

Institut für Meteorologie und Klimatologie
Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

Footprintbestimmung mittels LES für das LITFASS-2003 Experiment

Diplomarbeit im Fach Meteorologie

von

Farah Kanani

Oktober 2010

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	III
Tabellenverzeichnis	IV
Symbolverzeichnis	V
1 Einleitung	1
1.1 Footprintmodellierung für Turbulenzmessungen in der konvektiven Grenzschicht	1
1.2 Stand der Forschung im Bereich der Footprintmodellierung	5
1.3 Zielsetzungen und Struktur dieser Arbeit	13
2 Modellbeschreibung	15
2.1 Grundlagen von Turbulenzmodellen	15
2.2 Das parallelisierte Grobstruktursimulationsmodell PALM	18
2.2.1 Grundgleichungssystem zur Beschreibung atmosphärischer Bewegungsvorgänge	19
2.2.2 Parametrisierung mit dem Subskalenmodell	23
2.2.3 Modellgitter und numerische Verfahren	25
2.2.4 Rand- und Anfangsbedingungen	27
2.2.5 Parallelisierung	29
2.3 Das in PALM eingebettete Lagrangesche stochastische Modell	30
2.4 Auswerteprogramm zur Berechnung von Footprints aus den Partikel- daten der LES	35
3 Validierung des in PALM eingebetteten Lagrangeschen stochastischen Modells	40
4 Footprintsimulationen für das LITFASS-2003 Experiment	44
4.1 Das LITFASS-2003 Experiment	44
4.2 Modellinitialisierung und Antrieb	48
4.2.1 Simulation eines Tagesganges	50
4.2.2 Simulation einer quasi-stationären Grenzschicht	53
4.3 Erste Simulationen zur Untersuchung der Footprintstatistik für die Energiebilanzstationen und den 99m-Mast	57
4.4 Sensitivitätsstudie zur Verbesserung der Footprintstatistik	59
4.4.1 Partikelquellflächen	60
4.4.2 Partikelfreisetzungintervall	64
4.5 Footprints für die Standorte der Energiebilanzstationen	66
5 Zusammenfassung und Ausblick	71

Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematische Darstellung eines Footprints	3
1.2	50%-Quellgebietsfläche einer Fluss- und Konzentrationsmessung für verschiedene atmosphärische Zustände	4
1.3	Quer zum Wind integrierter Flussfootprint für verschiedene atmosphärische Zustände	5
1.4	Schematische Darstellung zum Verfahren der invertierten Schadstoffwolke	7
1.5	Schematische Darstellung der zu einem Footprint beitragenden Partikel bzw. Quellen bei einem homogenen und einem heterogenen Untergrund	10
2.1	Schema eines Energiespektrums in der atmosphärischen Grenzschicht	16
2.2	Skalentrennung in der LES	18
2.3	Arakawa-C Gitter	25
2.4	Interpolationsverfahren im Lagrangeschen Partikelmodell	34
2.5	Skizze zur Veranschaulichung der Footprintberechnung	36
2.6	Skizze zur Footprintberechnung über einem heterogenen Untergrund	38
3.1	Quer zum Wind integrierter Flussfootprint über homogenem Untergrund	41
3.2	Quer zum Wind integrierter Flussfootprint über homogenem Untergrund für verschiedene Messniveaus	42
3.3	Fluss- und Konzentrationsfootprint über einem homogenen Untergrund	42
3.4	Flussfootprint mit periodischen Strukturen	43
4.1	Messpunkte im LITFASS-Gebiet	45
4.2	Verteilung der Vegetationsklassen im LITFASS-Gebiet und der Umgebung	46
4.3	Vorgabe der turbulenten Wärmeflüsse	50
4.4	Horizontales Mittel der am 30. Mai an den Energiebilanzstationen gemessenen und als Antrieb für die Tagesgang-Simulation vorgegebenen fühlbaren und latenten Wärmeflüsse.	51
4.5	Horizontal gemittelte Vertikalprofile des fühlbaren und latenten Wärmeflusses um 13 UTC aus der Simulation des Tagesganges am 30. Mai.	51
4.6	Zeitreihen einiger für die Grenzschicht charakteristischer Größen (horizontales Mittel) aus der Simulation des Tagesganges am 30. Mai	52
4.7	Zeitliche Entwicklung der horizontal gemittelten Grenzschichthöhe für die 13UTC-Simulation	54
4.8	Horizontal gemittelte Vertikalprofile von Temperatur und spezifischer Feuchte für die 13UTC-Simulation	55

4.9	Horizontal gemittelte Vertikalprofile von fühlbarem und latentem Wärmefluss für die 13UTC-Simulation	55
4.10	xy-Schnitt der gemittelten Vertikalgeschwindigkeit für das LITFASS-Gebiet in einer Höhe von 700m	56
4.11	Erste Footprintergebnisse für die Station A3 mit noch unzureichender Footprintstatistik	58
4.12	Konzentrationsfootprints für den 99m-Mast mit noch unzureichender Footprintstatistik	58
4.13	Schematische Darstellung der Quellflächen	60
4.14	Relativer Beitrag verschiedener Quellflächen zur gesamten Konzentration (Energiebilanzstationen)	61
4.15	Relativer Beitrag verschiedener Quellflächen zur gesamten Konzentration (99m-Mast)	63
4.16	Relativer Beitrag einer Quellfläche nach verschiedenen Verlagerungsintervallen zur nach einem Referenzintervall vorliegenden Konzentration (Energiebilanzstationen)	65
4.17	Relativer Beitrag einer Quellfläche nach verschiedenen Verlagerungsintervallen zur nach einem Referenzintervall vorliegenden Konzentration (99m-Mast)	65
4.18	Flussfootprints für ausgewählte Energiebilanzstationen mit dem an diesen Stationen vorherrschenden mittleren Wind	67
4.19	Flussfootprints für ausgewählte Energiebilanzstationen mit Darstellung der nahen Sensorumgebung und einem zu den Standorten der Stationen zugehörigen Ausschnitt der Vegetationsklassenverteilung . .	69

Tabellenverzeichnis

4.1	Standorte der mikrometeorologischen Messungen während LITFASS-2003	46
4.2	Initialisierung der Heterogenitäten	49
4.3	Vorgabe der Temperatur- und Feuchteflüsse für die Footprintsimulationen	54
4.4	Verwendete Quellflächen in der Sensitivitätsstudie für die Energiebilanzstationen	62
4.5	Verwendete Quellflächen in der Sensitivitätsstudie für den 99m-Mast .	63

Symbolverzeichnis

Abkürzungen

CFL	Courant-Friedrichs-Lewy (Zeitschrittkriterium)
CORINE	Abkürzung für „Coordination of Information on the Environment“
DNS	Direkte Numerische Simulation
FAP	Footprintauswerteprogramm
FFT	Fast Fourier Transformation
HLRN	Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen
LES	Large-Eddy Simulation
G_{LIT}	LITFASS-Gebiet
LOF	Landoberfläche
LS	Lagrangesches stochastisches (Modell)
MOL	Meteorologisches Observatorium Lindenberg
MOST	Monin-Obukhov Similarity Theory
MPI	Message Passing Interface
NSG	Navier-Stokes-Gleichungen
PALM	Parallelisiertes Large-Eddy Simulationsmodell
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RRZN	Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen
SGS TKE	Subgridskalige turbulente kinetische Energie
TKE	Turbulente kinetische Energie

Griechische Symbole

Δ	Charakteristische Gitterweite
Δ_F	Filterlänge
Δt	LES-Zeitschritt
Δt_{CFL}	Zeitschritt nach dem CFL-Kriterium
Δt_{Diff}	Zeitschritt nach dem Diffusionskriterium
Δt_L	Lagrangescher Zeitschritt (Partikelzeitschritt)
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	Gitterweite in x-, y- und z-Richtung
$\Delta_A x, \Delta_A y$	Gitterweite des Footprintauswertegitters
ϵ	Dissipationsrate

ε_{ijk}	Alternierender Einheitstensor, $i, j, k \in \{1, 2, 3\}$
η	Kolmogorov-Länge
η_G	Gemessene(r) Konzentration bzw. Fluss eines passiven Skalars
θ	Potentielle Temperatur
θ_l	Potentielle Flüssigwassertemperatur
θ_v	Virtuelle potentielle Temperatur
Λ	Mischungsweglänge
ν	Kinematische Viskosität
ν_m, ν_h, ν_s	Molekulare Diffusionskoeffizienten für Impuls, Temperatur und Skalare
$\vec{d\xi}$	Dreidimensionaler Wiener-Prozess
ρ	Dichte
τ_{ki}	Subskaliger Schubspannungstensor, $k, i \in \{1, 2, 3\}$
φ	Geographische Breite
ψ	Atmosphärische Variable
Ω	Winkelgeschwindigkeit der Erde

Lateinische Symbole

\vec{a}	Deterministischer Term in der Langevin-Gleichung
B_L	Stochastischer Term in der Langevin-Gleichung
c_m	Smagorinsky-Konstante
c_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
C	Konzentration eines passiven Skalars
C'	Virtuelle Konzentration eines passiven Skalars
C_0	Universelle Konstante im Lagrangeschen stochastischen Modell
d	Abstand zur nächsten festen Oberfläche
D	Strömungsgebiet
e	Subskalige turbulente kinetische Energie
E_{sp}	Turbulente kinetische Energie pro Masseneinheit
f_C	Konzentrationsfootprint
f_F	Flussfootprint
f_i	Coriolisparameter, $i \in \{1, 2, 3\}$
$f_{\Delta t}$	Sicherheitsfaktor für das Zeitschrittkriterium
F	Fluss eines passiven Skalars
F_{ges}	Gesamte Auswertegitterfläche
F_x	Partikelquellfläche

g	Erdbeschleunigung
G	Analytische Filterfunktion
H_k	Subskaliger Temperaturfluss, $k \in \{1, 2, 3\}$
i, j, k	Vektorindizes
k	Wellenzahl
K_m, K_h	Turbulente Diffusionskoeffizienten für Impuls und Temperatur
l_v	Verdunstungswärme
L	Charakteristische Längenskala einer Strömung
N	Totale Partikelzahl
N_{eff}	Effektive Partikelzahl
p	Druck
q	Gesamtwassergehalt
q_l	Flüssigwassergehalt
q_v	Spezifische Feuchte
Q_h, Q_s	Quellen und Senken der Temperatur bzw. der skalaren Größe
Q_{η_G}	Quellstärke einer gemessenen Größe η_G
Re	Reynoldszahl
Re_{krit}	Kritische Reynoldszahl
R_L	Spezifische Gaskonstante trockener Luft
R_Q	Relativer Beitrag einer Quellfläche zur gesamten Konzentration
R_Z	Relativer Beitrag eines Zeitintervalls zur gesamten Konzentration
s	Skalare Größe
t	Zeit
T	Aktuelle Temperatur
u, v, w, u_i	Komponenten des Windvektors, $i \in \{1, 2, 3\}$
u_0	Geschwindigkeit des Grundstromes in der Grenzschicht
u_{k_g}	Komponente des geostrophischen Windvektors, $k \in \{1, 2\}$
U	Charakteristische Geschwindigkeit einer Strömung
V	Gittervolumen
\vec{V}_L	Totale Partikelgeschwindigkeit
\vec{V}_r	Aufgelöster Anteil der Partikelgeschwindigkeit
\vec{V}_s	Subskaliger Anteil der Partikelgeschwindigkeit
w_K	Vertikalgeschwindigkeit eines Partikels beim Kreuzen der Messhöhe
w_s	Großräumige Absinkgeschwindigkeit
$\overline{w'q'}$	Vertikaler turbulenter Feuchtefluss
$\overline{w'\theta'}$	Vertikaler turbulenter Temperaturfluss
$\overline{w'q'_h}$	Turbulenter latenter Wärmefluss (Wärmestromdichte)

$\overline{w'\theta'_h}$	Turbulenter fühlbarer Wärmefluss (Wärmestromdichte)
W_k	Subskaliger Feuchtefluss, $k \in \{1, 2, 3\}$
x, y, z, x_i	Kartesische Koordinaten, $i \in \{1, 2, 3\}$
x_D, y_D	Horizontale Distanz zwischen Quell- und Messort eines Partikels
x_K, y_K	Kreuzungspunkt von Partikeltrajektorie und Messniveau
x_S, y_S	Sensorposition im Footprintauswertegitter
x_W, y_W	Korrekturfaktor für die Footprintberechnung
\vec{X}_0	Quellort eines Partikels
\vec{X}_L	Aktuelle Position eines Partikels
z_0	Rauigkeitslänge
z_{bi}	Höhe der bodennahen Temperaturinversion
z_i	Inversionshöhe
z_m	Messniveau
Z	Partikelfreisetzungintervall

Mittelungen und Indizes angewandt auf eine Variable ϕ

ϕ_0	Grundzustand (Boussinesq-Approximation)
ϕ^*	Abweichung vom Grundzustand (Boussinesq-Approximation)
$\bar{\phi}$	Gefilterte Variable
ϕ''	Subskalige Fluktuation
$[\phi]$	Horizontales Mittel

Operatoren

∂	Partieller Differentialoperator
∇	Nabla-Operator
$ $	Betrag eines Vektors oder Skalars
\int	Integral-Operator

1 Einleitung

Footprints werden zur Validierung von Turbulenzmessungen eingesetzt und stellen somit ein Qualitätsmaß für die Messergebnisse dar. Ein Footprint beschreibt das Gebiet in der Umgebung eines Messensors, welches einen direkten Einfluss auf das Messergebnis hat. Die an einem Sensor bestimmten turbulenten Flüsse haben ihren Ursprung nicht etwa direkt unterhalb, sondern weitestgehend im Luv des Sensors. Insbesondere in stark heterogen geprägtem Gelände besteht die Problematik, dass das Gebiet mit dem größten Einfluss auf die Messung völlig andere Oberflächeneigenschaften aufweisen kann als die unterhalb des Sensors befindliche Oberfläche und somit die gemessenen Flüsse nicht den unterhalb des Sensors erzeugten Flüssen entsprechen. Anhand von Footprints kann also ermittelt werden, für welchen Untergrund in der Umgebung des Sensors die Messung repräsentativ ist. In dieser Arbeit werden Footprints speziell für die während des LITFASS-2003 Experimentes durchgeführten mikrometeorologischen Messungen modelliert.

1.1 Footprintmodellierung für Turbulenzmessungen in der konvektiven Grenzschicht

Anhand von mikrometeorologischen Messungen werden turbulente Prozesse in der atmosphärischen Grenzschicht untersucht. Diese Schicht ist den Reibungseffekten der Erdoberfläche direkt ausgesetzt und aufgrund dessen durch turbulente Austauschprozesse gekennzeichnet. Die untersten Millimeter der atmosphärischen Grenzschicht bildet direkt über dem Erdboden die viskose Unterschicht, in der jegliche Transporte von Impuls, Wärme und Masse auf molekularer Ebene erfolgen. In der sich anschließenden, bis zu 100m mächtigen Prandtl-Schicht sind die turbulenten Flüsse nahezu höhenkonstant. Oberhalb der Prandtl-Schicht befindet sich die Ekman-Schicht, die in Abhängigkeit von der thermischen Schichtung eine vertikale Mächtigkeit in der Größenordnung von 100 bis 1000m aufweist. Da der Einfluss der Bodenreibung mit zunehmender Höhe sinkt und somit die Wirkung der Corioliskraft zunimmt, ist eine Winddrehung mit der Höhe zu verzeichnen. Die turbulenten Flüsse nehmen mit der Höhe ab und erreichen an der Obergrenze einen Wert nahe Null (ETLING, 2008).

Die atmosphärische Grenzschicht kann verschiedene Stabilitätszustände aufweisen. Im Allgemeinen ist sie immer dann stabil, wenn sich relativ warme Luft über einer kühlen Oberfläche befindet (STULL, 1988). In diesem Fall ist die Grenzschicht wenig turbulent, da Vertikalbewegungen aufgrund der stabilen Temperaturschichtung unterdrückt werden. Eine neutrale Grenzschicht ist rein dynamisch getrieben, da es keine Auftriebskräfte durch Temperaturunterschiede gibt. Eine neutrale Schichtung stellt sich näherungsweise unter Bedingungen mit starken Winden und vollständiger Wolkenbedeckung ein (GARRATT, 1994). Die labile, auch als konvektiv bezeichnete Grenzschicht zeichnet sich dadurch aus, dass u. a. starke Auftriebskräfte die Turbulenzproduktion antreiben (STULL, 1988). Diese Auftriebskräfte können aus der star-

ken Erwärmung des Erdbodens durch die kurzwellige Sonneneinstrahlung resultieren. Der gleiche Effekt tritt auf, wenn relativ kühle Luft über eine wärmere Oberfläche (z. B. Wasser) gebracht wird.

Die Studien in dieser Arbeit befassen sich mit der Modellierung von Footprints in der konvektiven Grenzschicht, welche sich in eine stark labil geschichtete Prandtl-Schicht und eine im horizontalen Mittel adiabatisch geschichtete Mischungsschicht unterteilen lässt. Darüber befindet sich eine abschließende Inversion, welche die Vertikalbewegungen dämpft. Teilweise können Luftpakete infolge der Trägheit ihrer Bewegung in die Inversion eindringen, jedoch sinken sie aufgrund der thermischen Stabilität wieder in die Grenzschicht zurück. Bei diesem als Entrainment bezeichneten Prozess wird warme Luft aus der Inversion in die konvektive Grenzschicht eingemischt (GARRATT, 1994).

Mithilfe von Footprints kann eine Aussage über die räumliche Repräsentativität einer mikrometeorologischen Messung getroffen werden. Er beschreibt das Gebiet im Luv eines Sensors, welches maßgeblich das Ergebnis der Messung beeinflusst. Der Footprint $f(\vec{r}, \vec{r}')$ stellt demnach den Zusammenhang zwischen einer an einem Ort \vec{r} gemessenen Größe η_G (Signal), wie dem Fluss oder der Konzentration eines passiven Skalars, und den räumlich verteilten Quellen $Q_{\eta_G}(\vec{r} + \vec{r}')$ dieser Größe her (PASQUILL und SMITH, 1983):

$$\eta_G(\vec{r}) = \int_{\mathfrak{R}} Q_{\eta_G}(\vec{r} + \vec{r}') f(\vec{r}, \vec{r}') d\vec{r}'. \quad (1.1)$$

\vec{r}' steht für die Entfernung zwischen Quell- und Messort. Ein passives Skalar beschreibt dabei eine Größe, welche ohne jeglichen Einfluss auf die Strömung in dieser transportiert wird (FRÖHLICH, 2006). Anhand der schematischen Darstellung in Abbildung 1.1 soll der Begriff des Footprints verdeutlicht werden. Der an einem Turm befestigte Sensor misst in einer bestimmten Höhe ein Signal η_G . Der Wind weht in diesem Beispiel von rechts nach links. Stromaufwärts des Sensors befinden sich die Quellflächen des gemessenen Signals, welche per Definition eine horizontal homogene Quellstärke besitzen sollen. Mit den ungleich hohen Balken soll verdeutlicht werden, dass die Beiträge einzelner Quellflächen zum gemessenen Signal unterschiedlich groß sind. Die Aufgabe des Footprints besteht darin, jedem Element einer Quelle seinen relativen Beitrag zum gemessenen Signal zuzuweisen (SCHUEPP *et al.*, 1990; LECLERC und THURTELL, 1990). Laut BALDOCCHI (1997) beschreibt der Footprint ein statistisches Maß für die Wahrscheinlichkeit, mit der ein an einem Punkt freigesetztes Quellelement stromabwärts der Quelle an einer bestimmten Position gemessen wird. Das Gebiet mit dem größten Einfluss auf die Messung befindet sich stromaufwärts des Sensors, genau dort, wo die Wahrscheinlichkeitsverteilung ihr Maximum besitzt (BALDOCCHI, 1997). Ein Footprint wird jeweils für die Höhe ermittelt, in der auch die Messung der zu betrachtenden Größe stattfindet. Die hier erwähnten Quellelemente werden im Folgenden mithilfe von Partikeln dargestellt, welche innerhalb einer Large-Eddy Simulation mit einem Lagrangeschen stochastischen Modell verlagert werden (s. Kap. 2).

Footprints können sowohl für Flüsse als auch für Konzentrationen eines passiven Skalars berechnet werden. Fluss- und Konzentrationsfootprints unterscheiden sich

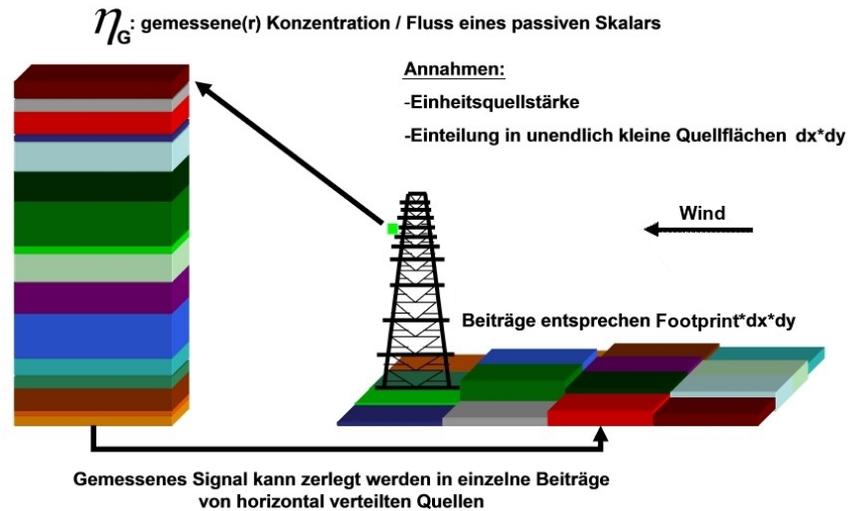


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung eines Footprints, welcher den Zusammenhang zwischen einem gemessenen Signal und dessen räumlich verteilten Quellen beschreibt (nach STEINFELD, 2009).

deutlich in ihrer horizontalen Erstreckung. Um diese Eigenschaft zu veranschaulichen sind in Abbildung 1.2 xy-Schnitte der jeweiligen Footprints dargestellt. Bei der Bestimmung des Flussfootprints muss unterschieden werden, ob der Beitrag eines Partikels zum Signal positiv oder negativ ist. Anschaulich betrachtet heißt das, ob das Partikel die Sensorhöhe von unten oder von oben durchquert hat. Diese Unterscheidung muss gemacht werden, da ein Fluss sowohl nach oben als auch nach unten gerichtet und somit positiv oder negativ sein kann. Bei der Konzentration dagegen leisten alle Partikel, die den Sensor passieren, einen positiven Beitrag zum Signal (KLJUN *et al.*, 2002). Anhand dieser Unterscheidungen lässt sich nun die ungleiche horizontale Erstreckung der Footprints erklären. Im Falle des Flussfootprints durchqueren Partikel, welche in der Nähe des Sensors freigesetzt werden, das Sensorniveau größtenteils von unten und leisten somit einen positiven Beitrag. In größerer Entfernung zum Sensor freigesetzte Partikel kreuzen das Sensorniveau gleichermaßen von unten als auch von oben, wodurch sich die positiven und negativen Beiträge teilweise kompensieren. Dies ist beim Konzentrationsfootprint nicht der Fall, da die Beiträge aller Partikel unabhängig von der Richtung der Partikelbewegung positiv gewertet werden. Aufgrund dessen kann ein Konzentrationsfootprint eine deutlich größere horizontale Erstreckung aufweisen als ein Flussfootprint. Insbesondere bei neutraler und stabiler Schichtung sind signifikante Größenunterschiede zu erkennen (KLJUN *et al.*, 2002). Diese Erklärung gilt sowohl für die horizontale Erstreckung in Windrichtung als auch quer zum Wind (VESALA *et al.*, 2008).

Die horizontale Erstreckung und die Lage des Footprintmaximums (Peak) hängen u. a. von der Wahl des Messniveaus (VESALA *et al.*, 2008), der Stabilität der Schichtung und der Rauigkeitslänge sowie von Windgeschwindigkeit und -richtung ab (FOKEN und LECLERC, 2004). Mit der horizontalen Erstreckung ist das kleinstmögliche Gebiet im Luv eines Sensors gemeint, welches zu einem bestimmten Prozentsatz für das gemessene Signal verantwortlich ist. Dieses Gebiet wird auch als

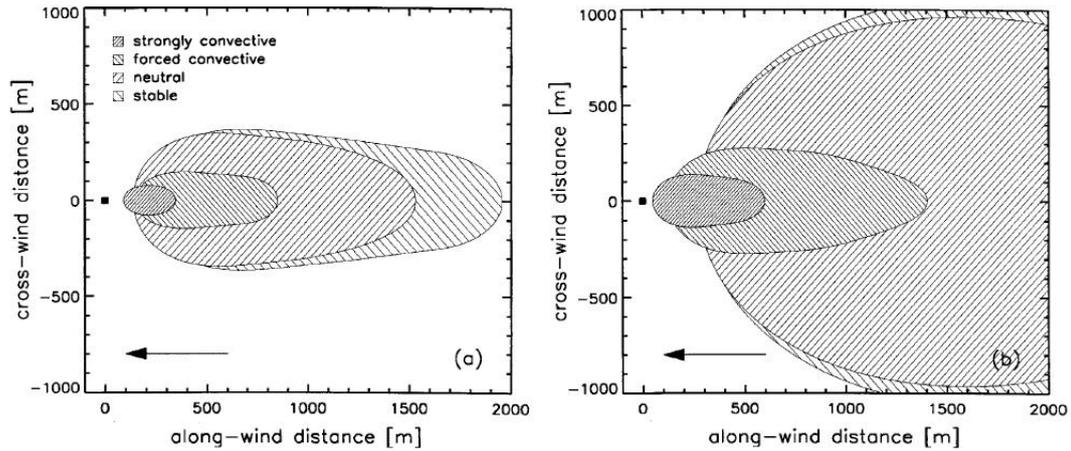


Abbildung 1.2: 50%-Quellgebietsfläche einer Fluss- (a) und einer Konzentrationsmessung (b) für verschiedene atmosphärische Zustände: Freie Konvektion (strongly convective), erzwungene Konvektion (forced convective), neutrale (neutral) und stabile (stable) Schichtung. Die Sensorposition ist durch das schwarze Quadrat gekennzeichnet. Der Wind weht von rechts nach links (nach KLJUN *et al.*, 2002).

$n\%$ -Quellgebiet bezeichnet (KLJUN *et al.*, 2002). Rein mathematisch betrachtet würde ein Footprint eine unendliche Ausdehnung aufweisen, weswegen er auf ein bestimmtes $n\%$ -Quellgebiet restringiert werden muss (VESALA *et al.*, 2008). In Abbildung 1.3 sind für verschiedene atmosphärische Zustände die quer zum Wind integrierten Flussfootprints f_f dargestellt. Bei labiler Schichtung wird viel turbulente kinetische Energie (TKE) durch Auftrieb produziert, wodurch Vertikalbewegungen initiiert oder verstärkt werden. Dies hat zur Folge, dass in einer bestimmten Höhe emittierte Partikel nur relativ geringe horizontale Distanzen zurücklegen können bevor sie die Sensorhöhe erreichen (VESALA *et al.*, 2008). Das Gebiet, welches den größten relativen Beitrag zum gemessenen Signal liefert, liegt also im Falle einer konvektiven Grenzschicht deutlich näher am Sensor als bei einer stabil geschichteten Grenzschicht, in der Vertikalbewegungen deutlich schwächer ausgeprägt sind. Das Maximum der Footprintfunktion liegt in diesem Fall in größerer Entfernung zum Sensor und das Gebiet mit einem bestimmten relativen Beitrag zum gemessenen Signal hat eine größere horizontale Erstreckung in Richtung des Windes als bei labiler Schichtung (KLJUN *et al.*, 2002). Die Rauigkeitslänge z_0 hat einen ähnlichen Effekt auf den Footprint. Je größer z_0 ist, desto größer ist die Produktion von TKE durch Scherung. Dies hat wiederum verstärkte Vertikalbewegungen zur Folge, was ähnlich wie bei labiler Schichtung die Peakposition näher an den Sensor rückt und den Wert des Peaks erhöht (LECLERC und THURTELL, 1990). Eine höhere Windgeschwindigkeit verbreitert einerseits den Footprint in Richtung des Windes, da freigesetzte Partikel so über eine relativ große horizontale Distanz verlagert werden bevor sie das Messniveau erreichen. Andererseits verschiebt sich in dem Fall auch der Peak in Richtung des Sensors, da durch die höhere Windgeschwindigkeit wieder mehr TKE durch Scherung produziert wird. Zusammenfassend betrachtet verändert jegliche Variation der die Turbulenzproduktion/-dissipation beeinflussenden Faktoren die Form des Footprints.

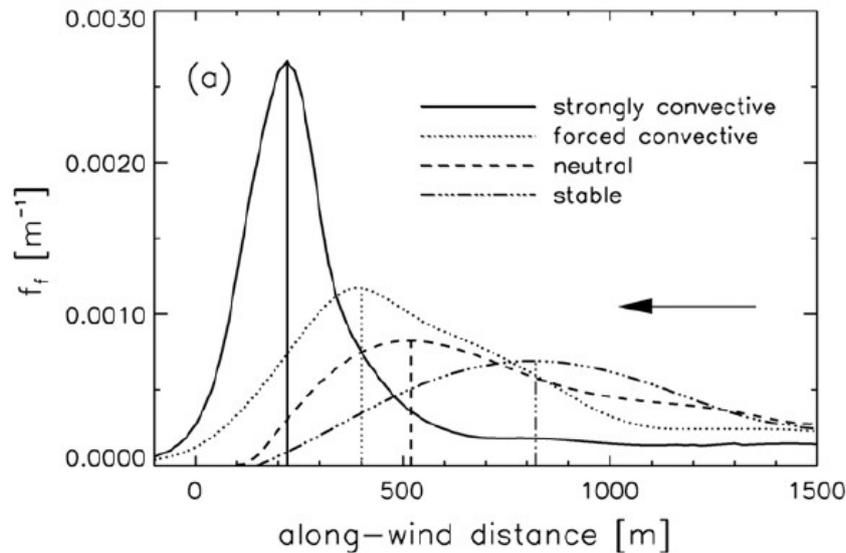


Abbildung 1.3: Quer zum Wind integrierter Flussfootprint für verschiedene atmosphärische Zustände: Freie Konvektion (strongly convective), erzwungene Konvektion (forced convective), neutrale (neutral) und stabile (stable) Schichtung. Der Sensor befindet sich bei $x = 0\text{m}$. Die Peakpositionen sind jeweils durch vertikale Linien gekennzeichnet. Der Wind weht von rechts nach links (nach KLJUN *et al.*, 2002).

1.2 Stand der Forschung im Bereich der Footprintmodellierung

Bei mikrometeorologischen Turbulenzmessungen (z.B. Eddy-Kovarianz Messungen) über einer heterogenen Landoberfläche stellt sich die Frage, für welches Kompositum von Untergründen die jeweilige Messung überhaupt repräsentativ ist (FOKEN, 2003). Bereits in einer schwach windigen und schwach turbulenten Strömung haben die an einem Sensor gemessenen turbulenten Flüsse ihren Ursprung meist in Gebieten stromaufwärts des Messortes. Die von direkt unterhalb des Sensors ausgehenden Flüsse haben dagegen kaum einen Einfluss auf die Messung. Über heterogenem Gelände, welches sich z. B. durch die horizontale Variabilität von fühlbarem und latentem Wärmefluss oder durch wechselnde Rauigkeitseinflüsse auszeichnet, besteht demnach eine sehr klare Abhängigkeit der Messergebnisse von der Wahl des Messortes (MARKKANEN, 2004). Bei einer homogenen Oberfläche bleiben die Messergebnisse von der Wahl der Sensorposition unbeeinflusst, da die von der Oberfläche ausgehenden Flüsse in allen Punkten per Definition gleichgroß sind und sich somit auch die an zwei verschiedenen Punkten in einer Ebene gemessenen Flüsse nicht unterscheiden (SCHMID, 2002). Insbesondere bei Messungen in heterogenem Gelände ist es von großer Bedeutung Footprintanalysen zur Validierung der Messergebnisse durchzuführen. So kann festgestellt werden, ob der gemessene Fluss tatsächlich von dem Oberflächentyp erzeugt wird, auf dem auch die dazugehörige Messung stattfindet (STEINFELD, 2009).

Die ersten in der Literatur festgehaltenen Versuche den Einflussbereich vorhandener Quellen und Senken in der näheren Umgebung eines Messortes über einem idealisiert heterogenen Untergrund zu ermitteln, gehen auf PASQUILL (1972) zurück. Da die Anzahl mikrometeorologischer Messstationen mit der Zeit stark zugenommen hat und die Messungen in immer komplexeres Gelände verlagert wurden (z. B. mit dem Messprogramm FLUXNET (BALDOCCHI *et al.*, 2001; REBMANN *et al.*, 2005)), gewannen auch die Untersuchungen auf dem Gebiet der Footprintmodellierung immer mehr an Bedeutung. Seit Beginn der 1990er Jahre wurden daher viele verschiedene Modelle nach unterschiedlichen Methoden entwickelt. Diese lassen sich in *Analytische Modelle*, *Lagrangesche stochastische Modelle*, *Ensemble-gemittelte Schließungsmodelle (RANS)* und *Large-Eddy Simulationen (LES)* unterteilen. Mit dieser rasanten Entwicklung ging das Bestreben einher, immer mehr von einer idealisierten zu einer realen Beschreibung der Heterogenitäten überzugehen (VESALA *et al.*, 2008).

Aufgrund der Vielfalt der Modelle existieren mittlerweile verschiedenste Definitionen und Begriffe für den Footprint einer Messung. Nach SCHUEPP *et al.* (1990) sowie LECLERC und THURTELL (1990) gibt ein Footprint den relativen Beitrag jedes Quell-elementes eines passiven Skalars zu einem gemessenen Fluss oder einer gemessenen Konzentration des passiven Skalars an. Nach VESALA *et al.* (2008) stellt ein Footprint das Sichtfeld eines Sensors dar. Einen etwas anderen Begriff für den Zusammenhang zwischen räumlich verteilten Quellen und einem gemessenen Signal verwenden KLJUN *et al.* (2002). Sie gehen von dem Begriff der Quellgebietsfläche aus, welche jene Quellen beinhaltet, die einen Einfluss auf das an einem bestimmten Ort gemessene Signal haben. Zuvor prägten bereits SCHMID und OKE (1990) den Begriff des $n\%$ -Quellgebietes, dessen Quellen zu einem bestimmten Prozentsatz n zur gemessenen Größe beitragen. Die Footprintfunktion wird daher oft auch als Quellwichtungsfunktion (*engl.* source weight function) bezeichnet (SCHMID, 1994). Lange Zeit galt auch der Begriff des effektiven Fetch von PASQUILL (1972) als gutes Maß für die Beschreibung des Einflussgebietes einer Messung, allerdings nur unter idealisierten Bedingungen. Der Fetch gibt eine ungefähre Abschätzung für das Quellgebiet einer Turbulenzmessung an. Die Länge des Fetch wird als das 100-fache der Messhöhe angenommen. Noch heute wird dieses 100:1-Verhältnis (Fetch : Messhöhe) als Daumenregel zur groben Abschätzung des Quellgebietes einer Turbulenzmessung verwendet (VESALA *et al.*, 2008). Inzwischen wurde jedoch gezeigt, dass der Fetch z. B. unter stabilen Verhältnissen deutlich größer ist (LECLERC und THURTELL, 1990).

Analytische Modelle basieren auf der Lösung der Advektions-Diffusionsgleichung. Mit dieser sogenannten Transportgleichung wird u. a. der Transport von Wärme, Masse oder Impuls innerhalb eines Fluides beschrieben. Die Transportprozesse erfolgen durch Advektion und Diffusion, wobei Letztere einen rein zufälligen Prozess darstellt. Die Footprintbestimmung wird nach dem Prinzip der invertierten Schadstoffwolke (*engl.* inverted plume assumption; s. Abb. 1.4) durchgeführt (SCHMID, 2002). Mit der Lösung der Transportgleichung wird zunächst die Konzentrationsverteilung (Schadstoffwolke) eines passiven Skalars berechnet, welches aus einer kontinuierlichen Punktquelle in eine turbulente Strömung emittiert und in dieser transportiert wird (SCHMID und OKE, 1990). Aus dieser Verteilung lassen sich dann mittels Koordinatentransformation Informationen über die Footprints für Konzentrations- und

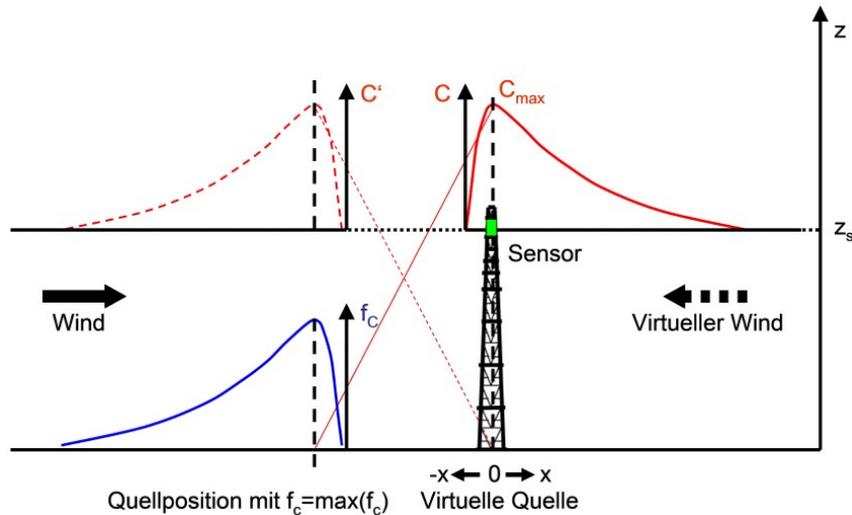


Abbildung 1.4: Schematische Darstellung zum Verfahren der invertierten Schadstoffwolke nach SCHMID und OKE (1990). Zur Bestimmung der Footprintfunktion f_c für eine Sensorposition ($x = 0$, $z = z_s$) wird durch Invertierung der Windrichtung ein virtueller Wind angenommen, mit dem sich für eine virtuelle Quelle ($x = 0$, $z = 0$) eine Konzentrationsverteilung C' ergibt. Diese Methode kann nur unter der Annahme einer horizontal homogenen Strömung angewendet werden.

Flussmessungen innerhalb der Prandtl-Schicht ableiten.

SCHUEPP *et al.* (1990) machten den Anfang in der analytischen Footprintmodellierung. Sie betrachteten in ihren Studien die Transportprozesse in einer neutral geschichteten Grenzschicht und prägten dabei den Begriff des Flussfootprints. In weiteren Studien wurden Footprintmodellierungen auch für andere atmosphärische Stabilitätszustände realisiert. So untersuchten HORST und WEIL (1992, 1994) die Abhängigkeiten eines Footprints von der Messhöhe und der atmosphärischen Schichtung. Sie zeigten dabei u. a., dass der Flussfootprint sehr stark mit der atmosphärischen Stabilität variiert. SCHMID (1994) hielt fest, dass die Quellgebiete von Flüssen etwa um eine Größenordnung kleiner sind als die von Konzentrationen. Diese Erkenntnis ist von großem Wert, wenn die Informationen über Flussfootprints anhand von Konzentrationsfeldern gewonnen werden (invertierte Schadstoffwolke). Aus den Studien ergab sich, dass Fluss- und Konzentrationsfootprints trotz dieser Größenunterschiede gleichermaßen auf Änderungen der thermischen Schichtung oder der Messhöhe reagieren. So werden die Footprints bei zunehmender Stabilität und Messhöhe in Strömungsrichtung gestreckt. Bei zunehmender Turbulenz quer zum Wind werden die Footprints entlang dieser Achse verbreitert.

Die Verwendbarkeit solcher Modelle ist jedoch an einige Bedingungen geknüpft. Da die Modelle auf vereinfachten Annahmen über das Windfeld beruhen, können lediglich horizontal homogene Strömungen betrachtet werden. Des Weiteren sind die Untersuchungen auf die bodennahe Prandtl-Schicht beschränkt, da die analytischen Lösungen der Transportgleichungen unter Berücksichtigung der MOST-Beziehungen (Monin-Obukhovsche Ähnlichkeitstheorie) hergeleitet wurden. Das Modell kann also nur in dem Bereich der Grenzschicht angewendet werden, wo das logarithmische

Windprofil Gültigkeit besitzt und die Skala der Turbulenzelemente durch die Nähe zur festen Oberfläche begrenzt ist (SCHMID, 2002). Zudem ist die Anwendbarkeit auf jene Situationen beschränkt, in denen die turbulente Diffusion in Strömungsrichtung vernachlässigbar klein gegenüber der Advektion ist (SCHMID, 2002). Für Geschwindigkeitsfluktuationen quer zur Strömungsrichtung wird eine gaußförmige Verteilung angenommen. Das heißt, dass analytische Modelle z. B. in einer stark konvektiven Grenzschicht oder bei Vorhandensein von Hindernissen, also unter stark turbulenten Strömungsverhältnissen, nicht eingesetzt werden können. So können unter horizontal heterogenen Bedingungen relativ große Fehler bei der Bestimmung der Quellgebiete und der Lage des Maximums der Footprintfunktion auftreten (SCHMID, 2002). Trotz der begrenzten Anwendbarkeit besitzen analytische Modelle den Vorteil, dass die Footprintbestimmung unter einem relativ geringen Rechenaufwand realisiert werden kann. Sie haben somit eine große Bedeutung für routinemäßige Footprintbestimmungen, wie z. B. vor Ort während der Planung und Durchführung von Messexperimenten. Dazu ist es allerdings im Vorfeld nötig, diese Modelle z. B. mittels Lagrangescher Footprintmodelle zu validieren.

Eine neue Generation von analytischen Modellen wurde erstmals von HSIEH *et al.* (2000) und später auch von KLJUN *et al.* (2004) geschaffen. Die sogenannten Hybridmodelle beruhen auf der Einfachheit konventioneller analytischer Footprintmodelle, machen jedoch Gebrauch von der komplexeren Physik Lagrangescher Modelle. Mit der Hybridmethode werden die Ergebnisse analytischer Modelle mittels Variation der darin auftretenden Parameter (z. B. atmosphärische Stabilität, Rauigkeitslänge, Messhöhe) an die Ergebnisse Lagrangescher stochastischer (LS) Modelle angepasst (HSIEH *et al.*, 2000). Auf diese Weise können analytische Modelle mit ihrem relativ geringen Rechenzeitbedarf zur Footprintbestimmung für verschiedenste atmosphärische Schichtungen und Messhöhen in der gesamten atmosphärischen Grenzschicht eingesetzt werden (KLJUN *et al.*, 2004). Jedoch ist auch bei den Hybridmodellen die Anwendbarkeit auf solche Flussregime begrenzt, für die diese Parameteranpassung auch tatsächlich durchgeführt wurde. Außerdem ist zu bemerken, dass die Ergebnisse der dort eingesetzten LS Modelle noch weitestgehend zu validieren sind und somit nur unter Vorbehalt Verwendung finden sollten (STEINFELD, 2009).

In den Lagrangeschen stochastischen Modellen wird eine andere Strategie verfolgt als in analytischen Modellen. Hier wird die Dispersion eines passiven Skalars durch sich in einer turbulenten Strömung bewegend Partikel beschrieben, die an den Quellen des passiven Skalars freigesetzt werden (STEINFELD, 2009). Anhand der berechneten Partikeltrajektorien lässt sich, im Gegensatz zur Methode der invertierten Schadstoffwolke, direkt auf den Footprint einer Messung schließen. Die Berechnung der Partikeltrajektorien erfolgt gemäß

$$d\vec{X}_L = \vec{V}_L dt, \quad (1.2)$$

unter Verwendung der sogenannten Langevin-Gleichung:

$$d\vec{V}_L = \vec{a}(t, \vec{X}_L, \vec{V}_L) dt + B_L(t, \vec{X}_L, \vec{V}_L) d\vec{\xi}. \quad (1.3)$$

In dieser stochastischen Differentialgleichung stehen $\vec{X}_L(t)$ und $\vec{V}_L(t)$ als Funktionen der Zeit t für die Position und die Geschwindigkeit eines Partikels im dreidimensio-

nalen Raum. Mit der Langevin-Gleichung wird die zeitliche Änderung der Lagrangeschen Geschwindigkeit \vec{V}_L durch einen deterministischen Term \vec{a} und einen stochastischen Term B_L ermittelt (VESALA *et al.*, 2008). Beide Terme sind von der Zeit sowie von der Position und der Geschwindigkeit eines Partikels abhängig. $d\vec{\xi}$ stellt einen dreidimensionalen gaußverteilten Zufallsprozess (Wiener-Prozess) dar, wobei die Komponenten dieser Größe sowohl untereinander als auch zeitlich nicht korreliert sind. Der zweite Term in Gleichung 1.3 besitzt somit einen stochastischen Charakter (STEINFELD, 2009). Über die Langevin-Gleichung gehen Informationen über mittlere Geschwindigkeitsfelder und Turbulenzstatistiken in die Trajektorienberechnung ein. Damit kann die Partikeldispersion in einer turbulenten Strömung realistisch dargestellt werden. LS Modelle können auch unter konvektiven Bedingungen mit nicht-gaußverteilter Turbulenz angewendet werden (VESALA *et al.*, 2008) und z. B. auch die Diffusion in Strömungsrichtung berücksichtigen (SCHMID, 2002). Der Einfluss dieses Prozesses ist nicht zu vernachlässigen, da sich das Maximum der Footprintfunktion ohne Diffusionsprozesse in Strömungsrichtung zu weit stromaufwärts befände (SCHMID, 2002). Zudem können Lagrangesche stochastische Modelle im Gegensatz zu analytischen Modellen auch für Untersuchungen außerhalb der Prandtl-Schicht eingesetzt werden. (BALDOCCHI, 1997; RANNIK *et al.*, 2000; RANNIK *et al.*, 2003). Die benötigten Turbulenzstatistiken werden meist aus numerischen Turbulenzmodellen (LES, RANS), in selteneren Fällen auch aus experimentellen Daten gewonnen.

Die Schwierigkeit besteht darin, geeignete Lösungen für \vec{a} und B_L zu finden, damit das Strömungsfeld und insbesondere die zufälligen turbulenten Prozesse möglichst realistisch in die Berechnungen der Partikeltrajektorien einfließen. In der Lösung für \vec{a} muss mittels eines Driftkorrekturterms die wichtige Anforderung an LS Modelle erfüllt werden, dass eine gut durchmischte Partikelverteilung auch im weiteren zeitlichen Verlauf gut durchmischt bleibt (*engl.* well-mixed condition nach THOMSON, 1987). Viele Modelle erfüllen diese Bedingung nur für ein bestimmtes Turbulenzregime. Es stehen aber auch einige Modelle zur Verfügung (z. B. KLJUN *et al.*, 2002), die für verschiedenste atmosphärische Schichtungen die Dispersion eines passiven Skalars realistisch simulieren können. Zur geeigneten Beschreibung von \vec{a} und B_L wird die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (*engl.* pdf: probability density function) des Eulerschen Geschwindigkeitsfeldes benötigt (VESALA *et al.*, 2008), welche in der sogenannten Fokker-Planck-Gleichung beschrieben wird (RISKEN, 1996). Die Lösung der Fokker-Planck-Gleichung ist nur im Falle eindimensionaler turbulenter Strömungen eindeutig. Für dreidimensionale turbulente Strömungen kann die Gleichung nicht eindeutig gelöst werden (VESALA *et al.*, 2008). Wird ein Lagrangesches Partikelmodell mit LES-Daten angetrieben, so beschränkt sich dieses sogenannte Eindeutigkeitsproblem (KURBANMURADOV *et al.*, 1999; KURBANMURADOV und SABELFELD, 2000) auf die subskalige Partikelgeschwindigkeit (STEINFELD, 2009). Eine ausführlichere Beschreibung der Mathematik des in dieser Arbeit verwendeten Lagrangeschen stochastischen Modells nach WEIL *et al.* (2004) folgt in Abschnitt 2.3.

Lagrangesche stochastische Modelle können sowohl im Vorwärts- als auch im Rückwärtsmodus betrieben werden, wobei in den meisten Modellen im Vorwärtsmodus simuliert wird (z. B. LECLERC und THURTELL, 1990; BALDOCCHI, 1997). In diesem Modus werden die Partikel an horizontal verteilten Quellen freigesetzt und deren zeitliche Verlagerung bis zum Erreichen des Messensors (aber auch darüber hinaus)

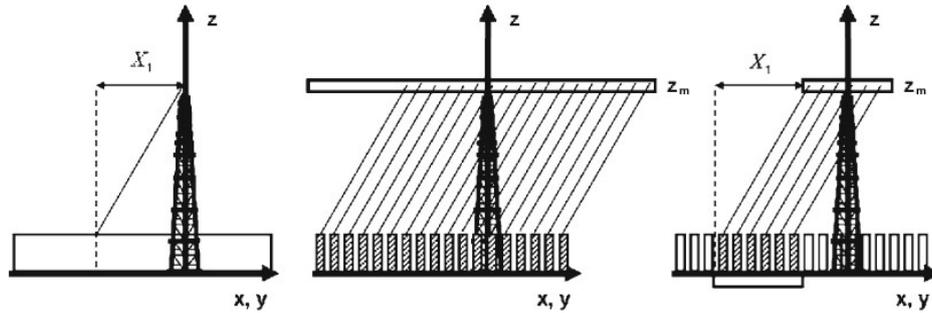


Abbildung 1.5: Schematische Darstellung der zur Berechnung des Footprints in der Entfernung X_1 von der Sensorposition beitragenden Quellen (schraffiert) und Kreuzungspunkte mit dem Messniveau bei einem homogenen (Mitte) und einem heterogenen Untergrund (rechts). Die linke Skizze beschreibt zum Vergleich den Fall einer Punktmessung (STEINFELD *et al.*, 2008).

berechnet. Es wird also die Partikelposition zum Zeitpunkt t und nachfolgend die neue Partikelposition zu einem Zeitpunkt $t + dt$ ($dt > 0$) berechnet. Für einfache Anwendungen mit idealisierten Annahmen (z. B. horizontal homogene Turbulenz) genügt es, die Partikel aus einer einzigen Punktquelle zu emittieren (STEINFELD, 2009). In diesem Fall können die Footprints wie bei den analytischen Modellen nach der Methode der invertierten Schadstoffwolke bestimmt werden, jedoch nur für ideale Verhältnisse (SCHMID, 2002). Über einem homogenen Untergrund tragen alle Partikel zum Footprint bei die an einer beliebigen Stelle das Messniveau kreuzen (s. Abb. 1.5, Mitte), da im homogenen Fall alle von der Oberfläche ausgehenden Flüsse gleich groß sind und somit für jeden Punkt ein und derselbe Footprint resultiert (SCHMID, 2002). Der Sensor kann hier als eine unendliche Messebene betrachtet werden. Der Footprint hängt in diesem Fall nur von der horizontalen Distanz zwischen Quelle und Sensor ab und nicht von einer bestimmten Sensorposition. Es würde demnach für die Footprintberechnung auch genügen, Partikel lediglich aus einer der in Abbildung 1.5 schraffierten Quellen zu emittieren. Bei der Footprintbestimmung über heterogenem Untergrund besteht die Schwierigkeit darin, dass die Oberflächenflüsse nicht überall gleich sind und somit der Footprint für jeden Punkt im Messniveau andere Gestalt annimmt. Es tragen also nur die Partikel zum Footprint für eine bestimmte Sensorposition bei, die auch tatsächlich an diesem Sensor registriert werden. Allerdings ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Partikel einen ausgewählten Punkt im Raum kreuzt, verschwindend gering. Es muss eine deutlich größere Partikelzahl freigesetzt werden als bei homogenen Verhältnissen. Dabei müssen die Quellen überall dort positioniert werden, wo sich auch eine Quelle des passiven Skalars befindet. Das bedeutet, dass ein unendlich dichtes Feld von Quellen benötigt wird (STEINFELD, 2009). Da die Partikelzahl aufgrund begrenzter Rechnerressourcen nicht unendlich groß sein kann, wird dem Sensor eine gewisse horizontale Ausdehnung zugewiesen (s. Abb. 1.5, rechts), um die Anzahl der am Sensor gezählten und zum Footprint beitragenden Partikel zu erhöhen und damit die Footprintstatistik zu verbessern. Im Vergleich zum homogenen Fall besitzt der Sensor keine unendliche Ausdehnung mehr. Somit ist es nicht mehr für alle Partikel gleich wahrscheinlich den Sensor aus einer Entfernung X_1 zu erreichen. Dies schaffen

nur die Partikel, die aus einer Quellfläche mit der Größe der Sensorfläche stammen (schraffierte Flächen in Abb. 1.5, rechts). Nähere Informationen hierzu finden sich in der Beschreibung des Footprintauswerteprogramms (s. Abschn. 2.4).

Die Partikeltrajektorien können auch im Rückwärtsmodus berechnet werden (z. B. FLESCHE *et al.*, 1995; FLESCHE, 1996; KLJUN *et al.*, 2002). Bei dieser Methode werden die Partikel an der Position des Sensors gestartet und in der Zeit zurückverlagert, um so auf den Quellort jedes einzelnen Partikels zu schließen. Das hat den entscheidenden Vorteil, dass auf diese Weise wesentlich weniger Trajektorien berechnet werden müssen, da jedes Partikel am Sensor gestartet wird und somit alle Partikel auch tatsächlich den Sensor passieren. Das Problem bei dieser Methode ist jedoch, dass der erste Bodenkontakt eines Partikels nach der Freisetzung am Sensor nicht unbedingt seinem Quellort entsprechen muss, wenn das Partikel auf dem Weg von seiner Quelle zum Sensor mehrmals den Boden berührt hat. Eine weitere Schwierigkeit besteht darin, die Anfangsgeschwindigkeiten der am Sensor gestarteten Partikel korrekt zu wählen (STEINFELD, 2009). Eine Methode zur Ermittlung der Anfangsgeschwindigkeiten ist in KLJUN *et al.* (2002) beschrieben.

Meist werden LS Modelle mit Geschwindigkeitsfeldern und Turbulenzstatistiken aus numerischen Simulationen, wie z. B. mit RANS (SOGACHEV *et al.*, 2002) oder LES Modellen (LECLERC *et al.*, 1997), angetrieben. Diese auf den Navier-Stokes Gleichungen basierenden Modelle können die Ausbreitung eines passiven Skalars berechnen (SCHMID, 2002), woraus sich auf den Footprint einer Messung schließen lässt.

RANS Modelle liefern Informationen über zeitlich gemittelte Felder, in denen aufgrund der langen Mittelungszeit direkte Informationen über turbulente Fluktuationen fehlen (Ensemble-Mittel). Der Einfluss der Turbulenz auf die gemittelten Felder und somit auf die Ausbreitung des Skalars wird hier parametrisiert. Footprints können sowohl über homogenem als auch über heterogenem Untergrund bestimmt werden (SOGACHEV und LLOYD, 2004). Allerdings steckt in den Parametrisierungen, mit denen die turbulenten Flüsse modelliert werden, eine relativ große Fehlerquelle. Die Footprints sind somit insbesondere bei Untersuchungen über heterogenem Gelände sehr stark abhängig von der Güte der Parametrisierung (STEINFELD, 2009).

Bei der LES werden die energietragenden Turbulenzelemente direkt aufgelöst, so dass lediglich die kleinen Skalen parametrisiert werden müssen. Mithilfe der LES können Strömungen über homogenem und heterogenem Gelände für verschiedenste Stabilitätsregime von stark labil bis stark stabil simuliert werden (z. B. SCHMID und SCHUMANN, 1989; MOENG und SULLIVAN, 1994; BEARE *et al.*, 2006). Dabei können sowohl idealisierte Heterogenitäten, z. B. mittels Variation des vom Boden ausgehenden Wärmestroms in einer konvektiven Grenzschicht betrachtet werden (LETZEL und RAASCH, 2003), als auch komplette Tagesgänge für Strahlungstage über einer real-heterogenen Oberfläche simuliert werden (UHLENBROCK, 2006). Mit den heute zur Verfügung stehenden Massivparallelrechnern besteht ebenfalls die Möglichkeit die Strömungen innerhalb von Pflanzenbeständen (z. B. KANDA und HINO, 1994; WATANABE, 2004) oder Gebäudeschluchten (z. B. LETZEL *et al.*, 2008) zu untersuchen. Mit den zahlreichen Anwendungsbereichen der LES ist daher auch der Einsatzbereich eines mit LES-Daten gesteuerten Footprintmodells relativ weit gefächert. Daher besitzt die LES großes Potential als Validierungswerkzeug für konventionelle Footprintmodelle (Analytische-, Hybridmodelle) (SCHMID, 2002).

Allerdings wurde die LES aufgrund des hohen Rechenzeit- und Speicherbedarfs (für den Antrieb der LS Modelle werden räumlich und zeitlich hoch aufgelöste Felder benötigt) bisher nicht sehr häufig im Bereich der Footprintbestimmung eingesetzt. Es existieren einige Studien, in denen Footprints z. B. unter Verwendung der Felder von aufgelöster und subskaliger TKE (HADFIELD, 1994) oder aus den berechneten Konzentrationsfeldern eines passiven Skalars bestimmt wurden (LECLERC *et al.*, 1997). Bei einem Vergleich mit den Ergebnissen des analytischen Footprintmodells von HORST und WEIL (1992) stellte HADFIELD (1994) qualitative Übereinstimmungen fest. LECLERC *et al.* (1997) beobachteten im Vergleich mit den Footprintergebnissen des analytischen Modells von HORST und WEIL (1992), des Lagrangeschen Modells von LECLERC und THURTELL (1990) und des Tracerexperimentes von FINN *et al.* (1996) Ähnlichkeiten, jedoch zeigten sich Unterschiede bei den Footprints für bodennahe Messsensoren sowie deutliche Abweichungen in der Lage des Footprintmaximums. Die Abweichungen in Bodennähe sind u. a. mit der Vernachlässigung der subskaligen Geschwindigkeitsfluktuationen zu erklären. Jedoch ist gerade in dem Bereich die Berücksichtigung der Fluktuationen erforderlich, da dort die subskaligen Turbulenzelemente den Großteil der gesamten turbulenten kinetischen Energie ausmachen und hauptsächlich für den turbulenten Transport verantwortlich sind (STEINFELD *et al.*, 2008).

Seit den Studien von WEIL *et al.* (2004) besteht die Möglichkeit die subskaligen Fluktuationen im Lagrangeschen Partikelmodell zu berücksichtigen. Dies ist ein essentieller Schritt zur Verbesserung der Footprintmodellierung. Denn gerade in Bodennähe, wo die Messungen turbulenter Flüsse und demnach auch die Footprintanalysen stattfinden, tragen die subskaligen Fluktuationen zu einem nicht zu vernachlässigenden Anteil zur Partikelgeschwindigkeit bei. Seit den Arbeiten von STEINFELD *et al.* (2008) ist das Lagrangesche Partikelmodell nach WEIL *et al.* (2004) in das hier verwendete LES Modell PALM (**parallelisiertes LES Modell**) eingebettet und kann „online“ mit den LES Daten angetrieben werden. Somit ist es nicht mehr nötig die zur Berechnung der Partikelgeschwindigkeiten benötigten dreidimensionalen Felder (z. B. Windgeschwindigkeit, TKE, Dissipation) in zeitlich und räumlich hochaufgelöster Form abzuspeichern, da dem LS Modell zu jedem Zeitschritt der LES die benötigten Informationen direkt zur Verfügung stehen. So können Simulationen mit höherer räumlicher und zeitlicher Auflösung durchgeführt werden.

STEINFELD *et al.* (2008) führten mit dem „online“ gekoppelten LES-LS Modell erstmals Footprintsimulationen über einer idealisiert heterogenen Oberfläche durch. Dazu wurde die Grenzschicht mit einem eindimensional heterogenen Wärmestrom geheizt. Sie zeigten, dass das neue Modell auch unter nicht-homogenen Bedingungen erfolgreich eingesetzt werden kann. Zuvor überprüften sie die Anwendbarkeit des Modells durch Vergleiche mit den Ergebnissen von WEIL *et al.* (2004) und den Konvektionstank-Experimenten von WILLIS und DEARDORFF (1976). Unter der Voraussetzung, dass auch der Einfluss der subskaligen turbulenten kinetischen Energie (SGS TKE) auf die Partikelverlagerung berücksichtigt wird, konnten die Ergebnisse entsprechend reproduziert werden. Vergleiche mit den in LECLERC *et al.* (1997) durchgeführten Vergleichsstudien bestätigten ebenfalls die generelle Anwendbarkeit des LES-LS Modells. Als wesentliches Ergebnis stellten STEINFELD *et al.* (2008) heraus, dass die Berücksichtigung des subskaligen Geschwindigkeitsanteils unerlässlich sei. In Bodennähe wird der Transport größtenteils über die nicht-aufgelösten subska-

ligen Anteile bewerkstelligt. Bei Vernachlässigung der subskaligen Prozesse werden insbesondere die bodennahen Vertikalbewegungen unterschätzt. Somit legen die Partikel eine größere horizontale Entfernung zurück bevor sie den Sensor erreichen. In dem Fall befindet sich das Footprintmaximum zu weit stromaufwärts und der Peakwert ist zu niedrig. STEINFELD *et al.* (2008) stellten weiterhin fest, dass die Annahme der lokalen Isotropie von WEIL *et al.* (2004) bei Footprintstudien in Bodennähe zu einer Überschätzung der vertikalen Geschwindigkeitsvarianz führt und daraus ein überhöhtes Footprintmaximum resultiert, welches zu dicht am Sensor situiert ist. Allerdings wird der durch diese Annahme verursachte Fehler als vernachlässigbar klein gegenüber der Nicht-Berücksichtigung der SGS TKE eingeschätzt.

1.3 Zielsetzungen und Struktur dieser Arbeit

Mikrometeorologische Messungen finden heute größtenteils in komplexem Gelände statt, da es gerade dort von großem Interesse ist die turbulenten Austauschflüsse zwischen Oberfläche und Atmosphäre zu quantifizieren. Insbesondere bei der Entwicklung von Vorhersagemodellen spielt es eine entscheidende Rolle, wie genau die Austauschflüsse einzelner Oberflächentypen bestimmt werden können, da diese Informationen in parametrisierter Form in größerskalige Wetter- oder Klimavorhersagemodelle eingehen (BEYRICH *et al.*, 2006b). Dementsprechend steigen auch die Anforderungen an Footprintmodelle und deren Entwicklung für den Einsatz in heterogenem Gelände.

Mit einer Large-Eddy Simulation werden unter Verwendung des darin eingebetteten Lagrangeschen stochastischen Partikelmodells, welches seit den Arbeiten von STEINFELD *et al.* (2008) zur Verfügung steht, Footprints für die Turbulenzmessstationen des LITFASS-2003 Experimentes modelliert. Damit schließt diese Arbeit an die Studien von STEINFELD (2009) an, in denen unter sehr idealisierten Bedingungen Footprints für zwei der Messstationen bestimmt wurden. In dieser Arbeit werden bezüglich der Oberflächenheterogenität reale Bedingungen angenommen. Es soll in erster Linie überprüft werden, inwieweit die Footprintbestimmung unter solch realen Bedingungen mit den vorhandenen Ressourcen realisiert werden kann. Wie bereits in Abschnitt 1.2 erwähnt, tragen bei der Betrachtung einer heterogenen Oberfläche nur die Partikel zum Footprint bei, die tatsächlich den Sensor (begrenzte Sensorfläche) durchkreuzt haben. Es ergibt sich daher die Vermutung, dass die Verlagerung einer Vielzahl von Partikeln und die Durchführung von Ensembles notwendig sein wird, um zu gewährleisten, dass genügend Partikel für die Footprintberechnung zur Verfügung stehen.

In Kapitel 2 werden Grundlagen des verwendeten numerischen Modells PALM und die Mathematik des darin eingebetteten Lagrangeschen stochastischen Modells erläutert, welches im Folgenden zur Footprintbestimmung eingesetzt wird. Zudem findet sich in diesem Kapitel auch eine Beschreibung der Methode zur Berechnung von Footprints aus den Partikeldaten der LES. Kapitel 3 beschäftigt sich mit der Validierung dieses gekoppelten LES-LS Modells für den Fall einer konvektiven Grenzschicht über homogenem Untergrund, um die Funktionsfähigkeit des Modells zu prüfen. Zu diesem Zweck werden die Studien von STEINFELD *et al.* (2008) herangezogen, die sich u. a. mit der Footprintbestimmung für verschiedene atmosphärische Stabilitätszustände

über homogenem Untergrund befassen. Die Beschreibung und Auswertung der Ergebnisse zu den Footprintstudien für das LITFASS-2003 Experiment sind zusammen mit einer kurzen Einführung über das Experiment selbst in Kapitel 4 aufgeführt. In Kapitel 5 folgt die Zusammenfassung und ein Ausblick über mögliche weiterführende Studien zu dem Thema der Footprintbestimmung für Turbulenzmessungen über heterogenem Untergrund.

2 Modellbeschreibung

Das in dieser Arbeit verwendete **parallelisierte LES-Modell PALM** wurde seit Beginn der 1990er Jahre am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover entwickelt (RAASCH und ETLING, 1998; RAASCH und SCHRÖTER, 2001) und bis heute stetig weiterentwickelt und um einige Anwendungsbereiche erweitert. So besteht u. a. die Möglichkeit, Untersuchungen von Strömungen inmitten von Gebäudeschluchten (LETZEL *et al.*, 2008) durchzuführen oder aber die Verlagerung von Partikeln mit einem in PALM eingebetteten Lagrangeschen Partikelmodell zu simulieren (s. Abschn. 2.3), um aus diesen Informationen dann z. B. Footprints abzuleiten (STEINFELD *et al.*, 2008). Das zur Footprintberechnung verwendete Auswerteprogramm wird in Abschnitt 2.4 beschrieben. In Abschnitt 2.2 sollen Grundlagen und Numerik des in FORTRAN90 geschriebenen Modells PALM aufgeführt werden. Einleitend geht es aber zunächst in Abschnitt 2.1 um die Eigenschaften von Turbulenz und die Beschreibung verschiedener Turbulenzmodelle.

2.1 Grundlagen von Turbulenzmodellen

Die meisten Strömungen in der Natur oder auch in vielen Bereichen der Technik besitzen turbulente Eigenschaften, deren Mechanismen noch nicht vollständig verstanden und daher Gegenstand zahlreicher Studien sind. Bei der Turbulenz handelt es sich um dreidimensionale, instationäre Bewegungen von stochastischer Natur, die maßgeblich für den Transport von Impuls, Wärme und anderen Skalaren verantwortlich sind. Sie sorgen auf diese Weise für eine gute Durchmischung der Grenzschicht. Insbesondere die konvektive Grenzschicht zeichnet sich durch wirbelartige Turbulenzelemente von großer Vielfalt bezüglich der Zeit- und Längenskalen aus, die sich gegenseitig überlagern. Die größten Luftwirbel erstrecken sich maximal über die gesamte Höhe der atmosphärischen Grenzschicht (10^3m), während die kleinsten Wirbel in der Größenordnung von 10^{-3}m liegen. Dabei können in geringer Distanz zum Erdboden, also nahe eines festen Randes, nur die kleinsten Wirbel existieren. Die Lebensdauer der Wirbel reicht von einigen Stunden bis hin zu Bruchteilen von Sekunden (STULL, 1988).

Wie turbulent eine Strömung ist, kann mithilfe der dimensionslosen Reynoldszahl Re analysiert werden:

$$Re = \frac{UL}{\nu}. \quad (2.1)$$

Sie beschreibt das Verhältnis von Trägheitskräften zu viskosen Reibungskräften einer Strömung und ist daher ein Maß für die Turbulenz einer Strömung. Die Trägheitskraft setzt sich zusammen aus den charakteristischen Geschwindigkeits- und Längenskalen U und L der größten, energietragenden Wirbel. Die viskosen Kräfte werden mit der kinematischen molekularen Viskosität ν beschrieben, welche im Zusammenhang mit den kleinsten, dissipativen Wirbeln steht (STULL, 1988). Aus Laborexperimenten ist

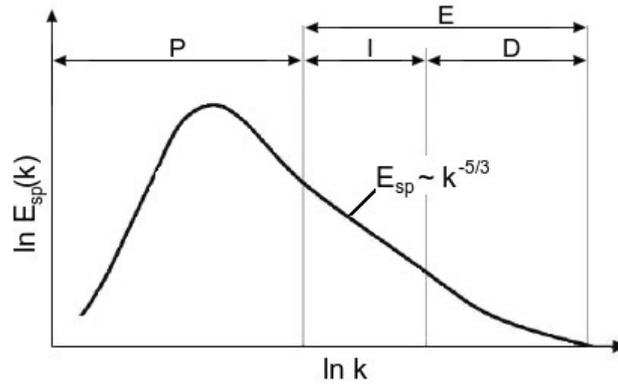


Abbildung 2.1: Schema eines Energiespektrums in der atmosphärischen Grenzschicht mit Produktionsbereich P , Trägheitsbereich I und Dissipationsbereich D für einen Wellenlängenbereich von 10^3m bis 10^{-3}m . Trägheits- und Dissipationsbereich ergeben zusammen den Gleichgewichtsbereich E (nach KRAUS, 2008).

bekannt, dass Strömungen unterhalb einer kritischen Reynoldszahl Re_{krit} von 10^3 laminar sind und erst oberhalb dieser durch das Aufprägen kleinster Störungen turbulent werden können (BLACKADAR, 1997). Eine Berechnung der Reynoldszahl mit für die atmosphärische Grenzschicht typischen Werten von $U = 1\text{ms}^{-1}$, $L = 1000\text{m}$ und $\nu = 1.5 \cdot 10^{-5}\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ergibt eine Reynoldszahl in der Größenordnung von 10^8 . Die atmosphärische Grenzschicht kann damit als turbulent angesehen werden.

Die großen, anisotropen Wirbel beinhalten den Großteil der turbulenten kinetischen Energie (TKE), während die isotropen kleinen Wirbel nur einen geringen Beitrag zur TKE liefern. Anhand des Energiespektrums in Abbildung 2.1 soll die spektrale Verteilung der TKE veranschaulicht werden. Aufgetragen ist die spektrale Energiedichte $E_{\text{sp}}(k)$ gegen die Wellenzahl k (KRAUS, 2008). Im Produktionsbereich P wird TKE durch thermische Konvektion und Scherung des Grundstroms erzeugt und den größten Wirbeln, also im Bereich kleiner Wellenzahlen k , zugeführt. Diese energietragenden Wirbel sind hauptsächlich für den turbulenten Transport in der Grenzschicht verantwortlich. Im Trägheitsbereich I (*engl.* inertial subrange) oder auch Transferbereich zerfallen die größeren Wirbel aufgrund von Instabilitäten in kleinere Wirbel (ETLING, 2008). Hier findet weder Produktion noch Dissipation von Energie statt, sondern die TKE wird lediglich durch das Spektrum weitergegeben (Energiekaskade). In diesem Bereich gilt für die Energiedichte folgende Gesetzmäßigkeit (KRAUS, 2008):

$$E_{\text{sp}}(k) \sim k^{-5/3}. \quad (2.2)$$

Die kleinen Wirbel zerfallen weiter, bis sie im Dissipationsbereich D (*engl.* dissipation range) unter der Wirkung von viskosen Reibungskräften ihre Energie in Form von Wärme an die Umgebung abgeben. Anhand der Kolmogorov-Länge η ,

$$\eta \sim \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4}, \quad (2.3)$$

werden die für diesen Bereich typischen Längenskalen beschrieben. Mit der kinematischen molekularen Viskosität der Luft $\nu = 1.5 \cdot 10^{-5}\text{m}^2\text{s}^{-1}$ und einer in Bodennähe

typischen Dissipationsrate $\epsilon = 1.0 \cdot 10^{-2} \text{m}^2 \text{s}^{-3}$ ergibt sich $\eta = 0.76 \text{mm}$. Dies entspricht der oben angegebenen Größenordnung der kleinsten Wirbel (KRAUS, 2008). Die beiden letztgenannten Bereiche bilden zusammen den Gleichgewichtsbereich E (*engl.* equilibrium range), in dem die Transferrate gleich der Dissipationsrate ist (STULL, 1988).

Zur Untersuchung turbulenter Strömungen gibt es verschiedene numerische Modelle, die sich in ihren Ansätzen und ihrer Verwendbarkeit unterscheiden. Die Basis für diese Modelle bilden die Navier-Stokes-Gleichungen (NSG), welche ein System von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung bilden. Zu den drei wesentlichen Modellen gehören die **Direkte Numerische Simulation** (DNS), die Modelle mit den Reynolds gemittelten NSG (RANS - **R**eynolds **A**veraged **N**avier **S**tokes) und die Grobstruktursimulationsmodelle (LES - **L**arge-**E**ddy **S**imulation). Numerische Simulationen haben bei der Untersuchung turbulenter Flüsse wesentliche Vorteile gegenüber Messungen im freien Feld. Simulationen erzeugen im Gegensatz zu Messungen hochaufgelöste dreidimensionale Daten, mit denen turbulente Prozesse detailliert analysiert werden können.

Bei der DNS werden alle Skalen der turbulenten Strömung explizit aufgelöst. Dabei muss das Simulationsgebiet groß genug sein, damit sich auch die größten Wirbel ausbilden können. Außerdem muss eine sehr geringe Gitterweite gewählt werden, um auch die kleinsten Wirbel zu erfassen (FRÖHLICH, 2006). Zur Simulation der turbulenten Strömung in der atmosphärischen Grenzschicht wäre eine sehr rechenzeitintensive dreidimensionale Simulation in der Größenordnung von 10^{18} Gitterpunkten erforderlich. Diese Anzahl von benötigten Gitterpunkten berechnet sich unter Annahme isotroper Turbulenz (nach KOLMOGOROV, 1941) aus dem Verhältnis:

$$N^3 \sim Re^{9/4} \quad (2.4)$$

(FRÖHLICH, 2006). Damit kann die Turbulenz zwar theoretisch sehr genau beschrieben werden, aufgrund begrenzter Rechnerressourcen (derzeit sind Simulationen mit 10^{11} Gitterpunkten möglich) funktioniert dies bislang aber nur für schwach turbulente Strömungen.

RANS Modelle basieren auf den Reynolds gemittelten NSG, mit denen nur noch die zeitliche Entwicklung des Ensemble-Mittels simuliert wird. Durch die Mittelung treten zusätzliche Terme auf, die die turbulenten Fluktuationen beinhalten. Diese Terme werden mithilfe von Parametrisierungen rein statistisch beschrieben, indem die unbekanntes turbulenten Fluktuationen durch die bekannten mittleren Größen dargestellt werden. Da das gesamte Turbulenzspektrum hier im Gegensatz zur DNS parametrisiert wird, haben RANS Modelle einen deutlich geringeren Rechenbedarf. Jedoch eignen sie sich nicht für detaillierte Turbulenzbetrachtungen, da die Turbulenz nicht explizit aufgelöst wird. Sie kommen eher dort zum Einsatz, wo es um die Untersuchung mittlerer Größen geht (FRÖHLICH, 2006).

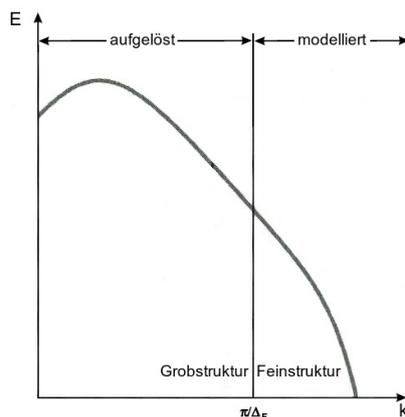


Abbildung 2.2: Grundprinzip der LES: Skizze zur Veranschaulichung der Skalentrennung von Grob- und Feinstruktur mit der Filterlänge Δ_F (nach FRÖHLICH, 2006).

In LES Modellen wird ein Mittelweg zwischen DNS und RANS gewählt. Große und kleine Skalen werden separat betrachtet. Die Trennung der Skalen erfolgt durch eine räumliche Filterung (s. Abschn. 2.2.1) bei der Abschneide- oder Filterlänge Δ_F (s. Abb. 2.2). Die großen energietragenden Skalen ($> \Delta_F$: Grobstruktur) werden anhand der NSG direkt berechnet, während der Einfluss der kleinen Skalen ($< \Delta_F$: Feinstruktur) auf die Grobstruktur mit einem Subskalenmodell (s. Abschn. 2.2.2) modelliert wird. Die Parametrisierungen müssen so gewählt werden, dass die Energiedissipation durch die kleinen Skalen korrekt beschrieben wird, damit es in diesem Skalenbereich nicht zu einer Ansammlung von Energie kommt. Mit der Methode der LES können im Gegensatz zur DNS auch stark turbulente Strömungen bei großen Reynoldszahlen simuliert werden. Aufgrund von Kolmogorovs Theorien über die lokale Isotropie und Homogenität der kleinen Skalen (KOLMOGOROV, 1941) besitzt die hier verwendete Parametrisierung für unterschiedliche atmosphärische Zustände universelle Gültigkeit. Mit den heute zur Verfügung stehenden Rechnerressourcen besteht die Möglichkeit, Simulationen mit sehr hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung durchzuführen und somit detaillierte Studien von turbulenten Prozessen in der atmosphärischen Grenzschicht zu betreiben. Simulationen mit derartiger Genauigkeit haben allerdings, ähnlich zur DNS, einen hohen Rechenzeit- und Speicherbedarf.

2.2 Das parallelisierte Grobstruktursimulationsmodell PALM

Zu Beginn wird das in PALM vorliegende Gleichungssystem zur Untersuchung atmosphärischer Bewegungsvorgänge beschrieben. In Abschnitt 2.2.2 geht es um das Subskalenmodell, mit dem die Feinstruktur behandelt wird. Im Anschluss daran werden Modellgitter, numerische Verfahren (s. Abschn. 2.2.3) sowie Anfangs- und Randbedingungen (s. Abschn. 2.2.4) beschrieben. Abschnitt 2.2.5 enthält einen Überblick über die Methode der Parallelisierung.

2.2.1 Grundgleichungssystem zur Beschreibung atmosphärischer Bewegungsvorgänge

Als Grundlage für die Beschreibung atmosphärischer Bewegungsvorgänge dienen die Bewegungsgleichungen

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \varepsilon_{ijk} f_j u_k - g \delta_{i3} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu_m \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right), \quad (2.5)$$

der erste Hauptsatz der Thermodynamik

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -u_k \frac{\partial \theta}{\partial x_k} + \nu_h \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_k^2} + Q_h \quad (2.6)$$

und die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} (u_k \rho). \quad (2.7)$$

Gleichung 2.8 beschreibt den Transport von weiteren Skalaren:

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -u_k \frac{\partial s}{\partial x_k} + \nu_s \frac{\partial^2 s}{\partial x_k^2} + Q_s. \quad (2.8)$$

Das Gleichungssystem gilt für die Betrachtung einer trockenen Atmosphäre (ETLING, 2008). Die Indizes $i, j, k \in \{1, 2, 3\}$ stehen jeweils für die drei Komponenten einer Größe. So beschreibt u_i die drei Komponenten des Geschwindigkeitsfeldes und x_i kartesische Koordinaten. t steht für die Zeit und ∂ für den partiellen Differentialoperator. Für den Coriolis-Parameter gilt $f_i = (0, 2\Omega \cos(\varphi), 2\Omega \sin(\varphi))$ mit der Winkelgeschwindigkeit der Erde $\Omega = 2\pi/24\text{h}$ und der geographischen Breite φ . p ist der Druck, ρ die Dichte, g die Schwerebeschleunigung der Erde, θ die potentielle Temperatur und s ein Skalar. Das Skalar s kann z. B. für den Gesamtwassergehalt q stehen, falls mit der *feuchten* Version von PALM gerechnet wird (s. u.). ν_m, ν_h, ν_s sind die molekularen Diffusionskoeffizienten für Impuls, Wärme und Skalare, Q_h und Q_s sind die Quellen und Senken der beiden letztgenannten Größen. ε_{ijk} ist der sogenannte alternierende Einheitstensor und δ_{ij} das Kronecker-Delta. Die hier aufgeführten prognostischen Gleichungen 2.5 - 2.8 bilden die Grundlage für die Berechnungen der prognostischen Variablen in PALM: Geschwindigkeitskomponenten u, v und w , potentielle Temperatur θ , Gesamtwassergehalt q und der subgridskaligen turbulenten kinetischen Energie e (SGS TKE). Letztgenannte wird zur Modellierung der Feinstruktur benötigt und anhand einer zusätzlichen prognostischen Gleichung berechnet (s. Abschn. 2.2.2). Zum Satz der Grundgleichungen gehört ebenfalls die Zustandsgleichung für ideale Gase:

$$p = \rho R_L T. \quad (2.9)$$

R_L ist die universelle Gaskonstante für trockene Luft. Die potentielle Temperatur θ in Gleichung 2.6 lässt sich wie folgt aus der aktuellen Temperatur T berechnen:

$$\theta(z) = T(z) \left(\frac{1000 \text{ hPa}}{p(z)} \right)^{\frac{R_L}{c_p}}, \quad (2.10)$$

mit der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p .

Da die Simulationen in dieser Arbeit hauptsächlich mit der *feuchten* Version von PALM gerechnet werden, sollen im Folgenden kurz die notwendigen Änderungen und Erweiterungen beschrieben werden. Im *feuchten* Gleichungssystem wird anstelle der potentiellen Temperatur die potentielle Flüssigwassertemperatur (SCHRÖTER, 2003)

$$\theta_1 = \theta - \frac{L}{c_p} \left(\frac{\theta}{T} \right) q_1, \quad (2.11)$$

(L : Verdunstungswärme) bzw. die virtuelle potentielle Temperatur θ_v (SOMMERIA und DEARDORFF, 1977) verwendet:

$$\theta_v = \theta_1 (1 + 0.61q_v - q_1). \quad (2.12)$$

Die spezifische Feuchte q_v steht für den Wasserdampf- und q_1 für den Flüssigwasser-gehalt. Die Summe der beiden Größen ergibt den Gesamtwassergehalt q . Im Folgenden werden keine Phasenübergänge berücksichtigt, somit ist $q_1 = 0$ und $\theta_1 = \theta$. Der erste Hauptsatz der Thermodynamik wird bei Verwendung der *feuchten* Modellversion mit der virtuellen potentiellen Temperatur beschrieben (Quellen und Senken der Temperatur können aufgrund der Nichtbeachtung von Phasenübergängen vernachlässigt werden):

$$\frac{\partial \theta_v}{\partial t} = -\frac{\partial(u_i \theta_v)}{\partial x_i} + \nu_h \frac{\partial^2 \theta_v}{\partial x_i^2}. \quad (2.13)$$

Die prognostische Gleichung für die spezifische Feuchte lässt sich analog zum ersten Hauptsatz schreiben:

$$\frac{\partial q_v}{\partial t} = -\frac{\partial(u_i q_v)}{\partial x_i} + \nu_q \frac{\partial^2 q_v}{\partial x_i^2}. \quad (2.14)$$

Auch in den Bewegungsgleichungen (2.5) ist die potentielle Temperatur θ durch die virtuelle potentielle Temperatur zu ersetzen.

Das vorgestellte Gleichungssystem ist aufgrund der nichtlinearen Advektionsterme in den meisten Fällen nur auf numerischem Wege lösbar. Bei der Untersuchung von kleinräumigen Bewegungsvorgängen, wie z. B. turbulente Flüsse in einer konvektiven Grenzschicht, in der hauptsächlich Auftriebskräfte von Bedeutung sind, kann auf die NSG eine Boussinesq-Approximation angewendet werden (ETLING, 2008). Diese Art der Näherung wird auch bei den Modellgleichungen angewandt. Hierbei wird eine Strömung als inkompressibel angenommen und Dichteunterschiede lediglich für die Archimedischen Auftriebskräfte berücksichtigt (ETLING, 2008). Die Näherung erfolgt durch eine Aufspaltung der thermodynamischen Größen Druck p , Dichte ρ und Temperatur θ , zusammenfassend dargestellt durch die allgemeine Größe ψ , in einen Grundzustand ψ_0 und eine Abweichung ψ^* von diesem Grundzustand:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi_0(z) + \psi^*(x, y, z, t). \quad (2.15)$$

Es wird dabei vorausgesetzt, dass sich Druck, Temperatur und Dichte im Grundzustand nur mit der Höhe ändern ($\psi_0 = \psi_0(z)$). Lediglich für den Antrieb des Grundstromes sollen horizontale Druckunterschiede über die geostrophische Windbeziehung

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_0}{\partial x_i} = \varepsilon_{i3k} f_3 u_{k_g} \quad (2.16)$$

zugelassen werden. Weiterhin sollen für den Grundzustand die statische Grundgleichung und die Zustandsgleichung für ideale Gase gelten (ETLING, 2008):

$$\frac{\partial p_0(z)}{\partial z} = -g\rho_0(z) \quad \text{und} \quad p_0 = \rho_0 R T_0. \quad (2.17)$$

Wird nun die Aufspaltung (2.15) zunächst auf die mit ρ multiplizierten Bewegungsgleichungen (2.5) angewendet und die molekulare Diffusion gegenüber den restlichen Kräften vernachlässigt, so ergibt sich:

$$\rho_0 \left(1 + \frac{\rho^*}{\rho_0} \right) \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) = -\rho_0 \left(1 + \frac{\rho^*}{\rho_0} \right) \varepsilon_{ijk} f_j u_k - \rho_0 \left(1 + \frac{\rho^*}{\rho_0} \right) g \delta_{i3} - \frac{\partial p_0}{\partial x_i} - \frac{\partial p^*}{\partial x_i}. \quad (2.18)$$

All jene Terme, die den Quotienten ρ^*/ρ_0 enthalten, werden unter der Voraussetzung $\rho^*/\rho_0 \ll 1$ gegenüber den anderen Termen als vernachlässigbar klein betrachtet. Lediglich im Auftriebsterm sollen selbst kleinste Dichteunterschiede berücksichtigt werden, um zu gewährleisten, dass infolge der horizontalen Dichteunterschiede Vertikalbewegungen stattfinden können. Es ist schwierig die Dichteschwankungen ρ^* zu messen. Daher wird mittels logarithmischer Differentiation der Gasgleichung (2.9) und der Aufspaltung (2.15) eine andere Form des Auftriebsterms beschrieben, welche statt der Dichte die direkt zu bestimmende Temperatur enthält (ETLING, 2008):

$$\frac{\rho^*}{\rho_0} - \underbrace{\frac{p^*}{p_0}}_{\frac{p^*}{p_0} \ll \frac{\rho^*}{\rho_0}} \approx - \underbrace{\frac{T^*}{T_0}}_{\frac{T^*}{T_0} \approx \frac{\theta_v^*}{\theta_{v_0}}} \Rightarrow \frac{\rho^*}{\rho_0} \approx - \frac{\theta_v^*}{\theta_{v_0}}. \quad (2.19)$$

Dabei wird die Annahme gemacht, dass Druckschwankungen gegenüber Dichteschwankungen vernachlässigbar klein sind (BLACKADAR, 1997). Unter Verwendung der statischen Grundgleichung (2.17) und der geostrophischen Windbeziehung (2.16) lauten die Bewegungsgleichungen mit dem modifizierten Auftriebsterm:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} (u_k u_i) - \varepsilon_{ijk} f_j u_k - \varepsilon_{i3k} f_3 u_{k_g} + g \delta_{i3} \frac{\theta_v^*}{\theta_{v_0}} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p^*}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2}. \quad (2.20)$$

Dichteunterschiede in einer Strömung können somit über die Temperaturschwankungen berücksichtigt werden, wobei der Auftriebsterm nur in der Gleichung für die Vertikalgeschwindigkeit auftaucht.

Die Kontinuitätsgleichung (2.7) wird ebenfalls Boussinesq-approximiert. Unter der Voraussetzung, dass der Grundzustand ρ_0 zeitlich konstant, horizontal homogen und

wie im Falle flacher Konvektion ($\leq 3000\text{m}$) als höhenkonstant anzunehmen ist, kann die inkompressible Kontinuitätsgleichung wie folgt geschrieben werden:

$$\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0. \quad (2.21)$$

Der Vorteil in der Betrachtung einer inkompressiblen Strömung liegt darin, dass Schallwellen aus den Boussinesq-approximierten Gleichungen herausgefiltert werden. Aufgrund dessen kann ein deutlich größerer Zeitschritt für die Integration der Modellgleichungen gewählt und folglich Rechenzeit eingespart werden. Die Erhaltungsgleichungen für die innere Energie (2.6) und für skalare Größen (2.7) bleiben in diesem Schritt unverändert.

Im Weiteren wird das Boussinesq-approximierte Gleichungssystem einer räumlichen Filterung unterzogen, um nach der Methode der LES das Turbulenzspektrum in einen aufgelösten und einen modellierten Bereich zu unterteilen (s. Abb. 2.2). Die Skalen werden bei einer als Abschneide- oder Filterlänge Δ_F definierten Wellenlänge getrennt. Dabei ist stets anzustreben, dass in den aufgelösten Skalen der Großteil der TKE enthalten ist.

Der gefilterte, aufgelöste Anteil $\bar{\psi}(x_i)$ (Grobstruktur) einer Größe $\psi(x_i)$ ergibt sich aus dem Faltungsgleichung

$$\bar{\psi}(x_i) = \int_D dx'_i F(x_i - x'_i) \psi(x'_i) \quad (2.22)$$

über ein Strömungsgebiet D . Für die Filterfunktion F wird in PALM ein Top-Hat Filter mit einer Filterweite gleich der Gitterweite verwendet, was häufig auch als implizite Filterung bezeichnet wird. Die Filterung erfolgt nach der Kontrollvolumenmethode (*engl.* volume-balance approach) von SCHUMANN (1975). Der aufgelöste Anteil $\bar{\psi}(x_i)$ ergibt sich aus dem Integral über diskrete, nicht überlappende Gittervolumina:

$$\bar{\psi}(V, t) = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \int_V \psi(V', t) dV', \quad (2.23)$$

mit dem Volumen einer Gitterbox:

$$V = \left[x - \frac{\Delta x}{2}, x + \frac{\Delta x}{2} \right] \times \left[y - \frac{\Delta y}{2}, y + \frac{\Delta y}{2} \right] \times \left[z - \frac{\Delta z}{2}, z + \frac{\Delta z}{2} \right]. \quad (2.24)$$

Die Filteroperation (2.23) verhält sich dabei wie ein Reynolds-Operator mit den Eigenschaften:

$$\overline{\psi''} = 0, \quad \overline{\bar{\psi}} = \bar{\psi}, \quad \overline{\psi\phi} = \bar{\psi}\bar{\phi} + \overline{\psi''\phi''}. \quad (2.25)$$

ϕ stellt hier eine beliebige Größe dar (STULL, 1988). Das hat den Vorteil, dass der nichtlineare Advektionsterm nach der Filterung folgende Form annimmt:

$$\overline{u_k u_i} = \overline{(\bar{u}_k + u''_k)(\bar{u}_i + u''_i)} = \bar{u}_k \bar{u}_i + \overline{u''_k u''_i}. \quad (2.26)$$

Der nicht aufgelöste Anteil $\psi''(x_i)$ (Feinstruktur), welcher den Effekt der Feinstruktur auf die Grobstruktur enthält, lässt sich folgendermaßen schreiben:

$$\psi''(x_i) = \psi(x_i) - \bar{\psi}(x_i). \quad (2.27)$$

Das Boussinesq-approximierte, gefilterte Gleichungssystem für eine feuchte Atmosphäre stellt sich ohne Berücksichtigung der molekularen Diffusion wie folgt dar:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{u}_k \bar{u}_i) - \varepsilon_{ijk} f_j \bar{u}_k - \varepsilon_{i3k} f_3 \bar{u}_{k_g} + \frac{\bar{\theta}_v^*}{\theta_{v0}} g \delta_{i3} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ki}}{\partial x_k}, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{u}_k \bar{\theta}_v) - \frac{\partial H_k}{\partial x_k}, \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} = 0, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial \bar{q}_v}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{u}_k \bar{q}_v) - \frac{\partial W_k}{\partial x_k}, \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial \bar{s}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{u}_k \bar{s}) - \frac{\partial W_k}{\partial x_k} + Q_s. \quad (2.32)$$

Dabei sind τ_{ki} , H_k und W_k die subskaligen turbulenten Flüsse von Impuls, fühlbarem Wärmestrom und latentem Wärmestrom. Sie lassen sich gemäß Gleichung 2.27 schreiben als:

$$\tau_{ki} = \overline{u_k'' u_i''} = \overline{u_k u_i} - \bar{u}_k \bar{u}_i, \quad (2.33)$$

$$H_k = \overline{u_k'' \theta_v''} = \overline{u_k \theta_v} - \bar{u}_k \bar{\theta}_v, \quad (2.34)$$

$$W_k = \overline{u_k'' q_v''} = \overline{u_k q_v} - \bar{u}_k \bar{q}_v. \quad (2.35)$$

Die turbulenten Fluktuationen sind zwar aus dem modifizierten Gleichungssystem 2.28 - 2.32 herausgefiltert, es treten jedoch infolge der durchgeführten Operationen neue Unbekannte in den Gleichungen auf, sodass das Gleichungssystem nicht geschlossen ist. Daher gilt es im Folgenden geeignete Formulierungen für die turbulenten Flüsse τ_{ki} , H_k und W_k zu finden. Der Stördruck \bar{p}^* wird in Abschnitt 2.2.3 behandelt.

2.2.2 Parametrisierung mit dem Subskalenmodell

Um das Gleichungssystem 2.28 - 2.32 zu schließen, werden die subskaligen turbulenten Flüsse (2.33) - (2.35) mit einem Subskalenmodell (SGS Modell) parametrisiert. Das SGS Modell soll insbesondere dazu dienen, den Energietransfer von den aufgelösten zu den unaufgelösten Skalen gemäß der Energiekaskade (s. Abschn. 2.1) zu gewährleisten und somit die Dissipation von Energie durch die kleinen Skalen berücksichtigen. Allein durch die Dissipation kann in einem Energie erhaltenden LES-Code die TKE von den aufgelösten Skalen abgeführt werden, damit es nicht zu einer Ansammlung von TKE im Bereich kleiner Skalen kommen kann. Ebenso muss die Dissipationsrate von der Statistik der großen Skalen abhängen und auf Änderungen dieser reagieren können.

Die Parametrisierung der unbekanntenen Größen erfolgt durch einen Gradientansatz:

$$\tau_{ki} = -K_m \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i} \right), \quad (2.36)$$

$$H_k = -K_h \frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial x_k}, \quad (2.37)$$

$$W_k = -K_h \frac{\partial \bar{q}_v}{\partial x_k}. \quad (2.38)$$

Mit diesem Gradientensatz können die subskaligen turbulenten Flüsse in Anlehnung an die molekulare Diffusion durch die Gradienten der bekannten mittleren Größen dargestellt werden (ETLING, 2008). Die Schwierigkeit besteht darin, geeignete Formulierungen für die turbulenten Diffusionskoeffizienten von Impuls K_m und Wärme K_h aufzustellen. In PALM wird dazu ein Schließungsansatz nach DEARDORFF (1980) verwendet. Zur Bestimmung von K_m und K_h wird für die SGS TKE

$$e = \frac{1}{2} \overline{u_i'' u_i''} = \frac{1}{2} \overline{(u_i - \bar{u}_i)^2} \quad (2.39)$$

eine zusätzliche prognostische Gleichung gerechnet:

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{u}_k e) - \tau_{ki} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} + \frac{g}{\theta_0} \overline{u_3'' \theta_v''} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \overline{u_k'' \left(e + \frac{p''}{\rho_0} \right)} \right\} - \epsilon. \quad (2.40)$$

Die turbulenten Flüsse der Turbulenzenergie $\overline{u_k'' e}$ und der Druckschwankung $\overline{u_k'' p''}$ sowie die Dissipation ϵ , welche im Folgenden noch eine große Rolle bei der Beschreibung der Partikelbewegungen spielen wird (s. Abschn. 2.3), werden wie folgt parametrisiert:

$$\epsilon = \left(0.19 + 0.74 \frac{\Lambda}{\Delta} \right) \frac{e^{\frac{3}{2}}}{\Lambda}, \quad (2.41)$$

$$\overline{u_k'' \left(e + \frac{p''}{\rho_0} \right)} = -2 K_m \frac{\partial e}{\partial x_k}. \quad (2.42)$$

Die Mischungsweglänge Λ ist ein Maß für die Größe der subskaligen Turbulenzelemente. Λ muss kleiner oder gleich der mittleren Auflösung ($\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$) des numerischen Gitters sein, da anhand des SGS Modells eben diese Skalen behandelt werden sollen. Turbulenzelemente, die sich in einem bestimmten Abstand d zu einer festen Oberfläche befinden, können nicht größer sein als dieser Abstand d . Zudem muss berücksichtigt werden, dass Λ bei stabiler Schichtung gegebenenfalls kleiner ist als bei labiler Schichtung. Es ergibt sich daraus folgende Beschränkung für die Mischungsweglänge:

$$\Lambda = \begin{cases} \min(\Delta, 0.7 d) & \text{für } \frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial z} \leq 0 \\ \min\left(\Delta, 0.7 d, 0.76 \sqrt{e} \left(\frac{g}{\theta_0} \frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial z}\right)^{-\frac{1}{2}}\right) & \text{für } \frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial z} > 0. \end{cases} \quad (2.43)$$

K_m und K_h berechnen sich schließlich wie folgt:

$$K_m = c_m \Lambda \sqrt{e}, \quad (2.44)$$

$$K_h = \left(1 + \frac{2\Lambda}{\Delta} \right) K_m. \quad (2.45)$$

Für die Smagorinsky-Konstante c_m wird ein Wert von 0.1 angenommen.

Im Bereich der LES existieren mittlerweile zahlreiche Schließungsansätze. Sobald allerdings die Auflösung des numerischen Gitters hoch genug ist und somit der Großteil der energietragenden Turbulenzelemente aufgelöst wird, können relativ einfach gestaltete SGS Modelle verwendet werden (FRÖHLICH, 2006).

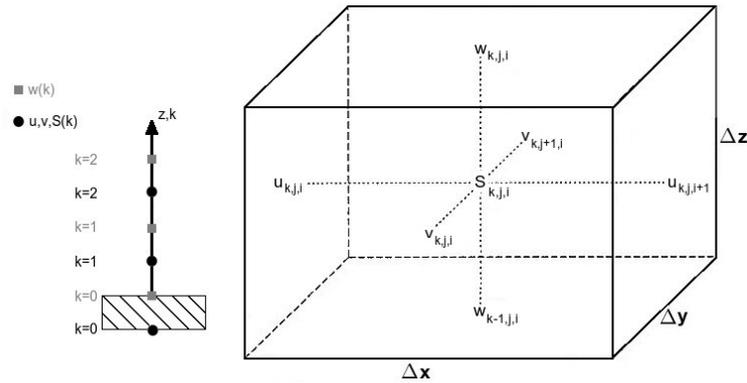


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des in PALM verwendeten numerischen Gitters (Arakawa-C). Die skalaren Größen sind im Zentrum eines Gittervolumens definiert, die Geschwindigkeitskomponenten jeweils um eine halbe Gitterweite versetzt dazu (nach SHENG *et al.*, 1998).

2.2.3 Modellgitter und numerische Verfahren

Um die prognostischen Gleichungen 2.28 - 2.32 numerisch lösen zu können, müssen die Gleichungen räumlich und zeitlich diskretisiert werden. Dies wird in PALM mit finiten Differenzen erzielt. Dabei werden die Differentiale ∂ durch Differenzen Δ approximiert. Die räumliche Diskretisierung wird in PALM auf einem versetzten Gitter (*engl.* staggered grid) des Arakawa-C Typs realisiert (s. Abb. 2.3). Versetzt bedeutet, dass die skalaren Variablen S ($\bar{\theta}$, \bar{e} , \bar{p}^* , K_m , K_h) im Zentrum eines Gittervolumens berechnet werden, während die Geschwindigkeitskomponenten u , v und w vom Zentrum ausgehend um eine halbe Gitterweite in x -, y - oder z -Richtung versetzt definiert sind. Die Indizes i , j und k stehen für die Gitterpunkte in x -, y - und z -Richtung. Mit der versetzten Anordnung des Gitters können die Divergenzen des Geschwindigkeitsfeldes ohne zusätzliche Mittelungsoperation auf den Gittermittelpunkt zentriert werden und somit die effektive Auflösung um einen Faktor zwei erhöht werden (PIELKE, 2002). Dies ist insbesondere bei der Bestimmung des Stördruckfeldes zur Beseitigung der Divergenzen von Vorteil. Das Gitter ist in jeder Raumrichtung in äquidistante Teilstücke unterteilt. Es besteht jedoch die Möglichkeit zur Verringerung des Rechenaufwandes das Gitter in z -Richtung ab einer bestimmten Höhe zu strecken. In Verbindung mit dem Partikelmodell kann diese Option allerdings bislang noch nicht genutzt werden.

Die Advektionsterme werden standardmäßig mit dem Advektionsverfahren zweiter Ordnung von PIACSEK und WILLIAMS (1970) (Form C3) diskretisiert. Da dieses Verfahren für in Flussform formulierte Advektionsterme hergeleitet wurde, kann es nur bei Inkompressibilität der Strömung (Divergenzfreiheit) eingesetzt werden (PIACSEK und WILLIAMS, 1970):

$$(\vec{u} \cdot \nabla)\psi = \underbrace{\nabla \cdot (\vec{u}\psi)}_{\text{Flussform}} - \underbrace{\psi \nabla \cdot \vec{u}}_{= 0, \text{ Divergenzfreiheit}}. \quad (2.46)$$

ψ ist hier eine beliebige advehierte Größe.

Bei zentrierten Differenzen, wie bei Piacsek-Williams, können sich in der Nähe großer Gradienten numerische Schwingungen mit einer Wellenlänge von zwei Gitter-

weiten in dem Feld einer Größe ausbilden, die auch als $2\Delta x$ -Instabilitäten bezeichnet werden. Da das Auftreten dieser numerischen Instabilitäten im Feld der subskaligen TKE in Bodennähe zu unrealistisch hohen Partikelgeschwindigkeiten in dem mit PALM gekoppelten Lagrangeschen Partikelmodell führen würde, wird bei eingeschaltetem Partikelmodell die Advektion der SGS TKE mit dem diffusiveren Upstream-Verfahren approximiert (STEINFELD, 2009).

Die zeitliche Diskretisierung erfolgt in PALM standardmäßig mit dem Runge-Kutta-Verfahren 3. Ordnung (DURRAN, 1999). Mit diesem Verfahren wird zur zeitlichen Integration einer Größe ein gewichtetes Mittel von Tendenzen berechnet, welche an verschiedenen Zwischenschritten innerhalb eines Zeitschrittes Δt bestimmt werden (FRÖHLICH, 2006). Auf diese Weise kann mit dem Runge-Kutta-Verfahren ein hoher Approximationsgrad erreicht werden. Um die numerische Stabilität des Verfahrens zu gewährleisten, muss Δt nach oben begrenzt werden. Für jeden Zeitschritt ergibt sich ein maximal möglicher Wert:

$$\Delta t = f_{\Delta t} \min(\Delta t_{\text{CFL}}, \Delta t_{\text{Diff}}). \quad (2.47)$$

$f_{\Delta t} \in [0, 1]$ in Gleichung 2.47 beschreibt einen vom verwendeten Zeitschrittverfahren abhängigen Sicherheitsfaktor. Δt wird zum einen durch das CFL-Kriterium (Courant-Friedrichs-Lewy) und zum anderen durch das Diffusionskriterium beschränkt. Das CFL-Kriterium (COURANT *et al.*, 1928) oder Advektionskriterium besagt, dass eine Größe während eines Zeitschrittes nicht über mehr als eine Gitterweite advehiert werden darf:

$$\Delta t_{\text{CFL}} \leq \min \left(\frac{\Delta x_i}{\bar{u}_{i_{\text{max}}}} \right). \quad (2.48)$$

Mit dem Diffusionskriterium (ROACHE, 1985) wird sichergestellt, dass auch die Diffusion einer Größe während eines Zeitschrittes nicht über eine Gitterweite hinaus stattfinden kann:

$$\Delta t_{\text{Diff}} \leq \min \left(\frac{\Delta x_i^2}{\max(K_m, K_h)} \right). \quad (2.49)$$

Für das Runge-Kutta-Verfahren wird aufgrund seiner hohen numerischen Stabilität in PALM standardmäßig ein Sicherheitsfaktor von 0.9 verwendet.

Die Divergenzfreiheit wird in PALM mithilfe eines Stördruckfeldes erzielt. Der Stördruck \bar{p}^* ist in den Boussinesq-approximierten Bewegungsgleichungen (2.28) nur noch ein rein dynamischer Druck und somit nicht mehr über die Gasgleichung (2.9) mit dem ersten Hauptsatz (2.29) gekoppelt. Druckschwankungen werden also nur noch durch die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes hervorgerufen. Aufgrund dessen kann der Term $-\rho_0^{-1} \partial_{x_i} \bar{p}^*$ in Gleichung 2.28 als Korrekturterm betrachtet werden, mit dem das Geschwindigkeitsfeld divergenzfrei gemacht werden kann (FRÖHLICH, 2006). Dies geschieht mit der sogenannten Prädiktor-Korrektor-Methode (PATRINOS und KISTLER, 1977). Anhand von Gleichung 2.28 wird zunächst ohne den Druckterm ein vorläufiges, noch divergenzbehaftetes Geschwindigkeitsfeld $\bar{u}_{i,\text{vorl}}^{t+\Delta t}$ prognostiziert. Das korrigierte Geschwindigkeitsfeld setzt sich aus dem vorläufigen Geschwindigkeitsfeld und dem Stördruckfeld zusammen:

$$\bar{u}_i^{t+\Delta t} = \bar{u}_{i,\text{vorl}}^{t+\Delta t} - \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}^{*t}}{\partial x_i}. \quad (2.50)$$

Das korrigierte Geschwindigkeitsfeld soll divergenzfrei sein:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \bar{u}_i^{t+\Delta t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{u}_{i,\text{vorl}}^{t+\Delta t} - \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}^{*t}}{\partial x_i} \right) \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.51)$$

Daraus ergibt sich folgende Formulierung für das Stördruckfeld:

$$\frac{\partial^2 \bar{p}^{*t}}{\partial x_i^2} = \frac{\rho_0}{\Delta t} \frac{\partial \bar{u}_{i,\text{vorl}}^{t+\Delta t}}{\partial x_i}. \quad (2.52)$$

Zur Lösung dieser sogenannten Poisson-Gleichung stehen verschiedene Verfahren zur Verfügung: Multigrid-, SOR-Verfahren (successive **o**ver **r**elaxation) und FFT (**F**ast-**F**ourier-**T**ransformation). Bei der für zyklische Randbedingungen eingesetzten FFT-Methode nach SCHUMANN und SWEET (1988) wird die Poisson-Gleichung in beiden horizontalen Richtungen fouriertransformiert und die daraus resultierende tridiagonale Matrix für den transformierten Stördruck gelöst, der im Anschluss daran wieder zurücktransformiert wird. Durch Einsetzen des sich ergebenden Stördruckfeldes in die Bewegungsgleichungen (2.28) resultiert ein divergenzfreies Geschwindigkeitsfeld.

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Footprintsimulationen wird eine nahezu stationäre Grenzschicht betrachtet (s. Abschn. 4.2.2), bei der sich z. B. die Profile von Temperatur und Feuchte sowie von fühlbarer und latenter Wärme nur quantitativ ändern dürfen. Zusätzlich soll auch die Grenzschichthöhe mit der Zeit konstant bleiben. Um bei vorhandenem Wärmestrom dem Grenzschichtwachstum entgegen zu wirken, wird ein großräumiges Absinken simuliert. Das Absinken wird mittels eines zusätzlichen Terms in den prognostischen Gleichungen für Temperatur (2.29) und Feuchte (2.31) realisiert (nach KHAIROUTDINOV und KOGAN, 1999):

$$\frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{u}_k \bar{\theta}_v) - \frac{\partial H_k}{\partial x_k} - \underbrace{w_s(z) \frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial z}}_{\text{Zusatzterm}}, \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial \bar{q}_v}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{u}_k \bar{q}_v) - \frac{\partial W_k}{\partial x_k} - \underbrace{w_s(z) \frac{\partial \bar{q}_v}{\partial z}}_{\text{Zusatzterm}}. \quad (2.54)$$

Die Absinkgeschwindigkeit $w_s(z)$ wird für jede Höhe z über lineare Funktionen beschrieben, die für jedes der gewählten Höhenintervalle vorgegeben werden können.

2.2.4 Rand- und Anfangsbedingungen

Um die prognostischen Gleichungen eindeutig lösen zu können, müssen neben den oben beschriebenen numerischen Verfahren auch geeignete Anfangs- und Randbedingungen gesetzt werden.

Für die lateralen Ränder eines Modellgebietes werden standardmäßig zyklische Randbedingungen verwendet. Das bedeutet, dass die aus dem Modellgebiet herausströmenden Informationen einer beliebigen Variable ψ auf der gegenüberliegenden Seite wieder in das Modellgebiet hineinströmen ($\psi(-1) = \psi(n)$ und $\psi(n+1) = \psi(0)$). Mit diesen Randbedingungen wird das Modellgebiet periodisch fortgesetzt.

An der Obergrenze des Modellgebietes werden für die Geschwindigkeitskomponenten \bar{u} , \bar{v} und \bar{w} sowie für den Stördruck \bar{p}^* Dirichlet-Randbedingungen vorgegeben. Hierbei wird der jeweiligen Größe ein direkter Wert zugeschrieben:

$$\begin{aligned}\bar{u}(x, y, z_{\text{Oberrand}}) &= u_g, \\ \bar{v}(x, y, z_{\text{Oberrand}}) &= v_g, \\ \bar{w}(x, y, z_{\text{Oberrand}}) &= 0, \\ \bar{p}^*(x, y, z_{\text{Oberrand}}) &= 0.\end{aligned}$$

Für die subskalige turbulente kinetische Energie e sowie für die virtuelle potentielle Temperatur $\bar{\theta}_v$ und die spezifische Feuchte \bar{q}_v , zusammengefasst mit ϕ , werden Neumann-Randbedingungen gesetzt ($\phi(x, y, z_{\text{Oberrand}}) = \phi(x, y, z_{\text{Oberrand}} - \Delta z)$), wobei der Wert des Temperatur- und des Feuchtegradienten mit der Zeit konstant bleibt.

Der untere Modellrand, welcher den Erdboden repräsentieren soll, befindet sich beim nullten Gitterpunkt des w -Levels. Dieser feste Rand kann von einer Strömung nicht durchdrungen werden. Daher muss dort die Vertikalgeschwindigkeit \bar{w} verschwinden, was mit der Dirichlet-Randbedingung $\bar{w}(x, y, z = 0) = 0$ realisiert wird. Um zu gewährleisten, dass auch nach der Anwendung des Drucklösers die Vertikalgeschwindigkeit am Boden gleich null ist, wird für den Stördruck die Neumann-Randbedingung $\bar{p}^*(x, y, -\frac{\Delta z}{2}) = \bar{p}^*(x, y, +\frac{\Delta z}{2})$ verwendet sodass $\partial \bar{p}^* / \partial z = 0$ ist. Für die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten \bar{u} und \bar{v} werden Dirichlet-Randbedingungen vorgegeben, sodass die Haftreibungsbedingung $\bar{u} = \bar{v} = 0$ erfüllt ist. Aufgrund des versetzten Gitters, auf dem \bar{u} und \bar{v} nicht direkt bei $z = 0$ sondern bei $z = -\frac{\Delta z}{2}$ ($k = 0$) und $z = +\frac{\Delta z}{2}$ ($k = 1$) definiert sind, wird die Haftreibungsbedingung mithilfe von Spiegelungsrandbedingungen realisiert:

$$\bar{u}(x, y, -\frac{\Delta z}{2}) = -\bar{u}(x, y, +\frac{\Delta z}{2}), \quad (2.55)$$

$$\bar{v}(x, y, -\frac{\Delta z}{2}) = -\bar{v}(x, y, +\frac{\Delta z}{2}). \quad (2.56)$$

Für e , $\bar{\theta}_v$ und \bar{q}_v gelten Neumann-Randbedingungen ($\phi(x, y, -\frac{\Delta z}{2}) = \phi(x, y, +\frac{\Delta z}{2})$).

Vom Erdboden bis zum ersten Gitterlevel der Horizontalgeschwindigkeitskomponenten ($z = \frac{\Delta z}{2}$) werden in PALM Prandtl-Schicht Beziehungen angenommen. Die bodennahen vertikalen turbulenten Flüsse werden nach der Monin-Obukhovschen Ähnlichkeitstheorie (MONIN und OBUKHOV, 1954) berechnet. In den hier durchgeführten Simulationen werden die vertikalen fühlbaren und latenten Wärmeflüsse $\overline{w'\theta'_0}$ und $\overline{w'q'_0}$ am Erdboden vorgegeben, sodass diese nicht über die Prandtl-Schicht Beziehungen bestimmt werden müssen. Die vertikalen Impulsflüsse lassen sich mit der Beziehung

$$\tau_{i3} = -u_*^2 \quad \text{mit } i = 1, 2 \quad (2.57)$$

bestimmen, wobei τ_{i3} für zwei Komponenten des Schubspannungstensors τ_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) steht. Die Schubspannungsgeschwindigkeit u_* ergibt sich durch Integration der

Dyer-Businger-Profilfunktionen für stabile und labile Schichtung (DYER, 1974) zu:

$$u_* = \begin{cases} \frac{\kappa \sqrt{u^2(z_p) + v^2(z_p)}}{\ln\left(\frac{z_p}{z_0}\right) + 5 \text{Rif} \frac{(z_p - z_0)}{z_p}} & \text{für Rif} \geq 0 \\ \frac{\kappa \sqrt{u^2(z_p) + v^2(z_p)}}{\ln\left(\frac{z_p}{z_0}\right) \ln\left(\frac{(1+a)^2(1+a^2)}{(1+b)^2(1+b^2)}\right) + 2(\arctan(a) - \arctan(b))} & \text{für Rif} < 0. \end{cases} \quad (2.58)$$

κ ist die Karmannsche Konstante mit einem Wert von 0.4, z_0 ist die Rauigkeitslänge und z_p die Höhe der Prandtl-Schicht (bei $z = \frac{\Delta z}{2}$). Für a und b gilt:

$$a = (1 - 16 \text{Rif})^{1/4}, \quad b = \left(1 - 16 \text{Rif} \frac{z_0}{z_p}\right)^{1/4}, \quad (2.59)$$

mit der Richardson-Flusszahl

$$\text{Rif} = \frac{z_p \kappa g}{\theta_v(z_p)} \frac{\tilde{\theta}_* + 0.61 \theta(z_p) \tilde{q}_*}{u_*^2}. \quad (2.60)$$

Die charakteristische Temperatur $\tilde{\theta}_*$ und die charakteristische Feuchte \tilde{q}_* lassen sich im Falle bereits vorgegebener vertikaler Wärmeflüsse wie folgt berechnen:

$$\tilde{\theta}_* = -\frac{\overline{w'\theta'_0}}{u_*}, \quad (2.61)$$

$$\tilde{q}_* = -\frac{\overline{w'q'_0}}{u_*}. \quad (2.62)$$

Die Footprintmodellierung wird für eine quasi-stationäre Grenzschicht durchgeführt. Eine Bedingung dafür ist, dass sich die Strömung im geostrophischen Gleichgewicht befindet. Um Rechenzeit zu sparen kann dieser Zustand mit einem „1D-Vorlauf“ eingestellt werden. Dazu wird eine eindimensionale Version der Modellgleichungen bei festgehaltenen Temperatur- und Feuchteprofilen gelöst, bis sich die Geschwindigkeitskomponenten im geostrophischen Gleichgewicht befinden. Das daraus resultierende Geschwindigkeitsprofil wird dann an die dreidimensionale Simulation übergeben.

Zu Beginn der Simulation erfolgt die Vorgabe der Variablen horizontal homogen. Damit sich daraus eine turbulente Strömung entwickelt, kann die Turbulenz durch das Aufprägen kleiner zufälliger Störungen getriggert werden. Dies wird in PALM mit einem Zufallsgenerator realisiert, mit dem in den ersten Zeitschritten der Simulation normalverteilte Zufallszahlen aus dem Intervall $[0, 1]$ zu den Geschwindigkeitsfeldern multipliziert werden. Die Störungen werden so lange aufgeprägt, bis die aufgelöste TKE einen vorgegebenen Mindestwert überschreitet.

Für die Verlagerung von Partikeln werden in den horizontalen Richtungen zyklische Randbedingungen angenommen. An der Obergrenze des Modells werden die Partikel absorbiert und am unteren Modellrand reflektiert.

2.2.5 Parallelisierung

Mit den heute zur Verfügung stehenden Großrechnern besteht die Möglichkeit, das LES Modell auch im parallelen Modus zu betreiben. Dadurch kann die Bearbeitungszeit erheblich reduziert werden, was wiederum das Rechnen von Simulationen mit

größeren Modellgebieten und einer höheren Auflösung ermöglicht. Daraus resultiert eine Erweiterung des aufgelösten Skalenbereiches der Turbulenzelemente. So können auch bisher ungeklärte Phänomene in der Grenzschicht anhand von Simulationen untersucht werden. Die Parallelisierung des Modellcodes wird durch eine uniforme, zweidimensionale, horizontale Gebietszerlegung realisiert. Jedes Prozessorelement (PE) rechnet dann die prognostischen Gleichungen für das ihm zugeordnete dreidimensionale Teilgebiet. Während der Simulation werden nach jedem Zeitschritt die Feldinformationen von den Rändern jedes Teilgebietes an die jeweils umliegenden PEs gesendet und auf sogenannten Geisterrändern gespeichert. Auf den Geisterrändern werden keine prognostischen Gleichungen gelöst. Sie dienen lediglich dem Zweck, jedes Teilgebiet in den horizontalen Richtungen um einen Gitterpunkt zu erweitern, um die diskretisierten Gleichungen auch an den Randpunkten der Teilgebiete berechnen zu können. Die Kommunikation zwischen den einzelnen PEs erfolgt mit der Software MPI (Message Passing Interface). Eine detaillierte Beschreibung der Parallelisierung des Modells findet sich in RAASCH und SCHRÖTER (2001). Gerechnet werden die teils rechenintensiven Simulationen auf den Großrechnern des HLRN (Norddeutscher Verbund zur Förderung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens) am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und am Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN) der Leibniz Universität Hannover. Zur Verfügung stehen momentan Maschinen des Typs SGI Altix.

2.3 Das in PALM eingebettete Lagrangesche stochastische Modell

PALM verfügt über ein Lagrangesches stochastisches Partikelmodell, mit dem die Verlagerung von Partikeln simultan („online“) mit den Daten der LES angetrieben wird. Zur Berechnung der Partikelgeschwindigkeiten werden hochaufgelöste dreidimensionale Informationen über die Windgeschwindigkeit und verschiedene turbulente Größen wie die Dissipation und die subskalige turbulente kinetische Energie benötigt. Im Gegensatz zu den „offline“ gekoppelten Modellen (WEIL *et al.*, 2004; CAI *et al.*, 2006), bei denen die Partikelverlagerung im Anschluss an die LES anhand gespeicherter Daten berechnet wird, ist bei der „online“-Kopplung die Speicherung von räumlich und zeitlich hochaufgelösten dreidimensionalen Feldern nicht mehr erforderlich. Es können somit Simulationen mit einem größeren Modellgebiet und höherer Auflösung gerechnet werden als mit den „offline“ gekoppelten Modellen, mit denen aufgrund des hohen Speicherbedarfs und der zeitintensiven Ausgabe- und Einlesevorgänge keine großen Simulationen durchgeführt werden können.

Mit dem in PALM eingebetteten Lagrangeschen Partikelmodell werden die Partikel direkt im Strömungsfeld der LES freigesetzt und deren Trajektorien berechnet. Die Position X_{L_i} eines Partikels zum Zeitpunkt $t + dt$ wird bestimmt durch:

$$X_{L_i}(X_{0_i}, t + dt) = X_{L_i}(X_{0_i}, t) + V_{L_i}(X_{0_i}, t)dt. \quad (2.63)$$

Der Index i steht für die drei Raumrichtungen. X_{0_i} beschreibt die Quellkoordinaten eines Partikels und V_{L_i} die Komponenten der Partikelgeschwindigkeit. Nach LAMB (1978), der als Erster ein LS Modell mittels LES-Daten (von DEARDORFF, 1974)

angetrieben hat, kann die Lagrangesche Geschwindigkeit eines Partikels V_{L_i} analog zum LES-Konzept der Skalentrennung (s. Abschn. 2.2.1) in einen aufgelösten (*engl.* resolved) und einen subskaligen Anteil aufgespalten werden:

$$V_{L_i} = V_{r_i} + V_{s_i}. \quad (2.64)$$

Der aufgelöste Anteil der Partikelgeschwindigkeit lässt sich aus dem LES-Feld der aufgelösten Geschwindigkeit berechnen. Die subskaligen Fluktuationen in der Partikelgeschwindigkeit werden zu einem Anteil durch die in der LES berechnete SGS TKE und zu einem Anteil mithilfe eines stochastischen Prozesses bestimmt. Wie in verschiedenen Studien gezeigt wurde, ist die Berücksichtigung der subskaligen Partikelgeschwindigkeiten vor allem in Bodennähe unerlässlich, also in dem Bereich, wo die Messungen von turbulenten Flüssen stattfinden. So konnten z. B. WEIL *et al.* (2004) und STEINFELD *et al.* (2008) erst unter Einbeziehung der subskaligen Anteile gute Übereinstimmungen mit den Konvektionstank-Experimenten von WILLIS und DEARDORFF (1976) erzielen. Auch GOPALAKRISHNAN und AVISSAR (2000), die in ihrem mit LES-Daten angetriebenen LS Modell die subskaligen Geschwindigkeitsfluktuationen nicht berücksichtigt hatten, kamen anhand von Vergleichssimulationen mit unterschiedlichen Auflösungen des LES-Gitters zu dem Schluss, dass die Vernachlässigung der subskaligen Fluktuationen nur in Bodennähe zu Abweichungen im prognostizierten Konzentrationsfeld führt. In diesem Bereich machen die subskaligen Turbulenzelemente einen Großteil der gesamten turbulenten kinetischen Energie aus. Demnach ist dort auch der Einfluss der subskaligen Turbulenz auf die Partikelgeschwindigkeit nicht zu vernachlässigen. Bei der Footprintbestimmung für bodennahe Messensoren mithilfe eines Lagrangeschen Ansatzes ist es daher ratsam, auch die subskaligen Partikelgeschwindigkeiten über einen geeigneten Ansatz zu berücksichtigen. Ohne die subskaligen Geschwindigkeitsfluktuationen können sich die in Bodennähe freigesetzten Partikel nur schlecht vom Boden entfernen, wodurch es dort zu einer übermäßigen Ansammlung von Partikeln kommt. Die Theorie zur Berechnung der subskaligen Partikelgeschwindigkeiten V_{s_i} mit einem Lagrangeschen stochastischen Modell soll im Folgenden erläutert werden. Detailliertere Informationen zu dem hier verwendeten Ansatz sind in der Veröffentlichung von WEIL *et al.* (2004) zu finden.

Das in PALM eingebettete Lagrangesche stochastische Modell basiert auf dem Modell von WEIL *et al.* (2004), welches auf einer Anpassung des von THOMSON (1987) hergeleiteten Modells an die Gitterbox-Skala beruht. Aus dem rein stochastischen Modell von THOMSON (1987), bei dem die Partikelgeschwindigkeiten anhand einer angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (*engl.* probability density function - PDF) für die Eulerschen Geschwindigkeiten bestimmt und somit gänzlich parametrisiert werden, ergibt sich durch die Anpassung an die Gitterbox-Skala ein Modell, in dem nur noch die subskaligen Anteile der Partikelgeschwindigkeit parametrisiert werden. Somit beschränkt sich auch das Nicht-Eindeutigkeitsproblem auf die subskaligen Anteile der Partikelgeschwindigkeit, da die aufgelösten Anteile abgesehen von numerischen Fehlern eindeutig aus den in der LES berechneten aufgelösten Geschwindigkeitsfeldern bestimmt werden (WEIL *et al.*, 2004).

Nach THOMSON (1987) wird das Inkrement der Partikelgeschwindigkeit V_{L_i} im Fall instationärer und inhomogener Turbulenz anhand folgender stochastischer Differen-

tialgleichung beschrieben:

$$dV_{L_i} = a_i dt + \sqrt{C_0 \langle \epsilon \rangle} d\xi_i. \quad (2.65)$$

Der zweite Term auf der rechten Seite beschreibt durch einen stochastischen Prozess den zufälligen Anteil der Partikelbeschleunigung und damit die Diffusion eines Partikels. $d\xi_i$ stellt einen dreidimensionalen gaußverteilten Zufallsprozess dar, wobei die Komponenten dieser Größe sowohl untereinander als auch zeitlich nicht korreliert sind. $\langle \epsilon \rangle$ ist die Ensemble-gemittelte Dissipation. Die Konstante C_0 kann nach THOMSON (1987) einen Wert von 4 ± 2 annehmen. In PALM wird ein Wert von 3 verwendet. Die Wahl des stochastischen Terms ist in dieser Form konsistent mit der Lagrangeschen Strukturfunktion im Inertialbereich (MONIN und YAGLOM, 1975): $dV_{L_i} dV_{L_j} = \delta_{ij} C_0 \langle \epsilon \rangle dt$ mit dem Kronecker-Symbol δ_{ij} . Sowohl $(C_0 \langle \epsilon \rangle)^{1/2}$ als auch die Funktionen a_i , die als eine Driftgeschwindigkeit verstanden werden können und auf deterministische Weise erhalten werden, müssen bei einem gaußverteilten Zufallsprozess die Focker-Planck-Gleichung erfüllen (mit der Focker-Planck-Gleichung wird die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Geschwindigkeit eines Partikels unter Wirkung von Drift und Diffusion beschrieben). Für die Funktionen a_i stellte THOMSON (1987) für den Fall inhomogener gaußverteilter Turbulenz folgende Formulierung auf:

$$a_i = -\frac{C_0 \langle \epsilon \rangle}{2} \langle \lambda_{ik} \rangle (V_k - V_{E_k}) + P(\mathbf{p_E}). \quad (2.66)$$

$\langle \lambda_{ik} \rangle$ ist das Inverse des Ensemble-gemittelten Schubspannungstensors $\langle \tau_{ij} \rangle$. V_i und V_{E_i} sind die i -ten Komponenten der totalen und der Ensemble-gemittelten Eulerschen Geschwindigkeiten. $P(\mathbf{p_E})$ ist eine Funktion der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion p_E für die Eulerschen Geschwindigkeiten. Bei einer gut durchmischten Partikelverteilung („well-mixed“ condition nach THOMSON (1987)) entspricht die PDF des Partikelensembles der PDF der Eulerschen Geschwindigkeiten und somit kann $P(\mathbf{p_E})$ mithilfe dieser beschrieben werden (z. B. RODEAN, 1996):

$$\begin{aligned} P(\mathbf{p_E}) = & \frac{1}{2} \frac{\partial \langle \tau_{il} \rangle}{\partial x_l} + \frac{\partial V_{E_i}}{\partial t} + V_{E_l} \frac{\partial V_{E_i}}{\partial x_l} \\ & + \left(\frac{1}{2} \langle \lambda_{lj} \rangle \left(\frac{\partial \langle \tau_{il} \rangle}{\partial t} + V_{E_m} \frac{\partial \langle \tau_{il} \rangle}{\partial x_m} \right) + \frac{\partial V_{E_i}}{\partial x_j} \right) (V_j - V_{E_j}) \\ & + \frac{1}{2} \langle \lambda_{lj} \rangle \frac{\partial \langle \tau_{il} \rangle}{\partial x_k} (V_j - V_{E_j}) (V_k - V_{E_k}). \end{aligned} \quad (2.67)$$

Um das Lagrangesche stochastische Modell von THOMSON (1987) auf die Gitterbox-Skala zu überführen, machten WEIL *et al.* (2004) folgende Annahmen:

1. Die Ensemble-gemittelte Geschwindigkeit V_{E_i} entspricht auf der Gitterbox-Skala der aufgelösten Geschwindigkeit V_{r_i} .
2. Das Lagrangesche stochastische Modell beschreibt die zufällige subskalige Geschwindigkeitsfluktuation V_{s_i} um V_{r_i} , sodass gilt: $V_i - V_{r_i} = V_{s_i}$

3. Die subskaligen Geschwindigkeiten ergeben sich aus einer gaußförmigen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, die von dem subskaligen Schubspannungstensor τ_{ij} und dessen Inversem λ_{ij} abhängt.
4. Die Ensemble-gemittelte Dissipation $\langle \epsilon \rangle$ entspricht auf der Gitterbox-Skala der lokalen Dissipation.

Die erste Annahme führt dazu, dass nur noch die subskaligen Anteile der Partikelgeschwindigkeit als stochastischer Prozess beschrieben werden müssen, da der aufgelöste Anteil der Partikelgeschwindigkeit V_{r_i} aus dem aufgelösten Geschwindigkeitsfeld der LES berechnet wird. In den Funktionen a_i steckt nach Anwendung der durch WEIL *et al.* (2004) gemachten Annahmen zum einen der aufgelöste Anteil der Partikelgeschwindigkeit und zum anderen der Teil der subskaligen Partikelgeschwindigkeit, der sich aus der in der LES berechneten subskaligen turbulenten kinetischen Energie und der Dissipation bestimmen lässt. Der andere Teil der subskaligen Partikelgeschwindigkeit wird, wie bereits erwähnt, durch einen gaußverteilten Zufallsprozess beschrieben. Die Funktion $P(\text{pE})$ (2.67) lässt sich mit den von WEIL *et al.* (2004) gemachten Annahmen und unter Rückgängigmachung der Eulerschen Zerlegung vereinfachen zu:

$$P(\text{pE}) = \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{il}}{\partial x_l} + \frac{dV_{r_i}}{dt} + \frac{1}{2} \lambda_{lj} \frac{d\tau_{il}}{dt} V_{s_i}. \quad (2.68)$$

Einsetzen von Gleichung 2.66 mit 2.68 und den aufgeführten Annahmen in die von THOMSON (1987) hergeleitete stochastische Differentialgleichung (2.65) sowie Subtraktion von dV_{r_i} auf beiden Seiten der Gleichung liefert für das Inkrement von V_{s_i} :

$$dV_{s_i} = -\frac{f_s C_0 \epsilon}{2} \lambda_{ik} V_{s_k} dt + \frac{1}{2} \left(\lambda_{lj} \frac{d\tau_{il}}{dt} V_{s_j} + \frac{\partial \tau_{il}}{\partial x_l} \right) dt + \sqrt{f_s C_0 \epsilon} d\xi_i. \quad (2.69)$$

In dem hier verwendeten Lagrangeschen stochastischen Modell nach WEIL *et al.* (2004) wird also lediglich der subskalige Anteil der Partikelgeschwindigkeit V_{s_i} anhand der stochastischen Differentialgleichung ermittelt. Mit dem Faktor $f_s \leq 1$ soll gewährleistet werden, dass die modellierte subskalige Partikelgeschwindigkeit nicht größer ist als die totale Partikelgeschwindigkeit V_{L_i} , die sich aus der stochastischen Differentialgleichung (2.69) vor Subtraktion von dV_{r_i} ergeben würde. Der Faktor f_s wird aus dem Verhältnis von subskaliger TKE e_s zu totaler TKE berechnet

$$f_s = \frac{[e_s]}{[e_r] + [e_s]}, \quad (2.70)$$

was laut WEIL *et al.* (2004) unter der Voraussetzung einer ähnlichen Form des Spektrums der Energiedichte für die aufgelösten und subskaligen Partikelgeschwindigkeitskomponenten, jedoch eines unterschiedlichen Gesamtenergiegehaltes, gerechtfertigt ist. Die eckigen Klammern stellen ein horizontales Mittel über das LES Modellgebiet dar. Je größer also der Anteil der subskaligen TKE an der totalen TKE ist, wie es z. B. in Bodennähe der Fall ist, desto größer ist auch der Anteil der subskaligen Partikelgeschwindigkeit an der Totalen.

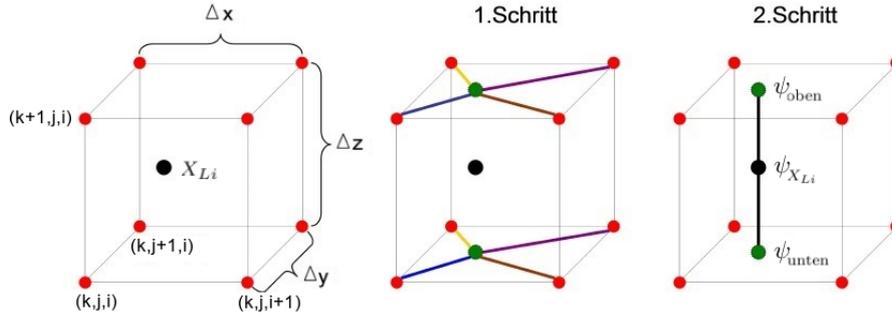


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Interpolation von aufgelösten Geschwindigkeiten, Dissipation und subskaliger turbulenter kinetischer Energie (zusammengefasst durch ψ) auf die momentane Partikelposition X_{L_i} innerhalb eines Gittervolumens $\Delta x \Delta y \Delta z$. Im ersten Schritt wird in der Horizontalen eine bilineare Interpolation der Informationen an den jeweils vier umliegenden Gitterpunkten durchgeführt. Im zweiten Schritt folgt eine lineare Interpolation in der Vertikalen (nach STEINFELD, 2009).

Unter der Annahme lokaler Isotropie für subskalige Turbulenzelemente werden τ_{il} und λ_{ik} diagonal, mit den Komponenten $\frac{2e_s}{3}$ bzw. $\frac{3}{2e_s}$, sodass sich Gleichung 2.69 vereinfachen lässt zu:

$$dV_{s_i} = -\frac{3f_s C_0 \epsilon}{4} \frac{V_{s_i}}{e_s} dt + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{e_s} \frac{de_s}{dt} V_{s_i} + \frac{2}{3} \frac{\partial e_s}{\partial x_i} \right) dt + \sqrt{f_s C_0 \epsilon} d\xi_i. \quad (2.71)$$

Dies ist die endgültige Form der stochastischen Differentialgleichung, mit der in dem in PALM eingebetteten Lagrangeschen stochastischen Modell die subskaligen Partikelgeschwindigkeiten zum Zeitpunkt t berechnet werden:

$$V_{s_i}(t) = V_{s_i}(t-1) + dV_{s_i}. \quad (2.72)$$

Die zur Berechnung der Partikelgeschwindigkeiten benötigten Größen (ϵ , e_s , $\frac{\partial e_s}{\partial x_i}$, V_{r_i}), zusammengefasst mit ψ , werden stets auf die jeweilige momentane Partikelposition X_{L_i} interpoliert (s. Abb 2.4). Dazu wird zunächst in den beiden Gitterebenen ober- und unterhalb des Partikels für die horizontale Partikelposition eine bilineare Interpolation von ψ der jeweils vier umliegenden Gitterpunkte durchgeführt. Anschließend werden die horizontal interpolierten Werte ψ_{oben} und ψ_{unten} linear auf die vertikale Partikelposition interpoliert, sodass sich der Wert $\psi_{X_{L_i}}$ an der momentanen Partikelposition ergibt. Die hier verwendete Interpolationsmethode funktioniert nur bei Verwendung eines äquidistanten LES-Gitters. Eine Streckung des Gitters in der Vertikalen zur Einsparung von Rechenzeit ist daher bei gleichzeitiger Verwendung des Lagrangeschen Partikelmodells nicht möglich. Ebenfalls zu beachten ist, dass auch innerhalb der Prandtl-Schicht (zwischen unterem Modellrand und erstem Gitterpunkt) linear interpoliert wird und damit kein logarithmischer Verlauf der Windgeschwindigkeit in die Berechnung der Partikelgeschwindigkeit in Bodennähe eingeht. Eine ausführliche Beschreibung des Interpolationsverfahrens ist in STEINFELD (2009) zu finden.

Analog zur Methode der LES wird das Zeitdifferential dt (s. Glg. 2.71) durch Differenzen approximiert, woraus sich der diskretisierte Partikelzeitschritt Δt_L ergibt (Lagrangescher Zeitschritt). Dieser darf nicht größer sein als der LES-Zeitschritt Δt , damit sich ein Partikel während eines Partikelzeitschrittes nicht über mehr als einen LES-Zeitschritt hinaus verlagern kann. Für Δt_L gilt (WEIL *et al.*, 2004):

$$\Delta t_L = \min(\Delta t, 0.025 T_L, \Delta t_R). \quad (2.73)$$

T_L steht für die Lagrangesche Zeitskala

$$T_L = \frac{4}{3} \frac{e_s}{f_s C_0 \epsilon}, \quad (2.74)$$

die ein Maß für die „Erinnerung eines Systems darstellt“. T_L gibt an, wie lange die Geschwindigkeit zum Zeitpunkt $t - \Delta t_L$ noch einen Einfluss auf die Partikelbewegung zum Zeitpunkt t hat. Das heißt, über welche Zeitspanne T_L eine Korrelation zwischen den Partikelgeschwindigkeiten besteht. Da in die Berechnung der subskaligen Partikelgeschwindigkeit (s. Glg. 2.71 und 2.72) die subskalige Partikelgeschwindigkeit des vorherigen Zeitschrittes miteingeht, muss der Lagrangesche Zeitschritt mittels Lagrangescher Zeitskala beschränkt werden. Bei einem zu großen Partikelzeitschritt wäre die Korrelation der beiden Geschwindigkeiten nicht gewährleistet. Δt_R beschreibt die Zeit, welche noch zum Erreichen des LES-Zeitschrittes benötigt wird. Die Partikel werden in Abhängigkeit der hier genannten Faktoren über einen oder mehrere Partikelzeitschritte verlagert, bis sie den LES-Zeitschritt erreichen. Dabei kann sich die Anzahl der in einem LES-Zeitschritt gerechneten Partikelzeitschritte von Partikel zu Partikel unterscheiden.

2.4 Auswerteprogramm zur Berechnung von Footprints aus den Partikeldaten der LES

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein vorhandenes Footprintauswerteprogramm (FAP) an die gegebene Aufgabenstellung der Footprintbestimmung über einer real-heterogenen Landoberfläche angepasst. Um die in diesem Fall entstehenden Partikeldatenmengen von mehreren TByte in angemessener Zeit (Größenordnung 10min) auswerten zu können, wurde der Code des FAP parallelisiert. Damit besteht nun die Möglichkeit die Footprintauswertung mithilfe von Massiv-Parallelrechnern durchzuführen. Die Bearbeitungszeit kann so etwa um den Faktor der verwendeten PEs verringert werden (bei einer Partikeldatenmenge von 5TByte und der Verwendung von 400 PEs reduziert sich die Bearbeitungszeit von 4000min auf etwa 10min). Die für den Austausch der Footprintfelder zwischen den einzelnen PEs benötigte Zeit ist dabei vernachlässigbar klein gegenüber der zur reinen Datenauswertung benötigten Zeit. Für das FAP werden ebensoviele PEs eingesetzt wie in der zugehörigen LES.

Jedes PE wertet gemäß den im Folgenden beschriebenen Gleichungen (2.75 - 2.87) die Partikeldaten jeweils einer Datei aus. Eine Datei enthält Informationen über die in einem Teilgebiet der LES registrierten Partikelkontakte mit dem gewählten Messniveau z_m . Zur Footprintberechnung werden folgende Informationen aus der LES benötigt (s. dazu Abb. 2.5):

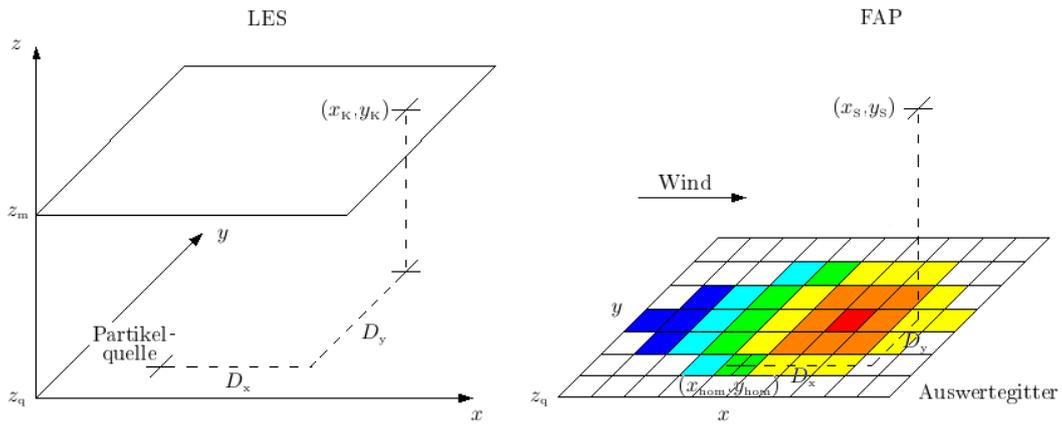


Abbildung 2.5: Skizze zur Veranschaulichung der Footprintberechnung. Links: Zu den in der LES gespeicherten Partikeldaten, die für die Footprintberechnung benötigt werden, gehören das Messniveau z_m , der Kreuzungspunkt (x_K, y_K) zwischen einem in der Quellhöhe z_q freigesetzten Partikel und dem Messniveau z_m sowie die Distanz (D_x, D_y) zwischen Quell- und Messort. Rechts: Das Auswertegitter ist in der Quellhöhe z_q definiert. Die Sensorposition (x_S, y_S) kann innerhalb des Auswertegitters beliebig gewählt werden. Ausgehend von dieser Position wird in der Entfernung (D_x, D_y) für den Punkt $(x_{\text{hom}}, y_{\text{hom}})$ der Beitrag des von diesem Punkt stammenden Quellelementes (Partikels) zum gemessenen Signal berechnet.

- Messniveau z_m ,
- x- und y-Koordinate des Kreuzungspunktes (x_K, y_K) einer Partikeltrajektorie mit dem betrachteten Messniveau z_m in m,
- horizontale Distanz (D_x, D_y) zwischen Partikelquellort und Kreuzungspunkt (x_K, y_K) in m,
- Vertikalgeschwindigkeit (w_K) des Partikels beim Kreuzen des Messniveaus.

Die Distanz eines verlagerten Partikels zu seinem Quellort wird zu jedem Partikelzeitschritt aktualisiert und bei Durchkreuzen eines Messniveaus als Distanz (D_x, D_y) zwischen Quell- und Messort abgespeichert.

In dem FAP wird ein zweidimensionales horizontales Auswertegitter (x, y) definiert, auf dem der Footprint für die Sensorposition (x_S, y_S) berechnet wird. Die einzelnen Flächen im Auswertegitter geben die absoluten Beiträge der aus der jeweiligen Fläche stammenden Quellelemente (Quellhöhe: z_q) zu dem am Sensor gemessenen Signal wieder. Das Auswertegitter kann sich sowohl in der Gitterweite $(\Delta x_A, \Delta y_A)$ als auch in der horizontalen Erstreckung von dem LES-Gitter unterscheiden, da in den gespeicherten Partikeldaten keine Informationen bezüglich dieser Parameter aus der LES enthalten sind. Dem Sensor kann innerhalb des Auswertegitters eine beliebige Position (x_S, y_S) zugewiesen werden. Ausgehend von dieser Position wird der Quellort

des den Sensor kreuzenden Partikels anhand der Distanz (D_x, D_y) ermittelt und der Beitrag dieser Quelle zum gemessenen Signal berechnet. D_x und D_y werden dazu in Indizes des Auswertegitters umgerechnet.

Bei der Footprintberechnung muss unterschieden werden, ob die Footprints für einen Sensor in homogenem oder heterogenem Gelände bestimmt werden sollen. Im Falle eines homogenen Untergrundes tragen alle Partikel, die an einer beliebigen Stelle das Messniveau z_m durchkreuzen, zum Footprint für diese Messhöhe bei (s. Abb. 1.5). Denn aufgrund der Homogenität der Oberflächenflüsse würde der zeitlich gemittelte Footprint für jeden Punkt innerhalb eines Messniveaus gleiche Gestalt annehmen (SCHMID, 2002). Es kann also angenommen werden, dass der Sensor eine unendliche Ausdehnung besitzt und demnach jeder Kreuzungspunkt eines Partikels mit dem Messniveau als Sensor definiert werden. So lassen sich alle einzelnen Sensorpositionen eines Messniveaus auf einen einzigen Sensorpunkt projizieren. Da in diesem Fall die genaue Position des Kreuzungspunktes irrelevant ist, werden lediglich Informationen über D_x , D_y und w_K zur Auswertung benötigt.

Um den Beitrag einer Quellfläche in der Entfernung (D_x, D_y) vom Sensor zu ermitteln, wird zunächst die mittlere Konzentration C_{hom} bzw. der mittlere Fluss F_{hom} der am Punkt $(x_{\text{hom}}, y_{\text{hom}})$ in der Entfernung (D_x, D_y) von der Sensorposition (x_s, y_s) freigesetzten Partikel berechnet (nach RANNIK *et al.*, 2003):

$$C_{\text{hom}} = \langle c(x_{\text{hom}}, y_{\text{hom}}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_K} \frac{1}{|w_K|}, \quad (2.75)$$

$$F_{\text{hom}} = \langle w_K \cdot c(x_{\text{hom}}, y_{\text{hom}}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_K} \frac{w_K}{|w_K|}. \quad (2.76)$$

Anschaulich betrachtet, trägt jedes in der Entfernung (D_x, D_y) vom Sensor freigesetzte Partikel zur Konzentration oder zum Fluss an diesem Punkt $(x_{\text{hom}}, y_{\text{hom}})$ bei. Das Mittel $\langle \rangle$ wird über alle zum Footprint beitragenden Partikel gebildet. Dies entspricht einem zeitlichen Mittel, da für eine hinreichende Footprintstatistik die über einen Zeitraum von mehreren Stunden registrierten Partikel-Messniveau-Kontakte in der Footprintberechnung berücksichtigt werden müssen. N bezeichnet die Anzahl der insgesamt freigesetzten Partikel und N_K die Anzahl aller Partikelkontakte mit dem Messniveau z_m (Sensor), wobei ein Partikel im zeitlichen Verlauf durchaus auch mehrmals einen Sensor passieren kann. w_K beschreibt die Vertikalgeschwindigkeit des Partikels bei Sensorkontakt. Befindet sich der Sensor in der linken unteren Ecke im Ursprung des Auswertegitters, so liegt der Punkt $(x_{\text{hom}}, y_{\text{hom}})$ bei:

$$x_{\text{hom}} = 0 + D_x, \quad (2.77)$$

$$y_{\text{hom}} = 0 + D_y. \quad (2.78)$$

Um allerdings die Umgebung des Sensors in allen Richtungen einsehen zu können, wird der Sensor in das Innere des Gitters verlagert und es gilt:

$$x_{\text{hom}} = x_s + D_x, \quad (2.79)$$

$$y_{\text{hom}} = y_s + D_y. \quad (2.80)$$

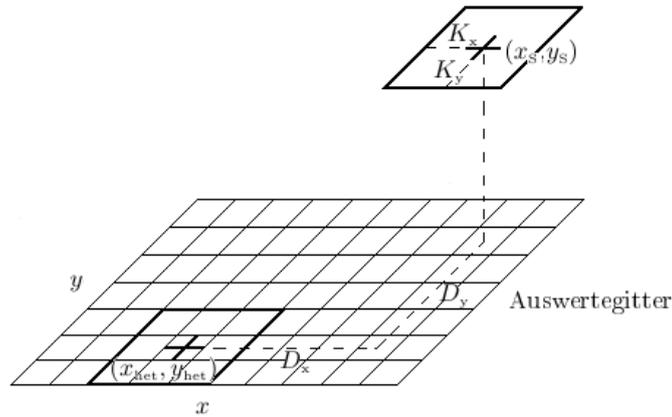


Abbildung 2.6: Skizze zur Footprintberechnung über einem heterogenen Untergrund. K_x und K_y sind Korrekturfaktoren.

Über einem heterogenen Untergrund gestaltet sich die Footprintsimulation schwieriger. Hier werden nur die Partikel in der Footprintauswertung berücksichtigt, die auch tatsächlich an einer bestimmten Sensorposition registriert werden. Denn im Falle einer heterogen geprägten Oberfläche ergibt sich für jede Sensorposition innerhalb eines Messniveaus ein individueller Footprint. Da nun nicht mehr wie im homogenen Fall jedes ein Messniveau kreuzende Partikel zum Footprint beiträgt, müssen deutlich mehr Partikel verlagert werden, um eine hinreichende Footprintstatistik zu erhalten. Allerdings ist selbst bei einer sehr großen Partikelzahl (z. B. $10^6/1\text{km}^2$, wie teilweise in dieser Arbeit verwendet) die Wahrscheinlichkeit verschwindend gering, dass ein Partikel einen ausgewählten Punkt im Raum kreuzt. Dem Sensor muss daher eine gewisse räumliche Ausdehnung zugewiesen werden (s. Abb. 1.5). Da die Gleichungen nach RANNIK *et al.* (2003) (z. B. 2.75 und 2.76) nur für homogene Oberflächenbedingungen Gültigkeit besitzen, sollte die Sensorfläche deutlich kleiner als die horizontale Erstreckung der Heterogenitäten sein, sodass über eine gewisse horizontale Distanz homogene Bedingungen angenommen werden können.

Durch die Begrenzung der Sensorfläche kann zur Berechnung von C_{het} und F_{het} nicht, wie bei der unbegrenzten Sensorfläche im homogenen Fall, mit der Gesamtpartikelzahl N normiert werden. An dieser Stelle muss die effektive Partikelzahl N_{eff} eingeführt werden, da es nicht mehr für alle freigesetzten Partikel N gleich wahrscheinlich ist eine begrenzte Sensorfläche zu kreuzen. Trifft ein Partikel aus einer bestimmten Entfernung (D_x , D_y) auf einen Punkt innerhalb der Sensorfläche (s. Abb. 2.6), so ist die Wahrscheinlichkeit die Sensorfläche aus gleicher Entfernung zu erreichen für jene Partikel gleich groß, die aus derselben Entfernung (D_x , D_y) einen Punkt in der Sensorfläche treffen. Das bedeutet, dass sich die effektive Partikelzahl aus den Partikeln ergibt, die aus einer Quellfläche mit der gleichen Erstreckung wie der der Sensorfläche stammen. N_{eff} berechnet sich daher wie folgt aus der Gesamtpartikelzahl N :

$$N_{\text{eff}} = \frac{N}{\text{Gesamtquellfläche (LES)}} \cdot \text{Sensorfläche.} \quad (2.81)$$

2.4 Auswerteprogramm zur Berechnung von Footprints aus den Partikeldaten der LES

Somit ergibt sich im heterogenen Fall für die mittlere Konzentration C_{het} und den mittleren Fluss F_{het} :

$$C_{\text{het}} = \langle c(x_{\text{het}}, y_{\text{het}}) \rangle = \frac{1}{N_{\text{eff}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{K}}} \frac{1}{|w_{\text{K}}|}, \quad (2.82)$$

$$F_{\text{het}} = \langle w_{\text{K}} \cdot c(x_{\text{het}}, y_{\text{het}}) \rangle = \frac{1}{N_{\text{eff}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{K}}} \frac{w_{\text{K}}}{|w_{\text{K}}|}, \quad (2.83)$$

mit

$$x_{\text{het}} = x_{\text{S}} + K_{\text{x}} + D_{\text{x}}, \quad (2.84)$$

$$y_{\text{het}} = y_{\text{S}} + K_{\text{y}} + D_{\text{y}}. \quad (2.85)$$

Dabei sind K_{x} und K_{y} Korrekturfaktoren, mit denen der wahre Kreuzungspunkt innerhalb der Sensorfläche berücksichtigt wird. Sie berechnen sich aus der Differenz zwischen den Sensor- und den Kreuzungskordinaten in der LES. Ohne diese Korrektur würden alle Partikelkontakte mit der Sensorfläche auf die Sensorposition $(x_{\text{S}}, y_{\text{S}})$ projiziert und somit nicht der wahre Quellort des Partikels erfasst werden.

Der Footprintwert für ein Flächenelement des Auswertegitters berechnet sich dann wie folgt (VESALA *et al.*, 2008):

$$f_{C_{\text{hom,het}}} = \frac{C_{\text{hom,het}}}{\Delta x_{\text{A}} \Delta y_{\text{A}}}, \quad (2.86)$$

$$f_{F_{\text{hom,het}}} = \frac{F_{\text{hom,het}}}{\Delta x_{\text{A}} \Delta y_{\text{A}}}. \quad (2.87)$$

Dies gilt sowohl im homogenen als auch im heterogenen Fall. Die Quellstärke wird hier nicht berücksichtigt, da für die in dieser Arbeit durchgeführten Studien eine einheitliche Quellstärke angenommen wird. Es ergibt sich für einen Konzentrationsfootprint die Einheit sm^{-3} , für einen Flussfootprint m^{-2} .

3 Validierung des in PALM eingebetteten Lagrangeschen stochastischen Modells

Vor Beginn der Footprintstudien für LITFASS-2003 wurde das hier verwendete LES-LS Modell zunächst für den Fall einer homogen geheizten konvektiven Grenzschicht validiert. Dazu wurde eine Simulation durchgeführt, deren Anfangs- und Randbedingungen sowie Steuerparameter entsprechend der Simulation von STEINFELD *et al.* (2008) gewählt wurden, um vergleichbare Ergebnisse zu erhalten.

STEINFELD *et al.* (2008) hatten ihr „online“ gekoppeltes LES-LS Modell mit den Ergebnissen von WEIL *et al.* (2004) sowie mit den Wassertankexperimenten von WILLIS und DEARDORFF (1976) validiert. Dabei stellten sie u. a. fest, dass die Berücksichtigung der subskaligen Partikelgeschwindigkeiten (s. Abschn. 2.3) insbesondere für Untersuchungen in Bodennähe von großer Bedeutung ist, um die Dispersion der Partikel dort realistisch modellieren zu können. Unter Berücksichtigung der subskaligen Partikelgeschwindigkeiten erzielten STEINFELD *et al.* (2008) eine sehr gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von WEIL *et al.* (2004) sowie WILLIS und DEARDORFF (1976).

Das Modellgebiet hatte eine Erstreckung von etwa $5\text{km} \times 5\text{km} \times 2\text{km}$ mit Gitterweiten von $\Delta x = \Delta y = 52\text{m}$ und $\Delta z = 21\text{m}$ (96^3 Gitterpunkte). Am unteren Modellrand (Erdboden) wurde ein homogener Temperaturfluss von 0.24K m/s und eine Rauigkeitslänge von 0.16m vorgegeben. Für die Temperatur wurde zu Beginn der Simulation bis in eine Höhe von 550m ein Wert von 300K vorgegeben, mit einer darüberliegenden starken Inversion von $1\text{K}/100\text{m}$. Angetrieben wurde die Strömung mit einem geostrophischen Wind von -3.6m/s (in negative x-Richtung wehend). Um die dreidimensionale Simulation mit einer im geostrophischen Gleichgewicht befindlichen Strömung zu initialisieren, wurde ein „1D-Vorlauf“ durchgeführt (s. Abschn. 2.2.4). Die Partikelfreisetzung begann nach 3h simulierter Zeit in einer quasistationären Grenzschicht. Dazu wurden in einer Quellhöhe von 70m im gesamten Modellgebiet über einen Zeitraum von 30min alle 120s Partikel freigesetzt und bis zum Ende der Simulation bei $t = 5\text{h}$ verfolgt. Die Verlagerung der Partikel wurde unter Berücksichtigung der subskaligen Partikelgeschwindigkeiten berechnet (s. Abschn. 2.3). Es wurden für drei verschiedene Messniveaus footprintrelevante Partikeldata ausgegeben ($z_m = 72.5\text{m}$, $z_m = 77.5\text{m}$ und $z_m = 100\text{m}$). Während der Partikelverlagerung ($3 - 5\text{h}$ nach Simulationsbeginn) lag die zeitlich gemittelte Grenzschichthöhe bei 1145m . Diese sowie die zeitlich gemittelten Werte der konvektiven Geschwindigkeitsskala w_* (2.07m/s), der Schubspannungsgeschwindigkeit u_* (0.34m/s) und der Obukhov-Stabilitätslänge L (-10.8m) stimmten mit den von STEINFELD *et al.* (2008) angegebenen Werten überein.

Zum Vergleich mit den Ergebnissen von STEINFELD *et al.* (2008) wurde der mit dem Footprint-Auswerteprogramm (s. Abschn. 2.4) berechnete, zweidimensionale Fluss-

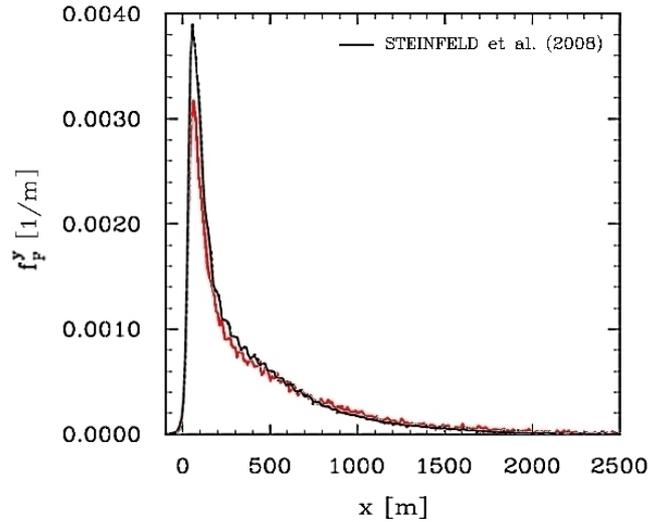


Abbildung 3.1: Quer zum Wind integrierter Flussfootprint für $z_m = 100\text{m}$ (rote Kurve). Zum Vergleich ist in schwarz das Ergebnis von STEINFELD *et al.* (2008) dargestellt. Der Sensor befindet sich an der Position $x = 0\text{m}$. Der geostrophische Wind weht in negative x-Richtung.

footprint (s. Abb. 3.3) quer zur Windrichtung integriert:

$$f_F^y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_F(x, y) dy. \quad (3.1)$$

Abbildung 3.1 zeigt den quer zum Wind integrierten Flussfootprint für das Messniveau $z_m = 100\text{m}$, 30m oberhalb der Quellhöhe (rote Kurve). Der Sensor befindet sich bei $x = 0\text{m}$. Sowohl die Form des Footprints als auch die Lage des Footprintmaximums stimmen mit den Ergebnissen von STEINFELD *et al.* (2008) überein (schwarze Kurve). Lediglich der Wert des Maximums weist einen Unterschied auf. Dies ließ zunächst vermuten, dass bei STEINFELD *et al.* (2008) womöglich eine andere Partikelzahl zur Normierung des Footprints (s. Glg. 2.87) verwendet wurde als tatsächlich in der Simulation verlagert wurden. Aus Simulationen mit verschiedenen Partikelzahlen (36 000 bis 11 250 000) ergab sich jedoch stets ein maximaler Wert von 0.0032/m und die Form des Footprints entsprach jeweils der in Abbildung 3.1 (rote Kurve). Es konnte demnach keine Abhängigkeit des Footprints von der Anzahl freigesetzter Partikel festgestellt werden. Eine eindeutige Erklärung für den unterschiedlichen Wert des Maximums konnte leider bisher nicht gefunden werden.

Abbildung 3.2 beschreibt die Abhängigkeit des Flussfootprints von der Messhöhe bei gleichbleibender horizontaler Position des Sensors. Dazu sind für die drei ausgewählten Messniveaus ($z_m = 72.5\text{m}$, $z_m = 77.5\text{m}$ und $z_m = 100\text{m}$), die quer zum Wind integrierten Flussfootprints dargestellt. Das Footprintmaximum befindet sich mit wachsender Entfernung zur Quellhöhe weiter stromaufwärts des Sensors ($x = 0\text{m}$). Dies ist damit zu begründen, dass die in 100m Messhöhe erfassten Partikel eine größere horizontale Distanz mit dem mittleren Wind zurücklegen können als jene

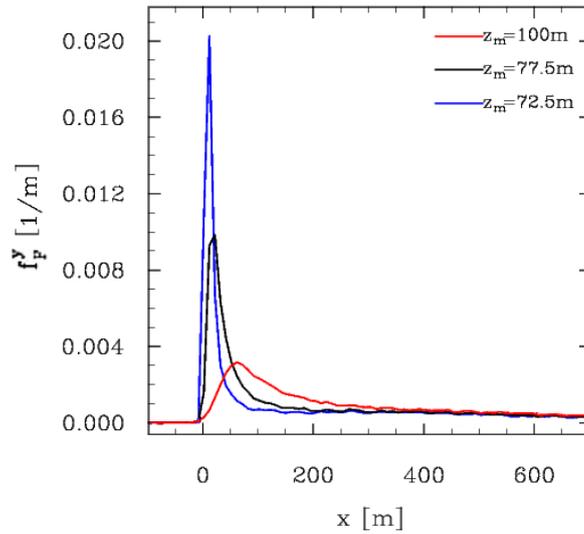


Abbildung 3.2: Quer zum Wind integrierte Flussfootprints für die Messniveaus $z_m = 72.5\text{m}$, $z_m = 77.5\text{m}$ und $z_m = 100\text{m}$. Der Sensor befindet sich an der Position $x = 0\text{m}$. Der geostrophische Wind weht in negative x-Richtung.

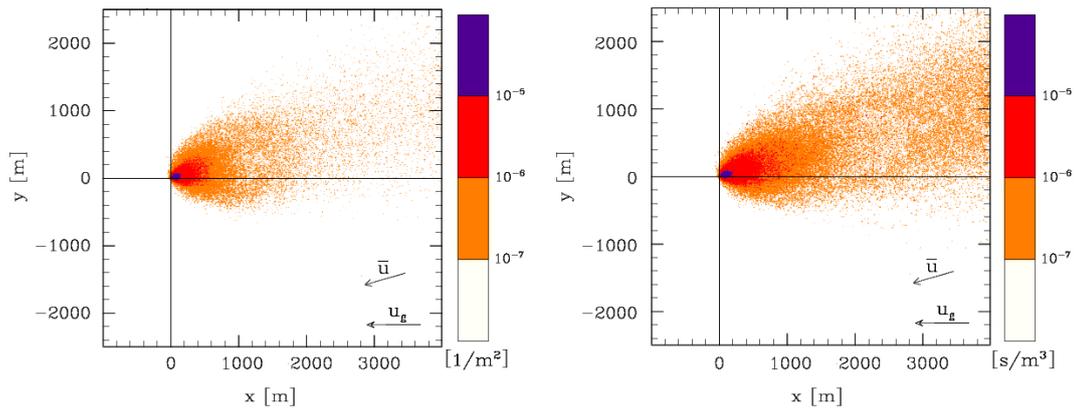


Abbildung 3.3: Fluss- und Konzentrationsfootprint für das Messniveau $z_m = 100\text{ m}$. Der Sensor befindet sich an der Position $(x, y) = (0\text{m}, 0\text{m})$. Der geostrophische Wind u_g weht in negative x-Richtung. \bar{u} beschreibt den über den Zeitraum der Partikelverlagerung (2h) und räumlich gemittelten Wind.

Partikel, die bereits in 72.5m das Messniveau kreuzen. Aus diesem Grund verringert sich mit zunehmender Messhöhe auch der Wert des Maximums und das Gebiet mit einem bestimmten Beitrag zum gemessenen Fluss (Betrachtung gleicher Flächen unter den Kurven im Bereich des Maximums) weist eine größere horizontale Erstreckung auf.

Ein Konzentrationsfootprint besitzt eine größere horizontale Erstreckung als ein Flussfootprint (KLJUN *et al.*, 2002). Anhand von Abbildung 3.3 soll dieser Unterschied veranschaulicht werden. Hier sind Fluss- und Konzentrationsfootprint für das Messniveau $z_m = 100\text{m}$ dargestellt. Die Sensorposition wird durch das Fadenkreuz

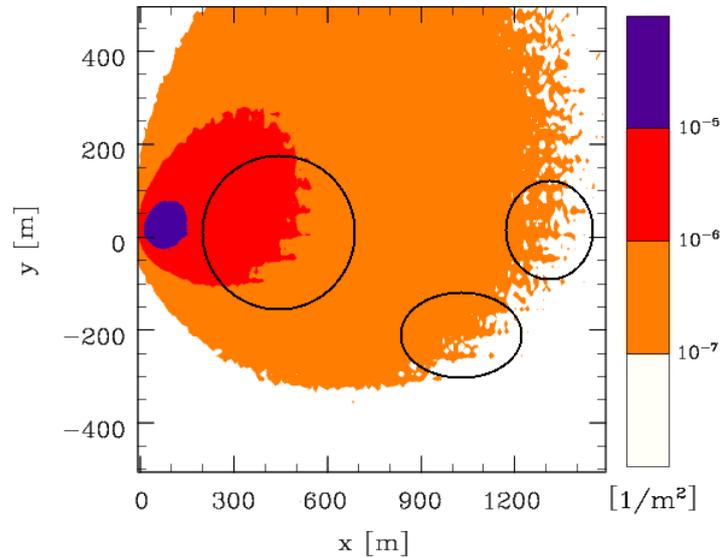


Abbildung 3.4: Flussfootprint für das Messniveau $z_m = 100\text{m}$. Bei Simulationen mit Partikelzahlen in der Größenordnung von 10^6 werden periodische Strukturen in den Footprints sichtbar (markiert durch die schwarzen Kreise).

markiert. Es zeigt sich, dass die farbigen Flächen gleicher Größenordnung des Footprintwertes beim Konzentrationsfootprint deutlich größere Gebiete stromaufwärts des Sensors umfassen als bei dem Flussfootprint. Außerdem fällt auf, dass die Ausrichtung des Footprints von der vorgegebenen geostrophischen Windrichtung abweicht. Dies ist mit der reibungsbedingten Ablenkung des geostrophischen Windes zu erklären.

Simulationen mit Partikelzahlen in der Größenordnung von 10^6 brachten in den Footprints periodische Strukturen zum Vorschein (markiert durch schwarze Kreise in Abb. 3.4). Dargestellt ist hier ein Flussfootprint für $z_m = 100\text{m}$. Es ist zu erkennen, dass die Partikelkonzentrationen periodische Maxima und Minima aufweisen. Die Wellenlänge dieser Strukturen entspricht der horizontalen Gitterweite (52m) der LES bzw. der horizontalen Distanz zwischen den einzelnen Partikelquellen (ebenfalls 52m). Bei genauerer Betrachtung von Abbildung 3.1 sind auch in den quer zum Wind integrierten Flussfootprints, sowohl in dieser Studie als auch in der von STEINFELD *et al.* (2008) diese periodischen Strukturen zu erkennen. Diese wurden allerdings von STEINFELD *et al.* (2008), vermutlich aufgrund der deutlich geringeren Partikelzahl, nicht als solche erkannt. In Tests mit anderen Distanzen zwischen den einzelnen Partikelquellen (104m, 200m) wurden ebenfalls besagte Strukturen mit der gleichen Wellenlänge gefunden. Das ließ vermuten, dass die Wellenlänge der Strukturen eventuell von der Gitterweite der LES abhängt. Weitere Untersuchungen dahingehend konnten jedoch im Rahmen dieser Arbeit leider nicht mehr durchgeführt werden und somit die Ursache für diese Strukturen bislang noch nicht geklärt werden.

4 Footprintsimulationen für das LITFASS-2003 Experiment

4.1 Das LITFASS-2003 Experiment

Das LITFASS¹-2003 Experiment stellte den experimentellen Schwerpunkt des Verbundvorhabens EVA_GRIPS² dar, dessen Gesamtziel die Untersuchung der Einflüsse einer heterogenen Landoberfläche, insbesondere bezüglich der Verdunstungsprozesse, auf die atmosphärische Grenzschicht war. Weitere Schwerpunkte von EVA_GRIPS lagen in der numerischen Modellierung und der Analyse von Satellitendaten. Details zu den einzelnen Schwerpunkten des LITFASS-2003 Experimentes sind u. a. bei BEYRICH und MENGELKAMP (2006), BEYRICH *et al.* (2006b) und MAUDER *et al.* (2006) nachzulesen. Für die Organisation des Experimentes war das Meteorologische Observatorium Lindenberg (MOL) vom Deutschen Wetterdienst (DWD) verantwortlich.

Die Intensivmessphase von LITFASS-2003 fand vom 19. Mai 2003 bis zum 17. Juni 2003 etwa 40km südöstlich von Berlin in der Umgebung von Lindenberg statt. Während dieser Messphase wurden neben luft- und satellitengestützten Messungen und Vertikalsondierungen ebenfalls bodennahe Turbulenzmessungen in einem Gebiet von 20 x 20km² (s. Abb. 4.1; südwestliche Ecke: 52°05'30" N, 13°54'00" O, nordöstliche Ecke: 52°16'30" N, 14°12'00" O) durchgeführt.

Die heterogene Landoberfläche (LOF) des LITFASS-Gebietes (G_{LIT}) hat eine für den Norden Mitteleuropas typische Beschaffenheit. Wald- und Ackerflächen machen jeweils etwa 43% der Fläche des Experimentgebietes aus, Wasserflächen etwa 6-7%. Dörfer und Straßen haben einen Anteil von 5% am gesamten Gebiet. Auf den Ackerflächen wird hauptsächlich Getreide (Triticale, Roggen, Gerste und Weizen) angebaut, auf einigen Flächen aber auch Gras, Raps oder Mais. Alle während der Experimentphase vorkommenden Landnutzungen lassen sich zu sieben Vegetationsklassen zusammenfassen, deren Verteilung in Abbildung 4.2 dargestellt ist. Die Orographie ist relativ schwach ausgeprägt. So treten auf einer Entfernung von 10-15km maximale Höhenunterschiede von 80-100m auf (BEYRICH und MENGELKAMP, 2006). Lediglich bei Sonnenaufgang und Sonnenuntergang könnte die Orographie in Form von Abschattungseffekten einen Einfluss haben (UHLENBROCK, 2006). Da die Footprintmodellierungen für die Mittagsstunden durchgeführt werden, können die orographischen Effekte demnach vernachlässigt werden. Eventuelle dynamische Effekte bedingt durch die Orographie werden hier ebenfalls nicht berücksichtigt.

Die experimentelle Bestimmung der turbulenten Flüsse von Wasserdampf, Wärme und Impuls wurde mittels verschiedener Messtechniken realisiert. So fanden die Turbulenzmessungen ($\sim 3\text{m}$ ü. LOF) an den Energiebilanzstationen (s. Abb. 4.1;

¹LITFASS: **L**indenberg **I**nhomogeneous **T**errain - **F**luxes between **A**tmosphere and **S**urface: a long term **S**tudy

²EVA_GRIPS: **E**Vaporation at the **G**RId and **P**ixel **S**cale

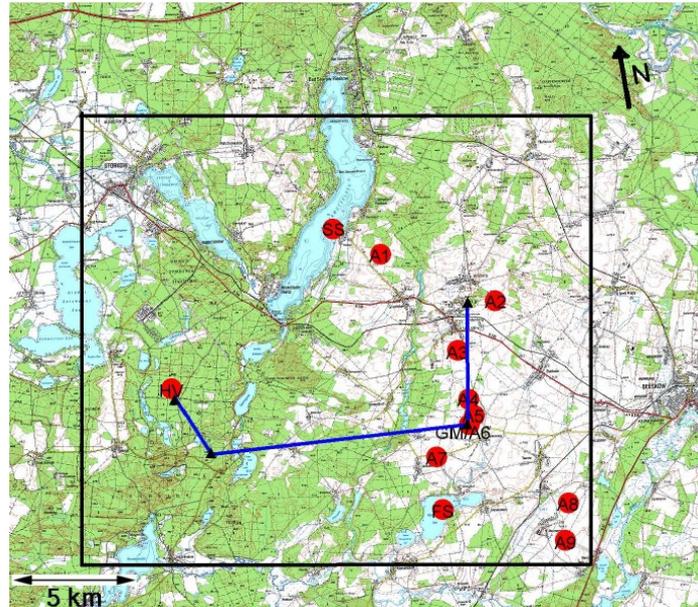


Abbildung 4.1: Das LITFASS-Gebiet (schwarze Box) in der Umgebung von Lindenberg, 40km südöstlich von Berlin. Die roten Kreise kennzeichnen die Positionen der Energiebilanzstationen; die schwarzen Dreiecke stellen Sender und Empfänger der Szintillometer dar, blaue Linien deren Messpfade. An dem Punkt GM befindet sich das Messfeld des DWD bei Falkenberg; dort waren zwei Energiebilanzstationen über Gras, ein 99m-Mast, ein SODAR/RASS- und zwei LIDAR-Systeme installiert (nach UHLENBROCK, 2006).

rote Kreise) nach der Eddy-Kovarianz Methode statt (BEYRICH *et al.*, 2006b). Diese ist eine der zuverlässigsten Methoden zur Messung turbulenter vertikaler Flüsse. Berechnet werden die Flüsse als zeitliches Mittel der zeitlich variablen Kovarianzen von Vertikalgeschwindigkeit und der zu transportierenden Größe (θ , q , u_i). Die Verteilung der Energiebilanzstationen wurde so gewählt, dass jede der sieben Vegetationsklassen (s. Abb. 4.2) durch mindestens eine Messung repräsentiert werden konnte. Es kamen aber auch verschiedene Langstrecken-Szintillometer (KOHSEK *et al.*, 2006; MEIJNINGER *et al.*, 2006) und eine Helikopter-Schleppsonde zum Einsatz (Helipod; BANGE *et al.*, 2006). Die Szintillometerpfade (34m, 43m und 70m ü. LOF), entlang derer räumlich gemittelte turbulente Wärmeflüsse aus Messungen der in der Luft auftretenden Dichteschwankungen abgeleitet wurden, sind in Abbildung 4.1 durch blaue Linien markiert. Mit den Helipodflügen (~ 80 m ü. LOF) konnten ebenfalls entlang vorgegebener Mess- bzw. Flugstrecken Informationen über räumlich gemittelte Wärmeflüsse gewonnen werden. Neben den Turbulenzmessungen wurden mittels luft- und bodengestützter Fernerkundungsmethoden (Radiosondenaufstiege) Profile mittlerer und turbulenter Größen ermittelt, um daraus auf die vertikale Struktur der atmosphärischen Grenzschicht und deren räumliche und zeitliche Variabilität zu schließen (BEYRICH und MENGELKAMP, 2006). Ebenfalls von Interesse war die räumliche Variabilität von Niederschlag, Bewölkung und solarer Einstrahlung. Nähere Informationen zu den Messtechniken sind den o. g. Berichten zu entnehmen.

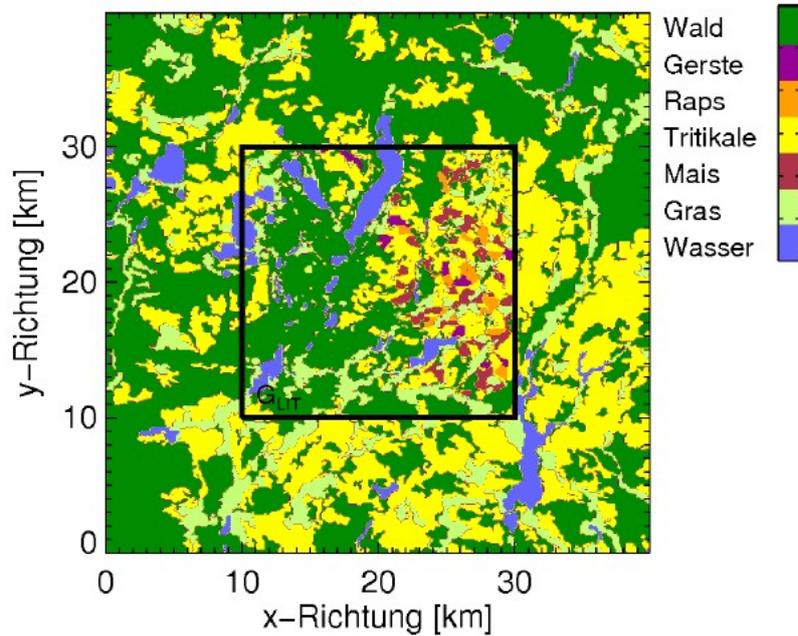


Abbildung 4.2: Verteilung der Vegetationsklassen im LITFASS-Gebiet (schwarze Box) und der Umgebung (nach UHLENBROCK, 2006).

Station	Landnutzung	geogr. Länge O	geogr. Breite N	Messhöhe [m]
GM	Gras (99m-Mast)	14°07'20"	52°09'57"	50.0/ 90.0
GM	Gras	14°07'20"	52°09'57"	2.40
FS	Wasser	14°06'37"	52°08'15"	3.85
A1	Triticale	14°04'29"	52°13'39"	3.55
A2	Raps	14°08'18"	52°12'34"	3.60
A3	Gerste	14°06'59"	52°11'31"	3.25
A4	Mais	14°07'18"	52°10'28"	3.25
A5	Triticale	14°07'28"	52°10'09"	2.80
A6	Mais	14°07'29"	52°10'00"	2.70
A7	Raps	14°06'10"	52°09'16"	3.40
A8	Triticale	14°10'36"	52°08'14"	3.55
A9	Raps	14°10'27"	52°07'26"	3.50
SS	Wasser	14°03'00"	52°14'10"	2.85
HV	Wald	13°57'09"	52°10'54"	2.85

Tabelle 4.1: Standorte der mikrometeorologischen Messungen während LITFASS-2003. Die Messhöhe ist auf ± 5 cm gerundet (BEYRICH, 2009).

Die Footprintmodellierungen werden für die Standorte der Energiebilanzstationen und den 99m-Mast durchgeführt (s. Tab. 4.1). Neben den turbulenten Wärme fluxen wurden an diesen Stationen auch Größen wie Lufttemperatur, relative Feuchte, Windgeschwindigkeit und -richtung, Druck, Niederschlagsmenge, Bodentemperatur, -feuchte und -wärmestrom sowie die kurz- und langwelligen Strahlungsströme gemessen. Einige dieser Daten wurden für den Antrieb des LES Modells verwendet (s. Abschn. 4.2).

In den Monaten unmittelbar vor der Intensivmessphase im Mai und Juni war es im Vergleich zum 30-jährigen Mittel relativ trocken. Auf den langen und kalten, schneearmen Winter folgte ein relativ warmer Frühling mit einer früh einsetzenden Sommerperiode. Aufgrund der geringen Niederschläge (die niedrigsten seit Beginn der Aufzeichnungen in Lindenberg 1905), die aus für diese Zeit untypischen Zirkulationsmustern (Ost-/Südostwinde statt der typischen Südwestwinde) resultierten, fehlte es bereits zu Beginn der Vegetationsperiode an Wasservorräten im Boden (BEYRICH und MENGELKAMP, 2006).

Das LITFASS-Gebiet und dessen Umgebung stand in der Anfangsphase des Experimentzeitraums unter dem Einfluss zyklonaler Strömungen mit Winden aus südwestlichen bis westlichen Richtungen. Während dieser Zeit passierten einige Fronten die Region. Nach einer Woche in der Intensivmessphase änderte sich die Wetterlage und es wurden hauptsächlich antizyklonale Einflüsse beobachtet. In der Höhe erstreckte sich von Mitteleuropa bis nach Skandinavien ein sich mehrfach regenerierender kräftiger Keil. Am Boden resultierten daraus häufige Hochdruck- bzw. Hochdruckrandlagen. Diese sonnige Wetterlage blieb bis auf einige Schauer und Gewitter (5./ 8. Juni), die im Zusammenhang mit der Passage flacher Tiefdruckrinnen standen, etwa zwei Wochen lang bestehen. Es wehten meist schwache Winde aus östlichen Richtungen. In der letzten Woche der Messphase lag eine Frontenwetterlage vor, wobei hauptsächlich subtropische Luftmassen das LITFASS-Gebiet erreichten. Insgesamt war die Intensivmessphase geprägt von hoher solarer Einstrahlung mit vereinzelt Niederschlagsereignissen (BEYRICH und MENGELKAMP, 2006).

In dem Experimentzeitraum gab es einige Tage („golden days“), an denen optimale meteorologische Bedingungen für die Ausbildung einer konvektiven Grenzschicht vorlagen. Diese Tage wurden von UHLENBROCK (2006) sowie MARONGA (2010) bezüglich der Entwicklung thermisch induzierter mesoskaliger Zirkulationen über einer heterogenen Landoberfläche untersucht. Die Bedingungen an die „golden days“ waren, dass eine ungestörte Sonneneinstrahlung vorliegt und advektive Effekte vernachlässigbar sein sollten. Nur so konnte der großräumige Einfluss der Oberflächenheterogenitäten auf die Zirkulationsentwicklung untersucht werden. Diese sogenannten Sekundärzirkulationen entwickeln sich, wenn die Oberfläche eine heterogene Temperaturverteilung aufweist (z. B. RAASCH und HARBUSCH, 2001), vergleichbar mit einer Land-Seewind-Zirkulation (STULL, 1988). Über einer relativ warmen Oberfläche dehnt sich die Luft stärker aus und die Druckflächen heben sich im Vergleich zur Luft über der kühleren Oberfläche stärker. Dies bedingt einen horizontalen Druckgradienten in der Höhe, wodurch sich eine Strömung vom wärmeren zum kälteren Gebiet einstellt. Durch den Luftmassenzuwachs über der kälteren Oberfläche heben sich insbesondere in Bodennähe die Druckflächen, was am Boden in einer Strömung vom kälteren zum

wärmeren Gebiet resultiert. Aus Kontinuitätsgründen stellen sich über der wärmeren Oberfläche Aufwärtsbewegungen und über der kühleren Oberfläche Abwärtsbewegungen ein. Die Sekundärzirkulationen stellen geordnete, stationäre Strukturen dar und sind der zufällig verteilten Turbulenz (Primärzirkulation), die sich unter konvektiven Bedingungen entwickelt, überlagert.

Für einen dieser „golden days“, den 30. Mai, werden unter den gegebenen meteorologischen Bedingungen und unter Berücksichtigung der vorliegenden Oberflächenheterogenitäten Footprints modelliert. An diesem Tag lagen die Temperaturen zwischen 13 und 28°C. Mitteleuropa lag unter dem Einfluss einer antizyklonalen Höhenströmung im Bereich eines Keils mit Achse entlang der Linie Benelux-Skandinavien. Am Boden befand sich ein Hoch über Weißrussland mit einem Keil bis Mittelengland. Aufgrund der geringen Luftdruckgegensätze südlich des Keils wehten über Mitteleuropa relativ schwache Winde mit 2-3m/s aus Ost-Südost. Es war infolge großräumiger Absinkbewegungen den ganzen Tag über wolkenlos.

4.2 Modellinitialisierung und Antrieb

Das Modellgebiet für die LITFASS-Simulationen wurde wie in den Studien von UHLENBROCK (2006) und MARONGA (2010) definiert. Damit sich bei zyklischen lateralen Randbedingungen die Strömung entsprechend der vorhandenen Heterogenitäten ungehindert ausbilden konnte, war es notwendig, das LITFASS-Modellgebiet um einen zusätzlichen Randbereich zu erweitern. So wurde gewährleistet, dass die in G_{LIT} eintretende Strömung nur die Turbulenzinformation von tatsächlich stromaufwärts gelegenen Gebieten enthält und nicht von Gebieten, die sich eigentlich stromabwärts befinden und nur aufgrund der zyklischen Randbedingungen einen Einfluss auf G_{LIT} haben können. In den Studien von UHLENBROCK (2006) und MARONGA (2010) konnte gezeigt werden, dass bei schwachen Winden ein zusätzlicher Rand von 10km ausreichend ist (s. Abb. 4.2). Das Modellgebiet hatte somit eine horizontale Erstreckung von $40 \times 40\text{km}^2$ bei einer Auflösung von $100 \times 100\text{m}^2$. In der Vertikalen lag die Auflösung bei 50m und das Gebiet reichte bis in eine Höhe von 3km ($\hat{=} 400 \times 400 \times 62 = 9.92 \cdot 10^6$ Gitterpunkten). Entsprechend der am 30. Mai 2003 dominierenden Windgeschwindigkeit und -richtung wurde für die u-Komponente des geostrophischen Windes ein Wert von -2m/s (Ostwind) vorgegeben. Um die Breitenkreisabhängigkeit der Corioliskraft zu berücksichtigen, wurde für die Lage von G_{LIT} eine geographische Breite von $+52.18^\circ$ angegeben. Die Simulationen wurden mit Feuchte gerechnet, allerdings ohne Berücksichtigung von Phasenübergängen (s. Abschn. 2.2.1). Um die Simulation mit einem im Gleichgewicht befindlichen Windprofil zu initialisieren, wurde ein „1D-Vorlauf“ über 10 Tage durchgeführt.

Informationen über die Landnutzungen der heterogenen Landoberfläche wurden dem Modell mittels eines CORINE³-Datensatzes zugeführt (zweidimensionales Feld mit einer Auflösung von 100m). Dabei wurden die insgesamt 16 im LITFASS-Gebiet und Umgebung auftretenden Landnutzungsklassen durch Mitarbeiter des MOL zu sieben Vegetationsklassen (s. Abb. 4.2) mit vergleichbaren Eigenschaften zusammengefasst. So wurden z. B. bebauten Gebiete sowie verschiedene Wald-Klassen unter der

³Abkürzung für „Coordination of Information on the Environment“; Programm der Europäischen Umweltagentur zur flächendeckenden Erfassung der Flächennutzung.

Vegetationsklasse	Rauigkeitslänge [m]	Temperatur (5 UTC) [°C]
Gras	0.012	15.15
Gerste	0.065	15.31
Mais	0.014	14.56
Tritikale	0.11	13.80
Raps	0.011	14.04
Wald	1.5	15.87
Wasser	0.0002	15.15

Tabelle 4.2: Rauigkeitslängen und bodennahe Temperaturen (5 UTC) für die sieben Vegetationsklassen am 30. Mai (BEYRICH, 2009).

Vegetationsklasse „Wald“ aufgeführt. Am unteren Modellrand wurde jedem Gitterpunkt eine dieser Vegetationsklassen zugewiesen.

Die Zuordnung physikalischer Größen zu den Vegetationsklassen erfolgte durch Verwendung der an den Energiebilanzstationen erhaltenen Daten, die für die jeweilige Vegetationsklasse aufgrund der durchgeführten Qualitätssicherung als repräsentativ befunden werden konnten (BEYRICH *et al.*, 2006b; MAUDER *et al.*, 2006). Zur effektiven Nutzung der vorhandenen Daten wurden die Ergebnisse von Energiebilanzstationen über gleichen Landnutzungen arithmetisch gemittelt. Zu jeder Vegetationsklasse lagen demnach Informationen (zweidimensionale Felder mit der Auflösung des CORINE-Datensatzes) über die Rauigkeitslänge z_0 (10% der Bestandshöhe; nach SHUTTLEWORTH *et al.*, 1997) am betrachteten Messtag sowie über die bodennahe Temperatur und die absolute Feuchte vor. Das zugehörige initiale Temperatur- und Feuchteprofil (für das gesamte Modellgebiet) ergab sich aus Berechnungen mit Radiosondendaten. Um diese Werte in PALM verwenden zu können, wurden die gemessenen Profile aus linearen Teilstücken rekonstruiert.

Unterhalb von 112m ü. NN lagen keine Radiosondendaten vor. Um auch für diesen Bereich die Profile vorgeben zu können und die heterogene Temperatur- und Feuchteverteilung am Boden zu berücksichtigen, wurde an jedem Gitterpunkt vom ebenen unteren Modellrand (referenziert auf 73m ü. NN $\hat{=}$ mittlerem Höhenniveau von G_{LIT}) bis zur Höhe der bodennahen Temperaturinversion $z_{bi} = 175\text{m}$ (horizontales Mittel um 5 UTC) eine lineare Interpolation von Temperatur und Feuchte durchgeführt:

$$\phi(x, y, z) = \phi(x, y, z = 0) + \frac{z}{z_{bi}} (\bar{\phi}(z_{bi}) - \phi(x, y, z = 0)) \quad \forall z \leq z_{bi}. \quad (4.1)$$

ϕ steht dabei für θ oder q . Ebenfalls zur Verfügung standen halbstündlich gemittelte Werte der Temperatur- und Feuchteflüsse $\overline{w'\theta'_0}$ und $\overline{w'q'_0}$ (in K m/s) für jede der sieben Vegetationsklassen. Um mit diesen Daten einen kontinuierlicheren Antrieb ohne abrupte Sprünge zu bewerkstelligen, wurde für jede Minute der Simulation zwischen den halbstündlichen Werten (Referenzzeitpunkte) linear interpoliert (nach

UHLENBROCK, 2006):

$$\begin{aligned} \overline{w'\phi'_0}(x, y, t) &= \overline{w'\phi'_0}(x, y, t - \delta t) \\ &+ \frac{\delta t}{1800 \text{ s}} \left[\overline{w'\phi'_0}(x, y, t + 1800 \text{ s} - \delta t) - \overline{w'\phi'_0}(x, y, t - \delta t) \right]. \end{aligned} \quad (4.2)$$

$\delta t = 60, 120, \dots, 1800 \text{ s}$ beschreibt die Zeit, die seit dem letzten Referenzzeitpunkt vergangen ist.

Mit der Vorgabe von z_0 (s. Tab. 4.2) wurde der Reibungseffekt der jeweiligen Oberfläche berücksichtigt. Die Reibung bedingt eine Scherung des mittleren Windes, die u. a. für die Produktion von TKE verantwortlich ist (STULL, 1988). So ist z. B. über den Waldflächen aufgrund der großen Rauigkeitslänge die Turbulenzproduktion deutlich größer als über einer relativ glatten Oberfläche. Der Bestand als solches wurde nicht simuliert, weshalb keine direkten Informationen über die Flüsse innerhalb der Bestandsschicht vorliegen. Aus diesem Grund wurden für die Waldstation HV keine Footprintmodellierungen durchgeführt.

Die Beschreibung der je nach Simulation variierenden Parameter sowie der gewählten Partikelparameter folgt an entsprechender Stelle.

4.2.1 Simulation eines Tagesganges

Zur Validierung des Simulationssetups und der gewählten Randbedingungen wurde zunächst der Tagesgang des 30. Mai simuliert, um einen Vergleich mit den Ergebnissen von UHLENBROCK (2006) und MARONGA (2010) durchführen zu können. Simuliert wurde der Zeitraum von 5 bis 17 UTC. Die zur Initialisierung verwendeten 2m-Temperaturen sind in Tabelle 4.2 aufgeführt. Die absolute Feuchte wurde am unteren Modellrand mit einem konstanten Wert von 0.007 kg/kg initialisiert.

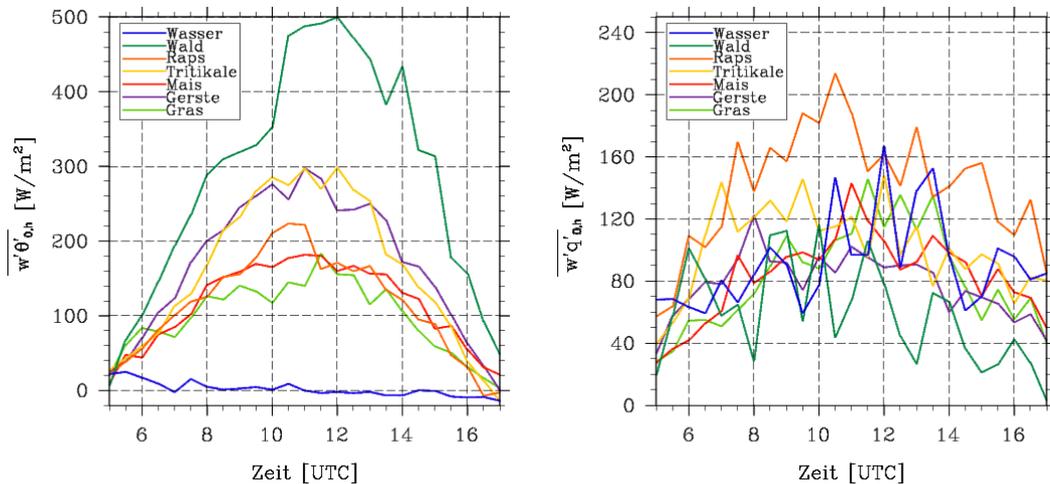


Abbildung 4.3: Tagesgang der am 30. Mai an den Energiebilanzstationen gemessenen fühlbaren und latenten Wärmeflüsse für die sieben Vegetationsklassen. Diese dienen in Form von Temperatur- und Feuchteflüssen als Antriebsdaten für die Simulation.

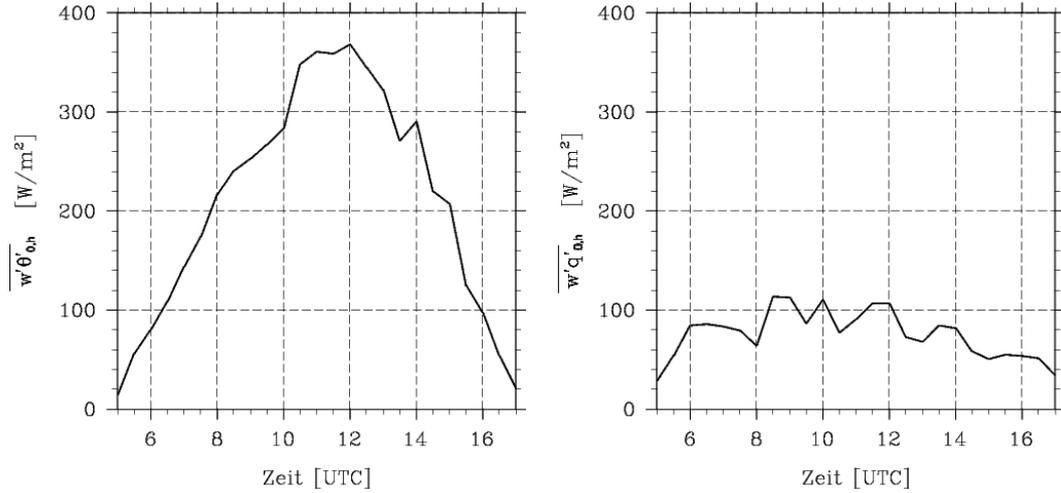


Abbildung 4.4: Horizontales Mittel der am 30. Mai an den Energiebilanzstationen gemessenen und als Antrieb für die Tagesgang-Simulation vorgegebenen fühlbaren und latenten Wärmeflüsse.

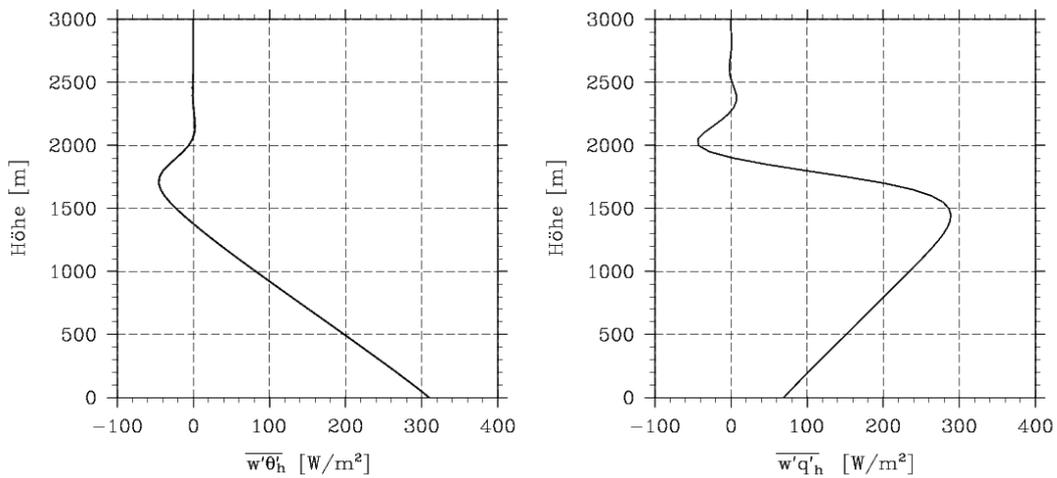


Abbildung 4.5: Horizontal gemittelte Vertikalprofile des fühlbaren und latenten Wärmeflusses um 13 UTC (über 900 s gemittelt) aus der Simulation des Tagesganges am 30. Mai.

Abbildung 4.3 zeigt die von den Vegetationsklassen ausgehenden fühlbaren und latenten Wärmeflüsse $w'\theta'_{0,h}$ und $w'q'_{0,h}$ (eig. Wärmestromdichten [W/m^2]). Diese ergeben sich aus den in PALM vorgegebenen Temperatur- und Feuchteflüssen $\overline{w'\theta'_0}$ und $\overline{w'q'_0}$ (in K m/s) durch Multiplikation mit ρc_p bzw. ρl_v , mit $\rho = 1.24 \text{ kg}/\text{m}^3$, der spezifischen Wärmekapazität $c_p = 1005 \text{ J}/\text{kgK}$ und der Verdunstungswärme $l_v = 2.5 \cdot 10^6 \text{ J}/\text{kgK}$. Aus Abbildung 4.3 ist zum einen ersichtlich, dass von den Waldflächen hinsichtlich des fühlbaren Wärmeflusses der größte Energieeintrag (bis zu $500 \text{ W}/\text{m}^2$) in die Grenzschicht bewerkstelligt wird. Der Energiebeitrag der Gras- und Ackerflächen ist mit etwa 150 bis $300 \text{ W}/\text{m}^2$ deutlich geringer. Über den Wasserflächen

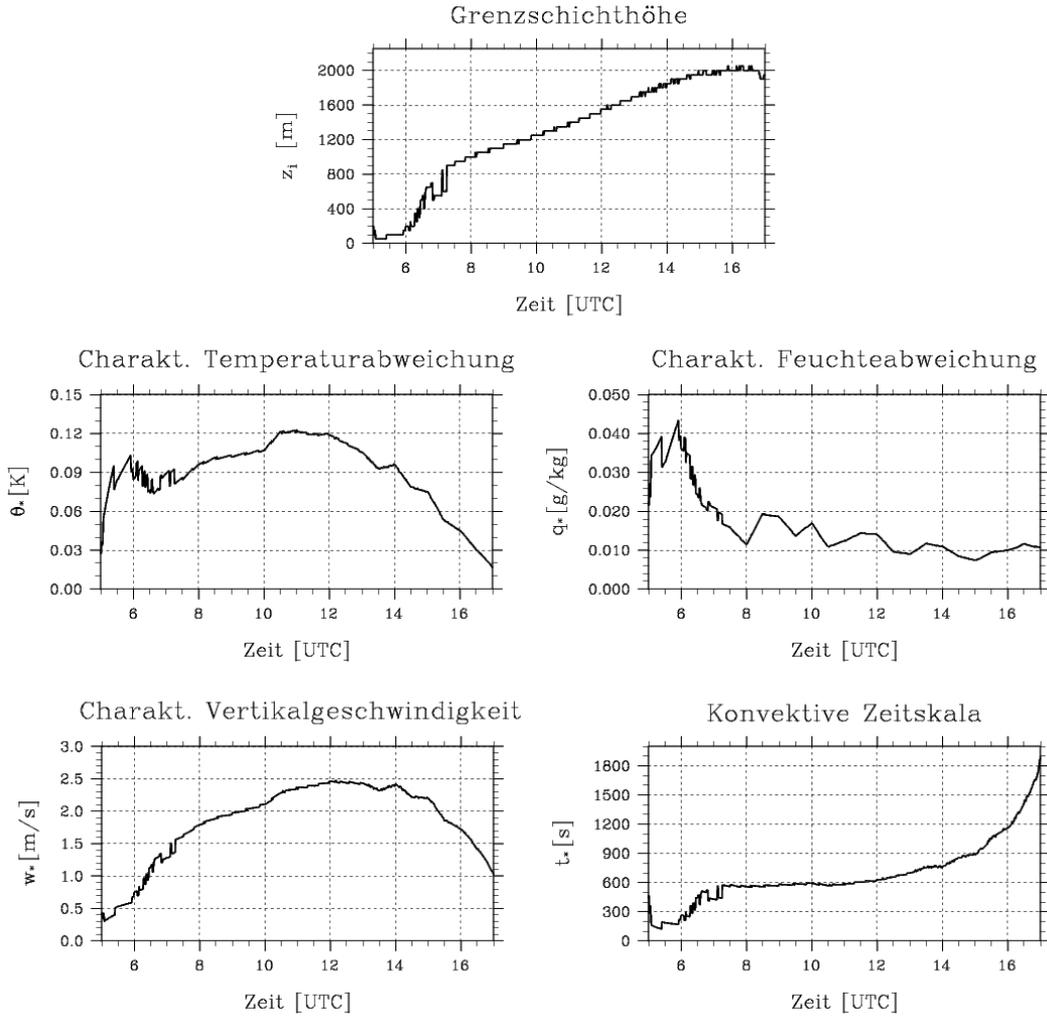


Abbildung 4.6: Zeitreihen einiger für die Grenzschicht charakteristischer Größen (horizontales Mittel) aus der Simulation des Tagesganges am 30. Mai.

ist kaum ein fühlbarer Wärmefluss vorhanden. Inwieweit sich diese Unterschiede in den Footprints für die Energiebilanzstationen widerspiegeln, wird sich in den folgenden Abschnitten zeigen. In den latenten Wärmeflüssen stellt sich die Heterogenität der Landoberfläche nicht so deutlich dar und es ist kein ausgeprägter Tagesgang zu erkennen. In der Mittagszeit liegen die Werte zwischen 80 und 170 W/m^2 . Dabei sind die geringsten latenten Wärmeflüsse über den Waldflächen zu finden, wohingegen z. B. über Raps, Triticale und Wasser die Verdunstung teilweise doppelt so hoch ist. Die latenten Wärmeflüsse weisen insbesondere über den Waldflächen starke Schwankungen von bis zu 50% auf. Laut UHLENBROCK (2006) werden diese vermutlich durch die Advektion von Feuchtefeldern verursacht.

Im horizontalen Mittel der vorgegebenen turbulenten Wärmeflüsse am Erdboden ist zu erkennen (s. Abb. 4.4), dass der bodennahe fühlbare Wärmefluss tagsüber etwa um einen Faktor 3 größer ist als der latente Wärmefluss. Dies hängt mit der

weitestgehend niederschlagsfreien synoptischen Lage (s. Abschn. 4.1) und mit dem damit einhergehenden geringen Feuchteeintrag in die Grenzschicht zusammen. Die relativ hohen fühlbaren Wärmeflüsse sind mit den am 30. Mai vorliegenden idealen Strahlungsbedingungen zu erklären.

Anhand der Abbildungen 4.3 und 4.4 konnte festgestellt werden, dass der Einfluss des fühlbaren Wärmeflusses am besagten Messtag deutlich größer war als der des latenten Wärmeflusses. Außerdem war der Heterogenitätseffekt der Landoberfläche deutlich stärker durch den fühlbaren Wärmefluss bedingt. Die hier dargestellten Wärmeflüsse stimmten mit denen aus UHLENBROCK (2006) überein. Auch die für eine konvektive Grenzschicht typischen Profile des horizontal gemittelten fühlbaren und latenten Wärmeflusses (s. Abb. 4.5) sind mit den von UHLENBROCK (2006) und MARONGA (2010) gezeigten Profilen vergleichbar.

Aus der hier durchgeführten Simulation ergaben sich zudem die in Abbildung 4.6 dargestellten zeitlichen Entwicklungen der Grenzschichthöhe z_1 (Höhe, in der das Minimum des fühlbaren Wärmeflusses liegt), der charakteristischen Temperatur- und Feuchteabweichung θ_* und q_* sowie der charakteristischen Vertikalgeschwindigkeit w_* und der konvektiven Zeitskala t_* im horizontalen Mittel. Die Berechnung dieser sogenannten Skalierungsparameter ist in UHLENBROCK (2006) zu finden. Da diese im Weiteren keine Verwendung finden werden, wird hier auf eine ausführliche Beschreibung verzichtet. Die Erwähnung dieser Größen dient lediglich der hier durchgeführten Vergleiche von Simulationsergebnissen. Die in Abbildung 4.6 dargestellten Ergebnisse stimmen mit den in UHLENBROCK (2006) und MARONGA (2010) gezeigten Zeitreihen der Skalierungsparameter überein.

4.2.2 Simulation einer quasi-stationären Grenzschicht

Für die Footprintstudien wurde anstatt des Tagesganges eine quasi-stationäre Grenzschicht für einen Zeitraum im Tagesgang des 30. Mai simuliert, damit für die Dauer der Partikelverlagerung möglichst gleichbleibende Strömungsbedingungen vorlagen. Bei der Simulation eines Tagesganges mit einem zeitlich variablen Antrieb wären auch die Strömungsbedingungen variabel und somit die ermittelten Footprints immer nur für einen bestimmten Zeitpunkt unter den gegebenen meteorologischen Bedingungen gültig. Zwar sind die Footprints bei der Simulation einer quasi-stationären Grenzschicht ebenfalls nur unter den angenommenen Bedingungen gültig, allerdings können hier aufgrund der quasi-stationären Strömungsbedingungen alle in einem Zeitraum von mehreren Stunden verlagerten Partikel zur Footprintmodellierung beitragen und damit zu einer besseren Statistik führen. Das Modell wurde dazu über die gesamte Simulationsdauer von 8 bzw. 12h mit konstanten Temperatur- und Feuchteflüssen (gemessen um 13 UTC) angetrieben, jedoch für jede Vegetationsklasse mit unterschiedlichen Werten (s. Tab. 4.3). Die initialen Temperatur- und Feuchteprofile wurden entsprechend der Profile aus den 11UTC-Radiosondendaten konstruiert (s. Abb. 5.4 in UHLENBROCK, 2006). Es wurde dieser Anfangszustand mit einer bereits aufgeheizten, gut durchmischten Grenzschicht anstelle der morgendlich stabilen Bedingungen von 5 UTC gewählt, damit an dieser Stelle Rechenzeit eingespart werden konnte. Bis in eine Höhe von 1300m wurde eine konstante Temperatur von 294K mit einer darüberliegenden Inversion von 0.5K/100m vorgegeben. Die spezifische Feuchte hatte am Boden einen Wert von 0.0055kg/kg. Darüber wurden folgende Gradienten

Vegetationsklasse	$\overline{w'\theta'_0}$ [K m/s]	$\overline{w'q'_0}$ [kg/kg m/s]
Gras	0.09	$3.76 \cdot 10^{-5}$
Gerste	0.2	$2.98 \cdot 10^{-5}$
Mais	0.13	$3.05 \cdot 10^{-5}$
Tritikale	0.2	$3.78 \cdot 10^{-5}$
Raps	0.13	$5.9 \cdot 10^{-5}$
Wald	0.36	$0.88 \cdot 10^{-5}$
Wasser	-0.002	$4.53 \cdot 10^{-5}$

Tabelle 4.3: Vorgegebene Temperatur- und Feuchteflüsse für die sieben Vegetationsklassen zum Antrieb der Footprintsimulationen.

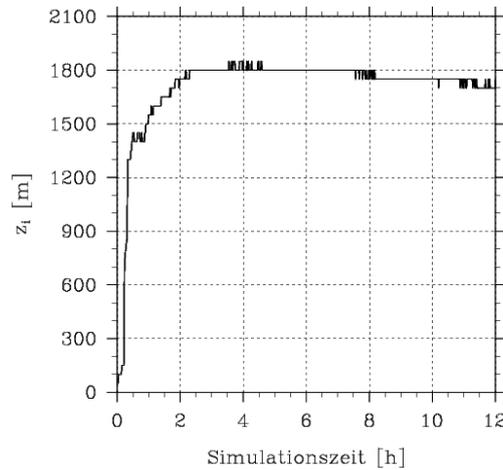


Abbildung 4.7: Horizontal gemittelte Grenzschichthöhe z_i . Für den Zeitraum der Partikelverlagerung (5 - 12h) bleibt diese nahezu konstant.

(in 1/100m) vorgegeben: -0.0015 bis 100m, 0.0 bis 1 200m, -0.0014 bis 1 450m, 0.0004 bis 2 050m, -0.0008 bis 2 250m, 0.0006 bis 2 400m und 0.0 bis 3 000m.

Um die Grenzschicht in einen quasi-stationären Zustand zu überführen, wurde das Grenzschichtwachstum durch Aufprägen eines großräumigen Absinkens auf die Temperatur- und Feuchteentwicklung gedämpft (s. Abschn. 2.2.3). Vom Boden bis in eine Höhe von 1 800m wurde für den Gradienten der Vertikalgeschwindigkeit ein Wert von $-0.0004(\text{m/s})/100\text{m}$ vorgegeben. Bis zu einer Höhe von 3 000m lag ein Gradient von $-0.0118(\text{m/s})/100\text{m}$ vor. So konnte gewährleistet werden, dass die Obergrenze der Grenzschicht während der Partikelverlagerung ($t > 5\text{h}$) auf einem nahezu konstanten Level von etwa 1 800m blieb. Abbildung 4.7 zeigt die zeitliche Entwicklung der horizontal gemittelten Grenzschichthöhe z_i .

Die in Abbildung 4.8 dargestellten horizontal gemittelten Vertikalprofile von Temperatur und spezifischer Feuchte (jeweils über 1h gemittelt) sollen den quasi-stationären

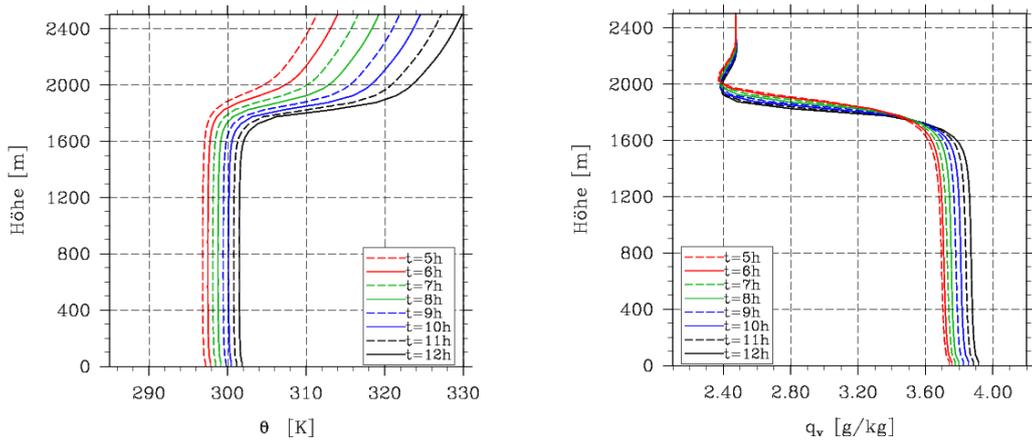


Abbildung 4.8: Horizontal gemittelte Vertikalprofile von Temperatur und spezifischer Feuchte (über 1h gemittelt) zur Veranschaulichung der Quasi-Stationarität der Grenzschicht für den Zeitraum der Partikelverlagerung.

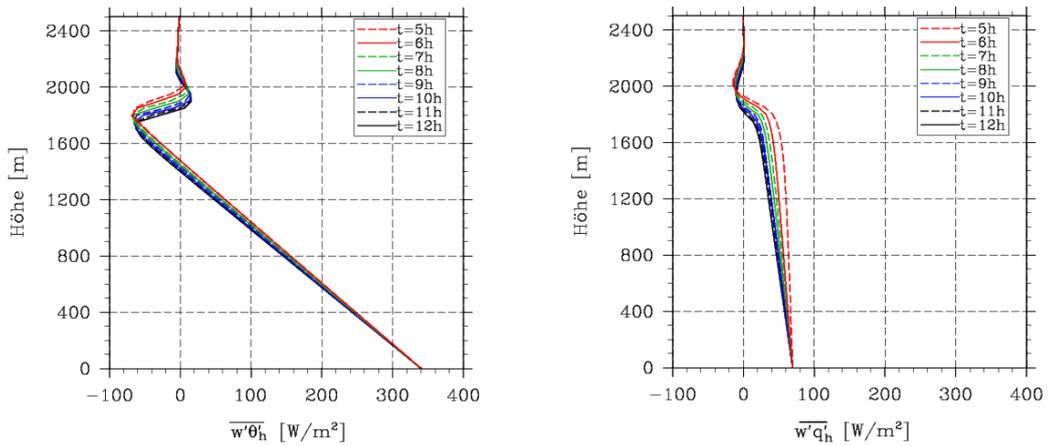


Abbildung 4.9: Horizontal gemittelte Vertikalprofile von fühlbarem und latentem Wärmefluss (über 1h gemittelt).

ren Zustand der Grenzschicht veranschaulichen. Quasi-stationär bedeutet hier, dass sich die Form der Profile der hier dargestellten Größen in der zeitlichen Entwicklung nicht ändert. Auch die horizontal gemittelten Vertikalprofile des fühlbaren und latenten Wärmeflusses (s. Abb. 4.9) weisen in der zeitlichen Entwicklung keine signifikanten Änderungen auf.

Weiterhin wurde geprüft, ob auch die in MARONGA (2010) vorgestellten Sekundärzirkulationen mit diesem Setup reproduziert werden konnten. Dazu wurde, wie in Abbildung 4.10 dargestellt, ein xy-Schnitt der vertikalen Windgeschwindigkeit w in einer Höhe von 700 m betrachtet, was etwa dem in MARONGA (2010) gezeigten Höhenniveau entspricht. Der xy-Schnitt ist hier nur für das LITFASS-Gebiet dargestellt, da eine Betrachtung des gesamten Modellgebietes nicht frei von Randef-

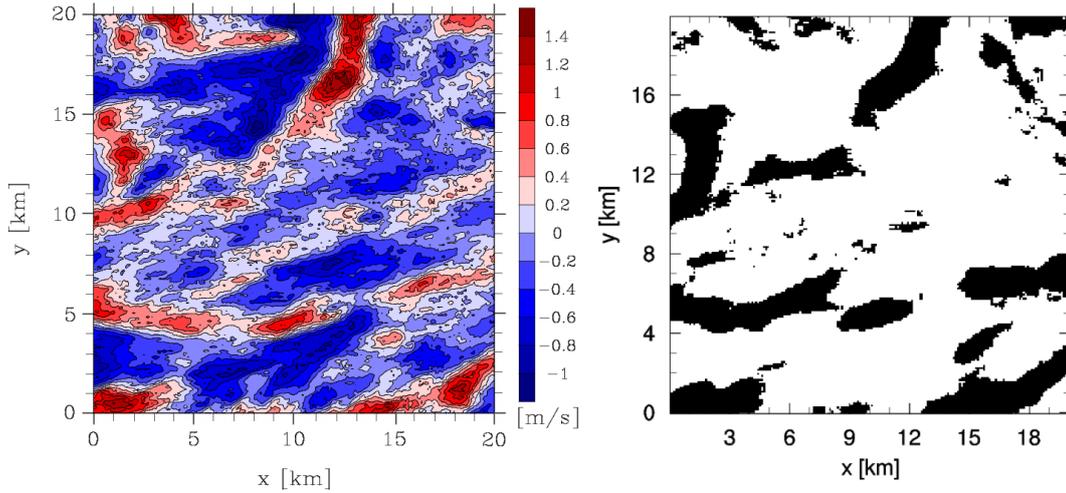


Abbildung 4.10: xy-Schnitt der über die letzten 7h der Simulation gemittelten Vertikalgeschwindigkeit w für das LITFASS-Gebiet in einer Höhe von 700m (links). Zum Vergleich ist auf der rechten Seite das Ergebnis von MARONGA (2010) für ein vergleichbares Höhenniveau zu sehen. Hier ist jedoch das über acht Ensembles gemittelte Geschwindigkeitsfeld $\tilde{w} > 0.08 w_*$ (in schwarz) nach 6h Simulationszeit (über 1h gemittelt) dargestellt.

fekten wäre. Das Windfeld wurde nicht wie in MARONGA (2010) über mehrere Ensembles gemittelt, sondern lediglich über die letzten 7h einer einzigen Simulation. Bei einem Vergleich der beiden Darstellungen in Abbildung 4.10 lässt sich erkennen, dass das hier gewählte Setup ein vergleichbares Strömungsfeld produziert und somit für die weiteren Simulationen geeignet ist. Zu sehen ist in der Abbildung, dass sich vor allem im Bereich größerer Wasserflächen wie dem Scharmützelsee im Norden ($x = 9 - 12\text{km}$, $y = 14 - 20\text{km}$) oder dem Groß Selchower See im Nordwesten ($x = 0 - 3\text{km}$, $y = 9 - 15\text{km}$) von G_{LIT} ausgeprägte Auf- und Abwindgebiete, sogenannte Sekundärzirkulationen ausgebildet haben. Auch über dem sich in Ost-West-Richtung erstreckenden Waldgebiet im Westen ($x = 0 - 9\text{km}$, $y = 4 - 6\text{km}$) sind derartige Strukturen zu erkennen. Bei den schwachwindigen und konvektiven Bedingungen an diesem Tag konnten sich die Strukturen aufgrund des verschwindend geringen Einflusses der Advektion durch den Grundstrom entsprechend der vorliegenden Heterogenität der Landoberfläche ausbilden. Für weiterführende Informationen zur Ausbildung von Sekundärzirkulationen im LITFASS-Gebiet in Abhängigkeit von den vorliegenden meteorologischen Bedingungen wird auf die Berichte von UHLENBROCK (2006) und MARONGA (2010) verwiesen.

4.3 Erste Simulationen zur Untersuchung der Footprintstatistik für die Energiebilanzstationen und den 99m-Mast

Wie bereits erwähnt, erfordert die Footprintmodellierung über einem realen Untersuchungsgebiet mit einer ausgeprägten heterogenen Landoberfläche die Verlagerung einer sehr großen Partikelzahl. Je mehr Partikel in die Footprintberechnung einfließen, desto besser wird die Footprintstatistik. Erst bei einer ausreichenden Statistik kann eine Aussage über das eine Messung beeinflussende Gebiet getroffen werden.

So wurde zunächst anhand einiger Tests ermittelt, dass mit dem zur Verfügung stehenden Arbeitsspeicher eines Prozessorelementes (PE) von 6 GByte bei dem o. g. Setup ($9.92 \cdot 10^6$ Gitterpunkte) und einer Verwendung von 400 PEs etwa 10^6 Partikel pro PE verarbeitet werden können, ohne einen Überlauf des Arbeitsspeichers und damit den Abbruch der Simulation hervorzurufen. Mit dieser maximal möglichen Partikelzahl pro Teilgebiet wurde ein Ensemble von zehn Simulationen durchgeführt, um zu erfahren, ob damit bereits eine gute Footprintstatistik gewonnen werden kann.

Jedes der zehn Ensembles wurde gemäß dem Setup für die 13 UTC-Simulation (s. Abschn. 4.2.2) gesteuert, wobei eine Simulationszeit von 8h gewählt wurde. Lediglich der für die Steuerung von Zufallszahlen verantwortliche Parameter wurde variiert, um zu gewährleisten, dass in jeder Simulation die zufällige Turbulenz und damit auch die subskaligen Partikelgeschwindigkeiten in den einzelnen Simulationen unterschiedlich verteilt sind. Auf diese Weise kann die Turbulenzstatistik und damit auch die Footprintstatistik erhöht werden. Die mittleren Größen der Strömung bleiben dabei von Ensemble zu Ensemble unverändert.

Die Partikel wurden nach 5h Simulationszeit in der quasi-stationären Grenzschicht freigesetzt. Dabei wurden am unteren Rand des gesamten Modellgebietes in einem Abstand von 2m insgesamt $4 \cdot 10^8$ Partikel freigesetzt (10^6 Partikel pro PE) und deren Trajektorien 1h lang verfolgt. Nach 1h wurden die Partikel gelöscht, um Platz für eine neue Partikelgeneration zu schaffen. Es wurde hierzu angenommen, dass das Haupteinflussgebiet auf eine Messung bei einem schwachen Wind von etwa 2m/s nicht weiter als 7km vom Sensor entfernt liegt. Dies entspricht etwa der maximalen horizontalen Verlagerungsdistanz eines Partikels, welches bei einem mittleren Wind von 2m/s 1h lang verlagert wird. Nach 6h und 7h Simulationszeit wurde jeweils eine neue Partikelgeneration gestartet, sodass am Ende der Simulationsdauer von 8h drei Sätze von insgesamt $1.2 \cdot 10^{10}$ Partikeln (in 10 Ensembles) jeweils 1h lang verlagert wurden. Während der Partikelverlagerung wurden alle Durchgänge von Partikeln mit den Messniveaus $z_m = 3\text{m}$ (mittlere Messhöhe der Energiebilanzstationen), $z_m = 50\text{m}$ und $z_m = 100\text{m}$ (Messhöhen am 99m-Mast) registriert und die zugehörigen Partikeldaten gespeichert.

Aus diesen zehn Ensembles ergaben sich unter Verwendung des Auswerteprogrammes aus Abschnitt 2.4 die in Abbildung 4.11 und 4.12 dargestellten Fluss- und Konzentrationsfootprints, hier beispielhaft für eine der Energiebilanzstation (A3) und die zwei Messhöhen des 99m-Mastes (GM). Dabei soll hier explizit darauf hingewiesen werden, dass anhand dieser Tests noch keine konkrete Aussage über den tatsächlichen Footprint der jeweiligen Messung getroffen werden konnte. Sowohl an den bodennahen Stationen als auch am Mast haben nur etwa 300 bis 400 Partikel die jeweilige

4.3 Erste Simulationen zur Untersuchung der Footprintstatistik für die Energiebilanzstationen und den 99m-Mast

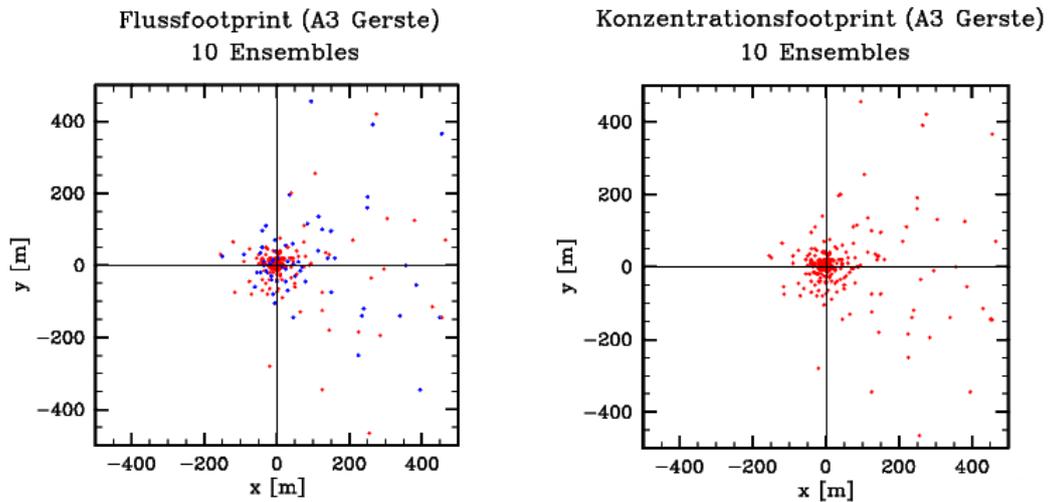


Abbildung 4.11: Erste Footprintergebnisse mit noch unzureichender Footprintstatistik, beispielhaft dargestellt für die Energiebilanzstation A3. Der Sensor befindet sich an der Position (0m,0m). In rot sind die positiven, in blau die negativen Beiträge einer Auswertegitterfläche dargestellt, aus der ein oder mehrere Partikel den Sensor erreicht haben. Es sind hier also keine absoluten Werte dargestellt.

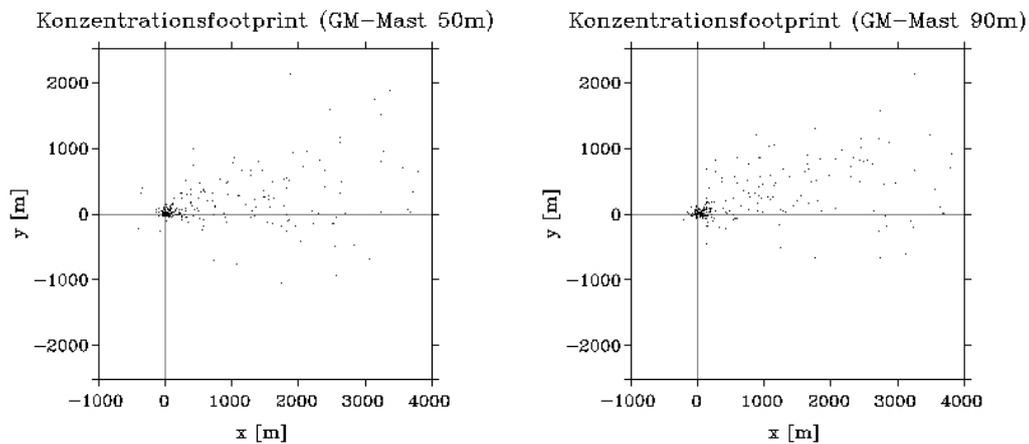


Abbildung 4.12: Konzentrationsfootprints für den 99m-Mast ($z_m = 50\text{m}$, $z_m = 90\text{m}$). Die schwarzen Punkte stellen jeweils eine Auswertegitterfläche dar, die mit einem oder mehreren Partikeln zum gemessenen Signal beiträgt. Der Sensor befindet sich an der Position (0m,0m).

Sensorfläche von $5 \times 5\text{m}^2$ gekreuzt, was bei Weitem noch keine ausreichende Footprintstatistik liefert. Aus diesen ersten Ergebnissen konnte lediglich das zugrunde liegende Problem bei der Footprintbestimmung über heterogenem Gelände bestätigt

werden. Trotz der verwendeten Partikelzahl von $1.2 \cdot 10^9$ pro Ensemble, hat lediglich ein winziger Bruchteil dieser tatsächlich eine Sensorfläche erreicht. Die vorhandenen Ressourcen wurden demnach nicht optimal ausgenutzt, da ein Großteil der im gesamten Modellgebiet freigesetzten Partikel überhaupt keine Relevanz für die Footprintbestimmung an den einzelnen Messsensoren hatte. Zum Vergleich war bei den in Kapitel 3 dargestellten Footprints für einen homogenen Untergrund bereits eine Partikelzahl von etwa 70 000 ausreichend, um einen statistisch aussagekräftigen Footprint zu erhalten.

Wie zuvor erwähnt, wurden die Ressourcen seitens der verfügbaren Massiv-Parallelrechner bezüglich der maximal verwendbaren Partikelzahlen bereits ausgeschöpft. Zudem bedeutete die Verlagerung einer derartigen Partikelzahl einen sehr hohen Rechenaufwand und Speicherbedarf (5 TByte). So benötigten zehn Ensembles mit o. g. Setup etwa 70h Rechenzeit pro Prozessor. Daher galt es im Folgenden Möglichkeiten zur effizienteren Nutzung der vorhandenen Ressourcen zu finden, um eine bessere Footprintstatistik zu erhalten.

4.4 Sensitivitätsstudie zur Verbesserung der Footprintstatistik

Ausgehend von den im vorherigen Abschnitt präsentierten ersten Ergebnissen, aus denen aufgrund unzureichender Statistiken noch keinerlei Aussage über die Footprints für die einzelnen Messstationen getroffen werden konnte, zielte das weitere Vorgehen darauf ab, die Footprintstatistik zu verbessern. Dabei stellte sich die Frage, wie die Zahl der an den Sensorflächen registrierten und somit zur Footprintstatistik beitragenden Partikel um möglichst mehrere Größenordnungen erhöht werden kann.

Eine Überlegung war, die Partikel nicht im gesamten Modellgebiet freizusetzen, sondern lediglich in kleinen Quellflächen in der Umgebung eines Sensors. Zum anderen war der in den ersten Tests gewählte Verlagerungszeitraum eines Partikelsatzes mit 1h relativ lang. Es wurde vermutet, dass insbesondere bei den bodennahen Messstationen der Großteil der Partikel in deutlich geringerer Zeit den jeweiligen Sensor erreichen kann, sodass das Zeitintervall zur Freisetzung neuer Partikelgenerationen vermutlich deutlich kürzer sein kann. Wenn im Folgenden der Begriff „Sensor“ verwendet wird, ist damit stets eine begrenzte Sensorfläche gemeint, deren Mittelpunkt sich an der Sensorposition befindet.

Mithilfe einer Sensitivitätsstudie bezüglich der Größe von Quellflächen und Freisetzungintervallen wurde ermittelt, wie weit Quellflächen und Zeitintervalle verkleinert werden können, ohne den Footprint signifikant zu beeinflussen. Als Ausgangspunkt für diese Studie dienten die aus den 10 Ensembles gemittelten Footprints. Zwar war die Statistik dieser Ergebnisse mehr als unzureichend, jedoch waren dies die einzig verfügbaren Daten zur Durchführung dieser Studie. Die Ergebnisse der Sensitivitätsstudie werden in den Folgenden Abschnitten vorgestellt.

Obwohl es in dieser Arbeit hauptsächlich um die Bestimmung von Flussfootprints (FFP) für die Turbulenzmessungen des LITFASS-2003 Experimentes gehen soll, wurden für die Sensitivitätsstudie die Konzentrationsfootprints (KFP) der Stationen betrachtet. Diese Herangehensweise wurde gewählt, da ein KFP eine größere horizontale Erstreckung aufweist als ein FFP (s. Abschn. 1.1). So sollte gewährleistet werden,

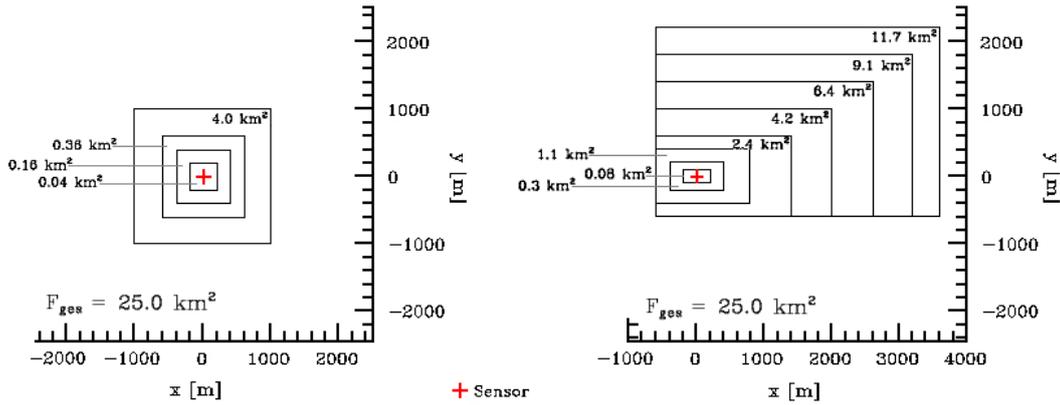


Abbildung 4.13: Schematische Darstellung der in dieser Sensitivitätsstudie betrachteten Quellflächen für die Energiebilanzstationen (links) und den 99m-Mast (rechts). Aufgrund der Überschaubarkeit sind nicht alle untersuchten Quellflächen eingezeichnet.

dass die ermittelten Quellflächen und Zeitintervalle in jedem Fall für die später zu modellierenden FFPs ausreichend sind.

4.4.1 Partikelquellflächen

Zur Untersuchung des Einflusses der Partikelquellflächen auf den Footprint wurden die aus den zehn Ensembles berechneten Konzentrationsfootprints für die Energiebilanzstationen und den 99m-Mast herangezogen. Das Auswertegitter hatte bei allen Footprints eine Erstreckung von $5 \times 5 \text{ km}^2$, wobei in Abbildung 4.11 aus Gründen der Anschaulichkeit nur ein Ausschnitt von $1 \times 1 \text{ km}^2$ dargestellt ist. Für die bodennahen Footprints wurde der Sensor im Zentrum des Auswertegitters bei (0m, 0m) positioniert, um in alle Richtungen ein möglichst weites Gebiet einsehen zu können, da der Wind im zeitlichen Mittel an den einzelnen Energiebilanzstationen aus unterschiedlichen Richtungen wehte (s. Abb. 4.18). Außerdem war in diesen ersten Ergebnissen zu erkennen, dass in einem Umkreis von etwa 50m um die Sensoren, unabhängig von der vorherrschenden Windrichtung, eine deutlich höhere Partikeldichte zu verzeichnen war als in größeren Entfernungen. Bei den Berechnungen der Footprints für den 99m-Mast wurde keine zentrierte Sensorposition gewählt, da der Wind dort im zeitlichen Mittel aus östlichen Richtungen wehte. Die Sensorposition lag ebenfalls bei (0m, 0m), jedoch wurde hier hauptsächlich der Bereich stromaufwärts der Sensoren ($z_m = 50\text{m}$, $z_m = 90\text{m}$) in positiver x-Richtung ausgewertet (s. Abb. 4.12).

Um die Quellflächen mit dem größten Einfluss zu ermitteln, wurde der relative Beitrag verschieden großer Quellflächen F_x zur gesamten Konzentration (Quellfläche F_{ges}) berechnet. Dazu wurden die um einen Sensor ausgerichteten Quellflächen betrachtet wie sie in Abbildung 4.13 skizziert sind. F_{ges} beschreibt die Gesamtfläche

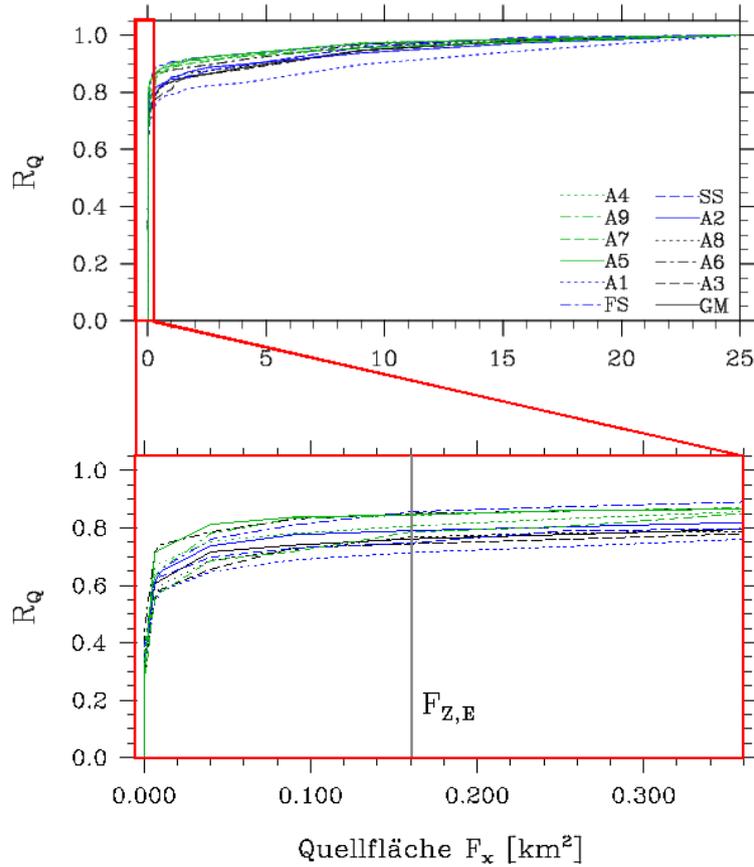


Abbildung 4.14: Relativer Beitrag R_Q verschiedener Quellflächen F_x zur gesamten Konzentration $C(F_{\text{ges}})$ in Abhängigkeit von der Größe der Quellflächen für die Energiebilanzstationen ($z_m = 3\text{m}$).

des Auswertegitters von $5 \times 5\text{km}^2$ und F_x die jeweilige Quellfläche, wobei hier aufgrund der Übersichtlichkeit nicht alle betrachteten F_x eingezeichnet sind. Eine Übersicht über die verwendeten Quellflächen für die Energiebilanzstationen und den 99m-Mast ist in den Tabellen 4.4 und 4.5 zu finden. Zur Berechnung der von einer Fläche ausgehenden Konzentration wird der Konzentrationsfootprint $f_C(x, y)$ über die jeweilige Quellfläche integriert, sodass sich der relative Beitrag R_Q einer Quellfläche zur gesamten Konzentration wie folgt bestimmen lässt:

$$R_Q = \frac{C(F_x)}{C(F_{\text{ges}})} = \frac{\int_{F_x} f_C(x, y) dF'_x}{\int_{F_{\text{ges}}} f_C(x, y) dF'_{\text{ges}}}. \quad (4.3)$$

Diese Berechnungen wurden gleichermaßen für die zwölf Sensorpositionen der Energiebilanzstationen sowie für die zwei Sensoren des 99m-Mastes durchgeführt.

Abbildung 4.14 zeigt den relativen Beitrag R_Q in Abhängigkeit von der Größe der Quellfläche F_x für die Positionen der Energiebilanzstationen ($z_m = 3\text{m}$).

Quellfläche [km ²]	Referenzpunkt (x,y) [m]	Erstreckung in x-Richtung [m]	Erstreckung in y-Richtung [m]
0.0001	(-5,-5)	10	10
0.0004	(-10,-10)	20	20
0.0016	(-20,-20)	40	40
0.0064	(-40,-40)	80	80
0.01	(-50,-50)	100	100
0.04	(-100,-100)	200	200
0.09	(-150,-150)	300	300
0.16	(-200,-200)	400	400
0.36	(-300,-300)	600	600
0.64	(-400,-400)	800	800
1.0	(-500,-500)	1000	1000
1.44	(-600,-600)	1200	1200
2.56	(-800,-800)	1600	1600
4.0	(-1000,-1000)	2000	2000
9.0	(-1500,-1500)	3000	3000
16.0	(-2000,-2000)	4000	4000
25.0 (F_{ges})	(-2500,-2500)	5000	5000

Tabelle 4.4: Verwendete Quellflächen in der Sensitivitätsstudie für die Energiebilanzstationen. Aufgelistet ist die jeweilige Erstreckung der Quellfläche in x- und y-Richtung, ausgehend von der linken unteren Ecke (Referenzpunkt) der Quellfläche.

Auf der Abszisse ist die Größe der in Abbildung 4.13 skizzierten Quellflächen aufgetragen. In der oberen Darstellung ist zu erkennen, dass ein großer Teil des Beitrages (80%) zur gesamten Konzentration verglichen mit der Größe der Gesamtfläche von relativ kleinen Quellflächen (etwa $500 \times 500\text{m}^2$) stammt. Die restlichen 20% der Gesamtkonzentration verteilen sich auf eine etwa 100-mal größere Fläche. Um den Bereich der sich ändernden Steigung der Kurve genauer betrachten zu können, ist in der unteren Bildhälfte dieser Bereich vergrößert dargestellt (rote Umrandung). Der steile Anstieg endet bereits bei einer Quellfläche von 0.01km^2 ($100 \times 100\text{m}^2$). Auf Grundlage dieser Ergebnisse und unter Berücksichtigung eines gewissen Sicherheitsbereiches wird für die Simulation der bodennahen Footprints eine Quellfläche von 0.16km^2 ($400 \times 400\text{m}^2$) als ausreichend betrachtet (markiert durch die vertikale Linie). Diese Fläche wird bei der Zeitintervallstudie im folgenden Abschnitt als $F_{Z,E}$ bezeichnet.

Die Ergebnisse der Quellflächenstudie für den 99m-Mast sind in Abbildung 4.15 dargestellt. Es ist zu beachten, dass die hier betrachteten Quellflächen anders ausge-

Quellfläche [km ²]	Referenzpunkt (x,y) [m]	Erstreckung in x-Richtung [m]	Erstreckung in y-Richtung [m]
0.08	(-200,-100)	400	200
0.32	(-400,-200)	800	400
1.12	(-600,-400)	1 400	800
1.44	(-600,-400)	1 800	800
2.4	(-600,-600)	2 000	1 200
3.22	(-600,-600)	2 300	1 400
4.16	(-600,-600)	2 600	1 600
5.22	(-600,-600)	2 900	1 800
6.4	(-600,-600)	3 200	2 000
9.12	(-600,-600)	3 800	2 400
11.76	(-600,-600)	4 200	2 800
25.0 (F_{ges})	(-1 000,-2 500)	5 000	5 000

Tabelle 4.5: Verwendete Quellflächen in der Sensitivitätsstudie für den 99m-Mast. Aufgelistet ist die Erstreckung der jeweiligen Quellfläche in x- und y-Richtung, ausgehend von der linken unteren Ecke (Referenzpunkt) der Quellfläche.

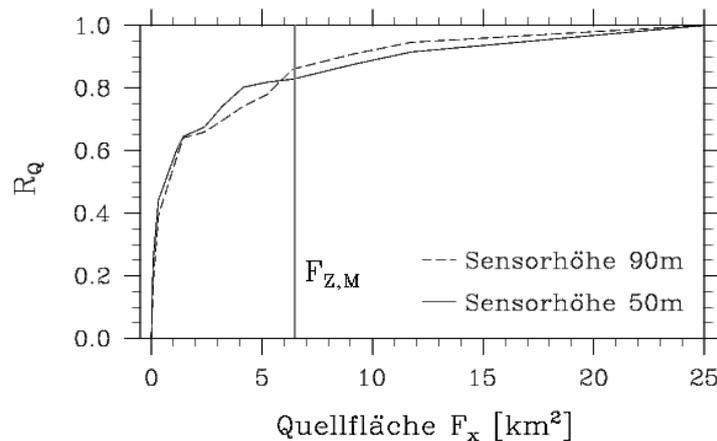


Abbildung 4.15: Relativer Beitrag R_Q verschiedener Quellflächen F_x zur gesamten Konzentration $C(F_{\text{ges}})$ in Abhängigkeit von der Größe der Quellflächen für den 99m-Mast ($z_m = 50\text{m}$ bzw. 90m).

richtet sind als bei der Studie für die Energiebilanzstationen (s. Abb. 4.13). R_Q konvergiert hier nicht so rasch gegen 1 wie bei den bodennahen Footprints, da bei höhergelegenen Sensorpositionen ein Großteil der Partikel vor Erreichen des Messniveaus über größere horizontale Distanzen verlagert wird (z. B. HORST und WEIL, 1992).

So ist die Quellfläche mit einem Beitrag von 80% zur gesamten Konzentration in diesem Fall um einen Faktor 20 größer als bei den in 3m Höhe befindlichen Sensoren. Für den 99m-Mast wird anhand des Kurvenverlaufs eine Quellfläche von 6.4km^2 ($3\,200 \times 2\,000\text{m}^2$) mit einem Beitrag von 80% zur gesamten Konzentration als ausreichend angenommen. Diese als $F_{Z,M}$ bezeichnete Fläche (markiert durch die vertikale Linie) wird im folgenden Abschnitt für die Zeitintervallstudie verwendet.

4.4.2 Partikelfreisetzungsintervall

Nachdem im vorherigen Abschnitt die zu wählenden Partikelquellflächen ermittelt wurden, geht es im Folgenden um die Bestimmung der kleinstmöglichen Zeitintervalle zur Freisetzung neuer Partikelgenerationen. Die Länge des Zeitintervalls beschreibt dabei gleichzeitig über welchen Zeitraum ein Partikel verlagert werden soll. Bei der Ermittlung eines geeigneten Zeitintervalls muss gewährleistet sein, dass alle Partikel der ermittelten Quellfläche $F_{Z,E}$ (Energiebilanzstationen) bzw. $F_{Z,M}$ (99m-Mast) in dem besagten Zeitintervall den Sensor erreichen.

Für diese Sensitivitätsstudie wurden einzelne Simulationen (keine Ensembles) für verschiedene Zeitintervalle gemäß dem Setup für die 13UTC-Simulation durchgeführt. Dazu wurde wie bei den Simulationen in Abschnitt 4.3 nach 5h simulierter Zeit ein Satz von Partikeln freigesetzt und über unterschiedlich lange Zeitintervalle verlagert. Um zu ermitteln, nach welcher Verlagerungszeit Z [min] die Konzentration C_F in der betrachteten Fläche $F_{Z,E}$ bzw. $F_{Z,M}$ den Wert der Konzentration bezogen auf ein gewähltes Referenzintervall Z_{Ref} erreicht, wurde analog zu Gleichung 4.3 der relative Beitrag R_Z berechnet:

$$R_Z = \frac{C_F(Z)}{C_F(Z_{\text{Ref}})}. \quad (4.4)$$

Für die Energiebilanzstationen wurde $Z_{\text{Ref}} = 15\text{min}$ gewählt. Die maximale horizontale Distanz, die ein Partikel innerhalb dieses Intervalls zurücklegen kann, liegt unter Annahme eines mittleren Windes von etwa 2m/s bei $1\,800\text{m}$. Dieses Intervall sollte bei der Untersuchung der Konzentration in der Fläche $F_{Z,E}$ als Referenzintervall ausreichend sein, da die Partikelquellflächen $F_{Z,E}$ für die Energiebilanzstationen lediglich eine Erstreckung von $400 \times 400\text{m}^2$ um den jeweiligen Sensor aufweisen (s. Abschn. 4.4.1) und die Partikel somit innerhalb von Z_{Ref} den Sensor erreichen können.

In Abbildung 4.16 sind die relativen Beiträge R_Z für die Energiebilanzstationen graphisch dargestellt. Für den Großteil der Sensorpositionen haben alle Partikel in dem betrachteten Gebiet $F_{Z,E}$ bereits nach 2 bis 3min den jeweiligen Sensor erreicht. Bei der Station FS beträgt das minimal mögliche Verlagerungsintervall 4min, da aufgrund des relativ geringen mittleren Windes (s. Abb. 4.18, Mitte) an dieser Station auch noch nach etwas längerer Zeit Partikel aus dem betrachteten Gebiet den Sensor erreichen. Auf der Grundlage dieser Ergebnisse wird für die folgenden Simulationen ein Zeitintervall von 4min als ausreichend angesehen.

Ausgehend von dem für die Energiebilanzstationen erhaltenen Zeitintervall wurde für den 99m-Mast ein Referenzintervall von 30min betrachtet. Die maximale Verlagerungsdistanz eines Partikels liegt hier bei $3\,600\text{m}$. Abbildung 4.17 zeigt den relativen Beitrag R_Z in Abhängigkeit von dem Verlagerungsintervall für die Sensorhöhen 50 und 90m. Bei dem 90m-Niveau haben, bezogen auf das Referenzintervall, bereits nach

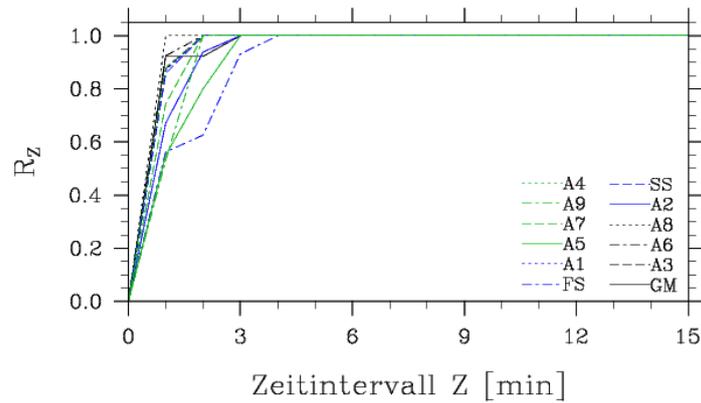


Abbildung 4.16: Relativer Beitrag R_Z der nach Z min in der Fläche $F_{Z,E}$ vorliegenden Konzentration zur nach 15min (Z_{Ref}) in derselben Fläche erreichten Konzentration (Energiebilanzstationen).

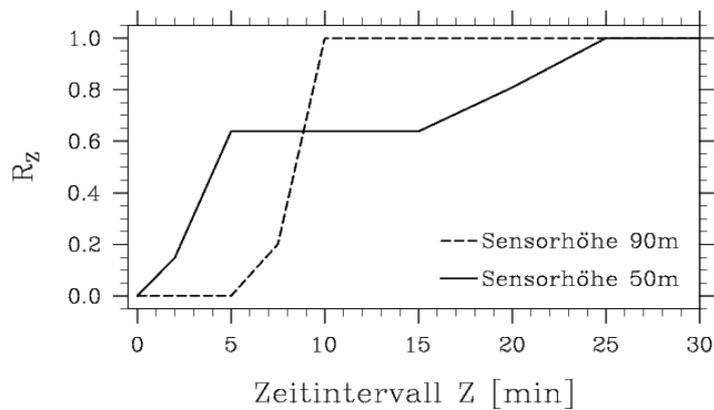


Abbildung 4.17: Relativer Beitrag R_Z der nach Z min in der Fläche $F_{Z,E}$ vorliegenden Konzentration zur nach 15min (Z_{Ref}) in derselben Fläche erreichten Konzentration (99m-Mast).

10min Verlagerungszeit alle Partikel aus der Quellfläche $F_{Z,M}$ den Sensor erreicht. Dagegen erschließt sich aus dem Verlauf der Kurve für das 50m-Niveau keine eindeutige Aussage über das für diese Höhe ausreichende Zeitintervall. Der relativ große Unterschied zwischen den beiden Messniveaus und die Tatsache, dass bei einem höheren Messniveau die Partikel aus der Quellfläche $F_{Z,M}$ den Sensor eher erreichen, deutet auf eine unzureichende Footprintstatistik hin. Da mit der Zeitintervallstudie für den 99m-Mast keine eindeutige Aussage über das zu wählende Zeitintervall möglich war, konnten im Rahmen dieser Arbeit für die Sensorniveaus des 99m-Mastes leider keine weiteren Simulationen durchgeführt werden.

4.5 Footprints für die Standorte der Energiebilanzstationen

Aus der Sensitivitätsstudie ergab sich folgendes neues Setup bezüglich der Partikelparameter. Die Freisetzung der Partikel erfolgte nun in Quellflächen mit einer Erstreckung von $\pm 200\text{m}$ in Richtung x und y um die jeweilige Sensorposition. Nach 5h Simulationszeit wurde der erste Satz von Partikeln gestartet und dann jeweils in Abständen von 4min neue Partikelgenerationen freigesetzt. Die Partikel wurden jeweils nach einer Verlagerungszeit von 4min gelöscht. Die Quellhöhe befand sich in 0.2m Höhe und nicht mehr wie in den vorherigen Simulationen direkt am Boden. Ein Grund hierfür ist, dass bei vorhandener Vegetation eine etwas vom Erdboden abgehobene Quellhöhe realistischere Bedingungen liefert. Der andere Grund ist, dass der mittlere Wind am Boden verschwindet und sich die dort freigesetzten Partikel somit lediglich durch kleinste Turbulenzelemente vom Erdboden entfernen können. Die Partikel müssten aufgrund dessen über relativ kleine Partikelzeitschritte verlagert werden, deren Länge maßgeblich von der subskaligen TKE, der Dissipation und dem Anteil der Subskaligen an der totalen TKE abhängt (s. Glg. 2.74). Je größer die Dissipation und der Anteil von SGS TKE zur totalen TKE, desto geringer ist der Partikelzeitschritt. Demnach müssen innerhalb eines LES-Zeitschrittes mehr Partikelzeitschritte gerechnet werden, was in einer höheren Rechenzeit resultieren kann. Es konnte anhand einiger Tests festgestellt werden, dass bei einer Quellhöhe von 0m etwa 2% mehr Rechenzeit zur Partikelverlagerung benötigt wird als mit einer Höhe von 0.2m.

Das sonstige Setup blieb soweit bestehen (s. Abschn. 4.2.2), einzig die Simulationsdauer wurde im Vergleich zu den ersten Tests (s. Abschn. 4.3) auf 12h hochgesetzt, um dadurch die Anzahl der verlagerten Partikelgenerationen noch weiter zu erhöhen. Es wurden fünf Ensembles simuliert, sodass in der Umgebung jeder Sensorposition ungefähr $5 \cdot 10^8$ Partikel verlagert wurden ($\sim 3000/\text{m}^2$ in dem $400 \times 400\text{m}^2$ Gebiet um den Sensor). Im Vergleich dazu waren es bei den in Abschnitt 4.3 vorgestellten ersten Tests 10^{10} Partikel, jedoch verteilt auf das gesamte Modellgebiet ($\sim 7/\text{m}^2$). Aus diesen fünf Ensembles wurden mithilfe des Auswerteprogramms Flussfootprints für die Energiebilanzstationen ($z_m = 3\text{m}$) bei einer Sensorfläche von $5 \times 5\text{m}^2$ berechnet. Im Folgenden werden die Ergebnisse für ausgewählte Stationen vorgestellt.

Abbildung 4.18 zeigt die Flussfootprints für die Stationen A3, FS und SS, wobei sich die Sensoren jeweils an der Position ($x = 0\text{m}$, $y = 0\text{m}$) befinden. Dargestellt ist nur der Bereich um den Sensor, in dem in der Simulation die Partikel freigesetzt wurden. Auf der rechten Seite dieser Abbildung ist der über die Dauer der Partikelverlagerung und über die fünf Ensembles gemittelte horizontale Wind in 25m (erster Gitterpunkt) an den hier betrachteten Sensorpositionen zu erkennen. Die Windrichtung in 25m gilt gleichermaßen in der Höhe der Messsensoren, da für diesen Bereich die Prandtl-Schicht Beziehungen gelten. Der hier gewählte Ausschnitt des Windfeldes ist der gleiche wie bei den Footprints auf der linken Seite. Mit dem Referenzvektor, der den geostrophischen Wind darstellt, wird über die Länge der Pfeile die Windgeschwindigkeit beschrieben. Diese beträgt etwa -1.3m/s bei A3, -0.6m/s bei FS und 1.7m/s bei SS. An der Station A3 tragen etwa 24 400, bei FS 21 800 und bei SS 25 200

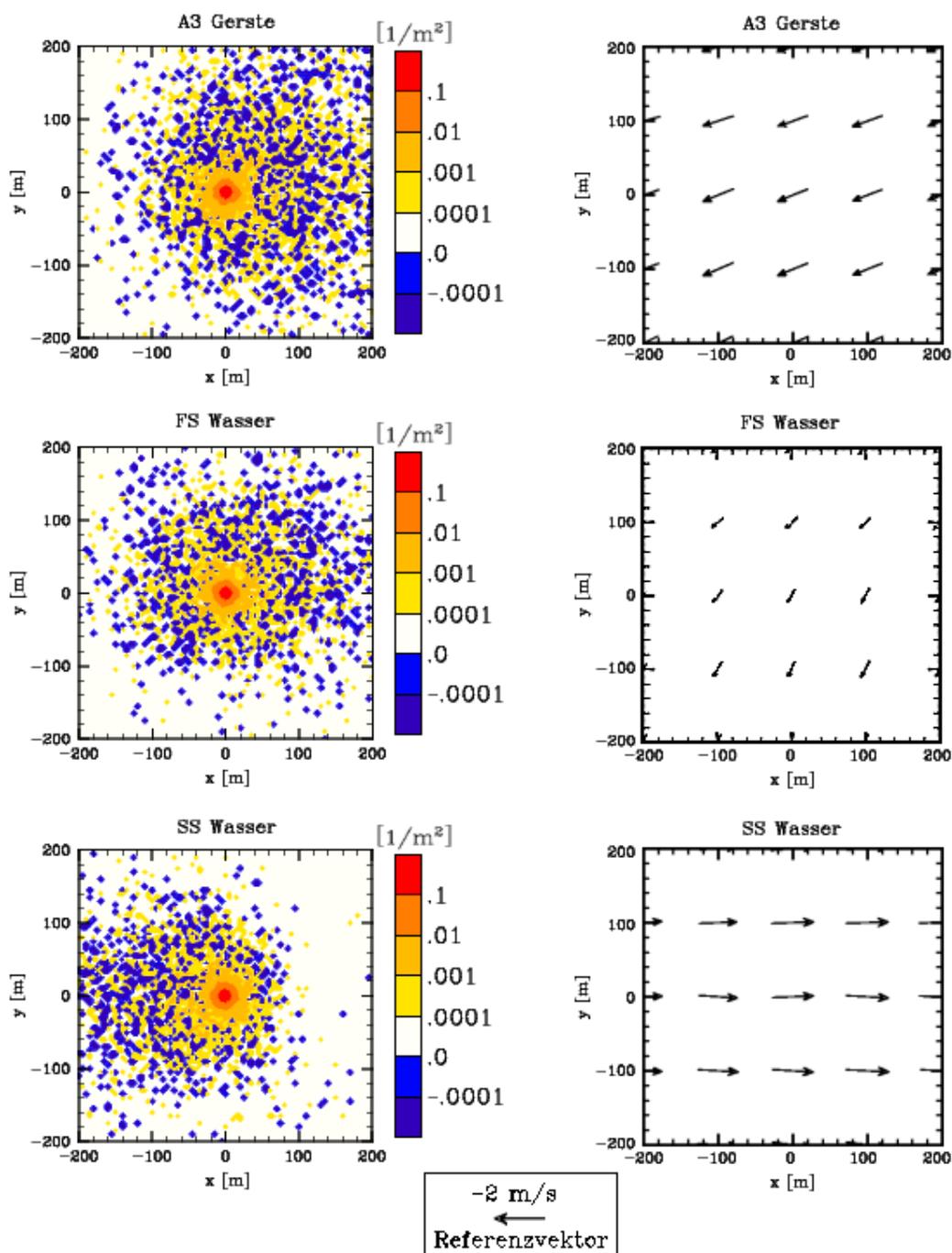


Abbildung 4.18: Flussfootprints für die Energiebilanzstationen A3, FS und SS. Der Sensor befindet sich jeweils an der Position $(0m, 0m)$. Die Koordinaten der Sensoren innerhalb des Modellgebietes sind $x = 25.0km$, $y = 21.2km$ (A3), $x = 24.3km$, $y = 15.2km$ (FS) und $x = 20.3km$, $y = 26.1km$ (SS). Die Flussfootprints sind das Ergebnis aus fünf Ensembles, gemittelt über die Dauer der Partikelverlagerung (7h pro Simulation). Auch der auf der rechten Seite dargestellte mittlere Wind (in 25m Höhe) beschreibt ein Ensemble-Mittel des über den Zeitraum der Partikelverlagerung gemittelten Windes. Der Referenzvektor beschreibt den in der Simulation verwendeten geostrophischen Wind.

Partikel zum Footprint bei. Das sind zwei Größenordnungen mehr als bei den ersten Tests, was in einer deutlich verbesserten Footprintstatistik resultiert.

In größerer Entfernung zum Sensor ist der Einfluss des mittleren Windes in der Ausrichtung der Flussfootprints zu erkennen. So kommt ein größerer Teil der Partikel aus der Richtung, aus der auch der mittlere Wind weht. Jedoch tritt der Einfluss des mittleren Windes bei einer geringeren Geschwindigkeit, wie an der Station FS, nicht so deutlich hervor. Die vereinzelt Beiträge aus anderen Richtungen sind durch die kurzfristigen Änderungen der Strömung zu erklären. Der mittlere Wind weht an den einzelnen Stationen jeweils aus unterschiedlichen Richtungen. Dies hängt mit der Heterogenität der Landoberfläche zusammen, die aufgrund des schwachen Windes und der starken differentiellen Erwärmung (Strahlungstag) am 30. Mai die Ausbildung starker Sekundärzirkulationen bedingte (s. Abb. 4.10). Insbesondere bei der Station SS sind die Auswirkungen der Sekundärzirkulation zu erkennen, die sich aufgrund der stark differentiellen Erwärmung von Wasser (Scharmützelsee) und Land entwickelt hat. Der bodennahe Wind weht hier entgegengesetzt zum geostrophischen Wind. Somit umfasst der Footprint für SS Gebiete westlich der Station, während die Footprints für den Großteil der anderen Stationen (nicht alle dargestellt) eher die östlich der Stationen gelegenen Gebiete markieren. Bei einem Vergleich der drei Footprints in Abbildung 4.18 ist zu erkennen, dass bei einer heterogenen Oberfläche für jede Sensorposition ein individueller Footprint mit jeweils unterschiedlichen Haupteinflussgebieten resultiert. Dies verdeutlicht, wie wichtig es ist für Messungen in heterogenem Gelände Footprintanalysen durchzuführen.

Bei der Betrachtung des näheren Sensorumfeldes fällt auf, dass der Einfluss des mittleren Windes mit sinkender Entfernung zum Sensor geringer wird. Um diesen Bereich näher betrachten zu können, ist dieser auf der linken Seite in Abbildung 4.19 vergrößert dargestellt. Auf der rechten Seite ist für die Standorte der hier betrachteten Stationen jeweils ein $1 \times 1\text{km}^2$ großer Ausschnitt der Vegetationsklassenkarte (s. Abb. 4.2) abgebildet. Das Kreuz markiert die Sensorposition und das Quadrat die Fläche, für die auf der linken Seite der Footprint dargestellt ist. Damit soll verdeutlicht werden, wie weit die Stationen jeweils von einem Oberflächenwechsel entfernt sind.

In der unmittelbaren Umgebung des Sensors ist in den Footprints keine bevorzugte Windrichtung zu erkennen. Trotz der Vorgabe einer geostrophischen Windgeschwindigkeit von -2 m/s sind die Footprints jeweils konzentrisch um den Sensor ausgerichtet. Zwar handelt es sich hier um einen relativ schwachen Wind, es wäre aber dennoch zu vermuten, dass sich zumindest bei den glatteren Wasseroberflächen ein deutlicherer Windrichtungseffekt in Sensornähe abzeichnen würde. An dieser Stelle macht sich bemerkbar, was auch schon in STEINFELD (2009) festgestellt wurde. Das Lagrange-sche stochastische Modell interpoliert die aufgelösten Windgeschwindigkeiten auch zwischen unterem Modellrand und erster Gitterebene linear und berücksichtigt somit nicht die Monin-Obukhovsche Ähnlichkeitstheorie. Demnach werden für die bodennahen aufgelösten Geschwindigkeiten in der Höhe der Messensoren deutlich niedrigere Werte berechnet als sich aus einem logarithmischen Verlauf ergeben würden. Das macht sich vor allem bei einem relativ schwachen Wind bemerkbar. Der Grund für die konzentrische Ausrichtung der Footprints liegt somit darin, dass aufgrund der unterschätzten aufgelösten Windgeschwindigkeiten in geringer Distanz zum Erdbö-

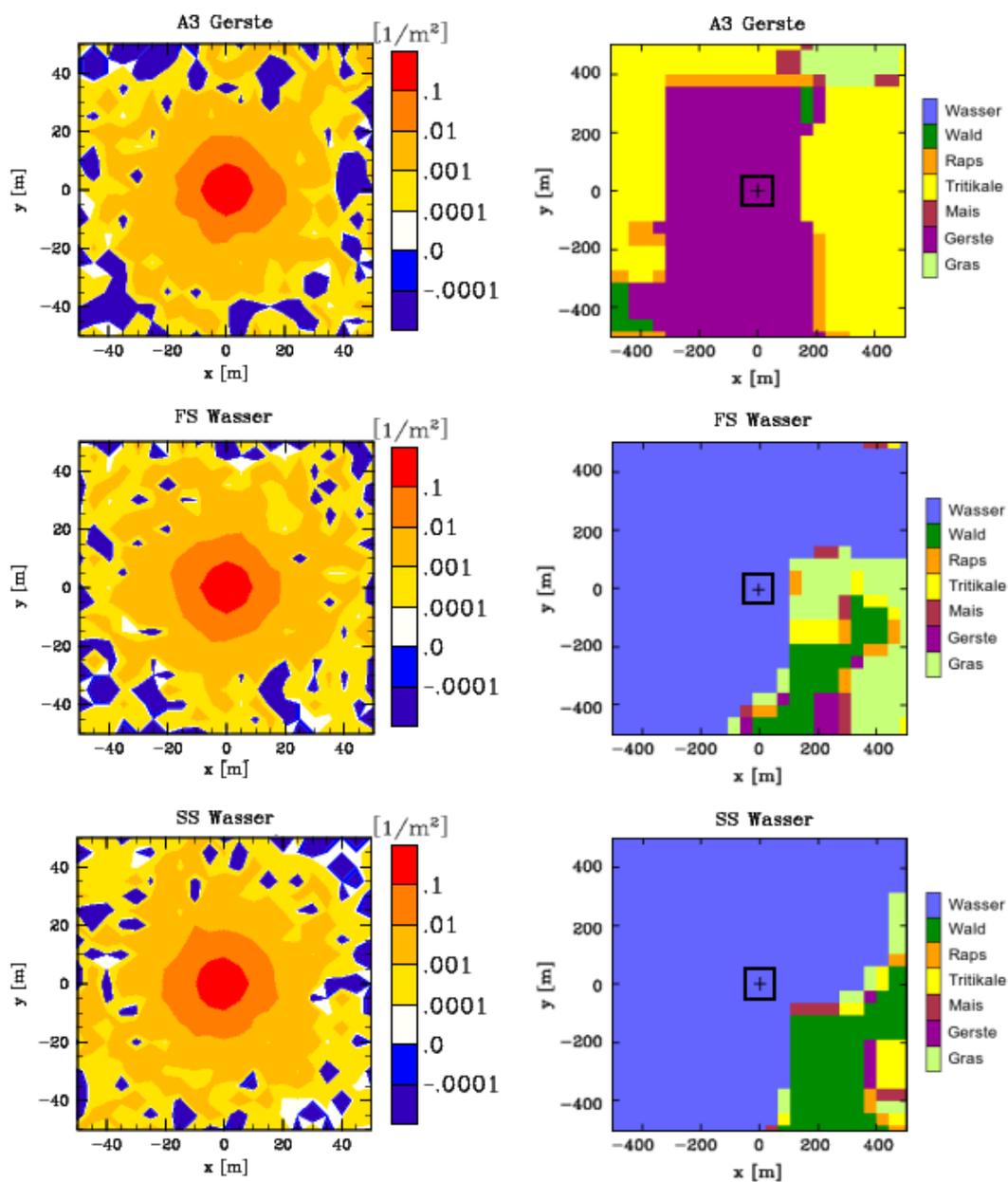


Abbildung 4.19: Flussfootprints wie in Abbildung 4.18, mit einer vergrößerten Ansicht der nahen Sensorumgebung ($\pm 50\text{m}$). Auf der rechten Seite sind zur Veranschaulichung der Sensorposition innerhalb des Untersuchungsgebietes $1 \times 1\text{km}^2$ große Ausschnitte der Vegetationsklassenkarte (s. Abb. 4.2) abgebildet. Das Kreuz markiert die Sensorposition und das Quadrat die Fläche, für die der Footprint auf der linken Seite dargestellt ist.

den die subskaligen Partikelgeschwindigkeiten einen größeren Anteil an der totalen Partikelgeschwindigkeit ausmachen als bei höheren aufgelösten Geschwindigkeiten. Die subskaligen Anteile werden in dem Lagrangeschen Partikelmodell mithilfe eines gaußverteilten Zufallsprozesses ermittelt (s. Abschn. 2.3). Mit dieser Verteilung der zufälligen Partikelgeschwindigkeiten wird demnach keine Richtung bevorzugt und es ergibt sich die dargestellte gleichmäßige Verteilung des Footprints um den Sensor. Auch die hier nicht abgebildeten Footprints weisen in Sensornähe eine ähnliche Form auf, unabhängig von der Oberflächenbeschaffenheit und des vorherrschenden mittleren Windes.

Ab einer gewissen Entfernung zum Sensor sind auch die für einen Flussfootprint typischen negativen Footprintwerte zu erkennen (in blau). Das bedeutet, dass aus bestimmten Gebieten stammende Partikel den Sensor größtenteils von oben durchkreuzt haben, sodass sich in der Summe ein negativer Beitrag dieser Gebiete zum Fluss ergibt. In diesem Fall ist die Zahl der Partikel mit einem negativen Beitrag relativ groß, da sich das Messniveau in 3m Höhe befindet und sich bereits nach einer kurzen Verlagerungszeit ($< 1\text{min}$) viele Partikel bereits oberhalb dieses Niveaus befinden.

Die in Abbildung 4.19 (links) dargestellten Gebiete von $100 \times 100\text{m}^2$ um den jeweiligen Sensor tragen zu mehr als 80% zum gesamten Fluss in dem $400 \times 400\text{m}^2$ -Gebiet bei (A3: 85%, FS: 88%, SS:89%). Über 80% des gesamten Flusses stammt demnach aus dem Gebiet, welches in Abbildung 4.19 (rechts) durch das Quadrat um die Sensorposition gekennzeichnet ist. Das deutet unter Vorbehalt darauf hin, dass die Messergebnisse an diesen Stationen für den jeweiligen Untergrund repräsentativ sind. Jedoch lässt sich aus diesen Ergebnissen noch keine endgültige Aussage darüber treffen.

Zusammenfassend zeigt sich der Einfluss des mittleren Windes lediglich bei den Partikeln, die aus größerer Entfernung den Sensor erreichen, da diese bereits durch verschiedene Höhen transportiert wurden, in denen die aufgelösten Anteile gegenüber den subskaligen Partikelgeschwindigkeiten überwiegen. Anhand dieser Ergebnisse zeigt sich, dass ein dringender Bedarf darin besteht, die aufgelösten Partikelgeschwindigkeiten in Bodennähe realistischer darzustellen. Sei es zum einen mithilfe einer logarithmischen Interpolation der aufgelösten Windgeschwindigkeiten zwischen nulltem und erstem Gitterpunkt oder durch eine deutlich höhere Auflösung des numerischen Gitters. Eine höhere Auflösung führt außerdem dazu, dass ein größerer Teil des Turbulenzspektrums aufgelöst wird und damit nur noch ein geringer Teil der Turbulenz als Zufallsprozess in der subskaligen Partikelgeschwindigkeit behandelt werden muss.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden Footprintmodellierungen erstmals für ein reales Untersuchungsgebiet unter Berücksichtigung der vorliegenden Oberflächenheterogenitäten und meteorologischen Bedingungen durchgeführt (s. Abschn. 4.2). Footprints beschreiben das Gebiet im Luv eines Messensors, welches maßgeblich das Ergebnis der Messung beeinflusst. Sie können somit Aufschluss darüber geben, ob eine Messung für die sich unterhalb des Sensors befindliche Oberfläche repräsentativ ist. Verwendet wurde dazu ein Lagrangesches stochastisches (LS) Modell, welches in eine Large-Eddy Simulation eingebettet ist. Auf diese Weise konnte eine Vielzahl von Partikeln direkt in dem Strömungsfeld der LES freigesetzt und deren Trajektorien unter Berücksichtigung der subskaligen Partikelgeschwindigkeiten mithilfe des LS Modells berechnet werden (s. Abschn. 2.3). Mit den daraus erhaltenen Partikeldaten konnten anhand eines in dieser Arbeit entwickelten Auswerteprogramms Footprints für beliebige Sensorpositionen innerhalb des betrachteten Messniveaus berechnet werden (s. Abschn. 2.4). Bereits im Vorfeld der Footprintstudien für das LITFASS-2003 Experiment stand fest, dass für eine hinreichende Statistik über einer heterogenen Landoberfläche die Verlagerung von sehr vielen Partikeln notwendig ist. Zudem ist es erforderlich mehrere Ensembles durchzuführen, um eine bessere Turbulenzstatistik in die Footprints einfließen zu lassen. Dies ist insbesondere bei Footprints für bodennahe Messungen von großer Bedeutung, wenn bei Simulationen mit einem relativ groben Gitter die Turbulenz im Bereich der Messsensoren nicht aufgelöst werden kann.

Die ersten Versuche Footprints an den Energiebilanzstationen und dem 99m-Mast zu bestimmen bestätigten, dass sich die Footprintmodellierung unter nicht-idealisierten Bedingungen deutlich schwieriger gestaltet als über einem homogenen oder idealisiert heterogenen Untergrund. Trotz der Verlagerung von etwa 10^{10} Partikeln (zehn Ensembles) konnten keine statistisch verwertbaren Footprints generiert werden, aus denen sich eine fundierte Aussage über das eine Messung beeinflussende Gebiet ergeben hätte. Von den 10^{10} Partikeln haben nur sehr wenige Partikel (Größenordnung 10^2) die jeweilige Sensorfläche von $5 \times 5\text{m}^2$ erreicht (s. Abschn. 4.3). Mithilfe von Sensitivitätsstudien bezüglich der Quellflächen (s. Abschn. 4.4.1) und Zeitintervalle (s. Abschn. 4.4.2) zur Partikelfreisetzung konnte die Anzahl der am Sensor registrierten Partikel bei den Energiebilanzstationen um zwei Größenordnungen erhöht und dadurch eine Verbesserung der Footprintstatistik erzielt werden. Dabei wurde festgestellt, dass ein Großteil der Partikel aus einigen hundert Metern Entfernung vom Sensor stammt und dass dieser Teil bereits nach wenigen Minuten den Sensor erreicht. Bei den höher gelegenen Sensoren am 99m-Mast zeigte sich erwartungsgemäß, dass der Großteil der Partikel aus einem deutlich größeren Gebiet stammt. Bezüglich des Zeitintervalls ergaben sich keine eindeutigen Ergebnisse. In den Flussfootprints für die bodennahen Messsensoren zeigte sich in größerer Entfernung zum Sensor der Einfluss des mittleren Windes auf die Ausrichtung der Footprints (s. Abschn. 4.5). Dagegen

konnte in der unmittelbaren Umgebung des Sensors, unabhängig von der betrachteten Sensorposition und der zugehörigen Oberflächeneigenschaften, kein Einfluss der mittleren Windrichtung festgestellt werden. In dem Bereich waren die Footprints nahezu konzentrisch um den jeweiligen Sensor ausgerichtet. Dies ließ darauf schließen, dass es in Bodennähe vermutlich zu einer Überschätzung der subskaligen Partikelgeschwindigkeiten gegenüber den aufgelösten Anteilen kommt. Es zeigt sich anhand dieser Ergebnisse, dass das in dieser Arbeit verwendete LES-LS Modell mit den vorhandenen Ressourcen durchaus in der Lage ist, unter heterogenen Bedingungen statistisch verwertbare Footprints zu modellieren. Jedoch besteht bei der Footprintmodellierung für bodennahe Messsensoren, wo ein Großteil des Transportes über subskalige Prozesse stattfindet, noch sehr großer Handlungsbedarf bezüglich der realistischen Bestimmung der bodennahen aufgelösten und subskaligen Partikelgeschwindigkeiten.

Um die Partikelgeschwindigkeiten in Bodennähe realistischer darzustellen, wäre es im nächsten Schritt sinnvoll, analog zur LES zwischen dem Erdboden und dem ersten Gitterpunkt anstelle der linearen Interpolation der aufgelösten Geschwindigkeiten eine logarithmische Interpolation zu verwenden. Insbesondere in Bodennähe führt die lineare Interpolation zu einer deutlichen Unterschätzung der aufgelösten Windgeschwindigkeit, die eigentlich innerhalb der bodennahen Schicht eher einem logarithmischen Verlauf folgen sollte. Auf diese Weise wird der Unterschätzung der aufgelösten Geschwindigkeiten entgegengewirkt und der Einfluss der mittleren Windrichtung auf den Footprint in Sensornähe kann genauer untersucht werden.

Außerdem könnten Simulationen mit einer deutlich höheren Auflösung durchgeführt werden. Eine Verfeinerung des Gitters würde dazu beitragen, den durch die Interpolation von aufgelöster Geschwindigkeit, TKE und Dissipation entstehenden Fehler möglichst gering zu halten. In erster Linie bedingt eine kleinere Gitterweite, dass ein größerer Teil des Turbulenzspektrums explizit aufgelöst wird und folglich nur noch ein geringer Anteil parametrisiert werden muss. Bei der Gitterverfeinerung wäre ebenfalls anzustreben, dass sich das betrachtete Messniveau oberhalb des ersten Gitterpunktes befindet. Gerade unterhalb dieses Punktes machen die subskaligen Partikelgeschwindigkeiten einen großen Anteil an der totalen Partikelgeschwindigkeit aus. Jedoch trifft in diesem Bereich die von WEIL *et al.* (2004) gemachte Annahme der Isotropie der subskaligen Turbulenz nicht zu. Laut STEINFELD *et al.* (2008) ist der dadurch entstehende Fehler vernachlässigbar, solange sich das Messniveau oberhalb des ersten Gitterpunktes befindet.

Eine höhere Auflösung bedeutet allerdings auch einen höheren Rechenaufwand. Daher sollte das Interpolationsverfahren in dem Lagrangeschen stochastischen Modell modifiziert werden, um das Rechnen mit einem in der Vertikalen gestreckten Gitter zu ermöglichen. Momentan funktioniert die Interpolation nur für ein äquidistantes Gitter. Die Verfeinerung des Gitters kann so auf die Grenzschicht beschränkt und oberhalb derer eine gröbere Auflösung gewählt werden. Im Vergleich zur kompletten Verfeinerung des Gitters würde damit weniger Rechenzeit benötigt.

Da sich im Rahmen dieser Arbeit die Untersuchung der Footprints für den 99m-Mast lediglich auf einige Sensitivitätsstudien beschränkten, wäre es ebenfalls interessant weitere Studien diesbezüglich durchzuführen. So könnten vermutlich auch hier die

Ressourcen besser ausgeschöpft werden, damit eine deutlich größere Partikelzahl zur Footprintberechnung beiträgt als in Abschnitt 4.3 vorgestellt wurde. Bei einer entsprechenden Footprintstatistik könnten so auch Footprints für höhere Messniveaus untersucht werden, in denen es nicht zu einer Überschätzung der subskaligen Anteile kommt. So könnte z. B. die Abhängigkeit der Footprints von der Distanz zwischen Quell- und Messhöhe studiert werden.

Literaturverzeichnis

- Baldocchi, D., 1997:** Flux footprints within and over forest canopies. *Boundary-Layer Meteorol.*, **85**, 273-292.
- Baldocchi, D. und Koautoren, 2001:** Fluxnet: A new tool to study the temporal and spatial variability of ecosystem-scale carbon dioxide, water vapour and energy flux densities. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **82**, 2415-2435.
- Bange, J., T. Spieß, M. Herold, F. Beyrich und B. Hennemuth, 2006:** Turbulent fluxes from Helipod flights above quasi-homogeneous patches within the LITFASS area. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 127-151.
- Beare, R. J. und Koautoren, 2006:** An intercomparison of large-eddy simulations of the stable boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **118**, 247-272.
- Beyrich, F., 2009:** Persönliche Mitteilung. Meteorologisches Observatorium Lindenberg, Deutscher Wetterdienst.
- Beyrich, F., H. A. R. De Bruin, D. Etling und T. Foken, 2006a:** Preface: The LITFASS-2003 experiment. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 1-4.
- Beyrich, F. und Koautoren, 2006b:** Area-averaged surface fluxes over the LITFASS region based on eddy-covariance measurements. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 33-65.
- Beyrich, F. und H.-T. Mengelkamp, 2006:** Evaporation over a heterogeneous land surface: EVA_GRIPS and the LITFASS-2003 experiment - an overview. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 5-32.
- Blackadar, A. K., 1997:** *Turbulence and diffusion in the atmosphere: Lectures in environmental sciences*. Springer Verlag, 185 S.
- Cai, X. und M. Y. Leclerc, 2007:** Forward-in-time and backward-in-time dispersion in the convective boundary layer: The concentration footprint. *Boundary-Layer Meteorol.*, **123**, 201-218.
- Cai, X., R. Zhang und Y. Li, 2006:** A large-eddy simulation and lagrangian stochastic study of heavy particle dispersion in the convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **120**, 413-435.
- Chehbouni, A., E. G. Njoku, J.-P. Lhomme und Y.H. Kerr, 1995:** Approaches for averaging surface parameters and fluxes over heterogeneous terrain. *J. Climate*, **8**, 1386-1393.
- Courant, R., K. Friedrichs und H. Lewy, 1928:** Über die partiellen Differentialgleichungen der mathematischen Physik. *Math. Ann.*, **100**, 32-74.

- Deardorff, J. W., 1974:** Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of a 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.
- Durrán, D. R., 1999:** *Numerical methods for wave equations in geophysical fluid dynamics*. Springer Verlag, 465 S.
- Dyer, A. J., 1974:** A review of flux-profile relationships. *Boundary-Layer Meteorol.*, **7**, 363-372.
- Etling, D., 2008:** *Theoretische Meteorologie*. Springer Verlag, 3. Aufl., 376 S.
- Finn, D., B. Lamb, M. Y. Leclerc und T. W. Horst, 1996:** Experimental evaluation of analytical and lagrangian surface-layer flux footprint models. *Boundary-Layer Meteorol.*, **80**, 283-308.
- Finnigan, J., 2004:** The footprint concept in complex terrain. *Agric. For. Meteorol.*, **127**, 117-129.
- Flesch, T. K., 1996:** The footprint for flux measurements from backward lagrangian stochastic models. *Boundary-Layer Meteorol.*, **78**, 399-404.
- Flesch, T. K., J. D. Wilson und E. Yee, 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 Verlag, 289 S.
- Foken, T. und M. Y. Leclerc, 2004:** Methods and limitations in validation of footprint models. *Agric. For. Meteorol.*, **127**, 223-234.
- Foken, T. und Koautoren, 2009:** Energy balance closure for the LITFASS-2003 experiment. *Theor. Appl. Climatol.*, **101**, 149-160.
- Fröhlich, J., 2006:** *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner Verlag, 1. Aufl., 414 S.
- Garratt, J. R., 1994:** *The atmospheric boundary layer*. Cambridge University Press, 316 S.
- Hadfield, M. G., 1994:** Passive scalar diffusion from surface sources in the convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **69**, 417-448.
- 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 J. C. Weil, 1992:** Footprint estimation for scalar flux measurements in the atmospheric surface layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **59**, 279-296.

- Horst, T. W. und J. C. Weil, 1994:** How far is far enough?: The fetch requirements for micrometeorological measurement of surface fluxes. *J. Atmos. Ocean. Tech.*, **11**, 1018-1025.
- Hsieh, C. I., G. Katul und T. Chi, 2000:** An approximate analytical model for footprint estimation of scalar fluxes in thermally stratified atmospheric flows. *Adv. Water Resour.*, **23**, 765-772.
- Kanda, M. und M. Hino, 1994:** Organized structure in developing turbulent flow within and above a plant canopy. *Boundary-Layer Meteorol.*, **68**, 237-257.
- Khairoutdinov, M. F. und Y. L. Kogan, 1999:** A large eddy simulation model with explicit microphysics: Validation against aircraft observations of a stratocumulus-topped boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **56**, 2115-2131.
- Kim, S.-W., C.-H. Moeng, J. C. Weil und M. C. Barth, 2005:** Lagrangian particle dispersion modeling of the fumigation process using large-eddy simulation. *J. Atmos. Sci.*, **62**, 1932-1946.
- Kljun, N., P. Calanca, M. W. Rotach und H. P. Schmid, 2004:** A simple parameterisation for flux footprint predictions. *Boundary-Layer Meteorol.*, **112**, 503-523.
- Kljun, N., M. W. Rotach und H. P. Schmid, 2002:** A three-dimensional backward lagrangian footprint model for a wide range of boundary-layer stratifications. *Boundary-Layer Meteorol.*, **103**, 205-226.
- Kohsiek, W., W. M. L. Meijninger, H. A. R. De Bruin und F. Beyrich, 2006:** Saturation of the large aperture scintillometer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 111-126.
- Kolmogorov, 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, 77-81.
- Kraus, H., 2008:** *Grundlagen der Grenzschicht-Meteorologie.* Springer Verlag, 1. Aufl., 214 S.
- Kurbanmuradov, O., U. Rannik, K. Sabelfeld und T. Vesala, 1999:** Direct and adjoint monte carlo algorithms for the footprint problem. *Monte Carlo Meth. Appl.*, **5**, 85-112.
- Kurbanmuradov, O. und K. Sabelfeld, 2000:** Stochastic lagrangian models for turbulent dispersion in the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **97**, 191-218.
- Lamb, R. G., 1990:** A numerical simulation of dispersion from an elevated point source in the convective planetary boundary layer. *Atmos. Environ.*, **12**, 1297-1304.

- Leclerc, M. Y. und G. Thurtell, 1990:** Footprint prediction of scalar fluxes using a markovian analysis. *Boundary-Layer Meteorol.*, **52**, 247-258.
- Leclerc, M. Y., S. H. Shen und B. Lamb, 1997:** Observations and large-eddy simulation modeling of footprints in the lower convective boundary layer. *J. Geophys. Res.*, **102**, 9323-9334.
- Leonard, A., 1974:** Energy cascade in large eddy simulation of turbulent fluid flows. *Advances in Geophysics*. Academic Press, Band **18**, 237-248.
- Letzel, M. O., M. Krane und S. Raasch, 2008:** High resolution urban large-eddy simulation studies from street canyon to neighbourhood scale. *Atmos. Env.*, **42**, 8770-8784.
- Letzel, M. O. und S. Raasch, 2003:** Large-eddy simulations of thermally induced oscillations in the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **60**, 2328-2341.
- 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, 195-210.
- Mahrt, L., 2000:** Surface heterogeneity and vertical structure of the boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **96**, 33-62.
- Markkanen, T., 2004:** *Micrometeorology of forest surface fluxes*. Dissertation, Division of Atmospheric Sciences, University of Helsinki.
- Maronga, B., 2010:** *The effect of secondary circulations on the boundary layer turbulence during LITFASS-2003 - An LES study*. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 97 S.
- Mauder, M., C. Liebenthal, M. Göckede, J.-P. Leps, F. Beyrich und T. Foken, 2006:** Processing and quality control of flux data during LITFASS-2003. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 67-88.
- Meijninger, W. M. L., F. Beyrich, A. Lüdi, W. Kohsiek und H. A. R. De Bruin, 2006:** Scintillometer-based turbulent fluxes of sensible and latent heat over a heterogeneous land surface - A contribution to LITFASS-2003. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 89-110.
- Mengelkamp, H.-T. und Koautoren, 2006:** Evaporation over a heterogeneous land surface. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **87**, 775-786.
- Moeng, C. und P. P. Sullivan, 1994:** A comparison of shear- and buoyancy-driven planetary boundary layer flows. *J. Atmos. Sci.*, **51**, 999-1022.
- Monin, A. S. und A. M. Obukhov, 1954:** Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground. *Trudy Academia Nauka SSR.*, **24**, 1963-1987.
- Monin, A. S. und A. M. Yaglom, 1975:** *Statistical Fluid Dynamics: Mechanics of Turbulence*. Vol. 2, MIT Press, 874 S.

- Pasquill, F., 1972:** Some aspects of boundary layer description. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, **98**, 469-494.
- Pasquill, F. und F. B. Smith, 1983:** *Atmospheric Diffusion*. Wiley, New York, 3. Aufl., 437 S.
- Patrinos, A. A. N. und A. L. Kistler, 1977:** A numerical study of the Chicago lake breeze. *Boundary-Layer Meteorol.*, **12**, 93-123.
- Piacsek, S. A. und G. P. Williams, 1970:** Conservation properties of convection difference schemes. *J. Comput. Phys.*, **6**, 392-405.
- Pielke, R., 2002:** *Mesoscale meteorological modeling*. Academic Press, 676 S.
- Raasch, S. und D. Etling, 1998:** Modeling deep ocean convection: Large eddy simulation in comparison with laboratory experiments. *J. Phys. Ocean.*, **28**, 1786-1802.
- Raasch, S. und G. Harbusch, 2001:** An analysis of secondary circulations and their effects caused by small-scale surface inhomogeneities using large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, **101**, 31-59.
- Raasch, S., und M. Schröter, 2001:** PALM - A large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol. Z.*, **10**, 363-372.
- Rannik, U., M. Aubinet, O. Kurbanmuradov, K. K. Sabelfeld, T. Markkanen und T. Vesala, 2000:** Footprint analysis for measurements over a heterogeneous forest. *Boundary-Layer Meteorol.*, **97**, 137-166.
- Rannik, U., T. Markkanen, J. Raittila, P. Hari und T. Vesala, 2003:** Turbulence statistics inside and over forest: Influence on footprint prediction. *Boundary-Layer Meteorol.*, **109**, 163-189.
- Rebmann, C. und Koautoren, 2005:** Quality analysis applied on eddy covariance measurements at complex forest sites using footprint modelling. *Theor. Appl. Climatol.*, **80**, 121-141.
- Risken, H., 1996:** *The Fokker-Planck equation: Methods of solution and applications*. Springer Verlag, 2. Aufl., 472 S.
- Roache, P. J., 1985:** *Computational Fluid Dynamics*. Hermosa Publishers, 6. Aufl., 446 S.
- Rodean, H. C., 1996:** *Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion*. Meteor. Monogr., Nr. 48, Amer. Meteor. Soc., 84 S.
- Sagaut, P., 2001:** *Large eddy simulation for incompressible flows*. Springer Verlag, 1. Aufl., 319 S.
- Schmid, H. P., 1994:** Source areas for scalars and scalar fluxes. *Boundary-Layer Meteorol.*, **67**, 293-318.

- 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 T. R. Oke, 1990:** 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 U. Schumann, 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.* Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 119 S.
- Schuepp, P. H., M. Y. Leclerc, J. MacPherson und R. L. Desjardins, 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.
- Schumann U. und R. A. Sweet, 1988:** Fast Fourier transforms for direct solution of Poisson's equation with staggered boundary conditions. *J. Comput. Sci.*, **75**, 123-137.
- Sheng, J., D. G. Wright, R. J. Greatbatch und D. E. Dietrich, 1998:** CANDIE: A new version of the DieCAST ocean circulation model. *J. Atmos. Ocean. Technol.*, **15**, 1414-1432.
- Shuttleworth, W., Z.-L. Yang und M. A. Arain, 1997:** Aggregation rules for surface parameters in global models. *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, **1**, 217-226.
- Smagorinsky, J., 1963:** General circulation experiments with the primitive equation. Part 1: The basic experiment. *Mon. Wea. Rev.*, **91**, 99-164.
- Sogachev, A. und J. Lloyd, 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., G. Menzhulin, M. Heimann und J. Lloyd, 2002:** A simple three-dimensional canopy-planetary boundary layer simulation model for scalar concentrations and fluxes. *Tellus*, **54B**, 784-819.
- Sommeria, G. und J. W. Deardorff, 1977:** Subgrid-scale condensation in models of nonprecipitating clouds. *J. Atmos. Sci.*, **34**, 344-355.
- Steinfeld, G., 2009:** *Die Beurteilung von Turbulenzmess- und Analyseverfahren der Mikrometeorologie durch virtuelle Messungen innerhalb von Grobstruktursimulationen.* Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 96 S.

- Steinfeld, G., 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.
- Steinfeld, G., S. Raasch, T. Markkanen, 2008:** Footprints in homogeneously and heterogeneously driven boundary layers derived from a lagrangian stochastic particle model embedded into large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, **129**, 225-248.
- Stull, R. B., 1988:** *An introduction to boundary layer meteorology*. Kluwer Academic Publishers, 1. Aufl., 666 S.
- Thomson, D. J., 1987:** Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flow. *J. Fluid. Mech.*, **180**, 529-556.
- Uhlenbrock, J., 2006:** *Numerische Untersuchung der konvektiven Grenzschicht über realen heterogenen Landoberflächen mit einem Grobstruktursimulationsmodell*. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 168 S.
- Vesala, T. und Koautoren, 2008:** Flux and concentration footprint modelling: State of the art. *Environmental Pollution*, **152**, 653-666.
- 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., P. P. Sullivan und C. Moeng, 2004:** The use of large eddy simulations in Lagrangian particle dispersion models. *J. Atmos. Sci.*, **61**, 2877-2887.
- Willis, G. E. und J. W. Deardorff, 1976:** A laboratory model of diffusion into the convective boundary layer. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, **102**, 427-445.
- Zdunkowski, W. und A. Bott, 2003:** *Dynamics of the atmosphere: A course in theoretical meteorology*. Cambridge University Press, 719 S.

Danksagung

Zuallererst möchte ich meinen herzlichen Dank an Herrn Prof. Dr. Siegfried Raasch richten, der mir für das Fortkommen meiner Diplomarbeit stets neue Denkanstöße gegeben hat und mir sowohl bei technischen Problemen als auch bei inhaltlichen Fragen mit Rat und Tat zur Seite stand.

Den Mitgliedern der PALM-AG gilt ebenfalls mein Dank für die Hilfestellungen in technischen Fragen. Auch den Mitarbeitern des HLRN in Hannover gilt dieser Dank, insbesondere Herrn Gabriel Gaus, für die geduldige Unterstützung bei der Bewältigung zahlreicher technischer Probleme. Ein weiteres Dankeschön geht an Frau Brünig, die mir doch das eine oder andere Mal durch den bürokratischen Irrgarten geholfen hat.

Natürlich sollen auch meine Kommilitonen und guten Freunde Viola Hilger, Linda Voß, Jens Fricke und Michael Schrempf nicht unerwähnt bleiben, die mir sowohl mit den zahlreichen Gruppensitzungen zur Prüfungsvorbereitung als auch mit der studentischen Freizeitgestaltung eine erinnerungswürdige Studienzeit beschert haben.

Ebenfalls möchte ich mich natürlich bei den fleißigen und kritischen Korrekturlesern dieser Diplomarbeit bedanken.

Meinen Eltern, Geschwistern und Großeltern möchte ich ganz herzlich dafür danken, dass sie sich stets mit mir über meine bestandenen Prüfungen gefreut haben, aber auch für die aufmunternden Worte, wenn das Studium mal nicht so reibungslos verlief.

Zu tiefstem Dank bin ich meinem Freund und zugleich bestem Freund Matthias Sühning verpflichtet, für die liebevolle, geduldige und kompetente Unterstützung während der Diplomarbeitsphase, aber auch für die zahlreichen schönen Momente, die wir bisher erlebt haben. - *Bin verdammt froh Dich zu haben.* -

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel sowie dem Rat meiner akademischen Lehrer angefertigt habe.

Hannover, 18. Oktober 2010