

Grobstruktursimulationen zur
Untersuchung des Einflusses von
Landoberflächenheterogenitäten auf die
Struktur der konvektiven Grenzschicht
sowie Analyse der Repräsentativität
von Turbulenzmessungen

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

Doktor der Naturwissenschaften
Dr. rer. nat.
genehmigte Dissertation
von

Dipl.-Met. Matthias Sühling
geboren am 2. Mai 1984, in Wernigerode

Referent: Prof. Dr. Siegfried Raasch
Korreferent: Prof. Dr. Dieter Etling
Tag der Promotion: 9. Juli 2014

Kurzzusammenfassung

Die atmosphärische Grenzschicht ist das Bindeglied zwischen der Erdoberfläche und der freien Atmosphäre. Der turbulente vertikale Austausch von Impuls sowie von fühlbarer und latenter Wärme in der Grenzschicht wird durch Wechselwirkung mit der Erdoberfläche und durch Entrainment, dem turbulenten Einmischen von Luft aus der freien Atmosphäre in die Grenzschicht, beeinflusst. Numerische Wettervorhersagemodelle können den turbulenten Austausch nicht auflösen, sodass dieser über Parametrisierungen beschrieben werden muss. Grenzschichtparametrisierungen sind jedoch nur über homogenen Oberflächen validiert. Heterogene Landoberflächen modifizieren den turbulenten Austausch in der Grenzschicht gegenüber homogenen Oberflächen. Gegenwärtig sind jedoch noch nicht alle Aspekte des Heterogenitätseinflusses auf die Grenzschicht verstanden und in Grenzschichtparametrisierungen berücksichtigt. Damit Parametrisierungen weiterentwickelt werden können, werden Messungen des turbulenten Austauschs über heterogenen Landoberflächen sowie ein verbessertes Verständnis des Heterogenitätseinflusses auf die Grenzschichtturbulenz benötigt. In der vorliegenden Arbeit wurden turbulenzauflösende Grobstruktursimulationen (LES) durchgeführt, mit dem Ziel den Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf die Grenzschichtturbulenz sowie auf das Entrainment zu quantifizieren. Zudem wurde die Repräsentativität von Turbulenzmessungen bewertet. Weiterhin wurden Unsicherheiten bei der Bestimmung des Footprints einer Messung, dem Zusammenhang zwischen dem gemessenen Signal und dessen räumlich verteilten Quellen, quantifiziert.

Basierend auf Messdaten des LITFASS-2003 Experiments wurde mittels LES untersucht, bis in welche Höhe die Signale der Oberflächenheterogenität in der Grenzschicht reichen. Dabei konnte bis an den Oberrand der Grenzschicht eine Korrelation zwischen den turbulenten Wärmeflüssen und den heterogenen bodennahen Wärmeflüssen nachgewiesen werden. Um diesen Heterogenitätseinfluss auch von experimenteller Seite aus nachweisen zu können, wurden die dafür notwendigen messstrategischen Anforderungen untersucht. Dafür wurden in der LES virtuelle Flugmessungen in Anlehnung an die während LITFASS-2003 durchgeführten Flugmessungen vorgenommen. Es hat sich herausgestellt, dass Einzelflugmessungen über verschiedenen Oberflächentypen nicht geeignet sind, um Heterogenitätssignale in der Grenzschicht zu erfassen. Da die Pfadlängen der Flugmessungen durch die Heterogenitätsskala beschränkt sind, können die größten, energietragenden Turbulenzskalen nicht ausreichend erfasst werden, wodurch eine große Unsicherheit bei der Messung besteht. Um diese Unsicherheit ausreichend zu reduzieren, sind mehrere statistisch unabhängige Einzelflugmessungen entlang eines Flugpfads notwendig.

Der Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf das Entrainment wurde anhand von idealisierten eindimensionalen Heterogenitäten untersucht. Es wurde gezeigt, dass ein heterogener Wärmeeintrag an der Erdoberfläche das Entrainment beeinflussen kann, in Abhängigkeit von der Amplitude und der Skala der Heterogenität. Im Vergleich zu einem homogenen Referenzfall wurde bei kleinen Amplituden ein verringertes Entrainment und bei großen Amplituden ein verstärktes Entrainment festgestellt. Der größte Einfluss wurde bei Heterogenitätsskalen in der Größenordnung der Grenzschichthöhe beobachtet. Mithilfe einer neu entwickelten Methode zur Bestimmung der lokalen Entrainmentrate konnten die physikalischen Ursachen dieses Heterogenitätseinflusses teilweise identifiziert werden.

Mittels eines in die LES eingebetteten Lagrangeschen Partikelmodells wurden erstmalig realistische Footprints über realen Oberflächenheterogenitäten für höher gelegene Messpositionen bestimmt und mit Footprints aus einem konventionellen Lagrangeschen stochastischen Modell verglichen. Dabei wurden in dem konventionellen Modell Unsicherheiten bei der Footprintbestimmung aufgedeckt. Insbesondere bei schwachem Wind und konvektiven Bedingungen überschätzt das konventionelle Modell die Größe der Footprints und weist kleinere Footprintmaxima auf, die stromaufwärts zu weit von der Sensorposition entfernt liegen. Bei höheren Windgeschwindigkeiten zeigten die Footprints aus der LES und aus dem konventionellen Modell eine gute Übereinstimmung.

Schlagworte: Atmosphärische Grenzschicht, Grobstruktursimulation, Oberflächenheterogenität

Abstract

The atmospheric boundary layer connects the Earth's surface and the free atmosphere. The turbulent vertical exchange of momentum as well as of sensible and latent heat in the boundary layer is affected by land-atmosphere interactions and by entrainment, which describes the turbulent mixing of air from the free atmosphere into the boundary layer. Numerical weather prediction models cannot resolve the turbulent transport, hence turbulence needs to be parametrized. However, boundary-layer parametrizations are validated only for turbulence over homogeneous surfaces. Heterogeneous land surfaces can modify the turbulent transport within the boundary layer. Currently, not all aspects of surface-heterogeneity effects on boundary-layer turbulence are sufficiently understood and considered within boundary-layer parametrizations. In order to improve parametrizations, turbulence measurements over heterogeneous surfaces, as well as an improved understanding of how surface heterogeneity affects boundary-layer turbulence, are required. In the present thesis turbulence-resolving large-eddy simulations (LES) were performed, in order to improve the understanding of surface-heterogeneity effects on boundary-layer turbulence and entrainment. Furthermore, the representativeness of turbulence measurements was evaluated. Moreover, uncertainties in the estimation of the footprint of a measurement, the link between the measured signal and the spatially distributed source areas, were quantified.

Based on data from the LITFASS-2003 experiment, LES were used to investigate up to which height the boundary layer is affected by surface heterogeneity. A correlation between the turbulent heat fluxes and the heterogeneous surface heat fluxes could be observed up to the top of the boundary layer. Moreover, the requirements for providing observational evidence of heterogeneity-induced effects within the boundary layer were identified. Therefore, virtual measurements were conducted within the LES, in accordance to flight measurements performed during LITFASS-2003. It was shown that single-leg flight measurements over different surface types are not capable of capturing heterogeneity-induced signals. This can be attributed to limited leg lengths, resulting in a large uncertainty of the measured fluxes due to an insufficient sampling of the largest energy-containing turbulence scales. In order to reduce this uncertainty, several statistically independent single-leg flight measurements are necessary above each surface type.

The effect of surface heterogeneity on entrainment was studied by idealized one-dimensional heterogeneities. It was shown that entrainment can be significantly affected by heterogeneous surface heating, depending on amplitude and scale of the heterogeneity. Compared to a homogeneous reference simulation, entrainment was decreased for small heat-flux amplitudes, while it was increased for large amplitudes. The largest impact could be observed for heterogeneity scales in the order of the boundary-layer height. A new method for the determination of local entrainment rates was developed. Using this method, the underlying physics that modify entrainment over heterogeneous surfaces were partly identified.

By using a Lagrangian particle model embedded into LES, realistic footprints for elevated turbulence measurements above heterogeneous terrain were determined for the first time. The LES footprints were compared against footprints from a conventional Lagrangian stochastic footprint model. Thereby, uncertainties were revealed in the footprint prediction with the conventional model. Particularly for weak wind and strong convective conditions, the conventional model overestimates the size of the footprint area. Moreover, the footprints from the conventional model peak farther upstream and exhibit too small maximum values compared to the footprints from the LES. For stronger winds, the conventional-model footprints were in good agreement with the LES footprints.

Keywords: Atmospheric boundary layer, Large-eddy simulation, Surface heterogeneity

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	V
1 Einleitung	1
1.1 Die atmosphärische Grenzschicht	3
1.2 Das LITFASS-2003 Experiment	4
1.3 Stand der Forschung	5
1.3.1 Heterogenitätssignale in der Grenzschicht	5
1.3.2 Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf das Entrainment	7
1.3.3 Footprintbestimmung in der atmosphärischen Grenzschicht	10
1.4 Zielsetzungen und Fragestellungen der Arbeit	13
2 Methodik	16
2.1 Beschreibung turbulenter Strömungen	16
2.2 Das LES Modell PALM	17
2.2.1 Modellgleichungen	17
2.2.2 Parametrisierung subskaliger Flüsse	18
2.2.3 Räumliche und zeitliche Diskretisierung	19
2.2.4 Sicherstellung der Inkompressibilität	20
2.2.5 Randbedingungen	21
2.2.6 Initialisierung	24
2.3 Das in PALM eingebettete Lagrangesche Partikelmodell	24
2.4 Lagrangesches stochastisches Footprintmodell	26
2.5 Analysemethoden	26
2.5.1 Untersuchung des Heterogenitätseinflusses auf die Grenzschicht	27
2.5.2 Virtuelle Flugmessungen	27
2.5.3 Bestimmung der lokalen Entrainmentrate	28
2.5.4 Footprintbestimmung	29
3 Wissenschaftliche Artikel	31
3.1 Artikel A: Heterogeneity-induced heat-flux patterns in the convective boundary layer: can they be detected from observations and is there a blending height? – A large-eddy simulation study for the LITFASS-2003 experiment	32
3.1.1 Beitrag des Autors	32
3.1.2 Publizierter Artikel	32
3.2 Artikel B: On the effect of surface heat-flux heterogeneities on the mixed-layer-top entrainment	56
3.2.1 Beitrag des Autors	56
3.2.2 Publizierter Artikel	56
3.3 Artikel C: Footprint estimation for elevated turbulence measurements – a comparison between large-eddy simulation and a Lagrangian stochastic backward model	83
3.3.1 Beitrag des Autors	83
3.3.2 Eingereichter Artikel	83

4 Zusammenfassung und Ausblick	108
Danksagung	115
Literaturverzeichnis	116
Lebenslauf	124
Veröffentlichungen	125

Abkürzungsverzeichnis

CFL	Courant-Friedrichs-Lewy (Zeitschrittkriterium)
DFG	Deutschen Forschungsgemeinschaft
DNS	Direkte Numerische Simulation
IHOP	International H ₂ O Project
LES	Large-Eddy Simulation
LITFASS	Lindenberg Inhomogeneous Terrain - Fluxes between Atmosphere and Surface: a long-term Study
LPDM-B	Backward Lagrangian Particle Dispersion Model
LS	Lagrangesches stochastisches Footprintmodell
MOST	Monin-Obukhov similarity theory (Ähnlichkeitstheory)
NOPEX	a NOrthern hemisphere climate Processes land surface EXperiment
PALM	Parallelisiertes Large-Eddy Simulation Modell
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
TKE	Turbulente kinetische Energie

1 Einleitung

Die atmosphärische Grenzschicht ist der Teil der Atmosphäre, der durch den direkten Austausch von Energie, Feuchte und Impuls mit der Erdoberfläche gekennzeichnet ist. Die Grenzschicht nimmt eine zentrale Rolle im Energie- und Wasserkreislauf der Atmosphäre ein, da sie das Bindeglied zwischen der Erdoberfläche und der darüber liegenden freien Atmosphäre ist. Ein grundlegendes Verständnis der in der Grenzschicht ablaufenden turbulenten Austauschprozesse ist daher essentiell für die Beschreibung des Wetter- und Klimasystems der Erde.

In numerischen Wettervorhersagemodellen mit horizontalen Gitterweiten im Bereich von 1–10 km werden turbulente Austauschprozesse nicht aufgelöst, sodass diese durch Parametrisierungen beschrieben werden müssen. Grenzschichtparametrisierungen wurden ursprünglich aus Messungen über homogenen Oberflächen entwickelt. Jedoch sind Landoberflächen häufig sehr heterogen beschaffen und können den turbulenten Austausch in der Grenzschicht gegenüber homogenen Oberflächen modifizieren. Es sind jedoch noch nicht alle Aspekte des Heterogenitätseinflusses auf die Grenzschicht verstanden, sodass dieser Einfluss in Grenzschichtparametrisierungen gegenwärtig nicht berücksichtigt werden kann.

Der Zustand der Grenzschicht hängt sowohl von den synoptischen Bedingungen als auch vom Austausch von Impuls sowie von fühlbarer und latenter Wärme zwischen der Erdoberfläche und der darüber liegenden Luftschicht ab, welcher durch die bodennahen Flüsse der entsprechenden Größen beschrieben wird. In Wettervorhersagemodellen gehen bodennahe Flüsse als untere Randbedingung in die zu lösenden Modellgleichungen ein. Die bodennahen Flüsse werden dafür mithilfe analytischer Beziehungen aus den vertikalen Gradienten der jeweiligen Größe knapp oberhalb der Erdoberfläche bestimmt (engl.: *flux-gradient relationship*). Ursprünglich wurden diese analytischen Beziehungen aus Messungen über homogenem Untergrund abgeleitet (z.B. Businger et al., 1971; Dyer, 1974; Högström, 1988). Über heterogenen Landoberflächen können die bodennahen Flüsse und vertikalen Gradienten in der Atmosphäre jedoch räumlich sehr unterschiedlich sein. Eine typische Gitterbox in Wettervorhersagemodellen umfasst häufig eine Vielzahl verschiedener Oberflächentypen mit unterschiedlichen mechanischen und thermischen Eigenschaften, sodass die für die Gitterbox repräsentativen flächengemittelten bodennahen Flüsse durch Aggregationsmethoden bestimmt werden müssen (Ament und Simmer, 2006). Dafür werden zunächst die jeweiligen bodennahen Flüsse für jeden einzelnen in der Gitterbox vorkommenden Oberflächentyp bestimmt und anschließend über alle Oberflächentypen gewichtet gemittelt. Bei der Aggregation werden jedoch interne Grenzschichten (z.B. Garrat, 1990) oder Sekundärzirkulationen (z.B. Shen und Leclerc, 1995; Raasch und Harbusch, 2001; Patton et al., 2005) nicht berücksichtigt, welche über heterogenen Oberflächen entstehen und den Austausch zwischen der Erdoberfläche und der Atmosphäre signifikant beeinflussen können (Brunsell et al., 2011). Dies kann zu Fehlern bei der Bestimmung der bodennahen Flüsse führen und somit zu Unsicherheiten in der Grenzschichtentwicklung sowie in der gesamten Vorhersage (Manrique-Sunen et al., 2013).

Turbulenzmessungen bieten die Möglichkeit, Parametrisierungen zu validieren und entsprechend weiterzuentwickeln (Beyrich et al., 2006). Bei der Messung turbulenter Flüsse

über einer heterogenen Oberfläche stammt das in einer typischen Höhe von mehreren Dekametern gemessene Signal gewöhnlich von verschiedenen Oberflächentypen. Um die Messung entsprechend interpretieren zu können, ist es notwendig die relativen Anteile der unterschiedlichen Oberflächentypen am gemessenen Signal, den Footprint einer Messung, zu kennen. Dieser Footprint kann jedoch wiederum durch Heterogenitätseffekte wie interne Grenzschichten oder Sekundärzirkulationen modifiziert sein (Vesala et al., 2008). Ein generelles Verständnis des Heterogenitätseinflusses ist daher essentiell für die Durchführung und Interpretation von Turbulenzmessungen.

Des Weiteren sind Turbulenzmessungen notwendig um den Heterogenitätseinfluss in der Grenzschicht quantifizieren zu können, z.B. ab welcher Höhe die Signale der Oberflächenheterogenität verschwinden und der vertikale Austausch in der Grenzschicht nicht mehr von der heterogenen Oberfläche abhängt, welche im Weiteren als Mischungshöhe (engl.: *blending height*) bezeichnet wird. Turbulenzmessungen sind jedoch, abhängig von der verwendeten Messmethodik, nur Punkt oder Linienmessungen. Bisher ist nicht ausreichend geklärt, inwieweit mit Turbulenzmessungen der Heterogenitätseinfluss in der Grenzschicht erfasst werden kann.

Der turbulente Austausch von Impuls sowie fühlbarer und latenter Wärme zwischen der Grenzschicht und der freien Atmosphäre stellt einen weiteren Faktor dar, der die Struktur der Grenzschicht beeinflusst (Conzemius und Fedorovich, 2006). So hat beispielsweise der Austausch latenter Wärme zwischen Grenzschicht und freier Atmosphäre einen Einfluss auf die Feuchte in der Grenzschicht, wodurch die Aufteilung der an der Erdoberfläche verfügbaren Strahlungsenergie auf die bodennahen Flüsse fühlbarer und latenter Wärme (engl.: *flux partitioning*) beeinflusst wird. Dies kann wiederum einen Einfluss auf die gesamte Grenzschicht haben (van Heerwaarden et al., 2009). Eine genaue Beschreibung des mittleren Austauschs zwischen Grenzschicht und freier Atmosphäre ist daher essentiell um die Grenzschichtentwicklung und deren Einfluss auf das Wettergeschehen entsprechend berücksichtigen zu können. In Wettervorhersagemodellen wird dieser mittlere Austausch anhand analytischer Beziehungen beschrieben. Dabei werden unter anderem die bodennahen Flüsse, der Turbulenzzustand innerhalb der Grenzschicht, der Zustand der freien Atmosphäre, sowie die vertikale Struktur der Inversionsschicht (z.B. van Zanten et al., 1999; Fedorovich et al., 2004) berücksichtigt. Die turbulenten Austauschprozesse am Oberrand der Grenzschicht sind jedoch nur schlecht verstanden (Angevine, 2008). Dazu zählt insbesondere der Einfluss von Schwerewellen, von Windscherung, und von einem heterogenen Wärmeintrag an der Erdoberfläche, sodass Parametrisierungen diese Effekte gegenwärtig nur sehr stark vereinfacht oder überhaupt nicht berücksichtigen.

In diesem Promotionsvorhaben wird das physikalische Verständnis erweitert, inwiefern heterogene Landoberflächen turbulente Austauschprozesse innerhalb der Grenzschicht, sowie zwischen Grenzschicht und freier Atmosphäre, beeinflussen. Des Weiteren wird die Repräsentativität von Turbulenzmessungen bewertet, um daraus verbesserte Strategien ableiten zu können, die es ermöglichen Heterogenitätseffekte in der Grenzschicht messtechnisch besser erfassen zu können. Weiterhin werden Modelle zur Bestimmung des Footprints einer Turbulenzmessung evaluiert und Unsicherheiten bei der Footprintbestimmung quantifiziert. Dafür werden turbulenzauflösende Grobstruktursimulationen (engl.: *large-eddy simulation*, LES) durchgeführt, in denen die heterogenen mechanischen und thermischen Eigenschaften der Erdoberfläche explizit vorgegeben werden. Die hohe zeitliche und räumliche Auflösung der LES ermöglicht es, den Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf die Struktur der Grenzschicht detailliert zu untersuchen, sowie virtuelle Turbulenzmessungen zur Bewertung von Messstrategien durchzuführen.

Abschnitt 1.1 gibt zunächst einen generellen Überblick zur atmosphärischen Grenzschicht. Eine kurze Beschreibung des LITFASS-2003 Experiments (Beyrich und Men-

gelkamp, 2006), welches unter anderem als Datengrundlage für diese Arbeit dient, ist in Abschnitt 1.2 zu finden. Abschnitt 1.3 gibt einen Überblick zum aktuellen Stand der Forschung. Detaillierte Fragestellungen und Zielsetzungen dieser Arbeit werden in Abschnitt 1.4 gegeben.

1.1 Die atmosphärische Grenzschicht

Die atmosphärische Grenzschicht lässt sich vertikal in unterschiedliche Schichten aufteilen. In den untersten Millimetern, der viskosen Unterschicht, dominieren molekulare Transportprozesse. Darüber befindet sich die Prandtlschicht, welche typischerweise eine vertikale Mächtigkeit von einigen Dekametern aufweist und in der der Großteil der Turbulenz in der Grenzschicht durch Auftrieb und Scherung produziert wird. Weiterhin ist die Prandtlschicht durch eine logarithmische Windzunahme mit der Höhe gekennzeichnet, sowie annähernd höhenkonstante vertikale Flüsse. Oberhalb schließt sich die Ekman-schicht an, die bis zur Obergrenze der Grenzschicht je nach Stabilität von wenigen Hundert Metern bis etwa zwei bis drei Kilometer Höhe reicht und die durch eine Winddrehung sowie -zunahme mit der Höhe charakterisiert ist. Darüber schließt sich die freie Atmosphäre an, in der die Strömung nahezu laminar ist.

Es gibt drei verschiedene Grundtypen von atmosphärischen Grenzschichten, die jeweils durch charakteristische Vertikalprofile von Windgeschwindigkeit, Temperatur, Feuchte sowie turbulenten Flüssen gekennzeichnet sind.

Im Fall sehr kleiner oder verschwindender bodennaher Wärme-flüsse, häufig bei starker Bewölkung oder nachts bei hohen Windgeschwindigkeiten, lassen sich neutrale Grenzschichten beobachten (Kraus, 2008). Diese sind durch einen adiabatischen Temperaturgradienten und eine Winddrehung mit der Höhe in der Ekman-schicht gekennzeichnet. Turbulenz wird in der neutralen Grenzschicht ausschließlich durch Windscherung produziert.

Die häufig nachts bei negativer Strahlungsbilanz auftretende stabile Grenzschicht ist durch eine stabile Temperaturschichtung gekennzeichnet. Turbulenz wird durch Windscherung produziert. Der turbulente vertikale Austausch in der stabilen Grenzschicht ist relativ schwach oder kommt teilweise sogar vollständig zum Erliegen (Stull, 1988).

Bei vorhandener kurzweiliger Einstrahlung bildet sich über Landoberflächen tagsüber eine konvektive Grenzschicht aus. Die konvektive Grenzschicht zeichnet sich durch eine labile Temperaturschichtung in der Prandtlschicht aus, sowie einer darüberliegenden vertikal gut durchmischten Schicht, welche auch als Mischungsschicht bezeichnet wird. Die Mischungsschicht reicht bis zur Obergrenze der konvektiven Grenzschicht in etwa ein bis drei Kilometer. Aufgrund der effektiven turbulenten Durchmischung weist die Mischungsschicht einen annähernd adiabatischen vertikalen Temperaturgradienten auf sowie annähernd höhenkonstante Feuchte- und Windprofile (Stull, 1988). Im Gegensatz zu einer neutralen oder stabilen Grenzschicht ist die konvektive Grenzschicht am Ober-rand durch eine Inversionsschicht abgeschlossen. Die Inversionsschicht ist durch eine starke Temperaturzunahme mit der Höhe (mehrere Kelvin pro 100 m), eine Abnahme der Feuchte mit der Höhe sowie durch vertikale Windscherung gekennzeichnet. Aufgrund von Windscherung sowie durch in die Inversionsschicht eindringende konvektive Aufwinde wird Impuls sowie trockene warme Luft aus der darüber liegenden, nicht turbulenten freien Atmosphäre in die Grenzschicht eingemischt (engl.: *entrainment*). Durch Entrainment werden sowohl das Wachstum der konvektiven Grenzschicht als auch die Vertikalprofile von Temperatur, Feuchte und Windgeschwindigkeit signifikant beeinflusst (Stull, 1976).

In der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich die konvektive Grenzschicht behandelt.

1.2 Das LITFASS-2003 Experiment

Diese Promotion war eingebettet in das von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) finanzierte Projekt: *The Effect of Land-Surface Heterogeneity on the Atmospheric Boundary-Layer Structure and Measurements* (ELSH). In Kooperation mit den Projektpartnern wurde in dem ELSH-Projekt der während des LITFASS¹-2003 Experiments erhobene Datensatz weiterführend untersucht und offenstehende Fragestellungen wurden mithilfe weiterentwickelter Analysemethoden neu angegangen, mit dem übergeordneten Ziel den Einfluss einer heterogenen Landoberfläche auf die Struktur der atmosphärischen Grenzschicht zu quantifizieren sowie Messstrategien und Analysemethoden von Turbulenzmessungen zu verbessern. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Messdaten des LITFASS-2003 Experiments als Basis für die Simulation einzelner Messtage verwendet. Im Folgenden wird ein kurzer Überblick über das LITFASS-2003 Experiment gegeben.

Das grundlegende Ziel des LITFASS-2003 Experiments bestand in der Bestimmung des Impuls- und Wärmeaustauschs über einer heterogenen Landoberfläche, um daraus geeignete Parametrisierungen zu entwickeln, die den flächengemittelten Austausch zwischen Erdoberfläche und Atmosphäre auf der Skala einer Gitterbox eines mesoskaligen Atmosphärenmodells beschreiben (Beyrich und Mengelkamp, 2006). Das LITFASS-2003 Experiment fand zwischen dem 19. Mai und 17. Juni 2003 in der Umgebung des Richard-Aßmann Observatoriums des Deutschen Wetterdienstes in Lindenberg, südöstlich von Berlin, statt. Das LITFASS-Gebiet ist ein nahezu flaches, durch verschiedene Landnutzungen geprägtes (vorwiegend Wälder, Seen, Acker- und Grasland) Gebiet, welches $20 \times 20 \text{ km}^2$ umfasst. Während des Experiments wurden über allen im LITFASS-Gebiet relevanten Oberflächentypen die einzelnen Komponenten der Energiebilanzgleichung an insgesamt 14 Energiebilanzstationen gemessen. Dazu gehörten der ein- und ausgehende Strahlungsfluss, der Bodenwärmestrom sowie die bodennahen Flüsse fühlbarer und latenter Wärme. Die aus den Messdaten abgeleiteten 30-minütigen gemittelten Flüsse an den Energiebilanzstationen unterlagen einer umfangreichen Qualitätssicherung. Für eine detaillierte Beschreibung der dazu verwendeten Tests und Algorithmen wird auf Mauder et al. (2006) verwiesen. Vegetationsparameter an den Energiebilanzstationen wurden einmal wöchentlich erfasst. Flächengemittelte Flüsse für das LITFASS-Gebiet wurden mithilfe von Scintillometermessungen (Meijninger et al., 2006), Turm- und Flugmessungen (Bange et al., 2006b), sowie durch Aggregation der an den Energiebilanzstationen gemessenen bodennahen Flüsse (Beyrich et al., 2006) bestimmt. Weiterhin wurden während LITFASS-2003 Flugmessungen mit unterschiedlichen Flugmustern durchgeführt, mit dem Ziel den Einfluss der Oberflächenheterogenität auf die Grenzschichtturbulenz zu quantifizieren (Bange et al., 2006a). Radiosondenaufstiege lieferten alle sechs Stunden Vertikalprofile von Druck, relativer Feuchte und Temperatur. Des Weiteren wurden SODAR/RASS und LIDAR Systeme, Windprofiler sowie Mikrowellenradiometer für die Vertikalsondierung der Grenzschicht eingesetzt. Eine detaillierte Beschreibung des LITFASS-2003 Experiments ist in Beyrich und Mengelkamp (2006) sowie Beyrich et al. (2006) zu finden.

¹Lindenberg Inhomogeneous Terrain - Fluxes between Atmosphere and Surface: a long-term Study

1.3 Stand der Forschung

1.3.1 Heterogenitätssignale in der Grenzschicht

Der Begriff Oberflächenheterogenität umfasst im Allgemeinen sowohl Orographie als auch räumliche Unterschiede in der Landnutzung, der Bodenstruktur und der Bodenfeuchte. Unterschiede in der Landnutzung sowie der Bodenbeschaffenheit bedingen räumliche Unterschiede in Rauigkeit, Temperatur sowie Feuchte der Erdoberfläche und führen zu räumlich heterogenen bodennahen Flüssen von Impuls sowie fühlbarer und latenter Wärme (Maronga und Raasch, 2013). Orographie kann einen signifikanten Einfluss auf Austauschprozesse in der Grenzschicht sowie der darüberliegenden freien Atmosphäre haben und wird in heutigen Wettervorhersagemodellen bereits abgebildet. Hingegen ist der Einfluss einer heterogenen Landnutzung sowie Bodenbeschaffenheit auf Austauschprozesse in der Grenzschicht noch nicht ausreichend verstanden. Im Rahmen dieser Arbeit wird dieser Einfluss untersucht. Der Begriff *Oberflächenheterogenität* bezieht sich daher im Weiteren ausschließlich auf heterogene bodennahe Flüsse bedingt durch Heterogenitäten in der Landnutzung sowie Bodenbeschaffenheit.

Mit zunehmendem Abstand zur Oberfläche wird die horizontale und vertikale Durchmischung der Grenzschicht aufgrund der zunehmenden Wirbelgröße effektiver, sodass die Signale der Oberflächenheterogenität in der Atmosphäre zunehmend schwächer werden. Die Höhe, in der der Einfluss der Oberflächenheterogenität unterhalb eines gewissen Grenzwerts sinkt, wird als Mischungshöhe bezeichnet (Mahrt, 2000). Die Mischungshöhe ist dabei von den atmosphärischen Bedingungen sowie von der Skala der Heterogenität abhängig. Dabei gilt im Allgemeinen: je größer die Heterogenitätsskalen sind, desto höher reicht der Einfluss der Heterogenität. Im Gegensatz dazu hat beispielsweise eine höhere mittlere Windgeschwindigkeit eine niedrigere Mischungshöhe zur Folge.

Das Konzept der Mischungshöhe wird sowohl in der mesoskaligen Modellierung als auch bei Turbulenzmessungen angewendet. In mesoskaligen Modellen wird durch die Aggregation von bodennahen Flüssen über verschiedenen Oberflächen implizit die Annahme getroffen, dass eine Mischungshöhe in der Höhe der ersten vertikalen Modellgitterebene (einige Dekameter) existiert, unabhängig von den atmosphärischen Bedingungen oder der Beschaffenheit der heterogenen Erdoberfläche (Ament und Simmer, 2006). Aufgrund dieser pauschalen Annahme können Fehler bei der Aggregation der mittleren bodennahen Flüsse entstehen, insbesondere wenn die Heterogenität stark ausgeprägt ist, wie beispielsweise zwischen Wasser- und Waldflächen (Manrique-Sunen et al. 2013). Alternative Aggregationsmethoden, zum Beispiel von Blyth (1995) oder Molod et al. (2003), beziehen zwar die jeweilige atmosphärische Situation und Beschaffenheit der Oberfläche bei der Aggregation der bodennahen Flüsse mit ein und können somit Fehler bei der Aggregation verringern (Molod et al., 2003), benötigen aber genaue Informationen darüber, ab welcher Höhe die Signale der Oberflächenheterogenität verschwinden. Auch bei der Messung flächengemittelter turbulenter Flüsse wird implizit die Annahme getroffen, dass die Grenzschicht im Messniveau horizontal gut durchmischt ist und homogene Bedingungen vorherrschen. Eine genaue Kenntnis der Mischungshöhe und des jeweiligen Einflusses der Heterogenität im Messniveau ist daher entscheidend für die Interpretation und Fehleranalyse einer Messung (Meijninger et al., 2002).

In der Literatur existieren verschiedene analytische Beziehungen zur Abschätzung der Mischungshöhe (z.B. Claussen, 1991; Raupach und Finnigan, 1995; Mahrt, 2000; Strunin et al., 2004). Bou-Zeid et al. (2007) haben in ihrer LES Studie für die neutrale Grenzschicht den Einfluss verschiedener Skalen von Rauigkeitsheterogenitäten auf die

Grenzschicht untersucht. Dabei konnte eine Mischungshöhe nachgewiesen werden, oberhalb derer der Einfluss der Oberflächenheterogenität in der Grenzschicht verschwindet. Des Weiteren wurde eine gute Übereinstimmung der beobachteten Mischungshöhen mit diversen analytischen Abschätzungen gefunden. Unter konvektiven Bedingungen wird die Existenz einer Mischungshöhe gegenwärtig kontrovers diskutiert, insbesondere für Heterogenitätsskalen in der Größenordnung einer in heutigen Wettervorhersagemodellen verwendeten Gitterbox (Beyrich et al., 2012). Brunsell et al. (2011) haben in ihrer LES Studie die Wechselwirkung zwischen der Atmosphäre und der darunter liegenden Oberfläche untersucht. Es wurden verschiedene Heterogenitätsskalen vorgegeben, angefangen von Heterogenitäten deutlich kleiner als die Grenzschichthöhe bis zu Heterogenitäten deutlich größer als die Grenzschichthöhe. Eine Spektralanalyse der turbulenten Wärmeflüsse hat gezeigt, dass die Wärmeflüsse in den untersten 100–200 m der konvektiven Grenzschicht auf ähnlichen Skalen verteilt waren wie die bodennahen Flüsse. Oberhalb zeigten die Spektren der turbulenten Wärmeflüsse in ihrer Studie jedoch keine Ähnlichkeit mehr zu den Spektren der bodennahen Flüsse, woraus Brunsell et al. (2011) schlossen, dass die Grenzschicht horizontal gut durchmischt ist. Dabei ist jedoch zu beachten, dass eine Spektralanalyse zwar Informationen über die spektrale Varianz bei einer gewissen räumlichen Skala liefert, jedoch keine Informationen darüber gibt, wie sich die Strömung bezüglich der darunter liegenden Oberfläche organisiert, was über einer heterogenen Oberfläche völlig unterschiedlich sein kann im Vergleich zu einer homogenen Oberfläche. Albertson und Parlange (1999) haben in ihrer LES Studie über idealisierten Oberflächenheterogenitäten im bodennahen fühlbaren Wärmefluss gezeigt, dass eine Mischungshöhe in der Grenzschicht auch unter konvektiven Bedingungen existiert, mit Ausnahme von Heterogenitätsskalen größer als die Grenzschichthöhe. Im diesem Fall konnte sogar ein Einfluss auf Entrainmentprozesse am Oberrand der Grenzschicht beobachtet werden.

Bei Heterogenitätsskalen größer als die Grenzschichthöhe können Sekundärzirkulationen entstehen, die sich über die gesamte Dicke der konvektiven Grenzschicht erstrecken (z.B. Shen und Leclerc, 1995; Raasch und Harbusch, 2001; Patton et al., 2005). Patton et al. (2005) haben in ihrer LES Studie über idealisierten, eindimensionalen Heterogenitäten im fühlbaren und latenten Wärmefluss gezeigt, dass die stärksten Sekundärzirkulationen auftreten, wenn das Verhältnis zwischen Heterogenitätsskala und Grenzschichthöhe zwischen 4 und 9 liegt. Maronga und Raasch (2013) haben in ihrer LES Studie für das LITFASS-2003 Experiment gezeigt, dass die auftretenden Sekundärzirkulationen bis zu 20% (40%) des Vertikaltransports an fühlbarer (latenter) Wärme in der Grenzschicht ausmachen können. Die Existenz von Sekundärzirkulationen, die sich über die gesamte Dicke der Grenzschicht erstrecken und einen Teil des vertikalen Transports übernehmen, steht jedoch im Widerspruch zum Konzept der Mischungshöhe.

Der Einfluss von thermischen Oberflächenheterogenitäten auf die Struktur der konvektiven Grenzschicht wurde auch mithilfe von Flugmessungen untersucht. So haben Strunin et al. (2004) interne Grenzschichten beobachtet, die sich über die gesamte Dicke der konvektiven Grenzschicht erstreckten. Basierend auf Flugmessungen während des NOPEX² Experiments (Halldin et al., 1998), haben Lyons und Halldin (2004) in der mittleren Grenzschicht noch eine deutliche Korrelation zwischen den turbulenten Flüssen fühlbarer und latenter Wärme und der darunter liegenden Oberflächenheterogenität festgestellt. Kang et al. (2007) und Gorska et al. (2008) haben basierend auf Flugmessungen während des IHOP³-2002 Experiments (Weckwerth et al., 2004) gezeigt, dass

²a NORthern hemisphere climate Processes land surface EXperiment

³International H₂O Project

Temperatur und Feuchte bis in die obere Grenzschicht mit der Oberflächenheterogenität korrelieren. Des Weiteren haben Gorska et al. (2008) ein verstärktes Entrainment über stärker beheizten Gebieten gefunden. Bange et al. (2006a) haben während LITFASS-2003 Flugmessungen über verschiedenen Oberflächentypen mit Hinblick auf Heterogenitätssignale in der konvektiven Grenzschicht analysiert. Für die gemessenen latenten Wärmeflüsse konnte nahe der Erdoberfläche kein eindeutiger Zusammenhang zu den darunter liegenden Oberflächentypen hergestellt werden, was Bange et al. (2006a) auf die geringen Unterschiede in den bodennahen Flüssen latenter Wärme sowie auf den signifikanten Einfluss von Entrainment zurückgeführt haben. Zwischen den nahe der Oberfläche gemessenen Flüssen fühlbarer Wärme und den darunter liegenden Oberflächentypen konnte hingegen ein klarer Zusammenhang beobachtet werden. In der mittleren Grenzschicht zeigte sich hingegen kein eindeutiger Zusammenhang. In manchen Situationen bestand eine klare Abhängigkeit zwischen den fühlbaren Wärmeflüssen und den darunter liegenden Oberflächentypen, in anderen Situationen jedoch suggerierten die gemessenen Flüsse eine horizontal gut durchmischte Grenzschicht. Um Rückschlüsse darauf ziehen zu können, unter welchen Bedingungen die Grenzschicht horizontal gut durchmischt ist, haben Bange et al. (2006a) versucht, die unterschiedlichen Fälle in einen Zusammenhang mit den meteorologischen Bedingungen zu bringen. Es konnte jedoch kein eindeutiger Zusammenhang festgestellt werden, der das Auftreten einer horizontal gut durchmischten Grenzschicht begünstigte. Da Flugmessungen den turbulenten Fluss nur eindimensional entlang einer begrenzten Distanz erfassen, werfen die in Bange et al. (2006a) publizierten Ergebnisse die Frage auf, inwiefern die während LITFASS-2003 durchgeführten Flugmessungen über verschiedenen Oberflächentypen repräsentative Werte der turbulenten Flüsse lieferten.

1.3.2 Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf das Entrainment

Entrainment findet am Oberrand der konvektiven Grenzschicht in der Inversionsschicht statt und beschreibt allgemein das turbulente Einmischen von relativ warmer und trockener Luft aus der nicht-turbulenten freien Atmosphäre in die Grenzschicht. Durch den damit verbundenen Austausch von Impuls sowie fühlbarer und latenter Wärme zwischen der Grenzschicht und der freien Atmosphäre wird die Struktur der konvektiven Grenzschicht maßgeblich beeinflusst (Stull, 1976). Aufgrund der stabilen Schichtung in der Inversionsschicht finden turbulente Einmischprozesse auf relativ kleiner Skala statt, sodass Entrainment in Wettervorhersagemodellen parametrisiert werden muss, um den Entrainmenteinfluss auf die Grenzschichtentwicklung entsprechend berücksichtigen zu können.

Abgesehen von einem großskaligen synoptischen Antrieb, wird das zeitliche Wachstum der Grenzschicht nur durch den Wärmeeintrag an der Erdoberfläche sowie durch Entrainment bestimmt. Das durch den Wärmeeintrag an der Oberfläche verursachte rein thermodynamische Wachstum der Grenzschicht wird als Encroachment bezeichnet (Stull, 1988). Der Anteil des Encroachments am Grenzschichtwachstum beträgt zwischen 70–90% (Stull, 1976; Canut et al., 2010). Die restlichen 10–30% sind auf den Wärmeeintrag durch Entrainment zurückzuführen. Die Stärke des Einmischens sowie die dafür verantwortlichen physikalischen Prozesse hängen stark vom Wärmeeintrag an der Oberfläche sowie von der Struktur der Inversionsschicht ab, welches in zahlreichen Studien unter Verwendung von Fernerkundungstechniken (z.B. Angevine et al., 1994; Davis et al., 1997, 2000; Beyrich und Gryning, 1998; Angevine, 1999; Grabon et al., 2010; Träumner et al., 2011), Flugmessungen (z.B. Lenschow et al., 1999; Bange et al., 2007; Canut et al.,

2010), sowie LES (z.B. Sullivan et al., 1998; Otte und Wyngaard, 2001; Fedorovich et al., 2004; Brooks und Fowler, 2012) beobachtet wurde. Dabei gilt im Allgemeinen: je höher der Wärmeeintrag am Boden oder je kleiner der vertikale Temperaturgradient in der Inversionsschicht ist, desto stärker ist das Entrainment. Des Weiteren können vertikale Windscherung am Oberrand der Grenzschicht (Davis et al., 1997; Kim et al., 2003; Pino et al., 2003; Conzemius und Fedorovich, 2006; Canut et al., 2010) sowie Schwerewellen (Lothon et al., 2009) das Entrainment verstärken und die zugrunde liegenden physikalischen Einmischprozesse modifizieren. In verschiedenen LES Studien wurde zudem beobachtet, dass ein heterogener Wärmeeintrag an der Erdoberfläche das Entrainment beeinflussen kann (z.B. Avissar und Schmidt, 1998; Raasch und Harbusch, 2001; Patton et al., 2005; van Heerwaarden und de Arellano, 2008; Ouwersloot et al., 2011; Maronga und Raasch, 2013). Gegenwärtig ist jedoch der Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf das Entrainment und die Struktur der Inversionsschicht noch nicht ausreichend verstanden.

Der Einfluss eines heterogenen Wärmeeintrags an der Oberfläche auf die Inversionsschicht wurde mithilfe von Flugmessungen (Kang et al., 2007) sowie LES (van Heerwaarden und de Arellano, 2008; Fesquet et al., 2009; Wang et al., 2011; Maronga und Raasch, 2013) untersucht. Dabei wurde jeweils eine positive Korrelation zwischen der lokalen Grenzschichthöhe und dem lokalen bodennahen fühlbaren Wärmestrom beobachtet, mit einer dickeren (weniger dicken) Grenzschicht über stärker (schwächer) beheizten Gebieten. In der LES Studie von van Heerwaarden und de Arellano (2008) über eindimensionalen Wärmestromheterogenitäten wurde bei den Aufwindbereichen der Sekundärzirkulationen eine lokal dickere Grenzschicht beobachtet. Die räumliche Variabilität der lokalen Grenzschichthöhe wurde daher von van Heerwaarden und de Arellano (2008) auf die Sekundärzirkulation zurückgeführt. Sie argumentierten, dass über den stärker beheizten Gebieten die konvektiven Aufwinde durch die Sekundärzirkulation verstärkt werden. Dadurch wird das Entrainment über den stärker beheizten Gebieten lokal verstärkt, sowie die Grenzfläche zwischen der Grenzschicht und der freien Atmosphäre oberhalb des Aufwindbereichs der Sekundärzirkulation ausgebeult. In der Studie von Maronga und Raasch (2013) über realen Oberflächenheterogenitäten traten die Aufwindbereiche der Sekundärzirkulationen vorrangig an den Grenzen der unterschiedlich beheizten Gebiete auf und nicht über der Mitte der stärker beheizten Gebiete, wo die Maximalwerte der lokalen Grenzschichthöhe zu beobachten waren. Eine Ausbeulung der Grenzfläche und verstärktes Entrainment aufgrund der Sekundärzirkulationen konnte daher die räumliche Variabilität der lokalen Grenzschichthöhe in ihrer Studie nicht erklären. Maronga und Raasch (2013) haben daher die räumliche Variabilität der Grenzschichthöhe auf den Encroachmenteffekt zurückgeführt.

In der existierenden Literatur herrscht kein Konsens darüber, ob Oberflächenheterogenitäten das mittlere Entrainment verstärken, abschwächen, oder überhaupt einen signifikanten Einfluss haben. Einer der Gründe für diese in der Literatur existierende Diskrepanz könnte die Verwendung unterschiedlicher Methoden zur Quantifizierung des mittleren Entrainments sein. Zur Untersuchung des Entrainments wird oftmals die Entrainmentgeschwindigkeit $w_e = dz_i/dt$ verwendet, welche die zeitliche Änderung der mittleren Grenzschichthöhe z_i beschreibt. Dabei ist jedoch zu beachten, dass das Grenzschichtwachstum nicht allein durch Entrainment sondern zu einem Großteil durch Encroachment bestimmt wird, welches vom Wärmeeintrag an der Oberfläche sowie von der vertikalen Mächtigkeit der Grenzschicht abhängt (Stull, 1988). Ein Vergleich von w_e zwischen einem heterogenen und einem homogenen Referenzfall ist daher streng genommen nur gültig, wenn das Grenzschichtwachstum durch Encroachment in allen Fällen identisch ist. Informationen über das mittlere Entrainment können auch aus dem Vertikal-

profil des Auftriebsflusses abgeleitet werden, insbesondere aus dem Minimum sowie dem vertikalen Bereich mit negativen Werten (van Zanten et al., 1999). Die in LES Studien aus horizontal gemittelten Vertikalprofilen des Auftriebsflusses abgeleiteten Informationen über das Entrainment sollten nach Lilly (2002) jedoch sehr vorsichtig interpretiert werden. Entrainment ist ein lokaler Prozess, der an diskreten Orten stattfindet. Eine horizontale Mittelung über diskrete Entrainmentereignisse, die über einen gewissen Höhenbereich verteilt sind, führt nach Lilly (2002) zu einer Glättung des Vertikalprofils des Auftriebsflusses und somit zu einem Informationsverlust. Über heterogen geheizten Oberflächen ist der von Lilly (2002) beschriebene Mittelungseffekt besonders ausgeprägt, da der Höhenbereich in dem Entrainmentereignisse stattfinden durch die räumliche Variabilität der Grenzschichthöhe zusätzlich verbreitert wird. Im heterogenen Fall führt dies zu einer vertikal mächtigeren Schicht mit negativen Werten des Auftriebsflusses, so dass allein aufgrund der horizontalen Mittelung ein unterschiedlich starkes Entrainment im Vergleich zum homogenen Fall suggeriert wird (van Heerwaarden und de Arellano, 2008).

Verglichen mit einem homogenen Referenzfall haben Maronga und Raasch (2013), basierend auf w_e sowie Vertikalprofilen des Auftriebsflusses, ein leicht verringertes Entrainment über dem heterogen geheizten LITFASS-Gebiet gefunden. Der Grund für das verringerte Entrainment wurde von Maronga und Raasch (2013) nicht weiterführend untersucht. Es wurde jedoch vermutet, dass die Sekundärzirkulationen über dem LITFASS-Gebiet den horizontalen Transport am Oberrand der Grenzschicht auf Kosten des vertikalen Transports begünstigen, wodurch das Entrainment leicht verringert wird. Im Gegensatz dazu haben Avissar und Schmidt (1998) sowie Raasch und Harbusch (2001) in ihren LES Studien über idealisierten Wärmestromheterogenitäten ein verstärktes Entrainment beobachtet, verglichen zu einem homogenen Referenzfall. Avissar und Schmidt (1998) haben zudem eine Verstärkung des Entrainments mit zunehmender Heterogenitätsskala gefunden. Patton et al. (2005) haben in ihren mit einem Bodenmodell gekoppelten LES über idealisierten Heterogenitäten nur einen geringen Einfluss auf das Entrainment festgestellt. Verglichen mit einem homogenen Referenzfall wiesen Simulationen für Heterogenitätsskalen in der Größenordnung der Grenzschichthöhe leicht geringere Werte von w_e auf, wohingegen Simulationen mit deutlich größeren Heterogenitätsskalen leicht höhere Werte von w_e aufwiesen. Die Wärmestromheterogenität war jedoch, verglichen mit den von Avissar und Schmidt (1998) sowie von Raasch und Harbusch (2001) vorgegebenen Wärmestromheterogenitäten, nur gering ausgeprägt. Dies deutet darauf hin, dass in der Studie von Patton et al. (2005) der Heterogenitätseffekt auf das Entrainment vergleichsweise gering war. Van Heerwaarden und de Arellano (2008) haben Vertikalprofile des Auftriebsflusses für verschiedene Heterogenitätsamplituden mit einem homogenen Referenzfall verglichen. Simulationen mit geringer Heterogenitätsamplitude deuteten auf ein verringertes Entrainment hin, wohingegen Simulationen mit großer Heterogenitätsamplitude auf ein verstärktes Entrainment hindeuteten. Da van Heerwaarden und de Arellano (2008) jedoch keinen Effekt auf die zeitliche Entwicklung der Grenzschichthöhe feststellen konnten, haben sie dieses Ergebnis wieder verworfen und die Unterschiede in den Auftriebsflussprofilen auf den von Lilly (2002) beschriebenen Mittelungseffekt zurückgeführt. Ouwersloot et al. (2011) haben in ihrer LES Studie über idealisierten Wärmestromheterogenitäten gezeigt, dass der Einfluss auf das Entrainment unterschiedlicher Natur sein kann, mit einem verstärkten Entrainment für große Heterogenitätsamplituden und einem verringerten Entrainment für kleine Heterogenitätsamplituden. Ouwersloot et al. (2011) führen dies auf die Sekundärzirkulationen zurück, deren Stärke mit der Heterogenitätsamplitude korreliert. Über dem Zentrum des stärker beheizten Gebiets führt der durch die Sekundärzirkulation induzierte mittlere Aufwind

zu einer zusätzlichen Vertikalbeschleunigung der konvektiven Aufwinde, sodass diese am Oberrand der konvektiven Grenzschicht tiefer in die stabil geschichtete Inversionsschicht eindringen können und so zu einem lokal verstärkten Entrainment führen. Über dem schwächer beheizten Gebiet führt gleichzeitig das durch die Sekundärzirkulation verursachte mittlere Absinken zu einer Abschwächung der konvektiven Aufwinde und somit zu einer lokalen Verringerung des Entrainments. Ouwersloot et al. (2011) haben die Hypothese aufgestellt, dass ab einer gewissen Stärke der Sekundärzirkulation kaum noch Entrainment über dem schwächer beheizten Gebiet stattfindet, da aufgrund des mittleren Absinkens die konvektiven Aufwinde den Oberrand der Grenzschicht nicht mehr erreichen. Ab einer gewissen Stärke der Sekundärzirkulation würde somit der über dem stärker beheizten Gebiet stattfindende verstärkende Effekt dominieren. Dies wiederum würde die Verstärkung des mittleren Entrainments bei größer werdenden Heterogenitätsamplituden erklären. Eine Bestätigung dieser Hypothese sowie eine weiterführende Analyse der für die unterschiedlichen Heterogenitätseinflüsse verantwortlichen physikalischen Prozesse steht jedoch noch aus. Den größten Einfluss auf das Entrainment haben Ouwersloot et al. (2011) für Heterogenitätsskalen in der Größenordnung der Grenzschichthöhe beobachtet. Für deutlich kleinere Heterogenitätsskalen wurde kein Effekt auf das Entrainment festgestellt, was Ouwersloot et al. (2011) darauf zurückführen, dass die Sekundärzirkulationen nicht bis zum Oberrand der Grenzschicht reichen. Auch für Heterogenitäten deutlich größer als die Grenzschichthöhe wurde kein signifikanter Effekt festgestellt. Obwohl die Heterogenitätsamplituden nicht direkt vergleichbar sind, steht dieses Ergebnis im Widerspruch zu den Ergebnissen von Avissar und Schmidt (1998), die eine Verstärkung des Entrainments für zunehmende Heterogenitätsskalen beobachtet haben.

Es ist zu beachten, dass Ouwersloot et al. (2011) Informationen über das Entrainment ausschließlich aus instantanen Werten der horizontal gemittelten Grenzschichthöhe abgeleitet haben. Nach van Heerwaarden und de Arellano (2008) können Simulationen über unterschiedlichen Heterogenitäten zu Beginn unterschiedliche numerische Einschwingphasen der Turbulenz (engl.: *model spin-up*) aufweisen, was kurzzeitig zu einem unterschiedlichen Grenzschichtwachstum führen kann. Obwohl in der Studie von van Heerwaarden und de Arellano (2008) nach der numerischen Einschwingphase in allen Simulationen ein nahezu identisches Grenzschichtwachstum beobachtet wurde, unterschieden sich dennoch die mittleren Grenzschichthöhen in ihren Simulationen. Die in Ouwersloot et al. (2011) aus instantanen Werten der Grenzschichthöhe abgeleiteten Informationen über die Stärke des Entrainments, sollten daher vorsichtig interpretiert werden.

1.3.3 Footprintbestimmung in der atmosphärischen Grenzschicht

Der Austausch von fühlbarer und latenter Wärme zwischen der Erdoberfläche und der Atmosphäre kann mithilfe von bodennahen Turbulenzmessungen erfasst werden, z.B. mithilfe von Scintillometern, Messtürmen, oder anhand fluggestützter Messungen. In heterogenen Landschaften stammt das in einer typischen Höhe von mehreren Dekametern gemessene Turbulenzsignal gewöhnlich von verschiedenen Oberflächentypen in der Umgebung des Sensors. Damit eine Messung entsprechend interpretiert werden kann, ist es erforderlich die jeweiligen relativen Beiträge der verschiedenen Oberflächentypen am gemessenen Signal, das Sichtfeld des Sensors, zu kennen. Dieses Sichtfeld wird in der Regel als Footprint bezeichnet.

Nach Pasquill und Smith (1983) beschreibt der Footprint f den Zusammenhang zwischen der an einem Sensor gemessenen Größe ϕ und den räumlich verteilten Quellen und

Senken Q_ϕ dieser Größe in der Umgebung des Sensors:

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

\mathfrak{R} steht für den dreidimensionalen Raum, \vec{r} für den Sensorort und \vec{r}' für die räumliche Entfernung zwischen Sensor- und Quellort. Rein mathematisch ist der Footprint einer Messung unendlich groß (Pasquill und Smith, 1983). Schmid und Oke (1990) haben aus diesem Grund den Begriff des n%-Quellgebiets eingeführt. Damit wird das Quellgebiet bezeichnet, welches zu n% zum gemessenen Signal am Sensor beiträgt. Der Footprint kann entweder für eine am Sensor gemessene Konzentration einer Größe oder für den Fluss dieser Größe bestimmt werden. In dieser Arbeit wurden ausschließlich Footprints für Flüsse bestimmt.

Die Form und die Größe des Footprints einer Messung hängen unter anderem von der Höhe des Messsensors, der Rauigkeit der Oberfläche, der thermischen Schichtung sowie der Windgeschwindigkeit ab. Beispielsweise nimmt mit zunehmender Messhöhe die horizontale Erstreckung des Footprints zu und die Position des Footprintmaximums verschiebt sich stromaufwärts bei kleiner werdendem Maximalwert. Hingegen haben eine labilere Schichtung oder eine größere Rauigkeit den gegenteiligen Effekt zur Folge. Eine detaillierte Diskussion der Abhängigkeit der Footprintbeschaffenheit von den atmosphärischen Bedingungen wird in Kljun et al. (2002) gegeben.

Es existieren verschiedene Ansätze zur Footprintbestimmung, die sich hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit und Komplexität unterscheiden. Analytische Footprintmodelle (z.B. Horst und Weil, 1992; Hsieh et al., 2000; Kormann und Meixner, 2001) beruhen auf analytischen Lösungen der Advektions-Diffusions-Gleichung, welche unter Verwendung der Monin-Obukhov Ähnlichkeitstheorie hergeleitet wurden. Die Anwendung analytischer Footprintmodelle ist daher ausschließlich auf die Prandtlschicht beschränkt. Hingegen können Lagrangesche stochastische (LS) Partikelmodelle (z.B. Kljun et al., 2002; Rannik et al., 2000) in der gesamten Grenzschicht angewendet werden. Jedes Partikel repräsentiert dabei eine bestimmte Konzentration der Größe ϕ , dessen Ausbreitung durch die Berechnung von Partikeltrajektorien auf Grundlage einer stochastischen Differentialgleichung (Langevin-Gleichung) bestimmt wird. Partikel werden dabei entweder direkt an den Quellorten freigesetzt und bis zum Messsensor verfolgt (Vorwärtsmodus), oder direkt am Messsensor freigesetzt und durch Rückwärtsintegration der stochastischen Differentialgleichung unter Verwendung eines negativen Zeitschritts bis zu ihren Quellorten zurückverfolgt (Rückwärtsmodus). Die für die Lösung der stochastischen Differentialgleichung verwendeten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Partikelgeschwindigkeiten werden durch den Turbulenzzustand in der Grenzschicht charakterisiert (Rodean, 1996), welcher entweder über Turbulenzparametrisierungen (Rotach et al., 1996) oder durch Beobachtungsdaten (Göckede et al., 2007) vorgegeben werden kann. Eine weitere Möglichkeit zur Footprintbestimmung bieten LES Modelle in Verbindung mit Lagrangeschen Partikelmodellen (z.B. Cai und Leclerc, 2007; Steinfeld et al., 2008). Die Partikelausbreitung wird dabei hauptsächlich durch die aufgelösten turbulenten Geschwindigkeitsfelder der LES bestimmt. Die stochastische Beschreibung der Partikelausbreitung wie in LS Modellen ist dabei nur auf die Subskala beschränkt, die nicht durch das numerische Gitter der LES aufgelöst wird (Weil et al., 2004). Die Footprintbestimmung mit LES hängt daher nicht mehr von der Qualität von Turbulenzparametrisierungen ab, mit Ausnahme von Bereichen, in denen die Turbulenz in der LES schlecht durch das numerische Gitter aufgelöst wird, wie beispielsweise nahe des Erdbodens (Steinfeld et al., 2008).

Die Footprintbestimmung mit LES erfordert einen hohen Rechenaufwand. Eine um-

fangreiche Footprintanalyse mittels LES für Flug- und Turmmessungen in einem operationellen Rahmen ist daher gegenwärtig nicht durchführbar, sodass dafür auf weniger rechenaufwändige analytische oder LS Footprintmodelle zurückgegriffen werden muss. Analytische Modelle oder LS Modelle sind jedoch nur unzureichend validiert, sodass eine gewisse Unsicherheit bei der Footprintbestimmung mit diesen Modellen besteht. Es existiert eine Vielzahl von Modellvergleichen zwischen analytischen und LS Footprintmodellen für verschiedene atmosphärische Bedingungen und Messhöhen (z.B. Kljun et al., 2003; Cai et al., 2008; Markkanen et al., 2009). Da bei beiden Ansätzen die Turbulenz jedoch vollständig parametrisiert ist, können Unsicherheiten bei der Footprintbestimmung die durch Turbulenzparametrisierungen bedingt sind, nur unzureichend erfasst werden. Eine unabhängige Validierung anhand von Beobachtungsdaten (z.B. Tracerexperimenten) oder turbulenzauflösenden Modellen ist daher unabdingbar. Bisher gibt es jedoch nur wenige Studien, die Footprintmodelle mithilfe von Tracerexperimenten validiert haben (z.B. Leclerc et al., 1997, 2003a,b; Kljun et al., 2004a; Göckede et al., 2005; van de Boer et al., 2013). Insbesondere für höher gelegene Messpositionen, wie beispielsweise bei Flug- oder Turmmessungen, sind dem Autor keine Studien diesbezüglich bekannt. Ein umfassender Überblick über Tracerexperimente wird in Foken und Leclerc (2004) gegeben. Auch der Einfluss von idealisierten Oberflächenheterogenitäten auf den Footprint einer Messung ist derzeit noch nicht ausreichend bekannt (Vesala et al., 2008) und kann von analytischen und LS Footprintmodellen nicht berücksichtigt werden. Obwohl die Footprintbestimmung mit LES gegenwärtig nur auf akademische Einzelfälle beschränkt ist, bietet diese dennoch eine Alternative zu logistisch aufwändigen und daher schwer durchführbaren Tracerexperimenten. Die LES kann somit einen wichtigen Beitrag zur Validierung von analytischen und LS Modellen leisten, sowie zu einem besseren Verständnis beitragen wie beispielsweise Footprints durch Heterogenitätseffekte beeinflusst sind. So haben Prabha et al. (2008) LES mit LS Footprints für Messpositionen oberhalb eines Pflanzenbestands in einer neutralen, scherungsgetriebenen Strömung verglichen, in der kohärente Strukturen den Großteil des vertikalen Transports ausmachen. Das Maximum der LES Footprints lag dabei deutlich näher am Sensor, mit höheren Maximalwerten als bei den LS Footprints. Prabha et al. (2008) führten diesen Unterschied auf den erhöhten vertikalen Transport durch kohärente Strukturen zurück, die im Vergleich zum LS Modell in der LES explizit aufgelöst wurden. Markkanen et al. (2009) haben LES und LS Footprints für verschiedene Messhöhen in einer homogen geheizten konvektiven Grenzschicht verglichen. Für Messhöhen nahe der Erdoberfläche wurde dabei eine gute Übereinstimmung zwischen den LES und LS Footprints gefunden, wohingegen für Messhöhen weiter oberhalb deutliche Unterschiede zu erkennen waren. Das Maximum der LES Footprints lag dabei, ähnlich wie bei Prabha et al. (2008), deutlich näher am Sensor. Außerdem waren die LES Footprints quer zur Hauptwindrichtung deutlich schmaler als die LS Footprints. Die Studien von Prabha et al. (2008) und Markkanen et al. (2009) deuten darauf hin, dass signifikante Unsicherheiten in den LS Footprints existieren, insbesondere für höher gelegene Messpositionen, in denen der vertikale Transport durch kohärente Strukturen nicht zu vernachlässigen ist. Der Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf den Footprint einer Messung wurde in den LES Studien von Steinfeld et al. (2008) sowie Markkanen et al. (2010) untersucht. Beide Studien zeigen, dass Sekundärzirkulationen einen deutlichen Einfluss auf Form und Größe eines Footprints haben können, insbesondere in Bereichen in denen die horizontale Strömung konvergiert oder divergiert. Wang und Rotach (2010) haben ähnliche durch Orographie verursachte Effekte gefunden. Diese durch Oberflächenheterogenitäten verursachten Einflüsse können jedoch durch weniger rechenaufwändige LS Footprintmodelle nicht abgebildet werden, da bis zum jetzigen Zeitpunkt keine geeigneten Turbulenzparametrisierungen für hete-

rogene Strömungen existieren (Markkanen et al., 2009). Dies impliziert wiederum eine gewisse Unsicherheit in den aus LS Modellen abgeleiteten Footprints.

1.4 Zielsetzungen und Fragestellungen der Arbeit

In der aktuellen Literatur wird die Frage, ob es in der konvektiven Grenzschicht eine Mischungshöhe für Heterogenitätsskalen in der Größenordnung einer in heutigen Wettervorhersagemodellen verwendeten Gitterbox gibt, kontrovers diskutiert. Für die Untersuchung dieser Fragestellung bietet das LITFASS-Gebiet mit seiner für Mittel- und Nordeuropa typischen heterogenen Landschaft ideale Bedingungen (Beyrich und Mengelkamp, 2006). Auf Grundlage des LITFASS-2003 Experiments wurden Simulationen für verschiedene meteorologische Bedingungen durchgeführt. Darauf basierend wurde untersucht, ob eine Mischungshöhe für die Flüsse fühlbarer und latenter Wärme in der konvektiven Grenzschicht existiert (Artikel A, Kapitel 3.1).

Die von Bange et al. (2006a) präsentierten Flugmessungen für das LITFASS-2003 Experiment zeigten keinen klaren Zusammenhang zwischen den meteorologischen Bedingungen und der horizontalen Durchmischung der konvektiven Grenzschicht. In Anlehnung an der in Bange et al. (2006a) vorgestellten Messstrategie zur Erfassung von Heterogenitätssignalen, wurde im Rahmen der LITFASS-2003 Simulationen ein Ensemble von virtuellen Flugmessungen durchgeführt. Diese wurden mit den realen Flugmessungen verglichen und es wurde untersucht, warum aus den realen Flugmessungen während LITFASS-2003 keine eindeutige Schlussfolgerung über den Heterogenitätseinfluss in der Grenzschicht gezogen werden konnte (Artikel A, Kapitel 3.1).

Der Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf das Entrainment am Oberrand der konvektiven Grenzschicht wird gegenwärtig kontrovers diskutiert. Dabei herrscht kein Konsens darüber, ob Heterogenitäten das mittlere Entrainment verstärken, abschwächen, oder überhaupt einen signifikanten Einfluss auf das Entrainment haben. Es wurden Simulationen für verschiedene Heterogenitätsamplituden und -skalen sowie verschiedene meteorologische Bedingungen durchgeführt, um den Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf das Entrainment zu untersuchen. Dabei wurden idealisierte eindimensionale Heterogenitäten in den Simulationen vorgegeben. Die Vorgabe idealisierter Heterogenitäten sollte es ermöglichen, den Einfluss verschiedener Heterogenitätsamplituden und -skalen getrennt voneinander zu untersuchen. Dies ermöglicht es unterschiedliche Effekte bei verschiedenen Heterogenitätsamplituden und -skalen voneinander getrennt zu analysieren, was über realen Heterogenitäten wie dem LITFASS-Gebiet nicht möglich gewesen wäre, da sich verschiedene Heterogenitätsamplituden und -skalen überlagern.

Um die Stärke des Entrainments unabhängig von w_e und Vertikalprofilen des Auftriebsflusses zu bestimmen, wurde eine neue Methode entwickelt um Entrainment zu quantifizieren. Mit dieser Methode ist es sowohl möglich den jeweiligen Anteil von Encroachment und Entrainment am Grenzschichtwachstum voneinander zu separieren, als auch lokale Informationen über die Stärke des Entrainments abzuleiten und somit das physikalische Verständnis über den Heterogenitätseinfluss auf das Entrainment zu erweitern (Artikel B, Kapitel 3.2).

Turbulenzmessungen sind ein entscheidender Bestandteil bei der Validierung mesoskaliger numerischer Modelle. Für die Interpretation einer Messung ist es erforderlich den Footprint der Messung zu kennen. Umfangreiche Footprintanalysen sind zur Zeit nur mit LS Footprintmodellen möglich, in denen die turbulente Strömung vollständig

parametrisiert wird. Die sich aus den Parametrisierungen ergebenden Unsicherheiten bei der Footprintbestimmung sind insbesondere über heterogenen Oberflächen sowie für höher gelegene Messpositionen, wie beispielsweise bei Flug- oder Turmmessungen, nicht ausreichend bekannt. Nach Kenntnis des Autors wurden in dieser Arbeit erstmalig realistische Footprints über realen Oberflächenheterogenitäten mittels einer turbulenzauflösenden LES bestimmt. Zunächst wurden im Rahmen einer Machbarkeitsstudie die Anforderungen bestimmt, um aus der LES realistische und statistisch aussagekräftige Footprints über heterogenen Oberflächen ableiten zu können. Die für zwei LITFASS-Tage bestimmten LES Footprints wurden mit Footprints aus dem LS Modell nach Kljun et al. (2002) verglichen, um die Unsicherheiten in den LS Footprints genauer quantifizieren zu können. Des Weiteren wurden in einer Sensitivitätsstudie über homogenem Untergrund LES und LS Footprints für unterschiedliche meteorologische Bedingungen verglichen (Artikel C, Kapitel 3.3).

Zusammenfassend werden die in den Artikeln A-C bearbeiteten Fragestellungen aufgeführt.

Mischungshöhe und Flugmessungen - Artikel A

- Gibt es eine Mischungshöhe in der konvektiven Grenzschicht?
- Gibt es unterschiedliche Mischungshöhen für latente und fühlbare Wärmeflüsse?
- Warum konnte aus den Flugmessungen während LITFASS-2003 keine eindeutige Schlussfolgerung über den Heterogenitätseinfluss in der Grenzschicht gezogen werden?
- Was sind die messstrategischen Anforderungen um Heterogenitätssignale in der Grenzschicht erfassen zu können?

Heterogenitätseinfluss auf das Entrainment - Artikel B

- Welchen Einfluss haben verschiedene Heterogenitätsamplituden und -skalen auf das Entrainment?
- Ist dieser Einfluss abhängig von den atmosphärischen Bedingungen?
- Was sind zugrunde liegende physikalische Mechanismen des Heterogenitätseinflusses?

Footprintbestimmung für höher gelegene Messpositionen - Artikel C

- Wie lauten die notwendigen Anforderungen für eine realistische und statistisch aussagekräftige Footprintbestimmung über heterogenen Oberflächen mittels LES?
- Wie groß sind die Unsicherheiten bei der Footprintbestimmung mit stochastischen Footprintmodellen im Vergleich zur LES?

Die weitere Arbeit ist wie folgt gegliedert: Kapitel 2 gibt einen Überblick über die in dieser Arbeit verwendeten Methoden und Analyseverfahren. Die Ergebnisse der Arbeit werden in den drei Artikeln A-C in Kapitel 3 präsentiert. Kapitel 4 gibt eine Zusammenfassung sowie einen Ausblick auf zukünftige Forschungsmöglichkeiten.

2 Methodik

In diesem Kapitel werden die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Methoden beschrieben. Zunächst werden in Abschnitt 2.1 einleitende Bemerkungen zur Beschreibung turbulenter Strömungen sowie deren numerische Simulation gegeben. Für die Untersuchung des Heterogenitätseinflusses auf die atmosphärische Grenzschicht wurde das **parallelisierte Large-Eddy-Simulations Modell PALM** (Raasch und Etling, 1998; Raasch und Schröter, 2001; Riechelmann et al., 2012) verwendet. Eine Beschreibung der verwendeten physikalischen und numerischen Aspekte von PALM ist in Abschnitt 2.2 zu finden. Das für die Footprintbestimmung verwendete, in PALM eingebettete Lagrangesche Partikelmodell (Steinfeld et al., 2008), sowie das Lagrangesche stochastische Footprintmodell nach Kljun et al. (2002) werden im Anschluss daran in Abschnitt 2.3 und 2.4 beschrieben. Abschnitt 2.5 gibt einen Überblick über die in dieser Arbeit verwendeten Analysemethoden.

2.1 Beschreibung turbulenter Strömungen

Turbulente Strömungen sind instationäre, rotationsbehaftete, dreidimensionale Bewegungen eines Fluids, die räumliche Gradienten von Impuls und skalaren Größen abbauen. Dieser als turbulente Diffusion bezeichnete Prozess übersteigt die molekulare Diffusion um mehrere Größenordnungen (Fröhlich, 2006). In der atmosphärischen Grenzschicht umfassen die räumlichen und zeitlichen Skalen der Turbulenz einen weiten Bereich. So besitzen die größten Wirbel in der atmosphärischen Grenzschicht Durchmesser in der Größenordnung von 10^3 m, wohingegen die kleinsten Wirbel Durchmesser in der Größenordnung von 10^{-3} m aufweisen. Die zeitliche Skala der Wirbelstrukturen reicht dabei von Bruchteilen von Sekunden bis zu Stunden (Stull, 1988).

Eine Maßzahl für die Turbulenz ist die dimensionslose Reynolds-Zahl $Re = UL/\nu$, welche das Verhältnis zwischen Trägheitskraft und Reibungskraft beschreibt (Stull, 1988). Dabei sind U und L typische Geschwindigkeits- und Längenskalen der betrachteten Strömung. ν bezeichnet die kinematische Viskosität des betreffenden Fluids. Die Strömung eines Fluids geht von einem laminaren in einen turbulenten Zustand über, wenn eine kritische Re von etwa 10^3 überschritten wird (Fröhlich, 2006). Typische Re für die atmosphärische Grenzschicht liegen in der Größenordnung von 10^7 - 10^9 , sodass die Strömung in der atmosphärischen Grenzschicht immer turbulent ist (Stull, 1988).

Eine weitere Maßzahl für die Turbulenz ist die turbulente kinetische Energie (TKE). Anhand der spektralen Verteilung der TKE lässt sich eine turbulente Strömung in drei Bereiche unterteilen. Bei kleinen Wellenzahlen (großen Wellenlängen) besitzt das Varianzspektrum der TKE ein Maximum. In diesem Bereich wird Turbulenz durch Auftrieb und Scherung produziert. Daran schließt sich der Inertialbereich an, in dem turbulente Strukturen durch Interaktion miteinander in immer kleinere Strukturen zerfallen, wodurch TKE von größeren zu kleineren Skalen transferiert wird. Dieser Prozess wird auch als Energiekaskade bezeichnet. Dabei folgt die spektrale Varianz S_{TKE} der TKE der Beziehung $S_{TKE} \propto \epsilon^{2/3} \lambda^{-5/3}$, mit der Wellenzahl λ und der Dissipationsrate ϵ (Stull, 1988). Die Wirbel in der Grenzschicht zerfallen solange in immer kleinere Wirbel, bis

ihre kinetische Energie durch molekulare Reibung vollständig in Wärme umgewandelt ist. Dieser Wellenzahlenbereich wird auch als Dissipationsbereich bezeichnet.

Es existieren drei wesentliche Ansätze zur Simulation turbulenter Strömungen: Direkte Numerische Simulation DNS, Reynolds-Averaged Navier-Stokes RANS, sowie Large-Eddy Simulation LES. Bei der DNS werden alle Turbulenzskalen durch das numerische Gitter explizit aufgelöst. Die DNS liefert bei Einsatz geeigneter numerischer Verfahren und ausreichend feiner Gitter nahezu exakte Ergebnisse. Nach Breuer (2002) beträgt die benötigte Gitterpunktanzahl N einer DNS etwa $N \approx Re^{9/4}$. Damit würden für eine DNS der atmosphärischen Grenzschicht $\approx 10^{18}$ Gitterpunkte benötigt. Dies übersteigt jedoch die gegenwärtig verfügbaren Computerressourcen bei Weitem, sodass DNS eher für die Untersuchung kleinskaliger Strömungen eingesetzt wird.

In RANS-Modellen, zu denen auch heutige Wettervorhersagemodelle zählen, werden die Ensemble-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen auf deutlich größeren Gittern gelöst, wodurch der erforderliche Rechenaufwand verglichen zu einer DNS deutlich geringer ausfällt. Infolge der Ensemblemittelung muss die Turbulenz in RANS-Modellen vollständig durch Parametrisierungen beschrieben werden, sodass RANS-Modelle zur detaillierten Untersuchung turbulenter Strömungen nicht geeignet sind.

Die LES wird häufig als Mittelweg zwischen DNS und RANS bezeichnet. Dies bezieht sich zum einen auf das grundlegende Konzept der Skalentrennung und zum anderen auf die benötigte Rechenzeit. Bei der LES werden die größerskaligen, energietragenden Turbulenzelemente explizit durch das numerische Gitter aufgelöst, wohingegen die kleinerkaligen, energieärmeren Turbulenzelemente (Subskalen) parametrisiert werden. Dazu ist es notwendig, dass die kleinsten noch aufgelösten Wirbel im Inertialbereich liegen und universelle isotrope Eigenschaften aufweisen, damit der Energietransfer von den größeren aufgelösten zu den kleineren parametrisierten Turbulenzskalen entsprechend durch das Subskalenmodell modelliert werden kann.

2.2 Das LES Modell PALM

2.2.1 Modellgleichungen

Für die Beschreibung turbulenter Strömungen werden in PALM die nicht-hydrostatischen, inkompressiblen, gefilterten, Boussinesq-approximierten Bewegungsgleichungen, die Kontinuitätsgleichung, der erste Hauptsatz der Thermodynamik dargestellt durch die potentielle Temperatur θ , sowie eine Erhaltungsgleichung für die spezifische Feuchte q gelöst (Riechelmann et al., 2012):

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} - \epsilon_{ijk} f_j u_k + \epsilon_{i3k} f_3 u_{gk} + \frac{\theta_v - [\theta_v]}{[\theta_v]} g \delta_{i3} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p^*}{\partial x_i} - \frac{\partial \overline{u_i'' u_j''}}{\partial x_j}, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial u_j \theta}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u_j'' \theta''}}{\partial x_j} - w_{\text{sub}} \frac{\partial \theta}{\partial x_3}, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{\partial u_j q}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u_j'' q''}}{\partial x_j} - w_{\text{sub}} \frac{\partial q}{\partial x_3}. \quad (2.4)$$

Es gilt für die Indizes $i, j, k \in (1, 2, 3)$. t bezeichnet die Zeit, u_i steht für die drei Geschwindigkeitskomponenten u, v, w und x_i für die kartesischen Raumrichtungen x ,

y, z . u_{g_i} sind die Komponenten des geostrophischen Winds. ϵ_{ijk} ist der alternierende Einheitstensor, $f_i = (0, 2\Omega \cos(\varphi), 2\Omega \sin(\varphi))$ sind die Coriolisparameter mit der Winkelgeschwindigkeit Ω der Erde und der geographischen Breite φ . δ_{ij} ist das Kronecker-Symbol, g die Schwerebeschleunigung, $\rho_0 = 1 \text{ kg m}^{-3}$ der höhenkonstante Grundzustand der Dichte, p^* der Stördruck und $\theta_v = \theta (1.0 + 0.61 q)$ die virtuelle potentielle Temperatur. Eckige Klammern stehen für ein horizontales Mittel über das Modellgebiet. w_{sub} bezeichnet eine höhenabhängige, horizontal homogene und zeitlich invariante, großräumige Absinkgeschwindigkeit. Doppelt gestrichene Größen kennzeichnen subskalige Größen. In der diskretisierten Form der Gln. 2.1 - 2.4 sind die Variablen implizit durch das numerische Gitter nach der Methode von Schumann (1975) gefiltert und stellen eine über das Gittervolumen gemittelte Größe dar. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind gefilterte Variablen nicht weiter gekennzeichnet, mit Ausnahme der Terme für die subskaligen Flüsse, welche mit einem Überstrich versehen sind. Für eine weiterführende Beschreibung der Filterung in PALM wird auf Gryschka (2010) verwiesen.

2.2.2 Parametrisierung subskaliger Flüsse

Das Gleichungssystem 2.1 - 2.4 enthält mehr Unbekannte als Gleichungen und ist somit nicht geschlossen. Die Schließung des Gleichungssystems erfordert die Parametrisierung der subskaligen Flüsse. In PALM wird ein auf dem Smagorinsky-Modell (Smagorinsky, 1963) basierender Schließungsansatz 1.5-facher Ordnung nach Deardorff (1980) verwendet. Dabei werden die subskaligen Flüsse für Impuls und Skalare über einen Gradientenansatz folgendermaßen mit den aufgelösten Größen verknüpft:

$$\overline{u_i'' u_j''} = -K_m \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} e \delta_{ij}, \quad (2.5)$$

$$\overline{u_i'' \theta''} = -K_h \frac{\partial \theta}{\partial x_i}, \quad (2.6)$$

$$\overline{u_i'' q''} = -K_h \frac{\partial q}{\partial x_i}. \quad (2.7)$$

Die turbulenten Diffusionskoeffizienten für Impuls K_m und Skalare K_h

$$K_m = c_m l \sqrt{e}, \quad (2.8)$$

$$K_h = \left(1 + \frac{2l}{\Delta} \right) K_m, \quad (2.9)$$

sind über die subskalige turbulente kinetische Energie e sowie die gitterweiten- und schichtungsabhängige Mischungsweglänge

$$l = \begin{cases} \min \left(\Delta, 1.8 d, 0.76 \sqrt{e} \left(\frac{g}{[\theta_v]} \frac{\partial \theta_v}{\partial z} \right)^{-1/2} \right), & \text{für } \frac{\partial \theta_v}{\partial z} > 0, \\ \min (\Delta, 1.8 d), & \text{für } \frac{\partial \theta_v}{\partial z} \leq 0, \end{cases} \quad (2.10)$$

parametrisiert. d bezeichnet dabei den senkrechten Abstand zur Erdoberfläche, $c_m = 0.1$ die Smagorinsky-Konstante und $\Delta = \sqrt[3]{\Delta x \Delta y \Delta z}$ die charakteristische Gitterweite. $\Delta x, \Delta y$ und Δz stehen für die entsprechende Gitterweite des Modells in x -, y - und z -Richtung. e wird über folgende prognostische Gleichung bestimmt:

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\frac{\partial (u_j e)}{\partial x_j} - \overline{u_i'' u_j''} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{g}{[\theta_v]} \overline{u_3'' \theta_v''} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{u_j'' \left(e + \frac{p''}{\rho_0} \right)} \right] - \epsilon. \quad (2.11)$$

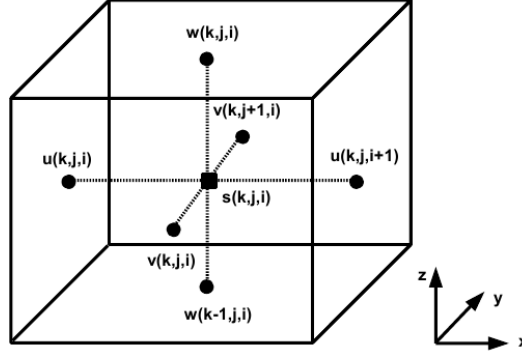


Abbildung 2.1: Anordnung der Variablen im Arakawa-C Gitter (nach Sühling, 2010). Die Indizes i, j, k stehen für die Raumrichtungen x, y, z . Skalare Größen werden als s zusammengefasst.

Der vertikale subskalige Fluss der virtuellen potentiellen Temperatur $\overline{u_3''\theta_v''}$ wird nach Cuijpers und Duynkerke (1993) folgendermaßen bestimmt:

$$\overline{u_3''\theta_v''} = C_1 \overline{u_3''\theta''} + C_2 \overline{u_3''q''}, \quad (2.12)$$

mit

$$C_1 = 1.0 + 0.61 q, \quad (2.13)$$

$$C_2 = 0.61 \theta. \quad (2.14)$$

Die Schließung von Gl. 2.11 erfordert eine Parametrisierung des Dissipationsterms

$$\epsilon = \left(0.19 + 0.74 \frac{l}{\Delta} \right) \frac{e^{3/2}}{l}, \quad (2.15)$$

sowie der Flüsse von subskaliger Turbulenzenergie und Druckschwankungen

$$\overline{u_j'' \left(e + \frac{p''}{\rho_0} \right)} = -2 K_m \frac{\partial e}{\partial x_j}. \quad (2.16)$$

Damit ist das gefilterte Gleichungssystem 2.1 - 2.4 geschlossen.

2.2.3 Räumliche und zeitliche Diskretisierung

Damit das Gleichungssystem 2.1 - 2.4 auf numerischem Wege gelöst werden kann, werden Differentialoperatoren in finite Differenzenquotienten überführt. Dadurch sind die Variablen nur noch für diskrete Punkte in Raum und Zeit definiert. Für die zeitliche Integration der prognostischen Gleichungen wird ein Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung nach Williamson (1980) verwendet. Der verwendete Zeitschritt Δt wird dabei in drei Teilzeitschritte unterteilt und die numerische Lösung des oben genannten Gleichungssystems wird zu drei Zeitpunkten ($t + 1/3\Delta t, t + 3/4\Delta t, t + \Delta t$) berechnet. Anschaulich betrachtet werden dabei die Tendenzterme zu drei verschiedenen Zeitpunkten im Zeitintervall Δt ermittelt und anschließend gewichtet gemittelt. Der dabei verwendete Zeitschritt unterliegt Stabilitätsbeschränkungen. Zum einen muss das CFL-Kriterium¹ (Courant et al.,

¹Courant-Friedrichs-Lewy

1928)

$$\Delta t_{\text{CFL}} \leq \min \left(\frac{\min(\Delta x, \Delta y, \Delta z(k))}{\max(u(i, j, k), v(i, j, k), w(i, j, k))} \right) \Big|_{i, j, k}, \quad (2.17)$$

zum anderen das Diffusionskriterium (Roache, 1985)

$$\Delta t_{\text{Diff}} \leq 0.125 \min \left(\frac{\min(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta z^2(k))}{\max(K_m(i, j, k), K_h(i, j, k))} \right) \Big|_{i, j, k}, \quad (2.18)$$

erfüllt sein. An dieser Stelle sei erwähnt, dass die auftretenden Quotienten in Gln. 2.17-2.18 zunächst lokal für jeden Gitterpunkt (i, j, k) im Modellgebiet bestimmt werden und anschließend das jeweilige Minimum über alle Gitterpunkte im Modellgebiet ermittelt wird. Für den verwendeten Zeitschritt ergibt sich:

$$\Delta t = c_{\Delta t} \min(\Delta t_{\text{CFL}}, \Delta t_{\text{Diff}}). \quad (2.19)$$

$c_{\Delta t} = 0.9$ ist ein Sicherheitsfaktor.

In PALM sind die Variablen auf einem Arakawa-C Gitter (Arakawa und Lamb, 1977) definiert, welches in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt ist. Skalare Größen sind im Mittelpunkt einer Gitterbox definiert, horizontale und vertikale Geschwindigkeitskomponenten hingegen um eine halbe Gitterweite in entsprechend negative bzw. positive Raumrichtung versetzt an den Rändern der jeweiligen Gitterbox. Räumliche Ableitungen von Geschwindigkeitskomponenten können somit ohne zusätzliche Interpolationen auf den Gittermittelpunkt zentriert werden. Gleiches gilt für die Zentrierung räumlicher Ableitungen von Skalaren auf die Ränder der Gitterbox. Insbesondere bei der Druck-Geschwindigkeits Kopplung ist dies von großer Bedeutung (Pielke, 2002).

Die horizontalen Gitterweiten sind im gesamten Modellgebiet äquidistant. In PALM besteht die Möglichkeit, die vertikale Gitterweite oberhalb einer vorgegebenen Höhe zu strecken:

$$\Delta z_{k+1} = \begin{cases} \Delta z_k, & k \leq k_{\text{stretch}}, \\ c_{\text{stretch}} \Delta z_k, & k > k_{\text{stretch}}. \end{cases} \quad (2.20)$$

In dieser Arbeit wurde ein konstanter Faktor von $c_{\text{stretch}} = 1.08$ verwendet.

Die entsprechenden Terme für die aufgelöste Advektion in Gln. 2.1 - 2.4 sowie 2.11 werden standardmäßig mit dem Verfahren fünfter Ordnung nach Wicker und Skamarock (2002) diskretisiert.

Sowohl die räumliche als auch die zeitliche Diskretisierung implizieren Fehler, welche sich vorrangig auf die kleinsten aufgelösten Skalen bis etwa $8\Delta x_i$ auswirken (Baldauf, 2008). Diskretisierungsfehler wirken wie ein zusätzlicher Filter (Sengupta und Nair, 1999) und können das Turbulenzspektrum bei hohen Wellenzahlen stark verfälschen (Kravchenko und Moin, 1996). Aus diesem Grund sollte das aus einer LES resultierende Turbulenzspektrum bei Skalen im Bereich der Gitterweite sehr vorsichtig interpretiert werden.

2.2.4 Sicherstellung der Inkompressibilität

Die Divergenzfreiheit der Strömung wird für jeden Runge-Kutta Teilzeitschritt über eine Prädiktor-Korrektor Methode nach Patrunos und Kistler (1977) realisiert. Die Bewegungsgleichungen 2.1 werden zunächst unter Vernachlässigung des Druckterms gelöst.

Das resultierende, provisorische Geschwindigkeitsfeld $u_{i,\text{prov}}^{t+\Delta t}$ erfüllt im Allgemeinen nicht die Bedingung der Divergenzfreiheit (2.2). Der Stördruckterm wird als eine Art Quellterm in der Bewegungsgleichung 2.1 betrachtet, der so bestimmt wird, dass $u_i^{t+\Delta t}$ die Kontinuitätsgleichung 2.2 erfüllt. Das endgültige Geschwindigkeitsfeld

$$u_i^{t+\Delta t} = u_{i,\text{prov}}^{t+\Delta t} - \frac{r^l \Delta t}{\rho_0} \frac{\partial p^{*t}}{\partial x_i} \quad (2.21)$$

wird dazu in die Kontinuitätsgleichung 2.2 eingesetzt. Die sich daraus ergebende Poisson-Gleichung

$$\frac{\partial^2 p^{*t}}{\partial x_i^2} = \frac{\rho_0}{r^l \Delta t} \frac{\partial u_{i,\text{prov}}^{t+\Delta t}}{\partial x_i}, \quad (2.22)$$

wird mit einem direkten Verfahren von Schumann und Sweet (1988) gelöst. Für den Fall zyklischer Randbedingungen wird die Poisson-Gleichung in beiden horizontalen Raumrichtungen Fourier-transformiert². Das daraus entstehende, tridiagonale Gleichungssystem wird für den transformierten Stördruck gelöst. Dieser wird anschließend wieder zurück in den Ortsraum transformiert und in Gl. 2.1 eingesetzt (Raasch und Schröter, 2001). Damit ist die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfelds sichergestellt. r^l hängt vom Teilzeitschritt l des Runge-Kutta Verfahrens ab. Für das verwendete Runge-Kutta Verfahren dritter Ordnung gilt: $r^1 = 1/3$, $r^2 = 5/12$ und $r^3 = 1/4$. Da r^l in Gl. 2.21 im Zähler und in Gl. 2.22 im Nenner steht, gehen die direkten Werte von r^l effektiv nicht in die Lösung der Bewegungsgleichungen ein und werden daher in Gl. 2.1 nicht mit aufgeführt. Durch die Wichtung des Stördrucks zu den einzelnen Teilzeitschritten wird sichergestellt, dass der effektiv wirkende physikalische Stördruck während des Zeitschritts bestimmt werden kann, was insbesondere für die Bestimmung von Druck-Geschwindigkeits oder Druck-Skalar Korrelationen von großer Bedeutung ist.

2.2.5 Randbedingungen

Infolge der räumlichen Begrenzung des Modellgebiets müssen an den Rändern entsprechende Randbedingungen für die prognostischen Variablen und den Stördruck gesetzt werden. Dabei sollen die Randbedingungen an physikalischen Rändern wie dem Erdboden möglichst sinnvoll gewählt werden. An nicht-physikalischen Rändern werden die Randbedingungen so gewählt, dass der Einfluss auf die Strömung möglichst gering ist.

Für die seitlichen Ränder werden zyklische Randbedingungen genutzt. Dies kommt einer unendlichen periodischen Fortsetzung des Modellgebiets in x - und y -Richtung gleich. Am Oberrand des Modellgebiets (z_t) werden für u und v Dirichlet-Randbedingungen gemäß $u(x, y, z_t) = u_g(z_t)$, $v(x, y, z_t) = v_g(z_t)$ verwendet. Des Weiteren gilt: $w(x, y, z_t) = 0$ und $p^*(x, y, z_t) = 0$. Für e wird am Oberrand eine Neumann-Randbedingung angenommen: $\left. \frac{\partial e}{\partial z} \right|_{z_t} = 0$. Weiterhin wird für θ und q am Oberrand eine Neumann-Randbedingung gemäß den initialen vertikalen Gradienten vorgegeben:

$$\phi(x, y, z_t) = \phi(x, y, z_t - \Delta z) + \left. \frac{\partial \phi_{\text{ini}}}{\partial z} \right|_{z_t} (z_t - \Delta z), \quad \phi \in (\theta, q), \quad (2.23)$$

mit dem Initialprofil ϕ_{ini} der entsprechenden prognostischen Variablen. Um den Einfluss des oberen Rands auf die Simulation der Grenzschicht möglichst gering zu halten, wurde

²Die Fourier-Transformation wird durch einen Fast-Fourier-Algorithmus realisiert.

nahe der Obergrenze des Modellgebiets eine Rayleigh Dämpfung benutzt. Dadurch soll verhindert werden, dass durch Konvektion angeregte Schwerewellen am Oberrand des Modellgebiets reflektiert werden. Dafür wird beim dritten Runge-Kutta Teilzeitschritt folgender Term zu den prognostischen Gleichungen von u_i , θ und q hinzugefügt:

$$-R_{\text{ray}}(\phi(x, y, z) - \phi_{\text{ini}}(z)), \quad \text{mit } \phi \in (u, v, w, \theta, q). \quad (2.24)$$

Für den Koeffizienten R_{ray} gilt (Klemp und Lilly, 1978):

$$R_{\text{ray}} = \begin{cases} 0, & z < z_{\text{ray}}, \\ c_{\text{ray}} \sin^2\left(\frac{\pi}{2} \frac{z - z_{\text{ray}}}{z_t - z_{\text{ray}}}\right), & z \geq z_{\text{ray}}, \end{cases} \quad (2.25)$$

mit $c_{\text{ray}} = 0.1$. $z_{\text{ray}} = 2/3 z_t$ ist die Höhe oberhalb derer gedämpft wird.

Der Unterrand des Modellgebiets bei $z = 0$ entspricht dem Erdboden, der für die Strömung undurchlässig ist, d.h. $w(x, y, z = 0) = 0$. Am Unterrand gelten Haftreibungsbedingungen: $u(x, y, z = 0) = 0$ und $v(x, y, z = 0) = 0$. Damit am Boden keine Vertikalbeschleunigung durch den Drucklöser aufgeprägt wird, gilt die Neumann-Randbedingung $\left.\frac{\partial p^*}{\partial z}\right|_0 = 0$. Für Skalare wird ebenfalls eine Neumann-Randbedingung $\left.\frac{\partial \phi}{\partial z}\right|_0 = 0$ angenommen, mit $\phi \in (e, \theta, q)$.

Zwischen der ersten vertikalen Modellgitterebene und der Erdoberfläche ist die energietragende Turbulenz nicht aufgelöst. Um die dort stattfindenden vertikalen Transporte und deren Einfluss auf die darüberliegenden Luftschichten trotzdem berücksichtigen zu können, müssen die bodennahen subskaligen vertikalen Flüsse bekannt sein. Die bodennahen subskaligen Flüsse fühlbarer und latenter Wärme wurden in dieser Arbeit direkt vorgegeben. Um die bodennahen subskaligen Impulsflüsse $\overline{w''u''}_0$ und $\overline{w''v''}_0$ zu erhalten, wurde zwischen der ersten vertikalen Modellgitterebene ($z_p = 0.5\Delta z$) und der Erdoberfläche eine Prandtlschicht angenommen und die von Monin und Obukhov (1954) entwickelte Ähnlichkeitstheorie (engl.: *Monin-Obukhov similarity theory*, MOST) ausgenutzt. Die sich aus MOST ergebenden bodennahen subskaligen Impulsflüsse gehen dann in die zu lösenden Modellgleichungen ein.

Für die Bestimmung der bodennahen subskaligen Impulsflüsse wird die nach MOST geltende Beziehung

$$\frac{\partial |v_h|}{\partial z} = \frac{u_*}{\kappa z} \phi_m, \quad (2.26)$$

ausgenutzt. $|v_h|$ bezeichnet den Absolutbetrag der horizontalen Windgeschwindigkeit bei z_p und $\kappa = 0.4$ die von Kármán Konstante. Die Schubspannungsgeschwindigkeit u_* ist mit den bodennahen subskaligen Impulsflüssen folgendermaßen verknüpft:

$$u_* = \left((\overline{w''u''}_0)^2 + (\overline{w''v''}_0)^2 \right)^{1/4}. \quad (2.27)$$

An dieser Stelle sei erwähnt, dass diese Beziehung nicht direkt zur Bestimmung der bodennahen subskaligen Impulsflüsse verwendet wird. Nichtsdestotrotz wird Gl. 2.27 im Folgenden benutzt um eine eindeutige Beziehung zur Bestimmung der bodennahen subskaligen Impulsflüsse $\overline{w''u''}_0$ und $\overline{w''v''}_0$ aus u_* zu erhalten. Für die Dyer-Businger Funktion ϕ_m (Businger et al., 1971; Dyer, 1974) für Impuls gilt:

$$\phi_m = \begin{cases} 1 + 5\text{Rif}, & \text{für } \text{Rif} \geq 0, \\ (1 - 16\text{Rif})^{-1/4}, & \text{für } \text{Rif} < 0, \end{cases} \quad (2.28)$$

mit der dimensionslosen Richardson-Zahl

$$\text{Rif} = \frac{z_p \kappa g (\theta_* + 0.61 \theta(z_p) q_*)}{\theta_v(z_p) u_*^2}. \quad (2.29)$$

Für die charakteristische Temperatur θ_* und Feuchte q_* gelten folgende Zusammenhänge:

$$\theta_* = -\frac{\overline{w''\theta''}_0}{u_*}, \quad q_* = -\frac{\overline{w''q''}_0}{u_*}. \quad (2.30)$$

Hierbei ist zu beachten, dass das in Gln. 2.29 - 2.30 verwendete u_* vom Zeitschritt zuvor stammt. Das u_* zum aktuellen Zeitschritt wird durch Integration von Gl. 2.26 (von der Rauiglängelänge z_0 bis z_p) und anschließendem Umstellen folgendermaßen bestimmt:

$$u_* = \begin{cases} \frac{\kappa |v_h|}{\ln\left(\frac{z_p}{z_0}\right) + 5 \text{Rif}\left(\frac{z_p - z_0}{z_p}\right)}, & \text{für Rif} \geq 0, \\ \frac{\kappa |v_h|}{\ln\left(\frac{z_p}{z_0}\right) - \ln\left(\frac{(1+A)^2(1+A^2)}{(1+B)^2(1+B^2)}\right) + 2(\arctan(A) - \arctan(B))}, & \text{für Rif} < 0, \end{cases} \quad (2.31)$$

mit

$$A = (1 - 16 \text{Rif})^{1/4}, \quad B = \left(1 - 16 \text{Rif} \frac{z_0}{z_p}\right)^{1/4}. \quad (2.32)$$

Mithilfe von Gl. 2.27 werden die bodennahen Impulsflüsse mit dem aktuellen u_* folgendermaßen verknüpft:

$$\overline{w''u''}_0 = -u_*^2 \cos(\alpha_0), \quad (2.33)$$

$$\overline{w''v''}_0 = -u_*^2 \sin(\alpha_0), \quad \text{mit } \alpha_0 = \arctan\left(\frac{v(z_p)}{u(z_p)}\right). \quad (2.34)$$

Durch Einsetzen dieser Beziehungen in Gl. 2.26 werden Ausdrücke für die vertikalen Gradienten der horizontalen Geschwindigkeitskomponenten erhalten:

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{-\overline{w''u''}_0}{u_* \kappa z} \phi_m, \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial v}{\partial z} = \frac{-\overline{w''v''}_0}{u_* \kappa z} \phi_m. \quad (2.36)$$

Die vertikale Integration von z_0 bis z_p führt zu folgenden, in PALM verwendeten Beziehungen für die bodennahen subskaligen Impulsflüsse:

$$\overline{w''u''}_0 = \begin{cases} \frac{-u_* \kappa u(z_p)}{\ln\left(\frac{z_p}{z_0}\right) + 5 \text{Rif}\left(\frac{z_p - z_0}{z_p}\right)}, & \text{für Rif} \geq 0, \\ \frac{-u_* \kappa u(z_p)}{\ln\left(\frac{z_p}{z_0}\right) - \ln\left(\frac{(1+A)^2(1+A^2)}{(1+B)^2(1+B^2)}\right) + 2(\arctan(A) - \arctan(B))}, & \text{für Rif} < 0, \end{cases} \quad (2.37)$$

sowie

$$\overline{w''v''}_0 = \begin{cases} \frac{-u_* \kappa v(z_p)}{\ln\left(\frac{z_p}{z_0}\right) + 5 \text{Rif}\left(\frac{z_p - z_0}{z_p}\right)}, & \text{für Rif} \geq 0, \\ \frac{-u_* \kappa v(z_p)}{\ln\left(\frac{z_p}{z_0}\right) - \ln\left(\frac{(1+A)^2(1+A^2)}{(1+B)^2(1+B^2)}\right) + 2(\arctan(A) - \arctan(B))}, & \text{für Rif} < 0. \end{cases} \quad (2.38)$$

Eine weiterführende Beschreibung der in PALM verwendeten Prandtschicht-Beziehungen ist in Steinfeld (2009, Kap. 4.3.4) zu finden.

2.2.6 Initialisierung

Die Initialisierung der prognostischen Felder von θ und q erfolgt durch Vorgabe vertikaler Profile. Die horizontal homogenen Anfangszustände von u , v und e werden unter Berücksichtigung der geostrophischen Windkomponenten, sowie der Initialprofile von θ und q , mittels einer eindimensionalen Version der Modellgleichungen und einem Mischungswegansatz nach Blackadar (1997) prognostisch bestimmt. Damit soll gewährleistet sein, dass sich die mittlere horizontale Strömung zu Beginn der LES im Gleichgewicht mit dem vorgegebenen geostrophischen Wind und der Reibung am Erdboden befindet. Initiale Werte von u_* , $\overline{w''u''}_0$, $\overline{w''v''}_0$, sowie initiale Vertikalprofile von K_m und K_h werden ebenfalls durch das eindimensionale Modell bereitgestellt. Um Turbulenz zu generieren, werden zu Beginn jeder Simulation unkorrelierte, gleichverteilte Zufallsstörungen in konstanten Zeitabständen auf die horizontalen Geschwindigkeitsfelder aufgeprägt, solange bis die TKE einen gewissen Schwellwert überschreitet.

2.3 Das in PALM eingebettete Lagrangesche Partikelmodell

Für die Footprintbestimmung in Artikel C wurde ein in PALM eingebettetes Partikelmodell benutzt. Dabei werden Partikel im Strömungsfeld freigesetzt und ihre Trajektorien bestimmt. Die Position eines Partikels zum Zeitpunkt $t + \Delta t_L$ wird durch

$$X_i(t + \Delta t_L) = X_i(t) + V_i(t) dt_L \quad (2.39)$$

bestimmt. X_i bezeichnet die räumliche Position eines Partikels entsprechend der i -ten Raumkoordinate und V_i die entsprechende Geschwindigkeitskomponente. dt_L bezeichnet den verwendeten Zeitschritt des Lagrangeschen Partikelmodells. Dabei ist zu beachten, dass dt_L nicht notwendigerweise mit dem Zeitschritt des LES Modells übereinstimmen muss. Nach Lamb (1978) kann die Lagrangesche Geschwindigkeit entsprechend des Grundprinzips der LES in einen aufgelösten Anteil V_i^a und einen subskaligen Anteil V_i^s zerlegt werden:

$$V_i = V_i^a + V_i^s. \quad (2.40)$$

V_i^a wird durch Interpolation der entsprechenden LES Geschwindigkeitsfelder auf die Partikelposition bestimmt. Der subskalige Anteil der Partikelgeschwindigkeit zum Zeitpunkt t ergibt sich aus

$$V_i^s(t) = V_i^s(t - \Delta t_L) + \Delta V_i^s. \quad (2.41)$$

ΔV_i^s beschreibt die zeitliche Änderung der subskaligen Partikelgeschwindigkeitskomponente über den Partikelzeitschritt.

Unter der Annahme isotroper und gaußverteilter Turbulenz haben Weil et al. (2004) das Modell von Thomson (1987) auf die Subskala angepasst und folgende stochastische Differentialgleichung zur Bestimmung der subskaligen Geschwindigkeitsänderungen erhalten:

$$dV_i^s = -\frac{3c_s C_0 \epsilon}{4} \frac{V_i^s}{e} dt_L + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{e} \frac{de}{dt_L} V_i^s + \frac{2}{3} \frac{\partial e}{\partial x_i} \right) dt_L + (c_s C_0 \epsilon)^{1/2} d\zeta_i, \quad (2.42)$$

die auch in PALM verwendet wird. $C_0 = 4 \pm 2$ (Thomson, 1987) ist eine universelle Konstante (in PALM wird $C_0 = 3$ verwendet). ζ_i ist ein Vektor bestehend aus gaußverteilten Zufallszahlen, dessen Komponenten weder räumlich noch zeitlich miteinander

korrelieren. Mit dem Faktor

$$c_s = \frac{[e]}{[e_r] + [e]}, \quad 0 \leq c_s \leq 1, \quad (2.43)$$

wird sichergestellt, dass die modellierten subskaligen Geschwindigkeitsänderungen der Partikel im horizontalen Mittel stets kleiner sind als die aufgelösten Geschwindigkeitsänderungen (Weil et al., 2004). Dabei steht e_r für die durch das numerische Gitter aufgelöste TKE. Die eckigen Klammern stehen für ein horizontales Mittel über das LES Modellgebiet. e sowie ϵ werden durch das Subskalenmodell (siehe Gl. 2.11 und 2.15) bereitgestellt. Der erste Term auf der rechten Seite von Gl. 2.42 repräsentiert den Einfluss der subskaligen Partikelgeschwindigkeit zum vorherigen Zeitschritt, also eine Art "Erinnerungsvermögen" des Partikels. Die Zeitspanne in der eine Korrelation zwischen $V_i^s(t - dt_L)$ und $V_i^s(t)$ besteht, wird als Lagrangesche Zeitskala bezeichnet (Weil et al., 2004):

$$T_L = \frac{4}{3} \frac{e}{c_s C_0 \epsilon}. \quad (2.44)$$

Der verwendete Zeitschritt des Partikelmodells sollte daher deutlich kleiner als T_L sein. Der in PALM verwendete Partikelzeitschritt ist stets kleiner gleich $1/40 T_L$.

Der zweite Term auf der rechten Seite von Gl. 2.42 stellt sicher, dass die von Thomson (1987) aufgestellte Bedingung der guten Durchmischung (engl.: *well-mixed condition*³) erfüllt ist. Dieser Term kann als eine Art Driftkorrektur verstanden werden. Dadurch wird verhindert, dass sich überproportional viele Partikel in Regionen geringer Turbulenzintensität ansammeln (Rodean, 1996). Der dritte Term auf der rechten Seite von Gl. 2.42 ist rein stochastischer Natur und beschreibt die subskalige Diffusion der Partikel durch einen gaußverteilten Zufallsprozess. Für eine detaillierte Herleitung und Diskussion von Gl. 2.42 wird auf Thomson (1987), Rodean (1996) und Weil et al. (2004) verwiesen.

Die für Gl. 2.40 sowie Gl. 2.42 benötigten Werte der aufgelösten Geschwindigkeitskomponenten sowie e und ϵ , werden aus den Feldern der LES auf die aktuelle Partikelposition interpoliert (Steinfeld et al., 2008). Dafür werden die entsprechenden Variablen zunächst in der ober- und unterhalb des Partikels liegenden LES-Gitterebene bilinear auf die entsprechende xy -Position des jeweiligen Partikels interpoliert. Anschließend wird mithilfe einer linearen Interpolation in vertikaler Richtung die entsprechende Variable an der aktuellen Partikelposition bestimmt. Eine Ausnahme bilden die aufgelösten Anteile der horizontalen Geschwindigkeitskomponenten unterhalb der ersten vertikalen Modellgitterebene. Da hier eine Prandtlschicht und somit eine logarithmische Windbeziehung vorliegt, würde eine lineare Interpolation in vertikaler Richtung zu einer signifikanten Unterschätzung der aufgelösten horizontalen Partikelgeschwindigkeiten führen. Daher werden die aufgelösten horizontalen Geschwindigkeitskomponenten für Partikel, die sich im Höhenintervall zwischen z_0 und z_p befinden, mithilfe von MOST bestimmt (siehe Abschnitt 2.2.5). Dafür werden zunächst die bekannten Werte von u_* , Rif , $\overline{w''u''}_0$ und $\overline{w''v''}_0$ bilinear auf die entsprechende xy -Position des jeweiligen Partikels interpoliert. Anschließend werden die Gln. 2.37 - 2.38 benutzt, um daraus die aufgelösten horizontalen Partikelgeschwindigkeiten in der entsprechenden Höhe zu bestimmen. Es wird angemerkt, dass dabei in den Gln. 2.37 - 2.38 anstelle von z_p die jeweilige Partikelhöhe verwendet wurde. In dem Fall, dass sich ein Partikel unterhalb von z_0 befindet, werden die aufgelösten horizontalen Geschwindigkeitskomponenten auf Null gesetzt.

Am Erdboden werden die Partikel reflektiert. An den seitlichen Rändern des Modellgebiets werden für die Partikel zyklische Randbedingungen angenommen.

³Eine ursprünglich gleichmäßige Verteilung von Partikelorten und -geschwindigkeiten muss bei der zeitlichen Integration erhalten bleiben, solange keine Quellen oder Senken vorhanden sind.

2.4 Lagrangesches stochastisches Footprintmodell

Für die Footprintbestimmung in Artikel C wurde auch ein LS Footprintmodell benutzt. Dabei kam das von Kljun et al. (2002) entwickelte Lagrangesche stochastische Footprintmodell (LPDM-B) zum Einsatz. Das LPDM-B basiert auf der Bestimmung von Partikeltrajektorien ähnlich zu Gl. 2.39. Im Gegensatz zu dem Lagrangeschen Partikelmodell in PALM, ist das LPDM-B aber ein Rückwärtsmodell, bei dem die Partikelposition zum Zeitpunkt $t - \Delta t_L$ aus der Partikelposition zum Zeitpunkt t bestimmt wird, d.h. es wird ein negativer Zeitschritt verwendet. Die Partikel werden dabei zu Beginn der Simulation am Messsensor freigesetzt und bis zu ihren Quellorten zurückverfolgt.

Im LPDM-B wird Turbulenz vollständig parametrisiert und die Partikelverlagerung wird über einen rein stochastischen Ansatz beschrieben. Die Änderung der Partikelgeschwindigkeit wird durch die allgemeine Langevin-Gleichung bestimmt:

$$dV_i^P = a_i + b_{ij} d\zeta_j. \quad (2.45)$$

Es gilt $b_{ij} = \sqrt{C_0\epsilon}$ mit $C_0 = 3$. Der zweite Term auf der rechten Seite von Gl. 2.45 beschreibt einen rein stochastischen gaußverteilten Zufallsprozess, äquivalent zu Gl. 2.42. Der erste Term auf der rechten Seite von Gl. 2.45 beinhaltet sowohl eine Driftkorrektur als auch die "Erinnerung" des Partikels. a_i wird so bestimmt, dass die von Thomson (1987) aufgestellte Bedingung der guten Durchmischung erfüllt ist. Es gilt:

$$a_i = \frac{1}{P(V_i^P)} \left(\frac{C_0\epsilon}{2} \frac{\partial P(V_i^P)}{\partial V_i^P} \right), \quad (2.46)$$

mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Partikelgeschwindigkeit $P(V_i^P)$. Mathematisch kann a_i in eine Formulierung überführt werden, die äquivalent (mit Ausnahme von c_s) zu den ersten beiden Termen auf der rechten Seite von Gl. 2.42 ist (Rodean, 1996). Das LPDM-B ist über einen weiten Bereich an thermischen Schichtungen sowie über die gesamte vertikale Erstreckung der Grenzschicht anwendbar (Kljun et al., 2002). Um dies zu gewährleisten, wird $P(V_i^P)$ in Abhängigkeit von der thermischen Schichtung der Grenzschicht, der Höhe des Partikels, der Grenzschichthöhe, den horizontalen und vertikalen Geschwindigkeitsvarianzen in der Grenzschicht, sowie der Schiefe der Vertikalgeschwindigkeit modelliert. Eine detaillierte Beschreibung dazu wird in Rotach et al. (1996) gegeben. Details zu den im LPDM-B verwendeten Turbulenz- und Windgeschwindigkeitsparametrisierungen in der Grenzschicht werden in Rotach et al. (1996) sowie de Haan und Rotach (1998) beschrieben.

Kljun et al. (2002) haben gezeigt, dass die Partikelausbreitung in einem Rückwärtsmodell stark von der initialen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Partikelgeschwindigkeiten abhängt. Eine realistische initiale Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion wird über einen Vorlauf bestimmt, bei dem die Partikelgeschwindigkeiten unter Verwendung von 2.45 modelliert werden, jedoch keine Partikelverlagerung stattfindet.

Partikel werden an der Erdoberfläche sowie am Oberrand der Grenzschicht reflektiert.

2.5 Analysemethoden

Im Folgenden werden die in dieser Arbeit verwendeten Analysemethoden beschrieben. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die in diesem Abschnitt verwendeten Variablenbezeichnungen sowie Notationen für horizontale und zeitliche Mittel und entsprechende Abweichungen davon nicht immer mit den in den Artikeln A-C verwendeten Bezeichnungen und Notationen übereinstimmen.

2.5.1 Untersuchung des Heterogenitätseinflusses auf die Grenzschicht

Zur Untersuchung des Heterogenitätseinflusses auf die konvektive Grenzschicht wurde eine räumliche Autokorrelationsanalyse zwischen den vorgegebenen bodennahen Wärmeflüssen und den turbulenten Wärmeflüssen in der Grenzschicht durchgeführt. Die bodennahen Wärmeflüsse wurden in den Simulationen direkt vorgegeben. Die vertikalen turbulenten Wärmeflüsse wurden mithilfe der zeitlichen Eddy-Kovarianz Methode für jeden Gitterpunkt bestimmt:

$$\widehat{w'\psi'} = \widehat{w\psi} - \widehat{w}\widehat{\psi}, \quad \text{mit } \psi \in (\theta, q). \quad (2.47)$$

Das oben stehende "Dach" kennzeichnet ein zeitliches Mittel über 30 Minuten. Turbulente Anteile sind durch einen hochstehenden Strich gekennzeichnet. Die räumliche Autokorrelationsanalyse nach Lohou et al. (1998, 2000) wurde für jede diskrete Höhe des Modellgebiets durchgeführt:

$$\rho_{\psi_s, \phi}(\delta x, \delta y, z) = \frac{\sum_{x=x_1}^{x_u} \sum_{y=y_1}^{y_u} \tilde{\psi}_s(x, y) \cdot \tilde{\phi}(x + \delta x, y + \delta y, z)}{\sqrt{\sum_{x=x_1}^{x_u} \sum_{y=y_1}^{y_u} (\tilde{\psi}_s(x, y))^2 \sum_{x=x_1}^{x_u} \sum_{y=y_1}^{y_u} (\tilde{\phi}(x, y, z))^2}}. \quad (2.48)$$

$\rho_{\psi_s, \phi} \in [-1, 1]$ ist der Korrelationskoeffizient zwischen dem vorgegebenen bodennahen Fluss ψ_s und dem vertikalen turbulenten Fluss ϕ in der Höhe z . $\delta x, \delta y$ bezeichnen die räumliche Verschiebung zwischen $\tilde{\phi}$ und $\tilde{\psi}_s$ in x - und y -Richtung. Die Tilde kennzeichnet die Abweichung der jeweiligen Größe von ihrem horizontalen Mittelwert. x_1, x_u, y_1 und y_u bezeichnen die linken, rechten, südlichen sowie nördlichen Grenzen des LES Modellgebiets. Verglichen mit einer gewöhnlichen Korrelationsanalyse ohne räumliche Verschiebung, hat diese räumliche Autokorrelationsanalyse den Vorteil, dass der durch den mittleren Wind verursachte räumliche Versatz von Heterogenitätssignalen mit der Höhe berücksichtigt wird. Dadurch kann ein umfassenderes Bild des Heterogenitätseinflusses auf die Grenzschicht erhalten werden.

2.5.2 Virtuelle Flugmessungen

In dieser Arbeit wurden virtuelle Flugmessungen nach der Methode von Schröter et al. (2000) durchgeführt. Ziel der virtuellen Flugmessungen war es, vertikale turbulente Wärmeflüsse entlang verschiedener Flugpfade im LITFASS-Gebiet zu bestimmen. Dabei bewegt sich ein virtueller Sensor entlang einer vorgegebenen Strecke durch das Modellgebiet und speichert Werte von θ, q und w entlang des Pfads. θ, q und w wurden bilinear auf die Sensorposition interpoliert. Virtuelle Messungen entlang eines Flugpfads fanden simultan in jeder vertikalen Gitterebene des Modellgebiets statt, sodass es möglich war, vertikale Flussprofile abzuleiten.

Aus den gemessenen Raum-Zeit Serien wurden vertikale turbulente Flüsse fühlbarer und latenter Wärme äquivalent zu Bange et al. (2006a) abgeleitet. Die turbulenten Fluktuationen wurden bestimmt, indem der jeweilige lineare Trend sowie Mittelwert abgezogen wurde. Der vertikale turbulente Fluss F ergibt sich dann aus der Multiplikation der entsprechenden Raum-Zeit Serien der turbulenten Anteile und einer anschließenden Mittelung über den Flugpfad.

Lenschow et al. (1994) haben, basierend auf der Arbeit von Lumley und Panofsky (1964) sowie Lenschow und Stankov (1986) interne Fehlermaße zur Quantifizierung der

Unsicherheit des gemessenen Flusses abgeleitet. Der Fehler der Flussmessung setzt sich dabei aus einem systematischen und einem zufälligen Fehler zusammen. Systematische Fehler entstehen durch eine unzureichende Erfassung der größten Turbulenzskalen, die einen Großteil des vertikalen Transports in der konvektiven Grenzschicht ausmachen (Mahrt, 1998). Bei realen Messungen können weitere systematische Fehler aufgrund der Messtechnik sowie aufgrund von Variationen der Flughöhe und -geschwindigkeit auftreten, die in der LES jedoch nicht vorkommen und im Weiteren nicht betrachtet werden. Nach Lenschow et al. (1994) ist der systematische Fehler ΔF folgendermaßen definiert:

$$\Delta F \leq \frac{2}{\rho_{w,\psi}} \frac{\sqrt{I_w I_\psi}}{L_{\text{Pf}}} F, \quad (2.49)$$

mit dem Korrelationskoeffizienten $\rho_{w,\psi}$ zwischen den Raum-Zeitserien von w und $\psi \in (\theta, q)$ sowie der Länge des Flugpfads L_{Pf} . I_w und I_ψ sind die integralen Längenskalen von w und ψ . Die integrale Längenskala kann als die maximale räumliche Distanz aufgefasst werden, in der eine atmosphärische Variable mit sich selber korreliert, d.h. als eine charakteristische Länge der in der Grenzschicht auftretenden Turbulenzelemente (Lothon et al., 2007). Die integrale Längenskala einer beliebigen Variablen ϕ kann über das Integral der Autokorrelationsfunktion der Raum-Zeit Serie

$$I_\phi = \int_0^{r_{v0}} dr_v \frac{\langle \phi(r + r_v) \phi(r) \rangle}{\langle \phi'^2 \rangle}, \quad (2.50)$$

bestimmt werden (Lenschow und Stankov, 1986). r beschreibt dabei den Ort, r_v die räumliche Verschiebung, r_{v0} die räumliche Verschiebung des Nulldurchgangs der Autokorrelationsfunktion und $\langle \phi'^2 \rangle$ die Varianz von ϕ entlang des Flugpfads. Spitze Klammern $\langle \rangle$ zeigen ein Mittel über die Raum-Zeit Serie an.

Der zufällige Fehler der Flussmessung σ_F beschreibt die Standardabweichung des Flusses und wurde folgendermaßen bestimmt (Lenschow et al., 1994):

$$\sigma_F \leq \frac{2}{\rho_{w,\psi}} \sqrt{\frac{\sqrt{I_w I_\psi}}{L_{\text{Pf}}}} |F|. \quad (2.51)$$

Der Gesamtfehler einer Flussmessung ergibt sich aus der Summe von ΔF und σ_F .

2.5.3 Bestimmung der lokalen Entrainmentrate

In Artikel B wurde der Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf das Entrainment untersucht. Für diese Studie wurden idealisierte Oberflächenheterogenitäten entlang der x -Achse des Modellgebiets vorgegeben. Entlang der y -Achse des Modellgebiets herrschten homogene Bedingungen vor. Artikel B beschreibt eine neu entwickelte Methode zur direkten Bestimmung lokaler Entrainmentraten über heterogen geheizten Oberflächen. Die Grundidee dieser Methode besteht darin, Entrainment als eine räumliche Umverteilung von Wärme aufzufassen. Durch diese Umverteilung wird die konvektive Grenzschicht erwärmt, gleichzeitig wird die Inversionsschicht abgekühlt, da die kühlere Luft aus der Grenzschicht die wärmere Luft in der Inversionsschicht ersetzt. Die lokale zeitliche Änderung der potentiellen Temperatur wird durch Gl. 2.3 beschrieben. Die auf der rechten Seite von Gl. 2.3 stehenden Terme für die aufgelöste Advektion $-\partial u_j \theta / \partial x_j$ sowie den subskaligen Transport fühlbarer Wärme $-\overline{\partial u_j'' \theta''} / \partial x_j$ wurden direkt aus der Diskretisierung der Advektionsterme sowie aus der Parametrisierung der subskaligen Flüsse

bestimmt. Ein großräumiges Absinken wurde in dieser Untersuchung nicht verwendet. Die Summe der auf der rechten Seite von Gl. 2.3 stehenden Terme wird im Weiteren als Flussdivergenz D bezeichnet. Ein positives D bedeutet eine lokale zeitliche Erwärmung, ein negatives D eine lokale zeitliche Abkühlung. D wurde entlang der homogenen y -Achse des Modellgebiets gemittelt, was im Folgenden durch $\langle \rangle_y$ gekennzeichnet wird. Im Weiteren wurde $\langle D(x, z, t) \rangle_y$ noch über 8 Ensemble-Läufe gemittelt. Zur Bestimmung lokaler Entrainmentraten E aus der y -gemittelten Flussdivergenz wurde über den Bereich mit lokalem negativem $\langle D(x, z, t) \rangle_y$ vertikal integriert:

$$\langle E(x, t) \rangle_y = \int_{z_1(x, t)}^{z_u(x, t)} dz \langle D(x, z, t) \rangle_y. \quad (2.52)$$

Die untere Integrationsgrenze $z_1(x, t)$ ist die Höhe in der $\langle D(x, z, t) \rangle_y$ negative Werte annimmt und sein Vorzeichen über die vier darüber liegenden Gitterpunkte nicht ändert. Die obere Integrationsgrenze $z_u(x, t)$ ist der Oberrand des Modellgebiets. Physikalisch beschreibt $\langle E(x, t) \rangle_y$ die mittlere Abkühlung der Inversionsschicht an einer x -Position durch Entrainment.

2.5.4 Footprintbestimmung

In Artikel C wurden Flussfootprints über homogenen und heterogenen Landoberflächen mittels LES bestimmt. Unter Annahme einer horizontal homogenen Quellstärke $Q_{0, \phi}$ an der Erdoberfläche lässt sich der Footprint f einer Flussmessung mathematisch folgendermaßen ausdrücken (Vesala et al., 2008):

$$f(x_0, y_0) = \frac{1}{Q_{0, \phi}} \frac{\partial^2 F_\phi(x_0, y_0)}{\partial x_0 \partial y_0}, \quad (2.53)$$

wobei F_ϕ den am Sensorort gemessenen Fluss einer beliebigen skalaren Größe ϕ mit den Quellkoordinaten x_0 und y_0 bezeichnet. Bei der Footprintbestimmung mit einem Lagrangeschen Partikelmodell repräsentiert jedes Partikel eine bestimmte Konzentration der Größe ϕ . In dieser Studie wurden Partikel nahe der Erdoberfläche freigesetzt und deren Trajektorien berechnet. Nach dem Prinzip der invertierten Schadstoffwolke (engl.: *inverted plume assumption*; Schmid, 2002), besitzt im homogenen Fall jedes freigesetzte Partikel dieselbe Wahrscheinlichkeit in einem bestimmten xy -Abstand zu seinen Quellkoordinaten eine bestimmte Höhe zu durchkreuzen (Steinfeld et al., 2008). Im homogenen Fall kann daher die Annahme einer horizontal unendlich ausgedehnten Sensorfläche getroffen werden (Steinfeld et al., 2008). Unter Benutzung der in Kurbanmuradov et al. (2001) gegebenen Formel (homogener Fall)

$$f_{\text{LES}}(x_0, y_0) = \frac{1}{N^p \Delta x_a \Delta y_a} \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^{n_l} \frac{w_{lk}^p}{|w_{lk}^p|} G(X_{lk}, Y_{lk}), \quad (2.54)$$

wurden Flussfootprints im Anschluss an die LES mithilfe eines eigenständigen FORTRAN90 Programms bestimmt, basierend auf den Arbeiten von Steinfeld et al. (2008). f_{LES} bezeichnet den LES Footprint, N^p die Anzahl der insgesamt freigesetzten Partikel, n_l die Anzahl der Schnittpunkte der Partikeltrajektorie des l -ten Partikels mit der Messhöhe des Sensors, und w_{lk}^p ist die entsprechende vertikale Komponente der Partikelgeschwindigkeit beim k -ten Durchkreuzen der Messhöhe. X_{lk} , Y_{lk} bezeichnen die

horizontale Distanz zwischen Partikelquelle und Kreuzungspunkt des Partikels mit der Messhöhe in x - und y -Richtung. $\Delta x_a = \Delta y_a = 10$ m sind die Gitterweiten des Auswertegitters. Es gilt $G = 1$, wenn die Trajektorie des l -ten Partikels die Messhöhe im Koordinatenintervall $x_0 - \frac{\Delta x_a}{2} \leq X_{lk} < x_0 + \frac{\Delta x_a}{2}$ und $y_0 - \frac{\Delta y_a}{2} \leq Y_{lk} < y_0 + \frac{\Delta y_a}{2}$ schneidet, ansonsten gilt $G = 0$. Sobald ein Partikel während der LES eine vorbestimmte Messhöhe durchkreuzt, werden die für Gl. 2.54 notwendigen Partikeldaten während der LES in Binärdateien geschrieben.

Im heterogenen Fall kann das Prinzip der invertierten Schadstoffwolke nicht angewendet werden (Schmid, 2002). Daher ist f_{LES} im Gegensatz zum homogenen Fall direkt von der xy -Position des Sensors abhängig. Jedoch ist die Wahrscheinlichkeit, dass genügend Lagrangesche Partikel einen Sensor mit einer typischen Fläche von wenigen Quadratzentimetern durchkreuzen sehr gering. Daher wurde im heterogenen Fall ein Sensor mit einer horizontalen Ausdehnung von $10 \times 10 \text{ m}^2$ in x - und y -Richtung benutzt. Nach Steinfeld et al. (2008) ist dieses Vorgehen gerechtfertigt, solange die Sensorfläche klein gegenüber der Fläche der darunter liegenden Oberflächenheterogenität bleibt. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Partikel die gegebene Sensorfläche in einem bestimmten xy -Abstand zu seinen Quellkoordinaten kreuzt, hängt im heterogenen Fall von den Quellkoordinaten des Partikels ab. Um sicherzustellen, dass f_{LES} im heterogenen Fall nur durch Partikel normiert wird die potentiell einen Beitrag zum Footprint leisten können, haben Steinfeld et al. (2008) N^{P} in Gl. 2.54 durch die effektive Partikelanzahl $N_{\text{eff}}^{\text{P}}$ ersetzt. $N_{\text{eff}}^{\text{P}}$ ist die Anzahl der freigelassenen Partikel aus einer Quellfläche mit identischer Größe zur Sensorfläche.

Neben den LES Footprints wurden außerdem Footprints mit dem von Kljun et al. (2002) entwickelten Rückwärtsmodell LPDM-B (Abschnitt 2.4) bestimmt. Der Footprint aus einem Rückwärtsmodell (engl.: *backward model*) bestimmt sich nach Flesch et al. (1995) folgendermaßen:

$$f_{\text{BW}}(x_0, y_0) = \frac{2}{N^{\text{P}} \Delta x_a \Delta y_a} \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^{n_l} \frac{w_{0l}^{\text{p,BW}}}{w_{lk}^{\text{p,BW}}} G(X_{lk}, Y_{lk}), \quad (2.55)$$

mit der initialen Vertikalgeschwindigkeit $w_{0l}^{\text{p,BW}}$ des l -ten Partikels am Sensor, sowie der Vertikalgeschwindigkeit $w_{lk}^{\text{p,BW}}$ des l -ten Partikels bei der k -ten Reflexion an der Erdoberfläche. X_{lk} , Y_{lk} , $w_{lk}^{\text{p,BW}}$ sowie $w_{0l}^{\text{p,BW}}$ sind direkte Ausgabegrößen des LPDM-B. Der Faktor 2 in Gl. 2.55 ist durch die Reflexion der Partikel am Erdboden bedingt, dadurch das ein Partikel eine infinitesimale vertikale Quellausdehnung zweimal durchfliegt und sich somit die Aufenthaltszeit des Partikels in der Quellregion verdoppelt (Flesch et al., 1995). Eine detaillierte Herleitung von Gl. 2.55 wird in Flesch et al. (1995) sowie Kljun et al. (2002) gegeben.

3 Wissenschaftliche Artikel

Dieses Kapitel umfasst die drei in diesem Promotionsvorhaben entstandenen Artikel A-C. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass Variablenbezeichnungen und Notationen in den Artikeln unterschiedlich sein können und nicht notwendigerweise mit denen in den Kapiteln 1 - 2 verwendeten Variablenbezeichnungen und Notationen übereinstimmen.

In **Artikel A** wird untersucht, ob eine Mischungshöhe für turbulente Flüsse in der konvektiven Grenzschicht existiert und wie hoch die Signale der Oberflächenheterogenität reichen. Die dafür durchgeführten Untersuchungen basieren auf Simulationen für zwei Tage des LITFASS-2003 Experiments mit unterschiedlichen meteorologischen Bedingungen. Des Weiteren werden anhand von virtuellen Flugmessungen über verschiedenen Oberflächentypen die messstrategischen Anforderungen untersucht, um Heterogenitätssignale anhand von Flugmessungen erfassen zu können. Zudem werden die Gründe aufgezeigt, warum aus den Flugmessungen während LITFASS-2003 keine eindeutigen Schlussfolgerungen über den Heterogenitätseinfluss in der Grenzschicht gezogen werden konnten.

In **Artikel B** wird der Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf das Entrainment am Oberrand der Grenzschicht untersucht, basierend auf Simulationen für verschiedene Heterogenitätsamplituden und -skalen sowie verschiedene meteorologische Bedingungen. Damit der Einfluss verschiedener Heterogenitätsamplituden und -skalen voneinander getrennt analysiert werden kann, werden für diese Studie idealisierte eindimensionale Heterogenitäten im bodennahen fühlbaren Wärmestrom vorgegeben. Des Weiteren werden die zugrunde liegenden physikalischen Ursachen des Heterogenitätseinflusses auf das Entrainment identifiziert. Zudem wird eine neu entwickelte Methode zur Ableitung lokaler Entrainmentraten über heterogenen Oberflächen vorgestellt.

Artikel C beschäftigt sich mit der Footprintbestimmung für Turbulenzmessungen über heterogenen Oberflächen. Footprints werden an zwei Tagen des LITFASS-2003 Experiments für einen 99-m Turm bestimmt. Im Rahmen einer Machbarkeitsstudie werden zunächst die Anforderungen ermittelt, um aus der LES realistische und statistisch aussagekräftige Footprints über heterogenen Oberflächen ableiten zu können. Des Weiteren werden Footprints mit einem konventionellen LS Footprintmodell bestimmt. Die LES Footprints werden mit den LS Footprints verglichen und es werden Unsicherheiten bei der Footprintbestimmung mit dem LS Modell aufgezeigt.

3.1 Artikel A: Heterogeneity-induced heat-flux patterns in the convective boundary layer: can they be detected from observations and is there a blending height? – A large-eddy simulation study for the LITFASS-2003 experiment

3.1.1 Beitrag des Autors

Alle Simulationen und Analysen wurden vom Autor durchgeführt. Das Setup der LITFASS-Simulationen basiert auf Vorarbeiten von Uhlenbrock (2006) sowie Maronga und Raasch (2013). Die mit dem Helipod gemessenen Flüsse sowie die dazugehörigen Fehlerabschätzungen wurden von Prof. Dr. Jens Bange und Yvonne Breitenbach bereitgestellt. Das Manuskript wurde vom Autor verfasst. Sprachkorrekturen wurden von 'Textcheck'¹ durchgeführt. Vorschläge von und Diskussionen mit Prof. Dr. Siegfried Raasch trugen dazu bei die Qualität des Manuskripts zu verbessern. Des Weiteren profitierte das Manuskript von den Vorschlägen zweier externer Gutachter.

3.1.2 Publizierter Artikel

Dieser Artikel wurde als Open-Access in Boundary-Layer Meteorology veröffentlicht.
Eingereicht: 15.11.2012, Akzeptiert: 26.03.2013

Sühning, M., S. Raasch, 2013: Heterogeneity-induced heat-flux patterns in the convective boundary layer: can they be detected from observations and is there a blending height? – A large-eddy simulation study for the LITFASS-2003 experiment. *Boundary-Layer Meteorol.*, **148**, 309–331, doi: 10.1007/s10546-013-9822-1.

¹www.textcheck.com

Heterogeneity-Induced Heat-Flux Patterns in the Convective Boundary Layer: Can they be Detected from Observations and is There a Blending Height?—A Large-Eddy Simulation Study for the LITFASS-2003 Experiment

Matthias Sühring · Siegfried Raasch

Received: 15 November 2012 / Accepted: 26 March 2013 / Published online: 14 April 2013
© The Author(s) 2013. This article is published with open access at Springerlink.com

Abstract An understanding of how the convective boundary layer (CBL) is mixed under heterogeneous surface forcing is crucial for the interpretation of area-averaged turbulence measurements. To determine the height and degree to which a complex heterogeneous surface affects the CBL, large-eddy simulations (LES) for two days of the LITFASS-2003 experiment representing two different wind regimes were undertaken. Spatially-lagged correlation analysis revealed the turbulent heat fluxes to be dependent on the prescribed surface flux pattern throughout the entire CBL including the entrainment layer. These findings prompted the question of whether signals induced by surface heterogeneity can be measured by airborne systems. To examine this question, an ensemble of virtual flights was conducted using LES, according to Helipod flight measurements made during LITFASS-2003. The resulting ensemble-averaged heat fluxes indicated a clear dependence on the underlying surface up to the top of the CBL. However, a large scatter between the flux measurements in different ensemble runs was observed, which was the result of insufficient sampling of the largest turbulent eddies. The random and systematic errors based on the integral length scale did not indicate such a large scatter. For the given flight leg lengths, at least 10–15 statistically independent flight measurements were necessary to give a significant estimate of heterogeneity-induced signals in the CBL. The need for ensemble averaging suggests that the observed blending of heterogeneity-induced signals in the CBL can be partly attributed to insufficient averaging.

Keywords Aircraft observation · Blending height · Convective boundary layer · Large-eddy simulation · LITFASS-2003

M. Sühring (✉) · S. Raasch
Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, Herrenhäuser Str. 2,
30419 Hannover, Germany
e-mail: suehring@muk.uni-hannover.de

1 Introduction

The blending height, z_b , refers to the height at which the influence of a heterogeneous surface gradually decreases below some threshold because of an increase in eddy size accompanied by the increased mixing of surface properties with height (Mahrt 2000). For both observational and modelling purposes it is often assumed that z_b exists. For example, the interpretation of area-averaged flux measurements and footprint analysis is based on the assumption that the convective boundary layer (CBL) is well mixed. Therefore, a knowledge of the extent to which the CBL is mixed above a heterogeneous surface is crucial for appropriate interpretations (Meijninger et al. 2002). In numerical weather prediction (NWP) models surface heterogeneities smaller than the numerical grid size are often parametrized by flux aggregation methods such as the mosaic or tile approach, where the flux of a quantity at the first grid level is an average of the calculated surface fluxes for each patch or surface type within the grid box (Ament and Simmer 2006). This, in turn, implies that z_b exists at the first grid level, independent of the atmospheric conditions. Other proposed aggregation methods, e.g. by Blyth (1995) or Molod et al. (2003), use an explicit blending height that does not depend on the grid size, but require explicit knowledge at which level the surface heterogeneity signals are blended.

The blending-height concept is a scale-dependent issue, where blending over smaller scales occurs at lower levels compared to blending over larger scales. Depending on the scale of the surface heat-flux or roughness heterogeneity, as well as dynamic and thermodynamic parameters of the flow, various analytically derived estimates of z_b exist and have been described in detail by Mahrt (2000) and Strunin et al. (2004).

For neutral conditions Bou-Zeid et al. (2007) confirmed the existence of z_b in their large-eddy simulations (LES) over surface roughness heterogeneities. They also found an agreement between the observed z_b and common analytically derived estimates. However, for convective conditions there is still no consensus on whether z_b exists. Using LES, Brunzell et al. (2011) investigated the interaction between the atmosphere and the underlying surface for different length scales of surface heterogeneity. A wide range of length scales was covered from small-scale heterogeneities to scales up to ten times larger than the boundary-layer depth, z_i . A spectral analysis showed that turbulent heat fluxes are distributed at similar length scales within the CBL, independent of the underlying heterogeneity length scale, with the exception of the lowest 100–200 m. This suggests that heat fluxes are blended above this level. However, although a spectral analysis provides information regarding the spectral energy at a certain scale, it does not indicate the flow organization with respect to the underlying surface, which might be completely different above heterogeneous surfaces compared to homogeneous surfaces. Albertson and Parlange (1999), in their LES of idealized surface heterogeneities, showed that z_b also exists under convective conditions, except for strong convective conditions and surface heterogeneities with a horizontal length scale significantly $> z_i$. For such situations an influence of surface heterogeneity on the entrainment processes was also found.

If the heterogeneity length scale is $> z_i$, secondary circulations (SC) develop that extend throughout the CBL (Shen and Leclerc 1995; Raasch and Harbusch 2001; Patton et al. 2005). Patton et al. (2005) showed that the strongest SCs occur if the ratio between the heterogeneity length scale and z_i is between 4 and 9. Maronga and Raasch (2013), hereafter MR13, reported that the SCs contributed up to 20 % of the total sensible heat flux and up to 39 % of the total latent heat flux in their LES for the complex heterogeneous terrain of the LITFASS-2003 experiment (Beyrich and Mengelkamp 2006). In general, the existence of SCs throughout the bulk of the CBL conflicts with the concept of a blending height.

Using LES, [van Heerwaarden and de Arellano \(2008\)](#), [Fesquet et al. \(2009\)](#), [Wang et al. \(2011\)](#) and MR13 found a correlation between the local boundary-layer depth $z_{i,\text{local}}$ and the underlying sensible surface heat flux that produced larger values of $z_{i,\text{local}}$ over warmer patches and smaller values over colder patches. [van Heerwaarden and de Arellano \(2008\)](#) attributed the varying values of $z_{i,\text{local}}$ in their study of idealized heterogeneities to rising SC updrafts that led to increased entrainment above the more strongly heated patches. In contrast, MR13 attributed the varying spatial values of $z_{i,\text{local}}$ to the encroachment effect ([Stull 1988](#)) because the SCs correlated with the edges of the underlying surface patches in their LES and not with the centres of the surface patches as did $z_{i,\text{local}}$. Both mechanisms indicate that the CBL is not well-mixed horizontally up to the top of the CBL.

The effect of heterogeneous surface forcing on the CBL was also investigated using airborne measurements. [Strunin et al. \(2004\)](#) observed surface heterogeneity-induced internal boundary layers that extended throughout the bulk of the CBL. [Kang et al. \(2007\)](#) reported spatial variations in $z_{i,\text{local}}$ and inferred that z_b exceeds $z_{i,\text{local}}$. [Gorska et al. \(2008\)](#) found spatial variability in potential temperature θ and specific humidity q in the upper part of the CBL that correlated with the underlying surface fluxes. They attempted to estimate the local entrainment rate from airborne measurements and suggested slightly higher values above stronger heated patches. Airborne flux measurements made during LITFASS-2003 were analyzed by [Bange et al. \(2006\)](#) with respect to heterogeneity-induced signals in the CBL. Near the surface, sensible heat fluxes were found to be dependent on the underlying surface type. In the upper flight levels between $0.3z_i$ and $0.6z_i$, fluxes were dependent on the underlying surface type, but in some situations the fluxes indicated a well-mixed CBL. However, no clear connection could be determined between the occurrence of a well-mixed CBL and the time of day, wind speed, or wind direction. Because flight measurements are only one-dimensional samples over a limited distance and at a certain point in time, the question arises of how representative are these flux measurements.

In the present study we analyze how the correlation between the complex surface heterogeneity and the turbulent heat-flux patterns changes with height and in particular if there is a height at which the correlation vanishes. To answer these questions we conducted a spatially-lagged correlation analysis ([Lohou et al. 1998, 2000](#)) between the prescribed surface heat-flux pattern and the turbulent heat-flux patterns above the surface. The analysis was based on an ensemble of LES runs for the heterogeneous LITFASS terrain (see MR13) using forcing data from the LITFASS-2003 experiment. In a second step we identify the requirements for detecting heterogeneity-induced spatial variations in the turbulent heat fluxes from flight measurements within the CBL. An ensemble of virtual flight measurements within the LES was conducted according to the method used by [Schröter et al. \(2000\)](#) and compared to the flight measurements during LITFASS-2003 presented by [Bange et al. \(2006\)](#). On the basis of these virtual flights, we investigated why the observations during LITFASS-2003 do not show clear heterogeneity-induced spatial heat-flux variations at the upper flight levels.

Section 2 briefly describes the LES model, the heterogeneous surface forcing, and the simulated LITFASS cases. Results of the spatially-lagged correlation analysis between the prescribed surface fluxes and the turbulent fluxes within the CBL are presented in Sect. 3. The results of the virtual flight measurements are discussed in Sect. 4, and a summary and ideas for future studies are presented in Sect. 5.

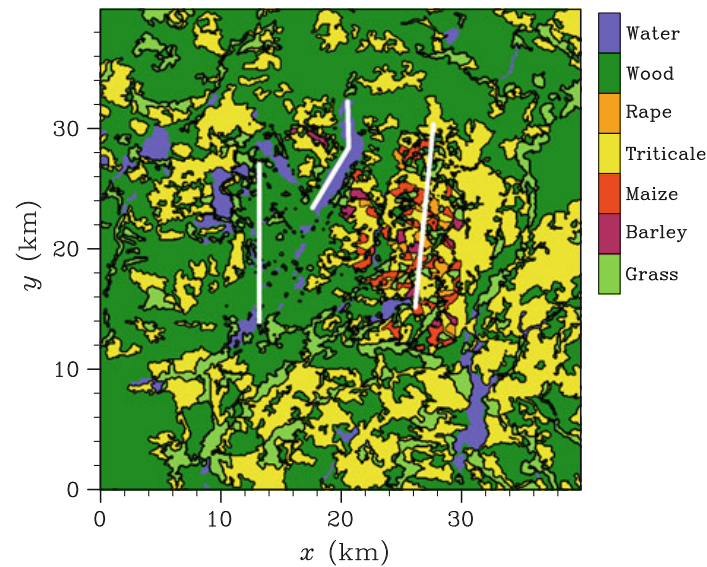


Fig. 1 Distribution of surface types of the centred $20 \times 20 \text{ km}^2$ LITFASS terrain and surroundings (after [Beyrich and Mengelkamp 2006](#)). The *white solid lines* above the water, farmland and forest patches display the location of the flight legs used for the virtual measurements for LIT2E

2 LES Model and Simulation Set-Up

2.1 Model Description

The PARallelized LES Model (PALM) was used for the numerical simulations in this study; it solves the non-hydrostatic incompressible Boussinesq equations, with the advection terms discretized by a fifth-order scheme ([Wicker and Skamarock 2002](#)). For the time integration a third-order Runge–Kutta scheme by [Williamson \(1980\)](#) was used. For the simulations cyclic lateral boundary conditions were applied. Between the surface and the first grid level, Monin–Obukhov similarity theory (MOST) was applied. Detailed descriptions of PALM have been provided by [Raasch and Etling \(1998\)](#) and [Raasch and Schröter \(2001\)](#). PALM has been successfully applied for investigations of the neutrally ([Letzel et al. 2008](#)) and weakly stably stratified boundary layer ([Beare et al. 2007](#); [Steinfeld et al. 2007](#)) as well as the homogeneously heated ([Schröter et al. 2000](#); [Raasch and Franke 2011](#)) and heterogeneously heated CBL ([Raasch and Harbusch 2001](#); [Letzel and Raasch 2003](#); [Inagaki et al. 2006](#); [Steinfeld et al. 2008](#); [Maronga and Raasch 2013](#)) and is therefore well suited for this study.

2.2 Case Description and Simulation Set-Up

A series of LES runs for the heterogeneous LITFASS terrain and its surroundings, presented in [Fig. 1](#) (see also [Beyrich and Mengelkamp 2006](#), Figs. 2, 3; MR13, Fig. 1), were conducted for a daily cycle from 0500 to 1700 UTC. The initial vertical profiles of θ and q for the entire model domain were derived from radiosonde measurements during the LITFASS-2003 experiment. The aerodynamic roughness length z_0 for the different surface types was estimated using $z_0 \approx 0.1h$ after [Shuttleworth et al. \(1997\)](#), where h is crop height. To obtain initial steady-state profiles of the horizontal velocity components, a one-dimensional version of the PALM code was applied, using the initial profiles of θ and q , and a mixing-length approach after [Blackadar \(1997\)](#). Modelling the initial wind profiles was found to be the best approach for the

simulations (instead of prescribing initial wind profiles derived from radiosondes) to obtain local daytime wind profiles that were in agreement with measurements from a wind profiler and from a 99-m tower, as well as measurements from radiosondes. During LITFASS-2003, sensible and latent surface heat fluxes were measured at energy balance stations located over different surface types. The measured surface fluxes were used as surface fluxes in the LES for all patches of the respective surface type in the entire model domain. Because the surface heat-flux data are available on a 30-min basis, the values were linearly interpolated in time. Following MR13, prescribing the observed surface fluxes was found to be the best approach for the simulations, because the usage of a soil–vegetation–atmosphere transfer model would have required the input of several local vegetation and soil parameters, which were not available. As already mentioned, we applied MOST as the lower boundary condition for the momentum equations, which is actually not valid over heterogeneous terrain, even though it is commonly used. It should be noted that this might result in erroneous turbulence statistics at the lowest grid levels (which are also largely affected by the subgrid-scale model), and so should be interpreted very carefully. For a more detailed description of the initialization and implementation of surface flux and roughness heterogeneities for the different surface types, see MR13. Two LITFASS days were simulated: May 30 and June 13, which are hereafter written as LIT2E and LIT6NW, respectively; the denotation is the same as that in MR13. LIT2E was characterized by a low geostrophic wind speed of 2 m s^{-1} from the east during the day. Figure 2 displays the surface heat fluxes for the different surface types during the course of the day. For LIT2E, the forest patches displayed the largest sensible surface heat fluxes of up to 0.4 K m s^{-1} at noon, followed by barley and triticale with kinematic fluxes up to 0.24 K m s^{-1} , and grass, maize, as well as rape with fluxes up to 0.16 K m s^{-1} . Compared to the other surface patches, the sensible heat input from the water patches was small during the whole day.

The different surface types exhibited highly varying latent heat fluxes during the day. Rape patches displayed the largest values, whereas forest patches displayed the lowest values. In general, the differences in the surface latent heat flux between the different surface patches were less pronounced than differences in the surface sensible heat flux.

For LIT6NW the geostrophic wind was directed from the north-west at a speed of 6 m s^{-1} . Each surface type displayed a pronounced daily cycle for the surface sensible heat flux, except for the water patches. Compared to LIT2E, the surface latent heat flux was generally larger and exhibited fewer temporal variations, with the exception of the striking peak for the forest patches at about 1000 UTC.

Detailed descriptions of the main features of the simulated CBL, the corresponding daily cycles, their agreement with the observational data, and the structure of the heterogeneity-induced SCs for the selected cases have been reported by MR13. MR13 determined a fetch that was dependent on wind speed and characterized the length scale at which SCs are affected by the upstream surface heterogeneity. For this reason, MR13 stressed the need to extend the model domain in the upwind direction to obtain a realistic local CBL structure within the domain of interest. This is of particular interest in the present comparison of the virtual flight measurements (see Sect. 4) with the flight measurements made during LITFASS-2003. Therefore, model domains of $40 \times 40 \times 4 \text{ km}^3$ for LIT2E and $56 \times 56 \times 4 \text{ km}^3$ for LIT6NW were simulated. A grid length of $\Delta x_1 = 40 \text{ m}$ in each spatial direction was used; beyond the top of the CBL, the vertical grid was stretched to save computational resources. To enhance the statistical significance of the virtual measurements (see Sect. 4), 20 ensemble runs with individual development of the turbulent eddies but identical mean conditions were performed by imposing different initial random perturbations on the horizontal velocity fields in each ensemble run.

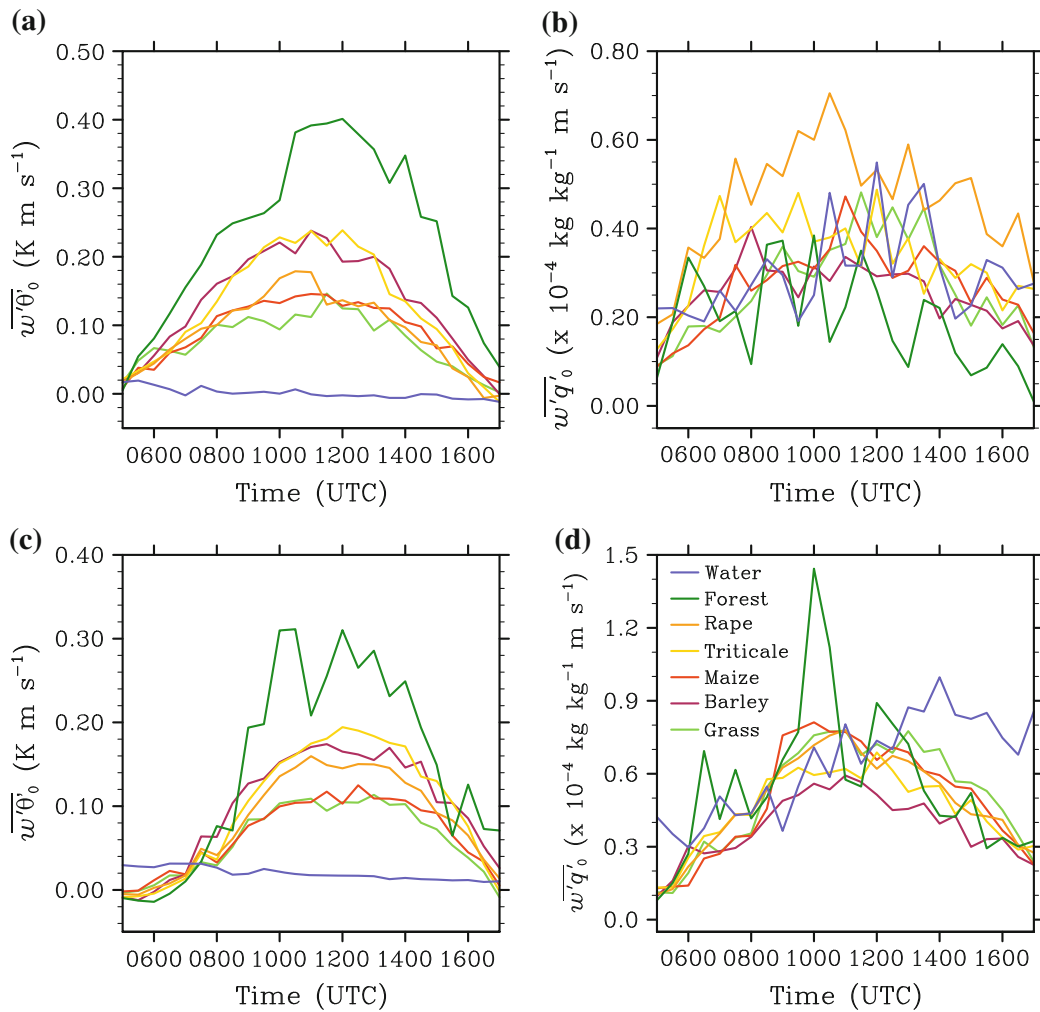


Fig. 2 Time series of the prescribed kinematic surface flux of sensible heat for **a** LIT2E, and **c** LIT6NW, and surface flux of latent heat **b** LIT2E and **d** LIT6NW

The three-dimensional data of vertical velocity w , θ , q , and the vertical heat fluxes for the entire model domain, which are required for the spatially-lagged correlation analysis (see Sect. 3), were sampled for each ensemble run. Because the LITFASS-2003 airborne flux measurements were made between 1300 and 1330 UTC, this time period was also used for the analysis of the three-dimensional data in the next section. For scaling the vertical coordinate, we used the mean boundary-layer depth during the analysis period, derived from the height of the maximum gradient of the local θ profile following Sullivan et al. (1998). This was 1,800 m for LIT2E and 1,610 m for LIT6NW (see also MR13).

3 Spatially-Lagged Correlation Analysis

3.1 Method

In order to analyze how the turbulent vertical heat-flux patterns within the CBL depend on the underlying heterogeneous terrain, three-dimensional data for the turbulent vertical heat

fluxes were required. The turbulent fraction of a quantity is defined as the deviation from a reference value; usually, in LES the horizontal mean of the respective quantity is used as a reference value. However, under horizontally heterogeneous conditions this method might fail, because the horizontal mean does not necessarily represent local conditions. Therefore, the temporal mean at each location was used as a reference value. Thus, the vertical turbulent flux of a scalar $\psi \in (\theta, q)$ was calculated for each discrete location in the model domain by the temporal eddy-covariance method:

$$\overline{w'\psi'} = \overline{w\psi} - \overline{w} \overline{\psi}, \quad (1)$$

where the overbar denotes a value averaged over 30 min. After calculating $\overline{w'\psi'}$ for each of the 20 ensemble runs, ensemble averaging was applied in order to eliminate randomly distributed turbulent structures that exist for longer than 30 min.

The first term on the right-hand side in Eq. 1 represents the total transport, and the second term on the right-hand side represents the mean vertical transport at a certain location. The mean vertical transport, hereafter the mesoscale flux contribution, is non-zero for the investigated cases because the SCs are nearly stationary in space for the given averaging interval. Hence, the calculated turbulent flux is only a part of the total vertical transport. However, the correlation analyses using the total fluxes produced almost identical results when only the turbulent fluxes were used, which might be due to the smaller mesoscale fluxes compared to the turbulent fluxes for the simulated days as reported in MR13. For this reason the impact of the mesoscale flux on our further analysis is of only minor importance and will be not discussed further. It should be emphasized that $\overline{w'\psi'}$ is only the resolved scale part of the flux, and in LES the turbulent transport on the grid scale is parametrized. The subgrid-scale flux contribution is negligibly small, except for the grid layers close to the surface. This is because turbulent transport is not well resolved by the numerical grid in this region due to the limited eddy size. Data analysis has shown that the subgrid-scale flux contribution is below 5 % of the total flux above the third vertical grid layer (see also [Steinfeld et al. 2007](#)). Therefore, the subgrid-scale flux contribution is not considered further in calculations of the turbulent flux.

To investigate the dependence of the vertical turbulent flux patterns on the underlying surface fluxes, a spatially-lagged two-dimensional correlation analysis as presented by [Lohou et al. \(1998, 2000\)](#) was applied

$$\rho_{\psi_s, \phi}(\delta x, \delta y, z) = \frac{\int_{x_1}^{x_u} \int_{y_1}^{y_u} \tilde{\psi}_s(x, y) * \tilde{\phi}(x + \delta x, y + \delta y, z) \, dx dy}{\sqrt{\int_{x_1}^{x_u} \int_{y_1}^{y_u} [\tilde{\psi}_s(x, y)]^2 \, dx dy \int_{x_1}^{x_u} \int_{y_1}^{y_u} [\tilde{\phi}(x, y, z)]^2 \, dx dy}}, \quad (2)$$

where $\rho_{\psi_s, \phi}(\delta x, \delta y, z) \in [-1, 1]$ is the correlation coefficient between the surface flux ψ_s and the turbulent flux ϕ considering the spatial displacement δx , δy between ψ_s and ϕ in the x - and y -directions. The tilde indicates the deviation from the horizontal mean value of the respective quantity; δx , δy as well as x , y , z are integer multiples of the numerical grid lengths Δx , Δy , Δz , and x_1 , x_u , y_1 , y_u denote the lower and upper lateral bounds of the model domain. The correlation analysis was performed for the entire domain, and cyclic conditions were applied at the lateral boundaries. For zero lag $\rho_{\psi_s, \phi}(0, 0, z)$ is equivalent to a one-point correlation. In contrast to the one-point correlation analysis used by [Albertson and Parlange \(1999\)](#), the spatially-lagged correlation analysis considers the spatial displacement by horizontal advection during vertical transport and is therefore better suited for conditions with a mean flow.

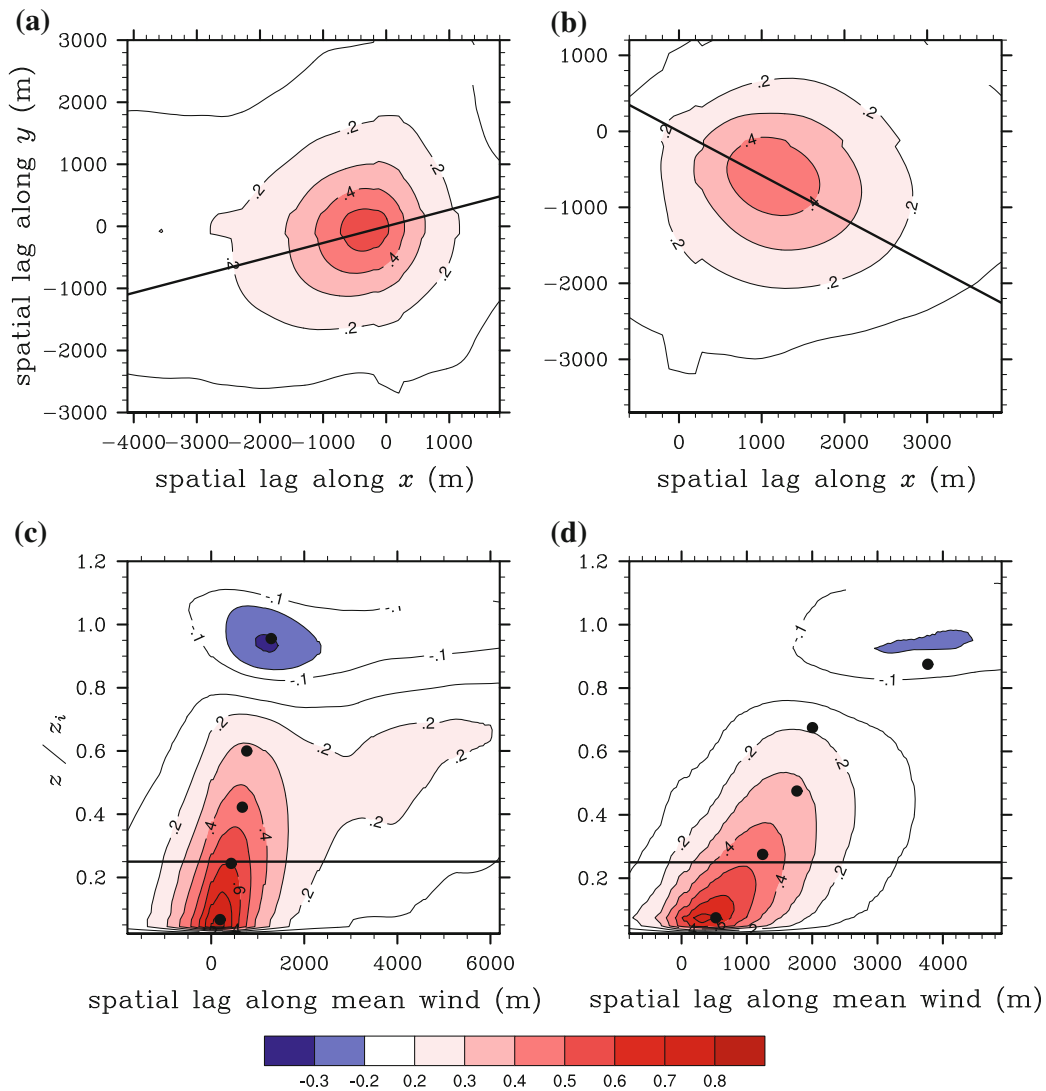


Fig. 3 Correlation coefficients between $\overline{w'\theta'_0}$ and $\overline{w'\theta'}$ for a horizontal cross-section at $0.25z_i$ **a** for LIT2E, and **b** LIT6NW. **(c)** and **(d)** show the correlation coefficients for LIT2E and LIT6NW depending on the height and spatial lag along the mean wind direction. The *black solid lines* in **(a)** and **(b)** indicate the respective intersection plane for **(c)** and **(d)** and vice versa. The *black circles* in **(c)** and **(d)** display the lag of the maximum correlation at certain height levels. Only absolute values larger than 0.2 are depicted

3.2 Results

Henceforth the correlation coefficient between the turbulent fluxes of sensible and latent heat $\overline{w'\theta'}$, $\overline{w'q'}$, and the respective surface fluxes $\overline{w'\theta'_0}$, $\overline{w'q'_0}$, will be abbreviated as ρ_{sens} and ρ_{lat} , respectively. Figure 3a, b shows horizontal cross-sections of ρ_{sens} at $0.25z_i$ for LIT2E and LIT6NW; the black solid lines indicate the axis parallel to the mean wind direction that is the corresponding intersection plane in Fig. 3c and d, respectively. A significant correlation between $\overline{w'\theta'}$ and $\overline{w'\theta'_0}$ is evident at this level. The maximum of the correlation is shifted downstream along the mean wind direction because any convective plume triggered by the surface is advected downstream while moving vertically. For this reason, it is obvious that a one-point correlation would fail, especially for higher wind speeds such as for LIT6NW.

Figure 3c, d shows q_{sens} as a function of height and spatial lag along the mean wind direction. Because the spatial lag along the mean wind direction does not necessarily coincide with the spatial lag δx , δy along the x - and y -directions, q was interpolated from Cartesian to polar coordinates to obtain values along the angle corresponding with the mean wind direction. The spatial shift of the maximum correlation increases with increasing height, indicating that the turbulent heat-flux patterns are inclined along the mean wind direction. Owing to the higher mean wind speed for LIT6NW, the spatial shift is larger than that on LIT2E (inclination angle is smaller), which is particularly evident from the areas with negative values of q_{sens} that appear at the top of the CBL. The mean inclination angle determined by the surface and the lag of the maximum correlation at the top of the CBL is 51° and 25° for LIT2E and LIT6NW, which is in agreement with the angle determined by the ratio between the convective velocity scale (w_*) and the horizontal mean wind speed, i.e. $\arctan(w_*|u|^{-1})$, respectively. In particular for LIT6NW it is obvious that the inclination angle changes with height, indicated by the slope between the black circles that display the horizontal lag of the maximum correlation at certain height levels. From the surface up to the middle part of the CBL the inclination angle increases with increasing height, while in the upper CBL the inclination angle decreases up to the top of the CBL. Near the surface the vertical wind speed of the eddies that are responsible for the bulk of the vertical transport (thermals) is small, i.e. the horizontal shift by the horizontal mean wind is large compared to the vertical upward transport (inclination angle is small). Due to positive buoyancy the thermals are vertically accelerated, resulting in larger inclination angles with increasing height in the middle part of the CBL, while the thermals are decelerated at the top of the CBL, resulting in smaller inclination angles of the maximum correlation.

Except for these upper parts of the CBL, q_{sens} is positive for most of the CBL for both LIT2E and LIT6NW. This implies that more strongly heated surface patches generate larger values of $w'\theta'$ in the downstream area. The negative correlation in the entrainment layer indicates that the turbulent exchange processes at the top of the CBL are still affected by the surface heterogeneity. More strongly heated patches generate a stronger entrainment at the top of the CBL than less heated patches.

The correlation decreases with height and becomes zero at about $0.8z_i$ in both cases. This does not mean that the surface heterogeneity signal is blended. These low values are simply caused by the general linear decrease in the local sensible heat-flux profiles over different surface types, which all have zero crossing at about the same height (see Fig. 9 where the local heat-flux profiles above farmland, forest, and water patches obtained from virtual flight measurements are shown). This results in less pronounced sensible heat-flux patterns, and hence the correlation appears to decrease with height.

Furthermore, the intersection of the different local heat-flux profiles directly implies that the heat-flux divergences vary horizontally, which in turn, generates spatially differential heating and subsequent spatial variations in $z_{i,\text{local}}$. These variations can be attributed to the encroachment effect, which describes the growth of z_i due to pure thermodynamic heating (Stull 1988). Therefore, both entrainment and encroachment might be responsible for the spatial variations in $z_{i,\text{local}}$ presented by MR13. To identify which is the dominant mechanism is beyond the scope of this study, but will be investigated in a follow-up study.

Figure 4 shows the correlation coefficient between the latent heat flux $\overline{w'q'}$ and $\overline{w'q'_0}$ for LIT2E and LIT6NW. For LIT2E, where $\overline{w'q'_0}$ for the different surface types varies substantially over time, a positive correlation between $\overline{w'q'}$ and $\overline{w'q'_0}$ exists only in the lower CBL up to $0.1z_i$. This suggests that the surface signal is already blended above this level for the latent heat flux. However, negative values of q_{lat} occur in the upper CBL. Bange et al. (2006) and MR13 noted that $\overline{w'q'}$ was more affected by the entrainment of dry air from

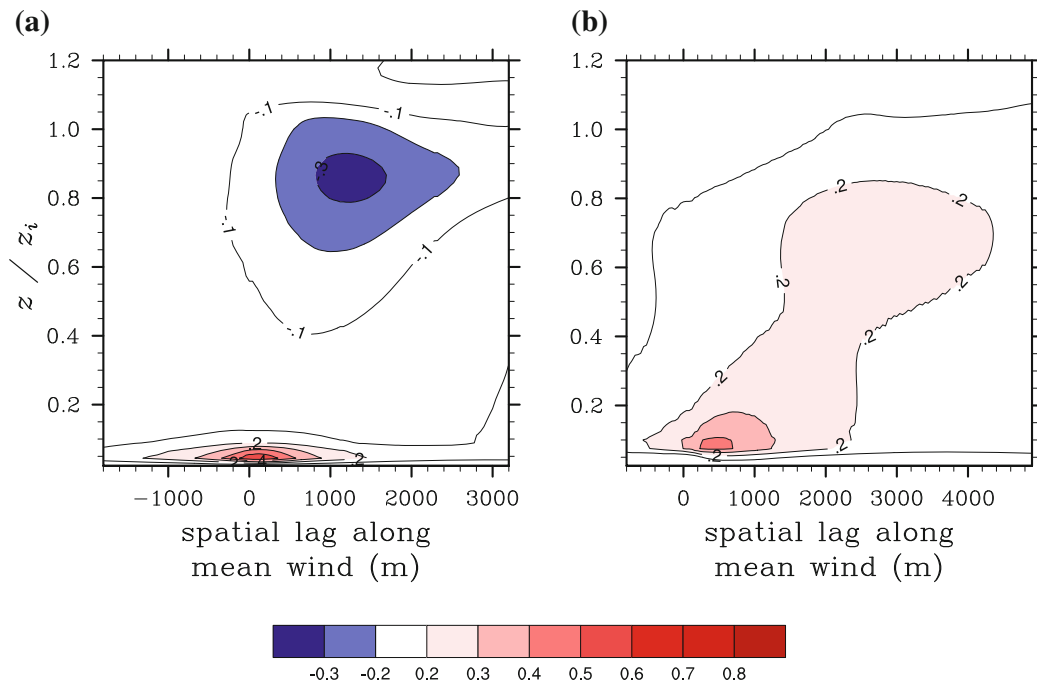


Fig. 4 Correlation coefficients between $\overline{w'q'_0}$ and $\overline{w'q'}$ for **a** LIT2E and **b** LIT6NW depending on the height and spatial lag along the mean wind direction. Only absolute values larger than 0.2 are depicted

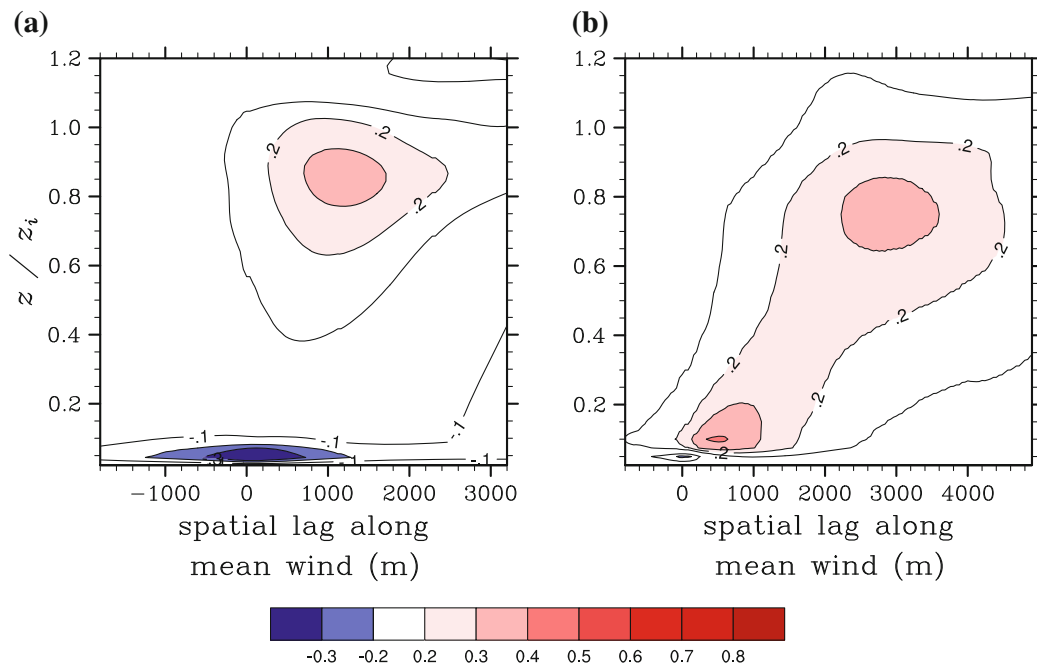


Fig. 5 Correlation coefficients between $\overline{w'\theta'_0}$ and $\overline{w'q'}$ for **a** LIT2E and **b** LIT6NW depending on the height and spatial lag along the mean wind direction. Only absolute values larger than 0.2 are depicted

the free atmosphere than by $\overline{w'q'_0}$ during LITFASS-2003. Because the entrainment is mainly steered by $\overline{w'\theta'_0}$ with larger entrainment fluxes of sensible heat above more strongly heated patches, it can be assumed that more strongly heated patches also generate larger entrainment

fluxes of latent heat. To confirm this, the correlation between $\overline{w'\theta'_0}$ and $\overline{w'q'}$ is shown in Fig. 5. For both days a positive correlation between both quantities is evident at the top of the CBL, indicating that larger entrainment fluxes of latent heat occur above more strongly heated patches. Therefore, it can be assumed that the significant correlation in Fig. 4 between $\overline{w'q'}$ and $\overline{w'q'_0}$ at the top of the CBL, as well as its sign, is merely due to the Bowen ratio of the surface fluxes, instead of implying a direct physical relationship between $\overline{w'q'_0}$ and $\overline{w'q'}$.

In contrast to LIT2E, LIT6NW exhibits positive values of q_{lat} throughout the CBL (see Fig. 4b), suggesting that $\overline{w'q'}$ is controlled by $\overline{w'q'_0}$ up to the top of the CBL. However, the entrainment effect discussed for LIT2E is also active here, making it difficult to distinguish between the two mechanisms, and in particular to decide if the direct correlation between $\overline{w'q'}$ and $\overline{w'q'_0}$ is lost above a certain level. Even though the direct correlation may be lost, the surface still affects the patterns in $\overline{w'q'}$ through the entrainment at the CBL top, which correlates with $\overline{w'\theta'_0}$, revealing that there is no blending height for $\overline{w'q'}$ too.

4 Turbulent Fluxes from Virtual Flight Measurements

4.1 Flight Strategy

During the LITFASS-2003 experiment, helicopter-borne turbulence measurements with the Helipod (Bange and Roth 1999) were made. Bange et al. (2006) used the experimental data collected from flights above the main LITFASS surface types of forest, water, and farmland to investigate the blending of sensible and latent heat fluxes at different heights. For the near-surface flights between 100–160 m (about $0.1z_i$), a clear dependence between the turbulent fluxes and the underlying surface type was determined. However, for LIT2E no correlation between the heat fluxes and the underlying surface types was found at the upper flight level at 780 m (about $0.45z_i$). An analysis of flights on other LITFASS days also showed no clear correlation between the heat fluxes and the underlying surface at the upper flight level.

On the basis of our previous analysis showing that heterogeneity-induced patterns in the turbulent heat fluxes extend up to the top of the CBL, we investigated whether and how heterogeneity-induced spatial variations in the heat fluxes over different land surface types can be measured and why the corresponding Helipod measurements do not show any heterogeneity-induced signals in the middle of the CBL. Therefore, virtual flight measurements were performed using the method of Schröter et al. (2000), which is described further below. To compare the virtual measurements with the Helipod measurements during LITFASS-2003, we focused on flights for LIT2E only because data from flight measurements over uniform surface patches were not available for LIT6NW.

The length of a flight leg in the LITFASS-2003 experiment was limited by the length scale of the surface heterogeneity of the LITFASS area. To keep the statistical flux error, which depends on the inverse of the leg length (Lenschow and Stankov 1986), as small as possible, only flight legs above the largest patches of the main surface types (water, farmland and forest) were chosen during LITFASS-2003 (Bange et al. 2006). The flight leg length is 9.7 km for water, 15.1 km for farmland, and 13.0 km for forest. In terms of space and time, the virtual flight legs in the LES were the same as the actual Helipod flight legs. The locations of the legs for LIT2E are given in Fig. 1 (see also Bange et al. 2006). The virtual flights were performed between 1300 and 1330 UTC and, in contrast to the Helipod flights that had a temporal offset between flights at different height levels, virtual flights were performed simultaneously at each grid level height. On the basis of the Helipod flight speed, a virtual flight speed of 40 m s^{-1} was chosen. During the LES, space–time series of w , θ

and q were sampled along the corresponding flight legs. Because the virtual flight positions typically did not coincide with the numerical grid of the LES, the grid point data had to be interpolated bi-linearly to the actual flight position. A sampling rate of 1 s^{-1} was selected for the efficient use of the LES-generated data with respect to the mean flight speed and the horizontal grid spacing of 40 m. A higher sampling rate would create aliasing effects (Schröter et al. 2000) without increasing the amount of physical information. To increase the statistical significance of the virtual flux measurements, the virtual flights were performed for each of the 20 ensemble runs. Repeating the measurement along the same flight leg within short time intervals in a single simulation was no alternative because these measurements were not statistically independent from each other due to the relatively long time scale of the large randomly distributed updrafts and downdrafts.

The spatial correlation analysis (see Sect. 3.2) for LIT2E indicated that the maximum horizontal shift of the surface signal by the mean wind was approximately 2.5 km between the top of the CBL and the surface. The horizontal distance between the flight legs above farmland and forest and the next adjacent different surface type in the upwind region of the respective legs was about twice the distance of this maximum horizontal shift. Therefore, the adjacent surface types should not have affected the virtual flux measurements on these flight legs. However, the leg over water might have been affected at higher levels by the adjacent forest and farmland patches east of the lake, because the lake is narrow in width and the horizontal distance between the leg and the eastern lakeside was partly less than 2.0 km.

For the sake of clarity we will briefly outline the rest of Sect. 4. Section 4.2 is concerned with the flux calculation and error estimation, as well as with the necessity of ensemble averaging to reduce the uncertainty of the virtually measured fluxes. In Sect. 4.3 the ensemble-averaged fluxes are compared with the observations. Section 4.4 shows that single legs are not capable of capturing heterogeneity-induced signals and discusses the reasons for this, while Sect. 4.5 is concerned with the failure of the inferred error estimates to indicate the large uncertainty of the single leg flux measurements.

4.2 Flux Calculation and Error Estimation

Turbulent vertical sensible and latent heat fluxes were determined from the virtually sampled space–time series using the eddy-covariance method. The turbulent fluctuations were calculated by removing the linear trend and the mean value from the space–time series of the respective variable. The instantaneous turbulent vertical scalar flux

$$f = w''\psi'' \quad (3)$$

was calculated by multiplying the resulting space–time series of the turbulent fluctuations w'' and ψ'' . Finally, the kinematic fluxes of sensible and latent heat were determined by averaging $\langle \rangle$ over the leg length:

$$F = \langle w''\psi'' \rangle, \quad (4)$$

where it is important to note that F is only the resolved scale part of the turbulent flux. However, as already mentioned in Sect. 3.1, the subgrid-scale flux contribution becomes negligibly small above the third vertical grid level (120 m). Therefore, the subgrid-scale flux contribution was not considered in the flux and error calculations.

The flux itself is subject to errors. Owing to limited leg lengths, sampling is often inadequate across all the scales that contribute to the flux, especially on the largest turbulence scales that scale with z_i (Mahrt 1998). A systematic difference between the flux F and the ‘true flux’ F_{true}

$$\Delta F = \frac{F - F_{\text{true}}}{F} \quad (5)$$

is referred to as the systematic error ΔF (Lenschow et al. 1994). Generally, the ‘true flux’ is unknown in experiments and an estimation of ΔF is required. Lenschow et al. (1994) derived ΔF on the basis of Lumley and Panofsky (1964), and Lenschow and Stankov (1986):

$$\Delta F \approx \left(\frac{2}{\rho_{w,\psi}} \right) \frac{I_f}{L_{\text{av}}} F, \quad (6)$$

where L_{av} denotes the size of the averaging interval (leg length) and $\rho_{w,\psi}$ is the correlation coefficient between w and ψ at temporal lag zero. It should be noted that $\rho_{w,\psi}$ is based on the values of the respective space–time series and should not be confused with the spatial correlation coefficient ϱ used in Sect. 3. The integral length scale I_f of the instantaneous flux f can be considered as the maximum spatial shift for which f is relatively well correlated with itself (Lothon et al. 2007). I_f was calculated from the integral of the spatial autocorrelation function of f

$$I_f = \int_0^{r_0} dr' \frac{\langle f(r+r') f(r) \rangle}{\langle f'^2 \rangle}, \quad (7)$$

where $\langle f'^2 \rangle$ denotes the variance of flux F , r is the location in the space–time series, r' is the spatial shift, and r_0 is the spatial shift of the first zero crossing of the autocorrelation function of f . Mann and Lenschow (1994) noted that the autocorrelation function of f often behaves in a ‘wild’ fashion, which is the reason why I_f is difficult to determine, especially if the flux is small (Lothon et al. 2007) and the autocorrelation function does not cross zero. Therefore, Lenschow et al. (1994) defined an upper limit for I_f

$$I_f \leq \sqrt{I_w I_\psi}, \quad (8)$$

using the more commonly available and robust integral length scales, I_w , I_ψ for w and ψ , respectively. Inserting Eq. 8 into Eq. 6 leads to the final expression for the upper limit of the systematic error

$$\Delta F \leq \left(\frac{2}{\rho_{w,\psi}} \right) \frac{\sqrt{I_w I_\psi}}{L_{\text{av}}} F. \quad (9)$$

Furthermore, the random flux error σ_F is defined as the standard deviation of the flux

$$\sigma_F \leq \left(\frac{2}{\rho_{w,\psi}} \right) \sqrt{\frac{I_f}{L_{\text{av}}}} |F|, \quad (10)$$

which is expressed in terms of the integral length scale and the averaging length. Lenschow et al. (1994) used a different approximation for I_f that is smaller than the approximation in Eq. 8 to estimate σ_F . So as to not underestimate σ_F , the approximation of I_f for σ_F by Lenschow et al. (1994) was replaced by Eq. 8 according to Bange et al. (2002). The resulting estimate we used for the upper limit of the random flux error is

$$\sigma_F \leq \left(\frac{2}{\rho_{w,\psi}} \right) \sqrt{\frac{\sqrt{I_w I_\psi}}{L_{\text{av}}}} |F|. \quad (11)$$

The total flux error E of the flux measurement is the sum of ΔF and σ_F .

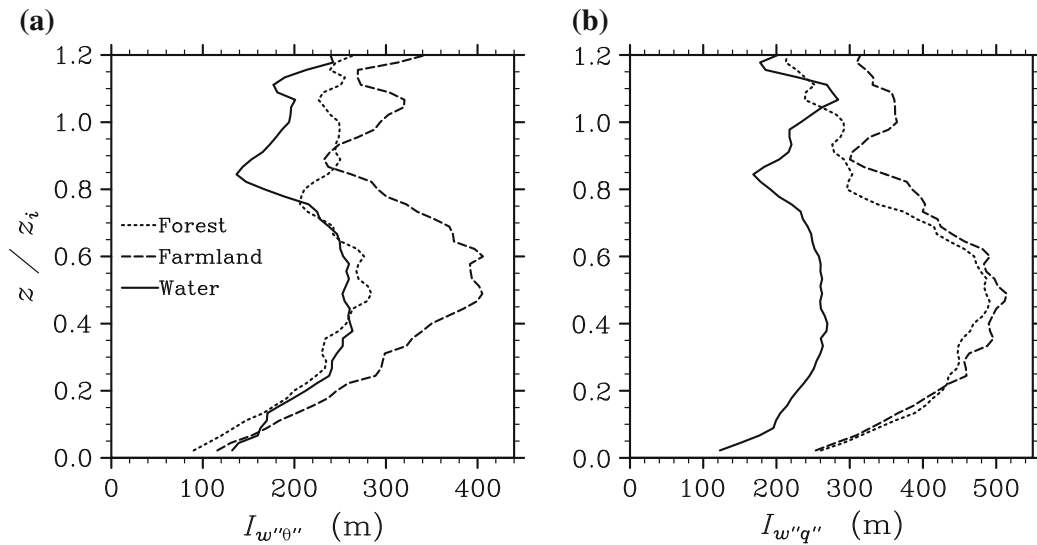


Fig. 6 Ensemble-averaged vertical profiles of the integral length scales of **a** $\langle w''\theta'' \rangle$ and **b** $\langle w''q'' \rangle$

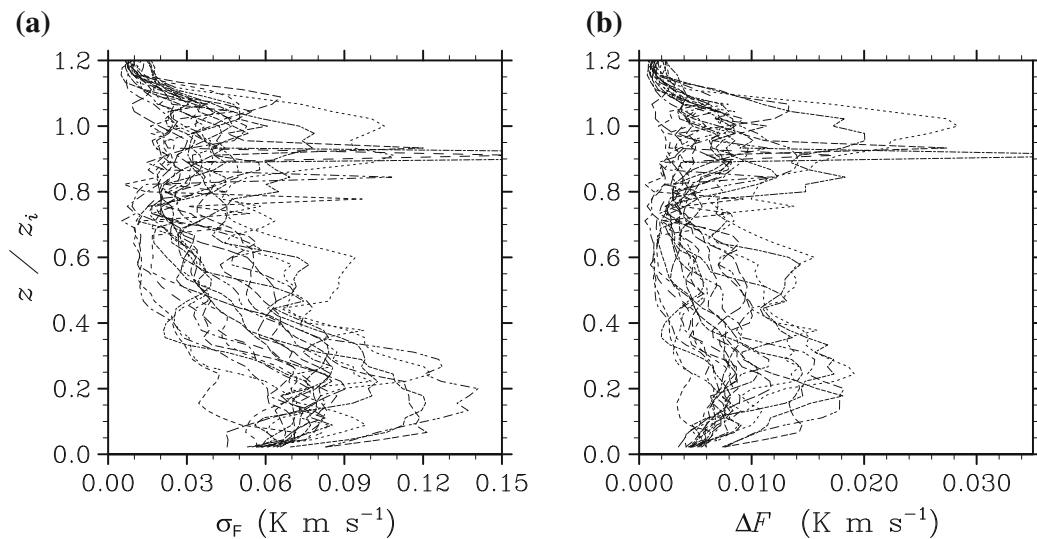


Fig. 7 Vertical profiles of the **a** random and **b** systematic sensible heat-flux errors above the forest from different ensemble runs

Figure 6 shows the ensemble-averaged integral length scales for the sensible and latent heat fluxes, $I_{w''\theta''}$ and $I_{w''q''}$, respectively. The largest integral length scales occur in the middle of the CBL, whereas the smallest scales occur near the surface as well as around the top of the CBL. For the forest and the farmland leg $I_{w''q''}$ is slightly larger than $I_{w''\theta''}$ within the CBL, according to the results of Uhlenbrock et al. (2004) and MR13, who found that the spatial scales in q are larger than those in θ above the heterogeneous LITFASS terrain.

Figure 7 shows the random and systematic errors of the virtually measured sensible heat-flux profiles for each of the 20 ensemble runs for the forest leg. In general, the largest errors occur in the lower CBL as well as at the top of the CBL. ΔF is about one order of magnitude smaller than σ_F for the different ensemble members. This suggests that the virtually measured fluxes do not deviate substantially from the ‘true flux’ due to insufficient sampling of the largest turbulent eddies. At the top of the CBL some of the measurements exhibit a peak

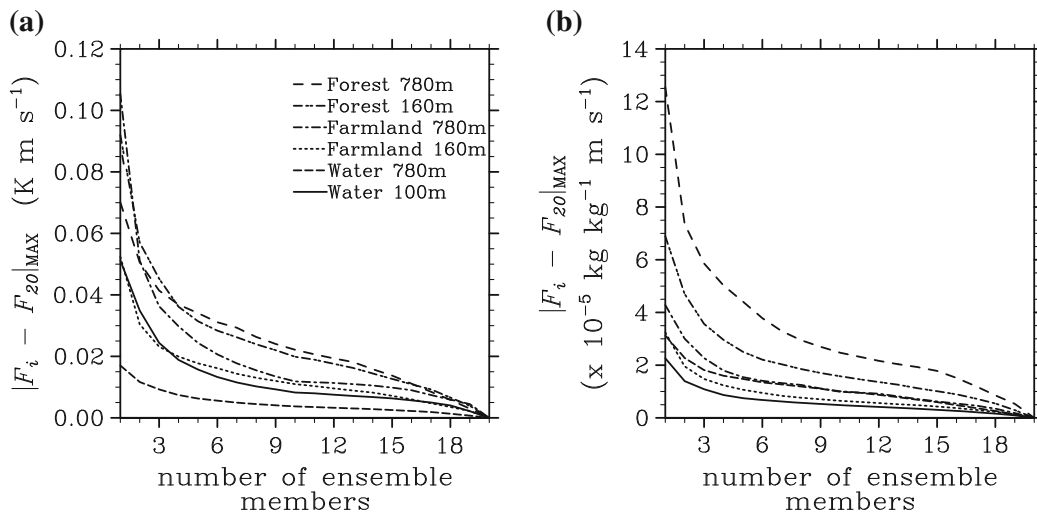


Fig. 8 Maximum possible deviation of the flux F_i , averaged over i ensemble members, from the flux F_{20} , averaged over 20 ensemble members, shown for **a** $\langle w''\theta'' \rangle$ and **b** $\langle w''q'' \rangle$ for each surface type. The height levels of the depicted virtual legs are identical to the height levels of the Helipod legs during LITFASS-2003

in ΔF and σ_F . These peaks are attributed to the low absolute values of $\rho_{w,\psi}$ in the stably stratified region within and above the entrainment zone.

In contrast to the small systematic errors, the random errors of the 20 single flight leg measurements show a much larger scatter, ranging from relatively small values up to values of 0.14 K m s^{-1} , which is on the order of the flux itself.

To investigate how the fluxes depend on the underlying surface type, it is essential to reduce this large uncertainty in the measured flux. In LES, this can be easily achieved by averaging over different realizations of the flux. The ‘true flux’ is calculated by ensemble-averaging over the 20 statistically independent virtual flux measurements. Figure 8 shows how the ensemble average converges to the value of the ‘true flux’ with an increasing number of ensemble members. Because the convergence of the ensemble average depends on the choice and the order of the ensemble members, those combinations of ensemble members are shown that give the maximum deviation of all possible combinations, i.e. the worst case. With more than 10–15 ensemble members, the change in the ensemble average becomes small, which indicates a sufficient convergence. A further increase in the number of ensemble members would not significantly change the ensemble-averaged flux. This justifies the use of the flux averaged over 20 ensemble members to represent the ‘true flux.’

Figure 8 also indicates that some single leg flux measurements deviate substantially from the ensemble-averaged values (for example, for the farmland, the single leg measured sensible heat flux deviates by about 0.1 K m s^{-1} from the ‘true flux’). Before the flux measurements from single flight legs and their representativeness of the ‘true flux’ are further investigated in Sect. 4.4, the ensemble-averaged flux profiles are discussed.

4.3 Comparison of Ensemble-Averaged LES Fluxes and Observed Fluxes

Figure 9 shows the ensemble-averaged sensible and latent heat-flux profiles calculated from the virtual flight measurements for LIT2E. The sensible heat-flux profiles for the three surface types differ throughout the CBL. The near-surface flux is largest above the forest (0.3 K m s^{-1}), significantly smaller above the farmland (0.15 K m s^{-1}), and almost

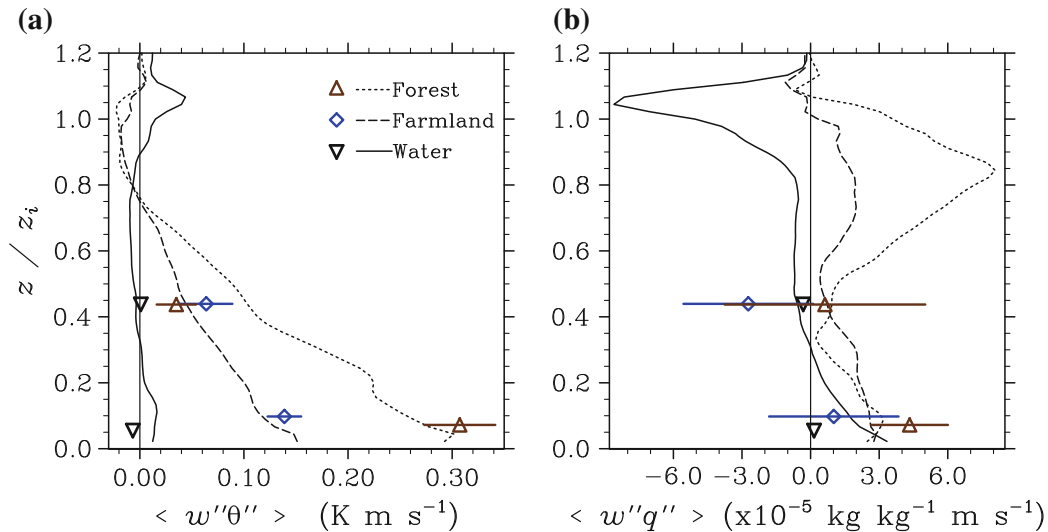


Fig. 9 Ensemble-averaged vertical profiles of **a** $\langle w''\theta'' \rangle$ and **b** $\langle w''q'' \rangle$, calculated from 20 virtual flights during the LES for LIT2E above water, farmland and forest. *Coloured symbols* represent the measured fluxes during LITFASS-2003 including their corresponding flux errors. It should be noted that the *error bars* for the measurements above water are smaller than the *symbol*. The *thin black vertically orientated lines* indicate the zero line

negligible above water. The sensible heat fluxes above the forest and farmland decrease almost linearly with height, which is typical for the CBL, and display a minimum with negative values in the entrainment layer. Both profiles almost coincide within the entrainment layer, but the forest profile indicates a slightly larger entrainment, which is in agreement with the results of the spatially-lagged correlation analysis in Sect. 3.2. In contrast, the profile over water has mostly positive values at these heights, indicating no entrainment at all. These three sensible heat-flux profiles clearly show that a well-mixed layer in the middle of the CBL does not exist.

In contrast to these ensemble-averaged virtual measurements, the Helipod fluxes plotted in Fig. 9a (see also Bange et al. 2006) suggest that the CBL is already well mixed at $0.45z_i$. For the water and farmland leg the Helipod and the ensemble-averaged virtual measurements agree fairly well. However, the Helipod flux for the forest leg at the upper level deviates substantially from the virtually measured ‘true flux’ and is even smaller than the farmland flux measured at the same level. Because the respective Helipod flux errors indicate only a small uncertainty, Bange et al. (2006) concluded that the measured fluxes are close to the respective ‘true fluxes.’ These discrepancies between the Helipod fluxes and the virtual ensemble-averaged fluxes raise issues regarding how representative a single leg flux measurement for the ‘true flux’ is, and how reliable the respective calculated flux errors really are. We will present detailed analyses of these issues in Sects. 4.4 and 4.5, respectively.

The real and ensemble-averaged virtual measured latent heat fluxes in Fig. 9b clearly do not have a large dependence on the underlying surface type below $0.5z_i$. This is attributed to the relatively small differences in $\overline{w'q'_0}$ among the different surface types (see Fig. 2). Above $0.5z_i$ the flux profiles start to differ significantly with increasing height. In particular, within the CBL, the latent heat flux over the farmland and forest increases, whereas it remains close to zero above water. This behaviour is not attributed to $\overline{w'q'_0}$, but rather to $\overline{w'\theta'_0}$, as mentioned in Sect. 3.2. The increased entrainment of sensible heat at the top of the CBL over warmer surface patches causes a stronger entrainment of dry air from the free atmosphere

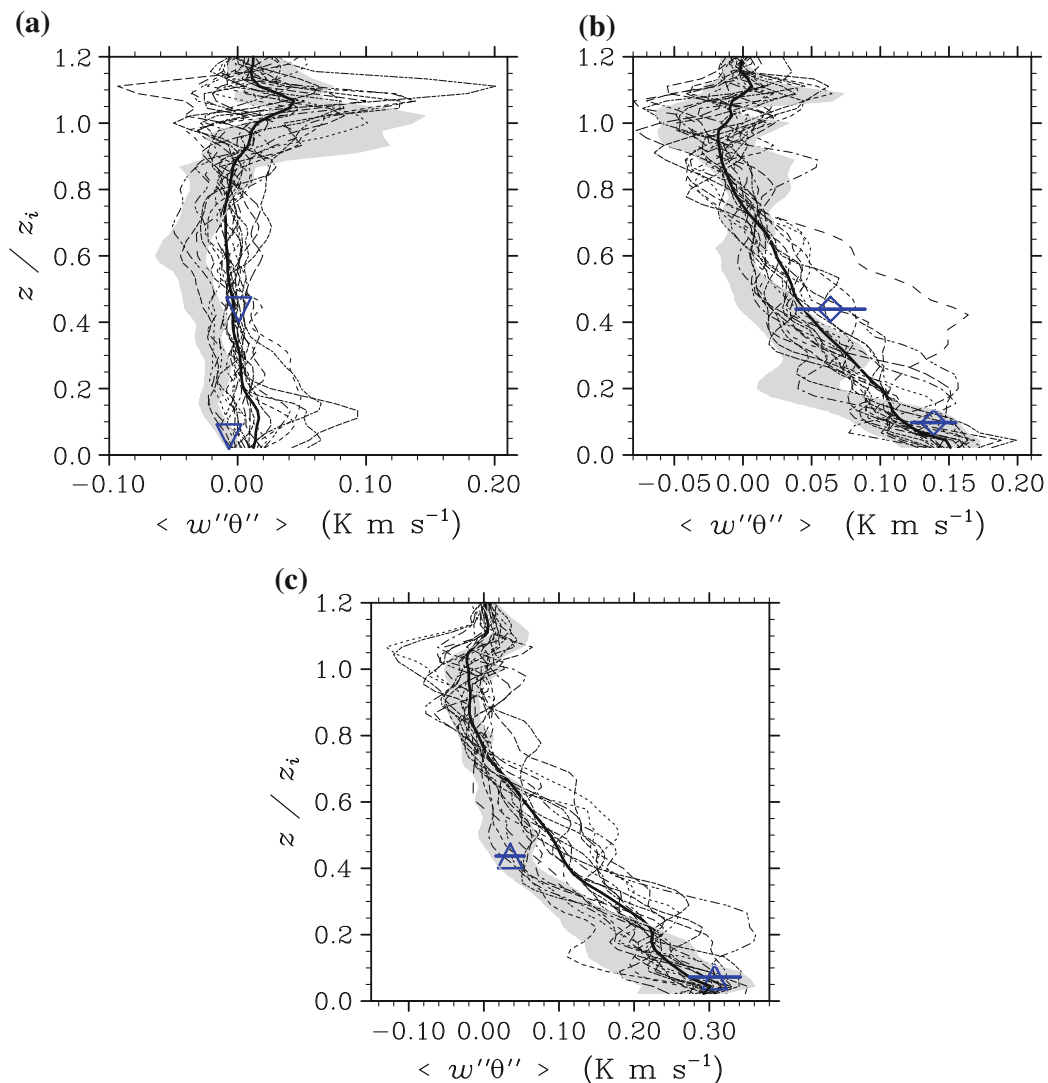


Fig. 10 Vertical profiles of $\langle w''\theta'' \rangle$ for the virtual single leg flux measurements (*thin dashed lines*) as well as for the respective ensemble average (*thick solid line*) above **a** water, **b** farmland and **c** forest. The *gray shaded area* shows the total flux error for one of the 20 single leg flux profiles. The Helipod fluxes and their corresponding total errors are also shown as *blue symbols*

into the CBL. As a result, the largest latent heat-flux values in the upper CBL can be found above the forest, and the lowest above water.

For the sake of completeness, the positive and negative peaks in the sensible and latent heat flux above water between $0.9z_i$ and $1.1z_i$ are addressed. Further LES data analysis (not shown) indicated that these peaks can be explained by thermals that originate from the adjacent forest patches east of the lake (see Fig. 1). These thermals penetrate deeply into the stably stratified layer and due to negative buoyancy, cold and moist downdrafts develop downstream of the updrafts. Owing to the westward shift caused by the mean wind, these local cold and moist downdrafts coincide with the location of the water leg and are captured as a turbulent flux. Because there is almost no convection from below above the lake (the flux is nearly zero throughout the complete CBL), there is no other flux contribution, e.g., by uprising thermals that compensate for flux contributions from cold and moist downdrafts, resulting in such peaks.

4.4 How Representative are Single Leg Turbulent Heat-Flux Measurements?

Figure 10a–c shows the 20 single leg flux profiles above the three surface types. At a certain height the single leg fluxes above a certain surface display a large degree of scatter. In particular, for the farmland and forest legs, the scatter between the respective single leg fluxes above one surface type can be larger than the absolute difference between the respective ‘true fluxes’ of different surface types. This can easily lead to the situation that a single leg measured flux above the forest is smaller than a single leg measured flux above the farmland. The possibility that such situations occur becomes greater with increasing height, where the absolute difference between the ‘true fluxes’ above forest and farmland decreases with height, while the scatter between single leg measurements above the same surface type remains large. These results clearly indicate that single leg flux measurements are not suitable for capturing heterogeneity-induced signals within the CBL. This is particularly true for the Helipod fluxes at the upper flight level that indicate a well-mixed CBL, whereas the ‘true fluxes’ indicate that the CBL at this height is not mixed at all.

The ratio between the length of the legs and z_i is about 6–8. It is obvious that the convective plumes and thermals that scale with z_i and that are responsible for the bulk of the vertical transport are not adequately sampled on such short legs. Depending on how many convective elements are sampled along the leg, the measured flux will be overestimated or underestimated, which explains the large scatter between the single leg measurements from different ensemble runs.

For this reason, the single leg Helipod flux measurements during LITFASS-2003, presented by [Bange et al. \(2006\)](#), may have much larger uncertainties than originally assumed. Therefore, the conclusions that [Bange et al. \(2006\)](#) derived from the data, e.g., that the signals from the larger surface patches of the LITFASS terrain blend within the lower half of the CBL, should be carefully reviewed.

To overcome the problem of insufficient sampling over limited averaging lengths, averaging over statistically independent flux measurements is required. Figure 8 reveals that several flights are necessary to significantly reduce the influence of the insufficient sampling on the resulting flux. Although it is difficult to exactly determine the number of flights required, it is obvious that for the given leg lengths of about 10 km at least 10–15 statistically independent measurements are required. While obtaining statistically independent measurements for a given leg is relatively simple with LES, it is quite difficult in field campaigns, where additional measurements can only be obtained by carrying out further flights with a temporal offset. Considering the non-stationarity due to the daily cycle, these flight measurements should be carried out during a limited time period. However, measurements along the same leg within a limited time period are statistically not independent, if the time interval between the measurements is smaller than the convective time scale that determines the lifetime of the randomly distributed large updrafts and downdrafts. For a typical convective time scale of 30 min, 10 independent flight legs would require a time interval of 5 h, which is a significant part of the daily cycle.

Strong mean boundary-layer flow may improve the situation by rapidly advecting updrafts and downdrafts so that consecutive flights would not measure the same drafts, even if the interval between the flights is smaller than the convective time scale.

Another way to conduct the required number of flights during a limited time period would be to fly several legs above different patches of identical surface type and comparable size. However, depending on the local structure of the SCs, which might be different over different patches, the success of this procedure is not necessarily guaranteed because flux contributions from the SCs can introduce an additional variability.

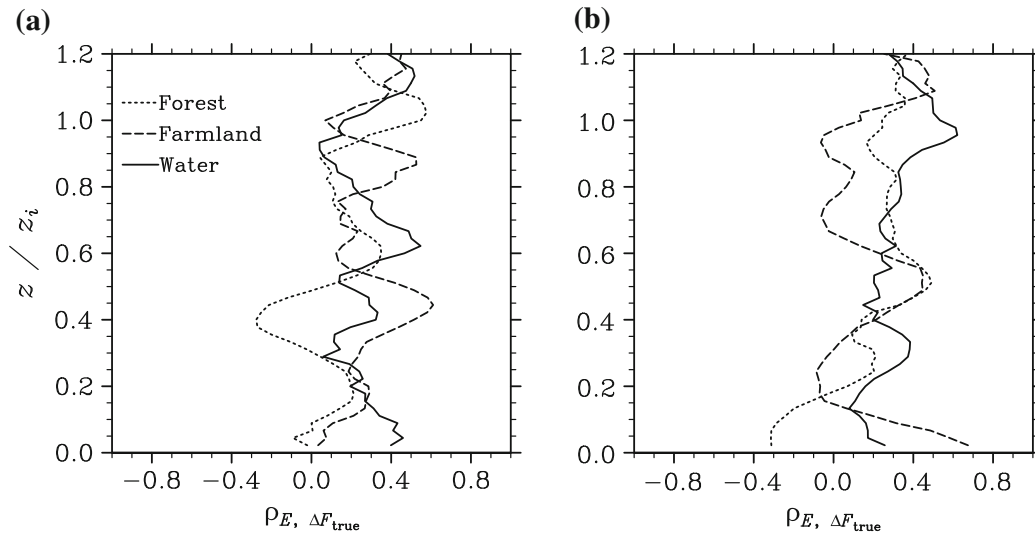


Fig. 11 Vertical profiles of the correlation coefficient between the total flux errors and the deviations of the single leg measured fluxes from the ‘true flux’ at the respective height for **a** $\langle w''\theta'' \rangle$ and **b** $\langle w''q'' \rangle$

4.5 How Reliable are the Estimated Flux Errors?

The grey-shaded areas in Fig. 10 show the range of the total flux error for a sensible heat-flux profile from a single leg of one of the ensemble runs. It is evident that the ‘true flux’ (the average over the 20 ensemble runs, depicted by the thick solid line in Fig. 10) often lies outside of the error range. In particular, over water the ‘true flux’ is almost always outside the depicted error range of the single leg flux profile. Data analysis of the single leg fluxes and the errors indicated that in about 50 % of all cases the ‘true flux’ is outside the error range of the single leg flux measurements for each of the three legs (not shown). This shows that the total flux error does not necessarily indicate how large the uncertainties of the flux measurements really are. This, in turn, contradicts the common assumption that large deviations of a single leg measurement from the ‘true flux’ coincide with a large total flux error, i.e., that there is a strong positive correlation between the total flux error E and the deviation ΔF_{true} of the single leg flux from the ‘true flux.’ In order to quantify the real relationship between these quantities, the correlation coefficient $\rho_{E, \Delta F_{\text{true}}}$ was calculated from the LES data and is presented in Fig. 11; $\rho_{E, \Delta F_{\text{true}}}$ clearly varies with height, but with no obvious trend. Values of $\rho_{E, \Delta F_{\text{true}}}$ range between 0 and 0.5, except for the forest leg where even negative values occur. This clearly demonstrates that the calculated total flux error is not an appropriate measure to quantify the uncertainty of the flux measurement for the given legs.

This unexpected conclusion can be attributed to the following reasons. The calculation of the flux error is based on the assumption that all turbulent scales contributing to the flux are sufficiently well sampled (Lenschow et al. 1994). However, this is not the case for the given legs because their lengths are too short to sufficiently capture the large convective eddies in the CBL. Because the error estimates do not consider this additional systematic flux sampling error, they are also not capable of indicating this additional uncertainty. Furthermore, the calculated systematic and random flux errors, which are expressed in terms of the integral length scale I_f of the flux, are based on the measurement itself; hence they are also subject to sampling errors like the flux itself (Mahrt 1998). For these reasons, the resulting systematic and random error estimates are not adequate for such short legs.

In order to capture heterogeneity-induced heat-flux patterns within the CBL at different heights with airborne measurements, the flight legs have to be located above different

surface types. Because the length scale of the underlying surface types is limited, the lengths of the legs are also limited. This, in turn, leads to insufficient sampling resulting in a large uncertainty of the fluxes. However, for the aforementioned reasons, the flux errors cannot indicate this large uncertainty. Since errors based on the integral length scale provide no reliable information about the uncertainty of the flux measurement, these estimated uncertainties should be interpreted very carefully for short legs. Although the small errors calculated for the Helipod fluxes (see Fig. 9) suggest that the measured fluxes can be trusted, our analysis clearly demonstrates the failure of the error estimates to quantify the large flux uncertainties, which can result in incorrect physical interpretations of CBL structure. Therefore, the uncertainty of the measured flux has to be better quantified for short legs, by carrying out more statistically independent flights at a certain level to increase the statistical significance of the measurement.

5 Summary

This study investigated how the turbulent heat fluxes in the CBL correlate with the heterogeneous surface heat-flux patterns. Using LES, two days of the LITFASS-2003 experiment were simulated, one characterized by a low wind speed of 2 m s^{-1} , the other by a larger wind speed of 6 m s^{-1} . A spatially-lagged correlation analysis between the prescribed sensible and latent surface heat fluxes and the corresponding turbulent vertical heat fluxes above the surface indicated that the surface heterogeneity pattern extends throughout the complete CBL for both fluxes, but particularly for the sensible heat flux. A correlation was even found between $\overline{w'\theta'_0}$ and the entrainment fluxes, indicating that stronger entrainment occurs above more strongly heated surface patches. In contrast to the sensible heat flux, the correlation between $\overline{w'q'_0}$ and the latent heat-flux patterns vanished in the lower half of the CBL. In the upper half of the CBL the latent heat-flux patterns were largely correlated with the entrainment fluxes, which in turn correlated with $\overline{w'\theta'_0}$. The correlation analysis revealed that a blending height for the sensible and latent heat fluxes does not exist. We emphasize that this should be mainly interpreted with respect to the larger-scale heterogeneities of the LITFASS terrain and not for scales in the range of a few hundred metres.

In larger-scale models the heterogeneous land surface and its interaction with the atmosphere is commonly treated by flux aggregation methods that assume blending below or at the first grid level for each atmospheric situation. Hence, the use of aggregation methods with explicit blending heights would improve the representation of land-atmosphere interactions in larger-scale models, as already reported by Molod et al. (2003), who found more realistic precipitation patterns when using an aggregation method with an explicit blending height. Furthermore, the correlation analysis showed that a heterogeneous surface forcing affects the entrainment processes, which in turn can affect the dynamics and even the mean state of the CBL. For example, a locally increased entrainment above more strongly heated patches can slightly stabilize the CBL from above, which in turn could counteract the convective updrafts. However, it has not been sufficiently clarified in the literature whether and how heterogeneous surface forcing affects the area-averaged entrainment. This issue will be further analysed in a follow-up study.

To investigate whether airborne measurements are able to capture surface heterogeneity-induced heat-flux patterns in the CBL, an ensemble of 20 statistically independent virtual flight measurements was carried out and compared to Helipod flight measurements during LITFASS-2003. The ensemble-averaged virtual measurements showed that the vertical turbulent heat fluxes clearly depend on the underlying surface type throughout the entire CBL.

However, the scatter between single leg flux measurements above a certain surface from different ensemble runs was quite large and partly even larger than the differences between the ‘true fluxes’ above the different surface types. Since the length of the legs was limited by the extent of the underlying surface patches, the ratio between the length of the given legs and z_i was only about 6–8, leading to an insufficient sampling of the largest turbulent eddies contributing to the flux, which in turn caused the large scatter. This clearly demonstrates that single leg flights are not suitable for capturing heterogeneity-induced turbulent heat-flux patterns in the CBL.

Based on the integral length scale of the flux, systematic and random errors for the virtual single leg fluxes were calculated according to [Lenschow et al. \(1994\)](#). It was shown that the flux errors are not appropriate for quantifying the uncertainty of the flux measurement for the given legs. Because the calculation of the integral length scale is based on the measurement itself, it is also subject to insufficient sampling of the largest turbulent eddies in the CBL. Furthermore, the calculation of the flux error is based on the assumption that all turbulent scales contributing to the flux are sufficiently sampled. However, this assumption was not valid for the given legs. For these reasons, the resulting systematic and random errors were not capable for indicating the large uncertainty in the single leg flux measurements.

It was shown that for the given legs at least 10–15 statistically independent flux measurements at a certain height would be required to determine the ‘true flux,’ which is in turn necessary to confirm heterogeneity-induced flux differences within the CBL. For real measurements it would be quite challenging to carry out the required number of flights. To ensure statistically independent flux measurements, the time interval between the measurements has to be larger than the convective time scale. Because the fluxes will change due to the daily cycle, a possible way to conduct the required number of flights during a limited time period would be to fly several legs above different patches of identical surface type and comparable size. However, depending on the local structure of the SCs, which might vary over different patches, the success of this procedure is not necessarily guaranteed because flux contributions from the SCs can introduce an additional variability.

This study has shown that LES combined with virtual measurements is a useful tool for interpreting observations as well as for detecting systematic errors. In particular, it has shown that fluxes calculated from single legs of limited length are not capable of capturing heterogeneity-induced effects on the CBL structure. Further research is needed to optimize strategies for turbulence measurements in order to provide observational evidence of heterogeneity-induced effects on the CBL.

Acknowledgments This study was supported by the German Research Foundation (DFG) under grant RA 617/21-1. All simulations were performed on the IBM Power6 at The German Climate Computing Center (DKRZ), Hamburg. We appreciate the two anonymous reviewers for their constructive and valuable comments that helped to improve the manuscript.

Open Access This article is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License which permits any use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author(s) and the source are credited.

References

- Albertson J, Parlange M (1999) Natural integration of scalar fluxes from complex terrain. *Adv Water Res* 23:239–252
- Ament F, Simmer C (2006) Improved representation of land-surface heterogeneity in a non-hydrostatic numerical weather prediction model. *Boundary-Layer Meteorol* 121:153–174

- Bange J, Roth R (1999) Helicopter-borne flux measurements in the nocturnal boundary layer over land—a case study. *Boundary-Layer Meteorol* 92:295–325
- Bange J, Beyrich F, Engelbart D (2002) Airborne measurements of turbulent fluxes during a case study about method and significance. *Theor Appl Climatol* 73:35–51
- Bange J, Spieß T, Herold M, Beyrich F, Hennemuth B (2006) Turbulent fluxes from Helipod flights above quasi-homogeneous patches within the LITFASS area. *Boundary-Layer Meteorol* 121:127–151
- Beare R, Cortes M et al (2007) An intercomparison of large-eddy simulations of the stable boundary-layer. *Boundary-Layer Meteorol* 118:247–272
- Beyrich F, Mengelkamp H (2006) Evaporation over a heterogeneous land surface: Eva_GRIPS and the LITFASS-2003 experiment: an overview. *Boundary-Layer Meteorol* 121:5–32
- Blackadar A (1997) *Turbulence and diffusion in the atmosphere*. Springer, Berlin, 185 pp
- Blyth EM (1995) Using a simple SVAT scheme to describe the effect of scale on aggregation. *Boundary-Layer Meteorol* 72:267–285
- Bou-Zeid E, Parlange M, Meneveau C (2007) On the parameterization of surface roughness at regional scales. *J Atmos Sci* 64:216–227
- Brunsell N, Mechem D, Anderson M (2011) Surface heterogeneity impacts on boundary layer dynamics via energy balance partitioning. *Atmos Chem Phys* 11:3403–3416
- Fesquet C, Dupont S, Drobinski P, Dubos T, Barthlott C (2009) Impact of terrain heterogeneity on coherent structure properties: numerical approach. *Boundary-Layer Meteorol* 133:71–92
- Gorska M, Vila-Guerau de Arellano J, LeMone M, van Heerwaarden C (2008) Mean and flux horizontal variability of virtual potential temperature, moisture, and carbon dioxide: aircraft observations and LES study. *Mon Weather Rev* 136:4435–4451
- Inagaki A, Letzel MO, Raasch S, Kanda M (2006) Impact of surface heterogeneity on energy imbalance: a study using LES. *J Meteorol Soc Jpn* 84:187–198
- Kang S, Davis K, LeMone M (2007) Observations of the ABL structures over a heterogeneous land surface during IHOP_2002. *J Hydrometeorol* 8:221–244
- Lenschow DH, Stankov B (1986) Length scales in the convective boundary layer. *J Atmos Sci* 43:1198–1209
- Lenschow DH, Mann J, Kristensen L (1994) How long is long enough when measuring fluxes and other turbulence statistics. *J Atmos Ocean Technol* 11:661–673
- Letzel MO, Raasch S (2003) Large eddy simulation of thermally induced oscillations in the convective boundary layer. *J Atmos Sci* 60:2328–2341
- Letzel MO, Krane M, Raasch S (2008) High resolution urban large-eddy simulation studies from street canyon to neighbourhood scale. *Atmos Environ* 42:8770–8784
- Lohou F, Druilhet A, Campistron B (1998) Spatial and temporal characteristics of horizontal rolls and cells in the atmospheric boundary layer based on radar and in situ observations. *Boundary-Layer Meteorol* 89:407–444
- Lohou F, Druilhet A, Campistron B, Redelspergers K, Said F (2000) Numerical study of the impact of coherent structures on vertical transfers in the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol* 97:361–383
- Lothman M, Couvreux F, Donier S, Guichard F, Lacarrere P, Lenschow DH, Noilhan J, Said F (2007) Impact of coherent eddies on airborne measurements of vertical turbulent fluxes. *Boundary-Layer Meteorol* 124:425–447
- Lumley L, Panofsky H (1964) *The structure of atmospheric turbulence*. Wiley, New York, 299 pp
- Mahrt L (1998) Flux sampling errors for aircraft and towers. *J Atmos Ocean Technol* 15:416–429
- Mahrt L (2000) Surface heterogeneity and vertical structure of the boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol* 96:33–62
- Mann J, Lenschow DH (1994) Errors in airborne flux measurements. *J Geophys Res D* 99:14519–14526
- Maronga B, Raasch S (2013) Large-eddy simulations of surface heterogeneity effects on the convective boundary layer during the LITFASS-2003 experiment. *Boundary-Layer Meteorol* 146:17–44
- Meijninger W, Hartogensis O, Kohsiek W, Hoedjes K, Zuurbier R, de Bruin H (2002) Determination of area-averaged sensible heat fluxes with a large aperture scintillometer over a heterogeneous surface—Flevoland field experiment. *Boundary-Layer Meteorol* 105:37–62
- Molod A, Salmun H, Waugh DW (2003) A new look at modeling surface heterogeneity: extending its influence in the vertical. *J Hydrometeorol* 4:810–825
- Patton E, Sullivan P, Moeng C (2005) The influence of idealized heterogeneity on wet and dry planetary boundary layers coupled to the land surface. *J Atmos Sci* 62:2078–2097
- Raasch S, Etling D (1998) Modeling deep ocean convection: large eddy simulation in comparison with laboratory experiments. *J Phys Oceanogr* 28:1786–1802
- Raasch S, Franke T (2011) Structure and formation of dust devil-like vortices in the atmospheric boundary layer: a high-resolution numerical study. *J Geophys Res* 116: D16 120

- Raasch S, Harbusch G (2001) An analysis of secondary circulations and their effects caused by small-scale surface inhomogeneities using large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol* 101:31–59
- Raasch S, Schröter M (2001) Palm—a large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol Z* 10:363–372
- Schröter M, Bange J, Raasch S (2000) Simulated airborne flux measurements in a LES generated convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol* 95:437–456
- Shen S, Leclerc M (1995) How large must surface inhomogeneities be before they influence the convective boundary layer structure? A case study. *Q J R Meteorol Soc* 121:1209–1228
- Shuttleworth W, Yang Z, Arain M (1997) Aggregation rules for surface parameters in global models. *Hydrol Earth Syst Sci* 1:217–226
- Steinfeld G, Letzel MO, Raasch S, Kanda M, Inagaki A (2007) Spatial representativeness of single tower measurements and the imbalance problem with eddy-covariance fluxes: results of a large-eddy simulation study. *Boundary-Layer Meteorol* 123:78–98
- Steinfeld G, Raasch S, Markkanen T (2008) Footprints in homogeneously and heterogeneously driven boundary layers derived from a Lagrangian stochastic particle model embedded into large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol* 129:225–248
- Strunin M, Hiyama T, Asanuma J, Ohata T (2004) Aircraft observations of the development of thermal internal boundary layers and scaling of the convective boundary layer over non-homogeneous land surfaces. *Boundary-Layer Meteorol* 111:491–522
- Stull R (1988) *An introduction to boundary layer meteorology*. Kluwer, Dordrecht, 666 pp
- Sullivan P, Moeng C, Stevens B, Lenschow D, Mayor S (1998) Structure of the entrainment zone capping the convective atmospheric boundary layer. *J Atmos Sci* 55:3042–3064
- Uhlenbrock J, Raasch S, Hennemuth B, Zittel P, Meijninger W (2004) Effects of land surface heterogeneities on the boundary layer structure and turbulence during LITFASS-2003: large-eddy simulations in comparison with turbulence measurements. In: 16th Symposium on boundary layers and turbulence, American Meteorological Society, Portland (Maine), paper 9,3
- van Heerwaarden C, Vila-Guerau de Arellano J (2008) Relative humidity as an indicator for cloud formation over heterogeneous land surfaces. *J Atmos Sci* 65:3263–3277
- Wang C, Tian W, Parker D, Marsham J, Guo Z (2011) Properties of a simulated convective boundary layer over inhomogeneous vegetation. *Q J R Meteorol Soc* 137:99–117
- Wicker L, Skamarock W (2002) Time-splitting methods for elastic models using forward time schemes. *Mon Weather Rev* 130:2088–2097
- Williamson JH (1980) Low-storage Runge–Kutta schemes. *J Comput Phys* 35:48–56

3.2 Artikel B: On the effect of surface heat-flux heterogeneities on the mixed-layer-top entrainment

3.2.1 Beitrag des Autors

Alle Analysen und der Großteil der Simulationen wurden vom Autor durchgeführt. Einige Simulationen wurden von Florian Herbort durchgeführt. Das Setup der Simulationen und Teile des Nutzer-eigenen FORTRAN90-Codes basierten auf Vorarbeiten von Florian Herbort. Die Methode zur Bestimmung der lokalen Entrainmentrate basiert auf einer vom Autor gemeinsam mit Dr. Björn Maronga entwickelten Idee. Das Manuskript wurde vom Autor verfasst. Diskussionen mit allen Koautoren sowie interne Begutachtungen trugen dazu bei die Qualität des Manuskripts zu verbessern. Des Weiteren profitierte das Manuskript von den Vorschlägen zweier externer Gutachter.

3.2.2 Publizierter Artikel

Dieser Artikel wurde als Open-Access in *Boundary-Layer Meteorology* veröffentlicht.
Eingereicht: 31.07.2013, Akzeptiert: 04.02.2014

Sühning, M., B. Maronga, F. Herbort, S. Raasch, 2014: On the effect of surface heat-flux heterogeneities on the mixed-layer-top entrainment. *Boundary-Layer Meteorol.*, **151**, 531–556, doi: 10.1007/s10546-014-9913-7.

On the Effect of Surface Heat-Flux Heterogeneities on the Mixed-Layer-Top Entrainment

Matthias Sühring · Björn Maronga · Florian Herbort ·
Siegfried Raasch

Received: 31 July 2013 / Accepted: 4 February 2014 / Published online: 13 March 2014
© The Author(s) 2014. This article is published with open access at Springerlink.com

Abstract We used a set of large-eddy simulations to investigate the effect of one-dimensional stripe-like surface heat-flux heterogeneities on mixed-layer top entrainment. The profiles of sensible heat flux and the temporal evolution of the boundary-layer depth revealed decreased entrainment for small heat-flux amplitudes and increased entrainment for large heat-flux amplitudes, compared to the homogeneously-heated mixed layer. For large heat-flux amplitudes the largest entrainment was observed for patch sizes in the order of the boundary-layer depth, while for significantly smaller or larger patch sizes entrainment was similar as in the homogeneous case. In order to understand the underlying physics of this impact, a new approach was developed to infer local information on entrainment by means of the local flux divergence. We found an entrainment maximum over the centre of the stronger heated surface patch, where thermal energy is accumulated by the secondary circulation (SC) that was induced by the surface heterogeneity. Furthermore, we observed an entrainment maximum over the less heated patch as well, which we suppose is to be linked to the SC-induced horizontal flow convergence at the top of the convective boundary layer (CBL). For small heat-flux amplitudes a counteracting effect dominates that decreases entrainment, which we suppose is the horizontal advection of cold air in the lower, and warm air in the upper, CBL by the SC, stabilizing the CBL and thus weakening thermal convection. Moreover, we found that a mean wind can reduce the heterogeneity-induced impact on entrainment. If the flow is aligned perpendicular to the border between the differentially-heated patches, the SC and thus its impact on entrainment vanishes due to increased horizontal mixing, even for moderate wind speeds. However, if the flow is directed parallel to the border between the differentially-heated patches, the SC and thus its impact on entrainment persists.

Keywords Convective boundary layer · Encroachment · Entrainment · Large-eddy simulation · Surface heterogeneity

M. Sühring (✉) · B. Maronga · F. Herbort · S. Raasch
Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover,
Herrenhäuser Str. 2, 30419 Hannover, Germany
e-mail: suehring@muk.uni-hannover.de

1 Introduction

Entrainment at the top of the convective boundary layer (CBL) describes the mixing of non-turbulent, warm and dry tropospheric air into the turbulent CBL through a stably-stratified interfacial layer (e.g. [Sullivan et al. 1998](#)). It is an important process that affects the development of the daytime CBL, because it regulates the exchange of sensible and latent heat, momentum ([Conzemius and Fedorovich 2006](#)), as well as chemical species ([Ouwensloot et al. 2011](#)) between the CBL and the free atmosphere. The underlying physics are on much smaller scales than the grid size used in numerical weather prediction (NWP) models, hence NWP models rely on accurate parametrizations of entrainment to incorporate its effect on the CBL evolution.

When neglecting large-scale synoptic forcing, the CBL grows only by surface heating and by entrainment. The CBL growth due to pure thermodynamic heating at the surface (assuming an incompressible fluid without thermal expansion) is termed encroachment ([Stull 1988](#)), which explains about 70–90% of the CBL growth ([Stull 1976](#); [Canut et al. 2010](#)). The remaining 10–30% can be ascribed to the entrainment of warm air. The physics and magnitude of entrainment depend strongly on the surface forcing and on the structure of the interfacial layer between the CBL and the troposphere, i.e. on its thickness and strength, which has been investigated in numerous studies using remote sensing techniques (e.g. [Angevine et al. 1994](#); [Davis et al. 1997, 2000](#); [Beyrich and Gryning 1998](#); [Angevine 1999](#); [Grabon et al. 2010](#); [Träumner et al. 2011](#)), aircraft observations (e.g. [Lenschow et al. 1999](#); [Bange et al. 2007](#); [Canut et al. 2010](#)) and large-eddy simulations (LES) (e.g. [Sullivan et al. 1998](#); [Otte and Wyngaard 2001](#); [Fedorovich et al. 2004](#); [Brooks and Fowler 2012](#)). Furthermore, entrainment physics depend also on the presence of elevated wind shear in the inversion layer that is accompanied by an increase in the magnitude of entrainment ([Davis et al. 1997](#); [Kim et al. 2003](#); [Pino et al. 2003](#); [Conzemius and Fedorovich 2006](#); [Canut et al. 2010](#)). The same applies also to the presence of roll convection and gravity waves ([Lothon et al. 2009](#)). Several LES studies reported also an effect of heterogeneous surface heating on entrainment ([Avisar and Schmidt 1998](#); [Raasch and Harbusch 2001](#); [Patton et al. 2005](#); [van Heerwaarden and de Arellano 2008](#); [Ouwensloot et al. 2011](#); [Maronga and Raasch 2013](#)), though this and the effect on the structure of the interfacial layer are still not well understood to date.

The local impact of a heterogeneous forcing on the structure of the interfacial layer was studied by aircraft observations ([Kang et al. 2007](#)) and LES ([van Heerwaarden and de Arellano 2008](#); [Fesquet et al. 2009](#); [Wang et al. 2011](#); [Maronga and Raasch 2013](#)). All of these studies reported a correlation between the local CBL depth z_i and the underlying surface sensible heat flux, where larger values of z_i were observed over stronger heated surface patches and vice versa. In their LES study over one-dimensional stripe-like surface patches [van Heerwaarden and de Arellano \(2008\)](#), hereafter HA08, attributed these spatial variations in the local z_i to rising secondary circulation (SC) updrafts that led to increased entrainment over the stronger heated patch. [Maronga and Raasch \(2013\)](#) used LES to study the effect of irregularly distributed surface heterogeneity on the CBL during the LITFASS-2003 experiment ([Beyrich and Mengelkamp 2006](#)). In their study the local z_i was highly correlated with the underlying surface heterogeneity pattern, whereas the SCs were found to be located at the edges of the surface patches and did not extend to the centre of the surface patches. Increased entrainment associated with SC updrafts thus did not explain the spatial variations in the local z_i over the LITFASS terrain, so that [Maronga and Raasch \(2013\)](#) attributed the spatial variations in the local z_i to spatial variations in encroachment. Based on LES for the LITFASS-2003 experiment, [Sühning and Raasch \(2013\)](#) conducted a correlation analysis

between the turbulent heat-flux patterns in the CBL and the underlying surface heat-flux pattern. They showed that signals from the surface heterogeneity extend throughout the entire CBL, resulting in increased entrainment over stronger heated patches and decreased entrainment over less heated patches. However, as local profiles of the sensible heat flux revealed spatially varying heating of the CBL, indicating spatially varying encroachment, it was not possible in their study to separate entrainment and encroachment, so that the spatial variations in the local z_i can be due to spatial variations in both entrainment and encroachment.

Henceforth, for a proper distinction, the entrainment of air from the free atmosphere into the CBL at a certain location (i.e. a finite column of air) is hereafter referred to as local entrainment, while entrainment derived from horizontal mean values over a horizontally extended domain is referred to as domain-averaged entrainment.

Even though various studies investigated the effect of surface heterogeneities on domain-averaged entrainment, it is still an open question whether a heterogeneous surface forcing affects domain-averaged entrainment, and if so, whether it is increased or decreased. One reason might be attributed to the use of different methods to define the magnitude of domain-averaged entrainment over heterogeneous terrain. Previous studies used either the entrainment velocity $w_e = dz_i / dt$, which is the temporal derivative of z_i , or the profile of sensible heat flux at the top of the CBL, particularly its minimum value and the region with negative flux, which are common entrainment measures (e.g. [van Zanten et al. \(1999\)](#)). However, horizontally-averaged heat-flux profiles in the entrainment layer obtained from LES should be interpreted very carefully with respect to the magnitude of entrainment, because local entrainment events at different heights can be smoothed out by the horizontal averaging ([Lilly 2002](#)). This is even more critical over heterogeneously-heated surfaces where the vertical level of the entrainment layer varies spatially due to the spatial variations of z_i . This results in a deeper region with negative heat flux for the heterogeneously-heated CBL compared to the homogeneously-heated CBL (HA08), suggesting different magnitudes of entrainment just by horizontal averaging.

[Maronga and Raasch \(2013\)](#) reported slightly decreased domain-averaged entrainment over the heterogeneously-heated LITFASS terrain compared to a homogeneous reference simulation, indicated by heat-flux profiles and w_e . They supposed that the existing SCs partly redirect the vertical transport to the horizontal transport, which in turn decreases entrainment. In contrast, based on profiles of sensible heat flux, [Avisar and Schmidt \(1998\)](#), and [Raasch and Harbusch \(2001\)](#) found increased entrainment in their LES over idealized sensible surface heat-flux heterogeneities compared to homogeneous runs. Moreover, [Avisar and Schmidt \(1998\)](#) observed increased entrainment for increasing patch size. [Patton et al. \(2005\)](#) investigated the impact of idealized surface heterogeneities on CBL structure and found only small changes in w_e for varying heterogeneity scales, where w_e slightly decreased for patch sizes in the order of z_i , but slightly increased for significantly larger patch sizes. However, in contrast to [Avisar and Schmidt \(1998\)](#) and [Raasch and Harbusch \(2001\)](#) the considered surface heat-flux heterogeneities were less pronounced in amplitude, indicating that the heterogeneity effect on entrainment was comparatively small in their study. HA08 observed, by means of vertical heat-flux profiles, increased entrainment for cases with large heterogeneity amplitudes and decreased entrainment for cases with small heterogeneity amplitudes, compared to a homogeneous reference case. However, they discarded this finding and attributed these modifications to the effect of the horizontal averaging, because they found the temporal evolution of z_i not affected by the heterogeneous surface heating. Based on LES over one-dimensional stripe-like surface patches, [Ouwensloot et al. \(2011\)](#), hereafter O11, pointed out that the effect of surface heterogeneities on entrainment is diverse, even though their results are based on differences in z_i at a certain point in time only, which

could also result from differences in the model spin-up (HA08). While they found increased entrainment for large heterogeneity amplitudes compared to a homogeneously-heated CBL, they observed decreased entrainment for small heterogeneity amplitudes. They attributed these findings to the existing SC, where the uprising branch of the SC allows the thermals to penetrate the inversion more rigorously. At the same time the subsiding branch of the SC suppresses the thermal convection. Depending on the strength of the SC, either the promoting or the suppressive effect of the SC on entrainment dominates, which in turn indicates that the suppressive effect is saturated at some point. However, the underlying physics are still unknown and a detailed investigation is still pending. Moreover, O11 showed that the largest impact on entrainment occurs when the patch size is in the order of z_i . For significantly smaller or larger patches no effect was observed, because the SC did not reach the top of the CBL or was weak and thus of minor importance for the entrainment. Even though the heterogeneity amplitudes are not directly comparable, this finding is in contrast to [Avisar and Schmidt \(1998\)](#) who observed increased entrainment for increasing patch size.

These different findings in the literature suggest that the effect of surface heterogeneity on entrainment depends in a complex manner on the atmospheric conditions and the type of surface heterogeneity, stressing the need for a comprehensive and systematic investigation of whether and how a heterogeneous surface forcing affects entrainment. In order to focus independently on effects induced by different heterogeneity amplitude and scale, which would be impossible for realistic surface heterogeneity where various heterogeneity amplitudes and scales are superimposed, we prescribe idealized surface heterogeneities. In a first step, based on a series of LES runs over one-dimensional stripe-like surface patches, we analyze how the heterogeneous forcing and the existing SC modify the CBL structure. To quantify domain-averaged entrainment over heterogeneous terrain former studies used either the profiles of sensible heat flux or the temporal evolution of z_i , while local information on entrainment was often inferred from local values of z_i . However, heat-flux profiles might be affected by horizontal averaging, z_i might be affected by differences in the model spin-up for different surface heterogeneities, and local values of z_i incorporate also the effect of encroachment, making it difficult to separate the heterogeneity effect on entrainment. In order to divide the boundary-layer growth into an entrainment portion and into an encroachment portion, we hence develop a new method based on the local flux divergence. In this way we provide local estimates of the entrainment rate, so that the method is also independent on horizontal averaging. Based on this approach, we investigate how the heterogeneity-induced SC affects local entrainment, and how the identified possible responsible processes interact with each other depending on the heterogeneous forcing. Subsequently, in order to achieve a more comprehensive view of the heterogeneity-induced impact on entrainment we perform a series of LES runs with a broader range of heterogeneity amplitudes and patch sizes, as well as different wind speeds and wind directions.

The paper is organized as follows: Sect. 2 describes the LES model, the simulation set-ups and the heterogeneous surface forcing, as well as the statistical analysis methods. Section 3 gives a detailed analysis of the structure of the heterogeneously-heated CBL. Subsequently, the method to determine the local entrainment rate is introduced and the results of this analysis are presented. Moreover, the possible heterogeneity-induced mechanisms modifying entrainment are identified and discussed. At the end of Sect. 3 a more comprehensive picture of the effect of varying heat-flux amplitude, patch size and mean wind on entrainment is presented. Section 4 gives a summary.

2 Methods

2.1 LES Model and Numerical Experiments

The **PA**rallelized **LES** Model **PALM** (Raasch and Etling 1998; Raasch and Schröter 2001), revision 993,¹ was used for the numerical simulations, and solves the non-hydrostatic incompressible Boussinesq equations. For the subgrid model the kinetic energy scheme of Deardorff (1980) was used. The advection terms were discretized by a fifth-order scheme (Wicker and Skamarock 2002), and for the time integration a third-order Runge–Kutta scheme (Williamson 1980) was used. Cyclic lateral boundary conditions were used, and between the surface and the first grid level Monin–Obukhov similarity theory was applied.

In the present study we focused on the dry CBL. All numerical experiments were initialized by a potential temperature profile $\theta(z)$ where θ was constant up to 800 m. This layer was capped by an inversion with a temperature jump of 2 K, and the above-lying free atmosphere had a lapse rate of 0.006 K m^{-1} . At the beginning of each simulation randomly distributed perturbations were imposed on the horizontal velocity fields to initiate turbulence. The surface heterogeneity in our simulations was prescribed by a horizontally varying surface sensible heat flux. A homogeneous roughness length of $z_0 = 0.1 \text{ m}$ was used.

In order to create heterogeneous forcing, we divided the model surface into alternating stronger and less heated patches along the x -axis. The surface sensible heat flux $H_0(x)$ on the respective patch deviates from the domain-averaged surface heat flux by a certain percentage, described by the parameter $A \in [0, 1]$. The domain-averaged surface heat flux was constant with a value of 0.1 K m s^{-1} in all performed simulations. In order to avoid different spin-up times for turbulence over different patches at the beginning of the simulation, the surface was heated homogeneously during the first hour of the simulation.

In a first step we varied the amplitude of the surface heterogeneity by varying A between 0 (the homogeneous reference case) and 1 with increments of 0.1 for a constant patch size $L = 3,200 \text{ m}$. In a second step we varied L for given $A = 0.5$, where L ranged from values significantly smaller to significantly larger than z_i . An overview of all performed simulations is given in Table 1. The name of the particular simulation is derived from the parameter A and L , for example, A50L32 is a simulation with $L = 3,200 \text{ m}$ and $A = 0.5$, where $H_0(x)$ is 50 % larger (smaller) over the stronger (less) heated patch compared to the horizontal mean value.

Raasch and Harbusch (2001) showed that a mean wind can modify the impact of surface heat-flux heterogeneities on the CBL. Depending on the wind direction with respect to the surface heterogeneity the impact can be reduced, even for moderate wind speeds. In order to study the relative importance of surface heterogeneities on entrainment under different wind regimes, we varied the geostrophic wind speed and direction for given $A = 0.5$ and $L = 3200 \text{ m}$. The geostrophic wind was adjusted in such a way that the mean boundary-layer flow is directed parallel or perpendicular to the heterogeneous x -axis during the simulation. To separate the heterogeneity effect from the effect of varying wind shear on entrainment, we performed homogeneous reference simulations with identical geostrophic forcing. The name of the particular simulation with mean wind (see Table 1) was derived from the wind direction and from the wind speed, where U and V denote simulations with mean CBL wind perpendicular and parallel to the heterogeneity, respectively.

For the studies with varying mean wind speed and heterogeneity amplitude and scale our model domain was $6.4 \text{ km} \times 25.6 \text{ km} \times 3.5 \text{ km}$ in the x -, y -, and z -directions, respectively. For patch sizes larger than $L = 3,200 \text{ m}$ we extended the domain in the x -direction so that

¹ The code can be accessed under <http://palm.muk.uni-hannover.de/browser/?rev=993>.

Table 1 Parameters of the performed simulations

Name	Grid $x \times y \times z$	A –	ΔH_0 (K m s^{-1})	L (m)	U_{CBL} (m s^{-1})	V_{CBL} (m s^{-1})
HOM	$512 \times 2048 \times 192$	0.0	0.0	–	0.0	0.0
HOM*	$512 \times 32000 \times 192$	0.0	0.0	–	0.0	0.0
Amplitude						
A10L32	$512 \times 2048 \times 192$	0.1	0.02	3200	0.0	0.0
A20L32	$512 \times 2048 \times 192$	0.2	0.04	3200	0.0	0.0
A20L32*	$512 \times 32000 \times 192$	0.2	0.04	3200	0.0	0.0
A30L32	$512 \times 2048 \times 192$	0.3	0.06	3200	0.0	0.0
A40L32	$512 \times 2048 \times 192$	0.4	0.08	3200	0.0	0.0
A50L32	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	3200	0.0	0.0
A50L32*	$512 \times 32000 \times 192$	0.5	0.1	3200	0.0	0.0
A60L32	$512 \times 2048 \times 192$	0.6	0.12	3200	0.0	0.0
A70L32	$512 \times 2048 \times 192$	0.7	0.14	3200	0.0	0.0
A80L32	$512 \times 2048 \times 192$	0.8	0.16	3200	0.0	0.0
A90L32	$512 \times 2048 \times 192$	0.9	0.18	3200	0.0	0.0
A100L32	$512 \times 2048 \times 192$	1.0	0.2	3200	0.0	0.0
Patch size						
A50L01	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	100	0.0	0.0
A50L02	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	200	0.0	0.0
A50L04	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	400	0.0	0.0
A50L08	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	800	0.0	0.0
A50L08*	$512 \times 32000 \times 192$	0.5	0.1	800	0.0	0.0
A50L16	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	1600	0.0	0.0
A50L16*	$512 \times 32000 \times 192$	0.5	0.1	1600	0.0	0.0
A50L64	$1024 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	6400	0.0	0.0
A50L96	$1536 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	9600	0.0	0.0
Wind						
U06	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	3200	0.6	0.0
U12	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	3200	1.2	0.0
U25	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	3200	2.5	0.0
U50	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	3200	5.0	0.0
V06	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	3200	0.0	0.6
V12	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	3200	0.0	1.2
V25	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	3200	0.0	2.5
V50	$512 \times 2048 \times 192$	0.5	0.1	3200	0.0	5.0

The number of grid points is shown in the x -, y -, and z -directions. ΔH_0 is the amplitude of the surface heterogeneity determined by the parameter A , which describes the relative deviation of the surface sensible heat flux over the respective patch from the horizontal mean value; L is the patch size; and U_{CBL} and V_{CBL} are the horizontal mean wind-speed components along and perpendicular the heterogeneous x -axis within the CBL during the simulation, respectively. Simulations marked with an asterisk are performed on larger domains

at least two differentially-heated patches fit into the model domain. We used an isotropic grid length of 12.5 m for all simulations. A sensitivity study (not shown) revealed this grid length to be sufficient, because the temporal evolution of z_i , which is thought to be one of the

most grid sensitive quantities (Sullivan and Patton 2011), did not change for decreasing grid spacing, indicating that the bulk of the entrainment processes was resolved in our simulations. Well above the entrainment layer the vertical grid was stretched to minimize computational resources, and a sponge layer prevented the reflection of gravity waves at the top of the model domain.

In Sect. 3.2 we present a method to determine local entrainment rates; this approach required an extended model domain in the y -direction to obtain a sufficiently large sample size. Therefore, we also performed simulations with a model domain of $6.4 \text{ km} \times 400.0 \text{ km} \times 3.5 \text{ km}$ in the x -, y -, and z -directions for selected cases, which are marked by an asterisk. These enlarged simulations ran for 4 h of simulation time and entrainment rates were calculated during the last hour of the simulation. The simulations with the smaller domain ran for 1 h more, i.e. 5 h, to highlight the different temporal evolution of the CBL over a longer period.

2.2 Statistical Analysis

The horizontal domain average of a quantity ϕ is indicated by squared brackets $[\]$, while the temporal average is indicated by an overbar. The surface forcing in our simulations is homogeneous along the y -axis. Hence, we can decompose a space and time-dependent variable into the spatial average along the y -axis and into a turbulent fluctuation as follows (e.g. Chen and Avissar 1994; Patton et al. 2005)

$$\phi(x, y, z, t) = \langle \phi \rangle(x, z, t) + \phi'(x, y, z, t), \quad (1)$$

where $\langle \phi \rangle$ is the spatial average along the y -axis, hereafter referred to as the phase average, which can be further decomposed into a domain-averaged contribution $[\phi]$ and a mesoscale fluctuation $\tilde{\phi}$; ϕ' is the turbulent fluctuation with respect to the phase average, and t denotes the time. The phase average of a quantity is used to illustrate heterogeneity-induced differences in the CBL. We also applied phase averaging to obtain information on how the heterogeneous forcing affects the turbulent flux pattern. The resulting instantaneous phase-averaged vertical turbulent flux of ϕ is defined by

$$\langle w' \phi' \rangle(x, z, t) = \langle (w(x, y, z, t) - \langle w \rangle(x, z, t)) (\phi(x, y, z, t) - \langle \phi \rangle(x, z, t)) \rangle, \quad (2)$$

where w is the vertical velocity. It should be noted that $\langle w' \phi' \rangle(x, z, t)$ is not representative of the total vertical transport at a given x - z position, because it does not include the flux portion due to the SC, hereafter referred to as the mesoscale flux, which is given by

$$[\tilde{w}\tilde{\phi}](z, t) = [(\langle w \rangle(x, z, t) - [w](z, t)) (\langle \phi \rangle(x, z, t) - [\phi](z, t))]. \quad (3)$$

Particularly for cases with larger heat-flux amplitudes the mesoscale flux was found to exceed the turbulent flux in the middle of the CBL and in the entrainment layer (not shown), as already reported by HA08 for a similar heterogeneous forcing (see HA08, Fig. 6). Therefore, the phase-averaged turbulent flux does not necessarily provide information on the total transport at a certain location, so that the turbulent flux will not be used to infer information on local entrainment. Nevertheless, the turbulent flux patterns are used to provide a hint to the general total vertical transport patterns, because the mesoscale transport is linked to the turbulent transport over heterogeneous terrain where e.g. uprising thermals appear always at the same location (HA08).

A common measure of entrainment is w_e or the temporal evolution of the domain-averaged boundary-layer depth $[z_i]$. Therefore, we calculated $[z_i]$ by horizontal averaging the local boundary-layer depth $z_i(x, y)$, according to the recent studies of HA08, O11, and Maronga and Raasch (2013). O11 evaluated different methods to determine $z_i(x, y)$ and stated that

the gradient method after [Sullivan et al. \(1998\)](#) gives the most reliable results. The gradient method defines $z_i(x, y)$ as the height where the vertical gradient of the potential temperature $\partial\theta / \partial z$ is a maximum for given x and y .

In Sect. 3.5 we discuss the effects of heterogeneity on the physics of entrainment. Therefore, we require local information on the turbulence intensity, which is usually provided by the turbulent kinetic energy (TKE). The turbulent fraction of a quantity is defined as the deviation from a reference value, which is usually the horizontal mean of the respective quantity in the LES. However, under horizontally heterogeneous conditions this method might fail, because the horizontal mean does not necessarily represent local mean conditions. Defining the TKE by means of the phase or temporal average is also not suitable as it would remove the mesoscale portion. This mesoscale portion contributes significantly to the entrainment flux, because entrainment events preferentially take place at the same location over heterogeneous terrain, as shown by HA08. We used the absolute value of the vorticity vector ζ_{abs} as a local measure of the turbulence intensity instead. The vorticity vector is given by

$$\zeta_i = \epsilon_{ijk} \frac{\partial u_j}{\partial x_k}, \quad (4)$$

where ϵ_{ijk} is the Levi–Civita tensor and u_j are the three velocity components; ζ_{abs} is based on local values and is not related to spatial or temporal averages such as the TKE. In contrast to the TKE, ζ_{abs} thus still includes local mesoscale fluctuations and is therefore better suited to study entrainment physics over heterogeneously-heated surfaces.

3 Results

3.1 CBL Characteristics

First of all we discuss here the impact of the heterogeneous surface forcing on the mean and local CBL structure for selected cases, i.e. A20L32*, A50L32*, A50L08*, A50L16* simulations, before we proceed to the discussion of the heterogeneity-induced effect on entrainment. Figure 1a shows the respective domain-averaged vertical profiles of θ after 4 h of simulated time. Simulation HOM* indicates a vertically well-mixed CBL, capped by an inversion with a potential temperature jump of about 2 K. The A20L32* simulation exhibits a slightly cooler CBL with a slightly lower inversion height ($z_i = 1,010$ m) compared to the HOM* simulation, whereas the runs with larger heat-flux amplitude exhibit a warmer and deeper CBL (e.g. $z_i = 1,080$ m for simulation A50L16*). Figure 1b shows phase-averaged vertical profiles of θ over the centre of the stronger and less heated patches, hereafter referred to as the warm and cold patches, for the respective cases. The heterogeneous runs exhibit a temperature difference of about 0.5 K between the warm and cold patches. While the CBL is vertically well-mixed over the warm patches, except for the surface layer, it appears that the CBL over the cold patches is slightly stabilized and thus vertically less mixed, particularly in the upper part of the CBL. The inversion over the warm patches is higher than over the cold patches (about 50 m for simulation A50L32*), indicating that the CBL is not well-mixed horizontally, except for simulation A50L08* where the inversion height over the warm and cold patches is similar. Figure 2a–d shows vertical cross-sections of the phase-averaged resolved-scale instantaneous turbulent vertical heat-flux pattern for the A20L32*, A50L32*, A50L08*, and A50L16* simulations, as well as the corresponding SC indicated by the wind vectors. It should be noted that the x -axis is normalized with the respective patch size, meaning that the horizontal scales in Fig. 2 vary among the cases. Moreover, it should be noted that

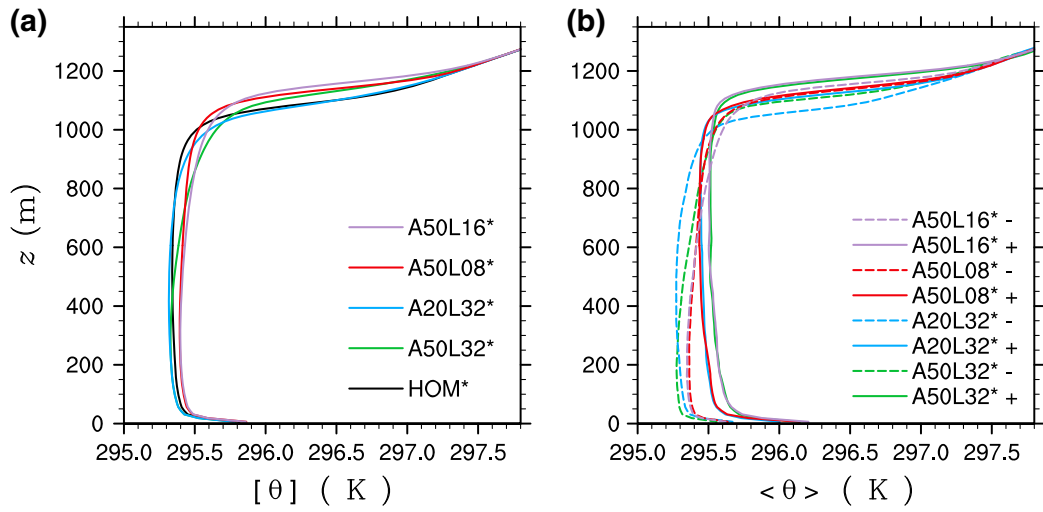


Fig. 1 Instantaneous vertical profiles of θ after 4 h of simulated time, **a** domain-averaged, **b** phase-averaged at the centre of the warm patches, indicated by *plus*, as well as at the centre of the cold patches, indicated by *minus*

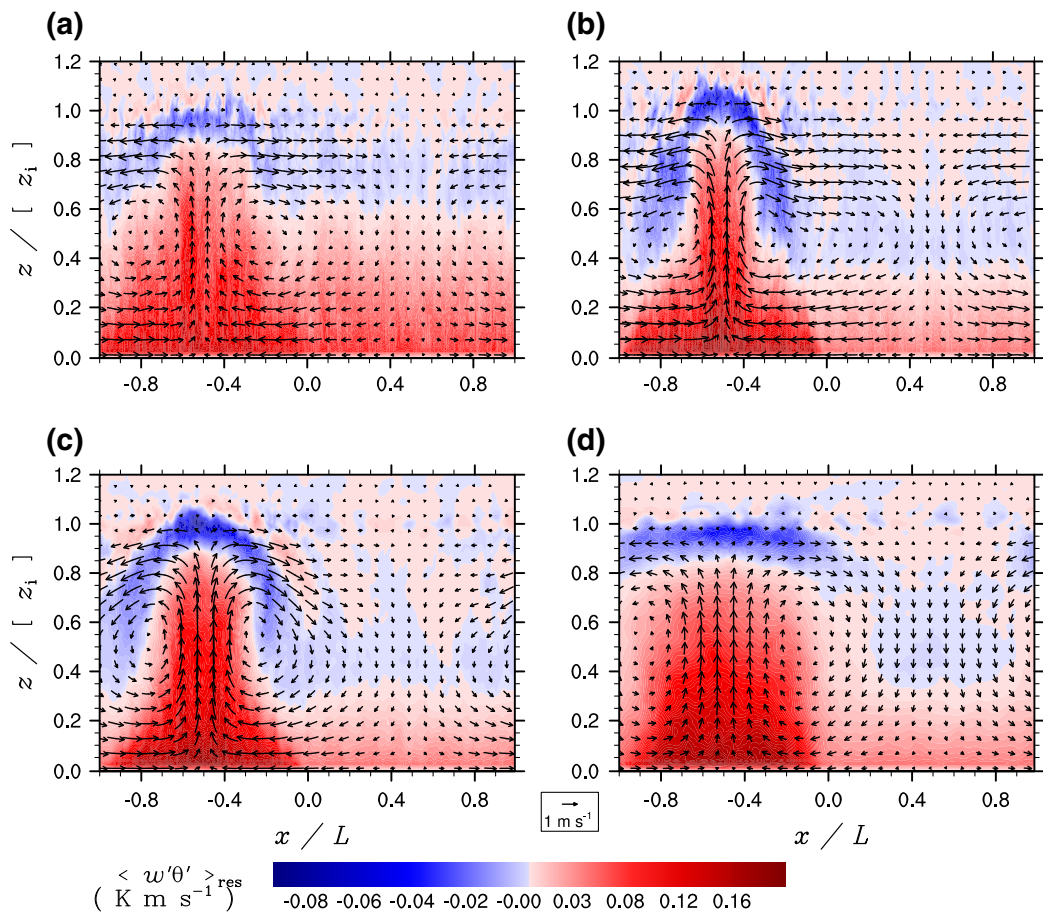


Fig. 2 Instantaneous vertical cross-section of the phase-averaged resolved-scale vertical turbulent sensible heat flux for the **a** A20L32*, **b** A50L32*, **c** A50L16*, and **d** A50L08* simulations after 4 h of simulated time. The corresponding phase-averaged flow is displayed by the wind vectors. The x -axis is normalized by the respective patch size; the z -axis is normalized by the respective domain-averaged CBL depth

the displayed wind vectors do not represent the entire flow on the mesoscale. As the Coriolis force was considered, the horizontal branches of the SC turn to the right of the flow direction after some integration time, so that the SC is not a two-dimensional but a three-dimensional phenomenon. However, as the wind component in the y -direction was more than one order of magnitude smaller than in the x -direction, this effect of the Coriolis force is not considered further. The SCs vary in strength among the cases, indicated by the length of the wind vectors. The weakest SC can be observed for simulation A20L32*, while the strongest SCs can be observed for simulation A50L32* and A50L16*. For all cases the uprising branch of the SC is located over the centre of the warm patch, while the subsiding branch is located over the cold patch. In the lower half of the CBL the subsiding branch diverges. As a result air parcels are horizontally advected towards the centre of the warm patch, where the flow converges and thermal energy accumulates. The bulk of the sensible heat is transported upwards within the uprising branch of the SC, which is evident by the positive values of the turbulent heat flux, while the turbulent heat flux is small or even negative in the remaining model domain. At the top of the CBL thermals that are associated with the uprising branch of the SC penetrate into the inversion layer. Due to the resulting prevailing compensatory subsidence directly beside the updraft region warm air is transported downwards, creating a region with negative turbulent heat flux. At the top of the CBL the uprising branch of the SC diverges and sensible heat is advected towards the cold patch. As a result of this warm air advection the upper CBL over the cold patch is stabilized (see also Fig. 1b), as discussed by Kang and Davis (2008). Over the centre of the cold patch the flow converges and the air subsides. The small or even negative values of the turbulent heat flux over the cold patch (e.g. for simulation A50L32* where the turbulent heat flux is negative above $0.4 z_i$) indicate that the thermal convection is weakened or even completely suppressed by the presence of the SC. In order to verify that the SC suppresses thermal convection over the cold patch and to ensure that the low heat flux is not only a result of the lower surface heat flux, we performed homogeneous runs with identical surface heating as over the cold patch. The corresponding homogeneous runs are denoted as HOMA20C and HOMA50C for the small amplitude case A20L32* and the larger amplitude cases A50L32*, A50L08*, A50L16*, respectively. Figure 4c shows the profiles of the phase-averaged resolved-scale turbulent heat flux over the centre of the cold patch, as well as the domain-averaged resolved-scale heat flux for the homogeneous reference cases. It should be noted that for the heterogeneous cases the flux contribution by the SC is missing, however, it is obvious that the subsiding branch of the SC would not contribute to the vertical upward transport over the cold patch. For the HOMA20C and HOMA50C simulations the heat flux decreases linearly with height and exhibits a well-defined region with negative values at the top of the CBL, which is about 970 and 880 m, respectively, whereas for the A20L32* and A50L32*, A50L08*, A50L16* simulations the turbulent heat flux over the cold patch decreases with height and is close to zero above 700 and 400 m (which is significantly lower than z_i , see also Fig. 1), respectively. In addition, in order to be sure that turbulence is suppressed in the upper part of the CBL for the larger amplitude cases, we performed a further test simulation based on simulation A50L32*, where Lagrangian particles were released near the surface in the entire horizontal model domain and tracked for 30 min. Particle trajectories were calculated online by an embedded Lagrangian particle model according to Steinfeld et al. (2008). While a large number of particles reached the top of the CBL over the warm patch, no particle reached levels higher than $0.6 z_i$ over the cold patch (not shown), confirming that the upper part of the CBL over the cold patch is decoupled from the surface heating below.

Figure 2 shows that the varying patch size and heat-flux amplitude affect the turbulent heat-flux pattern. For example, for simulation A50L32* the bulk of the turbulent upward

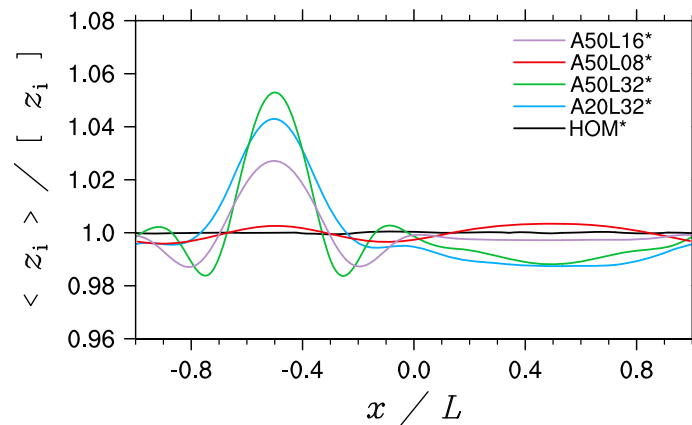


Fig. 3 Phase-averaged local boundary-layer depth $\langle z_i(x) \rangle$ along the heterogeneous x -axis after 4 h of simulated time, normalized by the corresponding domain-averaged value. The x -axis is normalized by the respective patch size

transport is located in a thin tube-like pattern over the centre of the warm patch. For smaller patch size or heat-flux amplitude, e.g. for simulation A50L08* and A20L32*, the upward transport still occurs over the warm patch, but the tube-like pattern becomes wider relative to the patch size. Hence, the area where thermals penetrate into the inversion increases, and the area where the vertical upward transport is weakened by the SC decreases, which is particularly evident for simulation A50L08* by the region with positive and negative heat flux within the CBL.

Figure 3 shows the phase-averaged local boundary-layer depth $\langle z_i(x) \rangle$ along the x -axis. As expected, no variation along the x -axis can be observed for the HOM* simulation. The largest spatial variation can be observed for the A50L32* simulation, followed by the A20L32* and A50L16* simulations, while the spatial variation is much less pronounced for the A50L08* simulation. It is striking that the spatial variation for the A20L32* simulation is larger than for the A50L16* simulation, indicating that the spatial variation is more affected by the patch size than by the strength of the SC. The largest values of $\langle z_i(x) \rangle$ occur over the centre of the warm patch. The A50L32* and A20L32* simulations exhibit a minimum over the cold patch, whereas simulation A50L08* exhibits a small maximum at this location. Even though the horizontal variations in $\langle z_i(x) \rangle$ suggest horizontal variations in entrainment, it should be noted that $\langle z_i(x) \rangle$ is not only determined by entrainment, but also the local structure of the interfacial layer (O11), as well as by encroachment (Maronga and Raasch 2013). Furthermore, the minima over the warm patch for simulation A50L32* and A50L16* are striking, which can be attributed to the penetration of thermals into the inversion and the resulting prevailing compensatory subsidence beside.

Figure 4a shows the domain-averaged total vertical sensible heat flux. As typical for the CBL, the profiles decrease linearly with height. At the top of the CBL the profiles differ among the cases, which is shown in the close-up view in Fig. 4b. The area with negative heat flux provides a measure of entrainment (van Zanten et al. (1999)), which implies that the magnitude of entrainment correlates with the vertical depth of the region with negative flux and the magnitude of the minimum value (HA08). According to this assumption, the heat-flux profile for the A20L32* simulation suggests less entrainment compared to the HOM* simulation, whereas the profiles for the A50L32*, A50L08*, and A50L16* simulations suggest more entrainment. HA08 found similar sensible heat-flux profiles as shown in Fig. 4a, b. However, they argued that the heat-flux differences within the entrainment layer are rather an effect of

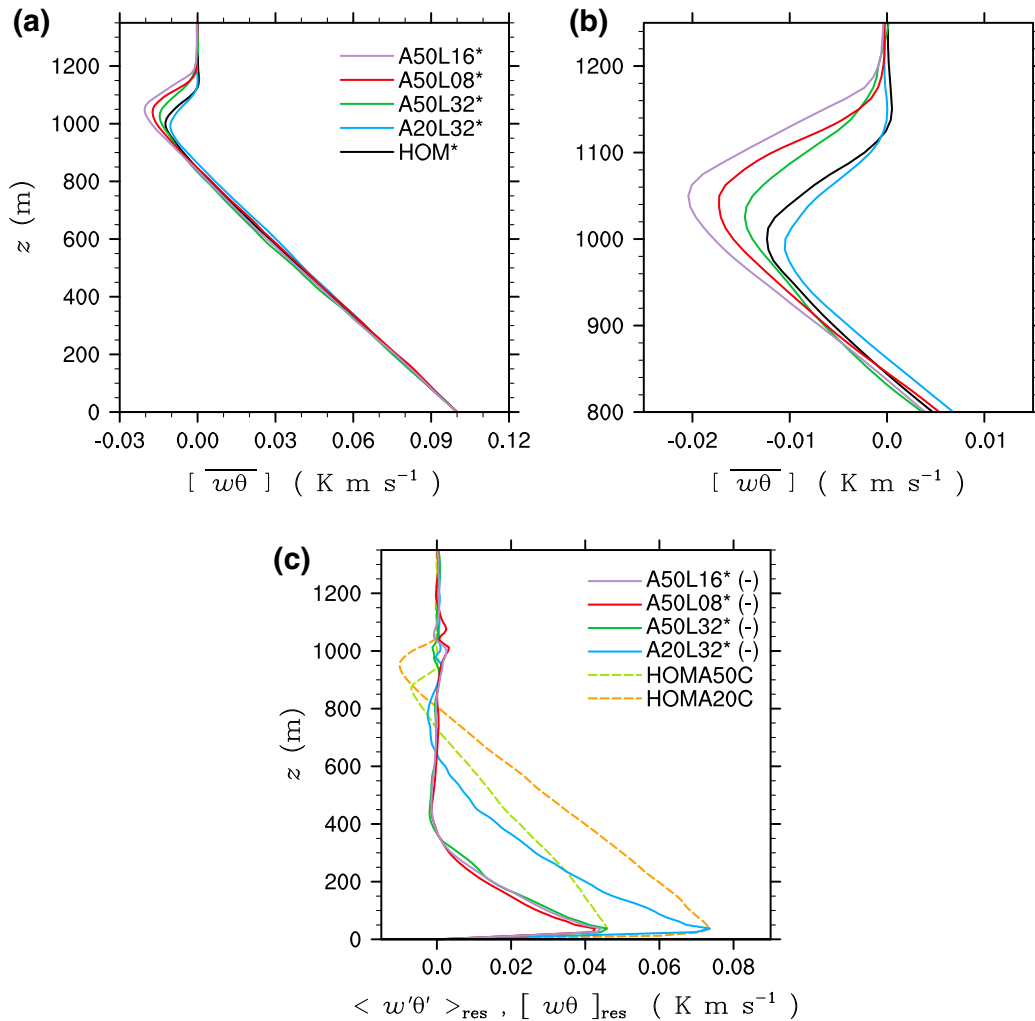


Fig. 4 **a, b** Vertical profiles of the domain-averaged total sensible heat flux after 4 h of simulated time, averaged over 15 min, for **a** the entire CBL, and **b** for the entrainment zone. **c** Vertical profiles of the instantaneous phase-averaged (*solid*) resolved-scale sensible turbulent heat flux over the cold patch (*minus*), as well as of the domain-averaged (*dashed*) resolved-scale sensible heat flux for the homogeneous reference simulations HOMA20C and HOMA50C, after 4 h of simulated time. The surface heating in the HOMA20C and HOMA50C simulations is identical to the cold-patch surface heating in the small amplitude case A20L32* and the large amplitude cases A50L32*, A50L16*, A50L08*, respectively

horizontal averaging than the result of a heterogeneity-induced effect on entrainment. This is due to the fact that the vertical level and depth of the entrainment layer and entrainment itself vary horizontally, modifying the horizontally-averaged heat-flux profile, as already discussed in Sect. 1. In order to provide an entrainment measure that is independent from horizontal averaging, but gives local information that is required to improve understanding of how heterogeneous forcing affects entrainment, we introduce a new approach below.

3.2 A New Approach to Determine Local Entrainment Rates

Entrainment can be considered as a redistribution of heat where warm tropospheric air is mixed into the CBL through a stably-stratified layer, heating the CBL. This redistribution implies that a layer exists that is cooled by the same amount as the CBL is heated. In order to

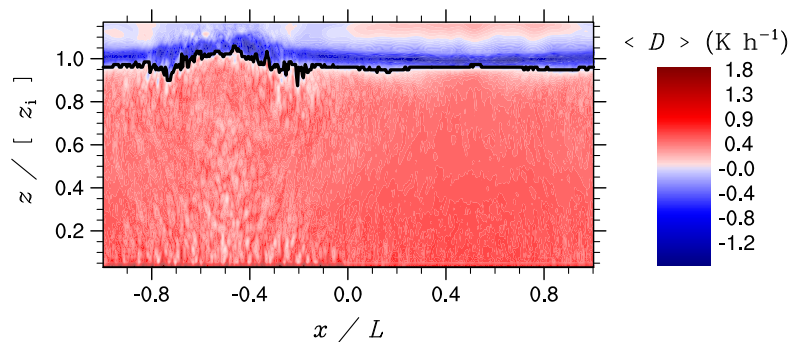


Fig. 5 Instantaneous vertical cross-section of $\langle D \rangle$ after 4 h of simulated time for simulation A50L32*. The black solid line indicates the zero-crossing according to our applied criteria. The x -axis is normalized by the patch size; the z -axis is normalized by the domain-averaged CBL depth

quantify the amount of heat entrained into the CBL, we consider the local temporal change of θ in our simulations, which is determined by

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial u_i \theta}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{i,\theta}}{\partial x_i} = D, \quad (5)$$

where the first term on the right-hand side describes the resolved-scale advection and the second term on the right-hand side is the parametrized turbulent transport on the subgrid scale. The prescribed surface heating given by $H_0(x)$ is considered in the subgrid-scale parametrization. To be consistent with the numerical discretization, we directly used the flux divergence provided by the advection scheme and the subgrid-scale parametrization. The sum of the right-hand side terms, which provides a heating or cooling rate at each grid point, is hereafter referred to as the total flux divergence D .

In order to investigate heterogeneity-induced differences in entrainment along the x -axis we applied phase-averaging on D . However, compared to the domain average, the phase average is statistically less significant because of the smaller number of statistically independent samples. To achieve statistically significant signals nevertheless, we extended the model domain along the y -axis for the selected cases as mentioned in Sect. 2.1 and shown in Table 1. Moreover, to increase the number of statistically independent samples, we performed eight ensemble runs for each selected case, where each ensemble run had an individual development of the turbulent eddies but identical mean conditions, realized by imposing different initial random perturbations on the horizontal velocity fields.

Figure 5 shows a vertical cross-section of the phase- and ensemble-averaged instantaneous $\langle D \rangle$ after 4 h of simulated time for simulation A50L32*; $\langle D \rangle$ is positive within the CBL, indicating that the CBL becomes warmer due to surface heating and entrainment. Based on this heating rate only it is not possible to distinguish between warming of the CBL due to surface heating and due to the entrainment of warm air from the free atmosphere. Hence, we considered the cooling at the top of the CBL, indicated by the negative $\langle D \rangle$. This cooling is completely attributed to the redistribution of heat, where the cooler air from the CBL replaces the warmer air of the inversion, which is mixed into the CBL. Thus, this cooling of the lower part of the stably-stratified layer is equivalent to the heating of the CBL by entrainment, providing a direct and local measure of the entrained heat.

Entrainment events along the y -axis do not always take place at the same heights, hence, negative $\langle D \rangle$ appears within a region of a certain depth in the phase average. To incorporate all entrainment events and to obtain mean entrainment rates along the y -axis, we vertically integrated over the region with negative $\langle D \rangle$

$$\langle E(x, t) \rangle = \int_{z_l(x, t)}^{z_u(x, t)} dz \langle D(x, z, t) \rangle, \quad (6)$$

where $z_l(x, t)$ and $z_u(x, t)$ are the lower and upper integration bounds. On closer inspection Fig. 5 reveals isolated negative values of $\langle D \rangle$ below the continuous region with negative values, e.g. at $x = -0.8L$, which might also belong to entrainment events. The vertical integration including these isolated negative values leads to almost identical results when we integrated over the continuous region with negative values neglecting these isolated values. Hence, starting from the surface, we defined $z_l(x, t)$ (indicated by the black solid line in Fig. 5) as the height where $\langle D \rangle$ reaches negative values and does not change its sign the four grid points above. Figure 5 shows non-zero values of $\langle D \rangle$ within the free atmosphere with alternating sign, which can be attributed to gravity waves and weak compensating motions that do not necessarily belong to entrainment processes. For this reason it is sometimes difficult to decide whether a cooling within the free atmosphere belongs to an entrainment event or not. However, a sensitivity analysis (not shown) revealed $\langle E \rangle$ almost independent of the choice of the upper integration bound, so that we decided to integrate up to the top of the model domain.

We calculated $\langle E \rangle$ every 60 s during the third and fourth hour of the simulation. Subsequently, we applied a temporal average to these values. Domain-averaged entrainment rates were obtained from the time-averaged values by averaging them along the x -direction.

It is obvious that the calculation of $\langle E \rangle$ requires a well-defined region with negative $\langle D \rangle$. Hence, the sample size of the combined phase and ensemble average should be large enough to allow for identifying a continuous region with negative $\langle D \rangle$ at each position along the x -direction. More precisely, we used the internal error expression of Lenschow et al. (1994) based on the integral length scale of D to estimate the required sample size (i.e. the averaging length along the y -direction). As the sampling error depends on the inverse of the averaging length, we have chosen the averaging length such that the relative error of the combined ensemble and phase average was $< 5\%$ in the entrainment and mixed layers. This again illustrates the requirement of ensemble averaging and an extended model domain in the y -direction (see Table 1).

This new method allows for separating the CBL warming (and thus growth) into contributions from the entrainment of warm air and from surface heating, i.e. encroachment, which is discussed in Sect. 3.3. The encroachment rate was calculated by integrating $\langle D \rangle$ from the surface to the top of the model domain (which is equivalent to subtracting $\langle E \rangle$ from the integral of $\langle D \rangle$ from the surface to $z_l(x, t)$).

3.3 Domain-Averaged Entrainment Rates and Comparison with Other Methods

In order to evaluate our introduced approach, we compared the temporally and domain-averaged entrainment rates $\overline{[E]}$ with commonly used entrainment measures. Therefore, we calculated w_e between the third and fourth hour of the simulation. Moreover, we calculated the vertical integral of domain- and time-averaged total sensible heat-flux profiles

$$I_{w\theta} = \frac{g}{\theta_0} \int dz \overline{[w\theta]}, \quad (7)$$

over the region where $\overline{[w\theta]} < 0$; g denotes the acceleration due to gravity, θ_0 is the basic state in the Boussinesq equations; g/θ_0 was identical in all simulations. $I_{w\theta}$ describes the net

Table 2 Physical unit and interpretation of different entrainment measures

Entrainment measure	Unit	Physical interpretation
w_e	m s^{-1}	CBL growth by encroachment and entrainment
$I_{w\theta}$	$\text{m}^3 \text{s}^{-3}$	Rate of net TKE consumption in the entrainment layer, associated with the change of thermal energy in the mixed layer by entrainment; might be affected by horizontal averaging
$\overline{[E]}$	K m s^{-1}	Amount of thermal energy transported from the free atmosphere into the CBL per unit area

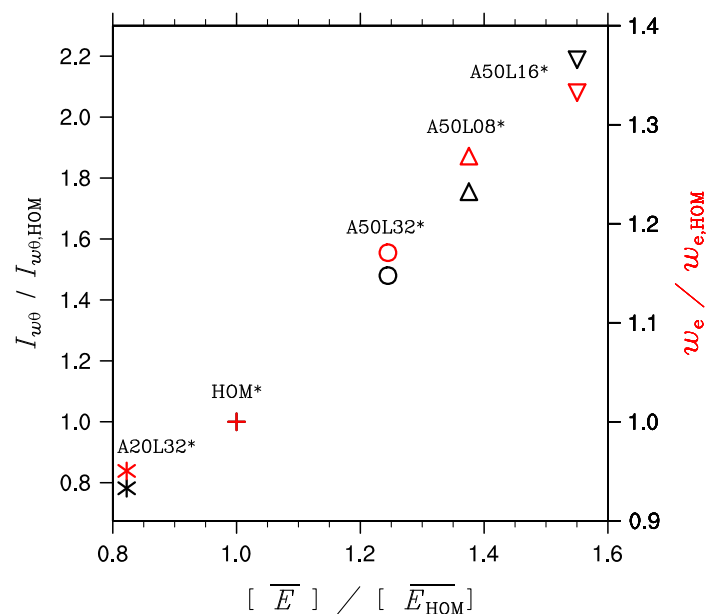


Fig. 6 Comparison of $\overline{[E]}$ with $I_{w\theta}$ (black symbols) and w_e (red symbols). Please note the different scale between the left and the right ordinate axes. All values are normalized with the corresponding value of the HOM* simulation

rate of TKE consumption by entrainment (Stull 1976). The different physical interpretations and units of entrainment measures used in this study are listed in Table 2.

In order to compare dimensionless quantities we normalized the respective values by the corresponding value of the HOM* simulation. Figure 6 shows that $\overline{[E]}$ correlates with $I_{w\theta}$ and w_e for the simulated cases. It is striking that $\overline{[E]}$, $I_{w\theta}$ and w_e vary significantly among the selected cases, where $\overline{[E]}$ is about 20% smaller for the A20L32* simulation compared to the HOM* simulation and about 30, 40, and even 60% larger for the A50L32*, A50L08*, and A50L16* simulations, respectively. The underlying physics of this heterogeneity-induced impact are discussed in the following sections. $\overline{[E]}$ correlates almost linearly with $I_{w\theta}$, revealing that the variations in the heat flux within the entrainment layer cannot be attributed only to the effect of horizontal averaging as stated by HA08. Nevertheless, due to the fact that the relative differences among the cases are larger in $I_{w\theta}$ than in $\overline{[E]}$, we do not rule out that horizontal averaging can have an effect on $I_{w\theta}$, where cases with larger heat-flux amplitude have a deeper region with negative flux.

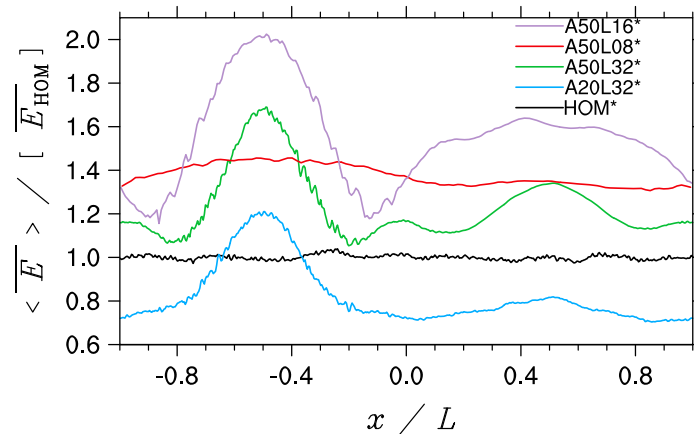


Fig. 7 Horizontal distribution of $\langle \overline{E(x)} \rangle$ along the heterogeneous x -axis, temporally averaged over 1 h and normalized by the domain-averaged value of the HOM* simulation. The x -axis is normalized by the patch size

$[\overline{E}]$ correlates linearly with w_e , i.e. the CBL grows faster for cases with larger $[\overline{E}]$ and vice versa. Even though both methods give the same qualitative result, it is striking that the relative differences among the cases are smaller in w_e than in $[\overline{E}]$. This is because w_e is dominantly determined by encroachment and thus less sensitive to variations in entrainment.

We quantified the contribution of entrainment and encroachment on the boundary-layer evolution. As expected, encroachment was identical in all simulations. The relative contribution of entrainment to the total CBL heating was 10, 12, 15, 20 and 23 % for the A20L32*, HOM*, A50L32*, A50L08* and A50L16* simulations, respectively, while the remaining relative contribution of encroachment was 90, 88, 85, 80 and 77 % for the A20L32*, HOM*, A50L32*, A50L08* and A50L16* simulations, respectively. The obtained relative contributions are in the range of the values given in the literature (e.g. Stull 1976; Canut et al. 2010), further indicating that the new method gives reliable estimates of entrainment and encroachment.

3.4 Local Entrainment Rates

The new local entrainment measure now allows us to study the effect of heterogeneity on the local entrainment rate. Figure 7 shows $\langle \overline{E(x)} \rangle$, normalized by the domain-averaged value of the HOM* simulation. As expected, $\langle \overline{E(x)} \rangle$ is homogeneously distributed for the HOM* simulation, whereas it varies along the x -axis for the heterogeneous simulations. The largest entrainment occurs over the centre of the warm patch, where thermal energy is accumulated and strong thermals can penetrate rigorously into the inversion layer. For simulation A50L32* and A50L16* two minima over the warm patch can be observed; these minima can be attributed to the prevailing compensatory subsidence beside the thermal updrafts, as already shown for the spatial distribution of $\langle z_i(x) \rangle$ (see Sect. 3.1). As discussed in Sect. 3.1, the width of the uprising branch of the SC increases relative to the patch size for decreasing patch sizes, so that the effective area over which the thermal convection can penetrate into the capping inversion enlarges and more uniformly distributed values of $\langle \overline{E(x)} \rangle$ can be observed over the warm patch, which is particularly evident for simulation A50L08*. Except for simulation A50L08*, a second maximum can be observed over the cold patch. This is surprising since almost no thermals reach the inversion layer over the cold patch, triggering entrainment events. We discuss the possible mechanisms that might explain this finding in Sect. 3.5. Moreover, it is surprising that the A20L32* simulation shows less entrainment than

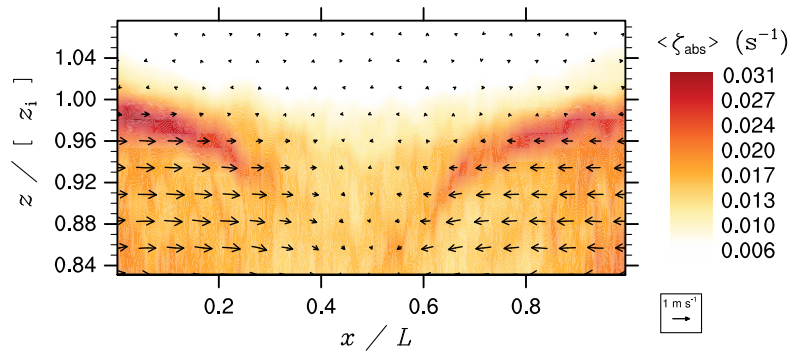


Fig. 8 Instantaneous vertical cross-section of $\langle \zeta_{\text{abs}} \rangle$ at the top of the CBL over the cold patch for simulation A50L32* after 4 h of simulated time. The phase-averaged flow is displayed by the wind vectors. The x -axis is normalized by the patch size; the z -axis is normalized by the domain-averaged CBL depth

the HOM* simulation, in contrast to the larger heterogeneity amplitude cases, even though $\langle \overline{E(x)} \rangle$ is similarly distributed. The possible underlying physics of this effect are discussed in Sect. 3.6.

Based on the local distribution of $\langle z_i(x) \rangle$, O11 inferred that entrainment over the cold patch is reduced. Even though $\langle z_i(x) \rangle$ and $\langle \overline{E(x)} \rangle$ (compare Figs. 3 and 7) correlate fairly well over the warm patch, including the minimum values next to the updraft region, they do not correlate over the cold patch, where $\langle \overline{E(x)} \rangle$ has a maximum but $\langle z_i(x) \rangle$ exhibits a minimum. This shows that the spatial distribution of $\langle z_i(x) \rangle$ is not a reliable measure of local entrainment. Hence we disagree with O11 and argue that the spatial distribution of $\langle z_i(x) \rangle$ is determined by encroachment and by the local structure of the interfacial layer rather than by entrainment.

3.5 Entrainment Physics over the Cold Patch

In order to investigate the underlying physics of the unexpected large entrainment rate over the cold patch, we analyzed the local turbulence intensity, provided by means of ζ_{abs} (see Sect. 2.2). The instantaneous phase-averaged $\langle \zeta_{\text{abs}} \rangle$ over the cold patch is shown in Fig. 8 for the A50L32* simulation after 4 h of simulated time. Within the free atmosphere $\langle \zeta_{\text{abs}} \rangle$ is close to zero, while larger values can be observed within the CBL, and in particular at its top, where entrainment takes place. It is striking that the heterogeneity-induced mean flow exhibits a vertical shear at the interfacial layer, indicated by the wind vectors. This local shear occurs mainly at the edges of the cold patch, where it contributes to the larger values of $\langle \zeta_{\text{abs}} \rangle$ that can be observed at these locations. Moreover, flow visualization revealed horizontally advected turbulence to be an important factor increasing $\langle \zeta_{\text{abs}} \rangle$ at the edges of the cold patch (not shown). Due to the absence of thermal convection as shown in Fig. 2, we hence suppose that entrainment at the edges of the cold patch is mainly driven by the vertical wind shear and the horizontally advected turbulence. Towards the centre of the cold patch $\langle \zeta_{\text{abs}} \rangle$ decreases gradually, indicating only weak turbulence there. This is due to the fact that the horizontally advected turbulence dissipates gradually towards the centre of the cold patch and the local vertical wind shear vanishes due to the horizontal flow convergence. However, the weak turbulence over the centre of the cold patch conflicts with the large entrainment that we observed there (see Fig. 7).

In order to examine how the converging SC over the cold patch interacts with the inversion layer, we visualized the flow to identify possible mechanisms causing the large entrainment. Figure 9 shows an example of the temporal evolution of entrainment events over the centre

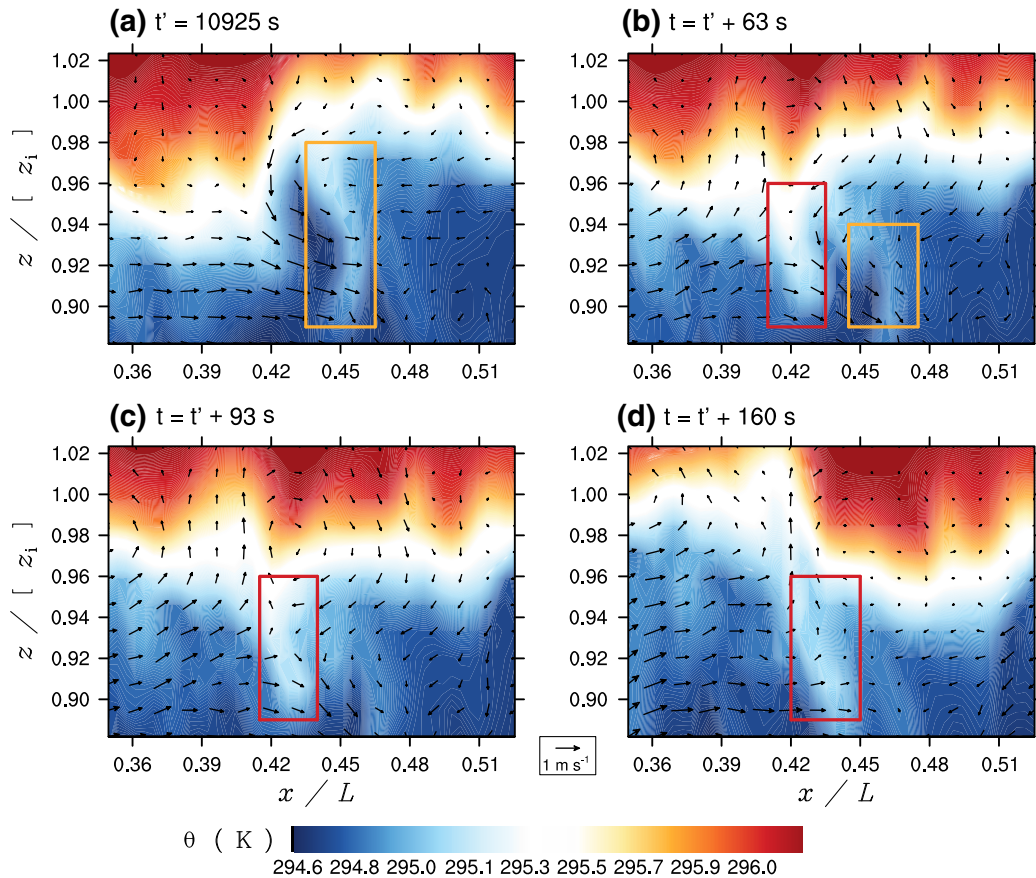


Fig. 9 Instantaneous vertical cross-sections of θ at the top of the CBL illustrating the temporal evolution of entrainment events over the centre of the cold patch for simulation A50L32*. Additionally, the corresponding instantaneous flow is displayed by the wind vectors. The x -axis is normalized by the patch size; the z -axis is normalized by the domain-averaged CBL depth. The *orange* and *red boxes* highlight and track pockets of warm air that dip down into the CBL

of the cold patch for the A50L32* simulation by four instantaneous snapshots of θ and the corresponding flow field. It is striking that the interfacial layer is wrinkled, as it can be observed e.g. by the pocket of warm air that dips down into the CBL at $x = 0.45 L$ in Fig. 9a, indicated by the orange box. In Fig. 9b this pocket of warm air is pinched off and separated from the inversion layer, while it becomes part of the mixed layer in the following due to turbulent mixing. Meanwhile, another wrinkle has been developed at $x = 0.42 L$ in Fig. 9b, indicated by the red box, which results from the strong downdraft that can be observed at $x = 0.42 L$ in Fig. 9a. This pocket of warm air deepens and narrows in the following, while the cooler air from the mixed layer starts to pinch off the pocket of warmer air at its upper part (see Fig. 9c). Subsequently, this warmer air is further drawn into the CBL and mixed with the ambient cooler air (see Fig. 9d). Sullivan et al. (1998) showed a similar entrainment mechanism where pockets of warm air dipped down into the CBL and were pinched off by strong compensating horizontal motions. However, in contrast to the entrainment events observed by e.g. Sullivan et al. (1998) or Träumner et al. (2011) that were triggered by thermal convection, the physical reason for the observed entrainment events over the cold patch is a different one in the present study, since the thermal convection is completely suppressed.

It is obvious that the local height of the interfacial layer varies horizontally, as can be observed by the step-like structures of the interfacial layer where strong horizontal temper-

ature gradients occur, particularly in Fig. 9a, d. These step-like structures are related to the horizontal advection of eddies towards the centre of the cold patch (also horizontal propagating gravity waves might be important), where they collide and interact with each other, which results in local distortions of the interfacial layer. It is striking that at the edge of these step-like structures strong vertical compensating motions occur, e.g. at $x = 0.42 L$ in Fig. 9a, d. As a result of these compensating motions, warm air is drawn in the CBL forming wrinkles if the motion is directed downward as e.g. in Fig. 9a, or the step-like feature is further developed if the motion is directed upward as e.g. in Fig. 9d. Owing to the fact that we observed (by visual flow inspection only) such distinct step-like structures and wrinkles primarily over the centre of the cold patch, we hypothesize that the wrinkling of the interfacial layer and the resulting entrainment events are mainly caused by the horizontal flow convergence.

Even though the turbulence intensity over the centre of the cold patch is smaller, entrainment is larger compared to e.g. the edges of the cold patch, where increased turbulence but less entrainment can be observed. We suppose that this might be related to the prevailing subsidence over the centre of the cold patch that counteracts the positive buoyancy of the drawn-in pockets of warm air, and therefore increases the possibility of entrainment of this warm air.

These processes that trigger entrainment over the cold patch are assumed to depend on the strength of the SC. For instance, a stronger SC is accompanied by more shear and advection, as well as a stronger flow convergence. Moreover, the horizontal scale of the SC might also affect the flow convergence. For smaller length scales, i.e. smaller patch sizes, the flow decelerates over shorter distances compared to larger length scales. As a result, the flow convergence becomes stronger, which could explain the larger values of $\langle \overline{E(x)} \rangle$ that can be observed for the A50L16* and A50L08* simulations over the cold patch, compared to the A50L32* simulation.

Although we discussed and demonstrated the possible underlying processes of the heterogeneity-induced effect on entrainment over the cold patch, we could not quantify the relative importance of each of them and how they scale with the strength of the SC. This would require a detailed investigation of local balance equations for the TKE and the heat flux within the entrainment layer, which would be challenging since it would require that both the mesoscale and the turbulent contributions be included.

3.6 What Causes the Reduced Entrainment for Small Heterogeneity Amplitudes?

From Fig. 6 we note that the A20L32* simulation on average exhibits less entrainment than the HOM* simulation, even over the warm patch (see Fig. 7). This is in contrast to the other heterogeneous cases and indicates the presence of a process counteracting the thermal convection over the warm patch. In the lower CBL the horizontal branches of the SC are directed towards the centre of the warm patch. On the one hand, due to the horizontal flow convergence thermal energy that originate mainly from the warm-patch surface heating is aggregated over the centre of the warm patch, strengthening the thermal convection at this location. On the other hand, the SC advects air parcels from the cold towards the warm patch which are on average cooler than the surrounding air (see Fig. 1), stabilizing the lower CBL over the warm patch, as shown by Kang and Davis (2008) and Kang et al. (2012). For the A20L32* simulation we suppose that the stabilization is the governing mechanism reducing entrainment over the warm patch, whereas e.g. for the A50L32* simulation the aggregation of thermal energy dominates, increasing entrainment over the warm patch. We note that the balance of these competing physical processes, i.e. whether the stabilization is able to

weaken thermal convection or not, and their dependence on the strength of the SC, is not well understood so far and need to be further explored.

Figure 1 indicates that the upper CBL over the cold patch is also stabilized, which results from the horizontal warm air advection by the SC in the upper CBL towards the cold patch (Kang and Davis 2008). In particular for the A20L32* simulation, where weak thermal convection still reaches the top of the CBL over the cold patch, this stabilization further weakens the thermal convection, reducing entrainment over the cold patch. For the larger heat-flux amplitude cases we suppose that the stabilization of the upper CBL over the cold patch is of minor importance for entrainment as thermal convection is already fully suppressed.

3.7 Temporal Evolution of the CBL Depth—Dependence on Heat-Flux Amplitude, Patch Size and Mean Wind Speed

In order to provide a more comprehensive picture of how surface heterogeneities affect entrainment, we investigated a wider range of heterogeneity amplitudes and patch sizes, as well as wind speeds and wind directions. Due to the large computational effort to determine the entrainment rate by means of the local flux divergence, we used the temporal evolution of $[z_i]$ instead, which allowed us to use smaller-domain simulations (see Table 1). As the temporal evolution of $[z_i]$ is primarily determined by encroachment, we normalized the respective values of $[z_i]$ by the values of the HOM simulation at the corresponding point in time, in order to remove the identical contributions from encroachment to emphasize the differences in entrainment. Figure 10a shows the normalized temporal evolution of $[z_i]$ for different heterogeneity amplitudes. During the first hour, where the CBL was heated homogeneously in all simulations, the temporal evolution of $[z_i]$ is identical. After 1 h of simulated time, the heterogeneous surface heating starts and the curves begin to diverge. Particularly larger amplitude runs show a local maximum between the second and third hour of the simulation. This maximum is linked to periodic oscillations of the SC strength found by Letzel and Raasch (2003), which remain for the entire period of the simulation, where the horizontal pressure and temperature gradients have to reach a quasi-steady state. For the A10L32 and A20L32 simulations the CBL grows slightly slower compared to the HOM simulation, consistent with Patton et al. (2005) and O11 for similar heterogeneity amplitudes and patch sizes. For A30L32 and larger amplitudes the CBL grows more rapidly compared to the HOM simulation, while the fastest growth can be observed for the largest amplitudes, consistent with Avissar and Schmidt (1998), Raasch and Harbusch (2001) and O11. We note that the effect of heterogeneity on entrainment is in contrast to HA08, who found, by means of the temporal evolution of $[z_i]$, no indication that entrainment is affected by heterogeneous surface heating. However, HA08 used a relative short analysis period, making it difficult to detect different temporal evolutions of $[z_i]$, particularly for non-normalized time series, which might explain their different observation.

Figure 10b shows how the temporal evolution of $[z_i]$ depends on the patch size. The largest impact on domain-averaged entrainment can be observed for simulations A50L08 and A50L16 with patch sizes in the order of $[z_i]$. For larger patch sizes the effect of the surface heterogeneity on entrainment decreases. Despite the strong oscillations that can be observed for simulations A50L64 and A50L96, the temporal mean growth of the CBL is close to the HOM simulation for both cases, which is in agreement with the findings reported by O11. They argued that for patch sizes significantly larger than $[z_i]$ the impact of the SC decreases and is only of minor importance for entrainment. In this case the boundary layer over the warm and the cold patches become separated and local entrainment depends more on the surface heating of the respective patch than on the strength of the SC, as also recently shown by

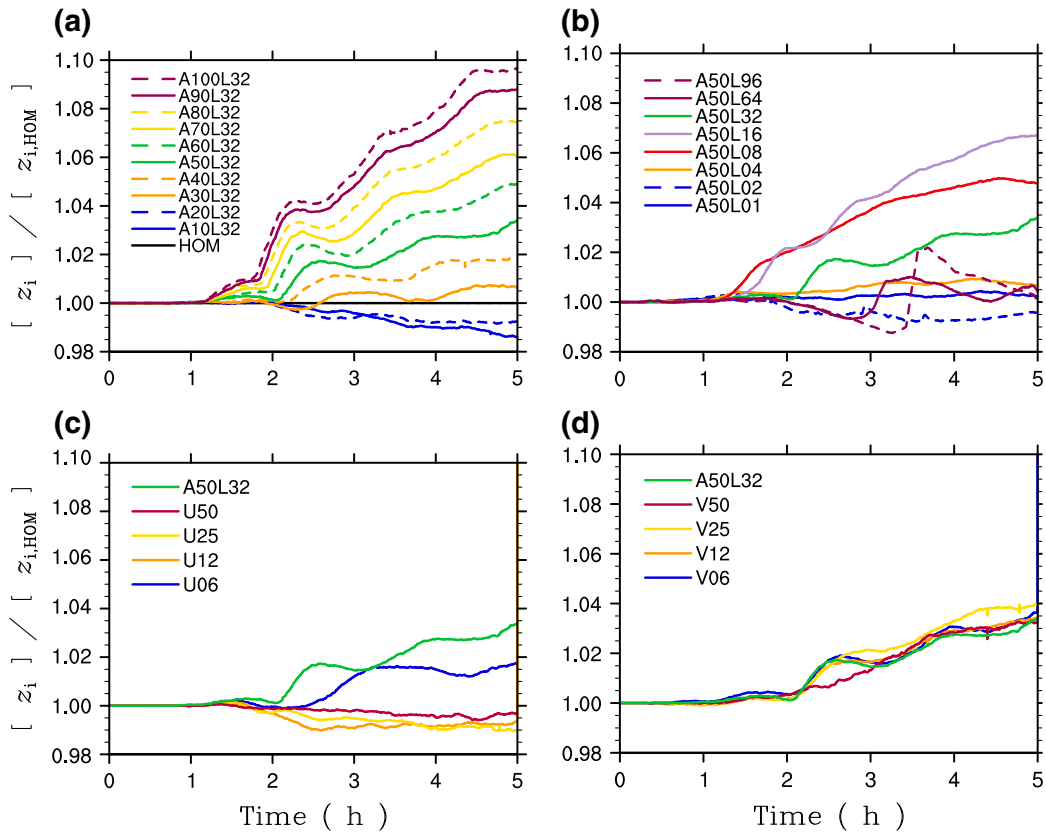


Fig. 10 Temporal evolution of $[z_i]$, normalized by the respective value of the homogeneous reference simulation at the corresponding point in time, for **a** varying heterogeneity amplitude, **b** varying patch size, **c** varying wind speed with wind perpendicular to the border between the patches, and **d** varying wind speed with wind parallel to the border between the patches. For the sake of comparison the heterogeneous reference case A50L32 is displayed in all plots

Sühring and Raasch (2013) for the larger heterogeneity scales of the LITFASS-2003 terrain. We note that the decreased heterogeneity impact on entrainment for larger patch sizes is in contrast to the findings reported by Avissar and Schmidt (1998), who found that entrainment further increases for increasing patch size (up to 40 km). However, Avissar and Schmidt (1998) inferred information on entrainment from vertical profiles of the sensible heat flux only. For a similar set-up Letzel and Raasch (2003) showed that heat-flux profiles are strongly influenced by the temporal oscillation of the SC, so that the results reported by Avissar and Schmidt (1998) concerning entrainment should be interpreted carefully. Furthermore, we note that the dependence of entrainment on patch size shown in Fig. 10b differs from the results shown by Patton et al. (2005), who found the largest impact on entrainment for significantly larger patch sizes (about $9z_i$). This might be due to the less pronounced heat-flux amplitude in their study, suggesting that the effect of varying patch size on entrainment might interact with the effect of varying heat-flux amplitude.

For patch sizes significantly smaller than $[z_i]$ the effect on the CBL growth is small. For the A50L01 simulation the impact is negligible, while $[z_i]$ is slightly smaller for A50L02 and slightly larger for the A50L04 simulation. Even though the surface-heterogeneity signal blends within the CBL and no SC can be observed (not shown), this suggests that also small-scale surface heterogeneities affect entrainment.

It is striking that the curve for the A50L08 simulation flattens and even drops down after about 4 h of simulated time. After this point in time the largest eddies within the CBL are large

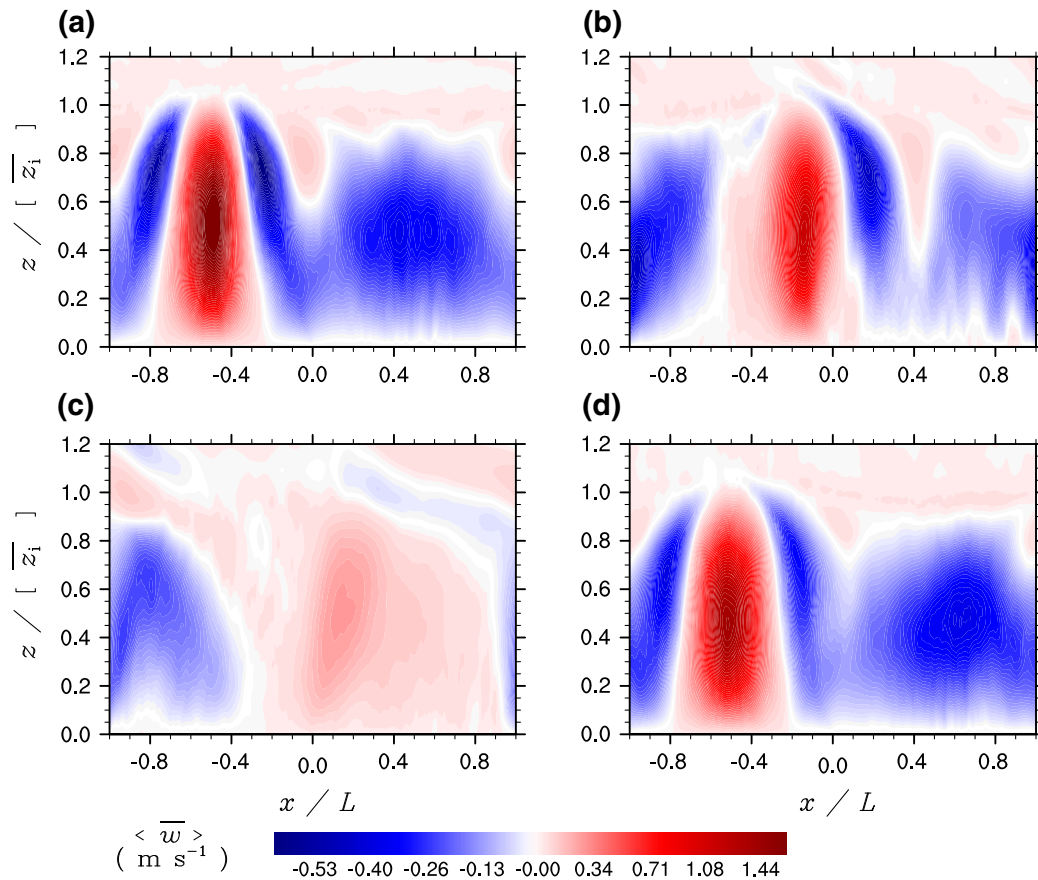


Fig. 11 15-min time-averaged vertical cross-section of the phase-averaged vertical velocity, indicating the strength of the SC, for the **a** A50L32, **b** U06, **c** U25, and **d** V25 simulations after 4 h of simulated time. The x -axis is normalized by the respective patch size; the z -axis is normalized by the respective domain- and time-averaged CBL depth

enough to efficiently reduce the horizontal temperature gradients that trigger the SC, so that the SC breaks down. Therefore, the SC-induced processes that are increasing entrainment vanish and entrainment decreases immediately.

Figure 10c, d shows the effect of surface heterogeneities on the temporal evolution of $[z_i]$ for varying wind speed and wind direction. We normalized the respective values of $[z_i]$ by the values of the respective homogeneous run (with identical geostrophic forcing) at the corresponding point in time, in order to separate the effect of surface heterogeneity on entrainment from the effect of varying wind shear. For simulation U06, where the flow is aligned perpendicular to the border between the patches, the CBL grows faster than the respective homogeneous case. However, compared to the A50L32 simulation, which is the corresponding case without mean wind, the heterogeneity-induced impact on entrainment is reduced. Raasch and Harbusch (2001) found that signals from the surface heterogeneity smear out as the increased horizontal mixing by the mean wind reduces the temperature gradients and thus weakens the corresponding SC. This is shown in Fig. 11b, where the uprising branch of the SC for U06 is less pronounced compared to the A50L32 simulation, shown in Fig. 11a, and shifted in downwind direction towards the cold patch. Figure 10c shows even slightly smaller values of $[z_i]$ for the U12 and U25 simulations compared to the respective homogeneous case. Since the SC is only weakly pronounced for these cases (see Fig. 11c), we suppose that the weak SC counteracts the thermal convection due to the

stabilization effect as discussed in Sect. 3.6. For further increasing wind speed the SC breaks down completely and no significant effect of heterogeneity on the boundary-layer evolution can be observed for the U50 simulation, confirming the results shown by O11.

If the flow is aligned parallel to the border between the patches the heterogeneity signal is not smeared out so that the horizontal temperature and pressure gradients persist, which results in similar SCs such as in the A50L32 simulation, as shown for example in Fig. 11d for simulation V25. Hence, the heterogeneity-induced effect on entrainment persists, leading to a similar CBL growth as in simulation A50L32.

4 Summary

In this study we investigated the impact of one-dimensional stripe-like surface heat-flux heterogeneities on mixed-layer top entrainment. The temporal evolution of $[z_i]$ revealed a significant effect of surface heterogeneity on entrainment, depending on heat-flux amplitude, patch size, as well as wind speed and wind direction. For small heat-flux amplitudes with patch sizes in the order of z_i we found slightly decreased entrainment compared to the homogeneous case, in agreement with Patton et al. (2005) and O11, while we found increased entrainment for large heat-flux amplitudes, in agreement with Avissar and Schmidt (1998), Raasch and Harbusch (2001) and O11. Thus, we could disprove that entrainment is not affected by the heterogeneous surface heating as stated by HA08. The largest increase in entrainment could be observed for patch sizes in the order of z_i . For patch sizes significantly smaller than z_i the heterogeneity effect on entrainment is small, but we nevertheless observed slightly modified entrainment compared to the homogeneous case. Even though the heterogeneity signal is blended within the CBL in this case, our results suggest that also small-scale surface heterogeneities affect the mixed-layer top entrainment. For patch sizes significantly larger than z_i entrainment decreases with increasing patch size, approaching the homogeneous case, consistent with O11. We note that this finding is in contrast to Avissar and Schmidt (1998), who found that entrainment further increases for increasing patch size. However, Avissar and Schmidt (1998) inferred information on entrainment from vertical profiles of the sensible heat flux only. For a similar set-up Letzel and Raasch (2003) showed that heat-flux profiles are strongly influenced by the temporal oscillation of the SC, so that the results reported by Avissar and Schmidt (1998) concerning entrainment should be interpreted carefully. Furthermore, we note that the dependence of entrainment on patch size in this study is different compared to the results shown by Patton et al. (2005), who found the largest increase in entrainment for significantly larger patch sizes of about $9z_i$, whereas our results show the largest increase for patch sizes of about z_i-2z_i . This might be due to the less pronounced heat-flux amplitude in their study, suggesting that the effect of varying patch size on entrainment interact with the effect of varying heat-flux amplitude.

Moreover, we showed that the impact of surface heterogeneity on entrainment vanishes already for moderate wind speeds when the flow is aligned perpendicular to the border between the differentially-heated patches, consistent with Raasch and Harbusch (2001) and O11. In contrast, if the flow is directed parallel to the border between the differentially-heated patches, the impact of surface heterogeneity on entrainment persists even for larger wind speeds.

In order to improve our understanding of the effect of surface heterogeneity on entrainment, we developed a new approach by means of the local flux divergence, which allows to infer local information on entrainment and to separate entrainment from encroachment. Compared to the previous studies by HA08 and O11, who inferred local information on entrainment

from local values of z_i , this new approach is more appropriate for studying entrainment over heterogeneous terrain since local values of z_i are determined by encroachment and by the local structure of the interfacial layer rather than by entrainment. Our analysis revealed a maximum of the local entrainment rate over the centre of the warm patch. Due to the existing SC, thermal energy is accumulated over the centre of the warm patch, which allows the formation of strong thermal convection that penetrate rigorously into the capping inversion. Moreover, we also found a maximum of the entrainment rate over the cold patch, which is, in case of large heat-flux amplitudes, even larger compared to the entrainment rate in the homogeneous case. This is in contrast to HA08 and O11 who argued that entrainment is decreased over the cold patch. The large entrainment rate over the cold patch is surprising since the thermal convection, which usually triggers entrainment at the top of the CBL, is completely suppressed by the SC. Our analyses suggest that the large entrainment over the cold patch is mainly due to the horizontal flow convergence induced by the SC, which wrinkles the interfacial layer and thus triggers entrainment events. We hypothesize that the processes that are increasing entrainment depend on the strength of the SC, even though we could not quantify this properly. Furthermore, a counteracting effect exists that is dominant for small heat-flux amplitudes. Due to the horizontal advection of warm and cold air by the horizontal branches of the SC the upper and lower part of the CBL is stabilized, respectively. In case of small heat-flux amplitude thermal convection can thus be slightly weakened, leading to decreased entrainment rates over the warm and over the cold patch, compared to the homogeneous case. We note that the processes induced by the surface heterogeneity that are increasing or decreasing entrainment are identified by qualitative analyses only and thus are hypothetical. Hence, these processes should be further explored to improve understanding of how entrainment is modified by heterogeneous surface heating.

Further on, it should be noted that over natural landscapes the impact of heterogeneous surface heating on entrainment depends not just simply on the strength of the SC. For example, for the LITFASS-2003 experiment [Maronga and Raasch \(2013\)](#) found decreased entrainment for the cases with the strongest SCs. In this case various heterogeneity scales and amplitudes superimpose each other, so that the balance between the heterogeneity-induced processes that increase or decrease entrainment might be modified, which is further complicated by a mean wind.

The present study confirms and connects findings from previous studies, which range from decreased to increased entrainment. For the investigated heterogeneous cases we showed that entrainment was decreased up to 20 % or increased up to 60 % compared to the homogeneous case. This large impact raises the question to what extent entrainment observations over land and subsequent parametrizations (for an overview see e.g. [Träumner et al. 2011](#)) are affected by effects of surface heterogeneity. Furthermore, the modified entrainment of sensible heat indicates also modified entrainment of dry air into the CBL, which is a crucial process affecting e.g. the partitioning of surface sensible and latent heat fluxes or cloud formation ([van Heerwaarden et al. 2009](#); [Huang and Margulis 2013](#)). Further research is needed to quantify the physics of entrainment over heterogeneous terrain, in order to consider them either in surface or entrainment parametrizations, to improve the representation of the land-atmosphere interaction in larger-scale models.

Acknowledgments This study was supported by the German Research Foundation (DFG) under grant RA 617/21-1 and RA 617/20-1, as well as by the Niedersächsische Technische Hochschule (NTH) under grant BU 2.2.3. All simulations were performed on the SGI Altix ICE at The North-German Supercomputing Alliance (HLRN), Hannover/Berlin. NCL (The NCAR Command Language (Version 6.0.0) [software]. (2011). Boulder, Colorado: UCAR/NCAR/CISL/VETS. doi:[10.5065/D6WD3XH5](https://doi.org/10.5065/D6WD3XH5)) has been used for data analysis

and visualization. We appreciate the two anonymous reviewers for their constructive and valuable comments that helped to improve the manuscript.

Open Access This article is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License which permits any use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author(s) and the source are credited.

References

- Angevine WM (1999) Entrainment results including advection and case studies from the Flatland boundary layer experiments. *J Geophys Res* 104:30947–30963
- Angevine WM, White AB, Avery SK (1994) Boundary layer depth and entrainment zone characterization with a boundary-layer profiler. *Boundary-Layer Meteorol* 68:375–385
- Avissar R, Schmidt T (1998) An evaluation of the scale at which ground-surface heat flux patchiness affects the convective boundary layer using large-eddy simulations. *J Atmos Sci* 55:2666–2689
- Bange J, Spiess T, van den Kroonenberg A (2007) Characteristics of the early-morning shallow convective boundary layer from Helipod flights during STINHO-2. *Theor Appl Climatol* 90:113–126
- Beyrich F, Gryning SE (1998) Estimation of the entrainment zone depth in a shallow convective boundary layer from sodar data. *J Appl Meteorol* 37:255–268
- Beyrich F, Mengelkamp H (2006) Evaporation over a heterogeneous land surface: EVA_GRIPS and the LITFASS-2003 experiment: an overview. *Boundary-Layer Meteorol* 121:5–32
- Brooks IM, Fowler AM (2012) An evaluation of boundary-layer depth, inversion and entrainment parameters by large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol* 142:245–263
- Canut G, Lothon M, Said F, Lohou F (2010) Observation of entrainment at the interface between monsoon flow and the Saharan Air Layer. *Q J R Meteorol Soc* 136:34–46
- Chen F, Avissar R (1994) The impact of land-surface wetness heterogeneity on mesoscale heat fluxes. *J Appl Meteorol* 33:1323–1340
- Conzemius RJ, Fedorovich E (2006) Dynamics of sheared convective boundary layer entrainment. Part I: methodological background and large-eddy simulations. *J Atmos Sci* 63:1151–1178
- Davis KJ, Lenschow DH, Oncley SP, Kiemle C, Ehret G, Giez A, Mann J (1997) Role of entrainment in surface–atmosphere interactions over the boreal forest. *J Geophys Res* 102:29219–29230
- Davis KJ, Gamage N, Hagelberg CR, Kiemle C, Lenschow DH, Sullivan PP (2000) An objective method for deriving atmospheric structure from airborne lidar observations. *J Atmos Ocean Technol* 17:1455–1468
- Deardorff JW (1980) Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorol* 18:495–527
- Fedorovich E, Conzemius RJ, Mironov D (2004) Convective entrainment into a shear-free, linearly stratified atmosphere: bulk models reevaluated through large eddy simulations. *J Atmos Sci* 61:281–295
- Fesquet C, Dupont S, Drobinski P, Dubos T, Barthlott C (2009) Impact of terrain heterogeneity on coherent structure properties: numerical approach. *Boundary-Layer Meteorol* 133:71–92
- Grabon JS, Davis KJ, Kiemle C, Ehret G (2009) Airborne lidar observations of the transition zone between the convective boundary layer and free atmosphere during the international H2O Project (IHOP) in 2002. *Boundary-Layer Meteorol* 134:61–83
- Huang HY, Margulis SA (2013) Impact of soil moisture heterogeneity length scale and gradients on daytime coupled land-cloudy boundary layer interactions. *Hydrol Process* 27:1988–2003
- Kang SL, Davis KJ, LeMone M (2007) Observations of the ABL structures over a heterogeneous land surface during IHOP_2002. *J Hydrometeorol* 8:221–244
- Kang SL, Davis KJ (2008) The effects of mesoscale surface heterogeneity on the fair-weather convective atmospheric boundary layer. *J Atmos Sci* 65:3197–3213
- Kang SL, Lenschow DH, Sullivan PP (2012) Effects of mesoscale surface thermal heterogeneity on low-level horizontal wind speeds. *Boundary-Layer Meteorol* 143:409–432
- Kim SW, Park SU, Moeng CH (2003) Entrainment processes in the convective boundary layer with varying wind shear. *Boundary-Layer Meteorol* 108:221–245
- Lenschow DH, Mann J, Kristensen L (1994) How long is long enough when measuring fluxes and other turbulence statistics. *J Atmos Ocean Technol* 11:661–673
- Lenschow DH, Krummel PB, Siems ST (1999) Measuring entrainment, divergence, and vorticity on the mesoscale from aircraft. *J Atmos Ocean Technol* 16:1384–1400
- Letzel MO, Raasch S (2003) Large eddy simulation of thermally induced oscillations in the convective boundary layer. *J Atmos Sci* 60:2328–2341

- Lilly DK (2002) Entrainment into mixed layers. Part I: sharp-edged and smoothed tops. *J Atmos Sci* 59:3340–3352
- Lothon M, Lenschow DH, Mayor SD (2009) Doppler lidar measurements of vertical velocity spectra in the convective planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol* 132:205–226
- Maronga B, Raasch S (2013) Large-eddy simulations of surface heterogeneity effects on the convective boundary layer during the LITFASS-2003 experiment. *Boundary-Layer Meteorol* 146:17–44
- Otte MJ, Wyngaard JC (2001) Stably stratified interfacial-layer turbulence from large-eddy simulation. *J Atmos Sci* 58:3424–3442
- Ouwensloot HG, Vilà-Guerau de Arellano J, van Heerwaarden CC, Ganzeveld LN, Krol MC, Lelieveld J (2011) On the segregation of chemical species in a clear boundary layer over heterogeneous land surfaces. *Atmos Chem Phys* 11:10681–10704
- Patton EG, Sullivan PP, Moeng CH (2005) The influence of idealized heterogeneity on wet and dry planetary boundary layers coupled to the land surface. *J Atmos Sci* 62:2078–2097
- Pino D, Vilà-Guerau de Arellano J, Duynkerke PG (2003) The contribution of shear to the evolution of a convective boundary layer. *J Atmos Sci* 60:1913–1926
- Raasch S, Etling D (1998) Modeling deep ocean convection: large eddy simulation in comparison with laboratory experiments. *J Phys Oceanogr* 28:1786–1802
- Raasch S, Harbusch G (2001) An analysis of secondary circulations and their effects caused by small-scale surface inhomogeneities using large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol* 101:31–59
- Raasch S, Schröter M (2001) PALM—a large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol Z* 10:363–372
- Steinfeld G, Raasch S, Markkanen T (2008) Footprints in homogeneously and heterogeneously driven boundary layers derived from a lagrangian stochastic particle model embedded into large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol* 129:225–248
- Stull RB (1976) The energetics of entrainment across a density interface. *J Atmos Sci* 33:1260–1267
- Stull RB (1988) An introduction to boundary layer meteorology. Kluwer, Dordrecht 666 pp
- Sühning M, Raasch S (2013) Heterogeneity-induced heat-flux patterns in the convective boundary layer: can they be detected from observations and is there a blending height? - A large-eddy simulation study for the LITFASS-2003 experiment. *Boundary-Layer Meteorol* 148:309–331
- Sullivan PP, Patton EG (2011) The effect of mesh resolution on convective boundary layer statistics and structures generated by large-eddy simulation. *J Atmos Sci* 68:2395–2415
- Sullivan PP, Moeng CH, Stevens B, Lenschow DH, Mayor SD (1998) Structure of the entrainment zone capping the convective atmospheric boundary layer. *J Atmos Sci* 55:3042–3064
- Träumner K, Kottmeier C, Corsmeier U, Wieser A (2011) Convective boundary-layer entrainment: short review and progress using doppler lidar. *Boundary-Layer Meteorol* 141:369–391
- van Heerwaarden CC, Vilà-Guerau de Arellano J (2008) Relative humidity as an indicator for cloud formation over heterogeneous land surfaces. *J Atmos Sci* 65:3263–3277
- van Heerwaarden CC, Vilà-Guerau de Arellano J, Moene AF, Holtslag AAM (2009) Interactions between dry-air entrainment, surface evaporation and convective boundary-layer development. *Q J R Meteorol Soc* 135:1277–1291
- van Zanten MC, Duynkerke PG, Cuijpers JWM (1999) Entrainment parameterization in convective boundary layers. *J Atmos Sci* 56:813–828
- Wang C, Tian WS, Parker DJ, Marsham JH, Guo ZH (2011) Properties of a simulated convective boundary layer over inhomogeneous vegetation. *Q J R Meteorol Soc* 137:99–117
- Wicker LJ, Skamarock WC (2002) Time-splitting methods for elastic models using forward time schemes. *Mon Weather Rev* 130:2088–2097
- Williamson JH (1980) Low-storage Runge–Kutta schemes. *J Comput Phys* 35:48–56

3.3 Artikel C: Footprint estimation for elevated turbulence measurements – a comparison between large-eddy simulation and a Lagrangian stochastic backward model

3.3.1 Beitrag des Autors

Alle Simulationen und Analysen wurden vom Autor durchgeführt. Nutzer-eigener Code für die Footprintbestimmung basiert auf Vorarbeiten von Steinfeld et al. (2008). Für die Bestimmung der LES Footprints wurde ein eigenständiges FORTRAN90-Programm genutzt, welches ebenfalls auf Vorarbeiten von Steinfeld et al. (2008) basiert und von Farah Kanani weiterentwickelt wurde. Das für die Footprintbestimmung genutzte LPDM-B wurde von Prof. Dr. Thomas Foken im Rahmen einer Vereinbarung mit Prof. Dr. Natasha Kljun für die Studien bereitgestellt. Alle Simulationen mit dem LPDM-B und dazugehörige Analysen wurden vom Autor durchgeführt. Das Manuskript wurde vom Autor verfasst. Diskussionen mit allen Koautoren sowie interne Begutachtungen trugen dazu bei die Qualität des Manuskripts zu verbessern.

3.3.2 Eingereichter Artikel

Dieser Artikel wurde zur Publikation in *Boundary-Layer Meteorology* eingereicht. Die allgemeinen Geschäftsbedingungen der Zeitschrift *Boundary-Layer Meteorology* (zugehörig zu Springer Science + Business Media) lassen die Verwendung des eingereichten Manuskripts als Teil einer Dissertationsschrift zu.

Eingereicht: 26.03.2014

Sühning, M., F. Kanani, D. Charuchittipan, T. Foken, S. Raasch, 2014: Footprint estimation for elevated turbulence measurements – a comparison between large-eddy simulation and a Lagrangian stochastic backward model. *Boundary-Layer Meteorol.*, submitted.

Boundary-Layer Meteorology manuscript No.
(will be inserted by the editor)

Footprint estimation for elevated turbulence measurements – a comparison between large-eddy simulation and a Lagrangian stochastic backward model.

Matthias Sühling · Farah Kanani ·
Doojdao Charuchittipan · Thomas Foken ·
Siegfried Raasch

Received: date / Accepted: date

Abstract We used a Lagrangian particle model embedded into large-eddy simulation (LES) to evaluate flux footprints at a 99-m tower in a convective boundary layer (CBL) over realistic heterogeneous terrain. Therefore, two days of the LITFASS-2003 experiment were simulated, representing two different wind regimes. In a first step we demonstrated the feasibility of realistic footprint prediction over heterogeneous surfaces by means of LES and point out the requirements and limitations of this approach. In a second step, in order to show the benefit of the LES approach, we compared the LES footprints against flux footprints derived from a commonly-used Lagrangian stochastic backward model (LPDM-B), where the particle dispersion is fully described in a stochastic framework. For both LITFASS days, the LES predict smaller footprints that peak closer to the sensor with larger peak values compared to the LPDM-B footprints. For the weak-wind case, the LES footprint shows a significantly narrower crosswind distribution compared to the LPDM-B, whereas for the strong-wind case the crosswind distribution of the LES and the LPDM-B footprint were in good agreement.

A more comprehensive comparison between the LES and the LPDM-B for the homogeneously-heated CBL revealed that the performance of the LPDM-B compared to the LES depends mostly on wind speed and to a smaller extent also on surface heating. As already indicated by the LITFASS-tower footprints, the differences between LES and LPDM-B footprints are most pronounced for weak-wind conditions, whereas LES and LPDM-B footprints agree fairly well for moderate and strong-wind conditions.

Matthias Sühling · Farah Kanani · Siegfried Raasch
Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover
Herrenhäuser Str. 2, 30419 Hannover, Germany
E-mail: suehring@muk.uni-hannover.de

Doojdao Charuchittipan · Thomas Foken
University of Bayreuth, Department of Micrometeorology, 95440 Bayreuth, Germany
Member of Bayreuth Center of Ecology and Environmental Research (BayCEER)

Keywords Convective boundary layer · Footprint · Lagrangian stochastic particle model · Large-eddy simulation · LITFASS-2003

1 Introduction

The quantification of heat, moisture and trace gas exchange between the Earth's surface and the atmosphere is crucial for understanding the terrestrial ecosystem. In order to quantify the surface-atmosphere exchange of e.g. sensible and latent heat, aircraft, scintillometer and tower-based flux measurements were conducted (e.g. Mahrt et al., 2001; Bange et al., 2006; Hutjes et al., 2010; Beyrich et al., 2012; Metzger et al., 2013). In heterogeneous landscapes, the measured signal at a typical height of several tens of metres usually originates from a mixture of different surface types with different exchange characteristics. Hence, for the interpretation of the measurement it is crucial to know which surface area effectively contributes to the measured signal and how this signal is composed of the source or sink contributions from different surface patches.

Various modelling approaches exist to determine this 'field of view' or footprint of a measurement, ranging from analytical solutions of the advection-diffusion equation (e.g. Horst and Weil, 1992; Hsieh et al., 2000; Kormann and Meixner, 2001), to Lagrangian stochastic (LS) particle modelling (e.g. Kljun et al., 2002; Rannik et al., 2000, 2003) and large-eddy simulations (LES) (e.g. Cai and Leclerc, 2007; Steinfeld et al., 2008). While analytical models can only be applied in the surface layer where Monin-Obukhov similarity theory (MOST) is valid, LS models can be applied within the entire boundary layer and for a broad range of boundary-layer stratifications (Kljun et al., 2002), using either parametrized or observed (Göckede et al., 2007) mean turbulence and wind statistics. In contrast to LS models, where the particle dispersion is solely determined by integrating a stochastic differential equation, the particle dispersion in the LES approach is mostly determined by the resolved-scale turbulent flow field and a stochastic approach is applied to the sub-grid scale only (Weil et al., 2004). However, due to its tremendous computational effort, extensive footprint estimation by means of LES for tower or aircraft observations is not possible. Nevertheless, the LES approach is well suited to improve the understanding of how footprints are affected by e.g. heterogeneous flow conditions. For example, compared to a horizontally-homogeneous flow, footprint characteristics can be significantly modified by a heterogeneous flow field, e.g. by horizontal flow convergence and divergence, caused either by surface heterogeneity-induced secondary circulations (Steinfeld et al., 2008; Markkanen et al., 2010) or orography (Wang and Rotach, 2010). This in turn means that the footprint estimation by 'less-computationally expensive' analytical or LS footprint models implies a certain uncertainty under heterogeneous flow conditions, since no appropriate turbulence and wind parametrizations are available to date (Markkanen et al., 2009). Beside these uncertainties due to heterogeneous flow conditions, footprint models also suffer from the lack of a comprehensive validation against observational data in general, even over homogeneous flat terrain. The footprint literature encompasses numerous studies that compared various footprint models under different atmospheric conditions (e.g. Kljun et al., 2003; Cai et al., 2008; Markkanen et al., 2009). However, so far only a few studies validated footprint models by means of tracer experiments (e.g. Leclerc et al., 1997, 2003a,b; Kljun et al., 2004; Göckede et

al., 2005; van de Boer et al., 2013). For a detailed overview and discussion of tracer experiments see Foken and Leclerc (2004). An alternative to expensive tracer experiments offers the LES approach, where the turbulent flow is explicitly resolved and where the atmospheric as well as the surface conditions can be controlled, making the LES approach well-suited for validating analytical and LS footprint models for a broad range of conditions (Foken and Leclerc, 2004). For example, Prabha et al. (2008) compared LES and LS footprints for neutral shear-driven flows in and above tall canopies, where coherent turbulent structures are responsible for the bulk of the vertical transport. They found that the LES footprints peak closer to the sensor and are more contracted compared to the LS footprints. They attributed this to a smaller horizontal and more effective vertical turbulent transport by the explicitly resolved coherent structures in the LES, while the turbulence parametrization in the LS cannot account for coherent structures. Markkanen et al. (2009) compared footprints derived from an LES and an LS model at various sensor heights in the homogeneously-heated convective boundary layer (CBL). While they found good agreement for sensor heights within the surface layer, they found less agreement at larger heights, where the LES footprints peak closer to the sensor and show a narrower crosswind distribution compared to the LS footprints. These studies indicated that systematic differences between LES and LS models could exist, particularly at elevated sensors such as towers or flight legs, where coherent flow structures become important for the vertical transport, stressing the need for a more comprehensive comparison between LES and LS footprints under different atmospheric conditions.

In the present study we evaluate flux footprints at elevated sensors by means of LES according to Steinfeld et al. (2008). For the first time (to the knowledge of the authors), we present LES footprints for elevated sensors over realistic heterogeneous terrain, which require a tremendous number of particles to obtain sufficient footprint statistics. We perform a series of LES runs for the heterogeneous LITFASS terrain for two selected days, characterized by different wind regimes, using forcing data from the LITFASS-2003 experiment (Beyrich and Mengelkamp, 2006). The LES footprints for the LITFASS days are compared against footprints derived from the LS footprint model of Kljun et al. (2002), which is forced by turbulence statistics and surface characteristics derived from the LES. In addition, for a more comprehensive comparison between LES and LS footprints, we evaluated footprints over homogeneously-heated terrain for different surface heating and mean-wind speed.

The paper is organized as follows: Sect. 2 describes the LES model and the embedded Lagrangian particle model, the footprint calculation from the LES, as well as the simulation setups. Furthermore, the LS footprint model and the aggregation of surface characteristics and turbulence statistics from the LES, required as input for the LS model, are described. At first, Sect. 3 shows how the LES footprints depend on the grid resolution. The requirements on how to obtain sufficient footprint statistics over heterogeneous terrain from the LES are described thereafter. Subsequently, results of the footprint analysis for the heterogeneous LITFASS cases as well as for the study over homogeneous terrain with varying surface heating and mean-wind speed are presented. Section 4 gives a summary.

2 Methods

2.1 LES model and embedded Lagrangian particle model

The **PA**rallelized **LES** Model PALM (Raasch and Etling, 1998; Raasch and Schröter, 2001), revision 1036¹, was used for the numerical simulations in this study. PALM solves the non-hydrostatic incompressible Boussinesq equations. For the subgrid model the kinetic energy scheme of Deardorff (1980) was used. The advection terms were discretized by a fifth-order scheme (Wicker and Skamarock, 2002). A third-order Runge-Kutta scheme by Williamson (1980) was used for the time integration. Cyclic lateral boundary conditions were applied. Between the surface and the first vertical grid level MOST was applied locally as surface boundary condition for the momentum equations.

For the footprint evaluation a parallelized Lagrangian particle model embedded into the LES was used, according to Steinfeld et al. (2008). This approach is based on the suggestions of Weil et al. (2004, 2012) to separate the particle velocity into a deterministic and a stochastic part, which corresponds to dividing the turbulent flow field into a resolved-scale and a subgrid-scale portion, respectively. The resolved-scale velocity is provided by the LES at each timestep, while the subgrid-scale velocity is predicted by integrating a stochastic differential equation according to Weil et al. (2004), who strictly adopted the Thomson (1987) model to the subgrid scale by assuming isotropic and Gaussian-distributed turbulence. To parametrize the stochastic particle dispersion on the subgrid scale, the LES provides local values of the subgrid-scale turbulent kinetic energy and the dissipation rate at each time step. According to Steinfeld et al. (2008), the LES data is interpolated bi-linearly on the actual particle position in the horizontal. In the vertical a linear interpolation is used. An exception is made for particles located between the surface and the first grid level, where a linear vertical interpolation of the resolved-scale horizontal velocity components would underestimate the horizontal particle displacement compared to using a logarithmic wind profile. Hence, in contrast to Steinfeld et al. (2008), we applied a logarithmic interpolation according to local MOST for the resolved-scale horizontal velocity components between the roughness height z_0 and the first vertical grid level, following the suggestions made by Cai et al. (2006). For particles located below z_0 the resolved-scale horizontal velocity components were set to zero. The improvements of logarithmic vertical interpolation on footprint prediction are discussed in Sect. 3.1.

At the bottom boundary of the model domain we used a reflection boundary condition for the particles, and cyclic conditions at the lateral boundaries. A more detailed description of the particle model embedded into the LES is given by Steinfeld et al. (2008) and Riechelmann et al. (2012).

According to Steinfeld et al. (2008), flux footprints $f(x, y)$ for a horizontally-homogeneous flow were calculated by a postprocessor using the formula given by Kurbanmuradov et al. (2001):

$$f_{\text{LES}}(x, y) = \frac{1}{N \Delta x \Delta y} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{w_{i,j}^p}{|w_{i,j}^p|} I(X_{i,j}, Y_{i,j}), \quad (1)$$

¹ The applied version of the code is provided under palm.muk.uni-hannover.de/browser/?rev=1036.

where N is the total number of released particles, n_i is the number of intersections of the trajectory of particle i with the measurement level, $w_{i,j}^p$ is the vertical component of the particle speed at the respective intersection point, and $X_{i,j}$, $Y_{i,j}$ denote the horizontal distance between the particle source and the intersection point in the x - and y -direction. $\Delta x = \Delta y = 10$ m are the grid spacings of the analysis grid in the postprocessor. $I = 1$ when the particle trajectory intersects the given measurement level in the coordinate interval $x - \frac{\Delta x}{2} \leq X_{i,j} < x + \frac{\Delta x}{2}$ and $y - \frac{\Delta y}{2} \leq Y_{i,j} < y + \frac{\Delta y}{2}$, otherwise $I = 0$. For homogeneous conditions Eq. 1 makes use of the inverted plume assumption, so that each particle that crosses a certain measurement level contributes to the footprint evaluation, i.e. the horizontal extension of the sensor is infinitely large. This in turn implies that $f(x, y)$ depends only on the horizontal distance between the particle source and the receptor, not on the receptor position itself (Schmid, 2002).

Over heterogeneous terrain the inverted plume assumption cannot be applied, so that $f(x, y)$ depends on the position of the sensor. However, as the probability that a particle passes through a sensor at a certain point in space is rather low, it is difficult to obtain reliable footprint statistics. For the heterogeneous cases we hence used a horizontally extended sensor area with edge lengths of $\Delta x_s = \Delta y_s = 10$ m, which should be an appropriate approach when the sensor area is small compared to the length scale of the underlying surface patches (Steinfeld et al., 2008).

Due to the infinitely large sensor area in the homogeneous case, each particle has the same probability to pass the sensor area at a certain distance from its source area. However, in the heterogeneous case the probability that a particle passes a finite sensor area depends strongly on the source location. For example, a particle released upwind of a sensor has a certain probability to cross the sensor area, while it is almost impossible to cross the sensor area for a particle released several kilometres downwind of the sensor. Nevertheless, particles released several kilometres downwind of a sensor would still affect the footprint calculation by the normalization with the total number of particles (see Eq. 1), even though it is impossible to effectively contribute to f . For this reason Steinfeld et al. (2008) modified Eq. 1 for the heterogeneous case by replacing N with the effective number of particles N_{eff} , which is the number of particles released in a source area identical to the sensor area (i.e. $10 \times 10 \text{ m}^2$). Thus, only particles are counted that effectively contribute to f at a certain distance (x, y) .

In order to visualize the footprint area, we estimated the smallest source area that contributes to 90% to the signal at a certain sensor, hereafter written as Ω_{90} , according to Schmid and Oke (1990). Moreover, to allow more quantitative evaluation, we calculated crosswind-integrated flux footprints $[f]$ (square brackets), as well as alongwind-integrated flux footprints $\langle f \rangle$ (angle brackets). In order to integrate f in alongwind as well as in crosswind direction, we rotated the discrete analysis grid on which f is defined, so that one of the grid axis of the analysis grid coincides with the mean-wind direction.

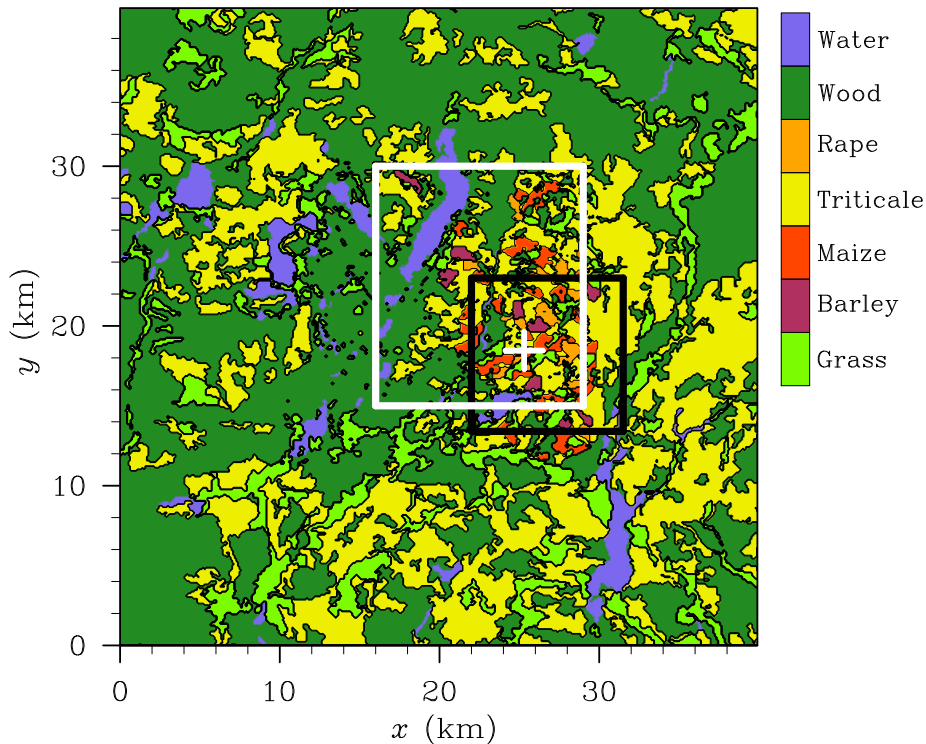


Fig. 1 Distribution of surface types of the centred $20 \times 20 \text{ km}^2$ LITFASS terrain and surroundings (after Beyrich and Mengelkamp 2006). The *black* and *white* boxes show the areas where particles were released for LIT2E and LIT6NW, respectively. The cross indicates the location of the 99-m tower.

2.2 Case description and LES setup

2.2.1 LITFASS-2003 cases

A series of LES runs for the heterogeneous LITFASS terrain and its surroundings, presented in Fig. 1 (see also Beyrich and Mengelkamp, 2006), were conducted for a part of the daily cycle from 0500–1300 UTC. The initial vertical profiles of potential temperature θ and specific humidity q were derived from radiosonde measurements during the LITFASS-2003 experiment. To obtain initial steady-state profiles of the horizontal velocity components, a one-dimensional version of the PALM code was applied, using the initial profiles of θ and q , and a mixing-length approach after Blackadar (1997). z_0 was estimated by $z_0 \approx 0.1 h$ (Shuttleworth et al., 1997), where h is the crop height. During LITFASS-2003, sensible and latent surface heat fluxes (H_0 and λ_0 , respectively) were measured at energy balance stations located over different surface types. Depending on the data quality of the measured fluxes, Beyrich et al. (2006) composed the fluxes measured at stations located over identical surface types. These composite fluxes were used as surface fluxes in the LES for all patches of the respective surface type. For a more de-

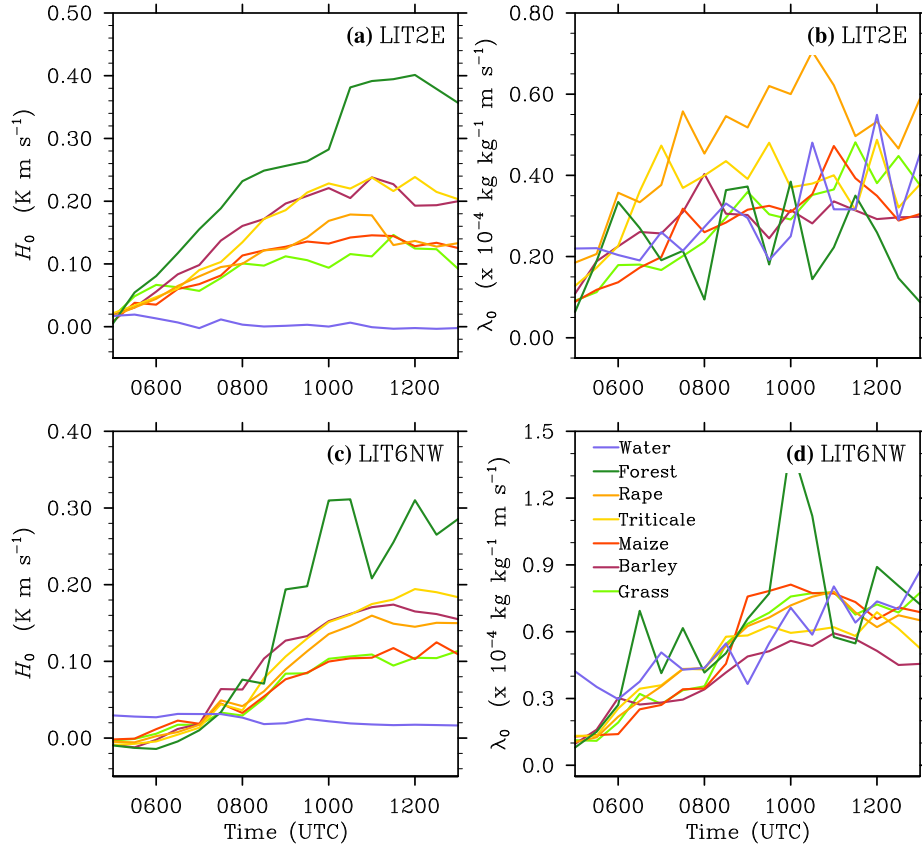


Fig. 2 Time series of the prescribed kinematic surface flux of sensible heat for **a** LIT2E, and **c** LIT6NW, and surface flux of latent heat for **b** LIT2E and **d** LIT6NW.

tailed description of the initialization and implementation of surface heat flux and roughness heterogeneities see Maronga and Raasch (2013).

Two LITFASS days were simulated, May 30 and June 13, which are hereafter denoted as LIT2E and LIT6NW, respectively. LIT2E was characterized by a low geostrophic wind speed of 2 m s^{-1} from the east during the day. For LIT6NW, the geostrophic wind was directed from the north-west at a speed of 6 m s^{-1} . Figure 2 shows the prescribed temporal evolution of H_0 and λ_0 for the different surface types. On both days, each surface type displayed a pronounced daily cycle (until 1300 UTC) for H_0 , except for the water patches. While λ_0 exhibited a daily cycle on LIT6NW, λ_0 varied highly in time for the different surface patches on LIT2E. Detailed descriptions of the main features of the simulated CBL, the corresponding daily cycles, their agreement with the observational data, and the structure of the heterogeneity-induced secondary circulations for the selected days have been reported by Maronga and Raasch (2013). Heterogeneity-induced local impacts on the simulated CBL for the selected days have been described in detail by Sühling and Raasch (2013).

For both LITFASS days we simulated model domains of $40 \times 40 \times 4 \text{ km}^3$ with an isotropic grid spacing of 25 m. Beyond the top of the CBL, the vertical grid was stretched in order to minimize computational resources.

For both LIT2E and LIT6NW we calculated flux footprints for the atmospheric conditions at 1300 UTC for the tower (see Fig. 1) at $z = 50 \text{ m}$, hereafter referred to T50, and at $z = 99 \text{ m}$, hereafter referred to T99. In order to ensure that the footprint evaluation for the LITFASS tower is independent on grid resolution, we performed a sensitivity study using different isotropic grid spacings (see Sect. 3.1). Therefore, we conducted homogeneously-heated simulations for LIT6NW, hereafter denoted as LIT6NWH, where H_0 and λ_0 were set to the respective horizontal mean values of the heterogeneous simulation.

To obtain adequate footprint statistics at T50 and T99 we had to ensure that a sufficiently large number of particles crosses the respective sensor areas. However, as the total number of simultaneously-tracked particles is restricted due to technical reasons (for details see further below), a footprint evaluation over a typical flux sampling interval of half an hour turned out to be insufficient since too less particles (only a few hundred) crossed the respective sensor areas. We hence extended the simulation time for further 5 hr with a time-constant heterogeneous surface forcing representative for the conditions at 1300 UTC. In order to ensure that the CBL properties stay constant during that period, i.e. to avoid that the mean-wind profile change in time or that the secondary circulations and thermals grow in size and strength, we kept the boundary-layer depth z_i on a constant value ($z_i = 1800 \text{ m}$ for LIT2E and $z_i = 1650 \text{ m}$ for LIT6NW). Therefore, we prescribed a mean subsidence of 0.0085 and 0.0065 m s^{-1} within the free atmosphere for LIT2E and LIT6NW, respectively, which was applied to the prognostic equations of θ and q . From $z = 1900 \text{ m}$ towards the surface, the subsidence velocity decreases linearly to zero. Even though the CBL becomes warmer and drier during the footprint evaluation over 5 hr compared to the actual conditions at 1300 UTC, the mean-flow field and the secondary circulations are in a stationary state (not shown), so that the effect of the forced stationarity on the resulting footprints is considered to be small. Moreover, to further improve the footprint statistics, we performed 15 ensemble runs for each simulated LITFASS day, while each ensemble run is characterized by an individual development of the turbulent eddies but identical mean conditions by imposing different initial random perturbations on the horizontal velocity fields.

As already mentioned, the footprint prediction by means of LES places high demands on the computational resources. In the following, we give some technical details and discuss how the technical restrictions affect the particle release in the simulations. Each simulation was performed on 1600 processor elements, where each processor element had an internal memory of 6 GByte, limiting the maximum number of simultaneously-tracked particles per processor element to about $2 \cdot 10^6$. This in turn restricts the particle release near the surface. While in reality the surface can be considered as a continuous source in space and time, it is not possible to define such a continuous source of particles in the LES. Hence, starting at 1300 UTC, we released particles from a discrete source in space and time, i.e. every 10 min with a spatial distance of 2 m in the x - and y -direction. According to this discrete particle source in space and time, the maximum number of particles on a processor element is reached after about 1 hr of simulation time. In order to be able to release further particles, the particles that were tracked for more

than 1 hr of simulation time were deleted. This should be appropriate, because particles that were tracked for more than 45 min did not significantly contribute to the footprint at T50 and T99 (not shown). Since the source area that can potentially contribute to the footprint at a given sensor location is predetermined by the mean wind, we released particles in predetermined areas only (see Fig. 1). Compared to release particles in the entire model domain, this has the advantage that the total number of released particles can be reduced, which in turn reduces redundant output data from particles that cannot reach any sensor position. To take into account that also particles can contribute to the footprint that were released downwind of the sensor, the source area was extended 3 km in downwind direction of the corresponding sensor position. Altogether, $4.5 \cdot 10^7$ ($2.0 \cdot 10^7$) particles were released every 10 min; the maximum number of simultaneously-tracked particles was $2.7 \cdot 10^8$ ($1.2 \cdot 10^8$) for LIT6NW (LIT2E). In each simulation $1.35 \cdot 10^9$ ($6.0 \cdot 10^8$) particles were simulated during the 5 hr of footprint evaluation, resulting in a total number of $2.0 \cdot 10^{10}$ ($9.0 \cdot 10^9$) particles for LIT6NW (LIT2E) for the 15 ensemble runs. However, on both days only about 10^5 particles crossed the sensor area at T99, which is the minimum number of particles to obtain adequate footprint statistics (see Sect. 3.2), again illustrating the need of ensemble runs and the extended footprint evaluation over 5 hr with forced stationary boundary-layer characteristics.

Particles were released at z_0 . A sensitivity study over a homogeneous surface (not shown) revealed no impact on the footprint characteristic when the particles were released at z_0 or further below, which can be attributed to the zero resolved-scale horizontal velocity components of the particles below z_0 .

2.2.2 Homogeneous cases

In order to compare LES and LPDM-B for a broader range of atmospheric conditions, in addition to the LITFASS cases, we performed a series of homogeneous LES runs with varying mean-wind speed and H_0 . Therefore, we focused simply on the dry CBL. The homogeneous runs were initialized by a vertical profile of θ that was constant up 600 m; the above-lying free atmosphere had a lapse rate of 0.006 K m^{-1} . A homogeneous $z_0 = 0.1 \text{ m}$ was used. We varied H_0 with values of 0.05, 0.1 and 0.15 K m s^{-1} . Further on, for each H_0 we varied the geostrophic wind speed such that the mean CBL wind was 2, 6 and 10 m s^{-1} during the footprint evaluation. The acronym of the particular homogeneous simulation was derived from H_0 and the mean wind, for example, H005U10 is a homogeneously-heated simulation with $H_0 = 0.05 \text{ K m s}^{-1}$ and a horizontal mean wind of 10 m s^{-1} within the CBL. A model domain of $5 \times 5 \times 2 \text{ km}^3$ was simulated. Due to the smaller model domain compared to the LITFASS cases, it was possible to use a much smaller isotropic grid spacing of 5 m. An overview of the homogeneous simulations including their mean characteristics is given in Table 1.

Starting from 2 hr of simulation time, every 10 min a set of particles was released; particles were tracked for 1 hr. Footprints were evaluated between the second and the fourth hour of simulation time.

2.3 Lagrangian stochastic backward model and derivation of effective input parameters from the LES

For this study we used the Lagrangian stochastic backward model (LPDM-B) of Kljun et al. (2002), which is based on the particle dispersion model described by Rotach et al. (1996) and de Haan and Rotach (1998). The LPDM-B is based on the well-mixed condition of Thomson (1987) and is applicable over the entire depth of the boundary layer. To account for different boundary-layer stratifications and to consider that turbulence is not generally a Gaussian-distributed process, particularly for unstable conditions, a skewed probability distribution of the vertical velocity is modelled. Parametrizations of mean and turbulent wind-velocity components are described by Rotach et al. (1996). A revised version of the underlying mathematical framework of the LPDM-B is given by Gibson and Sailor (2012). In the LPDM-B the particle dispersion is modelled in a backward timeframe, i.e. a set of particles is tracked from the sensor location towards its surface source area. Particles were reflected at the surface and at the top of the boundary layer; particles were tracked for 1 hr according to the LES. The LPDM-B requires the input of z_0 , z_i , friction velocity $u_* = ((wu_0)^2 + (wv_0)^2)^{\frac{1}{4}}$, convective velocity

$$w_* = \left(\frac{g z_i}{\theta_v} H_{0,v} \right)^{1/3}, \quad (2)$$

and Obukhov length

$$L = \frac{\theta_v}{\kappa g} \frac{u_*^3}{H_{0,v}}. \quad (3)$$

wu_0 and wv_0 are the horizontal components of the surface turbulent momentum flux, g is the acceleration due to gravity, $\kappa = 0.4$ is the von Kármán constant and $\theta_v = \theta (1.0 + 0.61q)$ is the virtual potential temperature near the surface. $H_{0,v} = H_0 (1 + 0.61q) + 0.61 \theta \lambda_0$ denotes the surface buoyancy flux.

In order to compare the LPDM-B footprints with the LES footprints at the respective sensor positions, the prescribed atmospheric quantities and surface characteristics in the LPDM-B need to be identical with the corresponding conditions in the LES. For the homogeneous cases we simply prescribed horizontally domain-averaged quantities of z_0 , z_i , L , u_* , w_* obtained from the LES (see Table 1), as well as domain-averaged profiles of the mean-wind speed and the standard deviations of the horizontal and vertical velocity components. However, for the heterogeneous LITFASS cases domain-averaged quantities are not necessarily representative for the conditions within the 'area of influence'. Local values at the tower might also fail, since the 'area of influence' at elevated sensors encompasses different surface types with different surface characteristics. In order to obtain an input for the LPDM-B representative for the local conditions in the LES, i.e. for the 'area of influence', we hence weighted the corresponding local LES values with f_{LES} :

$$\phi_{\text{eff}} = \sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} f_{\text{LES},i,j} \phi_{i,j}^{\text{LES}} \Delta x \Delta y, \quad (4)$$

where $\phi_{\text{eff}} \in \{L, u_*, w_*\}$ denotes the resulting effective area-averaged value over the LES footprint area. $\phi_{i,j}$ is the corresponding local value in the LES. $\Delta x =$

Table 1 Mean characteristics of the homogeneously-heated CBLs and input parameters for the LPDM-B. H_0 denotes the surface sensible heat flux, U_{CBL} is the mean CBL wind, and L , u_* , w_* and z_i are the domain-averaged values of Obukhov length, friction velocity, convective velocity and boundary-layer depth in the LES. All values are time-averaged over 2 hr.

Name	H_0 (K m s ⁻¹)	U_{CBL} (m s ⁻¹)	L (m)	u_* (m s ⁻¹)	w_* (m s ⁻¹)	z_i (m)
H005U2	0.05	2	-12.2	0.20	1.1	840
H01U2	0.1	2	-8.1	0.22	1.4	880
H015U2	0.15	2	-6.2	0.23	1.7	950
H005U6	0.05	6	-77.5	0.37	1.1	850
H01U6	0.1	6	-45.4	0.39	1.4	910
H015U6	0.15	6	-35.1	0.41	1.7	980
H005U10	0.05	10	-208.9	0.52	1.1	860
H01U10	0.1	10	-120.4	0.54	1.4	920
H015U10	0.15	10	-89.5	0.56	1.7	1020

$\Delta y = 10$ m are the grid spacings of the analysis grid and n_x , n_y denote the number of grid points determining the horizontal extension of the grid. Local LES values were interpolated from the LES grid to the analysis grid; they were averaged over 5 hr in time and over 15 ensemble runs. It should be noted that such a linear averaging is not appropriate to obtain representative area-averaged values of z_0 (e.g. Bou-Zeid et al., 2004). Therefore, according to Taylor (1987), $z_{0,\text{eff}}$ was estimated by

$$z_{0,\text{eff}} = \exp \left[\ln \sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} f_{\text{LES},i,j} z_{0,i,j} \Delta x \Delta y \right]. \quad (5)$$

An overview of the LES-derived values for T50 and T99 is given in Table 2. In order to obtain vertical profiles of the mean wind as well as the standard deviations of the horizontal and vertical velocity components that are representative for the local LES conditions (in the vicinity of the tower), we calculated unweighted horizontal averages over the respective LES footprint area. Here, it should be noted that the vertical profiles were almost independent on the exact averaging area, i.e. the profiles were almost the same when we averaged e.g. over a $1 \times 1 \text{ km}^2$ or a $3 \times 3 \text{ km}^2$ in the vicinity of the tower.

Assuming a uniform source strength, the two-dimensional flux footprint for a backward model is given by (Flesch, 1996)

$$f_{\text{BW}}(x, y) = \frac{2}{N \Delta x \Delta y} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{w_{i,0}^{\text{p,BW}}}{w_{i,j}^{\text{p,BW}}} I(X_{i,j}, Y_{i,j}), \quad (6)$$

where $w_{i,0}^{\text{p,BW}}$ is the initial speed of particle i and $w_{i,j}^{\text{p,BW}}$ is the corresponding vertical speed at touchdown j . The analysis grid for the evaluation of f_{BW} was identical to the analysis grid used for the LES footprints ($\Delta x = \Delta y = 10$ m).

Table 2 LES-derived input parameters for the LPDM-B at the tower for LIT2E and LIT6NW. L_{eff} , $u_{*,\text{eff}}$, $w_{*,\text{eff}}$ and $z_{0,\text{eff}}$ are the effective values of Obukhov length, friction velocity, convective velocity and roughness height, area-averaged over the LES footprint. z_i is the domain-averaged boundary-layer depth in the LES. All values are ensemble-averaged and time-averaged over 5 hr. T50 and T99 denote the sensors at the LITFASS tower at $z = 50$ m and $z = 99$ m, respectively.

Name	L_{eff} (m)	$u_{*,\text{eff}}$ (m s ⁻¹)	$w_{*,\text{eff}}$ (m s ⁻¹)	$z_{0,\text{eff}}$ (m)	z_i (m)
LIT2E					
T50	-1.38	0.141	2.06	0.02	1800
T99	-1.78	0.16	2.11	0.014	1800
LIT6NW					
T50	-16.54	0.323	2.06	0.034	1650
T99	-20.25	0.363	2.15	0.065	1650

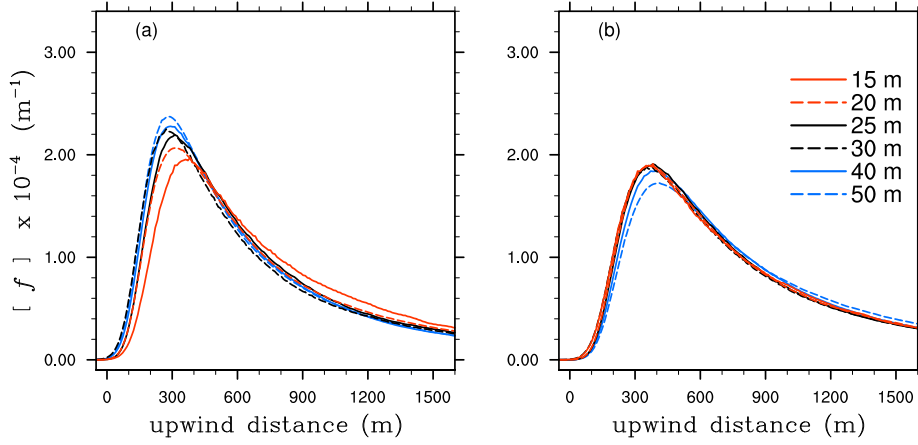


Fig. 3 Crosswind-integrated LES flux footprints for different LES grid resolutions at T99 for LIT6NW. Horizontal resolved-scale velocity components for particles between the surface and the first vertical grid level were interpolated **a** linearly and **b** logarithmically onto the actual particle location in the vertical direction.

3 Results

3.1 Effect of grid resolution and logarithmic vertical interpolation on footprint evaluation

Steinfeld et al. (2008) validated LES footprints against experimental data presented in Leclerc et al. (1997). The LES footprints were in good agreement with the experimental data, even though the footprint characteristics depended slightly on grid resolution for sensor heights close to the surface, i.e. the peak value increased and the peak location moved closer towards the sensor for increasing grid spacing. Steinfeld et al. (2008) attributed this to an effect of the non-negligible subgrid-scale particle velocity at the first vertical grid layers. The subgrid-scale particle velocity is parametrized on basis of the assumption that turbulence is always isotropic (Weil et al., 2004). However, turbulence becomes anisotropic close

to the surface, i.e. the variance of the horizontal velocity components is significantly larger than variance of the vertical velocity component (Sullivan et al., 2003). Consequently, the vertical subgrid-scale particle velocity is overestimated close to the surface, while the horizontal subgrid-scale particle velocity is underestimated, resulting in too large peak values of the footprint that are located too close to the sensor (Steinfeld et al., 2008).

In addition, there might be a further reason explaining the dependence of the LES footprints on grid spacing. Steinfeld et al. (2008) interpolated the resolved-scale horizontal particle velocity components linearly onto the actual particle position. While this might be justified within the bulk of the boundary layer, the assumption of a linear wind profile between the surface and the first vertical grid level, where the vertical shear is most pronounced, will underestimate the horizontal particle displacement (above z_0) compared to using a logarithmic wind profile, resulting in peak locations that are too close to the sensor. Both the effect of the linear interpolation and of the subgrid-scale particle velocity on the footprint characteristics decrease for decreasing grid spacing. Hence, the dependence of the peak value and location on grid spacing found by Steinfeld et al. (2008) could be ascribed to both effects.

In order to investigate to which extent the footprints for the LITFASS tower depend on grid spacing, we performed a sensitivity study for LIT6NWH (homogeneously-heated LITFASS case) with a varying isotropic grid spacing ranging from 15 to 50 m. This sensitivity study was performed once with a linear vertical interpolation of the resolved-scale horizontal particle velocity components as used by Steinfeld et al. (2008) and once with a logarithmic vertical interpolation (see Sect. 2.1), in order to assess the improvements attributed to the use of a logarithmic vertical interpolation.

Figure 3a shows $[f]$ at a sensor height of $z = 99$ m for linear vertical interpolation. Consistent with Steinfeld et al. (2008), the peak position is shifted farther upwind and the peak value decreases with decreasing grid spacing. Furthermore, no convergence with decreasing grid spacing can be observed. This is different if a logarithmic vertical interpolation is applied as shown in Fig. 3b. In this case, $[f]$ shows almost identical characteristics for grid spacings smaller than 30 m, indicating that the effect of the subgrid-scale particle velocity is not significant for the tower footprints for sufficiently small grid spacing. This further indicates that a grid spacing of 25 m, which is used for the heterogeneous LITFASS cases, is sufficient if a logarithmic vertical interpolation of the resolved-scale particle velocity components is applied.

For the sake of completeness, we will briefly discuss the possible reasons why the peak value of $[f]$ decreases and the peak position moves farther upwind for increasing grid spacings larger than 30 m in the case with logarithmic interpolation. This suggests that the horizontal particle velocity between z_0 and the first vertical grid level is overestimated for large grid spacing. The horizontal resolved-scale particle velocity components between the surface and the first vertical grid level are determined by local MOST, using the local horizontal LES velocity components at the first vertical grid level. If assuming that local MOST is exact over homogeneous terrain, this in turn implies that the horizontal LES velocity components at the first vertical grid level are overestimated, which was already observed in LES (e.g. Khanna and Brasseur, 1997; Stoll and Porté-Agel, 2006; Brasseur and Wei, 2010). The reasons for this general overestimation of the horizontal velocity

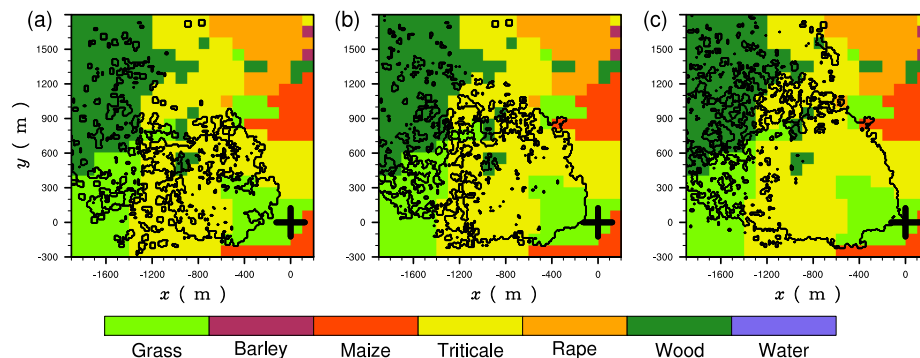


Fig. 4 90% source area for **a** 3, **b** 8 and **c** 15 ensemble members at T99 for LIT6NW. The *black* cross indicates the location of the tower.

components at the first vertical grid levels in LES are not totally clear, however, it might be related to an inconsistent formulation of the subgrid-scale model to the surface-wall model (Stoll and Porté-Agel, 2006), as well as to numerical discretization errors of the resolved-scale flow (Kawai and Larsson, 2012).

Summarized, the footprint estimation with the logarithmic vertical interpolation is more robust with respect to the grid resolution compared to the case with linear interpolation, at least for sufficiently small grid spacing. However, it should be noted that vertical logarithmic interpolation using local MOST was also applied in the heterogeneous LITFASS simulations, even though MOST is actually not valid over heterogeneous terrain, implying a certain inaccuracy of the particle dispersion close to the surface. Moreover, even though the bulk of the vertical transport is resolved at T99, it should be considered that the turbulent flow close to the surface is not well resolved by the numerical grid. Thus, internal boundary layers close to the surface are not well represented by the numerical grid, implying a further uncertainty in the resulting LES footprints over heterogeneous terrain. Due to the tremendous computational effort to obtain reliable footprint statistics over heterogeneous terrain (see next paragraph and Sect. 2.2.1 for technical details), it was not possible to perform a sensitivity study with varying grid spacing to quantify the uncertainty due to the use of MOST and the insufficient representation of internal boundary layers close to the surface. Hence, we will not consider the LES footprints as reference for the 'true state' in the heterogeneous simulations. Nevertheless, despite these possible uncertainty, the LES footprints are considered to be closer to the 'true state' than the LPDM-B footprints, where the turbulent flow is completely described in a stochastic framework and effects due to surface heterogeneity are not considered at all.

3.2 How to obtain sufficient footprint statistics from the LES

The footprint evaluation over heterogeneous terrain with a forward approach such as the LES is challenging in terms of obtaining reliable footprint statistics, which is due to the restricted probability for a released particle to cross a finite sensor

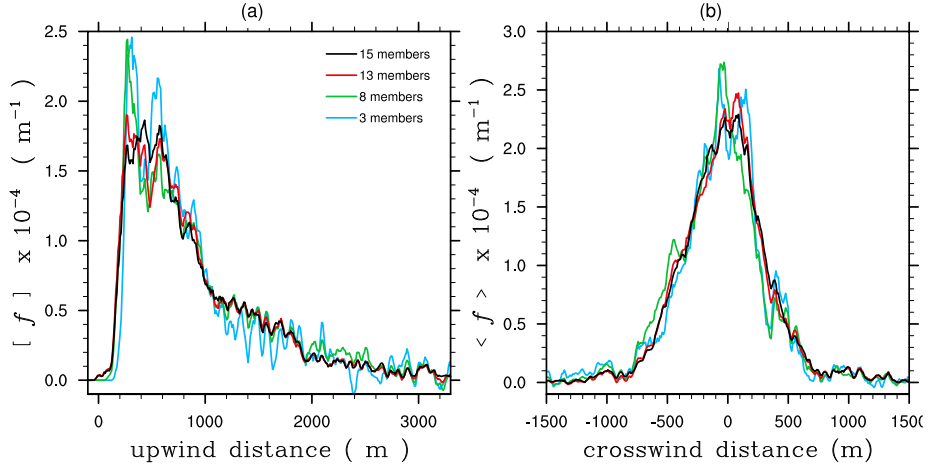


Fig. 5 **a** Crosswind-integrated and **b** alongwind-integrated flux footprint at T99 for LIT6NW for different number of ensemble members.

area. Hence, we performed a number of statistically independent ensemble runs in order to track a sufficiently large number of particles for reliable footprint statistics. Figure 4 shows Ω_{90} (90% source area) exemplarily for 3, 8 and 15 ensemble members at T99 for LIT6NW, in order to qualitatively illustrate how the footprint statistics improve with increasing number of ensemble members. The number of ensemble members is indicated by a superscript in this paragraph. From Ω_{90}^3 it is obvious that 3 ensemble members are not sufficient to obtain reliable footprints, since Ω_{90}^3 is completely scattered and not continuous, even close to the sensor. From 3 towards 8 ensemble members the footprint area increases and the footprint becomes more continuous, however, enclosed areas close to the sensor that do not belong to Ω_{90}^8 can still be observed. Even though the size of Ω_{90}^{15} is further increased and Ω_{90}^{15} becomes more continuous compared to Ω_{90}^8 , the shape of Ω_{90}^{15} does not change significantly, except for the regions farther upwind of the sensor. For a more quantitative investigation, Fig. 5 shows $[f]$ and $\langle f \rangle$ for different number of ensemble members at T99 for LIT6NW. For a small number of ensemble members both $[f]$ and $\langle f \rangle$ exhibit large fluctuations, and no clear peak location can be observed for $[f]$. With increasing number of ensemble members $[f]$ and $\langle f \rangle$ become more smooth, particularly in the vicinity of the peak location. Even though $[f]$ and $\langle f \rangle$ are still not perfectly smooth with 15 ensemble members, $[f]$ and $\langle f \rangle$ do not change significantly from 13 towards 15 ensemble members, indicating that a further small increase of the number of ensemble members will not significantly improve the footprint statistics (equivalent for LIT2E, not shown). It should be noted that a significant increase of the number of ensemble members (several orders of magnitude) would certainly further improve the footprint statistics, however, since this is practical not feasible we have chosen the number of 15 ensemble members as a compromise between reliable statistics and computational costs.

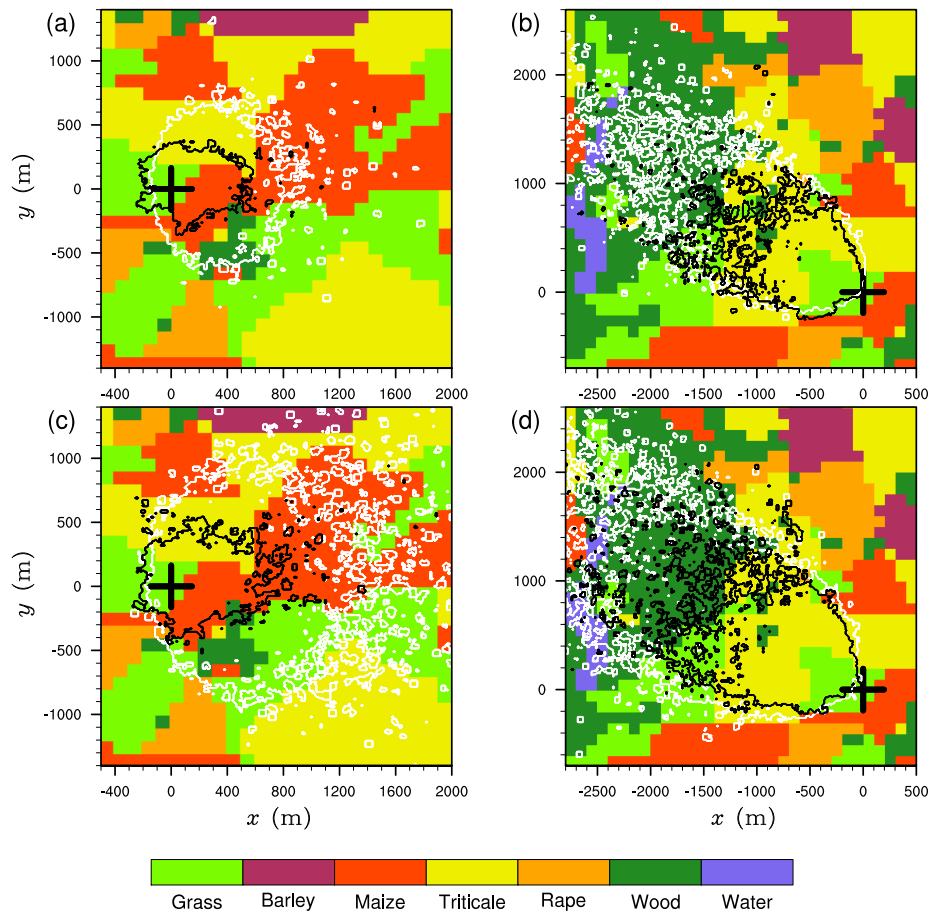


Fig. 6 90% source areas derived from the LPDM-B (*white* contour lines) and from the LES (*black* contour lines) for T50: **a** LIT2E and **b** LIT6NW, as well as for T99: **c** LIT2E and **d** LIT6NW. The *black* cross indicates the location of the tower.

3.3 Flux footprints for the LITFASS cases - comparison between LES and LPDM-B

For both days, Fig. 6 shows Ω_{90} for the LITFASS tower derived from the LES and the LPDM-B, indicated by the *black* and *white* contour lines, respectively. As expected, the size of Ω_{90} increases from T50 to T99 on both days. It is striking that for LIT2E the shape of Ω_{90} is rather concentric for both the LES and the LPDM-B, which can be attributed to the low mean-wind speed and the strongly convective conditions (Kljun et al., 2002), while for LIT6NW the shape of Ω_{90} is more stretched in upwind direction due to the stronger mean wind. For both days, the LPDM-B predicts a larger Ω_{90} area compared to the LES, particularly for T99. For LIT6NW the LPDM-B shows a larger upstream extension of Ω_{90} compared to the LES, while for LIT2E the LPDM-B shows not only a larger upstream

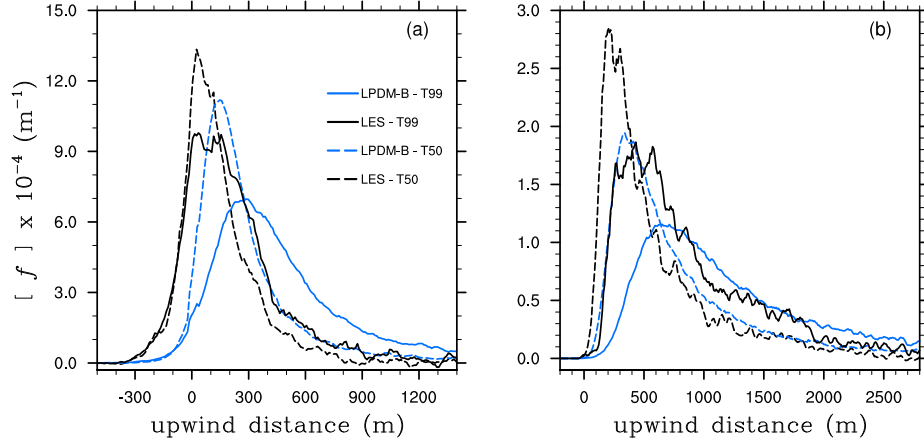


Fig. 7 Crosswind-integrated flux footprints for T50 and T99 derived from the LPDM-B (*blue*) and from the LES (*black*) for **a** LIT2E and for **b** LIT6NW.

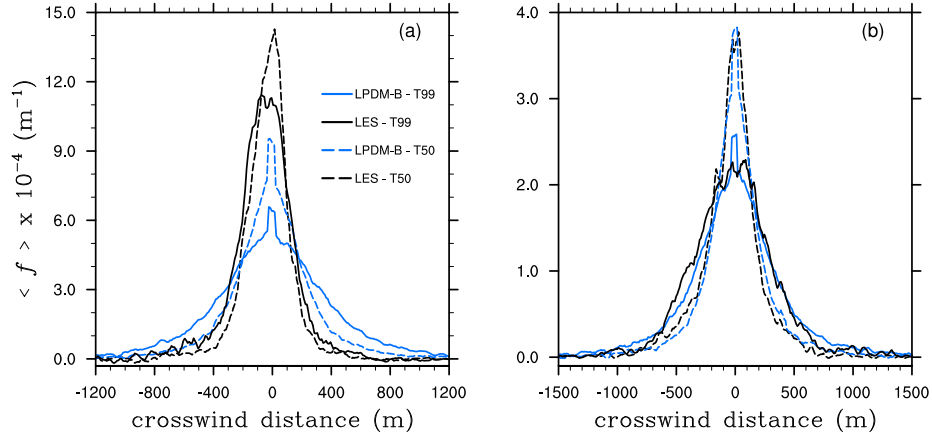


Fig. 8 Alongwind-integrated flux footprints for T50 and T99 derived from the LPDM-B (*blue*) and from the LES (*black*) for **a** LIT2E and for **b** LIT6NW.

extension but also a significantly larger crosswind extension.

Figure 7 shows the corresponding values of $[f]$. Henceforth, the flux footprints derived from the LES and the LPDM-B are abbreviated by f_{LES} and f_{BW} , respectively. For both days, $[f_{BW}]$ peaks farther upwind of the sensor with a smaller peak value compared to $[f_{LES}]$, in agreement with Markkanen et al. (2009). In contrast to $[f_{BW}]$, $[f_{LES}]$ exhibits a significant source-area contribution downwind of the sensor for LIT2E. Moreover, particularly for LIT2E, $[f_{BW}]$ exhibits slightly larger values farther upwind of the peak location compared to $[f_{LES}]$, according to the larger upstream extension of Ω_{90} for the LPDM-B (see Fig. 6). Figure 8 shows $\langle f \rangle$ at T50 and T99 on both days. As expected, $\langle f \rangle$ peaks close to zero in all cases. For LIT2E $\langle f_{BW} \rangle$ exhibit smaller peak values and broader cross-

wind distributions compared to $\langle f_{\text{LES}} \rangle$, consistent with the significantly larger crosswind extension of Ω_{90} for the LPDM-B (see Fig. 6). In contrast, for LIT6NW the peak values and the spatial distributions of $\langle f_{\text{BW}} \rangle$ are similar to $\langle f_{\text{LES}} \rangle$. Summarized, differences between the LES and the LPDM-B footprints can be observed, indicating substantial differences between the LPDM-B and the LES. In the LES, coherent turbulent structures, i.e. the regions with strong updrafts and weak downdrafts, are explicitly resolved in space and time, whereas in the LPDM-B these structures and their impact on the particle dispersion are fully described in a stochastic framework by modelling a skewed probability density distribution of the vertical velocity. As the prescribed mean turbulence statistics in the LPDM-B were identical to the local conditions in the LES, we hence follow the argumentation of Prabha et al. (2008) and Markkanen et al. (2009) and state that the differences between the LES and the LPDM-B footprints are due to the differences in the flow representation, which become more important for sensor heights above the surface layer, where coherent turbulent structures become responsible for the bulk of the vertical transport (see e.g. Hellsten and Zilitinkevich, 2013). Furthermore, particularly the crosswind distribution in Fig. 6, 8 indicates that the differences between the LPDM-B and the LES are more pronounced if the particle dispersion by the mean wind is small compared to the turbulent particle dispersion as for LIT2E. We investigate this issue in more detail in Sect. 3.4.

It should be noted that it was not possible in this study to determine to what extent the LES footprint is affected by the heterogeneous surface forcing, e.g. by internal boundary layers (secondary circulations were not observed over the farmland area around the LITFASS tower, see also Maronga and Raasch, 2013). This is because the LES footprint at the tower cannot be compared to a homogeneous reference under similar atmospheric conditions. For example, the mean surface forcing within the tower-footprint area is different compared to the horizontal mean surface forcing in the heterogeneous LITFASS simulation. Thus, a homogeneous reference simulation with a surface forcing representative for the tower footprint would result in different boundary-layer characteristics compared to the heterogeneous simulation, e.g. in different z_i , which in turn might affect the mean-wind profile. To perform a homogeneous simulation with identical domain-averaged surface forcing as in the heterogeneous simulation is also no alternative, since the mean-surface characteristics and fluxes might deviate substantially from the surface forcing within the footprint area in the heterogeneous simulation. Hence, it is not possible to separate the effect of surface heterogeneity from the effects of different atmospheric conditions or mean-surface characteristics.

3.4 Comparison between LES and LPDM-B for different wind speed and surface heating in a homogeneously-heated CBL

The footprint comparison for the LITFASS tower revealed differences between the LES and the LPDM-B that were more pronounced for weak wind. For a more comprehensive footprint comparison between LES and LPDM-B, we performed a series of homogeneous LES runs for different wind speed and different H_0 , representing different stability regimes. The advantage of simulating a homogeneously-heated CBL is that the inverted plume assumption can be applied, which results in reduced computational effort to obtain sufficient footprint statistics from LES

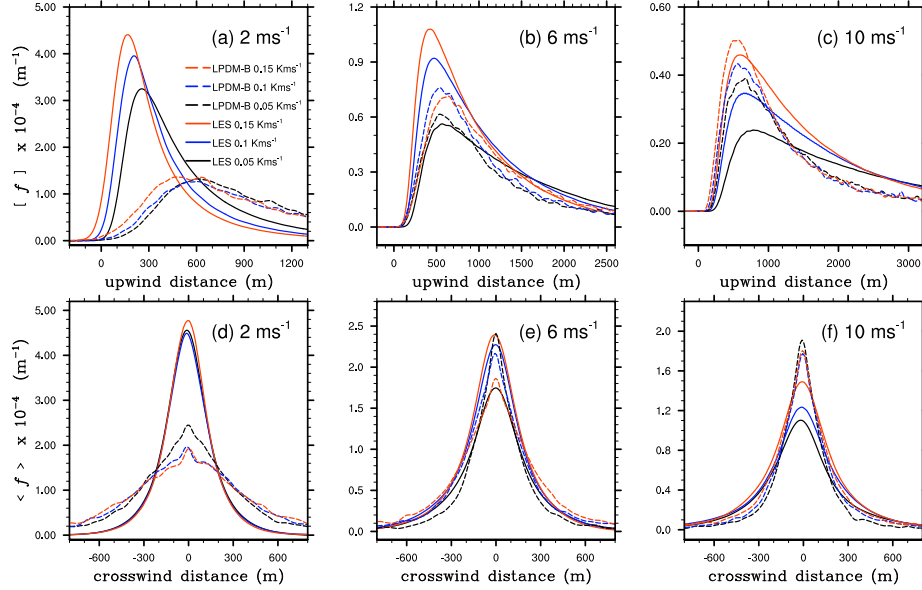


Fig. 9 Crosswind-integrated flux footprints at $z = 99$ m derived from the LES (solid) and the LPDM-B (dashed) for **a** 2 m s^{-1} , **b** 6 m s^{-1} and **c** 10 m s^{-1} for different surface sensible heat flux, as well as alongwind-integrated flux footprints for **d** 2 m s^{-1} , **e** 6 m s^{-1} and **f** 10 m s^{-1} .

compared to the heterogeneously-heated CBL. A further benefit is that the use of MOST as lower boundary condition for the momentum equations is valid, and thus no possible uncertainty is added to the LES footprints as over heterogeneous terrain. For these homogeneous simulations, we used a small isotropic grid spacing of 5 m, in order to further minimize the uncertainty of the LES footprints due to effects of the subgrid-scale model or the vertical interpolation of the resolved-scale particle velocity components near the surface, even though the predicted footprints show no grid dependence for grid spacings smaller than 30 m (see Sect. 3.1). For this reason we will use the LES footprints as reference for the 'true state' for this comparison. An overview of the performed simulations is given in Table 1.

Figure 9a compares $[f_{LES}]$ and $[f_{BW}]$ for varying H_0 at a wind speed of 2 m s^{-1} . As expected, for increasing H_0 the peak values of both $[f_{LES}]$ and $[f_{BW}]$ increase, and the respective peak locations move closer towards the sensor. For each H_0 case, $[f_{LES}]$ peaks closer to the sensor with larger peak values compared to $[f_{BW}]$, similar as observed for LIT2E. Moreover, the relative difference between $[f_{LES}]$ and $[f_{BW}]$ increases with increasing H_0 . Figure 9d shows the corresponding $\langle f_{LES} \rangle$ and $\langle f_{BW} \rangle$. Throughout all H_0 cases, $\langle f_{LES} \rangle$ exhibit larger peak values and a narrower crosswind extension compared to $\langle f_{BW} \rangle$. Figure 9b, e show crosswind and alongwind-integrated footprints for a moderate wind speed of 6 m s^{-1} , respectively. For the weak surface-heating case the peak value of $[f_{LES}]$ is slightly smaller compared to $[f_{BW}]$, while for the other surface-heating cases $[f_{LES}]$ peaks slightly closer to the sensor with slightly larger peak values. Figure 9e exhibits a slightly narrower crosswind extension for $\langle f_{LES} \rangle$ in case of strong H_0 , while for the weak surface-heating case $\langle f_{LES} \rangle$ is slightly broader compared to $\langle f_{BW} \rangle$. How-

ever, compared to the weak-wind cases, the differences between LES and LPDM-B are significantly smaller, particularly for the crosswind distribution. For a strong wind of 10 m s^{-1} (Fig. 9c,f), a reverse behaviour compared to the weak-wind case can be observed. For all H_0 cases, $[f_{\text{LES}}]$ peaks slightly farther upwind of the sensor with slightly smaller peak values compared to $[f_{\text{BW}}]$, and $\langle f_{\text{LES}} \rangle$ shows a broader crosswind extension compared to $\langle f_{\text{BW}} \rangle$, indicating that the LES would predict slightly larger footprint areas compared to the LPDM-B for strong-wind conditions.

Summarized, the comparison between LES and LPDM-B footprints for different wind speed and surface heating as shown in Fig. 9 revealed a more comprehensive picture of the uncertainty of the footprint prediction. While for strong wind the LES and LPDM-B footprints agree fairly well, large differences can be observed for weak wind, where the particle dispersion by the mean wind is small compared to the turbulent particle dispersion. Moreover, this comparison shows that the differences between LES and LPDM-B depend mostly on wind speed and to a smaller extent also on H_0 . Furthermore, this comparison also indicates that the differences between the LES and LPDM-B footprints found for the LITFASS tower (see Sect. 3.3) can be mainly ascribed to the dependence on wind speed rather than to heterogeneity-induced effects. However, it should be noted that this might not hold in general, and we do not want to rule out that footprint characteristics can be significantly affected by heterogeneity-induced effects as shown by Steinfeld et al. (2008) and Markkanen et al. (2010).

Even though the footprint estimation by means of LES is not suited for comprehensive footprint analyses for tower or airborne turbulence measurements due to its tremendous computational effort, the present comparison over heterogeneous and homogeneous terrain shows that LES is well suited to detect possible uncertainties in commonly-used 'less-computationally expensive' footprint models as e.g. the backward model of Kljun et al. (2002), in order to improve these footprint models. This might be of particular importance e.g. for the derivation of surface fluxes from tower or airborne measurements by dis-aggregation methods (Hutjes et al., 2010; Metzger et al., 2013), where the quality of the derived surface fluxes strongly depends on the performance of the applied footprint model.

4 Summary

In this study, we determined flux footprints for elevated sensor positions in the homogeneously and heterogeneously-heated CBL using a Lagrangian particle model embedded into LES. Compared to analytical or LS footprint models, the footprint prediction by means of LES has the advantage that turbulent structures or heterogeneous flow conditions are explicitly considered, so that LES footprints depend much less on turbulence parametrizations. In order to demonstrate the benefit of using LES for footprint evaluations, we compared LES footprints against footprints derived from the commonly-used LS backward footprint model of Kljun et al. (2002). However, despite the more realistic flow representation, the LES approach has the disadvantage that a large computational effort is required to obtain reliable footprint statistics, particularly over heterogeneous surfaces. Hence, the footprint evaluation by means of LES over realistic heterogeneous terrain was mainly intended to demonstrate the feasibility and to point out the requirements

and limitations of this approach.

For the heterogeneously-heated CBL we performed an ensemble of LES runs for two days of the LITFASS-2003 experiment, one characterized by a low wind speed of 2 m s^{-1} , the other by a larger wind speed of 6 m s^{-1} . Even though the prescribed mean-wind profile and the turbulence statistics in the LPDM-B were identical to the local conditions in the LES, our results reveal significant differences between the LES and LPDM-B tower footprints, particularly for weak-wind conditions. For both days, the size of the LES footprints is smaller compared to the LPDM-B footprints and the crosswind-integrated LES footprints peak closer to the sensor with larger peak values compared to the LPDM-B, which is in agreement with Markkanen et al. (2009). For the strong-wind case the crosswind extension of the LES and the LPDM-B footprint agrees fairly well, while for the weak-wind case the crosswind extension of the LES footprint is significantly smaller compared to the LPDM-B. Following Prabha et al. (2008) and Markkanen et al. (2009), we attribute these differences between the LES and the LPDM-B footprints to the differences in the flow representation, i.e. in the LES the regions with strong up-drafts and weak downdrafts are explicitly resolved in space and time, whereas in the LPDM-B these structures and their impact on the particle dispersion are fully described in a stochastic framework by modelling a skewed probability density distribution of the vertical velocity.

For a more comprehensive comparison between LES and LPDM-B, we performed a series of LES runs for the homogeneously-heated CBL with different wind speed and surface heating. We showed that the uncertainty of the LPDM-B footprints with respect to peak position, peak value and crosswind extension, depends mostly on wind speed and to a smaller extent also on surface heating. In general, despite small differences, LES and LPDM-B footprints were in good agreement for moderate and strong wind, while for weak wind the LPDM-B footprints deviate significantly from the LES footprints, according to the LITFASS-tower footprints. This in turn stresses the need to improve the stochastic particle dispersion particular for situations where the particle dispersion by the mean wind is small compared to the particle dispersion by turbulence.

Furthermore, in stochastic footprint models heterogeneity-induced effects such as internal boundary layers or secondary circulations cannot be considered appropriately due to the lack of appropriate turbulence parametrizations for heterogeneous conditions, resulting in further uncertainties in the footprint prediction. However, as we found similar differences between LES and LPDM-B footprints in the heterogeneously and in the homogeneously-heated CBL, we argue that the effect of surface heterogeneity on the LITFASS-tower footprints is small for the particular situations on the simulated LITFASS days. Nevertheless, we do not want to rule out that footprint characteristics can be significantly affected by heterogeneity-induced effects as already shown by Steinfeld et al. (2008) and Markkanen et al. (2010). Hence, future investigations should be designed to further quantify the effect of surface heterogeneity on footprint characteristics.

As the LES approach requires a tremendous computational effort, it is hence not applicable for extensive footprint evaluation for long-term eddy-covariance measurements, as well as for tower or aircraft measurements. It is nevertheless an invaluable tool to validate commonly-used analytical and LS footprint models and detect possible uncertainties in these models. Particularly for elevated turbulence measurements, e.g. by aircrafts or at towers, which are designed to derive local

surface fluxes for different land-surface types by dis-aggregation (e.g. Hutjes et al., 2010; Metzger et al., 2013), reliable footprint analyses are an essential prerequisite to obtain reliable local surface fluxes. Hence, future tracer experiments and LES studies should complement each other to further validate existing analytical as well as LS footprint models in order to minimize the uncertainty in the footprint prediction.

Acknowledgements This study was supported by the German Research Foundation (DFG) under grant RA 617/21-1 and FO 226/20-1. All simulations were performed on the SGI Altix ICE at The North-German Supercomputing Alliance (HLRN), Hannover/Berlin. We want to thank Professor N. Kljun for kindly providing the LPDM-B code for our use. NCL² has been used for data analysis and visualization. The authors wish to thank all participants of the LITFASS-2003 experiment who produced data used in this analysis. All participants of the LITFASS-2003 experiment are listed in Beyrich and Mengelkamp (2006).

References

- Bange J, Zittel P, Spieß T, Uhlenbrock J, Beyrich F (2006) A new method for the determination of area-averaged turbulent surface fluxes from low-level flights using inverse models. *Boundary-Layer Meteorol* 119: 527–561
- Beyrich F, Mengelkamp H (2006) Evaporation over a heterogeneous land surface: EVA_GRIPS and the LITFASS-2003 experiment: An overview. *Boundary-Layer Meteorol* 121: 5–32
- Beyrich F, Leps JP, Mauder M, Bange J, Foken T, Huneke S, Lohse H, Luedi A, Meijninger WML, Mironov D, Weisensee U, Zittel P (2006) Area-averaged surface fluxes over the LITFASS region based on eddy-covariance measurements. *Boundary-Layer Meteorol* 121: 33–65
- Beyrich F, Bange J, Hartogensis OK, Raasch S, Braam M, van Dinter D, Gräf D, van Kesteren B, van den Kroonenberg AC, Maronga B, Martin S, Moene AF (2012) Towards a validation of scintillometer measurements: The LITFASS-2009 experiment. *Boundary-Layer Meteorol* 144: 83–112
- Bou-Zeid E, Meneveau C, Parlange MB (2004) Large-eddy simulation of neutral atmospheric boundary layer flow over heterogeneous surfaces: blending height and effective surface roughness. *Water Resour Res* 40: W02505
- Brasseur JG, Wei T (2010) Designing large-eddy simulation of the turbulent boundary layer to capture law-of-the-wall scaling. *Phys Fluids* 22: 021303
- Cai XH, Zhang R, Li Y (2006) A large-eddy simulation and Lagrangian stochastic study of heavy particle dispersion in the convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol* 120: 413–435
- Cai XH, Leclerc MY (2007) Forward-in-time and backward-in-time dispersion in the convective boundary layer: the concentration footprint. *Boundary-Layer Meteorol* 123: 201–218
- Cai XH, Peng G, Guo X, Leclerc MY (2008) Evaluation of backward and forward Lagrangian footprint models in the surface layer. *Theor Appl Climatol* 93: 207–223
- Deardorff, JW (1980) Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorol* 18: 495–527
- de Haan P, Rotach MW (1998) A novel approach to atmospheric dispersion modelling: the Puff-Particle Model (PPM). *Q J R Meteorol Soc* 124: 2771–2792
- Flesch TK (1996) The footprint for flux measurements, from backward Lagrangian stochastic models. *Boundary Layer Meteorol* 78: 399–404
- Foken T, Leclerc MY (2004) Methods and limitations in validation of footprint models. *Agric For Meteorol* 127: 223–234
- Gibson M, Sailor DJ (2012) Corrections to the mathematical formulation of a backwards Lagrangian particle dispersion model. *Boundary-Layer Meteorol* 145: 399–406

² The NCAR Command Language (Version 6.0.0) [software]. (2011). Boulder, Colorado: UCAR/NCAR/CISL/VETS. <http://dx.doi.org/10.5065/D6WD3XH5>

- Göckede M, Markkanen T, Mauder M, Arnold K, Leps JP, Foken T (2005) Validation of footprint models using natural tracer measurements from a field experiment. *Agric For Meteorol* 135: 314–325
- Göckede M, Thomas C, Markkanen T, Mauder M, Ruppert J, Foken T (2007) Sensitivity of Lagrangian Stochastic footprints to turbulence statistics. *Tellus* 59B: 577–586
- Hellsten A, Zilitinkevich S (2013) Role of convective structures and background turbulence in the dry convective boundary layer. *Boundary Layer Meteorol* 149: 323–353
- Horst TW, Weil JC (1992) Footprint estimation for scalar flux measurements in the atmospheric surface layer. *Boundary Layer Meteorol* 59: 279–296
- Hsieh C, Katul G, Chi T (2000) An approximate analytical model for footprint estimation of scalar fluxes in thermally stratified atmospheric flows. *Adv Water Resour* 23: 765–772
- Hutjes RWA, Vellinga US, Gioli B, Miglietta F (2010) Dis-aggregation of airborne flux measurements using footprint analysis. *Agric For Meteorol* 150: 966–983
- Kawai S, Larsson J (2012) Wall-modeling in large eddy simulation: Length scales, grid resolution, and accuracy. *Phys Fluids* 24: 015105
- Khanna S, Brasseur JG (1997) Analysis of Monin-Obukhov similarity from large-eddy simulations. *J Fluid Mech* 345: 251–286
- Kljun N, Rotach MW, Schmid HP (2002) A three-dimensional backward Lagrangian footprint model for a wide range of boundary-layer stratifications. *Boundary-Layer Meteorol* 103: 205–226
- Kljun N, Kormann R, Rotach MW, Meixner FX (2003) Comparison of the Lagrangian footprint model LPDM-B with an analytical footprint model. *Boundary-Layer Meteorol* 106: 349–355
- Kljun N, Kastner-Klein P, Fedorovic E, Rotach MW (2004) Evaluation of Lagrangian footprint model using data from wind tunnel convective boundary layer. *Agric For Meteorol* 127: 189–201
- Kormann R, Meixner FX (2001) An analytical footprint model for non-neutral stratification. *Boundary Layer Meteorol* 99: 207–224
- Kurbanmuradov O, Rannik Ü, Sabelfeld KK, Vesala T (2001) Evaluation of mean concentration and fluxes in turbulent flows by Lagrangian stochastic models. *Math Comp Simul* 54: 459–476.
- Leclerc MY, Shen SH, Lamb B (1997) Observations and large-eddy simulation modeling of footprints in the lower convective boundary layer. *J Geophys Res* 102: 9323–9334
- Leclerc MY, Karipot A, Prabha T, Allwine G, Lamb B, Gholz HL (2003) Impact of non-local advection on flux footprints over a tall forest canopy: a tracer flux experiment. *Agric Forest Meteorol* 115: 19–30
- Leclerc MY, Meskhidze N, Finn D (2003) Comparison between measured tracer fluxes and footprint model predictions over a homogeneous canopy of intermediate roughness. *Agric Forest Meteorol* 117: 145–158
- Mahrt L, Vickers D, Sun JL, McCaughey JH (2001) Calculation of area-averaged fluxes: application to BOREAS. *Adv Water Resour* 24: 1133–1141
- Markkanen T, Steinfeld G, Kljun N, Raasch S, Foken T (2009) Comparison of conventional Lagrangian stochastic footprint models against LES driven footprint estimates. *Atmos Chem Phys* 9: 5575–5586
- Markkanen T, Steinfeld G, Kljun N, Raasch S, Foken T (2010) A numerical case study on footprint model performance under inhomogeneous flow conditions. *Meteorol Z* 19: 539–547
- Maronga B, Raasch S (2013) Large-eddy simulations of surface heterogeneity effects on the convective boundary layer during the LITFASS-2003 experiment. *Boundary-Layer Meteorol* 146: 17–44
- Metzger S, Junkermann W, Mauder M, Butterbach-Bahl K, Widemann BTY, Neidl F, Schafer K, Wieneke S, Zheng XH, Schmid HP, Foken T (2013) Spatially explicit regionalization of airborne flux measurements using environmental response functions. *Biogeosciences* 10: 2193–2217
- Prabha TV, Leclerc MY, Baldocchi D (2008) Comparison of in-canopy flux footprints between large-eddy simulation and the Lagrangian simulation. *J Appl Meteorol Climatol* 8: 2115–2128
- Raasch S, Etling D (1998) Modeling deep ocean convection: Large eddy simulation in comparison with laboratory experiments. *J Phys Oceano* 28: 1786–1802
- Raasch S, Schröter M (2001) PALM - a large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol Z* 10: 363–372

- Rannik Ü, Aubinet M, Kurbanmuradov O, Sabelfeld KK, Markkanen T, Vesala T (2000) Footprint analysis for measurements over heterogeneous forest. *Boundary-Layer Meteorol* 97:137–166.
- Rannik Ü, Markkanen T, Raittila J, Hari P, Vesala T (2003) Turbulence statistics inside and over forest: Influence on footprint prediction. *Boundary Layer Meteorol* 109: 163–189
- Riechelmann T, Noh Y, Raasch S (2012) A new method for large-eddy simulations of clouds with Lagrangian droplets including the effects of turbulent collision. *New J Phys*: 14, DOI: 10.1088/1367-2630/14/6/065008
- Rotach MW, Gryning SE, Tassone C (1996) A two-dimensional Lagrangian stochastic dispersion model for daytime conditions. *Q J R Meteorol Soc* 122: 367–389
- Schmid HP, Oke TR (1990) A model to estimate the source area contributing to turbulent exchange in the surface layer over patchy terrain. *Q J R Meteorol Soc* 116: 965–988
- Schmid HP (2002) Footprint modeling for vegetation atmosphere exchange studies: a review and perspective. *Agric For Meteorol* 113: 159–183
- Steinfeld G, Raasch S, Markkanen T (2008) Footprints in homogeneously and heterogeneously driven boundary layers derived from a Lagrangian stochastic particle model embedded into large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol* 129: 225–248
- Stoll R, Porté-Agel F (2006) Effect of roughness on surface boundary conditions for large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol* 118: 169–187
- Sühling M, Raasch S (2013) Heterogeneity-induced heat-flux patterns in the convective boundary layer: Can they be detected from observations and is there a blending height? - A large-eddy simulation study for the LITFASS-2003 experiment. *Boundary-Layer Meteorol* 148: 309–331
- Sullivan PP, Horst TW, Lenschow DH, Moeng CH, Weil JC (2003) Structure of subfilter-scale fluxes in the atmospheric surface layer with application to large-eddy simulation modelling. *J Fluid Mech* 482: 101–139
- Taylor PA (1987) Comments and further analysis on effective roughness lengths for use in numerical three-dimensional models. *Boundary-Layer Meteorol* 39: 403–418
- Thomson DJ (1987) Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *J Fluid Mech* 180: 529–556
- van de Boer A, Moene AF, Schüttemeyer D, Graf A (2013) Sensitivity and uncertainty of analytical footprint models according to a combined natural tracer and ensemble approach. *Agric For Meteorol* 169: 1–11
- Wang W, Rotach MW (2010) Flux footprints over an undulating surface. *Boundary-Layer Meteorol* 136: 325–340
- Weil JC, Sullivan PP, Moeng CH (2004) The use of large-eddy simulations in Lagrangian particle dispersion models. *J Atmos Sci* 61: 2877–2887
- Weil JC, Sullivan PP, Patton EG, Moeng CH (2012) Statistical variability of dispersion in the convective boundary layer: ensembles of simulations and observations. *Boundary-Layer Meteorol* 145: 185–210
- Wicker LJ, Skamarock WC (2002) Time-splitting methods for elastic models using forward time schemes. *Mon Wea Rev* 130: 2088–2097
- Williamson JH (1980) Low-storage Runge-Kutta schemes. *J Comput Phys* 35: 48–56

4 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde der Einfluss von Landoberflächenheterogenitäten auf die Struktur der konvektiven Grenzschicht mithilfe von Grobstruktursimulationen untersucht. Dabei sollte geklärt werden, welchen Einfluss Oberflächenheterogenitäten auf den vertikalen Austausch in der Grenzschicht und auf das Entrainment am Oberrand der Grenzschicht haben. Ein weiterer Schwerpunkt lag auf der Footprintbestimmung für Turbulenzmessungen sowie auf der Bewertung von fluggestützten Turbulenzmessungen. Das Ziel dieser Untersuchungen bestand darin, Unsicherheiten zu quantifizieren und verbesserte Strategien zur messtechnischen Erfassung von Heterogenitätseffekten in der Grenzschicht abzuleiten.

Bei der Bestimmung von bodennahen Flüssen in Wettervorhersagemodellen oder bei der Messung flächengemittelter Flüsse wird die Annahme getroffen, dass die Grenzschicht in der ersten Modellgitterebene beziehungsweise in der Höhe, in der die Messung (einige Dekameter) stattfindet, horizontal gut durchmischt ist. Die Existenz einer Mischungshöhe, oberhalb derer die Grenzschicht horizontal gut durchmischt ist und die turbulenten Flüsse horizontal homogen sind, ist gegenwärtig jedoch nicht hinreichend geklärt und Gegenstand wissenschaftlicher Diskussion. Dies gilt insbesondere für die konvektive Grenzschicht und für Heterogenitätsskalen in der Größenordnung einer Gitterbox in heutigen Wettervorhersagemodellen (1–10 km). Für Untersuchungen ob eine Mischungshöhe in der konvektiven Grenzschicht existiert, bietet das LITFASS-Gebiet mit seiner für Mittel- und Nordeuropa typisch heterogenen Landschaftsform ideale Voraussetzungen. Auf Grundlage des LITFASS-2003 Experiments wurde eine konvektive Grenzschicht für einen Tag mit schwachem und einen Tag mit stärkerem Hintergrundwind simuliert. Um die vertikale Reichweite der Heterogenitätssignale zu bestimmen, wurde eine räumliche Autokorrelationsanalyse zwischen den vorgegebenen bodennahen Wärmeflüssen und den turbulenten Wärmeflüssen in der Grenzschicht durchgeführt. An beiden simulierten Tagen konnte bis in die obere Grenzschicht, einschließlich der Entrainmentzone, eine Korrelation zwischen dem turbulenten fühlbaren Wärmefluss und dem bodennahen fühlbaren Wärmefluss nachgewiesen werden. Ein direkter Einfluss des bodennahen latenten Wärmeflusses auf den turbulenten latenten Wärmefluss konnte nur in der unteren Grenzschicht beobachtet werden. Der Grund dafür lag darin, dass nur relativ schwach ausgeprägte Heterogenitäten im bodennahen latenten Wärmefluss vorhanden waren. In der oberen Grenzschicht jedoch bestand ein indirekter Heterogenitätseinfluss auf den turbulenten latenten Wärmefluss durch Entrainment, welches lokal durch die Heterogenität im bodennahen fühlbaren Wärmefluss beeinflusst war. Diese Ergebnisse zeigen, dass die Grenzschicht bis zum Oberrand horizontal nicht gut durchmischt ist und folglich, dass eine Mischungshöhe in der konvektiven Grenzschicht nicht existiert. Dies impliziert Unsicherheiten bei der gegenwärtigen Parametrisierung bodennaher Flüsse in Wettervorhersagemodellen und betont die Notwendigkeit des Einsatzes komplexerer Aggregationsmethoden.

Bange et al. (2006a) haben anhand von Flugmessungen während LITFASS-2003 die horizontale Durchmischung der Grenzschicht über dem heterogenen LITFASS-Gebiet untersucht. In manchen Situationen zeigten die Messungen einen Zusammenhang zwischen

den turbulenten Wärmeflüssen in der mittleren Grenzschicht und der darunterliegenden Oberfläche, in anderen Situationen suggerierten die Messungen jedoch eine gut durchmischte Grenzschicht. Bange et al. (2006a) haben jedoch keinen eindeutigen Zusammenhang zwischen den meteorologischen Bedingungen und der horizontalen Durchmischung der Grenzschicht feststellen können. Dies wirft die Frage nach den messstrategischen Anforderungen auf, die notwendig sind um turbulente Flüsse über einzelnen Oberflächentypen hinreichend genau zu erfassen, um somit den Heterogenitätseinfluss auch anhand von Beobachtungsdaten bestätigen zu können. Dazu wurden virtuelle Flugmessungen über verschiedenen Oberflächentypen in den LITFASS-Simulationen vorgenommen, in Anlehnung an die während LITFASS-2003 durchgeführten Flugmessungen. Insgesamt wurde für jeden Flugpfad ein Ensemble von 20 statistisch unabhängigen Einzelflugmessungen in verschiedenen Höhen realisiert. In Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Autokorrelationsanalyse zeigten die über 20 Ensemblemitglieder gemittelten Vertikalprofile des turbulenten fühlbaren Wärmeflusses bis an den Oberrand der Grenzschicht eine klare Abhängigkeit vom Oberflächentyp. Auch der indirekte Heterogenitätseinfluss durch Entrainment auf den turbulenten latenten Wärmefluss in der oberen Grenzschicht konnte nochmals bestätigt werden.

Zwischen den turbulenten Flüssen der 20 Einzelflugmessungen über den jeweiligen Oberflächentypen wurde eine große Streuung beobachtet, welche zum Teil größer als die Unterschiede zwischen den repräsentativen Ensemble-gemittelten Flüssen über den einzelnen Oberflächentypen war. Diese große Unsicherheit in den Einzelflugmessungen konnte auf die unzureichende Erfassung der größten energietragenden Turbulenzskalen in der konvektiven Grenzschicht aufgrund zu kurzer Pfadlängen (6–8 mal der Grenzschichthöhe) zurückgeführt werden.

Die von Bange et al. (2006a) durchgeführte Fehleranalyse für die LITFASS-2003 Flugmessungen hat diese großen Unsicherheiten in den gemessenen Flüssen jedoch nicht entsprechend angezeigt. Äquivalent zu Bange et al. (2006a) wurden die systematischen und zufälligen Fehler der virtuellen Messungen basierend auf der integralen Längenskala des turbulenten Flusses nach Lenschow et al. (1994) bestimmt. Eine Grundannahme von Lenschow et al. (1994) ist, dass alle Turbulenzskalen, die signifikant zum turbulenten Fluss beitragen, auch ausreichend durch die Messung erfasst werden. Bei den durchgeführten Flugmessungen war dies jedoch nicht der Fall, sodass die größten Turbulenzskalen nur unzureichend in die Berechnung der integralen Längenskala eingingen. Es hat sich somit herausgestellt, dass die nach Lenschow et al. (1994) intern abgeleiteten Fehlermaße für solch kurze Pfadlängen, wie sie während LITFASS-2003 geflogen wurden, nicht geeignet sind, um die Unsicherheit des gemessenen Flusses entsprechend quantifizieren zu können. Aufgrund der großen Unsicherheit der Einzelflugmessungen während LITFASS-2003, sowie der unzureichenden Quantifizierung des dazugehörigen statistischen Fehlers, sollten die in Bange et al. (2006a) getroffenen Schlussfolgerungen bezüglich der Durchmischung der Grenzschicht kritisch betrachtet werden.

Weiterhin wurde gezeigt, dass für die Messung statistisch repräsentativer turbulenter Flüsse bei den gegebenen Pfadlängen mindestens 10–15 statistisch unabhängige Einzelflugmessungen entlang eines Flugpfads notwendig sind. Eine wichtige Voraussetzung für die statistische Unabhängigkeit von Einzelflugmessungen ist, dass der zeitliche Abstand zwischen zwei Messungen mindestens eine konvektive Zeitskala beträgt, damit nicht ein und dieselben Turbulenzelemente mehrfach erfasst werden. Die Erfüllung dieser Bedingung ist jedoch nicht ohne Weiteres möglich, da aufgrund der Instationarität der Flüsse im Tagesgang die benötigte Anzahl an Flügen entlang eines Flugpfads in einem begrenzten Zeitintervall durchgeführt werden muss. Alternativ könnten Flugmessungen während eines begrenzten Zeitintervalls an verschiedenen Orten über ähnlich

strukturierten Oberflächen durchgeführt werden. Aufgrund der unterschiedlichen lokalen Gegebenheiten kann jedoch der Flussbeitrag von möglichen Sekundärzirkulationen lokal sehr unterschiedlich sein, was zu einer zusätzlichen Variabilität der Messungen führen kann. Ein Erfolg dieser vorgeschlagenen Methode ist daher keinesfalls garantiert.

Auf Basis der hier vorgestellten Ergebnisse der virtuellen Flugmessungen ist es daher fraglich, ob der Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf der Skala einer in heutigen Wettervorhersagemodellen verwendeten Gitterbox (1–10 km) anhand von Flugmessungen ausreichend genau quantifizieren werden kann.

Die Autokorrelationsanalyse für die LITFASS-Tage zeigte, dass der Einfluss der Oberflächenheterogenität bis in die Entrainmentzone reicht. Inwieweit Oberflächenheterogenitäten einen Einfluss auf das mittlere Entrainment haben, konnte in der Literatur bisher jedoch nicht ausreichend geklärt werden. Die dazu publizierten Studien zeigen unterschiedliche Ergebnisse, die von einer Abschwächung, über keinen signifikanten Einfluss, bis hin zu einer Verstärkung des Entrainments reichen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde untersucht, ob Oberflächenheterogenitäten einen Einfluss auf das Entrainment haben und inwieweit dieser sowohl von der Heterogenität selber als auch von den atmosphärischen Bedingungen abhängt. Dazu wurden Grobstruktursimulationen für die konvektive Grenzschicht über idealisierten, streifenförmigen Heterogenitäten des bodennahen fühlbaren Wärmeflusses durchgeführt. Die Vorgabe idealisierter Heterogenitäten sollte es ermöglichen, den Einfluss verschiedener Heterogenitätsamplituden und -skalen getrennt voneinander zu untersuchen. Dies wäre über realen Heterogenitäten wie dem LITFASS-Gebiet nicht möglich gewesen, da sich verschiedene Heterogenitätsamplituden und -skalen überlagern.

Es wurde ein signifikanter Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf das Entrainment festgestellt. Verglichen mit einem homogen geheizten Referenzfall wurde bei kleinen Heterogenitätsamplituden ein verringertes, bei größeren Amplituden ein verstärktes Entrainment beobachtet. Für Heterogenitätsskalen in der Größenordnung der Grenzschichthöhe war die Verstärkung des Entrainments am ausgeprägtesten. Bei gleichbleibender Amplitude und Heterogenitätsskalen sehr viel kleiner als die Grenzschichthöhe wurde ein leicht verringertes Entrainment festgestellt, verglichen zu einem homogenen Referenzfall. Der Einfluss kleinskaliger Heterogenitäten ist jedoch überraschend, da die Heterogenitätssignale nicht bis zum Oberrand der Grenzschicht reichten. Die Ursachen dieses Einflusses sind im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht weiterführend untersucht wurden. Oberflächenheterogenitäten die sehr viel größer als die Grenzschichthöhe sind, zeigten keinen signifikanten Einfluss auf das mittlere Entrainment. Des Weiteren wurde gezeigt, dass der Einfluss der Oberflächenheterogenität auf das Entrainment abhängig von der Windgeschwindigkeit und -richtung ist. Weht der mittlere Wind senkrecht zu der Grenze zwischen den unterschiedlich beheizten Gebieten, so wird der Einfluss der Heterogenität auf das Entrainment bei zunehmender Windgeschwindigkeit vermindert. Dies kann auf die zusätzliche horizontale Durchmischung durch den mittleren Wind und der damit verbundenen Abschwächung der Heterogenitätssignale in der Grenzschicht zurückgeführt werden. Im Gegensatz dazu bleibt der Heterogenitätseffekt auf das Entrainment bestehen, wenn der mittlere Wind parallel zu der Grenze zwischen den unterschiedlich beheizten Gebieten weht. Mithilfe der durchgeführten Entrainmentstudie konnte gezeigt werden, dass der Heterogenitätseinfluss auf das Entrainment abhängig von der Heterogenitätsamplitude und -skala sowie den meteorologischen Bedingungen ist. Die in der bisherigen Literatur existierenden, zunächst widersprüchlichen Ergebnisse, konnten so zusammengeführt und bestätigt werden.

Um das physikalische Verständnis über den Einfluss von Oberflächenheterogenitäten

auf das Entrainment zu erweitern, wurde eine neue Methode zur Bestimmung der lokalen Entrainmentrate basierend auf lokalen Flussdivergenzen entwickelt. Ebenso ist es mit dieser neuen Methode möglich, die Anteile von Encroachment und Entrainment am Grenzschichtwachstum entsprechend zu separieren.

Die Analyse der lokalen Entrainmentrate zeigte ein Maximum über der Mitte des stärker beheizten Gebiets. Dieses Maximum der lokalen Entrainmentrate ist durch die horizontale Konvergenz der heterogenitätsinduzierten Sekundärzirkulation in der unteren Grenzschicht über dem stärker beheizten Gebiet bedingt. Dadurch wird die Temperatur über dem stärker beheizten Gebiet kontinuierlich erhöht, was aufgrund des verstärkten Auftriebs zu stärkeren konvektiven Aufwinden führt, die tiefer in die Inversionsschicht eindringen können und somit das Entrainment lokal verstärken. Ein weiteres Maximum der lokalen Entrainmentrate wurde über der Mitte des schwächer beheizten Gebiets lokalisiert. Die von Ouwersloot et al. (2011) aufgestellte Hypothese, dass über dem schwächer beheizten Gebiet kaum beziehungsweise gar kein Entrainment mehr stattfindet, wurde somit widerlegt. Die physikalische Ursache dieses zweiten Entrainmentmaximums konnte jedoch nicht abschließend geklärt werden. Es wird jedoch vermutet, dass es in Zusammenhang mit der horizontalen Konvergenz der Sekundärzirkulation am Oberrand der Grenzschicht steht. Beide durch die Sekundärzirkulation bedingten Effekte über dem stärker und dem schwächer beheizten Gebiet haben eine Verstärkung des flächengemittelten Entrainments zur Folge.

Die Analyse der lokalen Entrainmentrate hat gezeigt, dass im Fall kleiner Heterogenitätsamplituden das Entrainment sowohl über dem stärker als auch über dem schwächer beheizten Gebiet verringert ist, verglichen mit einem homogenen Referenzfall. Diese Verminderung des Entrainments bei kleinen Heterogenitätsamplituden ist auf die Existenz eines abschwächenden Effekts zurückzuführen, der insbesondere bei schwachen Sekundärzirkulationen dominiert. Durch die Sekundärzirkulation wird in der unteren Grenzschicht kältere Luft vom schwächer zum stärker beheizten Gebiet advehiert, sowie wärmere Luft vom stärker zum schwächer beheizten Gebiet in der oberen Grenzschicht. Dies führt zu einer Stabilisierung der unteren und oberen Grenzschicht über dem stärker beziehungsweise schwächer beheizten Gebiet, was zu einer Abschwächung der konvektiven Aufwinde und somit zu einer Verminderung des Entrainments führt. An dieser Stelle muss jedoch betont werden, dass es nicht möglich war, die durch die Sekundärzirkulation verursachten Entrainment-verstärkenden und -abschwächenden Prozesse quantitativ zu erfassen, sodass die in dieser Arbeit diskutierten physikalischen Ursachen für das verstärkte beziehungsweise verringerte Entrainment gegenwärtig als Hypothese anzusehen sind.

In Abhängigkeit von der vorgegebenen Oberflächenheterogenität wurde gezeigt, dass das flächengemittelte Entrainment im Vergleich zu einem homogenen Referenzfall bis zu 20% verringert, beziehungsweise bis zu 60% erhöht sein kann, was insbesondere für die Modellierung der spezifischen Feuchte sowie der Konzentration von chemischen Spurenstoffen in der Grenzschicht von Bedeutung ist. Dies betont nochmals die Notwendigkeit, Heterogenitätseffekte auch in Entrainmentparametrisierungen in numerischen Wettervorhersagemodellen einzubeziehen, um die Grenzschichtentwicklung und deren Einfluss auf das Wettergeschehen entsprechend berücksichtigen zu können.

Für die Validierung und Entwicklung von Turbulenzparametrisierungen in numerischen Wettervorhersagemodellen werden Messungen turbulenter Flüsse benötigt. Bei der Messung turbulenter Flüsse über einer heterogenen Oberfläche stammt das in einer typischen Höhe von mehreren Dekametern gemessene Signal gewöhnlich von verschiedenen Oberflächentypen. Um die Qualität der Messung beurteilen und die Messung entsprechend

einordnen zu können, ist es notwendig die relativen Anteile der unterschiedlichen Oberflächentypen am gemessenen Signal zu kennen. Für die Bestimmung dieser relativen Flussbeiträge werden üblicherweise Lagrangesche stochastische Footprintmodelle eingesetzt, in denen die turbulente Strömung vollständig parametrisiert wird. Eine umfassende Validierung und Quantifizierung der Unsicherheiten von stochastischen Footprintmodellen steht noch aus, insbesondere über heterogenen Oberflächen sowie Messhöhen von mehreren Dekametern, in denen Turbulenzmessungen vorgenommen werden die darauf abzielen den flächengemittelten Austausch zwischen der Erdoberfläche und der Atmosphäre zu quantifizieren.

Die Footprintbestimmung mittels eines in die LES eingebetteten Lagrangeschen Partikelmodells (Steinfeld et al., 2008) bietet die Möglichkeit, mit aufgelösten Turbulenzinformationen realistische Footprints über heterogenen Oberflächen zu bestimmen. Obwohl die Footprintbestimmung mittels LES für umfangreiche Footprintanalysen von Turbulenzmessungen aufgrund des hohen Rechenaufwands gegenwärtig nicht geeignet ist, bietet die LES neben aufwendigen Tracerexperimenten die einzige Möglichkeit, bestehende weniger rechenintensive Lagrangesche stochastische Footprintmodelle für ausgewählte meteorologische Situationen zu bewerten und zu validieren.

Im Rahmen einer Machbarkeitsstudie wurden in dieser Arbeit (nach Kenntnis des Autors) erstmalig Footprints für höher gelegene Messpositionen über realistischen Oberflächenheterogenitäten mittels LES bestimmt. Dabei wurden zunächst die notwendigen Anforderungen ermittelt, um realistische und statistisch aussagekräftige Footprints über heterogenen Oberflächen aus der LES ableiten zu können. Die LES Footprints wurden mit Footprints aus dem von Kljun et al. (2002) entwickelten Lagrangeschen stochastischen Footprintmodell LPDM-B verglichen. Footprints wurden für einen LITFASS-Tag mit schwachem und einen Tag mit stärkerem Hintergrundwind für einen 99-m Turm bestimmt. An beiden Tagen waren die LES Footprints kleiner als die LPDM-B Footprints, die Position des Footprintmaximums lag näher an der Sensorposition und das Footprintmaximum war stärker ausgeprägt. Des Weiteren waren bei schwachem Hintergrundwind die LES Footprints quer zur Windrichtung deutlich schmaler verglichen mit den LPDM-B Footprints, wohingegen bei stärkerem Hintergrundwind die Querwindverteilung der LES und LPDM-B Footprints gut übereinstimmte. Diese Ergebnisse lassen vermuten, dass die Güte der LPDM-B Footprints von den meteorologischen Bedingungen abhängt. Eine Sensitivitätsstudie über homogenem Untergrund mit verschiedenen bodennahen Wärmeflüssen und Windgeschwindigkeiten konnte diese Vermutung bestätigen. Es hat sich gezeigt, dass die Unsicherheit in den LPDM-B Footprints am größten ist, wenn der Partikeltransport durch den mittleren Wind klein gegenüber dem Partikeltransport durch Turbulenz ist, d.h. in schwachwindigen stark konvektiven Situationen. Durch diese Analysen existiert nun ein Anhaltspunkt, bei dem angesetzt werden kann um das LPDM-B in Zukunft zu verbessern. Momentan jedoch sollten Footprintanalysen die auf Basis des LPDM-B sowie davon abgeleiteten Modellen (Kljun et al., 2004b) durchgeführt werden, die oben genannten Unsicherheiten bei den entsprechenden meteorologischen Bedingungen mit einbeziehen und vorsichtig interpretiert werden.

Über heterogenem und homogenem Untergrund wurden ähnliche Unterschiede zwischen den LES und LPDM-B Footprints beobachtet. Es wird daher vermutet, dass die Unsicherheiten durch Heterogenitätseffekte in den LPDM-B Footprints klein sind, verglichen mit den schon existierenden Unsicherheiten durch Turbulenzparametrisierungen. Der Heterogenitätseinfluss auf den Footprint einer Messung, beispielsweise durch die Präsenz von internen Grenzschichten, ist nicht geklärt und bedarf weiterer Untersuchungen (Vesala et al., 2008).

Mithilfe der Footprintstudie wurde ein Beitrag zur Validierung von Footprintmodellen

geleistet. Dabei konnten im LPDM-B bestehende Unsicherheiten bei der Footprintbestimmung aufgedeckt werden. Dies bietet einen Ansatzpunkt für entsprechende Verbesserungen und Weiterentwicklungen der Footprintbestimmung.

Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden offene Fragen bezüglich des Einflusses heterogener Landoberflächen auf die konvektive Grenzschicht behandelt und systematische Unsicherheiten bei Turbulenzmessungen und bei der Footprintbestimmung aufgedeckt. Durch die in dieser Arbeit erzielten Resultate eröffnen sich neue Fragestellungen und Möglichkeiten für zukünftige Forschungsvorhaben.

Für die LITFASS-Simulationen wurde gezeigt, dass die Heterogenitätssignale bis an den Oberrand der konvektiven Grenzschicht reichen, was hauptsächlich bei den größten im LITFASS-Gebiet vorkommenden Heterogenitätsskalen vorkommt. Mithilfe der Autokorrelationsanalyse konnte allerdings nicht geklärt werden, wie hoch der vertikale Einfluss von kleinerskaligen Heterogenitäten reicht. Molod et al. (2003) sowie Ament und Simmer (2006) haben die Verwendung von Flussaggregationsmethoden vorgeschlagen, bei denen die Mischungshöhe von der darunter liegenden Heterogenitätsskala und den atmosphärischen Bedingungen abhängig ist, um Austauschprozesse zwischen der Landoberfläche und der Atmosphäre in Wettervorhersagemodellen besser berücksichtigen zu können. Dies erfordert jedoch eine entsprechend genaue Parametrisierung der Mischungshöhe. Die Grundvoraussetzung dafür wäre eine umfassende Untersuchung der horizontalen Durchmischung der konvektiven Grenzschicht bei verschiedenen Heterogenitätsskalen und atmosphärischen Bedingungen sowie ein Vergleich der dabei beobachteten Mischungshöhen mit gegenwärtig bestehenden Parametrisierungen für die Mischungshöhe (z.B. Raupach und Finnigan, 1995; Mahrt, 2000; Strunin et al., 2004).

Die Entrainmentstudie hat gezeigt, dass Oberflächenheterogenitäten einen Einfluss auf das Entrainment haben. Die physikalischen Ursachen dieses Einflusses konnten jedoch nicht ausreichend geklärt werden. Für ein besseres Verständnis des Heterogenitätseinflusses auf das Entrainment ist es allerdings unabdingbar, die dafür verantwortlichen Prozesse genau zu identifizieren und zu quantifizieren, um daraus verbesserte Entrainmentparametrisierungen für Wettervorhersagemodelle ableiten zu können. Heutzutage verwendete Entrainmentparametrisierungen basieren meist auf den Produktions- und Destruktionstermen der TKE, genauer gesagt auf dem Verhältnis von Auftrieb und Scherung am Oberrand der Grenzschicht, ausgedrückt durch die lokale Richardson-Zahl (z.B. Fedorovich et al., 2004). Eine Untersuchung der Produktions- und Destruktionsterme der TKE-Gleichung wäre daher ein erster Ansatz, um den Heterogenitätseinfluss genauer quantifizieren zu können.

Die in der Entrainmentstudie durchgeführte Sensitivitätsstudie hat gezeigt, dass Heterogenitätsskalen in der Größenordnung der Grenzschichthöhe den größten Einfluss auf das flächengemittelte Entrainment haben. Ein Vergleich zu der Studie von Patton et al. (2005) zeigt jedoch, dass für kleinere Heterogenitätsamplituden der größte Einfluss bei deutlich größeren Heterogenitätsskalen zu finden ist. Dies lässt vermuten, dass sich der Effekt unterschiedlicher Heterogenitätsamplituden mit dem Effekt unterschiedlicher Heterogenitätsskalen überlagert. Eine umfassende Sensitivitätsstudie mit verschiedenen Heterogenitätsamplituden und -skalen würde ein umfassenderes Bild liefern, inwieweit sich Effekte unterschiedlicher Heterogenitätsamplituden und -skalen überlagern. Zusätzlich könnte untersucht werden, wie sich die thermische Stabilität der freien Atmosphäre, sowie die Stärke oder Dicke der Inversionsschicht, auf den Heterogenitätseffekt auswirken.

In der Footprintstudie wurden Footprints über heterogenen Oberflächen bestimmt. Der Effekt der Oberflächenheterogenität auf den Footprint einer Messung, beispielsweise

durch interne Grenzschichten, wurde jedoch im Rahmen dieser Studie nicht genauer quantifiziert und bedarf weiteren Untersuchungen.

Der Vergleich zwischen den LES und LPDM-B Footprints zeigte, dass die LPDM-B Footprints für höher gelegene Messpositionen eine große Unsicherheit aufweisen, insbesondere bei geringen Windgeschwindigkeiten. Dies wird, wie schon von Prabha et al. (2008) sowie Markkanen et al. (2009) aufgeführt wurde, auf eine unzureichende Berücksichtigung von kohärenten turbulenten Strukturen zurückgeführt, welche im LPDM-B durch die Schiefe der Vertikalgeschwindigkeit berücksichtigt werden (Kljun et al., 2002). Hier könnte, in Kooperation mit den Entwicklern des LPDM-B, bei der Parametrisierung der Schiefe der Vertikalgeschwindigkeit angesetzt werden, um eine Verbesserung des LPDM-B zu erzielen.

Hutjes et al. (2010) sowie Metzger et al. (2013) haben Methoden vorgestellt, die es ermöglichen, die bodennahen Flüsse einzelner Oberflächentypen aus fluggestützten Turbulenzmessungen mittels einer umfassenden Footprintanalyse für den gesamten Flugpfad abzuleiten (engl.: *dis-aggregation*). Mithilfe der in dieser Arbeit durchgeführten virtuellen Flugmessungen und LES Footprintanalysen könnten die vorgeschlagenen Messprinzipien nachgeahmt werden. Die daraus abgeleiteten bodennahen Flüsse über verschiedenen Oberflächentypen könnten dann direkt mit den in der LES vorgegebenen bodennahen Flüssen verglichen werden. Die vorgeschlagenen Mess- und Analysemethoden könnten auf diese Weise evaluiert werden und die jeweiligen Unsicherheiten in den abgeleiteten Flüssen für verschiedene Heterogenitäten und atmosphärische Bedingungen könnten genau quantifiziert werden.

In dieser Arbeit konnte demonstriert werden, dass Oberflächenheterogenitäten einen signifikanten Einfluss auf die Struktur der Grenzschicht und auf das Entrainment am Oberrand der Grenzschicht haben. Des Weiteren wurden Unsicherheiten bei der Footprintbestimmung sowie bei der Erfassung von Heterogenitätssignalen durch Flugmessungen aufgedeckt. Anhand der gewonnenen Erkenntnisse kann der Einfluss von Heterogenitäten besser verstanden werden und es können Strategien zur Messung turbulenter Flüsse verbessert werden. Beides stellt die Grundlage für eine Weiterentwicklung von Parametrisierungen dar, um die komplexen Interaktionen zwischen der Landoberfläche und der Atmosphäre in Wetter- und Klimamodellen besser abbilden zu können.

Danksagung

Ich bedanke mich bei Prof. Dr. Siegfried Raasch für die Betreuung dieser Arbeit sowie für die fachlichen Diskussionen und Anregungen. Auch möchte ich mich an dieser Stelle dafür bedanken, dass er mir die Möglichkeit zur Fertigstellung dieser Arbeit auch nach Ablauf der eigentlichen Finanzierung gegeben hat.

Ebenfalls möchte ich mich bei Prof. Dr. Dieter Etling für die Übernahme des Korreferats bedanken.

Des Weiteren bedanke ich mich bei allen Mitgliedern der PALM-Arbeitsgruppe für die gute Zusammenarbeit sowie der stets vorhandenen Hilfsbereitschaft.

Vor allem möchte ich mich bei Farah Kanani, Dr. Björn Maronga, Dr. Rieke Heinze und Dr. Micha Gryschka für die vielen weiterführenden fachspezifischen Diskussionen bedanken.

Besonderer Dank gilt den beiden Korrekturlesern dieser Arbeit Farah Kanani und Dr. Rieke Heinze.

Danken möchte ich auch allen Koautoren sowie Gutachtern für ihren Beitrag zur strukturellen und fachlichen Verbesserung der Artikel.

Bedanken möchte ich mich auch bei meiner Familie und Freunden für die Unterstützung während der Studienzeit und der Promotionsphase.

Ganz besonders möchte ich Farah Kanani für den privaten Rückhalt und die stete Unterstützung danken.

Diese Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (Projektkennung: RA 617/21-1) unterstützt.

Die dieser Arbeit zugrunde liegenden Simulationen wurden auf der IBM Power6 des Deutschen Klimarechenzentrums (DKRZ) sowie auf der SGI Altix des Norddeutschen Verbunds für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) durchgeführt.

Für die Datenanalyse sowie -visualisierung wurde NCL¹ genutzt.

¹The NCAR Command Language (Version 6.0.0) [software]. (2011). Boulder, Colorado: UCAR/NCAR/-CISL/VETS. doi:10.5065/D6WD3XH5

Literaturverzeichnis

- Albertson, J., M. Parlange, 1999:** Natural integration of scalar fluxes from complex terrain. *Adv. Water. Res.*, **23**, 239–252.
- Ament, F., C. Simmer, 2006:** Improved representation of land-surface heterogeneity in a non-hydrostatic numerical weather prediction model. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 153–174.
- Angevine, W., 1999:** Entrainment results including advection and case studies from the Flatland boundary layer experiments. *J. Geophys. Res.*, **104**, 30947–30963.
- Angevine, W., 2008:** Transitional, entraining, cloudy, and coastal boundary layers. *Acta Geophysica*, **56**, 2–20.
- Angevine, W., A. White, S. Avery, 1994:** Boundary layer depth and entrainment zone characterization with a boundary-layer profiler. *Boundary-Layer Meteorol.*, **68**, 375–385.
- Arakawa, A., V. R. Lamb, 1977:** Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. – In: *General circulation models of the atmosphere*, J. Chang, Hsg., Academic Press, Bd. 17, S. 173–265.
- Avissar, R., T. Schmidt, 1998:** An evaluation of the scale at which ground-surface heat flux patchiness affects the convective boundary layer using large-eddy simulations. *J. Atmos. Sci.*, **55**, 2666–2689.
- Baldauf, M., 2008:** Stability analysis for linear discretisations of the advection equation with Runge-Kutta time integration. *J. Comput. Phys.*, **227**, 6638–6659.
- Bange, J., T. Spieß, M. Herold, F. Beyrich, B. Hennemuth, 2006a:** Turbulent fluxes from Helipod flights above quasi-homogeneous patches within the LITFASS area. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 127–151.
- Bange, J., P. Zittel, T. Spieß, J. Uhlenbrock, F. Beyrich, 2006b:** A new method for the determination of area-averaged turbulent surface fluxes from low-level flights using inverse models. *Boundary-Layer Meteorol.*, **119**, 527–561.
- Bange, J., T. Spieß, A. C. van den Kroonenberg, 2007:** Characteristics of the early-morning shallow convective boundary layer from Helipod flights during STINHO-2. *Theor. Appl. Climatol.*, **90**, 113–126.
- Beyrich, F., S. E. Gryning, 1998:** Estimation of the entrainment zone depth in a shallow convective boundary layer from sodar data. *J. Appl. Meteorol.*, **37**, 255–268.
- Beyrich, F., H. T. Mengelkamp, 2006:** Evaporation over a heterogeneous land surface: Eva_GRIPS and the LITFASS-2003 experiment: An overview. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 5–32.
- Beyrich, F., J. P. Leps, M. Mauder, J. Bange, T. Foken, S. Huneke, H. Lohse, A. Luedi, W. M. L. Meijninger, D. Mironov, U. Weisensee, P. Zittel, 2006:** Area-averaged surface fluxes over the LITFASS region based on eddy-covariance measurements. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 33–65.

- Beyrich, F., J. Bange, O. K. Hartogensis, S. Raasch, M. Braam, D. van Dinter, D. Gräf, B. van Kesteren, A. C. van den Kroonenberg, B. Maronga, S. Martin, A. F. Moene, 2012: Towards a validation of scintillometer measurements: The LITFASS-2009 experiment. *Boundary-Layer Meteorol.*, **144**, 83–112.
- Blackadar, A., 1997: *Turbulence and diffusion in the atmosphere*. Springer, Berlin, 185 S.
- Blyth, E. M., 1995: Using a simple SVAT scheme to describe the effect of scale on aggregation. *Boundary-Layer Meteorol.*, **72**, 267–285.
- Bou-Zeid, E., M. Parlange, C. Meneveau, 2007: On the parameterization of surface roughness at regional scales. *J. Atmos. Sci.*, **64**, 216–227.
- Breuer, M., 2002: *Direkte Numerische Simulation und Large-Eddy Simulation turbulenter Strömungen auf Hochleistungsrechnern*. Shaker Verlag, Aachen, 1. Aufl., 433 S.
- Brooks, I., A. Fowler, 2012: An evaluation of boundary-layer depth, inversion and entrainment parameters by large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, **142**, 245–263.
- Brunsell, N., D. Mechem, M. Anderson, 2011: Surface heterogeneity impacts on boundary layer dynamics via energy balance partitioning. *Atmos. Chem. Phys.*, **11**, 3403–3416.
- Businger, J. A., J. C. Wyngaard, Y. Izumi, E. F. Bradley, 1971: Flux–profile relationships in the atmospheric surface. *J. Atmos. Sci.*, **28**, 181–189.
- Cai, X. H., M. Y. Leclerc, 2007: Forward-in-time and backward-in-time dispersion in the convective boundary layer: the concentration footprint. *Boundary-Layer Meteorol.*, **123**, 201–218.
- Cai, X. H., G. Peng, X. Guo, M. Y. Leclerc, 2008: Evaluation of backward and forward Lagrangian footprint models in the surface layer. *Theor. Appl. Climatol.*, **93**, 207–223.
- Canut, G., M. Lothon, F. Said, F. Lohou, 2010: Observation of entrainment at the interface between monsoon flow and the Saharan Air Layer. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **136**, 34–46.
- Claussen, M., 1991: Estimation of areally-averaged surface fluxes. *Boundary-Layer Meteorol.*, **54**, 387–410.
- Conzemius, R., J. E. Fedorovich, 2006: Dynamics of sheared convective boundary layer entrainment. Part 1: Methodological background and Large-Eddy Simulations. *J. Atmos. Sci.*, **63**, 1151–1178.
- Cuijpers, J. W. M., P. G. Duynkerke, 1993: Large eddy simulation of trade wind cumulus clouds. *J. Atmos. Sci.*, **50**, 3894–3908.
- Courant, R., K. Friedrichs, H. Lewy, 1928: Über die partiellen Differentialgleichungen der mathematischen Physik. *Math. Ann.*, **100**, 32–74.
- Davis, K., D. H. Lenschow, S. Oncley, C. Kiemle, G. Ehret, A. Giez, J. Mann, 1997: Role of entrainment in surface-atmosphere interactions over the boreal forest. *J. Geophys. Res.*, **102**, 29219–29230.
- Davis, K., N. Gamage, C. Hagelberg, C. Kiemle, D. H. Lenschow, P. P. Sullivan, 2000: An objective method for deriving atmospheric structure from airborne lidar observations. *J. Atmos. Ocean. Technol.*, **17**, 1455–1468.
- de Haan, P., M. W. Rotach, 1998: A novel approach to atmospheric dispersion modelling: the Puff-Particle Model (PPM). *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **124**, 2771–2792.
- Deardorff, J. W., 1980: Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorol.*, **18**, 495–527.

- Dyer, A. J., 1974:** A review of flux–profile relationships. *Boundary-Layer Meteorol.*, **3**, 363–372.
- Etling, D., 2002:** *Theoretische Meteorologie*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2. Aufl., 354 S.
- Fedorovich, E., R. Conzemius, D. Mironov, 2004:** Convective entrainment into a shear-free, linearly stratified atmosphere: Bulk models reevaluated through large eddy simulations. *J. Atmos. Sci.*, **61**, 281–295.
- Fesquet, C., S. Dupont, P. Drobinski, T. Dubos, C. Barthlott, 2009:** Impact of terrain heterogeneity on coherent structure properties: Numerical approach. *Boundary-Layer Meteorol.*, **133**, 71–92.
- Flesch, T. K., J. D. Wilson, E. Yee, 1995:** Backward-time lagrangian stochastic dispersion models and their application to estimate gaseous emissions. *J. Appl. Meteorol.*, **34**, 1320–1332.
- Foken, T., M. Y. Leclerc, 2004:** Methods and limitations in validation of footprint models. *Agric. For. Meteorol.*, **127**, 223–234.
- Fröhlich, J., 2006:** *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner Verlag, Wiesbaden, 1. Aufl., 414 S.
- Garrat, J., R., 1990:** The internal boundary-layer - a review. *Boundary-Layer Meteorol.*, **50**, 171–203.
- Göckede, M., T. Markkanen, M. Mauder, K. Arnold, J. P. Leps, T. Foken, 2005:** Validation of footprint models using natural tracer measurements from a field experiment. *Agric. For. Meteorol.*, **135**, 314–325.
- Göckede, M., C. Thomas, T. Markkanen, M. Mauder, J. Ruppert, T. Foken, 2007:** Sensitivity of Lagrangian Stochastic footprints to turbulence statistics. *Tellus*, **59B**, 577–586.
- Gorska, M., J. Vilà-Guerau de Arellano, M. LeMone, C. C. van Heerwaarden, 2008:** Mean and flux horizontal variability of virtual potential temperature, moisture, and carbon dioxide: Aircraft observations and LES study. *Mon. Wea. Rev.*, **136**, 4435–4451.
- Grabon, J., K. Davis, C. Kiemle, G. Ehret, 2009:** Airborne lidar observations of the transition zone between the convective boundary layer and free atmosphere during the international H2O Project(IHOP) in 2002. *Boundary-Layer Meteorol.*, **134**, 61–83.
- Gryschka, M., 2010:** *Untersuchungen zur Entwicklung von Rollenkonvektion in Kaltluftausbrüchen mittels Grobstruktursimulationen*. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 104 S.
- Halldin, S., L. Gottschalk, A. A. van de Griend, S. E. Gryning, M. Heikinheimo, U. Hogstrom, A. Jochum, L. C. Lundin, 1998:** NOPEX—a northern hemisphere climate process land surface experiment. *J. Hydrol.*, **212**, 172–187.
- Högström, U., 1988:** Non-dimensional wind and temperature profiles in the atmospheric surface layer: a reevaluation. *Boundary-Layer Meteorol.*, **42**, 55–78.
- Horst, T. W., J. C. Weil, 1992:** Footprint estimation for scalar flux measurements in the atmospheric surface layer. *Boundary Layer Meteorol.*, **59**, 279–296.
- Hsieh, C., G. Katul, T. Chi, 2000:** An approximate analytical model for footprint estimation of scalar fluxes in thermally stratified atmospheric flows. *Adv. Water Resour.*, **23**, 765–772.

- Hutjes, R. W. A., U. S. Vellinga, B. Gioli, F. Miglietta, 2010:** Dis-aggregation of airborne flux measurements using footprint analysis. *Agric. For. Meteorol.*, **150**, 966–983.
- Kang, S. L., K. Davis, M. LeMone, 2007:** Observations of the ABL structures over a heterogeneous land surface during IHOP_2002. *J. Hydrometeorol.*, **8**, 221–244.
- Kim, S., S. Park, C. H. Moeng, 2003:** Entrainment processes in the convective boundary layer with varying wind shear. *Boundary-Layer Meteorol.*, **108**, 221–245.
- Klemp, J. B., D. K. Lilly, 1978:** Numerical simulation of hydrostatic mountain waves. *J. Atmos. Sci.*, **35**, 78–107.
- Kljun, N., M. W. Rotach, H. P. Schmid, 2002:** A three-dimensional backward Lagrangian footprint model for a wide range of boundary-layer stratifications. *Boundary-Layer Meteorol.*, **103**, 205–226.
- Kljun, N., R. Kormann, M. W. Rotach, F. X. Meixner, 2003:** Comparison of the Lagrangian footprint model LPDM-B with an analytical footprint model. *Boundary-Layer Meteorol.*, **106**, 349–355.
- Kljun, N., P. Kastner-Klein, E. Fedorovic, M. W. Rotach, 2004:** Evaluation of Lagrangian footprint model using data from wind tunnel convective boundary layer. *Agric. For. Meteorol.*, **127**, 189–201.
- Kljun, N., P. Calanca, M. W. Rotach, H. P. Schmid, 2004:** A simple parameterisation for flux footprint predictions. *Boundary-Layer Meteorol.*, **112**, 503–523.
- Kormann, R., F. X. Meixner, 2001:** An analytical footprint model for non-neutral stratification. *Boundary Layer Meteorol.*, **99**, 207–224.
- Kraus, H., 2008:** *Grundlagen der Grenzschicht-Meteorologie*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1. Aufl., 214 S.
- Kravchenko, A. G., P. Moin 1996:** On the effect of numerical errors in Large Eddy Simulations of turbulent flows. *J. Comput. Phys.*, **131**, 310–322.
- Kurbanmuradov, O., Ü. Rannik, K. K. Sabelfeld, T. Vesala, 2001:** Evaluation of mean concentration and fluxes in turbulent flows by Lagrangian stochastic models. *Math. Comp. Simul.*, **54**, 459–476.
- Lamb, R. G., 1978:** Footprint prediction of scalar fluxes using a markovian analysis. *Boundary-Layer Meteorol.*, **12**, 1297–1304.
- Leclerc, M. Y., S. H. Shen, B. Lamb, 1997:** Observations and large-eddy simulation modeling of footprints in the lower convective boundary layer. *J. Geophys. Res.*, **102**, 9323–9334.
- Leclerc, M. Y., A. Karipot, T. Prabha, G. Allwine, B. Lamb, H. L. Gholz, 2003:** Impact of non-local advection on flux footprints over a tall forest canopy: a tracer flux experiment. *Agric. Forest. Meteorol.*, **115**, 19–30.
- Leclerc, M. Y., N. Meskhidze, D. Finn, 2003:** Comparison between measured tracer fluxes and footprint model predictions over a homogeneous canopy of intermediate roughness. *Agric. Forest. Meteorol.*, **117**, 145–158.
- Lenschow, D. H., J. Mann, L. Kristensen, 1994:** How long is long enough when measuring fluxes and other turbulence statistics. *J. Atmos. Oceanic. Technol.*, **11**, 661–673.
- Lenschow, D. H., P. Krummel, S. Siems, 1999:** Measuring entrainment, divergence, and vorticity on the mesoscale from aircraft. *J. Atmos. Ocean. Technol.*, **16**, 1384–1400.

- Lenschow, D. H., B. B. Stankov, 1986:** Length scales in the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **43**, 1198–1209.
- Lilly, D. K., 2002:** Entrainment into mixed layers. Part I: Sharp-edged and smoothed tops. *J. Atmos. Sci.*, **59**, 3340–3352.
- Lohou, F., A. Druilhet, B. Campistron, 1998:** Spatial and temporal characteristics of horizontal rolls and cells in the atmospheric boundary layer based on radar and in situ observations. *Boundary-Layer Meteorol.*, **89**, 407–444.
- Lohou, F., A. Druilhet, B. Campistron, K. Redelspergers, F. Said, 2000:** Numerical study of the impact of coherent structures on vertical transfers in the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **97**, 361–383.
- Lothon, M., F. Couvreux, S. Donier, F. Guichard, P. Lacarrere, D. H. Lenschow, J. Noilhan, F. Said, 2007:** Impact of coherent eddies on airborne measurements of vertical turbulent fluxes. *Boundary-Layer Meteorol.*, **124**, 425–447.
- Lothon M., D. H. Lenschow, S. D. Mayor, 2009:** Doppler lidar measurements of vertical velocity spectra in the convective planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **132**, 205–226.
- Lumley, L., H. Panofsky, 1964:** *The structure of atmospheric turbulence*. John Wiley & Sons, New York, 299 S.
- Lyons, T., S. Halldin, 2004:** Surface heterogeneity und the spatial variation of fluxes. *Agric. For. Meteorol.*, **121**, 153–165.
- Mahrt, L., 1998:** Flux sampling errors for aircraft and towers. *J. Atmos. Oceanic. Technol.*, **15**, 416–429.
- Mahrt, L., 2000:** Surface heterogeneity and vertical structure of the boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **96**, 33–62.
- Manrique-Sunen, A., A. Nordbo, G. Balsamo, A. Beljaars und I. Mammarella, 2013:** Representing land surface heterogeneity: offline analysis of the tiling method. *J. Hydrometeorol.*, **14**, 850–867.
- Markkanen, T., G. Steinfeld, N. Kljun, S. Raasch, T. Foken, 2009:** Comparison of conventional Lagrangian stochastic footprint models against LES driven footprint estimates. *Atmos. Chem. Phys.*, **9**, 5575–5586.
- Markkanen, T., G. Steinfeld, N. Kljun, S. Raasch, T. Foken, 2010:** A numerical case study on footprint model performance under inhomogeneous flow conditions. *Meteorol. Z.*, **19**, 539–547.
- Maronga, B., S. Raasch, 2013:** Large-eddy simulations of surface heterogeneity effects on the convective boundary layer during the LITFASS-2003 experiment. *Boundary-Layer Meteorol.*, **146**, 17–44.
- Mauder, M., C. Liebenthal, M. Göckede, J. P. Leps, F. Beyrich, T. Foken, 2006** Processing and Quality Control of Flux Data During LITFASS-2003. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 67–88.
- Meijninger, W. M. L., O. K. Hartogensis, W. Kohsiek, K. Hoedjes, R. Zuurbier, H. A. R. de Bruin, 2002:** Determination of area-averaged sensible heat fluxes with a large aperture scintillometer over a heterogeneous surface - Flevoland field experiment. *Boundary-Layer Meteorol.*, **105**, 37–62.
- Meijninger, W. M. L., F. Beyrich, A. Lüdi, W. Kohsiek, H. A. R. De Bruin, 2006:** Scintillometer-based turbulent fluxes of sensible and latent heat over a heterogeneous land surface - A contribution to LITFASS-2003. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**, 89–110.

- Metzger, S., W. Junkermann, M. Mauder, K. Butterbach-Bahl, B. T. Y. Widemann, F. Neidl, K. Schafer, S. Wieneke, X. H. Zheng, H. P. Schmid, T. Foken, 2013: Spatially explicit regionalization of airborne flux measurements using environmental response functions. *Biogeosciences*, **10**, 2193–2217.
- Molod, A., H. Salmun, D. W. Waugh, 2003: A new look at modeling surface heterogeneity: Extending its influence in the vertical. *J. Hydrometeor.*, **4**, 810–825.
- Monin, A. S., A. M. Obukhov, 1954: Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground. *Trudy Academia Nauka SSR.*, **24**, 1963–1987.
- Otte, M. J., J. C. Wyngaard, 2001: Stably stratified interfacial-layer turbulence from Large-eddy simulation. *J. Atmos. Sci.*, **58**, 3424–3442.
- Ouwersloot, H. G., J. Vilà-Guerau de Arellano, C. C. van Heerwaarden, L. N. Ganzeveld, M. C. Krol, J. Lelieveld, 2011: On the segregation of chemical species in a clear boundary layer over heterogeneous land surfaces. *Atmos. Chem. Phys.*, **11**, 10681–10704.
- Panofsky, H. A., J. A. Dutton, 1984: *Atmospheric Turbulence, Models and Methods for Engineering Applications*. John Wiley & Sons, New York, 397 S.
- Pasquill, F., F. B. Smith, 1983: *Atmospheric Diffusion*. Wiley, New York, 3. Aufl., 437 S.
- Patrinos, A. A. N., A. L. Kistler, 1977: A numerical study of the Chicago lake breeze. *Boundary-Layer Meteorol.*, **12**, 93–123.
- Patton, E. G., P. P. Sullivan, C. H. Moeng, 2005: The influence of idealized heterogeneity on wet and dry planetary boundary layers coupled to the land surface. *J. Atmos. Sci.*, **62**, 2078–2097.
- Pielke, R. A., 2002: *Mesoscale meteorological modeling*. Academic Press, San Diego, 2. Aufl., 676 S.
- Pino, D., J. Vilà-Guerau de Arellano, P. G. Duynkerke, 2003: The contribution of shear to the evolution of a convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **60**, 1913–1926.
- Prabha, T. V., M. Y. Leclerc, D. Baldocchi, 2008: Comparison of in-canopy flux footprints between large-eddy simulation and the Lagrangian simulation. *J. Appl. Meteorol. Climatol.*, **8**, 2115–2128.
- Raasch, S., D. Etling, 1998: Modeling deep ocean convection: Large eddy simulation in comparison with laboratory experiments. *J. Phys. Oceano.*, **28**, 1786–1802.
- Raasch, S., G. Harbusch, 2001: An analysis of secondary circulations and their effects caused by small-scale surface inhomogeneities using large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, **101**, 31–59.
- Raasch, S., M. Schröter, 2001: PALM – A large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol. Z.*, **10**, 363–372.
- Rannik, Ü., M. Aubinet, O. Kurbanmuradov, K. K. Sabelfeld, T. Markkanen, T. Vesala, 2000: Footprint analysis for measurements over heterogeneous forest. *Boundary-Layer Meteorol.*, **97**, 137–166.
- Raupach, M. R., J. J. Finnigan, 1995: Scale issues in boundary-layer meteorology: surface energy balances in heterogeneous terrain. *Hydrol. Proc.*, **9**, 589–612.
- Riechelmann, T., Y. Noh, S. Raasch, 2012: A new method for large-eddy simulations of clouds with Lagrangian droplets including the effects of turbulent collision. *New. J. Phys.*, **14**, doi: 10.1088/1367-2630/14/6/065008.

- Roache, P. J., 1985:** *Computational fluid dynamics*. Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexiko, 6. Aufl., 446 S.
- Rodean, H. C., 1996:** *Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion*. Meteor. Monogr., Nr. 48, Amer. Meteor. Soc., 84 S.
- Rotach, M. W., S. E. Gryning, C. Tassone, 1996:** A two-dimensional Lagrangian stochastic dispersion model for daytime conditions. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **122**, 367–389.
- Schmid, H. P., T. R. Oke, 1990:** A model to estimate the source area contributing to turbulent exchange in the surface layer over patchy terrain. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **116**, 965–988.
- Schmid, H. P., 2002:** Footprint modeling for vegetation atmosphere exchange studies: a review and perspective. *Agric. For. Meteorol.*, **113**, 159–183.
- Schröter, M., J. Bange, S. Raasch, 2000:** Simulated airborne flux measurements in a LES generated convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **95**, 437–456.
- Schumann U., 1975:** Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. *J. Comput. Sci.*, **18**, 376–404.
- Schumann U., R. A. Sweet, 1988:** Fast Fourier Transforms for direct solution of Poisson's equation with staggered boundary conditions. *J. Comput. Sci.*, **75**, 123–137.
- Sengupta, T. K., M. T. Nair, 1999:** Upwind schemes and Large Eddy Simulation. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **31**, 879–889.
- Shen, S., M. Y. Leclerc, 1995:** How large must surface inhomogeneities be before they influence the convective boundary layer structure? A case study. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **121**, 1209–1228.
- Smagorinsky, J., 1963:** General circulation experiments with the primitive equation. Part 1: The basic experiment. *Mon. Wea. Rev.*, **91**, 99–164.
- Steinfeld, G., S. Raasch, T. Markkanen, 2008:** Footprints in homogeneously and heterogeneously driven boundary layers derived from a lagrangian stochastic particle model embedded into large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, **129**, 225–248.
- Steinfeld, G., 2009:** *Die Beurteilung von Turbulenzmess- und Analyseverfahren der Mikrometeorologie durch virtuelle Messungen innerhalb von Grobstruktursimulationen*. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 96 S.
- Strunin, M., T. Hiyama, J. Asanuma, T. Ohata, 2004:** Aircraft observations of the development of thermal internal boundary layers and scaling of the convective boundary layer over non-homogeneous land surfaces. *Boundary-Layer Meteorol.*, **111**, 491–522.
- Stull, R. B., 1976:** The energetics of entrainment across a density interface. *J. Atmos. Sci.*, **33**, 1260–1267.
- Stull, R. B., 1988:** *An introduction to boundary layer meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1. Aufl., 666 S.
- Sullivan, P. P., C. H. Moeng, B. Stevens, D. H. Lenschow, S. Mayor, 1998:** Structure of the entrainment zone capping the convective atmospheric boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **55**, 3042–3064.
- Sühring, M., 2010:** *Entwicklung und Optimierung numerischer Verfahren höherer Ordnung und ihre Implementierung im LES-Modell PALM*. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 72 S.

- Thomson, D. J., 1987:** Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *J. Fluid. Mech.*, **180**, 529–556.
- Träumner, K., C. Kottmeier, U. Corsmeier, A. Wieser, 2011:** Convective boundary-layer entrainment: short review and progress using doppler lidar. *Boundary-Layer Meteorol.*, **141**, 369–391.
- Uhlenbrock, J., 2006:** *Numerische Untersuchung der konvektiven Grenzschicht über realen heterogenen Landoberflächen mit einem Grobstruktursimulationsmodell*. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, 168 S.
- van de Boer, A., A. F. Moene, D. Schüttemeyer, A. Graf, 2013:** Sensitivity and uncertainty of analytical footprint models according to a combined natural tracer and ensemble approach. *Agric. For. Meteorol.*, **169**, 1–11.
- van Heerwaarden, C. C., J. Vilà-Guerau de Arellano, 2008:** Relative humidity as an indicator for cloud formation over heterogeneous land surfaces. *J. Atmos. Sci.*, **65**, 3263–3277.
- van Heerwaarden, C. C., J. Vilà-Guerau de Arellano, A. F. Moene, A. A. M. Holtslag, 2009:** Interactions between dry-air entrainment, surface evaporation and convective boundary-layer development. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **135**, 1277–1291.
- van Zanten, M. C. , P. G. Duynkerke, J. W. M. Cuijpers, 1999:** Entrainment parameterization in convective boundary layers. *J. Atmos. Sci.*, **56**, 813–828.
- Vesala, T., N. Kljun, Ü. Rannik, J. Rinne, A. Sogachev, T. Markkanen, K. Sabelfeld, T. Foken, M. Y. Leclerc, 2008:** Flux and concentration footprint modelling: State of the art. *Environ. Pollut.*, **152**, 653–666.
- Wang, W., M. W. Rotach, 2010:** Flux footprints over an undulating surface. *Boundary-Layer Meteorol.*, **136**, 325–340.
- Wang, C., W. Tian, D. Parker, J. Marsham, Z. Guo, 2011:** Properties of a simulated convective boundary layer over inhomogeneous vegetation. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **137**, 99–117.
- Weckwerth, T. M., D. B. Parsons, et. al., 2004:** An Overview of the International H2O Project (IHOP_2002) and Some Preliminary Highlights. *Bull. Am. Meteorol. Soc.*, **85**, 253–277.
- Weil, J. C., P. P. Sullivan, C. H. Moeng, 2004:** The use of large-eddy simulations in Lagrangian particle dispersion models. *J. Atmos. Sci.*, **61**, 2877–2887.
- Wicker, L. J., W. C. Skamarock, 2002:** Time-splitting methods for elastic models using forward time schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **130**, 2088–2097.
- Williamson, J. H., 1980:** Low-storage Runge-Kutta schemes. *J. Comput. Phys.*, **35**, 48–56.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: Matthias Sühning
Geburtstag: 2. Mai 1984
Geburtsort: Wernigerode

Wissenschaftlicher Werdegang

11/2009-10/2010: Wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover

11/2010-12/2013: Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover im DFG Projekt RA 617/21-1: *ELSH - Analysis of the relative importance of terrain heterogeneity, heterogeneous land use and heterogeneous forcing on the ABL structure using LES*

01/2014-06/2014: Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover im BMBF Projekt HD(CP)²: *High definition clouds and precipitation for climate prediction*

seit 07/2014: Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover

Studium

seit 11/2010: Promotionsstudium an der Leibniz Universität Hannover

10/2005-10/2010: Studium der Meteorologie an der Leibniz Universität Hannover
Diplomarbeit: *Entwicklung und Optimierung numerischer Verfahren höherer Ordnung und ihre Implementierung im LES-Modell PALM*
Abschluss: mit Auszeichnung

10/2004-08/2005: Studium des Wirtschaftsingenieurwesens an der Hochschule Harz

18. August 2014

Veröffentlichungen

Begutachtete Artikel

Sühning, M., B. Maronga, F. Herbort, S. Raasch, 2014: On the effect of surface heat-flux heterogeneities on the mixed-layer-top entrainment. *Boundary-Layer Meteorol.*, **151**, 531–556, doi: 10.1007/s10546-014-9913-7.

Sühning, M., S. Raasch, 2013: Heterogeneity-induced heat-flux patterns in the convective boundary layer: can they be detected from observations and is there a blending height? – A large-eddy simulation study for the LITFASS-2003 experiment. *Boundary-Layer Meteorol.*, **148**, 309–331, doi: 10.1007/s10546-013-9822-1.

Konferenzbeiträge

Sühning, M., B. Maronga, F. Herbort, S. Raasch, 2013: Der Einfluss von Oberflächenheterogenitäten auf das Entrainment am Oberrand der konvektiven Grenzschicht. *DACH Meteorologentagung 2013*, Innsbruck, Österreich

Sühning, M., S. Raasch, 2012: Numerical study on the mixing state of the convective boundary layer above heterogeneous surfaces and its measurability. *1st pan-GASS Workshop*, Boulder (CO), USA

Herbort, F., B. Maronga, M. Sühning, S. Raasch, 2012: The effect of surface heatflux heterogeneities on the mixed-layer top entrainment. *20th AMS Symposium on Boundary Layers and Turbulence*, Boston (MA), USA

Drüke, S., M. Sühning, B. Maronga, S. Raasch, 2012: The Effect of cloud shadows on coherent structures and secondary circulations in the convective boundary layer over homogeneous and heterogeneous terrain. *20th AMS Symposium on Boundary Layers and Turbulence*, Boston (MA), USA

Sühning, M., S. Raasch, 2012: Virtual flight measurements regarding the mixing state of the convective boundary layer during LITFASS-2003. An LES study. *20th AMS Symposium on Boundary Layers and Turbulence*, Boston (MA), USA