

# IBJparticle

Eine Implementierung des Ausbreitungsmodells

VDI 3945 Blatt 3: Umweltmeteorologie — Atmosphärische  
Ausbreitungsmodelle — Partikelmodell

Dr. L. Janicke, Dunum, September 2000

<b>Vorbemerkung</b>	<b>1</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Die Implementierung des Modells</b>	<b>2</b>
2.1 Definition der Gitter . . . . .	2
2.2 Definition der Feldgrößen . . . . .	7
2.3 Festlegung des Zeitschritts . . . . .	10
2.4 Die Berechnung der Trajektorien . . . . .	11
<b>3 Das Programm</b>	<b>16</b>
3.1 Benutzeranleitung . . . . .	16
3.2 Eingabe-Parameter . . . . .	19
3.3 Dateien . . . . .	25
<b>4 Verifikationstests</b>	<b>27</b>
4.1 Homogenitätstest . . . . .	27
4.1.1 Homogene Turbulenz, konstanter Zeitschritt . . . . .	27
4.1.2 Homogene Turbulenz, variabler Zeitschritt . . . . .	27
4.1.3 Inhomogene Turbulenz, konstanter Zeitschritt . . . . .	29
4.1.4 Inhomogene Turbulenz, variabler Zeitschritt . . . . .	29
4.2 Deposition . . . . .	31
4.2.1 Trockene Deposition ohne Sedimentation . . . . .	31
4.2.2 Trockene Deposition mit Sedimentation . . . . .	32
4.2.3 Nasse Deposition . . . . .	32
4.2.4 Interzeption . . . . .	33
4.3 Taylor-Theorem . . . . .	35
4.4 Berljang-Lösung . . . . .	36
4.5 Abgasfahnenüberhöhung . . . . .	38
4.6 Dreidimensionales Windfeld . . . . .	41
<b>A Dateistruktur</b>	<b>43</b>

	Ingenieurbüro Janicke Gesellschaft für Umweltphysik D-26427 Dunum Alter Postweg 21	eMail: info@janicke.de Internet: www.janicke.de
---	---	--



## Vorbemerkung

Die Urheberrechte des Computerprogramms **IBJparticle** liegen bei Dr. Lutz Janicke, Dunum. Das Programm einschließlich des Quelltextes ist unter der GNU PUBLIC LICENCE verfügbar, die mit dem Programm verteilt wird. Das bedeutet im wesentlichen, daß es frei kopiert und weitergegeben werden darf, sofern dies kostenlos und wieder unter der GNU PUBLIC LICENCE erfolgt. Falls das Programm modifiziert und weitergegeben wird, ist der Programmname zu ändern, insbesondere darf der neue Name nicht mit „IBJ“ beginnen.

Diese Dokumentation, das Programm und Beispielrechnungen sind im Internet unter <http://www.janicke.de> verfügbar. Dort stehen auch Anmerkungen, Korrekturen und Beiträge Dritter.

## 1 Einleitung

Die Richtlinie VDI 3945 Blatt 3 beschreibt ein Lagrangesches Partikel-Modell zur Berechnung der Ausbreitung von Spurenstoffen in der Atmosphäre und gibt eine Reihe von Verifikationstests an. *IBJparticle* ist die Modell-Implementierung, mit der die Arbeitsgruppe des VDI gearbeitet und die in der Richtlinie aufgeführten Verifikationstests durchgeführt hat.

In diesem Dokument wird zunächst beschrieben, auf welche Weise der in der Richtlinie beschriebene Algorithmus numerisch umgesetzt ist. Dazu gehört u.a., welches Koordinatensystem verwendet wird, wie es diskretisiert wird, wie die diskretisierten Felder interpoliert und wie Differential- und Integraloperationen numerisch durchgeführt werden (Abschnitt 2).

Das numerische Verfahren ist in einem Computerprogramm realisiert. Wie dieses Programm bedient wird, welche Eingabe es erfordert und was es ausgibt, ist in Abschnitt 3 beschrieben. Ergänzend ist in Anhang A die Struktur der verwendeten Files dargestellt.

In Abschnitt 4 folgen die Verifikationstests, die in der Richtlinie aufgeführt sind. Sie sind mit der Programmversion 1.5.2 durchgerechnet worden.

Eine Beschreibung verschiedener Anwendungsfälle ist vorgesehen, konnte aber in dieser Dokumentation nicht realisiert werden.



## 2 Die Implementierung des Modells

Dieser Abschnitt beschreibt die Implementierung von *IBJparticle* entsprechend der Richtlinie VDI 3945 Blatt 3. Es bestehen folgende Einschränkungen:

- Chemische Umwandlungen werden nicht modelliert.

### 2.1 Definition der Gitter

Rechengitter und Auswertegitter sind auf gleiche Weise definiert. Im folgenden wird zunächst das 3-dimensionale Rechen-Gitter beschrieben, die entsprechenden Größen für das Auswertegitter sind durch eine Tilde ( $\tilde{\phantom{x}}$ ) gekennzeichnet. Auf die Unterschiede im 1-dimensionalen Fall wird anschließend eingegangen.

Grundlage ist ein kartesisches Koordinatensystem  $(x, y, z)$  mit den Einheitsvektoren in Achsenrichtung  $\mathbf{e}_x$  (nach Osten),  $\mathbf{e}_y$  (nach Norden) und  $\mathbf{e}_z$  (nach oben). Es ist das ortsfeste System, im Gegensatz zum später auch verwendeten Windsystem. Das Rechengitter besitzt  $N_x$  Intervalle in  $x$ -Richtung und  $N_y$  und  $N_z$  Intervalle in den beiden anderen Richtungen. Um die Schreibweise übersichtlich zu halten, wird möglichst immer der Index  $i$  als Laufindex für die  $x$ -Richtung verwendet und entsprechend  $j$  und  $k$  für die  $y$ - und  $z$ -Richtung. Der erste gültige Indexwert bei der Zählung der Intervalle ist 1. Soll ein Laufindex bereits mit dem Wert 0 beginnen, dann wird die Schreibweise  $i'$ ,  $j'$  bzw.  $k'$  verwendet, also

$$\begin{aligned} i &= 1, 2, \dots, N_x & i' &= 0, 1, \dots, N_x \\ j &= 1, 2, \dots, N_y & j' &= 0, 1, \dots, N_y \\ k &= 1, 2, \dots, N_z & k' &= 0, 1, \dots, N_z \end{aligned} \quad (2.1)$$

Das Gitter ist horizontal äquidistant mit einer Maschenweite  $d$ , die Gitterpunkte sind

$$x_{i'} = x_0 + i'd \quad (2.2)$$

$$y_{j'} = y_0 + j'd \quad (2.3)$$

Die horizontalen Maschen  $\mathcal{D}_{ij}$  sind also quadratisch mit dem Flächeninhalt  $\Delta_{ij} = d^2$ ,

$$\mathcal{D}_{ij} = \{ (x, y) \mid x_{i-1} \leq x < x_i; y_{j-1} \leq y < y_j \} \quad (2.4)$$

Die Koordinaten der Maschenmittelpunkte (Zwischengitter) sind

$$x_i^* = 0.5(x_{i-1} + x_i) \quad (2.5)$$

$$y_j^* = 0.5(y_{j-1} + y_j) \quad (2.6)$$

Das Geländeprofil ist auf den Gitterpunkten  $(x_{i'}, y_{j'})$  als Tabelle  $b_{i'j'}$  und auf den Maschenmittelpunkten  $(x_i^*, y_j^*)$  als  $b_{ij}^*$  definiert. Zur Interpolation zwischen diesen



Punkten wird das Geländeprofil  $b(x, y)$  durch die vier Dreiecksflächen dargestellt, die innerhalb jeder Masche  $\mathcal{D}_{ij}$  durch die vier Eckpunkte und den Mittelpunkt aufgespannt werden,

$$b(x, y) = \begin{cases} (1 - \xi)b_{i-1,j-1} + \xi b_{i,j-1} + \eta(2b_{i,j}^* - b_{i-1,j-1} - b_{i,j-1}) & \text{in } \mathcal{D}_{ij}^{(1)} \\ (1 - \eta)b_{i,j-1} + \eta b_{i,j} + (1 - \xi)(2b_{i,j}^* - b_{i,j-1} - b_{i,j}) & \text{in } \mathcal{D}_{ij}^{(2)} \\ (1 - \xi)b_{i-1,j} + \xi b_{i,j} + (1 - \eta)(2b_{i,j}^* - b_{i-1,j} - b_{i,j}) & \text{in } \mathcal{D}_{ij}^{(3)} \\ (1 - \eta)b_{i-1,j-1} + \eta b_{i-1,j} + \xi(2b_{i,j}^* - b_{i-1,j-1} - b_{i-1,j}) & \text{in } \mathcal{D}_{ij}^{(4)} \end{cases} \quad (2.7)$$

$$\xi = (x - x_{i-1})/d \text{ für } x_{i-1} \leq x < x_i \quad (2.8)$$

$$\eta = (y - y_{j-1})/d \text{ für } y_{j-1} \leq y < y_j \quad (2.9)$$

$$\mathcal{D}_{ij}^{(1)} = \{(x, y) \mid \xi \geq \eta, \xi < 1 - \eta\} \quad (2.10)$$

$$\mathcal{D}_{ij}^{(2)} = \{(x, y) \mid \xi \geq \eta, \xi \geq 1 - \eta\} \quad (2.11)$$

$$\mathcal{D}_{ij}^{(3)} = \{(x, y) \mid \xi < \eta, \xi \geq 1 - \eta\} \quad (2.12)$$

$$\mathcal{D}_{ij}^{(4)} = \{(x, y) \mid \xi < \eta, \xi < 1 - \eta\} \quad (2.13)$$

Das vertikale Raster ist so definiert, daß die Koordinatenflächen dem Geländeprofil angepaßt sind. Statt  $z$  wird eine Koordinate  $s$  verwendet, die auf der Erdoberfläche  $z = b(x, y)$  den Wert 0 annimmt,

$$s = \hat{s} \frac{z - b(x, y)}{\hat{z} - b(x, y)} \quad (2.14)$$

Die Parameter  $\hat{s}$  und  $\hat{z}$  können dem Problem angepaßt werden. Typischerweise ist  $\hat{z}$  gleich der Mischungsschichthöhe, in jedem Fall aber höher als die höchste im Rechengebiet vorkommende Bodenerhebung. Für  $s = \hat{s}$  ist  $z = \hat{z}$ , in dieser Höhe ist also der Einfluß des Geländeprofiles auf die Form der Koordinatenfläche verschwunden. Das vertikale Raster  $s_{k'}$  enthält  $N_z$  Intervalle und braucht nicht äquidistant zu sein, wobei zweckmäßigerweise in Bodennähe die Intervalle  $d_{s;k}$  kleiner sind als in größerer Höhe,

$$d_{s;k} = s_k - s_{k-1} > 0 \quad (2.15)$$

$$s_0 = 0 \quad (2.16)$$

Die Gitterpunkte haben damit die Koordinaten

$$\mathbf{r}_{i'j'k'} = (x_{i'}, y_{j'}, z_{i'j'k'}) \quad (2.17)$$

$$z_{i'j'k'} = b_{i'j'} + \frac{s_k}{\hat{s}}(\hat{z} - b_{i'j'}) \quad (2.18)$$

Ihr gegenseitiger vertikaler Abstand ist

$$d_{i'j'k} = z_{i',j',k} - z_{i',j',k-1} = \frac{s_k - s_{k-1}}{\hat{s}}(\hat{z} - b_{i'j'}) \quad (2.19)$$



Entsprechend haben die Mittelpunkte der Maschen innerhalb einer Fläche  $s = s_k$  die Koordinaten und vertikalen Abstände

$$\mathbf{r}_{ijk'}^* = (x_i^*, y_j^*, z_{ijk'}^*) \quad (2.20)$$

$$z_{ijk'}^* = b_{ij}^* + \frac{s_k}{\hat{s}}(\hat{z} - b_{ij}^*) \quad (2.21)$$

$$d_{ijk}^* = z_{i,j,k}^* - z_{i,j,k-1}^* = \frac{s_k - s_{k-1}}{\hat{s}}(\hat{z} - b_{ij}^*) \quad (2.22)$$

Das gesamte Gitter ist aus Volumenelementen  $\mathcal{V}_{ijk}$  zusammengesetzt,

$$\mathcal{V}_{ijk} = \{ (x, y, z) \mid (x, y) \in \mathcal{D}_{ij}, s_{k-1} \leq s(x, y, z) < s_k \} \quad (2.23)$$

Der Inhalt  $\Delta_{ijk}$  des Volumenelementes  $\mathcal{V}_{ijk}$  ist

$$\Delta_{ijk} = \frac{d^2}{6}(d_{i-1,j-1,k} + d_{i,j-1,k} + d_{i-1,j,k} + d_{i,j,k} + 2d_{i,j,k}^*) \quad (2.24)$$

Das Volumenelement  $\mathcal{V}_{ijk}$  besitzt die Oberfläche  $\mathcal{A}_{ijk}$ , die sich aus verschiedenen Teilflächen zusammensetzt. In  $x$ -Richtung gibt es die Randflächen  $\mathcal{A}_{i-1,j,k}^{(x)}$  und  $\mathcal{A}_{i,j,k}^{(x)}$ , in  $y$ -Richtung die Randflächen  $\mathcal{A}_{i,j-1,k}^{(y)}$  und  $\mathcal{A}_{i,j,k}^{(y)}$  und unten und oben die Randflächen  $\mathcal{A}_{i,j,k-1}^{(z)}$  und  $\mathcal{A}_{i,j,k}^{(z)}$ . Die obere und untere Randfläche setzt sich wieder aus vier Dreiecksflächen  $\mathcal{A}_{ijk'}^{(z;\lambda)}$  zusammen,

$$\mathcal{A}_{ijk'}^{(z;\lambda)} = \{ (x, y, z) \mid (x, y) \in \mathcal{D}_{ij}^{(\lambda)}, s(x, y, z) = s_k \} \quad (2.25)$$

Der Flächeninhalt der Flächen  $\mathcal{A}_{i'jk}^{(x)}$  und  $\mathcal{A}_{ij'k}^{(y)}$  ist

$$\Delta_{i'jk}^{(x)} = \frac{d}{2}(d_{i',j-1,k} + d_{i',j,k}) \quad (2.26)$$

$$\Delta_{ij'k}^{(y)} = \frac{d}{2}(d_{i-1,j',k} + d_{i,j',k}) \quad (2.27)$$

Um den Flächeninhalt der Dreiecksflächen zu berechnen, werden zunächst die Vektoren  $\mathbf{a}_{ijk'}^{(\lambda)}$  gebildet, die vom Mittelpunkt zu den vier Eckpunkten weisen,

$$\mathbf{a}_{ijk'}^{(0)} = \mathbf{r}_{i-1,j-1,k'} - \mathbf{r}_{i,j,k}^* \quad (2.28)$$

$$\mathbf{a}_{ijk'}^{(1)} = \mathbf{r}_{i,j-1,k'} - \mathbf{r}_{i,j,k}^* \quad (2.29)$$

$$\mathbf{a}_{ijk'}^{(2)} = \mathbf{r}_{i,j,k'} - \mathbf{r}_{i,j,k}^* \quad (2.30)$$

$$\mathbf{a}_{ijk'}^{(3)} = \mathbf{r}_{i-1,j,k'} - \mathbf{r}_{i,j,k}^* \quad (2.31)$$

$$\mathbf{a}_{ijk'}^{(4)} = \mathbf{a}_{ijk'}^{(0)} \quad (2.32)$$



Mit Hilfe des Kreuzproduktes zweier Vektoren  $\mathbf{a}$  und  $\mathbf{b}$ ,<sup>1</sup>

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} \equiv (a_y b_z - a_z b_y, a_z b_x - a_x b_z, a_x b_y - a_y b_x) \quad (2.33)$$

kann der Vektor  $\mathbf{N}_{i,j,k'}^{(z;\lambda)}$ , der senkrecht auf der Dreiecksfläche  $\mathcal{A}_{i,j,k'}^{(z;\lambda)}$  steht (mit der Richtung nach oben) und dessen Betrag gleich dem Flächeninhalt ist, berechnet werden,

$$\mathbf{N}_{i,j,k'}^{(z;\lambda)} = \frac{1}{2} \mathbf{a}_{ijk'}^{(\lambda-1)} \times \mathbf{a}_{ijk'}^{(\lambda)} \text{ für } \lambda = 1, \dots, 4 \quad (2.34)$$

$$(2.35)$$

Flächeninhalt  $\Delta_{i,j,k'}^{(z;\lambda)}$  und Einheitsvektor in Normalenrichtung  $\mathbf{e}_{i,j,k'}^{(z;\lambda)}$  sind

$$\Delta_{i,j,k'}^{(z;\lambda)} = |\mathbf{N}_{i,j,k'}^{(z;\lambda)}| \quad (2.36)$$

$$\mathbf{e}_{i,j,k'}^{(z;\lambda)} = \frac{\mathbf{N}_{i,j,k'}^{(z;\lambda)}}{\Delta_{i,j,k'}^{(z;\lambda)}} \quad (2.37)$$

Eine Größe  $X$ , die auf den Gitterpunkten definiert ist und dort die Werte  $X_{i'j'k'}$  besitzt, wird zwischen den Gitterpunkten 3-fach linear interpoliert. Für  $(x, y, z) \in \mathcal{V}_{ijk}$  ist

$$\begin{aligned} X(x, y, z) &= \xi' \eta' \zeta' X_{i-1,j-1,k-1} + \xi \eta' \zeta' X_{i,j-1,k-1} + \xi' \eta \zeta' X_{i-1,j,k-1} \\ &\quad + \xi' \eta' \zeta X_{i-1,j-1,k} + \xi \eta \zeta' X_{i,j,k-1} + \xi \eta' \zeta X_{i,j-1,k} \\ &\quad + \xi' \eta \zeta X_{i-1,j,k} + \xi \eta \zeta X_{i,j,k} \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\xi = (x - x_{i-1})/d \text{ für } x_{i-1} \leq x < x_i \quad (2.39)$$

$$\eta = (y - y_{j-1})/d \text{ für } y_{j-1} \leq y < y_j \quad (2.40)$$

$$\zeta = [s(x, y, z) - s_{k-1}]/(s_k - s_{k-1}) \text{ für } s_{k-1} \leq s < s_k \quad (2.41)$$

$$\xi' = 1 - \xi \quad (2.42)$$

$$\eta' = 1 - \eta \quad (2.43)$$

$$\zeta' = 1 - \zeta \quad (2.44)$$

Häufig werden Mittelwerte über Größen benötigt, die auf dem Gitter (Werte  $X_{i'j'k'}$ ) und dem Zwischengitter (Werte  $X_{i'j'k'}^*$ ) definiert sind. Die Mittelwerte über die verschiedenen Flächen sind

$$\mathcal{A}_{i'j'k}^{(x)} : \langle X \rangle_{i'j'k}^{(x)} = \frac{1}{4} (X_{i',j-1,k-1} + X_{i',j,k-1} + X_{i',j-1,k} + X_{i',j,k}) \quad (2.45)$$

<sup>1</sup>Um die Indizierung der Gitterpunkte und die Kennzeichnung der Komponenten eines Vektors zu unterscheiden, werden hier für die Vektorkomponenten die Suffixe „x“, „y“ und „z“ verwendet, für die Gitterindizes dagegen lateinische Buchstaben in Kursivschrift ( $i, j, \dots$ ). Falls über Vektorkomponenten zu summieren ist, wird statt des Suffix ein kleiner griechischer Buchstabe als Index verwendet ( $\alpha, \beta, \dots$ ), der Wertebereich ist 1,2,3.



$$\mathcal{A}_{ij'k}^{(y)} : \langle X \rangle_{ij'k}^{(y)} = \frac{1}{4}(X_{i-1,j',k-1} + X_{i,j',k-1} + X_{i-1,j',k} + X_{i,j',k}) \quad (2.46)$$

$$\mathcal{A}_{ijk'}^{(z;1)} : \langle X \rangle_{ijk'}^{(z;1)} = \frac{1}{3}(X_{i,j,k'}^* + X_{i-1,j-1,k'} + X_{i,j-1,k'}) \quad (2.47)$$

$$\mathcal{A}_{ijk'}^{(z;2)} : \langle X \rangle_{ijk'}^{(z;2)} = \frac{1}{3}(X_{i,j,k'}^* + X_{i,j-1,k'} + X_{i,j,k'}) \quad (2.48)$$

$$\mathcal{A}_{ijk'}^{(z;3)} : \langle X \rangle_{ijk'}^{(z;3)} = \frac{1}{3}(X_{i,j,k'}^* + X_{i,j,k'} + X_{i-1,j,k'}) \quad (2.49)$$

$$\mathcal{A}_{ijk'}^{(z;4)} : \langle X \rangle_{ijk'}^{(z;4)} = \frac{1}{3}(X_{i,j,k'}^* + X_{i-1,j,k'} + X_{i-1,j-1,k'}) \quad (2.50)$$

Der Mittelwert über das Volumen  $\mathcal{V}_{ijk}$  ist näherungsweise<sup>2</sup>

$$\begin{aligned} \langle X \rangle_{ijk} \approx & \frac{d^2}{12\Delta_{ijk}} [2d_{ijk}^* (X_{i,j,k-1}^* + X_{i,j,k}^*) \\ & + d_{i-1,j-1,k} (X_{i-1,j-1,k-1} + X_{i-1,j-1,k}) \\ & + d_{i,j-1,k} (X_{i,j-1,k-1} + X_{i,j-1,k}) \\ & + d_{i,j,k} (X_{i,j,k-1} + X_{i,j,k}) \\ & + d_{i-1,j,k} (X_{i-1,j,k-1} + X_{i-1,j,k})] \end{aligned} \quad (2.51)$$

Sind die Werte auf dem Zwischengitter nicht definiert, wird für die Berechnung der Mittelwerte gesetzt:

$$X_{ijk'}^* = \frac{1}{4}(X_{i-1,j-1,k'} + X_{i,j-1,k'} + X_{i,j,k'} + X_{i-1,j,k'}) \quad (2.52)$$

Während fast alle im Modell verwendeten Feldgrößen auf den Gitterpunkten definiert sind, wird das Geschwindigkeitsfeld  $\mathbf{V}$  in einem versetzten Netz (Arakawa-C) definiert. Dies ist in der Regel auch in meteorologischen Modellen der Fall, so daß die Übernahme des Windfeldes vereinfacht wird. Außerdem wird die Vertikalkomponente  $V_z$  in das neue Koordinatensystem transformiert und durch  $V_s$  ersetzt, so daß längs einer Stromlinie gilt

$$\frac{ds}{dt} = V_s \quad (2.53)$$

Die Werte von  $V_x$  werden als Mittelwerte für die Flächen  $\mathcal{A}_{i'jk}^{(x)}$  definiert,  $V_y$  für die Flächen  $\mathcal{A}_{ij'k}^{(y)}$  und  $V_s$  für die Flächen  $\mathcal{A}_{ijk'}^{(z)}$ . Zwischen den jeweiligen Flächen wird linear interpoliert,

$$V_x(x, y, s) = \xi' V_{x;i-1,j,k} + \xi V_{x;i,j,k} \quad (2.54)$$

$$V_y(x, y, s) = \eta' V_{y;i,j-1,k} + \eta V_{y;i,j,k} \quad (2.55)$$

$$V_s(x, y, s) = \zeta' V_{s;i,j,k-1} + \zeta V_{s;i,j,k} \quad (2.56)$$

<sup>2</sup>Die exakte Integration über ein Volumenelement unter Verwendung der Interpolationsformel (2.38) würde noch einige Zusatzterme bringen, die aber bei nicht zu unebenem Gelände in der Regel vernachlässigt werden können.



Am Erdboden ist  $V_{s;i,j,0} = 0$ . Die Flüsse durch die Randflächen des Volumenelements  $\mathcal{V}_{ijk}$  sind

$$F_{i'jk}^{(x)} = V_{x;i'jk} \Delta_{i'jk}^{(x)} \quad (2.57)$$

$$F_{ij'k}^{(y)} = V_{y;ij'k} \Delta_{ij'k}^{(y)} \quad (2.58)$$

$$F_{ijk'}^{(z)} = V_{z;ijk'}^* d^2 \quad (2.59)$$

Hier ist  $V_{z;ijk'}^*$  die Geschwindigkeit, mit der die Deckfläche des Volumens  $\mathcal{V}_{ijk}$  in der Vertikalen verschoben würde,

$$V_{z;ijk'}^* = V_{s;ijk'} \frac{6\hat{z} - b_{i-1,j-1} - b_{i,j-1} - b_{i-1,j} - b_{i,j} - 2b_{i,j}^*}{6\hat{s}} \quad (2.60)$$

Die Divergenzfreiheit des Windfeldes läßt sich im  $(x, y, s)$ -System nicht mehr lokal exakt erreichen sondern nur noch im Mittel über die einzelnen Volumenelemente,

$$F_{i,j,k}^{(x)} - F_{i-1,j,k}^{(x)} + F_{i,j,k}^{(y)} - F_{i,j-1,k}^{(y)} + F_{i,j,k}^{(z)} - F_{i,j,k-1}^{(z)} = 0 \quad (2.61)$$

### Bei 1-dimensionaler Meteorologie:

Wenn das Gelände eben ist und die meteorologischen Größen als Vertikalprofile vorgegeben sind, braucht nur in der  $z$ -Richtung interpoliert zu werden. In diesem Fall werden auch  $V_x$  und  $V_y$  auf den Gitterpunkten definiert ( $V_z \equiv 0$ ) und gleichermaßen interpoliert.

## 2.2 Definition der Feldgrößen

Als Eingabefelder werden die auf den Gitterpunkten definierten Werte von  $\Sigma$  (Varianz der Windgeschwindigkeitsfluktuationen) und  $\mathbf{K}$  (Diffusionskoeffizienten) benötigt. Dazu kommt das bei 3-dimensionaler Meteorologie im versetzten Netz definierte Windfeld  $\mathbf{V}$ . Hieraus werden die Felder  $\Phi$ ,  $\Psi$ ,  $\Omega$  und  $\Lambda$  auf den Gitterpunkten und  $\mathbf{W}$  als Mittelwert über die Gittervolumina berechnet. Der Zeitschritt  $\tau$  wird zunächst auch als auf den Gitterpunkten vorgegebenes Feld behandelt, da er vom Algorithmus her frei vorgebar ist. In Abschnitt 2.3 ist beschrieben, wie das Feld in einer für die meisten Anwendungen geeigneten Weise aus den meteorologischen Feldern generiert werden kann.

In Abschnitt 2.1 war festgelegt worden, an welchen Raumpunkten die Werte der verschiedenen Größen benötigt werden. Für die Darstellung von Vektoren oder Tensoren ist noch die Angabe eines Basissystems von Einheitsvektoren notwendig. Im anfangs eingeführten ortsfesten System wird ein Tensor  $\mathbf{X}$  in der Form  $X_{\alpha\beta}$  oder unter Verwendung der Suffixe „x“, „y“ oder „z“ dargestellt. Die Felder  $\Sigma$  und  $\mathbf{K}$  werden normalerweise im Windsystem vorgegeben. Dies ist ein kartesisches Koordinatensystem, bei dem die  $x$ -Achse mit der Windrichtung übereinstimmt (der Wind weht in die positive  $x$ -Richtung). Zur Kennzeichnung von Größen, die im



Windsystem dargestellt sind, dient ein Háček Akzent (z.B.  $\check{X}_{\alpha\beta}$ ) oder es werden die Suffixe „u“ (windabwärts), „v“ (horizontal quer zur Windrichtung) und „w“ (vertikal quer zur Windrichtung) verwendet.

Es wird vorausgesetzt, daß das Meteorologiemodell für jeden Gitterpunkt die Größen  $\sigma_u$ ,  $\sigma_v$ ,  $\sigma_w$ ,  $u_*$  und die Diagonalelemente  $K_{uu}$ ,  $K_{vv}$  und  $K_{ww}$  des Diffusionstensors liefert. Hieraus werden die im Modell benötigten Felder zunächst im Windsystem berechnet und anschließend in das bei der Rechnung verwendete Koordinatensystem gedreht. Aus

$$\left(\check{\Sigma}_{\alpha\beta}\right) = \begin{pmatrix} \sigma_u^2 & 0 & -u_*^2 \\ 0 & \sigma_v^2 & 0 \\ -u_*^2 & 0 & \sigma_w^2 \end{pmatrix} \quad (2.62)$$

$$\left(\check{K}_{\alpha\beta}\right) = \begin{pmatrix} K_{uu} & 0 & 0 \\ 0 & K_{vv} & 0 \\ 0 & 0 & K_{ww} \end{pmatrix} \quad (2.63)$$

wird  $\Phi$  gemäß  $\Phi = \Sigma \cdot K^{-1}$  berechnet,

$$\left(\check{\Phi}_{\alpha\beta}\right) = \begin{pmatrix} \Sigma_{uu}/K_{uu} & 0 & \Sigma_{uw}/K_{ww} \\ 0 & \Sigma_{vv}/K_{vv} & 0 \\ \Sigma_{wu}/K_{uu} & 0 & \Sigma_{ww}/K_{ww} \end{pmatrix} \quad (2.64)$$

In der Diagonalen stehen die Reziprokwerte der Lagrange-Korrelationszeiten:

$$T_{L;u} = K_{uu}/\Sigma_{uu} \quad (2.65)$$

$$T_{L;v} = K_{vv}/\Sigma_{vv} \quad (2.66)$$

$$T_{L;w} = K_{ww}/\Sigma_{ww} \quad (2.67)$$

Für die Tensoren  $\Psi = (\mathbf{I} - \frac{1}{2}\tau\Phi) \cdot (\mathbf{I} + \frac{1}{2}\tau\Phi)^{-1}$  und  $\Omega = \Sigma - \Psi \cdot \Sigma \cdot \Psi^T$  erhält man (nicht aufgeführte Elemente haben den Wert 0)

$$\Psi_{uu} = [(1 - p_u)(1 + p_w) + \rho_{uw}p_u p_w]/D \quad (2.68)$$

$$\Psi_{vv} = (1 - p_v)/(1 + p_v) \quad (2.69)$$

$$\Psi_{ww} = [(1 + p_u)(1 - p_w) + \rho_{uw}p_u p_w]/D \quad (2.70)$$

$$\Psi_{uw} = -2p_w \rho_w / D \quad (2.71)$$

$$\Psi_{wu} = -2p_u \rho_u / D \quad (2.72)$$

$$p_u = \frac{1}{2}\tau\Phi_{uu} \quad (2.73)$$

$$p_v = \frac{1}{2}\tau\Phi_{vv} \quad (2.74)$$

$$p_w = \frac{1}{2}\tau\Phi_{ww} \quad (2.75)$$

$$\rho_u = \Sigma_{uw}/\Sigma_{uu} \quad (2.76)$$

$$\rho_w = \Sigma_{uw}/\Sigma_{ww} \quad (2.77)$$

$$\rho_{uw} = \rho_u \rho_w \quad (2.78)$$

$$D = (1 + p_u)(1 + p_w) - \rho_{uw}p_u p_w \quad (2.79)$$



$$\Omega_{uu} = 4\Sigma_{uu}\{\rho_{uw}p_w + p_u[1 + (1 - \rho_{uw})p_w]^2\}/D^2 \quad (2.80)$$

$$\Omega_{vv} = 4\Sigma_{vv}p_v(1 + p_v)^{-2} \quad (2.81)$$

$$\Omega_{ww} = 4\Sigma_{ww}\{\rho_{uw}p_u + p_w[1 + (1 - \rho_{uw})p_u]^2\}/D^2 \quad (2.82)$$

$$\Omega_{uw} = \Omega_{wu} = 4\Sigma_{ww}[p_u + p_w + 2(1 - \rho_{uw})p_u p_w]/D^2 \quad (2.83)$$

Die Matrix  $\check{\Omega}_{\alpha\beta}$  ist für  $\rho_{uw} < 1$  positiv definit, so daß eine Cholesky-Zerlegung möglich ist,

$$\det(\check{\Omega}_{\alpha\beta}) = \Omega_{vv}(\Omega_{uu}\Omega_{ww} - \Omega_{uw}^2) \quad (2.84)$$

$$= 64(1 - \rho_{uw}^2) \frac{\Sigma_{uu}\Sigma_{vv}\Sigma_{ww}p_u p_v p_w}{(1 + p_v)^2 D^2} \quad (2.85)$$

Um die berechneten Größen tatsächlich verwenden zu können, müssen sie aus dem Windsystem in das ortsfeste Koordinatensystem gedreht werden. Die Drehung erfolgt um eine vertikale Achse<sup>3</sup> mit der Drehmatrix

$$(R_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} V_x/V_a & -V_y/V_a & 0 \\ V_y/V_a & V_x/V_a & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.86)$$

$$V_a = \sqrt{V_x^2 + V_y^2} \quad (2.87)$$

Hat ein Tensor  $\mathbf{X}$  im Windsystem die Darstellung  $\check{X}_{\alpha\beta}$ , dann erhält man seine Darstellung im ortsfesten System durch

$$X_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma,\delta} R_{\alpha\gamma} \check{X}_{\gamma\delta} R_{\beta\delta} \quad (2.88)$$

Auf diese Weise werden die Darstellungen von  $\Sigma$ ,  $\Psi$  und  $\Omega$  im ortsfesten System berechnet. Die Cholesky-Zerlegung von  $\Omega$  wird erst nach der Drehung durchgeführt, also für die Matrix  $\Omega_{\alpha\beta}$ ,

$$\sum_{\gamma} \Lambda_{\alpha\gamma} \Lambda_{\beta\gamma} = \Omega_{\alpha\beta} \quad (2.89)$$

Auch für den Tensor  $\Sigma$  wird später noch die Cholesky-Zerlegung  $\mathbf{E}$  benötigt,

$$\sum_{\gamma} E_{\alpha\gamma} E_{\beta\gamma} = \Sigma_{\alpha\beta} \quad (2.90)$$

Die Berechnung der Driftgeschwindigkeit  $\mathbf{W}$  ist etwas aufwendig. Hierfür ist die Divergenz von Tensorfeldern zu bilden. Nach dem Gaußschen Satz kann die Divergenz

<sup>3</sup>Dies ist eine Näherung. In der Regel ist die  $w$ -Achse gegen die Vertikale entsprechend der Hangneigung gekippt. Da die horizontale Bewegung aufgrund der Wahl des Koordinatensystems automatisch in eine Bewegung parallel zur Erdoberfläche umgesetzt wird, ist zu erwarten, daß diese Näherung erst bei Hangneigungen von mehr als 20 Grad merkliche Auswirkungen hat.



$\nabla \cdot \mathbf{X}$  mit Hilfe des Flächenintegrals über die Oberfläche  $\mathcal{A}_{ijk}$  eines Volumenelementes  $\mathcal{V}_{ijk}$  berechnet werden, so daß man diese Größe automatisch als Mittelwert über ein Volumenelement erhält,

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{X} \rangle_{ijk} = \frac{1}{\Delta_{ijk}} \int_{\mathcal{A}_{ijk}} d\mathbf{f} \cdot \mathbf{X} \quad (2.91)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\Delta_{ijk}} \left\{ \Delta_{i,j,k}^{(x)} \mathbf{e}_x \cdot \langle \mathbf{X} \rangle_{i,j,k}^{(x)} - \Delta_{i-1,j,k}^{(x)} \mathbf{e}_x \cdot \langle \mathbf{X} \rangle_{i-1,j,k}^{(x)} \right. \\ &\quad + \Delta_{i,j,k}^{(y)} \mathbf{e}_y \cdot \langle \mathbf{X} \rangle_{i,j,k}^{(y)} - \Delta_{i,j-1,k}^{(y)} \mathbf{e}_y \cdot \langle \mathbf{X} \rangle_{i,j-1,k}^{(y)} \\ &\quad \left. + \sum_{\lambda=1}^4 \mathbf{N}_{i,j,k}^{(z;\lambda)} \cdot \langle \mathbf{X} \rangle_{i,j,k}^{(z;\lambda)} - \sum_{\lambda=1}^4 \mathbf{N}_{i,j,k-1}^{(z;\lambda)} \cdot \langle \mathbf{X} \rangle_{i,j,k-1}^{(z;\lambda)} \right\} \quad (2.92) \end{aligned}$$

Hiermit wird die Driftgeschwindigkeit  $\mathbf{W}$  berechnet,

$$\mathbf{W}_{ijk} = \frac{1}{2} \tau \langle \mathbf{I} + \Psi \rangle_{ijk} \cdot \langle \nabla \cdot \Sigma \rangle_{ijk} \quad (2.93)$$

### 2.3 Festlegung des Zeitschritts

Je kleiner der Zeitschritt gewählt wird, desto länger ist die Rechenzeit. Ein kleiner Zeitschritt verringert auch nicht den Stichprobenfehler. Aus ökonomischen Gründen ist es daher vorteilhaft, mit einem möglichst großen Zeitschritt zu rechnen, solange der verwendete Algorithmus dies nicht verbietet. Das ist hier nicht der Fall, und man kann beispielsweise setzen:

$$\tau = \alpha_\tau \min(T_{L;u}, T_{L;v}, T_{L;w}) \quad (2.94)$$

Es gibt aber noch andere Gesichtspunkte, die eine Begrenzung des Zeitschrittes empfehlen:

1. Ein Partikel sollte während eines Zeitschrittes eine Gitterzelle (sowohl von Rechengitter wie von Auswertegitter) höchstens zur Hälfte durchfliegen.
2. Der Zeitschritt sollte nicht größer sein als das Doppelte der kleinsten Lagrange-Korrelationszeit, sonst wird die Aufweitung einer Fahne aus einer punktförmigen Quelle nicht mehr richtig beschrieben ( $\alpha_\tau \leq 2$ ).

Hieraus ergeben sich für jeden Gitterpunkt die folgenden Bedingungen:

$$\tau (|V_{x;i'j'k'}^\dagger| + \sigma_{i'j'k'}^\dagger) \leq \frac{1}{2} d \quad (2.95)$$

$$\tau (|V_{y;i'j'k'}^\dagger| + \sigma_{i'j'k'}^\dagger) \leq \frac{1}{2} d \quad (2.96)$$

$$\tau (-V_{s;i'j'k'}^\dagger + \sigma_{s;i'j'k'}^\dagger) \leq \frac{1}{2} d_{s;k'} \quad (2.97)$$

$$\tau (V_{s;i'j'k'}^\dagger + \sigma_{s;i'j'k'}^\dagger) \leq \frac{1}{2} d_{s;k'+1} \quad (2.98)$$

$$\tau \leq 2K_{uu;i'j'k'} / \Sigma_{uu;i'j'k'} \quad (2.99)$$

$$\tau \leq 2K_{vv;i'j'k'} / \Sigma_{vv;i'j'k'} \quad (2.100)$$

$$\tau \leq 2K_{ww;i'j'k'} / \Sigma_{ww;i'j'k'} \quad (2.101)$$



Hierbei sind die  $V_\alpha^\ddagger$  die auf die Gitterpunkte bezogenen Werte der Geschwindigkeitskomponenten (gemittelt über die 4 benachbarten Werte auf den Flächenmittelpunkten),  $\sigma^\ddagger = \max(\sigma_u, \sigma_v)$  und  $\sigma_{s;i'j'k'}^\ddagger = \sigma_{w;i'j'k'} \hat{s} / (\hat{z} - b_{i'j'})$ . Aus Gleichung (2.101) folgt, daß das Meteorologie-Modell für  $K_{ww}$  kein Profil liefern darf, das am Erdboden beliebig klein wird. Realistisch sind Minimalwerte von einigen  $u_* z_0$ .

Als Zeitschritt  $\tau$  am Gitterpunkt  $\mathbf{r}_{i'j'k'}$  wird der größte Wert gewählt, der mit den Bedingungen (2.95) bis (2.101) verträglich ist. Zwischen den Gitterpunkten wird  $\tau$  linear interpoliert.

In der Programmversion 1.5 von `IBJparticle` ist nur die Bedingung (2.94) implementiert.

## 2.4 Die Berechnung der Trajektorien

Die gesamte Zeitspanne, für die eine Ausbreitungsrechnung durchzuführen ist, wird in eine Folge von Zeitintervallen eingeteilt, für die jeweils der Mittelwert der Konzentration zu berechnen ist, und diese Zeitintervalle werden bei Bedarf weiter in Teilintervalle zerlegt, innerhalb derer alle äußeren Parameter und Felder zeitlich konstant sind. Sei  $[t_A, t_B]$  ein solches Teilintervall. Bei der Abarbeitung dieses Intervalls werden zunächst alle neu emittierten Partikel generiert. Dann werden für alle vorhandenen Partikel die Trajektorien berechnet, bis jedes Partikel eine Zeit  $t \geq t_B$  erreicht oder das Rechengebiet verlassen hat. Innerhalb eines jeden Zeitschrittes werden die neue Position und Umwandlungen berechnet und das Partikel wird in den durchlaufenen Zellen registriert.

### Generierung der Partikel

Es wird davon ausgegangen, daß die Erzeugungsrate der Partikel  $R_p$  vorgegeben ist. Wenn mehrere Quellen existieren, müssen die Partikel auf die einzelnen Quellen verteilt werden. Dies erfolgt in der Regel proportional der jeweiligen Quellstärke.

Sei  $E_q^{(\nu)}$  die Quellstärke der  $q$ -ten Quelle ( $q = 1, \dots, N_q$ ) bezüglich des Stoffes  $\nu$ . Dann wird die Aufteilung der  $R_p(t_B - t_A)$  Partikel auf die Quellen zunächst für jeden Stoff separat durchgeführt (sofern überhaupt irgendeine Quelle im Augenblick diesen Stoff emittiert),

$$N_{p;q}^{(\nu)} = R_p(t_B - t_A) \frac{E_q^{(\nu)}}{\sum_q E_q^{(\nu)}} \quad (2.102)$$

Sei  $N_{p;q}^*$  die maximale Partikelzahl, die sich auf diese Weise für jede Quelle ergibt,

$$N_{p;q}^* = \max_\nu(N_{p;q}^{(\nu)}) \quad (2.103)$$

Dann werden die zu generierenden Partikel in diesem Verhältnis auf die einzelnen Quellen verteilt,

$$N_{p;q} = R_p(t_B - t_A) \frac{N_{p;q}^*}{\sum_q N_{p;q}^*}, \quad (2.104)$$



wobei auf die nächste ganze Zahl aufgerundet wird.

Die von der Quelle  $q$  emittierten  $N_{p;q}$  Partikel starten zu den Zeitpunkten

$$t_{q,\kappa}^{(0)} = t_A + (t_B - t_A) \frac{\kappa - 0.5}{N_{p;q}} \quad \text{für } \kappa = 1, \dots, N_{p;q} \quad (2.105)$$

Der Startort  $\mathbf{x}_0$  ist bei punktförmigen Quellen der Ort der Quelle  $\mathbf{x}_q$ . Hat das emittierende Raumgebiet die Form eines Quaders mit den Kantenlängen  $a_q$ ,  $b_q$  und  $c_q$  und der Ausrichtung<sup>4</sup>  $\varphi_q$ , dann wird der Startort zufällig gewählt, gleichverteilt im Inneren des Quaders,

$$x_{0;1} = x_{q;1} + \cos(\varphi_q) r_1^E a_q - \sin(\varphi_q) r_2^E b_q \quad (2.106)$$

$$x_{0;2} = x_{q;2} + \cos(\varphi_q) r_2^E b_q + \sin(\varphi_q) r_1^E a_q \quad (2.107)$$

$$x_{0;3} = x_{q;3} + r_3^E c_q \quad (2.108)$$

Die Zahlen  $r_\alpha^E$  sind auf dem Intervall  $[0, 1]$  gleichverteilte Zufallszahlen, die mit jedem neu erzeugten Partikel neu ausgewürfelt werden. Aus den kartesischen Koordinaten  $x_{0;\alpha}$  werden die Koordinaten im  $s$ -System  $x_{p;0}$ ,  $y_{p;0}$  und  $s_{p;0}$  berechnet.

Der Anfangswert  $\mathbf{u}_0$  der Turbulenzgeschwindigkeit wird für jedes Partikel so gewählt, daß im statistischen Mittel die gleiche Varianz erhalten wird, wie sie für die turbulente Strömung vorgegeben ist,

$$u_{0;\alpha} = \sum_{\beta=1}^3 E_{0;\alpha\beta} r_\beta^N \quad (2.109)$$

$$\sum_{\gamma=1}^3 E_{0;\alpha\gamma} E_{0;\beta\gamma} = \Sigma_{\alpha\beta}(x_{0;1}, x_{0;2}, x_{0;3}) \quad (2.110)$$

Die Zahlen  $r_\beta^N$  sind standard-normalverteilte Zufallszahlen (Mittelwert 0, Varianz 1), die unabhängig voneinander ausgewürfelt werden.

### Durchführung eines Zeitschrittes

Es wird der Zeitschritt für ein einzelnes Partikel beschrieben, das sich zu Beginn des Zeitschrittes, zur Zeit  $t_n$ , am Ort  $\mathbf{x}_n$  (Koordinaten  $x_{p;n}$ ,  $y_{p;n}$ ,  $s_{p;n}$ ) in der Gitterzelle  $(i_n, j_n, k_n)$  befindet und die Turbulenzgeschwindigkeit  $\mathbf{u}_n$  besitzt (Zeitschritt  $n$ ). Es repräsentiert die Massen  $m_n^{(\nu)}$ .

Die Länge des Zeitschrittes ist durch die Funktion  $\tau(\mathbf{x})$  vorgegeben. Im ersten Zeitschritt nach der Emission wird seine Länge aber statistisch variiert, um zu verhindern, daß bei punktförmigen Quellen in den ersten Zeitschritten die Positionen der verschiedenen Partikel in bestimmten Gebieten kumulieren und zu Artefakten bei der Konzentrationsverteilung führen. Der tatsächlich verwendete Zeitschritt ist

$$\tau_n = \begin{cases} \tau(\mathbf{x}_n) & \text{für } n > 0 \\ (0.5 + r_0^E) \tau(\mathbf{x}_0) & \text{für } n = 0 \end{cases} \quad (2.111)$$

<sup>4</sup>Winkel der durch  $a_q$  angegebenen Richtung gegen die  $x$ -Achse, Drehung um die  $z$ -Achse gegen den Uhrzeigersinn.



$r_0^E$  ist eine auf dem Intervall  $[0, 1]$  gleichverteilte Zufallszahl. Das Ende des Zeitschrittes ist damit

$$t_{n+1} = t_n + \tau_n \quad (2.112)$$

Zunächst werden die Felder  $\mathbf{\Lambda}$ ,  $\mathbf{\Psi}$ ,  $\mathbf{W}$  und  $\mathbf{V}$  am Ort des Partikels bestimmt:

$$\mathbf{\Lambda}_n = \mathbf{\Lambda}(\mathbf{x}_n) \quad (2.113)$$

$$\mathbf{\Psi}_n = \mathbf{\Psi}(\mathbf{x}_n) \quad (2.114)$$

$$\mathbf{W}_n = \mathbf{W}_{i_n j_n k_n} \quad (2.115)$$

$$\mathbf{V}_n = \mathbf{V}(\mathbf{x}_n) \quad (2.116)$$

Die Advektion erfolgt im  $s$ -System:

$$x'_{p;n} = x_{p;n} + \tau_n V_{x;n} \quad (2.117)$$

$$y'_{p;n} = y_{p;n} + \tau_n V_{y;n} \quad (2.118)$$

$$s'_{p;n} = s_{p;n} + \tau_n V_{s;n} \quad (2.119)$$

$$z'_{p;n} = b(x'_{p;n}, y'_{p;n}) + \frac{s'_{p;n}}{\hat{s}} (\hat{z} - b(x'_{p;n}, y'_{p;n})) \quad (2.120)$$

Die Verschiebung des Partikels aufgrund von Turbulenz und Zusatzgeschwindigkeit (wie z.B. Sedimentation) erfolgt im kartesischen System:

$$x_{p;n+1} = x'_{p;n} + \tau_n (u_{n;1} + U_{x;n}) \quad (2.121)$$

$$y_{p;n+1} = y'_{p;n} + \tau_n (u_{n;2} + U_{y;n}) \quad (2.122)$$

$$z_{p;n+1} = z'_{p;n} + \tau_n (u_{n;3} + U_{z;n}) \quad (2.123)$$

$$s_{p;n+1} = \hat{s} \frac{z_{p;n+1} - b(x_{p;n+1}, y_{p;n+1})}{\hat{z} - b(x_{p;n+1}, y_{p;n+1})} \quad (2.124)$$

Die neue Turbulenzgeschwindigkeit des Partikels ist:

$$u_{n+1;\alpha} = \sum_{\beta} \Psi_{n;\alpha\beta} u_{n;\beta} + \sum_{\beta} \Lambda_{n;\alpha\beta} r_{\beta}^N + W_{n;\alpha} \quad (2.125)$$

Liegt der neue Ort des Partikels in  $x$ - oder  $y$ -Richtung außerhalb des Rechengebietes, dann wird das Partikel aussortiert. Wird das Rechengebiet in der Vertikalen verlassen, dann wird das Partikel elastisch reflektiert:

$$z_{p;n+1} \rightarrow \begin{cases} 2b(x_{p;n+1}, y_{p;n+1}) - z_{p;n+1} & \text{Reflexion bei } s = 0 \\ 2\hat{z} - z_{p;n+1} & \text{Reflexion bei } z = \hat{z} \end{cases} \quad (2.126)$$

$$u_{n+1;3} \rightarrow -u_{n+1;3} \quad (2.127)$$

Liegt der neue Ort des Partikels innerhalb eines Hindernisses, dann wird der Zeitschritt wiederholt. Zuvor wird das Partikel neu initialisiert und zur Durchführung



der räumlichen Verschiebung wird nur die turbulente Geschwindigkeit des Partikels verwendet.

### Berechnung von Deposition und Umwandlungen

Während eines Zeitschrittes ändern sich die von einem Partikel repräsentierten Massen  $m_n^{(\nu)}$  durch Deposition und Umwandlungen. Die deponierten Massen werden für das Zeitintervall  $[t_A, t_B]$  in den Depositionssummen  $S_{d;ij}^{(\nu)}$  für trockene und  $S_{w;ij}^{(\nu)}$  für nasse Deposition aufaddiert, aus denen dann später die mittleren Depositionsmassenstromdichten berechnet werden. Wenn ein Partikel während des Zeitschrittes  $[t_n, t_{n+1}]$  den Boden berührt, werden seine Massen durch trockene Deposition verringert,

$$m_n^{(\nu)} \text{ wird ersetzt durch } (1 - p_{d;ijn}^{(\nu)})m_n^{(\nu)} \quad (2.128)$$

Die Depositionswahrscheinlichkeiten  $p_d^{(\nu)}$  werden nach Gleichung (R28) berechnet, wobei die Depositionsgeschwindigkeit  $v_d^{(\nu)}$  und die bodennahe vertikale turbulente Geschwindigkeit  $\sigma_0$  ortsabhängig sein können. Sie werden über das Gebiet einer Bodenfläche  $\mathcal{D}_{ij}$  hinweg als konstant angenommen, so daß auch die Depositionswahrscheinlichkeit als Mittelwert über jede Bodenfläche definiert ist. Zur Berechnung der Deposition wird der Wert für diejenige Fläche genommen, oberhalb der sich das Partikel zur Zeit  $t_n$  befindet.

Der Wert der Depositionssumme wird entsprechend der dem Partikel verloren gegangenen Masse erhöht,

$$S_{d;ijn}^{(\nu)} \text{ wird erhöht um } p_{d;ijn}^{(\nu)} m_n^{(\nu)} \quad (2.129)$$

Nach Durchführung des Zeitschrittes werden Umwandlungen und nasse Deposition berücksichtigt (s. Gleichung (R20) und (R22)),

$$m_{n+1}^{(\nu)} = m_n^{(\nu)} + \tau_n \sum_{\mu} A_{\nu\mu}(\mathbf{x}_n) m_n^{(\mu)} - \tau_n r_w^{(\nu)} m_n^{(\nu)} \quad (2.130)$$

Die Umwandlungsmatrix  $A_{\nu\mu}$  kann ortsabhängig sein, wird aber innerhalb eines Volumens  $\mathcal{V}_{ijk}$  als konstant angenommen. Die Depositionssumme für nasse Deposition wird entsprechend der Massenabreicherung des Partikels erhöht,

$$S_{w;ijn}^{(\nu)} \text{ wird erhöht um } \tau_n r_w^{(\nu)} m_n^{(\nu)} \quad (2.131)$$

Die mittlere Depositionsmassenstromdichte im Zeitraum  $[t_A, t_B]$  für die Fläche  $\mathcal{D}_{ij}$  ergibt sich, wenn die Depositionssumme durch die Größe der Fläche und die verstrichene Zeit dividiert wird,

$$\bar{F}_{d;ij}^{(\nu)} = \frac{S_{d;ij}^{(\nu)}(t_B) - S_{d;ij}^{(\nu)}(t_A)}{\tilde{d}^2(t_B - t_A)} \quad (2.132)$$

$$\bar{F}_{w;ij}^{(\nu)} = \frac{S_{w;ij}^{(\nu)}(t_B) - S_{w;ij}^{(\nu)}(t_A)}{\tilde{d}^2(t_B - t_A)} \quad (2.133)$$



Bei der Interzeption nehmen die Massen  $m^{(\nu)}$  entsprechend der zurückgelegten Strecke ab:

$$m_{n+1}^{(\nu)} = (1 - |\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n|/L_I(\mathbf{x}_n)) m_n^{(\nu)} \quad (2.134)$$

Die Interzeptionssumme wird entsprechend erhöht:

$$S_{I;i_n j_n k_n}^{(\nu)} \text{ wird erhöht um } m_n^{(\nu)} |\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n|/L_I(\mathbf{x}_n) \quad (2.135)$$

Die mittlere Interzeptionsdichte im Zeitraum  $[t_A, t_B]$ , also die pro Volumen- und Zeiteinheit absorbierte Masse, erhält man daraus zu:

$$\bar{F}_{I;ijk}^{(\nu)} = \frac{S_{I;ijk}^{(\nu)}(t_B) - S_{I;ijk}^{(\nu)}(t_A)}{\tilde{\Delta}_{ijk}(t_B - t_A)} \quad (2.136)$$

Sind die von einem Partikel repräsentierten Massen durch Deposition oder Umwandlung bis auf einen gewissen, vorgegebenen Bruchteil  $q_p$  (z.B. 1 %) zurückgegangen, dann wird das Partikel aussortiert.

### Berechnung der Konzentration

In der Konzentrationssumme  $S_{c;ijk}^{(\nu)}$  wird vermerkt, wie lange sich Partikel in dem Volumen  $\mathcal{V}_{ijk}$  aufgehalten und welche Massen sie dabei transportiert haben. Näherungsweise wird dabei so verfahren, daß eine Hälfte des Zeitschritts dem Volumen zugeschlagen wird, in dem der Startpunkt liegt, und die andere Hälfte dem Volumen des Endpunktes. Für jeden Zeitschritt gilt also

$$S_{c;i_n j_n k_n}^{(\nu)} \text{ wird erhöht um } \frac{1}{2} \tau_n m_n^{(\nu)} \quad (2.137)$$

$$S_{c;i_{n+1} j_{n+1} k_{n+1}}^{(\nu)} \text{ wird erhöht um } \frac{1}{2} \tau_n m_{n+1}^{(\nu)} \quad (2.138)$$

Sind alle Trajektorien für den Zeitraum  $[t_A, t_B]$  abgearbeitet, dann wird die mittlere Konzentration  $\bar{c}$  berechnet,

$$\bar{c}_{ijk}^{(\nu)} = \frac{S_{c;ijk}^{(\nu)}}{\tilde{\Delta}_{ijk}(t_B - t_A)} \quad (2.139)$$



## 3 Das Programm

Das Modell ist als Computer-Programm in ANSI-C realisiert. Es ist ein reines Text-Programm, läuft also unter UNIX in einem Terminalfenster, unter Windows in einem DOS-Fenster.

Das Programm ist Teil einer Reihe von Programmen zu Problemen der Stoffausbreitung in der Atmosphäre, die alle eine ähnliche Struktur besitzen, teilweise gleiche Module enthalten und das gleiche Datenformat verwenden. Sie unterliegen alle der GNU PUBLIC LICENCE, sind also kostenlos und werden im Quelltext weitergegeben. Die Urheberrechte liegen bei Dr. Lutz Janicke, Dunum. Das Programm ist sorgfältig und nach bestem Fachwissen erstellt, es werden aber keinerlei Garantien für die Korrektheit der Resultate gegeben. Wer das Programm verwendet, hat sich selbst anhand der Beispiele und des Quelltextes davon zu überzeugen, daß es für seine Zwecke geeignet ist.

Das Programm *IBJparticle* hat gegenüber der in Abschnitt 2 beschriebenen Implementierung folgende Einschränkungen:

1. Es kann nur mit einer Quelle gerechnet werden.
2. Es kann nur mit einem Stoff gerechnet werden.

### 3.1 Benutzeranleitung

Das Programm arbeitet nicht interaktiv sondern verwendet einen Command-File, in dem alle Aufgaben spezifiziert sind, die das Programm in einem Rechenlauf durchführen soll. Bei Rechnungen mit 3-dimensionaler Meteorologie werden weitere Daten-Files als Eingabe benötigt. Während der Rechnung schreibt das Programm ein Arbeitsprotokoll in den Log-File und erstellt eventuell weitere Ausgabe-Files. Alle diese Files haben vorgegebene Namen und befinden sich in einem einzigen Verzeichnis, dem Arbeitsverzeichnis. Zum Aufruf des Programms ist einzugeben:

```
IBJparticle Arbeitsverzeichnis Option ...
```

Mögliche Optionen sind:

**-C***Check* :

Kontrollausgabe wird in den File `prtchk.txt` geschrieben. Mit der bitweise interpretierten Variablen *Check* kann die Art der Kontrollausgabe angegeben werden (siehe Quelltext).

**-e** :

Alle im Command-File eingelesenen Textzeilen werden im Log-File protokolliert (*echo*).

**-h** :

Alle Aufgaben und Eingabeparameter werden am Bildschirm aufgelistet und anschließend das Programm beendet.

**-i** *Command* :

Der File mit dem Namen *Command* soll als Command-File verwendet werden (der Standardname ist `prtcmd.txt`).

**-l** *Log* :

Der File mit dem Namen *Log* soll als Log-File verwendet werden (der Standardname ist `prtlog.txt`).

**-q** :

Es werden keine Meldungen auf den Bildschirm geschrieben (*quiet*).

**-r** *Random* :

Die Zahl *Random* wird zum Parameter *Sd* addiert (Initialisierung des Zufallszahlengenerators).

**-T** *Tick* :

Alle *Tick* Sekunden wird auf dem Bildschirm die Zahl der im aktuellen Zeitintervall abgearbeiteten Partikel gemeldet.

**-v** *Verbose* :

Mit *Verbose* wird angegeben, wie ausführlich das Programm Meldungen auf dem Bildschirm und im Log-File ausgibt. Der Standardwert ist 0 (keine Ausgabe). Dieser Wert ist notwendig, wenn Ergebnisse in den Log-File geschrieben werden und diese Auflistung nicht unterbrochen werden soll. Sonst sollte `-v1` verwendet werden. Mit `-v2` werden Partikel-Bilanzen ausgeschrieben.

**-w** *Counter* :

Die Zahl *Counter* wird zum *write counter* (Parameter *Wc*) addiert.

Der Command-File (Standardname ist `prtcmd.txt`) ist ein reiner Text-File, kann also vom Benutzer mit einem Text-Editor erstellt werden. Der Protokoll-File (Standardname ist `prtlog.txt`) ist ebenfalls ein Text-File, der vom Programm bei jedem Programmablauf angelegt wird. Die Rechenergebnisse stehen entweder im Protokoll-File oder, wenn sie umfangreicher sind, in separaten Ausgabe-Files.

Der Command-File besteht aus mehreren Abschnitten. Jeder Abschnitt definiert eine Aufgabe mit den dazugehörigen Parametern. Eine vollständige Auflistung aller möglicher Aufgaben und der zugeordneten Parameter wird in Abschnitt 3.2 gegeben. Die erste Zeile eines Abschnittes beginnt mit dem Zeichen „\*“, unmittelbar gefolgt von einem Namen, und definiert die Teilaufgabe, die ausgeführt werden soll, beispielsweise

**\*Dimensionierung**

Signifikant ist hierbei nur der erste Buchstabe, also das „D“, wobei auch nicht zwischen Klein- und Großschreibung unterschieden wird. Genauso gut hätte man also auch schreiben können

**\*dimensions**

Es folgen in diesem Falle die Parameter, die zur Dimensionierung der Felder benötigt werden, also z.B.



```
*Dimensionierung      ' kleines Testnetz
Nx   10                ' 10 Intervalle in x-Richtung
Ny   5                 ' 5 Intervalle in y-Richtung
Nz   10                ' 10 Intervalle in z-Richtung
```

Bei den Parameternamen sind nur die ersten beiden Zeichen signifikant und es wird ebenfalls nicht zwischen Klein- und Großschreibung unterschieden. Anschließend folgen, durch Leerzeichen und/oder Tabulatoren getrennt, der oder die Werte. Dabei kann es sich um ganze Zahlen, Gleitkommazahlen oder Zeichenketten handeln. Zeichenketten können in Hochkommata eingeschlossen sein. Auch die Zeile, welche die Definition der Aufgabe enthält, kann nach dem Aufgabennamen noch Parameterwerte enthalten.

Ein Apostroph leitet einen Kommentar ein, der beim Einlesen überschlagen wird. Beginnt eine Zeile mit einem Leerzeichen oder einem Minuszeichen, wird die ganze Zeile als Kommentar angesehen.

Nachdem die erste Aufgabe eingelesen ist, wird die Dimensionierung der internen Felder vorgenommen, die später nicht mehr geändert werden kann. Die erste Aufgabe muß also immer \*D sein. Auch für Eingabeparameter, für die mehr als ein Wert anzugeben ist, wird der Speicherplatz in diesem Schritt angelegt. Wenn die Anzahl der Werte vom Benutzer festgelegt werden kann, existiert immer ein Parameter im Abschnitt \*D, der für die Dimensionierung verwendet wird. Beispielsweise kann der Benutzer festlegen, wieviele Intervalle  $N_z$  das vertikale Raster  $s_k$  besitzen soll, das durch den Eingabeparameter Zz im Abschnitt \*G definiert wird. Die Anzahl der einzugebenden Gitterpunkte ist um 1 größer:

```
*Dimensionierung      ' kleines Testnetz
Nz   10                ' 10 Intervalle in z-Richtung
*Gitter                ' Gitter-Definition
Zz   0 5 10 15 20 25 32 40 50 70 100      ' Nz+1 Werte
```

Manchmal ist es notwendig, bestimmte Aufgaben mehrfach durchzuführen, z.B. bei der Schätzung des Stichprobenfehlers. Hierzu gibt es die beiden Aufgaben \*loop  $n$  und \*next, die genau in dieser Form geschrieben werden müssen. Sie bewirken, daß alle dazwischen stehenden Befehle  $n$  mal wiederholt werden, also  $n + 1$  mal ausgeführt werden. Beispiel:

```
-           Hier stehen die ersten Aufgaben
-
*loop 10    ' Beginn einer Schleife
-           Alle jetzt folgenden Aufgaben werden 11 mal ausgeführt.
*next      ' Ende der Schleife
-
-           Hier folgen weitere Aufgaben.
```

Die Namen der Parameter sind über alle Abschnitte hinweg eindeutig und dürfen nur in dem Abschnitt gesetzt werden, für den sie vereinbart sind. Sie behalten ihren Wert solange bei, bis er explizit geändert wird. Es gibt hierzu einige wenige Ausnahmen, die in Abschnitt 3.2 aufgeführt sind.



## 3.2 Eingabe-Parameter

Das Programm *IBJparticle* erkennt folgende Aufgaben:

- \*C** [`all`]  
Es werden alle Ergebnistabellen (`cnc`, `dry`, `icp`, `wet`) gelöscht. Ist zusätzlich `all` angegeben, dann wird auch die Partikel-Tabelle gelöscht. Das Löschen der Ergebnistabellen ist explizit erforderlich, wenn ein neues Mittelungsintervall begonnen wird. Das Löschen der Partikel-Tabelle ist erforderlich, bevor eine Rechnung mit anderen Zufallszahlen zur Abschätzung des Stichprobenfehlers wiederholt wird.
- \*D**  
Die Dimensionen aller verwendeten Felder werden festgelegt. Diese Aufgabe darf nur einmal definiert werden und muß als erste im Command-File erscheinen.
- \*G**  
Das Rechengitter und das Auszählgitter werden festgelegt. Dies geschieht nur einmal zu Beginn einer Rechnung.
- \*P**  
Die für die Ausbreitungsrechnung benötigten Parameter (Meteorologie, Stoffdaten) werden festgelegt. Diese Aufgabe kann beliebig innerhalb einer Rechnung auftreten und bewirkt jedesmal eine Neuberechnung der internen Felder.
- \*Q**  
Die Quelldaten (Position, Ausdehnung, Quellstärke) werden festgelegt. Diese Aufgabe kann beliebig innerhalb einer Rechnung auftreten, so daß Zeitreihen mit veränderlichem Quellort oder variabler Quellstärke gerechnet werden können.
- \*R** `bp|bm|vx|vy|vs|vv|su|sv|sw|sc|ku|kv|kw|vd|pd|li`  
Die bei Verwendung einer 3-dimensionalen Meteorologie benötigten Felder werden eingelesen. Die Bedeutung der Namen ist in Abschnitt 3.3 erklärt. Es können mehrere Dateien mit einem Lesebefehl eingelesen werden, sofern nicht unterschiedliche Parameter zu definieren sind, z.B. mit „**\*R** `bp+vx+vy`“.
- \*W** `cnc|icp|dry|wet|wnd|drf|sgm|lmb|psi|eps|pdp|tau`  
Ergebnistabellen (`cnc`, `dry`, `icp`, `wet`) und bei 3-dimensionaler Meteorologie intern verwendete Felder werden ausgeschrieben. Die Bedeutung der Namen ist in Abschnitt 3.3 erklärt. Es können mehrere Dateien mit einem Schreibbefehl ausgeschrieben werden, sofern nicht unterschiedliche Parameter zu definieren sind, z.B. mit „**\*W** `cnc+dry`“. Die Ergebnistabellen sind Mittelwerte über alle seit dem letzten **\*C** abgearbeiteten Zeitintervalle.
- \*T** `*|Abschnittbuchstabe`  
Ausgabe der aktuellen Parameter in die Log-Datei. Mit `*` werden alle Parameterabschnitte, sonst nur der spezifizierte Abschnitt ausgegeben.
- \*Z**  
Es wird ein Zeitintervall durchgerechnet und Konzentration und Deposition bei den entsprechenden Ergebnistabellen aufaddiert.



Die einzelnen Eingabeparameter sind diesen Aufgaben zugeordnet, dürfen also nur in dem betreffenden Abschnitt gesetzt werden. Sie stellen entweder ganze Zahlen, Gleitkommazahlen oder Zeichenketten dar und werden zu Beginn der Rechnung mit einem Standardwert belegt. Sie behalten ihren Wert solange bei, bis er durch Eingabe eines neuen Wertes geändert wird. Ausnahmen hiervon sind explizit aufgeführt. Alle Längen sind in Metern anzugeben, alle Zeiten in Sekunden.

Die einem Parameter zugewiesenen Werte folgen dem Namen, von diesem und untereinander durch Leerzeichen und/oder Tabulatoren getrennt. Zeichenketten müssen, wenn sie nicht-alphanumerische Zeichen enthalten, in Hochkommata eingeschlossen sein.

In der folgenden Tabelle steht für jeden Parameter in einer Zeile der *Name*, anschließend der *Datentyp* (*integer*, *float* oder *string*), dahinter in Klammern die *Anzahl* der Werte und schließlich die *Standardsetzung*. In den darauf folgenden Zeilen ist die Bedeutung und Handhabung dieses Parameters beschrieben.

*C	Clear	[all]	_____
*D	Dimensionierung		_____
mc	<i>integer</i> (1)	4000	Maximale Anzahl von Bytes, die in einer Eingabezeile vorkommen können.
mx	<i>integer</i> (1)	0	Anzahl $N_x$ der Intervalle in x-Richtung beim Auswertegitter.
my	<i>integer</i> (1)	0	Anzahl $N_y$ der Intervalle in y-Richtung beim Auswertegitter.
mz	<i>integer</i> (1)	0	Anzahl $N_z$ der Intervalle in z-Richtung beim Auswertegitter.
nx	<i>integer</i> (1)	0	Anzahl $N_x$ der Intervalle in x-Richtung beim Rechengitter (3-dim. Meteorologie).
ny	<i>integer</i> (1)	0	Anzahl $N_y$ der Intervalle in y-Richtung beim Rechengitter (3-dim. Meteorologie).
nz	<i>integer</i> (1)	0	Anzahl $N_z$ der Intervalle in z-Richtung beim Rechengitter.
op	<i>string</i> (1)	""	Optionen zur Durchführung der Rechnung. Sie werden in der Form <i>Option+Option+...</i> aneinander gereiht. Die einzelnen Optionen sind:
perx			Periodische Randbedingungen in x-Richtung anwenden. Das bedeutet, daß Partikel, die das Rechengebiet am östlichen Rand verlassen, an gleicher y- und z-Position am westlichen Rand wieder in das Rechengebiet eintreten. Bei 3-dimensionaler Meteorologie müssen die meteorologischen Felder auf der östlichen und der westlichen Randfläche identisch sein.



- pery** Periodische Randbedingungen in  $y$ -Richtung (vgl. **perx**).
- met3** Es liegt eine 3-dim. Meteorologie vor (komplexes Gelände und/oder Gebäudeumströmung).
- velcor** Die Advektion eines Partikels soll mit dem Verfahren 2. Ordnung (korrigierende Advektion) durchgeführt werden. Dies ist nur zusammen mit **met3** sinnvoll.
- sd** *integer*(1) 11111  
Startzahl (*seed*) für den Zufallszahlengenerator.
- ti** *string*(1) TEST  
Bezeichnung (*title*) für den Rechenlauf für Dokumentationszwecke.
- \*G** Gitter \_\_\_\_\_
- A0** *float*(1) 0  
Westlicher Rand  $\tilde{x}_0$  des Auswertegitters.
- B0** *float*(1) 0  
Südlicher Rand  $\tilde{y}_0$  des Auswertegitters.
- Cc** *float*( $\tilde{N}_z + 1$ ) 0  
Vertikales Raster  $\tilde{s}_{k'}$  des Auswertegitters.
- Da** *float*(1) 0  
Horizontale Maschenweite  $\tilde{d}$  des Auswertegitters.
- Dc** *float*(1) 0  
Vertikale Maschenweite  $\tilde{d}_s$  des Auswertegitters. Falls das vertikale Raster des Auswertegitters, **Cc**<sub>2</sub> nicht explizit angegeben ist, wird dieser Wert verwendet, um daraus  $\tilde{s}_{k'} = k' \tilde{d}_s$  zu bilden.
- Dd** *float*(1) 0  
Horizontale Maschenweite  $\tilde{d}$  des Rechengitters.
- Sh** *float*(1) 0  
Vertikaler Skalierungswert  $\hat{s}$  von Rechen- und Auswertegitter. Falls kein Wert größer 0 angegeben ist, wird bei 3-dim. Meteorologie mit  $\hat{s} = \hat{z} = \infty$  gerechnet.
- X0** *float*(1) 0  
Westlicher Rand  $x_0$  des Rechengitters.
- X1** *float*(1) 0  
Östlicher Rand  $x_{N_x}$  des Rechengitters bei 1-dim. Meteorologie. Bei 3-dim. Meteorologie wird  $x_{N_x} = x_0 + N_x d$  gesetzt.
- Y0** *float*(1) 0  
Südlicher Rand  $y_0$  des Rechengitters.
- Y1** *float*(1) 0  
Nördlicher Rand  $y_{N_y}$  des Rechengitters bei 1-dim. Meteorologie. Bei 3-dim. Meteorologie wird  $y_{N_y} = y_0 + N_y d$  gesetzt.



- Zh** *float*(1) 0  
Vertikaler Skalierungswert  $\hat{z}$  von Rechen- und Auswertegitter. Falls Zh den Wert 0 hat, wird mit  $\hat{z} = \infty$  gerechnet. Partikel werden an der Schicht  $z = \hat{z}$  reflektiert, bei 3-dim. Meteorologie aber nur, wenn auch Sh einen Wert größer 0 hat.
- Zz** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Vertikales Raster  $s_{k'}$  des Rechengitters.
- \*P** Parameter \_\_\_\_\_
- Aa** *float*(1) 0  
Relativer Zeitschritt  $\alpha_\tau$ . Falls bei 1-dim. Meteorologie Ta nicht angegeben ist, wird der Zeitschritt  $\tau$  gleich dem  $\alpha_\tau$ -fachen der kleinsten Lagrange-Korrelationszeit gesetzt,  $\tau = \alpha_\tau \min(T_{L;u}, T_{L;v}, T_{L;w})$ . Ist auch kein Aa angegeben, wird der Zeitschritt auf 1 Sekunde gesetzt.
- Ku** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Diffusionskoeffizient  $K_{uu}$  bei 1-dim. Meteorologie.
- Kv** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Diffusionskoeffizient  $K_{vv}$  bei 1-dim. Meteorologie.
- Kw** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Diffusionskoeffizient  $K_{ww}$  bei 1-dim. Meteorologie.
- Pd** *float*(1) 0  
Depositionswahrscheinlichkeit  $p_d$ .
- Qp** *float*(1) 0.01  
Relative untere Grenze  $q_p$  für die Stoffmenge, die ein Partikel repräsentiert.
- Rp** *float*(1) 1  
Emissionsrate  $R_p$  der Partikel.
- Rw** *float*(1) 0  
Auswaschrage  $r_w$ .
- Sc** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Schubspannungsgeschwindigkeit  $u_*$  bei 1-dim. Meteorologie (verwendet für  $\Sigma_{uw} = -u_*^2$ ).
- Su** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Streuung  $\sigma_u$  der turbulenten Geschwindigkeit bei 1-dim. Meteorologie.
- Sv** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Streuung  $\sigma_v$  der turbulenten Geschwindigkeit bei 1-dim. Meteorologie.
- Sw** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Streuung  $\sigma_w$  der turbulenten Geschwindigkeit bei 1-dim. Meteorologie.
- Ta** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Konstanter Zeitschritt  $\tau$ .



- Tt** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Zeitschritt  $\tau$  bei 1-dim. Meteorologie. Ist **Tt** nicht angegeben, wird **Aa** zur Berechnung von  $\tau$  verwendet.
- Tu** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Lagrange-Korrelationszeit  $T_{L;u}$  bei 1-dim. Meteorologie. Kann alternativ zu **Ku** verwendet werden ( $K_{uu} = T_{L;u}\Sigma_{uu}$ ).
- Tv** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Lagrange-Korrelationszeit  $T_{L;v}$  bei 1-dim. Meteorologie. Kann alternativ zu **Kv** verwendet werden ( $K_{vv} = T_{L;v}\Sigma_{vv}$ ).
- Tw** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Lagrange-Korrelationszeit  $T_{L;w}$  bei 1-dim. Meteorologie. Kann alternativ zu **Kw** verwendet werden ( $K_{ww} = T_{L;w}\Sigma_{ww}$ ).
- Vd** *float*(1) 0  
Depositionsgeschwindigkeit  $v_d$ .
- Vs** *float*(1) 0  
Sedimentationsgeschwindigkeit  $v_s$ .
- Vx** *float*( $N_z + 1$ ) 1  
Windgeschwindigkeit  $V_x$  bei 1-dim. Meteorologie.
- Vy** *float*( $N_z + 1$ ) 0  
Windgeschwindigkeit  $V_y$  bei 1-dim. Meteorologie.
- \*Q** Quelle \_\_\_\_\_
- Aq** *float*(1) 0  
Horizontale Ausdehnung  $a_q$  der Quelle (bei  $\varphi_q = 0$  diejenige Kante, die in  $x$ -Richtung verläuft).
- Bq** *float*(1) 0  
Horizontale Ausdehnung  $b_q$  der Quelle (bei  $\varphi_q = 0$  diejenige Kante, die in  $y$ -Richtung verläuft).
- Cq** *float*(1) 0  
Vertikale Ausdehnung  $c_q$  der Quelle.
- Eq** *float*(1) 1  
Quellstärke  $E$ .
- Hq** *float*(1) 100  
Höhe der Quelle über Grund (Unterkante).
- Pq** *float*(1) 0  
Winkel  $\varphi_q$  zwischen der Kante  $a_q$  und der  $x$ -Richtung, gegen den Uhrzeigersinn gerechnet.



- Sq** *float*(1) 0  
Steigung  $\sigma_q$  der Unterkante der Quelle.
- Ud** *float*(1) 0  
Individuelle Streuung  $\sigma_U$  der Überhöhungsgeschwindigkeit innerhalb des Partikel-Ensembles.
- Ut** *float*(1) 0  
Zeitkonstante  $T_U$  der Überhöhungsgeschwindigkeit.
- Uu** *float*(3) 0  
Anfangswert  $U_0$  der Überhöhungsgeschwindigkeit.
- Xq** *float*(1) 0  
 $x$ -Koordinate  $x_q$  der Quellposition (Eckpunkt).
- Yq** *float*(1) 0  
 $y$ -Koordinate  $y_q$  der Quellposition (Eckpunkt).
- \*R** Read *Name+Name+...* \_\_\_\_\_
- Fn** *string*(1) ""  
Name des Files, der die mit *Name* bezeichnete Variable enthält. Der Wert von **Fn** wird nicht gespeichert, muß also bei jedem *Read* neu angegeben werden. Ist **Fn** nicht angegeben, dann wird als File-Name *Name.dmna* genommen. Ist der *read counter* aktiviert, dann wird der File-Name *NameCounter.dmna* verwendet, wobei *Counter* die vierstellige Darstellung der Zahl **Rc** ist (mit führenden Nullen), also z.B. *vx0002.dmna*.
- Rc** *integer*(1) -1  
Lesezähler *read counter* zur automatischen Bildung des File-Namens. Er ist aktiviert, wenn er einen Wert größer oder gleich 0 besitzt. Vor jedem *Read* wird er dann um 1 erhöht.
- \*T** Tabelle \*| *Abschnittbuchstabe* \_\_\_\_\_
- \*W** Write *Name+Name+...* \_\_\_\_\_
- Aw** *integer*(1) 0  
Inkrement des Schreibzählers **Wc**. Vor der Ausführung von *Write* wird der Wert von **Aw** zum Schreibzähler **Wc** addiert und anschließend **Aw** wieder auf 0 gesetzt.
- Fa** *float*(1) 1  
Faktor zu Darstellung der Wert der Variablen *Name* in einem Text-File. Bevor die Werte im Format **Fo** ausgeschrieben werden, werden sie mit **Fa** multipliziert, falls in **Fo** nicht schon ein Faktor spezifiziert ist.
- Fi** *string*(1) ""  
File-Name, der zum Ausschreiben der Variablen *Name* verwendet werden soll. Der Wert von **Fi** wird nicht gespeichert, muß also bei jedem *Write* neu angegeben werden. Ist **Fi** nicht angegeben, dann wird als File-Name *Name.dmna*



genommen. Ist der *write counter* aktiviert, dann wird der File-Name *NameCounter.dmn*a verwendet, wobei *Counter* die vierstellige Darstellung der Zahl *Wc* ist (mit führenden Nullen), also z.B. *cnc0002.dmn*a.

Sind die ersten drei Zeichen von *Fi* gleich „LOG“, dann werden die Daten in den Log-File geschrieben. Ihnen vorangestellt wird zur Kennzeichnung die Zeichenkette, die man erhält, wenn man *Fi* ab dem vierten Zeichen als Format (nach ANSI-C) zur Darstellung von *Wc* verwendet. Beispiel: *Wc* habe vor Aufruf von *Write* den Wert 5 und für *Fi* ist *LOGA%03d:* angegeben. Dann wird im Log-File die Marke *A006:* erzeugt und anschließend werden die Daten in die gleiche Zeile geschrieben.

**Fo** *string*(1) "%12.4e"

Format zur Darstellung der Daten in einem Text-File (siehe Abschnitt 3.3). Enthält das auszuschreibende Feld Vektoren oder Tensoren (Matrizen), dann ist das Format in der entsprechenden Vielfachheit anzugeben.

**Id** *string*(1) "TEST"

Zeichenkette zur Identifizierung der Daten für Dokumentationszwecke.

**Mo** *string*(1) "text"

Modus der Datendarstellung. Wird *binary* angegeben, dann werden nur die Strukturinformationen in den Text-File geschrieben, die Daten aber in einen separaten Binär-File. Er hat den gleichen Namen wie der Text-File, aber die Namensweiterung *dmnb*.

**Se** *string*(1) ""

Auswahl der auszuschreibenden Daten (siehe Abschnitt 3.3). Wird *Se* nicht angegeben, dann werden die Daten in der gespeicherten Reihenfolge geschrieben (dies entspricht "*i+:j+:k+*" bei einem 3-dim. Feld).

**Wc** *integer*(1) -1

Schreibzähler (*write counter*) zur automatischen Bildung des File-Namens. Er ist aktiviert, wenn er einen Wert größer oder gleich 0 besitzt. Vor jedem *Write* wird er dann um 1 erhöht.

**\*Z** Zeitintervall \_\_\_\_\_

**Dt** *float*(1) 1000

Länge des Zeitintervalls, über das die Simulation laufen soll.

### 3.3 Dateien

Die Eingabe-Files bei 3-dimensionaler Meteorologie enthalten Tabellen mit vorgeschriebener Dimensionierung, wobei jedes Tabellenelement eine skalare Größe oder die Komponente eines Vektors oder Tensors darstellt:



File	Bedeutung	Dimensionierung
bp	Bodenprofil Hauptgitter $b_{ij}$	$0..N_x; 0..N_y$
bm <sup>†</sup>	Bodenprofil Zwischengitter $b_{ij}^*$	$1..N_x; 1..N_y$
vx	Windgeschwindigkeit $V_{x;ijk}$	$0..N_x; 1..N_y; 1..N_z$
vy	Windgeschwindigkeit $V_{y;ijk}$	$1..N_x; 0..N_y; 1..N_z$
vs <sup>†</sup>	Windgeschwindigkeit $V_{s;ijk}$	$1..N_x; 1..N_y; 0..N_z$
su <sup>†</sup>	Turbulenz $\sigma_{u;ijk}$	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
sv	Turbulenz $\sigma_{v;ijk}$	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
sw	Turbulenz $\sigma_{w;ijk}$	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
sc <sup>†</sup>	Turbulenz $u_{*;ijk}$	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
ku <sup>†</sup>	Austauschkoeffizient $K_{u;ijk}$	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
kv	Austauschkoeffizient $K_{v;ijk}$	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
kw	Austauschkoeffizient $K_{w;ijk}$	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
vd <sup>†</sup>	Depositionsgeschwindigkeit $v_{d;ijk}$	$1..N_x; 1..N_y$
pd <sup>†</sup>	Depositionswahrscheinlichkeit $p_{d;ijk}$	$1..N_x; 1..N_y$

Die mit † gekennzeichneten Files können auch fehlen, wobei dann folgendermaßen verfahren wird:

bm : Wird aus  $b_{ij}$  berechnet.  
vs : Wird aus  $V_{x;ijk}$  und  $V_{y;ijk}$  berechnet.  
su : Wird gleich  $\sigma_{v;ijk}$  gesetzt.  
sc : Wird gleich 0 gesetzt.  
ku : Wird gleich  $K_{v;ijk}$  gesetzt.  
vd : Wird gleich 0 gesetzt.  
pd : Wird aus  $v_{d;ijk}$  berechnet.

Die Ausgabe-Files können nicht nur skalare Größen sondern auch Vektoren oder Tensoren als Tabellenelemente enthalten. Mögliche Ausgabe-Files sind:

File	Bedeutung	Element	Dimensionierung
— Ergebnisfelder —			
cnc	Konzentration $\bar{c}_{ijk}$	Skalar	$1..M_x; 1..M_y; 1..M_z$
dry	Trockene Deposition $F_{d;ij}$	Skalar	$1..M_x; 1..M_y$
icp	Interzeption $F_{i;ijk}$	Skalar	$1..M_x; 1..M_y; 1..M_z$
wet	Nasse Deposition $F_{d;ij}$	Skalar	$1..M_x; 1..M_y$
— Intern verwendete Felder —			
drf	Driftgeschwindigkeit $\mathbf{W}_{ijk}$	Vektor	$1..N_x; 1..N_y; 1..N_z$
lmd	Feld $\mathbf{\Lambda}_{ijk}$	Tensor	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
pdp	Depositionswahrscheinlichkeit $p_{d;ijk}$	Skalar	$1..N_x; 1..N_y$
psi	Feld $\mathbf{\Psi}_{ijk}$	Tensor	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
sgm	Windvarianz $\mathbf{\Sigma}_{ijk}$	Tensor	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
tau	Zeitschritt $\tau_{ijk}$	Skalar	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$
wnd	Windfeld $\mathbf{V}_{ijk}$	Vektor	$0..N_x; 0..N_y; 0..N_z$



## 4 Verifikationstests

Die im folgenden aufgeführten Testrechnungen dienen der Prüfung, ob der Algorithmus korrekt in einem Computerprogramm implementiert ist (Verifikation). Die Daten zu diesen Rechnungen, einschließlich der Bilder als EPS-Files, stehen in Unterverzeichnissen von `veri`. Mit dem Befehl `runveri` werden alle Verifikationsrechnungen neu durchgeführt, der Rechenzeitbedarf liegt bei etwa 3 Stunden (Pentium 266).

In der Regel sind alle Beispiele 101 mal mit unterschiedlichen Folgen von Zufallszahlen gerechnet und es wurde der Mittelwert aufgetragen. Der in den Bildern grau schattiert angegebene Unsicherheitsbereich ist  $\pm 2\sigma_m$ , wobei  $\sigma_m$  die geschätzte Streuung des Mittelwertes ist, er sollte also mit 95 % Wahrscheinlichkeit den wahren Wert enthalten. Alle Massenangaben sind in willkürlichen Masseneinheiten (ME).

### 4.1 Homogenitätstest

Wenn Partikel in einem endlichen Volumen freigesetzt werden, sollten sie - sofern keine äußeren Kräfte wirken - nach hinreichend langer Zeit das gesamte Volumen gleichmäßig ausfüllen. Das Rechenvolumen wurde in diesen Beispielen endlich gemacht, daß der obere Rand des Rechengebietes undurchlässig (Zh auf den obersten Wert von Zz gesetzt) und die seitlichen Ränder periodisch gemacht wurden (Op `perx+pery`). Das bedeutet z.B. für die  $x$ -Richtung, daß ein Partikel, das das Rechengebiet auf der rechten Seite verläßt, auf der linken Seite wieder hineingesetzt wird. Entsprechend wird in  $y$ -Richtung verfahren.

#### 4.1.1 Homogene Turbulenz, konstanter Zeitschritt

Daten in: `veri/homogen/1`

Wenn alle Parameter konstant sind, kann eine Abweichung von einer homogenen Dichteverteilung nur durch Randeffekte bewirkt werden. Bild 1 zeigt, daß anscheinend keine Randeffekte wirksam sind (bis auf eine geringfügige Erhöhung der Streuung). Die verwendeten meteorologischen Parameter sind  $\sigma_w = 0.5 \text{ m/s}$  und  $K_{zz} = 1 \text{ m}^2/\text{s}$ , der Zeitschritt  $\tau$  beträgt 2 sec.

#### 4.1.2 Homogene Turbulenz, variabler Zeitschritt

Daten in: `veri/homogen/2` und `veri/homogen/2a`

Der in diesem Beispiel verwendete Zeitschritt  $\tau$  variiert zwischen 1 Sekunde in Bodennähe und 8 Sekunden am oberen Rand des Rechengebietes. Die vertikale Lagrange-Korrelationszeit beträgt 4 Sekunden. Trotz homogener Turbulenz ist bei räumlich variablem Zeitschritt die Driftgeschwindigkeit ungleich Null. Eine Vernachlässigung dieser Driftgeschwindigkeit hätte erhebliche Abweichungen von der homogenen Dichteverteilung zur Folge, wie Bild 2 zeigt (Daten in `veri/homogen/2a`).

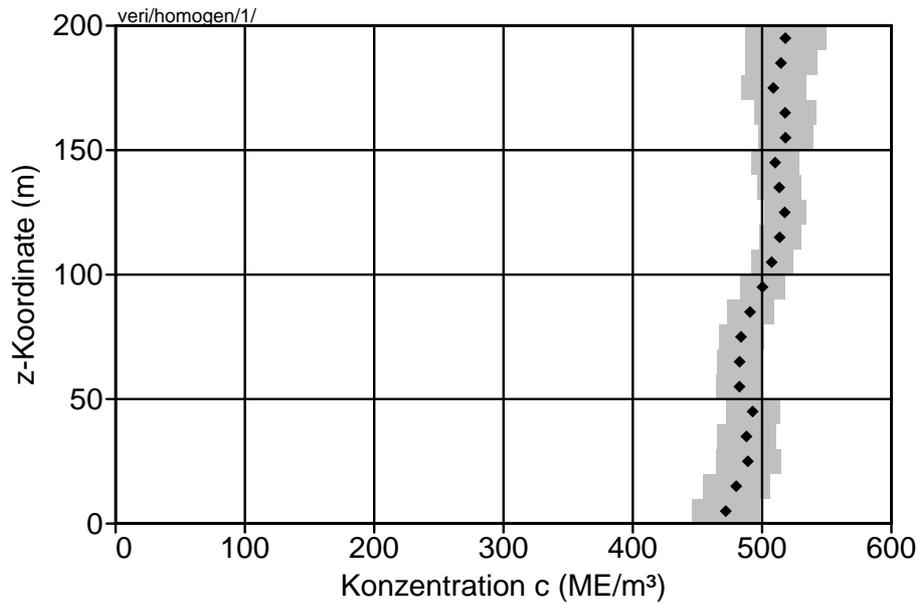


BILD 1: Vertikalprofil der Konzentration in einem abgeschlossenen Volumen bei homogener Turbulenz und konstantem Zeitschritt. Theoretisch sollte die Konzentration überall den gleichen Wert  $c = 500 \text{ ME/m}^3$  besitzen.

Bei korrekter Berücksichtigung der Driftgeschwindigkeit ist die Konzentrationsverteilung fast homogen, es treten keine signifikanten Abweichungen auf.

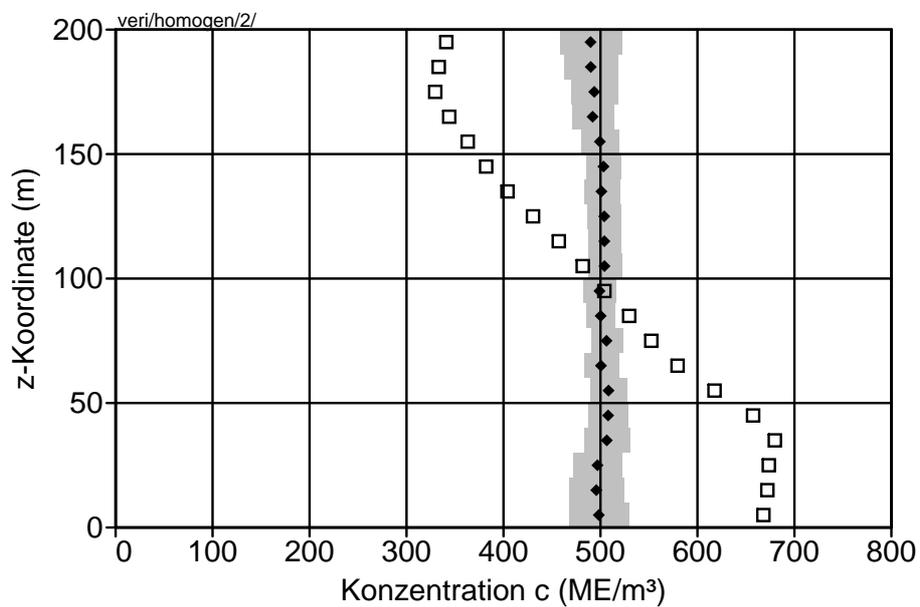


BILD 2: Vertikalprofil der Konzentration bei homogener Turbulenz und räumlich variablem Zeitschritt ( $1 \leq \tau \leq 8$ ). Die offenen Quadrate stammen aus einer Simulation, in der die Driftgeschwindigkeit willkürlich zu Null gesetzt wurde.

### 4.1.3 Inhomogene Turbulenz, konstanter Zeitschritt

Daten in: veri/homogen/3c

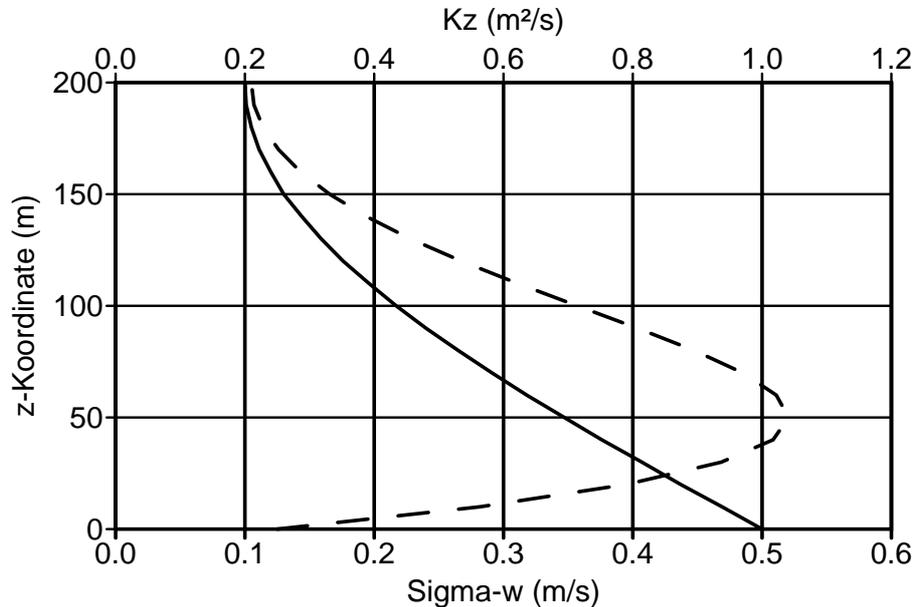


BILD 3: Vertikalprofile von  $\sigma_w(z)$  nach Gleichung (4.1) (durchgezogene Linie) und von  $K_{zz}(z)$  nach Gleichung (4.3) (gestrichelte Linie)

Das Vertikalprofil der Turbulenz ist folgendermaßen angesetzt:

$$\sigma_w(z) = 0.5 - 0.4 \sin\left(\frac{z\pi}{2\hat{z}}\right) \text{ in m/s} \quad (4.1)$$

$$T_w(z) = 1 + 20 \sin\left(\frac{z\pi}{2\hat{z}}\right) \text{ in s} \quad (4.2)$$

$$K_{zz}(z) = \sigma_w(z)^2 T_w(z) \text{ in m}^2/\text{s} \quad (4.3)$$

$\hat{z}$  ist die Obergrenze des Rechengebietes,  $\hat{z} = 200 \text{ m}$ . Das Profil ist so gewählt, daß es sich an seiner Obergrenze symmetrisch fortsetzen läßt, so daß reflektierende Randbedingungen keine Verfälschung bewirken (Bild 3).

Der Zeitschritt ist konstant,  $\tau = 2 \text{ s}$ , und beträgt damit in Bodennähe das Doppelte der Lagrange-Korrelationszeit  $T_w$ . Bild 4 zeigt, daß trotz der starken Inhomogenität in der Turbulenz eine nahezu homogene Dichteverteilung beobachtet wird. Die geringfügige, aber signifikante Erhöhung der Konzentration im untersten Intervall hat ihre Ursache in der relativ groben Intervalleinteilung in Bodennähe. Sie verschwindet, wenn man das Rechengitter nicht äquidistant in 10 m-Schritten anlegt sondern in Bodennähe eine feinere Unterteilung gemäß  $Zz = 0 \ 2 \ 5 \ 10 \ 20 \ 30 \ \dots$  wählt (siehe veri/homogen/3e).

### 4.1.4 Inhomogene Turbulenz, variabler Zeitschritt

Daten in: veri/homogen/4

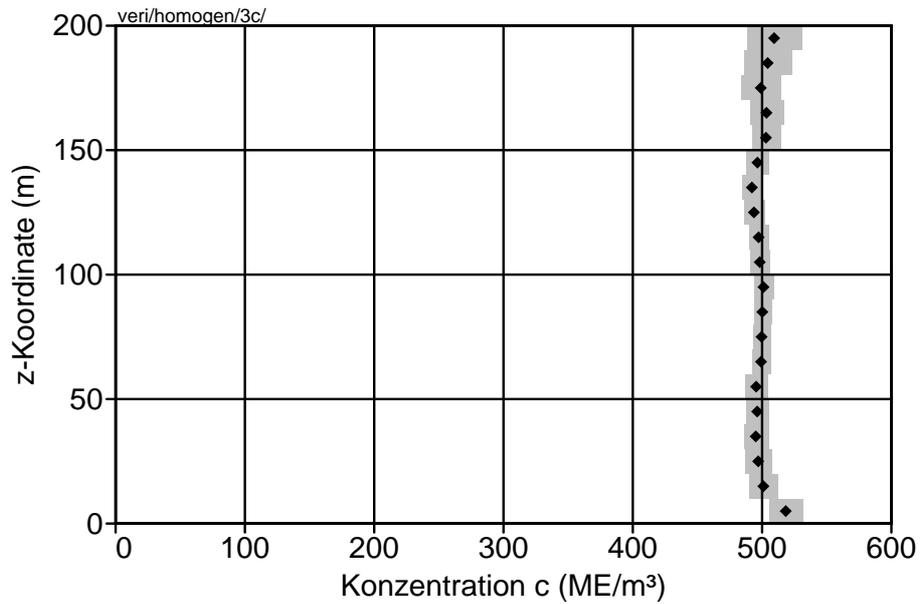


BILD 4: Vertikalprofil der Konzentration bei inhomogener Turbulenz (siehe Gleichung (4.1) bis (4.3)) und räumlich konstantem Zeitschritt  $\tau = 2$  Sekunden

Das Vertikalprofil der Turbulenz ist wieder entsprechend (4.1) bis (4.3) gewählt, der Zeitschritt ist aber variabel zwischen 2 Sekunden in Bodennähe und 20 Sekunden am oberen Rand des Rechengebietes (Bild 5). Der größere Zeitschritt bewirkt einen gegenüber Bild 4 etws vergrößerten Stichprobenfehler.

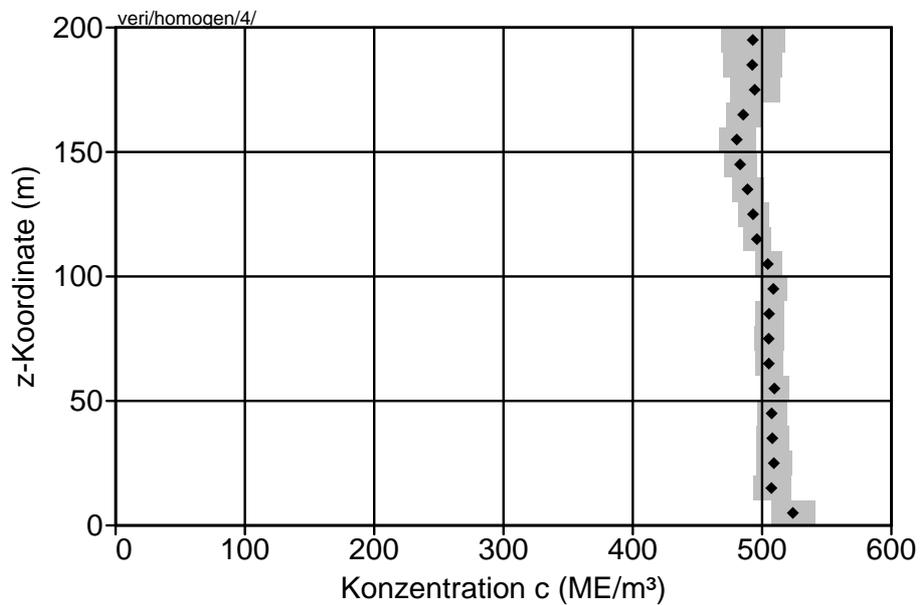


BILD 5: Vertikalprofil der Konzentration bei inhomogener Turbulenz (siehe Gleichung (4.1) bis (4.3)) und räumlich variablem Zeitschritt ( $2 \leq \tau \leq 20$ ).

## 4.2 Deposition

In den folgenden Beispielen werden die verschiedenen Abreicherungsmechanismen getestet.

### 4.2.1 Trockene Deposition ohne Sedimentation

Daten in: veri/deposition/1

Die trockene Deposition wird durch die Depositionsgeschwindigkeit  $v_d$  parametrisiert. Diese ist kein unmittelbarer Parameter des Algorithmus, sondern dort wird eine Depositionswahrscheinlichkeit  $p_d$  verwendet. Es ist daher nachzuweisen, daß bei Vorgabe von  $v_d$  und Berechnung von  $p_d$  tatsächlich eine Deposition der geforderten Größe auftritt.

Die durch Deposition hervorgerufene Verarmung der bodennahen Schichten erschwert die korrekte Bestimmung der Konzentration in Bodennähe und könnte damit das Ergebnis verfälschen. Es wird daher ein stationärer Prozeß betrachtet, bei dem eine hoch gelegene Quelle kontinuierlich emittiert, die Spurenstoffe durch ein Gebiet homogener Turbulenz zum Boden diffundieren und dann dort deponiert werden. Im Gleichgewicht wird genauso viel deponiert wie von der Quelle emittiert wird, und aus dem sich einstellenden Konzentrationsprofil kann dann auf die korrekte Behandlung der Deposition geschlossen werden.

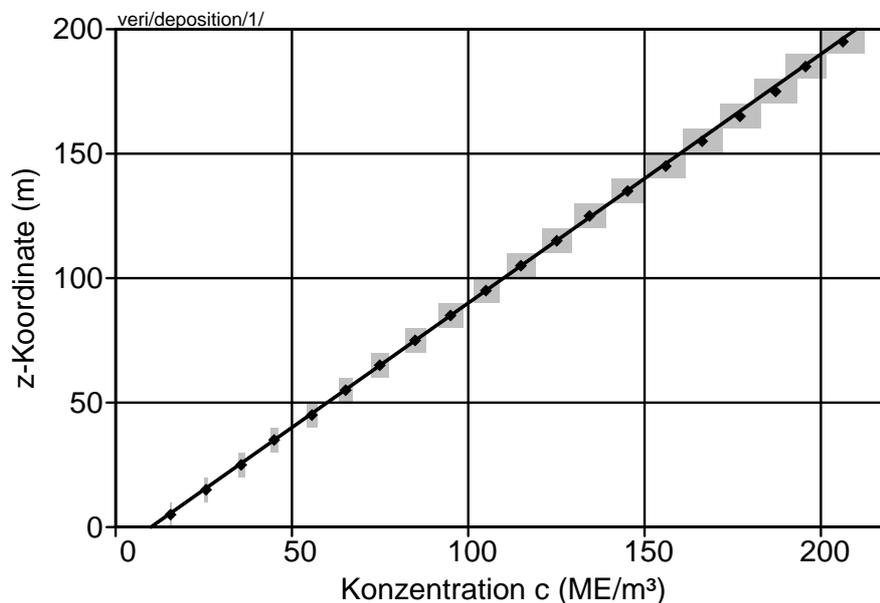


BILD 6: Vertikalprofil der Konzentration bei Deposition mit  $v_d = 0,1 \text{ m/s}$  ohne Sedimentation. Die Turbulenz ist homogen ( $K = 1 \text{ m}^2/\text{s}$ ), die Quelle bei  $z = 200 \text{ m}$  emittiert konstant mit  $F_c = 1 \text{ ME/m}^2\text{s}$ .

Es wird nur vertikale Diffusion betrachtet. Die Konzentrationsverteilung  $c(z)$  eines Stoffes mit einer Sedimentationsgeschwindigkeit  $v_s$  und einer Depositionsgeschwin-



digkeit  $v_d$  erfüllt bei Diffusion durch ein ruhendes Medium mit dem Diffusionskoeffizienten  $K$  die Differentialgleichung

$$-v_s \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (4.4)$$

Die Lösung für konstantes  $K$  ist

$$c(z) = c_0 \exp\left(-z \frac{v_s}{K}\right) + \frac{F_c}{v_s} \left[ 1 - \exp\left(-z \frac{v_s}{K}\right) \right] \quad (4.5)$$

Hierbei ist  $c_0$  die Konzentration am Erdboden und  $F_c$  die von der Quelle erzwungene Massenstromdichte, die gleich der am Erdboden deponierten Massenstromdichte ist,  $F_c = c_0 v_d$ . Ohne Sedimentation erhält man

$$c(z) = F_c \left( \frac{1}{v_d} + \frac{z}{K} \right) \text{ für } v_s \rightarrow 0 \quad (4.6)$$

Bild 6 zeigt die beobachtete Konzentration und den theoretischen Verlauf nach Gleichung (4.6).

#### 4.2.2 Trockene Deposition mit Sedimentation

Daten in: veri/deposition/2 und veri/deposition/3

Zunächst wird der Fall betrachtet, daß die Partikel gravitativ absinken, aber nicht am Boden deponiert werden. Nach einer kurzzeitigen Freisetzung stellt sich, ähnlich wie bei der barometrischen Höhenformel, eine exponentielle Dichteverteilung ein, die man aus Gleichung (4.5) durch die Spezialisierung auf  $F_c = 0$  erhält (Bild 7).

Für den Fall, daß die Depositionsgeschwindigkeit gleich der Sedimentationsgeschwindigkeit gewählt ist, liefert Gleichung (4.5) eine konstante Konzentrationsverteilung ( $c(z) = 20 \text{ ME/m}^3$  bei  $F_c = 1 \text{ ME/m}^2\text{s}$  und  $v_d = v_s = 0,05 \text{ m/s}$ ). Bild 8 zeigt den beobachteten Verlauf.

#### 4.2.3 Nasse Deposition

Daten in: veri/deposition/4

Zum Testen der nassen Deposition ist die am Erdboden pro Zeiteinheit deponierte Masse mit dem vertikalen Integral über die Konzentrationsverteilung zu vergleichen. Dieses Integral erhält man am einfachsten, wenn man in der Vertikalen im Auswertegitter nur eine Schicht wählt, die so hoch reicht, daß alle Partikel erfaßt werden. Bild 9 zeigt für einen Simulationslauf in Abhängigkeit von der Quellentfernung das Integral der Konzentration und die Massenstromdichte der nassen Deposition. Da beide den gleichen Stichprobenfehler aufweisen, erübrigt sich hier eine Ensemble-Mittelung.

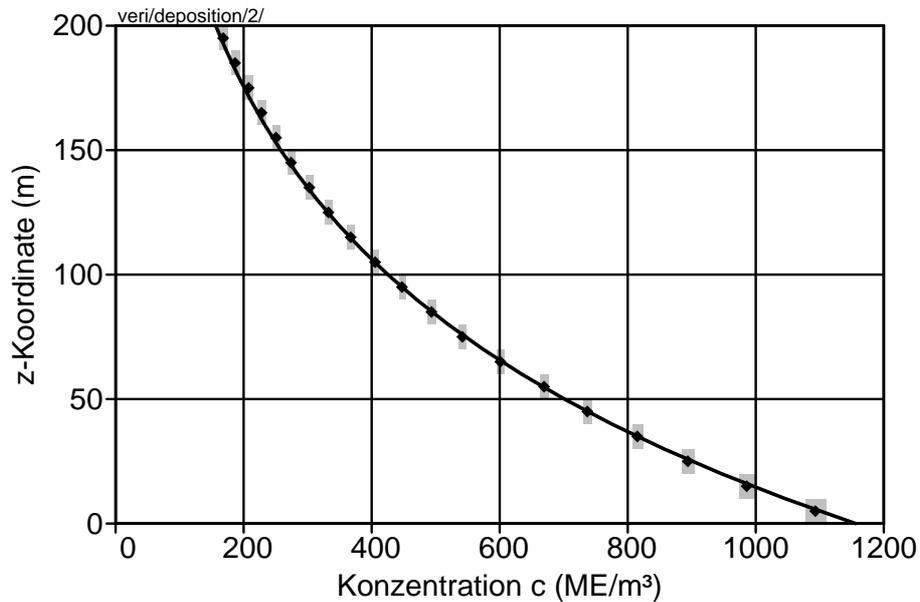


BILD 7: Vertikalprofil der Konzentration bei Sedimentation mit  $v_g = 0,01$  m/s und ohne Deposition. Die Turbulenz ist homogen ( $K = 1$  m<sup>2</sup>/s). Die durchgezogene Kurve ist der theoretische Verlauf nach Gleichung (4.5) für  $F_c = 0$ . Die über die gesamte Höhe gemittelte Konzentration hat den Wert 500 ME/m<sup>3</sup>.

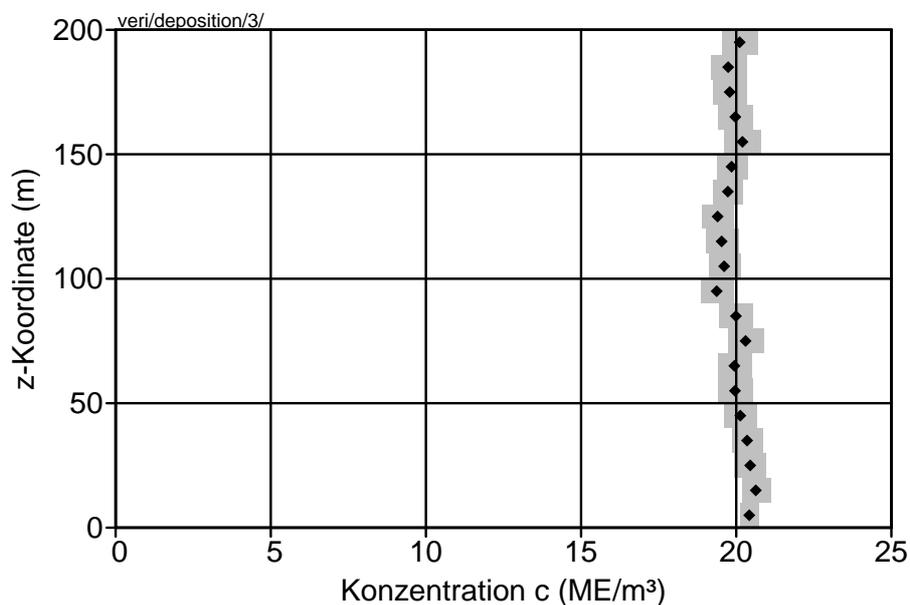


BILD 8: Vertikalprofil der Konzentration bei Deposition mit  $v_d = 0,05$  m/s und Sedimentation mit  $v_s = 0,05$  m/s. Die Quelle bei  $z = 200$  m emittiert konstant und erzwingt eine Massenstromdichte  $F_c = 1$  ME/m<sup>2</sup>s. Der theoretische Wert der Konzentration ist  $c(z) = 20$  ME/m<sup>3</sup>.

#### 4.2.4 Interzeption

Daten in: veri/deposition/5

Durch Interzeption, also Ablagerung in einem porösen, durchströmten Medium, wird

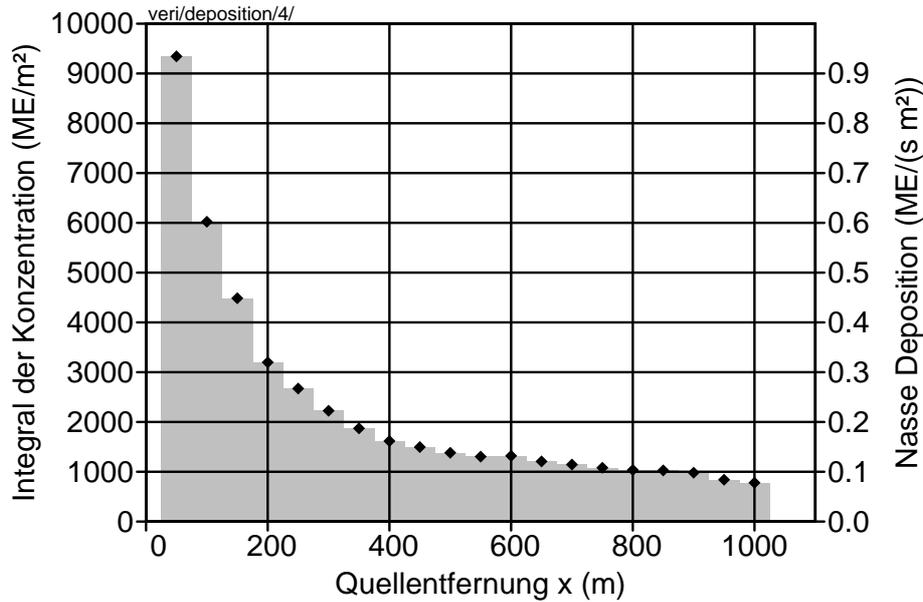


BILD 9: Vertikales Integral der Konzentration (graue Fläche, linke Achse) und Massenstromdichte der nassen Deposition (Rauten, rechte Achse) in Abhängigkeit von der Quellentfernung. Die Auswaschratesrate ist  $r_w = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ .

die in einer Fahne transportierte Stoffmenge verringert. Es wird hier eine stationäre Fahne betrachtet, die in einer homogenen Strömung mit  $V_x = 5 \text{ m/s}$  von einer Punktquelle bei  $x = -2050 \text{ m}$  ausgeht und für  $x \geq 0$  ein poröses Medium mit der Interzeptionslänge  $L_I = 1000 \text{ m}$  durchströmt. Um quer zur Fahnenachse zu integrieren und damit die gesamte, in  $x$ -Richtung transportierte Menge zu erhalten, wird ein Auswertegitter mit periodischen Randbedingungen in  $y$ -Richtung und Reflexion bei  $z = 100 \text{ m}$  gewählt. Die Maschenweite ist in allen Richtungen  $\Delta = 100 \text{ m}$ , die Quellstärke  $Q = 10^6 \text{ ME/m}^3$ . Weitere Parameter sind:  $\sigma_u = \sigma_v = 1 \text{ m/s}$ ,  $\sigma_w = 0,5 \text{ m/s}$ ,  $K_x = K_y = 50 \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $K_z = 10 \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $\tau = 2 \text{ s}$ . Da das Programm bei Rechnungen mit Interzeption eine 3-dim. Meteorologie erwartet, müssen diese Parameter als Felder vorgegeben werden. Ebenfalls muß formal ein Erdboden mit  $z = 0$  definiert werden.

Ohne Interzeption erwartet man eine Konzentration

$$c(x) = \frac{Q}{\Delta^2 V_x} \text{ für } x \leq 0 \quad (4.7)$$

Mit Interzeption sollte sich dann ein exponentieller Abfall ergeben,

$$c(x) = c(0) \exp(-x/L_I) \text{ für } x > 0 \quad (4.8)$$

Bild 10 zeigt den Vergleich dieses Verlaufes mit den beobachteten Mittelwerten, wobei 101 Rechnungen mit jeweils 10 Trajektorien durchgeführt wurden. Die Übereinstimmung im Bereich der Interzeption ist sehr gut, in Quellnähe gibt es jedoch signifikante Abweichungen. Das liegt daran, daß dort die Geschwindigkeitsverteilung der Partikel noch nicht ihre stationäre Form angenommen hat, obwohl die Initialisierung in Form einer Maxwell-Verteilung erfolgt.

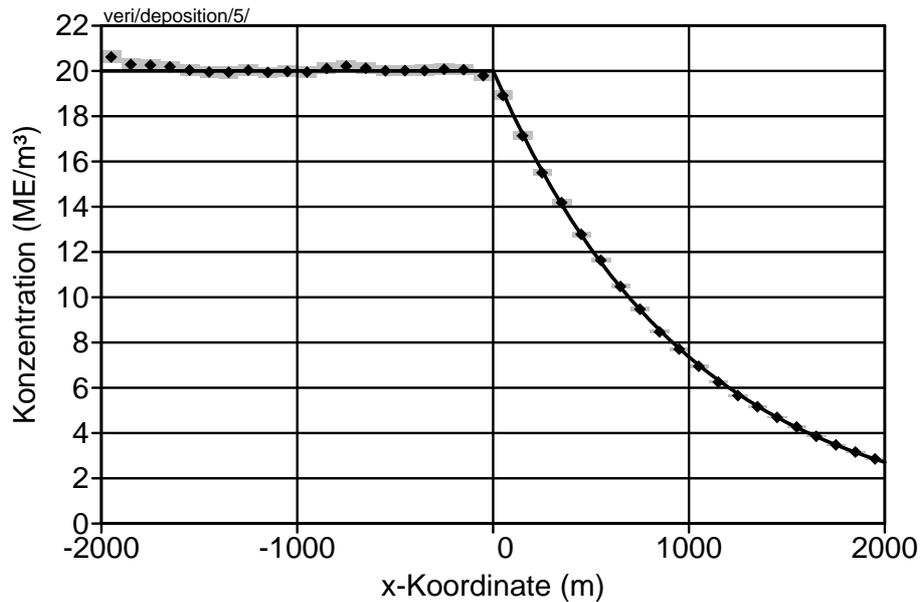


BILD 10: Quer zur Windrichtung gemittelte Konzentration einer stationären Fahne in  $x$ -Richtung, die für  $x > 0$  einer Interzeption mit  $L_I = 1000$  m ausgesetzt ist. Die Rauten (zusammen mit dem grauen Bereich) sind die für jedes Intervall berechneten Konzentrationswerte, die durchgezogene Kurve ist der theoretische Verlauf nach Gleichung (4.8).

### 4.3 Taylor-Theorem

Daten in: veri/taylor

Für den Fall homogener Turbulenz mit der Geschwindigkeitsfluktuation  $\sigma_{u,v,w}$  und einer exponentiellen Korrelationsfunktion mit der Zeitskala  $T_{u,v,w}$  in den drei Koordinatenrichtungen ( $x,y,z$ ) ergibt sich aus dem Taylor-Theorem (siehe z.B. SEINFELD<sup>5</sup>) als Aufweitung einer anfangs punktförmigen Teilchenwolke

$$\sigma_{x,y,z}^2(t) = 2T_{u,v,w}^2 \sigma_{u,v,w}^2 [t/T_{u,v,w} - 1 + \exp(-t/T_{u,v,w})] \quad (4.9)$$

Diese Beziehung wurde bei dreidimensionaler Turbulenz mit den Parametern

$\sigma_u$	0,8 m/s
$\sigma_v$	0,6 m/s
$\sigma_w$	0,4 m/s
$T_u$	200 s
$T_v$	200 s
$T_w$	20 s

für alle drei Koordinatenrichtungen im Zeitraum 0 bis 400 s überprüft.

<sup>5</sup>J.H. SEINFELD: *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. New York: John Wiley & Sons 1986, Seite 547.



In der Ausbreitungsrechnung wurden innerhalb einer Sekunde 40 000 Teilchen freigesetzt und die Konzentration als 10-Sekunden-Mittelwert fortlaufend registriert. Das räumliche Raster hatte horizontal 50 m und vertikal 10 m Maschenweite. Die Aufweitung der Wolke wurde über das zweite Moment der Konzentrationsverteilung  $c(x, y, z)$  bestimmt, also beispielsweise

$$\sigma_x^2 = \frac{\int x^2 c(x, y, z) dx dy dz}{\int c(x, y, z) dx dy dz} \quad (4.10)$$

Bild 11 zeigt, daß die theoretische Wolkenaufweitung sehr gut getroffen wird. Die Abweichungen bei kleinen Zeiten rühren daher, daß wegen der endlichen Maschenweite keine beliebig kleine Wolkenausdehnung registriert werden konnte.

#### 4.4 Berljang-Lösung

Daten in: veri/berljand/1

Die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (4.11)$$

wird für folgenden Sonderfall betrachtet:

- Die Ausbreitung ist stationär.
- Der Wind weht nur in  $x$ -Richtung.
- Die Diffusionskoeffizienten sind nur eine Funktion von  $z$ .
- Diffusion in  $x$ -Richtung wird vernachlässigt.
- Die Gleichung wird über die  $y$ -Koordinate integriert.

Für  $c_y = \int c dy$  erhält man dann die Gleichung:

$$u \frac{\partial c_y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{zz} \frac{\partial c_y}{\partial z} \right) \quad (4.12)$$

Für den Fall einer punktförmigen Quelle (Quellstärke  $Q$ ) bei  $x = 0$ ,  $z = H$ , einem Potenzgesetz für das Windprofil,

$$u(z) = u_H (z/H)^n \quad (4.13)$$

linear ansteigendem  $K_{zz}$ ,

$$K_{zz}(z) = K' z \quad (4.14)$$

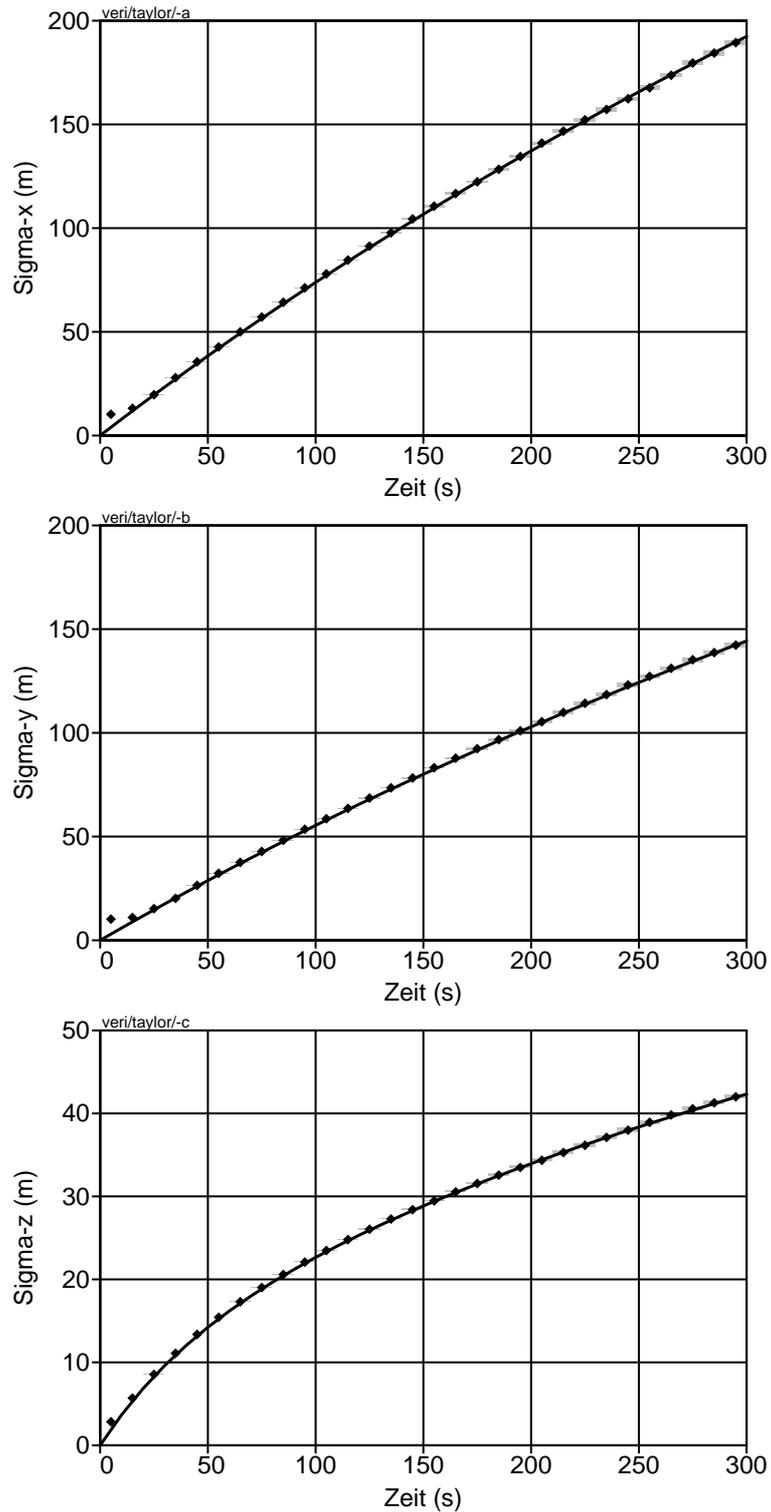


BILD 11: Aufweitung einer anfangs punktförmigen Partikelwolke und Vergleich mit der theoretischen Funktion nach Gleichung (4.9) (durchgezogene Linie). Oben:  $x$ -Richtung, Mitte:  $y$ -Richtung, Unten:  $z$ -Richtung.

und ohne Deposition am Erdboden,

$$K_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ bei } z = 0 \quad (4.15)$$



kann die Gleichung (4.12) exakt gelöst werden:<sup>6</sup>

$$\frac{Hu_H}{Q} c_y(x, z) = \frac{1+n}{\xi} \exp\left(-\frac{1+\zeta^{1+n}}{\xi}\right) I_0\left(2\frac{\zeta^{(1+n)/2}}{\xi}\right) \quad (4.16)$$

mit  $\xi = x \frac{(1+n)^2 K'}{Hu_H}$   
 $\zeta = z/H$

$I_0$  ist die modifizierte Bessel-Funktion.<sup>7</sup> Mit den Parameterwerten

$$\begin{aligned} n & 0,3 \\ H & 100 \text{ m} \\ u_H & 6 \text{ m/s} \\ K' & 0,1 \text{ m/s} \end{aligned}$$

erhält man eine Fahne, die ihr bodennahes Konzentrationsmaximum in einer Quellentfernung  $x = 2361$  m annimmt. Wählt man im Lagrange-Modell die Parameter  $\sigma_u$ ,  $\sigma_v$ ,  $\sigma_w$  und die Lagrange-Korrelationszeiten  $T_u$ ,  $T_v$ ,  $T_w$  so, daß die oben angegebenen Diffusionskoeffizienten reproduziert werden und die Flugzeit der Teilchen groß ist gegenüber den Lagrange-Korrelationszeiten, dann sollte das Modell genau diese Fahne reproduzieren.

Der Test wurde mit 40 000 Teilchen (für jede der 101 Stichproben), einem Zeitschritt von 1 Sekunde und Lagrange-Korrelationszeiten von ebenfalls 1 Sekunde durchgeführt. Die Quellstärke war  $Q = 10^6$  ME/s.

Das Bild 12 zeigt in den Quellentfernungen 500 m, 1000 m, 2000 m und 4000 m das vertikale Profil der quer zur Windrichtung integrierten Konzentration  $c_y$  im Höhenbereich von 0 m bis 400 m, das sehr gut mit dem theoretischen Profil nach Gleichung (4.16) übereinstimmt.

## 4.5 Abgasfahnenüberhöhung

Daten in: veri/ueber/1

Zur Modellierung einer Abgasfahnenüberhöhung ist im Algorithmus die Zusatzgeschwindigkeit  $\mathbf{U}$  vorgesehen. Im Anhang *Überhöhung* der RL wird ein Modell für die durch Austrittsimpuls und Thermik verursachte Überhöhung einer Abgasfahne beschrieben. Dabei wird explizit die Höhe der Fahnenachse  $h(x)$  (bzw.  $H(t)$ ) beschrieben.

In diesem Beispiel wird demonstriert, wie man die Hauptresultate eines solchen Modells, nämlich die Weite des Fahnenanstiegs und die erreichte Endhöhe, vereinfacht im Partikelmodell implementieren kann. Hierzu erhält jedes Partikel zu Anfang eine

<sup>6</sup>M.E. Berljand. *Moderne Probleme der atmosphärischen Diffusion und der Verschmutzung der Atmosphäre*. Akademie-Verlag, Berlin, 1982.

<sup>7</sup>W.H. PRESS, B.P. FLANNERY, S.A. TEUKOLSKY, W.T. VETTERLING: *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press 1989.

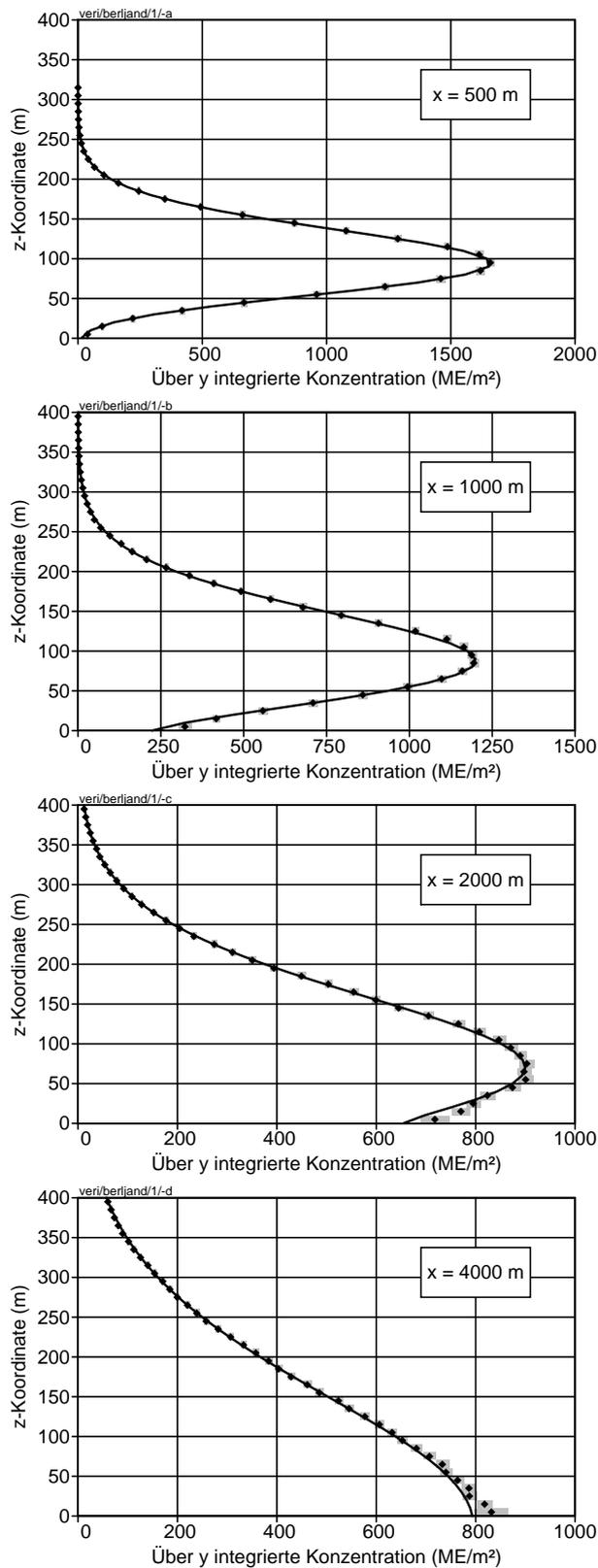


BILD 12: Vertikalprofil der über  $y$  integrierten Konzentration (Raute) und Vergleich mit der theoretischen Lösung nach Gleichung (4.16) (durchgezogene Linie) für die Quellentfernungen  $x = 500$  m, 1000 m, 2000 m und 4000 m (von oben nach unten).

nach oben gerichtete Zusatzgeschwindigkeit  $\mathbf{U}$ , die mit jedem Zeitschritt (Länge  $\tau$ ) um den Anteil  $\tau/T_U$  reduziert wird. Dies bedeutet einen exponentiellen Abfall mit der Zeit auf einer Zeitkonstanten  $T_U$ . Die insgesamt dadurch bewirkte Versetzung  $\Delta \mathbf{r}$  des Partikels ist:

$$\Delta \mathbf{r} = \mathbf{U} T_U \quad (4.17)$$

Die Hälfte dieser Versetzung wird in einer Entfernung  $x_{1/2} = \bar{V} T_U \ln 2$  erreicht, wobei  $\bar{V}$  die mittlere Transportgeschwindigkeit ist.

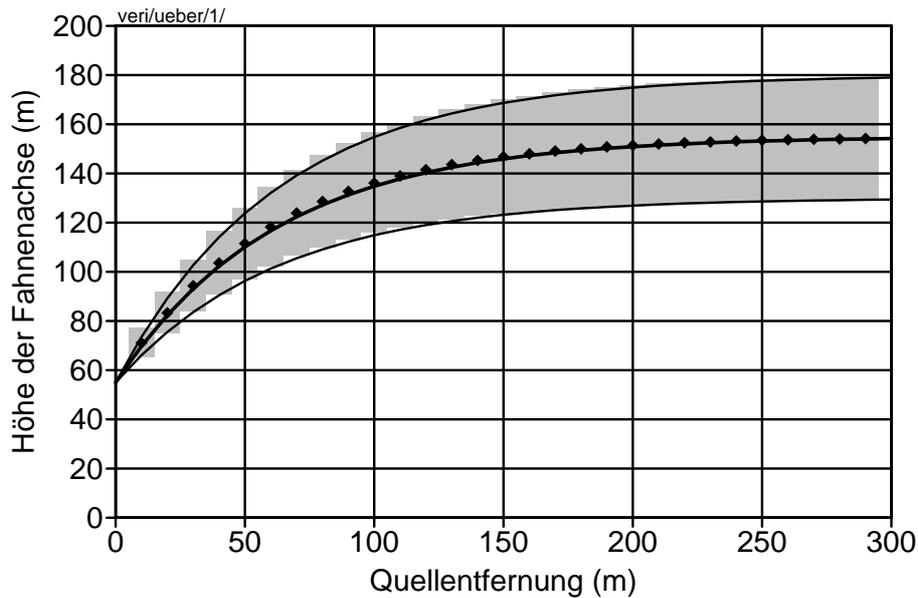


BILD 13: Simulation eines Abgasfahnenanstieges ohne Dispersion in der Umgebungsluft. Die durchgezogenen Linien geben den theoretischen Verlauf der Fahnenachse und die obere und untere Grenze aufgrund der Standardabweichung in der anfangs gewählten Zusatzgeschwindigkeit  $\mathbf{U}$  an. Die Rauten bezeichnen den beobachteten Fahnenmittelpunkt, der schraffierte Bereich die Fahnenbreite.

Bild 13 zeigt das Ergebnis einer solchen Simulation für eine Quellhöhe von 55 m und  $V_x(z) = \bar{V} = 5 \text{ m/s}$ ,  $T_U = 12.5 \text{ s}$ . Die Zusatzgeschwindigkeit  $U_z$  ist normalverteilt mit der Streuung  $\sigma_U = 0.2 \text{ m/s}$  um den Mittelwert  $U_{0,z} = 8 \text{ m/s}$  herum gewählt, so daß sich eine mittlere Überhöhung von 100 m ergibt. Für diese Rechnung ist die Luftturbulenz vernachlässigt, die Aufweitung der Fahne ergibt sich allein durch die Anfangsgeschwindigkeit der Partikel. Das Ergebnis beruht auf einer Rechnung mit 40 000 Partikeln ohne eine Analyse des Stichprobenfehlers. Die Fahnenbreite  $\sigma_h$  wird als Standardabweichung der Höhe  $z$  gewichtet mit der Konzentrationsverteilung  $c$  innerhalb der Fahne berechnet:

$$h(x) = \int z c(x, y, z) dy dz / c_{yz} \quad (4.18)$$

$$\sigma_h^2(x) = \int (z - h)^2 c(x, y, z) dy dz / c_{yz} \quad (4.19)$$

$$\text{mit } c_{yz}(x) = \int c(x, y, z) dy dz$$



## 4.6 Dreidimensionales Windfeld

Daten in: `veri/rotor`

Es wird die Bahn von Partikeln in einem Windfeld getestet, das einer starren Rotation um die  $z$ -Achse des Koordinatensystems entspricht,

$$V_x = -\omega y \quad (4.20)$$

$$V_y = \omega x \quad (4.21)$$

$$V_z = 0 \quad (4.22)$$

Das Windfeld wird auf einem Netz vom Typ Arakawa-C dargestellt, d.h.  $V_x$  ist auf denjenigen Flächen einer Gitterzelle definiert, deren Normalenrichtung parallel zur  $x$ -Achse verlaufen, und entsprechend  $V_y$  auf den Flächen senkrecht zur  $y$ -Achse. Innerhalb einer Zelle wird  $V_x$  linear in  $x$ -Richtung und  $V_y$  linear in  $y$ -Richtung interpoliert.

Das Gelände ist eben, Turbulenz wird nicht berücksichtigt. Mit  $\omega = \pi/60 \text{ s}^{-1}$  erhält man eine gegen den Uhrzeigersinn rotierende Strömung, die 120 s für einen Umlauf benötigt. Bild 14 zeigt die Bahn eines Partikels, das in 70 m Entfernung vom Nullpunkt startet und auf einem Raster von 10 m Maschenweite mit einem Zeitschritt  $\tau = 1 \text{ s}$ ,  $\mathbf{u} = 0$  und  $\mathbf{U} = 0$  über einen Zeitraum von 120 s transportiert wird (Daten in Unterverzeichnis 1a).

Dadurch, daß die Stromlinien Kreise sind und das Partikel immer tangential bewegt wird, entsteht eine Drift nach außen, die nach einem Umlauf etwa 16 % des Radius ausmacht (bei einer Bewegung von  $3^\circ$  pro Zeitschritt). Diese Verschiebung ist ein Diskretisierungsfehler und proportional zu  $\tau$ . Sie kann durch Verkleinern von  $\tau$ , aber auch durch eine geringfügige Modifizierung der Advektion verringert werden. Hierzu wird für die Advektion während eines Zeitschrittes nicht die Geschwindigkeit  $\mathbf{V}(\hat{\mathbf{x}})$  am Startpunkt  $\hat{\mathbf{x}}$  des Partikels benutzt sondern der Mittelwert aus dieser Geschwindigkeit und der am geschätzten Endpunkt, also

$$\mathbf{V}_{\text{eff}} = 0,5 [\mathbf{V}(\hat{\mathbf{x}}) + \mathbf{V}(\hat{\mathbf{x}} + \tau \mathbf{V}(\hat{\mathbf{x}}))] \quad (4.23)$$

Hiermit wird die Versetzung der Trajektorie erheblich reduziert (gestrichelte Linie in Bild 14, Daten in Unterverzeichnis 1b), aber es entsteht ein geringfügiger Phasenfehler (das Partikel ist etwas zu weit gereist). Dies wird noch einmal anhand einer Gruppe von  $4 \times 4$  Partikeln demonstriert, deren Startpunkte auf einem quadratischen Raster liegen (siehe Bild 15, Daten in den Unterverzeichnissen 2a, 2b und 2c). Nach einem Umlauf erscheint diese Gruppe um etwa 10 m nach oben versetzt und untereinander irregulär verschoben (linkes Bild). Mit der Advektion nach Gleichung (4.23) landen sie wieder in der Nähe des Ausgangspunktes, aber auch untereinander verschoben (mittleres Bild). Verringert man den Zeitschritt auf 0,2 s, dann erkennt man eine Systematik in der Verschiebung der Endpunkte. Dies ist jetzt kein Diskretisierungsfehler mehr in der Trajektorie sondern in der Darstellung des Geschwindigkeitsfeldes dadurch, daß auf einem Arakawa-C-Netz interpoliert wird.

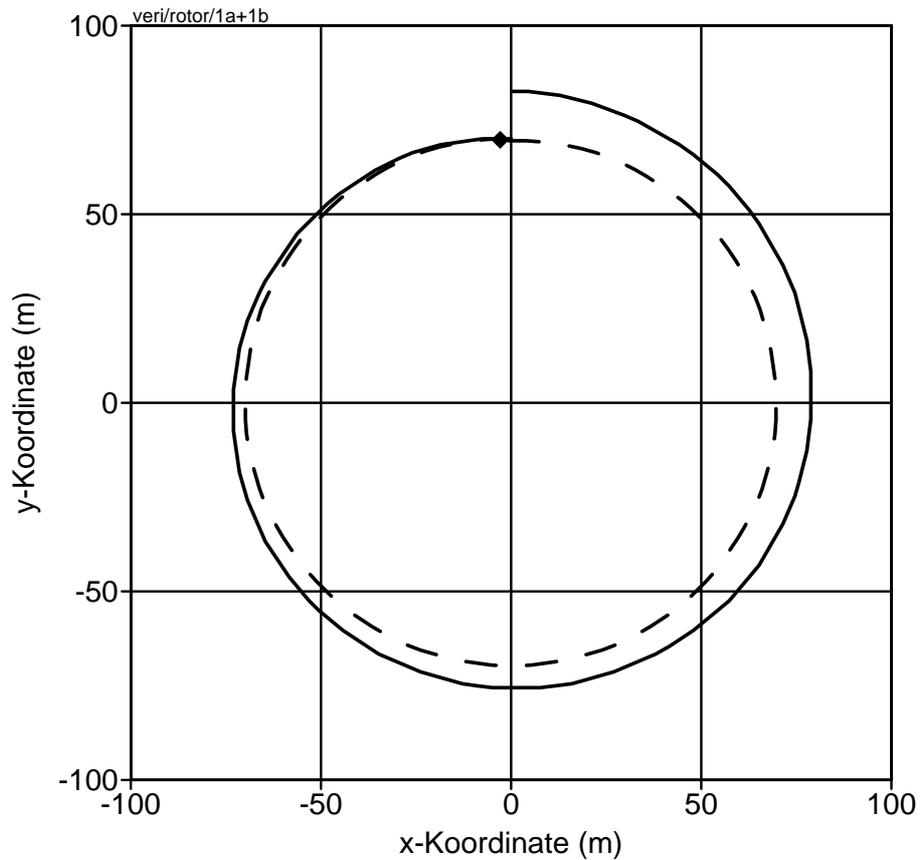


BILD 14: Bahn eines Partikels in einem starr rotierenden Windfeld mit einfacher Advektion (durchgezogene Linie) und mit korrigierender Advektion nach Gleichung (4.23) (gestrichelte Linie, die Raute markiert den Endpunkt).

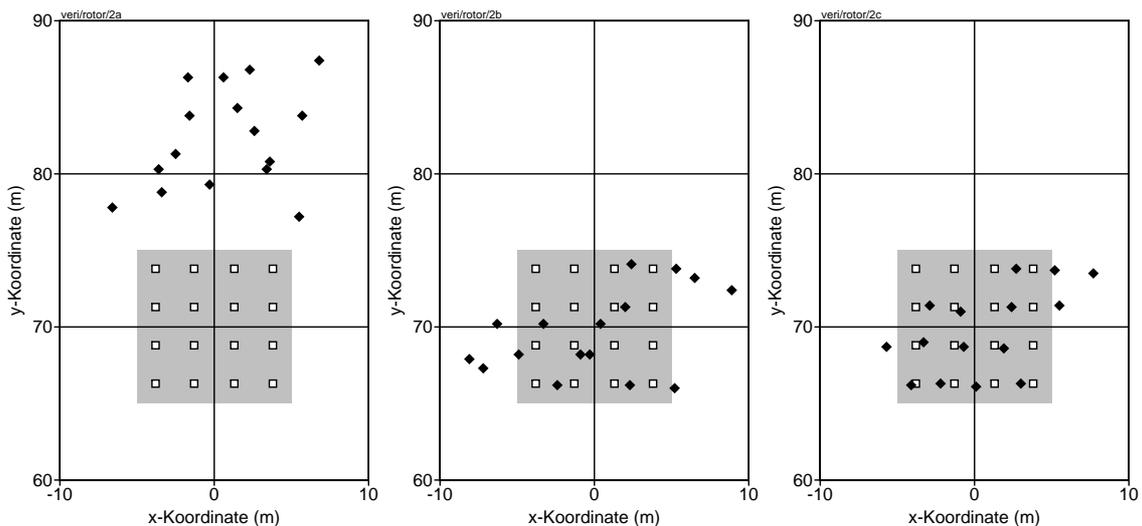


BILD 15: Endpunkte (Rauten) der Trajektorien von 16 Partikeln nach 120s Reisezeit, deren Startpunkte (Quadrate) regulär innerhalb einer Masche des Rechenetzes (graue Fläche) liegen. Das Windfeld ist durch Gleichung (4.20) gegeben. Links: Normale Advektion mit  $\tau = 1$  s. Mitte: Modifizierte Advektion nach Gleichung (4.23) mit  $\tau = 1$  s. Rechts: Modifizierte Advektion mit  $\tau = 0,2$  s.



## A Dateistruktur

Alle Dateien, die Ein- oder Ausgabefelder (Tabellen) repräsentieren, sind nach dem gleichen Prinzip aufgebaut. Sie enthalten zuerst einen Kopf, in dem alle Angaben zur Struktur und Darstellung der Tabelle stehen. Es folgt der Rumpf mit der eigentlichen Tabelle. Dieser Rumpf kann unmittelbar an den Kopf angehängt sein, wenn die Tabelle formatiert ausgeschrieben wird. Bei unformatierter Darstellung bildet der Rumpf immer einen eigenen File. In diesem Binär-File stehen die Tabellenelemente so, wie sie intern dargestellt sind, unmittelbar hintereinander ohne jegliche Steuerzeichen. Ein Tabellenelement kann eine einzelne Zahl (Datenelement) oder ein Verbund von mehreren Zahlen (*record*) sein.

Der Kopf ist ein Text-File mit der Namensweiterung **dmna**, der aus einzelnen Zeilen besteht. In jeder Zeile ist ein Parameter definiert. Der Name des Parameters steht zu Beginn der Zeile, gefolgt von einem oder mehreren Werten. Zulässige Trennzeichen sind Leerzeichen, Tabulator und Semikolon, die einzeln oder kombiniert verwendet werden können. Die Zeile kann durch LF oder CR+LF abgeschlossen sein.

Neben den vom Programm benötigten Parametern kann der Kopf auch weitere Parameter enthalten. Parameter, die das Programm nicht kennt, werden ignoriert. Der Kopf endet mit einer Zeile, die zu Anfang einen Stern, also \*, enthält. Mit der nächsten Zeile beginnt der Rumpf, sofern er mit dem Kopf zusammen einen einzigen File bildet. Die (formatierten) Tabellenelemente im Rumpf werden durch Leerzeichen, Semikolon, Tabulator, CR oder LF getrennt. Die Tabelle wird durch eine Zeile, die mit drei Sternen beginnt, beendet.

Folgende Parameter im Kopf der Datei werden vom Programm erkannt und interpretiert (die Namen müssen klein geschrieben und genau 4 Zeichen lang sein):

**buff** *integer*(1)

Anzahl der Bytes, die der Einlesepuffer für die Datenzeilen mindestens aufnehmen können muß.

**data** *string*(1)

Name des Files, der die eigentliche Tabelle enthält. Ist **data** nicht spezifiziert oder hat es den Wert „\*“, dann wird bei formatierter Ausgabe die Tabelle in den gleichen File geschrieben wie der Kopf. Bei unformatierter Ausgabe wird der File-Name des Kopfes übernommen, er erhält aber statt „.dmna“ die Endung „.dmnb“. Falls in **data** eine Pfadangabe gemacht ist, gilt diese relativ zu dem Verzeichnis, in dem der Kopf gespeichert ist.

**dims** *integer*(1)

Anzahl der Dimensionen (maximal 5).

**fact** *float*(1)

Faktor, mit dem bei formatierter Ausgabe alle Datenelemente vom Typ *float* oder *double* multipliziert werden, bevor sie im angegebenen Format ausgeschrieben werden. Bei der Eingabe formatierter Daten werden diese Datenelemente nach dem Einlesen durch **fact** dividiert.



**form** *string*(1)

Format, nach welchem bei formatierter Speicherung die Daten abgelegt sind. Bestehen die Tabellenelemente des gespeicherten Feldes aus mehreren Datenelementen, dann ist für jedes Datenelement eine Formatangabe erforderlich, und alle Einzelformate verkettet ergeben die Zeichenkette **form**.

$Format = Format_1Format_2\dots$

$Format_i = Name\%(*Factor)Length.PrecisionSpecifier$

Es bedeuten:

*Name* Name des Datenelementes (optional).

*Factor* Skalierungsfaktor (optional einschl. Klammern).

*Length* Länge des Datenfeldes.

*Precision* Anzahl der Nachkommastellen (bei *float*-Zahlen).

*Specifier* Umwandlungsangabe.

Der Skalierungsfaktor *Factor* wird genauso gehandhabt wie der Parameter **fact** und wirkt zusätzlich. Die Längenangabe *Length* ist die Mindestlänge des Datenfeldes. Sie kann überschritten werden, wenn dies zur korrekten Darstellung der Zahl erforderlich ist. Zwischen den Zahlen steht immer mindestens ein Trennungszeichen.

Folgende Umwandlungsangaben sind möglich:

<i>Spec.</i>	Typ	Länge	Beschreibung
<b>c</b>	<i>character</i>	1	einzelne Buchstaben
<b>d</b>	<i>integer</i>	4	Dezimalzahl
<b>x</b>	<i>integer</i>	4	Hexadezimalzahl
<b>f</b>	<i>float</i>	4	Festkommazahl (ohne Exponent)
<b>e</b>	<i>float</i>	4	Gleitkommazahl (mit Exponent)

Den Angaben **f** und **e** kann ein 1 vorangestellt sein (*double* mit Länge 8 Bytes), den Angaben **d** und **x** ein **h** (*short integer* mit der Länge 2 Bytes).

Gleichartige Formatangaben können zusammengefaßt werden:

$vx\%5.2fvz\%5.2fvz\%5.2f$  ist äquivalent zu  $vx\%[3]5.2f$

**hghb** *integer*(**dims**)

Höchster Indexwert für die verschiedenen Laufindizes.

**lowb** *integer*(**dims**)

Niedrigster Indexwert für die verschiedenen Laufindizes.

**mode** *string*(1)

Bei **binary** sind die Daten unformatiert gespeichert, sonst formatiert.

**sequ** *string*(1)

Angabe, in welcher Indexfolge die Daten gespeichert sind. Normalerweise läuft der am weitesten rechts stehende Index am schnellsten (C-Konvention). Dies entspricht bei einem 3-dim. Feld  $A_{ijk}$  der Angabe  $i+:j+:k+$ . FORTRAN speichert gemäß  $k+:j+:i+$ . Ein Minuszeichen statt des Pluszeichens bedeutet, daß



der betreffende Index rückwärts läuft. Es können auch Teilbereiche ausgewählt werden:  $j=10..1/1:i=5..25/1:k=1$ . Die Angabe  $/n$  bedeutet, daß der betreffende Index des Ausschnittes mit dem Wert  $n$  anfängt. Wird mit `sequ` ein Ausschnitt des Datenfeldes definiert, dann beziehen sich die Indexgrenzen `lowb` und `hghb` auf die ursprünglichen Indexdefinitionen.

`size integer(1)`

Länge der einzelnen Daten (*record size*) in Bytes. Bei formatierter Speicherung muß die aus der Formatangabe resultierende Summe der Längen der einzelnen Datenelemente gleich `size` sein.

### Beispiel:

Aus einem Feld von Gleitkommazahlen  $A_{ijk} = 100i + 10j + k$ ,  $i = 0..5$ ,  $j = 2..4$ ,  $k = 0..3$  wird ein Ausschnitt der horizontalen Schicht  $k = 1$  gespeichert:

```
form %4.1f
mode text
sequ j-:i=1..3/1:k=1
fact 1.000e-001
dims 3
size 4
lowb 1 2 1
hghb 3 4 1
*
14.1 24.1 34.1
13.1 23.1 33.1
12.1 22.1 32.1

***
```

---