S_w	ms^{-2}	Lokale Senkterme für Impuls
T	K	Absolute Temperatur
$T_{a,i}$	K	Lufttemperatur im Inneren der Häuser
T_{mrt}	K	mittlere Strahlungstemperatur
$T_{start,s}$	K	Starttemperatur Boden und Bodenoberfläche
T_0	K	Temperatur der Bodenoberfläche
T_f	K	Blatttemperatur
T_w	K	Temperatur der Wand- oder Dachfläche
t	s	Zeit
t^n	s	aktuelle Zeitschicht
t^{n+1}	s	folgende Zeitschicht $t^{n+1} = t^n + \Delta t$
t_l	$^{\circ}\text{C}$	Lufttemperatur
t_{cl}	$^{\circ}\text{C}$	Temperatur der Kleidungsoberfläche
t_s	$^{\circ}\text{C}$	Temperatur der Hautoberfläche
u, v, w	ms^{-1}	Windgeschwindigkeit in x, y und z-Richtung
$u^{aux}, v^{aux}, w^{aux}$	ms^{-1}	Hilfströmungsfeld in x, y und z-Richtung
u_*	ms^{-1}	Schubspannungsgeschwindigkeit
u_g, v_g	ms^{-1}	Geostrophische Windgeschwindigkeit in x, y-Richtung
\mathbf{u}	ms^{-1}	dreidimensionaler Windvektor $\mathbf{u} = (u, v, w)$
\mathbf{u}_{hor}	ms^{-1}	horizontaler Windvektor $\mathbf{u}_{hor} = (u, v)$
W	ms^{-1}	Betrag der Windgeschwindigkeit
$W_{dew(max)}$	kgm^{-2}	flüssiges Wasser auf den Blättern (max: Maximalwert)
W_f	ms^{-1}	Betrag der Windgeschwindigkeit an der Blattoberfläche
X, Y	m	Horizontale Ausdehnung des Modellgebietes in Metern

(Fortsetzung nächste Seite)

Fortsetzung lateinische Buchstaben		
Symbol	Einheit	Bedeutung
x, y, z	m	Kartesische Koordinaten in Metern
Z	m	Vertikale Ausdehnung des Kernmodellgebiets in Metern
z_0	m	mikroskalige Rauheitslänge
z_0^w	m	Rauheitslänge der Wände und Dächer
z_p	m	Höhe der Pflanze
z_r	m	Tiefe der Verwurzelungszone

b) Griechische Buchstaben

Griechische Buchstaben		
Symbol	Einheit	Bedeutung
β	K^{-1}	Expansionskoeffizient für trockene Luft ($=0.00353$)
β^*	-	Skalierungsfaktor für Oberflächenfeuchte
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	m	Gitterweiten in x, y und z-Richtung
Δz_s	m	vertikale Gitterauflösung in der untersten Box ($=0.2\Delta z$)
Δ^w	m	Abstand zur Wand- oder Dachfläche
Δt	s	Zeitschritt
Δq	$kg\,kg^{-1}$	Sättigungsdefizit der Luft
δ^c	-	Hinderniskenngröße Gesamtvolumen
$\delta^{x/y/z}$	-	Hinderniskenngröße x/y/z-Zellfläche
ℓ	m	Mischungsweg
ϵ	$m^2\,s^{-3}$	Dissipation der kinetischen Energie
$\eta_{(s)}$	$m^3\,m^{-3}$	volum. Wassergehalt des Bodens (s: bei Sättigung)
η_{fc}	$m^3\,m^{-3}$	volum. Wassergehalt des Bodens bei Feldkapazität
η_{wilt}	$m^3\,m^{-3}$	volum. Wassergehalt des Bodens am Welkepunkt
κ	-	von-Karman Konstante ($=0.4$)
κ_h	$m^2\,s^{-1}$	molek. Temperaturleitfähigkeit der Luft ($=0.21 \cdot 10^{-4}$)
κ_s, κ^s	$m^2\,s^{-1}$	Temperaturleitfähigkeit des Bodens
λ_s	$Wm^{-1}\,K^{-1}$	Wärmeleitfähigkeit des Bodens
λ_w	$Wm^{-1}\,K^{-1}$	Wärmeleitfähigkeit Wand oder Dach
ν	$m^2\,s^{-1}$	dynamische Viskosität der Luft ($=13.3 \cdot 10^{-6}$)
ω	-	Relaxationsparameter
$\hat{\phi}$	[ϕ]	allgem. Variable im 1D-Randmodell
ϕ'	[ϕ]	lokale Abweichung vom Mittelwert
ϕ^*, ϕ^{**}	[ϕ]	Zwischenlösungen im ADI-Verfahren
ϕ^n	[ϕ]	Wert einer Variable im letzten Zeitschritt
ϕ^{n+1}	[ϕ]	Wert einer Variable im nächsten Zeitschritt
ϕ^{w+1}	[ϕ]	Variable am nächsten Punkt senkrecht zur Wand/ zum Dach
ϕ^w	[ϕ]	Variablenwert an der Wand/ am Dach
ϕ_{x_m}	[ϕ]	Wert in x Meter Höhe
Φ	-	generelle Skalierungsfunktion
$\Phi_{m/h/v}$	-	Skalierungsfunktionen für Impuls, Wärme, Wasserdampf
$\Psi_{(s)}$	m	Matrixpotential des Bodens (s: bei Sättigung)
ρ	$kg\,m^{-3}$	Dichte der Luft
$\rho_i c_i$	$Jm^{-3}\,K^{-1}$	Volumenwärme des trockenen Bodenmaterials
$\rho_s c_s$	$Jm^{-3}\,K^{-1}$	Volumenwärme des Bodens mit eingelagertem Wasser
$\rho_w c_w$	$Jm^{-3}\,K^{-1}$	Volumenwärme des Wassers ($=4.182 \cdot 10^6$)
σ_{lw}^{\downarrow}	-	Modifikationsfaktor für abwärtsgerichtete langwellige Strahlung
σ_{lw}^{\uparrow}	-	Modifikationsfaktor für abwärtsgerichtete langwellige Strahlung
$\sigma_{kw,dif}$	-	Modifikationsfaktor für diffuse kurzwellige Strahlung
$\sigma_{kw,dif}$	-	Modifikationsfaktor für direkte kurzwellige Strahlung
σ_{svf}	-	Himmelslichtfaktor
σ_B	$Wm^{-2}\,K^{-4}$	Stefan-Boltzmann-Konstante ($=5.664 \cdot 10^{-8}$)
θ	K	Potentielle Temperatur
θ_{start}	K	Starttemperatur Atmosphäre
ϵ_f	-	Emissionsfaktor der Blätter

(Fortsetzung nächste Seite)

Fortsetzung griechische Buchstaben		
Symbol	Einheit	Bedeutung
ε_s	-	Emissionsfaktor der Bodenoberfläche
ε_w	-	Emissionsfaktor der Wände
ζ_v	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Diffusionsgeschw. von Wasserdampf ($=0.33 \cdot 10^{-4}$)
$\langle \rangle_{x,y,z}$		Differentialoperatoren in x-, y- und z-Richtung

1 Einleitung

Die vertikale Struktur der atmosphärischen Grenzschicht wird durch einen dynamischen Übergang zwischen zwei klimatologischen Einflußbereichen geprägt: An der Oberkante der Grenzschicht wird der Zustand der Atmosphäre von globalen makroskaligen Zirkulationsvorgängen bestimmt, während für die Dynamik in den bodennahen Bereichen zeitlich und räumlich stark variable mikroklimatologische Prozesse an der Bodenoberfläche und anderen bodennahen Oberflächen wie Vegetationsbeständen oder Gebäuden ausschlaggebend sind.

Makroskalige Zirkulationvorgänge in der Atmosphäre reagieren zumeist nur langsam und großmaßstäbig auf eine Veränderung der bodennahen Strukturen durch anthropogene Eingriffe oder natürliche Prozesse. Im Gegensatz hierzu sind die untersten Luftschichten sensibel gegenüber kleinskaligen lokalen Veränderungen der Umweltstruktur: Sie reagieren schnell und unmittelbar auf Strukturänderungen und können lokal sehr begrenzte Klimatope ausbilden. Zwischen der Gestaltung des Lebensraumes und dem sich einstellenden Mikroklima besteht somit ein enger zeitlicher und kausaler Zusammenhang. Das sich hier ausprägende Kleinklimamosaik, innerhalb bebauter Gebiete zusammenfassend als Stadtklima bezeichnet, besitzt eine Vielzahl von typischen Ausprägungen, die direkt mit den physikalischen, topographischen und geometrischen Eigenschaften der Schnittstelle zwischen dem Boden und der Atmosphäre verknüpft sind. Hierzu zählen Windfeldmodifikationen, Ausbildung von Bereichen mit Temperaturabweichungen oder aber Veränderungen im Wasserkreislauf (siehe z.B. VDI Kommission zur Reinhaltung der Luft, 1988; Oke, 1987).

Heute ist es wegen vielfältiger sozialer, kultureller und wirtschaftlicher Gründe oft nur schwer möglich, den Lebensraum so zu gestalten, daß ein physiologisch und psychologisch als angenehm empfundenen Klima jederzeit gewährleistet ist. Es ist somit eine Aufgabe der angewandten Klimatologie und Meteorologie zu untersuchen, wie im Rahmen von gegebenen Strukturparametern wie Rahmenbebauung oder generelle Landnutzung mit den Instrumenten der Raumplanung ein für Mensch und Tier angenehmes Klima erhalten bzw. geschaffen werden kann.

Ein wesentlicher Teil der Planungsprozesse besteht in dem Abwägen verschiedener Alternativen. Im Bereich der Klimatologie, insbesondere der Stadtklimatologie, ist es aufgrund der mannigfaltigen physikalischen Wechselwirkungen in der Umwelt jedoch oftmals nicht ohne weiteres möglich, verschiedene Planungsszenarien ad hoc miteinander zu vergleichen und zu bewerten. Zudem stellen sich oft Konflikte zwischen den Zielen der einzelnen Sach- und Fachebenen ein. Es ist deswegen unerlässlich, sich numerischer Simulationen als Hilfsmittel zu bedienen, um einen objektiven und wissenschaftlich nachvollziehbaren Überblick über die Auswirkung von geplanten Umweltveränderungen auf den Gesamtkomplex Klima zu erhalten.

Betrachtet man die verschiedenen strukturformenden Planungsprozesse in der Realität, so muß festgestellt werden, daß vor allem in der ersten grundsätzlichen Planungsphase aufgrund zahlreicher ökonomischer Aspekte (Eigentumsverhältnisse, Raumbedarf oder Verkehrsanbindungen, um nur einige zu nennen) zumeist seitens der Planungsträger nur eine geringe Bereitschaft besteht, klimatologische Aspekte bei der Planung zu berücksichtigen. Auf der anderen Seite treten nach der Festlegung des Standortes und der allgemeinen Baugestaltung oft zahlreiche weitere Fragen über die Gestaltung des Gebäudes und des Gebäudeumfeldes (Fassadengestaltung, Freiraumbegrünung) auf, bei denen die zuständigen Planer und Architekten bereit wären, klimatologische

Fragestellungen zu berücksichtigen. Auch die Rückbesinnung auf die Verwendung vorhandener Baubestände aus ökologischen oder städtebaulichen Gründen in den letzten Jahren führte weg von der Abriß- und Neubau-Mentalität hin zur einer Favorisierung von Sanierungs- und Umgestaltungsmaßnahmen innerhalb vorhandener Strukturen. In beiden Fällen ist es oft möglich, durch geringe Veränderungen in der Bebauungs- und Umweltstruktur das Mikroklima nachhaltig zu verbessern oder vor Schaden zu bewahren.

Bei solchen kleinskaligen Planungsaufgaben bieten herkömmliche numerische Modelle (s.u.) jedoch keine große Hilfestellung, da sie aufgrund der vorgenommenen Generalisierungen eine feinere Auflösung der verschiedenen urbanen Strukturelemente (Materialien, Gebäude, Vegetation) nicht zulassen oder die komplexen räumlichen und zeitlichen Wechselwirkungen innerhalb des dynamischen Systems nur unzureichend nachbilden. Zudem erlauben diese Modelle keine Kombination pflanzenphysiologischer Prozesse (agrometeorologische Ansätze) mit typischen stadtklimatologischen Prozessen (strömungsmechanische und energiebilanztechnische Ansätze).

Das in dieser Arbeit entwickelte dreidimensionale Modell ENVI-met soll als kleinskaliges Analysesystem diese Lücke schließen und eine möglichst genaue Beschreibung des Systems Oberfläche–Vegetation–Atmosphäre in städtischen Räumen ermöglichen.

1.1 Entwicklung numerischer Simulationsmodelle in den letzten Jahren

Zwischen den ersten eindimensionalen Rechenmodellen zur Beschreibung der Prozesse in der atmosphärischen Grenzschicht (z.B. Gutman und Torrance, 1975 oder Blackadar, 1962) und der heute verfügbaren Palette von Simulationsmodellen liegt ein komplexer Evolutionsprozeß, der aus einer Vielzahl sich verzweigender und sich parallel weiterentwickelnden Modellästen besteht. Hierzu kommen immer neue Äste und bestehende Modelle werden erweitert, so hier nur eine kurze und generelle Betrachtung erfolgt.

Numerische Modelle werden üblicherweise, je nach der räumlichen Dimension der betrachteten Prozesse, dem makroskaligen, mesoskaligen oder mikroskaligen Betrachtungsmaßstab zugeordnet.

Während die Sparte der makroskaligen Modelle recht eindeutig von globalen Zirkulationsmodellen mit unterschiedlicher horizontaler Auflösung repräsentiert wird, ist die Unterteilung zwischen mesoskaligen und mikroskaligen Modellen nicht immer einfach.

Aufgrund der immer größer werdenden Computerkapazitäten ist eine Einteilung nur anhand der Größe des betrachteten Gebietes heute oft nicht mehr sinnvoll, da ursprünglich mesoskalig ausgelegte Modelle in einer mikroskaligen räumlichen Auflösung betrieben werden können und umgekehrt. Die Beurteilung, für welche Skala ein Modell ausgelegt ist, kann hierbei variieren, je nachdem, welcher Prozeß im Modell betrachtet wird.

Im Bereich der Stadt- und Geländeklimatologie bietet es sich an, die Fähigkeit des Modells, einzelne Gebäudekörper aufzulösen als Einteilungskriterium zu verwenden. Während in mesoskaligen Modellen Bebauungsstrukturen nur stark parameterisiert dargestellt werden können (z.B. über die Porosität wie in FITNAH, Groß, 1991), sind mikroskalige Modelle in der Lage, die einzelnen Baukörper detailliert darzustellen.

Dieses Unterscheidungsmerkmal ist relativ unabhängig von der tatsächlich benutzten Rechenauflösung. Entscheidend ist die Art und Weise, wie die Gebäude über die numerischen Randbedingungen in die Modelle integriert wurden. Diese lassen bei mikroskaligen Modellen eine Betrachtung der Prozesse an einzelnen Gebäuden und Gebäudeteilen zu, während in mesoskaligen Modellen diese Option nicht besteht.

Der Haupteinsatzbereich von **mesoskaligen Modellen** liegt in der Beschreibung von regionalen Windverhältnissen, wobei hier vor allem solche Windsysteme von Interesse sind, die durch die topographische und thermische Situation verursacht und/oder modifiziert werden. Das so simulierte Windfeld kann als Trägermedium für die Ausbreitung von Luftschadstoffen verwendet werden, wodurch eine Immissionsrechnung in das Modell integriert werden kann.

Beispiele für mesoskalige Modelle im Bereich der Gelände- und Stadtklimatologie sind: FITNAH (Groß, 1991), METRAS (Schlünzen, 1988), RKM (Frenzen *et al.*, 1987), REWIH3D (Heiman, 1994), FOOT3D (Kerschgens *et al.*, 1994).

Zur Auflösung der tageszeitlich variierenden Prozesse im Gelände ist es notwendig, daß diese Modelle prognostisch über einen bestimmten Simulationszeitraum, hier zumeist 24 Stunden und mehr, betrieben werden. Nur so ist es möglich, die verschiedenen physikalischen Eigenschaften der im Modell vorhandenen Strukturen und deren Auswirkungen auf das Mesoklima numerisch nachzubilden.

Bei der Untersuchung kleinräumiger Prozesse, beispielsweise innerhalb von Stadtstrukturen oder in Vegetationsbeständen, ist man auf die Hilfe **mikroskaliger Simulationsmodelle** angewiesen. Hierbei kann in der Modellhierarchie grob zwischen zwei Ästen unterschieden werden:

Der erste Ast umfaßt jene Modelle, die mikroklimatologische Verhältnisse innerhalb von Bebauungsstrukturen beschreiben. Aufgrund der Problematik der Luftreinhaltung in Städten handelt es sich hierbei vor allem bei den in Europa entwickelten Modellen vorwiegend um Strömungs- und Ausbreitungsmodelle. Typische Vertreter dieser Modelle sind: MISKAM (Eichhorn, 1989), DAS-IM (Rökle, 1990), ASMUS (Groß 1997, 1994), MUKLIMO3 (Sievers, 1995), SCAM (Paterson und Apelt, 1989), SCALAR (Johnson und Hunter, 1995). Der Hauptschwerpunkt dieser Modelle liegt in der Berechnung der Windfeldstörungen durch Gebäude. Die benötigte Simulationszeit beschränkt sich bei diesen Modellen auf jene Zeit, die benötigt wird, um ein stationäres Windfeld zu erzeugen. Eine Betrachtung tageszeitlicher Variationen des Windfelds aufgrund thermischer Prozesse ist nicht vorgesehen oder möglich, wenngleich anzunehmen ist, daß diese auch Auswirkungen auf die Schadstoffverteilung haben.

Einen anderen Ansatz verfolgen jene Stadtklimamodelle, bei denen die Energiebilanz der Oberflächen im Vordergrund steht (z.B. Arnfield und Grimmond, 1998; Terjung und O'Rourke, 1980). Diese Modelle sind in der Lage, die energetischen Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Oberflächen sehr genau aufzulösen. Allerdings können nicht beliebige dreidimensionale Gebäudekonstellationen simuliert werden, da sie klar definierte Straßenachsen mit symmetrischer Randbebauung voraussetzen, wie sie beispielsweise in den Central Business Districts amerikanischer Städte oft zu finden sind. Auf europäische Verhältnisse mit sehr inhomogenen Gebäudestrukturen können sie nicht oder nur sehr eingeschränkt angewendet werden.

Der zweite Ast der mikroskaligen Modelle beschäftigt sich mit agrarmeteorologischen Fragestellungen, hier zumeist mit dem Strahlungs- und Wärmehaushalt innerhalb von Wäldern oder landwirtschaftlichen Kulturen (SVAT- (=Soil-Vegetation-Atmosphäre

Transfer)- Modelle). Bei diesen Simulationsverfahren, die oft ein- und zweidimensional konzipiert sind, wird ein großes Gewicht auf die umfassende Simulation der pflanzenphysiologischen Prozesse wie Transpiration und Wärmeaustausch mit der Umgebungsluft gelegt. Die Bestimmung des Windfeldes erfolgt oft über sehr einfache Widerstandsansätze. Beispiele für diese Gattung von Modellen findet man beispielsweise in: Schilling (1990) (auf der Basis von FITNAH), Naot und Mahrer (1989), Yamada (1982), Inclan *et al.* (1996), Siebert *et al.* (1992). Während diese Modelle die physikalischen und physiologischen Eigenschaften von Vegetationsbeständen recht genau nachbilden können, sind ihnen typische urbane Elemente wie Gebäude oder versiegelte Flächen fremd. Umgekehrt sind den stadtklimatologisch motivierten Modellen des ersten Astes Vegetationsbestände weitestgehend unbekannt. Sie können maximal durch die Verwendung poröser Hindernisse dargestellt werden.

1.2 Zielsetzung dieser Arbeit

Der Wunsch, urbane Strukturen als Gesamtsystem zu erfassen und die dynamischen Vorgänge numerisch zu beschreiben, erfordert eine Kombination beider mikroklimatologischer Ansätze. Bei der Bewertung von Strukturen hinsichtlich ihrer klimatischen Eigenschaften werden in Zukunft vor allem durch den allgemeinen Rückgang der Emissionsmengen einfache Indikatoren wie die Luftschadstoffkonzentration zunehmend unkritischer und durch komplexere Bewertungsverfahren wie beispielsweise den PMV-Wert zur Beurteilung der thermischen Behaglichkeit (Fanger, 1982) ersetzt werden. Die dreidimensionale prognostische Berechnung derart komplexer Kennwerte ist nur sinnvoll, wenn die verwendeten Modelle auch in der Lage sind, die benötigten Informationen mit einer hinreichenden räumlichen und zeitlichen Genauigkeit zu liefern.

Grob umrissen lassen sich folgende Anforderungen an mikroskalige Modelle zur Bewertung des Kleinklimas in städtischen Strukturen stellen:

- Berücksichtigung der Prozesse an „künstlichen“ Oberflächen wie versiegelten Oberflächen und Gebäudewänden und -dächern
- Simulation der pflanzenphysiologischen Prozesse einschließlich der Wechselwirkungen mit der Umgebung
- Freie Kombinierbarkeit von unterschiedlichen Oberflächen- und Bodentypen, Gebäuden und Vegetationselementen
- Instationäre prognostische Berechnung der mikroklimatologischen Prozesse

Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte mikroskalige Modell ENVI-met ermöglicht die numerische Betrachtung von urbanen Strukturen als gesamtheitlichen Wirkungskomplex unter besonderer Berücksichtigung der kleinskaligen Umweltgestaltung wie Straßenbegrünung, Gebäudestrukturen oder verschiedenen Versiegelungsmaterialien. Das Rechenmodell stellt eine große Zahl verschiedener Variablen vom Strömungsfeld über die Temperatur bis zur Turbulenzverteilung als Simulationsergebnisse zur Verfügung und erlaubt somit eine Betrachtung der komplexen physikalischen Prozesse und deren Zusammenspiel in Form des Mikroklimas.

1.3 Aufbau der Arbeit

Nach einer kurzen zusammenfassenden *Darstellung des ENVI-met Modellkonzeptes* (Kapitel 2, S. 7 ff.) folgt die detaillierte Beschreibung des Simulationsmodells, die sich in die Abschnitte *Atmosphäre* (Kapitel 3, S.13 ff.), *Boden und Grenzflächen* (Kapitel 4, S.59 ff.) sowie das *Vegetationsmodell* (Kapitel 5, S.73 ff.) gliedert. In Kapitel 6 *Numerische Verfahren in ENVI-met* (S. 81 ff) werden die im Modell verwendeten mathematischen Methoden zur Lösung der verschiedenen Modellgleichungen vorgestellt.

1.4 Allgemeine redaktionelle Anmerkungen

Die Arbeit umfaßt eine Vielzahl mathematischer Gleichungen und Symbole. Zur besseren Übersicht wurden Symbole mit übergeordneter Bedeutung im Symbolverzeichnis zusammengestellt. Symbole und Formelzeichen mit lokaler Bedeutung werden jeweils im Kontext erläutert, wobei eine Doppelbelegung einiger Symbole nicht zu vermeiden war.

Gleichungen und Terme wurden nur dann numeriert, wenn sie für das Modell von besonderer Bedeutung sind oder Bezug auf sie genommen wird.

Dieser Text basiert auf einer verkürzten Version der ursprünglichen Dissertationsschrift an der Ruhr-Universität Bochum und wird entsprechend den Neuerung und Änderungen in ENVI-met fortschreitend aktualisiert.

2 Das ENVI-met Modellkonzept

Das folgende Kapitel beschreibt das Modellkonzept von ENVI-met und enthält grundlegende, zum Verständnis der nachfolgenden Kapitel notwendige Erläuterungen. Spezielle Fragen und Details werden ausführlich in den Kapiteln zu den jeweiligen Teilmodulen erläutert.

2.1 Aufbau des Modells

Zur mathematischen Darstellung und Lösung der verwendeten Modellgleichungen wird das Untersuchungsgebiet als ein dreidimensionaler Raum mit der Dimension $\Omega = X \times Y \times Z$ dargestellt. Durch die Aufteilung von Ω in rechtwinklige Teilgebiete (Gitterzellen) mit der Dimension $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$ erhält man eine diskrete Anzahl von $I \times J \times K$ Quadern. Der momentane Modellzustand innerhalb eines Quaders mit den kartesischen Koordinaten i, j, k wird durch verschiedene Variablen, den sogenannten Prognosegrößen ϕ beschrieben. Diese können an verschiedenen Punkten innerhalb der Gitterzellen definiert sein, und beschreiben in der Form $\phi_{i,j,k}$ den mittleren zeitlichen und räumlichen Zustand des zugeordneten Modellteilgebietes. Abbildung 1 zeigt einen Überblick über die verschiedenen Teilbereiche des Gesamtmodells.

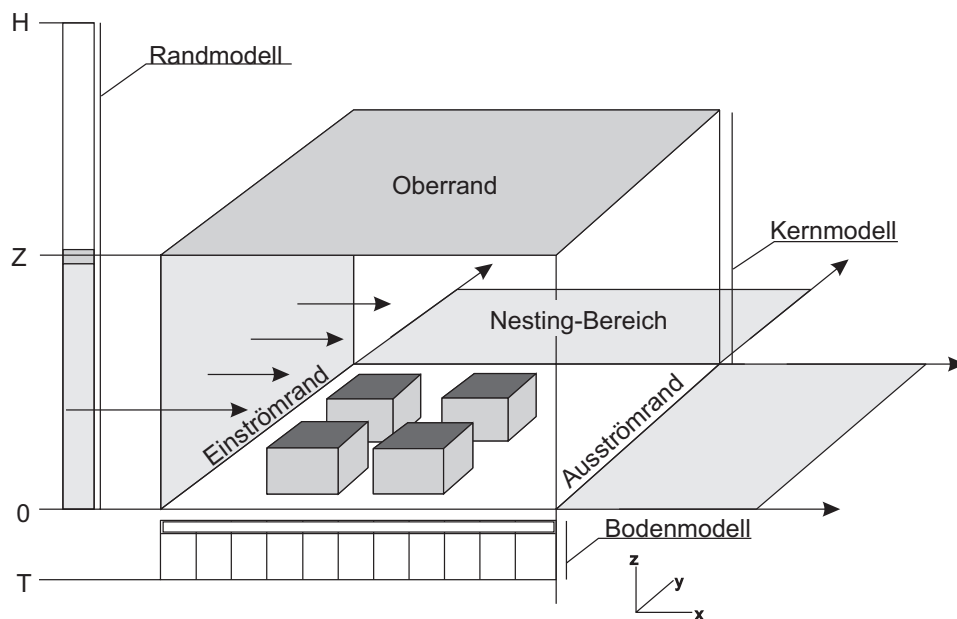


Abbildung 1: Schematischer Aufbau des Modells ENVI-met

Die verschiedenen festen und durchströmbaren Hindernisse (Gebäude, Vegetation) sind an die rechtwinklige Gitterstruktur gebunden, so daß eine Gitterzelle entweder komplett belegt ist, oder aber leer bleibt. Schräg zu den Gitterkanten verlaufende Hindernisse müssen durch Stufen approximiert werden.

Neben dem dreidimensionalen Modell mit der Höhe Z zur Simulation der Prozesse innerhalb des Untersuchungsgebietes wird ein eindimensionales Randmodell mit ei-

ner wesentlich größeren vertikalen Erstreckung H zur Simulation der gesamten atmosphärischen Grenzschicht benötigt, da es aus Rechenkapazitätsgründen nicht sinnvoll ist, das dreidimensionale Modell unnötig weit in der Höhe fortzusetzen. Das Randmodell wird zur Definition der verschiedenen Randbedingungen und als Referenzprofil verwendet.

Innerhalb des dreidimensionalen Kernmodells ist die Auflösung des Rechengitters konstant, mit Ausnahme der untersten Gitterzelle, die vertikal in 5 Teilzellen zur besseren Erfassung der bodennahen Prozesse aufgesplittet wird.

Zur Simulation der Temperatur- und Feuchteausaustauschprozesse im Boden wird für jeden Gitterpunkt ein eindimensionales Bodenmodell verwendet, mit dessen Hilfe die Oberflächentemperatur und -feuchte bestimmt werden kann. Die Gleichungen für die oberste Gitterbox werden dreidimensional gelöst, um eine Glättung der Oberflächentemperaturverteilung zu erreichen.

V2.5

Ab der Version 2.5 sind verschiedene Verfahren zum Aufbau des vertikalen Gitters möglich. Die Option, die unterste Gitterzelle in 5 kleinere Zellen vertikal zu splitten muß nicht in Anspruch genommen werden. Außerdem ist es möglich, die vertikale Gitterweite auch innerhalb des Modells zu variieren. Die Bestimmung der Gitterweiten im eindimensionalen Modellabschnitt zwischen der Oberkante des 3D-Modells Z und dem Oberrand des 1D-Modells H erfolgt über ein iteratives Verfahren, so daß ein möglichst glatter Übergang zwischen der Gitterweite im Kernmodell und der Gitterweite im Randmodell erzielt wird.

2.1.1 Berücksichtigung großskaliger Prozesse

Das Modellgebiet Ω kann nur einen Ausschnitt aus der Realität darstellen. Veränderungen, die durch großskalige Prozesse außerhalb des Modells bestimmt werden, wie beispielsweise der Tagesgang des Temperaturprofils am Modellrand, müssen daher durch geeignete Modellannahmen nachgebildet werden. Da das eindimensionale Randmodell den mittleren Zustand der Atmosphäre außerhalb des Kernmodells darstellen soll, gelten dort für die verschiedenen Prognosegrößen vom Kernmodell abweichende Rechenvorschriften. Zusätzlich wird das eigentliche Kernmodell an den Modellrändern um weitere Zellreihen, die sogenannten *Nesting-Zellen* ergänzt, deren Gitterweite sich nach außen hin mit jeder Zelle vergrößert. In diesem Bereich, der frei von Hindernissen ist, werden jeweils zwei unterschiedliche Bodenprofile und Oberflächentypen im Schachbrettmuster angeordnet. Dieses Verfahren verhindert einerseits numerische Randeefekte im Modell, da die Modellränder einen größeren Abstand von den Hindernissen bekommen, andererseits wird die Erzeugung eines ungestörten, repräsentativen Vertikalprofils der Prognosegrößen an den Einströmrändern unterstützt, da im Nestingbereich bereits eine vollständige dreidimensionale Berechnung der Austauschvorgänge stattfindet.

2.1.2 Berücksichtigung subskaliger Prozesse

Kleinräumige Prozesse, die im Bereich von bis zu einigen Zentimetern ablaufen und mit der minimalen Gitterauflösung des Modells nicht mehr erfaßt werden können, gehören zu den sogenannten „*subskaligen*“ Prozessen. Diese werden durch geeignete Parametrisierungsansätze explizit in das Modell integriert. Die Art und Weise, wie

diese Prozesse parameterisiert werden, bestimmt somit den zulässigen Bereich der Modellgitterweiten.

2.2 Gültigkeitsbereich des Modells

Durch die Konzeption des Modells und der Modellgleichungen für den mikroskaligen Bereich und die im vorhergehenden Abschnitt angesprochene Parameterisierung subskaliger Prozesse kann die Gitterzellengröße Δx , Δy und Δz im Modell nicht beliebig gewählt werden, da sonst die vorgenommenen Parameterisierungen nicht mehr den Charakter der dargestellten Prozesse widerspiegeln können. Die in diesem Modell verwendeten Parameterisierungen lassen eine horizontale Gitterauflösung im Bereich von 1 m bis ca. 20 m zu. Theoretisch ist auch eine größere Gitterweite zulässig, wobei hier die Auflösung der Hindernisse, die eine Gitterzelle nur komplett ausfüllen können, problematisch wird. Die vertikale Auflösung im Kernmodell sollte ungefähr der horizontalen Gitterweite entsprechen. Oberhalb des Kernmodells im eindimensionalen Randmodell verringert sich die vertikale Auflösung bis $\Delta z=500\text{m}$ am Modelloberrand.

Die Größe des Gesamtgebietes Ω ist hingegen weitestgehend frei wählbar, wird aber in der Praxis durch die zur Verfügung stehenden Computerressourcen limitiert.

2.3 Behandlung der räumlichen Randbedingungen

Zur Lösung der prognostischen Gleichungen im dreidimensionalen Modell sind für den Modelloberrand, die lateralen Ränder, die Bodengrenzfläche und die Gebäudewände geeignete Bedingungen festzulegen, die das Modell numerisch abschließen.

Die lateralen Ränder werden hierbei in **Einström- und Ausströmränder** differenziert. Als Einströmränder werden diejenigen Seiten des Modellgebietes bezeichnet, an denen die Normalkomponente des Strömungsfeldes in das Modellgebiet hinein gerichtet ist. Ausströmränder sind demzufolge alle Seitenränder, an denen die Normalkomponente aus dem Modellgebiet herausgerichtet ist, oder an denen kein Fluß stattfindet. Welcher Rand letztendlich als Einström- und welcher als Ausströmrand dient, hängt von der gewählten Anströmung des Modellgebiets ab. Bei der Betrachtung der Randbedingungen wird im folgenden, soweit nicht extra vermerkt, verallgemeinert davon ausgegangen, daß der linke und vordere Modellrand als Einströmrand und der rechte und hintere Modellrand als Ausströmrand dient. Bei anderen Anströmungssituationen sind die Formulierungen entsprechend sinngemäß umzustellen.

Die numerische Behandlung der Modellränder unterscheidet sich bei den einzelnen Prognosegrößen zum Teil sehr stark, so daß hier nur die allgemeine Konzeption dargestellt werden soll, die allen Variablen gemein ist. Die exakten Randbedingungen für die einzelnen Prognosegrößen werden in den jeweiligen Kapiteln dargestellt.

2.3.1 Einströmränder

An den Einströmrändern wird das im eindimensionalen Randmodell ermittelte vertikale Profil der Prognosevariablen dem dreidimensionalen Modell aufgeprägt. Da die Gültigkeit eines eindimensionalen Profils nur dann gegeben ist, wenn horizontale Homogenität vorliegt, läßt sich die Forderung ableiten, daß zwischen den Modellrändern

und dem Beginn des zu simulierenden gestörten Gebietes ein ausreichender Abstand gelassen werden muß. Diese Forderung betrifft ebenso alle weiteren Modellränder, die keine echten physikalischen Begrenzungen darstellen wie die Ausströmränder und den Modelloberrand. Durch die Verwendung der Nestingzellen mit nach außen hin zunehmender Gitterweite kann diese Forderung einfach erfüllt werden.

Liegt der Einströmrand zu nahe an den Hindernissen, so kann mitunter kein stationäres Windfeld berechnet werden. Der Abstand zwischen dem Einströmrand und dem ersten Hindernis sollte mindestens der doppelten maximalen Hindernishöhe entsprechen.

Das am Rand benötigte vertikale Profil der Prognosevariablen wird aus der prognostischen Lösung der Modellgleichungen in der eindimensionalen Form gewonnen, die synchron zur Lösung der dreidimensionalen Gleichungen erfolgt. Die Gleichungen für die verschiedenen Randprofile unterscheiden sich mitunter nicht nur in der Dimensionalität von ihren dreidimensionalen Äquivalenten, sondern es werden zum Teil auch andere Parameterisierungen verwendet.

Aus numerischen Gründen besitzt das dreidimensionale Kernmodell eine geringere vertikale Erstreckung als das Randmodell. Diese Annahme ist vertretbar, da ab einer gewissen Höhe die im Modell verursachten Störungen abgeklungen sind und so wieder von einem ungestörten Grenzschichtprofil ausgegangen werden kann.

2.3.2 Ausströmränder

Wie bei den Einströmrändern handelt es sich auch an den Ausströmrändern um rein numerische Ränder ohne physikalische Eigenschaften. Die Ausströmränder sollten so festgelegt werden, daß die Prognosevariablen im Inneren des Modellgebiets möglichst wenig beeinflusst werden. Im Falle des Stördruckfeldes ist jedoch eine geringe Beeinflussung erwünscht, da hier durch geeignete Randbedingungen ein im Modell entstandener Massenfehler (Differenz zwischen einströmender und ausströmender Luftmasse) ausgeglichen werden kann. Wie bei den Einströmrändern sorgen auch hier die Nesting-Zellen für einen ausreichenden Abstand zwischen den Hindernissen und den Ausströmrändern.

2.3.3 Modelloberrand

Das Gesamtmodell besitzt zwei Modelloberränder: Die obere Begrenzung des dreidimensionalen Modells bei $z = Z$ und den Oberrand des eindimensionalen Modells $z = H$ wobei $Z \ll H$ ist. Am Oberrand des dreidimensionalen Modells wird angenommen, daß die im Modell verursachten Störungen abgeklungen sind, so daß die Bedingungen für horizontale Homogenität erfüllt sind. Hiermit ist es möglich, die im eindimensionalen Randmodell in der Höhe Z prognostizierten Werte zu übernehmen und auf den dreidimensionalen Oberrand umzusetzen. Der Oberrand des eindimensionalen Modells H selber liegt in den oberen Schichten der Atmosphäre (hier $H = 2500$ m), in denen die Werte der Prognosevariablen vorgegeben werden und zeitlich konstant bleiben. Die Höhe des dreidimensionalen Modells kann variabel gewählt werden. Da am Oberrand dem Modell jedoch ungestörte Verhältnisse erzwungen werden, führt ein zu niedriger Rand zur Unterdrückung vertikaler Prozesse im Kernmodell. Als Faustregel ist mindestens die doppelte maximale Gebäudehöhe als Gesamthöhe des dreidimensionalen Modells anzusetzen.

2.3.4 Bodengrenzfläche und Gebäudewände

Im Gegensatz zu den bisher behandelten Rändern handelt es sich bei der Bodengrenzfläche und den Gebäudewänden um echte physikalische Ränder. Hier bestimmen mikroskalige Austauschprozesse die zu verwendenden Randbedingungen und variieren von Prognosegröße zu Prognosegröße. Die Bestimmung der Temperatur und Feuchte an den Grenzflächen erfolgt getrennt von der Lösung der Differentialgleichungen.

Die Bodengrenzfläche ist zudem der Oberrand des Bodenmodells und koppelt somit die Atmosphäre und den Boden miteinander. Der Unterrand des Bodenmodells liegt in der Tiefe $T = -1.75$ m. Hier wird, analog zum Oberrand des Atmosphärenmodells angenommen, daß die Bodentemperatur und der Wassergehalt des Bodens während der Simulation konstant bleiben. Die vertikale Auflösung des Bodenmodells ist vorgegeben und kann nicht geändert werden. Sie liegt im Bereich von 0.015 m nahe an der Oberfläche bis 0.5 m in den tieferen Bodenschichten.

2.4 Initialisierung des Modells

Bei der Initialisierung des Modells muß anhand von wenigen Ausgangswerten versucht werden, für das gesamte Modell eine realistische Datenverteilung zu erzeugen. Hierbei wird zunächst das eindimensionale Randmodell zeitlich integriert, bis das vertikale Profil aller Variablen einen quasi-stationären Zustand erreicht hat. Danach wird dieses Profil auf das dreidimensionale Modell umgesetzt. Die genaue Vorgehensweise bei der Initialisierung unterscheidet sich bei den einzelnen Prognosegrößen und wird in den entsprechenden Abschnitten gesondert erläutert.

2.5 Simulationsablauf und Ergebnisse

Nach der Bestimmung der Startwerte für alle Prognosevariablen und die Umsetzung auf das Modellgebiet beginnt die eigentliche dreidimensionale Simulation.

Um den Rechenaufwand zu reduzieren, werden die verschiedenen Parameter des Modells in unterschiedlichen Zeitintervallen neu berechnet. So wird beispielsweise die Temperatur- und Feuchteverteilung in jedem Rechenschritt aktualisiert, während die Oberflächentemperaturen und der Schattenwurf über einen längeren Zeitraum konstant gehalten werden können.

Während der Simulation werden zu frei wählbaren Zeitpunkten die aktuellen Datenfelder in Dateien ausgegeben und können ausgewertet werden. Die Simulation endet, wenn die vorgegebene Gesamtsimulationsdauer erreicht ist. Eine ausführliche Beschreibung des Simulationsablaufes ist in Kapitel 7, S. 113 ff. zu finden.

3 Das Atmosphärenmodell

Das Atmosphärenmodell umfaßt die Bestimmung aller relevanten Prozesse, die oberhalb der Bodenoberfläche ablaufen. Hierzu zählt neben der Berechnung der Wind-, Temperatur- und Feuchteverteilung auch die Bestimmung der kurzwelligen und langwelligen Strahlungsflüsse.

3.1 Bestimmung des Strömungsfeldes

Die Bestimmung des Strömungsfeldes erfordert die Lösung der dreidimensionalen *Navier-Stokes-Gleichungen* in der nicht-hydrostatischen Form. Hierzu wird ein sogenanntes *Splitting-Verfahren* verwendet, daß den kleinskaligen Stördruckgradienten getrennt von den eigentlichen prognostischen Strömungsgleichungen bestimmt.

3.1.1 Die Grundgleichungen

Zur Beschreibung der zeitlichen und räumlichen Entwicklung des Windfeldes im Modellgebiet werden die *Navier-Stokes-Gleichungen* in der dreidimensionalen nicht-hydrostatischen Euler-Form verwendet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = & \quad (3.1a) \\ & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_m \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_m \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ & + f(v - v_g) - S_u(x, y, z) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = & \quad (3.1b) \\ & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_m \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_m \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ & -f(u - u_g) - S_v(x, y, z) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = & \quad (3.1c) \\ & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_m \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_m \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ & -S_w(x, y, z) \end{aligned}$$

Die Schließung der turbulenten Terme in der Gleichung erfolgt hier, wie auch bei den anderen primitiven Gleichungen über den lokal isotropen Austauschkoefizienten K_m . Die Bestimmung der Austauschkoefizienten wird im Kapitel 3.3, S.29 ff. ausführlich dargestellt. Die Variation des Windfeldes durch das lokale Stördruckfeld wird über den Gradienten des dynamischen Stördruckes $\partial p' / \partial x_i$ in Richtung der Normalen der jeweiligen Strömungskomponente dargestellt. Die Schreibweise x_i steht für die „Einstein“-Schreibweise der drei Raumkoordinaten $x_i = x, y, z$ mit $i = 1, 2, 3$.

Die Terme $f(v - v_g)$ bzw. $f(u - u_g)$ in der Gleichung für die u - bzw. v -Komponente des Strömungsfeldes beschreiben die Drehung des bodennahen Windes gegenüber der geostrophischen Windrichtung u_g, v_g unter dem Einfluß der Corioliskraft. Für den Coriolisparameter f gilt $f = 2\Omega \sin \varphi$, wobei $\Omega = 7 \cdot 10^{-5} \text{s}^{-1}$ die Kreisfrequenz der Erdrotation und φ der Breitengrad ist. Im Modell wird f konstant auf 0.0001s^{-1} gesetzt.

Bei allen Strömungskomponenten ist zusätzlich der Impulsverlust an porösen Hindernissen (Vegetation) durch die Senkterme S_u, S_v und S_w zu berücksichtigen. Bei der Durchströmung poröser Körper entsteht ein Druckgradient in Richtung i der betrachteten Windkomponente u_i ($u_i = u, v, w$ mit $i = 1, 2, 3$). Diese Druckstörung und die Auswirkung auf das Strömungsfeld kann nach Yamada (1982) durch die Beziehung

$$S_{u_i}(x, y, z) = \left. \frac{\partial p''}{\partial x_i} \right|_p = c_{d,p} \text{LAD}(x, y, z) u_i W(x, y, z) \quad (3.2)$$

dargestellt werden. Hierbei ist $c_{d,p}$ der Dragkoeffizient für Impuls an den Blättern, für den im allgemeinen ein Wert von $c_{d,p} = 0.2$ angesetzt wird. LAD ist die Blattflächendichte, angegeben in m^2 Blattoberfläche pro m^3 Luft, als Maß für den Porositätsgrad der Vegetation. W ist der Betrag der Windgeschwindigkeit mit

$$W(x, y, z) = \sqrt{u^2(x, y, z) + v^2(x, y, z) + w^2(x, y, z)} \quad (3.3)$$

Da die Gitterauflösung des Modells ENVI-met im mikroskaligen Bereich liegt, wird angenommen, daß die Vegetation vollständig durch die Gitterboxen aufgelöst werden kann. Hieraus folgt, daß eine Gitterbox in allen Projektionsrichtungen entweder vollständig von Vegetation ausgefüllt wird, oder aber vollständig vegetationsfrei ist. Die Verwendung eines Bodenbedeckungsfaktors, wie er bei manchen Modellen Verwendung findet, ist hier nicht erforderlich.

3.1.2 Die Boussinesq-Approximation

In den Bewegungsgleichungen (3.1a) bis (3.1c) tritt die analytisch schwer zu bestimmende Dichte der Luft (ρ) auf. Da die im Modell untersuchte atmosphärische Grenzschicht im Verhältnis zur Höhe der Gesamtatmosphäre relativ dünn ist, bietet es sich an, die *Boussinesq-Approximation* zur Elimination der Luftdichte als Prognosegröße zu verwenden.

Hierbei werden folgende Annahmen getroffen:

- Die durch das Modellgebiet hervorgerufenen Störungen der betrachteten Modellgrößen weichen nur geringfügig von den jeweiligen Referenzwerten für eine ungestörte Atmosphäre ab.
- Dichteschwankungen der Luft sind auf Fluktuationen der Temperatur, nicht aber auf Fluktuationen des Druckes zurückzuführen (*anelastische Hypothese*).

Mit diesen Vereinfachungen kann die Luftdichte ρ durch einen konstanten Wert approximiert werden:

$$\rho \approx \rho_0 = 1.29 \text{kgm}^{-3}$$

Da die Luft nun als inkompressibles Fluid behandelt wird, muß als unmittelbare Konsequenz dieser Approximation bei der Lösung der Gleichungen die sogenannte *Verträglichkeits-Bedingung* (Filter-Bedingung)

$$0 = \nabla \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \quad (3.4)$$

beachtet werden, die nur divergenzfreie Strömungsfelder als exakte Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen zuläßt.

Als weitere Konsequenz müssen die durch den vertikalen Temperaturgradienten verursachten Dichteunterschiede explizit über Schwankungen der potentiellen Temperatur ausgedrückt werden. Aus den allgemeinen Gasgesetzen ergibt sich die Beziehung

$$\frac{\rho'}{\rho_0} = \frac{p'}{p_0} - \frac{T'}{T_0}$$

Setzt man voraus, daß die Druckstörungen p' gegenüber dem Grunddruck p_0 gering sind, kann man unter Verwendung der potentiellen Temperatur θ auch

$$\frac{\rho'}{\rho_0} = -\frac{\theta'}{\bar{\theta}}$$

schreiben.

θ' ist die vertikale Temperaturfluktuation am betrachteten Punkt bezogen auf die Referenztemperatur $\bar{\theta}$ in der Höhe z aus dem eindimensionalen Randmodell. Die entstehenden vertikalen thermischen Kräfte können in Form eines Auftriebsterms

$$g \frac{\theta'}{\bar{\theta}} \quad (3.5)$$

in die prognostischen Gleichung für die w -Komponente (3.1c) integriert werden.

3.1.3 Verfahren zur Lösung der Bewegungsgleichungen

Die Lösung der Bewegungsgleichungen ist aufgrund ihres gemischt-parabol-elliptischen Charakters nicht trivial und kann auf sehr unterschiedliche Art und Weise erfolgen.

Einen relativ einfachen Lösungsansatz im zweidimensionalen Raum bietet die sogenannte „*Vorticity-Methode*“ (Roache, 1984; Sievers *et al.*, 1987), bei der die Bestimmung des dynamischen Stördruckes p' entfällt, da über die Prognose der Wirbelstärke automatisch ein divergenzfreies Windfeld berechnet wird. Die Vorticity-Methode ist auch im dreidimensionalen Raum anwendbar (Sievers, 1995), wobei sie jedoch wesentlich komplexer wird und somit den Hauptvorteil der leichten Anwendbarkeit verliert. Zudem kann das Vorticity-Verfahren nur schwer um weitere strömungsbeeinflussende Faktoren wie beispielsweise die Vegetation erweitert werden und bietet somit für dieses Modell keine numerischen Vorteile gegenüber der im folgenden dargestellten prognostischen Berechnung des Stördruckfeldes.

Die Lösung der Bewegungsgleichungen mit Bestimmung des Stördruckes erfolgt über das sogenannte *Splitting-Verfahren* nach Patrinos und Kistler (1977). Der Vorteil des

Splitting-Verfahrens gegenüber der Vorticity-Methode liegt darin, daß die prognostischen Bewegungsgleichungen bis auf den druckabhängigen Term quasi unverändert numerisch behandelt werden und somit jederzeit um zusätzliche Terme ergänzt werden können. Der Nachteil des Verfahrens liegt im Hinzufügen einer weiteren Prognosegröße, der Druckstörung p' , die parallel zu den eigentlichen Bewegungsgleichungen über eine Poisson-Gleichung zu lösen ist.

Im Rahmen des Splitting-Verfahrens wird das in den Gleichungen (3.1a)-(3.1c) gesuchte divergenzfreie Windfeld in ein Hilfsströmungsfeld \mathbf{u}^{aux} und einen Druckterm $\nabla p'$ aufgesplittet:

$$\frac{\partial \mathbf{u}^{n+1}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{u}^{aux}}{\partial t} + \frac{1}{\rho_0} \nabla p' \quad (3.6)$$

Das Feld \mathbf{u}^{aux} wird durch die Lösung der sogenannten *verkürzten Bewegungsgleichungen* berechnet, in denen der Stördruck nicht berücksichtigt wird. Es enthält die korrekte Vorticity, erfüllt jedoch nicht notwendigerweise die Verträglichkeitsbedingung. Mit Hilfe dieses Strömungsfeldes kann die dazugehörige Druckverteilung iterativ oder direkt bestimmt werden, wodurch eine Korrektur zum divergenzarmen Windfeld \mathbf{u}^{n+1} möglich wird. Ein vollkommen *divergenzfrees* Windfeld kann jedoch weder mit diesem noch mit anderen Verfahren erzeugt werden. In der Nähe von Hindernissen und im Zentrum von Wirbeln bleibt immer eine Restdivergenz bestehen, da hier die Stördruckfelder vom numerischen Verfahren nicht mehr aufgelöst werden können. Es muß daher im Falle des druckkorrigierten Strömungsfeldes \mathbf{u}^{n+1} immer von einer *divergenzarmlen* Strömung gesprochen werden.

3.1.4 Die verkürzten Bewegungsgleichungen

Die verkürzten Bewegungsgleichungen zur Beschreibung des Hilfsströmungsfeldes \mathbf{u}^{aux} ergeben sich nach dem Entfernen der Druckterme, dem Hinzufügen des Auftriebterms und der expliziten Formulierung der Senkterme (3.2) aus den Gleichungen (3.1a) bis (3.1c) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^{aux}}{\partial t} + u \frac{\partial u^{aux}}{\partial x} + v \frac{\partial u^{aux}}{\partial y} + w \frac{\partial u^{aux}}{\partial z} = & \quad (3.7a) \\ & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_m \frac{\partial u^{aux}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_m \frac{\partial u^{aux}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial u^{aux}}{\partial z} \right) \\ & - c_{d,p} LAD(z) u^{aux} W(x, y, z) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v^{aux}}{\partial t} + u \frac{\partial v^{aux}}{\partial x} + v \frac{\partial v^{aux}}{\partial y} + w \frac{\partial v^{aux}}{\partial z} = & \quad (3.7b) \\ & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_m \frac{\partial v^{aux}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_m \frac{\partial v^{aux}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial v^{aux}}{\partial z} \right) \\ & - c_{d,p} LAD(z) v^{aux} W(x, y, z) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w^{aux}}{\partial t} + u \frac{\partial w^{aux}}{\partial x} + v \frac{\partial w^{aux}}{\partial y} + w \frac{\partial w^{aux}}{\partial z} = & \quad (3.7c) \\ & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_m \frac{\partial w^{aux}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_m \frac{\partial w^{aux}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial w^{aux}}{\partial z} \right) \\ & + g \frac{\theta'}{\bar{\theta}} - c_{d,p} LAD(z) w^{aux} W(x, y, z) \end{aligned}$$

Die Coriolisterme werden im dreidimensionalen Kernmodell aufgrund der geringen vertikalen Ausdehnung des betrachteten Luftkörpers vernachlässigt.

Setzt man die Filterbedingung $\nabla \mathbf{u} = 0$ in die gesplittete Navier-Stokes Gleichung (3.6) ein, so erhält man nach zeitlicher Diskretisierung als Zusammenhang zwischen dem Hilfsströmungsfeld \mathbf{u}^{aux} und dem Stördruckfeld p' die Poisson-Gleichung

$$\nabla^2 p' = \frac{\rho_0}{\Delta t} \nabla \mathbf{u}^{aux} \quad (3.8)$$

Die Korrektur der Geschwindigkeitskomponenten zum divergenzarmen Windfeld \mathbf{u}^{n+1} erfolgt nach der Lösung von (3.8) mit

$$u^{n+1} = u^{aux} - \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial x} \quad (3.9a)$$

$$v^{n+1} = v^{aux} - \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial y} \quad (3.9b)$$

$$w^{n+1} = w^{aux} - \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial z} \quad (3.9c)$$

3.1.5 Randbedingungen des Strömungsmodells

3.1.5.1 Einströmränder Das vertikale Profil der Windgeschwindigkeit wird am Einströmrand aus der eindimensionalen Form der u- und v-Prognosegleichungen (3.7a, 3.7b) gewonnen:

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \hat{K}_m \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) + f(\hat{v} - v_g) \quad (3.10a)$$

$$\frac{\partial \hat{v}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \hat{K}_m \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right) - f(\hat{u} - u_g) \quad (3.10b)$$

Die Vertikalkomponente des Strömungsfeldes wird in jeder Höhe gleich Null gesetzt:

$$\hat{w}(0..H) = 0$$

Da dieses Einströmprofil die durchschnittlichen mesoskaligen Verhältnisse widerspiegeln soll, ist für den Einströmrand eine gesonderte, vom Hauptmodell möglicherweise abweichende Bodenrauigkeitslänge \hat{z}_0 vorzugeben.

Im dreidimensionalen Modell wird am Einströmrand horizontale Homogenität vorausgesetzt, so daß die im eindimensionalen Randmodell berechneten Werte auf die Einströmflächen umgesetzt werden können:

$$u^{aux}(0..X, 0, z) = u^{aux}(0, 0..Y, z) = \hat{u}(z)$$

$$v^{aux}(0..X, 0, z) = v^{aux}(0, 0..Y, z) = \hat{v}(z)$$

$$w^{aux}(0..X, 0, z) = w^{aux}(0, 0..Y, z) = 0$$

Nach Bestimmung des Stördruckfeldes und der Korrektur der Auxilargeschwindigkeiten \mathbf{u}^{aux} an den inneren Gitterpunkten zum divergenzarmen Strömungsfeld \mathbf{u}^{n+1} für den Zeitschritt $n + 1$ werden die Randpunkte mit einer Nullgradient-Bedingung den inneren Punkten angepaßt:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right|_{x=0} &= \left. \frac{\partial v^{n+1}}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial w^{n+1}}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \\ \left. \frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right|_{y=0} &= \left. \frac{\partial v^{n+1}}{\partial y} \right|_{y=0} = \left. \frac{\partial w^{n+1}}{\partial y} \right|_{y=0} = 0 \end{aligned}$$

Der Stördruck p' benötigt am Einströmrand keine spezielle Randbedingung, so daß hier ein Verschwinden des Gradienten in Richtung der Normalen festgesetzt wird:

$$\left. \frac{\partial p'}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial p'}{\partial y} \right|_{y=0} = 0$$

3.1.5.2 Ausströmränder Die Randbedingungen an den Auströmrändern sollten so formuliert werden, daß die Strömung das Modellgebiet möglichst ungestört verlassen kann. Außerdem muß für jeden Rechenschritt gewährleistet werden, daß das Modell massenkonsistent bleibt, d.h. genau soviel Luftmasse in das Modell eintritt wie wieder austritt. Insbesondere die letztere Forderung stellt sich nicht automatisch ein, da durch das verwandte numerische Differenzenverfahren immer ein kleiner numerischer Fehler auftritt.

Für das prognostisch berechnete Hilfsströmungsfeld wird an den Ausströmrändern eine einfache Null-Gradient Bedingung verwendet:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial u^{aux}}{\partial x} \right|_{x=X} &= \left. \frac{\partial v^{aux}}{\partial x} \right|_{x=X} = \left. \frac{\partial w^{aux}}{\partial x} \right|_{x=X} = 0 \\ \left. \frac{\partial u^{aux}}{\partial y} \right|_{y=Y} &= \left. \frac{\partial v^{aux}}{\partial y} \right|_{y=Y} = \left. \frac{\partial w^{aux}}{\partial y} \right|_{y=Y} = 0 \end{aligned}$$

Durch geeignete Randbedingungen für das Druckfeld am Ausströmrand kann erreicht werden, daß das korrigierte divergenzarme Windfeld massenkonsistent ist. Hierbei wird zunächst davon ausgegangen, daß eine Differenz (*Massenfehler*) zwischen der in das Modellgebiet eintretenden Masse und der wieder austretenden Masse existiert. Zur Berechnung dieses Fehlers ist zunächst die Massenbilanz über alle lateralen Modellränder zu berechnen, deren Einzelkomponenten sich aus den Massenflüssen durch die jeweils betroffenen Randelemente (=lateralen Zellflächen) ergeben. Der untere Modellrand ist völlig undurchströmbar, da er vom Erdboden begrenzt wird. Der Modelloberrand ist zwar physikalisch prinzipiell durchströmbar, allerdings wurde hier festgelegt, daß die Normalkomponente des Strömungsfeldes in z-Richtung verschwindet ($w(x, y, Z) = 0$), wodurch an diesem Rand ebenfalls kein Massenfluß stattfinden kann.

Als Massenbilanz für den linken, rechten, vorderen und hinteren Modellrand erhält man somit:

$$\begin{aligned} m_{li} &= \rho_0 \int_0^Y \int_0^Z u(0, y, z) dy dz \\ m_{re} &= \rho_0 \int_0^Y \int_0^Z u(X, y, z) dy dz \\ m_{vo} &= \rho_0 \int_0^X \int_0^Z v(x, 0, z) dx dz \\ m_{hi} &= \rho_0 \int_0^X \int_0^Z v(x, Y, z) dx dz \end{aligned}$$

Der im Modell verursachte Massenfehler m_{err} ergibt sich aus der Gesamtbilanz der Massenflüsse an den Modellrändern:

$$m_{err} = m_{re} - m_{li} + m_{hi} - m_{vo} \quad (3.12)$$

Um diesen Massenfehler auszugleichen, sind die Randbedingungen des Druckfeldes an allen Ausströmrändern so zu modifizieren, daß die Massenerhaltung im Modellgebiet wieder hergestellt wird. Hierzu ist zunächst die Anzahl n_{aus} und die Oberfläche F_{aus}^Σ der Ausströmränder zu bestimmen. Als Ausströmränder werden hierbei alle randständigen Gitterzellen bezeichnet, an denen die Normalkomponenten des aktuell berechneten Windfeldes aus dem Modellgebiet hinaus führen, normalerweise also die Zellen der durch die Anströmungsrichtung festgelegten Ausströmränder.

Die Oberfläche F_{aus}^Σ berechnet sich mit:

$$F_{aus}^{\Sigma} = \int_0^Y \int_0^Z f^{li}(y, z) dy dz + \int_0^Y \int_0^Z f^{re}(y, z) dy dz + \int_0^X \int_0^Z f^{vo}(x, z) dx dz + \int_0^X \int_0^Z f^{hi}(x, z) dx dz \quad (3.13)$$

Hierbei sind f^{li} , f^{re} , f^{vo} und f^{hi} Funktionen, die festlegen, ob die entsprechende Zelle im aktuellen Strömungsfeld eine Aus- oder Einströmzelle ist. Für Ausströmzellen wird $f^{(\dots)} = 1$ bzw. -1 gesetzt, ansonsten ist $f^{(\dots)} = 0$, wodurch alle anderen Zellen nicht in die Berechnung der Ausströmoberfläche eingehen.

Für den linken Modellrand ergibt sich exemplarisch die Funktion

$$f^{li}(y, z) = \begin{cases} 1 & ; \text{wenn } u(0, y, z) < 0 \\ 0 & ; \text{wenn } u(0, y, z) \geq 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

Die Ausströmfunktionen für die übrigen Modellränder ergeben sich analog zum linken Modellrand.

Ein negativer Massenfehler bedeutet anschaulich, daß mehr Masse in das Modellgebiet hineinströmt, als an den Ausströmrändern wieder austritt. Um diesen Fehler zu korrigieren, muß somit der Massenfluß an den Ausströmrändern erhöht werden. Der Zusammenhang zwischen dem Druckfeld und dem korrigierten Strömungsfeld ist über (3.9a) gegeben. Für die Korrektur der u -Komponente am rechten Modellrand $x = X$ erhält man beispielsweise den Zusammenhang

$$u^{n+1}(X, y, z) = u^{aux}(X, y, z) - \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial x} \Big|_{x=X}$$

Hierbei ist der Gradient des Stördruckfeldes der benötigte Parameter zur Korrektur des Massenfehlers. Allgemein kann die Randbedingung des Stördruckes an einem Ausströmrand als

$$\frac{\partial p'}{\partial x_i} \Big|_{aus} = \Lambda \quad (3.15)$$

geschrieben werden. Die Druckkorrektur Λ kann nun beispielsweise am rechten und hinteren Rand so gewählt werden, daß ein negativer Massenfehler (Massenüberschuß) zu einer entsprechenden Erhöhung des Betrages der Strömungsgeschwindigkeit an den Ausströmrändern führt, also $\partial p / \partial x_i$ und Λ negativ gesetzt werden. Im umgekehrten Fall (positiver Massenfehler) sind die Beträge der Austrittsgeschwindigkeiten zu reduzieren ($\partial p / \partial x_i, \Lambda > 0$).

Am linken und vorderen Rand dreht sich das Vorzeichen des Korrekturterms aufgrund der Umkehrung der Strömungskomponenten entsprechend um.

Aus der Poisson-Gleichung (3.8) und den Ausströmrandfunktionen $f^{(\dots)}$ (3.14) können folgende Beziehungen zwischen dem Massenfehler m_{err} und dem Druckkorrekturwert Λ an den lateralen Rändern hergestellt werden:

$$\frac{\partial p'}{\partial x_i} \Big|_{lateral} = \Lambda = f^{(\dots)}(x/y, z) \cdot \frac{1}{\Delta t} \frac{m_{err}}{F_{aus}^{\Sigma}} \Phi(x, y, z) \quad (3.16)$$

Nimmt man an, daß die Massenkorrektur gleichmäßig auf alle Ausströmzellen verteilt wird, so ist die für eine bestimmte Zelle x, y, z anzusetzende Druckkorrektur mit der Größe der Austrittsfläche F_{aus} dieser Zelle zu gewichten. Hierzu wird der Wichtungsfaktor $\Phi(x, y, z)$ definiert mit:

$$\Phi(x, y, z) = \frac{F_{aus}^{\Sigma}/n_{aus}}{F_{aus}(x, y, z)} \quad (3.17)$$

Der Wichtungsfaktor ist umgekehrt proportional zum Anteil der Ausströmflächengröße zur Gesamtausströmfläche. Anschaulich bedeutet dieses, daß der gleiche Massenfluß bei Gitterzellen, die kleiner als der Durchschnitt sind, zu stärkeren Druckkorrekturen führt als bei größeren Zellen. Sind alle Zellen äquidistant, so ist der Wichtungsfaktor gleich 1.

An Gitterzellen, an denen die Strömung in das Modellinnere gerichtet ist, kann keine Druckkorrektur vorgenommen werden. Hier ergibt das Verfahren mit $\Lambda = 0$ die für den Einströmrand festgelegte Null-Gradient-Bedingung.

3.1.5.3 Bodengrenzfläche und Hindernisflächen An der Bodengrenzfläche, auf Hindernisflächen und innerhalb von festen Hindernissen werden die Geschwindigkeitskomponenten in Richtung ihrer Normalen und in der tangentialen Richtung auf Null gesetzt (*No-Slip-Bedingung, Haft-Bedingung*):

$$\begin{aligned} u_w^{aux} &= v_w^{aux} = w_w^{aux} &= 0 \\ u^{aux}(z=0) &= v^{aux}(z=0) = w^{aux}(z=0) &= 0 \\ \hat{u}(z=0) &= \hat{v}(z=0) &= 0 \end{aligned}$$

Für das Stördruckfeld wird ein Verschwinden des Normalgradienten in Richtung i der Hinderniswand und am Boden angenommen:

$$\left. \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right|_w = \left. \frac{\partial p'}{\partial z} \right|_{z=0} = 0$$

Hierdurch ergibt sich an den Wänden und am Boden die Zuweisung

$$u_i^{n+1} = u_i^{aux}$$

3.1.5.4 Modelloberrand Am Oberrand des eindimensionalen Randmodells bei $z = H$ wird das horizontale Windfeld durch die zeitlich konstanten Komponenten des geostrophischen Windes definiert:

$$\begin{aligned} \hat{u}(z=H) &= u_g \\ \hat{v}(z=H) &= v_g \end{aligned}$$

Da am Einströmrand von horizontal homogenen Verhältnissen ausgegangen wird, ist die Vertikalkomponente \hat{w} im gesamten Randmodell gleich Null und wird somit nicht extra berechnet.

An der Oberkante des dreidimensionalen Kernmodells wird ein geschlossener Modellrand vorausgesetzt. Hieraus folgt, daß alle im Modellgebiet erzeugten Störungen abgeklungen sind. In dieser Höhe entsprechen die Geschwindigkeitskomponenten den Werten aus dem eindimensionalen Randmodell:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial u^{aux}}{\partial x} \right|_{z=Z} &= \left. \frac{\partial u^{aux}}{\partial y} \right|_{z=Z} = 0 \\ \left. \frac{\partial v^{aux}}{\partial x} \right|_{z=Z} &= \left. \frac{\partial v^{aux}}{\partial y} \right|_{z=Z} = 0 \\ u^{aux}(z=Z) &= \hat{u}(z=Z) \\ v^{aux}(z=Z) &= \hat{v}(z=Z) \\ w^{aux}(z=Z) &= 0 \end{aligned}$$

Für den Stördruck p' wird am Oberrand ein Verschwinden des Normalgradienten festgesetzt:

$$\left. \frac{\partial p'}{\partial z} \right|_{z=Z} = 0$$

Hierdurch gilt auch automatisch:

$$u_i^{n+1} = u_i^{aux}$$

3.1.6 Initialisierung

Die Initialisierung des Strömungsfeldes läuft in mehreren Stufen ab, da zu jedem Zeitpunkt gewährleistet sein muß, daß ein quasi divergenzfreies Strömungsfeld als Ausgangspunkt für die prognostische Neuberechnung des Windfeldes vorhanden ist.

Zunächst wird, wie bei allen anderen Prognosegrößen auch, das eindimensionale Randmodell initialisiert. Ausgehend von der vorgegebenen mesoskaligen Rauigkeitslänge des Bodens \hat{z}_0 , der horizontalen Windgeschwindigkeit \mathbf{u}_{10m} in Anemometerhöhe 10 m sowie der Anströmungsrichtung Π wird zunächst die Windgeschwindigkeit an allen Gitterpunkten des Randmodells unter der Annahme einer neutralen Schichtung initialisiert. Die beiden horizontalen Komponenten des geostrophischen Windfeldes (u_g, v_g) bei $z = H$ sind

$$u_g = \mathbf{u}_{10m} \cdot \ln \left(\frac{H}{\hat{z}_0} \right) \ln \left(\frac{10}{\hat{z}_0} \right)^{-1} \sin \Pi \quad (3.18a)$$

$$v_g = \mathbf{u}_{10m} \cdot \ln \left(\frac{H}{\hat{z}_0} \right) \ln \left(\frac{10}{\hat{z}_0} \right)^{-1} \cos \Pi \quad (3.18b)$$

Die Windgeschwindigkeit in den einzelnen Rechenniveaus z berechnen sich dann mit

$$\hat{u}(z) = u_g \cdot \ln \left(\frac{z}{\hat{z}_0} \right) \ln \left(\frac{H}{\hat{z}_0} \right)^{-1} \quad (3.19a)$$

$$\hat{v}(z) = v_g \cdot \ln \left(\frac{z}{\hat{z}_0} \right) \ln \left(\frac{H}{\hat{z}_0} \right)^{-1} \quad (3.19b)$$

Ausgehend von dem so erzeugten logarithmischen Vertikalprofil werden die eindimensionalen Bewegungsgleichungen des Randmodells solange integriert, bis sich ein stationärer Zustand einstellt.

Die Erzeugung des dreidimensionalen Ausgangsströmungsfeldes ist, im Gegensatz zur dreidimensionalen Initialisierung der übrigen prognostischen Größen, nicht trivial. Der Grund hierfür liegt in der Tatsache, daß für jeden Rechenschritt ein zumindest annähernd divergenzfreies Strömungsfeld als Ausgangszustand vorhanden sein muß. Außerdem sollte dieses Windfeld nicht zu stark von der im folgenden Rechenschritt prognostizierten Strömungsverteilung abweichen, da das Verfahren sonst möglicherweise nicht konvergiert. Es ist somit nicht möglich, das eindimensionale Windfeld als Ausgangsfeld auf alle Gitterpunkte des dreidimensionalen Modells umzusetzen und dann im nächsten Rechenschritt auf den Gebäudewänden die Strömungskomponenten direkt auf Null zu setzen.

In numerischen Modellen wird aus diesem Grund eine *Diastrophiephase* der eigentlichen Simulation vorangestellt, bei der sich das Strömungsfeld langsam an die Struktur des Untersuchungsgebietes anpaßt.

In Modellen, die einen reliefierten Untergrund berücksichtigen können, wie beispielsweise FITNAH (Gross, 1991) oder FOOT-3D (Kerschgens *et al.*, 1994) besteht diese Phase aus einem allmählichen Anheben des ursprünglich planen Untergrundes bis das vorgegebene Relief erreicht ist. Durch diese allmähliche Änderung der Rahmenbedingungen weichen die jeweils aufeinanderfolgend prognostizierten Strömungsfelder nur wenig voneinander ab, so daß eine konvergente Lösung sichergestellt ist. Dieses Diastrophiekonzept läßt sich sinngemäß auch auf mikroskalige Modelle mit planem Untergrund und inneren Hindernissen (Gebäude u.ä.) übertragen.

Im Modell ENVI-met wird zur Initialisierung des Windfeldes ein dreistufiges Diastrophieverfahren verwendet, das sicherstellt, daß zu jeder Zeit ein divergenzarmes Strömungsfeld zur Verfügung steht. Im ersten Schritt wird das eindimensionale Windfeld auf alle Gitterpunkte im dreidimensionalen Modell umgesetzt. Auf den Hinderniswänden werden ebenfalls die jeweiligen Strömungskomponenten übernommen. Mit diesem Ausgangsströmungsfeld wird die erste prognostische Neuberechnung des Windfeldes vorgenommen, bei der neben den unterschiedlichen Bodenrauigkeiten auch poröse Hindernisse bereits berücksichtigt werden.

In den nächsten beiden Schritten werden nun die Strömungskomponenten auf den Hinderniswänden langsam abgebremst. Zunächst werden sie auf 50% der ursprünglichen Geschwindigkeit verringert und im zweiten Schritt schließlich auf 0% gesetzt. Dieses entspricht der im Modell vereinbarten *No-Slip*-Bedingung. Nach jedem Schritt wird das Windfeld neu berechnet, wobei sich der Stördruckgradient langsam aufbauen kann und so die Stabilität des Verfahrens gewährleistet ist.

Den Diastrophieschritten schließt sich eine Neuberechnung des Windfeldes an, wobei hier über den festgelegten Zeitraum von 10 sec integriert wird. Während dieser Zeit wird das Windfeld quasi-stationär und die Wirbelstrukturen bilden sich aus. Das so berechnete Strömungsfeld kann so als Ausgangsfeld in der eigentlichen Modellsimulation verwendet werden.

3.1.7 Prognose des Windfeldes im Gesamtmodell

Die Prognose des dreidimensionalen Windfeldes verursacht einen hohen Rechenaufwand, da einerseits die Zahl der benötigten Rechenschritte sehr hoch ist und andererseits nur mit kleinen Zeitschritten gearbeitet werden kann, um die Druckstörungen innerhalb des vorgegebenen Gitters erfassen zu können (siehe Kapitel 6, S.81 ff.).

Da im mikroskaligen Maßstab keine zeitabhängigen thermischen Windsysteme simuliert werden sollen, genügt es, das Strömungsfeld in regelmäßigen Abständen den veränderten thermischen Bedingungen im Modellgebiet anzupassen, also quasi diagnostisch zu berechnen. Hierbei wird das Windfeld solange berechnet, bis sich stationäre Verhältnisse einstellen. Bei geringen Windgeschwindigkeiten wirken sich thermische Kräfte wesentlich stärker auf das Strömungsfeld aus als bei einer starken Durchmischung der Luft, so daß eine Aktualisierung des Windfeldes häufiger erfolgen sollte. Das eindimensionale Windprofil am Einströmrand wird mit jedem Zeitschritt neu berechnet, da hier der numerische Aufwand gering ist.

3.2 Das Temperatur- und Feuchtefeld

Die Verteilung der Temperatur und Feuchte kann aus dem aktuellen Strömungsfeld, den turbulenten Austauschkoeffizienten sowie den lokalen Quellen und Senken innerhalb des Modellgebietes bestimmt werden.

3.2.1 Die Grundgleichungen

Das Temperatur- und Feuchtefeld in der Atmosphäre läßt sich über die kombinierte Diffusions-Advektionsgleichung mit internen Quellen und Senken für die potentielle Temperatur θ und die spezifische Feuchte q beschreiben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + v \frac{\partial \theta}{\partial y} + w \frac{\partial \theta}{\partial z} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_h \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_h \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_h \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) \\ & + \frac{1}{c_p \rho} \nabla R_{lw}(x, y, z) + Q_\theta(x, y, z) \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + u \frac{\partial q}{\partial x} + v \frac{\partial q}{\partial y} + w \frac{\partial q}{\partial z} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_v \frac{\partial q}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_v \frac{\partial q}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_v \frac{\partial q}{\partial z} \right) \\ & + Q_q(x, y, z) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Der Temperatur- und Feuchtefluß an Pflanzen wird über lokale Quell- und Senkterme Q_θ und Q_q in das Atmosphärenmodell integriert. Beide Terme werden vom Vegetationsmodell bereitgestellt und sind dort eingehend beschrieben (siehe Kapitel 5, S.73 ff.). K_h und K_v sind die turbulenten Austauschkoeffizienten für Wärme und Wasserdampf. Die Veränderung der Lufttemperatur durch die Divergenz langwelliger Strahlungsflüsse ∇R_{lw} wird in dieser Modellversion nicht berücksichtigt, da es innerhalb komplexer Geometrien sehr schwierig ist, diese Größe zu bestimmen. Es wird somit festgesetzt:

$$\frac{1}{c_p \rho} \nabla R_{lw} = 0$$

Ebenso wird die Phasenumwandlung von Wasserdampf in Wasser und umgekehrt innerhalb der Luft nicht berücksichtigt. Es wird somit davon ausgegangen, daß die relative Luftfeuchtigkeit immer unterhalb von 100% liegt.

V3.0

In der praktischen Anwendung von ENVI-met hat es sich gezeigt, dass die Vernachlässigung der Strahlungskühlung dazu führt, dass die Lufttemperatur in ENVI-met während der Nachtstunden oft nicht ausreichend abfällt und oft nur wenige zehntel Kelvin unter die Temperatur am Oberrand des Modells (Initialisierungsvorgabe) fällt.

Aus diesem Grund wurde beschlossen, ab Version 3.0 die Strahlungskühlung bzw. -erwärmung sowohl im eindimensionalen als auch im dreidimensionalen Modell wieder zu aktivieren. Da eine Lösung der Strahlungsübertragung im dreidimensionalen Raum vor allem unter Berücksichtigung der verschieden temperierten Objekte (Gebäudewände, Vegetation) zu komplex würde, wird ausschließlich der vertikale Strahlungsfluss berücksichtigt und zudem die Vereinfachung einer isothermen Atmosphäre verwendet.

Im eindimensionalen Fall erhält man für die Veränderung der Lufttemperatur aufgrund langwelliger Strahlungsdivergenz die Formulierung

$$S_{\theta} = \left. \frac{\partial \theta}{\partial t} \right|_{rad} = -\frac{1}{c_p \rho} \frac{\partial R_{lw}}{\partial z}$$

wobei $\partial R_{lw}/\partial z$ der vertikale Gradient der absorbierten langwelligen Strahlung ist. Die genaue Bestimmung dieses Terms ist im Kapitel 3.4.1.1 S. 50 detailliert dargestellt.

3.2.2 Randbedingungen des Temperatur- und Feuchtefeldes

3.2.2.1 Einströmränder Die Bestimmung der Randbedingungen für die Temperatur und die Feuchte in einem mikroskaligen Modell ist recht kompliziert.

Als Grundgleichungen für das vertikale Temperatur- und Feuchteprofil am Einströmrand werden die Gleichungen (3.20) und (3.21) in der eindimensionalen vertikalen Form verwendet:

$$\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \hat{K}_h \left(\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial z} \right) \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial \hat{q}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \hat{K}_v \left(\frac{\partial \hat{q}}{\partial z} \right) \quad (3.23)$$

Wie auch beim Strömungsmodell sollen diese Profile die mittleren mesoskaligen Verhältnisse außerhalb des Modellgebiets darstellen. Für das Temperatur- und Feuchtefeld ist es jedoch wesentlich komplizierter, geeignete Randbedingungen zu finden, da beide Profile einen realistischen Tagesgang der beiden Prognosegrößen reproduzieren müssen. Das vertikale Temperaturprofil am Einströmrand dient zudem als Referenzprofil für den angenommenen ungestörten Zustand der Atmosphäre.

An den Einströmrändern des Kernmodells werden die Werte aus dem eindimensionalen Randprofil übernommen

$$\begin{aligned}\theta(0..X, 0, z) &= \theta(0, 0..Y, z) = \hat{\theta}(z) \\ q(0..X, 0, z) &= q(0, 0..Y, z) = \hat{q}(z)\end{aligned}$$

Ab Version 2.5 ist es möglich, die Feuchte- und Temperaturfelder auch mit offenen Randbedingungen zu simulieren. In diesen Fällen gilt:

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{x=1} &= \left. \frac{\partial \theta}{\partial y} \right|_{y=1} = 0 \\ \left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_{x=1} &= \left. \frac{\partial q}{\partial y} \right|_{y=1} = 0\end{aligned}$$

Werden diese Randbedingungen verwendet, entfällt die Verwendung des eindimensionalen Profils für den Einströmrund. Am Oberrand bleibt jedoch nach wie vor der Referenzwert des eindimensionalen Modells maßgebend (siehe Modelloberrand).

Bei der Verwendung von offenen Rändern ist es nun allerdings nötig, die Definition der Referenztemperatur $\hat{\theta}$ zu verändern, da das Randmodell nicht mehr als repräsentativ für die Einströmbedingungen ist. Bei offenen Rändern wird nun für jede vertikale Schicht k eine gesonderte mittlere Referenztemperatur θ_{ref} berechnet:

$$\theta_{ref}(k) = \frac{1}{i \cdot j} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \theta_{i,j,k}$$

Gitterzellen, die von Gebäuden belegt sind ($\delta^c = 0$) gehen nicht in die Mittelung ein. Die so ermittelte Referenztemperatur wird in den maßgeblichen Gleichungen (w -Komponente der Strömung, Turbulenzgleichungen) anstelle des 1D-Modellwertes $\hat{\theta}(k)$ verwendet.

3.2.2.2 Ausströmränder Die Behandlung der Ausströmränder für das Temperatur- und Feuchtefeld ist unproblematisch, da hier nur dafür gesorgt werden muß, daß die im Modellgebiet verursachten Störungen das Gebiet ohne Reflexionseffekte verlassen können. Da das eigentliche Untersuchungsgebiet von mehreren Randgitterzellen mit nach außen zunehmender Maschenweite umrahmt wird („*Nesting-Zellen*“, siehe Abschnitt 2.1, S.7), ist der eigentliche Modellrand ausreichend weit von dem Kernmodell entfernt, so daß hier einfache Null-Gradient-Bedingungen ausreichend genau sind:

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{x=X} &= \left. \frac{\partial \theta}{\partial y} \right|_{y=Y} = 0 \\ \left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_{x=X} &= \left. \frac{\partial q}{\partial y} \right|_{y=Y} = 0\end{aligned}$$

3.2.2.3 Bodengrenzfläche und Hinderniswände Die Grenzflächenwerte für die Temperatur (T_0 für die Bodengrenzfläche bzw. T_w für die Wand- und Dachflächen) sowie für die Feuchte (q_0 bzw. q_w) werden außerhalb der eigentlichen Temperatur- und

Feuchteprognose berechnet und sind vor dem jeweiligen prognostischen Rechenschritt bekannt. Zwischen der im Boden- und Grenzflächenmodell definierten absoluten Temperatur T und der im Atmosphärenmodell gültigen potentiellen Temperatur θ gilt die Beziehung

$$\theta(z) = T(z) \left(\frac{p_0}{p(z)} \right)^{\frac{R_f}{c_p}} \quad (3.24)$$

Hierbei ist R_f die Gaskonstante der trockenen Luft ($287 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$) und c_p die spezifische Wärme der Luft bei Referenzdruck ($1847 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$).

An der Bodengrenzfläche gilt der im Modell festgelegte Referenzdruck $p(z=0) = p_0$, wodurch hier Identität zwischen T und θ besteht und beide Größen parallel verwendet werden können. Aufgrund der geringen vertikalen Erstreckung des Kernmodells gilt dieses auch ohne Einschränkung der Allgemeinheit für die Wand- und Dachflächen der Gebäude, so daß alle Grenzflächenwerte direkt in die Berechnung des Temperaturfeldes integriert werden können. Durch das Windfeld hervorgerufene Staudrucke sind in diesem Zusammenhang ebenfalls im Vergleich zum Gesamtdruck der Atmosphäre vernachlässigbar klein.

Die Bestimmung der Grenzflächenwerte \hat{T}_0 und \hat{q}_0 für das eindimensionale Randmodell ist etwas komplizierter, da hier realistische mittlere Zustände repräsentiert werden sollen.

Durch die *Nesting-Zellen* bietet ENVI-met die Möglichkeit, Austauschprozesse, die außerhalb des eigentlichen Untersuchungsgebiets stattfinden in das Modell zu integrieren. Hierbei handelt es sich allerdings um ein recht einfaches System, daß nur näherungsweise in der Lage ist, realistische Randbedingungen zu erzeugen.

Das *Chess-Nesting-Verfahren* sorgt dafür, daß die beiden vorgegebenen mesoskaligen Bodenprofiltypen jeweils alternierend angeordnet sind. Hierdurch kann die gesuchte mittlere Temperatur und Feuchte für das eindimensionale Randmodell als Mittelwert der Oberflächenwerte der jeweils ersten Gitterpunktreihe an den Einströmrändern definiert werden. Für Einströmränder bei $x = 0$ und $y = 0$ ergibt sich für die Temperatur die Zuweisung:

$$\hat{T}_0 = 0.5 \left(\frac{1}{X} \sum_{x=0}^X T(x, 0, 0) + \frac{1}{Y} \sum_{y=0}^Y T(0, y, 0) \right) \quad (3.25)$$

Für die Oberflächenfeuchte erfolgt die Berechnung analog. Theoretisch sind auch andere Verfahren zur Bildung der mittleren Oberflächenwerte denkbar. Bei der Entwicklung des Modells hat es sich jedoch gezeigt, daß es nicht sinnvoll ist, eine starke Rückkopplung zwischen den im Kernmodell berechneten Oberflächenwerten und den Einströmwerten zuzulassen, wie sie beispielsweise bei der Berechnung des Mittelwertes über alle Gitterzellen entstehen würde. In diesen Fällen hat sich bei der Temperatur eine Tendenz zur positiven Rückkopplung der Abkühlungs- und Aufwärmungsprozesse herausgebildet. Zudem ist die qualitative Bewertung der Ergebnissfelder schwer, da keine vom Modellgebiet unabhängigen Referenzwerte zur Verfügung stehen.

3.2.2.4 Modelloberrand Die Temperatur am Oberrand $z = Z$ des Kernmodells wird, wie bei allen Größen, unter der Annahme, daß die Störungen innerhalb des Modells abgeklungen sind, aus dem eindimensionalen Randmodell übernommen:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{z=Z} &= \left. \frac{\partial \theta}{\partial y} \right|_{z=Z} = 0 & \theta(z=Z) &= \hat{\theta}(z=Z) \\ \left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_{z=Z} &= \left. \frac{\partial q}{\partial y} \right|_{z=Z} = 0 & q(z=Z) &= \hat{q}(z=Z) \end{aligned}$$

Die Temperatur und Feuchte am Oberrand des eindimensionalen Randmodells $z = H$ werden während der Simulationszeit konstant gehalten und entsprechen dem bei der Initialisierung für diese Höhe berechneten Wert:

$$\begin{aligned} \hat{\theta}(z=H) &= \theta_{\text{start}} = \text{const.} \\ \hat{q}(z=H) &= q_H = \text{const.} \end{aligned}$$

3.2.3 Initialisierung

Die Lufttemperatur wird an allen Gitterpunkten des Randmodells unter der Annahme einer neutralen Schichtung mit dem vorgegebenen Startwert θ_{start} initialisiert. Die Oberflächentemperaturen werden auf den Startwert der Bodentemperaturen $T_{\text{start},s}$ gesetzt.

$$\hat{\theta}(0..H) = \theta_{\text{start}} \quad (3.26)$$

$$T_0 = T_{\text{start},s} \quad (3.27)$$

Für die spezifische Feuchte q liegen zwei Ausgangsinformationen vor: Die relative Feuchte f_{rel} in 2m Höhe sowie die spezifische Feuchte am Modelloberrand q_H . Ausgehend von dem Temperaturprofil wird die Sättigungsfeuchte q^* und die spezifische Feuchte in 2m Höhe (q_{2m}) berechnet. Die Ausgangswerte für die übrigen Prognosehöhen können nun aus dem resultierenden Feuchtegradienten zum Modelloberrand berechnet werden:

$$\begin{aligned} q_{2m} &= q^*(z=2m) \cdot f_{\text{rel}} \\ \hat{q}(z) &= q_{2m} + (z-2) \frac{q_{2m} - q_H}{2-H} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Nach der Initialisierung wird das eindimensionale Profil solange integriert, bis sich ein quasi-stationärer Zustand einstellt. Hierbei entwickelt sich auch die thermische Schichtung der Atmosphäre, sofern für den Boden und die Luft unterschiedliche Startwerte für die Temperatur vorgegeben wurden.

Anschließend wird das so berechnete Temperatur- und Feuchteprofil homogen auf das dreidimensionale Modell umgesetzt. Zu diesem Zeitpunkt steht bereits ein durch die Gebäude modifiziertes Strömungsfeld zur Verfügung, so daß sich in der anschließenden dreidimensionalen Initialisierungsphase das Temperatur- und Feuchtefeld den Strömungsverhältnissen anpassen kann. Die eigentliche dreidimensionale prognostische Berechnung beginnt, sobald sich quasi-stationäre Verhältnisse eingestellt haben.

3.3 Modellierung der turbulenten Austauschprozesse in der Atmosphäre

Die Bestimmung der turbulenten Austauschprozesse ist nicht-trivial und erfordert zahlreiche theoretische Überlegungen und Modelle, da sich diese Vorgänge, im Gegensatz zu den bisher eingeführten Größen, nicht unmittelbar herleiten lassen.

3.3.1 Turbulenzparameterisierung im mikroskaligen Modell

Turbulente Prozesse in der Natur laufen chaotisch ab. Um sie numerisch erfassen zu können, müssen Modellvorstellungen entwickelt werden, die diese Vorgänge linearisieren und damit analytisch beschreibbar machen. Verallgemeinert können Austauschprozesse als Fluß einer beliebigen skalaren Größe ϕ dargestellt werden: Der Momentanwert der Flußdichte \mathbf{j} zu einem Zeitpunkt t ist hierbei das Produkt aus der Konzentration von ϕ an einem Punkt und der Flußgeschwindigkeit \mathbf{u} des transportierenden Mediums:

$$\mathbf{j} = \mathbf{u} \cdot \phi \quad (3.29)$$

Beide Terme können in einen zeitlich stationären Mittelwert ($\bar{\mathbf{u}}, \bar{\phi}$) und eine fluktuierende (\mathbf{u}', ϕ') Komponente aufgesplittet werden (Konzept der *Reynolds-Zerlegung*):

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.30a)$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \quad (3.30b)$$

Setzt man (3.30a) und (3.30b) in (3.29) ein und integriert \mathbf{j} über einen Betrachtungszeitraum t zu $\mathbf{J} = \int^t \mathbf{j} \, dt$, so lassen sich alle zeitlich konstanten Terme zusammenfassen:

$$\mathbf{J} = \bar{\mathbf{u}}\bar{\phi} + \overline{\mathbf{u}'\phi} + \bar{\mathbf{u}}\phi' + \overline{\mathbf{u}'\phi'}$$

Die Fluktuationen der Einzelgrößen um ihren Mittelwert (ϕ', \mathbf{u}' , zweiter und dritter Term) sind im Zeitmittel definitionsgemäß gleich Null. Für die zeitlich gemittelte Flußdichte erhält man somit den Ausdruck

$$\mathbf{J} = \bar{\mathbf{u}}\bar{\phi} + \overline{\mathbf{u}'\phi'}$$

wobei der zweite Term der gesuchte turbulente Anteil des Massenstroms ist, während der erste Term die Advektion von ϕ beschreibt.

Die turbulenten Austauschprozesse selber lassen sich numerisch nicht direkt beschreiben, sondern müssen über sogenannte *Turbulenzschließungen* als Näherungswert aus bekannten oder bestimmbar Größen hergeleitet werden.

Schließungsansätze für die Modellierung atmosphärenphysikalischer Prozesse lassen sich grob in vier Gruppen gliedern. Hierbei läßt der Grad der Schließung Rückschlüsse auf die Zahl der benötigten Prognosegrößen zu (je höher die Ordnung desto größer die Zahl der Variablen):

- lokale Schließungen erster Ordnung (Mischungswegansatz)
- lokale Schließungen zweiter und höherer Ordnung
- nicht-lokale Schließungen erster und höherer Ordnung

- lokale Schließungen 1.5 Ordnung (E- ϵ Ansatz)

Im Folgenden wird ein kurzer Überblick über die verschiedenen Schließungsansätze und die Anwendbarkeit im Rahmen dieses Modells gegeben.

3.3.1.1 Lokale Schließungen erster Ordnung (Mischungswegansatz) Schließungen erster Ordnung beschreiben den turbulenten Austausch einer Größe ϕ über einen Austauschkoeffizienten K_ϕ und den Gradienten der Größe in der betrachteten Raumrichtung i , weshalb sie auch als *Gradientansätze* bezeichnet werden:

$$J_i^{\text{turb}}(\phi) = K_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = -\overline{u'_i \phi'}$$

Die Austauschkoeffizienten werden hierbei direkt aus einer oder mehreren bekannten primitiven Größen (Strömungsgeschwindigkeit, Temperatur oder Feuchte) abgeleitet. Bei meteorologischen Grenzschichtmodellierungen kann der von Blackadar (1962) formulierte *Mischungswegansatz* zuzüglich diverser Erweiterungen durch andere Autoren als Standard angesehen werden.

Die turbulenten Austauschkoeffizienten werden beim Mischungswegansatz aus der lokalen Windscherung und einer vordefinierten Mischungslänge hergeleitet. Der Einfluß der thermischen Schichtung der Atmosphäre kann durch die Verwendung empirischer Skalierungsfunktionen in das Schema eingearbeitet werden (Wang und Takle, 1995; Sievers *et al.*, 1987). Trotz seiner Einfachheit liefert dieses Verfahren bei der Simulation der atmosphärischen Grenzschicht über homogenem Gelände eine gute Übereinstimmung mit gemessenen Werten. Durch seinen unkomplizierten numerischen Aufbau und den damit verbundenen geringen Rechenzeiten erfreute sich dieses Verfahren vor allem in den Anfangstagen der mikro- und mesoskaligen Modellierung großer Beliebtheit.

Allerdings besitzt dieser Ansatz eine Reihe von Nachteilen, die seine Anwendbarkeit bei der Untersuchung dynamischer Prozesse in inhomogenen Gelände wie Straßenschluchten oder Vegetationsbeständen stark einschränken. Der gravierendste Nachteil ist, daß der Ansatz die explizite Bestimmung eines vertikalen Mischungsweges verlangt, was in der Nähe von Hindernissen nicht möglich ist. Weiterhin kann der advektive Transport von Turbulenzelementen nicht simuliert werden. Letzteres ist gerade im Bereich von Städten, wo zahlreiche Hindernisse auf engem Raum nebeneinander stehen von großer Bedeutung.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß Schließungsansätze erster Ordnung, zumindest im Kernmodell, im Hinblick auf die zu untersuchenden Phänomene nur mit zahlreichen Vorbehalten anwendbar sind.

3.3.1.2 Lokale Schließungen zweiter und höherer Ordnung Turbulenzschließungen zweiter Ordnung kommen ohne die explizite Bestimmung von Mischungslängen und Austauschkoeffizienten aus, da hier die turbulenten Flüsse direkt bestimmt werden. Sie benötigen zur Bestimmung der turbulenten Prozesse eine große Zahl von zusätzlichen Gleichungen und zu bestimmenden Konstanten. Bei der mehrdimensionalen Modellierung von atmosphärischen Prozessen haben Schließungen zweiter und höherer Ordnung aufgrund der sehr hohen Rechenzeiten praktisch keine Bedeutung und werden hier nicht weiter betrachtet.

3.3.1.3 Nicht-lokale Schließungen erster und höherer Ordnung Nicht-lokale Schließungen erlauben, im Gegensatz zu den bisher aufgelisteten lokalen Schließungsansätzen, einen direkten Transport der verschiedenen Prognosegrößen von einem Ausgangspunkt zu theoretisch jedem Zielpunkt innerhalb des Modellraumes. Bei lokalen Schließungen ist dieses nicht möglich, da hier nur Austauschprozesse zwischen jeweils benachbarten Berechnungspunkten betrachtet werden können. Ein weiterer Vorteil ist, daß Flüße entgegen dem Gradienten (*Counter-Gradient-Fluxes*), wie sie beispielsweise in Vegetationsbeständen vorkommen, simuliert werden können. Dieses ist mit anderen Schließungsansätzen nur sehr beschränkt möglich. Als Beispiel für nicht-lokale Schließungsansätze sei die von Stull (1993) entwickelte *Transilient Turbulence Theory* erwähnt. Diese Verfahren sind eine interessante Alternative zu herkömmlichen Schließungen, benötigen jedoch im dreidimensionalen Fall zu viel Speicherplatz, da die Beziehungen zwischen allen Gitterzellen gleichzeitig betrachtet werden müssen. Mit steigender Rechnerkapazität werden diese Ansätze in Zukunft eine zunehmend wichtigere Rolle spielen.

3.3.1.4 Lokale Schließungen 1.5 Ordnung (E- ϵ Ansatz) Die vierte und für dieses Modell entscheidende Gruppe von Parameterisierungen basiert auf dem von Mellor und Yamada (1974, 1982) vorgeschlagenen Kompromiß zwischen der Einfachheit von Schließungen erster Ordnung und den Vorteilen der Schließungen zweiter Ordnung und wird als Schließung 1.5ter Ordnung bezeichnet.

Zur Bestimmung der Austauschkoeffizienten werden zwei zusätzlich abgeleitete Variablen eingeführt und wie unabhängige Größen behandelt. Diese zusätzlichen Variablen sind die *turbulente kinetische Energie TKE* (E) und deren *Auflösungsrate* ($=Dissipation$) (ϵ). Durch die eigenständige Behandlung des $E - \epsilon$ Systems unterliegt dieser Ansatz nicht mehr den oben genannten Einschränkungen der Schließungen erster Ordnung: Advektionsvorgänge können simuliert werden und der Einfluß von horizontalen Inhomogenitäten und porösen Körper kann durch die Formulierung der entsprechenden Grenzbedingungen im Gleichungssystem erfaßt werden.

Das so entstehende Turbulenzmodell wird als $E - \epsilon$ Modell bezeichnet. Ursprünglich wurden $E - \epsilon$ Modelle zur Simulation stark an-isotropischer Fluidströmungen in Rohren und Kanälen entwickelt (Launder und Spalding, 1974) und erst in den letzten zehn Jahren auf atmosphärendynamische Fragestellungen erweitert.

Die Formulierung und Anwendung von $E - \epsilon$ -Modellen allgemein und in der Grenzschichtdynamik im Speziellen bringt neben zahlreichen Vorteilen jedoch auch eine Reihe Nachteile mit sich, die später im Abschnitt 3.3.3 betrachtet werden sollen.

3.3.2 Die prognostischen Gleichungen zur Beschreibung der lokalen Turbulenz

Der Zusammenhang zwischen den gesuchten turbulenten Flüssen in (3.30a) und der kinetischen Energie ist definiert als:

$$E = \frac{\overline{u'u'} + \overline{v'v'} + \overline{w'w'}}{2} \quad (3.31)$$

Hierbei wird davon ausgegangen, daß die lokale Turbulenz isotrop ist, also die turbulenten Flüsse vom Betrachtungsort aus in alle Raumrichtungen gleich stark sind.

Das eigentliche $E - \epsilon$ Modell besteht aus zwei gekoppelten Gleichungen: **Differentialgleichung I** beschreibt die Entstehung und den Transport der kinetischen Energie (Prognosegröße E), während **Differentialgleichung II** die Auflösung der mit (I) beschriebenen Turbulenzelemente parameterisiert (Prognosegröße ϵ).

Bei größerskaligen atmosphärischen Prozessen oder bei horizontal homogenen Verhältnissen kann System (II) in (I) eingesetzt werden, so daß unter der Annahme eines lokalen Gleichgewichtes zwischen Turbulenzentstehung und -auflösung nur eine prognostische Gleichung zu lösen ist (vergl. z.B. Gross, 1991). Im Bereich urbaner Strukturen kann jedoch nicht von einem solchen Gleichgewicht ausgegangen werden, da an Häusern und Vegetationselementen Turbulenz erzeugt wird, die erst an anderer Stelle nach erfolgter Advektion wieder abgebaut wird. Somit muß für die vorliegende Fragestellung das komplette Gleichungssystem verwendet werden.

3.3.2.1 System I: Prognose der lokalen turbulenten Energie (E) Die prognostische Gleichung für die lokale turbulente Energie enthält neben dem üblichen Advektionsanteil $-\mathbf{u}\nabla E$ und Diffusionsanteil $\nabla(K_E \nabla E)$ einige Zusatzterme, auf die im Folgenden kurz eingegangen werden soll.

Aufgesplittet in verschiedene Einflußgrößen läßt sich die prognostische Gleichung für die kinetische Energie symbolisch schreiben als

$$\frac{\partial E}{\partial t} - \mathbf{u}\nabla E = \nabla(K_E \nabla E) + T_P + T_T + T_D + Q_E - \epsilon \quad (3.32)$$

Produktionsterm T_P

Der Produktionsterm T_P beschreibt die Entstehung kinetischer Energie durch die bei der Scherung des Windfeldes entstehende Impulsänderung. Im dreidimensionalen Fall ist die Herleitung der so resultierenden Kräfte nicht trivial, da neben den Geschwindigkeitsänderungen in Richtung der Normalen der Strömungsvektoren auch die dreidimensionale Rotationen des Vektorfeldes zu berücksichtigen ist. Zur Parameterisierung dieser Kräfte kann das 2. *Newton'sche Gesetz* als Ausgangspunkt genommen werden. Hiernach ist die zeitliche Änderung des Impulses gleich der Summe der Kräfte, die auf ein Fluid wirken. Als relevante Kräfte treten hierbei Volumenkräfte und Oberflächenkräfte auf, wobei erstere im wesentlichen auf Fluktuationen der Dichte zurückzuführen sind und somit im Boussinesq-approximierten Modellsystem herausfallen. Es verbleiben die auf ein Volumenelement wirkenden Oberflächenkräfte, die über den dreidimensionalen Deformationstensor des Vektorfeldes $\Omega(\mathbf{u})$ dargestellt werden können, dessen lokale Divergenz die Entstehung von kinetischer Energie beschreibt:

$$T_P = K_m \nabla \Omega(\mathbf{u}) \quad (3.33)$$

Die Divergenz des Deformationstensors ist im dreidimensionalen Fall definiert als

$$\nabla \Omega(\mathbf{u}) = \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right]_{i,j=1,2,3} \quad (3.34)$$

Für den gesamten Produktionsterm ergibt sich somit die Formulierung

$$T_P = K_m \left\{ 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right\} \quad (3.35)$$

Im eindimensionalen Fall verschwinden aufgrund der angenommenen horizontalen Homogenität die Ableitungen der Strömungskomponenten nach x und y , außerdem ist w am Rand immer gleich Null. Als Produktionsterm im eindimensionalen Randmodell ergibt sich somit:

$$\hat{T}_P = K_m \left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right\} \quad (3.36)$$

Thermikterm T_T

Der Einfluß der thermischen Schichtung auf die Turbulenz wird über den Thermikterm T_T in die Prognosegleichung integriert. Die Parameterisierung erfolgt über die turbulente Fluktuation der potentiellen Temperatur ($w'\theta'$). Für die Schließung dieses Ausdruckes wird ein einfacher Gradientansatz verwendet, wobei analog zum Auftriebsterm in der w -Komponente der Bewegungsgleichung (siehe 3.7c, S.17) die lokale Temperatur in Beziehung zur Referenztemperatur $\hat{\theta}$ am Einströmrand gesetzt wird. Hier ergibt sich die Beziehung

$$T_T = \frac{g}{\hat{\theta}} \overline{w'\theta'} = -\frac{g}{\hat{\theta}} K_h \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (3.37)$$

Für die Berechnung des eindimensionalen Randprofils steht keine Referenztemperatur zur Verfügung. Die Schließung wird hier unter Verwendung des Expansionskoeffizienten für trockene Luft β ($=0.00353 \text{ K}^{-1}$) durchgeführt und lautet :

$$\hat{T}_T = g\beta \overline{w'\theta'} = -g\beta K_h \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (3.38)$$

Druckterm T_D

Der Term T_D beschreibt den druck-induzierten Transport der kinetischen Energie und kann mit

$$T_D = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p'u_i'}}{\partial x_i} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_m \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)$$

parameterisiert werden. Dieser Term wird im Modell jedoch nicht verwendet, da über seinen Beitrag zum Budget der kinetischen Energie bislang keine gesicherten Erkenntnisse vorliegen.

Quellterm Q_E

Als weitere Komponente ist die Entstehung bzw. Vernichtung von Turbulenz aufgrund poröser durchströmbarer Elemente (z.B. Vegetation) zu berücksichtigen. Diese lokalen Quellen werden über den Quelleterm Q_E explizit in die Gleichung integriert. Liu *et al.* (1996) und Wilson (1988) schlagen hierzu die Formulierung

$$Q_E = c_{d,p} \text{LAD}(z) W^3 - 4c_{d,p} \text{LAD}(z) |W| E \quad (3.39)$$

vor. Hierbei ist $c_{d,p}$ analog zum Senkterm in den Bewegungsgleichungen der Drag-Koeffizient an den Pflanzenblättern und W der Betrag der Windgeschwindigkeit in der Bezugshöhe. Der rechte Term berücksichtigt die Tatsache, daß durch Vegetation nicht nur Turbulenz erzeugt wird (Umwandlung von Impuls in TKE), sondern daß dort ebenso vorhandene Wirbel mit großer Turbulenzenergie zu schwächeren kleineren Wirbel abgebremst werden (Umwandlung TKE zu WKE = *Weak Turbulent Kinetic Energy*, vergl. Liu *et al.*, 1996).

Dissipation ϵ

Die turbulente kinetische Energie ist, wie bereits angedeutet, keine massenerhaltende Größe. Wird sie nicht ständig neu erzeugt, so baut sie sich aufgrund der viskosen Reibungskräfte in der Luft wieder ab. Diese Reduktionsrate wird durch Subtraktion der Dissipation ϵ in die Gleichung integriert.

Als komplettes Gleichungssystem I erhält man somit für das dreidimensionale Kernmodell:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + u \frac{\partial E}{\partial x} + v \frac{\partial E}{\partial y} + w \frac{\partial E}{\partial z} = & \\ & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_E \frac{\partial E}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_E \frac{\partial E}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_E \frac{\partial E}{\partial z} \right) \\ & + K_m \left\{ 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right. \\ & \left. + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right\} - \frac{g}{\theta} K_h \frac{\partial \theta}{\partial z} + Q_E(x, y, z) - \epsilon \end{aligned} \quad (3.40)$$

3.3.2.2 System II: Prognose der lokalen Energiedissipation (ϵ) Das Prognose-system II beschreibt die Auflösung vorhandener kinetischer Energie aufgrund viskoser Reibungskräfte. Stehen Energieerzeugung und -auflösung im Gleichgewicht, so kann die Auflösung durch die *Kolmogorov-Beziehung* als eine Funktion der kinetischen Energie E und des vertikalen Mischungswegs ℓ ausgedrückt werden (vergl. u.a. Detering und Etling 1985)

$$\epsilon = 0.16 \frac{E^{3/2}}{\ell} \quad (3.41)$$

Durch die Prognose von ϵ als eigenständige Größe muß jedoch auf diese Beziehung zur Bestimmung der Auflösungsrate nicht zurückgegriffen werden, wodurch auch die unbekannte Mischungslänge nicht mehr explizit bestimmt werden muß.

Aufgrund des durch (3.41) gegebenen proportionalen Zusammenhanges zwischen E und ϵ läßt sich in Anlehnung an die E-Gleichung eine ähnliche prognostische Gleichung für die Energiedissipation aufstellen:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} - \mathbf{u} \nabla \epsilon = \nabla (K_\epsilon \nabla \epsilon) + c_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{E} T_P + c_{3\epsilon} \frac{\epsilon}{E} T_T - c_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{E} + Q_\epsilon \quad (3.42)$$

Während die E-Gleichung (3.40) sich aus den Navier-Stokes Gleichungen und der Turbulenzschließung herleiten läßt, ist die Entstehung der Gleichung für die Energieauflösung nicht physikalisch motiviert, sondern repräsentiert die Modellvorstellung,

daß auch die Auflösung der Turbulenzenergie ähnlichen Gesetzen folgt wie deren Entstehung. Aus diesem Grund werden zum Abgleichen der Modellergebnisse mit Meßwerten der ϵ -Prognosegleichung einige Kalibrierungsvariablen ($c_{1\epsilon}, c_{2\epsilon}, c_{3\epsilon}$) hinzugefügt.

Der Produktions- und der Thermikterm (T_P und T_T) haben die identische Form wie bei der E-Gleichung, wobei der Einfluß der thermischen Verhältnisse bei stabiler Schichtung ($\partial\theta/\partial z > 0$) aber üblicherweise vernachlässigt wird. Wie bei der E-Gleichung wird auch hier der druckinduzierte ϵ -Transport (T_D) nicht berücksichtigt.

Der Quellterm Q_ϵ besitzt in der ϵ -Gleichung etwas andere Koeffizienten als in der E-Gleichung:

$$Q_\epsilon = 1.5c_{d,p} \text{LAD}(z)W^3 - 6c_{d,p} \text{LAD}(z)|W|\epsilon \quad (3.43)$$

Als endgültiges Gleichungssystem erhält man somit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + u \frac{\partial \epsilon}{\partial x} + v \frac{\partial \epsilon}{\partial y} + w \frac{\partial \epsilon}{\partial z} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_\epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_\epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_\epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \right) \\ & + c_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{E} K_m \left\{ 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right. \\ & \left. + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right\} \\ & - c_{3\epsilon} \frac{\epsilon}{E} \cdot \frac{g}{\theta} K_h \frac{\partial \theta}{\partial z} - c_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{E} + Q_\epsilon(x, y, z) \end{aligned} \quad (3.44)$$

Hierbei sind folgende Konstanten zur Kalibrierung zu verwenden:

$$c_{1\epsilon} = 1.44 \quad c_{2\epsilon} = 1.92 \quad c_{3\epsilon} = 1.44$$

Die hier verwendeten Werte werden als *Standard E – ϵ Modell* bezeichnet. Diese Wahl ist keineswegs unumstritten. Xu und Taylor (1997) stellen fest, daß bei der Anwendung des E – ϵ -Modells für atmosphärische Fragestellungen durchaus andere Parameter in Frage kommen. Hiermit ist bereits eines der Probleme mit dem Turbulenzmodell angesprochen, auf die im folgenden Abschnitt kurz eingegangen werden soll.

3.3.3 Probleme bei der Anwendung des Turbulenzmodells

Die Anwendung des E – ϵ Modells zur Berechnung der Turbulenz bei atmosphärenphysikalischen Fragestellungen verursacht eine Reihe von Problemen, die sowohl die oberen Atmosphärenschichten als auch die Turbulenzprognose in Hindernisnähe betrifft. Die Zahl und die Komplexität der verschiedenen Probleme machen es unmöglich, das Thema hier erschöpfend zu behandeln, so daß hier nur ein kurzes Schlaglicht auf diese Problematik geworfen werden soll. Als wesentliche Probleme kristallisieren sich hierbei folgende heraus:

1. Versagen des Modells in den oberen Atmosphärenschichten
2. Thermische Schichtungen können nicht realistisch berücksichtigt werden

3. Ungültigkeit der ϵ -Gleichung in der Nähe von Hindernissen
4. Probleme mit dem *Inertial Subrange* des $E - \epsilon$ Modells und dem *Aliasing* von Wellenlängen
5. Numerische Sensibilität und fehlende Konvergenz bei komplexen Fragestellungen sowie starke Abhängigkeit der Endergebnisse von den angewandten numerischen Methoden

zu 1)

Das Verhalten des $E - \epsilon$ Modells bei der eindimensionalen Prognose der neutralen atmosphärischen Grenzschicht steht zur Zeit im Zentrum der Diskussion über die Anwendbarkeit dieses Schließungsansatzes für atmosphärische Fragestellungen (vergl. z.B. Wilson und Mooney, 1997 sowie Wang und Takle, 1997). Detering und Etling (1985) und Duynkerke (1988) weisen darauf hin, daß unmodifizierte $E - \epsilon$ Modelle eine viel zu hohe Mischungsschicht berechnen. Die Austauschkoeffizienten wachsen in den oberen Atmosphärenschichten unrealistisch an und die Ekmanspirale kann nicht reproduziert werden. Um dieses Problem zu umgehen wurden zahlreiche Modifikationen des von Launder und Spalding (1974) entwickelten Originalmodells vorgenommen. Eine gute Übersicht über die verschiedenen vorgenommenen Modifikationen inklusive einem weiteren Ansatz findet man beispielsweise bei Xu und Taylor (1997).

zu 2)

Da bereits die Modellierung der neutral geschichteten Atmosphäre mit dem $E - \epsilon$ Modell große Probleme bereitet, ist es auch nicht möglich, den Einfluß verschiedener thermischer Schichtungen auf die Turbulenzverteilung realistisch zu berücksichtigen. Bei labiler Schichtung tendiert das Modell dazu instabil zu werden, da das E -Niveau in den oberen Atmosphärenschichten aufgrund des Überschusses von thermischer und mechanischer Energie zu sehr anwächst.

zu 3)

In der Nähe von Hinderniswänden ist das $E - \epsilon$ Modell aufgrund der auftretenden niedrigen Reynoldszahlen nicht gültig, da der turbulente Strömungsbereich verlassen wird. Zudem werden Turbulenzen senkrecht zur Wand gedämpft, wodurch die Annahme der lokalen Isotropie nicht mehr gültig ist (Griebl *et al.*, 1995). Zur exakten Beschreibung der Turbulenz in Hindernisnähe müssen Niedrig-Reynoldszahl-Modelle mit einer hohen Auflösung (Rodi, 1994) oder Zwei-Schicht-Modelle (Mohammadi, 1992) verwendet werden. Einen einfachen Ansatz für die Implementierung eines Zwei-Schichten-Modells stellen beispielsweise Jongen und Marx (1997) vor. Diese Modelle können im dreidimensionalen Modell aus numerischen Gründen nicht implementiert werden, zumal hierdurch weitere Probleme, wie beispielsweise die Festlegung des Übergangsbereiches zwischen dem Wandlayer und dem turbulenten Layer entstehen.

zu 4)

Die turbulente kinetische Energie und deren Auflösungsrate sind zwei Prognosegrößen, die in sehr unterschiedlichen räumlichen Skalenbereichen definiert sind. Bei der TKE handelt es sich um eine relativ großskalige Größe, die durch Wirbel im Bereich von einigen Metern gesteuert wird. Die Auflösung der Turbulenzenergie wird hingegen durch

molekulare Reibungskräfte verursacht, also durch sehr kleinskalige Prozesse. Ein Turbulenzwirbel durchläuft von der Entstehung bis zu seiner Auflösung somit einen großen Bereich räumlicher Dimensionen, von denen nur die Prozesse an der Obergrenze (Entstehung, E-Gleichung) sowie an der Untergrenze (Auflösung, ϵ -Gleichung) durch prognostische Gleichungen abgedeckt sind. Es existiert folglich ein Bereich, in dem die Turbulenzenergie bereits unabhängig von den ursprünglich erzeugenden Kräften ist, aber noch nicht durch molekulare Prozesse aufgelöst wird. Dieser Bereich wird als *Inertial Subrange* bezeichnet. In einem numerischen Modell mit einer Gitterweite von minimal 1 m können solche Prozesse nicht aufgelöst werden (Pielke, 1984, S.325 ff.). Eng hiermit verknüpft ist das Problem des sogenannten *Wave Aliasing* oder *Wave Folding*: Durch die unterschiedliche Dimension der Turbulenzentstehung und -auflösung bewegen sich beide Größen mit unterschiedlichen Wellenlängen durch das Modell. Unabhängig von der verwendeten Gitterauflösung im Modell entstehen bei nicht-linearen Wechselwirkungen zwischen zwei Prozessen mit unterschiedlichen Wellenlängen immer Wellen, die sowohl kleinere als auch größere Wellenlängen besitzen als die ursprünglichen Prozesse. Die so entstandenen kleinen und großen Wellen werden im numerischen Modell auf die nächste auflösbare größere Wellenlänge transformiert (*aliased*) (Pielke 1984, S.325 ff.). Hierdurch wird der Abbauprozess der kinetischen Energie unterbrochen und dem Modell fiktive Energie zugeführt, die letztendlich zu einem Versagen des Verfahrens führen kann. Um kleine Wellen herauszufiltern, ist es daher notwendig, dem Modell besondere numerische Filter hinzuzufügen.

zu 5)

Zu den im vorhergehenden Abschnitt angesprochenen generellen Problemen mit der physikalischen Natur der Turbulenzgleichungen existieren zudem praktische Probleme bei der Berechnung der Turbulenzfelder im strukturierten Gelände: Die Austauschkoeffizienten werden einerseits direkt aus dem Turbulenzfeld bestimmt, andererseits bestimmen sie im nächsten Rechenschritt über die mechanischen Produktionsterme die weitere Entwicklung der Turbulenzverteilung. Aufgrund dieser direkten expliziten Rückkopplung ist das $E - \epsilon - K$ System sehr empfindlich gegenüber kleinen Oszillationen, die vor allem während der Initialisierungsphase unumgänglich sind. Die Frage, ob sich ein numerisch stabiles System einstellt hängt im Falle des Turbulenzmodells sehr stark von den verwendeten numerischen Verfahren ab. Das *Lax Equivalence Theorems* von Ames (1977) besagt jedoch: 'Wenn eine numerische Methode korrekt ist, ist sie irrelevant'. Angewandt auf das Turbulenzmodell bedeutet dieses, daß man unabhängig von der verwandten numerischen Methode, solange sie korrekt ist, immer die gleiche Verteilung der Turbulenz als Ergebnis erhalten müßte. Wie in den vorangehenden Abschnitten gezeigt wurde, ist dieses beim $E - \epsilon$ -Modell nicht der Fall. Numerische Studien bei der Modellentwicklung und die aktuelle Diskussion (Wilson und Curtis, 1997; Wang und Takle, 1997) zeigen, daß die Lösung des $E - \epsilon - K$ -Systems sehr stark von den einzelnen numerischen Schritten und verwendeten Filterverfahren abhängt und keinesfalls eine eindeutige singuläre Lösung besitzt. Da die Turbulenzverteilung nur indirekt und nur an einzelnen Punkten zu bestimmten Zeitpunkten meßbar ist, existiert zur Zeit keine allgemein anerkannte Methode, um die Turbulenzgleichungen zu lösen. Aus diesem Grund wurden im vorliegenden Modell ausschließlich numerische Standardverfahren verwendet, die sich bei anderen Prognosegrößen als zuverlässig erwiesen haben.

Insgesamt kann man festhalten, daß die Verwendung des $E - \epsilon$ Modells neben einigen Vorteilen auch eine ganze Reihe von Nachteilen mit sich bringt. Die numerischen

Eigenarten des Verfahrens müssen bei der Konzeption des Modells berücksichtigt werden, um einen stabilen Simulationsablauf gewährleisten zu können.

3.3.4 Bestimmung der Austauschkoeffizienten im turbulenten Luftkörper

Im turbulenten Luftkörper können die Austauschkoeffizienten direkt aus der prognostisch berechneten $E - \epsilon$ Verteilung bestimmt werden.

Hier gilt:

$$K_m = c_\mu \frac{E^2}{\epsilon} \quad (3.45a)$$

$$K_h = 1.35 \cdot K_m \quad (3.45b)$$

$$K_v = K_h \quad (3.45c)$$

$$K_E = \frac{K_m}{\sigma_E} \quad (3.45d)$$

$$K_\epsilon = \frac{K_m}{\sigma_\epsilon} \quad (3.45e)$$

Für die Konstanten gilt $c_\mu=0.09$, $\sigma_E=1$ und $\sigma_\epsilon=1.3$ (Launder und Spalding, 1974). Eine weitere Skalierung der Austauschkoeffizienten mit der lokalen thermischen Schichtung wie bei Schließungsansätzen erster Ordnung erfolgt nicht.

Es wurde bereits im vorherigen Abschnitt angesprochen, daß das $E - \epsilon$ -Modell dazu tendiert, in den höheren Atmosphärenschichten die Turbulenz zu überschätzen.

Aus diesem Grund wurde das Modell um die Möglichkeit erweitert, die Austauschkoeffizienten am Einströmrand durch einen Mischungswegansatz (Schließung erster Ordnung) zu berechnen.

Hierdurch ergeben sich eine Reihe Vorteile:

- Grenzschichtprofile, die mit Mischungswegansätzen berechnet wurden, weisen im Fall geringer vertikaler Störungen eine gute Übereinstimmung mit Meßwerten auf. Da im Modell davon ausgegangen wird, daß durch das eindimensionale Randmodell mittlere mesoskalige Verhältnisse repräsentiert werden, kann der Mischungswegansatz hier angewendet werden.
- Es existieren zahlreiche allgemein anerkannte Skalierungsfunktionen zur Berücksichtigung von verschiedenen thermischen Schichtungen.
- Schließungsansätze erster Ordnung wie der Mischungswegansatz sind numerisch stabil

Bestimmung der Austauschkoeffizienten über den Mischungswegansatz

Der Mischungswegansatz nach Blackadar (1962) kann als Standard für Schließungen erster Ordnung angesehen werden, so daß hier nur die verwendeten Gleichungen und Modifikationen zusammengestellt sind.

Der Austauschkoeffizient für Impuls wird aus dem vertikalen Mischungsweg ℓ , der horizontalen Windscherung $\partial u_{hor}/\partial z$ und dem Schichtungszustand der Atmosphäre,

dargestellt durch die Stabilitätsfunktion Φ_m , hergeleitet:

$$K_m = \ell^2 \left| \frac{\partial \mathbf{u}_{\text{hor}}}{\partial z} \right| \Phi_m(\text{Ri}) \quad (3.46)$$

Der Mischungsweg ℓ berechnet sich mit

$$\ell = \frac{\kappa (z + z_0)}{1 + \kappa z / \lambda} \quad (3.47)$$

wobei z die Bezugshöhe, z_0 die Rauigkeitlänge des Bodens und κ die von-Kármán-Konstante ist.

Die Größe λ wird als *asymptotischer Mischungsweg* bezeichnet und kann als Grenzwert von ℓ in der freien Atmosphäre interpretiert werden.

Der Wert von λ wird in Abhängigkeit vom lokalen Schichtungszustand der Atmosphäre mit

$$\lambda = \begin{cases} 100 \text{ m} & ; \text{wenn Ri} > 0 \\ 30 \text{ m} & ; \text{wenn Ri} = 0 \\ 12.5 \text{ m} & ; \text{wenn Ri} < 0 \end{cases} \quad (3.48)$$

festgelegt (Eichhorn, 1989).

Die Richardson-Zahl Ri berechnet sich wie allgemein üblich aus

$$\text{Ri}(z) = \frac{g}{\bar{\theta}} \frac{\partial \theta / \partial z}{(\partial \mathbf{u}_{\text{hor}} / \partial z)^2} \quad (3.49)$$

Hierbei ist $\bar{\theta}$ die Mitteltemperatur der betrachteten Luftschicht und $\partial \theta / \partial z$ der vertikale Gradient der potentiellen Temperatur in der betrachteten Höhe.

Die Stabilitätsfunktion Φ_m ist definiert als

$$\Phi_m = \begin{cases} \sqrt{1 - \alpha \cdot \text{Ri}} & ; \text{wenn Ri} < 0 \\ 1 / \sqrt{1 + \alpha \cdot \text{Ri}} & ; \text{wenn Ri} \geq 0 \end{cases} \quad (3.50)$$

mit $\alpha = 6.0$ (Sievers *et al.*, 1987).

Die übrigen Austauschkoeffizienten für Wärme, Wasserdampf etc. werden nach der Bestimmung von K_m über (3.45b bis 3.45e) wieder einheitlich berechnet

Der Vollständigkeit halber bietet das Modell die Möglichkeit, den Mischungswegansatz auch im Kernmodell anzuwenden. Hierzu ist lediglich die vertikale Windscherung $\partial \mathbf{u}_{\text{hor}} / \partial z$ in (3.46) und (3.52) durch die Rotation $|\nabla \times \mathbf{u}|$ des Windfeldes zu ersetzen (Sievers, 1987 *et al.*; Eichhorn, 1989). Die Rotation kann über die bereits eingeführte Divergenz des Deformationstensors (3.34) parameterisiert werden:

$$|\nabla \times \mathbf{u}| = \sqrt{\nabla \Omega(\mathbf{u})} \quad (3.51)$$

Die Bestimmung der übrigen Terme erfolgt analog, wobei bei der Berechnung des Mischungsweges (3.47) über oder neben Gebäuden anstelle von z der minimale Abstand zur Gebäudewand bzw. Dach verwendet wird.

3.3.5 Bestimmung der Austauschkoeffizienten an festen Oberflächen

Die Austauschkoeffizienten zwischen dem Boden oder einer festen Hindernisoberfläche und den benachbarten freien Gitterzellen werden nicht über die turbulente kinetische Energie parameterisiert, sondern über empirische Ansätze aus dem physikalischen Zustand der grenzflächennahen Luftschichten und den Charakteristika der Fläche selber hergeleitet.

Hierbei ist zu unterscheiden, ob für den Austausch an der Grenzfläche die turbulente Durchmischung durch das übergeordnete Strömungsfeld maßgeblich ist (erzwungene Konvektion), oder ob der Einfluß der Windströmung schwach ist und thermische Kräfte die Grenzflächenflüsse bestimmen (freie Konvektion oder molekularer Austausch). Vor allem im Hinblick auf die Anwendbarkeit des Modells ENVI-met für windschwache Wetterlagen ist eine geeignete Parameterisierung der freien Konvektion notwendig, um das Modell thermisch antreiben zu lassen.

Betrachtet man zunächst nur horizontale Oberflächen, so kann das Verhältnis zwischen freier und erzwungener Konvektion über die Bulk-Richardsonzahl Ri_b erfaßt werden:

$$Ri_b = \frac{g\Delta^w (\theta_{w+1} - \theta_w)}{0.5 (\theta_{w+1} + \theta_w) \left(\mathbf{u}_{w+1}^{tang} \right)^2} \quad (3.52)$$

Hierbei ist θ_w die auf der horizontalen z-Zellfläche definierte Oberflächentemperatur der Grenzfläche, θ_{w+1} ist die Lufttemperatur im Mittelpunkt der angrenzenden freien Zelle und \mathbf{u}_{w+1}^{tang} ist der Betrag der tangentialen Windgeschwindigkeiten in der Zellmitte über der Fläche. Die Größe Δ^w steht für den Abstand zwischen dem nächsten freien Prognosepunkt und der Hindernisoberfläche. Das Subskript „w“ weist den Grenzflächenwert der jeweiligen Größe aus. Mit „w + 1“ indizierte Größen beziehen sich auf den nächsten Prognosepunkt senkrecht zur Oberfläche.

Im Bereich $-5.5 \leq Ri_b \leq 3.0$ kann davon ausgegangen werden, daß erzwungene Konvektion vorherrscht (Clarke, 1970) während bei $Ri_b > 3.0$ der turbulente Austausch zum Erliegen kommt und die molekularen Diffusionsvorgänge dominieren. Mit freier Konvektion ist zu rechnen, wenn Ri_b kleiner als -5.5 wird.

An vertikalen Oberflächen sowie an den horizontalen Unterseiten von überhängenden Hindernissen kann der Einfluß der thermischen Schichtung auf den Austauschprozeß nicht ohne weiteres quantifiziert werden. Hier wird der Einfachheit halber von neutralen Verhältnissen ausgegangen.

3.3.5.1 Austauschkoeffizienten bei erzwungener Konvektion Im Falle der erzwungenen Konvektion lassen sich die turbulenten Flüsse an einer festen Oberfläche in Richtung i ihrer Flächennormalen über die *Ähnlichkeitstheorie* von Monin-Obhukov (1954) beschreiben. Mit der Eingangs eingeführten Schreibweise lassen sich die Flüsse verallgemeinert darstellen als:

$$\text{turbulenter Impulsfluß} : \quad -\overline{u'_i u'} = u_*^2 \quad (3.53a)$$

$$\text{turbulenter Fluß skalarer Größen} : \quad -\overline{u'_i \phi'} = u_* \phi_* \quad (3.53b)$$

Die Grenzflächengrößen u_* und ϕ_* sind die Schubspannungsgeschwindigkeit an der Oberfläche und die Skalierungsgröße für den Grenzflächenfluß von ϕ . Im Modell werden Grenzflächenparameterisierungen für die Größen Impuls u_i , Temperatur θ sowie Feuchte q benötigt. Die Koeffizienten für die Turbulenzkenngößen E und ϵ können direkt aus dem Impulsaustausch bestimmt werden und brauchen keine gesonderte Behandlung.

Die zu bestimmenden Grenzflächenflüsse sind somit:

$$\text{turbulenter Impulsfluß} : -\overline{u'_i u'} = u_*^2 \quad (3.54a)$$

$$\text{turbulenter Wärmefluß} : -\overline{u'_i \theta'} = u_* \theta_* \quad (3.54b)$$

$$\text{turbulenter Wasserdampflluß} : -\overline{u'_i q'} = u_* q_* \quad (3.54c)$$

Diese unbekannten turbulenten Flüsse lassen sich unter Verwendung des sogenannten Drag-Koeffizienten $c_{d,N}$ als eine Funktion des Impulsflusses, des Schichtungzustandes und des Gradienten der jeweiligen Größe darstellen:

$$\begin{aligned} u_*^2 &= c_{d,N} \cdot \mathbf{u}_{w+1}^{\text{tang}} \left(\mathbf{u}_{w+1}^{\text{tang}} - \mathbf{u}_w^{\text{tang}} \right) \Phi_m(Ri_b) \\ &= D_m \left(\mathbf{u}_{w+1}^{\text{tang}} - \mathbf{u}_w^{\text{tang}} \right) \end{aligned} \quad (3.55a)$$

$$u_* \theta_* = c_{d,N} \cdot \mathbf{u}_{w+1}^{\text{tang}} (\theta_{w+1} - \theta_w) \Phi_h(Ri_b) = D_h (\theta_{w+1} - \theta_w) \quad (3.55b)$$

$$u_* q_* = c_{d,N} \cdot \mathbf{u}_{w+1}^{\text{tang}} (q_{w+1} - q_w) \Phi_v(Ri_b) = D_v (q_{w+1} - q_w) \quad (3.55c)$$

Die Transferkoeffizienten $D(\dots)$ fassen der Übersicht halber die Terme für den Impulsfluß und die thermische Schichtung zusammen.

$$D(\dots) = \mathbf{u}_{w+1}^{\text{tang}} \cdot c_{d,N} \cdot \Phi(\dots) Ri_b \quad (3.56)$$

Setzt man voraus, daß an der Grenzfläche auch die tangentialen Windgeschwindigkeiten gleich Null sind ($\mathbf{u}_w = 0$, *Haft-Bedingung*), läßt sich (3.55a) auch schreiben als:

$$u_*^2 = D_m \cdot \mathbf{u}_{w+1}^{\text{tang}} \quad (3.57)$$

Die tangentielle Windgeschwindigkeit $\mathbf{u}_{w+1}^{\text{tang}}$ ist hierbei aus den parallel zur Fläche strömenden Komponenten des Windfeldes zu bilden, also aus v, w bei x -Zellflächen, u, w bei y -Zellflächen und u, v bei z -Zellflächen.

Der in den Gleichungen verwendete Drag-Koeffizient $c_{d,N}$ ist ein Maß für den durch die Oberflächenrauigkeit z_0^w hervorgerufenen turbulenten Impulsfluß und ist bei neutraler Schichtung definiert als:

$$c_{d,N} = \frac{\kappa^2}{\ln((\Delta^w + z_0^w)/z_0^w)^2} \quad (3.58)$$

Um den Einfluß der thermischen Schichtung auf vertikale Austauschvorgänge zu berücksichtigen, werden die Funktionen $\Phi(\dots)$ in Abhängigkeit von der Bulk-Richardsonzahl (3.52) zur Skalierung der Transferkoeffizienten verwendet:

$$\Phi_{m/h}(Ri_b) = \begin{cases} 1 - \frac{b Ri_b}{1 + c_{m/h} |Ri_b|^{0.5}} & ; \text{wenn } Ri_b < 0 \\ n_{m/h} & ; \text{wenn } Ri_b = 0 \\ \frac{1}{(1 + a Ri_b)^2} & ; \text{wenn } Ri_b > 0 \end{cases} \quad (3.59)$$

$$\Phi_v(Ri_b) = \xi_v \Phi_h \quad (3.60)$$

Die zu verwendenden Koeffizienten sind:

$$\begin{aligned} \alpha &= 4.7 & b &= 9.4 \\ n_m &= 1 & n_h &= 1.35 \\ c_m &= 7.4 \cdot c_{d,N} \cdot b (\Delta^w/z_0^w)^{0.5} & c_h &= 0.72 \cdot c_m \\ \xi_v &= 1 \end{aligned}$$

Die Koeffizienten α , b , c_m und c_h sind aus universellen Stabilitätsfunktionen und empirischen Meßdaten hergeleitet und allgemein akzeptiert (vgl. u.a. Stull, 1988; Asaeda und Than Ca, 1993). Der Koeffizient n_h entspricht dem Verhältnis zwischen Impuls- und Wärmefluß bei neutralen Bedingungen (*turbulente Prandtl-Zahl*). Die Transferkoeffizienten von Wärme und Wasserdampf werden in diesem Modell gleichgesetzt. Zur Eichung der Modelldaten können jedoch auch andere Werte für ξ_v eingesetzt werden.

Bei senkrechten Flächen kann die Stabilitätsfunktion nicht auf den Transferkoeffizienten angewandt werden, da sich der Einfluß der thermischen Schichtung sich für senkrechte Austauschprozesse direkt ableiten läßt. Bei senkrechten Flächen ist somit für neutrale Verhältnisse mit $\Phi_{m/h/v} = 0$ zu rechnen.

Nach Gleichsetzen der Grenzflächenformulierungen von (3.55a- 3.55c) mit der Gradientenformulierung des Austauschkoeffizienten

$$-\overline{u'_i \phi'} = u_* \phi_* = K_\phi^w \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_w \quad (3.61)$$

und der linearen Approximation

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_w = \frac{\phi_{w+1} - \phi_w}{\Delta^w}$$

ergeben sich die gesuchten Austauschkoeffizienten an der Grenzfläche in Richtung der Flächennormalen wie folgt:

$$K_m^w = \Delta^w D_m \quad (3.62a)$$

$$K_h^w = \Delta^w D_h \quad (3.62b)$$

$$K_v^w = \Delta^w D_v \quad (3.62c)$$

Für den Austausch der kinetischen Energie sowie der Dissipationsrate wird angenommen, daß die im turbulenten Luftkörper geltenden Beziehungen zwischen den Austauschkoeffizienten auch an der Grenzfläche gültig bleiben:

$$K_E^w = \frac{K_m^w}{\sigma_E} \quad (3.62d)$$

$$K_\epsilon^w = \frac{K_m^w}{\sigma_\epsilon} \quad (3.62e)$$

Die an der Grenzfläche oft benötigte Schubspannung kann aus dem Austauschkoeffizienten wie folgt zurück gerechnet werden:

$$u_* = \sqrt{K_m^w \frac{u_{w+1}^{\text{tang}}}{\Delta^w}} \quad (3.63)$$

3.3.5.2 Austauschkoeffizienten bei molekularem Austausch Bei stabiler Schichtung und sehr schwachen Winden treten die molekularen Diffusionsgeschwindigkeiten in den Vordergrund, die in turbulenten Austauschsituationen sonst keine relevante Bedeutung besitzen.

Anstelle der Berechnung der turbulenten Koeffizienten nach (3.62a) bis (3.62c) werden im Bereich $Ri_b > 3.0$ die molekularen Diffusionskonstanten verwendet. Dieses ist für den Impulsaustausch die kinematische Zähigkeit der Luft (ν), für die Wärme die Temperaturleitfähigkeit der Luft (κ_h) und für den Wasserdampf die Diffusionsgeschwindigkeit für Wasserdampf (ζ_v):

$$K_m^w = \nu \quad (3.64a)$$

$$K_h^w = \kappa_h \quad (3.64b)$$

$$K_v^w = \zeta_v \quad (3.64c)$$

Die Bestimmung der Diffusionskonstanten für das Turbulenzmodell ist nicht sinnvoll, da bei molekularem Austausch per Definition keine Turbulenz existiert. Aus numerischen Gründen muß jedoch auch hier eine untere Grenze festgelegt werden, da sonst die Gefahr besteht, daß die Verbindung zwischen dem Turbulenzmodell und den übrigen Teilmodellen verloren geht. Die Koeffizienten K_e^w und K_e^w werden deswegen nach (3.62d) und (3.62e) unter Verwendung von $K_m^w = \nu$ bestimmt.

3.3.5.3 Austauschkoeffizienten bei freier Konvektion Anstelle des konstanten Impulsaustausches durch externe Windkräfte findet bei freier Konvektion ein vertikaler Transport durch eher zufällig aufsteigende Blasen stark erhitzter Luft statt. Zur Parameterisierung dieser Austauschprozesse an horizontalen Flächen wird das sogenannte $z^{-1/3}$ -Gesetz (Panhans und Schrodin, 1980) verwendet.

Nach dem $z^{-1/3}$ -Gesetz läßt sich der vertikale Temperaturfluß bei freier Konvektion wie folgt parameterisieren:

$$-\overline{w'\theta'} = 1.3 \left(\frac{g}{\theta_{w+1}} \right)^{1/2} \left[\frac{\theta_{w+1} - \theta_w}{3 \left((\Delta^w)^{-1/3} - (z_0)^{-1/3} \right)} \right]^{3/2} \quad (3.65)$$

Die gesuchten Austauschkoeffizienten ergeben sich wie bei der erzwungenen Konvektion durch Einsetzen von (3.65) in den Gradientenansatz (3.61), wobei für Wärme und Wasserdampf der gleiche Wert angesetzt wird:

$$K_h^w = K_v^w = - \frac{\overline{w'\theta'}}{\theta_{w+1} - \theta_w} \Delta^w \quad (3.66)$$

Die Austauschkoeffizienten für das Turbulenzmodell werden auch in diesem Fall mit (3.62d) und (3.62e) aus dem Austauschkoeffizient für Impuls berechnet.

3.3.6 Randbedingungen des Turbulenzmodells

3.3.6.1 Einströmränder Die Gleichungen am Randmodell ergeben sich aus der eindimensionalen Version der prognostischen Gleichungen (3.40, 3.44) sowie den

veränderten Parameterisierungen des Produktions- und Thermikterms in beiden Gleichungen. Man erhält hier somit als Gleichungssystem

$$\frac{\partial \hat{E}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_E \frac{\partial \hat{E}}{\partial z} \right) + \hat{K}_m \left\{ \left(\frac{\partial \hat{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \hat{v}}{\partial z} \right)^2 \right\} - g\beta K_h \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial z} - \hat{e} \quad (3.67)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{e}}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial z} \left(K_e \frac{\partial \hat{e}}{\partial z} \right) + c_{1e} \frac{\hat{e}}{\hat{E}} \hat{K}_m \left\{ \left(\frac{\partial \hat{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \hat{v}}{\partial z} \right)^2 \right\} \\ & - c_{3e} \frac{\hat{e}}{\hat{E}} g\beta K_h \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial z} - c_{2e} \frac{\hat{e}^2}{\hat{E}} \end{aligned} \quad (3.68)$$

An den Gitterpunkten am Einströmrand des Kernmodells werden die Werte aus dem Randmodell übernommen:

$$\begin{aligned} E(0..X, 0, z) &= E(0, 0..Y, z) = \hat{E}(z) \\ e(0..X, 0, z) &= e(0, 0..Y, z) = \hat{e}(z) \end{aligned}$$

V 2.5

Es hat sich gezeigt, dass das Turbulenzmodell dazu tendiert, im Laufe der Zeit das Niveau der Austauschkoeffizienten stetig zu erhöhen, ohne das hierfür physikalische Gründe vorlagen. Ab dem Überschreiten eines (nicht näher bestimmbar) Schwellenwertes von K_m wuchsen die Werte der Austauschkoeffizienten exponentiell an. Aus diesem Grund wird der Wert für \hat{K}_m im eindimensionalen Randmodell über den logarithmischen Profilansatz wie folgt limitiert:

$$\hat{K}_m(z) = \min(K_m(z), K_{m,\text{lim}}(z))$$

mit

$$K_{m,\text{lim}}(z) = \frac{\kappa^2 \cdot \mathbf{u}_{\text{ref}} \cdot z}{\ln(z_{\text{ref}}/\hat{z}_0)} \Phi$$

mit \mathbf{u}_{ref} : Windgeschwindigkeit in Höhe z_{ref} (10 m in ENVI-met) und \hat{z}_0 Rauigkeitslänge im 1D Modell. Φ ist ein Toleranzzuschlag zum neutralen Profil, der z.Z. mit 2 veranschlagt ist. Es hat sich gezeigt, daß eine derartige Limitierung im eindimensionalen Randmodell genügt, um ein Anwachsen des K_m -Niveaus auch im Kernmodell zu verhindern.

3.3.6.2 Ausströmränder An den Ausströmrändern wird ein Verschwinden der Ableitungen in Richtung des Modellrandes angenommen:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial E}{\partial x} \right|_{x=X} &= \left. \frac{\partial E}{\partial y} \right|_{y=Y} = 0 \\ \left. \frac{\partial e}{\partial x} \right|_{x=X} &= \left. \frac{\partial e}{\partial y} \right|_{y=Y} = 0 \end{aligned}$$

3.3.6.3 Bodengrenzfläche und Hinderniswände Wie bereits angesprochen wurde, ist das $E - \epsilon$ Modell in direkter Wandnähe streng genommen nicht gültig. Bei der Simulation atmosphärischer Prozesse mit einer Auflösung von üblicherweise 1 Meter und mehr zählen die Vorgänge in diesem kritischen wandnahen Bereich jedoch zu den subskaligen Prozessen, die durch kleinere Modifikationen des Gleichungssystems parameterisiert werden können.

Die Behandlung der Randbedingungen am Boden und den Hinderniswänden ist daher im Turbulenzmodell etwas umfangreicher als bei den übrigen Prognosegrößen, da nicht nur die eigentlichen Grenzflächenwerte zu bestimmen sind, sondern an angrenzenden freien Gitterpunkten der mechanische Produktionsterm modifiziert werden muß.

Geht man von einem logarithmischen Windprofil in direkter Hindernisnähe aus, so erhält man als Randwert für die turbulente kinetische Energie die Formulierung

$$E(z=0), E_w = \frac{(u_*^{\text{tang}})^2_{i,j}}{\sqrt{c_\mu}} \quad (3.69)$$

mit $c_\mu=0.09$. Vermutet man weiterhin, daß im Übergangsbereich zwischen turbulenter Strömung und der Oberfläche ein lokales Gleichgewicht zwischen Turbulenzproduktion und -auflösung besteht, so ergibt sich hieraus analog als Randbedingung für die Energiedissipation:

$$\epsilon(z=0), \epsilon_w = \frac{(u_*^{\text{tang}})^3_{i,j}}{\kappa \cdot z_0^{(w)}} \quad (3.70)$$

Hierbei ist $z_0^{(w)}$ die Rauigkeitslänge der betrachteten Oberfläche. Die einzusetzende Schubspannungsgeschwindigkeit u_*^{tang} wird aus dem Austauschkoeffizienten für Impuls K_m^w bzw. $K_m(z=0)$ an der Oberfläche (3.62a) und dem Betrag der tangential zur Oberfläche strömenden Windgeschwindigkeit u_{w+1}^{tang} bestimmt:

$$(u_*^{\text{tang}})_{i,j} = \sqrt{K_m^w \frac{|u_{w+1}^{\text{tang}}|}{\Delta^w}} \quad (3.71)$$

An Gitterpunkten neben Hindernissen und über der Bodenoberfläche ergibt sich aufgrund des geschachtelten Gitteraufbaus eine veränderte Parameterisierung des mechanischen Produktionsterms. Hierbei ist zu unterscheiden, ob die Scherung einer tangentialen oder der in Richtung der Oberflächennormalen definierten Strömungskomponente berechnet werden soll.

Die Abbremsung der Strömungskomponente, die in Richtung der Normalen der Oberfläche definiert ist, kann aufgrund des geschachtelten Gitteraufbaus einfach linear angenähert werden, da diese Komponente auf der Hindernisfläche sowie auf der gegenüberliegenden Zelle definiert ist ($u_{i,\perp}$ in Abbildung 2). Hier gilt die Näherung

$$\left. \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right|_{w,\perp} = \frac{u_{i,\perp}(w+1)}{\Delta_\perp^w} \quad (3.72)$$

Δ_\perp^w ist der Abstand zur Hinderniswand in Differenzierungsrichtung i und $u_{i,\perp}(w+1)$ die betreffende Windkomponente am nächsten Prognosepunkt senkrecht zur Wand.

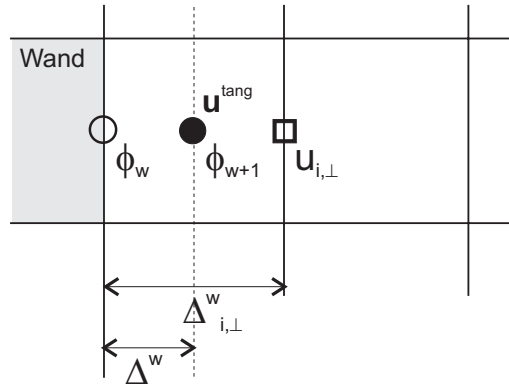


Abbildung 2: Definition der Prognosegrößen an Wänden. Beispiel $x - z$ -Schnitt

Bei den tangentialen Windkomponenten liegt die Oberfläche zwischen zwei Berechnungspunkten, so daß die Haftbedingung an der Wand explizit berücksichtigt werden muß. Hierzu wird die logarithmische Grenzschichtnäherung

$$\left. \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right|_w = \frac{(u_*^{\text{tang}})_i}{\kappa \cdot \Delta_j^w} \quad (3.73)$$

verwendet. Die tangentielle Schubspannungsgeschwindigkeit $(u_*^{\text{tang}})_i$ bezogen auf die Teilkomponente u_i berechnet sich analog zu (3.72) :

$$(u_*^{\text{tang}})_i = \sqrt{K_m^w \frac{|u_i^{\text{tang}}(w+1)|}{\Delta_j^w}} \quad (3.74)$$

Wird ein Gitterpunkt in mehrere Raumrichtungen von Hindernissen umgeben, so sind alle betroffenen Ableitungen im Produktionsterm durch diese Näherung zu ersetzen.

3.3.6.4 Modelloberrand Am Oberrand des Kernmodells bei $z = Z$ wird definitionsgemäß vorausgesetzt, daß die im Modellgebiet verursachten horizontalen Störungen abgeklungen sind und die Beträge von E und ϵ dem Referenzwert des eindimensionalen Randmodells entsprechen.

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial E}{\partial x} \right|_{z=Z} &= \left. \frac{\partial E}{\partial y} \right|_{z=Z} = 0 & E(x, y, Z) &= \hat{E}(z = Z) \\ \left. \frac{\partial \epsilon}{\partial x} \right|_{z=Z} &= \left. \frac{\partial \epsilon}{\partial y} \right|_{z=Z} = 0 & \epsilon(x, y, Z) &= \hat{\epsilon}(z = Z) \end{aligned}$$

Am Modelloberrand des Randmodells bei $z = H$ kann zwischen einem geschlossenen und einem offenen Modellrand gewählt werden.

Da die turbulente kinetische Energie die Tendenz hat, im Laufe der Zeit immer höhere Werte anzunehmen, sollte bei Langzeitsimulationen eine geschlossene Randbedingung mit $E(z = H) = \epsilon(z = H) = 0$ gewählt werden.

Für das eindimensionale Modell ergeben sich somit als Randbedingungen:

$$\left. \frac{\partial \hat{E}}{\partial z} \right|_{z=H} = \left. \frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial z} \right|_{z=H} = 0 \quad (\text{Offener Rand})$$

$$\hat{E}(z=H) = \hat{\epsilon}(z=H) = 0 \quad (\text{Geschlossener Rand})$$

3.3.7 Initialisierung

Unter Verwendung des Windprofils am Einströmrand wird die Schubspannungsgeschwindigkeit bestimmt und das Ausgangsprofil der kinetischen Energie und deren Dissipation wie folgt initialisiert:

$$\hat{E}(0..H) = \frac{u_*^2}{\sqrt{c_\mu}} \quad (3.75)$$

$$\epsilon(z) = \frac{u_*^3}{\kappa \cdot z} \quad (3.76)$$

Zusammen mit allen anderen Größen wird dieses Profil so lange integriert, bis sich quasi-stationäre Zustände einstellen. Hierbei wird immer zunächst die Dissipation ϵ und dann die kinetische Energie E prognostiziert. Nach jedem Zeitschritt werden die Austauschkoeffizienten der neuen Turbulenzverteilung oder, falls der Mischungswegansatz am Einströmrand gewählt wurde, dem neuen Windfeld angepaßt.

Da das Modell ENVI-met prognostisch über einen größeren Zeitraum rechnet, wird eine Schichtung der Atmosphäre nicht vorgegeben, sondern entwickelt sich im Laufe der Prognose in Abhängigkeit von den Randbedingungen. Die ersten Integrationszeitschritte werden hierdurch mit einer nahezu neutralen Schichtung durchgeführt, wodurch eine Konvergenz der $E - \epsilon$ Initialisierung sichergestellt wird. Gibt man hingegen einen konstanten Temperaturgradienten als Ausgangsschichtung vor, so besteht vor allem bei labilen Schichtungen in den höheren Atmosphärenschichten die Gefahr von numerischen Oszillationen, die eine Konvergenz des Verfahrens behindern.

Nach der eindimensionalen Initialisierungsphase wird das berechnete $E - \epsilon$ Profil auf das dreidimensionale Modell umgesetzt. In der hierauf folgenden dreidimensionalen Initialisierung paßt sich das Turbulenzfeld unter Verwendung von sehr kleinen Zeitschritten den tatsächlichen Begebenheiten im Modell an. Die Initialisierung wird abgeschlossen wenn die Stationaritätsbedingung

$$\left| \frac{\partial K_m}{\partial t} \right| < 10^{-2}$$

erfüllt ist.

3.3.8 Turbulenzprognose in der Hauptzeitschleife

Aufgrund der in Abschnitt 3.3.3 dargestellten numerischen Sensibilität des Turbulenzmodells kann eine Lösung des Gleichungssystems nur mit sehr kleinen Zeitschritten

erfolgen (siehe Kapitel 6). Hierdurch erhöht sich die Zahl der notwendigen Rechenoperation pro Hauptschritt sehr stark. Numerische Tests haben gezeigt, daß es ausreichend ist, die Turbulenzverteilung, ähnlich wie auch das Strömungsfeld, zu festgelegten Zeitpunkten zu aktualisieren und bis zur Stationarität zu integrieren. Die so berechneten Austauschkoefizienten werden bis zur nächsten Aktualisierung konstant gehalten. Hierdurch hält sich die Zahl der zusätzlichen Rechenschritte während der Simulation in einem vertretbaren Umfang.

3.3.9 Besonderheiten des Turbulenzmodells bei Schwachwindlagen

Das Turbulenzmodell ist auf einen mechanischen Antrieb angewiesen. Fällt die Windgeschwindigkeit unter ein gewisses Niveau, kann das $E - \epsilon$ Modell ohne spezielle Erweiterungen nicht mehr verwendet werden. Numerische Tests haben gezeigt, daß die Untergrenze bei einer Windgeschwindigkeit von etwa 0.7 ms^{-1} in 10 m Höhe liegt. Aus diesem Grund ist es in dieser Modellversion noch nicht möglich, das Modell völlig ohne Windströmung zu betreiben.

3.4 Die langwelligen und kurzwelligen Strahlungsflüsse

Die verschiedenen Ausprägungen des Mikroklimas sind sehr eng mit den lokalen Strahlungsbedingungen verknüpft. In urbanen Räumen werden die aufwärts- und abwärtsgerichteten Strahlungsflüsse durch die Vielzahl verschiedener Objekte auf engem Raum stark modifiziert, so daß eine genaue dreidimensionale Analyse des Modellgebietes und die Formulierung spezieller Strahlungsgesetze unerlässlich ist.

3.4.1 Langwellige Strahlung

Die vom Himmel abwärtsgerichtete langwellige Strahlung ist bei einer wolkenfreien Atmosphäre abhängig von der Temperatur und dem Absorptions- und Emissionsvermögen der einzelnen Luftschichten. Die tatsächliche Absorptions- und Emissionsrate der Luft in den verschiedenen Wellenlängenbereichen hängt von der Konzentration der Hauptstrahlungsabsorber Wasserdampf, Kohlendioxid und Ozon ab. Aufgrund der komplexen Zusammenhänge der sich zum Teil überlappenden Absorptionsbanden sowie der fehlenden Informationen über vertikale Verteilung von Kohlendioxid und Ozon ist es üblich, das Absorptions- und Emissionsvermögen der einzelnen Atmosphärenschichten ausschließlich als eine Funktion des Wasserdampfgehaltes zu betrachten (Gross, 1991; Paltridge und Platt, 1976).

Die abwärtsgerichtete langwellige Strahlung ohne modifizierende Komponenten wie z.B. Vegetationsschichten ist eine Funktion der Temperatur und der Emissions- und Absorptionsfähigkeit aller nach oben anschließenden Atmosphärenschichten bis zum Rand der Wasserdampfatmosphäre, die hier bei $z_v=15 \text{ km}$ angenommen wird. Der abwärtsgerichtete Strahlungsfluß in einer Höhe z kann über folgendes Integral dargestellt werden als:

$$R_{lw}^{\downarrow}(z) = \int_z^{z_v} \sigma T^4(z') \frac{\partial \epsilon(z', z)}{\partial z'} dz' \quad (3.77)$$

Zur Lösung des Integrals ist es notwendig, den Term $\partial \varepsilon / \partial z$ durch finite Atmosphärenschichten mit bestimmbarem Emissionsgrad zu diskretisieren. Bis zum Oberand des eindimensionalen Modells bei $z = H$ kann hierzu die bereits festgelegte vertikale Gitterstruktur verwendet werden. Oberhalb des Modellraumes wird eine lineare Abnahme der Temperatur um 3.0 K pro km sowie eine lineare Abnahme der spezifischen Feuchte bis $q(z_v) = 0$ angenommen (Gross, 1991).

Nach Paltridge und Platt (1976) kann das Integral (3.77) durch N Einzelschichten approximiert werden:

$$R_{lw}^\downarrow(z) = \sum_{n=1}^N \sigma T^4(n) [\varepsilon_n(m + \Delta m) - \varepsilon_n(m)] \quad (3.78)$$

Hierbei ist m die absorbierende Wasserdampfmenge zwischen der Höhe z und dem Unterrand der Schicht n , $m + \Delta m$ ist die absorbierende Wasserdampfmenge einschließlich der Schicht n .

Die Wasserdampfmenge m_i in einer Schicht i in der mittleren Höhe z_i mit der Dicke Δz_i ist gegeben als

$$m_i = \int_{z_i}^{z_i + \Delta z_i} \left(\frac{p(z_i)}{p_0} \right)^{0.85} \rho q_i dz_i \quad (3.79)$$

Hierbei ist $p(z_i)$ der Luftdruck in der Höhe z_i und q_i ist die spezifische Feuchte in der Schicht i .

Für die Berechnung des Luftdrucks wird vereinfachend die barometrische Höhenformel

$$p(z) = p_0 \cdot \exp(-z/z^*) \quad (3.80)$$

mit $z^* = 8000$ m verwendet. Der Zusammenhang zwischen der absorbierenden Wasserdampfmenge und der Emissivität der betrachteten Schicht kann auf der Basis der Meßdaten von Kuhn (1963) wie folgt parameterisiert werden (Pielke, 1984):

$$\varepsilon_n(z, z + \Delta z) = \begin{cases} 0.113 \log(1 + 12.6 m_g) & ; & \log m_g \leq -4.0 \\ 0.104 \log m_g + 0.440 & ; & -4.0 < \log m_g \leq -3.0 \\ 0.121 \log m_g + 0.491 & ; & -3.0 < \log m_g \leq -1.5 \\ 0.146 \log m_g + 0.527 & ; & -1.5 < \log m_g \leq -1.0 \\ 0.161 \log m_g + 0.542 & ; & -1.0 < \log m_g \leq 0 \\ 0.136 \log m_g + 0.542 & ; & \log m_g > 0 \end{cases}$$

Die absorbierende Wasserdampfmenge m_g ist in gcm^{-2} anzugeben. Es sei angemerkt, daß aufgrund des nicht-linearen Zusammenhanges zwischen dem Wasserdampfgehalt, dem Emissionsgrad und der empirischen Datengrundlage zu beachten ist:

$$\varepsilon_n(m + \Delta m) - \varepsilon_n(m) \neq \varepsilon_n(\Delta m)$$

Das hier vorgestellte Verfahren ist nur für einen wolkenfreien Himmel gültig. Bei der Anwesenheit von Wolken, insbesondere von warmen tiefhängenden Wolken ändert sich der langwellige Strahlungsaustausch zwischen den Atmosphärenschichten sowie zwischen der Atmosphäre und dem Boden entscheidend.

Da die Quantifizierung des Strahlungsflusses unter diesen Bedingungen komplex ist, wird die langwellige Strahlung am Modelloberrand bei Bewölkung über einen einfachen empirischen Ansatz parameterisiert (Oke, 1987):

$$R_{lw}^{\downarrow,0} = \sigma_B (T_{2m})^4 \left[1 - c \cdot \exp \left(-d (273 - T_{2m})^2 \right) \right] \quad (3.81)$$

$$R_{lw}^{\downarrow,0}(\text{bew.}) = R_{lw}^{\downarrow,0} \left(1 + \omega_{ges} \left(\frac{N_{ges}}{8} \right)^2 \right) \quad (3.82)$$

$R_{lw}^{\downarrow,0}(\text{bew.})$ ist die langwellige abwärtsgerichtete Strahlung am Modelloberrand bei Bewölkung, T_{2m} ist die Lufttemperatur in 2 m Höhe, für die Konstanten gilt $c = 0.261$ und $d = 7.77 \cdot 10^{-4}$. Der mittlere Einfluß der Bewölkung auf die langwellige Strahlung (ω_{ges}) ermittelt sich über die Beziehung:

$$\omega_{ges} = \frac{0.22N_t + 0.185N_m + 0.06N_h}{N_{ges}}$$

wobei N_t, N_m, N_h und N_{ges} der Bedeckungsgrad mit tiefen, mittleren und hohen Wolken bzw. der Gesamtbedeckungsgrad in Achteln ist (Bruse, 1995).

V3.0

3.4.1.1 Bestimmung der Erwärmung/ Abkühlung durch langwellige Strahlungsdivergenz Die Divergenz der langwelligen Strahlung hat vor allem in windstillen Wettersituationen eine erhebliche Auswirkung auf die vertikale Verteilung der Lufttemperatur und wurde daher ab Version 3.0 in die Modellgleichungen aufgenommen. Allerdings kommt hier nur ein sehr vereinfachtes Verfahren zum Einsatz, aus ausschließlich vertikale Strahlungsflüsse berücksichtigt. Zudem wird von einer Isothermie der Atmosphäre ausgegangen, welches zwar eine grobe Vereinfachung der realen Verhältnisse darstellt, die aber dennoch im Zusammenwirken mit den übrigen Ansätzen zur Strahlungsberechnung im Modell zu einem praktikablen Lösungsansatz führt.

Die Veränderung der Lufttemperatur aufgrund langwelliger Strahlungsdivergenz ist durch den eindimensionalen Ansatz

$$S_\theta = \left. \frac{\partial \theta}{\partial t} \right|_{rad} = -\frac{1}{c_p \rho} \frac{\partial R_{lw}}{\partial z}$$

gegeben, wobei $\partial R_{lw} / \partial z$ der vertikale Gradient der absorbierten langwelligen Strahlung ist, der sich aus den Gradienten der aufwärtsgerichteten (R_{lw}^\uparrow) und der abwärtsgerichteten Komponente (R_{lw}^\downarrow) zusammensetzt:

$$\frac{\partial R_{lw}}{\partial z} = \frac{\partial R_{lw}^\uparrow}{\partial z} - \frac{\partial R_{lw}^\downarrow}{\partial z}$$

Zur Bestimmung der abwärtsgerichteten Komponente R_{lw}^\downarrow in der Höhe z kann (3.77) analog angewendet werden. Für den aufwärtsgerichteten Strahlungsstrom ergibt sich:

$$R_{lw}^\uparrow(z) = \sigma T_0^4 (1 - \varepsilon(0, z)) + \int_0^z \sigma T^4(z') \frac{\partial \varepsilon}{\partial z'} dz' \quad (3.83)$$

Hierbei bestimmt der erste Term auf der rechten Seite die vom Erdboden ausgehende Wärmestrahlung abzüglich der Absorption in den unterhalb von z liegenden Luftschichten und der zweite Term die von eben diesen Luftschichten emittierte Wärmestrahlung, wiederum unter Berücksichtigung der Absorption in den nach oben anschließenden Schichten.

Während diese Formulierung im eindimensionalen Randmodell ohne Probleme zu lösen ist, ist es für das dreidimensionale Modell äußerst kompliziert, eine entsprechende Erweiterung zu finden, die mögliche Vegetationsschichten und Gebäude berücksichtigt. Aus diesem Grund wird die von Sasamori (1972, zit. in Pielke S. 199) vorgeschlagene Annahme einer isothermen Atmosphäre verwendet. Hierbei treten als Referenztemperaturen nur noch die Lufttemperatur in der betrachteten Höhe, die Oberflächentemperatur des Bodens und die Temperatur in einer Referenzhöhe H (Oberrand des Modells) auf. Die entsprechenden Vereinfachungen für die vertikalen Strahlungsflüsse lauten hierbei:

$$\begin{aligned}\frac{\partial R_{lw}^{\uparrow}}{\partial z} &= \sigma \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right|_z \left(\theta^4(z) - T_0^4 \right) \\ \frac{\partial R_{lw}^{\downarrow}}{\partial z} &= \sigma \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right|_z \left(\hat{\theta}^4(z=H) - \theta^4(z) \right)\end{aligned}$$

Im dreidimensionalen Modell werden als Referenztemperaturen jeweils die entsprechende Oberflächentemperatur an einem Punkt verwendet sowie bis zu einer Höhe $z = Z$ (Oberrand des 3D-Modells) die entsprechenden Lufttemperaturen des Hauptmodells. Oberhalb von $z = Z$ bis $z = H$ wird an jedem Punkt des Modells auf die Werte des eindimensionalen Randmodells ($\hat{\theta}$) zurückgegriffen.

Die Bestimmung des Gradienten der Emissivität erfolgt analog zu (3.77) mit

$$\left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right|_z = \frac{\varepsilon(m + \Delta m) - \varepsilon(m)}{z_2 - z_1}$$

wobei m die Wasserdampfmenge zwischen der Ausgangshöhe z_0 und der Höhe z_1 ist. Das Niveau der Ausgangshöhe richtet sich nach der betrachteten Strahlungsrichtung: Für die aufwärtsgerichtete Strahlung beginnt die Integration am Boden ($z_0 = 0$), während sie für die abwärtsgerichtete Komponente am Modelloberrand ($z_0 = H$) beginnt. Das Niveau z_2 sollte möglichst nahe bei z_1 liegen, da anhand dieser beiden Werte die Diskretisierung $\partial \varepsilon / \partial z$ vorgenommen wird. Da sich hier anbietet, die ohnehin vorhandenen Modellschichten zu verwenden, erfolgt die Wahl von z_1 und z_2 analog zu Gitteraufbau des Modells. Abbildung 3 veranschaulicht das Schema für die aufwärtsgerichtete (links) und abwärtsgerichtete (rechts) Integration. In der diskreten Schreibweise ergeben sich für die Menge des ausfällbaren Wassers m bezogen auf eine Schicht k für den aufwärtsgerichteten Strahlungsfluss die Formulierungen

$$\begin{aligned}m(z_1, k) &= \sum_{n=1}^{k-1} \left(\frac{p(n)}{p_0} \right)^{0.85} \rho q(n) \Delta z(n) \\ m + \Delta m(z_2, k) &= \sum_{n=1}^k \left(\frac{p(n)}{p_0} \right)^{0.85} \rho q(n) \Delta z(n)\end{aligned}$$

und für den abwärtsgerichteten Fluss

$$m(z_1, k) = \sum_{n=HH}^{k+1} \left(\frac{p(n)}{p_0} \right)^{0.85} \rho q(n) \Delta z(n)$$

$$m + \Delta m(z_2, k) = \sum_{n=HH}^k \left(\frac{p(n)}{p_0} \right)^{0.85} \rho q(n) \Delta z(n)$$

wobei HH für die oberste Modellschicht steht.

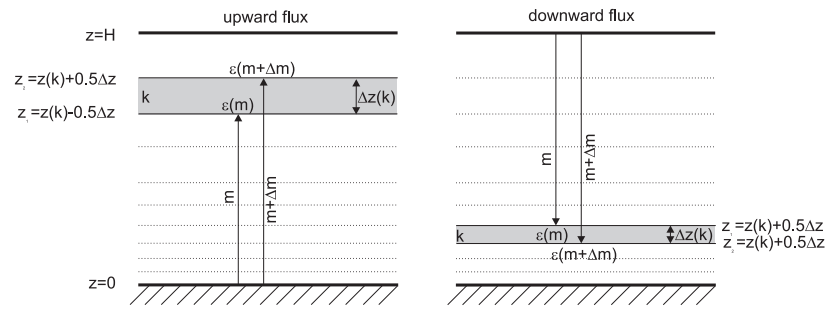


Abbildung 3: Vertikale Integration der Wasserdampfmenge zur Bestimmung der langwelligen Strahlungsdivergenz. Links: aufwärtsgerichtete Integration, Rechts: abwärtsgerichtete Integration

3.4.2 Kurzwellige Strahlung

Die kurzwelligen Strahlungsflüsse am Modelloberrand werden durch Integration der Strahlungsintensität der Sonne I_0 über den Wellenlängenbereich von $\lambda = 0.29 \mu\text{m}$ bis $\lambda = 4.0 \mu\text{m}$ berechnet:

$$R_{kw}^* = \int_{0.29}^{4.0} I_0(\lambda) \exp\{-\alpha_R(\lambda)m + \alpha_M(\lambda)m\} d\lambda \quad (3.84)$$

Der Energiegehalt in den einzelnen Wellenlängenbereichen kann aus den Tabellen von Houghton (1977) entnommen werden. Die optische Luftmasse m ist eine Funktion der Sonnenhöhe h :

$$m = \begin{cases} \frac{1}{\sin h} & ; \text{wenn } h > 10^\circ \\ 1.22 \left(\frac{1.0144}{\sin(h+1.44)} - 0.49 \right) & ; \text{wenn } h \leq 10^\circ \end{cases} \quad (3.85)$$

Die Koeffizienten für die Rayleigh- und Miestreuung (α_R und α_M) sind

$$\alpha_R(\lambda) = 0.00816 \cdot \lambda^{-4}$$

$$\alpha_M(\lambda) = \lambda^{-1.3} \beta_{tr}$$

wobei β_{tr} der Trübungskoeffizient nach Ångström ist. β_{tr} liegt im Bereich zwischen 0.0040 für klare Luft und 0.1 bei trüber Luft und kann aus Tabellen entnommen werden. Der Einfluß dieses Faktors auf das Endergebnis ist jedoch unter normalen atmosphärischen Bedingungen gering.

Den absolute Betrag der kurzwelligen direkten Strahlung am Modelloberrand erhält man nach Abzug der durch den Wasserdampf in der Atmosphäre absorbierten Energiebeträge:

$$R_{kw,dir}^0 = R_{kw}^* - R_{kw,abs} \quad (3.86)$$

Für $R_{kw,abs}$ gilt nach Liljequist (1979)

$$R_{kw,abs} = 70 + 2.8 \cdot e_{2m} \cdot m$$

Hierbei ist e_{2m} der Dampfdruck in 2 m Höhe in [hPa] und m wiederum die optische Luftmasse. Der im Laufe des Jahres leicht variierende Abstand zwischen Erde und Sonne wird bei der Berechnung der Strahlung vernachlässigt.

Bei wolkenfreiem Himmel kann die diffuse Strahlungskomponente nach Brown und Isfält (1974) wie folgt aus der direkten Komponente und der Sonnenhöhe h hergeleitet werden:

$$R_{kw,dif}^0 = R_{kw,dir}^0 \sin h \left(\frac{\gamma(h)}{1 - \gamma(h)} \right) \quad (3.87)$$

mit

$$\gamma(h) = \frac{1}{1 + 8(\sin h)^{0.7}}$$

Bei bewölktem Himmel verändern sich die Strahlungsverhältnisse, da sich der absolute Energiebetrag verringert und die diffuse Strahlung einen größeren Anteil an der verbleibenden Strahlungsenergie erhält. Der Wolkeneinfluß wird über das Verfahren von Taesler und Anderson (1984) in die Modellrechnung integriert. Für die direkte Komponente ergibt sich hiernach die Beziehung

$$R_{kw,dir}^0(bew.) = R_{kw,dir}^0 \left(1 - \frac{N_{ges}}{8} \right) \quad (3.88)$$

Die Veränderung der diffusen Komponente gestaltet sich komplexer, da hier auch Reflexionen zwischen dem Erdboden und der Wolkenunterseite zu berücksichtigen sind. Hier ergibt sich nach Taesler und Anderson (1984) die Beziehung

$$R_{kw,dif}^0(bew.) = \left(\frac{R_{kw,dir}^0 \sin h}{1 - \gamma(h)} \right) \left(\frac{a_s - 1}{a_w a_s - 1} \right) - R_{kw,dir}^0(bew.) \sin h \quad (3.89)$$

Die Albedo der verschiedenen Wolkenschichten a_w wird wie folgt gemittelt:

$$a_w = \frac{0.75N_t + 0.45N_m + 0.40N_h}{N_{ges}}$$

Für die Albedo des Bodens a_s wird ein über das Modellgebiet gemittelter Wert verwendet.

3.4.3 Modifikation der Strahlung durch Vegetation

Der Strahlungsfluß innerhalb und unterhalb von Vegetationsschichten ist durch die Abschwächung der kurzwelligen Strahlung und eine generelle Modifikation des langwelligen Strahlungsflusses charakterisiert. Zu den in diesem Abschnitt behandelten Veränderungen des Strahlungsflusses durch Vegetationselemente addieren sich die im nächsten Abschnitt dargestellten Einflüsse aufgrund von Gebäuden.

Die Veränderung der Strahlung beim Durchqueren von Vegetationsschichten ist ein äußerst komplexer Vorgang. In dieser Modellversion soll zunächst ein sehr einfaches Verfahren Verwendung finden, das später gegen komplexere Methoden (z.B. Rotenberg *et al.*, 1998) ausgetauscht werden kann.

Stellt man sich die Vegetation vereinfacht als ein trübes Medium vor, so kann der Grad der Modifikation σ beim Durchqueren der Vegetationsschichten in Anlehnung an das *Beer'sche Gesetz* über eine exponentielle Funktion dargestellt werden. Dabei ersetzt der durchstrahlte Blattflächenindex LAI die optische Weglänge des gedachten Strahles und der F ist ein von der Blattstellung abhängiger Extinktionskoeffizient (Oke, 1987).

Bei einem unmodifizierten Strahlungsverlauf ist $\sigma = 1$ und nimmt mit zunehmender Abschirmung ab, bis ein Wert von $\sigma = 0$ eine völlige Abschirmung anzeigt. Für die verschiedenen Strahlungsflüsse in einer Höhe z ergeben sich unterschiedliche Faktoren:

$$\text{Kurzwellig direkt:} \quad \sigma_{kw,dir}(z) = \exp(-F \cdot LAI'(z)) \quad (3.90a)$$

$$\text{Langwellig abwärts:} \quad \sigma_{lw}^{\downarrow}(z, z_p) = \exp(-F \cdot LAI(z, z_p)) \quad (3.90b)$$

$$\text{Langwellig aufwärts:} \quad \sigma_{lw}^{\uparrow}(0, z) = \exp(-F \cdot LAI(0, z)) \quad (3.90c)$$

Die Veränderung der diffusen Strahlung durch Vegetation wird nicht berücksichtigt, da hierfür kein einfaches Modell entwickelt werden kann. Ein Teil der direkten kurzwelligen Komponente wird durch Mehrfachreflexionen im Vegetationsbestand in diffuse Strahlung umgewandelt, wodurch ein Teil der abgeschirmten diffusen Himmelsstrahlung ersetzt wird.

Bei der vertikalen Integration der lokalen Blattflächendichten LAD zum Blattflächenindex LAI sind bei den einzelnen Strahlungskomponenten unterschiedliche Integrationsgrenzen zu verwenden. Im Fall der direkten Komponente wird der optische Pfad der Strahlung durch das Modellgebiet über ein später beschriebenes iteratives Verfahren bestimmt. Beim abwärtsgerichteten langwelligen Strahlungsfluß ist der Bereich oberhalb des Untersuchungspunktes z bis zur Höhe der Vegetation $z = z_p$ zu integrieren, während für die aufwärtsgerichtete langwellige Strahlungskomponente der Bereich unterhalb von z bis zur Bodenoberfläche $z = 0$ relevant ist.

Die absoluten Strahlungsflüsse in einer Höhe z können nach Bestimmung der Modifikationsfaktoren wie folgt berechnet werden:

$$R_{kw,dir}(z) = \sigma_{kw,dir}(z) R_{kw,dir}^0 \quad (3.91a)$$

$$R_{kw,dif}(z) = R_{kw,dif}^0 \quad (3.91b)$$

$$R_{lw}^{\downarrow}(z) = \sigma_{lw}^{\downarrow}(z, z_p) R_{lw}^{\downarrow,0} + (1 - \sigma_{lw}^{\downarrow}(z, z_p)) \varepsilon_f \sigma \overline{T}_{f+}^4 \quad (3.91c)$$

$$R_{lw}^{\uparrow}(z) = \sigma_{lw}^{\uparrow}(0, z) \varepsilon_s \sigma T_0^4 + (1 - \sigma_{lw}^{\uparrow}(0, z)) \varepsilon_f \sigma \overline{T}_{f-}^4 \quad (3.91d)$$

Die Referenzwerte $R_{kw,dif}^0$, $R_{kw,dif}^0$ und $R_{lw}^{l,0}$ beziehen sich auf die nach Abschnitt 3.4.1 und 3.4.2 bestimmten Referenzwerte der Strahlungskomponenten am Modelloberrand. \bar{T}_{f+} und \bar{T}_{f-} sind die mittleren Temperaturen der nach oben (+) und nach unten (−) anschließenden Vegetationsschichten, T_0 ist die Temperatur der Bodenoberfläche.

Der Faktor F ist abhängig von der Ausrichtung der Blätter und kann für zufällig orientierte Blätter gleich 0.5 gesetzt werden (Watanabe, 1994).

Der durchstrahlte Blattflächenindex LAI und LAI' ist eine Funktion der lokalen Blattflächendichte in den einzelnen von der Strahlung durchquerten Gitterboxen. Bei der langwelligen Strahlung wird davon ausgegangen, daß die Strahlung zunächst nur eine vertikale Abhängigkeit zeigt, so daß sich der Blattflächenindex aus dem vertikalen Integral der Blattflächendichten zwischen den Höhen z und z^* ergibt:

$$LAI(z, z^*) = \int_z^{z^*} LAD(z') dz'$$

Der abschirmende Einfluß von Vegetation seitlich des Untersuchungspunktes in Bezug auf die langwellige Strahlung bleibt hierbei unberücksichtigt, da das Verfahren sonst eine unangemessene Komplexität erreichen würde.

Bei der direkten Komponente hingegen wird der optische Weg und somit der relevante Blattflächenindex in Abhängigkeit von der Einfallsrichtung der direkten Sonnenstrahlen bestimmt. Hierdurch variieren die vom Strahl durchquerten Gitterboxen und der zu berücksichtigende Blattflächenindex mit dem Sonnenstand. Der von einem theoretischen Sonnenstrahl durchquerte Blattflächenindex läßt sich als Weg zwischen dem Anfangspunkt $a(x, y, z)$ und einem Endpunkt $A(x, y, z)$ mit der Länge l darstellen:

$$LAI'(a) = \int_a^A LAD(x', y', z') dl' \quad (3.92)$$

Der Anfangspunkt a entspricht hierbei dem Modellgitterpunkt, für den die Strahlung bestimmt werden soll. In einem dreidimensionalen Modell mit beliebiger Verteilung der Vegetation kann der durchstrahlte Blattflächenindex LAI' für die direkte Strahlung nur mit einem geometrischen Verfahren bestimmt werden. Ausgehend vom Startpunkt a wird hierzu ein Vektor in Richtung der Sonne konstruiert, der den Verlauf eines Sonnenstrahls repräsentiert (Strahlvektor). Dieser Vektor wird in n -finite Teilstücke mit einer vorgegebenen Höhenänderung Δz zerlegt. Die Endkoordinaten des n -ten Teilstückes dieses Vektors sind durch folgende Zuordnungen gegeben:

$$\begin{aligned} z_n &= z + \Delta z \cdot n \\ x_n &= x + \Delta x \cdot n \\ y_n &= y + \Delta y \cdot n \end{aligned}$$

Die Positionsänderung des Ende des Strahls in der horizontalen Projektion pro Höhenänderung Δz ist eine Funktion des Sonnenazimuts Ψ und der Sonnenhöhe h :

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sin \Psi \Delta xy \\ \Delta y &= \cos \Psi \Delta xy \\ \text{mit } \Delta xy &= \frac{\Delta z}{\tan h} \end{aligned}$$

Wie man erkennen kann, ist dieses Verfahren empfindlich gegenüber sehr niedrigen Sonnenständen. Um hier keine Gitterpunkt zu überspringen, muß Δz hier recht klein gewählt werden. Ein Wert von $\Delta z = 0.1$ m hat sich hierbei als hinreichend genau erwiesen.

Das Blattflächenintegral in (3.92) kann nun durch die Teilsegmente des Strahlvektors dargestellt werden und somit numerisch gelöst werden:

$$\int_a^A \text{LAD}(x', y', z') dl' = \sum_{n=1}^N \text{LAD}(x_n, y_n, z_n) \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2} \quad (3.93)$$

Der letzte Term auf der rechten Seite entspricht der Länge l' des Vektorsegmentes im Raum. Zur Ermittlung der lokalen Blattflächendichte LAD wird der aktuelle Endpunkt x_n, y_n, z_n dem zugehörigen Gitterpunkt zugeordnet und die Blattflächendichte, soweit dort vorhanden, ausgelesen. Ausgehend vom Untersuchungspunkt wird der Strahlvektor in jedem Rechenschritt um ein Segment verlängert. Der Endpunkt A ist nach N Strahlverlängerungen erreicht, wenn keine weitere Modifikation der direkten Komponente mehr eintreten kann, das Strahlende also oberhalb des höchsten Vegetationselementes liegt oder das Modellgebiet seitlich verlassen hat.

Eine Besonderheit im Rahmen dieses Verfahrens stellen die Gebäude dar, die im folgenden Abschnitt noch gesondert betrachtet werden. Trifft der Strahlvektor bei seiner Durchquerung des Modellgebietes auf ein festes (also undurchstrahlbares) Hindernis, so wird $\sigma_{kw,dir}$ sofort auf Null gesetzt, da der betreffende Ausgangspunkt im Schatten liegt.

Abschließend sei bemerkt, daß dieses Verfahren in der eindimensionalen Betrachtungsweise in den von Watanabe (1994) vorgeschlagenen Ansatz

$$\sigma_{kw} = \exp(-F \cdot \text{LAI}(z) \cdot \cos^{-1}(90 - h))$$

übergeht.

3.4.4 Modifikation der Strahlung durch Gebäude

Die Modifikation der kurzwelligen und langwelligen Strahlung durch Gebäude hat in Städten einen erheblichen Einfluß auf die lokale Energiebilanz. Die Abschattung der kurzwelligen direkten Strahlung wurde bereits im vorangehenden Abschnitt kurz angesprochen: Wird bei der Analyse des Modellgebiets ein Schnittpunkt des Strahlvektors mit einem Gebäude gefunden, so wird die direkte Strahlungskomponente auf Null gesetzt. Dieses Verfahren liefert somit automatisch auch die Modifikationsfaktoren für die kurzwellige direkte Strahlung im Bezug auf Gebäude.

Bei den übrigen Strahlungskomponenten wird zur Beschreibung des Verhältnisses zwischen Flächenabschirmung und freier Himmelssicht für jeden Modellgitterpunkt zunächst der Himmelssichtfaktor (*Sky-View-Faktor* σ_{svf}) ermittelt. Hierzu wird das schon im vorangehenden Abschnitt verwandte geometrische Verfahren in leicht modifizierter Form verwandt, um die maximalen Abschirmungswinkel α in der Raumrichtung π zu ermitteln. Der Himmelssichtfaktor ergibt sich dann aus dem gemittelten Abschirmungswinkel aus allen Teilrichtungen:

$$\sigma_{svf} = \frac{1}{360} \sum_{\pi=0}^{360} \cos \alpha(\pi) \quad (3.94)$$

Geht man vereinfachend davon aus, daß sich die diffuse Strahlung isotrop über den Himmel verteilt, so ergibt sich für die Reduzierung der kurzwelligen diffusen Strahlung aufgrund der Horizontabschirmung die Beziehung

$$R_{kw,dif}(z) = \sigma_{svf}(z) R_{kw,dif}^0 \quad (3.95)$$

Durch die Horizonteinschränkung wird jedoch ein Teil der direkten Strahlung im System durch Reflexion „gefangen“. Hierdurch erhöht sich die diffuse Komponente je nach den Reflexionseigenschaften der Umgebung zum Teil erheblich. Dieser Effekt kann durch die erweiterte Beziehung

$$R_{kw,dif}(z) = \sigma_{svf}(z) R_{kw,dif}^0 + (1 - \sigma_{svf}) R_{kw,dif}^0 \cdot \bar{a} \quad (3.96)$$

berücksichtigt werden. Die Umgebungsalbedo \bar{a} wird als mittlerer Wert über alle im Modell vorkommenden Gebäudewände und den Bodenoberflächen ermittelt.

Die Berechnung der langwelligen Strahlungsflüsse in der Nähe von Gebäuden gestaltet sich kompliziert, da hier nicht mehr vereinfacht von eindimensionalen Verhältnissen ausgegangen werden kann. Je nach Konstellation der Gebäude und in Abhängigkeit von den Oberflächentemperaturen stellt sich ein komplexes dreidimensionales System aus Emission, Absorption und Reflektion der langwelligen Strahlung ein.

Zur Berücksichtigung der Wärmestrahlung der Gebäude wird vereinfachend ein zusätzlicher horizontaler Strahlungsfluß in Abhängigkeit von der mittleren Fassadenoberflächentemperatur \bar{T}_w definiert:

$$R_{lw}^{\leftrightarrow}(z) = (1 - \sigma_{svf}(z)) \varepsilon_w \sigma_B \bar{T}_w^4 \quad (3.97)$$

In diesem Ansatz wird der Himmelssichtfaktor nicht nach Teilsektoren differenziert, so daß es keinen Unterschied macht, ob ein Punkt von einer kühlen Nordfassade oder einer heißen Südfassade abgeschirmt wird. Da die Reflexion der langwelligen Strahlung in diesem Ansatz nicht berücksichtigt wurde, wird zur Berechnung der langwelligen Strahlungsbilanz an der Bodenoberfläche und an Fassaden ein modifiziertes Verfahren verwendet, das diesen Aspekt berücksichtigt.

3.5 Bestimmen der Gitterweite im eindimensionalen Randmodell

V2.0

Ab Version 2.0 wird die vertikale Gitterweite im eindimensionalen Randmodell iterativ anhand des aktuellen Oberrandes der Kernmodells Z , der vertikalen Auflösung der obersten Schicht im Kernmodell $\Delta z(Z)$ und der Gesamthöhe des eindimensionalen Modells H bestimmt.

Hierdurch soll für jede Höhe Z eine gleichmäßige Aufweitung der Schichtdicke erreicht werden.

Die Schichtdicke $\Delta z(i)$ der i -ten Schicht des eindimensionalen Modells berechnet sich nach

$$\Delta z(i) = \alpha^{i+1} \Delta z(Z)$$

wobei α ein zu bestimmender Spreizfaktor ist, mit dessen Hilfe man in h Schichten unter Verwendung der vorgenannten Rechenvorschrift den Modellrand H erreicht.

Die zu überbrückende Distanz ΔH ist

$$\Delta H = H - (Z + 0.5\Delta z(Z))$$

wobei berücksichtigt wird, das H und Z jeweils im Zellmittelpunkt definiert sind.

Die mit einem Spreitzfaktor α überspannte Distanz ergibt sich aus:

$$\Delta G(\alpha) = \sum_{i=1}^h (\alpha^{i+1} \Delta z(Z)) - 0.5\alpha^{h+1} \Delta z(Z)$$

Mittels Regula-Falsi Methode wird nun der Spreitzfaktor α so bestimmt, daß die Bedingung

$$0 = \Delta G(\alpha) - \Delta H$$

hinreichend genau erfüllt ist.

4 Das Boden- und Grenzflächenmodell

Das Bodenmodell beschreibt die hydrologischen und thermodynamischen Prozesse in den Bodenschichten von $z = 0$ m bis zur Tiefe $z = -1.75$ m. In dieser Tiefe kann davon ausgegangen werden, daß die tageszeitlichen Schwankungen der Temperatur und Feuchte vernachlässigbar klein sind. Für jeden Gitterpunkt kann eine eigene Bodenart bzw. ein eigenes Versiegelungsmaterial gewählt werden, wodurch diverse Bodenstrukturen im Modell nachgebildet werden.

Im Boden wird ein eindimensionales nicht-äquidistantes Rechengitter mit 14 vertikalen Rechenpunkten verwendet (siehe Tabelle 3). Die Auflösung beträgt $\Delta z = 0.015$ m an der Oberfläche und weitet sich bis zu einer Gitterweite von $\Delta z = 0.5$ m in den tiefen Bodenschichten auf.

Tabelle 3: Aufbau des vertikalen Gitters im Bodenmodell

Layer	z (Mitte)	z (Unterkante)	Δz
1	0.005	0.01	0.01
2	0.015	0.02	0.01
3	0.025	0.03	0.01
4	0.035	0.04	0.01
5	0.05	0.06	0.02
6	0.07	0.08	0.02
7	0.09	0.10	0.02
8	0.15	0.20	0.10
9	0.25	0.30	0.10
10	0.35	0.40	0.10
11	0.45	0.50	0.10
12	0.75	1.0	0.50
13	1.25	1.5	0.50
14	1.75	2.0	0.50

Zur Glättung der Oberflächentemperaturen wird der Wärmeaustausch am ersten Gitterpunkt des Bodenmodells unterhalb der Oberfläche dreidimensional berechnet.

Die Aufgabe des Grenzflächenmodells besteht in der Bestimmung der aktuellen Oberflächenfeuchte und -temperatur des Bodens, der Gebäudewände sowie der Dächer. Das Grenzflächenmodell stellt somit die im Atmosphärenmodell benötigten thermodynamischen und hydrologischen Randbedingungen zur Verfügung.

Als Sonderfall behandelt das Bodenmodell ab Version 2.0 auch Wasserflächen. Da hier einige Besonderheiten gelten ist ihnen ein eigener Abschnitt gewidmet.

4.1 Hydrologischer Komplex des Bodenmodells

Das hydrologische Teilmodell simuliert den volumetrischen Wassergehalt η in einer Gitterbox als eine Funktion hydrologischer Ausgleichsprozesse. Die Hauptaufgabe des Hydrologiemodells im Bezug auf das Gesamtmodell besteht in der Bereitstellung der Feuchte der obersten Gitterbox zur Bestimmung der Grenzflächenfeuchte sowie der Bilanzierung des pflanzenverfügbaren Bodenwassers.

4.1.1 Die Grundgleichungen

Der vertikale Wasserfluß $j_{w,s}^s$ in einem wassergesättigten Boden unter dem Einfluß der Gravitation läßt sich über das *Gesetz von Darcy* beschreiben:

$$j_{w,s}^s = -\rho_w K_{\eta,s} \nabla \Psi_s - \rho_w K_{\eta,s} \vec{Z} - S_{\eta} \quad (4.1)$$

Hierbei ist $K_{\eta,s}$ die hydrologische Leitfähigkeit und Ψ_s ist das Matrixpotential eines wassergesättigten Bodens. \vec{Z} ist der Einheitsvektor in entgegengesetzter Richtung zur Gravitation und S_{η} ein lokaler Senkterm zur Berücksichtigung des Wasserverlustes durch Pflanzenwurzeln, der vom Pflanzenmodell (siehe Kapitel 5, S.73 ff.) bereitgestellt wird. Der mittlere Term auf der linken Seite beschreibt gravitationsbedingte Veränderungen im Wasserhaushalt eines Bodensegmentes hervorgerufen durch unterschiedliche Durchlässigkeiten der nach oben und unten anschließenden Bodenschichten und den damit verbundenen Wasserverlust bzw. das Aufstauen von Sickerwasser in den Bodenschichten.

Zur Lösung der Gleichung wird als abgeleitete Kenngröße die hydrologische Diffusität des Bodens definiert als:

$$D_{\eta} = K_{\eta} \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \quad (4.2)$$

Im nicht-wassergesättigten Bereich lassen sich die benötigten Werte für Ψ , K_{η} und D_{η} aus empirischen Formeln herleiten (Clapp und Hornberger, 1978):

$$\Psi = \Psi_s \left(\frac{\eta_s}{\eta} \right)^b \quad (4.3)$$

$$K_{\eta} = K_{\eta,s} \left(\frac{\eta}{\eta_s} \right)^{2b+3} \quad (4.4)$$

$$D_{\eta} = -\frac{b \cdot K_{\eta,s} \Psi_s}{\eta} \left(\frac{\eta}{\eta_s} \right)^{b+3} \quad (4.5)$$

Die Modellkonstante b und die Werte für η_s, Ψ_s und $K_{\eta,s}$ sind für unterschiedliche Bodenarten aus den Tabellen von Clapp und Hornberger (1978) zu entnehmen (siehe Tabelle 4). Innerhalb von Versiegelungsschichten gilt $\eta = \Psi = 0$.

An der Übergangsstelle zwischen natürlichen Böden und Versiegelungsschichten kann ebenfalls kein Wassertransport stattfinden, deswegen gilt hier $D_{\eta} = K_{\eta} = 0$. Hierdurch wird festgelegt, daß sich über Versiegelungsschichten das unter Graviationskraft aus höherliegenden Schichten abfließende Wasser komplett staut.

Der instationäre lokale Wasserfluß $j_{w,s}^s$ an einem Punkt leitet sich aus (4.1) unter Verwendung der hydrologischen Diffusität D_{η} nach (4.5) her:

$$j_{w,s}^s = -\rho_w D_{\eta} \nabla \eta - \rho_w K_{\eta} \vec{Z} - \rho_w S_{\eta} \quad (4.6)$$

Die benötigte prognostische Gleichung für den volumetrischen Wassergehalt ergibt sich nun aus der Raum-Zeit Ableitung von (4.6):

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{1}{\rho_w} \nabla j_{w,s}^s = D_{\eta} \left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} K_{\eta} - S_{\eta} \quad (4.7)$$

Tabelle 4: Hydrologische und thermodynamische Parameter verschiedener natürlicher Böden und Versiegelungsmaterialien. Zusammengestellt nach Clapp und Hornberger (1978) und Kuchling (1991).

η_s = Sättigungsfeuchte, η_{fc} = Feldkapazität, η_{wilt} = permanenter Welkpunkt, Ψ_s = Matrixpotential bei Sättigung, $K_{\eta,s}$ = Hydrologische Leitfähigkeit bei Sättigung, b = Clapp und Hornberger Konstante, $\rho_i c_i$ = Volumenwärme des Materials (ohne Wasser), λ = Wärmeleitfähigkeit (soweit konstant)

	η_s	η_{fc}	η_{wilt}	Ψ_s	$K_{\eta,s}$	b	$\rho_i c_i$	λ
Natürliche Materialien								
Sand	0.385	0.135	0.0068	-0.121	176.0	4.05	1.463	
lehmiger Sand	0.410	0.150	0.075	-0.090	156.3	4.38	1.404	
sandiger Lehm	0.435	0.195	0.114	-0.218	34.1	4.90	1.320	
schlammiger Lehm	0.485	0.255	0.179	-0.786	7.2	5.30	1.271	
Lehm	0.451	0.240	0.155	-0.478	7.0	5.39	1.212	
sandig-lehmiger Ton	0.420	0.255	0.175	-0.299	6.3	7.12	1.175	
schlammig-lehm. Ton	0.477	0.322	0.218	-0.356	1.7	7.75	1.317	
lehmiger Ton	0.476	0.325	0.250	-0.630	2.5	8.52	1.225	
sandiger Ton	0.426	0.310	0.219	-0.153	2.2	10.40	1.175	
schlammiger Ton	0.492	0.370	0.283	-0.490	1.0	10.40	1.150	
Ton	0.482	0.367	0.286	-0.405	1.3	11.40	1.089	
Torf	0.863		0.395	-0.356	8.0	7.75	0.836	
Versiegelungsmaterialien								
Zementbeton							2.083	1.63
Mineralbeton							1.750	2.33
Asphalt mit Kies							2.214	1.16
Asphalt mit Basalt							2.251	0.90
Granit							2.345	4.61
Basalt							2.386	1.73

Einheiten: $[\eta_s], [\eta_{fc}], [\eta_{wilt}] = m^3 m^{-3}$, $[\Psi_s] = m$, $[K_{\eta,s}] = 10^{-6} ms^{-1}$, $[\rho_i c_i] = 10^6 J m^{-3} K^{-1}$, $[\lambda] = W m^{-1} K^{-1}$

Da die hydrologischen Ausgleichs- und Sickerprozesse in den oberen Bodenschichten fast ausschließlich in vertikaler Richtung verlaufen, muß das hydrologische Modell nur eindimensional ausgelegt werden. Es gilt somit:

$$\frac{\partial \eta}{\partial x} \equiv \frac{\partial \eta}{\partial y} \equiv 0$$

Verwendet man außerdem anstelle der absoluten Tiefe z die in den Boden gerichtete Normalkoordinate n mit $n = -z$, so erhält man aus (4.7) die eindimensionale Prognosegleichung für den Bodenwassergehalt im ungesättigten Bereich:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = D_\eta \frac{\partial^2 \eta}{\partial n^2} - \frac{\partial}{\partial n} K_\eta - S_\eta \quad (4.8)$$

4.1.2 Randbedingungen des hydrologischen Teilmodells

Der Wassergehalt und der Gradient der hydrologischen Leitfähigkeit am unteren Modellrand bei $z = -T$ wird über die Bedingungen

$$\left. \frac{\partial \eta}{\partial t} \right|_{z=-T} = -f(\eta(Z = -T)) \quad \text{und} \quad \left. \frac{\partial K_\eta}{\partial z} \right|_{z=-T} = 0$$

beschrieben. Hierbei ist f eine extern vorzugebene Funktion, die den Wasserverlust der untersten Bodenschicht durch Drainagevorgänge beschreibt. In den meisten Fällen ist die einfache Beziehung $f = 0$ hinreichend genau.

Am oberen Modellrand wird eine Null-Gradient Bedingung für das Feuchtefeld angenommen

$$\left. \frac{\partial \eta}{\partial z} \right|_{z=0} = 0$$

Die an der Grenzfläche berechneten Wasser- und Wasserdampf Flüsse $j_{v,0}^{ges}$ setzen sich aus den Verdunstungs- bzw. Kondensationsflüssen an der Bodenoberfläche $J_{v,0}$ und dem eventuell von überliegender Vegetation abfließenden Tropfwasser P^\downarrow zusammen:

$$j_{v,0}^{ges} = -\rho J_{v,0} + P^\downarrow \quad (4.9)$$

Diese werden über einen zusätzlichen Quell-/Senkterm $Q_{\eta,0}$ in das Bodemodell integriert:

$$Q_{\eta,0} = \frac{1}{\rho_w} j_{v,0}^{ges} \frac{1}{\Delta z_{k=-1}} \quad (4.10)$$

Dieser Term wird zu gleichen Teilen auf die obersten beiden Bodenschichten verteilt. Hierdurch wird berücksichtigt, daß die Bodenoberfläche uneben ist und somit nicht nur die oberste Bodenschicht an der Verdunstung beteiligt ist. Auf diese Weise wird verhindert, daß die oberste Schicht unrealistisch schnell austrocknet.

Die Oberfläche selber tritt aufgrund ihrer fehlenden räumlichen Ausdehnung in der Wasserbilanz nicht in Erscheinung, so daß hier angenommen wird:

$$K_\eta(z = 0) = D_\eta(z = 0) = 0$$

Sind Gitterboxen mit Versiegelungsmaterialien belegt, so entfällt in diesen Zellen die Bestimmung des Wassergehaltes und für die angrenzenden nicht-versiegelten Gitterzellen wird eine Nullgradientbedingung verwendet. Ist auch die Oberfläche versiegelt, so entfällt der zusätzliche Grenzflächenquellterm, da keine hydrologischen Austauschprozesse an der versiegelten Grenzfläche stattfinden können. Der Spezialfall, daß von der Vegetation abtropfendes Wasser sich auf versiegeltem Boden sammelt wird in dieser Modellversion nicht weiter behandelt.

4.1.3 Initialisierung

Zur Initialisierung der Bodenfeuchte ist eine reaktive Feuchtigkeit in Bezug auf den Sättigungswert η_s explizit vorzugeben. Der volumetrische Wassergehalt in einer Schicht z kann dann über den bodenspezifischen Sättigungswert η_s berechnet werden:

$$\eta(z) = f_{rel,s} \cdot \eta_s(z) \quad (4.11)$$

Das Modell unterscheidet 3 Bodenzonen, für die jeweils ein unterschiedlicher Startwert für die Feuchte vorgegeben werden kann:

Obere Bodenschicht: 0 - 20 cm, Layer 1 - 8, Mittlere Bodenschicht 20 - 50 cm, Layer 9 bis 11, Untere Bodenschicht: unter 50 cm, Layer 12 - 14 (jeweils in Bezug auf die obere und untere Zellwand)

4.2 Thermodynamischer Komplex des Bodenmodells

4.2.1 Die Grundgleichungen

Die thermodynamischen Eigenschaften des Bodens sind eng mit den hydrologischen Verhältnissen in den einzelnen Bodenschichten gekoppelt. In diesem Modell wird vereinfachend davon ausgegangen, daß sich Wärme wie eine skalare Größe verhält, die je nach den aktuellen Bodeneigenschaften mehr oder minder schnell transportiert werden kann. Hierdurch werden Effekte wie Wärmetransporte durch erwärmtes Wasser oder Wasserdampf sowie Phasenumwandlungen nicht berücksichtigt. Die Beschreibung einer umfassenderen kombinierten Methode findet man beispielsweise in Asaeda und Thanh Ca (1993).

Die Lösung der Gleichungen des hydrologischen und thermischen Komplexes erfolgt nacheinander. Die prognostizierten hydrologischen Größen dienen hierbei als Eingangswerte für die Berechnung der thermodynamischen Parameter des gleichen Zeitschrittes. Aufgrund der sehr langsam ablaufenden Vorgänge handelt es sich hierbei um ein numerisch stabiles System, so daß durch die Aufsplittung der Rechenschritte hinsichtlich der erlaubten Zeitschritte bei der Simulation keine relevanten Einschränkungen entstehen.

Zur Berechnung der Temperatúraustauschvorgänge ist zunächst die spezifische Wärmekapazität und Dichte (Volumenwärme) $\rho_s c_s$ eines Bodensegmentes zu bestimmen, die sich aus der Volumenwärme des eigentlichen Bodenmaterials $\rho_i c_i$ (vgl. Tabelle 4) und des in den Bodenporen eingelagerten Wassers $\rho_w c_w$ zusammensetzt:

$$\rho_s c_s = (1 - \eta_s) \rho_i c_i + \eta \cdot \rho_w c_w \quad (4.12)$$

Hierbei ist für η der aktuelle volumetrische Wassergehalt in der betrachteten Gitterbox einzusetzen. Innerhalb von Versiegelungsschichten ist $\eta = 0$ und die resultierende Volumenwärme des Versiegelungsmaterials wird explizit vorgegeben.

Die Wärmeleitfähigkeit λ_s des Boden–Wasser–Gemisches kann über das aktuelle Matrixpotential Ψ^{cm} in cm ($=100\Psi_i$) nach Tjernström (1989) wie folgt parameterisiert werden:

$$\lambda_s = \begin{cases} 419 \exp - [(\log |\Psi_i^{cm}| + 2.7)] & ; \text{wenn } \log |\Psi_i^{cm}| \leq 5.1 \\ 0.172 & ; \text{wenn } \log |\Psi_i^{cm}| > 5.1 \end{cases} \quad (4.13)$$

Innerhalb von Versiegelungsschichten kann die Wärmeleitfähigkeit wiederum direkt aus den entsprechenden Tabellen entnommen werden.

Die Temperaturleitfähigkeit κ_s ergibt sich aus dem Quotienten aus Volumenwärme $\rho_s c_s$ und Wärmeleitfähigkeit λ_s :

$$\kappa_s = \frac{\lambda_s}{\rho_s c_s} \quad (4.14)$$

Der molekulare Wärmestrom j_h^s im Boden ohne interne Wärmequellen kann mit der Fourier-Gleichung beschrieben werden:

$$j_h^s = -\lambda_s \nabla T \quad (4.15)$$

Wie beim hydrologischen Teilmodell, so wird auch beim Wärmeaustausch davon ausgegangen, daß die horizontalen Wärmeflüsse im Allgemeinen vernachlässigt werden können:

$$\frac{\partial T}{\partial x} \equiv \frac{\partial T}{\partial y} \equiv 0$$

Hierdurch erhält man aus (4.15) und mit $-z = n$ als eindimensionale prognostische Gleichung:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{\rho_b c_b} \frac{\partial}{\partial z} j_h^s = \kappa_s \frac{\partial^2 T}{\partial n^2} \quad (4.16)$$

Um eine realistischere räumliche Verteilungen der Oberflächentemperaturen zu erreichen, werden die Austauschvorgänge am ersten Gitterpunkt unter der Oberfläche dreidimensional berechnet. Hierdurch wird gewährleistet, daß zu große Temperaturgradienten zwischen benachbarten Oberflächen ausgeglichen werden.

4.2.2 Randbedingungen des thermodynamischen Komplexes

Am Oberrand $z = 0$ ist das Bodenmodell über die Grenzfläche mit dem Atmosphärenmodell gekoppelt. Hier gilt die berechnete Grenzflächentemperatur T_0 als gemeinsame Randbedingung für beide Systeme. Am Modellunterrand $z = -T$ wird die Temperatur auf dem Anfangswert T_{-T} zeitlich festgehalten.

Zusammengefaßt ergeben sich als Randbedingungen:

$$\begin{aligned} T(z=0) &= T_0 \\ T(z=-T) &= T_{-T} = \text{const} \end{aligned}$$

An der Grenze zwischen natürlichen Böden und Versiegelungsmaterialien ist keine gesonderte Behandlung der Temperatúraustauschprozesse notwendig. Die Temperaturleitfähigkeit an der gemeinsamen Zellfläche wird durch Interpolation zwischen den beiden angrenzenden Temperaturleitfähigkeiten gewonnen.

4.2.3 Initialisierung

Zu Beginn der Modellrechnung wird die Temperatur in allen Bodenschichten auf den Anfangswert $T_{\text{start},s}$ gesetzt:

$$T(z) = T_{\text{start},s} \quad (4.17)$$

4.3 Behandlung von Wasserflächen

V2.0

Wasserflächen bzw. der gesamte Wasserkörper benötigen eine gesonderte Behandlung im Modell, da die zugrunde liegenden physikalischen Prozesse erheblich komplizierter sind als bei festen Böden.

Da sich im Wasser der Absorptionsbereich für kurzwellige Strahlung, in Abhängigkeit von der Wassertrübung und dem Einfallswinkel der Sonnenstrahlen, über mehrere Meter (bis zu 10 m, in Extremfällen in den Tropen bis zu 1000 m (Oke 1984)) erstrecken kann, muß die thermodynamische Gleichung um eine interne Wärmequelle erweitert werden:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa_w \frac{\partial^2 T}{\partial n^2} + Q_w \quad (4.18)$$

Zudem wird anstelle der Temperaturleitfähigkeit des Bodensubstrates die Temperaturleitfähigkeit κ_w von Wasser verwendet. Dieser Ansatz kann so nur auf unbewegte Wasserkörper angewandt werden, da nur molekulare Prozesse und keine Advektion durch Strömung berücksichtigt werden kann.

Die interne Wärmequelle Q_w wird definiert mit:

$$Q_w = -\frac{1}{c_p \rho_w} \cdot \frac{\partial R_{kw}^w}{\partial n}$$

wobei n wie bereits eingeführt, für die in den Boden gerichtete z -Achse steht.

Die kurzwellige Strahlung im Wasser in der Tiefe n kann über ein einfaches Beer'sches Extinktionsgesetz angenähert werden:

$$R_{kw}^w(n) = R_{kw,net}^w \cdot e^{-\xi n}$$

wobei $R_{kw,net}$ die Nettostrahlung an der Wasseroberfläche ist und ξ ein gewässerabhängiger Trübungskoeffizient, der bei kleineren Gewässern in der Regel zwischen 0.5 (Frühjahr) und 0.6 (Herbst) m^{-1} liegt. Je nach Gewässerart und Biomassenproduktion kann ξ , jedoch auch deutlich anderer Werte annehmen. Als obere Randbedingung geht nicht die komplette an der Oberfläche verfügbare Strahlung nach (4.39) ein, sondern nur ein Teil. Wie in Abschnitt 4.4.5 erläutert, werden ca. 45 % der Strahlung bereits in der ersten dünnen Wasserschicht absorbiert, so daß nur der verbleibende Rest $R_{kw,net}^w$ gemäß dem Beerschen Gesetz transmittiert wird:

$$R_{kw,net}^w = 0.55 R_{kw,net}$$

4.4 Bestimmung von Temperatur und Feuchte an Boden- und Gebäudeoberflächen

Zur Lösung der prognostischen Modellgleichungen werden die Temperatur und die Feuchte an der Bodenoberfläche sowie an den Wand- und Dachflächen der Gebäude benötigt. Die Bestimmung der Grenzflächenzustände erfolgt explizit getrennt von den übrigen Modellgleichungen. Die prognostizierten Oberflächenwerte werden jeweils solange als konstant angesehen, bis eine neue Bestimmung erfolgt.

4.4.1 Temperatur der Bodenoberfläche

Die aktuelle Oberflächentemperatur T_0 ergibt sich aus der Bilanzierung der turbulenten und molekularen Grenzflächenströme sowie der Strahlungsflüsse an der Grenzfläche:

$$0 = R_{kw,net} + R_{lw,net}(T_0) - G(T_0) - H(T_0) - LE(T_0, q_0) \quad (4.19)$$

$R_{kw,net}$ ist die eintreffende kurzwellige Nettostrahlung, $R_{lw,net}$ die langwellige Strahlungsbilanz, G der Bodenwärmestrom, H der sensible und LE der latente Wärmefluß in die Atmosphäre. Es sei an dieser Stelle nochmals darauf hingewiesen, daß im Modell ENVI-met, abweichend von anderen Modellen, unter der Grenzfläche nur der reine Boden, nicht aber etwaiger Pflanzenbewuchs verstanden wird.

Die kurzwellige Nettostrahlung $R_{kw,net}$ berechnet sich mit

$$R_{kw,net} = \{\cos \beta^* \cdot R_{kw,dif}(z=0) + R_{kw,dif}(z=0)\} (1 - \alpha_s) \quad (4.20)$$

$R_{kw,dif}$ und $R_{kw,dif}$ sind die aktuellen direkten und diffusen Anteile der kurzweligen Strahlung an der Oberfläche (siehe Abschnitt 3.4 S. 48 ff.). β^* ist der Winkel zwischen der einfallenden direkten Sonnenstrahlung und der Oberflächennormalen (*Lambertsches Cosinusetz*).

Die Albedo der Oberfläche (α_s) wird für Versiegelungsmaterialien aus Tabelle 4 vorgegeben. Für natürliche Böden kann sie nach Idso *et al.* (1975) aus dem Zenitwinkel der Sonne Z und dem Wassergehalt der obersten Bodenschicht $\eta_{z=1}$ und der Sättigungsfeuchte η_s bestimmt werden:

$$\alpha_s = \alpha_z + \alpha_w \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned}
a_z &= [\exp(0.003286 \cdot Z^{1.5}) - 1] / 100 \\
a_w &= \begin{cases} 0.31 - 0.34 \frac{\eta(z=-1)}{\eta_s} & ; \text{wenn } \frac{\eta(z=-1)}{\eta_s} \leq 0.5 \\ 0.14 & ; \text{wenn } \frac{\eta(z=-1)}{\eta_s} > 0.5 \end{cases}
\end{aligned}$$

Die Berechnung der langwelligen Strahlungsbilanz der Oberfläche gestaltet sich komplex, da hier potentielle Einflüsse von überliegenden Vegetationsschichten und abschirmenden Gebäuden berücksichtigt werden müssen. Die Gesamtbilanz des langwelligen Bereichs wird hierzu in zwei Komponenten gesplittet:

$$R_{lw,net}(T_0) = \sigma_{svf} R_{lw,net}^{frei}(T_0) + (1 - \sigma_{svf}) R_{lw,net}^{abgesch}(T_0) \quad (4.22)$$

$R_{lw,net}^{frei}$ ist die Strahlungsbilanz für den nicht von Gebäuden abgeschirmten Anteil des Himmels und $R_{lw,net}^{abgesch}$ die Bilanz für den abgeschirmten Himmelsteil. Die hier verwendeten Modifikationsfaktoren σ_{svf} und σ_{lw}^\perp wurden bei der Berechnung der Strahlungsflüsse in den Abschnitten 3.4.3 und 3.4.4, S.54 ff. eingeführt. Für die Komponenten der Strahlungsbilanz ergibt sich:

$$\begin{aligned}
R_{lw,net}^{frei}(T_0) &= \sigma_{lw}^\perp(0, z_p) (R_{lw}^{\perp,0} - \varepsilon_s \sigma T_0^4) \\
&\quad + (1 - \sigma_{lw}^\perp(0, z_p)) \frac{\varepsilon_f \varepsilon_s}{\varepsilon_f + \varepsilon_s - \varepsilon_f \varepsilon_s} (\sigma \bar{T}_f^4 - \sigma T_0^4) \quad (4.23a)
\end{aligned}$$

$$R_{lw,net}^{abgesch}(T_0) = \frac{\varepsilon_w \varepsilon_s}{\varepsilon_w + \varepsilon_s - \varepsilon_w \varepsilon_s} (\max(\sigma \bar{T}_w^4, \sigma T_0^4) - \sigma T_0^4) \quad (4.23b)$$

Bei der Berechnung der Strahlungsbilanz des nicht abgeschirmten Teils (4.23a) ist zu berücksichtigen, daß sich über der Fläche Vegetationsschichten befinden können, die den Himmel abschirmen und die langwellige Strahlungsbilanz maßgeblich beeinflussen. Dieser Teil der Bilanz ist dem nicht-abgeschirmten Bereich zuzuordnen, da der Sky-View-Faktor in der hier verwendeten Form nur die Abschirmung durch Gebäude berücksichtigt.

Der Strahlungsaustausch zwischen der Oberfläche und den Vegetationsschichten ist kompliziert, da es hier zu Reflektionen zwischen beiden Elementen kommt. Die in (4.23a) verwendete Formulierung wurde von Deardorff (1978) übernommen und berücksichtigt unter anderem die Tatsache, daß die Pflanzen und die Oberfläche einen unterschiedlichen Emissionsgrad aufweisen können (ε_f und ε_s). Der Abschirmungsfaktor σ_{lw}^\perp wird als Wichtungsfaktor zwischen der atmosphärischen Gegenstrahlung und der Wärmestrahlung von Vegetationsschichten verwendet.

Ähnlich ist das Vorgehen bei der Bestimmung der Strahlungsbilanz für den von Gebäuden abgeschirmten Teil der Oberfläche (4.23b). Hier ist der Strahlungsaustausch zwischen der Oberfläche und den Wänden der Gebäude zu berechnen. Für die Wandtemperatur \bar{T}_w wird ein über das gesamte Modellgebiet gemittelter Wert verwendet. Es muß sichergestellt werden, daß die verwendete Wandtemperatur nicht unterhalb der aktuellen Oberflächentemperatur liegt. Ist dieses der Fall, so tritt die Reflektion der Wärmestrahlung an den Wänden als maßgeblicher Faktor in den Vordergrund, wodurch ein Teil der langwelligen Strahlung im System gefangen wird. In beiden Gleichungen wird wiederum der Ansatz von Deardorff (1978) zur Berücksichtigung unterschiedlicher Emissionsgrade vom Boden und Wandflächen (ε_s und ε_w) angewandt.

Die turbulenten und molekularen Energieströme an der Grenzfläche sind

$$G(T_0) = j_{h,0}^s \quad (4.24)$$

$$H(T_0) = \rho c_p \cdot J_{h,0} \quad (4.25)$$

$$LE(T_0, q_0) = L(T_0) \rho \cdot J_{v,0} \quad (4.26)$$

Die turbulenten Ströme von sensibler Wärme und Wasserdampf ($J_{h,0}$ und $J_{v,0}$) ergeben sich aus dem im letzten Zeitschritt prognostizierten Zustand der Atmosphäre am ersten Prognosepunkt über der Grenzfläche ($\theta_{k=1}, q_{k=1}$) und den turbulenten Austauschkoeffizienten $K_{h/v}^0$ an der Grenzfläche:

$$J_{h,0} = -K_h^0 \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = K_h^0 \frac{T_0 - \theta_{k=1}}{0.5 \Delta z_{k=1}} \quad (4.27)$$

$$J_{v,0} = -K_v^0 \left. \frac{\partial q}{\partial z} \right|_{z=0} = K_v^0 \frac{q_0 - q_{k=1}}{0.5 \Delta z_{k=1}} \quad (4.28)$$

Die zur Verdunstung benötigte Energie L berechnet sich nach

$$L(T_0) = (2.501 - 0.00237 (T_0 - 273.13)) 10^6$$

Der Bodenwärmestrom $j_{h,0}^s$ ergibt sich analog aus der Differenz zwischen der Grenzflächentemperatur und der Bodentemperatur am ersten Bodengitterpunkt $T_{k=-1}$:

$$j_{h,0}^s = \lambda_s \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = \lambda_s (k=-1) \frac{T_0 - T_{k=-1}}{0.5 \Delta z_{k=-1}} \quad (4.29)$$

Zur Bestimmung der Grenzflächentemperatur wird das sogenannte *Regula-Falsi-Verfahren* verwendet, bei dem die Temperatur und die abhängigen Energieströme solange iterativ variiert werden, bis die Energiebilanzgleichung (4.19) erfüllt ist.

4.4.2 Temperatur der Dach- und Wandflächen

Als zusätzliche Randbedingungen für die Temperaturprognose in der Atmosphäre wird die Temperatur der Dach- und Wandflächen der Gebäude benötigt. Sie ergeben sich wiederum aus der Energiebilanz der jeweiligen Oberfläche, wobei in dieser Modellversion die Wärmespeicherung im Mauerwerk nicht berücksichtigt wird.

Die Energiebilanz einer Dach- oder Wandoberfläche ist:

$$0 = R_{kw,net} + R_{lw,net}(T_w) - H_w(T_w) - Q_w(T_w) \quad (4.30)$$

Die Berechnung der kurzwelligen Strahlungsströme gestaltet sich analog zu (4.20), wobei anstelle von $z = 0$ durch die Höhe der Oberfläche z_w einzusetzen ist. Damit unterschiedliche Dach- und Wandmaterialien und Farben simuliert werden können, ist es möglich, die Werte für die Albedo α_w frei zu wählen.

Aufgrund der komplexen Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Oberflächen im langwelligen Strahlungsbereich unterscheidet sich die Berechnung der langwelligen Strahlungsbilanz bei Dach- und Wandflächen.

Da in der beschriebenen Modellversion Dachflächen ausschließlich horizontal ausgerichtet sind, entspricht die Strahlungsbilanz des Daches der Formulierung (4.22). Vereinfachend wurde hier das Verhältnis der verschiedenen Emissivitäten vernachlässigt und der Tatsache Rechnung getragen, daß oberhalb der Dachfläche keine Vegetation in der gleichen Gittersäule mehr vorkommen kann. Hierdurch ergibt sich für die langwellige Strahlungsbilanz die Formulierung

$$R_{lw,net}(T_w) = \sigma_{svf} R_{lw}^{\downarrow,0} + (1 - \sigma_{svf}) \epsilon_w \sigma \overline{T}_w^4 - \epsilon_w \sigma T_w^4 \quad (4.31)$$

Für senkrechte Häuserwände hingegen stellt sich die Situation etwas anders dar: Aufgrund der vertikalen Ausrichtung empfängt die Fläche zusätzlich einen Teil der Wärmestrahlung des Bodens. Da bei der Ermittlung der Himmelssichtfaktoren die Flächenneigung sowie der Boden nicht mit berücksichtigt wird, werden für Fassadenoberflächen folgende vereinfachende Annahmen getroffen:

1. aus den unabgeschirmten Himmelssektoren empfangene langwellige Strahlung setzt sich jeweils zur Hälfte aus der Himmelstrahlung und der mittleren Wärmestrahlung der Bodenoberflächen zusammen
2. aus den abgeschirmten Sektoren empfangene Wärmestrahlung besteht zu 2/3 aus der Wärmestrahlung anderer Fassadenflächen und zu 1/3 aus der mittleren Wärmestrahlung des Bodens. Diese Annahme soll berücksichtigen, daß die Wärmestrahlung des oft wärmeren Bodens an den Fassaden reflektiert wird.

Die langwellige Strahlungsbilanz der Wandoberfläche kann wie folgt dargestellt werden:

$$\begin{aligned} R_{lw,net}(T_w) = & \sigma_{svf} \left(0.5 \cdot \epsilon_s \sigma \overline{T}_0^4 + 0.5 \cdot R_{lw}^{\downarrow,0} \right) \\ & + (1 - \sigma_{svf}) \left(0.33 \cdot \epsilon_s \sigma \overline{T}_0^4 + 0.67 \cdot \epsilon_w \sigma \overline{T}_w^4 \right) - \epsilon_w \sigma T_w^4 \end{aligned} \quad (4.32)$$

Zur Berechnung der Wärmestrahlung des Bodens ($\epsilon_s \sigma \overline{T}_0^4$) und der umgebenden Wände ($\epsilon_w \sigma \overline{T}_w^4$) werden jeweils über alle Gitterflächen gemittelte Werte verwendet, da der Himmelssichtfaktor keine Informationen über die Richtung aus der die Abschirmung kommt liefert. Eine Erweiterung des Konzeptes auf richtungsabhängige Sichtfaktoren ist durchaus möglich, wurde aber aus Speicherplatzgründen in dieser Version nicht realisiert.

Die horizontale Wärmeabstrahlung von Vegetationsschichten wird nicht berücksichtigt, so daß für Dächer und Wände die unmodifizierte langwellige Gegenstrahlung $R_{lw}^{\downarrow,0}$ als Referenzwert für die abwärtsgerichtete Strahlung zu verwenden ist.

Der sensible Wärmeübergang H_w zwischen der Oberfläche und der Umgebungsluft kann aus dem Austauschkoeffizienten an der Oberfläche K_h^w (siehe Abschnitt 3.3.5, S.40), dem Gradienten zwischen der Oberflächentemperatur und der Lufttemperatur θ_{w+1} am nächsten Prognosepunkt in Richtung i der Flächenexposition (siehe Abbildung 2, S.46) bestimmt werden

$$H_w = c_p \rho K_h^w \left. \frac{\partial T}{\partial x_i} \right|_w = K_h^w \frac{T_w - T_{w+1}}{\Delta^w} \quad (4.33)$$

Aufgrund der geringen vertikalen Erstreckung des Kernmodells kann auch für Flächen mit $z \neq 0$ die absolute Temperatur T parallel zur potentiellen Temperatur θ verwendet werden.

Der in (4.30) benötigte Wärmefluß Q_w durch die Wand bzw. durch das Dach berechnet sich aus:

$$Q_w = \lambda_w / d (T_w - T_{w,i}) \quad (4.34)$$

Hierbei ist λ_w die Wärmeleitfähigkeit und d die Dicke der Wand bzw. des Daches. Die Temperatur auf der Innenseite der Wand $T_{w,i}$ ergibt sich aus der stationären Energiebilanzgleichung ohne Wärmespeicherung im Mauerwerk:

$$0 = \lambda_w / d (T_w - T_{w,i}) + \alpha_i (T_{a,i} - T_{w,i}) \quad (4.35)$$

$T_{a,i}$ ist die Lufttemperatur im Inneren des Gebäudes und α_i ist der sensible Wärmeübergang an der Wandinnenseite. Da der Wärmefluß durch die Wand nicht simuliert werden soll, braucht $T_{w,i}$ nicht gesondert bestimmt werden. Anstelle der Wärmeleitfähigkeit wird zur Berechnung von Q_w der Wärmedurchgangskoeffizient oder k -Wert verwendet, der neben der reinen Wärmeleitung durch die Wand auch den sensiblen Wärmeaustausch mit der Luft an der Wandinnenseite (α_i) und an der Wandaußenseite (α_a) berücksichtigt:

$$\frac{1}{k} = \frac{1}{\alpha_a} + \frac{1}{\alpha_i} + \frac{d}{\lambda_w}$$

Der Wärmefluß W kann dann direkt aus der Oberflächentemperatur und der Gebäudeinnentemperatur bestimmt werden:

$$W = k (T_w - T_{a,i}) \quad (4.36)$$

Der im k -Wert implizit enthaltene Wärmeübergang α_a auf der Außenseite der Wand wird in dieser Formulierung allerdings nicht benötigt, so daß der Wärmeübergangskoeffizient etwas höher zu veranschlagen ist, als in Tabellen angegeben. Einige Werte sind exemplarisch in Tabelle 5 zusammengestellt. Das Modell unterscheidet in der vorliegenden Version zwischen dem Wärmedurchgang bei Wänden und bei Dächern, es können jedoch nicht für verschiedene Gitterpunkte bzw. Wandsegmente unterschiedliche k -Werte vorgegeben werden. Dieses kann in späteren Versionen jedoch problemlos integriert werden.

4.4.3 Feuchte an der Bodenoberfläche

Die Bestimmung der Grenzflächenfeuchte q_0 erfolgt über einen sogenannten β -Ansatz nach Deardorff (1978), der bei geringem Rechenaufwand eine gute Übereinstimmung mit gemessenen Werten liefert (Mihailović und Rajković, 1994). Für die Oberflächenfeuchte gilt:

$$q_0 = \beta' q^*(T_0) + (1 - \beta') q_{k=1} \quad (4.37)$$

Hierbei ist q^* die Sättigungsfeuchte bei einer gegebenen Grenzflächentemperatur T_0 und $q_{k=1}$ die spezifische Feuchte am ersten Prognosepunkt in der Atmosphäre.

Tabelle 5: Wärmedurchgangskoeffizienten k für verschiedene Materialien in $\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ nach Kuchling (1991)

Wände	Wanddicke d (cm)			
	24	30	39	49
Vollziegel	2.00	1.78	1.45	1.22
Kalksand-Lochsteine	1.85	1.57	1.37	1.10
Kalksand-Vollsteine	2.28	1.97	1.74	1.43
Gasbeton-Steine				
$\rho = 600 \text{ kgm}^{-3}$	1.12	0.94	0.80	0.62
$\rho = 1000 \text{ kgm}^{-3}$	1.38	1.17	1.01	0.79
Leichtbeton-Vollsteine				
$\rho = 1200 \text{ kgm}^{-3}$	1.50	1.30	1.10	0.87
$\rho = 1400 \text{ kgm}^{-3}$	1.72	1.48	1.29	1.02
$\rho = 1600 \text{ kgm}^{-3}$	1.97	1.71	1.50	1.21
Leichtbeton-Hohlblocksteine				
$\rho = 1400 \text{ kgm}^{-3}$	1.45	1.27		
$\rho = 1600 \text{ kgm}^{-3}$	1.59	1.38		
	0.3	1		
Glas	5.8	5.6		
Dächer				
Ziegeldach ohne Fugendichtung	12			
Ziegeldach mit Fugendichtung	6			

Der β' -Faktor ergibt sich aus der aktuellen Bodenfeuchte am ersten Prognosepunkt im Boden $\eta_{k=-1}$ und der Bodenfeuchte bei Feldkapazität η_{fc} (siehe Tabelle 4, S.61):

$$\beta' = \min \left(1, \frac{\eta_{k=-1}}{\eta_{fc}} \right)$$

Besteht die oberste Bodenschicht aus einem wasserundurchlässigen Versiegelungsmaterial, so ist $q_0 = 0$ und die Berechnung des latenten Wärmestroms entfällt.

4.4.4 Bestimmung der Feuchte an den Dach- und Wandflächen der Gebäude

Da mit der vorliegenden Modellversion keine Dach- oder Fassadenbegrünungen simuliert werden können, entspricht die Feuchte an den Gebäudewänden und Dächern immer der Feuchte der Luft am nächsten Prognosepunkt über der Fläche, so daß kein Wasserdampffluß stattfinden kann:

$$q_w = q_{w+1} \quad (4.38)$$

4.4.5 Bestimmung der Oberflächentemperatur von Gewässern

V2.0

Die Bestimmung der Temperatur der Gewässeroberflächen kann im Prinzip analog zur Bestimmung der Temperatur der Bodenoberfläche erfolgen. Anstelle der Albedo des

Bodens α_s in (4.20) wird die Albedo $\alpha_{w,dir}$ einer unbewegten Wasserfläche, die eine Funktion des Sonnenstandes ϕ ist, verwendet. Nach Pielke (1984) gilt :

$$\alpha_{w,dir} = \begin{cases} -0.0139 + 0.0467 \tan(90 - \phi) & ; \text{wenn } \phi > 5 \\ 0.4 & ; \text{sonst} \end{cases}$$

Die gleichzeitige Behandlung der direkten und der diffusen Strahlung in (4.20) bringt allerdings einen gewissen Fehler mit sich, da die starke Abhängigkeit von der Sonnenhöhe nur für die direkte Komponente zu beobachten ist. Für den diffusen Anteil ist der Wasserkörper relativ unabhängig von der Sonnenhöhe ein guter Absorber mit einer Albedo für diffuse Strahlung ($\alpha_{w,dif}$) im Bereich von 0.1 (Oke, 1984). Aus diesem Grund wird die kurzwellige Nettostrahlung getrennt nach diffuser und direkter Strahlung berechnet:

$$R_{kw,net} = \{\cos \beta^* \cdot R_{kw,dir}(z=0)\} (1 - \alpha_{w,dir}) + R_{kw,dif}(z=0) (1 - \alpha_{w,dif}) \quad (4.39)$$

Die kurzwellige Nettostrahlung an der Wasseroberfläche trägt jedoch nur zu kleinen Teilen zur Energiebilanz der obersten Wasserschicht bei, da ein großer Anteil transmittiert wird. Im Allgemeinen wird in der ersten dünnen Wasserschicht ein Anteil von 45% der Strahlung absorbiert, so daß für die Energiebilanz gilt

$$R_{kw,net}^* = 0.45 R_{kw,net}$$

Die verfügbare Feuchte an der Oberfläche entspricht immer der Sättigungsfeuchte bei der zugehörigen Wassertemperatur, also $\beta' = 1$.

Die übrigen Gleichungen werden analog zur Bodenoberfläche verwendet, wobei die Bezeichnung "*Bodenwärmestrom*" für G hier natürlich nicht mehr zutrifft.

5 Das Vegetationsmodell

Die Integration von Vegetation in mikroskalige Gitterpunktsmodelle wie ENVI-met erfordert einige Erweiterungen des Modellkonzepts. Im Gegensatz zu den bisher definierten Oberflächen, bei denen im wesentlichen die lokalen atmosphärischen Rahmenbedingungen den Zustand der Oberfläche und die Austauschprozesse mit der Umgebung steuern, ist bei Pflanzen das biologische Verhalten des Organismus ein zusätzlicher Steuermechanismus. Es ist deswegen nicht möglich, die einzelnen Gitterboxen mit Vegetation getrennt voneinander zu betrachten, sondern es muß der Bezug zur jeweiligen Pflanze als Individuum erhalten bleiben.

Neben den Schnittstellen, die alle Objekte in ENVI-met mit der Umgebung besitzen stellt das Vegetationsmodell folgende Informationen zur Verfügung:

- Temperatur der Blattflächen
- Turbulenter Austausch sensibler Wärme zwischen Atmosphäre und Blattoberfläche
- Wasserdampffluß (Transpiration und Evaporation bzw. Kondensation) an der Blattoberfläche
- Wasserbedarf der Pflanze (entspricht der Wasseraufnahme im Wurzelbereich)
- Interzeption von flüssigem Wasser im Blattwerk sowie Abtropfen von überschüssigem Wasser auf die Bodenoberfläche

5.1 Vegetationsparameterisierung im mikroskaligen Modell

Das entwickelte Vegetationsmodul abstrahiert eine Pflanze als eine eindimensionale Säule mit normierter Höhe bzw. Tiefe an. Der Bereich von $z/z_p = [0, +1]$ beschreibt hierbei den oberirdischen Teil der Pflanze, während der Bereich $z/z_r = [-1, 0]$ unterhalb der Erde liegt. Die wichtigste Kenngröße zur Beschreibung der realen Pflanzengestalt ist neben der absoluten Pflanzenhöhe z_p und der Wurzeltiefe $-z_r$ die Dichteverteilung der Blätter, bzw. die Dichteverteilung der Wurzeln im Boden. Die Blattverteilung wird über die Blattflächendichte (*Leaf Area Density* LAD [m^2 Blattoberfläche pro m^3]) dargestellt. Im Boden wurde dieses Konzept analog übernommen, so daß hier die Wurzeloberflächendichte (*Root Area Density* RAD) als Definitionsgröße zum Einsatz kommt. Die Dichtekennwerte sind an je 10 Stützpunkten $z/z_p = 0.1, 0.2..1.0$ und $z/z_t = -0.1, -0.2..-1.0$ innerhalb der Pflanzensäule definiert und werden unter Berücksichtigung der in der Konfigurationsdatei vorgegebenen tatsächlichen Pflanzenhöhe und Verwurzelungstiefe auf die korrespondierenden Gitterboxen im Modell verteilt. Bei großen Pflanzen wie z.B. Bäumen wird so ein Datenpunkt im normierten Pflanzenprofil mehreren Modellgitterpunkten zugeordnet, bei sehr kleinen Pflanzen wie z.B. Gras fallen mehrere Datenpunkte auf eine Gitterbox und die dort zugeordneten LAD-Werte werden gemittelt. Um die Auflösung kleiner Pflanzen zu verbessern wird die unterste Gitterbox des Atmosphärenmodells in 5 Teilboxen mit $\Delta z_s = 0.2\Delta z$ aufgesplittet. Durch dieses Verfahren ist es möglich, sowohl sehr kleine als auch große Pflanzen mit einem einheitlichen Modellschema zu behandeln.

Neben der generellen Pflanzengeometrie müssen für jeden verwendeten Pflanzentyp eine Reihe von physiologischen Parametern angegeben werden.

Hierzu zählen:

- minimaler Stomata-Widerstand $r_{s,min}$
- Art der Pflanze (Laubbaum, Nadelbaum, Gras) zur Bestimmung der Blattgeometrie
- Albedo der Blätter im kurzwelligen Bereich α_f

Andere Faktoren, wie die Emissivität der Blätter und der Anteil der durch das Blatt transmittierten Strahlung wird konstant gesetzt. Alle pflanzenbezogenen Parameter sind in einer Datenbank zusammengestellt und werden beim Start der Simulation mit der vorgegebenen Untersuchungskonfiguration verbunden. Tabelle 6 zeigt eine Auswahl verschiedener Vegetationsarten: Bäume (T1–T7), Hecke (H) und Grass (G). Die Daten wurden den Arbeiten von Groß (1991) und Mix *et. al.* (1994) entnommen oder geschätzt. Das Profil der Wurzelflächendichte wird in der Datenbank mangels besserer Informationen bei allen Pflanzen in allen Tiefen auf 0.1 gesetzt. Wie bereits angedeutet, enthalten diese Daten noch keine Information über die Höhe der jeweiligen Pflanze. Die absolute Höhe wird für die verschiedenen Pflanzen als zusätzliche Information in der Datenbank gespeichert.

Tabelle 6: Zusammenstellung verschiedener im Modell verwendeter Vegetationstypen. Verändert nach Groß (1991) und Mix *et al.* (1994).

ID	z/z_p										Art	D	K/S
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0			
T1	0.04	0.06	0.07	0.11	0.13	0.15	0.14	0.13	0.10	0.00	LB	m	○
T2	0.10	0.14	0.18	0.27	0.33	0.37	0.36	0.33	0.25	0.00	LB	d	○
T3	0.08	0.08	0.08	0.08	0.25	1.15	1.06	1.05	0.92	0.00	LB	d	●
T4	0.15	0.15	0.15	0.15	0.65	2.15	2.18	2.05	1.72	0.00	LB	sd	●
T5	0.00	0.00	0.15	0.15	0.65	2.15	2.18	2.05	1.72	0.00	LB	sd	●
T6	0.40	0.60	0.55	0.50	0.45	0.40	0.25	0.20	0.15	0.10	NB	m	○
T7	0.00	0.00	0.01	0.08	0.25	1.15	1.06	1.05	0.92	0.00	LB	d	●
H	1.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	L	sd	
G	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	G	m	

Art: LB=Laubbaum, NB=Nadelbaum, L=Laubgehölz, G=Gras, D: m=mitteldicht, d=dicht, sd=sehr dicht, K/S: ○=keine Differenzierung in Stamm- u. Kronenraum, ●=Differenzierter Kronenraum

5.2 Bestimmung der turbulenten Flüsse an der Blattoberfläche

5.2.1 Turbulenter Impulsaustausch

Der Impulsverlust an Blättern wurde bereits im Strömungsmodell durch zusätzliche Senkterme berücksichtigt. Auf der Seite des Vegetationsmodells ist keine weitere Behandlung des Impulsflusses notwendig.

5.2.2 Turbulenter Austausch sensibler Wärme

Der Temperaturfluß zwischen der Blattoberfläche und der umgebenden Luft ist eine Funktion der Temperaturdifferenz und des aerodynamischen Widerstandes der Blatto-

berfläche r_a . Dieses Konzept entspricht dem in Abschnitt 3.3.5 S.40 verwendeten Ansatz nach Monin-Obhukov. Zwischen dem aerodynamischen Widerstand r_a und den Dragkoeffizienten besteht die lineare Beziehung:

$$r_a = \frac{1}{c_d \cdot u_{w+1}} \quad (5.1)$$

Bei einer gegebenen Blattoberflächentemperatur T_f erhält man für den turbulenten Fluß sensibler Wärme die Formulierung:

$$J_{f,h} = 1.1 r_a^{-1} (T_f - T_a) \quad (5.2)$$

Der Widerstand r_a läßt sich nach Braden (1982) als eine Funktion der Windgeschwindigkeit W_f an der Blattoberfläche und zweier vegetationsspezifischer Kennwerte A und D darstellen:

$$r_a = A \sqrt{\frac{D}{\max(W_f, 0.05)}} \quad (5.3)$$

Für Laubbäume und Gräser ist für $A=87 \sqrt{s}m^{-1}$, bei Nadelblättern $A=200 \sqrt{s}m^{-1}$ anzusetzen, D steht für einen durchschnittlichen Blattdurchmesser und ist 0.02 m bei Nadelgehölzen und Gräsern sowie 0.15 m bei Laubbäumen (Schilling, 1990; Naot und Mahrer, 1989).

Bei Windstille ist r_a nicht definiert, so daß die minimale Windgeschwindigkeit auf 0.05 ms^{-1} festgesetzt wird. Eine Formulierung für freie Konvektion an Vegetationselementen ist zur Zeit nicht verfügbar.

5.2.3 Turbulenter Wasserdampffluß

Die Berechnung des Wasserdampfaustausches zwischen Blattoberfläche und der Luft gestaltet sich wesentlich komplexer als die Bestimmung des Wärmeüberganges, da sich der Wasserdampffluß in einen Verdunstungsterm $J_{f, \text{evap}}$ und einen Transpirationsterm $J_{f, \text{trans}}$ aufsplittet:

$$J_{f,v} = J_{f, \text{evap}} + J_{f, \text{trans}}$$

Hiervon ist ersterer nur von der Feuchtedifferenz zwischen der Blattoberfläche und der Umgebungsluft abhängig, während letzterer zudem durch komplexe pflanzenphysiologische Vorgänge beeinflusst wird.

Beide Terme lassen sich wiederum über Transferwiderstände parameterisieren. Für die Evaporation bzw. Kondensation ergibt sich der Ausdruck

$$J_{f, \text{evap}} = r_a^{-1} \begin{cases} f_w \Delta q & ; \text{ wenn } \Delta q \geq 0 \text{ (Verdunstung)} \\ \Delta q & ; \text{ wenn } \Delta q < 0 \text{ (Kondensation)} \end{cases} \quad (5.4)$$

Der hier verwendete aerodynamische Widerstand r_a entspricht dem nach (5.3) berechneten Widerstandswert.

Der Transpirationsfluß wird zusätzlich durch die Blattstomata reguliert. Hier ergibt sich die Formel:

$$J_{f,trans} = \begin{cases} (r_a + r_s)^{-1} (1 - f_w) \Delta q & ; \text{wenn } \Delta q \geq 0 \text{ (Transpiration)} \\ 0 & ; \text{wenn } \Delta q < 0 \end{cases} \quad (5.5)$$

In beiden Fällen ist die Feuchtedifferenz Δq zwischen der Sättigungsfeuchte q_* bei gegebener Blattemperatur T_f und der Feuchte der Umgebungsluft q_a zu berechnen:

$$\Delta q = q_*(T_f) - q_a$$

Der Anteil der feuchten Blattflächen (f_w) an der Gesamtblattfläche wird, Deardorff (1978) folgend, berechnet nach:

$$f_w = \left(\frac{W_{dew}}{W_{dew,max}} \right)^{2/3} \quad (5.6)$$

Diese Funktion berücksichtigt, daß sich auf den Blattoberflächen vorhandenes Wasser W_{dew} aufgrund von Tröpfchenbildung nicht gleichmäßig auf der zur Verfügung stehenden Oberfläche verteilt, sondern daß sich unterhalb der Sättigungsfeuchte $W_{dew,max}$ ($\approx LAD\Delta z \cdot 0.2 \text{ kgm}^{-2}$) sowohl benetzte als auch trockene Stellen bilden. Die Verwendung von f_w in (5.5) sorgt dafür, daß Verdunstung nur von dem feuchten Anteil der Blattoberflächen erfolgt, während Transpiration nur beim trockenen Teil eintreten kann.

Der stomatare Widerstand r_s beschreibt den regulierenden Einfluß der Schließzellen auf den Wasserdampfaustausch mit der Luft. Der tatsächliche Wert von r_s zu einem bestimmten Zeitpunkt ist eine komplexe Funktion aus verschiedenen Einflußgrößen wie Sonnenstrahlung, Wasserangebot, der Zusammensetzung der Luft oder dem allgemeinen physiologischen Zustand der Pflanze (vergl. Mihailović und Rajković, 1994).

Im Vegetationsmodell wird dieses Einflußspektrum vereinfachend auf drei Faktoren begrenzt: die aktuelle kurzwellige Sonnenstrahlung, das Wasserangebot im Boden und den generellen Grundzustand der Pflanze. In späteren Versionen wird dieses Teilmodul gegen komplexere Ansätze ausgetauscht, die das Verhalten der Stomata genauer beschreiben können (Jones, 1992).

Der aktuelle stomatare Widerstand kann wie folgt berechnet werden (siehe z.B. Deardorff, 1978):

$$r_s = r_{s,min} \left[\frac{R_{kw,max}}{0.03R_{kw,max} + R_{kw}} + f_s + f_{wilt} \right] \quad (5.7)$$

Hierbei ist $r_{s,min}$ ist der minimale stomatare Widerstand, der von Pflanze zu Pflanze und von Jahreszeit zu Jahreszeit variiert. In Tabelle 7 sind exemplarisch einige Widerstandswerte für verschiedene Vegetationsarten zusammengestellt. Im Vegetationsmodell wird angenommen, daß $r_{s,min}$ nur von der Pflanzenart abhängt und keine jahreszeitliche Schwankung besitzt.

Tabelle 7: Albedo und minimaler Stomatawiderstand verschiedener Vegetationstypen (nach Tjernström, 1989)

Vegetation	Albedo α_f	$r_{s,min}$
Getreide (jung)	0.30	200
Getreide (alt)	0.25	400
Zuckerrohr	0.2	200 bis 400
Nadelwald	0.15	600
Laubwald	0.25	400
Grass allgem.	0.2	200
Sumpf	0.2	200

5.2.3.1 Einfluß der Strahlung auf r_s Die maximal verfügbare kurzwellige Einstrahlung $R_{kw,max}$ ist im Modell definiert als jene Strahlung, die zur Mittagszeit auf ein unbeschattetes, zufällig orientiertes Blatt einfällt. R_{kw} ist die zum jeweiligen Zeitpunkt tatsächlich auf das Blatt einfallende kurzwellige Strahlung und somit abhängig von Sonnenstand und Schattenwurf.

Diese Strahlungsparameterisierung kann nur das ungefähre Verhalten der Blattschließzellen wiedergeben. Speziell bei Blättern, die immer im Schatten liegen oder aber extremer Sonnenstrahlung ausgesetzt sind, werden die Schließzellen in der Realität ein anderes Verhalten zeigen.

5.2.3.2 Einfluß der Jahreszeit auf r_s Der Faktor f_s beschreibt grob, ob die Blätter noch aktiv am Wasseraustausch teilnehmen oder aufgrund des allgemeinen Zustandes der Pflanze nicht mehr transpirieren. Während der Wachstumszeit ist $f_s=0$, im Herbst bzw. bei Gräsern im Spätsommer wird f_s gleich 1 gesetzt.

5.2.4 Einfluß des pflanzenverfügbaren Bodenwassers auf r_s

Einen weiteren wichtigen Einfluß auf die Transpiration der Pflanze übt das im Verwurzelungsbereich verfügbare Wasser aus (f_{wilt}). Nähert sich der Wassergehalt des Bodens dem permanenten Welkepunkt, so wird es für die Pflanze immer schwieriger, dem Boden durch osmotischen Saugdruck Wasser zu entziehen, so daß die Transpiration mangels Wassernachschub verringert werden muß. Die Parameterisierung dieses Zusammenhangs erfolgt über das Verhältnis aus dem aktuellen Bodenwassergehalt η und dem permanenten Welkepunkt η_{wilt} .

Hierbei wird ein gewichtetes Mittel über die gesamte Verwurzelungszone berechnet:

$$f_{wilt} = \frac{1}{N} \sum \left[\frac{RAD(n) \Delta z(n)}{RAI} \cdot \left(\frac{\eta_{wilt}(n)}{\eta(n)} \right)^2 \right] \quad (5.8)$$

Als Wichtungsfaktor wird hierbei der Anteil der Wurzeloberfläche im Layer n an der Gesamtwurzeloberfläche der Pflanze verwendet. N ist die Zahl der Bodenschichten innerhalb der Wurzelzone und RAI ist der Wurzelflächenindex mit

$$RAI = \int_{-z_r}^0 RAD(z') dz'$$

Da Pflanzen nur als vertikale Säulen interpretiert werden, ist es auch zulässig, Vegetation über versiegelten Oberflächen zu definieren. Hierdurch können beispielsweise ausladende Baumkronen simuliert werden. In diesen Fällen wird die Verwurzelungszone unterhalb der Versiegelungsschicht angesetzt und entsprechend verschoben.

5.2.5 Sonderfall Dachbegrünung

V2.5

Ab Version 2 ist es möglich, Pflanzen auch auf Dächern zu definieren. Da in diesen Fällen kein repräsentatives Bodenmodell verfügbar ist und die Wasserverfügbarkeit meist von externer Bewässerung abhängt, muß der Faktor f_{wilt} hier anders festgelegt werden.

Hierzu wird ein externer Bewässerungsfaktor $_{\text{water}}$ definiert, der zwischen 1 (volle Bewässerung) und knapp über 0 (extreme Trockenheit) liegen kann.

Die Einbindung in das Modell erfolgt durch die Zuweisung

$$f_{\text{wilt}} = \frac{\eta_{\text{wilt}}(n = -T)}{_{\text{water}} \cdot \eta_s(n = -T)}$$

Hierbei wird die fiktive Bodenfeuchte im Falle einer vollständigen Bewässerung $_{\text{water}}$ gleich der Sättigungsfeuchte des Substrats η_s der untersten Box im Bodenmodell gesetzt. Die Wahl der Bezugsbox ist im Prinzip beliebig, da auch die Feldkapazität η_{wilt} anhand dieser Box bestimmt wird. Es muß lediglich sichergestellt werden, daß in der gewählten Box kein Versiegelungsmaterial definiert wurde, was in der tiefsten Bodenschicht am wahrscheinlich immer gegeben ist.

5.2.5.1 Verteilung des flüssigen Wassers auf der Pflanze Die in (5.6) benötigte aktuelle Wassermenge W_{dew} auf den Blattoberflächen kann sich im Laufe der Simulationszeit durch Abtrocknen, Taubenetzung oder Abtropfen von Wasser verändern. Es ist somit nötig, den Anteil des flüssigen Wassers auf den Blattoberflächen in regelmäßigen Abständen zu aktualisieren.

Der Wasserhaushalt einer eindimensionalen Pflanzenschicht mit der Dicke Δz ergibt sich aus der Bilanz aus dem Wassergewinn durch Wasserdampfkondensation und zugeführtes Tropfwasser P_{\downarrow} (Regenwasser oder ablaufendes Wasser aus höheren Vegetationsschichten) abzüglich des Wasserverlustes durch Verdunstung oder in tiefere Schichten ablaufendes Tropfwasser P_{\downarrow} .

$$\frac{\partial W_{\text{dew}}}{\partial t} = -\rho \int_z^{z+\Delta z} \text{LAD}(z') J_{f,\text{evapo}} dz' + P_{\downarrow} - P_{\downarrow} \quad (5.9)$$

Übersteigt der Wasseranteil auf den Blättern einer Box den Maximalwert $W_{\text{dew,max}}$, so wird $W_{\text{dew}} = W_{\text{dew,max}}$ gesetzt und das überschüssige Wasser wird über den Tropfwasserterm P_{\downarrow} an die tiefer liegenden Vegetationsschichten weitergeleitet. In der untersten Vegetationsschicht wird der verbleibende Wasserrest der Bodenoberfläche zugeführt.

5.3 Bestimmung der Blattoberflächentemperatur

Die Energiebilanz eines einzelnen Blattes läßt sich schreiben als

$$0 = R_{kw,net} + R_{lw,net} - H_f - LE_f + Q_s \quad (5.10)$$

Der sensible und latente Wärme fluß an der Blattoberfläche ergibt sich aus (5.2) sowie (5.4) und (5.5):

$$H_f = c_p \rho J_{f,h} \quad (5.11)$$

$$LE_f = \rho L(T_f) (J_{f,trans} + J_{f,evap}) \quad (5.12)$$

Zur Bestimmung der Energiebilanz des Blattes müssen zunächst die kurzwelligen Strahlungsflüsse in einer Höhe z wie in Kapitel 3.4 S. 48 ff. beschrieben ermittelt werden.

Die an der Blattoberfläche absorbierte kurzwellige Strahlung $R_{kw,net}$ ist:

$$R_{kw,net}(z) = (F \cdot R_{kw,dir}(z) + R_{kw,dif}(z)) (1 - \alpha_f - tr_f) \quad (5.13)$$

wobei tr_f der Strahlungsanteil ist, der durch das Blatt transmittiert wird. Nach Oke (1984) kann hier 0.3 als gemittelter Wert über alle Wellenlängen angesetzt werden. Der Faktor F beschreibt den Einfluß der Blattausrichtung auf die Menge der absorbierten Strahlung und wird für zufällig ausgerichtete Blätter gleich 0.5 gesetzt. Die langwellige Strahlungsbilanz des Blattes ist:

$$R_{lw,net}(z, T_f) = \varepsilon_f R_{lw}^{\downarrow}(z) + \varepsilon_f R_{lw}^{\uparrow}(z) - 2\varepsilon_f \sigma T_f^4 + \varepsilon_f (R_{lw}^{\leftrightarrow}(z) - (1 - \sigma_{svf}) \sigma T_f^4) \quad (5.14)$$

Die verschiedenen Komponenten der langwelligen Strahlung wurden bereits in den Abschnitten 3.4.3 und 3.4.4 eingeführt und berücksichtigen, je nach Situation, auch den Strahlungsaustausch mit nach oben und unten anschließenden Vegetationsschichten und/ oder abschirmenden Gebäuden.

Die Emissivität der Blätter ε_f wird mit einem mittleren Wert von 0.96 (Pielke, 1984) konstant gehalten. Die Albedo α_f der Blätter variiert von Pflanze zu Pflanze und wird aus der Datenbank ausgelesen (siehe Tabelle 7).

Als letzter unbekannter Term in (5.10) verbleibt die interne Energiespeicherung im Blattkormus Q_s . Inclán *et al.* (1996) stellen fest, daß die interne Wärmespeicherung des Blattes je nach Pflanzenart vor allem beim Sonnenauf- und untergang eine wichtige Komponente der Energiebilanz ist. Allerdings existieren hierfür noch keine geeigneten Parameterisierungen und der Einfluß auf das Gesamtergebnis erscheint gering, so daß vereinfachend

$$Q_s = \text{const} = 0$$

angenommen wird.

Numerische Studien am Modell haben gezeigt, daß die Berechnung der Blattoberflächentemperatur sensibel auf unterschiedliche Strahlungsparameterisierungen reagiert. Vor allem die Berechnung der langwelligen Austauschprozesse zwischen

Gebäuden, der Vegetation und der Atmosphäre während der Nacht hat sich als sehr anfällig gegenüber marginalen Veränderungen gezeigt, so daß letztendlich hier jene Parameterisierungen vorgestellt wurden, mit denen die plausibelsten Ergebnisse produziert worden sind.

5.4 Koppelung mit dem Atmosphärenmodell

Der Wärme- und Feuchtefluß an der Blattoberfläche wird über die Quellterme Q_θ und Q_q mit den prognostischen Gleichungen des Atmosphärenmodells gekoppelt.

Für die prognostische Temperaturgleichung ergibt sich:

$$Q_\theta(x, y, z) = \text{LAD}(z) \cdot J_{f,h} = \text{LAD}(z) \cdot 1.1 r_a^{-1} (T_f - \theta(x, y, z)) \quad (5.15)$$

Der Quellterm für den Wasserdampffluß ist

$$Q_q(x, y, z) = \text{LAD}(z) \cdot (J_{f,trans} + J_{f,evap}) \quad (5.16)$$

bzw.

$$Q_q(x, y, z) = \text{LAD}(z) \cdot \begin{cases} \left\{ (1 - f_w) (r_a + r_s)^{-1} + f_w r_a^{-1} \right\} \Delta q & ; \text{wenn } \Delta q \geq 0 \\ \Delta q & ; \text{wenn } \Delta q < 0 \end{cases}$$

5.5 Koppelung mit dem Bodenmodell

Das von der Pflanze transpierte Wasser muß dem Boden entzogen werden. Hierzu verfügt der hydrologische Teil des Bodenmodells über die lokalen Senkterme S_η . Die Gesamtmenge des von der Pflanze transpirierten Wassers ergibt sich aus dem vertikalen Integral der in den verschiedenen Vegetationslayern prognostizierten Transpirationsflüsse

$$j_{f,trans}^{ges} = \rho \int_0^{z_p} \text{LAD}(z) J_{f,trans}(z) dz \quad (5.17)$$

Nach Hillel (1980) wird maximal 1% des transportierten Wassers innerhalb der Pflanze eingelagert, so daß davon ausgegangen wird, daß ein Gleichgewicht zwischen dem transpirierten Wasser und der Wasseraufnahme durch die Wurzeln besteht. Der Wasserentzug im Boden wird wie schon in (5.8) mit der jeweiligen Wurzeloberfläche in der Tiefe $-z$ gewichtet. Als zusätzlicher Wichtungsfaktor wird nach Pielke (1984) die hydrologische Diffusität des Bodens D_η in der jeweiligen Tiefe berücksichtigt. Der gesuchte Wasserentzug S_η in der Tiefe $-z$ ist dann:

$$S_\eta(-z) = \frac{j_{f,trans}^{ges}}{\rho_w} \left(\frac{\text{RAD}(-z) D_\eta(-z) \Delta z}{\int_{-z_r}^0 \text{RAD}(-z) D_\eta(-z) dz} \right) \frac{1}{\Delta z} \quad (5.18)$$

6 Numerische Verfahren in ENVI-met

Der Schwerpunkt dieses Kapitels liegt in der Darstellung der verwendeten Lösungsverfahren für die verschiedenen im Modell verwendeten Differentialgleichungen. Aufgrund der zahlreichen unterschiedlichen Gleichungen beschränkt sich dieser Teil auf die Darstellung der allgemeinen Lösungsschritte und, soweit nötig, die Erläuterung der Vorgehensweise bei einigen speziellen Termen.

Die universelle Ausgangsform der zu lösenden Differentialgleichungen für eine Größe ϕ lautet:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \langle \partial \phi \rangle_x + \langle \partial \phi \rangle_y + \langle \partial \phi \rangle_z + f(\phi) + R_\phi$$

Hierbei stehen die Operatoren $\langle \partial \phi \rangle_{i=x,y,z}$ für die advektiven und diffusiven Teilterme der Differentialgleichung in der Raumrichtung i :

$$\langle \partial \phi \rangle_i = -u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)$$

Da in diesem Kapitel die bisher verwendete allgemeine Schreibweise in der Einstein-Summation ($u_i = u, v, w$ mit $i = 1, 2, 3$) parallel zu den Koordinatenindizes i, j, k verwendet wird, steht im Folgenden in den Differenzengleichungen das hochgestellte i für eine der drei Raumrichtungen x, y und z , während ein tiefgestelltes i die Koordinate der x -Richtung bezeichnet.

Der Ausdruck $f(\phi)$ steht stellvertretend für einen von ϕ -abhängigen Term oder eine Funktion, die implizit in das Gleichungssystem integriert werden soll, also vom gesuchten ϕ abhängig ist (*implizites Adjustment* oder *impliziter Rest*).

Der Term R_ϕ beinhaltet die restlichen Teile der Gleichung, die explizit bekannt sind (*explizites Adjustent* oder *expliziter Rest*). Dieses sind im Wesentlichen die lokalen Senk- und Quellterme von ϕ sowie die verschiedenen Randbedingungen, die explizit in das Gleichungssystem eingearbeitet werden. Für den Austauschkoefizienten K ist der für die betrachtete Größe jeweils zuständige Koeffizient also z.B. K_m für Impuls oder K_h für Wärme einzusetzen. Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden diese Koeffizienten im Folgenden nicht mehr unterschieden.

6.1 Diskretisierung der Differentialgleichungen

Zur Lösung der Differentialgleichungen ist es notwendig, sie in Zeit und Raum an definierten Punkten zu diskretisieren. Hierzu wird im Raum ein rechtwinkliges Gitternetz konstruiert, in dem alle Berechnungsgrößen an eindeutigen Punkten definiert sind. Jeder Rechenpunkt ist somit repräsentativ für den mittleren Zustand des von den Gitterlinien (=Zellflächen) begrenzten Volumenelementes. Aufgrund des unterschiedlichen physikalischen Charakters der Prognosegrößen sind diese an verschiedenen Stellen im Rechengitter definiert (*gestaffeltes Rechengitter*), wodurch bei Berechnungen zwischen den Größen stets das zugrundeliegende räumliche Konzept berücksichtigt werden muß.

6.1.1 Aufbau des Rechengitters und Bezeichnungen im Gitter

6.1.1.1 Struktur des Rechengitters Fast alle Modellvariablen sind im geometrischen Mittelpunkt der dreidimensionalen Gittervolumina definiert, lediglich die drei Strömungskomponenten sind an der jeweils zum Koordinatenursprung gerichteten linken (u), vorderen (v) und unteren (w) Zellwand definiert. Die Temperaturen der Hindernisoberflächen T_w^x , T_w^y und T_w^z sind ebenfalls auf den Zellflächen definiert, gehen jedoch nur explizit als Randbedingung in die Lösung der Differentialgleichungen ein, so daß sie hier nicht weiter betrachtet werden müssen.

Damit die Diffusions- und Advektionsgleichungen numerisch einheitlich gelöst werden können, ist es erforderlich, daß die betrachtete Größe **zentriert** im Rechengitter vorliegt. Dieses ist für die im Gitter zentriert liegenden Größen automatisch gegeben, die im folgenden zusammenfassend mit dem Symbol χ dargestellt sind. Bei den Strömungskomponenten ist es hingegen notwendig, Hilfsgitter zu konstruieren, deren Geometrie sich aus dem Hauptgitter des Modells ableiten. Die so entstehenden Rechengitter sind gegenüber dem Hauptgitter um einen halben Gitterpunkt in der Richtung der Normalen der Strömungskomponente verschoben. Aufgrund des nicht immer äquidistanten Abstandes der Prognosepunkte muß die Größe der einzelnen Hilfsgitterzellen aus der Größe der jeweils beteiligten Hauptgitterboxen ermittelt werden. Die Hilfsgitter treten im Modell explizit nicht mehr in Erscheinung, erleichtern aber die Transparenz der in diesem Kapitel zum Teil sehr weit abstrahierten Rechenmethoden. Hierdurch wird eine symbolische Herleitung der Rechenverfahren möglich, die alle notwendigen Informationen enthält, sich aber dennoch kompakt darstellen läßt.

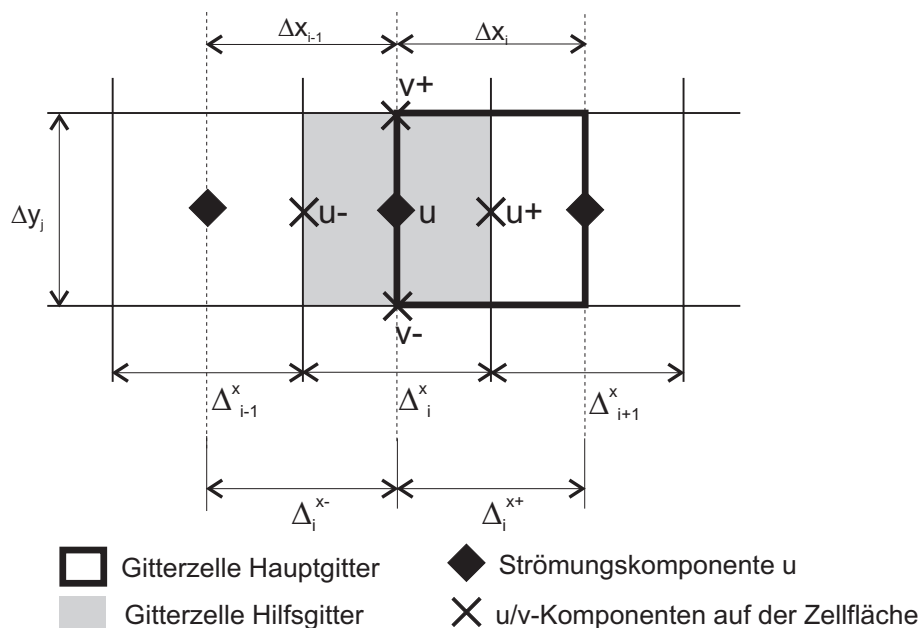


Abbildung 4: Lage und Aufbau des Hilfsgitters bei nicht-zentrierten Prognosegrößen. Beispiel u im x – y-Schnitt.

In Abbildung 4 ist am Beispiel der Strömungskomponente u die Lage der verschiede-

nen Gitterkenngrößen zueinander dargestellt.

Als weiteres Symbol wird die Variable a im weiteren Verlauf für diejenige Komponente der dreidimensionalen Gitterpunktkoordinaten i, j, k verwendet, die variabel in der betrachteten Raumrichtung i ist. Für $i = x$ steht a somit für die Koordinatenkomponente „ i “, bei $i = y$ für „ j “ und für $i = z$ für „ k “.

$$a = \begin{cases} \text{„}i\text{“} & ; \text{wenn } \langle \rangle_{i=x} \\ \text{„}j\text{“} & ; \text{wenn } \langle \rangle_{i=y} \\ \text{„}k\text{“} & ; \text{wenn } \langle \rangle_{i=z} \end{cases}$$

Unter Verwendung der definierten Symbole lassen sich die Gitterweiten im Rechengitter wie folgt definieren:

- Δ_a^i = zentrierte Differenz, Größe der Gitterbox a , in der die Prognosegröße in der Raumrichtung i zentriert liegt
- Δ_a^{i+} = Vorwärtsdifferenz zwischen a und $a + 1$ in Richtung i
- Δ_a^{i-} = Rückwärtsdifferenz zwischen $a - 1$ und a in Richtung i

Bei der Behandlung der Gleichungen und der Definition der Differenzen muß berücksichtigt werden, daß Gitterzellen von undurchströmbaren Hindernissen belegt sein können oder möglicherweise von Hinderniszellen begrenzt werden. Neben Hinderniszellen verringert sich die Strecke, über die zu differenzieren ist, um den vom Hindernis belegten Zellanteil, während innerhalb von Hinderniszellen oder auf Hinderniswänden die Bestimmung der Prognosegröße innerhalb des Differenzialverfahrens entfällt, da sie entweder nicht benötigt werden oder explizit bekannt sind.

6.1.1.2 Definition der Hinderniskenngrößen Zur effizienten Behandlung von inneren Hindernissen ist es üblich, zellflächenorientierte Hinderniskenngrößen zu verwenden (vgl. Griebel *et al.*, 1995; Sievers, 1995; Eichhorn, 1989). Hierzu wird eine Kenngröße δ eingeführt, die Zellteile auf Hinderniswänden oder innerhalb von Hindernissen kennzeichnet. Ist eine Gitterzelle i, j, k von einem undurchströmbaren Hindernis belegt, so werden alle sechs Zellflächen (δ^ψ mit $\psi \in \{,x, ,y, ,z\}$) und der Zellmittelpunkt ($\psi = ,c\text{“}$) dem Hindernis zugeordnet. Konventionsgemäß werden dabei die in Richtung des Koordinatenursprungs orientierten Flächen der Hinderniszelle i, j, k zugeordnet, während Flächen auf der abgewandten Seite bereits zu der in jeweiliger Raumrichtung anschließenden Zelle gehören. Ein nicht durchströmbares Hindernis in der Zelle i, j, k liefert somit folgende Kenngrößen:

$$\begin{aligned} \delta_{i,j,k}^c &= 0 \\ \delta_{i,j,k}^x &= \delta_{i+1,j,k}^x = 0 \\ \delta_{i,j,k}^y &= \delta_{i,j+1,k}^y = 0 \\ \delta_{i,j,k}^z &= \delta_{i,j,k+1}^z = 0 \end{aligned}$$

Für freie Zellflächen werden die Kenngrößen gleich Eins gesetzt, wodurch die jeweilige Differenzenstrecke unmodifiziert in das Gleichungssystem eingeht.

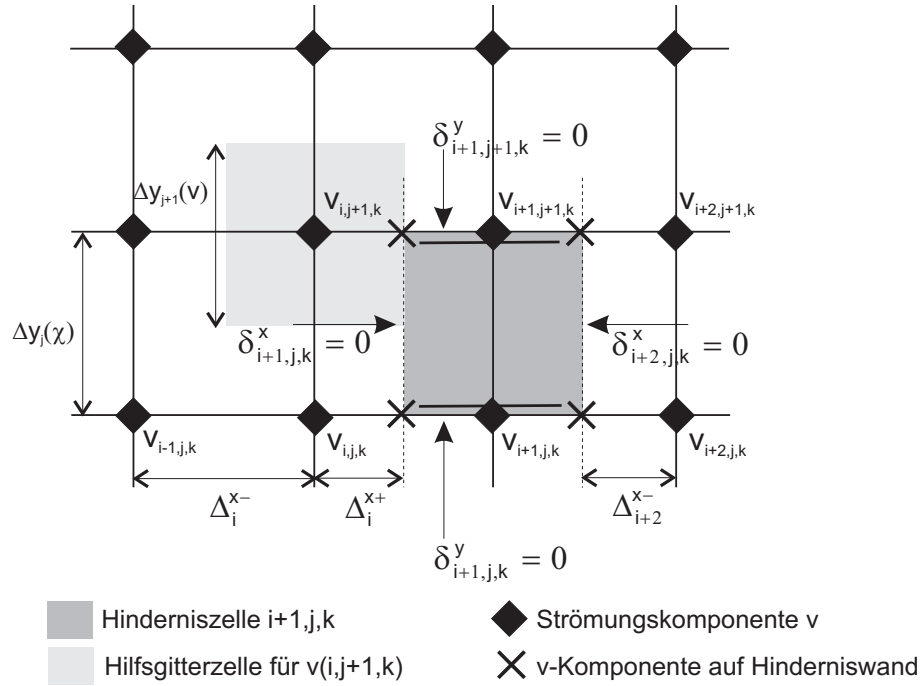


Abbildung 5: Differenzbildung neben Hinderniszellen. Beispiel $\partial v / \partial x$ im $x - y$ Schnitt.

Abbildung 5 veranschaulicht die Situation in der Nähe von Hindernissen am Beispiel der v -Komponente differenziert in x -Richtung: Die Vorwärtsdifferenz Δ_i^{x+} für $v_{i,j,k}$ verkürzt sich auf den im Freien liegenden Anteil, da der nächste v -Wert bereits an der Hinderniswand definiert ist. Da die v -Komponente auf der y -Zellfläche ($\psi = „y“$) definiert ist, ist als relevante Hinderniskenngröße $\delta_{i+1,j,k}^y$ zu verwenden. Gleiches gilt für die Rückwärtsdifferenz Δ_{i+2}^{x-} für $v_{i+2,j,k}$. Die Werte auf der Hinderniswand $v_{i+1,j,k}$ werden nicht prognostiziert, da sie aufgrund der festgelegten Haftbedingung definitionsgemäß zu jeder Zeit gleich Null sind.

6.1.1.3 Definition der Vegetationskenngrößen Als weiterer Modifikationsfaktor ist die Vegetation als poröses Hindernis im Gleichungssystem zu berücksichtigen. Da diese Hindernisse frei durchströmt werden können, ist keine gesonderte Grenzflächenbehandlung notwendig. Die Lage der Prognosegrößen im Gitter ändert sich nicht und die Kontinuität der Differentialgleichungen bleibt erhalten. Die Vegetationskenngrößen werden analog zu den Hinderniskenngrößen definiert, wobei der Porositätsgrad, dargestellt durch die lokale Blattflächendichte LAD, über den Grad der Modifikation entscheidet. Eine Porositätskennzahl $P = 0$ entspricht keiner Vegetation. Liegt eine Zellfläche zwischen zwei Gitterbox mit unterschiedlichem Porositätsgrad, so wird der größere der beiden Werte verwendet. Für die Vegetationskenngrößen ergibt sich somit

$$\begin{aligned}
P_{i,j,k}^c &= \text{LAD}_{i,j,k} \\
P_{i,j,k}^x &= \max(\text{LAD}_{i,j,k}, \text{LAD}_{i-1,j,k}) \\
P_{i,j,k}^y &= \max(\text{LAD}_{i,j,k}, \text{LAD}_{i,j-1,k}) \\
P_{i,j,k}^z &= \max(\text{LAD}_{i,j,k}, \text{LAD}_{i,j,k-1})
\end{aligned}$$

6.1.1.4 Bestimmung der Zellgrößen Bei den zentriert vorliegenden Prognosegrößen χ entsprechen die Zellabmessungen den Gittergrößen des Hauptgitters. Hier ergeben sich die Vorwärts- und Rückwärtsdifferenzen direkt aus den Abmessungen des Hauptgitters unter Berücksichtigung der Hinderniskenngrößen für die jeweilige Zellfläche:

$$\begin{aligned}
\chi\text{-Zelle:} \quad \Delta_{i,j,k}^x(\chi) &= \Delta x_i \\
\Delta_{i,j,k}^{x-}(\chi) &= 0.5 (\delta_{i-1,j,k}^c \Delta x_{i-1} + \Delta x_i) \\
\Delta_{i,j,k}^{x+}(\chi) &= 0.5 (\Delta x_i + \delta_{i+1,j,k}^c \Delta x_{i+1}) \\
\\
\Delta_{i,j,k}^y(\chi) &= \Delta y_j \\
\Delta_{i,j,k}^{y-}(\chi) &= 0.5 (\delta_{i,j-1,k}^c \Delta y_{j-1} + \Delta y_j) \\
\Delta_{i,j,k}^{y+}(\chi) &= 0.5 (\Delta y_j + \delta_{i,j+1,k}^c \Delta y_{j+1}) \\
\\
\Delta_{i,j,k}^z(\chi) &= \Delta z_k \\
\Delta_{i,j,k}^{z-}(\chi) &= 0.5 (\delta_{i,j,k-1}^c \Delta z_{k-1} + \Delta z_k) \\
\Delta_{i,j,k}^{z+}(\chi) &= 0.5 (\Delta z_k + \delta_{i,j,k+1}^c \Delta z_{k+1})
\end{aligned}$$

Für die Strömungskomponenten ist zusätzlich die Verschiebung des Hilfgitters gegenüber dem Hauptgitter zu berücksichtigen.

Für die Prognosegröße u ergeben sich exemplarisch folgende Zuweisungen:

$$\begin{aligned}
u\text{-Zelle:} \quad \Delta_{i,j,k}^x(u) &= 0.5 (\Delta x_i + \Delta x_{i-1}) \\
\Delta_{i,j,k}^{x-}(u) &= \Delta x_{i-1} \\
\Delta_{i,j,k}^{x+}(u) &= \Delta x_i \\
\\
\Delta_{i,j,k}^y(u) &= \Delta y_j \\
\Delta_{i,j,k}^{y-}(u) &= 0.5 (\delta_{i,j-1,k}^x \Delta y_{j-1} + \Delta y_j) \\
\Delta_{i,j,k}^{y+}(u) &= 0.5 (\Delta y_j + \delta_{i,j+1,k}^x \Delta y_{j+1}) \\
\\
\Delta_{i,j,k}^z(u) &= \Delta z_k \\
\Delta_{i,j,k}^{z-}(u) &= 0.5 (\delta_{i,j,k-1}^x \Delta z_{k-1} + \Delta z_k) \\
\Delta_{i,j,k}^{z+}(u) &= 0.5 (\Delta z_k + \delta_{i,j,k+1}^x \Delta z_{k+1})
\end{aligned}$$

Die nicht aufgelisteten Differenzen für die v - und w - Zellen ergeben sich analog zur u -Zelle und sind im Anhang zusammengestellt. Bei der Prognose der jeweiligen Strömungskomponente in Richtung ihrer Normalen (u in x -, v in y - und w in z -Richtung) entfällt die Behandlung der Hindernisgrößen, da sich durch den geschachtelten Gitteraufbau auch durch Hinderniswände keine Lageveränderungen der Prognosegrößen ergeben. Die Berechnungspunkte befinden sich entweder auf Hinderniswänden oder aber die Differenzierungsstrecke liegt vollständig im Freien.

6.1.2 Diskretisierung der Zeitableitung

Die Differentialgleichung wird implizit vorwärts in der Zeit diskretisiert, wobei die bekannten Werte aus dem vorangehenden Zeitschritt t^n generell mit ϕ^n und die gesuchten Werte zum Zeitpunkt t^{n+1} mit ϕ^{n+1} bezeichnet werden sollen. Bei Verwendung der Gleichungen im ADI-Verfahren (siehe Abschnitt 6.2.2) treten außerdem die dort benötigten Zwischenlösungen ϕ^* und ϕ^{**} auf.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \rightarrow \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} \quad (6.3)$$

Hierbei ist Δt der Zeitschritt, für den das Gleichungssystem gelöst wird und variiert von Prognosegröße zu Prognosegröße. Die Zeitschritte sind definiert als

$$t^{n+1} = t^n + \Delta t$$

6.1.3 Diskretisierung des Diffusionsterms

Der Diffusionsterm in Raumrichtung x_i wird für nicht-äquidistante Gitterweiten über zentrierte Differenzen mit einer Genauigkeit zweiter Ordnung in Raum und Zeit wie folgt diskretisiert:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) \rightarrow \frac{\delta_a^\psi}{\Delta_a^i} \left(\delta_{a+1}^c K_a^{i+} \frac{\phi_{a+1}^{n+1} - \phi_a^{n+1}}{\Delta_a^{i+}} - \delta_{a-1}^c K_a^{i-} \frac{\phi_a^{n+1} - \phi_{a-1}^{n+1}}{\Delta_a^{i-}} \right) \quad (6.4)$$

Die Hinderniskenngröße δ^ψ unterbindet die Berechnung des Diffusionsflusses, falls sich an der Definitionsstelle der Größe ($\psi = x$ -Fläche für u , $\psi = y$ -Fläche für v , $\psi = z$ -Fläche für w und $\psi = c$ für zentrierte Größen χ) ein Hindernis oder eine Hinderniswand befindet.

Die zusätzliche Kenngröße δ^c ist nur bei zentrierten Größen relevant, da hier der Massenfluß zwischen der Hinderniswand und der Atmosphäre gesondert behandelt werden muß.

Die Austauschkoeffizienten K^{i-} und K^{i+} sind auf den Flächen zwischen der betrachteten Zelle und den in Raumrichtung i benachbarten Zellen definiert und müssen durch räumliche Interpolation aus den im Hauptgitter zentriert liegenden Austauschkoeffizienten gewonnen werden:

$$\begin{aligned}
K_{i,j,k}^{x-}(\chi_{i,j,k}) &= \frac{\Delta x_i K_{i-1,j,k} + \Delta x_{i-1} K_{i,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \\
K_{i,j,k}^{x+}(\chi_{i,j,k}) &= \frac{\Delta x_i K_{i+1,j,k} + \Delta x_{i+1} K_{i,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \\
K_{i,j,k}^{y-}(\chi_{i,j,k}) &= \frac{\Delta y_j K_{i,j-1,k} + \Delta y_{j-1} K_{i,j,k}}{\Delta y_j + \Delta y_{j-1}} \\
K_{i,j,k}^{y+}(\chi_{i,j,k}) &= \frac{\Delta y_j K_{i,j+1,k} + \Delta y_{j+1} K_{i,j,k}}{\Delta y_j + \Delta y_{j+1}} \\
K_{i,j,k}^{z-}(\chi_{i,j,k}) &= \frac{\Delta z_k K_{i,j,k-1} + \Delta z_{k-1} K_{i,j,k}}{\Delta z_k + \Delta z_{k-1}} \\
K_{i,j,k}^{z+}(\chi_{i,j,k}) &= \frac{\Delta z_k K_{i,j,k+1} + \Delta z_{k+1} K_{i,j,k}}{\Delta z_k + \Delta z_{k+1}}
\end{aligned}$$

Durch den geschachtelten Gitteraufbau ergeben sich für die Strömungskomponenten wiederum abweichende Formulierungen. Für die Austauschkoefizienten auf den Zellflächen der u-Gitterzelle erhält man beispielsweise:

$$\begin{aligned}
K_{i,j,k}^{x-}(u_{i,j,k}) &= K_{i-1,j,k} \\
K_{i,j,k}^{x+}(u_{i,j,k}) &= K_{i,j,k} \\
K_{i,j,k}^{y-}(u_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j)} \\
&\quad \times [(K_{i-1,j-1,k} \Delta y_j + K_{i-1,j,k} \Delta y_{j-1}) \Delta x_i \\
&\quad + (K_{i,j-1,k} \Delta y_j + K_{i,j,k} \Delta y_{j-1}) \Delta x_{i-1}] \\
K_{i,j,k}^{y+}(u_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta y_j + \Delta y_{j+1})} \\
&\quad \times [(K_{i-1,j,k} \Delta y_{j+1} + K_{i-1,j+1,k} \Delta y_j) \Delta x_i \\
&\quad + (K_{i,j,k} \Delta y_{j+1} + K_{i,j+1,k} \Delta y_j) \Delta x_{i-1}] \\
K_{i,j,k}^{z-}(u_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta z_{k-1} + \Delta z_k)} \\
&\quad \times [(K_{i-1,j,k-1} \Delta z_k + K_{i-1,j,k} \Delta z_{k-1}) \Delta x_i \\
&\quad + (K_{i,j,k-1} \Delta z_k + K_{i,j,k} \Delta z_{k-1}) \Delta x_{i-1}] \\
K_{i,j,k}^{z+}(u_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta z_k + \Delta z_{k+1})} \\
&\quad \times [(K_{i-1,j,k} \Delta z_{k+1} + K_{i-1,j,k+1} \Delta z_k) \Delta x_i \\
&\quad + (K_{i,j,k} \Delta z_{k+1} + K_{i,j,k+1} \Delta z_k) \Delta x_{i-1}]
\end{aligned}$$

Die Berechnung der übrigen Größen gestaltet sich analog hierzu und ist im Anhang nochmals komplett zusammengestellt.

Bei zentriert liegenden Größen χ ist weiterhin zu beachten, daß in eine oder mehrere Richtungen Hinderniswände vorhanden sein können. In diesem Fall darf der Austauschkoefizient nicht durch einfache Interpolation gewonnen werden, da an festen Oberflächen spezielle Randbedingungen gelten. Der benötigte Austauschkoefizient K_w wird dann in Abhängigkeit von der Flächenorientierung, der tangentialen Überströmungsgeschwindigkeit sowie der thermischen Schichtung über die

Ähnlichkeitstheorie von Monin-Obhukov, wie in Abschnitt 3.3.5 S.40 ff. dargestellt, berechnet:

$$K_a^{i\pm} = K^w(\dots)$$

Neben der veränderten Berechnung des Austauschkoeffizienten muß in diesen Fällen auch die Diskretisierung des Diffusionsterms verändert werden. Durch die Verwendung der Hinderniskenngrößen fällt der Differenzterm in Richtung der Hinderniswand automatisch aus der Differenzengleichung heraus. Die Austauschvorgänge an der Hindernisoberfläche müssen somit explizit wieder in das Gleichungssystem integriert werden, wobei als Randbedingung der vorbestimmte Grenzflächenwert ϕ_w der jeweiligen Größe zu verwenden ist. Bei den Strömungskomponenten vereinfacht sich das Verfahren etwas, da hier die Grenzflächenwerte immer gleich Null sind.

Für die Rückwärts- bzw. Vorwärtsdiffusionsterme neben Hindernissen ergeben sich somit folgende Formulierungen:

$$-K^w \frac{\phi_a^{n+1} - \phi_w}{\Delta_a^i (\Delta^w)^i} \text{ bzw. } K^w \frac{\phi_w - \phi_a^{n+1}}{\Delta_a^w (\Delta^w)^i} = \quad (6.5)$$

$$-\phi_a^{n+1} \frac{K^w}{\Delta_a^i (\Delta^w)^i} + K^w \frac{\phi_w}{\Delta_a^i (\Delta^w)^i}$$

Für den Abstand $(\Delta^w)^i$ zur in Richtung i liegenden Hinderniswand ist die halbe Gitterweite der Untersuchungszelle in der betrachteten Raumrichtung einzusetzen. Durch die Verwendung der Hinderniskenngrößen bei der Bestimmung der Zellgrößen entspricht Δ^w automatisch der Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenz zur jeweiligen Hinderniszelle. Der erste Term auf der rechten Seite von (6.5) wird implizit bestimmt, während der zweite Term über den Integrationszeitschritt konstant gehalten wird und in den expliziten Restterm aufgenommen wird. Es ist ebenfalls numerisch zulässig, den gesamten Ausdruck explizit auszuwerten und dem Restterm hinzuzufügen. Grenzt eine Gitterzelle in mehrere Richtungen an Hindernisse, so ist der Restterm die Summe aller explizit bestimmten Diffusionsanteile.

Für die Strömungskomponenten ist eine gesonderte Behandlung neben Hindernissen nicht erforderlich, da dort, wie bereits erwähnt wurde, die Prognosepunkte mit den Hindernisflächen zusammenfallen.

6.1.4 Diskretisierung des Advektionsterms

Durch die eingeführte Gitterstruktur ist sichergestellt, daß jede Größe ϕ immer im Mittelpunkt der Gitterzellen definiert ist. Durch die Zellflächen kann durch das transportierende Strömungsfeld ein advektiver Massenstrom stattfinden, der zu einer Änderung der Konzentration der betrachteten Größe führt. Die Diskretisierung dieser Transporte erfolgt über das sogenannte *Upstream-Differencing* oder *Upwind-Verfahren*. Hierbei wird zur Berechnung des advektiven Flusses der jeweils stromaufwärts liegende Datenpunkt herangezogen (einseitige Differenzen):

$$-u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \rightarrow -\frac{u_+^i \phi_+ - u_-^i \phi_-}{\Delta x^i} \quad (6.6)$$

$$\phi_+ = \begin{cases} \phi_a^{n+1} & ; \text{ wenn } u_+^i > 0 \\ \phi_{a+1}^{n+1} & ; \text{ wenn } u_+^i < 0 \end{cases} \quad \phi_- = \begin{cases} \phi_{a-1}^{n+1} & ; \text{ wenn } u_-^i > 0 \\ \phi_a^{n+1} & ; \text{ wenn } u_-^i < 0 \end{cases} \quad (6.7)$$

Hierbei ist u_i die in Raumrichtung i transportierende Komponente des Strömungsfeldes. Die Größe u_-^i steht für die Transportgeschwindigkeit an der linken (bzw. vorderen oder unteren) Zellwand und u_+^i für die Transportgeschwindigkeit am rechten (bzw. hinteren oder oberen) Zellrand (siehe auch 4, S. 82).

Während für zentrierte Größen χ die Transportgeschwindigkeiten bereits auf den Zellflächen vorliegen, müssen sie für die Strömungskomponenten durch Interpolation aus den Geschwindigkeitskomponenten der jeweils beteiligten Zellen ermittelt werden. Hierbei geht der Gitterabstand des Hauptgitters als Wichtungsfaktor in die Mittelung ein (*Inverse-Distance-Interpolation*).

Für die u -Komponente ergeben sich folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned} u_-(u)_{i,j,k} &= 0.5 (u_{i-1,j,k} + u_{i,j,k}) \\ u_+(u)_{i,j,k} &= 0.5 (u_{i,j,k} + u_{i+1,j,k}) \\ v_-(u)_{i,j,k} &= \frac{\Delta x_i v_{i-1,j,k} + \Delta x_{i-1} v_{i,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \\ v_+(u)_{i,j,k} &= \frac{\Delta x_i v_{i-1,j+1,k} + \Delta x_{i-1} v_{i,j+1,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \\ w_-(u)_{i,j,k} &= \frac{\Delta x_i w_{i-1,j,k} + \Delta x_{i-1} w_{i,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \\ w_+(u)_{i,j,k} &= \frac{\Delta x_i w_{i-1,j,k+1} + \Delta x_{i-1} w_{i,j,k+1}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \end{aligned}$$

Auch hier sind die fehlenden Komponenten nach dem gleichen Schema zu bestimmen. Die Koordinatenindizes sowie die Bezugsgrößen werden im folgenden aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht mehr dargestellt, da sie aus dem Kontext eindeutig hervorgehen.

Um die in (6.7) enthaltenen Fallentscheidungen im Modell zu vermeiden, ist es üblich, die verschiedenen Kombinationsmöglichkeiten über Beträge zu formulieren, wobei die nicht benötigten Komponenten durch Multiplikation mit Null herausfallen (vgl. Griebel *et al.*, 1995; Roache, 1984; Eichhorn, 1989).

Liegt eine der beiden Geschwindigkeitskomponenten auf einer Hinderniswand ($u_i^w = 0$), so ergibt sich bei den Strömungskomponenten als Advektionsgeschwindigkeit bei äquidistanten Gittern automatisch die Hälfte der Geschwindigkeit des freiliegenden Punktes. Ist das Gitter nicht äquidistant, so treten die Gitterweiten als lineare Interpolationsgewichte auf. Da die Geschwindigkeit nahe der Gebäudekanten jedoch nicht linear abnimmt, sollte um Ungenauigkeiten zu vermeiden, in der Nähe von Hindernissen ein äquidistantes Gitter verwendet werden. Das verwendete Upstream-Verfahren erzeugt durch die Genauigkeit erster Ordnung jedoch ohnehin für eine Glättung aller Gradienten, so daß der hier gegebenenfalls verursachte Fehler nicht signifikant ist. Bei zentrierten Größen ist durch das Upstream-Verfahren automatisch sichergestellt, daß durch Hinderniswände wegen $u_i^w = 0$ kein Massenfluß stattfinden kann.

In allgemeiner Form kann die Diskretisierung der Advektionsgleichung wie folgt geschrieben werden:

$$-u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \rightarrow -\frac{\delta_a^\psi}{2\Delta_a^i} \left\{ (u_+^i + |u_+^i|) \phi_{a+1}^{n+1} + (u_+^i - |u_+^i|) \phi_{a+1}^{n+1} \right. \\ \left. - (u_-^i + |u_-^i|) \phi_{a-1}^{n+1} - (u_-^i - |u_-^i|) \phi_{a-1}^{n+1} \right\}$$

Die Größe Δ_a^i steht auch hier für die Zellgröße des Hilfsgitters in Raumrichtung i , also dem Abstand zwischen den beiden Zellwänden, durch die der advective Transport stattfindet. Die Kenngröße δ_a^ψ unterbindet wie im Falle der Diffusionsgleichung die Prognose für Punkte in Hindernissen und auf Hinderniswänden.

Für die Advektion von v im v -Feld ergibt sich so beispielsweise durch Einsetzen der entsprechenden Zellgröße in y -Richtung $\Delta_a^i = \Delta_{i,j,k}^y(v) = 0.5 (\Delta y_j + \Delta y_{j-1})$ und Prognosefläche $\psi = „y“$ folgende Diskretisierung:

$$-v \frac{\partial v}{\partial y} \rightarrow -\frac{\delta_{i,j,k}^y}{\Delta y_j + \Delta y_{j-1}} \left\{ (v_+ + |v_+|) v_{i,j,k}^{n+1} + (v_+ - |v_+|) v_{i,j+1,k}^{n+1} \right. \\ \left. - (v_- + |v_-|) v_{i,j-1,k}^{n+1} - (v_- - |v_-|) v_{i,j,k}^{n+1} \right\} \quad (6.8)$$

Durch die Bildung einseitiger Differenzen besitzt das Upwind-Verfahren nur eine Genauigkeit erster Ordnung in Raum und Zeit. Der hierdurch verursachte numerische Fehler wird als *numerische Diffusion* bezeichnet und führt zu einer Glättung der ϕ -Verteilung, wodurch vor allem im Bereich starker Gradienten ein gewisser Fehler verursacht wird. Andere Advektionsverfahren wie beispielsweise die *Lagrange*- und *Semi-Lagrange* Verfahren (Staniforth und Côté, 1991) oder das *Korrekturverfahren nach Smolarkiewicz* (Smolarkiewicz, 1984) verringern diese Diffusion, sind jedoch nur explizit anwendbar. Die in ENVI-met erforderlichen großen Zeitschritte würden mit diesen Verfahren eine unangemessen große Zahl von Advektionsteilschritten erfordern, die mit der momentan zur Verfügung stehenden Rechenleistung nicht bewältigt werden kann. Ein weiterer Vorteil des Upstream-Verfahrens ist, daß es ein positives Verfahren ist und durch die Filterwirkung hochfrequente Wellen eliminiert. Dieses ist vor allem, wie in Abschnitt 3.3.3, S. 35 ff. dargestellt, bei der Prognose der Turbulenzkenngrößen E und ϵ wünschenswert.

6.1.5 Diskretisierung der übrigen Terme

Neben den Advektions- und Diffusionstermen kommen in den Modellgleichungen eine Reihe weiterer Terme vor, deren Diskretisierung hier kurz angesprochen werden soll.

Generell ist die Annahme einer linearen Abhängigkeit zwischen den betrachteten Prozessen innerhalb eines Rechenschrittes die Grundlage für die Lösung der verwendeten Differentialgleichungen. Bei explizit berechneten Prozessen ist diese Linearität automatisch gegeben, nicht jedoch notwendigerweise beim impliziten Adjustment, wie es beispielsweise bei der ϵ -Gleichung in der Turbulenzprognose vorkommt. Die implizite Adjustmentfunktion f kann nur dann in das Gleichungssystem eingebaut werden, wenn sie als von ϕ_a^{n+1} linear abhängig darstellbar ist:

$$\frac{\phi_a^{n+1} - \phi_a^n}{\Delta t} = f \cdot \phi_a^{n+1}$$

Diese lineare Abhängigkeit kann durch eine Linearisierung in der Zeit leicht hergestellt werden. Dieses ist in den meisten Fällen ohne Stabilitätsverluste des numerischen Verfahrens durchführbar und wurde für alle nicht-linearen Terme im Modell angewandt. Hierbei werden alle nicht-linearen Zusammenhänge über die bekannten Variablenwerte aus der vergangenen Zeitschicht ausgedrückt.

6.1.5.1 Bewegungsgleichungen Bei den Bewegungsgleichungen ist der Einfluß poröser Hindernisse auf das Strömungsfeld in Form lokaler Senkterme in die Gleichung zu integrieren. Hier lautet die Beziehung wie im Strömungsmodul (Kapitel 3.1, S. 13) hergeleitet :

$$S_{u^i} = LAD(z) \cdot c_{d,p} \cdot W^n \cdot (u^i)^{n+1} \quad (6.9)$$

Die mittlere Windgeschwindigkeit W wird aus dem Windfeld des vorhergehenden Zeitschrittes berechnet, so daß nur die jeweils neu zu prognostizierende Geschwindigkeitskomponente implizit übrig bleibt und somit Linearität gegeben ist. Unter Verwendung der eingeführten Porositätskenngrößen ergeben sich folgende implizite Restterme:

$$f_{i,j,k}(u) = -P_{i,j,k}^x \cdot c_{d,p} \cdot W^n \quad (6.10a)$$

$$f_{i,j,k}(v) = -P_{i,j,k}^y \cdot c_{d,p} \cdot W^n \quad (6.10b)$$

$$f_{i,j,k}(w) = -P_{i,j,k}^z \cdot c_{d,p} \cdot W^n \quad (6.10c)$$

Existiert an der Untersuchungsfläche kein poröses Hindernis, so ist $f = 0$, da hier $P_{i,j,k}^\psi = 0$ ist.

In der w -Bewegungsgleichung ist zudem der aus der Boussinesq-Approximation resultierende Thermikterm zu diskretisieren. Hierbei ist die im Zellmittelpunkt definierte potentielle Temperatur θ auf die untere Zellfläche $k - 1/2$ umzurechnen:

$$g \frac{\theta'}{\hat{\theta}} \rightarrow g \frac{\theta_{i,j,k-1/2} - \hat{\theta}_{k-1/2}}{\hat{\theta}_{k-1/2}} = g \left(\frac{\theta_{i,j,k-1} \Delta z_k + \theta_{i,j,k} \Delta z_{k-1}}{\hat{\theta}_{k-1} \Delta z_k + \hat{\theta}_k \Delta z_{k-1}} - 1 \right) \quad (6.11)$$

Als Referenztemperatur dient die Temperatur $\hat{\theta}$ des eindimensionalen Randmodelles in der entsprechenden Höhe z .

6.1.5.2 Turbulenzgleichungen Die Struktur der prognostischen Gleichungen für die turbulente kinetische Energie und deren Dissipation führt zu recht komplizierten Adjustmenttermen.

Für die **kinetische Energie** sind außerhalb des Advektions-Diffusionsteils der Gleichung der mechanische Produktionsterm T_P , der Thermikterm T_T sowie der Quellterm an Vegetationselementen Q_E zu diskretisieren (siehe Abschnitt 3.3, S. 29 ff.).

Für den mechanischen Produktionsterm sind die drei Strömungskomponenten nach allen drei Raumrichtungen zu differenzieren. Stellvertretend für die übrigen Komponenten wird hier die Diskretisierung für die Strömungskomponente u dargestellt. Die Herleitung der anderen Komponenten und des kompletten Produktionsterms ist hierzu analog und wird nicht gesondert dargestellt.

Für Punkte, die nicht von Hindernissen begrenzt werden, lauten die Diskretisierungen:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} &\rightarrow \frac{u_{i+1,j,k} - u_{i,j,k}}{\Delta x_i} \\ \frac{\partial u}{\partial y} &\rightarrow \frac{0.5 (u_{i,j+1,k}^c + u_{i,j,k}^c) - 0.5 (u_{i,j,k}^c + u_{i,j-1,k}^c)}{\Delta y_j} \\ \frac{\partial u}{\partial z} &\rightarrow \frac{0.5 (u_{i,j,k+1}^c + u_{i,j,k}^c) - 0.5 (u_{i,j,k}^c + u_{i,j,k-1}^c)}{\Delta z_k}\end{aligned}$$

Sind benachbarte Gitterzellen von Hindernissen belegt, so werden die entsprechenden tangentialen Windscherungen über die Schubspannungsgeschwindigkeit u_* ermittelt. Die Diskretisierung dieser Randbedingungen wurde bereits in Abschnitt 3.3.6.3 S. 45 f. dargestellt.

Die Diskretisierung des Thermikterms lautet:

$$\frac{g}{\theta} K_h \frac{\partial \theta}{\partial z} \rightarrow \frac{g}{\theta_k} K_{i,j,k} \left(\frac{0.5 (\theta_{i,j,k+1} + \theta_{i,j,k}) - 0.5 (\theta_{i,j,k} + \theta_{i,j,k-1})}{\Delta z_k} \right) \quad (6.12)$$

V 2.5

Ist die nach oben oder unten anschließende Zelle von einem Hindernis belegt, so wird eine Null-Gradient Bedingung in Richtung der Hindernisfläche angenommen. Der in früheren Versionen verwendete Ansatz, die Oberflächentemperatur in die Berechnung einzubeziehen führte in der Praxis zu unrealistischen Turbulenzproduktionen und wurde ab Version 2.5 gestrichen.

Der Quellterm Q_E wird, wie alle anderen Komponenten des Turbulenzsystems, explizit bestimmt und kann über den Restterm in die Gleichung integriert werden.

$$Q_E = c_{d,p} LAD(z) \cdot W^3 - 4c_{d,f} LAD(z) \cdot |W^n| \cdot E^n \quad (6.13)$$

Die Struktur der prognostischen **Gleichung für die Energiedissipation** ϵ entspricht prinzipiell der Struktur der E-Gleichung. Allerdings treten hier vor jedem Term Koeffizienten der Form

$$c_x \frac{\epsilon}{E}$$

in Erscheinung. Eine implizite Integration in das Gleichungssystem ist numerisch möglich aber nicht sinnvoll. Numerische Experimente haben gezeigt, daß das $E - \epsilon - K$ System hierdurch sehr instabil wird und zum Teil nicht konvergiert. Der Grund hierfür liegt darin, daß die Lösung der Dissipationsgleichung explizit mit der Lösung der E-Gleichung des gleichen Zeitschrittes gekoppelt ist, wobei das in den Koeffizienten maßgebende Verhältnis ϵ/E sehr empfindlich gegen Oszillationen einer der Größen ist. Das

Verfahren wird wesentlich stabiler, wenn zur Berechnung der Koeffizienten die Prognosegrößen aus dem gleichen Zeitschritt verwendet werden. Da die Energiedissipation den Betrag der kinetischen Energie limitiert, ist die ϵ -Gleichung immer vor der E-Gleichung zu lösen, wodurch nur eine Diskretisation mit den ϵ -Werten des letzten Zeitschrittes möglich ist:

$$c_x \frac{\epsilon}{E} \rightarrow c_x \frac{\epsilon^n}{E^n}$$

6.1.6 Besonderheiten im Rahmen des Bodenmodells

Die Gleichungen für die Temperatur- und Feuchteverteilung im Boden werden eindimensional in der vertikalen Richtung gelöst. Um unrealistische horizontale Temperaturgradienten zwischen benachbarten Oberflächen zu vermeiden, erfolgt die Temperaturprognose am ersten Gitterpunkt des Bodenmodells unter der Oberfläche dreidimensional. Da hier der Einfluß der Oberflächentemperatur noch sehr stark ist, kann durch die dreidimensionale Berechnung eine realistische Glättung der Temperaturverteilung ohne übermäßigen Rechenaufwand erreicht werden.

Die Temperaturprognose in der x- und y-Raumrichtung erfolgt explizit, während die Berechnung in z-Richtung im Rahmen der üblichen Prognoseroutine implizit durchgeführt wird.

Die zur Berechnung des Temperaturflusses in x- und y-Richtung benötigten Zusatzterme können somit über den expliziten Restterm in das Gleichungssystem integriert werden:

$$\begin{aligned} R = & \frac{\delta_{i,j,1}^c}{\Delta x_i} \left(\delta_{i+1,j,1}^c \kappa_{i,j,k}^s \frac{T_{i+1,j,-1}^n - T_{i,j,-1}^n}{0.5(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} - \delta_{i-1,j,1}^c \kappa_{i,j,k}^s \frac{T_{i,j,-1}^n - T_{i-1,j,-1}^n}{0.5(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} \right) \\ & + \frac{\delta_{i,j,1}^c}{\Delta y_j} \left(\delta_{i,j+1,1}^c \kappa_{i,j,k}^s \frac{T_{i,j+1,-1}^n - T_{i,j,-1}^n}{0.5(\Delta y_j + \Delta y_{j+1})} - \delta_{i,j-1,1}^c \kappa_{i,j,k}^s \frac{T_{i,j,-1}^n - T_{i,j-1,-1}^n}{0.5(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j)} \right) \end{aligned} \quad (6.14)$$

Hierbei ist κ^s die Temperaturleitfähigkeit des Bodenmaterials. Unterhalb von Gebäuden entfällt die Bestimmung der Bodentemperatur, ebenso wird neben Gebäuden der Austausch mit Gitterpunkten unter Gebäuden unterdrückt.

Die Diskretisierung des Divergenzterms für die kurzwellige Strahlung im Falle von Wasserkörpern erfolgt über eine klassische Zwei-Punkte Differenz:

$$\frac{\partial R_{kw}}{\partial n} = \frac{R_{kw}(n + 0.5\Delta n) - R_{kw}(n - 0.5\Delta n)}{\Delta n}$$

mit $n = -z$ und

$$R_{kw}(n) = R_{kw,net} \cdot e^{-\xi n}$$

6.2 Numerische Lösung der prognostischen Gleichungen

Zur Lösung der im Modell verwendeten mehrdimensionalen Differentialgleichungen bietet sich das sogenannte *Alternating Direction Implicit* (ADI) Verfahren auf Basis der Arbeiten von Peacemen und Rachford (1955), Douglas (1955, 1962) und Douglas und Rachford (1956) an.

Das ADI-Verfahren weist die für ein implizites Verfahren typische numerische Stabilität bei großen Zeitschritten Δt auf und besitzt für äquidistante und nicht-äquidistante Rechengitter eine Genauigkeit erster Ordnung im Raum und zweiter Ordnung in der Zeit (Douglas 1955, 1957).

Bei dem ADI-Verfahren wird die ursprüngliche Differentialgleichung in Teilgleichungen aufgesplittet, von denen jede die Austauschvorgänge in einer der zu untersuchenden Raumrichtungen implizit berechnet. Diese Teilgleichungen werden nacheinander gelöst, wobei immer nur in einer Raumrichtung implizit gerechnet wird. Hierdurch muß in jedem Rechenschritt nur ein tridiagonales Matrixsystem berechnet werden, wofür numerisch effiziente Algorithmen zur Verfügung stehen.

Die Lösung der mehrdimensionalen Gleichungen mit dem ADI-Verfahren gliedert sich für n Raumrichtungen in n Teilschritte, wovon jeder Teilschritt eine Zwischenlösung des Gesamtproblems liefert. Für $n = 3$ Raumrichtungen erhält man folgendes ADI-Verfahren:

$$(I): \frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} = \langle \partial \phi^* \rangle_x + \langle \partial \phi^n \rangle_y + \langle \partial \phi^n \rangle_z + f\phi^* + R_\phi \quad (6.15a)$$

$$(II): \frac{\phi^{**} - \phi^*}{\Delta t} = \langle \partial \phi^{**} \rangle_y - \langle \partial \phi^n \rangle_y \quad (6.15b)$$

$$(III): \frac{\phi^{n+1} - \phi^{**}}{\Delta t} = \langle \partial \phi^{n+1} \rangle_z - \langle \partial \phi^n \rangle_z \quad (6.15c)$$

Die Diskretisierung erfolgt vorwärts in der Zeit, wobei n die bekannte aktuelle und $n + 1$ die gesuchte zukünftige Zeitschicht ist. ϕ^* und ϕ^{**} sind Zwischenlösungen des ADI-Verfahrens und werden nach dem Verfahren nicht mehr benötigt.

In welcher Reihenfolge die 3 ADI Schritte abgearbeitet werden, ist grundsätzlich nicht festgelegt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird daher das Prinzip $x-y-z$ -Richtung beibehalten. Für die Temperaturgleichungen wurde im Modell die Reihenfolge $z-x-y$ gewählt, da hier vor allem vertikale Gradienten zu finden sind, die durch die implizite Berechnung in z -Richtung im ersten Schritt ein wenig besser aufgelöst werden können.

Die Lösung der Gleichungen im Bodenmodell sowie im eindimensionalen Randmodell erfolgt implizit eindimensional und entspricht somit dem ersten Schritt des ADI-Verfahrens abzüglich der mehrdimensionalen Teilterme und wird nicht weiter gesondert erläutert.

6.2.1 Faktorisierung der Gleichungen

Damit die Gleichungen in einem Matrix-Verfahren gelöst werden können, müssen die einzelnen Terme nach den unterschiedlichen Prognosevariablen aufgelöst werden. Für

die verschiedenen Teilterme ergeben sich die im folgenden zusammengestellten Ausdrücke:

Diffusionsterm:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\delta_a^\psi}{\Delta_a^i} \left(\delta_{a+1}^c K_a^{i+} \frac{\phi_{a+1}^{n+1} - \phi_a^{n+1}}{\Delta_a^{i+}} - \delta_{a-1}^c K_a^{i-} \frac{\phi_a^{n+1} - \phi_{a-1}^{n+1}}{\Delta_a^{i-}} \right) \\
 &= \delta_a^\psi \delta_{a+1}^c \frac{K_a^{i+}}{\Delta_a^i \Delta_a^{i+}} (\phi_{a+1}^{n+1} - \phi_a^{n+1}) - \delta_a^\psi \delta_{a-1}^c \frac{K_a^{i-}}{\Delta_a^i \Delta_a^{i-}} (\phi_a^{n+1} - \phi_{a-1}^{n+1}) \\
 &= \delta_a^\psi \delta_{a-1}^c \frac{K_a^{i-}}{\Delta_a^i \Delta_a^{i-}} \phi_{a-1}^{n+1} - \left(\delta_a^\psi \delta_{a-1}^c \frac{K_a^{i-}}{\Delta_a^i \Delta_a^{i-}} + \delta_a^\psi \delta_{a+1}^c \frac{K_a^{i+}}{\Delta_a^i \Delta_a^{i+}} \right) \phi_a^{n+1} \\
 & \quad + \delta_a^\psi \delta_{a+1}^c \frac{K_a^{i+}}{\Delta_a^i \Delta_a^{i+}} \phi_{a+1}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

Advektionsterm:

Ausgehend von der Upstream-Formulierung

$$-\frac{\delta_a^\psi}{2\Delta_a^i} \left\{ (u_+^i + |u_+^i|) \phi_a^{n+1} + (u_+^i - |u_+^i|) \phi_{a+1}^{n+1} - (u_-^i + |u_-^i|) \phi_{a-1}^{n+1} - (u_-^i - |u_-^i|) \phi_a^{n+1} \right\}$$

bzw.

$$-\frac{\delta_a^\psi}{2\Delta_a^i} \left\{ - (u_-^i + |u_-^i|) \phi_{a-1}^{n+1} + [(u_+^i + |u_+^i|) - (u_-^i - |u_-^i|)] \phi_a^{n+1} + (u_+^i - |u_+^i|) \phi_{a+1}^{n+1} \right\}$$

werden die Advektionsgeschwindigkeiten definiert als:

$$\begin{aligned}
 \text{adv}A_a^i &= \frac{u_-^i + |u_-^i|}{2} \\
 \text{adv}B_a^i &= \frac{(u_+^i + |u_+^i|) - (u_-^i - |u_-^i|)}{2} \\
 \text{adv}C_a^i &= \frac{u_+^i - |u_+^i|}{2}
 \end{aligned}$$

Hiermit ergibt sich für die Advektionsanteile der Differenzengleichung:

$$\frac{\delta_a^\psi}{\Delta_a^i} \left(\text{adv}A_a^i \phi_{a-1}^{n+1} - \text{adv}B_a^i \phi_a^{n+1} - \text{adv}C_a^i \phi_{a+1}^{n+1} \right) \tag{6.17}$$

Die komplette implizite Differenzengleichung für die Raumrichtung i läßt sich nun vereinfacht als Koeffizientengleichung schreiben:

$$\left\langle \partial \phi^{n+1} \right\rangle_i \rightarrow \frac{\phi_a^{n+1} - \phi_a^n}{\Delta t} = A_a^i \phi_{a-1}^{n+1} + B_a^i \phi_a^{n+1} + C_a^i \phi_{a+1}^{n+1} \quad (6.18)$$

Die Koeffizienten A_a^i , B_a^i und C_a^i entsprechen den jeweiligen Koeffizienten im umgeformten Diffusionsterm (6.16) und Advektionsterm (6.17). Entfällt das Adjustment, so verkürzt sich die Gleichung entsprechend.

Faßt man die Advektions- und Diffusionsteile zusammen, so ergeben sich für die Koeffizienten folgende Zuweisungen:

$$A_a^i = \text{adv} A_a^i \frac{\delta_a^\psi}{\Delta_a^i} + \delta_{a-1}^c \delta_a^\psi \frac{K_a^{i-}}{\Delta_a^i \Delta_a^{i-}} \quad (6.19a)$$

$$= \frac{\delta_a^\psi}{\Delta_a^i} \left(\text{adv} A_a^i + \delta_{a-1}^c \frac{K_a^{i-}}{\Delta_a^{i-}} \right)$$

$$B_a^i = -\text{adv} B_a^i \frac{\delta_a^\psi}{\Delta_a^i} - \delta_{a-1}^c \delta_a^\psi \frac{K_a^{i-}}{\Delta_a^i \Delta_a^{i-}} - \delta_{a+1}^c \delta_a^\psi \frac{K_a^{i+}}{\Delta_a^i \Delta_a^{i+}} \quad (6.19b)$$

$$= -\frac{\delta_a^\psi}{\Delta_a^i} \text{adv} B_a^i - \frac{\delta_a^\psi}{\Delta_a^i} \left(\delta_{a-1}^c \frac{K_a^{i-}}{\Delta_a^{i-}} + \delta_{a+1}^c \frac{K_a^{i+}}{\Delta_a^{i+}} \right)$$

$$C_a^i = -\text{adv} C_a^i \frac{\delta_a^\psi}{\Delta_a^i} + \delta_{a+1}^c \delta_a^\psi \frac{K_a^{i+}}{\Delta_a^i \Delta_a^{i+}} \quad (6.19c)$$

$$= \frac{\delta_a^\psi}{\Delta_a^i} \left(-\text{adv} C_a^i + \delta_{a+1}^c \frac{K_a^{i+}}{\Delta_a^{i+}} \right)$$

Nach Umstellen von (6.18) erhält man

$$\frac{1}{\Delta t} \phi_a^n = (-A_a^i) \phi_{a-1}^{n+1} + \left(-B_a^i + \frac{1}{\Delta t} \right) \phi_a^{n+1} + (-C_a^i) \phi_{a+1}^{n+1} \quad (6.20)$$

Hierbei stehen die bekannten Größen ϕ^n auf der linken Gleichungsseite und die gesuchten Werte ϕ^{n+1} auf der rechten Seite. Wie aus der Gleichung hervorgeht, führt die implizite Berechnung der Differentialgleichung in eine Raumrichtung i nur zu einem tridiagonalen Gleichungssystem.

Liegt eine Prognosegröße auf bzw. innerhalb einer undurchströmbaren Hinderniszelle, so ergibt sich wegen $\delta^\psi = 0$ auch $A^i = B^i = C^i = 0$ wodurch die prognostizierte Größe an dieser Stelle unmodifiziert bleibt: $\phi^{n+1} = \phi^n$.

Die hier dargestellte Faktorisierung gilt selbstverständlich auch für die explizite Formulierung der Differentialgleichung $\langle \partial \phi^n \rangle_i$, wie sie im ADI-Verfahren zur Berechnung der Zwischenlösungen benötigt wird. In diesem Fall kann die Gleichung direkt durch Multiplikation der bekannten Ausgangswerte mit den jeweiligen Koeffizienten ermittelt werden.

6.2.2 Formulierung der Gleichungen im ADI-Verfahren

Mit Hilfe der Grundgleichung (6.20) lassen sich die Teilschritte (I) bis (III) des ADI-Verfahrens (6.15a) bis (6.15c) einfach in die Koeffizientenschreibweise überführen.

Die für die Matrixinversion benötigten Koeffizienten sind der besseren Übersicht halber in Klammern gesetzt. Das Adjustment wurde hierbei dem ersten Schritt des Verfahrens hinzugefügt, da die beiden hinteren Schritte als Korrekturschritte für die im ersten Schritt vorgenommene explizite Lösung der Gleichung in y- und z-Richtung zu interpretieren sind.

$$\begin{aligned}
 \text{(I)} \quad \frac{\phi_{i,j,k}^* - \phi_{i,j,k}^n}{\Delta t} &= \langle \partial \phi^* \rangle_x + \langle \partial \phi^n \rangle_y + \langle \partial \phi^n \rangle_z + f \phi^* + R_\phi \quad (6.21a) \\
 &= (A_{i,j,k}^x) \phi_{i-1,j,k}^* + (B_{i,j,k}^x) \phi_{i,j,k}^* + (C_{i,j,k}^x) \phi_{i+1,j,k}^* \\
 &\quad + (A_{i,j,k}^y) \phi_{i,j-1,k}^n + (B_{i,j,k}^y) \phi_{i,j,k}^n + (C_{i,j,k}^y) \phi_{i,j+1,k}^n \\
 &\quad + (A_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k-1}^n + (B_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k}^n + (C_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k+1}^n \\
 &\quad + f \cdot \phi_{i,j,k}^* + R_\phi
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{(II)} \quad \frac{\phi_{i,j,k}^{**} - \phi_{i,j,k}^*}{\Delta t} &= \langle \partial \phi^{**} \rangle_y - \langle \partial \phi^n \rangle_y \quad (6.21b) \\
 &= (A_{i,j,k}^y) \phi_{i,j-1,k}^{**} + (B_{i,j,k}^y) \phi_{i,j,k}^{**} + (C_{i,j,k}^y) \phi_{i,j+1,k}^{**} \\
 &\quad - (A_{i,j,k}^y) \phi_{i,j-1,k}^n - (B_{i,j,k}^y) \phi_{i,j,k}^n - (C_{i,j,k}^y) \phi_{i,j+1,k}^n
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{(III)} \quad \frac{\phi_{i,j,k}^{n+1} - \phi_{i,j,k}^{**}}{\Delta t} &= \langle \partial \phi^{n+1} \rangle_z - \langle \partial \phi^n \rangle_z \quad (6.21c) \\
 &= (A_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k-1}^{n+1} + (B_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k}^{n+1} + (C_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k+1}^{n+1} \\
 &\quad - (A_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k-1}^n - (B_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k}^n - (C_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k+1}^n
 \end{aligned}$$

Durch Umsortieren wie in (6.20) ergeben sich hieraus die benötigten Eingangsgleichungen für das Matrixsystem. Hierbei stehen wiederum die vor der jeweiligen Rechnung bekannten Größen auf der linken Gleichungsseite.

$$\begin{aligned}
 \text{(I)} \quad &(A_{i,j,k}^y) \phi_{i,j-1,k}^n + (A_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k-1}^n + \left(B_{i,j,k}^y + B_{i,j,k}^z + \frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,k}^n \quad (6.22a) \\
 &+ (C_{i,j,k}^y) \phi_{i,j+1,k}^n + (C_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k+1}^n + R_\phi \\
 &= (-A_{i,j,k}^x) \phi_{i-1,j,k}^* + \left(-B_{i,j,k}^x - f + \frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,k}^* + (-C_{i,j,k}^x) \phi_{i+1,j,k}^*
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{(II)} \quad &\left(\frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,k}^* - (A_{i,j,k}^y) \phi_{i,j-1,k}^n - (B_{i,j,k}^y) \phi_{i,j,k}^n - (C_{i,j,k}^y) \phi_{i,j+1,k}^n \quad (6.22b) \\
 &= (-A_{i,j,k}^y) \phi_{i,j-1,k}^{**} + \left(-B_{i,j,k}^y + \frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,k}^{**} + (-C_{i,j,k}^y) \phi_{i,j+1,k}^{**}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{(III)} \quad & \left(\frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,k}^{**} - (A_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k-1}^n - (B_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k}^n - (C_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k+1}^n \quad (6.22c) \\
& = (-A_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k-1}^{n+1} + \left(-B_{i,j,k}^z + \frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,k}^{n+1} + (-C_{i,j,k}^z) \phi_{i,j,k+1}^{n+1}
\end{aligned}$$

6.2.3 Korrektur der Advektionsgleichung im nicht-divergenzfreien Windfeld

Die numerische Lösung der Advektionsgleichung in der massenerhaltenden Form, wie sie in diesem Modell Verwendung findet, ist theoretisch nur in einem vollständig divergenzfreien Strömungsfeld zulässig. Existiert in einer Gitterzelle eine Differenz zwischen eintretendem und austretendem Massenstrom, kommt es notwendigerweise zu einer unrealistischen Änderung der transportierten Größe in der betreffenden Zelle. So macht sich eine negative Divergenz (mehr Massenstrom in die Zelle hinein als heraus) in einer physikalisch unbegründeten Akkumulation der betrachteten Größe in der Zelle bemerkbar, während umgekehrt eine positive Divergenz zu einem Abbau führt.

Es wurde bereits in Abschnitt 3.1 erläutert, daß das die im Rahmen dieses Modellverfahrens erzeugten Strömungsfelder meist nur *divergenzarm*, nicht aber *divergenzfrei* sind. Je nach Gitterstruktur und Hinderniskonstellation verbleibt vor allem in der Nähe von Hinderniskanten und im Zentrum von Wirbeln eine nicht zu eliminierende Restdivergenz, die zu Fehlern im Advektionsverfahren führt. Um eine langfristig stabile Lösung der Advektionsgleichung zu erhalten, wird die Differenzengleichung um einen impliziten Korrekturterm erweitert, der den divergenzverursachten Massenverlust korrigiert.

Im ersten Schritt des ADI Verfahrens werden implizit alle Gitterpunkte in x-Richtung korrigiert:

$$C_{i,j,k}^I = \text{div } \mathbf{u}_{i,j,k} \cdot \phi_{i,j,k}^*$$

In den ADI-Schritten (II) und (III) erfolgt nochmals eine Korrektur implizit in y- und z-Richtung, wobei hier nur die innerhalb des ADI-Verfahrens berechneten Korrekturen der ϕ -Konzentration berücksichtigt werden:

$$\begin{aligned}
C_{i,j,k}^{II} &= \text{div } \mathbf{u}_{i,j,k} \cdot (\phi_{i,j,k}^{**} - \phi_{i,j,k}^*) \\
C_{i,j,k}^{III} &= \text{div } \mathbf{u}_{i,j,k} \cdot (\phi_{i,j,k}^{n+1} - \phi_{i,j,k}^{**})
\end{aligned}$$

mit $\text{div } \mathbf{u} = \partial u / \partial x + \partial v / \partial y + \partial w / \partial z$.

Die Korrekturterme werden als zusätzliche implizite und explizite Restterme in das ADI-Verfahren eingearbeitet. Die Diskretisierung für den impliziten Anteil lautet für alle drei ADI-Schritte

$$C_{i,j,k}^{I,II,III} \rightarrow f_{i,j,k}^{\text{kor}} = \text{div } \mathbf{u}_{i,j,k} \quad (6.24)$$

Für den expliziten Anteil ergeben sich die Formulierungen

$$R_{i,j,k}^{II} = -\operatorname{div} \mathbf{u}_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^* \quad (6.25a)$$

$$R_{i,j,k}^{III} = -\operatorname{div} \mathbf{u}_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^{**} \quad (6.25b)$$

Da im Upstream-Verfahren der advective Massenfluß zwischen zwei benachbarten Zellen bestimmt wird, kann eine numerisch stabile Korrektur nur für alle Zellen synchron, also implizit erfolgen. Innerhalb des ADI-Verfahrens ist es jedoch notwendig, im ersten Schritt in y- und z-Richtung explizit zu rechnen. Hierdurch gehen die in diese Richtung liegenden Zellen unkorrigiert in die Berechnung ein. Die nachfolgenden Korrekturschritte des Verfahrens können zwar den hierdurch verursachten Fehler bezüglich des Differentialverfahrens korrigieren, nicht aber hinsichtlich der Divergenz-Korrektur.

Die auf den ersten Blick logische Folgerung, die Divergenzkorrektur erst nach dem letzten ADI-Schritt durchzuführen, scheitert, da der lokal verursachte Massenfehler im dritten ADI-Teilschritt sich durch Advektion und Diffusion bereits auf andere Gitterzellen verteilt hat und nicht mehr reproduzierbar ist.

Durch diese gewissermaßen explizite Korrektur kann der Berechnungszeitschritt nicht mehr völlig frei gewählt werden. Numerische Experimente haben gezeigt, daß dieses Verfahren bei Zeitschritten $\Delta t \leq 10$ s numerisch stabil bleibt. Der erlaubte Zeitschritt liegt somit trotz dieser Einschränkungen etwa um den Faktor 100 über den erlaubten Zeitschritten eines expliziten Advektionsverfahrens und erscheint, vor allem in Ermangelung eines besseren Ansatzes, als gangbarer Weg, um in der Praxis größere Zeitabschnitte numerisch stabil zu simulieren. Für künftige Modellversionen ist es erstrebenswert, ein besseres Verfahren zur Eliminierung der Restdivergenz außerhalb des ADI-Verfahrens zu finden.

6.2.4 Formulierung der Randbedingungen

Die bisher hergeleiteten gekoppelten Gleichungen lassen sich nur lösen, wenn die Werte an den äußeren Punkten des Rechengebietes jederzeit bekannt sind. Das Rechengebiet selber sei in dieser Darstellung durch das dreidimensionale Gebiet $\Omega [1, I] \times [1, J] \times [0, K]$ definiert, wobei die Randpunkte an den Koordinaten $i, j = 1, k = 0, i = I, j = J$ und $k = K$ liegen. In der praktischen Anwendung können die verschiedenen Raumrichtungen hiervon abweichende Randkoordinaten besitzen. So besitzen die Strömungskomponenten aufgrund des geschachtelten Gitteraufbaus in Richtung ihrer Normalen jeweils einen Prognosepunkt mehr. Dieses ist für die Lösung der Gleichung jedoch unerheblich. Verallgemeinert sei hier wiederum die Raumrichtung i verwendet, wodurch die Randwerte in einer Raumrichtung vereinfacht mit $\phi_{a=0}^i$ und $\phi_{a=A}^i$ mit $A = \{I, J, K\}$ bezeichnet werden können.

Zur Bestimmung der Randwerte in Differentialgleichungssystemen kommen für die Modellierung mikroklimatologischer Prozesse zwei Bedingungen in Betracht:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{a=0;A} = \alpha_{0;A}^i \quad \text{Dirichlet'sche Bedingung}$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{a=0;A} = \Lambda_{0;A}^i \quad \text{Neumann'sche Bedingung}$$

Bei der Dirichlet'schen Bedingung wird der Wert der äußeren Punkte über eine zeitliche Funktion aus den Randwerten des vorhergehenden Rechenschrittes bestimmt.

Üblicherweise ist $\alpha = 0$, wodurch die Randwerte konstant gehalten werden oder vor der Lösung der Differentialgleichung aktualisiert werden. Die Neumann'sche Bedingung drückt die Randwerte als Funktion des benachbarten inneren Rechenpunktes aus. Hier ist die Null-Gradient Bedingung mit $\Lambda = 0$ eine übliche Formulierung, um offene Modellränder zu simulieren.

Zur Lösung der Gleichungen sind die Randbedingungen ebenfalls in die Faktorenschreibweise zu überführen. Für die Dirichlet'sche Bedingung erhält man:

$$\frac{\phi_{a=0;A}^{n+1} - \phi_{a=0;A}^n}{\Delta t} = \alpha_{0;A}^i \iff \phi_{a=0;A}^{n+1} = \phi_{a=0;A}^n + \alpha_{0;A}^i \Delta t$$

Bei Lösung der Neumann'schen Randbedingungen ist zugunsten der numerischen Stabilität die implizite Integration der Randwertvorgaben in das Gleichungssystem zu wählen. Um die Zahl der Prognosepunkte nicht zu erhöhen, wird die Randbedingung über einseitige Differenzen zwischen dem letzten und vorletzten Punkt approximiert. Die Neumann-Bedingung ist somit zwischen den beiden Randpunkten definiert. Diese Formulierung besitzt nur eine Genauigkeit erster Ordnung im Raum, ist jedoch völlig ausreichend, wenn man sich vor Augen hält, daß die Annahme eines konstanten Gradienten am Modellrand eine eher willkürliche Annahme ist. Für den ersten und letzten Gitterpunkt erhält man somit folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned} \frac{\phi_{a=1}^{n+1} - \phi_{a=0}^{n+1}}{\Delta_{a=1}^{i-}} &= \Lambda_0^i \iff \phi_{a=0}^{n+1} - \phi_{a=1}^{n+1} = -\Lambda_0^i \Delta_{a=1}^{i-} \\ \frac{\phi_{a=A}^{n+1} - \phi_{a=A-1}^{n+1}}{\Delta_{A-1/2}^{i-}} &= \Lambda_A^i \iff -\phi_{a=A-1}^{n+1} + \phi_{a=A}^{n+1} = \Lambda_A^i \Delta_{A-1/2}^{i-} \end{aligned}$$

Zwischen den Modellrändern und dem ersten Hindernis sind mindestens zwei Gitterzellen freizulassen, um eine sinnvolle Formulierung der Randbedingungen zu ermöglichen. Dieses wird durch die Verwendung der Nesting-Zellen am Rand automatisch sichergestellt, so daß eine Behandlung der Kenngrößen δ_a^ψ am Rand nicht erforderlich ist.

6.2.5 Lösung des Gleichungssystem durch Matrixinversion

Zur numerischen Lösung ist das bisher entwickelte Gleichungssystem in die Vektorschreibweise zu überführen:

$$\mathbf{A} \times \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

Hierbei ist \mathbf{A} die sogenannte Koeffizientenmatrix, der Vektor \mathbf{y} enthält die vor dem Rechenschritt bekannten Größen von den linken Seiten der Gleichungen. Der Vektor \mathbf{x} ist der gesuchte Lösungsvektor, der nach der Matrixinversion durch Multiplikation von \mathbf{A} mit \mathbf{y} bestimmt werden kann.

Die Koeffizientenmatrix \mathbf{A} besteht aus $A \times A$ Elementen und enthält, je nach ADI-Schritt, die Koeffizienten des implizit zu lösenden Gleichungsteiles der zugehörigen faktorisierten Gleichungen (Schritt I: $i = x$ mit Gl. 6.22a, Schritt II: $i = y$ mit Gl. 6.22b, Schritt III: $i = z$ mit Gl. 6.22c)

Stellvertretend für den ersten ADI-Teilschritt (implizit in x -Richtung) ergibt sich folgende Matrix für die inneren Punkte $[2, I - 1]$:

$$\mathbf{A}^I = \begin{bmatrix} (\phi_1^*) & (\phi_2^*) & (\phi_3^*) & (\phi_4^*) & \cdots & (\phi_{I-2}^*) & (\phi_{I-1}^*) & (\phi_I^*) \\ -A_2^x & D_2^x & -C_2^x & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A_3^x & D_3^x & -C_3^x & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -A_{I-1}^x & D_{I-1}^x & -C_{I-1}^x \end{bmatrix}_{j,k=\text{const}}$$

$$\text{mit } D_a^x = -B_a^x - f - f^{\text{corr}} + 1/\Delta t$$

Der Übersicht halber wurden die restlichen Koordinatenbezeichnungen (j, k) hier weggelassen, da sie innerhalb einer Matrix konstant bleiben. Die Koeffizientenmatrix für die Raumrichtung y und z ergeben sich analog hierzu. Die Variable f^{corr} steht für den impliziten Zusatzterm, der aus dem Divergenz-Korrekturverfahren stammt (6.24).

Der Vektor \mathbf{y} unterscheidet sich bei den Einzelschritten des ADI-Verfahrens. Es gelten in den einzelnen ADI-Schritten folgende Zuweisungen:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^I(\phi^n) &= \begin{bmatrix} W_{a=2}^I \\ W_{a=3}^I \\ \vdots \\ W_{a=I-1}^I \end{bmatrix}_{j,k=\text{const}} \\ \mathbf{y}^{II}(\phi^n, \phi^*) &= \begin{bmatrix} W_{a=2}^{II} \\ W_{a=3}^{II} \\ \vdots \\ W_{a=J-1}^{II} \end{bmatrix}_{i,k=\text{const}} \\ \mathbf{y}^{III}(\phi^n, \phi^{**}) &= \begin{bmatrix} W_{a=1}^{III} \\ W_{a=2}^{III} \\ \vdots \\ W_{a=K-1}^{III} \end{bmatrix}_{i,j=\text{const}} \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} W_{a,j,k}^I &= (A_{a,j,k}^y) \phi_{a,j-1,k}^n + (A_{a,j,k}^z) \phi_{a,j,k-1}^n + \left(B_{a,j,k}^y + B_{a,j,k}^z + \frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{a,j,k}^n \\ &\quad + (C_{a,j,k}^y) \phi_{a,j+1,k}^n + (C_{a,j,k}^z) \phi_{a,j,k+1}^n + R_\phi(a, j, k) \\ W_{i,a,k}^{II} &= \left(\frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{i,a,k}^* - (A_{i,a,k}^y) \phi_{i,a-1,k}^n - (B_{i,a,k}^y) \phi_{i,a,k}^n - (C_{i,a,k}^y) \phi_{i,a+1,k}^n \\ &\quad + R_{i,a,k}^{II} \\ W_{i,j,a}^{III} &= \left(\frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,a}^{**} - (A_{i,j,a}^z) \phi_{i,j,a-1}^n - (B_{i,j,a}^z) \phi_{i,j,a}^n - (C_{i,j,a}^z) \phi_{i,j,a+1}^n \\ &\quad + R_{i,j,a}^{III} \end{aligned}$$

Die Terme R^{II} und R^{III} sind die expliziten Restterme des Divergenz-Korrekturverfahrens (6.25a, 6.25b). Die noch fehlende erste und letzte Zeile des Matrix-Vektorsystems ist je nach gewünschter Randbedingung an den Rändern in der untersuchten Raumrichtung zu wählen.

Für Dirichlet'sche Randbedingungen an beiden Modellrändern erhält man beispielsweise für den ersten ADI Schritt ($i = 1$ und $i = I$):

$$\mathbf{A}^I = \begin{bmatrix} (\phi_1^*) & (\phi_2^*) & (\phi_3^*) & (\phi_4^*) & \cdots & (\phi_{I-2}^*) & (\phi_{I-1}^*) & (\phi_I^*) \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{j,k=\text{const}}$$

und

$$\mathbf{y}^I(\phi^n) = \begin{bmatrix} \phi_1^n + \alpha_1^x \Delta t \\ \vdots \\ \phi_I^n + \alpha_I^x \Delta t \end{bmatrix}_{j,k=\text{const}}$$

Die Neumann'schen Randbedingungen erzeugen als Matrix-Vektor-System:

$$\mathbf{A}^I = \begin{bmatrix} (\phi_1^*) & (\phi_2^*) & (\phi_3^*) & (\phi_4^*) & \cdots & (\phi_{I-2}^*) & (\phi_{I-1}^*) & (\phi_I^*) \\ 1 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}_{j,k=\text{const}}$$

und

$$\mathbf{y}^I(\phi^n) = \begin{bmatrix} -\Lambda_1^x \Delta_1^{i+} \\ \vdots \\ \Lambda_I^x \Delta_I^{i-} \end{bmatrix}_{j,k=\text{const}}$$

Werden verschiedene Randbedingungen verwendet, so ist eine entsprechende Kombination aus beiden Systemen zu verwenden.

Zur Lösung des Gleichungssystems ist die \mathbf{A} -Matrix zu invertieren, welches aufgrund der tridiagonalen Struktur ohne großen Speicherbedarf möglich ist. Im Modell ENVI-met wird das Verfahren der *LU-Decomposition* mit Rückwärtsersetzung (Press *et al.*, 1990) zur Invertierung der Matrix verwendet. Den gesuchten Lösungsvektor \mathbf{x} erhält man nach der Matrixinvertierung durch die Multiplikation der inversen Matrix $\text{inv } \mathbf{A}$ mit \mathbf{y} :

$$\mathbf{x} = \text{inv } \mathbf{A} \times \mathbf{y}$$

Das komplette ADI-Verfahren stellt sich somit wie folgt dar:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^* &= \text{inv } \mathbf{A}^I \times \mathbf{y}^I(\phi^n) \\ \mathbf{x}^{**} &= \text{inv } \mathbf{A}^{II} \times \mathbf{y}^{II}(\phi^n, \phi^*) \\ \mathbf{x}^{n+1} &= \text{inv } \mathbf{A}^{III} \times \mathbf{y}^{III}(\phi^n, \phi^{**}) \end{aligned}$$

Der Lösungsvektor \mathbf{x} enthält die gesuchten Zwischenergebnisse bzw. nach dem dritten Schritt die Prognosevariablen der gesuchten Zeitschicht $n + 1$

$$\mathbf{x}^{n+1} = \begin{bmatrix} \phi_0^{n+1} \\ \phi_1^{n+1} \\ \phi_2^{n+1} \\ \vdots \\ \phi_a^{n+1} \end{bmatrix}$$

Mit einer Matrixinversion wird die Lösung synchron für alle Gitterpunkte $[0(1), A]$ in der jeweiligen Rechenrichtung mit den Koordinaten $b = \text{const}$ und $c = \text{const}$ ermittelt, wobei b und c jene verbleibenden Raumkoordinaten sind, für die im jeweiligen Schritt *nicht* implizit gerechnet wird. So wird beispielsweise im ersten Schritt des ADI-Verfahrens implizit in der x -Richtung gerechnet, wodurch die Punkte ($i = [1, I]$, $j = \text{const}$, $k = \text{const}$) synchron berechnet werden. Um die erste Zwischenlösung für *alle* inneren Punkte des System zu erhalten, muß diese Matrixinversion für jedes $j = [2, J - 1]$ und jedes $k = [1, K - 1]$ durchgeführt werden.

Bei den übrigen Raumrichtungen in den ADI-Schritten II und III ist hierzu analog zu verfahren. Die an den Rändern nicht berechneten Werte werden nach dem ADI-Verfahren gemäß der jeweils anzuwendenden Randbedingungen ersetzt.

6.3 Lösung der Filterbedingung des Strömungsmodells

Zur Bestimmung des divergenzarmen Windfeldes ist die Filterbedingung

$$\nabla \mathbf{u} = 0$$

zu beachten. Das im Modell ENVI-met verwendete Splitting-Verfahren berechnet das Windfeld zunächst durch prognostische Lösung der verkürzten Bewegungsgleichungen (3.7a) bis (3.7c) mit dem im vorhergehenden Abschnitt dargestellten ADI-Verfahren. Im Anschluß daran ist zur Korrektur des Strömungsfeldes die Poisson-Gleichung

$$\nabla^2 p' = \frac{\rho_0}{\Delta t} \nabla \mathbf{u}^{\text{aux}} \quad (6.26)$$

zu lösen. Hierbei ist \mathbf{u}^{aux} das aus der Lösung der verkürzten Bewegungsgleichungen erhaltene vorläufige Windfeld und p' der dynamische Stördruck. Das neue, divergenz-freiere Windfeld \mathbf{u}^* kann nach der Lösung von (6.26) aus der lokalen Divergenz des Stördruckfeldes bestimmt werden:

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{\text{aux}} - \frac{\Delta t}{\rho_0} \nabla p' \quad (6.27)$$

Die Bezeichnung *divergenzfreier* deutet bereits an, daß das so ermittelte Windfeld zu-meist nicht vollständig divergenzfrei ist, sondern lediglich divergenzfreier als das un-korrigierte Windfeld.

Die Lösung der Poisson-Gleichung kann sowohl direkt als auch iterativ erfol-gen. Bei der direkten Lösung wird das dreidimensionale Problem durch Fourier-Transformationen auf ein eindimensionales Problem abgebildet und nach der Lösung

wieder zum dreidimensionalen Feld zurück transformiert (vgl. Schumann und Sweet, 1976) In diesem Modell wurde ein weniger aufwendiges iteratives Lösungsverfahren verwendet, das zwar zeitintensiver aber dafür numerisch stabiler ist. Bei diesem Verfahren wird das Druckfeld solange variiert, bis das aus der aktuellen Druckverteilung resultierende korrigierte Windfeld \mathbf{u}^* eine gewisse Restdivergenz unterschreitet. Ist diese Bedingung erfüllt, so wird angenommen:

$$\mathbf{u}^{n+1} \simeq \mathbf{u}^* \quad (6.28)$$

6.3.1 Bestimmung des Stördruckes p'

Für ein gegebenes Strömungsfeld \mathbf{u}^{aux} erhält man das korrespondierende Stördruckfeld p' durch Lösung der elliptischen Poisson-Gleichung (6.26). In Komponentenschreibweise überführt ergibt sich:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial p'}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial p'}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial p'}{\partial z} \right) = \frac{\rho_0}{\Delta t} \text{div} \mathbf{u}^{aux} \quad (6.29)$$

Die Divergenz des Windfeldes in einer Gitterbox ist:

$$\text{div} \mathbf{u}^{aux} = \left(\frac{\partial u^{aux}}{\partial x} + \frac{\partial v^{aux}}{\partial y} + \frac{\partial w^{aux}}{\partial z} \right) \quad (6.30)$$

Wird die Gitterbox von einem undurchströmbaren Hindernis belegt, entfällt die Bestimmung des Stördruckes.

Zur iterativen Lösung von mehrdimensionalen elliptischen Differentialgleichungen ist das *Simultaneous Over-Relaxation Verfahren* (SOR-Verfahren) ein allgemein akzeptiertes und numerisch effizientes Verfahren (vgl. Wang und Takle, 1995; Eichhorn, 1989; Patrinos und Kistler, 1977).

Bei dem SOR-Verfahren handelt es sich um einen iterativen numerischen Algorithmus, bei dem die in den nächsten Iterationsschritt eingehenden Startwerte aus den Ergebnissen der letzten beiden Iterationsschritte gebildet werden, wobei die Resultate der letzten Iteration stärker gewichtet werden (*over-relaxation*). Hierdurch wird die Zahl der notwendigen Rechenschritte im Verfahren drastisch reduziert.

6.3.1.1 Diskretisierung der Stördruckgleichungen mit dem SOR-Verfahren

Die Gleichungen (6.29) und (6.30) lauten in der diskretisierten Form:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta x_i} \left\{ \delta_{i+1,j,k}^0 \frac{p_{i+1,j,k}^{it} - p_{i,j,k}^*}{0.5(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} - \delta_{i-1,j,k}^0 \frac{p_{i,j,k}^* - p_{i-1,j,k}^{it+1}}{0.5(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} \right\} \\ & + \frac{1}{\Delta y_j} \left\{ \delta_{i,j+1,k}^0 \frac{p_{i,j+1,k}^{it} - p_{i,j,k}^*}{0.5(\Delta y_j + \Delta y_{j+1})} - \delta_{i,j-1,k}^0 \frac{p_{i,j,k}^* - p_{i,j-1,k}^{it+1}}{0.5(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j)} \right\} \\ & + \frac{1}{\Delta z_k} \left\{ \delta_{i,j,k+1}^0 \frac{p_{i,j,k+1}^* - p_{i,j,k}^*}{0.5(\Delta z_k + \Delta z_{k+1})} - \delta_{i,j,k-1}^0 \frac{p_{i,j,k}^* - p_{i,j,k-1}^*}{0.5(\Delta z_{k-1} + \Delta z_k)} \right\} \\ & = \frac{\rho_0}{\Delta t} \text{div} \mathbf{u}_{i,j,k}^{aux} \end{aligned} \quad (6.31)$$

mit

$$\operatorname{div} \mathbf{u}_{i,j,k}^{\text{aux}} = \frac{u_{i+1,j,k}^{\text{aux}} - u_{i,j,k}^{\text{aux}}}{\Delta x_i} + \frac{v_{i,j+1,k}^{\text{aux}} - v_{i,j,k}^{\text{aux}}}{\Delta y_j} + \frac{w_{i,j,k+1}^{\text{aux}} - w_{i,j,k}^{\text{aux}}}{\Delta z_k}$$

Das Superskript „it“ steht hierbei für die Druckwerte aus dem vorhergehenden Iterationsschritt, während „it+1“ für bereits berechnete Druckwerte des aktuellen Zeitschrittes steht. Bei Berechnungen in Richtung der aufsteigenden Gitterpunktkoordinaten liegen als bekannte Werte die in die Rückwärtsdifferenzen eingehenden Punkte sowie die Randwerte vor. Das Konvergenzverhalten des Verfahrens verbessert sich zusätzlich, wenn die Neuberechneten Druckwerte verwendet werden, sobald sie zur Verfügung stehen (*sequentielle Iteration*).

Zur Berechnung der Druckverteilung in z-Richtung wurde die auch in MISKAM (Eichhorn, 1989) verwendete implizite Formulierung der Gleichung verwendet, wodurch die Stördruckwerte einer kompletten vertikalen Luftsäule in einem Schritt bestimmt werden. Die so berechneten Druckwerte p^* sind Zwischenlösungen, die noch mit den Druckwerten des letzten Iterationsschrittes gewichtet werden müssen.

6.3.1.2 Lösung der Poisson-Gleichung Zur Lösung wird die Poisson-Gleichung (6.31) so umgestellt, daß sie mittels Matrixinversion gelöst werden kann. Für innere Punkte ergibt sich:

$$\begin{aligned} A_{i,j,k}^z p_{i,j,k-1}^* + B_{i,j,k}^z p_{i,j,k}^* + C_{i,j,k}^z p_{i,j,k+1}^* = \\ -A_{i,j,k}^x p_{i-1,j,k}^{\text{it}+1} - C_{i,j,k}^x p_{i+1,j,k}^{\text{it}} - A_{i,j,k}^y p_{i,j-1,k}^{\text{it}+1} - C_{i,j,k}^y p_{i,j+1,k}^{\text{it}} + \frac{\rho_0}{\Delta t} \operatorname{div} \mathbf{u}_{i,j,k} \end{aligned} \quad (6.32)$$

Die Koeffizienten sind :

$$\begin{aligned} A_a^i &= \frac{\delta_{a-1}^c}{0.5\Delta_a^i (\Delta_{a-1}^i + \Delta_a^i)} \\ C_a^i &= \frac{\delta_{a+1}^c}{0.5\Delta_a^i (\Delta_a^i + \Delta_{a+1}^i)} \\ B_{i,j,k}^z &= - \left(A_{i,j,k}^x + C_{i,j,k}^x + A_{i,j,k}^y + C_{i,j,k}^y + A_{i,j,k}^z + C_{i,j,k}^z \right) \end{aligned}$$

Die Lösung des tridiagonalen Gleichungssystems liefert als Zwischenlösung die vertikale Druckverteilung p^* einer Säule [1..K] über dem Punkt i, j und ist für jeden inneren Gitterpunkt $[2, I-1] \times [2, J-1]$ durchzuführen. Die Werte für die Gitterpunkte an den Seitenrändern werden unter Verwendung der in Abschnitt 6.3.1.3 beschriebenen Randbedingungen nach jedem Iterationsschritt dem inneren Druckfeld angepaßt, während des Iterationsverfahrens selber bleiben sie konstant.

Die Näherungslösung $p^{\text{it}+1}$ der Poisson-Gleichung erhält man unter Verwendung des SOR-Verfahrens aus der Zwischenlösung p^* der Matrixinversion und dem Ausgangsfeld p^{it} nach der Rechenvorschrift:

$$p^{\text{it}+1} = \omega p^* + (1 - \omega) p^{\text{it}} \quad (6.33)$$

Hierbei ist ω der sogenannte *Relaxationsparameter*, der beim SOR-Verfahren im Bereich von $1 < \omega < 2$ liegt. Für $\omega = 1$ ergibt sich das klassische *Gauss-Seidel-Verfahren*, bei dem der Druckwert in jeder Zelle bei jedem Iterationsschritt unabhängig vom vorgehenden Schritt neu berechnet wird. Der optimale Wert von ω hängt von der Gittergeometrie und den verwandten Randbedingungen ab. Eine falsche Wahl des Parameters kann dazu führen, daß das SOR-Verfahren nicht konvergiert und eine Restdivergenz nicht abgebaut werden kann. Allerdings ist ein optimaler Relaxationsparameter, der zu einer asymptotischen Annäherung an die Endlösung führt, nicht notwendigerweise ein optimaler Parameter über das gesamte Iterationsverfahren (Press *et al.*, 1990). Vor allem in den ersten Iterationsschritten kann das Verfahren beschleunigt werden, wenn sich dem optimalen Parameter ω langsam genähert wird und die ersten Iterationsschritte die neue Drucknäherung stärker gewichten als die späteren Schritte (*Chebyshev-Beschleunigung*).

Für ein zweidimensionales Gitter mit einer mittleren Gitterweite $\overline{\Delta x}, \overline{\Delta y}$ und der Gesamtzahl der Gitterpunkte I, J ist zunächst der Spektralradius der Gauss-Seidel Iteration ρ_{Gauss} als Maß für das zu erwartende Konvergenzverhalten des Verfahrens zu bestimmen:

$$\rho_{\text{Gauss}} = \left(\frac{\cos \frac{\pi}{I} + \left(\frac{\overline{\Delta x}}{\overline{\Delta y}} \right)^2 + \cos \frac{\pi}{J}}{1 + \left(\frac{\overline{\Delta x}}{\overline{\Delta y}} \right)^2} \right)^2 \quad (6.34)$$

Diese Berechnungsvorschrift kann auch im dreidimensionalen Fall angewendet werden, da die wesentlichen Stördruckgradienten horizontal ausgerichtet sind. Der optimale Relaxationsparameter kann aus dem Spektralradius ermittelt werden:

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho_{\text{Gauss}}}} \quad (6.35)$$

Für die Chebyshev-Beschleunigung erfolgt die Berechnung von ω innerhalb des Iterationsverfahrens nach folgendem Schema (Press *et al.*, 1990):

$$\begin{aligned} \omega^{\text{it}=0} &= 1 \\ \omega^{\text{it}=1} &= 1 / (1 - 0.5\rho_{\text{Gauss}}) \\ \omega^{\text{it}=1+n} &= 1 / (1 - 0.25\rho_{\text{Gauss}} \cdot \omega^{\text{it}=n}), \quad n = 1, 2, 3... \\ \omega^{\text{it} \rightarrow \infty} &\rightarrow \omega_{\text{opt}} \end{aligned}$$

Nach jedem Iterationsschritt wird das Windfeld \mathbf{u}^{aux} mit der aktuellen Näherungslösung $p^{\text{it}+1}$ neu korrigiert und die nun vorhandene Restdivergenz in den Gitterboxen bestimmt.

6.3.1.3 Initialisierung und Randbedingungen des Stördruckfeldes Zum Start der Berechnung wird der Stördruck an allen Gitterpunkten auf Null gesetzt. Durch die Lösung der Poisson-Gleichung entwickelt sich das Stördruckfeld von Iterationsschritt zu Iterationsschritt, wobei nicht die absoluten Beträge von Interesse sind, sondern die horizontalen und vertikalen Gradienten.

In (6.31) treten ebenfalls wieder die Hinderniskenngrößen δ in Erscheinung. Sie sorgen dafür, daß neben festen Hinderniszellen der jeweilige Differenzenquotient verschwindet und die festgelegte Randbedingung

$$\left. \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right|_w = 0$$

in das Gleichungssystem integriert wird.

Für Gitterpunkte, die von Hindernissen belegt sind, entfällt die Bestimmung des Stördruckes. Hier kann ein beliebiger Wert, üblicherweise der Vorgabewert 0, eingesetzt werden, da keine numerische Kopplung mit den Nachbarzellen besteht.

Am Modelloberrand $k = K$ und an der Grenzfläche zum Boden $k = 1$ wurde, wie bei den Hinderniswänden ein Nullgradient des Druckes angenommen:

$$\left. \frac{\partial p'}{\partial z} \right|_{k=1} = \left. \frac{\partial p'}{\partial z} \right|_{k=K} = 0$$

An den lateralen Modellrändern muß die Randbedingung

$$\left. \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right|_{\text{lateral}} = \Lambda$$

erfüllt werden. Für Gitterzellen am Einströmrand wird der Gradient Λ immer gleich Null gesetzt. Am Ausströmrand bietet sich, wie bereits bei der Beschreibung des Strömungsmodells in Abschnitt 3.1.5, S.17 ff. dargestellt, die Möglichkeit, durch geeignete Wahl der Randbedingungen einen möglicherweise entstandenen Massenfehler im Modell zu korrigieren.

Bei der Massenbilanzgleichung an den Ein- und Ausströmrändern werden die Integrale durch Summation über die Randzellen diskretisiert:

$$\begin{aligned}
m_{li} &= \rho_0 \int_0^Y \int_0^Z u(0, y, z) dy dz \\
&= \rho_0 \sum_{j=2}^{J-1} \sum_{k=2}^{K-1} (u_{2,j,k} \Delta y_j \Delta z_k)
\end{aligned} \tag{6.36a}$$

$$\begin{aligned}
m_{re} &= \rho_0 \int_0^Y \int_0^Z u(X, y, z) dy dz \\
&= \rho_0 \sum_{j=2}^{J-1} \sum_{k=2}^{K-1} (u_{I,j,k} \Delta y_j \Delta z_k)
\end{aligned} \tag{6.36b}$$

$$\begin{aligned}
m_{vo} &= \rho_0 \int_0^X \int_0^Z v(x, 0, z) dx dz \\
&= \rho_0 \sum_{i=2}^{I-1} \sum_{k=2}^{K-1} (v_{i,2,k} \Delta x_i \Delta z_k)
\end{aligned} \tag{6.36c}$$

$$\begin{aligned}
m_{hi} &= \rho_0 \int_0^X \int_0^Z v(x, Y, z) dx dz \\
&= \rho_0 \sum_{i=2}^{I-1} \sum_{k=2}^{K-1} (v_{i,J,k} \Delta x_i \Delta z_k)
\end{aligned} \tag{6.36d}$$

Analog hierzu erfolgt die Berechnung der Gesamtoberfläche aller Ausströmkzellen F_{aus}^Σ :

$$\begin{aligned}
F_{aus}^\Sigma &= \int_0^Y \int_0^Z f^{li}(y, z) dy dz + \int_0^Y \int_0^Z f^{re}(y, z) dy dz + \int_0^X \int_0^Z f^{vo}(x, z) dx dz \\
&\quad + \int_0^X \int_0^Z f^{hi}(x, z) dx dz \\
&= \sum_{j=2}^{J-1} \sum_{k=2}^{K-1} (f_{j,k}^{li} \Delta y_j \Delta z_k) + \sum_{j=2}^{J-1} \sum_{k=2}^{K-1} (f_{j,k}^{re} \Delta y_j \Delta z_k) + \sum_{i=2}^{I-1} \sum_{k=2}^{K-1} (f_{i,k}^{vo} \Delta x_i \Delta z_k) \\
&\quad + \sum_{i=2}^{I-1} \sum_{k=2}^{K-1} (f_{i,k}^{hi} \Delta x_i \Delta z_k)
\end{aligned} \tag{6.37}$$

Die Funktionen f^{li} , f^{re} , f^{vo} und f^{hi} legen die Ein- und Ausströmkzellen fest und sind definiert als:

$$\begin{aligned}
f_{j,k}^{li} &= \begin{cases} -1 & ; \text{wenn } u_{2,j,k} < 0 \\ 0 & ; \text{wenn } u_{2,j,k} \geq 0 \end{cases} & f_{j,k}^{re} &= \begin{cases} 1 & ; \text{wenn } u_{I,j,k} \geq 0 \\ 0 & ; \text{wenn } u_{I,j,k} < 0 \end{cases} \\
f_{i,k}^{vo} &= \begin{cases} -1 & ; \text{wenn } v_{i,2,k} < 0 \\ 0 & ; \text{wenn } v_{i,2,k} \geq 0 \end{cases} & f_{i,k}^{hi} &= \begin{cases} 1 & ; \text{wenn } v_{i,J,k} \geq 0 \\ 0 & ; \text{wenn } v_{i,J,k} < 0 \end{cases}
\end{aligned}$$

Die unterschiedlichen Vorzeichen begründen sich durch die Definition der Strömungsrichtung im kartesischen Koordinatensystem.

Nach Bestimmung von F_{aus}^Σ und m_{err} mit

$$m_{err} = m_{re} - m_{li} + m_{hi} - m_{vo}$$

gilt für die gesuchten Druckgradienten:

$$\Lambda = f_{i/j,k}^{(\dots)} \frac{1}{\Delta t} \frac{m_{err}}{F_{aus}^\Sigma} \Phi_{i,j,k} \quad (6.38)$$

Die Wichtungsfunktion Φ ist:

$$\Phi_{i,j,k} = \frac{F_{aus}^\Sigma / n_{aus}}{F_{aus}(i,j,k)} \quad (6.39)$$

Für die Modellränder ergeben sich unter Berücksichtigung des geschachtelten Gitteraufbaus zusammenfassend die Randbedingungen:

$$\begin{aligned} \text{Rechter Rand:} \quad & \left. \frac{\partial p'}{\partial x} \right|_{i=I} = \Lambda \\ & \frac{p'_{I,j,k} - p'_{I-1,j,k}}{\Delta x_{I,j,k}^-} = f_{j,k}^{re} \frac{1}{\Delta t} \frac{m_{err}}{F_{aus}^\Sigma} \Phi_{I,j,k} \\ & p'_{I,j,k} = p'_{I-1,j,k} + f_{j,k}^{re} \frac{1}{\Delta t} \frac{m_{err}}{F_{aus}^\Sigma} \Phi_{I,j,k} \cdot \Delta x_{I,j,k}^- \\ \text{Linker Rand:} \quad & \left. \frac{\partial p'}{\partial x} \right|_{i=2} = \Lambda \\ & \frac{p'_{2,j,k} - p'_{1,j,k}}{\Delta x_{2,j,k}^-} = f_{j,k}^{li} \frac{1}{\Delta t} \frac{m_{err}}{F_{aus}^\Sigma} \Phi_{2,j,k} \\ & p'_{1,j,k} = p'_{2,j,k} - f_{j,k}^{li} \frac{1}{\Delta t} \frac{m_{err}}{F_{aus}^\Sigma} \Phi_{2,j,k} \cdot \Delta x_{2,j,k}^- \end{aligned}$$

Die Randbedingungen für den hinteren und vorderen Modellrand ergeben sich analog hierzu.

6.3.2 Anpassen des Windfeldes an das Druckfeld

Nach der Neuberechnung des Druckfeldes läßt sich eine neue Näherungslösung des Windfeldes für die inneren Gitterpunkte nach (6.27) ermitteln:

$$u_{i,j,k}^* = u_{i,j,k}^{aux} - \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial x} = u_{i,j,k}^{aux} - \delta_{i,j,k}^x \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{p'_{i,j,k} - p'_{i-1,j,k}}{0.5(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})} \quad (6.40a)$$

$$v_{i,j,k}^* = v_{i,j,k}^{aux} - \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial y} = v_{i,j,k}^{aux} - \delta_{i,j,k}^y \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{p'_{i,j,k} - p'_{i,j-1,k}}{0.5(\Delta y_j + \Delta y_{j-1})} \quad (6.40b)$$

$$w_{i,j,k}^* = w_{i,j,k}^{aux} - \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial z} = w_{i,j,k}^{aux} - \delta_{i,j,k}^z \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{p'_{i,j,k} - p'_{i,j,k-1}}{0.5(\Delta z_k + \Delta z_{k-1})} \quad (6.40c)$$

Liegen die Berechnungspunkte auf undurchströmbaren Hindernisflächen erfolgt keine Korrektur der Werte, da diese hier konstant Null sind. An den äußeren Gitterpunkten kann aufgrund der fehlenden Druckwerte das Windfeld nicht korrigiert werden, deshalb werden hier nach Beendigung des SOR-Verfahrens die an den benachbarten inneren Zellen berechneten Strömungskomponenten übernommen.

6.3.3 Ablauf der Windfeldberechnung

Die Prognose des dreidimensionalen Strömungsfeldes erfolgt quasi-prognostisch, d.h. nach einem festgelegten Zeitintervall wird das Windfeld solange integriert, bis sich ein stationärer Zustand einstellt. Das so ermittelte Windfeld ist dann bis zur nächsten Aktualisierung gültig.

Die Berechnung gliedert sich in zwei Schleifen: In der äußeren Schleife wird das Windfeld vorwärts in der Zeit prognostiziert, während in der inneren Schleife das SOR-Verfahren solange iterativ durchgeführt wird, bis eine Restdivergenz im Strömungsfeld unterschritten wurde oder keine Verbesserung des Ergebnisses mehr erreicht werden kann.

Der vollständige Algorithmus läuft wie folgt ab:

1. Berechnung des Hilfsströmungsfeldes \mathbf{u}^{aux} aus dem Startfeld \mathbf{u}^n aus den verkürzten Bewegungsgleichungen mit Hilfe des ADI-Verfahrens
2. Iterationsstart: Anpassen des Stördruckfeldes an das neue Strömungsfeld $p^{it} \rightarrow p^{it+1}$ mittels SOR-Verfahren
3. Berechnen eines korrigierten Strömungsfeldes \mathbf{u}^* aus p^{it+1} durch Einsetzen der berechneten Stördruckwerte in (6.40a) bis (6.40c)
4. Berechnung der maximalen Divergenz des Strömungsfeldes $\nabla \mathbf{u}^*$
5. Überprüfen, ob die Iteration abgebrochen werden kann, ansonsten Wiederholen der Schritte ab (2). Die Schleife wird beendet, wenn
 - (a) Die maximale Windfelddivergenz einen Grenzwert unterschreitet: $\nabla \mathbf{u}^* < \varepsilon$.
Der Grenzwert ist dynamisch im Bereich von $10^{-4} \geq \varepsilon \geq 10^{-5}$ definiert.
 - (b) Die maximale Veränderung der Druckfeldkorrektur zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten einen Grenzwert unterschreitet, so daß nicht angenommen werden kann, daß weitere Berechnungen das Ergebnis verbessern können:

$$|(|p^{it-1} - p^{it}| - |p^{it-2} - p^{it-1}|)|_{\max} < 10^{-8}$$
 (Diese Bedingung geht davon aus, daß sich der Betrag der Druckfeldkorrektur in jedem Schritt stetig ändert, was in der Praxis zutrifft)
 - (c) Eine festgelegte Zahl an Iterationsschritten überschritten wird. In diesem Fall wird das Grenzwertkriterium für die erlaubte Restdivergenz mit $\varepsilon^{neu} = 1.25\varepsilon$ gelockert, falls ε den festgelegten Maximalwert von 10^{-4} noch nicht erreicht hat.
6. Übernahme des korrigierten Strömungsfeldes als neues Strömungsfeld $\mathbf{u}^* \rightarrow \mathbf{u}^{n+1}$

7. Vergleich des neuen Strömungsfeldes \mathbf{u}^{n+1} mit dem Ausgangsfeld aus dem letzten Zeitschritt. Die Lösung wird als stationär angesehen, wenn die maximale Änderung aller Strömungskomponenten den Betrag von 1 % der geostrophischen Windgeschwindigkeit unterschreitet.
Ist dieses nicht der Fall, so wird $\mathbf{u}^{n+1} \rightarrow \mathbf{u}^n$ und die Prognose wiederholt sich mit Schritt (1).
8. Das Strömungsfeld ist divergenzarm und stationär und wird bis zur nächsten Aktualisierung konstant gehalten.

6.4 Wahl der Zeitschritte im Modell

Durch die implizite Formulierung der Differenzialgleichungen sind diese Lösungsverfahren im Prinzip unempfindlich gegenüber großen Zeitschritten. Dieses trifft jedoch nicht auf das System zur Prognose der Turbulenz und das Verfahren zur Bestimmung des Strömungsfeldes zu, da hier explizite Kopplungen vorgenommen wurden.

6.4.1 Zeitschritte bei der Turbulenzprognose

Das Turbulenzsystem ist in mehrfacher Hinsicht von expliziten Kopplungen betroffen: Zum einen ist der Betrag der Produktionsterme in beiden Gleichungen wesentlich vom Austauschkoefizienten K_m abhängig, der seinerseits wieder aus dem Turbulenzfeld berechnet wird. Zum Anderen wurde das nicht-lineare gekoppelte $E - \epsilon$ -System in zwei unabhängige Gleichungen gesplittet und linearisiert. Hierbei tritt vor allem das Problem des *wave folding* (siehe Abschnitt 3.3.3, S.35 f.) auf, durch das unrealistische Wellen im Modell erzeugt werden können.

Es ist unmöglich, exakt die Bedingungen zu spezifizieren, mit denen die Wellenerzeugung verhindert werden kann. Hierzu müßte zu jedem Rechenzeitpunkt eine Fourier-Analyse des gesamten Modellfeldes durchgeführt werden, um alle vorhandenen Frequenzen zu ermitteln. Es hat sich gezeigt, daß die Stabilität des Verfahrens in Verbindung mit dem Upstream-Advektionsschema meist gewährleistet ist, wenn die sogenannte *Courant-Zahl* im Bereich von 0.5 liegt (Pielke, 1984). Die Courant-Zahl C ist im dreidimensionalen System definiert als

$$C = \Delta t \left(\left| \frac{u}{\Delta x} \right|_{\max} + \left| \frac{v}{\Delta y} \right|_{\max} + \left| \frac{w}{\Delta z} \right|_{\max} \right)$$

Für den maximalen Zeitschritt Δt_{\max} bei $C = 0.5$ ergibt sich also

$$\Delta t_{\max} = \frac{0.5}{|u/\Delta x|_{\max} + |v/\Delta y|_{\max} + |w/\Delta z|_{\max}} \quad (6.41)$$

Allerdings ist dieses Kriterium bei schwachen Windgeschwindigkeiten (unter 1.0 m/s in 10 m Höhe) nicht ausreichend, da hier zu große Zeitschritte erlaubt würden. Liegt die vorgegebene Windgeschwindigkeit unter 1.0 m/s, so wird unabhängig von der Gitterauflösung $\Delta t = 0.1$ s verwendet.

Die minimal zulässige Windgeschwindigkeit liegt, abhängig von der Modellkonfiguration, bei etwa 0.7 bis 0.8 m/s. Unterhalb dieser Geschwindigkeit wird das Turbulenzmodell insgesamt ungültig. Bei großen Gitterpunkten ($\Delta x_i > 10$ m) wird der nach diesem Kriterium zulässige Zeitschritt ebenfalls zu groß, so daß im Modell der maximal zulässige Zeitschritt bei der Lösung des Turbulenzsystems relativ willkürlich auf $\Delta t_{\max} = 0.6$ s limitiert wurde.

6.4.2 Zeitschritte bei der Windfeldprognose

Die eigentlichen Strömungsgleichungen wurden implizit diskretisiert und sind somit unempfindlich gegen große Zeitschritte. Als spezielles Problem stellt sich jedoch die Tatsache dar, daß hier das transportierende Medium selber transportiert wird, wodurch die Gefahr zufälliger numerischer Effekte mit wachsender Zeitschrittgröße ebenfalls wächst. Dieses gilt jedoch nicht für das zur Erhaltung der Divergenzfreiheit verwandte Splitting Verfahren. Durch das relativ feine Rechengitter lassen sich mit dem SOR-Verfahren die hochfrequenten Anteile des Druckfeldes gut berechnen, nicht aber niedrigfrequente Druckwellen. Um diese auch bei großen Zeitschritten erfassen zu können, wäre der Einsatz von *Mehrgitterverfahren* erforderlich (vergl. Griebel *et al.*, 1995).

Wie auch bei der Turbulenzprognose kann die Konvergenz jedoch sichergestellt werden, wenn mit einer Courant-Zahl unter $C = 1$ gerechnet wird. Im Modell wird auch bei der Windfeldprognose mit $C = 0.5$ gerechnet, so daß der maximal zulässige Zeitschritt sich analog zu (6.41) ergibt.

7 Überblick über den Ablauf einer Simulation

7.1 Modulstruktur

Der folgende Ablaufplan gibt eine Übersicht über die Struktur einer vollständigen Simulation mit ENVI-met

1. Allgemeine Vorbereitungen

- (a) Einlesen der Konfigurationsdateien
- (b) Aufbau der Gitterstruktur
- (c) Verbinden der Datenbanken mit dem Modellgebiet
- (d) Vorberechnung konstanter Faktoren

2. Initialisierung

- (a) Initialisieren der vertikalen Ausgangsprofile
- (b) Berechnung des stationären eindimensionalen Randmodells
- (c) Umsetzen der vertikalen Profile auf das dreidimensionale Hauptmodell
- (d) Windfelddiastrophie
- (e) Prognose der stationären $E - \epsilon - K$ -Verteilung (I)
- (f) Prognose des stationären Windfeldes (I)
- (g) Prognose der stationären $E - \epsilon - K$ -Verteilung (II)
- (h) Prognose aller anderen Größen bis zur Stationarität

3. Hauptprognose

- (a) Prognose des eindimensionalen Grenzschichtprofils (alle Prognosegrößen) (Zeitschritt Kat. A)
- (b) Prognose des Temperaturfeldes im Atmosphärenmodell (Zeitschritt Kat. A)
- (c) Prognose des Feuchtefeldes im Atmosphärenmodell (Zeitschritt Kat. A)
- (d) Prognose der Bodentemperatur und Bodenfeuchte (Zeitschritt Kat. A)
- (e) Berechnen der Temperatur und Feuchte der Bodenoberfläche sowie der Wand- und Dachflächen Berechnung der Austauschkoefizienten am Boden (Zeitschritt Kat. B)
- (f) Berechnen der Strahlungsflüsse und Schattengrenzen (Zeitschritt Kat. C)
- (g) Neuberechnung der pflanzenphysiologischen Parameter (Blatttemperatur, Transferwiderstände etc.) (Zeitschritt Kat. D)
- (h) Berechnung des stationären Windfeldes und der Turbulenzverteilung (Zeitschritt Kat. E)
- (i) Ausgabe der Ergebnisse (Zeitschritt Kat. F)

4. Ende der Simulation

7.2 Kurzbeschreibung der einzelnen Schritte

7.2.1 Allgemeine Vorbereitungen

(a) Die verschiedenen Konfigurationsdateien werden eingelesen und die internen Datenbanken aufgebaut:

SOILS.DAT	Datenbank mit verschiedenen Bodenarten
PROFILS.DAT	Datenbank mit vertikalen Bodenprofilen
PLANTS.DAT	Datenbank für verschiedene Pflanzen
<Name>.CF	Basis-Konfigurationsdatei
<Name>.IN	Definition der Hindernisse, Pflanzen und Böden
SELECT.VAR	Auswahl der Ausgabevariablen im Atmosphärenmodell
PMV.CNF	Konfigurationsdatei für PMV-Wert Berechnung

(b) Anhand der aktuellen Konfiguration wird die Gitterstruktur aufgebaut.

(c) Die in (a) eingelesenen Datenbanken werden mit der real vorliegenden Konfiguration verbunden. Es wird geprüft, ob für alle im Modell verwendeten Bodentypen und Pflanzen Einträge vorliegen.

(d) Zur Beschleunigung der eigentlichen Rechnung werden eine Reihe von Konstanten vorberechnet. Aufgrund des limitierten Speicherplatzes werden jedoch nur solche Variablen vorberechnet, die sehr häufig im Modell Verwendung finden wie beispielsweise die Konstanten im SOR-Verfahren zur Stördruckberechnung.

7.2.2 Initialisierung

(a) Aus den Konfigurationsvorgaben werden einfache lineare bzw. im Fall des Windes logarithmische Ausgangsprofile berechnet.

(b) Die Ausgangsprofile werden bei konstanten Randbedingungen bis zum quasi-stationären Zustand integriert.

(c) Die in (b) berechneten vertikalen Profile werden auf das dreidimensionale Modell übertragen.

(d) Die Windgeschwindigkeit wird an den undurchströmbaren Hindernisflächen in drei Stufen (100%, 50% und 0% der ungestörten Windgeschwindigkeit) abgebremst und ein neues resultierendes Windfeld wird berechnet. Hierdurch ist sichergestellt, daß immer ein divergenzarmes Strömungsfeld zur Verfügung steht. Die Austauschkoeffizienten stammen aus dem eindimensionalen Modell und berücksichtigen noch nicht die reale Hinderniskonfiguration.

(e) Aus dem ersten stationären Windfeld mit Hindernissen nach (d) wird das erste stationäre Turbulenzfeld mit den zugehörigen Austauschkoeffizienten berechnet.

(f) Mit den neu berechneten Austauschkoeffizienten wird ein neues stationäres Windfeld berechnet. Hierbei wird das Windfeld über 10 Sekunden Modellzeit integriert, um eine realistische Ausgangsverteilung der Wirbel

zu erhalten, die sich meist erst nach einigen Sekunden Simulationszeit entwickeln.

(g) Anhand des neuen Strömungsfeldes erfolgt eine Neuberechnung der Turbulenzverteilung.

(h) Alle übrigen Prognosevariablen werden integriert, bis sich ein stationärer Zustand eingestellt hat. Danach beginnt die eigentliche instationäre Rechnung.

7.2.3 Hauptprognose

Die Berechnungen in der Hauptprognoseschleife des Modells erfolgen in verschiedenen Zeitintervallen. Die kleinste Zeitauflösung im Modell beträgt 10 Sekunden und entspricht der Zeitschrittkategorie A. Die übrigen Kategorien B bis F können frei definiert werden, müssen aber ein Vielfaches von 10 Sekunden sein.

(a) Die Oberflächenwerte für das eindimensionale Randmodell werden aus den zuständigen Randzellen ermittelt und das Grenzschichtprofil aktualisiert.

(b),(c) und (d) Prognose der Temperatur- und Feuchteverteilung in der Atmosphäre und im Boden unter Verwendung der aktuell gültigen Randbedingungen.

(e) Die Oberflächentemperatur- und feuchte wird an allen Gitterpunkten anhand der aktuellen Rahmenbedingungen berechnet. Hierzu zählen auch die Oberflächentemperaturen der Wand- und Dachflächen im Modell. Die Werte bleiben bis zur erneuten Aktualisierung konstant und werden als Randbedingungen in den weiteren Berechnungen verwendet.

(f) In Abhängigkeit von der Tageszeit werden die Schattengrenzen neu berechnet. Außerdem werden alle globalen Strahlungsflüsse, wie beispielsweise die mittlere langwellige Strahlung von den Fassaden, aktualisiert.

(g) Der Zustand der verschiedenen Pflanzen im Modell wird aktualisiert. Hierzu gehören neben der Neuberechnung der Blattoberflächentemperaturen auch die Bestimmung der aerodynamischen und stomataren Widerstände, auf deren Basis die lokalen Quellen/Senken für Wärme und Wasserdampf berechnet werden.

(h) Die eigentliche Windfeld- und Turbulenzberechnung erfolgt quasi-prognostisch. Das Windfeld wird solange neu berechnet, bis die maximale Änderung zwischen den Zeitschritten weniger als 1 % der geostrophischen Windgeschwindigkeit beträgt. Ebenso wird die Turbulenzverteilung aktualisiert. Wie bereits in den jeweiligen Kapiteln beschrieben wurde, wird bei der Windfeld- und Turbulenzprognose ein wesentlich kleinerer Zeitschritt verwendet als im übrigen Modell.

(i) Der aktuelle Zustand der verschiedenen Teilmodelle wird gespeichert. Für die Atmosphäre kann die Zahl der ausgegebenen Variablen über die Steuerdatei `SELECT.VAR` selektiert werden. Für das Bodenmodell und die Bodengrenzfläche ist aufgrund der wesentlich geringeren Datenmenge diese Option nicht vorgesehen.

Eine aktuelle Auflistung der von ENVI-met erzeugten Dateien finden Sie im Handbuch zum Programm. Die prinzipielle Dateistruktur ist wie folgt aufgebaut:

<xx>_AT_<Zeit>.EDI/.EDT	Zustand der Atmosphäre
<xx>_SO_<Zeit>.EDI/.EDT	Zustand des Bodens
<xx>_FX_<Zeit>.EDI/.EDT	Zustand der Bodengrenzfläche, Flüsse
<xx>1D.DAT	Protokoll 1D-Randmodell
P <x,y> <xx>.1D	Protokoll Überwachungspunkt x,y

<xx> steht für die in der Konfigurationsdatei festgelegte Simulationsbezeichnung, <Zeit> ist die jeweilige Modellzeit, zu der die Datei erzeugt wurde. Die Protokolldatei für einen Überwachungspunkt wird nur angelegt, wenn diese Option in der Konfigurationsdatei ausgewählt wurde. Eine nähere Beschreibung der Dateien ist in der Online-Dokumentation zum Modell auf der CD zu finden.

7.2.4 Ende der Simulation

Das Ende der instationären Simulation ist erreicht, wenn der in der Konfigurationsdatei (.CNF) festgelegte Zeitpunkt erreicht wurde. Die während der Modellsimulation ausgegebenen Mitteilungen werden in der Datei <xx>.LOG gespeichert.

8 Zusammenfassung und Schlußbemerkungen

In dieser Arbeit wurde die Entwicklung und Anwendung des Modells ENVI-met zur Untersuchung der Auswirkungen lokaler Umweltgestaltung auf das Mikroklima in städtischen Strukturen vorgestellt.

Durch die numerische Lösung der verschiedenen thermodynamischen, hydrologischen und strömungsmechanischen Grundgleichungen mit einem hochauflösenden Differenzenverfahren ermöglicht das Modell, das klimatologische Zusammenspiel verschiedener Elemente und Oberflächen in urbanen Räumen zu simulieren. Für jeden Punkt im Modellgitter kann das Bodenprofil, die Oberflächenart und die Belegung mit Gebäuden oder Vegetation weitestgehend frei gewählt werden. Hierdurch ist die Nachbildung auch von komplexen städtischen Strukturen möglich. Die prognostische Berechnung der Austauschvorgänge ermöglicht die Simulation zeitlich und räumlich instationärer Prozesse, vor allem der Erwärmung und Abkühlung von Flächen, die mit stationären diagnostischen Modellen nicht möglich ist.

Anhand von drei ausgewählten Beispielen wurde gezeigt, wie das Modell ENVI-met als Hilfsmittel bei der Beurteilung unterschiedlicher mikroklimatologischer Fragestellungen im Bereich der Stadtplanung eingesetzt werden kann. Hierbei wurde besonderes Gewicht auf die Beurteilung der Auswirkungen von Vegetation auf die Temperaturverteilung und das Bioklima im Straßenumfeld gelegt. Die von ENVI-met berechneten Ergebnisse erwiesen sich hierbei innerhalb des Modells als konsistent. Die simulierten Auswirkungen auf das Mikroklima decken sich qualitativ und quantitativ mit den allgemeinen stadtklimatologischen Beobachtungen. Ein konkreter Vergleich von Feldmessungen und Simulationsberechnungen konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht geleistet werden.

Ein zufriedenstellender Vergleich mit anderen Modellen konnte mangels vergleichbarer Modelle nicht durchgeführt werden. Ein Vergleich mit dem mikroskaligen Modell MISKAM von J. Eichhorn (1989) ergab wesentliche Differenzen bei der Prognose der Turbulenzverteilung, die auf die unterschiedlichen Berechnungsmethoden zurückzuführen sind.

Insgesamt erwies sich das Modell in der vorliegenden Version 1.0 als ein zuverlässiges Werkzeug zur Beurteilung kleinklimatischer Prozesse in städtischen Strukturen. Als zukünftige Forschungsziele sind an erster Stelle vergleichende Messungen aber auch die Verbesserung und Erweiterung des Modells zu nennen.

Da das Modell ohne finanzielle Fremdmittel entwickelt wurde, besteht die Möglichkeit, über das *Free-Source-Konzept* das Programm über Netzwerke anderen Forschergruppen unentgeltlich zur Verfügung zu stellen. Der hierdurch erzielbare Zusatznutzen in Form von Erweiterungen, Validierungen oder einfach nur von konstruktiver Kritik kann bei keiner anderen Nutzungsweise erzielt werden.

Die jeweils aktuelle Version von ENVI-met ist unter der Internet-Adresse www.geographie.ruhr-uni-bochum.de/agklima/envimet/index.html zu finden.

Diese Arbeit ist als Grundstein für die Entwicklung eines Modellbaukastens ENVI-met zu sehen, der mit der Hoffnung auf internationale Anwendung und Weiterentwicklung der Öffentlichkeit zugänglich gemacht wird.

Literaturverzeichnis

- Ames, W. F. (1977). *Numerical Methodes for Partial Differential Equations*. Second edition. Academic Press, New York.
- Arnfield, J. A. und Grimmond, C. S. B. (1998). An urban canyon energy budget model and its application to urban storage heat flux modelling. *Energy and Buildings*. (in Vorbereitung).
- Asaeda, T. und Thanh Ca, V. (1993). The subsurface transport of heat and moisture and its effect on the environment: A numerical model. *Boundary Layer Meteorology*, 65:159–179.
- Blackadar, A. K. (1962). The vertical distribution of wind and turbulent exchange in neutral atmosphere. *J. Geophys. Research*, 67:3095–3102.
- Braden, H. (1982). Simulationsmodell für den Wasser-, Energie- und Stoffhaushalt in Pflanzenbeständen. *Rep. Inst. Meteorol. Uni. Hannover*, (23).
- Brown, G. und Isfält, E. (1974). Solar irradiation and sun shading devices. In: *Report R19:1974*. Nat. Swedish Council for Building Research, Stockholm.
- Bruse, M. (1995). Entwicklung eines numerischen Modells zur Bestimmung von Oberflächentemperaturen. Diplomarbeit, Geographisches Institut der Universität Bochum.
- Clapp, R. B. und Hornberger, G. (1978). Empirical equations for some soil hydraulic properties. *Water Resource Research*, 14:601–604.
- Clarke, R. H. (1970). Recommended methods for the treatment of the boundary layer in numerical models. *Australian Meteorological Magazine*, 18:51–73.
- Deardorff, J. W. (1978). Efficient prediction of ground surface temperature and moisture with inclusion of a layer of vegetation. *J. Geophys. Research*, 83:1889–1903.
- Detering, H. W. und Etling, D. (1985). Application of the $E - \epsilon$ turbulence model to the atmospheric boundary layer. *Boundary Layer Meteorology*, 33:113–133.
- Douglas, J. (1955). On the numerical integration of $\partial^2 u / \partial x^2 + \partial^2 u / \partial y^2 = \partial u / \partial t$ by implicit methods. *J. Society of Industrial Applied Mathematics*, 3(1):42–56.
- Douglas, J. (1957). A note on the alternating direction implicit method for the numerical solution of heat flow problems. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 8:409–412.
- Douglas, J. (1962). Alternating direction methods for three space variables. *Numerische Mathematik*, 4:41–63.
- Douglas, J. und Rachford, H. H. (1956). On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables. *Transactions of the American Mathematical Society*, 82:421–439.
- Duynerkerke, P. G. (1988). Application of the $E - \epsilon$ turbulence closure to the neutral and stable atmospheric boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 45:865–880.

- Eichhorn, J. (1989). *Entwicklung und Anwendung eines dreidimensionalen mikroskaligen Stadtklima-Modells*. Dissertationsschrift, Univ. Mainz.
- Fanger, P. O. (1982). *Thermal Comfort. Analysis and Application in Environment Engineering*. McGraw Hill Book Company, New York.
- Frenzen, G., Heimann, D., und Wamser, M. (1987). Dokumentation des regionalen Klimamodells RKM auf der Basis von FITNAH. *DLR-Mitteilungen* 87-07.
- Griebel, M., Dornseifer, T., und Neunhoeffter, T. (1995). *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik*. Scientific Computing. Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden.
- Gross, G. (1991). Anwendungsmöglichkeiten mesoskaliger Simulationsmodelle dargestellt am Beispiel Darmstadt: Teil 1: Wind- und Temperaturfelder. *Meteorol. Rundschau*, 43:97–112.
- Groß, G. (1994). ASMUS- Ein numerisches Modell zur Berechnung der Strömung und der Schadstoffverteilung im Bereich einzelner Gebäude. Teil 1: Das Strömungsfeld. *Meteorologische Zeitschrift (n.F.)*, 3:267–274.
- Groß, G. (1997). ASMUS- Ein numerisches Modell zur Berechnung der Strömung und der Schadstoffverteilung im Bereich einzelner Gebäude. Teil 2: Schadstoffausbreitung und Anwendung. *Meteorologische Zeitschrift (n.F.)*, 6:130–136.
- Gutman, D. und Torrance, K. E. (1975). Response of the urban boundary layer to heat addition and surface roughness. *Boundary Layer Meteorology*, 9:217–233.
- Heimann, D. (1994). REWIH3D- Modell- und Programmbeschreibung. *DLR, Institut für Physik der Atmosphäre, Report No. 3*.
- Hillel, D. (1980). *Fundamentals of soil physics*. Academic Press, New York.
- Houghton, J. T. (1977). *The physics of the atmosphere*. Cambridge University Press, New York.
- Idso, S., Jackson, R., Kimball, B., und Nakagama, F. (1975). The dependence of bare soil albedo on soil water content. *J. Appl. Met.*, 14:109–113.
- Inclán, M. G., Forkel, R., Dlugi, R., und Stull, R. B. (1996). Application of transient turbulent theory to study interactions between the atmospheric boundary layer and forest canopies. *Boundary Layer Meteorology*, 79:315–344.
- Jendritzky, G. (1993). Das Klima als Gesundheitsfaktor. *Geographische Rundschau*, 2:107–114.
- Johnson, G. T. und Hunter, L. J. (1995). A numerical study of dispersion of passive scalars in city canyons. *Boundary Layer Meteorology*, 75:235–262.
- Jones, H. G. (1992). *Plants and microclimate*. Cambridge University Press, New York.
- Jongen, T. und Marx, Y. P. (1997). Design of an unconditionally stable, positive scheme for the $k-\epsilon$ and two-layer turbulence models. *Computer and Fluids*, 26:469–487.
- Kerschgens, M. et al. (1994). *WiTraK Windfeld-, Transport- und Klimatologie Programm*. Institut für Geophysik und Meteorologie, Universität zu Köln.

- Kuchling, H. (1991). *Taschenbuch der Physik*. Fachbuchverlag Leipzig- Köln, Leipzig.
- Kuhn, P. M. (1963). Radiometersonde observations of infrared flux emissivity of water vapour. *J. Appl. Meteorol.*, 2:368–378.
- Launder, B. und Spalding, D. B. (1974). The numerical computation of turbulent flow. *Computer Methods in Appl. Mechanics and Engineering*, 3:269–289.
- Liljequist, G. H. (1979). *Meteorologie*. Dept. of Meteorology, University of Uppsala, Uppsala.
- Liu, J. et al. (1996). $E - \epsilon$ modelling of turbulent airflow downwind of a model forest edge. *Boundary Layer Meteorology*, 77:21–44.
- Mellor, G. und Yamada, T. (1974). A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers. *Journal for Atmospheric Science*, 31:1791–1806.
- Mellor, G. und Yamada, T. (1982). Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Rev. Geophys.*, 20:851–875.
- Mihailović, A. und Rajković, A. (1994). Impact of differently designed evaporation schemes on variability of Bowen ratio and ground temperature in land-air parameterization modeling. *Meteorologische Zeitschrift (n.F.)*, 3:312–318.
- Mix, W., Goldberg, V., und Bernhardt, K.-H. (1994). Numerical experiments with different approaches for boundary layer modelling under large-area forest canopy conditions. *Meteorologische Zeitschrift (n.F.)*, 3:187–192.
- Mohammadi, B. (1992). Complex turbulent flows computation with a two layer approach. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 15:747–771.
- Monin, A. und Obukhov, A. M. (1954). Basic laws of turbulent mixing in the ground layer of the atmosphere. *Tr. Geopiz. Inst. Akad. Nauk.*, 24:163–187.
- Naot, O. und Mahrer, Y. (1989). Modelling microclimate environments: A verification study. *Boundary Layer Meteorology*, 46:333–354.
- Oke, T. R. (1987). *Boundary Layer Climates*. Methuen, London.
- Paltridge, G. W. und Platt, C. M. R. (1976). *Radiative processes in Meteorology and Climatology*. Elsevier, New York.
- Paterson, D. A. und Apelt, C. (1989). Simulation of wind flows around three-dimensional buildings. *Building and Environment*, 24:39–50.
- Patrinos, A. und Kistler, A. (1977). A numerical study of the Chicago lake breeze. *Boundary Layer Meteorology*, 12:93–123.
- Peaceman, D. und Rachford, H. (1955). The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations. *J. Society of Indust. Applied Mathematics*, 3(1):28–41.
- Pielke, R. A. (1984). *Mesoscale Meteorological Modelling*. Academic Press, New York.
- Plate, E. J. (1982). Windkanalmodellierungen von Ausbreitungsvorgängen in Stadtgebieten. In: *Abgasbelastungen durch den Kraftfahrzeugverkehr*. Verlag TÜV Rheinland, Köln.

- Potchter, O., Lonke, A., und Bitan, A. (1998). The effects of tall trees on climatic parameters at the pedestrian level in mediterranean climatic zones- A case study of Tel-Aviv. In: Alcofordao, M. et al. (Hrsg.), *Climate and Environmental Change, Pre-Regional Conference Meeting of the Commission on Climatology*, Lissabon. International Geographical Union.
- Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S., und Vetterling, W. T. (1990). *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, New York.
- Roache, P. (1984). *Computational fluid dynamics*. Academic Press, New York.
- Rodi, W. (1994). Current trends in turbulence modelling. In: Fezoni, L., Periaux, J., und Hunt, J. (Hrsg.), *Computational Aeronautical Fluid Dynamics*, Seiten 225–245. Oxford: Clarendon Press.
- Rökle, R. (1990). *Bestimmung der Strömungsverhältnisse im Bereich komplexer Bauwerksstrukturen*. Dissertationsschrift, Univ. Darmstadt.
- Rotenberg, E., Mamane, Y., und Joseph, J. H. (1998). Longwave radiation regime in vegetation-parameterisations for climate research. *Environmental Modelling and Software*, 13:361–371.
- Schilling, V. K. (1990). A parameterization for modelling the meteorological effects of tall forests- A case study of a large clearing. *Boundary Layer Meteorology*, 55:283–304.
- Schlünzen, H. (1988). Das mesoskalige Transport- und Strömungsmodell METRAS. *Hamburger Geophysikalische Einzelschriften*.
- Schumann, U. und Sweet, R. A. (1976). A direct method for the solution of the Poisson's Equation with Neumann boundary conditions on a staggered grid of arbitrary size. *J. Comp. Phys.*, 20.
- Siebert, J., Sievers, U., und Zdunkowski, W. (1992). A one-dimensional simulation of the interaction between land surface processes and the atmosphere. *Boundary Layer Meteorology*, 59:1–34.
- Sievers, U. (1995). Verallgemeinerung der Stromfunktionsmethode auf drei Dimensionen. *Meteorologische Zeitschrift (n.F.)*, 4:3–15.
- Sievers, U., Mayer, I., und Zdunkowski, W. G. (1987). Numerische Simulation des urbanen Klimas mit einem zweidimensionalen Modell. Teil 1: Die Modellgleichungen und deren numerische Behandlung. *Meteorologische Rundschau*, 40:40–52.
- Smolarkiewicz, P. K. (1984). A fully multidimensional positiv definite advection transport algorithm with small implicit diffusion. *J. Comp. Phys.*, 54:325–362.
- Staniforth, A. und Cote, J. (1991). Semilagrangian integration schemes for atmospheric models- A review. *Monthly Weather Review*, 119.
- Stull, R. B. (1988). *An Introduction into Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Press, Utrecht, Boston.
- Stull, R. B. (1993). Review of nonlocal mixing in turbulent atmosphere: Transilient Turbulence Theory. *Boundary Layer Meteorology*, 62:21–96.

- Taesler, R. und Anderson, C. (1984). A method for solar radiation computations using routine routine meteorological observations. *Energy and Buildings*, 7:341–352.
- Terjung, W. H. und O'Rourke, P. A. (1980). Simulating the causal elements of the urban heat islands. *Boundary Layer Meteorology*, 19:93–118.
- Tjernström, M. (1989). Some tests with a surface energy balance scheme including a bulk parameterization for vegetation in a mesoscale model. *Boundary Layer Meteorology*, 48:33–68.
- VDI (1996). Richtlinie VDI 3787: Methoden zur human-biometeorologischen Bewertung von Klima und Lufthygiene für die Stadt- und Regionalplanung Teil 1: Klima. Technischer Report, Verein deutscher Ingenieure.
- VDI Kommission Reinhaltung der Luft (Hrsg.) (1988). *Stadtklima und Luftreinhaltung: Ein wissenschaftliches Handbuch für die Praxis der Umweltplanung*. Springer Verlag.
- Wang, H. und Takle, E. (1997). Reply to comments by J.D. Wilson and C.J. Mooney on 'A numerical simulation of boundary-layer flows near shelterbelts'. *Boundary Layer Meteorology*, 85:151–159.
- Wang, H. und Takle, E. S. (1995). A numerical simulation of boundary-layer flows near shelterbelts. *Boundary Layer Meteorology*, 75:141–173.
- Watanabe, T. (1994). Bulk parameterization for a vegetated surface and its application to a simulation of nocturnal drainage flow. *Boundary Layer Meteorology*, 70:13–35.
- Wilson, J. D. und Mooney, C. J. (1997). Comments on 'A numerical simulation of boundary-layer flows near shelterbelts' by H.Wang and E. Takle. *Boundary Layer Meteorology*, 85:137–149.
- Xu, D. und Taylor, P. A. (1997). An $E - \epsilon - \ell$ turbulence closure scheme for planetary boundary-layer models: The neutrally stratified case. *Boundary Layer Meteorology*, 85:247–266.
- Yaakov, Y., Potchter, O., und Bitan, A. (1998). The influence of a small urban park on climatical parameters: A case Study of Gan-Meir, Tel-Aviv. In: Alcofordao, M. et al. (Hrsg.), *Climate and Environmental Change, Pre-Regional Conference Meeting of the Commission on Climatology*, Lissabon. International Geographical Union.
- Yamada, T. (1982). A numerical study of turbulent airflow in and above a forest canopy. *J. Meteorolog. Soc. Japan*, 60:439–454.

Anhang

Berechnung der Gittergrößen des Hilfgitters

u-Zelle:

$$\begin{aligned}\Delta_{i,j,k}^x(u) &= 0.5 (\Delta x_i + \Delta x_{i-1}) \\ \Delta_{i,j,k}^{x-}(u) &= \Delta x_{i-1} \\ \Delta_{i,j,k}^{x+}(u) &= \Delta x_i \\ \\ \Delta_{i,j,k}^y(u) &= \Delta y_j \\ \Delta_{i,j,k}^{y-}(u) &= 0.5 (\delta_{i,j-1,k}^x \Delta y_{j-1} + \Delta y_j) \\ \Delta_{i,j,k}^{y+}(u) &= 0.5 (\Delta y_j + \delta_{i,j+1,k}^x \Delta y_{j+1}) \\ \\ \Delta_{i,j,k}^z(u) &= \Delta z_k \\ \Delta_{i,j,k}^{z-}(u) &= 0.5 (\delta_{i,j,k-1}^x \Delta z_{k-1} + \Delta z_k) \\ \Delta_{i,j,k}^{z+}(u) &= 0.5 (\Delta z_k + \delta_{i,j,k+1}^x \Delta z_{k+1})\end{aligned}$$

v-Zelle:

$$\begin{aligned}\Delta_{i,j,k}^x(v) &= \Delta x_i \\ \Delta_{i,j,k}^{x\pm}(v) &= 0.5 (\Delta x_i + \delta_{i\pm 1}^y \Delta x_{i\pm 1}) \\ \\ \Delta_{i,j,k}^y(v) &= 0.5 (\Delta y_j + \Delta y_{j-1}) \\ \Delta_{i,j,k}^{y-}(v) &= \Delta y_{j-1} \\ \Delta_{i,j,k}^{y+}(v) &= \Delta y_j \\ \\ \Delta_{i,j,k}^z(v) &= \Delta z_k \\ \Delta_{i,j,k}^{z\pm}(v) &= 0.5 (\Delta z_k + \delta_{k\pm 1}^y \Delta z_{k\pm 1})\end{aligned}$$

w-Zelle:

$$\begin{aligned}\Delta_{i,j,k}^x(w) &= \Delta x_i \\ \Delta_{i,j,k}^{x\pm}(w) &= 0.5 (\Delta x_i + \delta_{i\pm 1}^z \Delta x_{i\pm 1}) \\ \\ \Delta_{i,j,k}^y(w) &= \Delta y_j \\ \Delta_{i,j,k}^{y\pm}(w) &= 0.5 (\Delta y_j + \delta_{j\pm 1}^z \Delta y_{j\pm 1}) \\ \\ \Delta_{i,j,k}^z(w) &= 0.5 (\Delta z_k + \Delta z_{k-1}) \\ \Delta_{i,j,k}^{z-}(w) &= \Delta z_{k-1} \\ \Delta_{i,j,k}^{z+}(w) &= \Delta z_k\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\chi\text{-Zelle:} \quad & \Delta_{i,j,k}^x(\chi) = \Delta x_i \\
& \Delta_{i,j,k}^{x-}(\chi) = 0.5 (\delta_{i,j,k}^x \Delta x_{i-1} + \Delta x_i) \\
& \Delta_{i,j,k}^{x+}(\chi) = 0.5 (\Delta x_i + \delta_{i+1,j,k}^x \Delta x_{i+1}) \\
& \Delta_{i,j,k}^y(\chi) = \Delta y_j \\
& \Delta_{i,j,k}^{y-}(\chi) = 0.5 (\delta_{i,j,k}^y \Delta y_{j-1} + \Delta y_j) \\
& \Delta_{i,j,k}^{y+}(\chi) = 0.5 (\Delta y_j + \delta_{i,j+1,k}^y \Delta y_{j+1}) \\
& \Delta_{i,j,k}^z(\chi) = \Delta z_k \\
& \Delta_{i,j,k}^{z-}(\chi) = 0.5 (\delta_{i,j,k}^z \Delta z_{k-1} + \Delta z_k) \\
& \Delta_{i,j,k}^{z+}(\chi) = 0.5 (\Delta z_k + \delta_{i,j,k+1}^z \Delta z_{k+1})
\end{aligned}$$

Berechnung der Austauschkoeffizienten

u-Austausch

$$\begin{aligned}
K_{i,j,k}^{x-}(u_{i,j,k}) &= K_{i-1,j,k} \\
K_{i,j,k}^{x+}(u_{i,j,k}) &= K_{i,j,k} \\
K_{i,j,k}^{y-}(u_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j)} \\
&\quad \times [(K_{i-1,j-1,k} \Delta y_j + K_{i-1,j,k} \Delta y_{j-1}) \Delta x_i \\
&\quad + (K_{i,j-1,k} \Delta y_j + K_{i,j,k} \Delta y_{j-1}) \Delta x_{i-1}] \\
K_{i,j,k}^{y+}(u_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta y_j + \Delta y_{j+1})} \\
&\quad \times [(K_{i-1,j,k} \Delta y_{j+1} + K_{i-1,j+1,k} \Delta y_j) \Delta x_i \\
&\quad + (K_{i,j,k} \Delta y_{j+1} + K_{i,j+1,k} \Delta y_j) \Delta x_{i-1}] \\
K_{i,j,k}^{z-}(u_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta z_{k-1} + \Delta z_k)} \\
&\quad \times [(K_{i-1,j,k-1} \Delta z_k + K_{i-1,j,k} \Delta z_{k-1}) \Delta x_i \\
&\quad + (K_{i,j,k-1} \Delta z_k + K_{i,j,k} \Delta z_{k-1}) \Delta x_{i-1}] \\
K_{i,j,k}^{z+}(u_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta z_k + \Delta z_{k+1})} \\
&\quad \times [(K_{i-1,j,k} \Delta z_{k+1} + K_{i-1,j,k+1} \Delta z_k) \Delta x_i \\
&\quad + (K_{i,j,k} \Delta z_{k+1} + K_{i,j,k+1} \Delta z_k) \Delta x_{i-1}]
\end{aligned}$$

v-Austausch

$$\begin{aligned}
K_{i,j,k}^{x-}(v_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta y_j + \Delta y_{j-1})} \\
&\quad \times [(K_{i-1,j,k}\Delta y_{j-1} + K_{i-1,j-1,k}\Delta y_j)\Delta x_i \\
&\quad + (K_{i,j,k}\Delta y_{j-1} + K_{i,j-1,k}\Delta y_j)\Delta x_{i-1}] \\
K_{i,j,k}^{x+}(v_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})(\Delta y_j + \Delta y_{j-1})} \\
&\quad \times [(K_{i,j,k}\Delta y_{j-1} + K_{i,j-1,k}\Delta y_j)\Delta x_{i+1} \\
&\quad + (K_{i+1,j,k}\Delta y_{j-1} + K_{i+1,j-1,k}\Delta y_j)\Delta x_i] \\
K_{i,j,k}^{y-}(v_{i,j,k}) &= K_{i,j-1,k} \\
K_{i,j,k}^{y+}(v_{i,j,k}) &= K_{i,j,k} \\
K_{i,j,k}^{z-}(v_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j)(\Delta z_{k-1} + \Delta z_k)} \\
&\quad \times [(K_{i,j-1,k-1}\Delta z_k + K_{i,j-1,k}\Delta z_{k-1})\Delta y_j \\
&\quad + (K_{i,j,k-1}\Delta z_k + K_{i,j,k}\Delta z_{k-1})\Delta y_{j-1}] \\
K_{i,j,k}^{z+}(v_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j)(\Delta z_k + \Delta z_{k+1})} \\
&\quad \times [(K_{i,j-1,k}\Delta z_{k+1} + K_{i,j-1,k+1}\Delta z_k)\Delta y_j \\
&\quad + (K_{i,j,k}\Delta z_{k+1} + K_{i,j,k+1}\Delta z_k)\Delta y_{j-1}]
\end{aligned}$$

w-Austausch

$$\begin{aligned}
K_{i,j,k}^{x-}(w_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta z_k + \Delta z_{k-1})} \\
&\quad \times [(K_{i-1,j,k-1}\Delta z_k + K_{i-1,j,k}\Delta z_{k-1})\Delta x_i \\
&\quad + (K_{i,j,k-1}\Delta z_k + K_{i,j,k}\Delta z_{k-1})\Delta x_{i-1}] \\
K_{i,j,k}^{x+}(w_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})(\Delta z_k + \Delta z_{k-1})} \\
&\quad \times [(K_{i,j,k-1}\Delta z_k + K_{i,j,k}\Delta z_{k-1})\Delta x_{i+1} \\
&\quad + (K_{i+1,j,k-1}\Delta z_k + K_{i+1,j,k}\Delta z_{k-1})\Delta x_i] \\
K_{i,j,k}^{y-}(w_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j)(\Delta z_k + \Delta z_{k-1})} \\
&\quad \times [(K_{i,j-1,k-1}\Delta z_k + K_{i,j-1,k}\Delta z_{k-1})\Delta y_j \\
&\quad + (K_{i,j,k-1}\Delta z_k + K_{i,j,k}\Delta z_{k-1})\Delta y_{j-1}] \\
K_{i,j,k}^{y+}(w_{i,j,k}) &= \frac{1}{(\Delta y_j + \Delta y_{j+1})(\Delta z_k + \Delta z_{k-1})} \\
&\quad \times [(K_{i,j,k-1}\Delta z_k + K_{i,j,k}\Delta z_{k-1})\Delta y_{j+1} \\
&\quad + (K_{i,j+1,k-1}\Delta z_k + K_{i,j+1,k}\Delta z_{k-1})\Delta y_j] \\
K_{i,j,k}^{z-}(w_{i,j,k}) &= K_{i,j,k-1} \\
K_{i,j,k}^{z+}(w_{i,j,k}) &= K_{i,j,k}
\end{aligned}$$

χ -Austausch

$$\begin{aligned}
K_{i,j,k}^{x-}(\chi_{i,j,k}) &= 0.5 (K_{i-1,j,k} + K_{i,j,k}) \\
K_{i,j,k}^{x+}(\chi_{i,j,k}) &= 0.5 (K_{i,j,k} + K_{i+1,j,k}) \\
K_{i,j,k}^{y-}(\chi_{i,j,k}) &= 0.5 (K_{i,j-1,k} + K_{i,j,k}) \\
K_{i,j,k}^{y+}(\chi_{i,j,k}) &= 0.5 (K_{i,j,k} + K_{i,j+1,k}) \\
K_{i,j,k}^{z-}(\chi_{i,j,k}) &= 0.5 (K_{i,j,k-1} + K_{i,j,k}) \\
K_{i,j,k}^{z+}(\chi_{i,j,k}) &= 0.5 (K_{i,j,k} + K_{i,j,k+1})
\end{aligned}$$

Berechnung der Transportgeschwindigkeiten**u-Transport**

$$\begin{aligned}
u_{-}(u)_{i,j,k} &= 0.5 (u_{i-1,j,k} + u_{i,j,k}) \\
u_{+}(u)_{i,j,k} &= 0.5 (u_{i,j,k} + u_{i+1,j,k}) \\
v_{-}(u)_{i,j,k} &= \frac{\Delta x_i v_{i-1,j,k} + \Delta x_{i-1} v_{i,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \\
v_{+}(u)_{i,j,k} &= \frac{\Delta x_i v_{i-1,j+1,k} + \Delta x_{i-1} v_{i,j+1,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \\
w_{-}(u)_{i,j,k} &= \frac{\Delta x_i w_{i-1,j,k} + \Delta x_{i-1} w_{i,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \\
w_{+}(u)_{i,j,k} &= \frac{\Delta x_i w_{i-1,j,k+1} + \Delta x_{i-1} w_{i,j,k+1}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}
\end{aligned}$$

v-Transport

$$\begin{aligned}
u_{-}(v)_{i,j,k} &= \frac{\Delta y_j u_{i,j-1,k} + \Delta y_{j-1} u_{i,j,k}}{\Delta y_j + \Delta y_{j-1}} \\
u_{+}(v)_{i,j,k} &= \frac{\Delta y_j u_{i+1,j-1,k} + \Delta y_{j-1} u_{i+1,j,k}}{\Delta y_j + \Delta y_{j-1}} \\
v_{-}(v)_{i,j,k} &= 0.5 (v_{i,j-1,k} + v_{i,j,k}) \\
v_{+}(v)_{i,j,k} &= 0.5 (v_{i,j,k} + v_{i,j+1,k}) \\
w_{-}(v)_{i,j,k} &= \frac{\Delta y_j w_{i,j-1,k} + \Delta y_{j-1} w_{i,j,k}}{\Delta y_j + \Delta y_{j-1}} \\
w_{+}(v)_{i,j,k} &= \frac{\Delta y_j w_{i,j-1,k+1} + \Delta y_{j-1} w_{i,j,k+1}}{\Delta y_j + \Delta y_{j-1}}
\end{aligned}$$

w-Transport

$$\begin{aligned}
u_{-}(w)_{i,j,k} &= \frac{\Delta z_k u_{i,j,k-1} + \Delta z_{k-1} u_{i,j,k}}{\Delta z_k + \Delta z_{k-1}} \\
u_{+}(w)_{i,j,k} &= \frac{\Delta z_k u_{i+1,j,k-1} + \Delta z_{k-1} u_{i+1,j,k}}{\Delta z_k + \Delta z_{k-1}} \\
v_{-}(w)_{i,j,k} &= \frac{\Delta z_k v_{i,j,k-1} + \Delta z_{k-1} v_{i,j,k}}{\Delta z_k + \Delta z_{k-1}} \\
v_{+}(w)_{i,j,k} &= \frac{\Delta z_k v_{i,j+1,k-1} + \Delta z_{k-1} v_{i,j+1,k}}{\Delta z_k + \Delta z_{k-1}} \\
w_{-}(w)_{i,j,k} &= 0.5(w_{i,j,k-1} + w_{i,j,k}) \\
w_{+}(w)_{i,j,k} &= 0.5(w_{i,j,k} + w_{i,j,k+1})
\end{aligned}$$

 χ -Transport

$$\begin{aligned}
u_{-}(\chi)_{i,j,k} &= u_{i,j,k} \\
u_{+}(\chi)_{i,j,k} &= u_{i+1,j,k} \\
v_{-}(\chi)_{i,j,k} &= v_{i,j,k} \\
v_{+}(\chi)_{i,j,k} &= v_{i,j+1,k} \\
w_{-}(\chi)_{i,j,k} &= w_{i,j,k} \\
w_{+}(\chi)_{i,j,k} &= w_{i,j,k+1}
\end{aligned}$$

