

边界层扩散与足迹模型：欧拉稳态对流-扩散方程的快速数值求解器

Mark 施洛特瓦尔德¹, Ray Chew², and Mathias Göckede¹

¹Max Planck Institute for Biogeochemistry, Jena, Germany

²California Institute of Technology, Division of Geological and Planetary Sciences, Pasadena, CA, USA

Correspondence: Mark 施洛特瓦尔德 (mark.schlutow@bgc-jena.mpg.de)

Abstract. 理解温室气体和污染物如何在大气中移动对于预测和缓解它们的影响至关重要。我们提出了一种新型的大气扩散和足迹模型：边界层扩散和足迹模型 (BLDFM)，该模型使用基于傅里叶方法、线性射线法和指数积分法的数值方法求解以欧拉形式表示的三维稳态对流-扩散方程。该模型设计灵活，可用于各种应用，包括气候影响研究、工业排放监测、农业规划和空间通量归属。我们通过分析测试案例来验证模型。数值结果与解析解显示出良好的一致性。我们也将本模型与 Kormann 和 Meixner (边界层气象学, 2001) 足迹模型 (FKM) 进行比较, 结果显示总体上良好的一致性但足迹的取值范围存在一些差异, 这些差异归因于 FKM 模型中忽略了沿流方向的湍流混合。我们的结果表明 BLDFM 模型作为大气科学家、生物地球化学家、生态学家和工程师有用工具的潜力。

1 Introduction

大气中气体、颗粒物和能量在行星边界层的传输和混合的精确量化对于理解与预测污染物扩散、温室气体通量以及地表-大气交换过程 (Stull, 1988; Baldocchi, 2008) 至关重要。

数值色散模型是完成此任务不可或缺的工具：它们整合气象数据、化学过程和流体动力学，以模拟物质如何在大气中传输和分散。这类模型应用于广泛的领域，从空气质量管理 and 公共健康风险评估到生态系统评价、气候影响研究、工业排放监测和农业规划 (Seinfeld and Pandis, 2012)。

与弥散模型相辅相成，通量足迹模型在解释固定观测点 (如涡度协方差塔 (Vesala et al., 2008; Aubinet et al., 2012)) 所采集的测量数据时至关重要。该足迹定义了测量点的视野，并代表了表面对于动量、热量、水分或痕量气体测量通量的影响，从而提高了我们对地表-大气交换过程如何从局部尺度扩展到区域尺度的理解 (Leclerc and Foken, 2014)。通过确定测量产生的空间范围，通量足迹模型为微气象学、生态学和生物地球化学研究的应用提供了关键见解 (Schmid, 2002)。

近年来，通量足迹模型获得了关注，用于空间通量归属建模。目的是绘制围绕通量塔的痕量气体、水分或能量通量的空间异质性地图。Wang et al. (2006) 在一个案例研究中展示了如何通过分解涡度协方差塔的通量

数据，并使用足迹和生态系统模型，推断出 CO₂ 的通量。Crawford and Christen (2015) 应用了类似的技术，结合环境控制和表面土地覆盖地图来归属测量的城市湍度协方差 CO₂ 通量的来源。Rey-Sanchez et al. (2022) 使用这种方法来检测甲烷热点。Pirk et al. (2024) 利用贝叶斯神经网络对退化冻土泥炭地的空间碳交换进行分解。这些努力的准确性取决于一个精确的通量足迹模型，该模型能准确关联地面通量与测量到的通量。

概念上，弥散模型和足迹模型都是基于控制标量（如大气中的温度、湿度、痕量气体或污染物）的对流和湍流混合的传输方程。在这些模型中，湍流混合通常通过基于湍流闭合理论 K 理论的涡扩散系数来表示。从数学上讲，控制方程是一个随空间和时间演化的标量偏微分方程，通常称为对流-扩散方程 (Stockie, 2011)。在大气边界层的微尺度上，可以通过假设稳态即忽略标量的时间导数来简化该方程。稳态假设是湍度协方差方法（“良好混合标准”）的标准组成部分。它之所以成立是因为存在尺度分离：虽然对流和湍流混合主要发生在微尺度上，但造成这种传输的风型的时间演变则发生在中尺度上。

在一组给定的假设下，稳态对流扩散方程有一个称为高斯羽流的封闭形式解析解。该解假设风场稳定且空间均匀；湍流扩散系数稳定且各向同性；以及在平均流向上的混合可以忽略不计。几个弥散和足迹模型基于类似的解析公式 (Pasquill, F., 1972; Schuepp et al., 1990; Lin and Hildemann, 1997; Kormann and Meixner, 2001; Moreira et al., 2005)。然而，为了推导出解析封闭形式的解所需的渐近假设可能相当严格，因为它们仅对有限范围的气象条件有效。

或者，重新表述对流-扩散方程，使参考框架跟随个体流动单元，得到传输问题的拉格朗日描述。以下模型是从拉格朗日方程通过随机轨迹导出的：Hsieh et al. (2000); Kljun et al. (2002, 2015)。应注意到，大多数随机拉格朗日足迹模型并不无条件地满足充分混合的标准，正如上述所述，这是湍度协方差方法有效性的必要条件 (Thomson, 1987)。

代替通过涡扩散率对湍流混合进行参数化，大涡模拟 (LES) 解析相关湍流尺度，使得对流成为标量 (Steinfeld et al., 2008; Cai et al., 2010; Schlutow et al., 2024) 的主要传输机制。尽管在模拟各种湍流状态下的复杂地形流动方面具有能力，行星边界层的大涡模拟由复杂的 Navier-Stokes 方程数值求解器组成，并且计算成本高昂。

在这篇论文中，我们提出了一种适用于行星边界层的替代大气扩散和足迹模型，该模型基于三维对流-扩散方程（欧拉形式）的数值解。此数值求解器利用快速傅里叶变换 (FFT)，实现了快速而准确的计算。运输问题的数值解具有以下优点：

1. 充分混合的准则在设计上无条件地得到满足。
2. 与分析方法不同，不需要渐近假设或估计。
3. 解的精度仅取决于分辨率。根据应用的不同，该方法的性能可能会有所变化，可以选择合适的分辨率以在较快的计算速度下获得中等精度的结果或在中等速度下获得高精度的结果。
4. 由于其数值性质，求解器可以以模块化的方式实现。特别是，湍流闭合模块与传输求解器分离，允许使用多种湍流模型，如一阶、一个半阶或更高阶的闭合方案 (Stull, 1988)，具体选择取决于应用场景。

本文结构如下。第 2 节介绍了新颖的边界层扩散与足迹模型 (BLDFM)。第 3 节重新审视了湍流闭合理论中的莫宁-奥布霍夫相似性理论。为了评估 BLDFM 的有效性, 在第 4 节中, 数值解与特定的解析解进行了对比测试。第 5 节将 BLDFM 与广泛使用且已建立良好的通量足迹模型 (Kormann and Meixner (2001)) 进行了比较。一些最终的备注在第 6 节给出。

2 求解输运方程: 边界层扩散和足迹模型 (BLDFM)

在本节中, 我们推导边界层扩散和足迹模型 (BLDFM)。我们考虑大气边界层内某个标量 Φ 的稳态对流扩散方程, 例如温度、湿度或痕量气体浓度,

$$\mathbf{u}_h(z) \cdot \nabla_h \Phi - K_h(z) \nabla_h^2 \Phi - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(z) \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) = 0, \quad (1)$$

表面处的通量边界条件为,

$$-K_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} = Q_0(\mathbf{x}_h) \text{ at } z = z_0, \quad (2)$$

其中 $\mathbf{x}_h = (x, y)^T$ 定义了东西和南北方向上的水平坐标, 而 $\mathbf{u}_h = (u, v)^T$ 是其相应的平均风速水平向量。水平的 Nabla 算子由 $\nabla_h = (\partial/\partial x, \partial/\partial y)^T$ 给出。上标 T 表示一个向量或矩阵的转置。风以及水平和垂直涡流扩散率, K_h 和 K_z , 仅依赖于垂直轴 z 。因此, 我们建模了一个稳定的边界层流动。变量 Q_0 代表标量 Φ 的水平变化表面运动通量。它可能代表感热通量, 如果 Φ 表示温度, 或表面-大气气体交换通量, 如果 Φ 恰好是痕量气体浓度如 CO_2 或甲烷。为了具有一般性, 我们将 Φ 与任意单位 (a.u.) 关联起来, 象征 K、kg/kg、mol/mol 或 kg/m^3 。因此, 运动通量 Q_0 的单位是 a.u. m/s。

在横向方向上, 我们可以假设一个周期性 (或消失) 的解。通过这个假设, 在水平边界上不能生成净通量。由于 (1) 是线性的且其系数仅依赖于 z 轴, 我们可以在水平方向应用傅里叶方法,

$$\Phi(\mathbf{x}_h, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \varphi(\boldsymbol{\mu}, z) e^{i\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{x}_h}, \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\mu} = \left(\frac{2\pi}{L_x} n, \frac{2\pi}{L_y} m \right)^T, \quad (4)$$

这在构造中满足了侧向边界条件。将傅里叶级数 (3) 插入稳态对流扩散方程 (1) 将问题转化为一组参数为 (n, m) 的二阶常微分方程, 可以写成

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) - \sigma^2 \varphi = 0. \quad (5)$$

方程 (5) 构成了一个本征值问题 (EVP), 其本征值为

$$\sigma^2(\boldsymbol{\mu}, z) = K_h(z) |\boldsymbol{\mu}|^2 + i\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{u}_h(z) \quad (6)$$

且边界条件为

$$-K_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} = q_0(\boldsymbol{\mu}) \text{ at } z = z_0. \quad (7)$$

这里我们使用了表面通量的傅里叶系数定义,

$$q_0(\boldsymbol{\mu}) = \frac{1}{L_x L_y} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} Q_0(\mathbf{x}_h) e^{-i\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{x}_h} d^2 \mathbf{x}_h, \quad (8)$$

其中 $[0, L_x] \times [0, L_y]$ 描绘了水平域。

我们旨在数值求解 EVP。因此, 我们用有限和来近似傅里叶级数 (3) 以及傅里叶系数定义中的积分 (8), 这允许在实现时使用快速傅里叶变换 (FFT)。考虑无界域 $z \in [z_0, \infty)$ 上 (5) 的解。为了将解约束为 $z \rightarrow \infty$, 我们应用最大值原理 (Evans, 2010, pp 344), 该原理指出 Φ 必须在其边界处达到最大值, 即在 $z = z_0$ 处。可以通过假设 (1) 的系数在某个高度 z_M 以上变为常数来实现最大值原理, 该高度被视为测量高度。根据这一前提, 可以计算出一个解析解 φ_M 对于 $z > z_M$ 。解析解对于 $z > z_M$ 的下边界条件最终成为数值解对于 $z_0 \leq z \leq z_M$ 的上边界条件。带有常数系数的 (5) 的通解被发现为,

$$\varphi = A + Bz \text{ for } (n, m) = (0, 0) \text{ and} \quad (9)$$

$$\varphi = Ce^{-\sigma z} + De^{\sigma z} \text{ for } (n, m) \neq (0, 0). \quad (10)$$

请注意, 该解在 $(n, m) = (0, 0)$ 处已经退化。最大原理要求 $D = 0$ 。因此, $z > z_M$ 的解析解是

$$\varphi_{\text{analytic}} = A + Bz \text{ for } (n, m) = (0, 0) \text{ and} \quad (11)$$

$$\varphi_{\text{analytic}} = Ce^{-\sigma z} \text{ for } (n, m) \neq (0, 0). \quad (12)$$

考虑到上述考虑因素, 寻找变量系数为 $z_0 \leq z \leq z_M$ 的 EVP 的数值解转化为一个边值问题。为了便于数值积分, 我们将 (5) 重写为一组耦合的一阶常微分方程, 通过代入垂直运动通量 q ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= -\frac{q}{K_z}, \\ \frac{\partial q}{\partial z} &= (-i\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{u}_h(z) - K_h(z)|\boldsymbol{\mu}|^2) \varphi, \end{aligned} \quad (13)$$

，并带有如下边界条件，

$$q = q_0 \text{ at } z = z_0 \text{ for all } (n, m), \quad (14)$$

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_{\text{analytic}} \\ -K_z \partial \varphi_{\text{analytic}} / \partial z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A + Bz_M \\ -K_z B \end{pmatrix}$$

$$\text{at } z = z_M \text{ for } (n, m) = (0, 0) \text{ and} \quad (15)$$

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_{\text{analytic}} \\ -K_z \partial \varphi_{\text{analytic}} / \partial z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Ce^{-\sigma z_M} \\ K_z \sigma C e^{-\sigma z_M} \end{pmatrix}$$

$$\text{at } z = z_M \text{ for } (n, m) \neq (0, 0). \quad (16)$$

让我们分别考虑 (n, m) 的两种情况。边界条件依赖于自由参数 A, B, C 。因此，无论是常微分方程还是边界条件都可能被简化。

对于 $(n, m) = (0, 0)$ ， $\partial q / \partial z = 0$ ，通量 $q = q_0$ 变为常数，问题可以重新表述为初值问题 (IVP)，

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = -\frac{q_0}{K_z(z)}, \quad (17)$$

$$\varphi = \varphi_0 \text{ at } z = z_0 \quad (18)$$

其中 φ_0 是一个新的自由参数，代替了 A 的角色，并表示表面的平均浓度。

对于 $(n, m) \neq (0, 0)$ ，我们得到以下简化，消去了对参数 B 和 C 的依赖，

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = -\frac{q}{K_z(z)}, \quad (19)$$

$$\frac{\partial q}{\partial z} = [-i\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{u}_h(z) - K_h(z)|\boldsymbol{\mu}|^2] \varphi,$$

$$q = q_0 \text{ at } z = z_0, \quad (20)$$

$$-K_z \sigma \varphi + q = 0 \text{ at } z = z_M.$$

注意上边界条件被转换为 Robin 边界条件。

此边值问题可使用线性打靶法 (Lindfield and Penny, 2018) 求解。设 $(\varphi_1, q_1)^T$ 是给定常微分方程 (ODEs) 系统 (19) 和初始条件 $(1, 0)^T$ 在点 $z = z_0$ 的解。类似地，设 $(\varphi_2, q_2)^T$ 是初始条件为 $(0, q_0)^T$ 在 $z = z_0$ 处的初值问题的解。原始边值问题的解由 (19) 和 (20) 给出，是两个初值问题解的线性组合，

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ q \end{pmatrix} = \alpha \cdot \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ q_1 \end{pmatrix} + 1 \cdot \begin{pmatrix} \varphi_2 \\ q_2 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$\alpha = \frac{K_z(z_M)\sigma(z_M)\varphi_2(z_M) - q_2(z_M)}{q_1(z_M) - K_z(z_M)\sigma(z_M)\varphi_1(z_M)}. \quad (22)$$

注意初始值的选择——不丧失一般性——是为了使线性组合系数的表达式紧凑。

由于常微分方程是线性的，初值问题可以通过指数积分方法 (Hochbruck and Ostermann, 2010) 进行数值求解。然而，更容易推导和实现的方法可能对大多数应用来说已经足够了。我们从指数积分器的泰勒展开中推导出了一种三阶方法，证明其具有一致性、稳定性和鲁棒性。它也比指数积分器快得多，在我们的实现中成为默认方法。指数积分器及其三阶近似的推导可以在附录 A 中找到。

2.1 格林函数和足迹

在某些应用中，解决原始问题的略微修改版本可能是有利的 (1)。方程 (19) 和 (20) 写作如下，

$$\frac{\partial G_{\Phi}}{\partial z} = -\frac{G_Q}{K_z(z)}, \quad (23)$$

$$\frac{\partial G_Q}{\partial z} = K_h(z) \nabla_h^2 G_{\Phi} - \mathbf{u}_h(z) \cdot \nabla_h G_{\Phi}, \quad (24)$$

边界条件为

$$-K_z \frac{\partial G_{\Phi}}{\partial z} = \delta(x) \delta(y) \text{ at } z = z_0. \quad (25)$$

这里，表面通量源项被替换为 delta 分布，这实际上表示一个无限小直径的单位点源。由元素 G_{Φ} 和 G_Q 组成的向量称为格林函数 (Finnigan, 2004)，而 (23)–(25) 的数值解则类似地从第 2 节得出。

最终，原问题的解 (1) 由格林函数与实际表面通量源项的卷积给出，

$$\Phi(\mathbf{x}_h, z) = \frac{1}{L_x L_y} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} Q_0(\boldsymbol{\xi}_h) G_{\Phi}(\mathbf{x}_h - \boldsymbol{\xi}_h, z) d^2 \boldsymbol{\xi}_h \quad (26)$$

同样地，

$$Q(\mathbf{x}_h, z) = \frac{1}{L_x L_y} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} Q_0(\boldsymbol{\xi}_h) G_Q(\mathbf{x}_h - \boldsymbol{\xi}_h, z) d^2 \boldsymbol{\xi}_h. \quad (27)$$

因此，在存在多个通量源项的应用中（例如多示踪剂方法），对于给定的气象条件，只需要计算一次格林函数。浓度和通量场然后通过卷积 (26) 和 (27) 来计算，离散化后这些变为简单的求和。总之，使用格林函数的方法在计算上可能更有效率。

请注意，Green 函数与足迹 F (Vesala et al., 2008) 之间存在密切联系：足迹是移至测量点的 Green 函数的反映。就 Green 函数而言，浓度和通量足迹可分别写为，

$$F_{\Phi}(\mathbf{x}_{h,M}, z_M; \mathbf{x}_h) = G_{\Phi}(\mathbf{x}_{h,M} - \mathbf{x}_h, z_M), \quad (28)$$

$$F_Q(\mathbf{x}_{h,M}, z_M; \mathbf{x}_h) = G_Q(\mathbf{x}_{h,M} - \mathbf{x}_h, z_M), \quad (29)$$

总之，BLDFM 构成一个分散模型和一个足迹模型。

3 平均风速和涡扩散率的分布特征

我们应用莫宁-奥布霍夫相似性理论 (MOST), 考虑大气稳定性的条件下, 获得风速 u_h 以及涡扩散率 K_h 和 K_z (Monin and Obukhov, 1954; Kormann and Meixner, 2001) 的分布。在 MOST 下, 平均水平风速可以表示为,

$$u_h(z) = \frac{u_*}{\kappa} \left(\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) + \psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right), \quad (30)$$

涡扩散系数, 在假设各向同性扩散的情况下, 由以下给出:

$$K_h(z) = K_z(z) = \frac{\kappa u_* z}{\phi_c(z/L)}. \quad (31)$$

变量 u_* 、 z_0 和 L 分别表示摩擦速度、粗糙度长度和 Obukhov 长度。后者是边界层稳定性的指标。它们是从涡相关测量中得到的典型诊断变量。参数 $\kappa = 0.4$ 是冯·卡门常数。大气稳定度通过通用函数 ψ_m 和 ϕ_c 进入方程, 这些函数由 Businger - Dyer 关系式 (Businger et al., 1971; Dyer, 1974) 规定为

$$\psi_m = \begin{cases} 5z/L & \text{for } L > 0, \\ -2 \ln \left(\frac{1+\zeta}{2} \right) - \ln \left(\frac{1+\zeta^2}{2} \right) & \\ \quad + 2 \arctan(\zeta) - \frac{\pi}{2} & \text{for } L < 0 \end{cases} \quad (32)$$

其中包含 $\zeta = (1 - 16z/L)^{1/4}$ 和

$$\phi_c = \begin{cases} 1 + 5z/L & \text{for } L > 0, \\ (1 - 16z/L)^{-1/2} & \text{for } L < 0. \end{cases} \quad (33)$$

由于 BLDFM 是一个数值求解器, 可以轻松实现更多的闭合模型选项, 比如一又二分之一或二级闭合。此外, 各向同性扩散的选择可以通过更复杂的参数化方案直接扩展。

4 与常数剖面的解析解比较

如图 (9) 和 (10) 所示, 如果稳态对流扩散方程的系数是常数, 则它存在解析解。这一事实提供了一个实用的测试案例, 用于评估前一节中提出的数值方法的性能。图 1 显示了当 u, v, K_h 和 K_z 设定为常数时, 数值解与解析解比较的结果。上方两个图显示了由表面标记的红点处单位点源引起的标量 Φ 的羽流及其在 $z_M = 10 \text{ m}$ 处的通量。下方两个图显示了与解析解相关的相对差异作为

$$\Delta_{\text{rel}} \Phi = \frac{\Phi_{\text{numerical}} - \Phi_{\text{analytic}}}{\max(\Phi_{\text{analytic}})}. \quad (34)$$

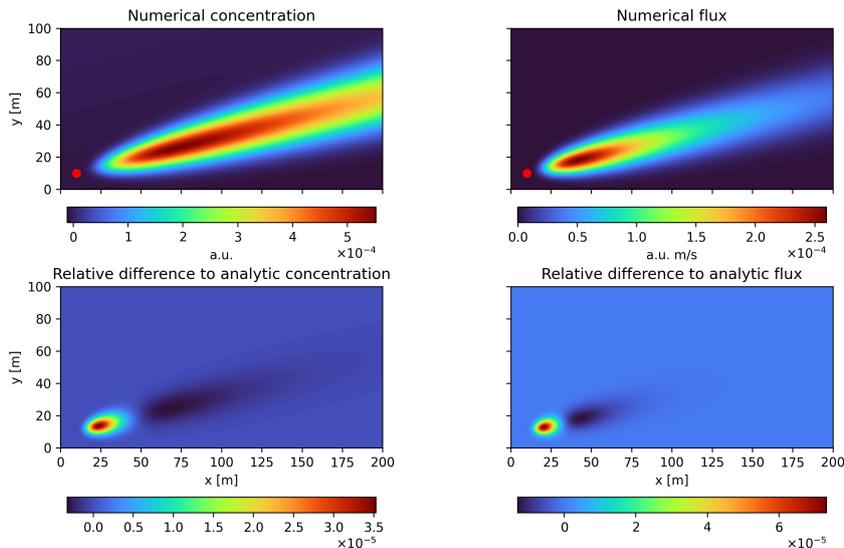


Figure 1. 与恒定水平风和涡扩散率分布的解析解对比。上行：用来自红色点处表面单位点源的 BLDFM 数值方案计算的 10m 处的质量浓度和通量。下行：相对于解析解的相对差异。

测试模拟中的风速设置为 $\mathbf{u}_h = (4.0, 1.0)^T \text{ m/s}$ ，涡扩散系数为 $K_h = K_z = 1.6 \text{ m}^2/\text{s}$ 。这些值被选用来描绘行星边界层中典型的气象条件。使用了 1024 个傅里叶模式和 256 个垂直网格点进行数值积分，采用如第 2 节和附录 A 所述的三阶方法，这可能对于常规应用稍微过多，但仍可以在现代台式计算机上保持足够快的速度。我们的计算机运行的是第 11 代 Intel®Core™i7 处理器，主频为 2.50 GHz，并且安装了 16 GiB 的 RAM。BLDFM 是使用 Python 3.13.2 实现并编译的。在单核（未并行）情况下，模拟运行时间是 14s。

结果符合预期，并生成了一个典型的羽流 (cf. Stockie, 2011)。与解析解的比较显示了非常好的一致性：最大相对差异小于 0.1%。为了验证收敛性，还测试了其他分辨率。相对误差随着更高分辨率而减小（此处未展示）。总之，在设计的测试案例场景中，BLDFM 数值积分器展示了强大的性能，有效地以高精度和效率解决了问题。

5 与 Kormann 和 Meixner 足迹模型比较

为了评估 BLDFM 作为足迹模型的能力，我们针对边界层的各种分层情景运行了两个不同的测试案例，并将结果与广为人知且广泛使用的足迹模型 Kormann and Meixner (2001, hereafter referred to as FKM) 进行了比较。FKM 模型与 BLDFM 相比遵循了一个截然不同的范式。与 BLDFM 的数值方法不同，FKM 基于稳态对流扩散方程在两种简化条件下的解析闭合形式解：

1. 细长羽流假设：忽略流向方向的湍流扩散。

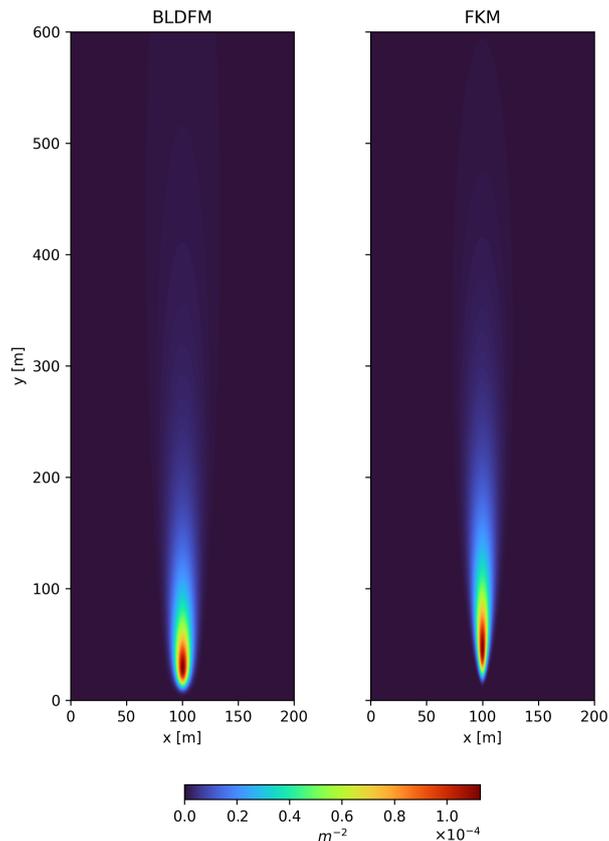


Figure 2. BLDFM 和 Kormann 及 Meixner 足迹模型在大气边界层非常不稳定条件下的足迹（详见正文）。

2. 水平风速和涡扩散率的垂直廓线以幂律形式进行建模。Monin-Obukhov 相似理论的廓线然后用幂律表示法近似，报告的最大偏差达 15%。

这些简化条件均未被 BLDFM 采用，因为其方法完全是数值性的。

图 2 展示了在不稳定条件下 BLDFM 和 FKM 的足迹对比。风从北面以 6.0m/s 的速度吹来，假设粗糙度长度为 $z_0 = 0.1\text{ m}$ ，测量点位于 $(x_M, y_M)^T = (100.0, 0.0)^T\text{ m}$ ，高度为 $z_M = 10.0\text{ m}$ 。莫宁-奥布霍夫长度为 $L = -20\text{ m}$ ，因此，大气条件非常不稳定。乍一看，FKM 和 BLDFM 的足迹看起来相似。两种足迹都有可比较的有效作用范围，即风从源头到接收器有效混合或传输标量的距离。仔细观察后会发现，BLDFM 足迹的最大值比 FKM 更接近测量点。BLDFM 和 FKM 之间的这种差异可以通过两个观测结果来解释。一方面，在非常不稳定的气象条件下，风速具有强烈的剪切分布，这在 FKM 模型中用幂律近似是具有挑战性的。相比之下，BLDFM 直接使用 MOST 的剖面作为数值积分的输入。另一方面，FKM 忽略了流向扩散。特别是在极端不稳定的情况下，涡动扩散可能极大，其忽略可能导致湍流传输的低估，因此导致作用范围的高估。

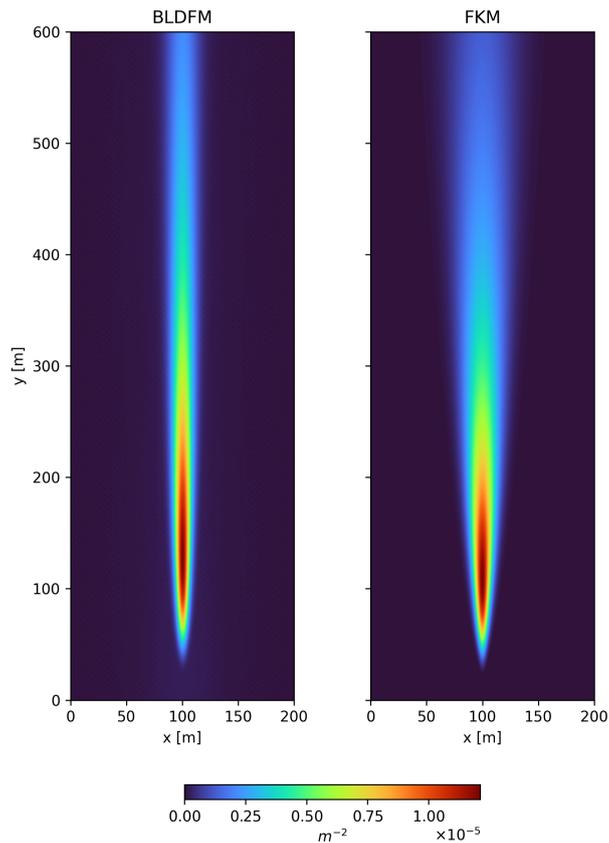


Figure 3. BLDFM 和 Kormann 及 Meixner 足迹模型在大气边界层非常稳定条件下的足迹（详见正文）。”

图 3 显示了在稳定条件下 BLDFM 和 FKM 的足迹对比。所有特征都与前一个案例相同，但莫宁-奥布霍夫长度被选为 $L = 20\text{m}$ ，即非常稳定的气溶胶条件。两个模型，BLDFM 和 FKM，生成具有相似延伸范围的足迹。足迹之间的主要区别在于横风宽度，对于 FKM 来说明显更宽。这一差异可以通过不同的模型选择来解释。在 FKM 中，水平涡流扩散率与垂直涡流扩散率不同。后者类似于 BLDFM 通过 MOST 确定，而水平涡流扩散率则以横风波动的形式进行建模。相比之下，BLDFM 假设涡流扩散率为各向同性。因此，BLDFM 可能低估了水平湍流混合。与非常不稳定条件下的测试案例相比，延伸范围的差异并不那么明显。这种微小差异也可以通过 BLDFM 的涡流扩散率的各向同性来解释，支持我们对 FKM 因忽略流向湍流混合而高估延伸范围的怀疑。

6 Conclusions

本文提出了一种用于大气边界层中不同湍流状态下的微尺度应用的新型大气扩散和足迹模型。该模型数值求解了欧拉形式的三维稳态对流-扩散方程。采用傅里叶方法将传输问题转化为一组二阶常微分方程，构成了

一个本征值问题。结合通量边界条件，问题被转换为一个边值问题，可以使用线性打靶法高效求解。这种数值公式允许与快速傅里叶变换及指数积分法相结合，从而产生了一个计算速度快且稳健的算法。平均风速和涡扩散系数的垂直分布通过莫宁-奥布霍夫相似理论计算得出，并考虑了边界层稳定性的影响。未来将实施更复杂的高阶闭合方案。BLDFM 的性能已经与一个特殊的解析解进行了对比测试。在典型的大气条件下以及较高的分辨率下，数值解和解析解之间的相对差异小于 0.1%。与 Kormann 和 Meixner 足迹模型 (FKM) 的比较显示了总体一致性的结果。然而，发现了足迹范围上的差异，我们将其归因于 FKM 忽略了流方向上的湍流混合。

Code availability. BLDFM is implemented in Python and freely available on <https://github.com/SchlutowSM2Group/BLDFM> under GPL-3.0 license.

Appendix A: 指数积分器的推导

在第 2 节中，我们介绍了指数积分器方法来求解由线性射线法产生的初值问题。我们将垂直轴用等间距增量 $z^{(n)} = z_0 + n\delta z$ 离散化，使得对于任意函数 $f = \mathbf{u}_h, K_h, K_z, \dots$ 我们可以写成 $f(z^{(n)}) = f^{(n)}$ 。然后，根据 Hochbruck and Ostermann (2010)，我们可以通过指数积分器方法推导出以下迭代方案，

$$\eta^{(n)} = -K_h^{(n)} |\boldsymbol{\mu}|^2 - \mathbf{i} \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{u}_h^{(n)}, \quad (\text{A1})$$

$$\lambda^{(n)} = \sqrt{\eta^{(n)} / K_z^{(n)}}, \quad (\text{A2})$$

$$\varphi^{(n+1)} = \cos(\lambda^{(n)} \delta z) \varphi^{(n)} - \frac{1}{\lambda^{(n)} K_z^{(n)}} \sin(\lambda^{(n)} \delta z) q^{(n)}, \quad (\text{A3})$$

$$q^{(n+1)} = \frac{\eta^{(n)}}{\lambda^{(n)}} \sin(\lambda^{(n)} \delta z) \varphi^{(n)} + \cos(\lambda^{(n)} \delta z) q^{(n)}. \quad (\text{A4})$$

注意，当区间 $z^{(n)} < z < z^{(n+1)}$ 内的所有系数都为常数时，这个解是精确的。当对指数积分器取三阶泰勒近似时，可以展开余弦和正弦来得到一个精度较低但计算速度较快的算法。

$$\cos(x) = 1 - \frac{1}{2}x^2 + \mathcal{O}(\|x\|^4), \quad (\text{A5})$$

$$\sin(x) = x - \frac{1}{6}x^3 + \mathcal{O}(\|x\|^4). \quad (\text{A6})$$

Author contributions. MS conceptualized the research problem and the initial model formulation. RC contributed to the development and implementation of the initial numerical approach and to discussions shaping the model formulation. MS later refined the model, corrected key issues, and completed its development, validation, and visualization of the results. MS and RC coordinated, implemented, and tested the software code. MG acquired financial support, managed, and supervised the research activity. MS prepared the manuscript with contributions from all co-authors.

Competing interests. The authors declare no competing interests.

Acknowledgements. RC 感谢德国研究联合会通过跨学科研究中心 (CRC) 1114 ‘复杂系统中的尺度级联’, 项目编号 235221301, 项目 A02: ‘大气流的多尺度数据和渐近模型同化’ 提供的资金支持。RC 进一步感谢 Schmidt Sciences, LLC 的支持, 作为气候建模联盟和虚拟地球系统研究学院 DataWave 项目的组成部分。MS 和 MG 感谢欧洲研究委员会 (ERC) 在欧盟地平线 2020 研究与创新计划下的资助 (资助协议号 951288, Q-Arctic)。

References

- Aubinet, M., Vesala, T., and Papale, D., eds.: *Eddy Covariance: A Practical Guide to Measurement and Data Analysis*, Springer Netherlands, Dordrecht, ISBN 978-94-007-2350-4 978-94-007-2351-1, <https://doi.org/10.1007/978-94-007-2351-1>, 2012.
- Baldocchi, D.: 'Breathing' of the Terrestrial Biosphere: Lessons Learned from a Global Network of Carbon Dioxide Flux Measurement Systems, *Australian Journal of Botany*, 56, 1, <https://doi.org/10.1071/BT07151>, 2008.
- Businger, J. A., Wyngaard, J. C., Izumi, Y., and Bradley, E. F.: Flux-Profile Relationships in the Atmospheric Surface Layer, *Journal of the Atmospheric Sciences*, 28, 181–189, [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1971\)028<0181:FPRITA>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1971)028<0181:FPRITA>2.0.CO;2), 1971.
- Cai, X., Chen, J., and Desjardins, R. L.: Flux Footprints in the Convective Boundary Layer: Large-Eddy Simulation and Lagrangian Stochastic Modelling, *Boundary-Layer Meteorology*, 137, 31–47, <https://doi.org/10.1007/s10546-010-9519-7>, 2010.
- Crawford, B. and Christen, A.: Spatial Source Attribution of Measured Urban Eddy Covariance CO₂ Fluxes, *Theoretical and Applied Climatology*, 119, 733–755, <https://doi.org/10.1007/s00704-014-1124-0>, 2015.
- Dyer, A. J.: A Review of Flux-Profile Relationships, *Boundary-Layer Meteorology*, 7, 363–372, <https://doi.org/10.1007/BF00240838>, 1974.
- Evans, L. C.: *Partial Differential Equations*, American Mathematical Soc., ISBN 978-0-8218-4974-3, 2010.
- Hochbruck, M. and Ostermann, A.: Exponential Integrators, *Acta Numerica*, 19, 209–286, <https://doi.org/10.1017/S0962492910000048>, 2010.
- Hsieh, C.-I., Katul, G., and Chi, T.-w.: An Approximate Analytical Model for Footprint Estimation of Scalar Fluxes in Thermally Stratified Atmospheric Flows, *Advances in Water Resources*, 23, 765–772, [https://doi.org/10.1016/S0309-1708\(99\)00042-1](https://doi.org/10.1016/S0309-1708(99)00042-1), 2000.
- Kljun, N., Rotach, M., and Schmid, H.: A Three-Dimensional Backward Lagrangian Footprint Model For A Wide Range Of Boundary-Layer Stratifications, *Boundary-Layer Meteorology*, 103, 205–226, <https://doi.org/10.1023/A:1014556300021>, 2002.
- Kljun, N., Calanca, P., Rotach, M. W., and Schmid, H. P.: A Simple Two-Dimensional Parameterisation for Flux Footprint Prediction (FFP), *Geoscientific Model Development*, 8, 3695–3713, <https://doi.org/10.5194/gmd-8-3695-2015>, 2015.
- Kormann, R. and Meixner, F. X.: An Analytical Footprint Model For Non-Neutral Stratification, *Boundary-Layer Meteorology*, 99, 207–224, <https://doi.org/10.1023/A:1018991015119>, 2001.
- Leclerc, M. Y. and Foken, T.: *Footprints in Micrometeorology and Ecology*, Springer, Berlin, Heidelberg, ISBN 978-3-642-54544-3 978-3-642-54545-0, <https://doi.org/10.1007/978-3-642-54545-0>, 2014.
- Lin, J.-S. and Hildemann, L. M.: A Generalized Mathematical Scheme to Analytically Solve the Atmospheric Diffusion Equation with Dry Deposition, *Atmospheric Environment*, 31, 59–71, [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(96\)00148-3](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(96)00148-3), 1997.
- Lindfield, G. and Penny, J.: *Numerical Methods: Using MATLAB*, Academic Press, ISBN 978-0-12-812370-6, 2018.
- Monin, A. S. and Obukhov, A. M.: Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere, *Tr. Akad. Nauk SSSR Geophys. Inst.*, 24, 163–187, 1954.

- Moreira, D. M., Tirabassi, T., and Carvalho, J. C.: Plume Dispersion Simulation in Low Wind Conditions in Stable and Convective Boundary Layers, *Atmospheric Environment*, 39, 3643–3650, <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.03.004>, 2005.
- Pasquill, F.: Some aspects of boundary layer description, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 98, 469–494, <https://doi.org/10.1002/qj.49709841702>, 1972.
- Pirk, N., Aalstad, K., Mannerfelt, E. S., Clayer, F., De Wit, H., Christiansen, C. T., Althuisen, I., Lee, H., and Westermann, S.: Disaggregating the Carbon Exchange of Degrading Permafrost Peatlands Using Bayesian Deep Learning, *Geophysical Research Letters*, 51, e2024GL109283, <https://doi.org/10.1029/2024GL109283>, 2024.
- Rey-Sanchez, C., Arias-Ortiz, A., Kasak, K., Chu, H., Szutu, D., Verfaillie, J., and Baldocchi, D.: Detecting Hot Spots of Methane Flux Using Footprint-Weighted Flux Maps, *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 127, e2022JG006977, <https://doi.org/10.1029/2022JG006977>, 2022.
- Schlutow, M., Stacke, T., Doerffel, T., Smolarkiewicz, P. K., and Göckede, M.: Large Eddy Simulations of the Interaction Between the Atmospheric Boundary Layer and Degrading Arctic Permafrost, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 129, e2024JD040794, <https://doi.org/10.1029/2024JD040794>, 2024.
- Schmid, H. P.: Footprint Modeling for Vegetation Atmosphere Exchange Studies: A Review and Perspective, *Agricultural and Forest Meteorology*, 113, 159–183, [https://doi.org/10.1016/S0168-1923\(02\)00107-7](https://doi.org/10.1016/S0168-1923(02)00107-7), 2002.
- Schuepp, P. H., Leclerc, M. Y., MacPherson, J. I., and Desjardins, R. L.: Footprint Prediction of Scalar Fluxes from Analytical Solutions of the Diffusion Equation, *Boundary-Layer Meteorology*, 50, 355–373, <https://doi.org/10.1007/BF00120530>, 1990.
- Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N.: *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*, John Wiley & Sons, ISBN 978-1-118-59136-9, 2012.
- Steinfeld, G., Raasch, S., and Markkanen, T.: Footprints in Homogeneously and Heterogeneously Driven Boundary Layers Derived from a Lagrangian Stochastic Particle Model Embedded into Large-Eddy Simulation, *Boundary-Layer Meteorology*, 129, 225–248, <https://doi.org/10.1007/s10546-008-9317-7>, 2008.
- Stockie, J. M.: The Mathematics of Atmospheric Dispersion Modeling, *SIAM Review*, 53, 349–372, <https://doi.org/10.1137/10080991X>, 2011.
- Stull, R. B., ed.: *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*, Springer Netherlands, Dordrecht, ISBN 978-90-277-2769-5 978-94-009-3027-8, <https://doi.org/10.1007/978-94-009-3027-8>, 1988.
- Thomson, D. J.: Criteria for the Selection of Stochastic Models of Particle Trajectories in Turbulent Flows, *Journal of Fluid Mechanics*, 180, 529–556, <https://doi.org/10.1017/S0022112087001940>, 1987.
- Vesala, T., Kljun, N., Rannik, Ü., Rinne, J., Sogachev, A., Markkanen, T., Sabelfeld, K., Foken, Th., and Leclerc, M.: Flux and Concentration Footprint Modelling: State of the Art, *Environmental Pollution*, 152, 653–666, <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2007.06.070>, 2008.
- Wang, W., Davis, K. J., Cook, B. D., Butler, M. P., and Ricciuto, D. M.: Decomposing CO₂ Fluxes Measured over a Mixed Ecosystem at a Tall Tower and Extending to a Region: A Case Study, *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 111, <https://doi.org/10.1029/2005JG000093>, 2006.