Simulierte CO₂- und H₂O-Flüsse über heterogenem Gelände - Kopplung eines Photosynthese-Modells mit dem meteorologischen Modell FOOT3DK



Inaugural - Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität zu Köln vorgelegt von

Mark Reyers

aus Emmerich

Köln 2011

Berichterstatter (Gutachter):	Prof. Dr. M. Kerschgens Prof. Dr. Y. Shao
Tag der mündlichen Prüfung:	01.02.2011

Kurzzusammenfassung

Das Hauptziel der vorliegenden Arbeit ist eine realistische Darstellung von Massen-Flüssen über heterogenem Gelände. Für diese Zielsetzung wird das mesoskalige meteorologische Modell FOOT3DK mit einem Photosynthese-Modell gekoppelt um Oberflächen-Flüsse von CO_2 und H_2O über verschiedenen Vegetationsarten zu simulieren. Das Photosynthese-Modell besteht aus einem C3 single-leaf Modell und einem erweiterten big-leaf Modell (sun/shade) zur Hochskalierung von der Blatt- auf die Pflanzenbestands-Skala. Bei dieser Skalierungs-Prozedur wird der Pflanzenbestand in einen sonnenbeschienenen und einen im Schatten liegenden Anteil unterteilt. Die Offline-Version des Photosynthese-Modells wird für zwei verschiedene Vegetationsarten validiert (Zuckerrübe und Weizen). Für mehrere Tage der Jahre 2008 und 2009 stimmen die simulierten Flüsse von CO_2 gut mit Eddy-Kovarianz Messungen in einem ländlich geprägten Untersuchungsgebiet im Westen Deutschlands überein.

Das gekoppelte FOOT3DK-Photosyntese Modell simuliert für einzelne Gitterpunkte CO₂- und H₂O-Flüsse, die gut zu gemessenen Flüssen passen. Neben dem generellen Tagesgang werden auch die Größenordnungen von dem Modell erfasst. Die über die stomatale Leitfähigkeit an die Photosynthese gekoppelten latenten Wärmeflüsse werden realistischer wieder gegeben als mit dem ursprünglich verwendeten Jarvis-Schema. Dennoch zeigen die mit dem gekoppelten Modell simulierten Flüsse teilweise deutliche Defizite, die hauptsächlich in Initialisierungs- und Randproblemen begründet sind.

Der Einfluss der Oberflächen-Heterogenität auf die simulierten Oberflächen-Flüsse wird von dem gekoppelten Modell gut wieder gegeben. Erwartungsgemäß werden die Flüsse überwiegend von der dominierenden Landnutzungsklasse bestimmt. Die CO₂-Flüsse sind hierbei hoch mit dem jeweiligen Blattflächen-Index korreliert, während diese Korrelation für den latenten Wärmefluss schwächer ausfällt. Die photosynthetische CO₂-Aufnahme durch die Stomata ist bekanntermaßen an die Transpiration der Pflanzen gekoppelt. Das Modell ist in der Lage, die dadurch miteinander verbundenen Flüsse von CO₂ und H₂O zu repräsentieren. Der Netto CO₂-Fluss und die Transpiration (und in einem geringeren Maße der Netto CO₂-Fluss und der latente Wärmestrom) sind in dem gekoppelten Modell stark anti-korreliert.

Die simulierten Oberflächen-Flüsse haben einen Einfluss auf die Struktur der planetaren

Grenzschicht. Die generellen Strukturen werden von dem gekoppelten Modell realistisch erfasst, während gemessene mikroskalige Strukturen nicht zufriedenstellend wieder gegeben werden. So stimmen aus dem Modell abgeleitete Haushaltsgleichungen für ein ganzes Luftpaket gut mit Flugzeug-Messungen überein, während Punkt-zu-Punkt Vergleiche von simulierten Konzentrationen von atmosphärischem CO₂ und H₂O mit Messungen einige Defizite der für die Simulationen benötigten Eingangs- und Randdaten aufdecken.

Das in der Literatur häufig untersuchte Verschließen der Pflanzen-Stomata unter erhöhtem atmosphärischen CO₂ wird von dem gekoppelten Modell gut wieder gegeben. Die Abnahme der simulierten stomatalen Leitfähigkeit führt zu einer verminderten Transpiration und damit zu einer Abnahme des gesamten latenten Wärmeflusses. Das zeigt, dass für die Modellierung realitätsnaher H₂O-Flüsse der in dieser Arbeit berücksichtigte photosynthetische CO₂-Fluss auch in zukünftigen Untersuchungen mit simuliert werden sollte. Da sich diese Ergebnisse mit denen anderer Studien decken, bildet das gekoppelte Modell ein nützliches Werkzeug für die Untersuchung der Austauschprozesse zwischen Biosphäre und Atmosphäre in zukünftigen Klima-Szenarien.

Abstract

The main goal of the presented study is the realistic simulation of mass fluxes over heterogeneous terrain. With this aim the mesoscale meteorological model FOOT3DK is coupled with a photosynthesis model to simulate surface fluxes of CO₂ and H₂O over different vegetation types. The photosynthesis model consists of a C3 single leaf model and an extended big leaf model (sun/shade) for the upscaling from leaf to canopy scale. The sun/shade upscaling procedure divides the canopy into a sunlit and a shaded fraction. The stand alone version of the photosynthesis model is validated for two vegetation types (sugar beet and wheat). Simulated CO₂ fluxes correspond well to eddy covariance measurements for several days of the years 2008 and 2009 at a test site in a rural area in the West of Germany.

Simulated fluxes of CO_2 and H_2O at singular grid points of the coupled FOOT3DKphotosynthesis model show good agreement with measurements. It delivers realistic fluxes with respect to the general daily course and the order of magnitude. Compared to the Jarvis based big leaf scheme, simulations of latent heat fluxes with a photosynthesis based scheme for stomatal conductance are more realistic. Nevertheless, for some situations the coupled model displaces several deficiencies, which are mainly caused by problems in initialising the model.

The impact of surface heterogeneity on simulated surface fluxes is well represented. As expected, flux averages are strongly influenced by the underlying land cover. While the simulated net CO_2 fluxes are highly correlated with the leaf area index, this correlation is weaker for the latent heat flux. Photosynthetic CO_2 uptake is associated with transpirational water loss via the stomata. The resulting opposing surface fluxes of CO_2 and H_2O are reproduced with the model approach. In the coupled model net CO_2 fluxes and transpiration (and to a lesser extend net CO_2 fluxes and latent heat fluxes) are highly anti-correlated.

While the influence of the simulated surface fluxes to the general structure of the planetary boundary layer seems to be reasonable, microscale structures are not captured by the model. Budget analyses for an atmospheric column correspond well to airborne measurements, whereas point-to-point comparisons of simulated concentrations of atmospheric CO_2 and H_2O with measurements reveal some inaccuracies of initialising

and boundary values.

The well established closure of the plant stomata under elevated atmospheric CO_2 is captured well by the coupled model. The decline of the simulated stomatal conductance leads to a decrease of the transpiration and thus to a weaker simulated latent heat flux. Hence, to simulate realistic fluxes of H₂O, the photosynthetic CO_2 flux should also be considered in prospective investigations. Since these results correspond well to other studies, the coupled model provides a useful tool for the investigation of exchange processes between biosphere and atmosphere under climate change.

Inhaltsverzeichnis

Kı	Kurzzusammenfassung		i
Al	ostrac	t	iii
1	Einl	eitung	1
2	Das	TR32-Projekt und die FLUXPAT-Messkampagne	5
	2.1	Die Projekt-Struktur und das Untersuchungsgebiet	5
	2.2	Flugzeugmessungen	9
	2.3	Eddy-Kovarianz und pflanzenphysiologische Messungen	11
3	Das	meteorologische Modell FOOT3DK	13
	3.1	Das Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK	14
4	Pho	tosynthese der Pflanzen	21
5	Das	Photosynthese-Modell	25
	5.1	Das C3 single-leaf Modell	25
	5.2	Das sun/shade Modell	29
	5.3	Validierung des Photosynthese-Modells	35

6	Das gekoppelte FOOT3DK-Photosynthese-Modell		41
7 Die Modell-Konfiguration			47
8	Erg	ebnisse des gekoppelten FOOT3DK-Photosynthese-Modells	51
	8.1	Simulierte Oberflächen-Flüsse an einzelnen Gitterpunkten	52
	8.2	Simulierte Flüsse von CO_2 und H_2O über heterogenem Gelände	58
	8.3	Einfluss der Oberflächen-Flüsse auf die Struktur der PBL	63
	8.4	Simulierte Flüsse von CO ₂ und H ₂ O unter erhöhtem atmosphärischen CO ₂ -Gehalt	73
9	Zus	ammenfassung und Diskussion	77
Li	teratı	ırverzeichnis	83
Da	nksa	gung	91
Er	kläru	ing	93

1 Einleitung

Die Troposphäre der Erde kann unter bestimmten Gesichtspunkten in zwei Bereiche eingeteilt werden. Sie besteht zum einen aus der freien Atmosphäre, in der die Strömungsverhältnisse unabhängig von den Eigenschaften des Erdbodens sind. Aufgrund des fehlenden Einflusses der Boden-Reibung herrschen in dieser Schicht nahezu geostrophische Windverhältnisse, d.h. Windstärke und Windrichtung werden durch das Gleichgewicht zwischen Druckgradient- und Coriolis-Kraft bestimmt. Weitaus komplexer gestalten sich die Strömungsverhältnisse in der vom Erdboden beeinflussten planetaren Grenzschicht (englisch: planetary boundary layer PBL), dem bodennächsten Teil der Troposphäre. Da in der PBL im Prinzip alles menschliche Leben statt findet, sind die dort stattfindenden Prozesse für unser tägliches Leben von großer Bedeutung. Gleichzeitig haben die vom Menschen im Laufe der letzten Jahrhunderte verursachten Veränderungen, wie die Industrialisierung und die Veränderung des Landschaftsbildes durch Bebauung oder Waldrodung, diese Prozesse wiederum stark beeinflusst. Daher ist es von großem Interesse ein Verständnis der in der PBL stattfindenden Vorgänge zu bekommen. Die generellen Strukturen unter idealisierten Bedingungen sind mittlerweile gut verstanden: die planetare Grenzschicht unterliegt einem Tagesgang, wobei die zeitliche Entwicklung der Struktur und der Grenzschichthöhe stark von den Rauhigkeitselementen und der Landnutzung des Erdbodens, dem Sonnenstand und der Wetterlage abhängt. Die Schlüsselgrößen bilden dabei die Energie- und Massenflüsse am Boden. Die PBL kann eine Höhe von über einem Kilometer erreichen und wird ihrerseits in verschiedene Teilbereiche unterteilt. Die einige Millimeter dicke Schicht unmittelbar über dem Erdboden ist die laminare Grenzschicht (englisch: micro layer), in der die Transporte von z.B. Wärme überwiegend auf molekularer Ebene ablaufen. Die sogenannte Prandtl-Schicht (englisch: surface layer) erstreckt sich über die untersten 10 % der PBL. In diesem Bereich werden die turbulenten Flüsse als höhenkonstant angenommen. Die Prandtl-Schicht ist ein Teil der Mischungsschicht (englisch: mixed layer), die sich unter konvektiven Bedingungen fast über die geasmte PBL erstreckt. Sie zeichnet sich durch eine durch thermische und mechanische Turbulenz induzierte gute Durchmischung und somit durch höhenkonstante Profile von z.B. Temperatur und Feuchte aus. Den Übergang zwischen der PBL und der freien Atmosphäre bildet die Entrainment Zone. Nachts geht die Mischungsschicht in die sehr stabile "residual layer" über, in der es in der Regel kaum Turbulenz-Elemente gibt (aus Stull, 1988).

Die tatsächlichen Bedingungen in der PBL und in Besonderem deren zeitliche Entwicklung sind durch sehr komplexe Strukturen charakterisiert. Diese Komplexität wird durch verschiedene physikalische Mechanismen auf unterschiedlichen zeitlichen und räumlichen Skalen induziert (Adegoke et al. 2007; Fesquet et al., 2009). Neben der horizontalen Advektion von Skalaren und der Einmischung von Luftmassen aus der freien Atmosphäre (de Arellano et al., 2004; Gorska et al., 2008), wird der Zustand der PBL hauptsächlich durch turbulente Massen- und Impuls-Flüsse bestimmt (z.B. Pielke und Niyogi, 2009). Pielke und Avissar (1990) konnten einen signifikanten Einfluss der Oberflächen-Heterogenität auf die horizontale Verteilung der Oberflächen-Flüsse und die Struktur der unteren Atmosphäre nachweisen. Desweiteren haben LeMone et al. (2007) mit Hilfe von Flugzeug- und Stationsmessungen einen starken Einfluss der Vegetationsbedeckung auf die horizontale Verteilung der Oberflächen-Flüsse aufgedeckt. Sie konnten zeigen, dass der sensible Wärmestrom über Flächen mit spärlicher Vegetation maximale Werte erreicht, während der latente Wärmestrom über diesen Flächen nur schwach ausgeprägt ist. Über bewachsenen Flächen hingegen sind starke Flüsse von H_2O zu beobachten. In vielen Studien der vergangenen Jahre wurde der Fokus darauf gelegt, diese wichtigen Oberflächen-Flüsse möglichst realistisch zu simulieren (z.B. Heinemann und Kerschgens, 2005; Beyrich und Mengelkamp, 2006). Eine wichtige Vorraussetzung für eine realistische Darstellung der Flüsse ist eine adäquate Auflösung der Oberflächen-Heterogenität (Shao et al., 2001). Dabei reicht es oftmals aus, die horizontale Auflösung des Bodenmodells bis zu einem gewissen Grad zu erhöhen. Mengelkamp et al. (2006) beispielsweise konnten zeigen, dass Modelle mit dem sogenannten "effective parameter approach", bei dem für jede Bodenkachel eine mittlere Eigenschaft aus allen anteiligen Landnutzungsklassen bestimmt wird, bei einer ausreichend hohen horizontalen Auflösung (250m x 250m) ähnlich gute Flüsse produzieren wie Modelle, die den "mosaic approach" verwenden. Bei dem "mosaic approach" wird für jede anteilige Landnutzungsklasse einer Bodenkachel ein eigener Fluss bestimmt und erst dann eine Mittelung durchgeführt.

In den meisten meteorlogischen Modellen wird auch heutzutage noch ein Oberflächen-Schema verwendet, dass auf einem von Jarvis (1976) vorgeschlagenem Modell basiert. In dem Jarvis-Schema wird die parametrisierte Transpiration der Pflanzen, die über bewachsenen Flächen den größten Anteil zum gesamten latenten Wärmefluss beiträgt, nur durch meteorologische Parameter (z.B. Temperatur, Feuchte und solare Einstrahlung) gesteuert. Tatsächlich muss bei der Transpiration jedoch berücksichtigt werden, dass der Wasserverlust der Pflanzen neben den meteorologischen Parametern hauptsächlich von dem physiologischen Prozess der Pflanzen-Photosynthese abhängt, da das bei der Photosynthese von den Pflanzen benötigte CO_2 durch dieselben Öffnungen (Stomata) aufgenommen wird, durch die die Pflanzen Wasser transpirieren (Zhan und Kustas, 2001). Daher liegt es nahe, in Modellen die Massen-Flüsse über eine simulierte stomatale Leitfähigkeit an die Pflanzen-Photosynthese zu koppeln. Modelle, die die Kopplung zwischen photosynthetischer CO_2 -Aufnahme und der Transpiration berücksichtigen, produzieren häufig sehr realistische Flüsse von CO₂ und H₂O (z.B. Houborg und Soegegaard, 2004). Land-Oberflächen-Modelle dieser Art werden in den meisten Studien auf einer Skala von einzelnen Blättern oder Pflanzenbeständen angewendet und mit gemessenen meteorologischen Parametern angetrieben (Collatz et al., 1991; Werner et al., 2001). Eine Kopplung an atmosphärische Modelle wurde bisher fast ausschließlich für Klima-Szenarien auf der globalen Skala durchgeführt (Sellers et al., 1996; Dai et al., 2003). Eine Notwendigkeit und einen großen Vorteil der Verwendung eines Photosynthesebasierten Land-Oberflächen-Schemas in mesoskaligen meteorologischen Modellen oder in Wettervorhersage-Modellen haben Niyogi et al. (2009) heraus gestellt. Sie konnten zeigen, dass mit einem mesoskaligen Grenzschicht-Modell, in dem das Jarvis-Schema durch ein Photosynthese-basiertes Land-Oberflächen-Schema ersetzt wurde, realistische Oberflächen-Flüsse und Charakteristika der Grenzschicht simuliert werden können. Das Modell konnte hierbei für verschiedene Vegetationsarten validiert werden. Aufgrund einer relativ groben horizontalen Auflösung (10 km) verwenden Niyogi et al. (2009) für ihre Studie ein big-leaf Schema, bei dem die Eigenschaften der einzelnen Blätter eines Pflanzenbestandes auf das eines einzigen repräsentativen Blattes reduziert werden. Für unstrukturierte Vegetationsbestände mit geringem Blattflächen-Index (z.B. Wiese) können mit diesem sehr simplen Ansatz realistische Flüsse produziert werden. Für höher aufgelöste bzw. komplexere Pflanzenbestände mit einem hohen Blattflächen-Index (z.B. Wald und Weizenfelder) sollten jedoch aufwendigere Skalierungs-Prozeduren, wie z.B. Mehrschichten-Modelle, verwendet werden (de Pury und Farquhar, 1997).

Die vorliegende Arbeit ist Teil des Transregional Collaborative Centre TR32-Projekts, in dem die Wechselwirkungen zwischen der Landoberfläche und der unteren Atmosphäre auf verschiedenen räumlichen und zeitlichen Skalen analysiert werden. Das Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines Modells zur realistischen Darstellung von Oberflächen-Flüssen. Dabei wird der Schwerpunkt auf die hochaufgelöste Simulation von CO₂- und H₂O-Flüssen über heterogenem Gelände sowie deren Einfluss auf die Struktur der unteren planetaren Grenzschicht gelegt. Für dieses Vorhaben wird das mesoskalige meteorologische Modell FOOT3DK mit einer horizontalen Auflösung von bis zu 100 m an ein Photosynthese-Modell gekoppelt. Der ursprünglich verwendete big-leaf Ansatz wird hierbei durch eine Skalierungs-Prozedur ersetzt, in der die Pflanzenbestände in einen sonnenbeschienenn und einen im Schatten liegenden Anteil unterteilt werden. Desweiteren soll gezeigt werden, dass die Kopplung der Transpiration an die Photosynthese der Pflanzen zu besseren simulierten latenten Wärmeflüssen beiträgt.

Im folgenden Kapitel wird zunächst das TR32-Projekt sowie die Eingliederung der vorliegenden Arbeit innnerhalb des Projekts vorgestellt. Eine detaillierte Beschreibung des mesoskaligen Modells FOOT3DK folgt im dritten Kapitel. Bevor das Photosynthese-Modell sowie dessen Validierung ausführlich beschrieben wird (Kapitel 5), soll im vierten Kapitel ein Einblick in die Grundlagen der Pflanzen-Photosynthese gegeben werden. Kapitel 6 und 7 umfassen die technische Umsetzung der Kopplung des Photosynthese-Modells an FOOT3DK sowie die Konfiguration des gekoppelten Modells. Erste Resultate von Simulationen mit dem gekoppelten Modell werden im achten Kapitel vorgestellt. Diese beinhalten die simulierten Flüsse an einzelnen Gitterpunkten sowie über heterogenen Flächen, den Einfluss der Oberflächen-Flüsse auf die Grenzschicht und Simulationen unter erhöhtem atmosphärischen CO₂-Gehalt. Eine Diskussion der gezeigten Ergebnisse beschließt die Arbeit.

2 Das TR32-Projekt und die FLUXPAT-Messkampagne

2.1 Die Projekt-Struktur und das Untersuchungsgebiet

Das TR32-Projekt (Transregional Collaborative Centre TR32 "Patterns in Soil-Vegetation-Atmosphere-Systems: Modelling, Monitoring and Data Assimilation") befasst sich mit den Austausch-Prozessen zwischen der Erdoberfläche und der unteren Atmosphäre auf verschiedenen räumlichen und zeitlichen Skalen. Dieser Bereich, in dem quasi alles menschliche Leben statt findet, zeichnet sich durch extrem komplexe Strukturen und Prozesse aus. Demenstprechend handelt es sich um ein stark interdisziplinäres Projekt, an dem Wissenschaftler unterschiedlichster Disziplinen der RWTH Aachen, der Universität zu Köln, der Universität Bonn und des Forschungszentrums Jülich beteiligt sind. Innerhalb des Projekts werden im Prinzip alle Skalen von einzelnen Bodenporen bis hin zur Mesoskala abgedeckt. Das Projekt ist in einzelne Teilbereiche, sogenannte Cluster, unterteilt. Um einen Überblick zu geben werden die einzelnen Cluster im folgenden in gekürzter Form vorgestellt:

Prozesse auf der kleinsten Skala werden von Cluster A untersucht:

- A1: Porenstrukturen, Wassertransport in Böden

- A2: Charakterisierung von Transport-Eigenschaften in ungesättigten Böden

- A3: Hydraulische Eigenschaften von ungesättigten Böden auf Skalen von einigen Zentimetern bis zu einigen Metern

Die Feldskala wird von Cluster B abgedeckt:

- B1: Charakterisierung von raum-zeitlichen Mustern des Boden-Wassertransports auf der Feldskala

- B3: Raum-zeitliche Muster von Kohlenstoff-Pools in Böden

- B4: Hochskalierung lokaler CO2-, Wasser- und Wärme-Flüsse auf die Feldskala

In Cluster C werden Prozesse auf der Mikro- bis Mesoskala betrachtet:

- C1: raum-zeitliche Variabilitäts-Muster in Fluss-Einzugsgebieten und deren Einfluss auf CO₂- und H₂O-Flüsse auf der Mikro- bis Mesoskala

- C3: Analyse raum-zeitlicher Strukturen der Bodenfeuchte

- C4: Skalen-konsistente Kopplung von Atmosphären- und Landoberflächen-Modellen

Cluster D befasst sich mit atmosphärischen Prozessen auf der Mikro- bis Mesoskala: - D1: Modellierung raum-zeitlicher Muster von Energie- und Massenflüssen über heterogenem Gelände

- D2: Experimentelle Studien zu raum-zeitlichen Mustern in der Atmosphäre

- D3: Bestimmung von CO₂- und H₂O-Flüssen mit Hilfe einer 4D-VAR Assimilation

- D5: Entwicklung eines hochaufgelösten Niederschlagsmodells aus direkten und Fernerkundungs-Messungen

Das Daten-Management und die Administration wird von Cluster Z durchgeführt:

- Z1: Datenbank und Daten-Management

- Z2: Administration und Koordination



Abb. 2.1: Das TR32-Projekt untergliedert in seine Teilbereiche.

Eine schematische Darstellung der einzelnen Teilbereiche und ihre raum-zeitliche Überschneidung zeigt Abbildung 2.1. Für detailliertere Informationen zu dem TR32Projekt sei an dieser Stelle auf die entsprechende Internetseite verwiesen: http://tr32.uni-koeln.de/index.php

Die vorliegende Arbeit ist in das Cluster D1 (Modellierung raum-zeitlicher Muster von Energie- und Massenflüssen über heterogenem Gelände) eingebettet. Die Kollaboration mit anderen Clustern ist zum einen in der Bereitstellung von Antriebsdaten begründet, zum anderen werden von D1 durchgeführte Modellierungen anhand von Messdaten anderer Cluster valdidert bzw. mit ihnen verglichen (siehe Abbildung 2.2). Als Antriebsdaten benötigt das von D1 betriebene Modell FOOT3DK neben atmosphärischen Daten aus Flugzeugmessungen (Cluster D2, DIMONA) und aus einem größerskaligen Modell (Cluster C4, COSMO-LM) auch gemessene pflanzenphysiologische Parameter (Cluster D2, LAI) und satellitengestützte Oberflächenparameter (Cluster Z1, ASTER). Genaueres hierzu folgt in Kapitel 7.



Abb. 2.2: Cluster D1 und die Kollaboration mit anderen Clustern.

Für die Validierung des Modells bzw. für Vergleiche der Simulationen mit Beobachtungen werden neben Feldmessungen (C3 und B1, Eddy-Kovarianz Messungen EC) auch Flugzeugmessungen (D2, DIMONA) benutzt, welche im Rahmen der sogenannten FLUXPAT-Messkampagne durchgeführt wurden. Bevor die FLUXPAT-Messkampagne beschrieben wird, soll zunächst das TR32 Untersuchungsgebiet vorgestellt werden. Das TR32 Untersuchungsgebiet liegt im Westen von Nordrhein-Westfalen im Einzugsgebiet des Flusses Rur, an der Grenze zu Belgien und den Niederlanden (siehe Abbildung 2.3). Der Süden des Rur-Einzugsgebiets ist geprägt durch Teile der orographisch stark strukturierten Eifel. Die überwiegend vorkommende Vegetation ist Laubund Mischwald. Im Norden hingegen ist das Gebiet sehr landwirtschaftlich geprägt. Neben Raps und Zuckerrübe wird vor allem Weizen angebaut. Im Vergleich zum Süden ist der nördliche Teil des Rur-Einzugsgebiets orographisch relativ einheitlich, Hauptmerkmal ist das Rur-Tal.



Abb. 2.3: Das Rur-Einzugsgebiet. Der schwarze Kasten kennzeichnet das für die Arbeit ausgewählte Modellgebiet.

Bis auf die Stadt Aachen gibt es in dem Gebiet hauptsächlich kleinere Siedlungen und Städte. Im Nordosten grenzt das Gebiet an den Bereich der Kölner Bucht. Für das TR32-Projekt wurden im Rur-Einzugsgebiet drei Teilgebiete ausgewählt, in denen intensive Messungen durchgeführt wurden (siehe farbig markierte Bereiche in Abbildung 2.3). Das für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationen ausschlaggebende Gebiet gehört dem Teilgebiet Ellebach an und liegt im Osten des Rur-Einzugsgebiets (im folgenden als "Modellgebiet" aufgeführt, siehe schwarzer Kasten in Abbildung 2.3). Im Norden des Modellgebiets liegt das Forschungszentrum Jülich. Trotz der Nähe zur Eifel ist das Klima typisch für Mitteleuropa, so wurde für die Stadt Jülich eine Jahresmittel-Temperatur von 9.8 °C bei einer durchschnittlichen jährlichen Sonnenscheindauer von 1528 Stunden gemessen (Datenbasis: 1961-2004). Im Schnitt fallen pro Jahr 693 mm Niederschlag.

Die Orographie des Modellgebiets weist ein leichtes Süd-Nord-Gefälle auf, mit Geländehöhen von 110 - 120 m über dem Meeresspiegel im Süden und 90 - 100 m über NN im Norden. Im Nordosten des Modellgebiets befinden sich Teile des Tagebaus Hambach, welches teilweise sogar unterhalb des Meeresspiegels liegt. Westlich des Tagebaus hat sich durch künstliche Aufschüttung die Sophienhöhe gebildet, mit Höhen von über 200 m über dem Meeresspiegel.

Im Rahmen des TR32-Projekts gab es im Jahr 2008 und 2009 sogenannte FLUXPAT

Messkampagnen (**Flux**es and **Pat**terns in the Soil-Vegetation-Atmosphere-System). Innerhalb dieser Messkampagnen wurde eine Vielzahl von Messinstrumenten eingesetzt, auf deren vollständige Beschreibung an dieser Stelle verzichtet wird. Statt dessen sollen im folgenden lediglich die für die vorliegende Arbeit relevanten Messungen und deren Methoden beschrieben werden.

2.2 Flugzeugmessungen

Die Flugzeugmessungen der FLUXPAT Messkampagne wurden mit der von Swiss Met-Air zur Verfügung gestellten DIMONA durchgeführt. Die DIMONA ist ein kleiner, zweisitziger Motorgleiter. Die relativ weite Spannbreite von 16.3 m und die guten aerodynamischen Eigenschaften ermöglichen die Installation von meteorologischen und chemischen Messgeräten mit einer Last von jeweils 50 kg unterhalb der beiden Flügel, sowie nochmal einer zusätzlichen Last von 30 kg im Rumpf. Dennoch kann das Flugzeug Spitzengeschwindigkeiten von bis zu 200 km/h erreichen. Ausgestattet ist die Maschine mit hochmodernen Sensoren zur Erfassung von chemischen und physikalischen Parametern.

Zur Bestimmung der Höhe über Grund wird ein Laser Höhenmeter (RIEGL, Laser altimeter LD90-3300HR, Österreich) verwendet. Die Position des Flugzeuges wird mit Hilfe eines GPS-Systems und einem Laser Höhenmeter berechnet. Aus der Position des Flugzeuges und unter Verwendung eines Geschwindigkeits-Referenz-Systems (Oxford Technical Solutions, OXS RT31202, Großbritannien) können die Windgeschwindigkeiten u, v und w abgeleitet werden.

Die Temperatur wird mit einem Kupfer-Konstantan Wärmefühler anhand einer Referenz-Temperatur, welche mit einem Thermistor in einem Aluminiumblock bestimmt wird, gemessen (Meteolabor, Schweiz). Die Genauigkeit liegt hierbei bei 0.1 K.

Zur Feuchtebestimmung werden zwei Sensoren benutzt: ein Taupunkt Hygrometer zur Bestimmung einer Referenzfeuchte (TP3, Metolab, Switzerland) und einem Infrarot Gasanalysator für Feuchtemessungen mit einer Auflösung von 10 Hz (LI-7500, Li-Cor/USA). Neben den meteorologischen Basis-Parametern werden zusätzlich eine Vielzahl von Spurengasen gemessen. Das für die vorliegende Arbeit relevante Gas ist CO₂. Die Messung der CO₂-Konzentration geschieht in drei Schritten: ungefähr alle 30 Minuten wird mit einer Gas-Chromatographie eine hochgenaue Referenz-Konzentration gemessen, während ein geschlossener Gasanalysator (LI-6262, Li-Cor/USA) eine durchgehende Referenz-Konzentration misst. Für CO₂-Fluktuationen von 10 Hz wird das bereits oben genannte LI-7500 verwendet.

Alle gemessenen Parameter werden als 10 Hz Daten gespeichert. Bei einer Fluggeschwindigkeit von ca. 50 m/s entspricht das somit einer räumlichen Auflösung von 5 m. Für die vorliegende Arbeit werden jedoch Daten verwendet, die in einem Post-Processing auf 1 Hz gemittelt wurden. Detaillierte Informationen zur Instrumentierung der DIMONA finden sich in Neininger et al. (2001) und Schmitgen et al. (2004). Die Flugzeugmessungen verfolgten je nach Anwendung zwei verschiedene Flugstrategien. Die erste Strategie beinhaltet das Ziel einen bestimmten Punkt des Modellgebiets (siehe schwarzer Kasten in Abbildung 2.3) möglichst oft zu überfliegen. Dementsprechend wurde für diese Strategie ein Kreuzmuster geflogen. Im Rahmen der zweiten Strategie wurde ein Hexagon geflogen um Haushalts- und Energiebilanz-Berechnungen für ein möglichst großes Luftpaket durchzuführen. Für die vorliegende Arbeit sind vor allem letztere Flugmuster von Bedeutung. Ein Beispiel für eine solche Flugroute ist in Abbildung 2.4 dargestellt. Die Ausdehnung des Hektagons ist dabei durch die beiden Tagebaugebiete im Westen und Nordosten des Untersuchungsgebiets und durch die Autobahn A4 im Süden begrenzt.



Abb. 2.4: Beispiel für ein geflogenes Hexagon innerhalb der TR32 FLUXPAT Messkampagne des Jahres 2009 (blaue Linie). Die Markierungen "M" und "S" kennzeichnen die Ortschaften Merken und Selhausen. Die rote Linie stellt die Autobahn A4 dar.

Der Start- und Landepunkt der Flugzeugmessungen liegt außerhalb des Untersuchungsgebiets. Zur Erstellung von Höhen-Profilen ist das Flugzeug nach jedem Start zunächst in Höhen von bis zu 1500 m aufgestiegen, um dann im Sinkflug auf die normale Messhöhe von ca. 100 m bis 250 m in das Modellgebiet zu fliegen.

Im Jahre 2008 gab es drei Messperioden (später April, Ende Juni/Anfang Juli, Mitte August) mit jeweils bis zu 8 Tagen. An allen Tagen gab es jeweils vormittags und nachmittags eine Flugzeugmessung. Im Jahre 2009 hingegen fand jeweils nur ein Flug pro Tag statt (ca. 10 - 15 UTC). Gemessen wurde innerhalb von zwei Messperioden (später April, Anfang/Mitte August).

2.3 Eddy-Kovarianz und pflanzenphysiologische Messungen

Eine weit verbreitete Methode zur Messung von turbulenten Oberflächen-Flüssen ist die sogenannte Eddy-Kovarianz Technik. Diese Methode basiert auf der Grundidee, dass ein vertikaler turbulenter Fluss eines Skalars nach einer Reynolds-Zerlegung und einigen vereinfachenden Annahmen, wie die Vernachlässigung der Divergenz, aus der Kovarianz der Abweichung des Vertikalwindes und der Abweichung des Skalars vom jeweiligen Mittelwert bestimmt werden kann. Im Rahmen der FLUXPAT Messkampagne bestehen die Eddy-Kovarianz Stationen aus einem CSAT3 Ultraschall-Anemometer (Campbell Scientific, USA) zur Messung der vertikalen Windgeschwindigkeit und einem LI7500 Gas-Analysator (Li-Cor, Lincoln, USA) zur Bestimmung der Konzentration eines Skalars. Beide Sensoren sind an mikrometeoroligischen Stationen installiert an denen neben den turbulenten Flüssen auch die meteorologischen Parameter Strahlung, Temperatur, relative Feuchte, Windgeschwindigkeit und Luftdruck, sowie die Bodentemperatur und der Bodenwassergehalt gemessen werden. Die Daten werden in einem aufwendigen Verfahren so aufbereitet, dass sie als halbstündige Mittelwerte vorliegen. Für die vorliegende Arbeit werden Messungen von zwei mikrometeorologischen Stationen verwendet, die innerhalb des Modellgebiets liegen (siehe schwarzer Kasten in Abbildung 2.3). Die Stationen sind auf einem 190m x 60m großem Weizenfeld und auf einem 178m x 237m umfassendem Zuckerrübenfeld bei Selhausen bzw. Merken installiert (siehe Kennzeichnungen in Abbildung 2.4). Nähere Informationen zu den Eddy-Kovarianz Messungen sind in Graf et al. (2010a, 2010b) zu finden.

Der für die vorliegende Arbeit wichtigste pflanzenphysiologische Parameter ist der Blattflächen-Index (englisch: leaf area index LAI). Der LAI ist die Summe der einseitigen Oberflächen aller Blätter eines Pflanzenbestandes pro Quadratmeter Grundfläche (in m^2/m^2). Der LAI kann durchaus größer als eins sein, wenn eine Pflanze aus mehreren Blattschichten übereinander besteht. So werden beispielsweise für Zuckerrübe in Phasen des maximalen Wachstums LAI-Werte von mehr als 5 m^2/m^2 gemessen. Es gibt zwei verschiedene Arten den LAI zu messen, welche beide im Rahmen der FLUXPAT Messkampagne zum Einsatz kamen. Bei der sogenannten destruktiven Methode werden von dem zu vermessenden Pflanzenbestand punktuell Pflanzenproben abgeerntet und dann im Labor gescannt. Die Messung des LAI der abgeernteten Proben wird mit einem LI3000A Areameter (LiCor, Lincoln, USA) durchgeführt, wobei beispielsweise die Distanz zwischen einzelnen Getreide-Reihen bei der Bestimmung des LAI berücksichtigt wird.

Bei der nicht-destruktiven Methode wird die LAI-Messung am Wachstumsort durchge-

führt, ohne in das Ökosystem aktiv einzugreifen. Zur Messung wird ein LICOR LAI2000 Analysator (LiCor, Lincoln, USA) verwendet, welcher im Prinzip auf Lichtintensitäts-Messungen basiert. Durch den Vergleich der Lichtintensität am Grund des Pflanzenbestandes mit der Intensität der einfallenden Strahlung oberhalb des Pflanzenbestandes wird der LAI, mit Hilfe einer Wahrscheinlichkeitsrechnung für ein Photon bis in eine bestimmte Tiefe des Pflanzenbestandes einzudringen, abgeschätzt.

Die destruktive Methode wurde in zweiwöchigen Abständen teilweise während einer ganzen Wachstumsphase durchgeführt, die nicht-destruktive Technik hingegen nur für einzelne ausgewählte Tage.

3 Das meteorologische Modell FOOT3DK

Das mesoskalige meteorologische Modell FOOT3DK (Flow Over Orographically structured Terrain 3-Dimensional, Kölner Version) ist ein prognostisches, nichthydrostatisches Modell und arbeitet mit topographie-folgenden Koordinaten (Born, 1989). Geeignet für die Mesoskala bis hin zur Mikroskala, und erweitert für eine Anwendung auf die gesamte Troposphäre, ermöglicht FOOT3DK ein mehrfaches passives Nesten in geeignete externe Modelle oder in sich selbst (Brücher, 1997) Es wurde bisher für eine Vielzahl von Untersuchungen verwendet. Brücher et al. (1994a,b) beispielsweise haben das Modell für die Erstellung synthetischer Windklimatologien über orographisch stark strukturiertem Gelände genutzt, während Pinto et al. (2009) das Auftreten von Böen in Sturmsituationen untersucht haben. Die Ausbreitung von Schadstoffen in dicht besiedelten Gebieten von Nordrhein-Westfalen wurde unter anderem von Brücher et al. (2001) simuliert. Shao et al. (2001) haben FOOT3DK benutzt, um Oberflächen-Flüsse von Energie und Impuls über heterogenem Gelände abzuschätzen. Hübener et al. (2005) haben die Evapotranspiration in einem semi-ariden Gebiet simuliert, während Sogalla et al. (2006) den Einfluss von Oberflächen-Eigenschaften auf den Niederschlag in West-Afrika untersucht haben. Eine sehr detaillierte Modell-Beschreibung findet sich in Brücher (1997) oder in Shao et al. (2001). Daher sollen im folgenden lediglich die für die vorliegende Arbeit relevanten Parametrisierungen und Modellkomponenten vorgestellt werden.

Das numerische Gitter von FOOT3DK besteht aus einem regelmäßigem Arakawa-C-Gitter (Mesinger und Arakawa, 1976), wobei jeder Gitterpunkt diskretisierte Informationen enthält, welche repräsentativ für ein atmosphärisches Luftpaket sind. Dies sind neben Skalaren wie die Feuchte oder die Temperatur auch Komponenten der Windgeschwindigkeit, des Impulses und der turbulenten Flüsse. Für jeden Gitterpunkt werden in jedem Zeitschritt die Grundgleichungen über eine zeitliche Diskretisierung gelöst. Diese Grundgleichungen umfassen den 1. Hauptsatz der Thermodynamik, die Bewegungsgleichungen, die Kontinuitätsgleichung und prognostische Gleichungen für Feuchtegrößen. Die vertikale Auflösung des Modells kann in Bodennähe frei gewählt werden, wobei die Dicke Δz_{min} der untersten Modellschicht mindestens ein Zehntel der horizontalen Auflösung betragen sollte. Mit Hilfe eines iterativen Lösungsverfahrens wird ein konstanter Spreizfaktor c berechnet, so dass für die Dicke der k-ten Modellschicht gilt

$$\Delta z_k = c^{(k-1)} \Delta z_{min} \tag{3.1}$$

In FOOT3DK wird in jedem Zeitschritt die Advektion für die potentielle Temperatur, für die turbulente kinetische Energie (TKE) und für die drei Feuchtegrößen Wasserdampf, Wolkenwasser und Regenwasser berechnet. Für die horizontale Advektion kann hierbei zwischen dem klassischen Upstream-Schema und dem quasimonotonen Semi-Lagrange-Verfahren (QMSL; Bermejo und Staniforth, 1992) gewählt werden, während die vertikale Advektion immer über das Upstream-Schema gelöst wird. Das QMSL-Verfahren hat den Vorteil einer nur sehr geringen numerischen Diffusion, d.h. Signalformen werden nahezu erhalten, es ist aber nicht exakt massenerhaltend. Das Upstream-Schema hingegen ist monoton und massenerhaltend, unterliegt dafür jedoch einer höheren numerischen Diffusion. Die Wahl des zu verwendenden Advektions-Schemas hängt jeweils von der zu simulierenden Situation ab.

In FOOT3DK werden subskalige turbulente Flüsse über einen sogenannten Gradientenansatz parametrisiert. So lässt sich zum Beispiel der turbulente Fluss eines Skalars ϕ in z-Richtung wie folgt bestimmen:

$$F_{\varphi_z} = -K_{z\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \tag{3.2}$$

 $K_{z\phi}$ ist hierbei der vertikale Diffusionskoeffizient. Dieser wird mittels einer Schließung $1\frac{1}{2}ter$ Ordnung der Level-2,5-Formulierung nach Mellor und Yamada (1982) bestimmt. Am Unterrand des Modells wird zur Bestimmung der turbulenten Flüsse die Monin-Obukhov-Theorie mit einer Parametrisierung der Stabilitätsfunktion nach Louis (1979) benutzt. Bei dieser Parametrisierung werden stabilitätsabhängige Profilfunktionen unter Verwendung der Bulk-Richardson-Zahl berechnet. Die Bulk-Richardson-Zahl ist ein Maß für die Windscherung und die Stabilität der Atmosphäre. Mit den nach diesen Ansätzen bestimmten turbulenten Flüssen werden die unteren Randbedingungen für die TKE bestimmt. Eine detaillierte Beschreibung der Turbulenz-Parametrisierung in FOOT3DK findet sich in der Arbeit von Brücher (1997).

Die für die vorliegende Arbeit wichtigste Modellkomponente von FOOT3K ist das Land-Oberflächen-Schema. Dieses wird ausführlich im folgenden Unterkapitel beschrieben.

3.1 Das Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK

Das Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK basiert auf dem sogenannten ISBA-Modell (Interaction Soil-Biosphere-Atmosphere-Model) nach Noilhan and Planton (1989). Dieses Modell besteht aus zwei Bodenschichten und einer Vegetationsschicht (siehe Abbildung 3.1). Die erste Bodenschicht umfasst die oberen 9 cm des Untergrunds, während die zweite Bodenschicht bis in eine Tiefe von 1 m reicht. Hierbei wird die Annahme gemacht, dass die Bodentemperatur und die Bodenfeuchte in 1 m Tiefe auf Zeitskalen von einigen Tagen nahezu konstant sind. Die Vegetationsschicht wird durch den sogenannten big-leaf-approach parametrisiert. Bei diesem Ansatz werden die Eigenschaften der einzelnen Blätter des gesamten Pflanzenbestandes auf das eines einzigen großen Blattes gemittelt. Dieses Blatt hat dabei einen Blattflächen-Index (LAI), der dem der Summe der LAI aller Einzelblätter entspricht. Der LAI ist ein Maß für die Gesamtfläche, die alle auf einem Quadratmeter vorkommenden Einzelblätter umfassen. Pflanzen mit vielen einzelnen Blättern in verschiedenen Bestandstiefen, wie z.B. Bäume, haben somit einen höheren LAI als Pflanzen, welche nur aus einer Bestandsschicht bestehen, wie z.B. Gras.



Abb. 3.1: Das Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK (E_g : Verdunstung vom Boden; E_w : Verdunstung von Wasserflächen; E_v : Verdunstung von den Blattoberflächen; E_{tr} : Transpiration; T_s : Oberflächentemperatur; w_r : Blatt-Interzeptionswasser; w_g : oberflächennahe Bodenfeuchte; w_2 : mittlere Bodenfeuchte bis in 1 m Tiefe).

Zur prognostischen Behandlung der Oberflächentemperatur T_s wird in dem Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK nicht mit absoluten Temperaturen gearbeitet, sondern mit Temperaturdifferenzen. Hierzu werden zwei prognostische Gleichungen gelöst:

$$\frac{\partial \vartheta_1}{\partial t} = \gamma_1 G - (\alpha_1 \vartheta_1 - \beta_1 \vartheta_2) \tag{3.3}$$

$$\frac{\partial \vartheta_2}{\partial t} = \beta_2 \vartheta_1 - \alpha_2 \vartheta_2 \tag{3.4}$$

 ϑ_1 ist die Temperaturdifferenz zwischen der Oberfläche und 1 m Tiefe, ϑ_2 die Differenz zwischen 9 cm und 1 m Tiefe. Dieser Ansatz nach Jacobsen und Heise (1982) wird auch Extended-Force-Restore-Methode genannt. Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung 3.3 entspricht einem Energie- oder auch Antriebs-Term (englisch: force), während der zweite Term die Umspeicherung (englisch: restore) von Wärme beschreibt. *G* ist der Bodenwärmestrom, wobei der Koeffizient γ_1 die Bodenfeuchte und die für den Wärmetransport ausschlaggebenden Bodeneigenschaften beinhaltet. Gleichung 3.4 für ϑ_2 enthält nur einen Umspeicherungs-Term. Die Koeffizienten α_1 , β_1 , β_2 und α_2 sind so gewählt, dass Temperaturwellen innerhalb des Bodens mit Amplituden zwischen 3 Stunden und einem Tag gut wieder gegeben werden. Mit Hilfe der o.g. Temperaturdifferenzen wird die Oberflächentemperatur T_s zum Zeitpunkt t + 1 wie folgt bestimmt:

$$T_s^{t+1} = T_s^t + \vartheta_1^{t+1} - \vartheta_1^t$$
(3.5)

Das Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK arbeitet mit 3 Feuchtegrößen. Das sind zum einen die oberflächennahe Bodenfeuchte w_g der obersten 9 cm und die mittlere Bodenfeuchte w_2 der gesamten Bodenschicht bis in 1 m Tiefe, und zum anderen das sogenannte Blatt-Interzeptionswasser w_r , also das Wasser welches sich auf den Blattoberflächen sammelt. Für die prognostische Behandlung dieser Größen wird das sogenannte Bucket-Schema verwendet. Bei diesem Ansatz werden laterale Feuchteflüsse im Boden vernachlässigt, d.h. Feuchte kann nur vertikal von tiefere in höhere (oder umgekehrt) Schichten verlagert werden. Die Parametrisierung für die prognostische Gleichung des Interzeptionswasser w_r ist relativ simpel:

$$\frac{\partial w_r}{\partial t} = veg P - \rho_s E_v \tag{3.6}$$

Der Niederschlag *P* wird hierbei mit der Vegetationsbedeckung *veg* gewichtet, da nur das Wasser, welches direkt auf die Blätter fällt, für den Interzeptionsspeicher von Bedeutung ist. Eine Senke für das Interzeptionswasser bildet die Verdunstung von der Vegetationsoberfläche E_v , welche mit der Luftdichte in Bodennähe ρ_s gewichtet wird. In der vorliegenden Arbeit werden keine Niederschlagsereignisse betrachtet, daher wird das Interzeptionswasser w_r überall mit 0 initialisiert.

Die oberflächennahe Bodenfeuchte w_g wird wie folgt aktualisiert:

$$\frac{\partial w_g}{\partial t} = \frac{1}{\rho_w \Delta z_1} c_1 [(1 - veg)P - \rho_s E_g] - \frac{c_2}{\tau} (w_g - w_{g_{eq}})$$
(3.7)

 c_1 und c_2 sind bodenspezifische Koeffizienten, ρ_w und ρ_s sind die Dichten von Wasser bzw. Luft in Bodennähe, Δz_1 ist die Dicke der ersten Bodenschicht (9 cm) und τ beträgt 86400 Sekunden (entpsr. 24 Stunden). In Gleichung 3.7 wird der Niederschlag *P* mit (1 - veg) gewichtet, da nur das Wasser, welches nicht auf die Vegetationsoberfläche fällt, den Boden erreicht. Die direkte Verdunstung vom Boden E_g bildet hierbei eine Senke für w_g . Der zweite Term auf der rechten Seite von Gleichung 3.7 beschreibt das Sickerverhalten von Wasser im Boden. w_{geq} ist der sogenannte Gleichgewichts-Wassergehalt, also der Wassergehalt bei dem die nach unten wirkende Gravitationskraft und die nach oben gerichtete Kapillarkraft ausgeglichen sind. Ist beispielsweise die oberflächennahe Bodenfeuchte $w_g > w_{geq}$, so überwiegt die Gravitationskraft und Bodenwasser sickert aus der ersten Bodenschicht in tiefere Schichten und steht dem oberen Feuchtereservoir somit nicht mehr zur Verfügung.

Die prognostische Gleichung des mittleren Bodenfeuchtegehalts w_2 berechnet sich mittels

$$\frac{\partial w_2}{\partial t} = \frac{1}{\rho_w \Delta z_2} [(1 - veg)P + veg R_{veg} - \rho_s (E_g + E_{tr})]$$
(3.8)

Neben dem Niederschlag P kommt als Quelle für w_2 der Runoff von den Vegetationsoberflächen R_{veg} hinzu, als Senke die Transpiration der Pflanzen E_{tr} , also das Wasser welches die Pflanzen über die Wurzeln aufnehmen und an die Atmosphäre abgeben. Es wird folglich die stark vereinfachte Annahme gemacht, dass die Wurzeln der Pflanzen immer bis in Tiefen unterhalb von 9 cm reichen und somit nur dem Feuchtereservoir w_2 Wasser entziehen. Die Transpiration E_{tr} , sowie die Verdunstung von der Vegetationsoberfläche E_v und die direkte Verdunstung vom Boden E_g , gehen in die Parametrisierung des latenten Wärmestroms *LE* und somit in die Energiebilanzgleichung des Bodens ein. In der Energiebilanzgleichung des Bodens wird der Bodenwärmestrom *G* als Residuum der Gesamt-Strahlungsbilanz *Q* und der turbulenten Flüsse sensibler und latenter Wärme *H* bzw. *LE* bestimmt:

$$G = Q - H - LE \tag{3.9}$$

Die Gesamt-Strahlungsbilanz Q setzt sich aus der kurzwelligen Einstrahlung S_{\downarrow} , der langwelligen Ausstrahlung L_{\uparrow} und der atmosphärischen Gegenstrahlung L_{\downarrow} zusammen:

$$Q = (1 - \alpha)S_{\downarrow} + L_{\downarrow} - L_{\uparrow} \tag{3.10}$$

 α ist hierbei die Albedo. In der Modellkomponente zur Berechnung von Q werden neben der kurzwelligen Lichtdurchlässigkeit der Atmosphäre auch Wolkeneffekte betrachtet. Da das Modell für kurze Laufzeiten von wenigen Tagen konzipiert wurde, wird die Strahlungsdivergenz in FOOT3DK nicht berücksischtigt, da diese erst ab einer Skala von sechs Tagen von Bedeutung ist (Brücher, 1997).

Eine Parametrisierung des turbulenten Flusses sensibler Wärme H wurde von Louis (1979) vorgeschlagen:

$$H = \rho_s c_p \frac{\theta_s - \theta_a}{r_a} \tag{3.11}$$

Es handelt sich hierbei um einen sogenannten Gradientenansatz. So sind θ_s und θ_a die potentiellen Temperaturen an der Oberfläche bzw. in dem untersten atmosphärischen Modell-Level. r_a ist als eine Art aerodynamischer Widerstand für den Transfer von Wärme und Feuchte zwischen Erdoberfläche und unterer Atmosphäre zu deuten. Dieser hängt neben der Windgeschwindigkeit und der Rauhigkeitslänge von der Bulk-Richardson-Zahl ab, welche ein Maß für die Stabilität der Atmosphäre darstellt. c_p ist die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck (1005 $\frac{J}{k_0 K}$).

Der turbulente Fluss latenter Wärme *LE* setzt sich aus vier anteiligen Feuchteflüssen zusammen (Noilhan und Planton, 1989; siehe Abbildung 3.1):

$$LE = \rho_s L(E_w + E_g + E_v + E_{tr}) \tag{3.12}$$

L ist die spezifische Verdampfungswärme (2500000 $\frac{J}{kg}$). Wie der turbulente Fluss sensibler Wärme *H* werden auch die anteiligen Feuchteflüsse von *LE* über einen Gradientenansatz parametrisiert. So gilt für die Verdunstung von offenen Wasserflächen *E_w*:

$$E_w = \frac{\delta_{water}}{r_a} (q_{sat}(T_s) - q_a) \tag{3.13}$$

 δ_{water} ist hierbei der jeweilige prozentuale Anteil des Gitterpunktes, der mit offenen Wasserflächen bedeckt ist. Wie auch bei dem Wärmeaustausch ist der Feuchtefluss durch den aerodynamischen Widerstand r_a begrenzt. $q_{sat}(T_s)$ ist die gesättigte spezifische Feuchte bei einer Oberflächentemperatur T_s , q_a die spezifische Feuchte in dem untersten atmosphärischen Modell-Level.

Für die direkte Verdunstung vom Boden E_g gilt:

$$E_g = \frac{\delta_{soil}}{r_a} (h_u q_{sat}(T_s) - q_a)$$
(3.14)

 δ_{soil} ist der Anteil des Gitterpunktes, der aus unbewachsenem Boden besteht, h_u ist die relative Feuchte an der Erdoberfläche. Im Falle von Niederschlag wird in E_g zusätzlich die Verdunstung von versiegelten Flächen berücksichtigt.

Der Term E_{ν} bildet die Verdunstung von mit Wasser benetzten Vegetationsoberflächen:

$$E_{v} = \frac{\delta_{veg} \delta_{wveg}}{r_{a}} (q_{sat}(T_{s}) - q_{a})$$
(3.15)

Dementsprechend handelt es sich bei dem Ausdruck $\delta_{veg}\delta_{wveg}$ um den Anteil der Vegetation, der mit Wasser bedeckt ist.

Neben dem aerodynamischen Widerstand r_a wird die Transpiration der Pflanzen E_{tr} durch den stomatalen Widerstand r_s gesteuert:

$$E_{tr} = \frac{\delta_{veg}(1 - \delta_{wveg})}{r_a + r_s} (q_{sat}(T_s) - q_a)$$
(3.16)

Bei den Stomata handelt es sich um kleine verschließbare Poren innerhalb der grünen Pflanzenteile, durch die die Pflanzen Wasser an die Umgebung abgeben. Die Öffnungsweite dieser Stomata hängt von den Umweltbedingungen in der direkten Umgebung der Pflanzen ab und wird bei diesem Ansatz wie folgt parametrisiert:

$$r_s = \frac{r_{s_{min}}}{LAI} \frac{F_1}{F_2 F_3 F_4}$$
(3.17)

 $r_{s_{min}}$ ist hierbei der pflanzenspezifische minimale stomatale Widerstand, während die Parameter F_1 bis F_4 den Einfluss der Umweltfaktoren auf den stomatalen Widerstand beschreiben. Diese Faktoren umfassen die photosynthetisch aktive Strahlung PAR (F_1), den Stress der Pflanzen durch Wassermangel (F_2), den Wasserdampfdruckdefizit (F_3) und die oberflächennahe Temperatur (F_4).

Das Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK arbeitet mit dem sogenannten "effectiveparameter" Ansatz (Arain et al., 1996). Bei diesem Ansatz werden die jeweiligen individuellen Eigenschaften aller anteiligen Landnutzungsklassen (LNK) eines Gitterpunktes bzw. einer Bodenkachel zu einer einzigen Eigenschaft zusammen gefasst, welche dann repräsentativ für den Gitterpunkt ist. Mit Hilfe dieser "mittleren" Eigenschaften wird für den Gittepunkt ein einziger Fluss (z.B. latenter Wärme) berechnet. Dieser Ansatz steht im Gegensatz zu dem sogenannten Kachel-Ansatz (englisch: tile approach), bei dem für jede anteilige LNK zunächst ein Fluss berechnet wird und diese anteiligen Flüsse schließlich zu einem einzigen für den Gitterpunkt repräsentativen Fluss gemittelt werden. Im Falle des "effective-parameter" Ansatz benötigt das Modell FOOT3DK also zunächst Informationen zu den mittleren Eigenschaften aller Gitterpunkte. Diese Informationen werden mit Hilfe eines Katasters erzeugt. Die Umsetzung zur Erstellung dieser mittleren Eigenschaften soll hier anhand eines Beispiels illustriert werden. Wie in Abbildung 3.2 angedeutet, ist ein Gitterpunkt des Modells repräsentativ für eine Bodenkachel, in diesem Fall mit einer Fläche von 1km x 1km.



Abb. 3.2: Beispiel für eine Bodenkachel mit den jeweiligen anteiligen LNK's

Das an FOOT3DK zu übergebende Kataster enthält neben der Orographie Informationen über die jeweiligen anteilgen Landnutzungsklassen, die in jeder Bodenkachel des Modells vorkommen. Das Kataster wird mit Hilfe von aus Satellitenmessungen klassifizierten LNK's erstellt (siehe Kapitel 7). In dem gezeigten Beispiel besteht die Bodenkachel zu 50% aus Wiese, und zu jeweils 25% aus Siedlung und unbewachsenem Boden. Da für die vorliegende Arbeit Simulationen für ländlich geprägte Gebiete durchgeführt werden, wird angenommen, dass die Siedlungen zu lediglich 50% versiegelt sind. Für die übrigen 50% wird ein LAI von 2.3 angenommen. Die Landnutzungsklasse Wiese hat in dem gezeigten Beispiel einen LAI von 2.0. Ein LAI von 0.1 für unbewachsenen Boden soll Unkraut und einzelne Grasbüschel repräsentieren. Damit ergibt sich für den gesamten Gitterpunkt ein mittlerer LAI von:

$$LAI = \delta_{Wiese} LAI_{Wiese} + \delta_{Boden} LAI_{Boden} + \delta_{Siedlung} \delta_{unversiegelt} LAI_{Siedlung}$$
(3.18)

$$LAI = 0.5 \cdot 2.0 + 0.25 \cdot 0.1 + 0.25 \cdot 0.5 \cdot 2.3 \tag{3.19}$$

$$LAI = 1.3125$$
 (3.20)

In dem gezeigten Beispiel wird also der mittlere LAI von 1.3125 an das Modell FOOT3DK übergeben, um z.B den stomatalen Widerstand r_s des Gitterpunktes (siehe Gleichung 3.17) und damit die Transpiration E_{tr} (siehe Gleichung 3.16) zu berechnen. Weitere LNK-spezifische Parameter welche auf diese Weise gemittelt werden sind z.B. die Albedo α (siehe Gleichung 3.10), der minimale stomatale Widerstand $r_{s_{min}}$ (siehe Gleichung 3.17) und die Vegetationsbedeckung δ_{veg} (siehe Gleichung 3.15 und 3.16). Alle LNK-spezifischen Parameter können vor jeder Simulation in einer Parameter-Liste beliebig gesetzt und somit der zu simulierenden Situation angepasst werden.

Bisher wurden in dem Modell FOOT3DK keine CO₂-Flüsse und Konzentrationen betrachtet. Um diese simulieren zu können, wird FOOT3DK an ein Photosynthese-Modell gekoppelt. Die theoretischen Grundlagen zur Photosynthese der Pflanzen und das Modell zur Simluation der Photosynthese sollen in den folgenden zwei Kapiteln vorgestellt werden.

4 Photosynthese der Pflanzen

Natürliche Organismen müssen ständig Energie aufwenden, um ihre innere Struktur aufrecht zu erhalten. Pflanzen beziehen diese Energie in der Regel aus dem Abbau makromolekularer Substanzen, wie z.B. Glucose. Dieser Vorgang wird auch Dissimilation genannt. Dabei handelt es sich um einen hoch komplizierten Prozess, auf den hier nicht im einzelnen eingegangen werden soll. Stark vereinfacht dargestellt wird bei der Dissimilation der C6-Körper Glucose (Molekül mit sechs Kohlenstoff-Atomen) in zwei C3-Körper Pyrovat zur Gewinnung von zwei Nukleotiden Adenosintrisphosphat (ATP) aufgespalten. ATP ist eine universell verfügbare Energieform innerhalb der Zelle, die genutzt wird um die Zellstruktur aufrecht zu erhalten und andere energieliefernde Prozesse zu regulieren. Um das Überleben der Pflanze sicher zu stellen muss also ständig neue Glucose gebildet werden. Die Photosynthese der Pflanzen ist hierbei einer der meist verbreitetsten Prozesse für die Neubildung dieser Glucose. Zugleich werden bei der Photosynthese auch direkt ATP gewonnen, was zur Folge hat, dass die Dissimilation im Licht stark gehemmt ist.

Die Photosynthese ist weithin bekannt als der Prozess, bei dem die Pflanze CO_2 aus der Atmosphäre aufnimmt und O_2 wieder abgibt. Die chemische Reaktionsgleichung lautet:

$$6CO_2 + 6H_2O \to C_6H_{12}O_6 + 6O_2 \tag{4.1}$$

Das erste Element auf der rechten Seite von Gleichung 4.1 ist Glucose. Tatsächlich handelt es sich bei der Photosynthese um einen sehr komplexen Prozess, der nach wie vor Gegenstand intensiver Untersuchungen ist und dessen exakte Beschreibung den Rahmen dieser Arbeit bei weitem überschreiten würde. Eine stark vereinfachte Darstellung der Photosynthese ist in Abbildung 4.1 gezeigt. Der Haupt-Energie-Lieferant für die Photosynthese ist das Sonnenlicht. Hauptsächlich rotes und blaues Licht wird von den Pigmenten Chlorophyll a und Chlorophyll b absorbiert, weshalb die meisten Pflanzen grün erscheinen. Die absorbierte Strahlung, auch photosynthetisch aktive Strahlung (englisch: photosynthetically active radiation PAR) genannt, wird in einen Elektronen-Transport J umgewandelt, bei dem Elektronen auf ein höheres Energieniveau gebracht werden. In einer Kette von sogenannten Reduktions-Systemen werden diese aktivierten Elektronen langsam wieder in ihren Grundzustand zurück versetzt, wobei die dabei frei werdende Energie in ATP und NADPH, die reduzierte Form von NADP⁺ (Nicotinamid-adeninendinakloetid-phosphat), gespeichert wird (siehe Zyklus 1 in Abbildung 4.1). In dieser Lichtreaktion wird also photoelektrische Energie in photochemische Energie umgewandelt. ATP ist der universelle Energielieferant für alle in der Photosynthese ablaufenden Prozesse.



Abb. 4.1: Vereinfachte schematische Illustration der Pflanzen-Photosynthese. Zur Abkürzungserklärung siehe Text.

Die eigentliche CO₂-Aufnahme geschieht während der sogenannten Carboxylierung (Zyklus 2 in Abbildung 4.1). Das aufgenommene CO₂ wird an den C5-Körper Ribulose-1.5-bisphosphat (RuBP) gebunden, das daraus resultierende C6-Element zerfällt dabei direkt wieder in die zwei C3-Elemente Phospho-Glycerinsäure (PGS). Pflanzen die diese Form der Carboxylierung durchführen zählen daher zu der Gattung der C3-Pflanzen. Unter Verbrauch eines in der Lichtreaktion gewonnenen ATP's wird das PGS in 1.3-di-Phosphor-Glycerinsäure phosphoryliert, welches wiederum durch eine Reduktion mit zwei Wasserstoffatomen, welche von dem NADPH stammen, zu Glycerin-Aldehyd-3-Phosphat umgewandelt wird, eine Vorstufe der zu den Hexosen gehörenden Glucose (siehe Prozess 5 in Abbildung 4.1). Für die Carboxylierung wird ein Katalysator benötigt, also ein Stoff der die Reaktion beschleunigt ohne selbst verbraucht zu werden. Im Falle der C3-Photosynthese ist dies das Enzym Ribulose-1.5-bisphosphat-carboxlyaseoxygenase (RUBISCO). RUBISCO kann neben der Carboxylierung einen anderen Prozess katalysieren, die sogenannte Oxygenierung (auch Photorespiration genannt, siehe Zyklus 3). In diesem Prozess wird lediglich ein PGS durch die Bindung von O_2 an RuBP erzeugt. Es wird daher in Fachkreisen viel diskutiert ob es sich dabei um eine Fehlfunktion handelt. Ein weiteres in der Oxygenierung produziertes Zwischenprodukt ist Phosphoglykolat (PGIA), welches unter Aufnahme von O_2 und Abgabe von CO_2 zu 0.5 PGS umgewandelt wird. Da die Carboxylierung und die Oxygenierung um denselben Katalysator RUBISCO "konkurrieren", bildet die begrenzte RUBISCO-Kapazität einen die Photosynthese limitierenden Faktor (siehe auch Kapitel 5.1). Ein Gebiet der neueren Biochemie an dem intensiv geforscht wird, ist die künstliche Herstellung effektiverer RUBISCO Verbindungen (siehe z.B. Liu et al., 2010)

Das während der Carboxylierung als CO_2 -Akzeptor dienende RuBP steht nach der Bindung mit CO_2 nicht mehr zur Verfügung, d.h. es muss ständig regeneriert werden um die Photosynthese aufrecht zu erhalten. Diese Regenerierung findet in dem sogenannten Calvin-Zyklus statt (in Abbildung 4.1 nur angedeutet als Zyklus 4). In diesem werden zehn von in der Carboxylierung insgesamt zwölf gebildeten PGS unter Verbrauch von sechs ATP zur Wiederherstellung von sechs RuBP genutzt. Das ATP wiederum wird wie oben bereits erwähnt in der Lichtreaktion gebildet (siehe Zyklus 1 in Abbildung 4.1), so dass die Elektronen-Transport-Rate *J* und somit die solare Einstrahlung den zweiten Faktor bildet, welcher die Photosynthese-Aktivität der Pflanzen einschränkt (siehe Kapitel 5.1).

Die CO₂-Aufnahme erfolgt durch die Stomata der Pflanzen. Das Öffnen dieser Stomata geht mit einem gleichzeitigen, "unfreiwilligen" Wasserverlust der Pflanzen durch diese Öffnungen einher. Dieser Wasserverlust, welcher dadurch zustande kommt, dass der Partialdruck des Wassers innerhalb der Blätter höher ist als in der Umgebungsluft, ist auch bekannt als Transpiration (siehe auch Kapitel 3.1). Aus diesem Grund ist bei C3-Pflanzen eine hohe CO₂-Aufnahme im allgemeinen mit einem hohen Wasserverlust verbunden, so transpiriert z.B. eine Sonnenblume pro Tag bis zu 14 mal soviel Wasser wie ein ausgewachsener Mensch. Gleichzeitig hat die Transpiration aber auch wichtige Funktionen für das Überleben der Pflanze, so dient das in der Pflanze transportierte Wasser der Kühlung und dem Ferntransport von Mineralien und Nährstoffen. Im Laufe der Evolution sind Pflanzengattungen entstanden, die durch zusätzliche Mechanismen einen hohen Wasserverlust verhindern. Ein Beispiel hierfür sind die CAM-Pflanzen, welche einen Weg gefunden haben das benötigte CO2 während der Nacht aufzunehmen und zu speichern. Durch die kühlere Umgebungsluft fällt der Wasserverlust Nachts deutlich geringer aus. Tagsüber wird dann das gespeicherte CO₂ bei starker Sonneneinstrahlung aber geschlossenen Stomata in den Photosynthese-Kreislauf eingeschleust. Ein weiteres Beispiel sind die sogenannten C4-Pflanzen. Bei diesen wird CO₂ durch ein zusätzliches Enzym (PEP Carboxylase) vorfixiert und in die Bündelscheidenzellen gepumpt. Der dadurch lokal erhöhte CO₂-Partialdruck führt dazu, dass auch bei nur gering geöffneten Stomata ausreichend CO₂ in den Photosynthese-Kreislauf gepumpt wird. Die meisten in den mittleren Breiten vorkommenden Pflanzen gehören der Gattung der C3-Pflanzen an. Ein Beispiel für eine C4-Pflanze ist Mais. Da dieser Pflanzentyp für die vorliegende Arbeit keine Rolle spielt, soll hier auf eine nähere Beschreibung der C4-Pflanzen verzichtet werden. Detaillierte Informationen finden sich z.B. in Peisker und Handerson (1992). Aus demselben Grund wird für diese Arbeit lediglich ein Modell für C3-Pflanzen benötigt. Dieses wird im folgenden Kapitel ausführlich beschrieben.

5 Das Photosynthese-Modell

Das für die vorliegende Arbeit angewendete Photosynthese-Modell besteht aus zwei Teilen. Dies ist zum einen ein C3 single-leaf Modell, also ein Modell welches die Photosynthese-Rate eines einzelnen Blattes einer C3-Pflanze simuliert. Desweiteren wird ein Modell zur Hochskalierung von der Blatt- auf die Pflanzenbestands-Ebene benötigt. In dieser Arbeit wird hierfür ein sogenanntes sun/shade-Modell benutzt, welches den gesamten Pflanzenbestand in einen Anteil sonnenbeschienener und in einen Anteil im Schatten liegender Blätter unterteilt. Beide Modelle werden im folgenden ausführlich beschrieben.

5.1 Das C3 single-leaf Modell

Ein Modell zur Simulation der Photosynthese eines einzelnen Blattes einer C3-Pflanze wurde bereits 1980 von Farquhar et al. entwickelt. Es handelt sich nach wie vor um eines der gebräuchlichsten C3 single-leaf Modelle. Dementsprechend umfangreich ist die in der Fach-Literatur beschriebene Anwendung des Modells (z.B. Harley et al., 1992; Werner et al., 2001). Insgesamt wurde die enstprechende Veröffentlichung von Farquhar et al. (1980) bereits über 2000 mal zitiert. Die hier beschriebene Modell-Anwendung basiert auf einer Arbeit von Ryel et al. (1993).

Die Grundannahme bei dem von Farquhar et al. (1980) entwickelten Modell ist die, dass mit jedem während der Carboxylierung aufgenommenem Mol CO_2 (siehe Zyklus 2 in Abbildung 4.1 aus Kapitel 4) ein halbes Mol CO_2 für die Oxygenierung (siehe Zyklus 3 in Abbildung 4.1) abgegeben wird. Die Netto-Photosynthese *A* eines einzelnen Blattes kann daher wie folgt angegeben werden:

$$A = V_c - 0.5V_o - R_d \tag{5.1}$$

 V_c bildet hierbei die Carboxylierungs-Rate, der CO₂-Umsatz der Oxygenierung wird ausgedrückt als V_o . Der zusätzliche Faktor R_d beschreibt die sogenannte Dunkelatmung. Die Dunkelatmung ist der Teil der in Kapitel 4 beschriebenen Dissimilation, bei dem die Glucosemoleküle in der Glykolyse zur Energiegewinnung in sechs CO₂ decarboxyliert werden. Es wird die Annahme gemacht, dass R_d nur von der Temperatur T abhängt (Harley et al., 1992):

$$R_d = exp\left(d - \frac{e}{R \cdot T}\right) \tag{5.2}$$

R ist die universelle Gaskonstante (8.314 $\frac{J}{mol \cdot K}$), *d* ein Skalierungsfaktor und *e* die Aktivierungsenergie. Da die Carboxylierung und die Oxygenierung über das katalysierende Enzym RUBISCO gekoppelt sind (siehe Kapitel 4), lässt sich Gleichung 5.1 wie folgt schreiben:

$$A = \left(1 - \frac{0.5 \cdot O_i}{\tau \cdot C_i}\right) V_c - R_d \tag{5.3}$$

 O_i und C_i sind die im Blattinneren um das RUBISCO konkurrierenden Konzentrationen von O_2 und CO_2 , τ ist ein Temperatur-abhängiger spezifischer Faktor für RUBISCO. Wie bereits in Kapitel 4 beschrieben, wird die Carboxylierung durch zwei Faktoren limitiert, so dass die Netto-Photosynthese *A* folgendermaßen berechnet werden kann:

$$A = \left(1 - \frac{0.5 \cdot O_i}{\tau \cdot C_i}\right) \min\{W_c, W_j\} - R_d \tag{5.4}$$

 W_c ist die durch die RUBISCO-Verfügbarkeit limitierte Carboxylierung und W_j die durch die RuBP-Regeneration limitierte Carboxylierung. W_c lässt sich durch eine maximale Carboxylierungsrate V_{max} ausdrücken:

$$W_{c} = \frac{V_{max}C_{i}}{C_{i} + K_{c}(1 + O_{i}/K_{o})}$$
(5.5)

Die sogenannten Michaelis-Menten-Konstanten für O₂ (K_o) und CO₂ (K_c) sind hierbei genauso wie V_{max} lediglich von der Temperatur abhängig (Harley et al., 1992):

$$K_o = exp\left(c_{k_o} - \frac{e_{k_o}}{R \cdot T}\right) \tag{5.6}$$

$$K_c = exp\left(c_{k_c} - \frac{e_{k_c}}{R \cdot T}\right) \tag{5.7}$$

$$V_{max} = \frac{exp\left(c_{v_c} - \frac{e_{v_c}}{R \cdot T}\right)}{1 + exp\left(\frac{s \cdot T - d_e}{R \cdot T}\right)}$$
(5.8)

 c_{k_o} , c_{k_c} und c_{v_c} sind Skalierungsfaktoren, während e_{k_o} , e_{k_c} und e_{v_c} die jeweiligen Aktivierungsenergien beschreiben. *s* ist ein Entropy-Term und d_e die Deaktivierungsenergie.

Wie in Kapitel 4 erläutert wird für die RuBP-Regeneration ausreichend ATP benötigt, so dass W_j proportional zur Elektronentransport-Rate J und somit zur photosynthetisch aktiven Strahlung PAR ist:

$$W_j = \frac{J \cdot C_i}{4(C_i + O_i/\tau)} \tag{5.9}$$

Dabei wird angenommen, dass vier angeregte Elektronen benötigt werden um ATP und NADPH für die Regeneration von RuBP im Calvin-Zyklus zu erzeugen (siehe Zyklus 1 und 4 in Abbildung 4.1). Eine empirische Formulierung für J wurde von Harley et al. (1992) vorgeschlagen:

$$J = \frac{\alpha \cdot I}{\sqrt{1 + \alpha^2 I^2 / J_{max}^2}} \tag{5.10}$$

 α ist die Lichtnutzungseffizienz oder auch der sogenannte Quanten-Wirkungsgrad (englisch: quantum efficiency), *I* die absorbierte PAR. Analog zu V_{max} wird die Elektronen-Transport-Rate bei Lichtsättigung J_{max} nach Harley et al. (1992) als Funktion der Temperatur und von Aktivierungs- und Deaktivierungsenergien parametrisiert. In der vorliegenden Arbeit wird zur Bestimmung von J_{max} jedoch ein von de Pury and Farquhar (1997) vorgeschlagener linearer Zusammenhang zwischen V_{max} und J_{max} benutzt:

$$\frac{J_{max}}{V_{max}} = a - b \cdot T \tag{5.11}$$

Dieser Zusammenhang gilt als erste Näherung für die im Sommerhalbjahr typischerweise auftretenden Temperaturen von 10°C bis 35°C. *a* und *b* sind empirische Faktoren. Bei geringer Lichtintensität (z.B. in den Morgen- bzw. Abendstunden) wird die Carboxylierung in der Regel durch die nicht ausreichende RuBP-Regeneration begrenzt, während die CO₂-Aufnahme bei Lichtsättigung (z.B. um die Mittagszeit) durch die limitierte RUBISCO-Verfügbarkeit beschränkt ist. Wie die simulierte Netto-Photosynthese *A* als Funktion der absorbierten PAR zeigt, wird dieses Verhalten von dem C3 singleleaf Modell sehr gut wieder gegeben (siehe Abbildung 5.1). So wird der Anstieg von *A* bei geringen Werten für PAR durch W_j bestimmt, während ab einer gewissen Strahlungsintensität (Lichtsättigung) W_c die maximal mögliche CO₂-Aufnahme steuert (vgl. Gleichung 5.4).

Die photosynthetische CO_2 -Aufnahme eines Blattes geschieht durch die Stomata. Die Öffnungsweite dieser Stomata wird mit Hilfe einer stomatalen Leitfähigkeit g_s parametrisiert. Es gibt eine Vielzahl von gekoppelten aber auch ungekoppelten Modellen für die

stomatale Leitfähigkeit. Für die vorliegende Arbeit wird ein gekoppeltes Modell nach Ball et al. (1987) benutzt, bei dem g_s linear von der Netto-Photosynthese A abhängt:

$$g_s = g_{min} + a_1 A \frac{h_s}{c_s} \tag{5.12}$$

 g_{min} ist die minimale stomatale Leitfähigkeit, h_s und c_s die relative Feuchte bzw. die Molanzahl des CO₂ an der Blattoberfläche und a_1 ein empirischer Koeffizient. Der theoretische Grundgedanke bei diesem Ansatz ist der, dass die Stomata bei einer sehr hohen Luftfeuchtigkeit weit geöffnet werden können ohne einen zu hohen Wasserverlust der Pflanze zu riskieren. Umgekehrt müssen die Stomata bei sehr hohem atmosphärischen CO₂-Gehalt nur leicht geöffnet sein um ausreichend CO₂ aufzunehmen. Dementsprechend reguliert die simulierte g_s in dem Modell die blattinterne CO₂-Konzentration C_i (siehe Gleichungen 5.3 - 5.5 und Gleichung 5.9):

$$C_i = c_s - \frac{A \cdot b1}{g_s} \tag{5.13}$$

b1 ist hierbei ein empirischer Koeffizient.



Abb. 5.1: Die simulierte Netto-Photosynthese (A) als Funktion der photosynthetisch aktiven Strahlung (PAR).

Alle in diesem Unterkapitel beschriebenen Parametrisierungen gelten wie bereits erwähnt für ein einzelnes Blatt einer C3-Pflanze. Um also die Netto-Photosynthese eines ganzen Pflanzenbestandes zu simulieren, ist eine sinnvolle Hochskalierung erforderlich. Ein Modell für eine solche Hochskalierung wird im folgenden Unterkapitel ausführlich beschrieben.
5.2 Das sun/shade Modell

Ein sehr simples Modell für die Hochskalierung von der Blatt- auf die Pflanzenbestands-Skala ist das big-leaf Modell, wie es auch in der Standardform von FOOT3DK zur Anwendung kommt (siehe Kapitel 3). Durch die Annahme, dass der Pflanzenbestand nur aus einem einzigen großen sonnenbeschienenen Blatt besteht, kommt es bei diesem Ansatz jedoch oft zu einer Überschätzung der Photosynthese-Rate, vor allem für Pflanzen mit einem hohen LAI (de Pury and Farquhar, 1997). Weitaus bessere Ergebnisse liefern die sehr komplizierten Multi-Layer-Modelle, bei denen der Pflanzenbestand sowohl vertikal als auch horizontal in mehrere "Schichten" mit gleichen Eigenschaften, wie beispielsweise die Ausrichtung der Blätter, eingeteilt wird (z.B. Beyschlag und Ryel, 1999). Für jede dieser Schichten wird dann die Netto-Photosynthese getrennt berechnet und schließlich zu einer einzigen Photosynthese-Rate aufsummiert. Ein solcher Ansatz ist für sehr kleine Skalen sinnvoll, wie z.B. die Simulation der Photosynthese einzelner Pflanzen. Für die in der vorliegenden Arbeit betrachteten Skala (mit einer horizontalen Auflösung von bis zu 100 m) ist die Anwendung eines Multi-Layer-Modells jedoch technisch nicht umsetzbar und wenig sinnvoll. Hier eignet sich das sogenannte sun/shade Modell nach de Pury und Farquhar (1997) weitaus besser, bei dem es sich im Grunde um ein erweitertes big-leaf Modell handelt. De Pury und Farquhar (1997) konnten zeigen, dass dieses Modell trotz seiner Simplizität ähnlich gute simulierte Photosynthese-Raten liefert wie die Multi-Layer-Modelle. Bei dem sun/shade Modell wird der gesamte Pflanzenbestand in einen sonnenbeschienenen und einen im Schatten liegenden Anteil unterteilt. Beide Anteile für sich werden dann so behandelt, als würden sie jeweils aus nur einem einzigen großen Blatt bestehen, so dass für beide Anteile das oben beschriebene C3 single-leaf Modell getrennt angewendet werden kann. Die Netto-Photosynthese des gesamten Pflanzenbestands ist dann die Summe der Photosynthese-Raten der beiden Anteile.

Bei dem sun/shade Modell wird als Grundidee angenommen, dass abhängig vom Sonnenstand nur ein kleiner Teil am Oberrand des Pflanzenbestandes direkt von der Sonne beschienen wird, während tiefer liegende Schichten meist im Schatten liegen und nur diffuse Strahlung absorbieren. Auch die Streuung der direkten Sonnenstrahlung an den oberen Blättern bzw. Pflanzenteilen wird in dem sun/shade Modell berücksichtigt. Dementsprechend besteht die von dem sonnenbeschienenen Anteil des Pflanzenbestandes gesamte absorbierte Strahlung *I*_{sun} aus folgenden Komponenten:

$$I_{sun} = I_{dir} + I_{dif} + I_{ges} \tag{5.14}$$

*I*_{dir} ist die absorbierte direkte Sonneneinstrahlung:

$$I_{dir} = S_{\downarrow} [(1 - \sigma)(1 - \exp\{-(LAI \cdot 0.5/\sin\beta)\})]$$
(5.15)

 S_{\downarrow} bildet die direkte einfallende photosynthetisch aktive Strahlung oberhalb des Pflanzenbestandes, während σ ein Maß für das Streuverhalten bildet. Durch den SonnenHöhen-Winkel β wird die Abhängigkeit vom Sonnenstand berücksichtigt. Die absorbierte diffuse Strahlung I_{dif} berechnet sich wie folgt:

$$I_{dif} = D_{\downarrow} \left[(1 - \rho_{cd}) \frac{1 - \exp\{-(k'_d + 0.5/\sin\beta)LAI\}}{k'_d + 0.5/\sin\beta} \cdot k'_d \right]$$
(5.16)

Hierbei ist D_{\downarrow} die diffuse Strahlung oberhalb des Pflanzenbestandes, ρ_{cd} und k'_d ein Reflektions- bzw. Absorbtionskoeffizient für diffuse Strahlung.

Eine Parametrisierung für die absorbierte gestreute Strahlung I_{ges} ist gegeben durch:

$$I_{ges} = S_{\downarrow} \left[(1 - \rho_{cb}) \frac{1 - \exp\{-(k_b' + 0.5/\sin\beta)LAI\}}{k_b' + 0.5/\sin\beta} \cdot k_b' - (1 - \sigma) \frac{1 - \exp\{-LAI/\sin\beta\}}{2} \right]$$
(5.17)

 ρ_{cb} und k'_{b} sind die Reflektions- bzw. Absorbtionskoeffizienten für gestreute Strahlung. Der zweite Term auf der rechten Seite von Gleichung 5.17 berücksichtigt, dass direkte Strahlung, die bereits absorbiert wurde, nicht mehr gestreut werden kann (vgl. Gleichung 5.15).

Die von dem im Schatten liegenden Anteil des Pflanzenbestandes absorbierte Strahlung I_{shade} wird als Residuum bestimmt:

$$I_{shade} = I_c - I_{sun} \tag{5.18}$$

 I_c ist die vom gesamten Pflanzenbestand (englisch: canopy) absorbierte Strahlung:

$$I_{c} = S_{\downarrow}(1 - \rho_{cb}) \left[1 - \exp\{-k_{b}^{'}LAI\} \right] + D_{\downarrow}(1 - \rho_{cd}) \left[1 - \exp\{-k_{d}^{'}LAI\} \right]$$
(5.19)

Neben RUBISCO als Katalysator ist Stickstoff ein weiterer wichtiger Bestandteil für die Carboxylierung (siehe Zyklus 2 in Abbildung 4.1). Dieses kann in relativ kurzer Zeit innerhalb der Pflanze umgelagert werden. Um also möglichst effizient Photosynthese betreiben zu können, wird während des Tages möglichst viel Stickstoff in den oberen sonnenbeschienenen Teil der Pflanze gepumpt, da hier durch die große Menge an absorbiertem Licht die besten Voraussetzungen für die Carboxylierung gegeben sind. In den Morgen- und Abendstunden hingegen wird der Stickstoff über die gesamte Pflanze verteilt. Um diesen tageszeitlichen Verlauf zu erfassen, wird in dem sun/shade Modell analog zur absorbierten Strahlung auch die maximale Carboxylierungsrate V_{max} (siehe Gleichung 5.5) für den sonnenbeschienenen und den im Schatten liegenden Anteil getrennt berechnet. Die maximale Carboxylierungsrate des sonnenbeschienenen Anteils V_{sun} lässt sich wie folgt berechnen:

$$V_{sun} = V_1 LAI \frac{(N_0 - N_b)}{(N_1 - N_b)} \left[\frac{1 - exp\{-k_{ln} - LAI \cdot 0.5/\sin\beta\}}{k_{ln} - LAI \cdot 0.5/\sin\beta} \right]$$
(5.20)

 N_0 ist die Stickstoffkonzentration im oberen Teil des Pflanzenbestandes, N_1 die mittlere Stickstoffkonzentration und N_b die photosynthetisch nicht wirksame Stickstoffkonzentration. k_{ln} beschreibt einen Stickstoff-Umlagerungskoeffizienten, während der Sonnen-Höhen-Winkel β wieder die Abhängigkeit vom Sonnenstand berücksichtigt. V_1 bildet die photosynthetisch wirksame RUBISCO-Kapazität pro Einheitsfläche. Analog zu Gleichung 5.18 wird die maximale Carboxylierungsrate des im Schatten liegenden Anteils V_{shade} als Residuum bestimmt:

$$V_{shade} = V_c - V_{sun} \tag{5.21}$$

mit V_c als maximale Carboxylierungsrate des gesamten Pflanzenbestandes:

$$V_{c} = V_{1}LAI\frac{(N_{0} - N_{b})}{(N_{1} - N_{b})} \left[\frac{1 - exp\{-k_{ln}\}}{k_{ln}}\right]$$
(5.22)

Mit Hilfe der für die beiden Anteile getrennt berechneten absobierten Strahlung (I_{sun} und I_{shade} , siehe Gleichungen 5.14 und 5.18) und maximalen Carboxylierungsraten (V_{sun} und V_{shade} , siehe Gleichungen 5.20 und 5.21) werden die Netto-Photosyntheseraten des sonnenbeschienenen Anteils A_{sun} und des im Schatten liegenden Anteils A_{shade} berechnet. Hierbei gehen I_{sun} und I_{shade} in die Bestimmung der Eleketronen-Transport-Rate (vgl. Gleichung 5.10) und somit der jeweiligen durch die RuBP-Regeneration limitierte Carboxylierung W_{jsun} und W_{jshade} ein (vgl. Gleichnung 5.9), während V_{sun} und V_{shade} zur Berechnung der jeweiligen durch die RUBISCO-Verfügbarkeit limitierte Carboxylierung W_{csun} und W_{cshade} genutzt werden (vgl. Gleichung 5.5). Die Netto-Photosyntheserate des gesamten Pflanzenbestandes A_c wird durch die Summe der Netto-Photosyntheseraten der beiden Anteile bestimmt:

$$A_c = A_{sun} + A_{shade} \tag{5.23}$$

so dass Gleichnung 5.4 geschrieben werden kann als:

$$A_c = \left(1 - \frac{0.5 \cdot O_i}{\tau \cdot C_{i_{sun}}}\right) \min\{W_{c_{sun}}, W_{j_{sun}}\} + \left(1 - \frac{0.5 \cdot O_i}{\tau \cdot C_{i_{shade}}}\right) \min\{W_{c_{shade}}, W_{j_{shade}}\} - R_d$$
(5.24)

Die O₂-Konzentration wird üblicherweise für beide Anteile konstant auf 210 Promille gesetzt, während die internen CO₂-Konzentrationen ebenfalls für beide Anteile getrennt berechnet werden ($C_{i_{sun}}$ und $C_{i_{shade}}$), indem das Modell für die stomatale Leitfähigkeit (siehe Gleichung 5.12) sowohl für den sonnenbeschienenen als auch den im Schatten liegenden Anteil angwendet wird:

$$g_{sun} = g_{min} + a_1 A_{sun} \frac{h_s}{c_s}$$
(5.25)

$$g_{shade} = g_{min} + a_1 A_{shade} \frac{h_s}{c_s}$$
(5.26)

Die Netto-Photosyntheserate des gesamten Pflanzenbestandes A_c gibt an, welche Menge an CO₂ Netto von den Pflanzen aufgenommen wird. In der Regel wird in einem Ökosystem aber gleichzeitig auch eine gewisse Menge an CO₂ von dem Boden an die Atmosphäre abgegeben. Diese sogenannte Bodenrespiration wird von Mikroorganismen verursacht, die im Boden gelagerte Mineralien zersetzen und dabei CO₂ frei setzen. Um also den Netto-Ökosystem-Austausch (engl.: net-ecosystem-exchange NEE) simulieren zu können, muss neben der Photosyntheserate des gesamten Pflanzenbestandes A_c zusätzlich die Bodenrespiration R_s berücksichtigt werden:

$$NEE = A_c - R_s \tag{5.27}$$

Eine sehr einfache Parametrisierung für R_s für verschiedene Böden mit unterschiedlichen Landnutzungen wurde von Bunnel et al. (1977) vorgeschlagen:

$$R_s = \frac{w_s}{a_1 + w_s} \frac{a_2}{a_2 + w_s} a_3 a_4^{(T-10)/10}$$
(5.28)

Hierbei sind w_s und T der mittlere Bodenfeuchtegehalt bzw. die mittlere Bodentemperatur. a_1 und a_2 sind empirische Werte für die Feldkapazität und die Sättigung, a_4 ist ein Temperatur-Sensitivitäts-Koeffizient. Es werden typische Werte für lehmige Böden angenommen ($a_1 = 0.20$, $a_2 = 0.23$, $a_4 = 2.0$). Die optimale Respirationsrate a_3 ist abhängig von der Landnutzungsklasse (z.B. 3.5 für Laubwald und 1.7 für Wiese). Im allgemeinen ist bei starker Einstrahlung die photosynthetische CO₂-Aufnahme der Pflanzen deutlich höher als die durch die Bodenrespiration an die Atmosphäre abgegebene Menge an CO₂, so dass tagsüber ein Netto CO₂-Fluss von der Atmosphäre in die Pflanzenbestände zu beobachten ist. Nachts, wenn die Photosynthese zum Erliegen kommt, kann es hingegen zu einem deutlich messbaren CO₂-Fluss von der Oberfläche in die Atmosphäre kommen.

Zum besseren Verständnis werden im folgenden alle für das sun/shade Modell relevanten simulierten Größen anhand eines Beispieltages für einen Pflanzenbestand mit Zuckerrübe präsentiert (siehe Abbildung 5.2). Es handelt sich bis auf einen kurzen wolkigen Abschnitt am späten Nachmittag um einen typischen Strahlungstag im Hochsommer (01. Juli 2008). Für die gezeigte Analyse wird das Modell mit gemessenen atmosphärischen Parametern einer mikrometeorologischen Station angetrieben (siehe Kapitel 2.3). Die gemessene direkt einfallende photosynthetisch aktive Strahlung oberhalb des Pflanzenbestandes S_{\downarrow} zeigt demenstprechend bis auf ein lokales Minimum um ca. 17:00 UTC einen typischen Tagesgang mit maximalen Werten von knapp 2000 $\mu mol/(m^2s)$ am Mittag, was einem Strahlungsfluss von ca. 1000 W/m^2 entspricht (siehe Abbildung 5.2(a)). Die von dem sonnenbeschienenen Anteil des Pflanzenbestandes simulierte absorbierte Strahlung I_{sun} (siehe Gleichung 5.14) folgt erwartungsgemäß dem Verlauf von S_{\downarrow} . Da ein bestimmter Anteil der einfallenden Strahlung reflektiert bzw. gestreut wird, werden für I_{sun} deutlich kleinere Werte simuliert als für die direkt einfallende Strahlung oberhalb des Pflanzenbestandes (S_{\perp}) , mit maximalen Werten von ungefähr 1300 $\mu mol/(m^2s)$.



(a) Gemessene direkt einfallende photosynthetisch aktive Strahlung S_{\downarrow} und simulierte absorbierte photosynthetisch aktive Strahlung I_{sun} und I_{shade}



(c) Gemessener atmosphärischer CO₂-Gehalt und simulierte interne CO₂-Konzentrationen $c_{i_{sun}}$ und $c_{i_{shade}}$



(e) Carboxylierungsraten der sonnenbeschienenen Blätter ($W_{c_{sun}}$ und $W_{j_{sun}}$) und der im Schatten liegenden Blätter ($W_{c_{shade}}$ und $W_{j_{shade}}$)



(b) Maximale Carboxylierungsraten V_{sun} und V_{shade}



(d) Stomatale Leitfähigkeiten g_{sun} und g_{shade}



(f) Netto CO₂-Fluss NEE und Bodenrespiration R_s

Abb. 5.2: Beispiel für die simulierten Einzelkomponenten des sun/shade Modells für den 01. Juli 2008 für einen Pflanzenbestand mit Zuckerrübe. In (e) sind die Carboxylierungsraten, die letztendlich zu NEE beitragen, mit Balken markiert. Es gilt zu beachten, dass in (f) postive Werte einen Fluss von der Atmosphäre in die Pflanzen bedeuten, negative Werte beschreiben einen Fluss vom Boden in die Atmosphäre.

Kurz nach Sonnenaufgang bzw. kurz vor Sonnenuntergang werden die schräg einfallenden Sonnenstrahlen überwiegend gestreut und von den tiefer liegenden Blättern absorbiert. Dieser Prozess wird von dem Modell gut erfasst. So werden für den im Schatten liegenden Anteil der Pflanzen zu diesen Zeitpunkten höhere absorbierte Strahlungswerte Ishade (siehe Gleichung 5.18) simuliert als für den sonnenbeschienenen Teil (siehe Abbildung 5.2(a)). Im Laufe des Tages bleibt der Verlauf von I_{shade} nahezu konstant, da auch bei stärkerer Einstrahlung der Anteil des absorbierten gestreuten Lichts gleich bleibt. Die simulierten maximalen Carboxylierungsraten V_{sun} und V_{shade} (siehe Gleichung 5.20 und 5.21) zeigen einen entgegengesetzten Tagesverlauf (siehe Abbildung 5.2(b)). Während der Nacht ist V_{sun} konstant null, während V_{shade} maximale Werte erreicht. Mit zunehmender Einstrahlung nimmt Vshade ab, Vsun hingegen erreicht sein Maximum um die Mittagszeit. Dieser Verlauf gibt die in den Pflanzen stattfindende Umlagerung des für die Carboxylierung benötigten Stickstoffs wieder. Bei fehlender oder nur geringer Einstrahlung wird das Stickstoff überwiegend in die tiefer liegenden Blätter verlagert, da hier der größte Teil der gestreuten und diffusen Strahlung absorbiert wird und dementsprechend Photosynthese betrieben wird. Mit zunehmender Einstrahlung wird der Großteil der Strahlung von den sonnenbeschienenen Blättern absorbiert. Um diese absorbierte Strahlung am effektivsten für die Photosynthese zu nutzen, wird Stickstoff in den oberen sonnenbeschienenen Teil der Pflanzen verlagert.

Abbildung 5.2(c) zeigt den gemessenen CO₂-Gehalt der Atmosphäre und die simulierten blattinternen CO₂-Konzentrationen $C_{i_{sun}}$ und $C_{i_{shade}}$ (siehe auch Gleichung 4.24). Während der Nacht, in der die Pflanzen keine Photosynthese betreiben und somit kein CO₂ verbraucht wird, stellt sich zwischen dem Blattinneren und der Außenluft ein Gleichgewicht ein, so dass $C_{i_{sun}}$ und $C_{i_{shade}}$ dem Verlauf des gemessenen atmosphärischen CO₂-Gehalts folgen. Mit zunehmender Einstrahlung nimmt die Photosynthese-Tätigkeit der Pflanzen zu, wodurch im Blattinneren immer mehr CO₂ gebunden wird und $C_{i_{sun}}$ und $C_{i_{shade}}$ dementsprechend abnehmen. Da die Photosynthese der im Schatten liegenden Blätter aufgrund der Absorbtions-Eigenschaften (siehe oben) früher einsetzt, reduziert sich für diesen Anteil der Pflanzen der interne CO2-Gehalt vor dem der sonnenbeschienenen Blätter. Tagsüber wird in dem oberen Bereich der Pflanze deutlich mehr Photosynthese betrieben als in dem tiefer liegenden Teil der Pflanzen, wodurch der interne CO₂-Gehalt der sonnenbeschienenen Blätter bei starker Einstrahlung ein Minimum aufweist. Die Photosynthese-Tätigkeit des im Schatten liegenden Anteils der Pflanzen ist indes so gering, dass ab einem bestimmenten CO₂-Gradienten zwischen Blattinnerem und der Außenluft mehr CO₂ in die Blätter diffundiert als verbraucht wird und es somit wieder zu einer Zunahme der CO₂-Konzentration kommt.

Die Tagesverläufe der stomatalen Leitfähigkeiten g_{sun} und g_{shade} (siehe Gleichung 4.25 und 4.26) unterscheiden sich nur gering voneinander (siehe Abbildung 5.2(d)). Sowohl für den im Schatten liegenden als auch dem sonnenbeschienenen Anteil ist nachmittags eine deutlich höhere Leitfähigkeit zu beobachten. Dies ist gleichbedeutend mit einem verstärkten Öffnen der Stomata, um die stark reduzierte innere CO₂-Konzentration wieder auf ein für die Photosynthese benötigtes Niveau zu bringen.

Die simulierten Tagesverläufe der Carboxylierungsraten der beiden Pflanzenanteile sind

in Abbildung 5.2(e) abgebildet. Bedingt durch die hohe maximale Carboxylierungsrate (vgl. Abbildung 5.2(b)), werden für den im Schatten liegenden Anteil des Pflanzenbestandes durchweg Werte von über 50 $\mu mol/(m^2s)$ für die durch die RUBISCO-Verfügbarkeit limitierte Carboxylierung $W_{c_{shade}}$ simuliert, mit Werten von bis zu 240 $\mu mol/(m^2s)$. Das spiegelt den Effekt wieder, dass in den tiefer liegenden Blättern im Prinzip stets ausreichend RUBISCO verfügbar ist. Die Photosynthese der im Schatten liegenden Blätter wird somit ausschließlich aufgrund der geringen absorbierten Strahlung (vgl. Abbildung 5.2(a)) und der daraus resultierenden limitierten RuBP-Regeneration $(W_{j_{shade}}, siehe Gleichung 5.24)$ begrenzt. Bei den sonnenbeschienenen Blättern ist diesbezüglich eine Abhängigkeit von der Tageszeit zu beobachten. Bei geringer Einstrahlung (kurz nach Sonnenaufgang bzw. kurz vor Sonnenuntergang) wird die Photosynthese durch die RuBP-Regeneration $(W_{j_{sun}})$ limitiert. Bei starker Einstrahlung bzw. bei Lichtsättigung wird zwar ausreichend RuBP erzeugt, die Photosynthese wird in diesem Fall jedoch durch die RUBISCO-Verfügbarkeit eingeschränkt $(W_{c_{sun}})$.

Gemäß Gleichung 5.24 gehen die jeweiligen minimalen Carboxylierungsraten in die Netto-Photosynthese des gesamten Pflanzenbestandes A_c und somit in Gleichung 5.27 zur Berechnung von NEE ein (siehe Abbildung 5.2(f)). In den frühen Morgenstunden bzw. ab Nachmittags folgt der Verlauf von NEE dem Tagesgang der kurzwelligen Einstrahlung (vgl. Abbildung 5.2(a)). Um die Mittagszeit hingegen bleibt NEE auf einem Niveau von ca. 20 - 23 $\mu mol/(m^2s)$, was hauptsächlich durch die limitierte RUBISCO-Verfügbarkeit des sonnenbeschienenen Anteils des Pflanzenbestandes ($W_{c_{sun}}$) bedingt ist (vgl. Abbildung 5.2(e)). Die simulierte Bodenrespiration R_s ist mit Werten von betragsmäßig ca. 1 - 2 $\mu mol/(m^2s)$ vergleichsweise gering (siehe Abbildung 5.2(f)). Da die Photosynthese einen CO₂-Fluss von der Atmosphäre in die Pflanzen bedingt, während bei der Bodenrespiration CO₂ an die Atmosphäre abgegeben wird, haben NEE und R_s verschiedene Vorzeichen.

5.3 Validierung des Photosynthese-Modells

Das Photosynthese-Modell, welches aus den in Kapitel 5.1 und Kapitel 5.2 beschriebenen Komponenten besteht, ist das erste seiner Art, welches am IGMK betrieben wird. Um eine Extrapolation des Modells auf eine gesamte horizontale Fläche zu rechtfertigen, muss das Modell anhand von vorhandenen Messungen der TR32 FLUXPAT Messkampagne für einzelne Landnutzungsklassen validiert werden. In der Regel besteht die Validierung eines Modells aus zwei Schritten: in einem ersten Schritt wird das Modell kalibriert, d.h. für eine bestimmte zu simulierende Situation (z.B. der Tagesgang zu einem bestimmten Termin) werden die Parameter des Modells so angepasst, dass simulierte und gemessene Werte möglichst gut übereinstimmen. Im zweiten Schritt werden mit diesen angepassten Modell-Parametern Simulationen weiterer Situationen durchgeführt und mit Messungen verglichen. Das Modell gilt als validiert, wenn auch für diese Situationen Messungen und Simulationen gut übereinstimmen. Wie bereits in den beiden letzten Unterkapiteln angedeutet, besteht das Photosynthese-Modell aus einer Vielzahl von pflanzenspezifischen Parametern (z.B. Aktivierungsenergien, empirische Faktoren, Streu-Koeffizienten ...). Insgesamt gibt es mehr als 30 Parameter. Bei der Anwendung eines Photosynthese-Modells auf einzelne Pflanzen wird im allgemeinen versucht alle Parameter des Modells auf die zu simulierende Situation anzupassen. Teilweise werden dabei sogar einige der Parameter im Labor gemessen und in das Modell eingespeist, sofern es möglich ist diese Messungen durchzuführen. Auf der in dieser Arbeit betrachteten Skala (ganze Pflanzenbestände mit einer Auflösung von 100 m) ist ein solches Vorgehen jedoch technisch nicht umsetzbar. Daher wurde in der vorliegenden Arbeit die Kalibrierung des Modells durch die Anpassung von lediglich drei der über 30 Parameter durchgeführt. Bei diesen Parametern handelt es sich um die photosynthetisch wirksame RUBISCO-Kapazität pro Einheitsfläche (V_1) , welche in die Bestimmung der maximalen Carboxylierungsraten eingeht (Vsun, siehe Gleichung 5.20), und um den Quanten-Wirkunsgrad (a) zur Berechnung der Elektronen-Transport-Rate (J, siehe Gleichung 5.10). Den dritten Parameter bildet ein Faktor zur Bestimmung der Höhe der Pflanzen-Grenzschicht oberhalb des Pflanzenbestandes. Kalibriert wurde das Modell jeweils für die beiden Landnutzungsklassen Weizen und Zuckerrübe. Die drei genannten Parameter wurden so justiert, dass Simulationen für den 06. Mai 2008 (Weizen) und den 16. August 2008 (Zuckerrübe) eine bestmögliche Übereinstimmung mit den entsprechenden Messungen zeigen (siehe Abbildungen 5.3(c) und 5.3(g)).

Für die Validierung des Photosynthese-Modells gehen Simulationen für acht weitere Tage der Sommerhalbjahre 2008 und 2009 mit ein (siehe Abbildung 5.3 und Abbildung 5.4). Dabei wurde das Modell, wie auch bei der Kalibrierung, mit gemessenen atmosphärischen Parametern aus mikrometeorologischen Stationen (Luftdruck, Temperatur, relative Feuchte, photosynthetisch aktive Strahlung, Wind und atmosphärischer CO₂-Gehalt) und gemessenen Boden- bzw. Oberflächenparametern (leaf area index LAI, Bodentemperatur und Bodenwassergehalt) angetrieben und mit Eddy-Kovarianz-Messungen in Selhausen (Weizen) und Merken (Zuckerrübe) verglichen (siehe Kapitel 2.3).

Die simulierten Tagesgänge der CO₂-Flüsse für die insgesamt zehn untersuchten Tage stimmen größtenteils mit den Messungen überein (siehe linke Spalte von Abbildung 5.3 und Abbildung 5.4). Trotz einiger Abweichungen zeigt das Modell keinen systematischen Fehler. So kommt es sowohl zu Überschätzungen als auch Unterschätzungen seitens des Photosynthese-Modells. Ein Vergleich der simulierten CO₂-Flüsse mit der gemessenen direkt einfallenden photosynthetisch aktiven Strahlung oberhalb des Pflanzenbestandes (siehe rechte Spalte von Abbildung 5.3 und Abbildung 5.4) zeigt, dass die Einstrahlung der wichtigste steuernde Parameter für die Photosynthese und somit für den Netto CO₂-Fluss NEE ist. Am 23. April 2008 beispielsweise ist um die Mittagszeit ein durch aufkommende Bewölkung bedingter starker Abfall der Einstrahlung zu beobachten (siehe Abbildung 5.3(b)), welcher in einer Abnahme des gemessenen CO₂-Flusses resultiert. Diese plötzliche Reduzierung des CO₂-Flusses wird von dem Modell sehr gut wieder gegeben (siehe Abbildung 5.3(a)). Auch das durch auflockernde Bewölkung verursachte lokale Maximum am Nachmittag wird von dem Modell erfasst.



Abb. 5.3: Linke Spalte: Simulierte Netto CO₂-Flüsse NEE (durchgezogene Linien) und Eddy-Kovarianz Messungen (gepunktete Linien) für Weizen und Zuckerrübe. Positive Werte beschreiben Flüsse von der Atmosphäre in die Pflanzen. Rechte Spalte: Gemessene direkt einfallende photosynthetisch aktive Strahlung oberhalb des Pflanzenbestandes (PAR).



Ähnliches gilt für den 06. Mai 2008, an dem es um die Mittagszeit zu einem kurzen Einbruch der Einstrahlung kommt (siehe Abbildung 5.3(d)). Das daraus resultierende lokale Minumum in den gemessenen CO_2 -Flüssen ist auch in den simulierten Flüssen erkennbar, so dass das Modell bis auf eine leichte Überschätzung am Vormittag insgesamt den Tagesverlauf von NEE sehr gut wieder gibt (siehe Abbildung 5.3(c)).

Einige Abweichungen des Modells von den Messungen sind nur schwer zu erklären. Am 01. Juli 2008 beispielsweise wird der CO₂-Fluss vom Modell vormittags deutlich unterschätzt, während nachmittags zu hohe Werte simuliert werden (siehe Abbildung 5.3(e)). Obwohl es sich bis auf einen kurzen wolkigen Abschnitt um einen typischen Strahlungstag handelt (vgl. Abbildung 5.3(f)), deutet der Verlauf des gemessenen CO₂-Flusses auf eine reduzierte Photosynthese-Tätigkeit der Pflanzen am Nachmittag hin. Ein möglicher Grund hierfür könnte ein Schließen der Stomata zur Verhinderung einer Austrocknung sein. Dieser Verlauf wird von dem Modell nicht erfasst.

Der gemessene Tagesgang des CO₂-Flusses am 16. August 2008 folgt deutlich dem Verlauf der gemessenen Einstrahlung (vgl. Abbildung 5.3(g) und Abbildung 5.3(h)). Eine gute Übereinstimmung des simulierten NEE mit Messungen ist nur vormittags erkennbar, nachmittags kommt es zu einer deutlichen Überschätzung des Modells. Diese Überschätzung ist vermutlich der Windgeschwindigkeit zuzuschreiben, die nachmittags deutlich zunimmt. Wie sich heraus gestellt hat, weist das Modell eine starke Sensitivität gegenüber der Windgeschwindigkeit auf (nicht gezeigt). Starker Wind ist in den Parametrisierungen gleich zu setzen mit erhöhter Turbulenz und somit mit stärkeren Flüssen. Trotz einer leichten Überschätzung des Modells am 24. April 2009 stimmen gemessene und simulierte CO₂-Flüsse für die drei gezeigten Strahlungstage im April 2009 insgesamt sehr gut überein (20., 21. und 24. April 2009, siehe Abbildungen 5.3(i), 5.4(a) und 5.4(e)). Am 23. April 2009, ein Tag mit durchgängig auftretender Kumulusbewölkung (siehe Abbildung 5.4(d)), kommt es hingegen vormittags und um die Mittagszeit zu stärkeren Abweichung zwischen Modell und Messungen (siehe Abbildung 5.4(c)). Nichtsdestoweniger wird auch für diesen Tag der Tagesverlauf der gemessenen CO2-Flüsse vom Modell erfasst.

Interessanterweise weisen sowohl die Messungen als auch die Simulationen des Jahres 2009 insgesamt niedrigere CO₂-Flüsse für Zuckerrübe (siehe Abbildung 5.4(g) und 5.4(i)) als für Weizen auf. Dies gilt vor allem für den 05. August 2009. Obwohl dieser Tag bezüglich des Blattflächen-Index vergleichbar mit dem 21. April 2009 (Weizen) ist und sogar eine höhere Einstrahlung aufweist (vgl. Abbildung 5.4(h) und 5.4(b)), werden am 05. August 2009 deutlich geringere Werte für NEE gemessen als für Weizen im April 2009. Das führt zu der Annahme, dass die untersuchten Zuckerrüben-Pflanzen eine geringere Photosynthese-Effektivität besitzen als Weizen. Diese Eigenschaft wird von dem Modell sehr gut wieder gegeben, was für eine sinnvoll durchgeführte Kalibrierung spricht (mit einer geringeren photosynthetisch wirksamen RUBISCO-Kapazität V_1 und einem geringeren Quanten-Wirkunsgrad α für Zuckerrübe als für Weizen).

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass das Photosynthese-Modell vor allem für Strahlungstage in der Lage ist sehr realistische Flüsse zu simulieren, sofern es mit gemessenen atmosphärischen Parametern angetrieben wird. In dem gekoppelten FOOT3DK-Photosynthese-Modell werden diese Parameter von dem Atmosphären-Teil von FOOT3DK simuliert und an das Photosynthese-Modell übergeben. Die Umsetzung der Kopplung beider Modelle wird im folgenden Kapitel beschrieben.

6 Das gekoppelte FOOT3DK-Photosynthese-Modell

In dem gekoppelten FOOT3DK-Photosynthese-Modell werden in jedem Zeitschritt die für das Photosynthese-Modell benötigten atmosphärischen Parameter von dem Atmosphären-Teil von FOOT3DK zur Verfügung gestellt (siehe Abbildung 6.1). Folgende Parameter werden übergeben:

- relative Feuchte
- Luftdruck
- Temperatur
- Windgeschwindigkeit
- direkt einfallende photosynthetisch aktive Strahlung (S_{\downarrow})
- atmosphärische CO₂-Konzentration

Bis auf die photosynthetisch aktive Strahlung und die CO_2 -Konzentration gehören alle Parameter zum Standard-Output von FOOT3DK. Relevant für das Photosynthese-Modell sind die Parameter der untersten Modellschicht h_0 . Diese Schicht wird für jeden Modell-Gitterpunkt wie folgt bestimmt:

$$h_0 = z_0 + z_d \tag{6.1}$$

 z_0 ist die Rauhigkeitslänge am jeweiligen Gitterpunkt, z_d die sogenannte Verdrängungsschicht. Es wird angenommen, dass die Verdrängungsschicht eine Dicke von etwa $7z_0$ besitzt.

Die direkt einfallende photosynthetisch aktive Strahlung (S_{\downarrow}) kann aus der solaren Einstrahlung bestimmt werden, welche wiederum als Standard-Output der ersten atmosphärischen Modellschicht (entspr. etwa 15 m über Grund) von FOOT3DK übergeben wird. Der Anteil der photosynthetisch aktiven Strahlung an der gesamten solaren Einstrahlung wurde bereits in einer Vielzahl von Studien bestimmt. Der Anteil für Cambridge beispielsweise beträgt 47 - 51 % (Szeicz, 1974), für Kopenhagen wurde ein Anteil von 47 - 50 % ermittelt. In einer Sensitivitätsstudie wurden verschiedene prozentuale Anteile

getestet. Es hat sich gezeigt, dass bei einem Anteil von 47 % die simulierte photosynthetisch aktive Strahlung am besten mit Messungen in dem für die vorliegende Arbeit relevantem Gebiet übereinstimmt (nicht gezeigt).



Abb. 6.1: Schematische Darstellung des gekoppelten FOOT3DK-Photosynthese-Modells.

Die vorliegende Arbeit bildet die erste Studie mit FOOT3DK, in der CO₂-Konzentrationen benötigt und betrachtet werden. Daher wird für die hier gezeigten Simulationen eine möglichst sinnvolle Initialisierung aller atmosphärischer Gitterpunkte mit einer bestimmten CO₂-Konzentration benötigt. Für die Initialisierung werden Flugzeugmesungen herangezogen, welche im Kapitel 2.2 bereits ausführlich beschrieben wurden. Im Rahmen dieser Flugzeugmessungen wurden zu bestimmten Zeitpunkten CO₂-Konzentrationen in verschiedenen Höhen von bis zu 1500 m gemessen. Ein Beispiel für ein daraus erstelltes vertikales Profil ist in Abbildung 6.2 gezeigt. Aus verschiedenen Gründen müssen hierbei folgende starke Vereinfachungen gemacht werden:

1.) Aufgrund fehlender Informationen zur räumlichen Verteilung der gemessenen CO₂-Konzentration wird jeder Gitterpunkt einer horizontalen Modellschicht mit derselben Konzentration initialisiert.

2.) Da das Modell aus numerischen Gründen stets vor Sonnenaufgang initialisiert werden sollte, die Flugzeugmessungen aber immer nach Sonnenaufgang statt fanden, stimmen der Zeitpunkt der Messungen und der Initialisierung nicht exakt überein.

3.) Da keine Informationen über die reale CO₂-Konzentration außerhalb des Modellgebiets vorhanden sind, wird für den Modellrand ein Null-Gradient angenommen, d.h. es wird die stark vereinfachte Annahme gemacht, dass die Konzentration außerhalb des Modellgebiets genauso hoch ist wie am Modellrand.

4.) Oberhalb von 1200 m wird die CO₂-Konzentration für alle Gitterpunkte konstant auf 386 ppm gesetzt.

Es ist nicht von der Hand zu weisen, dass diese Einschränkungen u.U. eine nichtrealitätsnahe Initialisierung der CO_2 -Konzentration verursachen. In einigen Studien werden Photosynthese-basierte Modelle mit zeitlich und räumlich konstanten CO_2 -Konzentrationen initialisiert und angetrieben. In einer Arbeit von Kothavala et al. (2005) beispielsweise wurde eine konstante Konzentration von 360 ppm vorgegeben. Flugzeugmessungen der TR32 FLUXPAT Messkampagne für verschiedene Tage zeigen jedoch, dass die Konzentration stark variieren kann. So wurden je nach Messtag bodennahe Konzentrationen von 389 bis 412 ppm gemessen. Um diese Schwankungen zumindest teilseise zu erfassen, wurde für die vorliegende Arbeit trotz großer Unsicherheiten die oben beschriebene Initialisierung der CO_2 -Konzentration gewählt.



Abb. 6.2: Vertikalprofil der CO₂-Konzentration für den 23. April 2008, erstellt aus Flugzeugmessungen von ca. 8:30 UTC bis 9:00 UTC.

Mittels der o.g. atmosphärischen Parameter berechnet das Photosynthese-Modell zu jedem Zeitschritt einen CO_2 -Fluss. Tagsüber wird der unteren Atmosphäre in der Regel aufgrund der Photosynthese-Aktivität der Pflanzen CO_2 entzogen. Um diesen Vorgang auch in dem Modell zu berücksichtigen, wird mit Hilfe des simulierten CO_2 -Flusses die CO_2 -Konzentration in der untersten atmosphärischen Modellschicht zu jedem Zeitschritt aktualisiert.

Weitere von dem Photosynthese-Modell simulierte Parameter sind die stomatalen Leitfähigkeiten $g_{s_{sun}}$ und $g_{s_{shade}}$ der sonnenbeschienenen und im Schatten liegenden Anteile des Pflanzenbestandes, welche wiederum an die Netto Photosynthese-Raten gekoppelt sind (siehe Gleichungen 5.25 und 5.26). Die Transpiration der Pflanzen geschieht durch dieselben stomatalen Öffnungen wie die photosynthetische CO₂-Aufnahme. Um diesen Zusammenhang zwischen diesen beiden Flüssen in dem gekoppelten Modell zu erfassen, werden die Kehrwerte von $g_{s_{sun}}$ und $g_{s_{shade}}$ benutzt, um die Transpiration in dem Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK zu berechnen. Das hat den zusätzlichen Vorteil, dass für die Transpiration anstatt des originalen big-leaf Ansatzes ein sun/shade-Modell angewendet werden kann, so dass die Transpiration (siehe Gleichung 3.16) dadurch für den sonnenbeschienenen und im Schatten liegenden Anteil ($E_{tr_{sun}}$ und $E_{tr_{shade}}$) getrennt bestimmt werden kann:

$$E_{tr_{sun}} = \frac{\delta_{veg}(1 - \delta_{wveg})}{r_a + 1/g_{sun}} (q_{sat}(T_s) - q_a) \frac{LAI_{sun}}{LAI_c}$$
(6.2)

$$E_{tr_{shade}} = \frac{\delta_{veg}(1 - \delta_{wveg})}{r_a + 1/g_{s_{shade}}} (q_{sat}(T_s) - q_a) \frac{LAI_{shade}}{LAI_c}$$
(6.3)

LAIsun ist hierbei der Blattflächen-Index des sonnenbeschienenen Anteils:

$$LAI_{sun} = \frac{1 - \exp(-(LAI_c \cdot 0.5/\sin\beta))}{0.5/\sin\beta}$$
(6.4)

Der Blattflächen-Index des im Schatten liegenden Anteils *LAI*_{shade} wird als Residuum des Blattflächen-Index des gesamten Pflanzenbestandes *LAI*_c berechnet:

$$LAI_{shade} = LAI_c - LAI_{sun} \tag{6.5}$$

Die Transpiration des gesamten Pflanzenbestandes E_{tr_c} wird schließlich als Summe der Transpirationsraten der beiden Anteile $E_{tr_{sun}}$ und $E_{tr_{shade}}$ bestimmt:

$$E_{tr_c} = E_{tr_{sun}} + E_{tr_{shade}} \tag{6.6}$$

Neben der Transpiration gehen in den turbulenten Fluss latenter Wärme LE noch die direkte Verdunstung vom Boden E_g , die Verdunstung von offenen Wasserflächen

 E_w und die Verdunstung von den Vegetationsoberflächen E_v ein (siehe Gleichung 3.12). Da für die vorliegende Arbeit nur Situationen ohne Niederschlag betrachtet werden, ist die Verdunstung von den Vegetationsoberflächen vernachlässigbar. Bei der Verdunstung vom Boden und von den offenenen Wasserflächen ist eine Unterscheidung zwischen sonnenbeschienenen und im Schatten liegenden Anteil nicht nötig, da es sich hierbei um unbewachsene Flächen handelt.

Zusammengefasst hat die hier beschriebene Kopplung von FOOT3DK mit einem Photosynthese-Modell daher zwei wichtige Neuerungen zur Folge:

- der original big-leaf Ansatz des Land-Oberflächen-Schemas von FOOT3DK wurde komplett durch ein sun/shade Modell ersetzt.

- durch die Anwendung derselben stomatalen Leitfähigkeiten sowohl im Photosynthese-Modell als auch in dem Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK wird die Transpiration der Pflanzen, und somit der turbulente Fluss latenter Wärme, an die Photosynthese der Pflanzen gekoppelt.

7 Die Modell-Konfiguration

Um Simulationen mit FOOT3DK durchzuführen, ist zunächst eine sinnvolle Initialisierung des Modells nötig, d.h. alle Gitterpunkte des Modells müssen mit Anfangswerten der wichtigsten meteorologischen Parameter belegt sein. Desweiteren benötigt das Modell in regelmäßigen zeitlichen Abständen aktualisierte Antriebsdaten, um die zeitliche Veränderung der Strömungsverhältnisse wiedergeben zu können. Die Programmumgebung von FOOT3DK wurde ursprünglich so entwickelt, dass es zwei Möglichkeiten der Initialisierung und des Antriebs gibt. Bei der ersten Methode reicht es aus, dem Modell ein vertikales Profil von Druck, Temperatur und Taupunkt als Anfangsbedingung zu übergeben. Durch ein aufwendiges Interpolationsverfahren werden alle Modell-Gitterpunkte mit aus diesem Profil abgeleiteten meteorologischen Parametern belegt. Bei dieser Methode wird eine zeitliche Variation des geostrophischen Windes als großskaliger Antrieb vorgegeben. Im Rahmen dieser Arbeit wurde versucht, sowohl das benötigte Vertikal-Profil als auch die zeitliche Variation des geostrophischen Windes aus Flugzeugmessungen vorzugeben (siehe Kapitel 2.2). Dabei zeigte sich, dass diese Methode nicht ausreicht um reale Strömungsverhältnisse befriedigend wiederzugeben.

Ein weiteres Verfahren zum Antrieb eines Modells, welches letztendlich auch bei dieser Arbeit angewendet wurde, ist das sogenannte Modellnesting. Beim Modellnesting werden im Prinzip Output-Daten eines übergeordneten, größerskaligen Modells zur Initialisierung und zum Modellantrieb verwendet. Dieses Verfahren hat den entscheidenden Vorteil, dass alle großskaligen Strömungseffekte dreidimensional erfasst werden können. Für die Initialisierung werden die meteorologischen Parameter des größerskaligen Modells durch eine Spline-Interpolation auf die Gitterstruktur von FOOT3DK angepasst, so dass alle Modell-Gitterpunkte mit von dem übergeordneten Modell simulierten Anfangs-Werten belegt sind. Für den weiteren Modellantrieb werden hingegen nur Randwerte benötigt. In regelmäßigen zeitlichen Abständen (in der Regel einmal stündlich) werden den fünf äußeren Randreihen von FOOT3DK und dem Modelloberrand prognostizierte Werte des größerskaligen Modells übergeben, die dann zeitlich gewichtet in jedem Simulations-Zeitschritt als Antrieb genutzt werden. Mit Hilfe einer räumlichen Gewichtungsfunktion wird der Einfluss des größerskaligen Modells linear von der äußeren bis zur fünften Randreihe gedämpft. Eine sehr detaillierte Beschreibung der Nesting-Prozedur wird von Brücher (1997) geliefert.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird FOOT3DK in das Modell COSMO-LM (Steppeler et al., 2003; Baldauf et al., 2009) genested, welches vom Cluster C4 des TR32 betrieben wird (siehe Kapitel 2.1). Das COSMO-LM weist eine horizontale Auflösung von 2.8 km x 2.8 km auf und wird seinerseits mit Analysen des COSMO-DE vom Deutschen Wetterdienst angetrieben. Folgende Parameter werden als Anfangs- und Randbedingungen übergeben: horizontale und vertikale Windkomponenten, geostrophischer Wind, potentielle Temperatur, spezifische Feuchte, Wolkenwasser, Druck, Bodentemperatur und Bodenfeuchte. Über ein passives Dreifach-Nesting (2.8 km -> 1000 m; 1000 $m \rightarrow 250 \text{ m}; 250 \text{ m} \rightarrow 100 \text{ m}$) werden letztendlich Simulationen mit einer horizontalen Auflösung von 100 m x 100 m erreicht, wobei in den letzten beiden Nesting-Schritten FOOT3DK in sich selbst genested wird. Für die in den folgenden Kapiteln beschriebenen Modell-Auswertungen sind ausschließlich die 100 m-Simulationen relevant, welche immer um 05 UTC initialisert werden. Das Modell wird in 21 orographie-folgende vertikale Atmosphären-Schichten unterteilt. Der Modell-Oberrand liegt bei 5000 m, die Schichtdicke der untersten atmosphärischen Schicht beträgt 30 m. Die Dicke der darüber liegenden Schichten wird mit zunehmender Höhe linear um den Faktor 1.22 gespreizt, so dass die oberste Modellschicht eine vertikale Ausdehnung von ungefähr 800 m hat. Die für das Kataster von FOOT3DK (siehe Kapitel 3.1) benötigten Informationen über die verschiedenen Landnutzungsklassen (LNK) des Modellgebiets werden aus Szenen des ASTER-Satelliten (Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer; http://asterweb.jpl.nasa.gov/) mit einer Auflösung von 15 m erstellt (Waldhoff, 2010). Dabei wurden die ursprünglich 22 vorhandenen LNK's zu acht LNK's zusammengefasst. Die Modellgebiete für die Jahre 2008 und 2009 unterscheiden sich in ihrer Größe und in ihrer Klassifikation, da für beide Jahre jeweils verschiedene ASTER-Szenarien verfügbar sind. Das Modellgebiet für die 100 m-Simulationen des Jahres 2008 umfasst 65 x 74 Gitterpunkte in Ost-West- bzw. Süd-Nord-Richtung, während für Simulationen des Jahres 2009 ein deutlich größeres Modellgebiet mit 95 x 90 Gitterpunkten zur Verfügung steht. Die Modellgebiete mit den klassifizierten Landnutzungsklassen sind in Abbildung 7.1(a) und 7.1(b) dargestellt. Die dominierenden Landnutzungsklassen sind Zuckerrüben- und Weizenfelder, zu erkennen sind außerdem einzelne kleine Siedlungen. Das Rur-Tal verlaüft in beiden Modellgebieten von Süden nach Nordwesten. Im Norden sind Teile des Forschungszentrum Jülich zu erkennen. In dem größeren Modellgebiet des Jahres 2009 sind zusätzlich Bestandteile von zwei Tagebau-Gebieten enthalten. Diese müssen für die Simulationen berücksichtigt werden, da die in Kapitel 2.2 beschriebenen Flugzeugmessungen im Jahr 2009 ein größeres Gebiet umfassten als im Jahr 2008.

Die Modelltopographie wurde mit Hilfe von Daten des SRTM-Atlas (Shuttle Radar Topography Mission) erstellt (siehe Abbildung 7.1(c) und 7.1(d)). Informationen zu den orographischen Höhen liegen in einer horizontalen Auflösung von 90 m vor (van Zyl, 2001).





Abb. 7.1: Die ASTER Landnutzungsklassifikationen (LNK) und die Blattflächen-Indizes (LAI) für April der Jahre 2008 und 2009. In 7.1(a) und 7.1(b) sind zusätzlich die Modellgitter der 100 m x 100 m Simulationen dargestellt, in 7.1(c) und 7.1(d) die SRTM-Topographien als Isolinien. Die gestrichelten Linien in Abbildung 7.1(a) und 7.1(b) kennzeichnen die in Kapitel 8.2 betrachteten West-Ost-Schnitte.

Die Simulationen wurden für verschiedene Termine von April bis August durchgeführt. Zu Beginn dieser Periode sind die Zuckerrübenfelder noch unbewachsen, während die Weizen- und Rapsfelder bereits bestellt sind. Im August hingegen befindet sich die Zuckerrübe in der Wachstumsphase, Raps- und Weizenfelder sind zu dieser Zeit bereits abgeerntet. Diese zeitlich variierende Pflanzenphysiologie wird in dem Modell dadurch berücksichtigt, dass dem Kataster für jeden zu simulierenden Tag die entpsrechenden gemessenen Blattflächen-Indizes übergeben werden (siehe Kapitel 2.3). Landnutzungsklassen, für die keine Messungen vorliegen, werden mit aus der Literatur entnommenen Werten belegt (Hagemann et al., 1999; Olson, 1994a, 1994b). Dies gilt ebenfalls für weitere von dem Kataster benötigte Parameter, wie z.B. Leitfähigkeiten und Albedo der verschiedenen Landnutzungsklassen. Eine Kartierung der so festgelegten Blattflächen-Indizes ist in Abbildung 7.1(c) und 7.1(d) gezeigt. Es handelt sich um Werte für den Monat April. Erwartungsgemäß ist die Verteilung der Blattflächen-Indizes durch die jeweilige dominierende Landnutzungsklasse geprägt. So sind maximale Werte für Wald zu erkennen, während die Indizes von Wasser, Tagebau und unbewachsenen Zuckerrübenfeldern nahezu Null betragen.

8 Ergebnisse des gekoppelten FOOT3DK-Photosynthese-Modells

In diesem Kapitel werden Ergebnisse von Simulationen des mit dem in Kapitel 6 beschriebenen gekoppelten FOOT3DK-Photosynthese-Modells vorgestellt. Das Hauptziel der vorliegenden Arbeit ist eine hochaufgelöste Simulation von CO2- und H2O-Flüssen über heterogenem Gelände. Daher werden nicht, wie in vielen bisherigen Arbeiten, großräumlich gemittelte Flüsse über einen langen Zeitraum betrachtet, sondern es werden vielmehr Oberflächen-Flüsse an einzelnen Gitterpunkten auf kurzen Zeitskalen für einzelne Situationen untersucht und, wenn möglich, mit Messungen verglichen. Eine bestmögliche Repräsentation der Oberflächen-Heterogenität wird durch eine sehr hohe Auflösung der Oberfläche erreicht. Das hat zur Folge, dass ein Großteil des Modellgebiets aus Gitterpunkten mit nur einer Landnutzungsklasse besteht und die Anzahl der Gitterpunkte mit gemischten Landnutzungsklassen und somit gemittelten Eigenschaften (vgl. auch Kapitel 3) minimiert wird. Aus diesem Grund beziehen sich die im folgenden gezeigten Ergebnisse ausschließlich auf Simulationen mit der feinsten horizontalen Auflösung von 100 m x 100 m (siehe Kapitel 7). Durch diese hohe Auflösung wird erreicht, dass beispielsweise das Modellgebiet des Jahres 2009 (siehe Abbildung 7.1(a)) zu fast 25 % aus Gitterpunkten mit nur einer einzigen Landnutzungsklasse besteht. Bei mehr als der Hälfte aller Gitterpunkte macht die dominierende Landnutzung mehr als 80 % aus, und immerhin dreiviertel aller Gitterpunkte bestehen zu mehr als 60 % aus einer Landnutzungsklasse.

Bevor die Oberflächen-Flüsse betrachtet werden, soll gezeigt werden, dass der Atmosphärenteil von FOOT3DK in der Lage ist, die atmosphärischen Bedingungen auch an einzelnen Gitterpunkten realistisch wieder zu geben. Ein guter und weit verbreiteter Indikator ist die oberflächennahe Temperatur. In Abbildung 8.1(a) und 8.1(b) sind die simulierten Tagesgänge der Temperatur für Gitterpunkte mit Weizen und Zuckerrüben dargestellt. Für beide gezeigten Beispiele stimmen die simulierten Temperaturen vor allem tagsüber sehr gut mit Messungen überein und weichen niemals um mehr als 2 °C von den Messungen ab. Auch die simulierte relative Feuchte passt, sowohl was den Tagesverlauf als auch die Größenordung angeht, gut zu Messungen von mikrometeorologischen Stationen (siehe Abbildung 8.1(c) und 8.1(d)).



Abb. 8.1: Halbstündig gemittelte simulierte und gemessene oberflächennahe Temperatur (oben) und relative Feuchte (unten) für Weizen und Zuckerrübe des Jahres 2009.

8.1 Simulierte Oberflächen-Flüsse an einzelnen Gitterpunkten

In einem ersten Schritt zur Auswertung der Ergebnisse des gekoppelten Modells gilt es, simulierte Flüsse mit Messungen zu vergleichen. Da im Rahmen der TR32 FLUXPAT Messkampagne (siehe Kapitel 2.3) Oberflächen-Flüsse lediglich auf einzelnen Feldern für einige wenige Landnutzungsklassen gemessen wurden, sollen in diesem Unterkapitel zunächst simulierte Flüsse von CO₂ und H₂O an einzelnen Gitterpunkten mit Eddy-Kovarianz-Messungen verglichen werden. Betrachtet werden jeweils halbstündig gemittelte Tagesgänge von vier exemplarischen Tagen der Jahre 2008 und 2009. Um die Vorteile eines Photosynthese-basierten Land-Oberflächen-Schemas heraus zu stellen, werden neben Ergebnissen des gekoppelten Modells auch simulierte latente Wärmeflüsse des original big-leaf Schemas von FOOT3DK (siehe Kapitel 3.1) gezeigt.

Während die latenten Wärmeflüsse des original big-leaf Schemas für einzelne Gitterpunkte mit Weizen am 23. April 2008 deutlich überschätzt werden, stimmen die simulierten Füsse von H_2O und CO_2 des gekoppelten Modells bis zum frühen Nachmittag sehr gut mit den Messungen überein (siehe Abbildung 8.2). So wird neben der Größenordnung auch der plötzliche Rückgang um ca. 12:00 UTC von dem gekoppelten Modell erfasst. Dieser Einbruch wird durch aufkommende Bewölkung verursacht, welche von dem Atmosphärenteil von FOOT3DK realistisch wiedergegeben wird. Nach 13 UTC unterscheiden sich die Simulationen und die Messungen voneinander. So wird das lokale Maximum der gemessenen Flüsse von H_2O und CO_2 um ca. 16:00 UTC, welches auf eine kurze Auflockerung zurück zu führen ist, von dem Modell zu früh simuliert. Dennoch zeigen diese Ergebnisse, dass der Atmosphärenteil von FOOT3DK in "Schönwetter" Situationen realistische, von dem Photosynthese-Modell benötigte atmosphärische Parameter liefert. Die simulierten Flüsse unterscheiden sich für verschiedene Gitterpunkte mit derselben Landnutzungsklasse innerhalb des Modellgebiets kaum voneinander. Dies ist darin begründet, dass die pflanzenphysiologischen Eigenschaften für eine Landnutzungsklasse im gesamten Modellgebiet einheitlich initialisiert werden müssen. Desweiteren herrschen im gesamten Modellgebiet aufgrund der geringen Ausdehnung überall ähnliche atmosphärische Bedingungen.



Abb. 8.2: Simulierte latente Wärmeflüsse LE (oben, rote Linien) und Netto CO₂-Flüsse NEE (unten, rote Linien) des gekoppelten FOOT3DK-Photosynthese-Modells (sun/shade) über Gitterpunkten mit 100 % Weizen und die entsprechenden Eddy-Kovarianz Messungen (gepunktete Linien) für den 23. April 2008. In Abbildung 8.2(a) und 8.2(b) sind zusätzlich simulierte LE des big-leaf Ansatzes des Standard Land-Oberflächen-Schemas von FOOT3DK gezeigt (grüne Linien). Positive Werte beschreiben Flüsse von der Oberfläche in die Atmosphäre und umgekehrt.

Am 01. Juli 2008, ein typischer Strahlungstag, weisen die simulierten latenten Wärmeflüsse des gekoppelten Modells und des original big-leaf Schemas nur geringe Unterschiede auf (siehe Abbildung 8.3(a) und 8.3(b)). Der Grund hierfür ist die Limitierung der stomatalen Leitfähigkeiten durch denselben Maximalwert in beiden Modellversionen. Der physikalische Hintergrund für diese Limitierung ist folgender: bei sehr starker Einstrahlung und großer Hitze öffnen die Pflanzen die Stomata nur bis zu einem gewissen Grad, um einen zu hohen Wasserverlust und somit eine Dehydrierung zu verhindern. Trotz einer leichten Unterschätzung am Morgen und einer geringen Überschätzung um die Mittagszeit simulieren dennoch sowohl das gekoppelte Modell als auch das original big-leaf Schema realistische H₂O-Flüsse. Neben der Größenordnung wir der für Strahlungstage typische Tagesverlauf, mit maximalen Werten um die Mittagszeit, vom Modell erfasst.

Der simulierte CO₂-Fluss für Zuckerrübe am 01. Juli 2008 fällt in den Morgenstunden betragsmäßig zu niedrig aus (siehe Abbildung 8.3(c) und 8.3(d)). Dennoch produziert das gekoppelte Modell insgesamt einen CO₂-Fluss, der sehr ähnlich zu den Messungen ist. Interessant ist vor allem die gute Übereinstimmung zwischen simuliertem und gemessenem Tagesverlauf. Trotz durchgängig wolkenfreiem Himmel zeigen die Messungen aufgrund des Abbaus des benötigten internen CO₂-Gehalts einen weitaus stärkeren CO₂-Fluss in den Morgenstunden als Nachmittags. Dieser Effekt wird von dem Modell sehr gut wieder gegeben.



Abb. 8.3: Wie Abbildung 8.2, aber für Zuckerrübe für den 01. Juli 2008.

Am 24. April 2009 sind die simulierten latenten Wärmeflüsse für Weizen des original big-leaf Schemas stark überschätzt, die simuluerten H₂O-Flüsse des gekoppelten Modells hingegen stimmen bis zur Mittagszeit gut mit den Messungen überein (siehe Abbildung 8.4(a) und 8.4(b)). Die plötzliche Abnahme des gemessenen latenten Wärmeflusses am Nachmittag wird jedoch auch von dem gekoppelten Modell nicht erfasst. Es ist schwierig eine Erklärung für diese Abschwächung zu finden, da es sich ebenfalls um einen typischen Strahlungstag handelt und die gemessenen meteorologischen Parameter, allen voran die Windrichtung, keine signifikante Änderung am Nachmittag offenbaren. Nichtsdestoweniger zeigt sich erneut, dass die Benutzung eines Photosynthese-basierten Schemas zu deutlich realistischeren Ergebnissen führt als die Verwendung des original big-leaf Ansatzes.

Die CO₂-Flüsse für den 24. April 2009 werden von dem gekoppelten Modell vor allem Nachmittags betragsmäßig zu stark wieder gegeben (siehe Abbildung 8.4(c) und 8.4(d)). Hinsichtlich des Tagesgangs liefert das gekoppelte Modell aber auch für diesen Tag zu-frieden stellende Ergebnisse.



Abb. 8.4: Wie Abbildung 8.2, aber für Weizen für den 24. April 2009.

Der Vollständigkeit halber muss allerdings festgehalten werden, dass es Situationen gibt, in denen das Modell Flüsse produziert die von den Messungen deutlich abweichen. Für den 18. August 2009 beispielsweise wird der latente Wärmefluss auch von dem gekoppelten Modell deutlich überschätzt (siehe Abbildung 8.5(a) und 8.5(b)). Diese Überschätzung wird teilweise durch eine zu hohe simulierte Bodenfeuchte verursacht. Da die von dem COSMO-LM vorgegebene Bodenfeuchte aber nur geringfügig höher ist als die gemessene, sind noch weitere Ursachen für die unrealistische Wiedergabe des H₂O-Flusses seitens des gekoppelten Modells zu suchen. Ein möglicher Grund könnte der Feuchte-Gradient zwischen Boden und Atmosphäre sein (siehe Gleichnungen 3.13 bis 3.16 aus Kapitel 3.1), der bei einer zu trocken simulierten Atmosphäre zu stark von dem Modell wieder gegeben wird. Ein Vergleich mit Messungen ist diesbezüglich jedoch schwierig.

Auch die simulierten CO_2 -Flüsse für diesen Tag weisen offensichtliche Unterschiede zu den Messungen auf (siehe Abbildung 8.5(c) und 8.5(d)). Zwar ist die betragsmäßi-

ge Überschätzung der CO_2 -Flüsse vergleichsweise gering, der simulierte Tagesverlauf zeigt aber zum Teil deutliche Abweichungen von den Messungen. Das lokale Minimum in den simulierten Flüssen um ca. 12:00 UTC ist zum Beispiel in den Messungen nicht zu erkennen. Dieses Minimum resultiert aus sehr geringen simulierten Werten für die internen CO_2 -Konzentrationen und stomatalen Leitfähigkeiten.



Abb. 8.5: Wie Abbildung 8.2, aber für Zuckerrübe für den 18. August 2009.

Alles in allem belegen die hier gezeigten Ergebnisse jedoch, dass das gekoppelte Modell durchaus in der Lage ist, realistische Flüsse von CO_2 und H_2O zu simulieren. Die Verwendung eines Photosynthese-basierten sun/shade Schemas anstatt des original big-leaf Ansatzes trägt hierbei zu deutlich verbesserten simulierten latenten Wärmeflüssen bei.

Wie bereits in Kapitel 3.1 beschrieben, setzt sich der simulierte latente Wärmefluss an Gitterpunkten ohne Wasserflächen aus der direkten Verdunstung vom Boden und der Transpiration der Pflanzen zusammen. Je nach Landnutzungsklasse sind die Beiträge dieser beiden Komponenten unterschiedlich groß. Wie die Simulationen für einen typischen Strahlungstag zeigen, wird der H₂O-Fluss über abgeerntetem Boden fast ausschließlich durch die direkte Verdunstung verursacht (siehe Abbildung 8.6(b)). Dagegen wird der simulierte latente Wärmefluss über Vegetationsflächen, wie z.B. Wiese, hauptsächlich durch die Transpiration der Pflanzen getragen und ist somit stärker als über abgeerntetem Boden (siehe Abbildung 8.6(a)). Die Bodenverdunstung für diese Landnutzungsklasse ist vergleichsweise gering. Ein entscheidender Parameter bei der Parametrisierung der beiden anteiligen Feuchteflüsse ist die Vegetationsbedeckung. Ein Wert von knapp 90 % für Wiese bedeutet, dass von oben betrachtet bei nur 10 % der Boden-

kachel der nackte Boden zu sehen ist, der Rest ist mit Vegetation bedeckt. Bei abgeerntetem Boden ist nur 10 % der Fläche bewachsen. Das spiegelt sich auch in den simulierten CO_2 -Flüssen wider. Während für Wiese eine starke CO_2 -Aufnahme simuliert wird, ist sie für Boden nahezu Null, so dass insgesamt die simulierten CO_2 - und H₂O-Flüsse auch für diese beiden Landnutzungsklassen sinnvoll erscheinen.



Abb. 8.6: Simulierte Netto CO₂-Flüsse (NEE) und latente Wärmeflüsse (LE) aufgeteilt in Transpiration und direkte Verdunstung vom Boden für Wiese und abgeerntetem Boden am 20. April 2009.

Eine in der Literatur haüfig untersuchte Größe ist der Wassernutzungsgrad (englisch: water use efficiency WUE, siehe z.B. Baldocchi et al. 2001). WUE kann als Quotient aus dem Netto CO_2 -Fluss NEE und dem latenten Wärmefluss LE definiert werden. Ein hoher WUE ist oftmals gleichbedeutend mit einer sehr effizienten Photosynthese, da die Pflanze bei einem nur geringen Wasserverlust viel CO_2 aufnimmt. Daher ist zu erwarten, dass die hochgezüchteten Getreide-Pflanzen einen höheren WUE haben als beispielsweise Wald oder Gräser. Wie die simulierten mittleren WUE für Gitterpunkte mit Wiese und Weizen bzw. Rübe zeigen, wird dieser Effekt von dem gekoppelten Modell sehr gut wieder gegeben (siehe Tabelle 8.1). Für alle drei gezeigten Tage wird jeweils ein geringerer WUE für Wiese simuliert als für die jeweilige Kulturpflanze. Diese Ergebnisse korrespondieren gut mit Messungen aus jüngeren Veröffentlichungen. Coulter et al. (2006) beispielsweise haben einen stärkeren CO_2 -Fluss über landwirtschaftlich genutzten Flächen in den USA gemessen als über Graslandschaften, während sich die gemessenen latenten Wärmeflüsse für beide Landnutzungsklassen kaum unterscheiden. Die hier präsentierten simulierten WUE für Weizen bzw. Rübe stimmen bezüglich der

Größenordnung gut mit Messungen der FLUXPAT-Messkampagne überein (siehe Tabelle 8.1). Die gemessenen WUE lassen darauf schließen, dass Weizen im April um einiges produktiver ist als Zuckerrübe im Juli. Aufgrund einer sinnvollen Kalibrierung ist das Modell in der Lage, diese unterschiedliche Produktivität zu erfassen.

Die gemessenen Tagesgänge der WUE für Zuckerrübe und Weizen am 01. Juli 2008 bzw. 24. April 2009 zeigen den für Strahlungstage typischen Verlauf (siehe Abbildung 8.7). Der Wassernutzungsgrad ist morgens am höchsten und nimmt im Laufe des Tages immer mehr ab. Dieser Verlauf wird vor allem durch die Transpiration bestimmt, die nachmittags aufgrund einer trockeneren und heißeren Atmosphäre höher ist als vor-

	23.04.2008	01.07.2008	24.04.2009
Wiese simuliert	0.104	0.061	0.099
Weizen simuliert	0.118	-	0.110
Zuckerrübe simuliert	-	0.072	-
Weizen gemessen	0.102	-	0.105
Zucekrrübe gemessen	-	0.075	-

Tab. 8.1: Simulierte WUE als Quotient aus täglich gemittelten NEE und LE für Gitterpunkte mit Weizen (23.04.2008 und 24.04.2009), Zuckerrübe (01.07.2008) und Wiese. Für Weizen und Zuckerrübe werden zusätzlich gemessene Werte für WUE gezeigt.

mittags, und wird von dem gekoppelten Modell für einzelne Gitterpunkte mit Weizen und Zuckerrübe zufriedenstellend erfasst. Auch anhand der gemessenen und simulierten Tagesverläufe der WUE ist zu erkennen, dass Weizen vor allem vormittags effektiver Photosynthese betreibt als Zuckerrübe.



Abb. 8.7: Simulierte und gemessene water-use-efficiency WUE für Zuckerrübe (01. Juli 2008) und Weizen (24. April 2009).

Zusammengefasst kann festgehalten werden, dass das gekoppelte Modell in der Lage ist, realistische atmosphärische Parameter und Oberflächen-Flüsse zu simulieren. Auch die simulierten Flüsse von CO_2 und H_2O für Landnutzungsklassen, für die keine Messungen vorliegen, erscheinen sinnvoll, so dass das Modell insgesamt für die Untersuchung von flächendeckenden Flüssen über heterogenem Gelände geeignet ist. Ergebnisse dieser Untersuchungen werden im folgenden Unterkapitel vorgestellt.

8.2 Simulierte Flüsse von CO₂ und H₂O über heterogenem Gelände

Die Größenordungen der simulierten Flüsse von CO₂ und H₂O werden in erster Linie durch die jeweilige dominierende Landnutzungsklasse und dem daraus resultierenden Blattflächen-Index bestimmt. Demenstprechend sind in den Verteilungen der gemittelten Flüsse über den Modellgebieten der Jahre 2008 und 2009 (siehe Abbildung 8.8) deutlich die Muster der ASTER Landnutzungsklassifikation zu erkennen (vgl. Abbildung 7.1). Gezeigt werden zeitliche Mittel von 11 - 12 UTC. Schwache Flüsse werden für Tagebau, Boden, Siedlung und Wasser simuliert, die stärksten Flüsse sind dagegen über Flächen mit Weizen bzw. Zuckerrübe zu beobachten. Das gilt für den latenten Wärmefluss LE, sowie in noch stärkerem Maße für den Netto CO₂-Fluss NEE. Auffällig ist, dass die Verteilungen der simulierten Flüsse am 24. April 2009 weitaus heterogener sind als für den 01. Juli 2008. Im Juli befinden sich sowohl Weizen als auch Zuckerrübe in der Wachstumsphase, so wurde für Weizen ein LAI von 3.4 gemessen, für Zuckerrübe ein LAI von 4.0. Da die simulierten Flüsse somit für beide Landnutzungsklassen ähnliche Größenordungen besitzen, sind für große Teile des Modellgebiets homogene Oberflächen-Flüsse zu erkennen (siehe Abbildung 8.8(a) und 8.8(c)).



Abb. 8.8: Stündlich gemittelte (11 - 12 UTC) Flüsse von H_2O (oben) und CO_2 (unten) über den gesamten Modellgebieten der Jahre 2008 und 2009. Positive Werte bedeuten Flüsse von der Oberfläche in die Atmosphäre und umgekehrt. Für Details siehe Text.

Anders stellt sich die Situation im April dar. Während sich Weizen bereits in der Wachstumsphase befindet, sind die Zuckerrüben-Felder noch unbewachsen. Dieser starke Kontrast ist in den Flüssen von CO₂ und H₂O sehr gut zu erkennen (siehe Abbildung 8.8(b) und 8.8(d)). Insgesamt wird der Einfluss der Oberflächenheterogenität auf die Verteilung der Oberflächen-Flüsse von dem gekoppelten Modell gut wieder gegeben. In den Abbildungen der latenten Wärmeflüsse (Abbildung 8.8(a) und 8.8(b)) sind einige unerwünschte Randeffekte zu erkennen. So treten am Rand teilweise unverhältnismäßig hohe Feuchte-Flüsse auf. Diese Effekte werden durch die Nesting-Prozedur verursacht. Im Inneren des Modellgebiets trocknet der Boden im Laufe des Tages ab, während die äußeren Randreihen in jedem Zeitschritt die höhere Bodenfeuchte des antreibenden Modells COSMO-CLM übergeben bekommen, so dass am Rand zum Teil stärkere H₂O-Flüsse simuliert werden als im übrigen Modellgebiet. Besonders ersichtlich ist das für das Tagebau-Gebiet im Nordosten des Modellgebiets für April 2009 (Abbildung 8.8(b)). Die simulierten Netto CO₂- und latenten Wärmeflüsse weisen eine gewisse räumliche Anti-Korrelation auf. Das zeigt sich besonders deutlich bei der Betrachtung von Ost-West-Schnitten durch die Modellgebiete.



Abb. 8.9: Stündlich gemittelte latente Wärmeflüsse LE (oben) und Netto CO₂-Flüsse NEE (unten) entlang eines Ost-West-Schnittes im Norden des Modellgebiets (dargestellt als gestrichelte Linie in Abbildung 7.1(b)) für den 23. April 2008. Gitterpunkte, die zu mehr als 80 % aus einer Landnutzungklasse bestehen, sind farbig markiert. Die Farbgebung entspricht der aus Abbildung 7.1(b) (gelb: Weizen; braun: Boden; magenta: Siedlung).

In Abbildung 8.9 sind stündlich gemittelte simulierte Flüsse von CO₂ und H₂O über 65 Gitterpunkten entlang eines Ost-West-Schnittes im Norden des Modellgebiets für den 23. April 2008 dargestellt (siehe gestrichelte Linie in Abbildung 7.1(b)). Beide Flüsse werden eindeutig von der jeweiligen dominierenden Landnutzungsklasse bestimmt. Hohe latente Wärmeflüsse und CO₂-Flüsse werden für Gitterpunkte mit Weizen simuliert, welcher sich zu dem gezeigten Zeitpunkt in der Wachstumsphase befindet. Die schwächsten Flüsse sind für Gitterpunkte zu beobachten, die von der Landnutzungsklasse Boden (enstpr. unbewachsenen Zuckerrüben-Feldern) dominiert werden. Während der Netto CO₂-Fluss für Gitterpunkte mit Boden nahezu Null beträgt (siehe z.B. Gitterpunkt 18, 19 und 58), erreicht der latente Wärmefluss aufgrund der parametrisierten direkten Verdunstung Werte von ungefähr 200 W/m². Dennoch weisen beide Flüsse eine ähnlich hohe Heterogenität auf und sind deutlich anti-korreliert (r = -0.44).



Abb. 8.10: Wie Abbildung 8.9, aber für den 01. Juli 2008. Gitterpunkte, die zu mehr als 80 % aus einer Landnutzungklasse bestehen, sind farbig markiert. Die Farbgebung entspricht der aus Abbildung 7.1(b) (gelb: Weizen; braun: Zuckerrübe; magenta: Siedlung).

Eine deutlich geringere Heterogenität zeigen beide Flüsse entlang des selben Ost-West-Schnittes für den 01. Juli 2008 (siehe Abbildung 8.10). Diese geringere Heterogenität ist darin begründet, dass sich die Zuckerrüben zu diesem Zeitpunkt genauso wie Weizen in der Wachstumsphase befinden und somit ähnliche Flüsse produzieren (siehe oben). Minimale Flüsse von CO_2 und H_2O sind lediglich für Gitterpunkte zu beobachten, die von der Landnutzungsklasse Siedlung dominiert werden (siehe z.B. Gitterpunkte 33, 34 und 35). Die Anti-Korrelation zwischen beiden Flüssen ist daher weitaus stärker als für den 23. April 2008 (r = -0.82). Die Kopplung zwischen dem latenten Wärmefluss LE, bestehend aus der Transpiration der Pflanzen und der direkten Verdunstung vom Boden, und dem Netto CO_2 -Fluss NEE kommt durch die Verwendung derselben simulierten stomatalen Leitfähigkeit zustande. Dabei wird jedoch nur die Transpiration der Pflanzen vollständig durch die Stomata gesteuert. Eine weitaus stärkere Kopplung zeigt sich daher für den Netto CO₂ Fluss und die Transpiration, hier exemplarisch dargestellt für den 24. April 2009 (siehe Abbildung 8.11). Sowohl die Transpiration als auch der CO₂-Fluss sind für Gitterpunkte mit der Landnutzungsklasse Boden aufgrund fehlender Vegetation nahezu Null, maximale Werte werden für Gitterpunkte mit Weizen simuliert. Dementsprechend weisen beide Flüsse für das gezeigte Beispiel eine sehr hohe Anti-Korrelation auf (r = -0.93). Die Kopplung zwischen CO₂-Fluss und dem latenten Wärmefluss für den selben Ost-West-Schnitt (nicht gezeigt) ist erwartungsgemäß niedriger (r = -0.75).



Abb. 8.11: Stündlich gemittelte Transpirationsraten (oben) und Netto CO₂-Flüsse NEE (unten) entlang eines Ost-West-Schnittes des Modellgebiets (dargestellt als gestrichelte Linie in Abbildung 7.1(a)) für den 24. April 2009. Gitterpunkte, die zu mehr als 80 % aus einer Landnutzungklasse bestehen, sind farbig markiert. Die Farbgebung entspricht der aus Abbildung 7.1(a) (gelb: Weizen; braun: Boden; magenta: Siedlung; grün: Wald).

Bislang haben sich nur wenige Studien mit der räumlichen Verteilung von CO_2 und H₂O-Flüssen auf der regionalen Skala befasst, zumal eine flächendeckende Messung von Oberflächen-Flüssen technisch nur sehr schwer umsetzbar ist (z.B. Anderson et al., 2008). In vielen Arbeiten wird der Schwerpunkt vielmehr auf die zeitliche Korrelation und der daraus abzuleitenden water-use-efficiency (WUE, siehe auch Unterkapitel 8.1) gelegt (z.B. Baldocchi et al., 2001). Räumliche Zusammenhänge werden meist über die Kopplung zwischen Oberflächen-Eigenschaften und den daraus resultierenden Flüssen betrachtet. Einer der wichtigsten Parameter zur Beschreibung der Oberflächen-Eigenschaft, gerade in Bezug auf die CO_2 - und H₂O- Flüsse, ist der Blattflächen-Index LAI. Während das für die vorliegende Arbeit verwendete gekoppelte Modell einen engen Zusammenhang zwischen dem LAI und dem Netto CO2-Fluss NEE aufdeckt, ist der Einfluss des LAI auf den latenten Wärmefluss LE weitaus schwächer (siehe Tabelle 8.2). Lediglich für den 01. Juli 2008 findet sich eine Korrelation von 0.71 zwischen LAI und LE, da sich zu diesem Zeitpunkt sowohl Zuckerrübe als auch Weizen in der Wachstumsphase befinden und die Verteilung des LAI innerhalb des Modellgebiets relativ homogen ist (siehe oben). Dennoch passen diese Ergebnisse gut zu denen anderer Untersuchungen. Gorska et al. (2008) beispielsweise haben Flugzeugmessungen und Large-Eddy-Simulationen kombiniert um den Zusammenhang zwischen den Oberflächen-Eigenschaften und den Flüssen von sensibler Wärme, latenter Wärme und CO₂ in einer Höhe von 70 m über Grund zu untersuchen. Die Untersuchungen wurden in einem mit Winterweizen und verschiedenen Graslandschaften bedeckten Gebiet durchgeführt. Während die Autoren eine hohe Korrelation zwischen dem normalisierten differenzierten Vegetationsindex (NDVI, ein Vegetationsindex der auf den unterschiedlichen Reflektionseigenschaften von lebendem und "totem" Material beruht) und dem CO_2 -Fluss gefunden haben (r = 0.7), ist die Korrelation zwischen NDVI und latentem Wärmefluss weitaus schwächer (r = 0.32).

	23.04.2008	01.07.2008	24.04.2009
LAI/LE	0.34	0.71	0.26
LAI/NEE	0.90	0.91	0.91

Tab. 8.2: Räumliche Korrelationen zwischen dem Blattflächen-Index (LAI) und stündlich gemitteltem (11 - 12 UTC) latenten Wärmefluss (LE) bzw. Netto CO₂-Fluss (NEE) für das gesamte Modellgebiet.

8.3 Einfluss der Oberflächen-Flüsse auf die Struktur der PBL

Die Kopplung eines mesoskaligen Modells mit einem Photosynthese-Modell ermöglicht neben der flächendeckenden Darstellung der CO₂- und H₂O-Flüsse auch die Untersuchung entsprechender Vertikalprofile. Am Beispiel eines typischen Strahlungstages (01. Juli 2008) soll gezeigt gezeigt werden, inwiefern der von dem gekoppelten Modell simulierte Netto CO₂-Fluss NEE die vertikale Verteilung des atmosphärischen CO₂-Gehalts beeinflusst (siehe Abbildung 8.12). Abbildung 8.12(a) zeigt die vertikale CO₂-Verteilung um 05 UTC, also die Verteilung zu Beginn der Simulation mit der das Modell initialisiert wurde. Hohe CO₂-Konzentrationen von 410 ppm und mehr finden sich in Bodennähe, während die Konzentration in größeren Höhen stark reduziert ist. Dieses Profil ist typisch für die Zeit vor Sonnenaufgang, da Nachts die thermische Konvektion zusammenbricht und CO₂ aus größeren Höhen zum Erdboden absinkt (Sun et al., 2006). Ein weiterer Grund für die hohen Werte in Bodennähe ist die in der Nacht aussetzende Photosynthese der Pflanzen. Das bei der Bodenatmung frei werdende CO₂ führt daher zu einem Netto CO₂-Fluss vom Untergrund in die Atmosphäre. Das Minimum am Boden um 07 UTC (Abbildung 8.12(b)) resultiert aus der einsetzenden photosynthetischen CO₂-Aufnahme nach Sonnenaufgang, die als Senke des atmosphärischen CO₂ bei gleichzeitig noch nicht einsetzenden vertikalen Transporten wirkt. Während des Tages zeigt sich als Folge der andauernden thermischen Konvektion und Turbulenz ein gut durchmischtes Vertikalprofil mit nahezu konstanten CO₂-Konzentrationen vom Boden bis zur Grenzschicht-Höhe (siehe Abbildung 8.12(c) und 8.12(d)). Kurz vor Sonnenuntergang lässt die turbulente Durchmischung nach, während die Pflanzen weiterhin Photosynthese betreiben, so dass die anhaltende CO₂-Aufnahme der Pflanzen erneut zu minimalen Werten in Bodennähe führt (Abbildung 8.12(e)). Nach Sonnenuntergang beginnt schließlich der Aufbau des o.g. typischen nächtlichen Vertikalprofils, mit permanent ansteigenden CO₂-Konzentrationen in Bodennähe (siehe Abbildung 8.12(f)).



Abb. 8.12: Simulierte vertikale CO₂-Profile zu sechs verschiedenen Zeitpunkten über einem Gitterpunkt mit Weizen am 01. Juli 2008.

Ein Vergleich der simulierten Profile mit aus Flugzeugmessungen erstellten Vertikalverteilungen der CO_2 -Konzentration legt nahe, dass das gekoppelte Modell in der Lage ist, den Auf- bzw. Abbau und die Umwälzung von atmosphärischem CO_2 realistisch wieder zu geben (siehe Abbildung 8.13). Obwohl der Einfluss der photosynthetischen
CO₂-Aufnahme auf die bodennahen Konzentrationen von dem Modell offensichtlich zu früh und zu stark simuliert wird (vgl. Abbildung 8.12(b) und 8.13(a)), lässt ein Vergleich der Simulationen mit gemessenen Profilen aus den von 11.45 bis 12.00 UTC bzw. von 15.50 bis 16.10 UTC dauernden Aufstiegen auf eine realistische turbulente Durchmischung seitens des gekoppelten Modells schließen (vgl. Abbildung 8.12(c) bzw. 8.12(d) mit 8.13(b) bzw. 8.13(c)). So sind die Konzentrationen sowohl in den Messungen als auch in den Simulationen vom Boden bis in Höhen von 1000 m nahezu konstant und zeigen außerdem ähnliche Größenordnungen, was trotz der in Kapitel 6 genannten Probleme für eine sinnvolle Initialisierung des atmosphärischen CO₂-Gehalts spricht.



Abb. 8.13: Gemessene vertikale CO₂-Profile aus Flugzeugmessungen zu drei verschiedenen Zeitpunkten am 01. Juli 2008.

Eine solch gute Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Vertikalprofilen von CO_2 ist leider nicht für alle Simulationstage erzielt worden. Zwar zeigen alle Simulationen einen für Strahlungstage typischen ähnlichen Verlauf, die Größenordnungen weichen jedoch mitunter sehr von den Messungen ab (nicht gezeigt). Hierfür gibt es mehrere mögliche Gründe, die in der abschließenden Diskussion genauer erläutert werden (Kapitel 9).

Die Oberflächen-Heterogenität und die damit verbundenen Oberflächen-Flüsse haben einen direkten Einfluss auf die Verteilung von Skalaren innerhalb der bodennahen Grenzschicht. Ein Mechanismus für die Verteilung von Wasserdampf und Temperatur wurde von Moene und Schüttemeyer (2008) vorgeschlagen: im idealisierten Fall sind Luftmassen über bewachsenenen Flächen relativ feucht und kühl, während die Luftmassen über daran angrenzende unbewachsene Flächen in der Regel warm und trocken ausgeprägt sind. Das hat zur Folge, dass Temperatur und Feuchte in Luftmassen, die durch thermisch erzeugte Turbulenzelemente von heterogenen Oberflächen in höhere Schichten transportiert werden, anti-korreliert sind. Eine positive Korrelation zeigt sich dagegen in Luftmassen, die von sehr homogenem Gelände oder aus gut durchmischten Schichten stammen. Ein ähnlicher Mechanismus ist für die Verteilung von CO_2 und H_2O zu beobachten (Detto et al., 2008; Scanlon und Sahu, 2008). Da tagsüber der photosynthetisch bedingte CO_2 -Fluss eine Senke für atmosphärisches CO_2 bildet, während der latente Wärmefluss gleichzeitig eine Quelle für H₂O darstellt, haben Luftmassen über bewachsenenen Flächen in der Regel einen geringen CO₂-Gehalt und eine hohe H₂O-Konzentration. Über unbewachsenen Flächen hingegen ist die Luft trocken und enthält vergleichsweise viel CO₂. Daher weisen auch die Konzentrationen von CO₂ und H₂O unter konvektiven Bedingungen und über heterogenem Gelände in der Regel eine Anti-Korrelation auf. Diese Anti-Korrelation ist in den Flugzeugmessungen, die im Rahmen der FLUXPAT-Kampagne am 24. April 2009 durchgeführt wurden, sehr gut zu erkennen (siehe Abbildung 8.14). Exemplarisch dargestellt sind gemessene Konzentrationen entlang einer geraden, Ost-West orientierten Flugstrecke im Süden des Modellgebiets (vgl. Abbildung 2.4) zu zwei verschiedenen Zeiten. Die Flugdauer für eine Flugstrecke beträgt ein bis zwei Minuten. An dem ersten Termin (ca. 11.53 UTC) wurde in Höhen zwischen 110 und 130 m über Grund gemessen, an dem zweiten Termin (ca. 12:43 UTC) in Höhen zwischen 90 und 120 m.



Abb. 8.14: Gemessene CO₂- und H₂O-Konzentrationen entlang einer Ost-West orientierten Flugstrecke (vgl. Abbildung 2.4) im Süden des Modellgebiets um ca. 11:53 UTC (oben) und um ca. 12:43 UTC (unten) am 24. April 2009.

Über weite Teile der zurückgelegten Flugstrecken sind deutliche Muster mit hohen CO_2 - und niedrigen H₂O-Konzentrationen (und umgekehrt) zu erkennen, die auf die Oberflächenheterogenität zurück zu führen sind und eine Anti-Korrelationen zwischen beiden Skalaren implizieren (r = -0.43 bzw. r = -0.30 für den ersten bzw. den zweiten Termin). Einige in Abbildung 8.14 gezeigte Peaks sind plötzlichen Änderungen der Flughöhe zuzuschreiben, so z.B. das Maximum bzw. Minimum nach einer zurückgelegten Strecke von ungefähr 2500 m des ersten Überflugs, wo das Flugzeug von ca. 125 m über Grund in eine Höhe von 110 m abgesackt ist. Über vielen Teilstücken ist die Flughöhe jedoch nahezu konstant, so dass hier die entgegen gesetzten Peaks mit ziemlicher Sicherheit aus dem oben beschriebenen Mechanismus resultieren (z.B. die lokalen Extrema bei ca. 2200 m bzw. bei 3800 bis 4300 m des ersten Überflugs).



Abb. 8.15: Gemessene CO₂- und H₂O-Konzentrationen entlang einer Ost-West orientierten Flugstrecke (vgl. Abbildung 2.4) im Norden des Modellgebiets um ca. 12:57 UTC (oben) und im Süden des Modellgebiets um ca. 12:53 UTC (unten) am 18. August 2009.

Anders stellt sich die Situation für den 18. August 2009 dar. Entlang einer Flugstrecke im Süden des Modellgebiets für einen Überflug um ca. 12:53 UTC weisen die Konzentrationsverteilungen von CO₂ und H₂O eine deutlich positive Korrelation von +0.65 auf (siehe Abbildung 8.15, unten). Dies gilt auch für Messungen, die vor bzw. nach dem gezeigten Beispiel im Süden des Modellgebiets durchgeführt wurden (nicht gezeigt). Es treten also deutliche Unterschiede zum 24. April 2009 auf, obwohl die Flugstrecke und die Flughöhe der gezeigten Beispiele nahezu gleich sind. Ein möglicher Grund hierfür ist eine Homogenisierung der Oberfläche im August durch das Abernten von Feldern, die sich im April noch in der Wachstumsphase befinden. Gestärkt wird diese These dadurch, dass entlang einer Flugstrecke im Norden des Modellgebiets zu ungefähr der gleichen Zeit sehr wohl eine Anti-Korreleation zwischen CO2 und H2O zu beobachten ist (siehe Abbildung 8.15, oben). Ein tatsächlicher Beleg dieser Vermutung würde allerdings eines sehr aufwendigen, im Rahmen dieser Arbeit nicht durchführbaren Verfahrens bedürfen, bei dem die Muster der Konzentrationsverteilungen bestimmten Punkten am Boden zugeordnet werden müssten. Dieses Beispiel soll vielmehr einen Eindruck davon vermitteln, wie komplex und dadurch nur sehr schwer modellierbar die Vorgänge innerhalb der Grenzschicht sind.

In diesem Kontext soll untersucht werden, inwieweit die simulierten Oberflächen-Flüsse des gekoppelten FOOT3DK-Photosynthese-Modells die horizontalen Verteilungen von CO₂ und H₂O beeinflussen. Abbildung 8.16 zeigt die simulierten CO₂- und H₂O-Konzentrationen über 95 Gitterpunkten entlang eines Ost-West-Schnittes des Modellgebiets für den 18. August 2009 (vgl. Abbildung 7.1(a)). Zusätzlich sind die entsprechenden Netto CO₂-Flüsse NEE und latenten Wärmeflüsse LE der darunter liegenden Oberflächen-Gitterpunkte dargestellt. Generell haben die simulierten Konzentrationen ähnliche Größenordungen wie die gemessenen Konzentrationen (vgl. Abbildung 8.15). Sowohl die simulierten CO₂- als auch die H₂O-Konzentrationen der ersten Modellschicht (mit einer zentrierten Höhe von 15 m über Grund) weisen eine hohe Variabilität auf, wobei die meisten Peaks eindeutig aus den Oberflächenflüssen resultieren. Das lokale Maximum (Minimum) der H₂O-Konzentration (CO₂-Konzentration) bei Gitterpunkt 1 bis 4 beispielsweise ist klar den starken Flüssen am darunter liegenden Boden zuzuordnen, die lokalen Minima (Maxima) bei Gitterpunkt 13, 28 und 84 ergeben sich aus den vergleichsweise schwachen Oberflächenflüssen. Dementsprechend sind die simulierten Flüsse positiv mit den Konzentrationen in der darüber liegenden ersten Modellschicht korreliert (r = 0.30 für LE und H₂O, r = 0.21 für NEE und CO₂). Die in der ersten Modellschicht erkennbaren Muster sind größtenteils auch in der vierten Modellschicht noch deutlich auszumachen, so dass davon auszugehen ist, dass der Einfluss der simulierten Oberflächenflüsse bis in diese Modellschicht reicht. Die zentrierte Höhe der vierten Modellschicht liegt 135 m über Grund und entspricht damit in etwa der Höhe der Flugzeugmessungen. Sowohl in der ersten als auch in der vierten Modellschicht sind die simulierten CO₂- und H₂O-Konzentrationen anti-korreliert (r = -0.21 bzw. r = -0.17). Am 24. April 2009 ist der Einfluss der simulierten Netto CO₂-Flüsse NEE auf die CO₂-Konzentrationen der ersten Modellschicht deutlich erkennbar, während dieser Effekt für den latenten Wärmestrom LE und die H2O-Konzentration nur sehr schwach ausgeprägt

ist (siehe Abbildung 8.17). Für diesen Tag simuliert das Modell einen relativ starken Süd-Ost-Wind, was zur Folge hat dass die einzelnen Peaks eine leichte Westverschiebung relativ zu den Oberflächenflüssen aufweisen, vor allem erkennbar für die CO₂-Konzentration.



Abb. 8.16: Stündlich gemittelte (11 - 12 UTC) latente Wärmeflüsse LE (oben) und Netto CO_2 -Flüsse (unten) sowie die daraus resultierenden Konzentrationen von H_2O und CO_2 in der ersten und vierten Modellschicht (entspr. 15 m bzw. 135 m über Grund) um 12 UTC. Gezeigt werden Flüsse und Konzentrationen über den 95 Gitterpunkten entlang der gestrichelten Linie aus Abbildung 7.1(a) für den 18. August 2009.

Dieser starke Wind ist auch die wahrscheinliche Ursache dafür, dass die Peaks in der vierten Modellschicht komplett verschwunden sind. In dem Modell impliziert ein starker oberflächennaher Wind offensichtlich eine starke turbulente Durchmischung, die zu einer Verwischung der Signale in der vierten Modellschicht führt. Dementsprechend sind die Konzentrationen von CO₂ und H₂O in der vierten Schicht sogar leicht positiv korreliert (r = +0.19), während sie in der ersten Modellschicht anti-korreliert sind (r = -0.29). Die Größenordnungen der simulierten Konzentrationen unterscheiden sich stark von den Messungen, vor allem für CO₂ (vgl. Abbildung 8.14). An dieser Stelle weicht das Modell also deutlich von den Messungen ab und es zeichnet sich ab, dass eine ursprünglich angedachte realistische Wiedergabe der mikroskaligen Strukturen in der unteren plane-



taren Grenzschicht durch das Modell mit der hier benutzten Konfiguration nicht ohne weiteres möglich ist.

Abb. 8.17: Wie Abbildung 8.16, aber für den 24. April 2009.

Das zeigen auch tatsächliche Punkt-zu-Punkt-Vergleiche zwischen simulierten und gemessenen CO₂- und H₂O-Konzentrationen, die in einem aufwendigen Verfahren von Cluster D2 des TR32 für den 01. Juli 2008 durchgeführt wurden (siehe Abbildung 8.18). Wie zu erkennen ist, wurde an diesem Tag das in Kapitel 2.2 genannte Kreuzmuster geflogen. In die gemessenen Konzentrationen gehen alle 1hz-Messungen ein, die in der Zeit zwischen 09:30 und 10:00 UTC und in einer Höhe von 88 ± 20 m durchgeführt wurden. Durch die Einteilung des überflogenen Gebietes in 250 m x 250 m Boxen kann über die so erstellte Wertemenge dann ein halbstündiges Mittel für jede Box gebildet werden. In die halbstündigen Mittel der simulierten Konzentrationen des gekoppelten Modells werden nur die Gitterpunkte berücksichtigt, die in etwa den 250 m x 250 m Boxen der dritten Modell-Schicht, deren zentrierte Höhe 88 m über Grund liegt. Während simulierte und gemessene Konzentrationen von H₂O für Teile des Modellgebiets im Norden und Nordwesten ähnliche Größenordnungen aufweisen, werden die H₂O-Konzentrationen im Süden und im äußersten Nordosten von dem Modell überschätzt. Noch größer sind

die Unterschiede zwischen gemessenen und simulierten CO₂-Konzentrationen. Die Messungen zeigen einen klaren Ost-West-Gradient, der von dem Modell nicht erfasst wird. Die Größenordnungen der CO₂-Konzentration stimmen nur für den Westen des Modellgebiets überein, ansonsten kommt es zu einer deutlichen Überschätzung auf Seiten des Modells. Mögliche Gründe für die Schwierigkeiten, mikroskalige Strukturen mit dem gekoppelten Modell realistisch wieder zu geben, werden in dem abschließenden Kapitel 9 diskutiert.



Abb. 8.18: Halbstündig gemittelte (09:30 bis 10:00 UTC) simulierte und gemessene Konzentrationen von CO_2 in ppm und H_2O in g/kg für den 01. Juli 2008. Für Details siehe Text. Persönliche Mitteilung: Christoph Selbach.

Eine andere Möglichkeit das Modell gegen Flugzeugmessungen zu validieren ist die Durchführung einer Haushaltsgleichung für ein ganzes Luftpaket. Hierbei werden im Gegensatz zu Punkt-zu-Punkt Vergleichen nicht einzelne mikroskalige Strukturen betrachtet, sondern es wird vielmehr getestet, ob das Modell in der Lage ist generelle Strukturen der Atmosphäre realistisch zu erfassen. Die Grundannahme bei einer solchen Haushaltsgleichung ist die, dass nach einigen vereinfachenden Annahmen der lokalzeitliche Trend eines Skalars innerhalb eines abgeschlossenen Luftpakets durch die horizontale Advektion und die vertikale Flussdivergenz dieses Skalars durch die Ränder des Luftpakets bestimmt wird. Die Größe des Luftpakets wird durch das geflogene Flugmuster festgelegt. Der lokal-zeitliche Trend kann sowohl für die Messungen als auch für das Modell relativ simpel berechnet werden. Durch die Annahme, dass die turbulenten Flüsse am Oberrand der planetaren Grenzschicht null sind, wird die vertikale Flussdivergenz mit Hilfe der Flüsse am Boden bestimmt. In dem Modell gehören die turbulenten Oberflächenflüsse zum Standard-Output, für die Flugzeugmessungen ist hingegen eine lineare Interpolation der in Flughöhe gemessenen Flüsse auf den Boden nötig. Die horizontale Advektion der Skalare wird jeweils als Residuum der Haushaltsgleichung berechnet. Eine sehr detaillierte Beschreibung des Grundkonzepts der Haushaltsgleichung und der Berechnungsprozeduren, sowie die Auswertung und Interpretation der Ergebnisse verschiedener Tage des Jahres 2009 sind in der Arbeit von Zacharias (2011) zu finden. Hier soll am Beispiel des 23. April 2008 gezeigt werden, dass das Modell in Bezug auf die spezifische Feuchte die generellen Strukturen der Grenzschicht realistisch simuliert (siehe Tabelle 8.3). Die Haushaltsgleichung wurde für die Zeit von ca. 09:30 bis 11:30 UTC durchgeführt. Der lokal-zeitliche Trend und die Flussdivergenz weisen in dem Modell und in den Messungen dasselbe Vorzeichen auf und werden von dem Modell nur leicht überschätzt, so dass auch die Advektion als Residuum dieselbe Größenordnung besitzt. Größere Defizite der Simulationen in Bezug auf die generelle Struktur zeigen sich dagegen für das atmosphärische CO₂ (siehe Tabelle 8.4). Zwar haben alle Terme der Haushaltsgleichung im Modell und in den Messungen dasselbe Vorzeichen, der lokal-zeitliche Trend ist in dem Modell jedoch um eine ganze Größenordnung kleiner als in den Messungen. Die Flussdivergenz wird von dem Modell deutlich überschätzt. Die großen Unterschiede zwischen Modell und Messungen in Bezug auf das CO2 werden ebenfalls in der abschließenden Diskussion näher beleuchtet.

	Messungen	Modell
zeitlicher Trend	-0.149	-0.191
Flussdivergenz	-0.168	-0.178
Advektion (als Residuum)	+0.317	+0.369

Tab. 8.3: Simulierte und gemessene Terme der Haushaltsgleichung für die spezifische Feuchte am 23. April 2008. Alle Haushaltsterme werden so konvertiert, dass sie die Einheit W/m³ haben.

	Messungen	Modell
zeitlicher Trend	+0.000317	+0.000066
Flussdivergenz	+0.000246	+0.000410
Advektion (als Residuum)	-0.000563	-0.000476

Tab. 8.4: Wie Tabelle 8.3, aber für atmosphärisches CO_2 . Alle Haushaltsterme werden so konvertiert, dass sie die Einheit ppm/s haben.

8.4 Simulierte Flüsse von CO₂ und H₂O unter erhöhtem atmosphärischen CO₂-Gehalt

In Zeiten intensiver Klimaforschung ist es von großem Interesse, wie mögliche klimatische Veränderungen die von dem gekoppelten Modell simulierten Oberflächen-Flüsse beeinflussen. Eine weit verbreitete Annahme ist die, dass eine vom Menschen verursachte Erhöhung des atmosphärischen CO2-Gehalts zu einer grundlegenden Veränderung der Pflanzen-Photosynthese führt. Der vorgeschlagene Mechanismus sieht dabei wie folgt aus: eine höhere atmosphärische CO₂-Konzentration führt zu einem stärkeren CO2-Gradienten zwischen Blattinnerem und der Außenluft. Dadurch müssen die Pflanzen die Stomata weniger weit öffnen, um die für die Photosynthese benötigte Menge an CO₂ aufzunehmen. Da die stomatale Leitfähigkeit gleichzeitig den Wasserverlust der Pflanzen reguliert, ist bei einem erhöhtem CO₂-Gehalt von einer reduzierten Transpiration der Pflanzen auszugehen (Tricker et al., 2005; Garcia-Amorena et al., 2006). Es soll an dieser Stelle exemplarisch für einen Tag getestet werden, inwieweit das gekoppelte Modell in der Lage ist, dieses Verhalten zu reproduzieren. Zu diesem Zweck wird eine Simulation mit einer um 300 ppm erhöhten atmosphärischen CO₂-Konzentration durchgeführt. Eine daraus resultierende bodennahe CO2-Konzentration von knapp 700 ppm entspricht in etwa der vorhergesagten Konzentration für das Jahr 2100 in einem moderaten Klima-Szenario (SRES-A1B Szenario; Nakicenovic, 2000) des Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC).

Abbildung 8.19 zeigt simulierte Parameter für einen Modelllauf mit erhöhtem CO₂-Gehalt im Vergleich zu einer Simulation, die mit einem tatsächlich gemessenem CO₂-Profil initialisiert wird (23. April 2008). Bei erstgenannter Simulation wird lediglich das CO₂-Profil zur Initialisierung an jedem Gitterpunkt um 300 ppm erhöht, die sonstige Modellkonfiguration bleibt unverändert. Dargestellt sind Ergebnisse für einen Gitterpunkt mit Weizen. Erwartungsgemäß führt eine Erhöhung der atmosphärischen CO2-Konzentration zu einer Abnahme der simulierten stomatalen Leitfähigkeiten, also einem verstärkten Schließen der Stomata (siehe Abbildung 8.19, oben). Diese Abnahme zeigt sich sehr deutlich für den im Schatten liegenden Anteil des Pflanzenbestandes, während der Effekt für den sonnenbeschienenen Anteil vor allem bei Lichtsättigung nur schwach ausgeprägt ist. Trotz der reduzierten stomatalen Leitfähigkeit bedingt der stärkere CO₂-Gradient zwischen Außenluft und Blattinnerem eine leichte Zunahme des simulierten CO₂-Flusses in die Pflanzen hinein (nicht gezeigt). Weitaus stärker ist der Einfluss auf die simulierte Transpiration der Pflanzen (siehe Abbildung 8.19, unten). So führt eine Zunahme der CO₂-Konzentration zu einer deutlichen Abnahme der simulierten Transpiration um mehr als 20 % im Vergleich zu Simulationen mit gemessenem CO₂-Gehalt. Da die Transpiration einen Großteil des latenten Wärmeflusses ausmacht (siehe Gleichung 3.12), ist auch der gesamte simulierte H₂O-Fluss für den gezeigten Gitterpunkt unter erhöhtem CO₂-Gehalt deutlich um 11 % reduziert (nicht gezeigt). Integriert über das gesamte Modellgebiet kommt es in dem Szenario zu einer Abnahme des latenten Wärmeflusses um knapp 9 %. Eine solche Reduzierung des H₂O-Flusses durch das Schließen der Pflanzen-Stomata als Folge des erhöhten CO₂-Gehalts hat Auswirkungen auf den gesamten Wasserkreislauf und somit auf das regionale bzw. großskalige Klima. So wird dem Boden durch die Abnahme der Transpiration der Pflanzen weniger Wasser entzogen, was aufgrund der daraus resultierenden reduzierten Wasseraufnahme-Fähigkeit des Untergrunds zu einem erhöhtem Oberflächen-Abfluss mit all seinen Folgen führt (Betts et al., 2007).



Abb. 8.19: Oben: simulierte stomatale Leitfähigkeiten unter gemessenem (durchgezogene Linien) und um 300 ppm erhöhtem (gepunktete Linie) atmosphärischen CO₂-Gehalt. Unten: simulierte Transpiration unter gemessenem (durchgezogene Linien) und erhöhtem atmosphärischen CO₂-Gehalt (gepunktete Linie). Gezeigt werden simulierte Werte für einen Gitterpunkt mit Weizen für den 23. April 2008.

Selbstverständlich müssen bei einem solchen "Zukunfts-Szenario" viele andere Faktoren, wie z.B. eine veränderte Landnutzung und Vegetationsbedeckung (Alo und Wang, 2006), sowie eine Zunahme der globalen Temperatur, berücksichtigt werden. Desweiteren kann nicht ausgeschlossen, dass sich auch die gesamte Pflanzen-Physiologie den veränderten Umweltbedingungen anpasst. All diese Faktoren können im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht näher beleuchtet werden. Nichtsdestoweniger stimmen die hier gezeigten Ergebnisse prinzipiell mit denen anderer Studien überein (z.B. Tricker et al., 2005), so dass das gekoppelte Modell im Prinzip für Simulationen von Zukunfts-Szenarien geeignet zu sein scheint.

9 Zusammenfassung und Diskussion

Die vorliegende Arbeit beleuchtet den Einfluss der Oberflächen-Heterogenität auf die Massenflüsse von CO2 und H2O. Für diese Zielsetzung wird das mesoskalige meteorologische Modell FOOT3DK mit einem Photosynthese-Modell gekoppelt, um die latenten Wärmeflüsse und die photosynthetischen CO₂-Flüsse der Pflanzen über einem Gebiet mit verschiedenen Landnutzungen zu simulieren. Das Phototsynthese-Modell besteht aus einem Modell für ein einzelnes Blatt von typischen Pflanzen der mittleren Breiten, sowie einer Skalierungsprozedur zur Hochskalierung auf die Pflanzenbestands-Ebene. Um die Transpiration der Pflanzen, welche einen Großteil des latenten Wärmeflusses ausmacht, an die Pflanzen-Photosynthese zu koppeln, werden die vom Photosynthese-Modell simulierten stomatalen Leitfähigkeiten in dem Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK verwendet, um den Wasserverlust der Pflanzen zu simulieren. Durch die Aufteilung des Pflanzenbestandes in einen im Schatten liegenden und einem sonnenbeschienenen Anteil, wird der in FOOT3DK standardmäßig verwendete big-leaf Ansatz durch das für komplexe Vegetationen geeignetere sun/shade Modell (de Pury und Farquhar, 1997) ersetzt. Um das gekoppelte FOOT3DK-Photosynthese-Modell zu validieren, werden simulierte latente Wärmeflüsse und Netto CO2-Flüsse über einzelne Modell-Gitterpunkte mit Eddy-Kovarianz-Messungen über Feldern mit Weizen und Zuckerrübe verglichen. Die Hauptergebnisse der vorliegenden Arbeit lassen sich wie folgt zusammen fassen:

- Die Offline-Version des Photosynthese-Modells ist in der Lage, realistische CO₂-Flüsse zu simulieren. Zwar wird die Größenordnung von gemessenen Flüssen von dem Modell nicht immer exakt getroffen, die zeitliche Entwicklung der simulierten Netto CO₂-Flüsse wird von dem Modell jedoch sehr gut erfasst.

- Die Anwendung eines Jarvis-basierten big-leaf Ansatzes führt wie in den meisten mesoskaligen Modellen zu einer deutlichen Überschätzung der latenten Wärmeflüsse. Durch die Verwendung eines Photosynthese-basierten sun/shade Ansatzes an Stelle des Jarvis-Schemas in dem Land-Oberflächen-Schema von FOOT3DK, werden die latenten Wärmeflüsse weitaus realistischer wieder gegeben. Sowohl die simulierten Netto CO₂-Flüsse als auch deren Verhältnis zu den latenten Wärmeflüssen im Hinblick auf

den Wassernutzungsgrad passen für einzelne Gitterpunkte des gekoppelten FOOT3DK-Photosynthese-Modells sehr gut zu den Messungen.

- Zeitlich gemittelte latente Wärmeflüsse und Netto CO₂-Flüsse über Gitterpunkten mit verschiedenen Landnutzungen zeigen eine moderate Anti-Korrelation, mit schwachen Flüssen über unbewachsenen Flächen und den stärksten Flüssen über Gitterpunkten mit Kulturpflanzen. Eine weitaus höhere Anti-Korrelation ist für die simulierten CO₂-Flüsse und die Transpiration der Pflanzen zu beobachten, was den Effekt der Kopplung beider Flüsse über die Pflanzen-Stomata sehr gut widerspiegelt.

- Im Hinblick auf den Zusammenhang zwischen Oberflächen-Charakteristika und den Flüssen von CO₂ und H₂O passen die hier gezeigten Ergebnisse sehr gut zu denen anderer Studien. So zeigt das gekoppelte Modell eine hohe Korrelation zwischen dem Netto CO₂-Fluss und dem Blattflächen-Index, während diese Korrelation für den latenten Wärmefluss und dem Blattflächen-Index weitaus schwächer ist.

- Der Einfluss der Oberflächen-Flüsse auf die generelle Struktur der planetaren Grenzschicht wird von dem Modell zum Teil realistisch erfasst. So zeigt ein simuliertes Vertikal-Profil der CO₂-Konzentration einen ähnlichen zeitlichen Verlauf wie ein aus Flugzeug-Messungen abgeleitetes Profil. Auch die Haushaltsgleichung der spezifischen Feuchte für ein ganzes Luftpaket weist ähnliche Einzelterme wie die Messungen auf.

- Unter einer erhöhten atmosphärischen CO₂-Konzentration, wie sie von einigen Global-Modellen für das Jahr 2100 vorhergesagt wird, kommt es zu einer Reduzierung der simulierten stomatalen Leitfähigkeit seitens des gekoppelten Modells. Dieses verstärkte Schließen der Stomata aufgrund eines stärkeren CO₂-Gradienten zwischen Außenluft und Blattinnerem resultiert in einer deutlichen Abnahme der Transpiration der Pflanzen und führt somit zu einer Abnahme des gesamten latenten Wärmeflusses.

- Mikroskalige Strukturen der planetaren Grenzschicht werden von dem gekoppelten Modell nicht zufriedenstellend wieder gegeben. Das gleiche gilt für eine Haushaltsgleichung für atmosphärisches CO₂. Das soll, genauso wie die anderen Ergebnisse der Arbeit, im folgenden diskutiert werden.

Die Schnittstelle zwischen der Atmosphäre und der Biosphäre bildet die wesentliche Umsatzfläche für Energie- und Materieflüsse. Deshalb werden seit mehreren Jahrzehnten große Anstrengungen unternommen, die sehr komplexen Vorgänge in der Atmosphäre und deren Wechselwirkungen mit der Landoberfläche möglichst realistisch mit Computer-Modellen darzustellen. Hierbei wurden, nicht zuletzt aufgrund von immer leistungstärkeren Rechnern und der Entwicklung von Super-Computern, enorme Fortschritte erzielt. Vor allem die Globalmodelle sind heutzutage in der Lage die Variabilität und die mittleren Zustände der Atmosphäre der jüngeren Vergangenheit und der Gegenwart zu erfassen, wie z.B. das am Max-Planck Institut in Hamburg entwickelte ECHAM-Modell (European Centre Hamburg; siehe z.B. Pinto et al., 2007). Auch

79

oberfläche/Atmosphäre von den Modellen statistisch teilweise sehr gut wieder gegeben (z.B. Heinemann und Kerschgens, 2006; Pinto et al., 2009). Bei der Darstellung von Prozessen und Strukturen auf der Mikro-Skala stoßen die Modelle jedoch auch heutzutage noch zum Teil an ihre Grenzen. Das belegen auch die in dieser Arbeit präsentierten Ergebnisse von Simulationen mit einer horizontalen Auflösung von 100 m. Die Gründe hierfür sind dabei nicht notwendigerweise in den benutzten Parametrisierungen, allen voran den parametrisierten Oberflächen-Flüssen, zu suchen. So konnte gezeigt werden, dass das gekoppelte FOOT3DK-Photosynthese-Modell durchaus in der Lage ist, gemessene Flüsse von H₂O und CO₂ und auch deren Zusammenhang über die "water use efficiency" für einzelne Gitterpunkte realistisch wieder zu geben. Die Kopplung von FOOT3DK mit einem Photosynthese-Modell und die daraus resultierende Kopplung der latenten Wärmeflüsse an die Photosynthese-Aktivität der Pflanzen über die simulierte stomatale Leitfähigkeit hat sich hierbei als sinnvolle Erweiterung heraus gestellt. Die Einteilung der Pflanzenbestände in einen sonnenbeschienenen und einen im Schatten liegenden Anteil (sun/shade Modell), anstatt der Verwendung des original big-leaf Ansatzes, bewirkt eine sichtbare Verbesserung bei der Simulation der latenten Wärmeflüsse, die in der ursprünglichen Version von FOOT3DK und auch in anderen verwendeten big-leaf basierten mesoskaligen Modellen häufig deutlich überschätzt werden (z.B. Maurer und Heinemann, 2006; Mengelkamp et al., 2006). Die Übereinstimmung der so simulierten Flüsse von CO₂ und H₂O mit Messungen ist ähnlich gut wie in Studien, in denen Photosynthese-basierte Modelle mit gemessenen meteorologischen Parametern angetrieben werden (z.B. Kothavala et al., 2005), was für eine realistische Wiedergabe der wichtigsten meteorologischen Parameter seitens des Atmosphärenteils von FOOT3DK spricht. Einige in den Simulationen auftretende Defizite sind vielmehr in den Initialisierungs- und Randbedingungen begründet. Einer der entscheidenden Parameter ist die Bodenfeuchte. Es gibt mittlerweile eine Vielzahl an Studien die belegen, dass die Bodenfeuchte einen großen Einfluss auf die gesamte Energiebilanz am Boden hat, und dass die in Modellen simulierten Oberflächen-Flüsse sehr sensitiv gegenüber der initialisierten Bodenfeuchte sind (z.B. Ament und Simmer, 2006; Song et al., 2007). Aufgrund der zahlreichen, in früheren Arbeiten bereits durchgeführten Sensitivitätsstudien bzgl. der Bodenfeuchte wurde in dieser Arbeit auf die Darstellung einer solchen Studie verzichtet, obwohl Untersuchungen in diese Richtung durchgeführt wurden. Für die gezeigten Simulationstage liegen zwar Bodenfeuchtemessungen vor, jedoch lediglich für jeweils ein Feld mit Weizen und eins mit Zuckerrübe. Es ist nicht möglich daraus abzuschätzen, wie hoch die Bodenfeuchte für andere Landnutzungsklassen wie z.B. Wald, Wiese oder unbewachsener Boden ist. Desweiteren kann nicht davon ausgegangen werden, dass alle Felder mit der selben Landnutzungsklasse innerhalb des Modellgebiets auch wirklich dieselbe Bodenfeuchte besitzen. So wird die Feuchte neben der Vegetationsart auch von dem Bodentyp und der Hangneigung beeinflusst. Aufgrund all dieser Unsicherheiten wurde für die vorliegende Arbeit entschieden, die simulierte Bodenfeuchte aus dem übergeordneten Modell COSMO-LM zu verwenden. Diese stimmt zwar für einige Tage und einzelne Gitterpunkte gut mit gemessenen Werten überein,

für andere Situationen weichen simulierte und gemessene Werte für die Bodenfeuchte jedoch deutlich voneinander ab, was einer der Gründe für die Überschätzung des simulierten latenten Wärmeflusses z.B. am 18. August 2009 sein könnte. Für zukünftige Studien sollte daher im Optimalfall eine flächendeckende gemessene Bodenfeuchte, z.B. aus Satelliten-Messungen, verwendet werden.

Der Einfluss der Oberflächen-Heterogenität auf die simulierten Flüsse von CO2 und H2O wird von dem Modell realitätsnah wieder gegeben. So werden die Größenordnungen des latenten Wärmeflusses und des Netto CO2-Flusses hauptsächlich von der dominierenden Landnutzungsklasse bestimmt. Beide Flüsse weisen aufgrund ihrer Kopplung über den stomatalen Widerstand eine deutliche räumliche Anti-Korrelation auf. Unglücklicherweise sind Vergleiche mit Messungen der FLUXPAT-Kampagne diesbezüglich nicht möglich, da eine räumliche Verteilung von gemessenen Oberflächenflüssen nicht verfügbar ist. Zwar können Flüsse von CO₂ und H₂O auch aus Flugzeugmessungen bestimmt werden, jedoch lässt die gewählte Flugstrategie nur die Abschätzung von Flüssen zu, die repräsentativ für ein Flächenmittel sind. Die hier gezeigten Ergebnisse passen jedoch zu Messungen aus anderen Studien. Anderson et al. (2008) haben eine starke Kopplung zwischen aus Flugzeugmessungen abgeleiteten Flüssen von CO₂ und H₂O gefunden. Die von ihnen gemessenen latenten Wärmeflüsse und Netto CO2-Flüsse zeigen entlang einer geraden Flugstrecke eine entgegengesetzte räumliche Verteilung, mit niedrigen Werten über abgeernteten Weizenfeldern und maximalen Werten über Flächen mit dichter Vegetation. Ein Vergleich mit Messungen aus Studien, die den Zusammenhang zwischen Oberflächen-Eigenschaften und den Flüssen von CO2 und H2O untersuchen (z.B. Gorska et al., 2008), stützt die hier gezeigten Ergebnisse dahingehend, dass auch in dem in dieser Arbeit verwendetem Modell der Einfluss des Blattflächen-Index auf den latenten Wärmefluss weitaus schwächer ist als auf den Netto CO₂-Fluss.

Einige Defizite der Simulationen offenbaren sich bei der Betrachtung des Einflusses der Oberflächen-Heterogenität und Flüsse auf die Struktur der planetaren Grenzschicht. So werden einzelne mikro-skalige Strukturen in den Simulationen nicht zufriedenstellend wieder gegeben. Dies zeigt sich besonders bei Punkt-zu-Punkt Vergleichen zwischen Simulationsergebnissen und Flugzeugmessungen. Einer der Gründe für die Diskrepanzen sind erneut die Initialisierungs- und Randbedingungen, vor allem in Bezug auf CO₂. Neben nur unzureichenden Informationen für eine exakte Initialisierung des CO₂-Profils (siehe Kapitel 6) liegt das Hauptproblem darin, dass in dem übergeordneten Modell COSMO-LM kein CO₂ berücksichtigt wird. Daher muss für den Rand ein Null-Gradient angenommen werden, was in der Realität nicht zutreffen muss. Ein weiteres Problem sind anthropogene Einflüsse. Im Einflussbereich des Modellgebiets befinden sich neben der Autobahn A4 auch mehrere Kohlekraftwerke, die eine starke Quelle für CO₂ darstellen. Diese potentiellen Quellen können in der hier gezeigten Modellkonfiguration nicht berücksichtigt werden, da hierfür die Implementierung von Punktquellen nötig wäre, die dem Modell regelmäßig gemessene Konzentrationen von CO2-Abgasen als Input übergeben. Eine solche Implementierung ist technisch sehr aufwendig und daher im Rahmen

dieser Arbeit nicht durchführbar. Unter diesen gegebenen Umständen kann trotz einer sinnvollen Parametrisierung keine Übereinstimmung in Bezug auf Punkt-zu-Punkt Vergleiche zwischen Modell und Messungen erwartet werden.

Die einzelnen Strukturen von CO₂ und H₂O in der Grenzschicht werden oft von Turbulenzelementen verursacht, die in dem Modell nur bis zu einer Größe explizit aufgelöst werden können, die der der horizontalen Auflösung entspricht. Kleinere Wirbel werden dagegen parametrisiert. Vielversprechendere Ergebnisse könnten Simulationen liefern, bei denen auch kleinere Wirbel explizit aufgelöst werden. Eine hierfür oft angewendete Technik ist die Large-Eddy-Simulation (LES, siehe z.B. Moeng, 1984). Eine solche LES-Studie mit einer horizontalen Auflösung von 1m x 1m ist für die zweite Phase des TR32 geplant.

Die generellen Strukturen innerhalb der Grenzschicht werden von dem gekoppelten Modell teilweise gut getroffen. Dies zeigt sich beispielsweise in der Wiedergabe der vertikalen Verteilung der CO₂-Konzentrationen für einzelne Tage, sowohl was die Größenordnungen der Konzentrationen als auch deren zeitlichen Verlauf in Bezug auf die turbulente Durchmischung angeht. Auch die einzelnen Terme der Haushaltsgleichung für die spezifische Feuchte stimmen im Rahmen der Messfehler zwischen Modell und Messungen überein. Das spricht dafür, dass die gesamte Modellkette inklusive dem COSMO-LM als übergeordnetem Antriebs-Modell sinnvoll gewählt wurde.

Als Fazit lässt sich festhalten, dass die Verwendung eines Photosynthese-basierten Land-Oberflächen-Schemas in mesoskaligen Modellen zu einer realistischeren Darstellung der Austauschprozesse zwischen Oberfläche und der unteren Atmosphäre beiträgt, und somit auch für zukünftige Studien, die dem besseren Verständnis dieser Prozesse dienen, von großem Nutzen ist. Es hat sich gezeigt, dass die Modellierung der Photosynthese für eine realistische Simulation der Pflanzen-Transpiration unverzichtbar ist. Da das gekoppelte Modell die auch in anderen Studien beobachtete Abnahme der Transpiration unter erhöhtem atmosphärischem CO₂-Gehalt sehr gut wieder gibt, ist es speziell für die Abschätzung möglicher Veränderungen der Austauschprozesse zwischen dem Ökosystem und der Atmosphäre in zukünftigen Klima-Szenarien geeignet. Aufgrund der gegebenen Möglichkeit das gekoppelte Modell in andere Modelle zu nesten, könnte es für solche Untersuchungen mit relativ wenig Aufwand mit Klimamodellen angetrieben werden. Für weitere Studien ist jedoch eine Validierung des gekoppelten FOOT3DK-Photosynthese-Modells für andere als die hier gezeigten Landnutzungsklassen und Wettersituationen sinnvoll und notwendig.

Literaturverzeichnis

Adegoke J.O., Pielke R., Carleton A.M., 2007: Observational and modelling studies of the impacts of agricultural-related land use change on planetary boundary layer processes in the central US. *Agric. For. Meteorol.*, **142**: 203-215.

Alo C.A., Wang G.L., 2008: Hydrological impact of the potential future vegetation response to climate changes projected by 8 GCMs. *J. Geophys. Res. - Biogeosciences*, **113**: G03011.

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.

Anderson M.C., Norman J.M., Kustas W.P., Houborg R., Starks P.J., Agam N., 2008: A thermal-based remote sensing technique for routine mappping of land-surface carbon, water and energy fluxes from field to regional scales. *Remote Sens. Environ.*, **112**: 4227-4241.

Arain A.M., Michaud J.D., Shuttleworth W.J., Dolman A.J., 1996: Testing of vegetation parameter aggregation rules applicable to the Biosphere-Atmosphere Transfer Scheme (BATS) at the Fife site. *J. Hydrol.*, **120**: 2622-2632.

de Arrelano J.V.G., Gioli B., Miglietta F., Jonker H.J.J., Baltink H.K., Hutjes R.W.A., Holtslag A.A.M., 2004: The entrainment process of carbon dioxide in the atmospheric boundary layer. *J. Geophys. Res.*, **109**: 110-124.

Baldauf M., Förstner C., Klink S., Reinhardt T., Schraff C., Seiffert A., Stephan K., 2009: Kurze Beschreibung des Lokal-Modells Kürzesfrist COSMO-DE (LMK) und seiner Datenbank auf dem Datenserver des DWD. *Deutscher Wetterdienst, Geschäftsbereich Forschung und Entwicklung, Offenbach, Germany*, 72 pp.

Baldocchi D.D., und Ko-Autoren, 2001: FLUXNET: A new tool to study the the temporal and spatial variability of ecosystem-scale carbon dioxide, water vapor, and energy flux densities. *Bull. Amer. Meteorol. Soc.*, **82**: 2415-2434.

Ball J.T., Woodrow I.E., Berry J.A., 1987: A model predicting stomatal conductance and its contribution to the control of photosynthesis under different environmental conditions. *In: Biggens, J, ed. Progress in Photosynthesis Research IV. Dordrecht: Martinus Nijhoff*, pp 221-224.

Bermejo R., Staniforth A., 1992: The Conversion of Semi-Lagrangian Advection Schemes to Quasi-Monotone Schemes. *Mon. Weather Rev.*, **120**: 2622-2632.

Betts R.A., und Ko-Autoren, 2007: Projected increase in continental runoff due to plant responses to increasing carbon dioxide. *Nature*, **448**: 1037-U5.

Beyschlag W., Ryel R.J., 1999: Canopy Modelling. *In: Pugnaire, F, Valladares F. (eds). Handbook of Plant Functional Ecology. New York, Marcel Dekker:* 771-804.

Born K., 1989: FOOT - Ein Dreischichtenmodell auf der Basis von REWIMET zur Simulation der dynamischen Grenzschicht. *Nicht veröffentlichte Diplomarbeit am Meteorologischen Institut der Universität Bonn*.

Brücher W., Kerschgens M., Steffany F., 1994: On the Generation of Synthetic Wind Roses in Orographically Structured Terrain. *Theor. Appl. Climatol.*, **48**: 203-207.

Brücher W., Kerschgens M., Steffany F., 1994: Synthetic Wind Climatologies. *Meteorol. Z.*, N.F.3: 183-186.

Brücher W., 1997: Numerische Studien zum Mehrfachnesting mit einem nichthydrostatischen Modell. *Mitteilungen aus dem Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität zu Köln*, Heft **115**.

Brücher W., Kessler C. Kerschgens M., Ebel A., 2001: Simulation of traffic-induced air pollution on regional to local scales. *Atmos. Environ.*, **34** (**27**): 4675-4681.

Bunnell F.L., Tait D.E.N., Flanagan P.W., Van Cleve K., 1977: Mircobial respiration and substrate weight loss, I, A general model of the influences of abiotic variables. *Soil Biol. Biochem.*, **9**: 33-40.

Collatz G.J., Ball J.T., Griver C., Berry J.A., 1991: Physiological and environmental regulation of stomatal conductance, photosynthesis and transpiration: a model that includes a laminar boundary layer. *Agric. For. Meteorol.*, **54**: 107-136. **Coulter R.L., Pekour M.S., Cook D.R., Klazura G.E., Martin T.J., Lucas J.D.**, 2006: Surface energy and carbon dioxide fluxes above different vegetation types within ABLE. *Agric. For. Meteorol.*, **136**: 147-158.

Dai Y., und Ko-Autoren, 2003: The Common Land Model. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, 84: 1013-1023.

Detto M., Katul G., Mancini M., Montaldo N., Albertson J.D., 2008: Surface heterogeneity and its signature in higher-order scalar similarity relationships. *Agric. For. Meteorol.*, **148**: 902-916.

Farquhar G.D., von Caemmerer S., Berry J.A., 1980: A biochemical model of photosynthetic CO₂ assimilation in leaves of C3-species. *Planta*, **149**: 78-90.

Fesquet C., Drobinski P., Barthlott C., Dubos T., 2009: Impact of terrain heterogeneity on near-surface turbulence structure. *Atmos. Res.*, **94**: 254-269.

Garcia-Amorena I., Wagner F., van Hoof T.B., Gomez Manzaneque F.G., 2006: Stomatal responses in deciduous oaks from southern Europe to the anthropogenic atmospheric CO₂ increase; refining the stomatal-based CO₂ proxy. *Rev. Palaebot. Palynol.*, **141**: 303-312.

Gorska M., de Arrelano J.V.G., LeMone M.A., van Heerwarden C.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.

Graf A., Prolingheuer N., Schickling A., Schmidt M., Schneider K., Schüttemeyer D., Herbst M., Huisman J.A., Weihermüller L., Scharnagl B., Steenpass C., Harms R., Vereecken H., 2010: Temporal downscaling of soil CO₂ efflux measurements based on time-stable spatial patterns. *Vad. Zone J.*, in press.

Graf A., Schuettemeyer D., Geiß H., Knaps A., Möllmann-Coers M., Schween J.H., Kollet S., Neininger B., Herbst M., Vereecken H., 2010: Boundedness of turbulent temperature probability distributions, and their relation to the vertical profile in the convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.*, **134**: 459-486.

Hagemann S., Botzet M., Dümenil L., Machenhauer M., 1999: Derivation of global GCM boundary conditions from 1 km land use staellite data. *Report* 289, Max-Planck-Institute for Meteorology, Hamburg, 34 Seiten.

Harley P.C., Thomas R.B., Reynolds J.F., Strain B.R., 1992: Modelling photosynthesis of cotton grown in elevated CO₂. *Plant Cell Environ.*, **15**: 271-282.

Heinemann G., Kerschgens M., 2005: Comparisons of methods for area-averaging surface energy fluxes over heterogeneous land surfaces using high-resolution non-hydrostatic simulations. *Int. J. Climatol.*, **25**: 379-403. DOI: 10.1002/joc.1123.

Heinemann G., Kerschgens M., 2006: Simulation of surface energy fluxes using highresolution non-hydrostatic simulations and comparisons with measurements for the LITFASS-2003 experiment. *Boundary-Layer Meteorol.*, **121**: 195-220.

Houborg R.M., Soegaard H., 2004: Regional simulation of ecosystem CO₂ and water vapor exchange for agricultural land using NOAA AVHRR and Terra MODIS satellite data. Application to Zealand, Denmark. *Remote Sens. Environ.*, **93**: 150-167.

Hübener H., Schmidt M., Sogalla M., Kerschgens M., 2005: Simulating Evapotranspiration in a Semi-Arid Environment. *Theor. Appl. Climatol.*, **80**: 153-167.

Jacobsen I., Heise E., 1982: A New Economic Method for the Computation of the Surface Temperature in Numerical Models. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **55**: 128-141.

Jarvis P., 1976: The interpretation of leaf water potential and stomatal conductance found in canopies in the field. *Philos. Trans. Roy. Soc. London*, **273B**: 593-610.

Kothavala Z., Arain M.A., Black T.A., Verseghy D., 2005: The simulation of energy, water vapor and carbon dioxide fluxes over common crops by the Canadian Land Surface Scheme (CLASS). *Agric. For. Meteorol.*, **133**: 89-108.

Kvifte G., Hegg K., Hansen V., 1983: Spectral distribution of solar radiation in the Nordic countries. *J. Climate Appl. Meteor.*, **22**: 143-152.

LeMone M.A., Chen F., Alfieri J.G., Tewari M., Geerts B., Miao Q., Grossman R.L., Coulter R.L., 2007: Influence of land cover and soil moisture on the horizontal distribution of sensible and latend heat fluxes in southeast Kansas during IHOP-2002 and CASES-97. *J. Hydrometeor.*, **8**: 68-87.

Liu C.M., Young A.L., Starling-Windhof A., Bracher A., Saschenbrecker S., Rao B.V., Rao K.V., Berninghausen O., Mielke T., Hartl F.U., Beckmann R., Hayer-Hartl M., 2010: Coupled chaperone action in folding and assembly of hexadecameric Rubisco. *Nature*, **463**: 197-U81.

Louis J.F., 1979: A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere. *Boundary-Layer Meteorol.*, **17**: 187-202.

Maurer B., Heinemann G., 2006: Validation of the "Lokal-Modell" over heterogeneous land surfaces using aircraft-based measurements of the REEEFA experiment and comparisons with micro-scale simulations. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **91**: 107-128.

Mellor G.L., Yamada T., 1982: Development of a Turbulence Closure Model for Geophysical Fluid Problems. *Rev. Geophys. Space Phys.*, **20**: 851-875.

Mengelkamp H.T., und Ko-Autoren, 2006: Evaporation over a heterogeneous landsurface - The EVA-GRIPS Project. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **87**: 775-786.

Mesinger F., Arakawa A., 1976: Numerical Methods Used in Atmospheric Models. *GARP Publ. Ser.*, **17**: 1-64.

Moene A.F., Schüttemeyer D., 2008: The Effect of Surface Heterogeneity on the Temperature-Humidity Correlation and the Relative Transport Efficiency. *Boundary-Layer Meteorol.*, **129**: 99-113.

Moeng C.H., 1984: A Large-Eddy-Simulation Model for the Study of Planetary Boundary-Layer Turbulence. *J. Atmos. Sci.*, **41**: 2052-2062.

Nakicenovic N., und Ko-Autoren, 2000: Emission scenarios. A Special Report of Working Group III of the Intergovernmental Panel on Climate Change. *Cambridge University Press*, 599 Seiten.

Neininger B., Fuchs W., Baeumle M., Volz-Thomas A., Prevot A.S.H., Dommen J., 2001: A small aircraft for more than just ozone: MetAir's 'Dimona' after ten years of evolving development. Paper presented at the 11th Symposium on Meteorological Observations and Instrumentation. *Am. Meteorol. Soc., Albuquerque, N.M.*

Niyogi D., Alapaty K., Raman S., Chen F., 2009: Development and Evaluation of a coupled Photosynthesis-Based Gas Exchange Evapotranspiration Model (GEM) for Mesoscale Weather Forecasting Applications. *J. Appl. Meteor. Climatol.*, **48**: 349-368.

Noilhan J., Planton S., 1989: A simple parameterization of land surface processes for meteorological models. *Mon. Wea. Rev.*, **117**: 536-549.

Olson J.S., 1994a: Global ecosystem framework: translation strategy. *USGS EROS Data Center Internal Reports*, Sioux Falls, p 39.

Olson J.S., 1994b: Global ecosystem framework: definitions. *USGS EROS Data Center Internal Reports*, Sioux Falls, p 37.

Peisker M., Handerson S.A., 1992: Carbon: terrestrial C4 plants. *Plant Cell Environ.*, 15: 987-1004.

Pielke R.A., Avissar R., 1990: Influence of landscape structure on local and regional climate. *Landscape Ecol.*, **4**: 133-155.

Pielke R.A., Niyogi D., 2009: The role of landscape processes within the climate system. Landform-Structure, Evolution, Process Control: *Proceedings of the International Symposium on Landforms Organised by the Research Training Group 437, Vol. 115, J.C. Otto and R. Dikaum, Eds., Springer, Berlin,* 67 Seiten.

Pinto J.G., Ulbrich U., Leckebusch G.C., Spangehl T., Reyers M., Zacharias S., 2007: Changes in storm track and cyclone activity in three SRES ensemble experiments with the ECHAM5/MPI-OM1 GCM. *Clim. Dyn.*, **29**: 195-210.

Pinto J.G., Neuhaus C.P., Krüger A., Kerschgens M., 2009: Assessment of the Wind Gust Estimates Method in Mesoscale Modelling of Storm Events over West Germany. *Meteorol. Z.*, **18**: 495-506.

de Pury D.G.G., Farquhar G.D., 1997: Simple scaling of photosynthesis from leaves to canopies without the errors of big-leaf models. *Plant Cell Environ.*, **20**: 537-557.

Ryel R.J., Beyschlag W., Caldwell M.M., 1993: Foliage orientation and carbon gain in two tussock grasses as assessed with a new whole-plant gas-exchange model. *Funct. Ecol.*, **7**: 115-124.

Scanlon T.M., Sahu P., 2008: On the correlation structure of water vapor and carbon dioxide in the atmospheric surface layer: A basis for flux partitioning. *Water Resour. Res.*, **44** (W10418).

Sellers P.J., und Ko-Autoren, 1996: A revised land surface parameterisation (SiB2) for atmospheric GCMs. Part I: Model formulation. *J. Climate*, **9**: 676-705.

Schmitgen S., Gei H., Ciais P., Neininger B., Brunet Y., Reichstein M., Kley D., Volz-Thomas A., 1993: Carbon dioxide uptake of a forested region in southwest France derived from airborne CO₂ and CO measurements in a quasi Lagrangian experiment. *J. Geophys. Res.*, **109**(D14302).

Shao Y., Sogalla M., Kerschgens M., Brücher W., 2001: Effects of land-surface heterogeneity upon surface fluxes and turbulent conditions. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **78**: 157-181.

Sogalla M., Krüger A., Kerschgens M., 2006: Mesoscale modelling of interactions between rainfall and the land surface in West Africa. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **91**: 211-221.

Song Y., Guo W., Zhang Y., 2007: Numerical Study of Impacts of Soil Moisture on the Diurnal and Seasonal Cycles of Sensible/Latent Heat Fluxes over a Semi-arid Region. *Adv. Atmos. Sci.*, **26**: 319-326.

Steppeler J., Doms G., Schättler U., Bitzer H., Gassmann A., Damrath U., 2003: Mesogamma scale forecasts using the non-hydrostatic model LM. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **82**: 75-96.

Sun H., Clark T.L., Stull R.B., Black T.A., 2006: Two-dimensional simulation of airflow and carbon dioxide transport over a forested mountain. Part II. Carbon dioxide budget analysis and advection effects. *Agric. For. Meteorol.*, **140**: 352-364.

Szeicz G., 1974: Solar radiation for plant growth. J. Appl. Ecol., 11: 617-636.

Tricker P.J., Trewin H.,Kull O., Clarkson G.J.J., Eensalu E., Tallis M.J., Colella A., Doncaster C.P., Sabatti M., Taylor G., 2005: Stomatal conductance and not stomatal density determines the long-term reduction in leaf transpiration of poplar in elevated CO₂. *Oecologia*, **143**: 652-660.

Waldhoff G., 2010: Land use classification of 2009 for the Rur catchment. DOI: 10.1594/GFZ.TR32.1

Werner C., Correia O., Ryel R.J., Beyschlag W., 2001: Effects of photoinhibition on whole-plant carbon gain assessed with a photosynthesis model. *Plant Cell Environ.*, 24: 27-40.

Zacharias S., 2011: Energiehaushalte aus Flugzeugmessungen und hoch aufgelösten Simulationen mit dem meteorologischen Modell FOOT3DK. *Nicht veröffentlichte Doktorarbeit am Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität zu Köln.*

Zhan X., Kustas W.P., 2001: A coupled model of land surface CO₂ and energy fluxes using remote sensing data. *Agric. For. Meteorol.*, **107**: 131-152.

van Zyl J.J., 2001: The Shuttle Radar Topography Mission: A breakthrough in remote sensing of topography. *Acta Astronaut.*, **58**(**5-12**): 559-565.

Danksagung

Zuerst möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Michael Kerschgens für die Vergabe des interessanten Themas und die Begutachtung der Arbeit bedanken. Ebenfalls für die Begutachtung bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr. Yaping Shao.

Mein ganz besonderer Dank gilt Frau Jun'Prof. Dr. Christiane Werner für die Hilfestellung bei der Programmierung des Photosynthese-Modells. Ihre ständige Bereitschaft, mich bei Fragen und Problemen tatkräftig zu unterstützen, hatte einen erheblichen Anteil am Gelingen dieser Arbeit.

Ein Dank für die Korrekturen an dieser Arbeit geht an Dr. Joaquim Pinto. Bei meinen Kollegen aus dem meteorologischen Institut, allen voran Stefan Zacharias, möchte ich mich für die ständige Hilfsbereitschaft und der angenehmen Atmosphäre bedanken.

Desweiteren danke ich allen TR32 Mitarbeitern, vor allem Dr. Alexander Graf, Anke Schickling und Guido Waldhoff sowie Marius Schmidt, für die unkomplizierte Bereitstellung von Messdaten.

Besonderer Dank geht an meine Familie, die mich immer unterstützt und nie am Gelingen der Arbeit gezweifelt hat.

Ein ganz spezieller Dank gilt Janina Hotze für die Bereitstellung von theoretischen Grundlagen zur Photosynthese - und für alles, was danach kam.

Erklärung

Ich versichere, dass ich die von mir vorgelegte Dissertation selbständig angefertigt, die benutzten Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben und die Stellen der Arbeit einschließlich Tabellen, Karten und Abbildungen-, die anderen Werken in Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, in jedem Einzelfall als Entlehnung kenntlich gemacht habe; dass diese Dissertation noch keiner anderen Fakultät zur Prüfung vorgelegen hat; dass sie noch nicht veröffentlicht worden ist, sowie, dass ich eine solche Veröffentlichung vor Abschluss des Promotionsverfahrens nicht vornehmen werde. Die Bestimmungen der Promotionsordnung sind mir bekannt. Die von mir vorgelegte Arbeit ist von Prof. Dr. M. Kerschgens betreut worden.

Teilpublikationen:

Reyers M., Krüger A., Werner C., Pinto J.G., Zacharias S., Kerschgens M., 2010: The simulation of the opposing fluxes of latent heat and CO₂ over various land-use types - coupling a gas exchange model to a mesoscale atmospheric model. *Boundary-Layer Meteorol.*, in press.

Ich versichere, dass ich alle gemachten Angaben wahrheitsgemäß nach bestem Wissen und Gewissen gemacht habe und verpflichte mich, jedmögliche, die obigen Angaben betreffenden Veränderungen, dem Dekanat unverzüglich mitzuteilen.

Köln, den 29. November 2010

(Mark Reyers)