

(Print) ISSN 1439–8222

(Internet) ISSN 1439–8303

Nummer/*Number* 2

Auflage/*Edition* 1

Berichte zur Umweltphysik

Reports on Environmental Physics

Vorschlag eines meteorologischen Grenzschichtmodells
für Lagrangesche Ausbreitungsmodelle

*A meteorological boundary layer model for Lagrangian
dispersion models*

Lutz Janicke, Ulf Janicke

Oktober/*October* 2000



Ingenieurbüro Janicke, Alter Postweg 21, 26427 Dunum, Germany

Autoren/*Authors* :

Dr. Lutz Janicke
Dr. Ulf Janicke
Ing.-Büro Janicke
Alter Postweg 21
D - 26427 Dunum
(eMail: lj@janicke.de)

Berichte zur Umweltphysik (Print), ISSN 1439–8222

Berichte zur Umweltphysik (Internet), ISSN 1439–8303

Herausgeber:

Ingenieurbüro Janicke
Alter Postweg 21, 26427 Dunum
Deutschland
Internet: www.janicke.de

Die Berichte dieser Schriftenreihe erscheinen in unregelmäßigen Zeitabständen. Sie werden im Selbstverlag gedruckt und außerdem auf der Internet-Seite www.janicke.de in Form von Pdf-Dateien kostenlos zur Verfügung gestellt. Alle Rechte sind dem Herausgeber vorbehalten.

Publisher:

Janicke Consulting
Alter Postweg 21, 26427 Dunum
Germany
Internet: www.janicke.de

The reports of this series are published at irregular time intervals and are printed by the publisher. In addition, the reports are made available free of charge in the Internet on page www.janicke.de in form of pdf files. All rights are reserved to the publisher.



Vorschlag eines meteorologischen Grenzschichtmodells für Lagrangesche Ausbreitungsmodelle

Lutz Janicke, Ulf Janicke

Oktober 2000

Zusammenfassung:

Auf der Basis einer ausführlichen Literaturrecherche wird ein meteorologisches Grenzschichtmodell bestimmt, welches im Rahmen von Ausbreitungsrechnungen mit Lagrange-Modellen verwendet werden kann. Das Modell wird anhand von Experimenten validiert.



1 Einleitung

In diesem Bericht wird eine Übersicht über gebräuchliche Grenzschichtprofile gegeben und anhand verschiedener Randbedingungen ein für eine Lagrange-Rechnung geeigneter Profilanatz aufgestellt. Ein besonderes Augenmerk wurde hierbei auf die Vertikalprofile der Windgeschwindigkeits-Fluktuationen und des Diffusionskoeffizienten gelegt. Die vorgeschlagenen Profilanätze erscheinen im Text eingerahmt.

Zur Validierung, also der Prüfung der Vorhersagegenauigkeit bei realen Anwendungen, wurde das Grenzschichtmodell in ein Dispersionsmodell eingebaut und es wurden Vergleichsrechnungen mit experimentellen Konzentrationsmessungen (*Prairie-Gras-Experimente*, Messungen am Kernforschungszentrum Karlsruhe und Windkanal-Messungen) durchgeführt.

Ein Grenzschichtmodell macht Aussagen über das Transportverhalten der Atmosphäre, ein Dispersionsmodell berechnet entsprechend diesen Vorgaben die Ausbreitung von freigesetzten Stoffen. Wenn nachgewiesen ist, daß das Dispersionsmodell die Vorgaben des Grenzschichtmodells eindeutig und korrekt umsetzt, dann hängt der Erfolg beim Nachrechnen von Ausbreitungsexperimenten allein vom Grenzschichtmodell ab. Diese Darstellung ist allerdings insofern etwas idealisiert, als dem Meteorologiemodell ja auch schon Modellvorstellungen über den Mechanismus des Transportes zu Grunde liegen, z.B. daß Flüsse proportional zu Gradienten sind. Je nach Modellkonzept wird das Dispersionsmodell unterschiedlich gut in der Lage sein, diese Vorstellungen umzusetzen. Daher ist zu erwarten, daß ein anderer Modelltyp auch zu einem anderen Ergebnis führen kann, selbst wenn auf dem gleichen Meteorologiemodell aufgesetzt wird.

Als Dispersionsmodell wurde ein Lagrangesches Partikelmodell gemäß VDI-3945/3 (Programm *IBJparticle*) verwendet, das anhand verschiedener Tests verifiziert worden ist (VDI-3945/3, Anhang D).

2 Die Grenzschichtprofile

Eine ebene atmosphärische Grenzschicht wird üblicherweise durch folgende Profile beschrieben:

Windgeschwindigkeit	$u(z)$
Fluktuationen der Windgeschwindigkeit	$\sigma_{u,v,w}(z)$ bzw. $\sigma_{\vartheta,\varphi}(z)$
Diffusionskoeffizienten	$K_{u,v,w}(z)$
potentielle bzw. fühlbare Temperatur	$\Theta(z)$ bzw. $T(z)$

Von einer Drehung der Windrichtung mit der Höhe z wird hier abgesehen. Die aufgeführten Funktionen werden in der Regel in Abhängigkeit von folgenden Parametern dargestellt:

Rauhigkeitslänge	z_0
Monin-Obukhov-Länge	L_M
Schubspannungsgeschwindigkeit	u_*
Mischungsschichthöhe	h_m



Eine weiterer wichtiger Parameter ist die konvektive Geschwindigkeitsskala,

$$w_* = \begin{cases} u_* \left(\frac{-h_m}{\kappa L_M} \right)^{1/3} & L_M < 0 \\ 0 & L_M \geq 0 \end{cases} . \quad (1)$$

Die Mischungsschichthöhe wird hier bei labiler Schichtung als vorgegeben angenommen. Ist sie nicht vorgegeben, wird ein Wert von 1100 m angesetzt. Dieser Wert ist sicher in den meisten Fällen zu gering und hat in der Regel zur Folge, daß hiermit durchgeführte Ausbreitungsrechnungen die bodennahe Konzentration eher über- als unterschätzen.

Für indifferente und stabile Schichtung wird entsprechend SEINFELD¹ folgender Ansatz gemacht:

$$h_m = \begin{cases} \alpha \frac{u_*}{f_c} & \text{für } |L_M| > u_*/f_c \quad (\text{indifferent}) \\ \alpha \frac{u_*}{f_c} \left(\frac{f_c L_M}{u_*} \right)^{1/2} & \text{für } 0 < L_M \leq u_*/f_c \quad (\text{stabil}) \end{cases} \quad (2)$$

mit dem Coriolis-Parameter $f_c = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Für den Faktor α werden in der Literatur unterschiedliche Werte angegeben (typischerweise zwischen 0.2 und 0.7). Im folgenden wird $\alpha = 0.3$ gesetzt.

Wenn keine Verdrängungshöhe d_0 (*zero plane displacement*) angegeben ist, ist der Nullpunkt des Windprofils bei $z = 0$, also $u(0) = 0$. Bei Angabe einer Verdrängungshöhe d_0 werden modifizierte Profile $\tilde{u}(z)$, $\tilde{\sigma}_{u,v,w}(z)$, $\tilde{K}_{u,v,w}(z)$ und $\tilde{\Theta}(z)$ verwendet:

$$\tilde{u}(z) = \begin{cases} \frac{z}{2d_0} u(d_0) & \text{für } z \leq 2d_0 \\ u(z - d_0) & \text{für } z > 2d_0 \end{cases} \quad (3)$$

$$\tilde{\sigma}_{u,v,w}(z) = \begin{cases} \sigma_{u,v,w}(0.5z) & \text{für } z \leq 2d_0 \\ \sigma_{u,v,w}(z - d_0) & \text{für } z > 2d_0 \end{cases} \quad (4)$$

$$\tilde{\Theta}(z) = \begin{cases} \Theta(0.5z) & \text{für } z \leq 2d_0 \\ \Theta(z - d_0) & \text{für } z > 2d_0 \end{cases} \quad (5)$$

$$\tilde{K}_{u,v,w}(z) = \begin{cases} K_{u,v,w}(0.5z) & \text{für } z \leq 2d_0 \\ K_{u,v,w}(z - d_0) & \text{für } z > 2d_0 \end{cases} \quad (6)$$

¹ SEINFELD, J.H.: *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. Wiley & Sons, New York, 1986.



Dies ist nur ein Notbehelf. Eigentlich müßte eine separate Modellierung innerhalb der Vegetationszone aufgestellt und an die Standardprofile oberhalb der Vegetation angepaßt werden.

2.1 Die Windgeschwindigkeit

Für das Windgeschwindigkeitsprofil wird bei labiler Schichtung der übliche Ansatz gemacht. Bei stabiler Schichtung wird eine auf HICKS² zurückgehende Modifizierung verwendet, die oberhalb der Prandtl-Schicht realistischere Werte liefert.

$$u(z) = \begin{cases} \frac{u_*}{\kappa} \Psi_0(\zeta) & \text{für } L_M > 0 \\ \frac{u_*}{\kappa} [\ln(\zeta/\zeta_0) - \Psi_1(\zeta)] & \text{für } L_M < 0 \end{cases} \quad (7)$$

$$\zeta(z) = \frac{z + z_0}{L_M} \quad (8)$$

$$\zeta_0 = \frac{z_0}{L_M} \quad (9)$$

$$\Psi_0(\zeta) = \begin{cases} \ln(\zeta/\zeta_0) + 5\zeta + X_1 & \text{für } \zeta < 0.5 \\ 8 \ln \zeta + 4.25/\zeta - 0.5/\zeta^2 + X_2 & \text{für } 0.5 \leq \zeta \leq 10 \\ 0.7585\zeta + X_3 & \text{für } \zeta > 10 \end{cases} \quad (10)$$

$$X_1 = -5\zeta_0,$$

$$X_2 = 7 \ln 2 - \ln \zeta_0 - 5\zeta_0 - 4$$

$$X_3 = 8 \ln 20 - 11.165 - \ln 2 - \ln \zeta_0 - 5\zeta_0$$

$$\Psi_1(\zeta) = \ln \left[\left(\frac{1+X}{1+X_0} \right)^2 \frac{1+X^2}{1+X_0^2} \right] - 2 (\arctan X - \arctan X_0) \quad (11)$$

$$X = (1 - 15\zeta)^{1/4}$$

$$X_0 = (1 - 15\zeta_0)^{1/4}$$

Hierbei ist κ die von-Kármán-Konstante.

2.2 Die Fluktuationen der Windgeschwindigkeit

Für σ_v und σ_w existieren eine ganze Reihe von Ansätzen, wobei meist Fallunterscheidungen zwischen indifferenter ($\mathcal{I} : L_M = \infty$), labiler ($\mathcal{L} : L_M < 0$) und stabiler ($\mathcal{S} : L_M > 0$) Schichtung getroffen werden. Einige sind:

² HICKS, B.B. (1976): Wind profile relationships from the Wangara experiments. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.* **102**, 535-551.

HANNA³:

$$\mathcal{I} : \sigma_v^{\text{Han}} = \sigma_w^{\text{Han}} = 1.3u_* \exp(-2zf_c/u_*) \quad (12)$$

$$\mathcal{L} : \sigma_v^{\text{Han}} = u_* \left(12 - 0.5 \frac{h_m}{L_M}\right)^{1/3} \quad (13)$$

$$\sigma_w^{\text{Han}} = \begin{cases} 0.96w_* \left(\frac{3z - L_M}{h_m}\right)^{1/3}, & \frac{z}{h_m} \leq 0.03 \\ \min \left[0.96w_* \left(\frac{3z - L_M}{h_m}\right)^{1/3}, 0.763w_* \left(\frac{z}{h_m}\right)^{0.175} \right], & 0.03 < \frac{z}{h_m} \leq 0.4 \\ 0.722w_* \left(1 - \frac{z}{h_m}\right)^{0.207}, & 0.4 < \frac{z}{h_m} \leq 0.96 \\ 0.37w_*, & 0.96 < \frac{z}{h_m} \leq 1 \end{cases} \quad (14)$$

$$w_* = u_* \left(\frac{-h_m}{\kappa L_M}\right)^{1/3} \quad (15)$$

$$\mathcal{S} : \sigma_v^{\text{Han}} = \sigma_w^{\text{Han}} = 1.3u_* \left(1 - \frac{z}{h_m}\right) \quad (16)$$

GRYNING ET AL.⁴:

$$\mathcal{L} : \sigma_v^{\text{GHIS}} = [u_*^2(2 - z/h_m) + 0.35w_*^2]^{1/2} \quad (17)$$

$$\sigma_w^{\text{GHIS}} = u_* \left[(1.7 - z/h_m) + 1.5 \left(\frac{-z}{\kappa L_M}\right)^{2/3} \exp(-2z/h_m) \right]^{1/2} \quad (18)$$

$$\mathcal{S} : \sigma_v^{\text{GHIS}} = u_* [2(1 - z/h_m)]^{1/2} \quad (19)$$

$$\sigma_w^{\text{GHIS}} = u_* [1.7(1 - z/h_m)^{3/2}]^{1/2} \quad (20)$$

HOLTSLAG ET AL.⁵:

$$\mathcal{L} : \sigma_w^{\text{HM}} = u_* \left[[1.6(1 - z/h_m)]^{3/2} + 1.2 \left(\frac{-z}{\kappa L_M}\right) (1 - 0.9z/h_m)^{3/2} \right]^{1/3} \quad (21)$$

³ HANNA, S.R. (1982): Applications in air pollution modeling. In: *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling* (Eds. F.T.M. Nieuwstadt und H. van Dop), Reidel, Boston.

⁴ GRYNING, S.-E., HOLTSLAG, A.A.M., IRWIN, J.S., SIVERTSEN, B. (1987): Applied dispersion modeling based on meteorological scaling parameters. *Atmospheric Environment* **21**, 79-89.

⁵ HOLTSLAG, A.A.M., MOENG, C.H. (1991): Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective atmospheric boundary layer. *J. Atmos. Sci.* **48**, 1690-1698.



PAUMIER ET AL.⁶:

$$\mathcal{L} : \sigma_v^{\text{Pau}} = \left[0.38w_*^2 + 2.7u_*^2 \frac{(1 - z/h_m)^2}{(1 + 2.8z/h_m)^{2/3}} \right]^{1/2} \quad (22)$$

$$\sigma_w^{\text{Pau}} = \left[1.54w_*^2 \left(\frac{z}{h_m} \right)^{2/3} \exp(-2z/h_m) + 1.457u_*^2(1 - z/h_m)^2 \right]^{1/2} \quad (23)$$

$$\mathcal{S} : \sigma_v^{\text{Pau}} = 1.643u_* \frac{1 - z/h_m}{(1 + 2.8z/h_m)^{1/3}} \quad (24)$$

$$\sigma_w^{\text{Pau}} = 1.207u_*(1 - z/h_m) \quad (25)$$

PANOFSKY ET AL.⁷:

$$\mathcal{L} : \sigma_v^{\text{Pan}} = u_* \left(12 - 0.5 \frac{h_m}{L_M} \right)^{1/3} \quad (26)$$

$$\sigma_w^{\text{Pan}} = 1.25u_* \left(1 - 3 \frac{z}{L_M} \right)^{1/3} \quad (27)$$

IRWIN⁸:

$$\mathcal{L} : \sigma_v^{\text{Irw}} = 1.78u_* \left[1 + 0.059 \left(\frac{-z}{L_M} \right) \right]^{1/3} \quad (28)$$

$$\mathcal{S} : \sigma_v^{\text{Irw}} = 1.78u_* \quad (29)$$

BINKOWSKI⁹:

$$\mathcal{S} : \sigma_w^{\text{Bin}} = u_* \left(\frac{1 + 3.7z/L_M}{3\kappa f_m} \right)^{1/3} \quad (30)$$

$$f_m = \begin{cases} 0.4 \left[1 + 3.9 \frac{z}{L_M} - 0.25 \left(\frac{z}{L_M} \right)^2 \right] & \text{für } z/L_M \leq 2 \\ 0.4 \left[6.78 + 2.39 \left(\frac{z}{L_M} - 2 \right) \right] & \text{für } z/L_M > 2 \end{cases}$$

⁶ PAUMIER, J., STINSON, D., KELLY, T., BOLLINGER, C., IRWIN, J.S. (1986): MPDA-1.1: A Meteorological processor for diffusion analysis. *EPA/600/8-86/011*, EPA, Research Triangle Park, NC.

⁷ PANOFSKY, H.A., TENNEKES, H., LENSCHOW, D.H., WYNGAARD, J.C. (1977): The characteristics of turbulent velocity components in the surface layer under convective conditions. *Boundary Layer Meteorology* **11**, 355-361.

⁸ IRWIN, J.S. (1979): Scheme for estimating dispersion parameters as a function of the release height. EPA-600/4-79-062. U.S. Environmental Protection Agency. Washington D.C..

⁹ BINKOWSKI, F.S. (1979): Simple semi-empirical theory for the turbulence in the atmospheric surface layer. *Atmospheric Environment* **13**, 247-253.



Ein neuerer Ansatz findet sich in der Arbeit von DEGRAZIA ET AL.¹⁰:

$$\mathcal{L} : \sigma_w^{\text{Deg}} = 0.65w_*f(z), \quad f(z) = (1 - e^{-4z/h_m} - 0.0003e^{8z/h_m})^{1/3} \quad (31)$$

$$\approx 1.4u_* \left(\frac{-z}{L_M} \right)^{1/3} \quad \text{für } z \ll h_m \quad (32)$$

$$\mathcal{S} : \sigma_w^{\text{Deg}} = 1.42u_*(1 - z/h_m)^{0.85} \frac{(1 + 3.7z/\Lambda)^{1/3}}{(1 + 15f_c z/u_* + 3.7z/\Lambda)^{1/3}} \quad (33)$$

$$\Lambda = L_M(1 - z/h_m)^{1.25} \quad (34)$$

$$\approx 1.4u_* \left(1 + 3.7 \frac{z}{L_M} \right)^{-1/3} \quad \text{für } z \ll h_m \quad (35)$$

Im Gegensatz zu den anderen Ansätzen fallen hier die Fluktuationen zum Oberrand der Mischungsschicht auf null ab. Bei labiler Schichtung und niedrigen Höhen gibt es wie bei den anderen Autoren eine Abhängigkeit $\propto z^{1/3}$, allerdings nicht explizit sondern über die Entwicklung der Funktion $f(z)$.

Bei den meisten Ansätzen für σ_w bei labiler Schichtung wird ein mechanischer Anteil und ein konvektiver Anteil addiert,

$$\sigma_w = [(u_* A_m)^\nu + (w_* \eta^{1/3} A_c)^\nu]^{1/\nu}, \quad (36)$$

$$\eta = z/h_m, \quad (37)$$

$$w_* = u_* \left(\frac{-h_m}{\kappa L_M} \right)^{1/3}. \quad (38)$$

Autor	A_m	A_c	ν
PANOFSKY	1.25	1.33	3
HANNA	$1.3 \exp(-2\alpha\eta)$	-	-
WILCZAK	-	$1.58\sqrt{1 - 0.91\eta}$	-
GRYNING	$\sqrt{1.7 - \eta}$	$\sqrt{1.5} \exp(-\eta)$	2
HOLTSLAG	$\sqrt{1.6}\sqrt{1 - \eta}$	$1.2^{1/3}\sqrt{1 - 0.9\eta}$	3
PAUMIER	$\sqrt{1.457}(1 - \eta)$	$\sqrt{1.54} \exp(-\eta)$	2
DEGRAZIA	$1.42(1 - \eta)^{0.85}$	1.03 für $z \ll h_m$	2

¹⁰DEGRAZIA, G.A., ANFOSSI, D., CARVALHO, J.C., MANGIA, C., TIRABASSI, T., CAMPOS VELHO, H.F. (2000): Turbulence parametrization for PBL dispersion models in all stability conditions. *Atmospheric Environment* **34**, 3575-3583.



IRWIN UND PAUMIER¹¹ fanden in Vergleichen mit experimentellen Daten bei labiler Schichtung für das von GRYNING ET AL. vorgeschlagene Profil gute Übereinstimmung. Daher wird der Ansatz von GRYNING verwendet, aber der mechanische Anteil mit einem exponentiellen Abfall, um einen besseren Anschluß an die indifferente Schichtung nach HANNA zu bekommen. Außerdem werden die dritten Potenzen addiert, damit die in Lagrange-Modellen benötigte Größe $\partial\sigma_w/\partial z$ in Bodennähe nicht divergiert. Für stabile Schichtung wird auch ein exponentieller Abfall gewählt, und zwar mit der aktuellen Mischungsschichthöhe als Skalierungslänge:

$$\sigma_w(z) = f_w u_* \begin{cases} \mu & \text{für } L_M > 0 \\ \left[\mu^3 + 2.1 \left(\frac{-z}{L_M} \right) \exp \left(\frac{-3z}{h_m} \right) \right]^{1/3} & \text{für } L_M < 0 \end{cases} \quad (39)$$

$$\mu(z) = \exp \left(\frac{-2\alpha z}{h_m} \right) \quad (40)$$

Für σ_u und σ_v wird auch der Ansatz von GRYNING gewählt, aber ebenfalls wieder mit einem exponentiellen Abfall und der Addition der dritten Potenzen. Zusätzlich wird explizit der Mittelungszeitraum \bar{t} berücksichtigt, der vermutlich der Hauptgrund für die unterschiedlichen Faktoren in den einzelnen Ansätzen ist, und σ_v proportional zu $\bar{t}^{0.2}$ angesetzt (siehe Ende von Abschnitt 2.4).

$$\sigma_{u,v}(z) = f_{u,v} A_v u_* \begin{cases} 1 & \text{für } L_M > 0 \\ \left[1 + 0.064 \left(\frac{-h_m}{L_M} \right) \right]^{1/3} & \text{für } L_M < 0 \end{cases} \quad (41)$$

$$A_v = \left(\frac{\bar{t}}{3600 \text{ s}} \right)^{0.2}, \quad \bar{t} \in [600 \text{ s}, 3600 \text{ s}] \quad (42)$$

Die verwendeten Konstanten sind $f_u = 2.5$, $f_v = 2.0$, $f_w = 1.3$.

Eine Höhenabnahme der horizontalen Fluktuationen für stabile Schichtung ist zwar in allen Ansätzen zu finden, läßt sich aber anhand der meteorologischen Daten der KfK-Experimente (siehe weiter unten) nicht verifizieren. Dort nehmen bei sehr stabiler Schichtung die gemessenen horizontalen und vertikalen Fluktuationen sogar zwischen den Höhen 100 m und 160 m zu. Ein Grund hierfür könnten Oszillationen sein, welche zwar in die Meßwerte eingehen, aber keinen Einfluß auf die Dispersion besitzen. Daher wurden die mechanischen Anteile der horizontalen Fluktuationen höhenunabhängig gewählt.

¹¹ IRWIN, J.S., PAUMIER, J.O. (1990): Characterizing the dispersive state of convective boundary layers for applied dispersion modeling. *Boundary Layer Meteorology* **53**, 267-296.



Die Fluktuationen $\sigma_{\varphi, \vartheta}$ ergeben sich schließlich zu

$$\sigma_{\varphi}(z) = \frac{180}{\pi} \frac{\sigma_w(z)}{u(z)}, \quad \sigma_{\vartheta}(z) = \frac{180}{\pi} \frac{\sigma_v(z)}{u(z)}. \quad (43)$$

2.3 Das Temperaturprofil

Das Profil für die potentielle Temperatur wird nach NIEWSTADT¹² angesetzt als

$$\Theta(z) = \Theta_0 + p_n \frac{T_*}{\kappa} [\ln(\zeta/\zeta_0) - \Psi_2(\zeta)] \quad (44)$$

$$T_* = \frac{u_*^2 \bar{T}}{\kappa g L_M} \quad (45)$$

$$\Psi_2(\zeta) = \begin{cases} -p_s(\zeta - \zeta_0) & \text{für } L_M > 0 \\ 2 \ln \left(\frac{1+Y}{1+Y_0} \right) & \text{für } L_M < 0 \end{cases}$$

$$Y(\zeta) = (1 - p_l \zeta)^{1/2}, \quad Y_0 = (1 - p_l \zeta_0)^{1/2}$$

Hierbei bezeichnet Θ_0 die potentielle Temperatur in der Höhe $z = 0$, \bar{T} die mittlere Lufttemperatur der Prandtl-Schicht (alle Temperaturen in Kelvin) und $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ die Erdbeschleunigung. Dieser Ansatz ergibt sich aus der Form der universellen Profilkfunktionen (siehe BUSINGER ET AL.¹³) und gilt streng genommen nur für die Prandtl-Schicht $z/h_m < 0.1$.

Für die Konstanten κ und $p_{n,s,l}$ werden in der Literatur^{14,15} verschiedene Werte angegeben:

Autor	κ	p_n	p_s	p_l
VAN ULDEN	0.35	0.74	6.3	9
SEINFELD	0.40	1.00	4.7	15
HÖGSTRÖM	0.40	1.00	7.8	12

Diese Parameter haben indirekt über die Bestimmung von L_M und u_* anhand der Profile von Θ und u auch Einfluß auf das Profil der Windfluktuationen. Ein Vergleich der Profile der Windfluktuationen mit den KfK-Daten ergab für die Parameter nach SEINFELD

¹² NIEWSTADT, F.T.M. (1978): The computation of the friction velocity u_* and the temperature scale T_* from temperature and wind velocity profiles by least-square methods. *Boundary Layer Meteorology* **14**, 235-246.

¹³ BUSINGER, J.A., WYNGAARD, J.C., IZUMI, Y., BRADLEY, E.F. (1971): Flux profile relationships in the atmospheric surface layer. *J. Atmos. Sci.* **28**, 181-189.

¹⁴ VAN ULDEN, A.P. (1978): Simple estimates for vertical diffusion from sources near the ground. *Atmospheric Environment* **12**, 2125-2129.

¹⁵ HÖGSTRÖM, U. (1988): Non-dimensional wind and temperature profiles in the atmospheric surface layer: a re-evaluation. *Boundary Layer Meteorology* **42**, 55-78.



die beste Übereinstimmung, während die Parameter von HÖGSTRÖM häufig zu niedrige Windfluktuationen ergaben.

Die bisher festgelegten Konstanten sind:

α	0.3
f_c	10^{-4} 1/s
κ	0.40
p_n	1.0
p_s	4.7
p_l	15.0
f_u	2.5
f_v	2.0
f_w	1.3

2.4 Die Diffusionskoeffizienten

Mit der Wahl der Profilkfunktionen für die potentielle Temperatur sind auch die Profile für den vertikalen Diffusionskoeffizienten in der Prandtl-Schicht festgelegt. Denn aus der Definition des Diffusionskoeffizienten (Austauschkoeffizienten) einer skalaren Größe wie der potentiellen Temperatur θ ,

$$\overline{w'\theta'} = -K_w \frac{\partial \theta}{\partial z}, \quad (46)$$

und der Definition der Monin-Obukhov-Länge,

$$L_M = -\frac{u_*^3 \overline{T}}{\kappa g \overline{w'\theta'}}, \quad (47)$$

folgt

$$K_w = \frac{u_*^3 \overline{T}}{\kappa g L_M} \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^{-1}. \quad (48)$$

Damit ergeben sich für die Prandtl-Schicht die Profile

$$\tilde{K}_w(z) = \begin{cases} \frac{\kappa u_* z}{p_n(1 + p_s z/L_M)} & \text{für } L_M > 0 \\ \frac{\kappa u_* z}{p_n(1 - p_l z/L_M)^{-1/2}} & \text{für } L_M < 0 \end{cases}. \quad (49)$$

Für negative L_M wählen HOLTSLAG UND MOENG den Ansatz

$$K_w^{\text{HM}}(z) = w_* h_m \left(\frac{z}{h_m} \right)^{4/3} (1 - z/h_m)^2 \quad (50)$$

$$= u_* z \left(\frac{z}{-\kappa L_M} \right)^{1/3} (1 - z/h_m)^2. \quad (51)$$



Dieser Ansatz berücksichtigt nur den turbulenten Anteil des Austauschkoeffizienten und erfüllt die Beziehung $K_w^{\text{HM}} \propto z^{4/3}$, siehe z.B. SEINFELD oder PANOFKY UND DUTTON¹⁶. LÜPKES UND SCHLÜNZEN¹⁷ setzen nach einem Vorschlag von ZILITINKEVICH

$$K_w^{\text{LS}}(z) = \left[\kappa u_* z + w_* h_m \left(\frac{z}{h_m} \right)^{4/3} \right] (1 - z/h_m)^2 \quad (52)$$

$$= \kappa u_* z \left[1 + \kappa^{-4/3} \left(\frac{z}{-L_M} \right)^{1/3} \right] (1 - z/h_m)^2 . \quad (53)$$

Der turbulente Anteil wird durch den Ansatz von HOLTSLAG UND MOENG beschrieben, der mechanische Anteil entspricht dem Ansatz Gl. (49) für indifferente Schichtung ($L_M \rightarrow \infty$).

Für indifferente Schichtung gibt SEINFELD nach Vorschlägen von MYRUP UND RANZIERI¹⁸ und SHIR¹⁹ folgende Profile an:

$$K_w^{\text{MR}}(z) = \begin{cases} \kappa u_* z & \text{für } z/h_m < 0.1 \\ \kappa u_* z (1.1 - z/h_m) & \text{für } 0.1 \leq z/h_m \leq 1.1 \\ 0 & \text{für } z/h_m > 1.1 \end{cases} \quad (54)$$

$$K_w^{\text{Shi}}(z) = \kappa u_* z \exp(-8f_c z/u_*) \quad (55)$$

Im Gegensatz zu dem Ansatz von HOLTSLAG UND MOENG fällt der Diffusionskoeffizient bei MYRUP UND RANZIERI nicht quadratisch, sondern linear zur Mischungsschichthöhe hin ab. Der exponentielle Abfall bei SHIR entspricht eher dem Ansatz von HOLTSLAG UND MOENG, $\exp(-8f_c z/u_*) \approx (1 - z/h_m)^{2.4}$ für $z < h_m$.

Für stabile Schichtung setzen BUSINGER UND ARYA²⁰

$$K_w^{\text{BA}} = \frac{\kappa u_* z}{p_n + p_s z/L_M} \exp(-8f_c z/u_*) . \quad (56)$$

Der erste Faktor entspricht dem mit dem Temperaturprofil konsistenten Ergebnis Gl. (49), der zweite Faktor ist identisch mit dem Ansatz von SHIR.

¹⁶ PANOFKY, H.A., DUTTON, J.A.: *Atmospheric Turbulence: Models and Methods for Engineering Applications*. Cambridge University Press, New York, 1992.

¹⁷ LÜPKES, CH., SCHLÜNZEN, K.H. (1996): Modeling the arctic convective boundary layer with different turbulence parametrizations. *Boundary Layer Meteorology* **79**, 107-130.

¹⁸ MYRUP, L.O., RANZIERI, A.J. (1976): A consistent scheme for estimating diffusivities to be used in air quality models. Rep. CA-DOT-TL-7169-3-76-32, California Department of Transportation, Sacramento.

¹⁹ SHIR, C.C. (1973): A preliminary numerical study of atmospheric turbulent flows in the idealized planetary boundary layer. *J. Atmos. Sci.* **30**, 1327-1339.

²⁰ BUSINGER, J.A., ARYA, S.P.S. (1974): Height of the mixed layer in the stably stratified planetary boundary layer. *Adv. Geophys.* **18A**, 73-92.



DEGRAZIA ET AL. wählen folgende Ansätze:

$$\mathcal{L}: K_w^{\text{Deg}}(z) = 0.16h_m w_* (-0.01h_m/L_M)^{1/2} f^4(z) \quad (57)$$

$$f(z) = (1 - e^{-4z/h_m} - 0.0003e^{8z/h_m})^{1/3} \quad (58)$$

$$\approx 3.4(-0.01h_m/L_M)^{1/2} \kappa u_* z \left(\frac{-z}{L_M} \right)^{1/3} \quad \text{für } z \ll h_m \quad (59)$$

$$\mathcal{S}: K_w^{\text{Deg}}(z) = 0.4z u_* (1 - z/h_m)^{0.85} \frac{(1 + 3.7z/\Lambda)^{1/3}}{(1 + 15f_c z/u_* + 3.7z/\Lambda)^{4/3}} \quad (60)$$

$$\Lambda = L_M (1 - z/h_m)^{1.25} \quad (61)$$

$$\approx \kappa u_* z \frac{1}{1 + 3.7z/L_M} (1 - z/h_m)^{0.85} \quad \text{für } z \ll h_m \quad (62)$$

Für sehr labile Schichtung wird der Diffusionskoeffizient durch den Stabilitätsparameter $(-0.01h_m/L_M)^{1/2}$ zusätzlich erhöht. Der Ansatz für stabile Schichtung und geringe Höhen entspricht etwa dem Ansatz Gl. (49).

Wie σ_w wird auch K_w für labile Schichtung meist aus einem mechanischen und einem konvektiven Anteil zusammengesetzt:

$$K_w = \kappa u_* z (B_m^\mu + B_c^\mu)^{1/\mu} \quad (63)$$

$$\eta = z/h_m \quad (64)$$

$$\zeta = z/L_M \quad (65)$$

Autor	B_m	B_c	μ
SHIR ²¹	$\exp(-8\alpha\eta)$	-	-
BUSINGER	1	$\sqrt{-15\zeta}$	2
HOLTSLAG	-	$3.4(-\zeta)^{1/3}(1 - \eta)^2$	-
ZILITINKEVICH	$(1 - \eta)^2$	$3.4(-\zeta)^{1/3}(1 - \eta)^2$	1
DEGRAZIA	$(1 - \eta)^{0.85}$	$3.4(-0.01h_m/L_M)^{1/2}(-\zeta)^{1/3}$ für $z \ll h_m$	1

Für $K_w(z)$ und labile Schichtung wird für den mechanischen Anteil ein exponentieller Abfall entsprechend SHIR gewählt, allerdings mit der aktuellen Mischungsschichthöhe h_m .

Für den konvektiven Anteil wird der Ansatz von HOLTSLAG UND MOENG übernommen, aber die Addition zum mechanischen Anteil nicht über die ersten Potenzen, wie von ZILITINKEVICH vorgeschlagen, sondern über die dritten Potenzen durchgeführt. Der Faktor wurde so modifiziert, daß ein glatter Übergang von stabiler zu labiler Schichtung entsteht.

²¹indifferente Schichtung: $h_m = \alpha u_* / f_c$, $f_c = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$.



Vergleichsrechnungen mit den *Prairie-Gras*-Experimenten zeigten, daß mit diesem Ansatz die konvektive Durchmischung für stark labile Schichtung ($|L_M| < 10$ m) nicht hinreichend berücksichtigt wird. Als Notlösung wird der zusätzliche Term $\propto (z/L_M)^2$ verwendet, der für sehr labile Schichtung zu einem stark erhöhten Diffusionskoeffizienten führt; sinnvoller wäre eine explizite Modellierung der Auf- und Abwinde.

Für stabile Schichtung wird der Ansatz von BUSINGER UND ARYA übernommen, allerdings wieder mit der aktuellen Mischungsschichthöhe.

$$K_w(z) = \frac{\kappa u_* z}{p_n} \begin{cases} \frac{\mu^3}{1 + p_s z/L_M} & \text{für } L_M > 0 \\ \left\{ \mu^9 + \left[3p_s \left(\frac{-z}{L_M} \right) + 120 \left(\frac{-z}{L_M} \right)^2 \right] \left(1 - \frac{z}{h_m} \right)^6 \right\}^{1/3} & \text{für } L_M < 0 \end{cases} \quad (66)$$

Für den horizontalen Diffusionskoeffizienten K_v gibt SEINFELD die Abschätzung

$$K_v \simeq 0.1 u_* h_m \left(\frac{-h_m}{\kappa L_M} \right)^{1/3} \quad (67)$$

Hier ist K_v höhenunabhängig. Windkanalversuche zeigen aber, daß die Breite einer von einer Punktquelle ausgehenden Fahne höhenunabhängig ist, und dies läßt sich modellmäßig nur erreichen, wenn K_v proportional zur Windgeschwindigkeit $u(z)$ ist. Es wird daher folgender Ansatz gewählt:

$$K_{u,v}(z) = 0.17 A_v \frac{u(z)}{10 f_{u,v} u_*} h_m \sigma_{u,v} \quad (68)$$

Mit dem Faktor A_v ist $K_v \propto A_v^2$, so daß sich für die Fahnenaufweitung σ_y für große Quellentfernungen mit $\sigma_y \propto K_v^{1/2}$ die experimentell bestätigte Beziehung $\sigma_y \propto A_v \propto \bar{t}^{0.2}$ ergibt.

2.5 Die Lagrange-Korrelationszeiten

Die Lagrange-Korrelationszeiten ergeben sich aus den Profilen der Fluktuationen der Windgeschwindigkeit und der Diffusionskoeffizienten zu

$$T_{u,v,w} = K_{u,v,w} / \sigma_{u,v,w}^2 \quad (69)$$

$$T_{u,v,w} = \max(z_0/u_*, T_{u,v,w}) . \quad (70)$$



3 Vergleich mit Experimenten

Die Vergleichsrechnungen wurden mit einem Lagrangeschen Ausbreitungsmodell nach VDI-3945/3 (Partikelmodell `IBJparticle`, Version 1.5.1) und dem oben festgelegten Grenzschichtmodell durchgeführt. Die Obergrenze der Mischungsschicht wurde nur als Übergang von einem Gebiet hoher Diffusion zu einem Gebiet niedriger Diffusion modelliert, so wie es das Grenzschichtprofil angibt; es wurde keine undurchdringliche Ebene angenommen.

In der Verifikation des Partikelmodells (VDI-3945/3, Anhang D) wurde gezeigt, daß das Modell bei Vorgabe der meteorologischen Profilkfunktionen die aus theoretischen Überlegungen heraus erwarteten Konzentrationsverteilungen liefert. Da die Profilkfunktionen aus dem Grenzschichtmodell stammen, ist ein Vergleich mit experimentellen Daten im wesentlichen eine Prüfung des Grenzschichtmodells (Vorhersage-Validität).

Bei den Rechnungen wurden so viele Trajektorien gerechnet, daß der Stichprobenfehler für die Konzentration in der Regel unter 1 % lag. Die Fahnenbreite σ_y wurde aus der Varianz der Konzentrationsverteilung $c(x, y, z)$ bestimmt, die als intervallweise konstant angenommen wurde. Falls die Fahne symmetrisch zur x -Achse liegt, ist

$$\sigma_y^2(x, z) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} y^2 c(x, y, z) dy}{\int_{-\infty}^{+\infty} c(x, y, z) dy}. \quad (71)$$

3.1 KfK-Messungen der Windgeschwindigkeitsfluktuationen

Die theoretischen Werte der horizontalen und vertikalen Windfluktuationen σ_θ bzw. σ_ϕ wurden mit den am Kernforschungszentrum Karlsruhe (KfK) in den Höhen 40 m, 100 m und 160 m gemessenen Werten²² verglichen, siehe Bild 1. Aufgetragen ist die relative Abweichung

$$r = 2 \frac{\sigma_{\theta,\phi}^{\text{th}} - \sigma_{\theta,\phi}^{\text{exp}}}{\sigma_{\theta,\phi}^{\text{th}} + \sigma_{\theta,\phi}^{\text{exp}}} \quad (72)$$

als Funktion der inversen Monin-Obukhov-Länge L_M .

Die Werte von u_* und L_M wurden für jedes zehnminütige Mittelungsintervall aus den gemessenen Wind- und Temperaturprofilen nach einem Verfahren von NIEUWSTADT bestimmt.²³ Hierbei wurden die theoretischen Profile der Windgeschwindigkeit und der potentiellen Temperatur mit Hilfe der Kalibrierungsparameter u_* und L_M an die experimentell bestimmten Profile angepaßt (Marquardt-Methode). Während NIEUWSTADT nur Differenzen in den Temperaturen und den Geschwindigkeiten betrachtet hatte, wurden hier die Absolutwerte verglichen und die Rauigkeitslänge z_0 wurde mit 1.5 m vorgegeben.

²² THOMAS, P., DILGER, H., HÜBSCHMANN, W., SCHÜTTELKOPF, H., VOGT, S. (1981): Experimental determination of the atmospheric dispersion parameters at the Karlsruhe nuclear research center for 60 m and 100 m emission heights. Kernforschungszentrum Karlsruhe KfK 3090, ISSN 0303-4003.

²³ NIEUWSTADT, F.T.M. (1978): The computation of the friction velocity u_* and the temperature scale T_* from temperature and wind velocity profiles by least-square methods. *Boundary Layer Meteorology* **14**, 235-246.

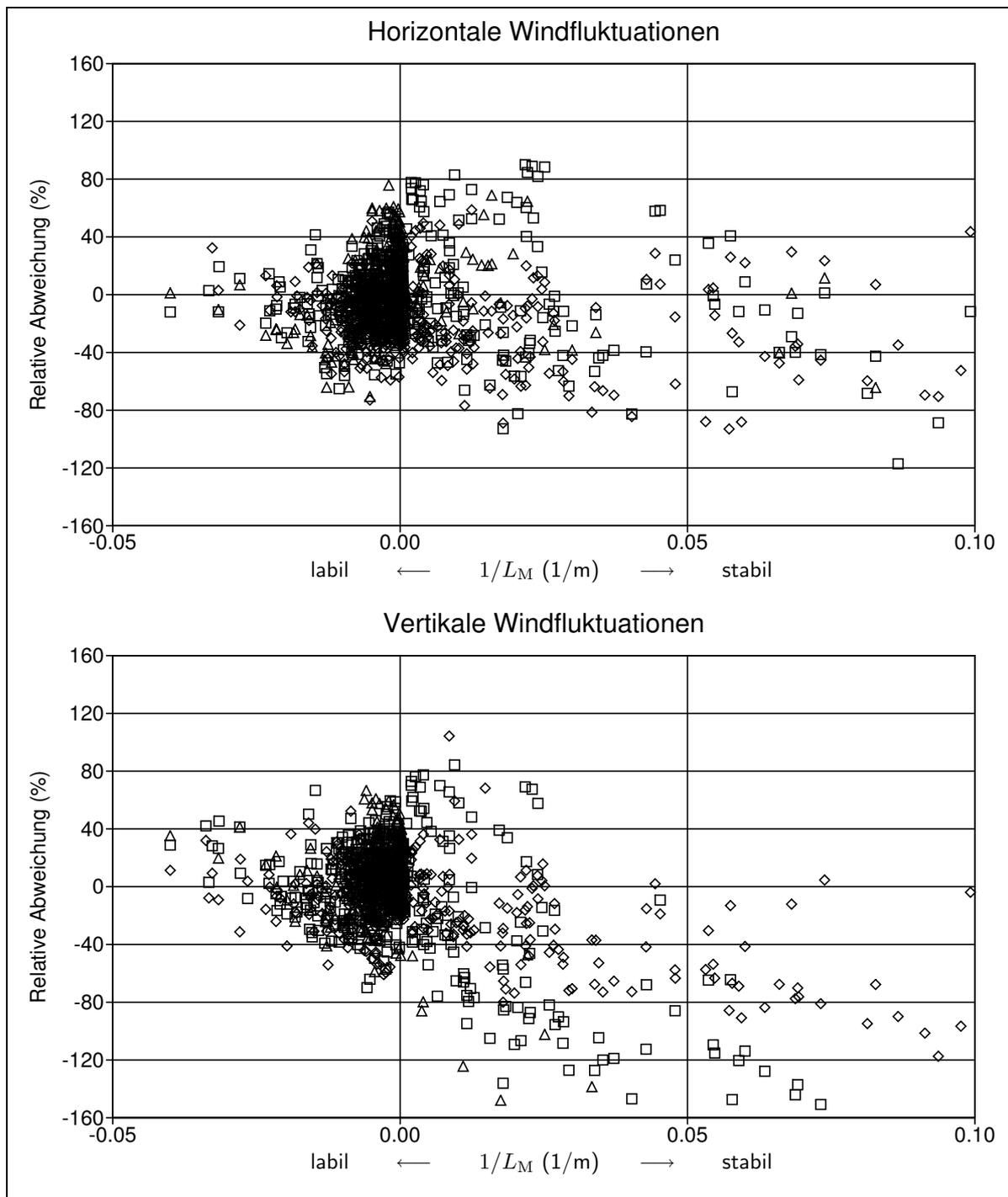


BIld 1: Vergleich der Fluktuationen der Windgeschwindigkeit σ_θ und σ_ϕ mit den KfK-Messungen für die Meßhöhen 40 m (Rauten), 100 m (Quadrate), 160 m (Dreiecke). Aufgetragen ist die relative Abweichung des theoretischen Wertes von dem gemessenen.



Für labile und indifferente Schichtungen ist die Übereinstimmung zufriedenstellend. Für stabile Schichtung läßt sich der exponentielle Abfall der vertikalen Fluktuationen anhand der gemessenen Werte nicht validieren.

3.2 Die *Prairie-Grass-Experimente*

Bei diesen Experimenten, die im Sommer 1956 durchgeführt worden waren, wurde SO_2 in ebenem Gelände mit sehr geringer Bodenrauigkeit in niedriger Höhe freigesetzt und die Konzentration auf Kreisbögen im Abstand von 50, 100, 200, 400 und 800 m als 10-Minuten-Mittelwert gemessen. Zusammenfassende Auswertungen hierzu wurden von VAN ULDEN²⁴, NIEUWSTADT²⁵ und NIEUWSTADT UND VAN ULDEN²⁶ angegeben. Grundlage für den Vergleich ist die bei HANNA ET AL.²⁷ aufgeführte Auflistung. Sie enthält eine Auswahl der von VAN ULDEN angegebenen Experimente und stimmt in ihren Angaben im wesentlichen damit überein.²⁸

Bei der Beurteilung veröffentlichter Resultate und dem Vergleich zwischen Rechenergebnissen und Meßergebnissen treten jedoch eine Reihe von Problemen auf:

- Für die von-Kármán-Konstante κ werden unterschiedliche Werte verwendet. Während früher (z.B. auch bei NIEUWSTADT) $\kappa = 0.35$ gebräuchlich war, setzt sich heute mehr der Wert $\kappa = 0.40$ durch. Fast alle zur Beschreibung der *surface layer* verwendeten Parameter und numerischen Konstanten hängen von κ ab.
- Der für die theoretische Beschreibung der *surface layer* verwendete Austauschkoefizient für Wärme, K_h , der auch für die Diffusion skalarer Beimengungen verwendet wird, wird unterschiedlich angegeben.
- Die Rauigkeitslänge wird unterschiedlich angegeben. VAN ULDEN verwendet $z_0 = 0.008$ m, HANNA gibt $z_0 = 0.006$ m an.
- Die aufgeführten Meßwerte stellen nicht immer die bodennahe Konzentration dar. Modellrechnungen zeigen, daß bei $x = 50$ m und neutraler bis stabiler Schichtung die bodennahe Konzentration um mindestens einen Faktor 1.5 höher ist als der in 1.5 m Höhe gemessene Konzentrationswert. Bei stabiler Schichtung gilt dies auch in größerer Entfernung. Eine entsprechende Diskussion ist bereits bei NIEUWSTADT UND VAN ULDEN zu finden. Eine direkte Anpassung einer empirischen Relation für bodennahe Konzentration an diese Meßwerte ist also gar nicht möglich, dies geht nur über Modellrechnungen.

²⁴VAN ULDEN, A.P. (1978): Simple estimates for vertical diffusion from sources near the ground. *Atmospheric Environment* **12**, 2125-2129.

²⁵NIEUWSTADT, F.T.M. (1978): The computation of the friction velocity u_* and the temperature scale T_* from temperature and wind velocity profiles by least-square methods. *Boundary Layer Meteorology* **14**, 235-246.

²⁶NIEUWSTADT, F.T.M., VAN ULDEN, A.P. (1978): A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. *Atmospheric Environment* **12**, 2119-2124.

²⁷HANNA, S.R., CHANG, J.S., STRIMAITIS, D.G. (1990): Uncertainties in source emission rate estimates using dispersion models. *Atmospheric Environment* **24A**, 2971-2980.

²⁸Die Abweichungen beruhen möglicherweise auf Schreibfehlern.



- Die Quelle ist nicht ideal punktförmig und passiv, sondern nimmt mit einer Ausströmgeschwindigkeit von bis zu 25 m/s (bei 5 cm Durchmesser) im Nahbereich sicher deutlichen Einfluß auf die Ausbreitung des emittierten Stoffes. Es ist zu vermuten, daß diese Beeinflussung auch noch in 50 m Entfernung wirksam ist.
- Das emittierte SO₂ wird von der Vegetation am Erdboden absorbiert, es ist aber nicht klar, in welchem Maße. Dies wird auch von den Witterungsverhältnissen und der Tageszeit abhängen und davon, wie weit die Vegetation bereits durch hohe SO₂-Konzentrationen geschädigt ist. NIEUWSTADT UND VAN ULDEN argumentieren, daß bei einer Depositionsgeschwindigkeit von $v_d = 0.07u_*$ am Erdboden (dies entspricht 0.5 bis 2 cm/s bezogen auf 1 m Referenzhöhe) kaum eine Beeinflussung des vertikalen Konzentrationsprofils oberhalb von 0.5 m (niedrigste Meßhöhe) zu erwarten und in den Messungen auch nicht erkennbar sei. Andererseits zeigt eine Modellrechnung für das von ihnen ausführlich dargestellte Experiment 59 ($u = 2.6$ m/s, $\bar{z} = 1.6$ m in 100 m Quellentfernung), daß bei einer Depositionsgeschwindigkeit von 0.006 m/s (bezogen auf die bodennahe Konzentration, d.h. $z = 0.05$ m) innerhalb 100 m Quellentfernung bereits 15 % der emittierten Menge absorbiert werden. Dies sollte im vertikalen Konzentrationsprofil auch bei $z = 0.5$ m bemerkbare Änderungen hervorrufen. Um so stärker müßte der Effekt in größerer Quellentfernung sein.

Die von HANNA aufgeführte Tabelle mit 44 Experimenten wurde zur Grundlage eines Vergleichs von Modellrechnung und Messung gemacht. Für jedes Experiment ist dort u.a. aufgeführt (siehe Tabelle 1):

- L_M Monin-Obukhov-Länge (wie von NIEUWSTADT berechnet).
 h_m Mischungsschichthöhe.
 u_* Schubspannungsgeschwindigkeit (wie von NIEUWSTADT berechnet).
 u_2 Mittlere Windgeschwindigkeit in 2 m Höhe.
 C_y Quer zur Windrichtung integrierte, durch die Quellstärke geteilte Konzentration in 1.5 m Höhe für die Quellentfernungen $x = 50, 200, 800$ m.
 C_{\max} Maximale, durch die Quellstärke geteilte Konzentration in 1.5 m Höhe für die Quellentfernungen $x = 50, 200, 800$ m.
 σ_y Die Fahnenbreite in 1.5 m Höhe für die Quellentfernungen $x = 50, 200, 800$ m.

Leider stehen keine der gemessenen Vertikalprofile (Konzentration und meteorologische Größen) zur Verfügung, aus denen man Rückschlüsse z.B. auf die Bedeutung der Deposition hätte ziehen können. Für die Analyse der Experimente wurde nur die quer zur Windrichtung integrierte Konzentration C_y betrachtet. Sie enthält nicht mehr das Mäandern der Fahne, beschreibt aber die vertikale Dispersion und erlaubt, wie auch HANNA bemerkt, einen deutlich präziseren Vergleich mit Modellergebnissen.

Die bei der Ausbreitungsrechnung verwendeten Parameter sind:

Rauhigkeitslänge	z_0	0.008	m
Mittlere Quellhöhe	H	0.46	m
Vertikale Ausdehnung der Quelle	ΔH	0.1	m
Depositionsgeschwindigkeit	v_d	$0.02u_*$	
Horizontale Maschenweite	Δx	5	m
Mittelungszeit	\bar{t}	600	s

Die kleinste vertikale Maschenweite des Rechenrasters betrug in Bodennähe 0.1 m. Das vertikale Mittelungsintervall zur Konzentrationsbestimmung ging von 1.4 m bis 1.6 m, die horizontale Maschenweite betrug 5 m.

Die Monin-Obukhov-Länge L_M wurde so wie von HANNA angegeben verwendet, die Schubspannungsgeschwindigkeit u_* wurde aus u_2 , der Windgeschwindigkeit in 2 m Höhe, neu berechnet.

Das unterschiedliche Vorgehen bei L_M und u_* hat folgenden Grund: zu ihrer Bestimmung wurden damals umfangreichere meteorologische Datensätze verwendet als heute noch zur Verfügung stehen. Daher sind die Werte im Prinzip zuverlässiger, aber sie wurden mit einem anderen Wert für die von-Kármán-Konstante berechnet (0.35 statt 0.4). Da sich dies vorwiegend auf den Wert von u_* auswirkt, wurde nur dieser Parameter neu berechnet.

Der Vergleich zwischen den gemessenen Windgeschwindigkeiten und den Werten, die man aus dem von VAN ULDEN angegebenen u_* (bei Verwendung von $\kappa = 0.35$) erhält, zeigt hinreichend gute Übereinstimmung (Bild 2). Die größte relative Abweichung erhält man für das Experiment 13 mit der stabilsten Schichtung. Hier führt in der Modellrechnung die Verwendung der gemessenen Windgeschwindigkeit statt des von NIEWSTADT angegebenen Wertes von u_* dazu, daß sich der gemessene Konzentrationswert wesentlich besser reproduzieren läßt.

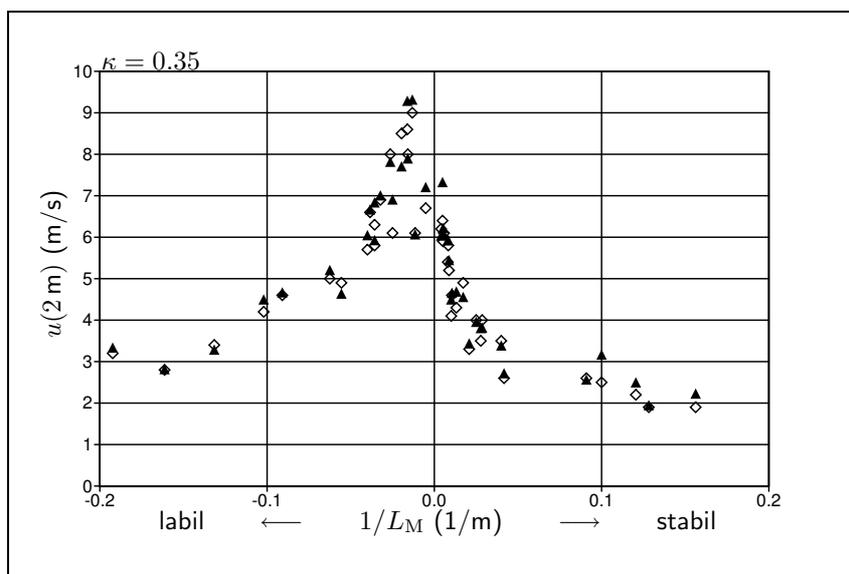


BILD 2: Gemessene Windgeschwindigkeit in 2 m Höhe (offene Rauten) und aus dem von VAN ULDEN angegebenen u_* zurückgerechnete Windgeschwindigkeit (gefüllte Dreiecke). Die einzelnen Experimente sind nach der Stabilität (reziproker Wert der Monin-Obukhov-Länge, $1/L_M$) geordnet.

Die für labile Schichtung angegebenen Werte der Mischungsschichthöhe wurden übernommen, bis auf den des Experimentes #15. Statt mit $h_m = 86$ m bei sehr labiler Schichtung wurde hier mit $h_m = 800$ m gerechnet. Bei indifferenter und stabiler Schichtung wurde die Mischungsschichthöhe nach Gl. (2) berechnet.



TABELLE 1: Die im Vergleich verwendeten Messdaten. Fehlende Werte sind durch drei Sterne (***) gekennzeichnet.

NR	LM	HM	UST	U2	CY		CM	SIGY	CY		CM	SIGY	CY		CM	SIGY	
	m	m	m/s	m/s	s/m ²	s/m ³	s/m ³	m	s/m ²	s/m ³	s/m ³	m	s/m ²	s/m ³	s/m ³	m	
-					50m	50m	50m	50m	200m	200m	200m	200m	800m	800m	800m	800m	800m
7	-9.8	1539	0.31	4.20	4.45e-002	1.03e-003	6.2	1.11e-002	4.70e-005	22.0	2.00e-003	8.19e-007	71.0				
8	-18.0	1580	0.31	4.90	5.60e-002	4.35e-003	6.6	1.21e-002	2.61e-004	21.0	1.54e-003	7.37e-006	86.0				
9	-31.0	626	0.46	6.90	4.02e-002	2.02e-003	9.0	1.09e-002	1.42e-004	33.0	1.41e-003	5.26e-006	116.0				
10	-11.0	1090	0.32	4.60	4.89e-002	1.85e-003	12.3	7.71e-003	1.14e-004	35.0	3.50e-004	1.72e-006	97.0				
13	3.4	***	0.09	1.30	***	***	***	***	***	***	1.33e-001	1.62e-003	***				
15	-7.6	86	0.23	3.40	7.43e-002	4.07e-003	8.6	1.41e-002	2.16e-004	26.0	1.15e-003	5.43e-006	92.0				
16	-5.2	1259	0.24	3.20	5.38e-002	1.88e-003	13.7	5.16e-003	6.46e-005	49.0	1.80e-004	5.11e-007	116.0				
17	48.0	***	0.21	3.30	1.05e-001	1.08e-002	***	3.40e-002	1.42e-003	***	1.10e-002	1.60e-004	***				
18	25.0	***	0.20	3.50	1.08e-001	1.05e-002	***	4.60e-002	1.60e-003	***	2.00e-002	2.36e-004	***				
19	-28.0	745	0.39	5.80	4.42e-002	1.99e-003	8.7	8.45e-003	1.20e-004	32.0	5.70e-004	3.31e-006	85.0				
20	-62.0	813	0.60	8.60	3.36e-002	1.55e-003	7.9	8.40e-003	1.40e-004	27.0	1.28e-003	7.04e-006	90.0				
21	172.0	***	0.38	6.10	5.80e-002	5.29e-003	***	1.80e-002	5.47e-004	***	6.00e-003	5.96e-005	***				
22	204.0	***	0.46	6.40	4.70e-002	4.58e-003	***	1.40e-002	5.44e-004	***	4.00e-003	4.87e-005	***				
23	193.0	***	0.39	5.90	4.70e-002	4.09e-003	***	1.70e-002	4.43e-004	***	4.00e-003	4.80e-005	***				
24	248.0	***	0.38	6.20	4.70e-002	3.60e-003	***	1.50e-002	3.88e-004	***	4.00e-003	4.38e-005	***				
25	-6.2	763	0.20	2.80	7.79e-002	2.83e-003	16.2	7.40e-003	5.95e-005	72.0	6.20e-004	2.13e-006	214.0				
28	24.0	***	0.16	2.60	1.36e-001	1.16e-002	***	5.10e-002	1.38e-003	***	1.50e-002	2.01e-004	***				
29	36.0	***	0.23	3.50	9.90e-002	5.47e-003	***	3.80e-002	6.45e-004	***	1.20e-002	6.08e-005	***				
32	8.3	***	0.13	2.20	***	***	***	1.15e-001	6.40e-003	***	5.60e-002	1.32e-003	***				
33	-51.0	***	0.50	8.50	3.30e-002	2.05e-003	***	9.00e-003	1.88e-004	***	1.30e-003	7.27e-006	***				
34	-76.0	***	0.60	9.00	3.00e-002	1.92e-003	***	9.00e-003	1.83e-004	***	1.80e-003	1.21e-005	***				
36	7.8	***	0.10	1.90	1.93e-001	1.99e-002	***	1.00e-001	4.82e-003	***	4.10e-002	9.26e-004	***				
37	95.0	***	0.29	4.60	6.10e-002	5.50e-003	***	2.10e-002	5.51e-004	***	7.00e-003	5.06e-005	***				
38	99.0	***	0.28	4.10	7.80e-002	7.77e-003	***	2.60e-002	1.11e-003	***	8.00e-003	1.39e-004	***				
41	35.0	***	0.23	4.00	7.90e-002	1.09e-002	***	3.20e-002	1.63e-003	***	1.20e-002	2.39e-004	***				
42	120.0	***	0.37	5.80	5.20e-002	4.70e-003	***	1.70e-002	5.36e-004	***	5.00e-003	3.66e-005	***				
43	-16.0	683	0.35	5.00	5.07e-002	2.30e-003	10.5	1.10e-002	1.49e-004	40.0	1.22e-003	4.76e-006	200.0				
44	-25.0	1664	0.40	5.70	4.47e-002	1.73e-003	11.4	1.08e-002	1.30e-004	43.0	1.39e-003	5.33e-006	126.0				
45	-87.0	***	0.39	6.10	5.20e-002	3.30e-003	***	1.70e-002	3.61e-004	***	3.50e-003	2.57e-005	***				
46	114.0	***	0.34	5.20	6.30e-002	5.20e-003	***	2.30e-002	5.61e-004	***	7.00e-003	5.84e-005	***				
48	-63.0	***	0.51	8.00	4.80e-002	2.07e-003	***	6.00e-003	1.56e-004	***	***	1.21e-005	***				
49	-28.0	636	0.45	6.30	4.22e-002	1.99e-003	8.9	1.14e-002	1.72e-004	35.0	1.47e-003	5.25e-006	118.0				
50	-26.0	851	0.44	6.60	4.09e-002	2.17e-003	8.2	8.85e-003	1.66e-004	28.0	1.07e-003	5.37e-006	115.0				
51	-40.0	2136	0.45	6.10	4.59e-002	2.50e-003	9.6	9.77e-003	1.67e-004	32.0	8.20e-004	3.96e-006	77.0				
53	10.0	***	0.17	2.50	1.54e-001	2.02e-002	***	8.30e-002	4.95e-003	***	6.20e-002	7.26e-004	***				
54	40.0	***	0.24	4.00	8.10e-002	9.53e-003	***	3.00e-002	1.37e-003	***	1.10e-002	2.13e-004	***				
55	124.0	***	0.37	5.40	5.30e-002	4.59e-003	***	1.80e-002	5.76e-004	***	5.00e-003	6.00e-005	***				
56	76.0	***	0.29	4.30	7.10e-002	6.64e-003	***	2.40e-002	7.75e-004	***	7.00e-003	1.00e-004	***				
57	-194.0	***	0.46	6.70	4.20e-002	2.53e-003	***	1.30e-002	2.60e-004	***	2.70e-003	1.97e-005	***				
58	6.4	***	0.11	1.90	***	***	***	1.05e-001	7.14e-003	***	5.10e-002	1.33e-003	***				
59	11.0	***	0.14	2.60	1.40e-001	1.74e-002	***	8.10e-002	5.53e-003	***	3.10e-002	9.02e-004	***				
60	58.0	***	0.28	4.90	6.20e-002	7.45e-003	***	2.30e-002	1.05e-003	***	8.00e-003	1.47e-004	***				
61	-38.0	515	0.51	8.00	3.43e-002	1.75e-003	10.4	1.12e-002	1.49e-004	35.0	1.96e-003	8.56e-006	109.0				
62	-30.0	***	0.34	5.20	***	***	***	1.30e-002	2.88e-004	***	2.30e-003	1.81e-005	***				

Für die Quellentfernungen 50 m, 200 m und 800 m wurden die berechneten Werte der quer zur Windrichtung integrierten Konzentration C_y , der maximal gemessenen Konzentration C_{\max} und der Fahnenbreite σ_y mit den Meßwerten verglichen (Bild 4, 5 und 6). Zur Normierung der Konzentration wurde — abweichend vom sonst üblichen Vorgehen — die in 2 m Höhe gemessene Windgeschwindigkeit u_2 benutzt, da die Windgeschwindigkeit in Quellhöhe nicht als Meßwert, sondern nur aus dem theoretischen Windprofil zur Verfügung steht.

Falls keine experimentellen Werte für die Fahnenbreite vorlagen, wurde sie aus den Angaben über die integrierte Konzentration und die maximale Konzentration unter Annahme

einer Gauß-Verteilung mit $\sigma_y = C_y / (\sqrt{2\pi} C_{\max})$ abgeschätzt.

Generell ist die Übereinstimmung zwischen der Lagrange-Rechnung und den Messungen sehr gut. Im einzelnen kann man folgendes feststellen:

- In geringer Quellentfernung werden die Konzentrationen etwas unterschätzt. Das kann an den besonderen Freisetzungsbedingungen liegen, denn die Ausströmgeschwindigkeit des SO_2 betrug bis zu 25 m/s.
- Bei sehr labiler Schichtung streuen die Meßwerte stark. Hier ist die Mittelungszeit von 10 Minuten sicher nicht ausreichend, um repräsentative Werte in konvektiven Phänomenen zu erhalten.
- Die Meßwerte der Fahnenbreiten streuen erwartungsgemäß stärker als die integrierten Konzentrationen. Die Modelle geben gut das mittlere Verhalten wieder. Es entsteht jedoch im Bereich der sehr labilen Schichtung der Eindruck, als würde die von der Theorie postulierte Zunahme der Fahnenbreite mit größerer Mischungsschichthöhe sich in den Meßdaten nicht wiederfinden. Sie scheinen eher negativ korreliert zu sein.

3.3 Windkanal-Messungen

Für die Rauigkeitslänge $z_0 = 0.7$ m und die Quellhöhen 60 m und 100 m liegen Windkanalmessungen der Konzentrationsverteilung $c(x, y, 0)$ in Bodennähe vor.²⁹ Durch Integration quer zur Windrichtung wurde die nicht mehr von der Mäanderbewegung abhängige Größe $c_y(x) = \int c(x, y, 0) dy$ bestimmt. Diese Funktion wurde mit dem Ausbreitungsprogramm IBJparticle unter Verwendung periodischer Randbedingungen und dem vorgeschlagenen Grenzschichtmodell bestimmt ($L_M = 9999$ m, $h_m = 800$ m), siehe Bild 3.

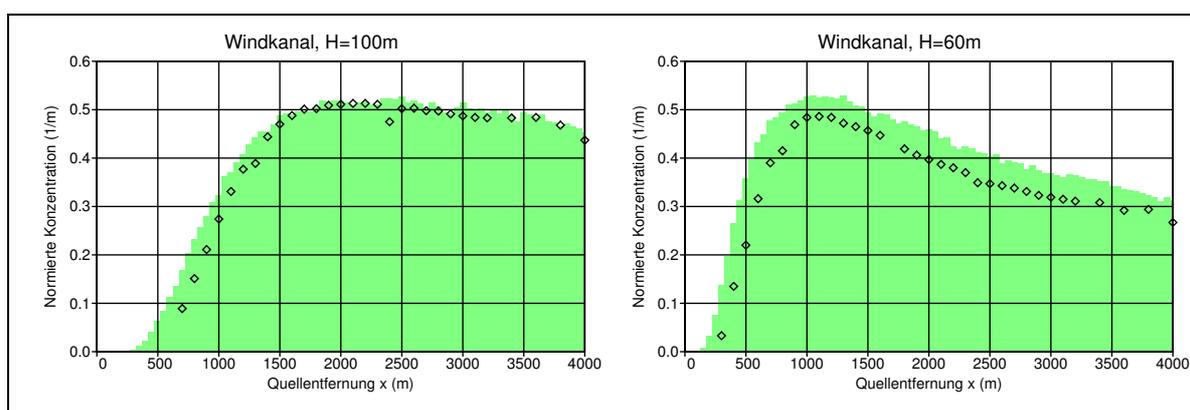


BILD 3: Vergleich mit den Windkanal-Messungen (Messung: offene Rauten, Rechnung: grüne Fläche).

Aufgetragen ist die normierte Konzentration $C_y = c_y h_q u_q / Q$ (Quellstärke Q , Quellhöhe h_q , Windgeschwindigkeit in Quellhöhe u_q) als Funktion der Quellentfernung. Die beobachteten Werte, vor allem Konzentrationsanstieg und Maximum, werden mit dem Grenzschichtmodell gut wiedergegeben.

²⁹KSP-BERICHT (2000): Validierung des „Kinematic Simulation Particle Model“ (KSP-Modell) für Anwendungen im Vollzug des BImSchG. Meteorologisches Institut der Universität Hamburg. Auftrag des Bundesumweltamtes, Forschungsbericht 98-295 43 354.

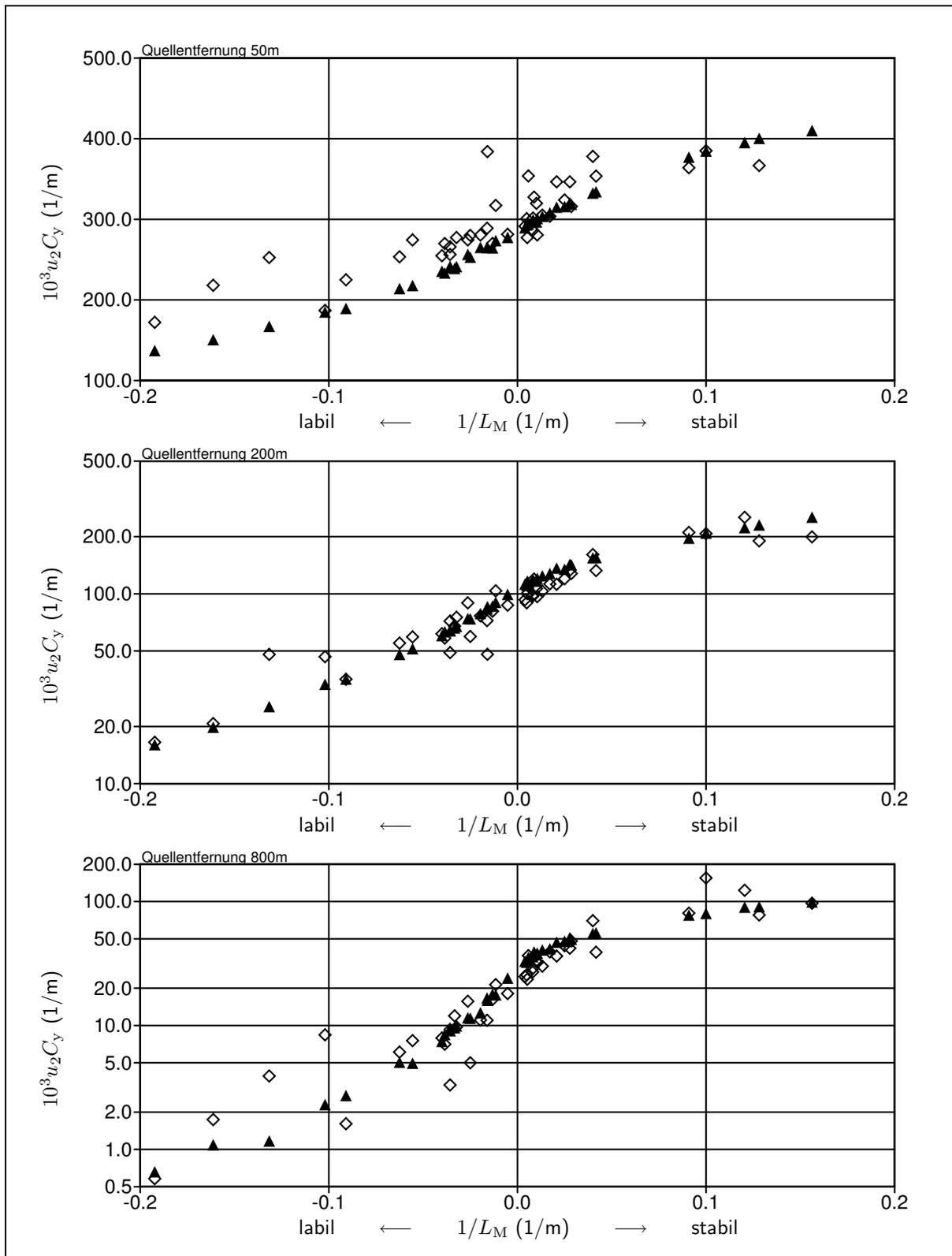


BILD 4: Quer zur Windrichtung integrierte, normierte Konzentration in den Quellentfernen $x = 50$ m (oben), $x = 200$ m (Mitte) und $x = 800$ m (unten). Aufgetragen ist der Wert von $10^3 u_2 C_y$ gegen die reziproke Monin-Obukhov-Länge. Die offenen Rauten sind Meßwerte aus den *Prairie-Grass*-Experimenten, die gefüllten Dreiecke Rechenwerte von IBJparticle.

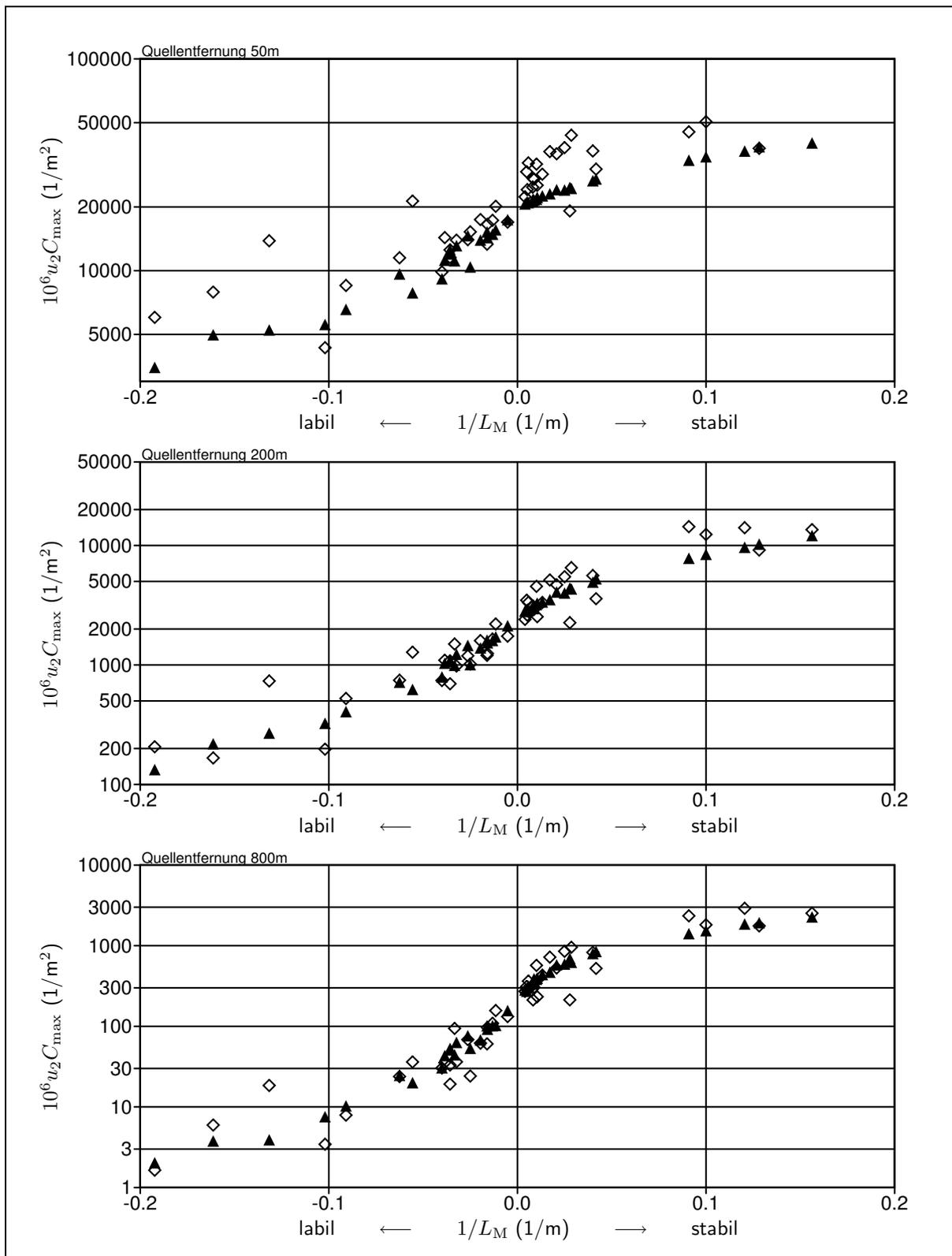


BILD 5: Maximale, normierte Konzentration in den Quellentfernungen $x = 50$ m (oben), $x = 200$ m (Mitte) und $x = 800$ m (unten). Aufgetragen ist der Wert von $10^6 u_2 C_{\max}$ gegen die reziproke Monin-Obukhov-Länge. Die offenen Rauten sind Meßwerte aus den *Prairie-Grass*-Experimenten, die gefüllten Dreiecke Rechenwerte von IBJparticle.

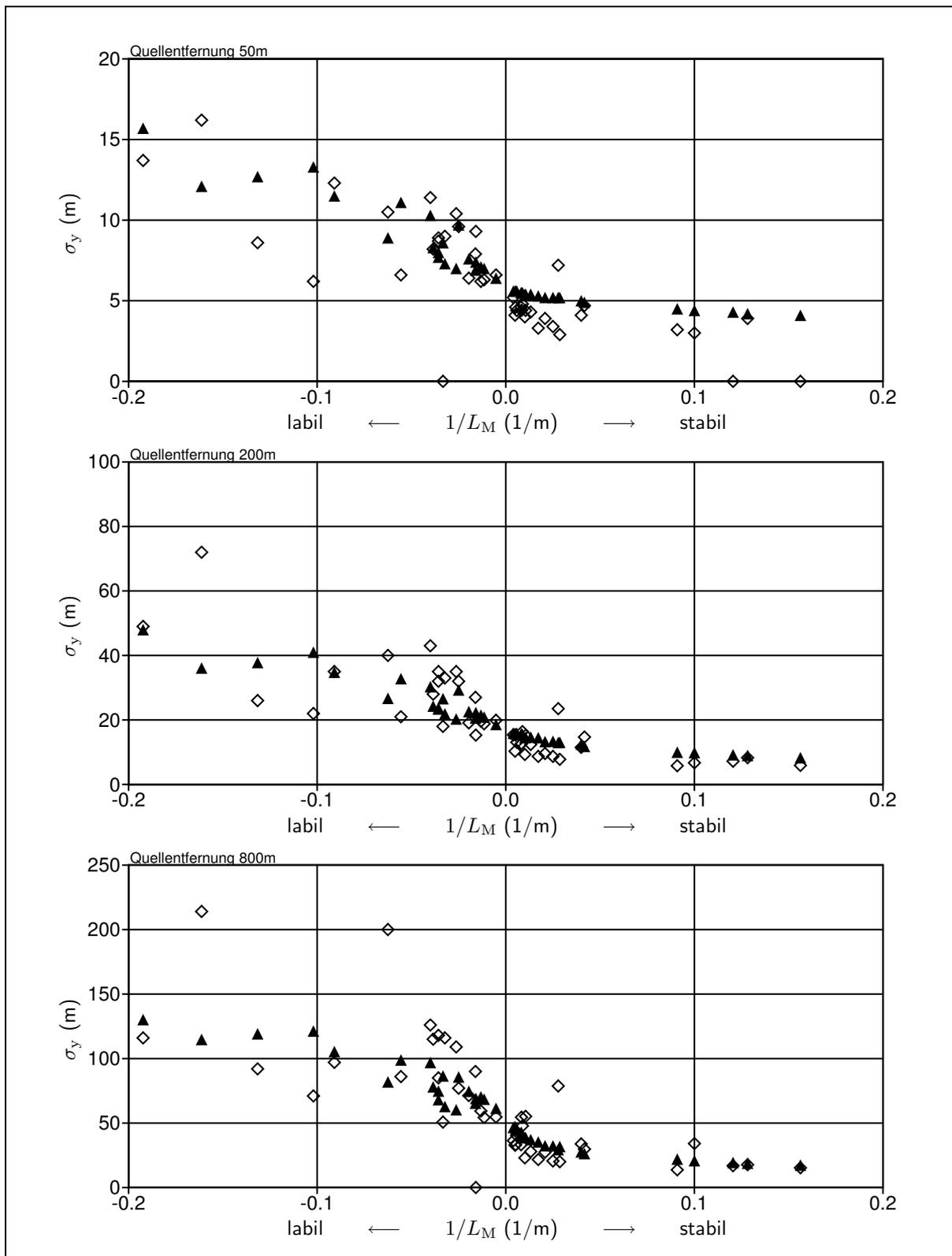


BILD 6: Fahnenbreite σ_y in den Quellentfernungen $x = 50$ m (oben), $x = 200$ m (Mitte) und $x = 800$ m (unten) als Funktion der reziproken Monin-Obukhov-Länge. Die offenen Rauten sind Meßwerte aus den *Prairie-Grass-Experimenten*, die gefüllten Dreiecke Rechenwerte von *IBJparticle*.



4 Zusammenfassung

Die Fähigkeiten des meteorologischen Grenzschichtmodells, das Transportverhalten der atmosphärischen Grenzschicht zur Verwendung in einem Lagrange-Modell gemäß VDI-3945/3 realistisch zu beschreiben, und auch die Möglichkeit, die Qualität der Modellierung zu überprüfen, hängen von der Stabilität der atmosphärischen Schichtung ab.

Bei indifferenter Schichtung wird die Konzentrationsverteilung in Bodennähe gut wiedergegeben: Die quer zur Windrichtung integrierte Konzentration und die Fahnenbreite können mit einer typischen Unsicherheit von 20 bis 30 % im Einzelfall bestimmt werden.

Für stabile Schichtung liegen weniger Vergleichsmöglichkeiten vor. Auch läßt sich die atmosphärische Grenzschicht wegen der stärkeren Entkopplung der Luftschichten nicht so gut durch Standardprofile beschreiben. Die Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Konzentrationswerten sind daher größer, lassen aber keine systematischen Fehler erkennen.

Für labile Schichtung wurde das Profil des vertikalen Austauschkoefizienten gegenüber herkömmlichen Vorstellungen modifiziert. Diese Modifizierung ermöglicht es, die *Prairie-Grass-Experimente* einigermaßen korrekt wiederzugeben. Sie bleibt aber ein Behelf, denn konvektive Phänomene sind im Bild des Austauschkoefizienten (und damit der Diffusionsgleichung) nicht korrekt erfassbar.

5 Literatur

Literaturhinweise sind bereits im Textteil aufgeführt worden. Im folgenden wird noch einmal eine vollständige, alphabetische Auflistung gegeben.

BINKOWSKI, F.S. (1979): Simple semi-empirical theory for the turbulence in the atmospheric surface layer. *Atmospheric Environment* **13**, 247-253.

BUSINGER, J.A., ARYA, S.P.S. (1974): Height of the mixed layer in the stably stratified planetary boundary layer. *Adv. Geophys.* **18A**, 73-92.

BUSINGER, J.A., WYNGAARD, J.C., IZUMI, Y., BRADLEY, E.F. (1971): Flux profile relationships in the atmospheric surface layer. *J. Atmos. Sci.* **28**, 181-189.

DEGRAZIA, G.A., ANFOSSI, D., CARVALHO, J.C., MANGIA, C., TIRABASSI, T., CAMPOS VELHO, H.F. (2000): Turbulence parametrization for PBL dispersion models in all stability conditions. *Atmospheric Environment* **34**, 3575-3583.

GRYNING, S.-E., HOLTSLAG, A.A.M., IRWIN, J.S., SIVERTSEN, B. (1987): Applied dispersion modeling based on meteorological scaling parameters. *Atmospheric Environment* **21**, 79-89.

HANNA, S.R. (1982): Applications in air pollution modeling. In: *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling* (Eds. F.T.M. Nieuwstadt und H. van Dop), Reidel, Boston.

HANNA, S.R., CHANG, J.S., STRIMAITIS, D.G. (1990): Uncertainties in source emission rate estimates using dispersion models. *Atmospheric Environment* **24A**, 2971-2980.

HICKS, B.B. (1976): Wind profile relationships from the Wangara experiments. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.* **102**, 535-551.



- HÖGSTRÖM, U. (1988): Non-dimensional wind and temperature profiles in the atmospheric surface layer: a re-evaluation. *Boundary Layer Meteorology* **42**, 55-78.
- HOLTSLAG, A.A.M., MOENG, C.H. (1991): Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective atmospheric boundary layer. *J. Atmos. Sci.* **48**, 1690-1698.
- IRWIN, J.S. (1979): Scheme for estimating dispersion parameters as a function of the release height. EPA-600/4-79-062. U.S. Environmental Protection Agency. Washington D.C..
- IRWIN, J.S., PAUMIER, J.O. (1990): Characterizing the dispersive state of convective boundary layers for applied dispersion modeling. *Boundary Layer Meteorology* **53**, 267-296.
- KSP-BERICHT (2000): Validierung des „Kinematic Simulation Particle Model“ (KSP-Modell) für Anwendungen im Vollzug des BImSchG. Meteorologisches Institut der Universität Hamburg. Auftrag des Bundesumweltamtes, Forschungsbericht 98-295 43 354.
- LÜPKES, CH., SCHLÜNZEN, K.H. (1996): Modeling the arctic convective boundary layer with different turbulence parametrizations. *Boundary Layer Meteorology* **79**, 107-130.
- MYRUP, L.O., RANZIERI, A.J. (1976): A consistent scheme for estimating diffusivities to be used in air quality models. Rep. CA-DOT-TL-7169-3-76-32, California Department of Transportation, Sacramento.
- NIEUWSTADT, F.T.M. (1978): The computation of the friction velocity u_* and the temperature scale T_* from temperature and wind velocity profiles by least-square methods. *Boundary Layer Meteorology* **14**, 235-246.
- NIEUWSTADT, F.T.M., VAN ULDEN, A.P. (1978): A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. *Atmospheric Environment* **12**, 2119-2124.
- PANOFSKY, H.A., TENNEKES, H., LENSCHOW, D.H., WYNGAARD, J.C. (1977): The characteristics of turbulent velocity components in the surface layer under convective conditions. *Boundary Layer Meteorology* **11**, 355-361.
- PANOFSKY, H.A., DUTTON, J.A.: *Atmospheric Turbulence: Models and Methods for Engineering Applications*. Cambridge University Press, New York, 1992.
- PAUMIER, J., STINSON, D., KELLY, T., BOLLINGER, C., IRWIN, J.S. (1986): MPDA-1.1: A Meteorological processor for diffusion analysis. EPA/600/8-86/011, EPA, Research Triangle Park, NC.
- SEINFELD, J.H.: *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. Wiley & Sons, New York, 1986.
- SHIR, C.C. (1973): A preliminary numerical study of atmospheric turbulent flows in the idealized planetary boundary layer. *J. Atmos. Sci.* **30**, 1327-1339.
- THOMAS, P., DILGER, H., HÜBSCHMANN, W., SCHÜTTELKOPF, H., VOGT, S. (1981): Experimental determination of the atmospheric dispersion parameters at the Karlsruhe nuclear research center for 60 m and 100 m emission heights. Kernforschungszentrum Karlsruhe KfK 3090, ISSN 0303-4003.
- VAN ULDEN, A.P. (1978): Simple estimates for vertical diffusion from sources near the ground. *Atmospheric Environment* **12**, 2125-2129.