
Ein Euler-Lagrange'sches Zirruswolken-Modell mit expliziter Aerosol- und Eismikrophysik: Studien zur Aggregation von Eispartikeln

Dissertation
an der Fakultät für Physik der
Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von Ingo Sölch
aus Fürstenfeldbruck

1. Gutachter: Prof. Dr. Bernd Kärcher
 2. Gutachter: Prof. Dr. Ulrich Schumann
- Tag der mündlichen Prüfung: 09.03.2009

Angefertigt am Institut für Physik der Atmosphäre, DLR Oberpfaffenhofen

Kurzfassung

Zirruswolken (Zirren), Eiswolken, die sich im oberen Bereich der Troposphäre bilden, spielen eine wichtige Rolle im Klimasystem der Erde. Trotz intensiver Forschung sind noch viele Fragen zu Zirren bezüglich der mikrophysikalischen Zusammensetzung, der Bildungsmechanismen sowie Kristallform einzelner Eispartikel oder deren Strahlungswechselwirkung unbeantwortet. Messungen von Eigenschaften der Zirruswolken sind auf Fernerkundungsverfahren oder räumlich begrenzte in-situ Messmethoden beschränkt. Ein wertvolles Werkzeug in der Erforschung von Zirren ist die numerische Modellierung, welche es erlaubt, eine Synthese bestehender Erkenntnisse aus Labor- und Feldmessungen zu schaffen.

In dieser Arbeit wird ein wolkenauflösendes, mehrdimensionales Modellsystem (EULAG-LCM) für Zirren aufgebaut, welches eine detaillierte Behandlung von Aerosol- und Eisphase beinhaltet. Das Modell berücksichtigt sowohl den Strahlungstransfer als auch die interne Dynamik in Wolken. Die Eisphase wird in einem innovativen Ansatz beschrieben, indem die Trajektorien einer großen Anzahl von Simulationspartikeln verfolgt werden. Dieser Euler-Lagrange'sche Ansatz ermöglicht neue Analysemöglichkeiten, welche fundierte Aussagen über Nukleationswege, Wachstumshistorien und Zusammensetzung der Eispartikel erlauben und wird erstmals in einem mehrdimensionalen Wolkenmodell mit einem hohen Grad an Komplexität bezüglich Mikrophysik und Dynamik verwendet.

Die Validierung des neuentwickelten EULAG-LCM erfolgt in drei Stufen: anhand einer Boxmodellstudie, einer internationalen Modell-Vergleichsstudie sowie einer im Rahmen dieser Arbeit aufbereiteten Fallstudie unter Berücksichtigung des Aggregationsprozesses.

Ein wesentlicher Prozess bei der vertikalen Verteilung von Eismasse (entscheidend für die Strahlungswirkung) und bei der Niederschlagsbildung in Zirren ist die Aggregation von Eispartikeln. Im Gegensatz zum Koagulationsprozess flüssiger Wolkentropfen ist die Aggregation von Eispartikeln bisher selten Gegenstand detaillierter numerischer Studien. Im Rahmen dieser Arbeit werden Aggregationsalgorithmen entwickelt, die auf den Trajektorien und Sedimentationsgeschwindigkeiten einzelner Kristalle beruhen. Dies stellt einen wichtigen Schritt dar, die Aggregation in einem mehrdimensionalen Kontext prozess-orientiert zu simulieren.

In der Fallstudie sowie den zugehörigen Sensitivitätsstudien, basierend auf einem umfangreichen Datensatz von Messungen in einem Zirrus mittlerer Breiten, wird die Aggregation von Eiskristallen und deren Modifikation durch atmosphärische Randbedingungen untersucht. Anhand der Trajektorien einzelner Simulationspartikel wird in dieser Arbeit u.a. gezeigt, dass ein Vorgang ähnlich dem 'seeder-feeder' Mechanismus bei der Niederschlagsbildung auch bei der Ausbildung großer Eispartikel in reinen Eiswolken existiert. Dieser kleine 'seeder-feeder' Prozess ist dadurch zu erklären, dass in Wolkenstrukturen am Oberrand des Zirrus Eiskristalle nukleieren, welche anschließend auf ihrem Weg durch die darunterliegenden Zirruschichten dort vorhandene Kristalle aufsammeln. So können die Kristalle schnell zu großen Massen anwachsen, was zu einer Selbstverstärkung des Aggregationsprozesses führt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Zirruswolken	1
1.2	Modellierung von Zirren	7
1.3	Ziele der Arbeit	8
2	Das Modellsystem EULAG-LCM	11
2.1	Operator-Splitting	12
2.2	Dynamik	14
2.2.1	EULAG	14
2.2.2	Advektion	15
2.2.3	Virtuelle potentielle Temperatur für Wolken	16
2.3	Mikrophysik	16
2.3.1	Aerosol	16
2.3.2	Eisphase	23
2.4	Strahlung	36
2.4.1	Parametrisierung der Strahlungstransportgleichung	37
2.5	Aggregation von Eispartikeln	40
2.5.1	Aggregationsalgorithmen	42
2.5.2	Skalierung von Eispartikelgrößenverteilungen	46
3	Idealisierte Simulationen zur Zirrenbildung	47
3.1	Aufbau einer EULAG-LCM Simulation	47
3.2	Parallelisierung	50
3.3	Benötigte Anzahl von Simulationsteilchen	51
3.4	Einfluss der Dimensionalität auf die Simulationsergebnisse	57
3.5	Interne Dynamik	58
4	Validierung des Mikrophysikmoduls	63
4.1	Boxmodellstudien - Vergleich mit dem APSC m	63
4.2	GEWEX GCSS WG2 Modellvergleich	65
4.2.1	Aufbau der Modellsimulation	67
4.2.2	Ergebnisse der EULAG-LCM Simulationen	68
4.2.3	Zirreninitiierung	70

5	Studien zum Aggregationsprozess in Zirren	73
5.1	Eine Fallstudie - ARM IOP SGP 9. März 2000	74
5.1.1	Messungen	76
5.1.2	Aufbau der Basis-Simulation	82
5.1.3	Ergebnisse der Basis-Simulation: Validierung anhand der Messdaten . . .	84
5.1.4	Vergleich der gemessenen und simulierten Eispartikelgrößenverteilungen .	88
5.1.5	Skalierung der simulierten Eispartikelgrößenverteilung	89
5.2	Sensitivitätsstudien	92
5.2.1	Vergleichsmaß: Mittlere säulenintegrierte optische Dicke	92
5.2.2	Ergebnisse der Sensitivitätsstudien	94
5.3	Studien zum Aggregationsprozess in Zirren	97
5.3.1	Analyse von Partikeltrajektorien - Ein detaillierter Blick auf den Aggre- gationsprozess für die Fallstudie	97
5.3.2	Einfluss der Aggregationseffizienz auf den Aggregationsprozess und die Wolkenbildung	105
5.3.3	Erhöhung der Aggregationseffektivität in Sublimationszonen	106
6	Zusammenfassung	109
6.1	Ziele und Methodik	109
6.2	Ergebnisse und Bewertung	109
6.3	Ausblick	111
A	Symbole und Abkürzungen	115
A.1	Verwendete Symbole	115
	Abbildungsverzeichnis	118
	Tabellenverzeichnis	122
	Literaturverzeichnis	124

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Zirruswolken

Wolken in der Atmosphäre existieren in einer großen Vielfalt an Formen und Entstehungsmechanismen. Ein Blick in die Wolkenklassifikation der WMO^{1.1}, die bis auf Luke Howard (1803) zurückgeht, der als Erster lateinische Bezeichnungen für Wolkengattungen verwendete, zeigt einen sehr umfangreichen Katalog an verschiedenen Wolkenarten. Die Klassifikation beruht dabei meist auf morphologischen Erscheinungen. Für das tägliche Leben sind insbesondere jene Wolkensysteme, die mit Schlechtwetterperioden verbunden sind, von entscheidender Bedeutung.

Zirruswolken^{1.2} (Zirren), die nach klassischer Definition als hohe Wolken mit federhafter Struktur bezeichnet werden, stellen für die täglichen Belange zunächst keine Beeinträchtigung dar. Erst das aufkommende Bewusstsein eines möglichen menschengemachten Klimawandels rückte Zirren in den Fokus wissenschaftlicher Fragestellungen. In einer wegweisenden Arbeit hat Liou (1986) auf deren entscheidenden Anteil an der Temperaturverteilung im System Atmosphäre hingewiesen, gleichzeitig aber den Kenntnisstand über dieses Element im Klimasystem als einen der geringsten eingestuft. Trotz intensiver Forschung sind noch viele Fragen bezüglich der mikrophysikalischen Zusammensetzung von Zirren, der Bildungswege und Kristallform einzelner Eispartikel oder deren Strahlungswechselwirkung unbeantwortet.

Im Rahmen dieser Arbeit sind Zirren als reine Eiswolken definiert, welche sich in der oberen Troposphäre und der Tropopausenregion ausformen. Eine Reihe von Bildungsmechanismen tragen zur Entstehung dieser Wolken bei, welche sich dann in ihrer mikro- und makrophysikalischen Zusammensetzung unterscheiden können. Die Mechanismen sind:

- **Synoptisch generierter Zirrus:** Diese Wolken bilden sich in den Hebungsregionen synoptischer Störungen, z.B. an Warmfronten oder im Bereich von Strahlströmen (Heymsfield, 1977; Mace *et al.*, 2006).
- **Cumulonimbus induzierter Zirrus:** Zirren, die sich in den vereisten Regionen im oberen Bereich konvektiver Systeme bilden. Durch die starken Aufwinde werden Wasserdampf, Hydrometeore und Aerosolpartikel in die obere Troposphäre transportiert (Jensen und Ackerman, 2006; Fierli *et al.*, 2007). Die Zirren können noch lange fortbestehen, selbst wenn der Cumulonimbus bereits zerfallen ist.

^{1.1}WMO - World Meteorological Organisation

^{1.2}Abgeleitet vom lateinischen Wort '*cirrus*' für Feder.

- **Lee-Zirrus:** Eiswolken, die sich in aufsteigenden Ästen von Schwerewellen vor allem im Lee von Gebirgen ausformen. Prominente Gebiete sind z.B. die Rocky Mountains oder die Anden (Dean *et al.*, 2005).
- **Ultradünner tropischer Zirrus:** An der kalten tropischen Tropopause bilden sich Zirren, die aus sehr kleinen Eisteilchen bestehen und deren optische Dicken unterhalb der Sichtbarkeitsgrenze für das menschliche Auge liegen (Lynch und Sassen, 2002).
- **Kondensstreifen-Zirrus:** Zirren, die aus persistenten Kondensstreifen des Flugverkehrs (contrails) entstehen und damit anthropogen induziert sind (Schumann, 2002).

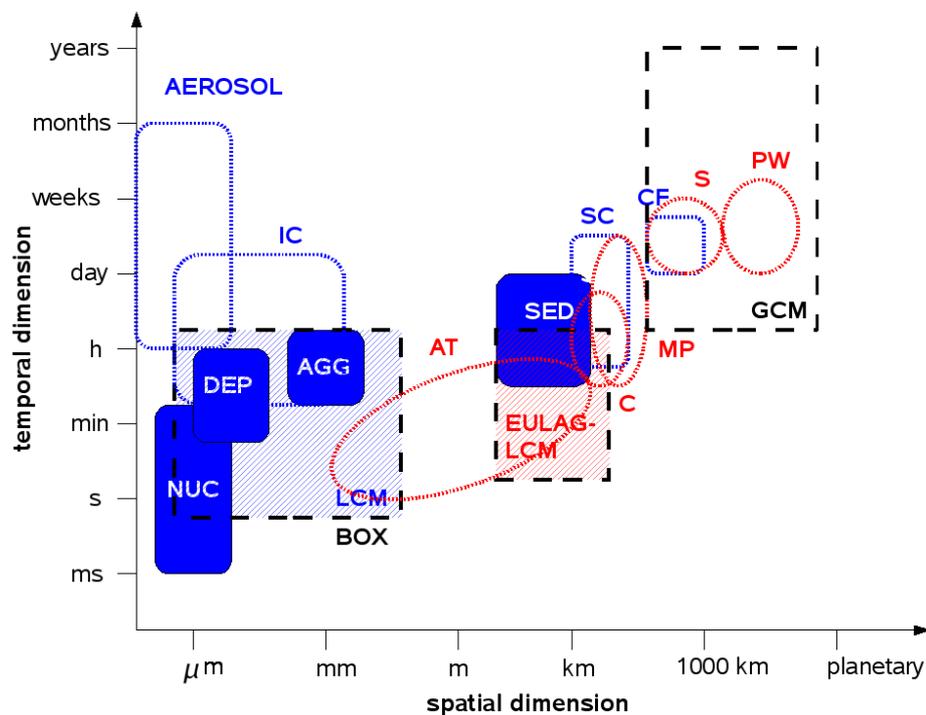


Abbildung 1.1: Typische Skalen atmosphärischer Bewegungen (rot gestrichelt), Wolkenstrukturen oder Wolkenpartikeln (blau gestrichelt) und von mikrophysikalischen Prozessen in kalten Wolken (blaue Kästen) bezüglich räumlicher und zeitlicher Dimension. Abkürzungen sind: AT - Atmosphärische Turbulenz; C - Konvektion; MP - Mesoskalige Prozesse (z.B. Schwerewellen, mesoskalige Gewitterkomplexe); S - Synoptische Prozesse (z.B. Frontal-Systeme mittlerer Breiten, Hebungsprozesse im Bereich des Starkwindbandes des Strahlstroms); PW - Planetare Wellen (z.B. Rossby Wellen). AEROSOL - Aerosolpartikel; IC - Einzelne Eiskristalle; SC - Einzelne Zirruswolken; CF - Zirrusfelder. NUC - Eisbildungsprozesse; DEP - Diffusionswachstum; AGG - Aggregation von Eispartikeln; SED - Sedimentation von Eispartikeln. Die schwarz gestrichelten Kästen stellen typische Auflösungsbereiche von Modellen dar: BOX - Boxmodelle; LCM - Lagrangian Cirrus Module (im Rahmen dieser Arbeit entwickelt); GCM - General Circulation Model. Zur näheren Erläuterung siehe Text.

Zirruswolken spielen für unser Klima eine wichtige Rolle (Liou, 1986). Die Eiswolken können den Strahlungshaushalt der Erde auf zwei unterschiedliche Arten beeinflussen. Die Eispartikel reflektieren einen Teil der einfallenden solaren Strahlung zurück ins Weltall, was zu einer Abkühlung

der darunterliegenden Atmosphäre führt (Albedo-Effekt). Andererseits verringern sie die Emission von terrestrischer Infrarotstrahlung ins Weltall und führen so zu einer Erwärmung der Atmosphäre (Treibhauseffekt). Welcher Effekt überwiegt, hängt von den Eigenschaften der Zirren ab, u.a. der Eiskristallanzahlkonzentration, der Dicke der Wolke und dem Eiswassergehalt. Strahlungstransportrechnungen zeigen, dass optisch dünne Zirren und Kondensstreifen, zumindest im globalen Mittel, einen wärmenden Effekt und optisch dicke Zirren einen kühlenden Effekt haben (Stephens *et al.*, 1990).

Zirren als skalenübergreifendes Phänomen

Die Bildung von Zirren in der Atmosphäre umfasst räumliche Skalen L , die sich um mehrere Größenordnungen unterscheiden: von der synoptischen Skala mit $L \sim 1000$ km bis in den molekularen Bereich mit $L \sim 1$ nm, wenn Wasserdampf auf wachsende Eiskristalle aufgenommen wird. In Abbildung 1.1 wird schematisch dargestellt, auf welchen räumlichen und zeitlichen Skalen Wolkenprozesse, Wolkenstrukturen und atmosphärische Strömungen, welche die Wolkenbildung beeinflussen, typischerweise existieren.

Am unteren Ende der Skalen finden sich die mikrophysikalischen Prozesse, die in der Schemazeichnung als blaue Kästen dargestellt sind und im Folgenden kurz erläutert werden.

Die Nukleation, die Bildung einzelner neuer (pristiner) Eiskristalle aus flüssigen oder an wasserunlöslichen Partikeln (ice nuclei, IN) in der Atmosphäre, steht an vorderster Stelle im Skalendiagramm. Im Gegensatz zur Tropfenbildung in Wasserwolken, die bei wenigen Zehntel Prozent Übersättigung vonstatten geht, nukleieren Eispartikel erst bei viel höheren Übersättigungen von mehreren zehn Prozent. Typische Größen von Aerosolpartikeln, die in die Wolkenbildung eingreifen, bewegen sich im sub-Mikrometer Bereich bis hin zu einigen Mikrometern. Die Zeitskala, auf der die Neubildung von Eis lokal stattfindet, ist meist auf wenige Minuten beschränkt. Flüssige Aerosoltröpfchen, welche beim Überschreiten einer kritischen Gefrierfeuchte homogenen Eiskristalle nukleieren, enthalten im Zirrusniveau neben Wasser meist gelöste Schwefelsäure (H_2SO_4) und organische Komponenten (Murphy *et al.*, 1998). Der Prozess der vollständigen Kristallisation einzelner Tröpfchen läuft dabei sehr schnell ab und ist abhängig von Größe und chemischer Zusammensetzung des Tröpfchens. Bei heterogener Nukleation bildet sich Eis an Oberflächen der IN. Dabei spielen spezielle Strukturmerkmale der Oberfläche, welche die Eisnukleation günstig beeinflussen, eine wichtige Rolle. Homogene und heterogene Nukleation schließen sich nicht gegenseitig aus, sondern können parallel für die Bildung von Eiswolken von entscheidender Bedeutung sein (DeMott, 2002; Haag und Kärcher, 2004). Während die homogene Nukleation als wichtiger Pfad für die Zirrenbildung angesehen wird (Heymsfield und Sabin, 1989; Sassen und Dodd, 1989; Kärcher und Ström, 2003), ist die heterogene Nukleation Gegenstand aktueller Forschung. Bei Zirrenbildung in Temperaturbereichen oberhalb der homogenen Gefrierschwelle oder langsamen Auftrieben wird der heterogenen Nukleation eine wichtige Rolle in der Wolkeninitiation zugeschrieben (DeMott *et al.*, 1997). Oft diskutiert ist z.B. auch der Einfluss von Ruß, der bei der Verbrennung fossiler Brennstoffe entsteht (Kärcher *et al.*, 2007), sowie der Einfluss von Mineralstaub (Archuleta *et al.*, 2005) auf die mikrophysikalische Struktur von Eispartikeln und Wolkeneigenschaften.

Die neugebildeten Eispartikel wachsen durch die Anlagerung von Wasserdampf, dem Prozess der Deposition, an. Dieser beeinflusst die kleinsten, gerade entstandenen Kristalle bis hin zu großen Eispartikeln mit einer typischen Dimension von einigen 100 Mikrometern. Der Wachs-

tumsprozess bestimmt den Massenzuwachs einzelner Kristalle in Zeitbereichen von einigen zehn Minuten, bei sehr kalten Temperaturen und entsprechend geringen Wachstumsraten bis hin zu vielen Stunden (Jensen und Pfister, 2004; Kärcher, 2005).

Aufgrund ihrer Masse werden die Kristalle in einer Zirruswolke vom Schwerefeld der Erde beschleunigt und sinken Richtung Erdboden. Diese Vertikalgeschwindigkeit, die Sedimentationsgeschwindigkeit, wirkt lokalen Aufwärtsgeschwindigkeiten der Atmosphäre entgegen. Große Kristalle können dabei Sedimentationsgeschwindigkeiten von 2 m s^{-1} erreichen (Mitchell und Heymsfield, 2005) und damit typische Falldistanzen von 2 bis 3 Kilometern in Zeitskalen von einigen zehn Minuten überstreichen. Sehr kleine Partikel fallen mit nur wenigen cm s^{-1} , so dass der Sedimentationsprozess die Wolkenstruktur über einen langen Zeitraum beeinflusst.

Treffen Partikel in einer Wolke aufeinander und bleiben aneinander haften, spricht man von Koagulation, im speziellen Fall der Eispartikel von Aggregation. Tritt Koagulation für kleine Partikel $r < 1 \text{ }\mu\text{m}$ aufgrund Brown'scher Bewegung auf, dominiert für größere Eispartikel in Zirren die Aggregation aufgrund differentieller Sedimentation (Westbrook *et al.*, 2004a; Field und Heymsfield, 2003). Große Partikel fallen schneller als kleinere und sammeln diese auf ihrem Weg auf. Details über den Mechanismus, der die Eispartikel verbindet, sind Gegenstand aktueller Forschung und nicht geklärt. Elektrische Kräfte, ein kurzfristiges Anschmelzen der Eisoberflächen durch eine lokale Druckerhöhung beim Stoß, die Existenz einer quasi flüssigen Schicht an der Kristalloberfläche oder ein Sinterungsprozess, bei dem die Oberflächenenergie der stoßenden Partikel minimiert wird, bilden mögliche Erklärungsansätze (Meakin, 1992). Kristalle mit komplexerer Struktur könnten sich auch rein mechanisch verhaken und damit die Kontaktzeit der beiden Eisteilchen verlängern (Field, 1999; Field *et al.*, 2006b). Die Aggregation bildet größere Verbunde aus mehreren Einzelpartikeln mit typischen Dimensionen von einigen Millimetern. Der Prozess trägt zur Niederschlagsbildung und zur vertikalen Verteilung von Eismasse in Zirren bei. Letzteres beeinflusst den Strahlungshaushalt, da die Strahlungsemission der Eiskristalle unter anderem von der Temperatur und damit von der Höhe der Wolke in der Atmosphäre abhängt. Kollisionen zwischen Eiskristallen treten in Zirren deutlich seltener auf, als es für Wassertropfen in warmen Wolken der Fall ist. Die Zeitskala, auf der die Aggregation die Zirrusstruktur beeinflusst, bewegt sich von mehreren Minuten bis zu wenigen Stunden, bevor Kristallaggregate aus der Wolke aussedimentieren.

Größenverteilungen von Eispartikeln in Zirren, typische Dimensionen von Wolkenpartikeln und Wolkenstrukturen sind in Abbildung 1.1 mit gestrichelten blauen Linien dargestellt. Einzelne Eiskristalle, aus denen Zirren zusammengesetzt sind, umfassen üblicherweise einen Größenbereich von einigen Mikrometern bis hin zu einigen Millimetern. Die Lebensdauer der Kristalle, nicht notwendigerweise der gesamten Wolke, bewegt sich zwischen Minuten, z.B. in Leezirren wenn Eis nach der Bildung im absteigenden Ast der Welle rasch sublimiert, und einem Tag, für sehr kleine Partikel mit Durchmessern von wenigen Mikrometern in Zirren an der tropischen Tropopause (Luo *et al.*, 2003; Shibata *et al.*, 2007). Der Begriff 'einzelner Zirrus' (SC) in Abbildung 1.1 umfasst konvektive Elemente von etwa ein bis zwei Kilometern Ausdehnung, die einen Grundbaustein von cirrus uncinus^{1,3} darstellen (Heymsfield, 1975), einzelne Leezirren (horizontale Ausdehnung typischerweise einige Wellenlängen der orographischen Störung), gealterte Kondensstreifen (Breite von mehreren Kilometern), einzelne nicht zusammenhängende Zirrusstrukturen, die sich in-situ bilden mit horizontalen Erstreckungen von einigen wenigen bis zu

^{1,3}cirrus uncinus - Zirruswolken, die eine hakenförmige Struktur aufweisen.

Eigenschaft	Mittelwert	Bereich	INCA NH	INCA SH
Dicke	1.5 km	0.1 - 8 km		
Höhe	9 km	4 - 20 km		
Eiskristallkonzentration	30 L ^{-1*}	10 ⁻⁴ - 10 ⁴ L ⁻¹	2230 L ⁻¹	1480 L ⁻¹
Eismassengehalt	0.025 g m ⁻³	10 ⁻⁴ - 1.2 g m ⁻³	0.008 g m ⁻³	0.0081 g m ⁻³
Dimension der Kristalle	250 μm*	1 - 8000 μm		

Tabelle 1.1: *Eigenschaften von Zirruswolken (Dowling und Radke, 1990). In der rechten Hälfte sind Medianwerte der Messungen während der INCA Kampagne, jeweils für die Nord- und Südhemisphäre getrennt, aufgetragen (Gayet et al., 2004).*

einigen zehn Kilometern sowie ausgedehnte Gewitteramben (einige zehn bis hundert Kilometer Ausdehnung). Verdichten sich einzelne Wolken und überziehen den gesamten Himmel vor einer herannahenden Warmfront, spricht man von Cirrostratus-Bewölkung. Derartige Wolkenfelder werden von atmosphärischen Strömungen auf der synoptischen Skala bestimmt und schließen damit den Skalenbereich für Wolkenstrukturen am oberen Ende ab. Einen Überblick über mittlere Eigenschaften von Zirren geben z.B. Dowling und Radke (1990) oder Gayet *et al.* (2004), zusammengefasst in Tabelle 1.1.

Die Wolkenbildung findet eingebettet in die atmosphärische Zirkulation statt. Dabei stehen Wolkenprozesse und Dynamik in Wechselwirkung. Hebungsvorgänge in Wettersystemen auf der synoptischen Skala sind Regionen, in welchen sich Zirrenfelder ausbilden. Haag und Kärcher (2004) zeigen, dass Temperaturfluktuationen auf der Mesoskala die Eigenschaften der neu gebildeten Zirren wesentlich mitbestimmen. Konvektive Systeme von Gewitterzellen transportieren Wasserdampf und Aerosolpartikel in den Bereich der oberen Troposphäre und fördern dort die Eisbildung (Jensen und Ackerman, 2006). Mesoskalige Aufwindssysteme, wie z.B. bei Schwellen, sind bevorzugte Regionen, in denen sich Zirren bilden. Sassen und Campbell (2001) zeigen in einer Klimatologie von Zirren mittlerer Breiten, dass über 25% der beobachteten Wolken in Gebieten großräumigen Absinkens entstehen. Mesoskalige Prozesse sind die Ursache für ein Auslösen der Zirrenbildung unter solchen Bedingungen. Atmosphärische Turbulenz hat einen Einfluss hinunter bis zu den Skalen der mikrophysikalischen Vorgänge in Eiswolken, bevor die Energie der turbulenten Strukturen im Dissipationsbereich in Wärme umgewandelt wird. Durch die Freisetzung latenter Wärme und strahlungsbedingter Erwärmungsraten, trägt die Eisphase ihrerseits zur Produktion kinetischer Energie turbulenter Fluktuationen bei (Starr und Cox, 1985).

Eiswolken greifen in den Wasserhaushalt der Troposphäre ein und tragen zur Bildung von Niederschlag bei. So zeigen Herzegh und Hobbs (1980), dass der von Bergeron (1950) für orographischen Niederschlag postulierte 'seeder-feeder' Mechanismus, auch bei der Bildung von Regengebieten in Warmfronten greift. Hierbei sedimentieren Eispartikel aus höhergelegenen Eiswolken ('seeder-Wolke') in darunterliegende Wolken mit flüssigen Wassertropfchen ('feeder-Wolke'). Durch den Bergeron-Findeisen Prozess können die Eisteilchen auf Kosten der Wassertropfen, bedingt durch den geringeren Sättigungsdampfdruck über Eis relativ zu unterkühltem Wasser, rasch anwach-

*Diese Werte sind nach heutiger Sicht nicht notwendigerweise repräsentativ, sondern entsprechen eher unteren (Konzentration) bzw. oberen (Dimension) Grenzen.

sen und zur Niederschlagsbildung beitragen. Herzegh und Hobbs (1980) stellen fest, dass die Eispartikel sehr wahrscheinlich durch diffusives Wachstum und Aggregation in den Eiswolken zu entsprechenden Größen anwachsen, um in die tiefergelegenen Bereiche zu gelangen. Der Ursprung und die Entwicklungsgeschichte großer Eispartikel in der ‘seeder-Wolke’ sind weitgehend unerforscht. Offene Fragen sind z.B. jene nach den Regionen in einem Zirrus, in welchen Aggregation verstärkt auftritt, und deren Modifikation durch atmosphärische Randbedingungen.

Messungen von Zirren

Das aufkommende Bewusstsein über die Bedeutung von Eiswolken im Klimasystem hat zu einer Reihe von Beobachtungsstudien geführt. Die systematische Erforschung begann in den frühen 80er Jahren mit dem ISCCP^{1.4} Projekt (Rossow und Schiffer, 1991), welches später in GEWEX^{1.5} integriert wurde. Bei ISCCP werden mit Hilfe von Satellitendaten die Verteilung und wichtige physikalische Eigenschaften von Wolken global beobachtet. Allerdings unterliegt die Fernerkundung von Eiswolken aus dem All Schwierigkeiten aufgrund von Wolkeninhomogenitäten und der geringen optischen Dicke τ von Zirren. So werden optisch dünne ($\tau \lesssim 0.1$) Eiswolken mit der verwendeten Sensorik nicht detektiert (Liao *et al.*, 1995). Bodengestützte oder satellitengetragene LIDAR Messungen (LITE^{1.6}), idealerweise kombiniert mit nahezu zeitgleichen Radarmessungen (CloudSat, CALIPSO)^{1.7}, können diese optisch dünnen Wolken detektieren.

Neben den Fernerkundungsverfahren (LIDAR, Radar, Strahlungsmessungen) werden in Feldmesskampagnen in-situ Messgeräte auf Forschungsflugzeugen verwendet, um mikrophysikalische Eigenschaften der Zirren (Anzahlkonzentration von Eispartikeln, Form und Größenverteilung der Eiskristalle) zu vermessen. Beispiele für derartige Anstrengungen sind unter anderem FIRE^{1.8} (Cox *et al.*, 1987), das europäische Projekt ICE^{1.9} (Raschke, 1990), INCA (Gayet *et al.*, 2004) und die ARM IOPs^{1.10}. Im Rahmen von ARM wurden einige gut ausgestattete Beobachtungsstandorte eingerichtet, die mit diversen passiven und aktiven Fernmesssystemen instrumentiert sind. Einer der Standorte befindet sich in der Nähe von Lamont im Bundesstaat Oklahoma (USA). Dieses sogenannte Cloud and Radiation Testbed (CART) ist immer wieder Ausgangspunkt für flugzeuggestützte Messkampagnen. Die Ergebnisse von Feldkampagnen sind lokal stark begrenzte Momentaufnahmen von Wolkenstrukturen und können so nur Teilaspekte von Zirrusseigenschaften liefern. Viele Ideen, die mikrophysikalische Prozesse in Zirren beschreiben, stammen aus Labormessungen. Insbesondere können dabei für Feldmessungen schwer zugängliche Messgrößen untersucht werden (DeMott, 2002).

^{1.4}ISCCP - International Satellite Cloud Climatology Project

^{1.5}GEWEX - Global Energy and Water Cycle Experiment (<http://www.gewex.org/gcss.html>)

^{1.6}LITE - Lidar In-Space Technology Experiment, 1996. Bei LIDAR (Light detection and ranging) Messungen werden Partikelkonzentrationen durch die Detektion des zurückgestreuten Anteils eines vorher ausgesandten Laserpulses gemessen.

^{1.7}CloudSat und CALIPSO (Cloud-Aerosol Lidar and Infrared Pathfinder Satellite Observations) sind zwei Umweltsatelliten, die ein Radar- bzw. ein Lidarmesssystem und einen Sensor im IR tragen und in einem Verbund mit drei weiteren Satelliten (A-Train) in Formation auf einer sonnensynchronen Umflaubahn fliegen.

^{1.8}FIRE - First ISCCP Regional Experiment

^{1.9}ICE - International Cirrus Experiment

^{1.10}ARM IOP - Atmospheric Radiation Measurement Intensive Operational Period

1.2 Modellierung von Zirren

Aufgrund der schweren Zugänglichkeit der oberen Troposphäre für direkte Messmethoden sind Messungen dort auf Fernerkundungsverfahren oder räumlich stark begrenzte in-situ Messmethoden beschränkt. Die Modellierung von Zirren bietet die Möglichkeit, eine Synthese bestehender Erkenntnisse aus Labor- und Feldmessungen zu schaffen. Sie erlaubt es, Hypothesen zu überprüfen, zu modifizieren oder neue Hypothesen zu entwickeln. Vorhandene Datensätze aus Feldmesskampagnen können zur Validierung der bestehenden Modellansätze herangezogen werden.

Die Modellierung von Zirren bewegt sich von zwei unterschiedlichen Richtungen auf das skalenübergreifende Phänomen Zirrus zu. GCM^{1.11}, die geeignet sind, die Rolle von Zirren im Klimasystem der Atmosphäre auf globaler Skala zu simulieren, werden in immer höheren räumlichen und zeitlichen Auflösungen betrieben und ermöglichen es, den Einfluss von Zirrenfeldern auf die atmosphärische Zirkulation und das Klima mit wachsender Detailtreue zu bewerten. Bestehende diagnostische (Sundqvist *et al.*, 1989) oder prognostische Wolken schemata (Tiedtke, 1993) sind an die Mikrophysik von Wasserwolken angepasst und vereinfachen die Bildung der Eisphase zu stark. Neue Schemata für Eiswolken werden entwickelt, um bestehende Defizite abzubauen (Kärcher und Burkhardt, 2008). Die Entstehung von Wolken, insbesondere die Nukleation von Eis in Zirren, ist aber immer noch hochgradig parameterisiert. Abbildung 1.1 zeigt im oberen rechten Bereich den Skalenbereich, der von GCM-Simulationen typischerweise abgedeckt wird. Die offenen Ränder der Modellsymbole deuten an, dass die hier gewählten Grenzen für die räumliche und zeitliche Dimension nicht als scharf abgegrenzt gesehen werden dürfen. Am unteren Ende der Skala steht die Box-Modellierung von Zirren. Hier wird in einem abgeschlossenen Luftvolumen die Initiierung und Lebensdauer von Eispartikeln explizit berechnet. Die Beschränkung auf ein isoliertes Volumen erlaubt es, mikrophysikalische Prozesse mit einem hohen Grad an Genauigkeit zu behandeln. Diese Modelle sind ein geeignetes Werkzeug, wichtige Einflussfaktoren bei der Wolkenbildung zu identifizieren. Fehlendes Grundlagenwissen stellt hier die Limitierung der prozess-orientierten Beschreibung dar.

Die Entwicklung von Zirren in der Atmosphäre findet als stark gekoppeltes System zwischen Dynamik, Strahlung und Mikrophysik (Gultepe und Starr, 1995) statt. Um realistische Simulationen durchführen zu können, bedarf es also zumindest eines 2D Modells, in dem die interne Dynamik (Auf- und Abwindzonen) in Zirren und ihre Wechselwirkung mit mikrophysikalischen Prozessen berücksichtigt werden können. Solche wolkenauflösenden Modelle (CRM^{1.12}) schließen die Lücke zwischen den Box- und GCM-Modellansätzen in Abbildung 1.1. In einer Pionierarbeit haben Starr und Cox (1985) ein 2D Zirrusmodell entwickelt, wobei die mikrophysikalischen Eigenschaften des Zirrus aber über messbare Größen wie z.B. dem Eiswassergehalt parameterisiert waren. Dieses Modell konnte bereits zeigen, wie wichtig die Wechselwirkung zwischen Strahlungsfeld und Eisphase für die interne Dynamik einer Eiswolke ist.

Als Weiterentwicklung der Boxmodelle haben Jensen *et al.* (1994) ein 1D Modell entwickelt, das größen aufgelöst Aerosol- und Eisbildungsprozesse berücksichtigt. Die Spektren der Eisphase werden dabei hinsichtlich ihrer Masse oder ihres Radius in eine endliche Anzahl von einheitlichen Größenklassen unterteilt. Die Anzahlkonzentrationen der einzelnen Eisklassen werden

^{1.11}GCM - General Circulation Model

^{1.12}CRM - Cloud Resolving Model

dann analog zur Gasphase als kontinuierliche Funktionen betrachtet. Größenaufgelöste Informationen über die Eisphase sind z.B. wichtig, um den Sortierungseffekt von Eiskristallen aufgrund unterschiedlicher Sedimentationsgeschwindigkeiten zu berücksichtigen. Das Modell von Jensen *et al.* (1994) berechnete im Vergleich zu Messungen realistische Eiswassergehalte, jedoch war die Eiskristallanzahlkonzentration zu gering. Jensen *et al.* (1996) führten Studien über ultradünne Zirren an der tropischen Tropopause durch. Allerdings wird die interne Dynamik in einem 1D Zugang nicht beschrieben. Dies ist wichtig, da die Bildung von Eiswolken stark vom Sättigungsverhältnis bezüglich Eis und damit von Fluktuationen im Vertikalwind abhängt (Starr und Quante, 2002). Später wurde das ursprünglich eindimensionale Modell auf ein flexibles mehrdimensionales ausgeweitet. Weitere mehrdimensionale Modelle mit spektraler Eismikrophysik finden sich bei Lin (1997), Khvorostyanov und Sassen (1998) und Gu und Liou (2000).

In jüngster Zeit werden CRM-Simulationen im Sinne von Grobstrukturrechnungen (LES^{1.13}) durchgeführt. Hierbei werden Gitterpunktabstände verwendet ($\sim 20 - 100$ m), die es erlauben, einen Großteil der internen Dynamik in Zirren explizit aufzulösen (Marsham und Dobbie, 2005). Aufgrund ihres geringen Rechenzeitaufwandes werden für diese Studien häufig 'Bulk-Ansätze' wie im Modell von Starr und Cox (1985) verwendet, in welchen nur Momente der Eispartikelgrößenverteilung wie Anzahlkonzentration und Eiswassergehalt prognostiziert werden (Spichtinger und Gierens, 2008). Über die Form der Größenverteilung müssen im Vorhinein Annahmen getroffen werden. Der 'Bulk-Ansatz' ermöglicht es, eine hohe Anzahl von Simulationen durchzuführen, und erlaubt es, Sensitivitätsstudien in Anbetracht des umfangreichen Parameterraums atmosphärischer Bedingungen bei der Zirrenbildung und Entwicklung durchzuführen, wie z.B. in den Studien von Liu *et al.* (2003a). Erst kürzlich haben Shirgaonkar und Lele (2006) die Rolle unterschiedlicher atmosphärischer Parameter bei der Entwicklung von Kondensstreifen mit einem LES Modell untersucht. In der Arbeit wird ein Euler-Lagrange'scher Ansatz verwendet, in dem die Entwicklung einer hohen Anzahl von einzelnen Eispartikeln simuliert wird. Die Studien sind aber lediglich auf die Jet- bis Wirbelphase (einige Sekunden bis wenige Minuten nach der Bildung) und auf pures diffusives Wachstum einer vorbestimmten Anzahl von Eispartikeln beschränkt.

1.3 Ziele der Arbeit

Ein Hauptziel der vorliegenden Arbeit ist der *Aufbau eines mehrdimensionalen, wolkenauflösenden Modellsystems*, das es erlaubt, realitätsnahe Studien zur Bildung und Entwicklung von Zirren durchzuführen. Das System soll im Sinne von Grobstruktursimulationen arbeiten und diese mit prozess-orientierter, detaillierter Behandlung der Aerosol- und Eisphase unter der Berücksichtigung von Strahlungswechselwirkung kombinieren. So soll die Lücke zwischen der Boxmodellierung und der Verwendung von Bulk-Ansätzen in LES Modellen geschlossen werden. Durch den prozess-orientierten Ansatz können neueste Erkenntnisse aus Theorie, Messung und Laborstudien direkt in die mehrdimensionalen Simulationen einfließen. Wie in Abbildung 1.1 mit der roten Box angedeutet, sollen Rechnungen auf der Skala einzelner Zirren in hoher Auflösung durchgeführt werden.

Einen entscheidenden Aspekt zur Zirrensimulation trägt die Verwendung Lagrange'scher Ein-

^{1.13}LES - Large Eddy Simulation

zelpartikelverfolgung zur Beschreibung der Eisphase bei, die bisher nicht in mehrdimensionalen wolkenauflösenden Modellen dieser Komplexität zur Anwendung kam. Hierbei wird das System Luft-Eiskristalle einer Zirruswolke als disperse Zweiphasenströmung angesehen. Die eine Phase bilden die Luftmoleküle in der Gasphase, in der die Eiskristalle als zweite, feste Phase deutlich unterscheidbar vorkommen. Nimmt man typische Werte für den Atmosphärenzustand in der Bildungsregion von Zirren (z.B. $T = 220$ K; $p = 300$ hPa) und eine Eiskristallkonzentration von 1 cm^{-3} an, dann trifft in einem Luftvolumen von 1 cm^3 ein Eiskristall auf $\sim 10^{19}$ bis 10^{20} Luftmoleküle. Es erscheint daher sinnvoll, das Fluid Luft makroskopisch als Kontinuum zu beschreiben, während die Eiskristalle durch eine endliche Menge diskreter Einzelteilchen repräsentiert werden. Die Verfolgung einzelner Eiskristalle ergibt gegenüber bestehenden Bulk- oder Bin-Modellen neue Analysemöglichkeiten bei der Simulation von Zirruswolken, die fundierte Aussagen über Nukleationswege, Wachstumshistorien und Zusammensetzung der Eispartikel ermöglichen. Der Euler-Lagrange'sche Ansatz vermeidet numerische Artefakte (z.B. numerische Diffusion) in Bulk- oder sektionalen Modellen, welche auch mit immer feineren Modellauflösungen und hochentwickelten Parameterisierungen nicht umgangen werden können.

Bei der Entwicklung des neuen Modellsystems muss besonderes Augenmerk auf die Validierung gerichtet werden. Neben dem Test der Beschreibung der einzelnen Prozesse wird im Rahmen dieser Arbeit ein geeigneter Datensatz zur Validierung des Modells als Fallstudie aufgebaut. Simulationen werden mit den Ergebnissen der Messungen verglichen. Für die Validierung werden Messungen im Rahmen der ARM IOP ausgewählt. Hier wird umfangreiches Datenmaterial zur Verfügung gestellt, das neben einer Reihe von passiven und aktiven Fernmesssystemen auch flugzeuggetragene in-situ Messungen in einem synoptisch generierten Zirrus beinhaltet. Diese zusätzlichen Informationen über Form und mikrophysikalische Eigenschaften der Eisphase sind wichtige Bausteine für die numerische Simulation.

Für den Prozess der Aggregation stehen für den Euler-Lagrange'schen Ansatz bis jetzt noch keine Aggregationsschemata zur Verfügung. Im Einzelpartikelbild können die Trajektorien und Sedimentationsgeschwindigkeiten einzelner Kristalle herangezogen werden, um einen wichtigen Schritt in Richtung prozess-orientierter Modellierung der Eiskristallaggregation durch differentielle Sedimentation zu gehen. Ein weiteres Hauptziel der Arbeit besteht darin, derartige Aggregations-Algorithmen zu entwickeln und damit gezielt *Studien zum Aggregationsprozess* in Zirren durchzuführen. Ausgehend von der Fallstudie und zugehörigen Sensitivitätsstudien sollen folgende offene Fragen untersucht werden: In welchen Regionen eines Zirrus tritt Aggregation verstärkt auf? Wie wird der Aggregationsprozess initiiert, was hält ihn am laufen? Gibt es atmosphärische Randbedingungen, welche diesen Ablauf modifizieren?

Mit dieser Arbeit soll eine Basis geschaffen werden, um durch weiterführende Studien den Kenntnisstand über Zirren zu vertiefen und damit einen wichtigen Faktor im Klimasystem der Erde besser zu beschreiben.

Gliederung der Arbeit

In **Kapitel 2** wird das entwickelte Modellsystem vorgestellt und die zugrunde liegende Physik erläutert. Desweiteren werden idealisierte Simulationen zur Anzahl der benötigten Simulationsteilchen, dem Einfluss der Dimensionalität auf die Turbulenz und zur internen Dynamik von Zirren präsentiert. **Kapitel 3** befasst sich mit der Validierung des Mikrophysikmoduls LCM anhand einer Boxmodellstudie und anhand eines internationalen Modellvergleichs im Rahmen

der GEWEX GCSS WG2. Aggregationsalgorithmen für den Euler-Lagrange'schen Modellansatz werden in **Kapitel 4** vorgestellt. In **Kapitel 5** wird das EULAG-LCM anhand einer realen Fallstudie mit Messdaten verglichen. In einer Sensitivitätsstudie wird die Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von den getroffenen Annahmen für meteorologische und numerische Parameter untersucht. Im dritten Teil dieses Kapitels kommen die erweiterten Analysemöglichkeiten des EULAG-LCM zur Anwendung, um die Aggregation in Zirren anhand der Modellsimulationen eingehender zu untersuchen. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse und einen Ausblick auf mögliche Anschlussstudien gibt **Kapitel 6**.

Kapitel 2

Das Modellsystem EULAG-LCM

In diesem Kapitel wird das Modellsystem EULAG-LCM (Lagrangian Cirrus Module) vorgestellt und die zugrunde liegende Physik erläutert. Weiterhin werden Aggregations-Algorithmen entwickelt, die in einem Euler-Lagrange'schen Kontext angewandt werden können.

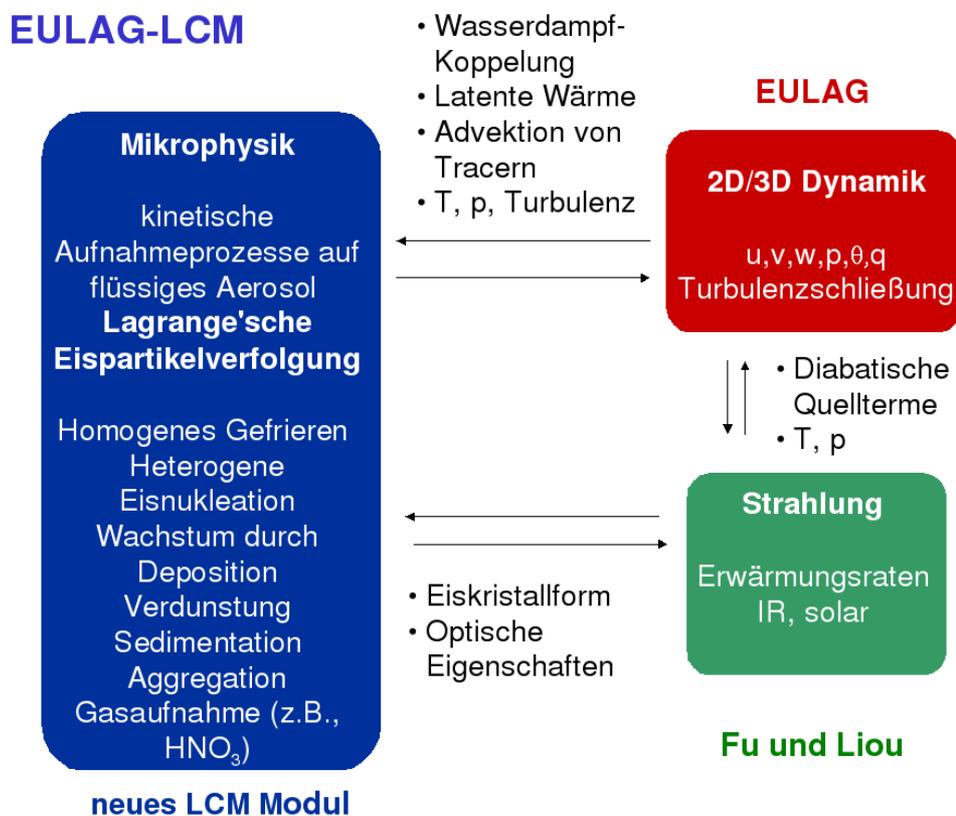


Abbildung 2.1: Schematische Übersicht des Modellsystems EULAG-LCM.

Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte EULAG-LCM ist ein wolkenauflösendes Modellsystem, welches die Bildung und Entwicklung von Zirren behandelt. Es ist für reine Eiswolken konzipiert, insbesondere für diejenigen, die sich in Temperaturbereichen unterhalb von 235 K bilden. In diesen lässt sich das Vorhandensein von reinem Wasser in Form unterkühlter Tröpfchen ausschließen. Wie Abbildung 2.1 zeigt, ist das EULAG-LCM ein stark gekoppeltes System, bei dem Prozesse in der Atmosphäre auf verschiedenen Zeit- und Längenskalen interagieren. Wie bereits in Abbildung 1.1 verdeutlicht, tragen zur Zirrenbildung dynamische Prozesse auf Skalen von bis zu ~ 100 km Länge bei. Dies geschieht, wenn großräumige, synoptische Hebungprozesse Luftmassen abkühlen oder mesoskalige Fluktuationen, wie Schwerewellen von einigen Kilometern Länge auftreten. Aber auch Fluktuationen kleinskaliger, isotropischer Turbulenz bis hin zu Mechanismen im sub-Millimeterbereich, wenn Wassermoleküle von winzigen Aerosoltröpfchen oder Eiskristallen aufgenommen werden, beeinflussen die Zirrenbildung. Drei untereinander gekoppelte Bausteine bilden das Modellsystem:

Dynamik Hierunter fallen Strömungs- und Transportvorgänge in der Atmosphäre, sowie deren thermodynamischer Zustand. Im EULAG-LCM wird dieser Teil mit dem Modell EULAG (Grabowski und Smolarkiewicz, 2002) berechnet (siehe Kapitel 2.2).

Mikrophysik Hier werden die Prozesse, welche die Aerosol- und Eiskristallpopulation betreffen, simuliert. Für das Aerosol sind dies das Wachstum flüssiger Aerosoltröpfchen und deren homogenes Gefrieren, heterogene Eiskerne sowie die Aufnahme von Spurengasen. Für die Eisphase werden Wachstum, Verdunstung, Sedimentation, Spurengasaufnahme und Aggregation der Eispartikel berücksichtigt. Dieser Teil umfasst das im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelte Modul EULAG-LCM (siehe Kapitel 2.3).

Strahlung Dieser Bereich behandelt die Wechselwirkung elektromagnetischer Wellen im solaren und infraroten Spektrum mit der Atmosphäre und ihren Bestandteilen, wie Spurengase, Aerosole und Wolkenpartikel (siehe Kapitel 2.4).

2.1 Operator-Splitting

Alle in Abbildung 2.1 aufgeführten Prozesse interagieren und laufen simultan in einem Luftpaket ab. Im numerischen Modell der vorliegenden Komplexität ist es nicht möglich, alle Vorgänge gleichzeitig zu lösen, weshalb einzelne Abschnitte sequentiell bearbeitet werden. Das heißt, die Variablen aus anderen Bereichen werden konstant gehalten, während ein bestimmter Prozess in der Zeit fortgeführt wird. Bevor in den folgenden Abschnitten die physikalischen Prozesse der EULAG-LCM Module im einzelnen vorgestellt werden, soll hier kurz der numerische Ansatz des 'Operator-Splitting' zum Lösen der gekoppelten Gleichungssysteme vorgestellt werden.

Abbildung 2.2 zeigt schematisch, in welcher Reihenfolge die einzelnen Prozesse in EULAG-LCM abgearbeitet werden: Es werden unterschiedliche Lösungsschemata und Zeitschrittunterteilungen für unterschiedliche Komponenten verwendet, die für den einzelnen Vorgang am besten geeignet sind. So benötigt das homogene Gefrieren, das besonders sensitiv auf Änderungen in der Wasserdampfkonzentration und der Temperatur reagiert, wesentlich kleinere Zeitschritte als der dynamische Zeitschritt Δt des EULAG.

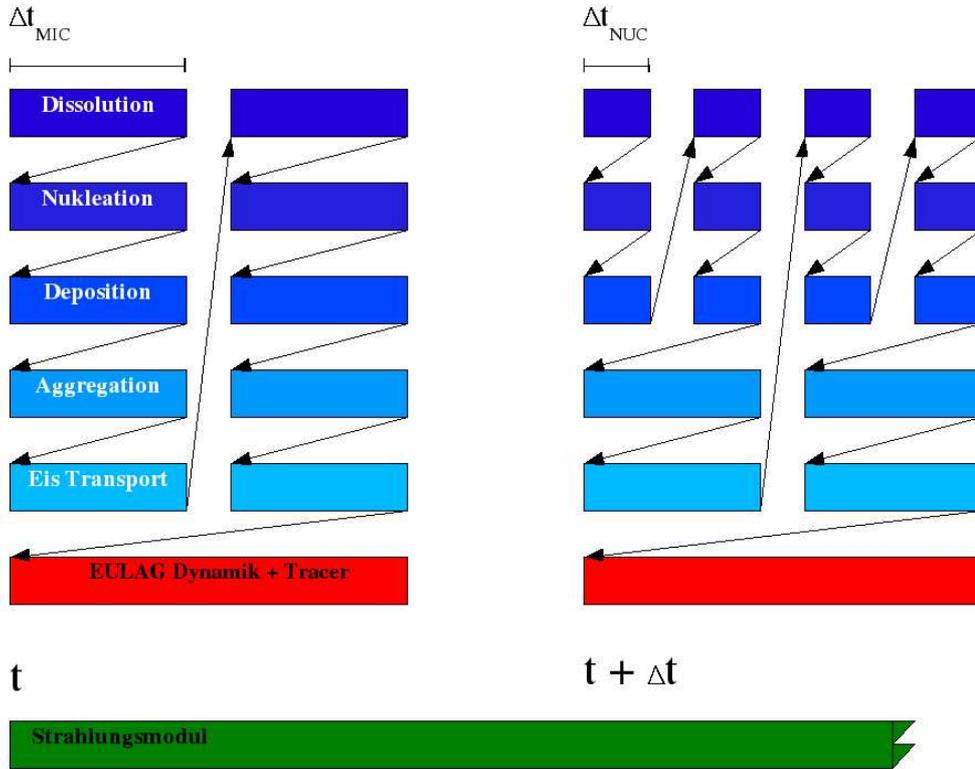


Abbildung 2.2: Das Operator-Splitting Schema des EULAG-LCM. Die Prozesse werden in der Sequenz $Dissolution \rightarrow Nukleation \rightarrow Deposition \rightarrow Aggregation \rightarrow Transport$ von Eis \rightarrow EULAG Dynamik abgearbeitet. Der dynamische Zeitschritt Δt ist im Normalfall in kleinere Unterschritte Δt_{MIC} im Mikrophysikmodul unterteilt. Alternativ können die Prozesse $Dissolution \rightarrow Nukleation \rightarrow Deposition$ nochmals in einen Unterschritt Δt_{NUC} aufgespalten werden, falls Nukleationsereignisse auftreten. Die Koppelung an das Strahlungsmodul erfolgt nicht in jedem Zeitschritt Δt ; strahlungsbedingte Raten werden in größeren, frei wählbaren Abständen $\Delta t_{RAD} = L\Delta t (L \geq 1)$ erneut berechnet.

Ein Zeitschritt des EULAG-LCM läuft folgendermaßen ab:

Während die Variablen des dynamischen Modells (rot dargestellt) zum Zeitpunkt t festgehalten werden, startet die sequentielle Abarbeitung der mikrophysikalischen Prozesse (blau). Der benutzte mikrophysikalische Zeitschritt wird in äquidistante Einheiten Δt_{MIC} eingeteilt, um eine höhere Genauigkeit bei der Simulation zu erreichen. Für eine natürliche Zahl N gilt dann:

$$\Delta t = N\Delta t_{MIC}. \quad (2.1)$$

Nach jedem Prozess im Mikrophysikmodul werden Felder wie Aerosol-, Eispartikel- und Wasserdampfkonzentration verändert und stehen für den nächsten Abschnitt zur Verfügung. Die Größen des dynamischen Modells bleiben aber unverändert. Nach Ablauf der Sequenz für das Mikrophysikmodul sind die entsprechenden Größen zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ bekannt, und die Dynamik wird unter Einbezug dieser veränderten Variablen nachgezogen. Sollte in einzelnen Gebieten der Nukleationsprozess, also das Entstehen neuer Eiskristalle, wichtig sein, wird innerhalb des Mikrophysikmoduls der Zeitschritt für die Prozesse Aerosolwachstum, Nukleation und

Deposition nochmals unterteilt, so dass wiederum für eine natürliche Zahl M gilt:

$$\Delta t_{MIC} = M \Delta t_{NUC}. \quad (2.2)$$

Dies ist auf der rechten Seite in Abb. 2.2 zu sehen. Das Strahlungsmodul wird in der Regel nicht zu jedem Zeitschritt Δt aufgerufen. Die dort berechneten Strahlungsgrößen werden jeden L -ten dynamischen Zeitschritt erneuert. Die Wahl von L kann für jede Simulation unterschiedlich gewählt sein. Ein beispielhafter Simulationsaufbau wird in Kapitel 3.1 gegeben.

2.2 Dynamik

2.2.1 EULAG

Die Dynamik des EULAG-LCM basiert auf dem anelastischen, nicht-hydrostatischen Modell EULAG (Grabowski und Smolarkiewicz, 2002). Unter Berücksichtigung der Feuchte lauten die Bewegungsgleichung und thermodynamische Gleichung

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} + f\mathbf{k} \times \mathbf{u}' = -\nabla \left(\frac{p'}{\bar{\rho}} \right) + \mathbf{g} \frac{\theta'_d}{\bar{\theta}} + \mathbf{D}\mathbf{u} \quad (2.3)$$

$$\frac{d\theta'}{dt} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \theta_e + \mathbf{D}\theta + Q_R + Q_H. \quad (2.4)$$

Hier beschreibt \mathbf{u} den Windvektor, p den atmosphärischen Druck, ρ die Dichte von Luft und θ die potentielle Temperatur; \mathbf{g} ist der Vektor der Erdbeschleunigung und f der Coriolisparameter, wobei \mathbf{k} ein Einheitsvektor in vertikaler Richtung ist. Die Variablen $\bar{\theta}$ und $\bar{\rho}$ beziehen sich auf ein anelastisches Hintergrundprofil, für das gilt:

$$\nabla \cdot (\bar{\rho}\mathbf{u}) = 0. \quad (2.5)$$

Das Subskript e bezieht sich auf einen zusätzlich definierten Umgebungszustand, der nicht zwangsläufig in anelastischer Balance sein muss. Er wird aus Gründen der numerischen Effizienz eingeführt. Abweichungen von diesem Umgebungszustand werden mit einem Strich gekennzeichnet, so dass

$$\theta' = \theta - \theta_e. \quad (2.6)$$

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u} - \mathbf{u}_e. \quad (2.7)$$

Mit \mathbf{D} werden viskose Kräfte für die entsprechenden Variablen dargestellt. Die turbulenten Diffusionskoeffizienten in \mathbf{D} werden über einen prognostischen Zugang mit Hilfe der turbulent kinetischen Energie (TKE) berechnet. In (2.4) steht Q_R für den strahlungsbedingten diabatischen Quellterm. Das Freisetzen latenter Wärme bei Wachstumsprozessen von Eisparkeln wird durch Q_H ausgedrückt. Q_H und die "density potential temperature" θ_d (siehe Abschnitt 2.2.3) im Auftriebsterm von (2.3) drücken den Einfluss des Wasserdampfes auf die Bewegungsgleichungen aus (Emanuel, 1994). Die Kontinuitätsgleichung für das Wasserdampf-mischungsverhältnis q_v ist,

$$\frac{dq_v}{dt} = \mathbf{D}q_v - Q_{DEP} - Q_{DIS}. \quad (2.8)$$

Senken ergeben sich hier, wenn Wasserdampf auf Eisteilchen (Q_{DEP}) oder auf Aerosole aufgenommen wird (Q_{DIS}).

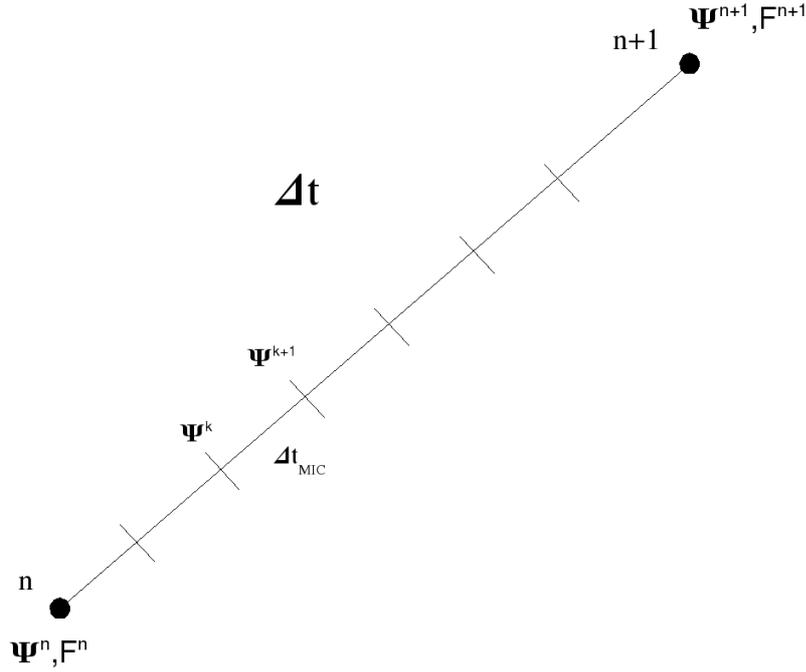


Abbildung 2.3: Die Antriebsterme F_i^{n+1} zum Modellzeitpunkt $n + \Delta t$ für das semi-implizite Advektionsschema des EULAG werden als Mittel über die kürzeren mikrophysikalischen Zeitschritte Δt_{MIC} gebildet.

Mischungsverhältnisse von chemischen Komponenten der Aerosole werden als Tracer advehiert.

$$\frac{dq_i}{dt} = \mathbf{D}_{q_i}. \quad (2.9)$$

2.2.2 Advektion

Werden Mischungsverhältnisse q transportiert (Wasserdampf, Spurengase, Aerosol), ist es wichtig, dass das Advektionsschema des Modells positiv definit ist. Das heißt, q darf keine unphysikalischen, negative Zahlen annehmen. Der MPDATA Algorithmus (Smolarkiewicz und Margolin, 1998) des EULAG erfüllt diese Voraussetzung und lässt sich an gewünschte Genauigkeiten anpassen. In der Schreibweise von Smolarkiewicz und Margolin (1998) lautet das Schema des impliziten Verfahrens für den Vektor der Variablen Ψ (θ', \mathbf{u}):

$$\Psi_i^{n+1} = LE_i(\tilde{\Psi}) + 0.5h\mathbf{F}_i^{n+1}; \quad (2.10)$$

LE bezeichnet hier eine vereinfachte Schreibweise für den Transportoperator, \mathbf{F} die entsprechenden Antriebsterme der einzelnen Variablen und $\tilde{\Psi} \equiv \Psi_i^n + 0.5\Delta t\mathbf{F}_i^n$; i und n sind räumliche und zeitliche Indizes. Eine fundierte Abhandlung zum Algorithmus findet sich in den oben genannten Referenzen. Wichtig für das gekoppelte System EULAG-LCM sind die Antriebsterme F_i . Zum Lösen des impliziten Verfahrens (2.10) wird F_i^{n+1} zum neuen Zeitpunkt $n+1$ benötigt. Es werden insbesondere auch die Antriebsterme aus den expliziten Berechnungen des Mikrophysikmoduls benötigt. Folgt man der Idee von Grabowski und Smolarkiewicz (2002), können diese expliziten Terme als Mittelwerte über die mikrophysikalischen Zeitschritte Δt_{MIC} bzw. Δt_{NUC} gewonnen

werden, wie in Abbildung 2.3 gezeigt. Der Zeitschritt Δt ist in mehrere kleinere Zeitschritte Δt_{MIC} unterteilt. Während der Integration vom alten Zeitpunkt n zum neuen Zeitschritt $n + 1$ durchläuft der Variablenvektor der mikrophysikalischen Größen mehrere Zwischenschritte Ψ^k . Die resultierenden Antriebsterme zu den Zwischenschritten ergeben sich zu F^k . Mit (2.1) gilt dann:

$$\langle F \rangle_i^{n+1} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} F^k. \quad (2.11)$$

Die Quellterme für das Freisetzen latenter Wärme und jene für strahlungsbedingte Erwärmungsraten können mit Hilfe expliziter Verfahren berechnet werden. Für den impliziten Algorithmus (2.10) kann der entsprechende Antriebsterm zum neuen Zeitpunkt $n + 1$ aus (2.11) gewonnen werden.

2.2.3 Virtuelle potentielle Temperatur für Wolken

Enthält ein Luftpaket Wasserdampf und Wolkenpartikel, ändert sich dessen Dichte und damit der Auftrieb, den das Paket erfährt. Enthält das Luftpaket nur Wasserdampf, kann die virtuelle potentielle Temperatur eingeführt werden. Die virtuelle Temperatur T_v ist jene, die ein trockenes Luftpaket hätte, wenn es gleiche Dichte und Druck wie das feuchte Luftpaket aufweisen würde:

$$T_v = T(1 + \epsilon q_v), \quad (2.12)$$

wobei $\epsilon = 0.61$ das Verhältnis der molaren Massen von Wasserdampf und trockener Luft ist und q_v die spezifische Feuchte. Sind auch Wolkenpartikel im Luftpaket enthalten, beschleunigen diese die Luft aufgrund ihrer Sedimentation und dem resultierenden Luftwiderstand vertikal. Anstatt diesen zusätzlichen Beschleunigungsterm direkt in die Impulsgleichung einzubauen, kann dieser Effekt über die Auftriebskraft berücksichtigt werden, indem die sogenannte density potential temperature (Betts und Bartlo, 1991; Emanuel, 1994) verwendet wird. Für das Gleichungssystem im EULAG ist diese definiert als

$$\theta_d = \theta + \bar{\theta}(\epsilon q_v - q_{ice}) \quad (2.13)$$

$$q_v = \frac{\omega_v}{\epsilon}, \quad (2.14)$$

$$\omega_v = \frac{N_v}{N_a}, \quad (2.15)$$

ω_v ist das Anzahlmischungsverhältnis, q_v das Massenmischungsverhältnis von Wasserdampf; q_{ice} das Eismassenmischungsverhältnis.

2.3 Mikrophysik

2.3.1 Aerosol

Aerosole sind luftgetragene flüssige, feste oder Mischphasenpartikel in der Atmosphäre, die neben Wolkenpartikeln in einer sehr großen Spannbreite an Zusammensetzungen, Formen und Anzahlkonzentrationen vorkommen. Wie für Wasserwolken sind Aerosole auch für Eiswolken von Bedeutung, da sie die Wolkenbildung kontrollieren. Reines Wasser gefriert, abhängig von

der Tropfengröße, bei ~ 235 K spontan, wodurch es in kälteren Temperaturbereichen nicht mehr für die Eisbildung zur Verfügung steht. Eis nukleiert durch homogenes Gefrieren flüssiger Aerosoltröpfchen oder heterogen auf Oberflächen fester Partikel (z.B. Wüstenstaub oder Ruß) in der Atmosphäre. Aerosolbildungs- oder Koagulationsprozesse sind im EULAG-LCM nicht berücksichtigt. Frisch nukleierte Aerosolpartikel haben Radien von nur einigen nm und gefrieren aufgrund ihres geringeren Volumens erst bei höheren Übersättigungen bezüglich Eis S_i als größere Tropfen. Deshalb nehmen diese kleinen Aerosoltröpfchen keinen wesentlichen Einfluss auf die Wolkenbildung. Koagulationsprozesse zwischen Aerosolpartikeln laufen auf deutlich längeren Zeitskalen als die Zeitdauer einer EULAG-LCM Simulation ab und spielen neben dem Wachstum durch Kondensation nur dann eine Rolle, wenn eine sehr hohe Anzahl frisch nukleierter ultrafeiner Partikel vorhanden ist (Pierce und Adams, 2007). Die Aerosolpopulation wird deshalb als unbeeinflusst von Koagulation angenommen. Im EULAG-LCM sind die folgenden Prozesse zur Wolkenbildung wichtig:

- Homogenes Gefrieren von $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ oder $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}/\text{HNO}_3$ Aerosolen
- Heterogene Nukleation
- Wachstum flüssiger Aerosoltröpfchen

Der Abbau der Aerosol- oder Eiskernanzahlkonzentration durch Eisbildung wird explizit berücksichtigt. Der begrenzende Einfluss einer geringen Anzahl von heterogenen Eiskeimen auf die Eispartikelanzahl und die resultierende Struktur des Zirrus kann so zuverlässig in Konkurrenz mit homogenen Gefrierprozessen simuliert werden.

Flüssiges Aerosol - $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ und $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}/\text{HNO}_3$

Flüssige Aerosoltröpfchen bestehen im EULAG-LCM aus $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ oder $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}/\text{HNO}_3$, eine typische Zusammensetzung in der oberen Troposphäre. Schwefelsäure (H_2SO_4) und Wasser sind meist Hauptbestandteile des Aerosols in dieser Region (Finlayson-Pitts und Pitts, 2000; Murphy *et al.*, 1998). Daneben können auch organische Komponenten (Murphy *et al.*, 1998) oder Ammonium (NH_4) im Aerosol vorhanden sein, abhängig von dem Bildungs- und Transportweg der Partikel. Laborstudien zu den Gefriereigenschaften von Lösungen (Koop *et al.*, 2000) haben gezeigt, dass die eisbildenden Eigenschaften der flüssigen, unterkühlten Partikel weitgehend unabhängig von deren chemischen Zusammensetzung sind. Dieser Befund sowie das Fehlen detaillierter Informationen über thermodynamische Eigenschaften unterschiedlichster Lösungen bedingt die Beschränkung auf $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}/\text{HNO}_3$ Aerosol.

Die Hinzunahme von Salpetersäure (HNO_3) in die Modellgleichungen ist begründet durch die Bedeutung der Partitionierung von reaktivem Stickstoff zwischen Gas-, Aerosol- und Eisphase für die Ozonchemie. Dies ist kein zentraler Bestandteil dieser Arbeit, erlaubt aber weiterführende Studien zur Aufnahme von HNO_3 in Zirruspartikel. Das entwickelte Aerosolmodul des EULAG-LCM berechnet die kinetische Aufnahme flüchtiger Bestandteile wie H_2O und auch HNO_3 in die flüssigen Aerosoltröpfchen durch Kondensation und anschließender Lösung der Komponenten (Dissolution). Die Schwefelsäuremasse im Partikel ändert sich unter atmosphärischen Bedingungen nur sehr langsam (Zeitskala von Tagen) und wird deshalb als konstant angesehen.

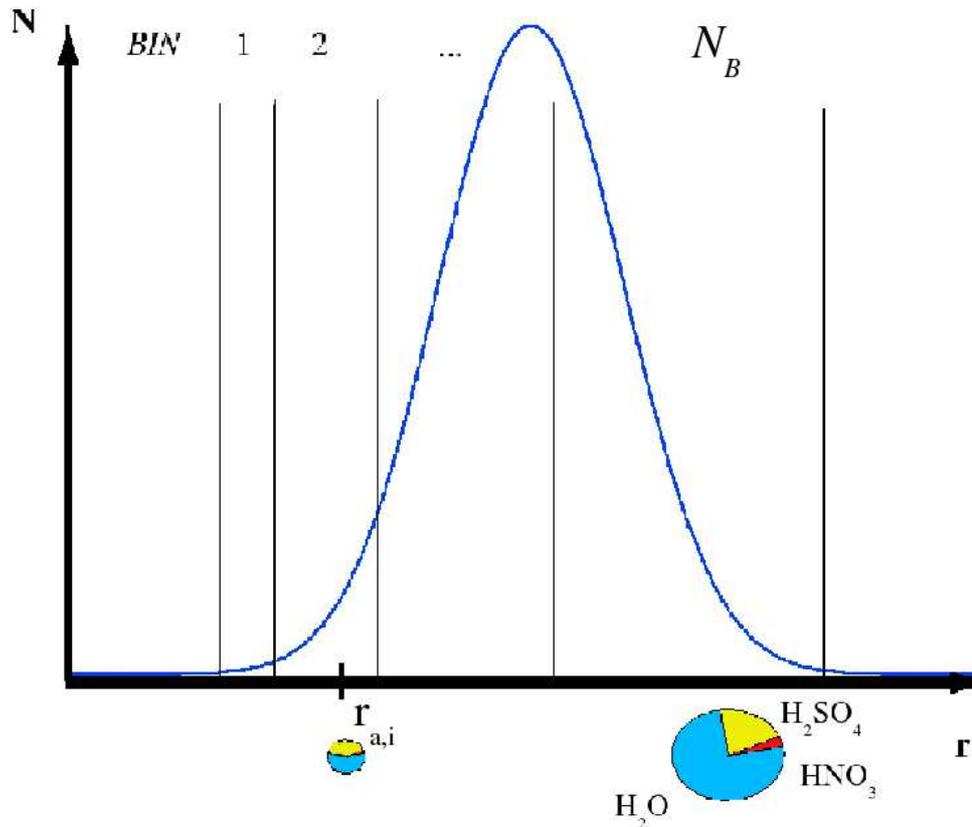


Abbildung 2.4: Die Größenverteilung des Aerosols ist in k diskrete Intervalle eingeteilt. Für jede dieser Klassen ist die Zusammensetzung des $H_2SO_4/H_2O/HNO_3$ Partikels bekannt.

Numerische Struktur zur Beschreibung der Aerosoltröpfchen-Größenverteilung: Freier mittlerer Radius (moving-center)

Die Zusammensetzung der flüssigen Aerosolpartikel ändert sich u.a. durch Schwankungen im Wasserdampfdruck oder der Temperatur. Zur Beschreibung der Aerosolgrößenverteilung wird ein diskretes Gitter über den Radius r_a der Aerosolpartikel aufgebaut. Informationen über die Aerosolzusammensetzung liegen dann in N_B Größenintervallen (Bins) vor. Innerhalb eines Bin haben die Aerosolpartikel den Radius $r_{a,i}$. Um die Aerosolverteilung über mehrere Größenordnungen (10 nm – 1 μ m) mit einer begrenzten Anzahl an Bins beschreiben zu können, nehmen die Intervallgrößen mit zunehmendem Radius zu (siehe Abbildung 2.4). Zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der Größenverteilung werden in der verwendeten moving-center Struktur (Jacobson, 1997a) die unteren und oberen Bin-Grenzen zu Beginn der Simulation festgelegt und nicht mehr verändert. Dadurch können bei Transportprozessen Aerosolpartikel benachbarter Gitterpunkte in die aktuelle Aerosolverteilung der gleichen Klasse i eingebracht werden. Innerhalb der Bin-grenzen kann der Radius der Partikel frei variieren und die Aerosole zu ihren tatsächlichen Radien $r_{a,i}(t)$ anwachsen. Über- bzw. unterschreitet $r_{a,i}(t)$ die Bin-grenzen des aktuellen Intervalls i , werden alle entsprechenden Aerosole aus i in die passenden benachbarten Bins übernommen. Durch eine Mittelung werden sie mit den dort bereits vorhandenen Teilchen vermischt und ein neuer mittlerer Radius berechnet. Hierbei gehen Informationen über die Aerosolverteilung ver-

loren, wenn Eigenschaften aus ursprünglich zwei Bins auf einen reduziert werden. Für die Wahl dieses Schemas im EULAG-LCM sprechen jedoch die folgenden Vorteile:

- Die numerische Dispersion (ein künstliches Aufweiten der Größenverteilung) während des Wachstumsprozesses von Aerosolpartikeln über Bingrenzen hinweg ist durch den freien mittleren Radius weitgehend eliminiert.
- Für die Anwendung in einem mehrdimensionalen Modell ist diese Methode besonders geeignet, da die Bingrenzen fixiert bleiben. Wenn Tröpfchen während Transportprozessen in benachbarte Gitterboxen advehiert werden, können diese in das gleiche Intervall i eingebracht werden.

Wachstum flüssiger Aerosoltröpfchen - Dissolution

Der Radius $r_{a,i}$ eines Aerosolpartikels ändert sich mit seiner aktuellen Zusammensetzung durch Wachstums- oder Verdunstungsprozesse. Die Partikel wachsen, wenn Moleküle q (H_2O oder HNO_3) auf der Partikeloberfläche auftreffen und in die Lösung aufgenommen werden. Diesen Mechanismus nennt man Dissolution. Die Gleichungen für die Änderungen der Anzahlkonzentrationen $N_{q,i}$ der Komponente q in einem Aerosolpartikel mit Radius $r_{a,i}$ lauten (im Folgenden soll h äquivalent für die mikrophysikalischen Zeitschritte Δt_{MIC} oder Δt_{NUC} stehen):

$$\frac{dN_{q,i,t}}{dt} = k_{q,i,t-h} \left(N_{q,t} - S'_{q,i,t-h} \frac{N_{q,i,t}}{H'_{q,i,t-h}} \right) \quad (2.16)$$

$$\frac{dN_{q,t}}{dt} = - \sum_{i=1}^{N_B} \frac{dN_{q,i,t}}{dt} = - \sum_{i=1}^{N_B} \left[k_{q,i,t-h} \left(N_{q,t} - S'_{q,i,t-h} \frac{N_{q,i,t}}{H'_{q,i,t-h}} \right) \right]. \quad (2.17)$$

In obiger Gleichung beschreibt

$$k_{q,i,t-h} = N_{i,t-h} 4\pi r_{a,i,t-h} D_{q,i,t-h}^{eff} \quad (2.18)$$

den Massentransferkoeffizienten zum Zeitpunkt $t-h$. Die Aufnahme von H_2O oder HNO_3 in die Lösung in (2.16) wird durch eine Abweichung der momentanen Konzentration der chemischen Komponente von jener im Gleichgewichtszustand ausgelöst. Das Gleichgewicht ist über den Sättigungsdampfdruck definiert, dessen Reduktion über der gekrümmten Tröpfchenoberfläche durch den Kelvin-Korrekturfaktor $S'_{q,i}$ beschrieben wird:

$$S'_{q,i} = \frac{p'_{q,s,i}}{p_{q,s}} = \exp \left(\frac{2\sigma_p v_q}{r_{a,i} k_B T} \right). \quad (2.19)$$

In (2.19) beschreibt σ_p die Oberflächenspannung des Aerosolpartikels gegenüber der Gasphase, v_q das Volumen, welches ein Molekül q im Lösungstropfen einnimmt, und k_B die Boltzmann Konstante.

Des Weiteren spielt der Lösungseffekt eine wichtige Rolle. Da auch andere Moleküle in der Lösung vorhanden sind, wird der Sättigungsdampfdruck gegenüber einem Tropfen aus reinem Wasser reduziert. Die stärkere Bindung der H_2O Moleküle in der Lösung reduziert deren Austrittswahrscheinlichkeit aus dem Verbund. Die effektive Henry-Konstante wird eingeführt, um

die Gleichung in Form von (2.16) schreiben zu können:

$$H'_{q,i,t-h} = k_b T \frac{N_{q,i,t-h}}{p_{q,s,i,t-h}}. \quad (2.20)$$

Gleichung (2.17) beschreibt die Koppelung von (2.16) an die Konzentration N_q in der Gasphase. Zur Lösung des gekoppelten Differentialgleichungssystems wird das APD-Schema verwendet (Jacobson, 1997b), das zusätzlich zu (2.16) und (2.17) die Gleichung für die Massenerhaltung von H_2O und HNO_3 verwendet:

$$N_{q,t} + \sum_{i=1}^{N_B} N_{q,i,t} = N_{q,t-h} + \sum_{i=1}^{N_B} N_{q,i,t-h} = N_{q,tot}; \quad (2.21)$$

$N_{q,tot}$ ist die totale Anzahlkonzentration der Moleküle q . Die Methode benötigt keine Iterationen, erhält die Masse und ist bedingungslos stabil. Eine exakte Beschreibung des Lösungsschemas ist in der oben genannten Referenz gegeben.

Initiierung der Eisphase - homogenes Gefrieren und heterogene Nukleation

Wie bereits erwähnt, bilden sich Zirren bei Temperaturen < 235 K mittels der Aerosolpartikel. Abbildung 2.5 zeigt die im EULAG-LCM modellierten Nukleationspfade. Dies sind:

- Homogenes Gefrieren von $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ oder $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}/\text{HNO}_3$ Aerosoltröpfchen (A).
- Heterogenes Gefrieren von flüssigen Aerosoltröpfchen, die einen festen, unlöslichen Kern enthalten (B).
- Heterogene Nukleation von Eis aus der Gasphase an der Oberfläche fester, unlöslicher Bestandteile der Atmosphäre (C).

Weitere in der Literatur diskutierte Nukleationspfade wie das Kontaktgefrieren oder Kondensationsgefrieren (DeMott, 2002) werden im EULAG-LCM nicht behandelt. Das Kontaktgefrieren bedingt die Koagulation zwischen einem Gefrierkern und Wolkentropfen, die im Modell aber nicht vorhanden sind. Die Oberfläche der Aerosolpartikel ist zu gering, um eine Koagulation wahrscheinlich zu machen. Im Fall des Kondensationsgefrierens kondensiert Wasserdampf auf einem Eiskern. Anschließend bildet sich im flüssigen Wasser Eis. Dieser Prozess benötigt Umgebungen, deren Feuchtegehalt nahe der Wassersättigung liegt. Bei $T < 235\text{K}$ entspricht dies einer Eisübersättigung von 145 %, weshalb das flüssige Schwefelsäure-Aerosol früher gefrieren wird. Wie in Abbildung 2.5 ersichtlich, gefriert bei der homogenen Nukleation das Wasser in den Lösungströpfchen ohne das Einwirken eines Eiskernes, wie es im Falle der heterogenen Nukleation stattfindet. Homogene und heterogene Nukleation schließen sich nicht gegenseitig aus, sondern können parallel für die Bildung von Eiswolken von entscheidender Bedeutung sein (DeMott, 2002; Haag und Kärcher, 2004). Während homogene Nukleation als wichtiger Pfad für die Zirrenbildung angesehen wird (Kärcher und Ström, 2003), ist die Rolle der heterogenen Nukleation Gegenstand aktueller Forschung. Bei Zirrenbildung in Temperaturbereichen oberhalb der homogenen Gefrierschwellen oder langsamen Auftrieben wird der heterogenen Nukleation eine wichtige Rolle bei der Wolkeninitiierung zugeschrieben. Oft diskutiert ist z.B. auch der Einfluss von Ruß, der bei der Verbrennung fossiler Brennstoffe entsteht, auf die mikrophysikalische Struktur von Eispartikeln und Wolkeneigenschaften (Kärcher *et al.*, 2007).

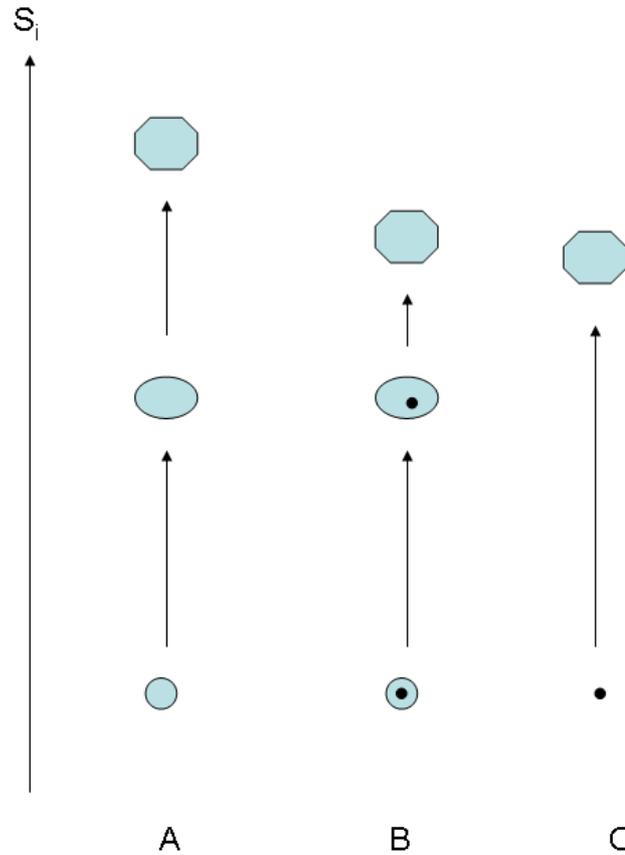


Abbildung 2.5: Eisbildungspfade im EULAG-LCM: A) Homogenes Gefrieren von Lösungströpfchen; B) Heterogene Nukleation von Lösungströpfchen im Immersionsmodus; C) Heterogene Nukleation wasserunlöslicher Eiskeime im Depositionsmodus.

Homogenes Gefrieren flüssiger Aerosoltröpfchen

Ratenkoeffizienten J_f für das homogene Gefrieren flüssiger Aerosole werden nach einer Parametrisierung von Koop *et al.* (2000) berechnet. In diesem Ansatz, ist $J_f = f(T, a_w)$ nur eine Funktion von Temperatur und der Aktivität von Wasser im Aerosoltröpfchen. Diese Aussage gilt, basierend auf Laborstudien über das Gefrierverhalten unterschiedlichster Lösungszusammensetzung, unabhängig von der chemischen Zusammensetzung des Partikels. Somit ist eine solide Basis zur Berechnung des Gefrierprozesses in der Atmosphäre gegeben.

Die Aktivität von Wasser a_w ist definiert als das Verhältnis des Sättigungsdampfdruck von H_2O über der Lösung $p_{v,s,a}$ gegenüber dem Gleichgewicht über dem reinen Wassers $p_{v,s}$,

$$a_w = \frac{p_{v,s,a}}{p_{v,s}}. \quad (2.22)$$

In EULAG-LCM werden keine thermodynamischen Gleichgewichtszustände bezüglich der Zusammensetzung der einzelnen Partikel angenommen, so dass a_w von der aktuellen Zusammensetzung des einzelnen Lösungstropfen einer Größenklasse abhängig ist. Daten zum Sättigungsdampfdruck $p_{v,s,a}$ über Lösungen aus $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ oder $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}/\text{HNO}_3$ bei kalten Temperaturen liefert Luo *et al.* (1995).

Für jede Größenklasse i in der Aerosolverteilung werden unter der Annahme, dass das gesamte Wasser im Tröpfchen instantan gefriert, folgende Gleichungen gelöst:

$$\frac{dN_{a,i}}{dt} = -j_f N_{a,i}, \quad \frac{dN_{ice}}{dt} = j_f N_{a,i}, \quad j_f = \frac{4\pi r_{a,i}^3}{3} J_f, \quad (2.23)$$

wobei N_i die Anzahlkonzentration von Eis ist. Die Umverteilung von H_2O oder HNO_3 zwischen Aerosol-, Eis- und Gasphase beim Gefrieren wird durch

$$\frac{dN_{q,i}}{dt} = -j_f N_{q,i}, \quad (2.24)$$

$$\frac{dN_{q,ice}}{dt} = j_f N_{q,i} R_l, \quad (2.25)$$

$$\frac{dN_q}{dt} = j_f N_{q,i} (1 - R_l), \quad (2.26)$$

beschrieben. Der Retentionskoeffizient R_l beschreibt, welcher Bruchteil von z.B. HNO_3 nach dem Gefrierprozess in der Eisphase verbleibt.

Eiskeime und heterogene Eisnukleation

Heterogene Nukleation wird im EULAG-LCM über den Weg des Immersions- oder Depositionsgefrieren berücksichtigt, ausgelöst durch Eiskeerne (ice nuclei, IN).

Immersionsgefrieren Chen *et al.* (1998) haben gezeigt, dass in einer großen Anzahl von Aerosolpartikeln unlösliche, anorganische Bestandteile vorkommen. Diese können in den Eisbildungsprozess eingreifen, indem sich an deren Oberfläche bevorzugt Eiskeime bilden und so die Gefriereigenschaften des Partikels gegenüber reinen Lösungen modifizieren.

In EULAG-LCM wird ein fester Kern dadurch simuliert, dass ein bestimmter Bruchteil V_{frac} des gesamten Aerosolvolumens V_i eines flüssigen Aerosoltröpfchens als Eiskern mit Volumen V_{core} angesehen wird. Dies entspricht der Vorstellung eines unlöslichen Partikels, das von einer flüssigen Schale mit Volumen V_{liq} umgeben wird. Das gesamte Volumen des Partikels setzt sich zusammen aus:

$$V_{a,i} = V_{liq} + V_{core} = (1 - V_{frac})V_{a,i} + V_{frac}V_{a,i}. \quad (2.27)$$

Ein solches Aerosolpartikel besitzt zwei Möglichkeiten, ein Eispartikel zu bilden. Ein Eiskeim vermag sich auf der Oberfläche des Eiskerns zu bilden, oder in der flüssigen Phase entstehen Eiskeime kritischer Größe durch homogenes Gefrieren. Die Raten beim Immersionsgefrieren müssen sich als eine Wahrscheinlichkeit ergeben, die sich aus der Summation der beiden Wege ergibt. Sie lautet:

$$j_f = \underbrace{4\pi r_{c,i}^2 \Delta J_f(a_w + \delta a_w)}_{\text{Kern}} + \underbrace{4\pi(r_{a,i}^3 - r_{c,i}^3)/3 \cdot J_f(a_w)}_{\text{flüssige Schale}}. \quad (2.28)$$

j_f setzt sich aus der Wahrscheinlichkeit für heterogenes Gefrieren an der Oberfläche des festen Kerns zusammen (1. Term) und der Wahrscheinlichkeit, dass im verbleibenden Volumen ein Eiskeim gebildet wird, identisch mit der Methode für homogenes Gefrieren (2. Term).

$\Delta = 30 \text{ nm}$ berücksichtigt unterschiedliche kinetische Faktoren bei homogener und heterogener

Nukleation. Die Gefrierenraten J_f für den heterogenen Anteil werden über die 'shifted-activity' Methode berechnet (Kärcher und Lohmann, 2003). Hierbei wird derselbe Verlauf der Gefrierenraten in Abhängigkeit von a_w angenommen wie im homogenen Fall, allerdings wird die Aktivität von Wasser um δa_w verschoben, so dass der Gefrierprozess bereits bei einem vorgegebenen kritischen Übersättigungswert S_{cr} und unterhalb der homogenen Gefrierschwelle stattfindet. Zobrist *et al.* (2007) zeigen, dass sich gemessene Gefrierenraten im Immersionsmodus gut mit dieser Methode parametrisieren lassen.

Depositionsgefrieren Depositionsgefrieren tritt auf, wenn Wassermoleküle direkt aus der Gasphase an der Oberfläche von festen, wasserunlöslichen IN anhaften und einen Eiskeim bilden, der groß genug ist, um spontan wachsen zu können. Die Rolle des Depositionsgefrierens in der oberen Troposphäre ist unklar, da es mit gängigen Messmethoden nicht möglich ist, die Eigenschaften der IN und das ausgelöste Gefrierverhalten als isolierten Prozess zu betrachten. Außerdem ist es nur in Gegenwart hochreichender Konvektion möglich, dass Depositionskerne während ihres Transports aus ihren Quellregionen in der Grenzschicht in die obere Troposphäre keine flüssige Beschichtung akkumulieren. Labormessungen von Möhler *et al.* (2006) mit Proben verschiedener Mineralstaubtypen zeigen, dass die Gefrierfeuchten, bei denen Eisnukleation stattfindet, auch für idealisierte Umgebungen sehr variabel sind. Trotzdem sind die vorgestellten Ergebnisse der Studie ein Weg zu einem besseren Verständnis dieses Nukleationspfades und sollen daher in das EULAG-LCM Eingang finden. Generell zeigt sich, dass mit zunehmender Übersättigung mehr und mehr IN Eisteilchen bilden:

$$\frac{dN_{ice}}{dt} = n_p a \frac{dS_i}{dt}. \quad (2.29)$$

Gleichung (2.29) beruht auf einem exponentiellen Anstieg von aktivierten IN als Funktion von $(S_i - S_0)$. Oberhalb einer Grenzfeuchte S_0 entsteht Eis; a ist ein Parameter, der aus den Labormessungen für verschiedene Proben gewonnen wurde und n_p die anfängliche Konzentration von IN bevor Eis im Luftpaket auftritt. Der gleichzeitige Abbau der Aerosolkonzentration ist durch

$$\frac{dN_a}{dt} = -\frac{dN_{ice}}{dt} \quad (2.30)$$

gegeben. Anders als beim homogenen Gefrierprozess oder beim Prozess des Immersionsgefrierens sind hier, mangels experimenteller Daten, keine Informationen über die Größenabhängigkeit des Gefriervorgangs vorhanden, sodass angenommen wird, dass alle entstehenden Eispartikel gleich groß sind.

2.3.2 Eisphase

Behandlung der Eisphase in EULAG-LCM

Aus fluiddynamischer Sicht kann das System Luft-Eiskristalle einer Zirruswolke als disperse Zweiphasenströmung angesehen werden. Die eine Phase bilden die Luftmoleküle in der Gasphase, in der die Eiskristalle als zweite, feste Phase deutlich unterscheidbar enthalten sind. Nimmt man typische Werte für den Atmosphärenzustand in der Bildungsregion von Zirren (z.B. $T=220$ K; $p=300$ hPa) und eine typische Eiskristallkonzentration von 1 cm^{-3} an, dann trifft in einem Luftvolumen von 1 cm^3 ein Eiskristall auf $\sim 10^{19}$ bis 10^{20} Luftmoleküle. Es erscheint daher sinnvoll, das Fluid Luft als Kontinuum anzusehen, während die Eiskristalle durch eine endliche

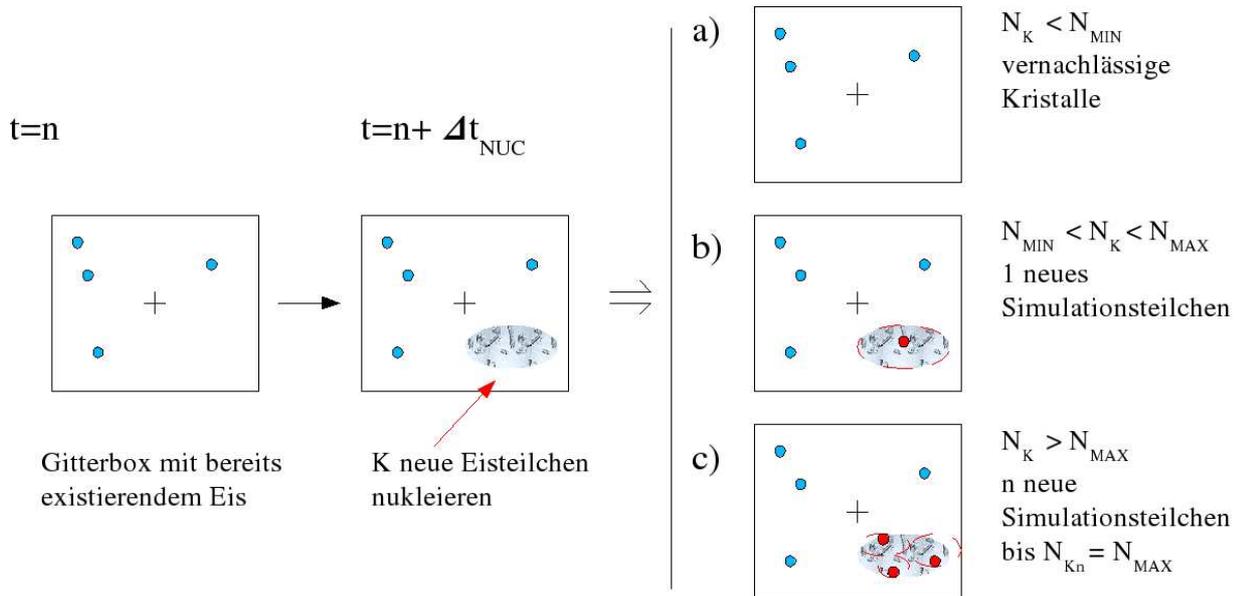


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung der Simulationsteilchenentstehung in EULAG-LCM.

Menge diskreter Einzelteilchen repräsentiert werden.

Ein geeignetes Verfahren zur Behandlung dieser Zweiphasenströmungen ist das Euler-Lagrange-Verfahren. Bei diesem Verfahren wird die kontinuierliche Phase Luft durch die Lösung der Erhaltungsgleichungen (2.3) und (2.4) berechnet. Die disperse Eisphase wird simuliert, indem eine Vielzahl von Eiskristallen unter Beachtung der auf sie wirkenden Prozesse durch das zuvor berechnete Strömungsfeld verfolgt werden. Die Eigenschaften der dispersen Phase erhält man dabei durch Anzahlmittelung. Dem Einfluss der Eiskristalle auf die Fluidströmung durch das Freisetzen latenter Wärme bei der Deposition von Wasserdampf, wird durch geeignete Quellterme in den Erhaltungsgleichungen der kontinuierlichen Phase Rechnung getragen. Eine Modifikation des Turbulenzfeldes durch die Interaktion der Strömung mit den Partikeln wird nicht vorgenommen, auch wenn der Massenanteil der Partikel in einem Volumen zeitweise von gleicher Größenordnung wie die der Luftpartikel sein kann. Ein genaues Bild des Mechanismus fehlt (Vaillancourt und Yau, 2000). Die Größenordnung dieses Effekts sollte aber für die hier vorliegenden Anwendungen, in denen keine Hydrometeore wie Graupel, Hagel oder Schnee betrachtet werden, sehr gering sein und auf die Zirrenstruktur entsprechend wenig Einfluss haben.

Zu den Vorteilen des Euler-Lagrange-Verfahrens zählen im Wesentlichen:

- Einfache Berücksichtigung der Partikelgrößenverteilung
- Anschauliche Modellierung der physikalischen Prozesse, die auf die Eiskristalle wirken (z.B. Sedimentation, Aggregation)
- Neue Analysemöglichkeiten, da einzelnen Partikeln Informationen zugeschrieben werden können (z.B. Nukleationsweg, Historie über den Wachstumsprozess)

Aufgrund der hohen Anforderungen an Rechnerkapazitäten können in EULAG-LCM nicht alle Eisteilchen individuell verfolgt werden. Stattdessen wird eine Vielzahl von Partikeln verfolgt. In Abbildung 2.6 wird die Vorgehensweise zur Auswahl dieser Simulationsteilchen skizziert.

Startpunkt ist eine Gitterbox zum Zeitpunkt $t = n$ mit dem Volumen V_{BOX} . Diese enthält Aerosole, IN und eventuell schon existierendes Eis. Aus den bekannten IN- oder Aerosolzusammensetzungen kann mit Hilfe der Nukleationsschemata (2.23), (2.28) oder (2.29) die Anzahl der Eiskristalle, für jede der k Aerosolgrößenklassen und Typen berechnet werden, die während des kurzen Nukleationszeitschrittes Δt_{NUC} entstehen. In Abbildung 2.6 nukleieren K neue Eisteilchen. Die Anzahlkonzentration der K Partikel in der Gitterbox ergibt sich zu:

$$N_K = \frac{K}{V_{BOX}}. \quad (2.31)$$

Um die Anzahl der zu verfolgenden Simulationsteilchen beschränken zu können, werden anhand von N_K Grenzen gebildet. Hierbei werden drei Fälle unterschieden:

- a) Die Konzentration unterschreitet einen Schwellenwert N_{MIN}
- b) Die Konzentration liegt zwischen N_{MIN} und einer oberen Schranke N_{MAX}
- c) Die Konzentration überschreitet den Schwellenwert N_{MAX} .

Die Auswahl der Schranken N_{MIN} und N_{MAX} stellt eine Abwägung zwischen Rechenzeitaufwand und Genauigkeit des Modelllaufs dar und muss individuell für einzelne Läufe angepasst werden. Ein Beispiel ist in Kapitel 3.3 gegeben.

Fall a) $N_K < N_{MIN}$ In diesem Fall tragen die entstehenden Kristalle zu einem unwesentlichen Teil zur Konzentration in der Box bei. Kleine Zuwächse der Eiskonzentration werden vernachlässigt. Meist nukleieren dadurch im nächsten Zeitschritt Δt_{NUC} mehr Kristalle, die dann berücksichtigt werden. Diese Maßnahme dient der Reduzierung der entstehenden Simulationsteilchen und damit des Rechenzeitbedarfs.

Fall b) $N_{MIN} < N_K < N_{MAX}$ Liegt die Konzentration zwischen den beiden Schwellenwerten, wird für alle K Eispartikel, die aus einer Aerosol- oder IN-Größenklasse entstehen ein Repräsentant ausgewählt. Dieses Simulationsteilchen repräsentiert eine monodisperse Verteilung von K Eisteilchen. Die Anzahl der Kristalle pro Simulationsteilchen \mathcal{N}_i ist hier:

$$\mathcal{N}_i = K. \quad (2.32)$$

Dem Simulationsteilchen wird per Zufall ein mittlerer Ort innerhalb der Gitterbox zugewiesen.

Fall c) $N_K > N_{MAX}$ Ist der Anteil, den die neu entstandenen Kristalle an der Eiskonzentration haben, hoch, werden sehr viele Kristalle nur durch einen Repräsentanten vertreten, was einen Verlust an Auflösung in der Eispartikelgrößenverteilung und damit an Genauigkeit bedeuten würde. Deshalb werden mehrere Simulationsteilchen initiiert, so dass die maximale Anzahlkonzentration der Eiskristalle pro Repräsentant die Schwelle N_{MAX} nicht überschreitet.

$$\mathcal{N}_i = V_{BOX} N_{MAX} \quad (2.33)$$

Verbleibende Kristalle werden durch einen Repräsentanten mit geringerem \mathcal{N}_i aufgefangen. Diese Maßnahme erhöht den Rechenzeitbedarf, steigert aber die Genauigkeit.

Die Anzahl der Simulationsteilchen \mathcal{N}_{sim} ist a priori nicht festgelegt, sondern folgt aus der Wahl der Schwellenwerte N_{MIN} und N_{MAX} , der Anzahl der Größenklassen aus denen Eis nukleiert und der Anzahl der Nukleationsereignisse, die sich aus den atmosphärischen Gegebenheiten für jede Simulation individuell ergeben.

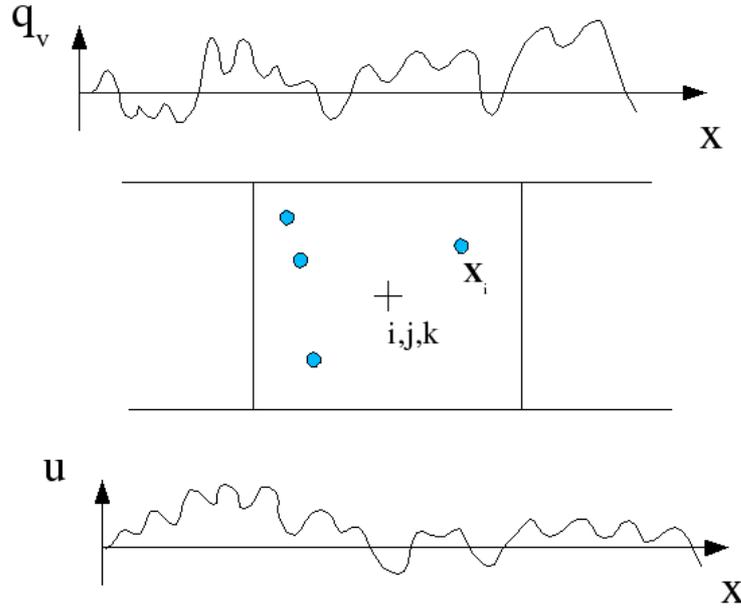


Abbildung 2.7: Gitterbox zum Punkt i, j, k im EULAG mit vorhandenen Eispartikeln am Ort x_i . Schematisch sind ein Wind- und Wasserdampfmischungsverhältnisfeld aufgetragen, wie sie aufgrund unauflöser Variabilität als Horizontalschnitt durch die Felder existieren können.

Ensemblemittelung für Eispartikeleigenschaften

Für die Koppelung mit der Gasphase und zum Zweck der Analyse der Simulationen ist es nötig, die volumengemittelten Eigenschaften der Eisphase zu bestimmen. Diese erhält man aus den Eigenschaften der einzelnen Simulationspartikel durch Ensemblemittelung. Hierbei wird jedes Simulationspartikel mit der Anzahl der realen Eisteilchen \mathcal{N}_i , die es repräsentiert, gewichtet. So ergibt sich für die totale Anzahlkonzentration von Eisteilchen

$$N_{ice} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{SIM}} \mathcal{N}_i}{V_{BOX}} \quad (2.34)$$

und für den anzahlgewichteten mittleren Durchmesser

$$D_1 = \frac{\sum_{i=1}^{N_{SIM}} D_i \mathcal{N}_i}{\sum_{i=1}^{N_{SIM}} \mathcal{N}_i}. \quad (2.35)$$

V_{BOX} bezeichnet das Volumen der entsprechenden Gitterbox. In Kapitel 3.3 werden noch weitere Überlegungen zur Statistik der Mittelwerte diskutiert.

Koppelung Eisphase und Gasphase

Um Koppelungen zwischen Eis- und Gasphase zu berücksichtigen, muss eine Verknüpfung zwischen der Lagrange'schen und Euler'schen Betrachtungsweise vorgenommen werden. Während

die Simulationspartikel der Eisphase an allen möglichen Punkten \mathbf{x} des Integrationsgebietes vorhanden sein können, werden die Fluideigenschaften nur an diskreten Gitterpunkten i, j, k berechnet. Während des Wachstums, dem Verdunsten sowie der Advektion der Eiskristalle müssen die Felder von Wasserdampf oder Windgeschwindigkeit an der aktuellen Position \mathbf{x}_i eines Simulationsteilchens bekannt sein (siehe Abbildung 2.7). Im EULAG-LCM gelten für alle \mathbf{x}_i in einer Gitterbox die volumengemittelten Werte \mathbf{u} , q_v und θ . Aufgrund der verwendeten hohen Auflösung werden im EULAG-LCM die Variablen nicht zwischen benachbarten Gitterpunkten auf den Partikelort hin interpoliert. Zwischen benachbarten Gitterpunkten kann ein Gradient im Geschwindigkeits- oder Feuchtefeld vorhanden sein. Eine Interpolation würde diesem zwar Rechnung tragen, bringt physikalisch allerdings keinen Vorteil, da der Gradient bei geringen Gitterpunktabständen (≈ 100 m) von Fluktuationen ähnlicher Amplitude überlagert sein kann und bei \mathbf{x}_i ein größerer oder kleinerer Wert vorkommt. Eine Interpolation glättet die Felder, macht die Simulation aber nicht physikalischer. Da das Feuchtefeld nur indirekt über Wachstumsraten (siehe Kapitel 2.3.2) in Wachstumsprozesse der Eiskristalle eingreift, ergeben sich auch keine Unstetigkeiten in den Eispartikeleigenschaften durch Sprünge im Umgebungsfeld, wenn Eiskristalle in eine neue Gitterbox transportiert werden. Auch für das Geschwindigkeitsfeld wird auf eine Interpolation verzichtet, allerdings wird der Einfluss subskaliger Variabilität auf die Dispersion von Eiskristallen berücksichtigt (siehe 2.3.2).

Zusammenfassend gilt:

- Die aktuellen Fluideigenschaften am Partikelort ergeben sich aus den volumengemittelten Werten am entsprechenden Gitterpunkt und werden für die Dauer eines Zeitschritts als konstant angenommen.

Wachstum von Eiskristallen durch Deposition - Freisetzung latenter Wärme

Lagern sich H_2O Moleküle aus der Gasphase an einem Eiskristall an und werden in den Kristallverband aufgenommen, spricht man von Deposition. Eine analytische Herleitung der Gleichung für den Massenzuwachs eines einzelnen Eiskristalls folgt Mason (1971). Für die Anwendung im EULAG-LCM wurden die Gleichungen erweitert, um den Einfluss von Strahlung auf das Partikelwachstum berücksichtigen zu können.

Die Gleichung für den Massenzuwachs eines einzelnen Eiskristalls dm_i/dt lautet:

$$\frac{dm_i}{dt} = \frac{4\pi\chi_i D'_v (p_v - p'_{v,s})}{\frac{D'_v L_s p'_{v,s}}{\kappa'_d T} \left(\frac{L_s}{R_v T} - 1 \right) + R_v T} - \frac{H_{R,i} D'_v p'_{v,s} \left(\frac{L_s}{R_v T} - 1 \right)}{\kappa'_d T \left[\frac{D'_v L_s p'_{v,s}}{\kappa'_d T} \left(\frac{L_s}{R_v T} - 1 \right) + R_v T \right]} \quad (2.36)$$

Der erste Term auf der rechten Seite von (2.36) beschreibt den Wachstumprozess der Eiskristalle durch diffusiven Transport von Wasserdampf auf die Kristalloberfläche. Der zweite tritt als Zusatzterm auf, wenn die Wechselwirkung des Eiskristalls mit dem Strahlungsfeld berücksichtigt wird (siehe Kapitel 2.4). In (2.36) ist der modifizierte Diffusionskoeffizient D'_v gegeben durch

$$D'_v = \beta_v D_v f_v. \quad (2.37)$$

Für den temperatur- und druckabhängigen Diffusionskoeffizienten D_v wird nach Pruppacher und Klett (1997)

$$D_v = 0.211 \left(\frac{1013.25}{p} \right) \left(\frac{T}{273.15} \right)^{1.94} \quad (2.38)$$

Eiskristallform	C_1	C_2
Hexagonale Säulchen ($Re < 20$)	0.0309	0.1447
Flaschenprismenbündel	0.3005	-0.0022

Tabelle 2.1: Ventilationskoeffizienten für Eiskristalle.

verwendet. Dieser ist korrigiert durch β_v

$$\frac{1}{\beta_v} = \frac{r}{r + \lambda_v} + \frac{4D_v\chi_0}{\alpha_v v_{th,v} r} \quad (2.39)$$

das für kleine Teilchen ($r \approx \lambda_v$) den Übergang vom diffusiven Fluss von H_2O zur Kristalloberfläche hin zur kinetischen Beschreibung liefert, wenn die mittlere freie Weglänge eine ähnliche Größe wie das Partikel selbst aufweist. Ebenso wird der Ventilationskoeffizient f_v berücksichtigt, der den verstärkten Fluss von Wasserdampf auf die Oberfläche eines fallenden Kristalls beschreibt. Zur Berechnung folgt diese Arbeit Heymsfield (1975) für Flaschenprismenbündel und Liu *et al.* (2003a) für hexagonales Eis, basierend auf Resultaten von Ji und Wang (1999):

$$f_v = 1.0 + C_1 X + C_2 X^2, \quad (2.40)$$

wobei

$$X = Sc^{1/3} Re^{1/2}. \quad (2.41)$$

In (2.41) ist $Sc = \nu/D_v$ die Schmidtzahl, das Verhältnis von kinematischer Viskosität von Luft zur Diffusivität von Wasserdampf, und Re die Reynoldszahl, die in (2.52) definiert ist. Die Koeffizienten C_1 und C_2 sind in Tabelle 2.1 aufgeführt. Ventilation für kugelförmiges Eis wird nach Pruppacher und Klett (1997) mit den Koeffizienten

$$f_v = \begin{cases} 1.0 + 0.14X^2 & X < 1.0 \\ 0.86 + 0.28X & X \geq 1.0 \end{cases} \quad (2.42)$$

behandelt.

In (2.36) ist χ_i die Kapazität des Kristalls, die die veränderte Wasserdampfverteilung um ein nichtsphärisches Partikel berücksichtigt; $\chi_0 = \frac{\chi_i}{r}$ ist die auf den Radius normalisierte Kapazität. χ_i wird nach einer Methode von Westbrook *et al.* (2008) berechnet, die eine Vielzahl von Trajektorien diffundierender H_2O Moleküle auf Kristalle unterschiedlicher Form über eine Monte Carlo Methode berechnen. Für hexagonale Säulchen mit Länge D , Breite W und einem Aspektverhältnis $Ar = D/W$ ergibt sich

$$\chi_i = [0.58 (1 + 0.95Ar^{0.75})] \frac{W}{2}. \quad (2.43)$$

Für Flaschenprismenbündel mit sechs Armen, maximaler Dimension D und dem Aspektverhältnis Ar eines einzelnen Prismas ergibt sich

$$\chi_i = 0.4Ar^{-0.25}D. \quad (2.44)$$

Für Aggregate von Eiskristallen aus einigen wenigen Monomeren stellt sich schnell

$$\chi_i = 0.25D \quad (2.45)$$

ein. Kapazitäten, wie sie im EULAG-LCM verwendet werden, sind in Abbildung 2.9 dargestellt.

Weiter beschreibt L_s in (2.36) die latente Wärme der Sublimation, κ'_d die thermische Leitfähigkeit von Luft, R_v die Gaskonstante für Wasserdampf, p_v den Partialdruck von Wasserdampf und $p_{v,s}$ den Wasserdampfättigungsdruck über der Partikeloberfläche. Der Kelvineffekt (siehe (2.19)) in $p'_{v,s}$ für kleine Eiskristalle wird berücksichtigt, indem ein Radius r_i eines sphärischen Partikels mit äquivalentem Volumen verwendet wird. α_v ist der Massenakkommodationskoeffizient. Messungen von α_v zeigen eine hohe Streuung und stellen eine kritische Komponente in der Simulation von Zirren dar (Lin *et al.*, 2002). Im EULAG-LCM wird $\alpha_v = 0.5$ nach Kärcher (2003) gewählt, dessen Depositionskoeffizient an Laborstudien und Feldmessungen in mittleren Breiten angepasst wurde. Dieser kann aber beliebig variiert werden.

Das Wachstum der Eiskristalle ist über

$$\frac{dN_v}{dt} = -\frac{N_A}{m_v V_{BOX}} \sum_{i=1}^{N_{SIM}} \frac{dm_i}{dt} \mathcal{N}_i \quad (2.46)$$

an die Anzahlkonzentration N_v von Wasserdampf in der Gasphase gekoppelt. Hier ist N_A die Avogadrozahl und m_v die Molmasse von H_2O . N_{SIM} ist die Anzahl der Simulationsteilchen in der Gitterbox i, j, k . Das gekoppelte System (2.36) und (2.46) wird mit Hilfe des 'analytic predictor of condensation' Algorithmus nach Jacobson (1999) gelöst. Dieses Schema benötigt keine Iterationen, ist bedingungslos stabil und massenerhaltend.

Durch die Freisetzung latenter Wärme beim Wachstum der Eispartikel wird die potentielle Temperatur θ erhöht. Der Antriebsterm Q_H in (2.4) berechnet sich über die Änderung des Wasserdampf-mischungsverhältnisses q_v zu

$$Q_H = \frac{d\theta}{dt} = -\frac{L_s}{c_p \Pi} \frac{dq_v}{dt}, \quad (2.47)$$

$$\Pi = \left(\frac{p}{p_{00}} \right)^\kappa. \quad (2.48)$$

Rückführung verdunstender Eiskristalle in die Aerosolphase

Verdunsten Eiskristalle vollständig, wird das Aerosolpartikel, aus dem sie ursprünglich entstanden sind, wieder freigesetzt. Da die Nukleationspfade einzelner Eiskristalle im EULAG-LCM bekannt sind, ist es möglich, das eisbildende Aerosolpartikel an der aktuellen Position des Eispartikels freizusetzen, an der es erneut in folgende Gefrierprozesse eingreifen könnte. Für den Fall homogener Nukleation wird angenommen, dass das Eispartikel vollständig verdunstet ist, sobald die Anzahlkonzentration von Wassermolekülen derjenigen entspricht, welche flüssige Aerosoltröpfchen haben, die aus derselben Größenklasse i entstammen, aus der sich auch das Eispartikel gebildet hat. Im Fall der heterogenen Nukleation im Depositionsmodus gilt, dass ein Eispartikel verdunstet ist, wenn die Anzahl von Wassermolekülen im Eispartikel unterhalb eines Schwellenwerts N_{thr} liegt (typischer Weise $N_{thr} = 1000$). Für nichtaggregierte Eisteilchen wird im EULAG-LCM jeder Nukleationspfad gespeichert. Haben sich Cluster aus verschiedenen Kristallen während des Aggregationsprozesses (siehe Kapitel 2.5) gebildet, kann jeweils nur der Nukleationspfad des aufsammelnden Kristalls gespeichert werden, wodurch Information über Aerosolpartikel verloren gehen kann.

Eisform	α [cgs]	β	γ	σ	Quelle
<i>Sphärisches Eis</i>	0.4765	3.0	-		
<i>Hexagonale Säulchen (C1e):</i> 					
$30 \mu\text{m} < D \leq 100 \mu\text{m}$	0.1677	2.91	0.684	2.00	Mitchell (1996)
$100 \mu\text{m} < D \leq 300 \mu\text{m}$	0.00166	1.91	0.0696	1.50	Mitchell (1996)
$300 \mu\text{m} < D$	0.000907	1.74	0.0512	1.414	Mitchell (1996)
<i>Flaschenprismenbündel (C2a):</i> 					
$D \leq 100 \mu\text{m}$	0.1	2.2997	0.0869	1.57	Mitchell (1996)
$D > 100 \mu\text{m}$	0.00308	2.26	0.0869	1.57	Mitchell (1996)
ARM IOP 9. März 2000:					
<i>Flaschenprismenbündel (C2a):</i> 					
$m - D$	0.0138	2.54			Heymsfield <i>et al.</i> (2002)
$A - D$ (5 Arme)			0.2148	1.7956	Heymsfield <i>et al.</i> (2002)
<i>Aggregate aus C2a:</i> 					
	0.00183	2.04	-	-	Heymsfield <i>et al.</i> (2002)

Tabelle 2.2: Empirische Relationen für Masse ($m = \alpha D^\beta$) und Fläche ($A = \gamma D^\sigma$) eines Eiskristalls. Die unteren Spalten zeigen Relationen und Bilder für Kristalle, die während eines Messfluges am 9. März 2000 im Rahmen der ARM IOP gewonnen wurden.

Form der Eiskristalle

Im EULAG-LCM wird nicht explizit die Form einzelner Eiskristalle gespeichert. Dies wäre prinzipiell möglich, bedeutet aber einen sehr hohen Speicherplatzbedarf. Aussagen über die maximale Dimension oder projizierte Fläche der Eispartikel in Fallrichtung werden in Abhängigkeit von ihrer Masse getroffen und beruhen auf vorher getroffenen Annahmen über die Eiskristalleigenschaften. Hier können optische Proben aus Zirren hilfreich sein, um vorhandene Eiskristallformen zu identifizieren (Lawson *et al.*, 2006b). Eine allgemein gültige Systematik, welche Eispartikelform unter welchen Bedingungen entsteht, ist noch weitgehend ungeklärt und vorhandenes Wissen beruht zumeist auf Laborstudien (Bailey und Hallett, 2004). Aussagen über Partikeleigenschaften werden im EULAG-LCM mit Hilfe von empirischen Relationen der Form

$$m = \alpha D^\beta \quad (2.49)$$

$$A = \gamma D^\sigma \quad (2.50)$$

getroffen. Diese basieren auf flugzeuggetragenen Messungen und geben einen Mittelwert über die Partikeleigenschaften für einen Eistyp. Einen Überblick über verwendete Relationen gibt Tabelle 2.2. Abbildung 2.8 stellt die resultierende Dimension der unterschiedlichen Partikel in Abhängigkeit ihrer Masse dar. In den Relationen (2.49) und (2.50) sind variierende Formeigenschaften der Kristalle enthalten. So nimmt z.B. das Aspektverhältnis $A = W/D$ von hexagonalen Säulchen mit dem Durchmesser der Basisfläche W mit wachsender Masse ab, wie Messungen von Auer und Veal (1970) zeigen. Frisch nukleierte Kristalle haben ein Aspektverhältnis von $A = 1$ ($W = D$), während es für Säulchen mit $D = 500 \mu\text{m}$ nur noch $A = 0.2$ annimmt und die Partikel verstärkt in die Länge wachsen.

Sedimentation

Im Schwerfeld der Erde werden Zirrenpartikel aufgrund ihrer Masse zum Erdboden hin beschleunigt. Die resultierende Sedimentationsgeschwindigkeit wirkt der lokalen Aufwärtsgeschwindigkeit entgegen. Die Fallgeschwindigkeit verursacht eine vertikale Umverteilung der Eismasse und damit auch des Wasserdampfes. Dieser Prozess spielt deshalb eine entscheidende Rolle für den Wasserhaushalt und die Strahlungseigenschaften der Wolke, die stark von der vertikalen Struktur des Zirrus abhängen (Khvorostyanov und Sassen, 2002).

Die Berechnung der Sedimentationsgeschwindigkeit $v_{t,i}$ stützt sich auf Arbeiten von Mitchell und Heymsfield (2005), Heymsfield und Iaquina (2003) und Mitchell (1996). Darin wird $v_{t,i}$ über einen theoretischen Zusammenhang zwischen der Best-Zahl X und der Reynoldszahl Re des fallenden Kristalls hergeleitet. X ist definiert als:

$$X = C_D Re^2 = \frac{2g\rho_a}{\eta_a^2} D^2 \frac{m}{A}. \quad (2.51)$$

Hier ist C_D der Widerstandsbeiwert und η_a die dynamische Viskosität der Luft. Ist Re bekannt, kann über deren Definition die Sedimentationsgeschwindigkeit $v_{t,i}$ berechnet werden.

$$Re = \frac{v_{t,i} D \rho_a}{\eta_a} \quad (2.52)$$

Abraham (1970) und Bohm (1989) zeigen einen theoretischen Zusammenhang zwischen X und Re auf, der allgemein für feste Partikel gilt, die in einem reibungsbehafteten Fluid fallen. Es wird angenommen, dass sich eine Grenzschicht um den Körper bildet. Diese wird als fest mit dem Teilchen verbunden angesehen und die Gleichungen für das Strömungsmechanikproblem werden für die Einheit Teilchen-Grenzschicht aufgestellt. Die Reibung wird dabei als unabhängig von der Form des Partikels angesehen.

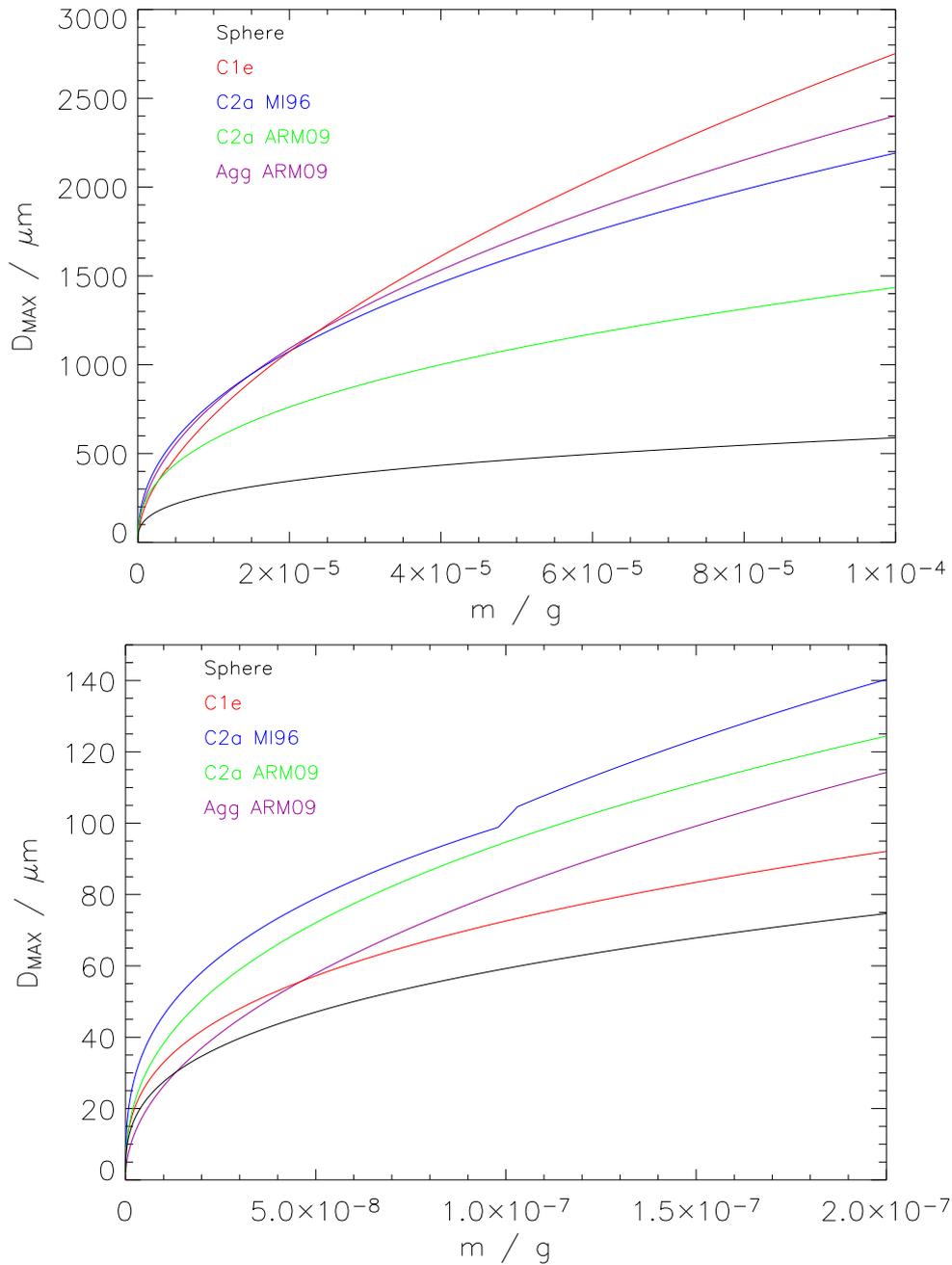


Abbildung 2.8: Empirische Relationen zur maximalen Dimension D unterschiedlicher Eiskristallformen als Funktion ihrer Masse. Kugelförmige Eispartikel (sphere, schwarz), hexagonales Eis (C1e, rot), Flaschenprismenbündel (bullet rosettes) parametrisiert nach Mitchell (1996) (C2a MI96, blau), Flaschenprismenbündel parametrisiert nach Heymsfield et al. (2002) (C2a ARM09, grün) und Aggregate aus einer Kombination von Flaschenprismenbündeln nach Heymsfield et al. (2002) (Agg ARM09, lila). Empirische Relationen für die beiden letzten Kristallformen basieren auf Beobachtungen während eines Messfluges am 9. März 2000 im Rahmen der ARM IOP. Der untere Graph fokussiert dabei auf kleine Massen.

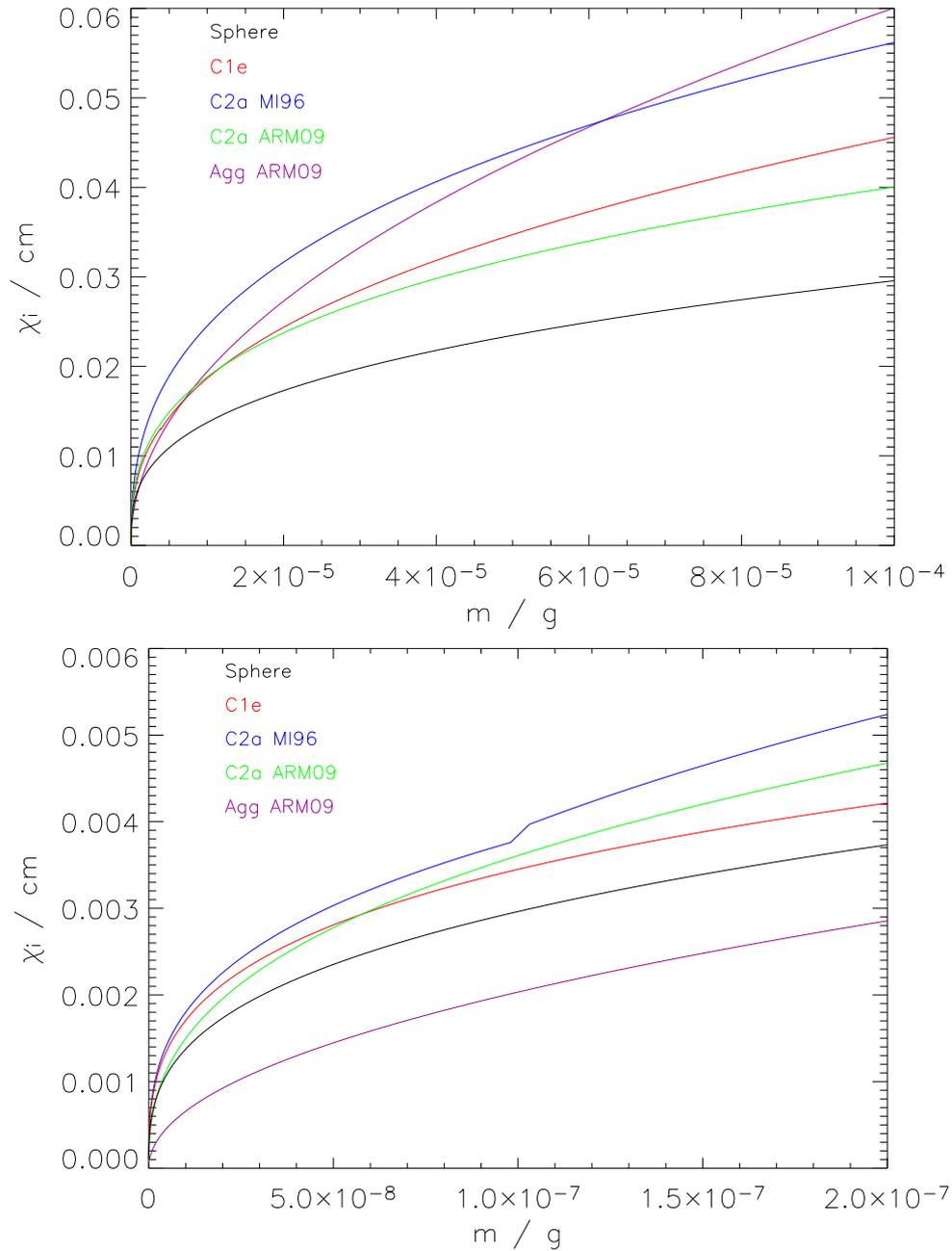


Abbildung 2.9: Kapazität χ_i für unterschiedliche Eiskristalltypen, basierend auf Rechnungen von Westbrook et al. (2008). Für die unterschiedlichen Kristallformen siehe Abbildung 2.8.

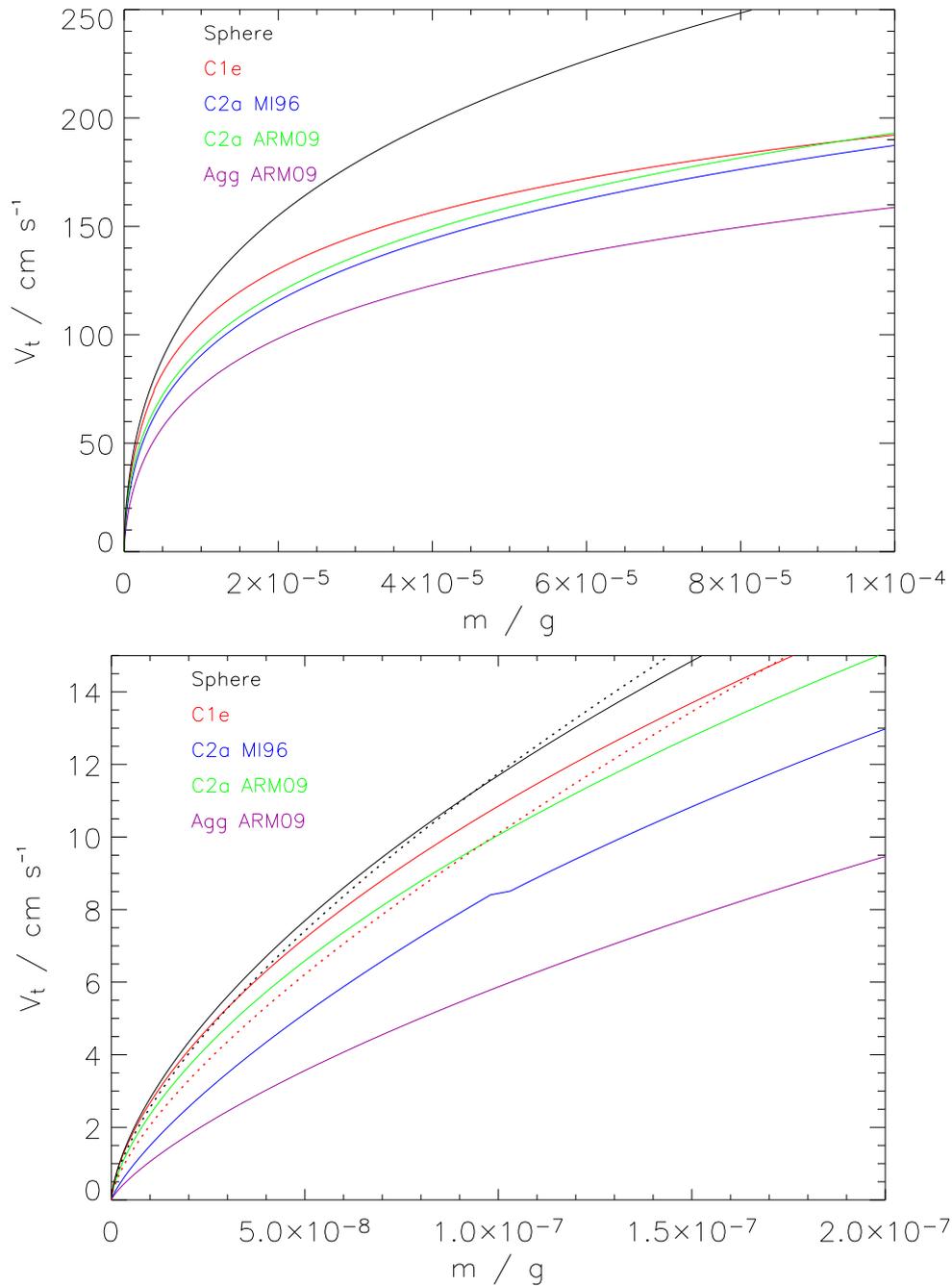


Abbildung 2.10: Fallgeschwindigkeit $v_{t,i}$ für $T = 233.15$ K und $p = 350$ hPa nach Mitchell und Heymsfield (2005). Für die unterschiedlichen Kristallformen siehe Abbildung 2.8. Im unteren Graph sind zusätzlich die Stokes-Fallgeschwindigkeit $v_{t,Sph}$ für kugelförmiges Eis (schwarz gepunktet) und die Stokes-Fallgeschwindigkeit für hexagonale Säulchen (rot gepunktet) für kleine Partikel ($Re < 0.6$) eingezeichnet.

Mitchell und Heymsfield (2005) geben noch eine Erweiterung zur Theorie an, die berücksichtigt, dass bei realen Eisteilchen (vor allem bei Aggregaten) eine Strömung durch das Eisteilchen möglich ist und die Grenzschicht ausgedehnter sein kann. Dies wird durch den Term $a_0 X^{b_0}$ in (2.53) ausgedrückt.

$$Re = \frac{\delta_0^2}{4} \left[\left(1 + \frac{4X^{1/2}}{\delta_0^2 C_0^{1/2}} \right)^{1/2} - 1 \right]^2 - a_0 X^{b_0} = aX^b \quad (2.53)$$

Der Zusatzterm in (2.53) ist über $a_0 = 1.7 \times 10^{-3}$ und $b_0 = 0.8$ für Aggregate parametrisiert und entfällt für kompakte Partikelformen. Mitchell und Heymsfield (2005) empfehlen zur Beschreibung der Oberflächenrauigkeit $\delta_0 = 5.83$ und $C_0 = 0.6$ zu verwenden. Die Relation $Re-X$, wird als Potenzgesetz geschrieben, wobei die Konstanten a und b analytisch berechnet werden können. Um die Best-Zahl X zu berechnen, muss die Masse und Oberfläche der Kristalle bekannt sein. Diese werden aus den Relationen (2.49) sowie (2.50) abgeschätzt. Mitchell und Heymsfield (2005) weisen darauf hin, dass die mit diesem Schema berechneten Fallgeschwindigkeiten sehr stark von den verwendeten empirischen Relationen zwischen Masse und Länge der Kristalle abhängen. Abbildung 2.10 fasst Sedimentationsgeschwindigkeiten für unterschiedliche Kristallarten als Funktion ihrer Masse zusammen.

Für sehr kleine Partikel ($Re < 1$) ist die Grenzschichtannahme in der Theorie von Mitchell und Heymsfield (2005) prinzipiell nicht mehr gültig und die Partikel fallen im Stokes-Regime. Für die Fallgeschwindigkeit einer Kugel in einem viskosen Fluid ist die Lösung für die Sedimentationsgeschwindigkeit gut bekannt:

$$v_{t,Sph} = \left(\frac{g}{6\pi\eta} \right) \frac{m}{r} C_C. \quad (2.54)$$

In (2.54) beschreibt $C_C = 1 + 1.26\lambda/r$ die Cunningham-Korrektur für sehr kleine Partikelradien, die nahe der mittleren freien Weglänge λ liegen. Westbrook (2008) findet in seiner Arbeit, dass die für $Re \gg 1$ erfolgreich überprüfte Methode von Mitchell und Heymsfield (2005) bei kleinen Radien ($Re < 1$) von der Stokes-Geschwindigkeit abweicht. Er zeigt auf, dass die Sedimentationsgeschwindigkeiten für nicht sphärische Partikel mit $D < 100 \mu\text{m}$ berechnet werden können, indem in (2.54) $r = \chi_i$ gesetzt wird. Allerdings weist Westbrook (2008) darauf hin, dass mit geeigneten empirischen Relationen für m und A realistische Fallgeschwindigkeiten im Stokes-Regime über (2.53) berechnet werden können. In Abbildung 2.10 sind zum Vergleich die Fallgeschwindigkeiten für sphärische und hexagonale Eispartikel nach (2.54) gezeigt. Die maximale Überschätzung der berechneten Sedimentationsgeschwindigkeiten nach Mitchell und Heymsfield (2005) gegenüber der Stokes-Lösung beträgt für Partikel mit $D < 30 \mu\text{m} \sim 30\%$. Diese verringert sich mit zunehmender Größe. Für $Re \sim 1$ verliert die Stokes-Lösung ihre Gültigkeit. Die Fallgeschwindigkeiten für Aggregate weichen von der Lösung für sphärische Partikel stark ab. Hier gelten die verwendeten Relation $m - D$ nur für größere Partikel und sollten in diesem Massenbereich nicht verwendet werden.

Lagrange'sche Eispartikelverfolgung

In EULAG-LCM werden einzelne Eiskristalle verfolgt. Diese werden mit dem Windfeld \mathbf{u} transportiert, bewegen sich aber auch relativ zur Strömung aufgrund der Sedimentation und zu einem

gewissen Teil aufgrund ihrer Trägheit. Die Trajektorie eines Kristalls wird im EULAG-LCM als

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{u} + (\tilde{\mathbf{u}}_i + \mathbf{v}_{t,i}), \quad (2.55)$$

berechnet. In (2.55) repräsentiert \mathbf{x}_i die Position des Eispartikels, $\mathbf{v}_{t,i}$ seine Sedimentationsgeschwindigkeit und $\tilde{\mathbf{u}}_i$ eine zusätzliche Geschwindigkeitskomponente, die turbulente Fluktuationen im nicht aufgelösten Geschwindigkeitsfeld repräsentiert (siehe z.B. Schilling *et al.* (1996)). $\tilde{\mathbf{u}}_i$ sorgt für eine Dispersion der Eiskristalle. Die Amplitude dieser Fluktuationen wird anhand der lokalen turbulenten kinetischen Energie je Massenanteil TKE berechnet, die im EULAG Modell prognostiziert wird. Über einen Monte-Carlo Prozess ergibt sich $\tilde{\mathbf{u}}_i$ zu

$$\tilde{\mathbf{u}}_i(t) = R_L \tilde{\mathbf{u}}_i(t - \Delta t_{MIC}) + \mathbf{u}_i^*(t). \quad (2.56)$$

$$\mathbf{u}_i^*(t) = \sqrt{1 - R_L^2} \sigma_u \Omega. \quad (2.57)$$

In (2.57) ist Ω eine normalverteilte Zufallsvariable und R_L die Lagrange'sche Autokorrelationsfunktion, mit

$$R_L = \exp\left(-\frac{\Delta t_{MIC}}{\tau_L}\right) \quad (2.58)$$

und $\tau_L = K_m/TKE$ die Lagrange'sche Zeitskala. Ihre Verwendung basiert auf der Annahme, dass Kristalle diese zusätzliche Geschwindigkeit nicht wesentlich von einem Zeitschritt zum nächsten ändern, verknüpft mit den turbulenten Strukturen in der Strömung. \mathbf{u}_i^* ist eine Zufallsgeschwindigkeit, die über eine Monte-Carlo Methode über eine normalverteilte Zufallszahl mit der Standardabweichung

$$\sigma_u = \sqrt{TKE}, \quad (2.59)$$

gewonnen wird. Die Größe dieser Fluktuationen ist durch die vorhergesagte Stärke der Turbulenzelemente bestimmt.

2.4 Strahlung

Neben der vertikalen Verlagerung von strahlungsaktivem Wasserdampf wechselwirken Eiswolken auch direkt mit der Strahlung. Die Wolken erzeugen eine Umverteilung der absorbierten Strahlung in einer vertikalen Säule der Atmosphäre durch Streuung solarer Strahlung und Absorption infraroter Strahlung (IR). Quantitativ hängt diese Strahlungswechselwirkung von der horizontalen und vertikalen Struktur der Wolke und der Form und Größe der darin enthaltenen Kristalle ab (Gu und Liou, 2000). Es ist bis heute nicht eindeutig nachgewiesen, ob Zirren in ihrer Gesamtheit nun einen positiven oder negativen Strahlungsantrieb am Oberrand der Atmosphäre (TOA) für das Erdklima bedeuten (Lynch *et al.*, 2002). Bei optisch dünnen Zirren überwiegt der erwärmende Effekt, da die Sonnenstrahlung nur unwesentlich abgeschwächt wird, während optisch dichtere Zirren durch die stärkere Reflektion kühlend wirken. Für die Simulation einzelner Zirren ist die durch die strahlungsbedingten diabatischen Quellterme hervorgerufene Wechselwirkung der Strahlung mit der Dynamik wichtig. Auf- und Abwinde, Resultate turbulenter Austauschprozesse, entstehen, die ihrerseits einen Einfluss auf die Struktur des Wolkenfeldes haben.

Ein weiterer Prozess, bei dem Strahlung die Wolkenentstehung und Persistenz modifiziert, ist der

Effekt auf das diffusive Wachstum der Eiskristalle. Durch IR Absorption oder Emission erwärmt oder kühlt sich die Eiskristalloberfläche gegenüber der umgebenden Luft ab. Die geänderte Temperatur bewirkt, dass sich der Sättigungsdampfdruck über der Kristalloberfläche verändert und die Eisteilchen schneller verdunsten oder wachsen (Hall und Pruppacher, 1976; Stephens, 1983; Gu und Liou, 2000). Dieser Einfluss ist durch den zweiten Term auf der rechten Seite von (2.36) beschrieben. Für die Berechnung der hierzu benötigten absorbierten Strahlung $H_{R,i}$ sind optische Eigenschaften über Eiskristalle verschiedener Form und Größe nötig. Dies ist ein wesentlicher Punkt in der aktuellen Zirrenforschung. Aufgrund der Komplexität des Themas ist dieser Teil der Wechselwirkung Strahlung - Eiswachstum noch nicht in EULAG-LCM implementiert. Allerdings ist über (2.36) und das Strahlungsmodul eine Schnittstelle für diesen Austausch vorhanden und erlaubt so die zukünftige Erweiterung des Modellsystems.

Um den Einfluss der Strahlung auf Zirren untersuchen zu können, wurde eine 1D Strahlungsroutine von Fu und Liou (1993) an das EULAG gekoppelt. Anforderungen an dieses Modul sind:

- Effiziente Berechnung der Erwärmungsraten, da die Routine für jeden Gitterpunkt aufgerufen wird.
- Möglichst genaue Beschreibung der Strahlungseigenschaften von Zirrenpartikeln.

Diesen Anforderungen wird die genannte Routine gerecht, welche auf einer Parametrisierung der optischen Eigenschaften anhand der Messdaten für eine große Zahl von Zirrenfeldern beruht und Eingang in viele Modelle gefunden hat.

2.4.1 Parametrisierung der Strahlungstransportgleichung

Die Berechnung der strahlungsbedingten Antriebsterme $Q_R(z)$ in der thermodynamischen Gleichung (2.4) wird mit Hilfe des Strahlungstransportschemas von Liou *et al.* (1988) berechnet. Dieses basiert auf der sogenannten 'delta-four-stream' Näherung für planparallele Atmosphären. Hier wird angenommen, dass sich Strahlung nur in vier diskrete Raumrichtungen ausbreiten kann. Der Strahlungstransport wird in einzelnen Säulen berechnet (independent column approximation). Die Wolkenstrukturen etc. werden dann als horizontal homogen angenommen, um Streuung von Photonen aus lateralen Gebieten berechnen zu können. Die Absorption von Strahlung durch Gase wird über die 'correlated k-distribution' berücksichtigt (Fu und Liou, 1992). Das Spektrum solarer und infraroter Strahlung wird in einzelne, nicht überlappende Bereiche unterteilt. Im kurzwelligen Bereich wird die Absorption von H_2O , O_3 , CO_2 und O_2 berechnet, im Infraroten H_2O , O_3 , CO_2 , CH_4 und N_2O . Wolkenwechselwirkungen für Zirren sind über den Eiswassergehalt IWC und den Effektivradius D_{ge} parametrisiert, unter der Annahme, dass hexagonales Eis vorliegt. Diese Kristallform ist eine der möglichen Eisformen in EULAG-LCM. Aus den exakten Informationen über die Eiskristallgrößenverteilungen in den einzelnen Gitterboxen wird, für die Koppelung an das Strahlungsmodul, auf die benötigten zwei Parameter zurückgerechnet.

Der Eiswassergehalt und der Effektivradius für hexagonale Säulchen mit Länge D und Breite W , wie in Fu (1996) beschrieben, werden gebildet als

$$IWC = \frac{1}{V_{BOX}} \sum_{i=1}^{N_{SIM}} m_i \mathcal{N}_i \quad (2.60)$$

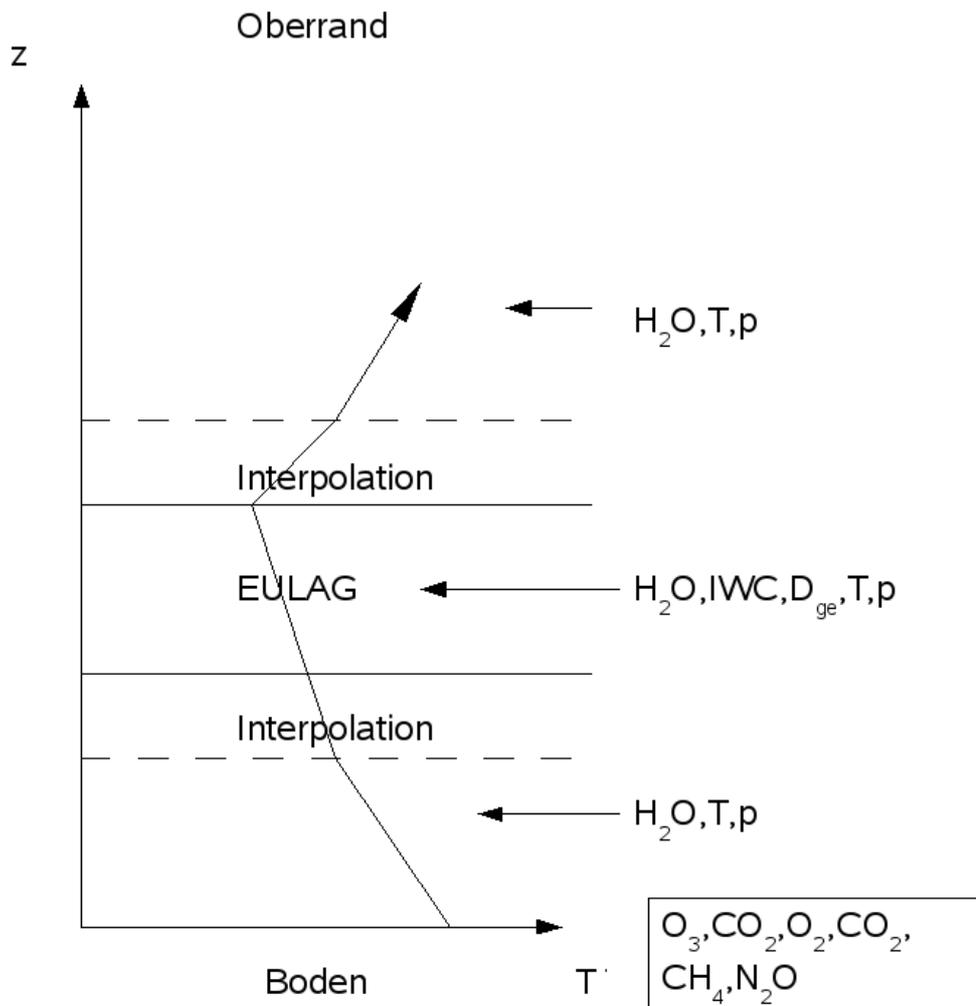


Abbildung 2.11: Schematische Übersicht, wie das Strahlungsmodul an EULAG-LCM gekoppelt ist. Vertikale Profile von O_3 , CO_2 , O_2 , CH_4 und N_2O werden aus einem Hintergrundprofil übernommen. Die EULAG-LCM Schicht wird mittels der Temperatur in das entsprechende Höhenintervall eingebettet. Zur weiteren Erläuterung s. Text.

$$\begin{aligned}
D_{ge} &\equiv \frac{\int_{D_{min}}^{D_{max}} W^2 D n(D) dD}{\int_{D_{min}}^{D_{max}} \left[W D + \frac{\sqrt{3}}{4} W^2 \right] n(D) dD} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^{N_{SIM}} W_i^2 D_i}{\sum_{i=1}^{N_{SIM}} \left[W_i D_i + \frac{\sqrt{3}}{4} W_i^2 \right]}. \tag{2.61}
\end{aligned}$$

wobei $n(D)$ die auf die Bin-Weite normierte Anzahlkonzentration von Kristallen mit Länge D ist. Wechselwirkungen der Aerosolphase mit dem Strahlungsfeld sind nicht berücksichtigt.

Im EULAG-LCM wird meist nur ein Ausschnitt aus der Atmosphäre mit vertikalen Erstreckungen von einigen Kilometern simuliert, während zur Berechnung des Strahlungstransportes Informationen über den Zustand der Atmosphäre vom Boden bis zum Atmosphärenoberrand benötigt werden. Annahmen über den vertikalen Aufbau der Luftsäule bezüglich Zusammensetzung und thermodynamischen Bedingungen werden deshalb aus Hintergrundprofilen gewonnen, die auf US -Standard Atmosphären nach Anderson *et al.* (1986) beruhen. In dieses Hintergrundprofil wird der EULAG-LCM Ausschnitt eingebettet. Der entsprechende Höhenbereich wird über die Temperatur gefunden, wie in Abbildung 2.11 dargestellt. In jeder vertikalen Säule wird ein Profil der strahlungsrelevanten Größen gebildet. Die Profile von O_3 , CO_2 , O_2 , CH_4 und N_2O sind über ihre Hintergrundprofile definiert, ebenso T , p und die Wasserdampfkonzentration in Atmosphärenbereichen außerhalb der EULAG-LCM Schicht. Innerhalb des Integrationsgebietes sind T , p , H_2O , D_{ge} und Eiswassergehalt bekannt. Im Übergang zwischen Hintergrundprofil und EULAG-LCM befindet sich ein Interpolationsbereich, in dem die beiden Profile linear ineinander überführt werden, um starke Gradienten zu vermeiden, die zu falschen Ergebnissen in der Strahlungstransportrechnung führen können. Neben den in (2.4) benötigten Erwärmungsraten Q_R liefert das Strahlungsmodul auch noch aufwärts und abwärts gerichtete Flüsse solarer und infraroter Strahlung. Diese können in zukünftigen Erweiterungen für die Berechnung der Wechselwirkung Strahlung - Eispartikelwachstum verwendet werden.

2.5 Aggregation von Eispartikeln

Optische Proben von Eispartikeln in Zirren zeigen oft Strukturen, die durch den Prozess der Aggregation entstanden sind. Bei diesem treffen Kristalle aufeinander, bleiben aneinander haften und bilden so einen Verbund aus mehreren Einzelteilchen. In Zirren tritt die Aggregation aufgrund differentieller Sedimentation auf (Westbrook *et al.*, 2004a; Field und Heymsfield, 2003).

Große Partikel fallen schneller als kleinere und sammeln diese auf ihrem Weg auf.

Details über den Mechanismus, der die Eispartikel verbindet, ist Gegenstand aktueller Forschung und nicht geklärt. Elektrische Kräfte, ein kurzfristiges Anschmelzen der Eisoberflächen durch eine lokale Druckerhöhung beim Stoß, die Existenz einer quasi flüssigen Schicht an der Kristaloberfläche oder ein Sinterungsprozess, bei dem die Oberflächenenergie der stoßenden Partikel minimiert wird (Field *et al.*, 2006b) sind mögliche Erklärungsansätze (Meakin, 1992). Kristalle mit komplexerer Struktur könnten sich auch rein mechanisch verhaken und damit die Kontaktzeit der beiden Eisteilchen verlängern (Field, 1999). Der exakte Mechanismus ist nicht bekannt.

Wichtig für die EULAG-LCM Simulationen ist die Umverteilung der Eismasse von kleineren Partikeln hin zu größeren. Die Anzahlkonzentration der kleineren Eisteilchen wird verringert und es entstehen Teilchen mit größer Masse, wie in Abbildung 2.12 skizziert. Der Aggregationsprozess verändert die Größenverteilung der Eiskristalle in Zirren und damit die optischen Eigenschaften und den Eismassenfluss.

Aufgrund der Komplexität des Aggregationsprozesses in Zirren und offener Fragen in Bezug auf die Effizienz des Mechanismus für unterschiedliche Partikeltypen und Formen, sind Studien zum Aggregationsprozess selten, im Vergleich zur Koaleszenz flüssiger Tropfen in warmen Wolken. Westbrook *et al.* (2004a) benutzen eine Monte-Carlo Methode, um die Aggregation synthetischer Eispartikel durchzuführen und die Struktur der Größenverteilung und Aggregatform zu klären. Mitchell (1988) und Lawson *et al.* (1998) benutzen analytische Modelle, um die Entwicklung parametrisierter Größenverteilungen aus Messungen unter dem Einfluss von Wachstum, Aggregation und dem Aufbrechen von Eiskristallen zu verfolgen. Field und Heymsfield (2003) verwenden ein einfaches numerisches Modell, um vermessene Verteilungen unter dem Prozess der Aggregation zu verfolgen. Diese Modelle vernachlässigen jedoch die Nukleation von neuem Eis und Wechselwirkungen mit Dynamik und Strahlung und geben so nur einen Teilaspekt des Lebenszyklus von Zirren wieder.

In bestehenden Zirrusmodellen, die eine spektrale Darstellung der Mikrophysik^{2.1} zur Beschreibung der Eisphase verwenden, kann der Aggregationsprozess über die Ratengleichung von Smoluchowski (1917) parametrisiert werden (Khain und Sednev, 1995; Cardwell *et al.*, 2003).

$$\frac{dN_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{ij} N_i(t) N_j(t) - N_k(t) \sum_{j=1}^{\infty} K_{kj} N_j(t) \quad (2.62)$$

Gleichung (2.62) beschreibt die zeitliche Änderung der Anzahl von Eiskristallen der Größenklasse k . Produktions- bzw. Verlustterme sind gegeben, wenn Teilchen j mit Teilchen i aggregieren um

^{2.1}Die Spektren der Eisphase werden hinsichtlich ihrer Masse oder ihres Radius in eine endliche Zahl von einheitlichen Größenklassen unterteilt.

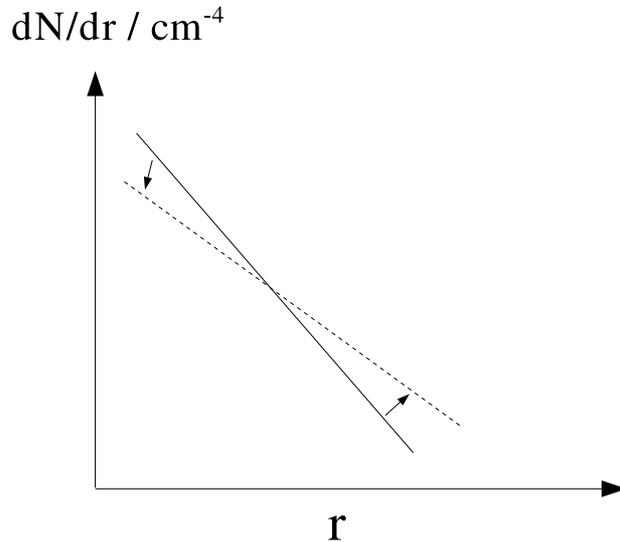


Abbildung 2.12: Schematische Darstellung des Effekts des Aggregationsprozesses auf die Größtenverteilung der Eiskristalle. Bei einer gegebenen Verteilung (durchgezogene Linie) nimmt die Anzahlkonzentration kleiner Teilchen ab, die großer Partikel zu (gestrichelte Linie).

Teilchen der Masse k zu generieren (1. Term), bzw. Teilchen k von Teilchen j aufgesammelt werden (2. Term). Die Aggregationsrate wird dabei durch die Stoßratenmatrix K_{ij} parametrisiert. Westbrook *et al.* (2004a) schlagen für die Stoßratenmatrix den 'sweep-out' Prozess vor, wie er in den meisten der oben aufgeführten Studien verwendet wird. In Abbildung 2.13 ist die Idee schematisch dargestellt. Zwei Kristalle mit Radien r_i und r_j haben unterschiedliche Sedimentationsgeschwindigkeiten $v_i > v_j$. Die Fläche $\pi (r_i + r_j)^2$ spiegelt sämtliche Trajektorien der beiden Partikel wider, die einen Kontakt der Eiskristalle ermöglichen. Je höher die Relativgeschwindigkeit $|v_i - v_j|$ der beiden Kristalle zueinander ist, desto größer ist die Wahrscheinlichkeit, dass Teilchen der Klasse j von Teilchen der Klasse i aufgesammelt werden. Es ergibt sich

$$K_{ij} = \pi (r_i + r_j)^2 |v_i - v_j| E_a. \quad (2.63)$$

E_a beschreibt hier die Aggregationseffizienz und hat Werte zwischen 0 (kein Zusammenstoß führt zum Anhaften) und 1 (jede Kollision führt zum Anhaften). Neben dieser bestimmen die Anzahlkonzentrationen und Relativgeschwindigkeiten der aggregierenden Eispartikelklassen die Effizienz des Aggregationsprozesses.

Gleichung (2.62) gilt nur unter der Annahme einer kontinuierlichen Verteilung der Eiskristalle in einer Gitterbox, wenn die Anzahldichten der Eispartikel über ihre räumlichen Mittelwerte gegeben sind. Eine Anwendung für die Lagrange'sche Eispartikelverfolgung ist deshalb nicht möglich.

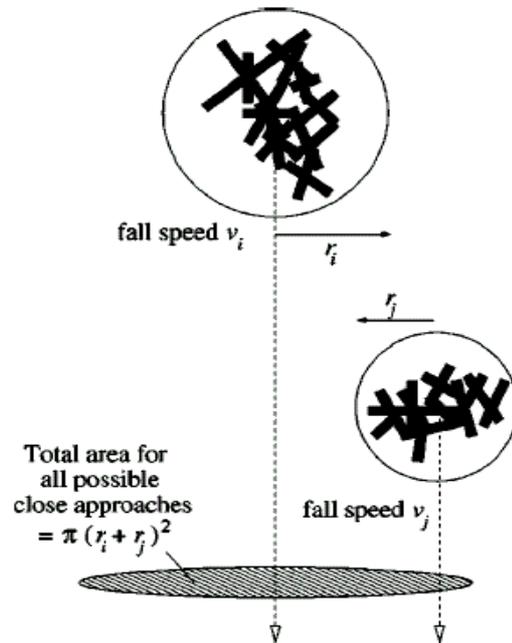


Abbildung 2.13: Schematische Illustration der Trajektorien zweier Eiskristalle mit unterschiedlichen Fallgeschwindigkeiten v_i und v_j , die zu einer möglichen Kollision der Eispartikel führen. Die schraffierte Fläche $\pi (r_i + r_j)^2$ zeigt den Bereich aller Trajektorien, die zu einem Aggregationsereignis führen können, nach Westbrook et al. (2004a).

Im Folgenden werden neue Algorithmen entwickelt, mit denen der Aggregationsprozess im EULAG-LCM auf Basis von \mathcal{N}_{sim} Trajektorien, einer begrenzten Teilmenge der realen Eispartikel, simuliert werden kann. Aufgrund dieser Beschränkung in der Statistik der Partikeleigenschaften ist es erforderlich, zusätzlich Annahmen über mittlere Eigenschaften der Eisphase in die Algorithmen einfließen zu lassen.

2.5.1 Aggregationsalgorithmen

Für jede Gitterbox wird der Aggregationsprozess einzeln betrachtet, d.h. Aggregation über Gitterboxgrenzen hinweg findet nicht statt. Die entwickelten Algorithmen basieren auf der Idee des 'sweep out' Prozesses. Hierfür wird folgendes Schema angewandt:

- a) Die Simulationspartikel werden nach ihrer z -Koordinate in absteigender Reihenfolge sortiert. Dieser Schritt vermeidet, dass im Folgenden $\mathcal{N}_{sim} \times \mathcal{N}_{sim}$ Trajektorienbahnen auf mögliche Kollisionen hin untersucht werden müssen. Ausgehend vom obersten Partikel werden in absteigender Reihenfolge bezüglich der vertikalen Koordinate potentielle Kollisionspartner identifiziert (in Abbildung 2.14 ist die Reihenfolge: $i, 1, 2, 3, \dots$).
- b) Simulationspartikel, die im Zeitschritt Δt_{MIC} von Teilchen i unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Sedimentationsgeschwindigkeiten eingeholt werden können, erfüllen die

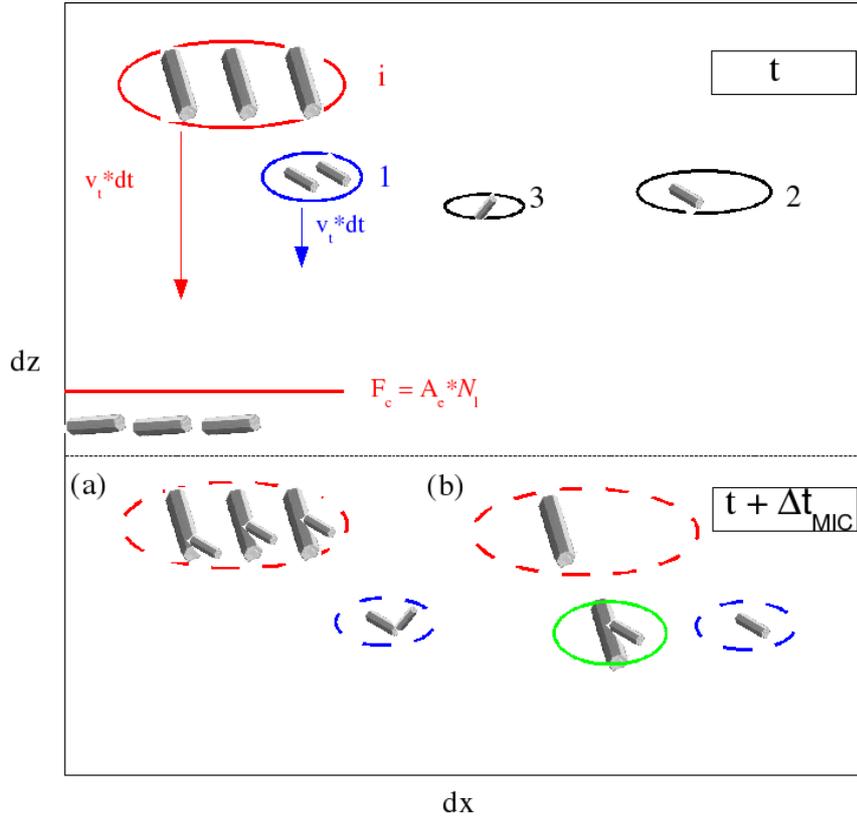


Abbildung 2.14: Schematische Darstellung des Hybrid Aggregationsalgorithmus im EULAG-LCM. Beschreibung siehe Text.

Beziehung:

$$z_i - (v_{t,i} + \tilde{w}_i) dt' = z_j - (v_{t,j} + \tilde{w}_j) dt' \iff dt' = \frac{z_i - z_j}{(v_{t,i} + \tilde{w}_i) - (v_{t,j} + \tilde{w}_j)} < \Delta t_{MIC}. \quad (2.64)$$

Zusätzlich zur Sedimentation wird hier die turbulente vertikale Geschwindigkeitskomponente \tilde{w} aus (2.55) verwendet.

- c) Ist (2.64) erfüllt, wird der Anteil der \mathcal{N}_j realen Eiskristalle aus j berechnet, der von den schneller fallenden Teilchen i aufgesammelt werden kann. Zusätzlich zur Information der Simulationsteilchen, werden nun gemittelte Eigenschaften der Teilchen verwendet, um Aggregationswahrscheinlichkeiten zu berechnen. In Anlehnung an den 'sweep-out' Prozess wird eine maximale Fläche F_c der auf sammelnden Kristalle gebildet, mit der sie das Volumen der Gitterbox überstreichen:

$$F_c = A_e \mathcal{N}_i. \quad (2.65)$$

A_e wird aus den empirischen Relationen in Kapitel 2.3.2 ermittelt. Dies berücksichtigt implizit, dass die Kristalle eine zufällige Orientierung im Raum haben können. Aufgrund der geringen Anzahldichten von Eiskristallen in Zirren wird hier vorausgesetzt, dass die \mathcal{N}_i Teilchen nicht überlappen.

Unter der Annahme, dass die Kristalle aus j in der Box horizontal gleichverteilt sind, kann eine durchschnittliche Anzahlkonzentration C_j der Teilchen pro Fläche gebildet werden:

$$C_j = \frac{\mathcal{N}_j}{dx dy}. \quad (2.66)$$

Multipliziert man diese mit F_c , ergibt sich die Anzahl der aufgesammelten Kristalle aus j zu:

$$\mathcal{N}_{sweep} = F_c C_j E_a \quad (2.67)$$

E_a beschreibt hier in Anlehnung an (2.63) eine Aggregationseffizienz. In der Regel gilt $\mathcal{N}_{sweep}/\mathcal{N}_i < 1$.

- \mathcal{N}_{sweep} ist die Anzahl von Kristallen aus der von Simulationsteilchen j repräsentierten Menge realer Eiskristalle, welche von jenen aus i im Zeitschritt Δt_{MIC} aufgesammelt werden.

Zwei unterschiedliche Algorithmen werden dargestellt, um diese Information auf die \mathcal{N}_{sim} Simulationsteilchen zu übertragen.

Partikel - Partikel Algorithmus

Im Bild der Einzelpartikelverfolgung werden die Eisphaseneigenschaften aus der Kenntnis der Trajektorien der \mathcal{N}_{sim} Simulationsteilchen gewonnen. Im Partikel - Partikel Aggregationsalgorithmus wird in diesem Sinne über \mathcal{N}_{sweep} eine Wahrscheinlichkeit Ω_i gebildet, dass genau das Simulationsteilchen i eines derjenigen Kristalle aus der Menge der \mathcal{N}_i Partikel ist, welche mit Teilchen aus j zusammenstoßen (unter der Annahme, dass Teilchen nicht mehrfach stoßen). Diese ist:

$$\Omega_i = \frac{\mathcal{N}_{sweep}}{\mathcal{N}_i} \quad (2.68)$$

Über einen Monte-Carlo Prozess wird entschieden, ob für das Simulationspartikel ein Aggregationsereignis stattfindet oder nicht. Hierfür wird eine Zufallszahl $\zeta \in [0, 1]$ gebildet. Gilt $\zeta \leq \Omega_i$ aggregieren die beiden Kristalle. Da die Simulationsteilchen unterschiedliche Anzahlen realer Eiskristalle repräsentieren können, ist die maximale Anzahl der Partikel, die aggregieren, durch die kleinere bestimmt. Angenommen es gilt $\mathcal{N}_i > \mathcal{N}_j$, so aggregieren alle realen Kristalle aus j mit denen aus i . Die restlichen Kristalle verbleiben in i und aggregieren nicht.

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_i &= \mathcal{N}_i - \mathcal{N}_j & ; & & m_i &= m_i \\ \mathcal{N}_j &= \mathcal{N}_j & ; & & m_j &= m_j + m_i. \end{aligned}$$

- Der Vorteil des Partikel - Partikel Algorithmus ist, dass im Bild der Einzelteilchenverfolgung weiterhin die Eigenschaften einzelner, repräsentativer Partikel betrachtet werden. Somit können gezielt Aussagen über deren Eigenschaften getroffen werden. Allerdings sind die Wahrscheinlichkeiten Ω_i in Zirkeln gering, so dass durch die begrenzte Anzahl an Simulationspartikeln in der Regel statistisch nur eine geringe Anzahl von Aggregationsereignissen erfasst werden können.

Die Wahrscheinlichkeit, dass Simulationsteilchen während ihres Lebenszyklus nicht aggregieren ist hoch, obwohl ein Teil der realen Partikel dies mit Sicherheit tut. Dies soll mit dem nächsten Algorithmus berücksichtigt werden.

Hybrid Algorithmus

Um die Probleme eines zu geringen Stichprobenumfangs aus dem Partikel-Partikel Algorithmus zu umgehen, wird nun berücksichtigt, dass ein Teil der realen Eiskristalle eines Simulationsteilchens aggregiert, ein anderer nicht. Zwei Varianten werden vorgestellt.

Schema A: In der einfacheren Variante werden die \mathcal{N}_{sweep} Kristalle in (2.67), die aus j aufgesammelt werden, anteilmäßig auf alle Kristalle \mathcal{N}_i aufgeteilt, also

$$\mathcal{N}_j = \mathcal{N}_j - \mathcal{N}_{sweep}. \quad (2.69)$$

Die Masse wird auf alle Kristalle in i verteilt:

$$m_i = m_i + m_j \frac{\mathcal{N}_{sweep}}{\mathcal{N}_i}. \quad (2.70)$$

Dies ist im unteren linken Teil der Abbildung 2.13 dargestellt. Die Anzahl der Kristalle in i bleibt erhalten. Der Vorteil dieser Methode liegt darin, dass die Anzahl der Simulationspartikel nicht erhöht wird. In diesem Algorithmus weicht man vom Bild der Einzelteilchenverfolgung ab. Da die Masse einiger weniger aufgesammlter Partikel auf alle Teilchen verteilt wird, entspricht m_i nicht mehr der eines einzelnen Kristalls - dieser hätte nach dem Aggregationsprozess seine alte Masse oder $m_i + m_j$ - sondern einer mittleren Masse der repräsentierten realen Kristalle. Hier wird angenommen, dass im Laufe der Simulation immer wieder andere Partikel aus i aggregieren und sich somit im Mittel die vorhergesagte Massenverteilung ergibt. Somit sind Aussagen über die Eigenschaften einzelner Partikel in Simulationen mit dem Hybrid Algorithmus nicht mehr möglich, allerdings ergeben sich gemittelte Eigenschaften und die Eispartikelgrößenverteilung aus der Kenntnis von nur \mathcal{N}_{sim} Partikeleigenschaften. Ein Nachteil entsteht, wenn die Anzahl der aufgesammelten Kristalle \mathcal{N}_{sweep} deutlich kleiner als \mathcal{N}_i ist. Dann wird die Masse der wenigen Kristalle auf viele Partikel verteilt. Anstatt wenige große Teilchen zu erzeugen, werden mehr Teilchen mit deutlich geringeren Radien entstehen. Um dieses Problem zu umgehen, müssen neue Simulationspartikel eingeführt werden, wie in Schema B beschrieben.

Schema B: Die aggregierten Partikel werden im Falle $\mathcal{N}_{sweep} < \mathcal{N}_i$ dann durch ein neues Simulationspartikel k beschrieben, wenn deren Konzentration $N_s = \mathcal{N}_{sweep}/V_{BOX}$ einen Schwellenwert N_{sca} (z.B. 10^{-7} cm^{-3}) überschreitet.

$$\mathcal{N}_i = \mathcal{N}_i - \mathcal{N}_{sweep}; \quad \mathcal{N}_j = \mathcal{N}_j - \mathcal{N}_{sweep}; \quad \mathcal{N}_k = \mathcal{N}_{sweep}; \quad (2.71)$$

$$m_k = m_j + m_i. \quad (2.72)$$

Dieser Cluster wird auf Höhe des Aggregationsvorgangs in die Gitterbox eingefügt, wie im unteren rechten Teil der Abbildung skizziert. Sonst folgt der Algorithmus Schema A. Nachteil dieser Methode ist, dass neue Simulationsteilchen entstehen und den Rechenaufwand des EULAG-LCM erhöhen.

- Der Vorteil des Hybrid Aggregationsalgorithmus besteht darin, dass Informationen über mittlere Eigenschaften der Eisphase (N_i , IWC etc.) und Eispartikelgrößenverteilungen auch aus der Kenntnis der Trajektorien von nur wenigen Simulationspartikeln bestimmt werden können. Die Eigenschaften der Simulationsteilchen entsprechen dann aber den mittleren Eigenschaften der realen Eispartikel. Detailliertere Informationen über Partikeleigenschaften gehen so verloren.

2.5.2 Skalierung von Eispartikelgrößenverteilungen

Aus Laborstudien und Computersimulationen zu Aggregationsprozessen in unterschiedlichen Teilbereichen der Physik zeigte sich, dass Partikelgrößenverteilungen (GV), die durch den Aggregationsprozess beeinflusst sind, erfolgreich über

$$n(D, t) = D_1(t)^{-\theta} g[D/D_1(t)] \quad (2.73)$$

skaliert werden können (Meakin, 1992). $n(D, t)$ ist die auf die Binweite normierte Anzahlkonzentration. Gleichung (2.73) besagt, dass eine universelle Funktion g gefunden werden kann, die, unabhängig von der Zeit, mit einer mittleren Eispartikellänge $D_1(t)^{-\theta}$ skaliert, die GV zu jedem Zeitpunkt beschreibt. g hängt nur vom normierten Durchmesser $D/D_1(t)$ ab. Der mittlere Durchmesser wird hier, wie in Field und Heymsfield (2003) beschrieben, mittels

$$D_1 = 0.5 \frac{\int_0^{\infty} D^3 n(D, t) dD}{\int_0^{\infty} D^2 n(D, t) dD} \quad (2.74)$$

berechnet. Field und Heymsfield (2003) zeigen, dass GV, die aus Messungen in natürlichen Zirken stammen, erfolgreich nach (2.73) skaliert werden können. Den benötigten Skalierungsfaktor θ leiten Field und Heymsfield (2003) oder Westbrook *et al.* (2004b) dabei aus der Annahme einer konstanten Eismassenflussdichte $\phi = \int_0^{\infty} n(D, t) m(D) v_t(D) dD$ ab. Wie in (2.73) vorhergesagt, fallen die GV, die zu unterschiedlichen Zeiten gewonnen werden, auf einem universellen Graph g zusammen, zumindest für den Teilbereich der GV, der ausschließlich durch Aggregation beeinflusst ist. Unter der Annahme, dass dieser Bereich der GV durch einen exponentiellen Ansatz der Form $n(D, t) = N_0(t) \exp[-\lambda(t)D]$ dargestellt werden kann, zeigen Field und Heymsfield (2003) eine Beziehung zwischen θ , ϕ , λ und N_0 auf, aus welcher der Skalierungsfaktor bestimmt werden kann:

$$d \ln N_0 \propto d \ln \phi + \theta d \ln \lambda. \quad (2.75)$$

Ist die Eismassenflussdichte konstant ($d \ln \phi = 0$), ist θ durch den Gradient von $d \ln N_0$ gegenüber $d \ln \lambda$ gegeben.

Ist die Physik des Aggregationsalgorithmus in Kapitel 2.5 richtig beschrieben, sollte dieser Befund auch für GV gelten, die in EULAG-LCM Simulationen gefunden werden. Dies wird in Kapitel 5.1.5 demonstriert werden.

Kapitel 3

Idealisierte Simulationen zur Zirrenbildung

In diesem Kapitel wird der Aufbau einer EULAG-LCM Simulation erläutert. Des Weiteren werden idealisierte Studien zur Anzahl der benötigten Simulationspartikel, dem Einfluss der Dimensionalität auf die Turbulenz und zur internen Dynamik von Zirren präsentiert.

3.1 Aufbau einer EULAG-LCM Simulation

Im Folgenden wird ein typischer Aufbau einer EULAG-LCM Simulation, wie er auch in den weiteren Abschnitten der Arbeit verwendet wird, dargestellt. Damit ist ein leichteres Verständnis des Zusammenwirkens der verschiedenen Bausteine des Modellsystems zu erhalten. Generell können Simulationen in 2D oder 3D durchgeführt werden. Aufgrund der hohen Rechenzeitanforderung von 3D-Rechnungen werden überwiegend 2D Modellgebiete verwendet.

1. Ansetzen des Modellgebietes: Ein kartesisches Gitter ist Ausgangspunkt der Modellrechnungen. Die gesamte horizontale Erstreckung L und vertikale Ausdehnung Z des Integrationsgebietes wird in ein homogenes Gitter mit den Gitterpunktabständen dx und dz in $n \times l$ Punkte eingeteilt. In Abbildung 3.1 ist in der linken Hälfte der Aufbau dargestellt und ein beliebiger Gitterpunkt i, k eingezeichnet. An diesen Punkten liegen die dynamischen Variablen vor, die im EULAG berechnet werden. Ebenso sind Wasserdampfkonzentrationen, Aerosolverteilung und Zusammensetzung bekannt. Da die Eiskristalle in EULAG-LCM unabhängig von dieser Struktur verfolgt werden - die Position des Partikels ist an beliebigen Punkten (x_p, z_p) gegeben - ist es zur Beschreibung der Interaktion zwischen Gas- und Eisphase, sowie der Dynamik nötig, Eiskristalle einzelnen Gitterboxen zuzuweisen. Wie in Abbildung 3.1 dargestellt, werden alle Kristalle mit einem maximalen Abstand von $|x_p - x_i| < 0.5 \cdot dx$ und $|z_p - z_i| < 0.5 \cdot dz$ dem Gitterpunkt i, k zugeschrieben. Die lateralen Randbedingungen sind periodisch. In der Vertikalen werden feste Ränder am Ober- und Unterrand des Simulationsgebietes angenommen, hier

gilt also $w = 0$.

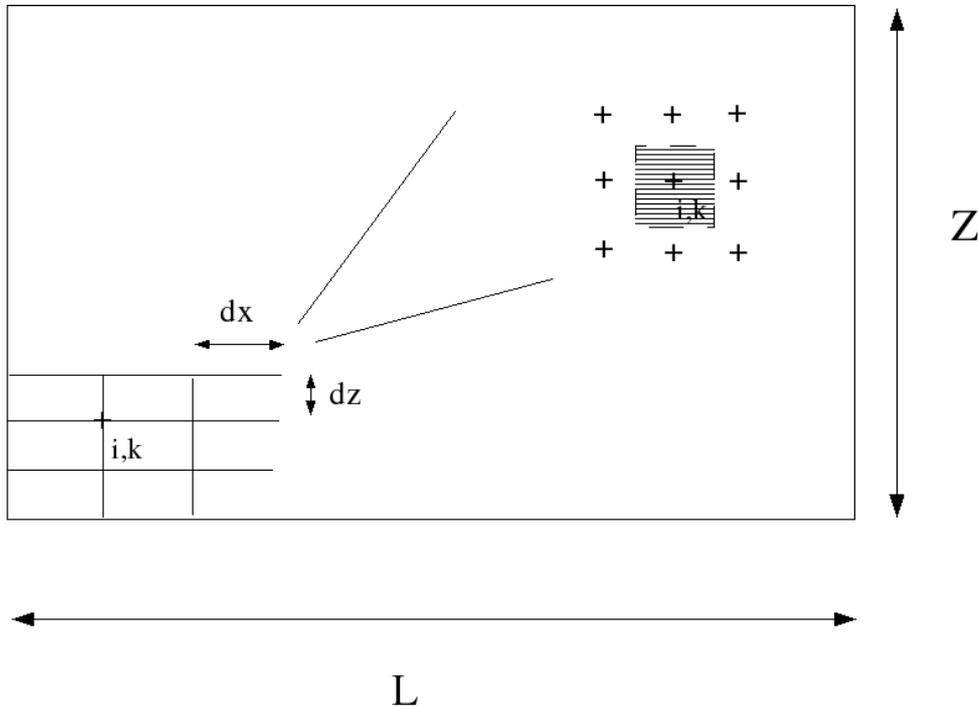


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau eines Integrationsgebietes mit horizontaler Erstreckung L und vertikaler Ausdehnung Z im EULAG-LCM. Links ist die kartesische Gitterstruktur mit Maschenweiten dx und dz dargestellt. Eiskristalle werden einem Gitterpunkt i, k zugeschrieben, wenn sie einen maximalen Abstand halber Maschenweite in alle Raumrichtungen vom Gitterpunkt besitzen, wie rechts dargestellt ist.

2. Profile für Temperatur, Druck, Windfeld, Wasserdampf und Aerosol: Als nächstes werden die initialen Profile für Temperatur, Druck, Windfeld, Wasserdampf und Aerosolverteilung vorgegeben. Dies kann entweder durch idealisierte oder real gemessene Verteilungen geschehen.

Flüssige Aerosole werden zu Beginn der Simulation als reine H_2SO_4 Partikel angenommen, die für den Fall des Immersionsgefrierens einen festen Kern enthalten können. In einem Zwischenschritt werden die verbleibenden Spurengase (H_2O und HNO_3) mittels (2.16) in einen Gleichgewichtszustand zwischen Aerosol- und Gasphase gebracht, bis sich die chemische Zusammensetzung der resultierenden $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ oder $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}/\text{HNO}_3$ Aerosoltröpfchen unter den gegebenen thermodynamischen Bedingungen nicht mehr ändert. Typische Verteilungen und Moden für die Aerosolklasse finden sich z.B. in Schröder *et al.* (2002). Im Normalfall wird eine Verteilung angenommen, die in 10 Größenklassen unterteilt ist. Eine Verteilung für IN kann zusätzlich angesetzt werden.

3. Kühlraten: Im Rahmen dieser Arbeit werden in der Regel Ausschnitte aus der Atmosphäre von einigen Kilometern Ausdehnung simuliert. Für die Zirrenbildung sind aber auch Vorgänge

auf größeren Skalen wichtig, wie synoptische Hebungsvorgänge oder mesoskalige Wellenbewegungen (Hoyle *et al.*, 2005). Diese können berücksichtigt werden, indem dem Simulationsgebiet als Ganzes ein großräumiges Vertikalwindfeld w_0 aufgeprägt wird. Man folgt dem Hebungsprozess mit dem Integrationsgebiet und die Vertikalgeschwindigkeit wird in ein adiabatisches Kühlen des Modellgebietes umgerechnet. Beim Aufstieg bleibt θ_e konstant, während sich p_e und T_e durch adiabatische Kompression oder Expansion ändern.

$$\frac{dT_e}{dt} = \frac{dT_e}{dz} \frac{dz}{dt} = -\frac{g}{c_p} w_0(t) \quad (3.1)$$

Aus der konstanten potentiellen Temperatur kann dann aus

$$\theta_e = T_e \left(\frac{p_{00}}{p_e} \right)^\kappa \quad (3.2)$$

der Druck und über die ideale Gasgleichung

$$\bar{\rho} = \frac{p_e}{R_d T_e} \quad (3.3)$$

die Dichte berechnet werden. Das Hintergrundprofil wird verändert und trägt im Falle einer Abkühlung zur Zirrenbildung bei.

4. Turbulente Fluktuationen: Während die im letzten Schritt angesetzten Kühlraten einen externen Antrieb bilden, tritt Turbulenz auch als innere Eigenschaft der Atmosphäre im Integrationsgebiet auf. Es existieren Fluktuationen im Geschwindigkeits-, Temperatur- und Feuchtefeld, die den mesoskaligen Bewegungen überlagert sind. Diese kleinskalige Variabilität trägt zur Heterogenität von Zirrenfeldern bei und kann aufgrund der hohen räumlichen Auflösung im EULAG-LCM über einen weiten Bereich simuliert werden. Kleine Skalen, die nicht mehr aufgelöst sind, können über die Turbulenzschließung des EULAG parametrisiert werden. Auswertungen von Quante und Starr (2002) sowie Gulpepe und Starr (1995) zeigen den allgegenwärtigen Charakter dieser Fluktuationen und geben Anhaltspunkte für deren Intensität. Die Messungen zeigen auch, dass im Turbulenzspektrum ein Abfall der Energiedichte turbulenter Schwankungen mit zunehmender Wellenzahl k (abnehmender Wellenlänge) proportional zu $k^{-5/3}$ oder auch stärker mit $\sim k^{-2}$, stattfindet.

Um aufgelöste Turbulenz in den EULAG-LCM Simulationen beschreiben zu können, werden dem Hintergrundprofil Fluktuationen in p , θ und \mathbf{u} überlagert. Gewonnen werden diese Schwankungen aus Simulationen, die im Voraus mit EULAG durchgeführt werden. In diesen 3D Rechnungen wird sogenanntes weißes Rauschen simuliert, indem den anfänglichen Feldern an jedem Gitterpunkt zufällige Werte überlagert werden. Stabilität und Gitterstruktur stimmen in diesen Simulationen mit den in den Wolkensimulationen verwendeten Profilen überein. Nach einer genügend langen Zeitspanne hat sich ein turbulentes Spektrum (z.B. für die Vertikalwindgeschwindigkeit) eingestellt und die gebietsgemittelte Amplitude der Geschwindigkeitsfluktuationen w^* nimmt ein annähernd konstantes Niveau an:

$$w^* = \sqrt{\frac{1}{nl} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^l w_{i,k}^2} \quad (3.4)$$

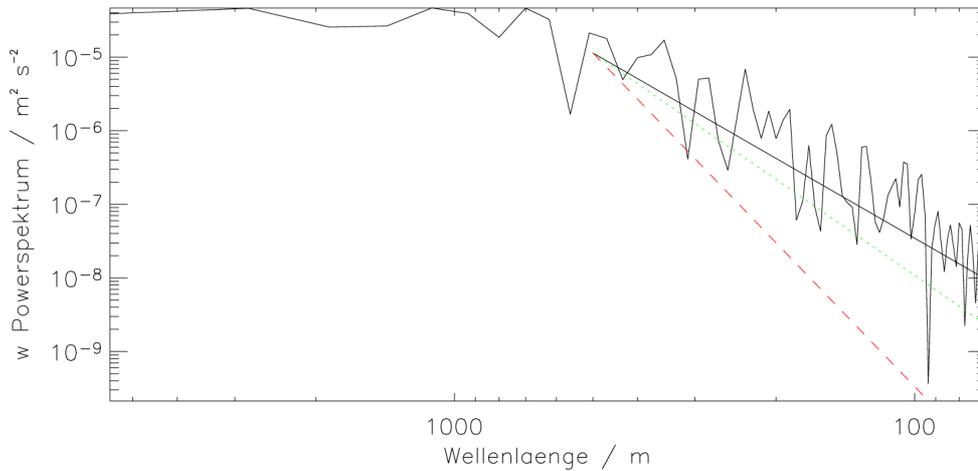


Abbildung 3.2: *Periodogramm der wellenlängenabhängigen Energiedichteverteilung der vertikalen Windgeschwindigkeit w , die zur Initialisierung einer EULAG-LCM Simulation verwendet wird. Die schwarze Linie zeigt einen angenommenen Abfall der Energiedichteverteilung proportional zur Wellenzahl $k^{-5/3}$; grün k^{-2} und rot k^{-3} .*

Hier wird über alle Gitterpunkte n und l summiert. Bei stabiler Schichtung der Atmosphäre ist die Turbulenz anisotrop. Fluktuationen im Vertikalwindfeld sind gegenüber der horizontalen Bewegungen gedämpft. Eine spektrale Analyse^{3.1} horizontaler Schnitte des Geschwindigkeitsfeldes im EULAG-LCM (Abbildung 3.2) zeigt, dass der zu erwartende Verlauf der Energiedichte erreicht wird. Natürlich muss man davon ausgehen, dass Turbulenz nur in einer 3D Simulation beschrieben werden kann, da es sich um einen dreidimensionalen Prozess handelt und sich nur dort der Energietransport über die Skalen hinweg entwickeln kann. Werden zur Initialisierung einer 2D Simulation Schnitte aus den 3D Feldern verwendet, ist dieser Energietransport nicht mehr gültig. Dennoch deutet die spektrale Analyse des Geschwindigkeitsfeldes aus 2D Simulationen darauf hin, dass die Skalen der Auf- und Abwindregionen ähnlich sind und die entscheidenden Elemente der Wechselwirkung zwischen Turbulenz und der Zirrenbildung bzw. deren Lebenszyklus simuliert werden können. Bis auf Skalen mit Wellenlängen von einigen Gitterpunktabständen, welche numerisch bedingt stärker gedämpft werden, bleibt das Spektrum über den Zeitraum der Simulationen weitgehend erhalten. Eine kurze Überprüfung dieser These wird in Kapitel 3.4 gegeben.

3.2 Parallelisierung

Die Berechnung der Trajektorien einer großen Anzahl an Simulationspartikeln stellt hohe Anforderungen an Speicher und Rechenzeitkapazität dar. Tabelle 3.1 listet die Modellvariablen für ein Lagrange'sches Simulationspartikel auf. Das EULAG Modell ist dafür ausgelegt, auf Hochleistungsrechnern zu arbeiten, die eine parallelisierte Verarbeitung der Strömungsberechnung mit

^{3.1}Zur Analyse wird ein Periodogramm horizontaler Schnitte $w(z)$ erzeugt. Hierzu werden mittels einer Fourier-Analyse die Fourierkoeffizienten $\hat{w}(k)$ berechnet. Die Energiedichte bei der Wellenzahl k im Periodogramm ergibt sich zu $P(k) = |\hat{w}(k)|^2$.

Variable	Beschreibung
x_i, y_i, z_i	Koordinaten des Eiskristalls
r	volumenäquivalenter Radius eines sphärischen Eispartikels mit gleicher Masse
$\mathcal{N}_v, \mathcal{N}_{sa}, \mathcal{N}_{na}$	Anzahl der H_2O , H_2SO_4 und HNO_3 Moleküle im Eiskristall
$\tilde{u}_i, \tilde{v}_i, \tilde{w}_i$	turbulente Geschwindigkeitskomponenten
$nbin_0$	Größenklasse i des Aerosolpartikels, aus dem der Kristall nukleierte
col	Anzahl der Aggregationsereignisse für einen Kristall

Tabelle 3.1: Liste der Modellvariablen für ein Lagrange'sches Simulationsteilchen.

dem Message Parsing Interface (MPI)^{3.2} erlauben. Methodisch wird hierfür das Rechengelände horizontal in kleinere Untereinheiten zerlegt, die auf unterschiedliche Prozessoren aufgeteilt werden. Bei der Entwicklung des LCM Moduls war es daher wichtig, diesen Parallelisierungsvorgang beizubehalten und die Mikrophysikroutinen komplett parallelisierbar zu gestalten. Insbesondere beim Transport von Eiskristallen zwischen den Prozessoren ist darauf zu achten, dass ein effektiver Abgleich der Informationen über Eiskristalleigenschaften möglich ist, um die Laufzeit einer EULAG-LCM Simulation zu reduzieren.

3.3 Benötigte Anzahl von Simulationsteilchen

Anhand von 2D Simulationen soll gezeigt werden, dass eine hinreichende Anzahl von Simulationsteilchen \mathcal{N}_{sim} existiert, um aus der Kenntnis der Eigenschaften einer Teilmenge von Eisteilchen auf die Gesamtheit schließen zu können. Aus statistischen Überlegungen folgt, dass die Abweichung der gefundenen Mittelwerte des Ensembles von Simulationsteilchen vom tatsächlichen Wert mit zunehmender Anzahl an Simulationsteilchen $\propto 1/\sqrt{\mathcal{N}_{sim}}$ abnimmt. Allerdings ist aufgrund der sich ständig ändernden Gegebenheiten während einer Simulation eine a priori getroffene Aussage über gewünschte Genauigkeit und benötigte Anzahl an Simulationsteilchen \mathcal{N}_{sim} faktisch nicht durchführbar. Zur Ermittlung von \mathcal{N}_{sim} wird hier die Änderung von integralen Werten über die Wolkeneigenschaften (z.B. das horizontal gemittelte Eiswassermischungs-

^{3.2}Message Passing Interface (MPI) ist ein Standard, der den Nachrichtenaustausch bei parallelen Berechnungen auf verteilten Computersystemen beschreibt.

Idealisierte 2D Simulationen zur Partikelanzahl							
Gitterpunkte	n	m	l	Zeitschritt / s	Δt	Δt_{MIC}	Δt_{NUC}
	320	-	251		4	2	0.25
Maschenweite / m	dx	dy	dz	Meteo	$\mathbf{N}^2 / \text{s}^{-2}$	$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{z}} / \text{s}^{-1}$	$\mathbf{w}_0 / \text{m s}^{-1}$
	35	-	20		9.9×10^{-5}	8×10^{-4}	0.1
Zirrusparameter							
Eistyp	hexagonale Säulchen						
Aerosole							
Typ	$\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ Lösungströpfchen						
Nukleationsweg	Homogenes Gefrieren						

Tabelle 3.2: Einstellungen für die idealisierten 2D Simulationen in Kapitel 3.3.

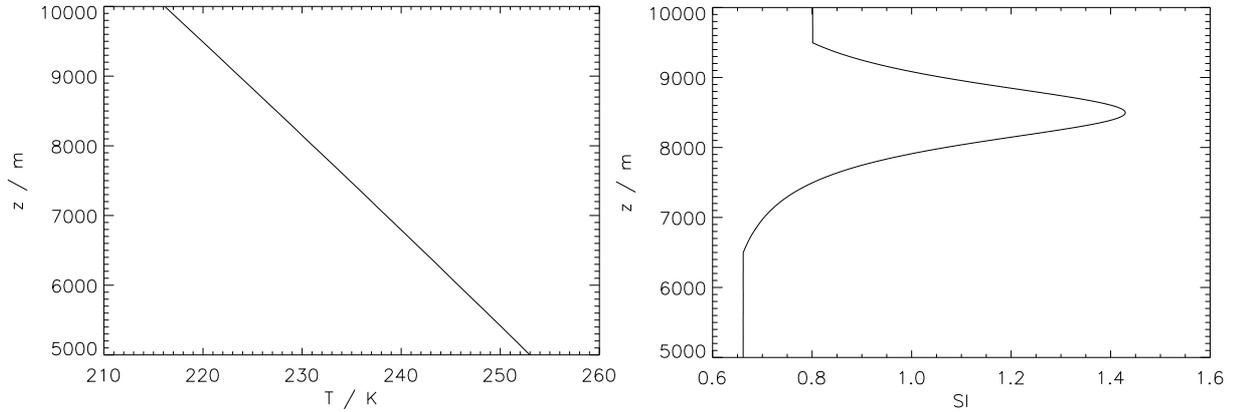


Abbildung 3.3: *Idealisierte Profile zur Initialisierung der Simulationen in Kapitel 3.3. Links: Temperatur T ; rechts: Sättigungsverhältnis bezüglich Eis S_i .*

verhältnis) bei einer Variation der Anzahl von Simulationsteilchen betrachtet. Die Ergebnisse dieser Referenzsimulationen zeigen, dass eine optimale Anzahl von Simulationsteilchen gefunden werden kann, die einen Kompromiss zwischen Rechenzeitaufwand und Genauigkeit darstellt, wie im Folgenden gezeigt wird.

Aufbau der Simulationen Es werden drei Simulationen mit identischen Anfangsbedingungen durchgeführt, die sich in der Anzahl der betrachteten Simulationspartikel \mathcal{N}_{sim} unterscheiden.

Das Integrationsgebiet ist ein 2D Ausschnitt der Atmosphäre von $11 \text{ km} \times 5 \text{ km}$ Ausdehnung, der in 5 km Höhe ansetzt. Tabelle 3.2 fasst den Aufbau der Simulationen zusammen.

Die Zirrenbildung wird von einem konstanten Auftrieb $w_0 = 0.1 \text{ m s}^{-1}$ verursacht, der einen externen Antrieb darstellt und das Modellgebiet adiabatisch abkühlt. Der Coriolisterm in (2.3) wird nicht berücksichtigt, weil dessen Einfluss auf der Skala einzelner Zirren von einigen Kilometern Ausdehnung vernachlässigt werden kann. Die initialen Temperatur- und Feuchteprofile sind aus Abbildung 3.3 ersichtlich. Das Wasserdampfprofil weist eine eisübersättigte Schicht in 8.5 km Höhe auf, deren Maximum einen Wert von $S_i = 1.4$ hat. Die Eisbildung wird über das homogene Gefrieren flüssiger $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ Aerosolpartikel simuliert. Die Größenverteilung der reinen H_2SO_4 Tröpfchen zu Beginn der Simulation wird als Lognormalverteilung angesetzt. Die Anzahlkonzentration N_a von Aerosolpartikeln in einer Größenklasse ist horizontal und vertikal homogen und ergibt sich zu:

$$N_a = \frac{N_{tot} \Delta r_a}{r_a \sqrt{2\pi} \ln \sigma_g} \exp \left[-\frac{\ln^2 (r_a / \bar{R})}{2 \ln^2 \sigma_g} \right]. \quad (3.5)$$

Die Parameter der Verteilung werden basierend auf Schröder *et al.* (2002) festgesetzt: Totale Anzahlkonzentration $N_{tot} = 100 \text{ cm}^{-3}$; geometrische Standardabweichung $\sigma_g = 1.5$ und Massen-Medianradius Radius $\bar{R} = 1.5 \times 10^{-5} \text{ cm}$. Die Verteilung ist in 10 Bins gesplittet.

Für die Eispartikelform werden hexagonale Säulchen angenommen. Das Strahlungsmodul ist für diese Versuche ausgeschaltet.

Lauf	N_{MIN} / cm^{-3}	\mathcal{N}_{sim}
A	10^{-6}	900000
B	10^{-5}	700000
C	10^{-4}	280000

Tabelle 3.3: Wahl der unteren Konzentrationsschranke N_{MIN} , ab der Nukleationsereignisse berücksichtigt werden, und die resultierende maximale Anzahl an Simulationsteilchen \mathcal{N}_{sim} in den unterschiedlichen Läufen.

Diskussion der Simulationsergebnisse Die Anzahl der Simulationsteilchen \mathcal{N}_{sim} wird zu einem erheblichen Teil durch die Wahl des Schwellenwertes N_{MIN} bestimmt (siehe Kapitel 2.3.2). Tabelle 3.3 fasst die Wahl von N_{MIN} und resultierende maximale Anzahl von Simulationsteilchen der unterschiedlichen Läufe zusammen. Beruhend auf den erweiterten Analysemöglichkeiten durch die Lagrange'sche Eispartikelverfolgung in EULAG-LCM, ergibt sich ein Einblick in den Simulationsverlauf bei unterschiedlicher Wahl von N_{MIN} . Abbildung 3.4 zeigt Trajektorien des Simulationsteilchens in den Läufen A, B und C, das als erstes Teilchen in einer bestimmten Gitterbox nukleiert. Die verschiedenen Schwellenwerte bewirken ein zeitlich versetztes Einsetzen der Nukleation.

Eine genauere Analyse zeigt folgendes Schema im Ablauf der Eisbildung:

- 1) In allen Gitterboxen steigt die Eisübersättigung S_i infolge der großräumigen Hebung w_0 zu Beginn an (siehe Abbildung 3.4, Bild 5).
- 2) Nukleation setzt ein. Als Erstes nukleieren in der Simulation A (grüne Kurven) Kristalle, da dort die Schranke N_{MIN} am kleinsten ist. Die Anzahlkonzentration N_i in der Gitterbox ist gering, ebenso die Anzahl realer Kristalle, die durch das Simulationsteilchen repräsentiert werden (siehe Bild 4 und 2).
- 3) In Simulation A bauen dann die entstandenen Kristalle die Übersättigung etwas ab, in den anderen beiden steigt S_i durch das Fehlen von Eis weiter an, da N_{MIN} dort Nukleation noch verhindert.
- 4) Aufgrund der höheren Übersättigung in den Simulationen B und C entstehen bei der Nukleation der Eisteilchen zu einem späteren Zeitschritt mehr Eisteilchen auf einmal.
- 5) Da mehr Kristalle in B und C vorhanden sind, wachsen die Eisteilchen nur zu geringeren Radien an, haben dadurch unterschiedliche Sedimentationsgeschwindigkeiten und durchlaufen eine andere Entwicklung.

Infolge dieses Prozesses, der ähnlich auch für andere Partikel existiert, bilden sich während der Simulationen Unterschiede zwischen den Läufen heraus. Abbildung 3.5 stellt das Eiswasser-mischungsverhältnis in den Simulationen C und A dar. Deutlich ist die gröbere Auflösung der Eisphase durch die geringere Anzahl \mathcal{N}_{sim} in Simulation C zu erkennen. Bildet man eine integrale Eigenschaft der Eisphase, wie das vertikale Profil der horizontal gemittelten Eiswasser-mischungsverhältnisse (Abbildung 3.6), ist festzustellen, dass sich zwischen Simulation A und B ein Sättigungseffekt herausstellt. Die Profile weichen nur marginal voneinander ab. Es ist also möglich, eine Einstellung für N_{MIN} zu finden, die einen guten Kompromiss zwischen Laufzeit und Genauigkeit darstellt.

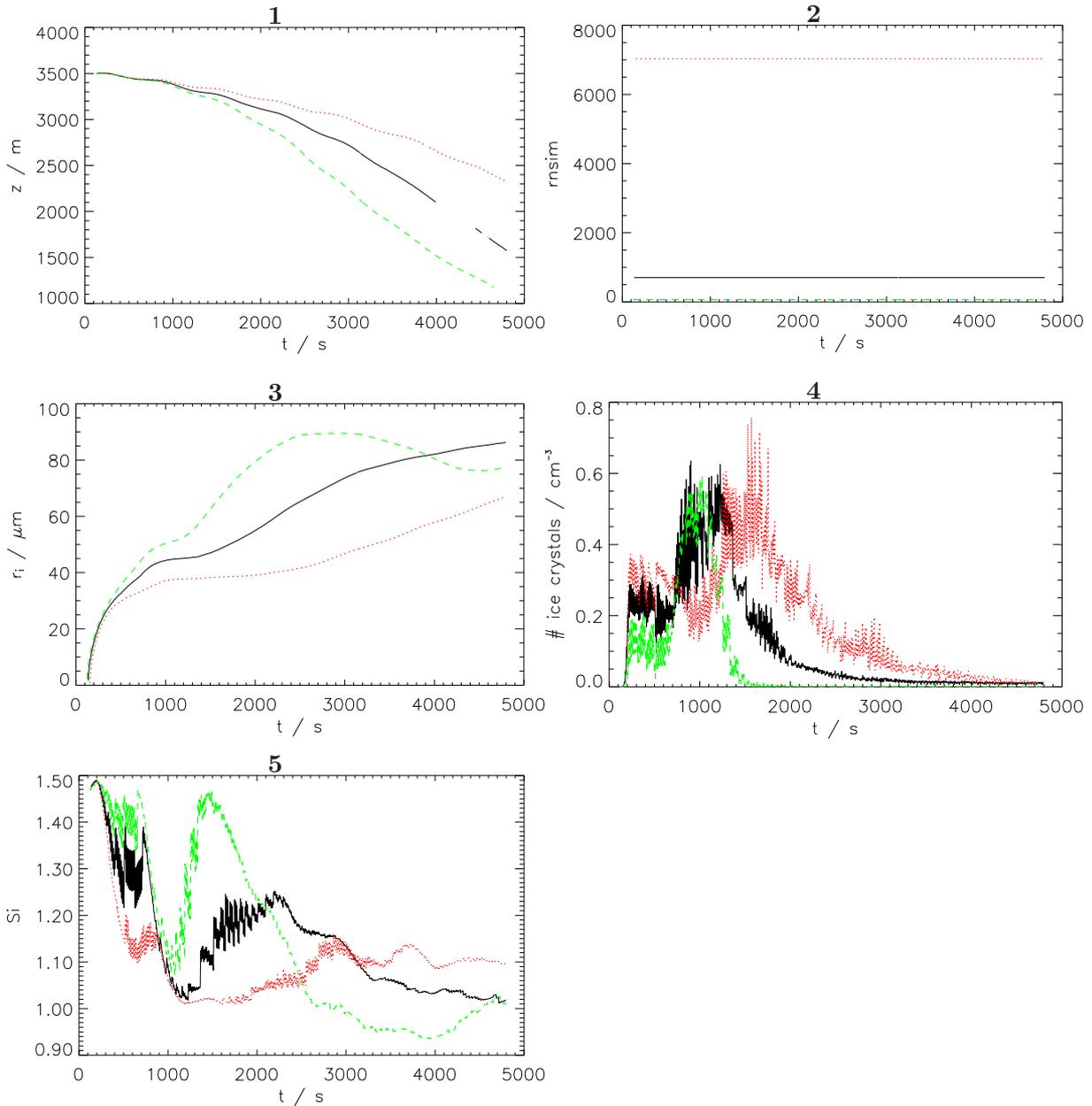


Abbildung 3.4: Trajektorien des Eisteilchens, welches in Simulationen mit variierender Zahl von Simulationsteilchen als erstes Eisteilchen in derselben Gitterbox nukleiert; Simulation A (grün), Simulation B (schwarz) und Simulation C (rot). Gezeigt sind: 1) vertikale Koordinate des Partikels, 2) Anzahl realer Eiskristalle N_i , die durch das Simulationsteilchen repräsentiert werden, 3) volumenäquivalenter Radius der Kristalle, 4) Eiskristallanzahlkonzentration an der Partikelposition und 5) Übersättigung am Partikelort.

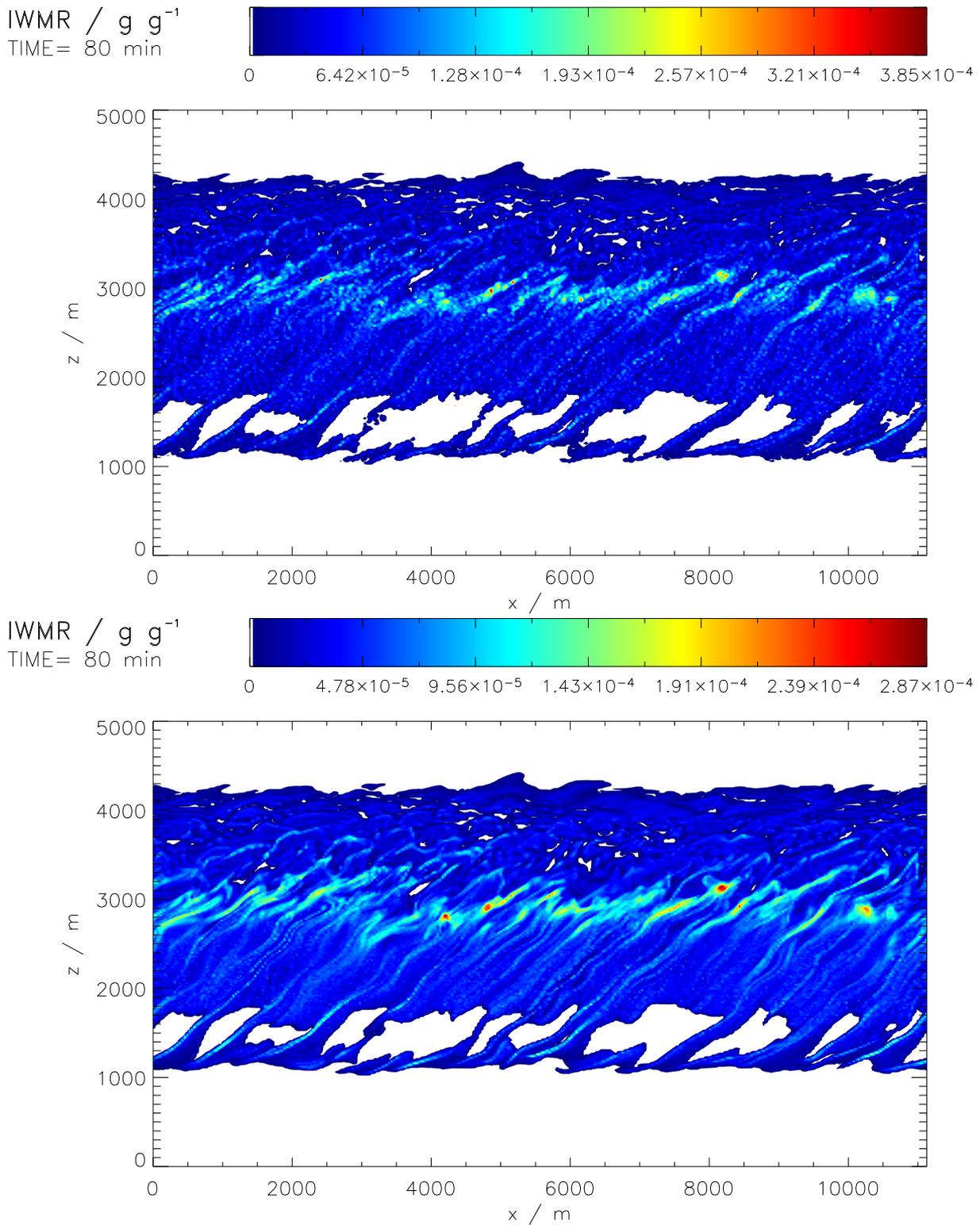


Abbildung 3.5: Eiswassermischungsverhältnis in SIMULATION C (oben, $\mathcal{N}_{sim} = 280000$) und SIMULATION A (unten, $\mathcal{N}_{sim} = 900000$).

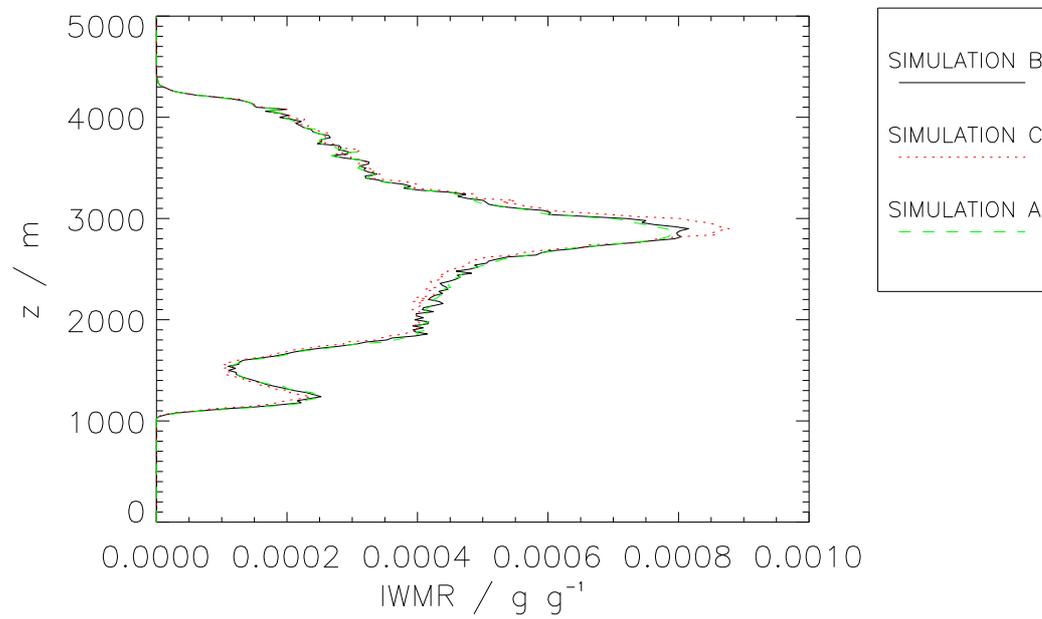


Abbildung 3.6: Horizontal gemittelte Werte des Eiswassermischungsverhältnisses. SIMULATION A verfolgt 900000 Einzelpartikel, SIMULATION B 700000 und SIMULATION C 280000.

3.4 Einfluss der Dimensionalität auf die Simulationsergebnisse

In Kapitel 3.1 wurde dargestellt, dass zur Initialisierung der 2D Simulationen turbulente Fluktuationen aus zuvor berechneten 3D Feldern verwendet werden. Es wurde die These aufgestellt, dass trotz der unphysikalischen Beschreibung isotroper Turbulenz in 2D der wesentliche Einfluss der Variationen in Wind- und Feuchtefeld auf Zirrusimulationen erhalten bleibt und Abweichungen zu 3D Rechnungen gering bleiben.

Zur Untersuchung dieser Behauptung wurden sowohl eine 3D wie auch 2D Simulationen unter identischen Bedingungen durchgeführt. Tabelle 3.4 fasst die Einstellungen für die 3D Simulation zusammen). Wie im vorangegangenen Kapitel 3.3 wird Wolkenbildung durch einen konstanten vertikalen Auftrieb initiiert (siehe Tabelle 3.4). Die Rechnungen werden vereinfacht, indem kugelförmiges Eis angenommen wird und das Strahlungsmodul ausgeschaltet ist.

Zur Initialisierung der 2D Rechnungen werden Schnitte aus dem 3D Turbulenzfeld an unterschiedlichen Positionen in y -Richtung verwendet. Hierbei ist anzumerken, dass die Turbulenzfelder der 3D Simulationen keine exakte Lösung des 2D Gleichungssystems darstellen. Dadurch ergeben sich in den 2D Rechnungen leicht veränderte Anfangsbedingungen nach der ersten Iteration des numerischen Schemas des EULAG zur Lösung des gekoppelten Gleichungssystems. Dies bewirkt zusätzliche Abweichungen der 2D zu den 3D Läufen.

Als Maß für die Abweichung der Simulationen voneinander wird wieder das horizontal gemittelte Eiswassermischungsverhältnis (siehe Kapitel 3.3) herangezogen. Die Mittelung in 3D bedeutet für ein Feld $A(x, y, z, t)$ eine räumliche Mittelung über die $n \times m$ Gitterpunkte:

$$\overline{A(z, t)} = \frac{1}{nm} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m A_{ij}(x, y, z, t). \tag{3.6}$$

Im Fall der 2D Rechnungen folgt der räumlichen Mittelung in x -Richtung eine Ensemblemittelung über die einzelnen Vertikalschnitte, als Pendant zur räumlichen Mittelung in y -Richtung im 3D Fall:

$$\overline{A(z, t)} = \frac{1}{N_{2D}} \sum_{s=1}^{N_{2D}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{si}(x, z, t), \tag{3.7}$$

wobei $N_{2D} = 4$ die Anzahl der 2D Simulationen ist.

Idealisierte 3D Simulation							
Gitterpunkte	n	m	l	Zeitschritt / s	Δt	Δt_{MIC}	Δt_{NUC}
	320	32	201		4	2	0.25
Maschenweite / m	dx	dy	dz	Meteo	$\mathbf{N}^2 / \text{s}^{-2}$	$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} / \text{s}^{-1}$	$\mathbf{w}_0 / \text{m s}^{-1}$
	35	35	20		9.9×10^{-5}	8×10^{-4}	0.1
Zirrusparameter							
Eistyp	kugelförmiges Eis						
Aerosole							
Typ	H ₂ SO ₄ /H ₂ O Lösungströpfchen						
Nukleationsweg	Homogenes Gefrieren						

Tabelle 3.4: Einstellungen für die idealisierte 3D Simulation in Kapitel 3.4.

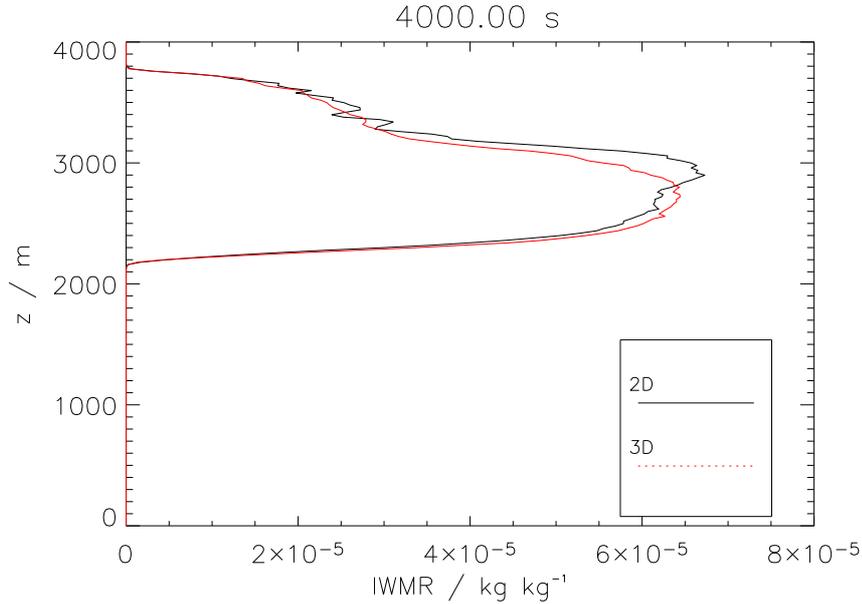


Abbildung 3.7: Vergleich des horizontal gemittelten Eiswassermischungsverhältnisses in den 2D (schwarz) und 3D Simulationen (rot) nach 66 min. Die Kurve für den 2D Fall ist ein Ensemble aus vier unterschiedlichen Läufen.

Wie Abbildung 3.7 zeigt, ergeben sich zwischen den 2D und 3D Mittelwerten Unterschiede. In etwa 3 km Höhe im Simulationsgebiet beträgt die maximale Abweichung $\sim 10\%$. Diese erste Abschätzung der Unsicherheit zeigt, dass Unterschiede durch das Fehlen der dritten Dimension existieren, die Abweichungen aber eher gering einzuschätzen sind. Die hohe Anforderung an den Rechenzeitbedarf durch 3D Rechnungen beschränkt deren Anwendung. Generell sind diese Rechnungen aber möglich und erlauben weiterführende Studien und Verwendungsmöglichkeiten des EULAG-LCM.

3.5 Interne Dynamik

Folgende Simulation soll einen kurzen Einblick in die enge Wechselwirkung von Dynamik, Strahlung und Mikrophysik in Zirren geben, die schon oft in der Arbeit erwähnt wurde. Die Absorption solarer Strahlung, die Absorption und Emission von IR Strahlung und die Freisetzung latenter Wärme modifizieren die Turbulenzstärke in Zirren. Dies manifestiert sich in einer Zunahme der turbulent kinetischen Energie pro Masseneinheit TKE , die in EULAG-LCM prognostiziert wird. Wesentliche lokale Quellen für Turbulenz sind Instabilitäten an Windscherungen S und Auftriebskräfte erwärmter Luftpakete B . Energiesenke ist die Dissipation, die Umwandlung von Bewegungsenergie in Wärme, ausgedrückt über die Dissipationsrate ϵ . Dominieren diese Terme im Fall homogener Turbulenz, lässt sich die Ratengleichung für TKE vereinfacht schreiben als:

$$\frac{\partial TKE}{\partial t} \approx \underbrace{-\overline{u'w'} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{g}{\theta} \overline{w'\theta'}}_{S+B} - \epsilon. \quad (3.8)$$

Die Energieproduktion nimmt dabei mit zunehmender Windscherung und mit abnehmender Stabilität der Atmosphäre zu.

Aufbau der Simulation Die Simulation ist analog zu jenen in Kapitel 3.3 aufgebaut, lediglich die Stabilität ist auf $N^2 = 6.9 \times 10^{-5} \text{ s}^{-2}$ reduziert und die Scherung auf $2 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ erhöht. Für das Strahlungsmodul wird ein Profil für die mittleren Breiten im Sommer verwendet. Der Sonnenzenitwinkel wird auf $\theta_Z = 63^\circ$ festgehalten. Dies entspricht einer Simulation zur Mittagszeit am 21. Juni an einem Standort auf einer geographischen Breite von 48° N .

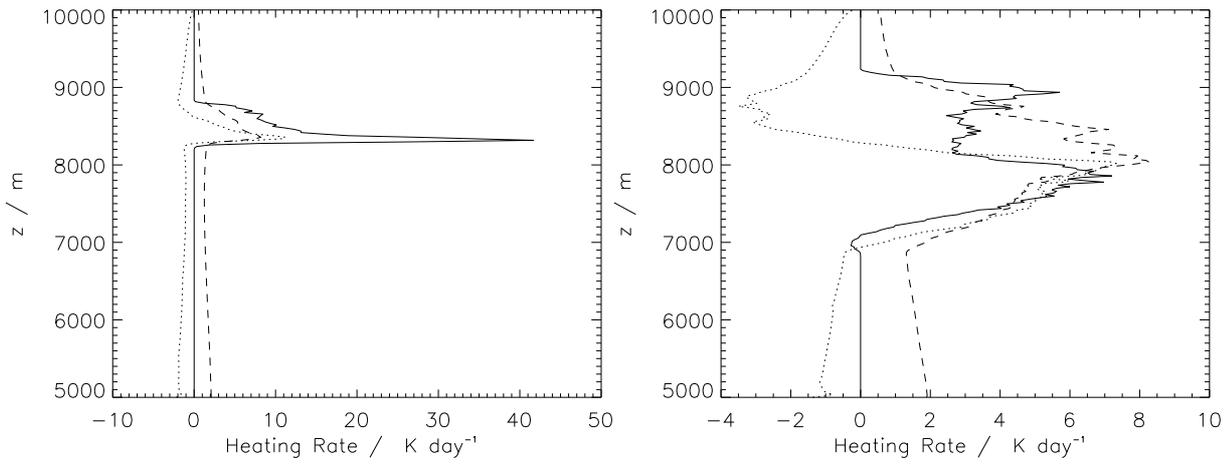


Abbildung 3.8: Diabatische Erwärmungsraten durch die Freisetzung latenter Wärme (durchgezogene Linie), Absorption solarer Strahlung (gestrichelt) und Absorption bzw. Emission von IR-Strahlung (gepunktet) nach 20 min (links) und 60 min (rechts) (man beachte die unterschiedliche Skalierung der x-Achse).

Ergebnisse der Simulation Abbildung 3.8 zeigt die diabatischen Quellterme nach 20 (links) und 60 Minuten (rechts) in der Simulation. Abbildung 3.9 zeigt dazu das Profil der potentiellen Temperatur bei der Initialisierung und nach 60 Minuten. Zu Beginn der Wolkenbildung dominiert die Freisetzung latenter Wärme (LH) (bis zu $\sim 40 \text{ K d}^{-1}$). Wie aus Abbildung 3.9 ersichtlich, findet die Wolkenbildung unter relativ warmen Temperaturen statt ($\theta = 316 \text{ K} \rightarrow T \sim 225 \text{ K}$), bei denen Wasserdampf in hohem Maße auf die Eiskristalle deponiert. Die Absorption von solarer und IR-Strahlung hat ebenfalls einen erwärmenden Effekt in den entstehenden Wolkelementen (bis zu $\sim 6 \text{ K d}^{-1}$).

Nach 60 Minuten haben sich die Raten für LH stark reduziert. An der Wolkenunterkante, bei etwa 7 km Höhe, schlägt das LH-Profil in den negativen Bereich um. Hier sublimieren Kristalle. Je stärker untersättigt der Sublimationsbereich ist, der sich eventuell unterhalb der Wolke befindet, desto größer sind die Kühlraten. Solare Strahlung wird über den gesamten Bereich des Zirrus absorbiert und hat einen erwärmenden Effekt auf die Zirrenschicht. Am unteren Rand des Zirrus wird IR-Strahlung absorbiert und heizt dort die untere Wolken-schicht auf. Bei 8300 m Höhe schlägt das IR-Profil ins Negative um. Eiskristalle emittieren IR-Strahlung und wirken kühlend im oberen Bereich des Zirrus. Liu *et al.* (2003b) finden in einer ähnlichen Simulation (Fallbeispiel: warmer Zirrus in instabiler Schichtung) Erwärmungsraten von vergleichbarer Größenordnung.

Die Profile der Erwärmungsraten bewirken eine Stabilisierung der Atmosphäre bis in den Bereich von etwa 8 km Höhe, darüber ist die Wolkenschicht deutlich destabilisiert, wie die Profile der potentiellen Temperatur (Abbildung 3.9) zeigen.

In Abbildung 3.10 sind die Energieproduktionsraten $B + S$ aus (3.8) und die Energiedissipationsrate ϵ als horizontale Mittelwerte dargestellt. Wie man sieht, sind die Raten im Zirrusniveau deutlich erhöht und erreichen Werte von etwa $3 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-3}$. Dieser Wert ist eher am unteren Spektrum der aus verschiedenen Kampagnen abgeleiteten Dissipationsraten in Zirren einzuordnen (Quante und Starr, 2002). Während sich in den übrigen Regionen Produktion und Dissipation in etwa die Waage halten, finden sich zwischen 8 und 9 km Höhe in der Zone mit reduzierter Stabilität immer wieder Bereiche, in denen die Produktionsraten die Dissipationsraten übersteigen. Dies führt zu einer Zunahme der Turbulenz in diesem Niveau, wie die horizontal gemittelten Werte der TKE in Abbildung 3.10 zeigen. Gebietsgemittelt findet zu diesem Zeitpunkt eine Nettoproduktion von Turbulenz statt.

Zusammenfassend gilt:

- IR Strahlung erwärmt die untere Wolkenregion, kühlt die Wolkenoberkante und führt damit zu einer Destabilisierung der Wolkenschicht.
- Solare Erwärmungsraten wirken der Kühlung durch die IR Emission der Eiskristalle am Oberrand der Wolke entgegen.
- Das Freisetzen latenter Wärme wirkt zu Beginn der Simulation destabilisierend, wenn entstehende Wolkenelemente erwärmt werden, und so einen zusätzlichen Auftrieb erfahren. Existiert eine ausgeprägte Sublimationszone im unteren Bereich der Wolke, wirkt die Verdunstung kühlend und stabilisiert den unteren Bereich der Wolkenzone.

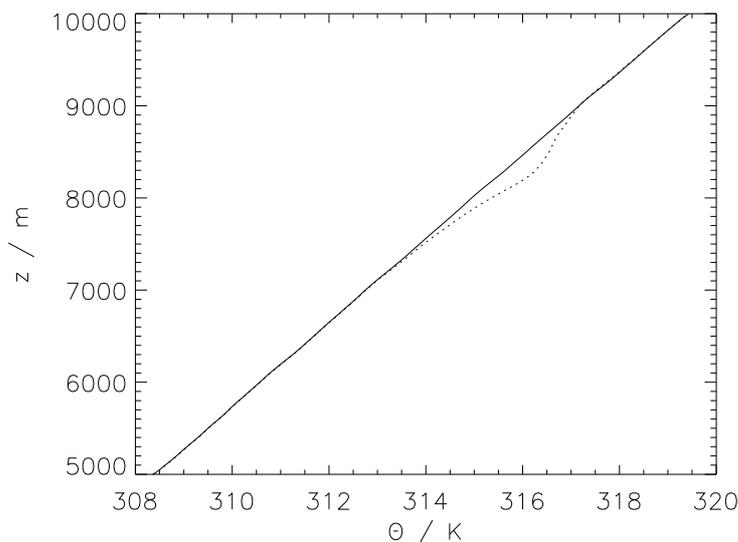


Abbildung 3.9: Horizontal gemittelttes Profil der potentiellen Temperatur θ bei der Initialisierung (durchgezogene Linie) und nach 60 Minuten (gepunktet).

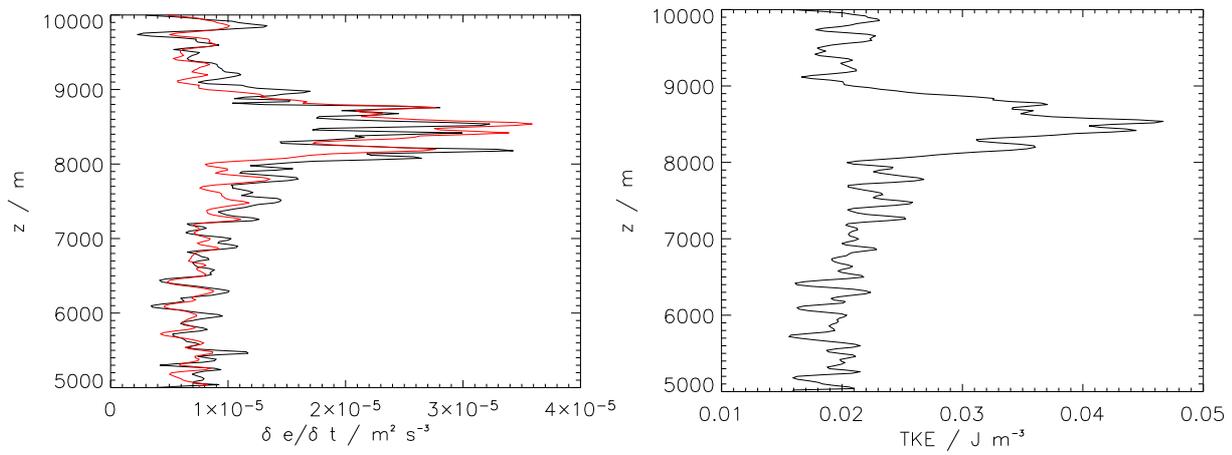


Abbildung 3.10: Links: Horizontal gemittelte Produktionsraten turbulent kinetischer Energie ($B + S$, schwarz) und Energiedissipationsraten (ϵ , rot) nach 60 Minuten. Rechts: Horizontal gemittelte Werte der turbulent kinetische Energie TKE.

Kapitel 4

Validierung des Mikrophysikmoduls

In diesem Kapitel wird das EULAG-LCM anhand einer Boxmodell- und einer Fallstudie im Rahmen des GEWEX GCSS WG2 Projektes validiert werden.

4.1 Boxmodellstudien - Vergleich mit dem APSC m

Die mikrophysikalischen Routinen des EULAG-LCM sind auf der Basis des APSC m ^{4.1} Modellsystems (Kärcher, 2003) erweitert worden. Das APSC m verwendet sowohl zur Beschreibung der Aerosol- wie auch der Eisphase eine sektionale Mikrophysik, wie sie in Kapitel 2.3.1 beschrieben wird, im Gegensatz zur Lagrange'schen Eispartikelverfolgung im EULAG-LCM. Das APSC m wurde einem ausführlichen Modellvergleich unterzogen (Lin *et al.*, 2002) und durch detaillierte Messungen in einer Aerosolkammer (Haag *et al.*, 2003) sowie durch Vergleiche mit Feldmessungen validiert.

Um die neuentwickelten Routinen im EULAG-LCM zu verifizieren, bietet sich ein Vergleich der Mikrophysik mit dem APSC m an. Hierzu wird das EULAG-LCM ebenfalls als Boxmodell in einer 0D Variante betrieben. Sedimentationsprozesse sind unterdrückt.

Als Vergleichsfall wird eine von Lin *et al.* (2002) publizierte Studie im Rahmen des GEWEX^{4.2} Parcel Model Comparison Projektes herangezogen. Neben dem APSC m nahmen sechs weitere Boxmodelle an dieser Studie teil. Der ausgewählte Fall simuliert Zirrenbildung bei kalten Temperaturen. Ausgehend von etwa 213 K und 170 hPa wird ein Luftvolumen adiabatisch mit einer konstanten Vertikalgeschwindigkeit von 0.2 m s^{-1} gehoben. Als Nukleationsweg für die Eisbildung im Volumen wird das homogene Gefrieren flüssiger $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ Tröpfchen berücksichtigt. Eine genaue Beschreibung der Simulation für die Vergleichsstudie findet sich in Lin *et al.* (2002).

^{4.1}Das APSC m (Advanced Particle Simulation Code) Modellsystem ist ein Boxmodell zur Simulation von Aerosol- und Eisbildungsprozessen.

^{4.2}GEWEX - Global Energy and Water Cycle Experiment

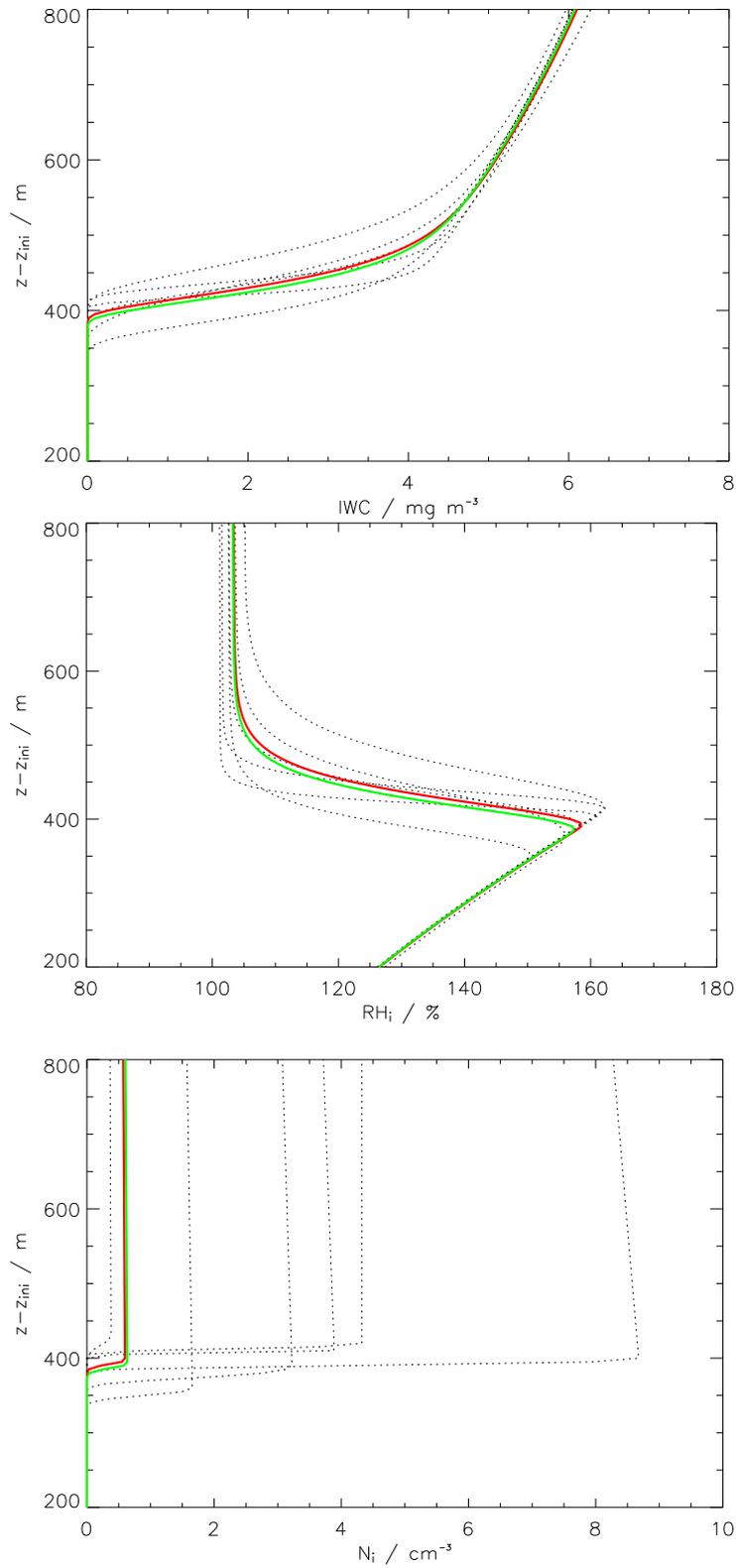


Abbildung 4.1: Ergebnisse der Boxmodell-Vergleichsstudie, für Eiswassergehalt IWC (oben), Relative Feuchte bezüglich Eis RHI (mitte) und Anzahlkonzentration N_i (unten). Die Graphen des APSCm (rot) und des EULAG-LCM (grün) zeigen einen sehr ähnlichen Verlauf. Gestrichelt sind die Werte der anderen teilnehmenden Modelle gekennzeichnet.

In Abbildung 4.1 sind die Ergebnisse der Simulationen, erweitert um die Resultate des EULAG-LCM Laufs, zusammengefasst. Eiswassergehalt IWC , Relative Feuchte bezüglich Eis RHI und Anzahlkonzentration N_i sind gegenüber der vertikalen Verschiebung des Luftpaketes als Funktion der Ausgangshöhe bei etwa 13 km dargestellt. Deutlich ist der weitgehend identische Verlauf des APSC m (rote Kurve) und des EULAG-LCM (grüne Kurve) zu sehen. Dies lässt den Schluss zu, dass die mikrophysikalischen Routinen bezüglich Aerosolzusammensetzung, Eisbildung und Eiswachstum korrekt im EULAG-LCM implementiert wurden und die Ergebnisse eines validierten Modells wiedergeben können. Die große Schwankungsbreite zwischen den einzelnen teilnehmenden Modellen wird von Lin *et al.* (2002) hauptsächlich auf Unterschiede in den homogenen Nukleationsraten, in der Zusammensetzung des Aerosols beim Gefrierprozess und in der Aufnahme von Wasserdampf auf Eiskristalle zurückgeführt. Diese große Streuung der Ergebnisse war Anlass für eine weitere Fallstudie zur Zirrenbildung im Rahmen der GEWEX GCSS WG2^{4.3}. Die Modelle sollen in diesem Fall an reale Messdaten herangeführt werden, um Aussagen über die Möglichkeiten und Genauigkeit vorhandener Zirrusmodelle treffen zu können. Diese Fallstudie wird im folgenden Kapitel beschrieben.

4.2 GEWEX GCSS WG2 Modellvergleich

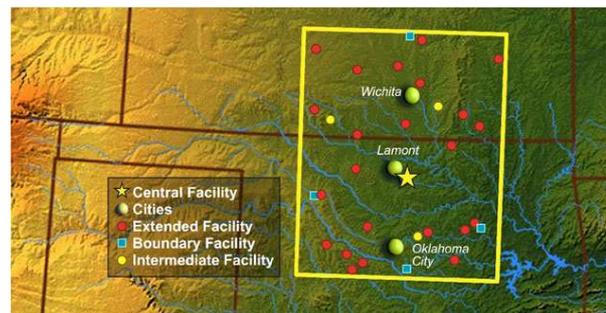


Abbildung 4.2: Das ARM Messnetz in Oklahoma, U.S.A., mit der zentralen Messstelle (CF - Central Facility) in Lamont ($N36^{\circ} 37' W97^{\circ} 30'$) und einer Reihe von Nebenstationen.

Im Gegensatz zu der idealisierten Studie in Kapitel 4.1 sollen in der neu angelegten laufenden Fallstudie Modelle anhand eines realen Szenarios bewertet werden. Als Datensatz wurde ein Zirrusfeld, das sich im Süden der Great Plains (SGP) in den USA am 9. März 2000 gebildet hat, ausgewählt. Im Rahmen des ARM^{4.4} Programms wurden Messungen der dreidimensionalen Struktur und der mikrophysikalischen Eigenschaften der Wolken durchgeführt. Für diesen Tag sind Flugzeugbeobachtungen und unterschiedliche bodengestützte Messungen (z.B. Radarmessungen, Radiosondenaufstiege und Bilder von Wolkenkameras) verfügbar.

^{4.3}GCSS WG2 - Cloud System Studies; Arbeitsgruppe 2 - Zirrus

^{4.4}Atmospheric Radiation Measurement

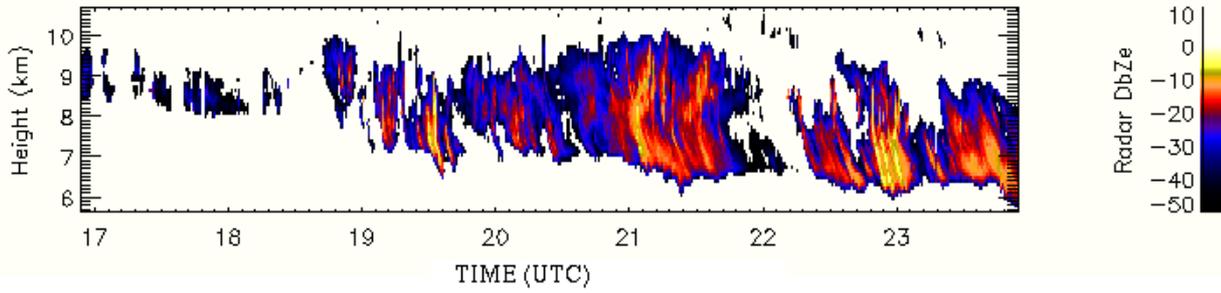


Abbildung 4.3: Gemessene Radarreflektivitäten über der CF Messstation.

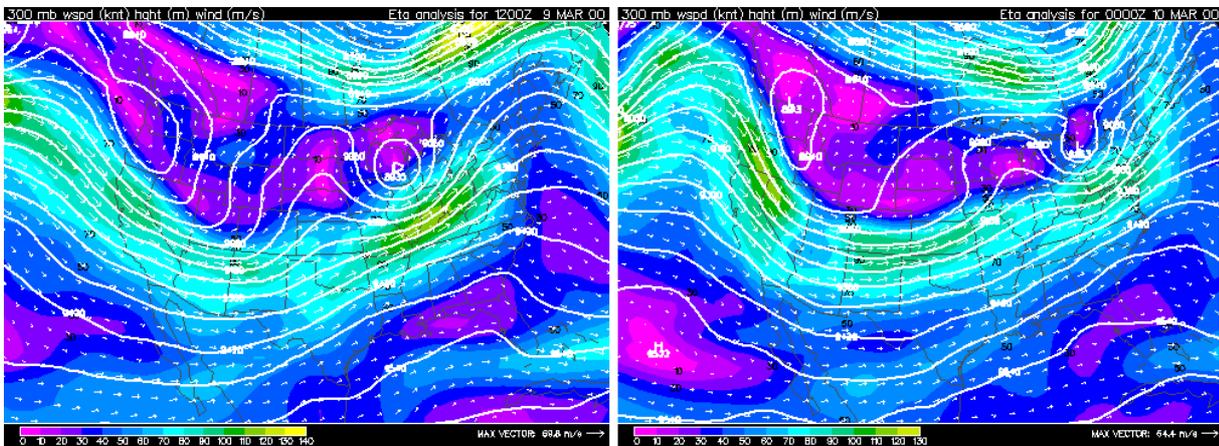


Abbildung 4.4: 300 hPa Analyse des Eta Atmosphären Modells um 12 UTC (linkes Bild) und 24 UTC (rechtes Bild). Gezeigt sind die Isohypsen der 300 hPa Fläche (m), Windvektoren ($m s^{-1}$) und farbig die Windgeschwindigkeit (knt) über Nordamerika.

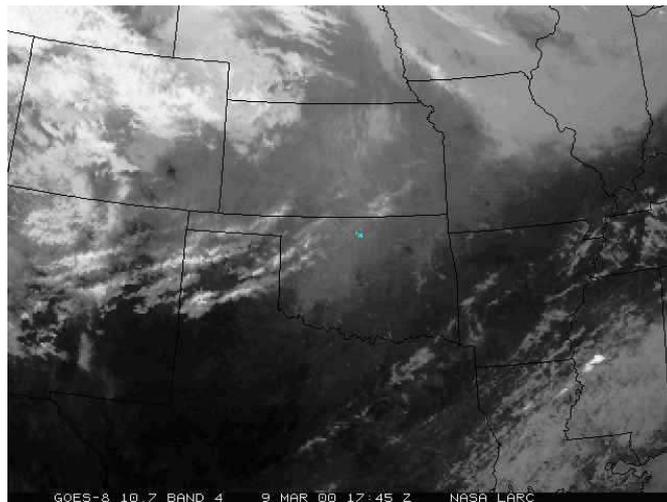


Abbildung 4.5: IR Satellitenbild des Zirrus um 17.45 UTC über der CF Messstelle (blauer Punkt).

In Teil I der Vergleichsstudie wird die Entstehung jener Eiswolken untersucht, die im Laufe des Tages als Erste über der Messstation (CF, siehe Abbildung 4.2) beobachtet wurden. Die Zirren bildeten sich in einer schwachen Störung in der oberen Troposphäre im Bereich eines starken süd-westlichen Strahlstroms (siehe Abb. 4.4). Die ersten Eiswolken entstanden am Morgen des 9. März (lokale Zeit) stromaufwärts der CF, als der Trog über das Gebirgsmassiv von Zentral Neu-Mexiko zog. Wie Abbildung 4.5, ein IR Satellitenbild der Region, und die Radarreflektivitäten in Abbildung 4.3 zeigen, ist das Wolkenfeld zu dieser Zeit noch relativ schwach ausgeprägt.

4.2.1 Aufbau der Modellsimulation

Die 2D Simulation der Zirreninitiierungsphase ist semi-Euler'sch aufgebaut. Die meteorologischen Bedingungen bei der Initialisierung entsprechen denen, wie sie am Entstehungsort des Zirrus erwartet werden. Die Einstellungen sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Das Zirrenfeld wird dann mit der Hauptströmung verfolgt, während sich die Wolken im Simulationsgebiet intensivieren und schließlich über die CF advehiert werden. Die Autoren der Fallstudie geben als Grund für die Wolkenbildung Schwerewellen an, die sich bei der Überströmung des Massivs der westlich gelegenen Rocky Mountains bilden. Um das Wellenfeld zu charakterisieren, wurde von den Autoren eine Simulation mit 3DVOM^{4.5} durchgeführt. Aus der räumlichen Verteilung der Auf- und Abwindgebiete wird eine Zeitreihe für die Vertikalwindgeschwindigkeit w_0 gebildet, die sich aus der Advektion des Simulationsausschnittes zur CF ergibt und als externer Antrieb im EULAG-LCM verwendet wird (siehe Kapitel 3.1). Zur einheitlichen Initialisierung aller teilnehmenden Modelle werden Radiosondenaufstiege an der CF verwendet, die unter Berücksichtigung des externen Schwerewellenantriebes an den vermuteten Ort der Wolkeninitiierung projiziert werden.

Der Strahlungantrieb Q_R in (2.4) ist vorgegeben und entstammt den Simulationen des UK Met Office LEM Modells. Die Profile für θ_e und \mathbf{u} werden geglättet bzw. leicht modifiziert, um das Auftreten unphysikalischer Schwerewellen aufgrund numerischer Instabilitäten zu vermeiden. Das Feuchteprofil wird unverändert übernommen. Die Anfangsprofile für T und S_i sind aus Abbildung 4.6 ersichtlich.

^{4.5}Das 3DVOM (3-D Velocities over Mountains) ist ein Modell, das hochaufgelöste Simulationen von Leewellen durch Überströmung komplexer Topographie ermöglicht.

GCSS WG2 Modellvergleich							
<i>Gitterpunkte</i>	n	m	l	<i>Zeitschritt / s</i>	Δt	Δt_{MIC}	Δt_{NUC}
	128	-	121		2	2	0.25
<i>Maschenweite / m</i>	dx	dy	dz	<i>Meteo</i>	$\mathbf{N}^2 / \text{s}^{-2}$	$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} / \text{s}^{-1}$	$\mathbf{w}_0 / \text{m s}^{-1}$
	100	-	50		variabel	8×10^{-4}	variabel
Zirrusparameter							
<i>Eistyp</i>	pristines Eis: hexagonale Säulchen; Aggregate: Flaschenprismenbündel						
<i>Aggregation</i>	Hybrid Schema A	<i>Effizienz</i>	$E_a = 0.5$				
Aerosole							
<i>Typ</i>	Eiskerne						
<i>Nukleationsweg</i>	Meyers <i>et al.</i> (1992)						

Tabelle 4.1: *Einstellungen für die Simulation zur GCSS WG2 Studie.*

Die Eisbildung folgt dem Schema von Meyers *et al.* (1992). Dieses parametrisiert die Anzahl der aktivierten Eiskerne N_{IN} (l^{-1}) als Funktion des Sättigungsverhältnis S_i :

$$N_{IN} = \exp[a + b(100(S_i - 1))]. \quad (4.1)$$

Die Konstanten sind $a = -0.639$ und $b = 0.1296$. Hiermit folgt das EULAG-LCM dem Referenzmodell, um eine bessere Vergleichbarkeit mit den Met Office LEM Simulationen bezüglich der Modellphysik zu gewährleisten. Tabelle 4.1 fasst den Aufbau der Simulation zusammen.

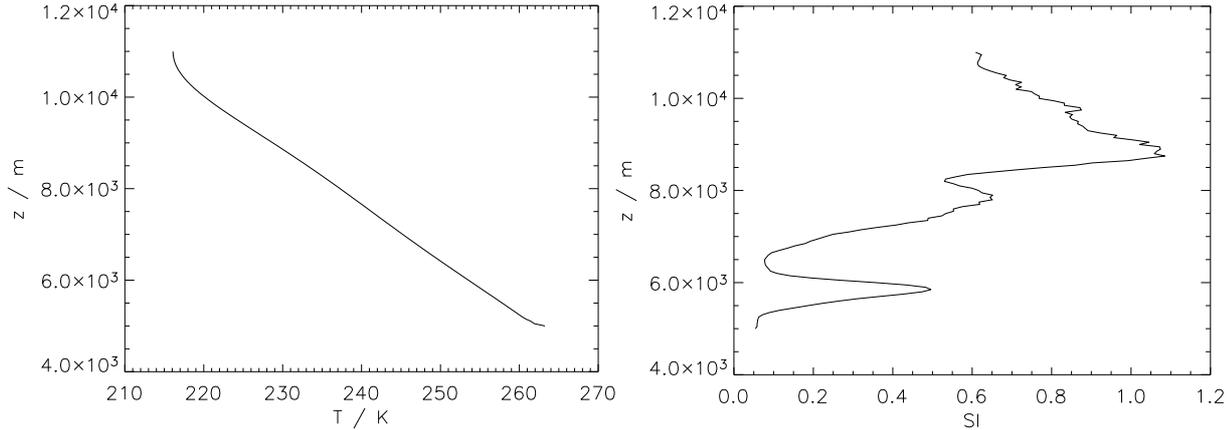


Abbildung 4.6: Anfangsprofile zur GCSS WG2 Modellvergleichsstudie. Links: Temperatur T ; rechts: Sättigungsverhältnis bezüglich Eis S_i .

4.2.2 Ergebnisse der EULAG-LCM Simulationen

Im Folgenden sind die Ergebnisse der Referenzsimulation des EULAG-LCM dargestellt. Der Zeitpunkt, an dem die Simulation mit den Messungen verglichen wird, ist in der GCSS Studie nach 3.5 Stunden gesetzt. In dieser Phase ist das Zirrenfeld aufgrund des vorgegebenen Schwerewellenantriebs in partieller Auflösung begriffen. In Abbildung 4.7 ist das 2D Feld des Eiswassermischungsverhältnisses $IWMR$ zu sehen. Die Wolkenstruktur zeigt eine klar definierte Wolkenunterkante in etwa 8500 m Höhe, bedingt durch die sehr trockene Atmosphäre unterhalb von 8500 m. Dies ist in Einklang mit den gemessenen Radarreflektivitäten (Abbildung 4.3), die kein Eis unterhalb von 8000 m Höhe im Zeitraum zwischen 17 UTC und 18 UTC zeigen. Die simulierte Eispartikelgrößenverteilung zeigt, dass die Durchmesser der Eispartikel zu dieser Zeit kleiner als $200 \mu\text{m}$ bleiben (siehe Abbildung 4.8). Diese kleinen Eiskristalle verdunsten rasch in der trockenen Zone.

Ein detaillierter Vergleich der Ergebnisse aller teilnehmenden Modelle liegt noch nicht vor und kann im Rahmen dieser Arbeit daher nicht beschrieben werden. Abbildung 4.9 stellt die horizontal gemittelten $IWMR$ Werte der Simulationen des EULAG-LCM (schwarz) und des UK Met Office LEM Modells (rot) dar. Zusätzlich ist das gemessene Profil (gepunktet) der Radarmessung um 17.30 UTC eingezeichnet. Hier ist eine Übereinstimmung der simulierten Werte hinsichtlich Amplitude und Profil vorhanden. Somit kann das EULAG-LCM hinsichtlich erster Ergebnisse bezüglich des UK Met Office LEM Modell validiert werden. Ein Vergleich weiterer Modellgrößen und Sensitivitätsstudien sind Teil laufender Arbeiten im Rahmen der GEWEX GCSS WG2 Studie.

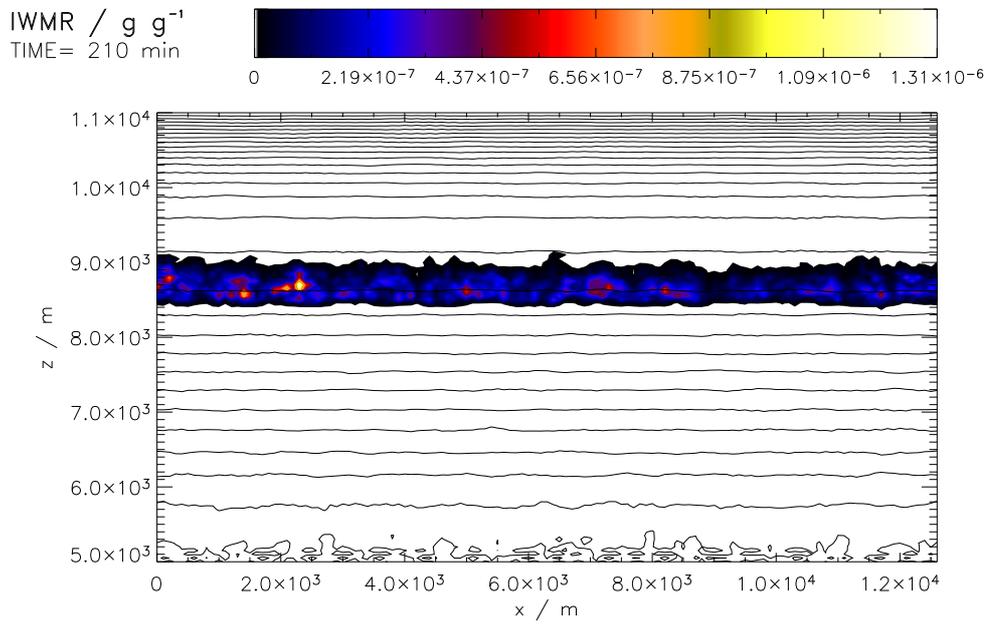


Abbildung 4.7: *Simuliertes Eiswassermischungsverhältnisses (IWMR) im EULAG-LCM nach 3.5 h in der Simulation.*

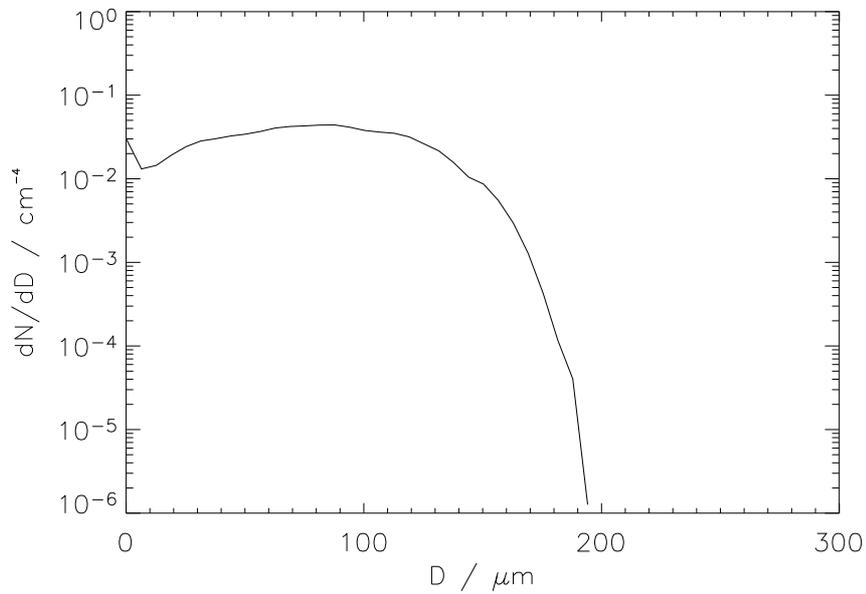


Abbildung 4.8: *Die Bin-Weiten normierte Eiskristallgrößenverteilung (GV) nach 3.5 h in der Simulation. Die GV wird über die gesamte Wolke gebildet.*

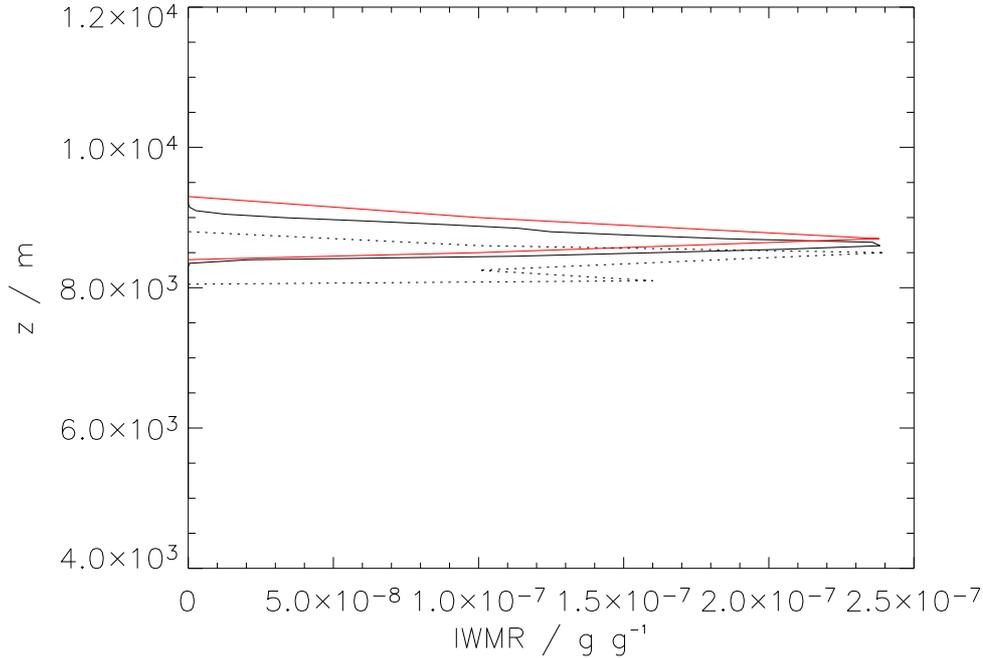


Abbildung 4.9: Vergleich horizontal gemittelter Werte des Eiswassermischungsverhältnisses IWMR im EULAG-LCM (schwarz), dem UK Met Office LEM Modell (rot) sowie gemessener IWMR Werte (gepunktet) um 17.30 UTC im Bereich der CF.

4.2.3 Zirreninitiierung

Die Initiierung der Wolkenbildung wird im EULAG-LCM mit (4.1) über das Schema von Meyers *et al.* (1992) simuliert. Dieses wurde auch im UK Met Office LEM Modell verwendet, welches als Referenzmodell zum Aufbau der Vergleichsstudie dient. In diesem Referenzsystem passen Feuchteprofil, Auftriebsgeschwindigkeit und Nukleationsweg für einen möglichen Entwicklungsprozess des beobachteten Zirrus zusammen, um am Referenzpunkt 17.30 UTC die gemessenen Wolkenprofile zu erhalten. Aufgrund der Beschränkung der Messung auf einen Ort ist eine Validierung des zeitlichen Verlaufs der Wolkenbildung nicht möglich.

Abbildung 4.10 zeigt das Radiosonden Profil über der CF um 17.30 UTC. Auffällig ist die stark eisübersättigte Region in etwa 8600 m Höhe im Radiosondenprofil ($S_i \sim 1.4$). Auch wenn die Messung der hohen Übersättigung vermutlich aus wolkenfreien Gebieten stammt, stellt sie den simulierten Verlauf der Wolkenbildung über das Meyers-Schema in Frage. In diesem ist keine Einschränkung der Anzahlkonzentration für Eiskerne enthalten, so dass mit zunehmender Übersättigung immer mehr Eispartikel entstehen. Bei $S_i = 1.4$ wird eine Anzahlkonzentration für Eispartikel von $N_i \gtrsim 100 \text{ l}^{-1}$ vorhergesagt. Die Zeitskala, auf der diese Konzentration die Übersättigung abbaut, ist umgekehrt proportional zu N_i und geringer als jene, auf der die niedrigen Kühlraten in der Simulation ($\sim 1 \text{ K h}^{-1}$) eine weitere Erhöhung von S_i bewirken. Messungen von Übersättigungen um 40% lassen vermuten, dass die Anzahlkonzentration von Eiskernen, zumindest lokal, gering sein muss. Die grüne Kurve in Abbildung 4.10 zeigt das Profil des EULAG-LCM Standardlaufs (Meyers Schema) nach 2 Stunden. Zu diesem Zeitpunkt erreicht S_i im Modell seinen Maximalwert von 1.2 in einer Höhe von etwa 9000 m. Darunter ist das Profil

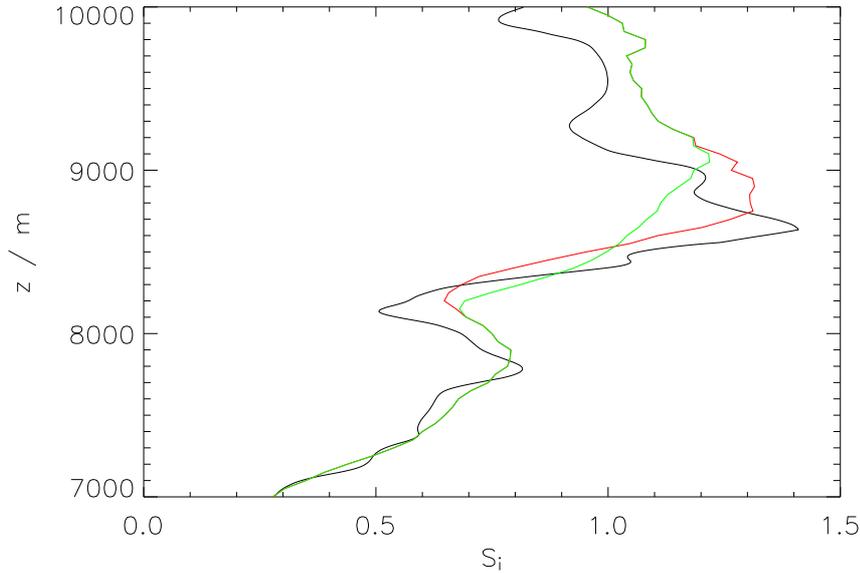


Abbildung 4.10: Profil des Sättigungsverhältnis S_i in der EULAG-LCM Simulation nach 2 h: Meyers Schema (grün) und Depositionsgefrieren nach Möhler (rot). Zusätzlich ist die Radiosondenmessung über der CF um 17.30 UTC (schwarz) gezeigt.

gegenüber der Radiosondenmessung weniger stark übersättigt.

Die rote Kurve zeigt die Ergebnisse eines modifizierten EULAG-LCM Laufs, in welchem die Eisnukleation über das Depositionsgefrieren nach Möhler *et al.* (2006) parameterisiert wird. Die Anzahlkonzentration für IN ist hier auf 5 l^{-1} beschränkt. Die S_i Werte in diesem Lauf nehmen deutlich höhere Werte von (~ 1.32) an. Dies ist auf die reduzierte Anzahlkonzentration der entstandenen Eispartikel in diesem Lauf zurückzuführen. Die *IWMR* Werte erreichen nach 2 Stunden dennoch einen Wert von 1.7 g g^{-1} , was nur geringfügig unterhalb der Messungen zum Referenzzeitpunkt 17.30 UTC liegt. Um 17.30 UTC in der Simulation (3.5 Stunden) hat sich die Wolke im modifizierten Lauf bereits aufgelöst. Die Wahl des Referenzzeitpunktes im Standardlauf ist jedoch nicht aus den Messungen bestimmbar. Beobachtungen zeigen, dass sich immer wieder neue Wolkenelemente im Simulationszeitraum bilden, was dem Bildungsweg über das Meyers Schema widerspricht. Dieses sagt eine relativ homogene Wolkenstruktur über den gesamten Zeitraum von 3 Stunden vorher. Eventuell kann sich in den übersättigten Gebieten, wie sie die Radiosondenmessung zeigt, in lokalen Aufwindzonen auch homogenes Eis bilden. Dies würde eher den beobachteten konvektiven Wolkenelementen entsprechen.

Der Vergleich des Standardlaufs mit der modifizierten Simulation verdeutlicht, wie wichtig es ist, beschränkte Anzahlkonzentrationen von Eiskernen und eventuell konkurrierende Effekte der homogenen Nukleation beim Eisbildungsprozess in Zirrensimulationen zu berücksichtigen. Solche Anregungen wurden in die GCSS Arbeitsgruppe eingebracht und sind Gegenstand weiterer Studien, die über den Rahmen dieser Dissertation hinausgehen.

Kapitel 5

Studien zum Aggregationsprozess in Zirren

In diesem Kapitel wird eine Fallstudie zur weiteren Validierung des EULAG-LCM ausgearbeitet. Als Referenz werden Messungen in einem synoptisch generierten Zirrus herangezogen, die am 9. März 2000 im Rahmen der ARM IOP durchgeführt wurden. In einer Sensitivitätsstudie wird die Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von den getroffenen Annahmen für meteorologische und numerische Parameter untersucht. Im dritten Teil des Kapitels kommen die erweiterten Analysemöglichkeiten des EULAG-LCM zur Anwendung, um die Aggregation in Zirren anhand der Modellsimulationen eingehender zu untersuchen.

Studien des Aggregationsprozesses von Eiskristallen in natürlichen Zirren sind sehr komplex. Die Hauptschwierigkeit besteht darin, dieselbe Population von Eiskristallen einer Wolke zu vermessen, während der Prozess der Aggregation Eispartikelmassen umverteilt und somit die Größenverteilung (GV) verändert. GV, die bei horizontalen Messflügen gefunden werden, sind durch horizontale Heterogenität der Zirrenfelder beeinflusst und stellen nicht dieselbe Population von Partikeln dar. Zusätzlich beeinflussen Wachstumsprozesse den unteren Teil der GV (Teilchen kleiner als einige $100 \mu\text{m}$), so dass es fast unmöglich ist, Bereiche in der Wolke zu finden, die sich in einem stationären Zustand befinden und in denen der Aggregationsprozess ungestört beobachtet werden kann. Um in einem weitgehend homogenen Wolkenbereich zu messen, in dem die Annahme eines stationären Zustandes erfüllt ist, werden sogenannte Spiralflugmessungen durchgeführt (Lo und Passarelli Jr., 1982). Bei diesem Flugmuster werden enge Spiralen geflogen, welche mit dem Wind mitdriften. Dabei sinkt das Flugzeug mit einer mittleren Fallgeschwindigkeit der Eiskristalle ($\sim 1 \text{ m s}^{-1}$) ab. Auf diese Weise werden die nötigen Voraussetzungen für das Vermessen des Aggregationsprozesses in Zirren am besten getroffen und der Einfluss horizontaler Advektion minimiert. Solange die Aggregation von Eiskristallen nicht im Labor untersucht werden kann, stellt diese Messmethode den besten Zugang dar, die Evolution von GV zu quantifizieren (Field *et al.*, 2006b).

Ein entsprechender Datensatz wurde in Spiralfügen gewonnen, die am 9. März 2000 über der ARM Messstelle (CF, siehe Kapitel 4.2) in einem synoptisch generierten Zirrus durchgeführt wurden. Diese Fallstudie schließt sich zeitlich an die im Kapitel 4.2 gezeigte an. Zusätzlich ha-

ben Field und Heymsfield (2003) die in Kapitel 2.5.2 beschriebene Skalierung von GV erfolgreich für diesen Datensatz angewandt, was im Weiteren eine theoretische Überprüfung der Modellsimulationen erlauben wird.

Nach einer kurzen Beschreibung der vorhandenen Messdaten wird im nächsten Kapitel eine EULAG-LCM Simulation aufgebaut, welche die Zirrenbildung nachvollzieht. Diese Fallstudie bietet eine zusätzliche Möglichkeit, das EULAG-LCM und insbesondere den Aggregationsalgorithmus (Kapitel 2.5.2) zu validieren. Es soll untersucht werden, ob das Modell die Existenz von Partikeln mit $D \geq 3000 \mu\text{m}$ unter realistischen Bedingungen prognostiziert.

5.1 Eine Fallstudie - ARM IOP SGP 9. März 2000

In Kapitel 4.2 wurde das Zirrenfeld vom 9. März 2000 zu einem frühen Zeitpunkt (17.30 UTC) beobachtet und diskutiert. Im Laufe des Tages intensivierte sich die hohe Bewölkung (siehe auch Abbildung 4.3) und verlief später als Serie von Bändern parallel zur Windrichtung (Comstock *et al.*, 2007) über die Messstation. Abbildung 5.1 zeigt das Zirrenfeld um 20.45 UTC über Oklahoma. Der blaue Punkt symbolisiert die CF Messstelle. Sowohl das Satellitenbild als auch Bilder der installierten Wolkenkamera (Abb. 5.2) zeigen eine starke horizontale Heterogenität des Wolkenfeldes.

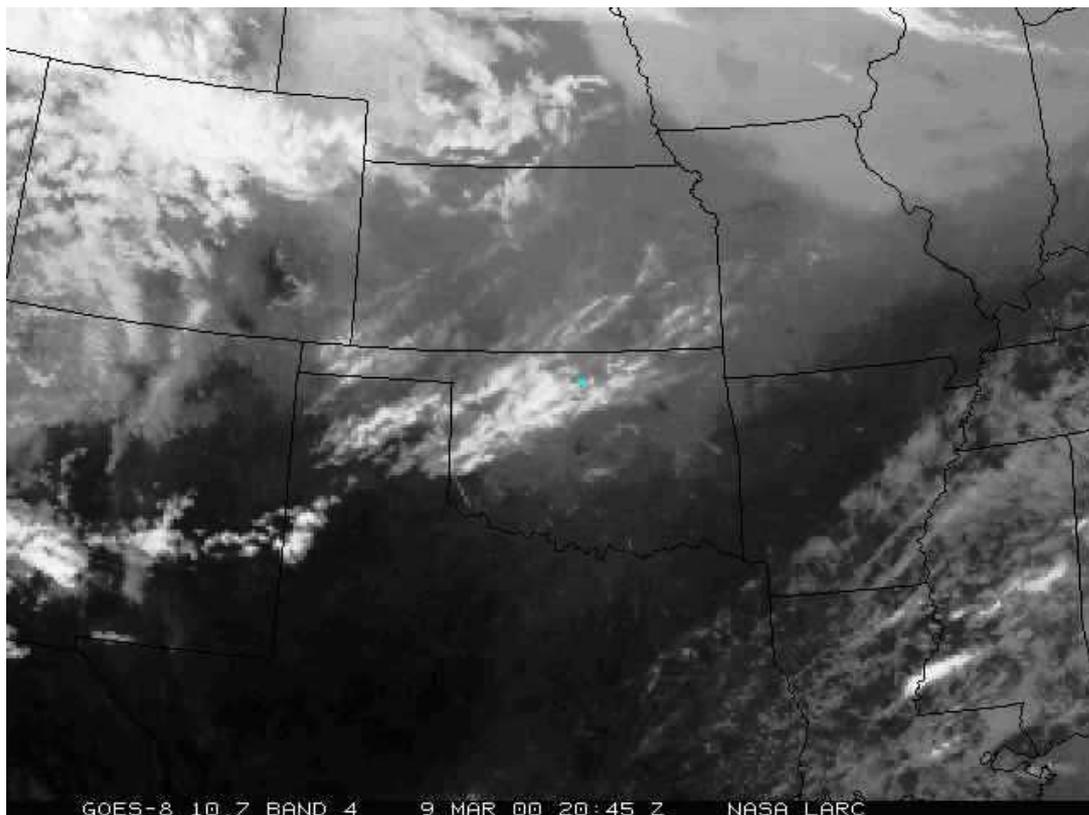


Abbildung 5.1: IR Satellitenbild des Zirrus um 20.45 UTC über der CF Messstelle (blauer Punkt). Vergleiche auch Abbildung 4.5.

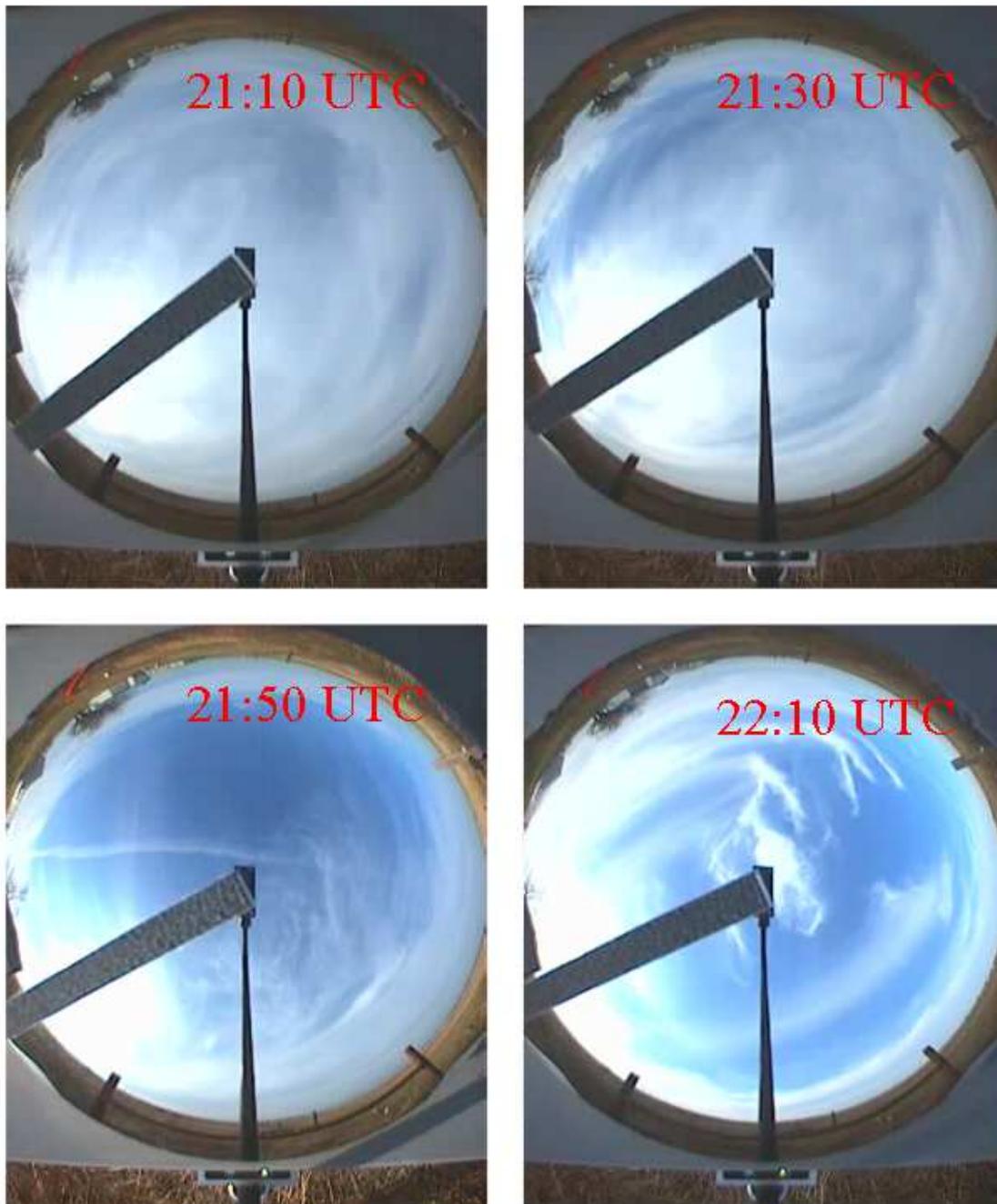


Abbildung 5.2: Bilder der Wolkenkamera über der CF (21.10 UTC - 22.10 UTC).

5.1.1 Messungen

Die Daten, die im Rahmen dieser Arbeit ausgewertet werden, stammen aus Messungen im Atmospheric Radiation Measurement (ARM) Programm, das durch das U.S. Department of Energy, Office of Science, Office of Biological and Environmental Research, Environmental Sciences Division finanziert wird. Folgende Messungen stehen für diesen Zeitraum zur Verfügung:

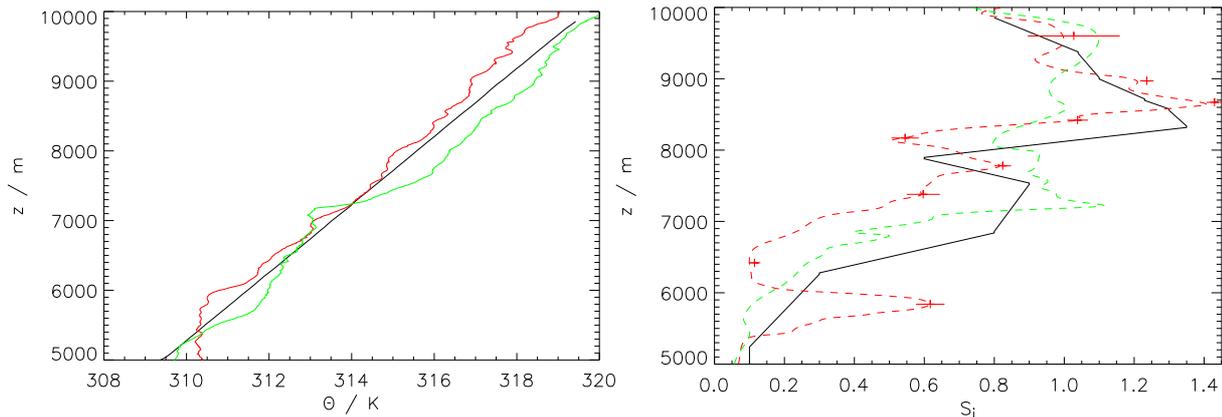


Abbildung 5.3: Radiosondenmessungen der potentiellen Temperatur θ (links) und des Sättigungsverhältnisses bezüglic Eis S_i (rechts) über der CF Messstelle um 17.30 UTC (rot) und 20.30 UTC (grün). Die Feuchtedaten wurden auf bekannte Fehler der Vaisala RS80-H Sensoren korrigiert (Miloshevich et al., 2001). In rot ist für die 17.30 UTC Messung zusätzlich der mittlere absolute Fehler und dessen Standardabweichung eingezeichnet (Miloshevich et al., 2006). In schwarz sind die Felder in der EULAG-LCM Simulation gezeigt, die zur Initialisierung des Modells verwendet werden.

Radiosondenmessungen Radiosondenaufstiege stehen im Intervall von drei Stunden zur Verfügung. Abbildung 5.3 (rechtes Bild) zeigt die Eisübersättigung S_i , die aus den Feuchte- und Temperaturdaten der Aufstiege gewonnen wurden. Die rote Kurve wurde um 17.30 UTC, die grüne um 20.30 UTC gemessen. Die Daten sind auf bekannte Fehler der Vaisala RS80-H Sensoren hin korrigiert ('dry-bias', Nichtlinearität der temperaturabhängigen Korrekturterme, temperaturabhängiges Ansprechverhalten der Sensoren). Zusätzlich ist in der Abbildung der mittlere absolute Fehler und dessen Standardabweichung eingezeichnet, die eine Funktion der Temperatur und Feuchte sind (Miloshevich *et al.*, 2006). Auffallend ist die deutlich eisübersättigte Schicht zwischen 8000 m und 9000 m Höhe in der Messung um 17.30 UTC. Es werden Werte von 40 % Übersättigung erreicht. Zu beachten ist, dass der mittlere Fehler der Messung in diesem Bereich nominell klein ist, für einen individuellen Aufstieg aber eine deutlich höhere Abweichung haben kann. Es ist nicht auszuschließen, dass es sich bei der Spitze um eine Überkorrektur bezüglich des Algorithmus handelt, welcher das verzögerte Ansprechverhalten des Sensors bei kalten Temperaturen und großen Feuchtegradienten berichtigen soll. Trotzdem deutet die Spitze und auch das zweite Maximum bei etwa 9000 m Höhe auf eine deutlich eisübersättigte Schicht hin. Unterhalb von 7000 m fällt das Sättigungsverhältnis S_i stark ab. Das Maximum unterhalb 6000 m hat einen transienten Charakter, wie der Vergleich mit der Messung um 20.30 UTC (rote Kurve) zeigt. Ist die frühere Messung noch nicht stark von Wolken beeinflusst, muss um 20.30 UTC von einer starken Modifikation des Wasserdampfes durch die vorhandene Zirrusbewölkung (siehe

Radarmessungen in Abb. 4.3) ausgegangen werden. In der späteren Messung sind die Maxima bei 9500 m und 10000 m Höhe weitgehend erhalten geblieben oder haben sich intensiviert, die stark übersättigte Region zwischen 8000 m und 9000 m ist abgebaut. Unterhalb von 8000 m ist die Atmosphäre feuchter. Karten der äquivalentpotentiellen Temperatur zeigen in diesem Zeitraum eine relativ gradientschwache Luftmasse. Dies ist ein Indiz dafür, dass Veränderungen des Feuchtefeldes zwischen 17.30 UTC und 20.30 UTC hauptsächlich durch adiabatisches Kühlen in Hebungsprozessen hervorgerufen werden und nicht durch Advektion feuchterer Luftmassen.

Zusätzlich zum Feuchteprofil liefern die Radiosondendaten auch die vertikale Schichtung der Atmosphäre, also die potentielle Temperatur θ (linkes Bild in Abb. 5.3).

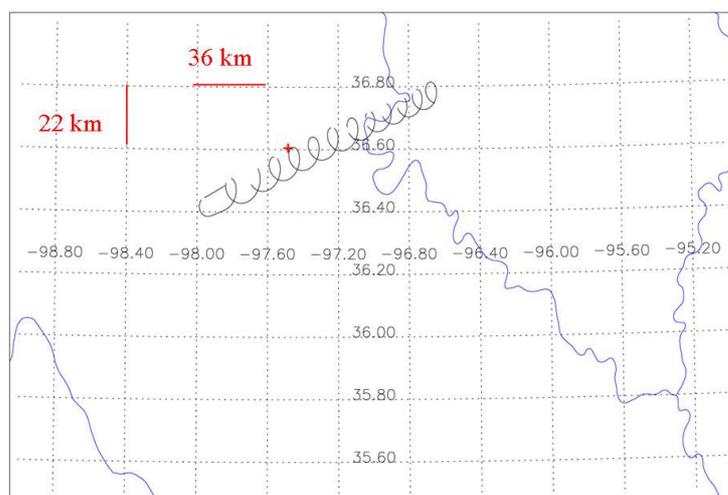


Abbildung 5.4: Flugpfad des ARM Fluges der Citation der Universität von North Dakota (21.30 UTC - 22.25 UTC). Die Spirale über der rot markierten CF fand von 21.46 bis 21.50 UTC statt.

Flugzeugmessungen Im Zeitraum zwischen 18.30 UTC und 22.30 UTC fand ein Messflug in den Wolkenstrukturen über der CF statt, der detaillierte Informationen über mikrophysikalische Eigenschaften der Eisphase lieferte. Nachdem mehrere Horizontal-Schnitte in konstanten Höhen geflogen wurden, folgte zwischen 21.30 UTC und 22.25 UTC ein Spiralfflug (siehe Flugweg in Abbildung 5.4). Die Spirale direkt über der Messstation wurde um ca. 21.45 UTC geflogen. An Bord des Citation Flugzeuges der Universität von Nord Dakota waren unter anderem folgende Messsysteme installiert:

- Counterflow Virtual Impactor (CVI): Ein Einlasssystem, welches nur Partikel mit $D > 7 \mu\text{m}$ einfängt, so dass in Eiswolken direkt die Masse von kondensiertem Wasser in Eisteilchen pro Volumeneinheit (Eiswassergehalt) mit einer Detektionsgrenze von 0.003 g m^{-3} messen kann.
- Cloud Particle Imager (CPI): Mit diesem können hochaufgelöste 2D Bilder von Eispartikeln gewonnen werden (siehe Abb. 5.5).

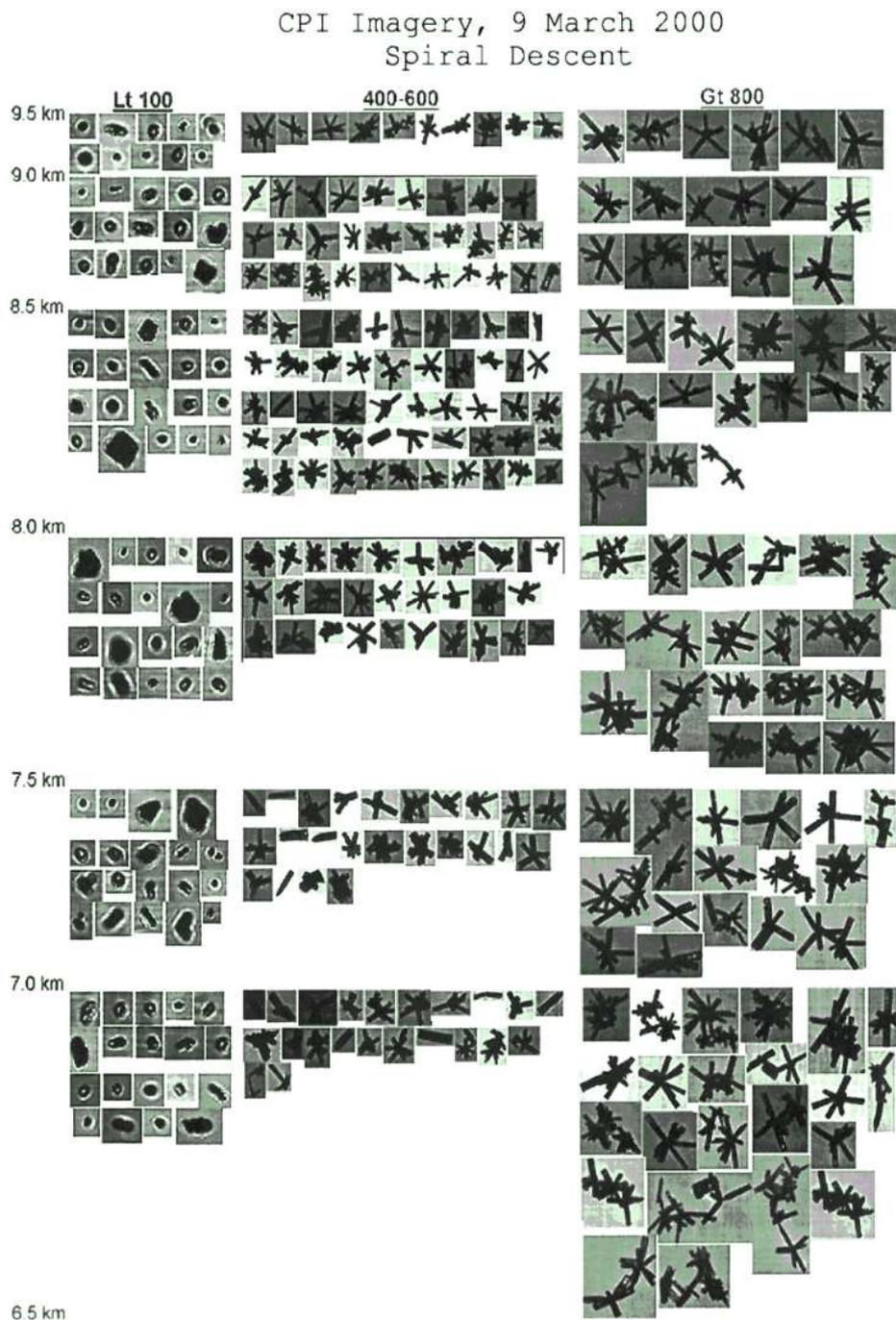


Abbildung 5.5: CPI Bilder von Eispartikeln, aufgenommen während des ARM Fluges am 9. März 2000. Beispielbilder sind nach Höhe und Größenklasse sortiert. Partikel mit unter 100 μm Durchmesser (links), Partikel zwischen 400 μm und 600 μm (Mitte) und Partikel größer als 800 μm (rechts). Die Anzahl der Bilder pro Größenklasse ist nicht repräsentativ für die wirklichen Anzahlkonzentrationen (Field und Heymsfield, 2003).

- Partikelmesssysteme (PMS), 2D-C Wolken- und 2D-P Niederschlagssonde: Diese nehmen elektronisch zweidimensionale Abbilder der Partikel auf, mit welchen GV im Bereich zwischen 33 bis etwa 1000 μm (2D-C) bzw. 200 - 6000 μm (2D-P) bestimmt werden (Heymsfield *et al.*, 2002). Einschränkungen dieser Systeme im Hinblick auf GV-Messungen sind Gegenstand aktueller Diskussion. Insbesondere bei kleinen Partikeldurchmessern können durch das Zerbrechen von Eispartikeln am Messsystemeinlass oder durch falsche Fokussierung der optischen Systeme unrealistisch hohe Werte für die Anzahlkonzentrationen angezeigt werden (Lawson *et al.*, 2006a; Field *et al.*, 2006a). Die Fehler der 2D-C Messungen in Zirren sind schwer zu ermitteln, wenn das Gerät bei hohen Geschwindigkeiten im Flugzeug verwendet wird. Gayet *et al.* (2004) geben eine grobe Abschätzung des totalen Messfehlers für die Anzahlkonzentration mit $\sim 50\%$ an. Diese Einschränkungen der Messung müssen bei der Interpretation der Ergebnisse berücksichtigt werden.

Die CPI Bilder in Abbildung 5.5 zeigen, dass die Eisteilchen mit Durchmessern größer 100 μm fast ausschließlich Flaschenprismenbündel (engl.: bullet rosettes) und Aggregate dieser Eiskristallform sind (Heymsfield *et al.*, 2002). Kleinere Teilchen sind annähernd sphärisch oder säulchenförmig.

Stellt man den gemessenen Eiswassergehalt (*IWC*) als Funktion der Höhe und des Kurses des Flugzeuges während des Spiralfuges dar (siehe Abbildung 5.6), erkennt man Variabilität in der Wolkenstruktur. Field und Heymsfield (2003) heben hier die deutlichen Kanten in den *IWC* Messungen bei einer Flugrichtung von 140° und 300° Grad hervor. Die Autoren gehen davon aus, dass diese kohärenten vertikalen Strukturen auf eine erfolgreiche Messung der identischen Wolkenformation beim Abstieg hindeuten und in jeder Spirale wieder dieselbe Wolke vermessen wurde. Alle folgenden Darstellungen von Atmosphären- oder Eisphaseneigenschaften beziehen sich auf Mittelungen über diesen Kursbereich in einzelnen Spiralen, was einer horizontalen Flugstrecke von etwa 15 km entspricht. Durch das Absinken des Flugzeuges mit 1 m s^{-1} liegen die Mittelwerte in der Vertikalen etwa alle 280 m vor.

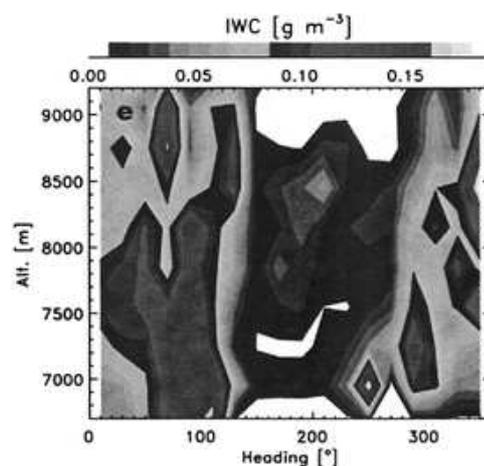


Abbildung 5.6: Der gemessene Eiswassergehalt *IWC* (Mittelwerte über Sekundenintervalle) während des Spiralfuges am 9. März 2000 als Funktion der Höhe und des Kurses des Flugzeuges nach Field und Heymsfield (2003).

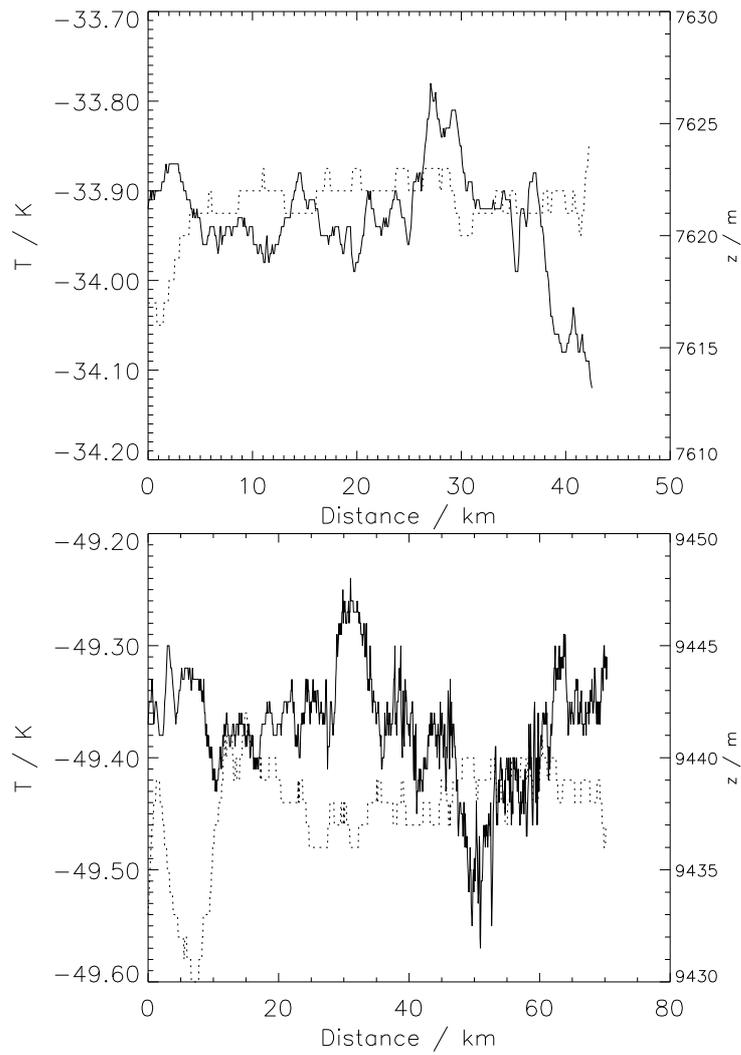


Abbildung 5.7: Horizontale Flugabschnitte parallel zur Strömungsrichtung zu unterschiedlichen Zeiten. Gezeigt ist die gemessene Temperatur (durchgezogene Linie) und die Flughöhe (gepunktete Linie).

Abbildung 5.7 zeigt Ausschnitte aus horizontalen Flugstrecken, die vor dem Spiralfly in unterschiedlichen Höhen durchgeführt wurden. Die Flugrichtung verlief nach Südwesten, parallel zur Strömungsrichtung. Die Temperaturschnitte zeigen, dass mesoskalige Fluktuationen unterschiedlicher Wellenlänge in den Daten vorhanden sind. Da senkrecht zur Anströmungsrichtung die Rocky Mountains verlaufen, ist ein Signal von Schwerewellen in der Atmosphäre zu erwarten. Die maximalen Amplituden betragen in etwa 0.1 K. Nimmt man ein stationäres Wellenfeld an, kann daraus eine grobe Abschätzung der auftretenden Aufwinde vorgenommen werden, wenn für die Windgeschwindigkeit parallel zur Strömungsrichtung $u \approx 20 \text{ m s}^{-1}$ (im Einklang mit den Messungen) gesetzt wird:

$$\frac{dT}{dt} \simeq u \frac{\partial T}{\partial x} = -w_{grav} \frac{g}{c_p} \quad (5.1)$$

$$w_{grav} = -\frac{c_p}{g} u \frac{\partial T}{\partial x} \simeq 0.02 \text{ m s}^{-1}. \quad (5.2)$$

Es ergibt sich eine vertikale Geschwindigkeitskomponente von $w_{grav} \simeq 0.02 \text{ m s}^{-1}$.

Zusätzliches Datenmaterial In einer objektiven Analyse (Zhang *et al.*, 2001), die Erkenntnisse aus Modell- und den vorhandenen Messdaten kombiniert, wurden großräumige Vertikalgeschwindigkeiten diagnostiziert. Abbildung 5.8 zeigt w als Vertikalprofil, analysiert für den Bereich oberhalb der CF Messstation. Der Auftrieb intensiviert sich mit fortschreitender Zeit, nimmt generell aber nur moderate Werte unter 0.1 m s^{-1} an. Zu den späteren Zeiten (20.30 UTC und 23.30 UTC) findet sich ein Maximum in der Aufwindgeschwindigkeit etwas oberhalb 500 hPa und ein Abklingen von w mit zunehmender Höhe. Wie bereits erwähnt, können dieser Vertikalgeschwindigkeit noch mesoskalige Fluktuationen überlagert sein, welche die Kühlraten lokal verstärken können. Aufgrund der vorhandenen Flugzeugprofile werden deren Amplituden ($w_{grav} \approx 0.02 \text{ m s}^{-1}$) aber als moderat eingeschätzt.

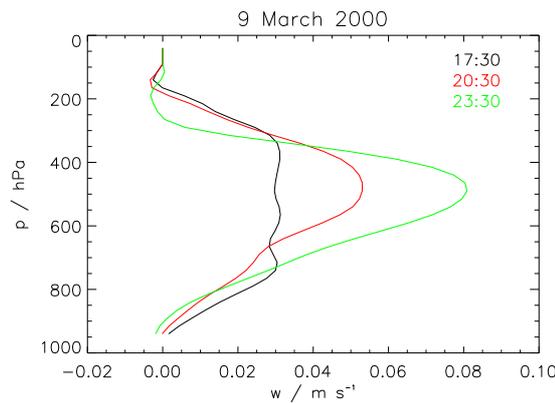


Abbildung 5.8: Vertikalprofil der Vertikalgeschwindigkeit w , übernommen aus einer optimalen Analyse von Zhang *et al.* (2001). Die verschiedenen Farben geben die Profile zu den angegebenen Uhrzeiten (UTC) wieder.

Basis-Simulation zur ARM IOP 9. März Fallstudie							
Gitterpunkte	n	m	l	Zeitschritt / s	Δt	Δt_{MIC}	Δt_{NUC}
	128	-	244		4	2	0.25
Maschenweite / m	dx	dy	dz	Meteo	$\mathbf{N}^2 / \text{s}^{-2}$	$\frac{\partial u}{\partial z} / \text{s}^{-1}$	$\mathbf{w}_0 / \text{m s}^{-1}$
	30	-	20		6.3×10^{-5}	2×10^{-3}	0.06 - 0.035
Zirrusparameter							
Eistyp	pristines Eis: hexagonale Säulchen \rightarrow Flaschenprismenbündel (ARM); Aggregate aus C2a (ARM)						
Aggregation	Schema B		Effizienz	$E_a = 0.7$			
Aerosole							
Typ	H ₂ SO ₄ /H ₂ O Lösungströpfchen						
Nukleationsweg	Homogenes Gefrieren						
Strahlung							
Berechnung der Profile alle	40 s						

Tabelle 5.1: Einstellungen für die Simulationen zur Fallstudie ARM IOP 9. März 2000 in Kapitel 5.1.2.

5.1.2 Aufbau der Basis-Simulation

Simulationsstrategie: Die Wolkenbildung wird in einem 2D Ausschnitt semi-Euler'sch verfolgt. Profile zur Modellinitialisierung basieren auf den vorhandenen Messdaten und stellen mittlere Profile dar. Plausible Annahmen über den Nukleationsweg der Eiskristalle führen zur Ausbildung eines ausgeprägten Zirrus. Die Messungen werden mit den Modellwerten zu jenem Zeitpunkt verglichen, an dem die Simulationsergebnisse Übereinstimmung bezüglich vertikaler Ausdehnung, Eiskristallanzahlkonzentration und Wasserdampfdruck im Zeitraum des Spiralfluges zwischen 21.30 UTC und 22.25 UTC zeigen.

Wie in der GEWEX GCSS WG2 Fallstudie (Kapitel 4.2) wird die Wolkenbildung in einem semi-Euler'schen Zugang betrachtet. In einem 2D Integrationsgebiet, welches einen Schnitt durch die Atmosphäre zwischen 5000 m und 10000 m darstellen soll, wird die Wolkeninitiierung stromaufwärts der CF berechnet und die Entwicklung des Zirrus bei der Advektion in Richtung Messstelle simuliert. Wie Satellitenbilder und die Wolkenkamera zeigen, entwickeln sich immer wieder neue Zirrusstrukturen, während das Feld in Richtung CF advehiert wird. Die simulierten Wolken- und Atmosphäreneigenschaften sollen mittlere Profile wiedergeben. Der genaue Zeitpunkt, an dem die Wolkenbildung für den betrachteten Ausschnitt beginnt, ist nicht bekannt. Eine exakte Initialisierung der atmosphärischen Profile am Ort der Wolkenbildung ist aufgrund der meist ortsgebundenen Messungen nicht möglich. Dennoch bietet das vorliegende Datenmaterial einen umfangreichen Überblick über die benötigten Eingabeparameter und bietet so eine erfolgversprechende Möglichkeit, Modellsimulation und Messergebnisse zu vergleichen. Tabelle 5.1 fasst die verwendeten Einstellungen zusammen. Eine Studie der Sensitivität der Simulationsergebnisse auf die getroffenen Annahmen für meteorologische und numerische Parameter findet sich im nächsten Kapitel.

In Abbildung 5.3 sind zusätzlich zu den Messungen die zur Initialisierung verwendeten Profile für θ_e und S_i dargestellt (schwarze Kurven). Das Temperaturprofil ist dem Radiosondenaufstieg

um 20.30 UTC angelehnt. Es ist geglättet, um numerische Instabilitäten in den Anfangsbedingungen zu vermeiden. Zusätzlich ist von einer Modifikation des gemessenen Temperaturprofils durch die interne Dynamik in den Wolkenstrukturen auszugehen, so dass Fluktuationen nicht den Anfangsbedingungen für die Simulation entsprechen müssen. Das Sättigungsverhältnis S_i in Bereichen über 8000 m wird an die Radiosondenmessung um 17.30 UTC angepasst. Im unteren Teil wird das Profil stärker übersättigt angesetzt als in der Messung, da bereits von einer Intensivierung des Feldes durch die analysierte, großräumige Hebung ausgegangen werden kann. Ansatzweise kann dies auch aus dem Profil der Messung um 20.30 UTC geschlossen werden, welches erhöhte S_i Werte aufweist. Letztendlich erschließt sich das verwendete Profil auch aus dem Vergleich der simulierten und gemessenen Verteilung während des Laufs, wie später noch beschrieben wird. Das Anfangsprofil ist in der Vertikalen nach unten verschoben, da die angenommene großräumige Hebung ein Aufgleiten der Modelldomäne während der Simulation bewirkt.

Die externe großräumige Hebung w_0 in der Simulation (siehe (3.1)) wird aus Abbildung 5.8 bestimmt. Hierbei handelt es sich um Werte, die sich aus der Analyse des Vertikalwindes in einer Säule oberhalb der CF ergeben. Berücksichtigt man, dass lokale mesoskalige Fluktuationen diese analysierte Hebung noch intensivieren können, wird für ein mittleres Profil $w_0 = 0.06 \text{ m s}^{-1}$ am Unterrand des Simulationsgebietes und $w_0 = 0.035 \text{ m s}^{-1}$ am Oberrand verwendet. Dazwischen nimmt das Profil linear ab.

Als Nukleationspfad wird homogenes Gefrieren von $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ Aerosolen angenommen. Für diesen Nukleationsweg müssen nur wenige Annahmen über die Aerosolzusammensetzung und dessen Gefriereigenschaften getroffen werden, für welche keine Messdaten vorhanden sind. Des Weiteren deuten hohe gemessene Übersättigungen darauf hin, dass die Anzahlkonzentration von heterogenen Eiskernen lokal gering sein mag, wie bereits in Kapitel 4.2.3 diskutiert.

Die aus vielen pristinen Eiskristallen zusammengesetzten Partikel in der zweiten und dritten Spalte der CPI-Bilder aus Abbildung 5.5 deuten darauf hin, dass der Aggregationsprozess Einfluss auf die GV der Eispartikel hat. Die Aggregation von Kristallen wird in der Simulation über das Hybrid Schema B (siehe Kapitel 2.5) simuliert. Die Aggregationseffizienz wird mit $E_a = 0.7$ als konstant angesetzt. Dies ist eine vereinfachte Darstellung, da E_a von vielen Faktoren wie Partikelform und -größe oder Umgebungstemperatur abhängig sein könnte. Der Kenntnisstand über die Aggregation einzelner Eispartikel ist aber sehr gering und Annahmen über E_a können nur hypothetischer Natur sein und es ist üblich eine konstante Effizienz in Modellsimulationen zu benutzen. In einer Studie von Mitchell (1988) wird $E_a = 0.1$ verwendet, während Field und Heymsfield (2003) für verschiedene gemessene GV Werte zwischen $0.1 < E_a < 0.7$ ermitteln. Für die Flugzeugmessungen der vorliegenden Fallstudie geben Field und Heymsfield (2003) einen Wert von $E_a = 0.7$ an. Kajikawa und Heymsfield (1989) finden in Messungen in Zirren bei $T \sim -40 \text{ }^\circ\text{C}$ neben anderen Typen sowohl Aggregate aus Flaschenprismenbündeln wie auch säulchenförmiger Eispartikel. Dies unterstützt die Annahme einer vom Partikeltyp unabhängigen Effizienz.

Basierend auf den Eispartikelformen in Abbildung 5.5 wird pristines Eis als hexagonale Säulchen mit variablem Aspektverhältnis angenommen, die mit zunehmender Größe in Flaschenprismenbündel überführt werden. Dies geschieht durch eine lineare Interpolation der Partikeleigenschaften zwischen $1 \text{ } \mu\text{m} < D < 200 \text{ } \mu\text{m}$. Aggregate sind aus Flaschenprismenbündeln zusammengesetzt (Heymsfield *et al.*, 2002). Die Simulationen zeigen sich als sehr sensitiv in Bezug auf die

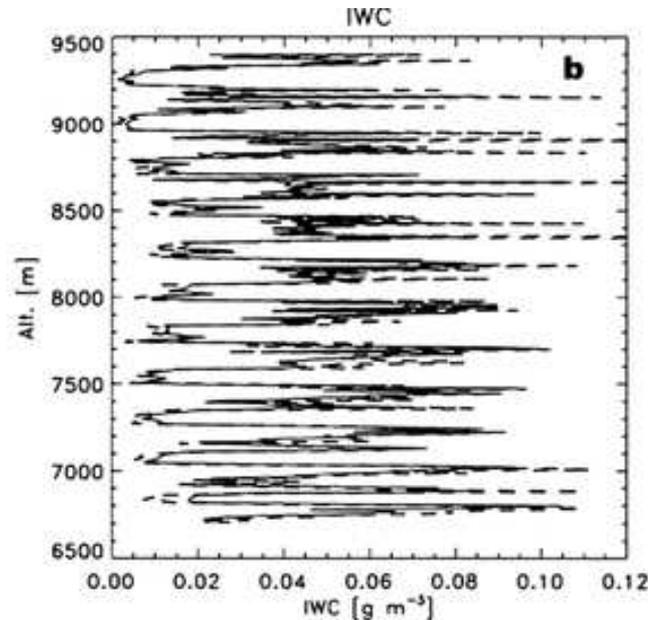


Abbildung 5.9: Während des Spiralfuges durch das Zirrusfeld gewonnener Eiswassergehalt. Daten aus der CVI Messung (gestrichelt) und aus Schätzungen der 2D Proben nach Field und Heymsfield (2003) (durchgezogene Linien).

verwendeten Annahmen zur Partikelform. Die verwendeten Partikeleigenschaften sind aber konsistent mit den in Abbildung 5.5 gezeigten Kristallen und basieren auf empirischen Relationen, welche speziell für diesen Tag abgeleitet wurden.

Das Strahlungsmodul wird verwendet und ein Abgleich der Erwärmungsraten findet alle 40 Sekunden statt. Kleinere Zeitintervalle zwischen zwei Aufrufen führen nicht mehr zu einer wesentlichen Änderung der Resultate (siehe Kapitel 5.2). Der mittlere Sonnenzenitwinkel wird der Jahres- und Tageszeit entsprechend auf $\theta_z = 41.4^\circ$ festgehalten.

5.1.3 Ergebnisse der Basis-Simulation: Validierung anhand der Messdaten

Das Spiralfugmuster erlaubt es, aus den Messdaten vertikale Profile der Wolkenstruktur zu generieren, welche einen ausführlichen Vergleich mit den simulierten Ergebnissen ermöglichen. Simulation und Messung werden zu jenem Zeitpunkt gegenübergestellt, an dem der angenommene Bildungsweg in der Simulation zu einem Zirrus führt, der in Struktur und mikrophysikalischen Eigenschaften jenem der Messungen im Zeitraum des Spiralfuges entspricht. Dieser Zeitpunkt wird in der Simulation nach etwa 144 Minuten festgesetzt. Abbildung 5.20 (Kapitel 5.3.1) zeigt den resultierenden Eiswassergehalt (IWC) in der Simulation. Die Wolkenoberkante liegt hier bei 9200 m, die Basis bei etwa 6200 m, mit Fallstreifen in tieferliegenden Schichten. Vergleicht man dies mit den Radarbeobachtungen um 21.40 UTC, als die Spirale direkt über der CF geflogen wurde (siehe Abbildung 4.3), stimmen die errechneten Wolkenkanten mit den Messungen überein. Vereinzelt finden sich in den Radarreflektivitäten auch Wolkenstrukturen etwas oberhalb dieses Höhenbereiches. Auch in den Radarbildern sind ausgebildete Fallstreifen zu erkennen, die aufgrund der unterschiedlichen Beobachtungsgeometrien aber nicht direkt verglichen werden

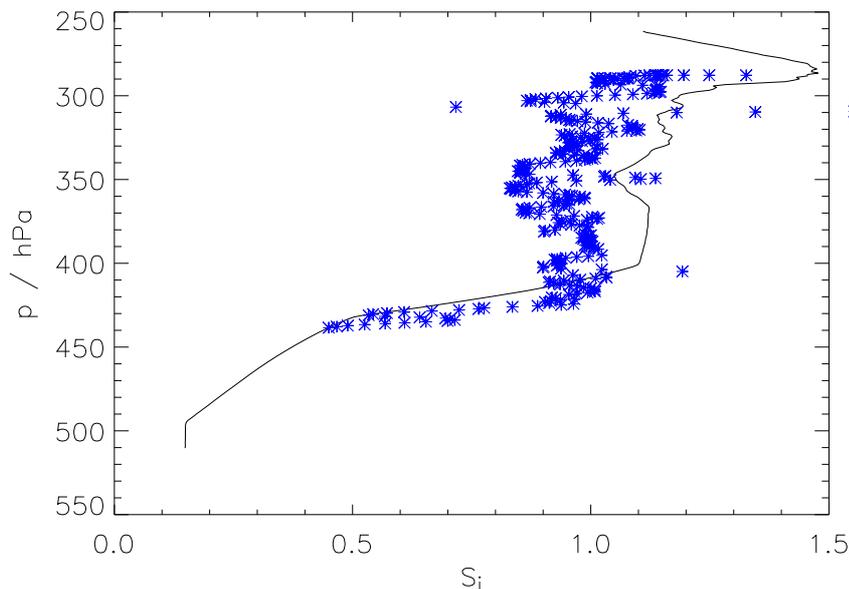


Abbildung 5.10: Während des Spiralfuges durch das Zirrusfeld gewonnene Sättigungsverhältnisse S_i (blaue Sterne). Die durchgezogene Linie entspricht den S_i Werten in der EULAG-LCM Simulation nach 136 min.

dürfen. Die IWC Werte in der Simulation erreichen vereinzelt ein Maximum von etwa 0.06 g m^{-3} , vor allem in höhergelegenen Schichten der Wolke, und liegen damit im mittleren Bereich der Amplituden, die während des Spiralfuges ermittelt wurden (siehe Abbildung 5.9).

Abbildung 5.10 zeigt einen Vergleich der in-situ gemessenen Sättigungsverhältnisse S_i (blaue Sterne) mit den simulierten Werten. Beide Profile weisen einen ähnlichen Verlauf in drei unterschiedlichen Zonen auf. Unterhalb 420 hPa fallen die S_i Werte deutlich ab und kennzeichnen eine untersättigte Schicht, in der Eiskristalle sublimieren. Darüber befindet sich ein Bereich, in dem die Übersättigung von den Eispartikeln weitgehend abgebaut wurde. Beide Profile liegen nahe $S_i \sim 1$, wobei die Messwerte zu niedrigeren Werten tendieren. Bei etwa 290 hPa findet sich ein stark eisübersättigter Bereich. Dies entspricht der Wolkenbildungszone. Hebungsprozesse bewirken dort eine Abkühlung und erhöhen das Sättigungsverhältnis, bis Nukleationsprozesse neue Partikel bilden und die Übersättigung abbauen. Die zweite Spitze bei 310 hPa ist in der Simulation bereits abgebaut. Insgesamt gilt:

- Das zur Initialisierung verwendete Wasserdampfprofil wird durch die vorgegebenen Kühlraten und den sich bildenden Zirrus in der Simulation derart modifiziert, dass sich zum Referenzzeitpunkt eine Übereinstimmung mit dem gemessenen Profil ergibt.

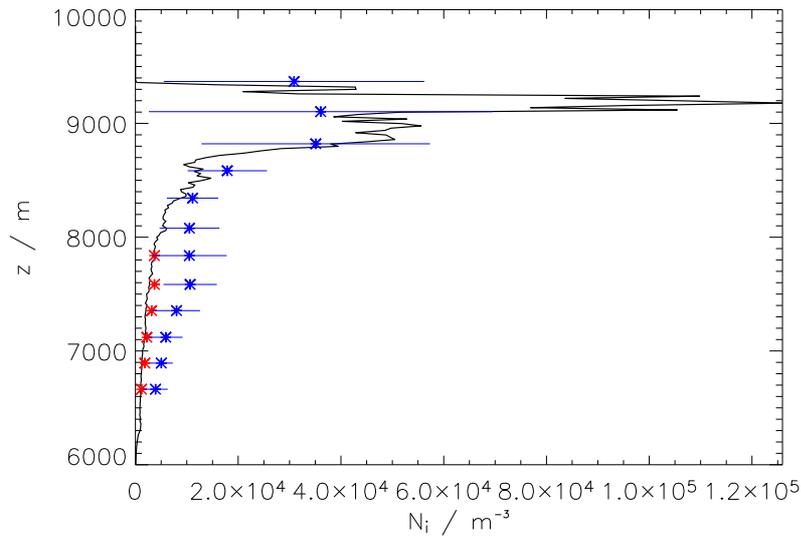


Abbildung 5.11: Während des Spiralfluges durch das Zirrenfeld gewonnene Eiskristallanzahlkonzentrationen (blaue Sterne). Die horizontalen blauen Linien geben den Wertebereich mit einer Standardabweichung σ um den Mittelwert wieder. Die durchgezogene Linie entspricht den N_i Werten in der EULAG-LCM Simulation nach 144 min. Rote Sterne repräsentieren Eiskristallanzahlkonzentrationen, wenn nur Partikel $D > 300 \mu\text{m}$ in den gemessenen GV zur Berechnung von N_i herangezogen werden.

Abbildung 5.11 stellt eine Gegenüberstellung der ermittelten Eiskristallanzahlkonzentrationen N_i und der simulierten Werte dar. Die gemessenen Werte von N_i (blaue Sterne) werden aus den gemittelten GV der einzelnen Spiralen gebildet (siehe Kapitel 5.1.1, Flugzeugmessungen). Die horizontalen blauen Balken geben den Wertebereich mit einer Standardabweichung σ um den Mittelwert wieder. Generell stimmen die Wolkengrenzen, Größenordnung und vertikale Struktur der Eiskristallanzahlkonzentration überein. Die Amplitude oberhalb 9000 m Höhe entspricht frisch nukleierten Kristallen in der Simulation. Derartige Nukleationsspitzen werden in den Messungen aufgrund der räumlichen Mittelung abgeschwächt. Unterhalb von 8000 m ist die Konzentration um einen Faktor zwei bis drei unterschätzt. Wie später noch ausführlicher erläutert wird, ist die Anzahlkonzentration durch das Fehlen kleinerer Partikel in der Simulation in tiefer gelegenen Wolkenschichten gegenüber der Messung reduziert. Entfernt man die kleine Partikelmode ($D < 300 \mu\text{m}$) in den Messungen, so findet sich wieder eine Übereinstimmung mit den simulierten Werten. Mögliche Ursachen für die Abwesenheit kleinerer Partikel werden im nächsten Abschnitt gegeben. Kurz zusammengefasst gilt:

- Zur Validierung der EULAG-LCM Simulationen werden bodengestützte und flugzeuggetragene Messungen verwendet. Die Daten des Spiralfluges sind Mittelwerte über Teilbereiche einzelner Spiralen. Entsprechend ist die Modellsimulation als Ausschnitt der Wolkenstruktur zu sehen, die mittlere Bedingungen darstellt. Der exakte zeitliche Verlauf der Wolkenentwicklung kann wegen fehlender Messdaten nicht nachvollzogen werden, dennoch deutet der Vergleich der Messungen mit der Simulation hinsichtlich S_i , N_i und IWC darauf hin, dass das EULAG-LCM die Zirrenbildung nachvollziehen kann und an einem zeitlichen Referenzpunkt Übereinstimmung mit den Messdaten gefunden wird.

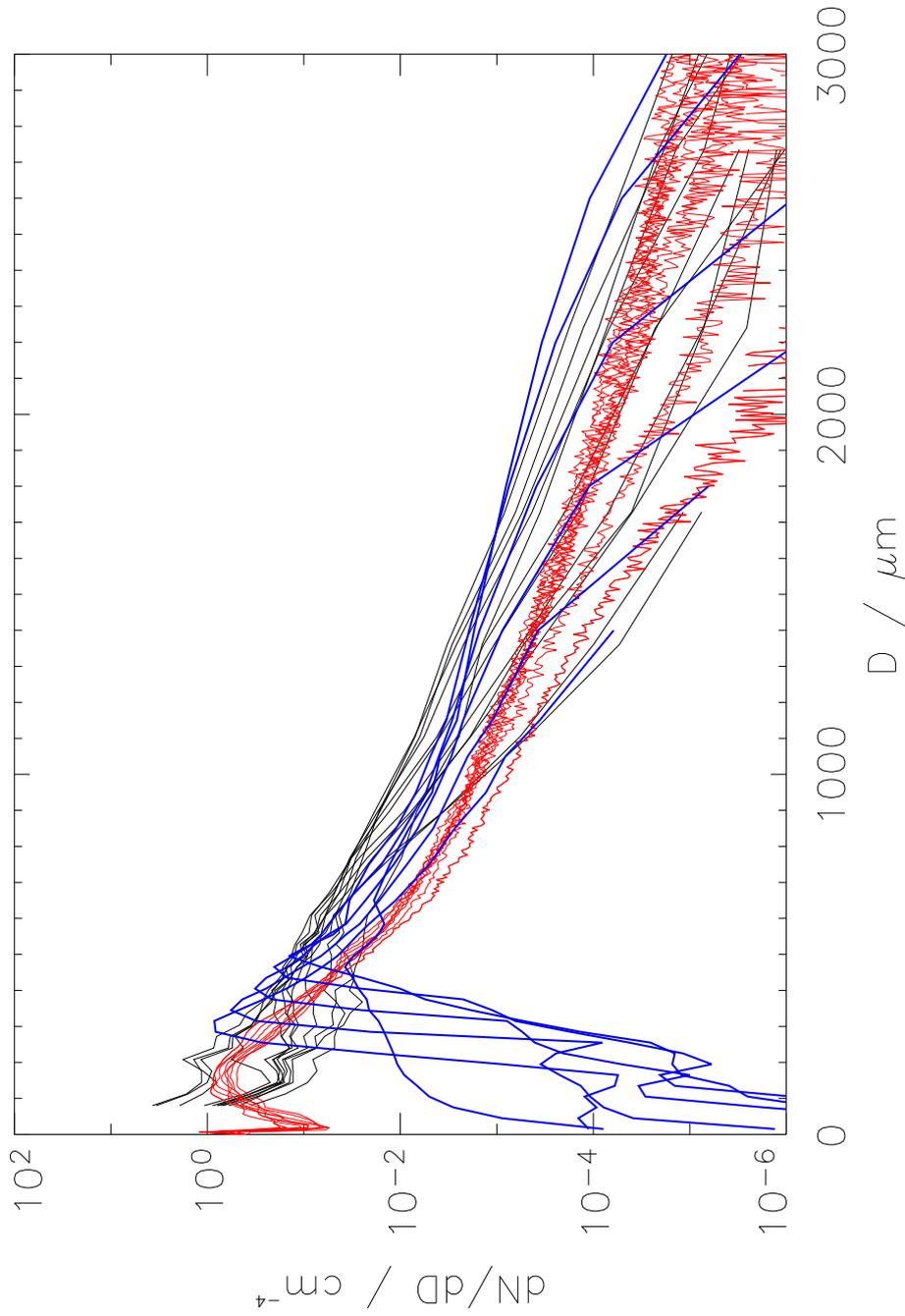


Abbildung 5.12: Eispartikelgrößenverteilungen (GV, schwarz), die während des Spiralfuges am 9. März 2000 zwischen 9000 m und 7000 m gemessen wurden (gemittelt für Flugabschnitte mit Kursen zwischen 300 und 140 Grad). Die Verteilungen wurden etwa alle 250 m in unterschiedlichen Flughöhen gewonnen, wobei die schmalste Verteilung der oberen Wolkenhälfte entstammt, die breiteste dem unteren Bereich. Überlagert sind Kurven (blau), die die simulierte GV im EULAG-LCM Lauf wiedergeben, die ebenfalls in unterschiedlichen Höhen (alle 280 m) und zeitlich versetzt (alle 280 s) gebildet werden. In rot sind simulierte GV dargestellt, die die Verteilung der Partikel im gesamten Wolkenbereich zwischen 7000 m und 9000 m jeweils 280 s versetzt wiedergeben.

5.1.4 Vergleich der gemessenen und simulierten Eispartikelgrößenverteilungen

Die Lagrange'sche Partikelverfolgung im EULAG-LCM erlaubt es, GV der Eiskristalle über beliebige Wolkenregionen zu bilden und mit in-situ gewonnenen Messungen zu vergleichen. Somit kann zusätzlich zu den horizontal gemittelten Größen N_i und S_i im vorherigen Kapitel ein Vergleich der mikrophysikalischen Eigenschaften des Zirrus vorgenommen werden. Abbildung 5.12 zeigt die GV, die in unterschiedlichen Höhen während des Spiralfuges gemessen wurden (schwarze Kurven). Die Höhendifferenz zwischen zwei GV entspricht in etwa 280 m. Der zeitliche Abstand zwischen GV Messungen aufeinanderfolgender Spiralen beträgt 280 s. Zu berücksichtigen ist, dass die gemessene GV einen Mittelwert über einen horizontalen Bereich darstellt und durch Heterogenität in der Wolkenstruktur Eispartikel unterschiedlicher Entwicklungsstadien in der Messung enthalten sein können. Unter der Annahme von Field und Heymsfield (2003), dass erfolgreich dieselbe Wolkenstruktur, also die identische Population von Eiskristallen vermessen wurde, ist das Anwachsen der Anzahlkonzentrationen großer Partikel beim Abstieg durch den Aggregationsprozess bestimmt.

Simulierte GV aus dem EULAG-LCM Lauf sind als blaue Kurven wiedergegeben. Diese werden analog zur Messung in unterschiedlichen Höhen (alle 280 m) und zeitlich versetzt (alle 280 s) gebildet. Der Vergleich zeigt, dass das Modell in der Lage ist, die GV ab etwa 500 μm wiederzugeben. Die Zunahme der Anzahlkonzentration großer Partikel ist in den simulierten Kurven enthalten. Auffallend ist jedoch das Fehlen der kleinen Partikelmode, die in den Messungen in allen Höhenbereichen vorhanden ist. Hieraus resultiert die zu kleinen simulierten Anzahlkonzentrationen, wie in Abbildung 5.11 gezeigt. Quellen für die kleinere Partikelmode in den Messungen können sein:

- 1) Horizontale Heterogenität: Die Messung stellt einen Mittelwert über eine horizontale Wegstrecke dar. Die GV können daher kleinere Partikel aus Nukleationszonen in unterschiedlichen Höhenbereichen oder Kristalle an Wolkenrändern enthalten. Dort können Eiskristalle mit geringen Durchmessern existieren.
- 2) Messfehler: Das verwendete Messsystem ist dafür bekannt, dass am Messeinlass größere Partikel zerbrechen und die kleinen Splitter der kleinen Partikelmode zugeschrieben werden (Lawson *et al.*, 2006a).
- 3) Sekundäre Eisproduktion: Cardwell *et al.* (2003) haben bei ihren Simulationen von gemessenen Eisspektren in Zirren festgestellt, dass durch Nukleation und Aggregation allein der hohe Anteil von kleinen Partikeln in tieferen Wolkenbereichen nicht erklärt werden kann. In ihren Rechnungen war eine hohe Produktionsrate kleiner Eispartikel durch sekundäre Eisproduktion nötig, um die vermessenen GV zu erhalten. Ein möglicher Prozess zur Produktion sekundärer Eispartikel unterhalb des Hallett-Mossop-Temperaturbereichs (-8 bis -3 °C) ist das Aufbrechen von Aggregaten in untersättigten Gebieten, wie Laboruntersuchungen von Bacon *et al.* (1998) zeigen. Dabei brechen die Verbindungsstellen der einzelnen Kristalle im Aggregat auf. Auch Wolde und Vali (2002) weisen darauf hin, dass die Anzahl kleiner Kristalle mit steigenden maximalen Abmessungen von Kristallen (zunehmender Breite der GV) in gemessenen Verteilungen anwächst. Sie stellen fest, dass der Prozess der sekundären Eisproduktion über einen weiten Bereich an atmosphärischen Bedingungen äußerst effizient ablaufen müsste, um die hohen Konzentrationen an kleinen Partikeln erklären zu können. Der Prozess kann quantitativ nicht abgeschätzt werden, da der Me-

chanismus jenseits des Hallet-Mossop-Bereichs unzureichend verstanden ist, wie Cantrell und Heymsfield (2005) in ihrem Übersichtsartikel berichten.

In rot sind in Abbildung 5.11 simulierte GV zu verschiedenen Zeiten zu sehen, die die Verteilung der Partikel zwischen 9000 m und 7000 m jeweils 280 s versetzt in der gesamten Wolke darstellen. Im Unterschied zu den blauen Kurven ist nun die kleine Partikelmode vorhanden. Sie resultiert aus den Nukleationszonen am oberen Rand der Wolke. Sollte in den vermessenen Wolken Nukleation auch in niedrigeren Bereichen stattgefunden haben, könnte dies teilweise die kleine Partikelmode erklären. Ein kurzer Ausblick auf diesen Effekt durch heterogene Nukleation wird in Kapitel 5.2 gegeben.

Aufgrund der Unsicherheiten bei der Initialisierung der Modellparameter, möglichen Defiziten der Modellphysik, aber auch durch bereits erwähnte Fehlerquellen bei der Messung der GV ist eine exakte Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation nicht zu erwarten. Dennoch ist das EULAG-LCM in der Lage, die gemessenen Größenordnungen der GV nachzubilden. Die Existenz von Partikeln mit Durchmessern von $\gtrsim 3000 \mu\text{m}$ wird korrekt wiedergegeben. Nachdem im nächsten Abschnitt das Aggregationsmodul des EULAG-LCM anhand der theoretischen Überlegungen zur Skalierung der GV aus Kapitel 2.5.2 überprüft wird, folgt in Kapitel 5.2 eine Sensitivitätsstudie bezüglich der Unsicherheiten bei der Initialisierung des Basis-Modelllaufs zur Fallstudie.

5.1.5 Skalierung der simulierten Eispartikelgrößenverteilung

Wie in Kapitel 2.5.2 beschrieben, haben Field und Heymsfield (2003) die GV der im vorherigen Kapitel gezeigten Spiralflugmessungen skaliert. Dabei gehen sie von einem konstanten Massenfluss ϕ aus, der in den Daten auch weitgehend bestätigt ist. Dies bedeutet, dass sich der vermessene Zirrus annähernd in einem stationären Zustand befunden hat. In der oberen Wolkenregion müssen also immer wieder neue Eisteilchen nukleieren, die in darunterliegenden Bereichen zur Ausbildung aggregierter Partikel beitragen (dies wird in Kapitel 5.3.1 noch genauer dargestellt), um den Massenfluss konstant zu halten. Die Neubildung von Eis wird statistisch in unterschiedlichen Regionen der Spiralbahn auftreten, die durch die räumliche Mittelung in den gemessenen GV enthalten sind. Dies bedeutet, dass zu jedem Zeitpunkt Aggregate in unterschiedlichen Entwicklungsstadien zur GV beitragen. Die gemittelte GV in einer bestimmten Höhe sollte sich demnach im Laufe der Zeit nicht wesentlich verändern. Beim Absinken in aufeinanderfolgenden Spiralen kann demnach ein Aggregationsprozess beobachtet werden, wenn die Kristalle um ~ 280 m sedimentieren.

Aufgrund des kleineren Simulationsgebietes und der diskreten vertikalen Auflösung treten im EULAG-LCM Nukleationsereignisse nicht stetig auf, sondern zeitlich diskret. Die Annahme eines stationären Zustandes ist in der Simulation somit nicht immer erfüllt. Bildet man dort die GV auf einem konstanten Höhenintervall, ist diese nicht konstant. Verlust oder Zugewinn an großen Partikeln verändern die Anzahlkonzentrationen. Wird ein Absinken des Flugzeuges mit 1 m s^{-1} angenommen, verändert der Eintrag oder Verlust großer Partikel durch Sedimentation die GV und überdeckt den Aggregationsprozess, was eine Skalierung dieser GV nicht erlaubt.

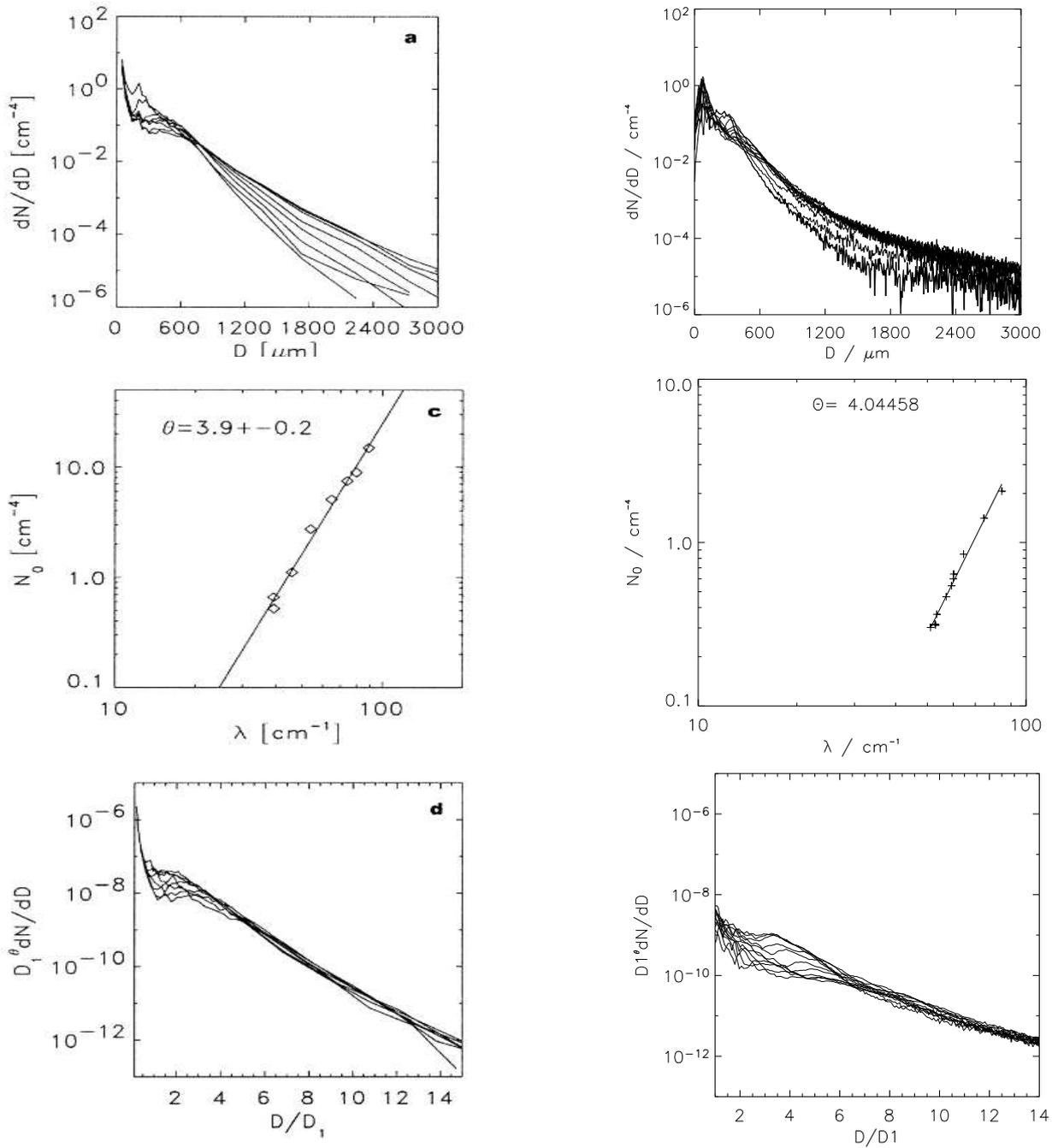


Abbildung 5.13: Skalierung der Eispartikelgrößenverteilung nach Field und Heymsfield (2003). Links sind die aus der Messung gewonnenen Werte dargestellt, rechts die simulierten Ergebnisse. Das obere Bild zeigt GV, die in unterschiedlichen Höhen (links) bzw. zu unterschiedlichen Zeiten (rechts) erhalten wurden. In der mittleren Reihe wird der Skalierungsfaktor θ nach (2.75) gebildet. Die unteren Bilder zeigen die skalierten GV aus der oberen Reihe.

Dieses Problem kann umgangen werden, indem die zu unterschiedlichen Zeiten gebildeten GV skaliert werden, welche ein Abbild der gesamten Wolke darstellen. Automatisch ist so die Voraussetzung erfüllt, die Skalierung auf eine identische Population von Eiskristallen anzuwenden (rote Kurven in Abbildung 5.12). Eine Beschränkung auf Partikeldurchmesser $D > 800 \mu\text{m}$, minimiert den Einfluss von diffusivem Wachstum auf die GV. Die erste GV wird zu einem Zeitpunkt der Wolkenbildung aufgestellt, an dem verstärkt neue Kristalle am Wolkenoberrand nukleieren. Die weiteren GV folgen dann im Abstand von 280 s, was dem Bild entspricht, dass die Kristalle sedimentieren und bei einer angenommenen mittleren Fallgeschwindigkeit von 1 m s^{-1} 280 m in der Vertikalen überstreichen. Kann für die GV zu unterschiedlichen Zeiten eine Skalierung gefunden werden, ist dies eine Bestätigung für die aufgeführte Hypothese.

Abbildung 5.13 zeigt die Skalierung für die gemessene sowie die simulierte GV. An das obere Ende der simulierten GV (Abbildung 5.13 rechts oben) werden Funktionen der Form $n(D, t) = N_0(t) \exp[-\lambda(t)D]$ angelegt. Die minimale Größe der Kristalle, ab welcher die GV einer exponentiellen Form folgen, beträgt $800 \mu\text{m}$, in Einklang mit gemessenen Spektren aus Feldstudien (Wolde und Vali, 2002). Aus den Parametern N_0 und λ ergibt sich dann nach (2.75) der gesuchte Skalierungsfaktor θ , der sowohl in der Messung wie auch in der Simulation einen Wert von $\theta \sim 4$ annimmt. Multipliziert man die simulierten GV mit D_1^θ und trägt das Ergebnis als Funktion von D/D_1 auf, fallen die simulierten GV für größere Partikel annähernd auf eine universelle Gerade, analog zur Messung (untere Zeile in Abbildung 5.13). Für kleinere Partikel, die u.a. von Wachstumsprozessen beeinflusst sind, weiten sich die Kurven in Simulation und Messung auf. Der unterschiedliche Verlauf der universellen Funktionen ist durch die Unterschiede in der gemessenen und simulierten GV und den daraus resultierenden Abweichungen in D_1 bedingt.

Die erfolgreiche Skalierung der simulierten GV unterstützt die Annahme, dass der Aggregationsprozess durch das Hybrid Schema in seiner Physik richtig beschrieben wird. Die Simulation konnte somit zur Validierung des Aggregationsprozesses im EULAG-LCM beitragen.

5.2 Sensitivitätsstudien

Wie bereits erwähnt, können die Rahmenbedingungen für die Simulation zur Fallstudie nicht exakt aus den Messdaten bestimmt werden. Die zu geringe räumliche und zeitliche Abdeckung der Messungen und mögliche Fehler in den Beobachtungsdaten bergen Unsicherheiten für die Initialisierung. Im Folgenden werden Rechnungen mit veränderten meteorologischen Anfangsbedingungen oder veränderten numerischen Parametern durchgeführt, um die Sensitivität der EULAG-LCM Simulationen auf diese Variationen zu studieren. Für die Umgebungsvariablen werden Vertikalwind, Feuchtefeld, Aggregationseffizienz, Scherung sowie Nukleationsweg variiert. Hinsichtlich der Numerik wird die Sensitivität auf den verwendeten Zeitschritt, die vertikale Auflösung sowie die Anzahl der Simulationsteilchen untersucht. Letzteres erlaubt es, gefundene Abweichungen durch physikalische Prozesse in ein Verhältnis zu rein statistischen Fluktuationen zu setzen. Diese ergeben sich durch Unterschiede in der Anzahl und Art der verwendeten Simulationsteilchen in verschiedenen Läufen.

5.2.1 Vergleichsmaß: Mittlere säulenintegrierte optische Dicke

Werden Variablen zwischen einzelnen Simulationen verändert, ergeben sich aufgrund der Einzelpartikelverfolgung statistische Fluktuationen durch eine Änderung der Anzahl und Position der berechneten Simulationspartikel, wie bereits in Kapitel 3.3 diskutiert wurde. Ein direkter Vergleich der Ergebnisse in einzelnen Gitterboxen ist nicht sinnvoll, da lokal Abweichungen auftreten können, während integrale Eigenschaften des Zirrus aber sehr ähnlich sind. Als Vergleichsmaß wird deshalb die mittlere säulenintegrierte optische Dicke $\bar{\tau}$ eingeführt, definiert als:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \tau_i \quad (5.3)$$

$$\tau_i = \int_1^Z \beta(z) dz \quad ; \quad \beta(z) = IWC(z) \left(a + \frac{b}{D_{ge}(z)} \right). \quad (5.4)$$

Die optische Dicke ist ein Maß für die Strahlungswirksamkeit der Wolke im solaren Spektrum und vereint über die Extinktionsparametrisierung von Ebert und Curry (1992) in (5.4) Eiswassergehalt IWC und Effektivradius D_{ge} . Hier ist n die Anzahl der Gitterpunkte in horizontaler Richtung. In (5.4) stellt β die Extinktion und Z die vertikale Ausdehnung des Modellgebietes dar.

Um die Abweichung einer Variationsrechnung A vom Basislauf B bewerten zu können, wird die relative Abweichung der mittleren säulenintegrierten optischen Dicke $\bar{\tau}$ als Funktion der Zeit berechnet:

$$\Delta\tau(t) = \frac{\bar{\tau}_A(t) - \bar{\tau}_B(t)}{\bar{\tau}_B(t)} \quad (5.5)$$

Tabelle 5.2 fasst die Ergebnisse der verschiedenen Sensitivitätsläufe zusammen. In den zwei letzten Spalten sind der zeitliche Mittelwert und die Standardabweichung von $\Delta\tau(t)$ bzw. der Median und das 20- und 80-Prozent Perzentil in Prozent eingetragen.

<i>Sensitivität auf meteorologische Parameter</i>						
Lauf	Parameter	Variation	Simulationspartikel	$\Delta\tau$ Mittel	$\Delta\tau$ Median (P20,P80)	
a)	$w / \text{m s}^{-1}$	+0.02 m s ⁻¹ (+33 %)	7.3×10^6	+63.8 % ± 68.6 %	36.8 % (9.4 %, 132.5 %)	
b)		-0.02 m s ⁻¹ (-33 %)	1.4×10^6	-77.3 % ± 11.0 %	-74.5 % (-83.1 %, -67.2 %)	
c)	S_i	(+10 %)	5.1×10^6	+29.5 % ± 59.4 %	12.6 % (-6.0 %, 49.8 %)	
d)		(-10 %)	4.5×10^6	-41.8 % ± 28.9 %	-32.0 % (-67.0 %, -15.0 %)	
e)	E_a	+0.3 (+43 %)	4.7×10^6	-14.5 % ± 11.7 %	-19.1 % (-24.5 %, -0.3 %)	
f)		-0.3 (-43 %)	5.0×10^6	+14.6 % ± 11.3 %	15.3 % (2.4 %, 27.5 %)	
g)	$\frac{\partial u}{\partial z} / \text{s}^{-1}$	+0.002 s ⁻¹ (+100 %)	2.2×10^6	-11.1 % ± 25.5 %	-6.7 % (-12.4 %, 3.0 %)	
h)		+0.001 s ⁻¹ (+50 %)	3.6×10^6	-10.2 % ± 17.5 %	-8.5 % (-13.2 %, -1.2 %)	
i)		-0.001 s ⁻¹ (-50 %)	3.6×10^6	-7.6 % ± 17.1 %	-13.8 % (-17.2 %, 10.4 %)	
j)	Nukleation	+heterogen	8.9×10^6	-7.0 % ± 66.2 %	-4.1 % (-42.3 %, 1.4 %)	
<i>Sensitivität auf numerische Parameter</i>						
Lauf	Parameter	Variation	Simulationspartikel	$\Delta\tau$ Mittel	$\Delta\tau$ Median (P20,P80)	
k)	$L\Delta t$ (Strahlung)	-20 s (-50 %)	4.9×10^6	-0.7 % ± 3.4 %	-0.82 % (-4.3 %, 3.3 %)	
l)	$\Delta t, \Delta t_{MTC}, \Delta t_{NUC}$	-2 s, -1 s, -0.125 s (-50 %)	5.0×10^6	-2.8 % ± 16.7 %	-0.1 % (-4.2 %, 5.3 %)	
m)	dz	-15 m (-50 %)	5.3×10^6	-0.7 % ± 10.5 %	0.9 % (-1.8 %, 4.7 %)	
n)	\mathcal{N}_{sim}	+4.4 × 10 ⁶ (+90 %)	9.2×10^6	+1.5 % ± 9.2 %	-0.3 % (-2.1 %, 2.1 %)	
o)		+1.2 × 10 ⁶ (+25 %)	6.0×10^6	-0.4 % ± 5.9 %	-0.18 % (-5.0 %, 3.0 %)	
p)		+0.5 × 10 ⁶ (+9 %)	5.3×10^6	-0.6 % ± 5.2 %	-0.06 % (-5.6 %, 3.6 %)	
q)		-2.3 × 10 ⁶ (-47 %)	2.5×10^6	-4.4 % ± 10.6 %	-3.6 % (-9.0 %, 4.6 %)	
r)		-2.9 × 10 ⁶ (-60 %)	1.9×10^6	-5.3 % ± 15.0 %	-3.5 % (-8.0 %, 4.2 %)	

Table 5.2: Sensitivitätsstudien zur Fallstudie ARM IOP SGP 9. März 2000. Die erste Spalte gibt die Laufbezeichnung an, die zweite den variierten Parameter. In der dritten Spalte folgt der Absolutwert der Variation und in Klammern die relative Änderung. Die maximale Anzahl an Simulationspartikeln ist in der vierten Spalte aufgelistet. In der fünften Spalte wird der zeitliche Mittelwert von $\Delta\tau$, definiert nach (5.5), und die dazugehörige Varianz aufgeführt. Der Median und das 20- bzw. 80-Prozent Perzentil ist in Spalte sechs gezeigt.

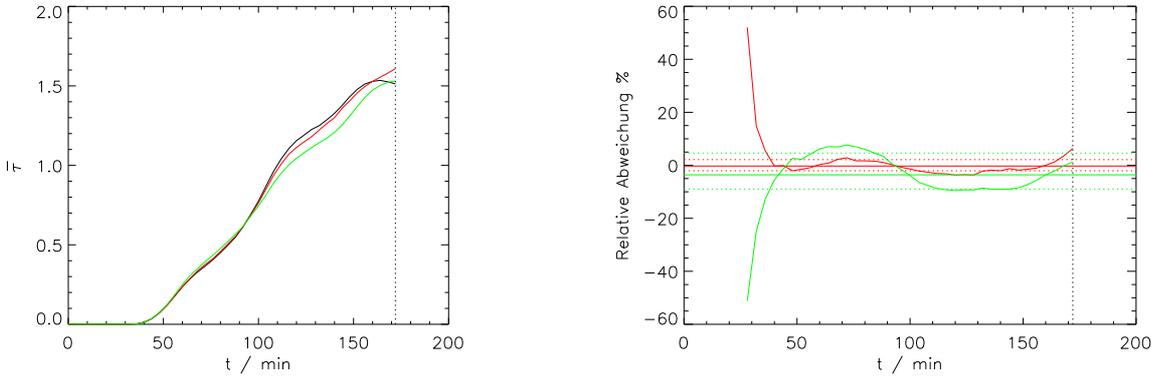


Abbildung 5.14: Links: Zeitliche Entwicklung von $\bar{\tau}$ im Basislauf (schwarz) und in Lauf n) (rot) und r) (grün) mit mehr bzw. weniger Simulationsteilchen (siehe Tabelle 5.2). Rechts: Relative Abweichung von Lauf n) (rot) und Lauf r) (grün) vom Basislauf. Zusätzlich ist der Median (durchgezogene horizontale Linie) und das entsprechende 20- bzw. 80-Prozent Perzentil eingetragen (gestrichelte Linien).

5.2.2 Ergebnisse der Sensitivitätsstudien

Variationen der numerischen Parameter

Anzahl der Simulationsteilchen \mathcal{N}_{sim} Analog zu Kapitel 3.3 wird die Anzahl der Simulationsteilchen \mathcal{N}_{sim} über den Parameter N_{MIN} variiert, der eine untere Konzentrationsgrenze angibt, ab der ein Nukleationsereignis in die Simulation einfließt. Es ist wichtig die Sensitivität auf diesen Parameter zu untersuchen, weil jede Variation weiterer Modellvariablen zu einer Änderung in der Anzahl und in den Positionen der verfolgten Simulationsteilchen führt. Die Ergebnisse der weiteren Studien können demnach teilweise durch eine veränderte Statistik maskiert sein.

Insgesamt werden für \mathcal{N}_{sim} fünf Läufe durchgeführt mit einer Variation der maximalen Anzahl an Simulationsteilchen zwischen -60% und $+90\%$ (Lauf r) und n) in Tabelle 5.2). Abbildung 5.14 zeigt exemplarisch die zeitliche Entwicklung von $\bar{\tau}$ und $\Delta\tau(t)$ für den Basislauf und die Variationen r) und n). Die relativ hohen Abweichungen zu Beginn der Wolkenentstehung sind hauptsächlich auf einen zeitverzögerten Einsatz der Nukleation bei der Wahl unterschiedlicher Werte von N_{MIN} zurückzuführen. Der Absolutwert der optischen Dicke ist zu dieser Zeit noch gering ($\bar{\tau} < 0.03$). In der weiteren Entwicklung schwanken die Abweichungen um die Nulllinie. Wie der Tabelle zu entnehmen ist, beträgt die mittlere zeitliche Abweichung $5.3\% \pm 15.0\%$ bzw. $1.5\% \pm 9.2\%$. Die Mediane im rechten Bild der Abbildung zeigen eine noch geringere Abweichung. Diese sind in geringerem Maße von den hohen $\Delta\tau$ -Werten zu Beginn des Vergleichs beeinflusst. Generell gilt:

- Die Abweichungen bei einer Variation der verwendeten Anzahl an Simulationsteilchen betragen im Mittel unter 5% , im Median unter 4% .
- Fluktuationen relativ zum Basislauf nehmen mit einer Abnahme der Partikelzahl zu und werden mit zunehmender Simulationsteilchenanzahl geringer. Dies bekräftigt das Ergebnis aus Kapitel 3.3, in dem eine Sättigung für die benötigte Anzahl an Simulationsteilchen gefunden wurde.

Variation der Frequenz des Aufrufs der Strahlungsroutine, Variation des Zeitschrittes sowie der vertikalen Modellauflösung Für den Basislauf erfolgt der Abgleich der Erwärmungsraten Q_R mit den mikrophysikalischen Profilen alle 40 s. Eine Verdoppelung dieser Frequenz auf 20 s (Lauf k)) ergibt lediglich eine mittlere Abweichung von -0.7% im Median -0.82% .

- Eine weitere Erhöhung der Frequenz des Aufrufs der Strahlungsroutine ergibt nur eine geringfügige Änderung in den Wolkeneigenschaften und die Erwärmungsraten Q_R werden mit 40 s ausreichend oft mit den mikrophysikalischen Feldern abgeglichen.

Verdoppelt man die zeitliche Auflösung für den dynamischen Zeitschritt Δt , den mikrophysikalischen Zeitschritt Δt_{MIC} und den Nukleationszeitschritt Δt_{NUC} (Lauf l)), ist die mittlere Abweichung mit -2.8% (Median -0.1%) gering. Dies gilt ebenso für eine Verdoppelung der vertikalen Modellauflösung (Lauf m)) mit einer mittleren Abweichung von -0.7% (Median 0.9%).

- Das EULAG-LCM zeigt sich wenig sensitiv auf Änderungen des verwendeten Zeitschrittes oder der vertikalen Modellauflösung.

Variationen der meteorologischen Parameter

Im Weiteren wird die Sensitivität der Modellsimulationen zur Fallstudie auf meteorologische Parameter untersucht, die Unsicherheiten bei der Initialisierung enthalten können. In den einzelnen Läufen ergeben sich durch unterschiedliche atmosphärische Bedingungen zwangsläufig Abweichungen in der Anzahl und Art der verwendeten Simulationspartikel. Wie im Vorangehenden gezeigt wurde, sind die Sensitivitäten des EULAG-LCM auf eine Änderung der Anzahl der Simulationspartikel im Mittel unter 5% . Die Sensitivitäten auf meteorologische Parameter sind in allen durchgeführten Rechnungen höher, so dass gefundene Abweichungen den physikalischen Prozessen zugeordnet werden können und nicht maßgeblich durch statistische Fluktuationen aufgrund der Partikelanzahl hervorgerufen werden. In diesem Abschnitt werden die quantitativen Abweichungen aufgezeigt. Eine qualitative Auswertung ausgewählter Fälle folgt in Kapitel 5.3.1.

Aggregationseffizienz E_a Die Aggregationseffizienz wurde in Anlehnung an die Rechnungen von Field und Heymsfield (2003) für die Basis-Simulation auf einen Wert von $E_a = 0.7$ gesetzt. Für die Läufe e) und f) wird die Effizienz auf $E_a = 1$ erhöht bzw. auf $E_a = 0.4$ herabgesetzt. Wie in Abbildung 5.15 zu sehen ist, nimmt die optische Dicke für den Fall $E_a = 0.4$ im Laufe der Zeit zu, während sie im Fall $E_a = 1$ im Vergleich zur Basis-Simulation verringert ist. Im Mittel ergeben sich Abweichungen von $14.6\% \pm 11.3\%$ bzw. $-14.5\% \pm 11.7\%$, im Median etwas größere Differenzen. Dieses Ergebnis wird in Kapitel 5.3.2 noch eingehender besprochen.

Vertikalwind w Die größten Abweichungen der durchgeführten Sensitivitätsstudien ergeben sich für Variationen im Vertikalwindfeld. Als Fluktuation wird die Amplitude der Schwerewellen aus der Abschätzung nach (5.2) mit $w_{grav} = 0.02 \text{ m s}^{-1}$ verwendet ($\pm 33\%$). Das Vertikalwindfeld bestimmt maßgeblich die Kühlraten $\omega = |dT/dt|$ in aufsteigenden Luftpaketen in einer stabil geschichteten Atmosphäre. Diese bestimmen die Zunahme der Übersättigung und damit verbunden die Zunahme der Anzahlkonzentration der homogen gebildeten Eiskristalle (Kärcher

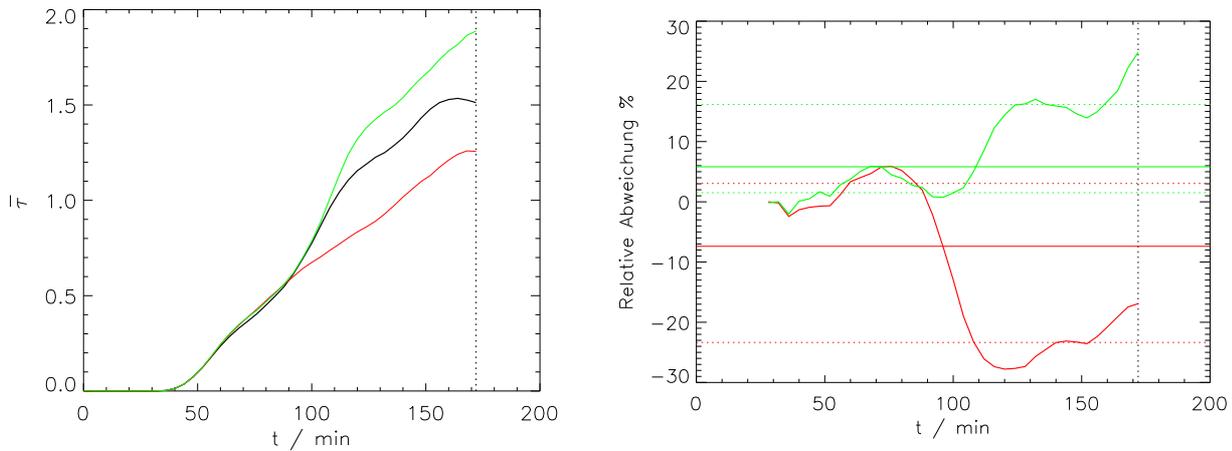


Abbildung 5.15: Links: Zeitliche Entwicklung von $\bar{\tau}$ in der Basis-Simulation (schwarz) und in Lauf e) (rot) und f) (grün) mit einer Aggregationseffizienz $E_a = 1.0$ bzw. $E_a = 0.4$ (siehe Tabelle 5.2). Rechts: Relative Abweichung von Lauf e) (rot) und Lauf f) (grün) vom Basislauf. Zusätzlich ist der Median (durchgezogene horizontale Linie) und das entsprechende 20- bzw. 80-Prozent Perzentil eingetragen (gestrichelte Linien).

und Burkhardt, 2008). Je höher ω ist, desto mehr Eiskristalle entstehen. Entsprechend findet sich für Fall a) mit einer erhöhten Vertikalwindgeschwindigkeit eine mittlere Zunahme von $\Delta\tau$ um $+63.8\% \pm 68.6\%$, für Fall b) eine mittlere Abnahme von $-77.3\% \pm 11.0\%$. Diese hohen Sensitivitäten bestätigen den dominanten Einfluss der dynamischen Variabilität auf kleinen räumlichen Skalen auf die Eisbildung und weitere Entwicklung von Zirren (Kärcher und Ström, 2003).

Übersättigung bezüglich Eis S_i Für die Läufe c) und d) wird die Feuchte für das gesamte Sättigungsverhältnisprofil um 10 % erhöht bzw. reduziert. Dieser Variationsbereich entspricht in etwa der größten nominellen Abweichung der Radiosondenmessungen in Abbildung 5.3, wenngleich individuelle Abweichungen größer sein können. Das veränderte Feuchteangebot wird in eine Änderung der Wasserdampfmasse umgesetzt, die auf die vorhandenen Eiskristalle aufgenommen wird. Entsprechend findet sich für Fall c) eine mittlere Zunahme von $+29.5\% \pm 59.4\%$ und für Lauf d) eine mittlere Abnahme von $-41.8\% \pm 28.9\%$.

Nukleationsweg Für die Basis-Simulation stellt homogenes Gefrieren den Nukleationspfad der Eiskristalle dar. Wie bereits in Kapitel 4.2.3 diskutiert, kann ein Einfluss heterogener Nukleationskerne nicht ausgeschlossen werden, selbst wenn für die Fallstudie eine geringe Konzentration erwartet wird. Zusätzlich zu $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$ Aerosolen wird in Lauf j) eine Mode an IN (Eiskeimen) mit einer Anzahlkonzentration von 2 l^{-1} simuliert. Die Nukleationseigenschaften der festen Aerosolpartikel werden aus Labormessungen mit Mineralstaubpartikeln von Möhler *et al.* (2006) entnommen und über (2.29) mit $S_0 = 1.1$ und $a = 3.0$ parametrisiert. Durch die geringere Übersättigungsgrenze S_0 , bei der Eis heterogen nukleiert, bildet sich der Zirrus in Lauf j) im Gegensatz zum Fall mit ausschließlich homogener Nukleation zu einem früheren Zeitpunkt. Dies ist im rechten Bild von Abbildung 5.16 an der Zunahme von $\bar{\tau}$ zu erkennen. Die heterogen gebildeten Eiskristalle nehmen Wasserdampf auf und verringern so das weitere

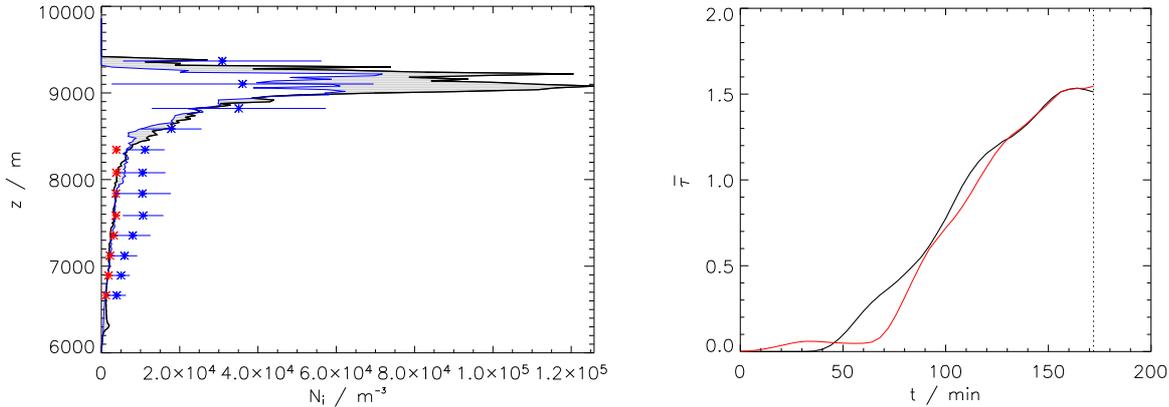


Abbildung 5.16: Links: Wie Abbildung 5.11. Zusätzlich zu den Ergebnissen der Basis-Simulation sind die Anzahlkonzentrationen aus Lauf j) eingezeichnet (blaue Linie). Die Schraffur gibt die Differenz der Läufe an. Rechts: Zeitliche Entwicklung von $\bar{\tau}$ in der Basis-Simulation (schwarz) und in Lauf j) (rot).

Anwachsen von S_i aufgrund der vorgeschriebenen Kühlrate. Homogene Nukleation wird vorerst unterdrückt und findet zeitlich versetzt statt. Der Zeitpunkt des Einsatzes ist an der starken Zunahme von $\bar{\tau}$ nach etwa 70 Minuten (rote Kurve) zu erkennen. In der weiteren Entwicklung gleichen sich beide Läufe immer stärker an, da die Anzahlkonzentration der IN mit 2 l^{-1} relativ gering ist, und der Einfluss der homogen nukleierten Kristalle dominiert. In Abbildung 5.16 sind im linken Bild die horizontal gemittelten Anzahlkonzentrationen in der Basis-Simulation jenen aus Lauf j) gegenübergestellt. Die Mode an IN führt in der Simulation zu einer leicht erhöhten Konzentration an Eispartikeln in unteren Wolkenschichten. In der Wolkenbildungszone ist N_i reduziert. Die Hinzunahme von IN reicht nicht aus, um in diesem EULAG-LCM Lauf die hohe Anzahlkonzentration von Eis in tieferen Schichten (wie in Kapitel 5.1.4 diskutiert) zu erklären.

Scherung $\frac{\partial u}{\partial z}$ Wie aus Tabelle 5.2 ersichtlich, haben relativ hohe Variationen der vertikalen Windscherung $\frac{\partial u}{\partial z}$ um 50 % (Läufe h) und i) bzw. 100 % (Lauf g)) eine vergleichsweise geringe Auswirkung auf die Abweichung in der optischen Dicke $\bar{\tau}$ (im Mittel ~ 10 %). Dies entspricht Ergebnissen von Marsham und Dobbie (2005), die ebenfalls eine geringe Sensitivität ihrer Simulationen auf die Stärke der Scherung finden.

5.3 Studien zum Aggregationsprozess in Zirren

5.3.1 Analyse von Partikeltrajektorien - Ein detaillierter Blick auf den Aggregationsprozess für die Fallstudie

Es verbleibt, einen tieferen Einblick in den Aggregationsprozess in Zirren auf Basis der EULAG-LCM Simulationen zu geben. Hier soll geklärt werden, auf welche Weise Eispartikel mit maximalen Dimensionen von bis zu $D \gtrsim 3000 \mu\text{m}$ entstehen. Anhand der Trajektorien ausgewählter Simulationsteilchen sollen diejenigen Kristalle identifiziert werden, welche das große Ende der GV bestimmen. Hierfür werden explizit die zusätzlichen Analysemöglichkeiten der Lagrange'schen Partikelverfolgung herangezogen.

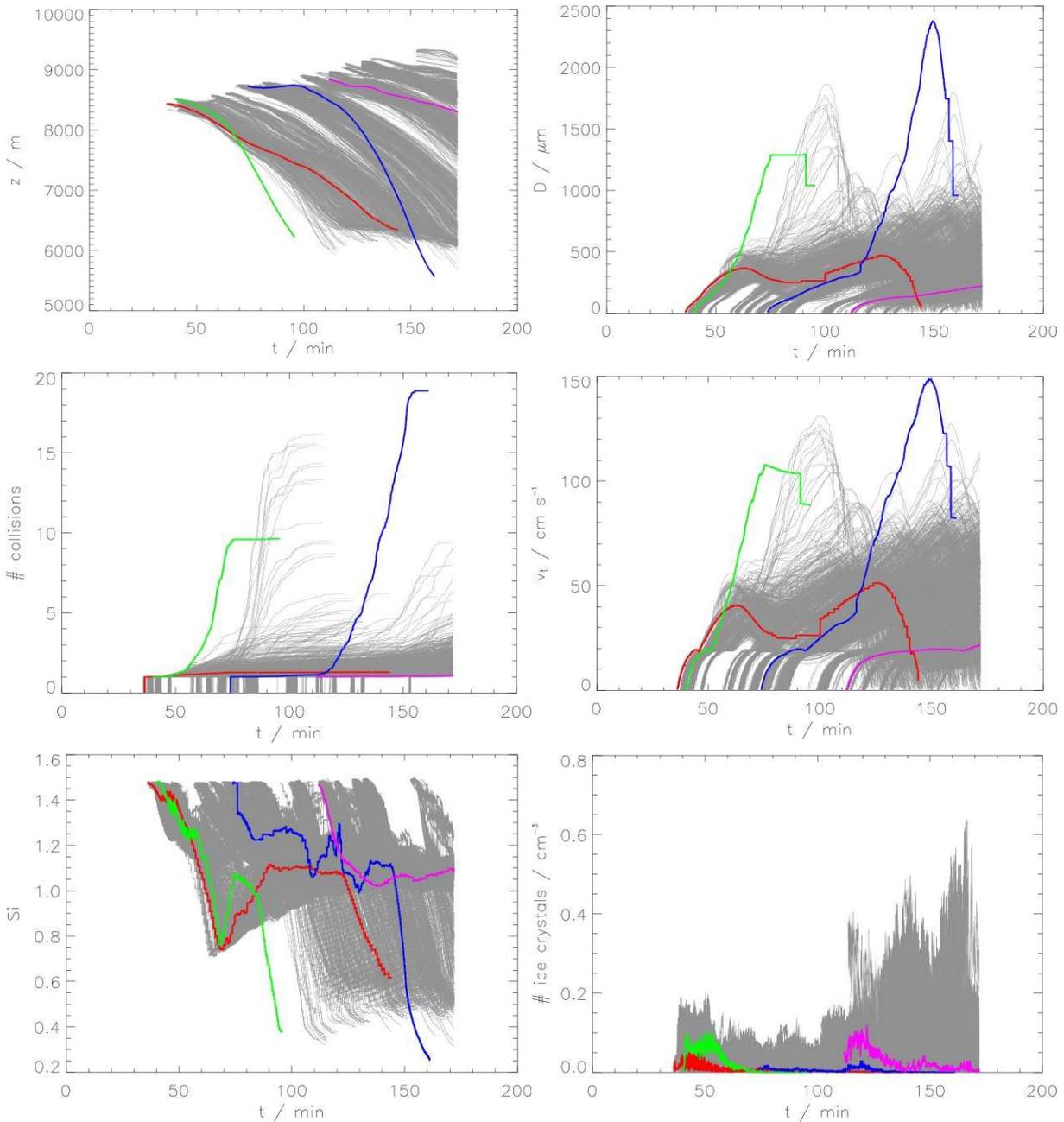


Abbildung 5.17: Trajektorien von Simulationsteilchen im zeitlichen Verlauf. Farblich sind ausgewählte Eiskristalle dargestellt. Oben links: Vertikale Koordinate z_p ; oben rechts: maximale Dimension D des Kristalls; Mitte links: Die Anzahl von Kollisionen mit anderen Eispartikeln pro Kristall, die zu einem Aggregationsereignis führen; Mitte rechts: Die Sedimentationsgeschwindigkeit v_t der Kristalle (Unstetigkeiten in v_t resultieren aus einer sprunghaften Änderung des Partikeltyps hin zu Aggregaten); unten links: Das Sättigungsverhältnis S_i ; unten rechts: Die umgebende Eiskristallanzahlkonzentration in der Gitterbox N_i .

Der Vorteil gegenüber der Euler'schen Betrachtung der Eisphase besteht darin, trotz eines komplexen Modells Einblick in einzelne physikalische Prozesse der Eisphase zu erhalten. Abbildung 5.17 fasst die Entwicklung ausgewählter Simulationsteilchen zusammen. Farbig ist die Entwicklung von zwei Partikeln dargestellt, die zu Beginn der Simulation entstehen (rot und grün) und von zwei Kristallen (blau und lila), die zu einem späteren Zeitpunkt in einer höhergelegenen Wolkenregion nukleieren. Die Wolkenstruktur und die GV der Eispartikel sind in den Abbildung 5.18 bis 5.20 zu unterschiedlichen Zeitpunkten dargestellt.

68 Minuten 68 Minuten nach Initialisierung der Simulation hat sich ein schmales Zirrenband im Bereich zwischen 7800 m und 8500 m gebildet (siehe Abbildung 5.18). Im mittleren Bild ist die Position des roten und grünen Kristalls eingezeichnet. Wie aus der Anzahl der Aggregationsereignisse in Abbildung 5.17 ersichtlich, spielt Aggregation für den Kristall, der im Anfangsstadium der Wolkenbildung entsteht, keine Rolle. Aufgrund unterschiedlicher Sedimentationsgeschwindigkeiten stellt sich ein Sortierungseffekt der Eiskristalle nach ihrer Größe in der Vertikalen ein. Dadurch überstreicht der Kristall selten Gebiete in denen andere Partikel mit einer deutlich unterscheidbaren Fallgeschwindigkeit vorhanden sind. Der rote Kristall wächst durch Deposition zu einer Größe von etwa 300 μm heran, bis er in der untersättigten Schicht bei 8000 m an Masse verliert.

Der grün markierte Kristall nukleiert zu einem späteren Zeitpunkt in einem höhergelegenen Bereich des Zirrus. Nachdem seine Abmessung D rasch durch diffusives Wachstum zunimmt, sedimentiert er in tiefer gelegene Wolkenschichten. Dabei finden verstärkt Kollisionen mit bereits vorhandenem Eis statt. Die Anzahl der Kollisionen pro Partikel nimmt stetig zu, bis das Eisteilchen in Regionen mit niedrigen Eispartikelanzahlkonzentrationen gelangt und später sublimiert. Einen besonders raschen Anstieg der Kollisionen findet man im unteren Bereich der Wolke, an dem die zuerst entstandenen Kristalle in der untersättigten Schicht an Masse verlieren. Dies führt zu einer Auffächerung in der Differenz der Sedimentationsgeschwindigkeiten (siehe Abbildung 5.17 bei 3500 s) was eine Erhöhung der Kollisionswahrscheinlichkeit bewirkt.

Die GV der Eispartikel im gesamten, entstehenden Zirrus ist zu diesem Zeitpunkt noch relativ schmal mit maximalen Längen von etwas über 1000 μm . Allerdings ist schon der Ansatz der Aggregationsmode ab etwa 500 μm zu erkennen. Diese bildet einen exponentiell abfallenden Ast (eine Gerade in Abbildung 5.18) mit zunehmendem Partikeldurchmesser aus. Das rote Partikel hat seine maximale Größe erreicht und verliert langsam an Masse, während das grüne Partikel weiter wächst.

124 Minuten Nach 124 Minuten (Abbildung 5.19) hat das Zirrenfeld an vertikaler Mächtigkeit gewonnen. Die mittlere Ausdehnung beträgt in etwa 2500 m und die Schicht erstreckt sich von 6300 m bis 9000 m Höhe. Einige Fallstreifen ragen auch in tiefere Schichten. Bis zu diesem Zeitpunkt sind immer wieder neue Kristalle in der übersättigten Schicht an der Oberkante der Wolke entstanden, die eine Bildungsregion neuer Partikel darstellt. Stellvertretend sind in Abbildung 5.17 die Trajektorien zweier Simulationsteilchen herausgehoben (blau und lila), um einen Einblick in den Aggregationsprozess zu diesem Zeitpunkt zu geben. Das zu Beginn nukleierte rote Partikel existiert noch und ist langsam an den Unterrand der Wolke sedimentiert. Das blaue und das lila Partikel nukleieren etwa im selben Höhenbereich. Im Vorangehenden wurde dargestellt, dass Kristalle, die im oberen Bereich der Wolke entstehen, während ihrer Sedimentation durch tiefergelegene Wolkenschichten mit bereits existierendem Eis aggregieren. Das verstärkte

Auftreten von Partikelkollisionen führt zur Ausbildung der Aggregationsmode in der GV.

Das blaue Partikel bekräftigt dieses Bild. Verursacht durch eine Intensivierung des Aggregationsprozesses, nimmt die GV in Abbildung 5.19 an Breite zu. Mit zunehmender vertikaler Distanz, die das Partikel überstreicht, gewinnt das blaue Teilchen an Größe, verbunden mit einer Zunahme der Masse und Sedimentationsgeschwindigkeit und damit der Aggregationswahrscheinlichkeit.

Allerdings gelangt nicht jedes Simulationsteilchen, welches im oberen Bereiche der Wolke entsteht, in tiefer gelegene Schichten. Turbulente Fluktuationen lassen Simulationsteilchen lokal in Regionen mit variierenden Anzahlkonzentrationen entstehen. Dies bedingt ein unterschiedlich schnelles Anwachsen der Kristalle. Das lila Simulationsteilchen in Abbildung 5.17 nukleiert in einer Region, in der zum selben Zeitpunkt deutlich mehr Teilchen entstehen, als es für das blaue der Fall ist. Durch die starke Konkurrenz um den vorhandenen Wasserdampf wächst das lila Partikel durch diffusives Wachstum kaum an. Die Sedimentationsgeschwindigkeit bleibt gering und das Teilchen verbleibt im oberen Wolkenbereich. So bestimmen also statistische Fluktuationen auf kleiner Skala mit, wieviele Eiskristalle für den Aggregationsprozess in tieferen Bereichen des Zirrus zur Verfügung stehen.

144 Minuten Den Unterschied in der Wachstumshistorie zwischen dem blauen und dem lila Teilchen erkennt man nach 144 Minuten (Abbildung 5.20). Das lila Partikel verbleibt im oberen Bereich der Wolke, während das blaue im unteren zu finden und in den exponentiellen Ast der Aggregationsmode der GV zu diesem Zeitpunkt einzuordnen ist. Der Durchmesser des Eiskristalls beträgt $D \approx 1900 \mu\text{m}$. Abbildung 5.17 zeigt, dass sich unter der Annahme des Aggregationsalgorithmus des EULAG-LCM etwa 20 Kollisionen mit anderen Partikeln, die zu einem Aggregationsereignis führen, bei einer zurückgelegten Distanz von etwa 2 km in der Vertikalen ergeben.

- Die Analyse der Trajektorien einzelner Eiskristalle in der EULAG-LCM Simulation stellt heraus, dass der Aggregationsprozess in Zirren als statistisches Ereignis angesehen werden kann. Die Entstehung von Eisaggregaten mit hohen Massen erfolgt im Modell nicht stetig, sondern ist abhängig von der Nukleation neuer Kristalle am Oberrand der Wolke. Diese müssen eine anfängliche Größenschwelle erreichen, um in tiefere Wolkenschichten zu gelangen, in denen sie in Regionen mit hoher Eiskristallanzahlkonzentration stark an Masse zulegen. Durch den resultierenden Flächenzuwachs der Partikel erhöht sich die Wahrscheinlichkeit für weitere Kollisionen mit anderen Kristallen. Werden keine neuen Teilchen in der Nukleationszone der Wolke gebildet, kommt der Aggregationsprozess zum Erliegen und der Anteil großer Partikel in der GV reduziert sich, wenn diese aus dem Zirrus aussedimentieren und sublimieren.
- Die Eiskristallaggregate in der Simulation sind selten aus mehr als 30 einzelnen Kristallen zusammengesetzt, was mit beobachteten Größenordnungen in der Literatur übereinstimmt (Harimayo und Kawasota, 2001). Auch Abbildung 5.5 gibt Hinweise darauf, dass große Partikel aus relativ wenigen pristinen Eiskristallen zusammengesetzt sind.
- Eine transiente Erhöhung der Aggregationsraten im Modell ist in Bereichen festzustellen, in dem Eiskristalle an Masse verlieren, langsamer sedimentieren, um von nachfolgenden Partikeln, die eine höhere Sedimentationsgeschwindigkeit haben, eingeholt zu werden. Dieser Prozess trägt zur vertikalen Schichtung der Wolken bei und wird in Kapitel 5.3.3 noch einmal aufgegriffen.

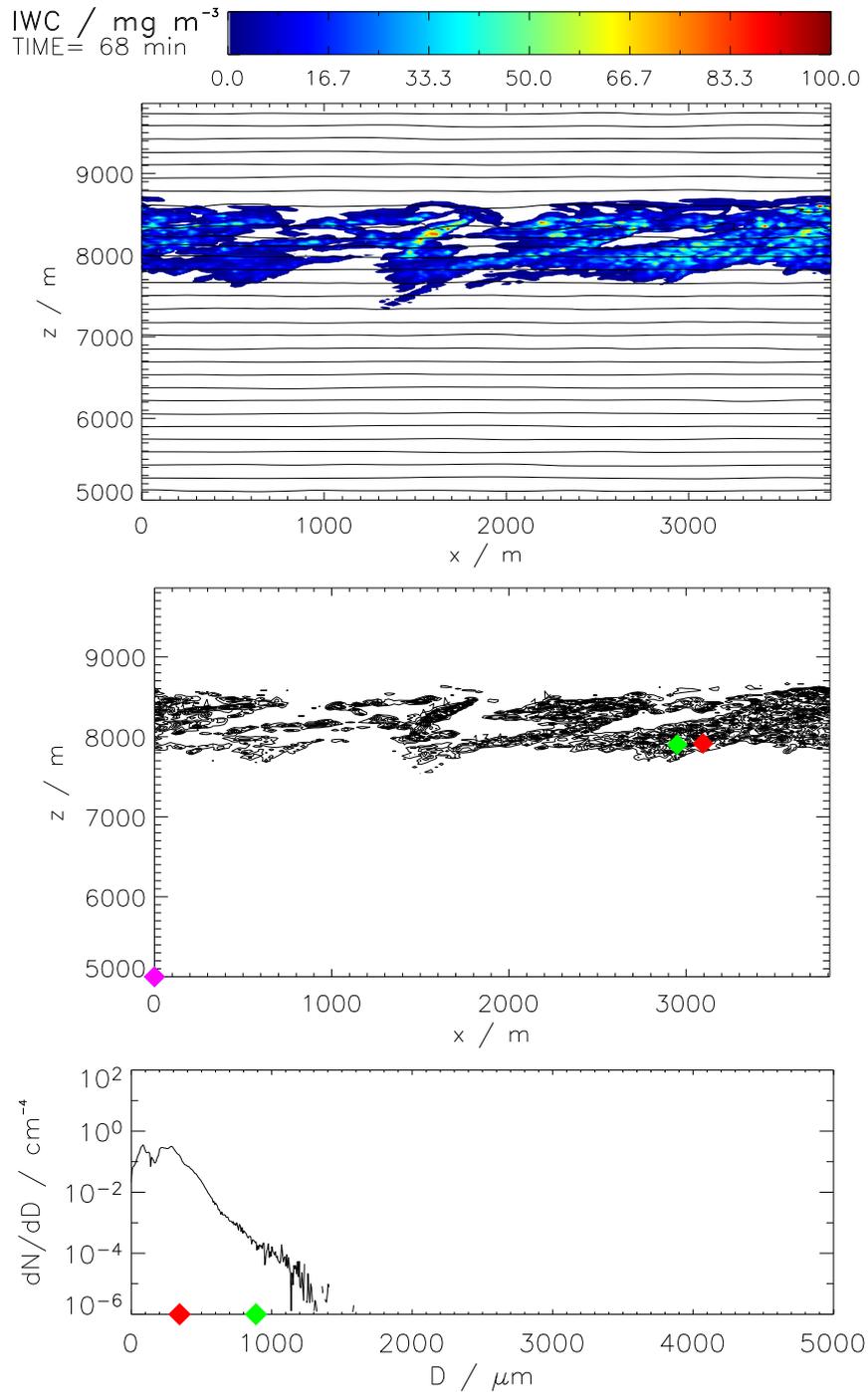


Abbildung 5.18: Oben: Eiswassergehalt IWC in der EULAG-LCM Simulation nach 68 Minuten; in schwarz sind Isentropen unterlegt. Mitte: Position ausgewählter Simulationsteilchen; schwarz hinterlegt ist das IWC Feld. Unten: Die Bin-Weiten normierte Eispartikelgrößenverteilung $n(D)$ für die gesamte Wolke. Farbig ist die maximale Dimension D der Simulationsteilchen angedeutet.

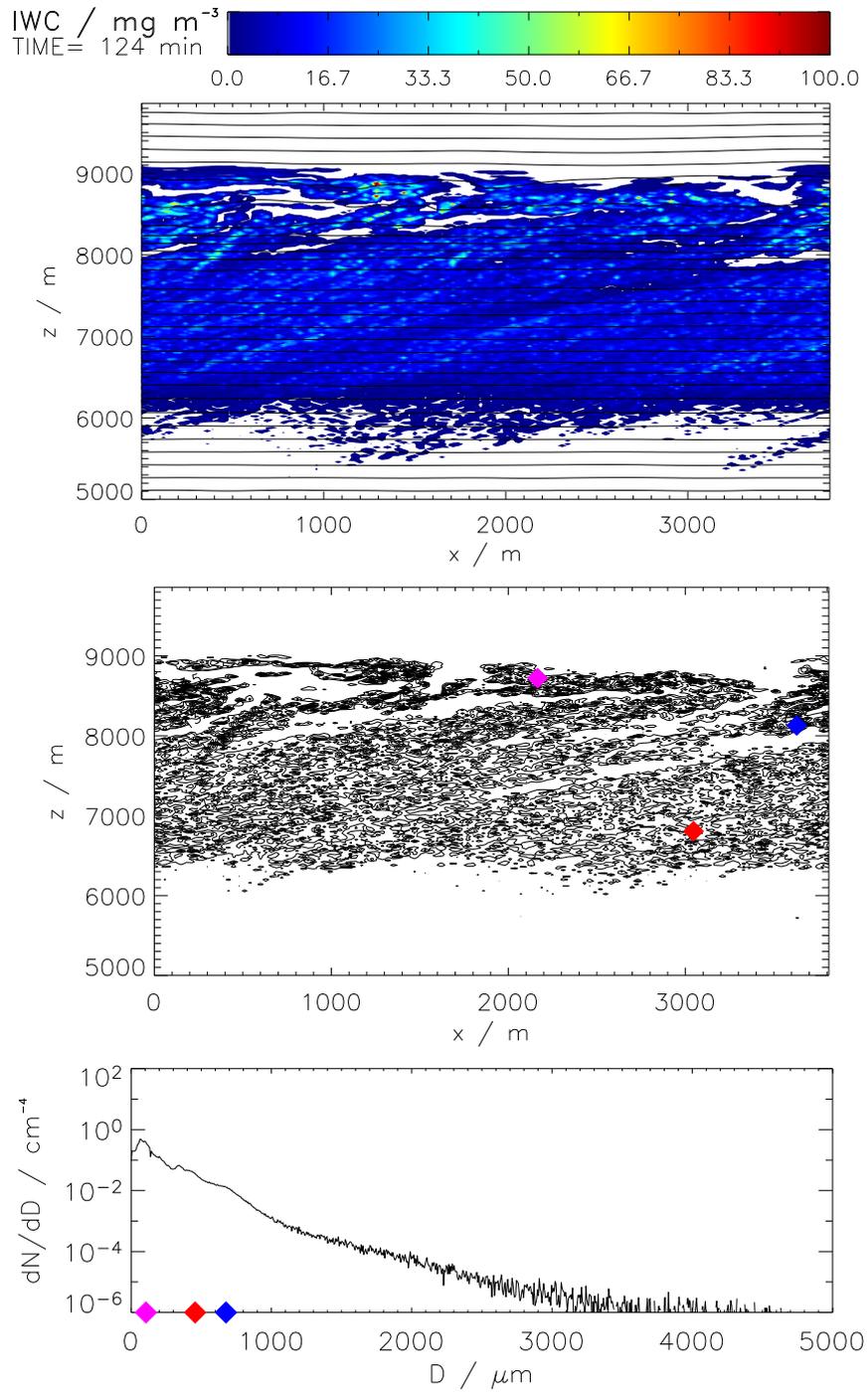


Abbildung 5.19: Wie Abbildung 5.18 für den Zeitpunkt nach 124 Minuten.

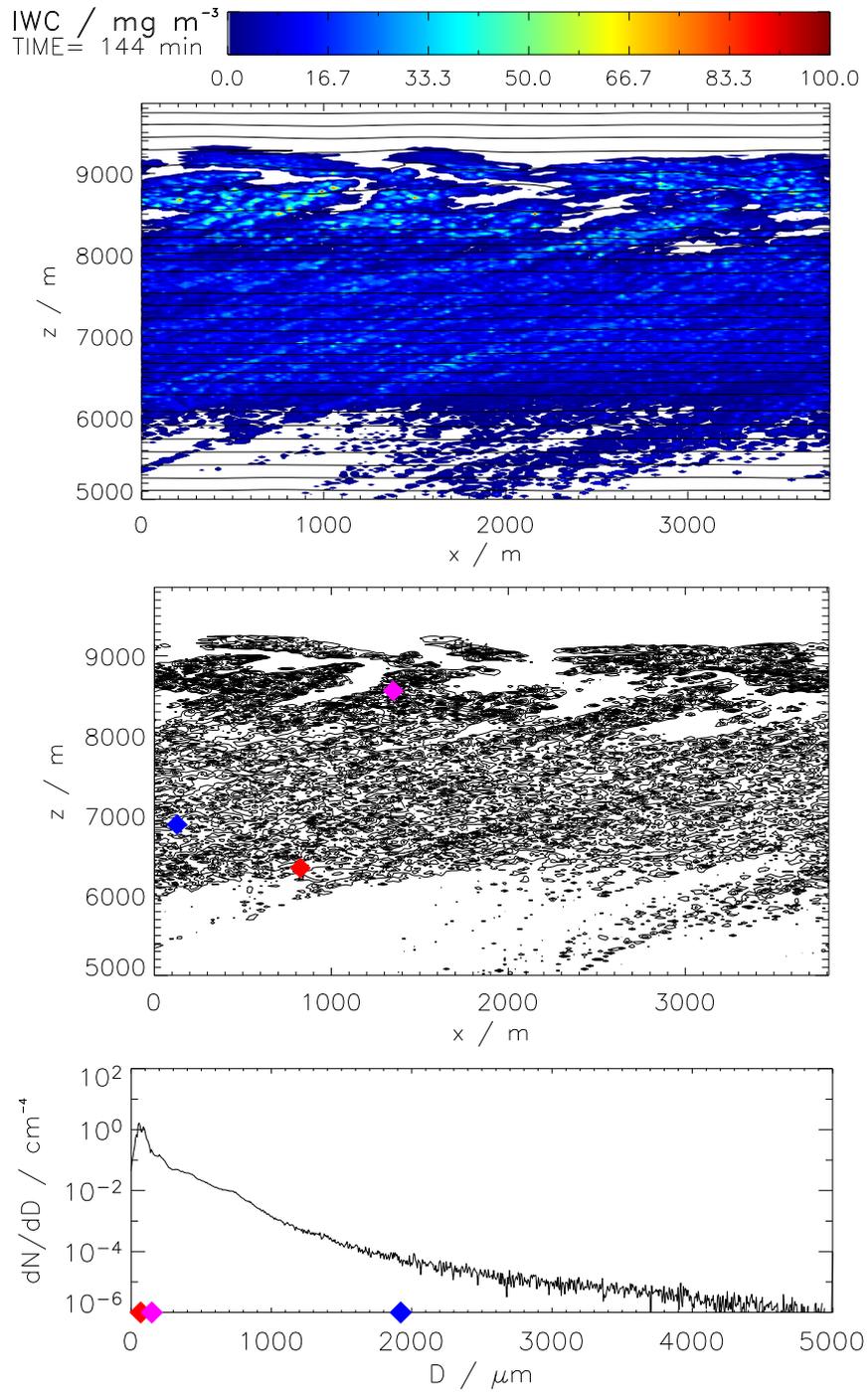


Abbildung 5.20: Wie Abbildung 5.18 für den Zeitpunkt nach 144 Minuten.

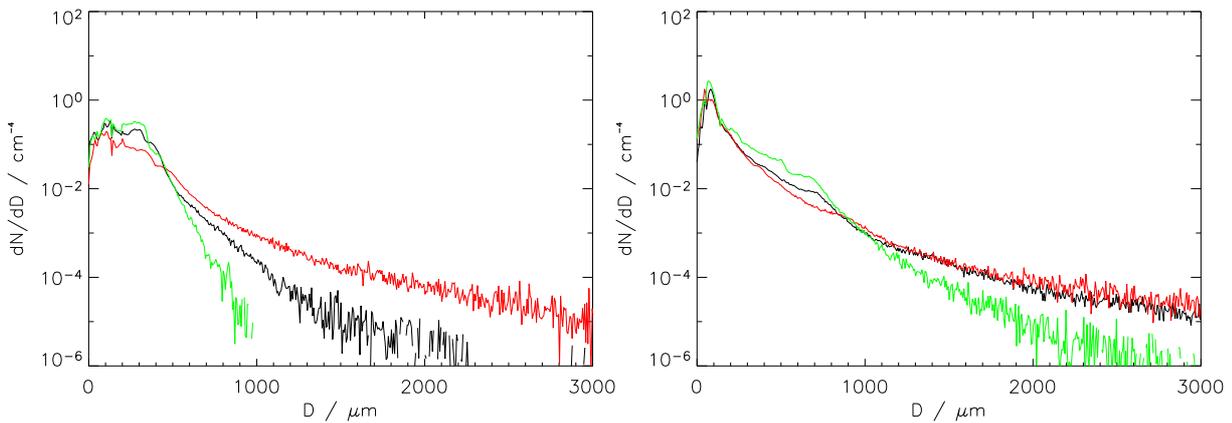


Abbildung 5.21: GV für die gesamte Wolke in der Basis-Simulation (schwarz), in Lauf e) (rot) und Lauf f) (grün) aus Tabelle 5.2. Links: nach 88 Minuten; Rechts: nach 172 Minuten.

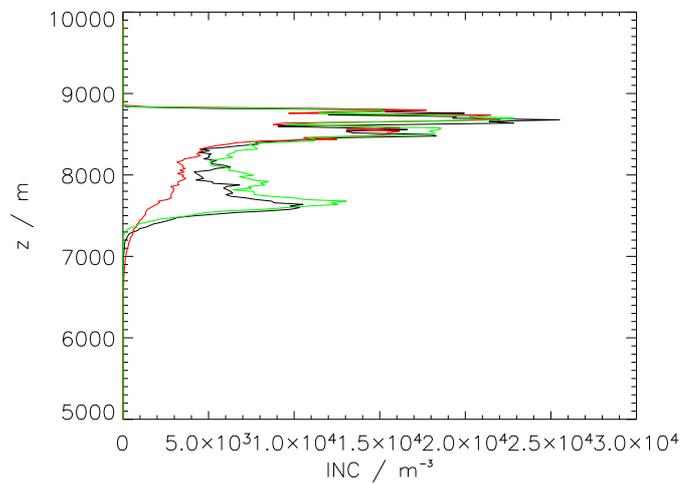


Abbildung 5.22: Horizontal gemittelte Eispartikelanzahlkonzentration nach 88 Minuten in der Basis-Simulation (schwarz), in Lauf e) (rot) und Lauf f) (grün) aus Tabelle 5.2.

5.3.2 Einfluss der Aggregationseffizienz auf den Aggregationsprozess und die Wolkenbildung

In den Sensitivitätsstudien wurde die Aggregationseffizienz aus (2.67) um jeweils 43 % von 0.7 auf 1.0 heraufgesetzt (Lauf e)) bzw. auf 0.4 reduziert (Lauf f)). E_a bestimmt mit, wie effizient Aggregate gebildet werden. In Abbildung 5.21 sind im linken Bild GV in den einzelnen Läufen nach 88 Minuten dargestellt. Es zeigt sich, dass mit höherem E_a die Breite der GV zunimmt und gleichzeitig ein Verlust kleinerer Partikel auftritt. Die großen Partikel am oberen Ende der GV im Fall e) ($E_a = 1$) besitzen eine höhere Sedimentationsgeschwindigkeit und damit nimmt der Massenfluss aus den oberen und mittleren Bereichen des Zirrus heraus zu. Teilchen aggregieren leichter, gewinnen schneller an Masse und transportieren Eispartikel nach unten. Die Abnahme der Anzahlkonzentration von Eispartikeln in Höhenbereichen über 7500 m zu diesem Zeitpunkt ist in Abbildung 5.22 zu sehen. Hier sind die horizontalen Mittelwerte von N_i nach 88 Minuten dargestellt. Die aggregierten Eispartikel sedimentieren schneller, bis sie in die untersättigte Schicht am Unterrand des Zirrus gelangen, in der sie sublimieren. Die Aggregationseffizienz trägt also zu einem Teilchen- und Massenverlust im Zirrus bei. Eine Reduktion der Partikelkonzentration im Größenbereich zwischen 200 μm und 900 μm mit zunehmender Aggregationseffizienz kann man der GV nach 172 Minuten im rechten Bild aus Abbildung 5.21 entnehmen. Dieser Verlust erklärt die Abnahme der mittleren säulenintegrierten optischen Dicke $\bar{\tau}$ mit zunehmender Aggregationseffizienz E_a in Abbildung 5.15.

- Je größer E_a , desto größer der Partikel- und Massenverlust in den oberen und vor allem in den mittleren Regionen des Zirrus. Dieser Verlust bewirkt eine Abnahme der mittleren optischen Dicke mit einer Zunahme von E_a im alternden Zirrus.

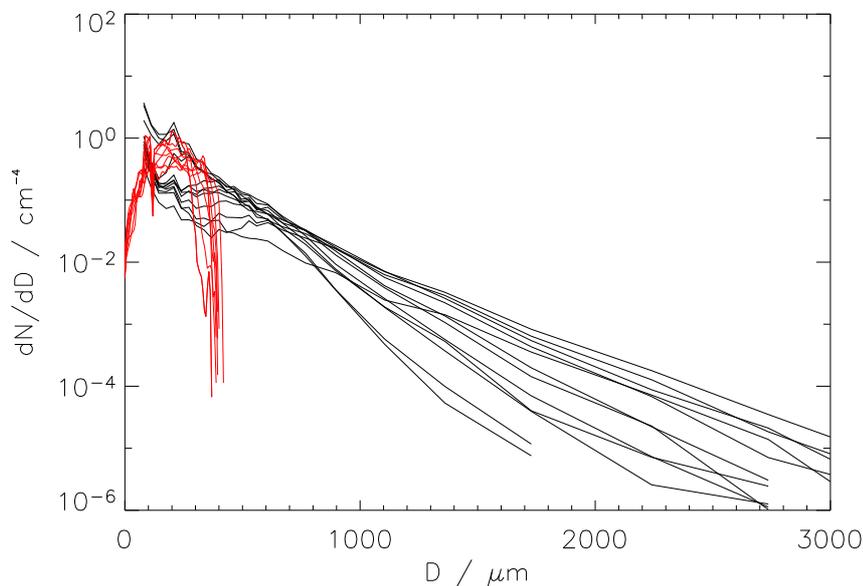


Abbildung 5.23: Wie Abbildung 5.12, mit dem Unterschied, dass keine Aggregation im EULAG-LCM Lauf berücksichtigt wird.

Wie wichtig der Aggregationsprozess für die Struktur der GV ist, zeigt Abbildung 5.23. Hier wird die gleiche Simulation gerechnet, allerdings ist keine Aggregation berücksichtigt ($E_a = 0$). In rot

ist wieder die zeitliche Entwicklung der GV für die gesamte Wolke den gemessenen GV (schwarz) gegenübergestellt. Durch Wachstumsprozesse allein werden maximale Partikeldurchmesser von $400 \mu\text{m}$ erreicht. Die Verteilung fällt danach stark ab.

- Der Aggregationsprozess ist der einzige Mechanismus, der zur Ausbildung großer Eiskristalle führt. Ohne diesen kann die Existenz von Partikeln mit $D \gtrsim 3000 \mu\text{m}$ nicht erklärt werden.

5.3.3 Erhöhung der Aggregationseffektivität in Sublimationszonen

In Kapitel 5.3.1 wurde anhand der Trajektorien einzelner Kristalle gezeigt, dass der Aggregationsprozess durch die eisuntersättigte Schicht in etwa 8000 m Höhe in der Anfangsphase der Wolkenbildung beeinflusst ist. Die These ist, dass die Frequenz von Aggregationsereignissen in der trockenen Schicht vorübergehend erhöht ist. Hier soll dieses Ergebnis aus dem Einzelpartikelbild mit Hilfe integraler Größen der Eisphase noch eingehender untersucht werden. Dazu werden folgende Größen definiert:

$$N_{AGG} = \frac{1}{\Delta t_a} \int_t^{t+\Delta t_a} \frac{1}{V_{BOX}} \sum_{i=1}^{N_{SIM}} \mathcal{N}_{sweep} \quad (5.6)$$

$$Eff_{AGG} = \frac{1}{\Delta t_a} \int_t^{t+\Delta t_a} \frac{1}{V_{BOX}} \sum_{i=1}^{N_{SIM}} \frac{\mathcal{N}_{sweep}}{\mathcal{N}_i} \quad (5.7)$$

In (5.6) und (5.7) bezeichnet \mathcal{N}_i die Anzahl der Kristalle in einem Simulationsteilchen i , welches sedimentiert und mit anderen Kristallen kollidiert, und \mathcal{N}_{sweep} nach (2.67) die Anzahl der Eispartikel, die dabei aus einem anderen Simulationspartikel mit jenen aus i aggregieren. Δt_a gibt einen Mittelungszeitraum an, im EULAG-LCM sind dies zehn Zeitschritte.

- N_{AGG} gibt die Anzahl der Aggregationsereignisse in einer Gitterbox pro Volumen- und Zeiteinheit an.

Diese Größe zeigt, in welchen Regionen der Wolke besonders viele Aggregationsereignisse auftreten. Die Anzahl der Kollisionen hängt dabei stark von der Anzahlkonzentration N_i der Eiskristalle in der Gitterbox ab und kann bei hohen Werten von N_i groß sein, auch wenn anteilmäßig wenige der vorhandenen Partikel aggregieren. Um die Effektivität der Aggregation besser separieren zu können, wird die Größe Eff_{AGG} eingeführt. Dabei wird die Anzahl der aggregierenden Partikel mit jener der aufsammelnden Kristalle gewichtet, um die Effektivität des Prozesses zu beschreiben.

- Eff_{AGG} gibt die Effektivität an, mit der Kristalle andere Partikel beim Aggregationsprozess einfangen.

Um den Einfluss der Sublimation in der trockenen Schicht in 8000 m bewerten zu können, wurde zusätzlich zu den Läufen a) bis r) der Sensitivitätsstudie ein Lauf durchgeführt, dessen S_i -Profil in dieser Höhe übersättigt ist, wie Abbildung 5.24 zeigt. Wie bereits angedeutet, sublimieren die Eiskristalle in der Basis-Simulation in der untersättigten Schicht in einem frühen Stadium der Wolkenbildung. Dabei wird Wasserdampf freigesetzt, der zu einer Feuchteanreicherung und

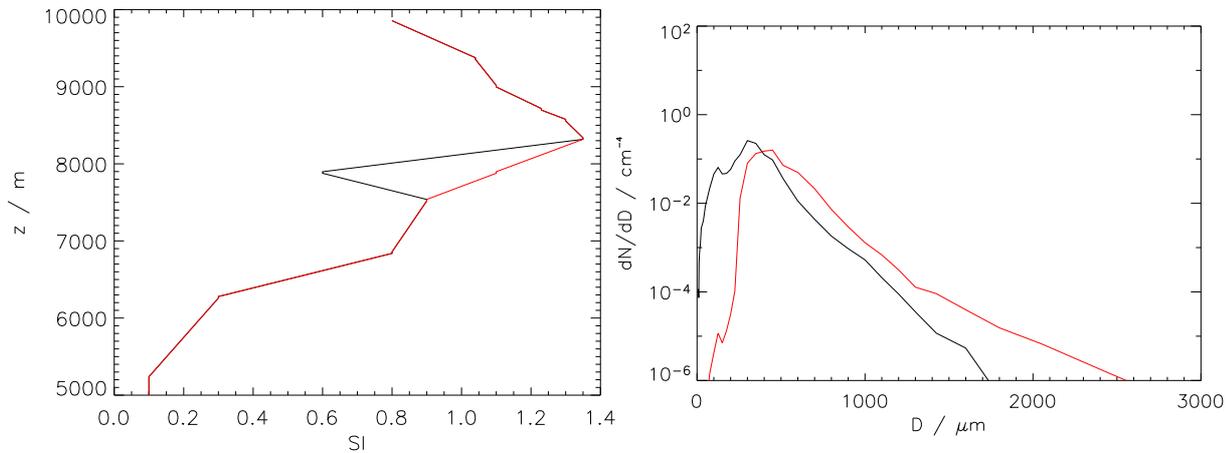


Abbildung 5.24: Links: Anfangsprofil der Eisübersättigung S_i in der Basis-Simulation (schwarz) und im Lauf ohne trockene Schicht (rot). Rechts: Eispartikelgrößenverteilung in den Simulationen aus einem Bereich zwischen 7500 m und 8200 m nach 88 Minuten.

einem Abbau der Untersättigung führt. Die Kristalle ihrerseits verlieren dabei Masse und sedimentieren deutlich langsamer. Nachfolgende Eispartikel sublimieren in der inzwischen weniger stark untersättigten Schicht verzögert. Dieser Vorgang führt dazu, dass die Größenverteilung der Eiskristalle in diesem Bereich im Vergleich zur Simulation ohne untersättigte Schicht eine deutlich erkennbare Mode an kleinen Partikeln aufweist (siehe Abbildung 5.24). Die vorhandene Mode an größeren Partikeln aggregiert nun verstärkt mit den zusätzlichen kleineren Partikeln. In

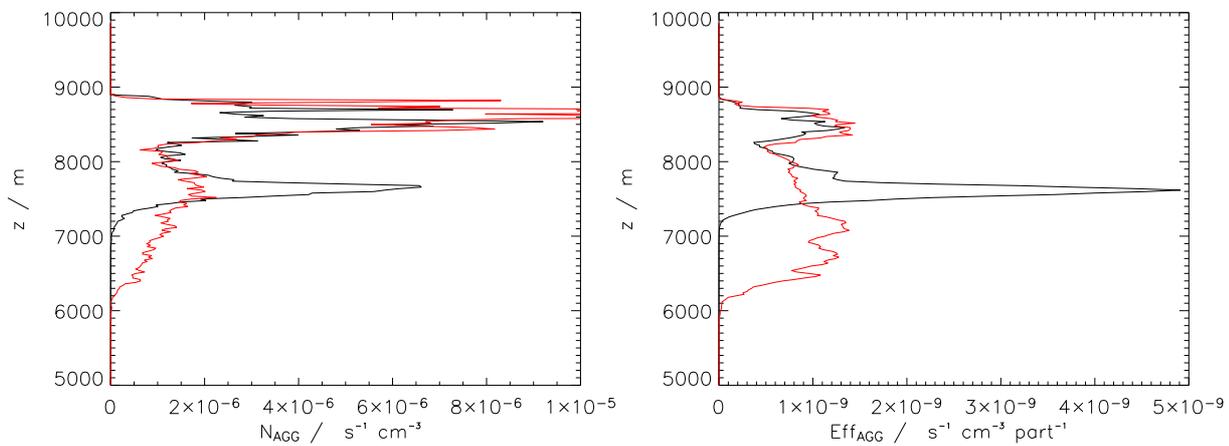


Abbildung 5.25: Links: Anzahl der Aggregationsereignisse (N_{AGG}). Rechts: Aggregationseffektivität (Eff_{AGG}) nach 92 Minuten in der Basis-Simulation (schwarz) und im modifizierten Lauf (rot).

Abbildung 5.25 ist im linken Bild die Anzahl der Aggregationsereignisse N_{AGG} nach Gleichung (5.6) dargestellt. Beide Simulationen zeigen ein Maximum von N_{AGG} in der oberen Wolkenhälfte. Die Basis-Simulation besitzt ein weiteres Maximum in der eben besprochenen Sublimationsregion. Dass es sich dabei wirklich um eine Erhöhung der Aggregationseffektivität und nicht nur um eine reine Steigerung durch eine erhöhte Partikelkonzentration handelt, lässt sich im rechten Bild

ablesen. In der Basis-Simulation übersteigt Ef_{AGG} im zweiten Maximum in der untersättigten Schicht die Werte im oberen Wolkenbereich deutlich, obwohl in der Nukleationszone etwa viermal soviel Eiskristalle vorhanden sind.

- Das Aggregationsmodell des EULAG-LCM deutet darauf hin, dass in Sublimationszonen eine Erhöhung der Aggregationseffektivität auftritt. Eiskristalle sublimieren in dieser Schicht, verlieren Masse und sedimentieren dadurch langsamer. Nachfolgende Kristalle sedimentieren schneller und aggregieren verstärkt mit der zusätzlichen Mode an kleinen Partikel, was zu einer Häufung von Aggregationsereignissen führt.

Kapitel 6

Zusammenfassung

6.1 Ziele und Methodik

Die Hauptziele der vorliegenden Arbeit waren:

- 1) **Aufbau eines wolkenauflösenden mehrdimensionalen Modells für Zirren** mit detaillierter Behandlung der Aerosol- und Eisphase unter Berücksichtigung der Strahlungswechselwirkung und der internen Dynamik in Wolken.
- 2) **Validierung des Modellsystems** durch detaillierte Vergleiche mit Feldexperimenten, teilweise auch im Rahmen internationaler Kooperationen, wie der GEWEX GCSS WG2.
- 3) **Beschreibung der Aggregation im Rahmen der Lagrange'schen Eispartikelverfolgung** aufgrund ihrer Bedeutung für die Vertikalstruktur des Zirrus und der daraus resultierenden Strahlungswechselwirkung.

6.2 Ergebnisse und Bewertung

Aufbau des Modellsystems Im ersten Teil dieser Arbeit wurde ein neues Zirrus-Modellsystem konzipiert und implementiert. Das Modell stellt ein gekoppeltes System aus Dynamik, Strahlung und Mikrophysik dar und ist dafür ausgelegt, detaillierte Studien zu Wolkenbildung und Entwicklung auf der Skala einzelner Zirruswolken durchzuführen. Methodisch wurde hierzu ein im Rahmen dieser Arbeit entwickeltes Mikrophysikmodul (LCM) an das dynamische Modell EULAG (Grabowski und Smolarkiewicz, 2002) unter Einbindung einer 1D Strahlungstransfer-routine (Fu und Liou, 1993) gekoppelt. Rechnungen werden im Sinne von Grobstruktursimulationen durchgeführt. Dies entspricht der Philosophie, soweit möglich auf Parametrisierungen im Modell zu verzichten und prozess-orientierte Simulationen durchzuführen.

In einem innovativen Ansatz werden zur Beschreibung der Eisphase die Trajektorien einer großen Anzahl von Simulationspartikeln verfolgt (siehe Kapitel 2.3.2). Dieser Lagrange'sche Zugang wird erstmalig in einem mehrdimensionalen Wolkenmodell mit einem hohen Grad an Komplexität bezüglich Mikrophysik und Dynamik angewandt. Die Verfolgung einzelner Eiskristalle ergibt gegenüber bestehenden Bulk- oder Bin-Modellen neue Analysemöglichkeiten bei der Simulation von Zirren, die Aussagen über Nukleationswege, Wachstumshistorien und Zusammensetzung der Eispartikel ermöglichen.

Der Euler-Lagrange'sche Ansatz reduziert numerische Artefakte, welche sich in Bulk- oder sektionalen Modellen ergeben, die auch mit immer feineren Modellauflösungen und hochentwickelten Parametrisierungen nicht umgangen werden können. So führt dort die Annahme, dass die Eisphase analog zur Gasphase makroskopisch als kontinuierliche Funktion vorliegt, bei starken Gradienten zum Auftreten numerischer Diffusion und Dispersion. Dies kann besonders an Wolkenkanten zu einer unphysikalischen Ausweitung der Wolkenfläche führen. Insbesondere Bulk-Schemata können durch unterschiedliche Sedimentationsgeschwindigkeiten für die prognostischen Variablen Eiskristallanzahl und Eismasse in Zwei-Momenten Schemata inkonsistente Felder ausbilden.

Limitierungen des EULAG-LCM Ansatzes sind daher weniger theoretischer Natur, sondern durch die Begrenzung in der Rechenzeitkapazität und der resultierenden Reduktion der Simulationsteilchen bedingt. Diese Einschränkungen werden mit einer erwarteten Zunahme der Leistungsfähigkeit von Großrechenanlagen stetig abgebaut, was die Attraktivität der vorgestellten innovativen Methode zur Behandlung der Eisphase in der Zirrusforschung erhöht. In der vorliegenden Arbeit wurden neue Algorithmen zum Aufbau Euler-Lagrange'scher Modellsysteme entwickelt und validiert. Es konnte gezeigt werden, dass bei der Simulation von Zirren im Euler-Lagrange'schen Kontext eine hinreichende Anzahl von Simulationspartikeln existiert, um aus der Kenntnis der Eigenschaften einer Teilmenge von Eisteilchen auf die Gesamtheit schließen zu können (siehe Kapitel 3.3 und Kapitel 5.2.2). Dies ermöglicht es, Simulationen durchzuführen, welche einen guten Kompromiss aus Genauigkeit und Rechenzeitaufwand darstellen.

Validierung Die Validierung des EULAG-LCM erfolgte in drei Stufen. Anhand einer Boxmodellstudie, einer Vergleichsstudie im Rahmen der GEWEX GCSS WG2 Arbeitsgruppe und einer Fallstudie, die insbesondere den Aggregationsprozess hervorhebt.

In der GEWEX GCSS WG2 Fallstudie (Kapitel 4.2) wurde das Modellsystem anhand eines realen Szenarios mit bestehenden Zirrusmodellen verglichen. Das EULAG-LCM liefert hier Resultate, die in Übereinstimmung sowohl zu den Messungen als auch zu den teilnehmenden CRM-Modellen sind. Aufgrund der komplexen Mikrophysik kann das EULAG-LCM Anregungen zu weiteren Arbeiten bezüglich Nukleationsweg und Eispartikeleigenschaften geben, die in vielen anderen Modellen nicht vorhanden sind.

In dieser Arbeit wurde weiterhin ein anschließender Vergleichsfall auf der Basis eines umfangreichen Datensatzes des ARM Programmes erarbeitet (Kapitel 5.1). Flugzeuggetragene Spiralfugmessungen konnten hier ausgewertet werden. Das EULAG-LCM war in der Lage, über einen realistischen Bildungsweg die beobachtete Wolkenstruktur zu simulieren. Eine breite Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den Messungen konnte gefunden werden.

Aggregation in Zirren Ein wichtiger Prozess bei der vertikalen Verteilung von Eismasse (Strahlungswirkung) und der Niederschlagsbildung in Zirren ist die Aggregation von Eispartikeln. Der dominierende Prozess, der zu Kollisionen zwischen Eispartikeln führt, ist die differentielle Sedimentation (Westbrook *et al.*, 2004a). Im Gegensatz zu flüssigen Wolkentropfen war die Aggregation von Eispartikeln bislang selten Gegenstand detaillierter numerischer Studien. Dies mag daran liegen, dass in bisherigen Zirrusmodellen der Aggregationsprozess über eine Ratengleichung parametrisiert wurde. Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei Aggregationsalgorithmen entwickelt, die in einem Euler-Lagrange'schen Ansatz anwendbar sind (Kapitel 2.5). Die Algorithmen beruhen auf den Trajektorien und Sedimentationsgeschwindigkeiten einzelner

Kristalle und stellen somit einen wichtigen Schritt zur prozess-orientierten Simulation der Aggregation in einem mehrdimensionalen Kontext dar.

In einer im Rahmen dieser Arbeit aufbereiteten Fallstudie wurde der Aggregationsprozess von Eiskristallen im Detail untersucht. Die Simulation der Aggregation ist unerlässlich, um die Existenz von großen Eispartikeln mit Dimensionen bis zu einigen Millimetern in gemessenen GV erklären zu können (Kapitel 5.3.2). Anhand der Trajektorien einzelner Simulationspartikel konnte gezeigt werden, dass ein Prozess ähnlich zum 'seeder-feeder' Prozess bei der Niederschlagsbildung auch bei der Ausbildung großer Eispartikel in reinen Eiswolken existiert (Kapitel 5.3.1). Dieser kleine 'seeder-feeder' Prozess besteht darin, dass in Wolkenstrukturen am Oberrand des Zirrus Eiskristalle nukleieren, die anschließend auf ihrem Weg durch die darunterliegenden Wolken-schichten dort existierende Kristalle aufsammeln und so schnell zu großen Massen anwachsen können, was zu einer Selbstverstärkung des Aggregationsprozesses führt. Aufgrund unterschiedlicher Sedimentationsgeschwindigkeiten stellt sich in der 'feeder-Wolke' eine vertikale Sortierung der Kristalle bezüglich ihrer Größe ein. Ohne den Eintrag frisch nukleierter Eispartikel aus 'seeder-Wolkenelementen' in höhergelegenen Schichten käme der Aggregationsprozess und damit die Ausbildung großer, für die Niederschlagsbildung relevanter Eiskristalle rasch zum Erliegen. Turbulente Fluktuationen und daraus resultierende Unterschiede in den Wachstumshistorien von Eispartikeln führen aber dazu, dass nur einige Kristalle aus der 'seeder-Wolke' in tieferliegende Schichten gelangen.

Je effizienter der Aggregationsprozess ist, desto stärker findet ein Partikel- und Massenverlust in den oberen und vor allem in mittleren Regionen eines Zirrus statt. Dieser Verlust bewirkt eine Abnahme der mittleren optischen Dicke mit einer Zunahme der Aggregationseffizienz in alternden Zirren (Kapitel 5.3.2).

Weiterhin deutet das Aggregationsmodell des EULAG-LCM darauf hin, dass in untersättigten Schichten (Sublimationszonen) eine Erhöhung der Aggregationseffektivität auftritt. Eiskristalle sublimieren in dieser Schicht, verlieren Masse und sedimentieren dadurch langsamer. Nachfolgende Kristalle sedimentieren schneller und aggregieren verstärkt mit der zusätzlichen Mode an kleinen Partikel, was zu einer Häufung von Aggregationsereignissen führt (Kapitel 5.3.3).

Wie in vorangegangenen Studien (Cantrell und Heymsfield, 2005) bleibt die Existenz zahlreicher kleiner Partikel, die bis in die tiefsten Wolkenregionen von Zirren in Messungen gefunden wurden (siehe Kapitel 5.1.4), eine offene Frage. Cardwell *et al.* (2003) erklären diese persistente Mode an kleinen Partikeln über den Prozess der sekundären Eisproduktion, der dort aber nur über eine konstante Rate parametrisiert ist. Eine physikalische Berechnung des Prozesses wäre wünschenswert, um die Plausibilität dieser Annahme zu überprüfen. Wolde und Vali (2002) weisen darauf hin, dass die sekundären Produktionsraten sehr hoch sein müssen, um kleine Partikel in ausreichender Anzahlkonzentration (2 bis 3 Größenordnungen mehr kleine Partikel) über den gesamten Simulationszeitraum zu erhalten.

6.3 Ausblick

Wie gezeigt wurde, ist das EULAG-LCM sehr gut geeignet, Feldmessungen zur Zirrenbildung und -entwicklung zu begleiten. Aufgrund der Koppelung von Dynamik, Strahlung und Mikrophysik sind die wesentlichen Prozesse, die zur Wolkenstruktur beitragen, erfasst. Die Kenntnis der Trajektorien einzelner Eispartikel erlaubt es, sowohl volumengemittelte Eigenschaften als auch

jene individueller Kristalle zu analysieren. Somit können Messung und Simulation detailliert verglichen werden und Prozesse in Zirren für unterschiedliche Fallstudien kampagnenbegleitend überprüft werden. In naher Zukunft könnte dies im Rahmen der ML-Cirrus (Midlatitude Cirrus) Kampagne geschehen, die das neue Forschungsflugzeug HALO (High Altitude and Long Range Research Aircraft) involviert. Spezifische Messmethoden, wie das Spiralfugmuster (siehe Kapitel 5) können im Modell direkt nachgebildet werden, um die Interpretation der Ergebnisse zu erleichtern.

Prozessstudien zu optisch dünnen Zirren an der tropischen Tropopause sind ein weiteres mögliches Anwendungsgebiet des EULAG-LCM, um zu bewerten, wie effektiv Eispartikel aus dünnen Zirren in die tropische Stratosphäre gelangen und dort zur Hydrierung beitragen. Hier hat sich gezeigt, dass nukleierte Eiskristalle eine gewisse Zeit in einem metastabilen Zustand als kubisches Eis existieren und erst danach in die hexagonale Form übergehen (Murphy, 2003). Aufgrund eines Vorganges analog zum Bergeron-Findeisen Prozess in Mischwolken wachsen hexagonale Eispartikel, bedingt durch ihren geringeren Sättigungsdampfdruck, auf Kosten der kubischen Eispartikel. Dies impliziert die Ausbildung größerer Kristalle und kann möglicherweise, durch eine erhöhte Sedimentationsgeschwindigkeit der schneller wachsenden Partikel, zu einer verringerten Hydrierung der Stratosphäre beitragen. Hier hat die Einzelpartikelverfolgung des EULAG-LCM den entscheidenden Vorteil gegenüber Bulk- oder sektionalen Ansätzen, den Prozess physikalisch für einzelne Simulationspartikel nachzuvollziehen.

Dies gilt ebenso für die Aufnahme von Salpetersäure (HNO_3) auf Eispartikel. HNO_3 stellt ein Reservoirgas für die reaktiven Stickstoffverbindungen NO und NO_2 dar, welche zur photolytischen Ozonproduktion beitragen. Somit können Zirren in der Troposphäre zu einer vertikalen Umverteilung von Stickstoffverbindungen führen und in den Ozonkreislauf eingreifen. Kärcher und Voigt (2006) haben einen neuen Ansatz für die Aufnahme von HNO_3 auf Eiskristalle entwickelt, der den möglichen Einfang (Trapping) von deponierten Spurengasen in wachsende Eiskristalle beschreibt, und der im Falle von HNO_3 auf einer Reihe von Feldmessungen basiert. Dieser ist für die Anwendung in numerischen Modellen geeignet und bereits in den EULAG-LCM Gleichungen eingebaut. Das Modell kann helfen, Analysen zur Aufnahme von HNO_3 auf Eispartikel durchzuführen und damit die Analyse der im Herbst 2008 durchgeführten CONCERT Kampagne am DLR zu unterstützen.

Das EULAG-LCM ist nicht nur für die Betrachtung in-situ gebildeter Zirren konzipiert, sondern kann auch für die Untersuchung flugzeuginduzierter Kondensstreifen herangezogen werden. In den letzten Jahren ist vor dem Hintergrund eines sich rasant entwickelnden Flugaufkommens (jährliche Zunahme von 2 % -15 %) das Interesse an dessen Einfluss auf das Klima gestiegen (Penner *et al.*, 1999). Erst kürzlich haben Shirgaonkar und Lele (2006) sowie Unterstrasser (2008) mit LES Modellen die Rolle unterschiedlicher atmosphärischer Parameter bei der Entwicklung von Kondensstreifen untersucht. Angetrieben durch meteorologische Felder aus hochaufgelösten Wettervorhersagemodellen, könnte das EULAG-LCM genutzt werden, die Rolle sekundärer Eiskernung und der Aggregation bei der Entwicklung der Eispartikelgrößenverteilung in alternden Kondensstreifen-Zirren zu bewerten.

Eine technische Anwendung des EULAG-LCM stellt die Validierung von Bulk-Ansätzen dar, die häufig aufgrund ihres geringen Rechenaufwandes herangezogen werden. Diese setzen für die mikrophysikalischen Berechnungen eine angenommene Form der Größenverteilung der Eiskristalle voraus. Es kann überprüft werden, inwieweit diese a priori getroffene Annahme gerechtfertigt

ist. Im Speziellen kann das von Spichtinger und Gierens (2008) entwickelte Modellsystem validiert werden, dessen Dynamik ebenfalls auf dem EULAG beruht und so eine gezielte Bewertung der durch die Mikrophysik hervorgerufenen Differenzen erlaubt.

Anhang A

Symbole und Abkürzungen

A.1 Verwendete Symbole

Symbol	Definition	SI-Einheit
Ar	Aspektverhältnis eines hexagonalen Eissäulchens	-
a_w	Wasseraktivität	-
C_D	Widerstandsbeiwert	-
c_p	Spezifische Wärmekapazität von Luft = 1004.67	J kg ⁻¹ K ⁻¹
D	Maximale Dimension eines Eispartikels	m
D_{ge}	Effektiver Durchmesser von hexagonalen Säulchen	m
D_q	Diffusionskoeffizient für Moleküle q in Luft	m ² s ⁻¹
dx, dy, dz	Gitterpunktabstand im EULAG	m
E_a	Aggregationseffizienz	-
Eff_{AGG}	Aggregationseffektivität	m ⁻³ s ⁻¹
f	Coriolisparameter	s ⁻¹
f_v	Ventilationskoeffizient für einen fallenden Eiskristall	-
g	Schwerebeschleunigung	m s ⁻²
Δt	Zeitschritt im EULAG	s
Δt_{MIC}	Zeitschritt im Mikrophysikmodul EULAG-LCM	s
Δt_{NUC}	Zeitschritt im Mikrophysikmodul EULAG-LCM während Nukleationsereignissen	s
$H'_{q,i}$	Effektive Henry-Konstante für Moleküle q	-
j_f	Nukleationsrate	s ⁻¹
J_f	Nukleationsrate pro Volumen Aerosol	m ⁻³ s ⁻¹
k_b	Boltzmann-Konstante = 1.3804 x 10 ⁻²³	J K ⁻¹
K_{ij}	Stoßratenmatrix	-
L_s	Latente Wärme der Sublimation	J kg ⁻¹
m_i	Masse eines Eispartikels	kg
m_q	Molare Masse der Moleküle q	kg mol ⁻¹

Symbol	Definition	SI-Einheit
n, m, l	Anzahl der Gitterpunkte in x -, y - und z -Richtung in EULAG	-
$n(D)$	Bin-Weiten normierte Größenverteilung	m^{-4}
N	Brunt-Väisälä Frequenz	s^{-1}
N_A	Avogadrozahl = 6.02213×10^{23}	mol^{-1}
N_{AGG}	Zeitlich gemittelte Anzahldichte von Aggregationsereignissen	$m^{-3} s^{-1}$
$N_{a,i}$	Anzahlkonzentration von Lösungströpfchen der Größenklasse i	m^{-3}
N_i	Anzahl der realen Eisteilchen in einem Simulationspartikel	-
N_{ice}	Anzahlkonzentration von Eisteilchen	m^{-3}
N_q	Anzahlkonzentration der Moleküle q in der Gasphase	m^{-3}
$N_{q,i}$	Anzahlkonzentration der Moleküle q in Aerosoltröpfchen der Größenklasse i	m^{-3}
$N_{q,tot}$	Totale Anzahlkonzentration der Moleküle q	m^{-3}
N_{SIM}	Anzahl der Simulationspartikel in einer Gitterbox	-
N_{sweep}	Anzahl von aufgesammelten Kristallen bei Aggregation	-
p	Luftdruck	Pa
$p_{q,s,i}$	Sättigungsdampfdruck für Gas q über einem Lösungströpfchen der Größenklasse i	Pa
q_{ice}	Mischungsverhältnis von Eis	$kg\ kg^{-1}$
q_v	Mischungsverhältnis von Wasserdampf	$kg\ kg^{-1}$
Q_H	Erwärmungsrate durch Freisetzung latenter Wärme	$K\ s^{-1}$
Q_R	Strahlungsbedingte Erwärmungsrate	$K\ s^{-1}$
R_l	Retentionskoeffizient	-
R^*	Universelle Gaskonstante = 8.3145	$J\ mol^{-1}\ K^{-1}$
Re	Reynolds-Zahl	-
$r_{a,i}$	Radius eines Aerosoltröpfchens der Größenklasse i	m
$r_{c,i}$	Radius eines unlöslichen Partikels in Aerosoltröpfchen der Größenklasse i	m
S_c	Schmidt-Zahl	-
S_i	Sättigungsverhältnis bezüglich Eis	-
$S'_{q,i,t}$	Kelvinkorrektur für den Sättigungsdampfdruck über Lösungströpfchen der Größenklasse i	-
T	Lufttemperatur	K
T_v	Virtuelle Temperatur	K
TKE	Turbulente Kinetische Energie je Massenanteil	$m^2\ s^{-2}$
\mathbf{u}	Skaliges Windfeld im EULAG	$m\ s^{-1}$
$\tilde{\mathbf{u}}_i$	Geschwindigkeitsfluktuation beim Transport von Eispartikeln	$m\ s^{-1}$
$V_{a,i}$	Volumen eines Aerosoltröpfchens der Größenklasse i	m^3
V_{BOX}	Volumen einer Gitterbox	m^3
V_{core}	Volumen eines unlöslichen Partikels in Aerosoltröpfchen	m^3

Symbol	Definition	SI-Einheit
V_{liq}	Volumen der flüssigen Phase eines Aerosoltröpfchens	m^3
v_q	Volumen eines Moleküls q in Lösungströpfchen	m^3
$v_{th,q}$	Mittlere thermische Geschwindigkeit der Moleküle q	$m\ s^{-1}$
X	Best- (oder Davies-) Zahl	-
α_q	Akkomodationskoeffizient für Moleküle q auf Eis	-
α_t	Thermischer Akkomodationskoeffizient	-
β_v	Knudsen-Korrekturfaktor	-
χ_i	Kapazitätsfaktor	m
κ_d	Thermische Leitfähigkeit von Luft	$W\ m^{-1}\ K^{-1}$
λ_q	Mittlere freie Weglänge der Moleküle q	m
η_a	Dynamische Viskosität der Luft	$kg\ m^{-1}\ s^{-1}$
ϕ	Eismassenfluss	$kg\ m\ s^{-1}$
ρ_i, ρ_a	Dichte von Eis, Luft	$kg\ m^{-3}$
$\sigma_{p/v}$	Oberflächenspannung zwischen Lösungströpfchen und Luft	$J\ m^{-2}$
θ	Potentielle Temperatur	K
θ_Z	Sonnenzenitwinkel	-

Abbildungsverzeichnis

1.1	Typische Skalen atmosphärischer Bewegungen, Wolkenstrukturen oder Wolkenpartikeln sowie von mikrophysikalischen Prozessen in kalten Wolken.	2
2.1	Schematische Übersicht des Modellsystems EULAG-LCM.	11
2.2	Das Operator-Splitting Schema des EULAG-LCM.	13
2.3	Semi-implizites Advektionsschema des EULAG.	15
2.4	Beschreibung der Aerosoltröpfchen-Größenverteilung.	18
2.5	Eisbildungspfade im EULAG-LCM.	21
2.6	Schematische Darstellung der Simulationspartikelentstehung in EULAG-LCM.	24
2.7	Unaufgelöste Variabilität in einer Gitterbox im EULAG.	26
2.8	Empirische Relationen zur maximalen Dimension unterschiedlicher Eiskristallformen als Funktion ihrer Masse.	32
2.9	Kapazität unterschiedlicher Eiskristalltypen.	33
2.10	Sedimentationsgeschwindigkeit unterschiedlicher Eiskristalltypen.	34
2.11	Schematische Übersicht des Strahlungsmoduls im EULAG-LCM.	38
2.12	Schematische Darstellung des Effekts des Aggregationsprozesses auf die Größenverteilung der Eiskristalle.	41
2.13	Schematische Illustration des 'sweep-out' Prozesses.	42
2.14	Schematische Darstellung des Hybrid Aggregationsalgorithmus im EULAG-LCM.	43
3.1	Schematischer Aufbau eines Integrationsgebietes im EULAG-LCM.	48
3.2	Periodogramm der wellenlängenabhängigen Energiedichtevertelung der vertikalen Windgeschwindigkeit.	50
3.3	Idealisierte Profile zur Initialisierung der Simulationen in Kapitel 3.3.	52
3.4	Trajektorien von Eispartikeln in den Simulationen zur benötigten Anzahl von Simulationspartikeln.	54
3.5	2D Feld des Eiswassermischungsverhältnisses in den Simulationen zur benötigten Anzahl von Simulationspartikeln.	55
3.6	Horizontal gemittelte Werte des Eiswassermischungsverhältnisses.	56
3.7	Vergleich des horizontal gemittelten Eiswassermischungsverhältnisses in den 2D und 3D Simulationen.	58
3.8	Diabatische Erwärmungsraten in den Simulationen zur internen Dynamik.	59
3.9	Horizontal gemitteltes Profil der potentiellen Temperatur in den Simulationen zur internen Dynamik.	60
3.10	Horizontal gemittelte Produktionsraten turbulent kinetischer Energie sowie der turbulent kinetischen Energie in den Simulationen zur internen Dynamik.	61

4.1	Ergebnisse der Boxmodell-Vergleichsstudie.	64
4.2	Das ARM Messnetz in Oklahoma, U.S.A.	65
4.3	Gemessene Radarreflektivitäten über der CF Messstation zur GCSS WG2 Fallstudie.	66
4.4	300 hPa Analyse des Eta Atmosphären Modells zur GCSS WG2 Fallstudie.	66
4.5	IR Satellitenbild des Zirrus um 17.45 UTC zur GCSS WG2 Fallstudie.	66
4.6	Anfangsprofile zur GCSS WG2 Modellvergleichsstudie.	68
4.7	Simuliertes Eiswassermischungsverhältnisses im EULAG-LCM zur GCSS WG2 Modellvergleichsstudie.	69
4.8	Bin-Weiten normierte Eiskristallgrößenverteilung im EULAG-LCM zur GCSS WG2 Modellvergleichsstudie.	69
4.9	Vergleich horizontal gemittelter Werte des Eiswassermischungsverhältnisses im EULAG-LCM, dem UK Met Office LEM Modell sowie gemessener Werte zur GCSS WG2 Modellvergleichsstudie.	70
4.10	Profile des Sättigungsverhältnis in den EULAG-LCM Simulationen zur GCSS WG2 Modellvergleichsstudie.	71
5.1	IR Satellitenbild des Zirrus um 20.45 UTC zur ARM IOP Fallstudie.	74
5.2	Bilder der Wolkenkamera zur ARM IOP Fallstudie.	75
5.3	Radiosondenmessungen der potentiellen Temperatur und des Sättigungsverhältnisses bezüglich Eis.	76
5.4	Flugpfad zu den Spiralfugmessungen zur ARM IOP Fallstudie.	77
5.5	CPI Bilder von Eispartikeln zur ARM IOP Fallstudie.	78
5.6	Der gemessene Eiswassergehalt während des Spiralfuges zur ARM IOP Fallstudie.	79
5.7	Horizontale Flugabschnitte parallel zur Strömungsrichtung zu unterschiedlichen Zeiten.	80
5.8	Vertikalprofil der Vertikalwindgeschwindigkeit zur ARM IOP Fallstudie.	81
5.9	Während des Spiralfuges durch das Zirrusfeld gewonnener Eiswassergehalt.	84
5.10	Vergleich der simulierten und der gemessenen Sättigungsverhältnisse.	85
5.11	Vergleich der simulierten und der gemessenen Eiskristallanzahlkonzentrationen zur ARM IOP Fallstudie.	86
5.12	Vergleich der simulierten und der gemessenen Eispartikelgrößenverteilungen zur ARM IOP Fallstudie.	87
5.13	Skalierung der Eispartikelgrößenverteilung nach Field und Heymsfield (2003)	90
5.14	Zeitliche Entwicklung der mittleren säulenintegrierten optischen Dicke in den Sensitivitätsstudien zur Anzahl der Simulationspartikel.	94
5.15	Zeitliche Entwicklung der mittleren säulenintegrierten optischen Dicke in den Sensitivitätsstudien zur Aggregationseffizienz.	96
5.16	Vergleich der simulierten sowie der gemessenen Eiskristallanzahlkonzentrationen in der Sensitivitätsstudie zur heterogenen Nukleation.	97
5.17	Trajektorien von Simulationspartikeln im zeitlichen Verlauf in der Basis-Simulation zur ARM IOP Fallstudie.	98
5.18	Eiswassergehalt sowie Eispartikelgrößenverteilung in der Basis-Simulation zur ARM IOP Fallstudie nach 68 Minuten.	101
5.19	Eiswassergehalt sowie Eispartikelgrößenverteilung in der Basis-Simulation zur ARM IOP Fallstudie nach 124 Minuten.	102

5.20 Eiswassergehalt sowie Eispartikelgrößenverteilung in der Basis-Simulation zur ARM IOP Fallstudie nach 144 Minuten. 103

5.21 Eispartikelgrößenverteilungen in der Sensitivitätsstudie zum Einfluss der Aggregationseffizienz. 104

5.22 Horizontal gemittelte Eispartikelanzahlkonzentration in der Sensitivitätsstudie zum Einfluss der Aggregationseffizienz. 104

5.23 Vergleich der simulierten und der gemessenen Eispartikelgrößenverteilungen in einer Simulation ohne Aggregation. 105

5.24 Anfangsprofil der Eisübersättigung sowie die Eispartikelgrößenverteilung in der Sensitivitätsstudie zum Einfluss von Sublimationszonen auf die Aggregationseffektivität. 107

5.25 Anzahl der Aggregationsereignisse sowie Aggregationseffektivität in der Sensitivitätsstudie zum Einfluss von Sublimationszonen auf die Aggregationseffektivität. 107

Tabellenverzeichnis

1.1	Eigenschaften von Zirruswolken.	5
2.1	Ventilationskoeffizienten für Eiskristalle.	28
2.2	Empirische Relationen für Masse und Fläche eines Eiskristalls.	30
3.1	Liste der Modellvariablen für ein Lagrange'sches Simulationspartikel.	51
3.2	Einstellungen für die idealisierten 2D Simulationen in Kapitel 3.3.	51
3.3	Wahl der unteren Konzentrationsschranke in den Simulationen zur benötigten Anzahl von Simulationspartikeln.	53
3.4	Einstellungen für die idealisierte 3D Simulation in Kapitel 3.4.	57
4.1	Modelleinstellungen für die Simulation zur GCSS WG2 Studie.	67
5.1	Einstellungen für die Simulationen zur Fallstudie ARM IOP 9. März 2000 in Kapitel 5.1.2.	82
5.2	Sensitivitätsstudien zur Fallstudie ARM IOP SGP 9. März 2000.	93

Literaturverzeichnis

- Abraham, F. F. (1970). Functional dependence of drag coefficient of a sphere on Reynolds number. *Phys. Fluids*, **13**, 2194–2195.
- Anderson, G. P., Clough, S. A., Kneizys, F. X., Chetwynd, J. H., and Shettle, E. P. (1986). AFGL atmospheric constituent profiles (0-120 km). Technical report.
- Archuleta, C. M., DeMott, P. J., and Kreidenweis, S. M. (2005). Ice nucleation by surrogates for atmospheric mineral dust and mineral dust/sulfate particles at cirrus temperatures. *Atmos. Chem. Phys.*, **5**, 2617–2634.
- Auer, A. H. and Veal, D. L. (1970). The dimension of ice crystals in natural clouds. *J. Atmos. Sci.*, **27**, 919–926.
- Bacon, N. J., Swanson, B. D., Baker, M. B., and Davis, E. J. (1998). Breakup of levitated frost particles. *J. Geophys. Res.*, **103**, 13763–13775.
- Bailey, M. and Hallett, J. (2004). Growth rates and habits of ice crystals between -20° and -70° C. *J. Atmos. Sci.*, **61**, 514–544.
- Bergeron, T. (1950). Über den Mechanismus der ausgiebigen Niederschläge. *Ber. Dtsch. Wetterdienstes*, **12**, 225–232.
- Betts, A. K. and Bartlo, J. (1991). The density temperature and the dry and wet virtual adiabats. *Mon. Wea. Rev.*, **119**, 169–175.
- Bohm, H. P. (1989). A general equation for the terminal fall speed of solid hydrometeors. *J. Atmos. Sci.*, **46**, 2419–2427.
- Cantrell, W. and Heymsfield, A. (2005). Production of ice in tropospheric clouds: A review. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **86**, 795–807.
- Cardwell, J., Field, P. R., and Choullarton, T. W. (2003). A modelling study of ice-spectrum modes in deep frontal clouds. *Q.J.R. Meteorol. Soc.*, **129**, 1873–1890.
- Chen, Y., Kreidenweis, S. M., McInnes, L. M., Rogers, D. C., and DeMott, P. J. (1998). Single particle analyses of ice nucleating aerosols in the upper troposphere and lower stratosphere. *Geophys. Res. Lett.*, **25**, 1391–1394.
- Comstock, J. M., D’Entremont, R., De Slover, D., Mace, G. G., Matrosov, S. Y., McFarlane, S. A., Minnis, P., Mitchell, D., Sassen, K., Shupe, M. D., Turner, D. D., and Wang, Z. (2007).

- An intercomparison of microphysical retrieval algorithms for upper-tropospheric ice clouds. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **88**, 191–204.
- Cox, S. K., McDougal, D. S., Randall, D. A., and Schiffer, R. A. (1987). FIRE - the first ISCCP regional experiment. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **68**, 114–118.
- Dean, S. M., Lawrence, B. N., Grainger, R. G., and Heuff, D. N. (2005). Orographic cloud in a GCM: The missing cirrus. *Climate Dynamics*, **24**, 771–780.
- DeMott, P. J. (2002). Laboratory studies of cirrus cloud processes. In D. K. Lynch, K. Sassen, D. O. Starr, and G. Stephens, editors, *Cirrus*. Oxford Univ. Press, New York.
- DeMott, P. J., Rogers, D. C., and Kreidenweis, S. M. (1997). The susceptibility of ice formation in upper tropospheric clouds to insoluble aerosol components. *J. Geophys. Res.*, **102**, 19575–19584.
- Dowling, D. R. and Radke, L. F. (1990). A summary of the physical properties of cirrus clouds. *J. Appl. Meteorol.*, **29**, 970–978.
- Ebert, E. E. and Curry, J. A. (1992). Parameterization of ice cloud optical properties for climate models. *J. Geophys. Res.*, **97**, 3831–3836.
- Emanuel, K. A. (1994). *Atmospheric convection*. Oxford University Press.
- Field, P. R. (1999). Aircraft observations of ice crystal evolution in an altostratus cloud. *J. Atmos. Sci.*, **56**, 1925–1941.
- Field, P. R. and Heymsfield, A. J. (2003). Aggregation and scaling of ice crystal size distributions. *J. Atmos. Sci.*, **60**, 544–560.
- Field, P. R., Heymsfield, A. J., and Bansemer, A. (2006a). Shattering and particle interarrival times measured by optical array probes in ice clouds. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, **23**, 1357–1371.
- Field, P. R., Heymsfield, A. J., and Bansemer, A. (2006b). A test of ice self-collection kernels using aircraft data. *J. Atmos. Sci.*, **63**, 651–666.
- Fierli, F., Di Donfrancesco, G., Cairo, F., Zampieri, M., and Orlandi, E. (2007). Cirrus clouds in convective outflow during the HIBISCUS campaign. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, **7**, 6737–6765.
- Finlayson-Pitts, B. J. and Pitts, J. N. J. (2000). *Chemistry of the upper and lower atmosphere*. Academic Press, San Diego, London, first edition.
- Fu, Q. (1996). An accurate parametrization of the solar radiative properties of cirrus clouds for climate models. *J. Clim.*, **9**, 2058–2082.
- Fu, Q. and Liou, K.-N. (1992). On the correlated k-distribution method for radiative transfer in nonhomogeneous atmospheres. *J. Atmos. Sci.*, **49**, 2139–2156.
- Fu, Q. and Liou, K.-N. (1993). Parametrization of the radiation properties of cirrus clouds. *J. Atmos. Sci.*, **50**, 2008–2025.

- Gayet, J. ., Ovarlez, J., Shcherbakov, V., Ström, J., Schumann, U., Minikin, A., Auriol, F., Petzold, A., and Monier, M. (2004). Cirrus cloud microphysical and optical properties at southern and northern midlatitudes during the inca experiment. *J. Geophys. Res.*, **109**, D20206, doi:10.1029/2004JD004803.
- Grabowski, W. W. and Smolarkiewicz, P. K. (2002). A multiscale anelastic model for meteorological research. *Mon. Wea. Rev.*, **130**, 939–956.
- Gu, Y. and Liou, K.-N. (2000). Interactions of radiation, microphysics, and turbulence in the evolution of cirrus clouds. *J. Atmos. Sci.*, **57**, 2463–2479.
- Gultepe, I. and Starr, D. O. (1995). Dynamical structure and turbulence in cirrus clouds: Aircraft observations during FIRE. *J. Atmos. Sci.*, **52**, 4159–4182.
- Haag, W. and Kärcher, B. (2004). The impact of aerosols and gravity waves on cirrus clouds at midlatitudes. *J. Geophys. Res.*, **109**, 1–18.
- Haag, W., Kärcher, B., Ström, J., Minikin, A., Ovarlez, J., Lohmann, U., and Stohl, A. (2003). Freezing thresholds and cirrus cloud formation mechanisms inferred from in situ measurements of relative humidity. *Atmos. Chem. Phys.*, **3**, 1791–1806.
- Hall, W. D. and Pruppacher, H. R. (1976). The survival of ice particles falling from cirrus clouds in subsaturated air. *J. Atmos. Sci.*, **33**, 1995–2006.
- Harimayo, T. and Kawasota, Y. (2001). Snowflake formation and its regional characteristics. *J. Fac. Sci. Hokkaido Univ. Ser. 7*, **11**, 793–809.
- Herzogh, P. H. and Hobbs, P. V. (1980). The mesoscale and microscale structure and organization of clouds and precipitation in midlatitude cyclones. II: Warm-frontal clouds. *J. Atmos. Sci.*, **37**, 597–611.
- Heymsfield, A. J. (1975). Cirrus uncinus generating cells and the evolution of cirroform clouds: Part III. *J. Atmos. Sci.*, **32**, 799–808.
- Heymsfield, A. J. (1977). Precipitation development in stratiform ice clouds: A microphysical and dynamical study. *J. Atmos. Sci.*, **34**, 367–381.
- Heymsfield, A. J. and Iaquinta, J. (2003). Cirrus crystal terminal velocities. *J. Atmos. Sci.*, **57**, 916–938.
- Heymsfield, A. J. and Sabin, R. M. (1989). Cirrus crystal nucleation by homogeneous freezing of solution droplets. *J. Atmos. Sci.*, **46**, 2252–2264.
- Heymsfield, A. J., Lewis, S., Bansemer, A., Iaquinta, J., Miloshevich, L. M., Kajikawa, M., Twohy, C., and Poellot, M. R. (2002). A general approach for deriving the properties of cirrus and stratiform ice cloud particles. *J. Atmos. Sci.*, **59**, 3–29.
- Hoyle, C. R., Luo, B. P., and Peter, T. (2005). The origin of high ice crystal number densities in cirrus clouds. *J. Atmos. Sci.*, **62**, 2568–2579.
- Jacobson, M. Z. (1997a). Development and application of a new air pollution modeling system - II. Aerosol module structure and design. *Atmos. Environ.*, **31**, 131–144.

- Jacobson, M. Z. (1997b). Numerical techniques to solve condensational and dissolutional growth equations when growth is coupled to reversible reactions. *Aerosol Sci. Technol.*, **27**, 491–498.
- Jacobson, M. Z. (1999). *Fundamentals of atmospheric modeling*. Cambridge Univ. Press, U.K.
- Jensen, E. and Pfister, L. (2004). Transport and freeze-drying in the tropical tropopause layer. *J. Geophys. Res.*, **109**, D02207, doi:10.1029/2003JD004022.
- Jensen, E. J. and Ackerman, A. S. (2006). Homogeneous aerosol freezing in the tops of high-altitude tropical cumulonimbus clouds. *Geophys. Res. Lett.*, **33**, L08802, doi:10.1029/2005GL024928.
- Jensen, E. J., Toon, O. B., Westphal, D. L., Kinne, S., and Heymsfield, A. J. (1994). Microphysical modeling of cirrus 1. Comparison with 1986 FIRE IFO measurements. *J. Geophys. Res.*, **99**, 421–442.
- Jensen, E. J., Toon, O. B., Selkirk, H. B., Spinhirne, J. D., and Schoeberl, M. R. (1996). On the formation and persistence of subvisible cirrus clouds near the tropical tropopause. *J. Geophys. Res.*, **101**, 21361–21375.
- Ji, W. and Wang, P. (1999). Ventilation coefficients for falling ice crystals in the atmosphere at low-intermediate Reynolds number. *J. Atmos. Sci.*, **56**, 829–836.
- Kajikawa, M. and Heymsfield, A. J. (1989). Aggregation of ice crystals in cirrus. *J. Atmos. Sci.*, **46**, 3108–3121.
- Kärcher, B. (2003). Simulating gas-aerosol-cirrus interactions: Process oriented microphysical model and applications. *Atmos. Chem. Phys.*, **3**, 1645–1664.
- Kärcher, B. (2005). Supersaturation, dehydration, and denitrification in arctic cirrus. *Atmos. Chem. Phys.*, **5**, 1757–1772.
- Kärcher, B. and Burkhardt, U. (2008). A cirrus cloud scheme for general circulation models. *Q.J.R. Meteorol. Soc.*, **134**, 1439–1461.
- Kärcher, B. and Lohmann, U. (2003). A parametrization of cirrus cloud formation: Heterogeneous freezing. *J. Geophys. Res.*, **108**, 4698, doi: 10.1029/2002JD003220.
- Kärcher, B. and Ström, J. (2003). The roles of dynamical variability and aerosols in cirrus cloud formation. *Atmos. Chem. Phys.*, **3**, 823–838.
- Kärcher, B. and Voigt, C. (2006). Formation of nitric acid/water ice particles in cirrus clouds. *Geophys. Res. Lett.*, **33**, L08806, doi:10.1029/2006GL025927.
- Kärcher, B., Möhler, O., DeMott, P. J., Pechtl, S., and Yu, F. (2007). Insights into the role of soot aerosols in cirrus cloud formation. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 4203–4227.
- Khain, A. P. and Sednev, I. L. (1995). Simulation of hydrometeor size spectra evolution by water-water, ice-water and ice-ice interactions. *Atmos. Res.*, **36**, 107–138.
- Khvorostyanov, V. I. and Sassen, K. (1998). Cirrus cloud simulation using explicit microphysics and radiation. Part I: Model description. *J. Atmos. Sci.*, **55**, 1808–1821.

- Khvorostyanov, V. I. and Sassen, K. (2002). Microphysical processes in cirrus and their impact on radiation. In D. K. Lynch, K. Sassen, D. O. Starr, and G. Stephens, editors, *Cirrus*. Oxford Univ. Press, New York.
- Koop, T., Luo, B. P., Tsias, A., and Peter, T. (2000). Water activity as the determinant for homogenous ice nucleation in aqueous solutions. *Nature*, **406**, 611–614.
- Lawson, R. P., Stewart, R. E., and Angus, L. J. (1998). Observations and numerical simulations of the origin and development of very large snowflakes. *J. Atmos. Sci.*, **55**, 3209–3229.
- Lawson, R. P., O'Connor, D., Zmarzly, P., Weaver, K., Baker, B., Mo, Q., and Jonsson, H. (2006a). The 2D-S (stereo) probe: Design and preliminary tests of a new airborne, high-speed, high-resolution particle imaging probe. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, **23**, 1462–1477.
- Lawson, R. P., Baker, B., Pilson, B., and Mo, Q. (2006b). In situ observations of the microphysical properties of wave, cirrus, and anvil clouds. Part II: Cirrus clouds. *J. Atmos. Sci.*, **63**, 3186–3203.
- Liao, X., Rossow, W. B., and Rind, D. (1995). Comparison between SAGE II and ISCCP high-level clouds 1. Global and zonal mean cloud amounts. *J. Geophys. Res.*, **100**, 1121–1135.
- Lin, R. F. (1997). *A numerical study of the evolution of nocturnal cirrus by a two-dimensional model with explicit microphysics*. Ph.D. thesis, Pennsylvania State University, State College.
- Lin, R. F., Starr, D. O., DeMott, P. J., Cotton, R., Sassen, K., Jensen, E., Kärcher, B., and Liu, X. (2002). Cirrus parcel model comparison project. Phase 1: The critical components to simulate cirrus initiation explicitly. *J. Atmos. Sci.*, **59**, 2305–2329.
- Liou, K.-N. (1986). Influence of cirrus clouds on weather and climate processes: A global perspective. *Mon. Wea. Rev.*, **114**, 1167–1199.
- Liou, K.-N., Fu, Q., and Ackermann, T. P. (1988). A simple formulation of the delta-four-stream approximation for radiative transfer parametrizations. *J. Atmos. Sci.*, **45**, 1940–1947.
- Liu, H., Wang, P. K., and Schlesinger, R. E. (2003a). A numerical study of cirrus clouds. Part I: Model description. *J. Atmos. Sci.*, **60**, 1075–1084.
- Liu, H., Wang, P. K., and Schlesinger, R. E. (2003b). A numerical study of cirrus clouds. Part II: Effects of ambient temperature, stability, radiation, ice microphysics, and microdynamics on cirrus evolution. *J. Atmos. Sci.*, **60**, 1097–1119.
- Lo, K. K. and Passarelli Jr., R. E. (1982). Growth of snow in winter storms: An airborne observational study. *J. Atmos. Sci.*, **39**, 697–706.
- Luo, B. P., Carlslaw, K. S., Peter, T., and Clegg, S. L. (1995). Vapour pressures of H₂SO₄/HNO₃/HCl/HBr/H₂O solutions to low stratospheric temperatures. *Geophys. Res. Lett.*, **22**, 247–250.
- Luo, B. P., Peter, T., Fueglistaler, S., Wernli, H., Wirth, M., Kiemle, C., Fletnje, H., Yushkov, V. A., Khattatov, V., Rudakov, V., Thomas, A., Borrmann, S., Toci, G., Mazzinghi, P., Beuermann, J., Schiller, C., Cairo, F., Di Donfrancesco, G., Adriani, A., Volk, C. M., Strom,

- J., Noone, K., Mitev, V., MacKenzie, R. A., Carslaw, K. S., Trautmann, T., Santacesaria, V., and Stefanutti, L. (2003). Dehydration potential of ultrathin clouds at the tropical tropopause. *Geophys. Res. Lett.*, **30**, 1557, doi:10.1029/2002GL016737.
- Lynch, D. K. and Sassen, K. (2002). Subvisual cirrus. In D. K. Lynch, K. Sassen, D. O. Starr, and G. Stephens, editors, *Cirrus*. Oxford Univ. Press, New York.
- Lynch, D. K., Sassen, K., Starr, D. O., and Stephens, G. (2002). *Cirrus*. Oxford Univ. Press, New York.
- Mace, G. G., Benson, S., and Vernon, E. (2006). Cirrus clouds and the large-scale atmospheric state: Relationships revealed by six years of ground based data. *J. Clim.*, **19**, 3257–3278.
- Marsham, J. H. and Dobbie, S. (2005). The effects of wind shear on cirrus: A large-eddy model and radar case-study. *Q.J.R. Meteorol. Soc.*, **131**, 2937–2955.
- Mason, B. J. (1971). *The physics of clouds*. Clarendon Press, Oxford.
- Meakin, P. (1992). Aggregation kinetics. *Phys. Scr.*, **45**, 295–331.
- Meyers, M. P., DeMott, P. J., and Cotton, W. R. (1992). New primary ice-nucleation parameterizations in an explicit cloud model. *J. Appl. Meteor.*, **31**, 708–721.
- Miloshevich, L. M., Vömel, H., Paukkunen, A., Heymsfield, A. J., and Oltmans, S. J. (2001). Characterization and correction of relative humidity measurements from vaisala RS80-A radiosondes at cold temperatures. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, **18**, 135–156.
- Miloshevich, L. M., Vömel, H., Whiteman, D. N., Lesht, B. M., Schmidlin, F. J., and Russo, F. (2006). Absolute accuracy of water vapor measurements from six operational radiosonde types launched during AWEX-G and implications for AIRS validation. *J. Geophys. Res.*, **111**, D09S10, doi:10.1029/2005JD006083.
- Mitchell, D. L. (1988). Evolution of snow-size spectra in cyclonic storms. Part I: Snow growth by vapor deposition and aggregation. *J. Atmos. Sci.*, **45**, 3431–3451.
- Mitchell, D. L. (1996). Use of mass- and area-dimensional power laws for determining precipitation particle terminal velocities. *J. Atmos. Sci.*, **53**, 1710–1723.
- Mitchell, D. L. and Heymsfield, A. J. (2005). Refinements in the treatment of ice particle terminal velocities, highlighting aggregates. *J. Atmos. Sci.*, **62**, 1637–1644.
- Möhler, O., Field, P. R., Connolly, P., Benz, S., Saathoff, H., Schnaiter, M., Wagner, R., Cotton, R., Krämer, M., Mangold, A., and Heymsfield, A. J. (2006). Efficiency of the deposition mode ice nucleation on mineral dust particles. *Atmos. Chem. Phys.*, **6**, 3007–3021.
- Murphy, D. M. (2003). Dehydration in cold clouds is enhanced by a transition from cubic to hexagonal ice. *Geophys. Res. Lett.*, **30**, 2230, doi:10.1029/2003GL018566.
- Murphy, D. M., Thomson, D. S., and Mahoney, M. J. (1998). In situ measurements of organics, meteoritic material, mercury, and other elements in aerosols at 5 to 19 kilometers. *Science*, **282**, 1664–1669.

- Penner, J. E., Lister, D. H., Griggs, D. J., Dokken, D. J., and McFarland, M. (1999). *Aviation and the global atmosphere. A special report of Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK.
- Pierce, J. R. and Adams, P. J. (2007). Efficiency of cloud condensation nuclei formation from ultrafine particles. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 1367–1379.
- Pruppacher, H. R. and Klett, J. D. (1997). *Microphysics of clouds and precipitation*. Kluwer Acad. Pub., Dordrecht.
- Quante, M. and Starr, D. O. (2002). Dynamical process in cirrus clouds: A review of observational results. In D. K. Lynch, K. Sassen, D. O. Starr, and G. Stephens, editors, *Cirrus*. Oxford Univ. Press, New York.
- Raschke, E. (1990). The international cirrus experiment (ICE) - a joint european effort. *ESA Journal*, **14**, 193–199.
- Rossow, W. B. and Schiffer, R. A. (1991). ISCCP cloud data products. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **72**, 2–20.
- Sassen, K. and Campbell, J. R. (2001). A midlatitude cirrus cloud climatology from the facility for atmospheric remote sensing. Part I: Macrophysical and synoptic properties. *J. Atmos. Sci.*, **58**, 481–496.
- Sassen, K. and Dodd, G. C. (1989). Haze particle nucleation simulations in cirrus clouds, and applications for numerical and lidar studies. *J. Atmos. Sci.*, **46**, 3005–3014.
- Schilling, V., Siano, S., and Etling, D. (1996). Dispersion of aircraft emissions due to wake vortices in stratified shear flows: A two-dimensional numerical study. *J. Geophys. Res.*, **101**, 20965–20974.
- Schröder, F. P., Kärcher, B., Fiebig, M., and Petzold, A. (2002). Aerosol states in the free troposphere at northern midlatitudes. *J. Geophys. Res.*, **107**, **8126**, doi:10.1029/2000JD000194.
- Schumann, U. (2002). Contrail cirrus. In D. Lynch, K. Sassen, D. Starr, and G. Stephens, editors, *Cirrus*. Oxford Univ. Press, New York.
- Shibata, T., Vömel, H., Hamdi, S., Kaloka, S., Hasebe, F., Fujiwara, M., and Shiotani, M. (2007). Tropical cirrus clouds near cold point tropopause under ice supersaturated conditions observed by lidar and ballon-borne cryogenic frost point hygrometer. *J. Geophys. Res.*, **112**, **D03210**, doi:10.1029/2006JD007361.
- Shirgaonkar, A. A. and Lele, S. K. (2006). High-resolution simulations of contrails: Effect of atmospheric properties. *AIAA Paper 2006*, page 1414.
- Smolarkiewicz, P. K. and Margolin, L. G. (1998). MPDATA: A finite-difference solver for geophysical flows. *J. Comput. Phys.*, **140**, 459–480.
- Smoluchowski, M. V. (1917). Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Z. Phys. Chem.*, **92**, 129–168.

- Spichtinger, P. and Gierens, K. M. (2008). Modelling of cirrus clouds - Part 1: Model description and validation. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, **8**, 601–686.
- Starr, D. O. and Cox, S. K. (1985). Cirrus clouds. Part I: A cirrus cloud model. *J. Atmos. Sci.*, **42**, 2663–2681.
- Starr, D. O. and Quante, M. (2002). Dynamical processes in cirrus clouds. In D. K. Lynch, K. Sassen, D. O. Starr, and G. Stephens, editors, *Cirrus*. Oxford Univ. Press, New York.
- Stephens, G. L. (1983). The influence of radiative transfer on the mass and heat budgets of ice crystals falling in the atmosphere. *J. Atmos. Sci.*, **40**, 1729–1739.
- Stephens, G. L., Tsay, S.-C., Stackhouse Jr., P. W., and Flatau, P. J. (1990). The relevance of the microphysical and radiative properties of cirrus clouds to climate and climatic feedback. *J. Atmos. Sci.*, **47**, 1742–1753.
- Sundqvist, H., Berge, E., and Kristjansson, J. E. (1989). Condensation and cloud parameterization studies with a mesoscale numerical weather prediction model. *Mon. Weather Rev.*, **117**, 1641–1657.
- Tiedtke, M. (1993). Representation of clouds in large-scale models. *Mon. Weather Rev.*, **121**, 3040–3061.
- Unterstrasser, S. (2008). *Numerische Simulationen von Kondensstreifen und deren Übergang in Zirren*. Ph.D. thesis, LMU München.
- Vaillancourt, P. A. and Yau, M. K. (2000). Review of particle turbulence: Interactions and consequences for cloud physics. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **81**, 285–298.
- Westbrook, C. (2008). The fall speeds of sub-100 μm ice crystals. *Q.J.R. Meteorol. Soc.*, **134**, 1243–1251.
- Westbrook, C. D., Ball, R. C., Field, P. R., and Heymsfield, A. J. (2004a). Theory of growth by differential sedimentation, with application to snowflake formation. *Phys. Rev. E*, **70**, 021403–1–021403–7.
- Westbrook, C. D., Ball, R. C., Field, P. R., and Heymsfield, A. J. (2004b). Universality in snowflake aggregation. *Geophys. Res. Lett.*, **31**, L15104, doi:10.1029/2004GL020363.
- Westbrook, C. D., Hogan, R. J., and Illingworth, A. J. (2008). The capacitance of pristine ice crystals and aggregate snowflakes. *J. Atmos. Sci.*, **65**, 206–219.
- Wolde, M. and Vali, G. (2002). Cloud structure and crystal growth in nimbostratus. *Atmos. Res.*, **61**, 49–74.
- Zhang, M. H., Lin, J. L., Cederwall, R. T., Yio, J. J., and Xie, S. C. (2001). Objective analysis of ARM IOP data: Method and sensitivity. *Mon. Wea. Rev.*, **129**, 309–311.
- Zobrist, B., Koop, T., Luo, B. P., Marcolli, C., and Peter, T. (2007). Heterogeneous ice nucleation rate coefficient of water droplets coated by a nonadecanol monolayer. *J. Phys. Chem.*, **111**, 2149–2155.

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Bernd Kärcher, der diese Promotion betreut hat. Ohne seine ständige Bereitschaft für Diskussionen, seine tatkräftige Unterstützung und sein Engagement wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen. Er hat einen wichtigen Anteil zum Gelingen beigetragen.

Bei Prof. Dr. Ulrich Schumann möchte ich mich für die Möglichkeit bedanken, die Promotion am Institut für Physik der Atmosphäre des DLR Oberpfaffenhofen zu erstellen sowie für das gezeigte Interesse an der Arbeit und die Übernahme des Zweitgutachtens.

Für tatkräftige Unterstützung bei den EULAG Simulationen bedanke ich mich bei Andreas Dörnbrack und Christian Kühnlein. Bei Fragen, die den Strahlungstransfer betreffen, fand ich bei Ulrich Hamann immer ein offenes Ohr. Thomas Hamburger unterstützte mich mit ECMWF Analysen. Ein herzliches Dankeschön auch an Simon Unterstrasser, der während vieler Diskussionen zum Thema Eisbildung und Turbulenz, durch konstruktive Anregungen immer wieder neue Aspekte zur Arbeit beitrug.

Ein großes Dankeschön auch an meine Bürokollegin Verena für ihre tatkräftige Unterstützung in sämtlichen Lebenslagen, während der Zeit der Promotion.

Für die angenehme Arbeitsatmosphäre am Institut möchte ich mich bei Kirstin, Simone, Dominik, Tina, Sebastian, Monika, Thomas, Kaspar, Vera, Heinfried, Eric, Jan, Rudi, Kathi, Klaus, Bernadett, zahlreichen Andreas'en und allen anderen bedanken, die ich hier vergessen haben mag.

Schließlich möchte ich meinen Eltern, meinem Bruder und seiner Frau, meinen Neffen und Miriam danken, die mich immer unterstützten und mir zur Seite standen, oder für notwendige Ablenkung sorgten.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Ingo Sölch
geboren am	26.02.1976
in	Fürstenfeldbruck

Schulbildung

1982 – 1986	Grundschule Ebersberg
1986 – 1995	Gymnasium Grafing
1995	Abitur

Zivildienst

1995 – 1996	Zivildienst beim BRK
-------------	----------------------

Studium

1997 – 1999	Studium Sonderschulpädagogik LMU München
1999 – 2001	Grundstudium Meteorologie LMU München
2001	Vordiplom Meteorologie
2001 – 2005	Hauptstudium Diplom-Meteorologie LMU München mit Nebenfach Informatik
2005	Abschluss als Diplom-Meteorologe Thema der Diplomarbeit: <i>The accuracy of the linearized standard Balance Equations and the Asymmetric Balance Equation in a shallow water numerical model</i>
2005 –	Promotionsstudium Meteorologie LMU München Doktorand am Institut für Physik der Atmosphäre, Deut- sches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Oberpfaffenhofen