

BERICHTE AUS DEM ZENTRUM FÜR MEERES- UND KLIMAFORSCHUNG

Reihe A: Meteorologie



Nr. 39

Ingo Schlüter

**Simulation des Transports biogener Emissionen
in und über einem Waldbestand mit einem
mikroskaligen Modellsystem**

Berichte aus dem Zentrum für Meeres- und Klimaforschung
Reihe A: Meteorologie

Nr. 39

Ingo Schlüter

**Simulation des Transports biogener Emissionen
in und über einem Waldbestand mit einem
mikroskaligen Modellsystem**

Die "**Berichte aus dem Zentrum für Meeres- und Klimaforschung**" erscheinen in 6 Reihen mit folgendem Inhalt:

Reihe A:	Meteorologie
Reihe B:	Ozeanographie
Reihe C:	Geophysik
Reihe D:	Biogeochemie und Meereschemie
Reihe E:	Hydrobiologie und Fischereiwissenschaft
Reihe Z:	Interdisziplinäre Zentrumsberichte

Alle Beiträge sind unredigiert und geben allein die Meinung des Verfassers wieder. Sie sollen in erster Linie dem sich jeweiligen Thema befassenden Personenkreis als Arbeitsunterlagen dienen und sind oft gleichzeitig Berichte für die Institutionen, die die betreffenden Arbeiten gefördert haben.

Der Volltext dieser Arbeit ist verfügbar unter:

http://www.zmaw.de/fileadmin/Bib/ZMK_A.html

Diese Arbeit wurde am 27. Juni 2006 vom Department für Geowissenschaften der Universität Hamburg als Dissertation angenommen.

- 1. Gutachter: Prof. Dr. K. Heinke Schlünzen**
- 2. Gutachter: Prof. Dr. Ralf Koppmann**

**Prof. Dr. Kay-Christian Emeis
(Leiter des Departments für Geowissenschaften)**

ISSN 0947-7128

Zentrum für Meeres- und Klimaforschung der Universität Hamburg
Bundesstr. 53 – 20146 Hamburg

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden für zwei ausgewählte Tage Simulationsrechnungen durchgeführt, um biogene Emissionen aus einem Waldgebiet modellieren zu können. Dazu wurde ein auf die Mikroskala angepasstes Modellsystem verwendet, das aus dem mikroskaligen Transport- und Strömungsmodell MITRAS und dem mikroskaligen Chemietransportmodell MICTM besteht. Die beiden Modelle wurden zunächst an die Vegetation angepasst. MITRAS wurde um eine Bestandsparametrisierung erweitert, während ein Emissionsalgorithmus für biogene Emissionen in MICTM implementiert wurde. Zum Vergleich wurden Daten des AFO2000-Projektes ECHO („Emission und chemische Umwandlung biogener flüchtiger organischer Verbindungen“) herangezogen. In zwei Feldmesskampagnen wurden während ECHO in einem auf dem Gelände des Forschungszentrums Jülich liegenden Waldgebiet mehrere Messtürme aufgestellt, deren Messgeräte eine gute Datendichte für den Vergleich mit den Modellergebnissen gewährleisten konnten. Die meteorologischen Parameter Temperatur und Windgeschwindigkeit konnten mit MITRAS gut simuliert werden, die Randbedingungen wurden an den Einströmrändern teilweise aus Messungen vorgegeben. Unter Verwendung eines modifizierten Guenther-Algorithmus’ wurden mit MICTM zu dem in MITRAS berechneten meteorologischen Parametern Isoprenemissionen simuliert. Die Isoprenemissionen konnten vom Modellsystem gut modelliert werden, wenn realitätsnahe Isoprenkonzentrationen am Einströmrand vorgegeben wurden. Bei unbekannten und daher zu niedrigen Einströmprofilen wurden die Isoprenemissionen jedoch um den Faktor 3 unterschätzt. Neben Isopren konnte auch die OH-Konzentration gut wiedergegeben werden. NO, NO₂ und O₃ konnten wie beim Isopren nur durch Vorgabe geeigneter Einströmprofile modelliert werden. Diese Stoffe waren direkt von den Einströmbedingungen abhängig. Das Vorhersagegebiet war für das Modellsystem zu klein, um diese Stoffe in der richtigen Größenordnung zu berechnen. Die Modellierung von SF₆ als Tracer war mit großen Unsicherheiten verbunden, da das Konzentrationsgefälle sehr groß war und die Genauigkeit des Messpunktes nur auf 25 m bestimmt werden konnte, was einem Radius von 5 Gitterboxen entspricht.

Abstract

In this study, two days were selected to simulate biogenic emissions from a forest. A model system is used, which is adapted to the microscale. It consists of the microscale transport and stream model MITRAS and the microscale chemistry transport model MICTM. First of all, both models were adjusted to handle vegetation. MITRAS was extended by a parameterisation of a forest stand, while MICTM was upgraded with an algorithm for biogenic emissions. Data from the AFO2000-project ECHO (“emission and chemical transformation of biogenic volatile organic compounds”) is taken as a basis to compare the model simulations with measurements. Two field campaigns were carried out in ECHO in a forest on the area of the Research Centre Jülich. The data obtained from different towers in different heights provide a good basis for the comparison with the model output. Meteorological data, i. e. temperature and wind, were well simulated with MITRAS, the boundary conditions at the inflow were taken partly from measurements. A modified Guenther-algorithm was used in MICTM to calculate diurnal cycles of isoprene corresponding to the meteorological parameters which were determined with MITRAS. If realistic isoprene concentrations at the inflow boundary were provided, the emissions of isoprene could be simulated by the model system in the right magnitude. They were underestimated by a factor of 3, if the concentrations were unknown and therefore assumed too low. Besides isoprene, OH could be simulated properly. With appropriate inflow conditions, NO, NO₂ and O₃ were also well simulated. These species were strictly dependent from the boundary conditions. The model area was too small for the model system to predict them self-dependant and in the correct magnitude. The simulation of SF₆ as a tracer is associated with great uncertainties, because the gradient of the concentrations was very high and the location where SF₆ was measured could be defined within an uncertainty of 25 m which is equivalent to a radius of 5 grid boxes.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	i
Abstract	ii
Inhaltsverzeichnis	iii
Abbildungsverzeichnis	vi
Tabellenverzeichnis	ix
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Stand der Forschung	3
1.3 Vorgehen in dieser Arbeit	4
2 Modellsystem	5
2.1 Überblick über verschiedene Modelltypen	5
2.1.1 Statistische Modelle	5
2.1.2 Diagnostische Modelle	6
2.1.3 Prognostische Modelle	6
2.2 MITRAS	8

2.2.1	Modellgleichungen	8
2.2.2	Anpassungen von MITRAS an die Vegetation	10
2.3	MICTM	13
2.3.1	Isopren	15
2.3.2	Photolyseraten	17
2.3.3	Biogene Emissionen	19
3	Eingabedaten und Randbedingungen	23
3.1	Modellgebiet	23
3.2	Präprozessoren	25
3.2.1	GRITOP	25
3.2.2	MASK	27
3.2.3	MITRAS 1D	28
3.2.4	STAR	32
3.3	Randbedingungen	33
3.3.1	Randbedingungen für MITRAS	33
3.3.2	Randbedingungen für MICTM	35
4	Anwendung des Modellsystems	37
4.1	Modellläufe	37
4.2	Ausgewählte Tage	39
4.3	Auswertung der Meteorologie (MITRAS)	41
4.3.1	Ostwindlage am 14.07.2003	41
4.3.2	Westwindlage am 18.07.2003	47
4.4	Auswertung der Chemie (MICTM)	51
4.4.1	Ostwindlage am 14.07.2003	53
4.4.2	Westwindlage am 18.07.2003	58

4.4.3	Sensitivitätsstudien	64
4.4.4	Tracer-Experimente	70
5	Diskussion und Ausblick	74
5.1	Diskussion	74
5.2	Ausblick	76
	Danksagung	78
A	Numerische Betrachtungen	79
B	Umrechnungen	82
B.1	Bestimmung des Blattflächendichteprofiles	82
B.2	Photonenenergie	84
C	RADM2 - Spezies und Reaktionen	86
	Literaturverzeichnis	90

Abbildungsverzeichnis

2.1	Widerstandskoeffizient c_d für den 14.07.2003	11
2.2	Schaubild des Modellsystems	14
2.3	Photolyserate $J(\text{O}^1\text{D})$ für den 14.07.2003	17
2.4	Photolyserate $J(\text{NO}_2)$ für den 14.07.2003	18
2.5	Photolyserate $J(\text{O}^1\text{D})$ für den 18.07.2003	18
2.6	Photolyserate $J(\text{NO}_2)$ für den 18.07.2003	19
2.7	Bestimmung der Strahlungsparameter	21
3.1	Simulationsgebiet	24
3.2	Modellgebiet in der Gitterstruktur	27
3.3	Temperatur aus Radiosondendaten	29
3.4	Taupunkt aus Radiosondendaten	30
3.5	Hintergrundkonzentrationen von O_3 und OH	33
3.6	Hintergrundkonzentrationen von NO_2 und NO	35
4.1	Stationarität der Windgeschwindigkeit und der Temperatur	38
4.2	Messungen der Windrichtung	39
4.3	Messungen der Strahlung	40
4.4	Streudiagramm der Temperatur für den 14.07.2003	42
4.5	Tagesgang der Temperatur für den 14.07.2003	42

4.6	Modelliertes Temperaturfeld für den 14.07.2003	43
4.7	Gemessene und modellierte Temperaturprofile für den 14.07.2003	44
4.8	Horizontalschnitt des Temperaturfeldes für den 14.07.2003	45
4.9	Streudiagramm der Windgeschwindigkeit für den 14.07.2003	46
4.10	Streudiagramm der u -Komponente für den 14.07.2003	46
4.11	Streudiagramm der v -Komponente für den 14.07.2003	47
4.12	Vertikalschnitt der Windgeschwindigkeit für den 14.07.2003	48
4.13	Windgeschwindigkeitsprofile am 14.07.2003 um 14:00 Uhr	48
4.14	Streudiagramm der Temperatur für den 18.07.2003	49
4.15	Tagesgang der Temperatur für den 18.07.2003	50
4.16	Horizontalschnitt des Temperaturfeldes für den 18.07.2003	50
4.17	Streudiagramm der Windgeschwindigkeit für den 18.07.2003	51
4.18	Streudiagramm der u -Komponente für den 18.07.2003	52
4.19	Streudiagramm der v -Komponente für den 18.07.2003	52
4.20	OH-Konzentration am 14.07.2003 in 38 m	53
4.21	O ₃ -Konzentration am 14.07.2003 in 36 m	54
4.22	NO ₂ -Konzentration am 14.07.2003 in 36 m	55
4.23	NO-Konzentration am 14.07.2003 in 36 m	56
4.24	Horizontalschnitt der Isoprenkonzentration für den 14.07.2003	57
4.25	Vertikalschnitt der Isoprenkonzentration für den 14.07.2003	57
4.26	Tagesgang der Isoprenkonzentration für den 14.07.2003	58
4.27	Messungen der Isoprenkonzentration für den 14.07.2003	59
4.28	OH-Konzentration am 18.07.2003 in 38 m	59
4.29	O ₃ -Konzentration am 18.07.2003 in 36 m	60
4.30	NO ₂ -Konzentrationen am 18.07.2003 in 36 m	61
4.31	NO-Konzentrationen am 18.07.2003 in 36 m	61

4.32	Horizontalschnitt der Isoprenkonzentration für den 18.07.2003 . . .	62
4.33	Vertikalschnitt der Isoprenkonzentration für den 18.07.2003	63
4.34	Messungen der Isoprenkonzentration für den 18.07.2003	63
4.35	Differenzenplot der Isoprenkonzentration für den 14.07.2003 . . .	65
4.36	Differenzenplot der Isoprenkonzentration für den 18.07.2003 . . .	66
4.37	Neue Einströmprofile für Isopren	67
4.38	Isoprenkonzentration am 14.07.2003	68
4.39	Differenzenplot der Isoprenkonzentration für den 14.07.2003 . . .	68
4.40	Isoprenkonzentration am 18.07.2003	69
4.41	Differenzenplot der Isoprenkonzentration für den 18.07.2003 . . .	69
4.42	Horizontalschnitt der SF ₆ -Konzentration für den 18.07.2003	71
4.43	Vertikales SF ₆ -Konzentrationsprofil für den 18.07.2003	72
4.44	Windgeschwindigkeitsprofil für den 18.07.2003	72
B.1	Blattflächenindex und -dichte	83

Tabellenverzeichnis

2.1	Parameter für den Emissionsalgorithmus	20
3.1	Landnutzungsklassen	25
3.2	Vertikale Schichten der Modelle	26
3.3	Korrelationskoeffizienten für die Windgeschwindigkeit	31
3.4	Hintergrundkonzentrationen der POPCORN-Kampagne	34
A.1	Performance-Test mit MITRAS	80
C.1	Substanzen in MICTM	86
C.2	Photolysereaktionen in STAR und MICTM	88

1 Einleitung

1.1 Motivation

Die Anzahl der Tage mit Sommersmog¹ ist ebenso wie die Hintergrundkonzentration von Ozon signifikant gestiegen (Winkler, 2005). In Europa wird an 68 % der Luftqualitätsmessstationen der Grenzwert von $180 \mu\text{g}$ Ozon pro m^3 Luft für über 3 Stunden im Jahre 2003² überschritten. Durch photochemische Prozesse können Ozonkonzentrationen während der Sommermonate auf so hohe Werte steigen, dass sie eine mögliche Gesundheitsgefährdung für den Menschen und eine mögliche Gefahr für die Landwirtschaft darstellen (Bittner et al., 2005).

Bodennahes Ozon wird aus den Vorläufern NO_x und flüchtigen organischen Kohlenstoffverbindungen (VOC) gebildet. Biogene VOC sind für die Ozonbildung weitaus wichtiger als bisher angenommen. Sie leisten außerdem einen signifikanten Beitrag für die Bildung von Photosmog im industrialisierten Teil der Welt, wo hohe NO_x -Konzentrationen vorhanden sind (Steinbrecher et al., 2005). Wie frühere Untersuchungen gezeigt haben (Stick et al., 2000), sind die NO_x -Konzentrationen in Mitteleuropa großräumig hoch genug, um auch über den Hauptemissionsgebieten der biogenen VOC erheblich zur Ozonbildung beizutragen. Biogene VOC-Emissionen können nur Ozon bilden, wenn genügend anthropogenes NO_x vorhanden ist.

Während der Sommermonate übersteigen die geschätzten biogenen Emission die anthropogenen VOC Emissionen in Deutschland (Richter et al., 1998). Die emit-

¹Als Sommersmog werden hohe Aerosol- und Ozonkonzentrationen in der Umgebungsluft bezeichnet. Sommersmog wird in der Literatur auch als Photosmog bezeichnet.

²Aus einer Presseveröffentlichung der Europäischen Umweltbehörde im Oktober 2003

tierten VOC sind weitgehend ungesättigt, daher hoch reaktiv und haben ein höheres Ozonbildungspotenzial als die meisten anthropogenen VOC (Atkinson, 2000). Guenther et al. (1995) schätzen, dass die globalen biogenen Emissionen in der Größenordnung von bis zu 1150 Tg C pro Jahr liegen und demnach um den Faktor 5 bis 10 höher sind als anthropogene Emissionen. In den mittleren Breiten machen biogene VOC an sonnigen Tagen etwa 60 % aller VOC aus (Koppmann et al., 2005), die jedoch für 90 % des photochemischen Umsatzes wegen ihrer Reaktion mit OH-Radikalen verantwortlich sind.

Trotz signifikanter Fortschritte in den letzten 10 Jahren und der Erkenntnis, dass biogene VOC bedeutsam für das gesamte System der Atmosphäre sind, ist das Verständnis von Biosphären–Atmosphären Wechselwirkungen noch am Anfang. Der Einfluss biogener Emissionen auf die Photochemie der Troposphäre, die Luftqualität und die Bildung klimawirksamer Folgeprodukte wie troposphärisches Ozon oder organische Aerosole ist sowohl auf globaler als auch regionaler und lokaler Skala noch weitgehend unverstanden. Die Schwierigkeit, die Rolle biogener Emissionen richtig abzuschätzen, ergibt sich u. a. daraus, dass die Nettoquellstärke an reaktiven Spurengasen aus Waldbeständen nicht genau bekannt ist.

Der Austausch reaktiver Spurengase zwischen einem Waldbestand und der planetarischen Grenzschicht ist ein komplexer Vorgang, an dem zahlreiche Prozesse unterschiedlicher Natur beteiligt sind: Biologische Prozesse, die den Gasaustausch zwischen Pflanze und Waldluft kontrollieren, chemische Umwandlungsprozesse im und unmittelbar über dem Wald, und mikrometeorologische Prozesse, die den Transport innerhalb des Waldes und über die Bestandsgrenzen hinweg bestimmen. Diese ineinandergreifenden biologischen, luftchemischen und meteorologischen Prozesse sind bislang nur ungenügend verstanden.

Im Rahmen des Forschungsvorhabens ECHO („Emission und chemische Umwandlung biogener flüchtiger organischer Verbindungen“) wurde untersucht, welche und wie viele Spurengase ein – für unsere Breiten – typischer Mischwaldbestand an die Atmosphäre abgibt, welchen Einfluss diese Verbindungen auf die Chemie der Atmosphäre haben und wie groß ihr Beitrag zur Ozonbildung in Sommermoglagen ist.

ECHO wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im Rahmen des Atmosphärenforschungsprogramms AFO 2000 gefördert. Im AFO

2000 wurden Ozon, Aerosole und Schadstoffe aus dem Verkehr einschließlich der Luftfahrt gleichzeitig betrachtet, um so neue Erkenntnisse über die Wechselwirkungen der einzelnen Stoffe zu erlangen. Das primäre Ziel von ECHO ist ein besseres Verständnis von Wäldern als komplexe Quelle von reaktiven organischen Spurenstoffen. Dazu wurden zwei Feldmesskampagnen im Stetterbacher Forst auf dem Gelände des Forschungszentrums Jülich in den Sommern 2002 und 2003 durchgeführt. Begleitend dazu wurden Labor- und Simulationsexperimente in der Atmosphärensimulationskammer SAPHIR und in einer Pflanzenkammer durchgeführt. Dynamische Aspekte des Waldes wurden in einem Windkanalexperiment untersucht.

Neben den umfangreichen bodengebundenen Messungen im Waldbestand sind auch Informationen aus der Atmosphäre über den Baumkronen – vor und hinter dem Waldgebiet erforderlich. Diese wurden in ECHO nicht bestimmt. Dazu eignen sich jedoch Modellsimulationen, in denen der Austausch der Emissionen in der Grenzschicht beschrieben werden kann. Mit einem mikroskaligen Modellsystem sollen daher biogene Emissionen aus dem in ECHO untersuchten Waldbestand und deren Umwandlung in der Atmosphäre simuliert werden.

1.2 Stand der Forschung

Biogene Emissionen wurden in den letzten Jahren auf verschiedenen Skalen untersucht. So unterschieden sich die dafür verwendeten Modelle in ihrer räumlichen Auflösung. Globale Modelle wurden von Guenther et al. (1995) und Levis et al. (2003) entwickelt. Als regionales Modell verwendeten Vogel et al. (1995) das nichthydrostatische mesoskalige Modell KAMM mit dem Gasphasenmechanismus RADM2, um in einer Auflösung von $3 \times 3 \text{ km}^2$ biogene VOC zu berechnen und deren Einfluss auf Ozonkonzentrationen zu bestimmen. Stewart et al. (2003) verwendeten das dreidimensionale nichthydrostatische Modell MM5 um stündliche meteorologische Daten zu berechnen, auf dessen Basis Isopren- und Monoterpenflüsse in Großbritannien auf einer räumlichen Skala von $12 \times 12 \text{ km}^2$ berechnet wurden. Bereits mit dem Vorgängermodell MM4 simulierten McKeen et al. (1991) den Ozonhaushalt auf der regionalen Skala. Mit BEIS und BEIS2 entwickelten Pierce und Waldruff (1991) und Pierce et al. (1998) mehrschichtige Modelle, mit denen Simpson et al. (1995, 1999) regionale biogene Emissionskataster erstellten.

Auf der Mikroskala verwendeten Huber et al. (1999) ein mehrschichtiges meteorologisches Modell für die Berechnung der photosynthetisch aktiven Strahlung und der Blatttemperatur in Abhängigkeit der Kronenraumtiefe, zu denen Isoprenemissionen für 20 Vegetationsschichten berechnet wurden. Makar et al. (1999) entwickelten ein eindimensionales Modell, das 1001 Level mit einer Gitterweite von 1 m auflöste.

Fast allen Modellen ist gemein, dass sie für biogene Emissionen den Emissionsalgorithmus von Guenther et al. (1995) verwenden. Für die Behandlung der chemischen Reaktionen und Spezies in den Modellen gibt es verschiedene Reaktionsmechanismen, die für unterschiedliche Zwecke optimiert sind. Für den Gasphasenmechanismus RADM2 wurden von Stockwell et al. (1990) Isopren als explizite Spezies implementiert. Der Nachfolger von RADM2, RACM (Stockwell et al., 1997), wurde weiter verbessert und um einen neuen Reaktionsmechanismus für biogene Emissionen erweitert. Von Makar et al. (2003) wurde ein Mechanismus entwickelt, der explizit für die Bildung von Aerosolen und Ozon optimiert ist. Stroud et al. (2005) untersuchten damit den Effekt der biogenen Emissionen auf die Ozonproduktion.

1.3 Vorgehen in dieser Arbeit

Im nächsten Kapitel werden in Abschnitt 2.1 verschiedene Modelltypen vorgestellt und Gründe für die hier am besten zu verwendende Modellart genannt. Das verwendete Modellsystem MITRAS/MICTM wird in den Abschnitten 2.2 und 2.3 beschrieben. In Kapitel 3 werden die Eingabedaten und Randbedingungen erläutert, sowie die Präprozessoren vorgestellt, die für den Betrieb der Modelle notwendig sind. Die Ergebnisse der Modellsimulationen zu zwei ausgewählten Messtagen werden dann in Kapitel 4 präsentiert. Abschließend werden die Ergebnisse diskutiert und in einem Ausblick (Kapitel 5) werden weitere Überlegungen für zukünftige Arbeiten und Erweiterungen dieser Arbeit angestellt.

2 Modellsystem

In diesem Kapitel werden verschiedene Modelltypen vorgestellt (Abschnitt 2.1). Dabei wird begründet, warum die Wahl auf MITRAS und MICTM gefallen ist. In den Abschnitten 2.2 und 2.3 folgt eine ausführliche Beschreibung der beiden benutzten Modelle.

2.1 Überblick über verschiedene Modelltypen

Für die Modellierung mikroskaliger Phänomene in der planetarischen Grenzschicht können verschiedene Modelltypen verwendet werden. Diese unterscheiden sich nicht nur in ihrer Komplexität, sondern dienen auch unterschiedlichen Anforderungen. Dabei unterteilen sie sich in statistische, diagnostische und prognostische Modelle, die nachfolgend beschrieben werden (López, 2002; Panskus, 2000).

2.1.1 Statistische Modelle

Statistische Modelle werden hauptsächlich für die Berechnung der Ausbreitung von Schadstoffen verwendet. Dabei wird nach einer Gauß-Verteilung die Ausbreitung senkrecht zur Windgeschwindigkeit und in Windrichtung beschrieben, während das Windfeld selbst nicht berechnet wird. Sie berücksichtigen physikalische Prozesse nicht detailliert und liefern nur statistische Aussagen über die Verteilung von Luftbeimengungen. Diese Modelle wurden in der Vergangenheit

zur Kontrolle von Schadstoffen nach dem Bundesimmissionsschutzgesetz eingesetzt. Heute werden in der TA-Luft¹ Lagrange-Modelle vorgeschrieben.

2.1.2 Diagnostische Modelle

Diagnostische Modelle verwenden dreidimensionale divergenzfreie Windfelder, die an Orografie bzw. an Gebäudestrukturen angepasst und stationär sind. Eine zeitliche Entwicklung kann daher mit diesen Modellen nicht erfasst werden. Sie beschreiben eine Momentaufnahme der Strömung zum Zeitpunkt der Simulation. Bei hinreichender Informationsdichte der äußeren und inneren Randbedingungen liefern diese Modelle bei wenig Rechenaufwand gute Ergebnisse z. B. für komplexe Bebauung bzw. stark gegliedertes Gelände (Manfrahs, 2000; Teuchert, 2002).

2.1.3 Prognostische Modelle

Prognostische Modelle lösen in der Meteorologie die Navier-Stokes-Gleichungen als miteinander gekoppelte Differentialgleichungen. Sie bieten die Möglichkeit auch instationäre Strömungen zu berechnen. Für die Lösung der Gleichungen gibt es verschiedene Ansätze, die im Folgenden vorgestellt werden.

Direkte numerische Simulation

Bei der direkten numerischen Simulation (DNS) findet die geringste Näherung der Navier-Stokes-Gleichungen statt, Parametrisierungen für subskalige Phänomene werden nicht mehr benötigt. Auf einem extrem feinen Rechengitter auf der Kolmogorov-Mikroskala (mm- bis cm-Auflösung) werden auch kleinere Wirbel noch aufgelöst. Diese Methode ist sehr rechenintensiv, da ein sehr kleiner Zeitschritt wegen der Proportionalität zur dritten Potenz der Reynoldszahl Re gewählt werden muss. Für die Beschreibung turbulenter Strömungen in einem Waldgebiet ist dieses Verfahren nicht geeignet.

Grobstruktursimulation

Den größten Anteil der Turbulenz und des Transportes von Strömungen haben große Wirbel. Diese werden durch die Grobstruktursimulation, die meist auch im deutschen Sprachgebrauch als Large Eddy Simulation (LES) bezeichnet wird,

¹TA-Luft = Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft

unter Parametrisierung der kleinskaligeren Wirbel in einer Auflösung von 5 bis 100 m direkt simuliert. Bei der LES wird angenommen, dass kleine turbulente Strukturen isotrop sind, d. h. keine bevorzugte Richtung haben und nur einen kleinen Anteil an der Turbulenzenergie beschreiben. Die Parametrisierung der weniger energietragenden Wirbel ist daher wenig bedeutsam.

Reynolds gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen

Die Variablen der Navier-Stokes-Gleichungen werden in einer sogenannten Reynolds-Zerlegung in einen mittleren Anteil und einen fluktuierenden Anteil, der sich im zeitlichen Mittel zu Null aufhebt, aufgeteilt. Bei der anschließenden Mittelung der Gleichungen erhält man Terme der mittleren Größen und der Korrelationen der Schwankungen. Diese Korrelationen entsprechen dem turbulenten Anteil der Flüsse, die zur Lösung des Gleichungssystems parametrisiert werden müssen. Im Gegensatz zu den LES-Modellen müssen die Parametrisierungen der RANS-Modelle² auch einen großen Teil der energiereichen Wirbel beschreiben, weshalb den Parametrisierungen eine wichtige Bedeutung zukommt. Diese Art der Zerlegung wird im verwendeten Modell MITRAS benutzt, da sie auch auf einem größeren Gitter gerechnet werden kann.

Transiliente Turbulenztheorie

Das nichtlokale Turbulenzschließungsverfahren der transilienten Turbulenztheorie (TTT) beruht nicht auf dem Diffusionsansatz, löst einzelne Wirbel aber auch nicht explizit auf. Stattdessen wird eine Transilienzmatrix bestimmt, deren Koeffizienten den Austausch zwischen einzelnen Schichten beschreiben. Die Herleitung dieser Matrix ist von weiteren Annahmen über das Mischungspotential der Atmosphäre abhängig, in einem Grenzschichtmodell muss jeder Rechenzeitschritt dazu aufgesplittet werden. Dieses Verfahren in ein bereits vorhandenes RANS-Modell einzuführen ist ein großer Aufwand und wird daher hier nicht weiter verfolgt. Außerdem kann die TTT allein nur den turbulenten Anteil der auftretenden vertikalen Flüsse erklären, nicht jedoch den advektiven Anteil, der durch eine im zeitlichen Mittel nicht verschwindende Vertikalbewegung auftritt (Nützmann, 1999).

²RANS = **R**eynolds-averaged **N**avier-**S**tokes equations

2.2 MITRAS

Im Rahmen des Troposphärenforschungsprogramms des BMBF wurde gemeinsam von dem Meteorologischen Institut der Universität Hamburg, dem Institut für Troposphärenforschung in Leipzig, dem Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung in Bremerhaven und dem Fraunhofer Institut für atmosphärische Umweltforschung in Garmisch-Partenkirchen (jetzt: Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Bereich Atmosphärische Umweltforschung (IMK-IFU) im Forschungszentrum Karlsruhe) das mikroskalige Transport- und Strömungsmodell MITRAS entwickelt (Schlünzen et al., 2003). Es basiert auf dem von Schlünzen (1990) entwickelten mesoskaligen Modell METRAS.

MITRAS kann neben dem Strömungsfeld auch Temperatur und Feuchte auf der Mikroskala berechnen. Die Mikroskala wird durch eine horizontale Längenskala von 0.1 bis 2000 m und einer Zeitskala von wenigen Sekunden bis zu einer Stunde charakterisiert. Die von MITRAS berechneten Daten werden im mikroskaligen Chemietransportmodell MICTM benutzt, das in Abschnitt 2.3 näher beschrieben wird.

2.2.1 Modellgleichungen

MITRAS ist ein nichthydrostatisches dreidimensionales Modell, das die Flussform der prognostischen Gleichungen für Wind, potentielle Temperatur und Feuchte in einem geländefolgenden Koordinatensystem löst. Diagnostische Gleichungen für die Temperatur und den Druck komplettieren das Gleichungssystem.

Dieses gekoppelte, nichtlineare Differentialgleichungssystem kann nicht analytisch, sondern muss numerisch gelöst werden. Dazu werden noch spezielle an die Mikroskala angepasste Vereinfachungen vorgenommen:

- Durch die Eliminierung der Dichte als prognostische Größe werden aus dem Gleichungssystem Schallwellen, die keinen nennbaren Einfluss auf mikroskalige Phänomene haben, gefiltert. Dies wird auch als anelastische Näherung bezeichnet: $\vec{\nabla} \rho \vec{v} = 0$.

- Dichteschwankungen, die zu Auftriebskräften führen, werden nur im Auftriebsterm berücksichtigt. Diese Bussinesq-Approximation vereinfacht die Modellierung sehr stark ohne größere Ungenauigkeiten zu produzieren.
- Molekulare Flüsse werden gegenüber turbulenten vernachlässigt, da sie um einige Größenordnungen kleiner sind.
- Der Effekt der Coriolis-Kraft wird auf der Mikroskala in den hier durchgeführten Modellrechnungen vernachlässigt, d. h. $f = 0$. Bei der Initialisierung wird dieser Effekt durch die vorgegebenen Windprofile berücksichtigt und ist somit in den Ergebnissen enthalten.

Mit den genannten Vereinfachungen setzt sich das zu lösende Gleichungssystem zusammen aus den Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Bewegungsgleichungen

$$\frac{\partial \rho_0 \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho_0 \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} + \underbrace{\frac{\partial \rho_0 \bar{u}'_i \bar{u}'_j}{\partial x_j}}_{\text{3. Term}} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \underbrace{\frac{\partial \bar{p}'}{\partial x_i}}_{\text{5. Term}} + \tilde{\rho} g \delta_{i3}, \quad (2.1)$$

der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho_0 \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.2)$$

und den Erhaltungsgleichungen für Wärme, Wasser und Konzentrationen

$$\frac{\partial \rho_0 \bar{\chi}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_0 \bar{u}_j \bar{\chi}}{\partial x_j} + \frac{\partial \rho_0 \bar{\chi}' \bar{u}'_j}{\partial x_j} = Q_\chi, \quad (2.3)$$

mit $\chi = \theta, q_1^k, C_j$. Hinzu kommen noch als diagnostische Gleichungen die ideale Gasgleichung

$$v_i^k = \frac{R_i^k T}{p}, \quad (2.4)$$

und die Definition der potentiellen Temperatur θ . Der Standarddruck p_0 ist mit 1000 hPa festgelegt:

$$\theta = T \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}}. \quad (2.5)$$

Dieses Gleichungssystem wird in einem nicht-äquidistanten Arakawa-C-Gitter gelöst. Dazu bedarf es noch einiger Schließungsansätze, insbesondere im Hinblick auf die Bestandparametrisierung, die im Folgenden beschrieben werden.

2.2.2 Anpassungen von MITRAS an die Vegetation

Bestandsparametrisierung

MITRAS wurde ursprünglich für Gebäudeumströmungen entwickelt, poröse Hindernisse wie ein Waldgebiet waren nicht implementiert. Üblicherweise fällt in der Meteorologie der 5. Term der Gleichung 2.1 weg, da die Druckfunktion stetig ist. Innerhalb von subskaliger Vegetation sind Mittelung und Differentiation aber nicht kommutativ, da vor einem Widerstand (wie einem Baumstamm) in Windrichtung der Druck höher und dahinter niedriger ist (Groß, 1987, 1993).

Dieser sogenannte Formwiderstand kann in Abhängigkeit von einem aerodynamischen Widerstandskoeffizienten c_d und der Blattflächendichte l_d berechnet werden (Wilson und Shaw, 1977).

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} = c_d l_d \overline{u_i} |\vec{v}| \quad (2.6)$$

Dieser Ansatz, der sich in vielen Modellen mit Vegetationsparametrisierung wiederfindet (Glasow und Bott, 1998; Groß, 1993; Meyers und Paw U, 1986; Pereira und Shaw, 1980), wird auch in MITRAS benutzt. Die Bestimmung der Blattflächendichte ist in Anhang B.1 näher beschrieben.

c_d wurde in dieser Arbeit als höhen- und zeitkonstant angenommen, obwohl es Geschwindigkeits- und Bestandsabhängigkeiten gibt. Teuchert (2002) konnte diese Abhängigkeit jedoch mit Messungen in dem in dieser Arbeit zu untersuchenden Waldbestand nicht erfassen, da diese Werte auf Grund der Messtechnik nicht eindeutig bestimmbar sind. Während der ECHO-Kampagne wurden die Werte von c_d aus USAT-Messungen³ abgeleitet (Abb. 2.1). Die Fehler, die bei dieser Ableitung entstehen sind jedoch nicht bekannt, liegen erwartungsgemäß aber bei einem Faktor 10. Gute Simulationsergebnisse wurden mit $c_d = 0.2$ erreicht, dies ist auch in der Literatur ein verbreiteter Wert (Nützman, 1999; Pinard und Wilson, 2001).

Turbulenzparametrisierung

Das Korrelationsprodukt in Gleichung 2.1 (3. Term) wird mit einem klassischen Gradientansatz parametrisiert.

$$-\overline{u'_i u'_j} = K_{ij}^m \cdot \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \quad (2.7)$$

³USAT = Ultraschallanemometer und -thermometer

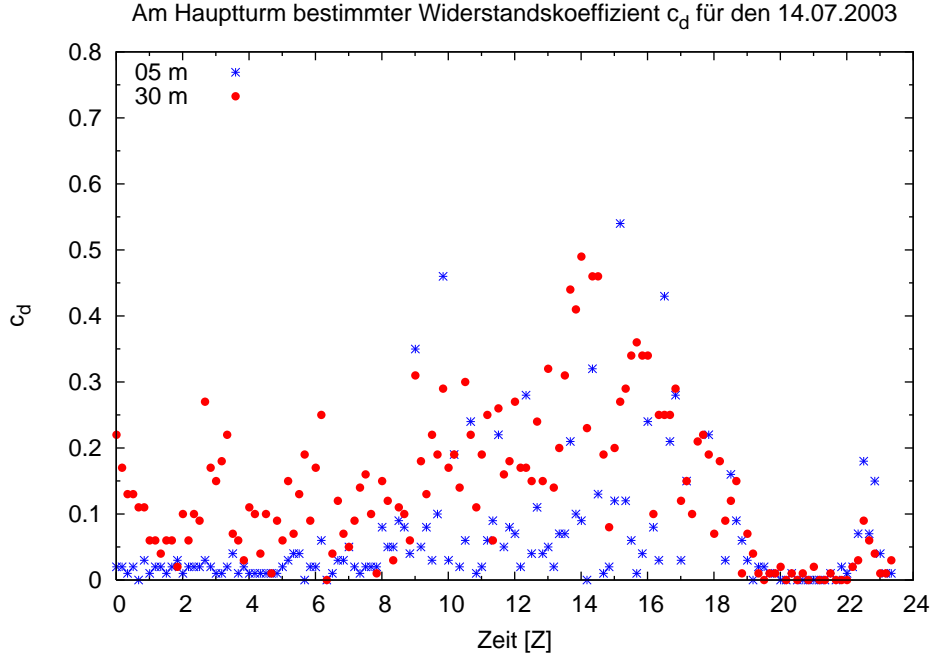


Abbildung 2.1: Am Hauptturm bestimmter Widerstandskoeffizient c_d für den 14.07.2003. Im Kronenraum sind die Werte höher als im Stammraum. Tagsüber steigen die Werte in diesen Höhen über 0.5.

Analog dazu gilt auch für die turbulenten Flüsse der skalaren Größen

$$-\overline{\chi' u_j'} = K_\chi \cdot \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x_i}. \quad (2.8)$$

K_{ij}^m bezeichnet den turbulenten Diffusionskoeffizienten für Impuls und ist in Analogie zur molekularen Viskosität ein Maß für die Wirbelviskosität. Eine Studie zu verschiedenen Turbulenzparametrisierungen in MITRAS findet sich in López (2002) und López et al. (2005).

MITRAS enthält neben der hier verwendeten Prandtl-Kolmogorov-Schließung (Gleichung 2.9) noch eine modifizierte k - ϵ -Schließung nach Kato und Launder (1993), in der die Eddy-Diffusivität in Abhängigkeit der turbulenten kinetischen Energie k und der Energie-Dissipationsrate ϵ gebracht wird. Der Diffusionskoeffizient ist in vertikaler und horizontaler Richtung gleich und wird berechnet als:

$$K_{hor} = K_{ver} = c_m \frac{l_n}{\phi_m} \sqrt{k} \quad (2.9)$$

Dabei ist $c_m = 0.4$, l_n die Mischungsweglänge und ϕ_m eine Stabilitätsfunktion für den Impuls, in die der Schichtungseinfluss der Atmosphäre eingeht. Die turbulente kinetische Energie k wird noch durch einen zusätzlichen Produktionsterm $c_d l_d |\vec{v}|^3$ ergänzt, der die durch die Bestandselemente verursachte turbulente kinetische Energie beschreibt.

In der Literatur findet sich seit über 20 Jahren eine Diskussion über die Ungültigkeit des K -Ansatzes für Bestandselemente. Statt einer Schließung 1. Ordnung wird einer Schließung höherer Ordnung Vorzug gegeben, weil die Diffusionskoeffizienten keine gegen den Gradienten gerichtete Flüsse erzeugen können, wie sie aber in Messungen gefunden werden (Raupach, 1989a,b; Shaw, 1977; Wilson, 1988; Zeng und Takahashi, 2000). Turbulente Flüsse sind in der Hindernisschicht nämlich eindeutig durch sporadische, kohärente Strukturen auf der gesamten Hindernisskala domiert (Raupach und Thom, 1981; Finnigan, 2000).

Bei Groß (1993) ist zu finden, dass diese Beobachtungen für eindimensionale Modelle sicherlich richtig sind, in dreidimensionalen Modellen jedoch die Advektion eine größere Rolle spielt, so dass dieser Ansatz durchaus benutzt werden kann. Pinnard und Wilson (2001) arbeiteten heraus, dass einfache Schließungen 1. Ordnung oftmals genauso gut in der Windvorhersage sind, wie Schließungen 2. Ordnung, welche in dreidimensionalen Modellen nur mühsam integriert werden können und zu einem erhöhten Rechenaufwand führen.

Die Tatsache, dass sich beim hier integrierten K -Ansatz ein zweites Windmaximum im Stammraum ausbilden kann (Abb. 4.1), ist ein Zeichen dafür, dass die zuvor beschriebenen Unzulänglichkeiten vernachlässigt werden können. Bei einer eindimensionalen Betrachtungsweise würde diese Art der Parametrisierung allerdings versagen. Auch einfache exponentielle Ansätze können die Maxima nicht repräsentieren (Yamada, 1982).

Parametrisierung der Strahlung

Die von der Sonne ausgehende kurzwellige Strahlung wird in der Atmosphäre von Wasserdampf und anderen Gasen leicht abgeschwächt und gelangt an die Erdoberfläche. In einem Waldgebiet findet der Strahlungsumsatz im Kronenraum statt. Im Falle eines Kronenschlusses kommt dabei dem oberen Drittel die größte Bedeutung zu. Die Blätter absorbieren die kurzwellige Strahlung und erwärmen die Umgebungsluft. Die Erwärmungsrate Q_θ ist dabei proportional zur

Abschwächung der Strahlung.

$$Q_\theta = -\frac{1}{\rho_0 c_p} \frac{dR_N}{dz} \quad (2.10)$$

Die Luft innerhalb des Bestandes ist dabei tagsüber in der unteren Hälfte stabil geschichtet, in der oberen Hälfte instabil (Finnigan, 2000). Die kurzwellige Strahlung R_N wird im Bestand mit einer Exponentialfunktion angenähert, die auf Uchijima (1961) zurückgeht.

$$R_N(z) = R_N(h) \exp(-k \cdot l_i(z)) \quad (2.11)$$

gilt in der Höhe z für $0 < z < h$. $R_N(h)$ ist dabei die ungestört einfallende Strahlungsfussdichte am Oberrand des Bestandes. Der kumulative Blattflächenindex l_i wurde im Bestand gemessen (Abschnitt B.1). k ist ein empirischer Extinktionskoeffizient, der mit der Tageszeit variiert und am Abend Werte von 2.5 bis 3.0 annehmen kann. Auch wurden Abhängigkeiten von der Baumart beobachtet. In der Literatur finden sich Werte von 0.5 bis 0.64, die tagsüber gültig sind. Die besten Ergebnisse wurden allerdings mit einem konstanten $k = 0.25$ erzielt, da sonst die Temperatur im Bestand zu hoch wurde.

Der Ansatz von Impens und Lemeur (1969) mit zwei empirischen Konstanten $k_1 = 0.622$ und $k_2 = 0.0533$ konnte in den Modellergebnissen nicht überzeugen:

$$R_N(z) = R_N(h) \exp(-k_1 l_i(z) + k_2 l_i(z)^2) \quad (2.12)$$

In diesem Ansatz hätten beide Konstanten angepasst werden müssen.

Die langwellige Ausstrahlung des Bestandes wurde im Modell nicht weiter berücksichtigt, da die Kronenraumerwärmung durch die Parametrisierung der Abschwächung der kurzwelligen Strahlung über die Erwärmungsrate Q_θ schon ausreichend genau dargestellt werden kann.

2.3 MICTM

MICTM ist das mikroskalige Chemietransportmodell, es wurde von Grawe (2006) auf Basis des mesoskaligen Chemietransportmodells MECTM (Lenz et al., 2000; Müller et al., 2000) an die Mikroskala angepasst. Eingabedaten sind neben den

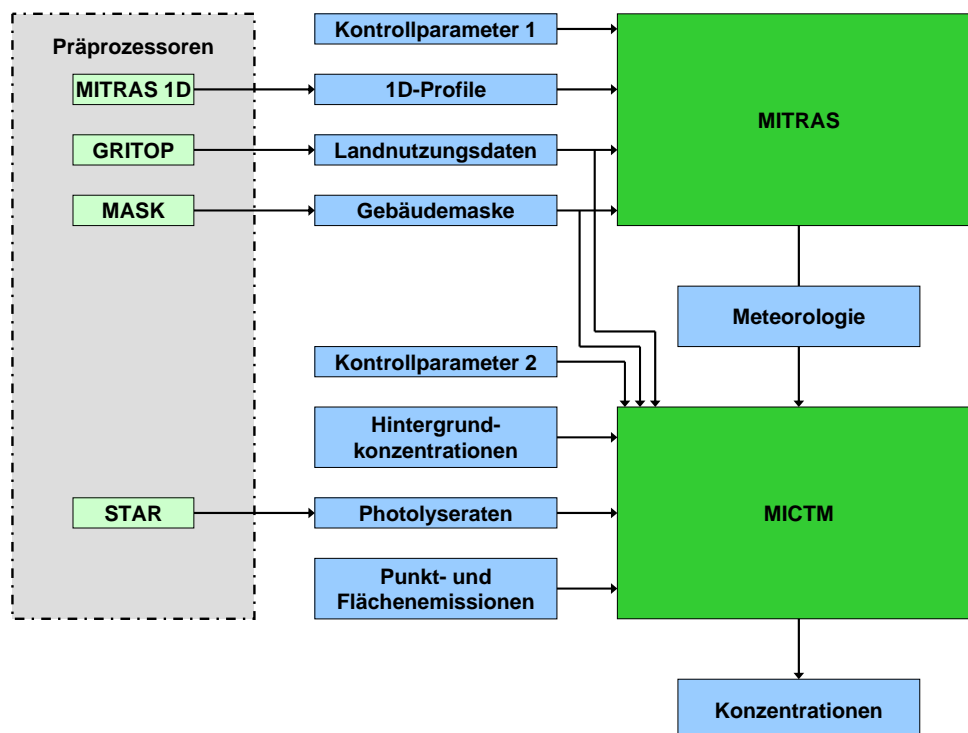


Abbildung 2.2: Das Modellsystem MITRAS/MICTM benötigt zusätzliche Eingabedaten u. a. aus verschiedenen Präprozessoren. MITRAS produziert eine Vorhersage, die an MICTM übergeben wird. Für das berechnete meteorologische Feld werden Konzentrationen für 59 verschiedene Spezies in MICTM bestimmt.

meteorologischen Ausgabefeldern von MITRAS Photolyseraten (Abschnitt 2.3.2) aus dem Präprozessor STAR und Hintergrundkonzentrationen sowie Emissionsdaten getrennt nach Punkt- und Flächenquellen (Abb. 2.2). MICTM enthält den Gasphasenmechanismus des *Regional Acid Deposition Model* in der Version 2 (RADM2) von Stockwell et al. (1990). RADM2 ist für die Ozonvorhersage optimiert und enthält die nötigen chemischen Reaktionen und Verbindungen bei gleichzeitiger Minimierung der notwendigen Computerressourcen. Der Mechanismus wird in vielen atmosphärischen Modellen für die Berechnung von Konzentrationen von Oxidantien und anderen Luftschadstoffen verwendet. RADM2 repräsentiert die organische Chemie durch einen *reactivity aggregated molecular approach* (Middleton et al., 1990). Ähnliche organische Verbindungen werden dabei durch eine Wichtung mit der Reaktivität in Molekülgruppen zusammengefasst. Wie diese Wichtung für die am häufigsten emittierten VOCs funktioniert, ist in

Middleton et al. (1990) beschrieben.

Derzeit kann MICTM für 59 Spezies (Tab. C.1) Ausbreitung, Transport, Umwandlung und Deposition berechnen, wobei über 200 Reaktionen berücksichtigt werden. Von den biogenen VOC ist Isopren eines der reaktivsten und spielt bei der Ozonformation eine dominante Rolle (Simpson et al., 1995, 1999; Makar et al., 1999), daher ist für die hier vorliegende Fragestellung die Betrachtung des Isoprens von besonderer Bedeutung. Im nächsten Abschnitt folgt deshalb eine eingehende Beschreibung der Isoprenchemie und deren Behandlung im Modell.

2.3.1 Isopren

Isopren, nach IUPAC-Nomenklatur⁴ als 2-Methyl-1.3-butadien bezeichnet, gilt als der Hauptbestandteil der von Laubwäldern emittierten biogenen Emissionen. Die große Anzahl chemischer Stoffe und Reaktionen, die am Isoprenabbau in der Atmosphäre beteiligt sind, erlaubt keine explizite Behandlung, sondern erfordert einen zusammengefassten Mechanismus. Stockwell et al. (1990) führte in RADM2 eine sehr vereinfachte Isoprenchemie ein, die diesen Abbau zu modellieren versucht.

Isopren wird in der Atmosphäre durch OH-Radikale, Nitratradikale und Ozon abgebaut. NO₃ ist tagsüber nicht von Bedeutung, da sich durch die Photolyse von NO₃ keine nennenswerten Konzentrationen aufbauen können. NO₃ dürfte kurz nach Sonnenaufgang vollständig abgebaut sein.

Obwohl die Ozon-Konzentration etwa 6 Zehnerpotenzen über der des OH-Radikals liegt, ergibt sich mit den Geschwindigkeitskonstanten für den Isoprenabbau mit OH ($k_{\text{OH}} = 1.2 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$) und Ozon ($k_{\text{O}_3} = 4.1 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$), dass der Abbau von Isopren unter den Bedingungen einer nur mäßig verunreinigten Atmosphäre ($[\text{OH}] = 10^6 \text{ cm}^{-3}$ und $[\text{O}_3] = 40 \text{ ppb}$) zu 90% über die Reaktion mit dem OH-Radikal verläuft (Bluhm, 1997). Zu beachten ist, dass auch die Temperaturabhängigkeit der Reaktionskonstanten $k = A \exp\left(\frac{E}{RT}\right)$ die Größenordnung derselbigen nicht ändert (Stockwell et al., 1990).

Abbau durch OH-Radikale

In troposphärischer Luft reagiert Isopren hauptsächlich mit OH (Zimmermann

⁴IUPAC = International Union of Pure and Applied Chemistry

und Poppe, 1996). Durch Addition von OH-Radikalen an einem endständigen Kohlenstoffatom des Isoprens und der anschließenden Reaktion mit einem Sauerstoffmolekül können acht Peroxyradikale aus Alkenen entstehen (Sprengnether et al., 2002), die in RADM2 zu einer Gruppe OLTP zusammengefasst werden.



Diese Peroxyradikale reagieren mit Stickstoffmonoxid (NO) weiter zu den Hauptabbauprodukten Methacrolein (MACR) und Methylvinylketon (MVK), die jedoch erst im RADM2-Nachfolger RACM (Stockwell et al., 1997) bzw. in diversen RADM2-Erweiterungen (Zimmermann und Poppe, 1996) als explizite Spezies behandelt werden.

Abbau durch Nitratraddikale

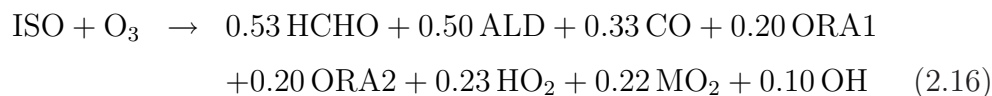
Isopren reagiert nicht nur schnell mit OH-Radikalen, sondern in verunreinigter Luft auch schnell mit Nitratraddikalen ($k_{\text{NO}_3} = 5.81 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$). Da das Maximum der Isoprenemissionen von Pflanzen am Nachmittag liegt und Isopren tagsüber nicht vollständig durch OH-Radikale abgebaut wird, dürfte die Reaktion von Isopren mit Nitratraddikalen vor allem in der Nacht für die Entstehung von organischen Nitraten eine wichtige Rolle spielen, selbst wenn nachts praktisch kein Isopren emittiert wird.



OLN entspricht hier einer Gruppe von ungesättigten mehrfunktionellen Alkylnitraten (u. a. Dinitrate, Hydroxynitrate und Carbonylnitrate).

Abbau durch Ozon

Deutlich langsamer verläuft der Abbau von Isopren durch Ozon. Der Abbau spielt Tag und Nacht eine Rolle und ist unterhalb der Baumkrone ähnlich bedeutsam wie der Abbau mit OH.



2.3.2 Photolyseraten

Als Eingabedaten für MICTM wurden aus dem STAR-Präprozessor (Abschnitt 3.2.4) Photolyseraten J_N berechnet. Diese wurden analog der Strahlung für MITRAS behandelt (Gleichung 2.11), in dem diese innerhalb des Waldes eine exponentielle Abschwächung mit dem kumulativen Blattflächenindex l_i erfuhren. Für k wurde hier jedoch der in der Literatur zu findende Wert von 0.5 eingesetzt, da diese Werte für die Photolyseraten besser mit den Messungen übereinstimmten (Abb. 2.3 bis 2.6).

$$J_N(z) = J_N(h) \exp(-k \cdot l_i(z)) \quad (2.17)$$

$J_N(h)$ bezeichnet die ungestörte Photolyserate am Oberrand des Waldes. Für beide Tage wurden ähnliche Ergebnisse produziert. Die Messungen in 38 m wurden gut vorhergesagt, während die Bodenwerte leicht überschätzt wurden.

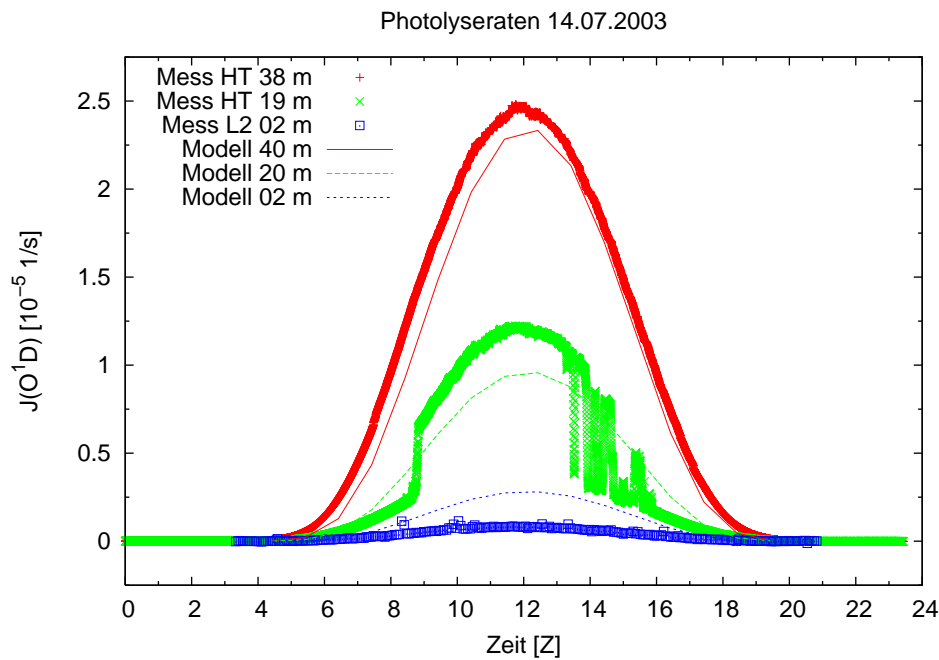


Abbildung 2.3: Modellierte und gemessene Photolyserate $J(O^1D)$ für den 14.07.2003 in verschiedenen Höhen. L2 bezeichnet eine Lichtung im Wald.

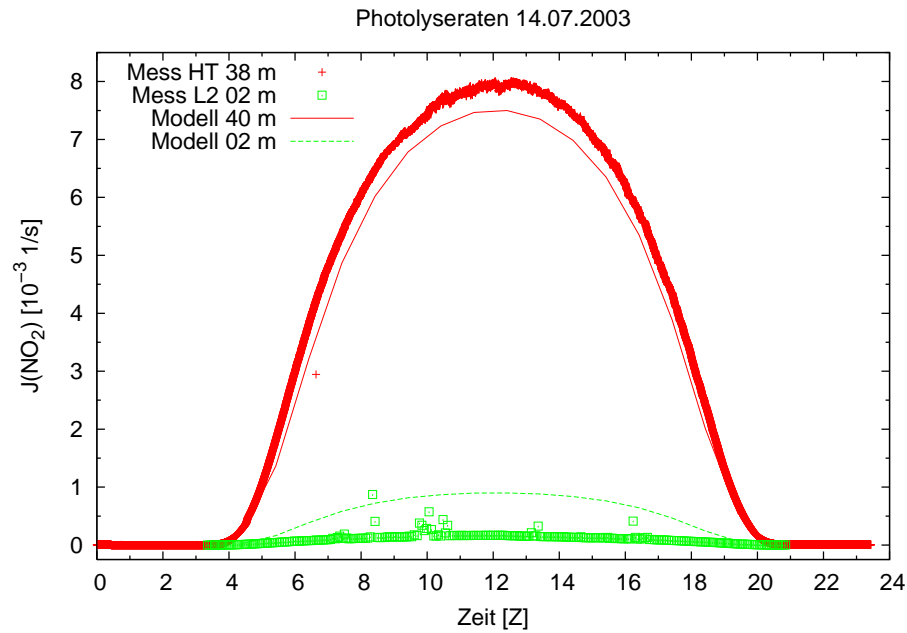


Abbildung 2.4: Modellerte und gemessene Photolyserate $J(\text{NO}_2)$ für den 14.07.2003 in verschiedenen Höhen. L2 bezeichnet eine Lichtung im Wald.

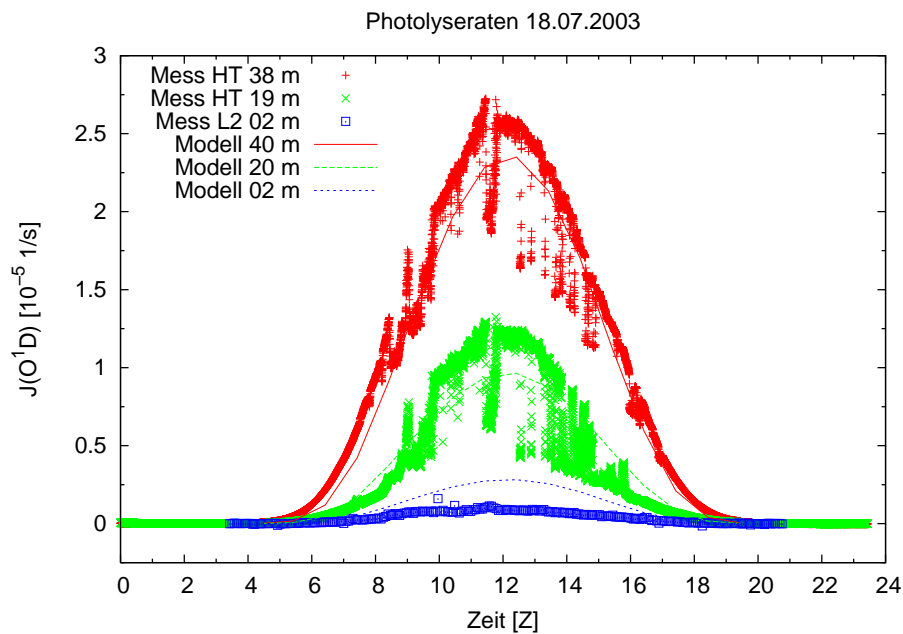


Abbildung 2.5: Modellerte und gemessene Photolyserate $J(\text{O}^1\text{D})$ für den 18.07.2003 in verschiedenen Höhen. L2 bezeichnet eine Lichtung im Wald.

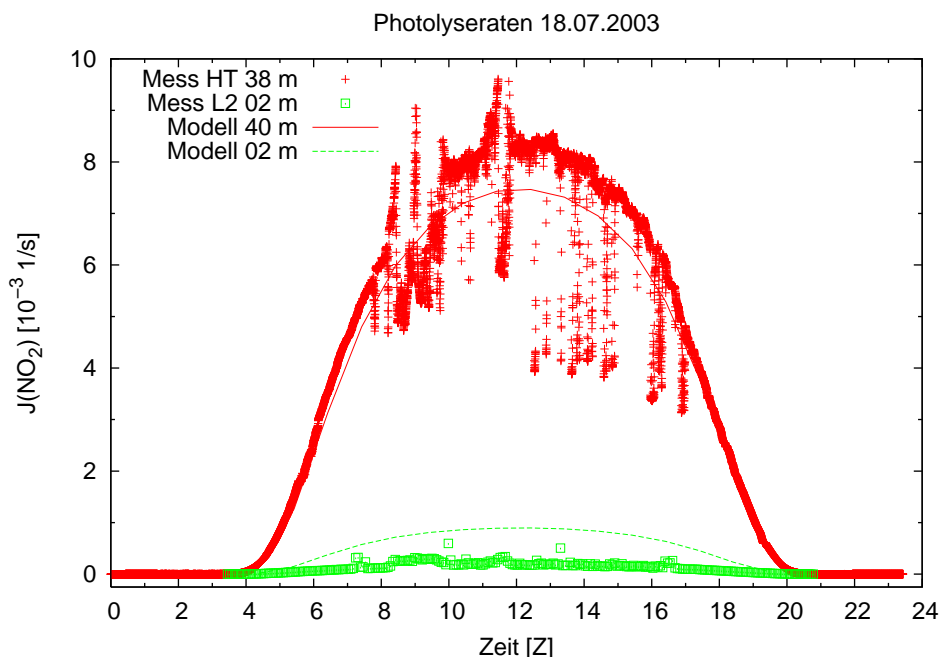


Abbildung 2.6: Modellierte und gemessene Photolyserate $J(\text{NO}_2)$ für den 18.07.2003 in verschiedenen Höhen. L2 bezeichnet eine Lichtung im Wald.

2.3.3 Biogene Emissionen

Isopren- und Monoterpenemissionsraten sind von äußeren Einflüssen wie Lichtintensität, Temperatur, Luftfeuchtigkeit und CO_2 -Konzentrationen abhängig. Guenther et al. (1991) fanden jedoch nur eine leichte Abhängigkeit von der Luftfeuchtigkeit. Bei Zunahme der relativen Feuchte um 10 % konnte lediglich ein Zuwachs der Emissionen um 1-3 % verzeichnet werden. Die Isoprenemissionen hingen zudem nur von sehr geringen (< 100 ppm) oder sehr hohen (> 600 ppm) CO_2 -Konzentrationen ab. Einen größeren Einfluss auf die Isoprenemissionen hatten allerdings Temperatur und Lichtintensität. Emissionen von Isopren nehmen bei Temperaturen unter 30°C zunächst exponentiell mit der Temperatur zu, erreichen ein Maximum zwischen 35 und 40°C und fallen anschließend wieder rasch ab, was charakteristisch für den Temperatureinfluss auf die Enzymaktivität ist. Einen steilen Anstieg der Isoprenemissionen wird auch mit zunehmender photosynthetisch aktiver Strahlung (PAR) zwischen 0 und ca. $400 \frac{\mu\text{mol}}{\text{m}^2\text{s}}$ beobachtet. Darüber wirkt sich eine Zunahme weniger stark aus. Bei Werten von etwa 700

Tabelle 2.1: Die Parameter für den hier verwendeten Emissionsalgorithmus wurden in der ECHO-Kampagne neu bestimmt.

	Guenther et al. (1993)	ECHO	Einheit
I_S	–	$1.3 \cdot 10^{-13}$	$\frac{\text{mol}}{\text{cm}^2 \text{ s}}$
α	0.0027	0.00334	$\frac{\text{m}^2 \text{ s}}{\mu\text{mol}}$
c_l	1.066	0.97	1
c_{T1}	95000	4107	$\frac{\text{J}}{\text{mol}}$
c_{T2}	230000	–	$\frac{\text{J}}{\text{mol}}$
T_S	303.15	303	K
T_M	314	–	K
β	0.09	–	1

bis $900 \frac{\mu\text{mol}}{\text{m}^2 \text{ s}}$ erreicht die Emissionsrate ihr Maximum.

Dem entsprechend setzt sich die Isoprenemissionsrate Φ_{iso} aus einer Standard-Isoprenemissionsrate I_S bei 30 °C und einer Einstrahlung von $1000 \frac{\mu\text{mol}}{\text{m}^2 \text{ s}}$ und zweier Korrekturfaktoren C_L und C_T für die Lichtintensität bzw. die Blatttemperatur zusammen.

$$\Phi_{iso} = I_S \cdot C_L \cdot C_T \quad (2.18)$$

Guenther et al. (1993, 1995) geben die Faktoren an als:

$$C_L = \frac{\alpha \cdot c_l \cdot PAR}{\sqrt{1 + \alpha^2 \cdot PAR^2}} \quad (2.19)$$

$$C_T = \frac{\exp\left(\frac{c_{T1}}{R} \frac{T - T_S}{T \cdot T_S}\right)}{1 + \exp\left(\frac{c_{T2}}{R} \frac{T - T_M}{T \cdot T_S}\right)} \quad (2.20)$$

Die empirisch bestimmten Koeffizienten α , c_l , c_{T1} , c_{T2} und T_M sind aus Emissionsratenmessungen verschiedener Spezies abgeleitet (Geron et al., 1994; Guenther et al., 1995) und von Art zu Art unterschiedlich. T bezeichnet die Blatttemperatur und T_S eine Standardtemperatur. R ist die allgemeine Gaskonstante. Sie hat den Wert von $8.134 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$.

In MICTM wird statt Gleichung 2.20 ein leicht modifizierter Guenther-Algorithmus

$$C_T = \exp\left(\frac{c_{T1}}{R} \frac{T - T_S}{T \cdot T_S}\right) \quad (2.21)$$

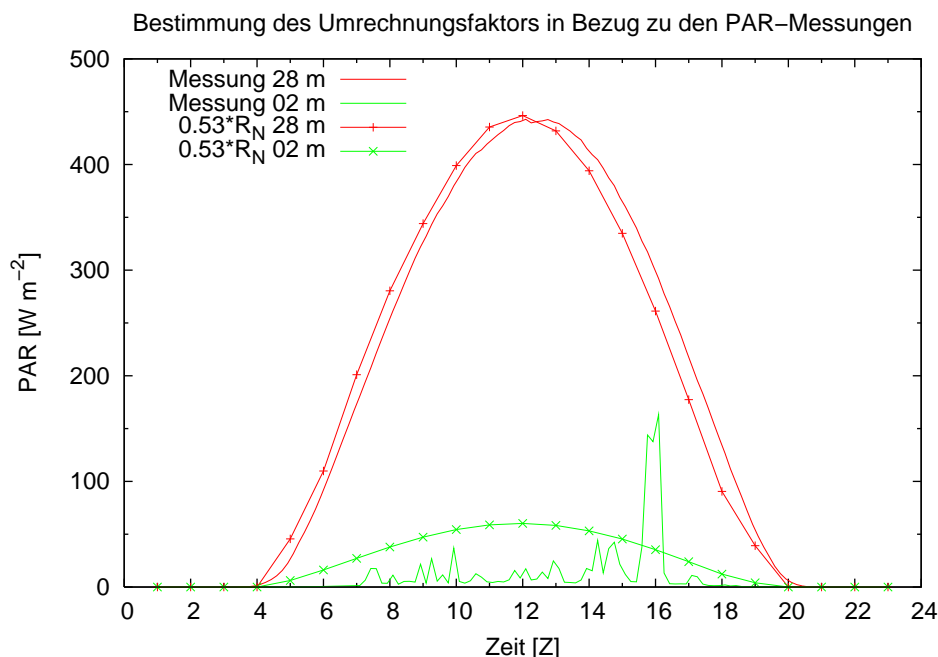


Abbildung 2.7: Bestimmung des Umrechnungsfaktors für die Umwandlung von R_N in PAR auf der Grundlage von Mess- und Modelldaten am Westturm für den 14.07.2003.

mit veränderten Parametern (Tab. 2.1) benutzt, der gegenüber dem normalen Guenther-Algorithmus eine etwa um 15 % erhöhte Isoprenemission ergibt. Die Parameter sind während der ECHO-Kampagne neu bestimmt worden.

Statt der für die biogenen Emissionen benötigten photosynthetisch aktiven Strahlung (PAR) wird in MITRAS nur die gesamte kurzwellige Strahlung berechnet. Daher wird PAR mit Hilfe eines empirischen Faktors aus der kurzwelligen Gesamtstrahlung R_N angenähert. Dieser Faktor wurde durch einen Vergleich der vorhergesagten Strahlung R_N mit der gemessenen Strahlung PAR bestimmt (Abb. 2.7). Dabei ist der Wert von PAR in W m^{-2}

$$[PAR] = 0.53 \cdot [R_N]. \quad (2.22)$$

Der in der Abbildung 2.7 zu erkennende Offset von etwa 30 Minuten zwischen den Messungen und dem Modell geht auf eine ungenügende Zeitsynchronisation des Messinstruments zurück und hat keine Auswirkungen auf die Qualität der modellierten Strahlungsparameter.

Monoterpenemissionen können für Laubwälder vernachlässigt werden. Sie spie-

len hauptsächlich bei Nadelwäldern eine Rolle und zeigen im Gegensatz zu den Isoprenemissionen nur eine Temperaturabhängigkeit. Für Monoterpene (α -Pinen, β -Pinen und sonstige biogenen Emissionen) gilt

$$\Phi_{mono} = M_S \cdot \exp(\beta \cdot (T - T_S)), \quad (2.23)$$

mit M_S als Standardemissionsrate für Monoterpene. Der Nadelwaldanteil im ECHO-Modellgebiet war gering, die Nadelbäume belegen insgesamt eine Fläche von weniger als 1 %. Monoterpenemissionen wurden daher nicht weiter berücksichtigt.

3 Eingabedaten und Randbedingungen

Um mit den im vorangegangenen Kapitel beschriebenen Modellen für ausgewählte Tage Simulationen durchführen zu können (Kap. 4) muss zunächst das Modellgebiet und dessen Behandlung in den Modellen bestimmt werden. In diesem Kapitel wird außerdem erläutert, wie die für die Modellläufe benötigten Eingabedaten zum großen Teil mittels Präprozessoren aufbereitet werden. Abschließend werden die benutzten Randbedingungen für MITRAS und MICTM beschrieben.

3.1 Modellgebiet

Das Forschungszentrum Jülich liegt vollständig im StetternicHER Forst, der eine Fläche von etwa 350 ha umfasst. Der Mischwaldbestand, der dort seit etwa 300 Jahren existiert, weist Inhomogenitäten bzgl. der Baumarten und -höhen auf. So sind dort hauptsächlich Eichen und Buchen mit einem Alter zwischen 80 und 120 Jahren zu finden, aber auch einige Nadelbäume. Die Bäume sind zwischen 28 und 38 m hoch. Das in MITRAS/MICTM zu modellierende Gebiet ist 720 mal 360 m² groß (Abb. 3.1). Dieser Ausschnitt wurde gewählt, weil dort zahlreiche Messwerte vorhanden sind, die während der ECHO-Kampagne in 2002 und 2003 an extra dafür aufgestellten Messtürmen, die im Weiteren als Haupt-, West- und Ostturm bezeichnet werden, gesammelt worden sind. Für eine Modellsimulation in diesem Gebiet ist also eine gute und ausreichende Datengrundlage vorhanden. Der Ostturm lag etwas außerhalb des Modellgebietes, auf Grund der wenigen dort

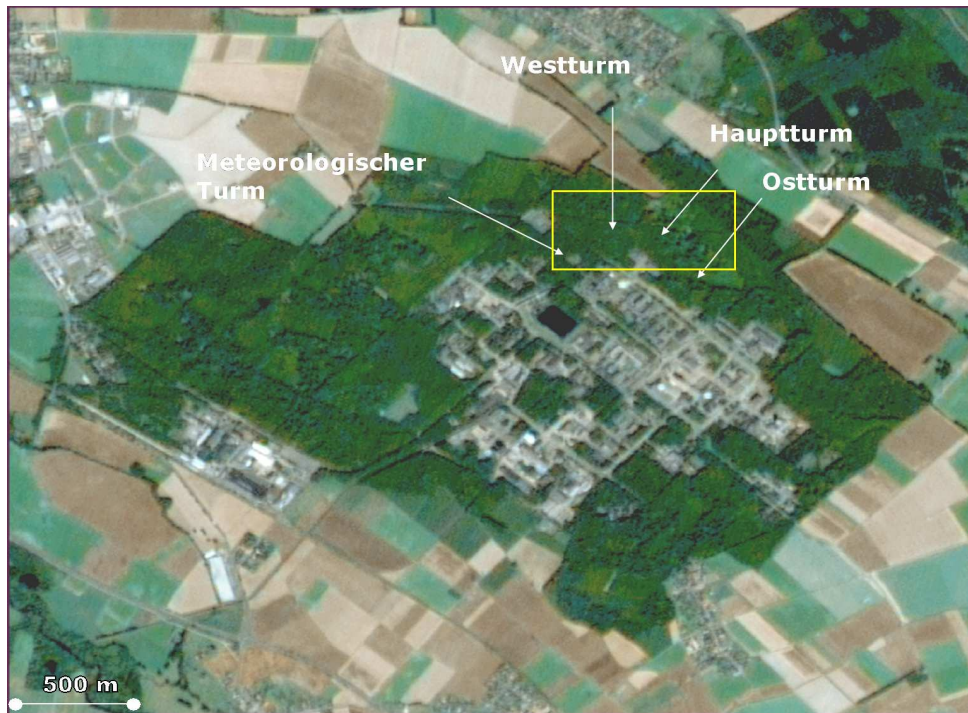


Abbildung 3.1: Das Simulationsgebiet (gelb umrahmt) liegt innerhalb des Forschungszentrums Jülich. Die Standorte des meteorologischen Turms sowie die der drei Messtürme (Haupt-, West- und Ostturm) sind markiert.

durchgeführten Messungen stellt dies aber im weiteren Verlauf kein Problem dar. Zudem liegt das Gebiet entlang der Hauptwindrichtungssachse Ost – West.

Der Modelloberrand liegt wegen der begrenzten Rechenkapazitäten (Anhang A) bei 200 m. Für die Betrachtung der Wechselwirkung Wald – Grenzschicht reicht diese Höhe jedoch aus, da direkte Einflüsse nur etwa bis zur dreifachen Hindernishöhe zu erwarten sind.

Das Gelände des Forschungszentrums Jülich wurde 2000 mitsamt seiner umliegenden Waldgebiete mit Hilfe von Luftbildern aus dem Jahre 1998 photogrammetrisch vermessen. Dabei wurde das Modellgebiet in 18 Kategorien (Tab. 3.1) in einem $5\text{ m} \times 5\text{ m}$ Raster unterteilt. Zusätzlich zu den Baumhöhen wurden auch noch die einzelnen Gebäudehöhen bestimmt. Mit Hilfe des Präprozessors GRITOP wurden diese Daten in ein dreidimensionales Gitter überführt (Abschnitt 3.2.1). Die Positionen der Messtürme wurden durch GPS-Messungen bestimmt.

Tabelle 3.1: Landnutzungsklassen der digitalisierten Karten (LNK) und ihr Äquivalent in MITRAS. Die Höhen der Bäume wurden in einer neu definierten Höhenklasse abgespeichert.

digitalisierte Karten		MITRAS	
LNK	Kategorie	LNK	Kategorie
1	Ackerflächen	4	Wiese/Weide
2	Straße/Parkplatz	9	bebaute Flächen
3	Laubwald (25–30 m)	7	Mischwald
4	Wiese/Weide	4	Wiese/Weide
5	Laubwald (10–15 m)	7	Mischwald
6	Laubwald (> 30 m)	7	Mischwald
7	Gebüsch (0–10 m)	6	Gebüsch
8	Laubwald (15–20 m)	7	Mischwald
9	Gebäude	9	bebaute Flächen
10	Laubwald (20–25 m)	7	Mischwald
11	Nadelwald (15–20 m)	8	Nadelwald
12	Nadelwald (> 30 m)	8	Nadelwald
13	Sonstiges	3	gemischte Bodennutzung
14	Nadelwald (10–15 m)	8	Nadelwald
15	Nadelwald (20–25 m)	8	Nadelwald
16	Gewässer	0	Gewässer
17	Bahngleise	9	bebaute Flächen
18	Nadelwald (25–30 m)	8	Nadelwald

3.2 Präprozessoren

3.2.1 GRITOP

Die digitalisierten Rasterdaten haben als Bezugssystem Gauß-Krüger-Koordinaten, MITRAS und MICTM rechnen jedoch in lokalkartesischen Koordinaten. Die Umrechnung und die Anpassung der Landnutzungsklassen an MITRAS/MICTM wurden mit dem Präprozessor **GRITOP** durchgeführt. Das Programm kann aus digitalen Kartensätzen ein nicht äquidistantes Gitter sowohl in horizontaler als auch in vertikaler Richtung erzeugen und die gitterflächenbezogene Landnutzung

Tabelle 3.2: Vertikale Schichten der Modelle. Die Schichten -1 und 27 sind Hilfsschichten, die nur für eine adäquate Berechnung der Randbedingungen benötigt werden.

NX3	Höhe [m]	NX3	Höhe [m]	NX3	Höhe [m]
-1	-5.00	9	45.00	19	117.97
0	0.00	10	50.00	20	129.78
1	5.00	11	55.00	21	142.77
2	10.00	12	60.50	22	157.06
3	15.00	13	66.55	23	172.78
4	20.00	14	73.21	24	190.07
5	25.00	15	80.54	25	209.09
6	30.00	16	88.60	26	228.11
7	35.00	17	97.47	27	247.13
8	40.00	18	107.23		

zuordnen. Die horizontale Gitterweite wurde mit 5 m konstant gehalten, in vertikaler Richtung hat die oberste Schicht eine Ausdehnung von etwa 19 m, wobei bis zu einer Höhe von 50 m das Gitter noch nicht gespreizt wird (Tab. 3.2).

GRITOP erzeugt eine $i \times j$ -Matrix mit 144×72 Gitterpunkten, denen jeweils horizontale Gitterweiten, geografische Länge und Breite, Landnutzungsklassen, Baumhöhe und Baumart zugeordnet sind. Die Baumart unterscheidet nicht zwischen Buchen, Eichen und sonstigen, sondern unterteilt diese in Isoprenemitter und -nichtemitter. Dabei gelten Eichen als 100 %, Buchen als 0 % und Mischwälder als 50 % Isoprenemitter (Abb. 3.2).

Die Koordinatentransformation und die Bestimmung der Messtürme durch GPS-Messungen haben zur Folge, dass die einzelnen Gitterpunkte mit einer Unsicherheit von etwa 25 m behaftet sind, die aber beim Vergleich der Simulationen mit den Messdaten keine Einschränkung bedeuten. Eine Ausnahme bilden hier die Tracermessungen in Abschnitt 4.4.4. Die Baumhöhen sind an die Modellhöhen angepasst. Dies entspricht etwa der Genauigkeit, mit der die Bäume vermessen worden sind.

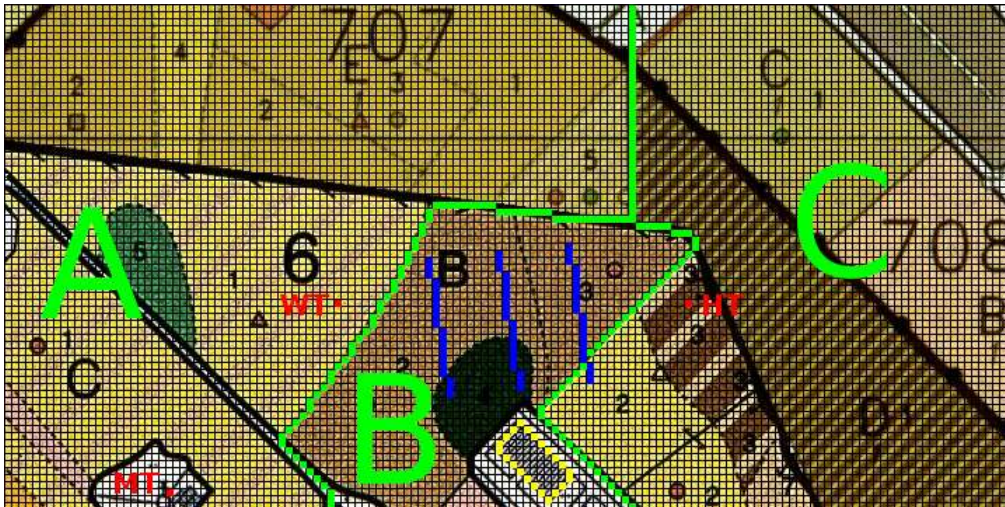


Abbildung 3.2: Dargestellt ist das Modellgebiet in der Gitterstruktur, dem eine Karte der Landnutzung hinterlegt ist. Die Felder A, B und C sind jeweils Bereiche mit Eichen, Buchen und Mischwald, die unterschiedliche Anteile an den Isoprenemissionen haben. Der meteorologische Turm und die beiden ECHO-Messtürme sind als rote Punkte (MT, WT und HT) gekennzeichnet. Die blauen Linien sind die SF_6 -Quellen für die Tracerexperimente (Abschnitt 4.4.4). In gelb dargestellt ist der Umriss eines Gebäudes, welches von den Modellgleichungen erfasst wird.

3.2.2 MASK

Am südlichen Rand des Modellgebietes befindet sich in der Mitte das Institutsgebäude 06.1 des ICG-V (Abb. 3.2). Da Gebäude die Strömung stark beeinflussen, muss das Gebäude mit Hilfe des Präprozessors **MASK** in das Modellgebiet integriert werden. Als mögliche Formen können Quader, Tetraeder und Prismen mit einer Grundfläche eines gleichschenkligen Dreiecks an das Modellgitter angepasst werden. Diese Formen können zusätzlich um einen beliebigen Winkel in der Ebene gedreht werden.

Das Gebäude 06.1 füllt im Modellgitter eine Grundfläche von 50 m mal 25 m und ist etwa 15 m hoch. In MITRAS/MICTM wird gewährleistet, dass dieser Bereich vom Wind umströmt wird und die Stoffkonzentrationen innerhalb des Gebäudes Null sind.

3.2.3 MITRAS 1D

Meteorologische Modelle benötigen für belastbare Vorhersagen eine Einschwingzeit, in der sich die meteorologischen Größen an die Modellgleichungen anpassen. Um diese Zeit zu verkürzen und zusätzlich die Stabilität des Modells zu erhöhen, wird hier der Präprozessor **MITRAS 1D** verwendet, der eindimensionale, bereits an die Modellgleichungen angepasste Profile erstellt. Diese Profile werden als Eingabedaten für das dreidimensionale MITRAS verwendet. In MITRAS setzt sich eine Modellsimulation für einen Tagesgang aus stündlichen Einzelläufen zusammen (Abschnitt 4.1). Daher müssen für jede Stunde Randwerte übergeben werden. Für die einzelnen meteorologischen Parameter soll dies getrennt erläutert werden.

Strahlung

Die am Modelloberrand eintreffende kurzwellige Strahlung bestimmt sich in MITRAS durch die Solarkonstante. Da das Modellgebiet jedoch nur etwa 200 m hoch ist (Kap. 3.1), würde am Oberrand eine zu hohe Strahlung eintreffen. Um die in 200 m einfallende solare Strahlung neu zu bestimmen, wurde mit **MITRAS 1D** ein Tagesgang für den 14.07.2003 gerechnet. Dieser eindimensionale Modelllauf hatte einen Modelloberrand in einer Höhe von 12 km, damit die Strahlung und ihre Abschwächung in der Atmosphäre durch Wasserdampf und weitere Gase möglichst genau wiedergegeben werden kann. In etwa 200 m wurde dann die eintreffende Strahlung bestimmt und als neuer Eingabeparameter für die Modellrechnungen verwendet. Als Eingabedaten wurden zur Berechnung der Strahlungskorrektur die Temperatur und die relative Feuchte aus Radiosondenaufstiegen (Abb. 3.3 und 3.4) der umliegenden Stationen Essen (D), De Bilt (NL), Uccle (B) und St-Hubert (B) genutzt. Da über den gesamten Tag nahezu konstante Verhältnisse geherrscht haben, wurden für die Korrekturberechnung über den Tag konstante Profile für Temperatur und Feuchte angenommen. Die mit der Tageszeit variierenden Werte im Taupunkt hängen mit Bewölkung in einer Höhe zwischen 500 und 900 hPa zusammen und wurden vernachlässigt.

Die relative Feuchte aus den Radiosondendaten wurde über die Magnus-Formel (3.1) zur Bestimmung des Dampfdrucks $e(T)$ als Funktion von Temperatur und

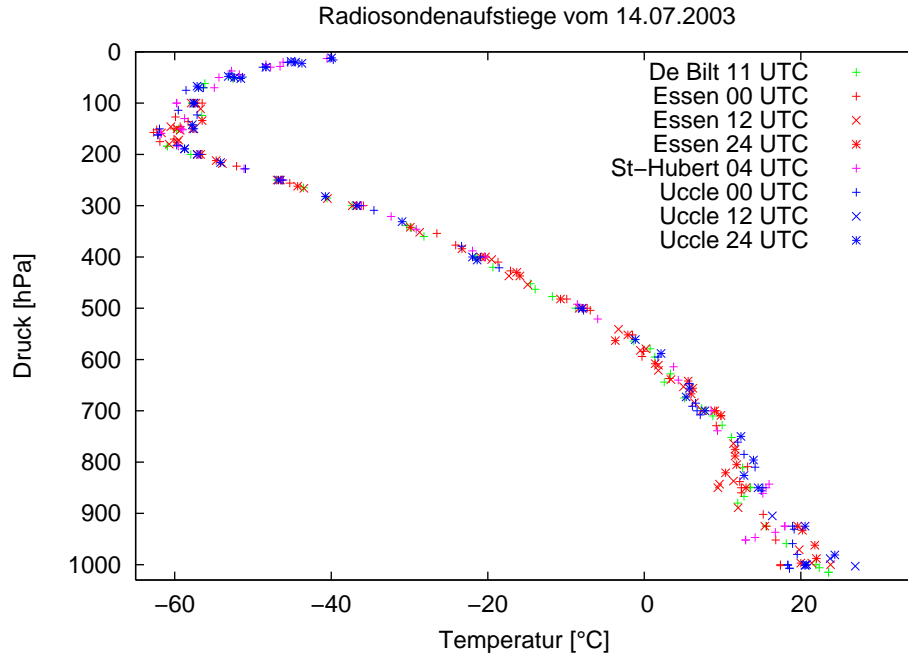


Abbildung 3.3: Die Temperatur aus den Radiosondendaten der umliegenden Stationen zeigten während des 14.07.2003 kaum Variationen.

Taupunkt T_d bestimmt.

$$e(T) = \begin{cases} 610.78 \exp\left(\frac{17.08 T}{234.18 + T}\right), & \text{für } T \geq 0^\circ\text{C} \\ 610.78 \exp\left(\frac{17.84 T}{245.43 + T}\right), & \text{für } T < 0^\circ\text{C} \end{cases} \quad (3.1)$$

Für die relative Feuchte f gilt dann die Beziehung $f = \frac{e(T)}{e(T_d)}$, mit $e(T_d)$ als Sättigungsdampfdruck.

Für den zweiten zu modellierenden Tag, dem 18.07.2003, wurden ähnliche Verhältnisse in den Temperatur- und Feuchteprofilen gefunden. Die Bestimmung der Strahlung in 200 m Höhe wurde daher für diesen Tag nicht neu berechnet, sondern die für den 14.07.2003 errechnete Korrektur übernommen.

Temperatur

Als stündliche Temperaturvorgabe werden lediglich zwei Werte verwendet. Die Messwerte des Hauptturms in 2 m werden als Oberflächentemperatur, die Messwerte des meteorologischen Turms in 120 m als obere Randwerte festgelegt. Damit wurde bewusst auf die in den Messungen vorhandene Kronenraumerwärmung

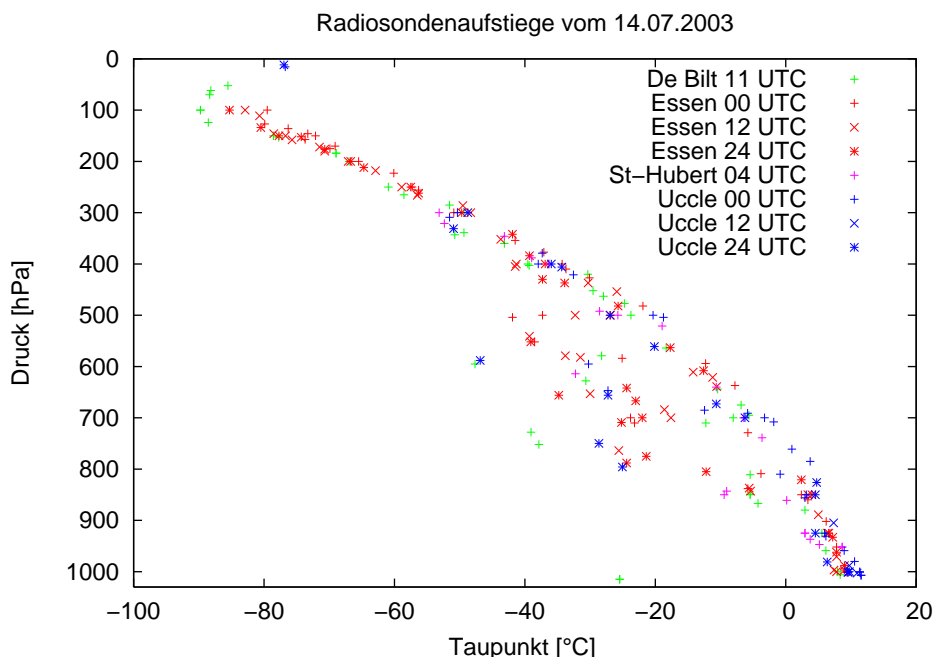


Abbildung 3.4: Der Taupunkt aus den Radiosondendaten vom 14.07.2003 zeigte lediglich zwischen 500 und 900 hPa eine sich im Laufe des Tages ändernde Luftfeuchtigkeit, die im Modell jedoch vernachlässigt wurde.

am Tage und in den Abendstunden verzichtet, da das Modell diese Erwärmung durch die Abschwächung der Strahlung innerhalb des Waldes selbst erzeugen soll. Der Nachteil dabei ist, dass die leicht erhöhte Temperatur im Kronenraum in der Nacht nicht modelliert werden kann, da es sich hier um einen Speichereffekt handelt, der vom vorherigen Tag bedingt ist. Da in dieser Arbeit die biogenen Emissionen die Hauptrolle spielen und diese vornehmlich am Tage emittiert werden, kann die unzureichende nächtliche Temperaturvorhersage im Kronenraum vernachlässigt werden. Die Probleme, die die hier verwendete Rechenmethode aufwirft, werden im Anhang A näher erläutert. Für die Auswertung werden die beiden in das Modell übernommenen Messwerte nicht mehr herangezogen.

Windgeschwindigkeit

Als Eingabedaten für die Windgeschwindigkeitsprofile werden die Messwerte in den Höhen 50, 80, 100 und 120 m des meteorologischen Turms unverändert übernommen. Das eindimensionale MITRAS 1D wurde im Gegensatz zu MITRAS nicht an die Vegetation angepasst. Es enthält somit keine Bewuchsparametrisierung. In

Tabelle 3.3: Pearson-Korrelationskoeffizienten für die Windgeschwindigkeitskomponenten u und v und den Betrag der Windgeschwindigkeit $|\vec{v}|$ am Haupt- und Westturm und Messdaten aus 30 m am meteorologischen Turm vom 14. und 18.07.2003. Das aus den Messwerten des Haupt- und Westturms gemittelte Profil korreliert gut mit den Messdaten des meteorologischen Turms.

	Hauptturm	Westturm	gemittelt
$u_{14.}$	0.46	0.63	0.62
$v_{14.}$	0.76	0.82	0.83
$ \vec{v} _{14.}$	0.29	0.66	0.59
$u_{18.}$	0.97	0.98	0.98
$v_{18.}$	0.79	0.95	0.93
$ \vec{v} _{18.}$	0.91	0.93	0.95

30 m Höhe werden daher per linearer Regression die Messwerte des freistehenden meteorologischen Turms an die von Haupt- und Westturm gemittelten Werte angenähert um eine zu hohe An- und Durchströmung des Stammraumes in MITRAS zu verhindern. Es wird erwartet, dass sich das Windprofil vom Boden bis zum Kronendach in MITRAS selbstständig anpasst.

Die Messwerte in 30 m Höhe des meteorologischen Turms korrelieren gut mit den gemittelten Werten des Haupt- und Westturms (Tab. 3.3), so dass die lineare Regression hier als geeignet angenommen werden kann. Die Berechnungsformeln für die neuen Windgeschwindigkeitskomponenten der 30 m-Werte vom 14. und 18.07.2003 lauten jeweils

$$u_{14.} = 0.2869 \cdot u_{\text{MT}} - 0.4514 \quad (3.2)$$

$$v_{14.} = 0.4224 \cdot v_{\text{MT}} - 0.2632 \quad (3.3)$$

und

$$u_{18.} = 0.5756 \cdot u_{\text{MT}} - 0.0458 \quad (3.4)$$

$$v_{18.} = 0.5847 \cdot v_{\text{MT}} + 0.1156. \quad (3.5)$$

Das vertikale Windprofil kann sich in MITRAS 1D im Gegensatz zu den Randbedingungen in MITRAS (Kap. 3.3) frei einstellen. Damit ist gewährleistet, dass sich zum Boden hin ein stationäres Profil ausbilden kann.

Relative Feuchte

Für die relative Feuchte wurden stündliche Messwerte des meteorologischen Turmes in den Höhen 10, 20, 30, 50, 80, 100 und 120 m als Anfangs- und Randwerte übernommen. Die Evaporation des Waldes wurde in den Modellgleichungen nicht weiter berücksichtigt, da der Aufwand für die Implementierung und die dadurch zusätzlich entstehenden Unsicherheiten nicht gerechtfertigt gewesen wäre. Der Einfluss der Bäume auf die relative Feuchte ist in den Messwerten, die als Randwerte in das Modell eingehen, bereits enthalten.

3.2.4 STAR

Chemische Transportmodelle wie RADM2 benötigen zur Konzentrationsberechnung der verschiedenen Stoffe für jeden Gitterpunkt und Zeitschritt unter anderem für jede einzelne Photolysereaktion N Photolysefrequenzen J_N . Für die Berechnung dieser Photolysefrequenzen wird das **STAR**-Modell¹ von Ruggaber et al. (1994) verwendet. **STAR** berechnet mit Hilfe der in MITRAS bestimmten meteorologischen Profile für Temperatur, Druck, Feuchte und den Flüssigwassergehalt die Photolysefrequenzen durch Integration über alle Wellenlängen λ des Produkts aus dem spektralen aktinischen Fluss I_A , dem spektralen Absorptionsquerschnitt σ_N und der Quantenausbeute ϕ_N .

$$J_N(\tau) = \int_{\lambda} I_A(\tau, \lambda) \cdot \sigma_N(\lambda) \cdot \phi_N(\lambda) d\lambda \quad (3.6)$$

Für die Berechnung werden nur die in der Troposphäre relevanten Wellenlängen zwischen 290 nm und 700 nm verwendet. Oberhalb dieser Wellenlängen hat das Licht nicht genügend Energie, um von den Molekülen absorbiert zu werden und die chemische Bindungsenergie zu überwinden. Die Moleküle können dann nicht mehr in verschiedene Produkte photolysieren. Von den 36 in **STAR** bestimmbareren Reaktionen werden in MICTM 21 wieder eingelesen (Tab. C.2). Dabei ist zu beachten, dass die Photolysefrequenzen näherungsweise nur stündlich neu berechnet werden und dass die durch den Wald verursachte Abschwächung der Photolysefrequenzen nicht in **STAR** berücksichtigt werden kann, sondern erst in MICTM (Abschnitt 2.3.2).

¹STAR = System for Transfer of Atmospheric Radiation

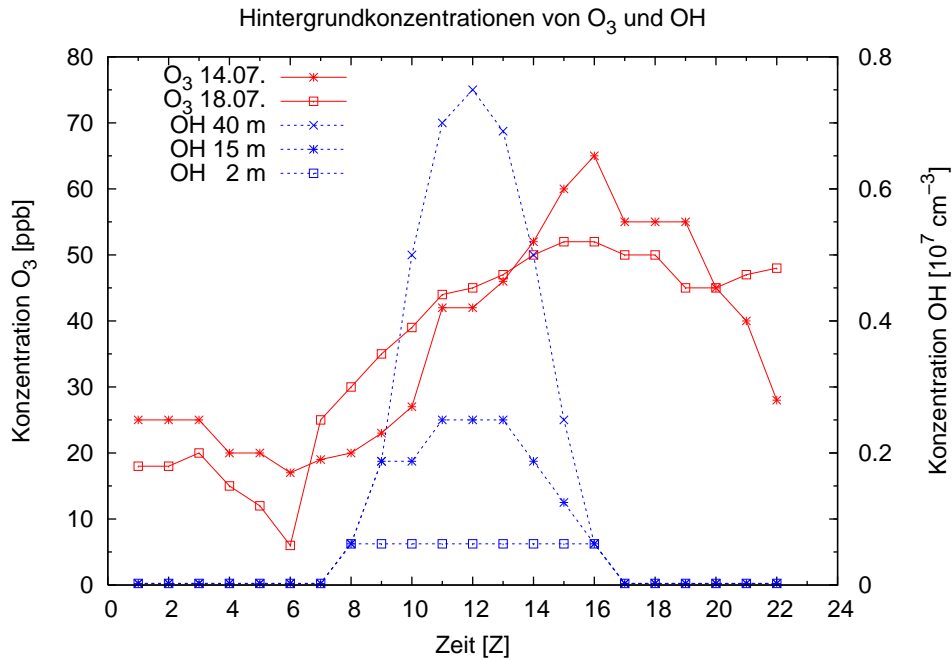


Abbildung 3.5: Diese Hintergrundkonzentrationen von O₃ und OH für den 14. und den 18.07.2003 wurden in der Sensitivitätsstudie (Abschn. 4.4.3) statt der in POPCORN bestimmten Hintergrundwerte stündlich neu eingelesen. Die OH-Konzentration war an beiden Tagen gleich.

3.3 Randbedingungen

In einem relativ kleinen Modellgebiet sind die Randbedingungen von besonders großer Bedeutung, da sie die Modellergebnisse stark beeinflussen können. Insbesondere gilt dies für den Einströmrand, wenn wie in den vorliegenden Modellrechnungen wegen der begrenzt zur Verfügung stehenden Rechenzeit kein größeres Vorlaufgebiet zur Anpassung an die Strömungsverhältnisse möglich ist.

3.3.1 Randbedingungen für MITRAS

Für den Wind werden an den Einströmrändern feste Werte vorgegeben. Diese entsprechen genau den Profilen, die im Präprozessor MITRAS 1D stündlich neu berechnet werden (Abschnitt 3.2). Für die Ausströmränder verschwindet der Gradient. An den Einströmrändern entsteht durch das Festhalten der Randwerte teil-

weise numerischer Lärm, der sich allerdings nicht weiter in das Modellgebiet fort-pflanzt und daher vernachlässigt werden kann. Die für die Vergleiche mit den Messungen relevanten Gitterpunkte liegen alle weit genug vom Rand entfernt.

Als Randbedingungen für Temperatur und Feuchte werden die Größen am Einströmrand vorgegeben und die randnormalen Gradienten an den seitlichen Rändern Null gesetzt.

Tabelle 3.4: Die in der POPCORN-Kampagne ermittelten Hintergrundkonzentrationen werden für den RADM2-Mechanismus in MICTM benutzt. Für die mit * gekennzeichneten Größen wurden in den Sensitivitätsstudien zusätzlich Tagesgänge aus ECHO verwendet, die in den Abbildungen 3.5 und 3.6 dargestellt sind. Die Abkürzungen für die einzelnen Substanzen sind in Tabelle C.1 erläutert.

Substanz	Konz. [ppb]	Substanz	Konz. [ppb]	Substanz	Konz. [ppb]
NO ₂ *	6.5	SO ₂	0.556	OLN	$4.05 \cdot 10^{-3}$
NO *	0.03	SULF	$4.05 \cdot 10^{-7}$	ACO ₃	$4.05 \cdot 10^{-4}$
O ₃ *	25	CH ₄	$1.86 \cdot 10^3$	TCO ₃	$4.05 \cdot 10^{-3}$
HONO	$8.26 \cdot 10^{-5}$	ETH	0.86	OH *	$0.01 \cdot 10^{-4}$
HNO ₃	0.01	HC3	0.381	ETHP	$4.05 \cdot 10^{-3}$
HNO ₄	0.1	HC5	0.0601	HC3P	$4.05 \cdot 10^{-3}$
NO ₃	$1.62 \cdot 10^{-5}$	HC8	0.0494	HC5P	$4.05 \cdot 10^{-3}$
H ₂ O ₂	0.544	OL2	0.15	HC8P	$4.05 \cdot 10^{-3}$
HCHO	2.03	OLT	0.0961	OL2P	$4.05 \cdot 10^{-3}$
CO	116.0	OLI	0.0144	OLTP	$4.05 \cdot 10^{-3}$
ALD	0.5	TOL	0.109	OLIP	$4.05 \cdot 10^{-3}$
OP1	0.1	CSL	$1.0 \cdot 10^{-3}$	TOLP	$4.05 \cdot 10^{-3}$
OP2	0.1	XYL	0.0676	XYLP	$4.05 \cdot 10^{-3}$
PAA	$1.0 \cdot 10^{-3}$	PAN	0.22	KETP	$4.05 \cdot 10^{-3}$
KET	$1.0 \cdot 10^{-3}$	ISO	0.0232	XNO ₂	$4.05 \cdot 10^{-3}$
GLY	$1.0 \cdot 10^{-3}$	TPAN	$1.0 \cdot 10^{-3}$	XO ₂	$4.05 \cdot 10^{-3}$
MGLY	$1.0 \cdot 10^{-3}$	ORA1	$1.0 \cdot 10^{-7}$	NH ₃	0.0
DCB	$1.0 \cdot 10^{-3}$	ORA2	$4.05 \cdot 10^{-7}$	HCl	0.0
ONIT	$4.05 \cdot 10^{-7}$	HO ₂	$4.86 \cdot 10^{-3}$	SF ₆	0.0
N ₂ O ₅	$8.10 \cdot 10^{-5}$	MO ₂	$4.05 \cdot 10^{-3}$		

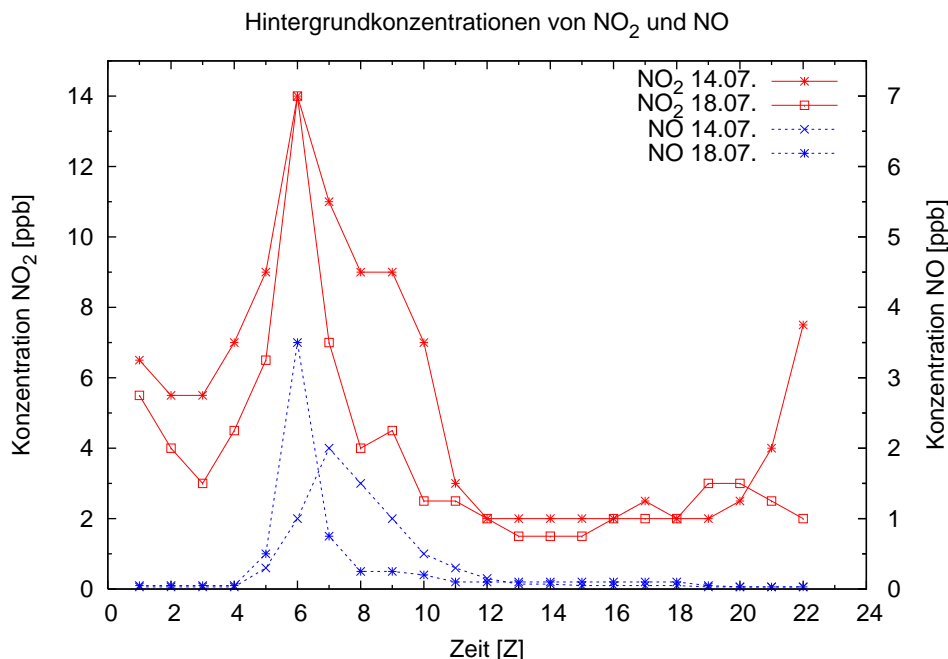


Abbildung 3.6: Diese Hintergrundkonzentrationen von NO₂ und NO für den 14. und den 18.07.2003 wurden für die Sensitivitätsstudie aus den Messungen übernommen und stündlich neu eingelesen.

3.3.2 Randbedingungen für MICTM

Für den RADM2-Mechanismus wurde ein experimentell bestimmter Datensatz der POPCORN-Kampagne von 1994 (Plaß-Dülmer et al., 1998) verwendet, der für alle 59 in MICTM benutzten Stoffe Hintergrundkonzentrationen enthält (Tab. 3.4). Das Beobachtungsgebiet lag zu dieser Zeit abseits von Ballungszentren in einem Maisfeld in Pennewitt (Mecklenburg-Vorpommern). Dadurch repräsentieren die Werte dieses Datensatzes die atmosphärische Zusammensetzung von Spurengasen für weite Teile Europas. Sie können somit als gültige Hintergrundkonzentrationen für das hier verwendete Simulationsgebiet betrachtet werden. Für diesen Datensatz ist allerdings kein Tagesgang in den Konzentrationen vorhanden, ebenso fehlen vertikale Profile. Für die in der Isoprenchemie eine Rolle spielenden Stoffe OH, Ozon, NO und NO₂ wurde der Datensatz zusätzlich um einen Tagesgang erweitert, für OH wurde zudem ein Vertikalprofil aus den ECHO-Messungen generiert (Abbildungen 3.5 und 3.6). Für eine Sensitivitätsstudie (Abschnitt 4.4.3)

ist damit gewährleistet, dass die Isoprenchemie auch mit den während ECHO gemessenen Hintergrundkonzentrationen gerechnet werden kann.

Für alle 59 Stoffe werden die Hintergrundkonzentrationen stündlich neu eingelesen und am Einströmrand als feste Randwerte vorgegeben. Der Fluss am unteren Rand wird bestimmt durch die Depositionsgeschwindigkeit, die im Modell für die einzelnen Stoffe vorgegeben wird. Am Oberrand des Modells gilt der gleiche Gradient wie der im Modell berechnete (konstanter Gradient).

4 Anwendung des Modellsystems

In diesem Kapitel werden die beiden Tage, die für die Modellrechnungen ausgewählt wurden, mit ihren meteorologischen Eigenschaften in Abschnitt 4.2 vorgestellt. Anschließend werden die Ergebnisse der beiden Modellrechnungen mit MITRAS und MICTM in den Abschnitten 4.3 und 4.4 präsentiert und ausgewertet.

4.1 Modellläufe

Die in der ECHO-Datenbank abgelegten Messwerte haben als Zeitbezug alle Mitteleuropäische Zeit (MEZ). Die Modelle MITRAS und MICTM rechnen jedoch in lokaler Sonnenzeit (Z), auch wahre Ortszeit genannt. Für den Vergleich der Modellergebnisse mit den Messungen müssen diese Zeiten ineinander umgerechnet werden.

MEZ ist definiert als die mittlere Ortszeit am 15. Längengrad östlich von Greenwich. Das Modellgebiet befindet sich etwa auf 6°24' O (Abschnitt 3.1). 1° in Ost-West-Richtung entspricht etwa 83 km, bzw. 4 min Unterschied in der lokalen Sonnenzeit. Daraus ergibt sich eine Differenz der lokalen Sonnenzeit in Jülich zur MEZ von etwa 34.4 Minuten:

$$12:00 \text{ MEZ} \doteq 11:00 \text{ UTC} \doteq 11:26:36 \text{ Z}$$

Für die im nachfolgenden Abschnitt ausgewählten Tage wurde mit dem Modellsystem MITRAS/MICTM jeweils ein Tagesgang gerechnet. In MITRAS wurde dieser zur Einsparung von Rechenzeit (Anhang A) aus stündlichen Einzelläufen

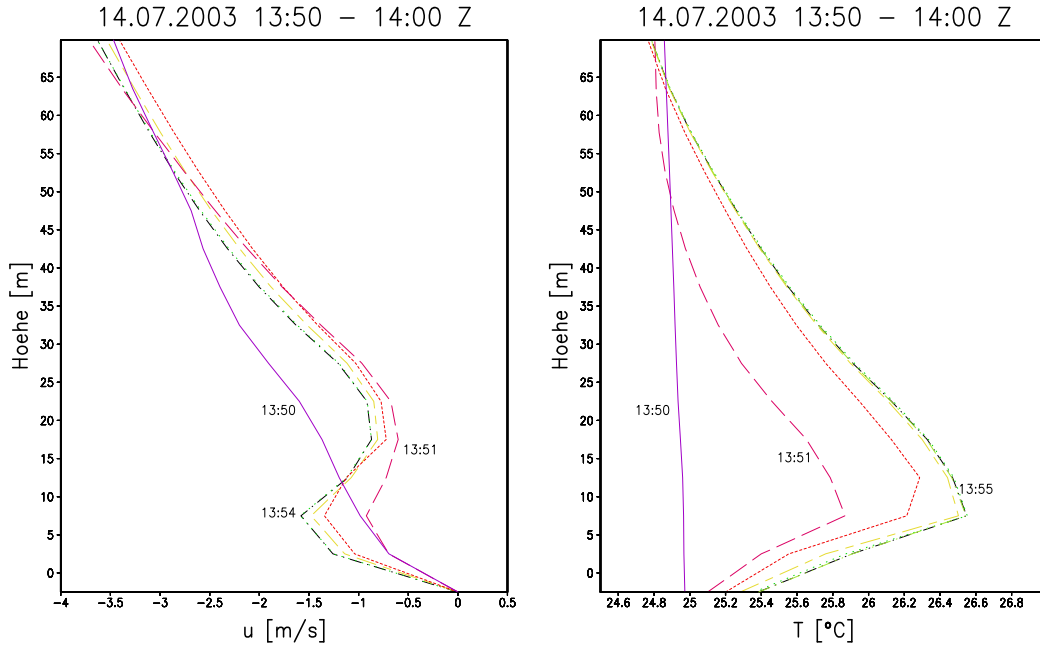


Abbildung 4.1: Bereits nach 4 Minuten erreicht die u -Komponente der Windgeschwindigkeit Stationarität, bei der Temperatur geschieht dies nach etwa 5 Minuten.

zusammengesetzt. Das Modell wurde jeweils 10 Minuten bis zur vollen Stunde integriert. Die zur vollen Stunde (lokaler Zeit) bestimmten Ergebnisse entsprechen den stündlichen ECHO-Messwerten etwa zur 35. Minute MEZ. Zum Vergleich mit Messdaten wurden, soweit sie nicht anders gekennzeichnet sind, 10-Minuten-Mittelwerte von der 30. bis zur 40. Minute verwendet.

Die Integrationszeiten von 10 Minuten (dies entspricht zwischen 3500 und 5000 Integrationsschritten) reichen aus, um einen quasi-stationären Zustand zu erreichen. Die Erwärmung im Kronenraum erreicht am Tage nach 5 Minuten ein lokales Maximum und die Strömung stellt sich bereits nach 4 Minuten ein (Abb. 4.1). Die hier verwendete Methode eignet sich also gut dazu, einen Tagesgang aus mehreren Einzelläufen zusammenzusetzen.

In MICTM werden die stündlichen Einzelwerte der Wind-, Temperatur- und Feuchtefelder zusammengefasst und der chemische Transport gerechnet. Die meteorologischen Werte zwischen den einzelnen Stunden werden linear interpoliert. So ist sichergestellt, dass die Chemie kontinuierlich gerechnet werden kann.

4.2 Ausgewählte Tage

Für die Modellierung mit einem mikroskaligen Modell müssen die zu modellierenden Tage bestimmten Kriterien entsprechen. Da MITRAS auf Grund der geringen Modellhöhe keine Grenzschichtwolken oder höhere Wolken berechnen kann, muss darauf geachtet werden, dass wolkenfreie oder gering bewölkte Tage ausgewählt werden. Zudem sollte wegen der Ost-West-Ausrichtung des Modellgebietes entweder Ost- oder Westwind vorherrschen, damit das Strömungsfeld im Modellgebiet genügend Vorlauf hat um sich anzupassen. Idealerweise sind an beiden Tagen entgegengesetzte Windrichtungen zu wählen, um das Verhalten des Modells in unterschiedlichen Situationen zu untersuchen.

Um die Ergebnisse mit Messungen vergleichen zu können, müssen die ausgewählten Tage in der Zeit der ECHO-Kampagne liegen. Die zu vergleichenden Parameter müssen als Datensatz vorliegen und die zugehörigen Messinstrumente funktioniert haben. Zusätzlich sollen für einen der beiden Tage SF₆-Tracermessungen verfügbar sein, um den Transport im Bestand unabhängig von chemischen Umsetzungen vergleichen zu können.

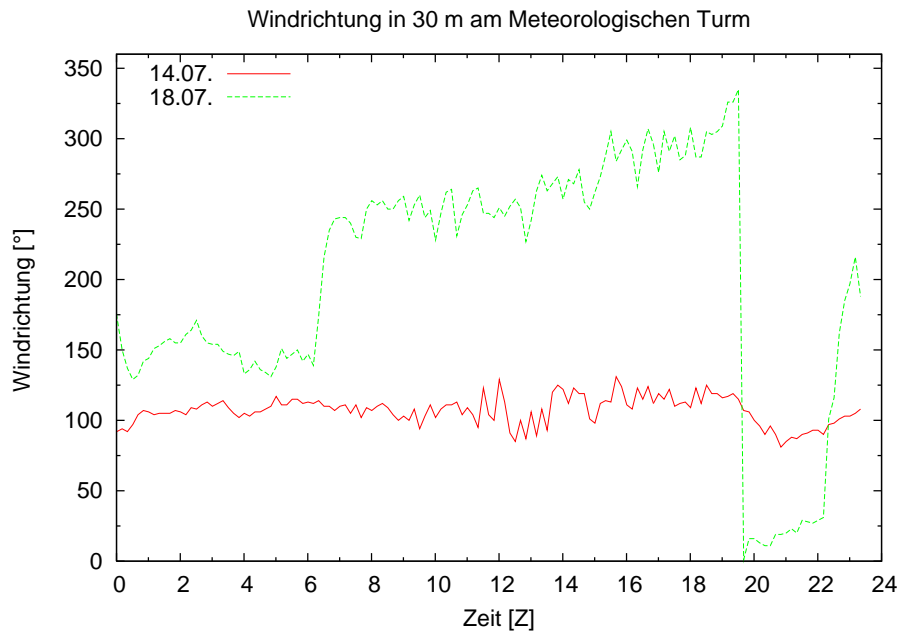


Abbildung 4.2: Messungen der Windrichtung am 14. und 18.07.2003. Die Windrichtung wurde in 30 m Höhe am meteorologischen Messturm bestimmt.

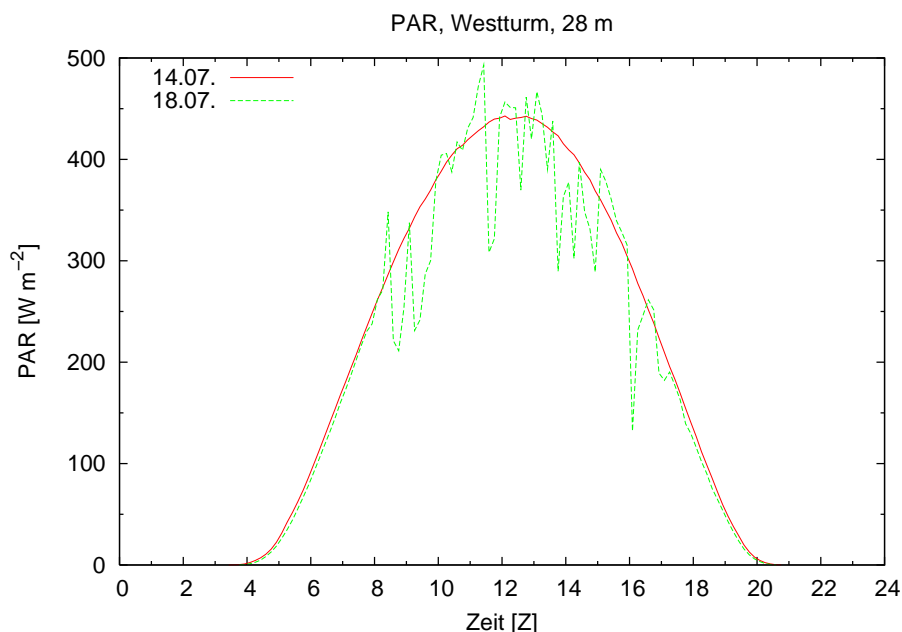


Abbildung 4.3: Messungen der photosynthetisch aktiven Strahlung am 14. und 18.07.2003. Die Strahlung wurde in 28 m Höhe am Westturm bestimmt.

1. Modelltag: 14. Juli 2003

Am 14. Juli 2003 war in Norddeutschland ein Zwischenhoch mit 1020 hPa zu finden. Der nach Süden hin bis 1010 hPa abnehmende Bodendruck garantierte über den gesamten Tag eine stabile Ostwindlage (Abb. 4.2) mit einem wolkenlosen Himmel (Abb. 4.3) über dem Modellgebiet. Die Windgeschwindigkeit war am meteorologischen Turm tagsüber in 10 m mit 1 bis 2 m/s nahezu konstant.

2. Modelltag: 18. Juli 2003

Ein über Süddeutschland liegendes Hochdruckgebiet verlagerte sich im Laufe des Tages weiter nach Osten. Die in der Nacht noch aus Südsüdwest kommende Luftströmung drehte zwischen 6 und 7 Uhr lokaler Zeit nach Westen. Im Laufe des Tages drehte der Wind weiter nach Norden, um schließlich am späten Abend wieder aus südlicher Richtung zu kommen. Trotz dieser Winddrehungen ist zumindest tagsüber die gewünschte Westwindlage zu sehen (Abb. 4.2). Während der Westwindlage lag die Geschwindigkeit auch hier am meteorologischen Turm in 10 m Höhe zwischen 1 und 2 m/s.

Bei Westwindlagen zieht im Gegensatz zu Ostwindlagen in den Sommermonaten

häufiger auch feuchte Luft mit Wolkenbildung über das Modellgebiet hinweg. An diesem Tag war dies nur vereinzelt der Fall. An den kurzzeitigen Änderungen der Strahlung im Tagesverlauf (Abb. 4.3) und in den Radiosondendaten (Abb. 3.4) sind diese Wolken wiederzufinden. Dennoch kann dieser Tag als guter Strahlungstag bezeichnet werden, denn Westwindlagen an anderen Tagen sind gewöhnlich mit sehr viel mehr Wolken verbunden.

Am 18. Juli 2003 wurde in den Mittagsstunden ein SF₆-Tracerexperiment durchgeführt, dessen Messwerte vorliegen und mit Modellergebnissen verglichen werden können (Abschnitt 4.4.4).

Die Auswertung der beiden Tage erfolgt getrennt nach den Ergebnissen für die Meteorologie mit MITRAS und für die chemischen Größen mit MICTM.

4.3 Auswertung der Meteorologie (MITRAS)

4.3.1 Ostwindlage am 14.07.2003

Für einen guten Überblick über die Qualität der Modellergebnisse bietet es sich an, alle zur Verfügung stehenden Messungen mit den Modellergebnissen des gesamten Tagesgangs in einem Streudiagramm zu vergleichen. In Abbildung 4.4 sind alle verfügbaren Temperaturmessungen der einzelnen Türme den Modellergebnissen aus MITRAS gegenübergestellt. Deutlich zu erkennen ist die geringe Abweichung gegenüber den Messungen von etwa 2 K, welche sich auch im hohen Korrelationskoeffizienten von 0.97 bemerkbar macht. Die in den höheren Temperaturen zu niedrig vorhergesagte Temperatur für den meteorologischen Turm lässt sich mit seiner Nähe zum Modellrand erklären. Da der Turm im Modellgebiet direkt am Einströmrand liegt (Abb. 4.8), kann sich dort keine Kronenraumerwärmung ausbilden, so dass keine den Messungen entsprechenden Temperaturen modelliert werden können. Für einen Vergleich mit Messungen ist der meteorologische Turm wegen seiner Nähe zum südlichen Rand daher nicht geeignet.

Die Temperaturmessungen am meteorologischen Turm wurden mit Platindraht-Temperaturfühlern (PT-100) durchgeführt, deren Messgenauigkeit bei ± 0.1 K

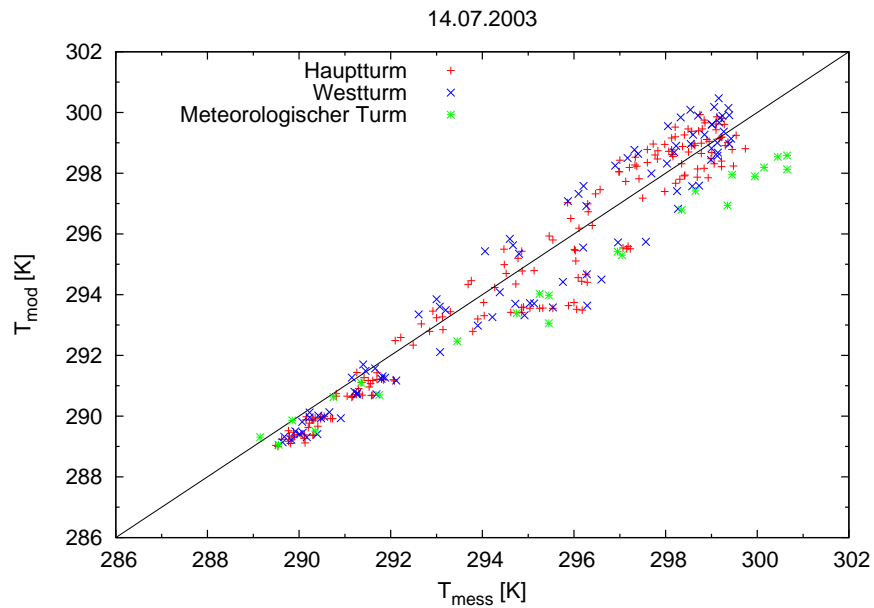


Abbildung 4.4: Streudiagramm der Temperatur für den 14.07.2003 mit allen verfügbaren Messstellen. Der Korrelationskoeffizient beträgt 0.97.

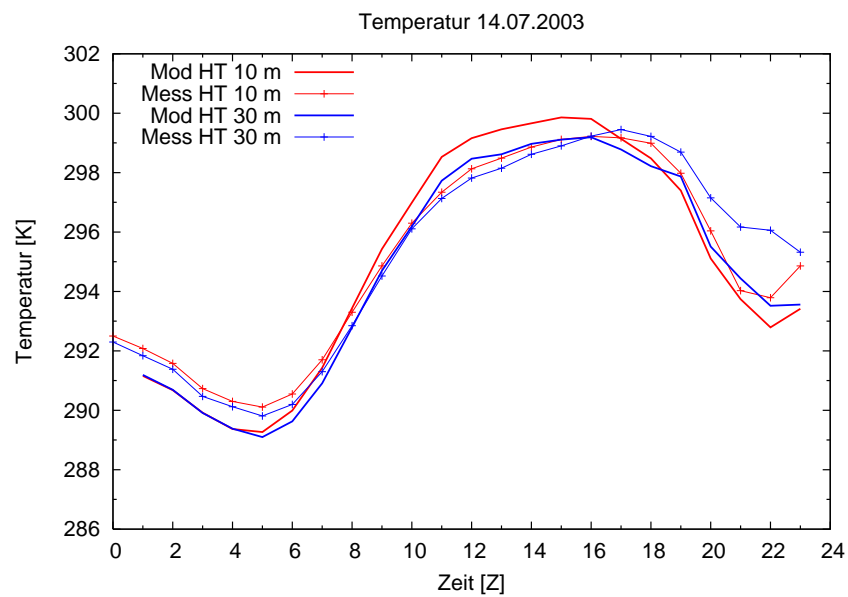


Abbildung 4.5: Tagesgang der Temperatur für den 14.07.2003 in 10 und 30 m Höhe am Hauptturm. Die maximale Abweichung beträgt etwa 2 K in den Abendstunden. Die Erwärmung im Kronenraum kann dort nicht modelliert werden, da es sich um einen Speichereffekt des vorhergehenden Tages handelt.

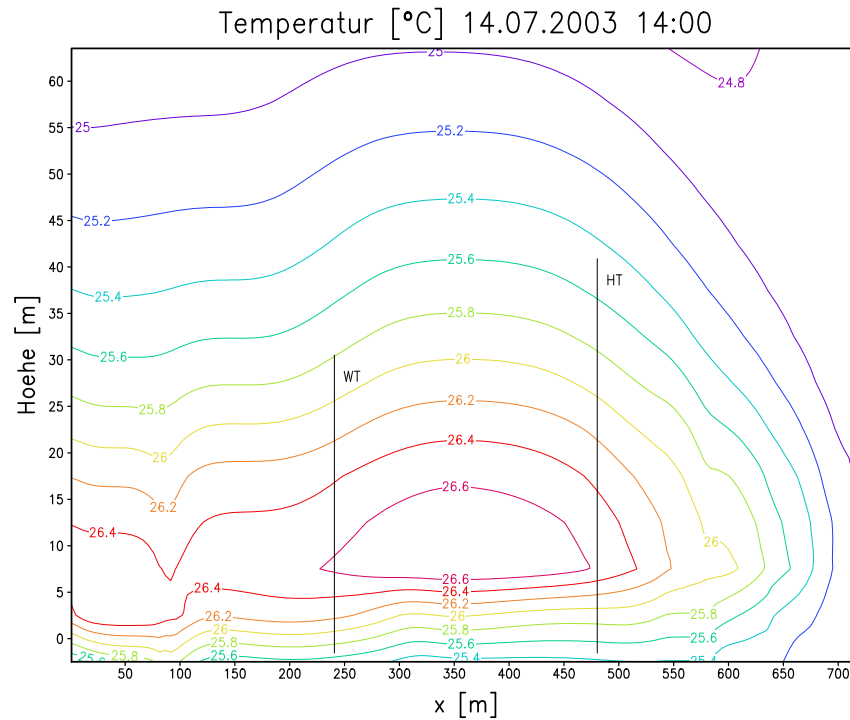


Abbildung 4.6: Modelliertes Temperaturfeld für den 14.07.2003 um 14:00 Uhr. Der West- und der Hauptturm sind mit eingezeichnet. Die stärkste Temperaturerhöhung findet unterhalb des Kronenraums in 10 m statt.

liegen. Für die Messungen am Haupt- und Westturm werden Ultraschallthermometer benutzt, deren Messgenauigkeit in einem ähnlichen Größenbereich liegen.

Der in Abbildung 4.5 dargestellte Tagesgang der Temperatur lässt erkennen, dass in den Abendstunden und Nachts die Temperatur um etwa 2 K unterschätzt wird, am Tage jedoch mit einer Überschätzung von etwa 1 K recht gut dargestellt wird. Die nächtliche Unterschätzung ist eine Folge der zusammengesetzten Modellläufe, bei denen wärmere Luft aus den vorhergehenden Stunden nicht im Kronenraum gespeichert werden kann. Für die hier vorrangig betrachteten Isoprenemissionen in Abschnitt 4.4 ist dies aber ein zu vernachlässigender Nachteil, denn die durch diese Methode erzielte Rechenzeiterparnis ist beträchtlich (Anhang A).

In Abbildung 4.6 ist ein Vertikalschnitt durch die Ebene gezeigt, in der die beiden Messtürme stehen. Vom Einströmrand (rechts) zur Modellgebietsmitte ist deutlich die ansteigende Temperatur zu erkennen, die ein Maximum in der Mo-

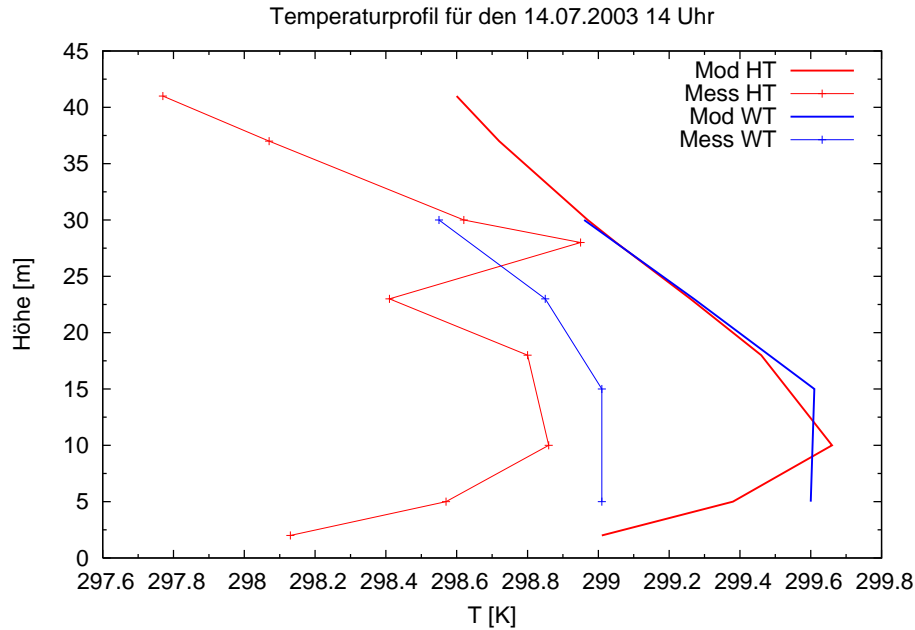


Abbildung 4.7: Gemessene und modellierte Profile der Temperatur für den 14.07.2003 um 14:00 Uhr an West- und Hauptturm.

dellgebietsmitte erreicht und zum Ausströmrand hin nicht weiter steigt. Die Kronenraumerwärmung um 14:00 Z hat ihr Maximum zwischen 7 und 15 Metern. Dies bestätigen auch die Messungen (Abbildung 4.7). Dort ist ebenfalls zu sehen, dass die Temperatur zwar in allen Höhen um etwa 1 K überschätzt wird, das Profil aber in der richtigen Höhe sein Maximum aufweist. Das gemessene Profil am Hauptturm weist noch ein zusätzliches 2. Maximum in 30 m Höhe auf, welches aber weder in den modellierten Profilen noch an dem des Westturms wiederzufinden ist.

Ein Schnitt durch den Kronenraum in 17.5 m Höhe zeigt, dass die Temperatur in Strömungsrichtung ansteigt und erst am Auströmrand ihr Maximum erreicht (Abbildung 4.8). Die in Strömungsrichtung ansteigende Temperatur ist am Einströmrand zwar ein Effekt der Randprofile, allgemein ist dieser Anstieg aber auch in den Messungen wiederzufinden. In Abbildung 4.7 ist zu sehen, dass die Temperatur innerhalb des Waldes am Westturm bezogen auf die Messungen am Hauptturm leicht erhöht ist.

Sind die Messungen der Windgeschwindigkeit in einem Streudiagramm (Abbil-

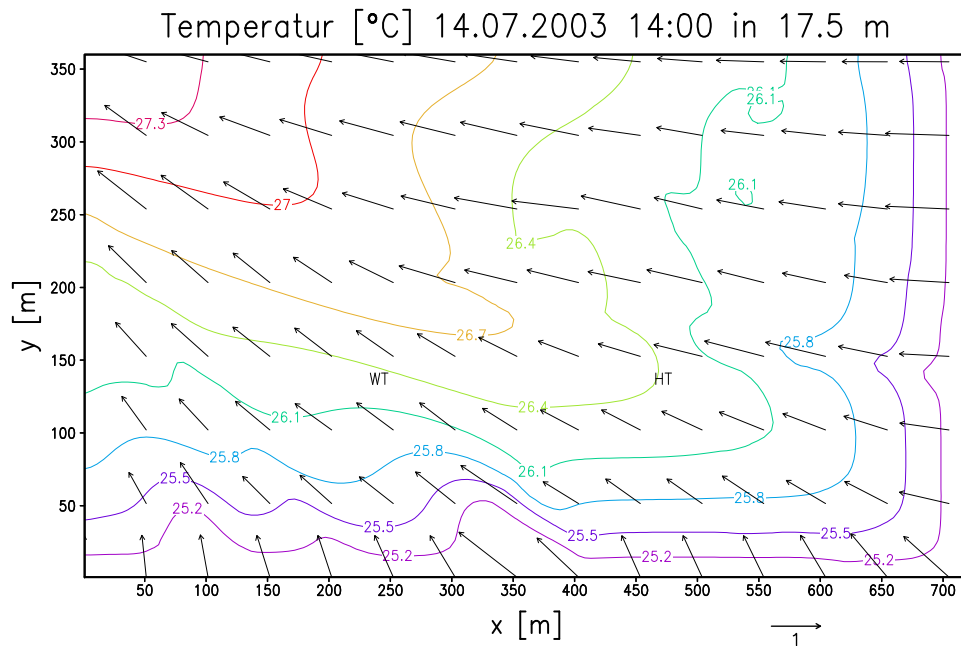


Abbildung 4.8: Horizontalschnitt des modellierten Temperaturfeldes für den 14.07.2003 um 14:00 Uhr in 17.5 m Höhe mit eingezeichneten Windpfeilen.

dung 4.9) dargestellt, wird deutlich, dass insbesondere bei niedrigen Windgeschwindigkeiten bis 1 m/s die Windgeschwindigkeit vom Modell MITRAS leicht überschätzt wird. Für höhere Windgeschwindigkeiten steigt die Streuung zwar an, im Mittel werden sie aber im Vergleich zu den gemessenen Werten insbesondere am Hauptturm gut wiedergegeben. Die Messungenauigkeit der Windgeschwindigkeitsmessung beträgt bei Ultraschallanemometern etwa 0.1 bis 0.2 m/s.

Wenn die Windgeschwindigkeit in ihre Komponenten u und v aufgeteilt wird (Abbildungen 4.10 und 4.11), ist das oben diskutierte Verhalten auf die u -Komponente übertragbar. Die gemessene v -Komponente schwankt dagegen um Null.

Ein Vertikalschnitt durch die Turmebene (Abbildung 4.12) lässt erkennen, dass die niedrigsten Windgeschwindigkeiten sowohl in Bodennähe als auch im Kronenraum auftreten. Dazwischen bildet sich im Stammraum ein sekundäres Windmaximum aus. Dies bestätigen auch die Profilmessungen, die in Abbildung 4.13 gezeigt sind. Die Windgeschwindigkeit wird mit 0.5 bis 1 m/s im Stammraum nur leicht überschätzt. Die Profile sind sonst sehr ähnlich. Zu erkennen ist, dass am Westturm die gemessene Windgeschwindigkeit schon oberhalb 15 m Höhe wie-

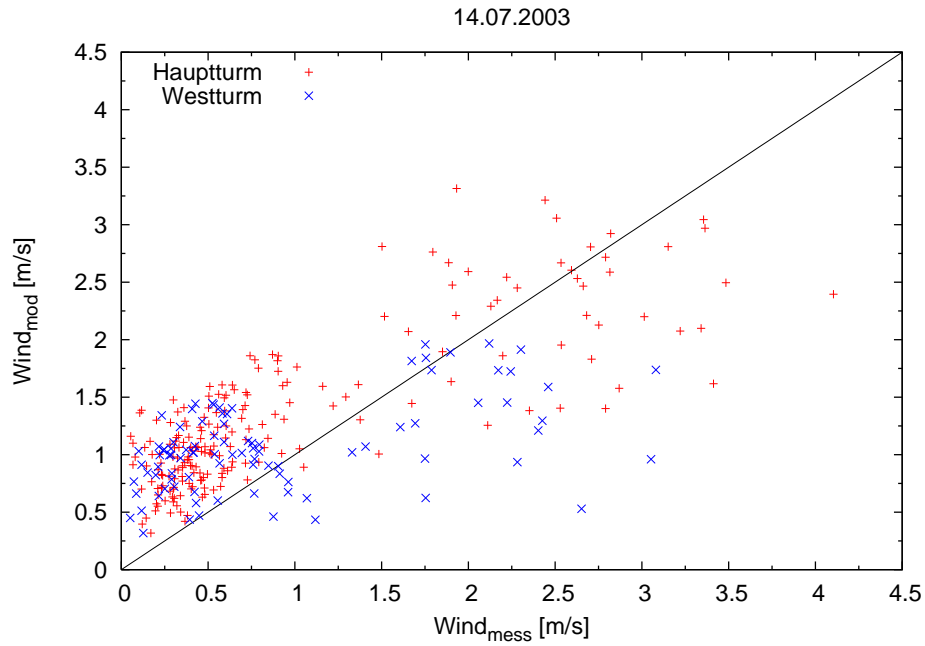


Abbildung 4.9: Streudiagramm der Windgeschwindigkeit für den 14.07.2003. Der Korrelationskoeffizient für $|\vec{v}|$ beträgt 0.73.

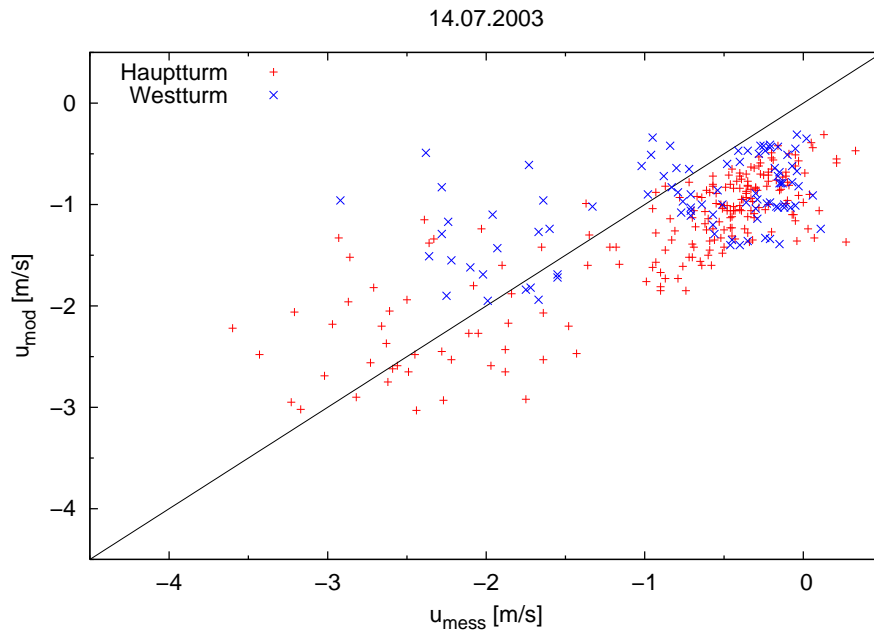


Abbildung 4.10: Streudiagramm der u -Komponente der Windgeschwindigkeit für den 14.07.2003. Der Korrelationskoeffizient für u beträgt 0.74.

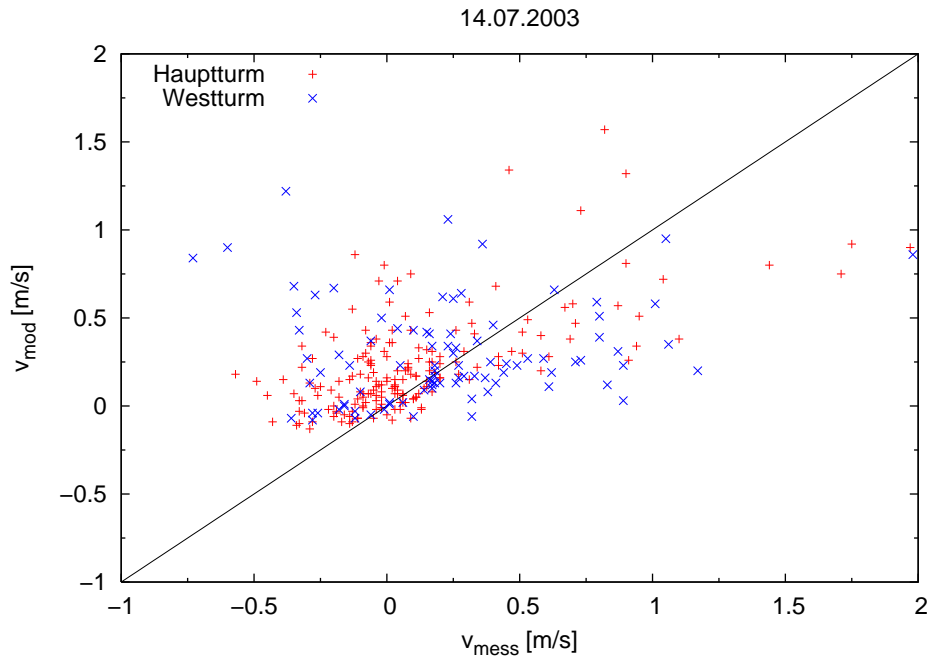


Abbildung 4.11: Streudiagramm der v -Komponente der Windgeschwindigkeit für den 14.07.2003. Der Korrelationskoeffizient für v beträgt 0.44.

der zunimmt, da dort die Bäume etwas niedriger sind als am Hauptturm. In den Messungen ist dies so nicht wiederzufinden. Zum einen nehmen die Windgeschwindigkeiten in der Höhe ab 20 m langsamer wieder zu, als in den Messungen zu finden. Zum anderen gleichen sich die modellierten Profile für den West- und den Hauptturm sehr stark. Die Gründe dafür können eine ungenügende Darstellung der Blattflächendichte am Westturm sein, die nur eine Näherung darstellt (Anhang B.1) und eine unzureichende Baumhöhe auf dem Modellgitter, das nur eine Gitterweite von 5 m besitzt.

4.3.2 Westwindlage am 18.07.2003

Der Vergleich aller Temperaturmesspunkte in einem Streudiagramm (Abb. 4.14) zeigt ähnliche Strukturen wie am 14.07.2003. Die größten Abweichungen betragen auch hier etwa 2 K. Die Temperaturen in dem Bereich 288 bis 291 K werden vom Modell etwas stärker unterschätzt als am anderen Modelltag. Auch hier sind dies wieder die Stunden in der Nacht, in denen die warme Luft der vorhergehenden

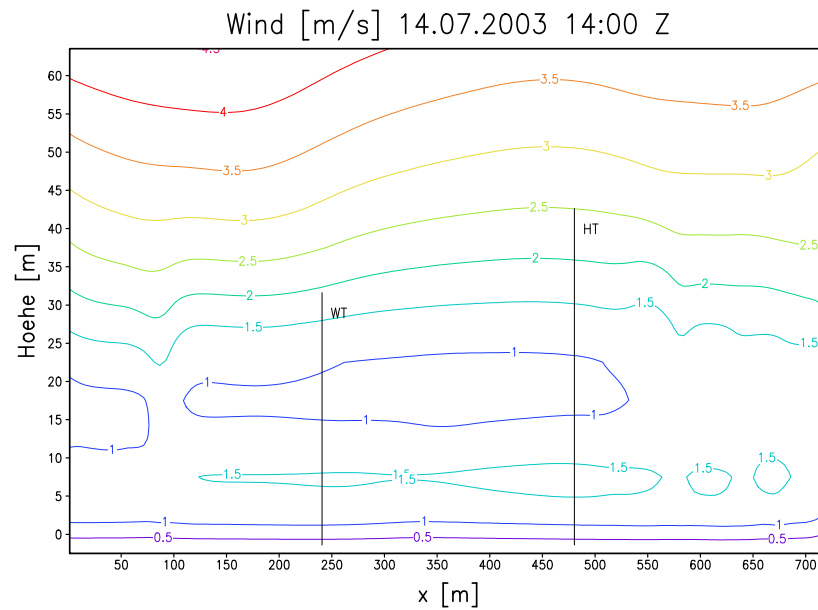


Abbildung 4.12: Betrag der Windgeschwindigkeit für den 14.07.2003 um 14:00 Uhr. Als vertikale Linien dargestellt sind der Haupt- und der Westturm.

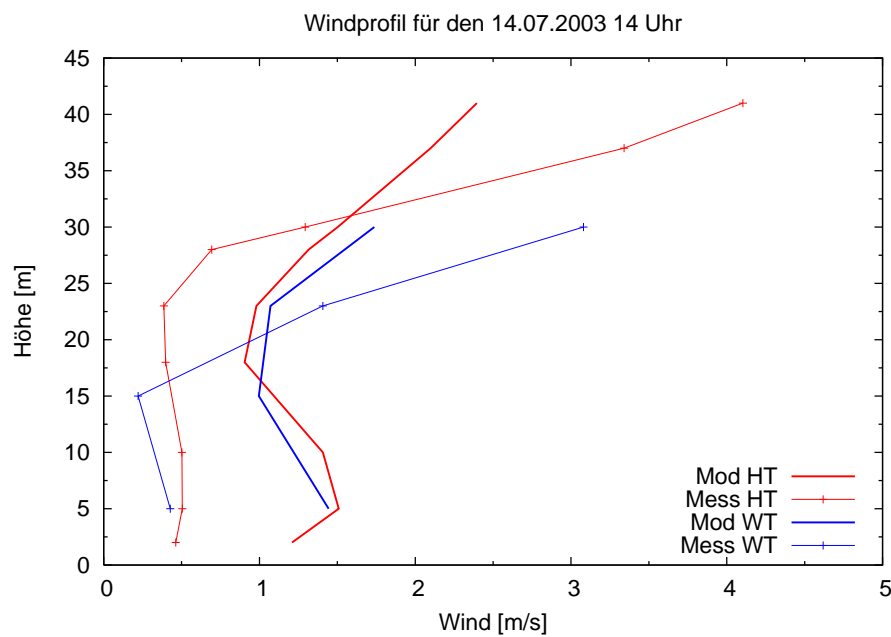


Abbildung 4.13: Windgeschwindigkeitsprofile am 14.07.2003 um 14:00 Uhr. Der Vergleich mit Messungen am Haupt- und Westturm zeigt eine um 0.5 m/s leicht erhöhte Windgeschwindigkeit des Modells.

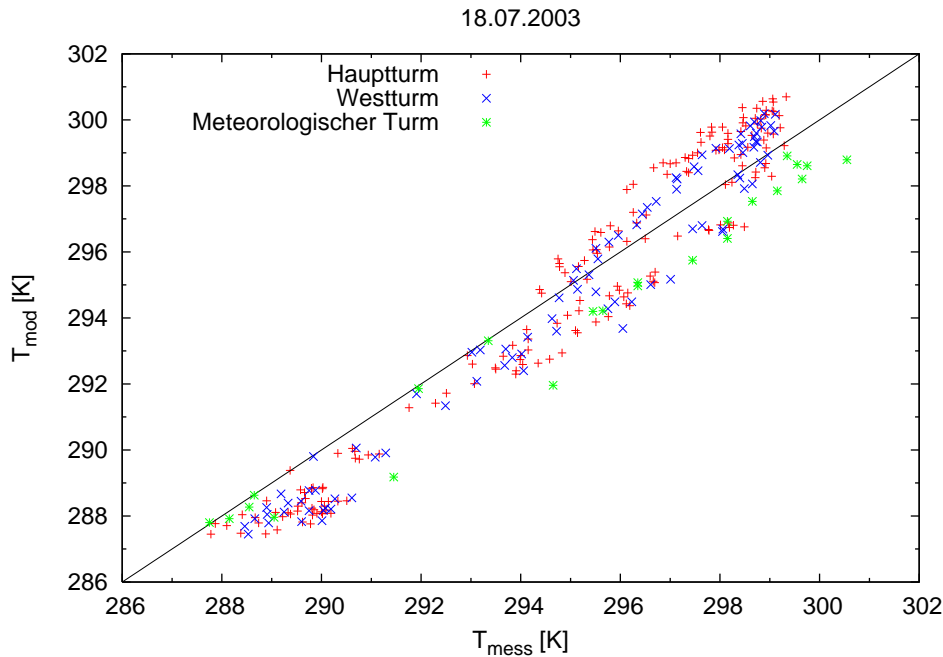


Abbildung 4.14: Streudiagramm der Temperatur für den 18.07.2003 mit allen verfügbaren Messstellen. Die Messpunkte in 2 m am Hauptturm und in 120 m am meteorologischen Turm sind ausgenommen. Der Korrelationskoeffizient beträgt 0.97.

Stunden im Kronenraum durch die Simulation einzelner Stunden nicht modelliert werden kann (Abb. 4.15).

Ähnlich wie am 14.07.2003 kann am Tage die Temperatur insgesamt gut wiedergegeben werden. Im Kronenraum wird sie nur leicht um etwa 1 K überschätzt. Ab 17:00 Z fällt die modellierte Temperatur stärker als die gemessene ab. In den Nachtstunden zeigt sich dann der gleiche Effekt wie in den Morgenstunden des gleichen Tages.

Ein Horizontalschnitt durch den Kronenraum in 17.5 m Höhe (Abb. 4.16) zeigt, dass auch hier die Temperatur in Strömungsrichtung um 14:00 Z leicht zunimmt. Deutlich zu erkennen sind das lokale Maximum am Hauptturm und die erhöhte Windgeschwindigkeit an der Straße, an der der Kronen- und Stammraum nicht ganz geschlossen war. Damit verbunden ist auch eine im Gegensatz zur Umgebung um 0.5 K leicht niedrigere Temperatur. Bei Ost-Anströmung ist dieser Effekt nicht so deutlich sichtbar, da die Straße nicht geradlinig zum Ostrand hin verläuft.

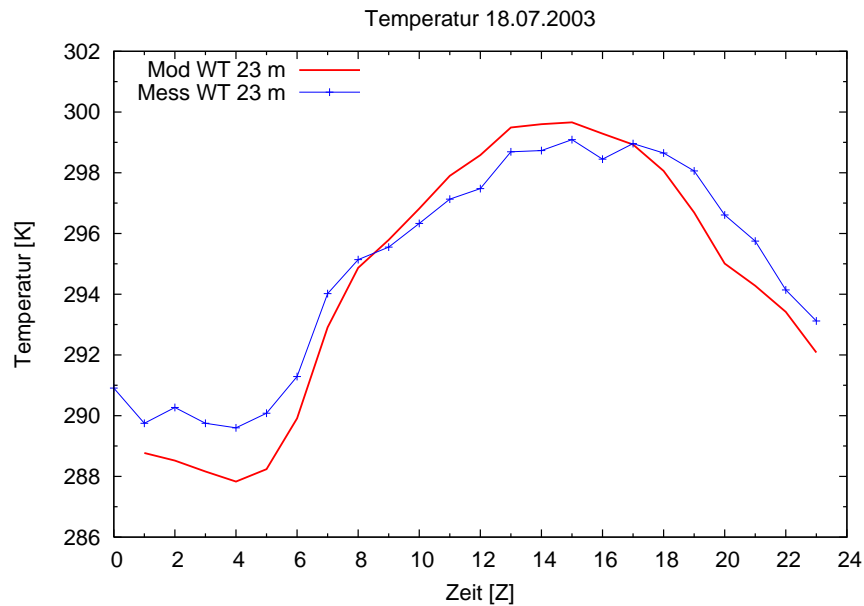


Abbildung 4.15: Tagesgang der Temperatur für den 18.07.2003 in 23m Höhe am Westturm. Die maximale Abweichung beträgt 2K in den Abendstunden. Die Erwärmung im Kronenraum kann dort nicht modelliert werden, da es sich um einen Speichereffekt handelt.

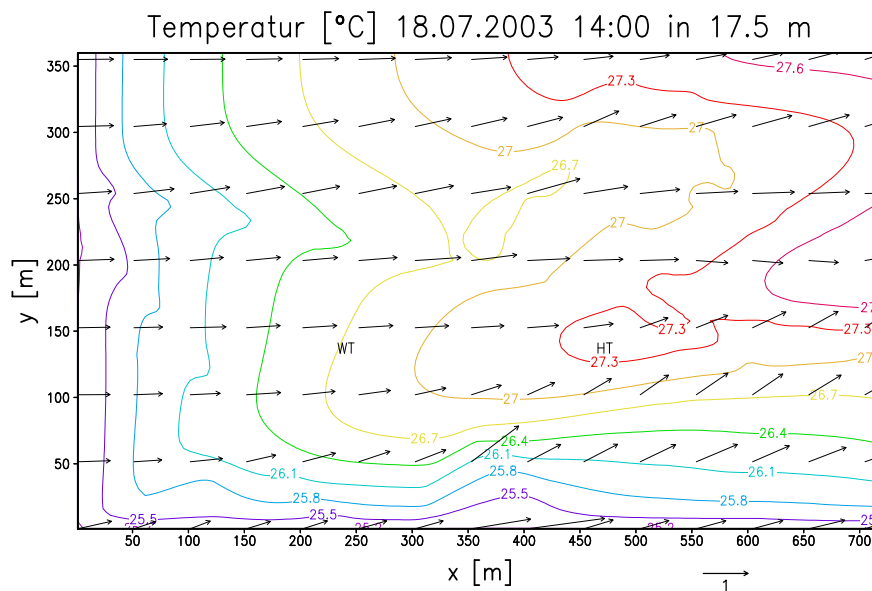


Abbildung 4.16: Modelliertes Temperaturfeld für den 18.07.2003 um 14:00 Uhr als Horizontalschnitt in 17.5m Höhe mit eingezeichneten Windpfeilen.

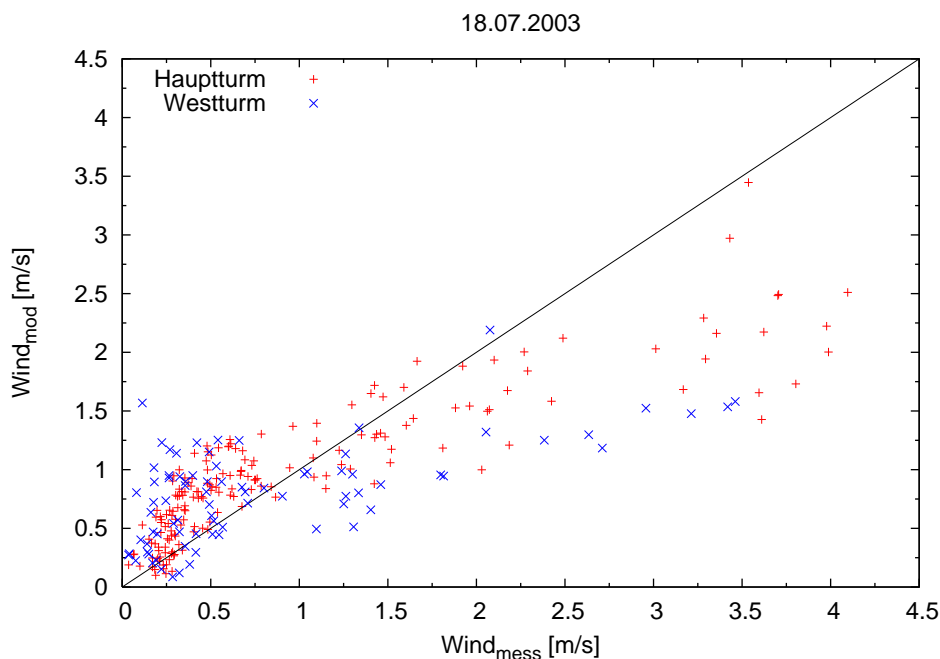


Abbildung 4.17: Streudiagramm der Windgeschwindigkeit für den 18.07.2003. Der Korrelationskoeffizient für $|\vec{v}|$ beträgt 0.82.

Die im Streudiagramm (Abb. 4.17) aufgetragene Windgeschwindigkeit zeigt für kleine Werte genau wie für den 14.07., dass die Windgeschwindigkeit um 0.5 m/s überschätzt wird. Im Gegensatz dazu geht bei höheren gemessenen Windgeschwindigkeiten die Tendenz zu unterschätzten modellierten Windgeschwindigkeiten. Im Bereich 3 bis 4 m/s werden sie bis zu 2 m/s unterschätzt.

Aufgeteilt in die u - und v -Komponente der Windgeschwindigkeit (Abb. 4.18 und 4.19) wird deutlich, dass ähnlich dem 14.07. hauptsächlich die u -Komponente für die gute Korrelation beiträgt. Die v -Komponente der Windgeschwindigkeit schwankt hauptsächlich um Null. Bei gemessenen Werten zwischen 0.5 und 3 m/s wird diese Komponente zudem vom Modell noch mit 0 bis 1.5 m/s unterschätzt.

4.4 Auswertung der Chemie (MICTM)

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der Vorhersage von Isopren in einem Waldgebiet. In dieser Auswertung sollen daher die am Isoprenabbau beteiligten

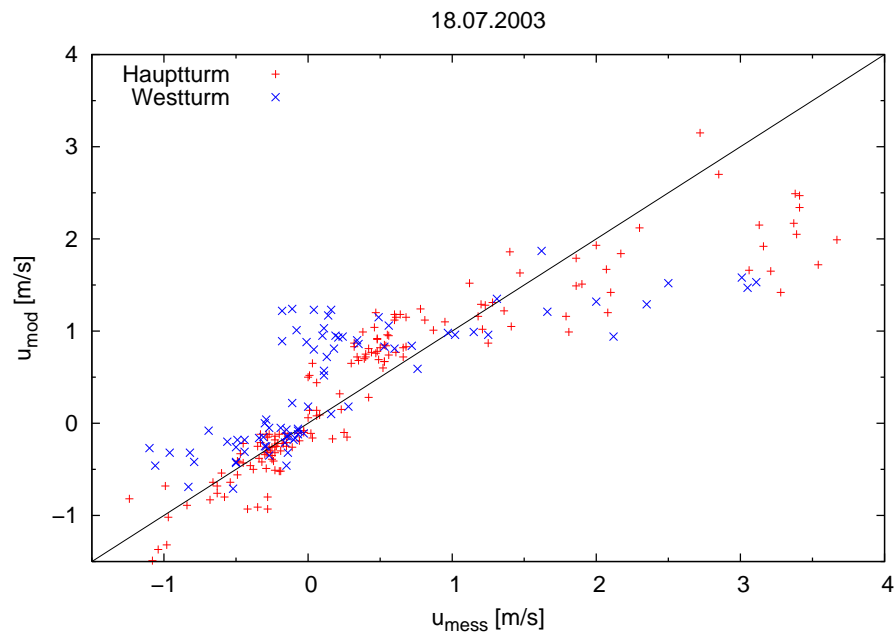


Abbildung 4.18: Streudigramm der u -Komponente der Windgeschwindigkeit für den 18.07.2003. Der Korrelationskoeffizient für u beträgt 0.86.

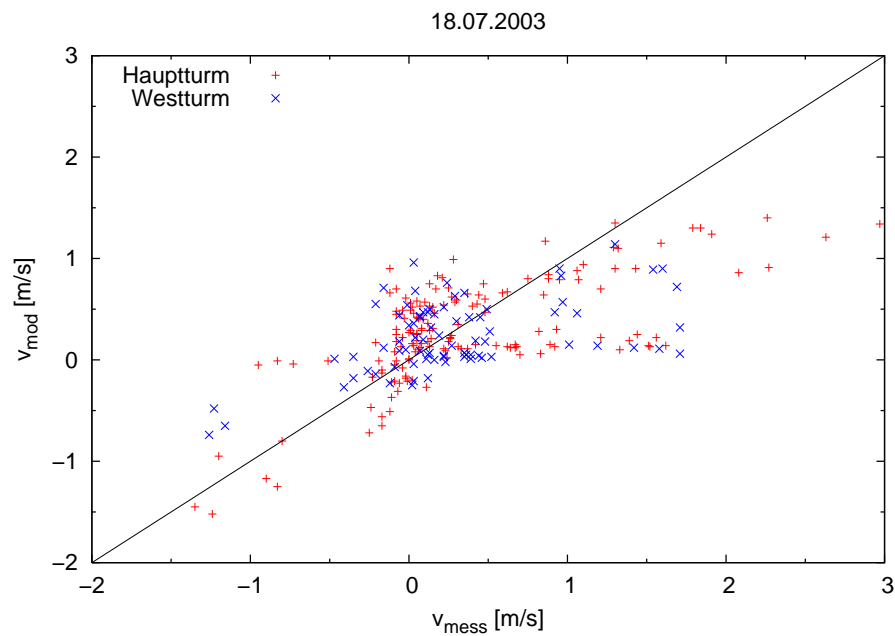


Abbildung 4.19: Streudigramm der v -Komponente der Windgeschwindigkeit für den 18.07.2003. Der Korrelationskoeffizient für v beträgt 0.63.

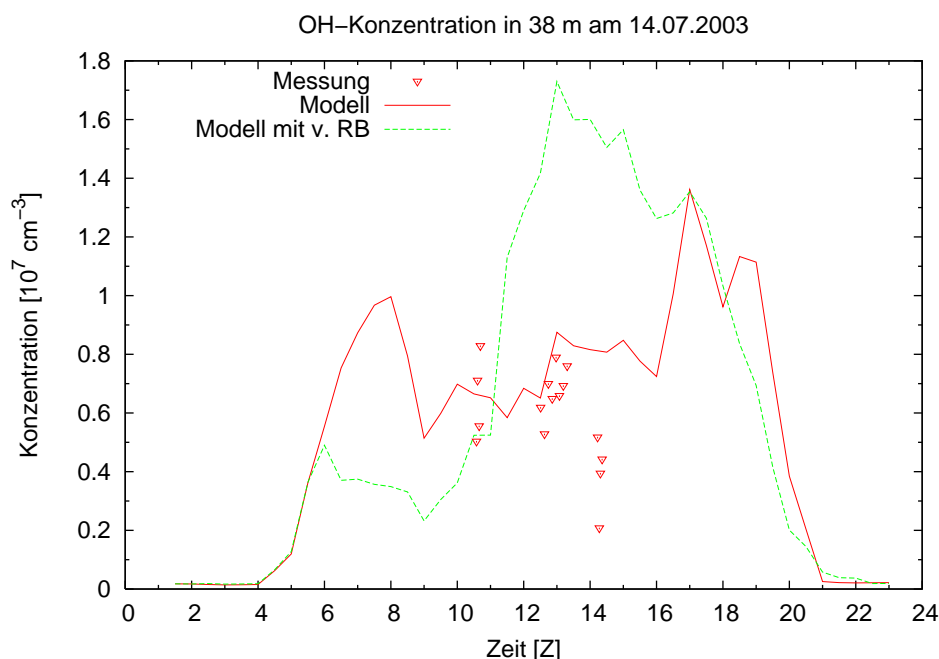


Abbildung 4.20: Die wenigen gemessenen und die modellierten OH-Konzentrationen am 14.07.2003 in 38 m Höhe am Hauptturm stimmen in ihrer Größenordnung gut überein. Für die veränderten Randbedingungen ergibt sich eine Verdopplung der OH-Konzentrationen über den Mittag.

Stoffe OH und Ozon sowie Isopren selber genauer betrachtet werden. Für NO_3 lagen zu wenige Messdaten vor, um sie mit in die Auswertung einbeziehen zu können. Stattdessen wurden zusätzlich NO_2 und NO mit ausgewertet. Auf die übrigen im Chemiealgorithmus berechneten Stoffe – zu denen in vielen Fällen auch keine geeigneten Messdaten vorliegen – kann hier nicht näher eingegangen werden. Für die beiden Tage werden die Modellergebnisse, wie auch schon im Abschnitt zuvor, getrennt ausgewertet.

4.4.1 Ostwindlage am 14.07.2003

Die Konzentrationen von OH, NO, NO_2 und O_3 wurden am Einströmrand den gesamten Tag über auf dem Messwert von 1 Uhr festgehalten. Das Modell sollte in der Lage sein, mit zunehmender Entfernung vom Einströmrand einen realitätsnäheren Tagesgang der OH-Konzentrationen zu berechnen. Auf Grund der

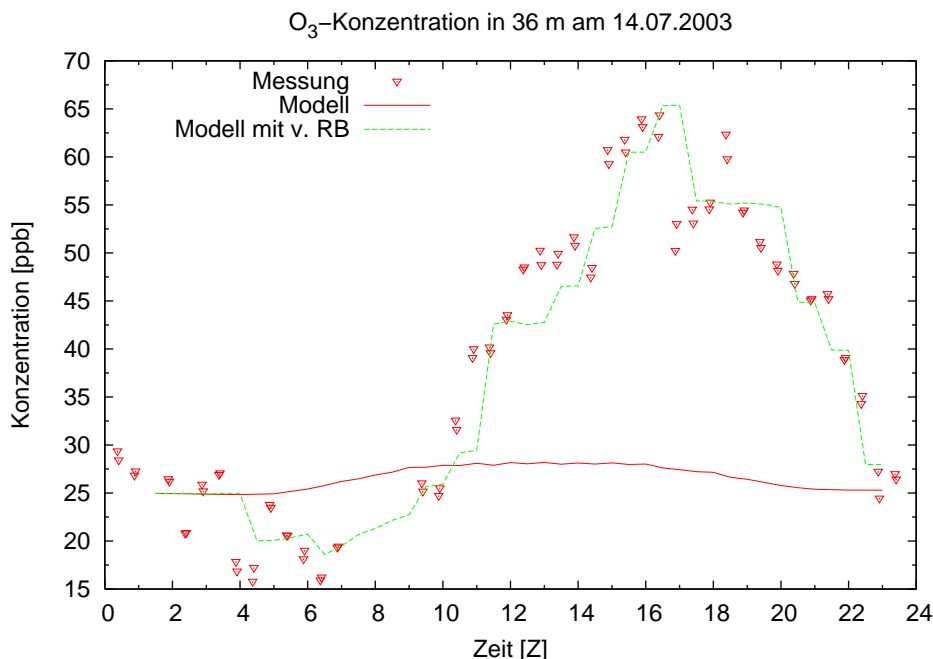


Abbildung 4.21: Die über den Tag modellierten O₃-Konzentrationen zeigen am Hauptturm nahezu keinen Tagesgang. Die am Einströmrund stündlich angepassten Messwerte verändern sich kaum.

längeren Lebensdauer von NO, NO₂ und O₃ und des kleinen Modellgebietes gilt dies für diese Stoffe jedoch nicht. Die Modellergebnisse für den Hauptturm, die in den Abbildungen dieses und des nächsten Abschnittes mit „Modell“ gekennzeichnet sind, sollen dennoch mit Messwerten verglichen werden. Die Ergebnisse mit der Beschriftung „Modell mit v. RB“ sind Sensitivitätsstudien, die im Abschnitt 4.4.3 diskutiert werden.

Für OH waren an diesem Tag nur vereinzelte Messwerte in der Zeit zwischen 10 und 14 Uhr vorhanden. Der Vergleich mit den Modellergebnissen zeigt, dass die Größenordnung der Konzentration gut wiedergegeben werden kann (Abb. 4.20). Tagsüber liegen die Werte zwischen 0.6 und $1.4 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$, in der Nacht fallen sie um mehr als eine Größenordnung ab und liegen damit unter der Nachweisgrenze von $3 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$ der laser-induzierten Fluoreszenz (LIF) Technik.

Die modellierten O₃-Konzentrationen am Hauptturm unterscheiden sich dagegen kaum von den Randwerten und bleiben auch über den Tag bei fast konstanten 25 ppb (Abb. 4.21). Am Tage erhöht sich die Konzentration lediglich um ein bis

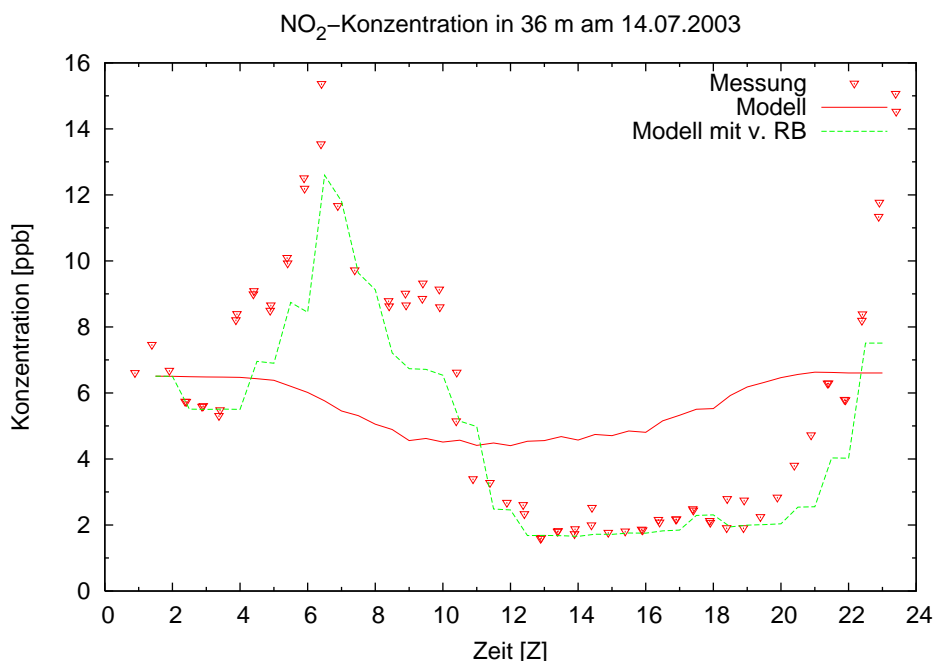


Abbildung 4.22: NO₂-Konzentration am Hauptturm in 36 m Höhe für den 14.07.2003.

zwei ppb, die zum Abend aber auch wieder abnimmt.

In der Abbildungen 4.22 und 4.23 sind die Modellergebnisse für die NO₂- und NO-Konzentrationen in 36 m Höhe am Hauptturm dargestellt. Die gemessene NO₂-Konzentration beträgt in der Nacht 6 ppb und fällt tagsüber um 2 ppb ab. In den Abendstunden steigt sie wieder auf den Anfangswert. Der Verlauf der Messwerte kann nicht wiedergegeben werden, da diese Konzentrationen hauptsächlich durch den Verkehr im Forschungszentrum bedingt sind. Die Schadstoffe, die vom Autoverkehr verursacht werden, fließen nur bei den Sensitivitätsstudien (Abschnitt 4.4.3) in das Modell mit ein.

Das modellierte NO zeigt einen ausgeprägten Tagesgang mit Konzentrationen um 2 ppb in den Mittagsstunden. Dieser Anstieg kann nicht in den Messwerten wiedergefunden werden. Dort ist lediglich ein Maximum in den Morgenstunden zu finden, der analog zur NO₂-Konzentration durch den Autoverkehr verursacht wird. Die Maxima um 6:30 bzw. 7:00 Uhr lokaler Zeit entsprechen in etwa dem Arbeitsbeginn im Forschungszentrum um 8:00 Uhr MESZ.

Isopren wird erwartungsgemäß am stärksten im Kronenraum gebildet und wird

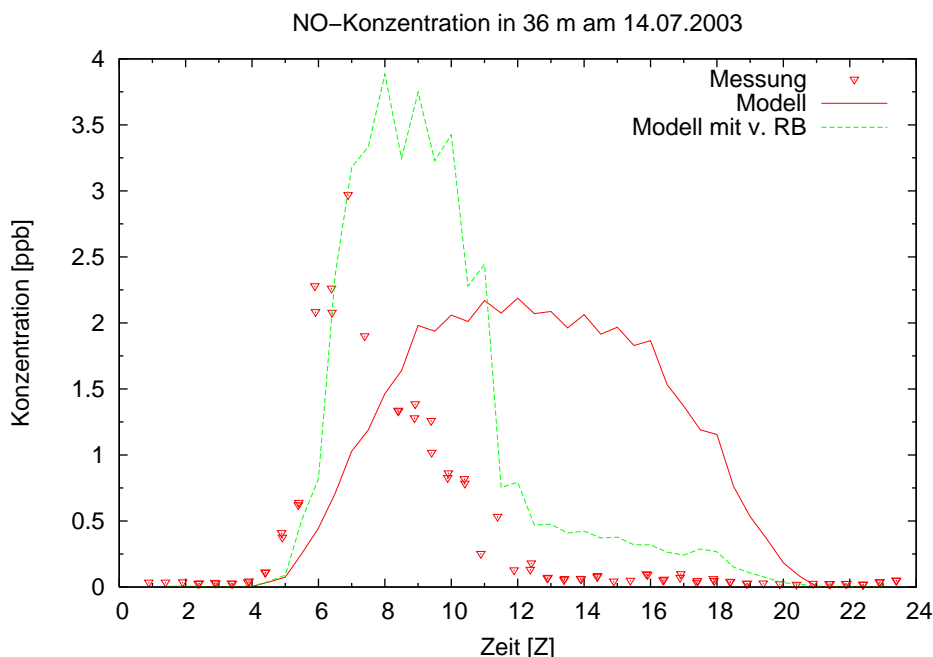


Abbildung 4.23: NO-Konzentrationen am Hauptturm in 36 m Höhe für den 14.07.2003.

oberhalb des Bestandes abgebaut (Abb. 4.24 und 4.25). In den Bereichen, in denen keine oder nur geringe Isoprenemissionen auftreten, wird Isopren durch OH wieder abgebaut, was zu einer Verringerung der Konzentration führt. Deutlich zu erkennen ist auch die niedrigere Konzentration im Bereich des Weges und des Gebäudes. An diesen Stellen wird nur wenig Isopren emittiert und auf Grund der höheren Windgeschwindigkeit auch schneller wegtransportiert.

Der in Abbildung 4.26 gezeigte Tagesgang der simulierten Isoprenemissionen am Hauptturm lässt erkennen, dass die Hauptquelle der Isoprenemissionen im Kronenraum liegt. In den frühen Morgenstunden beginnt sich eine messbare Konzentration aufzubauen, die sich bis in eine Höhe von 80 m verteilt. Zwischen 9 und 12 Uhr bildet sich ein Maximum in Kronenraum aus, das zum Abend hin wieder abgebaut wird. Gegen 19:30 Uhr sind die Isoprenemissionen wieder unter den Hintergrundwert von 0.02 ppb abgesunken.

Der Vergleich mit den Messungen in Abbildung 4.27 zeigt eine deutliche Unterschätzung der Isopren-Konzentrationen. Die Konzentrationen in der Nacht und der Anstieg werden bis 6 Uhr noch gut wiedergegeben. Anschließend steigen die

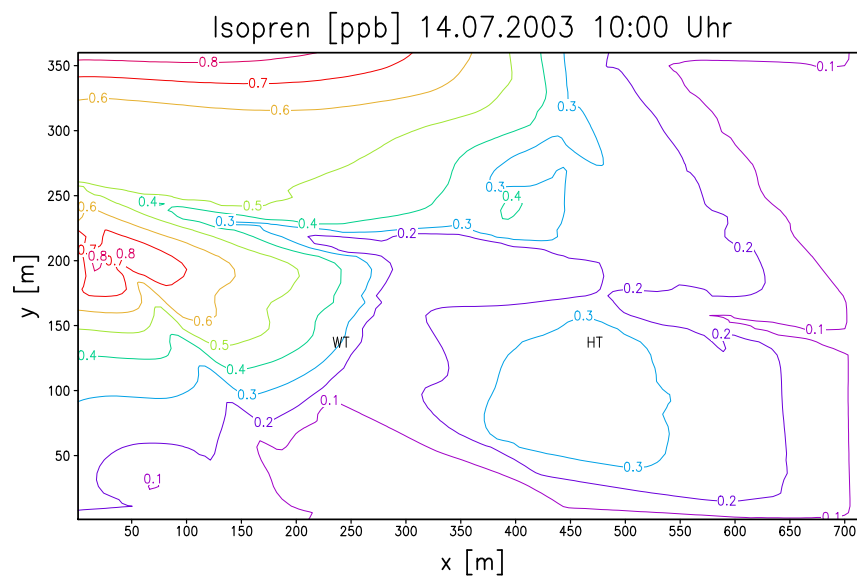


Abbildung 4.24: Isoprenkonzentration am 14.07.2003 um 10:00 Uhr in 17.5 m Höhe. Die höchsten Konzentrationen ergeben sich nahe des Ausströmrandes. WT und HT kennzeichnen die Standorte des West- und Hauptturmes.

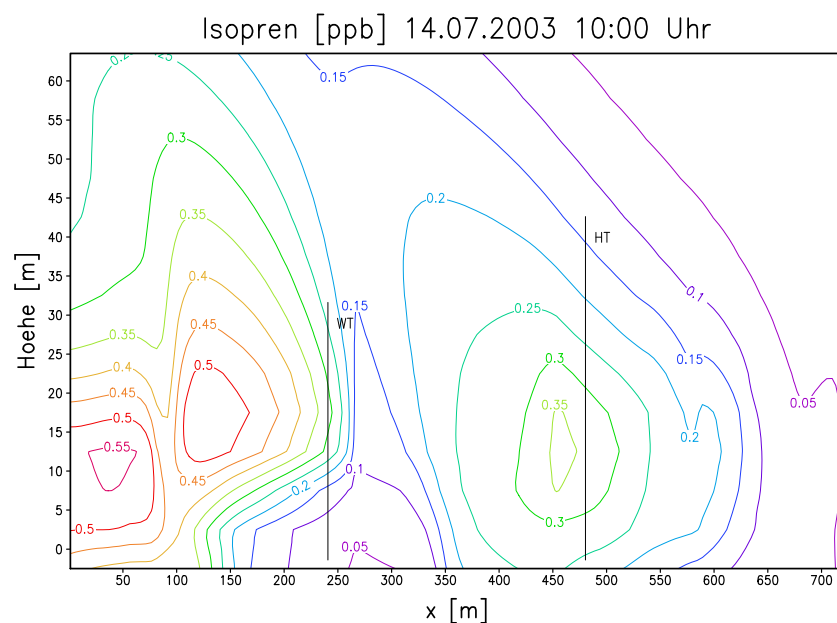


Abbildung 4.25: Isoprenkonzentration für den 14.07.2003 um 10:00 Uhr in der vertikalen Schnittebene der beiden Messtürme. Der West- und Hauptturm sind mit eingezeichnet.

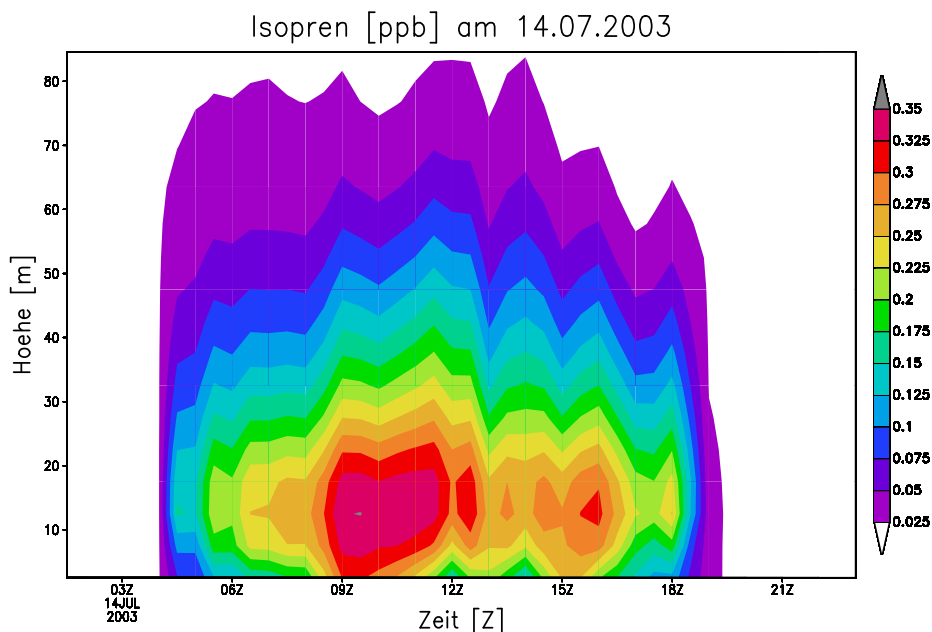


Abbildung 4.26: Tagesgang der simulierten Isoprenkonzentration für den 14.07.2003 am Hauptturm. Das Maximum bildet sich erwartungsgemäß im Kronenraum.

Werte in 18m Höhe nicht über 0.4 ppb und bleiben damit über 1 ppb unterhalb der gemessenen Werte. Gründe dafür können zu geringe Emissionen im Nahbereich des Hauptturms oder zu niedrige Hintergrund- bzw. Randwerte sein. Dies kann jedoch durch Sensitivitätsstudien in Abschnitt 4.4.3 geklärt werden.

4.4.2 Westwindlage am 18.07.2003

Wie auch schon für den 14.07.2003 wurden auch hier die Konzentrationen von OH, NO, NO₂ und O₃ am Einströmrand auf dem Messwert von 1 Uhr festgehalten. Die Modellergebnisse können dann mit den Messungen des restlichen Tages verglichen werden.

Am 18.07.2003 wurden keine Messungen von OH durchgeführt. Die Modellergebnisse der OH-Konzentration werden daher nur in ihrer Größenordnung mit den Werten vom 14.07.2003 verglichen. In Abbildung 4.28 lässt sich wie auch schon am 14.07. ein Tagesgang erkennen, der hier zwei Maxima um 7 und um 10 Uhr aufweist. Die Konzentration fällt zum Abend hin schneller ab als am 14.07.

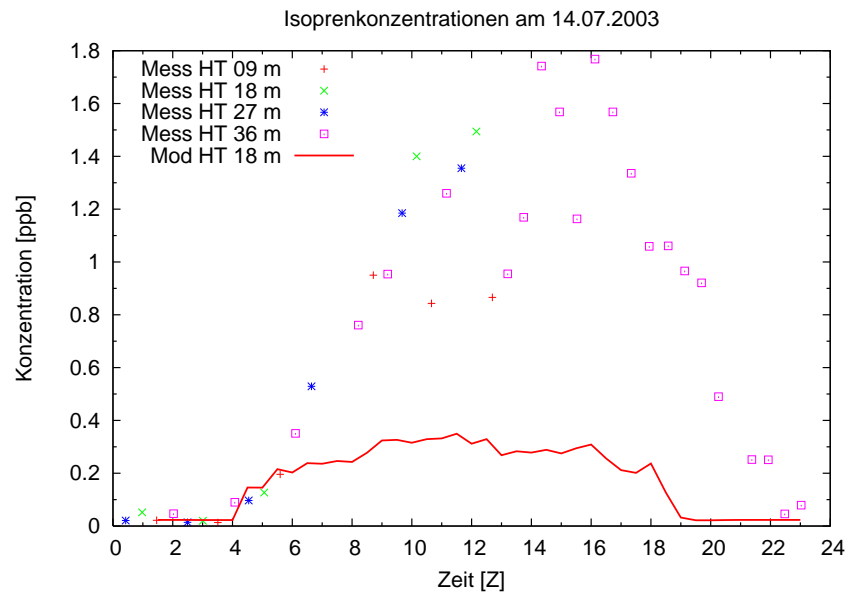


Abbildung 4.27: Die Isoprenkonzentration für den 14.07.2003 wurde in 18 m Höhe am Hauptturm mit 1 ppb deutlich unterschätzt.

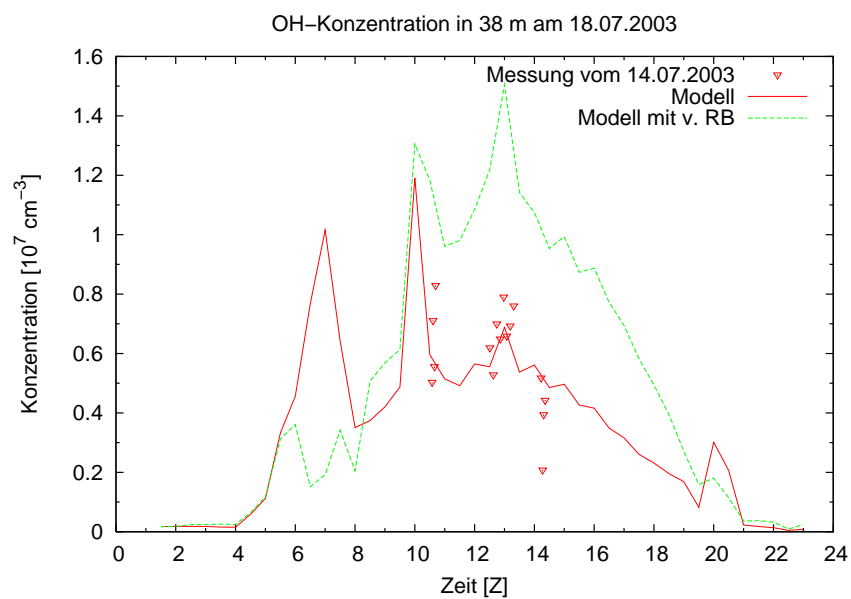


Abbildung 4.28: Die modellierten OH-Konzentrationen am 18.07.2003 38 m Höhe stimmen in der Größenordnung gut mit den Messungen vom 14.07.2003 überein. Am Nachmittag verdoppeln sich die Konzentrationen in den Sensitivitätsstudien mit veränderten Randbedingungen. Für den 18.07. liegen keine Messwerte für OH vor.

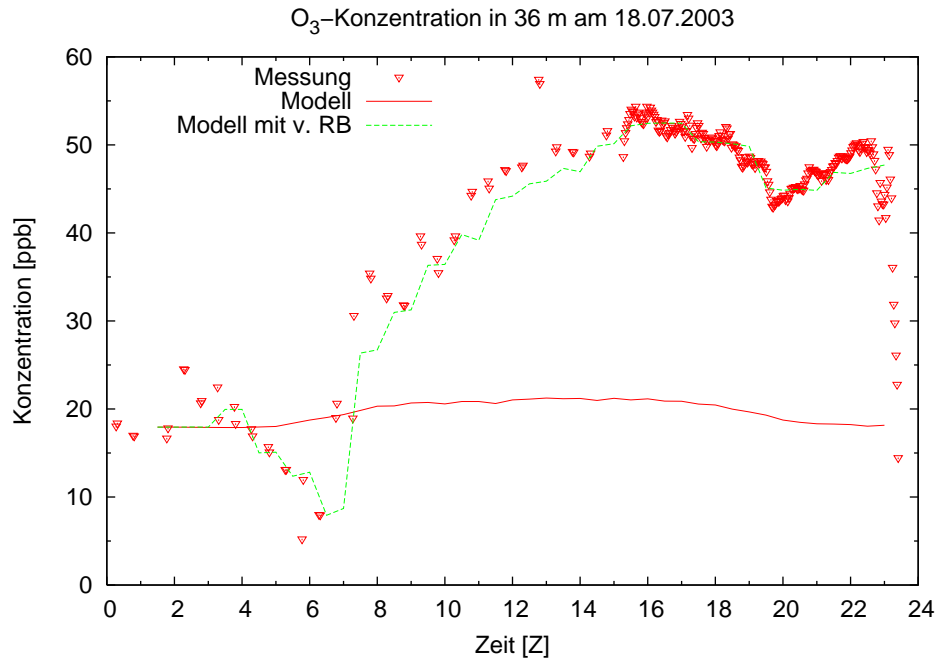


Abbildung 4.29: Ozon zeigt am 18.07.2003 nahezu keinen Tagesgang in 36 m, wenn die Randwerte festgehalten werden.

Die modellierte Ozonkonzentration bleibt bis auf eine leichte Zunahme um 2 ppb in den Morgenstunden über den gesamten Tag nahezu konstant (Abb. 4.29). Die gemessenen Konzentrationen von über 50 ppb können wegen der niedrigen am Einströmrand vorgegebenen Hintergrundkonzentration von etwa 20 ppb nicht aufgebaut werden.

Die NO_2 -Konzentration fällt von anfänglichen simulierten 5.5 ppb in der Nacht um etwa 2 ppb bis 10 Uhr ab und bleibt bis zu den Abendstunden konstant, ehe es dann wieder auf 5.5 ppb ansteigt (Abb. 4.30). Die Größenordnung stimmt gut mit den Messungen überein. Das Maximum von 14 ppb um 7 Uhr stammt auch hier vom Verkehr und kann nicht vom Modell erfasst werden, weil es in den Emissionsdaten fehlt.

Der Tagesgang der modellierten NO-Konzentration ist fast identisch mit dem für den 14.07.2003. Auch hier steigt die Konzentration von etwa 0.1 ppb in der Nacht auf 2 ppb am Tage und fällt erst ab 17 Uhr wieder ab (Abb. 4.31). Diese hohen Konzentrationen können abgesehen vom morgendlichen Maximum um 6:30 Uhr nicht in den Messungen wiedergefunden werden.

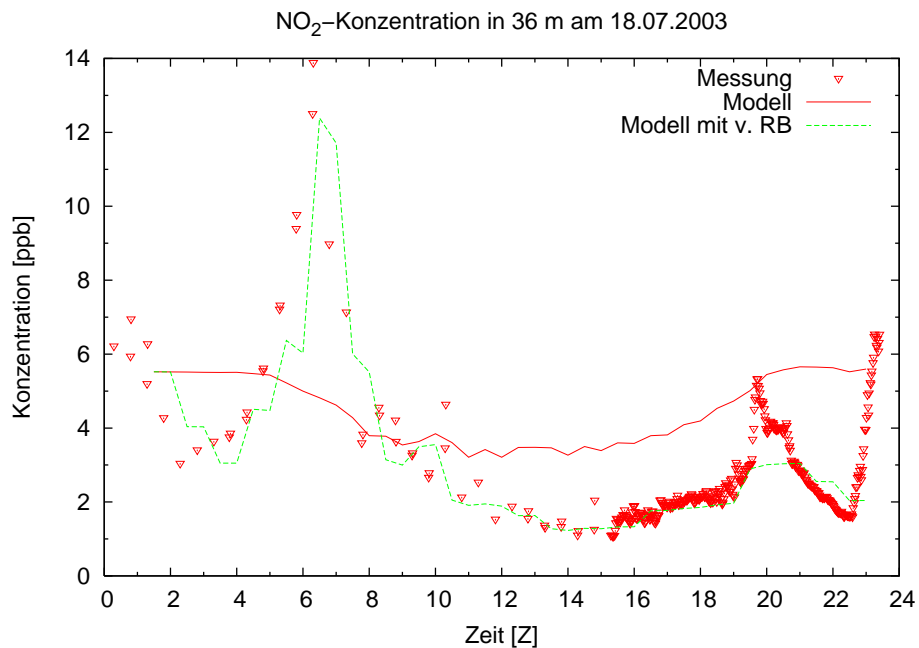


Abbildung 4.30: Gemessene und modellierte NO₂-Konzentrationen am Hauptturm in 26 m Höhe für den 18.07.2003.

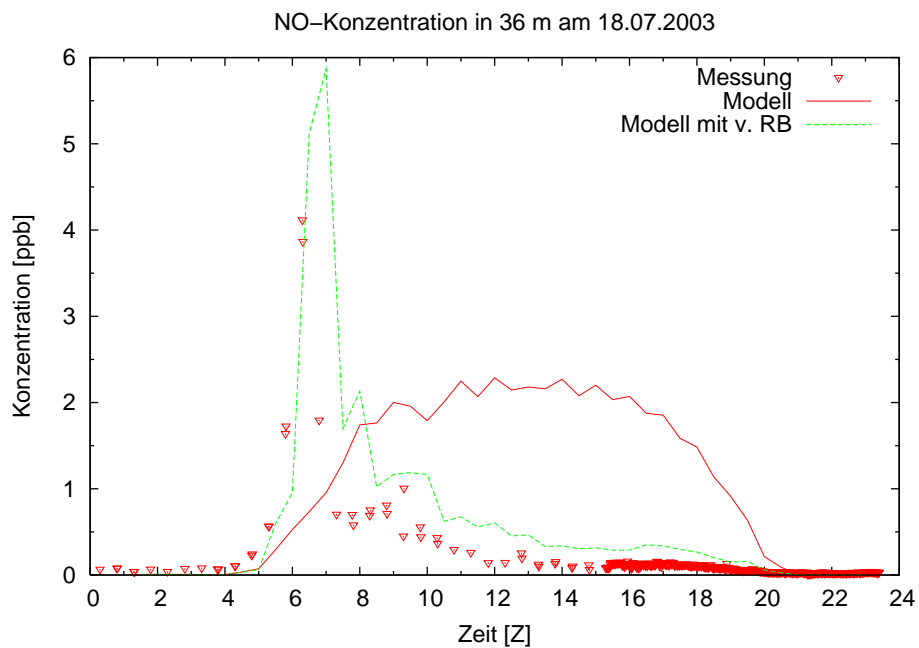


Abbildung 4.31: Gemessene und modellierte NO-Konzentrationen am Hauptturm in 26 m Höhe für den 18.07.2003.

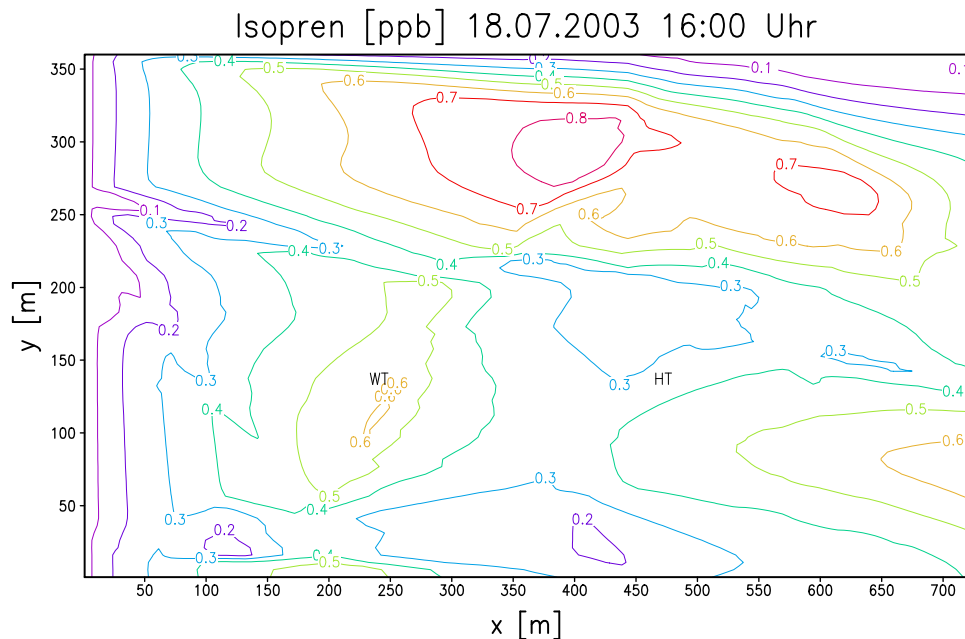


Abbildung 4.32: Horizontalschnitt der Isoprenkonzentration für den 18.07.2003 um 16:00 Uhr in 17.5 m Höhe. Das Maximum der Konzentration lag nördlich der beiden Messtürme.

Für den 18.07.2003 wird in Abbildung 4.32 erkennbar, dass bei Westwind die Isoprenkonzentration nach 200 m in Höhe des Westturmes ein lokales Maximum erreicht hat. Der zwischen den beiden Türmen liegende Bereich ohne Isoprenemissionen bewirkt, dass Isopren dort wieder um 0.3 ppb abgebaut wird. Der nördlich der Türme liegende Bereich baut weiterhin Isoprenkonzentrationen von bis zu 0.8 ppb auf. Dass das Maximum der Konzentration nicht wie beim 14.07.2003 am Ausströmrund des Modellgebietes liegt ist ein Zeichen dafür, dass das Modellgebiet genügend groß gewählt ist.

Der Vertikalschnitt in Abbildung 4.33 zeigt deutlich das im Kronenraum liegende Maximum der Isoprenkonzentration am Westturm. In östlicher Richtung wird Isopren abgebaut. Hinter dem Hauptturm baut es sich wieder auf, das Maximum der Konzentration ist dort direkt am Boden zu finden.

In Abbildung 4.34 ist deutlich zu erkennen, dass die hohen am Hauptturm gemessenen Isoprenkonzentrationen von über 3 ppb um 12 Uhr nicht erreicht werden. Stattdessen kommt das Modell nicht über eine Konzentration von 0.7 ppb hinaus.

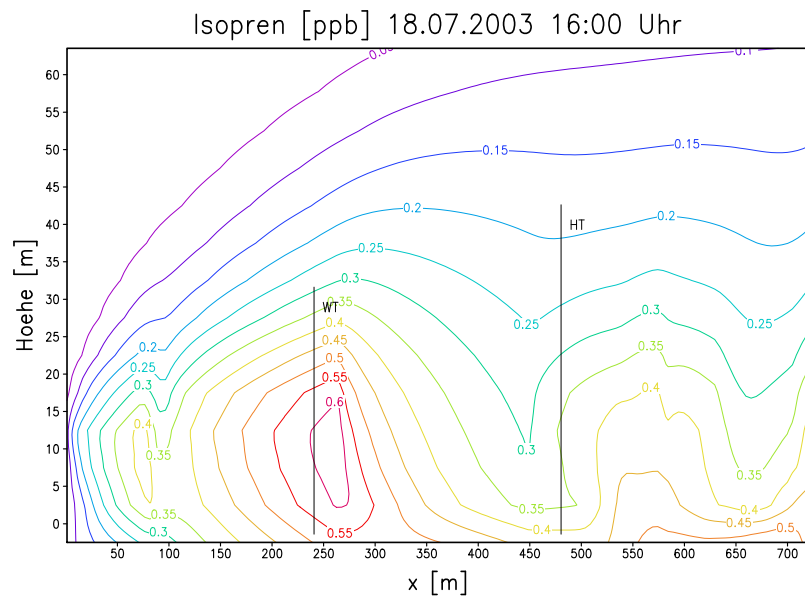


Abbildung 4.33: Vertikalschnitt der Isoprenkonzentration für den 18.07.2003 um 16:00 Uhr in der Schnittebene der beiden Messtürme. Der West- und Hauptturm sind mit eingezeichnet.

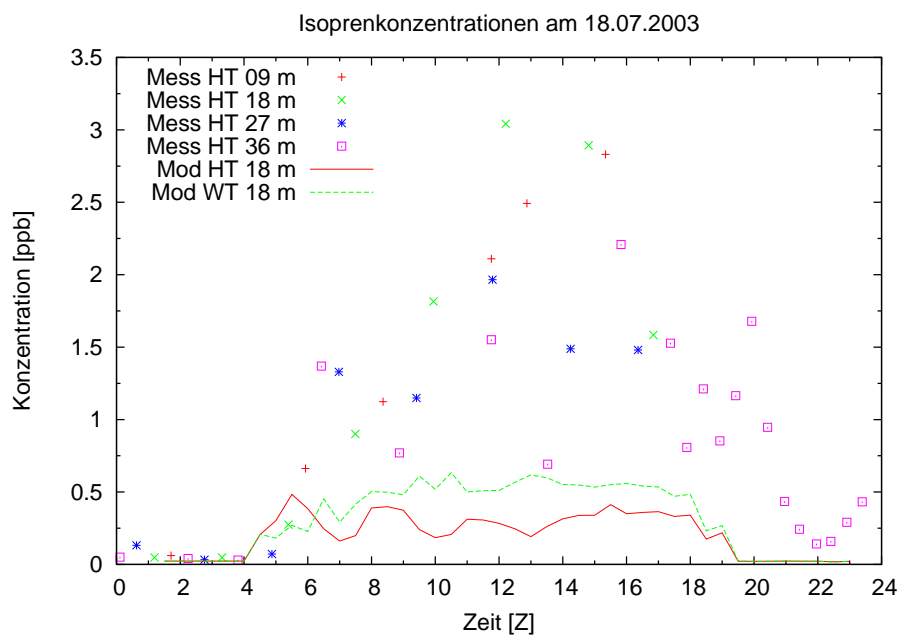


Abbildung 4.34: Die hohen Isoprenkonzentrationen am 18.07.2003 wurden vom Modell nicht erreicht.

Aufgrund der Westwindlage wird hier sicherlich mehr Isopren in das Modellgebiet hineingetragen als am 14.07.2003, da deutlich mehr Waldgebiet an das Modellgebiet angrenzt. Die Sensitivitätsstudien sollen im nächsten Abschnitt klären, ob mit höheren Isoprenkonzentration am Einströmrand auch höhere Werte in der Modellgebietsmitte erreicht werden können.

4.4.3 Sensitivitätsstudien

Für die am Isoprenabbau beteiligten Verbindungen OH, NO₂, NO und O₃ wurden in den beiden Simulationen nur die Messwerte von 1 Uhr als Randwerte vorgegeben. Das Modell sollte selbstständig in der Lage sein, einen Tagesgang für diese Konzentrationen aufzubauen. Die OH-Konzentration lag auch an beiden Tagen in der richtigen Größenordnung, für den 14.07.2003 wurde sie gut simuliert. NO₂, NO und auch O₃ konnte das Modell aber nicht richtig wiedergeben. Daher wurden für die beiden Tage Sensitivitätsstudien durchgeführt, in denen die Konzentrationen an den Einströmrändern für diese Verbindungen aus den Messungen stündlich vorgegeben wurde. Für NO₂, NO und O₃ wurden höhenkonstante Werte vorgegeben. Ein sich mit der Höhe änderndes Profil wurde für OH aus den Messungen generiert. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen in den vorherigen Abschnitten bereits mit der Kennzeichnung „Modell mit v. RB“ enthalten.

Da die Ergebnisse von beiden Tagen sehr ähnlich sind, können diese in der Diskussion zusammengefasst werden. Die OH-Konzentration verdoppelt sich in den Mittagsstunden auf $1.6 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$, während sie in den Morgenstunden zwischen 6 und 9 Uhr geringer ist (Abb. 4.20 und 4.28). Abends nähern sich die Werte jeweils wieder an. Das Modell kann den zusätzlichen Eintrag von OH nicht auf die Höhe der Messwerte reduzieren. NO₂ und O₃ verändern sich im Modellgebiet gegenüber den vorgegebenen Randwerten kaum. Die Messwerte, die am Einströmrand vorgegeben wurden, finden sich auch an den Messtürmen wieder. Diese Eigenschaft war auch schon bei den beiden Simulationen vorher beobachtet worden (Abb. 4.21, 4.22, 4.29 und 4.30). In der Abbildung 4.23 erkennt man, dass das Maximum bis 3 ppb in den frühen Morgenstunden in der NO-Konzentration wiederzufinden ist, NO jedoch auch noch bis in die Abendstunden zu hoch ist. Gegen 10 Uhr ist der Wert sogar dreimal so hoch wie der Messwert von 1 ppb. Erst gegen 19 Uhr nähern sich Modellergebnisse und Messwerte wieder an. Für

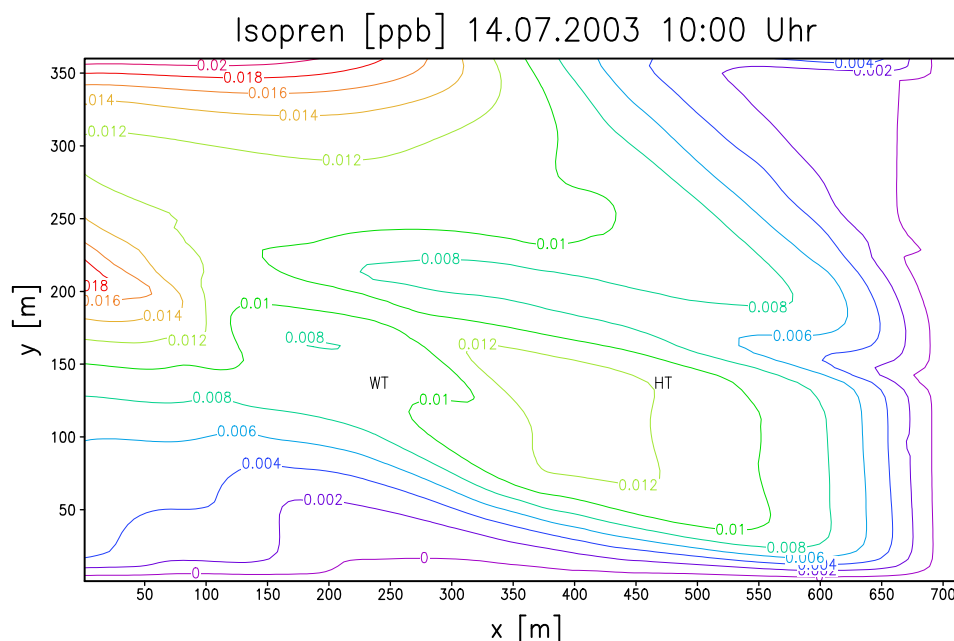


Abbildung 4.35: Differenzenplot der Isoprenkonzentration für den 14.07.2003 um 10:00 Uhr in 17.5 m Höhe. Mit veränderten Randbedingungen steigt die Isoprenkonzentration nur leicht um maximal 0.02 ppb.

Die Isoprenkonzentration verändert sich für die beiden Tage kaum gegenüber den Simulationen mit festen Randwerten, wenn die Randbedingungen für OH, O₃, NO₂ und NO verändert werden. In den beiden Abbildungen 4.35 und 4.36 sind die Differenzen der Isoprenkonzentrationen zu einem ausgewählten Zeitpunkt zu sehen. Positive Werte bedeuten eine Zunahme und negative Werte eine Abnahme der Konzentration durch die veränderten Randbedingungen. Am 14.07. steigt die Isoprenkonzentration um 10:00 Uhr nur leicht um maximal 0.02 ppb. Einen schwachen Anstieg der Konzentration am Einströmrand wird für den 18.07.2003 um 16:00 Uhr modelliert, der allerdings in Strömungsrichtung wieder abnimmt und im Maximum zu einem stärkeren Abbau des Isoprens um 0.04 ppb führt. Zu den anderen Zeiten lagen die Veränderungen in der Isoprenkonzentration in einer ähnlichen Größenordnung.

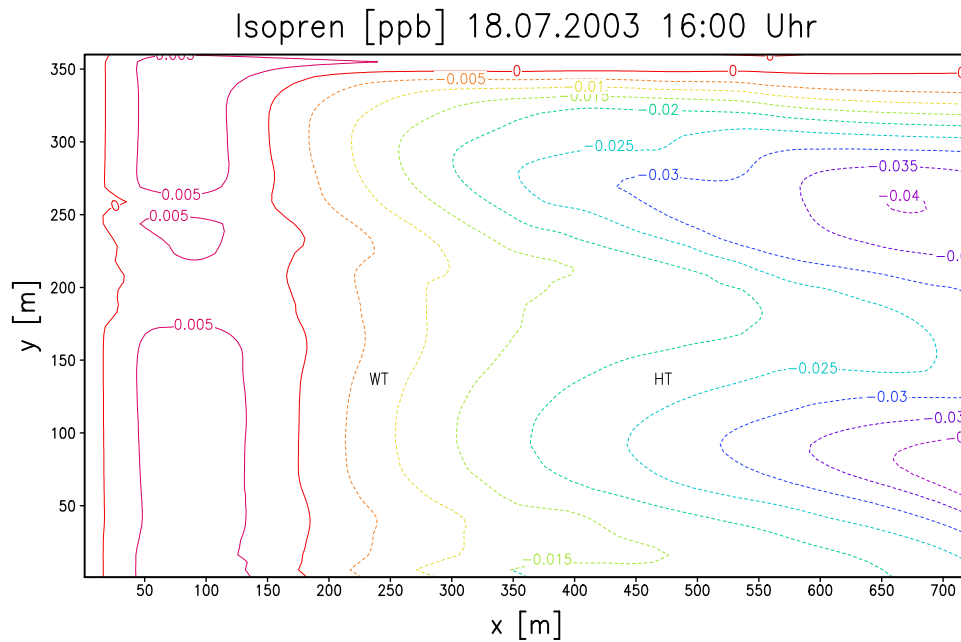


Abbildung 4.36: Differenzenplot der Isoprenkonzentration für den 18.07.2003 um 16:00 Uhr in 17.5 m Höhe. Nach einem leichten Anstieg am Einströmrand fällt die Isoprenkonzentration um 0.04 ppb.

Die Hintergrundkonzentrationen der in MICTM behandelten Stoffe wurden aus der POPCORN-Kampagne entnommen (Abschnitt 3.3). Die dort gemessenen Konzentrationen waren nicht von einem Waldgebiet beeinflusst. Das Modellgebiet in dieser Arbeit beinhaltet jedoch nicht nur Bäume, sondern ist teilweise selbst von Bäumen umgeben, so dass diese sicherlich auch einen Einfluss auf die Konzentrationen haben. Da dieser Einfluss jedoch nicht bekannt ist, können dazu nur Annahmen gemacht werden. Die im vorhergehenden Abschnitt dargestellten Modellergebnisse zeigen tagsüber eine deutlich zu niedrige Isoprenkonzentration. Bislang ist noch nicht bekannt, ob diese durch eine zu geringe Emission aus den Pflanzen hervorgerufen wird, oder ob der Isoprenhintergrund generell als zu niedrig angenommen wurde. Jedoch kann davon ausgegangen werden, dass der Isopreneintrag in das Modellgebiet durch die außerhalb stehenden Bäume deutlich größer ist als bisher angenommen. Daher wurden für beide Tage jeweils eine ausgesuchte Stunde mit veränderten Isoprenkonzentrationen an den Einströmrandern neu modelliert. Das Konzentrationsprofil nahe dem Ausströmrand der vorherigen Stunde wurde als neues Einströmprofil verwendet (Abb. 4.37). Die

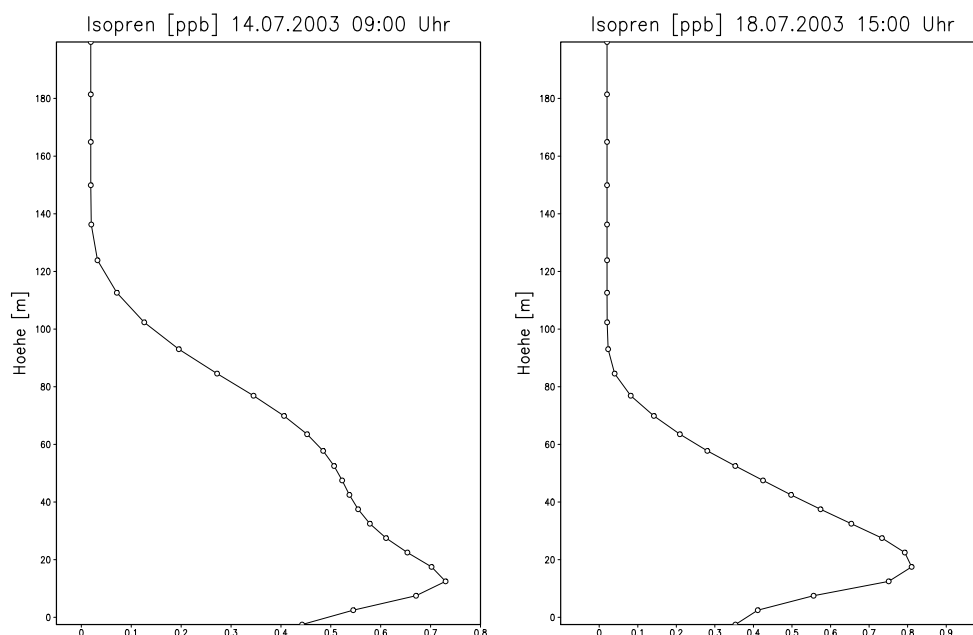


Abbildung 4.37: Für den 14.07.2003 (9 Uhr) und 18.07.2003 (15 Uhr) neue Einströmprofile für das Isopren verwendet.

Ergebnisse sind für den 14.07.2003 in den Abbildungen 4.38 und 4.39 bzw. für den 18.07.2003 in den Abbildungen 4.40 und 4.41 gezeigt. Die Isoprenkonzentration erhöht sich am Einströmrand etwa um den Wert des neuen Einströmprofils. In Strömungsrichtung wird die höhere Konzentration jedoch wieder abgebaut, so dass an den Messtürmen etwa noch 0.4 ppb mehr Isopren vorhanden ist, als in der ursprünglichen Modellsimulation. Mit diesen Werten verdoppeln sich die Konzentrationen von Isopren gegenüber den vorhergehenden Modellsimulationen und entsprechen den in den Messungen gefundenen Werten.

Die Isoprenkonzentration am Einströmrand ist weitgehend unbekannt. Mit der Abschätzung der neuen Einströmprofile kann das Modell die Isoprenkonzentrationen in ihrer Größenordnung insgesamt gut wiedergeben. Da auch die erhöhten Werte am Einströmrand sich in Strömungsrichtung verringern, deutet dies auf einen vernünftigen Isoprenabbau im Modell hin. Die Isoprenkonzentrationen im Modellgebietsinnern lassen sich stark von den Randwerten des Isoprens, jedoch nicht von OH, NO₂, NO und O₃ beeinflussen. In einem kleinen Modellgebiet ist der Effekt der Randwerte deutlich größer als der Effekt der chemischen Umwandlung im Innern des Gebietes.

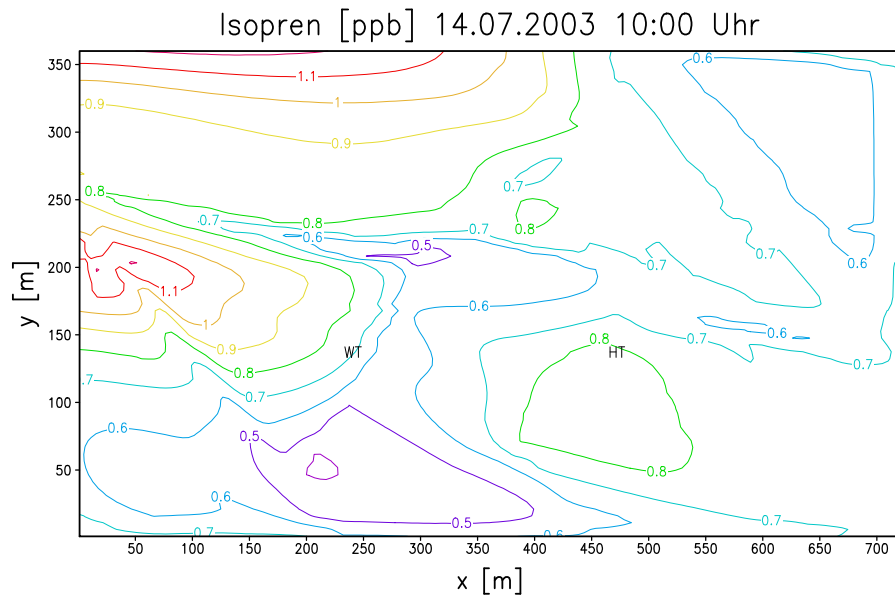


Abbildung 4.38: Isoprenkonzentration am 14.07.2003 um 10:00 Uhr in 17.5 m Höhe. Die höhere Isoprenkonzentration am Einströmrand macht sich auch innerhalb des Modellgebietes bemerkbar.

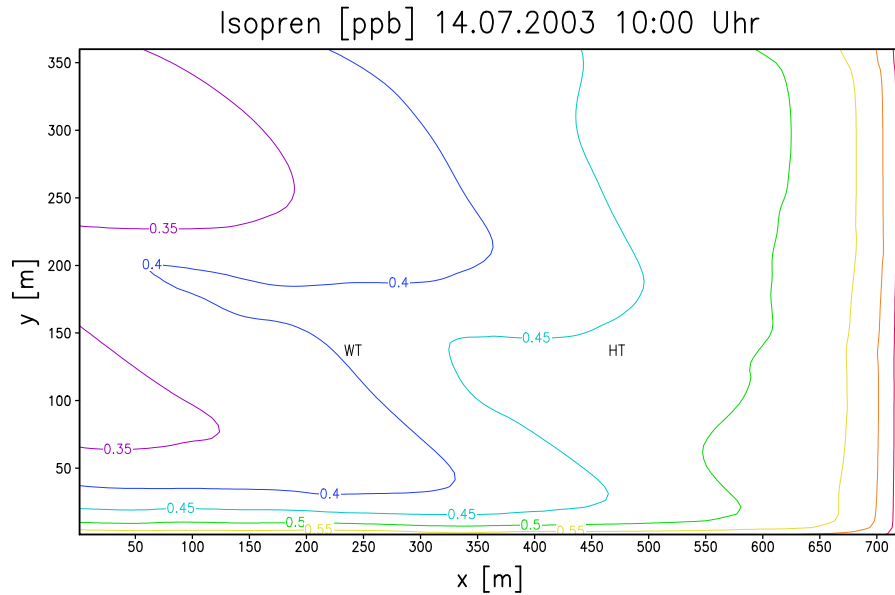


Abbildung 4.39: Differenzenplot der Isoprenkonzentration am 14.07.2003 um 10:00 Uhr in 17.5 m Höhe. Die am Einströmrand um 0.65 ppb höhere Konzentration wird in Strömungsrichtung auf 0.35 ppb reduziert.

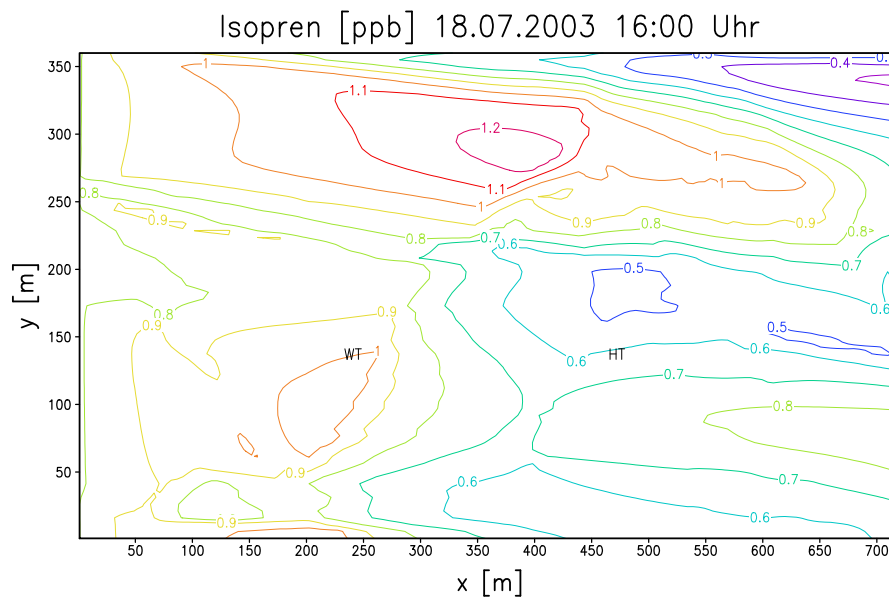


Abbildung 4.40: Isoprenkonzentration am 18.07.2003 um 16:00 Uhr in 17.5 m Höhe. Die höheren Hintergrundkonzentrationen des Isoprens erhöhen die Gesamtkonzentration im Modellgebiet deutlich.

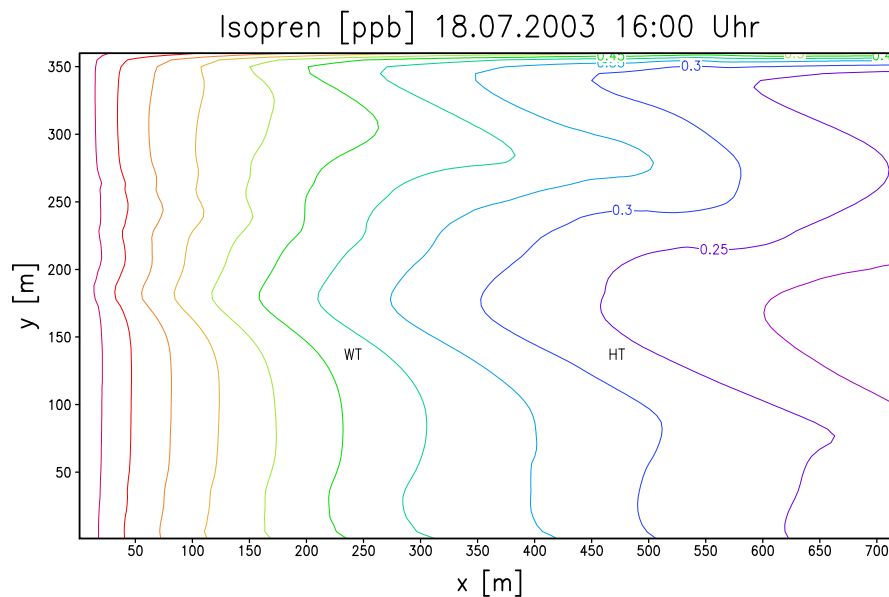


Abbildung 4.41: Differenzenplot der Isoprenkonzentration am 18.07.2003 um 16:00 Uhr in 17.5 m Höhe. Auch hier wird die um 0.7 ppb höhere Konzentration in Strömungsrichtung auf nur noch 0.25 ppb reduziert.

4.4.4 Tracer-Experimente

Am 18.07.2003 wurden zusätzlich zu den laufenden Messungen Tracer-Experimente mit SF_6 durchgeführt. Diese sollen mit dem Modellsystem simuliert werden, um Aussagen über die im Wald vorhandene Advektion und Diffusion treffen zu können.

Schwefelhexafluorid (SF_6) ist ein inertes Gas und dadurch als Tracer sehr gut geeignet. Einmal in die Atmosphäre emittiert dauert es etwa 3200 Jahre, bis die extrem stabilen Moleküle in sehr hohen Atmosphärenschichten durch energiereiche UV-Strahlung abgebaut werden. SF_6 ist das wirksamste bekannte Treibhausgas. Eine Tonne SF_6 entspricht dabei dem Klimapotenzial von 23900 Tonnen CO_2 . In den Experimenten wurde nur eine sehr geringe Menge von insgesamt 1.7 kg freigesetzt, die keine messbare Auswirkung auf das Klima hat. Durch die geringen Hintergrundkonzentrationen von ca. 5 ppt (Aubrun et al., 2005) können die in diesem Experiment freigesetzten Mengen jedoch einfach bestimmt werden.

Für die Freisetzung wurden drei 100 m lange Schläuche verwendet, die einen Abstand von 50 m zueinander hatten. Die Lage der Schläuche ist in der Abbildung 3.2 ersichtlich. Die Schläuche hatten in 1 m Abstand Kapillaröffnungen durch die das SF_6 freigesetzt wurde. Die Freisetzungshöhe war etwa 1 m über dem Boden. Um messbare Konzentrationen zu erreichen und vernünftige Druckverhältnisse im Schlauch zu haben, wurde in diesem Experiment N_2 5.0 (Stickstoff mit einer Reinheit von $\geq 99.999\%$) als Trägergas verwendet. Die Emission startete um 11:00 MEZ und endete um 13:02 MEZ. Zwischen 11:58 und 12:01 MEZ war aus technischen Gründen eine kurze Unterbrechung der Emission notwendig.

Das Modellgitter kann die Kapillaröffnungen auf Grund der Maschenweite nicht explizit auflösen, daher wurden die Emissionen über 60 Punktquellen parametrisiert (Abb. 3.2). Die Emissionen wurden näherungsweise halbstündlich von 10:30 Z bis 12:30 Z eingelesen. Pro Punktquelle ergab sich somit in einer halben Stunde eine Freisetzung von etwa 7 g SF_6 .

Die SF_6 -Konzentrationen wurden als Profile am Hauptturm gemessen. Die Messungen erfolgten so, dass konstant Luft von verschiedenen Höhen durch jeweils einen Kessel gepumpt wurde. Die Luft in den Kesseln wurde so dreimal pro Stunde ausgetauscht. Aus diesen Kesseln sind zyklisch alle 10 Minuten Proben analysiert worden.

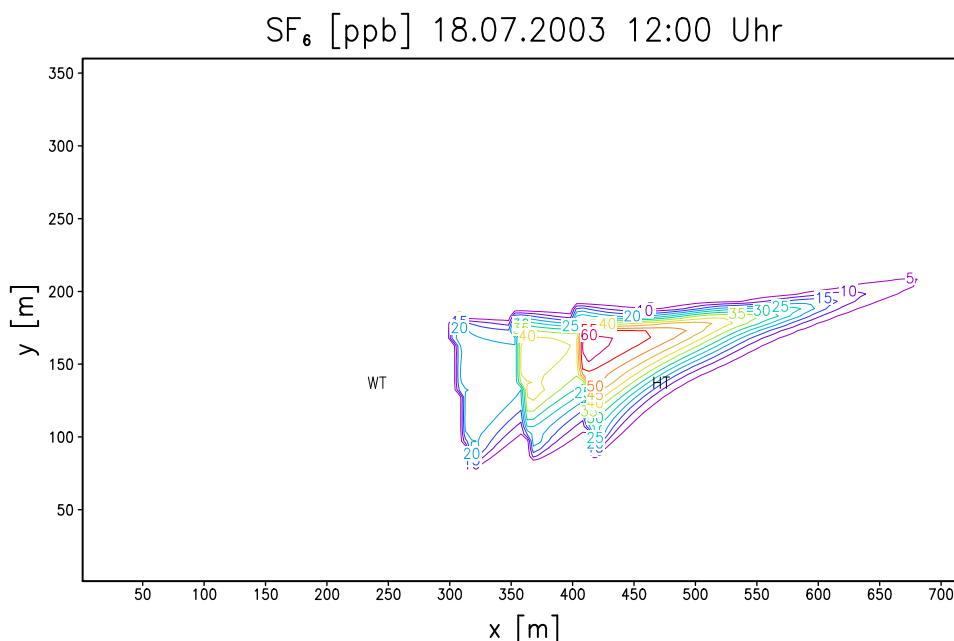


Abbildung 4.42: Horizontalschnitt der modellierten SF_6 -Konzentration für den 18.07.2003 um 12:00 Uhr in 2.5 m Höhe.

Die Modellergebnisse von MICTM liegen alle halbe Stunde vor, sind dann jedoch Momentanwerte, die nicht ohne weiteres mit den Messungen verglichen werden können. Zudem sind die Konzentrationen am Hauptturm stark davon abhängig, aus welcher Richtung der Wind kommt und ob der Turm überhaupt in der Ab-
luftfahne der SF_6 -Emissionen steht.

Für 12:00 Uhr sind die Konzentrationen in 2.5 m Höhe gezeigt (Abb. 4.42). Zu erkennen sind die drei Emissionslinien, die jeweils 20 ppb SF_6 emittieren. Die Konzentrationen addieren sich bis kurz hinter der dritten Emissionslinie zu einem Maximum von 60 ppb. In Strömungsrichtung wird das SF_6 verteilt und die Konzentrationen nehmen stark ab.

Der Vergleich mit der Messung gegen 12:00 Uhr ergibt, dass die Konzentrationen am Hauptturm vom Modell stark überschätzt werden. Sowohl am Boden als auch in der Höhe werden zu hohe Konzentrationen vorhergesagt (Abb. 4.43). Die Windgeschwindigkeit wird insbesondere im Stammraum um etwa 0.5 m/s überschätzt (Abb. 4.44). Bei niedrigeren Windgeschwindigkeiten reicht die SF_6 -Fahne nicht so nah an den Hauptturm heran und führt daher zu niedrigeren Konzentrationen.

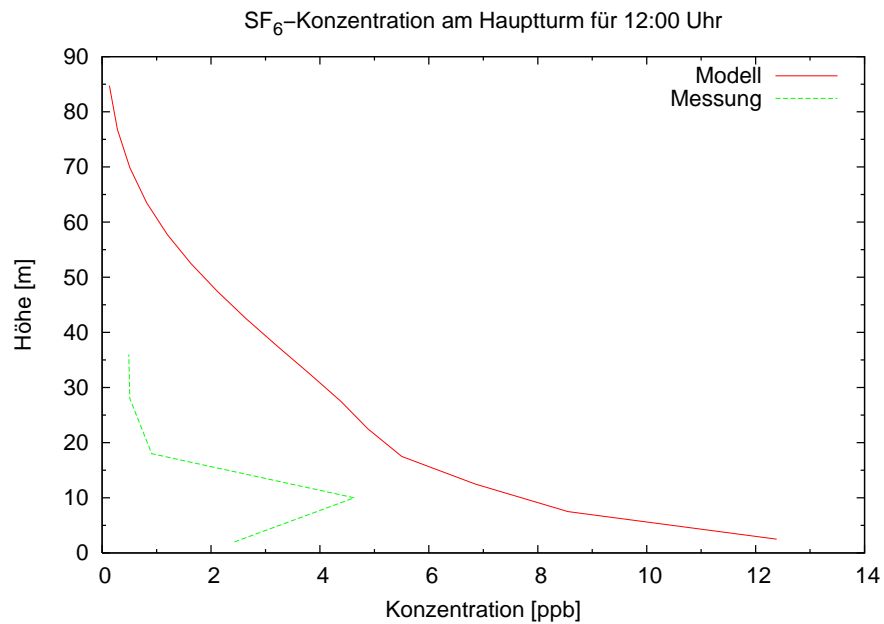


Abbildung 4.43: Vergleich der SF₆-Konzentrationsprofile am 18.07.2003 um 12:00 Uhr. Die Konzentrationen wurden vom Modell um mehr als das doppelte überschätzt.

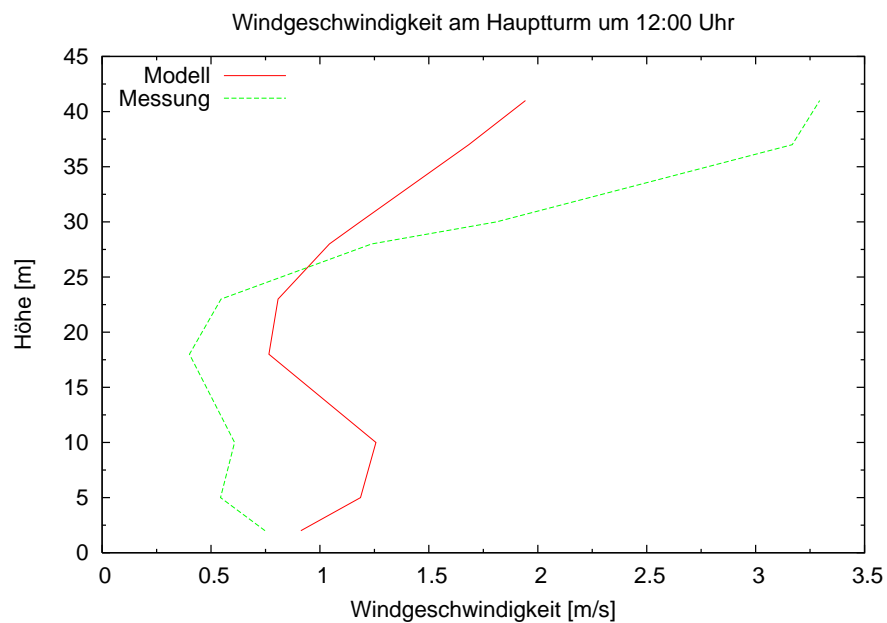


Abbildung 4.44: Profil der Windgeschwindigkeit für den 18.07.2003 am Hauptturm um 12:00 Uhr. Im Stammraum wird die Windgeschwindigkeit um 0.5 m/s überschätzt.

Die modellierte Windrichtung für 12:00 Uhr in 2 m und 5 m beträgt 243° und 241° , die gemessenen Werte weichen mit 240° und 237° nur leicht nach Süden ab. Der Hauptturm dürfte aber dennoch in den etwas geringeren Konzentrationen der SF_6 -Fahne stehen.

Die Unsicherheit in der Simulation der SF_6 -Konzentrationen ist wegen der nicht genau bestimmbaren Position der Messtürme (Abschnitt 3.2.1) sehr groß. Bildet man einen Kreis mit einem Radius von etwa 25 m um den Hauptturm herum, so schwankt die SF_6 -Konzentration von 0 bis 50 ppb (Abb. 4.42).

5 Diskussion und Ausblick

5.1 Diskussion

In dieser Arbeit wurden für zwei ausgewählte Tage Simulationen durchgeführt, um biogene Emissionen, hauptsächlich Isopren, aus einem Waldgebiet vorhersagen zu können. Dazu wurde das mikroskalige Modellsystem MITRAS/MICTM benutzt, in das erfolgreich eine Vegetationsparametrisierung und ein Emissionsalgorithmus implementiert wurden. Damit steht für die dreidimensionale Simulation biogener Emissionen in einem Waldgebiet ein Modellsystem für die Mikroskala zur Verfügung.

Dabei hat sich gezeigt, dass es für ein kleines Modellgebiet möglich ist, die meteorologischen Parameter und die Emissionen in ihrer Größenordnung richtig vorherzusagen, wenn die Randbedingungen bekannt sind. Von Vorteil in dieser Arbeit waren die ausreichend vorhandenen Messungen. Wenn jedoch keine Messungen für den Vorhersagezeitraum zur Verfügung stehen, ist bei der Modellierung mit größeren Unsicherheiten zu rechnen, da bereits leichte Änderungen in den Anfangs- und Randbedingungen sich auf das gesamte Modellgebiet auswirken. So kann das Modellsystem auch nur dann auf andere Waldgebiete übertragen werden, wenn die dortigen Verhältnisse sehr genau bekannt sind.

Mit MITRAS konnte das Temperatur- und Strömungsfeld gut simuliert werden. Der etwas intensivere Tagesgang der Temperatur kann eine Folge der fehlenden Evapotranspiration des Waldes sein, die in den Modellgleichungen nicht berücksichtigt wurde. Sie hat einen Einfluss auf die Umgebungs- und Blatttemperatur durch transpirative Kühlung (Geron et al., 1994).

Trotz des zusammengesetzten Tagesganges konnten die Daten in MICTM übernommen und die Simulationen durchgeführt werden. Bei Vorgabe realitätsnaher Einströmbedingungen konnten die Isoprenemissionen für den 14.07.2003 in der richtigen Größenordnung vorhergesagt werden. Die Unsicherheit beim 18.07.2003 lag etwa bei einem Faktor 2.

Im Vergleich mit anderen Modellen ist dies ein sehr guter Wert. Huber et al. (1999) modellierten mit ihrem eindimensionalen Modell auf 20 Höhenleveln eine um 4 °C zu hohe Temperatur im Kronenraum und brachten dies mit Isoprenemissionsunsicherheiten von einem Faktor 2 in Verbindung. Mit einem eindimensionalen Modell von Makar et al. (1999) modellierten Stroud et al. (2005) Isoprenprofile zwischen 1.5 und 2.5 ppb. Auf der regionalen Skala berechneten Simpson et al. (1995) und Simpson et al. (1999) für Europa Isoprenemissionen und ermittelten einen Unsicherheitsfaktor von 5. Zu bedenken ist aber, dass sich die vertikalen Biomassenverteilungen unterscheiden und die Ergebnisse daher nicht direkt miteinander verglichen werden können.

Wurden die Konzentrationen des Isoprens am Einströmrand als zu niedrig angenommen, weil die Isoprenemitter, die sich außerhalb des Modellgebietes befinden, nicht beachtet wurden, waren auch die Isoprenkonzentrationen im Modellgebietsinnern zu niedrig und wurden bis zu einem Faktor 6 unterschätzt.

Der Prozess der Isoprenoxidation muss innerhalb von Chemietransportmodellen wegen der limitierten Rechenzeit in einem stark komprimierten Mechanismus beschrieben werden. Das Wissen über den Abbau von biogenen VOC hat in den letzten Jahren jedoch signifikant zugenommen, die Modelle haben sich dem jedoch nicht angepasst. Forkel et al. (2005) untersuchten im AFO2000-Projekt ValChem den RADM2-Nachfolger RACM (Stockwell et al., 1997) und befanden sogar diesen für den Isoprenabbau als nicht mehr zeitgemäß. Der hier verwendete RADM2-Mechanismus kann den Isoprenabbau nur grob wiedergeben. Bessere Ergebnisse erzielen beispielsweise das RACM-MIM (Geiger et al., 2003; Dorn et al., 2005). Dieses muss bei der Verwendung des Modellsystems MITRAS/MICTM ausschließlich für die Betrachtung von biogenen Emissionen beachtet werden.

NO₂, NO und auch Ozon können in einem kleinen Modellgebiet nicht richtig vorhergesagt werden. Sie müssen für die Berechnung eines Tagesganges am Einströmrand bereits richtig vorgegeben werden, da sich diese Konzentrationen in einem Modellgebiet, das weniger als einen Kilometer abdeckt, nur wenig verändern.

Diese Stoffe haben allerdings auch bei veränderten Randbedingungen – also bei Vorgabe des gemessenen Tagesganges – keinen großen Einfluss auf die Isoprenkonzentration. Lediglich die OH-Konzentrationen wurden durch die Vorgabe fester Randwerte besser modelliert. Messungen als Randwerte zu übergeben verschlechterte hier die Simulation.

5.2 Ausblick

Die Einströmprofile für MITRAS wurden aus dem eindimensionalen MITRAS 1D vorgegeben. Diese Profile sind den Modellgleichungen angepasst. Jedoch wird in MITRAS 1D der Einfluss des Waldes nicht berücksichtigt. Dieser Einfluss wirkt sich erst im dreidimensionalen MITRAS aus. Für eine konsistentere Betrachtungsweise müssten diese Parametrisierungen auch in dem eindimensionalen Modell vorhanden sein. Dies könnte numerischen Lärm verhindern, wie er in diesen Simulationen teilweise auftrat.

Die Evapotranspiration des Waldes hat wahrscheinlich einen Einfluss auch auf die Emissivität des Waldes. Weiter gehende Untersuchungen und die Berücksichtigung im Modell würden die Unsicherheiten und offenen Fragen in dieser Richtung schmälern.

Die Isoprenemissionen sind direkt abhängig von der Blatttemperatur. In den Emissionsalgorithmus geht als Vereinfachung nur die Temperatur der Umgebung ein, da die Oberflächentemperaturen der Blätter nicht bekannt sind. Innerhalb des Kronenraums neigen die Blatttemperaturen höher als die der Umgebungsluft zu sein, was zu höheren Emissionen führt (Simpson et al., 1995). Aus Einzelmessungen ergaben sich bei sonnenbeschienenen Blättern Oberflächentemperaturen von über 40 °C (Chaparro-Suarez, 2004), die bei den Emissionen in dem Maße nicht berücksichtigt werden. Für eine Verbesserung des Emissionsalgorithmus sollten diese Beobachtungen mit einfließen.

Im Hinblick auf die beanspruchte Rechenzeit muss gesagt werden, dass das mikroskalige Modellsystem MITRAS/MICTM nicht für kurzfristige Vorhersagen geeignet ist. Das Modellsystem MITRAS/MICTM wurde mit den mesoskaligen Modellen METRAS und MECTM bereits erfolgreich im AFO2000-Projekt VALIUM angewendet (Schatzmann et al., 2005), jedoch wurden MITRAS/MICTM nur bis

zu einer auftretenden Stationarität gerechnet und nicht auf einen Tagesgang ausgedehnt. Die Modelle müssen also weiter optimiert werden, wenn sie Tagesgänge modellieren sollen.

Mit weiteren Sensitivitätsstudien könnten die Veränderungen der Emissionen, die durch ein anderes LAI-Profil entstehen, untersucht werden. Das hier verwendete Profil entspricht nur einem Mittelwert aus mehreren Messungen. Echte dreidimensionale Verteilungen könnten die Simulation der Isoprenemissionen weiter verbessern. Die Biomasseverteilung stellt für Lamb et al. (1996) nämlich immer noch die größte Unsicherheitsquelle dar.

Interessant wäre auch, den Einfluss der Temperatur auf die Isoprenemissionen zu untersuchen. Dabei könnten die in den Klimaszenarien berechneten Temperaturen als Grundlage genommen werden. In der Ozonvorhersage wird dies auch in Zukunft noch eine wichtige Rolle spielen.

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. K. Heinke Schlünzen und Prof. Dr. Ralf Koppmann für die gute Unterstützung und die vielen Anregungen zu dieser Arbeit. Wegen der Entfernung Hamburg – Jülich (und anschließend auch Karlsruhe) war dies sicherlich nicht immer einfach aber dennoch erfolgreich.

Für die Einführung in das Modellsystem MITRAS und MICTM sei insbesondere David Grawe gedankt, ohne den die schnelle Einarbeitung und die Klärung vieler offener Fragen sicher nicht möglich gewesen wäre. Bei der Programmierung im Modell und der Anwendung von Prä- und Postprozessoren hat mir Volker Reinhardt sehr geholfen.

Der unermüdliche Einsatz von Heiner Geiß für mein stets knappes Rechenzeitkontingent hat dazu beigetragen, meine rechenintensiven Simulationen in angemessener Zeit durchführen zu können.

Dem gesamten ECHO-Team sei für die Bereitstellung der Messdaten gedankt. Die Radiosondendaten sind vom British Atmospheric Data Centre (BADC) kostenfrei zur Verfügung gestellt worden.

Diese Arbeit wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im Rahmen des deutschen Atmosphärenforschungsprogramms AFO 2000 unter dem Kennzeichen 07ATF47 gefördert.

A Numerische Betrachtungen

Das Modellsystem MITRAS/MICTM wurde im Rahmen des Troposphärenforschungsprogramms als Gemeinschaftsmodell entwickelt. Die Weiterentwicklung wird vom Meteorologischen Institut der Universität Hamburg koordiniert. Die am DKRZ¹ zur Verfügung stehenden Rechner sind NEC SX-6 mit 500 MHz Prozessoren. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Modellsystem auf den Jülicher Großrechner implementiert, der aus IBM e-server pSeries 690 Frames besteht, die mit Power4+ Prozessoren mit jeweils 1.7 GHz ausgestattet sind. Als Betriebssystem wird IBM AIX 5.2 verwendet. Der Fortran-Quellcode von MITRAS/MICTM wurde zudem an XL Fortran für AIX angepasst.

MITRAS ist nicht parallelisiert und konnte daher nur auf einem Prozessor gerechnet werden. Für einen Tagesgang in der hier verwendeten Konfiguration (Abschnitt 3.1) hätte das Modell etwa 30 Tage Rechenzeit verbraucht. Dies wäre aber für einen einzelnen Tagesgang nicht durchführbar. Da auf einer möglichst hoch aufgelösten Skala gerechnet werden sollte, war eine Vergrößerung des Modellgitters nicht sinnvoll. Daher wurde über eine Parallelisierung des Quellcodes nachgedacht.

Ein Performance-Test mit MITRAS sollte über den parallelisierbaren Anteil des Quellcodes Aufschluss geben. Dazu wurde ein Testlauf mit etwa 350.000 Gitterpunkten und einer vorher festgelegten Anzahl an Zeitschritten durchgeführt. Dabei wurden die beiden implementierten Gleichungssystemlöser BiCgStab² und IGCG³ getestet. Der in MITRAS implementierte IGCG-Löser ist dabei jedoch

¹DKRZ = Deutsches Klimarechenzentrum

²Stabilisiertes Bi-konjugiertes Gradientenverfahren

³Konjugiertes Gradientenverfahren

Tabelle A.1: In einem Performance-Test mit MITRAS wurden die Anteile der Rechenzeit bestimmt.

	ohne MASS BiCgStab	mit MASS BiCgStab	mit MASS IGCG
Laufzeit	3:00 h	2:20 h	2:30 h
Gleichungssystem- löser	37 %	52 %	62 %
trig. Funktionen und interne Bibliotheken	34 %	9 %	8 %
parallelisierbarer Anteil	15 %	20 %	20 %
Rest	14 %	19 %	10 %

für mikroskalige Anwendungen nicht hinreichend geeignet, da dieser Algorithmus – durch die Wahl seines Vorkonditionierers – die Anisotropie des Gitters in mesoskaligen Modellen ausnutzt, die in MITRAS nicht mehr gegeben ist. Die für AIX optimierten intrinsischen Funktionen (MASS⁴) wurden ebenfalls getestet.

Das Ergebnis ist in der Tabelle A.1 dargestellt. Die Routinen, die jeweils keinen oder nur sehr geringen Anteil an der Rechenzeit besitzen, wurden als Rest zusammengefasst. Der parallelisierbare Anteil betrug in allen drei Testsimulationen 15 bis 20 %. Der parallele Anteil am Modellcode muss jedoch mindestens 30 % betragen, damit die Parallelisierung mit OpenMP sich in einem Zeitgewinn bemerkbar macht. Auf Grund des iterativen BiCgStab-Lösers ist die Parallelisierung nicht möglich. Es gibt zwar bereits parallelisierte Gleichungssystemlöser, deren Implementierung in ein bereits vorhandenes Modell wäre jedoch ein erheblicher Aufwand, der im Rahmen dieser Arbeit nicht geleistet werden konnte.

Eine alternative und hier angewendete Möglichkeit war die Aufteilung des zu rechnenden Tagesganges in mehrere Abschnitte. Dazu wurde der Tagesgang in 24 Läufe aufgeteilt, die jedoch nicht eine volle Stunde simulieren, sondern nur jeweils 10 Minuten. Diese Zeit hat ausgereicht, um einen quasistationären Zustand zu erreichen (Kapitel 4). Die Ergebnisse der 24 Läufe wurden dann wieder zu einem Tagesgang zusammengesetzt, ausgewertet und in MICTM weiterverwendet. So

⁴Mathematical Acceleration Subsystem für AIX

war es möglich, einen Tagesgang mit MITRAS in einem sechstel der Zeit zu rechnen.

Diese verwendete Methodik ergab, dass die Einzelläufe völlig unabhängig voneinander waren. Der Vorteil daran war, dass die Läufe auch gleichzeitig gerechnet werden konnten und bei freien Kapazitäten des Großrechners in 5 Stunden (bezogen auf den Testlauf) berechnet werden konnten. Diese Unabhängigkeit der Läufe war jedoch nicht unbedingt gegeben. Die Implementierung der Vegetation beinhaltet, dass eine Kronenraumerwärmung in der Nacht vom Modell nicht erfasst werden konnte. Der am Tag durch die Sonneneinstrahlung aufgeheizte Kronenraum speicherte die Wärme auch bei schon erfolgtem Sonnenuntergang noch über mehrere Stunden. Dieser Effekt hätte nur durch modifizierte Temperaturprofile am Einströmrand ausgeglichen werden können. Dazu hätte für jede Stunde die Differenz der durch Strahlung verursachten Erwärmung und der gemessenen Temperatur berechnet werden müssen. Darauf wurde hier jedoch verzichtet, weil Isopren nur bei Strahlung von den Pflanzen emittiert wird und daher in den Abend- und Nachtstunden vernachlässigbar klein ist.

Da MICTM einen durchgängigen Tagesgang simuliert, auch wenn die Strömungs- und Temperaturfelder aus stündlichen Einzelergebnissen zusammengesetzt wurden, ergab sich hier wiederum ein erheblicher Rechenzeitaufwand. Trotz der Parallelisierung, die in MICTM erfolgreich implementiert ist, benötigte das Modell wegen des hoch aufgelösten Modellgitters und des kleinen Zeitschritts von etwa 1.2 Sekunden zwei Wochen, um 24 Stunden simulieren zu können.

B Umrechnungen

B.1 Bestimmung des Blattflächendichteprofiles

Für die Berechnung der Strömung und der Strahlungseigenschaften im Bestand spielt die Blattflächendichte l_d eine wichtige Rolle. Sie beschreibt in einem homogenen Bestand die Fläche der Blätter bezogen auf das Volumen. Im Gegensatz dazu ist der Blattflächenindex l_i die Fläche der Blätter bezogen auf die Grundfläche. Mit Hilfe des Plant Canopy Analyser LAI2000 der Firma LI-COR (Lincoln, USA) können diese beiden Variablen bestimmt werden. Dazu werden die Strahlungsverhältnisse¹ im Bestand mit denen über dem Bestand verglichen. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Lichtstrahl nicht bis zum Messgerät durchdringt, ist dabei proportional zur Weglänge, zur Blattflächendichte und zur Orientierung der Blätter. Für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $T(\theta, \phi)$ gilt dann

$$T(\theta, \phi) = \exp(-G(\theta, \phi) \cdot \mu \cdot S(\theta, \phi)) \quad (\text{B.1})$$

mit der Annahme, dass die Blätter im Gegensatz zum Kronenraum klein und zufällig verteilt sind. θ ist der Zenit- und ϕ der Azimutwinkel. $G(\theta, \phi)$ gibt den Anteil der Blätter an, der in die Richtung (θ, ϕ) projiziert wird, μ die mittlere Blattflächendichte in $\frac{\text{m}^2}{\text{m}^3}$ und $S(\theta, \phi)$ die Weglänge, die ein Lichtstrahl in Richtung (θ, ϕ) zurücklegen muss. Wird im Folgenden über den Azimutwinkel gemittelt, ergibt sich für die Blattflächendichte

$$\mu = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{-\ln(T(\theta))}{S(\theta)} \sin \theta d\theta. \quad (\text{B.2})$$

¹Idealerweise werden die Messungen an einem Tag mit gleichmäßig strukturierter Bewölkung gemacht um Helligkeitsunterschiede, die das Messergebnis verfälschen können, zu vermeiden.

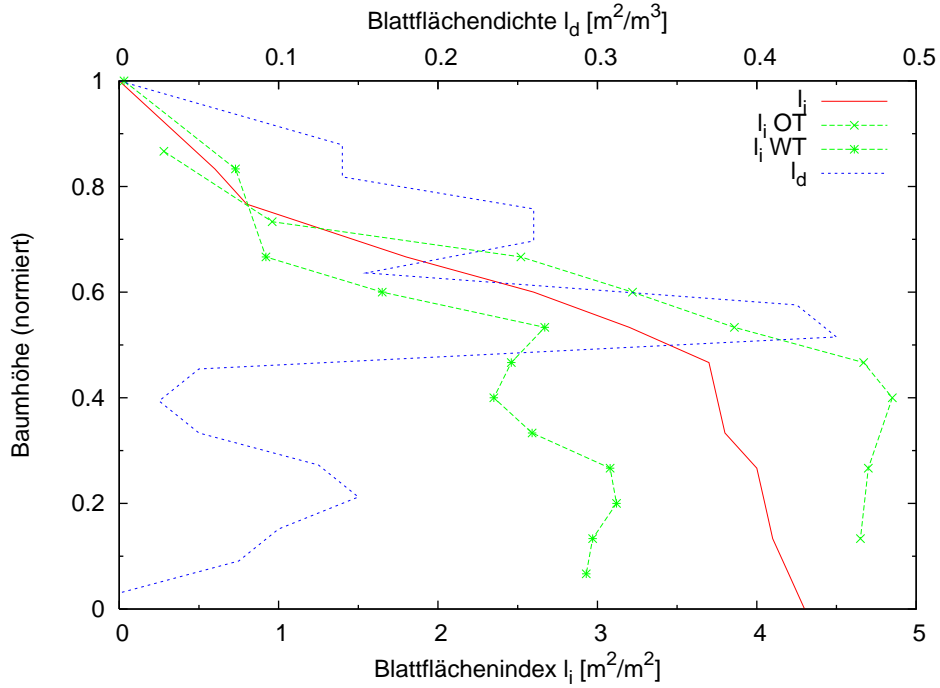


Abbildung B.1: Der im Modell verwendete Blattflächenindex l_i wurde aus den beiden Profilen des Ost- und Westturms gemittelt. l_d zeigt die verwendete Blattflächendichte.

Wenn der Blattflächenindex durch

$$l_i = \mu z \quad (\text{B.3})$$

definiert wird und die Weglänge S mit dem Zenitwinkel in Bezug gesetzt wird

$$S(\theta, \phi) = \frac{z}{\cos \theta}, \quad (\text{B.4})$$

ergibt sich die Bestimmungsgleichung für l_i

$$l_i = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} -\ln(T(\theta)) \cos \theta \sin \theta d\theta. \quad (\text{B.5})$$

Der Plant Canopy Analyzer bestimmt aus 5 diskretisierten Winkelbereichen den Blattflächenindex. Bei den Messungen spielen natürlich auch der Stammraum und die Äste eine Rolle, die aber in Bezug auf den mittleren Fehler keinen großen Einfluss haben. Genau genommen handelt es sich hier also um einen Vegetationsflächenindex.

In dem in ECHO untersuchten Wald wurden an den drei Messtürmen l_i -Profile bestimmt. Die Werte des Hauptturms konnten allerdings auf Grund der dort vorhandenen Lichtung nicht verwendet werden. Die beiden übrigen Profile wurden

zu einem in MITRAS verwendeten Profil gemittelt. Theoretisch muss l_i kontinuierlich zum Boden hin zunehmen, diverse Unsicherheiten in der Messmethode lassen die Ergebnisse jedoch erheblich streuen (Aubrun et al., 2005). Für die Eingabedaten wurden diese Fehler korrigiert (Abb. B.1). Das kumulative eindimensionale Profil des l_i wurde noch mit der Baumhöhe normiert und mit den Landnutzungsklassen, die Baumart und -höhen enthalten, zu einem dreidimensionalen l_i erweitert.

Die Blattflächendichte l_d ergibt sich nach Wu et al. (2000):

$$l_d = \left| \frac{\Delta l_i(z)}{\Delta z} \right|. \quad (\text{B.6})$$

B.2 Photonenenergie

Pflanzen brauchen zur Photosynthese hauptsächlich Licht im Wellenlängenbereich zwischen 400 nm und 700 nm. Dieser Bereich des Lichtspektrums wird photosynthetisch aktive Strahlung (PAR) genannt. Die zur Berechnung der biogenen Emissionen nach Gleichung 2.18 verwendete PAR wird in der Einheit $\frac{\mu\text{E}}{\text{m}^2\text{s}}$ angegeben. 1 Einstein (E) entspricht dabei der Energie von 1 mol Photonen². Da die Strahlungsberechnung in MITRAS allerdings in $\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$ erfolgt, muss die Strahlung umgerechnet werden. Die Energie eines einzelnen Photons ist das Produkt aus dem Planck'schen Wirkungsquantum h und einer Frequenz $\nu = \frac{c}{\lambda}$

$$\varepsilon = h\nu, \quad (\text{B.7})$$

wobei c die Lichtgeschwindigkeit und λ die Wellenlänge ist. Für 1 mol Photonen gilt somit:

$$1 \text{ E} = N_A \varepsilon = N_A h \nu = N_A h \frac{c}{\lambda} \quad (\text{B.8})$$

Mit der Avogadrokonstante $N_A = 6.02214 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$, $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $c = 2.99792458 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ und $\lambda = (400 - 700) \cdot 10^{-9} \text{ m}$ ergibt sich eine wellenlängenabhängige Energie von

$$1 \text{ E}(400 \text{ nm}) = 2.99 \cdot 10^5 \text{ J} \quad (\text{B.9})$$

$$1 \text{ E}(550 \text{ nm}) = 2.175 \cdot 10^5 \text{ J} \quad (\text{B.10})$$

$$1 \text{ E}(700 \text{ nm}) = 1.709 \cdot 10^5 \text{ J} \quad (\text{B.11})$$

²Ein mol Photonen bedeutet in diesem Zusammenhang eine Anzahl von $6.02214 \cdot 10^{23}$ (Avogadrozahl) Photonen.

550 nm wurde hier als Mittelwert der photosynthetisch aktiven Strahlung verwendet. Damit gilt die in MITCM verwendete Umrechnung

$$1 \frac{\mu\text{E}}{\text{m}^2 \text{s}} = 0.2175 \frac{\text{W}}{\text{m}^2}. \quad (\text{B.12})$$

C RADM2 - Spezies und Reaktionen

Tabelle C.1: Substanzen in MICTM

	Substanz	Name
1	NO ₂	Stickstoffdioxid
2	NO	Stickstoffmonoxid
3	O ₃	Ozon
4	HONO	Salpetrige Säure
5	HNO ₃	Salpetersäure
6	HNO ₄	Peroxosalpetersäure
7	NO ₃	Nitrat
8	H ₂ O ₂	Wasserstoffperoxid
9	HCHO	Formaldehyd
10	CO	Kohlenstoffmonoxid
11	ALD	Acetaldehyd
12	OP1	Methylhydroperoxid
13	OP2	Höhere organische Peroxide
14	PAA	Peroxyessigsäure
15	KET	Keton
16	GLY	Glyoxal
17	MGLY	Methylglyoxal
18	DCB	Ungesättigte Dicarbonyl
19	ONIT	Organische Nitrate
20	N ₂ O ₅	Distickstoffpentoxid
<i>Fortsetzung auf der nächsten Seite</i>		

Tabelle C.1: *Fortsetzung*

	Substanz	Name
21	SO ₂	Schwefeldioxid
22	SULF	Schwefelsäure
23	CH ₄	Methan
24	ETH	Ethan
25	HC3	Alkane mit OH-Geschwindigkeitskonstanten (bei 298 K und 1 atm) zwischen $2.7 \cdot 10^{-13}$ und $3.4 \cdot 10^{-12}$
26	HC5	Alkane mit OH-Geschwindigkeitskonstanten (bei 298 K und 1 atm) zwischen $3.4 \cdot 10^{-12}$ und $6.8 \cdot 10^{-12}$
27	HC8	Alkane mit OH-Geschwindigkeitskonstanten (bei 298 K und 1 atm) größer als $6.8 \cdot 10^{-12}$
28	OL2	Ethen
29	OLT	Endständige Alkene
30	OLI	Interne Alkene
31	TOL	Toluen und weniger reaktive Aromate
32	CSL	Kresol und andere OH-substituierte Aromate
33	XYL	Xylen und reaktivere Aromate
34	PAN	Peroxyacetylnitrat und höhere PAN-Verbindungen
35	ISO	Isopren
36	TPAN	Ungesättigte PAN-Verbindungen
37	ORA1	Ameisensäure
38	ORA2	Essigsäure und höhere Säuren
39	HO ₂	Hydroperoxyradikal
40	MO ₂	Methylperoxyradikal
41	OLN	Produkte aus dem NO ₃ -Alken
42	ACO ₃	Acetylperoxy- und höher gesättigte Acylperoxyradikale
43	TCO ₃	Ungesättigte Acylperoxyradikale
44	OH	Hydroxylradikal
45	ETHP	Von ETH gebildete Peroxyradikale
46	HC3P	Von HC3 gebildete Peroxyradikale
47	HC5P	Von HC5 gebildete Peroxyradikale
48	HC8P	Von HC8 gebildete Peroxyradikale
49	OL2P	Von OL2 gebildete Peroxyradikale
<i>Fortsetzung auf der nächsten Seite</i>		

Tabelle C.1: Fortsetzung

	Substanz	Name
50	OLTP	Von OLT gebildete Peroxyradikale
51	OLIP	Von OLI gebildete Peroxyradikale
52	TOLP	Von TOL gebildete Peroxyradikale
53	XYLP	Von XYL gebildete Peroxyradikale
54	KETP	Von KET gebildete Peroxyradikale
55	XNO ₂	Zusätzliche Bildung von organischen Nitraten
56	XO ₂	Zusätzlicher Umsatz von NO nach NO ₂
57	NH ₃	Ammoniak
58	HCl	Salzsäure
59	SF ₆	Schwefelhexafluorid

Tabelle C.2: Photolysereaktionen in STAR und MICTM.

	Reaktion	MICTM
1	$\text{O}_3 + h\nu \rightarrow \text{O}^1\text{D} + \text{O}_2$	2
2	$\text{O}_3 + h\nu \rightarrow \text{O}^3\text{P} + \text{O}_2$	3
3	$\text{NO}_2 + h\nu \rightarrow \text{O}^3\text{P} + \text{NO}$	1
4	$\text{NO}_3 + h\nu \rightarrow \text{NO} + \text{O}_2$	7
5	$\text{NO}_3 + h\nu \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}^3\text{P}$	8
6	$\text{HONO} + h\nu \rightarrow \text{HO} + \text{NO}$	4
7	$\text{HNO}_3 + h\nu \rightarrow \text{HO} + \text{NO}_2$	5
8	$\text{HNO}_4 + h\nu \rightarrow \text{HO}_2 + \text{NO}_2$	6
9	$\text{H}_2\text{O}_2 + h\nu \rightarrow 2 \text{HO}$	9
10	$\text{HCHO} + h\nu \rightarrow 2 \text{HO}_2 + \text{CO}$	11
11	$\text{HCHO} + h\nu \rightarrow \text{H}_2 + \text{CO}$	10
12	$\text{CH}_3\text{CHO} + h\nu \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2 + \text{HO}_2 + \text{CO}$	12
13	$\text{CH}_3\text{COCH}_3 + h\nu \rightarrow \text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2$	16
14	$\text{CH}_3\text{COC}_2\text{H}_5 + h\nu \rightarrow \text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2$	-1
15	$\text{CHOCHO} + h\nu \rightarrow 0.13 \text{HCHO} + 1.87 \text{CO}$	17
16	$\text{CH}_3\text{COCHO} + h\nu \rightarrow \text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{HO}_2 + \text{CO}$	19
17	$\text{HCOCH=CHCHO} + h\nu \rightarrow 0.98 \text{HO}_2 + \text{H}(\text{CO})\text{CH=CHCO}_3 + 0.02 \text{CH}_3\text{CO}_3$	20
Fortsetzung auf der nächsten Seite		

Tabelle C.2: *Fortsetzung*

	Reaktion	MICTM
18	$\text{CH}_3\text{O}_2\text{H} + h\nu \rightarrow \text{HCHO} + \text{HO}_2 + \text{HO}$	13
19	$\text{CH}_3\text{COO}_2\text{H} + h\nu \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2 + \text{CO}_2 + \text{HO}$	15
20	$\text{CH}_3\text{ONO}_2 + h\nu \rightarrow 0.2 \text{CH}_3\text{CHO} + 0.8 \text{CH}_3\text{COCH}_3 + \text{HO}_2 + \text{NO}_2$	21
21	$\text{HCOCHO}_2 + h\nu \rightarrow 0.45 \text{HCHO} + 1.55 \text{CO} + 0.8 \text{HO}_2$	18
22	$\text{Cl}_2 + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{Cl}$	-1
23	$\text{ClNO} + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{NO}$	-1
24	$\text{ClNO}_2 + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{NO}_2$	-1
25	$\text{ClO} + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{O}$	-1
26	$\text{ClONO}_2 + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{NO}_3$	-1
27	$\text{HOCl} + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{OH}$	-1
28	$\text{OCIO} + h\nu \rightarrow \text{ClO} + \text{O}$	-1
29	$\text{Cl}_2\text{O}_3 + h\nu \rightarrow \text{ClO} + \text{OCIO}$	-1
30	$\text{BrO} + h\nu \rightarrow \text{Br} + \text{O}$	-1
31	$\text{BrONO}_2 + h\nu \rightarrow \text{Br} + \text{NO}_3$	-1
32	$\text{HOBr} + h\nu \rightarrow \text{Br} + \text{OH}$	-1
33	$\text{Br}_2\text{O} + h\nu \rightarrow \text{Br} + \text{BrO}$	-1
34	$\text{Br}_2 + h\nu \rightarrow \text{Br} + \text{Br}$	-1
35	$\text{BrCl} + h\nu \rightarrow \text{Br} + \text{Cl}$	-1
36	$\text{BrNO}_2 + h\nu \rightarrow \text{Br} + \text{NO}_2$	-1

Die mit -1 gekennzeichneten Reaktionen werden in MICTM nicht benutzt.

Literaturverzeichnis

- Atkinson, R., 2000, Atmospheric chemistry of VOC and NO_x, *Atmos. Env.*, **34**, 2063-2101
- Aubrun, S., R. Koppmann, B. Leidl, M. Möllmann-Coers und A. Schaub, 2005, Physical modelling of a complex forest area in a wind tunnel – comparison with field data, *Agric. For. Meteorol.*, **129**, 121-135
- Bittner, M., M. Dameris, H. Elbern, F. Fiedler, H. Herrmann und R. Koppmann, 2005, Matters of AFO 2000, In: Results of the German Atmospheric Research Programme - AFO 2000, R. Winkler (Ed), Federal Ministry of Education and Research (BMBF), Publications and Website Division, Berlin, 5-8
- Bluhm, H., 1997, OH-Konzentrationen während der POPCORN-Kampagne: Sensitivitätsuntersuchungen zum Einfluß von Geschwindigkeitskonstanten, Quellen und Senken, Universität zu Köln, 112 Seiten
- Chaparro, G., ECHO-Workshop, München, 22.11.-24.11.2004
- Dorn, H.-P., T. Brauers, R. Häseler, F. J. Johnen, M. Karl, E. Schlosser, A. Wahner, M. Memmesheimer, H. J. Jakobs, E. Friese, H. Feldmann, C. Kessler, G. Piekorz, A. Ebel, M. J. Kerschgens, J. Zimmermann und M. Klein, 2005, An integrated data archive of atmospheric chemical standard scenarios for the evaluation of chemistry-transport-models - IDEC, In: Results of the German Atmospheric Research Programme - AFO 2000, R. Winkler (Ed), Federal Ministry of Education and Research (BMBF), Publications and Website Division, Berlin, 44-47

- Finnigan, J., 2000, Turbulence in plant canopies, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **32**, 519-571
- Forkel, R., B. Bonn, R. von Kuhlmann, E. Haas, H. Geiger, I. Barnes und U. Pöschl, 2005, Validation of chemical mechanisms for the description of isoprene and α -pinene degradation within 3-dimensional chemistry transport models (ValChem), In: Results of the German Atmospheric Research Programme - AFO 2000, R. Winkler (Ed), Federal Ministry of Education and Research (BMBF), Publications and Website Division, Berlin, 40-43
- Geiger, H., I. Barnes, I. Bejan, T. Benter und M. Spittler, 2003, The tropospheric degradation of isoprene: an updated module for the regional atmospheric chemistry mechanism (RACM), *Atm. Env.*, **37**, 1503-1519
- Geron, C. D., A. B. Guenther und T. E. Pierce, 1994, An improved model for estimating emissions of volatile organic compounds from forests in the eastern United States, *J. Geophys. Res.*, **99** (D6), 12773-12791
- Glasow R. von und A. Bott, 1998, Interaction of radiation fog with tall vegetation, *Atm. Environment*, **33**, 1333-1346
- Grawe, D., 2006, Verknüpfung von Modellen und Daten für die Konzentrationsvorhersage, Dissertation (in Vorbereitung), Department für Geowissenschaften, Universität Hamburg
- Groß, G., 1987, Numerische Simulation von Luftströmungen in und über Pflanzenbeständen, Habilitationsschrift, TU Darmstadt
- Groß, G., 1993, Numerical simulation of canopy flows, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 167 Seiten
- Guenther, A. B., R. K. Monson und R. Fall, 1991, Isoprene and monoterpene emission rate variability: Observations with eucalyptus and emission rate algorithm development, *J. Geophys. Res.*, **96**, 10799-10808
- Guenther, A. B., P. R. Zimmerman, P. C. Harley, R. Monson und R. Fall, 1993, Isoprene and monoterpene emission rate variability: Model evaluations and sensitivity analyses, *J. Geophys. Res.*, **98** (D7), 12609-12617

- Guenther, A. B., C. N. Hewitt, D. Erickson, R. Fall, C. Geron, T. Graedel, P. Harley, L. Klinger, M. Lerdau, W. A. McKay, T. Pierce, B. Scholes, R. Steinbrecher, R. Tallamraju, J. Taylor und P. Zimmerman, 1995, A global model of natural volatile organic compound emissions, *J. Geophys. Res.*, **100** (D5), 8873-8892
- Huber, L., P. Laville und J. D. Fuentes, 1999, Uncertainties in isoprene emissions from a mixed deciduous forest estimated using a canopy microclimate model, *J. Appl. Meteorol.*, **38**, 899-912
- Impens, I. und R. Lemeur, 1969, Extinction of net radiation in different crop canopies, *Arch. Meteorol. Geophys. Bioklimatol.*, **B17**, 403-412
- Kato, M. und B. M. Launder, 1993, The modeling of turbulent flow around stationary and vibrating square cylinders, 9th Symposium on turbulent shear flows, Kyoto, 10.4.1-10.4.6.
- Koppmann, R., J. Kesselmeier, F. X. Meixner, M. Schatzmann, B. Leitz, T. Hoffmann, R. Dlugi, M. Zelger, J. Kleffmann, A. Neftel, J. Dommen, C. Thomas, T. Trautmann und B. Neininger, 2005, Emission and chemical transformation of biogenic volatile organic compounds (ECHO) - Investigations in and above a mixed forest stand, In: Results of the German Atmospheric Research Programme - AFO 2000, R. Winkler (Ed), Federal Ministry of Education and Research (BMBF), Publications and Website Division, Berlin, 29-39
- Lamb, B., T. Pierce, D. Baldocchi, E. Allwine, S. Dilts, H. Westberg, C. Geron, A. Guenther, L. Klinger, P. Harley und P. Zimmerman, 1996, Evaluation of forest canopy models for estimating isoprene emissions, *J. Geophys. Res.*, **101** (D17), 22787-22797
- Lenz, C.-F., F. Müller und K. H. Schlünzen, 2000, The sensitivity of mesoscale chemistry transport model results to boundary values, *Env. Monitoring and Assessment*, **65**, 287-298
- Levis, S., C. Wiedinmyer, G. B. Bonan und A. Guenther, 2003, Simulating biogenic volatile organic compound emissions in the Community Climate System Model, *J. Geophys. Res.*, **108** (D21), 4659, doi:10.1029/2002JD003203

- López, S. D., 2002, Numerische Modellierung turbulenter Umströmungen von Gebäuden, *Ber. Polarforsch. Meeresforsch.*, **418**, ISSN 1618-3193
- López, S. D., C. Lüpkes und K. H. Schlünzen, 2005, The effect of different $k-\epsilon$ closures on the results of a micro-scale model for the flow in the obstacle layer, *Meteorol. Z.*, **14**, 839-848
- Makar, P. A., J. D. Fuentes, D. Wang, R. M. Staebler und H. A. Wiebe, 1999, Chemical processing of biogenic hydrocarbons within and above a temperate deciduous forest, *J. Geophys. Res.*, **104** (D3), 3581-3603
- Makar, P. A., M. D. Moran, M. T. Scholtz und A. Taylor, 2003, Speciation of volatile organic compound emissions for regional air quality modeling of particulate matter and ozone, *J. Geophys. Res.*, **108** (D2), 4041, doi:10.1029/2001JD000797
- Manfrahs, C., 2000, Einsatz eines diagnostischen Strömungsmodelles zur Beschreibung der Strömung im Wald, *Berichte des Forschungszentrums Jülich*, **3807**, ISSN 0944-2952
- McKeen, S. A., E.-Y. Hsie, M. Trainer, R. Tallamraju und S. C. Liu, A regional model study of the ozone budget in the eastern United States, *J. Geophys. Res.*, **96** (D6), 10809-10845
- Meyers, T. und K. T. Paw U, 1986, Testing of a higher-order closure model for modeling airflow within and above plant canopies, *Boundary-Layer Meteorol.*, **37**, 297-311
- Middleton, P., W. R. Stockwell und W. P. L. Carter, 1990, Aggregation and analysis of volatile organic compound emissions for regional modeling, *Atm. Environment*, **24A**, 1107-1133
- Müller, F., K. H. Schlünzen und M. Schatzmann, 2000, Test of two numerical solvers for chemical reaction mechanisms in 3D-air quality model, *Env. Modelling And Software*, **15**, 639-646
- Nützmann, E., 1999, Modellierung des turbulenten Austausches zwischen der Prandtl-Schicht und der Waldatmosphäre, Dissertation, Georg-August-Universität Göttingen

- Panskus, H., 2000, Konzept zur Evaluation hindernisauflösender mikroskaliger Modelle und seine Anwendung auf das Modell MITRAS, *Fortschr.-Ber. VDI*, **7**, **389**, Düsseldorf: VDI Verlag
- Pereira, A. R. und R. H. Shaw, 1980, A numerical experiment on the mean wind structure inside canopies of vegetation, *Agric. Meteorol.*, **22**, 303-318
- Pierce, T. und P. Waldruff, 1991, PC-BEIS: A personal computer version of the biogenic emissions inventory system, *J. Air Waste Manage. Assoc.*, **41**, 937-941
- Pierce T., C. Geron, L. Bender, R. Dennis, G. Tonnesen, A. Guenther, 1998, Influence of increased isoprene emissions of regional ozone modeling, *J. Geophys. Res.*, **103** (D19), 25611-25629
- Pinard, J. D. J.-P. und J. D. Wilson, 2001, First and second-order closure models for wind in a plant canopy, *J. Appl. Meteorol.*, **40**, 1762-1768
- Plaß-Dülmer, C., T. Brauers und J. Rudolph, 1998, POPCORN: A field study of photochemistry in north-eastern Germany, *J. Atmos. Chem.*, **31**, 5-31
- Raupach, M. R., 1989, A practical Lagrangian method for relating scalar concentrations to source distributions in vegetation canopies, *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, **115**, 609-632
- Raupach, M. R., 1989, Applying Lagrangian fluid mechanics to infer scalar source distributions from concentration profiles in plant canopies, *Agric. For. Meteorol.*, **47**, 85-108
- Raupach, M. R. und A. S. Thom, 1981, Turbulence in and above plant canopies, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **13**, 97-129
- Richter, K., R. Knoche, T. Schoenemeyer, G. Smiatek und R. Steinbrecher, 1998, Abschätzung der biogenen Kohlenwasserstoffemissionen in den neuen Bundesländern, *Zeitschrift für Umweltchemie und Ökotoxikologie*, **10**, 319-324
- Ruggaber, A., R. Dlugi und T. Nakajima, 1994, Modelling radiation quantities and photolysis frequencies in the troposphere, *J. Atm. Chem.*, **18**, 171-210
- Schatzmann, M., W. Bächlin, S. Emeis, J. Kühlwein, B. Leitl, W. J. Müller, K. Schäfer und H. Schlünzen, 2005, Development and validation of tools for

- the implementation of European air quality policy in Germany (Project VALLIUM), In: Results of the German Atmospheric Research Programme - AFO 2000, R. Winkler (Ed), Federal Ministry of Education and Research (BMBF), Publications and Website Division, Berlin, 57-62
- Schlünzen, K. H., 1990, Numerical studies on the inland penetration of sea breeze fronts at a coastline with tidally flooded mudflats, *Beitr. Phys. Atmosph.*, **63**, 243-256
- Schlünzen, K. H., D. Hinneburg, O. Knoth, M. Lambrecht, B. Leitl, S. López, C. Lüpkes, H. Panskus, E. Renner, M. Schatzmann, T. Schoenemeyer, S. Trepte und R. Wolke, 2003, Flow and transport in the obstacle layer: First results of the micro-scale model MITRAS, *J. Atm. Chem.*, **44**, 113-130
- Shaw, R. H., 1977, Secondary wind speed maxima inside plant canopies, *J. Appl. Meteorol.*, **16**, 514-521
- Simpson, D., A. Guenther, C. N. Hewitt und R. Steinbrecher, 1995, Biogenic emissions in Europe, 1, Estimates and uncertainties, *J. Geophys. Res.*, **100** (D11), 22875-22890
- Simspon, D., W. Winiwarter, G. Börjesson, S. Cinderby, A. Ferreira, A. Guenther, C. H. Hewitt, R. Janson, M. A. K. Khalil, S. Owen, T. E. Pierce, H. Puxbaum, M. Shearer, U. Skiba, R. Steinbrecher, L. Tarrasón und M. G. Öquist, 1999, Inventorying emissions from nature in Europe, *J. Geophys. Res.*, **104** (D7), 8113-8152
- Sprengnether, M., K. L. Demerjian, N. M. Donahue und J. G. Anderson, 2002, Product analysis of the OH oxidation of isoprene and 1,3-butadiene in the presence of NO, *J. Geophys. Res.*, **107** (D15), 4268, doi:10.1029/2001JD000716
- Steinbrecher, R., et al., 2005, Regional biogenic emissions of reactive volatile organic compounds (BVOC) from forests: Process studies, modelling and validation experiments (BEWA2000), In: Results of the German Atmospheric Research Programme - AFO 2000, R. Winkler (Ed), Federal Ministry of Education and Research (BMBF), Publications and Website Division, Berlin, 14-28
- Stewart, H. E., C. N. Hewitt, R. G. H. Bunce, R. Steinbrecher, G. Smiatek und T. Schoenemeyer, 2003, A highly spatially and temporally resolved in-

- ventory for biogenic isoprene and monoterpene emissions: Model description and application to Great Britain, *J. Geophys. Res.*, **108** (D20), 4644, doi:10.1029/2002JD002694
- Stick, C., S. Beilke, K. Uhse, A. Adolphsen, E. Hundhausen und M. Wallasch, 2000, Die lufthygienische Situation an der deutschen Nordseeküste im Hinblick auf SO₂ und NO₂, *Phys. Rehab. Kur Med.*, **10**, 176-183
- Stockwell, W. R., P. Middleton, J. S. Chang und X. Tang, 1990, The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling, *J. Geophys. Res.*, **95**, 16343-16367
- Stockwell, W. R., F. Kirchner und M. Kuhn, 1997, A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling, *J. Geophys. Res.*, **102** (D22), 25847-25879
- Stroud, C., P. Makar, T. Karl, A. Guenther, C. Geron, A. Turnipseed, E. Nemitz, B. Baker, M. Potosnak und J. D. Fuentes, 2005, Role of canopy-scale photochemistry in modifying biogenic-atmosphere exchange of reactive terpene species: Results from CELTIC field study, *J. Geophys. Res.*, **110**, D17303, doi:10.1029/2005JD005775
- Teuchert, D., 2002, Ein bodennahes Strömungsmodell für den Waldbestand – Entwicklung und Anpassung eines diagnostischen Strömungsmodells für den operationellen Betrieb, *Berichte des Forschungszentrums Jülich*, **3964**, ISSN 0944-2952
- Uchijima, Z., 1961, On characteristics of heat balance of water layer under paddy plant cover, *Bull. Nat. Inst. Agric. Sci.*, Series A, **8**, 243-263
- Vogel, B., F. Fiedler und H. Vogel, 1995, Influence of topography and biogenic volatile organic compounds emission in the state of Baden-Württemberg on ozone concentrations during episodes of high air temperatures, *J. Geophys. Res.*, **100** (D11), 22907-22928
- Wilson, J. D., 1988, A second-order closure model for flow through vegetation, *Boundary-Layer Meteorol.*, **42**, 371-392
- Wilson, N. R. und R. H. Shaw, 1977, A higher order closure model for canopy flow, *J. Appl. Meteorol.*, **16**, 1197-1205

- Winkler, R., 2005, General aspects and the development of the German atmospheric research programme AFO 2000, In: Results of the German Atmospheric Research Programme - AFO 2000, R. Winkler (Ed), Federal Ministry of Education and Research (BMBF), Publications and Website Division, Berlin, 2-4
- Wu, J., Y. Liu und D. E. Jelinski, Effects of leaf area profiles and canopy stratification on simulated energy fluxes: the problem of vertical spatial scale, *Ecol. Model.*, **134**, 283-297
- Yamada, T., 1982, A numerical model study of turbulent airflow in and above a forest canopy, *J. Meteor. Soc. Jap.*, **60**, 439-454
- Zeng, P. und H. Takahashi, 2000, A first-order closure model for the wind flow within and above vegetation canopies, *Agric. For. Meteorol.*, **103**, 301-313
- Zimmermann, J. und D. Poppe, 1996, A supplement for the RADM2 chemical mechanism: the photooxidation of isoprene, *Atm. Env.*, **30**, 1255-1269

Berichte aus dem Zentrum für Meeres- und Klimaforschung - Reihe A

**Meteorologisches Institut
Bundesstr. 55
20146 Hamburg**

<http://www.mi.uni-hamburg.de>

1. Schlüssel, P. ; Taurat, D. (1992): The benefits from a synergy of passive satellite measurements with active LIDAR soundings.
2. Brinkop, S. (1992): Parameterisierung von Grenzschichtwolken für Zirkulationsmodelle.
3. Brümmer, B. [Hrsg.] (1992): ARKTIS 1991- Report on the field phase with examples of measurements.
4. Schulz, J. (1993): Fernerkundung des latenten Wärmeflusses an der Meeresoberfläche.
5. Nodorp, D. (1993): Ein Zirkulationsmodell mit transientem Antrieb.
6. Marotzke, K. (1993): Physikalische Modellierung der Ausbreitung störfallartig freigesetzter schwerer Gase zur Abschätzung von Gefahrenbereichen im bebauten Gelände.
7. Martin, T. (1993): Multispektrale Meereisklassifikation mit passiven Satellitenradiometern.
8. Lunkeit, F. (1993): Simulation der interannualen Variabilität mit einem globalen gekoppelten Atmosphäre-Ozean Modell.
9. Kollewe, M. (1993): Fernerkundung von Wolken mit der Sauerstoff Absorptionsbande im nahen Infrarot.
10. Standfuss, C.; Hollweg, H.-D.; Graßl, H. (1993): The impact of a Radiation Budget Scanner aboard Meteosat second generation on the accuracy of regional budget parameters.
11. Brümmer, B. [Hrsg.] (1993): ARKTIS 1993- Report on the field phase with examples of measurements.
12. Richter, M.C. (1994): Niederschlagsmessung mit dem vertikal ausgerichteten FM-CW-Doppler-Radar-RASS-System - Validierung und Anwendung.
13. Festschrift zum 70. Geburtstag von Prof. Dr. G. Fischer (1994).
14. Khvorostyanov, V.I. (1994): Mesoscale processes of cloud formation, cloud radiation interaction, and their modelling with explicit cloud microphysics.
15. Wyputta, U. (1994): Untersuchungen zum Stofftransport in die Antarktis anhand von Messungen an der Georg-von-Neumayer-Station.
16. Müller, G. (1995): Mesoskalige Zellularkonvektion in Abhängigkeit von unterschiedlichen physikalischen Prozessen und synoptischen Randbedingungen - Numerische Simulationen.
17. Hollweg, H.-D. et al (1995): Interaction at mm and optical frequencies. Part I: Current problems in radiative transfer simulations.
18. Hollweg, H.-D. et al (1995): Interactions at mm and optical frequencies. Part II: Specific atmospheric absorption and emission features: Investigation and modelling.
19. Grötzner, A. (1995): Subskalige partielle Meereisbedeckung in einem globalen atmosphärischen Zirkulationsmodell.
20. Schlüssel, P. (1995): Passive Fernerkundung der unteren Atmosphäre und der Meeresoberfläche aus dem Weltraum.
21. Bartsch, B. (1996): Fernerkundung des Wasserdampfgehalts der Atmosphäre über Land aus rückgestreuter Sonnenstrahlung.

22. Taurat, D. (1996): Windfelder über See unter Verwendung von Satellitendaten und Druckanalysen.
23. Schlünzen, K.H. (1996): Validierung hochauflösender Regionalmodelle.
24. Donat, J. (1996): Windkanalexperimente zur Ausbreitung von Schwergasstrahlen.
25. Roth, B. (1996): Bildung von H₂SO₄-H₂O-Aerosol in einem vertikalen laminierten Strömungsreaktor.
26. Thiemann, S. (1996): Die vertikale Struktur der konvektiven Grenzschicht während arktischer Kaltluftausbrüche über See.
27. Standfuss, C. et al (1996): Earth Radiation Budget - General Purpose Data Base.
28. Niemeier, U. (1997): Chemische Umsetzungen in einem hochauflösenden mesoskaligen Modell.
29. Schneider, W. (1997): Die Nordostwasser Polynja: Entstehung und Hydrographie.
30. v. Salzen, K. (1997): Entwicklung und Anwendung eines Modells für die Dynamik und Zusammensetzung sekundären und marinen Aerosols.
31. Klugmann, D. (1998): Messung von Niederschlag und Vertikalwind in der unteren Atmosphäre mit Millimeterwellen-Doppler-RADAR-Profilern.
32. Brümmer, B. and S. Thiemann (1999): Field Campaign ACSYS 1998: Aircraft measurements in Arctic on-ice air flows.
33. Brümmer, B. (2000): Field experiment FRAMZY 1999 - Cyclones over the Fram Strait and their impact on sea ice. Field report with examples of measurements.
34. Ganske, A., G. Peters und B. Fischer (2002): Bestimmung meteorologischer Ausbreitungsparameter mit SODAR.
35. Dierer, S. (2002): Untersuchung von groß- und mesoskaligen Einflüssen auf die Entwicklung polarer Mesozyklonen mit Hilfe des Modells METRAS.
36. Schimmel, F. (2002): Development and test of an atmospheric flow model employing adaptive numerical methods.
37. Brümmer, B. et al (2005): FRAMZY 2002 – Second field experiment on Fram Strait cyclones and their impact on sea ice. Field report with measurement examples.
38. Meyer, E. M. I. (2006): Die Bedeutung atmosphärischer Prozesse für den Stickstoffeintrag in Küstengewässer.
39. Schlüter, I. (2006): Simulation des Transports biogener Emissionen in und über einem Waldbestand mit einem mikroskaligen Modellsystem.