

Das kleinskalige Strömungsmodell MUKLIMO_3

Teil 2: Thermodynamische Erweiterungen

von Uwe Sievers



Berichte des Deutschen Wetterdienstes

Das kleinskalige Strömungsmodell MUKLIMO_3

Teil 2: Thermodynamische Erweiterungen

von Uwe Sievers

Zitationsvorschlag:

Sievers, Uwe (Hrsg.: Deutscher Wetterdienst): Das kleinskalige Strömungsmodell MUKLIMO_3. Teil 2: Thermodynamische Erweiterungen. - Offenbach am Main: Selbstverlag des Deutschen Wetterdienstes, 2016.
(Berichte des Deutschen Wetterdienstes ; 248)

ISSN der Online-Ausgabe: 2194-5969

ISBN: 978-3-88148-490-9

Nutzungsbedingungen:

Dieses Dokument steht unter folgender Creative Commons-Lizenz:



Sie dürfen das Werk bzw. den Inhalt unter folgenden Bedingungen vervielfältigen, verbreiten und öffentlich zugänglich machen: Sie müssen den Namen des Autors/Rechteinhabers in der von ihm festgelegten Weise nennen. Dieses Werk bzw. dieser Inhalt darf nicht für kommerzielle Zwecke verwendet werden und es darf nicht bearbeitet, abgewandelt oder in anderer Weise verändert werden. Mit der Verwendung dieses Dokumentes erkennen Sie die Nutzungsbedingungen an.

Die in den DWD-Berichten veröffentlichten Texte werden allein von ihren jeweiligen Autoren verantwortet; die darin zum Ausdruck gebrachte Meinung entspricht nicht notwendig der Meinung des Herausgebers (Deutscher Wetterdienst).

Fachliche Durchsicht: Dipl.-Met. Marita Roos

Herausgeber und Verlag:

Deutscher Wetterdienst
Fachinformationsstelle und
Deutsche Meteorologische Bibliothek
Frankfurter Straße 135
63067 Offenbach
bibliothek@dwd.de
www.dwd.de

Korrespondenzadresse:

Deutscher Wetterdienst
Zentrales Klimabüro
Frankfurter Str. 135
63067 Offenbach
klima.offenbach@dwd.de

Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht beschreibt die *Thermodynamikversion* des kleinskaligen atmosphärischen Strömungsmodells MUKLIMO_3, deren Anwendungsschwerpunkt in der Simulation von beispielhaften Tagesgängen der atmosphärischen Variablen für Modellgebiete mit städtischer Bebauung liegt. Ihre Erweiterungen gegenüber der auf das reine Strömungsgeschehen beschränkten *Basisversion* des Modells (SIEVERS, 2012) bestehen zum einen in der Hinzunahme von prognostischen Gleichungen für den Wärme- und Feuchtehaushalt der Atmosphäre. Zum anderen tritt zu den atmosphärischen Gleichungen ein lokal eindimensionales *Erdbodenmodell* hinzu. Es beinhaltet Bilanzgleichungen der Wärme sowie des volumetrischen Wassergehalts im Boden und ist über ein Modell des niedrigen *Bodenbewuchses* an die Atmosphäre gekoppelt. Von der Basisversion übernommen wird die Stromfunktions-Vorticity-Methode zur Integration der atmosphärischen Bewegungsgleichung. Die Ansätze zur Behandlung von Bebauung und Baumbestand werden ebenfalls übernommen, dabei aber durch Oberflächenbilanzen für Wärme, Feuchte und Strahlung ergänzt und an den atmosphärischen Wärme- und Feuchtehaushalt gekoppelt.

Eingehend erläutert wird die Einbeziehung der unaufgelösten Bebauung in die atmosphärischen Gleichungen. Hierfür werden die Gitterzellen des dreidimensionalen Modellgebiets mit zusätzlichen Kenngrößen für den Volumenanteil und die Wandflächen der in ihnen enthaltenen Gebäude versehen. Zudem werden die Modellgleichungen der Atmosphäre über ein gedachtes Ensemble variierender Anordnungen der Einzelgebäude auf den Flächen der unaufgelösten Bebauung, gemittelt. Die dabei entstehenden Korrelationsprodukte der gebäudebedingten Fluktuationen der thermodynamischen Variablen beinhalten den mittleren Einfluss der Bebauung auf die atmosphärischen Zustandsgrößen. Für sie werden geeignete, vom jeweiligen Bebauungstyp abhängige Parametrisierungen entwickelt.

Neben der Vorstellung und Diskussion der Modellgleichungen, ihrer Parametrisierungen und numerischen Behandlung enthält der Bericht Hinweise zur Handhabung des Modells. Dies betrifft die Modellierung der Orographie und der Flächennutzung des Modellgebiets ebenso wie die Gestaltung von Bebauung und Bodenbewuchs. Ebenfalls erläutert wird der Aufbau des numerischen Gitters, die Vorgabe der atmosphärischen Anfangs- und Randbedingungen, die Gestaltung des Simulationsablaufs sowie die Steuerung der Resultatsausgabe.

Abstract

The small-scale atmospheric flow model MUKLIMO_3

Part 2: Thermodynamic extensions

The present report describes the thermodynamic version of the small-scale atmospheric flow model MUKLIMO_3, whose main purpose is the simulation of representative diurnal cycles of the atmospheric variables within urban areas. Compared to the basic version of the model (SIEVERS, 2012), which is restricted to the simulation of flow fields, the thermodynamic extensions consist mainly in the addition of budget equations for *heat* and *moisture* within the atmosphere. Furthermore, a local, one-dimensional *soil* model with prognostic equations for heat and volumetric water content within the soil is coupled to the atmosphere by means of an interface model representing low vegetation. The stream-function vorticity method for the integration of the atmospheric flow equation is adopted from the basic model version as well as the numerical treatment of unresolved built-up area and forests, but the latter ones have been expanded and coupled to the atmospheric heat and moisture budgets by balance equations for heat, radiation and water vapor at their surfaces.

The inclusion of the unresolved treatment of built-up areas into the atmospheric budget equations is discussed in detail. It is achieved by characterizing them with the volume fraction and the wall area of the buildings within the grid-cell. Additionally, the budget equations of the atmosphere are averaged over a virtual ensemble of varying arrangements of individual buildings representing the given unresolved built-up areas. For the resulting correlation products of building-induced fluctuations of the thermodynamic variables, adequate parameterizations are developed, depending on the characteristics of the built-up areas.

Additionally to the presentation and discussion of the model equations, their numerical treatment, and parameterizations, the report gives advice for the practical use of the model. This includes the modelling of land use and orography as well as the specification of built-up areas and forests, the spatial resolution of the model region, initial and boundary conditions of the simulation and the output of results.

Inhalt

Zusammenfassung	3
Abstract	4
Inhalt	5
Symbolliste	7
1 Einleitung	13
2 Modellierung	15
2.1 Modellgitter	15
2.2 Geländehöhe	15
2.3 Flächennutzung	19
2.4 Aufgelöste Bebauung	24
3 Atmosphärische Bilanzgleichungen	25
3.1 Strömungsberechnung	25
3.2 Wärmehaushalt der Atmosphäre	39
3.3 Wasserhaushalt	46
3.4 Randbedingung der atmosphärischen Bilanzgleichungen	47
3.5 Wärmetausch mit materiellen Oberflächen	51
3.6 Diffusionskoeffizienten	60
4 Strahlung	63
4.1 Einfallende Strahlung	63
4.2 Strahlung auf geneigte Flächen	66
4.3 Kurzwellige Strahlung im Bereich von Bebauung	67
4.4 Kurzwellige Strahlung im Wald	73
4.5 Langwellige Strahlung	77
5 Bodenmodell	79
5.1 Allgemeines	79
5.2 Versiegelter Boden	81
5.3 Unversiegelter Boden	85
5.4 Niedriger Bodenbewuchs	99
5.5 Dachbegrünung	107
6 Ablauf und Gestaltung von Modellsimulationen	109
6.1 Eingabedatei	109
6.2 Maximale Feldabmessungen	118
6.3 Eindimensionales Antriebsmodell	120
6.4 Dreidimensionale Simulation	121
Anhang	124
A Darcy-Gesetz	124

B Diffusionsflussdichte der trockenen Luft im Boden	125
C Diffuse Strahlung auf geneigte Flächen	127
D Advektionsschema	129
D.1 Vorbemerkung	129
D.2 Donor-Cell-Verfahren	129
D.3 Time-Splitting	130
D.4 Modifiziertes Schema	132
E Standard-Eingabedatei	135
Literatur	149
Abbildungsverzeichnis	151
Tabellenverzeichnis	151
Hinweis	151

Symbolliste

Die Liste erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Bezeichnungen, die im Text nur lokal benutzt werden und dort auch erklärt sind, können fehlen.

1. Kleine Buchstaben:

c_d	Drag-Koeffizient in den Reibungsansätzen für die Blätter eines Baumbestands sowie unaufgelöste Bebauung, dimensionslos, Wert $c_d = 0.2$
c_p	spezifische Wärme der trockenen Luft, Wert $c_p = 1\,005\text{ J kg}^{-1}\text{ K}^{-1}$
c_{ca}, c_{fc}, c_{gc}	Transferkoeffizienten in den Transportgesetzen des Bestandsmodells, dimensionslos
d	Verdrängungshöhe des Bodenbewuchses
d_f	(mit „f“ für „foliage“): Blattflächendichte des Baumbestands entsprechend der einseitig gerechneten Blattfläche pro atmosphärischem Volumen, Einheit $\text{m}^2\text{ m}^{-3}$ bzw. m^{-1}
d_r	Dachflächendichte der unaufgelösten Bebauung, d. h. in einem vertikalen Niveau mit Dächern befindliche Dachflächen im Verhältnis zur Grundfläche, dimensionslos
d_w	Wandflächendichte der unaufgelösten Bebauung, Einheit $\text{m}^2\text{ m}^{-3}$ bzw. m^{-1}
$\vec{e}_{1/2/3}$	kartesische Einheitsvektoren
f	Coriolis-Parameter, Einheit s^{-1}
f_2	spezifische freie Energie des Wassers mit $f_2 = f_2(T)$, Einheit J kg^{-1}
\vec{g}, g	Schwerkraft, Betrag der Schwerkraft, Wert $g = 9.8065\text{ m s}^{-2}$
h_0, h_0^*	Geländehöhe, absolut und relativ zur Basishöhe des Modellgebiets
h_{basis}	Basishöhe des Modellgebiets, d. h. zur relativen Geländehöhe Null gehörige absolute Geländehöhe
$h_{\text{geb}}, h_{\text{tree}}, h_{\text{stem}}$	Gebäudehöhe, Baumhöhe, Stammhöhe der Bäume
h_{hydr}	hydraulisches Potential des Bodenwassers, Einheit m
h_1, h_2	spezifische Enthalpien von dampfförmigem und flüssigem Wasser (Einheit J kg^{-1})
i, j, k	Gitterindizes des in Zellen unterteilten Modellgebiets korrespondierend zu den Raumrichtungen x, y, z
$l_{21}, l_{21;b}$	Verdunstungswärme des Wassers bzw. des Bodenwassers, letztere unter Einschluss der Benetzungswärme W der Porenwände
m^0, m^1	Konzentrationen der atmosphärischen Partialmassen „trockene Luft“ und „Wasserdampf“
m, l, n	Anzahl der Gitterabschnitte in x -, y - und z -Richtung
n_x, n_y, n_z	Anzahl der Gitterabschnitte in x -, y - und z -Richtung, gleichbedeutend mit m, l, n
$n_{0;ij}, n_{0;i\pm 1/2j}, n_{0;ij\pm 1/2}$	Geländehöhenindizes (unter Berücksichtigung von Blöcken der aufgelösten Bebauung) mit Bezug auf die Mitte bzw. die Seitenränder des horizontalen Flächenelements F_{ij}
$n_{0;ij}^t, n_{0;i\pm 1/2j}^t, n_{0;ij\pm 1/2}^t$	Geländehöhenindizes unter Ausschluss der aufgelösten Bebauung
\vec{n}_g	Normalenvektor der Bodengrenzfläche
p, p_0	Luftdruck, höhenabhängiger ($p_0 = p_0(z)$) Gleichgewichtsluftdruck Einheit Pa bzw. $\text{kg m}^{-1}\text{ s}^{-2}$
p^{21}, p_b^{21}	Gleichgewichtsdampfdruck des Wassers und des (an die Porenwände gebundenen) Bodenwassers

q^m, q^h, q^{vap}	Flächenquellstärken für den Impuls, Wärme und Wasserdampf
r_a, r_c, r_s, r_{gc}	Widerstandskoeffizienten in den Parametrisierungsansätzen für die Flussdichten im Bereich des niedrigen Bodenbewuchses
u, v, w	kartesische Komponenten der atmosphärischen Strömungsgeschwindigkeit, Einheit m s^{-1}
\vec{v}, \vec{v}_h	Geschwindigkeitsvektor, Horizontalkomponente des Geschwindigkeitsvektors
$\vec{v} \vec{v}$	Geschwindigkeitsdyade
v_{geb}	Volumendichte der unaufgelösten Bebauung, dimensionslos
v_{gr}	Begrünungsanteil der Dachflächen, dimensionslos
v_s	Versiegelungsgrad der Bodengrenzfläche, dimensionslos
x, y, z	kartesische Raumrichtungskordinaten des dreidimensionalen Modellgebiets
x_i, y_j, z_k	diskrete Mittelpunktskordinaten der Zellen des Modellgebiets
$x_{i\pm 1/2}, y_{j\pm 1/2}, z_{k\pm 1/2}, z_{b;k\pm 1/2}$	seitliche und vertikale Randkordinaten der Gitterzelle V_{ijk} , Schichtgrenzen im Boden
$z_b, z_{b;k}$	(nach unten gerichtete) Vertikalkoodinate des Bodenmodells, kontinuierlich und diskret

2. Große Buchstaben:

A_f, A_g, A_r, A_w	Albedowerte für unterschiedliche Oberflächen
E_g, E_w, E_r, E_f	Energiebilanzen an unterschiedlichen Oberflächen
$F_{ij}, F_{i\pm 1/2jk}, F_{i j\pm 1/2k}$	horizontales Flächenelement des numerischen Gitters, Seitenflächen der Gitterzelle V_{ijk}
$F_{\text{sw/lw}}^{\uparrow}, F_{\text{sw/lw}}^{\downarrow}$	auf- und abwärts gerichtete Flussdichten der kurz- und langwelligen Strahlung, Einheit W m^{-2}
$F_g^{\text{sw/lw}}, F_r^{\text{sw/lw}}, F_w^{\text{sw/lw}}$	kurz- oder langwellige Einstrahlung auf die Bodengrenzfläche sowie die Dächer und Wände der unaufgelösten Bebauung, Einheit W m^{-2}
$\vec{J}^q, \vec{J}^0, \vec{J}^1$	atmosphärische Flussdichten der sensiblen Wärme, der trockenen Luft und des Wasserdampfes
$\vec{J}_b^q, \vec{J}_b^0, \vec{J}_b^1, \vec{J}_b^2$	Flussdichten der sensiblen Wärme, der trockenen Luft, des Wasserdampfes und von Flüssigwasser im Boden
J	viskoser Spannungs- oder (molekularer) Reibungstensor
J^T	turbulenter Spannungs- oder Reynolds-Tensor
K_m, K_h	turbulente Diffusionskoeffizienten für den Impuls bzw. Wärme und atmosphärische Beimengungen, Einheit $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
L_{AI}	Blattflächenindex, d. h. einseitig gerechnete, über die Höhe des Bestands aufsummierte Blattfläche pro Grundfläche, dimensionslos
$L_b^{q;u}, L_b^{q;v}$	Temperaturleitfähigkeit (Thermodiffusivität) des unversiegelten und des versiegelten Bodens in $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
Q^m, Q^h, Q^{vap}	Volumenquellstärken für den Impuls, Wärme und Wasserdampf
R_0, R_1	Gaskonstanten der trockenen Luft und des Wasserdampfes mit den Werten $R_0 = 287.05 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ und $R_1 = 461.51 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
T, T_g, T_f	Lufttemperatur, Temperatur der Bodengrenzfläche und der Blattflächen, Einheit K
T_b^v, T_b^u	Temperatur in den unversiegelten bzw. versiegelten Bereichen des Bodens, Einheit K

V_{ijk} mit $\{ijk\}$ indizierte Zelle des numerischen Gitters, zugleich Volumen derselben
 W Benetzungswärme des Bodenwassers in J kg^{-1}

3. Griechische Buchstaben:

α^*, β^* dimensionslose Parameter in den Stabilitätsfunktionen $\varphi_{m/h}$ der Ansätze für die turbulenten Diffusionskoeffizienten $K_{m/h}$

$\beta(z_a, z_b), \beta_{kk'}, \beta_g$ in Zusammenhang mit der Strahlungsberechnung in unaufgelöster Bebauung: „kumulative“ Wandflächendichte (kontinuierlich und diskret), „Wandflächenzahl“

γ_{ad} trockenadiabatischer Temperaturgradient mit dem Wert $\gamma_{ad} = 0.0098 \text{ K m}^{-1}$

$\Delta_{ij}, \Delta_{i\pm 1/2 j}, \Delta_{i j\pm 1/2}$ Abweichungen der Geländehöhen von den zugeordneten „regulären“ Höhen des Modellgitters mit Bezug auf die Mitte bzw. die Seitenränder des horizontalen Flächenelements F_{ij}

η, η^1, η^2 volumetrischer Gesamtwassergehalt des Bodens, volumetrischer Bodenwassergehalt bei alleiniger Berücksichtigung der Dampfphase bzw. des Flüssigwassers, dimensionslos

η_s Sättigungswert des volumetrischen Bodenwassergehalts, entspricht der Porosität der Bodenmatrix, dimensionslos

$\vec{\zeta}, \zeta_{1/2/3}$ Vorticity-Vektor oder kurz: Vorticity (deutsch Wirbelvektor, Wirbelstärke oder Wirbelhaftigkeit), hier aus der mittleren Geschwindigkeit berechnet als $\vec{\zeta} = \nabla \times \vec{v}$, kartesische Komponenten von $\vec{\zeta}$, Einheit s^{-1}

$\vec{\zeta}^*$ mit der Winkelgeschwindigkeit $\vec{\Omega}$ der Erde als $\vec{\zeta}^* = \vec{\zeta} + 2\vec{\Omega}$ zusammengefasste Vorticity

$\vec{\tilde{\zeta}}, \tilde{\zeta}_{1/2/3}$ impulsbezogener Vorticity-Vektor mit $\vec{\tilde{\zeta}} = \nabla \times \vec{\rho v}$, kartesische Komponenten von $\vec{\tilde{\zeta}}$, Einheit $\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$

θ_0 Zenitwinkel des Sonnenstands

κ von-Kármán-Konstante, dimensionslos, Wert $\kappa = 0.4$

$\lambda, \lambda_{ca}, \lambda_{gc}, \lambda_{ub}$ externe Stabilitätslänge nach CLARKE (1970) bei unterschiedlichen Bezugsniveaus

λ_b^v Wärmeleitfähigkeit des versiegelten Bodens, Einheit $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$

λ_{geo} östliche Länge des Modellgebiets

μ_0 Kosinus des Sonnenzenitwinkels θ_0

ρ Dichte der atmosphärischen Luft in kg m^{-3}

ρ_0 (höhenabhängiger) Gleichgewichtswert der atmosphärischen Luftdichte

ρ_{eff} „effektive“ Dichte der atmosphärischen Luft, wird unter Einbeziehung der in der unaufgelösten Bebauung gleich Null gesetzten Luftdichte errechnet

ρ_2 Dichte von Flüssigwasser, Wert $\rho_2 = 1000 \text{ kg m}^{-3}$

$\rho_b^0, \rho_b^1, \rho_b^2, \rho_b^3$ auf das Gesamtvolumen des Bodens bezogene Partialdichten der Bodenkomponenten der trockenen Luft, des Wasserdampfes, des Flüssigwassers und der Bodenmatrix, Einheit kg m^{-3}

$\rho_{b;0}, \rho_{b;1}$ auf die Gasphase des Bodens bezogene Partialdichten der trockenen Luft und des Wasserdampfes

σ Stefan-Boltzmann-Konstante, Wert $\sigma = 5.6697 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{K}^{-4}$

σ_f Abschirmfaktor des niedrigen Bodenbewuchses, dimensionslos

σ_{tree} Baumbedeckungsgrad der Grundfläche, dimensionslos

φ_0 Winkel, um den die y -Achse des Modellgebiets im Uhrzeigersinn gegen geographisch Nord gedreht ist

φ_{geo} nördliche Breite des Modellgebiets in Grad

Φ	Potential der Schwerkraft oder Geopotential mit $\vec{g} = -\nabla\Phi$, Einheit $\text{m}^3 \text{s}^{-2}$
ϕ_0	Azimutwinkel des Sonnenstands
$\vec{\psi}, \psi_1, \psi_2$	vektorielle Stromfunktion zu divergenzfreien Geschwindigkeitsfeldern, erste und zweite kartesische Komponenten von $\vec{\psi}$ (die dritte verschwindet identisch), Einheit $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
$\tilde{\psi}, \tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2$	„impulsbezogene“ Stromfunktion zu divergenzfreien Feldern der Impulsdichte, erste und zweite kartesische Komponenten von $\tilde{\psi}$, Einheit $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$
ψ_b, ψ_b^s	Feuchtepotential des wasserhaltigen Bodens, Sättigungswert des Feuchtepotentials, beides in J kg^{-1}
ψ_h	Feuchtepotential des wasserhaltigen Bodens, ausgedrückt als Steighöhe einer Wassersäule in m
ψ_s	Tabellenwerte für das Feuchtepotential wassergesättigter Böden, ausgedrückt als Steighöhe einer Wassersäule in cm
$\psi_{k'k-1/2}$	in Zusammenhang mit der Strahlungsberechnung in unaufgelöster Bebauung: Sichtfaktor für die Wände der Schicht k' mit Sicht vom Niveau $z_{k-1/2}$, dimensionslos
$\Psi_{\text{sun}}, \Psi_{\text{sky}}$	Sonnensicht- und Himmelssichtfaktoren, dimensionslos
$\vec{\Omega}$	Winkelgeschwindigkeit der rotierenden Erde, Einheit s^{-1}

4. Zusatzbezeichnungen:

a	tiefgestellt: auf die angrenzende Atmosphäre bezogene Variable (bei Flussdichten und Energiebilanzen an materiellen Oberflächen), z. B. T_a, q_a, z_a
af	tiefgestellt: kennzeichnet atmosphärische Variablen im Bereich der den Boden bedeckenden Vegetationsschicht, z. B. T_{af}, q_{af}
b	tiefgestellt: zum Bodeninneren gehörige Variable, z. B. $z_{b;k}, n_b, T_b^v, T_b^v, \psi_b, h_{1;b}, h_{2;b}, l_{21;b}, \mu_{2;b}$
d	tiefgestellt: diffuser Strahlungsanteil (bei Flussdichten und Energiebilanzen an materiellen Oberflächen)
g	tiefgestellt: zur Bodengrenzfläche gehörig, z. B. $E_g, M_g, T_g, q_g, z_{0;g}, c_{gc}$
geb	tiefgestellt (für „Gebäude“): auf die Gebäude der unaufgelösten Bebauung bezogen
f	tiefgestellt (für „foliage“): auf die Blätter des niedrigen Bodenbewuchses oder des Baumbestands bezogen
h	tiefgestellt: horizontaler Anteil einer Vektorgröße, z. B. \widehat{v}_h, ∇_h
h	hochgestellt (für „heat“): auf die sensible Wärme bezogene Größe, z. B. Flussdichte oder Volumenquelle
i, j, k	tiefgestellt: kennzeichnet die Zell- oder Schichtzugehörigkeit diskreter Variabler korrespondierend zu den Raumrichtungen x, y, z
lw, sw	kennzeichnet die lang- und kurzwelligen Strahlungsintensitäten und -flussdichten
m	hochgestellt (für „momentum“): auf den Impuls bezogen
p	tiefgestellt: paralleler Strahlungsanteil (in Zusammenhang mit Strahlungsflüssen)
q	hochgestellt: kennzeichnet die sensiblen Wärmestromdichten sowohl in der Atmosphäre als auch im Erdboden
r	(für „roof“): zu den Dächern der unaufgelösten Bebauung gehörig, z. B. $T_r, z_{0;r}$
s	tiefgestellt: auf die Strahlung bezogen (bei Wärmequellen)
t	tiefgestellt (für „terrain“): auf die Geländehöhe ohne aufgelöste Bebauung bezogene Variable
u	hochgestellt (für „unversiegelt“): kennzeichnet die unversiegelten Anteile des Bodens
v	hochgestellt (für „versiegelt“): kennzeichnet die versiegelten Anteile des Bodens
vap	hochgestellt (für „vapor“): kennzeichnet die Flussdichten und Quellen des Wasserdampfes
w	tiefgestellt: zu den Wänden der unaufgelösten Bebauung gehörig, z. B. $T_w, z_{0;w}$
T	tiefgestellt: turbulent gemittelte Variable

U tiefgestellt: zur „Umlenkungsturbulenz“ der unaufgelösten Bebauung gehörig
 ν hochgestellt: Nummer des Iterationsschritts (bei iterativen Lösungsverfahren)
 $\widetilde{\dots}$ die Tilde (\sim) kennzeichnet über das (fiktive) Bebauungs-Ensemble gemittelte Werte der atmosphärischen Variablen, wobei das von den Gebäuden eingenommene Volumen in die Mittelung einbezogen wird.
 Zudem werden auch die impulsbezogenen Versionen der Stromfunktion und der Vorticity, wegen ihres Zusammenhangs mit der mittleren Impulsdichte $\widetilde{\rho\vec{v}}$, durch die Tilde gekennzeichnet.

$\widehat{\dots}$ das Dach ($\hat{}$) kennzeichnet „atmosphärische“ Mittelwerte des (fiktiven) Bebauungs-Ensembles, d. h. das von den Gebäuden eingenommene Volumen wird bei der Mittelung ausgeschlossen.

1 Einleitung

Nach dem ersten Teil des Berichts zum kleinskaligen atmosphärischen Strömungsmodells MUKLIMO_3 (SIEVERS, 2012), der die Beschreibung der auf das reine Strömungsgeschehen beschränkten *Basisversion* des Modells zum Inhalt hat, befasst sich der hier vorliegende *zweite* Teil des Berichts mit den *thermodynamischen* Erweiterungen von MUKLIMO_3. Sie beinhalten die Hinzunahme von numerischen Teilmodellen für

- den *Wärmehaushalt* der Atmosphäre einschließlich von Modellansätzen für die kurz- und langwellige *Strahlung*,
- den *Feuchtehaushalt* der Atmosphäre,
- den *Erdboden* mit Bilanzen seiner Wärme und seines volumetrischen Wassergehalts,
- die Schicht niedrigen Bewuchses zwischen Erdboden und Atmosphäre, auch *Canopy*-Schicht genannt.

Damit werden Elemente, die zum Teil schon in der zweidimensionalen „Urfassung“ des Modells (SIEVERS und ZDUNKOWSKI, 1986) enthalten waren, wieder aufgenommen, auf drei Dimensionen verallgemeinert und erweitert. Die Beschreibung entspricht der Modellversion vom 14. Oktober 2014.

Im Wesentlichen beibehalten wird das *Strömungsmodell* der Basisversion mit seinem *Stromfunktions-Vorticity*-Ansatz zur zeitlichen Integration der atmosphärischen Bewegungsgleichung. Hinzu kommt jedoch ein *Auftriebsterm*, der die Kräfte berücksichtigt, die auf die Atmosphäre aufgrund horizontal unterschiedlicher Temperaturen einwirken. Erweitert werden gegenüber der Basisversion müssen auch die Ansätze für die turbulenten *Diffusionskoeffizienten*, um den besonderen Verhältnissen bei *stabiler* oder *labiler* atmosphärischer Schichtung gerecht zu werden. Zur numerischen Umsetzung dieser Modellerweiterungen werden in MUKLIMO_3, neben bewährten Verfahren und Parametrisierungen, auch einige nicht veröffentlichte Ansätze benutzt, für die dieser Bericht die erste Niederschrift ist. Dazu zählen

- die *Einbeziehung* der unaufgelösten Bebauung in die atmosphärischen Bilanzgleichungen, insbesondere in den Stromfunktions-Vorticity-Algorithmus,
- die *Sonderbehandlung* der bodennächsten atmosphärischen Gitterzellen mit Anpassung an die Geländehöhe,
- die *Verbesserung* der Time-Splitting-Version des so genannten Donor-Cell-Verfahrens zur numerischen Behandlung der Advektion,
- die *Erweiterung* des Verfahrens zur kurzwelligen Strahlungsberechnung in unaufgelöster Bebauung auf langwellige Strahlung,
- das Verfahren zur kurz- und langwelligen *Strahlungsberechnung* über Flächen mit *Baumbestand*.

Durch die thermodynamischen Erweiterungen verändert sich der grundsätzliche Charakter des Modells MUKLIMO_3: Vom reinen Strömungsmodell der Basisversion zur Simulation *stationärer* Windverhältnisse mutiert es in der Thermodynamik-Version zu einem atmosphärischen Modell zur Simulation quasi-periodischer *zeitlicher Abläufe*, insbesondere von modellhaften *Tagesgängen*. Die Beschränkung auf „quasi-periodische“ Abläufe ergibt sich aus den Modellvorgaben: Insbesondere wird die kurzwellige Einstrahlung in das Modellgebiet tagesperiodisch aus dessen geografischer Lage bei vorgegebenem Bedeckungsgrad errechnet. Zudem sind die Windgeschwindigkeit, die Lufttemperatur und die spezifische Feuchte an der Modellobergrenze während der gesamten Simulationsdauer fest vorgegeben. Weitere Einschränkungen in den Anwendungsmöglichkeiten

der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 ergeben sich daraus, dass die atmosphärische Feuchtebilanz des Modells *keine* Phasenübergänge des Wasserdampfes, und damit weder Wolkenbildung noch Regen oder Schnee beinhaltet. Berücksichtigt wird jedoch *Taubildung* an den Blättern der Bäume und des niedrigen Bodenbewuchses sowie Wasserverdunstung und Kondensation im Boden und an seiner Oberfläche.

Mit horizontalen Auflösungen von typischerweise 50 bis 200 m gerät die Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 in den oberen Randbereich der Mikroskala, der die Basisversion mit ihren aufgelösten Einzelgebäuden zugerechnet wird, und erreicht die *Mesoskala*, deren Modelle nach GROSS (2014) eine typische Gitterauflösung von 50 m bis 1 km besitzen. Dabei wird die *unaufgelöste* Modellierung von Bebauung zum Regelfall, und zugleich gewinnt die *Orographie* der Modellgebiete an Bedeutung.

Der Anwendungsschwerpunkt der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 liegt in der Simulation von Tagessgängen der atmosphärischen Variablen, zumeist bei Strahlungswetterlagen, für kleinskalige Modellgebiete mit strukturierter städtischer Bebauung. Dabei wird primär das unterschiedliche Verhalten der Lufttemperatur in verschiedenen Siedlungsstrukturen, aber auch der Einfluss von innerstädtischen Grünflächen oder die Unterschiede zwischen Stadt und Umland untersucht. Durch Ankopplung von MUKLIMO_3 an *regionale* Klimamodelle oder regionale Klimabeobachtungen sind aber auch abgeleitete Aussagen zu wichtigen Klimakenngrößen wie der mittleren Anzahl von *Sommertagen* oder der Zahl *heißer* Tage pro Jahr möglich (FRÜH et al., 2011). Durch *Vergleichsrechnungen* zu gezielten Änderungen der Siedlungsstruktur können auch die möglichen klimatischen Auswirkungen geplanter oder angedachter Maßnahmen untersucht werden. Eine interessante Einsatzmöglichkeit der Thermodynamikversion sind Studien an idealisierten *virtuellen* Städten (BUCHHOLZ und KOSSMANN, 2015).

Der Bericht beginnt mit den Prinzipien und Möglichkeiten der *Modellgestaltung* in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3. Es folgen Darlegungen zur Behandlung der atmosphärischen Bilanzgleichungen, der Strahlung und des Erdbodenmodells. Den Schluss des Hauptteils bilden Hinweise zum Ablauf und zur Gestaltung von *Modellsimulationen*. Der dann noch folgende Anhang widmet sich der vertieften Darstellung von Spezialthemen, gibt aber auch die *Standard-Eingabedatei* zur Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 wieder. Sie enthält eine Liste aller vom Programmnutzer vorgebbaren Variablen mit Hinweisen zu ihrer Bedeutung und ihrem Gebrauch.

Zur Schreibweise: Im Text werden einzelne Wörter durch *kursive* Schreibweise hervorgehoben. Dies dient der besseren Lesbarkeit des Textes. Die zahlreichen mathematisch-physikalischen Variablen und Parameter des Textes werden grundsätzlich mit zumeist kursiv gesetzten lateinischen oder mit griechischen Buchstaben bezeichnet. Sie können hoch- oder tiefgestellte Zusatzbezeichnungen haben oder indiziert sein. Vektoren tragen einen Pfeil, Tensoren sind gerade und fett gesetzt, physikalische Einheiten erscheinen in gerader mathematischer Schrift. Die Gleichungen des Berichts sind durchgehend nummeriert. In Fällen, in denen sie lediglich Wiederholungen oder unbedeutende Zwischenergebnisse repräsentieren, kann die Nummerierung auch fehlen. Um Einheitlichkeit mit den zahlreichen Formeln des Berichts zu gewährleisten, wird bei Dezimalzahlen die *wissenschaftliche* Notation mit Dezimalpunkt anstelle des deutschen Kommas auch im Text verwendet.

Wenngleich die meisten Variablenbezeichnungen des Berichts in enger Anlehnung an ihre Namen im Quellcode des Modells MUKLIMO_3 gewählt sind, vermeidet der Text direkte Bezüge auf letzteren, da er auch für Leser, die nicht in seinem Besitz sind, verständlich sein soll. Eine Ausnahme sind die für die Gestaltung konkreter Projekte benötigten Variablen der Eingabe- und Landnutzungsdateien, zudem die Namelist-Gruppen der Eingabedatei und einige Dateien von grundsätzlicher Bedeutung. Deren Bezeichnungen werden unverändert übernommen. Sie erscheinen im Text in kursiver Schrift, die Namen der Namelist-Gruppen sowie der Dateien sind zusätzlich in Anführungszeichen gesetzt.

2 Modellierung

2.1 Modellgitter

Der Gitteraufbau der Thermodynamikversion von MUKLIMO_3 entspricht dem der Basisversion, siehe SIEVERS (2012). Das heißt, das Modell MUKLIMO_3 benutzt kartesische Koordinaten x , y , z und setzt ein achsenorientiertes, quaderförmiges Integrationsgebiet V voraus. Die gesamte Modellerstreckung wird entlang ihrer horizontalen Achsen in n_x bzw. n_y Abschnitte mit den Abmessungen Δx_i bzw. Δy_j und zudem in n_z von unten nach oben gezählte vertikale Schichten mit den Erstreckungen Δz_k untergliedert, die sich zu horizontalen Flächenelementen $F_{ij} = \Delta x_i \Delta y_j$ und räumlichen Gitterzellen $V_{ijk} = \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k$ zusammensetzen. Die Mittelpunktkoordinaten der Abschnitte bzw. Schichten werden mit x_i , y_j und z_k bezeichnet. Die auch benötigten Grenzkordinaten der Abschnitte zu ihren Nachbarn werden demgegenüber halbzahlig indiziert als $x_{i\pm 1/2}$, $y_{j\pm 1/2}$ und $z_{k\pm 1/2}$. Über jedem horizontalen Flächenelement F_{ij} ist zudem ein „Geländehöhenindex“ $n_{0;i,j}$ definiert, der die Zugehörigkeit der Gitterzellen festlegt: Eine Zelle V_{ijk} mit $k > n_{0;i,j}$ gehört zur Atmosphäre, andernfalls ist sie Teil des Bodens (oder eines aus ihm herausragenden Gebäudes, vergleiche Kap. 2.4). Weitere Höhenindizes mit ähnlicher Bedeutung werden später eingeführt und erläutert. Die Gittergestaltung des Modellgebiets, d. h. die Festlegung der Abschnitte Δx_i , Δy_j und Δz_k sowie ihrer Anzahlen n_x , n_y und n_z ist Aufgabe des Programmnutzers. Hierfür müssen in der *Eingabedatei* von MUKLIMO_3 die Variablen der Gittereinteilung in gewünschter Weise festgelegt werden, siehe die Kapitel 6.1 und 6.1.1.

Der Einordnung des Modellgebiets in ein geografisches Koordinatensystem dienen die Variablen *xllcorner* und *yllcorner* (mit *ll* für *lower left*) der *Eingabedatei*, welche die Horizontalkoordinaten der südwestlichen Ecke des Modellgebiets festlegen. Sie werden in einem geeigneten, vom Programmnutzer wählbaren System angegeben, z. B. in *UTC*- oder *Gauß-Krüger*-Koordinaten. Zudem kann man über die Spezifikation von *hbasis* der Basisebene des dreidimensionalen Modellgitters eine ihr entsprechende geografische Höhe zuordnen, siehe dazu auch Kapitel 2.2. Erforderlich ist darüber hinaus die Spezifikation der geografische Winkelkoordinaten *alat* und *elen*, die mit für das Modellgebiet repräsentativen Werten der nördlichen Breite und der östlichen Länge zu belegen sind. Die Größe *alat* wird modellintern zur Berechnung der täglichen Sonnenbahn und der mit ihr verbundenen Strahlungsintensitäten benötigt, vermittels *elen* wird die „Wahre Ortszeit“ (WOZ) des Modellgebiets in die „Gesetzliche Zeit“ (MEZ bzw. MESZ) umgerechnet. Zudem kann das horizontale Modellgebiet gegen die geografische Orientierung gedreht sein: Dies wird erreicht durch eine von Null verschiedene Spezifikation der Größe *phi0*. Sie repräsentiert den Winkel, um den die *y*-Achse des Modellgebiets (im Uhrzeigersinn) gegen geografisch Nord gedreht ist.

2.2 Geländehöhe

Während in der *Basisversion* von MUKLIMO_3 (siehe SIEVERS, 2012) die Gestaltung der Geländehöhe wahlweise über Rechteckblöcke oder über ein Höhenraster erfolgt, ist in der *Thermodynamikversion* ausschließlich die Höhenmodellierung über ein von einer *Geländehöhendatei* einzulesendes Rasterfeld $h_{0;ij}$ möglich. Die wesentlichen Aspekte bei der orografischen Gestaltung des Modellgebiets sind:

1. Die einzulesenden Höhenwerte $h_{0;ij}$ gehören zu den Mittelpunkten der Flächenelemente F_{ij} .
2. Nach dem Einlesen wird das Höhenfeld $h_{0;ij}$ modellintern ersetzt durch ein um die Basishöhe h_{basis} vermindertes und auf nichtnegative Werte beschränktes Feld $h_{0;ij}^*$,

$$h_{0;ij}^* := \max(0, h_{0;ij} - h_{\text{basis}}) . \quad (1)$$

Die Grundhöhe h_{basis} wird entweder in der Eingabedatei über die Variable $hbasis$ vorgegeben oder von MUKLIMO_3 als minimaler Wert aller $h_{0;ij}$ ermittelt.

3. Dann wird jedem Flächenelement F_{ij} des horizontalen Gitters sein Geländehöhenindex $n_{0;ij}$ zugewiesen, der aus der Bedingung ermittelt wird, dass die (reduzierte) Höhe $h_{0;ij}^*$ zwischen den vertikalen Gitterniveaus $z_{n_{0;ij}}$ und $z_{n_{0;ij}+1}$ liegt, dass also gilt

$$z_{n_{0;ij}} \leq h_{0;ij}^* < z_{n_{0;ij}+1} . \quad (2)$$

Alle Zellen V_{ijk} mit $k > n_{0;ij}$ gehören dann zur Atmosphäre, solche mit $k \leq n_{0;ij}$ hingegen zum Boden.

4. Die Festlegung des Geländehöhenindex $n_{0;ij}$ nach Gleichung (2) hat zur Folge, dass $h_{0;ij}^*$ um maximal eine halbe Gitterbreite nach oben oder unten von der „regulären“ Gitterhöhe $z_{n_{0;ij}+1/2}$ abweicht. Bezeichnet man diese Höhenabweichung als Δ_{ij} ,

$$\Delta_{ij} := h_{0;ij}^* - z_{k_0+1/2} \quad \text{mit der Abkürzung} \quad k_0 = n_{0;ij} , \quad (3)$$

(vergleiche Abb. 1 auf S. 16), so gilt für sie folglich die Ungleichung

$$-0.5\Delta z_{k_0} \leq \Delta_{ij} \leq 0.5\Delta z_{k_0+1} \quad \text{mit} \quad k_0 = n_{0;ij} . \quad (4)$$

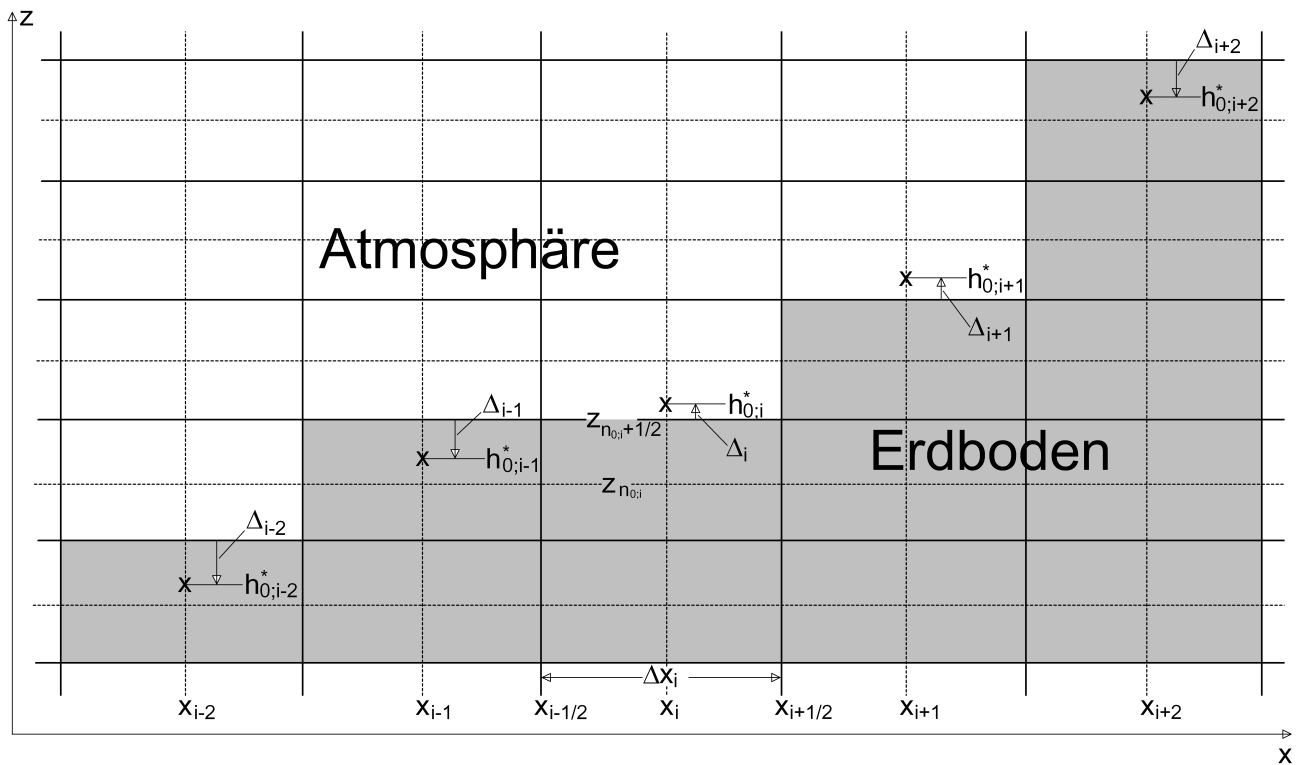


Abbildung 1: Ausschnitt eines zweidimensionalen Modellgitters mit reduzierten Geländehöhen $h_{0;ij}^*$ und Höhenabweichungen Δ_{ij} . Die atmosphärischen und die Bodenzellen sind noch ohne „Deformation“ gezeichnet.

Zum Ausgleich dieses Höhenunterschiedes und zur Abmilderung von gitterbedingten Geländestufen werden die untersten atmosphärischen Gitterzellen V_{ijk_1} nach unten hin so gestaucht oder gestreckt, dass ihr Unterrand sich mit der reduzierten Geländehöhe deckt. Das Volumen der so deformierten Zellen wird dann errechnet als

$$V_{ijk_1} = \Delta x_i \Delta y_j (\Delta z_{k_1} - \Delta_{ij}) \quad \text{mit} \quad k_1 = n_{0;ij} + 1 . \quad (5)$$

5. Wegen der geschachtelten Gitterstruktur (siehe SIEVERS, 2012) werden in MUKLIMO_3 reduzierte Geländehöhen nicht nur über den Zentren, sondern auch über den Seitenrändern der Flächenelemente F_{ij} benötigt. Sie werden halbzahlige als $h_{0;i\pm 1/2j}^*$ bzw. $h_{0;i j\pm 1/2}^*$ indiziert. Zu ihnen gehören ebenfalls halbzahlige Geländehöhenindizes $n_{0;i\pm 1/2j}$ und $n_{0;i j\pm 1/2}$ sowie Differenzfelder $\Delta_{i\pm 1/2j}$ bzw. $\Delta_{i j\pm 1/2}$, welche den Abweichungen der halbzahligen Geländehöhen von den nächstgelegenen „regulären“ Gitterniveaus entsprechen. Die halbzahligen Geländehöhenindizes werden festgelegt als

$$\begin{aligned} n_{0;i\pm \frac{1}{2}j} &:= \max(n_{0;ij}, n_{0;i\pm 1j}) \\ n_{0;ij\pm \frac{1}{2}} &:= \max(n_{0;ij}, n_{0;ij\pm 1}) . \end{aligned} \quad (6)$$

Sie regeln die Zugehörigkeit der Zellseitenflächen: Flächen $F_{i\pm 1/2jk}$ bzw. $F_{ij\pm 1/2k}$ mit $k > n_{0;i\pm 1/2j}$ bzw. $k > n_{0;ij\pm 1/2}$ gehören zur Atmosphäre, solche mit $k \leq n_{0;i\pm 1/2j}$ bzw. $k \leq n_{0;ij\pm 1/2}$ zum Boden. Die Definition (6) stellt sicher, dass die Zellseitenflächen $F_{i\pm 1/2jk}$ bzw. $F_{ij\pm 1/2k}$ immer dann zum Boden gehören, wenn wenigstens eine der an sie angrenzenden Gitterzellen V_{ijk} und $V_{i\pm 1jk}$ bzw. $V_{ij\pm 1k}$ zum Boden gehört.

Die halbzahligen Geländehöhen $h_{0;i\pm 1/2j}^*$ und $h_{0;ij\pm 1/2}^*$ werden zunächst durch lineare Interpolation zwischen den benachbarten zentrierten Höhen $h_{0;ij}^*$ und $h_{0;i\pm 1j}^*$ bzw. $h_{0;ij\pm 1}^*$ bestimmt, vergleiche Abbildung 2 auf S. 18. Zusätzlich wird gefordert, dass $h_{0;i\pm 1/2j}^*$ bzw. $h_{0;ij\pm 1/2}^*$ zwischen z_{k_0} und z_{k_0+1} liegen muss, wobei k_0 für $n_{0;i\pm 1/2j}$ bzw. $n_{0;ij\pm 1/2}$ steht. Ist das nicht der Fall, werden die „First Guess“-Werte für $h_{0;i\pm 1/2j}^*$ und $h_{0;ij\pm 1/2}^*$ entsprechend angehoben. Für die als

$$\begin{aligned} \Delta_{i\pm \frac{1}{2}j} &:= h_{0;i\pm \frac{1}{2}j}^* - z_{k_0+\frac{1}{2}} \quad \text{mit} \quad k_0 = n_{0;i\pm \frac{1}{2}j} \\ \Delta_{ij\pm \frac{1}{2}} &:= h_{0;ij\pm \frac{1}{2}}^* - z_{k_0+\frac{1}{2}} \quad \text{mit} \quad k_0 = n_{0;ij\pm \frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (7)$$

festgelegten Höhendifferenzen $\Delta_{i\pm 1/2j}$ und $\Delta_{ij\pm 1/2}$ gelten dann, in Entsprechung zur Gleichung (4), die Beschränkungen

$$\begin{aligned} -0.5\Delta z_{k_0} &\leq \Delta_{i\pm \frac{1}{2}j} \leq 0.5\Delta z_{k_0+1} \quad \text{mit} \quad k_0 = n_{0;i\pm \frac{1}{2}j} \\ -0.5\Delta z_{k_0} &\leq \Delta_{ij\pm \frac{1}{2}} \leq 0.5\Delta z_{k_0+1} \quad \text{mit} \quad k_0 = n_{0;ij\pm \frac{1}{2}} . \end{aligned} \quad (8)$$

Siehe dazu auch Abbildung 2 auf S. 18.

Zur Angleichung des numerischen Gitters an die Geländehöhe werden, außer den Volumina $V_{ij k_1}$ der bodennächsten atmosphärischen Gitterzellen (siehe Gl. 5), auch die untersten atmosphärischen Zellseitenflächen $F_{i\pm 1/2j k_1}$ bzw. $F_{ij\pm 1/2 k_1}$ nach unten gestreckt oder gestaucht gemäß den Beziehungen

$$\begin{aligned} F_{i\pm \frac{1}{2}j k_1} &= \Delta y_j \left(\Delta z_{k_1} - \Delta_{i\pm \frac{1}{2}j} \right) \quad \text{mit} \quad k_1 = n_{0;i\pm \frac{1}{2}j} + 1 \\ F_{ij\pm \frac{1}{2} k_1} &= \Delta x_i \left(\Delta z_{k_1} - \Delta_{ij\pm \frac{1}{2}} \right) \quad \text{mit} \quad k_1 = n_{0;ij\pm \frac{1}{2}} + 1 . \end{aligned} \quad (9)$$

Siehe dazu auch Kapitel 3.2.5).

6. Die für die Strahlungsberechnung (siehe Kap. 4) benötigten diskreten *Normalenvektoren* $\vec{n}_{g;ij}$ der Bodengrenzfläche über den Flächenelementen F_{ij} werden ermittelt, indem zunächst die Steigungen $s_{x;ij}$ und $s_{y;ij}$ des Geländes in x - bzw. y -Richtung bestimmt werden als

$$s_{x;ij} = \frac{h_{0;i+\frac{1}{2},j}^* - h_{0;i-\frac{1}{2},j}^*}{\Delta x_i}, \quad s_{y;ij} = \frac{h_{0;i,j+\frac{1}{2}}^* - h_{0;i,j-\frac{1}{2}}^*}{\Delta y_j} . \quad (10)$$

Daraus können die kartesischen Komponenten $(n_{g;ij})_k$ der Flächennormalen, unter Beachtung einer

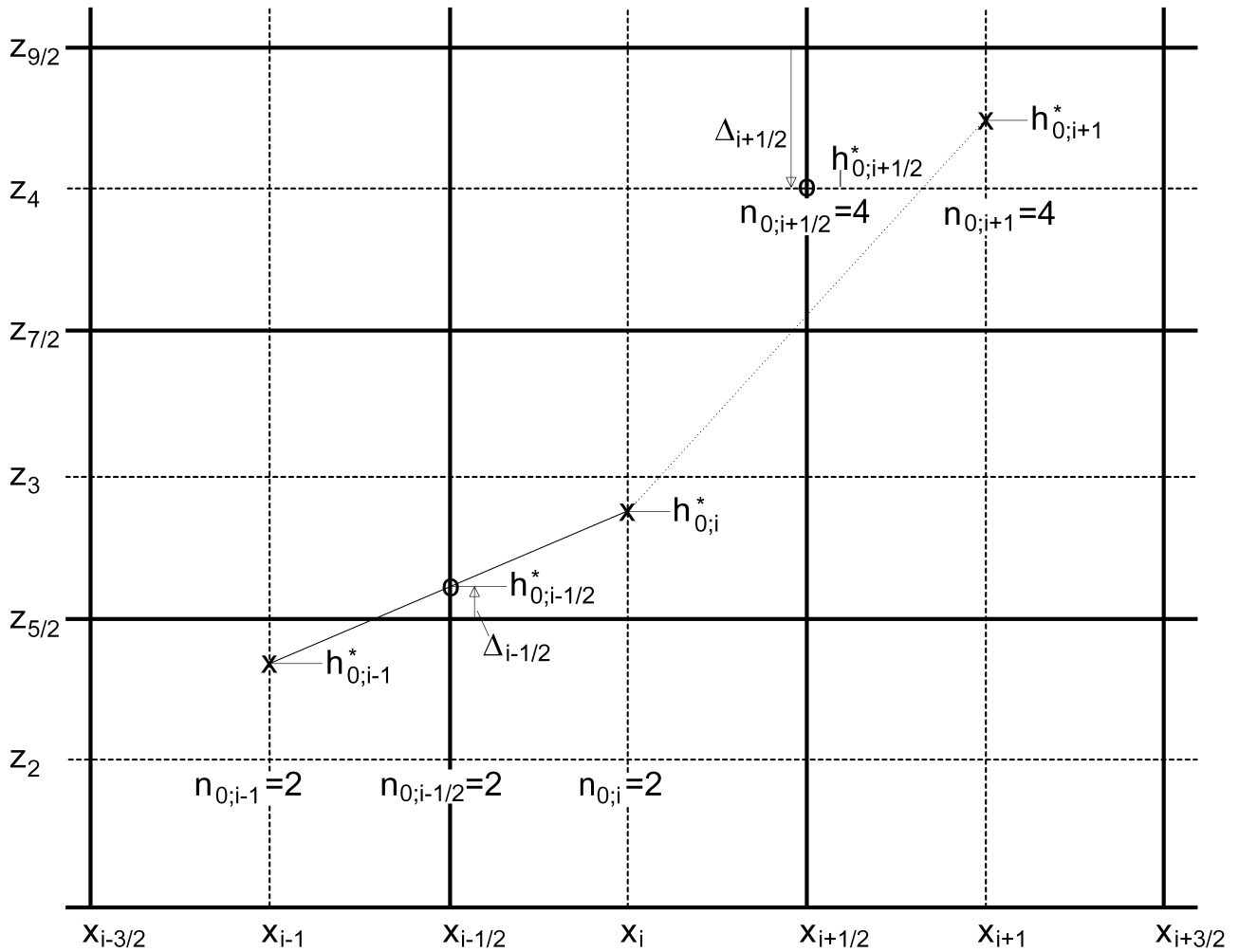


Abbildung 2: Ausschnitt eines zweidimensionalen Modellgitters mit halbzahlig reduzierten Geländehöhen $h_{0,i\pm 1}^*$ und Höhenabweichungen $\Delta_{i\pm 1/2}$. Die Höhen $h_{0,i\pm 1/2}^*$ werden als „First Guess“ durch lineare Interpolation aus den benachbarten zellzentrierten Geländehöhen $h_{0,i}^*$ und $h_{0,i\pm 1}^*$ bestimmt. Liegt ein so ermittelter Wert $h_{0,i+1/2}^*$ unter der Mindesthöhe $z_{n_{0,i+1/2}}$, so wird er auf diese angehoben. Das ist in der Abbildung bei $x_{i+1/2}$ der Fall (gepunktete Linie).

eventuellen Drehung des Modellgebiets gegen die geografische Nordrichtung, errechnet werden als

$$\begin{aligned}
 (n_{g;ij})_1 &= \frac{-s_{x;ij} \cos \phi_0 + s_{y;ij} \sin \phi_0}{\sqrt{1 + s_{x;ij}^2 + s_{y;ij}^2}} \\
 (n_{g;ij})_2 &= \frac{-s_{x;ij} \sin \phi_0 - s_{y;ij} \cos \phi_0}{\sqrt{1 + s_{x;ij}^2 + s_{y;ij}^2}} \\
 (n_{g;ij})_3 &= \frac{1}{\sqrt{1 + s_{x;ij}^2 + s_{y;ij}^2}} .
 \end{aligned} \tag{11}$$

Dabei ist ϕ_0 der Winkel, um den die y-Achse des Modellgebiets im Uhrzeigersinn gegen geographisch Nord gedreht ist (vergleiche dazu auch Kap. 2.1).

Abbildung 3 auf S. 19 demonstriert den glättenden Einfluss, den die oben beschriebene Anpassung der bodennächsten Gitterzellen an die Orographie auf die Modellresultate hat.

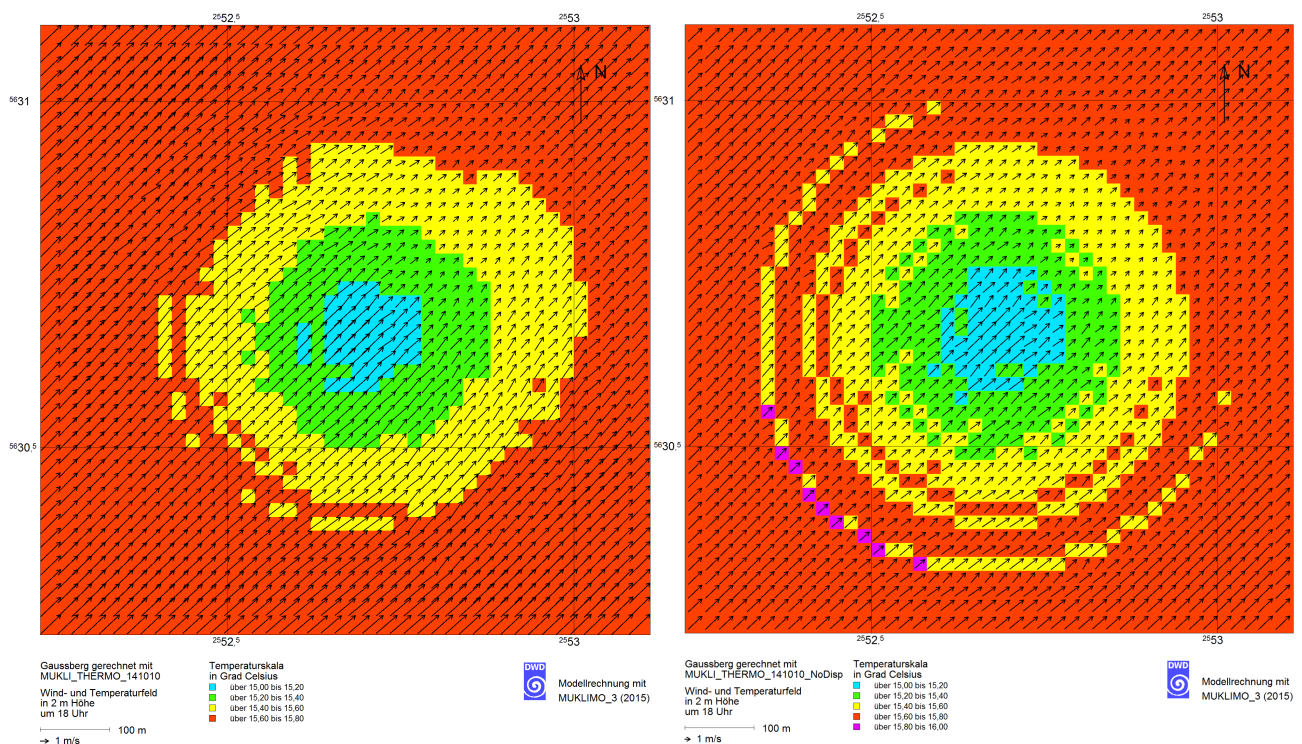


Abbildung 3: Überströmung einer gaußförmigen, 40 m hohen Erhebung. Vergleich der Modellresultate für den Wind und die Lufttemperatur für zwei Simulationen mit glätteter (links) und stufenförmiger Orographie.

2.3 Flächennutzung

2.3.1 Landnutzungstabelle

Die Modellierung der Flächennutzung in der Thermodynamikversion von MUKLIMO_3 entspricht dem LNK-Modus („Landnutzungsklassen-Modus“) der Basisversion, siehe den ersten Teil des Berichts (SIEVERS, 2012).

Das bedeutet, dass den Flächenelementen F_{ij} des Modellgebiets über Code-Zahlen entsprechend vordefinierte Flächennutzungstypen zugewiesen werden. Die Code-Zahlen werden von einer *Flächennutzungsdatei* eingelesen, in der sie in Form von *Rasterdaten* enthalten sind. Die Vordefinition der Flächennutzungstypen wiederum erfolgt über eine ebenfalls von MUKLIMO_3 einzulesende *Landnutzungstabelle*.

Im Unterschied zum LNK-Modus der Basisversion ist in der Thermodynamikversion die Maximalzahl unterschiedlicher Flächennutzungstypen von 9 auf 99 erweitert worden. Zudem hat sich die Anzahl der für jede Flächennutzung vorgebbaren Parameter geändert: Seit dem Programm-Update vom 13. Mai 2013 sind es 24 Grundgrößen, mit deren Hilfe die Eigenschaften der verschiedenen Flächennutzungen festgelegt bzw. gegenüber den generellen, für das gesamte Modellgebiet gültigen Vorgaben abgeändert werden können. Letzteres ist insbesondere für *Sensitivitätsstudien* von Nutzen.

Die folgende Auflistung der vorgebbaren Parameter orientiert sich in der Benennung und Beschreibung dieser Größen an der zum Programmumfang von MUKLIMO_3 gehörigen beispielhaften Landnutzungstabelle „*LU_Tab.txt*“:

<i>vg1</i>	Flächenanteil der Gebäude des ersten Typs an der Grundfläche (es sind 2 Typen möglich), dimensionslos
<i>vg2</i>	Flächenanteil der Gebäude des zweiten Typs an der Grundfläche, dimensionslos
<i>wai1</i>	gebäudebezogener „Wandflächenindex“ des ersten Gebäudetyps, d. h. Verhältnis der Wandfläche eines typischen Einzelgebäudes zu seiner Grundfläche, dimensionslos
<i>wai2</i>	gebäudebezogener Wandflächenindex des zweiten Gebäudetyps
<i>h1</i>	Höhe Gebäudetyp 1 in m
<i>h2</i>	Höhe Gebäudetyp 2 in m
<i>vs</i>	Versiegelungsgrad des gebäudefreien Flächenanteils, dimensionslos, Werte von 0 bis 1, die Sonderbelegung $vs = -1$ definiert <i>Wasserflächen</i>
<i>z0u</i>	Bodenrauigkeit der unversiegelten Flächenanteile in m
<i>hbm</i>	bei Baumbestand: Baumhöhe in m
<i>hst</i>	bei Baumbestand: Höhe des Stammraums (Bereich unterhalb der Baumkronen) in m
<i>bf0</i>	bei Baumbestand: Blattflächendichte (gleich einseitig gerechnete Blattflächen pro atmosphärisches Volumen) für den Bereich des Stammraums in $m^2 m^{-3}$ bzw. m^{-1} , bezogen auf einen Einzelbaum
<i>bf1</i>	bei Baumbestand: Blattflächendichte im Kronenbereich in m^{-1} , bezogen auf einen Einzelbaum
<i>lai</i>	Blattflächenindex der bodennahen Vegetationsschicht, dimensionslos
<i>hca</i>	Höhe der bodennahen Vegetationsschicht in m
<i>sigbm</i>	Bestandsdichte der Bäume (Baumbedeckungsgrad), dimensionslos
<i>sigma</i>	Abschirmung der nicht versiegelten Bodenanteile durch die bodennahe Vegetationsschicht, dimensionslos
<i>grant</i>	bei Nutzungstypen mit Bebauung: Anteil begrünter Dächer, sonst ohne Bedeutung
<i>albw</i>	bei Bebauung: mittlere Albedo der Wandflächen (negativer Wert: es gilt der in der Eingabedatei in der Namelist-Gruppe „ <i>param</i> “ für die Variable <i>albw</i> angegebene Wert bzw. bei fehlender Angabe deren Vorgabe $albw = 0.3$), bei Flächennutzungen ohne Bebauung bedeutungslos
<i>albd</i>	bei Bebauung: mittlere Albedo der Dachflächen (negativer Wert: es gilt der in der Eingabedatei in der Namelist-Gruppe „ <i>param</i> “ für die Variable <i>albd</i> angegebene Wert bzw. bei fehlender Angabe deren Vorgabe $albd = 0.3$), bei Flächennutzungen ohne Bebauung bedeutungslos
<i>albvs</i>	Albedo der versiegelten Flächenanteile (negativer Wert: es gilt der in der Eingabedatei in der Namelist-Gruppe „ <i>param</i> “ für die Variable <i>albedv</i> angegebene Wert bzw. bei fehlender Angabe

- deren Vorgabe $albedv = 0.25$), bei Flächennutzungen ohne Bebauung bedeutungslos
- kwand* bei Bebauung: Wärmedurchgangszahl (sogenannter *K-Wert*) der Wände in $\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ (negativer Wert: es gilt der in der Eingabedatei in der Namelist-Gruppe „*param*“ für die Variable *xkw* angegebene Wert bzw. bei fehlender Angabe deren Vorgabe $xkw = 1.5$), bei Flächennutzungen ohne Bebauung bedeutungslos
- kdach* bei Bebauung: Wärmedurchgangszahl (sogenannter *K-Wert*) der Dächer in $\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ (negativer Wert: es gilt der in der Eingabedatei in der Namelist-Gruppe „*param*“ für die Variable *xkd* angegebene Wert bzw. bei fehlender Angabe deren Vorgabe $xkd = 1.5$), bei Flächennutzungen ohne Bebauung bedeutungslos
- cwand* bei Bebauung: Wärmekapazität der Wände in $\text{Jm}^{-2}\text{K}^{-1}$ (negativer Wert: es gilt der in der Eingabedatei in der Namelist-Gruppe „*param*“ für die Variable *cw* angegebene Wert bzw. bei fehlender Angabe deren Vorgabe $cw = 0.3 \cdot 10^6$), bei Flächennutzungen ohne Bebauung bedeutungslos
- cdach* bei Bebauung: Wärmekapazität der Dächer in $\text{Jm}^{-2}\text{K}^{-1}$ (negativer Wert: es gilt der in der Eingabedatei in der Namelist-Gruppe „*param*“ für die Variable *cda* angegebene Wert bzw. bei fehlender Angabe deren Vorgabe $cda = 0.15 \cdot 10^6$), bei Flächennutzungen ohne Bebauung bedeutungslos

2.3.2 Freiflächen

Ist für eine Flächennutzung in der Tabelle gemäß Kapitel 2.3.1 weder eine der Gebäudehöhen $h1$ und/oder $h2$ noch die Baumhöhe hbm mit einem Wert > 0 belegt, so gehört die Nutzung zur Klasse der *Freiflächen*. Für sie werden über die Landnutzungstabelle vor allem der

- Versiegelungsgrad vs des Bodens und die
- Rauigkeitslänge $z0u$ der unversiegelten Flächenanteile,

aber auch die drei die niedrige Vegetation des unversiegelten Bodenanteils betreffenden Parameter:

- Blattflächenindex lai ,
- Bewuchshöhe hca und
- Bodenabschirmung $sigma$

festgelegt. Vergleiche hierzu auch das Kapitel 5.4 über das Bodenbewuchsmodell von MUKLIMO_3. Darüber hinaus kann die

- Bodenalbedo $albvs$

der versiegelten Flächenanteile mit einem nutzungsspezifischen Wert belegt werden. Die in die untere Randbedingung der Bewegungsgleichung von MUKLIMO_3 eingehende *effektive* Rauigkeitslänge des Bodens $z0;eff$ wird als Mittel aus dem Tabellenwert für $z0$ und der in der *Eingabedatei* festgelegten Rauigkeitslänge für versiegelte Flächen $z0v$ errechnet mit Wichtung entsprechend der Bodenversiegelung vs (entspricht der Variablen vs der Landnutzungstabelle).

Das Modell MUKLIMO_3 kennt noch eine ganze Reihe weiterer Bodenparameter wie z. B. den Bodentyp der unversiegelten Flächenanteile, die Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität der versiegelten Anteile, die Albedo-Werte der Vegetationsbedeckung und des unbedeckten Bodens und andere mehr. Diese Parameter sind in MUKLIMO_3 mit für alle Nutzungstypen gültigen Vorgabewerten belegt. Die Vorgaben können für das jeweils bearbeitete Projekt (über die Gruppe „*boden*“ der *Eingabedatei*) geändert werden, allerdings nicht nutzungsspezifisch. Siehe hierzu auch das Kapitel 6.1 über die *Eingabedatei* sowie die *Standard-Namelist* im Anhang E.

2.3.3 Wasserflächen

In der Landnutzungstabelle gilt für den Versiegelungsgrad v_s eine Sondervereinbarung, indem mit der eigentlich unerlaubten Wertzuweisung $v_s = -1$ *Wasserflächen* vereinbart werden. Für sie wird weder ein Erdboden- noch ein Bestandsmodell gerechnet. Stattdessen haben Wasserflächen in der Thermodynamikversion von MUKLIMO_3 eine *feste* Temperatur $tw0$, die in der *Eingabedatei* in der *Namelist-Gruppe* „*profile*“ vereinbart und während der gesamten Simulationsdauer konstant gehalten wird. Die Annahme einer festen Temperatur für stehende oder fließende Gewässer ist dadurch gerechtfertigt, dass ihre Tagesamplitude sehr viel kleiner ist als die der Atmosphäre. Festgehalten wird auch die spezifische Feuchte an der Wasseroberfläche, und zwar auf ihrem zu $tw0$ gehörigen Sättigungswert. Für die Rauigkeitslänge von Wasseroberflächen gilt für sie von der Landnutzungstabelle eingelesene Wert $z0u$.

2.3.4 Unaufgelöste Bebauung

Falls die dem Flächenelement F_{ij} zugeordnete Nutzung eine Gebäudehöhe $h1 > 0$ aufweist, ist das Flächenelement mit *unaufgelöster Bebauung* belegt. Mit den Grundgrößen $h1$, $vg1$ und $wai1$ der *Landnutzungstabelle* (siehe Kap. 2.3.1) werden die in die diskreten Modellgleichungen von MUKLIMO_3 eingehenden, ortsabhängigen Größen der *Volumendichte* $v_{geb;ijk}$ der Bebauung (gleich Volumenanteil der Gebäude pro Gittervolumen) sowie der *Wandflächendichte* $d_{w;ijk}$ (gleich Wandflächen pro Gittervolumen) für die atmosphärischen Gitterzellen (d. h. für alle V_{ijk} mit $k > n_{0;ij}$) errechnet als

$$v_{geb;ijk} = \alpha_{1;ijk}^{red} vg1 \quad (12)$$

bzw.

$$d_{w;ijk} = \alpha_{1;ijk}^{red} \frac{vg1 wai1}{h1}, \quad (13)$$

wobei der „Reduktionsfaktor“ $\alpha_{1;ijk}^{red}$ die Höhenabhängigkeit der Verteilungen widerspiegelt und errechnet wird als

$$\alpha_{1;ijk}^{red} = \begin{cases} 1 & \text{für } z_{k+\frac{1}{2}} \leq h1 + h_{0;ij}^* \\ \frac{h1+h_{0;ij}^*-z_{k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} & \text{für } z_{k-\frac{1}{2}} \leq h1 + h_{0;ij}^* < z_{k+\frac{1}{2}} \\ 0 & \text{für } z_{k-\frac{1}{2}} > h1 + h_{0;ij}^* \end{cases} \quad (14)$$

Hier ist $h_{0;ij}^*$ die in Kapitel 2.2 eingeführte, um die Basishöhe h_{basis} des Modellgebiets *reduzierte* Gelände- und die Summe $h1 + h_{0;ij}^*$ somit die auf die Basis des Modellgitters bezogene Gesamthöhe der Bebauung.

In MUKLIMO_3 besteht mithilfe der Landnutzungstabelle die Möglichkeit, die unaufgelöste Bebauung eines Siedlungstyps aus zwei unterschiedlichen Gebäudearten zusammensetzen. Das wird erreicht, indem man nicht nur den Größen $h1$, $vg1$ und $wai1$, sondern auch den Parametern $h2$, $vg2$ und $wai2$ Werte größer Null zuweist. In einem solchen Fall werden zusätzliche, dem Gebäudetyp „2“ zuzuordnende Anteile der Volumen-

und Wandflächendichte errechnet und zu den Werten des Gebäudetyps „1“ hinzugefügt, d. h. $v_{geb;ijk}$ und $d_{w;ijk}$ werden, anstelle von Gleichung (12) bzw. (13), errechnet als

$$v_{geb;ijk} = \alpha_{1;ijk}^{red} v_{g1} + \alpha_{2;ijk}^{red} v_{g2} \quad (15)$$

bzw.

$$d_{w;ijk} = \alpha_{1;ijk}^{red} \frac{v_{g1} w_{ai1}}{h1} + \alpha_{2;ijk}^{red} \frac{v_{g2} w_{ai2}}{h2}, \quad (16)$$

wobei $\alpha_{2;ijk}^{red}$, mit $h2$ anstelle von $h1$, durch Gleichung (14) erklärt ist.

In der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 nicht vorgesehen ist die im Bericht über die PC-Basisversion (SIEVERS, 2012) in Kapitel 4.4.5 beschriebene Modellierung anisotroper Bebauung mit bevorzugter Durchlassrichtung für den Wind.

Die Ermittlung der *Dachflächen* der unaufgelösten Bebauung folgt in MUKLIMO_3 der Vorstellung, dass sämtliche Gebäude *Flachdächer* besitzen. Für die numerische Behandlung der Dächer werden diskrete *Dachflächendichten* $d_{r;ijk}$ („roof densities“) eingeführt, welche die zwischen den vertikalen Niveaus z_{k-1} und z_k liegenden Dächer zusammenfassen. In der Modellvorstellung von MUKLIMO_3 werden diese Dächer auf der Grenze $z_{k-1/2}$ zwischen diesen Niveaus angesiedelt und ihre Dichte der oberen der beiden Schichten zugewiesen, da nur sie von den Wechselbeziehungen zwischen der Atmosphäre und den Dächern betroffen ist. Gemäß dieser Modellvorstellung errechnen die Werte $d_{r;ijk}$ der Dachflächendichte sich dann als

$$d_{r;ijk} = v_{geb;ijk} - v_{geb;ijk-1} \quad \text{für } k \geq n_{0;ij} + 2. \quad (17)$$

In MUKLIMO_3 gibt es für die Dächer der unaufgelösten Bebauung die Möglichkeit einer *Begrünung*, wobei der im Folgenden als v_{gr} bezeichnete Anteil begrünter Dächer eines Siedlungstyps durch den Parameter *grant* in der Landnutzungstabelle festgelegt wird. Zu weiteren Details der Dachbegrünung siehe Kapitel 5.5.

Die Bodenflächen zwischen den Gebäuden der unaufgelösten Bebauung werden wie Freiflächen (siehe Kap. 2.3.2) modelliert mit der Maßgabe, dass der Versiegelungsgrad v_s sich nicht auf die gesamte Grundfläche F_{ij} einer Gitterzelle bezieht, sondern stattdessen auf ihren bebauungsfreien Anteil.

Nicht möglich in MUKLIMO_3 ist die gleichzeitige Modellierung von unaufgelöster Bebauung und Baumbestand, weil das derzeitige Strahlungsmodell der unaufgelösten Bebauung (siehe Kap. 4.3) dafür nicht eingerichtet ist. Wird in der Landnutzungstabelle für eine Flächennutzung dennoch beides vereinbart, wird der Baumbestand ignoriert.

Das Bauvolumen sowie die Wand- und Dachflächen der unaufgelösten Bebauung beeinflussen nicht nur das atmosphärische *Strömungsgeschehen*, sondern gehen auch in deren *Wärmegleichung* und – jedenfalls bei begrünten Dächern – in die Feuchtebilanz sowie die Modellierung der Austauschkoefizienten ein. Siehe dazu die entsprechenden Abschnitte des Kapitels 3 über die „atmosphärischen“ Bilanzgleichungen. Die Berechnung der kurz- und langwelligen Strahlung im gebäudefreien Bereich der unaufgelösten Bebauung ist in den Kapiteln 4.3 und 4.5.1 dargestellt.

2.3.5 Baumbestand

Ist der Parameter *hbm* der Baumhöhe (siehe Kap. 2.3) für das Flächenelement F_{ij} größer als Null, so wird über F_{ij} *Baumbestand* modelliert. Er repräsentiert insbesondere Wald oder Parks und beeinflusst die atmosphärischen Gleichungen von MUKLIMO_3 über das diskrete Feld $d_{f;ijk}$ (mit „f“ für „foliage“) seiner *Blattflächendichte*. Diese ist definiert als (einseitig gerechnete) Gesamtfläche aller Blätter pro Gittervolumen V_{ijk} und fungiert in den Bilanzgleichungen des Modells (siehe Kap. 3) als Quelle oder Senke für den Impuls sowie für

Wärme und Feuchte. Die zusätzliche Beeinflussung der kurz- und langwelligen Strahlung ist in den Kapiteln 4.4 und 4.5.2 dargestellt.

Für die Modellierung des Baumbestands werden aus den Grundgrößen hst , $bf0$ und $sigbm$ der Landnutzungstabelle (siehe Kap. 2.3) zunächst die dem *Stammraum* der Bäume zuzurechnenden Werte der Blattflächendichte $d_{f;ijk}^{stem}$ errechnet. Für sie gilt die folgende Beziehung:

$$d_{f;ijk}^{stem} = \begin{cases} sigbm \cdot bf0 & \text{für } z_{k+\frac{1}{2}} \leq hst + h_{0;ij}^* \\ sigbm \cdot bf0 \frac{hst + h_{0;ij}^* - z_{k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} & \text{für } z_{k-\frac{1}{2}} \leq hst + h_{0;ij}^* < z_{k+\frac{1}{2}} \\ 0 & \text{für } z_{k-\frac{1}{2}} > hst + h_{0;ij}^* \end{cases} \quad (18)$$

Es folgt die Ermittlung der Blattflächendichte $d_{f;ijk}^{crown}$ für den *Kronenbereich* der Bäume aus den Grundgrößen hbm , hst , $bf1$ und $sigbm$ der Landnutzungstabelle mithilfe einer zur Gleichung (18) ähnlichen Beziehung, auf deren formelmäßige Darstellung hier verzichtet wird. Die gesamte Blattflächendichte $d_{f;ijk}$ ist dann die Summe beider Anteile, d. h.

$$d_{f;ijk} = d_{f;ijk}^{stem} + d_{f;ijk}^{crown} \quad (19)$$

Der *Boden* unter den Baumkronen einschließlich seines niedrigen Bewuchses wird über die entsprechenden Parameter der Landnutzungstabelle so modelliert, wie im Kapitel 2.3.2 für *Freiflächen* erläutert. Dabei ergeben sich aus der Vorgabe der Bestandsdichte $sigbm$ keine Beschränkungen für den Versiegelungsgrad vs , da auch die Flächen unter den Bäumen versiegelt sein können.

Wegen der im vorangehenden Kapitel 2.3.4 erwähnten Unvereinbarkeit von Baumbestand mit unaufgelöster Bebauung empfiehlt es sich, die Grundflächen von Gebäuden innerhalb eines Baumbestands den versiegelten Flächenanteilen zuzurechnen.

2.4 Aufgelöste Bebauung

Neben unaufgelöster Bebauung ist in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3, ebenso wie in der PC-Basisversion, die Modellierung von *aufgelösten* Einzelgebäuden möglich. Dies geschieht jedoch nicht über die in Kapitel 2.3.1 eingeführte Flächennutzungsdatei. Stattdessen ist in der Namelist-Gruppe „*dateien*“ der *Eingabedatei* eine nach dem Prinzip der *Rechteckdatei* (siehe dazu Kap. 5.7.3.2 in SIEVERS, 2012) aufgebaute Gebäudedatei „*geb_datei*“ anzugeben. Sie gestattet, neben der Modellierung von Gebäudeblöcken, auch die Darstellung wandartiger Hindernisse.

Die Datenzeilen der Gebäudedatei geben, wie in SIEVERS (2012) beschrieben, die horizontalen Eckindizes i_1 , i_2 , j_1 und j_2 sowie die Höhe h_{geb} je eines blockförmigen Einzelgebäudes an. Da die Eckindizes mit den halbzahligen indizierten Zellrandkoordinaten des horizontalen Modellgitters korrespondieren, reicht die Erstreckung eines so spezifizierten Gebäudeblocks von $x_{i_1+1/2}$ bis $x_{i_2+1/2}$ und von $y_{j_1+1/2}$ bis $y_{j_2+1/2}$. Das heißt, er überdeckt alle Flächenelemente F_{ij} mit $i_1 < i \leq i_2$ und $j_1 < j \leq j_2$. Stimmen die Eckindizes i_1 und i_2 oder j_1 und j_2 überein, „entartet“ der Gebäudeblock zu einem wandartigen Hindernis. Zur vertikalen Modellierung des Blocks wird die Geländehöhe des Modellgebiets im zugehörigen Rechteckbereich so angehoben, dass ein aus dem Boden herausragendes massives Strömungshindernis entsteht. Zu seiner Einpassung in das vertikale Modellgitter wird die Summe aus der mittleren Geländehöhe $(h_{i_1 j_1}^* + h_{i_1 j_2}^* + h_{i_2 j_1}^* + h_{i_2 j_2}^*)/4$ und der Gebäudehöhe h_{geb} gebildet und das zu ihr nächstgelegene halbzahlige Gitterniveau $z_{k+1/2}$ bestimmt. Dessen Index wird im Folgenden mit k_{geb} bezeichnet. Der Gebäudeblock reicht dann über seine gesamte horizontale Erstreckung einheitlich bis in die Höhe $z_{k_{geb}+1/2}$.

Als Konsequenz aus der Geländeanhebung über den Flächen mit aufgelöster Bebauung müssen auch die Höhenindizes $n_{0;ij}$, $n_{0;i\pm 1/2j}$ und $n_{0;ij\pm 1/2}$ (vergleiche Kap. 2.2) sowie die Höhendifferenzen Δ_{ij} , $\Delta_{i\pm 1/2j}$ und $\Delta_{ij\pm 1/2}$ im Gebäudebereich revidiert werden zu

$$\begin{aligned} n_{0;ij} &\rightarrow k_{\text{geb}} \quad \text{und} \quad \Delta_{ij} \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad i_1 < i \leq i_2 \quad \text{und} \quad j_1 < j \leq j_2 \\ n_{0;i+\frac{1}{2}j} &\rightarrow k_{\text{geb}} \quad \text{und} \quad \Delta_{i+\frac{1}{2}j} \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad i_1 \leq i \leq i_2 \quad \text{und} \quad j_1 < j \leq j_2 \\ n_{0;ij+\frac{1}{2}} &\rightarrow k_{\text{geb}} \quad \text{und} \quad \Delta_{ij+\frac{1}{2}} \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad i_1 < i \leq i_2 \quad \text{und} \quad j_1 \leq j \leq j_2. \end{aligned} \quad (20)$$

Zugleich werden die „alten“ Werte (vor der Gebäudemodellierung) der betreffenden Felder unter den Bezeichnungen $n_{0;ij}^t$, $n_{0;i\pm 1/2j}^t$ und $n_{0;ij\pm 1/2}^t$ sowie Δ_{ij}^t , $\Delta_{i\pm 1/2j}^t$ und $\Delta_{ij\pm 1/2}^t$ (mit „t“ für „terrain“) beibehalten, da MUKLIMO_3 die Informationen über die Geländehöhe, auch im Gebäudebereich, nach wie vor benötigt. Demnach beschreiben die Größen $n_{0;ij}$, Δ_{ij} usw. die Untergrenze des atmosphärischen Modellbereichs mit Berücksichtigung von Gebäuden, die Größen $n_{0;ij}^t$, Δ_{ij}^t usw. dagegen die Geländehöhe ohne Gebäude. Bei fehlender aufgelöster Bebauung stimmen $n_{0;ij}$ mit $n_{0;ij}^t$, Δ_{ij} mit Δ_{ij}^t usw. überein.

Die Dächer der aufgelösten Bebauung sind in MUKLIMO_3 Teil der Bodengrenzfläche, wobei die Bodenversiegelung *vs* im Bereich der Gebäudeblöcke auf Eins und Rauigkeitslänge auf den über die Eingabedatei vorgebbaren Wert *z0d* abgeändert wird (siehe die Namelist-Gruppe „*boden*“ im Anhang E). Davon abweichende Belegungen der Flächennutzungsdatei werden hierbei überschrieben. Vom Programm nicht automatisch zurückgesetzt werden jedoch von der Flächennutzungsdatei veranlasste Modellierungen von unaufgelöster Bebauung und von Wald. Da beides nicht mit aufgelöster Bebauung vereinbar ist, muss bei der Gestaltung der Flächennutzungsdatei darauf geachtet werden, dass im Bereich von Einzelgebäuden nicht zugleich unaufgelöste Bebauung oder Baumbestand vereinbart werden. Sinnvoll ist eine Belegung der betreffenden Flächenelemente mit Null (Code-Zahl für undefinierte Nutzung), möglich ist auch die Vereinbarung von versiegeltem Boden oder einer anderen Nutzung mit niedrigem Bewuchs.

Die Strukturen der aufgelösten Bebauung, sowohl Gebäudeblöcke als auch wandartige Hindernisse, wirken wegen ihrer Undurchdringlichkeit auf das atmosphärische Strömungsgeschehen ein. Außerdem gibt es Wechselbeziehungen mit dem Wärmehaushalt der Atmosphäre. Diese werden allerdings indirekt modelliert, da MUKLIMO_3 über kein Strahlungsmodell der aufgelösten Bebauung verfügt. Der Kunstgriff besteht darin, dass die Wände der Gebäudeblöcke ihren atmosphärischen Nachbarzellen als Wandflächen einer fiktiven *unaufgelösten* Bebauung zugerechnet werden. Als solche empfangen sie nach Kapitel 4.3 bzw. 4.5.1 berechnete kurz- und langwellige Strahlung und stehen entsprechend Kapitel 3.5.1 im Wärmetausch mit der Atmosphäre. Im Gegenzug wird die atmosphärische Wärmeleichung (88) mit einer *No-Flux*-Bedingung für die Wärmeflüsse an den (aufgelösten) Wandflächen des numerischen Gitters integriert.

3 Atmosphärische Bilanzgleichungen

3.1 Strömungsberechnung

3.1.1 Grundprinzip

Die Grundaufgabe der atmosphärischen Strömungsberechnung ist die zeitliche Integration der Bewegungsgleichung der Atmosphäre. Wie im ersten Teil dieses Berichts (SIEVERS, 2012) ausführlich dargelegt, unterscheidet sich die Basisversion von MUKLIMO_3 von anderen Modellen, indem diese Aufgabe mithilfe eines *Stromfunktions-Vorticity*-Algorithmus gelöst wird. Diesem Ansatz folgt auch die Thermodynamik-Version. Ein zweiter wesentlicher Aspekt ist, dass der Einfluss *unaufgelöster* Bebauung auf das Strömungsgeschehen in den Algorithmus integriert wird.

3.1.2 Atmosphärische Bewegungsgleichung

Die Strömungsberechnung in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 beruht auf der im Folgenden angegebenen, noch ungemittelten *Navier-Stokes*-Gleichung der atmosphärischen Luft im Bezugssystem der rotierenden Erde, die sich in vektorieller Schreibweise darstellt als

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{v} \vec{v} + \nabla \cdot \mathbf{J} = -\nabla p - \rho \nabla \Phi - 2 \vec{\Omega} \times \rho \vec{v} \quad (21)$$

mit den Größen

ρ	Dichte der atmosphärischen Luft,
\vec{v}	Strömungsgeschwindigkeit,
\mathbf{J}	(molekularer) Reibungstensor, auch viskoser Spannungstensor genannt
p	Luftdruck
Φ	Potential der Schwerkraft, auch <i>Geopotential</i> genannt,
$\vec{\Omega}$	Winkelgeschwindigkeit der Erde.

Aus den oben genannten Grundgrößen ergeben sich die zusammengesetzte Größe der Impulsdichte $\rho \vec{v}$ (Impuls pro Masseneinheit) sowie die Dyade $\rho \vec{v} \vec{v}$. Die Wirkung des Divergenzoperators ($\nabla \cdot \dots$) auf sie sowie auf den Reibungstensor \mathbf{J} stellt sich in kartesischer Komponentenschreibweise dar als

$$(\nabla \cdot \rho \vec{v} \vec{v})_k = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \rho v_i v_k}{\partial x_i}; \quad (\nabla \cdot \mathbf{J})_k = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial J_{ik}}{\partial x_i} \quad \text{für } k = 1, 2, 3. \quad (22)$$

Zur Bewegungsgleichung (21) kommt in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 als *Filterbedingung* die Forderung nach *Divergenzfreiheit* für die Impulsdichte $\rho \vec{v}$ des Strömungsfeldes hinzu, d. h. es wird

$$\nabla \cdot \rho \vec{v} = 0 \quad (23)$$

verlangt. Diese Bedingung unterscheidet sich durch die Einbeziehung der Dichte von der in SIEVERS (2012) für die Basisversion von MUKLIMO_3 verlangten Forderung nach Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes. Die Änderung trägt dem Umstand Rechnung, dass die Modellgebiete der Thermodynamik-Version in größere Höhen reichen dürfen als bei der Basisversion, wodurch die Höhenabhängigkeit der Dichte nicht mehr in jedem Fall vernachlässigbar erscheint.

Bei der numerischen Integration der Bewegungsgleichung (21) kommt als weitere Vereinfachung noch die *Boussinesq*-Approximation hinzu, derzufolge Abweichungen der atmosphärischen Dichte ρ von ihrer mittleren Verteilung $\rho_0(z)$ nur dann berücksichtigt werden, wenn sie in Zusammenhang mit der *Schwerkraft* auftreten. Außer beim Term $\rho \nabla \Phi$ wird ρ also angenähert als

$$\rho \approx \rho_0(z). \quad (24)$$

Die mittlere Dichte ist in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 – anders als bei der Basisversion – wegen der zumeist größeren vertikalen Erstreckung der Modellgebiete eine Funktion der Höhe. Sie wird aus der anfänglichen Gleichgewichtsdruckverteilung $p_0(z)$ und dem anfänglichen Temperaturprofil $T_i(z)$ des eindimensionalen *Antriebsmodells* von MUKLIMO_3 (siehe Kap. 6.1.4 und 6.3) über die *ideale Gasgleichung* der trockenen Luft als

$$\rho_0(z) = \frac{R_0 T_i(z)}{p_0(z)}$$

errechnet. Der Gleichgewichtsdruck wiederum ergibt sich aus der vertikalen Integration der *hydrostatischen* Grundgleichung

$$\frac{dp_0}{dz} = -\rho_0 g ,$$

die sich nach ihrer Umformung zu

$$\frac{1}{p_0} \frac{dp_0}{dz} = -\frac{g}{R_0 T_i}$$

integrieren lässt mit dem Resultat

$$p_0(z) = p_0(z=0) \exp\left(-g \int_0^z \frac{dz'}{R_0 T_i}\right) . \quad (25)$$

Dabei ist der Luftdruck in der Höhe $z=0$ in MUKLIMO_3 festgelegt als $p_0(z=0) = 1013$ hPa.

3.1.3 Zweistufiger Mittelungsprozess

In atmosphärischen Modellen wird die Bewegungsgleichung (21) üblicherweise nicht direkt integriert, sondern zuvor *gemittelt*. Das hat den Sinn, die nicht explizit behandelbaren *turbulenten* Schwankungen des Geschwindigkeitsfeldes zu eliminieren. Als Besonderheit werden in MUKLIMO_3 die von der *unaufgelöste* Bebauung (siehe Kap. 2.3.4) verursachten Störungen in den Feldern der atmosphärischen Variablen in diesen Mittelungsprozess mit einbezogen. Das geschieht, wie im ersten Teil dieses Berichts (SIEVERS, 2012, siehe dort Kap. 4.4.3) dargelegt, über die Vorstellung eines fiktiven Modellgebiet-*Ensembles* mit unterschiedlichen Realisierungen der unaufgelösten Bebauung. Das heißt, neben dem eigentlichen Modellgebiet mit seiner real existierenden Bebauung stelle man sich weitere Modellgebiete vor, die innerhalb der bebauten Flächen jeweils denselben Bebauungstyp aufweisen, sich jedoch in der konkreten Anordnung der Gebäude voneinander unterscheiden. Diese Anordnungen seien rein zufällig, und die Zahl der Ensemble-Mitglieder N_E soll so groß sein, dass die Bildung von *Mittelwerten* sinnvoll ist. Sie werden durch eine Tilde ($\widetilde{\dots}$) angezeigt und aus den turbulent gemittelten Werten $\overline{(\dots)_i}$ nach der Regel

$$\widetilde{(\dots)} := \frac{1}{N_E} \sum_{i=1}^{N_E} \overline{(\dots)_i} \quad (26)$$

gebildet.

Vom Ensemble wird erwartet, dass seine Mittelwerte bezüglich der Gebäude- und Wandflächendichte der unaufgelösten Bebauung, v_{geb} bzw. d_w , sowie der Gebäudehöhe h_{geb} die (ortsabhängigen) Modellvorgaben korrekt widerspiegeln.

Zur Durchführung der Ensemble-Mittelung ist es nützlich, zunächst eine „Gebäudeausschluss-Funktion“ $\varepsilon_i(\vec{x})$ einzuführen, die für oberhalb der Bodengrenzfläche liegende Punkte \vec{x} – in Abhängigkeit vom betrachteten Ensemble-Mitglied „ i “ – entweder Null oder Eins ist: Null, wenn \vec{x} zu einem Gebäude gehört, sonst Eins, also

$$\varepsilon_i(\vec{x}) := \begin{cases} 0 & \text{falls } \vec{x} \text{ für das Ensemble-Mitglied } i \text{ ein Gebäudepunkt ist} \\ 1 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (27)$$

Für das Ensemble-Mittel dieser Funktion sollte dann gemäß obiger Forderung gelten

$$\widetilde{\varepsilon}(\vec{x}) = \frac{1}{N_E} \sum_{i=1}^{N_E} \varepsilon_i(\vec{x}) \stackrel{!}{=} 1 - v_{\text{geb}}(\vec{x}) , \quad (28)$$

wobei das Ausrufezeichen über dem Gleichheitszeichen signalisiert, dass es sich um eine Forderung an das Ensemble handelt. Für die Formulierung der entsprechenden Forderung bezüglich der Wandflächendichte d_w

denke man sich den Modellgebietspunkt \vec{x} von einem kleinen Volumen ΔV umgeben. Dieses Volumen enthält dann, in Abhängigkeit von \vec{x} und ΔV , für jedes Ensemble-Mitglied unterschiedliche Wandflächenanteile, die mit $W_i(\vec{x}, \Delta V)$ bezeichnet werden sollen. Für den Grenzfall verschwindend kleiner Volumina ΔV ist dann zu fordern

$$\lim_{\Delta V \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\Delta V} \widetilde{W}(\vec{x}, \Delta V) \right\} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\Delta V N_E} \sum_{i=1}^{N_E} W_i(\vec{x}, \Delta V) \right\} \stackrel{!}{=} d_w(\vec{x}). \quad (29)$$

Mithilfe der gebäudespezifischen Funktion $\varepsilon_i(\vec{x})$ wird eine im Folgenden benötigte „effektive“ Luftdichte ρ_{eff} eingeführt, welche die atmosphärische Luftmasse, statt auf das atmosphärische Volumen, auf das – innerhalb der Bebauung aus Atmosphäre und Gebäuden bestehende – Gesamtvolumen bezieht. Sie ist folglich, unter Nichtbeachtung der in den Gebäuden eingeschlossenen Luft, definiert ist als

$$\rho_{\text{eff}} := \widetilde{\varepsilon} \widetilde{\rho}. \quad (30)$$

Im Rahmen der in Kapitel 3.1.2 eingeführten Boussinesq-Approximation erhält man aus Gleichung (28) für ρ_{eff} die Näherung

$$\rho_{\text{eff}} \approx \widetilde{\varepsilon} \rho_0(z) = (1 - v_{\text{geb}}) \rho_0(z). \quad (31)$$

Für atmosphärische Variable, die im Gebäudeinneren nicht von Interesse oder gar nicht erklärt sind, macht die Mittelung nach der Vorschrift (26) keinen Sinn. Für sie wird stattdessen ein rein atmosphärischer, durch ein „Dach“ (\dots) anstelle der Tilde gekennzeichneter Mittelwert eingeführt. Für „spezifische“ Variable ψ (auf die Masseneinheit bezogene Werte von Bilanzgrößen) ist dieser Mittelwert erklärt als

$$\widehat{\psi} := \frac{\widetilde{\varepsilon \rho \psi}}{\widetilde{\varepsilon \rho}} = \frac{\widetilde{\varepsilon \rho \psi}}{\rho_{\text{eff}}}. \quad (32)$$

Speziell für die mittlere Windgeschwindigkeit $\widehat{\vec{v}}$ (kann als „spezifischer Impuls“ gedeutet werden) ergibt sich daraus der Zusammenhang

$$\widehat{\vec{v}} = \frac{\widetilde{\varepsilon \rho \vec{v}}}{\rho_{\text{eff}}} = \frac{\widetilde{\rho \vec{v}}}{\rho_{\text{eff}}}, \quad (33)$$

wobei der Faktor ε im Zähler der Relation weggelassen werden konnte, da $\rho \vec{v}$ im Gebäudeinneren ohnehin verschwindet.

Für nicht-spezifische Größen (\dots) (z. B. Dichte ρ , Druck p oder Druckgradient ∇p) wird das atmosphärische Mittel nach der Vorschrift

$$(\dots) := \frac{\widetilde{\varepsilon (\dots)}}{\widetilde{\varepsilon}} \quad (34)$$

errechnet. Ist eine Variable (\dots) im Gebäudeinneren erklärt und hat dort den Wert Null, so sind beide Mittelwerte erklärt und zwischen ihnen besteht der Zusammenhang

$$(\dots) = \widetilde{\varepsilon} (\widehat{\dots}) = (1 - v_{\text{geb}}) (\widehat{\dots}). \quad (35)$$

Mit diesen Vorgaben stellt sich das Mittelungsverfahren von MUKLIMO_3 für die atmosphärischen Bilanzgleichungen wie folgt dar:

1. Mittelung der Bilanzgleichungen für den Impuls (Bewegungsgleichung), Wärme und Feuchte jedes einzelnen Ensemble-Mitglieds über die turbulenten Schwankungen in den Feldern der atmosphärischen Variablen. Hierzu werden die atmosphärischen Variablen aufgeteilt in Mittelwerte (\dots) und Schwankungen $(\dots)'$. Die bei der Mittelung der Bilanzgleichungen entstehenden Korrelationsprodukte der im Detail unbekanntenen turbulenten Schwankungen werden als *turbulente Flüsse* gedeutet und mithilfe von *Parametrisierungsansätzen* berechnet.

Die turbulent gemittelten Bilanzgleichungen der einzelnen Ensemble-Mitglieder sehen zwar formal identisch aus, haben aber dennoch verschiedene Lösungen, da sie zu jeweils unterschiedlichen Realisierungen der unaufgelösten Bebauung zeitlich integriert werden. Zur Kennzeichnung ihrer Zugehörigkeit werden die atmosphärischen Felder deshalb mit der Nummer i ihres Ensemble-Mitglieds versehen. Aus jeder der drei atmosphärischen Bilanzgleichungen entsteht somit ein Ensemble von N_E über die turbulenten Schwankungen gemittelten prognostischen Gleichungen.

2. Für die nachfolgende Ensemble-Mittelung werden die turbulent gemittelten, mitgliederspezifischen atmosphärischen Felder aufgespalten in mittlere Felder $(\overline{\dots})$ und individuelle Abweichungen $(\overline{\dots})_i - (\overline{\dots})$. Die bei der Ensemble-Mittelung als Folge dieser Aufspaltung entstehenden Korrelationsprodukte werden als *Umlenkungsflüsse* bezeichnet, da sie in engem Zusammenhang mit der Umlenkung der atmosphärischen Strömung durch die individuellen Gebäude stehen. Sie müssen, ähnlich wie die turbulenten Flüsse, *parametrisiert* werden. Die Abbildung 8 auf S. 64 zeigt die gebäudeinduzierte Strömungsdurchmischung beispielhaft für eine Tracer-Substanz, deren „Ausbreitungsfahne“ auf eine Anordnung von 25 aufgelösten Einzelgebäuden trifft und dadurch gespreizt wird.
3. Als Resultat der vorstehend beschriebenen zweistufigen Mittelung erhält man prognostische Gleichungen für turbulent gemittelte atmosphärische Variable, die im Bereich von unaufgelöst modellierter Bebauung zu keiner bestimmten Gebäudeverteilung gehören, sondern mittlere Verhältnisse zu verschiedenen denkbaren Gebäudeanordnungen repräsentieren.
4. Die aus der zeitlichen Integration der zweistufig gemittelten Bilanzgleichungen erhaltenen atmosphärischen Felder repräsentieren im Bereich unaufgelöster Bebauung zwar grundsätzlich Mittelwerte über ein fiktives Modellgebiets-Ensemble mit unterschiedlich realisierten Bebauungen. Sie können aber recht gut auch als *flächige* Mittelwerte über ausreichend große Teilbereiche einer realen Bebauung gedeutet werden. Dies wird in Abbildung 8 auf S. 64 demonstriert. Man muss sich allerdings darüber im Klaren sein, dass an die Details einer speziellen Gebäudeanordnung gebundene Besonderheiten der atmosphärischen Felder durch die Mittelung verloren gehen. Insbesondere können die Resultate von Windfeldmessungen innerhalb der Bebauung von der Anordnung der Einzelgebäude beeinflusst sein und stark von den prognostizierten Mittelwerten abweichen. Auch die Unterschiede in der Lufttemperatur zwischen besonnten und schattigen Teilflächen der Bebauung werden durch die Mittelung verwischt.

Die Einbeziehung von Baumbestand in die atmosphärischen Bilanzgleichungen erfordert im Prinzip dieselbe Vorgehensweise wie bei der unaufgelösten Bebauung, d. h. die Einführung eines Ensembles von Modellgebieten, in denen die Einzelbäume der Bereiche mit Baumbestand jeweils unterschiedlich arrangiert sind, mit anschließender Mittelung der atmosphärischen Bilanzgleichungen über dieses Ensemble. Auf die explizite Darstellung dieser Mittelung wird jedoch verzichtet, da sie ganz analog zum Mittelungsprozess der unaufgelösten Bebauung verläuft. Stattdessen werden die sich ergebenden Zusatzterme direkt in die Bilanzgleichungen eingeführt und geeignet parametrisiert.

3.1.4 Gemittelte Bewegungsgleichung

Bei der Mittelung der Bewegungsgleichung (21) nach den Prinzipien des Kapitels 3.1.3 ist zu bedenken, dass auch solche Punkte des dreidimensionalen Modellgebiets, die für einige Ensemble-Mitglieder im Inneren eines Gebäudes oder gar in einer Gebäudewand liegen, in den Prozess mit einbezogen werden. Die Bewegungsgleichung wird deshalb so umformuliert, dass die in ihr auftretenden Terme im Gebäudeinneren entweder von sich aus verschwinden oder problemlos Null gesetzt werden können, so dass sie mit diesem Wert auch in die Gebäudewände fortsetzbar sind. Dabei wird vereinfachend davon ausgegangen, dass die Innenluft der Gebäude vom atmosphärischen Geschehen abgekoppelt ist (keine offenen Fenster!).

Bei der Impulsdichte $\rho\vec{v}$ ist diese Bedingung von sich aus erfüllt, da die Luft im Gebäudeinneren als ruhend angenommen wird. In den Wänden ist \vec{v} zwar nicht definiert, dafür aber verschwindet dort die Luftdichte ρ , so dass $\rho\vec{v}$ auch in den Wänden problemlos Null gesetzt werden kann. Für die angemessene Umformung der übrigen Terme wird benutzt, dass die Bewegungsgleichung der ruhenden Gebäudeluft sich auf statische Verhältnisse reduziert. Das heißt, neben der Geschwindigkeit \vec{v} verschwindet im Gebäudeinneren auch der horizontale Druckgradient $\nabla_h p$, während seine Vertikalkomponente mit der Schwerkraft im Gleichgewicht ist. Für die Einbeziehung der Gebäude in den Mittelungsprozess wird deshalb die Umformung

$$-\nabla p - \rho\nabla\Phi = -\nabla_h p - \delta\rho\nabla\Phi \quad (36)$$

vorgenommen, in der die Druckabweichung $\delta\rho$ definiert ist als

$$\delta\rho := \rho + \frac{1}{g} \frac{\partial p}{\partial z} \quad \text{mit } g = -\frac{d\Phi}{dz} = \text{Schwerkraft} . \quad (37)$$

Man beachte, dass beide Anteile auf der rechten Seite von Gleichung (36) im Gebäudeinneren verschwinden. Mit der Umformung (36) erhält die Bewegungsgleichung (21) nach ihrer turbulenten Mittelung für das Ensemble-Mitglied „i“ die Form

$$\frac{\partial(\overline{\rho\vec{v}})_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho\vec{v}})_i \overline{\vec{v}}_i + \nabla \cdot \mathbf{J}_{T,i} + \overline{\nabla \cdot \mathbf{J}}_i = -\overline{\nabla_h p}_i - \overline{\delta\rho}_i \nabla\Phi - 2\vec{\Omega} \times (\overline{\rho\vec{v}})_i , \quad (38)$$

in welcher der turbulente Spannungs- oder Reynoldstensor $\mathbf{J}_{T,i}$ sich aus den Impuls- und Geschwindigkeitschwankungen, $(\rho\vec{v})'_i$ und \vec{v}'_i , errechnet als

$$\mathbf{J}_{T,i} = \overline{(\rho\vec{v})'_i \vec{v}'_i} . \quad (39)$$

Für die nun noch anstehende Ensemble-Mittelung der Gleichung (38) werden die Größen $(\rho\vec{v})_i$, \vec{v}_i , $\nabla_h p_i$ und $\delta\rho_i$ im Gebäudeinneren einschließlich der Wände zu Null angenommen und die mittlere Impulsdichte $(\overline{\rho\vec{v}})_i$ und Geschwindigkeit $\overline{\vec{v}}_i$ aufgespalten als

$$(\overline{\rho\vec{v}})_i = \widetilde{\rho\vec{v}} + ((\overline{\rho\vec{v}})_i - \widetilde{\rho\vec{v}}) ; \quad \overline{\vec{v}}_i = \widehat{\vec{v}} + (\overline{\vec{v}}_i - \widehat{\vec{v}}) . \quad (40)$$

Das Resultat der nach Gleichung (26) durchgeführten Mittelung ist dann

$$\frac{\partial\widetilde{\rho\vec{v}}}{\partial t} + \nabla \cdot \widetilde{\rho\vec{v}} \widehat{\vec{v}} + \nabla \cdot \mathbf{J}_U + \overline{\nabla \cdot \mathbf{J}}_T + \overline{\nabla \cdot \mathbf{J}} = -\widetilde{\nabla_h p} - \widetilde{\delta\rho} \nabla\Phi - 2\vec{\Omega} \times \widetilde{\rho\vec{v}} . \quad (41)$$

Der *gebäudeinduzierte* Spannungstensor \mathbf{J}_U ist hierbei definiert als

$$\mathbf{J}_U := \frac{1}{N_E} \sum_{i=1}^{N_E} ((\overline{\rho\vec{v}})_i - \widetilde{\rho\vec{v}}) (\overline{\vec{v}}_i - \widehat{\vec{v}}) \quad (42)$$

mit der Kennzeichnung „U“ für *Umlenkung*. Er beschreibt die zusätzliche Durchmischung der Atmosphäre infolge der Strömungsumlenkung durch die Gebäude, deren Folgen für die Ausbreitung einer Luftbeimengung in der Abbildung 8 auf S. 64 demonstriert werden.

Für die Weiterentwicklung der rechten Seite von Gleichung (26) ist es erforderlich, die dort auftretenden Ensemble-Mittelwerte $\widetilde{\nabla_h p}$ und $\widetilde{\delta\rho}$ auf die entsprechenden atmosphärischen Mittel zurückzuführen. Da sowohl $\nabla_h p$ als auch $\delta\rho$ im Gebäudeinneren verschwinden bzw. (in den Wänden) Null gesetzt werden können, besteht nach Gleichung (35) der Zusammenhang

$$\begin{aligned} \widetilde{\nabla_h p} &= \widetilde{\varepsilon} \widehat{\nabla_h p} = (1 - v_{\text{geb}}) \widehat{\nabla_h p} \\ \widetilde{\delta\rho} &= \widetilde{\varepsilon} \widehat{\delta\rho} = \widetilde{\varepsilon} \widehat{\rho} + \frac{\widetilde{\varepsilon}}{g} \frac{\partial \widehat{p}}{\partial z} = (1 - v_{\text{geb}}) \left\{ \widehat{\rho} + \frac{1}{g} \frac{\partial \widehat{p}}{\partial z} \right\} . \end{aligned} \quad (43)$$

Damit kann das Agglomerat $-\widetilde{\nabla}_h p - \widetilde{\delta\rho} \nabla\Phi$ umarrangiert werden zu

$$-\widetilde{\nabla}_h p - \widetilde{\delta\rho} \nabla\Phi = - (1 - v_{\text{geb}}) (\widetilde{\nabla} p + \widetilde{\rho} \nabla\Phi) . \quad (44)$$

Bei der Rückführung der gemittelten Divergenzen $\widetilde{\nabla} \cdot \widetilde{\mathbf{J}}_T$ und $\widetilde{\nabla} \cdot \widetilde{\mathbf{J}}$ auf die Divergenzen der gemittelten Impulsflussdichten ist Umsicht angesagt, da diese für jedes einzelne Ensemble-Mitglied im Gebäudeinneren verschwinden, nicht aber bei Annäherung an ein Gebäude von außen. Werden die Impulsflussdichten erst gemittelt, so werden diese Unstetigkeiten geglättet, und es gibt keine Probleme bei der anschließenden Differentiation. Wird aber zuerst differenziert, so entstehen an den Gebäudegrenzen Singularitäten nach Art der Diracschen δ -Funktion, die bei der nachfolgenden Mittelung berücksichtigt werden müssen. Die Konsequenz daraus ist, dass die Prozesse der Mittelung und Divergenzbildung nicht vertauschbar sind, d. h.

$$\widetilde{\nabla} \cdot \widetilde{\mathbf{J}}_T \neq \nabla \cdot \widetilde{\mathbf{J}}_T ; \quad \widetilde{\nabla} \cdot \widetilde{\mathbf{J}} \neq \nabla \cdot \widetilde{\mathbf{J}} .$$

Zur Kompensation dieser Ungleichheit wird die Summe der beiden gemittelten Divergenzterme deshalb angesetzt als

$$\widetilde{\nabla} \cdot \widetilde{\mathbf{J}}_T + \widetilde{\nabla} \cdot \widetilde{\mathbf{J}} =: \nabla \cdot \widetilde{\mathbf{J}}_T + \nabla \cdot \widetilde{\mathbf{J}} - \widetilde{Q}_{\text{visk}}^m , \quad (45)$$

wobei die durch Gleichung (45) eingeführte Größe $\widetilde{Q}_{\text{visk}}^m$ (mit „m“ für „momentum“) eine noch unbestimmte Impulsquelle (bzw. Senke) darstellt, welche die Bremsung der atmosphärischen Strömung zwischen den Gebäuden durch molekulare und turbulente Reibung an deren Wänden repräsentiert.

Außer den Impulsflussdichten sind auch die turbulent gemittelten Druckfelder \widetilde{p}_i der individuellen Ensemble-Mitglieder an den Gebäuden unstetig, da in ihrem Luv Staudruck und im Lee Unterdruck auftritt. Ensemble-Mittelung und Gradientbildung des Luftdrucks sind daher nicht vertauschbar:

$$\widetilde{\nabla}_h p \neq \nabla_h \widehat{p} .$$

Mit einer weiteren, ebenfalls noch unbestimmten Impulsquelle wird der mittlere Druckgradient $\widetilde{\nabla}_h p$ deshalb ersetzt durch

$$\widehat{\nabla} p =: \nabla \widehat{p} - \widetilde{Q}_p^m / (1 - v_{\text{geb}}) . \quad (46)$$

Die damit eingeführte Größe \widetilde{Q}_p^m (mit „p“ für „pressure“) repräsentiert den Impulsübertrag von der Atmosphäre auf die Bebauung infolge des Staudrucks im Luv und des Unterdruck im Lee der Einzelgebäude.

Mit den vorstehenden Umformungen und Ersetzungen erhält die über das Modellgebiets-Ensemble gemittelte Bewegungsgleichung ihre endgültige Form

$$\frac{\partial \widetilde{\rho \vec{v}}}{\partial t} + \nabla \cdot \widetilde{\rho \vec{v} \vec{v}} + \nabla \cdot (\mathbf{J}_U + \widetilde{\mathbf{J}}_T + \widetilde{\mathbf{J}}) = \widetilde{Q}_{\text{visk}}^m + \widetilde{Q}_p^m - (1 - v_{\text{geb}}) \nabla \widehat{p} - \rho_{\text{eff}} \nabla\Phi - 2 \vec{\Omega} \times \widetilde{\rho \vec{v}} . \quad (47)$$

Die Auswirkungen unaufgelöster Bebauung auf das atmosphärische Strömungsgeschehen spiegeln sich in ihr vor allem im Auftreten des zusätzlichen Spannungstensors \mathbf{J}_U sowie der beiden Impulsquellen $\widetilde{Q}_{\text{visk}}^m$ und \widetilde{Q}_p^m wider. Diese Größen sind vorläufig unbestimmt und müssen im Folgenden sinnvoll parametrisiert werden.

3.1.5 Divergenzfreiheit und impulsbezogener Stromfunktionsansatz

Zur mittleren Bewegungsgleichung (47) der Thermodynamik-Version kommt als *Filterbedingung* die ebenfalls zu mittelnde Forderung der Gleichung (23) nach Divergenzfreiheit des Impulsdichtefeldes $\rho \vec{v}$ hinzu. Sie geht bei Durchführung der im vorangehenden Kapitel 3.1.3 besprochenen Ensemble-Mittelung in die Forderung

$$\widetilde{\nabla} \cdot \widetilde{\rho \vec{v}} = \nabla \cdot \widetilde{\rho \vec{v}} = 0 \quad (48)$$

über, d. h. die für das ungemittelte Feld $\rho\vec{v}$ geforderte Divergenzfreiheit gilt auch für das Ensemble-Mittel $\widetilde{\rho\vec{v}}$ der Impulsdichte.

Ähnlich wie in der Basisversion von MUKLIMO_3, in der die Filterbedingung $\nabla \cdot \vec{v} = 0$ durch die Einführung einer zweikomponentigen *Stromfunktion* $\vec{\psi}$ erfüllt wird (Kap. 2.3.2 in SIEVERS, 2012), kann die gemittelte Divergenzfreiheitsbedingung der Gleichung (48) durch einen Ansatz der Form

$$\widetilde{\rho\vec{v}} = -\nabla \times \widetilde{\vec{\psi}} \quad (49)$$

mit einer zweikomponentigen, *impulsbezogenen* Stromfunktion

$$\widetilde{\vec{\psi}} = \tilde{\psi}_1 \vec{e}_1 + \tilde{\psi}_2 \vec{e}_2 \quad (50)$$

erfüllt werden. Sie wird, zur Unterscheidung von der normalen, geschwindigkeitsbezogenen Stromfunktion $\vec{\psi}$ durch eine Tilde ($\tilde{}$) gekennzeichnet.

Dem Ansatz der Gleichung (49) entspricht die folgende Komponentendarstellung:

$$\widetilde{\rho u} = \frac{\partial \tilde{\psi}_2}{\partial z} ; \quad \widetilde{\rho v} = -\frac{\partial \tilde{\psi}_1}{\partial z} \quad \widetilde{\rho w} = \frac{\partial \tilde{\psi}_1}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{\psi}_2}{\partial x} . \quad (51)$$

Das so errechnete Feld der mittleren Impulsdichte $\widetilde{\rho\vec{v}}$ ist stets automatisch divergenzfrei. Aus ihm erhält man entsprechend Gleichung (33) die mittlere Geschwindigkeit $\widehat{\vec{v}}$ als

$$\widehat{\vec{v}} = \frac{\widetilde{\rho\vec{v}}}{\rho_{\text{eff}}} . \quad (52)$$

Der Stromfunktionsansatz der Gleichung (51) mit Einbeziehung der unaufgelösten Bebauung wurde erstmalig in SIEVERS (1990) vorgestellt. Ohne Einbeziehung unaufgelöster Bebauung wird er auch im TVM-Modell (Thermal Vorticity Model) von THUNIS und CLAPPIER (2000) verwendet.

3.1.6 Impulsbezogene Vorticity und Stromfunktionsgleichung

Im Zusammenhang mit der Einführung einer Stromfunktion ist es üblich, von der prognostischen Gleichung für die Geschwindigkeit bzw. im vorliegenden Fall für die Impulsdichte zu einer prognostischen Gleichung für die *Vorticity* überzugehen. In Ergänzung zur impulsbezogenen Stromfunktion $\vec{\psi}$ wird deshalb durch die Definition

$$\vec{\zeta} = \nabla \times \rho\vec{v} \quad (53)$$

eine ebenfalls auf die *Impulsdichte* bezogene Vorticity $\vec{\zeta}$ eingeführt. Zwischen den beiden Komponenten der Stromfunktion $\vec{\psi}$ sowie der ersten und zweiten Komponente der Vorticity $\vec{\zeta}$ besteht dann die *Stromfunktionsgleichung* genannte Beziehung

$$\begin{aligned} \tilde{\zeta}_1 &:= \frac{\partial^2 \tilde{\psi}_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\psi}_1}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \tilde{\psi}_2}{\partial y \partial x} \\ \tilde{\zeta}_2 &:= \frac{\partial^2 \tilde{\psi}_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\psi}_2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \tilde{\psi}_1}{\partial x \partial y} , \end{aligned} \quad (54)$$

mittels der $\tilde{\psi}_1$ und $\tilde{\psi}_2$ aus gegebenen $\tilde{\zeta}_1$ und $\tilde{\zeta}_2$ zu bestimmen sind. Da die impulsbezogene Gleichung (54) formal mit der im ersten Teil des Berichts (siehe Kap. 3.4.2 in SIEVERS, 2012) behandelten (geschwindigkeitsbezogenen) Stromfunktionsgleichung übereinstimmt, ist das Lösungsverfahren der MUKLIMO_3 Basisversion (siehe SIEVERS, 2012, Kap. 3.4.3) für die Thermodynamik-Version übernommen worden. Auf seine erneute Darstellung wird deshalb verzichtet.

Die neben der impulsbezogenen Vorticity $\vec{\zeta}$ auch benötigte *geschwindigkeitsbezogene* Vorticity $\vec{\zeta}$ wird, nach Lösung der Stromfunktionsgleichung (54) und Berechnung der Impulsdichte- und Geschwindigkeitsfelder $\widetilde{\rho\vec{v}}$ bzw. $\widehat{\vec{v}}$ aus den Gleichungen (51) und (34), diagnostisch aus der Beziehung

$$\vec{\zeta} = \nabla \times \widehat{\vec{v}} \quad (55)$$

errechnet.

3.1.7 Vorticity-Gleichung

Die prognostische Gleichung für die (impulsbezogene) Vorticity oder kurz: *Vorticity*-Gleichung erhält man durch Rotationsbildung der gemittelten Bewegungsgleichung (47) mit anschließender Beschränkung auf die erste und zweite Komponente der entstehenden Gleichung. Der Übersichtlichkeit halber wird die zugrunde liegende Bewegungsgleichung (47) hier noch einmal in der prinzipiellen Schreibweise

$$\frac{\partial \widetilde{\rho\vec{v}}}{\partial t} + (\widetilde{\rho\vec{v}} \cdot \nabla) \widehat{\vec{v}} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{\text{eff}} = \vec{Q}_{\text{geb/f}}^m - (1 - v_{\text{geb}}) \nabla \widehat{p} - \rho_{\text{eff}} \nabla \Phi - 2\vec{\Omega} \times \widetilde{\rho\vec{v}} \quad (56)$$

wiederholt, mit den Zusammenfassungen

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\text{eff}} &= \mathbf{J}_U + \widetilde{\mathbf{J}}_T + \widetilde{\mathbf{J}} \\ \vec{Q}_{\text{geb/f}}^m &= \vec{Q}_{\text{visk}}^m + \vec{Q}_p^m. \end{aligned} \quad (57)$$

Hierbei bleibt offen, ob der Spannungstensor \mathbf{J}_U sowie der Impulsquellterm $\vec{Q}_{\text{geb/f}}^m$ und die durch ihn repräsentierte Bremskraft von unaufgelöster Bebauung (\vec{Q}_{geb}^m) oder von einem eventuellen *Baumbestand* (\vec{Q}_f^m) herühren. Vergleiche hierzu die Anmerkung im vorletzten Absatz des Kapitels 3.1.3. Bei der Umformung des Advektionsterms $\nabla \cdot \widetilde{\rho\vec{v}} \widehat{\vec{v}}$ der Gleichung (47) zu seiner Form $(\widetilde{\rho\vec{v}} \cdot \nabla) \widehat{\vec{v}}$ in Gleichung (56) wurde von der Divergenzfreiheitsbedingung (48) Gebrauch gemacht.

Der Übergang von der Tendenzgleichung (56) für die Impulsdichte $\widetilde{\rho\vec{v}}$ zur prognostischen Gleichung für die impulsbezogene Vorticity $\vec{\zeta}$ geschieht durch Rotationsbildung der gesamten Gleichung. Sie wird im Folgenden Term für Term abgehandelt:

1. Die *Tendenz* $\partial \widetilde{\rho\vec{v}} / \partial t$ der Impulsdichte wird bei der Rotationsbildung, mit Vertauschung von zeitlicher Ableitung und der Rotationsbildung, transformiert gemäß

$$\frac{\partial \widetilde{\rho\vec{v}}}{\partial t} \rightarrow \nabla \times \frac{\partial \widetilde{\rho\vec{v}}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \widetilde{\rho\vec{v}} = \frac{\partial \vec{\zeta}}{\partial t}. \quad (58)$$

2. Die Rotationsbildung des *Advektionsterms* $(\widetilde{\rho\vec{v}} \cdot \nabla) \widehat{\vec{v}}$ ergibt, mit dem Zusammenhang der Gleichung (52) und unter Benutzung der Identität

$$(\widehat{\vec{v}} \cdot \nabla) \widehat{\vec{v}} = \frac{\nabla (\widehat{\vec{v}} \cdot \widehat{\vec{v}})}{2} - \widehat{\vec{v}} \times (\nabla \times \widehat{\vec{v}})$$

den Übergang

$$(\widetilde{\rho\vec{v}} \cdot \nabla) \widehat{\vec{v}} \rightarrow \nabla \times \left\{ \rho_{\text{eff}} \frac{\nabla \widehat{\vec{v}} \cdot \widehat{\vec{v}}}{2} - \widetilde{\rho\vec{v}} \times (\nabla \times \widehat{\vec{v}}) \right\} = \nabla \rho_{\text{eff}} \times \frac{\nabla \widehat{\vec{v}} \cdot \widehat{\vec{v}}}{2} - \nabla \times (\widetilde{\rho\vec{v}} \times \vec{\zeta}). \quad (59)$$

3. Die Divergenz des zusammengefassten *Reynoldstensors* \mathbf{J}_{eff} wird parametrisiert als

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_{\text{eff}} = \nabla \times \rho_{\text{eff}} K_m \vec{\zeta}$$

(vergleiche Gl. 3.6 in SIEVERS, 2012). Das ergibt den Übergang

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_{\text{eff}} \rightarrow \nabla \times (\nabla \cdot \mathbf{J}_{\text{eff}}) = \nabla \times (\nabla \times \rho_{\text{eff}} K_m \vec{\zeta}) . \quad (60)$$

4. Für die durch $\vec{Q}_{\text{geb}/f}^m$ repräsentierten Bremskräfte gilt, vorläufig ohne weitere Umformung, der Übergang

$$\vec{Q}_{\text{geb}/f}^m \rightarrow \nabla \times \vec{Q}_{\text{geb}/f}^m . \quad (61)$$

5. Die Ausdrücke $(1 - v_{\text{geb}}) \nabla \widehat{p}$ und $\rho_{\text{eff}} \nabla \Phi$ werden gemeinsam betrachtet. Diese Zusammenfassung beinhaltet die auf die Luftpakete wirkende Auftriebskraft. Bei der Rotationsbildung ergibt sich dann der Übergang

$$\begin{aligned} & - (1 - v_{\text{geb}}) \nabla \widehat{p} - \rho_{\text{eff}} \nabla \Phi = - (1 - v_{\text{geb}}) (\nabla \widehat{p} + \widehat{\rho} \nabla \Phi) \\ & \rightarrow - \nabla \times \left\{ (1 - v_{\text{geb}}) (\nabla \widehat{p} + \widehat{\rho} \nabla \Phi) \right\} \\ & = - \nabla (1 - v_{\text{geb}}) \times (\nabla \widehat{p} + \widehat{\rho} \nabla \Phi) - (1 - v_{\text{geb}}) \nabla \widehat{\rho} \times \nabla \Phi . \end{aligned} \quad (62)$$

Hiervon wird der erste Term der rechten Seite vernachlässigt, da er – wegen der hydrostatischen Grundgleichung – näherungsweise Null ist. Zum Faktor $\nabla \widehat{\rho} \times \nabla \Phi$ des zweiten Terms trägt nur der horizontale Anteil des Dichtegradienten $\nabla_h \widehat{\rho}$ etwas bei. Dieser wird approximiert als

$$\nabla_h \widehat{\rho} = \rho_0 \nabla_h \frac{\widehat{p}}{\rho_0} \approx - \rho_0 \frac{\nabla_h \widehat{T}}{\widehat{T}} \quad (63)$$

entsprechend der Annahme, dass Abweichungen der Dichte $\widehat{\rho}$ von der Gleichgewichtsverteilung $\rho_0(z)$ im Wesentlichen auf Temperaturschwankungen zurückgeführt werden können. Mit der Näherung (31) stellt sich die endgültige, in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 benutzte Transformation des Auftriebsterms dann dar als

$$- (1 - v_{\text{geb}}) \nabla \widehat{p} - \rho_{\text{eff}} \nabla \Phi \rightarrow \frac{\rho_{\text{eff}}}{\widehat{T}} \nabla_h \widehat{T} \times \nabla \Phi . \quad (64)$$

6. Für den *Coriolis*-Term $(-2\vec{\Omega} \times \widetilde{\rho\vec{v}})$ kann der Übergang, mit Faktorvertauschung beim Kreuzprodukt, geschrieben werden als

$$- 2\vec{\Omega} \times \widetilde{\rho\vec{v}} \rightarrow \nabla \times (\widetilde{\rho\vec{v}} \times 2\vec{\Omega}) . \quad (65)$$

Das Ergebnis kann dann mit dem zweiten Summanden des Advektionsterms auf der rechten Seite von Gleichung (59) zusammengefasst werden mit dem Resultat

$$- \nabla \times (\widetilde{\rho\vec{v}} \times \vec{\zeta}) - \nabla \times (\widetilde{\rho\vec{v}} \times 2\vec{\Omega}) = - \nabla \times (\widetilde{\rho\vec{v}} \times \vec{\zeta}^*) , \quad (66)$$

wobei die „Gesamt-Vorticity“ $\vec{\zeta}^*$ erklärt ist als

$$\vec{\zeta}^* := \vec{\zeta} + 2\vec{\Omega} . \quad (67)$$

Mit den vorstehenden Teilresultaten des Rotationsübergangs ergibt sich aus der gemittelten Bewegungsgleichung (56) die vektorielle Vorticity-Gleichung in der Form

$$\frac{\partial \vec{\zeta}}{\partial t} - \nabla \times (\widetilde{\rho\vec{v}} \times \vec{\zeta}^*) + \nabla \rho_{\text{eff}} \times \frac{\nabla \widehat{\vec{v}} \cdot \widehat{\vec{v}}}{2} + \nabla \times (\nabla \times \rho_{\text{eff}} K_m \vec{\zeta}) = \nabla \times \vec{Q}_{\text{geb}/f}^m + \frac{\rho_{\text{eff}}}{\widehat{T}} \nabla_h \widehat{T} \times \nabla \Phi . \quad (68)$$

Als weitere Vereinfachung wird in MUKLIMO_3 von der Coriolis-Kraft $2\vec{\Omega} \times \widetilde{\rho\vec{v}}$ nur der Anteil berücksichtigt, der einer Drehung des Modellgebiets um seine vertikale Achse \vec{e}_3 entspricht, d. h. es wird die Ersetzung

$$2\vec{\Omega} \rightarrow f \vec{e}_3 \quad (69)$$

vorgenommen. Dabei ist f der sogenannte Coriolis-Parameter, der sich aus der Winkelgeschwindigkeit Ω der Erde und der geografischen Breite φ_{geo} des Modellgebiets errechnet als

$$f = 2 \Omega \sin \varphi_{\text{geo}} . \quad (70)$$

In MUKLIMO_3 gilt demnach für die Komponenten der Gesamt-Vorticity ζ_3^* der Zusammenhang

$$\zeta_1^* = \zeta_1 ; \quad \zeta_2^* = \zeta_2 ; \quad \zeta_3^* = \zeta_3 + 2 \Omega_3 = \zeta_3 + f . \quad (71)$$

Damit können die in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 für die Geschwindigkeitsprognose herangezogenen ersten beiden Komponenten der Vorticity-Gleichung in der Form

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \widetilde{\zeta}_1}{\partial t} + \frac{\partial(\widetilde{\rho v} \zeta_1 - \widetilde{\rho u} \zeta_2)}{\partial y} + \frac{\partial(\widetilde{\rho w} \zeta_1 - \widetilde{\rho u} \zeta_3^*)}{\partial z} + \frac{\partial \rho_{\text{eff}}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\widetilde{\vec{v}} \cdot \widetilde{\vec{v}}}{2} \right) - \frac{\partial \rho_{\text{eff}}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\widetilde{\vec{v}} \cdot \widetilde{\vec{v}}}{2} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_1}{\partial y} - \frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_2}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_1}{\partial z} - \frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_3}{\partial x} \right) \\ & = - \frac{\partial Q_2^m}{\partial z} + g \frac{\rho_{\text{eff}}}{\widehat{T}} \frac{\partial \widehat{T}}{\partial y} \end{aligned} \quad (72)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \widetilde{\zeta}_2}{\partial t} + \frac{\partial(\widetilde{\rho u} \zeta_2 - \widetilde{\rho v} \zeta_1)}{\partial x} + \frac{\partial(\widetilde{\rho w} \zeta_2 - \widetilde{\rho v} \zeta_3^*)}{\partial z} + \frac{\partial \rho_{\text{eff}}}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\widetilde{\vec{v}} \cdot \widetilde{\vec{v}}}{2} \right) - \frac{\partial \rho_{\text{eff}}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\widetilde{\vec{v}} \cdot \widetilde{\vec{v}}}{2} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_2}{\partial x} - \frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_1}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_2}{\partial z} - \frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_3}{\partial y} \right) \\ & = \frac{\partial Q_1^m}{\partial z} - g \frac{\rho_{\text{eff}}}{\widehat{T}} \frac{\partial \widehat{T}}{\partial x} \end{aligned} \quad (73)$$

geschrieben werden.

3.1.8 Auftriebsterm

Die numerischen Erfahrungen mit dem Auftriebsterm $\rho_{\text{eff}} / \widehat{T} \nabla_{\text{h}} \widehat{T} \times \nabla \Phi$ der vektoriellen Vorticity-Gleichung (68) haben gezeigt, dass er zur Ausbildung von *Störungen* in den simulierten Geschwindigkeits- und Temperaturfeldern führen kann, die an *Konvektionsrollen* erinnern (vergleiche Abb. 4 unten). Die Ursache dieser *unerwünschten* Strukturen wurde in einem *Konflikt* des Auftriebsterms mit der Modellierung des Diffusionskoeffizienten K_m (siehe Kap. 3.6.2) vermutet: Da K_m im Fall einer labilen Schichtung der Atmosphäre den Austausch über konvektive Prozesse mit beinhaltet, könnte die zusätzliche Modellierung des Auftriebs in der Vorticity-Gleichung eine *doppelte* Berücksichtigung des konvektiven Antriebs der Atmosphäre bewirken.

Da also die Wirkung konvektiver Prozesse in MUKLIMO_3 über die Modellierung des turbulenten Austauschs bereits ausreichend berücksichtigt und ihre aufgelöste Modellierung nicht erwünscht ist, sollte der Auftrieb in der Vorticity-Gleichung im Fall stark *labiler* atmosphärischer Schichtung konsequenterweise *unterdrückt* werden. Zugleich muss er aber bei *stabiler* und – wenigstens teilweise – auch bei schwach labiler Schichtung *erhalten* bleiben, da sonst der Antrieb für *Kaltluftströmungen* und *Hangaufwinde* entfallen würde. Die Aufgabe

bestand jetzt darin, eine Lösung zu suchen, die beiden Forderungen – möglichst ohne „Sprünge“ – gleichzeitig gerecht wird. Sie wurde in dem Übergang

$$\frac{\rho_{\text{eff}}}{\widehat{T}} \nabla_{\text{h}} \widehat{T} \times \nabla \Phi \rightarrow \frac{1}{2} (1 + \tanh \xi) \frac{\rho_{\text{eff}}}{\widehat{T}} \nabla_{\text{h}} \widehat{T} \times \nabla \Phi \quad (74)$$

gefunden, in dem der von der lokalen thermischen Schichtung $\partial \widehat{\theta} / \partial z$ abhängige Parameter ξ definiert ist als

$$\xi := \frac{10}{\gamma_{\text{ad}}} \frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial z}. \quad (75)$$

Mit ihm konnte das Auftreten der unerwünschten Störungen unterbunden werden, siehe Abbildung 4 oben.

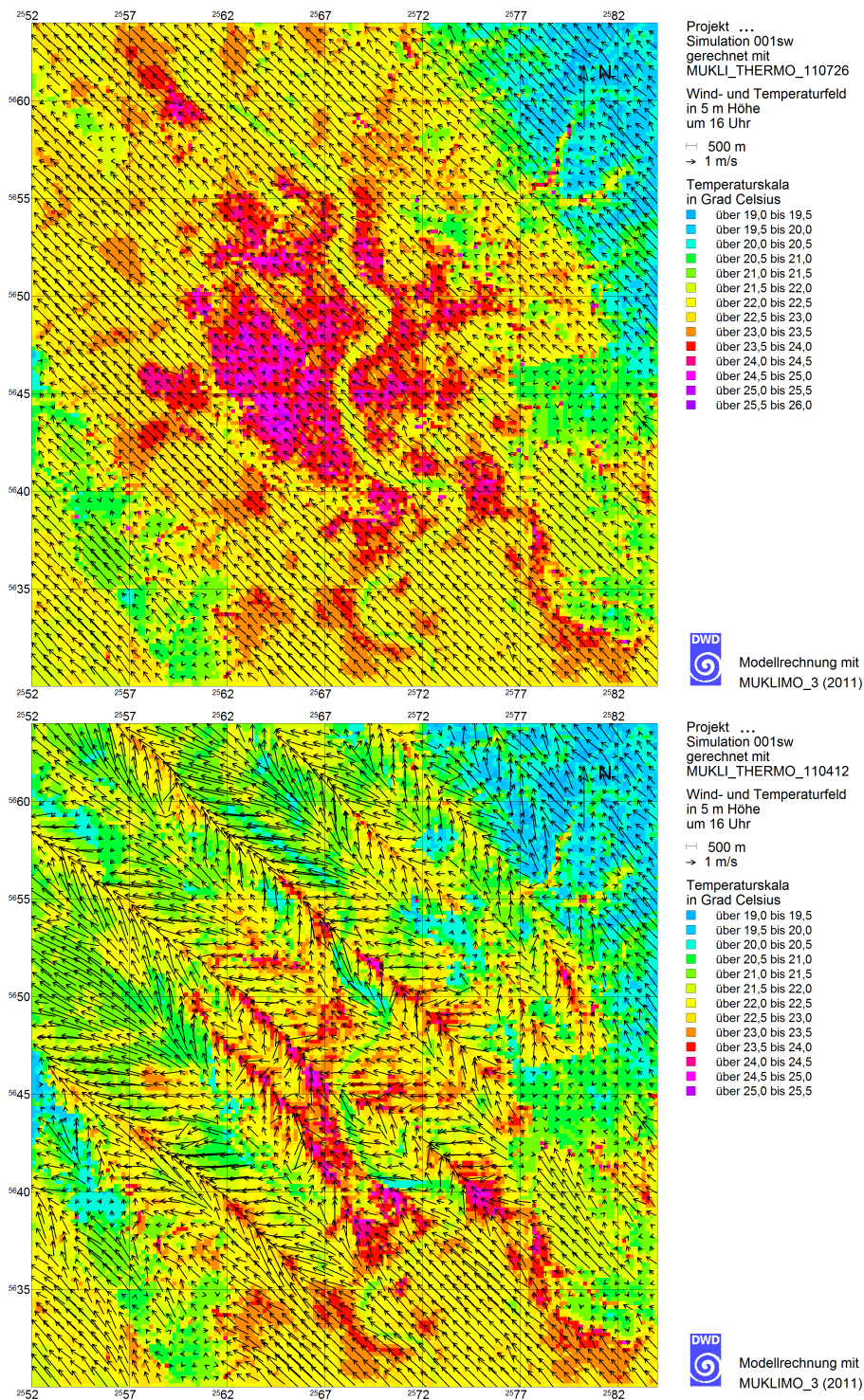


Abbildung 4: Vergleich zweier Simulationen vor (unten) und nach Einführung der Auftriebsdämpfung (oben).

3.1.9 Parametrisierung von Baumbestand und unaufgelöster Bebauung

Die Berücksichtigung von *Baumbestand* sowie von *unaufgelöster* Bebauung in Bezug auf die Strömungsbe-
rechnung in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 entspricht der in Teil 1 des Berichts (SIEVERS,
2012) beschriebenen Vorgehensweise. Demnach wird ein eventueller Baumbestand in der gemittelten Bewe-
gungsgleichung der Atmosphäre (siehe Gl. 56) durch die Einführung eines zur lokalen *Blattflächendichte* d_f
des Baumbestands (eingeführt in Kap. 2.3.5) und zum Quadrat der Horizontalgeschwindigkeit \widehat{v}_h proportio-
nalen „Bremsterms“ \vec{Q}_f^m berücksichtigt. Er entspricht der Quelle \vec{Q}^m der Gleichung (56) für den Fall, dass die
Strömungshindernisse des Modellgebiets die Blätter eines Baumbestands sind, und wird parametrisiert wird
als

$$\vec{Q}_f^m = -c_d d_f \rho_{\text{eff}} \widehat{v}_h |\widehat{v}_h| \quad (76)$$

mit d_f : Blattflächendichte des Baumbestands

und $c_d = 0.2$: dimensionsloser, sogenannter *Drag*-Koeffizient.

In die Vorticity-Gleichung (68) bzw. ihre ersten beiden Komponenten (Gl. 72 und 73) geht dieser Zusatzterm
über seine Rotation ein, d. h.

$$\frac{\partial \vec{\zeta}}{\partial t} + \dots = \nabla \times \vec{Q}_f^m + \dots \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \vec{\zeta}}{\partial t} + \dots = -c_d \nabla \times (d_f \rho_{\text{eff}} \widehat{v}_h |\widehat{v}_h|) + \dots \quad (77)$$

Die Auswirkungen *unaufgelöster Bebauung* auf die atmosphärische Strömung sind zum Teil bereits durch die in
Kapitel 3.1.3 eingeführte *effektive* Dichte ρ_{eff} und die mit ihr verbundene Divergenzfreiheitsbedingung $\nabla \rho_{\text{eff}} \cdot \widehat{v} = 0$
(vergleiche Gl. 48 und 52) berücksichtigt. Sie bedeutet, dass einem Luftpaket bei seinem Vordringen in die
unaufgelöste Bebauung weniger Volumen zur Verfügung steht als außerhalb. Die Forderung nach Kontinuität
zwingt die atmosphärische Strömung dann zum Ausweichen vor der Bebauung oder zur Beschleunigung beim
Eintritt in diese bzw. einer Kombination aus beidem.

Der zweite von der unaufgelösten Bebauung auf die atmosphärische Strömung ausgeübte und in MUKLIMO_3
berücksichtigte Effekt wird durch die Impulsquelle \vec{Q}_{geb}^m der Bewegungsgleichung (56) repräsentiert. Sie setzt
sich nach Gleichung (57) aus einem Reibungs- und einem Staudruckanteil zusammen und wird als *Bremskraft*
gedeutet. Ihre Parametrisierung folgt dem in Gleichung (76) wiedergegebenen Ansatz für den Baumbestand.
Ersetzt wird dabei lediglich die Blattflächendichte d_f des Baumbestands durch die *Wandflächendichte* d_w der
unaufgelösten Bebauung, d. h. der Ansatz lautet

$$\vec{Q}_{\text{geb}}^m = -c_d d_w \rho_{\text{eff}} \widehat{v}_h |\widehat{v}_h| \quad (78)$$

In MUKLIMO_3 wird der Einfluss unaufgelöster Bebauung auf das atmosphärische Strömungsverhalten also
sowohl über die Einführung der *effektiven* Dichte ρ_{eff} und den mit ihr verknüpften *Verdrängungseffekt* als auch
über den in die Bewegungsgleichung (56) eingehenden und nach Gleichung (78) parametrisierten *Bremsterm*
 \vec{Q}_{geb}^m berücksichtigt.

In der Untersuchung von Gross (2014) werden verschiedene Ansätze zur Berücksichtigung unaufgelöster Be-
bauung in mesoskaligen Modellen mit mikroskaligen Modellresultaten für aufgelöste Bebauung verglichen.
Der Autor gelangt zu dem Ergebnis, dass sowohl ein „*Drag*“-Ansatz nach Art der Gleichung (78) wie auch ein
„*Porositäts*“-Ansatz befriedigende Übereinstimmung erzielen. Ein reiner Rauigkeitsansatz wie auch ein Rau-
igkeitsansatz mit Nullpunktsverschiebung schneidet demgegenüber schlechter ab, insbesondere in der näheren
Umgebung des bebauten Bereichs.

Bezüglich der Modifikationen, die der „Mischungsweg“ l und die Diffusionskoeffizienten $K_{m/h}$ durch die un-
aufgelöste Bebauung erfahren, wird auf Kapitel 3.6.3 verwiesen.

3.1.10 Zeitliche Integration

Für ihre zeitliche Integration werden die beiden Komponenten der Vorticity-Gleichung (72) und (73) in MUKLIMO_3, zusammen mit den Ansätzen und Parametrisierungen der Kapitel 3.1.8 bis 3.1.9, in *Teiloperationen* untergliedert, die getrennt voneinander diskretisiert werden. Jeder Teiloperation entspricht dann im Quellcode des Programms ein eigenes Unterprogramm. Die partiellen zeitlichen Änderungen der beiden Vorticity-Komponenten $\tilde{\zeta}_1$ und $\tilde{\zeta}_2$ werden dann in jeweils expliziten Teilschritten berechnet und aufsummiert. Dabei ist die Reihenfolge der Teiloperationen unerheblich, da die Zwischenergebnisse für $\tilde{\zeta}_1$ und $\tilde{\zeta}_2$ in sie nicht eingehen.

3.2 Wärmehaushalt der Atmosphäre

3.2.1 Ausgangsgleichung

Da im atmosphärischen Teil der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 Phasenübergänge des Wasserdampfes – mit Ausnahme der Verdunstungsvorgängen am Boden und in der Vegetation – außer Betracht bleiben, wird die im Modell MUKLIMO_3 verwendete atmosphärische *Wärmegleichung* aus einer vereinfachten Enthalpiebilanz der Luft abgeleitet, die in der Form

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{v} h + \nabla \cdot \vec{J}^h = \frac{dp}{dt} + Q^h \quad (79)$$

mit

ρ *Luftdichte*

h *spezifische Enthalpie* der Luft

\vec{J}^h *Flussdichte* der Enthalpie

p *Luftdruck*

Q^h *Wärmequellen*

$\frac{d}{dt}(\dots) = \frac{\partial}{\partial t}(\dots) + \vec{v} \cdot \nabla(\dots)$ *substantielle Ableitung*

geschrieben wird. Die Volumenquellen Q^h (mit „h“ für „heat“) der Wärmegleichung reduzieren sich, nach dem Ausschluss der Phasenumwandlungen des Wasserdampfes und bei Vernachlässigung der Wärmeproduktion durch innere Reibung, auf die mit Q_s^h bezeichnete Erwärmung bzw. Abkühlung durch Absorption und Emission insbesondere *langwelliger* Strahlung,

$$Q^h \rightarrow Q_s^h. \quad (80)$$

Da der Luftdruck p in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 nicht direkt zur Verfügung steht, wird seine substantielle Ableitung dp/dt mittels der Näherungen

$$\frac{\partial p}{\partial t} \approx 0; \quad \nabla p \approx \rho \vec{g} \quad \text{mit} \quad \vec{g} = -\nabla \Phi \quad \text{Schwerkraft}$$

approximiert als

$$\frac{dp}{dt} \approx \rho \vec{v} \cdot \vec{g}. \quad (81)$$

Mit $\vec{g} = -\nabla \Phi$ und $\Phi = gz$ kann diese Näherung weiter umgeformt werden zu

$$\frac{dp}{dt} \approx -\rho \vec{v} \cdot \nabla gz = -\rho \vec{v} \cdot c_p \cdot \nabla \gamma_{ad} z, \quad (82)$$

wobei der sogenannte (trocken-)adiabatische Temperaturgradient γ_{ad} aus der Schwerkraft g und der spezifischen Wärme c_p der trockenen Luft zu berechnen ist als

$$\gamma_{\text{ad}} := g/c_p . \quad (83)$$

Benutzt man für die Änderungen der partiellen Enthalpie h außerdem die Beziehung

$$\delta h \approx c_p \delta T + \sum_{n=0}^{n=1} h_n \delta m^n$$

mit

δ	beliebiger Differentialoperator	(84)
m^n	Konzentrationen der <i>Partialmassen</i> der Luft	
$h_n = \partial h / \partial m^n$	spezifische <i>Enthalpien</i> der Luftkomponenten,	

in der h in guter Näherung als vom Luftdruck p unabhängig angesehen wird und die Summation nur über die beiden Komponenten „trockene Luft“ (Index 0) und „Wasserdampf“ (Index 1) ausgeführt wird, in Verbindung mit den Bilanzgleichungen

$$\rho \frac{dm^k}{dt} + \nabla \cdot \vec{J}^k = 0 \quad \text{für } k = 1, 2 \quad (85)$$

der beiden Luftkomponenten, so kann man aus der Enthalpiebilanz (79) zusammen mit der Entwicklung (82) die *Wärmegleichung* in der von MUKLIMO_3 benutzten Form

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p (\vec{v} \cdot \nabla) (T + \gamma_{\text{ad}} z) + \nabla \cdot \vec{J}^q = Q_s^h \quad (86)$$

ableiten. In ihr ist die *sensible* Wärmestromdichte \vec{J}^q erklärt als

$$\vec{J}^q = \vec{J}^h - \sum_{n=0}^{n=1} h_n \vec{J}^n \quad (87)$$

3.2.2 Gemittelte Wärmegleichung

Für die Anwendung in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 in Modellgebieten mit eventuell vorhandener *unaufgelöster* Bebauung oder *Baumbestand* muss die Wärmegleichung (86) der im Kapitel 3.1.3 für die Bewegungsgleichung beschriebenen *zweistufigen* Mittelung unterzogen werden, wobei der Einfluss unauflöster Bebauung oder eines eventuellen Baumbestands mit einbezogen wird. Das Resultat wird, ohne detaillierte Herleitung, geschrieben als

$$c_p \rho_{\text{eff}} \frac{\partial \widehat{T}}{\partial t} + c_p \widetilde{\rho \vec{v}} \cdot \nabla (\widehat{T} + \gamma_{\text{ad}} z) + \nabla \cdot \vec{J}_{\text{eff}}^q = Q_{\text{geb/f}}^h + Q_s^h . \quad (88)$$

Dabei setzt sich die *effektive sensible* Wärmestromdichte \vec{J}_{eff}^q , in Analogie zum Impulsstromdichte-Tensor \mathbf{J}_{eff} der Gleichung (57), aus den mittleren molekularen und turbulenten Stromdichten, $\widetilde{\vec{J}}^q$ und $\widetilde{\vec{J}}_T^q$, sowie zusätzlich einer *Umlenkungs*-Stromdichte \vec{J}_U^q zusammen, die den gebäudeinduzierten Geschwindigkeitsschwankungen des Ensembles zuzuordnen ist,

$$\vec{J}_{\text{eff}}^q = \vec{J}_U^q + \widetilde{\vec{J}}_T^q + \widetilde{\vec{J}}^q . \quad (89)$$

Die Quellen Q_{geb}^h bzw. Q_f^h repräsentieren die Wärmeströme von den Oberflächen der Gebäude bzw. den Blättern des Baumbestands in die Atmosphäre. Sie werden durch die Ensemble-Mittelung der Wärmegleichung von Oberflächenquellen der individuellen Ensemble-Mitglieder zu *Volumenquellen* des gesamten Ensembles transformiert. Beim Strahlungsquellterm Q_s^h wurde der Einfachheit halber auf die Kennzeichnung als Ensemble-Mittel verzichtet.

3.2.3 „Potentielle“ Temperatur

Für die numerische Durchführung der Advektions- und Diffusionsoperationen der Wärme Gleichung ist es von Vorteil, die gemittelte Gleichung (88) durch die Einführung einer modifizierten *potentiellen* Temperatur $\widehat{\theta}$ weiter umzuformen. Sie wird, in Ermangelung einer präzisen Kenntnis des Druckes p , ersatzweise definiert als

$$\widehat{\theta} := \widehat{T} + \gamma_{\text{ad}} z . \quad (90)$$

Diese Form des Übergangs zur „potentiellen“ Temperatur entspricht der anschaulichen Vorstellung, dass die individuellen Luftpakete der Modellatmosphäre in einem fiktiven, adiabatischen Transportprozess von ihrer aktuellen Höhe z in das Basisniveau $z = 0$ des Modellgebiets verbracht werden. Aufgrund der Luftdruckunterschiede zwischen den Niveaus ändert sich die Temperatur des Pakets dabei von \widehat{T} zu $\widehat{\theta}$. Nähert man den Luftdruck p entsprechend Gleichung (25) durch den *hydrostatischen* Gleichgewichtsdruck $p_0(z)$ an, so ergibt sich zwischen \widehat{T} und $\widehat{\theta}$ deren Zusammenhang gemäß Gleichung (90). Bis auf die Näherung der hydrostatischen Grundgleichung ist dies im Einklang mit der üblichen Einführung der potentiellen Temperatur.

Mit dem Übergang von \widehat{T} zu $\widehat{\theta}$ lässt sich die Wärme Gleichung (88) weiter umzuformen zu

$$c_p \rho_{\text{eff}} \frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial t} + c_p \widetilde{\rho \vec{v}} \cdot \nabla \widehat{\theta} + \nabla \cdot \vec{J}_{\text{eff}}^q = Q_{\text{geb}/f}^h + Q_s^h . \quad (91)$$

3.2.4 Weitere Ansätze

Für die numerische Integration der Wärme Gleichung (91) wird die *Gesamtwärmestromdichte* \vec{J}_{eff}^q , unter Vernachlässigung ihres mittleren molekularen Anteils, modelliert als

$$\vec{J}_{\text{eff}}^q = -\rho_{\text{eff}} c_p K_h \nabla \widehat{\theta} , \quad (92)$$

wobei die Größe K_h der (gemeinsame) *turbulente* Diffusionskoeffizient für Wärme und materielle Beimengungen der Atmosphäre ist. Er wird so formuliert (siehe Kap. 3.6), dass er die durch Strömungsumlenkung um die Gebäude induzierte Stromdichte \vec{J}_U^q mit umfasst.

Die mit der unaufgelösten Bebauung verknüpfte *Wärmequelle* Q_{geb}^h wird unterteilt in ihre von den Wänden und Dächern herrührenden Anteile Q_w^h und Q_r^h :

$$Q_{\text{geb}}^h = Q_w^h + Q_r^h . \quad (93)$$

Zur Berechnung des *Wandanteils* Q_w^h siehe Kapitel 3.5.1. Beim *Dachflächenanteil* Q_r^h wiederum muss zwischen *begrüntem* und unbegrüntem Dächern unterschieden werden, für die der Wärmehaushalt mit der Atmosphäre unterschiedlich berechnet wird. Mit dem Begrünungsanteil der Dächer v_{gr} (vergleiche Kap. 5.5) wird die Unterteilung geschrieben als

$$Q_r^h = v_{\text{gr}} Q_{r;\text{gr}}^h + (1 - v_{\text{gr}}) Q_{r;\text{vs}}^h , \quad (94)$$

wobei $Q_{r;\text{gr}}^h$ den begrüntem und $Q_{r;\text{vs}}^h$ den versiegelten Dachanteilen zugeordnet wird. Zur Berechnung von $Q_{r;\text{vs}}^h$ siehe Kapitel 3.5.2. Erläuterungen zu $Q_{r;\text{gr}}^h$ sind in Kapitel 5.5 zu finden.

Die Berechnung der Wärmequelle Q_f^h , die den von den *Blättern* eines eventuellen Baumbestandes ausgehenden Wärmestrom repräsentiert, wird in Kapitel 3.5.4 erläutert.

Bezüglich des Strahlungsterms Q_s^h wurde bei der Entwicklung von MUKLIMO_3 anfänglich davon ausgegangen, dass das Modell wegen der Kürze seiner Simulationszeiten ohne Modellierung einer Strahlungsabkühlung

auskommt. Es hat sich dann aber gezeigt, dass sich bei Simulationszeiten über 24 h in der Atmosphäre zuviel nächtens nicht abgebaute Wärme ansammelt, so dass die Temperaturen von Tag zu Tag immer weiter ansteigen. Zur Abhilfe wurde ein rein empirischer Abkühlungsterm eingeführt, der den langwelligen Strahlungsaustausch zwischen der Atmosphäre und der Bodengrenzfläche nachempfunden. Er wird modelliert als

$$Q_s^h = -c_p \rho_{\text{eff}} \frac{\max(\widehat{T} - T_g, 0)}{\tau_s} \quad (95)$$

mit einer repräsentativen Bodentemperatur T_g und einer charakteristischen Zeit τ_s mit einem Wert von 20 h.

3.2.5 Besonderheiten der räumlichen Diskretisierung

Die für ihre numerische Integration notwendige *räumliche* Diskretisierung der Advektions- und Diffusionsanteile der Wärme Gleichung (91) folgt in ihren Grundsätzen dem ersten Teil dieses Berichts (siehe Kap. 4.7 „Ausbreitungsmodell“ in SIEVERS, 2012). Zudem ist das für die Advektion verwendete *modifizierte* Donor-Cell-Schema im Anhang D ausführlich beschrieben. Die Darlegungen zur räumlichen Diskretisierung der Wärme Gleichung werden deshalb auf die Sonderbehandlung beschränkt, welche die untersten atmosphärischen Gitterzellen erfahren.

Bei der Diskretisierung der Wärme Gleichung (91) ist zu beachten, dass die unmittelbar über dem Boden angesiedelten atmosphärischen Gitterzellen V_{ijk} wie auch ihre Seitenflächen $F_{i\pm 1/2, jk}$ und $F_{ij, k\pm 1/2}$ nach dem Gelände höhenkonzept des Kapitels 2.2 gemäß Gleichung (5) bzw. (9) deformiert sein können. So zeigt Abbildung 5 (auf S. 43) einen auf zwei Dimensionen vereinfachten, die Bodengrenzfläche umfassenden Modellgebietsausschnitt, in dem die Gitterzelle V_{ik} im Zentrum und an der linken Seite um Δ_i bzw. $\Delta_{i-1/2}$ nach unten gestreckt, an der rechten Seite hingegen um $\Delta_{i+1/2}$ nach oben gestaucht ist.

Zudem sind auch die *Grundflächen* $F_{ijk-1/2}$ der bodennächsten atmosphärischen Gitterzellen an ein evtl. geneigtes Gelände angepasst. Ihre aus der *Neigung* resultierende *Flächenergrößerung* wird mithilfe der dritten Komponente $(n_{g, ij})_3$ der diskreten *Normalenvektoren* $\vec{n}_{g, ij}$ der Bodengrenzfläche (siehe Gl. 11) errechnet als

$$F_{ijk-1/2} = \begin{cases} \Delta x_i \Delta y_j / (n_{g, ij})_3 & \text{für } k = n_0; ij + 1 \\ \Delta x_i \Delta y_j & \text{sonst.} \end{cases}$$

Um den Besonderheiten der deformierten Zellen Rechnung zu tragen, werden der Advektions- wie auch der Diffusionsterm der Wärme Gleichung (91) räumlich diskretisiert in der für alle Zellen gültigen Form

$$c_p \rho_{\text{eff}; ij k} \left(\frac{\partial \widehat{\theta}_{ijk}}{\partial t} \right)^{\text{adv/diff}} = \frac{F_{i-1/2, jk} \varphi_{x; i-1/2, jk}^{\text{adv/diff}} - F_{i+1/2, jk} \varphi_{x; i+1/2, jk}^{\text{adv/diff}}}{V_{ijk}} + \frac{F_{ij, k-1/2} \varphi_{y; ij, k-1/2}^{\text{adv/diff}} - F_{ij, k+1/2} \varphi_{y; ij, k+1/2}^{\text{adv/diff}}}{V_{ijk}} + \frac{F_{ijk-1/2} \varphi_{z; ij k-1/2}^{\text{adv/diff}} - F_{ijk+1/2} \varphi_{z; ij k+1/2}^{\text{adv/diff}}}{V_{ijk}}. \quad (96)$$

Dabei sind $\varphi_x^{\text{adv/diff}}$, $\varphi_y^{\text{adv/diff}}$ und $\varphi_z^{\text{adv/diff}}$ mit den jeweils zugehörigen Gitterindizes die kartesischen Komponenten der Advektions- bzw. Diffusionsflussdichten an den Positionen der jeweiligen Randflächen von V_{ijk} . Gleichung (96) besagt, dass die zeitliche Änderung des Wärmeinhalts von V_{ijk} durch die Bilanz der Wärme flüsse durch die Randflächen der Zelle bestimmt ist, wobei die „Flüsse“ sich als Produkt aus den Abmessungen

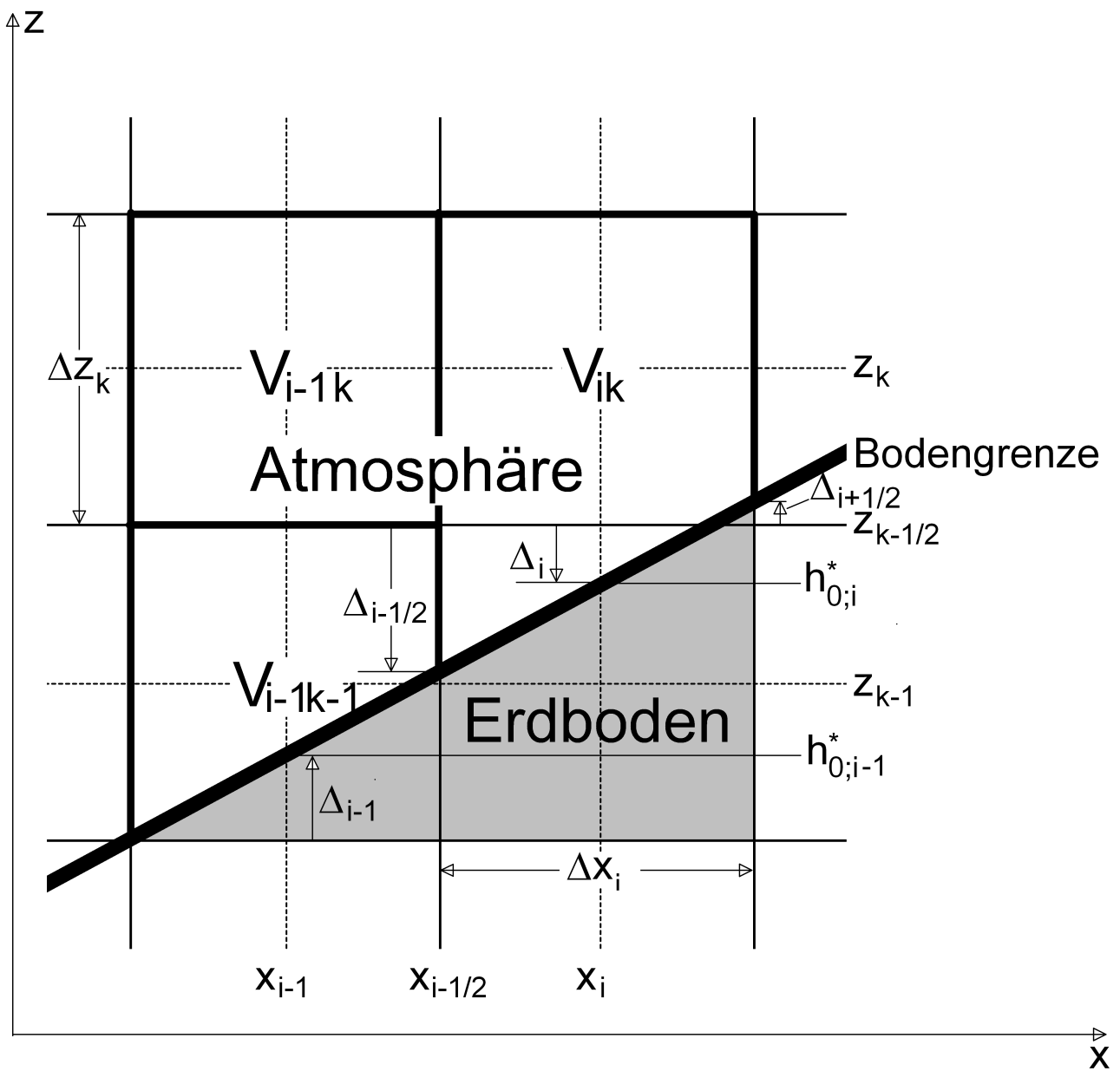


Abbildung 5: Gitterzellstruktur in einem zweidimensionalen, die Bodengrenzfläche umfassenden Ausschnitt eines Modellgebiets.

der jeweiligen Randfläche und der zugehörigen Flussdichte errechnen. Für Gitterzellen V_{ijk} mit regulären Abmessungen geht Gleichung (96) über in die übliche Form einer diskreten Bilanzgleichung:

$$c_p \rho_{\text{eff};ijk} \left(\frac{\partial \widehat{\theta}_{ijk}}{\partial t} \right)^{\text{adv/diff}} = \frac{\varphi_{x;i-\frac{1}{2}jk}^{\text{adv/diff}} - \varphi_{x;i+\frac{1}{2}jk}^{\text{adv/diff}}}{\Delta x_i} + \frac{\varphi_{y;ij-\frac{1}{2}k}^{\text{adv/diff}} - \varphi_{y;ij+\frac{1}{2}k}^{\text{adv/diff}}}{\Delta y_j} + \frac{\varphi_{z;ijk-\frac{1}{2}}^{\text{adv/diff}} - \varphi_{z;ijk+\frac{1}{2}}^{\text{adv/diff}}}{\Delta z_k}. \quad (97)$$

Bei Anwendung der Gleichung (96) ist – außer einer möglichen Deformation der Zelle – noch eine weitere Besonderheit zu beachten, die in Abbildung 5 dargestellt ist. Man sieht dort einen auf zwei Dimensionen reduzierten Gitterausschnitt mit von links nach rechts ansteigendem Gelände, wodurch die Gitterzelle V_{ik} in der Mitte und an ihrer linken Seite nach unten verlängert, an ihrer rechten Seite hingegen nach oben verkürzt ist. Das hat zur Folge, dass sie links an zwei atmosphärische Zellen angrenzt, sowohl an ihren regulären Nachbarn V_{i-1k} als auch an die darunter gelegene, deformierte Zelle V_{i-1k-1} . Übertragen auf dreidimensionale Verhältnisse (mit $k=n_{0;ij}$) tritt die in Abbildung 5 gezeigte Situation dann ein, wenn die beiden Geländehöhenidizes $n_{0;ij}$ und $n_{0;i-1j}$ die Bedingung $n_{0;ij} < n_{0;i-1j}$ erfüllen und zugleich die Gitterdeformation $\Delta_{i-1/2j}$ nach unten gerichtet, d. h. negativ ist. Als Konsequenz setzt sich der Wärmetausch von V_{ijk} über ihre nach unten verlängerte Seitenfläche $F_{i-1/2jk}$ mit ihren linken Nachbarn in diesem Fall aus zwei Anteilen zusammen: dem Austausch mit V_{i-1jk} und einem zusätzlichen Austausch mit $V_{i-1jk-1}$, die entsprechend ihren Flächenanteilen zu gewichten sind. Das heißt, dass der durch $F_{i-1/2jk}$ hindurchtretende diffusive Wärmestrom im beschriebenen Sonderfall mit Parametrisierung der Wärmestromdichte nach Gleichung (92) zu berechnen ist als

$$\begin{aligned} F_{i-\frac{1}{2}jk} \varphi_{x;i-\frac{1}{2}jk}^{\text{diff}} &= -\Delta y_j \Delta z_k \frac{c_p (\rho_{\text{eff}} K_h)_{i-\frac{1}{2}jk} (\widehat{\theta}_{ijk} - \widehat{\theta}_{i-1jk})}{\frac{1}{2} (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} \\ &+ \Delta y_j \Delta_{i-\frac{1}{2}j} \frac{c_p (\rho_{\text{eff}} K_h)_{i-\frac{1}{2}jk} (\widehat{\theta}_{ijk} - \widehat{\theta}_{i-1jk-1})}{\frac{1}{2} (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} \\ &\text{für } k = n_{0;ij} + 1 \wedge n_{0;i-1j} < n_{0;ij} \wedge \Delta_{i-\frac{1}{2}j} < 0. \end{aligned} \quad (98)$$

Ebenfalls abweichend vom Normalfall, mit der Differenz $\widehat{\theta}_{ijk} - \widehat{\theta}_{i-1jk-1}$ anstelle von $\widehat{\theta}_{ijk-1} - \widehat{\theta}_{i-1jk-1}$, wird der aus der rechten Seite $F_{i-1+1/2jk-1}$ der Gitterzelle $V_{i-1jk-1}$ austretende diffusive Wärmestrom digitalisiert als

$$\begin{aligned} F_{i-1+\frac{1}{2}jk-1} \varphi_{x;i-1+\frac{1}{2}jk}^{\text{diff}} &= \Delta y_j \Delta_{i-\frac{1}{2}j} \frac{c_p (\rho_{\text{eff}} K_h)_{i-\frac{1}{2}jk} (\widehat{\theta}_{ijk} - \widehat{\theta}_{i-1jk-1})}{\frac{1}{2} (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} \\ &\text{für } k = n_{0;ij} + 1 \wedge n_{0;i-1j} < n_{0;ij} \wedge \Delta_{i-\frac{1}{2}j} < 0. \end{aligned} \quad (99)$$

Das entspricht gerade dem zweiten Term auf rechten Seite von Gleichung (98). Dem nach Gleichung (98) modellierten Zufluss in die Zelle V_{ijk} über deren linke Seitenfläche stehen somit in der Summe gleich große Abflüsse aus den beiden Nachbarzellen V_{i-1jk} und $V_{i-1jk-1}$ gegenüber, so dass die Konservativität des Differenzschemas der Gleichung (96) gewahrt bleibt.

Ein weiterer Sonderfall für die Berechnung der Zuflüsse in die Zelle V_{ijk} liegt dann vor, wenn deren linke Seitenfläche $F_{i-\frac{1}{2}jk}$ zu einem Gebäude oder einer Wand der aufgelösten Bebauung gehört, siehe Kapitel 2.4. Für eine atmosphärische Gitterzelle V_{ijk} (d. h. es gilt $k > n_{0;ij}$) ist das dann der Fall, wenn zwischen dem vertikalen Gitterindex k und den „halbzahligen“ Indizes der Gesamthöhe (Gelände plus aufgelöste Bebauung) $n_{0;i-\frac{1}{2}j}$ bzw. der Terrainhöhe $n_{0;i-1/2j}^t$ die Beziehung $n_{0;i-\frac{1}{2}j}^t < k \leq n_{0;i-1/2j}$ besteht. Da die Höhe aufgelöster Gebäude in MUKLIMO_3 stets so modelliert wird, dass sie mit einem „regulären“ Gitterniveau zusammenfällt und da der Wärmetausch ihrer Wände mit der Atmosphäre in MUKLIMO_3 nach Kapitel 2.4 in die Behandlung der „unaufgelösten“ Bebauung integriert ist, gilt in diesem Fall am linken Zellrand von V_{ijk} eine *No-Flux*-Bedingung, d. h. es wird gefordert

$$\varphi_{x;i-\frac{1}{2}jk}^{\text{diff}} = 0 \quad \text{für } k > n_{0;ij} \wedge n_{0;i-\frac{1}{2}j}^t < k \leq n_{0;i-\frac{1}{2}j}. \quad (100)$$

Die anhand des diffusiven Wärmestroms durch die linke Randfläche $F_{i-\frac{1}{2}jk}$ einer atmosphärischen Gitterzelle V_{ijk} vorgestellten, bei Anwendung von Gleichung (96) zu beachtenden Sonderfälle gelten natürlich in entsprechender Weise auch für die diffusiven und advektiven Flüsse durch die anderen Seitenflächen von V_{ijk} .

3.2.6 Zeitliche Integration

Die zeitliche Integration der atmosphärischen Wärmeleichung (91) wird in der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 in Teilschritte *gesplittet*, die wie folgt abgearbeitet werden:

1. Integration der Wärmeleichung für einen halben numerischen Zeitschritt $dt/2$ im Hinblick auf die Quellen Q_w^h und Q_r^h , die den Wärmetausch der Atmosphäre mit den Wänden und Dächern der unaufgelösten Bebauung beinhalten.
2. Integration der Wärmeleichung für einen halben Zeitschritt im Hinblick auf die Quellen Q_f^h , die den Wärmetausch der Atmosphäre mit den Blättern des Baumbestandes beinhalten.
3. Transformation aller Temperaturen \widehat{T}_{ijk} des Modellgebiets von absoluten auf potentielle Werte $\widehat{\theta}_{ijk}$:

$$\widehat{T}_{ijk} \rightarrow \widehat{\theta}_{ijk} = \widehat{T}_{ijk} + \gamma_{ad} z_k . \quad (101)$$

4. Integration der Wärmeleichung in der Form (91) für einen halben Zeitschritt im Hinblick auf die Teiloperationen der *Advektion*. Der Algorithmus dafür ist das im Anhang D beschriebene modifizierte *Donor-Cell*-Verfahren mit *Time-Splitting* in der Abarbeitungsreihenfolge xyz .
5. Integration der Wärmeleichung für einen halben Zeitschritt im Hinblick auf die beiden Teiloperationen der *horizontalen Diffusion*, zuerst für die x -, dann für die y -Richtung.
6. Integration der Wärmeleichung für die Teiloperation der *vertikalen Diffusion*. Dieser Schritt ist in zwei Halbschritte aufgeteilt, von denen der erste explizit, der zweite implizit ausgeführt wird, beide jeweils mit dem halben Zeitschritt $dt/2$.
7. Erneute Ausführung der ersten 5 Schritte, jetzt aber in umgekehrter Reihenfolge und mit Rücktransformation von der potentiellen zur absoluten Temperatur. Dies wirkt der Willkür in der Reihenfolge der Abarbeitung entgegen.
8. Berechnung der atmosphärische Abkühlung aufgrund langwelliger Ausstrahlung für den gesamten numerischen Zeitschritt dt entsprechend der Gleichung (95).

Das ausschließlich auf die Teiloperation der vertikalen Diffusion angewendete halb-impizite Integrationsverfahren dient der numerischen Stabilität: Bei einer rein expliziten Behandlung wäre die Gefahr einer numerischen Instabilität bei diesem Teilschritt besonders groß. Der Grund dafür sind die (bei labiler atmosphärischer Schichtung) großen Diffusionskoeffizienten gepaart mit kleinen vertikalen Gitterabständen. Dem wirkt die halb-implizite Behandlung des Teilschritts entgegen. Das halb-implizite Integrationsverfahren wird auch als *Crank-Nicolson*-Schema (CRANK und NICOLSON, 1947) bezeichnet. Es ist von zweiter Ordnung in der Zeit und numerisch stabil. Zur grundsätzlichen Vorgehensweise siehe auch Kapitel 5.2.

3.3 Wasserhaushalt

Der Haushalt des atmosphärischen Wasserdampfes wird von der Bilanzgleichung der *spezifischen* Feuchte, deren atmosphärisches Mittel als \widehat{q} bezeichnet wird, gesteuert. Ohne ihre in MUKLIMO_3 ausgeklammerten Phasenübergänge kann der Wasserdampf als inerte atmosphärische Beimengung behandelt werden. Die nach den Prinzipien des Kapitels 3.1.3 gemittelte Bilanzgleichung der spezifischen Feuchte wird deshalb angesetzt als

$$\rho_{\text{eff}} \frac{\partial \widehat{q}}{\partial t} + \widetilde{\rho \vec{v}} \cdot \nabla \widehat{q} = \nabla \cdot \rho_{\text{eff}} K_h \nabla \widehat{q} + Q^{\text{vap}} . \quad (102)$$

Hier ist die Größe K_h der bereits in Zusammenhang mit der Parametrisierung der Wärmestromdichte (siehe Gl. 92 in Kap. 3.2.4) eingeführte, gemeinsame turbulente Diffusionskoeffizient für Wärme und atmosphärische Beimengungen. Der Quellterm Q^{vap} (mit „vap“ für „vapor“) repräsentiert die in der Atmosphäre vorhandenen Quellen für Wasserdampf. In MUKLIMO_3 sind das die von den Blättern der Bäume sowie die von den begrünten Dächern ausgehenden Verdunstungsraten Q_f^{vap} und Q_r^{vap} :

$$Q^{\text{vap}} = Q_f^{\text{vap}} + Q_r^{\text{vap}} . \quad (103)$$

In Anlehnung an die Parametrisierungen des Canopy-Modells (siehe Kap. 5.4) wird der Wasserdampfstrom Q_f^{vap} von oder zu den Blättern als *Widerstandsgesetz* der Form

$$Q_f^{\text{vap}} = d_f \frac{q_s(T_f) - \widehat{q}}{r_m} \quad (104)$$

modelliert. Dabei ist d_f die bereits in Kapitel 2.3.5 eingeführte *Blattflächendichte* (gleich einseitig gerechnete Blattflächen pro Volumen), T_f die Blattflächentemperatur und $q_s(T_f)$ der zugehörige Sättigungswert der spezifische Feuchte. Beim Übergangswiderstand r_m wird zwischen Verdunstung und Kondensation unterschieden, indem r_m angesetzt wird als

$$r_m = \begin{cases} 0.5 r_a & \text{für } \widehat{q} \geq q_s(T_f) \\ r_a + r_s & \text{für } \widehat{q} < q_s(T_f) . \end{cases} \quad (105)$$

Zur Modellierung des „atmosphärischen“ Widerstands r_a und des *Stomata*-Widerstands r_s siehe das Kapitel 5.4 über den niedrigen Bodenbewuchs. Für den Fall der Taubildung an den Blättern ($\widehat{q} \geq q_s(T_f)$) entspricht Gleichung (104) mit $r_m = 0.5 r_a$ dem Ansatz (134) für die Wärmestromdichte von den Blättern zur Atmosphäre, wobei dort allerdings die Beiträge der Blattober- und -unterseiten getrennt behandelt werden. Die Halbierung $r_m \rightarrow 0.5 r_a$ des atmosphärischen Widerstands r_a kann (bei Einsetzen von $r_m = 0.5 r_a$ in Gl. 104) stattdessen auch als Verdoppelung der einseitig berechneten Blattflächendichte d_f gedeutet werden. Sie bringt somit zum Ausdruck, dass die Kondensation an den Blättern beidseitig stattfindet. Im Fall der Blattverdunstung $\widehat{q} < q_s(T_f)$ wird der Widerstand r_m als Summe $r_a + r_s$ angesetzt. Hier tritt r_a ohne den Faktor 0.5 auf, da die Spaltöffnungen (*Stomata*) der Blätter, von denen die Verdunstung ausgeht, sich allein an den Blattunterseiten befinden. Der *Stomata*-Widerstand r_s tritt hinzu, da das verdunstende Wasser auf seinem Weg vom Blattinneren durch die *Stomata* in die Atmosphäre einen zusätzlichen Widerstand überwinden muss.

Die Berechnung der von den begrünten Dächern ausgehenden Verdunstungsrate Q_r^{vap} erfolgt ebenfalls nach den Ansätzen des Modells für den niedrigen Bodenbewuchs, indem zunächst die in Anlehnung an Gleichung (313) berechnete Flussdichte $J_{\text{ca};k-1/2}^1$ des Wasserdampfes über den begrünten Anteilen der im Niveau $z_{k-1/2}$ befindlichen Dächer bestimmt wird. Hieraus errechnet sich die Volumenquellstärke $Q_{r;k}^{\text{vap}}$ der Feuchte für die Gitterzellen der nach oben angrenzenden Schicht k als

$$Q_{r;k}^{\text{vap}} = v_{\text{gr}} d_{r;k} J_{\text{ca};k-\frac{1}{2}}^1 / \Delta z_k . \quad (106)$$

Dabei ist $d_{r;k}$ die den Gitterzellen der Schicht k zugerechnete (siehe Kap. 2.3.4) Flächendichte der im Niveau $z_{k-1/2}$ befindlichen Dächer und v_{gr} ihr (für alle vertikalen Niveaus gleicher) *Begrünungsanteil*.

Die *zeitliche* Integration der Bilanzgleichung (102) des atmosphärischen Wasserdampfes wird in MUKLIMO_3 *parallel* zur Integration der Wärmeleichung durchgeführt. Das dabei verwendete *Time-Splitting*-Schema entspricht deshalb im Grundsatz der Darstellung in Kapitel 3.2.6.

3.4 Randbedingung der atmosphärischen Bilanzgleichungen

Die Vorticity-Gleichung (72), die Wärmeleichung (91), die Bilanzgleichung des Wasserdampfes (102) wie auch die Stromfunktionsgleichung (54) erfordern für ihre numerische Lösung bzw. zeitliche Integration *Randbedingungen* an den Grenzflächen des Modellgebiets, da die Differenzenapproximationen für die Gleichungsterme mit räumlichen Ableitungen dort teilweise nicht bildbar sind.

Da die Schließungsansätze an den unterschiedlichen Randflächen durchaus ungleich sind, werden die Randbedingungen für die Untergrenze, die Obergrenze und die seitlichen Ränder des Modellgebiets im Folgenden *getrennt* behandelt. Da zudem die Randbedingungen für die auch in der Basisversion von MUKLIMO_3 verwendeten Gleichungen des Strömungsmodells bereits im Teil 1 des Berichts (SIEVERS, 2012) ausführlich behandelt sind, ist ihre folgende Darstellung kurz gefasst.

3.4.1 Untergrenze der Atmosphäre

An der Untergrenze des atmosphärischen Modellgebiets, die von der Bodengrenzfläche mitsamt den auf ihnen befindlichen Gebäuden der aufgelösten Bebauung gebildet wird, verlangt die dortige Randbedingung von der impulsbezogenen *Stromfunktion* $\tilde{\psi}$ das Verschwinden ihrer beiden Komponenten, d. h.

$$\tilde{\psi}_1 = 0 \quad \text{und} \quad \tilde{\psi}_2 = 0 \quad \text{am Bodenrand .}$$

Zur numerischen Umsetzung dieser Bedingung siehe SIEVERS (2012), Kapitel 4.6.

Bezüglich der Vertikalkomponente ihrer *Advektionsterme* erfordern weder die Wärmeleichung noch die Feuchtebilanz besondere Randbedingungen, da die Windgeschwindigkeit an der Untergrenze der Atmosphäre wegen der *Undurchdringlichkeit* des Bodenrandes Null ist, so dass die advektiven Flüsse dort ohnehin verschwinden. Für die beiden Komponenten der Vorticity-Gleichung wird das Problem der vertikalen Advektion unmittelbar über dem Boden gelöst, indem die drei Komponenten der Windgeschwindigkeit im Bodeninneren einschließlich einer fiktiven Gitterschicht unterhalb der Modelluntergrenze zu Null angenommen werden. Mithilfe dieser zusätzlichen Geschwindigkeitswerte lassen sich dann die Komponenten der *geschwindigkeitsbezogenen* Vorticity $\vec{\zeta}$ nach Gleichung (55) im gesamten Modellgebiet berechnen, also auch auf der Bodengrenzfläche, wo sie für das *Donor-Cell-Verfahren* der Vorticity-Advektion benötigt werden, vergleiche hierzu Kapitel 3.3.3 in SIEVERS (2012).

Die unteren Randbedingungen der Vorticity-Gleichung, der Wärmeleichung sowie der Wasserdampfbilanz für die Parametrisierungsansätze der *turbulenten Diffusion* bestehen darin, dass die Vertikalkomponenten der Flussdichten für Impuls, Wärme und Feuchte am Erdboden, anstatt aus Gradientengesetzen, auf der Basis *universeller* Profile berechnet werden. Grundlage hierfür ist die Annahme, dass die Vertikalkomponenten der turbulenten Flussdichten über einem beispielhaften Flächenelement F_{ij} innerhalb einer vom Boden bis zum untersten atmosphärischen Gitterniveau z_a reichenden Schicht näherungsweise als konstant angesehen und durch universelle Gesetze nach *Monin-Obukhov* beschrieben werden können (siehe z. B. STULL, 1988). Dementsprechend werden die Antriebe $K_m \partial v_h / \partial z$ der Impulsstromdichte (vergleiche Gl. 60), $K_h \partial \theta / \partial z$ der Wärmestromdichte (vergleiche Gl. 92) und $K_h \partial q / \partial z$ der Feuchtestromdichte (vergleiche Gl. 102) in Bodennähe angesetzt als

$$K_m \frac{\partial v_h}{\partial z} \approx u_*^2 ; \quad K_h \frac{\partial \theta}{\partial z} \approx u_* T_* ; \quad K_h \frac{\partial q}{\partial z} \approx u_* q_* \quad \text{für} \quad h_0 < z \leq z_a . \quad (107)$$

Die hierin eingehende Schubspannungsgeschwindigkeit u_* sowie die „Skalengrößen“ T_* und q_* werden in MUKLIMO_3 aus einer auf einem Vorschlag von CLARKE (1970) beruhenden *externen* Formulierung der Monin-Obukhov-Gesetze berechnet. In Anlehnung an die Notation in PANHANS und SCHRODIN (1980) werden diese

Relationen geschrieben als

$$\begin{aligned}
 v_h(z_a) &= u_* G_M \left(\frac{z_m}{\lambda}, \frac{z_m}{z_0} \right) \\
 \theta(z_a) &= \theta(h_0) + T_* G_\theta \left(\frac{z_m}{\lambda}, \frac{z_m}{z_0} \right) \\
 q(z_a) &= q(h_0) + q_* G_\theta \left(\frac{z_m}{\lambda}, \frac{z_m}{z_0} \right)
 \end{aligned} \tag{108}$$

mit der *externen* Stabilitätslänge λ definiert als

$$\lambda := \frac{T(z_a) v_h^2(z_a)}{g \{ \theta(z_a) - \theta(h_0) \}} \tag{109}$$

und dem relativen Bodenabstand $z_m = z_a - h_0$. Die Funktionen G_M und G_θ sind universeller Natur und werden in PANHANS und SCHRODIN (1980) als „Clarke-Funktionen“ bezeichnet. Bei der Definition der externen Stabilitätslänge λ ist hier, im Vergleich zu PANHANS und SCHRODIN (1980), der Wasserdampfterm des Nenners vernachlässigt. Das ist im Einklang mit Gleichung (63), in der nur temperaturbedingte Dichteschwankungen berücksichtigt werden.

Den Gleichungen (108) und (109) steht die originale Formulierung der Monin-Obukhov-Gesetze gegenüber, die sich in der Form

$$\frac{\partial v_h}{\partial z} = \frac{u_*}{\kappa z} \Phi_M(z/L); \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{T_*}{\kappa z} \Phi_H(z/L); \quad \frac{\partial q}{\partial z}(z_u) = \frac{q_*}{\kappa z} \Phi_H(z/L)$$

mit den Monin-Obukhov-Funktionen $\Phi_M(z/L)$ für den Impuls und $\Phi_H(z/L)$ für Wärme bzw. Feuchte schreiben lassen. Die Monin-Obukhov-Länge L kann dabei in „trockener“ Näherung dargestellt werden als

$$L = \frac{T u_*^2}{\kappa g T_*} \tag{110}$$

Grundsätzlich können die Clarke-Funktionen G_M und G_θ auf die Monin-Obukhov-Funktionen Φ_M und Φ_H zurückgeführt werden. Der Zusammenhang ist jedoch kompliziert und kann nicht in geschlossener analytischer Form angegeben werden. Er muss vielmehr in Form numerisch errechneter Diagramme oder Tabellen dargestellt werden. Die Arbeit von CLARKE (1970) präsentiert demzufolge ein Nomogramm, dem die Funktionen G_M und $(G_M G_\theta)^{1/2}$ in Abhängigkeit von ihren beiden Argumenten z_m/λ und $\ln z_m/z_0$ zu entnehmen sind. Als Ergänzung dazu haben PANHANS und SCHRODIN (1980) aus den in DELSOL et al. (1971) angegebenen Formulierungen der Monin-Obukhov-Funktionen zweidimensionale Tabellen für G_M und G_θ in Abhängigkeit von äquidistanten Werten z_m/λ und $\lg z_m/z_0$ errechnet, womit die Clarke'sche Idee für die Verwendung in numerischen atmosphärischen Modellen brauchbar wurde. Die Werteschemata sind als *Clarke*-Tabellen in den Quellcode von MUKLIMO_3 integriert. Aus ihnen werden die für beliebige Wertepaare z_m/λ und $\lg z_m/z_0$ benötigten Funktionen G_M und G_θ in genügender Genauigkeit durch doppelt lineare Interpolation bestimmt.

Der Vorteil der externen Formulierung der Monin-Obukhov-Gesetze für die Berechnung der Skalengrößen u_* , T_* und q_* in numerischen Modellen gegenüber ihrer direkten Anwendung liegt darin, dass letztere grundsätzlich einen iterativen Prozess erfordern, da die Berechnung der Skalengrößen die Kenntnis der Monin-Obukhovschen Stabilitätslänge L erfordert, in die wiederum die Skalengrößen eingehen, d. h. es ist ein implizites Problem zu lösen. Die externe (oder besser vielleicht: *explizite*) Formulierung vermeidet diese Komplikation, indem sie gestattet, die Skalengrößen u_* , T_* und q_* allein aus zur Verfügung stehenden Variablenwerten am Boden und im untersten atmosphärischen Niveau z_a zu berechnen.

In MUKLIMO_3 werden die „Skalengrößen“ u_* , T_* und q_* zur Bestimmung der bodennahen turbulenten Flussdichten über allen Flächenelementen F_{ij} nach den Gleichungen (108) zunächst getrennt nach versiegelten und

unversiegelten Flächenanteilen berechnet. Über den unversiegelten Flächen werden dabei die Wechselbeziehungen der Atmosphäre mit niedrigem Bodenbewuchs in die Kalkulation mit einbezogen, siehe hierzu Kapitel 5.4. Zur Ermittlung der endgültigen Werte u_* , T_* und q_* werden die getrennt berechneten Größen u_*^v , T_*^v , q_*^v und u_*^u , T_*^u , q_*^u zusammengeführt nach den Beziehungen

$$\begin{aligned} u_*^2 &:= v_s (u_*^v)^2 + (1 - v_s) (u_*^u)^2 \\ T_* &:= \{v_s u_*^v T_*^v + (1 - v_s) u_*^u T_*^u\} / u_* \\ q_* &:= \{v_s u_*^v q_*^v + (1 - v_s) u_*^u q_*^u\} / u_* . \end{aligned} \quad (111)$$

Dies entspricht einer Mittelung der turbulenten Flussdichten mit einer Gewichtung entsprechend dem Versiegelungsgrad v_s des betrachteten Flächenelements.

3.4.2 Obergrenze

Die oberen Randbedingungen der atmosphärischen Bilanzgleichungen sind gekennzeichnet durch die *Vorgabe* externer Werte für die Variablen an der Modellobergrenze, die bei MUKLIMO_3 dessen eindimensionalem Antriebsmodell entstammen, siehe Kapitel 6.3. Das gilt für die gemittelte Temperatur \widehat{T}_{ijn_z} ebenso wie für die spezifische Feuchte \widehat{q}_{ijn_z} und die beiden impulsbezogenen Vorticity-Komponenten $\widetilde{\zeta}_{1;ijn_z}$ und $\widetilde{\zeta}_{2;ijn_z}$, also

$$\widehat{T}_{ijn_z} = \widehat{T}_{n_z}^{1d}, \quad \widehat{q}_{ijn_z} = \widehat{q}_{n_z}^{1d}, \quad \widetilde{\zeta}_{1;ijn_z} = \widetilde{\zeta}_{1;n_z}^{1d}; \quad \widetilde{\zeta}_{2;ijn_z} = \widetilde{\zeta}_{2;n_z}^{1d} .$$

Zusätzlich werden bei der Integration der *Vorticity-Gleichung* (72 und 73) in ihrer obersten Rechenfläche $n_z - 1$ für die Berechnung der vertikalen Advektion und Diffusion obere Randwerte der geschwindigkeitsbezogenen Vorticity-Komponenten ζ_1 und ζ_2 sowie des Diffusionskoeffizienten K_m benötigt. Sie werden vorgeschrieben als

$$\zeta_{1;ijn_z} = \zeta_{1;n_z}^{1d}; \quad \zeta_{2;ijn_z} = \zeta_{2;n_z}^{1d}; \quad K_{m;ijn_z} = K_{m;n_z}^{1d} .$$

Die obere Randbedingung der *Stromfunktionsgleichung* (54) für die beiden Komponenten $\widetilde{\psi}_1$ und $\widetilde{\psi}_2$ der impulsbezogenen Stromfunktion wird, mit den notwendigen Änderungen wegen des Übergangs vom Geschwindigkeits- zum Impulsbezug der Stromfunktion, entsprechend der Gleichung (3.37) in SIEVERS (2012) formuliert. Die darin als vorzugebende Parameter eingehenden Impulsfelder ρu_{ij}^{top} und ρv_{ij}^{top} werden horizontal einheitlich vorgeschrieben als

$$\rho u_{ij}^{\text{top}} = \widetilde{\rho} u_{n_z}^{1d}; \quad \rho v_{ij}^{\text{top}} = \widetilde{\rho} v_{n_z}^{1d} \quad \text{für alle } i, j .$$

Der auch vorzugebende vertikale Impuls ρw_{ij}^{top} orientiert sich an der mittleren Geländeneigung des gesamten Modellgebiets und wird errechnet als

$$\rho w_{ij}^{\text{top}} = \widetilde{\rho} u_{n_z}^{1d} \left(\frac{\partial h_0}{\partial x} \right) + \widetilde{\rho} v_{n_z}^{1d} \left(\frac{\partial h_0}{\partial y} \right) .$$

Zur oberen Randbedingung der Modellgleichungen gehört auch, dass die Werte der Modellvariablen in den 4 Gitterschichten unterhalb der Modellobergrenze – zur Abmilderung des Übergangs von modellierten zu vorgeschriebenen Werten – nach jedem numerischen Zeitschritt mit einem höhenabhängigen Faktor α_k entsprechend dem Schema

$$\phi_{ijk}^{\text{final}} = \alpha_k \phi_{ijk}^{\text{calc}} + (1 - \alpha_k) \phi_k^{1d}$$

an das eindimensionale Modell *angekoppelt* werden. Dabei steht ϕ sowohl für die Temperatur \widehat{T} als auch die beiden Vorticity-Komponenten $\widetilde{\zeta}_1$ und $\widetilde{\zeta}_2$ und die Diffusionskoeffizienten K_m und K_h . Der Gewichtungsfaktor α_k nimmt ab mit zunehmender Entfernung von der Modellobergrenze:

$$\alpha_{n_z-1} = 0.5; \quad \alpha_{n_z-2} = 0.2; \quad \alpha_{n_z-3} = 0.1; \quad \alpha_{n_z-4} = 0.05 .$$

3.4.3 Seitenflächen

Kernstück der „offenen“ seitlichen Randbedingungen für die Modellgleichungen von MUKLIMO_3 sind die in (SIEVERS, 2012, Kap. 3.3.4.3) beschriebenen *Seitenflächenmodelle*, die das dreidimensionale Modellgebiet allseitig umgeben und in denen die Modellgleichungen unter *zweidimensionalen* Bedingungen gerechnet werden. „Zweidimensional“ heißt dabei, dass horizontale Homogenität in der zum jeweiligen Rand senkrechten Richtung verlangt wird. Eine Sonderrolle spielen die *Ecksäulen* des Modellgebiets: Sie gehören zu jeweils zwei Seitenflächen und bilden die Ränder der zugehörigen Seitenflächenmodelle. Auf ihnen wird Homogenität in beiden horizontalen Richtungen verlangt und folglich *eindimensional* gerechnet.

Die *Ankopplung* des inneren Modellgebiets an die Seitenflächenmodelle geschieht über das *Upstream-Prinzip* des als Advektionsschema verwendeten *Donor-Cell-Verfahrens* (siehe Anhang D). Es sorgt sowohl bei den beiden Komponenten der Vorticity-Gleichung (72 und 73), als auch bei der Wärme Gleichung (91) und der Bilanzgleichung (102) des Wasserdampfes dafür, dass eine von den Seitenrändern nach innen gerichtete Windgeschwindigkeit die Variablenwerte der Seitenflächenmodelle in das innere Modellgebiet hinein getragen werden. Ist die Windgeschwindigkeit auf den Seitenrändern hingegen nach außen gerichtet, gibt es keine Ankopplung des inneren Modellgebiets an die Seitenränder.

Für die horizontalen Anteile der Diffusionsterme der prognostischen Modellgleichungen werden an den Seitenrändern *No-Flux*-Bedingungen verlangt, d. h.

$$\frac{\partial}{\partial n} \left(\rho_{\text{eff}} K_h \frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial n} \right) = 0 ; \quad \frac{\partial}{\partial n} \left(\rho_{\text{eff}} K_h \frac{\partial \widehat{q}}{\partial n} \right) = 0 ,$$

für die Wärme Gleichung und die Feuchtebilanz, wobei n die Horizontalkoordinate der jeweiligen Normalenrichtung der Seitenfläche repräsentiert, sowie

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_2}{\partial x} - \frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_1}{\partial y} \right) = 0$$

für die $\widetilde{\zeta}_2$ -Gleichung auf x -orientierten Seitenflächen und

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_1}{\partial y} - \frac{\partial \rho_{\text{eff}} K_m \zeta_2}{\partial x} \right) = 0$$

für die $\widetilde{\zeta}_1$ -Gleichung auf y -orientierten Seitenflächen.

Einer seitlichen Randbedingung bedarf auch der *Auftriebsterm* $\rho_{\text{eff}} / \widehat{T} \nabla_h \widehat{T} \times \nabla \Phi$ der vektoriellen Vorticity-Gleichung (68) wegen des in ihm auftretenden horizontalen Temperaturgradienten: Dessen Komponenten werden auf den seitlichen Rändern des Modellgebiets Null gesetzt und zusätzlich in den angrenzenden 3 Zellschichten mit den Faktoren 0.2, 0.5 und 0.8 abgeschwächt, um einen allmählichen Übergang zu erreichen.

Für die Seitenrandbedingungen der *Stromfunktionsgleichung* (54) wird auf SIEVERS (2012), Kap. 3.4.2 verwiesen.

Eine Besonderheit gilt für die zweidimensionale Temperaturberechnung auf den Seitenflächen des Modellgebiets: In Simulationen mit früheren Modellversionen war mehrfach das Problem aufgetreten, dass das Modellgebiet im Verlauf der Nacht von den Seitenrändern her mit viel zu kalter Luft quasi „überflutet“ wurde. Als Ursache für dieses unerwünschte Phänomen hat sich die Bildung von „Kaltluftseen“ in den Mulden der zweidimensionalen Orographie der seitlichen Ränder herausgestellt. Aus ihnen strömt beständig kalte Luft in das innere Modellgebiet, ohne dass ihr Kälteinhalt dadurch abnehmen würde, da das Modellkonzept von MUKLIMO_3 keine Rückwirkung des inneren Modellgebiets auf seine Seitenränder beinhaltet. Um einer zu starken Auskühlung in den Mulden der Seitenränder entgegenzuwirken, wurden daraufhin die bodennächsten Werte der

2d Temperaturfelder auf den Seitenrändern an die Temperatur des 1d Antriebsmodells (siehe Kap. 6.3) gekoppelt, wobei die Anbindung so gestaltet wurde, dass sie nur im Fall einer nächtlichen Bodeninversion wirksam wird. Die Zusatzanweisungen, die in Situationen mit $\widehat{T}_{n_0,1d+1}^{1d} < \widehat{T}_{n_0,1d+2}^{1d}$ (Bodeninversion im 1d Modell) nach jedem numerischen Zeitschritt ausgeführt wird, sind

$$\begin{aligned}\widehat{T}_{1j n_0+1} &= 0.95 \widehat{T}_{1j n_0+1} + 0.05 \max(\widehat{T}_{1j n_0+1}, \widehat{T}_{n_0,1d+1}^{1d}) \\ \widehat{T}_{mj n_0+1} &= 0.95 \widehat{T}_{mj n_0+1} + 0.05 \max(\widehat{T}_{mj n_0+1}, \widehat{T}_{n_0,1d+1}^{1d}) \\ \widehat{T}_{i1 n_0+1} &= 0.95 \widehat{T}_{i1 n_0+1} + 0.05 \max(\widehat{T}_{i1 n_0+1}, \widehat{T}_{n_0,1d+1}^{1d}) \\ \widehat{T}_{il n_0+1} &= 0.95 \widehat{T}_{il n_0+1} + 0.05 \max(\widehat{T}_{il n_0+1}, \widehat{T}_{n_0,1d+1}^{1d}) .\end{aligned}\tag{112}$$

Abbildung 6 zeigt beispielhaft die Abschwächung der von den Seitenrändern herrührenden nächtlichen „Kaltlufteinbrüche“, die durch diese Ankopplung bewirkt wird.

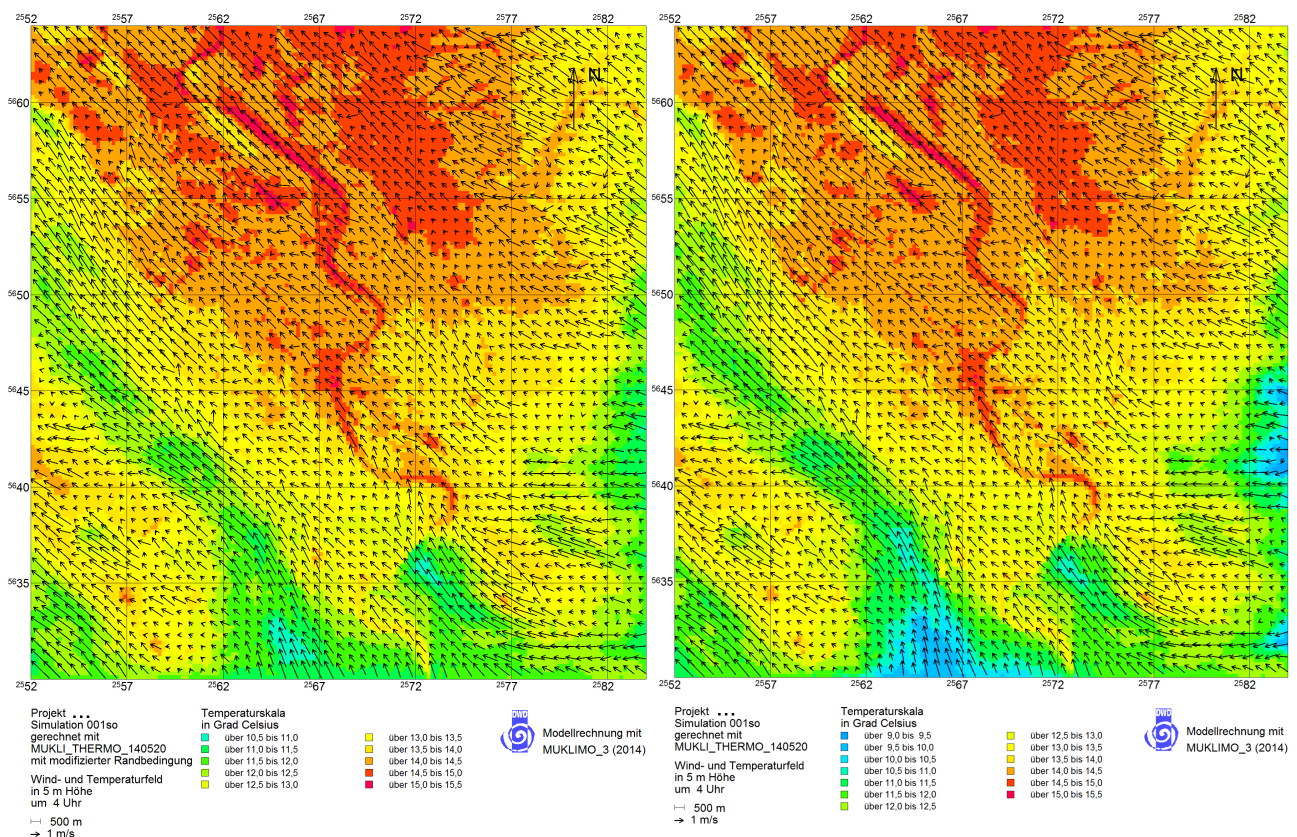


Abbildung 6: Vergleich zweier Simulationen mit unterschiedlicher Berechnung der zweidimensionalen seitlichen Temperaturfelder: Mit Ankopplung der seitlichen Temperaturrandwerte an das eindimensionale Antriebsmodell (links) und ohne eine solche Ankopplung (rechts).

3.5 Wärmetausch mit materiellen Oberflächen

Im dreidimensionalen Modellgebiet wirken sowohl die Wände und Dächer der unaufgelösten Bebauung als auch die Blattflächen eventueller Baumbestände aufgrund des an ihnen stattfindenden Energieumsatzes als Wärmequellen bzw. -senken der Atmosphäre. Die Blattflächen eines Baumbestandes sowie einer eventuellen Dachbegrünung wirken zudem als *Feuchtequellen*. Zur Bestimmung der zugehörigen Wärme- und Feuchteströme müssen die Oberflächentemperaturen der Wände, Dächer und Blätter ermittelt werden. Das geschieht

aus dem Prinzip der Energieerhaltung, indem verlangt wird, dass sich die verschiedenen Energieflüsse an den jeweiligen Flächen jeweils zu Null addieren. In den folgenden drei Kapiteln werden die zugehörigen Ansätze im Einzelnen erläutert.

3.5.1 Gebäudewände

Die mit den Gebäuden der unaufgelösten Bebauung verknüpfte Wärmequelle Q_{geb}^h der Wärmeleichung (91) wird, in Wiederholung der Gleichung (93)

$$Q_{\text{geb}}^h = Q_w^h + Q_r^h,$$

in einen Wandanteil Q_w^h und einen Dachanteil Q_r^h aufgeteilt, die numerisch unterschiedlich behandelt werden.

Die Bestimmung des Wandanteils Q_w^h der Wärmequelle erfordert die Kenntnis der Außentemperaturen T_w der Gebäudewände, die aus der Forderung nach einem *Energieflussgleichgewicht* an ihnen errechnet werden. Diese Forderung besagt, dass sich T_w in jeder Gitterzelle mit unaufgelöster Bebauung so einstellt, dass die auf die Wände auftreffenden Netto-Strahlungsstromdichten gerade durch die von den Wänden in die Atmosphäre und das Gebäudeinnere gerichteten Wärmestromdichten kompensiert werden.

Für die Wände einer im vertikalen Niveau k gelegenen Gitterzelle (auf die Kennzeichnung des zugehörigen horizontalen Flächenelements wird verzichtet) stellt die Energiebilanz $E_{w;k}$ und die Forderung nach ihrem Gleichgewicht sich dar als

$$E_{w;k} = D_k^{\text{sw}} + D_k^{\text{lw}} + d_{w;k} q_{\text{wa};k}^h + d_{w;k} q_{\text{wi};k}^h \stackrel{!}{=} 0. \quad (113)$$

Hier sind D_k^{sw} und D_k^{lw} die Divergenzen der kurz- und langwelligen Strahlungsstromdichten für die betrachtete Gitterzelle, während die Größen $q_{\text{wa};k}^h$ und $q_{\text{wi};k}^h$ die beiden Wärmestromdichten bezeichnen, die von den Wänden in die Atmosphäre bzw. das Innere der Gebäude gerichtet sind. Der mit ihnen verknüpfte Faktor $d_{w;k}$ repräsentiert die in Kapitel 2.3.4 eingeführte *Wandflächendichte* der unaufgelösten Bebauung.

Die Relation (113) wird in MUKLIMO_3 als *implizite* Bestimmungsgleichung für die mittlere außenseitige Temperatur $T_{w;k}$ der in der Gitterschicht k befindlichen Gebäudewände genutzt, die ihrerseits in die Berechnung sowohl der Wärmestromdichten $q_{\text{wa};k}^h$ und $q_{\text{wi};k}^h$ als auch der langwelligen Strahlungsstromdivergenz D_k^{lw} eingeht. Für diese Größen werden geeignete Ansätze benötigt.

Die in die Gleichung (113) eingehenden Strahlungsstromdivergenzen $D_k^{\text{sw/lw}}$ erhält man aus den kurz- und langwelligen Strahlungsstromdichten $F_{\text{sw/lw}}^{\uparrow}$ bzw. $F_{\text{sw/lw}}^{\downarrow}$ im Bereich von unaufgelöster Bebauung (siehe Kap. 4.3 und 4.5.1) als

$$D_k^{\text{sw/lw}} = \frac{F_{\text{sw/lw}, k+\frac{1}{2}}^{\uparrow} - F_{\text{sw/lw}, k-\frac{1}{2}}^{\uparrow} + F_{\text{sw/lw}, k-\frac{1}{2}}^{\downarrow} - F_{\text{sw/lw}, k+\frac{1}{2}}^{\downarrow}}{\Delta z_k}. \quad (114)$$

Die von den Wänden im Mittel in die Atmosphäre gerichtete Wärmestromdichte $q_{\text{wa};k}^h$ wird in der Form eines *Transfersgesetzes* proportional zur Temperaturdifferenz zwischen Wand und Atmosphäre angesetzt als

$$q_{\text{wa};k}^h = \widehat{v}_{h;k} c_{\text{wa}} \rho_0 c_p (T_{w;k} - \widehat{T}_k). \quad (115)$$

Hier ist c_{wa} ein dimensionsloser Transferkoeffizient, $\widehat{v}_{h;k}$ der Betrag der horizontalen Windgeschwindigkeit und \widehat{T}_k die atmosphärische Temperatur in der betrachteten Gitterzelle. Vergleiche auch die entsprechenden Ansätze des Kapitels 5.4.

Zur Bestimmung des Transferkoeffizienten $c_{wa;k}$ wird davon ausgegangen, dass die im Kapitel 3.4.1 dargestellten *universellen* Profilanätze für die bodennahe Strömung auf *wandnahe* Strömungen übertragbar sind. Die mittlere Wärmestromdichte von den Wänden in die Atmosphäre ist dann auch darstellbar als

$$q_{wa;k}^h = -\rho_0 c_p u_*^w T_*^w, \quad (116)$$

wobei die Schubspannungsgeschwindigkeit u_*^w und die Skalengröße T_*^w des wandnahen Temperaturprofils aus den universellen Ansätzen

$$\widehat{v}_{h;k} = u_*^w G_M \left(\frac{d}{\lambda_{Cl}}, \frac{d}{z_{0;w}} \right); \quad \widehat{T}_k = T_{w;k} + T_*^w G_\theta \left(\frac{d}{\lambda_{Cl}}, \frac{d}{z_{0;w}} \right) \quad (117)$$

mit den Größen

G_M	Universelle Clarke-Funktion für den Impuls
G_θ	Universelle Clarke-Funktion für Wärme
λ_{Cl}	externe Stabilitätslänge nach CLARKE (1970)
d	repräsentativer Wandabstand mit dem Wert 2 m
$z_{0;w}$	Rauigkeitslänge der Wände

errechnet werden. Das erste Argument der beiden Clarke-Funktionen wird hier jeweils Null gesetzt entsprechend der für einen horizontalen Austausch gerechtfertigten Annahme einer neutralen atmosphärischen Schichtung.

Die Gleichsetzung der beiden Ansätze (115) und (116) für die Wärmestromdichte $q_{wa;k}^h$ von den Wänden in die Atmosphäre ergibt für den Transferkoeffizienten c_{wa} der Gleichung (115) die Berechnungsvorschrift

$$c_{wa} = \frac{1}{G_M \left(0, \frac{d}{z_{0;w}} \right) G_\theta \left(0, \frac{d}{z_{0;w}} \right)}. \quad (118)$$

Die von den Wänden in das Gebäudeinnere gerichtete Wärmestromdichte $q_{wi;k}^h$ hat in dem von MUKLIMO_3 verwendeten Ansatz zwei Anteile, d. h. sie wird gemäß der Beziehung

$$q_{wi;k}^h = q_{wi;k}^{h;1} + q_{wi;k}^{h;s}. \quad (119)$$

aufgespalten in einen *linearen* Anteil $q_{wi;k}^{h;1}$ und einen *Speicher*-Anteil $q_{wi;k}^{h;s}$.

Der *lineare* Anteil $q_{wi;k}^{h;1}$ dieses Ansatzes beschreibt den stationären Wärmestrom, der bei festgehaltener Innen- und Außentemperatur durch die Wand fließen würde. Mit den Temperaturen $T_{w;k}$ der Wandaußenseiten und T_{inn} im Inneren der Gebäude wird er ausgedrückt als

$$q_{wi;k}^{h;1} = K_w (T_{w;k} - T_{inn}). \quad (120)$$

Der Proportionalitätskoeffizient K_w dieser Beziehung ist eine charakteristische Materialkonstante der Wand mit der Einheit $W m^{-2} K^{-1}$, die im Bauwesen zumeist als „K-Wert“ bezeichnet wird. Ihr Wert wird in der *Eingabedatei* (siehe Kap. 6.1) durch die Spezifikation der Variablen xkw der Namelist-Gruppe „*param*“ festgelegt. Der Vorgabewert ist $xkw = 1.5 W m^{-2} K^{-1}$. Bezüglich der Gebäudeinnentemperatur T_{inn} wird angenommen, dass sie sich, gemessen an den Tagesschwankungen der atmosphärischen Temperatur, nur allmählich ändert. Sie ist daher in MUKLIMO_3 eine vorgebbare, im Verlauf einer Simulation festgehaltene Größe (Variable *tinn* der Namelist-Gruppe „*profile*“, Vorgabe $tinn = 20^\circ C$). Bei der Festlegung von T_{inn} sollte davon ausgegangen

werden, dass die Gebäude eine Heizung besitzen, welche die Innentemperatur nicht unter einen für die Hausbewohner akzeptablen Wert von etwa 20 °C fallen lässt. Eine „Klimaanlage“ zur Vermeidung erhöhter Innentemperaturen ist demgegenüber im Gebäudekonzept von MUKLIMO_3 nicht vorgesehen. Bei der Simulation von Tagesgängen im Verlauf einer länger andauernden Hitzeperiode muss daher ein die Gebäudeaufheizung widerspiegelnder Wert von T_{inn} spezifiziert werden.

Der zweite Anteil $q_{\text{wi};k}^{\text{h};\text{s}}$ der Aufspaltung (119) beschreibt die *Wärmespeicherung* der Wand. Er wird unter der Annahme berechnet, dass die Temperaturverteilung längs eines Schnittes durch die Wand stets einem stationären, durch die beiden Temperaturen T_{inn} und $T_{\text{w};k}$ bestimmten Profil entspricht. Erhöht sich jetzt $T_{\text{w};k}$, so ändert sich auch das stationäre Temperaturprofil innerhalb der Wand und mit ihm der Wärmehalt der Wand. Die dafür aufzubringende Wärme wird der Wand durch den zusätzlichen Wärmestrom $q_{\text{wi};k}^{\text{h};\text{s}}$ zugeführt. Er wird dementsprechend modelliert als

$$q_{\text{wi};k}^{\text{h};\text{s}} = C_{\text{w}}^* \frac{T_{\text{w};k} - T_{\text{w};k}^{\text{alt}}}{\Delta t_{\text{b}}} . \quad (121)$$

Dabei repräsentiert $T_{\text{w};k}^{\text{alt}}$ die Wandaußentemperatur zum vorangegangenen Berechnungszeitpunkt, während Δt_{b} der Zeitschritt für die Prognose der Bodentemperatur ist (siehe Kap. 5.1). Er wird auch als Zeitintervall für die Temperaturberechnung der Wände verwendet. Die Wärmekapazität C_{w}^* schließlich ist die Wärmemenge, welche die Einheitswandfläche aufnimmt, wenn beim stationären Profil die Wandaußentemperatur um 1 K erhöht wird. Ihr Wert hängt von der Struktur und den Materialeigenschaften der Wand bzw. ihrer Schichten ab. In MUKLIMO_3 ist vereinfachend angenommen, dass die Wand aus einheitlichem Material besteht und innerlich homogen ist. Dann sind die stationären Temperaturprofile längs eines Wandquerschnittes stets linear und es gilt der Zusammenhang

$$C_{\text{w}}^* = \frac{C_{\text{w}}}{2} . \quad (122)$$

Hier ist die Materialkonstante C_{w} die flächenhafte *Wärmekapazität* der Wand, d. h. die Wärmemenge, die man benötigt, um ein Wandstück mit der Abmessung von 1 m² um 1 K zu erwärmen. In der Eingabedatei ist ihr die Variable c_{w} der Namelist-Gruppe „*param*“ mit dem Vorgabewert $c_{\text{w}} = 0.3 \cdot 10^6 \text{ J m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ zugeordnet.

Mit den vorstehenden Ansätzen und Parametrisierungen lautet die Bedingung (113) für das Energieflussgleichgewicht an der Wand

$$E_{\text{w};k}(T_{\text{w};k}) = D_k^{\text{sw}} + D_k^{\text{lw}} + d_{\text{w};k} \left\{ \widehat{v}_{\text{h};k} c_{\text{wa}} \rho_0 c_p (T_{\text{w};k} - \widehat{T}_k) + K_{\text{w}} (T_{\text{w};k} - T_{\text{inn}}) + \frac{C_{\text{w}}}{2} \frac{T_{\text{w};k} - T_{\text{w};k}^{\text{alt}}}{\Delta t} \right\} \stackrel{!}{=} 0 . \quad (123)$$

Dies ist zugleich die Bestimmungsgleichung für $T_{\text{w};k}$, die sich somit als *Nullstellenproblem* darstellt. Es wird iterativ nach dem sogenannten *Newton-Verfahren* gelöst, d. h. die $(\nu + 1)$ -te Näherung $T_{\text{w};k}^{\nu+1}$ der Wandaußentemperatur wird aus der ν -ten Näherung $T_{\text{w};k}^{\nu}$ nach der Vorschrift

$$T_{\text{w};k}^{\nu+1} = T_{\text{w};k}^{\nu} - \frac{E_{\text{w};k}(T_{\text{w};k}^{\nu})}{E'_{\text{w};k}(T_{\text{w};k}^{\nu})} \quad (124)$$

errechnet. Dabei ist $E'_{\text{w};k}$ die Ableitung der durch Gleichung (123) definierten Energiebilanz nach der Wandaußentemperatur $T_{\text{w};k}$. Die Iteration wird erfolgreich beendet, wenn der Restbetrag der Energiebilanz nach höchstens 10 Schritten unter 0.1 W m⁻² gefallen ist, andernfalls wird sie mit einer Fehlermeldung abgebrochen.

Nach Bestimmung der Wandaußentemperaturen $T_{\text{w};k}$ werden die für die Integration der atmosphärischen Wärmegleichung (88) benötigten Wandanteile $Q_{\text{w};k}^{\text{h}}$ der Wärmequelle $Q_{\text{geb}}^{\text{h}}$ errechnet, indem die aus der Gleichung (115) erhaltenen Energiestromdichten $q_{\text{wa};k}^{\text{h}}$ mit den Wandflächendichten $d_{\text{w};k}$ der jeweiligen Gitterzellen multipliziert werden:

$$Q_{\text{w};k}^{\text{h}} = d_{\text{w};k} q_{\text{wa};k}^{\text{h}} . \quad (125)$$

Die Neuberechnung von Q_w^h für alle Gitterzellen mit unaufgelöster Bebauung erfolgt in MUKLIMO_3 in festen zeitlichen Abständen, siehe Kapitel 3.5.3. Die Integration der Wärmeleichung (88) wird dann mit den jeweils letztgültigen Werten von Q_w^h durchgeführt.

3.5.2 Gebäudedächer

Die meisten Aspekte des Wärmetausches der Gebäudewände mit der Atmosphäre können auf die Dächer übertragen werden, wobei die Materialkonstanten $z_{0;w}$, K_w und C_w sowie der Transferkoeffizient c_{wa} der Gleichungen (115), (120) und (121) durch die entsprechenden Größen $z_{0;r}$, K_r , C_r (Variable $z0r$, xkd und cda der Namelist-Gruppen „*boden*“ bzw. „*param*“ der Eingabedatei) und c_{ra} für die Dächer zu ersetzen sind.

Ein Unterschied in der numerischen Behandlung der Dächer zu den Wänden besteht jedoch darin, dass Erstere in MUKLIMO_3 an die halbzahlig vertikalen Niveaus $z_{k-1/2}$ gebunden sind, während die Wände über das gesamte Volumen der Gitterzellen V_{ijk} verteilt sind. Die Dachflächendichten $d_{r;k}$ sind daher, anders als die Volumendichten $d_{w;k}$ der Wände, dimensionslose *Flächendichten* (also Dachflächen pro Grundfläche), wobei die Dächer der Rechenfläche $z_{k-1/2}$ den mit ihnen in Austausch stehenden Gitterzellen des Niveaus k zugerechnet werden, vergleiche Kapitel 2.3.4. Ebenso werden die gleichfalls den Flächen $z_{k-1/2}$ zuzurechnenden diskreten Felder der Dachtemperatur $T_{r;k}$ sowie die Wärmestromdichten $q_{ra;k}^h$ und $q_{ri;k}^h$ ganzzahlig mit k indiziert. Wegen der horizontalen Orientierung der Dachflächen können die von ihnen ausgehenden, in die Atmosphäre gerichteten Flussdichten $q_{ra;k}^h$ der sensiblen Wärme und $q_{ra;k}^{vap}$ des Wasserdampfes analog zu den entsprechenden Flussdichten an der Bodengrenzfläche berechnet werden, siehe dazu Kapitel 3.4.1. Im Endeffekt erhält man für die Wärmestromdichte $q_{ra;k}^h$ von den unbegrünten Dächern in die Atmosphäre (zu den begrünten Dachflächenanteilen siehe Kap. 5.5) ein der Gleichung (115) entsprechendes Transfersgesetz der Form

$$q_{ra;k}^h = \widehat{v}_{h;k} c_{ra;k} \rho_0 c_p \left\{ T_{r;k} - \widehat{T}_k - \gamma_{ad}(z_k - z_{k-\frac{1}{2}}) \right\}, \quad (126)$$

in dem sich der Transferkoeffizient $c_{ra;k}$ für das betrachtete Dachniveau aus den universellen Clarke-Funktionen G_M und G_θ errechnet als

$$c_{ra;k} = \frac{1}{G_M \left(\frac{\Delta z_k}{2\lambda_{Cl}}, \frac{\Delta z_k}{2z_{0;r}} \right) G_\theta \left(\frac{\Delta z_k}{2\lambda_{Cl}}, \frac{\Delta z_k}{2z_{0;r}} \right)}, \quad (127)$$

wobei λ_{Cl} die als

$$\lambda_{Cl} = \frac{\widehat{T}_k \widehat{v}_{h;k}^2}{g \left\{ \widehat{T}_k - T_{r;k} + \gamma_{ad}(z_k - z_{k-\frac{1}{2}}) \right\}} \quad (128)$$

berechnete externe Stabilitätslänge und $z_{0;r}$ die Rauiglänge der Dächer ist (zu spezifizieren über die Variable $z0d$ der Namelist-Gruppe „*boden*“, Vorgabe $z0d=0.05$ m).

Die Energiebilanzgleichung zur Bestimmung der Oberflächentemperatur $T_{r;k}$ der im Gitterniveau $z_{k-\frac{1}{2}}$ befindlichen Dachflächen lautet

$$F_{sw, k-\frac{1}{2}}^\downarrow (1 - A_r) + F_{lw, k-\frac{1}{2}}^\downarrow - \sigma T_{r;k}^4 - q_{ra;k}^h - q_{ri;k}^h \stackrel{!}{=} 0. \quad (129)$$

Dabei sind A_r die *Albedo* der Dachflächen, σ die *Stefan-Boltzmann-Konstante* und $q_{ri;k}^h$ die von den Dächern in das Gebäudeinnere gerichtete Wärmestromdichte.

Mit dem Ansatz der Gleichung (126) für $q_{ra;k}^h$ und einer zweigeteilten Parametrisierung von $q_{ri;k}^h$ analog zu den

Gleichungen (120) und (121) erhält die Energiebilanzgleichung (129) die Form

$$\begin{aligned}
 E_{r;k}(T_{r;k}) &= F_{sw;k-\frac{1}{2}}^{\downarrow} (1 - A_r) + F_{lw;k-\frac{1}{2}}^{\downarrow} - \sigma T_{r;k}^4 \\
 &\quad - \widehat{v}_{h;k} c_{ra;k} \rho_0 c_p \left\{ T_{r;k} - \widehat{T}_k - \gamma_{ad}(z_k - z_{k-\frac{1}{2}}) \right\} \\
 &\quad - K_r (T_{r;k} - T_{inn}) - \frac{C_r}{2} \frac{T_{r;k} - T_{r;k}^{alt}}{\Delta t_b} \\
 &\stackrel{!}{=} 0 .
 \end{aligned} \tag{130}$$

Aus ihr wird $T_{r;k}$ mithilfe des Newton-Verfahrens bestimmt.

Anders als bei den gleichmäßig über die Gitterzellen verteilten Wänden hat der Wärmeaustausch der Atmosphäre mit den Dächern nicht die Form einer Volumenquelle, sondern stellt sich als *Flächenquelle* im Dachniveau $z_{k-1/2}$ dar, von der aus die Wärme in die Zellen der darüber befindlichen Gitterschicht k fließt. Zur Umrechnung in die *Volumenquelle* $Q_{r;vs;k}^h$ der Wärmeleichung (88) (siehe dazu auch die in den Gl. 93 und 94 vorgenommenen Aufteilungen) muss die von den Dächern ausgehenden Wärmestromdichte $q_{ra;k}^h$ spontan auf die gesamte, über ihnen befindliche Gitterzelle verteilt werden. Das ergibt den Zusammenhang

$$Q_{r;vs;k}^h = d_{r;k} q_{ra;k}^h / \Delta z_k . \tag{131}$$

3.5.3 Iterative Berechnung

Ein *Problem* der Wand- und Dachttemperaturberechnung ist, dass die Oberflächentemperaturen der Gebäude aller vertikaler Niveaus die langwellige Strahlungsbilanz über dem betreffenden Flächenelement F_{ij} beeinflussen, was wiederum Auswirkungen auf die Berechnung der Oberflächentemperaturen hat und vice versa. Das erfordert ein iteratives Vorgehen, bei dem die Oberflächentemperaturen „säulenweise“, d. h. für alle Höhengniveaus über einem Flächenelement F_{ij} gemeinsam, berechnet werden. Der Algorithmus besteht aus den Teilschritten

- Berechnung der kurzwelligen Einstrahlung auf Wände und Dächer der Säule
- (Neu-)Berechnung der langwelligen Strahlungsbilanz der Säule
- (Neu-)Berechnung der Wand- und Dachttemperaturen

Die letzten beiden Schritte werden wiederholt, bis die Forderungen (123) und (130) des Energiegleichgewichts in allen Wand- und Dachniveaus zugleich mit einer Genauigkeit von besser als 0.1 Wm^{-2} erfüllt sind.

Der zeitliche Abstand der Temperaturberechnungen für die Wände und Dächer entspricht dem Zeitschritt Δt_b für die Integration der Bodengleichungen (siehe Kap. 5). Er ist in MUKLIMO_3 eine vorgebbare Größe (siehe im Anhang E die Variable *minb* der Namelist-Gruppe „zeit“) mit einem Default-Wert von 1 min.

3.5.4 Blattflächen

Beim Wärmetausch der Atmosphäre mit den Blättern der Baumbestände des Modellgebiets ist die von den Blättern ausgehende Verdunstung in die Energiebilanz E_f an deren Oberflächen mit einzubeziehen. Für atmosphärische Gitterzellen mit Blättern im Niveau k (auf die horizontale Kennzeichnung der Zellen wird verzichtet)

wird sie daher angesetzt als

$$E_{f;k} = D_k^{\text{sw}} + D_k^{\text{lw}} + d_{f;k} \left(q_{\text{fa};k}^{\text{h}} + q_{\text{fi};k}^{\text{h}} + l_{21} q_{\text{fa};k}^{\text{vap}} \right). \quad (132)$$

Hier sind D_k^{sw} und D_k^{lw} die für Gitterzellen mit Belaubung nach Gleichung (114) berechneten *Divergenzen* der kurz- und langwelligen Strahlungsstromdichten (siehe Kap. 4.4 und 4.5.2), während $d_{f;k}$ die in Kapitel 2.3.5 eingeführte *Blattflächendichte* ist. Die Größen $q_{\text{fa};k}^{\text{h}}$ und $q_{\text{fi};k}^{\text{vap}}$ repräsentieren die Dichten (gerechnet pro Blattfläche) der von der Belaubung in die Atmosphäre gerichteten *Wärme-* und *Wasserdampfströme*. Die verbleibende Flussdichte $q_{\text{fi};k}^{\text{h}}$ entspricht der in die Substanz des Baumbestandes eindringenden und dort gespeicherten Wärme. Der prinzipielle Unterschied von Gleichung (132) zu Gleichung (113) für die Wände der unaufgelösten Bebauung ist das Auftreten der *latenten* Wärmestromdichte $l_{21} q_{\text{fa};k}^{\text{vap}}$ von den Blättern in die Atmosphäre. Außerdem ist zu beachten, dass sowohl die Blattober- als auch die Blattunterseiten in Kontakt zur Atmosphäre stehen, wobei sich deren Strahlungsumgebungen deutlich voneinander unterscheiden können. MUKLIMO_3 ordnet der Unterseite der Blätter deshalb eine von der Oberseitentemperatur $T_{f;k}^{\text{tree}}$ abweichende Temperatur $T_{\text{fu};k}^{\text{tree}}$ zu, die aus der Oberseitentemperatur $T_{f;k}^{\text{tree}}$ und der mittleren atmosphärischen Temperatur \widehat{T}_k über den Zusammenhang

$$T_{\text{fu};k}^{\text{tree}} = \widehat{T}_k + 0.1 (T_{f;k}^{\text{tree}} - \widehat{T}_k) \quad (133)$$

errechnet wird. Dieser rein empirische Ansatz stellt sicher, dass die Temperaturen der geschützten Blattunterseiten stets näher an der atmosphärische Temperatur bleiben als die der Blattoberseiten. Er wurde in MUKLIMO_3 eingeführt, weil die zunächst mit einheitlicher Blattoberseite durchgeführten Simulationen im Wald tagsüber oftmals zu hohe und nachts zu tiefe Lufttemperaturen ergeben hatten. Abbildung 5 zeigt anhand eines beispielhaften Vergleichs die durch den Ansatz (133) bewirkte spätabendliche Erhöhung der Lufttemperatur.

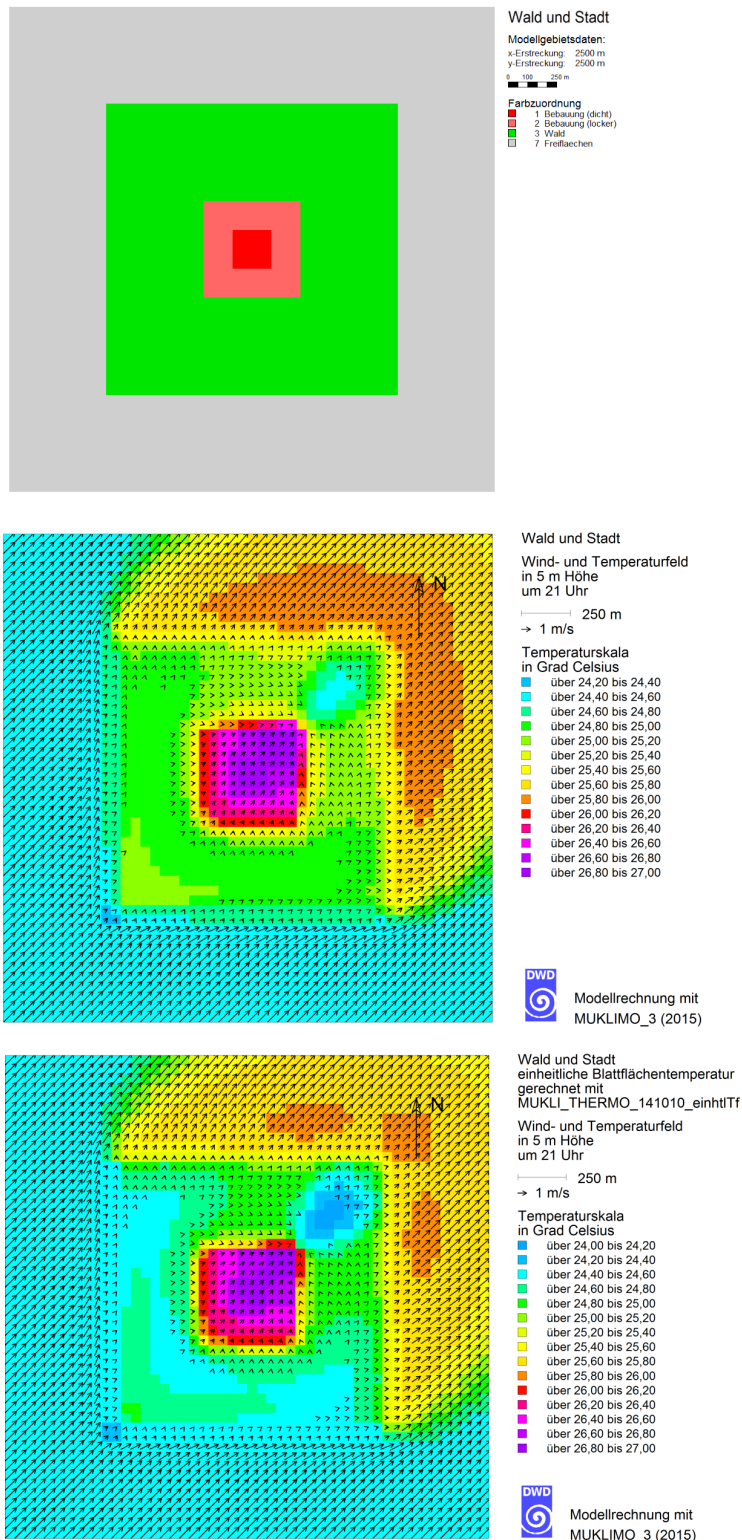


Abbildung 7: Vergleich zweier Simulationen mit unterschiedlichen Ansätzen für die Blattflächentemperatur des Baumbestands. Oben: Modellgebiet. Bildmitte: Wind- und Temperaturfeld um 21 Uhr simuliert mit Unterscheidung der Temperaturen der Blattober- und Unterseiten. Unten: Wind- und Temperaturfeld einer Vergleichssimulation mit einheitlichen Blatttemperaturen.

Die Modellierung des Wärmestroms wie auch des Wasserdampfstroms von den Blättern in die Atmosphäre folgt grundsätzlich den Ansätzen des Bodenbewuchsmodells, siehe Kapitel 5.4. In Zusammenfassung der Wärmeströme von der Blattober- und Unterseite wird $q_{fa;k}^h$ deshalb angesetzt als

$$q_{fa;k}^h = \rho_0 c_p \left(\frac{T_{f;k} - \widehat{T}_k}{r_{a;k}} + \frac{T_{fu;k} - \widehat{T}_k}{r_{a;k}} \right) = 1.1 \rho_0 c_p \frac{T_{f;k} - \widehat{T}_k}{r_{a;k}} \quad (134)$$

mit dem gitterzellspezifischen Wärmeübergangswiderstand $r_{a;k}$ gemäß Gleichung (326). Im Unterschied zum Bodenbewuchsmodell wird in MUKLIMO_3 beim Baumbestand die Wärmespeicherung nicht vernachlässigt. Das heißt, dass nur ein Teil der an den Blättern umgesetzten Wärme in die Atmosphäre gelangt, der andere Teil dagegen als „innerer“ Wärmestrom $q_{fi;k}^h$ in die materielle Substanz des Baumbestands (Blätter, Zweige, Äste, Stämme) eindringt und dort gespeichert wird. Diese Reduktion des atmosphärischen Wärmestroms wird in MUKLIMO_3 mithilfe eines empirischen „Wirkungsfaktors“ f_{wirk} (mit dem Wert $f_{\text{wirk}} = 0.47$) dargestellt als

$$q_{fa;k}^h = f_{\text{wirk}} \left(q_{fa;k}^h + q_{fi;k}^h \right) . \quad (135)$$

Daraus erhält man zwischen dem inneren und dem atmosphärischen Wärmestrom den Zusammenhang

$$q_{fi;k}^h = \frac{1 - f_{\text{wirk}}}{f_{\text{wirk}}} q_{fa;k}^h . \quad (136)$$

Der Ansatz für die Flächendichte $q_{fa;k}^{\text{vap}}$ des Wasserdampfstroms von den Blättern einer Gitterzelle in die Atmosphäre lautet

$$q_{fa;k}^{\text{vap}} = \rho_0 \frac{q_s(T_{f;k}) - \widehat{q}_k}{r_{m;k}} \quad (137)$$

in Entsprechung zum *Widerstandsgesetz* der Gleichung (104). Er beruht auf der Annahme, dass im Inneren der Blätter Sättigungsdampfdruck $q_s(T_{f;k})$ herrscht. Bei der Modellierung des Widerstandes $r_{m;k}$ der vorstehenden Gleichung wird entsprechend Gleichung (105) zwischen Situationen mit Verdunstung und solchen mit Kondensation an den Blättern unterschieden. Der Grund für diese Unterscheidung ist, dass der Wasserdampf beim Übertritt aus dem Blattinneren in die Atmosphäre, zusätzlich zum atmosphärischen Widerstand $r_{a;k}$ (siehe Gl. 134), den sogenannten *Stomata*-Widerstand $r_{s;k}$ (siehe Gl. 328) der Blätter überwinden muss. Bei Kondensation, d. h. für $\widehat{q}_k > q_s(T_{f;k})$, entfällt dagegen der *Stomata*-Widerstand.

Mit den vorstehenden Ansätzen für $q_{fa;k}^h$, $q_{fi;k}^h$ und $q_{fa;k}^{\text{vap}}$ wird die Forderung

$$E_{f;k} = E_{f;k} (T_{f;k}) \stackrel{!}{=} 0 \quad (138)$$

nach Verschwinden der Energiebilanz (132) zur Bestimmungsgleichung für die Blattflächentemperatur $T_{f;k}$ in der jeweiligen Gitterzelle. Sie wird, wie bei den Wänden und Dächern, nach dem Newton-Verfahren gelöst. Zu beachten ist auch hier, dass die langwellige Einstrahlung auf die Blätter einer Gitterzelle in Wechselbeziehung mit den Blattflächentemperaturen der gesamten Gittersäule steht. Die Bestimmung der langwelligen Strahlungsflüsse innerhalb einer Gittersäule mit Blättern (siehe Kap. 4.5.2) ist deshalb eingebettet in eine *iterative* Prozedur zur Ermittlung der Blattflächentemperaturen.

Nach Ermittlung von $T_{f;k}$ wird der *Quellterm* $Q_{f;k}^h$ der Wärme Gleichung (88) aus der von den Blättern in die Atmosphäre gerichteten Wärmestromdichte $q_{fa;k}^h$ und der Blattflächendichte $d_{f;k}$ errechnet als

$$Q_{f;k}^h = d_{f;k} q_{fa;k}^h , \quad (139)$$

während man den dem Baumbestand zuzuordnenden Anteil $Q_{f;k}^{\text{vap}}$ der Wasserdampfquelle Q^{vap} in der atmosphärischen Feuchtebilanz (102) erhält als

$$Q_{f;k}^{\text{vap}} = d_{f;k} q_{fa;k}^{\text{vap}} . \quad (140)$$

3.6 Diffusionskoeffizienten

3.6.1 Neutrale atmosphärische Schichtung

Die Modellierung des turbulenten Diffusionskoeffizienten K_m für den Impuls in der Basisversion von MUKLI-MO_3 (SIEVERS, 2012) beruht auf dem *Prandtschen Mischungswegansatz*

$$K_m = l^2 \left| \frac{\partial \vec{v}_h}{\partial z} \right| ,$$

in dem die *Mischungsweglänge* l definiert ist als

$$l = \kappa z \quad \text{mit } \kappa \approx 0.4 : \quad \text{von-Kármán-Konstante.}$$

Er setzt den Diffusionskoeffizienten K_m einer ebenen Strömung in Beziehung zur Scherung der Horizontalgeschwindigkeit \vec{v}_h und zum Bodenabstand z . Der Prandtsche Ansatz ist für ein Problem mit Gebäudeumströmungen, wie auch bei Strömungen in merklich geneigtem Gelände, jedoch nicht direkt anwendbar, da die zugehörigen Geschwindigkeitsfelder sehr stark von horizontalen Strömungen abweichen können. Er muss deshalb so modifiziert werden, dass er auch für parallele Strömungen längs beliebig orientierter Flächen (Wände!) anstelle einer horizontalen Ebenen anwendbar ist. Das wird erreicht, indem man die Vertikalableitung der Horizontalgeschwindigkeit $\partial \vec{v}_h / \partial z$ durch die Normalableitung $\partial \vec{v}_t / \partial n$ der Tangentialgeschwindigkeit \vec{v}_t parallel zur betrachteten Grenzfläche ersetzt, wobei der Bodenabstand z in den Normalenabstand d des Bezugspunktes von der Fläche übergeht. Man überzeugt sich, dass die mit dem Stromfunktions-Vorticity-Ansatz von MUKLI-MO_3 konforme Verallgemeinerung

$$K_m = l^2 \left| \frac{\partial \vec{v}_h}{\partial z} \right| \quad \rightarrow \quad K_m = l^2 \left| \vec{\zeta} \right|$$

$$l = \kappa z \quad \rightarrow \quad l = \kappa d$$

mit d : minimaler Abstand zur Bodenkontur

diesem Anspruch genügt, da sie für horizontale Strömungen in den originalen Prandtl-Ansatz übergeht, zugleich aber invariant gegenüber Drehungen der Grenzfläche ist.

Außerdem wird in MUKLI-MO_3 das unbegrenzte Anwachsen des Mischungswegs mit dem Bodenabstand unterbunden, indem der Mischungsweg l gemäß einem Ansatz von BLACKADAR (1962) durch einen maximalen Mischungsweg l_∞ nach oben begrenzt wird entsprechend dem Übergang

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{\kappa d} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{l} = \frac{1}{\kappa d} + \frac{1}{l_\infty} . \quad (141)$$

Die Länge l_∞ ist in MUKLI-MO_3 mit dem Wert $l_\infty = 30$ m vorbelegt. Dieser Wert kann jedoch über die Eingabedatei (Variable *xlB* der Namelist-Gruppe „*param*“) geändert werden, vergleiche Anhang E.

Der turbulente Diffusionskoeffizient K_h , der in MUKLI-MO_3 gleichermaßen für den Transport von Wärme (siehe Gl. 92) wie von atmosphärischen Beimengungen (siehe Gl. 102) verwendet wird, steht bei neutraler Schichtung zu K_m in der Beziehung

$$K_h = 1.35 K_m . \quad (142)$$

3.6.2 Verallgemeinerung für eine geschichtete Atmosphäre

Zum Gebrauch in der *Thermodynamik-Version* müssen die im vorstehenden Kapitel wiedergegebenen Ansätze der Basisversion für K_m und K_h so verallgemeinert werden, dass sie die Abhängigkeit der turbulenten Diffusionskoeffizienten von der *Stabilität* der atmosphärischen Schichtung berücksichtigen. Zu diesem Zweck wird

eine entsprechend dem Stromfunktions-Vorticity-Konzept von MUKLIMO_3 modifizierte *Richardson-Zahl* Ri (genauer: Gradienten-Richardson-Zahl) eingeführt, die definiert ist als

$$Ri := \frac{g \widehat{\partial\theta}/\partial z}{\widehat{T} \zeta^2}. \quad (143)$$

Dieser dimensionslose Quotient, in dem g die Schwerkraft ist, setzt die Stabilität der Schichtung in Beziehung zur Windscherung. Der Unterschied zur üblichen Definition der Richardson-Zahl besteht in der – in Gleichung (141) auch schon vorgenommenen – Ersetzung der vertikalen Scherung des Horizontalwinds durch die Vorticity,

$$\left| \frac{\partial \vec{v}_h}{\partial z} \right| \rightarrow |\zeta|. \quad (144)$$

Sie entspringt einerseits der Notwendigkeit, für horizontale Strömungen konzipierte Größen so zu verallgemeinern, dass sie auch für beliebig gerichtete Strömungen anwendbar werden. Andererseits harmonisiert sie mit der in MUKLIMO_3 verwendeten Stromfunktions-Vorticity-Methode.

Mithilfe von *Stabilitätsfunktionen* $\varphi_m(Ri)$ bzw. $\varphi_h(Ri)$ können die in MUKLIMO_3 verwendeten Ansätze für die stabilitätsabhängigen turbulenten Diffusionskoeffizienten K_m und K_h in der Form

$$K_{m/h} = l^2 |\zeta| \varphi_{m/h}(Ri), \quad (145)$$

geschrieben werden, wobei $\varphi_m(Ri)$ in Anlehnung an SIEVERS und ZDUNKOWSKI (1986) angesetzt wird als

$$\varphi_m(Ri) = \begin{cases} \sqrt{1 - \alpha^* Ri} & \text{für } Ri \leq 0 \\ 1/\sqrt{1 + \alpha^* Ri} & \text{für } Ri > 0. \end{cases} \quad (146)$$

Der Parameter α^* hat dabei den Wert $\alpha^* = 6$. Der Ansatz der Gleichung (146) ist so beschaffen, dass seine beiden Zweige an der Schnittstelle $Ri \rightarrow 0$ „glatt“, d. h. stetig differenzierbar, ineinander übergehen: Die *Taylor-Entwicklung* nach Ri ergibt für beide Fälle die erste Näherung $\varphi_m \approx 1 - 3 Ri$. Das ist in Übereinstimmung mit GUTMAN und TORRANCE (1975). Der Ansatz der Gleichung (146) ist aber insofern weitergehend, als er auch für $|Ri| \gg 1$ brauchbar bleibt: Im Grenzfall $Ri \rightarrow +\infty$ (stark stabile Schichtung bei verschwindender Windscherung) geht φ_m , und damit auch K_m , mit $Ri^{-0.5}$ gegen Null. Im entgegengesetzten Fall $Ri \rightarrow -\infty$ (stark labile Schichtung bei geringer Windscherung) strebt φ_m zwar mit $Ri^{0.5}$ gegen Unendlich, aber der nach Gleichung (145) berechnete Diffusionskoeffizient K_m bleibt dennoch endlich, da er sich – mit Beschränkung auf den labilen Zweig der Schichtung – auch schreiben lässt als

$$K_m = l^2 \sqrt{\zeta^2 - \frac{\alpha^* g}{\widehat{T}} \frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial z}} \quad \text{für } \frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial z} \leq 0. \quad (147)$$

Bei Vernachlässigung der durch die Vorticity repräsentierten Windscherung gegenüber dem Stabilitätsterm resultiert daraus das „Grenzgesetz“ einer rein konvektiven Durchmischung

$$K_m \rightarrow l^2 \sqrt{\frac{\alpha^* g}{\widehat{T}}} \left(-\frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial z} \right)^{0.5} \quad \text{für } Ri \rightarrow -\infty. \quad (148)$$

Anders als bei SIEVERS und ZDUNKOWSKI (1986), wo die beiden Diffusionskoeffizienten K_m und K_h der Einfachheit halber nicht unterschieden werden, verwendet MUKLIMO_3 für die Stabilitätsfunktion φ_h einen eigenständigen Ansatz. Er lautet

$$\varphi_h = 1.35 \varphi_m \begin{cases} \sqrt{1 - \alpha^* Ri} / \sqrt{1 - \beta^* Ri} & \text{für } Ri \leq 0 \\ 1 / \{1 + 0.5(\alpha^* - \beta^*) Ri\} & \text{für } Ri > 0, \end{cases} \quad (149)$$

wobei der neu hinzukommende Parameter β^* den Wert $\beta^* = 2$ hat. Auch dieser Ansatz ist stetig differenzierbar bei $Ri = 0$. Das Verhältnis K_h/K_m (Kehrwert der turbulenten *Prandtl-Zahl* Pr_t) strebt mit ihm im labilen Grenzfall $Ri \rightarrow -\infty$ gegen den konstanten Wert $1.35\alpha^*/\beta^*$, für $Ri \rightarrow +\infty$ hingegen gegen Null. Bei neutraler Schichtung $Ri=0$ erhält man den bereits in Gleichung (142) angegebenen Wert $K_h/K_m = 1.35$.

3.6.3 Berücksichtigung von Bebauung

Die Anwesenheit von Bebauung ändert das Strömungsverhalten der Atmosphäre sowohl durch die erzwungene Umströmung der Gebäude als auch durch das Auftreten zusätzlicher Windscherungen längs der Wände und Kanten der Gebäude, die wiederum die Quelle für zusätzliche Turbulenzen sind. Dieser Effekt wird in MUKLIMO_3, wie im ersten Teil dieses Berichts (SIEVERS, 2012) beschrieben, dadurch berücksichtigt, dass in den Ansatz der dortigen Gleichung (145) für die Diffusionskoeffizienten $K_{m/h}$ eine zusätzliche „Windscherung“ \widehat{v}_h/d_b einbezogen wird. Die Diffusionskoeffizienten $K_{m/h}$ werden dann berechnet als

$$K_{m/h} = l^2 \sqrt{\left(\vec{\zeta}\right)^2 + \left(\widehat{v}_h/d_b\right)^2} \varphi_{m/h}(Ri) . \quad (150)$$

Dabei ist d_b (mit „b“ für „building“) ein repräsentatives Maß für den Abstand, den die atmosphärischen Punkte von der nächstgelegenen Gebäudewand haben. Sie wird in MUKLIMO_3 durch die Beziehung

$$\frac{1}{d_b} = \frac{2d_w}{1 - v_{geb}} \quad (151)$$

in Relation zur Wandflächendichte d_w der unaufgelösten Bebauung gesetzt. Zur Ableitung dieses Zusammenhangs siehe Kap. 4.4.4 in SIEVERS (2012).

Als zweite Modifikation zur Berücksichtigung unaufgelöster Bebauung in den Ansätzen für die Diffusionskoeffizienten wird der repräsentative Wandabstand d_b auch in die Berechnung des Mischungswegs l , der ja als Minimalabstand zu den Hindernissen des Strömungsvolumens gedeutet wird, mit einbezogen. Auch diese Änderung ist bereits im ersten Teil des Berichts beschrieben (siehe SIEVERS, 2012, Kap. 4.4.4).

Wie in den Kapiteln 3.1.3 und 3.2.2 dargelegt, führt die statistische Behandlung der atmosphärischen Strömung im Bereich unaufgelöster Bebauung aber zudem zum Auftreten neuer Korrelationsprodukte, die als *Umlenkungsflüsse* gedeutet werden, da sie in Zusammenhang mit der Umlenkung der Strömung durch die Gebäude stehen. Das ist sowohl in der Bewegungsgleichung (56) wie auch im Wärmehaushalt (91) und der Wasserdampfbilanz (102) der Fall. Im Rahmen des Konzepts der unaufgelösten Bebauung werden diese Umlenkungsflüsse, in analoger Weise wie die „normalen“ Flüsse, über *Gradientansätze* parametrisiert, d. h. sie werden bei der Formulierung der turbulenten Diffusionskoeffizienten K_m und K_h über *Zusatzterme* $Z_{m/h}$ gemäß einem Übergang

$$K_{m/h} \rightarrow K_{m/h} + Z_{m/h} \quad (152)$$

berücksichtigt. In die Formulierung der *zusätzlichen* Diffusionskoeffizienten $Z_{m/h}$ zur Berücksichtigung der Umlenkeffekte der unaufgelösten Bebauung sollte die mittlere horizontale *Windgeschwindigkeit* \widehat{v}_h , eine charakteristische *Gebäudeabmessung* sowie die Dichte v_{geb} der *Gebäudeanordnung* eingehen. Zur Gewinnung einer charakteristischen Gebäudeabmessung aus den zur Verfügung stehenden Größen v_{geb} und d_w geht man zweckmäßigerweise von einer Bebauung mit einheitlichen quadratischen Gebäudegrundrissen aus. Man kann dann zeigen, dass deren Seitenlänge a_{geb} zu v_{geb} und d_w in der Beziehung

$$a_{geb} = \frac{4 v_{geb}}{d_w} \quad (153)$$

steht. Mithilfe dieser charakteristischen Abmessung wird der zusätzliche Diffusionskoeffizient Z_m der Umlenkungsturbulenz modelliert als

$$Z_m = C_U \frac{4 v_{geb}}{d_w} \widehat{v}_h \min(v_{geb}, 0.25) . \quad (154)$$

Die Beschränkung der Abhängigkeit von v_{geb} auf einen Maximalwert von 0.25 erfolgt, da die Gesamtfläche der Störzonen um die Einzelgebäude mit zunehmender Bebauungsdichte nicht beliebig anwachsen kann. Vielmehr beginnen die Einzelzonen irgendwann zu überlappen. Der freie Parameter C_U des Ansatzes wurde nach numerischen Tests mit verschiedenen Werten schließlich mit $C_U = 0.2$ als bestgeeigneter Wahl belegt. Abbildung

8 auf Seite 64 demonstriert die Wirkung des Ansatzes. Sie zeigt, dass er die Übereinstimmung der Resultate für unaufgelöst modellierte Bebauung mit den Ergebnissen für eine entsprechende Anordnung mit aufgelösten Gebäuden merklich verbessert.

4 Strahlung

4.1 Einfallende Strahlung

Die auf die Flächenelemente eines Modellgebiets unmittelbar über dem Boden, bzw. bei Bebauung oder Bewaldung unmittelbar über den Gebäudedächern oder den Baumkronen, einfallende kurzwellige Strahlungsflussdichte $F_{\text{top}}^{\text{sw}}$ wird in MUKLIMO_3, einschließlich ihrer Aufteilung in parallele und diffuse Anteile, mithilfe empirischer Gesetze berechnet. Grundlage dafür sind die in der VDI-Richtlinie 3789 (VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE (VDI), 1994) angegebenen Zusammenhänge, die im Folgenden kurz dargestellt werden.

Die direkte Sonnenstrahlung $F_{\text{dir}}^{\text{sw}}$ wird ohne Druckkorrektur, unter der Annahme einer Wolkenbedeckung η des Himmels, berechnet als

$$F_{\text{dir}}^{\text{sw}} = F^s \mu_0 \exp \left[\frac{-\tau_L}{0.9 + 9.4 \mu_0} \right] (1 - \eta) . \quad (155)$$

In diese Formel gehen, neben der Solarkonstante F^s mit einem Wert von 1380 Wm^{-2} , der Zenitwinkel θ_0 der Sonne (bzw. sein Kosinus $\mu_0 = \cos \theta_0$) sowie der *Linkesche Trübungs faktor* τ_L ein, der die optische Dicke der Atmosphäre beschreibt.

Zur Ermittlung der *diffusen* Strahlung wird zuerst die *Globalstrahlung* $F_{\text{glob}}^{\text{sw}}$ aus der Formel

$$F_{\text{glob}}^{\text{sw}} = 0.84 F^s \mu_0 \exp \left\{ \frac{-0.027 \tau_L}{\mu_0} \right\} (1 - 0.72 \eta^{3.2}) \quad (156)$$

berechnet. Die gesamte diffuse Strahlung $F_{\text{diff,tot}}^{\text{sw}}$ ergibt sich dann aus den Gleichungen (155) und (156) als

$$F_{\text{diff,tot}}^{\text{sw}} = F_{\text{glob}}^{\text{sw}} - F_{\text{dir}}^{\text{sw}} . \quad (157)$$

Weil die diffuse Strahlung bei unvollständiger Himmelsbedeckung eine ausgeprägte Spitze rund um die Position der Sonne besitzt, wird die Sonnenstrahlung, anstatt in die direkte und die (totale) diffuse Strahlung, in einen *parallelen* Anteil F_{p}^{sw} und einen *isotropen* diffusen Anteil F_{d}^{sw} untergliedert. Das wird erreicht durch Abspaltung eines sonnennahen, anisotropen Anteils von der diffusen Strahlung, der die Spitze der diffusen Strahlungsverteilung repräsentiert. Zusammen mit der direkten Strahlung bildet die sonnennahe diffuse Strahlung dann die parallele Strahlung F_{p}^{sw} ,

$$F_{\text{p}}^{\text{sw}} = F_{\text{dir}}^{\text{sw}} \left(1 + \frac{F_{\text{glob}}^{\text{sw}} - F_{\text{dir}}^{\text{sw}}}{F^s \mu_0} \right) , \quad (158)$$

während der isotrope diffuse Anteil F_{d}^{sw} einfach als *diffuse* Strahlung F_{d} bezeichnet und aus der Beziehung

$$F_{\text{d}}^{\text{sw}} = F_{\text{diff,tot}}^{\text{sw}} \left(1 - \frac{F_{\text{dir}}^{\text{sw}}}{F^s \mu_0} \right) \quad (159)$$

berechnet wird.

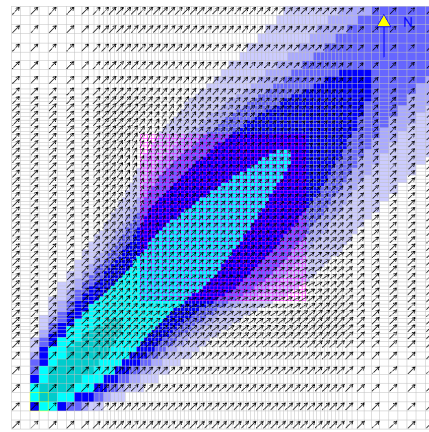
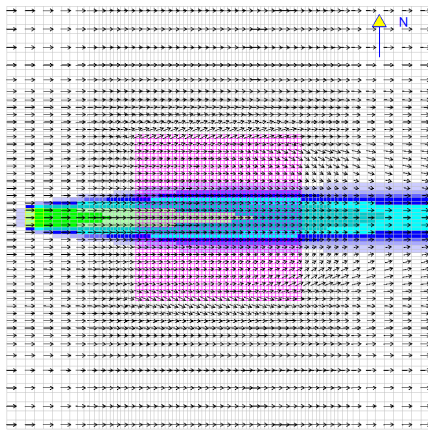
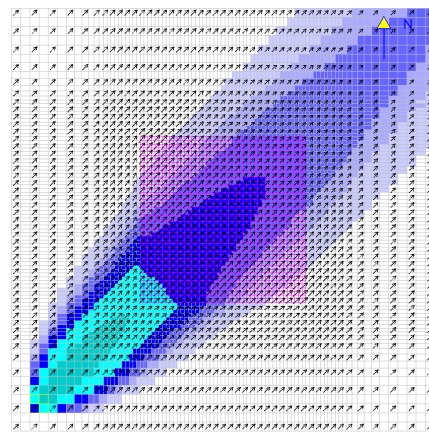
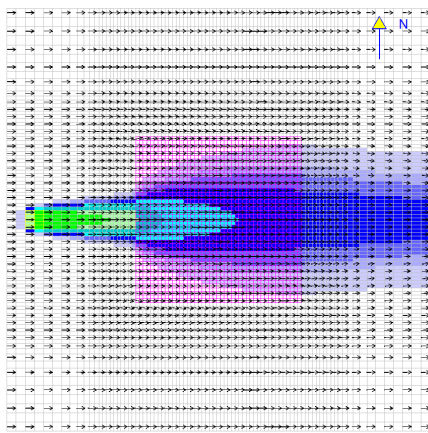
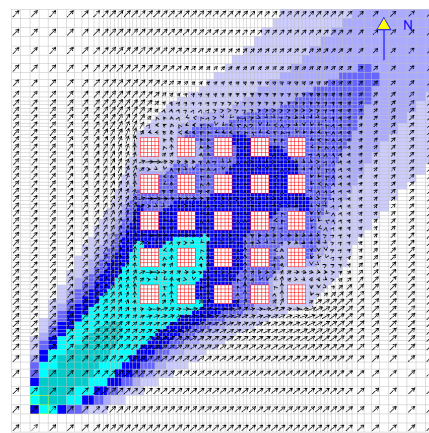
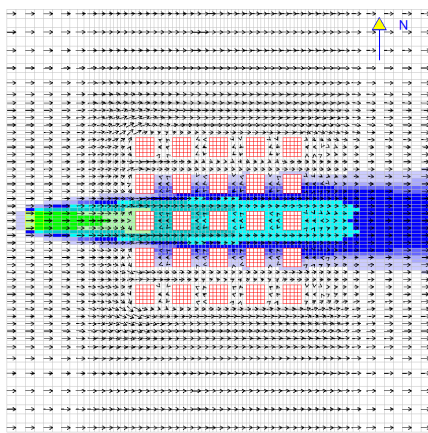


Abbildung 8: Vergleichsrechnungen zur Ausbreitung einer Luftbeimengung, die auf eine Anordnung aus 25 kubischen Gebäuden (oben) bzw. auf einen gleichgroßen Bereich entsprechender modellierter unaufgelöster Bebauung trifft. Die Vergleichsrechnungen wurden mit (Mitte) und ohne Modellierung von „Umlenkungsturbulenz“ (unten) sowie für die beiden Anströmrichtungen West (links) bzw. Südwest (rechts) mit der PC-Basisversion V2.28 von MUKLIMO_3 (SIEVERS, 2012) durchgeführt.

Für die auf den Boden bzw. die Obergrenze von Bebauung oder Bewuchs einfallende kurzwellige Strahlungsdichte gilt dann der Zusammenhang

$$F_{\text{top}}^{\text{sw}} = F_{\text{glob}}^{\text{sw}} = F_{\text{p}}^{\text{sw}} + F_{\text{d}}^{\text{sw}} . \quad (160)$$

Die notwendigen Änderungen in der Berechnung der parallelen und diffusen Strahlungsanteile bei geneigten Empfangsflächen werden in Kapitel 4.2 besprochen. Der Strahlungsverteilung innerhalb unaufgelöster Bebauung für den Bereich vom Boden bis zu den höchsten Dächern ist Kapitel 4.3 gewidmet, die entsprechende Darstellung bei Baumbestand findet man in Kapitel 4.4.

Die Parametrisierung der langwelligen Netto-Ausstrahlung der Bodengrenzfläche F_{N}^{lw} basiert auf den Ansätzen von MÖLLER (1954) und ZDUNKOWSKI et al. (1975) mit zusätzlicher Einbeziehung der Bewölkung:

$$F_{\text{N}}^{\text{lw}} = (115 - 3.24 t_{\text{b,dew}} - 0.0185 t_{\text{b,dew}}^2) 0.699 + 2.097 t_{\text{b}} \{1 - \eta(1 - \zeta)\} . \quad (161)$$

Dabei ist $t_{\text{b,dew}}$ die mittlere Taupunkttemperatur des untersten Kilometers der Atmosphäre in Grad Celsius und t_{b} die bodennahe atmosphärische Temperatur ebenfalls in Grad Celsius. In MUKLIMO_3 ist die Bezugshöhe für t_{b} als 20 m über Grund festgesetzt. Der Parameter ζ modelliert den mit wachsender Höhe der Wolkenbasis abnehmenden Einfluss von Bewölkung auf die langwellige Netto-Strahlung. Sein Wertebereich reicht von 0.14 für Basishöhen unter 1.5 km bis zu 0.8 für Basishöhen von mehr als 7 km. Für Basishöhen zwischen 1.5 km und 7 km wird ζ durch lineare Interpolation ermittelt, wobei ein dritter Stützwert von 0.25 für 3 km Höhe der Wolkenbasis hinzugezogen wird.

Setzt man die langwellige Emissivität ϵ_{g} der Bodengrenzfläche näherungsweise gleich Eins, so errechnet sich die langwellige Einstrahlung $F_{\text{top}}^{\text{lw}}$ der Atmosphäre auf die Bodengrenzfläche, bzw. die Obergrenze einer eventuellen Bebauung oder eines Baumbestands, (atmosphärische *Gegenstrahlung*) unter Verwendung des Ansatzes der Gleichung (161) im Prinzip als

$$F_{\text{lw};\text{geg}} = \sigma T_{\text{g,rad}}^4 - F_{\text{lw};\text{N}} . \quad (162)$$

Hier ist σ (mit dem Wert $\sigma = 5.6697 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2}\text{K}^{-4}$) die Stefan-Boltzmann-Konstante und $T_{\text{g,rad}}$ die Strahlungstemperatur der Bodengrenzfläche in K. Die numerischen Erfahrungen hiermit sind jedoch schlecht, weshalb die Gegenstrahlung in MUKLIMO_3 durch die Beziehung

$$F_{\text{top}}^{\text{lw}} = \sigma T_{\text{n;ng}}^4 - F_{\text{lw};\text{N}} \quad (163)$$

errechnet wird, d. h. mit der bodennahen atmosphärischen Temperatur $T_{\text{a;ng}}$ (mit ng für „near ground“) anstelle der Strahlungstemperatur $T_{\text{g,rad}}$ der Bodengrenzfläche, wobei $T_{\text{a;ng}}$ als Mittelwert über die untersten 100 m der Atmosphäre errechnet wird. Die Notwendigkeit der Modifikation von Gleichung (162) zu Gleichung (163) ist weniger durch die gar nicht so großen Unterschiede in den errechneten Werten der langwelligen Gegenstrahlung begründet als vielmehr durch die bei Gleichung (162) bestehende „Rückkopplung“ zwischen Bodentemperatur und Gegenstrahlung: In Strahlungsnächten führt Gleichung (162) bei beginnender Auskühlung des Bodens zu einer Unterschätzung der langwelligen Gegenstrahlung. Im Gegenzug führt die zu geringe Gegenstrahlung bei der nächstfolgenden Auswertung des Energieflussgleichgewichts der Bodengrenzfläche zu einer zu geringen Bodentemperatur, weshalb die Gegenstrahlung bei ihrer nächsten Berechnung noch weiter unterschätzt wird usw. Testsimulationen mit MUKLIMO_3 für sommerliche Strahlungswetterlagen haben gezeigt, dass die errechneten Bodentemperaturen durch diesen Effekt im Verlauf der Nacht auf vollkommen unrealistische Werte deutlich unter 0 °C sinken können. Durch die Verwendung der bodennahen atmosphärischen Temperatur $T_{\text{a;ng}}$ in Gleichung (163) anstelle der Strahlungstemperatur des Bodens $T_{\text{g,rad}}$ in Gleichung (162) wird der beschriebene Rückkopplungseffekt deutlich abgeschwächt und die simulierten Tagesgänge der Temperatur werden realistischer.

Wegen der notwendigen Änderungen in der Berechnung der langwelligen Gegenstrahlung bei geneigten Empfangsflächen wird auch hier auf Kapitel 4.2 hingewiesen. Der langwelligen Strahlungsverteilung innerhalb unaufgelöster Bebauung für den Bereich vom Boden bis zu den höchsten Dächern ist Kapitel 4.5.1 gewidmet, die entsprechende Darstellung bei Baumbestand findet man in Kapitel 4.5.2.

4.2 Strahlung auf geneigte Flächen

Ein mit der Einstrahlung auf Flächen mit unaufgelöster Bebauung oder Bewaldung zusammenhängendes Problem ist die Strahlung auf eine geneigte Empfangsfläche. Dabei sind wiederum die parallele, die diffuse und die langwellige Strahlung unterschiedlich zu behandeln.

- Parallele Strahlung:

Relativ einfach zu behandeln ist die parallele Einstrahlung auf eine geneigte Empfangsfläche. Hier ist lediglich zu beachten, dass in den empirischen Formeln des Kapitels 4.1 zur Berechnung der parallelen Strahlung der Zenitwinkel der Sonne θ_0 ersetzt werden muss durch den Winkel zwischen Flächennormaler \vec{n}_g der geneigten Empfangsfläche und dem in Richtung Sonne zeigenden Einheitsvektor \vec{n}_0 . Das gilt für den Fall, dass die Sonne über dem Horizont steht (d. h. $\mu_0 = \cos \theta_0 > 0$). Allgemein stellt der Zusammenhang zwischen der für eine horizontale Empfangsfläche nach Gleichung (158) berechneten parallelen Strahlungsflussdichte F_p^{sw} auf eine horizontale Empfangsfläche und der Strahlungsflussdichte $F_{p;\text{geneigt}}^{\text{sw}}$ auf eine geneigte Empfangsfläche sich dar als

$$F_{p;\text{geneigt}}^{\text{sw}} = \begin{cases} F_p^{\text{sw}} \max(0, \vec{n}_g \cdot \vec{n}_0) / \mu_0 & \text{für } \mu_0 > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (164)$$

- Diffuse Strahlung:

Die diffuse Einstrahlung auf eine geneigte Empfangsfläche wird gegenüber der Einstrahlung auf eine horizontale Fläche dadurch vermindert, dass die geneigte Fläche in ihrem ansteigenden Bereich einen Teil des von der horizontalen Fläche aus sichtbaren Himmelsraums verstellt. Die Berechnung der dadurch verursachten Abschirmung A_d der diffusen Einstrahlung erfolgt auf Grundlage des allgemeinen Zusammenhangs

$$A_d = \frac{\int_{sH} \cos \theta \, d\Omega}{\int_H \cos \theta \, d\Omega}, \quad (165)$$

wobei H den gesamten Himmelsraum und sH seinen vom Bezugspunkt aus sichtbaren Anteil repräsentiert. Das Resultat kann geschrieben werden als

$$A_d = \frac{1 + \vec{e}_3 \cdot \vec{n}_g}{2}. \quad (166)$$

Hier ist \vec{e}_3 der vertikale Einheitsvektor. Zur Ableitung dieses Ergebnisses siehe Anhang C. Damit stellt der Zusammenhang der auf die horizontale Fläche einfallenden, nach Gleichung (159) berechneten diffusen Strahlungstromdichte F_d^{sw} und der diffusen Strahlung auf eine geneigte Fläche $F_{d;\text{geneigt}}^{\text{sw}}$ sich dar als

$$F_{d;\text{geneigt}}^{\text{sw}} = A_d F_d^{\text{sw}} = \frac{1 + \vec{e}_3 \cdot \vec{n}_g}{2} F_d^{\text{sw}}. \quad (167)$$

Reflektierte Strahlung aus dem abgeschirmten Bereich bleibt dabei außer Betracht.

- Langwellige Strahlung:

Die Modifikation der auf die geneigte Fläche einfallenden langwelligeren Einstrahlung (Gegenstrahlung) wird analog zur diffusen Strahlung behandelt mit dem Unterschied, dass die Strahlung aus dem abgeschirmten Raumwinkelbereich nicht vernachlässigt, sondern durch Wärmestrahlung aus der Umgebung (Strahlungstemperatur T_u) ersetzt wird. Der Zusammenhang zwischen der langwelligeren Einstrahlung auf die geneigte Fläche $F_{lw;\text{geneigt}}$ und der Einstrahlung F_{lw} auf die horizontale Fläche ist dann

$$F_{lw;\text{geneigt}} = F_{lw} \frac{1 + \vec{e}_3 \cdot \vec{n}_g}{2} + \sigma T_u^4 \frac{1 - \vec{e}_3 \cdot \vec{n}_g}{2}. \quad (168)$$

Befinden sich Bebauung oder Bäume auf der geneigten Fläche, so wird bei der Strahlungsberechnung die Flächenneigung dadurch berücksichtigt, dass die an der Obergrenze der Bebauung vorgegebenen Werte der einfallenden parallelen und diffusen sowie langwelligen Strahlung gemäß den Gleichungen (164), (167) und (168) modifiziert werden. Weitere Änderungen am Algorithmus der Strahlungsberechnung werden nicht vorgenommen.

4.3 Kurzwellige Strahlung im Bereich von Bebauung

4.3.1 Einfallende Strahlung am Boden

Der numerische Ansatz von MUKLIMO_3 zur näherungsweisen Berechnung der kurzwelligen Einstrahlung auf den Boden innerhalb bebauter Flächen ist aus einer Verallgemeinerung der analytisch berechenbaren *Sonnen-* und *Himmelssicht-Faktoren* gewonnen. Die Ableitung ist wie folgt:

Den über den Boden einer bebauten Fläche gemittelten Anteil der parallelen kurzwelligen Einstrahlung $F_{p;g}$ (mit den Kennzeichnungen „p“ für „parallel“ und „g“ für „ground“) kann man ganz allgemein erhalten, indem man die im obersten Dachniveau der Bebauung einfallende Strahlungsflussdichte $F_{p;top}$ mit dem besonnten Anteil der Bodenfläche multipliziert. Dieser Anteil wird im Folgenden *Sonnensichtfaktor* genannt und durch $\Psi_{sun;g}$ bezeichnet. Er kann auch als Wahrscheinlichkeit gedeutet werden, von einem beliebigen Bodenpunkt aus die Sonne zu sehen. Der Zusammenhang zwischen den beiden Strahlungsflussdichten im Dachniveau und am Boden kann dann geschrieben werden als

$$F_{p;g} = \Psi_{sun;g} F_{p;top} \quad (169)$$

Für den Spezialfall einer unendlich langen Straßenschlucht der Breite w_{street} mit beidseitigen Gebäuden der Höhe h_{geb} kann der Sonnensichtfaktor analytisch berechnet werden: Unter der Annahme einer durch die Zenit- und Azimutwinkel θ_0 bzw. ϕ_0 gekennzeichneten Sonnenposition erhält man den beschatteten Anteil f_s^{sc} (mit „s“ für „shadow“ und „sc“ für „street canyon“) als

$$f_s^{sc} = \min \left\{ 1, \frac{h_{geb}}{w_{street}} \tan \theta_0 |\cos(\phi - \phi_0)| \right\} \quad (170)$$

(vergleiche SIEVERS und FRÜH, 2012). Dabei bezeichnet der Azimutwinkel ϕ die „Orientierung“ der Straßenschlucht. Gemeint ist damit der Winkel, den die Flächennormale der Gebäudewände mit der Nordrichtung bildet.

Als nächster Schritt zur näherungsweisen Ermittlung der Einstrahlung auf den Boden wird die einzelne Straßenschlucht durch ein Ensemble von Straßenschluchten mit unterschiedlichen, aber gleichförmig verteilten Orientierungen ersetzt. Mittelung der Gleichung (170) über den Azimutwinkel der Wandorientierung ϕ ergibt dann den Sonnensicht-Faktor $\Psi_{sun;g}^{sc}$ des Straßenschlucht-Ensembles als

$$\Psi_{sun;g}^{sc} = 1 - \frac{2}{\pi} \left(\xi_g + \arccos \frac{1}{\xi_g^*} - \sqrt{\xi_g^{*2} - 1} \right) \quad (171)$$

mit den Abkürzungen $\xi_g := \frac{h_{geb}}{w_{street}} \tan \theta_0$ und $\xi_g^* := \max(\xi_g; 1)$.

Die Verallgemeinerung dieser Beziehung von einem Straßenschlucht-Ensemble auf beliebige Bebauungsstrukturen basiert auf der Idee, Bebauungsstrukturen durch eine so genannte *Wandflächenzahl* β_g zu charakterisieren.

Sie errechnet sich aus den beiden in MUKLIMO_3 ohnehin zur Charakterisierung unaufgelöster Bebauung verwendeten Funktionen der Gebäudedichte $v_{\text{geb}}(z)$ und der Wandflächendichte $d_w(z)$ sowie der (maximalen) Gebäudehöhe h_{geb} als

$$\beta_g := \int_0^{h_{\text{geb}}} \frac{d_w(z)}{1 - v_{\text{geb}}(z)} dz . \quad (172)$$

Die Wandflächenzahl β_g ist an keine spezielle Struktur der Bebauung gebunden und daher zur Charakterisierung unaufgelöster Bebauung besser geeignet als das Höhen-zu-Breiten-Verhältnis (engl. *Aspect Ratio*) $h_{\text{geb}}/w_{\text{street}}$ einer repräsentativen Straßenschlucht.

Für den Spezialfall einer Straßenschlucht errechnet deren Wandflächenzahl β_g^{sc} sich als

$$\beta_g^{\text{sc}} = \frac{2h_{\text{geb}}}{w_{\text{street}}} . \quad (173)$$

Ersetzt man vermittels dieser Beziehung in Gleichung (171) die Kennzahl h/w der Straßenschlucht durch die Wandflächenzahl β_g einer beliebigen Bebauungsstruktur, so erhält man die allgemein verwendbare Beziehung

$$\Psi_{\text{sun};g} = 1 - \frac{2}{\pi} \left(\xi_g + \arccos \frac{1}{\xi_g^*} - \sqrt{\xi_g^{*2} - 1} \right) \quad (174)$$

mit $\xi_g := \frac{\beta_g}{2} \tan \theta_0$; $\xi_g^* := \max(\xi_g; 1)$.

Gleichung (174) beinhaltet indes mehr als nur die Ersetzung des Verhältnisses h/w durch einen gleichwertigen anderen Parameter: In SIEVERS und FRÜH (2012) wird gezeigt, dass sie nicht nur für den Spezialfall eines Straßenschlucht-Ensembles exakt wird, sondern auch für den Fall einer Anordnung aus isolierten Einzelgebäuden, solange der Sonnenstand so hoch ist, dass sämtliche Gebäudeschatten komplett auf den Boden fallen, ohne irgendwelche Wände anderer Gebäude zu treffen. Für beliebige Gebäudeanordnungen geht die Exaktheit von Gleichung (174) zwar verloren, sie bleibt aber in jedem Fall eine gute Näherung. Die Berechnung von Sonnensicht- (wie auch Himmelssicht-) Faktoren für verschiedene Bebauungsstrukturen mithilfe von Wandflächenzahlen wird in SIEVERS und FRÜH (2012) als *Wall Area Approach*, abgekürzt WAA, bezeichnet in Unterscheidung zum *Aspect Ratio Approach* (ARA).

Der *Himmelssicht-Faktor* $\Psi_{\text{sky};g}$ (engl. *sky view factor*) kann auch als Abschwächungskoeffizient der diffusen kurzwelligeren Strahlung auf dem Weg vom obersten Dachniveau der Bebauung zum Boden gedeutet werden. Zwischen ihm und dem Sonnensicht-Faktor $\Psi_{\text{sun};g}$ besteht die generelle Beziehung

$$\Psi_{\text{sky};g} = \frac{1}{\pi} \int_H \cos \theta_0 \Psi_{\text{sun};g}(\beta_g, \theta_0) d\Omega_0 , \quad (175)$$

in der $d\Omega_0 = \sin \theta_0 d\theta_0 d\phi_0$ das von den Sonnenstandswinkeln θ_0 und ϕ_0 abhängige Raumwinkelement und H den Himmelshalbraum repräsentiert. Unter Benutzung der Gleichung (174) für den Sonnensicht-Faktor $\Psi_{\text{sun};g}$ kann das Integral analytisch ausgewertet werden (siehe SIEVERS und FRÜH, 2012) mit dem Ergebnis

$$\Psi_{\text{sky};g} = \sqrt{1 + \frac{\beta_g^2}{4}} - \frac{\beta_g}{2} . \quad (176)$$

Als zusammenfassendes Resultat dieses Kapitels wird festgehalten, dass die kurzwellige Einstrahlung F_g^{sw} auf den Boden im Bereich unaufgelöster Bebauung in MUKLIMO_3 berechnet wird als

$$F_g^{\text{sw}} := F_{p;g} + F_{d;g} = \Psi_{\text{sun};g} F_{p;\text{top}} + \Psi_{\text{sky};g} F_{d;\text{top}} \quad (177)$$

wobei die Faktoren $\Psi_{\text{sun}/\text{sky};g}$ der Sonnen- bzw. Himmelssicht aus den Gleichungen (174) und (176) bestimmt werden. Dieses Resultat beinhaltet noch keine Reflexionen.

4.3.2 Einstrahlung auf die Wände und Dächer

Zum Verständnis der numerischen Behandlung der Einstrahlung auf die Wände und Dächer unaufgelöster Bebauung ist es hilfreich, zuerst die durch die Gleichung (172) eingeführte *Wandflächenzahl* zu einer *kumulativen* Wandflächendichte-Funktion $\beta(z_a, z_b)$ zu verallgemeinern, die definiert ist als

$$\beta(z_a, z_b) := \int_{z_a}^{z_b} \frac{d_w(z)}{1 - v_{\text{geb}}(z)} dz . \quad (178)$$

Sie „misst“ die Wandflächen zwischen den beiden Höhenniveaus z_a und $z_b \geq z_a$. Zwischen der Wandflächenzahl β_g und der kumulativen Wandflächendichte $\beta(z_a, z_b)$ besteht dann der Zusammenhang

$$\beta_g = \beta(0, h_{\text{geb}}) \quad \text{mit} \quad h_{\text{geb}} : \quad (\text{maximale}) \text{ Gebäudehöhe.}$$

Mithilfe von $\beta(z, h_{\text{geb}})$ lassen sich auch die – auf das Bodenniveau bezogenen – Sichtfaktoren $\Psi_{\text{sky/sun};g}$ zu höhenabhängigen Funktionen $\Psi_{\text{sky/sun}}(z)$ verallgemeinern. Das wird erreicht, indem die Wandflächenzahl β_g in den Gleichungen (174) und (176) durch die kumulative Wandflächendichte $\beta(z, h_{\text{geb}})$ ersetzt wird, resultierend in

$$\Psi_{\text{sky}}(z) = \sqrt{1 + \frac{\beta^2(z, h_{\text{geb}})}{4}} - \frac{\beta(z, h_{\text{geb}})}{2} \quad (179)$$

$$\Psi_{\text{sun}}(z) = 1 - \frac{2}{\pi} \left(\xi(z, h_{\text{geb}}) + \arccos \frac{1}{\xi^*(z, h_{\text{geb}})} - \sqrt{\xi^{*2}(z, h_{\text{geb}}) - 1} \right) . \quad (180)$$

In diesen Beziehungen hängen auch die Funktionen $\xi(z, h_{\text{geb}})$ und $\xi^*(z, h_{\text{geb}})$, in Verallgemeinerung der in Gleichung (174) eingeführten Größen ξ_g und ξ_g^* , von $\beta(z, h_{\text{geb}})$ anstelle von β_g ab, d. h. sie sind definiert als

$$\xi(z, h_{\text{geb}}) := \frac{\beta(z, h_{\text{geb}})}{2} \tan \theta_0 \quad \text{und} \quad \xi^*(z, h_{\text{geb}}) := \max\{\xi(z, h_{\text{geb}}), 1\} . \quad (181)$$

Die verallgemeinerten Sichtfaktoren $\Psi_{\text{sky/sun}}(z)$ repräsentieren die Himmelssicht bzw. die Wahrscheinlichkeit, die Sonne zu sehen, für ein veränderliches Bezugsniveau z mit Werten von $z=0$ (Boden) bis $z=h_{\text{geb}}$ (Bebauungsobergrenze). Mit ihrer Hilfe kann die abwärts gerichtete, durch ein beliebiges Höhenniveau z hindurchtretende kurzwellige Strahlungsflussdichte $F_{\text{sw}}^\downarrow(z)$ ausgedrückt werden als

$$F_{\text{sw}}^\downarrow(z) = \Psi_{\text{sun}}(z) F_{\text{p};\text{top}} + \Psi_{\text{sky}}(z) F_{\text{d};\text{top}} . \quad (182)$$

Zugleich erhält man die kurzwellige Einstrahlung $F_{\text{r}}^{\text{sw}}(z_{\text{r}})$ auf eventuell im Niveau z_{r} befindliche Dächer als

$$F_{\text{r}}^{\text{sw}}(z_{\text{r}}) = \Psi_{\text{sun}}(z_{\text{r}}) F_{\text{p};\text{top}} + \Psi_{\text{sky}}(z_{\text{r}}) F_{\text{d};\text{top}} . \quad (183)$$

Aus Gründen der Energieerhaltung muss die Wertedifferenz der abwärts gerichteten Strahlungsflussdichten zwischen der Ober- und der Untergrenze einer vertikalen Schicht gerade der gesamten Einstrahlung auf die in der Schicht befindlichen Wände entsprechen. Nimmt man an, dass die Schicht sich von $z - \Delta z/2$ bis $z + \Delta z/2$ erstreckt und verteilt die Einstrahlung gleichmäßig auf die Wände, so erhält man die mittlere Bestrahlungsstärke der Wände $F_{\text{w}}^{\text{sw}}(z)$ als

$$F_{\text{w}}^{\text{sw}}(z) = \frac{F_{\text{sw}}^\downarrow(z + \Delta z/2) - F_{\text{sw}}^\downarrow(z - \Delta z/2)}{\beta(z - \Delta z/2, z + \Delta z/2)} . \quad (184)$$

Zur Auswertung dieser Beziehung müssen zuerst die Strahlungsflussdichten $F_{\text{sw}}^\downarrow(z \pm \Delta z/2)$ unter Anwendung der Gleichungen (182) berechnet werden. Wie im vorangehenden Kapitel 4.3.1 ist auch hier anzumerken, dass die Formeln (183) und (184) zur Berechnung der kurzwelligen Einstrahlung auf die Dächer und Wände unaufgelöster Bebauung erste Näherungen darstellen, bei denen Reflexionen an den Wänden und Dächern noch außer Betracht bleiben.

4.3.3 Numerisches Strahlungsschema unter Einschluss von Reflexionen

Die numerische Berechnung der kurzwelligen Einstrahlung auf den Boden sowie die Wände und Dächer im Bereich unaufgelöster Bebauung gemäß dem WAA-Schema von MUKLIMO_3 (siehe Kap. 4.3.1) unterscheidet sich von den analytischen Darlegungen der beiden vorangehenden Kapitel zum einen durch die Unterteilung der kontinuierlichen Vertikalkoordinate z in *diskrete* Schichten Δz_k und zum anderen durch die Berücksichtigung von reflektierter Strahlung. Bezüglich der am Boden wie auch von den Wänden und Dächern reflektierten Strahlung wird angenommen, dass sie räumlich *isotrop* verteilt ist und sich mithilfe von *Albedo*-Werten A_g , A_w und A_r für den Boden, die Wände und die Dächer berechnen lässt.

Sei jetzt n die Anzahl vertikaler Schichten vom Boden bis zum obersten Dachniveau und Δz_k mit $k = 1, \dots, n$ ihre Erstreckung. Zusätzlich werden die mittlere Höhe einer Schicht „ k “ als z_k und ihre bei $z_k \pm \Delta z_k/2$ liegenden Ober- und Untergrenzen mit $z_{k \pm 1/2}$ bezeichnet. Für das numerische Strahlungsschema werden die Gebäude- und Wandflächendichte-Funktionen, $v_{\text{geb}}(z)$ und $d_w(z)$, innerhalb jeder vertikalen Schicht als konstant mit Werten $v_{\text{geb};k}$ bzw. $d_{w;k}$ angesehen. Die diskreten Entsprechungen $\beta_{kk'}$ der kumulativen Wandflächendichte $\beta(z_a, z_b)$ errechnen sich damit als

$$\beta_{kk'} := \beta(z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k'+\frac{1}{2}}) = \sum_{\kappa=k}^{k'} \frac{d_{w;\kappa} \Delta z_\kappa}{1 - v_{\text{geb};\kappa}} . \quad (185)$$

Als Konsequenz erhält man für die Himmels- und Sonnensicht-Faktoren $\Psi_{\text{sky/sun}}(z)$ in den diskreten Niveaus $z = z_{k-1/2}$ die Ausdrücke

$$\Psi_{\text{sky}; k-\frac{1}{2}} := \Psi_{\text{sky}}(z_{k-\frac{1}{2}}) = \sqrt{1 + \frac{\beta_{kn}^2}{4}} - \frac{\beta_{kn}}{2} \quad (186)$$

sowie

$$\Psi_{\text{sun}; k-\frac{1}{2}} := \Psi_{\text{sun}}(z_{k-\frac{1}{2}}) = 1 - \frac{2}{\pi} \left(\xi_{kn} + \arccos \frac{1}{\xi_{kn}^*} - \sqrt{\xi_{kn}^{*2} - 1} \right) \quad (187)$$

mit $\xi_{kk'} := \frac{\beta_{kk'}}{2} \tan \theta_0$ und $\xi_{kk'}^* := \max(\xi_{kk'}, 1)$.

Vergleiche hierzu die Gleichungen (179) bis (181).

Die diskrete Entsprechung der Gleichung (182) für das Abklingen der abwärts gerichteten kurzwelligen Strahlungsflussdichte wird, unter Einbeziehung von Wandreflexionen, angesetzt als

$$F_{\text{sw}; k-\frac{1}{2}}^\downarrow = \Psi_{\text{sun}; k-\frac{1}{2}} F_{\text{p}; n+\frac{1}{2}}^\downarrow + \Psi_{\text{sky}; k-\frac{1}{2}} F_{\text{d}; n+\frac{1}{2}}^\downarrow + A_w \sum_{k'=k}^n \psi_{k'k-\frac{1}{2}} F_{\text{w}; k'}^{\text{sw}} \quad (188)$$

für $k = 1, \dots, n$.

Hierin bezeichnet $F_{\text{sw}; k-\frac{1}{2}}^\downarrow$ die durch die Untergrenze $z_{k-1/2}$ der Schicht k von oben nach unten hindurchtretende kurzwellige Strahlungsflussdichte, während $F_{\text{w}; k'}^{\text{sw}}$ die kurzwellige Einstrahlung auf die Wände der Schicht k' repräsentiert. Die Größen $\psi_{k'k-\frac{1}{2}}$ werden als schichtspezifische *Wandsicht*-Faktoren gedeutet, bei denen der erste Index k' die betrachtete Schicht bezeichnet und der zweite (halbzahlige) Index zum Niveau $z_{k-1/2}$ der Betrachtung korrespondiert. Die Wandsichtfaktoren werden aus den Differenzen der Sichtfaktoren für die obere und die untere Begrenzungsebene der Schicht k' nach SIEVERS und FRÜH (2012) berechnet als

$$\psi_{k'k-\frac{1}{2}} = \frac{\beta_{k'k'}}{2} + \sqrt{1 + \frac{\beta_{kk'-1}^2}{4}} - \sqrt{1 + \frac{\beta_{kk'}^2}{4}} . \quad (189)$$

Im Hinblick auf die Einstrahlung auf die Dächer ist anzumerken, dass das Modell MUKLIMO_3 grundsätzlich nur diskrete Gebäudehöhen zulässt, die jeweils mit den Obergrenzen $z_{k+1/2}$ der vertikalen Schichten zusam-

menfallen (vergleiche Kap. 2.3.4). Dächer in diesen Höhen existieren immer dann, wenn die diskrete Gebäudedichte $v_{\text{geb};k}$ mit zunehmender Höhe (d. h. beim Übergang k zu $k+1$) abnimmt. Folgerichtig wird die Flächendichte $d_{r;k+1}$ der Dächer (Summe aller Dachflächen mit der Höhe $z_{k+1/2}$ im Verhältnis zur Grundfläche) errechnet als

$$\begin{aligned} d_{r;k+1} &= v_{\text{geb};k} - v_{\text{geb};k+1} \quad \text{für } k = 1, \dots, n-1 \\ d_{r;n+1} &= v_{\text{geb};n} . \end{aligned}$$

Beachte: Nach der in Kapitel 2.3.4 eingeführten Konvention werden die in den halbzahligen Höhengniveaus angesiedelten Dachflächen den über ihnen liegenden Gitterzellen zugerechnet und entsprechend ganzzahlig indiziert. Aus den abwärts gerichteten Strahlungsflussdichten $F_{\text{sw};k+1/2}^{\downarrow}$ erhält man die Einstrahlung auf eventuelle Dächer ($F_{r;k+1/2}^{\text{sw}}$) wie auch auf den Boden (F_{g}^{sw}) als

$$F_{r;k+\frac{1}{2}}^{\text{sw}} = F_{\text{sw};k+\frac{1}{2}}^{\downarrow} \quad \text{für } k = 1, \dots, n \quad (190)$$

$$F_{\text{g}}^{\text{sw}} = F_{\text{sw};\frac{1}{2}}^{\downarrow} . \quad (191)$$

Zusätzlich zu den abwärts gerichteten Flussdichten $F_{\text{sw};k-1/2}^{\downarrow}$ erfordert die Einbeziehung von Reflexionen in das kurzwellige WAA Strahlungsschema die Berechnung von aufwärts gerichteten Strahlungsflussdichten $F_{\text{sw};k+1/2}^{\uparrow}$. Zunächst sei eine einheitliche Gebäudehöhe angenommen, womit es nur ein einziges Dachniveau in Höhe der Bebauungsobergrenze gibt. Unter dieser Annahme werden die Flussdichten $F_{\text{sw};k+1/2}^{\uparrow}$ aus der am Boden und den Wänden reflektierten Strahlung errechnet als

$$\begin{aligned} F_{\text{sw};k+\frac{1}{2}}^{\uparrow} &= \Psi_{\text{g};k+\frac{1}{2}} A_{\text{g}} F_{\text{g}}^{\text{sw}} + A_{\text{w}} \sum_{k'=1}^k \psi_{k'k+\frac{1}{2}} F_{\text{w};k'}^{\text{sw}} \\ &\text{für } k = 1, \dots, n . \end{aligned} \quad (192)$$

Hier ist $\Psi_{\text{g};k+1/2}$ der *Bodensicht*-Faktor, während die Größen $\psi_{k'k+1/2}$ Wandsicht-Faktoren für die Wände innerhalb der Schicht k' repräsentieren, beides mit abwärts gerichteter Sicht vom Niveau $z_{k+1/2}$. Sie werden errechnet als

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{g};k+\frac{1}{2}} &= \sqrt{1 + \frac{\beta_{1k}^2}{4}} - \frac{\beta_{1k}}{2} \\ \psi_{k'k+\frac{1}{2}} &= \frac{\beta_{k'k'}}{2} + \sqrt{1 + \frac{\beta_{k'+1k}^2}{4}} - \sqrt{1 + \frac{\beta_{k'k}^2}{4}} . \end{aligned} \quad (193)$$

Die mögliche Existenz von Dächern in den Niveaus $z_{k+1/2}$ unterhalb der maximalen Gebäudehöhe macht die Verhältnisse komplizierter, da die Flussdichten $F_{\text{sw};k+1/2}^{\uparrow}$ dann unstetig werden. Diese Diskontinuität macht es nötig, bei der Indizierung der Flussdichten die Obergrenze der Schicht k von der Untergrenze der Schicht $k+1$ zu unterscheiden. Zwischen der dementsprechend als $F_{\text{sw};k+1-1/2}^{\uparrow}$ benannten Flussdichte an der Untergrenze der Schicht $k+1$ und der Flussdichte $F_{\text{sw};k+1/2}^{\uparrow}$ an der Obergrenze der Schicht k besteht dann die Beziehung

$$F_{\text{sw};k+1-\frac{1}{2}}^{\uparrow} = \frac{(1 - v_{\text{geb};k}) F_{\text{sw};k+\frac{1}{2}}^{\uparrow} + d_{r;k+1} A_{\text{r}} F_{r;k+\frac{1}{2}}^{\text{sw}}}{1 - v_{\text{geb};k+1}} . \quad (194)$$

Sie besagt, dass $F_{\text{sw};k+1-1/2}^{\uparrow}$ sich zusammensetzt aus der von unten durch das Niveau $z_{k+1/2}$ hindurchtretenden Flussdichte $F_{\text{sw};k+1/2}^{\uparrow}$ und der von den Dachflächen des Niveaus $z_{k+1/2}$ reflektierten Strahlung. Außerdem berücksichtigt Gleichung (194), dass die gebäudefreie Bezugsfläche für die Strahlungsflussdichten sich beim Übergang von der Schicht k in die Schicht $k+1$ sprunghaft vom Wert $a(1 - v_{\text{geb};k})$ gerade unterhalb von $z_{k+1/2}$ zum Wert $a(1 - v_{\text{geb};k+1})$ gerade oberhalb von $z_{k+1/2}$ ändert. Ist das Niveau $z_{k+1/2}$ frei von Dächern, stimmen $F_{\text{sw};k+1-1/2}^{\uparrow}$ und $F_{\text{sw};k+1/2}^{\uparrow}$ überein, da $d_{r;k+1}$ dann Null und $v_{\text{geb};k+1}$ gleich $v_{\text{geb};k}$ ist.

Die Verallgemeinerung des Schemas (192) zur Berechnung der aufwärts gerichteten Strahlungsflussdichten $F_{sw;k+1/2}^\uparrow$ auf das komplexere Problem mit Dächern in den Zwischenniveaus gelingt durch eine Unterteilung des Vertikalbereichs der Bebauung in *Zwischenbereiche*, innerhalb derer die diskreten Werte $v_{geb;k}$ der Gebäudedichte jeweils konstant sind: Wenn jetzt k_1 die erste vertikale Schicht mit Dächern an ihrer Obergrenze ist, so wird die Berechnung der Flussdichten $F_{sw;k+1/2}^\uparrow$ gemäß Gleichung (192) zunächst nur für den Indexbereich von $k = 1$ bis zu $k = k_1$ durchgeführt. Danach wird die Höhe $z_{k_1+1/2}$ zum neuen Grundniveau des Algorithmus und die nach Gleichung (194) berechnete Flussdichte $F_{sw;k_1+1-1/2}^\uparrow$, in Ersetzung von $A_g F_g^{sw}$, zum zugehörigen unteren Randwert. Dann wird die Berechnung der Flussdichten, mit den notwendigen Änderungen der Gleichung (192), wieder aufgenommen, diesmal für den Indexbereich von $k = k_1+1$ bis zum nächsten Niveau mit Dächern, und so fort bis das oberste Niveau $k = n$ erreicht ist.

Schließlich muss noch, zur Sicherstellung der Energieerhaltung, die Gleichung (184) für die Einstrahlung $F_{w;k}^{sw}$ auf die Wände der Schicht k durch die folgende Beziehung für die *Netto-Strahlung* $F_{w;k}^{sw;N}$ auf die Wände ersetzt werden

$$F_{w;k}^{sw;N} = \frac{F_{sw;k+1/2}^\downarrow - F_{sw;k-1/2}^\downarrow + F_{sw;k-1/2}^\uparrow - F_{sw;k+1/2}^\uparrow}{\beta_{kk}} . \quad (195)$$

Die Einstrahlung auf die Wände erhält man dann aus der Netto-Strahlung gemäß der Beziehung

$$F_{w;k}^{sw} = \frac{F_{w;k}^{sw;N}}{1 - A_w} . \quad (196)$$

Der komplette MUKLIMO_3 Algorithmus zur kurzweiligen Strahlungsberechnung innerhalb unaufgelöster Bebauung baut auf den zuvor beschriebenen Teilberechnungen auf. Er ist dabei iterativ und setzt sich aus den folgenden, wiederholt durchgeführten Teilschritten zusammen:

1. Berechnung der abwärts gerichteten Strahlungsflussdichten $F_{sw;k-1/2}^\downarrow$ gemäß Gleichung (188) mit den jeweils „aktuellen“ Werten $F_{w;k}^{sw}$ der Wandeinstrahlung,
2. Berechnung „neuer“ Werte der Einstrahlung $F_{r;k+1/2}^{sw}$ und F_g^{sw} auf die Dächer und Wände anhand der Gleichungen (190) und (191),
3. Berechnung der aufwärts gerichteten Strahlungsflussdichten $F_{sw;k+1/2}^\uparrow$ gemäß Gleichung (192), gleichfalls mit den jeweils aktuellen Werten $F_{w;k}^{sw}$ der Wandeinstrahlung,
4. Berechnung verbesserter „aktueller“ Werte der Wandeinstrahlung aus den bisher gültigen „alten“ und den „neuen“ Werten gemäß der Relaxationsformel

$$F_{w;k}^{sw} = A_w F_{w;k}^{sw;old} + (1 - A_w) F_{w;k}^{sw;new} . \quad (197)$$

Die Relaxation bei der Bestimmung der Wandeinstrahlung ist notwendig zur numerischen Stabilisierung des iterativen Algorithmus der Strahlungsberechnung. Schnellste Konvergenz wird erreicht, wenn man den Gewichtungsfaktor des „alten“ Wertes gleich der Wandalbedo A_w wählt. Anzumerken ist, dass der zweite Term auf der rechten Seite der Relaxationsbeziehung bei dieser Wahl mit der Netto-Strahlung auf die Wände übereinstimmt.

Der Algorithmus beginnt mit verschwindenden Werten der Wandeinstrahlung und endet, wenn die maximale Änderung aller Einstrahlungswerte kleiner wird als 0.01 Wm^{-2} . Das ist zumeist nach 5 bis 6 Iterationsschritten der Fall.

4.4 Kurzwellige Strahlung im Wald

4.4.1 Geschlossener Bestand

Im Wald soll zunächst davon ausgegangen werden, dass die Baumkronen ein näherungsweise gleichförmiges und geschlossenes Blätterdach bilden. Deshalb geht die Strahlungsmodellierung vorläufig von einer horizontal homogenen und somit nur vertikal veränderlichen *Blattflächendichte* d_f aus:

$$d_f = d_f(z) \quad (\text{einseitige}) \text{ Blattflächendichte.}$$

Zu ihrer Modellierung in MUKLIMO_3 siehe Kapitel 2.3.5.

Wegen des zufallsartigen Charakters der Blattverteilung ist die Abnahme der abwärts gerichteten parallelen Strahlungsflussdichte $F_p^\downarrow(z)$ durch Strahlungsabsorption an den Blattoberflächen beim Durchtritt durch eine infinitesimale Schicht der Dicke dz dann (ohne Berücksichtigung reflektierter Strahlung) beschreibbar durch eine differentielle Gleichung der Form

$$F_p^\downarrow(z-dz) = \left\{ 1 - \frac{\alpha_f d_f(z) dz}{\cos \theta_0} \right\} F_p^\downarrow(z). \quad (198)$$

Dabei ist α_f ein dimensionsloser *Formfaktor* der Strahlungsabsorption, welcher die mittlere Orientierung der Blattflächen beschreibt. Analytisch am einfachsten behandelbar ist der Idealfall, dass sämtliche Blattflächen horizontal orientiert sind. Er wird den folgenden Betrachtungen zugrunde gelegt. Mit ihm errechnet sich α_f sonnenstandsabhängig als

$$\alpha_f = \cos \theta_0. \quad (199)$$

Zum Vergleich: Bei vollkommen isotroper Verteilung der Blatorientierungen hätte α_f den Wert 0.5, bei perfekter Orientierung zur Sonne erhielte man $\alpha_f = 1$.

Mit der angenommenen horizontalen Orientierung der Blattflächen wird das Absorptionsgesetz (198) unabhängig vom Sonnenzenitwinkel θ_0 und vereinfacht sich zu

$$F_p^\downarrow(z-dz) = \{ 1 - d_f(z) dz \} F_p^\downarrow(z). \quad (200)$$

Nach Einführung einer *kumulativen* Blattflächendichte

$$d_{f; \text{cum}}(z_a, z_b) := \int_{z_a}^{z_b} d_f(z) dz \quad (201)$$

welche die Blattflächen zwischen den Niveaus z_a und z_b „aufsummiert“ und aus der man den *Blattflächenindex* L_{AI} des Baumbestands erhält als

$$L_{AI} = d_{f; \text{cum}}(0, h_{\text{tree}}),$$

kann man die analytische Lösung der differentiellen Absorptionsgleichung (200) schreiben als

$$F_p^\downarrow(z_a) = F_p^\downarrow(z_b) \exp\{-d_{f; \text{cum}}(z_a, z_b)\}. \quad (202)$$

Sie liefert die nach unten gerichtete Strahlungsflussdichte $F_p^\downarrow(z_a)$ im Niveau z_a in Abhängigkeit von der als bekannt angenommenen Flussdichte $F_p^\downarrow(z_b)$ im (höher gelegenen) Niveau z_b unter dem Einfluss der zwischen beiden Niveaus befindlichen Belaubung.

Die Unabhängigkeit der Absorption von der Einfallrichtung der Strahlung hat außerdem zur Folge, dass sämtliche Richtungskomponenten der *diffusen* Strahlung gleichförmig und einheitlich absorbiert werden. Die angenommene Isotropie der auf den Baumbestand einfallenden diffusen Strahlung bleibt daher erhalten und

die Blattabsorption der nach unten gerichteten *diffusen* Strahlungsflussdichte $F_d^\downarrow(z)$ kann durch das zur Gleichung (202) für die *parallele* Strahlung vollkommen analoge Gesetz

$$F_d^\downarrow(z_a) = F_d^\downarrow(z_b) \exp\{-d_{f; \text{cum}}(z_a, z_b)\} . \quad (203)$$

beschrieben werden. Als Folge dieser Übereinstimmung kann man die Bilanzen der parallelen und diffusen Strahlungsflussdichten zum folgenden Absorptionsgesetz für die *kurzwellige* Strahlungsflussdichte zusammenfassen,

$$F_{\text{sw}}^\downarrow(z_a) = F_{\text{sw}}^\downarrow(z_b) \exp\{-d_{f; \text{cum}}(z_a, z_b)\} \\ \text{mit } F_{\text{sw}}^\downarrow(z) := F_p^\downarrow(z) + F_d^\downarrow(z) . \quad (204)$$

Eine weitere Folge der angenommenen horizontalen Blatorientierung ist, dass die an der Oberseite der Blattflächen reflektierte Strahlung keine nach unten gerichtete Komponente hat, so dass die nach unten gerichteten Strahlungsflüsse von der Blattreflexion nicht direkt beeinflusst werden. Das wäre erst dann der Fall, wenn man die Reflexion der aufwärts gerichteten Strahlung an den Unterseiten der Blätter in die Betrachtung einbezöge. Das Strahlungsschema von MUKLIMO_3 für den Wald beschränkt sich jedoch auf Reflexionen *erster* Ordnung. Die Einbeziehung von Reflexionen in die kurzwellige Strahlungsbilanz im Wald erfordert deshalb keine Änderung der Bilanzgleichung (204).

Die Berechnung der aufwärts gerichteten kurzwelligen Strahlungsflussdichte im Wald $F_{\text{sw}}^\uparrow(z)$ hingegen erfordert die Berücksichtigung der an den Blattoberflächen reflektierten Strahlung in Form eines *Quellterms* $Q_{f; \text{sw}}$. Ihre differentielle Bilanz wird daher angesetzt als

$$F_{\text{sw}}^\uparrow(z+dz) = \{1 - d_f(z) dz\} F_{\text{sw}}^\uparrow(z) + Q_{f; \text{sw}}(z) dz , \quad (205)$$

wobei $Q_{f; \text{sw}}(z)$ aus der nach unten gerichteten Strahlung $F_{\text{sw}}^\downarrow(z)$, der Blattflächendichte $d_f(z)$ und der Blattalbedo A_f zu errechnen ist als

$$Q_{f; \text{sw}}(z) = A_f d_f(z) F_{\text{sw}}^\downarrow(z) . \quad (206)$$

Den für die Integration der Gleichung (205) erforderlichen unteren Randwert $F_{\text{sw}}^\uparrow(z=0)$ erhält man vermittels der Bodenalbedo A_g als

$$F_{\text{sw}}^\uparrow(z=0) = A_g F_{\text{sw}}^\downarrow(z=0) . \quad (207)$$

Die kurzwellige Netto-Strahlungsflussdichte $F_{\text{sw}; f}^N$ auf die in der Schicht zwischen z und $z + dz$ befindlichen Blätter ist dann aus den nach oben und unten gerichteten Strahlungsflussdichten errechenbar als

$$F_{\text{sw}; f}^N(z) = \frac{F_{\text{sw}}^\downarrow(z + dz) - F_{\text{sw}}^\downarrow(z) + F_{\text{sw}}^\uparrow(z) - F_{\text{sw}}^\uparrow(z + dz)}{d_f(z) dz} . \quad (208)$$

Die numerische Umsetzung der Bilanzgleichungen für den geschlossenen Waldbestand wird hier nicht weiter verfolgt, da sie als Grenzfall des im folgenden Kapitel 4.4.2 dargestellten *offenen* Waldbestandes mit enthalten ist.

4.4.2 Offener Bestand

Ist ein Baumbestand nicht geschlossen, sondern besteht stattdessen aus klar voneinander abgegrenzten Einzelbäumen oder Baumgruppen, so ist die Strahlungsbehandlung auf der Grundlage von horizontal homogen verteilten Blattflächen den tatsächlichen Verhältnissen nicht mehr angemessen, da die Strahlungsausbreitung im Baumbereich und in den baumfreien Zwischenflächen ganz unterschiedlichen Charakter hat. Um der Realität dieses Falls besser gerecht zu werden, teilt das Modell MUKLIMO_3 die Strahlungsflüsse auf gemäß:

- Strahlungsfluss 1: Strahlung im Baumbestand
- Strahlungsfluss 2: Strahlung in den baumfreien Bereichen

Bei der Zusammenfassung zum Gesamtfluss wird der Strahlungsfluss 1 dann mit dem *Baumbedeckungsgrad* σ_{tree} gewichtet und der Strahlungsfluss 2 entsprechend mit $1 - \sigma_{\text{tree}}$. Die beiden Teilflüsse treten über die *Baumseitenflächen* miteinander in Austausch. Für das Verständnis der folgenden, nicht veröffentlichten Überlegungen stelle man sich vor, dass die Einzelbäume von gedachten, einhüllenden Zylindern umgeben sind. Die mit $d_{s;\text{tree}}$ benannte *Seitenflächendichte* des Baumbestands (gleich Seitenflächen der Bäume pro atmosphärischem Volumen) entspricht dann den Seitenflächen dieser Zylinder, gemittelt über die horizontale Bezugsfläche und gerechnet pro Höhenintervall.

Die Strahlungsberechnung im baumfreien Bereich (Strahlungsfluss 2) erfolgt mit Unterscheidung zwischen paralleler und diffuser Strahlung in Anlehnung an ihre Berechnung innerhalb unaufgelöster Bebauung (siehe Kap. 4.3), wobei die Seitenflächendichte $d_{s;\text{tree}}$ der Bäume an die Stelle der Wandflächendichte d_w tritt. Im Unterschied zur unaufgelösten Bebauung wird die Strahlung an den Baumseitenflächen jedoch nicht reflektiert, sondern dringt in den Blattbereich ein und wird dort Bestandteil der Strahlungsflüsse 1 (parallel und diffus). Im Gegenzug tritt über die Baumseitenflächen parallele und diffuse Strahlung aus dem Baumbereich aus und wird in die Strahlungsflüsse 2 integriert.

Innerhalb des Baumbereichs (Strahlungsflüsse 1) wird die parallele und diffuse Strahlung nach den im vorangehenden Kapitel 4.4.1 beschriebenen Absorptionsgesetzen behandelt, wobei die auf die gesamte Grundfläche bezogene Blattflächendichte $d_f(z)$ jetzt auf deren baumbestanden Anteil umzurechnen, d. h. durch $d_f(z)/\sigma_{\text{tree}}$ zu ersetzen ist. Zusätzlich zu den Bilanzen des vorangehenden Kapitels ist in jeder vertikalen Schicht ein Strahlungsverlust durch Austritt aus den Seitenflächen sowie ein Gewinn durch Zutritt aus dem baumfreien Bereich zu berücksichtigen.

Die differentielle Änderung der nach unten gerichteten diffusen Strahlungsflussdichte im Baumbestand $F_{1;d}^\downarrow$ lässt sich dann durch den Ansatz

$$F_{1;d}^\downarrow(z - dz) = F_{1;d}^\downarrow(z) - \frac{d_f(z) dz}{\sigma_{\text{tree}}} F_{1;d}^\downarrow(z) - \frac{0.5 d_{s;\text{tree}} dz}{\sigma_{\text{tree}}} \{F_{1;d}^\downarrow(z) - F_{2;d}^\downarrow(z)\} \quad (209)$$

beschreiben, wobei der dritte Term auf der rechten Seite den Strahlungsübertritt vom baumbestanden in den baumfreien Bereich und umgekehrt beschreibt. Der zugehörige Faktor $0.5 d_{s;\text{tree}} dz/\sigma_{\text{tree}}$ ist dabei als *Sichtfaktor* der in der Schicht zwischen $z - dz$ und z befindlichen Baumseitenflächen mit Sicht aus dem Baumbestand zu deuten.

Im baumfreien Bestand dagegen ändert sich die abwärts gerichtete Strahlungsflussdichte $F_{2;d}^\downarrow$ nur infolge Strahlungsübertritts durch die Baumseitenflächen gemäß der Gleichung

$$F_{2;d}^\downarrow(z - dz) = F_{2;d}^\downarrow(z) - \frac{0.5 d_{s;\text{tree}} dz}{1 - \sigma_{\text{tree}}} \{F_{2;d}^\downarrow(z) - F_{1;d}^\downarrow(z)\} . \quad (210)$$

Auch hier repräsentiert der Faktor $0.5 d_{s;\text{tree}} dz/(1 - \sigma_{\text{tree}})$ auf der rechten Seite der obigen Gleichung den Sichtfaktor der Baumseitenflächen, diesmal jedoch mit Sicht aus dem baumfreien Bereich heraus.

In ähnlicher Weise gelten für die beiden Komponenten $F_{1;p}^\downarrow$ und $F_{2;p}^\downarrow$ der abwärts gerichteten *parallelen* Strahlungsflussdichten die Bilanzen

$$\begin{aligned} F_{1;p}^\downarrow(z - dz) &= F_{1;p}^\downarrow(z) - \frac{d_f(z) dz}{\sigma_{\text{tree}}} F_{1;p}^\downarrow(z) - \frac{d_{s;\text{tree}} \tan \theta_0 dz}{\pi \sigma_{\text{tree}}} \{F_{1;p}^\downarrow(z) - F_{2;p}^\downarrow(z)\} \\ F_{2;p}^\downarrow(z - dz) &= F_{2;p}^\downarrow(z) - \frac{d_{s;\text{tree}} \tan \theta_0 dz}{\pi(1 - \sigma_{\text{tree}})} \{F_{2;p}^\downarrow(z) - F_{1;p}^\downarrow(z)\} . \end{aligned} \quad (211)$$

Hier entspricht der Ansatz der rechtsseitigen Austauschterme der (im Mittel über alle Orientierungen) durch die Baumseitenflächen hindurchtretenden parallelen Strahlungsintensität.

Man erkennt, dass es sich bei den vorstehenden Bilanzen sowohl der diffusen als auch der parallelen abwärts gerichteten Strahlungsflussdichten um Systeme linearer homogener Differentialgleichungen handelt, die – unter der Annahme schichtweise konstanter Blattflächendichten – stückweise konstante Koeffizienten besitzen. Als Folge sind beide Systeme für jede Teilschicht analytisch lösbar, d. h. man kann die Werte an der jeweiligen Schichtuntergrenze aus den als gegeben angenommenen Werten an der Obergrenze berechnen. Die Gesamtlösung erhält man, indem man – beginnend mit der obersten Schicht mit den an der Baumobergrenze gegebenen Strahlungsflussdichten als Randwerten – in rekursiver Weise Teillösungen errechnet, die schichtweise bis hinunter zum Boden fortgesetzt werden.

Die aufwärts gerichtete Strahlung ist rein diffus. In die Bilanz ihrer Teilflussdichte innerhalb des Baumbestands muss jedoch, im Unterschied zur nach unten gerichteten Strahlung, die Reflexion der abwärts gerichteten Strahlungsflussdichten an den Blättern mit einbezogen werden. Das führt auf die beiden gekoppelten Gleichungen

$$\begin{aligned}
 F_{1;d}^{\uparrow}(z+dz) &= F_{1;d}^{\uparrow}(z) - \frac{d_f(z) dz}{\sigma_{\text{tree}}} F_{1;d}^{\uparrow}(z) - \frac{0.5 d_{s;\text{tree}} dz}{\sigma_{\text{tree}}} \{F_{1;d}^{\uparrow}(z) - F_{2;d}^{\uparrow}(z)\} \\
 &+ \frac{A_f d_f(z) dz}{\sigma_{\text{tree}}} \{F_{1;p}^{\downarrow}(z) + F_{1;d}^{\downarrow}(z)\} \\
 F_{2;d}^{\uparrow}(z+dz) &= F_{2;d}^{\uparrow}(z) - \frac{0.5 d_{s;\text{tree}} dz}{1 - \sigma_{\text{tree}}} \{F_{2;d}^{\uparrow}(z) - F_{1;d}^{\uparrow}(z)\} .
 \end{aligned} \tag{12}$$

Auch sie bilden ein lineares, allerdings nicht mehr homogenes System, das – wie die beiden Gleichungen der abwärts gerichteten Strahlung – schichtweise analytisch gelöst wird. Dabei ist es notwendig, die in den Reflexionsterm der ersten Gleichung eingehenden, zuvor für die Schichtgrenzen berechneten abwärts gerichteten Strahlungsflussdichten über die jeweilige Schicht zu mitteln. Die von unten nach oben gerichtete Rekursion beginnt dabei am Boden mit den Werten

$$\begin{aligned}
 F_{1;d}^{\uparrow}(z=0) &= A_g \{F_{1;p}^{\downarrow}(z=0) + F_{1;d}^{\downarrow}(z=0)\} \\
 F_{2;d}^{\uparrow}(z=0) &= A_g \{F_{2;p}^{\downarrow}(z=0) + F_{2;d}^{\downarrow}(z=0)\} .
 \end{aligned} \tag{13}$$

Die Umsetzung der skizzierten Idee einer getrennten Strahlungsberechnung für die baumbestandenen und die baumfreien Flächenanteile des Bodens in einen Algorithmus zur Strahlungsmodellierung erfordert einen geeigneten Ansatz für die Baumseitenflächendichte $d_{s;\text{tree}}$ des Bestands. Er sollte von den Vorgabegrößen des Bestandsgrads σ_{tree} sowie der Baumhöhe h_{tree} abhängen und wird, wie am Anfang des Kapitels schon erwähnt, aus der Vorstellung von Einzelbäumen als zylinderartigen Objekten gewonnen: Bei geringer Bestandsdichte mit voneinander getrennten Einzelbäumen errechnet sich die Seitenflächendichte dann als Produkt aus dem mittleren Kronendurchmesser d_{crown} der Bäume und ihrer Anzahl n_{tree} pro Grundfläche als $d_{s;\text{tree}} = \pi d_{\text{crown}} n_{\text{tree}}$. Andererseits ergibt sich der Bestandsgrad als $\sigma_{\text{tree}} = \pi d_{\text{crown}}^2 n_{\text{tree}}/4$. Daraus folgt der Zusammenhang $d_{s;\text{tree}} = 4\sigma_{\text{tree}}/d_{\text{crown}}$. Nimmt man jetzt noch an, dass der Kronendurchmesser eines Baumes ungefähr seiner halben Höhe entspricht, so erhält man die für kleine σ_{tree} gültige Beziehung $d_{s;\text{tree}} \approx 8\sigma_{\text{tree}}/h_{\text{tree}}$. Mit wachsender Bestandsdichte verlangsamt sich zunächst die Zunahme von $d_{s;\text{tree}}$ mit σ_{tree} , da die Bäume sich zu Baumgruppen zusammenschließen und die Individualität ihrer Seitenflächen verloren geht. Im Grenzfall eines sehr dichten Baumbestands ($\sigma_{\text{tree}} \rightarrow 1$) schließlich geht die Seitenflächendichte $d_{s;\text{tree}}$ wieder gegen Null, wobei die Art und Form der verbleibenden Baumücken ihr asymptotisches Verhalten bestimmen. Nimmt man an, dass die Lücken fehlenden Einzelbäumen entsprechen, so sollte das asymptotische Verhalten von $d_{s;\text{tree}}$ im Grenzfall $\sigma_{\text{tree}} \rightarrow 1$ *symmetrisch* zum Verhalten für $\sigma_{\text{tree}} \rightarrow 0$ sein. Der in MUKLIMO_3 verwendete Ansatz

$$d_{s;\text{tree}} = 8 \sigma_{\text{tree}} (1 - \sigma_{\text{tree}})/h_{\text{tree}} \tag{14}$$

entspricht diesen Überlegungen und Annahmen.

4.5 Langwellige Strahlung

4.5.1 Langwellige Strahlung im Bereich von Bebauung

Die Berechnung der langwelligen Strahlung innerhalb unaufgelöster Bebauung ist Teil des in Kapitel 3.5.3 besprochenen iterativen Prozesses zur Berechnung der Oberflächentemperaturen des Bodens (T_g) sowie der Gebäudewände (T_w) und -dächer (T_r). Ihre in den Algorithmus eingehenden Werte gehören daher zum jeweils aktuellen Schritt des übergeordneten iterativen Verfahrens.

Die langwellige Strahlungsberechnung erfolgt unter der Voraussetzung, dass sowohl die atmosphärische Absorption als auch die thermische Eigenstrahlung der Atmosphäre im Zwischenbereich der Gebäude als vernachlässigbar gegenüber den Austauschprozessen mit den Wänden und dem Boden angesehen werden können. Dann kann die langwellige Strahlung ganz ähnlich wie die kurzwellige diffuse Strahlung berechnet werden. Der Unterschied ist nur, dass die an den Wänden und dem Boden reflektierte Strahlung durch die Wärmestrahlung dieser Flächen zu ersetzen ist.

Zur weiteren Vereinfachung wird mit einer Emissivität der materiellen Flächen von Eins gerechnet. Das bedeutet auch, dass die auftreffende langwellige Strahlung von den Flächen vollständig absorbiert wird, so dass keine Reflektionen berücksichtigt werden müssen.

Der Algorithmus zur Berechnung der langwelligen Strahlung innerhalb von Bebauung stellt sich dann wie folgt dar:

1. Vorgabe der von oben auf die Obergrenze der Bebauung auftreffenden langwelligen Gegenstrahlung $F_{lw; geg}$ der Atmosphäre.
2. Schichtweise Berechnung der nach unten gerichteten langwelligen Strahlungsflussdichte F_{lw}^\downarrow als

$$\begin{aligned}
 F_{lw; n+\frac{1}{2}}^\downarrow &= F_{lw; geg} && \text{oberer Randwert} \\
 F_{lw; k-\frac{1}{2}}^\downarrow &= \Psi_{sky; k-\frac{1}{2}} F_{lw; n+\frac{1}{2}}^\downarrow + \sigma \sum_{k'=k}^n \psi_{k'k-\frac{1}{2}} T_{w; k'}^4 && \text{für } k = 1, \dots, n.
 \end{aligned} \tag{215}$$

3. Schichtweise Berechnung der nach oben gerichteten langwelligen Strahlungsflussdichte F_{lw}^\uparrow als

$$F_{lw; k+\frac{1}{2}}^\uparrow = \Psi_{g; k+\frac{1}{2}} \sigma T_g^4 + \sigma \sum_{k'=1}^k \psi_{k'k+\frac{1}{2}} T_{w; k'}^4 \quad \text{für } k = 1, \dots, n. \tag{216}$$

Der Einfachheit halber weggelassen sind hier die Komplikationen bei Anwesenheit von Zwischendachflächen: Sie werden wie bei der diffusen Strahlung behandelt. Außerdem wurde so getan, als wären die Temperaturen der Wand- und Bodenflächen direkt verfügbare Größen. Tatsächlich müssen sie aber aus dem Energieflussgleichgewicht an den jeweiligen Flächen berechnet werden, wobei die thermische Einstrahlung auf diese wiederum eine der Eingangsgrößen ist. Somit sind beide Teilaufgaben miteinander gekoppelt und müssen gemeinsam sowie iterativ gelöst werden.

4. Berechnung der langwelligen Einstrahlung auf den Boden (F_g^{lw}), die Dächer (F_r^{lw}) und die Wände (F_w^{lw})

gemäß

$$\begin{aligned}
F_g^{lw} &= F_{lw; \frac{1}{2}}^\downarrow \\
F_{r; k+\frac{1}{2}}^{lw} &= F_{lw; k+\frac{1}{2}}^\downarrow, \quad k = 1, \dots, n \\
F_{w; k}^{lw} &= \frac{F_{lw; k+\frac{1}{2}}^\uparrow - F_{lw; k-\frac{1}{2}}^\uparrow + F_{lw; k-\frac{1}{2}}^\downarrow - F_{lw; k+\frac{1}{2}}^\downarrow}{\beta_{kk}}, \quad k = 1, \dots, n.
\end{aligned} \tag{217}$$

Als nächster Schritt des übergeordneten iterativen Verfahrens erfolgt die Neuberechnung der Oberflächentemperaturen T_g , T_r und T_w unter Verwendung der gemäß Gleichung (217) aktualisierten langwelligen Einstrahlungen F_g^{lw} , F_r^{lw} und F_w^{lw} .

4.5.2 Langwellige Strahlung im Baumbestand

Die langwellige Strahlung im Baumbestand wird analog zur diffusen Strahlung behandelt mit dem Unterschied, dass die thermische Strahlung der Blätter als Quellterm in die Bilanz mit einbezogen werden muss. Dafür entfällt die reflektierte Strahlung, da vereinfachend davon ausgegangen wird, dass die Blätter eine thermische Emissivität von Eins besitzen. Ihre Reflektivität muss demzufolge entsprechend dem Kirchhoffschen Strahlungsgesetz Null sein.

Die differentielle Bilanz der abwärts gerichteten langwelligen Strahlungsflussdichte im Baumbestand ist dann

$$\begin{aligned}
F_{1; lw}^\downarrow(z - dz) &= F_{1; lw}^\downarrow(z) - \frac{d_f(z) dz}{\sigma_{tree}} \left\{ F_{1; lw}^\downarrow(z) - \sigma (T_{fu}^{tree})^4 \right\} \\
&\quad - \frac{0.5 d_{s; tree} dz}{\sigma_{tree}} \left\{ F_{1; lw}^\downarrow(z) - F_{2; lw}^\downarrow(z) \right\} \\
F_{2; lw}^\downarrow(z - dz) &= F_{2; lw}^\downarrow(z) - \frac{0.5 d_{s; tree} dz}{1 - \sigma_{tree}} \left\{ F_{2; lw}^\downarrow(z) - F_{1; lw}^\downarrow(z) \right\}
\end{aligned} \tag{218}$$

mit den oberen Randwerten

$$F_{1; lw}^\downarrow(z = h_{tree}) = F_{2; lw}^\downarrow(z = h_{tree}) = F_{lw; geg}.$$

Dabei ist T_{fu}^{tree} die Temperatur der unterseitigen Blattoberflächen, die entsprechend Gleichung (133) aus der oberseitigen Blattflächentemperatur T_f^{tree} und der atmosphärischen Temperatur \widehat{T} errechnet wird als

$$T_{fu}^{tree} = \widehat{T} + 0.1 (T_f^{tree} - \widehat{T})$$

Für die aufwärts gerichteten langwelligen Strahlungsflusskomponenten im Baumbestand gelten die Beziehun-

gen

$$\begin{aligned}
 F_{1;lw}^{\uparrow}(z + dz) &= F_{1;lw}^{\uparrow}(z) - \frac{d_f(z) dz}{\sigma_{tree}} \left\{ F_{1;lw}^{\uparrow}(z) - \sigma (T_f^{tree})^4 \right\} \\
 &\quad - \frac{0.5 d_{s;tree} dz}{\sigma_{tree}} \left\{ F_{1;lw}^{\uparrow}(z) - F_{2;lw}^{\uparrow}(z) \right\} \\
 F_{2;lw}^{\uparrow}(z + dz) &= F_{2;lw}^{\uparrow}(z) - \frac{0.5 d_{s;tree} dz}{1 - \sigma_{tree}} \left\{ F_{2;lw}^{\uparrow}(z) - F_{1;lw}^{\uparrow}(z) \right\}
 \end{aligned} \tag{219}$$

mit den unteren Randwerten

$$F_{1;lw}^{\uparrow}(z=0) = F_{2;lw}^{\uparrow}(z=0) = \sigma T_g^4 .$$

Zur Unterscheidung zwischen ober- und unterseitigen Blattflächentemperaturen siehe auch Kapitel 3.5.4.

Auch für den Baumbestand gilt, dass die Bestimmung der langwelligen Strahlungsflüsse Teil eines übergeordneten iterativen Prozesses ist, in dem die Blattflächentemperatur T_f aus dem Energieflussgleichgewicht an den Blättern bestimmt wird.

4.5.3 Terrestrische Strahlung

Die *terrestrische* Strahlung F_{lw}^t , unter der man die vom Erdboden bzw. den auf ihm befindlichen massiven Hindernissen in die Atmosphäre ausgesendete thermische Strahlung versteht, geht in keine Berechnung von MUKLIMO_3 ein. Ihre horizontale Verteilung kann aber dennoch bei der Resultatsausgabe berücksichtigt werden.

Über unbebauten Flächen F_{ij} ohne Baumbestand rührt die terrestrische Strahlung teils vom Boden und teils von den Blattflächen des niedrigen Bodenbewuchses her. Sie wird deshalb als gewichtetes Mittel errechnet als

$$F_{lw;ij}^t = \sigma_{f;ij} \sigma T_{f;ij}^4 + (1 - \sigma_{f;ij}) \sigma T_{g;ij}^4 . \tag{220}$$

Hier charakterisiert $\sigma_{f;ij}$ die Abschirmung des Bodens durch die Vegetation, während $T_{f;ij}$ die Blattflächentemperatur des Bodenbewuchses ist, vergleiche das Kapitel 5.4 über das Bestandsmodell.

Befindet sich hingegen unaufgelöste Bebauung oder Bewaldung auf dem Flächenelement F_{ij} , so wird die terrestrische Strahlung im Rahmen der langwelligen Strahlungsberechnung innerhalb der Bebauung bzw. Bewaldung ermittelt und mit dem jeweils obersten Wert der nach oben gerichteten langwelligen Strahlungsflussdichte F_{lw}^{\uparrow} identifiziert, d. h.

$$F_{lw;ij}^t = F_{lw;ij}^{\uparrow} . \tag{221}$$

Vergleiche hierzu die Kapitel 4.5.1 und 4.5.2.

5 Bodenmodell

5.1 Allgemeines

Da das Geschehen in der atmosphärischen Grenzschicht von den Vorgängen an der Bodengrenzfläche und im Boden mitbestimmt wird, besitzt MUKLIMO_3, neben dem im Kapitel 3 beschriebenen atmosphärischen Mo-

dell, auch ein *Bodenmodell*. Dessen Aufgabe ist es, die zeitliche Entwicklung der Bodenvariablen zu simulieren und sie, über geeignete Grenzschichtbedingungen, an die Atmosphäre anzukoppeln.

Das Bodenmodell unterscheidet zwischen festen Oberflächen und Wasserflächen (siehe Kap. 2.3.3) und bei den festen Flächen wiederum zwischen *versiegelten* und *unversiegelten* Bereichen. Deren Anteile werden, Flächenelement für Flächenelement, durch den *Versiegelungsgrad* vs_{ij} festgelegt. Dessen Werte sind landnutzungs-spezifisch und werden den unterschiedlichen Nutzungstypen über die *Landnutzungstabelle* des Kapitels 2.3 zugewiesen. Zu beachten ist dabei, dass der Versiegelungsgrad von Flächen mit unaufgelöster Bebauung sich auf deren unbebauten Anteil bezieht.

Für die versiegelten und unversiegelten Bereiche werden unterschiedliche Bilanzgleichungen der Bodenvariablen gerechnet, unabhängig davon, wie groß ihr jeweiliger Anteil tatsächlich ist und auch dann, wenn er gänzlich verschwindet. Während für die versiegelten Bodenanteile eine reine *Wäremeitungs-gleichung* (siehe Kap. 5.2.1) ohne Feuchtebilanz gerechnet wird, kommen für den unversiegelten Boden *gekoppelte* Bilanzgleichungen für die Wärme und den Feuchtegehalt des Bodens zum Einsatz, siehe Kapitel 5.3.

Für die *räumliche* Diskretisierung der Bilanzgleichungen des Bodens wird die im Kapitel 2.1 für das atmosphärische Modell vorgenommene Unterteilung des horizontalen Modellgebiets in $n_x \times n_y$ Flächenelemente F_{ij} mit genutzt und jedem Flächenelement eine sich unterhalb des jeweiligen Bodenniveaus befindliche *Bodensäule* zugeordnet. Diese Säulen werden in n_b vertikale Schichten untergliedert, die von oben nach unten gezählt werden. Ihre Dicken werden mit $\Delta z_{b;k}$ und die zentralen Niveaus mit $z_{b;k}$ bezeichnet, wobei dem obersten Niveau $k = 1$ die Tiefe 0 m zugewiesen wird. Damit können die zugehörigen Variablen der Bodentemperatur und der Bodenfeuchte als Grenzschichtwerte gedeutet werden. Die folgenden Niveaus werden rekursiv aus der Beziehung

$$z_{b;k} = z_{b;k-1} + 0.5 (\Delta z_{b;k} + \Delta z_{b;k-1}) \quad (222)$$

berechnet. Zur Schichteinteilung im Boden siehe auch Kapitel 6.1.3. Für jede Bodensäule wird horizontale Homogenität ihrer Parameter und Variablen angenommen, so dass es keine Wechselbeziehungen zwischen benachbarten Säulen gibt. Die diskreten Bodenbilanzgleichungen, sowohl für die versiegelten als auch die unversiegelten Bereiche, zerfallen daher in $n_x \times n_y$ voneinander unabhängige Teilsysteme für die jeweiligen Säulen, in denen die Variablen nur von der Vertikalkoordinate abhängen.

Da die *zeitlichen* Abläufe im Boden im Vergleich zur Atmosphäre verhältnismäßig langsam erfolgen, wird zur Integration ihrer Bilanzgleichungen ein im Vergleich zum atmosphärischen Zeitschritt Δt größerer Schritt Δt_b verwendet. Er ist in MUKLIMO_3 als $\Delta t_b = 1$ min vorvereinbart, kann aber über die Variable *minb* der Eingabedatei (in der Namelist-Gruppe „zeit“) geändert werden. Außerdem erfolgt die zeitliche Integration der Bodenbilanzgleichungen – im Unterschied zu den atmosphärischen Bilanzgleichungen des Kapitels 3, die größtenteils explizit integriert werden – nach dem halb-impliziten *Crank-Nicolson*-Verfahren (CRANK und NICOLSON, 1947), das von zweiter Ordnung in der Zeit und von hoher numerischer Stabilität ist.

Die *Ankopplung* der Bodenbilanzgleichungen an die Atmosphäre erfolgt über Gleichgewichtsbedingungen für die Energie- und Feuchteflüsse an der Grenzfläche zwischen Boden und Atmosphäre. Bei den unversiegelten Flächen ist dabei ein numerisches Modell für den (niedrigen) Bodenbewuchs zwischengeschaltet, siehe Kapitel 5.4. Die getrennt berechneten Energie- und Feuchteflüsse von den versiegelten und unversiegelten Flächen in die Atmosphäre – und umgekehrt – werden entsprechend dem Versiegelungsgrad vs_{ij} des jeweiligen Flächenelements gewichtet.

5.2 Versiegelter Boden

5.2.1 Wärmeleitungsgleichung

Da in die versiegelten Teilbereiche des Bodens keine Feuchte eindringt, besteht ihr prognostisches System allein aus einer Wärmeleitungsgleichung

$$C_b^v \frac{\partial T_b^v}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_b^{q:v} = \nabla \cdot \lambda_b^v \nabla T_b^v \quad (223)$$

für die Temperatur T_b^v der versiegelten Bodenbereiche, in der die Wärmestromdichte $\vec{J}_b^{q:v}$ parametrisiert ist als

$$\vec{J}_b^{q:v} = -\lambda_b^v \nabla T_b^v \quad (224)$$

In Gleichung (5.2.1) ist C_b^v mit der Einheit $\text{Jm}^{-3}\text{K}^{-1}$ die Wärmekapazität und λ_b^v mit der Einheit $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ die Wärmeleitfähigkeit des versiegelten Bodens. Die zur Charakterisierung der thermischen Bodeneigenschaften ebenfalls gebräuchliche *Temperaturleitfähigkeit* $L_b^{q:v}$ (auch Wärme- oder Thermodiffusivität genannt, Einheit m^2s^{-1} entsprechend einem Diffusionskoeffizienten) steht zur Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit in der Relation

$$L_b^{q:v} = \frac{\lambda_b^v}{C_b^v} \quad (225)$$

Die Form (223) der Wärmeleitungsgleichung wie auch die Programmierung ihrer numerischen Lösung in MUKLIMO_3 lassen grundsätzlich zu, dass sowohl C_b^v als auch λ_b^v ortsabhängig sind. Im Programmcode werden die entsprechenden numerischen Felder jedoch mit konstanten, vom Programmnutzer durch Wertzuweisungen an die die Variablen *albl dv* (Wärmeleitfähigkeit) und *akbl dv* (Thermodiffusivität) der *Eingabedatei* beeinflussbaren Werten belegt, siehe Anhang E, Namelist-Gruppe „boden“.

Für die räumliche *Diskretisierung* und zeitliche Integration der Wärmeleitungsgleichung (223) wird der Bodentemperatur T_b^v ein dreidimensionales numerisches Feld mit den Elementen $T_{b;ijk}^v$ zugeordnet. Mit den im Kapitel 5.1 für die Gittereinteilung des Bodens getroffenen Vereinbarungen ergeben sich dann für die zeitliche Änderung der diskreten Temperaturwerte $T_{b;ijk}^v$ die folgenden prognostischen Gleichungen:

$$C_b^v \frac{\partial T_{b;ijk}^v}{\partial t} = \frac{1}{\Delta z_{b;k}} \left\{ \frac{\lambda_b^v (T_{b;ijk+1}^v - T_{b;ijk}^v)}{0.5 (\Delta z_{b;k+1} + \Delta z_{b;k})} - \frac{\lambda_b^v (T_{b;ijk}^v - T_{b;ijk-1}^v)}{0.5 (\Delta z_{b;k} + \Delta z_{b;k-1})} \right\} \quad (226)$$

für $i = 1, \dots, n_x, \quad j = 1, \dots, n_y, \quad k = 2, \dots, n_b - 1,$

die in $n_x \times n_y$ voneinander unabhängige Teilsysteme für die einzelnen Bodensäulen zerfallen.

Hinzu kommen obere und untere *Randbedingungen*. An der Untergrenze $k = n_b$ des Bodenmodells wird die Temperatur auf ihrem anfänglichen, von der Geländehöhe $h_{0;ij}$ abhängigen Wert

$$T_{b;ijn_b}^v = tb0 - 0.006 \text{ Km}^{-1} (h_{0;ij} - h_{0;1d}) \quad (227)$$

festgehalten, wobei $h_{0;1d}$ die Geländehöhe des eindimensionalen Antriebsmodells (siehe Kap. 6.3) und $tb0$ die vom Programmnutzer über die Eingabedatei spezifizierbare Anfangstemperatur des eindimensionalen Bodenmodells ist (vergleiche Kap. 6.1.4). Die in Gleichung (227) implizierte Temperaturabnahme mit der Geländehöhe entspricht dem Erfahrungswert, dass die atmosphärische Temperatur im Mittel um 0.6 K pro 100 m Höhenunterschied abnimmt. Dieser Wert ist in Gleichung (227) auf den Boden übertragen worden.

Die Notwendigkeit einer *oberen* Randbedingung ergibt sich daraus, dass die Temperaturwerte $T_{b;ij k-1}^v$ auf der rechten Seite der Gleichung (226) für das oberste Niveau $k = 1$ nicht definiert sind. Zudem ist die Bodengrenzfläche für die Wärmeleitungsgleichung kein echter „Rand“. Vielmehr spielt sie im Gesamtsystem Atmosphäre–Erdboden die Rolle einer *Zwischengrenzfläche*. Deshalb kommt der oberen Randbedingung der Bodenwärmegleichung auch die Aufgabe zu, die Wärmeausbreitung im Boden an das Wärmegeschehen in der Atmosphäre *anzukoppeln*. Aus diesem Grund werden den Temperaturen $T_{b;ij 1}^v$ des obersten Bodenniveaus, das sich direkt auf der Bodengrenzfläche befindet, vor jedem zeitlichen Integrationsschritt die gerade aktuellen *Grenzschichttemperaturen* $T_{g;ij}^v$ der versiegelten Bodenoberflächen zugewiesen, d. h.

$$T_{b;ij 1}^v = T_{g;ij}^v \quad \text{für } i = 1, \dots, n_x, \quad j = 1, \dots, n_y. \quad (228)$$

Dabei stammen die Werte für $T_{g;ij}^v$ aus der *Gleichgewichtsbedingung* für die Energieflüsse von und zu den versiegelten Bodenflächen. Sie wird *vor* jedem Integrationsschritt der Wärmeleitungsgleichung ausgewertet, siehe Kapitel 5.2.2. Während der nachfolgenden Durchführung des numerischen Zeitschritts gilt dann die obere Randbedingung

$$\frac{\partial T_{b;ij 1}^v}{\partial t} = x_{\text{bound}} \frac{\partial T_{b;ij 2}^v}{\partial t}, \quad (229)$$

wobei der Parameter x_{bound} in MUKLIMO_3 als $x_{\text{bound}} = 0.5$ festgelegt ist. Die Bedingung (229) kann als gewichtetes Mittel aus der Forderung

$$\frac{\partial T_{b;ij 1}^v}{\partial t} = 0$$

eines zeitlich konstanten *Wertes* und der alternativen Bedingung

$$\frac{\partial T_{b;ij 1}^v}{\partial t} = \frac{\partial T_{b;ij 2}^v}{\partial t}$$

einer zeitlich konstanten *Differenz* zwischen dem ersten und zweiten Bodenniveau aufgefasst werden, wobei x_{bound} der Wichtungsfaktor ist. Die gemischte Bedingung (228) wird anstelle der eigentlich einleuchtenderen reinen Differenzbedingung verwendet, da letztere sich in Testrechnungen als numerisch nicht immer stabil herausgestellt hat.

Wie bereits in Kapitel 5.1 erwähnt, erfolgt die *zeitliche* Integration der diskreten Bodenwärmegleichung (226) nach dem sogenannten Crank-Nicholson-Algorithmus. Charakteristisch für dieses Verfahren ist die Aufteilung des Integrationsschritts in zwei Halbschritte, von denen der erste explizit, der zweite hingegen implizit ausgeführt wird. Für eine ausgesuchte, dem Flächenelement F_{ij} zugeordnete Bodensäule kann der gesamte Zeitschritt des Verfahrens durch die folgenden Teilschritte beschrieben werden:

1. *Anfangszuweisung*: Es wird ein *Hilfsfeld* $T_{b;ij k}^{v;\nu}$ eingeführt, das mit den Bodentemperaturwerten $T_{b;ij k}^v$ zu Beginn des Zeitschritts belegt wird, d. h.

$$T_{b;ij k}^{v;\nu} \equiv T_{b;ij k}^v \quad \text{für } k = 1, \dots, n_b. \quad (230)$$

2. *Expliziter Halbschritt*: Durch explizite Integration der Gleichung (226) für einen halben Zeitschritt $\Delta t_b/2$ werden *Zwischenresultate* $T_{b;ij k}^{v;\nu+1/2}$ berechnet, die der Bodentemperatur zur Zeit $t^{\nu+1/2} = t^\nu + \Delta t_b/2$ entsprechen. Inklusive Randbedingungen besteht der explizite Teilschritt aus den Operationen

$$T_{b;ij k}^{v;\nu+1/2} = T_{b;ij k}^{v;\nu} + \begin{cases} 0 & \text{für } k = 1 \quad \text{und} \quad k = n_b \\ \frac{0.5\Delta t_b}{C_b^v \Delta z_{b;k}} \left(\frac{\lambda_b^v (T_{b;ij k+1}^{v;\nu} - T_{b;ij k}^{v;\nu})}{0.5(\Delta z_{b;k+1} + \Delta z_{b;k})} - \frac{\lambda_b^v (T_{b;ij k}^{v;\nu} - T_{b;ij k-1}^{v;\nu})}{0.5(\Delta z_{b;k} + \Delta z_{b;k-1})} \right) & \text{sonst.} \end{cases} \quad (231)$$

3. *Impliziter Halbschritt*: Die Gleichung (226) wird, jetzt mit impliziter zeitlicher Diskretisierung, d. h. die Temperaturwerte der rechtsseitigen Differenzterme werden dem Endzeitpunkt des Integrationsschritts

zugeordnet, für einen weiteren Halbschritt $\Delta t_b/2$ integriert. Die gesuchten Resultate des impliziten Teilschritts werden hierfür einem weiteren Hilfsfeld $T_b^{v;v+1}$ zugewiesen, dessen Elemente aus den Gleichungen

$$T_{b;ijk}^{v;v+1} = T_{b;ijk}^{v;v+1/2} + \begin{cases} 0.5 (T_{b;ij2}^{v;v+1} - T_{b;ij2}^{v;v}) & \text{für } k = 1 \\ 0 & \text{für } k = n_b \\ \frac{0.5\Delta t_b}{C_b^v \Delta z_{b;k}} \left(\frac{\lambda_b^v (T_{b;ijk+1}^{v;v+1} - T_{b;ijk}^{v;v+1})}{0.5(\Delta z_{b;k+1} + \Delta z_{b;k})} - \frac{\lambda_b^v (T_{b;ijk}^{v;v+1} - T_{b;ijk-1}^{v;v+1})}{0.5(\Delta z_{b;k} + \Delta z_{b;k-1})} \right) & \text{sonst.} \end{cases} \quad (232)$$

errechnet werden. Die im System (232) als oberste Zuweisung enthaltene Randbedingung für $k = 1$ ist, unter Benutzung der Identität

$$T_{b;ij1}^{v;v+1/2} + x_{\text{bound}} (T_{b;ij2}^{v;v+1} - T_{b;ij2}^{v;v+1/2}) = T_{b;ij1}^{v;v} + x_{\text{bound}} (T_{b;ij2}^{v;v+1} - T_{b;ij2}^{v;v}),$$

unabhängig vom Zwischenwert $T_{b;ij1}^{v;v+1/2}$ formuliert, so dass dieser nicht benötigt wird und deshalb beim expliziten Teilschritt ungeändert gelassen werden kann, siehe die obere Zuweisung in (231).

Charakteristisch für das Gleichungssystem (232) ist, dass in ihm die gesuchten Werte $T_{b;ijk}^{v;v+1}$ auch auf den rechten Gleichungsseiten auftreten. Das bedeutet, dass zu ihrer Bestimmung ein System von n_b linearen Gleichungen zu lösen ist, dessen Matrix allerdings nur in ihren drei zentralen Diagonalen von Null verschiedene Werte aufweist (*tridiagonales* System). Seine Lösung erfolgt in MUKLIMO_3 nach dem *Gaußschen* Eliminationsverfahren.

4. Endzuweisung: Das Feld T_b^v wird mit den Werten $T_{b;ijk}^{v;v+1}$ überschrieben, welche die Bodentemperaturen zum neuen Zeitpunkt $t^{v+1} = t^v + \Delta t_b$ darstellen

$$T_{b;ijk}^v = T_{b;ijk}^{v;v+1} \quad \text{für alle } k. \quad (233)$$

5. Schlussbemerkung: Im Unterschied zu den oben skizzierten Teilschritten kommt die Umsetzung des Crank-Nichelson-Verfahrens in ein Fortran-Unterprogramm ohne die Hilfsfelder $T_{b;ijk}^{v;v}$ und $T_{b;ijk}^{v;v+1/2}$ aus. Stattdessen wird das Feld $T_{b;ijk}^v$ direkt mit den jeweils neu errechneten Werten überschrieben. Dabei muss durch „Zwischenspeicherung“ dafür Sorge getragen werden, dass bei Abarbeitung der Gleichung (231) bezüglich des vertikalen Indexes k nicht auf bereits überschriebene Werte $T_{b;ijk-1}^v$ zugegriffen wird.

Das in den Gleichungen von (230) bis (233) für eine beispielhafte Bodensäule dargestellte zeitliche Integrationsverfahren der Wärmeleitungsgleichung (223) muss für alle Bodensäulen des Modellgebiets ausgeführt werden. In MUKLIMO_3 werden diese Berechnungen „zeilenweise“ abgearbeitet, soll heißen, dass die Operationen für den Indexbereich $i = 1, \dots, n_x$ zu ein und demselben Index j innerhalb eines einzigen Unterprogrammaufrufs gemeinsam ausführt werden, während die Schleife über j im übergeordneten Unterprogramm angesiedelt ist. Diese Struktur dient einer beschleunigten Programmausführung, da die numerischen Operationen der Dreifachschleife des Verfahrens bezüglich i (und auch bezüglich j) parallel abgearbeitet werden können, d. h. *vektorisierbar* sind, nicht aber bezüglich k .

5.2.2 Energieflussgleichgewicht

Die Grenzflächentemperatur T_g^v der versiegelten Anteile eines beispielhaften Flächenelements F_{ij} wird aus dem *Energieflussgleichgewicht* an dessen Oberfläche berechnet. Dieses Prinzip entspricht der Vorstellung, dass die Bodenoberfläche eine dünne, masselose Schicht ist, in der folglich auch keine Energie gespeichert wird. Demzufolge müssen die zum Boden gerichteten Energieflussdichten in der Summe gerade den vom Boden fort gerichteten Flussdichten die Waage halten. Betrachtet werden dabei die Strahlungsflussdichten

- der kurzwelligigen Einstrahlung F_g^{sw} ,
- der reflektierten kurzwelligigen Strahlung $A_g^v F_g^{sw}$,
- der langwelligen Einstrahlung F_g^{lw} sowie
- der langwelligen Ausstrahlung $\sigma (T_g^v)^4$.

Hier ist σ die Stefan-Boltzmann-Konstante und A_g^v die Albedo des versiegelten Bodens, die eine für das gesamte Modellgebiet einheitliche Vorgabegröße der Eingabedatei ist (Variable *albedv* der Namelistgruppe „*param*“, vergleiche Anhang E). Die auf das Flächenelement F_{ij} einfallenden Strahlungsflussdichten F_g^{sw} und F_g^{lw} werden unter Berücksichtigung der Flächenneigung sowie einer sich auf F_{ij} eventuell befindenden unaufgelösten Bebauung oder Bewaldung berechnet, vergleiche Kapitel 4. Hinzu kommen die vom versiegelten Boden in die Atmosphäre gerichtete

- sensible Wärmestromdichte $J_a^{q:v}$ sowie die
- in den Boden gerichtete Wärmestromdichte $J_b^{q:v}$.

Dabei wird $J_a^{q:v}$ als Flussdichte in der Bodengrenzschicht entsprechend Kapitel 3.4.1 modelliert als

$$J_a^{q:v} = -\rho_0 c_p u_*^v T_*^v. \quad (234)$$

Die hierin eingehende Schubspannungsgeschwindigkeit u_*^v über dem versiegelten Boden sowie die Skalengröße T_*^v der Temperatur werden mithilfe der universellen *Clarke*-Funktionen G_M und G_θ aus den Beziehungen (108) des Kapitels 3.4.1 errechnet. Daraus ergibt sich der Zusammenhang

$$J_a^{q:v} = -\frac{\rho_0 c_p \widehat{v}_h(z_a)}{G_M G_\theta} \left\{ \widehat{T}(z_a) - T_g^v + \gamma_{ad}(z_a - h_0) \right\}, \quad (235)$$

in dem $\widehat{v}_h(z_a)$ und $\widehat{T}(z_a)$ die Mittelwerte der bodenparallelen Windgeschwindigkeit bzw. der Temperatur im untersten atmosphärischen Gitterniveau z_a und γ_{ad} der in Kapitel 3.2.1 eingeführte *trockenadiabatische* Temperaturgradient sind. Die Argumente der *Clarke*-Funktionen G_M und G_θ sind der Übersichtlichkeit halber weggelassen.

Die in den Boden gerichtete Wärmestromdichte $J_b^{q:v}$ wird aus der Temperaturdifferenz $T_{b;2}^v - T_g^v$ zwischen dem zweiten Bodenniveau $z_{b;2}$ und der Bodengrenzfläche sowie der Wärmeleitfähigkeit λ_b^v errechnet als

$$J_b^{q:v} = -\lambda_b^v \frac{(T_{b;2}^v - T_g^v)}{z_{b;2}}. \quad (236)$$

Die Forderung des Energieflussgleichgewichts an den versiegelten Bodenflächen wird dann formuliert als

$$E_g^v(T_g^v) := (1 - A_g^v) F_g^{sw} + F_g^{lw} - \sigma (T_g^v)^4 - J_a^{q:v} - J_b^{q:v} \stackrel{!}{=} 0. \quad (237)$$

Da T_g^v sowohl in die Berechnung der langwelligen Ausstrahlung wie auch des atmosphärischen und des Bodenwärmestroms eingeht, stellt Gleichung (237) eine Forderung an T_g^v nach Art eines Nullstellenproblems dar. Aus ihr werden in MUKLIMO_3 die jeweils neue Grenzschichttemperatur im Minutentakt nach dem iterativen *Newton*-Verfahren

$$T_g^{v;\nu+1} = T_g^{v;\nu} - \frac{E_g^v(T_g^{v;\nu})}{(E_g^v)'(T_g^{v;\nu})} \quad (238)$$

bestimmt, wobei $T_g^{v;\nu}$ die vor dem $(\nu + 1)$ -ten Iterationsschritt gültige Näherung für T_g^v und $T_g^{v;\nu+1}$ der daraus errechnete verbesserte Wert sind. Die zur Auswertung von Gleichung (238) benötigte Ableitung $(E_g^v)'(T_g^v)$ der Energiebilanz E_g^v nach der Grenzschichttemperatur T_g^v ergibt sich aus den Gleichungen (237), (234) und (235) als

$$(E_g^v)'(T_g^v) = -4\sigma (T_g^v)^3 + \frac{\rho_0 c_p \widehat{v}_h(z_a)}{G_M G_\theta} + \frac{\lambda_b^v}{z_{b;2}}. \quad (239)$$

Als Startwert $T_g^{v;0}$ für die Iteration nach Gleichung (238) wird der Grenzschichttemperatur der momentan gültige Temperaturwerte $T_{b;1}^v$ des obersten Bodenniveaus zugewiesen, d. h.

$$T_g^{v;0} = T_{b;1}^v. \quad (240)$$

Die Bestimmung der Grenzflächentemperaturen nach Gleichung (238) muss für alle Flächenelemente F_{ij} durchgeführt werden. Zur Beschleunigung des numerischen Ablaufs werden die F_{ij} in MUKLIMO_3 dabei „reihenweise“ abgearbeitet, d. h. das betreffende Unterprogramm wird zu jedem j nur einmal aufgerufen und die Newton-Schritte nach Gleichung (238) dann als Schleife über alle $i = 1, \dots, n_x$ parallel ausgeführt, vergleiche auch den letzten Absatz von Kapitel 5.2.1. Die Iteration endet, wenn die Temperaturänderungen des zuletzt ausgeführten Schrittes für alle i unter 0.1 K geblieben sind. Ist dies nach 10 Schritten noch nicht der Fall, wird ein Warnhinweis ausgegeben.

Nach Beendigung der Newton-Iteration (238) für alle Flächenelemente F_{ij} werden auch die obersten Bodentemperaturen $T_{b;ij}^v$ aktualisiert, indem ihnen die neu errechneten Grenzflächentemperaturen $T_{g;ij}^{v;neu}$ zugewiesen werden, d. h.

$$T_{b;ij}^v = T_{g;ij}^{v;neu}. \quad (241)$$

Diese dienen dann als obere Randwerte bei der zeitliche Integration der Bodenwärmegleichung nach Kapitel 5.2.1.

5.3 Unversiegelter Boden

5.3.1 Allgemeines

Für die modellhafte Behandlung des unversiegelten Erdbodens ist die Lösung einer einfachen Wärmegleichung nicht ausreichend. Vielmehr sind im Wärme- und Feuchtehaushalt des Bodens Wechselbeziehungen zwischen der Bodentemperatur und dem Bodenwassergehalt sowohl untereinander als auch mit der Bodensubstanz zu beachten. Eine grundlegende Darstellung der Zusammenhänge gibt die Arbeit von EDLEFSEN und ANDERSON (1943). Das in MUKLIMO_3 benutzte Bodenmodell ist die numerische Umsetzung der in SIEBERT et al. (1992) gegebenen Gleichungen. In ihm wird der Boden als poröses Medium bestehend aus den 4 Komponenten

- feste *Bodensubstanz* oder *Bodenmatrix*, gekennzeichnet durch den Index 3
- *Flüssigwasser* (Index 2)
- *Wasserdampf* (Index 1)
- *trockene Luft* (Index 0)

behandelt, wobei die Nummerierung von trockener Luft, dampfförmigem und flüssigem Wasser als 0, 1 und 2 der in der Meteorologie üblichen Bezeichnungsweise folgt. Hinzu tritt der Index 3 für die Bodenmatrix. Zudem

werden die Größen und Variablen des unversiegelten Bodens, wo immer es notwendig scheint, mit einem „b“ gekennzeichnet und gegebenenfalls zusätzlich mit einem „u“ für „unversiegelt“. Bei thermodynamischen Funktionen, die unbeeinflusst von der Bodenmatrix sind, fehlt eine solche Kennzeichnung. Auch bei den intensiven Zustandsvariablen der Temperatur T und des Druckes p wird auf sie verzichtet.

Grundlegend für das Bodenmodell von MUKLIMO_3 ist, dass die Bodeneigenschaften, ebenso wie seine thermodynamischen Zustandsvariablen und die in ihm ablaufenden Transportvorgänge, allesamt durch mittlere Werte über eine genügend große Anzahl von Poren beschrieben werden. Eine wichtige Kenngröße des Bodens ist dabei seine *Porosität*, die mit η_s bezeichnet wird, da sie zugleich dem Sättigungswert des volumetrischen Bodenwassergehalts (siehe unten) entspricht. Die Tabelle 1 auf S. 94 präsentiert einige Porositätswerte für unterschiedliche Bodentypen.

Die Massenanteile der einzelnen Bodenkomponenten werden durch die *partiellen* Dichten ρ_b^0 bis ρ_b^3 charakterisiert. Sie geben die Massen der in einem Einheitsvolumen des porösen Bodens enthaltenen jeweiligen Komponente in kg m^{-3} an. Ihre hochgestellten Komponentenindizes dienen der Unterscheidung von den in den folgenden Darlegungen ebenfalls verwendeten Dichten $\rho_{k;b}$ mit tiefgestelltem Index, die nicht auf das Gesamtvolumen des Bodens bezogen sind, sondern stattdessen auf das von der betreffenden Komponente eingenommene Partialvolumen. So sind $\rho_{0;b}$ und $\rho_{1;b}$ die auf das Volumen der Gasphase des Bodens bezogenen Partialdichten der trockenen Luft und des Wasserdampfes. Die Größe ρ_2 ohne Bodenkennzeichnung ist die (gewöhnliche) Dichte von Wasser mit dem Wert $\rho_2 = 1000 \text{ kg m}^{-3}$.

Für den Wassergehalt des Bodens wird, anstelle der partiellen Dichten ρ_b^1 und ρ_b^2 , auch das dimensionslose und mit η bezeichnete Maß des *volumetrischen* Bodenwassergehalts verwendet. Es steht in Zusammenhang mit der labortechnischen Bestimmung des Bodenwassergehalts und gibt das Volumen des im Boden enthaltenen und aus ihm extrahierten Wassers im Verhältnis zum Volumen der Bodenprobe an. Für die folgenden Überlegungen wird η aufgeteilt in seine beiden, dem dampfförmigen und dem flüssigen Bodenwasser zuzuordnen Anteile η^1 und η^2 mit $\eta = \eta^1 + \eta^2$. Für ihre anschauliche Deutung müssen das flüssige und dampfförmige Wasser getrennt aus der Bodenprobe extrahiert und der dampfförmige Anteil dann verflüssigt werden. Die so erhaltenen Teilvolumina, in Relation zum Volumen der Bodenprobe gesetzt, ergeben dann die volumetrischen Teilwassergehalte η^1 und η^2 . Entsprechend dieser Deutung erfolgt ihre Umrechnung in die Partialdichten ρ_b^1 und ρ_b^2 über die Beziehungen $\rho_b^1 = \rho_2 \eta^1$, $\rho_b^2 = \rho_2 \eta^2$.

Weitere vereinfachende Annahmen des Bodenmodells sind:

1. Die poröse Bodensubstanz (die „Bodenmatrix“) ist starr und unverrückbar. Ihr Material ist zudem unlöslich.
2. Der Wärmeausgleich zwischen den Teilsubstanzen des Bodens erfolgt spontan, so dass ihnen eine *einheitliche* Temperatur T zugeordnet werden kann.
3. Die Phasenumwandlung zwischen „Flüssigwasser“ und „Wasserdampf“ erfolgt so rasch, dass man stets vom Zustand des chemischen Gleichgewichts zwischen ihnen ausgehen kann.
4. Es gibt einen spontanen „Druckausgleich“ zwischen der Gasphase des Bodens und der Atmosphäre, so dass man den Luftdruck im Boden als zeitlich konstant ansehen kann.
5. Für sämtliche Bodengleichungen gilt im Modell MUKLIMO_3 die vereinfachende Bedingung der horizontalen Homogenität, auch wenn sie bei der folgenden Ableitung der Gleichungen zumeist nicht explizit verlangt wird.

Ein wesentliches Charakteristikum des porösen Bodens ist, dass das in ihm enthaltene Flüssigwasser durch Kapillarkräfte an die Porenwände gebunden ist (Adhäsionseffekt). Mit der vergrößerten Grenzfläche zwischen

Bodenwasser und Gasphase des Bodens nimmt außerdem die Bedeutung der Oberflächenspannung stark zu. Nach EDLEFSEN und ANDERSON (1943) können diese Effekte durch die Einführung eines von der Bodenart und dem Wassergehalt abhängigen chemischen Zusatzpotentials ψ_b berücksichtigt werden. Es wird hier, in Übersetzung des englischen Begriffs „moisture potential“ als *Feuchtepotential* benannt. Sinnvoll, anstelle von „Feuchtepotential“, wäre auch die Bezeichnung „Matrixpotential“, da ψ_b summarisch die Kräfte beschreibt, die von der Bodenmatrix auf das Wasser ausgeübt werden. Sie wird hier aber nicht verwendet. Nach Einführung des Feuchtepotentials erhält man das effektive chemische Potential $\mu_{2;b}$ des Bodenwassers, indem man ψ_b zum chemischen Potential μ_2 des (ungebundenen) Flüssigwassers hinzufügt. Es gilt also

$$\mu_{2;b} = \mu_2 + \psi_b . \quad (242)$$

Dabei wird davon ausgegangen, dass sich ψ_b allein als Funktion der Bodentemperatur T und des volumetrischen Bodenwassergehalts η ausdrücken lässt, d. h. $\psi_b = \psi_b(T, \eta)$.

Das Feuchtepotential ψ_b^s von gesättigtem Bodenwasser (d. h. die Poren sind vollständig mit Wasser gefüllt) kann ermittelt werden, indem man die Unterseite einer Bodenprobe in ein Wasserbad taucht und dann die *Steighöhe* ψ_h des in die Poren eindringenden Wassers misst. Wendet man die Gleichgewichtsbedingung

$$(\mu_2 + \Phi) = \text{const} \quad (243)$$

(Φ gleich Geopotential) für Wasser im Schwerfeld der Erde (siehe z. B. LANDAU und LIFSCHITZ, 1966) auf eine Position A in der Höhe z_A der freien Wasseroberfläche und eine Position B in der Höhe z_B der Obergrenze des in den Bodenporen aufgestiegenen Wassers an, so gilt

$$(\mu_2 + \Phi)_A = (\mu_{2;b} + \Phi)_B = (\mu_2 + \psi_b^s + \Phi)_B . \quad (244)$$

Daraus folgt dann der Zusammenhang

$$\psi_b^s = \Phi_B - \Phi_A = g(z_B - z_A) = g\psi_h \quad (245)$$

zwischen dem Sättigungswert ψ_b^s des Feuchtepotential und der Steighöhe ψ_h des Bodenwassers, wobei der Umrechnungsfaktor g die Schwerkraftkonstante ist. Wegen dieses Zusammenhangs wird das Feuchtepotential, statt als Energie pro Masse, zumeist in Form einer Höhe angegeben, siehe dazu auch Kapitel 5.3.5.

Die für die Wärmebilanz des Bodens wichtige Konsequenz aus der Bindung des Flüssigwassers an die Porenwände ist das Auftreten einer (differentiellen) *Benetzungswärme* W , deretwegen die Enthalpie $h_{2;b}$ des Bodenwassers angesetzt wird als

$$h_{2;b} = h_2 - W . \quad (246)$$

Zwischen W und dem Feuchtepotential ψ_b besteht, entsprechend einem allgemeinen thermodynamischen Zusammenhang zwischen dem chemischen Potential und der partiellen Enthalpie einer beliebigen Substanz, die Beziehung

$$W = -\psi_b + T \left(\frac{\partial \psi_b}{\partial T} \right)_{\eta} . \quad (247)$$

Für den Wasserdampf in den Bodenporen hingegen wird davon ausgegangen, dass seine Enthalpie $h_{1;b}$ unbeeinflusst von der Bodenmatrix bleibt, d. h. es gilt

$$h_{1;b} \equiv h_1 . \quad (248)$$

Als weitere Folge aus der Bindung des Bodenwassers an die inneren Oberflächen der festen Bodensubstanz haben es die Wassermoleküle schwerer, dem Verband des Flüssigwassers zu „entkommen“ (d. h. zu verdampfen). Als Konsequenz sinkt der Gleichgewichtsdampfdruck p_b^{21} des Bodenwassers im Vergleich zum nur von

der absoluten Temperatur T abhängigen Dampfdruck $p^{21}(T)$ des ungebundenen Wassers. Aus der Gleichgewichtsbedingung $\mu_1 = \mu_{2;b}$ mit $\mu_{2;b}$ gemäß Gleichung (242) für Wasser und Wasserdampf im Boden und der aus ihr folgenden *Clausius-Clapeyron*-Gleichung

$$\left(\frac{\partial p_b^{21}}{\partial T} \right)_\eta = \frac{h_{1;b} - h_{2;b}}{T(v_{1;b} - v_2)} \quad (249)$$

lässt sich, bei Vernachlässigung des spezifischen Volumens $v_2 = 1/\rho_2$ des Flüssigwassers gegenüber dem spezifischen Volumen $v_{1;b} = 1/\rho_{1;b}$ des Wasserdampfes, der Zusammenhang

$$p_b^{21} = p^{21}(T) \exp(\psi_b/R_1T) \quad (250)$$

ableiten, wobei R_1 die Gaskonstante des Wasserdampfes ist. Zur Verifizierung der Gleichung (250) schreibe man die *Clausius-Clapeyron*-Gleichung (249) mit der genannten Vereinfachung und unter Benutzung der idealen Gasgleichung für den Wasserdampf

$$p_b^{21} = p_b^1 = \frac{R_1T}{v_{1;b}}$$

in der Form

$$\frac{1}{p_b^{21}} \left(\frac{\partial p_b^{21}}{\partial T} \right)_\eta = \left(\frac{\partial \ln p_b^{21}}{\partial T} \right)_\eta = \frac{h_{1;b} - h_{2;b}}{R_1T^2} = \frac{h_1 - h_2}{R_1T^2} + \frac{W}{R_1T^2}.$$

Mithilfe der beiden Umformungen

$$\frac{h_1 - h_2}{R_1T^2} = \frac{d \ln p^{21}}{dT}; \quad \frac{W}{R_1T^2} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\psi_b}{R_1T} \right)_\eta$$

und Integration über T gelangt man dann zu der Beziehung

$$\ln p_b^{21} = \ln p^{21} + \frac{\psi_b}{R_1T},$$

die gleichwertig zur Relation (250) ist.

5.3.2 Bilanzgleichung des Bodenwassers

Maßgeblich für die zeitliche Entwicklung des Bodenwassergehalts sind die Massenbilanzen der drei beweglichen Bodenkomponenten: trockene Luft (Index 0), Wasserdampf (Index 1) und Flüssigwasser (Index 2), die in ihrer Grundform geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_b^0}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_b^0 &= 0 \\ \frac{\partial \rho_b^1}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_b^1 &= \rho_2 \frac{\partial \eta^1}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_b^1 = I^{21} \\ \frac{\partial \rho_b^2}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_b^2 &= \rho_2 \frac{\partial \eta^2}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_b^2 = -I^{21} - S_\eta. \end{aligned} \quad (251)$$

Hier sind die in Kapitel 5.3.1 eingeführten Dichten ρ_b^0 bis ρ_b^2 die Partialmassen der jeweiligen Bodenkomponente pro Bodenvolumen, wohingegen ρ_2 die (gewöhnliche) Dichte von Wasser ist. Die Vektoren \vec{J}_b^0 , \vec{J}_b^1 und \vec{J}_b^2 sind die Diffusionsflussdichten (Massenflüsse pro Sekunde durch einen Einheitsquerschnitt des Bodens) der trockenen Luft und der beiden Phasen des Bodenwassers, jeweils in $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$). Die „Senke“ S_η

repräsentiert den Wasserentzug des Bodens durch pflanzliche Wurzeln, während I^{21} die Umwandlungsrate von Flüssigwasser in Wasserdampf ist, beides in $\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$.

Die Herleitung der Wasserbilanzgleichung aus den Gleichungen (251) beginnt mit dem im vorangehenden Kapitel 5.3.1 vereinbarten chemischen Gleichgewicht zwischen den beiden Wasserphasen des Bodens. Unter dieser Annahme ist der Partialdruck p_b^1 des Wasserdampfes stets gleich seinem Sättigungswert, d. h. es gilt

$$p_b^1 = p_b^{21}, \quad (252)$$

wobei für p_b^{21} der Zusammenhang der Gleichung (250) gilt. Außerdem ist es sinnvoll, die partiellen Wassergehalte η^1 und η^2 zum volumetrischen Gesamtwassergehalt η des Bodens, erklärt als

$$\eta := \eta^1 + \eta^2, \quad (253)$$

zusammenzufassen. Für η gilt dann die Bilanzgleichung

$$\rho_2 \frac{\partial \eta}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{J}_b^1 + \vec{J}_b^2) = -S_\eta. \quad (254)$$

In ihr sind \vec{J}_b^1 und \vec{J}_b^2 sowie S_η noch unbestimmt. Die nächste Teilaufgabe besteht deshalb darin, geeignete Parametrisierungsansätze für die Diffusionsflussdichten \vec{J}_b^1 und \vec{J}_b^2 bereitzustellen. Beide können nicht zusammen parametrisiert, sondern müssen getrennt behandelt werden.

Für die Wasserdampfdiffusion ist von Belang, dass der Dampf sich nicht unabhängig in den Bodenporen bewegt, sondern in der trockenen Luft diffundiert. Deshalb ist für \vec{J}_b^1 eine „zweistufige“ Parametrisierung angebracht, die zum einen die Bewegung der feuchten Luft relativ zur Bodenmatrix betrachtet und zum anderen die Diffusion des Wasserdampfes innerhalb der feuchten Luft. Für den Gesamtstrom $\vec{J}_b^0 + \vec{J}_b^1$ der feuchten Luft wäre ein Ansatz der Form

$$\vec{J}_b^0 + \vec{J}_b^1 = -\frac{D_b^{\text{air}}}{R_0 T} (\nabla p + (\rho_{0;b} + \rho_{1;b}) \nabla \Phi) \quad (255)$$

angemessen. Dabei ist D_b^{air} ein die Gasströmung innerhalb der Bodenmatrix bestimmender Diffusionskoeffizient, wobei der Nenner $R_0 T$ in Gleichung (255) eingeführt wurde, damit D_b^{air} die „richtige“ Dimension „(Länge)²/Zeit“ erhält. Weiterhin sind $\rho_{0;b}$ und $\rho_{1;b}$ die auf die Gasphase des Bodenvolumens bezogenen Dichten der trockenen Luft und des Wasserdampfes, während Φ das Geopotential repräsentiert. Werte für den Koeffizienten D_b^{air} , die von der Porenstruktur des Bodens wie auch vom Wassergehalt η abhängen sollten, sind allerdings kaum verfügbar, so dass der praktischen Anwendung der Gleichung (255) Grenzen gesetzt sind und nach anderen Wegen zur Bestimmung des Gasstromes gesucht werden muss. Zur Lösung dieses Problems wird in MUKLIMO_3 nur die relative Bewegung des Wasserdampfes im Boden gegenüber der trockenen Luft nach einem Diffusionsgesetz modelliert. Danach wird die dann noch offene Diffusionsflussdichte \vec{J}_b^0 der trockenen Luft relativ zur Bodenmatrix *diagnostisch* so bestimmt, dass der Druck p der Gasphase zeitlich konstant bleibt, siehe Anhang B. Die entsprechende Forderung

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad (256)$$

ist deshalb, nach der Bedingung des chemischen Gleichgewicht zwischen den Phasen des Wassers, eine zweite *Filterbedingung*, die zur Schließung der Wasserbilanzgleichung (254) herangezogen wird.

Zur Umsetzung dieser Idee wird die Diffusionsflussdichte \vec{J}_b^1 aufgespalten als

$$\vec{J}_b^1 = \vec{J}_{b;\text{rel}}^1 + \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} \vec{J}_b^0, \quad (257)$$

wobei $\vec{J}_{b;rel}^1$ anstatt auf das Ruhesystem der Bodenmatrix, auf ein mit der trockenen Luft mitbewegtes System bezogen ist. Für diese relative Diffusionsflussdichte, welche der Bewegung eines Gases in einem anderen zugeordnet ist, gilt dann ein Gesetz der Form

$$\vec{J}_{b;rel}^1 = -\frac{D_b^{vap}}{R_1 T} \nabla p_b^1. \quad (258)$$

Zur Modellierung des Diffusionskoeffizienten D_b^{vap} siehe Gleichung (288) in Kapitel 5.3.5.

Mit der Aufspaltung von \vec{J}_b^1 gemäß Gleichung (257) nimmt die Wasserbilanzgleichung (254) die Zwischenform

$$\rho_2 \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} \nabla \cdot \vec{J}_b^0 + \vec{J}_b^0 \cdot \nabla \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} + \nabla \cdot (\vec{J}_{1;rel}^b + \vec{J}_2^b) = -S_\eta \quad (259)$$

an, welche die Modellierung der Diffusionsflussdichte \vec{J}_b^0 noch offen lässt.

Die Parametrisierung der *Flüssigwasserstromdichte* \vec{J}_b^2 folgt aus der Gleichgewichtsbedingung für ein fluides Medium in einem äußeren Kraftfeld. Sie lässt sich so formulieren, dass im betrachteten Volumen nicht nur die Temperatur (thermisches Gleichgewicht), sondern auch die Summe aus freier Enthalpie (pro Masseneinheit) des Fluids und dem Potential der äußeren Kraft konstant sein muss (mechanisches Gleichgewicht, siehe z. B. LANDAU und LIFSCHITZ, 1966). Auf das Mehrkomponentensystem des Bodens im Schwerfeld der Erde und das in ihm enthaltene Flüssigwasser übertragen, bedeutet diese Gleichgewichtsbedingung, dass die Summe $\mu_{2;b} + \Phi$ des chemischen Potentials $\mu_{2;b}$ und des Geopotentials Φ konstant sein muss. Ist diese Bedingung nicht erfüllt, setzt – zur (Wieder-)Herstellung des Gleichgewichts – eine Ausgleichsströmung ein. Deren „Antrieb“ ist der für ein konstantes Temperaturfeld berechnete Gradient „ $\nabla_T \dots$ “ der Summe $\mu_{2;b} + \Phi$. Die Flussdichte der Ausgleichsströmung ist dann entgegengesetzt und in erster Näherung proportional zu diesem Antrieb. Dementsprechend wird die Dichte \vec{J}_b^2 des Flüssigwasserstroms im Boden angesetzt als

$$\vec{J}_b^2 = -\frac{\rho_2 K_\eta}{g} (\nabla_T \mu_{2;b} + \nabla \Phi). \quad (260)$$

Dabei ist der bei konstanter Temperatur berechnete Gradient von $\mu_{2;b}$ erklärt als

$$\nabla_T \mu_{2;b} := \nabla \mu_{2;b} - \frac{\partial \mu_{2;b}}{\partial T} \nabla T. \quad (261)$$

Der Proportionalitätsfaktor K_η des Ansatzes (260) ist von der Dimension eines Diffusionskoeffizienten, d. h. von der Einheit $m^2 s^{-1}$ und wird als (ungesättigte) *hydraulische* Leitfähigkeit bezeichnet. Zu seiner Modellierung siehe Kapitel 5.3.5.

Bei Wassersättigung des Bodens entspricht die Gleichung (260) dem sogenannten *Darcy-Gesetz* für Flüssigkeitsströmungen in einem porösen Medium, wie im Anhang A gezeigt wird.

Bei ungesättigten Böden, wie sie in MUKLIMO_3 vorausgesetzt sind, wird das Diffusionsgesetz (260) in der vereinfachten Form

$$\vec{J}_b^2 = -\frac{\rho_2 K_\eta}{g} \nabla (\psi_b + \Phi) \quad (262)$$

angewendet. Man erhält sie, indem man in Gleichung (260) das Bodenwasserpotential darstellt als

$$\mu_{2;b} = \mu_2 + \psi_b = f_2(T) + \frac{p}{\rho_2} + \psi_b. \quad (263)$$

Dabei ist benutzt, dass für μ_2 die thermodynamische Identität

$$\mu_2 = f_2(T) + \frac{p}{\rho_2} \quad (264)$$

besteht, in der die spezifische *freie Energie* $f_2(T)$ des Wassers, im Einklang mit dessen angenommener Inkompressibilität, allein von der Temperatur T abhängt.

Anders als bei Wassersättigung ist in wasserungesättigten Böden die Vernachlässigung des Druckgradienten möglich, da die Gasphase des Bodens dann in direktem Kontakt zur Atmosphäre steht. Der Gasdruck im Boden entspricht daher dem bodennahen Luftdruck der Atmosphäre und ist praktisch höhenkonstant. Bei der Bildung von $\nabla_T \mu_{2;b}$ im wasserungesättigten Boden wird deshalb, außer der Temperaturabhängigkeit $\partial\psi_b/\partial T$ des Feuchtepotentials, auch der Druckgradient ∇p vernachlässigt, d. h. es wird die Näherung

$$\nabla_T \mu_{2;b} = \frac{\nabla p}{\rho_2} + \nabla\psi_b - \frac{\partial\psi_b}{\partial T} \nabla T \approx \nabla\psi_b \quad (265)$$

benutzt. Damit geht der allgemein formulierte Ansatz (260) für die Dichte des Flüssigwasserstroms \vec{J}_b^2 in seine spezielle, auf ungesättigte Böden zugeschnittene Fassung (262) über.

Die in Gleichung (259) jetzt noch offene Diffusionsflussdichte \vec{J}_b^0 der trockenen Luft wird nicht parametrisiert, sondern, wie bereits erwähnt, mithilfe der Filterbedingung (256) aus Gleichung (259) *eliminiert*. Aus der Forderung (256) nach zeitlicher Konstanz des Gasdruckes in den Bodenporen folgt (siehe Anhang B) für die Divergenz von \vec{J}_b^0 ein Zusammenhang der Form

$$\nabla \cdot \vec{J}_b^0 = -C_T \frac{\partial T}{\partial t} - C_\eta \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (266)$$

der im Anhang B als Gleichung (355) abgeleitet ist. Dort sind auch die Formeln (362) und (363) zur Berechnung der Koeffizienten C_T und C_η zu finden.

Nach Ersetzung des Terms $\nabla \cdot \vec{J}_b^0$ mithilfe von Gleichung (266) erhält die Wasserbilanzgleichung (259) die neue Form

$$\left(\rho_2 - \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_\eta \right) \frac{\partial \eta}{\partial t} - \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_T \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{J}_b^0 \cdot \nabla \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} + \nabla \cdot (\vec{J}_{1;rel}^b + \vec{J}_b^2) = -S_\eta. \quad (267)$$

Für die Berechnung des ebenfalls noch zu eliminierenden Diffusionsflusses \vec{J}_b^0 wird explizit Gebrauch gemacht von der in Kapitel 5.3.1 erhobenen Forderung nach horizontaler Homogenität der Bodengleichungen. Dann gilt

$$\vec{J}_b^0 = J_b^0 \vec{e}_z \quad \text{und somit} \quad \nabla \cdot \vec{J}_b^0 = \frac{\partial J_b^0}{\partial z}. \quad (268)$$

Daraus kann die Vertikalkomponente $J_b^0(z)$ der Diffusionsflussdichte durch Integration errechnet werden, wenn man davon ausgeht, dass sie an der Untergrenze z_{base} des Bodenmodells verschwindet. Man erhält dann

$$J_b^0(z) = \int_{z_{base}}^z \frac{\partial J_b^0(\zeta)}{\partial \zeta} d\zeta. \quad (269)$$

Zur zeitlichen Integration im Modell MUKLIMO_3 wird die Bilanzgleichung (267) des Bodenwassers mit den vorgestellten Ansätzen und Parametrisierungen in der Form

$$\left(\rho_2 - \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_\eta \right) \frac{\partial \eta}{\partial t} - \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_T \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (D_\eta \nabla \eta + D_T \nabla T) + H_\eta \quad (270)$$

geschrieben. Die darin neu eingeführten Koeffizienten D_η und D_T sowie die Inhomogenität H_η stehen zu den Koeffizienten der zuvor angegebenen empirischen Gesetze in den Beziehungen

$$\begin{aligned} D_\eta &= \frac{D_b^{vap}}{R_1 T} \left(\frac{\partial p_b^{21}}{\partial \eta} \right)_T + \frac{\rho_2 K_\eta}{g} \left(\frac{\partial \psi_b}{\partial \eta} \right)_T \\ D_T &= \frac{D_b^{vap}}{R_1 T} \left(\frac{\partial p_b^{21}}{\partial T} \right)_\eta + \frac{\rho_2 K_\eta}{g} \left(\frac{\partial \psi_b}{\partial T} \right)_\eta \end{aligned} \quad (271)$$

sowie

$$H_{\eta} = -S_{\eta} - \vec{J}_b^0 \cdot \nabla \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} + \rho_2 \frac{\partial K_{\eta}}{\partial z} . \quad (272)$$

Die numerische Integration der Wasserbilanzgleichung (270) des unversiegelten Bodens wird in Kapitel 5.3.6 behandelt. Zuvor wird im folgenden Kapitel 5.3.3 auf die Ausgestaltung der pflanzlichen Wassersenke S_{η} eingegangen.

5.3.3 Wurzelzone

Die in Kapitel 5.3.2 in die Bilanz des Bodenwassers eingeführte *Senke* S_{η} repräsentiert den Wasserentzug des Bodens durch pflanzliche Wurzeln. Zu ihrer Modellierung wird im Boden eine für alle horizontalen Flächenelemente F_{ij} des Modellgebiets einheitlich definierte *Wurzelzone* eingeführt. Sie wird durch die beiden Indizes k_{root}^{\min} und k_{root}^{\max} festgelegt, denen die Variablen $krmin1$ und $krmax1$ entsprechen, die vom Programmnutzer in der Namelist-Gruppe „*boden*“ der Eingabedatei spezifiziert werden können (siehe Kap. 6.1.3 sowie Anhang E). Zur Wurzelzone gehören dann alle Bodenschichten, deren vertikaler Index k der Bedingung

$$k_{\text{root}}^{\min} \leq k \leq k_{\text{root}}^{\max} \quad (273)$$

genügt. Ein möglicher Wasserentzug des Bodens ist auf die Schichten dieser Wurzelzone begrenzt.

Weiterhin wird im Rahmen des atmosphärischen Modells, Flächenelement für Flächenelement, die vom pflanzlichen Bewuchs des Modellgebiet ausgehende Verdunstungsrate errechnet mit Einbeziehung sowohl des niedrigen Bodenbewuchses (siehe Kap. 5.4) wie auch des vertikal aufgelösten Baumbestands (Kap. 3.5.4). Sie wird mit jedem numerischen Zeitschritt neu errechnet und als zweidimensionales Feld S_{ij} der physikalischen Einheit $\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$ vom atmosphärischen Modell an das Bodenmodell übergeben. Der Wasserentzug des Bodens wird dann numerisch so gestaltet, dass die der Verdunstungsrate entsprechende Wassermenge mit jedem Zeitschritt immer nur einer Bodenschicht (innerhalb der Wurzelzone) entnommen wird. Diese Schicht k_{root} wird – mit jedem Schritt neu – aus der Bedingung bestimmt, dass ihr Wasserangebot für die Pflanzen am leichtesten „verfügbar“ ist. Das heißt, für $k = k_{\text{root}}$ ist die für den Übertritt des Bodenwassers in das pflanzliche Wurzelwerk maßgebliche Summe $\mu_{2;b} + \Phi$ aus chemischem Potential des Bodenwassers und Geopotential momentan am größten. Die schichtabhängige Modellierung der Senke S_{η} hat dementsprechend die Form

$$S_{\eta;k} = \begin{cases} S_{ij}/\Delta z_{b;k} & \text{für } k = k_{\text{root}} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (274)$$

Im Verlauf einer längeren Simulation kann der Index k_{root} zwischen den Schichten der Wurzelzone hin- und herwechseln, da der Wasserentzug einer Schicht k_{root} mit einem Absinken ihres chemischen Potentials $\mu_{2;b}$ verbunden ist, was den Verlust ihrer Maximumeigenschaft für $\mu_{2;b} + \Phi$ zur Folge haben kann. Letztlich wird so ein gleichmäßig über die Schichten der Wurzelzone verteilter Wasserentzug bewirkt.

Zur Wechselbeziehung zwischen der pflanzlichen Verdunstung im Rahmen des atmosphärischen Modells und dem Wasserentzug in der Wurzelzone des Bodenmodells gehört auch, dass das Bodenmodell den Pflanzenbestand mittels eines zweidimensionalen Feldes $\eta_{\text{root};ij}$ ständig über seinen momentanen Wasserbestand „informiert“. Als Maß hierfür dient der volumetrische Wassergehalt der Schicht k_{root} , der momentan das Wasser entzogen wird, das heißt

$$\eta_{\text{root};ij} := \eta_{ij} k_{\text{root}} . \quad (275)$$

Die Werte $\eta_{\text{root};ij}$ gehen dann als repräsentativer Wassergehalt des Bodens in die Berechnung des Stomata-Widerstandes der Blätter ein (siehe Gl. 328 in Kap. 5.4) und beeinflussen damit die Blattverdunstungsraten sowohl des niedrigen Bewuchses als auch des Baumbestands.

5.3.4 Wärmegleichung des Bodens

Die Bodenwärmegleichung des Modells MUKLIMO_3 beinhaltet Vereinfachungen gegenüber dem in SIEVERS et al. (1983) angegebenen komplexen Zusammenhang. In Übereinstimmung mit SIEBERT et al. (1992) wie auch PHILIP (1957) wird sie formuliert als

$$C \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{J}_{b;i}^q + l_{21;b} \vec{J}_b^1) = 0 . \quad (276)$$

Dabei ist $l_{21;b}$ die latente Wärme der Bodenwasserverdunstung unter Einschluss der dabei gegenüber der normalen Wasserverdunstung zusätzlich aufzubringenden Benetzungswärme W (siehe auch Kap. 5.3.1),

$$l_{21;b} := l_{21} + W = h_1 - h_2 + W. \quad (277)$$

Gleichung (276) besagt, dass als zweiter Mechanismus des Wärmetransports im Boden, neben der „inneren“ Wärmestromdichte $\vec{J}_{b;i}^q$, der mit dem Wasserdampfstrom \vec{J}_b^1 verknüpfte Transport latenter Energie $l_{21;b}$ berücksichtigt wird. Zum Verständnis des Effekts stelle man sich vor, dass der Wasserdampfdruck an einer Position A des Bodens höher ist als an einem Nachbarort B , entweder weil die Temperatur oder weil der Bodenwassergehalt in A höher ist als in B . Es setzt dann ein Diffusionsstrom ein, der Wasserdampf von A nach B transportiert, wo er unter Freisetzung von Kondensations- und Benetzungswärme kondensiert. Zugleich wird der bei A entstehende Verlust an Wasserdampf durch Verdunstung wieder ausgeglichen und die dafür benötigte Verdunstungswärme dem Boden entzogen. Nimmt man dann noch an, dass die in der Dampfphase von A nach B transportierte Wassermasse als Flüssigwasser von B nach A zurückfließt, so wird im Endeffekt Verdunstungswärme von A nach B transportiert, d. h., man hat – neben der „normalen“ Wärmeleitung – einen zweiten Mechanismus des Wärmetransports. Dieser in feuchten porösen Medien auftretende zusätzliche Wärmestrom kann um ein Vielfaches wirksamer sein als die normale Wärmeleitung und ist auch für die Bauphysik von grundsätzlicher Bedeutung: Auf diesen Effekt ist z. B. zurückzuführen, dass Wände aus porösem Material bei Durchfeuchtung ihre thermischen Isoliereigenschaften weitgehend verlieren.

Mit der Aufspaltung des Wasserdampfstromes gemäß Gleichung (257) und der Elimination von $\nabla \cdot \vec{J}_b^0$ mithilfe der Gleichung (266) wird die Wärmegleichung (276) umgeformt zu

$$\begin{aligned} & \left\{ C - l_{21;b} \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_T \right\} \frac{\partial T}{\partial t} - l_{21;b} \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_\eta \frac{\partial \eta}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{J}_{b;i}^q + l_{21;b} \vec{J}_{b;rel}^1) \\ & = -\vec{J}_b^0 \cdot \nabla \left(l_{21;b} \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} \right) \end{aligned} \quad (278)$$

Zu ihrer numerischen Integration wird die innere Wärmestromdichte $\vec{J}_{b;i}^q$ angesetzt als

$$\vec{J}_{b;i}^q = -L_b^{q;u} \nabla T . \quad (279)$$

Hier ist $L_b^{q;u}$ die Temperaturleitfähigkeit (oder Thermodiffusivität) des unversiegelten Bodens, die nach Gleichung (287) modelliert wird. Die Parametrisierung der relativen Diffusionsflussdichte $\vec{J}_{b;rel}^1$ des Wasserdampfes folgt der Gleichung (258).

Mit diesen Parametrisierungen wird die Wärmegleichung (278) in der übersichtlicheren und zur Wasserbilanzgleichung (270) analogen Form

$$\left(C - l_{21;b} \frac{\rho_b^1}{\rho_b^0} C_T \right) \frac{\partial T}{\partial t} - l_{21;b} \frac{\rho_b^1}{\rho_b^0} C_\eta \frac{\partial \eta}{\partial t} = \nabla \cdot (L_T \nabla T + L_\eta \nabla \eta) + H_T \quad (280)$$

Soil type	η_s	ψ_s	K_{η_s}	b	η_{wilt}	$\rho_i c_i$
Sand	.395	-12.1	.01760	4.05	.0677	1.47
Loamy sand	.410	-9.0	.01563	4.38	.0750	1.41
Sandy loam	.435	-21.8	.00341	4.90	.1142	1.34
Silt Loam	.485	-78.6	.00072	5.30	.1794	1.27
Loam	.451	-47.8	.00070	5.39	.1547	1.21
Sandy clay loam	.420	-29.9	.00063	7.12	.1749	1.18
Silty clay loam	.477	-35.6	.00017	7.75	.2181	1.32
Clay loam	.476	-63.0	.00025	8.52	.2498	1.23
Sandy clay	.426	-15.3	.00022	10.40	.2193	1.18
Silty clay	.492	-49.0	.00010	10.40	.2832	1.15
Clay	.482	-40.5	.00013	11.40	.2864	1.09
Peat	.863	-35.6	.00080	7.75	.3947	0.84

Tabelle 1: Bodenparameter für 11 Bodentypen (U.S. Department of Agriculture) plus Torf (nach PIELKE, 1984). Die Bodenporosität (η_s) ist dimensionslos, der Sättigungswert des Feuchtepotentials (ψ_s) ist in cm und der Sättigungswert der hydraulischen Leitfähigkeit (K_s) in cm s^{-1} angegeben, der Exponent b ist dimensionslos. Der volumetrische Wassergehalt, bei dessen Unterschreiten die Pflanzen irreversibel welken (η_{wilt}), ist ebenfalls dimensionslos. Die Einheit für die Wärmekapazität des trockenen Bodens ($\rho_i c_i$) ist $\text{J cm}^{-3} \text{K}^{-1}$. Die Werte der ersten vier Spalten sind von CLAPP und HORNBERGER (1978) übernommen.

geschrieben. Die hierin auftretenden thermischen Transportkoeffizienten L_T und L_η sind gegeben durch

$$L_T = L_b^{q;u} + l_{21;b} \frac{D_b^{\text{vap}}}{R_1 T} \frac{\partial p_b^{21}}{\partial T} \quad (281)$$

$$L_\eta = l_{21;b} \frac{D_b^{\text{vap}}}{R_1 T} \frac{\partial p_b^{21}}{\partial \eta} + \frac{\rho_2 K_\eta}{g} \frac{\partial \psi_b}{\partial \eta}$$

und die Inhomogenität H_T durch

$$H_T = -\vec{J}_b^0 \cdot \nabla \frac{l_{21;b} \rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} \quad (282)$$

Zur numerischen Integration der mit der Wasserbilanzgleichung (270) gekoppelten Wärmegleichung (280) des unversiegelten Bodens siehe Kapitel 5.3.6.

5.3.5 Parameterwerte

Das Feuchtepotential ψ_b , die hydraulische Leitfähigkeit K_η wie auch die Wärmekapazität C des Bodens werden in MUKLIMO_3 aus empirischen Formeln mit bodentypabhängigen Parameterwerten berechnet. Grundlage dafür ist die dem Buch von PIELKE (1984) entnommene Wertezusammenstellung der Tabelle 1.

Die für die Berechnung der η -abhängigen Werte des Feuchtepotentials ψ_b und der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit K_η benutzten Zusammenhänge sind

$$\psi_b(\eta) = \frac{g \psi_s}{100} \left(\frac{\eta_s}{\eta} \right)^b \quad (283)$$

$$K_\eta(\eta) = \frac{K_s}{100} \left(\frac{\eta}{\eta_s} \right)^{2b+3} \quad (284)$$

Diese Formeln entstammen der Zusammenstellung von CLAPP und HORNBERGER (1978). In sie sind die bodentypabhängigen Werte des Sättigungspotentials ψ_s bzw. der hydraulischen Leitfähigkeit K_s sowie der Bodenporosität η_s und des Exponenten b der Tabelle 1 einzusetzen. In Gleichung (283) ist berücksichtigt, dass die Tabellenwerte für ψ_s , entsprechend der potentiellen Steighöhe einer Wassersäule, in cm angegeben sind. Sie werden daher zunächst auf m (Faktor 1/100) und dann (durch Multiplikation mit der Schwerkraft g) auf ihre in MUKLIMO_3 benutzte Form einer „Energiedichte“ mit der Einheit J kg^{-1} umgerechnet. Ebenso werden in Gleichung (284) die in cm s^{-1} angegebenen Tabellenwerte für K_s durch 100 dividiert, um die Zielgröße $K_\eta(\eta)$ in m s^{-1} zu erhalten. Anmerkung: Im Programmcode von MUKLIMO_3 sind die Werte der Tabelle 1 für ψ_s , K_s sowie $\rho_i c_i$ bereits auf das m kg s -System umgerechnet.

Die Formel (283) beinhaltet keine Temperaturabhängigkeit des Feuchtepotentials ψ_b . Die in die Berechnung des Koeffizienten D_T der Bilanzgleichung (270) des Bodenwassers eingehende Temperaturableitung $\partial\psi_b/\partial T$ wird deshalb nach PHILIP (1957) berechnet als

$$\left(\frac{\partial\psi_b}{\partial T}\right)_\eta = \gamma^* \psi_b \quad \text{mit} \quad \gamma^* = -2.09 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}. \quad (285)$$

Die Modellierung der Wärmekapazität C sowie der Temperaturleitfähigkeit $L_b^{q;u}$ folgt den in PIELKE (1984) angegebenen Zusammenhängen:

- Wärmekapazität C :

$$C = C(\eta) = (1 - \eta_s) 10^6 \rho_i c_i + \eta C_2. \quad (286)$$

Dabei ist $\rho_i c_i$ die der Tabelle 1 auf S. 94 zu entnehmende Wärmekapazität der trockenen und porenfreien Bodensubstanz „i“ und C_2 die Wärmekapazität von Flüssigwasser mit dem Wert $C_2 = 4.16 \cdot 10^6 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$. Der Faktor 10^6 in Gleichung (286) rechnet die Tabellenwerte für $\rho_i c_i$ von $\text{J cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$ in die Zieleinheit $\text{J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$ um.

- Temperaturleitfähigkeit $L_b^{q;u}$:

$$L_b^{q;u} = \begin{cases} 419 \exp\left[-(P_f + 2.7)\right] \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1} & \text{für } P_f \leq 5.1 \\ 0.172 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1} & \text{für } P_f > 5.1 \end{cases} \quad (287)$$

mit $P_f = \log_{10}(-100 \psi_b/g)$.

Hinweis: Die Berechnung der dimensionslosen Größe P_f nach der etwas obskuren obigen Formel erfordert als Argument des Zehnerlogarithmus den Zahlenwert des als Steighöhe in cm ausgedrückten Feuchtepotentials. Der Ausdruck $100 \psi_b/g$ mit der Schwerkraft g im Nenner spiegelt die dafür erforderliche Umrechnung wider, wobei vorausgesetzt ist, dass ψ_b in J kg^{-1} angegeben ist.

Der Koeffizient D_b^{vap} der Gleichung (255) für die Diffusion des Wasserdampfes innerhalb der Gasphase des Bodens wird modelliert als

$$D_b^{\text{vap}} = \alpha_t (\eta_s - \eta) D_{\text{bulk}}^{\text{vap}}, \quad (288)$$

wobei der Faktor $\eta_s - \eta$ der Beschränkung der Wasserdampfdiffusion auf das Gasvolumen des Bodens entspricht, während die zusätzliche Multiplikation mit α_t („tortuosity factor“ mit dem Wert 0.7) die „Gewundenheit“ des Weges durch die Bodenporen berücksichtigt. Der Koeffizient $D_{\text{bulk}}^{\text{vap}}$ der Bulk-Diffusion des Wasserdampfes wird nach PRUPPACHER und KLETT (1980), Formel (13-3) modelliert als

$$D_{\text{bulk}}^{\text{vap}} = 0.211 \cdot 10^{-4} \left(\frac{T}{273.15 \text{ K}}\right)^{1.94} \left(\frac{1013.25 \text{ hPa}}{p}\right) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}. \quad (289)$$

5.3.6 Numerisches Lösungsverfahren

Zur Unterscheidung von der atmosphärischen Temperatur T sowie der Bodentemperatur der versiegelten Flächenanteile T_b^v wird die Bodentemperatur in diesem Abschnitt mit T_b^u (mit „u“ für „unversiegelt“) benannt und die Bezeichnung C für die Wärmekapazität des Bodens geändert zu C_b^u .

Die Gleichungen (270) und (280) machen deutlich, dass das prognostische System des Bodens aus gekoppelten Gleichungen für die Variablen T_b^u und η besteht, die in der zusammenfassenden Form

$$\mathbf{A} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} T_b^u \\ \eta \end{pmatrix} = \mathbf{D} \cdot \begin{pmatrix} T_b^u \\ \eta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} H_T \\ H_\eta \end{pmatrix} \quad (290)$$

geschrieben werden können, wobei die 2×2 -Matrix \mathbf{A} und der 2×2 -Differentialoperator \mathbf{D} (unter Voraussetzung horizontaler Homogenität $\partial/\partial x \dots = \partial/\partial y \dots = 0$) gegeben sind durch

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} C_b^u - l_{21;b} \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_T & -l_{21;b} \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_\eta \\ -\frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_T & \rho_2 - \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_\eta \end{pmatrix}; \quad \mathbf{D} = \frac{\partial}{\partial z} \begin{pmatrix} L_T \frac{\partial}{\partial z} & L_\eta \frac{\partial}{\partial z} \\ D_\eta \frac{\partial}{\partial z} & D_T \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}. \quad (291)$$

Die räumliche Diskretisierung der Bodengleichungen der unversiegelten Flächenanteile folgt den allgemeinen Ausführungen des Kapitels 5.1. Die Variablen T_b^u und η werden damit zu dreidimensionalen numerischen Feldern mit den Elementen $T_{b;ijk}^u$ und η_{ijk} . Für sie gelten die räumlich diskreten Gleichungen

$$\begin{aligned} & \left(C_b^u - \frac{l_{21;b} \rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_T \right)_{ijk} \frac{\partial T_{b;ijk}^u}{\partial t} - \left(l_{21;b} \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_\eta \right)_{ijk} \frac{\partial \eta_{ijk}}{\partial t} \\ &= \frac{1}{\Delta z_{b;k}} \left(\frac{L_{T;ijk+1/2} (T_{b;ijk+1}^u - T_{b;ijk}^u)}{z_{b;k+1} - z_{b;k}} - \frac{L_{T;ijk-1/2} (T_{b;ijk}^u - T_{b;ijk-1}^u)}{z_{b;k} - z_{b;k-1}} \right) \\ &+ \frac{L_{\eta;ijk+1/2} (\eta_{ijk+1} - \eta_{ijk})}{z_{b;k+1} - z_{b;k}} - \frac{L_{\eta;ijk-1/2} (\eta_{ijk} - \eta_{ijk-1})}{z_{b;k} - z_{b;k-1}} \Big) + H_{T;ijk} \end{aligned} \quad (292)$$

entsprechend der Wärmegleichung (280) sowie

$$\begin{aligned} & \left(\rho_2 - \frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_\eta \right)_{ijk} \frac{\partial \eta_{ijk}}{\partial t} - \left(\frac{\rho_{1;b}}{\rho_{0;b}} C_T \right)_{ijk} \frac{\partial T_{b;ijk}^u}{\partial t} \\ &= \frac{1}{\Delta z_{b;k}} \left(\frac{D_{\eta;ijk+1/2} (\eta_{ijk+1} - \eta_{ijk})}{z_{b;k+1} - z_{b;k}} - \frac{D_{\eta;ijk-1/2} (\eta_{ijk} - \eta_{ijk-1})}{z_{b;k} - z_{b;k-1}} \right) \\ &+ \frac{D_{T;ijk+1/2} (T_{b;ijk+1}^u - T_{b;ijk}^u)}{z_{b;k+1} - z_{b;k}} - \frac{D_{T;ijk-1/2} (T_{b;ijk}^u - T_{b;ijk-1}^u)}{z_{b;k} - z_{b;k-1}} \Big) + H_{\eta;ijk} \end{aligned} \quad (293)$$

entsprechend der Wasserbilanzgleichung (270), jeweils für den vertikalen Indexbereich von $k=2$ bis $k=n_b-1$.

Die Randbedingungen der diskreten Gleichungen sind: An der Untergrenze $k=n_b$ des Bodens werden sowohl die Temperaturwerte $T_{b;ijn_b}^u$ als auch die Werte η_{ijn_b} des volumetrischen Wassergehalts zeitlich festgehalten auf ihren Anfangswerten

$$T_{b;ijn_b}^u = tb0 - 0.006 \text{ Km}^{-1} (h_{0;ij} - h_{0;1d}); \quad \eta_{ijn_b} = \eta(ifeu1d), \quad (294)$$

wobei $tb0$ der vom Programmnutzer über die Eingabedatei vorzugebende Anfangswert der Bodentemperatur ist, während $\eta(ifeu1d)$ der (über die Variable $ifeu1d$ der Eingabedatei steuerbare) Anfangswert des volumetrischen Bodenwassergehalts ist. Vergleiche dazu Kapitel 6.1.4 sowie die Anmerkungen zur Namelist-Gruppe

„boden“ im Anhang E. Zur Höhenabhängigkeit der Anfangstemperatur siehe auch die untere Randbedingung (227) des versiegelten Bodens. Im obersten Bodenniveau werden beide Größen *vor* Ausführung eines jeden numerischen Zeitschritts an die jeweils aktuelle Temperatur $T_{g;ij}^u$ und spezifische Feuchte $q_{g;ij}^u$ der unversiegelten Bodengrenzflächen angeglichen. Bei der *Ausführung* des Zeitschritts gelten dann die der Gleichung (229) des versiegelten Bodens entsprechenden Bedingungen

$$\frac{\partial T_{b;ij1}^u}{\partial t} = x_{\text{bound}} \frac{\partial T_{b;ij2}^u}{\partial t}; \quad \frac{\partial \eta_{ij1}}{\partial t} = x_{\text{bound}} \frac{\partial \eta_{ij2}}{\partial t}, \quad (295)$$

wobei der Parameter x_{bound} , wie beim versiegelten Boden, als $x_{\text{bound}} = 0.5$ festgelegt ist.

Wie die Wärme Gleichung des versiegelten Bodens, so werden auch die gekoppelten Bilanzgleichungen (292) und (293) des unversiegelten Bodens mithilfe des *Crank-Nicolson*-Verfahrens zeitlich integriert, welches sich jetzt durch die folgenden Teilschritte darstellen lässt:

1. *Kopplung* der Bodenvariablen an die Atmosphäre: Vor jedem Integrationsschritt werden den obersten Bodenwerten der Temperatur $T_{b;ij1}^u$ und des volumetrischen Wassergehalts η_{ij1} die beim vorangehenden Aufruf des Bestandsmodells für den niedrigen Bodenbewuchs (siehe Kap. 5.4) berechneten Werte $T_{g;ij}^u$ und $\eta_{g;ij}^u$ der unversiegelten Bodengrenzfläche zugewiesen.

$$T_{b;ij1}^u = T_{g;ij}^u; \quad \eta_{ij1} = \eta_{g;ij}^u. \quad (296)$$

2. *Anfangszuweisung*: Es werden Hilfsfelder $T_b^{u;\nu}$ und η^ν eingeführt, deren Elemente mit den Temperatur- und Feuchtwerten $T_{b;ijk}^u$ bzw. η_{ijk} zu Beginn des Zeitschritts belegt werden, d. h.

$$T_{b;ijk}^{u;\nu} \equiv T_{b;ijk}^u; \quad \eta_{ijk}^\nu \equiv \eta_{ijk} \quad \text{für } k = 1, \dots, n_b. \quad (297)$$

3. *Expliziter Halbschritt*: Für ihre numerische Behandlung in MUKLIMO_3 werden die Gleichungen (292) und (293) durch C_b^u bzw. ρ_2 geteilt. Vorbereitende Operationen für ihre zeitliche Integration sind dann die Berechnung der an den Schichtgrenzen definierten Transportkoeffizienten $L_{T;ijk\pm 1/2}$, $L_{\eta;ijk\pm 1/2}$, $D_{T;ijk\pm 1/2}$ und $D_{\eta;ijk\pm 1/2}$, weiterer schichtzentrierter Koeffizienten wie der Wärmekapazitäten $C_{u;ijk}^b$, der Dichtequotienten ρ_b^1/ρ_b^0 , der Verdunstungswärme $l_{b;ijk}^{21}$ sowie der Gleichungsinhomogenitäten $H_{T;ijk}$ und $H_{\eta;ijk}$. Letzteres schließt die rekursive Berechnung der Stromdichte $J_{0;ijk}^b$ der trockenen Luft nach den Gleichungen (266) und (269) ein. Danach werden durch explizite Integration der Gleichungen (292) und (293) für einen halben Zeitschritt $\Delta t_b/2$ Zwischenresultate $T_{b;ijk}^{u;\nu+1/2}$ und $\eta_{ijk}^{\nu+1/2}$ berechnet, die der Bodentemperatur und -feuchte zur Zeit $t^{\nu+1/2} = t^\nu + \Delta t_b/2$ entsprechen. Für den expliziten Teilschritt werden die Gleichungen der Niveaus von $k=2$ bis $k=n_b - 1$ geschrieben als

$$\begin{aligned} A_{ijk;11} \frac{T_{b;ijk}^{u;\nu+1/2} - T_{b;ijk}^{u;\nu}}{\Delta t_b/2} + A_{ijk;12} \frac{\eta_{ijk}^{\nu+1/2} - \eta_{ijk}^\nu}{\Delta t_b/2} &= r s_{ijk;1}^\nu \\ A_{ijk;21} \frac{T_{b;ijk}^{u;\nu+1/2} - T_{b;ijk}^{u;\nu}}{\Delta t_b/2} + A_{ijk;22} \frac{\eta_{ijk}^{\nu+1/2} - \eta_{ijk}^\nu}{\Delta t_b/2} &= r s_{ijk;2}^\nu \end{aligned} \quad (298)$$

wobei die Elemente der 2×2 -Matrix \mathbf{A}_{ijk} gegeben sind als

$$\begin{aligned} A_{ijk;11} &= \left(1 - \frac{l_{21;b} \rho_{1;b}}{C_b^u \rho_{0;b}} C_T \right)_{ijk}; & A_{ijk;12} &= - \left(\frac{l_{21;b} \rho_{1;b}}{C_b^u \rho_{0;b}} C_\eta \right)_{ijk} \\ A_{ijk;21} &= - \left(\frac{\rho_{1;b}}{\rho_2 \rho_{0;b}} C_T \right)_{ijk}; & A_{ijk;22} &= \left(1 - \frac{\rho_{1;b}}{\rho_2 \rho_{0;b}} C_\eta \right)_{ijk} \end{aligned} \quad (299)$$

Anmerkung dazu: Im Vergleich zur kontinuierlichen Matrix \mathbf{A} der Gleichung (291) sind die Koeffizienten $A_{ijk;11}$ und $A_{ijk;12}$ der diskreten Matrix \mathbf{A}_{ijk} durch C_b^u und $A_{ijk;21}$ sowie $A_{ijk;22}$ durch ρ_2 dividiert. Die

nicht explizit angegebenen rechten Seiten $rs_{ijk;1}^v$ und $rs_{ijk;2}^v$ der Gleichungen (298) ergeben sich aus der durch $C_{u;ijk}^b$ dividierten Wärmeleichung (292) und der durch ρ_2 dividierten Wasserbilanz (293).

Die Auflösung des Systems 298 nach $T_{b;ijk}^{u;\nu+1/2}$ und $\eta_{ijk}^{\nu+1/2}$ erfordert die Inversion der Matrix \mathbf{A}_k und resultiert in

$$\begin{aligned} T_{b;ijk}^{u;\nu+1/2} &= T_{b;ijk}^{u;\nu} + \frac{\Delta t_b}{2} \left(A_{ijk;11}^{-1} rs_{ijk;1}^v + A_{ijk;12}^{-1} rs_{ijk;2}^v \right) \\ \eta_{ijk}^{\nu+1/2} &= \eta_{ijk}^{\nu} + \frac{\Delta t_b}{2} \left(A_{ijk;21}^{-1} rs_{ijk;1}^v + A_{ijk;22}^{-1} rs_{ijk;2}^v \right) \end{aligned} \quad (300)$$

für $k = 2, \dots, n_b$.

4. *Impliziter Halbschritt*: Die prognostischen Gleichungen des impliziten Teilschritts sind

$$\begin{aligned} &A_{ijk;11} \frac{T_{b;ijk}^{u;\nu+1} - T_{b;ijk}^{u;\nu+1/2}}{\Delta t_b/2} + A_{ijk;12} \frac{\eta_{ijk}^{\nu+1} - \eta_{ijk}^{\nu+1/2}}{\Delta t_b/2} \\ &= \frac{1}{\Delta z_{b;k}} \left(\frac{L_{T;ijk+1/2}^v (T_{b;ijk+1}^{u;\nu+1} - T_{b;ijk}^{u;\nu+1})}{z_{b;k+1} - z_{b;k}} - \frac{L_{T;ijk-1/2}^v (T_{b;ijk}^{u;\nu+1} - T_{b;ijk-1}^{u;\nu+1})}{z_{b;k} - z_{b;k-1}} \right) \\ &+ \frac{L_{\eta;ijk+1/2}^v (\eta_{ijk+1}^{\nu+1} - \eta_{ijk}^{\nu+1})}{z_{b;k+1} - z_{b;k}} - \frac{L_{\eta;ijk-1/2}^v (\eta_{ijk}^{\nu+1} - \eta_{ijk-1}^{\nu+1})}{z_{b;k} - z_{b;k-1}} \Big) + H_{T;ijk}^v \\ &\text{für } k = 2, \dots, n_b \end{aligned} \quad (301)$$

und

$$\begin{aligned} &A_{ijk;21} \frac{T_{b;ijk}^{u;\nu+1} - T_{b;ijk}^{u;\nu+1/2}}{\Delta t_b/2} + A_{ijk;22} \frac{\eta_{ijk}^{\nu+1} - \eta_{ijk}^{\nu+1/2}}{\Delta t_b/2} \\ &= \frac{1}{\Delta z_{b;k}} \left(\frac{D_{T;ijk+1/2}^v (T_{b;ijk+1}^{u;\nu+1} - T_{b;ijk}^{u;\nu+1})}{z_{b;k+1} - z_{b;k}} - \frac{D_{T;ijk-1/2}^v (T_{b;ijk}^{u;\nu+1} - T_{b;ijk-1}^{u;\nu+1})}{z_{b;k} - z_{b;k-1}} \right) \\ &+ \frac{D_{\eta;ijk+1/2}^v (\eta_{ijk+1}^{\nu+1} - \eta_{ijk}^{\nu+1})}{z_{b;k+1} - z_{b;k}} - \frac{D_{\eta;ijk-1/2}^v (\eta_{ijk}^{\nu+1} - \eta_{ijk-1}^{\nu+1})}{z_{b;k} - z_{b;k-1}} \Big) + H_{\eta;ijk}^v \\ &\text{für } k = 2, \dots, n_b. \end{aligned} \quad (302)$$

Hinzu kommen die Randbedingungen

$$\begin{aligned} T_{b;ij1}^{u;\nu+1} &= T_{b;ij1}^{u;\nu} + x_{\text{bound}} (T_{b;ij2}^{u;\nu+1} - T_{b;ij2}^{u;\nu}) \\ \eta_{ij1}^{\nu+1} &= \eta_{ij1}^{\nu} + x_{\text{bound}} (\eta_{ij2}^{\nu+1} - \eta_{ij2}^{\nu}) \\ T_{b;ijn_b}^{u;\nu+1} &= T_{b;ijn_b}^{u;\nu} ; \quad \eta_{ijn_b}^{\nu+1} = \eta_{ijn_b}^{\nu} . \end{aligned} \quad (303)$$

Zur Lösung dieses Systems werden die Variablen $T_{b;ijk}^{u;\nu+1}$ und η_{ijk} zusammengefasst zu mit $|\xi\rangle_{ij}$ bezeichneten numerischen Vektoren der Dimension $2n_b$, deren Elemente ξ_{ijk} definiert sind als

$$\xi_{ij2k} := T_{b;ijk}^u ; \quad \xi_{ij2k-1} := \eta_{ijk} \quad \text{für } k = 1, \dots, n_b. \quad (304)$$

Die Auflösung der Gleichungen (301) sowie der Randbedingungen (303) nach den gesuchten Größen $\xi_{ijk}^{\nu+1}$ führt dann auf ein lineares Gleichungssystem der Form

$$a_{ijk} \xi_{ij\kappa-3}^{\nu+1} + b_{ijk} \xi_{ij\kappa-2}^{\nu+1} + c_{ijk} \xi_{ij\kappa-1}^{\nu+1} + d_{ijk} \xi_{ijk}^{\nu+1} + e_{ijk} \xi_{ij\kappa+1}^{\nu+1} + f_{ijk} \xi_{ij\kappa+2}^{\nu+1} + g_{ijk} \xi_{ij\kappa+3}^{\nu+1} = h_{ijk} . \quad (305)$$

Mit Unterscheidung zwischen geraden und ungeraden κ sind sie sowie die Inhomogenitäten h_{ijk} gegeben durch

$$\begin{aligned}
a_{ijk} &= -\frac{0.5 \Delta t_b L_{\eta;ijk-1/2}^v}{C_{u;ijk}^{b;v} \Delta z_{b;k} (z_{b;k} - z_{b;k-1})} ; & b_{ijk} &= -\frac{0.5 \Delta t_b L_{T;ijk-1/2}^v}{C_{u;ijk}^{b;v} \Delta z_{b;k} (z_{b;k} - z_{b;k-1})} \\
e_{ijk} &= -\frac{0.5 \Delta t_b L_{\eta;ijk+1/2}^v}{C_{u;ijk}^{b;v} \Delta z_{b;k} (z_{b;k+1} - z_{b;k})} ; & f_{ijk} &= -\frac{0.5 \Delta t_b L_{T;ijk+1/2}^v}{C_{u;ijk}^{b;v} \Delta z_{b;k} (z_{b;k+1} - z_{b;k})} \\
c_{ijk} &= A_{ijk;12} - a_{ijk} - e_{ijk} ; & d_{ijk} &= A_{ijk;11} - b_{ijk} - f_{ijk} ; & g_{ijk} &= 0 \\
h_{ijk} &= A_{ijk;11} \xi_{ijk}^{\nu+1/2} + A_{ijk;12} \xi_{ijk-1}^{\nu+1/2} + (H_T/C_u^{b;v})_{ijk} \\
&\text{für gerades } \kappa = 2k \text{ mit } 1 < k < n_b
\end{aligned} \tag{306}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
b_{ijk} &= -\frac{0.5 \Delta t_b D_{\eta;ijk-1/2}^v}{\rho_2 \Delta z_{b;k} (z_{b;k} - z_{b;k-1})} ; & c_{ijk} &= -\frac{0.5 \Delta t_b C_{T;ijk-1/2}^v}{\rho_2 \Delta z_{b;k} (z_{b;k} - z_{b;k-1})} \\
f_{ijk} &= -\frac{0.5 \Delta t_b D_{\eta;ijk+1/2}^v}{\rho_2 \Delta z_{b;k} (z_{b;k+1} - z_{b;k})} ; & g_{ijk} &= -\frac{0.5 \Delta t_b D_{T;ijk+1/2}^v}{\rho_2 \Delta z_{b;k} (z_{b;k+1} - z_{b;k})} \\
d_{ijk} &= A_{ijk;22} - b_{ijk} - f_{ijk} ; & e_{ijk} &= A_{ijk;21} - c_{ijk} - g_{ijk} ; & a_{ijk} &= 0 \\
h_{ijk} &= A_{ijk;21} \xi_{ijk+1}^{\nu+1/2} + A_{ijk;22} \xi_{ijk}^{\nu+1/2} + (H_\eta/\rho_2)_{ijk} \\
&\text{für ungerades } \kappa = 2k - 1 \text{ mit } 1 < k < n_b .
\end{aligned} \tag{307}$$

Die zugehörigen Randbedingungen (303) transformieren sich in den neuen Variablen zu

$$\begin{aligned}
\xi_{ij1}^{\nu+1} - x_{\text{bound}} \xi_{ij3}^{\nu+1} &= \xi_{ij1}^{\nu} - x_{\text{bound}} \xi_{ij3}^{\nu} \\
\xi_{ij2}^{\nu+1} - x_{\text{bound}} \xi_{ij4}^{\nu+1} &= \xi_{ij2}^{\nu} - x_{\text{bound}} \xi_{ij4}^{\nu} \\
\xi_{ij2n_b-1}^{\nu+1} &= \xi_{ij2n_b-1}^{\nu} ; & \xi_{ij2n_b}^{\nu+1} &= \xi_{ij2n_b}^{\nu} .
\end{aligned} \tag{308}$$

5. *Endzuweisung*: Das um die Randbedingungen (308) ergänzte lineare Gleichungssystem (305) besitzt eine Gleichungsmatrix, die nur in ihren sieben zentralen Diagonalen von Null verschiedene Werte besitzt. Es wird nach dem Verfahren der Gauß-Elimination nach den $\xi_{ijk}^{\nu+1}$ aufgelöst und diese den Feldern $T_{b;ijk}^u$ und η_{ijk} als neue Temperatur- und Feuchtefelder des unversiegelten Bodens zum Zeitpunkt $t^{\nu+1} = t^{\nu} + \Delta t_b$ zugewiesen

$$T_{b;ijk}^u = \xi_{ij2k}^{\nu+1} ; \quad \eta_{ijk} = \xi_{ij2k-1}^{\nu+1} \quad \text{für } k = 1, \dots, n_b. \tag{309}$$

Das im vorstehenden Text für eine beispielhafte Bodensäule dargestellte zeitliche Integrationsverfahren für die Bilanzgleichungen des unversiegelten Bodens muss für alle Bodensäulen des Modellgebiets ausgeführt werden. In MUKLIMO_3 werden diese Berechnungen, wie schon bei der Wärmeleitungsgleichung des versiegelten Bodens beschrieben (siehe Kap. 5.2.1), „zeilenweise“ abgearbeitet, soll heißen, dass die Operationen für den Indexbereich $i = 1, \dots, n_x$ zu ein und demselben Index j innerhalb eines einzigen Unterprogrammaufrufs gemeinsam ausgeführt werden, während die Schleife über j in einem übergeordneten Unterprogramm angesiedelt ist. Diese Struktur dient auch hier einer beschleunigten Programmausführung.

5.4 Niedriger Bodenbewuchs

Das *Bestandsmodell* (auch kurz Canopy-Modell genannt, von engl. *canopy*: Baldachin, Betthimmel) beschreibt in MUKLIMO_3 den Energieumsatz in einem zwischen der Bodengrenzfläche und dem untersten atmosphärischen Recheniveau angesiedelten Pflanzenbestand sowie den damit verbundenen Austausch von Wärme und

Feuchte zwischen ihm und der Atmosphäre sowie dem Erdboden. Dabei ist der Begriff „Bestand“ nicht auf landwirtschaftliche Nutzflächen beschränkt, sondern umfasst z. B. auch die Rasenflächen in Parks oder den Bodenbewuchs im Wald unterhalb der Bäume. Das Bestandsmodell von MUKLIMO_3 ist im Wesentlichen die Umsetzung der in SIEBERT et al. (1992) angegebenen, großenteils auf DEARDORFF (1978) beruhenden Gleichungen und Beziehungen in ein numerisches Modell. Dessen Grundidee besteht darin, zur Modellierung der Wechselbeziehungen zwischen dem Bodenbewuchs und der Atmosphäre eine in einer für den Bewuchs repräsentativen Höhe angesiedelte, speicherfreie atmosphärische Zwischenschicht einzuführen, welche die Blattflächen des Bodenbewuchses enthält und im Folgenden als *Vegetationsschicht* bezeichnet wird. In ihr wird Strahlung in sensible und latente Wärme umgesetzt und Wärme und Feuchte zwischen Blättern und Atmosphäre ausgetauscht. Einen Austausch von Wärme und Feuchte gibt es zudem zwischen der Vegetationsschicht und der untersten Schicht des atmosphärischen Modells sowie der Bodengrenzfläche. Daraus resultieren Erhaltungsbedingungen für die Flussdichten der Energie und der spezifischen Feuchte, die zur Bestimmung der bestandsspezifischen thermodynamischen Variablen genutzt werden.

Der Bodenbewuchs wird in MUKLIMO_3 durch vier über die *Landnutzungstabelle* des Kapitels 2.3 festzulegende Parameter charakterisiert. Es sind dies die *Bewuchshöhe* h_{can} , der *Blattflächenindex* L_{AI} (Leaf Area Index), der *Abschirmfaktor* σ_f sowie die Rauigkeitslänge z_0^u der unversiegelten Flächenanteile des Bodens. Aus der Bewuchshöhe wird dann über die Beziehung

$$d = 0.7 h_{\text{can}} \quad (310)$$

die *Verdrängungshöhe* d festgelegt, um welche die universellen atmosphärischen Profile des Kapitels 3.4.1 über dem Bodenbewuchs gegenüber der Geländehöhe verschoben angesetzt werden. Der Blattflächenindex L_{AI} ist das Verhältnis der gesamten, einseitig gerechneten Blattflächen des Bodenbewuchses zur Grundfläche (in DEARDORFF (1978) und SIEBERT et al. (1992) wird statt L_{AI} der auf die Pflanzenquerschnitte bezogene Parameter L_A benutzt, der zu L_{AI} in der Beziehung $L_{\text{AI}} = \sigma_f L_A$ steht). Der Abschirmfaktor σ_f ist ein Maß für den von oben aus durch die Pflanzenbedeckung hindurch sichtbaren Bodenanteil. Hinzu kommt die vom Programmnutzer über die Variable *af1d* der Namelist-Gruppe „*boden*“ (siehe Anhang E) festlegbare Blattflächenalbedo A_f mit dem Vorgabewert $A_f = 0.15$.

Zur Beschreibung der physikalischen Prozesse innerhalb der Bestandschicht werden der die Blätter umgebenden Atmosphäre eigene Variablen u_{af} , T_{af} und q_{af} für die mittlere Windgeschwindigkeit, die Lufttemperatur und die spezifische Luftfeuchte zugewiesen (Bezeichnungen nach DEARDORFF, 1978). Dazu tritt die Variable der Blattflächentemperatur T_f (mit „f“ für „foliage“) und die zugehörige spezifische Feuchte q_f , die mit der Sättigungfeuchte $q_s(T_f)$ identifiziert wird. Die Werte der genannten Bestandsvariablen sind, zusammen mit der Temperatur T_g^u und der spezifischen Feuchte q_g^u der unter dem Bewuchs befindlichen unversiegelten Bodengrenzfläche, gekoppelt an den Zustand der Atmosphäre oberhalb des Bestands sowie an die Verhältnisse im darunter befindlichen Erdboden.

Seien jetzt T_a , q_a und u_a die Temperatur, die spezifische Feuchte sowie die horizontale Windgeschwindigkeit in der untersten, in der Höhe z_a über Grund befindlichen Rechenfläche des atmosphärischen Modells und T_b sowie η_b die Bodentemperatur und der volumetrische Wassergehalt im obersten prognostischen Niveau $z_{b;2}$ des unversiegelten Bodens (vergleiche Kap. 5.1). Beim Aufruf des Bestandsmodells für das Flächenelement F_{ij} sind davon die zur Atmosphäre gehörigen Größen z_a , T_a , q_a und u_a belegt als

$$\begin{aligned} z_a &= 0.5 (\Delta z_{n_0;ij+1} - \Delta_{ij}) ; & T_a &= T_{ij n_0;ij+1} \\ q_a &= q_{ij n_0;ij+1} ; & u_a &= \sqrt{u_{ij n_0;ij+1}^2 + v_{ij n_0;ij+1}^2} , \end{aligned} \quad (311)$$

während für die Rauigkeitslänge $z_{0;c}$ der Vegetationsschicht sowie die Bodengrößen T_b sowie η_b die Entsprechungen

$$z_{0;c} = z_{0;ij}^u ; \quad T_b = T_{b;ij 2}^u ; \quad \eta_b = \eta_{ij 2} \quad (312)$$

gelten.

Die Aufgabe des Bestandsmodells besteht jetzt darin, aus diesen Größen in Verbindung mit den auf den Bewuchs einfallenden kurz- und langwelligen Strahlungsflussdichten die oben angeführten Bestandsvariablen und zusätzlich die Temperatur T_g^u sowie die spezifische Feuchte q_g^u der unversiegelten Bodengrenzfläche neu zu bestimmen. Die dabei ermittelten Flussdichten für Wärme und Feuchte vom Bestand in die Atmosphäre gehen dann, als Beitrag der unversiegelten Flächenanteile des Bodens, in die unteren Randbedingungen (Kap. 3.4.1) der atmosphärischen Wärmeleichung (Kap. 3.2.1) sowie der Feuchtebilanz (Kap. 3.3) ein, während T_g^u und q_g^u als obere Randwerte der beiden prognostischen Gleichungen des unversiegelten Bodens dienen (siehe Kap. 5.3.6).

Die Bestimmung der Bestandsvariablen stellt sich somit als *diagnostisches* Problem dar. Sein Lösungsansatz besteht darin, die gesuchten Temperatur- und Feuchtwerte so zu bestimmen, dass die miteinander gekoppelten Energie- und Wasserdampfbilanzen in der Vegetationsschicht und an der Bodengrenzfläche gleichzeitig erfüllt sind. Die Lösung wird in die folgenden Teilaufgaben mit den jeweils zugehörigen empirischen Ansätzen und Parametrisierungen untergliedert:

1. Bestimmung der Wärme- und Wasserdampf Flüsse von der Vegetationsschicht in die darüber liegende Atmosphäre:

Die als J_{ca}^q bzw. J_{ca}^1 (mit „c“ für Canopy und „a“ für Atmosphäre) benannten Wärme- und Wasserdampf fluxdichten von der Vegetationsschicht in die darüber liegende Atmosphäre werden nach DEARDORFF (1978) in Form von Transfergesetzen angesetzt als

$$\begin{aligned} J_{ca}^q &= u_a c_{ca} \rho_0 c_p \{T_{af} - T_a - \gamma_{ad}(z_a - d)\} \\ J_{ca}^1 &= u_a c_{ca} \rho_0 (q_{af} - q_a) \end{aligned} \quad (313)$$

errechnet. Hier ist c_{ca} ein dimensionsloser *Transferkoeffizient* und γ_{ad} der in Kapitel 3.2.1 eingeführte *trockenadiabatische* Temperaturgradient, mit dessen Hilfe die Temperaturdifferenz $T_{af} - T_a$ auf die Differenz der entsprechenden „potentiellen“ Temperaturen reduziert wird, vergleiche Kapitel 3.2.3. Gleichung (313) impliziert, dass die repräsentative Höhe über dem Boden, in der sich die Vegetationsschicht des Bestandsmodells befindet, mit der Verdrängungshöhe d des Bewuchses übereinstimmt.

Der Vergleich dieser Ansätze mit den Grenzschichtgesetzen

$$J_{ca}^q = -\rho_0 c_p u_* T_* ; \quad J_{ca}^1 = -\rho_0 u_* q_*$$

des Kapitels 3.4.1 zusammen mit der externen Formulierung der universellen Profildfunktionen entsprechend Gleichung (108) zeigt, dass der Transferkoeffizient c_{ca} durch die *universellen* Clarke-Funktionen G_M und G_θ für den Impuls bzw. Wärme ausgedrückt werden kann als

$$c_{ca} = \frac{1}{G_M(z_{ca}/\lambda_{ca}, z_{ca}/z_{0;c}) G_\theta(z_a/\lambda_{ca}, z_a/z_{0;c})} \quad (314)$$

mit $z_{ca} = z_a - d + z_{0;c}$. Die darin enthaltene Verschiebung um die Rauigkeitslänge $z_{0;c}$ wurde eingeführt, damit das bei neutraler Schichtung gültige logarithmische Windprofil

$$v_h(z) = \frac{u_*}{\kappa} \ln \frac{z - d + z_{0;c}}{z_{0;c}}$$

in Höhe der Vegetationsschicht, d. h. für $z = d$, Null wird. Die in den Gleichungen (314) auftretende *externe* Stabilitätslänge λ_{ca} ist zu berechnen als

$$\lambda_{ca} = \frac{T_a u_a^2}{g \{T_a - T_{af} + \gamma_{ad}(z_a - d)\}} \quad (315)$$

(vergleiche Gl. 109).

2. Bestimmung der Windgeschwindigkeit u_{af} in der Vegetationsschicht:

Die repräsentative Windgeschwindigkeit u_{af} in der Vegetationsschicht wird nach DEARDORFF (1978) als gewichtetes Mittel zweier unterschiedlich errechneter Werte u_{af}^v und u_{af}^0 für die Grenzfälle einer vollkommen dichten Vegetation ($\sigma_f = 1$) sowie eines extrem dünnen Bewuchses ($\sigma_f \rightarrow 0$) angesetzt als

$$u_{af} = \sigma_f u_{af}^v + (1 - \sigma_f) u_{af}^0, \quad (316)$$

wobei u_{af}^v gegeben ist als

$$u_{af}^v = 0.83 u_*^v. \quad (317)$$

Die darin auftretende Schubspannungsgeschwindigkeit u_*^v wiederum wird aus der externen Formulierung des universellen Geschwindigkeitsprofils über dem dichten Bewuchs gemäß Gleichung (108) errechnet als

$$u_*^v = \max \left(\frac{u_a}{G_M(z_{ca}/\lambda_{ca}, z_{ca}/z_{0;c})}, 0.05 \text{ m/s} \right), \quad (318)$$

wobei die Beschränkung nach unten aus numerischen Gründen eingeführt wurde (Vermeidung von Divisionen durch Null).

Anders als bei DEARDORFF (1978), der die Höhe z_a des atmosphärischen Niveaus offenlässt und vereinfachend davon ausgeht, dass u_{af} bei verschwindender Vegetationsdichte $\sigma_f = 0$ mit u_a übereinstimmt (wie auch T_{af} mit T_a und q_{af} mit q_a), berücksichtigt das Bestandsmodell von MUKLIMO_3 die Höhenunterschiede zwischen z_a und d und berechnet u_{af}^0 deshalb aus dem Ansatz eines universellen Geschwindigkeitsprofils für den bewuchsfreien Anteil der unversiegelten Bodenflächen. Hierzu wird zunächst eine auf den unbewachsenen Flächenanteil zugeschnittene *externe* Stabilitätslänge λ_{ub} eingeführt, die sich errechnet als

$$\lambda_{ub} = \frac{T_a u_a^2}{g (T_a - T_g + \gamma_{ad} z_a)}, \quad (319)$$

und mit ihrer Hilfe die Schubspannungsgeschwindigkeit u_*^0 über den unbewachsenen Flächenanteilen ermittelt als

$$u_*^0 = \frac{u_a}{G_M(z_{ga}/\lambda_{ub}, z_{ga}/z_{0;g})}, \quad (320)$$

wobei $z_{0;g}$ die Rauigkeitslänge der unter dem Bewuchs befindlichen Bodenoberfläche ist, während z_{ga} erklärt ist als $z_{ga} = z_a - z_{0;g}$. Die Größe $z_{0;g}$ ist in MUKLIMO_3 für alle Flächenelemente F_{ij} des Modellgebiets einheitlich mit dem Wert der vom Programmnutzer vorgebbaren Variablen z_{0g1d} belegt (Vorgabe $z_{0g1d} = 0.01 \text{ m}$, siehe im Anhang E die Ausführungen zur Namelist-Gruppe „*boden*“). Aus dem universellen Profilansatz für die Höhe $z = d$ erhält man dann u_{af}^0 als

$$u_{af}^0 = u_*^0 G_M \left(\frac{d + z_{0;g}}{\lambda_{ub}}, \frac{d + z_{0;g}}{z_{0;g}} \right). \quad (321)$$

3. Netto-Strahlungsflüsse:

Bei unbebauten Flächen ohne Baumbestand wird die auf die Obergrenze des Bodenbewuchses auftreffende kurzwellige Strahlungsflussdichte F_c^{sw} mit der nach Kapitel 4.1 berechneten und für geneigte Flächen nach Kapitel 4.2 modifizierten Flussdichte F_{top}^{sw} identifiziert. Befindet sich Bebauung oder Baumbestand auf dem Flächenelement, so entspricht F_c^{sw} stattdessen der nach Gleichung (190) in Kapitel 4.3.3 bzw. nach Gleichung (213) in Kapitel 4.4.2 berechneten Strahlungsflussdichte F_g^{sw} auf den Boden.

Die innerhalb der Vegetationsschicht von den Blättern bzw. am Boden absorbierten kurzwelligigen Netto-Strahlungsflussdichten $F_{N;c}^{sw}$ und $F_{N;g}^{sw}$ werden in Abhängigkeit von F_c^{sw} angesetzt als

$$\begin{aligned} F_{N;c}^{sw} &= F_c^{sw} \sigma_f (1 - A_f) \left(1 + \frac{(1 - \sigma_f) A_g}{1 - \sigma_f A_f A_g} \right) \\ F_{N;g}^{sw} &= F_c^{sw} (1 - \sigma_f) (1 - A_g) \frac{1}{1 - \sigma_f A_f A_g} . \end{aligned} \quad (322)$$

Hier sind A_f und A_g die Albedowerte der Blätter bzw. des unbedeckten Bodens (entsprechend den Variablen $af1d$ und $ag1d$ der Namelist-Gruppe „boden“ mit den Vorbelegungen $af1d=0.15$ und $ag1d=0.1$, siehe Anhang E). Dem Ansatz zugrunde liegt eine Bilanzbetrachtung, die außer den direkt auf die Blätter bzw. den Boden auftreffenden Flussdichten $\sigma_f F_c^{sw}$ und $(1 - \sigma_f) F_c^{sw}$ auch die am Boden reflektierte und von dort auf die Unterseite der Blattflächen treffende Strahlung in Form einer Mehrfachreflektion berücksichtigt.

In den langwelligigen Bilanzen werden die Emissivitäten der Blätter und des Bodens gleich Eins gesetzt und die Netto-Strahlungsflussdichten $F_{N;c}^{lw}$ der Blattflächen innerhalb der Vegetationsschicht und $F_{N;g}^{lw}$ des Bodens modelliert als

$$\begin{aligned} F_{N;c}^{lw} &= \sigma_f (F_c^{lw} + \sigma T_g^4 - 2\sigma T_f^4) \\ F_{N;g}^{lw} &= (1 - \sigma_f) F_c^{lw} + \sigma_f \sigma T_f^4 - \sigma T_g^4 \end{aligned} \quad (323)$$

mit der langwelligen Einstrahlung F_c^{lw} am Oberrand des Canopy und der Stefan-Boltzmann-Konstanten σ . Für die Wertzuweisung an F_c^{lw} gilt Entsprechendes wie für F_c^{sw} .

4. Flussdichten der sensiblen Wärme und des Wasserdampfes von den Blattflächen der Vegetationsschicht in die Atmosphäre:

In Anlehnung an DEARDORFF (1978) werden die von den Blättern des Bodenbewuchses ausgehenden Wärme- und Feuchteflussdichten J_{fc}^q bzw. J_{fc}^1 in Form von *Transfer-Gesetzen*

$$\begin{aligned} J_{fc}^q &= 1.1 L_{AI} u_{af} c_{fc} \rho_0 c_p (T_f - T_{af}) \\ J_{fc}^1 &= L_{AI} u_{af} c_{fc} \rho_0 \{q_s(T_f) - q_{af}\} r'' . \end{aligned} \quad (324)$$

oder dazu gleichwertigen *Widerstands-Gesetzen*

$$\begin{aligned} J_{fc}^q &= \frac{1.1 L_{AI} \rho_0 c_p}{r_a} (T_f - T_{af}) \\ J_{fc}^1 &= \frac{L_{AI} \rho_0}{r_a} \{q_s(T_f) - q_{af}\} r'' \end{aligned} \quad (325)$$

modelliert. Der Faktor 1.1 in den oberen Gleichungen trägt in pauschaler Weise dem Umstand Rechnung, dass die Stängel und Zweige des Bewuchses zum Wärmetausch mit der Atmosphäre beitragen, nicht jedoch zum Feuchtetausch. Der Transferkoeffizient c_{fc} beider Gleichungen und der korrespondierende Widerstand r_a werden parametrisiert als

$$c_{fc} = 0.01 \left\{ 1 + \frac{0.3 \text{ m s}^{-1}}{u_{af}} \right\} ; \quad r_a := \frac{1}{u_{af} c_{fc}} = \frac{100}{u_{af} + 0.3 \text{ m s}^{-1}} \quad (326)$$

Der Faktor r'' in der Gleichung für J_{fc}^1 berücksichtigt die Modifikationen im Mechanismus des Wasserdampftransports gegenüber dem Wärmetransport. Dies ist zum einen der sogenannte *Stomata-Widerstand* r_s , den der Wasserdampf beim Übertritt aus dem Blattinneren in die Atmosphäre zusätzlich überwinden muss. Als „Stomata“ (Mehrzahl von griechisch *stóma* „Mündung“, „Öffnung“) werden die Spaltöffnungen an der Unterseite der Blätter bezeichnet, über welche die Pflanzen die Blattverdunstung steuern. Zum anderen können die Blätter von Tau benetzt sein. Der pro Blattfläche des Canopy gespeicherte Tau W_{dew}

wird in MUKLIMO_3 bilanziert. Er kann bis zu einem Maximalwert $W_{\text{dmax}} = 0.1 \text{ kg m}^{-2}$ anwachsen. Darüber hinausgehender Tau tropft von den Blättern zum Boden und wird in eine Flüssigwasserstromdichte $-J_{\text{gc}}^2$ umgerechnet. Die gegenwärtige Programmversion von MUKLIMO_3 geht allerdings vereinfachend davon aus, dass die maximale Aufnahmekapazität der Blätter für Tau nicht überschritten wird und setzt deshalb J_{gc}^2 auf Null. Mit diesen Vereinbarungen wird r'' modelliert als

$$r'' = \begin{cases} \frac{1}{r_a + r_s} \left\{ r_a + r_s (W_{\text{dew}}/W_{\text{dmax}})^{2/3} \right\} & \text{für } q_{\text{af}} < q_s(T_f) \\ 1 & \text{für } q_{\text{af}} \geq q_s(T_f) \end{cases} . \quad (327)$$

Der Stomata-Widerstand r_s wird nach PIELKE (1984), mit F_f^{sw} anstelle von F_c^{sw} , angesetzt als

$$r_s = r_c \left\{ \frac{F_{c;\text{max}}^{\text{sw}}}{0.03 F_{c;\text{max}}^{\text{sw}} + F_f^{\text{sw}}} + P + \left(\frac{\eta_{\text{wilt}}}{\eta_{\text{root}}} \right)^2 \right\} . \quad (328)$$

Hier ist r_c ein (von der Pflanzenart abhängiger) minimaler Stomata-Widerstand, der in MUKLIMO_3 pauschal mit $r_c = 100 \text{ s m}^{-1}$ belegt ist. Die maximale Einstrahlung $F_{c;\text{max}}^{\text{sw}}$ hat den festen Wert $F_{c;\text{max}}^{\text{sw}} = 800 \text{ W m}^{-2}$, während die mittlere Einstrahlung auf ein Einzelblatt F_f^{sw} , welche die Einstrahlung F_c^{sw} auf die Bestandsschicht als Ganzes in der Formel von PIELKE (1984) ersetzt, berechnet wird als

$$F_f^{\text{sw}} = \min(0.5, \sigma_f/L_{\text{AI}}) F_c^{\text{sw}} . \quad (329)$$

Diese Ersetzung berücksichtigt, dass die Blattflächen insbesondere eines dichten Bestandes nicht alle die volle Strahlung erhalten, da sie sich gegenseitig abschirmen und nicht alle horizontal, sondern zufällig orientiert sind.

Die Größe P in Gleichung (328) ist ein *saisonal*er Faktor, der nur außerhalb der Wachstumsphase der Pflanzen Werte größer als Null annimmt. Da die Simulationen von MUKLIMO_3 zumeist im Hochsommer liegen, ist er im Programmcode (vorläufig) spezifiziert als $P = 2$. Die *Welk*-Grenze η_{wilt} des volumetrischen Wassergehalts (Bodenfeuchte, bei deren Unterschreiten die Pflanzen dem Boden kein Wasser mehr entziehen können) wird, in Abhängigkeit vom Bodentyp, der Tabelle 1 entnommen. Der volumetrische Wassergehalt η_{root} in der Wurzelzone des Bodens wird vom Bodenmodell bereitgestellt, vergleiche Kapitel 5.3.3.

5. Flussdichten der sensiblen Wärme und Feuchte vom Boden zur Vegetationsschicht:

In Analogie zur Formulierung der Flussdichten J_{ca}^q und J_{ca}^1 der Gleichung (313) werden auch die Flussdichten J_{gc}^q und J_{gc}^1 vom Boden zur Vegetationsschicht als *Transfer*-Gleichungen mit dem Transferkoeffizienten c_{gc} formuliert,

$$\begin{aligned} J_{\text{gc}}^q &= u_{\text{af}} c_{\text{gc}} \rho_0 c_p (T_g - T_{\text{af}} - \gamma_{\text{ad}} d) \\ J_{\text{gc}}^1 &= u_{\text{af}} c_{\text{gc}} \rho_0 (q_g - q_{\text{af}}) . \end{aligned} \quad (330)$$

Gleichwertig dazu ist die Formulierung als *Widerstandsgesetz*

$$\begin{aligned} J_{\text{gc}}^q &= \frac{\rho_0 c_p}{r_{\text{gc}}} (T_g - T_{\text{af}} - \gamma_{\text{ad}} d) \\ J_{\text{gc}}^1 &= \frac{\rho_0 c_p}{r_{\text{gc}}} (q_g - q_{\text{af}}) . \end{aligned} \quad (331)$$

in denen der *Widerstand* r_{gc} dem Kehrwert des Produkts $u_{\text{af}} c_{\text{gc}}$ entspricht. Dieser Widerstand setzt sich aus zwei Anteilen zusammen, zum einen aus dem durch die Bodenrauigkeit $z_{0;g}$ induzierten Widerstand r_{gc}^0 und zum anderen aus dem Zusatzwiderstand der Blätter r_{gc}^f

$$r_{\text{gc}} = r_{\text{gc}}^0 + r_{\text{gc}}^f . \quad (332)$$

Die Größe r_{gc}^0 wird, entsprechend der Gleichung (314) für den Transferkoeffiziente c_{ca} , aus universelle Profilanätzen für die Windgeschwindigkeit und die Temperatur im vertikalen Bereich vom Boden bis zur für den Bodenbewuchs repräsentativen Verdrängungshöhe d errechnet als

$$r_{gc}^0 = \frac{G_M \left(\frac{d+z_{0;g}}{\lambda_{gc}}, \frac{d+z_{0;g}}{z_{0;g}} \right) G_\theta \left(\frac{d+z_{0;g}}{\lambda_{gc}}, \frac{d+z_{0;g}}{z_{0;g}} \right)}{u_{af}} \quad (333)$$

mit der externen Stabilitätslänge λ_{gc} definiert als

$$\lambda_{gc} = \frac{T_{af} u_{af}^2}{g (T_{af} - T_g + \gamma_{ad} d)} \quad (334)$$

Der Ansatz für r_{gc}^f ist

$$r_{gc}^f = \frac{\exp(0.27 L_{AI}) - 1}{1.35 (0.27 \kappa_f)^2 u_{af}} \quad (335)$$

Hier kann $\kappa_f \approx 2.25$ als eine Art „von-Kármán-Konstante“ für Strömungen im Vegetationsbestand gedeutet werden. Zur Ableitung siehe SIEBERT et al. (1992).

6. Berechnung von T_{af} und q_{af} :

Da in der Luftschicht des Bodenbewuchses vereinbarungsgemäß keine Wärme und kein Wasserdampf gespeichert wird, müssen für die Wärme- und Feuchteströme von und zu dieser Luftschicht die Erhaltungsgesetze

$$\begin{aligned} J_{gc}^q + J_{fc}^q &= J_{ca}^q \\ J_{gc}^1 + J_{fc}^1 &= J_{ca}^1 \end{aligned} \quad (336)$$

erfüllt sein. Einsetzen der Beziehungen (313), (324) und (330) führt auf die Gleichungen

$$\begin{aligned} T_{af} &= \frac{u_a c_{ca} (T_a + \gamma_{ad}(z_d - d)) + u_{af} c_{gc} (T_g - \gamma_{ad} d) + 1.1 L_{AI} u_{af} c_{fc} T_f}{u_a c_{ca} + u_{af} c_{gc} + 1.1 L_{AI} u_{af} c_{fc}} \\ q_{af} &= \frac{u_a c_{ca} q_a + u_{af} c_{gc} q_g + L_{AI} u_{af} c_{fc} r'' q_s(T_f)}{u_a c_{ca} + u_{af} c_{gc} + L_{AI} u_{af} c_{fc} r''} \end{aligned} \quad (337)$$

mit deren Hilfe die für die Berechnung der Wärmestromdichte J_{ca}^q von der Vegetationsschicht in die Atmosphäre benötigte Temperatur T_{af} im Canopy als gewichtetes Mittel der Temperaturen T_a , T_g sowie T_f und die für die Berechnung des Wasserdampfstroms J_{ca}^1 benötigte Feuchte q_{af} als Mittel der Feuchtwerte q_a , q_g sowie $q_s(T_f)$ ausgedrückt werden.

7. Vor der Berechnung von T_{af} und q_{af} aus den Gleichungen (337), müssen noch die Blattflächen- und Bodentemperaturen, T_f bzw. T_g , sowie die spezifische Feuchte q_g bestimmt werden. Dabei ist q_g mit dem Bodenwassergehalt η_g an der Grenzfläche über die Beziehung

$$q_g = \frac{R_0}{R_1} \frac{p_b^{21}(T_g, \eta_g)}{p_g - p_b^{21}(1 - R_0/R_1)} \quad (338)$$

verknüpft, wobei der Gleichgewichtsdampfdruck p_b^{21} des Bodenwassers nach Gleichung (250) zu errechnen ist als

$$p_b^{21}(T_g, \eta_g) = p^{21}(T_g) \exp\{\psi_b(\eta_g)/R_1 T\}.$$

Die Bedingung zur Bestimmung von T_f und T_g sowie η_g sind dann die drei Forderungen, dass

- die Summe E_c aller Energiestromdichten von und zur Vegetationsschicht,

- die Summe E_g der Energiestromdichten von und zur Bodengrenzfläche sowie
- die Summe M_g der Wasserdampf- und Flüssigwasserströme am Boden

sich jeweils zu Null addieren müssen, also

$$\begin{aligned}
E_c(T_f, T_g, \eta_g) &:= F_{N;c}^{sw} + F_{N;c}^{lw} - J_{fc}^q - l_{21} J_{fc}^1 = 0 \\
E_g(T_f, T_g, \eta_g) &:= F_{N;g}^{sw} + F_{N;g}^{lw} - J_{gc}^q - J_{b;i}^q - l_{21;b} (J_{gc}^1 + J_b^1) = 0 \\
M_g(T_f, T_g, \eta_g) &:= J_{gc}^1 + J_{gc}^2 + J_b^1 + J_b^2 = 0.
\end{aligned} \tag{339}$$

Dabei sind $J_{b;i}^q$, J_b^1 und J_b^2 die traditionsgemäß von der Bodengrenzfläche ins Bodeninnere gerichteten Komponenten der Flusssichten $\vec{J}_{b;i}^q$, \vec{J}_b^1 und \vec{J}_b^2 der inneren Wärme sowie der beiden Wasserphasen im Boden. Sie werden aus den diskretisierten Gleichungen (279), (257) und (262) errechnet, als deren Antriebe die durch $z_{b;2}$ dividierten Differenzen $T_g - T_b$ und $\eta_g - \eta_b$ eingesetzt werden. Die Größe $l_{21;b}$ ist die Verdunstungswärme des Bodenwassers unter Einschluss der Benetzungswärme W , siehe Gleichung (277) in Kapitel 5.3.4.

Analytisch betrachtet stellt Gleichung (339) ein Nullstellenproblem für ein System aus 3 Gleichungen für die 3 Unbekannten T_f , T_g und η_g dar. Es wird in MUKLIMO_3 iterativ nach dem sogenannten, auf Systeme von Gleichungen verallgemeinerten *Newton-Verfahren* gelöst, bei dem die verbesserte Näherungslösung des $(\nu+1)$ -ten Iterationsschritts aus der ν -ten Näherung nach der Vorschrift

$$\begin{pmatrix} T_f \\ T_g \\ \eta_g \end{pmatrix}^{\nu+1} = \begin{pmatrix} T_f \\ T_g \\ \eta_g \end{pmatrix}^{\nu} - \left[\frac{\partial (E_c, E_g, M_g)}{\partial (T_f, T_g, \eta_g)} \right]^{-1;\nu} \cdot \begin{pmatrix} E_c \\ E_g \\ M_g \end{pmatrix}^{\nu} \tag{340}$$

errechnet wird. Die dafür erforderlichen, den Elementen der Funktionalmatrix

$$\frac{\partial (E_c, E_g, M_g)}{\partial (T_f, T_g, \eta_g)}$$

entsprechenden partiellen Ableitungen werden analytisch errechnet mit der Einschränkung, dass die impliziten, in den Transferkoeffizienten c_{ca} , c_{fa} und c_{ca} enthaltenen Abhängigkeiten dabei nicht berücksichtigt werden.

Die Iteration beginnt mit den in eigenen Feldern gespeicherten Werten des vorangegangenen Integrationsschrittes für T_{af} , T_f und q_{af} über den Flächenelementen F_{ij} . Als Startwerte für T_g und η_g dienen die vom Modell des unversiegelten Bodens übergebenen Temperatur- und Wassergehaltswerte $T_{b;ij1}^u$ bzw. η_{ij1} , siehe Kapitel 5.3.6. Die in der folgenden Iteration festgehaltenen Werte T_a und q_a entsprechen den untersten Temperatur- und Feuchtwerten des atmosphärischen Modells, das auch die einfallenden kurz- und langwelligigen Strahlungsflussdichten F_c^{sw} und F_c^{lw} bereitstellt. Zur Berechnung der Wärme- und Feuchteflüsse von der Bodengrenzfläche ins Bodeninnere werden zudem Bodenwerte T_b und η_b benötigt, die mit $T_{b;ij2}^u$ und η_{ij2} belegt werden.

Die nach dieser Initialisierung folgende Iteration lässt sich in die folgenden Teiloperationen untergliedern:

- Berechnung der *Transferkoeffizienten* der verschiedenen Transportgesetze (nur bei den ersten beiden Iterationsschritten)
- Berechnung neuer Werte T_{af}^{ν} und q_{af}^{ν} (aus Gl. 337) sowie von q_f^{ν} (entsprechend der Sättigungsfeuchte $q_s(T_f)$) und q_q^{ν} (aus Gl. 338)

- c) Berechnung der *Flussdichten* für Wärme- und Feuchte
- von der Vegetationsschicht in die Atmosphäre,
 - vom Boden zur Vegetationsschicht,
 - von der Bodengrenzfläche ins Bodeninnere sowie
 - innerhalb der Vegetationsschicht von den Blättern zur Atmosphäre
- d) Berechnung der ν -ten Näherungen E_c^ν , E_g^ν und M_g^ν der drei Bilanzen E_c , E_g und M_g aus den Gleichungen (339)
- e) Berechnung und Inversion der Funktionalmatrix
- f) Berechnung verbesserter Werte $T_f^{\nu+1}$, $T_g^{\nu+1}$ und $\eta_g^{\nu+1}$ aus Gleichung (340)
- g) Prüfung der Iteration auf Abbruch: Die Iteration wird erfolgreich beendet, wenn die maximale Änderung der Bilanzen E_c und E_g für die Vegetationsschichten aller parallel behandelten Flächenelemente F_{ij} unter $1 \text{ W m}^{-2}\text{s}^{-1}$ und zugleich die maximale Änderung der Wasserbilanzen M_g unter $1 \cdot 10^{-7} \text{ kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$ gefallen ist, sowie ohne ausreichende Konvergenz, wenn eine (im Programm mit 10 belegte) maximale Iterationszahl überschritten ist.

Nach Beendigung der Iteration wird noch die von den Blättern ausgehende und in die Prognose der Bodenvariablen eingehende Verdunstungsrate S (siehe Kap. 5.3.3) sowie die an den Blättern eventuell gespeicherte Taumenge W_{dew} neu berechnet. Danach werden die aktualisierten Werte für T_{af} , q_{af} und T_f an das atmosphärische Modell übergeben,

$$T_{\text{af}} \rightarrow TAF3d_{ij}; \quad q_{\text{af}} \rightarrow Q_{ij1}; \quad T_f \rightarrow TF3d_{ij}, \quad (341)$$

wo sie in die Berechnung der Flussdichten für Wärme und Feuchte an der Bodengrenzfläche nach Kapitel 3.4.1 sowie in die Berechnung der vom Boden ausgehenden langwelligen Strahlung eingehen. Mit den Bodengrenzwerten T_g und η_g wiederum werden, zur Ankopplung des Bodenmodells an die Atmosphäre, die obersten Werte der Variablenfelder $T_{\text{b};ijk}^u$ und η_{ijk} überschrieben,

$$T_{\text{b};ij1}^u = T_g; \quad \eta_{ij1} = \eta_g. \quad (342)$$

Vergleiche dazu auch Kapitel 5.3.6.

Die exemplarisch für ein beliebiges Flächenelement dargestellten Rechenoperationen des Bestandsmodells müssen tatsächlich für alle Elemente F_{ij} des Modellgebiets ausgeführt werden. Wie schon bei den prognostischen Gleichungen des Bodenmodells erläutert, erfolgt diese numerische Abarbeitung auch beim Bestandsmodell „reihenweise“, d. h. für alle zu gegebenem j gehörigen Indizes i gemeinsam in einem einzigen Aufruf des dem Bestandsmodell entsprechenden Unterprogramms. Der Grund dafür ist auch hier die Beschleunigung des numerischen Ablaufs durch die Programmierung „vektorisierbarer“ numerischer Schleifen.

5.5 Dachbegrünung

Das Modell MUKLIMO_3 bietet die Option, die Dächer einer im Modellgebiet eventuell vorhandenen *unaufgelösten Bebauung* (Kap. 2.3.4) zu *begrünen*. Die Modellierung der Dachbegrünung beruht auf der Vorstellung, dass die Bebauung mit Flachdächern versehen ist, die ganz oder teilweise mit einer bewachsenen Erdschicht bedeckt sind. Der relative Anteil begrünter Dächer wird dabei, in Abhängigkeit vom Bebauungstyp, in der

Landnutzungstabelle (siehe Kap. 2.3) vorgegeben. Die Umsetzung dieser Vorstellung erfolgt über ein dreikomponentiges Modell der begrünten Dächer, bestehend aus:

- *Vegetationsmodell*, das an die Atmosphäre ankoppelt ist und in dem die auf den Bewuchs der Dächer auftreffende Strahlung in sensible und latente Wärme umgesetzt wird.
- *Bodenmodell* für das die Dächer bedeckende Substrat. Es wird in mehrere numerische Schichten untergliedert, in denen Bilanzgleichungen für Wärme und Feuchte gelöst werden.
- Dem eigentlichen „Dach“, das aus einer Schicht besteht und an seiner Unterseite an das als Wärmereservoir (festgehaltene Temperatur) fungierende Gebäudeinnere ankoppelt. Der Wärmestrom durch das Dach wird aus der Temperaturdifferenz „oben minus unten“ über ein einfaches Transfergesetz mit dem *K-Wert* K_r der Dächer errechnet, vergleiche Kapitel 3.5.1 und 3.5.2. Der Vorgabewert für K_r von $1.5 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ kann vom Programmnutzer über die Eingabedatei (siehe Kap. 6.1) durch Spezifikation der Variablen *xkd* der Namelist-Gruppe „*param*“ geändert werden.

Über ein ähnliches Modell mit eindimensionalen Annahmen wird von Gross (2012) berichtet. Der Autor hat mit ihm die Temperaturdifferenzen über begrünten und unbegrünten Dächern für verschiedene Zeitskalen unter eindimensionalen Annahmen berechnet.

Für die oben genannten Vegetations- und Bodenteilmodelle der begrünten Dächer sowie ihre Kopplung untereinander und an die Atmosphäre können die in den Kapiteln 5.3 und 5.4 eingeführten Ansätze weitgehend unverändert übernommen werden. Das Bodenmodell der begrünten Dächer besitzt jedoch eigene Spezifikationen

- des Bodentyps,
- der vertikalen Erstreckung sowie
- der Wurzelzone.

Die Spezifikation des Bodentyps der begrünten Dächer erfolgt über die Variable *isdach* der Eingabedatei (gehört zur Namelist-Gruppe „*param*“). Für die vertikale Erstreckung der Bodenbedeckung gilt, dass die Schicht-einteilung $\Delta z_{b;k}$ des regulären Erdbodenmodells übernommen, aber die Anzahl der Schichten von n_b zu n_r verringert wird. Der Anzahl n_r entspricht in der Eingabedatei die Variable *nbdach* mit der Vorgabe *nbdach*=7. Die Wurzelzone erstreckt sich, ohne Einflussmöglichkeit des Programmnutzers, über die Schichten 3 bis n_r .

Geändert gegenüber den Gleichungen (294) des Erdbodenmodells ist zudem die *untere Randbedingung* des Substrats der Dachbegrünung: Während nach ersteren die Temperatur und der volumetrische Wassergehalt in der untersten Bodenschicht zeitlich konstant gehalten werden, wird im Bodenmodell der begrünten Dächer eine *No-Flux*-Bedingung für die Feuchte und eine *Constant-Flux*-Bedingung

$$J_{r;n_r+1/2}^q = J_{ri}^q$$

für die Wärmestromdichten $J_{r;n_r+1/2}^q$ vom Substrat zur Dachoberfläche und J_{ri}^q von der Dachoberfläche in das Gebäudeinnere gefordert. Mit ihrer Hilfe wird $J_{br;n_r+1/2}^q$ wie folgt in Relation zur Gebäudeinnentemperatur T_{inn} gesetzt: Sei $T_{r;n_r+1/2}$ die (noch unbekannt) Temperatur an der Grenzfläche zwischen Substrat und massivem Dach. Mit ihr werden die beiden Wärmeflüsse angesetzt als

$$J_{r;n_r+1/2}^q = -L_{r;n_r}^q \frac{T_{r;n_r+1/2} - T_{r;n_r}}{\Delta z_{n_r}/2}; J_{ri}^q = -K_r (T_{inn} - T_{r;n_r+1/2}) .$$

Hier sind $L_{r;n_r}^q$ die gemäß Gleichung (287) modellierte Temperaturleitfähigkeit im untersten Rechenniveau des Dachsubstrats, K_r der im Kapitel 3.5 eingeführte *K-Wert* der Dächer und T_{inn} die in MUKLIMO_3 als

Modellparameter fungierende Gebäudeinnentemperatur. Elimination von T_r führt dann auf die in MUKLIMO_3 benutzte untere Randbedingung für den Bodenwärmefluss

$$J_{r;n_r+1/2}^q = -\frac{2L_{r;n_r}^q K_r}{2L_{r;n_r}^q + K_r \Delta z_{n_r}} (T_{\text{inn}} - T_{n_r}) , \quad (343)$$

die zusammen mit der Bedingung

$$J_{r;n_r+1/2}^1 + J_{r;n_r+1/2}^2 = 0 \quad (344)$$

an die Stelle der Gleichungen (294) des unversiegelten Bodenmodells tritt.

Das *Bestandsmodell* der Dachbegrünung benutzt, in gleicher Weise wie das Bestandsmodell des niedrigen Bodenbewuchses, die Ansätze des Kapitels 5.4, hat aber eigene Vorgabemöglichkeiten für

- die Vegetationshöhe h_{can}
- den Blattflächenindex L_{AI} und
- den Abschirmfaktor σ_f ,

die über die Eingabedatei mittels der Variablen *hcdach*, *xlaidach* und *sigdach* der Namelist-Gruppe „*param*“ spezifiziert werden.

Die auf die begrünten Dächer einfallenden kurz- und langwelligen Strahlungsflussdichten werden nach den Kapiteln 4.3.3 und 4.5.1 berechnet.

Die langwellige Strahlungstemperatur der Dächer wird als mit dem Begrünungsanteil gewichteter Mittelwert aus den Strahlungstemperaturen der begrünten und der versiegelten Dachanteile errechnet. Entsprechende Mittelungen gelten auch für die Flussdichten der sensiblen Wärme und der Feuchte von den Dächern in die Atmosphäre mit der Besonderheit, dass beim Feuchtestrom der versiegelte Anteil verschwindet.

6 Ablauf und Gestaltung von Modellsimulationen

6.1 Eingabedatei

Von zentraler Bedeutung für die Simulationen mit der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 ist die *Eingabedatei*. Über sie werden alle vorgebbaren Spezifikationen eines durchzuführenden Modelllaufs festgelegt. Sie ist ihrer Struktur nach eine von MUKLIMO_3 einzulesende Fortran-*NAMELIST*, die vom Programmnutzer zu erstellen ist. Deren Regeln sind im ersten Teil dieses Berichts (SIEVERS, 2012) erläutert worden. Bei jedem Programmlauf der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 ist eine entsprechend präparierte Eingabedatei unter stets demselben Namen „*muklimo.in*“ bereitzustellen. Diese muss sich beim Programmstart im selben Ordner befinden wie das ausführbare Programm.

Zu den *Aufgaben* der Eingabedatei zählen insbesondere:

- Festlegung der *Lage* und der *Abmessungen* des Modellgebiets,
- Gestaltung des *numerischen Gitters*,
- Vorgabe der *Geländehöhe* und der *Flächennutzung* im Modellgebiet,

- Vorgabe von *Anfangswerten* und *-profilen* der meteorologischen Variablen,
- Festlegung der *Startzeit* und der *Dauer* einer Simulation.

Auf sie wird in den folgenden Kapiteln näher eingegangen. Es gehört aber auch die Regelung der Resultatsausgabe und die Spezifikation verschiedener Oberflächen- und Materialeigenschaften dazu, z. B. Rauigkeitslängen, Albedo-Werte, Wärmeleitfähigkeiten und -kapazitäten.

Zur besseren Übersichtlichkeit sind die Variablen der Eingabedatei in die *NAMELIST-Gruppen*

- „*dateien*“
- „*zeit*“
- „*param*“
- „*grid*“
- „*boden*“
- „*profile*“
- „*pollution*“
- „*output*“

untergliedert. Zur Ergänzung der in den nächsten Unterkapiteln folgenden Darlegungen ist im Anhang E die kommentierte Standard-Eingabedatei „*standard_thermodyn.in*“ wiedergegeben. Sie enthält eine Auflistung aller zu den einzelnen Namelist-Gruppen gehörigen *Variablen* mit Erläuterungen zu ihrer *Bedeutung*, ihrem *Gebrauch* und ihrer *Vorbelegung*.

6.1.1 Lage des Modellgebiets und Gestaltung des numerischen Gitters

Die geografische *Lage* des Modellgebiets wird in der Eingabedatei über die als *real* vereinbarten Variablen

- *alat* und
- *elen*

der Namelist-Gruppe „*param*“ festgelegt. Sie entsprechen der nördlichen Breite (*alat*) und der östlichen Länge (*elen*) eines repräsentativen Bezugspunktes im Modellgebiet und sind jeweils in Grad anzugeben. Die Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 benötigt sie zur Berechnung des tages- und jahreszeitabhängigen *Sonnenstandes*.

Zudem können über die Variablen

- *xllcorner* und *yllcorner*

der Namelist-Gruppe „*grid*“ die *metrischen* Koordinaten der linken unteren Ecke des Modellgebiets angegeben werden, z. B. im Gauß-Krüger- oder im UTM-System. Sie haben keine Bedeutung für den Ablauf einer

Simulation, werden aber in Form eines *Kommentars* in die Resultatsdateien übernommen.

Der Aufbau des dreidimensionalen *numerischen Gitters*, welches das Modellgebiet horizontal und vertikal aufspannt, ist im Kapitel 2.1 beschrieben. Seine Gestaltung geschieht über die Variablen

- $n1d$
- m, l, n
- dx und dy
- $dz1d$
- $nadd$

der Namelist-Gruppe „*grid*“ sowie über den *Drehwinkel*

- $phi0$

der Namelist-Gruppe „*param*“. Von ihnen sind $n1d$, m , l und n sowie $nadd$ als *integer* vereinbart, dx , dy und $dz1d$ hingegen als eindimensionale *Felder* vom Typ *real*, $phi0$ als einfache *real*-Variable. Für die Variablen der Eingabedatei vom Typ *integer* müssen ganzzahlige Werte angegeben, für solche vom Typ *real* können wahlweise Festkomma-, Gleitkomma- oder ganzzahlige Werte spezifiziert werden. Groß- oder Kleinschreibung bei den Variablennamen ist insignifikant. Für sämtliche Zahlenvariablen der Eingabedatei gilt im Übrigen die *implizite* Fortran-Typvereinbarung, nach der Variable, deren Name mit i , j , k , l , m oder n beginnt, vom Typ *integer* sind, alle anderen dagegen *real*.

Die Feldelemente $dx(i)$ repräsentieren die *Gitterabschnitte* in x -Richtung und m ihre *Anzahl*, $dy(j)$ entsprechend die Abschnitte in y -Richtung mit der Anzahl l . Die Abschnitte dürfen *ungleichförmig* bemessen sein. Vernünftig ist, $dx(i)$ und $dy(j)$ in einem *Kernbereich* konstant zu lassen, außerhalb davon – mit Annäherung an die seitlichen Ränder – aber anwachsen zu lassen. Obwohl es keine strengen Vorschriften gibt, sollten die Änderungen möglichst gleichförmig und nicht allzu sprunghaft erfolgen. Empfohlen wird, jeweils die ersten und letzten 5 der horizontalen Gitterabschnitte konstant zu lassen.

Es müssen nicht alle $dx(i)$ und $dy(j)$ für $i = 1, \dots, m$ bzw. $j = 1, \dots, l$ einzeln festgelegt werden: In der *Eingabedatei* nicht festgelegte Abschnitte werden jeweils automatisch an den vorangehenden Abschnitt *angepasst*. Wenn man z. B. nur $dx(1)$ spezifiziert, so erhalten alle folgenden $dx(i)$ auch den für $dx(1)$ angegebenen Wert. Außerdem können *Wiederholungsfaktoren* verwendet werden. Die Spezifikation

```
dx=100*10.
```

z. B. belegt die ersten hundert Gitterabschnitte $dx(i)$ mit 10 m.

Im Unterschied zu den horizontalen Gitterabmessungen werden durch die Spezifikationen der Eingabedatei in vertikaler Richtung nicht die Abstände $dz(k)$ des 3-dimensionalen Modells (kurz: *3d* Modell), sondern stattdessen die Abstände $dz1d(k)$ für $k = 1, \dots, n1d$ des in größere Höhen reichenden 1-dimensionalen (*1d*) *Antriebsmodells* (siehe Kap. 6.3) festgelegt. Diese Abstände werden normalerweise inäquidistant mit hoher Auflösung im Bereich der Hindernisse des Modellgebiets festgelegt. Ihre Gesamterstreckung sollte etwa 1 000 m betragen, da die Temperatur und die relative Feuchte in dieser Höhe zur Berechnung der langwelligen atmosphärischen *Gegenstrahlung* herangezogen werden (vergleiche Kap. 4.1). Die n vertikalen Gitterschichten $dz(k)$ des in

geringere Höhe reichenden 3d Modells werden dann an diejenigen des 1d Modells angeglichen:

$$dz(k) = dz1d(k) \quad \text{für } k = 1, \dots, n.$$

Ist das Modellgelände eben und sind die Hindernisse nicht höher als etwa 50 m, so wird eine vertikale Gesamterstreckung des 3d Modellgebiets von 400 m als ausreichend erachtet, wobei die Auflösung an der Modellobergrenze bis auf 50 m oder mehr anwachsen darf. Im Übrigen sollte man eine hohe Gitterauflösung, sowohl horizontal wie auch vertikal, nur dort anwenden, wo sie auch wirklich gebraucht wird. Eine unnötig feine Auflösung bringt keine qualitativen Verbesserungen, erhöht aber den Rechenzeitbedarf und die Neigung von MUKLIMO_3 zu numerischen Instabilitäten.

Die Integer-Variable *nadd* steht in Zusammenhang mit den *seitlichen* Randbedingungen der Modellgleichungen (siehe Kap. 3.4.3), die von *Homogenität* der atmosphärischen Variablen in der zum jeweiligen Seitenrand senkrechten Richtung ausgehen. Um nicht in Widerspruch zu dieser Bedingung zu geraten, wird das horizontale Gitter von MUKLIMO_3 modellintern in allen Richtungen um jeweils eine (oder mehrere) Gitterbreiten erweitert. Die Geländehöhe dieser zusätzlichen Reihen wird an den jeweiligen Seitenrand des eigentlichen Modellgebiets, über den sie hinausreichen, angeglichen. Wird keine andere Vereinbarung getroffen, gilt das auch für die Flächennutzung. Falls jedoch in der Eingabedatei die Variable *freeland* (Namelist-Gruppe „*dateien*“, siehe Anhang E) auf *.true.* gesetzt ist, so werden die Landnutzungsparameter der zusätzlichen Reihen entweder entsprechend der Spezifikation von *luextra* belegt oder (bei *luextra*=0) an das 1d Antriebsmodell angeglichen. Die Anzahl *nadd* der zusätzlichen Reihen ist mit Eins vorbelegt. Dieser Wert kann aber vom Programmnutzer über die Eingabedatei geändert werden. Größere Werte von *nadd* sind dann angezeigt, wenn die Geländehöhe oder die Flächennutzung des jeweiligen Projekts in Randnähe sehr inhomogen ist. Die Belegung von *nadd* ist bei der Berechnung der maximalen Feldabmessungen (Kap. 6.2) zu berücksichtigen. In vertikaler Richtung fügt MUKLIMO_3 modellintern eine *ausdehnungslose* Bodenschicht hinzu, die der Speicherung von Bodenwerten der atmosphärischen Variablen dient. Hier hat der Programmnutzer keine Eingriffsmöglichkeit.

Mithilfe des Winkels *phi0* kann die *y*-Achse des Modellgebiets gegen die geografische Nordrichtung gedreht werden. Dabei ist *phi0* in Grad anzugeben, wobei positive Werte einer Drehung im Uhrzeigersinn entsprechen. Ist eine solche Drehung nicht angesagt, darf die Angabe von *phi0* fehlen, da der Vorgabewert *phi0*=0 einem ungedrehten Modellgebiet entspricht.

6.1.2 Geländehöhe und Flächennutzung

Die *Geländehöhe* und die *Flächennutzung* eines Modellgebiets werden in der Eingabedatei durch Wertzuweisung an die Variablen der Namelist-Gruppe „*dateien*“ festgelegt. Für die Geländehöhe ist das die Zeichenvariable

- *h0_datei*,

welcher der in Apostrophe gesetzte Name einer *Höhen-Rasterdatei* zuzuweisen ist. Steht die Datei bei der Programmausführung von MUKLIMO_3 im sogenannten *aktuellen* Verzeichnis, genügt die Angabe ihres einfachen *Dateinamens* (ohne Pfadangabe), andersfalls ist ihr (absoluter oder relativer) *Pfadname* zu verwenden. Die in Zeilen angeordneten Daten der Höhen-Rasterdatei müssen für jede Zelle des horizontalen Modellgitters einen in m angegebenen Höhenwert bereitstellen, wobei die Zeilen von Nord nach Süd und die Werte innerhalb der Zeilen von West nach Ost angeordnet sind. Die Höhen können mit oder ohne Nachkommastellen angegeben werden, sie müssen aber in jedem Fall getrennt voneinander geschrieben sein, da sie von MUKLIMO_3 im (*Fortran*-) Stern-Format gelesen werden. Erlaubt ist, dass die Höhen-Rasterdatei – außer den Datenzeilen – auch *Kommentarzeilen* enthält. Als solche gelten alle Zeilen, deren erstes wesentliches (vom Leerzeichen verschiedenes) Zeichen weder eine Ziffer noch das Minus-Zeichen ist.

Die Wertzuweisung an *h0_datei* darf auch fehlen: Ist *h0_datei* nicht spezifiziert, so werden alle Höhen des Modellgebiets mit Null belegt.

Der Gestaltung der Höhenstruktur des Modellgebiets dient, außer der Höhen-Rasterdatei, auch die als *real* vereinbarte Variable

- *hbasis*.

Durch sie wird die *Basishöhe* des Modellgebiets festgelegt, d. h. die Geländehöhe, auf die das Modellgitter „aufsetzt“. Bleibt *hbasis* unbelegt, so macht MUKLIMO_3 die geringste Geländehöhe des Modellgebiets zur Basishöhe. Somit kann *hbasis* auch genutzt werden, um Geländetiefen, deren Höhe einen bestimmten Mindestwert unterschreitet, gezielt anzuheben.

Wie die Geländehöhe, so wird auch die *Flächennutzung* des Modellgebiets durch eine *Rasterdatei* festgelegt. Es ist dies die *Landnutzungsdatei*, die der Zeichenvariablen

- *lu_datei*

zuzuweisen ist. Durch sie wird jedem horizontalen Flächenelement eine *Code-Zahl* zugeordnet, der eine bestimmte Landnutzung entspricht. Deren Parameterwerte wiederum werden in der *Landnutzungstabelle* festgelegt (vergleiche Kap. 2.3), die in der Eingabedatei unter dem Variablennamen

- *lutab*

zu vereinbaren ist.

Im Unterschied zu den Höhenwerten sind die Code-Zahlen der Landnutzungsdatei unbedingt ganzzahlig anzugeben. Weiterhin müssen sie nicht notwendigerweise „auf Abstand“, sondern können stattdessen auch mit fester Stellenzahl

- *ndigits*

pro Einzelwert geschrieben sein. Die Variable *ndigits* gehört zur Namelist-Gruppe „*dateien*“ und ist mit Eins vorbelegt. Eine Sondervereinbarung gilt für die Spezifikation *ndigits=0*. Dieser Wert bedeutet, dass die Datenzeilen der Landnutzungsdatei im (*Fortran*-) Stern-Format gelesen werden und entsprechend geschrieben sein müssen.

Aufgelöste Bebauung wird gestaltet, indem der Zeichenvariablen

- *geb_datei*

eine entsprechend gestalteten *Rechteckdatei* zugewiesen wird. Zur Form und den Regeln einer Rechteckdatei für aufgelöste Bebauung siehe Kapitel 2.4 dieses Berichts sowie Kapitel 5.7.3.2 in SIEVERS (2012).

Die *Straßenabschnittsdatei*, die der Zeichenvariablen

- *strabdat*

zugewiesen werden kann, dient der Modellierung von Bodenversiegelung durch *Straßen*, die aufgrund zu geringer Gitterauflösung nicht detailliert dargestellt werden können. Für Straßenabschnittsdateien gilt eine spezielle

Formatvereinbarung: Ihre Datenzeilen haben den Inhalt

$$kenn0 = 7 \quad i \quad j \quad strbrei \quad strlen$$

wobei i und j das von einer Straße durchschnittene Flächenelement F_{ij} bezeichnen, während $strbrei$ die Straßenbreite und $strlen$ die Länge des innerhalb von F_{ij} verlaufenden Straßenabschnitts ist, beides anzugeben in m. Die fest vereinbarte Kennzahl $kenn0$ dient der Identifizierung der Datenzeilen als zu einer Straßenabschnittsdatei gehörig. Sie muss den Wert $kenn0=7$ haben. Zeilen mit anderem $kenn0$ werden ignoriert. Aus den vorstehenden Angaben errechnet MUKLIMO_3 eine *zusätzliche* Versiegelung, die dem Flächenelement F_{ij} – über die Vorgaben der Landnutzungstabelle hinaus – zugewiesen wird. Die Dichte einer eventuell vorhandenen Bebauung oder von Baumbestand wird entsprechend reduziert.

6.1.3 Bodenmodell

Zu jeder Gittersäule des 3d Modellgebiets, wie auch im 1d Modell, gibt es unterhalb der Bodengrenzfläche ein *Bodenmodell*. Seine vertikale *Erstreckung* wird, einheitlich für alle Gittersäulen, durch Spezifikation der Variablen

- nb

festgelegt. Sie gehört der Namelist-Gruppe „*grid*“ an und bezeichnet die *Anzahl* vertikaler Schichten des Bodenmodells. Dabei ist nb in Zusammenhang mit den *Abmessungen* $dz_b(k)$ der vertikalen Schichten zu sehen. Diese sind mit 2 mm, 4 mm, 1 cm, 2.5 cm, 4 cm, 7 cm für die obersten sechs und mit 10 cm für alle darunter liegenden Schichten *fest* vorgegeben und können über die Eingabedatei nicht geändert werden. *Änderbar* ist nur ihre Anzahl nb , wobei die Vorgabe $nb=15$ so gewählt ist, dass die unterste Rechenfläche für die Variablen des Bodenmodells gerade in 1 m Tiefe liegt (vergleiche Kap. 5.1).

Der *Bodentyp* der unversiegelten Flächenanteile wird über die Variable

- $is1d$

der Namelist-Gruppe „*boden*“ festgelegt, ebenfalls einheitlich für das eindimensionale Antriebsmodell und alle Flächenelemente F_{ij} des dreidimensionalen Modells. Zur Auswahl stehen 12, in der Tabelle 1 sowie im Anhang E aufgeführte Bodentypen, die einer Klassifizierung des USDA (United States Department of Agriculture) entsprechen. Voreingestellt ist $is1d=3$ entsprechend dem Typ „sandiger Lehm“.

Änderbar ist zudem, und zwar über die Variablen

- $krmin1$ und $krmax1$

der Namelist-Gruppe „*boden*“, die Schichtenstreckung der *Wurzelzone* des Bodens. Nach der Beschreibung im Kapitel 5.3.2 ist das der vertikale Bereich, in dem die Wurzeln der Pflanzen dem Boden das Wasser entziehen, welches oberhalb der Bodengrenzfläche von ihren Blättern verdunstet wird. Die Vorgabewerte sind $krmin1=3$ und $krmax1=7$, d. h. die Wurzelzone erstreckt sich über die Bodenschichten 3 bis 7.

Das Bodenmodell der begrünten Dächer benutzt zwar die Schichteinteilung $dz_b(k)$ des Erdbodenmodells, hat aber eigene Parameter des Bodentyps und der Schichtanzahl, die über die Variablen

- $isdach$ und $nbdach$

der Namelist-Gruppe „*param*“ spezifiziert werden. Vorgaben: *isdach*=2 (lehmgiger Sand) und *nbdach*=7. Die Gesamterstreckung des Bodenmodells der Dachbegrünung beträgt damit 25 cm. Die Wurzelzone erstreckt sich unveränderbar über die Schichten 3 bis *nbdach*.

6.1.4 Anfangsprofile und weitere meteorologische Parameter

Jede Modellsimulation mit der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 bedarf der Festlegung von *Anfangsprofilen* für den Wind, die Lufttemperatur und die spezifische Feuchte zur Startzeit der 1d Modellsimulation sowie weiterer meteorologischer Parameter.

Das Anfangsprofil für den Wind wird durch die Spezifikation der drei Variablen

- *wind*, *phiwin* und *hwin*

der Namelist-Gruppe „*profile*“ festgelegt. Dabei ist *wind* die Windgeschwindigkeit in m s^{-1} , *phiwin* die Windrichtung in Grad (0° = Nord, 90° = Ost) und *hwin* die Höhe in m über Grund, für welche diese Angaben gelten sollen. Das von MUKLIMO_3 daraus konstruierte Anfangsprofil der Windgeschwindigkeit ist höhenkonstant über die gesamte Erstreckung des 1d Antriebsmodells. In der folgenden 1d Modellsimulation werden die Windgeschwindigkeit und die Windrichtung dann, bis zum Start des 3d Modells, in der Höhe *hwin* festgehalten. Dabei ist auch die Spezifikation des *Coriolis*-Parameters

- *f*

von Bedeutung, der mit 0.0001 s^{-1} vorbelegt ist.

Detaillierter sind die Gestaltungsmöglichkeiten für die vertikalen Anfangsverteilungen der Lufttemperatur und der atmosphärischen Feuchte, indem stückweise *lineare* Profile vorgebar sind. Für die Lufttemperatur können über die Feldvariablen

- *ht* und *temp*

bis zu 5 Stützstellen *ht(i)* (in m ü. Grund) und Stützwerte *temp(i)* (in $^\circ\text{C}$) angegeben werden. Zwischen ihnen wird das Anfangsprofil durch lineare *Interpolation* festgelegt. Als weitere Stützstelle kommt die Bodengrenzfläche mit dem über die Variable

- *tb0*

wählbaren Anfangswert der *Bodentemperatur* hinzu. Liegt die oberste Stützstelle des Anfangsprofils unterhalb der Grenze des 1d Modells, wird in diesem Bereich eine Abnahme der Anfangstemperatur von 0.3 K pro 100 m modelliert. Vom Programmnutzer über die Variablen

- *tw0* und *tinn*

änderbar sind zudem die Temperatur der *Wasserflächen* sowie die *Gebäudeinnentemperatur*. Sie sind mit 18°C bzw. 20°C vorbelegt und werden während der gesamten Simulation konstant gehalten.

In ähnlicher Weise wie die Temperatur wird das Anfangsprofil der atmosphärischen Feuchte aus den Stützstellen und Stützwerten

- *hq* und *qrel*

ermittelt mit bis zu 5 Stützwerten $q_{rel}(i)$ der *relativen* Feuchte, anzugeben in %. Oberhalb der obersten und unterhalb der untersten Stützstelle wird das anfängliche Feuchteprofil ggf. extrapoliert, indem der oberste bzw. unterste Stützwert der relativen Feuchte konstant fortgesetzt wird.

Die Anfangsfeuchte im Erdboden (volumetrischer Wassergehalt) wird über die ganzzahlige Variable

- *ifeu1d*

der Namelistgruppe „*boden*“ festgelegt, wobei 6 Stufen zur Auswahl stehen. Details dazu im Anhang E.

Einfluss auf den atmosphärischen Modellablauf nimmt zudem die über die Spezifikation von

- *bedgr*

festzulegende *Himmelsbedeckung* (Werte von 0 bis 1), die in MUKLIMO_3 als während der gesamten Simulation festgehaltener Parameter der *Strahlungsberechnung* fungiert. Für einen wolkenlosen Himmel gilt *bedgr*=0 und bei vollständiger Bedeckung *bedgr*=1.

6.1.5 Zeitlicher Ablauf und Zeitschritte

Der zeitliche *Ablauf* einer Simulation sowie die Gestaltung der numerischen *Zeitschritte* wird über Variable der Namelist-Gruppe „*zeit*“ geregelt.

Die logische Variable

- MESZ

gibt Auskunft, ob für die folgenden Zeitangaben die mitteleuropäische Sommerzeit oder die mitteleuropäische Standardzeit MEZ gilt. Vorgabe ist MESZ = .true.

Mit den Variablen

- *monat*, *itag0* und *lst0*

wird die Startzeit des 1d Antriebsmodells nach Monat, Tag und Stunde festgelegt,

- *itag1* und *lst1*

bestimmen, unter Beibehaltung von *monat*, den Tag und die Stunde, zu der die 3d Simulation beginnt. Die Spezifikation von

- *itag2* zusammen mit *lst2*

legt das Ende der Simulation fest. Liegt zwischen den beiden Startzeiten bzw. zwischen Startzeit und Simulation sende ein Monatswechsel, müssen *itag1* bzw. *itag2* über das Monatsende hinaus fortgezählt werden.

Weitere Variable regeln das Zeitschrittverhalten von MUKLIMO_3:

- *dt1d*

legt den Zeitschritt für die Integration des 1d Antriebsmodells fest. Angabe in s, Vorgabe: $dt1d = 2$. Für den Zeitschritt

- *dt3d*

der 3d Simulation gilt eine Sondervereinbarung: Bei der Spezifikation $dt3d=0$ wird entweder mit *dynamischem* Zeitschritt gerechnet, d. h. für *dt3d* werden modellintern auf der Grundlage von numerischen Stabilitätskriterien angemessene und ständig aktualisierte Werte ermittelt, oder aber, wenn die logische Variable

- *dtread*

auf *.true.* gesetzt ist, von einer unter

- *dt_file*

angegebenen *Zeitschrittdatei* eingelesen. Das Gegenstück zu *dtread* ist die logische Variable

- *dtwrite.*

Auf *.true.* gesetzt, bewirkt sie, dass alle im Verlauf der 3d Simulation benutzten Zeitschritte in die als *dt_file* vereinbarte Zeitschrittdatei *herausgeschrieben* werden. Anschließend kann *dt_file*, in Verbindung mit *dtread = .true.*, in *Vergleichssimulationen* als Einlesedatei für die Zeitschritte vereinbart werden. Diese Möglichkeit ist wichtig insbesondere für *Sensitivitätsstudien*, bei denen gezielte Eingriffe in die Modellkonfiguration vorgenommen werden, denn sie garantiert die Verwendung absolut gleicher Zeitschritte. Dadurch wird ein *Auseinanderdriften* der Modellresultate aufgrund unterschiedlicher Zeitschritte vermieden.

Von Bedeutung in Zusammenhang mit der dynamischen Zeitschrittwahl $dt3d=0$ ist die Variable

- *dtfact,*

die mit Eins vorbelegt ist und mit deren Hilfe der dynamisch errechnete Zeitschritt *verkleinert* werden kann:

$$dt3d \rightarrow dtfact * dt3d .$$

Das kann erforderlich sein, wenn eine Simulation aus irgendeinem Grund einmal numerisch *instabil* geworden ist. Diese Möglichkeit ist wegen der großenteils expliziten Integrationsverfahren der prognostischen Modellgleichungen nie ganz ausgeschlossen und kann ihre Ursachen z. B. in einer sehr komplexen Orographie haben. Die Behebung eines solchen Problems gelingt oftmals, indem zunächst einmal mittels *dtfact* die Zeitschritte der Simulation halbiert werden.

Die ganzzahlige Variable

- *minb*

legt den – von *dt3d* verschiedenen – Zeitschritt (in min) fest, mit dem die prognostischen Gleichungen des *Bodenmodells* integriert werden. Sie ist mit *minb=1* vorbelegt und wird normalerweise nicht geändert.

6.1.6 Resultatsausgabe

Die Resultatsausgabe der Thermodynamikversion von MUKLIMO_3 wird über die Variablen der Namelist-Gruppe „*output*“ gesteuert. Während der 3d Simulation werden die vereinbarten Ergebnisse standardmäßig alle

zwei Stunden (kann über die Variable *ia* geändert werden, siehe Anhang E) in das als *directry* spezifizierte Ergebnisverzeichnis, bei fehlender Spezifikation in das *aktuelle* Verzeichnis geschrieben. Die Ausgabe zur Modellkonfiguration sowie die *1d* Ergebnisse werden hingegen in den *Standard-Output* des Rechensystems geschrieben. Beim *PC* ist das der Bildschirm. Durch Ergebnisumleitung beim Startbefehl von MUKLIMO_3 können auch diese Resultate in eine ausgewählte Datei gelenkt werden.

Vorgabemäßig vereinbart ist die Ausgabe der *2d* horizontalen Geschwindigkeitsfelder (Variable *iu* vorgegeben als *iu = 1*) für das unterste atmosphärische Niveau und zusätzlich für eine vorgebbare Höhe *href* über Grund sowie der atmosphärischen Temperatur und der relativen Feuchte für dieselben Niveaus (Variablen *itp* und *iqr* vorgegeben als *itp=1* bzw. *iqr=1*). Wünscht man die Ausgabe der kompletten *3d* Ergebnisfelder, müssen die logischen Variablen *uvwcompl*, *tcompl* bzw. *qcompl* auf *.true.* gesetzt werden. Neben diesen Standardfeldern gibt es noch zahlreiche weitere Ergebnisse, deren Ausgabe durch entsprechende Spezifikation der zugehörigen Variablen in „*output*“ vereinbart werden kann, so z. B. die Bodentemperatur und der volumetrische Wassergehalt im Boden, die maximale und minimale Temperatur des untersten atmosphärischen Niveaus, die turbulenten Diffusionskoeffizienten oder die kurz- und langwellige Einstrahlung auf den Boden. Zudem können *Sonderausgabezeiten*, eine gesonderte Resultatsausgabe für bestimmte atmosphärische „Säulen“ des Modellgebiets sowie *Zeitreihen* mit stündlicher Resultatsausgabe für ausgesuchte Punkte des Modellgebiets vereinbart werden. Detaillierte Auskunft hierzu gibt die Beschreibung der Namelist-Gruppe „*output*“ im Anhang E.

Von Wichtigkeit für den Programmnutzer sind zudem die Zeichenvariablen *xtension* und *commres(5)* der Namelist-Gruppe „*output*“. Mit *xtension* wird eine maximal drei Zeichen umfassende *Namenserweiterung* vereinbart, die an die Bezeichnung sämtlicher Ergebnisdateien einer Simulation angehängt wird. Diese heißen dann z. B. „*t.xtension*“ (3d Temperaturfeld), „*tll.xtension*“ (Temperaturfeld im untersten atmosphärischen Niveau), „*t_href.xtension*“ (Temperatur in der Höhe *href* über Grund), „*uvw.xtension*“ (3d Geschwindigkeitsfeld) usw. Durch unterschiedliche Festlegung von *xtension* können insbesondere verschiedene Modellläufe zu geänderten Bedingungen ein- und desselben Projekts auseinander gehalten werden. Wird weder *xtension* noch *directry* geändert, so überschreibt MUKLIMO_3 bei einem Folgeauflauf die Ergebnisse einer vorangehenden Simulation ohne Warnung oder Rückfrage. Mit *commres(1)* bis *commres(5)* können bis zu fünf Kommentarzeilen vereinbart werden, die von MUKLIMO_3 in den Kopf sämtlicher Ergebnisdateien geschrieben werden.

Für die Ausgabe zwei- und dreidimensionaler Ergebnisfelder verwendet die Thermodynamikversion von MUKLIMO_3 das für seine Basisversion entwickelte und im ersten Teil dieses Berichts (SIEVERS, 2012) beschriebene Dateiformat. Es zeichnet sich dadurch aus, dass den eigentlichen Daten jeder Ergebniszeile vier (bei skalaren Resultaten) oder fünf (bei vektorialen Feldern) *Kennzahlen* vorangestellt sind, die eine Zuordnung der Zeile ermöglichen. Zu den Details siehe Kapitel 5.5 in SIEVERS (2012).

6.2 Maximale Feldabmessungen

Der Quellcode zur Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 ist mit *festen* Abmessungen für die Felder der Modellkonfiguration und der thermodynamischen Variablen programmiert. Die festen Feldgrenzen haben den Charakter von Maximalparametern und werden über die *Include-Datei* „*limits.inc*“, die beim Übersetzen des Quellcodes zugegen sein muss, in das Programm eingebracht. In ihr werden die Maximalwerte

- *n1max*,
- *nxmax*, *nymax* und *nzmax*,
- *nbmax*,
- *ngmax* und *nbmmax* sowie

- $nqmax$

festgelegt.

In der ausführbaren Fassung des Programms MUKLIMO_3 setzen sie *Obergrenzen* für die Gestaltung aktueller Modellkonfigurationen, d. h. deren über die Eingabedatei festzulegende Feldgrenzen dürfen die Maximalwerte wohl unter-, aber nicht überschreiten. Im Quellcode hingegen können Programmnutzer die Maximalwerte, wenn nötig, durch Ändern von „*limits.inc*“ und anschließendes Neu-Übersetzen des Programms an die Erfordernisse ihrer Projekte anpassen. Zu bedenken ist aber, dass die Größe der Maximalparameter entscheidend ist für den Speicherplatzbedarf des ausführbaren Programms: Je nach Rechner können zu groß vereinbarte maximale Feldgrenzen die „Performance“ des Programms beeinträchtigen oder seine Ausführung gänzlich unmöglich machen.

Mit den Maximalwerten von „*limits.inc*“ sind die folgenden Beschränkungen der Feldabmessungen aktueller Projekte verbunden:

- Die aktuelle vertikale Erstreckung $n1d$ des $1d$ Modells unterliegt dabei – unter Beachtung der von MUKLIMO_3 modellintern zum vertikalen Gitter hinzugefügten ausdehnungslosen Bodenschicht, siehe Kapitel 6.1.1 – der Beschränkung

$$n1d \leq n1max - 1 .$$

- In gleicher Weise gilt für die vertikale Erstreckung n des $3d$ Modells die Einschränkung

$$n \leq nzmax - 1 .$$

- Bei den horizontalen Abmessungen m und l muss die veränderbare Gittererweiterung $nadd$ mit einbezogen werden, d. h. es gelten die Beschränkungen

$$m + 2nadd \leq nxmax ; \quad l + 2nadd \leq nymax .$$

- Die Anzahlen der Bodenschichten nb sowie der Schichten des Bodensubstrats der Dachbegrünung $nbdach$ sind durch $nbmax$ begrenzt, es sind also die Bedingungen

$$nb \leq nbmax ; \quad nbdach \leq nbmax$$

zu beachten.

- Die vertikalen Abmessungen ng der Felder für die unaufgelöste Bebauung und nbm des Baumbestands werden *nicht* über die Eingabedatei geregelt. Sie ergeben sich vielmehr aus den Vorgaben zur Flächennutzung in Verbindung mit der Orographie und der vertikalen Gitterauflösung. Dennoch gelten für sie die Beschränkungen

$$ng \leq ngmax ; \quad nbm \leq nbmmax .$$

Außerdem wird von MUKLIMO_3 verlangt, dass wenigstens die *obersten* drei Gitterschichten frei von Bebauung und Baumbestand bleiben. Wenn der Speicherplatzbedarf des ausführbaren Programms MUKLIMO_3 keine entscheidende Bedeutung hat, ist es deshalb *vernünftig*, die Parameter $ngmax$ und $nbmmax$ an die maximale Vertikalerstreckung $nzmax$ anzukoppeln und sie in der Include-Datei *limits.inc* festzulegen als

$$ngmax = nzmax - 3 ; \quad nbmmax = nzmax - 3 .$$

Ist es dagegen wichtig, das ausführbare Programm für eine aktuelle Simulation möglichst „klein“ zu halten, können kleinere Werte für $ngmax$ und $nbmmax$ angebracht sein, z. B. wenn gar keine unaufgelöste Bebauung oder kein Baumbestand vorhanden sind.

- Der Parameter nq_{max} betrifft die Modellierung *aufgelöster* Bebauung und legt die maximale Anzahl von Quadern fest, die in der Rechteckdatei der aufgelösten Bebauung (vergleiche Kap. 6.1.2) zur Gestaltung der Gebäude spezifiziert werden dürfen.

6.3 Eindimensionales Antriebsmodell

Die Rolle des sogenannten eindimensionalen (oder kurz $1d$) Vorschaltmodells der PC-Basisversion von MUKLIMO_3 (SIEVERS, 2012), das die Anfangs- sowie die oberen Randwerte der $3d$ Simulationen liefert, wird in der Thermodynamikversion von dessen $1d$ Antriebsmodell übernommen. Die Umbenennung erfolgt, da ihm erweiterte Aufgaben zukommen: Im Gesamtkonzept der Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 spielt es die Rolle eines *regionalen* Antriebs. Wie das $3d$ Modell umfasst es

- atmosphärische Bilanzgleichungen für den *Wind*, die *Lufttemperatur* und die spezifische *Feuchte* sowie
- Bilanzgleichungen für die Temperatur und den volumetrischen Wassergehalt im *Erboden*, die über ein
- *Grenzflächenmodell* der Erdoberfläche, das auch Vegetation berücksichtigt, miteinander verknüpft sind.

Diese Gleichungen entsprechen denen des $3d$ Modells (vergleiche die Kapitel 3 und 5) mit dem Unterschied, dass für das $1d$ Modell *horizontale Homogenität* verlangt wird. Außerdem sind im $1d$ Modell keine Bebauung und kein Baumbestand zugelassen.

Hinzu kommen Modellgleichungen zur Berechnung der auf den Erdboden auftreffenden

- *kurz-* und *langwelligen* Strahlungsflussdichten,

die gleichermaßen für das $1d$ wie auch das $3d$ Modell gelten.

Entsprechend seiner Rolle eines *regionalen* Antriebs gibt das $1d$ Modell die Randwerte des Windes, der Lufttemperatur und der spezifischen Feuchte an der Obergrenze des dreidimensionalen Modells vor. Der *Versiegelungsgrad* $vs1d$ (in der Namelist-Gruppe „*boden*“ der Eingabedatei) sowie die über den *Höhenindex* $n01d$ (in der Namelist-Gruppe „*grid*“) steuerbare Geländehöhe des $1d$ Modells sollten deshalb so vorgegeben werden, dass sie die Verhältnisse in der Umgebung des jeweiligen Modellgebiets widerspiegeln. Des Weiteren sollte die vertikale Erstreckung des $1d$ Modells *nicht* unter 1 km liegen, zum einen, damit die obere Randbedingung mit festgehaltenen Werten der Temperatur und der spezifischen Feuchte vertretbar erscheint, und zum anderen weil die Temperatur- und Feuchtwerte des untersten atmosphärischen Kilometers zur Berechnung der langwelligen Gegenstrahlung herangezogen werden.

Beim Betrieb des $1d$ Modells können zwei *Phasen* unterschieden werden:

1. Die *Phase 1* reicht vom Beginn der Simulation (Start des $1d$ Modells) bis zum Start des $3d$ Modells. Die Anfangsprofile für diesen Teil der Simulation werden wie in Kapitel 6.1.4 beschrieben festgelegt. Sodann werden die $1d$ Modellgleichungen für die vorgegebene Zeit integriert mit festen Werten der Lufttemperatur und der spezifischen Feuchte an der Modellobergrenze. Die Windgeschwindigkeit und die Windrichtung hingegen werden in der Höhe $hwin$ festgehalten (vergleiche Kap. 6.1.4). Die erste Phase der $1d$ Simulation dient der Erzeugung *ingeschwungener* Profile sowohl der atmosphärischen wie auch der Bodenvariablen. Am Ende der ersten Simulationsphase steht die Übertragung der dann gültigen Variablenwerte vom $1d$ auf das $3d$ Modellgebiet, wo sie als Anfangswerte dienen.

2. Die *zweite* Phase der *1d* Modellsimulation beginnt zeitgleich mit dem Start der *3d* Simulation, zu der sie anschließend *parallel* verläuft. Das heißt auch, dass beide Simulationen gemeinsam mit dem Zeitschritt des *3d* Modells durchgeführt werden. Als weiterer Unterschied zur *1d* Phase werden die Horizontalkomponenten des Windes nicht mehr in der Höhe *hwin* festgehalten, sondern stattdessen an der Obergrenze $z(n)$ des *3d* Modells. Aufgabe der *1d* Simulation ist es jetzt, fortlaufend aktualisierte *obere* Randwerte für das *3d* Modell zu liefern. Das betrifft die Lufttemperatur und die spezifische Feuchte, die Vorticity-Komponenten und die Austauschkoeffizienten, vergleiche Kapitel 3.4.2. Darüber hinaus liefert das *1d* Modell die sich fortlaufend ändernde kurz- und langwellige Einstrahlung auf den Boden des *3d* Modellgebiets.

Die *1d* Simulation endet zeitgleich mit der *3d* Simulation.

6.4 Dreidimensionale Simulation

Die *dreidimensionale* Simulation ist das Herzstück einer jeden MUKLIMO_3 Modellrechnung. Sie startet zu einem vom Programmnutzer über die Eingabedatei vorgegebenen Zeitpunkt (siehe Kap. 6.1.5) mit der Initialisierung der *3d* Variablen gemäß den dann vorliegenden Resultaten der *1d* Simulation. Dabei werden die *1d* Profile für die Lufttemperatur, die spezifische Feuchte und die Austauschkoeffizienten sowie die beiden Komponenten der impulsbezogenen Stromfunktion und Vorticity, soweit möglich, *höhenkonform* vom *1d* auf das *3d* Gitter übertragen. Sonderregelungen sind nur da erforderlich, wo atmosphärische Niveaus des *3d* Gitters tiefer liegen als das unterste atmosphärische Niveau des *1d* Modells. Dieser Fall kann eintreten, wenn der Geländehöhenindex $n01d$ des *1d* Modells (vergleiche Kap. 6.3) mit einem Wert > 0 belegt ist. Die *3d* Anfangswerte der Stromfunktion und der Vorticity werden dann Null gesetzt, während die spezifische Feuchte und die Austauschkoeffizienten mit den untersten atmosphärischen Werten der *1d* Profile belegt werden. Die Anfangswerte der Lufttemperatur erhalten demgegenüber einen „Zuschlag“ von 0.6 K pro 100 m Höhenabnahme gegenüber dem untersten atmosphärischen Niveau des *1d* Modells.

Die Anfangswerte der in jeder Gittersäule unter dem zugehörigen Geländeniveau angesiedelten *Bodenmodelle* werden ebenfalls aus den Resultaten der *1d* Simulation übernommen. Dabei werden die Werte des volumetrischen Wassergehalts unverändert beibehalten, während bei der Übertragung der Temperaturen der versiegelten und unversiegelten Bodenanteile eine Abkühlung von 0.6 K pro 100 m Höhenanstieg vorgenommen wird. Dieser Wert entspricht einer Übertragung der mittleren atmosphärischen Temperaturabnahme mit der Höhe auf den Boden. Auch die Anfangswerte der Temperatur und Feuchte im Bodensubstrat der *begrünt*en Dächer werden aus den Resultaten des *1d* Modells für die unversiegelten Bodenanteile übernommen. Hierbei wird der volumetrische Wassergehalt unverändert von Bodenniveau zu Bodenniveau übertragen, während die Bodentemperatur (ohne Höhenanpassung) vor der Übertragung so modifiziert wird, dass sie sich mit zunehmender Tiefe dem Vorgabewert der Gebäudeinnentemperatur T_{inn} annähert. Vergleiche hierzu auch Kapitel 5.5. Nach Festlegung der Anfangswerte für das *3d* Feld der Lufttemperatur werden die Wand- und Dachtemperaturen der unaufgelösten Bebauung sowie die anfänglichen Blatttemperaturen des Baumbestands an diese Werte angeglichen. Entsprechendes gilt auch für die den Canopy-Modellen der Bodengrenzfläche und der begrünten Dächer zugeordneten Variablen der Blattflächentemperatur sowie der Lufttemperatur und -feuchte innerhalb des jeweiligen Bewuchses.

Die Initialisierung des *3d* Modells wird fortgeführt mit einer *erstmaligen* Integration der *Stromfunktionsgleichung* (54) nach dem im ersten Teil des Berichts besprochenen iterativen Lösungsverfahren (Kap. 3.4.3 in SIEVERS, 2012). Wegen der Unangepasstheit der anfänglichen, aus der *1d* Simulation übernommenen Anfangswerte der Stromfunktionskomponenten an die dreidimensionalen Gegebenheiten werden dabei 50 anstatt der sonst verwendeten 5 Iterationsschritte ausgeführt. Aus den so erhaltenen verbesserten Stromfunktionswerten werden dann mithilfe der Gleichungen (51), (52) und (55) zunächst die Anfangswerte der *Impulsdichte* $\vec{\rho v}$ und

daraus dann die Anfangswerte der *Geschwindigkeit* $\widehat{\vec{v}}$ und der geschwindigkeitsbezogenen *Vorticity* $\vec{\zeta}$ errechnet.

Nach der Initialisierung der Variablen startet die zeitliche Integration der 3d Modellgleichungen. Sie beinhaltet die im Folgenden beschriebenen Operationen:

- Integration der Gleichungen (88) und (102) des atmosphärischen Wärme- und Feuchtehaushalts. Sie wird mit jedem numerischen Zeitschritt durchgeführt, wobei die Gesamtoperation, wie in den Kapiteln 3.2.6 und 3.3 dargestellt, in Teiloperationen untergliedert ist. Diese werden nacheinander (Time-Splitting) in zwei *Halbschritten* ausgeführt. Dabei wird die Reihenfolge der Teiloperationen zur Symmetrisierung des Verfahrens im zweiten Halbschritt umgekehrt. Zur Kompensation der innerhalb der Zeitschrittroutine von MUKLIMO_3 namens *timestep* jeweils mit halbem Zeitschritt $dt/2$ aufgerufenen Teiloperationen wird *timestep* ihrerseits mit der Zeitschrittspezifikation $dt = 2 * dt3d$ aufgerufen, sodass jede Teiloperation letztlich mit dem Zeitschritt $dt3d$ ausgeführt wird. Durch die Aufteilung des Gesamtschritts in zwei Halbschritte entsteht also unter dem Strich *kein* numerischer Mehraufwand.
- Diagnostische Berechnung der *Skalengrößen* u_* , θ_* und q_* , die in die untere *Randbedingung* der atmosphärischen Bilanzgleichungen eingehen, siehe Kapitel 3.4.1. Dabei wird die Schubspannungsgeschwindigkeit u_* mit jedem Zeitschritt neu berechnet. Zur *Dämpfung* von unerwünschten *Feed-Back*-Effekten mit der Bewegungsgleichung wird u_* *relaxiert*, d. h. als gewichtetes Mittel aus dem errechneten „neuen“ Wert und dem jeweils gültigen „alten“ Wert errechnet. Der Gewichtungsfaktor für den alten Wert ist 0.9. Die sehr viel aufwendigere Bestimmung von θ_* und q_* , die den Aufruf des *Canopy*-Modells (siehe Kap. 5.4) erfordert, ist dagegen an den Integrationsrhythmus der Bodengleichungen angeglichen und erfolgt nur alle *minb* Minuten. Zu *minb* siehe Kapitel 6.1.5.
- Zeitliche Integration der zweikomponentigen impulsbezogenen *Vorticity*-Gleichung (72 und 73), gefolgt von der diagnostischen Lösung der *Stromfunktionsgleichung* (54), danach Neuberechnung der Felder der *Impulsdichte* $\widehat{\rho\vec{v}}$, der *Geschwindigkeit* $\widehat{\vec{v}}$ und der (geschwindigkeitsbezogenen) *Vorticity* $\vec{\zeta}$. Auch diese Operationen werden in zwei Halbschritte aufgeteilt, im Unterschied zur Neuberechnung der Lufttemperatur und der spezifischen Feuchte aber nur mit jedem *sechsten* Zeitschritt ausgeführt. Die numerische Intention dabei ist, durch die reduzierte Anzahl der Stromfunktions- und Vorticity-Berechnungen *Rechenzeit* zu sparen. Begründet ist die Vorgehensweise dadurch, dass das Geschwindigkeitsfeld relativ schnell auf Änderungen der äußeren Bedingungen (Temperatur, Austauschkoeffizienten) reagiert. Es befindet sich deshalb stets in der Nähe eines *quasi-stationären* Gleichgewichtszustands. Dies führt zu der Erkenntnis, dass die Windgeschwindigkeit in einem kleinskaligen Modell wie MUKLIMO_3 nicht mit jedem Zeitschritt neu berechnet werden muss. Stattdessen ist es ohne große Fehler möglich, das Geschwindigkeitsfeld, wie andere Größen auch (z. B. die Austauschkoeffizienten oder die Skalengrößen θ_* und q_*), jeweils für eine Weile konstant zu lassen, um es dann an die zwischenzeitlich geringfügig geänderten Bedingungen „nachzuführen“.
- Neuberechnung der *Austauschkoeffizienten*. Sie erfolgt jeweils vor den beiden Halbschritten zur Integration der Vorticity-Gleichung.
- *Kopplung* der Variablen des 3d Modells an diejenigen des 1d Modells. Ist im Kapitel 3.4.2 beschrieben und wird jeweils im Anschluss an die beiden Halbschritte zur Integration der Vorticity-Gleichung durchgeführt.
- Zeitliche Integration der Bilanzgleichungen des *Bodenmodells* zur Prognose der Bodentemperatur und der Bodenfeuchte. Diese Berechnung erfolgt mit eigenem Zeitschritt *dtb* alle *minb* Minuten,
- Berechnung der auf den Boden auftreffenden kurz- und langwelligen *Strahlungsflussdichten*. Erfolgt alle

15 Minuten.

Alle genannten Operationen der *3d* Simulation werden von den entsprechenden Operationen des *1d* Modells begleitet, die *parallel* dazu durchgeführt werden. Sie liefern die ständig aktualisierten oberen *Randwerte* der *3d* Simulation.

Die *Resultatsausgabe* erfolgt vorgabemäßig im 2-Stunden-Rhythmus, siehe Kapitel 6.1.6. Dabei dürfen die ausgegebenen Anfangsfelder *keinesfalls* als erste Resultate der *3d* Simulation gedeutet werden. Sie sind *uneingeschwungen* und dienen nur Kontrollzwecken. Erst nach mindestens einstündiger Simulation beginnen die Ergebnisse brauchbar zu werden. Die *3d* Simulation endet zum in der Eingabedatei in der Namelist-Gruppe „zeit“ angegebenen Zeitpunkt, vergleiche auch Kapitel 6.1.5.

Anhang

A Darcy-Gesetz

Das Darcy-Gesetz (benannt nach dem französischen Ingenieur Jean Darcy, der es um die Mitte des 19. Jahrhunderts erstmalig formuliert hat) dient der Berechnung von Flüssigkeitsströmen durch poröse Medien und wird insbesondere zur Berechnung von Grundwasserströmungen herangezogen. Es gilt bei geringen Strömungsgeschwindigkeiten und besagt, dass der Volumenfluss Q des Wassers durch einen Querschnitt A zwischen zwei Punkten 1 und 2 proportional zur Differenz ihrer so genannten *hydraulischen* Potentiale h_{hydr} (Einheit m) und umgekehrt proportional zum Abstand der Punkte ist. Dem entspricht seine vektorielle Formulierung

$$\frac{1}{\rho_2} \vec{J}_b^2 = -K_s \nabla h_{\text{hydr}}, \quad (345)$$

in welcher die Volumenflussdichte des Wassers (Wasservolumen pro Querschnitt und Zeit) durch den Quotienten \vec{J}_b^2/ρ_2 seiner in Kapitel 5.3.2 eingeführten Diffusionsflussdichte \vec{J}_b^2 (Einheit $\text{kg m}^2\text{s}^{-1}$) und der Dichte ρ_2 des Wassers ausgedrückt ist. Die von der Art des durchströmten porösen Mediums abhängige „Proportionalitätskonstante“ des Darcy-Gesetzes wird in der Bodenhydrologie als hydraulische Leitfähigkeit oder auch als Widerstandsbeiwert bezeichnet. Das hier verwendete Symbol K_s kennzeichnet ihren Sättigungswert (Bodenporen vollständig mit Wasser gefüllt) in Unterscheidung von der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit K_{η} der Gleichung (260) des Kapitels 5.3.2.

Das hydraulische Potential h_{hydr} der Darcy-Gleichung (345) repräsentiert aus mikroskopischer Sicht einen Mittelwert der Summe aller auf das Wasser innerhalb der Bodenporen einwirkenden Teilpotentiale unter Einschluss kapillarer Effekte. Da das Potential so aber kaum bestimmbar ist, muss es auf makroskopisch messbare Größen zurückgeführt werden. Das gelingt durch einen gedanklichen Kunstgriff: Zur Definition des hydraulischen Potentials an einem Ort \vec{x} im Boden denke man sich dort eine kleine Aussparung der Bodenmatrix, die aber doch groß genug ist, um in ihr den Druck p ungestört von irgendwelchen Kapillarkräften messen zu können. Mit seiner Hilfe wird das hydraulische Potential h_{hydr} dann erklärt als

$$h_{\text{hydr}}(\vec{x}) := \frac{p(\vec{x})}{\rho_2 g} + z, \quad (346)$$

wobei g die Schwerkraft und z die Vertikalkoordinate des Messpunkts \vec{x} ist.

Für Messungen des hydraulischen Potentials ist entsprechend dieser Definition das Einbringen einer Druckmess-Sonde in das poröse Medium erforderlich. Bei Grundwasserströmungen gibt es dafür ein recht einfaches Verfahren, das darin besteht, „Standrohre“ mit wasserdurchlässiger Grundfläche in die wasserführende Schicht einzubringen und die Höhe der sich in ihnen einstellenden Wasserspiegel zu messen. Deren Differenzen an verschiedenen Messpunkten entsprechen dann den für die Strömung maßgeblichen Differenzen der hydraulischen Potentiale.

Zum Vergleich des aus thermodynamischen Überlegungen herrührenden Ansatzes (260) für die Bodenwasserflussdichte \vec{J}_b^2 mit dem bodenhydrologischen Darcy-Gesetz (345) muss das Potential $\mu_{2;b}$ auf messbare Größen zurückgeführt werden. Dafür wird ebenfalls angenommen – wie schon bei der Definition des hydraulischen Potentials – dass der Messpunkt \vec{x} von einem gedachten winzigen Hohlraum umgeben ist. Zwischen dem Wasser in diesem Hohlraum mit dem chemischen Potential $\mu_2(\vec{x})$ und dem Bodenwasser an einem Nachbarpunkt \vec{x}' in unmittelbarer Umgebung des Hohlraums mit dem chemischen Potential $\mu_{2;b}(\vec{x}')$ besteht dann chemisches Gleichgewicht, d. h. es gilt die Beziehung

$$\mu_{2;b}(\vec{x}) = \lim_{\vec{x}' \rightarrow \vec{x}} \mu_{2;b}(\vec{x}') = \mu_2(\vec{x}). \quad (347)$$

Benutzt man jetzt den Zusammenhang

$$\mu_2 = f_2(T) + \frac{p}{\rho_2} \quad (348)$$

der Gleichung (264), in der $f_2(T)$ die allein von der Temperatur T abhängige spezifische *freie Energie* des Wassers ist, so folgt daraus

$$\nabla_T \mu_{2;b} = \frac{1}{\rho_2} \nabla p. \quad (349)$$

Setzt man dieses Ergebnis in den Ansatz (260) ein, so wird ersichtlich, dass er für wassergesättigte Böden und mit K_s anstelle von K_η mit dem Darcy-Gesetz (345) übereinstimmt.

B Diffusionsflussdichte der trockenen Luft im Boden

Zur Elimination der Diffusionsflussdichte der im Boden befindlichen trockenen Luft \vec{J}_b^0 aus der prognostischen Gleichung des Gesamtwassers (259) wird die hier wiederholte Bilanzgleichung

$$\frac{\partial \rho_b^0}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_b^0 = 0 \quad (350)$$

der trockenen Luft (vergleiche Gl. 251) herangezogen und die zeitliche Entwicklung ihrer Partialdichte ρ_b^0 auf die zeitlichen Änderungen der Bodenvariablen T , η und p zurückgeführt, d. h. dargestellt als

$$\frac{\partial \rho_b^0}{\partial t} = \left(\frac{\partial \rho_b^0}{\partial T} \right)_{p,\eta} \frac{\partial T}{\partial t} + \left(\frac{\partial \rho_b^0}{\partial \eta} \right)_{T,p} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \left(\frac{\partial \rho_b^0}{\partial p} \right)_{T,\eta} \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (351)$$

Für den Druck p in der Gasphase des Bodens wurde aber in Kapitel 5.3.1 vereinbart, dass er sich stets an den atmosphärischen Luftdruck angleicht. Damit werden seine zeitlichen Änderungen vernachlässigbar, da auch im atmosphärischen Modell von MUKLIMO_3 eine eventuelle Drucktendenz $\partial p / \partial t$ außer Betracht bleibt. Im Boden gilt also

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad (352)$$

als vereinbart. Mithilfe dieser *Filterbedingung* kann Gleichung (351) vereinfacht werden zu

$$\frac{\partial \rho_b^0}{\partial t} = C_T \frac{\partial T}{\partial t} + C_\eta \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (353)$$

wobei die Koeffizienten C_T und C_η formal erklärt sind als

$$C_T := \left(\frac{\partial \rho_b^0}{\partial T} \right)_{p,\eta} \quad \text{und} \quad C_\eta := \left(\frac{\partial \rho_b^0}{\partial \eta} \right)_{T,p}. \quad (354)$$

Die Divergenz der Diffusionsflussdichte der trockenen Luft $\nabla \cdot \vec{J}_b^0$ kann somit umgeformt werden zu

$$\nabla \cdot \vec{J}_b^0 = -\frac{\partial \rho_b^0}{\partial t} = -C_T \frac{\partial T}{\partial t} - C_\eta \frac{\partial \eta}{\partial t}. \quad (355)$$

Zur expliziten Berechnung der Koeffizienten C_T und C_η benötigt man eine Darstellung von ρ_b^0 in Abhängigkeit von den Bodenvariablen T , p und η , d. h. in der Form

$$\rho_b^0 = \rho_b^0(T, p, \eta). \quad (356)$$

Als Ausgangsgleichung hierfür wird die (auf das Gesamtvolumen des Bodens bezogene) Partialdichte ρ_b^0 der trockenen Luft mithilfe ihrer idealen Gasgleichung dargestellt als

$$\rho_b^0 = (\eta_s - \eta^2) \rho_{0;b} = (\eta_s - \eta^2) \frac{p_b^0}{R_0 T}. \quad (357)$$

Dabei ist verwendet, dass die trockene Luft auf den Volumenanteil $\eta_s - \eta^2$ der Gasphase des Bodens beschränkt ist. Gleichung (357) zeigt noch nicht die gewünschte Abhängigkeit, da sie von der Form $\rho_b^0 = \rho_b^0(T, \eta^2, p_b^0)$ ist. Mithilfe der Beziehungen

$$p_b^0 = p - p_b^1$$

sowie

$$\eta_s - \eta^2 = \eta_s - \eta + \eta^1 = \eta_s - \eta + \frac{\rho_b^1}{\rho_2} = \eta_s - \eta + (\eta_s - \eta^2) \frac{p_b^1}{\rho_2 R_1 T}$$

und daraus folgend

$$\eta_s - \eta^2 = (\eta_s - \eta) \frac{\rho_2 R_1 T}{\rho_2 R_1 T - p_b^1}$$

kann sie aber umgerechnet werden zu

$$\rho_b^0 = (\eta_s - \eta) \frac{p - p_b^1}{R_0 T} \frac{\rho_2 R_1 T}{\rho_2 R_1 T - p_b^1}$$

oder anders ausgedrückt

$$\rho_b^0 = (\eta_s - \eta) \frac{p - p_b^1}{R_0 T} \left(1 + \frac{p_b^1}{\rho_2 R_1 T - p_b^1} \right).$$

Beachtet man jetzt noch, dass der Partialdruck p_b^1 des Wasserdampfes im Boden gemäß Gleichung (252) mit seinem – von T und η abhängigen – Sättigungswert p_b^{21} übereinstimmt, so stellt der damit erhaltene Zusammenhang

$$\rho_b^0 = (\eta_s - \eta) \frac{p - p_b^{21}(T, \eta)}{R_0 T} \left(1 + \frac{p_b^{21}(T, \eta)}{\rho_2 R_1 T - p_b^{21}(T, \eta)} \right) \quad (358)$$

die Partialdichte ρ_b^0 in der gewünschten Form $\rho_b^0 = \rho_b^0(T, p, \eta)$ dar.

Für die Berechnung von C_T und C_η wird Gleichung (358) wegen der Abschätzung

$$p_b^{21} = \rho_{1;b} R_1 T \ll \rho_2 R_1 T \quad (359)$$

vereinfacht zu der Näherung

$$\rho_b^0 \approx (\eta_s - \eta) \frac{p - p_b^{21}(T, \eta)}{R_0 T}, \quad (360)$$

in der p_b^{21} entsprechend Gleichung (250) dargestellt wird als

$$p_b^{21} = p_b^{21}(T, \eta) = p^{21}(T) \exp(\psi_b / R_1 T) \quad (361)$$

mit dem Gleichgewichtsdampfdruck $p^{21}(T)$ von Wasser außerhalb des Bodens und mit einem nach Gleichung (283) modellierten und nur von η abhängigen Feuchtepotential ψ_b .

Für C_T erhält man dann zunächst

$$C_T = \left(\frac{\partial \rho_b^0}{\partial T} \right)_{p, \eta} \approx -\frac{\eta_s - \eta}{R_0 T^2} \left\{ p - p_b^{21} + T \left(\frac{\partial p_b^{21}}{\partial T} \right)_{\eta} \right\},$$

worin der Term $T \partial p_b^{21} / \partial T$ unter Benutzung der Clausius-Clapeyron-Gleichung

$$\frac{dp^{21}}{dT} \approx \frac{l_{21} p^{21}}{R_1 T^2}$$

für den Gleichgewichtsdampfdruck p^{21} von Wasser außerhalb des Bodens weiterentwickelt wird als

$$T \left(\frac{\partial p_b^{21}}{\partial T} \right)_\eta = \left(\frac{T}{p^{21}} \frac{dp^{21}}{dT} - \frac{\psi_b}{R_1 T} \right) p_b^{21} = \frac{l_{21} - \psi_b}{R_1 T} p_b^{21} .$$

Das Endresultat für C_T ist dann

$$C_T = \left(\frac{\partial \rho_b^0}{\partial T} \right)_{p, \eta} \approx -\frac{\eta_s - \eta}{R_0 T^2} \left\{ p - p_b^{21} \left(1 - \frac{l_{21} - \psi_b}{R_1 T} \right) \right\} . \quad (362)$$

Für C_η erhält man

$$C_\eta = \left(\frac{\partial \rho_b^0}{\partial \eta} \right)_{T, p} \approx -\frac{1}{R_0 T} \left\{ p + (\eta_s - \eta) \left(\frac{\partial p_b^{21}}{\partial \eta} \right)_T \right\} .$$

Hierin wird für die Berechnung der Ableitung $\partial p_b^{21} / \partial \eta$ die explizite Form des Feuchtepotentials ψ_b benötigt, das in MUKLIMO_3 als

$$\psi_b(\eta) = \frac{g \psi_s}{100} \left(\frac{\eta_s}{\eta} \right)^b$$

mit bodentypabhängigen Werten für ψ_s , η_s und b berechnet wird, vergleiche Formel (283) in Kapitel 5.3.5. Daraus erhält man

$$\left(\frac{\partial p_b^{21}}{\partial \eta} \right)_T = \frac{p_b^{21}}{R_1 T} \frac{d\psi_b}{d\eta} = \frac{p_b^{21}}{R_1 T} \left(-\frac{b \psi_b}{\eta} \right) ,$$

und somit

$$C_\eta = \left(\frac{\partial \rho_b^0}{\partial \eta} \right)_{T, p} \approx -\frac{1}{R_0 T} \left\{ p - p_b^{21} \frac{\eta_s - \eta}{\eta} \frac{b \psi_b}{R_1 T} \right\} . \quad (363)$$

C Diffuse Strahlung auf geneigte Flächen

Die diffuse Einstrahlung auf eine geneigte Bodengrenzfläche mit dem Normalenvektor \vec{n}_g wird gegenüber der Einstrahlung auf eine horizontale Fläche dadurch vermindert, dass die geneigte Fläche in ihrem ansteigenden Bereich den Blick auf den Himmel teilweise verstellt. Die Berechnung der dadurch verursachten Abschirmung A_d der diffusen Einstrahlung erfolgt auf Grundlage des im Kapitel 4.2 in Gleichung (165) angegebenen, hier wiederholten allgemeinen Zusammenhangs

$$A_d = \frac{\int_{sH} \cos \theta \, d\Omega}{\int_H \cos \theta \, d\Omega} , \quad (364)$$

Dabei repräsentiert H den gesamten Himmelsraum und sH seinen vom Bezugspunkt aus sichtbaren Anteil. Die Größe θ ist der Zenitwinkel, ϕ der Azimutwinkel und $d\Omega$ das infinitesimale Raumwinkelelement des Himmelsraums mit dem Zusammenhang $d\Omega = \sin \theta \, d\theta \, d\phi$.

Legt man für die folgende Betrachtung die x -Achse des Koordinatensystems in die Richtung des steilsten Anstiegs der Bodengrenzfläche, dessen Hebungswinkel $\gamma_{g,0}$ zur Flächennormalen \vec{n}_g in der Beziehung

$$\cos \gamma_{g,0} = \vec{e}_3 \cdot \vec{n}_g ; \quad \vec{e}_3 \text{ vertikaler Einheitsvektor} \quad (365)$$

steht und ersetzt in Gleichung (364) den Zenitwinkel θ durch den Hebungswinkel γ , der mit θ durch die Relation $\gamma = \pi/2 - \theta$ verknüpft ist, so kann man den Abschirmfaktor A_d darstellen als

$$A_d = 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \int_0^{\gamma_g(\phi)} \sin \gamma \cos \gamma d\gamma .$$

Hier ist $\gamma_g(\phi)$ der Hebungswinkel der geneigten Fläche in Blickrichtung ϕ , der sich aus dem Zusammenhang

$$\tan \gamma_g(\phi) = \tan \gamma_{g;0} \cos \phi \quad (366)$$

errechnet.

Die Integration über γ lässt sich ausführen mit dem Zwischenresultat

$$A_d = 1 - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin^2 \gamma_g(\phi) d\phi .$$

Mit Gleichung (366) erhält man dann

$$A_d = 1 - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{c^2 \cos^2 \phi}{1 + c^2 \cos^2 \phi} d\phi \quad \text{mit} \quad c = \tan \gamma_{g;0} .$$

Durch Ergänzen des Integranden zu Eins kommt man auf

$$A_d = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\phi}{1 + c^2 \cos^2 \phi} . \quad (367)$$

Mit dem unbestimmten Integral

$$\int \frac{d\phi}{1 + c^2 \cos^2 \phi} = \frac{1}{\sqrt{1 + c^2}} \arctan \frac{\tan \phi}{\sqrt{1 + c^2}}$$

und der Grenzwertbeziehung

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \arctan x = \pm \frac{\pi}{2}$$

erhält man für das Integral auf der rechten Seite von Gleichung (367) das Resultat

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\phi}{1 + c^2 \cos^2 \phi} = \frac{\pi}{\sqrt{1 + c^2}} .$$

Dies in Gleichung (367) eingesetzt ergibt, nach Elimination von c , für den Abschirmfaktor A_d das in Kapitel 4.2 in Gleichung (166) angegebene Ergebnis

$$A_d = \frac{1 + \cos \gamma_{g;0}}{2} = \frac{1 + \vec{e}_3 \cdot \vec{n}_g}{2} . \quad (368)$$

Für die diffuse Strahlung $F_{d; \text{geneigt}}^{\text{sw}}$ auf die geneigte Fläche folgt daraus der in Gleichung (167) gegebene Zusammenhang

$$F_{d; \text{geneigt}}^{\text{sw}} = A_d F_d^{\text{sw}} = \frac{1 + \vec{e}_3 \cdot \vec{n}_g}{2} F_d^{\text{sw}} .$$

D Advektionsschema

D.1 Vorbemerkung

Im Modell MUKLIMO_3 wird der Advektionsanteil der Wärme- und Feuchtegleichung nach einem modifizierten sogenannten Donor-Cell-Verfahren mit Time-Splitting behandelt. Die Modifikation nutzt die Besonderheit der in MUKLIMO_3 verwendeten *Stromfunktionsmethode*, die stets exakt *divergenzfreie* Strömungsfelder liefert. Da die Methode nicht veröffentlicht ist, wird im Folgenden zunächst das ursprüngliche Schema beschrieben und danach die Motivation, die grundlegende Idee und die positiven Auswirkungen seiner in MUKLIMO_3 verwendeten Abänderung dargelegt.

D.2 Donor-Cell-Verfahren

Zur numerischen zeitlichen Integration der eindimensionalen Advektionsgleichung

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} = - \frac{\partial \rho u C}{\partial x} \quad (369)$$

für die Bewegung einer Beimengung C im Geschwindigkeitsfeld u eines Trägermediums (z. B. die Atmosphäre) der Dichte ρ wird häufig der als *Donor-Cell*-Schema bekannte (siehe z. B. ROACHE, 1982) und als *FTBS*-Verfahren (Forward in Time Backward in Space) einzuordnende Algorithmus

$$C_i^{v+1} = C_i^v + \Delta t \frac{(\rho u)_{i-\frac{1}{2}} C_{i-\frac{1}{2}}^{\text{up};v} - (\rho u)_{i+\frac{1}{2}} C_{i+\frac{1}{2}}^{\text{up};v}}{\rho_i \Delta x_i} \quad (370)$$

benutzt. Dabei sind die *Upstream*-Werte $C_{i\pm 1/2}^{\text{up};v}$ der Konzentration C , die zu den Abschnittsgrenzen $x_{i\pm 1/2}$ der in Teilstücke Δx_i untergliederten x -Achse gehören, erklärt als

$$C_{i-\frac{1}{2}}^{\text{up};v} = \begin{cases} C_{i-1}^v & \text{für } (\rho u)_{i-\frac{1}{2}} \geq 0 \\ C_i^v & \text{für } (\rho u)_{i-\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (371)$$

$$C_{i+\frac{1}{2}}^{\text{up};v} = \begin{cases} C_i^v & \text{für } (\rho u)_{i+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ C_{i+1}^v & \text{für } (\rho u)_{i+\frac{1}{2}} < 0. \end{cases}$$

Zur Vermeidung von rechenzeitaufwendigen Fallunterscheidungen wird das Verfahren in numerischen Programmen zumeist in der gleichwertigen Form

$$C_i^{v+1} = C_i^v + \frac{\Delta t}{2\rho_i \Delta x_i} \left\{ (\rho u + |\rho u|)_{i-\frac{1}{2}} C_{i-1}^v + (\rho u - |\rho u|)_{i-\frac{1}{2}} C_i^v - (\rho u + |\rho u|)_{i+\frac{1}{2}} C_i^v - (\rho u - |\rho u|)_{i+\frac{1}{2}} C_{i+1}^v \right\}. \quad (372)$$

umgesetzt. Es hat einige generelle Eigenschaften, die zu seiner Beliebtheit beitragen: Das Donor-Cell-Verfahren

- ist *numerisch stabil*, sofern der Zeitschritt Δt dem *CFL-Kriterium* $(\rho u)_{i\pm 1/2} \Delta t / (\rho_i \Delta x_i) \leq 1$ (*CFL* ist die Abkürzung für Courant-Friedrichs-Lewy, siehe COURANT et al., 1928) für alle i genügt,
- ist *positiv definit*, d. h. nicht-negative Verteilungen $\{C_i\}$ bleiben stets nicht-negativ,
- ist *konservativ*, d. h. den Zu- und Abflüssen in einen bzw. aus einem Gitterabschnitt Δx_i stehen entgegengesetzt gleiche Ab- und Zuflüsse aus bzw. in die beiden Nachbarzellen gegenüber. Global betrachtet bedeutet diese Eigenschaft, dass die über alle Gitterabschnitte aufsummierte zeitliche Änderung der

Zellinhalte $\rho_i C_i$ gerade den während derselben Zeit erfolgenden Zu- und Abflüssen durch die seitlichen Ränder des Integrationsbereichs entspricht,

- gehorcht einem *Upstream*-Prinzip, d. h. zur zeitlichen Änderung eines Zellinhaltes $\rho_i C_i$ tragen ausschließlich die Inhalte von *stromauf* gelegenen Gitterabschnitten (gleich „Zellen“) bei.

Die Verallgemeinerung der Advektionsgleichung (369) auf die zweidimensionale horizontale Ebene stellt sich dar als

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} = -\nabla_{\text{h}} \cdot \rho \vec{v}_{\text{h}} C = -\frac{\partial \rho u C}{\partial x} - \frac{\partial \rho v C}{\partial y} . \quad (373)$$

Zu ihrer Diskretisierung kann das Prinzip des Donor-Cell-Schemas der Gleichung (370) auf beide Raumrichtungen angewendet werden. Das Resultat ist die Gleichung

$$C_{ij}^{v+1} = C_{ij}^v + \Delta t \left\{ \frac{(\rho u)_{i-\frac{1}{2}j} C_{i-\frac{1}{2}j}^{\text{up};v} - (\rho u)_{i+\frac{1}{2}j} C_{i+\frac{1}{2}j}^{\text{up};v}}{\rho_{ij} \Delta x_i} + \frac{(\rho v)_{ij-\frac{1}{2}} C_{ij-\frac{1}{2}}^{\text{up};v} - (\rho v)_{ij+\frac{1}{2}} C_{ij+\frac{1}{2}}^{\text{up};v}}{\rho_{ij} \Delta y_j} \right\} \quad (374)$$

mit entsprechend zu Gleichung (371) definierten Upstream-Werten $C_{i\pm 1/2j}^{\text{up};v}$ und $C_{ij\pm 1/2}^{\text{up};v}$ zum Zeitschritt v . Die oben angeführten grundlegenden Eigenschaften des Donor-Cell-Schemas bleiben erhalten. Angepasst werden muss nur das *CFL*-Kriterium der numerischen Stabilität. Ganz analog verläuft auch die Verallgemeinerung des Donor-Cell-Verfahrens auf drei Dimensionen.

D.3 Time-Splitting

Anstatt die *Teiloperationen* der x - und y -Advektion der Gleichung (374) *parallel* zu behandeln, können sie auch zeitlich *gestaffelt* (engl. *Time-Splitting*) abgearbeitet werden. Kennzeichnet man die Zwischenresultate als $C_{ij}^{v;\mu}$, so lässt sich der Gesamtschritt $C_{ij}^v \rightarrow C_{ij}^{v+1}$ des Donor-Cell-Verfahrens mit Time-Splitting in Entsprechung zur Gleichung (372) darstellen als

$$\begin{aligned} C_{ij}^{v;0} &= C_{ij}^v \\ C_{ij}^{v;1} &= C_{ij}^{v;0} + \frac{\Delta t}{2\rho_{ij}\Delta x_i} \left\{ (\rho u + |\rho u|)_{i-\frac{1}{2}j} C_{i-\frac{1}{2}j}^{v;0} + (\rho u - |\rho u|)_{i-\frac{1}{2}j} C_{ij}^{v;0} \right. \\ &\quad \left. - (\rho u + |\rho u|)_{i+\frac{1}{2}j} C_{ij}^{v;0} - (\rho u - |\rho u|)_{i+\frac{1}{2}j} C_{i+\frac{1}{2}j}^{v;0} \right\} \\ C_{ij}^{v;2} &= C_{ij}^{v;1} + \frac{\Delta t}{2\rho_{ij}\Delta y_j} \left\{ (\rho v + |\rho v|)_{ij-\frac{1}{2}} C_{ij-\frac{1}{2}}^{v;1} + (\rho v - |\rho v|)_{ij-\frac{1}{2}} C_{ij}^{v;1} \right. \\ &\quad \left. - (\rho v + |\rho v|)_{ij+\frac{1}{2}} C_{ij}^{v;1} - (\rho v - |\rho v|)_{ij+\frac{1}{2}} C_{ij+\frac{1}{2}}^{v;1} \right\} \\ C_{ij}^{v+1} &= C_{ij}^{v;2} , \end{aligned} \quad (375)$$

wobei die Reihenfolge der x - und y -Advektion auch umgekehrt werden könnte.

Das Schema mit Time-Splitting ist im Allgemeinen genauer als die parallele Abarbeitung der Teilschritte. Das wird deutlich bei einem homogenen Trägermedium mit räumlich konstanten Feldern ρ , u , v mit $u > 0$ und $v > 0$. Bei Benutzung der Abkürzungen $\alpha_i = u\Delta t/\Delta x_i$ und $\beta_j = v\Delta t/\Delta y_j$ erhält man für die „neue“ Konzentration C_{ij}^{v+1} aus dem zweiten Teil von Gleichung (375) die Relation

$$C_{ij}^{v+1} = C_{ij}^{v;2} = C_{ij}^{v;1} + \beta_j (C_{ij-1}^{v;1} - C_{ij}^{v;1})$$

und daraus, durch Einsetzen der Zwischenresultate

$$\begin{aligned} C_{ij-1}^{v;1} &= C_{ij-1}^v + \alpha_i(C_{i-1j-1}^v - C_{ij-1}^v) \\ C_{ij}^{v;1} &= C_{ij}^v + \alpha_i(C_{i-1j}^v - C_{ij}^v) \end{aligned}$$

das Endergebnis

$$C_{ij}^{v+1} = C_{ij}^v + \alpha_i(1 - \beta_j)(C_{i-1j}^v - C_{ij}^v) + \beta_j(1 - \alpha_i)(C_{ij-1}^v - C_{ij}^v) + \alpha_i\beta_j(C_{i-1j-1}^v - C_{ij}^v). \quad (376)$$

Zum Vergleich dieses Resultats mit den analytischen Eigenschaften der Advektion stelle man sich vor, dass die Ausgangskonzentrationen C_{ij}^v jeweils gleichmäßig über die Flächen $\Delta x_i \Delta y_j$ ihrer Gitterzellen verteilt sind und dass diese zellweise konstante Verteilung dann insgesamt um den Vektor $\Delta t \vec{v}_h$ gegenüber ihrer Ausgangslage verschoben wird. Dabei geraten die Inhalte der mit $\{i-1j\}$, $\{ij-1\}$ und $\{i-1j-1\}$ indizierten Nachbarzellen teilweise in die Zelle $\{ij\}$. Die Aufsummation der Inhalte von $\{ij\}$ nach der Verschiebung ergibt dann, wie man leicht nachprüfen kann, ebenfalls das Resultat der Gleichung (376). Unter diesen speziellen Annahmen stimmt also das Ergebnis des Donor-Cell-Schemas mit Time-Splitting mit dem Resultat einer analytischen Verschiebung des Konzentrationsfeldes überein, wenn auch nur für einen ersten Zeitschritt. Bei Berechnung von C_{ij}^{v+1} nach dem Schema der Gleichung (374), d. h. bei paralleler Abarbeitung der Teiloperationen, fehlen demgegenüber alle das Produkt $\alpha_i\beta_j$ enthaltenden Terme der Gleichung (376).

Das Donor-Cell-Schema mit Time-Splitting hat aber auch einige unerwünschte Eigenschaften, die seine unmodifizierte Verwendbarkeit infrage stellen. Die Probleme sollen anhand eines divergenzfreien Geschwindigkeitsfeldes der Form $u = -ax$, $v = ay$ in einem inkompressiblen Medium aufgezeigt werden, wobei die Beimengung C zur Zeit $t = t^v$ eine konstante Anfangsverteilung $C = C_0$ besitzen möge. Betrachtet wird jetzt eine den Gebietsursprung symmetrisch umfassende Gitterzelle $\{ij\}$ mit der Abmessung Δ in beiden Richtungen. Die Geschwindigkeiten auf den Seitenrändern dieser Zelle sind antisymmetrisch mit den Werten $u_{i-1/2j} = \delta$, $u_{i+1/2j} = -\delta$, $v_{ij-1/2} = -\delta$ und $v_{ij+1/2} = \delta$ mit der Abkürzung $\delta = a\Delta/2$. Damit erhält man bei der Berechnung von C_{ij}^{v+1} mithilfe der Gleichung (375) das Zwischenresultat

$$C_{ij}^{v;1} = C_{ij}^{v;0} + \frac{\Delta t}{\Delta x_i}(u_{i-1/2j}C_{i-1j}^{v;0} - u_{i+1/2j}C_{i+1j}^{v;0}) = C_0(1 + 2\delta/\Delta)$$

und daraus folgend das Endresultat

$$C_{ij}^{v+1} = C_{ij}^{v;1} + \frac{\Delta t}{\Delta y_j}(v_{ij-1/2}C_{ij}^{v;1} - v_{ij+1/2}C_{ij}^{v;1}) = C_0(1 - 4\delta^2/\Delta^2). \quad (377)$$

Es zeigt, dass die anfängliche *Homogenität* einer Beimengungsverteilung in einem bewegten inkompressiblen Medium bei Anwendung des Donor-Cell-Verfahrens mit Time-Splitting *nicht erhalten* bleibt. Noch ein anderer Aspekt ist am Resultat der Gleichung (377) bemerkenswert: Die Differenz $C_{ij}^{v+1} - C_{ij}^v = -4C_0\delta^2/\Delta^2$ hängt vom Wert C_0 der Anfangsverteilung ab. Das heißt aber, dass man unterschiedliche Resultate erhält, je nachdem, ob man Absolutwerte von C betrachtet oder Abweichungen von einem Referenzwert. Für die Temperaturadvektion insbesondere hängen die Resultate davon ab, ob die Temperatur in K oder °C gemessen wird.

Wegen dieser Schwächen des Donor-Cell-Verfahrens mit Time-Splitting ist die Idee aufgekommen, dass man vom Feld C zuerst einen irgendwie gearteten Mittelwert \bar{C} abziehen und das Time-Splitting-Verfahren erst nach der Transformation $C \rightarrow C - \bar{C}$ anwenden sollte. Das bringt in der Tat deutliche Verbesserungen, besitzt bei der Wahl des Mittelwerts ein gewisses Maß an Willkür und behebt die Probleme auch nicht völlig, wie man am Beispiel eines Modellgebiets, das in voneinander isolierte Teilgebiete zerfällt, erkennen kann.

D.4 Modifiziertes Schema

Beschränkt man sich, was dank der verwendeten *Stromfunktionsmethode* in MUKLIMO_3 stets gegeben ist, auf Advektionsprobleme mit divergenzfremem Feld der Impulsdichte, d. h. es gilt

$$\nabla \cdot \rho \vec{v} = \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0, \quad (378)$$

so gibt es eine zur Subtraktion eines Mittelwerts \bar{C} alternative Möglichkeit zur „Reparatur“ des Donor-Cell-Verfahrens mit Time-Splitting, die besser befriedigt. Ihre Grundidee besteht darin, die dreidimensionale, in Vektorschreibweise formulierte Advektionsgleichung

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \vec{v} C$$

unter Benutzung der Divergenzfreiheitsbedingung (378) identisch umzuformen zu

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \vec{v} C + C \nabla \cdot \rho \vec{v}$$

und den Zusatzterm $C \nabla \cdot \rho \vec{v}$, trotz seines Verschwindens, in die numerische Formulierung des Advektionsschemas mit einzubeziehen. Das Donor-Cell-Verfahren in drei Dimensionen, zunächst ohne Time-Splitting, schreibt sich dann als

$$\begin{aligned} C_{ijk}^{v+1} = C_{ijk}^v + \Delta t \left\{ \frac{(\rho u)_{i-\frac{1}{2}jk} (C_{i-\frac{1}{2}jk}^{\text{up};v} - C_{ijk}^v) - (\rho u)_{i+\frac{1}{2}jk} (C_{i+\frac{1}{2}jk}^{\text{up};v} - C_{ijk}^v)}{\rho_{ijk} \Delta x_i} \right. \\ + \frac{(\rho v)_{ij-\frac{1}{2}k} (C_{ij-\frac{1}{2}k}^{\text{up};v} - C_{ijk}^v) - (\rho v)_{ij+\frac{1}{2}k} (C_{ij+\frac{1}{2}k}^{\text{up};v} - C_{ijk}^v)}{\rho_{ijk} \Delta y_j} \\ \left. + \frac{(\rho w)_{ijk-\frac{1}{2}} (C_{ijk-\frac{1}{2}}^{\text{up};v} - C_{ijk}^v) - (\rho w)_{ijk+\frac{1}{2}} (C_{ijk+\frac{1}{2}}^{\text{up};v} - C_{ijk}^v)}{\rho_{ijk} \Delta z_k} \right\}. \end{aligned} \quad (379)$$

Das ist jetzt noch keine wirkliche Änderung des Schemas, da die hinzugekommenen Terme sich wegen der diskreten Divergenzfreiheitsbedingung

$$\frac{(\rho u)_{i+\frac{1}{2}jk} - (\rho u)_{i-\frac{1}{2}jk}}{\Delta x_i} + \frac{(\rho v)_{ij+\frac{1}{2}k} - \rho v_{ij-\frac{1}{2}k}}{\Delta y_j} + \frac{(\rho w)_{ijk+\frac{1}{2}} - (\rho w)_{ijk-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} = 0 \quad (380)$$

für das Impulsdichtefeld $\rho \vec{v}$ zu Null addieren. Wenn man jetzt aber auf das formal geänderte Donor-Cell-Schema der Gleichung (379) die Idee des Time-Splittings anwendet, erhält man das folgende *modifizierte* Ver-

fahren, das sich vom Schema der Gleichungen (375) echt unterscheidet:

$$\begin{aligned}
C_{ijk}^{v;0} &= C_{ijk}^v \\
C_{ijk}^{v;1} &= C_{ijk}^{v;0} + \frac{\Delta t}{\rho_{ijk} \Delta x_i} \left\{ (\rho u + |\rho u|)_{i-\frac{1}{2}jk} (C_{i-1jk}^{v;0} - C_{ijk}^{v;0}) \right. \\
&\quad \left. - (\rho u - |\rho u|)_{i+\frac{1}{2}jk} (C_{i+1jk}^{v;0} - C_{ijk}^{v;0}) \right\} \\
C_{ijk}^{v;2} &= C_{ijk}^{v;1} + \frac{\Delta t}{\rho_{ijk} \Delta y_j} \left\{ (\rho v + |\rho v|)_{ij-\frac{1}{2}k} (C_{ij-1k}^{v;1} - C_{ijk}^{v;0}) + (\rho v - |\rho v|)_{ij-\frac{1}{2}k} (C_{ijk}^{v;1} - C_{ijk}^{v;0}) \right. \\
&\quad \left. - (\rho v + |\rho v|)_{ij+\frac{1}{2}k} (C_{ijk}^{v;1} - C_{ijk}^{v;0}) - (\rho v - |\rho v|)_{ij+\frac{1}{2}k} (C_{ij+1k}^{v;1} - C_{ijk}^{v;0}) \right\} \\
C_{ijk}^{v;3} &= C_{ijk}^{v;2} + \frac{\Delta t}{\rho_{ijk} \Delta z_k} \left\{ (\rho w + |\rho w|)_{ijk-\frac{1}{2}} (C_{ijk-1}^{v;2} - C_{ijk}^{v;0}) + (\rho w - |\rho w|)_{ijk-\frac{1}{2}} (C_{ijk}^{v;2} - C_{ijk}^{v;0}) \right. \\
&\quad \left. - (\rho w + |\rho w|)_{ijk+\frac{1}{2}} (C_{ijk}^{v;2} - C_{ijk}^{v;0}) - (\rho w - |\rho w|)_{ijk+\frac{1}{2}} (C_{ijk+1}^{v;2} - C_{ijk}^{v;0}) \right\} \\
C_{ijk}^{v+1} &= C_{ijk}^{v;3} .
\end{aligned} \tag{381}$$

Die Reihenfolge der Teiloperationen kann dabei auch geändert sein: In MUKLIMO_3 wird, zur besseren Symmetrisierung des Schemas, der gesamte Integrationschritt in zwei Halbschritte unterteilt, wobei im zweiten Halbschritt die Reihenfolge der Operationen von xyz zu zyx umgekehrt ist.

Es gilt jetzt, die numerischen Eigenschaften dieses modifizierten Schemas zu beurteilen:

- Klar ist, dass die positive Definitheit und das Upstream-Prinzip des Donor-Cell-Verfahrens auch im modifizierten Schema erhalten bleiben.
- Außerdem überzeugt man sich leicht davon, dass das Schema bei räumlich konstantem ρ und $\rho \vec{v}$ wieder in seine ursprüngliche Form entsprechend den Gleichungen (375) übergeht, da die Zusatzterme der drei Teilschritte sich dann jeweils aufheben. Damit gilt die für diesen Fall gezeigte verbesserte Genauigkeit gegenüber dem Donor-Cell-Verfahren ohne Time-Splitting auch für das modifizierte Verfahren.
- Eine deutliche Verbesserung bringt das modifizierte Schema hingegen bei einem räumlich konstanten Ausgangsfeld $C_{ijk}^v = C_0$ für alle i, j und k . Zunächst stellt man fest, dass das Zwischenresultat $C_{ijk}^{v;1}$ jetzt, ganz unabhängig von den Impulsdichten $(\rho u)_{i\pm 1/2jk}$, stets ungeändert gegenüber C_{ijk}^v bleibt. Als Folge bleiben auch $C_{ijk}^{v;2}$ gegenüber $C_{ijk}^{v;1}$ und $C_{ijk}^{v;3}$ gegenüber $C_{ijk}^{v;2}$ und somit C_{ijk}^{v+1} gegenüber C_{ijk}^v überhaupt ungeändert. Demnach bleibt die räumliche Konstanz einer Konzentrationsverteilung, unabhängig vom Geschwindigkeitsfeld, beim modifizierten Verfahren stets erhalten.
- Das Bezugsniveau einer Verteilung kann beim modifizierten Schema beliebig verschoben werden, ohne dass sich an den relativen Konzentrationen etwas ändert.
- Nicht sofort erkennbar ist, dass das modifizierte Schema auch *konservativ* ist. Schreibt man jedoch den Gesamtschritt – unter Wiederverwendung der Upstream-Werte C^{up} und Ausnutzung der Divergenzfrei-

heitsbeziehung der Gleichung (380) – in der Form

$$\begin{aligned}
C_{ijk}^{v+1} = & C_{ijk}^v + \Delta t \frac{(\rho u)_{i-\frac{1}{2}jk} C_{i-\frac{1}{2}jk}^{\text{up};v;0} - (\rho u)_{i+\frac{1}{2}jk} C_{i+\frac{1}{2}jk}^{\text{up};v;0}}{\rho_{ijk} \Delta x_i} \\
& + \Delta t \frac{(\rho v)_{ij-\frac{1}{2}k} C_{ij-\frac{1}{2}k}^{\text{up};v;1} - (\rho v)_{ij+\frac{1}{2}k} C_{ij+\frac{1}{2}k}^{\text{up};v;1}}{\rho_{ijk} \Delta y_j} \\
& + \Delta t \frac{(\rho w)_{ijk-\frac{1}{2}} C_{ijk-\frac{1}{2}}^{\text{up};v;2} - (\rho w)_{ijk+\frac{1}{2}} C_{ijk+\frac{1}{2}}^{\text{up};v;2}}{\rho_{ijk} \Delta y_j},
\end{aligned} \tag{382}$$

so wird klar, dass in allen drei Richtungen den advektiven Zu- und Abflüssen in die bzw. aus der Gitterzelle V_{ijk} gleichgroße Ab- und Zuflüsse aus bzw. in die Nachbarzellen gegenüberstehen, was die Konservativität des Schemas ersichtlich werden lässt.

Als Fazit bleibt festzuhalten, dass die beschriebene, in MUKLIMO_3 verwendete Modifikation das ursprüngliche Donor-Cell-Verfahren mit Time-Splitting zur numerischen Simulation advektiver Vorgänge in zwei wichtigen Punkten entscheidend verbessert: Zum einen ist das modifizierte Schema invariant gegenüber Verschiebungen des Bezugsniveaus der transportierten Größe und zum anderen bleibt bei ihm eine anfängliche räumliche Homogenität der untersuchten Verteilung im Verlauf der Zeit erhalten.

E Standard-Eingabedatei

Zur Information über die Variablen der *Eingabedatei*, ihre Bedeutung und ihre Voreinstellungen ist im Folgenden die Datei „*standard_thermodyn.in*“ wiedergegeben:

```
***** Standard-Eingabedatei *****
Kommentierte Eingabedatei zur Thermodynamik-Version von MUKLIMO_3 mit
Erläuterungen zu saemtlichen Variablen einschliesslich ihrer
Vorgabewerte entsprechend der Programmfassung "MUKLI_THERMO_141010"
```

```
***** Gruppe "dateien" *****
Kurzbeschreibung der Variablen:
```

```
h0_datei    character*256: Rasterdatei der Gelaendehoehen
            Vorgabe: h0_datei = ' '
hbasis      real: "Basishoehe" des 3d Modellgebiets.
            Einheit: m ue. NN
            Vorgabe: hbasis = minimale Gelaendehoehe
lu_datei    character*256: Rasterdatei der Landnutzung. Weist
            allen Flaechenelementen des Modellgebiets
            (ganzzahlige) Code-Zahlen zu, die vordefinierten
            Landnutzungen entsprechen.
            Vorgabe: lu_datei = ' '
ndigits     integer: Stellenzahl, mit der die Einzelwerte der
            Landnutzungsdatei geschrieben sind. Sonderbedeutung
            der Spezifikation "ndigits=0": Die Werte sind "auf
            Luecke" geschrieben und koennen im
            (Fortran-)Stern-Format gelesen werden.
            Vorgabe: ndigits = 1
geb_datei   character*256: Rechteckdatei aufgeloester Bebauung.
            Vorgabe: geb_datei = ' '
strabdat    character*256: "Strassenabschnittsdatei". Dient der
            Ermittlung des Versiegelungsgrades von horizontalen
            Gitterzellen, die von Strassen durchschnitten werden.
            Vorgabe: strabdat = ' '
lutab       character*256: Landnutzungstabellen-Datei zur
            Abaenderung oder Neudefinition der vorgegebenen
            Landnutzungsparameter des "Frankfurt-Projekts".
            Vorgabe: lutab = ' ', d.h. Landnutzungsspezifikationen
            des "Frankfurt-Projekts" bleiben ungeaendert gueltig
            (siehe Datei LU_Tab_Frankfurt_erweitert.txt)
freeland    logical: Bestimmt den Belegungsmodus der "nadd"
            zusaetzlichen Streifen an den seitlichen Raendern des
            Modellgebiets: Bei "freeland=.true." werden diese
            Streifen entsprechend den Vorgaben des 1d
            Antriebsmodells belegt, andernfalls werden die
            seitlichen Randwerte des inneren Modellgebiets auf die
            zusaetzlichen Streifen uebertragen.
            Vorgabe: freeland = .false.
luextra     integer: Landnutzungsvorgabe fuer die durch "nadd"
            spezifizierten zusaetzlichen Gitterzellen des
            Modellgebietsrandes. Wirkt bei "freeland=.true."
            Vorgabe: luextra=0, d.h. auf dem zusaetzlichen Rand
            gelten die Spezifikationen des 1d Antriebsmodells.
```

```
+++++ Beispielhafte Spezifikationen +++++
&dateien
```

```
h0_datei='hoehen.rs'      ! Gelaendehoehen-Datei
```

```

lu_datei='landuse.rs'      ! Landnutzungsdatei beschrieben mit
ndigits=3                 ! 3 Stellen pro Einzelwert
geb_datei=' '              ! keine "aufgeloeste" Bebauung
freeland=.true.           ! zusaetzliche Randzeilen belegt wie
                           ! 1d Modell

```

```
/end
```

```
+++++++ Ende Gruppe "dateien" ++++++
```

```
C
```

```
***** Gruppe "zeit" *****
```

Kurzbeschreibung der Variablen:

```

monat      integer: Monat der Simulation.
            Vorgabe: 7 (Juli)
mesz       logical: Die folgenden Zeitangaben sind in
            mitteleuropaeischer Zeit MEZ (mesz=.false.) bzw. in
            mitteleuropaeischer Sommerzeit MESZ (mesz=.true.).
            Vorgabe: mesz = .true.
itag0      integer: Starttag (im Monat "monat") des
            eindimensionalen Antriebsmodells.
            Vorgabe: itag0 = 23
lst0       integer: Startstunde des eindimensionalen
            Antriebsmodells.
            Vorgabe: lst0 = 10
itag1      integer: Starttag der dreidimensionalen Simulation.
            Vorgabe: itag1 = itag0 + 1
lst1       integer: Startstunde der dreidimensionalen Simulation.
            Vorgabe: lst1 = lst0
itag2      integer: Endtag der dreidimensionalen Simulation.
            Vorgabe: itag2 = itag1 + 1
lst2       integer: Endstunde der dreidimensionalen Simulation.
            Vorgabe: lst2 = 9
dt1d       real: Zeitschritt des eindimensionalen
            Antriebsmodells.
            Einheit: s
            Vorgabe: dt1d = 2.
dt3d       real: Zeitschritt der dreidimensionalen Simulation.
            Einheit: s
            Vorgabe: dt3d = 0., d.h. der Zeitschritt wird
            modellintern auf der Grundlage von numerischen
            Stabilitaetskriterien errechnet
dtfact     real: Reduktionsfaktor fuer den Zeitschritt der
            dreidimensionalen Simulation.
            Vorgabe: dtfact = 0.4
minb       integer: Zeitschritt (in Minuten) fuer die Integration
            der Gleichungen des Bodenmodells.
            Einheit: min
            Vorgabe: minb = 1
itest1d    integer: Steuerparameter fuer den Modellablauf mit den
            Moeglichkeiten
            itest1d = 0: normaler Programmablauf
            itest1d = 1: Beschraenkung der Simulation auf das
            1d Antriebsmodell
            itest1d >= 2: 1d Antirebsmodell plus
            Initialisierung 3d Modell plus
            itest1d-2 Integrationssschritte des
            3d Modells
            Vorgabe: itest1d = 0
dtread     logical: Bei dtread=.true. werden die Zeitschritte
            nicht modellintern berechnet, sondern stattdessen
            von der (in einem anderen Programmablauf mit der

```

```

Spezifikation dtwrite=.true. erzeugten) Datei
"dt_file" gelesen. Diese Option dient dem
Ergebnisvergleich verschiedener Modellkonfigurationen
(z.B. Soll- und Istzustand).
Vorgabe: dtread = .false.
dtwrite      logical: Schalter fuer die Option zum Herausschreiben
              des numerischen Zeitschritts
              Vorgabe: dtwrite = .false.
dt_file      character*256: Datei, in die Zeitschritte geschrieben
              werden (bei dtwrite=.true.) bzw. von der sie
              gelesen werden sollen (dtread=.true.)
              Vorgabe: dt_file = ' '

```

Variable aus fruerehen Modellversionen, die noch im Programmcode stehen, aber zur Zeit bedeutungslos sind, da die zugehoerigen Modelloptionen inaktiviert wurden:

```

regen        real: Massenstromdichte des am Boden ankommenden
              Fluessigwasserstroms
              Einheit: kg/m**2/s
              Vorgabe: 0.
itagreg      integer: Tag des Regeneinsatzes
              Vorgabe: 0
lstreg       integer: Stunde des Regeneinsatzes
              Vorgabe: 0
minreg       integer: Minute des Regeneinsatzes
              Vorgabe: 0
regdau       real: Andauer des Regens
              Einheit: s
              Vorgabe: 0.

```

+++++ Beispielhafte Spezifikationen +++++

```

&zeit
monat= 7          ! Simulationsmonat Juli
itag0=15, lst0=9  ! Startzeit (Tag, Stunde) 1d Antriebsmodell
itag1=16, lst1=9  ! Startzeit 3d Simulation
itag2=17, lst2=8  ! Endzeit 3d Simulation
dt1d=6.0         ! Zeitschritt 1d Antriebsmodell in s
dt3d=0.          ! 3d Simulation mit dynamischem Zeitschritt
dtfact=1.        ! keine Zeitschrittreduktion
/end

```

+++++ Ende Gruppe "zeit" +++++

C

***** Gruppe "param" *****

Kurzbeschreibung der Variablen:

```

alat        real: Geografische Breite des Modellgebiets.
              Einheit: Grad Nord
              Vorgabe: undefiniert
elen        real: Oestliche Laenge des Modellgebiets.
              Einheit: Grad
              Vorgabe: undefiniert
phi0        real: Winkel, um den die y-Achse des Modellgebiets im
              Uhrzeigersinn gegen Nord gedreht ist.
              Einheit: Grad
              Vorgabe: phi0 = 0.
f           real: Coriolis-Parameter
              Einheit: s**-1
              Vorgabe: f = 1.e-4
xlb         real: Maximaler Mischungsweg im Blackadar-Ansatz
              fuer den Mischungsweg.
              Einheit: m

```

tauli Vorgabe: xlb = 30.
 real: Linkescher Truebungsfaktor.
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: Monatsmittelwert gemaess
 Tabelle der VDI-Richtlinie 3789
 bedgr real: Bedeckungsgrad des Himmels (zwischen 0 und 1).
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: bedgr = 0.375
 xcl real: Hoehe der Wolkenuntergrenze.
 Einheit: km
 Vorgabe: xcl = 1.
 albedv real: Albedo der versiegelten Flaechenanteile.
 des Bodens
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: albedv = 0.2
 albedu real: Albedo der unversiegelten Flaechenanteile.
 des Bodens
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: albedu = 0.2
 xkw real: So genannter "K-Wert" der Gebaeudewaende.
 Einheit: W/m**2/K
 Vorgabe: xkw = 1.5
 xkd real: So genannter "K-Wert" der Gebaeuedaecher.
 Einheit: W/m**2/K
 Vorgabe: xkd = 1.5
 cw real: Flaechenhafte Waermekapazitaet der
 Gebaeudewaende.
 Einheit: J/K/m**2
 Vorgabe: cw = 0.3e6
 cda real: flaechenhafte Waermekapazitaet der
 Gebaeuedaecher.
 Einheit: J/K/m**2
 Vorgabe: cda = 0.15e6
 albw real: Albedo der Gebaeudewaende.
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: albw = 0.3
 albd real: Albedo der Gebaeuedaecher.
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: albd = 0.2
 tbf logical: Bei tbf=.true. wird die Bodentemperatur
 nicht simuliert, sondern festgehalten.
 Vorgabe: tbf = .false.
 lcnp logical: Bei lcnp=.false. wird statt des
 Canopy-Modells und des aufwendigen Bodenmodells mit
 gekoppelten prognostischen Gleichungen fuer die
 Bodentemperatur und die Bodenfeuchte ein einfacheres
 Modell (nur Waermeleitung, empirischer
 Verdunstungsansatz) gerechnet.
 Vorgabe: .true.
 nbdach integer: Anzahl der Bodenschichten fuer die
 Dachbegruenung. Dabei gelten die Schichtdicken dzb(k)
 des Bodens ungeaendert auch fuer den Boden der
 begruenten Daecher (siehe die Variable "nb" der
 Gruppe "grid"), nicht aber die Gesamtdicke.
 Vorgabe: nbdach=min(7,nbmax). Daraus errechnet sich
 die Vorgabe fuer die Gesamtdicke der Bodenschicht
 als 25.1 cm
 isdach integer: Bodentyp der Dachbegruenung. Zu den
 Bodentypen siehe die Variable "is1d" der Gruppe

```

        "boden".
        Vorgabe: isdach=2 ("lehmiger Sand")
hcdach    real: Bewuchshoehe der Dachbegruening.
        Einheit: m
        Vorgabe: hcdach = 0.1
xlaidach  real: Blattflaechenindex der Dachbegruening.
        Einheit: Dimensionslos
        Vorgabe: xlaidach = 1.0
sigdach   real: Bedeckungsgrad des Bodens der begruerten Daecher
        durch den Bewuchs.
        Einheit: Dimensionslos
        Vorgabe: sigdach = 1.0
+++++++ Beispielhafte Spezifikationen ++++++
&param
  alat=50.94, elen=6.96 !Breite und Laenge Stadtmitte Koeln
  phi0=0.,             !Rotationswinkel Modellgebiet
  bedgr=.25            !bedgr=Bedeckungsgrad
  xcl=1.                !xcl=Wolkenuntergrenze in km
  f=1.e-4              !Coriolis Parameter (ausschalten mit f=0.0)
/end
+++++++ Ende Gruppe "param" ++++++
C
***** Gruppe "grid" *****
Kurzbeschreibung der Variablen:
  m      integer: Anzahl der Gitterstreifen in x-Richtung,
        maximal nxmax-2*nadd (siehe Datei "limits.inc").
        Vorgabe: m = nxmax
  l      integer: Anzahl der Gitterstreifen in y-Richtung
        maximal nymax-2*nadd.
        Vorgabe: l = nymax
  n      integer: Anzahl der vertikalen Gitterschichten des
        3d Modells, n<=n1d (maximal nzmax-1)
        Vorgabe: n = nzmax
  nadd   integer: Zusaetzliche Gitterstreifen an den
        seitlichen Raendern des Modellgebiets
        Vorgabe: 1
  n1d    integer: Anzahl der vertikalen Gitterschichten des
        1d Antriebsmodells, maximal n1max-1
        Vorgabe: n1d = n1max
  nb     integer: Anzahl der Gitterschichten im Boden. Die
        zugehoerigen Schichtdicken in m (bei nbmax=15) sind
        0.002 , 0.004 , 0.01 , 0.025 , 0.04 , 0.07 , 9*0.1/
        Vorgabe: nb = nbmax. Der Wert nbmax (festgelegt in
        "limits.inc" mit derzeit nbmax=15) darf von nb nicht
        ueberschritten werden
  n01d   integer: Gitterindex der obersten Bodenschicht des
        1d Antriebsmodells
        Vorgabe: n01d = 0
  dz1d   1d real: Vertikale Schichtabmessungen des 1d
        Antriebsmodells. Bis zum vertikalen Index k=n gelten
        diese Abmessungen auch fuer das 3d Modellgebiet.
        Einheit: m
        Spezifikation: dz1d = Werteliste, Wiederholungs
        faktoren vor einzelnen Werten sind erlaubt
        Vorgabe: dz1d(k) = 25. fuer alle k
  dx     1d real: Abmessungen der Gitterstreifen in x-Richtung.
        Einheit: m
        Spezifikation: dx = Werteliste, wobei unspezifizierte
        Werte (dx(i)<0) rekursiv an den jeweiligen Vorgaenger

```

angeglichen werden.

Vorgabe: dx(1) = 10., dx(i)=-99 fuer alle i>2, fuehrt zu dx(i)=10. fuer alle i<=m

dy 1d real: Abmessungen der Gitterstreifen in y-Richtung
Einheit: m

Spezifikation: dy = Werteliste

Vorgabe: dy(j) = 10., dy(j)=-99 fuer alle j>2

xllcorner, yllcorner

real: Kartenbezogene Koordinaten der linken unteren Ecke des Modellgebiets, z.B. Gauss-Krueger-Koordinaten (oder anderes System).

Einheit: m

Vorgabe: xllcorner = 0., yllcorner = 0.

+++++ Beispielhafte Spezifikationen +++++

&grid

n1d=40 !n1d=Anz.Gitterzellen 1D Modell

n01d=4 !n01d=oberstes Bodenniveau im 1d Modell

m=160, l=170, n=25 !m,l,n=Anz.Gitterpunkte in x-, y- und z-Richtung

nadd=2 !nadd=Anz. zusaetzlicher Gitterstreifen

nb=15 !nb=Anz.Gitterpkte im Boden

dx=160*200 !Gitterweiten x-Richtung

dy=170*200 !Gitterweiten y-Richtung

xllcorner=2552000., yllcorner=5630000. !Modellecke links unten

!in GK-Koordinaten

dz1d=10*10.,12.,18.,24.,32.,40.,12*50.,60.,2*70.,10*100.

!1d-Gitterweiten z-Richtung

/end

+++++ Ende Gruppe "grid" +++++

C

***** Gruppe "boden" *****

Kurzbeschreibung der Variablen:

z01du real: Rauigkeitslaenge der unversiegelten
Flaechenanteile des 1d Antriebsmodells.
Einheit: m

Vorgabe: z01du = 0.2

z01dv real: Rauigkeitslaenge der versiegelten
Flaechenanteile des 1d Antriebsmodells.
Einheit: m

Vorgabe: z01dv = 0.01

z0uvorg real: Vorgabewert fuer die Rauigkeitslaenge der
unversiegelten Flaechenanteile des 3d Modells.
Wirkt nur in Bereichen mit Landnutzungsspezifikation
"0". Andernfalls gilt der Wert "z0u" der
Landnutzungstabelle.

Bei negativer Spezifikation z0uvorg <= 0 wird der
Wert modellintern ueberschrieben mit z0uvorg = z01du.

Einheit: m

Vorgabe: z0uvorg = -999 gleichbedeutend mit
z0uvorg = z01du.

z0vvorg real: Vorgabewert fuer die Rauigkeitslaenge der
versiegelten Flaechenanteile des 3d Modells.
Bei negativer Spezifikation z0vvorg <= 0 wird der
Wert modellintern ueberschrieben mit z0vvorg = z01dv.
Einheit: m

Vorgabe: z0vvorg = -999 gleichbedeutend mit
z0vvorg = z01dv.

z0w real: Rauigkeitslaenge der Wandflaechen.
Einheit: m

Vorgabe: z0w = 0.05

z0d real: Rauigkeitslaenge der Dachflaechen.
 Einheit: m
 Vorgabe: z0d = 0.05

vs1d real: Versiegelungsgrad der Bodenflaeche des
 1d Antriebsmodells.
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: vs1d = 0.04

Parameter der Canopy-Schicht des 1d Antriebsmodells

hca1d real: mittlere Bewuchshoehe
 Einheit: m
 Vorgabe: hca1d = 0.3

xlaf1d real: Blattflaechenindex.
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: xlaf1d = 2.

sig1d real: Pflanzenbedeckungsgrad der unversiegelten
 Flaechenanteile des Bodens.
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: sig1d = 0.8

z0g1d real: Rauigkeitslaenge des Bodens unterhalb
 des Bewuchses.
 Einheit: m
 Vorgabe: 0.01

af1d real: Albedo der Blattflaechen.
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: af1d = 0.15

ag1d real: Albedo des Bodens unterhalb der Pflanzenschicht
 Einheit: Dimensionslos
 Vorgabe: ag1d = 0.1

Variablen des Bodenmodells

a) Variablen der unversiegelten Flaechenanteile des Bodens

is1d integer: Code-Nummer des Bodentyps im 1d wie auch im
 3d Modell mit folgenden Moeglichkeiten:
 11 USDA (United States Department of Agriculture)
 textural classes plus peat (=Torf)

1=sand	2=loamy sand
3=sandy loam	4=silt loam
5=loam	6=sandy clay loam
7=silty clay loam	8=clay loam
9=sandy clay	10=silty clay
11=clay	12=peat

Vorgabe: is1d = 3 (sandiger Lehm)

ifeuld integer: Kennzahl (von 1 bis 6) zur Festlegung des
 des anfaenglichen volumetrischen Bodenwassergehalts
 "etastart". Er wird, unter Benutzung der
 bodentypabhaengigen Parameter der Welkgrenze "etawilt"
 und der Saettigungsfeuchte "etasat", errechnet als

$$\text{etastart} = 0.5 \cdot \text{etawilt} + 0.2 \cdot (\text{ifeuld} - 1) \cdot (\text{etasat} - \text{etawilt})$$
 .
 Das ergibt
 ifeuld=1: extrem trockener Boden
 (etastart=0.5*etawilt)
 ifeuld=6: fast gesaettigte Feuchte
 (etastart=etasat-0.5*etawilt).
 Vorgabe: ifeuld = 3

krmin1 integer: oberer Schichtindex der "Wurzelzone"
 des Bodens (Bereich, dem das verdunstende Wasser
 des Canopy entzogen wird). Gilt fuer das 1d wie

```

auch das 3d Modell.
Vorgabe: krmin1 = 3
krmax1      integer: unterer Schichtindex der "Wurzelzone".
Vorgabe: krmax1 = 7
b) Variablen der versiegelten Flaechenanteile
akb1dv      real: Thermodiffusivitaet des Bodens im Bereich der
versiegelten Flaechenanteile des 1d Antriebsmodells.
Einheit: m**2/s
Vorgabe: akb1dv = 2.4e-7
alb1dv      real: Waermeleitfaehigkeit des Bodens im Bereich der
versiegelten Flaechenanteile des 1d Antriebsmodells.
Einheit: W/m/K
Vorgabe: alb1dv = 1.0
c) Parameter des einfachen Bodenmodells der unversiegelten Flaechen
(nur Waermeleitung, kein Canopy, empirischer Verdunstungsansatz;
wirksam, wenn die logische Variable "lcnp" der Gruppe "param" auf
.false. gesetzt ist):
akb1du      real: Thermodiffusivitaet der unversiegelten
Flaechenanteile des 1d Antriebsmodells.
Einheit: m**2/s
Vorgabe: akb1du = 3.0e-7
alb1du      real: Waermeleitfaehigkeit der unversiegelten
Flaechenanteile des 1d Antriebsmodells.
Einheit: W/m/K
Vorgabe: alb1du = 0.6
bet1d       real: Empirischer Verdunstungsparameter.
Einheit: kg/m**2/s
Vorgabe: bet1d = 0.006
+++++ Beispielfhafte Spezifikationen +++++
&boden
z01du=0.35  !Rauigkeitslaenge unversiegelte Flaechen 1D Modell
is1d=3      !Bodentyp 3 (sandiger Lehm), 1d und 3d Modell
ifeuld=2    !Feuchtestufe des Bodens beim Start des 1d Modells
vs1d=0.02   !Versiegelung 1d
z0d = 0.05  !Rauigkeitslaenge Daecher
z0w = 0.05  !Rauigkeitslaenge Waende
hca1d = 0.5  !Bewuchshoehe 1d Modell
/end
+++++ Ende Gruppe "boden" +++++
C
***** Gruppe "profile" *****
Kurzbeschreibung der Variablen:
wind        real: Vorgeschriebene Windgeschwindigkeit des 1d
Antriebsmodells, gilt bis zum Start der 3d
Simulation. (Anm.: Die Moeglichkeit, einer stuendlich
vorgescriebenen Windgeschwindigkeit ist zur
Zeit inaktiviert.)
Einheit: m/s
Vorgabe: Kein Vorgabewert
phiwin      real: Vorgeschriebene Windrichtung des 1d
Antriebsmodells, gilt bis zum Start der 3d
Simulation.
Einheit: Grad
Vorgabe: Kein Vorgabewert
hwin        real: Hoehe ueber Grund des 1d Antriebsmodells,
in der die vorgeschriebene Windgeschwindigkeit gelten
soll. (Gilt bis zum Start der 3d Simulation. Ab dann
wird die Windgeschwindigkeit in Hoehe der Obergrenze
des 3d Modells festgehalten.)

```


Einheit: m
 Vorgabe: hwin = 10.
 temp 1d real: Stuetzwerte des Anfangsprofils der
 Lufttemperatur des 1d Antriebsmodells.
 Vorgebar sind bis zu 5 Werte. Zum Profil hinzu
 tritt der Wert "tb0" (Anfangswert der Bodentemperatur,
 siehe unten) fuer die Hoehe Null.
 Einheit: Grad Celsius
 Vorgabe: Keine Vorgabewerte
 ht 1d real: Zu den vorgegebenen Stuetzwerten "temp(k)"
 korrespondierende Hoehenwerte ueber Grund. Zwischen
 den Stuetzstellen wird das Anfangsprofil der
 Temperatur durch lineare Interpolation ermittelt,
 oberhalb der obersten Stuetzstelle faellt die
 Anfangstemperatur um 0.3 K pro 100 m ab.
 Einheit: m
 Vorgabe: Keine Vorgabewerte
 qrel 1d real: Stuetzwerte des Anfangsprofils der relativen
 Feuchte des 1d Antriebsmodells.
 Vorgebar sind bis zu 5 Werte.
 Einheit: Prozent
 Vorgabe: Keine Vorgabewerte
 hq 1d real: Zu den vorgegebenen Stuetzwerten "qrel(k)"
 der relativen Feuchte korrespondierende Hoehenwerte.
 Zwischen den Stuetzstellen wird das Anfangsprofil der
 relativen Feuchte linear interpoliert, oberhalb der
 obersten und unterhalb der untersten Stuetzstelle
 ist der Anfangswert der relativen Feuchte konstant.
 Einheit: m
 Vorgabe: Keine Vorgabewerte
 tb0 real: Anfangswert der Bodentemperatur fuer die
 Hoehe des Basisniveaus. Fuer andere Gelaendehoeen
 wird modellintern eine Abnahme von 0.6 K pro
 100 m Hoehendifferenz hinzuaddiert.
 Gilt gleichermassen fuer die versiegelten wie
 auch die unversiegelten Flaachenanteile des 1d
 Antriebsmodells.
 Einheit: Grad Celsius
 Vorgabe: tb0 = 10.
 tinn real: Gebaeudeinntemperatur. Wird benoetigt zur
 Berechnung der Waermestroeme aus dem Gebaeudeinneren
 durch deren Waende und Daecher in die Atmosphaere.
 Gilt fuer die gesamte Simualtionsdauer.
 Einheit: Grad Celsius
 Vorgabe: tinn = 20.
 tw0 real: Temperatur eventueller Wasserflaechen des
 Modellgebiets. Wird waehrend der Simulation konstant
 gehalten.
 Einheit: Grad Celsius
 Vorgabe: tw0 = 18.

Variable aus frueheren Modellversionen, die noch im Programmcode stehen,
 aber zur Zeit bedeutungslos sind, da die zugehoerigen Modelloptionen
 inaktiviert wurden:

wind 1d real: Stundenweise vorgeschriebene
 Windgeschwindigkeit mit Werten wind(0) bis wind(23).
 Einheit: m/s
 Vorgabe: Keine Vorgabewerte

```

phiwin      1d real: Windrichtung gemessen im Uhrzeigersinn gegen
             Nord. Wie bei "wind" koennen auch fuer "phiwin"
             stundenweise Werte phiwin(0) bis phiwin(23)
             spezifiziert werden.
             Einheit: Grad
             Vorgabe: Keine Vorgabewerte
iref,jref   integer: Definiert einen modellgebietsinternen
             Bezugspunkt der Windgeschwindigkeit. Horizontale
             Indizes der Gitterposition, an der die
             Windgeschwindigkeit waehrend der 3d Simulation
             vorgeschrieben werden soll.
             Vorgabe: iref = 0, jref = 0, d.h. die
             Windgeschwindigkeit wird an der Modellobergrenze nach
             Massgabe des 1d Modells vorgeschrieben
hwinfix     logical: Mit hwinfix=.true. kann verhindert werden,
             dass die Hoehe der vorgeschriebenen
             Windgeschwindigkeit mit dem Beginn der 3d Simulation
             zur Obergrenze des 3d Modellgebiets wechselt.
             Bei stundenweise vorgeschriebenen Windgeschwindig-
             keitswerten wird hwinfix automatisch .true. gesetzt.
             Vorgabe: hwinfix = .false.
+++++++ Beispielfhafte Spezifikationen ++++++
&profile
wind=6.1, phiwin=135., hwin=100.,
temp = 15, 11., 4.5      !Stuetzerte des anf. Temperaturprofils
ht = 50., 550., 1000.  !Stuetzstellen des anf. Temperaturprofils
qrel = 35., 34.6, 34.  !Stuetzwerte des Anfangsprofils der rF
hq = 50., 550., 1000.  !Stuetzstellen des Anfangsprofils der rF
tb0=16., !initiale Bodentemperatur
tw0=18., ! Wassertemperatur
tinn=20. ! Innenraumtemperatur
/end
+++++++ Ende Gruppe "profile" ++++++
C
***** Gruppe "pollution" *****
Die Modelloption zur Simulation einer Schadstoffausbreitung ist zur
Zeit inaktiviert.
Kurzbeschreibung der Variablen:
  pollut     logical: Schaltet das Dispersionsmodell einer
             einer Luftbeimengung ein oder aus.
             Vorgabe: pollut = .false.

Weitere (zur Zeit bedeutungslose) Variable
  s_file     character*256: Datei der Schadstoffquellen
             Vorgabe: s_file = ' ', d.h. keine Quellen
  unitc      character*20: Physikalische Einheit der
             Schadstoffkonzentration.
             Vorgabe: unitc = 'micrograms/m**3'
  cfact      real: Faktor, um den die herausgeschriebenen
             Ergebnisse der Schadstoffkonzentration sich von
             "unitc" unterscheiden.
             Vorgabe: cfact = 1.0
  ntyp       integer: Anzahl unterschiedlicher Strassentypen.
             Vorgabe= ntyp = 0
  emissfac   1d real: (strassentypabhaengige) Emissionsfaktoren
             Einheit: g/km/Fahrzeug
             Vorgabe: Keine Vorgabewerte
  traffid    1d real: (strassentypabhaengige) Fahrzeugdichte
             Einheit: Fahrzeuge/Tag

```

```

Vorgabe: Keine Vorgabewerte
vpegel      1d real: Stundenweise Verteilung des Kfz-Aufkommens.
            Einheit: Prozent des Tageswerts
            Vorgabe: vpegel(k) = 100./24. fuer k = 0,...,23
+++++++ Beispielhafte Spezifikationen ++++++
&pollution
  pollut=.false. !keine Schadstoffausbreitung
/end
+++++++ Ende Gruppe "pollution" ++++++
C

```

***** Gruppe "output" *****

Kurzbeschreibung der Variablen:

a) Allgemeines

```

directry    character*256: Verzeichnis, in das die Ergebnisse der
            aktuellen Simulation geschrieben werden sollen.
            Vorgabe: directry = ' '
xtension    character*3: Namenserweiterung fuer die
            Ergebnisdateien der aktuellen Simulation.
            Spezifikationen mit 1, 2 oder 3 (fuer Dateinamen
            erlaubte) Zeichen sind moeglich.
            Vorgabe: xtension = ' '
commres     character*80(5): Bis zu fuefzeiliger "Kommentar",
            der in den Kopf der Ergebnisdateien geschrieben wird
            Vorgabe: commres = 5*' '
href        real: Hoehe ueber Grund, fuer die eine zusaetzliche
            Resultatsausgabe (neben der Ausgabe fuer das unterste
            atmosphaerische Niveau) der Felder der
            Geschwindigkeit, der Temperatur und der relativen
            Feuchte erfolgen soll.
            Einheit: m
            Vorgabe: href = 0, d.h. keine zusaetzliche Ausgabe

```

b) Regelung der Ausgabezeiten

```

ia          integer: Zeitintervall fuer das Herausschreiben
            der Ergebnisse in Stunden
            Vorgabe: ia = 3., d.h. Resultatsausgabe, ausser fuer
            den Anfangszeitpunkt, zu allen durch 3 teilbaren
            Stunden
nextra      integer: Anzahl von minutengenauen
            Extra-Zeitpunkten (ausserhalb des
            normalen Ausgaberrhythmus), zu denen eine
            Resultatsausgabe erfolgen soll.
            Vorgabe: nextra = 0, maximal erlaubt 30.
lstextra    1d integer: Sundenwerte der Extra-Ausgabezeiten
            Vorgabe: lstextra = 30*-99, d.h. undefiniert
minextra    1d integer: Minutenwerte der Extra-Ausgabezeiten
            Vorgabe: minextra = 30*-99integer:

```

c) Festlegung der auszugebenden Felder

c1) atmosphaerische Variablen

```

iu          integer: Bei iu=1 Ausgabe der 2d horizontalen
            Geschwindigkeitsfelder fuer das unterste
            atmosphaerische Niveau und ggf. zusaetzlich in der
            vorgebbaren Hoehe "href". iu<>1: keine Ausgabe.
            Vorgabe: iu = 1
uvwcompl    logical: Bei uvwcompl=.true. Ausgabe der
            dreidimensionalen 3-komponentigen Geschwindigkeit.
            Nur wirksam, wenn zugleich iu=1 spezifiziert ist.
            Vorgabe: uvwcompl = .false.
itp         integer: Bei itp=1 Ausgabe der 2d Temperaturfelder
            fuer das unterste atmosphaerische Niveau und ggf.

```

zusätzlich in der vorgebbaren Hoehe "href".
Ausserdem werden die 2d Felder der maximalen und der minimalen Temperatur herausgeschrieben, entweder fuer die Hohe "href" ueber Grund (bei href>0) oder fuer das unterste atmosphaerische Niveau.

itp<>1: keine Ausgabe der vorgenannten Felder.

Vorgabe: itp = 1

tcompl logical: Bei tcompl=.true. Ausgabe der dreidimensionalen Temperaturfelder (tcompl=.true.). Nur wirksam, wenn zugleich itp=1 spezifiziert ist.
Vorgabe: tcompl = .false.

iqr integer: Bei iqr=1 Ausgabe der 2d Felder der relativen Feuchte fuer das unterste atmosphaerische Niveau und ggf. in der vorgebbaren Hoehe "href".

iqr<>1: keine Ausgabe der relativen Feuchte.

Vorgabe: iqr = 1

qcompl logical: Zusätzliche Ausgabe der dreidimensionalen rF-Felder (qcompl=.true.). Nur wirksam, wenn zugleich iqr=1 spezifiziert ist.

Vorgabe: qcompl = .false.

ikm integer: Bei ikm=1 Ausgabe der 3d Felder des Austauschkoeffizienten fuer den Impuls Km.

Vorgabe: ikm=0, d.h. keine Ausgabe von Km

ikh integer: Bei ikh=1 Ausgabe der 3d Felder des Austauschkoeffizienten fuer Waerme und atmosphaerische Beimengungen Kh.

Vorgabe: ikh=0, d.h. keine Ausgabe von Kh

z.Z. nicht aktiv wegen abgeschalteter Schadstoffberechnung

ic integer: Bei pollut=.true. und ic=1 Ausgabe der 2d Felder der Schadstoffkonzentration fuer das unterste atmosphaerische Niveau und ggf. in der vorgebbaren Hoehe "href".

ic<>1: keine Ausgabe der Schadstoffkonzentration.

Vorgabe: ic = 0

ccompl logical: Zusätzliche Ausgabe der dreidimensionalen Schadstofffelder (ccompl=.true.). Nur wirksam, wenn zugleich pollut=.true. und ic=1 spezifiziert ist.

Vorgabe: ccompl = .false.

ccfak real: Nur fuer die Ausgabe von Punktergebnissen: Faktor, um den die Ausgabe der Schadstoffkonzentrationen gegenueber der Vorgabe "Mikrogramm pro Kubikmeter" geaendert werden soll.

Vorgabe: ccfak=1.

c2) Bodenfelder

itbrad integer: Bei itbrad=1 Ausgabe der Strahlungstemperatur der Bodengrenzflaeche mit Einbeziehung des niedrigen Bodenbewuchses.

Vorgabe: itbrad=0.

itb integer: Bei itb=1 Ausgabe der dreidimensionalen Felder der Bodentemperatur, unterschieden nach versiegelten und unversiegelten Flaechenteilen.

Vorgabe: itb=0, d.h. keine Ausgabe der Bodentemperatur

itbrad integer: Bei itbrad=1 Ausgabe der Strahlungstemperatur der Bodengrenzflaeche mit Einbeziehung des niedrigen Bodenbewuchses.

Vorgabe: itbrad=0.

ifb integer: Bei ifb=1 Ausgabe der dreidimensionalen Felder der Bodenfeuchte (volumetrischer Wassergehalt).

Vorgabe: ifb=0, d.h. keine Ausgabe der Bodenfeuchte

```

depth          real: Fuer depth>0 werden 2d Felder der
                Bodentemperatur und des volumetrischen Wassergehalts
                in der Tiefe "depth" ausgegeben.
                Einheit: m
                Vorgabe: depth = 0,
c3) andere zumeist 2d Felder
israd          integer: Bei israd=1 werden zweidimensionalen Felder
                der auf den Boden auftreffenden kurzwelligigen
                Strahlung ausgegeben.
                Vorgabe: israd = 0
ilrad          integer: Bei ilrad=1 werden zweidimensionalen Felder
                der auf den Boden auftreffenden langwelligigen
                Strahlung sowie der vom Boden und seinen Hindernissen
                ausgehenden "terrestrischen" Strahlung ausgegeben.
                Vorgabe: ilrad = 0
iheatfl        integer: Ausgabe des 2d Feldes des sensiblen
                Waermeflusses am Boden (iheatfl=1);
                iheatfl <> 1: keine Ausgabe.
                Vorgabe: iheatfl = 0
iustern        integer: Ausgabe des 2d Feldes der Skalengroesse
                ustern am Boden (iustern=1);
                iustern <> 1: keine Ausgabe.
                Vorgabe: iustern = 0
itstern        integer: Ausgabe des 2d Feldes der
                Skalierungstemperatur Tstern am Boden (itstern=1);
                itstern <> 1: keine Ausgabe.
                Vorgabe: itstern = 0
mixlen         integer: Ausgabe des 3d Feldes der Mischungsweg-
                laenge (mixlen=1); mixlen <> 1: keine Ausgabe.
                Vorgabe: mixlen = 0
d) Sonderresultate
ncout          integer: Anzahl von ausgewaehlten Gitterpositionen,
                fuer die in einer Extradatei vertikale
                Werteverteilungen ausgegeben werden sollen
                (maximal 30).
                Vorgabe: ncout = 0
icout,jcout    1d integer: Horizontale Gitterindizes der
                ausgewaehlten Vertikalprofile.
                Vorgabe: icout = 30*0, jcout = 30* 0
pointname      character*20(30): Kurzbezeichnung der ausgewaehlten
                Punkte.
                Vorgabe: pointname = 30*' '
npoint         integer: Anzahl an Punkten, fuer die in einer
                gesonderten Ausgabedatei "pointres.xtension"
                stuendliche Resultate der untersten
                atmosphaerischen Werte von Wind, Temperatur
                und relativer Feuchte ausgegeben werden sollen.
                Maximal 50 Punkte.
                Vorgabe: npoint = 0
iipkt, jjpkt   1d integer: Horizontale Indizes der fuer die
                Sonderausgabe ausgewaehlten Punkte.
                Vorgabe: iipkt(1..50) = 0, iipkt(1..50)
+++++ Beispielhafte Spezifikationen +++++
&output
xtension='xxx' !Namenserweiterung der Ausgabedateien
ia=2           !Ausgabefrequenz in Stunden
href=5.        !Hoehe ueber Grund der Ausgabefelder
commres(1)='Projekt KU11B/10/032_KOELN_KOOPERATION',
commres(2)='Modellkonfiguration "b200 (Biotopkartierung 200m)"',

```

```

commres(3)='Eckpunktsimulation 001 S0: tt tief, qr tief, ff hoch'
uvwcompl=.true. !vollstaendige 3d Felder fuer u, v, w ausgeben
Tcompl=.true. !vollstaendiges 3d Temperaturfeld ausgeben
! inaktivierte Ausgabeprofile (eines anderen Projekts)
! ncout = 4 ! Anz. Ausgabeprofile
! icout(1) = 11 !x-Position Ausgabeprofil 1
! jcout(1) = 6 !y-Position Ausgabeprofil 1
! pointname(1) = 'FlughafenStat' !Name Ausgabeprofil 1
! icout(2) = 20
! jcout(2) = 7
! pointname(2) = 'WaldSued'
! icout(3) = 85
! jcout(3) = 40
! pointname(3) = 'Innenstadt'
! icout(4) = 116
! jcout(4) = 15
! pointname(4) = 'KaiserleiStat'
/end
+++++++ Ende Gruppe "output" ++++++++

```

Literatur

- BLACKADAR, A. K., 1962: The vertical distribution of wind and turbulent exchange in a neutral atmosphere. – *J. Geophys. Res.* **67**, 3095–3102.
- BUCHHOLZ, S., M. KOSSMANN, 2015: Research note. Visualisation of summer heat intensity for different settlement types and varying surface fraction partitioning. – *Landscape Urban Plan* **144**, 59–64.
- CLAPP, R., G. HORNBERGER, 1978: Empirical equations for some soil hydraulic properties. – *Water Resour. Res.* **14**, 601–604.
- CLARKE, R. H., 1970: Recommended methods for the treatment of the boundary layer in numerical models. – *Austr. Met. Magazine* **18**, 207–226.
- COURANT, R., K. FRIEDRICHS, H. LEWY, 1928: Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik. – *Mathematische Annalen* **100**, 32–74.
- CRANK, J., P. NICOLSON, 1947: A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. – *Advances in Computational Mathematics* **6**(1), 207–226.
- DEARDORFF, J. W., 1978: Efficient prediction of ground surface temperature and moisture, with inclusion of a layer of vegetation. – *J. Geophys. Res.* **83**, 1889–1903.
- DELSOL, F., K. MIYAKODA, R. H. CLARKE, 1971: Parameterized processes in the surface boundary layer of an atmospheric circulation model. – *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* **97**, 181–208.
- EDLEFSEN, N. E., A. B. C. ANDERSON, 1943: Thermodynamics of soil moisture. – *Hilgardia* **15**, 31–298.
- FRÜH, B., P. BECKER, T. DEUTSCHLÄNDER, J.-D. HESSEL, M. KOSSMANN, I. MIESKES, J. NAMYSLO, M. ROOS, U. SIEVERS, T. STEIGERWALD, H. TURAU, U. WIENERT, 2011: Approximative procedure for the analysis of the impact of climate change on the urban heat load in Frankfurt am Main, Germany. – *J. Appl. Met. Clim.* **50**, 167–184.
- GROSS, G., 2012: Numerical simulation of greening effects for idealised roofs with regional climate forcing. – *Meteorol. Zeitschrift* **21**, 173–181.
- GROSS, G., 2014: On the parameterization of urban land use in mesoscale models. – *Boundary-Layer Meteor.* **150**, 319–326.
- GUTMAN, D. P., K. E. TORRANCE, 1975: Response of the urban boundary layer to heat addition and surface roughness. – *Boundary-Layer Meteor.* **9**, 217–233.
- LANDAU, L. D., E. M. LIFSCHITZ, 1966: *Lehrbuch der Teoretischen Physik. Band VI: Hydrodynamik* – Akademie-Verlag, Berlin, 618 S.
- MÖLLER, F., 1954: Ein Kurzverfahren zur Bestimmung der langwelligen Ausstrahlung dicker Atmosphärenschichten (Quick method to determine long-wave emission for optically thick layers). – *Arch. Met. Geoph. Biokl. A*, **7**, 158–169.
- PANHANS, W.-G., R. SCHRODIN, 1980: A one-dimensional circulation and climate model and its application to the lower atmosphere. – *Contrib. Phys. Atmosph.* **53**, 264–294.
- PHILIP, J. R., 1957: Evaporation and moisture and heat fields in the soil. – *Journ. Met.* **15**, 354–366.
- PIELKE, R. A., 1984: *Mesoscale Meteorological Modelling* – Academic Press, New York, 612 S.
- PRUPPACHER, H. R., J. D. KLETT, 1980: *Microphysics of clouds and precipitation* – D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, The Netherlands, 713 S.
- ROACHE, P. J., 1982: *Computational fluid dynamics* – Hermosa Publishers, Albuquerque N. M., 446 S.

- SIEBERT, J., U. SIEVERS, W. ZDUNKOWSKI, 1992: A one-dimensional simulation of the interaction between land surface processes and the atmosphere. – *Bound.-Layer Meteorol.* **59**, 1–34.
- SIEVERS, U., 1990: Dreidimensionale Simulationen in Stadtgebieten. – In: Schriftenreihe Umweltmeteorologie, Band 15: Sitzung des Hauptausschusses II am 7. und 8. Juni 1990 in Lahnstein, 36–43, Düsseldorf. Kommission Reinhaltung der Luft im VDI und DIN.
- SIEVERS, U., 2012: Das kleinskalige Strömungsmodell MUKLIMO_3. Teil 1: Theoretische Grundlagen, PC-Basisversion, Validierung. – In: Berichte des Deutschen Wetterdienstes, Band 240, Deutscher Wetterdienst, Offenbach am Main, Germany.
- SIEVERS, U., B. FRÜH, 2012: A practical approach to compute short-wave irradiance interacting with subgrid-scale buildings. – *Meteorol. Z.* 349–364.
- SIEVERS, U., W. ZDUNKOWSKI, 1986: A microscale urban climate model. – *Contr. Phys. Atmosph.* **59**, 13–40.
- SIEVERS, U., R. FORKEL, W. ZDUNKOWSKI, 1983: Transport equations for heat and moisture in the soil and their application to boundary layer problems. – *Contrib. Phys. Atmosph.* **56**, 58–83.
- STULL, R. A., 1988: *An Introduction to Boundary Layer Meteorology* – Kluwer, Dordrecht, 666 S.
- THUNIS, P., A. CLAPPIER, 2000: Formulation and evaluation of a nonhydrostatic mesoscale vorticity model (TVM). – *Mon. Weather Rev.* **128**, 3236–3251.
- VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE (VDI), 1994: Umweltmeteorologie - Wechselwirkung zwischen Atmosphäre und Oberflächen - Berechnung der kurz- und langwelligen Strahlung (Environmental meteorology - Interaction between atmosphere and surfaces - Computation of short and long-wave radiation). – In: VDI-Richtlinie 3789 Blatt 2, Beuth-Verlag, Berlin.
- ZDUNKOWSKI, W. G., J. PAEGLE, J. REILLY, 1975: The effect of soil moisture upon the atmospheric and soil temperature near the air-soil interface. – *Arch. Met. Geoph. Biokl. A*, **24**, 245–268.

Abbildungsverzeichnis

1	Modellgitter mit atmosphärischen Zellen und Bodenzellen	16
2	Modellgitter mit halbzahlig reduzierten Geländehöhen	18
3	Auswirkungen der Orographieglättung	19
4	Vergleich zweier Simulationen vor und nach Einführung der Auftriebsdämpfung	37
5	Gitterzellstruktur in einem die Bodengrenzfläche umfassenden Ausschnitt eines Modellgebiets .	43
6	Zur Ankopplung der seitlichen Temperaturrandwerte an das 1d Antriebsmodell	51
7	Auswirkung unterschiedlicher Modellierungen der Blatttemperaturen	58
8	Ausbreitung einer Luftbeimengung im Bereich aufgelöster und unaufgelöster Bebauung . . .	64

Tabellenverzeichnis

1	Bodenparameter für 11 Bodentypen der USDA-Klassifizierung plus Torf	94
---	---	----

Hinweis

Alle Rechte an der Thermodynamikversion von MUKLIMO_3 liegen beim Deutschen Wetterdienst. Bei Fragen zum Modell wenden Sie sich bitte an:

Deutscher Wetterdienst
Zentrales Klimabüro
Frankfurter Straße 135
63067 Offenbach am Main

Tel.: +49(0)69/8062-2990
Fax-Nr.: +49(0)69/8062-2993
email: klima.offenbach@dwd.de

Berichte des Deutschen Wetterdienstes

Nr. 247 K. Trusilova; W. Riecke:

Klimauntersuchung für die Metropolregion Hamburg zur Entwicklung verschiedener meteorologischer Parameter bis zum Jahr 2050

Nr. 246 Hänsel, Stephanie; Schucknecht, Anne; Böttcher, Falk; Bernhofer, Christian; Matschullat, Jörg:

Niederschlagsveränderungen in Sachsen von 1901 bis 2100 - Starkniederschlags- und Trockenheitstrends

Nr. 245 P. Winkler:

Untersuchung zu historischen und neuzeitlichen Dampfdruckmessungen am Observatorium Hohenpeißenberg

Nr. 244 Ch. Brendel; E. Brisson; F. Heyner; E. Weigl; B. Ahrens:

Bestimmung des atmosphärischen Konvektionspotentials über Thüringen

Nr. 243 K. Hoffmann; W. Bivour; B. Früh; M. Koßmann; P.-H. Voß:

Klimauntersuchungen in Jena für die Anpassung an den Klimawandel und seine erwarteten Folgen - ein Ergebnisbereich

Nr. 242 C. Stein; G. Maliltz:

Das Hochwasser an Elbe und Donau im Juni 2013: Wetterentwicklung und Warnmanagement des DWD: Hydrometeorologische Rahmenbedingungen

Nr. 241 A. Hoff; C. Drüe; H.-R. Sonnabend:

Messphysik und Datenverarbeitung der Verkehrsflugzeuge als meteorologische Sensorträger

Nr. 240 U. Sievers:

Das kleinskalige Strömungsmodell MUKLIMO_3. - Teil 1: Theoretische Grundlagen, PC-Basisversion und Validierung

Nr. 239 F. Herbert:

Die Erschließung der Rossby-Welle durch Lärmfilterung

Nr. 238 G. Augter:

Vergleich der Referenzmessungen des Deutschen Wetterdienstes mit automatisch gewonnenen Messwerten

Nr. 237 B. Früh, M. Koßmann, M. Roos:

Frankfurt am Main im Klimawandel: Eine Untersuchung zur städtischen Wärmebelastung

Nr. 236 G. Augter, M. Roos:

Berechnung von Sturmintensitäten für Deutschland

Nr. 235 U. Maier, G. Müller-Westermeier:

Verifikation klimatologischer Rasterfelder

Nr. 234 W. Riecke, G. Rosenhagen:

Das Klima in Hamburg: Entwicklung in Hamburg und der Metropolregion

Gesamtliste der „Berichte des Deutschen Wetterdienstes“ unter www.dwd.de/bibliothek.



Deutscher Wetterdienst

Fachinformationsstelle und Deutsche Meteorologische Bibliothek
Frankfurter Straße 135
63067 Offenbach