

DIE BEURTEILUNG VON TURBULENZMESS- UND
ANALYSEVERFAHREN DER MIKROMETEOROLOGIE DURCH
VIRTUELLE MESSUNGEN INNERHALB VON
GROBSTRUKTURSIMULATIONEN

Von der Fakultät für Mathematik und Physik
der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover
zur Erlangung des Grades

Doktor der Naturwissenschaften
– Dr. rer. nat. –

genehmigte Dissertation
von
Dipl.-Met. Gerald Steinfeld
geboren am 27.04.1977 in Osnabrück

Hannover 2009

Referent: Prof. Dr. Siegfried Raasch
Korreferent: Prof. Dr. Dieter Etling
Vorsitzender des Prüferkollegiums: Prof. Dr. Herbert Pfnür

Tag der Promotion: 28. 11. 2008

Kurzfassung

Die Bestimmung der Austauschflüsse an der Grenzfläche zwischen Erde und Atmosphäre steht im Mittelpunkt der Mikrometeorologie. Eine Kenntnis der Austauschprozesse an der Erdoberfläche ist sowohl essentiell für die Wettervorhersage als auch für die Prognose der Klimaentwicklung. Eine der Theorie widersprechende Beobachtung in vielen Messexperimenten ist eine nicht geschlossene Energiebilanz an der Erdoberfläche. Vielfach wird über eine systematische Unterschätzung der räumlich repräsentativen durch die in den Messexperimenten lokal bestimmten turbulenten Wärmeflüsse spekuliert. Hier wurde das lokale Messverfahren der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode mit einem LES-Modell untersucht. Durch ein LES-Modell wird der Großteil der turbulenten Strukturen explizit aufgelöst, wodurch eine Simulation von lokalen Zeitreihen turbulenter Größen möglich wird, aus denen, wie im Feldexperiment, zeitliche Eddy-Kovarianz-Flüsse als Abschätzung für den räumlich repräsentativen Wärmestrom erhalten werden können. Anders als im Feldexperiment erfolgt die Bestimmung der turbulenten Größen nicht nur an einzelnen Punkten innerhalb eines großen Untersuchungsgebietes, sondern an jedem Gitterpunkt einer horizontalen Ebene des Modellgebiets, wodurch eine Aussage über die räumliche Variation der lokal bestimmten Flüsse möglich wird. Darüber hinaus ist es in der LES auch möglich, über die räumliche Eddy-Kovarianz-Methode die räumlich repräsentativen Flüsse zu bestimmen. Damit ist eine Untersuchung der Fragestellung möglich, ob die lokal über die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode bestimmten Flüsse die wahren Flüsse tatsächlich systematisch unterschätzen.

Hier wurde festgestellt, dass die lokal bestimmten Flüsse selbst über horizontal homogenem Untergrund und bei geringer Messhöhe räumlich stark variieren und den repräsentativen Wärmestrom systematisch unterschätzen, sofern langlebige turbulente organisierte Strukturen beobachtet werden können. Allerdings hängt das Ausmaß der Unterschätzung von der Messhöhe ab und liegt in Bodennähe über horizontal homogenem Untergrund deutlich unterhalb des in Messexperimenten beobachteten Residuums der Energiebilanz.

In Messexperimenten bestimmte Austauschflüsse stehen mit den Austauschigenschaften der Erdoberfläche in der Umgebung des Messensors in Zusammenhang. Sind die Gebiete, die die Messungen der unterschiedlichen Energieflüsse beeinflussen unterschiedlich groß, so kann auch dies Ursache für eine nicht geschlossene Energiebilanz sein. Es gehört daher zur Qualitätssicherung einer Messung zu überprüfen, für welchen Untergrund die bestimmten Austauschflüsse tatsächlich repräsentativ sind. Hier wurde ein neues Verfahren entwickelt, mit dem es gelingt, den Zusammenhang zwischen den gemessenen Konzentrationen und Flüssen eines passiven Skalars und dessen Quellen, den sogenannten Footprint, zu bestimmen. Das neue Verfahren benutzt ein in ein LES-Modell eingebettetes Lagrangesches stochastisches Footprintmodell. Der Vorteil des neuen Verfahrens gegenüber konventionellen Footprintmodellen ist, dass das turbulente Strömungsfeld nicht vollständig parametrisiert, sondern durch Verwendung eines LES-Modells fast vollständig aufgelöst wird. Ergebnisse früherer Ausbreitungsexperimente konnten reproduziert werden. Vergleiche mit früheren Ergebnissen für Footprintbestimmungen in einer konvektiven Grenzschicht machen die Bedeutung der turbulenten Diffusion in Strömungsrichtung deutlich. Negative Footprintwerte für Flussmessungen in der konvektiven Grenzschicht werden auf die vertikale Inhomogenität der Turbulenz zurückgeführt. Footprintbestimmungen bei neutraler und stabiler Schichtung zeigen die weite Verwendbarkeit des neu entwickelten Verfahrens. Ergebnisse einer erstmaligen Bestimmung von realistischen Footprints in einer heterogen geheizten Grenzschicht zeigen mögliche Schwachpunkte von konventionellen Footprintmodellen auf.

Schlagwörter: Eddy-Kovarianz-Methode, Footprintbestimmung, Grobstruktursimulation

Abstract

The evaluation of exchange fluxes between the earth and the atmosphere is one of the main tasks in the field of micrometeorology. Knowledge on the exchange processes at this interfacial layer is essential for the daily weather forecast as well as for a prediction of the future climate development. Contrary to the theory, a non-closed energy balance has been reported for most field experiments. Some authors discuss whether locally determined fluxes underestimate spatially representative fluxes systematically. Here, the local measuring technique of the temporal eddy covariance method has been investigated by the means of large-eddy simulation (LES). A LES model explicitly resolves the bulk of the turbulent eddies. Therefore local time series of turbulent variables can be simulated from that — in the same way as in field experiments — temporal eddy-covariance fluxes can be determined as estimates for the representative heat flux. Contrary to the situation in field experiments the measurement of turbulent variables is not only done at single points, but at all grid points within a horizontal section of the model domain. Therefore, an information on the spatial variation of the local fluxes can be obtained. Moreover, the spatial eddy-covariance method can be used to obtain the representative flux from LES data. Thus, it can be investigated whether the locally determined temporal eddy-covariance fluxes underestimate the representative flux systematically.

Here, it is pointed out that even over a horizontally homogeneous surface a large spatial variance of the local fluxes is observed. The temporal eddy-covariance method leads to a systematic underestimation of heat fluxes provided that persistent turbulent organised structures exist. The magnitude of underestimation depends significantly on the sensor height. Close to the surface over a horizontally homogeneous terrain the underestimation is significantly smaller than the residual of the energy balance observed in field experiments.

Information on the exchange conditions at the ground surface directly beneath the sensor cannot be obtained directly from measurements of exchange fluxes. In fact, the signal measured at the sensor is linked to the exchange conditions in the surrounding of the sensor. If the areas that contribute to the measured signals of the different energy fluxes are different in size and the ground surface is horizontally heterogeneous, this might cause a non-closed energy balance. Before parameterisations e.g. for the representation of the energy and mass exchange between the earth and the atmosphere in weather forecast and climate models can be determined, it has to be analyzed, for which ground surface the measured exchange fluxes are in fact representative. Here, a new method for the determination of the relation between a measured signal and its sources, the so-called footprint, has been developed. The new footprint evaluation method uses a Lagrangian stochastic model that is embedded into a LES model. The advantage of the new footprint evaluation method compared to conventional footprint models is that the turbulent flow field that determines the footprint is not completely parameterised, but it is nearly completely resolved. Results of prior diffusion experiments were reproduced by applying the new model. Comparisons with prior footprint evaluations in a convective boundary layer, point out the importance of turbulent dispersion in streamwise direction for footprint evaluations. The observation of negative footprints for flux measurements in a convective boundary layer is attributed to the vertically inhomogeneous turbulence under such conditions. Footprint evaluations under neutral and stable stratification emphasize the wide range of application for the new developed method. Finally, results from first-time evaluations of realistic footprints for measurements in a heterogeneously heated boundary layer point out potential shortcomings of conventional footprint models under such conditions.

key words: Eddy-covariance method, Footprint evaluation, Large-eddy simulation

Danksagung

Auch wenn am Ende eines Promotionsvorhabens nur ein einzelner Name das Titelblatt der Dissertationsschrift ziert, so ist die vorgelegte Arbeit dennoch nicht das Werk eines einzelnen Menschen allein. Und so haben auch am Zustandekommen dieser Dissertation eine Vielzahl von Menschen einen mehr oder weniger großen Anteil. All diesen Menschen gebührt mein aufrichtiger Dank.

Besonders bedanken möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Siegfried Raasch, der mir die Möglichkeit verschaffte, nach meinem von ihm angestoßenen Japan-Aufenthalt wieder zurück an das Institut für Meteorologie und Klimatologie in Hannover zu kommen. Schließlich gelang es ihm für das Projekt LES-Footprint eine längerfristige Förderung durch die DFG zu erhalten, so dass ich im Rahmen dieses Projektes die Arbeiten an meiner Promotion abschließen konnte. Dank sagen möchte ich Herrn Prof. Dr. Raasch insbesondere für die hervorragende Betreuung meiner Arbeit, aber auch für die zahlreichen Möglichkeiten über mein Projekt hinaus auch Erfahrung in der Lehre am Institut zu gewinnen.

Bei Herrn Prof. Dr. Günter Groß und Prof. Dr. Dieter Etling möchte ich mich ganz besonders für Ihre Bereitschaft bedanken, meinen Aufenthalt am Institut während der Zeit zu unterstützen, in der noch keine Finanzierung durch ein längerfristig gefördertes Projekt vorhanden war. Herrn Prof. Etling möchte ich insbesondere auch für die Übernahme des Korreferats für diese Dissertation danken.

Herrn Prof. Dr. Thomas Foken und Frau Dr. Tiina Markkanen von der Universität Bayreuth möchte ich für die gute Zusammenarbeit im Rahmen des DFG-Projekts LES-Footprint danken. Von ihrer langjährigen Erfahrung auf dem Gebiet der Footprintmodellierung konnte ich bei der Einarbeitung in dieses für mich neue Gebiet sehr profitieren, wobei insbesondere Frau Dr. Markkanen mit viel Geduld alle Fragen eines Neuanfängers auf ihrem Fachgebiet ertrug und beantwortete. Die zahlreichen Diskussionen auf unseren Projekttreffen in Bayreuth, Hannover und Wien trugen wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit bei.

Sehr dankbar bin ich Herrn Prof. Dr. Manabu Kanda vom Tokyo Institute of Technology, Tokio, Japan, der mir nach nur wenigen Gesprächsminuten auf der AMS-Konferenz in Wageningen 2002 das Vertrauen schenkte und mich einlud, direkt nach meinem Diplomabschluss für ein Jahr an sein Institut zu kommen. Als vorbildhafter Gastgeber und hervorragender Forscher trug er wesentlich dazu bei, dass mein Aufenthalt in Japan sowohl in beruflicher als auch in privater Hinsicht heute zu meinen positivsten Erinnerungen zählt. Mit seiner Betreuung meiner Untersuchungen zur nicht geschlossenen Energiebilanz war Prof. Kanda auch nicht unerheblich am Legen des Grundsteins zu dieser Dissertation beteiligt. Den weiteren Verlauf meiner Arbeiten begleitete Prof. Dr. Kanda interessiert bei zwei weiteren Aufenthalten von mir am Tokyo Institute of Technology.

Dem Deutschen Akademischen Austauschdienst (DAAD) möchte ich für die Finanzierung meines einjährigen Japan-Aufenthaltes durch das Programm „Jahresstipendien für Graduierte“ sowie meiner zwei weiteren Japan-Aufenthalte durch das Programm „Hochschulpartnerschaften mit Ostasien“ danken. Mein Dank gilt auch dem Japanischen Ministerium für Erziehung, Kultur, Sport, Wissenschaft und Technologie (MEXT), das ebenfalls an der Finanzierung meines einjährigen Japan-Aufenthalts beteiligt war.

Danken möchte ich auch der gesamten Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Thomas Foken, insbesondere Herrn Dr. Johannes Lüers und Frau Katharina Staudt. Die außerordentlich freundliche Aufnahme machten meine Besuche in Bayreuth immer zu besonderen Höhepunkten meines Arbeitsalltags.

Ganz besonders danken möchte ich auch den Mitgliedern der Arbeitsgruppe von Prof. Dr.

Kanda in Tokio. Als Tutorin stand Frau Fumi Kasamatsu mir bei allen Problemen des japanischen Alltags zur Verfügung. Ohne sie hätte ich einen Großteil der Zeit für meine wissenschaftlichen Arbeiten im Kampf mit der japanischen Bürokratie verloren. Frau Ryoko Oda, Herrn Yu Nakayama, Herrn Masahiko Kanega, Herrn Dr. Atsushi Inagaki, Herrn Dr. Toru Kawai, Herrn Jin Zhang und Herrn Prof. Dr. Ryo Moriwaki danke ich für die zahlreichen Diskussionen, aus denen ich großen Nutzen für diese Arbeit ziehen konnte, aber auch für die vielen privaten Erlebnisse, die mir meine Zeit in Japan so angenehm in Erinnerung bleiben lassen.

Ein Dankeschön geht auch an alle Kollegen am Institut für Meteorologie und Klimatologie, denen ich in meiner Zeit am Institut begegnen durfte. Insbesondere den Mitgliedern der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. Raasch, vor allem meinen langjährigen Kollegen Herrn Dr. Marcus Letzel und Herrn Micha Gryschka, möchte ich für die sehr positive Arbeitsatmosphäre, die durch Frau Carolin Weinreis noch einmal an Qualität gewonnen hat, danken. Meinem Zimmernachbarn Herrn Björn Witha möchte ich für die stete Bereitschaft zur Diskussion inhaltlicher und technischer Fragen, insbesondere in der Endphase meiner Promotion, einen Dank aussprechen. Außerhalb der LES-Arbeitsgruppe möchte ich mich noch besonders bei meinem ehemaligen Schreibtischnachbarn Herrn Dr. Tim Böhme sowie bei Frau Susanne Keyn bedanken, die mir gerade in der ersten Zeit nach meiner Rückkehr aus Japan wichtige Stützen bei meiner Arbeit im Institut waren. Untrennbar mit meiner Zeit am Institut in Erinnerung bleiben wird mir auch Frau Christiane Brüinig. Auch an noch so trist erscheinenden Tagen konnte sie mit ihrer positiven Art dafür sorgen, dass man das Sekretariat positiv gestimmt wieder verließ.

Bei aller fachlichen Unterstützung - zur Geschichte dieser Dissertation gehören auch Zeiten, die sehr schwierig für mich waren. Gerade in solchen Zeiten kommt es darauf an, dass man Menschen in seiner nächsten Umgebung weiß, die zu einem stehen. Für diese rüchhaltlose Unterstützung durch meine Familie gebührt ihr der größte Dank.

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

2.1	Schematische Darstellung der Energiebilanz an der Erdoberfläche	11
2.2	Systematische Unterschätzung von turbulenten Flüssen in dem numerischen Experiment von Inagaki et al. (2006b)	14
3.1	Schematische Darstellung des Zusammenhangs zwischen einem gemessenen Signal und dessen Quellen - des Footprints der Messung.	16
3.2	Beispiel für die Abhängigkeit des Footprints von der Höhe des Messniveaus . . .	18
3.3	Schematische Darstellung der Annahme der invertierten Schadstoffwolke	20
5.1	Schematische Darstellung der Interpolation der LES-Daten auf den Partikelauenthaltsort	51
5.2	Nassi-Schneiderman-Diagramm für das Unterprogramm <code>advect_particles.f90</code> . . .	54
7.1	Zusammenhang zwischen dem Auftreten negativer Footprintwerte und dem typischen Muster der Ausbreitung eines passiven Skalars in einer konvektiven Grenzschicht	59
7.2	Drehung des mittleren Windes mit der Höhe in der simulierten stabil geschichteten Grenzschicht	60
7.3	Footprint für eine Konzentrationsmessung in einer simulierten städtischen Grenzschicht	61
7.4	Über 60 Minuten gemittelttes Feld der Geschwindigkeitskomponente v in einer Höhe von 42,5 m	62
7.5	Vektoren des über 60 Minuten gemittelten Geschwindigkeitsfelds in der yz -Ebene direkt hinter den Gebäuden	62
7.6	Quellflächen für Flussmessungen an den Stationen A4 und A5 in der idealisierten LITFASS-Simulation für den 26. Mai 2003	63
7.7	yz -Schnitt der über 30 Minuten und entlang der x -Richtung gemittelten Windgeschwindigkeitskomponente v für die LITFASS-Simulation für den 26. Mai 2003	64
C-1	Veröffentlichung III: Abbildung 1	82
C-2	Veröffentlichung III: Abbildung 2	85
C-3	Veröffentlichung III: Abbildung 3	86
C-4	Veröffentlichung III: Abbildung 4	87
C-5	Veröffentlichung III: Abbildung 5	88
C-6	Veröffentlichung III: Abbildung 6	88
C-7	Veröffentlichung III: Abbildung 7	89
C-8	Veröffentlichung III: Abbildung 8	89
C-9	Veröffentlichung III: Abbildung 9	90

INHALTSVERZEICHNIS

Kurzfassung	iii
Abstract	iv
Danksagung	v
Abbildungsverzeichnis	vii
Symbolverzeichnis	xiv
Liste der beigefügten Publikationen	1
1 Einführung	2
1.1 Ziele und Struktur der Arbeit	8
2 Das Problem der nicht geschlossenen Energiebilanz	10
3 Footprints	15
3.1 Hintergrund und Definition des Begriffs „Footprint“	15
3.2 Methoden zur Bestimmung von Footprints	19
3.2.1 Analytische Footprintmodelle	19
3.2.2 Lagrangesche stochastische Footprintmodelle	21
3.2.3 Reynolds-gemittelte Modelle	26
3.2.4 LES-Modelle	26
3.2.5 Probleme der konventionellen Footprintbestimmungsmethoden vor Beginn der Arbeiten an der Promotion	28
4 Beschreibung des verwendeten Grobstruktursimulationsmodells	30
4.1 Das Gleichungssystem zur Beschreibung atmosphärischer Bewegungsvorgänge . .	30
4.2 Die Boussinesq-Approximation	31
4.3 Numerische Modelle zur Simulation atmosphärischer Strömungen	34
4.3.1 Einführung in die Theorie der Grobstruktursimulationsmodelle	35
4.3.2 Das gefilterte Gleichungssystem im LES-Modell PALM	38
4.3.3 Parametrisierung der subskaligen turbulenten Flüsse in PALM	38
4.3.4 Die Prandtl-schicht in PALM	40
4.3.5 Die numerischen Verfahren	43
4.3.6 Die Poisson-Gleichung für den Stördruck	45
5 Das eingebettete Lagrangesche stochastische Modell	47
5.1 Bisherige Verwendungen von LES-Daten zum Antrieb von Lagrangeschen Modellen	47
5.2 Theorie des Lagrangeschen stochastischen Modells	49
6 Einführung in die Veröffentlichungen	55

7	Schlussfolgerungen aus dieser Arbeit	57
7.1	Ergebnisse dieser Arbeit	57
7.2	Ausblick auf weitere Untersuchungen	61
	Literaturverzeichnis	73
	Anhang A: Veröffentlichung I	74
	Anhang B: Veröffentlichung II	75
	Anhang C: Veröffentlichung III	76
C-1	Introduction	76
C-2	Methods	79
C-2.1	The LS model embedded into the LES model PALM	79
C-2.2	Conventional Lagrangian stochastic models	79
C-2.3	Footprint calculations	80
C-2.4	Model comparison	81
C-3	Results and discussion	84
C-3.1	Comparison between LES model versions with and without Coriolis force	84
C-3.2	Comparison among LES, BW and FW models	87
C-3.3	Quality classification	90
C-4	Conclusions	91

SYMBOLVERZEICHNIS

Abkürzungen

CarboEurope	EU-Projekt zur Bestimmung des europäischen Kohlenstoffdioxidhaushalts
CFL	Courant-Friedrichs-Levy-Kriterium
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
CS	Correction Storage
DNS	Direkte Numerische Simulation
FFT	Fast-Fourier-Transformation
FLUXNET	FLUX NETwork
HLRN	Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen
LES	Large-Eddy Simulation
LITFASS	Lindenberg Inhomogenous Terrain - Fluxes between Atmosphere and Surface: a long-term Study
O ₂	Sauerstoff
PALM	PARallelized Large-eddy simulation Model
PAR	Photosynthetic Active Radiation
RANS	Reynolds Averaged numerical Navier-Stokes simulation model
SGS	SubGrid-Scale
SOR	Successive Over Relaxation
TKE	Turbulente Kinetische Energie
VERTIKO	VERTikaltransporte von Energie- und Spurenstoffen an Ankerstationen und ihre räumliche/zeitliche Extrapolation unter KOMplexen natürlichen Bedingungen

Einheiten

%	Prozent
h	Stunden
hPa	Hektopascal
Hz	Hertz
m	Meter
nm	Nanometer
s	Sekunden
W	Watt
km	Kilometer

Griechische Symbole

α_0	Winkel zwischen den horizontalen Geschwindigkeitskomponenten in der Prandtl-schicht
δa	Größe der Flächenquelle
δm_i	Ladung/Masse des i-ten Partikels
Δs	geometrisches Mittel der Gitterweiten
Δt	Zeitschritt
δt	Länge des Freisetzungszeitraums
δV	Größe der Volumenquelle
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	Gitterweiten
δ_{ij}	Kronecker-Symbol
ϵ	Dissipationsrate
ϵ_{ijk}	alternierender Einheitstensor
η	von Sensor gemessenes Signal
η_K	Kolmogorow-Skala, innere Skala der Turbulenz
γ	molekularer Wärmeleitkoeffizient
κ	von Karman Konstante
λ_{ij}	Invertierter Schubspannungstensor
μ	Viskosität, Zähigkeitsbeiwert
ν	molekularer Diffusionskoeffizient
Ω	Winkelgeschwindigkeit der Erde
ω	Kreisfrequenz
$\bar{\Delta}$	räumliche Filterskala
ϕ	geographische Breite
ϕ_h	Profilfunktion für Temperatur
ϕ_m	Profilfunktion für Impuls
π	Kreiszahl
Ψ, Ψ_1, Ψ_2	beliebige Variable
ρ	Luftdichte
τ_i	Aufenthaltsdauer des i-ten Partikels im Quellbereich
τ_l	zeitliche Filterskala
τ_{ij}	Reynoldsscher Schubspannungstensor
Θ	potentielle Temperatur
θ_*	charakteristische Temperatur
$\vec{\xi}$	Vektor im stochastischen Term der Langevin-Gleichung, dessen Komponenten die Inkremente eines Wiener Prozesses sind

Lateinische Symbole

\vec{a}, a_i	Vektor im deterministischen Term der Langevin-Gleichung
\vec{r}	Ortsvektor
\vec{r}^{\prime}	Verschiebungsvektor zwischen Sensor und Quelle
\vec{k}	Wellenzahlvektor
\vec{V}_L	Vektor der Partikelgeschwindigkeit
\vec{V}_r	aus dem Feld der aufgelösten Geschwindigkeiten in der LES abgeleiteter Anteil der Partikelgeschwindigkeit
\vec{V}_s	modellierter, subskaliger Anteil der Partikelgeschwindigkeit
\vec{X}_L, \vec{X}_P	Ortsvektor der Partikelposition
B	Bodenwärmestrom
B_L	Matrix im stochastischen Term der Langevin-Gleichung
C	Ensemble-gemittelte Konzentration eines passiven Skalars
C_0	universale Konstante
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
E	turbulenter Fluss latenter Wärme
e, e_s	subskalige turbulente kinetische Energie
e_r	aufgelöste turbulente kinetische Energie
F	Ensemble-gemittelter Fluss eines passiven Skalars
f	Footprintfunktion (zumeist zweidimensional)
f_C	Konzentrationsfootprint
f_F	Flussfootprint
f_i	Coriolisparameter
f_s	Verhältnis zwischen der horizontal gemittelten subskaligen turbulenten kinetischen Energie und der horizontal gemittelten gesamten turbulenten kinetischen Energie
F_{Θ}	lokaler instantaner kinematischer Wärmestrom
f_{sicher}	Sicherheitsfaktor bei der Berechnung des Zeitschritts im LES-Modell
G	charakteristische Funktion eines Faltungsintegrals
g	Schwerebeschleunigung
H	turbulenter Fluss fühlbarer Wärme
I	Residuum, lokale Abweichung des lokal nach der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode bestimmten Flusses vom für das Untersuchungsgebiet repräsentativen kinematischen Temperaturfluss
K	beliebige Konstante
K_h	turbulenter Diffusionskoeffizient für Temperatur
K_m	turbulenter Diffusionskoeffizient für Impuls
L	Monin-Obukhov-Länge
l	Mischungsweg

L_I	Integralskala, äußere Skala der Turbulenz
N	Gesamtzahl freigesetzter Partikel
n_i	Anzahl von Schnittpunkten des i -ten Partikels mit dem Messniveau
p	Luftdruck
p^*	Stördruck, mesoskalige Druckabweichung
p_E	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Eulerschen Geschwindigkeiten
p_s	synoptischskalige Druckabweichung
Q	Nettostrahlungsbilanz an der Grenzfläche zwischen Erde und Atmosphäre
Q_0	Quellstärke einer Flächenquelle
Q_k	Nettobilanz der kurzwelligen Strahlungsströme
Q_l	Nettobilanz der langwelligen Strahlungsströme
$Q_l \downarrow$	zum Boden hin gerichteter langwelliger Strahlungsfluss, atmosphärische Gegenstrahlung
$Q_l \uparrow$	vom Boden weg gerichteter langwelliger Strahlungsfluss
Q_η	Quellstärke von η
$Q_k \downarrow$	zum Boden hin gerichteter kurzwelliger Strahlungsfluss
$Q_k \uparrow$	vom Boden weg gerichteter kurzwelliger Strahlungsfluss
R	Residuum der Energiebilanz
r	Faktor zur Berücksichtigung der Zeitschrittlänge in der Poisson-Gleichung für den Stördruck
R_L	spezifische Gaskonstante für trockene Luft
Re	Reynoldszahl
Rif	Richardsonflusszahl
S	Speicherterm in der Energiebilanzgleichung
S_0	Quellstärke einer Volumenquelle
T	aktuelle Temperatur
t	Zeit
U_c	charakteristische Geschwindigkeit
u_i, u, v, w	Komponenten der Windgeschwindigkeit
u_*	Schubspannungsgeschwindigkeit
u_{gi}	geostrophischer Wind
u_{max}	maximale Signalgeschwindigkeit
W_i^T	Touchdowngeschwindigkeit des i -ten Partikels
W_{ij}	Vertikalkomponente der Partikelgeschwindigkeit beim j -ten Durchflug des i -ten Partikels durch das Messniveau (Vorwärtsmethode)
W_{ij}^T	Touchdowngeschwindigkeit beim j -ten Aufenthalt des i -ten Partikels im Quellgebiet

W_i	Vertikalkomponente der Geschwindigkeit des i -ten Partikels bei der Freisetzung (Rückwärtsmethode)
x_i, x, y, z	kartesische Koordinaten
z_0	Rauhigkeitslänge
z_p	Höhe der Obergrenze der Prandtlschicht
\bar{u}_{vorl_i}	im LES-Modell ohne Berücksichtigung des Stördruckterms erhaltene Geschwindigkeiten
X_{p1}, X_{p2}, X_{p3}	Koordinaten der Partikelposition
Restliche Symbole	
\Re	dreidimensionaler Raum

Liste der beigelegten Publikationen

Diese Dissertationsschrift besteht aus einem einleitenden Text, der Hintergrundinformationen zu den im Rahmen des Promotionsprojekts durchgeführten Untersuchungen vermittelt und somit eine Einordnung der präsentierten Arbeiten in den aktuellen Stand der Forschung erlaubt, sowie drei wissenschaftlichen Veröffentlichungen.

- I G. Steinfeld, M. O. Letzel, S. Raasch, M. Kanda und A. Inagaki (2007). Spatial representativeness of single tower measurements and the imbalance problem with eddy-covariance fluxes: results of a large-eddy simulation study. *Boundary-Layer Meteorol.*, 123:77-98. ©Springer Science and Business Media B.V.
- II G. Steinfeld, S. Raasch und T. Markkanen (2008). Footprints in homogeneously and heterogeneously driven boundary layers derived from a Lagrangian stochastic particle model embedded into a large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, 129:225-248. ©Springer Science and Business Media B.V.
- III T. Markkanen, G. Steinfeld, N. Kljun, S. Raasch und T. Foken (2008). Validation of conventional Lagrangian stochastic footprint models against LES driven footprint estimates. *Atm. Chem. Phys.*, zur Veröffentlichung eingereicht.

EINFÜHRUNG

Mit dem Begriff Grenzschicht wird die Schicht eines Fluids in unmittelbarer Nachbarschaft zu einer Oberfläche bezeichnet, die durch einen signifikanten Austausch von Impuls, Wärme und Masse zwischen der Berandung und dem Fluid gekennzeichnet ist (Arya, 1988). Demnach ist die atmosphärische Grenzschicht die direkt oberhalb der Erdoberfläche liegende Luftschicht, deren Eigenschaften aus den Interaktionen zwischen der Atmosphäre und der darunter liegenden Landoberfläche auf einer Zeitskala von einigen Stunden bis hin zu einem Tag resultieren (Arya, 1999). Die vertikale Mächtigkeit der Grenzschicht ist variabel und kann von nur wenigen Dekametern in der nächtlichen, stabil geschichteten Grenzschicht bis hin zu 5 km in der konvektiven Grenzschicht in tropischen Gebieten reichen (Arya, 1988). Den Übergang zwischen der atmosphärischen Grenzschicht und der freien Atmosphäre bildet die sogenannte Entrainmentzone, innerhalb der Luft aus der freien Atmosphäre in die Grenzschicht eingemischt wird. Im Tagesverlauf leistet diese Einmischung einen Beitrag zur Erwärmung und zum Wachstum der Grenzschicht. Die Eigenschaften der Unterlage zusammen mit der Dynamik und Thermodynamik der unteren Atmosphäre bestimmen die Eigenschaften der atmosphärischen Grenzschicht, wie z.B. ihre vertikale Erstreckung, die Wind- und Temperaturverteilung in ihr, ihre Transport- und Diffusionseigenschaften sowie die Dissipation von geordneter Bewegungsenergie in ungeordnete Wärmeenergie. Die Wechselwirkung zwischen der Erdoberfläche und der darüber liegenden Grenzschicht erfolgt im Großteil der Grenzschicht schnell und effektiv durch turbulenten Austausch. Die kontinuierliche Anwesenheit von Turbulenz, d.h. von Luftwirbeln mit Abmessungen, die Größenordnungen von etwa 10^{-3} bis 10^3 m umfassen, ist ein besonderes Charakteristikum der atmosphärischen Grenzschicht, das sie von der darüber liegenden freien Atmosphäre unterscheidet. Der turbulente Austausch ist um etwa das 10^5 -fache effektiver als der molekulare Austausch. Nur der unterste Millimeter über der Erdoberfläche weist rein molekulare Austauschprozesse und entsprechend große Gradienten auf. Während die atmosphärische Grenzschicht einen deutlichen Tagesgang aufweist, ist dieser im Rest der Atmosphäre nicht zu verzeichnen.

Die Existenz der atmosphärischen Grenzschicht ist in vielfältiger Hinsicht von Bedeutung. So stammt die, die allgemeine atmosphärische Zirkulation antreibende Energie, zwar primär aus der kurzwelligen Sonnenstrahlung, sie wird aber zum großen Teil erst nach Umwandlung in andere Energieformen an der Erdoberfläche durch turbulenten Transport von Wärme und Feuchte in der atmosphärischen Grenzschicht in die Atmosphäre abgegeben. Eine differentielle Erwärmung der Erdoberfläche, gefolgt von einer durch molekulare und turbulente Diffusion bewerkstelligten differentielle Erwärmung der darüber liegenden Luftschichten, führt dann zur Ausbildung von großräumigen Druckgradienten (zunächst in der Höhe und erst danach am Boden), die letztlich zu großräumigen Bewegungen in der Atmosphäre führen. Darüber hinaus sorgt erst die Existenz einer atmosphärischen Grenzschicht dafür, dass überhaupt Leben auf der Erde möglich ist. So sorgen die turbulenten Prozesse in der atmosphärischen Grenzschicht für ein gemäßigtes Mikroklima in der Nähe des Erdbodens. Turbulente Prozesse sorgen auch für die Durchmischung von Schadstoffen mit ihren häufig bodennahen Quellen (wie z.B.

Autoverkehr, Hausbrand) in der atmosphärischen Grenzschicht, was im Allgemeinen für eine Verbesserung der Luftqualität im bodennahen Bereich sorgt. Ohne den turbulenten Transport in der atmosphärischen Grenzschicht würde zudem auch der Prozess der Photosynthese, der bedeutendste biogeochemische Prozess auf der Erde, bei dem als Abfallprodukt aus Kohlendioxid (CO_2) lebensnotwendiger Sauerstoff (O_2) wird, stark beeinträchtigt werden, da der turbulente Transport in der atmosphärischen Grenzschicht für eine kontinuierliche Zuführung von CO_2 zu den O_2 produzierenden Pflanzen sorgt. Für den Wasserkreislauf auf der Erde spielt außerdem auch die Evapotranspiration, d.h. die Verdunstung von Wasser von der Erd- und von Pflanzenoberflächen und der anschließende turbulente Transport von Wasserdampf in die Atmosphäre durch die atmosphärische Grenzschicht hindurch eine bedeutende Rolle.

Die Mikrometeorologie ist der Zweig der Meteorologie, der sich mit den Prozessen auf der sogenannten Mikroskala der atmosphärischen Bewegungsvorgänge beschäftigt. Sie ist auf die Untersuchung derjenigen Phänomene beschränkt, die ihren Ursprung in jener Schicht haben, in der Auswirkungen der Reibung des Atmosphärenfluids am Erdboden unmittelbar zu beobachten sind. Diese Schicht ist nun aber gerade die atmosphärische Grenzschicht, weswegen die Mikrometeorologie auch teilweise als Grenzschichtmeteorologie bezeichnet wird. In der Mikrometeorologie wird der Austausch von Wärme, Masse und Impuls zwischen dem Erdboden und der Atmosphäre untersucht. Neben der in den letzten Jahren im Hinblick auf den prognostizierten Klimawandel wichtiger gewordenen Überwachung des Austausches von Treibhausgasen zwischen der Erdoberfläche und der Atmosphäre, ist die Bestimmung der einzelnen Terme der Energiebilanzgleichung an der Grenzfläche zwischen Erde und Atmosphäre ein besonders wichtiges Untersuchungsgebiet der Mikrometeorologie, wobei insbesondere auch die Untersuchung der Abhängigkeit der verschiedenen Terme von der Beschaffenheit der Erdoberfläche von Bedeutung ist.

In die Energiebilanz für eine ideale Oberfläche (eben, horizontal homogen, großflächig und undurchlässig für Strahlung) gehen nur vier Energieflüsse ein. Neben der Nettostrahlung sind diese der fühlbare und der latente Wärmestrom sowie der Bodenwärmestrom. Die Größen der einzelnen Komponenten der Energiebilanz am Erdboden sind von vielen Faktoren abhängig, so z.B. von der Art der Unterlage und ihrer Eigenschaften (Feuchtegehalt des Bodens, Struktur, Vegetation etc.), von der geographischen Lage, vom Datum, der Uhrzeit und dem Wetter. In den numerischen Wettervorhersagemodellen können diese Prozesse der Umwandlung von einer Energieform in eine andere nicht explizit simuliert werden. Vielmehr müssen diese Prozesse parametrisiert werden. Mit Hilfe der entwickelten Parameterisierungen werden durch Vorgabe der Oberflächeneigenschaften, der geographischen Lage, des Datums, der Uhrzeit, des Wetters (z.B. Bedeckungsgrad) und der resultierenden Nettostrahlung Werte für den fühlbaren und den latenten Wärmestrom sowie für den Bodenwärmestrom erhalten. Die so abgeleiteten Energieflüsse werden dann in numerischen Wettervorhersagemodellen als Randbedingung innerhalb des 1. Hauptsatzes der Thermodynamik mit der Zielsetzung der Vorhersage der weiteren Temperaturentwicklung innerhalb der Atmosphäre verwendet. Eine Validierung der in den numerischen Wettervorhersagemodellen verwendeten Parameterisierungen der Energiebilanzgleichung steht bisher aber noch weitgehend aus. Diese könnte theoretisch anhand der in Messungen bestimmten Energiebilanz erfolgen.

Foken (2003) berichtet allerdings, dass es in den Messungen zur Bestimmung der Energiebilanz an der Grenzfläche zwischen Erde und Atmosphäre bisher nicht gelungen ist, die Energiebilanz zu schließen. In der Literatur (z.B. Kanda et al., 2004a) wird daher von dem Problem der nicht geschlossenen Energiebilanz oder dem Energiebilanzschließungsproblem (*engl.* energy imbalance problem) gesprochen. Laut Foken (2003) wird tagsüber eine Überschätzung der Summe der Wärmeströme durch die Nettostrahlung beobachtet, während in den Nachtstun-

den eine Unterschätzung der Summe der Wärmeströme durch die Nettostrahlung festgestellt wird. Die nicht geschlossene Energiebilanz widerspricht dabei dem fundamentalen Satz von der Erhaltung der Energieflüsse für eine infinitesimal dünne Schicht. Eine infinitesimal dünne Schicht kann keine Energie speichern, so dass die zu ihr hin gerichteten Energieflüsse vom Betrag her genauso groß sein müssen wie die von ihr weg gerichteten Energieflüsse. Die Ursachen für die nicht geschlossene Energiebilanz haben trotz einiger Vermutungen (z.B. [Mahrt, 1998](#); [Twine et al., 2000](#)) sowie aller Bemühungen bisher nicht eindeutig bestimmt werden können, so dass die Suche nach den Ursachen der nicht geschlossenen Energiebilanz auch ganz aktuell noch Gegenstand der Forschung ist ([Foken, 2008](#); [Huang et al., 2008](#)). Ohne die Feststellung einer geschlossenen Energiebilanz in Messexperimenten ist eine Verwendung von experimentell bestimmten Daten zur Validierung von Parametrisierungen der Energiebilanz jedoch höchst fragwürdig.

Zur Bestimmung der in die Energiebilanz einfließenden turbulenten Flüsse fühlbarer bzw. latenter Wärme stehen der Mikrometeorologie verschiedene Methoden zur Auswahl. Bei der Bowen-Verhältnis-Methode werden nur der Bodenwärmestrom und die Nettostrahlung direkt gemessen sowie das Bowen-Verhältnis, also das Verhältnis von fühlbarem zu latentem Wärmestrom, bestimmt. Dieses wird aus dem Verhältnis zwischen den Gradienten von Temperatur und Feuchte in zwei verschiedenen Höhen ermittelt. Mit Hilfe dieser Informationen werden dann der fühlbare Wärmestrom und der latente Wärmestrom gerade so bestimmt, dass eine Schließung der Energiebilanz erzwungen wird. Die Bowen-Verhältnis-Methode gehört damit wie die weit verbreitete Bulk-Methode zu den Profilmethoden der Flussbestimmung, die auf der Fluss-Gradient-Ähnlichkeit beruhen. Sie ist allerdings kein Verfahren, bei dem die zu bestimmenden Flüsse direkt gemessen werden, sondern die Flüsse werden, wie oben beschrieben, aus anderen gemessenen Größen berechnet, wobei jedoch noch einige Annahmen gemacht werden, die keine Allgemeingültigkeit besitzen ([Foken, 2003](#)). In den letzten Jahren wird aufgrund ihrer verbesserten Wirtschaftlichkeit aber mehr und mehr die Eddy-Kovarianz-Methode zur Bestimmung der turbulenten Flüsse verwendet. Diese stellt zwar im Gegensatz zu den verschiedenen Ausführungen der Profilmethode ein direktes Messverfahren ohne allzu viele restriktive Annahmen ([Arya, 1988](#)) und ohne die Notwendigkeit zur Benutzung von empirischen Koeffizienten dar ([Foken, 2003](#)). Allerdings basiert die Herleitung der mathematischen Algorithmen der Eddy-Kovarianz-Methode auf einer Reihe von Abschätzungen und Vereinfachungen, so dass das Verfahren nur bei Erfüllung dieser Annahmen exakt anwendbar ist ([Foken, 2003](#)). Die Qualität der Messungen mit der Eddy-Kovarianz-Methode wird daher tatsächlich auch mehr von dem Grad der Erfüllung ihrer Grundvoraussetzungen und weniger von der verwendeten Gerätetechnik an sich bestimmt ([Foken, 2003](#)). Die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode verlangt das Vorhandensein von Zeitreihen von turbulenten Größen in einer sehr hohen zeitlichen Auflösung (laut [Foken \(2003\)](#) beträgt die benötigte Abtastrate 10-20 Hz), was entsprechend geeignete Messgeräte erforderlich und damit das Verfahren relativ teuer macht.

Eine der wichtigsten Voraussetzungen, die für eine erfolgreiche Verwendung der Eddy-Kovarianz-Methode erfüllt sein muss (wenn repräsentative Austauschflüsse für eine bestimmte Art von Unterlage bestimmt werden sollen), ist das Vorhandensein einer horizontal homogenen Unterlage ([Foken, 2003](#)). Die Messungen, die an einem bestimmten Ort durchgeführt werden, hängen nicht nur von den Austauschigenschaften der unmittelbar unterhalb des Messgerätes liegenden Oberfläche ab. Vielmehr werden die Messungen durch die Unterlageneigenschaften in einem zum großen Teil windaufwärts des Sensors gelegenen Gebiet beeinflusst. Ein Kernmerkmal der Erdoberfläche ist ihre Inhomogenität, die sich zum Beispiel in einer Vielfalt von Geländeformen, in unterschiedlicher Vegetation, in einem unterschiedlichen Bodenfeuchtegehalt oder in einem heterogenen Grad der Abschattung der Oberfläche durch Wolken kennzeichnet.

Ist aber das Vorhandensein einer homogenen Unterlage eine Voraussetzung für die erfolgreiche Anwendung der Eddy-Kovarianz-Methode, so gehört es zur Qualitätssicherung von Messungen mit dieser Methode zu überprüfen, ob die Unterlage, die die Eddy-Kovarianz-Messung beeinflusste, tatsächlich horizontal homogen ist. Dazu wird das Quellgebiet oder der Footprint einer Messung (Messgröße ist dabei die Konzentration oder der Fluss eines passiven Skalars) bestimmt. Zur Footprintbestimmung stehen verschiedene Methoden zur Verfügung, die entweder analytische Lösungen der Transportgleichung für ein passives Skalar darstellen oder aber Lagrangesche Ausbreitungsmodelle benutzen (Schmid, 2002). Sie werden verbreitet zur Qualitätssicherung von Eddy-Kovarianz-Messungen eingesetzt, ihre Ergebnisse sind aber weitgehend noch nicht validiert worden (Finn et al., 1996). Obwohl die Bestimmung von Footprints eigentlich gerade für Messungen in heterogenem Gelände von außerordentlich großer Bedeutung ist, sind die heute verfügbaren Footprintmodelle nicht dazu in der Lage, Inhomogenitäten der Unterlage und deren Auswirkungen auf den Turbulenzzustand der darüber liegenden Atmosphäre zu berücksichtigen. Dies liegt vor allem daran, dass keine allgemeingültigen Parametrisierungen zur Beschreibung turbulenter Flüsse in heterogenem Gelände vorliegen. Footprintmodelle simulieren die turbulente Strömung nicht selber, sondern in ihnen ist die turbulente Strömung vollständig parametrisiert. Ohne entsprechende Parametrisierungen kann ein Footprintmodell nicht betrieben werden. Während mit der Entwicklung von auf zeitlicher Skala im Rückwärtsmodus betriebenen Lagrangeschen Footprintmodellen (Flesch et al., 1995; Kljun et al., 2002) mittlerweile ein mathematischer Algorithmus zur Verfügung steht, dem nur noch eine geeignete Beschreibung der turbulenten Strömung in Gegenwart von Inhomogenitäten fehlt, um zur Bestimmung von Footprints für Punktmessungen in heterogenem Gelände eingesetzt werden zu können, können die analytischen Modelle, deren Anwendbarkeit ohnehin auf Footprint-Bestimmungen innerhalb der Prandtl-Schicht beschränkt ist, prinzipiell nicht um die Berücksichtigung der Auswirkungen eines heterogenen Untergrunds erweitert werden. Trotz der Nichtberücksichtigung der Auswirkungen einer heterogenen Unterlage auf die turbulente Strömung in den heute zur Verfügung stehenden Footprintmodellen, werden diese dennoch auch zur Beurteilung der Güte von Eddy-Kovarianz-Messungen in komplexem Gelände, wie z.B. an den Stationen des FLUXNET-Messnetzwerkes (Baldocchi et al., 2001; Rebmann et al., 2005) oder des CarboEurope-Messnetzwerkes (Göckede et al., 2008), eingesetzt. Zum Teil wird versucht die Heterogenität wenigstens dadurch zu berücksichtigen, dass für Eingangsparameter der Footprintmodelle (z.B. Rauhlängigkeit) nicht die am Ort des Messensors bestimmten Werte verwendet werden, sondern die über die Umgebung des Messensors gemittelten Werte. So soll beispielsweise ein größerer Austausch bei erhöhter Rauhlängigkeit in der Umgebung des Messensors berücksichtigt werden. Die in den Footprintmodellen parametrisierte Strömung bleibt aber dennoch weiterhin horizontal homogen. Schmid (2002) sowie Foken und Leclerc (2004) ziehen in Übersichtsartikeln zur Footprintmethode daher das Fazit, dass es einen dringenden Bedarf für die Validierung und Erweiterung vorhandener Footprintmodelle, insbesondere im Hinblick auf Messungen in heterogenem Gelände, gibt. Footprintmodelle können nicht nur zur Interpretation und Planung von Einzelmessungen verwendet werden. Sie können darüber hinaus auch z.B. dabei helfen, Messungen auf unterschiedlichen Skalen miteinander in Beziehung zu setzen. So gelang es beispielsweise Reth et al. (2005) die Abweichungen zwischen mit Bodenkammermessungen und mit der Eddy-Kovarianz-Methode bestimmten Kohlendioxidflüssen signifikant zu reduzieren, nachdem der mit der Eddy-Kovarianz-Methode bestimmte Fluss unter Berücksichtigung der Footprints beider Messungen korrigiert worden war.

Mag in den letzten Jahren das Betreiben von Eddy-Kovarianz-Messapparaturen auch kostengünstiger geworden sein (Foken, 2003), so ist der Betrieb eines dichten Netzes von Eddy-Kovarianz-Messungen in einem Untersuchungsgebiet jedoch mit 10000-50000 Euro pro Messsta-

tion (Foken, 2003) zurzeit noch viel zu kostenintensiv, um zum Standardprogramm eines jeden Feldexperiments zu gehören. So war es z.B. während des LITFASS2003-Experiments (Beyrich et al., 2004) lediglich möglich an 10 Standorten innerhalb eines rund 250 km² großen Gebietes Eddy-Kovarianz-Messungen über verschiedenen Oberflächenarten durchzuführen, obwohl an diesem Feldexperiment eine Vielzahl von Forschungseinrichtungen aus dem In- und Ausland, die über die entsprechenden mikrometeorologischen Messstationen verfügten, beteiligt waren. Ähnliche Verhältnisse, was die Anzahl an Eddy-Kovarianz-Messapparaturen anging, herrschten auch während der Messzeiträume der VERTIKO-Studie (Bernhofer und Köstner, 2006), aber das Untersuchungsgebiet umfasste ein Gebiet zwischen dem Erzgebirge und Berlin und war damit noch einmal wesentlich größer als das des LITFASS2003-Experiments. Bodengestützte Messungen mit Hilfe der Eddy-Kovarianz-Methode sind daher in der Regel punktuelle Messungen an einem Ort und folgerichtig kann nur die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode zur Bestimmung der turbulenten Flüsse benutzt werden. Teilweise werden in Feldexperimenten die bodengestützten Flussmessungen noch durch flugzeuggestützte Messungen ergänzt. Flugzeuggestützte Messungen liefern keine Zeitreihen von turbulenten Größen an einem festen Ort, sondern Fluktuationen von turbulenten Größen entlang eines Messpfades. Die Bestimmung turbulenter Flüsse erfolgt dann über die räumliche Eddy-Kovarianz-Methode. Hierbei ist allerdings zu berücksichtigen, dass die Messungen entlang des Messpfades nicht alle zum selben Zeitpunkt, sondern in zeitlich leicht versetzter Folge erfolgen. Schröter et al. (2000) haben gezeigt, dass die räumliche Eddy-Kovarianz-Methode dazu geeignet ist, räumlich repräsentative Werte der Austauschflüsse über einem horizontal homogenen Untergrund zu bestimmen. Mahrt (1998) berichtet, dass in Feldexperimenten häufig Abweichungen zwischen flugzeuggestützt (räumliche Eddy-Kovarianz-Methode) und bodengestützt (zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode) bestimmten Austauschflüssen beobachtet werden. Abweichungen wurden beispielsweise auch in dem von Isaac et al. (2004) beschriebenen Feldexperiment festgestellt. Katul et al. (1999) beobachteten große Standardabweichungen von bis zu 33 % für turbulente fühlbare und latente Wärmeströme, die an sieben horizontal voneinander verschobenen Positionen über einem horizontal homogenen Kiefernwald bestimmt worden waren. Zusammen genommen werfen diese Beobachtungen die Frage auf, ob die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode, d.h. die Bestimmung der turbulenten Flüsse aus an einem Punkt aufgenommenen Zeitreihen turbulenter Größen, überhaupt dazu in der Lage ist, tatsächlich räumlich repräsentative Werte von Austauschflüssen zu liefern. Sollte die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode in der Tat nicht dazu in der Lage sein, räumlich repräsentative Werte der Austauschflüsse zu liefern, so stellt sich natürlich auch die Frage, ob die Beobachtung der nicht geschlossenen Energiebilanz in Experimenten, in denen die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode benutzt wurde, nicht mit diesem möglichen grundsätzlichen Mangel des verwendeten Messverfahrens erklärt werden könnte.

Die numerische Technik der Grobstruktursimulation oder kurz LES (Abkürzung für *engl.* large-eddy simulation), die auf Lilly (1967) und Deardorff (1970) zurückgeht, hat sich mittlerweile zu einem bedeutenden Werkzeug für die Untersuchung von turbulenten Strömungen in der atmosphärischen Grenzschicht entwickelt. Anfänglich lediglich zur Simulation von konvektiven Grenzschichten verwendet (z.B. Schmidt und Schumann, 1989; Moeng und Sullivan, 1994), ist aufgrund der mit der zunehmenden Leistungsfähigkeit moderner Großrechner möglich gewordenen Verbesserung der räumlichen Auflösung in der LES mittlerweile auch die Untersuchung von Strömungen bei neutraler (z.B. Su et al., 1988; Drobinski und Foster, 2003) und stabiler Schichtung (z.B. Kosovic und Curry, 2000; Beare et al., 2006) Anwendungsbereich der LES-Methode geworden. Auch die extrem hohe Auflösungen erfordernden Simulationen von turbulenten Strömungen innerhalb von Pflanzenbeständen (z.B. Kanda und Hino, 1994; Watanabe, 2004) sowie der städtischen Grenzschicht (z.B. Kanda et al., 2004b; Letzel, 2007) sind

mittlerweile zu Standardanwendungen von Grobstruktursimulationsmodellen geworden. Mit der zunehmenden Verfeinerung der LES-Gitter hat die LES auch Einzug in den Themenbereich der Mikrometeorologie eingehalten. Die LES stellt eine ideale Untersuchungsmethode dar, die mit ihrer unübertroffenen Kombination aus sehr hoher räumlicher und sehr hoher zeitlicher Auflösung turbulenter Strömungen eine perfekte Ergänzung zu Feldmessungen ist, bei denen in der Regel entweder nur zeitlich (Mastmessungen) oder räumlich (Flugzeugmessungen) hochaufgelöste Messdaten vorliegen. Darüber hinaus bietet das Werkzeug der numerischen Simulation auch die besten Voraussetzungen zur Durchführung von Parameterstudien, die darüber hinaus auch noch in Abhängigkeit von den zur Verfügung stehenden Rechnerressourcen teilweise parallel zueinander und damit zeitsparend erfolgen können.

Wyngaard und Peltier (1996) beschäftigten sich als einige der ersten mit der Frage, wie Ergebnisse von Grobstruktursimulationen mit Ergebnissen von Messexperimenten verglichen werden können. In der Folgezeit gab es zahlreiche LES-Studien, bei denen es nicht nur um eine Ergänzung von experimentell bestimmten Daten durch Grobstruktursimulationen ging, sondern auch um eine grundsätzliche Überprüfung in der realen Atmosphäre verwendeter Messverfahren. So untersuchten Schröter et al. (2000), ob flugzeuggestützte Messungen turbulenter Größen unter Verwendung der räumlichen Eddy-Kovarianz-Methode dazu geeignet sind, um räumlich repräsentative Werte von turbulenten Flüssen zu bestimmen. Kanda et al. (2004a) sowie Inagaki et al. (2006a) beschäftigten sich mit der Untersuchung der Frage, ob in stark konvektiven Grenzschichten Punktmessungen turbulenter Größen an einzelnen hohen Messtürmen unter Verwendung der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode dazu ausreichen, um die räumlich repräsentativen Werte der turbulenten Flüsse zu erhalten. Die beiden Studien stellten erste Untersuchungen zu der Fragestellung dar, ob eventuell die Verwendung der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode für die in Messexperimenten in der Regel nicht geschlossene Energiebilanz verantwortlich ist. Weinbrecht et al. (2004) wiederum versuchten eine Validierung des relativ neuen Messverfahrens der akustischen Tomographie mit Hilfe der LES. Ein weiteres Beispiel für Vergleiche von experimentell bestimmten Daten mit LES-Daten ist die Arbeit von Uhlenbrock (2006). Dort wurden die Ergebnisse eines mit Messdaten unter Berücksichtigung der horizontalen Heterogenität des realen Messgebiets angetriebenen Grobstruktursimulationsmodells u.a. mit den Ergebnissen der innerhalb des Messgebiets durchgeführten Lidar- und HELIPOD-Messungen verglichen.

Ein weiteres mögliches Anwendungsgebiet der LES auf dem Gebiet der Untersuchung von Messverfahren der Mikrometeorologie liegt in der Footprintbestimmung zur Qualitätssicherung und Interpretation der z.B. mit Hilfe der Eddy-Kovarianz-Methoden bestimmten Austauschflüsse. Schmid (2002) sieht in der LES dabei in mehrfacher Hinsicht einen, wenn nicht sogar den einzigen Hoffnungsträger, zum Erhalt von verlässlichen Footprints für Messungen turbulenter Austauschflüsse in heterogenem Gelände. Mangels geeigneter Datensätze von Tracerexperimenten in der realen Atmosphäre sieht Schmid (2002) in LES-Datensätzen (z.B. durch Simulation eines Tracerexperiments) eine Alternative, die zur Validierung von Footprintmodellen verwendet werden kann. Die in den Footprintmodellen verwendeten Parametrisierungen könnten mit Hilfe von Grobstruktursimulationen auf ihren Gültigkeitsbereich überprüft werden. LES-Daten könnten aber auch zur Ableitung neuer Flussparametrisierungen für Footprintmodelle genutzt werden. Die LES-Methode ist bereits erfolgreich zur Simulation von turbulenten Strömungen über idealisierten sowie realen heterogenen Unterlagen verwendet worden (z.B. Letzel und Raasch, 2003; Patton et al., 2005; Uhlenbrock, 2006). Es besteht daher auch die Hoffnung, dass die LES-Daten zumindest für einige idealisierte Fälle zur Ableitung von Flussparametrisierungen in Footprintmodellen genutzt werden können. Schließlich erkennt Schmid (2002) auch, dass LES-Modelle im Prinzip auch direkt zur Bestimmung von Footprints verwendet werden können, da sie die turbulente Strömung explizit simulieren, auf denen letztlich die

Ausbreitung von Schadstoffen basiert. Eine routinemäßige Anwendung zur Qualitätssicherung von Fluss- und Konzentrationsmessungen in Feldexperimenten scheitert allerdings an dem enormen Ressourcenbedarf der LES. Zur Validierung von konventionellen Footprintmodellen ist eine Berechnung von Footprints unter Einsatz eines Grobstruktursimulationsmodells aber dennoch sinnvoll. Ähnliche Hoffnungen bezüglich der LES-Methode wie in Schmid (2002) werden auch in Foken und Leclerc (2004) geäußert.

Trotz des Potentials, das der LES-Methode innerhalb der Mikrometeorologie auf dem Gebiet der Footprintbestimmung zugeschrieben wird, gibt es bisher allerdings nur relativ wenige Studien, die die LES zur Bestimmung von Footprints einsetzten. Leclerc et al. (1997) verglichen ihre aus der Integration einer prognostischen Gleichung für ein passives Skalar bestimmten Footprints (Eulersche Methode) mit Daten eines der wenigen für Footprintbestimmungen tauglichen Tracerexperimente (Finn et al., 1996) sowie mit Ergebnissen eines analytischen und eines stochastischen Footprintmodells. Cai und Leclerc (2007) verwendeten die in einer LES-Simulation bestimmten Geschwindigkeitsfelder, um damit verschiedene Lagrangesche stochastische Footprintmodelle anzutreiben (Lagrangesche Methode). In beiden Studien blieb es trotz der Verwendung eines LES-Modells allerdings bei einer Footprintbestimmung für Messungen in einer horizontal homogen angetriebenen Grenzschicht.

1.1 ZIELE UND STRUKTUR DER ARBEIT

Thema dieser Arbeit war eine weitere Untersuchung von Messverfahren zur Bestimmung turbulenter Größen mit Hilfe eines Grobstruktursimulationsmodells. Zunächst stand dabei die Untersuchung der Frage im Vordergrund, ob die in Messexperimenten beobachtete, nicht geschlossene, tagsüber negative Energiebilanz (d.h. die gemessenen zum Boden hin gerichteten Energieflüsse (negatives Vorzeichen) sind vom Betrag her größer als die vom Boden weg gerichteten Energieflüsse (positives Vorzeichen)), bei Verwendung der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode durch einen systematischen Fehler dieser Methode verursacht wird. Kanda et al. (2004a) haben gezeigt, dass die Methode der Grobstruktursimulation hervorragend zur Untersuchung des Energiebilanzschließungsproblems geeignet ist, da aufgrund der fast vollständigen Auflösung der Turbulenz in der Grobstruktursimulation mit diesem Verfahren die lokale Messung von Zeitreihen turbulenter Größen simuliert kann. Diese virtuellen Messungen können an jedem Gitterpunkt des LES-Modellgebiets erfolgen, so dass die räumliche Variation der Ergebnisse von lokalen Turbulenzmessungen untersucht werden kann. Darüber hinaus hat die Verwendung der Methode der Grobstruktursimulation gegenüber Messexperimenten den Vorteil, dass auch der tatsächliche, räumlich repräsentative Wärmestrom bekannt ist, denn die Verfügbarkeit von Messdaten in hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung lässt nach Schröter et al. (2000) eine Bestimmung desselben über die räumliche Eddy-Kovarianz-Methode zu. Die Kenntnis des tatsächlichen räumlich repräsentativen Wärmestroms ist aber zwingend notwendig, wenn die Frage beantwortet werden soll, ob die lokalen Messungen den räumlich repräsentativen Fluss tatsächlich systematisch unterschätzen. Es ist ferner zu beachten, dass das Verfahren der Grobstruktursimulation gegenüber Flugzeugmessungen den Vorteil besitzt, dass die turbulenten Größen an allen Messpunkten simultan bestimmt werden. Unter Benutzung eines Grobstruktursimulationsmodells konnten Kanda et al. (2004a) schließlich zeigen, dass für Mastmessungen in relativ großen Höhen von mehr als 50 m, bei sehr schwachem bzw. verschwindendem Hintergrundwind (geostrophischer Wind von weniger als 4 m s^{-1}) und konvektiver Grenzschicht, lokale Messungen unter Verwendung der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode in der Tat in einer systematischen Unterschätzung der räumlich repräsentativen Wärmeströme sogar für die ideale Bedingung eines

horizontal homogenen Untergrunds resultieren. Teilweise wurden in der numerischen Studie von [Kanda et al. \(2004a\)](#) systematische Abweichungen von mehr als 20% zwischen dem räumlich repräsentativen Wärmestrom und dem lokal über die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode bestimmten Wert festgestellt. Von der Größenordnung her liegt diese Abweichung im Bereich des Residuums, das experimentell bei der Bestimmung der Energiebilanzen festgestellt wurde (siehe z.B. die Übersicht in [Foken, 2003](#)). Aber welche Auswirkung hat der von [Kanda et al. \(2004a\)](#) diagnostizierte systematische Fehler der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode bei Messungen in größerer Nähe zum Erdboden, also dort wo der Großteil der mikrometeorologischen Messungen zur Bestimmung der Energiebilanzen durchgeführt wird? Wie ändern sich die beobachteten Abweichungen zum räumlich repräsentativen Wärmestrom, wenn der Hintergrundwind deutlich größer als in der Studie von [Kanda et al. \(2004a\)](#) ist? Hat die Größe des bodennahen Wärmestroms eine Auswirkung auf die Größe der Abweichungen vom repräsentativen Wärmestrom in einer bestimmten Höhe? Welchen Effekt hat das von [Kanda et al. \(2004a\)](#) erkannte Defizit der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode bei stabiler Schichtung? Gibt es Möglichkeiten die systematische Unterschätzung durch Modifikationen der Eddy-Kovarianz-Methode zu verringern? Mit all diesen Fragen beschäftigt sich der **Artikel I** dieser kumulierten Dissertation.

Im zweiten Teil dieser Arbeit (**Artikel II** und **III**) wurde die Untersuchung von Messverfahren der Mikrometeorologie mit der Entwicklung, Validierung und Anwendung eines Verfahrens, mit dem unter Benutzung der Daten eines Grobstruktursimulationsmodells Footprintbestimmungen für Konzentrations- und Flussmessungen eines passiven Skalars durchgeführt werden können, fortgesetzt. Wie schon oben erläutert worden ist, ist eine standardmäßige Durchführung von Grobstruktursimulationen zur Footprintbestimmung aufgrund des enormen Rechenzeitbedarfes für die LES nicht möglich. Daher sollte eine Forschergruppe an der Universität Bayreuth im Rahmen der Arbeiten zur Promotion auch mit LES-Daten versorgt werden, die zu einer Bewertung und Überarbeitung der Parametrisierungen zweier konventioneller Footprintmodelle benutzt werden sollten (**Artikel III**). Zur Bestimmung von Footprints mit dem Grobstruktursimulationsmodell PALM wurde eine Lagrangesche Methode gewählt, d.h. das LES-Modell wurde um ein Lagrangesches stochastisches Modell erweitert. Die Physik des Lagrangeschen stochastischen Modells inklusive seines Antriebs durch Daten der Grobstruktursimulation entsprach dabei der des Modells in [Weil et al. \(2004\)](#). Allerdings wurde für die Kopplung zwischen LES-Modell und Lagrangeschem stochastischen Modell mit einer Ausführung des Lagrangeschen Modells als Unterprogramm des LES-Modells ein grundsätzlich anderer Weg gewählt.

Im Folgenden wird zunächst ein Überblick über das Problem der in den Messungen nicht geschlossenen Energiebilanz an der Grenzfläche zwischen Erde und Atmosphäre gegeben, bevor über den aktuellen Stand auf dem Gebiet der Footprintmodellierung berichtet wird. Es folgt eine Einführung in die Methode der Grobstruktursimulation und insbesondere in das hier verwendete LES-Modell PALM. Danach wird das im Rahmen dieses Promotionsvorhabens entwickelte mit PALM gekoppelte Lagrangesche stochastische Modell beschrieben, Schließlich werden die im Rahmen dieser Arbeit erzielten Ergebnisse zusammengefasst, Schlussfolgerungen gezogen und ein Ausblick auf mögliche weitere Anwendungen des neu entwickelten gekoppelten Modells gegeben.

DAS PROBLEM DER NICHT GESCHLOSSENEN ENERGIEBILANZ

Die bedeutendste Energieumsatzfläche für atmosphärische Prozesse ist die Oberfläche der Erde. Eine schematische Darstellung der an der Grenzfläche zwischen Erde und Atmosphäre im Gleichgewicht stehenden Energieflüsse zeigt Abbildung 2.1. Ein Teil der den Erdboden erreichenden, von der Sonne ausgehenden kurzwelligigen Strahlung $Q_k \downarrow$ erwärmt die Erdoberfläche, während der andere Teil $Q_k \uparrow$ wieder reflektiert wird. Für unterschiedliche Arten von Landoberflächen variieren die Anteile der absorbierten und der reflektierten kurzwelligigen Strahlung relativ stark. So beträgt der Anteil der absorbierten Strahlung bei einer schneebedeckten Erdoberfläche teilweise nur 2 %, bei einer rauhen Wasserfläche und einer Sonnenhöhe von 30 Grad jedoch beinahe 100 % (Geiger et al., 1995). Kiehl und Trenberth (1997) berichten, dass von den 342 W m^{-2} , die im globalen Mittel als solarer kurzwelliger Strahlungsfluss die Obergrenze der Erdatmosphäre passieren, 198 W m^{-2} die Erdoberfläche erreichen. Davon werden dann 30 W m^{-2} wieder reflektiert, so dass im globalen Mittel an der Grenzfläche zwischen Erde und Atmosphäre ein Nettogewinn von 168 W m^{-2} für die Bilanz der kurzwelligen Strahlungsströme zu notieren ist. Neben der kurzwelligen Strahlung Q_k empfängt die Erdoberfläche auch langwellige Strahlung Q_l , die als Wärmestrahlung von Wolken, Partikeln und Gasen emittiert wird (atmosphärische Gegenstrahlung $Q_l \downarrow$; globaler Mittelwert: 324 W m^{-2}). Die von der Erdoberfläche empfangene Energie wird zu einem Teil wieder in Form von langwelliger Strahlung in die Atmosphäre abgegeben ($Q_l \uparrow$; globaler Mittelwert: 390 W m^{-2}). Tagsüber ist die Strahlungsbilanz der Erdoberfläche, $Q = Q_k + Q_l$, positiv, d.h. die Erdoberfläche erhält mehr Energie in der Form von Strahlungsströmen, als sie Energie in der Form von Strahlungsströmen abgibt. Nachts hingegen ist die Strahlungsbilanz in der Regel negativ, da die kurzwelligen Strahlungsströme dann wegfallen und die atmosphärische Gegenstrahlung vom Betrag her geringer als die langwellige Ausstrahlung ist. In einer infinitesimal dünnen Schicht, wie sie die Grenzfläche zwischen Erde und Atmosphäre darstellt, kann keine Energie gespeichert werden, d.h. die zu der Grenzfläche hin gerichteten Energieflüsse müssen vom Betrag her genauso groß sein wie die von der Fläche weg gerichteten Energieflüsse. Da für eine infinitesimal dünne Schicht also der Satz von der Erhaltung der Energie ein Verschwinden der Summe der Energieflüsse postuliert, muss es außer den Strahlungsflüssen noch weitere Energieflüsse geben, die tagsüber für einen Energietransport von der Erdoberfläche weg und nachts für einen Energietransport zu der Erdoberfläche hin sorgen. Bei diesen weiteren Energieflüssen handelt es sich um die turbulenten Flüsse fühlbarer und latenter Wärme, H und E sowie um den weitgehend auf molekularer Wärmeleitung beruhenden Bodenwärmestrom B . Das heißt, die Energiebilanz am Erdboden lässt sich formulieren als:

$$Q + H + L + B = 0. \quad (2.1)$$

In experimentellen Untersuchungen ist die Energiebilanzgleichung (2.1) trotz vorliegender theoretischer Notwendigkeit nicht geschlossen (Foken, 2003), d.h. der experimentelle Befund ist häufig

$$Q + H + L + B + R = 0, \quad (2.2)$$

wobei R im Deutschen als das Residuum der Energiebilanz bezeichnet wird, während im Eng-

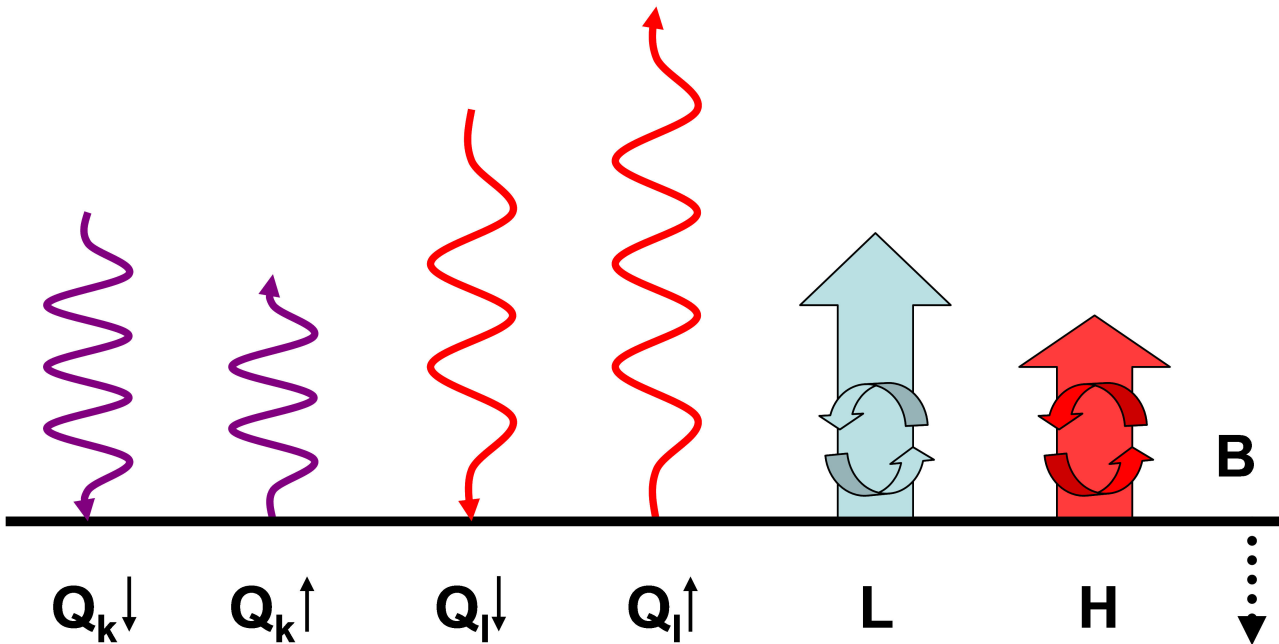


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der in die Energiebilanzgleichung für die Grenzfläche Erde-Atmosphäre eingehenden Energieflüsse. Die unterschiedlichen Pfeillängen sollen dabei die typischen Größenverhältnisse zwischen den verschiedenen Energieflüssen am Tage andeuten. Die typischen Richtungen der Flüsse am Tage werden durch die Orientierung der Pfeile angegeben.

lischen häufig auch der Begriff „energy imbalance“ verwendet wird. In den Experimenten ist $R \neq 0$, während die Theorie fordert, dass $R = 0$ ist. Insbesondere wird auch in solchen Feldexperimenten, bei denen die turbulenten Flüsse fühlbarer und latenter Wärme in lokalen Messungen über die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode bestimmt werden, ein von Null abweichendes Residuum beobachtet. In der Literatur werden zahlreiche mögliche Ursachen für die nicht geschlossene Energiebilanz diskutiert, so z.B. in den Artikeln von [Mahrt \(1998\)](#), [Twine et al. \(2000\)](#) oder [Foken et al. \(2004\)](#). Demnach lassen sich die möglichen Fehlerursachen in zwei Gruppen aufteilen. Die erste Gruppe enthält solche Fehler, die mit den Unzulänglichkeiten der Beobachtungsbedingungen sowie der verwendeten Messgeräte zu tun haben. Zu diesen gehören systematische Fehler durch eine Modifikation des zu messenden Flusses durch den Messsensor oder eine zu lange Reaktionszeit der Messsensoren auf Änderungen der Flussbedingungen. Darüber hinaus können auch unterschiedliche Footprints der gemessenen Strahlungskomponenten und der gemessenen turbulenten Flüsse dann für einen systematischen Fehler bei der Bestimmung der Energiebilanz sorgen ([Moore et al., 1996](#)), wenn die Energiebilanz für eine heterogene Landoberfläche bestimmt werden soll. Schließlich umfasst die erste Gruppe auch noch solche Fehler, die durch eine Heterogenität der Topographie im Messgebiet und damit in Zusammenhang stehender horizontaler Advektion verursacht werden ([Desjardins et al., 1997](#)). Die zweite Gruppe von möglichen Ursachen für die nicht geschlossene Energiebilanz umfasst Faktoren, die mit dem Fluss und den turbulenten Strukturen in der atmosphärischen Grenzschicht in Verbindung stehen. Hierzu zählt, dass der turbulente fühlbare Wärmestrom über horizontal homogener Unterlage in der konvektiven atmosphärischen Grenzschicht linear mit der Höhe abnimmt (z.B. [Stull, 1988](#)). Mag die Annahme von höhenkonstanten turbulenten Flüssen in der Prandtl-Schicht auch näherungsweise ihre Gültigkeit besitzen, oberhalb der Prandtl-Schicht gemessene turbulente Flüsse können nicht mit den Austauschflüssen direkt an der Erdoberfläche gleichgesetzt werden. Vielmehr unterschätzt ein oberhalb der Prandtl-Schicht gemessener fühlbarer Wärmestrom den Wert des fühlbaren Wärmestroms direkt oberhalb der Erdoberfläche. So be-

richten [Foken et al. \(2004\)](#), dass die Tatsache, dass die Messungen der Strahlungsflüsse und der turbulenten Wärmeströme einige Meter oberhalb des Erdbodens, die des Bodenwärmestroms aber einige Zentimeter unterhalb des Erdbodens erfolgen, dann zu einem nicht verschwindenden Residuum in der Energiebilanzgleichung führt, wenn es zwischen den beiden Messniveaus zu einer Speicherung von Energie kommt. Laut [Foken et al. \(2004\)](#) kommt es gerade innerhalb der oberen Bodenschichten zur Speicherung von Energie. Daher wird Gleichung (2.1) auch modifiziert, wenn die Messungen der einzelnen Terme der Energiebilanzgleichung in unterschiedlichen Höhen stattfinden. Es wird ein zusätzlicher Speicherterm S eingeführt, so dass die Gleichung die folgende Form annimmt:

$$Q + H + L + B + S = 0. \quad (2.3)$$

Der Speicherterm S bedarf nach [Foken \(2003\)](#) auch besonderen Augenmerks, wenn die Messungen zur Ermittlung der Energiebilanz innerhalb eines Pflanzenbestands oder in städtischer Umgebung durchgeführt werden. Weiterhin wird als Ursache für die nicht geschlossene Energiebilanz auch eine nicht ausreichende Mittelungszeit für die Bestimmung der turbulenten Flüsse diskutiert. Ist die Mittelungszeit nicht lang genug, so erfolgt keine ausreichende Mittelung über die in der turbulenten Strömung enthaltenen größerskaligen Wirbel ([Lenschow et al., 1994](#); [Caramori et al., 1994](#)). Eine Ausdehnung des Mittelungszeitraums ist aber auch nicht immer ohne weiteres möglich, da die Verwendung der Eddy-Kovarianz-Methode eigentlich stationäre Verhältnisse erfordert.

[Kanda et al. \(2004a\)](#) untersuchten schließlich mit Hilfe eines Grobstruktursimulationsmodells die von [Mahrt \(1998\)](#) aufgeworfene Frage, inwieweit die Existenz von langlebigen, turbulenten organisierten Strukturen eine Unterschätzung des turbulenten fühlbaren Wärmestroms durch lokale Flussbestimmungen über die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode verursachen kann.

Eine Untersuchung des Problems der nicht geschlossenen Energiebilanz unter Verwendung der numerischen Methode der Grobstruktursimulation wie in [Kanda et al. \(2004a\)](#) oder wie in der in **Artikel I** vorgestellten Studie hat dabei mehrere Vorteile. Die Simulation von Turbulenzmessungen ist frei von den Fehlern, mit denen jedes in Feldexperimenten verwendete Messgerät behaftet ist. Virtuelle Messgeräte modifizieren beispielsweise nicht die turbulente Strömung, was für zur Bestimmung turbulenter Flüsse in der realen Atmosphäre eingesetzte Messgeräte aber praktisch immer unvermeidbar ist, da turbulente Flüsse nichts anderes als die Kovarianzen von zwei verschiedenen turbulenten Größen sind. Messungen der zwei verschiedenen Größen erfordern im Prinzip aber auch zwei Messsensoren, die idealerweise am gleichen Ort messen müssen. Tatsächlich wird aber bei realen Messungen nicht am gleichen Ort gemessen, so dass die Messungen des einen Sensors immer dann durch den anderen Sensor gestört werden, wenn die beiden Sensoren genau in Windrichtung hintereinander ausgerichtet sind. Zum anderen hat die numerische Simulation den Vorteil, dass die Experimentbedingungen genau vorgegeben werden können. Somit können Studien durchgeführt werden, bei denen gezielt einzelne Parameter variiert werden, um die Abhängigkeit der untersuchten Größe (wie hier beispielsweise die Größe des Residuums R) von den variierten Parametern zu analysieren. Schließlich ist im numerischen Experiment auch der repräsentative Fluss, also der tatsächliche Fluss, bekannt, so dass die genauen Abweichungen der über die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode bestimmten Flüsse von den eigentlich zu bestimmenden repräsentativen Flüssen bestimmt werden können.

[Kanda et al. \(2004a\)](#) definierten den repräsentativen Wärmestrom (genauer muss eigentlich vom Temperaturfluss oder vom kinematischen Wärmestrom gesprochen werden) in einer bestimmten Höhe über horizontal homogenem Untergrund als die räumlich über eine horizontale Ebene und zeitlich über mindestens 60 Minuten gemittelten lokalen Flüsse. Eine horizontale Mittelung einer Größe Ψ wurde dabei durch $[\Psi]$ dargestellt, während die zeitliche Mittelung

der Größe Ψ als $\bar{\Psi}$ geschrieben wurde (in dieser Dissertation wird $\bar{\Psi}$ dann später auch zur Darstellung der Filteroperation der Grobstruktursimulation verwendet). Das Residuum I (von dem im Englischen verwendeten Begriff „imbalance“ für diese Größe) wurde dann als das Verhältnis der Abweichung des lokalen zeitlichen Eddy-Kovarianz-Flusses $\overline{w'\Theta'}$ von dem repräsentativen Fluss $\overline{F_\Theta}$ zum repräsentativen Fluss definiert. Im horizontalen Mittel ergab sich damit

$$[I] = (\overline{w'\Theta'} - \overline{F_\Theta}) / \overline{F_\Theta} = \overline{w\Theta} / \overline{F_\Theta} \quad (2.4)$$

für die systematische Abweichung des lokal nach der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode bestimmten turbulenten Temperaturflusses vom repräsentativen Temperaturfluss. Demnach unterschätzen die mit der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode bestimmten Temperaturflüsse den repräsentativen Temperaturfluss, wenn das zeitliche Mittel der Vertikalgeschwindigkeit lokal nicht verschwindet und die lokalen zeitlichen Mittel der Vertikalgeschwindigkeit und der potentiellen Temperatur nicht vollständig unkorreliert miteinander sind. Existieren in einer turbulenten Strömung langlebige turbulente organisierte Strukturen, deren Position sich mit der Zeit nur wenig ändert, so sind diese Bedingungen aber erfüllt.

[Kanda et al. \(2004a\)](#) erhielten für Messungen in einer Höhe von 100 m bei verschwindendem Hintergrundwind eine systematische Unterschätzung des repräsentativen Temperaturflusses, also ein $[I]$, von mehr als 20 %. Bei Vorgabe eines relativ schwachen geostrophischen Windes von 4 m s^{-1} wurde eine dramatische Abnahme der systematischen Unterschätzung auf Werte von maximal 2,6 % festgestellt. Eine Verlängerung der Flussmittelungszeit resultierte ebenfalls in einer Verringerung der systematischen Abweichung der lokalen zeitlichen Eddy-Kovarianz-Flüsse vom repräsentativen Temperaturfluss. Allerdings nahm die Varianz der lokalen Abweichungen vom repräsentativen Temperaturfluss mit Verlängerung der Mittelungszeit sogar noch weiter zu. [Kanda et al. \(2004a\)](#) identifizierten die Existenz von turbulenten organisierten Strukturen mit deutlich längerer Lebensdauer als der von einzelnen Turbulenzelementen als Ursache für die beobachteten Abweichungen der lokal über die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode bestimmten Temperaturflüsse vom repräsentativen Temperaturfluss. Die Beantwortung der Frage, ob der von [Kanda et al. \(2004a\)](#) diskutierte Mechanismus der systematischen Unterschätzung des repräsentativen Temperaturflusses aber auch für Eddy-Kovarianz-Messungen dicht oberhalb der Erdoberfläche eine Rolle spielen kann, blieb einer Untersuchung in Folgestudien überlassen. In **Artikel I** wird eine Studie vorgestellt, die diese und einige weitere der in der Untersuchung von [Kanda et al. \(2004a\)](#) offen gebliebenen Fragen, beantwortet.

Zum Abschluss dieses Kapitels sei darauf hingewiesen, dass es in der Literatur Überlegungen gibt, wonach die Beobachtung einer nicht geschlossenen Energiebilanz möglicherweise auch eine systematische Unterschätzung von Flüssen passiver Skalare impliziert, z.B. in [Ham und Heilman \(2003\)](#). Auch nach den Ergebnissen von [Kanda et al. \(2004a\)](#) wäre eine systematische Unterschätzung der Flüsse eines passiven Skalares durchaus möglich, denn nach [Kanda et al. \(2004a\)](#) erscheint das Verfahren der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode allgemein ungeeignet, um repräsentative Flüsse zu bestimmen. [Moncrieff et al. \(1996\)](#) wiesen darauf hin, dass eine Unterschätzung der Kohlendioxidflüsse von 25 % (laut [Foken \(2003\)](#)) entspräche dies der typischen Größenordnung für das in Experimenten beobachtete Residuum der Energiebilanz) am Tage bedeuten würde, dass Wälder als Quellen und nicht mehr als Senken von Kohlendioxid erkannt würden. Eine experimentelle Untersuchung einer möglichen systematischen Unterschätzung der Flüsse von passiven Skalaren ist noch schwieriger als eine Untersuchung der nicht geschlossenen Energiebilanz, da über die repräsentativen Flüsse des passiven Skalars noch weniger bekannt ist als über den repräsentativen Wärmestrom. Dieser muss ja theoretisch die Energiebilanzgleichung schließen. [Inagaki et al. \(2006b\)](#) sowie [Huang et al. \(2008\)](#) untersuchten mit einem Grobstruktursimulationsmodell die Frage, ob die Verwendung der zeitlichen Eddy-

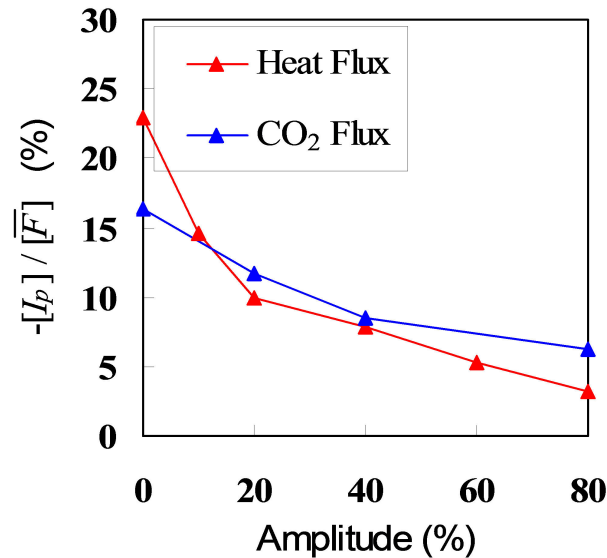


Abbildung 2.2: Systematische Abweichungen der mit der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode bestimmten Wärmeströme sowie Flüsse eines passiven Skalars vom jeweiligen repräsentativen Fluss für Flussmessungen in einer heterogen geheizten (eindimensionale sinusförmige Variation des Wärmestroms) Grenzschicht (aus [Inagaki et al., 2006b](#)). Dargestellt sind die beobachteten systematischen Abweichungen in einer Höhe von 100 m in Abhängigkeit von der Amplitude der Variation des bodennahen Wärmestroms (gegeben in Prozent des horizontal gemittelten bodennahen Wärmestroms).

Kovarianz-Methode zu einer systematischen Unterschätzung der repräsentativen Flüsse eines passiven Skalars führt. In beiden Studien konnten ähnliche Ergebnisse wie für den Wärmestrom bzw. Temperaturfluss festgestellt werden (siehe z.B. die von [Inagaki et al. \(2006b\)](#) bestimmten Abweichungen vom repräsentativen Fluss in [Abbildung 2.2](#)). Allerdings zeigte sich auch eine Abhängigkeit der Größenordnung der systematischen Unterschätzung von der Verteilung der Quellen des passiven Skalars, da diese auch die Korrelation zwischen dem zeitlich gemittelten Vertikalwind und der zeitlich gemittelten Konzentration des passiven Skalars an einem Ort maßgeblich mitbestimmt und der Mittelwert des Produkts dieser beiden Größen ja nach [Gleichung \(2.4\)](#) die systematische Abweichung vom repräsentativen Fluss darstellt.

FOOTPRINTS

3.1 HINTERGRUND UND DEFINITION DES BEGRIFFS „FOOTPRINT“

Mit der Entwicklung verhältnismäßig kostengünstiger, zeitlich hochauflösender Messapparaturen zur Bestimmung von turbulenten Schwankungen der Windgeschwindigkeitskomponenten, der Temperatur, der Feuchte sowie der Konzentrationen weiterer Luftbeimengungen konnte in den 90er Jahren des 20. Jahrhunderts eine starke Zunahme von Eddy-Kovarianz-Messungen zur Bestimmung des Austauschs von Wärme, Wasserdampf und Gasen zwischen der Erdoberfläche und der Atmosphäre beobachtet werden (Baldocchi et al., 2001). Die zunehmende Anzahl von Studien, die sich mit der Bestimmung von Austauschflüssen zwischen der Erdoberfläche und der Atmosphäre beschäftigen, steht dabei auch mit dem Erkenntnisgewinn in Zusammenhang, dass eine Veränderung der Konzentration der Treibhausgase, wie zum Beispiel Kohlenstoffdioxid, eine wichtige Rolle für die Entwicklung des Klimas besitzt (zum Beispiel IPCC, 2001). So wurde beispielsweise ein weltweites Netzwerk zur Überwachung des Austausches von Kohlenstoffdioxid zwischen der Erdoberfläche und der Atmosphäre eingerichtet (Baldocchi et al., 2001), wobei die Messungen der Austauschflüsse mit Hilfe der Eddy-Kovarianz-Methode erfolgen. Im Zuge der Zunahme von Messungen der Austauschflüsse zwischen Erde und Atmosphäre nahm auch das Interesse an der Entwicklung von Modellen zu, die eine Bestimmung der Footprints von gemessenen Flüssen ermöglichen (Foken und Leclerc, 2004). Um Missverständnissen vorzubeugen, soll hier ausdrücklich betont werden, dass keine speziellen Footprintmodelle für bestimmte Messverfahren existieren. Eine an einem Ort gemessene Größe sollte natürlich unabhängig von der zu ihrer Bestimmung verwendeten Messmethode sein und damit gilt, dass auch der Footprint unabhängig von dem verwendeten Messverfahren ist.

Footprints definieren den Zusammenhang zwischen einer an einem Ort gemessenen Größe und den räumlich verteilten Quellen dieser Größe in der Umgebung des Sensors (Schmid, 2002). Vesala et al. (2008) beschreiben den Footprint als das Sichtfeld eines Sensors, das den Einfluss von Quellen eines passiven Skalars auf die an einem Ort gemessenen Flüsse oder Konzentrationen des passiven Skalars widerspiegelt. Eine grundlegende mathematische Definition der Footprintfunktion f als Transferfunktion zwischen einer gemessenen Größe η an einem Ort \vec{r} und den räumlich verteilten Quellen dieser Größe $Q_\eta(\vec{r} + \vec{r}')$ gaben Pasquill und Smith (1983):

$$\eta(\vec{r}) = \int_{\mathfrak{R}} Q_\eta(\vec{r} + \vec{r}') f(\vec{r}, \vec{r}') d\vec{r}'. \quad (3.1)$$

Eine leicht abgewandelte Definition des Begriffs Footprint wurde von Schuepp et al. (1990) sowie Leclerc und Thurtell (1990) gegeben. In ihren Arbeiten wurde der Footprint als der relative Beitrag von jedem Quellelement eines passiven Skalars zu einem gemessenen Fluss oder einer gemessenen Konzentration des passiven Skalars definiert. Die Definition von Schuepp et al. (1990) sowie Leclerc und Thurtell (1990) stimmt nur für den Fall einer horizontal homogenen Quellstärke mit der fundamentalen Definition des Footprints von Pasquill und Smith (1983) überein. Abbildung 3.1 illustriert noch einmal den Begriff des Footprints als die Größe, die den Zusammenhang zwischen einem gemessenen Signal und dessen Quellen angibt.

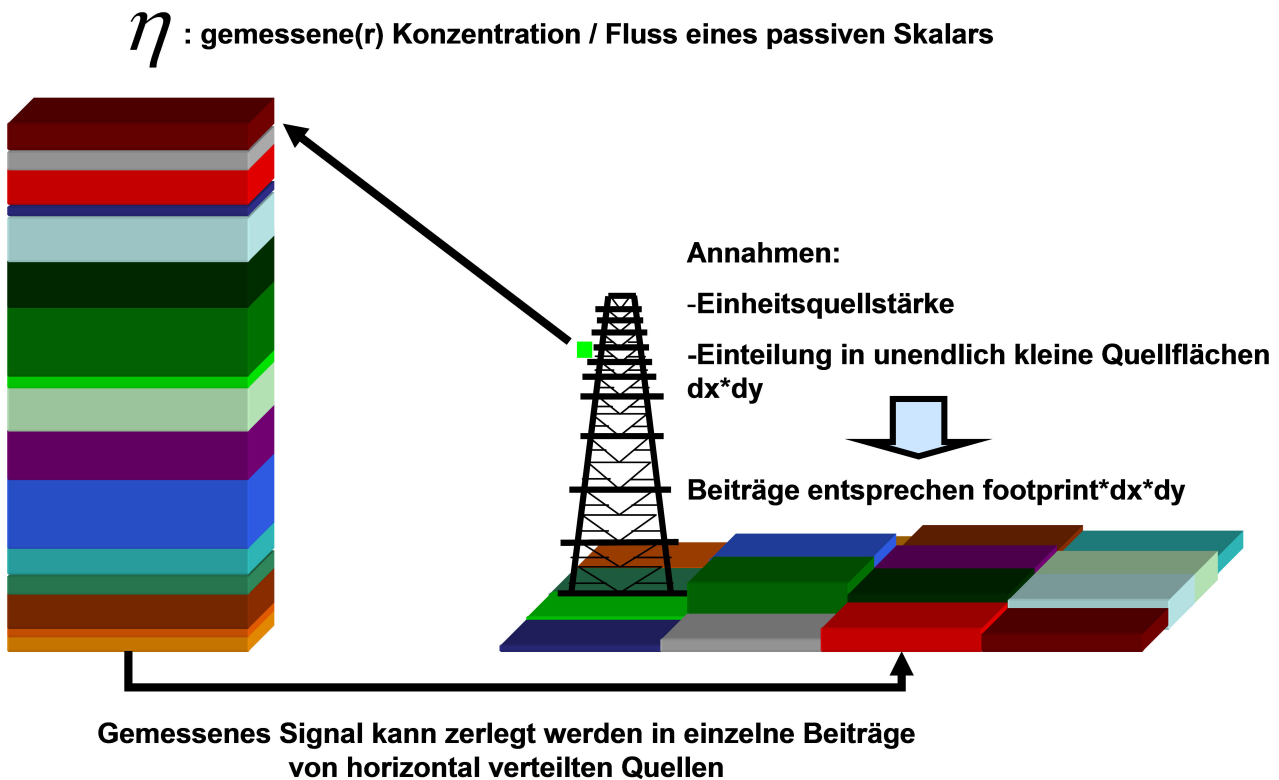


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung des Zusammenhangs zwischen einem gemessenen Signal und dessen Quellen - des Footprints der Messung.

Ein weiterer wichtiger Begriff, der mit dem Begriff des Footprints in Verbindung steht, ist der Begriff der Quellgebietsfläche, der von Kljun et al. (2002) verwendet wurde. Nach ihrer Definition ist die Quellgebietsfläche der Teil der Erdoberfläche, der die Quellen eines passiven Skalars umfasst, die zu den gemessenen Flüssen und Konzentrationen an einem bestimmten Messort beitragen. Die Quellgebietsfläche für eine Messung enthält nach der Definition des Footprints von Pasquill und Smith (1983) alle diejenigen Punkte, an denen sowohl die Footprintfunktion f als auch die Quellstärke Q_η ungleich Null sind. Schmid und Oke (1990a) und Schmid und Oke (1990b) führten den Begriff des $n\%$ -Quellgebietes ein. Damit bezeichneten sie das Gebiet, das die Quellen enthält, die $n\%$ zu der gemessenen Größe beitragen.

Die seit den 90er Jahren des vorigen Jahrhunderts festzustellende Inflation von Studien, die sich mit der Bestimmung von Footprints und Quellgebietsflächen beschäftigen (Schmid, 2002), lässt sich auf die außerordentliche Bedeutung der Footprintanalyse für die Bewertung von Eddy-Kovarianz-Messungen zurückführen (Foken, 2003; Foken und Leclerc, 2004). Würden Flussmessungen über einem unendlich weit ausgedehnten horizontal homogenen Untergrund durchgeführt, für den die Quellen- bzw. Senkenverteilung eines passiven Skalars ebenfalls horizontal homogen wäre, so würden sich die an zwei unterschiedlichen Punkten gemessenen Flüsse dieses passiven Skalars nicht voneinander unterscheiden. Die Bestimmung des Footprints der Messung wäre unter solch idealen Bedingungen ohne jegliche praktische Bedeutung. Tatsächlich hat die Erdoberfläche aber einen deutlich inhomogenen Charakter, wobei die Heterogenitäten der Erdoberfläche, wie Differenzen in der Bodenfeuchte, unterschiedlich bepflanzte Ackerflächen, der Stadt-Land oder der Ozean-Kontinent-Gegensatz, auf ganz unterschiedlichen Skalenbereichen anzutreffen sind (Letzel und Raasch, 2003).

Die Heterogenitäten der Erdoberfläche zeigen sich beispielsweise auch in einer räumlichen Variation der Quellstärken der Treibhausgase. So ist zu erwarten, dass ein Wald tagsüber als

erhebliche Kohlenstoffdioxidsenke betrachtet werden kann, während städtische Gebiete eher als Kohlenstoffdioxidquellen angesehen werden müssen. [Markkanen \(2004\)](#) berichtet darüber, dass es auch innerhalb eines Waldes zu räumlichen Unterschieden der Kohlenstoffdioxidaustauschflüsse kommen kann. So hängt die Austauschrate für Kohlenstoffdioxid in starkem Maße von der einfallenden photosynthetisch aktiven Strahlung (PAR, *engl.* photosynthetic active radiation) ab. Die PAR entspricht etwa dem sichtbaren Bereich des Sonnenspektrums, also dem Wellenlängenbereich zwischen 400 nm und 700 nm ([Reitmayer, 2000](#)). [Reitmayer \(2000\)](#) berichtet, dass die PAR durch wechselnde Umgebungsbedingungen wie Sonnenstand, Bewölkungsgrad, Bestandesdichte und Bestandesstruktur räumlichen und zeitlichen Schwankungen unterliegt. Die Schwankungen im Angebot der PAR führen aber auch zu Schwankungen in der Photosyntheseleistung und damit auch in den Quell- und Senkenstärken für Sauerstoff und Kohlendioxid. An Waldkanten sollte das Angebot an photosynthetisch aktiver Strahlung größer sein als inmitten des Waldes, so dass ein Baum am Waldrand eine größere Senke für Kohlenstoffdioxid darstellen sollte als ein identischer Baum inmitten eines dichten Waldbestands. Eine weitere Größe, die die Senkenstärke beeinflusst, ist die Blattflächendichte. Pflanzenbestände mit niedrigen Blattflächendichten sollten weniger starke Senken für Kohlenstoffdioxid darstellen als Pflanzenbestände mit hohem Blattflächenindex. Die üblicherweise vorhandenen räumlichen Unterschiede in den Quell- und Senkenstärken führen aber dazu, dass anders als für das oben entworfene Idealbild eines unendlich ausgedehnten horizontal homogenen Untergrunds, die Ergebnisse von Messungen der Austauschflüsse über der Erdoberfläche stark von dem Ort der Messung abhängen. Daher stellt sich immer die Frage, für welchen Untergrund die gemessenen Austauschflüsse tatsächlich repräsentativ sind. Gerade im Falle einer stark inhomogenen Quellstärkenverteilung ist es daher wichtig den Footprint der Messung zu bestimmen ([Markkanen, 2004](#)). Die Information über die Quellgebietsfläche erlaubt eine Interpretation von Messungen und gibt an, für welches Kompositum von Untergründen der gemessene Fluss repräsentativ ist ([Foken, 2003](#)). Ist nur ein Oberflächentyp in der Quellgebietsfläche enthalten, so kann die Messung als repräsentativ für diesen Oberflächentyp betrachtet werden. Dabei ist die Bestimmung der Austauschflüsse für einzelne Oberflächentypen die Basis für die Entwicklung von Modellen, beispielsweise zur Beschreibung des Austausches der Treibhausgase zwischen Erde und Atmosphäre, die dann in größerskaligen Klimamodellen zur Verbesserung der Vorhersagen der künftigen Klimaentwicklung eingesetzt werden können. Verlässlichere Klimaprognosen werden dabei helfen, den Druck auf die Politik zu erhöhen, um zu festen Vereinbarungen zum Schutz des Weltklimas und zur Begrenzung der Klimaerwärmung als Nachfolgevereinbarungen zum Kyoto-Protokoll zu kommen.

Das Quellgebiet eines Flusses hängt von der Höhe des Messniveaus (siehe z.B. [Abbildung 3.2](#)) und der Rauigkeit der unterhalb des Messortes liegenden Erdoberfläche ab, wie von [Leclerc und Thurtell \(1990\)](#) gezeigt wurde. Daneben üben aber auch meteorologische Bedingungen (Windgeschwindigkeit, Windrichtung, Turbulenzintensität und atmosphärische Schichtung) einen großen Einfluss auf die Zusammensetzung des Quellgebietes einer Messung aus ([Vesala et al., 2008](#)). Eine eingehende Diskussion der Abhängigkeit der Footprintfunktion von der atmosphärischen Schichtung findet sich in [Kljun et al. \(2002\)](#). Über inhomogenem Untergrund wird neben der Information über den Footprint der Messung auch eine Information über die räumliche Verteilung der Quellstärken des gemessenen Flusses benötigt, um zu einer vollständigen Interpretation des gemessenen Flusses zu kommen. So könnten beispielsweise mit Informationen über die Footprints von Messungen in zwei Höhen, Differenzen zwischen den gemessenen Flüssen in den beiden Höhen möglicherweise auf die Beeinflussung der Messung in der oberen Höhe durch einen zweiten Oberflächentyp zurückzuführen sein. Vertikale Flussdivergenzen wären damit auf horizontale Gradienten der Austauschflüsse zurückzuführen ([Foken, 2003](#)). Entsprechen-

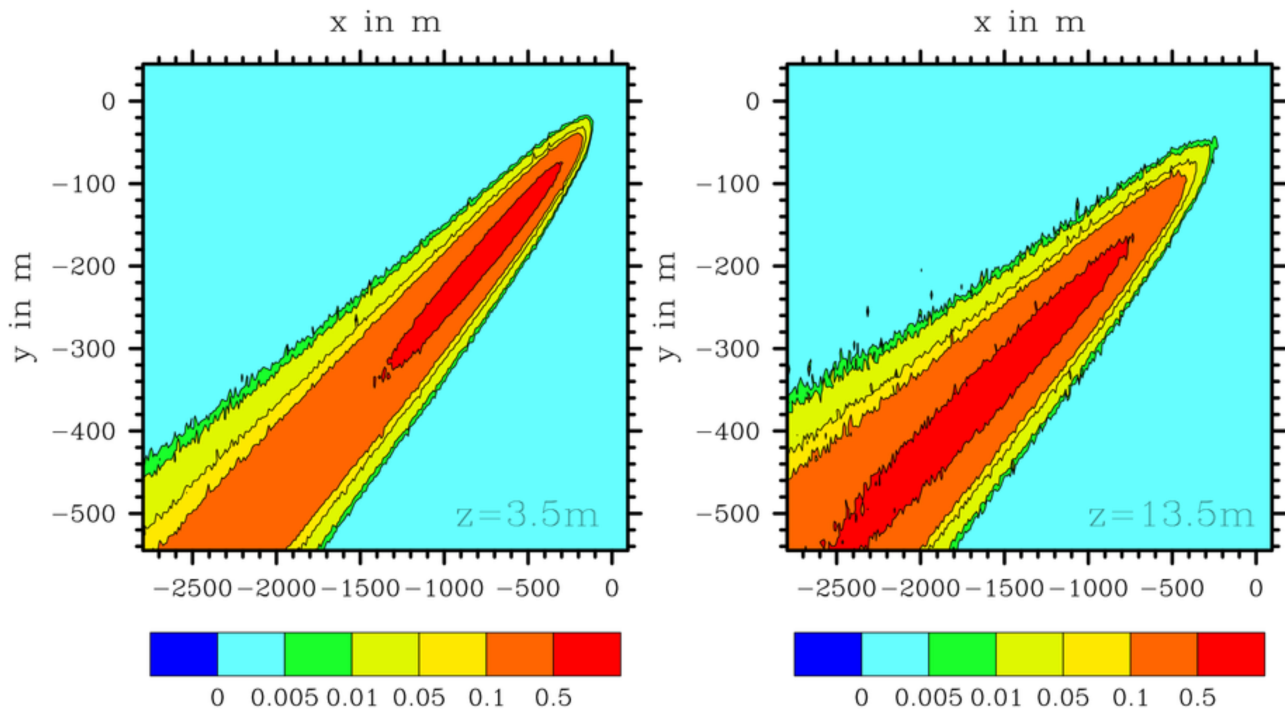


Abbildung 3.2: Abhängigkeit des Footprints von der Höhe des Messniveaus illustriert am Beispiel der Konzentrationsfootprints für Messhöhen von 3,5 m (links) und 13,5 m (rechts) in der in Artikel II vorgestellten simulierten stabilen Grenzschicht. Die Footprints sind mit dem Maximum des Konzentrationsfootprints für die jeweilige Messhöhe normiert.

de Korrekturverfahren können zu einer Vereinheitlichung der Ergebnisse von Flussmessungen mit verschiedenen Messmethoden führen, wie z.B. von [Reth et al. \(2005\)](#) gezeigt wurde.

Footprints können mit den heute verfügbaren Methoden sowohl für die Messungen von Flüssen als auch für die Messungen von Konzentrationen von passiven Skalaren bestimmt werden. Eine Schwierigkeit für die Bestimmung von Footprints für gemessene Impulsflüsse und Wärmeströme ist, dass die Footprintfunktion f in Gleichung (3.1) für nicht passive Skalare eine Funktion in Abhängigkeit von der Quellstärke ist ([Schmid, 2002](#)).

Die Quellgebiete von Konzentrationsmessungen sind größer als die Quellgebiete von Flussmessungen, da Quellen eines passiven Skalars nur positiv zur Konzentration an einem bestimmten Ort beitragen können, während je nachdem ob eine aus einer Quelle resultierende Flussbeimengung den Sensor in einem Aufwind- oder in einem Abwind passiert, ein positiver oder negativer Beitrag zum Gesamtfluss erhalten werden kann.

Zur Bestimmung der Footprints und Quellgebiete von Messungen sind im Wesentlichen seit Beginn der 90er Jahre des vorigen Jahrhunderts eine Reihe verschiedener Ansätze verfolgt worden. So wurden analytische Modelle zur Bestimmung von Footprints entwickelt. Es wurden Lagrangesche stochastische Modelle zur Ermittlung von Footprints verwendet und es gab Footprintbestimmungen sowohl mit Hilfe von turbulenzauflösenden Grobstruktursimulationsmodellen als auch mit Reynolds-gemittelten Modellen, in denen die Turbulenz vollständig parametrisiert wurde. Relativ neu sind Ansätze, wonach, basierend auf den mit Lagrangeschen stochastischen Modellen berechneten Footprints, Parametrisierungen zur Ermittlung von Footprints entwickelt werden. Dabei werden analytische Funktionen in Abhängigkeit von Parametern wie Messhöhe, mittlerem Horizontalwind und Turbulenzintensität an die Ergebnisse Lagrangescher stochastischer Footprintmodelle angepasst. Diese neue Art von analytischen Footprintmodellen ist dann aber vollständig darauf angewiesen, dass bereits die Ergebnisse der zur Ableitung von

analytischen Beziehungen für die Footprintfunktion verwendeten Lagrangeschen stochastischen Footprintmodelle korrekte Berechnungen von Footprints liefern.

In den folgenden Unterkapiteln soll eine kurze Einführung in die verschiedenen Verfahren zur Bestimmung von Footprints gegeben werden, wobei der Fokus auf der Darstellung der Unzulänglichkeiten, aber auch auf den bisher noch nicht ausgeschöpften Potenzialen der verschiedenen Modelle liegen wird. Eine ausführlichere Übersicht über den aktuellen Stand auf dem Gebiet der Footprintmodellierung kann den Artikeln von [Schmid \(2002\)](#) und [Vesala et al. \(2008\)](#) entnommen werden.

3.2 METHODEN ZUR BESTIMMUNG VON FOOTPRINTS

3.2.1 Analytische Footprintmodelle

Unter bestimmten Voraussetzungen können analytische Lösungen der Transportgleichung oder Advektions-Diffusionsgleichung eines passiven Skalars erhalten werden. Zu den Voraussetzungen gehört beispielsweise, dass die Strömung in der die Ausbreitung des passiven Skalars erfolgt, horizontal homogen ist und dass die turbulente Diffusion des passiven Skalars in Strömungsrichtung vernachlässigbar gegenüber der Advektion ist. Analytische Footprintmodelle bestimmen den Footprint einer Messung aus der analytischen Lösung der Transportgleichung. Es wird also zunächst das mittlere Konzentrationsfeld, das aus der Freisetzung eines passiven Skalars an einer kontinuierlichen Punktquelle in eine turbulente Strömung resultiert, bestimmt. Aus dem berechneten Konzentrationsfeld können dann Informationen über die Footprints von Konzentrations- und Flussmessungen in beliebigen Höhen innerhalb der Prandtschicht gewonnen werden.

Ein erstes analytisches Footprintmodell entwickelten [Schuepp et al. \(1990\)](#), die mit dieser Studie auch den Begriff des Flussfootprints prägten. Mit dem analytischen Footprintmodell von [Horst \(1999\)](#) steht ein analytisches Footprintmodell zur Verfügung, das auch bei anderer als neutraler Schichtung verwendet werden kann und Variationen der mittleren Windgeschwindigkeit mit der Höhe berücksichtigt. Die Anwendung der analytischen Modelle bleibt aber auf die Berechnung von Footprints für Messungen in der Prandtschicht beschränkt, da die analytischen Lösungen der Transportgleichung unter Berücksichtigung der Beziehungen der Monin-Obukhovschen Ähnlichkeitstheorie hergeleitet worden sind. Alle analytischen Footprintmodelle machen Gebrauch von der Annahme der invertierten Schadstoffwolke (*engl.* inverted plume assumption) ([Schmid, 2002](#)). [Abbildung 3.3](#) zeigt eine Illustration der Annahme der invertierten Schadstoffwolke. Die Annahme der invertierten Schadstoffwolke geht von einer Analogie zwischen der sich stromaufwärts eines Messensors gelegenen Einflusszone der Messung und der Entwicklung einer virtuellen Schadstoffwolke ausgehend von einer an der horizontalen Position des Messensors aber in Quellhöhe gelegenen Punktquelle aus. In die analytische Lösung der Transportgleichung geht also die Annahme ein, dass das passive Skalar an nur einer einzigen Punktquelle freigesetzt wird. Aus der Konzentrationsverteilung, die aus der Freisetzung aus der Punktquelle resultiert, kann dann durch Koordinatentransformation eine Information über den Footprint für eine Messposition erhalten werden. Die analytischen Modelle sind somit nur bei Vorliegen horizontal homogener Turbulenz verwendbar. Turbulente Diffusion in Strömungsrichtung wird bei den analytischen Modellen vernachlässigt, so dass sie Quellgebiete liefern, die vollständig stromaufwärts vom Messsensor liegen. Diese Annahme kann bei hoher Turbulenzintensität, z.B. in einer stark konvektiv geprägten atmosphärischen Grenzschicht, zu deutlichen Fehlern in der Bestimmung des Quellgebiets einer Messung, insbesondere aber auch in der Lage des Maximums der Footprintfunktion führen ([Schmid, 2002](#)), wie auch in **Artikel II** deutlich wird. Dort werden nämlich die Ergebnisse von Footprintmodellen, die die turbulente Diffusion

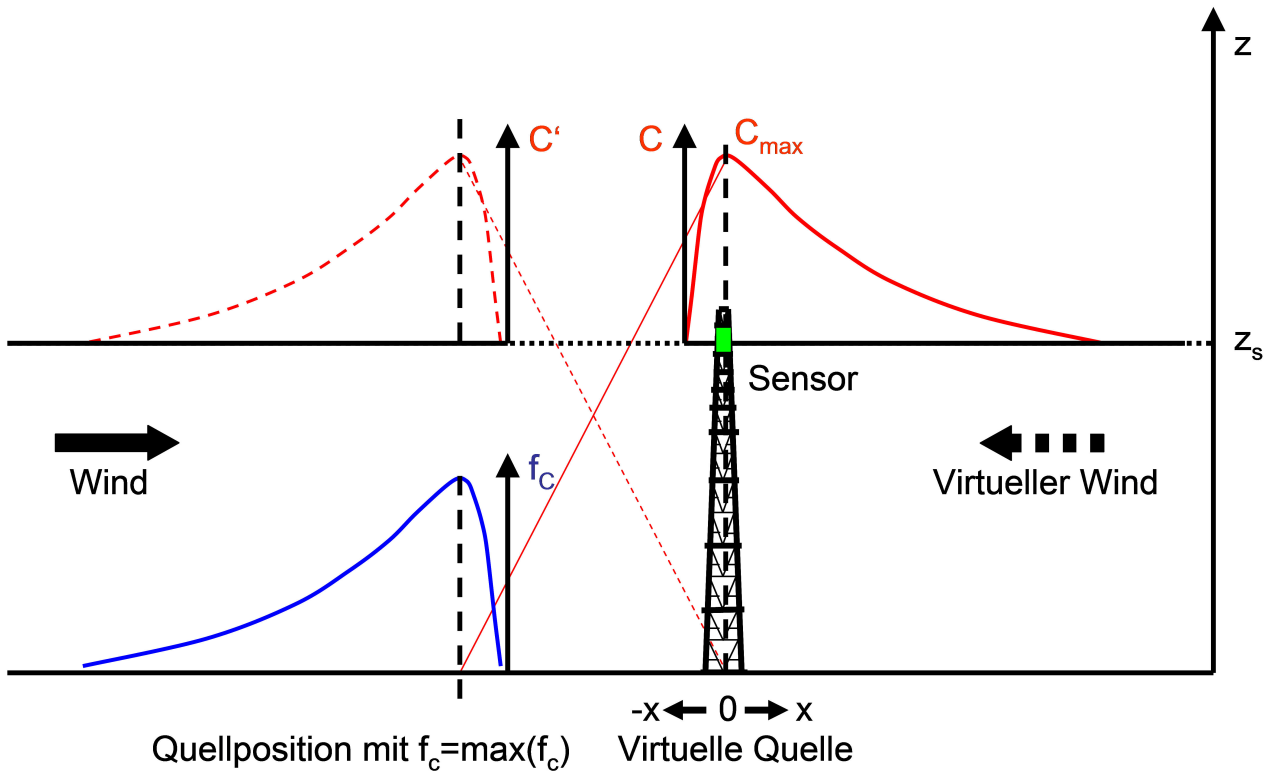


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung zur Annahme der invertierten Schadstoffwolke nach Schmid und Oke (1990b). Unter der Voraussetzung einer horizontal homogenen Strömung kann die Footprintfunktion f_c für eine Messung am Ort $(x = 0, z = z_s)$ aus einer Invertierung der Windrichtung und anschließender Berechnung der Konzentrationsverteilung C' für eine virtuelle Quelle in Quellhöhe direkt unterhalb des Messgerätes erhalten werden.

in Strömungsrichtung vernachlässigen, mit den Ergebnissen der im Rahmen dieses Promotionsvorhabens entwickelten Footprintbestimmungsmethode, bei der die turbulente Diffusion auch in Strömungsrichtung berücksichtigt wird, verglichen. Für die Geschwindigkeitsschwankungen quer zur Strömungsrichtung wird in den analytischen Modellen eine gaußförmige Verteilung angenommen.

Analytische Footprintmodelle beinhalten eine stark vereinfachte Physik der Ausbreitung eines passiven Skalars in einer turbulenten Strömung, um eine möglichst große mathematische Einfachheit zu gewinnen. Hintergrund ist, dass unter relativ geringem Rechenaufwand Footprintinformationen erhalten werden sollen. Damit sind die analytischen Footprintmodelle von großer Bedeutung für routinemäßige Footprintbestimmungen, die z.B. auch auf Laptops vor Ort während der Durchführung oder Planung von Messexperimenten erfolgen können sollen.

Eine relativ neue und deutlich andere Art von analytischen Footprintmodellen haben erstmals Hsieh et al. (2000) beschrieben. Sie verwendeten eine sogenannte Hybridmethode, bei der eine analytische Lösung an Ergebnisse eines Lagrangeschen stochastischen Footprintmodells angepasst wurde. Somit wurde eine explizite algebraische Beziehung zur Berechnung von Footprints erhalten. Auch Kljun et al. (2004) entwickelten ein solches Hybridmodell. Hybridmodelle verbinden die Vorteile der den Lagrangeschen stochastischen Modellen zugrunde liegenden komplexeren Physik mit dem relativ geringen Rechenzeitbedarf eines herkömmlichen analytischen Footprintmodells. Allerdings bleibt die Verwendbarkeit von Hybridmodellen auf solche Flussregime beschränkt, für die zuvor auch tatsächlich eine Anpassung einer analytischen Funktion an Ergebnisse eines Lagrangeschen stochastischen Modells erfolgt ist. Zudem ist bei der Verwendung der Ergebnisse dieser neuartigen analytischen Modelle auch zu berücksichtigen, dass selbst

die Validierung der zu ihrer Ableitung verwendeten Lagrangeschen stochastischen Modelle noch weitgehend aussteht.

3.2.2 Lagrangesche stochastische Footprintmodelle

Eine Alternative zu den analytischen Footprintmodellen steht mit der Gruppe der Lagrangeschen stochastischen Footprintmodelle zur Verfügung. Die Grundannahme der Lagrangeschen stochastischen Modelle ist, dass die Dispersion eines passiven Skalars in einer turbulenten Strömung durch die Berechnung der Trajektorien einer endlichen Zahl von Partikeln, die an den Quellen des passiven Skalars freigesetzt werden, bestimmt werden kann (Schmid, 2002). Die Grundgleichung zur Bestimmung der zeitlichen Verlagerung eines Partikels ist

$$d\vec{X}_L = \vec{V}_L dt, \quad (3.2)$$

wobei \vec{X}_L die Position und \vec{V}_L die Geschwindigkeit des Partikels (oder Lagrangesche Geschwindigkeit) bezeichnen. Die Lagrangesche Geschwindigkeit in einer turbulenten Strömung wird üblicherweise über eine stochastische Differentialgleichung, die sogenannte Langevin-Gleichung, die die Inkremente der Lagrangeschen Geschwindigkeiten für Markov-Prozesse erster Ordnung beschreibt, bestimmt (z.B. Wilson und Sawford, 1996):

$$d\vec{V}_L = \vec{a}(t, \vec{X}_L, \vec{V}_L) dt + B_L(t, \vec{X}_L, \vec{V}_L) d\vec{\xi}. \quad (3.3)$$

\vec{a} ist ein Vektor und B_L ist eine 3×3 -Matrix. Die Komponenten von \vec{a} und B_L bestehen aus nicht-linearen Funktionen. \vec{a} und B_L sind vom Ort, von der Zeit und von der Geschwindigkeit eines Partikels abhängig. Die Komponenten von $d\vec{\xi}$ sind die Inkremente eines Wiener Prozesses, d.h. eines gaußverteilten Zufallsprozesses. Die Komponenten von $d\vec{\xi}$ sind jeweils unabhängig von den Komponenten in den zwei anderen Raumrichtungen und die Komponenten sind darüber hinaus auch zeitlich unabhängig voneinander (Weil et al., 2004). Desweiteren besitzen die Komponenten von $d\vec{\xi}$ jeweils einen verschwindenden Mittelwert und eine Varianz dt (Reynolds, 1998). Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (3.3) ist der sogenannte deterministische Term der Langevin-Gleichung. Er stellt eine Kopplung der Partikelgeschwindigkeiten zwischen zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten sicher. Der zweite Term ist der sogenannte stochastische Term, der den unkorrelierten zufälligen Beitrag zur Beschleunigung der Partikel widerspiegelt.

Die korrekte Formulierung von \vec{a} und B_L ist der kritische Teil bei der Entwicklung eines Lagrangeschen stochastischen Modells. Es müssen für \vec{a} und B_L Lösungen gefunden werden, die die stochastische Natur des Turbulenzfeldes berücksichtigen. Gleichzeitig muss die Formulierung des Lagrangeschen stochastischen Modells auch einen Driftkorrekturterm enthalten, der sicherstellt, dass eine gut durchmischte Partikelverteilung auch im weiteren zeitlichen Verlauf gut durchmischt erhalten bleibt und es somit mit der Zeit nicht zu einer Ansammlung von Partikeln in bestimmten Bereichen der Grenzschicht kommt. Dies ist das von Thomson (1987) formulierte Hauptkriterium für Lagrangesche stochastische Modelle, die sogenannte Bedingung guter Durchmischung (*engl.* well-mixed condition). \vec{a} und B_L werden üblicherweise aus der Haushaltsgleichung der Eulerschen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Geschwindigkeitskomponenten, der Fokker-Planck-Gleichung (z.B. Rodean, 1996; Wilson und Sawford, 1996; Weil et al., 2004) gewonnen. Alle Berechnungen eines Lagrangeschen stochastischen Modells basieren auf extern vorgegebenen Turbulenzstatistiken, d.h. während die analytischen Modelle ausschließlich für spezielle Sätze von Turbulenzstatistiken hergeleitet worden sind, sind die

Lagrangeschen stochastischen Modelle prinzipiell rein mathematische Beschreibungen, die relativ flexibel für Footprintbestimmungen mit sehr unterschiedlichen Turbulenzcharakteristiken eingesetzt werden können. Viele Modelle erfüllen zwar die Bedingung guter Durchmischung von Thomson (1987) nur für ein bestimmtes Turbulenzregime (Vesala et al., 2008), es existieren aber durchaus auch stochastische Lagrangesche Modelle, die für einen weiten Bereich von Schichtungsbedingungen in der atmosphärischen Grenzschicht Verwendung finden können (z.B. Kljun et al., 2002).

Im Gegensatz zu den analytischen Footprintmodellen sind Lagrangesche stochastische Footprintmodelle grundsätzlich auch dazu in der Lage, nicht-gaußförmige, inhomogene Turbulenz bei der Footprintbestimmung zu berücksichtigen. War eine Berücksichtigung der turbulenten Diffusion in Strömungsrichtung in den analytischen Modellen ausgeschlossen, so stellt sie für Lagrangesche stochastische Modelle kein grundsätzliches Problem dar. Schmid (2002) berichtet, dass die Nichtberücksichtigung der turbulenten Diffusion in Strömungsrichtung dazu führt, dass die Lage des Maximums der Footprintfunktion zu weit stromaufwärts berechnet wird, was Schmid (2002) damit begründet, dass die Diffusion in gewissem Maße der Advektion entgegenwirkt (siehe hierzu auch Artikel II). Ein Problem der Lagrangeschen stochastischen Footprintmodelle ist, dass für dreidimensionale turbulente Strömungen keine eindeutige Lösung der Fokker-Plank-Gleichung existiert (Sabelfeld und Kurbanmuradov, 1998; Vesala et al., 2008), während für eindimensionale turbulente Strömungen die Lösung der Fokker-Planck-Gleichung eindeutig ist. Eine Diskussion des Eindeutigkeitsproblems findet sich in den Arbeiten von Kurbanmuradov et al. (1999, 2001) und Kurbanmuradov und Sabelfeld (2000).

Ein wichtiger Vorteil der Lagrangeschen stochastischen Footprintmodelle im Vergleich zu den analytischen Footprintmodellen ist die Möglichkeit, das Modellgebiet in der Vertikalen in mehrere Schichten mit unterschiedlichen Flussstatistiken aufteilen zu können (siehe z.B. Baldocchi, 1997; Rannik et al., 2000, 2003). So ist die Verwendbarkeit der Lagrangeschen stochastischen Footprintmodelle anders als die der analytischen Footprintmodelle auch nicht ausschließlich auf Footprintbestimmungen für Messungen innerhalb der Prandtlschicht beschränkt (siehe z.B. Rannik et al., 2000). Lagrangesche stochastische Footprintmodelle sind prinzipiell auch dazu in der Lage Footprints für gemessene Größen zu bestimmen, deren Quellen vertikal verteilt sind (Rannik et al., 2003).

Die meisten Lagrangeschen stochastischen Footprintmodelle werden im Vorwärtsmodus betrieben (z.B. Leclerc und Thurtell, 1990; Baldocchi, 1997; Rannik et al., 2000, 2003), d.h. nach der Partikelposition zum Zeitpunkt t wird die Partikelposition zum Zeitpunkt $t + dt$ ($dt > 0$) berechnet. Die Partikel werden bei der Vorwärtsmethode also prinzipiell an den Orten der Quellen eines passiven Skalars freigelassen und auf ihrem Weg zum Messort verfolgt. Vereinfachend wird in diesen Modellen zumeist die Freisetzung von Partikeln aus einer einzigen Quelle simuliert. Die Footprints für einen festen Messort können dann unter Verwendung der Annahme der invertierten Schadstoffwolke mit Hilfe einer Koordinatentransformation erhalten werden (z.B. Schmid, 2002). Die Verwendung der Annahme der invertierten Schadstoffwolke ist aber nur bei Vorliegen horizontal homogener und stationärer Turbulenz möglich, so dass die Verwendung vieler Lagrangescher stochastischer Modelle im Vorwärtsmodus ähnlich wie die der analytischen Footprintmodelle auf sehr ideale Verhältnisse beschränkt ist. Dass aber im Vorwärtsmodus betriebene Lagrangesche stochastische Footprintmodelle grundsätzlich durchaus auch für Footprintbestimmungen in heterogenem Gelände geeignet sind, haben Luhar und Rao (2004) gezeigt. Es reicht dann zur Bestimmung des Footprints von Punktmessungen allerdings nicht mehr aus, die Ausbreitung von Partikeln aus einer einzigen Quelle zu berechnen, sondern um eine exakte Übereinstimmung mit den Verhältnissen in der realen atmosphärischen Grenzschicht zu erhalten, müssen eigentlich an jedem Ort, an dem in der Realität Quellen des

passiven Skalars vorhanden sind, auch im Modell Partikel freigesetzt werden. Anders als bei den Footprintbestimmungen unter horizontal homogenen Bedingungen fließt auch nicht mehr jeder Schnittpunkt einer Partikeltrajektorie mit dem Messniveau in die Footprintberechnung ein. Nur wenn ein Partikel den Messsensor tatsächlich passiert, darf es für die Footprintberechnung berücksichtigt werden. Aufgrund dieser Tatsachen wird offensichtlich, dass Footprintbestimmungen mit einem im Vorwärtsmodus betriebenen Lagrangeschen stochastischen Modell unter horizontal heterogenen Bedingungen die Berechnung von wesentlich mehr Partikeltrajektorien erfordern als unter horizontal homogenen Bedingungen. Eine ausführliche Beschreibung, dass tatsächlich (zumindest für idealisierte Fälle) und wie konkret mit Hilfe eines im Vorwärtsmodus beschriebenen Lagrangeschen stochastischen Modells Footprintbestimmungen erfolgen können, gibt **Artikel II**. Die Footprintbestimmung erfolgt dabei allerdings für Messungen mit einem flächenhaften Sensor als Näherung des Footprints für Messungen mit einem Punktsensor. Diese Näherung ist aber insofern berechtigt, als dass reale Sensoren natürlich auch immer eine endliche Ausdehnung besitzen.

In den letzten Jahren wurden auch verstärkt Bemühungen unternommen (z.B. [Flesch et al., 1995](#); [Flesch, 1996](#); [Kljun et al., 2002](#)) Lagrangesche stochastische Modelle zu entwickeln, die im Rückwärtsmodus betrieben werden, d.h. nach der Partikelposition zum Zeitpunkt t wird die Partikelposition zum Zeitpunkt $t - dt$ ($dt > 0$) berechnet. Bei dieser Art von Lagrangeschen stochastischen Modellen werden die Partikel am Messort gestartet und dann bis zu ihren Quellpositionen zurückverfolgt. Die Rückwärtsmodelle haben den Vorteil, dass alle gerechneten Partikelbahnen den Messort auch wirklich passieren. Bei den Vorwärtsmodellen ist dies näherungsweise nur bei Gültigkeit der Annahme der invertierten Schadstoffwolke der Fall, denn dann werden alle Schnittpunkte von Partikeltrajektorien mit der Messhöhe zu Messorten. Die Annahme der invertierten Schadstoffwolke besitzt aber nur bei horizontaler Homogenität und Stationarität der turbulenten Strömung Gültigkeit. Die Rückwärtsmodelle basieren im Prinzip auf denselben Gleichungen wie die Vorwärtsmodelle, es ist lediglich das Vorzeichen eines Terms in der Fokker-Planck-Gleichung zu verändern ([Flesch et al., 1995](#)) und eine simple lineare Koordinatentransformation durchzuführen, so dass $t \rightarrow t'$, wobei $t' = T_0 - t$ und T_0 eine beliebige Konstante ist.

Ein wichtiger Unterschied zwischen den Vorwärts- und den Rückwärtsmodellen liegt in der Menge des passiven Skalars, das ein einzelnes Partikel transportiert. Bei den Vorwärtsmodellen trägt jedes Partikel dieselbe Masse des passiven Skalars. Gibt die Quellstärke Q_0 an, wieviel Kilogramm eines passiven Skalars pro Flächen- und Zeiteinheit freigesetzt werden, so wird jedes Partikel (also auch das i -te Partikel) bei der Freisetzung aus einer Quelle mit der Ausdehnung δa an der Stelle \vec{X}_{L_0} in einem Vorwärtsmodell mit der Masse

$$\delta m_i = \delta m(\vec{X}_{L_0}) = \frac{Q_0}{N} \delta a \delta t \quad (3.4)$$

bestückt, wenn insgesamt N Partikel während eines Zeitschritts δt an dieser Quelle freigesetzt werden ([Schmid, 2002](#)).

Bei den Rückwärtsmodellen werden die Partikel hingegen als individuelle Fluidelemente betrachtet, die unterschiedliche Mengen des passiven Skalars enthalten. Die einzelnen Fluidelemente müssen nicht notwendigerweise mit Masse bestückt sein. Erst wenn der Weg eines einzelnen Partikels zu einer Quelle des passiven Skalars zurückverfolgt werden kann, erfolgt eine Zuweisung einer Masse zu dem Partikel. Befindet sich das i -te Partikel über eine Zeit τ_i im Bereich einer Quelle mit der volumetrischen Quellstärke $S_0(\vec{X}_L)$, so wird das Partikel mit der Masse

$$\delta m_i = S_0(\vec{X}_L) \tau_i \delta V \quad (3.5)$$

bestückt, wobei δV das Volumen des Quellgebiets bezeichnet. Für eine Quelle an der Erdoberfläche mit der Quellstärke $Q_0 = S_0 dz$ kann die Aufenthaltszeit des Partikels im Quellbereich mit Hilfe der sogenannten Touchdowngeschwindigkeit (von *engl.* „to touchdown“: aufsetzen, landen) ausgedrückt werden als:

$$\tau_i = \frac{2dz}{|W_i^T|}. \quad (3.6)$$

Der Faktor 2 ist auf die Reflexion am Erdboden zurückzuführen, die praktisch zu einem zweifachen Durchfliegen der infinitesimalen Quellausdehnung dz in zwei unterschiedlichen Richtungen führt. Die Ladung eines Partikels ist im Rückwärtsmodell also antiproportional zur Touchdowngeschwindigkeit.

Aus Vorwärtsmodellen kann die mittlere Konzentration eines passiven Skalars an einem Ort (x, y, z) , die sich nach der kontinuierlichen Freisetzung eines passiven Skalars in einer Flächenquelle mit der Quellstärke Q_0 ergibt, bestimmt werden als

$$C = \langle c(x, y, z) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{|W_{ij}|} Q_0(x - X_{ij}, y - Y_{ij}). \quad (3.7)$$

Hierbei steht n_i für die Anzahl von Schnittpunkten einer Partikeltrajektorie i mit der Messhöhe z ; W_{ij} , X_{ij} und Y_{ij} stehen für die Vertikalkomponente der Partikelgeschwindigkeit und die Koordinaten des Aufenthaltsorts des Partikels i im Moment der j -ten Passage des Messniveaus. Gleichung (3.7) ist bereits eine Spezialform der Gleichung zur Ermittlung der Konzentration eines passiven Skalars, da sie in dieser Form nur unter der Annahme horizontaler Homogenität Gültigkeit besitzt. Es wird angenommen, dass alle Partikel an einer Quellposition, nämlich dem Ursprung des Koordinatensystems freigesetzt werden. Der Beitrag einer Quelle zur Konzentrationsmessung hängt hier nur von dem Abstand zwischen Quelle und Messort ab. Der mittlere Fluss kann entsprechend ermittelt werden als

$$F = \langle w(x, y, z)c(x, y, z) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{W_{ij}}{|W_{ij}|} Q_0(x - X_{ij}, y - Y_{ij}). \quad (3.8)$$

Nach [Vesala et al. \(2008\)](#) lautet der Zusammenhang zwischen der mittleren Konzentration C und dem Konzentrationsfootprint f_C dann

$$f_C = \frac{1}{Q_0} \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial y}. \quad (3.9)$$

Der Zusammenhang zwischen dem mittleren Fluss F und dem Flussfootprint f_F ergibt sich ganz analog als

$$f_F = \frac{1}{Q_0} \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}. \quad (3.10)$$

Zu beachten ist, dass diese Gleichungen für die Footprintfunktionen auch aus der grundlegenden Footprintdefinition von [Pasquill und Smith \(1983\)](#) (Gleichung 3.1) erhalten werden können, wenn die räumlich variable Quellstärke des passiven Skalars in Gleichung (3.1) durch eine horizontal homogene Quellstärke Q_0 ersetzt wird. Die im Rahmen des hier neu entwickelten Verfahrens zur Bestimmung der Footprints von gemessenen Flüssen bzw. Konzentrationen eines passiven Skalars aus den Ausgaben eines im Vorwärtsmodus betriebenen Lagrangeschen stochastischen Modells verwendeten Algorithmen werden ausführlich in **Artikel II** erläutert.

Die mittlere Konzentration kann mit Hilfe eines Rückwärtsmodells bestimmt werden als

$$C = \langle c(x, y, z) \rangle = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{|W_{ij}^T|} Q_0(X_{ij}, Y_{ij}), \quad (3.11)$$

während der mittlere Fluss erhalten werden kann als

$$F = \langle w(x, y, z)c(x, y, z) \rangle = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{W_i}{|W_{ij}^T|} Q_0(X_{ij}, Y_{ij}). \quad (3.12)$$

Hierbei ist W_i die Vertikalkomponente der Geschwindigkeit des i -ten Partikels bei der Freisetzung am eigentlichen Messort und W_{ij}^T ist die Touchdowngeschwindigkeit des i -ten Partikels bei seinem j -ten Aufenthalt im Quellbereich. Diese Formeln beinhalten keinerlei Annahmen über die horizontale Homogenität der turbulenten Strömung. Die Konzentrations- und Flussfootprints können dann wiederum aus dem Konzentrations- bzw. Flussfeld über die Formeln (3.9) bzw. (3.10) bestimmt werden. Als kritisch gilt bei den im Rückwärtsmodus betriebenen Lagrangeschen Modellen die korrekte Initialisierung der Partikelgeschwindigkeit bei Simulationsbeginn am Messort. Kljun et al. (2002) bestimmten eine geeignete Initialisierung der Partikelgeschwindigkeiten über ein Vorlauf- oder Spin-up-Verfahren, bei dem eine gewisse Zeit lang zwar Partikelgeschwindigkeiten nach den Gleichungen des Lagrangeschen Modells bestimmt werden, aber keine Verlagerung der Partikel erfolgt. Ein weiteres Problem der Rückwärtsmodelle ist, dass der Quotient aus Vertikalgeschwindigkeit am Messort und Touchdowngeschwindigkeit in die Berechnung des Flussfootprints einfließt, so dass es häufig zu unnatürlichen Maxima der Footprintfunktion für solche Quellbereiche kommt, aus denen wenige Partikel der am Messort registrierten Partikel stammen. Kljun et al. (2002) wendeten daher einen Glättungsoperator auf das von ihnen bestimmte Footprintfeld an. Wie durch die Kooperationspartner von der Universität Bayreuth, mit denen es im Rahmen der Arbeiten zur Promotion zu einer Zusammenarbeit kam, in **Artikel III** gezeigt wird, ist die Anwendung des Glättungsoperators aber nicht trivial, da die Gefahr besteht, dass auch physikalisch relevante Strukturen der Footprintfunktion, insbesondere bei der Betrachtung zweidimensionaler Footprints weggemittelt werden. Ein Teil des Vorteils der Rückwärtsmodelle, dass die Verlagerung von weniger Partikeln als in den Vorwärtsmodellen berechnet werden muss, da sichergestellt ist, dass alle Partikel auch wirklich den Messort durchfliegen, geht also durch die höhere Anfälligkeit des Rückwärtsmodells für statistisches Rauschen im Prinzip wieder verloren.

Die Lagrangeschen stochastischen Footprintmodelle besitzen, wie oben beschrieben, grundsätzlich zwar einen weitaus größeren Anwendungsbereich als die analytischen Footprintmodelle. Allerdings ist ein Lagrangesches Footprintmodell auch immer nur so gut wie die Parametrisierungen, die in ihm zur Beschreibung der turbulenten Strömung verwendet werden. Allgemein gültige Parameterisierungen zur Beschreibung turbulenter Strömungen über horizontal heterogenem Untergrund stehen nicht zur Verfügung, so dass auch den Ergebnissen der konventionellen Lagrangeschen Footprintmodelle trotz aller Vorteile gegenüber den analytischen Footprintmodellen nur eingeschränktes Vertrauen entgegengebracht werden darf.

Ein weiterer Nachteil der Lagrangeschen stochastischen Modelle ist ihr im Vergleich zu den analytischen Modellen relativ großer Rechenzeitbedarf. Dies führte, wie oben beschrieben, zur Ableitung von einfachen analytischen Beziehungen aus den Ergebnissen von Lagrangeschen Footprintmodellen durch Hsieh et al. (2000) und Kljun et al. (2004). Diese Hybridmodelle liefern bei deutlich geringerem Rechenaufwand Informationen über die Footprints, die vergleichbar sind mit denen eines konventionellen Lagrangeschen Modells. Allerdings muss zur Entwicklung

des Hybridmodells immer erst eine Berechnung von Footprints mit einem konventionellen Lagrangeschen Modell für einen entsprechenden Satz von Eingangsparametern erfolgen, so dass die Zeitersparnis eines Hybridmodells erst nach mehrmaliger Footprintberechnung für ähnliche Sätze von Eingabeparametern zum Tragen kommt.

3.2.3 Reynolds-gemittelte Modelle

Prinzipiell sind alle numerischen Modelle, die die Navier-Stokes-Gleichungen lösen, dazu geeignet, zur Berechnung der Ausbreitung von passiven Skalaren eingesetzt zu werden (Schmid, 2002). Damit sind sie dazu in der Lage, Informationen darüber zu liefern, welchen Beitrag eine Quelle an einem bestimmten Ort zur Konzentration oder zum Fluss des passiven Skalars an einem bestimmten Messort liefert. Sie können daher auch für Footprintbestimmungen benutzt werden. Eine Art von numerischen Modellen zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen sind die Reynolds-gemittelten Modellen (*engl.* **R**eynolds **a**veraged numerical **N**avier-**S**tokes simulation (RANS) models). Als Lösung werden keine Informationen über instantane Geschwindigkeits-, Temperatur- und Konzentrationsfelder erhalten, sondern über die zeitlich gemittelten Felder dieser Größen. Die Mittelungszeit ist dabei so lang, dass die prognostizierten Felder keine turbulenten Schwankungen mehr enthalten, das zeitliche Mittel also dem Ensemble-Mittel entspricht. Der Einfluss der Turbulenz auf die Entwicklung der gemittelten Felder muss aber auch in RANS-Modellen berücksichtigt werden, denn die den RANS-Modellen zugrunde liegenden Gleichungen enthalten Terme, in denen turbulente Flüsse eingehen. Die Berücksichtigung der Turbulenz geschieht in den RANS-Modellen komplett über Parametrisierungen. Die Verwendbarkeit von RANS-Modellen für Footprintbestimmungen ist erst relativ spät ausgenutzt worden. Sogachev et al. (2002) präsentierten erstmals, wie ein RANS-Modell Footprintinformationen liefern kann. Sogachev und Lloyd (2004) beschrieben ausführlich eine Methode, wie auch über inhomogenem Untergrund mit Hilfe von RANS-Modellen Footprintinformationen erhalten werden können.

Die Methode der Footprintbestimmung über Reynolds-gemittelte Modelle hat den Nachteil, dass auch sie abhängig von der Qualität der Parametrisierungen ist, mit denen in ihnen die turbulenten Flüsse modelliert werden. Darüber hinaus ist auch diese Methode relativ rechenaufwändig, gerade für Footprintbestimmungen in heterogenem Gelände, da die Footprintbestimmung nach der Methode von Sogachev und Lloyd (2004) hier die Lösung von so vielen prognostischen Gleichungen für passive Skalare erfordert, wie Quellgitterboxen vorhanden sind. D.h. im Prinzip wird in der Methode von Sogachev und Lloyd (2004) eine Ausbreitungsrechnung pro Quellvolumen durchgeführt und die resultierende Konzentration am Messort berechnet.

3.2.4 LES-Modelle

Eine andere Methode zur numerischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen ist die Methode der Grobstruktursimulation oder LES. Die Methode der LES führt zur expliziten Auflösung der großen Turbulenzelemente, die den Großteil der turbulenten kinetischen Energie enthalten und für den Großteil des Transports von Wärme, Impuls und Masse in der atmosphärischen Grenzschicht verantwortlich sind. Die Auswirkung kleinskaliger Turbulenzelemente wird parametrisiert. Vesala et al. (2008) sehen den größten Vorteil der LES bei der Footprintbestimmung darin, dass die LES in vielen Fällen die einzige Methode ist, um realistische Informationen über eine turbulente Strömung zu erhalten - die Grundvoraussetzung einer jeden Ausbreitungsrechnung. Nach Simulationen von konvektiven Grenzschichten (z.B. Schmidt und Schumann, 1989; Moeng und Sullivan, 1994) und Simulationen von turbulenten Strömungen bei neutraler

Schichtung (z.B. [Moeng und Sullivan, 1994](#); [Su et al., 1988](#)), gehören mittlerweile auch Simulationen turbulenter Flüsse bei stabiler Schichtung (z.B. [Kosovic und Curry, 2000](#); [Beare et al., 2006](#)) zu den Standardanwendungen der LES. Die Simulation von turbulenten Strömungen über heterogenem Untergrund gehört mittlerweile schon seit mehr als anderthalb Jahrzehnten zu den Anwendungsbereichen der LES. Die simulierten Fälle reichen dabei von konvektiven Grenzschichten mit idealisierten, eindimensionalen Variationen des bodennahen Wärmestroms (z.B. [Letzel und Raasch, 2003](#)) bis hin zu Simulationen kompletter Tagesgänge für verschiedene konvektive Grenzschichten über einem realen Untersuchungsgebiet ([Uhlenbrock, 2006](#)). Die fortschreitende Entwicklung der Computertechnik mit immer leistungsfähigeren Massivparallelrechnern hat Grobstruktursimulationen mit immer feineren Gitterauflösungen ermöglicht. Zusammen mit der Entwicklung entsprechender numerischer Techniken ist damit mittlerweile auch die Simulation der turbulenten Durchströmung von Pflanzenbeständen (z.B. [Kanda und Hino, 1994](#); [Watanabe, 2004](#)) und städtischen Gebieten (z.B. [Kanda et al., 2004b](#); [Letzel, 2007](#)) möglich geworden. Ein großer Nachteil der LES ist hingegen ihr enormer Rechenzeitbedarf, der eine routinemäßige Bestimmung von Footprints mittels der LES-Methode momentan unmöglich erscheinen lässt ([Schmid, 2002](#)). So wurde die LES auf dem Gebiet der Footprintbestimmung bisher auch im Wesentlichen als Forschungs- und Entwicklungswerkzeug verwendet.

Bisher benutzten nur relativ wenige Studien die LES zum Zwecke der Footprintbestimmung. [Hadfield \(1994\)](#) verwendete die von einer Grobstruktursimulation berechneten Felder der aufgelösten und der subskaligen turbulenten kinetischen Energie, um ein im Vorwärtsmodus betriebenes Lagrangesches stochastisches Modell zu betreiben. [Hadfield \(1994\)](#) beobachtete eine qualitative Übereinstimmung zwischen den von seinem Modell berechneten Footprints und den Ergebnissen des analytischen Footprintmodells von [Horst und Weil \(1992\)](#).

[Leclerc et al. \(1997\)](#) berechneten Footprints direkt aus den von einem LES-Modell berechneten Konzentrationsfeldern eines passiven Skalars. Die Ergebnisse ihres Eulerschen Ansatzes zur Footprintberechnung verglichen sie mit den Ergebnissen des analytischen Modells von [Horst und Weil \(1992\)](#), des Lagrangeschen stochastischen Modells von [Leclerc und Thurtell \(1990\)](#) sowie mit den Footprints, die aus den Daten eines Tracerexperiments von [Finn et al. \(1996\)](#) abgeleitet werden konnten. [Leclerc et al. \(1997\)](#) stellten zwar Ähnlichkeiten zwischen den verschiedenen Modellen und den experimentellen Footprints fest, sie beobachteten aber auch größere Unterschiede für Messhöhen nahe des Erdbodens. Diese Unterschiede wurden von [Leclerc et al. \(1997\)](#) auf eine mangelnde Auflösung der dominanten turbulenten Strukturen in der LES in der Nähe des Erdbodens geschoben. Nicht näher diskutiert wurde von [Leclerc et al. \(1997\)](#) die relativ deutliche Differenz der Lage des Footprintmaximums zwischen den numerischen Modellen und den Daten des Tracerexperiments. Diese offene Frage wird in **Artikel II** wieder aufgegriffen.

[Cai und Leclerc \(2007\)](#) speicherten in Abständen von 50 s die dreidimensionalen Felder der aufgelösten Geschwindigkeiten und der subskaligen turbulenten kinetischen Energie eines Grobstruktursimulationsmodells, um damit nach beendeter Grobstruktursimulation, im Vorwärtsmodus und im Rückwärtsmodus betriebene Lagrangesche Modelle mit dem Ziel der Footprintbestimmung für Konzentrationsmessungen anzutreiben.

Alle LES-Studien zu Footprintbestimmungen wurden bisher für Situationen mit horizontal homogenen turbulenten Strömungen durchgeführt. Die Footprints der LES-Modelle bestätigten im Wesentlichen die Ergebnisse von analytischen und Lagrangeschen stochastischen Modellen. Anwendungen der LES für Footprintbestimmungen in heterogenem Gelände standen vor Beginn der Arbeiten an der Promotion noch aus, obwohl die LES bereits seit langem, spätestens jedoch seit der Studie von [Shen und Leclerc \(1995\)](#), erfolgreich zur Simulation turbulenter Strömungen über horizontal heterogenem Untergrund eingesetzt wird. In **Artikel II** wird nun erstmals eine Anwendung der LES auf Footprintbestimmungen für Messungen in einem horizontal heterogen

geheizten Gebiet gezeigt.

3.2.5 Probleme der konventionellen Footprintbestimmungsmethoden vor Beginn der Arbeiten an der Promotion

Ein Vergleich der Ergebnisse von verschiedenen Footprintmodellen durch [Kljun et al. \(2003\)](#) zeigte Unterschiede, obwohl in den verschiedenen Footprintmodellen ähnliche Eingabeparameter zur Beschreibung der vorherrschenden Strömungsverhältnisse verwendet worden waren. Wenn verschiedene Footprintmodelle schon unter den idealisierten Bedingungen der Studie von [Kljun et al. \(2003\)](#) zu voneinander abweichenden Ergebnissen kommen, so ist offensichtlich, dass erst recht eine Validierung von Footprintmodellen für natürliche, nicht idealisierte atmosphärische Bedingungen unbedingt notwendig ist. Leider stehen nur wenige Daten aus Feldexperimenten zur Verfügung, die für eine Validierung von Footprintmodellen geeignet sind. [Vesala et al. \(2008\)](#) zählen dazu im Wesentlichen die in [Cooper et al. \(2003\)](#), [Finn et al. \(1996\)](#), [Leclerc et al. \(2003\)](#) und [Leclerc et al. \(1997\)](#) beschriebenen Experimente, deren Rohdaten überdies auch nicht der Allgemeinheit zugänglich sind, wie die ergebnislosen Bemühungen um die Rohdaten des Tracerexperimentes von [Finn et al. \(1996\)](#) im Rahmen der Arbeiten zu dieser Promotion zeigten. Und selbst die zitierten Datensätze sind laut [Foken und Leclerc \(2004\)](#) nicht für eine Validierung von zweidimensionalen Footprints geeignet, sondern nur für die Validierung von eindimensionalen, d.h. quer zum Wind aufintegrierten Footprints. Die Durchführung weiterer Validierungsexperimente ist daher laut [Schmid \(2002\)](#) und [Foken und Leclerc \(2004\)](#) unbedingt wünschenswert.

Die meisten Footprintmodelle sind für sehr idealisierte Bedingungen hergeleitet worden, die in vielen Fällen von den in Messexperimenten tatsächlich herrschenden Zuständen nicht erfüllt sind. Neue Validierungsexperimente sollten für einen möglichst weiten Bereich von atmosphärischen Schichtungen und gerade auch für solche Bedingungen durchgeführt werden, für die die Bedingungen, die der Herleitung eines Footprintmodells zugrunde lagen, nicht erfüllt sind. Mangels Alternativen werden Footprintmodelle heute nämlich ohnehin auch unter Bedingungen eingesetzt, für die diese ursprünglich nicht hergeleitet worden waren. So werden beispielsweise auch Modelle, die Gebrauch von der Annahme der invertierten Schadstoffwolke machen, also von einer horizontal homogenen turbulenten Strömung ausgehen, zur Bewertung von Messungen in heterogenem Gelände eingesetzt. Echte Bewährungsproben für die konventionellen Footprintmodelle wären zum Beispiel Validierungen anhand von Daten von Messungen auf einer Waldlichtung oder im Grenzbereich zwischen einer Wasser- und einer festen Landoberfläche. Mit Hilfe so konzipierter Validierungsexperimente sollte eine Abschätzung über die möglichen Fehler eines Modells bei der Abschätzung des Footprints in heterogenem Gelände gelingen. Besonders interessant dürfte hierbei die Beantwortung der Frage sein, ob es zur Bestimmung von Footprints in horizontal heterogenem Gelände ausreichend ist, die Heterogenität über die Vorgabe von aus Aggregationsmodellen ([Hasager und Jensen, 1999](#); [Hasager et al., 2003](#)) erhaltenen Eingabeparametern unter Beibehaltung der Annahme einer horizontal homogenen Strömung zu berücksichtigen oder ob auch eine explizite Berücksichtigung von möglicherweise durch die Heterogenität induzierten Strömungsstrukturen notwendig ist.

[Foken und Leclerc \(2004\)](#) plädieren für neue Tracerexperimente mit sowohl nicht natürlich als auch mit natürlich vorkommenden Tracergasen zur Validierung von Footprintmodellen. In Übereinstimmung mit [Schmid \(2002\)](#) sehen sie aber auch großes Potenzial in der LES-Methode für eine Validierung von Footprintmodellen. LES-Modelle liefern realistische Strömungsfelder in einer räumlichen und zeitlichen Auflösung, die ein Feldexperiment nicht liefern kann. Darüber

hinaus hat die LES auch Vorteile gegenüber neuen Feldexperimenten, was den zeitlichen und den finanziellen Aufwand angeht, den es zu ihrer Durchführung bedarf. [Foken und Leclerc \(2004\)](#) sprechen sich daher für einen Vergleich von Footprintmodellen mit LES-Resultaten aus.

In **Artikel III** wird als erster Schritt einer Validierung zweier konventioneller Footprintmodelle mit Hilfe von Daten eines LES-Modells die Validierung der Modelle für einfache horizontal homogene Strömungen unter verschiedenen thermischen Schichtungen präsentiert. Die Daten des LES-Modells wurden dabei im Rahmen der Arbeiten an der Promotion produziert, während die Entwicklung von grundlegenden Werkzeugen und Kriterien zum Vergleich der mit verschiedenen Methoden bestimmten Footprints den Kooperationspartnern Frau Dr. Tiina Markkanen und Herrn Prof. Dr. Thomas Foken von der Universität Bayreuth oblag. Die entwickelten Vergleichswerkzeuge und -kriterien sollen auch für künftige Validierungsexperimente in komplexeren Situationen Anwendung finden. Entsprechende LES-Daten für die dringend benötigten Validierungsexperimente in heterogenem Gelände liegen nun nach Abschluss der Arbeiten an der Promotion bereits vor, wie beispielsweise **Artikel II** oder den vorgestellten Beispielen im Schlusskapitel dieser Arbeit entnommen werden kann.

KAPITEL 4

BESCHREIBUNG DES VERWENDETEN GROBSTRUKTURSIMULATIONSMODELLS

4.1 DAS GLEICHUNGSSYSTEM ZUR BESCHREIBUNG ATMOSPHERISCHER BEWEGUNGSVORGÄNGE

Alle atmosphärischen Bewegungsvorgänge lassen sich durch ein Gleichungssystem beschreiben, welches die Erhaltungsgleichungen für den Impuls oder die Navier-Stokes-Gleichungen

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} = -\epsilon_{ijk} f_j u_k - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - g \delta_{i3} + \frac{\mu}{\rho} \left\{ \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right\}, \quad (4.1)$$

die Massenerhaltungsgleichung oder Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_k \frac{\partial \rho}{\partial x_k} = 0, \quad (4.2)$$

sowie den ersten Hauptsatz der Thermodynamik

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + u_k \frac{\partial \Theta}{\partial x_k} = \gamma \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x_k^2} \quad (4.3)$$

umfasst. Dabei sind u_i die drei Komponenten des Geschwindigkeitsfelds, ϵ_{ijk} ist der alternierende Einheitstensor, $f_i = (0, 2\Omega \cos(\phi), 2\Omega \sin(\phi))$ sind die Coriolisparameter mit der Winkelgeschwindigkeit der Erde $\Omega = \frac{2\pi}{24\text{h}}$ und der geographischen Breite ϕ , p steht für den Luftdruck, ρ ist die Luftdichte, g ist die Schwerebeschleunigung der Erde, δ_{ij} ist das Kronecker-Symbol, μ ist die Viskosität oder der Zähigkeitsbeiwert mit $\frac{\mu}{\rho} = \nu$, wobei ν der molekulare Diffusionskoeffizient für den Impuls ist. Θ ist die potentielle Temperatur und γ bezeichnet den molekularen Wärmeleitkoeffizienten. Werden zu diesen fünf Gleichungen noch die diagnostische Beziehung der Zustandsgleichung für ein ideales Gas

$$p = \rho R_L T \quad (4.4)$$

und die Definitionsgleichung der potentiellen Temperatur

$$\Theta = T \left(\frac{1000\text{hPa}}{p} \right)^{\frac{R_L}{c_p}} \quad (4.5)$$

hinzugefügt, wobei c_p die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck und R die spezifische Gaskonstante ist, so ist schließlich ein Gleichungssystem gefunden, das aus sieben Gleichungen für die sieben Größen

- Komponente der Windgeschwindigkeit in x-Richtung u_1 oder u ,
- Komponente der Windgeschwindigkeit in y-Richtung u_2 oder v ,

- Komponente der Windgeschwindigkeit in z-Richtung u_3 oder w ,
- Luftdruck p ,
- aktuelle Temperatur T ,
- potentielle Temperatur Θ ,
- und Luftdichte ρ

besteht. Aufgrund der Nichtlinearität der Advektionsterme in den Erhaltungsgleichungen ist eine analytische Lösung dieses Gleichungssystems jedoch im Allgemeinen nicht möglich. Das oben aufgeführte Gleichungssystem ist nur in einer trockenen Atmosphäre, d.h. in einer Atmosphäre, die vollkommen frei von Wasserdampf ist, vollständig. Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten und in den **Artikeln I-III** präsentierten Simulationen wurde durchweg die Annahme einer trockenen Atmosphäre gemacht. Die notwendigen Erweiterungen an dem oben dargestellten Grundgleichungssystem, die zur Berücksichtigung der Feuchte in der Atmosphäre notwendig sind, können zum Beispiel [Schröter \(2003\)](#) entnommen werden.

4.2 DIE BOUSSINESQ-APPROXIMATION

Das im vorhergehenden Abschnitt aufgeführte Grundgleichungssystem beschreibt alle in einer trockenen Atmosphäre vorkommenden Phänomene. Häufig ist es möglich das Grundgleichungssystem zu vereinfachen, wenn ein spezielles Phänomen untersucht werden soll. So wird in der numerischen Wettervorhersage ausgenutzt, dass sich die Atmosphäre großräumig betrachtet näherungsweise in einem hydrostatischen Gleichgewicht befindet, so dass die prognostische Gleichung für die Vertikalkomponente der Geschwindigkeit durch die statische Grundgleichung ersetzt werden kann. Dies ist dann die sogenannte hydrostatische Approximation.

Sollen hingegen Phänomene untersucht werden, bei denen die Vertikalgeschwindigkeiten die gleichen Größenordnungen wie die Horizontalgeschwindigkeiten erreichen, wie beispielsweise für die turbulenten Prozesse innerhalb der atmosphärischen Grenzschicht, so stellt die Boussinesq-Approximation eine geeignete Vereinfachung des Grundgleichungssystems dar. [Stull \(1988\)](#) listet die Bedingungen auf, die für eine Durchführung der Boussinesq-Approximation erfüllt sein müssen. In der atmosphärischen Grenzschicht sind die von [Stull \(1988\)](#) genannten Bedingungen zumeist erfüllt und so können die thermodynamischen Zustandsvariablen ρ , T und Θ aufgespalten werden in einen nur von der Höhe z abhängigen Grundzustand (Index 0) und eine Abweichung (*) davon, d.h.:

$$\rho(x, y, z, t) = \rho_0(z) + \rho^*(x, y, z, t) \quad (4.6)$$

$$T(x, y, z, z) = T_0(z) + T^*(x, y, z, t). \quad (4.7)$$

Wird zusätzlich unterstellt, dass die vertikale Erstreckung der betrachteten Bewegung klein gegenüber der Skalenhöhe der Atmosphäre ist, wovon bei der Untersuchung flacher Konvektion ($z \leq 3000$ m) ausgegangen werden kann, so kann die Referenzdichte näherungsweise auch als konstant angenommen werden:

$$\rho_0(z) = \rho_0 = \text{const.} \quad (4.8)$$

Auch der Druck p wird in einen Grundzustand und eine Abweichung davon aufgespalten. Um synoptischskalige Druckgradienten über den geostrophischen Wind ausdrücken zu können, wird die Abweichung vom Grundzustand p_0 allerdings in zwei Terme aufgespalten. Der erste Term

enthält die synoptischskaligen Druckabweichungen vom Grundzustand p_s , während die verbleibende, mesoskalige Abweichung vom Grundzustand wieder einfach als p^* bezeichnet werden soll (Chlond, 1998). Unter der Voraussetzung eines höhenkonstanten geostrophischen Windes und eines näherungsweise horizontal homogenen Referenzzustandes des Druckes gilt, dass die synoptischskaligen Abweichungen vom Referenzzustand des Druckes ebenfalls höhenkonstant sind, so dass sich die Aufspaltung des Druckes schreiben lässt als

$$p(x, y, z, t) = p_0(z) + p_s(x, y) + p^*(x, y, z, t). \quad (4.9)$$

Die horizontalen Gradienten der synoptischskaligen Druckabweichungen können dann über die Beziehungen für die Komponenten des geostrophischen Windes ausgedrückt werden:

$$\frac{\partial p_s}{\partial x_i} = \rho_0 \epsilon_{ij3} f_3 u_{g_j}. \quad (4.10)$$

Der Vertikalgradient der synoptischskaligen Druckabweichung verschwindet hingegen nach Gleichung (4.9). Darüber hinaus wird bei der Boussinesq-Approximation auch die Annahme gemacht, dass der Grundzustand der thermodynamischen Variablen auch die statische Grundgleichung und die Zustandsgleichung für ein ideales Gas erfüllt:

$$\frac{\partial p_0}{\partial z} = -g\rho_0 \quad (4.11)$$

$$p_0 = \rho_0 R_L T_0. \quad (4.12)$$

Werden nun die Aufspaltungen (4.6) und (4.9) in der mit ρ multiplizierten Navier-Stokes-Gleichung (4.1) vorgenommen, wobei zusätzlich der Term der molekularen Diffusion als vernachlässigbar gegenüber den restlichen Termen betrachtet werden soll, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \rho_0 \left(1 + \frac{\rho^*}{\rho_0}\right) \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) &= -\rho_0 \left(1 + \frac{\rho^*}{\rho_0}\right) \epsilon_{ijk} f_j u_k \\ &\quad - \rho_0 \left(1 + \frac{\rho^*}{\rho_0}\right) g \delta_{i3} \\ &\quad - \frac{\partial p_0}{\partial x_i} - \frac{\partial p_s}{\partial x_i} - \frac{\partial p^*}{\partial x_i}. \end{aligned}$$

Der entscheidende Schritt der Boussinesq-Approximation erfolgt nun, indem sämtliche Terme, in denen der Quotient aus Dichteabweichung ρ^* und der Dichte im Grundzustand ρ_0 auftritt, als vernachlässigbar klein betrachtet werden. Nur das Produkt der Dichteabweichung mit der Schwerebeschleunigung g kann nicht als vernachlässigbar gegenüber den restlichen Termen betrachtet werden. Damit können Auftriebskräfte durch Dichteunterschiede berücksichtigt werden. Unter der zusätzlichen Ausnutzung der Tatsache, dass der Grundzustand die statische Grundgleichung (4.11) erfüllt und für den Grundzustand des Druckes die geostrophische Windbeziehung (4.10) gilt, lässt sich die Boussinesq-approximierte Form der Bewegungsgleichung schreiben als

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} = -\epsilon_{ijk} f_j u_k - \epsilon_{ij3} f_3 u_{g_j} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p^*}{\partial x_i} - \underbrace{\frac{\rho^*}{\rho_0} g \delta_{i3}}_{\text{Auftriebsterm}}.$$

Aus der logarithmischen Differentiation der Zustandsgleichung für ein ideales Gas kann eine Form des Auftriebsterms hergeleitet werden, in der Abweichungen der potentiellen Temperatur

statt Dichteabweichungen berücksichtigt werden (Etling, 2002). Diese Form des Auftriebsterms ist in der Meteorologie eher gebräuchlich, da die Temperatur im Gegensatz zur Dichte eine direkt zu messende Größe ist. Der Zusammenhang zwischen Temperaturabweichungen und Dichteabweichungen lautet:

$$-\frac{\rho^*}{\rho_0} \approx \frac{\Theta^*}{\Theta_0}. \quad (4.13)$$

Somit kann die Boussinesq-approximierte Bewegungsgleichung auch in der folgenden, der weiteren Herleitung der Modellgleichungen zugrunde liegenden Form geschrieben werden:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} = -\epsilon_{ijk} f_j u_k - \epsilon_{ij3} f_3 u_{gj} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p^*}{\partial x_i} + \frac{\Theta^*}{\Theta_0} g \delta_{i3}. \quad (4.14)$$

Um eine zur Bewegungsgleichung konsistente Form der Kontinuitätsgleichung zu erhalten, wird nun auch in (4.2) eine Aufspaltung der thermodynamischen Variablen ρ in Grundzustand und Abweichung davon vorgenommen. Damit ergibt sich zunächst

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \underbrace{\rho_0 \left(1 + \frac{\rho^*}{\rho_0} \right)}_{\approx 1, \text{ da } \frac{\rho^*}{\rho_0} \ll 1} \right\} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \underbrace{\rho_0 \left(1 + \frac{\rho^*}{\rho_0} \right) u_k}_{\approx 1} \right\} = 0.$$

Unter Berücksichtigung, dass die Dichte des Grundzustands ρ_0 eine zeitunabhängige und horizontal homogene Größe ist, lässt sich dann die folgende Beziehung herleiten:

$$u_3 \frac{\partial \rho_0}{\partial z} + \rho_0 \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0.$$

Lässt man nun auch hier wieder die Annahme eines näherungsweise höhenkonstanten Referenzzustandes der Dichte $\rho_0 = \text{const.}$ einfließen, so nimmt die Kontinuitätsgleichung in der Boussinesq-Approximation die einfache Form

$$\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0 \quad (4.15)$$

an (Etling, 2002). Die Strömung kann dann also als inkompressibel betrachtet werden. Die Inkompressibilität führt dazu, dass die, sich besonders schnell ausbreitenden Schallwellen, nicht mehr länger in der Lösung des Boussinesq-approximierten Gleichungssystems enthalten sind. Dies ist ein für die numerische Lösung des Gleichungssystems außerordentlich bedeutsamer Vorteil. Die Rechenzeit kann nach Ausfilterung der Schallwellen deutlich reduziert werden, da nach dem Courant-Friedrichs-Levy-Kriterium (CFL-Kriterium) der maximale noch eine stabile Lösung garantierende Zeitschritt Δt antiproportional zur auftretenden maximalen Signalgeschwindigkeit u_{max} ist. Außerdem erlaubt es die Inkompressibilität auch, die in den prognostischen Gleichungen für die Windgeschwindigkeitskomponenten und für die potentielle Temperatur enthaltenen Advektionsterme in die Flussform zu überführen. Dies bedeutet für den Advektionsterm in der Erhaltungsgleichung für den Impuls:

$$u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} = \frac{\partial (u_k u_i)}{\partial x_k} - \underbrace{u_i \frac{\partial u_k}{\partial x_k}}_{=0} = \frac{\partial (u_k u_i)}{\partial x_k}. \quad (4.16)$$

Für die Advektion von potentieller Temperatur liefert eine hierzu analoge Vorgehensweise:

$$u_k \frac{\partial \Theta}{\partial x_k} = \frac{\partial (u_k \Theta)}{\partial x_k}. \quad (4.17)$$

4.3 NUMERISCHE MODELLE ZUR SIMULATION ATMOSPHERISCHER STRÖMUNGEN

Die Simulation atmosphärischer turbulenter Strömungen hat sich in den letzten Jahrzehnten als ein wichtiges Werkzeug zur Erforschung der atmosphärischen Grenzschicht etabliert. Neben der Erforschung grundsätzlicher Aspekte der Turbulenz, wie z.B. in [Moeng und Sullivan \(1994\)](#) oder [Otte und Wyngaard \(2001\)](#), spielt die numerische Simulation auch eine wichtige Rolle bei der Entwicklung von Schließungsansätzen für größerskalige numerische Modelle (z.B. [Noh et al., 2003](#)).

Der Vorteil der numerischen Simulation turbulenter Strömungen gegenüber Messkampagnen in der realen atmosphärischen Grenzschicht liegt dabei zum einen in der Abwesenheit von systematischen Fehlern der Messsensoren. Zum anderen lässt die Methode der numerischen Simulation auch gezielte Parameterstudien zu. Ein weiterer Vorteil der numerischen Simulationen ist, dass Daten an jedem Gitterpunkt des Modellgebiets generiert werden, während Messungen in der realen Atmosphäre häufig nur an einzelnen Punkten des Untersuchungsgebiets durchgeführt werden können.

Grundsätzlich existieren verschiedene Techniken für die Simulation turbulenter Strömungen. Das vom Konzept her einfachste Verfahren ist die Methode der **Direkten Numerischen Simulation** (DNS), das ausführlich in [Leonard \(1974\)](#) erläutert wird. Das Konzept der DNS beruht darauf, dass sämtliche in der zu simulierenden Strömung auftretenden Turbulenzelemente – von den großen energietragenden Wirbeln im Produktionsbereich bis hin zu den kleinsten Turbulenzelementen im Dissipationsbereich – explizit durch das numerische Modell aufgelöst werden. Das Verfahren der DNS ist also konzeptionell sehr einfach, da durch die explizite Berücksichtigung aller Turbulenzelemente keine Parametrisierungen benötigt werden.

Sollen alle in der atmosphärischen Grenzschicht auftretenden Turbulenzelemente durch ein numerisches Modell explizit aufgelöst werden, so ergeben sich zwei Forderungen an das Modell. Zum einen muss das gewählte Modellgebiet in seiner Erstreckung größer sein als die größten auftretenden Turbulenzelemente. Ein Maß für die Größe der größten Turbulenzelemente ist die Integralskala oder äußere Skala L_I der Turbulenz, die angibt, über welche räumliche Distanz die Fluktuationen der Geschwindigkeitskomponenten noch miteinander korreliert sind. Die zweite Anforderung an das numerische Modell ist, dass die numerische Simulation auch in der Lage sein muss, die Dissipation von turbulenter kinetischer Energie zu erfassen. Die Dissipation, also die Umwandlung von turbulenter kinetischer Energie in ungeordnete Molekularbewegung (Wärmeenergie) erfolgt nur auf den kleinsten Skalen der Turbulenz. Ein Maß für die Größe der kleinsten Turbulenzelemente ist die Kolmogorow-Skala oder innere Skala η_K ([Ferziger und Peric, 1999](#)). Mit Hilfe der kinematischen molekularen Viskosität ν und der Dissipationsrate ϵ ergibt sich die Kolmogorow-Skala als

$$\eta = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{\frac{1}{4}}. \quad (4.18)$$

An die DNS stellt sich somit die Forderung, dass die Anzahl der Gitterpunkte in jeder Raumrichtung mindestens $\frac{L_I}{\eta_K}$ beträgt. [Tennekes und Lumley \(1973\)](#) zeigen einen Zusammenhang zwischen dem Verhältnis der äußeren und der inneren Skala einer turbulenten Strömung und der Reynoldszahl Re , einem Maß für das Verhältnis von Trägheitskraft zu Reibungskraft, auf:

$$Re^{\frac{3}{4}} = \left(\frac{LU_c}{\nu}\right)^{\frac{3}{4}} \sim \frac{L_I}{\eta_K}. \quad (4.19)$$

Hierbei ist die äußere Skala L_I , also die vertikale Erstreckung der Grenzschicht, auch ein Maß für die Längenskala der turbulenten Strömung, und U_c ist deren charakteristische Geschwindigkeitsskala. Bei einer dreidimensionalen DNS ergibt sich also unter der Annahme isotroper

Turbulenz, dass die zur vollständigen Integration der turbulenten Strömung benötigte Anzahl von Gitterpunkten proportional zu $Re^{\frac{9}{4}}$ ist. Für praktische Anwendungen ist jedoch die Zahl der verwendbaren Gitterpunkte durch die zur Verfügung stehenden Computerressourcen beschränkt. Dabei bestimmt sich die maximal verwendbare Gitterpunktzahl aus dem auf dem betrachteten Rechnersystem zur Verfügung stehenden Arbeitsspeicher. Typische Werte für die äußere Skala L der Turbulenzelemente in der atmosphärischen Grenzschicht liegen in einer Größenordnung von 10^3 m, während die Größenordnung der Werte für die innere Skala 10^{-3} m beträgt (Arya, 1988). Damit ergibt sich, dass für die numerische Simulation der atmosphärischen Turbulenz mittels DNS, die benötigte Anzahl von Gitterpunkten in einem Bereich von 10^{18} liegt - dies überschreitet die Fähigkeiten von Massivparallelrechnern heute noch um etwa sieben Größenordnungen. Die Verwendbarkeit der DNS bleibt somit auf Fälle mit moderaten Reynoldszahlen beschränkt. Darüber hinaus ist natürlich auch immer zu berücksichtigen, dass die geplante Simulation unter einem vertretbaren Verhältnis von Kosten und Nutzen durchzuführen sein muss, d.h. es ist darauf zu achten, dass der Rechenzeitbedarf der geplanten DNS noch in einem vertretbaren Rahmen liegt. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die Rechenzeit, die zur Durchführung einer DNS benötigt wird, sogar proportional zu $Re^{\frac{11}{4}}$ ist (Breuer, 2002), da die den Zeitschritt bestimmenden Kriterien von der in der Simulation verwendeten Gitterweite abhängig sind.

4.3.1 Einführung in die Theorie der Grobstruktursimulationsmodelle

Aus der Undurchführbarkeit der DNS für größere Reynoldszahlen erwächst die Forderung nach einer alternativen Technik zur Simulation von turbulenten Strömungen. Vor diesem Hintergrund wurde das Verfahren der **Large-Eddy-Simulation** (LES) oder Grobstruktursimulation entwickelt. Die Simulation turbulenter Strömungen mit der Technik der LES wurde erstmals von Lilly (1967) sowie Deardorff (1970) durchgeführt. Zur Untersuchung der atmosphärischen Grenzschicht wurde die LES-Methode dann erstmals von Deardorff (1973) angewendet. Bei der Grobstruktursimulation, in die unter anderem in Sagaut (2001) eine ausführliche Einführung gegeben wird, kann die Zahl der benötigten Gitterpunkte gegenüber einer DNS derselben turbulenten Strömung durch eine unterschiedliche Behandlung von großskaliger und kleinskaliger Turbulenz erheblich reduziert werden.

Bei der LES werden nur die großen energiereichen Turbulenzelemente, die im Wesentlichen für den Transport von Wärme, Impuls und Masse in einer turbulenten Strömung verantwortlich sind (Mason, 1994), explizit durch das numerische Modell aufgelöst. Der Einfluss der Feinstruktur (nicht aufgelöste Skalen) auf die Grobstruktur (aufgelöste Skalen) kann jedoch nicht einfach vernachlässigt werden, sondern muss über Parametrisierungen, die sogenannten subskaligen Modelle (*engl.* subgrid-scale models; **SGS**-models), berücksichtigt werden. Die Hauptaufgabe der Feinstruktur ist dabei die ausreichende Dissipation der Grobstruktur (Mason, 1994). In der Praxis erfolgt die Trennung von großskaligen und kleinskaligen Turbulenzelementen über die Anwendung einer Filteroperation auf das den Simulationen zu Grunde liegende Gleichungssystem, das zu Beginn dieses Kapitels erläutert wurde.

Die Filterskala muss dabei im Inertialbereich des Turbulenzspektrums liegen. In diesem Bereich erfolgt im Wesentlichen nur ein Energietransfer von den großen zu den kleinen Skalen. Zwei unterschiedliche turbulente Strömungen unterscheiden sich im Wesentlichen nur in ihrer Grobstruktur, d.h. in den großen energiereichen Turbulenzelementen. Die kleinskalige Turbulenz hingegen ist in beiden Fällen statistisch betrachtet ähnlich (Garratt, 1992) und somit einer Beschreibung durch allgemein gültige Parametrisierungen zugänglich. Während beispielsweise

die größerskaligen Turbulenzelemente durchaus anisotrop sein können, ist für die kleinskaligen Turbulenzelemente die Annahme von Isotropie bis auf den Bereich in der Nähe fester Berandungen gerechtfertigt (Sullivan et al., 2003).

Durch Messungen in der atmosphärischen Grenzschicht weit oberhalb der Erdoberfläche konnte die Gültigkeit der von Kolmogorow (1941) aufgestellten Hypothesen bezüglich der Eigenschaften der kleinskaligen Turbulenz bestätigt werden (Sorbjan, 1989). Dies zeigt, dass in größerer Entfernung zum Erdboden die Berücksichtigung der subskaligen Turbulenzelemente über Parametrisierungsansätze durchaus gerechtfertigt ist.

Mit dem Konzept der Grobstruktursimulation ändert sich die zur Berechnung einer turbulenten Strömung benötigte Anzahl der Gitterpunkte erheblich gegenüber der DNS. So muss die Gitterweite bei der Simulation atmosphärischer Turbulenz nicht mehr im Millimeterbereich liegen, sondern nimmt je nach zu untersuchender Fragestellung Werte im Bereich zwischen einigen Zentimetern oder Dekametern und etwa 100 m an.

Wie muss das zu Beginn dieses Kapitels eingeführte Gleichungssystem nun aber modifiziert werden, damit nur noch die Grobskala explizit aufgelöst wird? Das heißt, wie kann das ursprüngliche Gleichungssystem in eine Form überführt werden, die die Grundlage für ein Grobstruktursimulationsmodell bildet?

Um eine unterschiedliche Behandlung von Grob- und Feinstruktur zu erhalten, muss eine Filteroperation auf das ursprüngliche Gleichungssystem angewendet werden. Die explizite Berechnung von kleinskaligen Turbulenzelementen nahe des Dissipationsbereichs entfällt dann, während die großen, energietragenden Turbulenzelemente explizit aufgelöst werden. Aus mathematischer Sicht lässt sich die Skalentrennung als Tief-Pass-Filterung im Phasenraum beschreiben. Nach Leonard (1974) lässt sich die zugehörige Filteroperation im Ortsraum wie folgt schreiben:

$$\bar{\Psi}(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\vec{\zeta}, t') G(\vec{x} - \vec{\zeta}, t - t') dt' d^3\vec{\zeta}. \quad (4.20)$$

Der aufgelöste Anteil $\bar{\Psi}(\vec{x}, t)$ einer von Ort und Zeit abhängigen Variablen $\Psi(\vec{x}, t)$ lässt sich damit als Produkt eines Faltungsintegrals mit der charakteristischen Funktion G und der zugehörigen räumlichen Filterskala $\bar{\Delta}$ sowie der zeitlichen Abschneideskala $\bar{\tau}$ erhalten. Symbolisch lässt sich die Filteroperation und damit der Zusammenhang zwischen der aufgelösten Größe $\bar{\Psi}$ und dem ungefilterten Ψ auch schreiben als

$$\bar{\Psi} = G \star \Psi. \quad (4.21)$$

Der nicht aufgelöste Anteil Ψ' ist damit

$$\Psi'(\vec{x}, t) = \Psi(\vec{x}, t) - \bar{\Psi}(\vec{x}, t). \quad (4.22)$$

Die zugehörige symbolische Schreibweise ist

$$\Psi' = (1 - G) \star \Psi. \quad (4.23)$$

Im Phasenraum lässt sich die Filteroperation beschreiben als eine Multiplikation der Fourier-Transformierten $\hat{\Psi}(\vec{k}, \omega)$ der Funktion $\Psi(\vec{x}, t)$ mit der Fourier-Transformierten $\hat{G}(\vec{k}, \omega)$ der Filterfunktion $G(\vec{x}, t)$:

$$\hat{\bar{\Psi}}(\vec{k}, \omega) = \hat{\Psi}(\vec{k}, \omega) \hat{G}(\vec{k}, \omega). \quad (4.24)$$

Dabei ist ω die Kreisfrequenz und \vec{k} der Wellenzahlvektor. Alle zur Skalenfilterung benutzten Operatoren müssen die folgenden drei Eigenschaften erfüllen (Sagaut, 2001):

1. Eine Anwendung der Filteroperation auf eine Konstante K muss wieder die Konstante selbst ergeben. Dies ist gleichbedeutend mit der Tatsache, dass das Integral über die Filterfunktion 1 ergeben muss:

$$\overline{K} = K. \quad (4.25)$$

2. Der Filteroperator muss die Bedingung der Linearität erfüllen, d.h. die Anwendung des Operators auf die Summe zweier Funktionen muss das gleiche Ergebnis liefern wie die Summe der einzeln gefilterten Funktionen:

$$\overline{\Psi_1 + \Psi_2} = \overline{\Psi_1} + \overline{\Psi_2}. \quad (4.26)$$

3. Der Filteroperator muss kommutativ mit dem Ableitungsoperator sein:

$$\overline{\frac{\partial \Psi}{\partial s}} = \frac{\partial \overline{\Psi}}{\partial s}. \quad (4.27)$$

Darüber hinaus ist zu erwähnen, dass die Filteroperatoren im Allgemeinen keineswegs Reynolds-Operatoren sind, d.h., das Ergebnis einer zweifachen Anwendung des Filteroperators liefert nicht dasselbe Ergebnis wie eine einfache Anwendung,

$$\overline{\overline{\Psi}} \neq \overline{\Psi}, \quad (4.28)$$

und eine Anwendung der Filteroperation auf den nicht aufgelösten Anteil Ψ' verschwindet nicht:

$$\overline{\Psi'} \neq 0. \quad (4.29)$$

Ein weit verbreiteter Filteroperator, der hier jedoch nicht näher beschrieben werden soll, ist der spektrale Abschneidefilter (*engl.* spectral sharp cutoff filter). Die Fourier-Transformierte der Filterfunktion bewirkt, dass die Fourier-Transformierte des aufgelösten Anteils $\overline{\Psi}$ nur noch die Anteile der Fourier-Transformierten der Gesamtfunktion Ψ für Wellenzahlen k kleiner oder gleich einer Wellenzahl k_c enthält, die sich als $k_c = \frac{2\pi}{\Delta}$ ergibt. Ein weiteres Beispiel für einen Filteroperator ist der sogenannte Box- oder Top-Hat-Filter. In einer Dimension lässt sich die Filterfunktion für den Ortsraum wie folgt schreiben:

$$G(x - \zeta) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta} & \text{für } |x - \zeta| \leq \frac{\Delta}{2}, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.30)$$

Im Fourierraum bewirkt dieser Filteroperator kein vollständiges Abschneiden von Anteilen oberhalb einer bestimmten Wellenzahl, aber die Beiträge mit großen Wellenzahlen werden im Fourierraum durch die Filterung mit sehr kleinen Werten multipliziert, da die Fourier-Transformierte des Top-Hat-Filters

$$\hat{G}(k) = \frac{\sin\left(k\frac{\Delta}{2}\right)}{k\frac{\Delta}{2}} \quad (4.31)$$

ist. Auch der Top-Hat-Filter ist kein Reynolds-Operator. Da auch das Produkt der ersten Filteroperation $\overline{\Psi}$ eine kontinuierliche Funktion ist, fließen bei der zweiten Anwendung der Filteroperation auch Werte der ungefilterten Funktion Ψ außerhalb des eigentlichen Mittelungsbereichs in die erneute Mittelbildung ein.

Im im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Grobstruktursimulationsmodell PALM (**P**arallelized **L**arge-eddy simulation **M**odel) ([Raasch und Etling, 1991](#); [Raasch und Schröter, 2001](#)), das

nach den Modifikationen von [Letzel \(2007\)](#) auch zur Simulation der Umströmung von Gebäuden oder anderen undurchlässigen Hindernissen verwendet werden kann, wird eine Trennung zwischen der Grobskala und der Feinskala der Turbulenz auf eine ähnliche Art und Weise wie mit dem Top-Hat-Filter erreicht. Die verwendete Kontrollvolumenmethode nach [Schumann \(1975\)](#) fasst die Filterung des ursprünglichen Gleichungssystems aber direkt mit der zur numerischen Lösung der Gleichungen notwendigen Diskretisierung zusammen. Die Grundgleichungen werden daher nicht kontinuierlich im Raum gemittelt wie in der ursprünglichen Form des Top-Hat-Filters, sondern über diskrete Gittervolumina, die nicht miteinander überlappen ([Raasch und Etling, 1991](#)). Der Zusammenhang zwischen einer ungefilterten Größe Ψ und der zugehörigen gefilterten Größe $\overline{\Psi}$ lässt sich dann nach [Letzel \(2007\)](#) in der folgenden Form schreiben:

$$\overline{\Psi}(x, y, z, t) = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} \int_{y-\frac{\Delta y}{2}}^{y+\frac{\Delta y}{2}} \int_{z-\frac{\Delta z}{2}}^{z+\frac{\Delta z}{2}} \Psi(x', y', z', t) dx' dy' dz'. \quad (4.32)$$

Hierbei ist $x \in \{A + i\Delta x\}$, $y \in \{B + j\Delta y\}$ und $z \in \{C + k\Delta z\}$, wobei A , B und C die Koordinaten des Ursprungs des Modellgitters und i , j und k die Gitterpunktsindizes (ganzzahlig) bezeichnen. Diese Art der Filterung wird auch als implizite Filterung bezeichnet ([Fröhlich, 2006](#)), da die Filterung letztendlich durch die Diskretisierung erfolgt. Während die Anwendung des Top-Hat-Filters auf eine kontinuierliche Funktion nicht mit den Regeln für einen Reynolds-Operator konform ist, erfüllt die Anwendung des Mittelungsoperators auf diskrete Gittervolumina die Bedingungen für einen Reynolds-Operator. Damit gilt für den aufgelösten oder nach der Filterung verbleibenden Anteil des Produktes zweier Größen der Zusammenhang

$$\overline{\Psi_1 \Psi_2} = \overline{\Psi_1} \overline{\Psi_2} + \overline{\Psi'_1 \Psi'_2}. \quad (4.33)$$

4.3.2 Das gefilterte Gleichungssystem im LES-Modell PALM

Nach Durchführung der Filterung nimmt das Grundgleichungssystem im hier verwendeten Grobstruktursimulationsmodell PALM die folgende Form an:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_k \overline{u}_i} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \overline{p}^*}{\partial x_i} - (\epsilon_{ijk} f_j \overline{u}_k + \epsilon_{ij3} f_3 \overline{u}_j) \\ & + g \frac{\overline{\Theta}^*}{\Theta_0} \delta_{i3} - \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u'_i u'_k}, \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\frac{\partial \overline{u}}{\partial x_i} = 0, \quad (4.35)$$

$$\frac{\partial \overline{\Theta}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_k \overline{\Theta}} - \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u'_k \Theta'}. \quad (4.36)$$

4.3.3 Parametrisierung der subskaligen turbulenten Flüsse in PALM

Das gefilterte Gleichungssystem (4.34)-(4.36) enthält mehr Unbekannte als Gleichungen. Es ist somit nicht geschlossen. Durch die Filterung hat sich in den Navier-Stokes-Gleichungen und im 1. Hauptsatz der Thermodynamik jeweils ein zusätzlicher Term ergeben, über den die Auswirkung der subskaligen Turbulenz auf die aufgelösten Skalen berücksichtigt wird. Um das gefilterte

Gleichungssystem zu schließen, sind zusätzliche Beziehungen für die unbekanntenen Größen $\overline{u'_k u'_i}$ und $\overline{u'_k \Theta'}$ einzuführen. Eine umfassende Übersicht über verschiedene Schließungsansätze bietet [Stull \(1988\)](#). Jede Art von Modellierung der subskaligen turbulenten Flüsse besteht dabei in einer Rückführung auf aufgelöste Größen. In PALM wird ein Schließungsansatz eineinhalbter Ordnung nach [Deardorff \(1980\)](#) verwendet. Es wird von eineinhalbter Ordnung gesprochen, da das Konzept die Lösung einer weiteren prognostischen Gleichung für die subskalige turbulente kinetische Energie \bar{e} vorsieht, und daher die zweiten statistischen Momente nicht alle direkt auf aufgelöste Größen zurückgeführt werden. Die Rückführung der subskaligen Flüsse auf aufgelöste Größen gelingt in PALM wie folgt:

$$\overline{u'_k u'_i} = -K_m \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{e} \delta_{ij}, \quad (4.37)$$

$$\overline{u'_k \Theta'} = -K_h \frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial x_k}. \quad (4.38)$$

Der turbulente Diffusionskoeffizient für Impuls K_m wird in PALM über den Prandtl-Kolmogorow-Ansatz ([Detering, 1985](#))

$$K_m = 0,1l\sqrt{\bar{e}} \quad (4.39)$$

bestimmt, der die Kenntnis der subskaligen turbulenten kinetischen Energie \bar{e} voraussetzt. Diese wird durch zeitliche Integration einer weiteren prognostischen Gleichung erhalten. Der turbulente Diffusionskoeffizient für Wärme K_h lässt sich über den Zusammenhang

$$K_h = \left(1 + \frac{2l}{\Delta s} \right) K_m \quad (4.40)$$

bestimmen. Hierbei ist $\Delta s = (\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z)^{\frac{1}{3}}$ als geometrisches Mittel der Gitterweiten in den drei Raumrichtungen ein Maß für die charakteristische Gitterweite. Die Größe l bezeichnet den Mischungsweg, der in PALM in Abhängigkeit von charakteristischer Gitterweite, thermischer Schichtung und Abstand zum unteren Rand bestimmt wird. Bei neutraler oder labiler Schichtung bestimmt sich in PALM der Mischungsweg l daher als

$$l = \Delta s, \text{ bzw. } l = \min(\Delta s, 0,7 \cdot z(k=1)). \quad (4.41)$$

Liegt eine stabile Schichtung vor, so ergibt sich

$$l = \min \left(\Delta s, 0, 76\sqrt{\bar{e}} \left(\frac{g}{\Theta_0} \frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial z} \right)^{-\frac{1}{2}} \right), \text{ bzw.} \quad (4.42)$$

$$l = \min \left(\Delta s, 0, 76\sqrt{\bar{e}} \left(\frac{g}{\Theta_0} \frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial z} \right)^{-\frac{1}{2}}, 0,7 \cdot z(k=1) \right). \quad (4.43)$$

Die Wandanpassung des Mischungsweges wird dabei nur am ersten Gitterpunkt ($k=1$) vorgenommen. Die charakteristische Gitterweite wird am 1.Gitterpunkt in z-Richtung ebenfalls an die Entfernung vom festen Rand angepasst, damit bei labiler Schichtung stets gewährleistet bleibt, dass $K_h = 3K_m$ ist.

Die prognostische Gleichung für die subskalige turbulente kinetische Energie lautet (z.B. [Etling, 2002](#)):

$$\frac{\partial \bar{e}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} \bar{u}_k \bar{e} - \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{g}{\Theta_0} \overline{u'_3 \Theta'} \quad (4.44)$$

$$- \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{u'_j \left(e + \frac{p'}{\rho_0} \right)} \right) - \epsilon. \quad (4.45)$$

Die beiden letzten Terme auf der rechten Seite von Gleichung (4.44) sind neue Unbekannte, die ebenfalls parametrisiert werden müssen. Im Falle der Dissipation ϵ erfolgt eine Parametrisierung nach der Kolmogorow-Hypothese:

$$\epsilon = \left(0.19 + 0.74 \frac{l}{\Delta s} \right) \frac{\bar{e}^{\frac{3}{2}}}{l}. \quad (4.46)$$

Für die turbulenten Flüsse von Turbulenzenergie und Druckschwankungen wird ein Gradientenansatz gemacht:

$$\overline{u'_k \left(e' + \frac{p'}{\rho_0} \right)} = -2K_m \frac{\partial \bar{e}}{\partial x_j}. \quad (4.47)$$

4.3.4 Die Prandtlschicht in PALM

In PALM wird zwischen dem Erdboden und dem ersten Gitterpunkt, an dem die Horizontalgeschwindigkeitskomponenten sowie die Skalare definiert sind, eine Prandtlschicht angenommen. Die vertikalen turbulenten Flüsse werden hier aus in der Prandtlschicht gültigen Beziehungen abgeleitet.

Die Schubspannungsgeschwindigkeit u_* ist eine charakteristische Geschwindigkeit, die durch die Beziehung

$$u_* = (|\tau_{ij}/\bar{\rho}|)^{\frac{1}{2}} \quad (4.48)$$

definiert wird, wobei τ_{ij} der Reynoldssche Schubspannungstensor und ρ die Luftdichte ist. Unter Benutzung der bodennahen vertikalen Impulsflüsse $(\overline{u'w'}, \overline{v'w'})$ zur Beschreibung der bodennahen Schubspannung lässt sich die Schubspannungsgeschwindigkeit schreiben als

$$u_* = \left((-\overline{u'w'})^2 + (-\overline{v'w'})^2 \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (4.49)$$

Basierend auf dieser Definition der Schubspannungsgeschwindigkeit u_* kann der vertikale turbulente Impulsfluss $\overline{u'w'}$ bestimmt werden als

$$u_*^2 \cos(\alpha_0) = -\overline{u'w'}, \quad (4.50)$$

während der vertikale turbulente Impulsfluss $\overline{v'w'}$ aus

$$u_*^2 \sin(\alpha_0) = -\overline{v'w'} \quad (4.51)$$

erhalten werden kann. Der Winkel α_0 , der in der Prandtlschicht als konstant angenommen wird, ist der Winkel zwischen der x-Richtung und der Richtung des mittleren Horizontalwindes und kann bestimmt werden als

$$\alpha_0 = \arctan \left(\frac{\overline{v}(z_p)}{\overline{u}(z_p)} \right), \quad (4.52)$$

wobei z_p die Höhe der Prandtlschicht ist. Nach der Monin-Obukhovschen-Ähnlichkeitstheorie gilt die folgende Beziehung für den Vertikalgradienten des mittleren Horizontalwindes

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\bar{v}|}{\partial z} &= \frac{u_*}{\kappa z} \phi_m \left(\frac{z}{L} \right) \\ &= u_* \frac{1}{\kappa z} \phi_m \left(\frac{z}{L} \right). \end{aligned} \quad (4.53)$$

In der Gleichung (4.53) ist L die Monin-Obukhov-Länge und κ die von-Karman-Konstante, während ϕ_m die Profil- oder Dyer-Businger Funktion für den Impuls bezeichnet:

$$\phi_m = \begin{cases} 1 + 5\text{Rif} & \text{falls Rif} > 0, \\ 1 & \text{falls Rif} = 0, \\ (1 - 16\text{Rif})^{-\frac{1}{4}} & \text{falls Rif} < 0. \end{cases} \quad (4.54)$$

Hierbei steht Rif für die dimensionslose Richardsonflusszahl.

Durch Integration der Gleichung (4.53) von z_0 bis zu einer beliebigen Höhe z innerhalb der Prandtlschicht kann die folgende Beziehung für die Schubspannungsgeschwindigkeit erhalten werden:

$$u_* = \begin{cases} \frac{|\bar{v}(z)|\kappa}{\left(\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) + 5\text{Rif}\left(\frac{z-z_0}{z}\right)\right)} & \text{falls Rif} \geq 0, \\ \frac{|\bar{v}(z)|\kappa}{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \ln\left(\frac{(1+A)^2(1+A^2)}{(1+B)^2(1+B^2)}\right) + 2(\arctan(A) - \arctan(B))} & \text{falls Rif} < 0 \end{cases} \quad (4.55)$$

A und B stehen hierbei für

$$A = (1 - 16\text{Rif})^{\frac{1}{4}} \quad (4.56)$$

und

$$B = \left(1 - 16\text{Rif}\frac{z_0}{z}\right)^{\frac{1}{4}}. \quad (4.57)$$

In PALM wird die Schubspannungsgeschwindigkeit in der Tat über die Gleichung (4.55) erhalten, wobei für z die Höhe der Prandtlschicht z_p , d.h. die Höhe unterhalb der in PALM eine Parametrisierung mit Prandtlschichtbeziehungen erfolgt, eingesetzt wird.

Durch Ausnutzen der Gleichungen (4.52) und (4.53), ist es auch möglich eine Beziehung für die Änderung der mittleren u -Komponente der Windgeschwindigkeit mit der Höhe zu erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} &= \frac{\partial |\bar{v}|}{\partial z} \cos(\alpha_0) \\ &= \frac{u_*}{\kappa z} \phi_m\left(\frac{z}{L}\right) \cos(\alpha_0) \\ &= \frac{1}{u_*} u_*^2 \cos(\alpha_0) \frac{1}{\kappa z} \phi_m\left(\frac{z}{L}\right) \\ &= \frac{-\overline{u'w'}}{u_*} \frac{1}{\kappa z} \phi_m\left(\frac{z}{L}\right). \end{aligned} \quad (4.58)$$

Ganz analog dazu kann eine Beziehung für die Änderung der mittleren v -Komponente der Windgeschwindigkeit mit der Höhe hergeleitet werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} &= \frac{\partial |\bar{v}|}{\partial z} \sin(\alpha_0) \\ &= \frac{u_*}{\kappa z} \phi_m\left(\frac{z}{L}\right) \sin(\alpha_0) \\ &= \frac{1}{u_*} u_*^2 \sin(\alpha_0) \frac{1}{\kappa z} \phi_m\left(\frac{z}{L}\right) \\ &= \frac{-\overline{v'w'}}{u_*} \frac{1}{\kappa z} \phi_m\left(\frac{z}{L}\right). \end{aligned} \quad (4.59)$$

Da die rechten Seiten der Gleichungen (4.58) und (4.59) nur durch Vorfaktoren, die in der Prandtschicht als konstant angenommen werden, von der rechten Seite der Gleichung (4.53) abweichen, kann direkt von der Integration Gebrauch gemacht werden, die zu Gleichung (4.55) führte, um die Beziehung

$$C = \frac{-\overline{u'w'}}{u_*} = \begin{cases} \frac{\overline{u(z)\kappa}}{\left(\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) + 5\text{Rif}\left(\frac{z-z_0}{z}\right)\right)} & \text{falls Rif} \geq 0, \\ \frac{\overline{u(z)\kappa}}{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \ln\left(\frac{(1+A)^2(1+A^2)}{(1+B)^2(1+B^2)}\right) + 2(\arctan(A) - \arctan(B))} & \text{falls Rif} < 0. \end{cases} \quad (4.60)$$

sowie die Beziehung

$$D = \frac{-\overline{v'w'}}{u_*} = \begin{cases} \frac{\overline{v(z)\kappa}}{\left(\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) + 5\text{Rif}\left(\frac{z-z_0}{z}\right)\right)} & \text{falls Rif} \geq 0, \\ \frac{\overline{v(z)\kappa}}{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \ln\left(\frac{(1+A)^2(1+A^2)}{(1+B)^2(1+B^2)}\right) + 2(\arctan(A) - \arctan(B))} & \text{falls Rif} < 0. \end{cases} \quad (4.61)$$

zu erhalten, die einen ersten Schritt auf dem Weg zur Bestimmung der vertikalen turbulenten Impulsflüsse in der Prandtschicht darstellen. Beide Gleichungen, (4.60) und (4.61), werden in PALM verwendet. Um schließlich die turbulenten vertikalen Impulsflüsse in der Prandtschicht zu bestimmen, müssen die Gleichungen (4.60) und (4.61) nur noch mit -1 und mit der Schubspannungsgeschwindigkeit u_* multipliziert werden, so dass noch die folgenden zwei Schritte in PALM ausgeführt werden:

$$\overline{u'w'} = -Cu_* \quad (4.62)$$

sowie

$$\overline{v'w'} = -Du_*. \quad (4.63)$$

Der turbulente vertikale Wärmestrom in der Prandtschicht kann vom Benutzer von PALM explizit auf einen bestimmten Wert gesetzt werden. Wird vom Benutzer jedoch kein Wert für den bodennahen Wärmestrom vorgegeben, so wird der bodennahe Wärmestrom (exakter Temperaturfluss oder kinematischer Wärmestrom) $\overline{w'\Theta'}_0$ über den Zusammenhang

$$\overline{w'\Theta'}_0 = -u_*\theta_* \quad (4.64)$$

berechnet. Hierbei ist θ_* die sogenannte charakteristische Temperatur für die Prandtschicht. Ohne die Vorgabe eines bodennahen Wärmestroms wird die charakteristische Temperatur θ_* in PALM aus der integrierten Version der Profilfunktion der potentiellen Temperatur erhalten. Nach der von Monin und Obukhov entwickelten Ähnlichkeitstheorie gilt die folgende Beziehung für den vertikalen Gradienten der potentiellen Temperatur in der Prandtschicht:

$$\frac{\partial \overline{\Theta}}{\partial z} = \frac{\theta_*}{\kappa z} \phi_h. \quad (4.65)$$

In Gleichung (4.65) bezeichnet ϕ_h die Profil- oder Dyer-Businger-Funktion für die Temperatur:

$$\phi_h = \begin{cases} 1 + 5\text{Rif} & \text{falls Rif} > 0, \\ 1 & \text{falls Rif} = 0, \\ (1 - 16\text{Rif})^{-\frac{1}{2}} & \text{falls Rif} < 0. \end{cases} \quad (4.66)$$

Durch Integration von Gleichung (4.65) von z_0 bis zu einer beliebigen Höhe z innerhalb der Prandtschicht kann die folgende Beziehung für die charakteristische Temperatur hergeleitet

werden:

$$\theta_* = \begin{cases} \frac{\kappa(\bar{\Theta}(z) - \bar{\Theta}(z_0))}{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) + 5\text{Rif}\left(\frac{z-z_0}{z}\right)} & \text{falls Rif} \geq 0, \\ \frac{\kappa(\bar{\Theta}(z) - \bar{\Theta}(z_0))}{\ln\left(\frac{z}{z_0} - 2\ln\left(\frac{1+A}{1+B}\right)\right)} & \text{falls Rif} < 0 \end{cases} \quad (4.67)$$

Hierbei stehen A und B für

$$A = \sqrt{1 - 16\text{Rif}} \quad (4.68)$$

und

$$B = \sqrt{1 - 16\text{Rif}\frac{z_0}{z}}. \quad (4.69)$$

Erwähnenswert ist darüber hinaus, dass die Temperatur in der Höhe der Rauigkeitslänge z_0 , die für die Berechnung von θ_* in Gleichung (4.67) benötigt wird, in PALM auf dem ersten Gitterpunktsniveau der Temperatur mit dem Gitterpunktsindex $k = 0$ abgespeichert ist. Die Höhe, die diesem Gitterpunktsniveau allerdings eigentlich zugeordnet ist, ist $-0.5\Delta z$, wobei Δz die Gitterweite in vertikaler Richtung ist. Wird der bodennahe turbulente vertikale Wärmestrom $\overline{w'\Theta'}_0$ vom Benutzer vorgegeben, so wird die Berechnung von θ_* für die eigentliche zeitliche Integration des LES-Modells nicht benötigt. Stattdessen wird θ_* lediglich für statistische Zwecke berechnet. In diesem Fall wird die charakteristische Temperatur einfach durch eine Umstellung der Gleichung (4.64) erhalten:

$$\theta_* = -\frac{\overline{w'\Theta'}_0}{u_*}. \quad (4.70)$$

Die oben gegebene Einführung in die Berücksichtigung der Prandtlschicht im LES-Modell PALM ist nur für die trockene Version von PALM, d.h. für die Version ohne Berücksichtigung von Feuchte in der Atmosphäre vollständig. Im Fall, dass PALM in seiner feuchten Version betrieben wird, wird auch noch eine Information über den turbulenten vertikalen Fluss spezifischer Feuchte in der Prandtlschicht benötigt, der entweder auch direkt vom Benutzer vorgegeben wird oder nach Bestimmung der charakteristischen Feuchte in der Prandtlschicht bestimmt werden kann. Der Weg zur Berechnung des Feuchteflusses ist dabei analog zu dem Weg, der zur Bestimmung des Wärmestroms in der Prandtlschicht führte.

4.3.5 Die numerischen Verfahren

Die Diskretisierung

In PALM werden zur numerischen Lösung des oben ausführlich erläuterten Gleichungssystems finite Differenzenverfahren benutzt. Dabei werden die räumlichen und zeitlichen Differentialquotienten in Differenzenquotienten überführt (z.B. $\partial t \rightarrow \Delta t$). Die nichtlinearen Advektionsterme werden nach der von [Piacsek und Williams \(1970\)](#) beschriebenen Methode approximiert. Dieses Verfahren kann - wie allgemein Advektionsverfahren zweiter Ordnung - bei Auftreten großer Differenzen auf engem Raum zur Ausbildung von sogenannten numerischen $2\Delta x$ -Instabilitäten führen (z.B. [LeVeque, 1992](#)). Das Auftreten solcher $2\Delta x$ -Instabilitäten im Feld der subskaligen turbulenten kinetischen Energie würde im mit PALM gekoppelten Lagrangeschen stochastischen Modell aber unrealistisch große Partikelgeschwindigkeiten verursachen. Daher wird in PALM wie in [Chlond \(1992\)](#) die Advektion von subskaliger turbulenter kinetischer Energie mit dem diffusiveren Upstream-Verfahren approximiert, wenn eine Simulation mit eingeschaltetem Lagrangeschen stochastischen Partikelmodell durchgeführt wird. [Chlond \(1992\)](#) verwendete mit dem Upstream-Verfahren für die subskalige turbulente kinetische Energie $\bar{\epsilon}$ ebenfalls ein anderes

Advektionsverfahren als für die restlichen prognostischen Größen, da das Upstream-Verfahren sicherstellt, dass positive Skalare wie die subskalige turbulente kinetische Energie immer positiv bleiben. Das Piacsek-Williams-Verfahren kann hingegen zunächst auch physikalisch unsinnige negative Werte für die subskalige turbulente kinetische Energie prognostizieren, die dann in PALM nachträglich mit einem Zehntel des Wertes zum vorherigen Zeitschritt überschrieben werden.

In PALM werden alle berechneten Größen auf einem versetzten Gitter (*engl.* staggered grid) vom Arakawa-C-Typ (Arakawa, 1966) abgespeichert. In PALM sind die skalaren Größen $(\Theta, \bar{e}, \bar{p}^*, K_m, K_h)$ an den Mittelpunkten eines Gittervolumens definiert, während die horizontalen Komponenten der Windgeschwindigkeit, \bar{u}_1 und \bar{u}_2 , in den gleichen Höhenniveaus wie die Skalare, aber an horizontalen Positionen, die jeweils um eine halbe Gitterweite in negative x -Richtung bzw. negative y -Richtung verschoben liegen, definiert sind. Die Vertikalgeschwindigkeit \bar{u}_3 ist an Positionen eine halbe Gitterweite oberhalb des Zentrums der Gitterbox definiert. Der große Vorteil eines versetzten Gitters vom Arakawa-C-Typ liegt in der Erhöhung der effektiven Auflösung um einen Faktor zwei (Pielke, 2002), da eine Approximation zweiter Ordnung der räumlichen Ableitungen durch Bildung von Differenzenquotienten über eine Gitterweite erreicht wird. Darüber hinaus erlaubt das Arakawa-C-Gitter eine sehr einfache Berechnung der Divergenzen des Strömungsfeldes ohne zusätzliche Mittelungsoperationen und die Beseitigung der Divergenzen über die Bestimmung eines Stördruckfelds (siehe Abschnitt 4.3.6) ist wesentlich effektiver, als wenn ein nicht versetztes Gitter mit der effektiv schlechteren Auflösung benutzt wird (Anderson, 1995).

Das Verfahren der zeitlichen Integration

Für die zeitliche Integration der prognostischen Gleichungen wird in PALM standardmäßig ein Runge-Kutta-Verfahren 3.Ordnung (Durrant, 1999) verwendet. Die Implementierung dieses Verfahrens in PALM ist detailliert in Jansen (2004) dokumentiert. Das Runge-Kutta-Verfahren zeichnet sich aufgrund seines hohen Approximationsgrads durch eine hohe numerische Stabilität aus, so dass Zeitschritte mit Größen von 90 % des sich nach Advektions- und Diffusionskriterium theoretisch ergebenden Wertes bedenkenlos verwendet werden können. Dies ist deutlich höher als beispielsweise beim Leap-Frog-Verfahren, das aufgrund der geringeren numerischen Stabilität nur mit maximal 10 % des theoretisch möglichen Zeitschritts betrieben werden sollte. Darüber hinaus kann das Runge-Kutta-Verfahren 3.Ordnung unter Beibehaltung numerischer Stabilität sowohl zusammen mit dem Piacsek-Williams-Advektionsverfahren als auch mit dem einfachen Upstream-Verfahren 1.Ordnung betrieben werden.

Der Zeitschritt Δt wird in PALM durch Multiplikation des Minimums aus dem sich nach dem CFL-Kriterium (Advektionskriterium) und dem sich nach dem Diffusionskriterium ergebenden Zeitschritt mit einem Sicherheitsfaktor f_{sicher} bestimmt:

$$\Delta t = f_{sicher} \min(\Delta t_{CFL}, \Delta t_{diff}). \quad (4.71)$$

Für das Runge-Kutta-Verfahren besitzt der Sicherheitsfaktor f_{sicher} standardmäßig einen Wert von 0,9. Das CFL-Kriterium sichert, dass der Bereich des Modellgebiets, der die Lösung an einem Gitterpunkt, die mit den diskretisierten Gleichungen berechnet wurde, beeinflusst, vollständig den Bereich enthält, der die Lösung im kontinuierlichen Fall bestimmt (Roache, 1985). Das CFL-Kriterium (Courant et al., 1928) ist für die lineare Wellengleichung abgeleitet worden, wird aber unter Berücksichtigung eines Sicherheitsfaktors auch zur Lösung der nicht-linearen

Navier-Stokes-Gleichungen verwendet. Für das CFL-Kriterium gilt:

$$\Delta t_{CFL} = \min \left(\frac{\Delta x}{\max(\bar{u}_1)}, \frac{\Delta y}{\max(\bar{u}_2)}, \min \left(\frac{\Delta z}{\bar{u}_3} \right) \right). \quad (4.72)$$

Die Einhaltung des Diffusionskriteriums verhindert, dass innerhalb eines Zeitschrittes die Diffusion einer Größe über eine Maschenweite des Gitters hinaus stattfinden kann. Es lautet:

$$\Delta t_{diff} = \frac{1}{8} \frac{\min(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta z^2)}{\max(K_m, K_h)}. \quad (4.73)$$

4.3.6 Die Poisson-Gleichung für den Stördruck

Die in PALM verwendeten prognostischen Gleichungen für die drei Komponenten der aufgelösten Windgeschwindigkeit, \bar{u}_1 , \bar{u}_2 und \bar{u}_3 , sind in der verwendeten Form nur korrekt, wenn das der Prognose für den nächsten Zeitpunkt zugrunde liegende Strömungsfeld die Bedingung der Divergenzfreiheit erfüllt. Die Möglichkeit der Notation der Advektionsterme in der Flussform setzt zwingend das Vorhandensein eines divergenzfreien Geschwindigkeitsfelds voraus. In PALM wird die Forderung nach Divergenzfreiheit durch die Bestimmung eines geeigneten Stördruckfeldes erfüllt. Mit einem Verfahren nach [Patrinos und Kistler \(1977\)](#), bei dem die Integration der Navier-Stokes-Gleichung für jeden Zeitschritt in zwei Teilschritte unterteilt wird (*engl.* time-splitting), wird der Stördruckterm $\frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i}$ so angepasst, dass das neu prognostizierte Geschwindigkeitsfeld jeweils divergenzfrei ist.

Wird das Runge-Kutta-Verfahren zur zeitlichen Integration der Modellgleichungen verwendet, so erfolgt die Gewährleistung der Divergenzfreiheit wie folgt. Das in PALM verwendete Runge-Kutta-Verfahren besteht aus drei Teilschritten. Nur im ersten Teilschritt des Runge-Kutta-Verfahrens wird der Stördruckterm - allerdings unter Verwendung des Stördruckfeldes zum vorherigen Zeitpunkt - bei der zeitlichen Integration der Bewegungsgleichungen verwendet. Hierdurch wird eine Prädiktion des Drucklösers erreicht. In den beiden anderen Teilschritten wird der Stördruckterm zunächst überhaupt nicht berücksichtigt, da laut [Jansen \(2004\)](#) ansonsten eine Überkonditionierung des Drucklösers vorläge. In allen drei Teilschritten wird somit zunächst ein divergenzbehaftetes, vorläufiges Geschwindigkeitsfeld \bar{u}_{vorl_i} erhalten. Das endgültige Geschwindigkeitsfeld muss dann einerseits der Kontinuitätsgleichung genügen, also divergenzfrei sein, berechnet sich andererseits aber aus dem vorläufigen Geschwindigkeitsfeld und dem Stördruckterm. Daher muss auch gelten:

$$\frac{\partial \bar{u}_i^{t+\Delta t}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{u}_{vorl_i}^{t+\Delta t} - \frac{r \Delta t}{\varrho_0} \frac{\partial \bar{p}^{*t}}{\partial x_i} \right) \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.74)$$

$$\implies \frac{\partial^2 \bar{p}^{*t}}{\partial x_i^2} = \frac{\varrho_0}{r \Delta t} \frac{\partial \bar{u}_{vorl_i}^{t+\Delta t}}{\partial x_i}. \quad (4.75)$$

Letzte der beiden Gleichungen ist eine lineare partielle Differentialgleichung 2. Ordnung oder elliptische Differentialgleichung und wird als Poisson-Gleichung für den Stördruck bezeichnet. Der Stördruck muss also letztendlich der Poisson-Gleichung genügen, um die Divergenzfreiheit des aufgelösten Geschwindigkeitsfelds zu sichern. Der Faktor r in 4.74 hängt prinzipiell von dem verwendeten Zeitschrittverfahren ab. In PALM besitzt r aber unabhängig von dem verwendeten Zeitschrittverfahren immer einen Wert von 1, so dass in PALM zwar die durch den Stördruck bewirkten Geschwindigkeitsänderungen korrekt berechnet werden (der Faktor r kürzt sich bei

der Berechnung der durch die Gradienten des Stördrucks über die Zeit $r\Delta t$ bewirkte Geschwindigkeitsänderung ohnehin heraus) und so zu jedem Zeitpunkt ein divergenzfreies Geschwindigkeitsfeld erhalten wird. Bei der Interpretation der berechneten Absolutwerte des Stördrucks \bar{p}^* ist jedoch einmal aufgrund des dreifachen Aufrufes des Drucklösers im Runge-Kutta-Verfahren und einmal aufgrund der Nichtberücksichtigung des korrekten Faktors r Vorsicht geboten. Zur Lösung der Poisson-Gleichung für den Stördruck 4.74 stehen in PALM drei verschiedene Verfahren zur Verfügung:

- die direkte Lösung mittels **F**ast-**F**ourier-**T**ransformation (FFT-Algorithmus),
- die iterative Lösung mittels sukzessiver Überrelaxation (SOR-Verfahren, *engl.* **s**uccessive **o**ver **r**elaxation),
- und das Multigrid-Verfahren (CS-Algorithmus, *engl.* **c**orrection **s**torage).

Eine ausführliche Erläuterung aller Verfahren ist in der Arbeit von [Uhlenbrock \(2001\)](#) zu finden. Im Rahmen der in dieser Studie durchgeführten Simulationen, die in den **Artikeln I-III** vorgestellt werden, ist lediglich das Verfahren der Bestimmung des Stördrucks mittels FFT zum Einsatz gekommen, welches in PALM routinemäßig verwendet wird, wenn mit zyklischen seitlichen Randbedingungen, wie auch hier, gerechnet wird.

DAS EINGEBETTETE LAGRANGESCHE STOCHASTISCHE MODELL

5.1 BISHERIGE VERWENDUNGEN VON LES-DATEN ZUM ANTRIEB VON LAGRANGESCHEN MODELLEN

Wie in Kapitel 3 deutlich wurde, werden innerhalb der Mikrometeorologie in die Methode der Grobstruktursimulation große Hoffnungen im Bezug auf Validierungsmöglichkeiten von konventionellen, d.h. analytischen und Lagrangeschen stochastischen Footprintmodellen, sowie im Bezug auf die erstmalige Bestimmung realistischer Footprints unter horizontal heterogenen Bedingungen gesetzt.

Bisher stand allerdings noch der Nachweis, dass die Methode der Grobstruktursimulation, die in sie gesetzten Hoffnungen auf dem Gebiet der Footprintmodellierung erfüllen kann, aus. Nur wenige Studien existierten, die sich mit der Verwendung von LES-Modellen zur Footprintbestimmung beschäftigten, und in all diesen Studien wurden lediglich Footprintbestimmungen für Messungen über vollkommen idealisierten, horizontal homogenen Untergründen durchgeführt. Darüber hinaus beschränkten sich die wenigen Studien auch noch auf Footprintbestimmungen in der konvektiven Grenzschicht. Dabei sahen Schmid (2002), Foken und Leclerc (2004) sowie Vesala et al. (2008) besonders große Vorteile der LES gegenüber den konventionellen Methoden zur Footprintbestimmung in dem weiten Bereich von atmosphärischen Schichtungen, unter denen die LES realistische Strömungsfelder und damit potentiell auch realistische Footprints liefern kann. Als weiterer Vorteil der LES wurde ihre Fähigkeit, auch bei horizontal heterogener Unterlage realistische Strömungsfelder zu generieren, angesehen.

Im Rahmen dieser Arbeit sollte daher unter Verwendung des LES-Modells PALM erstmals das Potential von Grobstruktursimulationsmodellen für Footprintbestimmungen in der konvektiven, neutralen und stabilen Grenzschicht aufgezeigt werden. Darüber hinaus sollten auch Footprintbestimmungen für Messungen in Grenzschichten mit horizontal heterogenen Randbedingungen durchgeführt werden. Dabei sollten die Heterogenitäten in den durchzuführenden Simulationen von einfachen eindimensionalen Wärmestrominhomogenitäten über idealisierte Gebäudefelder bis hin zur Abbildung einer realen Landoberfläche mit Rauigkeits-, Wärmestrom- und Feuchteunterschieden reichen.

Als grundsätzliche Methode zur Footprintbestimmung mit Hilfe des LES-Modells wurde ein Lagrangescher Ansatz wie in Hadfield (1994) oder Cai und Leclerc (2007) und damit nicht die Eulersche Methode wie in Leclerc et al. (1997) gewählt. Die Eulersche Methode erscheint für einen Einsatz unter horizontal heterogenen Bedingungen ungeeignet, da bei ihrer Verwendung für flächendeckende Footprintinformationen so viele zusätzliche prognostische Gleichungen für passive Skalare zu lösen wären, wie es Quellen für das passive Skalar gibt. Für die Footprintbestimmung für einzelne Quellen, wie zum Beispiel in Sogachev und Lloyd (2004) mit einem RANS-Modell praktiziert, kann die Eulersche Methode jedoch eine gute Alternative zum Lagrangeschen Ansatz sein, da die Eulersche Methode eine Footprintbestimmung direkt aus Ausgabedaten des LES-Modells ermöglicht, während bei der Lagrangeschen Bestimmungsmethode die Bestimmung von Footprints erst nach der Verwendung von LES-Daten in einem Lagrangeschen stochastischen Modell möglich ist.

Die Verwendung von Daten eines Grobstruktursimulationsmodells zur Simulation der Partikelverlagerung geht ursprünglich auf [Lamb \(1978\)](#) zurück. Er verwendete die Ergebnisse der LES von [Deardorff \(1974\)](#), um die Dispersion eines aus einer kontinuierlichen Punktquelle freigesetzten Schadstoffs zu berechnen. Dafür zerlegte [Lamb \(1978\)](#) ganz analog zum Grundprinzip der Grobstruktursimulation die Lagrangesche Geschwindigkeit eines Partikels \vec{V}_L in einen Anteil, der aus dem Feld der in der LES aufgelösten Geschwindigkeit bestimmt wurde (\vec{V}_r) und einen Anteil, der die subskaligen Geschwindigkeitsfluktuationen repräsentieren sollte (\vec{V}_s):

$$\vec{V}_L = \vec{V}_r + \vec{V}_s. \quad (5.1)$$

Der subskalige Anteil der Partikelgeschwindigkeiten wurde über ein Monte-Carlo-Schema unter Verwendung der vom Grobstruktursimulationsmodell berechneten subskaligen turbulenten kinetischen Energie bestimmt. Mit seiner Methode konnte [Lamb \(1978\)](#) relativ gute Übereinstimmungen mit den Ergebnissen des Konvektionstankexperiments von [Willis und Deardorff \(1978\)](#) erzielen. Damit galt die grundsätzliche Eignung von LES-Daten für den Antrieb eines Lagrangeschen Modells mit dem Ziel der Simulation von Dispersionsexperimenten als gezeigt.

[Gopalakrishnan und Avissar \(2000\)](#) verwendeten ebenfalls LES-Daten, um damit ein Lagrangesches Modell anzutreiben. Sie verzichteten allerdings auf eine Modellierung des subskaligen Anteils der Partikelgeschwindigkeiten, da ihrer Meinung nach kein geeigneter Ansatz dafür zur Verfügung stand. Daher bestimmten sie die Partikelgeschwindigkeiten alleine aus dem aufgelösten Geschwindigkeitsfeld. Durch Vergleichsläufe mit unterschiedlichen Auflösungen in der LES kamen sie zu der Einschätzung, dass die Vernachlässigung der subskaligen Geschwindigkeitsfluktuationen nur in Bodennähe zu Abweichungen im prognostizierten Konzentrationsfeld führte, also dort, wo auch in der LES die subskaligen Turbulenzelemente einen Großteil zu der gesamten turbulenten kinetischen Energie und den turbulenten Flüssen beitragen.

Vor Beginn der Arbeiten zur Promotion enthielt auch das Grobstruktursimulationsmodell PALM bereits ein Lagrangesches Modell, das allerdings wie das Lagrangesche Modell in [Gopalakrishnan und Avissar \(2000\)](#) auf die Modellierung des subskaligen Anteils der Partikelgeschwindigkeiten verzichtete. Typischerweise sind Eddy-Kovarianz-Messungen der turbulenten Flüsse und die Quellen eines passiven Skalars aber im bodennahen Bereich anzutreffen, also genau dort, wo eine Vernachlässigung des subskaligen Anteils der Partikelgeschwindigkeit nach [Gopalakrishnan und Avissar \(2000\)](#) problematisch ist. Es ist daher empfehlenswert, den subskaligen Anteil der Partikelgeschwindigkeiten über eine geeignete Parametrisierung zu berücksichtigen, wenn mit Hilfe des Lagrangeschen, dann stochastischen, Modells die Footprints für bodennahe Quellen bestimmt werden sollen. In **Artikel II** wird näher auf die Bedeutung der subskaligen Fluktuationen der Partikelgeschwindigkeit für Ausbreitungsrechnungen und Footprintbestimmungen eingegangen.

Die Benutzung von LES-Daten für den Antrieb eines Lagrangeschen Partikelmodells wie in [Lamb \(1978\)](#) anstatt der vollständigen Parametrisierung der Partikelgeschwindigkeiten, wie z.B. in [Leclerc und Thurtell \(1990\)](#) oder [Wilson und Swaters \(1991\)](#), hat den Vorteil, dass es für das von der LES prognostizierte Geschwindigkeitsfeld, abgesehen von den Auswirkungen numerischer Ungenauigkeiten, nur eine einzige Lösung gibt. Wie in dem Kapitel 3 berichtet wurde, liefern die Lagrangeschen Footprintmodelle, in denen die Partikelgeschwindigkeiten vollkommen parametrisiert werden, hingegen keine eindeutige Lösung, wenn dreidimensionale Turbulenz simuliert wird. Das Nicht-Eindeutigkeitsproblem wird bei der Benutzung von LES-Daten zum Antrieb eines Lagrangeschen stochastischen Modells auf die subskaligen Komponenten der Partikelgeschwindigkeit reduziert. Mögliche Auswirkungen des Nicht-Eindeutigkeits-Problems sollten also geringer als in den vollkommen parametrisierten Modellen sein ([Weil et al., 2004](#)).

Das Lagrangesche stochastische Modell, das im Rahmen dieser Studie unter Verwendung von Daten des LES-Modells PALM zur Berechnung von Footprints verwendet wurde, wurde im Laufe der Arbeiten an der Promotion nach dem Vorbild des Modells von [Weil et al. \(2004\)](#) entwickelt. Weitere Vorschläge, wie LES-Daten zum Antrieb eines Lagrangeschen stochastischen Modells genutzt werden können, wurden vor erst relativ kurzer Zeit auch von [Cai et al. \(2006\)](#) (die entsprechende Methode wurde dann von [Cai und Leclerc \(2007\)](#) auch zur Bestimmung von Footprints verwendet) und von [Vinkovic et al. \(2006\)](#) veröffentlicht.

Im Folgenden soll eine kurze Einführung in die Theorie des im Rahmen dieses Promotionsvorhabens entwickelten und in das Grobstruktursimulationsmodell PALM in Form eines Unterprogramms eingebetteten Lagrangeschen stochastischen Modells gegeben werden. Für tiefergehende Informationen sei bereits an dieser Stelle auf die Veröffentlichung von [Weil et al. \(2004\)](#) verwiesen, auf die sich die Entwicklung des hier verwendeten Modells stützte.

5.2 THEORIE DES LAGRANGESCHEN STOCHASTISCHEN MODELLS

Der von [Weil et al. \(2004\)](#) entwickelte Vorschlag für ein Lagrangesches stochastisches Modell, das durch LES-Daten angetrieben werden kann, basiert auf einer Anpassung der ursprünglich von [Thomson \(1987\)](#) hergeleiteten Theorie für Lagrangesche stochastische Modelle an die Gitterbox-Skala. Das heißt, wurde bei [Thomson \(1987\)](#) die gesamte Turbulenz parametrisiert, so wird bei [Weil et al. \(2004\)](#) nur noch die Turbulenz, die nicht durch das numerische Gitter aufgelöst wird, parametrisiert. Die Unterschiede zwischen dem originalen Modell von [Thomson \(1987\)](#) und dem modifizierten Modell von [Weil et al. \(2004\)](#) lassen sich also in gewisser Weise mit dem Unterschied zwischen einem Ensemble-gemittelten Modell und einem Volumen-gemittelten Modell vergleichen.

[Thomson \(1987\)](#) leitete für den allgemeinen Fall instationärer und inhomogener Turbulenz folgende Form der Langevin-Gleichung (3.3) her:

$$dV_{Li} = a_i dt + \sqrt{C_0 \langle \epsilon \rangle} d\xi. \quad (5.2)$$

Der zweite Term ist der Zufallsanteil der Partikelbeschleunigung mit der universalen Konstanten C_0 und der Ensemble-gemittelten Dissipation $\langle \epsilon \rangle$. Der Wert der universalen Konstante wurde von Thomson (1987) mit 4 ± 2 angegeben. Damit ist der Zufallsterm in einer Form, die konsistent mit der von [Monin und Yaglom \(1975\)](#) berechneten Lagrangeschen Strukturfunktion im Inertialbereich ist: $dV_{Li}dV_{Lj} = \delta_{ij}C_0 \langle \epsilon \rangle dt$, wobei δ_{ij} das Kronecker-Symbol ist.

Die Funktionen a_i wurden von [Thomson \(1987\)](#) für den Fall inhomogener gaußverteilter Turbulenz bestimmt als

$$a_i = -\frac{C_0 \langle \epsilon \rangle}{2} \langle \lambda_{ik} \rangle (V_k - V_{Ek}) + \frac{\phi_i}{p_E}. \quad (5.3)$$

Hierbei ist $\langle \lambda_{ik} \rangle$ das Inverse des Ensemble-gemittelten Schubspannungstensors $\langle \tau_{ij} \rangle$, V_i und V_{Ei} sind die i-ten Komponenten der totalen Partikelgeschwindigkeit und der Ensemble-gemittelten Eulerschen Geschwindigkeiten und $\frac{\phi_i}{p_E}$ ist

$$\begin{aligned} \frac{\phi_i}{p_E} &= \frac{1}{2} \frac{\partial \langle \tau_{il} \rangle}{\partial x_l} + \frac{\partial V_{Ei}}{\partial t} + V_{El} \frac{\partial V_{Ei}}{\partial x_l} \\ &+ \left(\frac{1}{2} \langle \lambda_{lj} \rangle \left(\frac{\partial \langle \tau_{il} \rangle}{\partial t} + V_{Em} \frac{\partial \langle \tau_{il} \rangle}{\partial x_m} \right) + \frac{\partial V_{Ei}}{\partial x_j} \right) (V_j - V_{Ej}) \\ &+ \frac{1}{2} \langle \lambda_{lj} \rangle \frac{\partial \langle \tau_{il} \rangle}{\partial x_k} (V_j - V_{Ej})(V_k - V_{Ek}). \end{aligned} \quad (5.4)$$

p_E ist dabei die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Eulerschen Geschwindigkeiten. An dieser Stelle führten [Weil et al. \(2004\)](#) die Anpassungen durch, die am Thomson-Modell vorgenommen werden müssen, damit nur noch die subskaligen Anteile der Partikelgeschwindigkeit als Lösung der Langevin-Gleichung erhalten werden. Dafür machten [Weil et al. \(2004\)](#) die folgenden vier Annahmen.

1. Das Pendant für die Ensemble-gemittelte Geschwindigkeit V_{Ei} ist auf der Gitterbox-Skala die aufgelöste Geschwindigkeit V_{ri} .
2. Das Lagrangesche stochastische Modell beschreibt die subskalige zufällige Geschwindigkeit V_{si} um V_{ri} .
3. Die subskaligen Geschwindigkeitsanteile sind Elemente einer gaußförmigen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, die von dem subskaligen Schubspannungstensor τ_{ij} und dem Inversen des subskaligen Schubspannungstensors λ_{ij} abhängt.
4. Das Pendant für die Ensemble-gemittelte Dissipationsrate $\langle \epsilon \rangle$ ist auf der Gitterbox-Skala die lokale Dissipationsrate ϵ .

Unter diesen Voraussetzungen und unter Rückgängigmachung der Eulerschen Zerlegung lässt sich Gleichung (5.4) für die Gitterbox-Skala dann in der folgenden Form schreiben:

$$\begin{aligned} \frac{\phi_i}{p_E} &= \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{il}}{\partial x_l} + \frac{dV_{ri}}{dt} \\ &+ \frac{1}{2} \lambda_{lj} \frac{d\tau_{il}}{dt} V_{si}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Nimmt man die Modifikationen für die Anpassung an die Gittervolumenskala nun auch in der Langevin-Gleichung (5.2) vor, macht dort Gebrauch von Gleichung (5.5) und subtrahiert von beiden Seiten der Gleichung noch dV_{ri} , so ergibt sich schließlich als Bestimmungsgleichung für die Inkremente der Komponenten des subskaligen Anteils der Partikelgeschwindigkeiten:

$$dV_{si} = -\frac{f_s C_0 \epsilon}{2} \lambda_{ik} V_{sk} dt + \frac{1}{2} (\lambda_{lj} \frac{d\tau_{il}}{dt} V_{sj} + \frac{\partial \tau_{il}}{\partial x_l}) dt + \sqrt{f_s C_0 \epsilon} d\xi_i. \quad (5.6)$$

Hierbei wurde von [Weil et al. \(2004\)](#) noch zusätzlich der Faktor f_s im ersten und letzten Term eingeführt, um zu berücksichtigen, dass die subskaligen Anteile der Partikelgeschwindigkeiten, die modelliert werden, kleiner sind als die totale Partikelgeschwindigkeit, die in der ursprünglichen Langevin-Gleichung zu modellieren war. [Weil et al. \(2004\)](#) zeigten, dass der Faktor f_s unter der Voraussetzung eines ähnlichen Verlaufs des Spektrums der Energiedichte für die aufgelösten und die subskaligen Lagrangeschen Geschwindigkeitskomponenten, aber eines unterschiedlichen Gesamtenergieinhalts, als das Verhältnis zwischen der subskaligen turbulenten kinetischen Energie und der totalen turbulenten kinetischen Energie bestimmt werden kann:

$$f_s = \frac{[e_s]}{[e_r] + [e_s]}. \quad (5.7)$$

Die eckigen Klammern deuten dabei eine Mittelung über die gesamte horizontale Ebene des LES-Modellgebiets an.

Unter der Voraussetzung von lokaler Isotropie der subskaligen Turbulenz lässt sich die Gleichung (5.6) noch weiter vereinfachen, da dann sowohl der subskalige Schubspannungstensor als

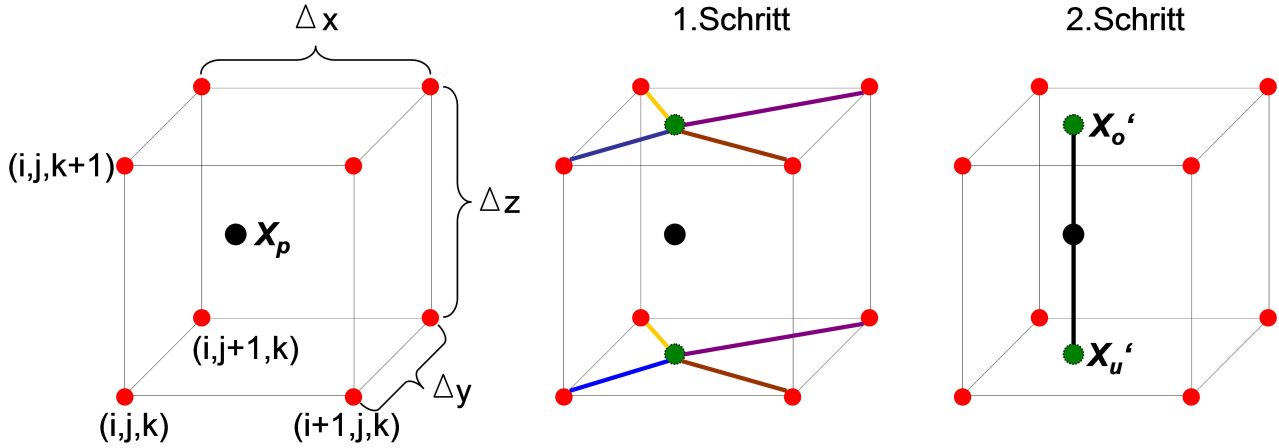


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung des Interpolationsverfahrens zur Ableitung von Werten der aufgelösten Geschwindigkeit, der Dissipation und der subskaligen turbulenten kinetischen Energie am Partikelauenthaltsort. Der schwarze Kreis markiert den Partikelauenthaltsort, während die acht roten Kreise die Eckpunkte des zugehörigen Gittervolumens der Grobstruktursimulation kennzeichnen. Die grünen Kreise markieren die Lage der Punkte, für die Werte der oben genannten Größen nach dem ersten Teilschritt der Interpolation (bilineare Interpolation) vorliegen. Die blaue Linie im mittleren Teil der Abbildung hat die Länge \sqrt{a} , die braune die Länge \sqrt{b} , die goldfarbene die Länge \sqrt{c} und die violette die Länge \sqrt{d} mit a, b, c, d aus Gleichung (5.9).

auch dessen Inverses diagonal werden. Die Komponenten des subskaligen Schubspannungstensors sind dann $\frac{2e_s}{3}$, wobei e_s die subskalige turbulente kinetische Energie am Partikelauenthaltsort ist. Die Komponenten des Inversen des subskaligen Schubspannungstensors sind $\frac{3}{2e_s}$, also das Reziproke der Komponenten des subskaligen Schubspannungstensors. Insgesamt ergibt sich dann für die Inkremente des subskaligen Anteils der Partikelgeschwindigkeit die Gleichung:

$$dV_{si} = -\frac{3f_s C_0 \epsilon}{4} \frac{V_{si}}{e_s} dt + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{e_s} \frac{de_s}{dt} V_{si} + \frac{2}{3} \frac{\partial e_s}{\partial x_i} \right) dt + \sqrt{f_s C_0 \epsilon} d\xi_i. \quad (5.8)$$

Diese Gleichung liegt der zeitlichen Integration des subskaligen Anteils der Partikelgeschwindigkeiten in PALM zugrunde. Der aufgelöste Anteil der Partikelgeschwindigkeiten wird zu jedem Zeitpunkt mittels Interpolation des LES-Geschwindigkeitsfelds auf den aktuellen Partikelauenthaltsort bestimmt. In die Interpolation fließen dabei die Geschwindigkeitswerte an den acht benachbarten Gitterpunkten ein. Abbildung 5.1 zeigt eine schematische Darstellung des hier verwendeten Interpolationsverfahrens. Zunächst werden über eine bilineare Interpolation unter Berücksichtigung der Geschwindigkeiten an den jeweils vier Gitterpunkten im nächsten vertikalen Gitterpunktsniveau ober- bzw. unterhalb der Partikelposition Geschwindigkeitswerte in dem jeweiligen Niveau für die horizontale Position des Partikels bestimmt. Z.B. ergibt sich für

den ersten Schritt zur Bestimmung der aufgelösten Partikelgeschwindigkeitskomponente V_{ri} :

$$\begin{aligned}
a &= (X_{p_1} - (i - \frac{1}{2})\Delta x)^2 + (X_{p_2} - j\Delta y)^2 \\
b &= (\Delta x - X_{p_1} + (i - \frac{1}{2})\Delta x)^2 + (X_{p_2} - j\Delta y)^2 \\
c &= (X_{p_1} - (i - \frac{1}{2})\Delta x)^2 + (\Delta y - X_{p_2} + i\Delta y)^2 \\
d &= (\Delta x - X_{p_1} + (i - \frac{1}{2})\Delta x)^2 + (\Delta y - X_{p_2} + i\Delta y)^2 \\
g &= a + b + c + d \\
V_{r1u}' &= ((g - a) * \bar{u}_1(i, j, k) + (g - b) * \bar{u}_1(i + 1, j, k) \\
&\quad + (g - c) * \bar{u}_1(i, j + 1, k) + (g - d) * \bar{u}_1(i + 1, j + 1, k)) / (3g) \\
V_{r1o}' &= ((g - a) * \bar{u}_1(i, j, k + 1) + (g - b) * \bar{u}_1(i + 1, j, k + 1) \\
&\quad + (g - c) * \bar{u}_1(i, j + 1, k + 1) \\
&\quad + (g - d) * \bar{u}_1(i + 1, j + 1, k + 1)) / (3g).
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Hierbei stehen Δx , Δy und Δz , wie in Abbildung 5.1 angedeutet, für die Gitterweiten des LES-Modellgitters in die x -, in die y - und in die z -Richtung, während i , j und k die Gitterpunktsindizes für die drei Raumrichtungen bezeichnen. Zwischen den beiden Zwischenwerten V_{r1u}' und V_{r1o}' wird dann in der vertikalen Richtung eine lineare Interpolation durchgeführt, so dass schließlich ein Wert für die aufgelöste Geschwindigkeit am Partikelauftenthaltort erhalten wird.

$$V_{r1} = V_{r1u}' + \frac{X_{p_3} - (k - \frac{1}{2})\Delta z}{\Delta z} (V_{r1o}' - V_{r1u}'). \tag{5.10}$$

Die subskalige turbulente kinetische Energie am Partikelauftenthaltort, deren räumliche Ableitungen sowie die lokale Dissipation, allesamt Größen, die in Gleichung (5.8) benötigt werden, werden genauso wie die aufgelösten Geschwindigkeiten durch Interpolation von LES-Daten erhalten. Es sind allerdings aufgrund der geschachtelten Gitterstruktur jeweils leichte Änderungen an den Interpolationsgleichungen notwendig. Das hier verwendete Interpolationsverfahren erfordert, dass das Gitter des LES-Modells im gesamten Modellgebiet aus gleich großen Gitterboxen besteht. Eine Rechnung mit vertikal gestrecktem Gitter oberhalb der Grenzschicht zur Einsparung von Rechenzeit ist bei Zuschaltung des Lagrangeschen stochastischen Modells nicht möglich. Darüber hinaus ist noch anzumerken, dass das hier verwendete Interpolationsverfahren innerhalb der Prandtl-Schicht noch verbesserungswürdig ist, da das Interpolationsverfahren auch innerhalb der Prandtl-Schicht eine lineare Zunahme der Geschwindigkeit mit der Höhe annimmt und somit das Lagrangesche stochastische Modell nicht explizit die Monin-Obukhovsche Ähnlichkeitstheorie berücksichtigt. Eine Verbesserung könnte in Zukunft der von Cai et al. (2006) gemachte Vorschlag zur Berücksichtigung der Prandtl-Schicht-Beziehungen in Lagrangeschen stochastischen Modellen bringen.

Während Weil et al. (2004) das Lagrangesche Modell als vom LES-Modell separates Modell entwarfen, wurde das Lagrangesche Modell in dieser Studie fest in das LES-Modell PALM implementiert, d.h. nach jedem Zeitschritt des LES-Modells folgen für jedes der freigesetzten Partikel so viele Zeitschritte des Lagrangeschen Modells, bis das Partikel über den ganzen LES-Zeitschritt hinweg verlagert worden ist. Es kann hier also davon gesprochen werden, dass das LES-Modell und das Lagrangesche stochastische Modell online miteinander gekoppelt sind. Besser noch lässt sich das Lagrangesche Modell aber als eingebettet in das LES-Modell beschreiben. Da das Lagrangesche stochastische Modell in Form eines Unterprogramms in das LES-Modell

PALM integriert ist, und das LES-Modell PALM parallelisiert ist, wurde auch das Lagrangesche Partikelmodell vollständig parallelisiert programmiert. Dies erlaubt die Berechnung der Verlagerung einer sehr großen Zahl von Partikeln. Auf den Höchstleistungsrechnern des HLRN-1 in Hannover und Berlin konnte somit die Verlagerung von einigen hundert Millionen Partikeln gleichzeitig berechnet werden. Eine so große Zahl von Partikeln wird tatsächlich auch für die Footprintbestimmung für Messungen in inhomogenem Gelände mit einem im Vorwärtsmodus betriebenen Lagrangeschen Modell (siehe Artikel II) benötigt.

Eine Illustration des Kopplungsprozesses zwischen dem LES-Modell PALM und dem implementierten Lagrangeschen stochastischen Modell sowie des inneren Ablaufs der Berechnungen im eingebetteten Lagrangeschen stochastischen Modells gibt das Diagramm 5.2.

Die Umsetzung der Verbindung des Grobstruktursimulationsmodells mit dem Lagrangeschen stochastischen Modell in Form einer Online-Kopplung ist vorteilhaft gegenüber der aufeinanderfolgenden Ausführung von LES und Lagrangeschem Modell wie z.B. in [Weil et al. \(2004\)](#) oder [Cai und Leclerc \(2007\)](#). Die Realisierung des Antriebs mit LES-Daten in jenen Studien erfordert das Abspeichern von riesigen Datenmengen, nämlich der dreidimensionalen aufgelösten Geschwindigkeiten, Dissipationsraten und subskaligen turbulenten kinetischen Energie in dichtem zeitlichen Abstand. Schon bei der relativ kleinen Simulation von [Weil et al. \(2004\)](#) war es nicht möglich die dreidimensionalen LES-Felder für alle LES-Zeitschritte auf Festplatte abzuspeichern. [Weil et al. \(2004\)](#) mussten daher bei der Verwendung der LES-Daten im Lagrangeschen stochastischen Modell zwischen in einem Abstand von 10 s ausgegebenen Daten zeitlich interpolieren. [Cai und Leclerc \(2007\)](#) hatten sogar nur in zeitlichen Abständen von 50 s ausgegebene Felder zur Verfügung. Die Ausgabe auf die Festplatte und das Einlesen von der Festplatte sind für große Datenmengen zudem auch noch sehr zeitaufwendig und machen damit das Verfahren von [Weil et al. \(2004\)](#) und [Cai und Leclerc \(2007\)](#) relativ langsam. Somit wird deutlich, dass für Simulationen, die große Modellgebiete und gleichzeitig sehr feine Auflösungen benötigen, das Verfahren von [Weil et al. \(2004\)](#) und [Cai und Leclerc \(2007\)](#) sehr schnell an die Grenzen z.B. des Speicherplatzangebots auf Massivparallelrechnern stoßen wird. Die Möglichkeit der Implementierung direkt in das LES-Modell war auch ausschlaggebend dafür im Rahmen dieses Promotionsvorhabens zunächst ein im Vorwärtsmodus betriebenes Lagrangesches Modell mit LES-Daten anzutreiben, auch wenn z.B. [Schmid \(2002\)](#), die Rückwärtsmodelle im Bezug auf die Footprintbestimmung in heterogenem Gelände im Vorteil gegenüber den Vorwärtsmodellen sieht, da die Vorwärtsmodelle Footprints im heterogenen Gelände nur unter einem immensen Aufwand bezüglich der Zahl der freigesetzten Partikel berechnen können ([Luhar und Rao, 2004](#); [Schmid, 2002](#)).

advec_particles.f90 — Vereinfachte Übersicht über die Abläufe innerhalb des in PALM eingebetteten Lagrangeschen stochastischen Modells

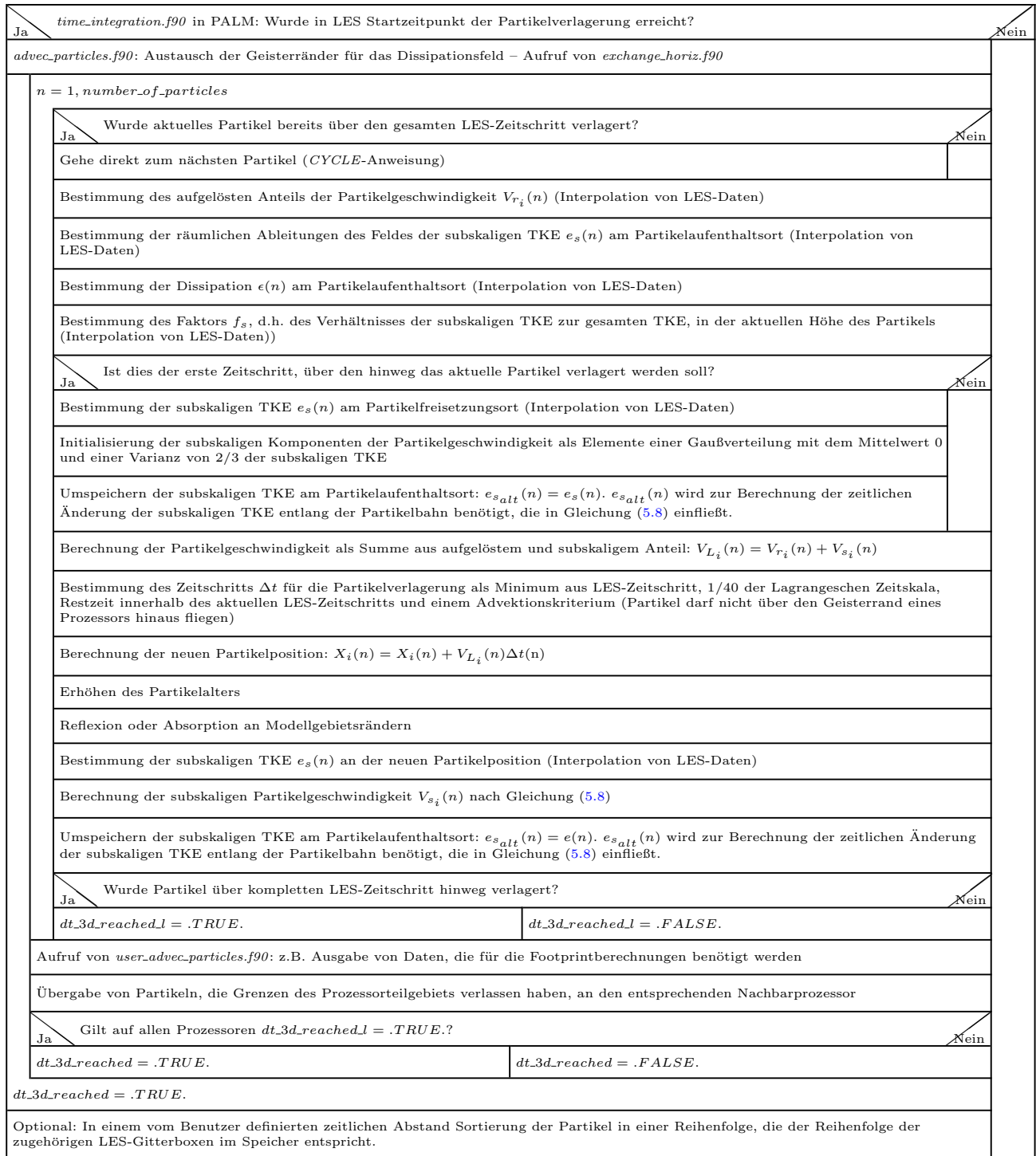


Abbildung 5.2: Nassi-Schneiderman-Diagramm für das Unterprogramm *advec_particles.f90*

EINFÜHRUNG IN DIE VERÖFFENTLICHUNGEN

Die **Veröffentlichung I** beschäftigt sich mit der Fragestellung, welche Rolle lokale Messungen turbulenter Flüsse nach der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode für die Beobachtung der in Messexperimenten nicht geschlossenen Energiebilanz spielen. Unterschätzen die lokal nach der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode bestimmten turbulenten Flüsse die wahren Flüsse systematisch? In den **Veröffentlichungen II** und **III** geht es um die Entwicklung und Validierung von Modellen, mit denen das Einflussgebiet von Messungen des Flusses und der Konzentration eines passiven Skalars bestimmt werden können.

In **Veröffentlichung I** werden mit einem Grobstruktursimulationsmodell Messungen des turbulenten (kinematischen) Wärmestroms simuliert. Die Wärmeströme werden dabei sowohl über die räumliche (erfordert Messungen mit vielen, räumlich verteilten Sensoren) als auch über die zeitliche (lokale Messungen an einzelnen Punkten des Messgebiets) Eddy-Kovarianz-Methode bestimmt. Der zeitlich gemittelte räumliche Eddy-Kovarianz-Fluss wird als repräsentativer Wärmestrom betrachtet, und es werden Statistiken über die Abweichungen der lokal bestimmten, zeitlichen Eddy-Kovarianz-Flüsse vom repräsentativen Wärmestrom berechnet. **Veröffentlichung I** setzt somit die Untersuchungen von [Kanda et al. \(2004a\)](#) zum Problem der nicht geschlossenen Energiebilanz fort. Kann der von [Kanda et al. \(2004a\)](#) beschriebene Mechanismus zur systematischen Unterschätzung des repräsentativen Wärmestroms auch noch in geringeren Höhen als den in [Kanda et al. \(2004a\)](#) benutzten 100 m beobachtet werden, also dort wo üblicherweise Energiebilanzstationen in Messexperimenten messen und eine nicht geschlossene Energiebilanz konstatieren? Wie groß ist die systematische Unterschätzung, wenn der geostrophische Wind deutlich größer als bei [Kanda et al. \(2004a\)](#) ist? Welche Rolle spielt die Turbulenzintensität für die Größe der systematischen Unterschätzung? Lassen sich mit dem Mechanismus von [Kanda et al. \(2004a\)](#) auch die in den Experimenten beobachteten besonders großen Abweichungen in der stabil geschichteten nächtlichen Grenzschicht erklären? Gibt es eventuell Verfahren, mit denen die systematische Unterschätzung der repräsentativen Wärmeströme reduziert werden kann?

In **Veröffentlichung II** wird ein neues Modell zur Bestimmung der Footprints von Messungen des Flusses und der Konzentration eines passiven Skalars vorgestellt. Das neue Modell besteht aus einem in das LES-Modell PALM eingebetteten Lagrangeschen stochastischen Modell. Die Validierung des neuen Modells wird in zwei Schritten durchgeführt. Zunächst wird für eine Ausbreitungsrechnung ein Vergleich mit den Ergebnissen eines anderen numerischen Modells und eines Konvektionstankexperimentes durchgeführt. Dann wird die Eignung des neuen Modells zur Bestimmung von Footprints durch einen Vergleich mit den Ergebnissen einer früheren Vergleichsstudie von Footprintmodellen, in die auch Daten eines Tracerexperimentes einfließen, nachgewiesen. Die Footprintbestimmungen wurden dabei in einer konvektiven Grenzschicht durchgeführt. Die Eignung des neuen Modells zur Footprintbestimmung für einen weiten Bereich von atmosphärischen Schichtungen wird dann durch Footprintbestimmungen bei nahe neutraler Schichtung und bei moderat stabiler Schichtung gezeigt. Übereinstimmungen und Unterschiede zu früher publizierten Ergebnissen von konventionellen Footprintmodellen

für ähnliche Schichtungsverhältnisse werden diskutiert. Schließlich werden die Ergebnisse von Footprintbestimmungen für Messungen in einer heterogen geheizten konvektiven Grenzschicht präsentiert und mögliche Schwierigkeiten von konventionellen Footprintmodellen in solchen Situationen aufgezeigt.

In **Veröffentlichung III** werden die Ergebnisse des neuen Modells für die konvektive Grenzschicht aus **Veröffentlichung II** zur Validierung von zwei konventionellen Lagrangeschen stochastischen Modellen verwendet. Bei den beiden Lagrangeschen stochastischen Modellen handelt es sich um das im Vorwärtsmodus betriebene Modell von [Rannik et al. \(2003\)](#), das für diese Studie um eine Parametrisierung zur Beschreibung der Verhältnisse in der Mischungsschicht erweitert wurde (zuvor war dieses Modell ausschließlich für Footprintbestimmungen innerhalb der Prandtlschicht konzipiert gewesen), und das im Rückwärtsmodus betriebene Modell von [Kljun et al. \(2002\)](#). Ein Vergleich der Ergebnisse dieser drei verschiedenen Ansätze zur Footprintbestimmung wird auch noch für einen weiteren Fall einer konvektiven Grenzschicht durchgeführt. Im Zentrum dieses Artikels steht die Präsentation einer Methode, mit der die Ergebnisse verschiedener Footprintmodelle nicht nur qualitativ, sondern auch quantitativ miteinander verglichen werden können. Dazu werden z.B. auch Kriterien entwickelt, wann die Übereinstimmung der mit zwei verschiedenen Footprintmodellen berechneten Footprints als gut gilt. Die Verfügbarkeit solcher Kriterien ist für die erfolgreiche Validierung von Footprintmodellen essentiell. Die Entwicklung von Vergleichskriterien wurde dabei von den Kollegen der Universität Bayreuth durchgeführt. Im Rahmen dieser Promotion wurden lediglich die für die Validierung der konventionellen Modelle benötigten LES-Daten produziert.

SCHLUSSFOLGERUNGEN AUS DIESER ARBEIT

7.1 ERGEBNISSE DIESER ARBEIT

Ein Schwachpunkt der Studie von [Kanda et al. \(2004a\)](#) war die Untersuchung der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode durch die Analyse von virtuellen Messungen der Zeitreihen von Vertikalgeschwindigkeit und potentieller Temperatur in Höhen von mehr als 50 m, zumeist sogar in Höhen von 100 m oder mehr. Es war fraglich, inwieweit die Ergebnisse der Studie von [Kanda et al. \(2004a\)](#) überhaupt Aussagekraft für reale Messungen an Energiebilanzmessstationen, die typischerweise innerhalb der Prandtl-Schicht durchgeführt werden, haben. In dieser Arbeit konnte für den Fall der konvektiven Grenzschicht das Ergebnis der Studie von [Kanda et al. \(2004a\)](#), dass die Bestimmung von turbulenten Wärmeströmen über die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode aus hochauflösenden Messungen der Zeitreihen von Vertikalgeschwindigkeit und potentieller Temperatur an einzelnen Punkten eines Untersuchungsgebiets zu einer systematischen Unterschätzung der für das Untersuchungsgebiet repräsentativen Wärmeströme führt, auch für solche Fälle bestätigt werden, in denen die Messungen der turbulenten Größen in deutlich geringeren Höhen als in [Kanda et al. \(2004a\)](#) durchgeführt wurden. Interessant ist dabei allerdings, dass eine deutlich Abnahme der systematischen Abweichung des lokalen zeitlichen Eddy-Kovarianz-Flusses vom repräsentativen Wärmestrom mit abnehmender Höhe festgestellt werden muss. So konnte selbst unter den Bedingungen, die in [Kanda et al. \(2004a\)](#) als ideal für die Beobachtung großer Imbalancen erkannt wurden, für eine Messhöhe von 20 m noch nicht einmal mehr eine systematische Unterschätzung des repräsentativen Wärmestroms von 5 % festgestellt werden. Dies ist deutlich geringer als die in [Foken \(2003\)](#) aufgelisteten Imbalancen, die in Feldexperimenten in der jüngeren Vergangenheit beobachtet wurden und bei geringerer Messhöhe als in unserem numerischen Experiment bis zu 37 % betragen. Neben der systematischen Unterschätzung des repräsentativen Flusses wurde in dieser Arbeit aber auch eine große räumliche Varianz der lokalen Abweichungen vom repräsentativen Wärmestrom festgestellt.

Die von [Kanda et al. \(2004a\)](#) aufgestellte These, wonach eine zunehmende Windgeschwindigkeit zu einer Abnahme der systematischen Unterschätzung des repräsentativen Wärmestroms durch die lokalen zeitlichen Eddy-Kovarianz-Flüsse führt, konnte nur bedingt bestätigt werden. Solange auch bei einer Erhöhung der Windgeschwindigkeit noch Zellenkonvektion zu beobachten ist, solange ist auch eine Abnahme der systematischen Unterschätzung festzustellen. Wird bei größeren Windgeschwindigkeiten aber Rollenkonvektion angetroffen, so können deutlich größere Imbalancen beobachtet werden als in Schwachwindfällen mit Zellenkonvektion. Bei der Rollenkonvektion handelt es sich um organisierte Turbulenz, bei der ein bedeutender Anteil des Wärmeaustausches zwischen Erde und Atmosphäre durch die organisierten Strukturen geleistet wird, d.h. die Advektion potentieller Temperatur mit dem mittleren vertikalen Wind spielt hier eine sehr große Rolle. Dieser Term wird bei der zeitlichen Eddy-Kovarianz-Methode aber vernachlässigt, was wie von [Mahrt \(1998\)](#) postuliert und von [Inagaki et al. \(2006a\)](#) in einem numerischen Experiment gezeigt, zu einer Unterschätzung der räumlich repräsentativen Wärmefflüsse führt.

In der hier vorgestellten Arbeit konnten in der simulierten stabilen Grenzschicht keine turbu-

lenten organisierten Strukturen mit hoher Lebensdauer beobachtet werden. Folgerichtig konnte auch keine signifikante Unterschätzung der Wärmeströme durch die zeitliche Eddy-Kovarianz-Methode in der stabilen Grenzschicht in dem hier vorgestellten numerischen Experiment beobachtet werden.

Ferner wurde in der hier vorgestellten Arbeit gezeigt, dass die weitverbreitete Methode der Filterung der lokalen Zeitreihen von Temperatur und Vertikalwind mit den lokalen Trends der Zeitreihen zu einer Verstärkung der systematischen Unterschätzung führt. Es wurde eine alternative Filtermethode vorgeschlagen, bei der nur die Zeitreihe der potentiellen Temperatur gefiltert wird, und zwar mit dem Trend der über das Messgebiet gemittelten potentiellen Temperatur. Die aus den mit dieser Methode gefilterten Zeitreihen bestimmten Eddy-Kovarianz-Flüsse besitzen nicht das Problem einer systematischen Unterschätzung des repräsentativen Wärmestroms.

Zur Interpretation von gemessenen Austauschflüssen zwischen der Erde und der Atmosphäre ist eine Kenntnis über das Quellgebiet oder den Footprint einer Messung von Bedeutung. So könnte beispielsweise, insbesondere bei Messungen in horizontal heterogenen Gebieten, eine Ursache der nicht geschlossenen Energiebilanz in Feldexperimenten unterschiedlich große Quellgebiete der einzelnen Energieflüsse sein. Eine Bestimmung von Quellgebieten kann auch dabei helfen, den geeigneten Standpunkt für einen Messsensor in einem Feldexperiment zu finden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neues Modell entwickelt, mit dem die Bestimmung von Quellgebieten bzw. Footprints der Messungen von Flüssen und Konzentrationen eines passiven Skalars für einen weiten Bereich von atmosphärischen Schichtungen und für sowohl horizontal homogene als auch horizontal heterogene Flussbedingungen möglich ist. Das neu entwickelte Modell besteht aus einem in Form eines Unterprogramms in ein Grobstruktursimulationsmodell eingebetteten Lagrangeschen stochastischen Modell. Somit wurde erstmals eine Online-Kopplung zwischen Grobstruktursimulationsmodell und Lagrangeschem Modell realisiert. Die Online-Kopplung erweist sich als vorteilhaft, da sie die Ausgabe von riesigen Datenmengen des LES-Modells zum späteren Antrieb des Lagrangeschen Modells wie in der Offline-Kopplung vermeidet und damit Rechnungen mit sehr viel feiner aufgelösten und größeren Modellgebieten zugänglich ist. Die im Lagrangeschen Modell berechneten Partikelgeschwindigkeiten setzen sich zusammen aus einem aufgelösten Anteil, der durch Interpolation des Geschwindigkeitsfelds der Grobstruktursimulation auf den Partikelauenthaltsort bestimmt wird, und einen subskaligen Anteil, der aus einer stochastischen Differentialgleichung erhalten wird. Die Annahme der Isotropie in der Modellierung des subskaligen Anteils der Partikelgeschwindigkeit ist in der unmittelbaren Nähe des Erdbodens nicht erfüllt und führt hier zu einer Abhängigkeit der Ergebnisse des Lagrangeschen Modells von der Auflösung im LES-Modell. Dies zeigt, dass die mit dem Verfahren der Online-Kopplung mögliche höhere Auflösung der LES tatsächlich ein nutzbringender Vorteil gegenüber der Offline-Kopplung ist.

Das neu entwickelte Modell reproduzierte die Ergebnisse von früheren numerischen und experimentellen Studien für die Ausbreitung eines passiven Skalars. Ein Vergleich mit früheren Footprintstudien zeigte, dass das neu entwickelte Modell auch dazu in der Lage ist, seinem eigentlichen Verwendungszweck, nämlich der Bestimmung realistischer Footprints, nachzukommen. Ein Ergebnis der Vergleiche mit den früheren Studien war, dass die Bestätigung früherer Überlegungen, dass die Vernachlässigung turbulenter Dispersion in Strömungsrichtung, die in allen analytischen Footprintmodellen unvermeidbar ist, zu einem Maximum der Footprintfunktion führt, das zu weit stromaufwärts liegt.

Ein Charakteristikum der Footprintfunktion für Messungen des Flusses eines passiven Skalars in der konvektiven Grenzschicht, dem bisher keine größere Aufmerksamkeit in der Literatur gewidmet wurde, ist das Auftreten von negativen Werten der Footprintfunktion für Quellen in

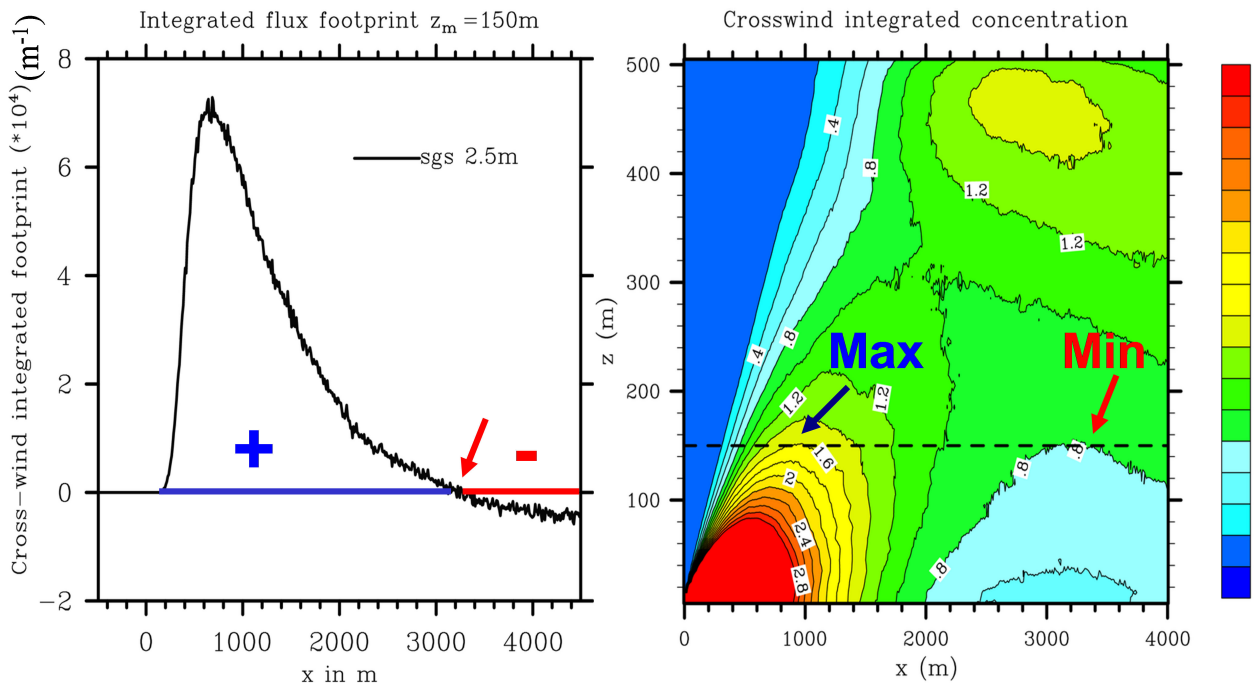


Abbildung 7.1: Quer zur mittleren Windrichtung aufintegrierter Flussfootprint für eine Messhöhe von 150 m (links) und quer zur mittleren Windrichtung aufintegrierte normierte Konzentration (rechts) für die in **Artikel II** beschriebene konvektive Grenzschicht. Die Abbildung veranschaulicht den Zusammenhang zwischen dem Auftreten von negativen Werten des Flussfootprints und dem typischen Muster der Ausbreitung eines passiven Skalars in der konvektiven Grenzschicht. Negative Flussfootprints werden beobachtet, wenn die Konzentration des passiven Skalars unterhalb der Messhöhe mit zunehmendem Abstand vom Quellort zunimmt.

einiger Entfernung vom Sensor. Das Auftreten der negativen Werte hängt mit der vertikal inhomogenen Turbulenz zusammen, die für bodennahe Quellen des passiven Skalars zu einem Maximum der Konzentration des passiven Skalars in der oberen Hälfte der Grenzschicht und einem Minimum der Konzentration in Bodennähe in einiger Entfernung vom Freisetzungsort führt. In noch größerer Entfernung von der Quelle zeigt sich die Konzentration dann aber gut durchmischt. Daher muss es in einiger Entfernung vom Freisetzungsort zu einer vermehrten Abwärtsbewegung von Partikeln kommen, was dann zu negativen Flussfootprints für diese Entfernungen führt (siehe auch Abbildung 7.1).

Der große Anwendungsbereich für das neue Modell wurde durch Berechnungen von Footprints für Messungen von Flüssen und Konzentrationen von passiven Skalaren in einer konventionell neutralen atmosphärischen Grenzschicht und in einer stabil geschichteten Grenzschicht gezeigt. Hierbei wurde der große Einfluss der unter diesen Schichtungsbedingungen zu beobachtenden starken Winddrehung mit der Höhe (siehe Abbildung 7.2) auf die Footprints deutlich. So zeigten die Footprints keine Symmetrie, was an der Verteilung der Gebiete mit den hier durch die Winddrehung mit der Höhe verursachten negativen Werten der Footprintfunktion zu erkennen war. Darüber hinaus änderte sich die Ausrichtung der Quellgebiete mit der Höhe ganz analog zur Änderung des Windes mit der Höhe. Diese Tatsache ist insbesondere zu berücksichtigen, wenn Flussbestimmungen aus unterschiedlichen Höhen miteinander verglichen werden sollen, wie beispielsweise Messungen an Energiebilanzstationen mit flugzeuggestützten Messungen.

Schließlich wurden mit dem neuen Modell auch erstmals Footprints für Messungen in einer horizontal heterogenen geheizten Grenzschicht bestimmt. Dazu musste das Footprintbestim-

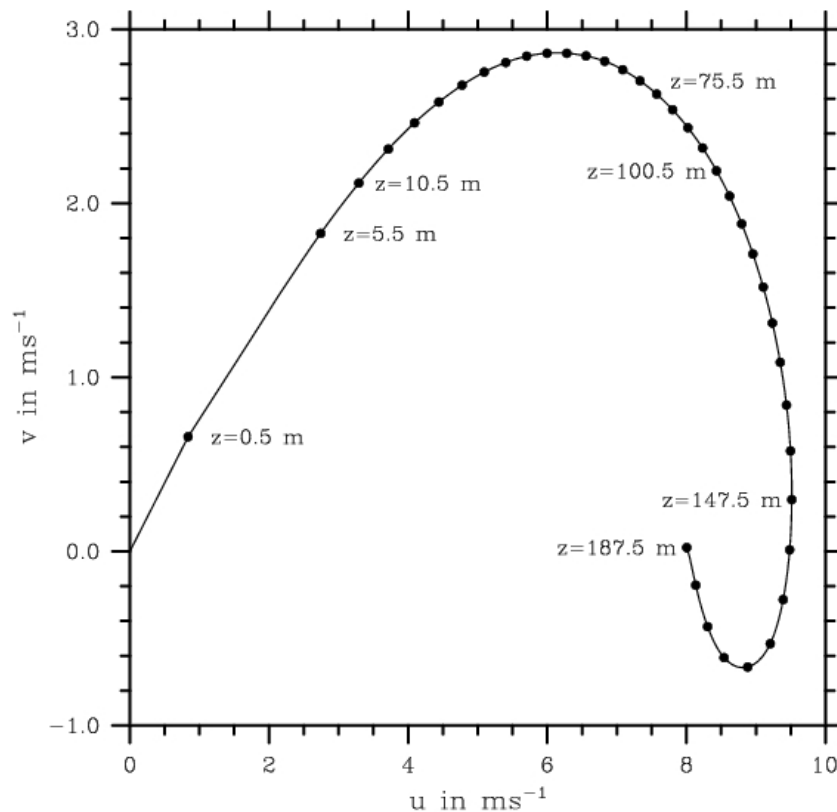


Abbildung 7.2: Drehung des mittleren Windes mit der Höhe in der in **Artikel II** präsentierten, simulierten stabilen Grenzschicht. Die Länge der Mittelungsperiode betrug eine Stunde. Die Punkte markieren die Spitzen der Vektoren des Horizontalwinds in jedem fünften Gitterpunktsniveau (d.h. in einem Abstand von 5 m) der LES ausgehend vom ersten Gitterpunktsniveau oberhalb des Erdbodens (0,5 m).

mungsverfahren von [Rannik et al. \(2003\)](#) leicht abgewandelt werden. In der heterogen geheizten Grenzschicht war die Bestimmung von Footprints für Punktmessungen aufgrund der Verwendung eines Lagrangeschen Modells im Vorwärtsmodus nicht möglich. Stattdessen wurden Footprints für horizontal ausgedehnte Messsensoren mit Messflächen von einigen Quadratmetern durchgeführt. Dies entspricht der Bestimmung eines mittleren Footprints für ein Feld von horizontal unendlich dicht nebeneinander liegenden Punktmessungen. Sensitivitätsstudien zeigten, dass die Abhängigkeit der Footprintergebnisse von der Größe der Messfläche relativ gering ist. Die Footprintergebnisse für die horizontal heterogen geheizte Grenzschicht zeigten deutliche Auswirkungen der Heterogenität auf die Zusammensetzung der Quellflächen von Messungen. In Bereichen einer konvergenten Strömung konnte ein Quellgebiet mit zwei Hauptrichtungen diagnostiziert werden. Solch komplexe Strömungen können in konventionellen Footprintmodellen bisher nicht berücksichtigt werden. Die hier vorgestellte Arbeit lässt daher vermuten, dass mit konventionellen Footprintmodellen berechnete Footprints teilweise deutliche Abweichungen von den tatsächlichen Quellgebieten aufweisen. Eine Weiterentwicklung von konventionellen Footprintmodellen unter Verwendung von für horizontal heterogene Bedingungen gültigen Parametrisierungen ist daher dringend erforderlich. Auf absehbare Zeit ist die Grobstruktursimulation noch ein zu ressourcenaufwändiges Verfahren, um für standardmäßige Footprintbestimmungen zum Einsatz kommen zu können. Die Validierung der weiterentwickelten konventionellen Footprintmodelle kann dabei mit Hilfe von Ergebnissen eines Grobstruktursimulationsmodells erfolgen, wenn keine geeigneten Daten eines Messexperimentes vorliegen.

Eine Validierung der Ergebnisse zweier konventioneller Lagrangescher Footprintmodelle mit Hilfe der im Rahmen dieser Arbeit gewonnenen Daten des neu entwickelten Modells wurde zu-

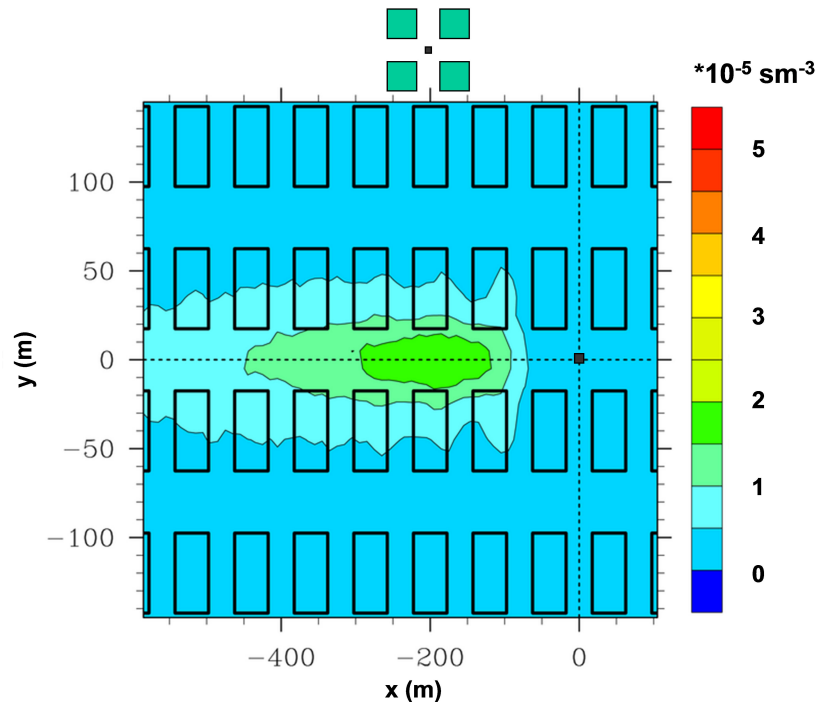


Abbildung 7.3: Footprint für Konzentrationsmessungen in einer Höhe von 10 m im Zentrum der Straßenkreuzung innerhalb eines idealisierten Gebäudefelds. Das passive Skalar (bzw. die Partikel) wurde in einer Höhe von 45 m frei gelassen, also etwas oberhalb der Oberkante der Gebäude in einer Höhe von 40m. Vorgegeben war ein mittlerer Wind in positiver x -Richtung.

nächst für horizontal homogene Grenzschichten durch Kooperationspartner an der Universität Bayreuth durchgeführt. Der besondere Fokus lag dabei auf einer Validierung der zweidimensionalen Footprintfunktion. Für die Validierung der zweidimensionalen Footprints gibt es bisher keine geeigneten Daten aus Messexperimenten, so dass hier zurzeit LES-Daten die beste Validierungsmöglichkeit darstellen. Für die meisten Messhöhen in verschiedenen konvektiven Grenzschichten konnte nach den von den Kooperationspartnern aus Bayreuth entwickelten Kriterien eine relativ gute Übereinstimmung zwischen den Footprints des neu entwickelten gekoppelten LES-Lagrangeschen Ansatzes und den Footprints der beiden konventionellen Modelle festgestellt werden. In der stabilen und neutralen Grenzschicht zeigten sich größere Abweichungen, da die konventionellen Modelle die Winddrehung mit der Höhe vollkommen vernachlässigten.

Grundsätzlich wurde im Rahmen dieser Arbeit gezeigt, dass die Möglichkeiten der LES-Methode auf dem Gebiet der Footprintbestimmung tatsächlich den von Schmid (2002) und Foken und Leclerc (2004) geäußerten Hoffnungen zu entsprechen scheinen. Im Rahmen dieses Promotionsvorhabens wurde ein Werkzeug entwickelt, mit dem nun auch die Bestimmung von Footprints unter heterogenen Bedingungen möglich ist. Anhand der Ergebnisse des LES-Modells muss aber eine Weiterentwicklung der konventionellen Footprintmodelle erfolgen, um die Vorteile des LES-Ansatzes auch für standardmäßige Footprintbestimmungen nutzen zu können, da die routinemäßige Bestimmung von Footprints mit Hilfe eines LES-Modells in nächster Zeit aufgrund des enormen Ressourcenbedarfs der LES nicht möglich ist.

7.2 AUSBLICK AUF WEITERE UNTERSUCHUNGEN

Zum Abschluss sollen noch kurz zwei weitere Untersuchungen erwähnt werden, die mit dem im Laufe des Promotionsvorhabens entwickelten, in das Grobstruktursimulationsmodell PALM

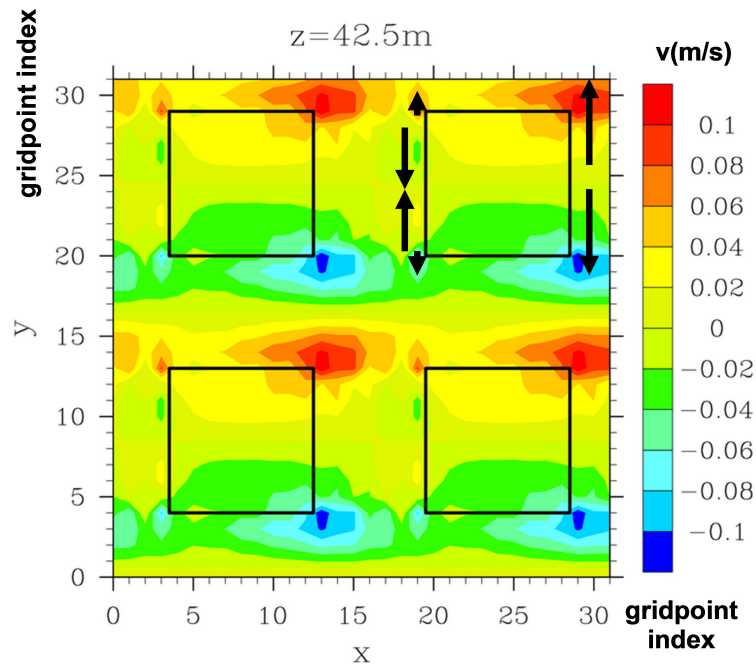


Abbildung 7.4: Über die erste Stunde der Partikelausbreitung gemittelttes Feld der Geschwindigkeitskomponente v in einer Höhe von 42,5 m, also genau in der Mitte zwischen Gebäudeoberkante und Quellhöhe. Während die Strömung direkt hinter den Gebäuden eine deutliche Komponente in Richtung der offenen Straße besitzt, ist vor den Gebäuden eine Konvergenz der v -Komponente der Geschwindigkeit festzustellen.

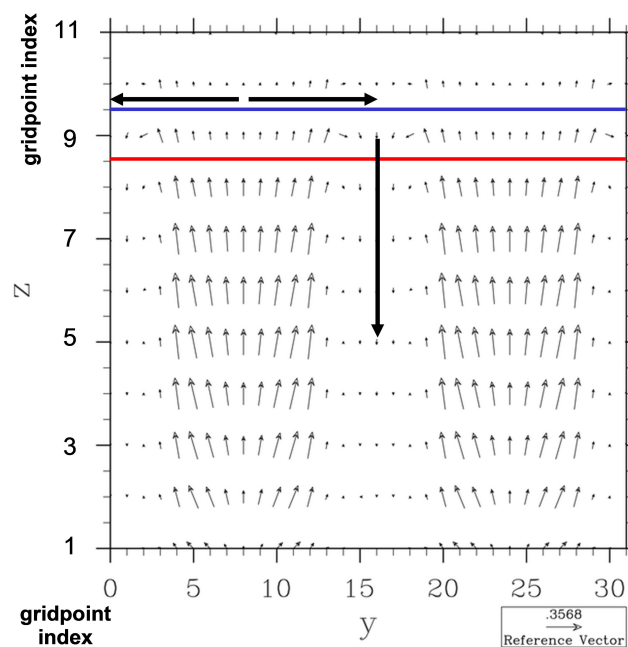


Abbildung 7.5: Vektoren des über 60 Minuten gemittelten Geschwindigkeitsfelds in der yz -Ebene direkt hinter den Gebäuden. Partikel, die an der Rückseite der Gebäude freigesetzt werden, werden mit der mittleren Strömung in Richtung der offenen Straße abtransportiert. Über der Mitte der offenen Straße konvergiert die mittlere Strömung und die Partikel sinken langsam mit der mittleren Strömung zum Messsensor in 10 m Höhe ab.

A4: 80% source area of sc. flux A5: 80% source area of sc. flux

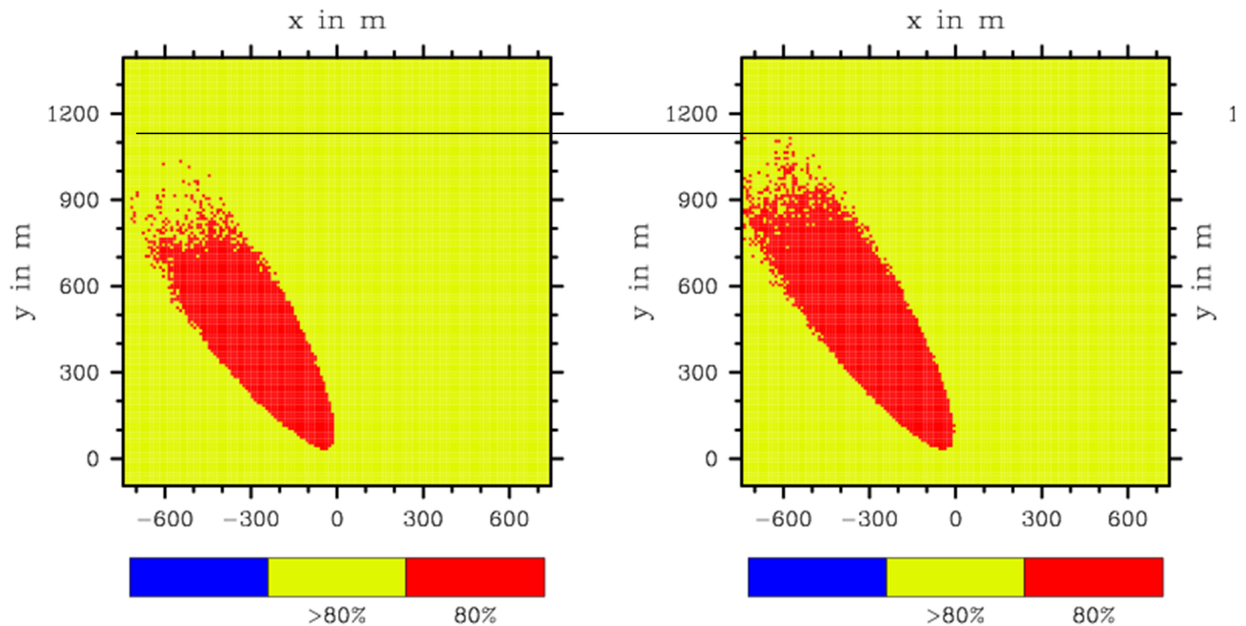


Abbildung 7.6: 80%-Quellgebiet für den gemessenen Fluss in einer Höhe von 30 m an den Positionen A4 (links, weniger rauher Untergrund) bzw. A5 (rechts, rauherer Untergrund) der idealisierten LITFASS-Simulation, die mit Messdaten des LITFASS2003-Experiments (Beyrich et al., 2004) vom 26. Mai 2003 angetrieben wurde. Obwohl der Untergrund um die Messstation A5 rauher ist als um die Messstation A4 erstreckt sich das Quellgebiet für die Messung an A5 weiter stromaufwärts als das Quellgebiet für die Messung an der Station A4.

eingebettete, Lagrangeschen stochastischen Modell durchgeführt wurden, bisher aber noch nicht veröffentlicht wurden und deshalb in dieser kumulierten Dissertation auch keinen größeren Umfang einnehmen sollen. Zum einen wurde die neue Footprintbestimmungsmethode zur Ermittlung von Footprints für Messungen der Konzentration und des Flusses eines passiven Skalars innerhalb und oberhalb einer idealisierten städtischen Rauigkeitsschicht eingesetzt. Dazu wurde mit Hilfe des Grobstruktursimulationsmodells die Überströmung eines regelmäßigen Quaderfeldes simuliert (siehe die Arbeit von Letzel (2007) für Informationen zur Berücksichtigung des Einflusses von Gebäuden auf die Strömung im Grobstruktursimulationsmodell PALM). Abbildung 7.3 zeigt ein Beispiel für die erhaltenen Footprints. Offensichtlich haben Quellpositionen auf der Leeseite der Gebäude einen größeren Einfluss auf das gemessene Signal als Quellpositionen auf der Luvseite der Gebäude. Eine Erklärung für diese Beobachtung lässt sich durch Analyse der Strömungsfelder (siehe z.B. Abbildung 7.4 und Abbildung 7.5) gewinnen, die auch im zeitlichen Mittel komplexe Wirbelstrukturen aufweisen. Die Heterogenität der mittleren Strömung, die sich in den komplexen Wirbelstrukturen zeigt, führt auch zu sehr großen Unterschieden der Footprints für unterschiedliche horizontale Messpositionen, selbst wenn das vertikale Messniveau das gleiche ist. Die Bestimmung von Footprints für Messungen in städtischen Gebieten ist beispielsweise hilfreich, um die Verursacher von Konzentrationshotspots zu identifizieren. Möglicherweise lassen sich aus solchen Studien Informationen für die Stadtplanung gewinnen, welche Quellpositionen vermieden werden sollten, um das Auftreten von sehr hohen Konzentrationen eines Schadstoffs an einem bestimmten Ort zu vermeiden.

Eine andere Untersuchung, die mit dem neuen Modell durchgeführt wurde, war die Bestimmung von Footprints für die Positionen der Messsensoren A4 und A5 für einige der Tage des LITFASS2003-Experiments (Beyrich et al., 2004) - einem Experiment in der deutlich von In-

Messungen in horizontal heterogenen Bedingungen liefern können.

LITERATURVERZEICHNIS

- Anderson, J. D. (1995). *Computational fluid dynamics - the basics with applications*. McGraw-Hill, New York.
- Arakawa, A. (1966). Computational design for long-term numerical integration of the equations of fluid motion: Two-dimensional incompressible flow. Part I. *JCP*, 12:12–35.
- Arya, S. P. (1988). *Introduction to micrometeorology*. Academic Press, San Diego.
- Arya, S. P. (1999). *Air pollution meteorology and dispersion*. Oxford University Press, New York.
- Baldocchi, D. (1997). Flux footprints within and over forest canopies. *Boundary-Layer Meteorol.*, 85:273–292.
- Baldocchi, D. D., Falge, E., Gu, L., Olson, R., Hollinger, D., Running, S., Anthoni, P., Bernhofer, C., Davis, K., Fuentes, J. D., Goldstein, A., Katul, G., Law, B. E., Lee, X., Malhi, Y., Meyers, T., Munger, J. W., Oechel, W., Pilegaard, K., Schmid, H. P., Valentini, R., Verma, S., Vesala, T., Wilson, K. und Wofsy, S. (2001). Fluxnet: A new tool to study the temporal and spatial variability of ecosystem-scale carbon dioxide, water vapour and energy flux densities. *BAMS*, 82:2415–2435.
- Beare, R. J., Cortes, M. A. J., Cuxart, J., Esau, I., Golaz, C., Holtslag, A. A. M., Khairoutdinov, M., Kosovic, B., Lewellen, D., Lund, T., Lundquist, J., McCabe, A., Macvean, M. K., Moene, A., Noh, Y., Poulos, G., Raasch, S. und Sullivan, P. P. (2006). An intercomparison of large-eddy simulations of the stable boundary-layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, 118:247–272.
- Bernhofer, C. und Köstner, B., Herausgeber (2006). *Vertikaltransporte von Energie und Spurenstoffen an Ankerstationen und ihre räumliche und zeitliche Extrapolation unter komplexen natürlichen Bedingungen (VERTIKO)*, Band 12 der Reihe *Tharandter Klimaprotokolle*. TU Dresden, Dresden.
- Beyrich, F., Adam, W., Bange, J., Behrens, K., Berger, F. H., Bernhofer, C., Bösenberg, J., Dier, H., Foken, T., Göckede, M., Görsdorf, U., Güldner, J., Hennemuth, B., Heret, C., Huneke, S., Kohsiek, W., Lammert, A., Lehmann, V., Leiterer, U., Leps, J.-P., Liebethal, C., Lohse, H., Lüdi, A., Mauder, M., Meijninger, W. M. L., Mengelkamp, H.-T., Queck, R., Richter, S. H., Spieß, T., Tittlebrand, A., Weisensee, U. und Zittel, P. (2004). *Verdunstung über einer heterogenen Landoberfläche, Das LITFASS-2003 Experiment*, Band 79 der Reihe *Arbeitsergebnisse*. Deutscher Wetterdienst, Forschung und Entwicklung, Offenbach.
- Breuer, M. (2002). *Direkte numerische Simulation und Large-Eddy Simulation turbulenter Strömungen auf Hochleistungsrechnern*. Shaker Verlag, Aachen.
- Cai, X. und Leclerc, M. Y. (2007). Forward-in-time and backward-in-time dispersion in the convective boundary layer: asymmetry and equivalence. *Boundary-Layer Meteorol.*, 123:201–218.
- Cai, X. H., Zhang, R. und Li, Y. (2006). A large-eddy simulation and lagrangian stochastic study of heavy particle dispersion in the convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, 120:413–435.
- Caramori, P., Schuepp, P., Desjardins, R. und Macpherson, I. (1994). Structural analysis of airborne flux estimates over a region. *J. Climate*, 7:627–640.
- Chlond, A. (1992). Three-dimensional simulation of cloud street development during a cold air outbreak. *Boundary-Layer Meteorol.*, 58:161–200.

- Chlond, A. (1998). Grobstruktursimulation - eine Methode zur Berechnung turbulenter atmosphärischer Strömungen. Habilitation, Fachbereich Geowissenschaften der Universität Hamburg, 193 Seiten.
- Cooper, D. I., Eichinger, W. E., Archuleta, J., Hipps, L., Kao, J., Leclerc, M. Y., Neale, C. M. und Prueger, J. (2003). Spatial source-area analysis of three-dimensional moisture fields, from lidar, eddy-covariance, and a footprint model. *Agric. For. Meteorol.*, 114:213–234.
- Courant, R., Friedrichs, K. und Lewy, H. (1928). Über die partiellen Differentialgleichungen der mathematischen Physik. *Math. Ann.*, 100:32–74.
- Deardorff, J. W. (1970). A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers. *J. Fluid. Mech.*, 41:453–480.
- Deardorff, J. W. (1973). Three-dimensional numerical modelling of the planetary boundary layer. In Haugen, D. A., Herausgeber, *Workshop on Micrometeorology*, Seiten 271–311. Amer. Meteorol. Soc.
- Deardorff, J. W. (1974). Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of the heated planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, 7:81–106.
- Deardorff, J. W. (1980). Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorol.*, 18:495–527.
- Desjardins, R. L., MacPherson, J. I., Mahrt, L., Schuepp, P., Pattey, E., Neumann, H., Baldocchi, D., Wofsy, S., Fitzjarrald, D., McCaughey, H. und Joiner, D. W. (1997). Scaling up flux measurements for the boreal forest using aircraft-tower combinations. *J. Geophys. Res.*, 102:29125–29133.
- Detering, H. W. (1985). *Mischungsweg und turbulenter Diffusionskoeffizient in atmosphärischen Simulationsmodellen*. Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover, **25**.
- Drobinski, P. und Foster, R. C. (2003). On the origin of near-surface streaks in the neutrally-stratified planetary boundary-layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, 108:247–256.
- Durran, D. R. (1999). *Numerical methods for wave equations in geophysical fluid dynamics*. Springer, New York.
- Etling, D. (2002). *Theoretische Meteorologie. Eine Einführung*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- Ferziger, J. H. und Peric, M. (1999). *Computational methods for fluid dynamics*. Springer Verlag, Berlin, 2 edition.
- Finn, D., Lamb, B., Leclerc, M. Y. und Horst, T. W. (1996). Experimental evaluation of analytical and lagrangian surface layer flux footprint models. *Boundary-Layer Meteorol.*, 80:283–308.
- Flesch, T. K. (1996). The footprint for flux measurements from backward lagrangian stochastic models. *Boundary-Layer Meteorol.*, 78:399–404.
- Flesch, T. K., Wilson, J. D. und Yee, E. (1995). Backward-time lagrangian stochastic dispersion models and their application to estimate gaseous emissions. *J. Appl. Meteorol.*, 34:1320–1332.
- Foken, T. (2003). *Angewandte Meteorologie*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- Foken, T. (2008). The energy balance closure problem: An overview. *Ecol. Appl.*, 18:1351–1367.
- Foken, T. und Leclerc, M. Y. (2004). Methods and limitations in validation of footprint models. *Agric. For. Meteorol.*, 127:223–234.

- Foken, T., Wimmer, F., Mauder, M., Thomas, C. und Liebenthal, C. (2004). Some aspects of the energy balance closure problem. *Atmos. Chem. Phys.*, 6:4395–4402.
- Fröhlich, J. (2006). *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner, Wiesbaden.
- Garratt, J. R. (1992). *The atmospheric boundary layer*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Geiger, R., Aron, R. H. und Todhunter, P. (1995). *The climate near the ground*. Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft, Braunschweig, Wiesbaden.
- Göckede, M., Foken, T., Aubinet, M., Aurela, M., Banza, J., Bernhofer, C., Bonnefond, J.-M., Brunet, Y., Carrara, A., Clement, R., Dellwik, E., Elbers, J. A., Eugster, W., Fuhrer, J., Granier, A., Grünwald, T., Heinesch, B., Janssens, I. A., Knohl, A., Kooble, R., Laurila, T., Longdoz, B., Manca, G., Marek, M., Markkanen, T., Mateus, J., Matteucci, G., Mauder, M., Migliavacca, M., Minerbi, S., Moncrieff, J. B., Montagnani, L., Moors, E., Ourcival, J.-M., Papale, D., Pereira, J., Pilegaard, K., Pita, G., Rambal, S., Rebmann, C., Rodrigues, A., Rotenberg, E., Sanz, M. J., Sedlak, P., Seufert, G., Siebicke, L., Soussana, J. F., Valentini, R., Vesala, T., Verbeeck, H. und Yakir, D. (2008). Quality control of carboeurope flux data part 1: Coupling footprint analyses with flux data quality assessment to evaluate sites in forest ecosystems. *Biogeosciences*, 5:433–450.
- Gopalakrishnan, S. G. und Avissar, R. (2000). An LES study of the impacts of land surface heterogeneity on dispersion in the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 57:352–371.
- Hadfield, M. G. (1994). Passive scalar diffusion from surface sources in the convective boundary-layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, 69:417–448.
- Ham, J. M. und Heilman, J. L. (2003). Experimental test of density and energy-balance corrections on carbon dioxide flux as measured using open path eddy-covariance. *Agron. J.*, 95:1393–1403.
- Hasager, C. B. und Jensen, N. O. (1999). Surface-flux aggregation in heterogeneous terrain. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 125:2075–2102.
- Hasager, C. B., Nielsen, N. W., Jensen, N. O., Boegh, F., Christensen, J. H., Dellwik, E. und Søgaard, H. (2003). Effective roughness calculated from satellite-derived land cover maps and hedge-information used in a weather forecasting model. *Boundary-Layer Meteorol.*, 109:227–254.
- Horst, T. W. (1999). The footprint for estimation of atmosphere-surface exchange fluxes by profile techniques. *Boundary-Layer Meteorol.*, 90:171–188.
- Horst, T. W. und Weil, J. C. (1992). Footprint estimation for scalar flux measurements in the atmospheric surface-layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, 59:279–296.
- Hsieh, C. I., Katul, G. und Chi, T. (2000). An approximate analytical model for footprint estimation of scalar fluxes in thermally stratified atmospheric flows. *Adv. Water Resour.*, 23:765–772.
- Huang, J. P., Lee, X. H. und Patton, E. G. (2008). A modelling study of flux imbalance and the influence of entrainment in the convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, 127:273–292.
- Inagaki, A., Letzel, M. O., Raasch, S. und Kanda, M. (2006a). The impact of the surface heterogeneity on the energy imbalance problem using les. *J. Met. Soc. Japan*, 84:187–198.
- Inagaki, A., Steinfeld, G., Raasch, S. und Kanda, M. (2006b). The numerical experiment of the energy and CO₂ imbalance problem using les. In *Extended Abstracts, 6th Symposium on the Urban Environment*, Atlanta, USA. AMS.

- IPCC (2001). *Climate Change 2001; The Scientific Basis, Contribution of Working Group I to the Third Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Isaac, P. R., Mcaneney, J., Leuning, R. und Hacker, J. M. (2004). Comparison of aircraft and ground-based flux measurements during OASIS95. *Boundary-Layer Meteorol.*, 110:39–67.
- Jansen, H. (2004). *Das Zeitschrittverfahren in PALM*. 28 Seiten, URL http://www.muk.uni-hannover.de/~PALM_group/doc/tec/numerik.heiko/Zeitschrittverfahren.pdf .
- Kanda, M. und Hino, M. (1994). Organized structure in developing turbulent flow within and above a plant canopy. *Boundary-Layer Meteorol.*, 68:237–257.
- Kanda, M., Inagaki, A., Letzel, M. O., Raasch, S. und Watanabe, T. (2004a). LES study on the energy imbalance problem with eddy covariance fluxes. *Boundary-Layer Meteorol.*, 110:381–404.
- Kanda, M., Moriwaki, R. und Kasamatsu, F. (2004b). Large-eddy simulation of turbulent organized structures within and above explicitly resolved cube arrays. *Boundary-Layer Meteorol.*, 112:343–368.
- Katul, G., Hsieh, C., Bowling, D., Clark, K., Shurpali, N., Turnipseed, A., Albertson, J., Tu, K., Hollinger, D., Evans, B., Offerle, B., Anderson, D., Ellsworth, D., Vogel, C. und Oren, R. (1999). Spatial variability of turbulent fluxes in the roughness sublayer of an even-aged pine forest. *Boundary-Layer Meteorol.*, 93:1–28.
- Kiehl, J. T. und Trenberth, K. E. (1997). Earth's annual global mean energy budget. *Bull. Am. Meteorol. Soc.*, 78:197–208.
- Kljun, N., Calanca, P., Rotach, M. W. und Schmid, H. P. (2004). A simple parameterisation for flux footprint predictions. *Boundary-Layer Meteorol.*, 112:503–523.
- Kljun, N., Kormann, R., Rotach, M. W. und Meixner, F. X. (2003). Comparison of the lagrangian footprint model lpdm-b with an analytical footprint model. *Boundary-Layer Meteorol.*, 106:349–355.
- Kljun, N., Rotach, M. W. und Schmid, H. P. (2002). A 3d-backward lagrangian footprint model for a wide range of boundary layer stratifications. *Boundary-Layer Meteorol.*, 103:205–226.
- Kolmogorow, A. N. (1941). Die lokale Struktur der Turbulenz in einer inkompressiblen zähen Flüssigkeit bei sehr großen REYNOLDSSchen Zahlen. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 32:299–303. Nachdruck in: H. Goering (Hsg.), 1958: *Statistische Theorie der Turbulenz*. — Akademie-Verlag, Berlin, 77–81.
- Kosovic, B. und Curry, J. A. (2000). A large eddy simulation study of a quasi-steady, stably stratified atmospheric boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 57:1052–1068.
- Kurbanmuradov, O., Rannik, U., Sabelfeld, K. und Vesala, T. (1999). Direct and adjoint monte carlo algorithms for the footprint problem. *Monte Carlo Meth. Appl.*, 5:85–112.
- Kurbanmuradov, O., Rannik, U., Vesala, T. und Sabelfeld, K. (2001). Evaluation of mean concentration and fluxes in turbulent flows lagrangian stochastic models. *Math. Comp. Sim.*, 54:459–476.
- Kurbanmuradov, O. und Sabelfeld, K. (2000). Stochastic lagrangian models for turbulent dispersion in atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, 97:191–218.
- Lamb, R. G. (1978). Footprint prediction of scalar fluxes using a markovian analysis. *Boundary-Layer Meteorol.*, 12:1297–1304.
- Leclerc, M. Y., Meskhidze, N. und Finn, D. (2003). Footprint predictions comparison with a tracer flux experiment over a homogeneous canopy of intermediate roughness. *Agric. For. Meteorol.*, 117:17–34.

- Leclerc, M. Y., Shen, S. H. und Lamb, B. (1997). Observations and large-eddy simulation modeling of footprints in the lower convective boundary layer. *Journal of Geophysical Research*, 102:9323–9334.
- Leclerc, M. Y. und Thurtell, G. (1990). Footprint prediction of scalar fluxes using a markovian analysis. *Boundary-Layer Meteorol.*, 52:247–258.
- Lenschow, D. H., Mann, J. und Kristensen, L. . (1994). How long is long enough when measuring fluxes and other turbulent statistics. *J. Atmos. Ocean. Tech.*, 11:661–673.
- Leonard, A. (1974). Energy cascade in large eddy simulation of turbulent fluid flows. In *Advances in Geophysics*, Band 18, Seiten 237–248. Academic Press.
- Letzel, M. O. (2007). *High resolution Large-Eddy Simulation of turbulent flow around buildings*. Dissertationsschrift, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover.
- Letzel, M. O. und Raasch, S. (2003). Large-eddy simulations of thermally induced oscillations in the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, 60:2328–2341.
- LeVeque, R. J. (1992). *Numerical methods for conservation laws*. Birkhäuser, Basel.
- Lilly, D. K. (1967). The presentation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. *Proc. IBM Scientific Computing Symp. on Environmental Sciences*, Thomas J. Watson Research Center, Seiten 195–210.
- Luhar, A. K. und Rao, K. S. (2004). Source footprint analysis for scalar fluxes measured in flows over inhomogeneous surface. In Gryning, S. E. und Millian, M. M., Herausgeber, *Air Pollution Modelling and its Application, Vol. X*, Seiten 315–323. Plenum Press, New York.
- Mahrt, L. (1998). Flux sampling errors for aircraft and towers. *J. Atmos. Ocean. Tech.*, 15:416–429.
- Markkanen, T. (2004). *Micrometeorology of forest surface fluxes*. Dissertationsschrift, Division of Atmospheric Sciences, Department of Physical Sciences, Faculty of Science, UNiversity of Helsinki, Helsinki, Finland.
- Mason, P. J. (1994). Large-eddy simulation: A critical review of the technique. *Quart. J. R. Meteorol. Soc.*, 120:1–26.
- Moeng, C. und Sullivan, P. P. (1994). A comparison of shear- and buoyancy-driven planetary boundary layer flows. *J. Atmos. Sci.*, 51:999–1022.
- Moncrieff, J., Malhi, Y. und Leuning, R. (1996). The propagation of errors in long-term measurements of land-atmosphere fluxes of carbon and water. *Global Change Biology*, 2:231–240.
- Monin, A. S. und Yaglom, A. M. (1975). *Statistical Fluid Dynamics: Mechanics of Turbulence*. MIT Press.
- Moore, K. E., Fitzjarrald, D. R., Sakai, R. K., Goulden, M. L., Munger, J. W. und Wofsy, S. C. (1996). Seasonal variation in radiative and turbulent exchange at a deciduous forest in central massachusetts. *J. Appl. Meteor.*, 35:122–134.
- Noh, Y., Cheon, W.-G., Hong, S.-Y. und Raasch, S. (2003). Improvement of the K-profile model for the planetary boundary layer based on large eddy simulation data. *Boundary-Layer Meteorol.*, 107:401–427.
- Otte, M. J. und Wyngaard, J. C. (2001). Stably stratified interfacial-layer turbulence from large-eddy simulation. *J. Atmos. Sci.*, 58:3424–3442.
- Pasquill, F. und Smith, F. B. (1983). *Atmospheric Diffusion*. Wiley, New York.

- Patrinos, A. N. A. und Kistler, A. L. (1977). A numerical study of the Chicago lake breeze. *Boundary-Layer Meteorol.*, 12:93–123.
- Patton, E. G., Sullivan, P. P. und Moeng, C.-H. (2005). The influence of idealized heterogeneity on wet and dry planetary boundary layers coupled to the land surface. *J. Atmos. Sci.*, 62:2078–2097.
- Piacsek, S. A. und Williams, G. P. (1970). Conservation properties of convection difference schemes. *J. Comput. Phys.*, 6:392–405.
- Pielke, R. (2002). *Mesoscale meteorological modeling*, Band 78 der Reihe *International Geophysics Series*. Academic Press, San Diego.
- Raasch, S. und Etling, D. (1991). Numerical simulation of rotating turbulent thermal convection. *Beitr. Phys. Atmosph.*, 64:185–199.
- Raasch, S. und Schröter, M. (2001). **PALM** - A large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol. Z.*, 10:363–372.
- Rannik, U., Aubinet, M., Kurbanmuradov, O., Sabelfeld, K. K., Markkanen, T. und Vesala, T. (2000). Footprint analysis for measurements over a heterogeneous forest. *Boundary-Layer Meteorol.*, 97:137–166.
- Rannik, U., Markkanen, T., Raittila, J., Hari, P. und Vesala, T. (2003). Turbulence statistics inside and over forest: influence on footprint prediction. *Boundary-Layer Meteorol.*, 109:163–189.
- Rebmann, C., Göckede, M., Foken, T., Aubinet, M., Aurela, M., Berbigier, P., Bernhofer, C., Buchmann, N., Carrara, A., Cescatti, A., Ceulemans, R., Clement, R., Elbers, J. A., Granier, A., Grünwald, T., Guyon, D., Havrankova, K., Heinesch, B., Knohl, A., Laurila, T., Longdoz, B., Marcolla, B., Markkanen, T., Miglietta, F., Moncrieff, J., Montagnani, L., Moors, E., Nardino, M., Ourcival, J.-M., Rambal, S., Rannik, U., Rotenberg, E., Sedlak, P., Unterhuber, G., Vesala, T. und Yakir, D. (2005). Quality analysis applied on eddy covariance measurements at complex forest sites using footprint modelling. *Theor. Appl. Climatol.*, 80:121–141.
- Reitmayer, H. (2000). *Quantifizierung des spektralen Angebotes photosynthetisch aktiver Strahlung (PAR) innerhalb eines Fichten-Buchen-Mischbestandes*. Dissertationsschrift, Lehrstuhl für Bioklimatologie und Immissionsforschung, Technische Universität München.
- Reth, S., Göckede, M. und Falge, E. (2005). Co₂ efflux from agricultural soils in eastern germany - comparison of a closed chamber system with eddy covariance measurements. *Theor. Appl. Climatol.*, 80:105–120.
- Reynolds, A. M. (1998). A two-dimensional lagrangian stochastic dispersion model for convective boundary layers with wind shear. *Boundary-Layer Meteorol.*, 86:345–352.
- Roache, P. J. (1985). *Computational Fluid Dynamics*. Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexiko.
- Rodean, H. (1996). *Stochastic Lagrangian models of turbulent diffusion*. *Meteorological Monographs*, Vol. 26, No. 48, Band 54. American Meteorological Society, Boston.
- Sabelfeld, K. K. und Kurbanmuradov, O. A. (1998). One-particle stochastic lagrangian model for turbulent dispersion in horizontally homogeneous turbulence. *Monte Carlo Meth. Appl.*, 4:127–140.
- Sagaut, P. (2001). *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg/New York.

- Schmid, H. P. (2002). Footprint modeling for vegetation atmosphere exchange studies: a review and perspective. *Agric. For. Meteorol.*, 113:159–183.
- Schmid, H. P. und Oke, T. R. (1990a). Estimating the source area of a turbulent flux measurement over a patchy surface. In *Proceedings of the Eighth Symposium on Turbulence and Diffusion, Preprints*, Seiten 123–126, Boston. AMS.
- Schmid, H. P. und Oke, T. R. (1990b). A model to estimate the source area contributing to turbulent exchange in the surface-layer over patchy terrain. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 116:965–988.
- Schmidt, H. und Schumann, U. (1989). Coherent structure of the convective boundary layer derived from large-eddy simulations. *J. Fluid. Mech.*, 200:511–562.
- Schröter, M. (2003). *Untersuchung der Evolution von Konvektionsstrukturen bei Kaltluftausbrüchen mit Hilfe eines parallelisierten Grobstrukturmodells*. Dissertationsschrift, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover.
- Schröter, M., Bange, J. und Raasch, S. (2000). Simulated airborne flux measurements in a LES generated convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, 95:437–456.
- Schuepp, P. H., Leclerc, M. Y., MacPherson, J. und Desjardins, R. L. (1990). Footprint prediction of scalar fluxes from analytical solutions of the diffusion equation. *Boundary-Layer Meteorol.*, 50:355–373.
- Schumann, U. (1975). Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. *J. Comput. Phys.*, 18:376–404.
- Shen, S. und Leclerc, M. Y. (1995). How large must surface inhomogeneities be before they influence the convective boundary layer structure? A case study. *Quart. J. R. Meteorol. Soc.*, 121:1209–1228.
- Sogachev, A. und Lloyd, J. J. (2004). Using a one-and-a-half order closure model of the atmospheric boundary layer for surface flux footprint estimation. *Boundary-Layer Meteorol.*, 112:467–502.
- Sogachev, A., Menzhulin, G., Heimann, M. und Lloyd, J. (2002). A simple three-dimensional canopy - planetary boundary layer simulation model for scalar concentrations and fluxes. *Tellus*, 54B:784–819.
- Sorbjan, Z. (1989). *Structure of the atmospheric boundary layer*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- Stull, R. B. (1988). *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- Su, H.-B., Shaw, R. H., Paw, U. K. T., Moeng, C.-H. und Sullivan, P. P., . (1988). Turbulent statistics of neutrally stratified flow within and above a sparse forest from large-eddy simulation and field observations. *Boundary-Layer Meteorol.*, 88:363–397.
- Sullivan, P. P., Horst, T. W., Lenschow, D., Moeng, C.-H. und Weil, J. C. (2003). Structure of subfilter-scale fluxes in the atmospheric surface layer with application to large-eddy simulation modeling. *J. Fluid. Mech.*, 482:101–139.
- Tennekes, H. und Lumley, J. L. (1973). *A first course in turbulence*. The MIT Press, Cambridge.
- Thomson, D. J. (1987). Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flow. *J. Fluid. Mech.*, 180:529–556.
- Twine, T. E., Kustas, W. P., Norman, J. M., Cook, D. R., Houser, P. R., Meyers, T. P., Prueger, J. H., Starks, P. J. und Wesley, M. (2000). Correcting eddy-covariance flux underestimates over a grassland. *Agric. For. Meteorol.*, 103:279–300.

- Uhlenbrock, J. (2001). Entwicklung eines Multigrid-Verfahrens zur Lösung elliptischer Differentialgleichungen auf Massivparallelrechnern und sein Einsatz im LES-Modell PALM. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover.
- Uhlenbrock, J. (2006). *Numerische Untersuchung der konvektiven Grenzschicht über realen heterogenen Landoberflächen mit einem Grobstruktursimulationsmodell*. Dissertationsschrift, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover.
- Vesala, T., Kljun, N., Rannik, U., Rinne, J., Sogachev, A., Markkanen, T., Sabelfeld, K., Foken, T. und Leclerc, M. Y. (2008). Flux and concentration footprint modelling: State of the art. *Environmental Pollution*, 152:653–666.
- Vinkovic, I., Aguirre, C., Ayrault, M. und Simoens, S. (2006). Large-eddy simulation of the dispersion of solid particles in a turbulent boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, 121:283–311.
- Watanabe, T. (2004). Large-eddy simulation of coherent turbulent structures associated with scalar ramps over plant canopies. *Boundary-Layer Meteorol.*, 112:307–341.
- Weil, J. C., Sullivan, P. P. und Moeng, C.-H. (2004). The use of large-eddy simulations in lagrangian particle dispersion models. *J. Atmos. Sci.*, 61:2877–2887.
- Weinbrecht, S., Raasch, S., Ziemann, A., Arnold, A. und Raabe, A. (2004). Comparison of large-eddy simulation data with spatially averaged measurements obtained by acoustic tomography - presuppositions and first results. *Boundary-Layer Meteorol.*, 111:441–465.
- Willis, G. E. und Deardorff, J. W. (1978). A laboratory study of dispersion from an elevated source within a modeled convective planetary boundary layer. *Atmos. Environ.*, 12:1305–1312.
- Wilson, J. D. und Sawford, B. L. (1996). Review of lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere. *Boundary-Layer Meteorol.*, 78:191–210.
- Wilson, J. D. und Swaters, G. E. (1991). The source area influencing a measurement in the planetary boundary-layer - the footprint and the distribution of contact distance. *Boundary-Layer Meteorol.*, 55:25–46.
- Wyngaard, J. C. und Peltier, L. J. (1996). Experimental micrometeorology in an era of turbulence simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, 78:71–86.

ANHANG A: VERÖFFENTLICHUNG I

Da das Copyright für diesen wissenschaftlichen Artikel bei der Firma Springer Science and Business Media B.V. liegt und diese einen Abdruck des Artikels nicht innerhalb von passwortfrei zugänglichen PDF-Dokumenten (entsprechend der gewählten Form der Veröffentlichung dieser Dissertation) erlaubt, kann hier leider kein Abdruck des Artikels erfolgen.

Die bibliographischen Angaben für diesen Artikel lauten: G. Steinfeld, M. O. Letzel, S. Raasch, M. Kanda und A. Inagaki (2007). Spatial representativeness of single tower measurements and the imbalance problem with eddy-covariance fluxes: results of a large-eddy simulation study. *Boundary-Layer Meteorol.*, 123:77-98.

ANHANG B: VERÖFFENTLICHUNG II

Da das Copyright für diesen wissenschaftlichen Artikel bei der Firma Springer Science and Business Media B.V. liegt und diese einen Abdruck des Artikels nicht innerhalb von passwortfrei zugänglichen PDF-Dokumenten (entsprechend der gewählten Form der Veröffentlichung dieser Dissertation) erlaubt, kann hier leider kein Abdruck des Artikels erfolgen.

Die bibliographischen Angaben für diesen Artikel lauten: G. Steinfeld, S. Raasch und T. Markkanen (2008). Footprints in homogeneously and heterogeneously driven boundary layers derived from a Lagrangian stochastic particle model embedded into a large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, 129:225-248.

ANHANG C: VERÖFFENTLICHUNG III

Da der Prozess der Veröffentlichung des dritten wissenschaftlichen Aufsatzes dieser kumulierten Dissertation auch zwei Monate nach der Disputation noch nicht vollständig abgeschlossen ist, die allgemeinen Geschäftsbedingungen der Zeitschrift *Atmospheric Chemistry and Physics* eine Veröffentlichung des Inhalts als Teil einer Doktorarbeit jedoch zulassen, ist an dieser Stelle das zugehörige, bei *Atmospheric Chemistry and Physics* zur Begutachtung eingereichte Manuskript, beigelegt.

Validation of conventional Lagrangian stochastic footprint models against LES driven footprint estimates

TIINA MARKKANEN¹, GERALD STEINFELD², NATASCHA KLJUN³,
SIEGFRIED RAASCH², THOMAS FOKEN¹

¹Department of Micrometeorology, University of Bayreuth, 95440 Bayreuth, Germany

²Institute of Meteorology and Climatology, Leibniz Universität Hannover, Hannover, Germany

³Department of Geography, Swansea University, Singleton Park, Swansea, United Kingdom

Abstract. In this study we compare the performance of traditional Lagrangian stochastic (LS) footprint models that use parameterised flow field characteristics with results of a Lagrangian trajectory model embedded in large eddy simulation (LES) framework. The two Lagrangian models follow the particles backward and forward in time while the trajectories in LES only evolve forward in time. We assess their performance in unstably and neutrally stratified boundary layers at observation levels covering the whole depth of the atmospheric boundary layer. We present a concept for footprint model comparison that can be applied for 2D footprints. Because the flow field description among the three models is most realistic in LES we use those results as reference in the comparison. We found that for lowest observation heights the results of all three models are comparable. At higher levels the results are similar at close distances from the measurement point, whereas at further distances the differences grow considerably.

C-1 INTRODUCTION

Footprint modelling aims at determining the areas of highest influence on concentrations or fluxes of atmospheric constituents at a certain location. This is necessary in interpreting the results of measurements especially when those are performed over a landscape of varying source strengths. While the term footprint refers to the field of view of a measurement device, the outcome of footprint modelling typically is the footprint function or source weight function

(see Schmid, 1997, and the references therein). Analytical footprint models facilitate an analytical solution for diffusion equation and are usually applied only for flow within well developed, stationary atmospheric surface layer (ASL) where Monin-Obukhov scaling is valid. In the Lagrangian stochastic (LS) approach a large number of particles are followed as they traverse between their sources and the observation point. Stochastic models are more time consuming but they can also be applied for measurements over tall canopies where the within canopy flow and along wind diffusion are of crucial importance and roughness layer effects modifies the characteristics of turbulence (e.g. Baldocchi, 1997; Rannik et al., 2000, 2003). LS simulations can be run either backward (e.g., Kljun et al., 2002) or forward (e.g., Leclerc and Thurtell, 1990; Rannik et al., 2000) in time. The heterogeneities in the flow field and even nonstationarity are more straightforward to take into account in backward modelling, whereas forward models are less sensitive for stochastic noise than backward models in which the flux contributions are dependent on the ratio of initial and touchdown velocities (Flesch, 1996). Conventional way to simulate LS dispersion requires pre-determined flow characteristics as input. Large eddy simulations (LES), instead, determine the statistics of turbulence themselves according to the given initial and boundary conditions. Those flow field characteristics are consequently either used as input for Lagrangian particles (Cai and Leclerc, 2007) or the particles are released during LES run in which case the particles experience the flow field development in real time (Steinfeld et al., 2008).

In the present comparison of footprint models we use the LS model LPDM-B (Kljun et al., 2002) for backward simulations (BW) and the LS model by Univ. of Helsinki (Rannik et al., 2000; Markkanen et al., 2003; Rannik et al., 2003) for forward simulations (FW). As a reference we use the LES model PALM (Raasch and Etling 1998; Raasch and Schröter, 2001) which simulates trajectories of a large number of particles simultaneously with general flow field calculations (Steinfeld et al., 2008). From this data the footprints are determined in a similar way as in conventional forward LS models (Kurbanmuradov et al., 1999).

In previous footprint model comparison studies the most common measures used are peak position and certain statistical measures of cumulative footprint function. (Schmid (1997) defined for 2D source areas the effect level of certain percentage of the total source weight function, Markkanen et al. (2003) used distances of cumulative 1D footprint function reaching certain percentage; former cumulates the values from the maximum toward areas of smaller contribution up to selected percentage, and the latter cumulates cross-wind integrated footprint function from infinity at downwind from the measurement point towards increasing distances upwind. Both in model comparison studies (Horst and Weil, 1992; Rannik et al., 2000; Kljun et al., 2003) and in studies aiming at model evaluation based on tracer experiments (Finn et al., 1996; Leclerc et al., 2003a, b; Mölder et al., 2004) as well as on wind tunnel experiments (Kljun et al., 2004) cross wind dimension is often neglected, and the results are shown in 1D - that is, as functions of along mean wind distance from the observation position. The reason for neglecting cross wind dimension in the analysis of LS simulations is often too high stochastic noise of 2D patterns. On the other hand, any comparison is more straightforward as a function of one cartesian dimension than of two dimensions. Quite often the cross wind direction is not considered in the simulations at all. In the tracer experiment evaluation case the reason for exclusion of cross wind direction may also be that the experiment set up only provides information for vertical dimension. For practical purposes, however, the source area has to be considered in 2D. For instance, quality assessment tools (e.g., Göckede et al., 2007, 2008) make use of 2D footprints to determine the areas of importance surrounding the measurement point.

Nowadays, as computing power has increased, the run times for simulations with high enough particle numbers have decreased and even the 2D data can be used as such without smoothing

the data by means such as density kernel method facilitated by Kljun et al. (2002). Density kernel method, even though common tool in producing estimates of less noise, needs careful consideration of the width of the kernel window to keep the important patterns of the footprint functions. This is especially important when the 2D footprint function is not symmetrical over mean wind axis, as in the case when Ekman layer wind direction turning is taken into account (Steinfeld et al., 2008).

Moreover, in a comparison the tendency of the cumulated footprint function of each model has to be considered to make the simulated results truly comparable. According to Horst and Weil (1994), in the case of the uniform surface flux the integrated flux footprint function has to tend to unity under homogeneous flow within the surface layer. Higher within the atmospheric boundary layer (ABL) (in fact in convective boundary layer) it tends to $1 - z_m/z_i$ (Horst and Weil, 1992), where z_m stands for measurement height and z_i is ABL depth. While in the family of analytical flux footprint models many do not satisfy the condition Haenel and Grünhage (1999) developed a 1D model that tends to unity once integrated to infinity.

As the upper boundary of particle dispersal is often neglected when footprints are determined for low measurement heights, the footprints derived from LS simulations are usually normalised by their cumulative values at certain horizontal distances from the observation point. Nevertheless, when the whole depth of the boundary layer is considered, the plume reflection from the boundary layer top influences the shape of the flux footprint function strongly which often does not cumulatively tend to any well defined value within reasonable distances from the observation point. This is due to locally negative flux footprint functions which are to be expected under complicated flow situation as was demonstrated by Finnigan (2004) in a case of convergent flow near a hill top, whereas under simple shear flow situation the integrated flux footprint function is bound by 0 and 1.

Among LS approaches cumulative cross wind integrated flux footprint function presented by Leclerc and Thurtell (1990) tends to unity. The versions of the forward flux footprint model by Univ. of Helsinki (Rannik et al, 2000; Markkanen et al., 2003; Rannik et al, 2003) which only consider the surface layer flux footprint functions tend to unity. This is due to the fact that the flow field fulfills the simple shear flow condition discussed by Finnigan (2004). In Kljun et al. (2004) the parameterisation of LPDM-B model satisfies the integral condition of unity, as well.

According to Finnigan (2004) cumulated concentration footprint functions are expected to be bound by zero and one as they can be interpreted as Green's functions of Eulerian mass conservation equation or transition probabilities in Lagrangian framework. In work by Cai and Leclerc (2007), that combines LES derived flow characteristics with LS simulations, concentration footprints tend to unity in infinity, showing, however at certain distances values well over unity. The results are normalised by the fraction of boundary layer lying below the source height. On the contrary, in the footprint model by Univ. of Helsinki (Rannik et al., 2000) which derives the footprints from dispersion data according to Kurbanmuradov et al. (1999) the concentration footprint functions tend to infinity when normalised only by the simulated particle number (which corresponds to normalisation by source strength).

In this work we present a concept to compare the 2D Lagrangian footprints extending through whole depth of the ABL. For that aim we present a way to normalise the stochastic particle data that is suitable for the data sets in hand. We quantify model agreement both for the equality of their sizes and for the degree of overlapping source areas. Finally we present a classification for 2D model agreement.

C-2 METHODS

C-2.1 The LS model embedded into the LES model PALM

The LS particles are embedded into LES model PALM whose range of applicability covers boundary layers from convective to weakly stably stratified (Beare et al., 2006; Steinfeld et al., 2008) including neutral stratification (Letzel et al., 2006). The method for particle inclusion is based on Weil et al (2004), who separate the velocity scales of particles into two scales consisting of deterministic part and stochastic part, corresponding to the division of turbulent flow field into grid-scale and sub-grid scales, respectively. For stochastic transport Weil et al. (2004) adopted the Thomson (1987) model which assumes isotropy and Gaussianity of turbulence (see Weil et al. (2004) for more details). The grid scale flow characteristics are interpolated linearly in vertical and bilinearly in horizontal direction to sub-grid scale particle positions. Following Kim et al. (2005), no boundary condition has been used at the boundary layer top, whereas at the top of the model domain reflection condition has been applied. Nevertheless the latter condition had no effect as no particle reached the top of the domain. Importantly, in the PALM embedded LS model, the particles are simulated online during LES run. That is not the case in LES driven LS simulations by Weil et al. (2004), Cai and Leclerc (2007) and Kim et al. (2005) who used precalculated LES data for consequent, separate LS simulations, which is costly concerning the disc space and limited by writing and reading rates of the data. Furthermore, the PALM embedded LS calculations are fully parallelised which facilitates release of exceptionally high number of particles. For more discussion on benefits of our approach see Steinfeld et al. (2008). In this work PALM is driven in its dry mode and cyclic lateral boundaries are applied both for the flow field and the particles. Furthermore, Monin-Obukhov similarity is applied between the surface and the first computational grid point level.

C-2.2 Conventional Lagrangian stochastic models

Backward model LPDM-B

In LPDM-B the dispersion is based on a model by Rotach et al. (2006) and de Haan and Rotach (1998) which satisfied the well mixed condition by Thomson (1987) from convective to stable stratifications and over the whole depth of the atmospheric boundary layer. We use the model in its most parameterized form in which only surface roughness length, friction velocity, Obukhov length, convective velocity scale and boundary layer height are required as input. Parameterizations of mean wind speed and standard deviations are given in Rotach et al. (1996). Calculation of backward trajectories and the method of deriving the flux and concentration footprint function out of the release and touchdown velocity data are given in Flesch et al. (1995) and Flesch (1996). For detailed description and sensitivity analysis of the model as whole the reader is advised to have a look at Kljun et al. (2002).

Forward model

The forward model by Univ. of Helsinki (Rannik et al., 2000) was used in this work as a version presented in Rannik et al. (2003). The model simulates transition of stochastic particles according to Thomson's (1987) 3D model forward in time. The model only considers dispersal within the ASL where Monin-Obukhov similarity is assumed. Universal functions accounting for stabilities for wind statistics, for wind speed and for dissipation rate of turbulence are given in

Rannik et al. (2003). As the model version Rannik et al. (2003) actually considers the roughness sublayer including canopy sublayer the leaf area density was adjusted so that roughness length of 0.14 m was attained. Because the canopy height (0.75 m) was low compared to the lowest measurement height (10 m) and the particles were released from the top of the canopy, the inclusion of canopy layer is not expected to have a strong influence on the particle dispersion.

C-2.3 Footprint calculations

In the following presentation the form of the functions is otherwise adopted from Vesala et al. (2008) except for the notation convention, where capital letters in speeds and positions refer to particles, while low case letters stand for fixed Eulerian reference frame such as speeds and positions in the measurement point. According to Flesch (1996) in the case of BW model the vertical flux density at the location (x, y, z) is

$$F(x, y, z) = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{W_{i0}}{W_{ij}} Q(X_{ij}, Y_{ij}, z_0), \quad (\text{C-1})$$

where summations run over the number of particles (N) and touchdowns (n_i), W_{i0} is initial speed of the particle and W_{ij} is its speed at touchdown. Q stands for source strength and N stands for total number of particles. 2D footprint functions are subsequently calculated as follows:

$$f(x, y, z) = \frac{1}{Q} \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}. \quad (\text{C-2})$$

The equation for concentration at the sensor location differs from the respective equation for flux in the sense that initial speed of particles is not considered in the nominator. Thus the equation is as follows:

$$C(x, y, z) = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{W_{ij}} Q(X_{ij}, Y_{ij}, z_0). \quad (\text{C-3})$$

The footprint function, however, is of a similar form as that of flux footprint.

In the FW model case, the respective estimator for flux at position (x, y, z) is as follows:

$$F(x, y, z) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{W_{ij}}{|W_{ij}|} Q(x - X_{ij}, y - Y_{ij}, z_0), \quad (\text{C-4})$$

where n_i stands for number of interceptions of the particle with the measurement level z_m and, consequently, W_{ij} represents the particle velocity at the moment of interception. Otherwise the notation follows that of backward calculations (Eq. C-1 to C-3). Concentration at (x, y, z) is calculated as follows

$$C(x, y, z) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{|W_{ij}|} Q(x - X_{ij}, y - Y_{ij}, z_0). \quad (\text{C-5})$$

The respective footprints are determined as in the backward model case above (Eq. C-2).

In this study source strength Q is horizontally homogeneous within the domain. Thus normalisation by source strength in Eq. C-2 simply reduces the variable out of consideration.

Table C-1: Parameters characterising the site, flow situation and the domain used in both runs.

Parameter	case 1 (case 1 with Coriolis force)	case 2
site		
h_c	0.75 m (0.75 m)	0.75 m
z_0	0.14 m (0.14 m)	0.14 m
flow situation		
L	-32 m (-30 m)	-76.6 m
z_i	500 m (560 m)	545.95 m
w_*	0.78 m s ⁻¹ (0.97 m s ⁻¹)	0.76 m s ⁻¹
u_*	0.27 m s ⁻¹ (0.27 m s ⁻¹)	0.295 m s ⁻¹
domain extension		
cross wind	1000 m	1000 m
down wind	200 m	200 m
up wind	3000 m	5000 m

C-2.4 Model comparison

In this work we simulated the convective, homogeneous boundary-layer already investigated in the paper of Leclerc et al. (1997) (case with Obukhov length of -32 m, *cf.* Table C-1). Additionally, we simulated a more neutral case with Obukhov length of -77 m. Since the two conventional LS models in their present form only consider stationary flow condition, the stage of a well developed, very slowly growing ABL situation was considered for LES as well. The parameters characterising the site and the flow are given in Table C-1.

We simulated trajectories for ten observation heights (10, 30, 40, 50, 100, 150, 200, 250, 300 and 350 m) for a mixed layer of approximately 500 m (see Table C-1). Nevertheless, FW simulations were only performed up to observation height of 100 m which is already beyond the validity of the model that only considers ASL flow. For each measurement height, we calculated the footprint contributions for evenly spaced grids of resolutions of: 5, 10, 20, 50, 100, 200 and 400 m. A wide range of resolutions was applied to be able to select the most suitable resolutions for each measurement height (see the end of this chapter for the selection of resolution). Selecting an appropriate resolution is crucial so that no important patterns in the footprint functions will be leveled out by too coarse resolution, whereas too high resolution will give rise to outliers due to statistical noise which is characteristic of stochastic simulations. This noise is especially disturbing in the BW model case, where the touchdown speed occurs in the nominator of flux and concentration functions (Eq. C-1 and Eq. C-3). The effect of noise can be reduced by increasing the amount of simulated particles but here we used particle numbers typical for conventional models of the order of 10^5 while the number of particles in LES was one order of magnitude more.

In the comparison among the three models we used LES results as reference because of its most realistic description of the flow field and largest particle number, consequently producing least noise. For model comparison it is important to compare both sizes of the areas contributing to the signal as well as their locations. To concentrate on differences in shapes of the footprint patterns instead of differences in total contributions, all footprints were normalised by the total contribution from the selected horizontal domain. Thus the total signal from the domain area was equal to unity. In order to take into account all the particles contributing to the signal, the footprints should be normalised by the contribution from an area that extends to infinity in each

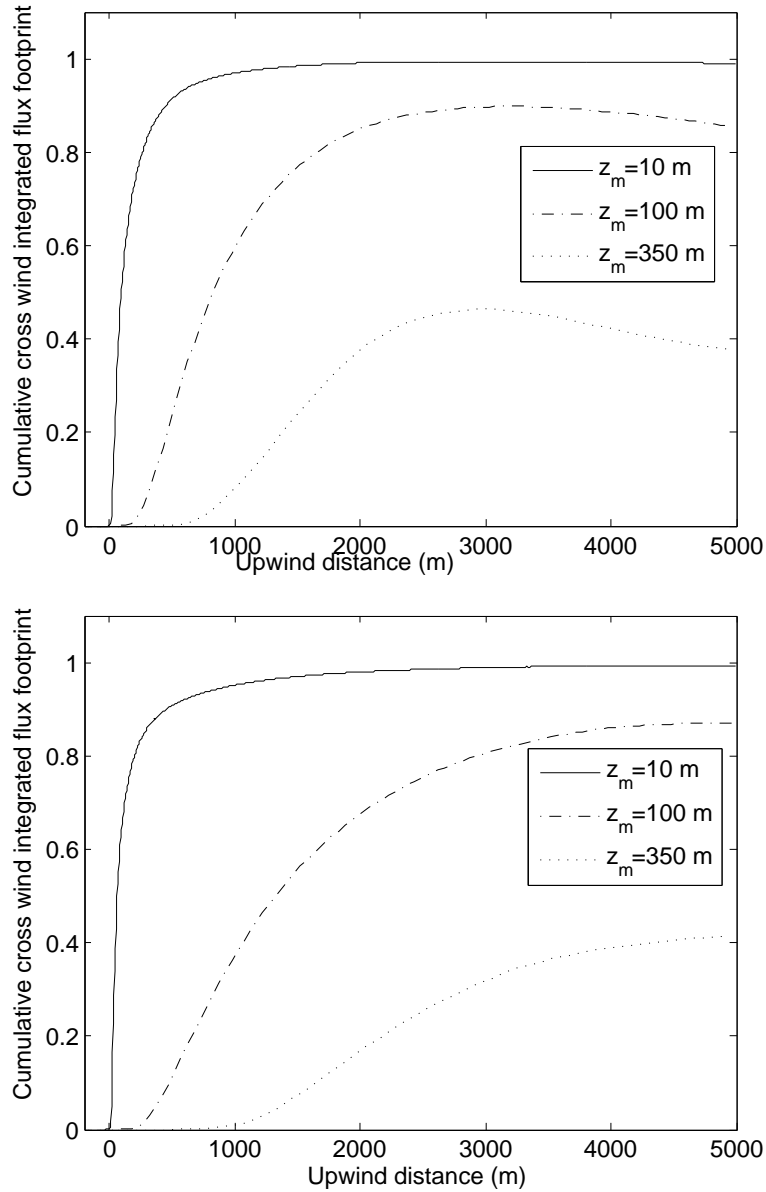


Figure C-1: Cumulative cross wind integrated footprints from three observation levels predicted by LES model within 5000 m upwind from the measurement point. a) The convective case of $L = -32$ m and b) the near neutral case of $L = -77$ m.

direction from the measurement point. As in practice an infinite domain is not computationally possible and moreover, it does not make sense in practice because no infinite fetch occurs in the nature, we selected fixed domain sizes for both stratifications.

In cross wind it was enough to extend the horizontal domain to 1000 m in each direction, while a distance of 200 m captured all the contribution from down wind in all the modelled cases. Because negative contributions from areas where descending particles outnumbered their ascending counterparts were observed in the LES results (see also Steinfeld et al., 2008), the contribution from the total domain is dependent on the domain up wind extension. The areas of negative and positive contribution are distributed symmetrically across mean wind direction, which is partly due to exclusion of the Coriolis force from the simulations (see section C-3.1 for effects of its neglect). Thus, a cross wind integrated footprint shows the importance and along mean wind location of the areas of negative contribution within the domain (Figure C-1).

Under the convective case (Figure C-1a) the contribution of negative part of the cross wind integrated footprint to the total signal within 5000 m upwind is at its highest at the highest measurement level being 19% of the contribution of positive part which dominates within 3000 m up wind from the measurement point. The influence of negative part decreases monotonously towards low measurement heights and practically vanishes at the lowest height of 10 m. However, according to these results we set the up wind domain extension of the L=-32 m to 3000 m for all measurement heights. Under the nearly neutral case of L=-77 m (Figure C-1b) there is practically no dominance of negative contributions observed within 5000 m upwind. As the cross wind integrated cumulative footprints reach a plateau at this distance the upwind domain extension was set to 5000 m.

In this study we normalise the footprints by total contribution from the whole domain area of fixed size. Another option of normalising by merely the fraction from positively contributing areas exclusively would cause bias between the models because of the two fundamentally different sources of negative contributions, stochastic noise and overall flow pattern which dominates negative contributions of BW and LES models respectively. While stochastic noise could be reduced by coarse grid, the effect of flow pattern is better revealed by using dense grid. In both cases the fraction of negative areas would decrease, whereas the flux contribution from the whole domain does not depend on the grid size and serves thus better as normalisation parameter. Because the LES model showed most prominent areas of negative contributions to the signal, the above presented selection of extension of total domain area was consequently used for footprint normalisation for all models (Table ??).

We used following approach to classify and compare the footprint functions. Firstly, we determined the peak locations in along wind and cross wind direction. Secondly, to quantify the similarities in shapes and extensions of footprint patterns, we determined the smallest areas contributing certain percentages to the LES, BW and FW footprints.

Schmid and Oke (1990) used the term source area of level P (Ω_P) of the respective measure for analytical two dimensional footprint functions. As in the case of a stochastic model the footprints are given as probability of each grid within the domain to serve as source for the measurements, we cannot determine a well defined single area bounded by an isopleth as it is possible in the case of an analytical function. Instead, for some resolution - measurement height -combinations, the smallest area contributing certain percentage of the total flux consists of several separate parts. Moreover, for certain combinations such a smallest area cannot be found at all as the contribution from an individual grid cell alone is higher than the given limits. This problem can be avoided by an appropriate grid size - measurement height combination selection, which was used as the only means to reduce the influence of stochastic noise. In this work we adopted the notation by Schmid and Oke (1990) regardless of the above mentioned fundamental difference between the presentation of footprint areas in analytical functions and stochastic estimators.

To select the suitable grid size - measurement height -combinations we firstly: ruled out combinations producing obvious outliers in along wind peak position patterns when plotted as functions of measurement height. This criterium removed outliers from predictions by all the models and set a lower limit of grid size (Δx) as follows: $\Delta x > 0.4z_m$, where z_m is measurement height. Secondly, we determined an upper limit such that the shapes of footprint functions would not suffer from too drastic areal averaging. This limit was found to set grid size as follows: $\Delta x \leq z_m$. Together these criteria preserved one or two grid sizes for each measurement height.

For the selected data we determined the smallest areas contributing 10%, 20%, 50% and 80% to the footprints, that is Ω_{10} , Ω_{20} , Ω_{50} and Ω_{80} respectively. Additionally we determined

Table C-2: Quality categories for footprint comparison

Quality of comparison	code	$1 - \Omega_P^\cap / \Omega_P^{Ref}$	$(\Omega_P - \Omega_P^{Ref}) / \Omega_P^{Ref}$
high agreement	3	> 70%	> 60%
moderate agreement	2	> 50%	> 40%
low agreement	1	> 30%	> 20%
no agreement	0	< 30%	< 20%

the area that is common for both the validated model (BW or FW) and the reference (LES), that is an intersection of the two Ω_{PS} ($\Omega_P^{Val} \cap \Omega_P^{Ref}$) and we denoted it as Ω_P^\cap .

In order to compare the equality of predicted footprint functions it is possible to determine the signal predicted by both models that originate from Ω_P^\cap . When both these values are close or in agreement to the target percentage, the two models agree perfectly for that part. When one of the models is close to the given upper limit but the other one is smaller, the former one is completely disclosed by the latter one.

For practical model comparison Ω_P^\cap is of more relevance than equality of the size of the area of level P by the qualified model (Ω_P^{Val}) and the reference (Ω_P^{Ref}). Nevertheless, also the footprint size has an influence because a too large Ω_P^{Ref} would fake a good agreement by enclosing Ω_P^{Val} . Therefore a combination of both parameters can only be a good measure for comparison. Accordingly, we finally present a classification of model agreement to the reference. The classification is based on both agreement of sizes of the source areas and on the degree of their overlapping. The size agreement between the examined model and the reference is given as follows: $(|\Omega_P^{Val} - \Omega_P^{Ref}|) / \Omega_P^{Ref}$ and the degree of overlapping as follows: $1 - \Omega_P^\cap / \Omega_P^{Ref}$

The final agreement class ranging from 0 to 3 (no agreement to good agreement) is consequently determined according to the decision table shown in Table C-2.

This method of classification was principally adopted from Rebmann et al. (2005) and in the updated version Göckede et al. (2008) who had developed a schema to combine footprints with the land use data. They defined levels of the target land use which must be in the footprint area like 60 or 80 %. Then they checked for how many measurements these levels are fulfilled. Also the quality check of turbulent fluxes is on the first view an arbitrary combination of different parameters (Foken and Wichura (1996); Foken et al. (2004)).

C-3 RESULTS AND DISCUSSION

C-3.1 Comparison between LES model versions with and without Coriolis force

As the Coriolis force (CF) was not considered in the basic LES runs, we estimated its influence by making an additional run with the CF. In this run the grid resolution was 10 m. The boundary layer characteristics of the additional run also differed from those of the basic LES run (see Table C-1).

First we evaluate the influence of lower sub grid scale (SGS) resolution of the runs with CF. Steinfeld et al. (2008) showed the importance of LES grid size at lowest measurement height of 10 m: higher resolution produced peaks that were located at further distances and were of lower intensities than those predicted with lower resolution. When all the measurement heights are considered, however, the resolutions of 10 and 2.5 m show high agreement of peak position and intensity, coefficients of determination being $r^2=0.94$ and $r^2=0.96$, for along mean wind flux footprint peak position and peak intensity respectively. As expected, for total contribution to

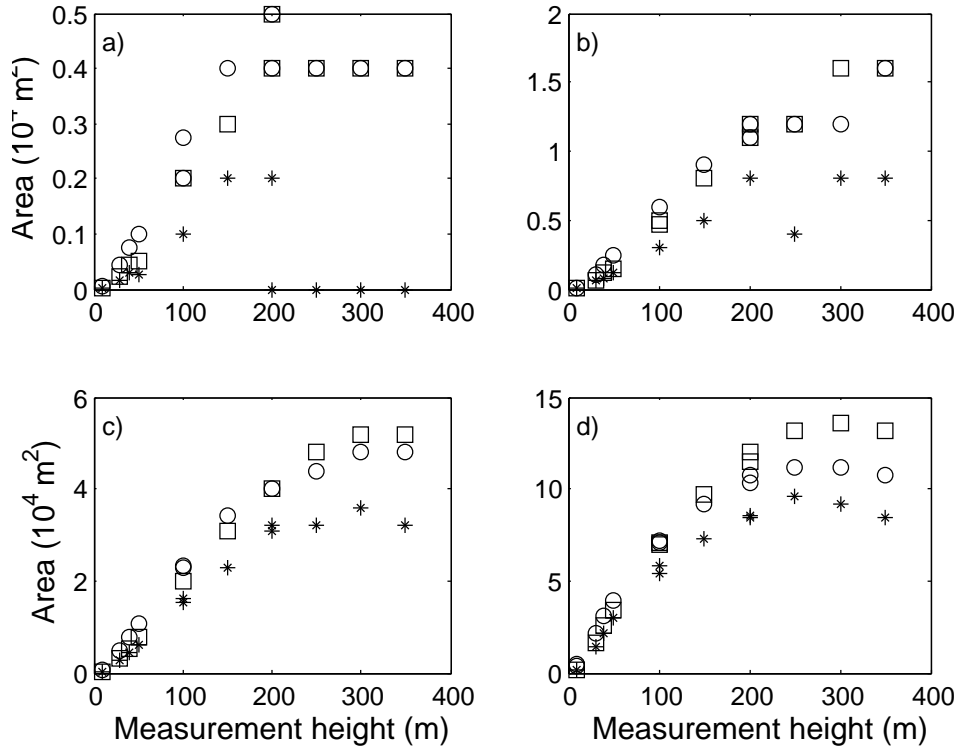


Figure C-2: The sizes of the smallest source areas contributing a) 10%, b) 20%, c) 50% and d) 80% to the flux footprints, i.e. Ω_{10} , Ω_{20} , Ω_{50} and Ω_{80} . The model with Coriolis force indicated by circles, the model without Coriolis force with squares and the common area of both models Ω_{10}^c , Ω_{20}^c , Ω_{50}^c and Ω_{80}^c with asterisk. Results shown only for selected grid resolutions (see section C-2.4 for criteria)

the flux and concentration footprints from the whole domain area the models agree perfectly, because large flow structures are responsible for transport in that size-scale. Thus, we can conclude that the coarse grid resolution is acceptable in assessing the effect of the inclusion of the CF.

Next we evaluate the influence of the inclusion of the CF on the footprint predictions. As under influence of CF the mean wind direction turns clockwise from the surface towards the top of the ABL, the mean wind direction at each observation height separately was set identical to that of respective simulations without CF.

Comparison of flux and concentration footprints predicted by both model parameterisations revealed that, for selected data the flux footprint peak positions alongwind were 10% to 30% closer to the observation point when CF was included. In cross wind, the peak positions were well centralised implying that the mean wind direction at the observation height mostly determines the position of the footprint peak even when CF is included. However, in the case of concentration footprints the peak positions were slightly biased towards counterclockwise positions from the mean wind when CF was included. The discrepancy between flux and concentration footprints is due to the fact that concentration footprints positively contributed by particles travelling both upwards and downwards (Eq. C-5). Accordingly, the contributing particles originate from further distances and experience the turning wind in the ABL for longer time than those contributing positively to flux footprints.

The Ω_{10} , Ω_{20} , Ω_{50} and Ω_{80} of the model with CF are at the lowest observation level up to 3 fold compared to those of the results of the run without it (Figure C-2).

Difference gets smaller towards larger heights and is opposite at the highest levels. At the lowest level the overlapping area among the two model versions is nearly equal to the

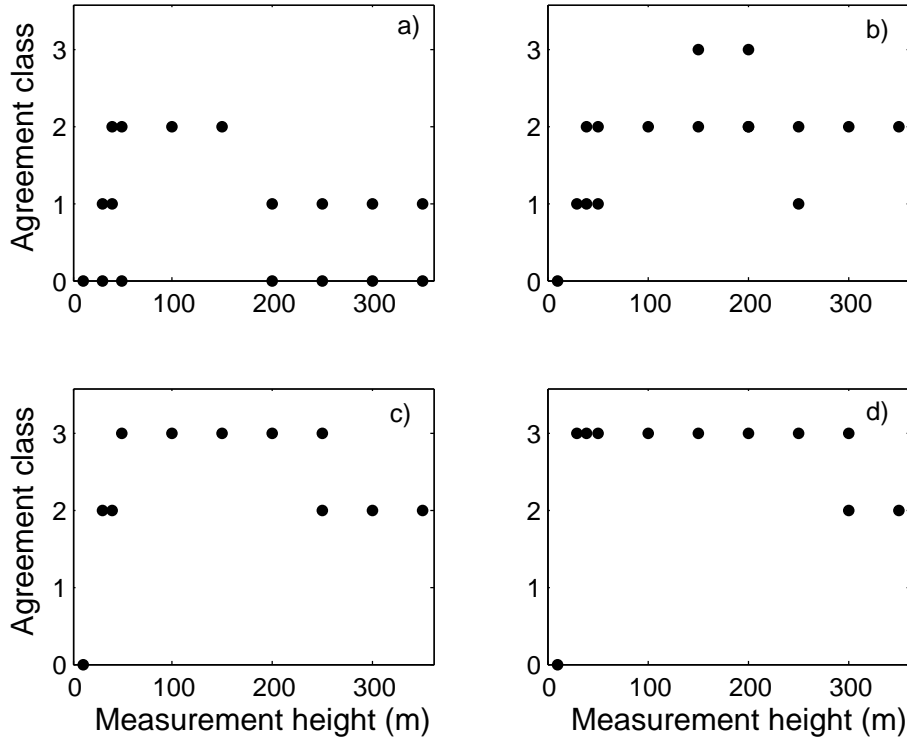


Figure C-3: Agreement classes for validation of LES parameterisation without Coriolis force against parameterisation including Coriolis force in the convective case of $L=-32$ m. Validations for a) Ω_{10} , b) Ω_{20} , c) Ω_{50} and d) Ω_{80} . Results shown only for selected grid resolutions (see section C-2.4 for criteria)

case without CF, which implies that the areas predicted by this model are enclosed by its counterpart taking CF into account. This is largely due to narrower peak because of lower resolution of version considering CF, as reported in the beginning of this chapter and in more detail by Steinfeld et al (2008). At higher levels up to 250 m the footprint areas are quite similar for all effect levels, however, the fractions of footprint areas common to both versions (Ω_{PS}) get lower, which in turn, is due to both above mentioned discrepancy between peak positions and the distortion of symmetry across mean wind axis at far distances when CF is taken into account. Behaviour of concentration footprint areas are very similar to those of flux footprints (not shown). Moreover, total areas contributing certain fractions to the concentration footprints are from 3 up to 40 -fold compared to those of respective flux footprints (not shown). These fractions are very similar among the two LES versions discussed above and in agreement with earlier works (Schmid, 1994; Rannik et al., 2000) where the fraction was concluded to be an order of magnitude.

Finally, the overall model agreement classification was applied to this pair of model parameterisations using the version with CF as reference (Figure C-3). Ω_{10} is generally of lowest agreement while agreement gets better and is either high or moderate for larger effect levels. The only exception of the general rule is the lowest measurement level where there is practically no agreement observed, which is obvious because of the reasons discussed above. Since neither BW nor FW model consider CF in their present flow parameterisations, they are compared to the LES model version without CF consideration.

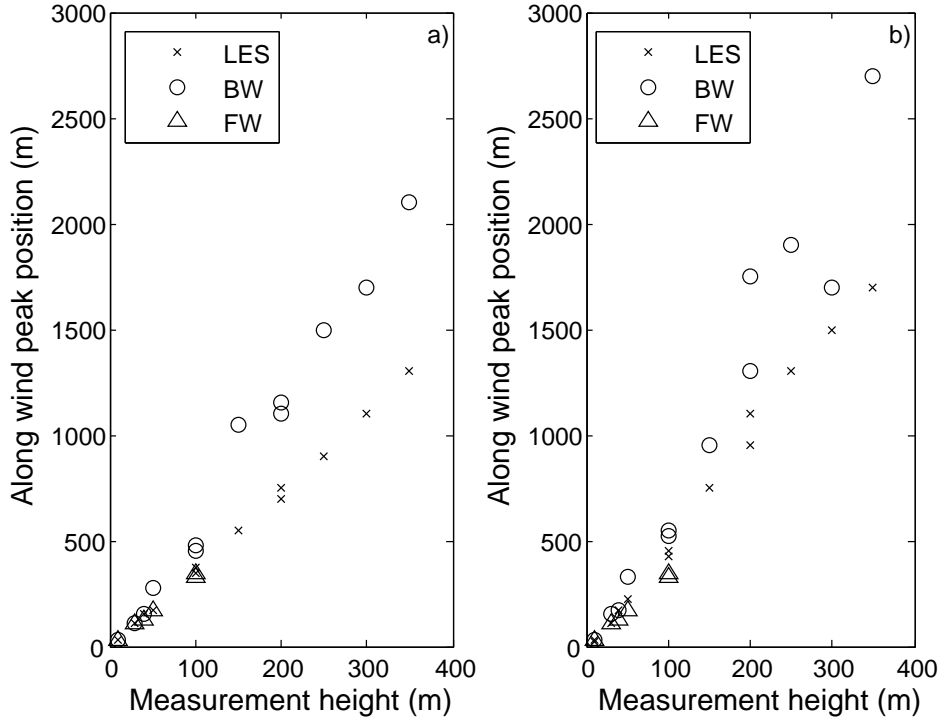


Figure C-4: Along wind peak position of the flux footprint as a function of measurement height for LES (crosses), backward (circles) and forward (triangles) models (a) in the $L=-32$ m case and b) in the $L=-77$ m case. Results shown only for selected grid resolutions (see section C-2.4 for criteria).

C-3.2 Comparison among LES, BW and FW models

In Figure C-4 are shown the flux footprint peak positions in along wind direction as a function of measurement height. Each model predicts relatively linear dependence between the two variables under both stability cases. FW models shows nearly perfect agreement with LES predictions, while BW model predicts peaks located further upwind. In cross wind the peak positions are located close to zero as expected (not shown). However, in the $L = -32$ m case LES results show slight tendency towards positive values, that is, peak locations right from mean wind axis, whereas in the $L = -77$ m case the peak is located slightly left from the axis. This implies not vanishing cross wind flow of particles, which may be due to a discontinuous release of particles in puffs instead of a continuous release of particles.

In the concentration footprint case the peak positions increase linearly in alongwind direction with increasing measurement heights too, ranging from zero up to 2500 meters (not shown). The cross wind positions showed similar asymmetry in the LES case as the flux footprints, while BW and FW model predictions were symmetric across mean wind axis.

In Figures C-5 to C-8 are shown the relative fluxes predicted by the validated model (BW or FW) and the reference (LES) from Ω_p^Ω . At low measurement heights BW model predicted fluxes close to the target limit and mostly larger than those predicted by LES. This implies that Ω_p^{Val} is largely disclosed by Ω_p^Ω , which in turn is an implication of more concentrated BW model footprint. The fluxes are closer to each other under convective (Figure C-5) than under near neutral (Figure C-7) stratification. At high measurement levels the fluxes predicted by both models are very close to each other but they deviate from the target percentage more towards higher measurement levels. The ratio between predicted fluxes from Ω_p^Ω in the FW model and LES model comparison (Figures C-6 and C-8) is opposite to comparison between BW and LES.

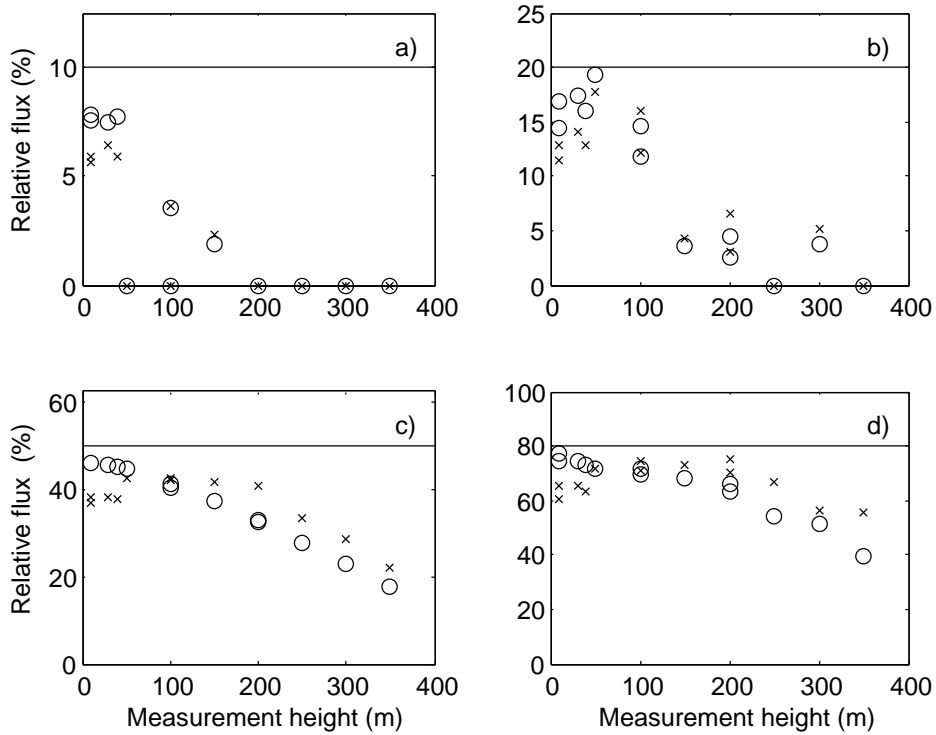


Figure C-5: The relative fluxes from LES (crosses) and BW (circles) predictions from a) Ω_{10}^{Ω} , b) Ω_{20}^{Ω} , c) Ω_{50}^{Ω} and d) Ω_{80}^{Ω} in the $L=32$ m case. Results shown only for selected grid resolutions (see section C-2.4 for criteria).

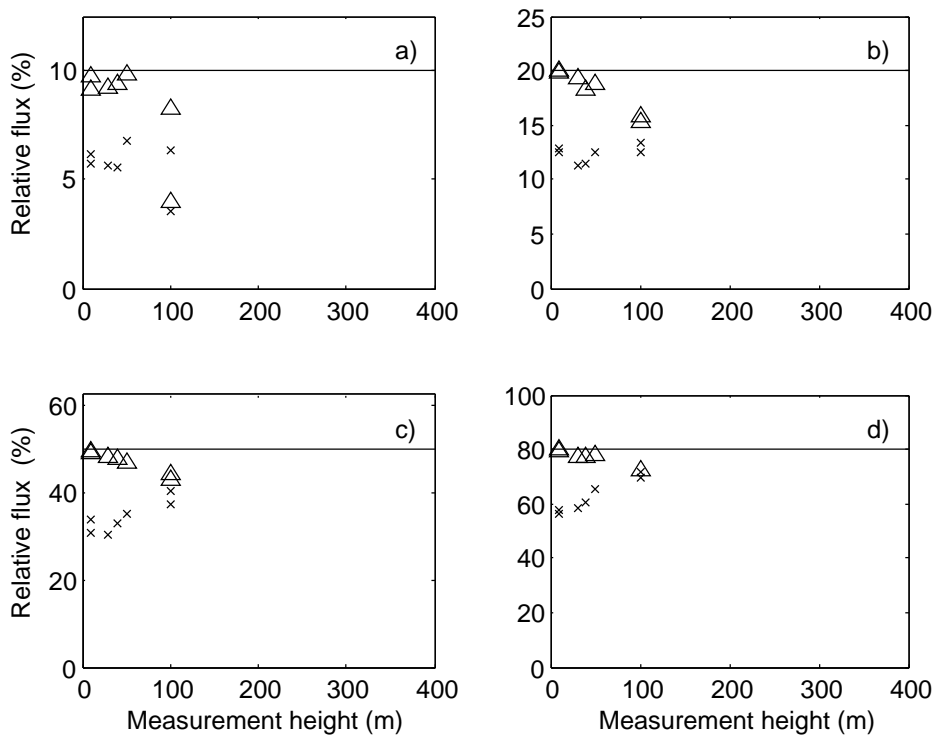


Figure C-6: The relative fluxes from LES (crosses) and FW (triangles) predictions from a) Ω_{10}^{Ω} , b) Ω_{20}^{Ω} , c) Ω_{50}^{Ω} and d) Ω_{80}^{Ω} in the $L=32$ m case. Results shown only for selected grid resolutions (see section C-2.4 for criteria).

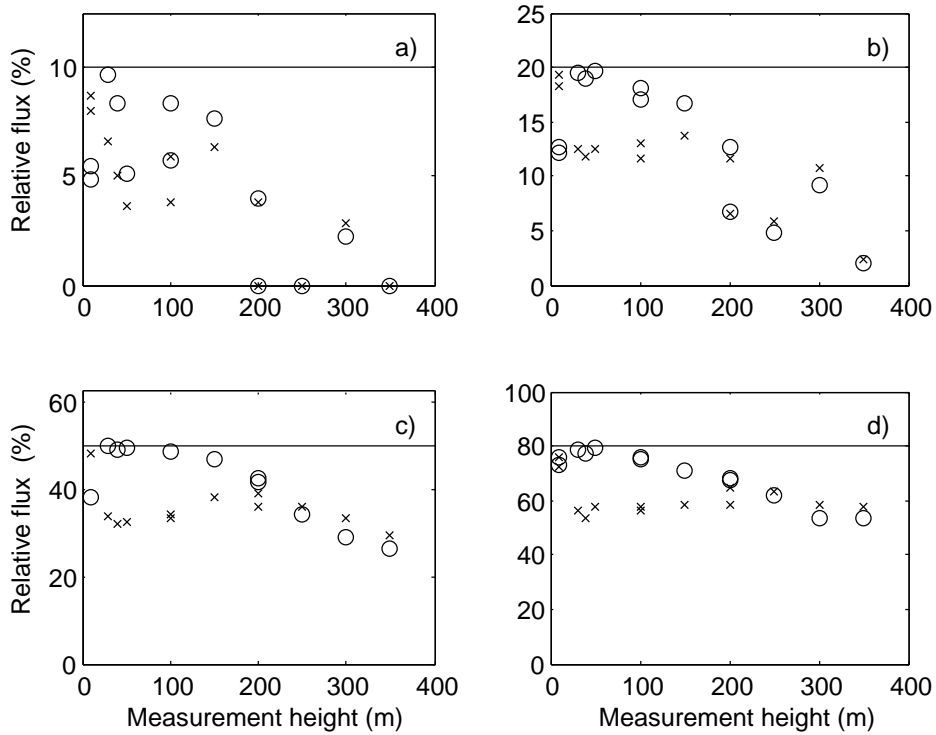


Figure C-7: The relative fluxes from LES (crosses) and BW (circles) predictions from a) Ω_{10}^{Ω} , b) Ω_{20}^{Ω} , c) Ω_{50}^{Ω} and d) Ω_{80}^{Ω} in the $L=77$ m case. Results shown only for selected grid resolutions (see section C-2.4 for criteria).

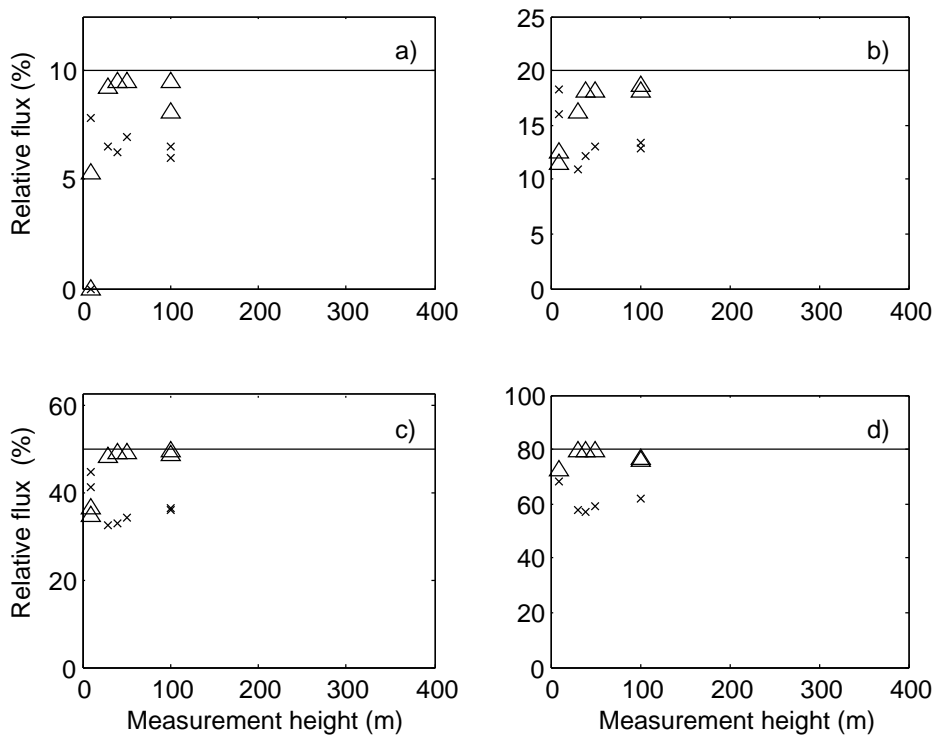


Figure C-8: The relative fluxes from LES (crosses) and FW (triangles) predictions from a) Ω_{10}^{Ω} , b) Ω_{20}^{Ω} , c) Ω_{50}^{Ω} and d) Ω_{80}^{Ω} in the $L=77$ m case. Results shown only for selected grid resolutions (see section C-2.4 for criteria).

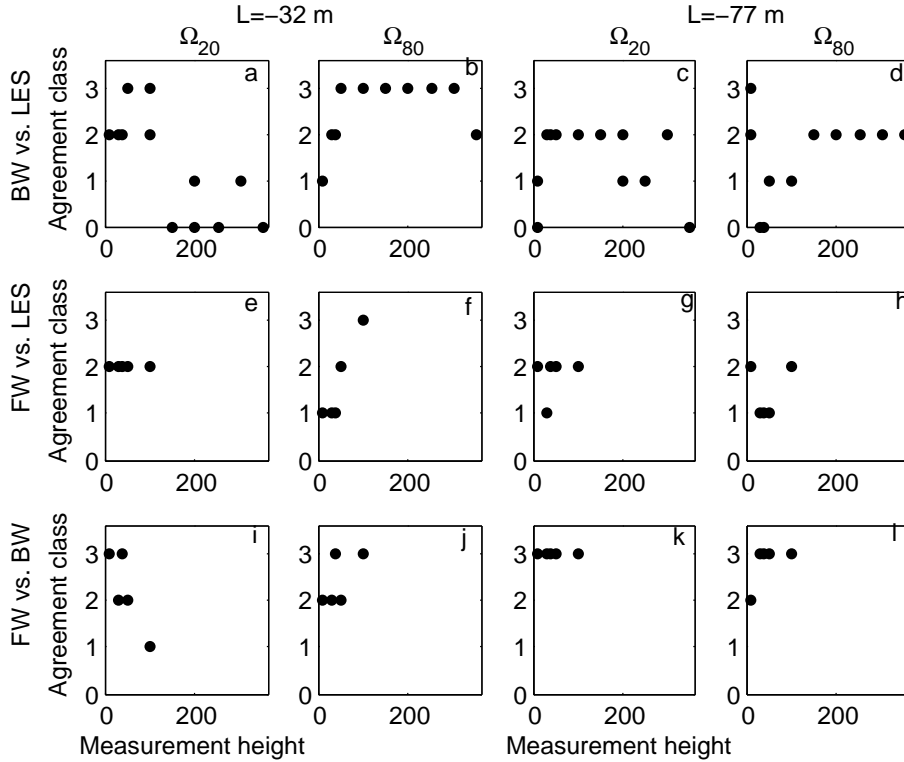


Figure C-9: Validation of BW model against LES in the convective case of $L=-32$ m for a) Ω_{20} , b) Ω_{80} and in the near neutral case of $L=-77$ m for c) Ω_{20} , d) Ω_{80} . Validation of FW model against LES in the convective case of $L=-32$ m for e) Ω_{20} , f) Ω_{80} and in the near neutral case of $L=-77$ m for g) Ω_{20} , h) Ω_{80} . Validation of FW model against BW in the convective case of $L=-32$ m for i) Ω_{20} , j) Ω_{80} and in the near neutral case of $L=-77$ m for k) Ω_{20} , l) Ω_{80} . Results shown only for selected grid resolutions (see section C-2.4 for criteria).

Generally the fluxes are of closest agreement when effect levels of 80% are observed.

C-3.3 Quality classification

From Figure C-9 we see how the above discussed features are reflected by the agreement class qualification scheme. Qualification of BW against LES reveals generally quite good agreement. At Ω_{80} (Figure C-9b) agreement is high for most of the intermediate measurement heights under convective stratification. However, the same stratification also shows the worst results as agreement of Ω_{20} at high measurement levels (Figure C-9a) are observed. This behaviour is expected due to above discussed deviation in peak positions between BW and LES models. Near neutral case (Figures C-9c, C-9d) is mostly of moderate agreement.

FW model qualifies mostly moderately against LES (Figures C-9e to C-9h). Finally shown are the FW model predictions qualified against BW (Figures C-9i to C-9l). Here the agreement turns out to be largely high and especially good under near neutral stratification.

The agreement class qualification of concentration footprints (not shown) revealed mostly same or better agreement than that of flux footprints. The only cases where the agreement was reduced from their flux footprint counterparts, were the agreement of FW model against LES at the lowest measurement level in the $L = -32$ m and Ω_{20} case, on the one hand and in the $L = -77$ m and Ω_{80} case on the other being of low agreement in both cases. Nevertheless, the worst agreement of concentration footprints was found in the $L = -32$ m and Ω_{20} case at measurement heights $z_m > 200$ m in BW against LES qualification. Again the obvious reason

is the disagreement of peak positions among the two models.

C-4 CONCLUSIONS

As routinely used stochastic footprint models lack means of validation (Foken and Leclerc, 2004) we facilitated LES footprint predictions in 2D to explore the performance of two conventional models under two atmospheric stratifications over homogeneous surface. We present measures to quantify the model agreement against a reference model at different effect levels giving the extension of the area of the most important footprint around its peak position.

In comparison of conventional models against LES according to the agreement classification scheme that takes into account both extension of predicted footprint area and degree of overlapping between the areas, we found out that the two widely used models perform very good or moderately good for most of the measurement heights. The agreement is generally better for intermediate measurement heights and for convective case, whereas the two conventional flux footprint models agree best under near neutral conditions. This is not surprising as good agreement among the two models under neutral stratification was already reported by Kljun et al. (2002). Peak positions, that were evaluated additionally, turned out to be very similar at low measurement heights as influence of convective structures is not pronounced.

In this work we excluded the areas of pronounced negative fluxes from the analysis by restricting the domain within suitable along mean wind distances. However, under neutral and slightly stable stratifications and over a heterogeneous surface the negative areas may be located asymmetrically across mean wind direction, which makes their exclusion more problematic. For those cases the applicability of the method has to be further considered.

Acknowledgements. We thank German Science Foundation (DFG) for funding of Tiina Markkanen and Gerald Steinfeld (projects FO 226/10-1,2 and RA 617/16-1,2).

References

- Baldocchi, D.: Flux footprints within and over forest canopies, *Boundary-Layer Meteorol.*, 85, 273-292, 1997.
- Beare, R., Macvean, M., Holtslag, A., Cuxart, J., Esau, I., Golaz, J.-C., Jimenez, M., Khairoutdinov, M., Kosovic, B., Lewellen, D., Lund, T., Lundquist, J., McCabe, A., Moene, A., Noh, Y., Raasch, S., and Sullivan, P.: An Intercomparison of Large-Eddy Simulations of the Stable Boundary Layer, *Boundary-Layer Meteorol.*, 118, 247-272, doi:10.1007/s10546-004-2820-6, 2006.
- Cai, X. and Leclerc, M.: Forward-in-time and Backward-in-time Dispersion in the Convective Boundary Layer: the Concentration Footprint, *Boundary-Layer Meteorol.*, 123, 201-218, doi:10.1007/s10546-006-9141-x, 2007.
- de Haan, P. and Rotach, M.: A novel approach to atmospheric dispersion modelling: the Puff-particle model (PPM), *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 124, 2771-2792, 1998.
- Finn, D., Lamb, B., Leclerc, M. Y., and Horst, T. W.: Experimental evaluation of analytical and Lagrangian surfacelayer footprint models, *Boundary-Layer Meteorol.*, 80, 283-308, 1996.
- Finnigan, J.: The footprint concept in complex terrain, *Agric. For. Meteorol.*, 127, 117-129, 2004.
- Flesch, T.: The footprint for flux measurements from backward Lagrangian stochastic models,

- Boundary-Layer Meteorol., 78, 399-404, 1996.
- Flesch, T., Wilson, J., and Yee, E.: Backward-time Lagrangian stochastic dispersion models and their application to estimate gaseous emissions, *J. Appl. Meteorol.*, 34, 1320-1332, 1995.
- Foken, T. and Leclerc, M. Y.: Methods and limitations in validation of footprint models, *Agric. For. Meteorol.*, 127, 223-234, 2004.
- Foken, T. and Wichura, B.: Tools for quality assessment of surface-based flux measurements, *Agric. For. Meteorol.*, 78, 83-105, 1996.
- Foken, T., Göckede, M., Mauder, M., Mahrt, L., Amiro, B. D., and Munger, J.: Post-field data quality control, in: *Handbook of Micrometeorology: A Guide for Surface Flux Measurement and Analysis*, edited by Lee, X., Massman, W., and Law, B., pp. 181-208, Kluwer, Dordrecht, 2004.
- Göckede, M., Markkanen, T., Hasager, C., and Foken, T.: Update of footprint-based approach for the characterisation of complex measurement sites, *Boundary-Layer Meteorol.*, 118, 635-655, 2007.
- Göckede, M., Foken, T., Aubinet, M., Aurela, M., Banza, J., Bernhofer, C., Bonnefond, J.-M., Brunet, Y., Carrara, A., Clement, R., Dellwik, E., Elbers, J., Eugster, W., Fuhrer, J., Granier, A., GrÅ“unwald, T., Heinesch, B., Janssens, I., Knohl, A., Koeble, R., Laurila, T., Longdoz, B., Manca, G., Marek, M., Markkanen, T., Mateus, J., Matteucci, G., Mauder, M., Migliavacca, M., Minerbi, S., Moncrieff, J., Montagnani, L., Moors, E., Ourcival, J.-M., Papale, D., Pereira, J., Pilegaard, K., Pita, G., Rambal, S., Rebmann, C., Rodrigues, A., Rotenberg, E., Sanz, M., Sedlak, P., Seufert, G., Siebicke, L., Soussana, J., Valentini, R., Vesala, T., Verbeeck, H., and Yakir, D.: Quality control of CarboEurope flux data Part I: Coupling footprint analyses with flux data quality assessment to evaluate sites in forest ecosystems, *Biogeosc.*, 5, 433-450, 2008.
- Haenel, H. D. and Grünhage, L.: Footprint analysis: a closed analytical solution based on height-dependent profiles of wind speed and eddy viscosity, *Boundary-Layer Meteorol.*, 93, 395-409, 1999.
- Horst, T. and Weil, J.: Footprint estimation for scalar flux measurements in the atmospheric surface layer, *Boundary-Layer Meteorol.*, 59, 279-296, 1992.
- Horst, T. and Weil, J.: How far is far enough?: The fetch requirements for micrometeorological measurement of surface fluxes, *J. Atmos. Oceanogr. Techn.*, 11, 1018-1025, 1994.
- Kim, S., Moeng, C., Weil, J., and Barth, M.: Lagrangian particle dispersion modeling of the fumigation process using large-eddy simulation, *J. Atmos. Sci.*, 62, 1932-1946, 2005.
- Kljun, N., Rotach, M. W., and Schmid, H. P.: A 3D Backward Lagrangian Footprint Model for a Wide Range of Boundary Layer Stratifications, *Boundary-Layer Meteorol.*, 103, 205-226, 2002.
- Kljun, N., Kormann, R., Rotach, M. W., and Meixner, F. X.: Comparison of the Lagrangian footprint model LPDM-B with an analytical footprint model, *Boundary-Layer Meteorol.*, 106, 349-355, 2003.
- Kljun, N., Kastner-Klein, P., Fedorovich, E., and Rotach, M.: Evaluation of a Lagrangian Footprint Model Using Data from a Wind Tunnel Convective Boundary Layer, *Agric. For. Meteorol.*, 127, 189-201, 2004.
- Kurbanmuradov, O., Rannik, Ü., Sabelfeld, K., and Vesala, T.: Direct and adjoint Monte Carlo for the footprint problem, *Monte Carlo Meth. and Applic.*, 5, 85-111, 1999.
- Leclerc, M. and Thurtell, G.: Footprint prediction of scalar fluxes using a Markovian analysis, *Boundary-Layer Meteorol.*, 52, 247-258, 1990.
- Leclerc, M., Shen, S., and Lamb, B.: Observations and large eddy simulation modeling of

- footprints in the lower convective boundary layer, *J. Geophys. Res. Atmos.*, 102, 9323-9334, 1997.
- Leclerc, M., Karipot, A., Prabha, T., Allwine, G., Lamb, B., and Gholz, H.: Impact of non-local advection on flux footprints over a tall forest canopy: a tracer flux experiment, *Agric. For. Meteorol.*, 115, 19-30, 2003a.
- Leclerc, M., Meskhidze, N., and Finn, D.: Comparison between measured tracer fluxes and footprint model predictions over a homogeneous canopy of intermediate roughness, *Agric. For. Meteorol.*, 117, 145-158, 2003b.
- Letzel, M., Kanda, M., and Raasch, S.: A new dimension of Urban Climate Modelling with parallel Large-eddy Simulation, in: Preprints, 6th International Conference on Urban Climate, Göteborg, Sweden, International Association for Urban Climate, 2006.
- Markkanen, T., Rannik, Ü., Marcolla, B., Cescatti, A., and Vesala, T.: Footprints and fetches for fluxes over forest canopies with varying structure and density, *Boundary-Layer Meteorol.*, 106, 437-459, 2003.
- Mölder, M., Klemetsson, L., and Lindroth, A.: Turbulence and dispersion in a forest - tests of Thomsons random-flight model., *Agric. For. Meteorol.*, 127, 203-222, 2004.
- Raasch, S. and Etling, D.: Modeling deep oceanic convection: Large-eddy simulation in comparison with laboratory experiments, *J. Phys. Oceanogr.*, 28, 1786-1802, 1998.
- Raasch, S. and Schröter, M.: PALM - a large-eddy simulation model performing on massively parallel computers, *Meteorol. Z.*, 10, 363-372, 2001.
- Rannik, Ü., Aubinet, M., Kurbanmuradov, O., Sabelfeld, K., Markkanen, T., and Vesala, T.: Footprint analysis for the measurements over a heterogeneous forest, *Boundary-Layer Meteorol.*, 97, 137-166, 2000.
- Rannik, Ü., Markkanen, T., Raittila, J., Hari, P., and Vesala, T.: Turbulence Statistics Inside and Over Forest: Influence on Footprint Prediction, *Boundary-Layer Meteorol.*, 109, 163-189, doi:10.1023/A:1025404923169, 2003.
- Rebmann, C., Göckede, M., Foken, T., Aubinet, M., Aurela, M., Berbigier, P., Bernhofer, C., Buchmann, N., Carrara, A., Cescatti, A., Ceulemans, R., Clement, R., Elbers, J., Granier, A., Grünwald, T., Guyon, D., Havránková, K., Heinesch, B., Knohl, A., Laurila, T., Longdoz, B., Marcolla, B., Markkanen, T., Miglietta, F., Moncrieff, J. B., Montagnani, L., Moors, E., Nardino, M., Ourcival, J.-M., Rannik, S. R. Ü., Rotenberg, E., Sedlak, P., Unterhuber, G., Vesala, T., and Yakir, D.: Quality analysis applied on eddy covariance measurements at complex forest sites using footprint modelling, *Theor. Appl. Climatol.*, 80, 121-141, 2005.
- Rotach, M., Gryning, S.-E., and Tassone, C.: A twodimensional Lagrangian stochastic dispersion model for daytime conditions, *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 122, 367-389, 1996.
- Schmid, H. P.: Source areas for scalar and scalar fluxes, *Boundary-Layer Meteorol.*, 67, 293-318, 1994.
- Schmid, H. P.: Experimental design for flux measurements: matching scales of observations and fluxes, *Agric. For. Meteorol.*, 87, 179-200, 1997.
- Schmid, H. P. and Oke, T. R.: A model to estimate the source area contributing to turbulent exchange in the surface layer over patchy terrain, *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 116, 965-988, doi:10.1256/smsqj.49408, 1990.
- Steinfeld, G., Raasch, S., and Markkanen, T.: Evaluation of footprints in homogeneous and inhomogeneous terrain with a Lagrangian stochastic particle model embedded into a large eddy simulation model, *Boundary-Layer Meteorol.*, 129, 225-248, 2008.
- Thomson, D.: Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows, *J. Fluid Mech.*, 180, 529-556, 1987.

-
- Vesala, T., Kljun, N., Rannik, Ü., Rinne, J., Sogachev, A., Markkanen, T., Sabelfeld, K., Foken, T., and Leclerc, M.: Flux and concentration footprint modelling: State of the art, *Environ. Pollut.*, 152, 653-666, 2008.
- Weil, J. C., Sullivan, P. P., and Moeng, C.: The use of large eddy simulations in Lagrangian particle dispersion models, *J. Atmos. Sci.*, 61, 2877-2887, 2004.

LEBENS LAUF

Persönliche Daten

Name	Gerald Friedrich Johannes Steinfeld
Geburtsdatum, -ort	27. April 1977, Osnabrück
Bildungsweg	
1983 bis 1987	Graf-Ludolf-Grundschule Kloster Oesede
1987 bis 1989	Orientierungsstufe Kloster Oesede
1989 bis 1996	Gymnasium Oesede
Juni 1996	Abitur
Juli 1996 bis August 1997	Zivildienst im Diakonie-Krankenhaus Georgsmarienhütte
Oktober 1997 bis März 2003	Studium der Meteorologie an der Universität Hannover
Oktober 1999	Vordiplom im Fach Meteorologie
Februar 2002 bis März 2003	Diplomarbeit, Titel: „Kopplung von Grobstruktursimulationsmodellen unterschiedlicher räumlicher Auflösung auf Massivparallelrechnern“
März 2003	Diplom im Fach Meteorologie
Juni 2003 bis Mai 2004	Auslandsaufenthalt am Tokyo Institute of Technology, Tokio, Japan; Finanzierung durch das Programm „Jahresstipendium für Graduierte“ des Deutschen Akademischen Austauschdienstes (DAAD) und durch das Programm „Academic Frontiers Student Exchange Promotion Program“ des japanischen Ministeriums für Erziehung, Kultur, Sport, Wissenschaft und Technologie (MEXT)
Mai 2004 bis September 2005	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover
Oktober 2005 bis September 2008	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover, Bearbeitung des DFG-Projekts LES-Footprint
seit Oktober 2008	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover

Liste wissenschaftlicher Veröffentlichungen

G. Steinfeld, S. Raasch und T. Markkanen (2008). Footprints in homogeneously and heterogeneously driven boundary layers derived from a Lagrangian stochastic particle model embedded into a large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, 129:225-248.

G. Steinfeld, M. O. Letzel, S. Raasch, M. Kanda und A. Inagaki (2007). Spatial representativeness of single tower measurements and the imbalance problem with eddy-covariance fluxes: results of a large-eddy simulation study. *Boundary-Layer Meteorol.*, 123:77-98.