Einfluss von Pollenfragmenten auf die Eisbildung in Wolken

Eine Modellstudie unter Verwendung des Modellsystems ICON-ART

On the effect of subpollen particles on ice nucleation in clouds A modell study using the modelling system ICON-ART

> Masterarbeit im Fach Meteorologie von

> > **Sven Werchner**

Oktober 2018



INSTITUT FÜR METEOROLOGIE UND KLIMAFORSCHUNG KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE (KIT)

Referent: Korreferent:



Prof. Dr. Christoph Kottmeier Prof. Dr. Corinna Hoose

This document is licenced under the Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International Licence.

Abstract

The thunderstorm asthma phenomenon describes a strong increase in asthma attacks after events of heavy precipitation. Pollen allergens are amongst the most efficient triggers of asthma but show heavily reduced effectiveness due to the pollen which bear these allergens being to large to enter the lower airways, in which asthma is triggered. The events of precipitation however cause the pollen to burst and release the smaller allergens and other subpollen particles, which have a much higher effectiveness regarding asthma attacks. Considering ice nucleation, pollen as biological particles show a comparable behaviour. Biological ice-nucleating processes, though being very efficient in nucleating ice, are not considered in numerical weather and climate modells due to their low effectiveness. This low effectiveness is caused by the size and mass of biological ice nuclei (e.g. pollen), since they cannot be transported into altitudes, in which biological ice-nucleating processes can take place.

This thesis investigates, whether the conversion of an efficient trigger into an effective one by bursting of pollen can be applied to ice nucleation. The smaller subpollen particles (short: SPP) may be able to reach higher altitudes in larger numbers and therefore be able to trigger biological ice nucleation. To which extend this is to be expected and how these subpollen particles will influence the overall ice nucleation in clouds, is the topic of this thesis. This will be achieved by a pure model study using the modelling system ICON-ART.

Based on the work by Zhou (2014), that shows the relative humidity as the deciding factor for initiating the bursting of pollen, a parameterization is developed, which transforms a fraction of pollen into the smaller subpollen particles and therefore simulates the bursting process. These subpollen particles are used as biological ice nuclei by the heterogeneous nucleation parameterization by Phillips et al. (2013) in the model runs. The control runs will be done without biological ice nucleation, so differences between these simulations can be regarded as effects caused by the biological ice nucleation.

This work describes the generation of a new additional (biological) mode in the ice number concentration, which manifestes itself at altitudes between 800 m and 4000 m, where the temperatures nearly exclusively allow only biological ice nucleating processes. Furthermore a strong reduction in cloud droplets is observed in these heights, which can be explained by the Wegener-Bergeron-Findeisenprocess due to the newly formed ice particles. Therefore a strong influence in the composition of mixed-phase clouds can be observed in this altitudes. An additional effect is present at higher altitudes with lower temperatures, in which mostly non-biological ice nucleation takes place. Due to the heavy consumption of water caused by the biological ice nucleating processes a reduction in ice number concentration occurs.

The effective radius, which can be used to compare the size of ice particles of varying form, is depended on both the ice number concentration and the available humidity. It experiences a strong reduction in the biological mode's altitudes, while it stays nearly unaffected in those altitudes, that correspond to the non-biological mode. Its meaning for radiation effects make the influences on the effective radius a strong candidate for further investigations, especially in the biological mode.

The modelled precipation is determined by a multitude of different factors. However, it shows influences caused by the biological ice nucleation with subpollen particles. A longterm trend, which raises the mean accumulated precipation by 0.9% after ten days of simulation, is present as well as hourly differences, whose amplitudes reach higher values.

Within this thesis also sensitivity studies were conducted regarding the temporal progress and the emitted amount of subpollen particles. It can be stated that a reduced subpollen particle emission causes a reduction in the amplitudes of the effects. When regarding time periods with only limited burst processes the signals tend to spread more.

Zusammenfassung

Das Phänomen Gewitterasthma (Thunderstorm Asthma) beschreibt eine starke Häufung von Asthmaanfällen nach starken Niederschlagsereignissen. Pollenallergene gelten als effiziente Asthmaauslöser, deren Effektivität allerdings sehr stark reduziert ist, da die tragende Polle zu groß ist um in die unteren Atemwege zu gelangen. Aufgrund der Niederschlagsereignisse platzen die Pollen und die freigesetzten deutlich kleineren Pollenallergene sowie andere Pollenfragmente weisen nun eine höhere Effektivität bezüglich Asthmaanfällen auf. Bei Betrachtung der Eisnukleation verhält es sich mit Pollen als biologische Partikel sehr ähnlich. Biologische Eisnukleationsprozesse, wenn auch sehr effizient bei der Eisbildung, werden aufgrund ihrer geringen Effektivität in Wetter- und Klimamodellen nicht berücksichtigt. Die geringe Effektivität ist der Größe und Masse der biologischen Eiskeimen (wie zum Beispiel Pollen) geschuldet, da diese aufgrund dessen nicht in Höhenschichten transportiert werden können, in welchen der Nukleationprozess einsetzen kann.

Diese Arbeit untersucht, ob die Umwandlung eines effizienten Erregers in einen effektiven Erreger durch das Platzen von Pollen auch auf die Eisnukleation anwendbar ist. Die kleineren Pollenfragmente, welche auch als SPPs (subpollen particles) bezeichnet werden, können im Vergleich zu den größeren Pollen höhere Luftschichten in größerer Anzahl erreichen und möglicherweise biologische Eisnukleation hervorrufen. Ob und in welchem Ausmaß das passiert und in wie weit folglich die Pollenfragmente die Eisbildung in Wolken beeinflussen, sucht diese Arbeit zu beantworten. Dies erfolgt über die Durchführung einer reinen Modellstudie mithilfe des Modellsystems ICON-ART.

Basierend auf einer Arbeit von Zhou (2014), nach welcher die relative Feuchte das Pollenplatzen in der Atmosphäre initiiert, wird eine Parametrisierung entwickelt, die einen Anteil an Pollen in die kleineren Pollenfragmente umwandelt und somit den Platzprozess simuliert. Diese Pollenfragmente werden im Experimentlauf der Nukleationsparametrisierung von Phillips et al. (2013) als biologische Eiskeime übergeben. Als Kontrollsimulation wird ein weiterer Lauf ohne biologische Eisnukleation durchgeführt, sodass Unterschiede zwischen diesen Simulationen der biologischen Eisnukleation zuzuordnen sind.

Die Ergebnisse der Modellstudie beschreiben zunächst die Entwicklung einer neuen (biologischen) Mode der Eispartikelanzahlkonzentration, welche sich in Höhen von etwa 800 m bis 4000 m befindet, in welchen Temperaturen herrschen, die fast ausschließlich biologische Eisnukleation zulassen. Zudem ist in diesem Höhenbereich eine starke Reduktion der Wolkentropfenanzahl zu beobachten, welche vom Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozess aufgrund der erzeugten Eispartikel herrührt. Es ist demnach ein starker Einfluss auf die Zusammensetzung von Mischphasenwolken in diesen Höhen zu erkennen. Aufgrund des hohen Feuchteverbrauchs durch die biologische Eisnukleation zeigt sich auch ein Effekt in größeren Höhen mit geringeren Temperaturen, in welchen überwiegend nichtbiologische Eisnukleationsprozesse wirken. Dieser macht sich über eine Reduktion der Eispartikelanzahl deutlich.

Der effektive Radius, welcher die Vergleichbarkeit der Größe von Eispartikeln unterschiedlicher Form ermöglicht, hat neben der Eispartikelanzahl auch die zur Verfügung stehende Feuchte als abhängige Größe. Er erfährt in Höhen der biologischen Mode eine Reduktion seines mittleren Werts, während er in solchen Höhen der nicht-biologischen Eisnukleation weitestgehend unbeeinflusst bleibt. Aufgrund seiner Bedeutung für unter anderem die Strahlungswirkung sind die Einflüsse auf den effektiven Radius insbesondere für die biologische Mode von Interesse.

Die modellierte Niederschlagsmenge ist von einer Vielzahl an Größen abhängig, zeigt aber dennoch einen Einfluss auf die biologische Eisnukleation mit SPPs. So ist ein langzeitlicher Trend zu erkennen, welcher eine Erhöhung der mittleren akkumulierten Niederschlagsmenge um 0,9 % nach 10 Tagen beschreibt, sowie auch stündliche Differenzen, deren Amplitude höhere Ausmaße erreichen. Die ebenfalls durchgeführten Sensitivitätsuntersuchungen gegenüber des zeitlichen Verlaufs und der emittierten SPP-Menge zeigen, dass durch eine verringerte SPP-Konzentration die Einflüsse in ihrer Amplitude abnehmen, während eine Betrachtung anfänglicher Zeiträume, in welchen nur eine geringe Anzahl an Platzprozessen stattfindet, eine breitere Streuung der Einflüsse erzeugen.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis						
1	Einleitung					
2	Grundlagen					
	2.1	Pollen	und Pollenfragmente	3		
		2.1.1	gesundheitliche Bedeutung (Gewitterasthma)	4		
		2.1.2	Allergenfreisetzung durch Pollenplatzen	5		
	2.2	Eisnuk	leation und biologische Aerosolpartikel	7		
3	Modell					
	3.1	ICON		9		
	3.2	Weitere	entwicklung von ICON zu ICON-ART	12		
	3.3	wichtig	ge Parametrisierungen	14		
		3.3.1	Pollenemission	14		
		3.3.2	Empirische Parametrisierung heterogener Eisnukleation	16		
4	Pollenfragmente und Eisnukleation					
	4.1	Modell	erweiterung um Parametrisierung der SPP-Emission	19		
	4.2	Aufbau	ı der Modellstudie	24		
		4.2.1	Überblick über verwendete Modellkonfigurationen	24		
		4.2.2	Informationen zur Auswertung	25		
	4.3	Auswe	rtung des Einflusses von Pollenfragmenten auf die Eisbildung in Wolken	26		
		4.3.1	Eispartikelanzahldichte	28		
		4.3.2	Effektiver Radius	41		
		4.3.3	Niederschlag	52		
	4.4	Überbl	ick über die Kernaussagen	59		
5	Zusa	ammen	fassung	61		
Lit	Literaturverzeichnis					

Abbildungsverzeichnis

2.1	Verengung der unteren Atemwege bei Asthma	4
2.2	Temperatur und Eissättigung für Eisnukleation unterschiedlicher Aerosoltypen	7
3.1	Beispielhaftes Ergebnis einer Gittererstellung mit ICON	11
3.2	Prozessdiagramm von ICON(-ART)	13
3.3	Parametrisierung für Immersionsgefrieren der biologischen Partikel	16
4.1	Gauß'sche Glockenkurve für den platzenden Pollenanteil	23
4.2	Simulationsgebiet	24
4.3	Zeitlicher Verlauf der Pollen- und SPP-Verteilung in 4000 Metern Höhe	27
4.4	Pollen- und SPP-Verteilung in 4000 Metern Höhe	28
4.5	Histogramme Eispartikelanzahldichte über SPP-Konzentration (ER100)	29
4.6	Histogramme Eispartikelanzahldichte über SPP-Konzentration (ER100, Temperatur-	
	filter)	30
4.7	Differenzhistogramm Eispartikelanzahldichte über SPP-Konzentration (ER100)	31
4.8	Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über SPP-Konzentration (ER1 und	
	ER10)	33
4.9	Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über SPP-Konzentration (ER100, An-	
	fang und Ende)	35
4.10	Differenzhistogramm Eispartikelanzahldichte über Temperatur (ER100)	36
4.11	Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über Temperatur (ER1 und ER10)	37
4.12	Vertikalprofile der mittleren Eispartikelanzahldichte (ER100)	39
4.13	Vertikalprofile der mittleren Wolkentropfenanzahldichte (ER100)	40
4.14	Histogramme Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER100)	42
4.15	Histogramme Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER100, normiert)	43
4.16	Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER100)	44
4.17	Differenzhistogramm Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER100, Tem-	
	peraturfilter)	46
4.18	Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER10 und ER1)	47
4.19	Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER100, An-	
	fang und Ende)	49
4.20	Höhenprofil des effektiven Radius (ER100)	50
4.21	Verteilung der akkumulierten Niederschlagsdifferenz (ER100)	52
4.22	Histogramme der stündlichen Niederschlagsmenge (ER100)	53
4.23	Histogramme der absoluten stündlichen Niederschlagsdifferenz (ER100)	54
4.24	Histogramme der relativen stündlichen Niederschlagsdifferenz (ER100)	55

4.25	Zeitlicher Verlauf der mittleren relativen Niederschlagsdifferenz (ER100)	56
4.26	Zeitlicher Verlauf der mittleren relativen Niederschlagsdifferenz (ER10)	57
4.27	Zeitlicher Verlauf der mittleren relativen Niederschlagsdifferenz (ER1)	58
4.28	Schematische Darstellung der Kernaussagen	59

1 Einleitung

Diese Masterarbeit befasst sich mit Pollenfragmenten und der biologischen Eisnukleation. Pollen werden von Pflanzen ausgestoßen und haben neben wissenschaftlichen Aspekten auch eine gesundheitliche Relevanz, da sie Pollenfragmente enthalten, die allergische Reaktionen auslösen können (Allergene). Eine möglichst genaue Vorhersage der Pollenkonzentration ist daher ein für die Bevölkerung wichtiger Aspekt der Wettervorhersage. Zudem sind Pollen und Pollenfragmente biologische Partikel, welche als sehr effizient für die Eisbildung gelten, das heißt, dass sie Eisbildung bei relativ hohen Temperaturen ermöglichen. Eis hat eine große Bedeutung für die Meteorologie, da es neben der Quelle für Niederschlag unter anderem auch einen Strahlungseffekt hat.

Biologische Eisnukleationsprozesse werden in Wetter- und Klimamodellen nicht berücksichtigt, obwohl biologische Partikel sehr effiziente Eiskeime sind. Dies liegt darin begründet, dass es aufgrund ihrer Größe und Masse den biologischen Partikeln nicht möglich ist die relevanten Höhen in ausreichender Anzahlkonzentration zu erreichen, um einen signifikanten Effekt auf die Eisnukleation auszuüben. So zeigen unter anderem Hoose et al. (2010) unter Verwendung eines globalen Modell, dass der globale Anteil an Eispartikeln, die einen biologischen Eiskeim aufweisen, nur etwa $1 \cdot 10^{-5}$ % ist. Dies trifft auch auf Pollen zu, allerdings zeigt sich anhand eines Phänomens mit dem Namen Thunderstorm Asthma (zu deutsch: Gewitterasthma), dass es Prozesse gibt, bei der die Pollen platzen und eine Vielzahl an kleineren Pollenfragmenten freigeben. Diese weisen ähnliche Eisnukleationseigenschaften auf, wodurch die biologische Eisnukleation an Bedeutung gewinnen könnte (Zhou 2014; Suphioglu 1998; Grote et al. 2003; Taylor et al. 2002; O'Sullivan et al. 2015; D'Amato et al. 2007). In der Forschung stellen Pollen ein weites Untersuchungsfeld dar. Unter anderem aufgrund der gesundheitlichen Auswirkungen ist die Untersuchung des Ausbreitungsverhaltens und die Entwicklung entsprechender Ausbreitungsmodelle für Pollen von großer Bedeutung, wie in Wang et al. (2017), Vogel et al. (2008) und Helbig et al. (2004) deutlich wird, aber auch Untersuchungen zu ihrem Einfluss auf den Niederschlag über ihre Funktion als Wolkenkondensationskeime sind von Interesse. Hierbei wird auch immer mehr das Aufplatzen von Pollen und somit die Pollenfragmente berücksichtigt (Steiner et al. 2015; Wozniak et al. 2018).

Die Erweiterung ART (Aerosol and Reactive Trace gases, Bangert et al. (2012), Rieger et al. (2015), Gasch et al. (2017)) des beim Deutschen Wetterdienst (DWD) operationell verwendeten Wettermodells ICON (ICOsahedral Non-hydrostatic, Zängl et al. (2015)) ist in der Lage, die räumliche und zeitliche Entwicklung von unter anderem Pollenverteilungen vorherzusagen und biologische Eisnukleation zu berücksichtigen. ART ist im Wesentlichen eine Entwicklung des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) am Karlsruher Institut für Technologie (KIT).

Gegenstand dieser Arbeit ist es, mithilfe von ICON-ART eine Maximalabschätzung für den Einfluss von Pollenfragmenten auf die biologische Eisnukleation zu liefern. Hierbei handelt es sich um eine reine Modellstudie, was bedeutet, dass keine Messdaten zur Analyse hinzugezogen werden. Der Grund hierfür ist unter anderem, dass es zur Zeit der Anfertigung dieser Arbeit keine Messdaten für Pollenfragmente gibt. Für die Modellstudie ist es notwendig, eine Parametrisierung für die Emission der Pollenfragmente aus den zur Verfügung stehenden Pollen zu entwickeln.

In Kapitel 2 werden die theoretischen Grundlagen zu Pollen und Pollenfragmenten erläutert und die Eisnukleation vorgestellt. Anschließend widmet sich Kapitel 3 dem im Rahmen dieser Arbeit verwendeten und erweiterten Modellsystem ICON-ART. Hierbei werden zunächst Besonderheiten des Wettermodells ICON aufgezeigt und darauffolgend die Erweiterung ART vorgestellt. Das Kapitel schließt mit der Vorstellung der für diese Arbeit wichtigen Parametrisierungen ab, die zum einen die Pollenemission und zum anderen die biologische Eisnukleation beschreiben. Kapitel 4 befasst sich mit der Auswertung der aus den Modellläufen gewonnenen Ergebnissen. Hierfür wird zunächst auf die Erweiterung von ICON-ART eingegangen, mit der Pollenfragmente emittiert werden. Im Anschluss daran werden die Modellkonfigurationen dargelegt und die aus den Modellläufen gewonnenen Ergebnisse unter unterschiedlichen Gesichtspunkten ausgewertet. Abschließend erfolgt eine Zusammenfassung der Arbeit in Kapitel 5.

2 Grundlagen

Dieses Kapitel geht auf theoretische Grundlagen ein, die für das Verständnis dieser Arbeit wichtig sind. Zunächst erfolgt eine Einführung in das Thema der Pollenfragmente, kleine biologische Partikel, deren Freisetzung in großer Anzahl durch das Aufplatzen von Pollen erfolgt und die ähnlich wie Pollen als Eiskeime fungieren können.

Hieran schließt sich das Thema der Eisnukleation an, wobei ein größerer Fokus auf der biologischen Eisnukleation liegt. Es wird unter anderem verdeutlicht, warum biologische Eiskeime in der Modellierung (insbesondere im operationellen Betrieb) bislang nicht berücksichtigt werden.

2.1 Pollen und Pollenfragmente

Begriffe wie die Pollenflug-Vorhersage oder der Pollenflug-Gefahrenindex verdeutlichen, dass Pollen ein (insbesondere für die Gesundheit) wichtiger Aspekt der operationellen Wettervorhersage sind. Bei Pollen handelt es sich um ein grobes Puder, welches von Pflanzen ausgestoßen wird, die Samen jener Pflanze enthält und somit zu deren Fortpflanzung beiträgt (Zhou 2014). Die sich im Inneren der Polle befindlichen Allergene stellen für Allergiker und Asthmatiker ein gesundheitliches Risiko dar, weswegen eine Vorhersage der Pollenkonzentration für die Bevölkerung von Bedeutung ist. Diese Allergene und andere Stoffe, die sich in der Polle befinden und im Folgenden zusammenfassend als Pollenfragmente oder SPP (kurz für subpollen particles) bezeichnet werden, ähneln sich in vielen Aspekten den Pollen, weisen aber auch entscheidende Unterschiede zu ihnen auf. So haben SPPs und die zugehörigen Pollen eine ähnliche Dichte und die Eiseffizienz von SPPs ist vergleichbar mit der der zugehörigen Polle. Als biologische Partikel ermöglichen Pollen und SPPs Eisbildung bei hohen Temperaturen (mehr als etwa -20 °C, siehe Kapitel 2.2). Die Hauptunterschiede beziehen sich auf deren Größe: So ist der Durchmesser von SPPs zumeist mehr als eine Größenordnung geringer als der der Polle. Unter Hinzunahme der Annahme, dass der Großteil der Pollenmasse in den SPPs liegt, entstehen beim Ausstoßprozess somit aus einer Polle bis zu etwa 1000 SPPs (Steiner et al. 2015). Diese Partikel sind bezüglich ihrer Größe inhomogen, was einen weiteren großen Unterschied zu den zugehörigen Pollen darstellt, die nur eine sehr schmale Größenverteilung vorweisen (Sénéchal et al. 2015).

Die folgenden Teile dieser Arbeit widmen sich zum einen dem Phänomen des Gewitterasthmas, durch welches die gemeldete Anzahl an Asthmapatienten in Krankenhäusern nach Starkregenereignissen ansteigt und als Anfang der Betrachtung von SPPs in der Atmosphäre angesehen wird, und zum anderen dem Erzeugungsprozesses von SPP, welche durch das Platzen der Polle entstehen.



Abbildung 2.1: Verengung der unteren Atemwege bei Asthma. In den unteren Atemwege sorgen Asthmaauslöser für eine Verengung der Atemwege, welche die Asthmasymptome auslösen. Quelle: (Weber 2016)

2.1.1 gesundheitliche Bedeutung (Gewitterasthma)

Asthma bronchiale (oder kurz: Asthma) ist eine "entzündlich obstruktive Atemwegserkrankung mit anfallsweise auftretender Dyspnoe infolge variabler [und] reversibler Bronchialverengung" (Pschyrembel 2006). Die zugehörigen Symptome (unter anderem "Episoden von Dyspnoe (Atemnot), Husten [und] zäher Auswurf" (Pschyrembel 2006)) treten überwiegend in der Nacht oder in den Morgenstunden auf und sind auf einen gehemmten Luftstrom in den unteren Atemwegen zurückzuführen. Abbildung 2.1 zeigt den Effekt eines Asthmaanfalls auf die unteren Atemwege. Bei Asthma handelt es sich um ein verbreitetes Phänomen, welches Menschen jeden Alters auf der ganzen Welt betreffen kann. So leiden weltweit etwa 300 Millionen Menschen an dieser bislang nicht heilbaren Erkrankung und die WHO schätzt, dass jedes Jahr etwa 250 Tausend vorzeitig an Asthma sterben (D'Amato et al. 2007), wobei es sich zumeist um vermeidbare Tode handelt. Obwohl Asthmapatienten sehr effizient behandelt werden können, was zumeist über die Milderung von Atembeschwerden und Verbesserung der Lungenfunktion erfolgt (Masoli et al. 2004), so gibt es immer noch Lücken im Verständnis, in wie weit Umweltfaktoren mit dieser Krankheit in Verbindung stehen (Zhou 2014).

Eine der effektivsten Methoden das Asthmarisiko zu senken ist die Vermeidung des Kontakts mit Erregern, welche als Risikofaktoren bezeichnet werden. Nach Masoli et al. (2004) sind die verbreitesten Risikofaktoren für Asthma Tierfell, Staubmilben, Schimmel und auch Pflanzenpollen. Lange Zeit galten letztere nicht als ein solcher Risikofaktor, was ihrer Größe geschuldet ist. Da Asthma in den unteren Atemwegen auslöst und in den oberen Teilen des Atemweges diverse Filter grobe Partikel aus dem Luftstrom nehmen, können nur sehr kleine Partikel zu Asthmaanfällen führen. Die Wahrscheinlichkeit und Häufigkeit, mit der Pollen als größere Partikel den Weg in die unteren Atemwege finden, ist sehr gering, was die Nichteinstufung als Risikofaktor erklärt (Schäppi et al. 1997).

Ein Großteil der Asthmaanfälle treten in Zusammenhang mit allergischen Reaktionen auf. Für diese bedarf es bestimmte Substanzen, welche als Allergene bezeichnet werden. Neben Hausstaub und Tierfell weisen auch Pflanzenpollen solche Allergene auf. Pollenallergene zählen zu den effizientesten Auslösern allergischer Reaktionen und können somit auch als effizienter Asthmaauslöser bezeichnet werden. Aufgrund des oben beschriebenen Umstands, dass die tragende Polle nicht in der Lage ist, die Allergene in die unteren Atemwege zu bringen, sind Pollenallergene zwar ein effizienter, jedoch zumeist nicht effektiver Asthmaauslöser.

Bevor Pollen als mögliche Quelle für Asthma-Allergene in Betracht gezogen wurden, wurden als zu-

fällig deklarierte Anstiege von Asthma-Fällen bei Niederschlag beobachtet (Zhou 2014; Suphioglu 1998). So berichten Wardman et al. (2002), dass während Gewitterstürmen Asthmapatienten für fünf bis siebzehn Prozent der Notfallaufnahmen verantwortlich sind. Dieser Anteil reduziert sich an gewitterlosen Tagen auf etwa ein bis zwei Prozent (Zhou 2014).

Neben der Beobachtung von Anstiegen der Asthmapatientenanzahl treten ebenso erhöhte Umgebungskonzentrationen biologischer Partikel in Verbindung mit Niederschlagsereignissen auf (Huffman et al. 2013), was den Anstieg der Asthmaanfälle erklären kann. So weist Grote et al. (2003) darauf hin, dass die Freisetzung kleiner allergentragender Partikel zu berücksichtigen ist, da diese das Auftreten von Asthma nach Niederschlagsperioden erklären würde. Zudem verdeutlicht Grote et al. (2003) weiter, dass die freigesetzten Partikel, deren Durchmesser sich im Submikrometerbereich befindet, wichtige Allergene enthalten. Um die Freisetzung der Allergene zu erklären, legen viele Autoren das Augenmerk auf das Platzen der Pollen, was durch die Niederschlagsereignisse ausgelöst wird (Zhou 2014; Grote et al. 2003; Taylor et al. 2002). Somit ist es Taylor et al. (2004) zu Folge wahrscheinlich, dass die meisten hoch allergischen Pflanzen pollenallergenbelastetes Aerosol direkt von der Blüte mit dem Wind ausstoßen können, nachdem sie Regen, Nebel oder Tau ausgesetzt waren.

2.1.2 Allergenfreisetzung durch Pollenplatzen

Wie im vorigen Kapitel 2.1.1 angedeutet erfolgt die Emission von SPPs über das unter anderem von Niederschlag ausgelöste Platzen von Pollen. Eine Bestätigung hierfür findet sich in der Arbeit von Pummer et al. (2012), in welcher er erklärt, dass eine Materialfreisetzung durch das Platzen von feuchten Pollen durch Elektronenmikroskopie im Labor beobachtet wurde. Auch Augustin et al. (2013) beschreibt den Kontakt mit Wasser als Methode zur Extraktion der SPPs aus der Polle. Neben der insbesondere für das Gewitter-Asthma bedeutenden Freisetzung der SPPs in und auf den Pflanzen durch Regen, spekulierten Forscher, dass das Pollenplatzen auch in den Atemwegen selbst und in der Luft auftreten kann (Taylor et al. 2002). Nach Zhou (2014) ist für das Pollenplatzen in der Luft die relative Feuchte von großer Bedeutung, ein Kontakt mit flüssigem Wasser ist daher nicht unbedingt von Nöten. So beobachtet Zhou (2014), dass, wenn die Pollen einer höheren relativen Feuchte ausgesetzt sind, diese schneller und zu einem größeren Anteil platzen. Als Erklärungsgrundlage für den Platzprozess gibt Zhou (2014) das Wasserpotential in Verbindung mit dem Turgordruck in der Polle an. Dieser Turgordruck (oder auch Turgor) ist der positive hydrostatische, elastische Druck in den Zellen einer Pflanze auf die Zellwand (Lüttge et al. 2010). Überwindet dieser die Wandstärke der Polle, platzt die Polle auf und stößt die SPPs aus. Der Turgordruck kann diese Stärke erreichen, da die Menge an Proteinen, Stärke und anderer Polysaccharide das Wasserpotential des Pollenzytoplasmas verringert und Wasser immer von höheren Wasserpotential zu niedrigerem fließt. Bei hoher relativer Feuchte weist die Luft ein höheres Wasserpotential als das der Polle auf, was zur Aufnahme von Wasser durch die Polle führt, wodurch selbige anschwellt. Diese Volumenänderung wird von Zhou (2014) durch

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = A_{\mathrm{sur}}k\left(\pi_{\mathrm{out}} - \pi_{\mathrm{in}} - \Delta p\right) \tag{2.1}$$

beschrieben. Hier ist $\frac{dV}{dt}$ die Volumenänderungsrate der Polle in m³ s⁻¹, A_{sur} ihre Oberfläche in m² und *k* ihre Wasserpermeabilität in m s⁻¹ Pa⁻¹. Unter Wasserpermeabilität wird die Durchlässigkeit der Pollenwand bezüglich Wasser verstanden. Hier beschreibt sie welche Durchflussgeschwindigkeit erreicht wird, wenn eine Druckdifferenz von 1 Pa herrscht. π_{in} und π_{out} sind das osmotische Potential innerhalb und das Wasserpotential außerhalb der Polle, welche wie auch der Druckunterschied Δp zwischen Turgordruck und atmosphärischem Druck in Pa angegeben sind. Das osmotische Potential ist aus der Wasseraktivität des Stoffs a_W (dimensionslose Größe zwischen 0 und 1, vergleichbar mit der relativen Feuchte) über

$$\pi = RT \frac{\ln a_{\rm W}}{M_{\rm W}} \tag{2.2}$$

berechenbar. In Gleichung 2.2 ist $R \approx 8,314 \,\mathrm{Jmol}^{-1} \,\mathrm{K}^{-1}$ die universelle Gaskonstante, *T* die Temperatur in K und $M_{\rm W} \approx 1,807 \cdot 10^{-5} \,\mathrm{m}^3 \,\mathrm{mol}^{-1}$ das Molvolumen von flüssigem Wasser. Zusammen mit dem Druckpotential, welcher dem Druckunterschied Δp aus Gleichung 2.1 entspricht, und dem in dieser Arbeit vernachlässigten Matrix- und Gravitationspotential, bildet es das Wasserpotential des Stoffs. Für das Wasserpotential von Luft ist Gleichung 2.2 ebenfalls anwendbar, allerdings ist die Wasseraktivität $a_{\rm W}$ mit der relativen Feuchte RH zu ersetzen.

In Gleichung 2.1 ist zu erkennen, dass das Volumen der Polle zunimmt, wenn $\pi_{out} - \pi_{in} - \Delta p > 0$ ist. Dieses Anschwellen weist allerdings durch die Pollenwand einen Grenzwert auf. Nach Zhou (2014) hat sich der Radius der Polle zu diesem Zeitpunkt um etwa 1 - 2 µm erhöht. Sofern obige Bedingung weiterhin erfüllt ist, fließt trotz des Erreichens der maximalen Anschwellgröße weiterhin Wasser über osmotische Prozesse in die Polle hinein. Dieser Fluss komprimiert das Pollenzytoplasma und somit steigt der Turgordruck. Aufgrund der Tatsache, dass die Polle ihr Volumen nicht mehr vergrößern kann, ändert sich in diesem Fall Zhou (2014) zu Folge Gleichung 2.1 in

$$J = A_{\rm sur} k \left(\pi_{\rm out} - \pi_{\rm in} - \Delta p \right). \tag{2.3}$$

J ist hier der Wasserfluss in m³ s⁻¹. Dieser Wasserfluss bestimmt wie stark das Zytoplasma verdichtet wird. Aus dieser neuen Dichte (ρ_1) lässt sich durch Kenntnis der alten Dichte (ρ_0) und des Kompressionsmoduls (*E* - Verhältnis zwischen Druck- und relativer Dichteänderung) die Änderung des Turgordrucks iterativ über

$$\Delta p_{\text{turgor}} = E\left(1 - \frac{\rho_0}{\rho_1}\right) \tag{2.4}$$

bestimmen. *E* hat die Einheit N m⁻², ebenso wie Δp_{turgor} . Die Dichten sind in kg m⁻³ zu verwenden. Mit steigendem Wasseranteil nimmt die Wasserpotentialdifferenz zwischen Polle und Umgebung ab, wodurch mit der Zeit immer weniger Wasser in die Polle fließt und der Turgordruckanstieg abnimmt. Gilt schlussendlich $\pi_{out} - \pi_{in} - \Delta p = 0$ bleibt der Turgordruck konstant, da kein Wasserfluss in die Polle mehr stattfindet. Ist der zu diesem Zeitpunkt erreichte Wert des Turgordrucks kleiner als der Gegendruck durch die Wandstärke der Polle, kommt es zu keinem Aufplatzen, übersteigt er jenen kritischen Wert, so platzt die Polle im Verlauf des Turgordruckanstiegs auf und setzt die SPPs frei.



Abbildung 2.2: **Temperatur und Eissättigung für Eisnukleation unterschiedlicher Aerosoltypen.** Biologische Partikel (grüne Marker) ermöglichen Eisnukleation mit unter bei den hohen Temperaturen. Quelle: (Hoose und Möhler 2012)

2.2 Eisnukleation und biologische Aerosolpartikel

Eis hat für die Atmosphäre eine vielseitige Bedeutung. Nicht nur entsteht der überwiegende Teil des Niederschlags aus der Eisphase, sondern auch Größen wie die Strahlung oder die Temperatur sind von dieser stark beeinflusst. Die Bildung von Eis (auch als Eisnukleation bezeichnet) erfolgt hierbei in der Atmosphäre selbst aus der flüssigen oder auch gasförmigen Phase des Wassers, wenn die Bedingungen hierzu erfüllt sind. Jene beziehen sich zumeist auf die Feuchte mit dem Begriff der Eissättigung und die Temperatur.

Eisnukleation kann auf eine Vielzahl an Arten und Weisen erfolgen. Die Hauptunterscheidung der Prozesse zueinander ist, ob es sich um homogene oder um heterogene Eisnukleation handelt. Bei ersterer gefriert ein Wasser- oder Lösungströpfchen ohne einen weiteren teilnehmenden Partner durch das Erreichen der hierfür notwendigen Temperatur. Diese ist nach Pruppacher und Klett (1997) für Tropfenradien kleiner als 5 µm mit $T_{\text{hom}} = -38$ °C sehr weit unterhalb des Tripelpunkts ($T_{\text{tripel}} =$ 0,01 °C), ab welchem die Eisphase auftreten kann. Diese starke Reduzierung der notwendigen Temperatur ist auf thermodynamische Effekte zurückzuführen. Die für das Gefrieren von Wasser notwendigen Eiskristallembryonen (Anhäufung von Wassermolekülen in einer eisähnlichen Struktur) müssen eine kritische Größe erreichen, um sich stabil entwickeln zu können. Die Zufälligkeit ihrer Erzeugung durch die Molekularbewegung und die Abhängigkeit dieser Molekularbewegung von der Temperatur bewirken, dass die homogene Eisbildung bei Temperaturen über T_{hom} aufgrund der kritischen Embryogröße sehr unwahrscheinlich ist (Lohmann et al. 2016).

Die heterogene Eisnukleation erfolgt hingegen bereits bei (teilweise deutlich) höheren Temperaturen.

Hierbei ist neben Wasser ein weiterer Stoff an der Nukleation beteiligt, der als Eiskeim fungiert. Ein solcher Eiskeim weist eine eiskristallähnliche Struktur auf, was zur Folge hat, dass Wasser, welches sich an diesen anlagert, zur Annahme dieser Struktur neigt. Da es sich nicht mehr um eine rein zufällige Ausrichtung handelt und weniger Wassermoleküle notwendig sind, um den kritischen Radius des Eiskristallembryos zu erreichen, gefriert das Wasser durch die Unterstützung des Eiskeims bei höheren Temperaturen (Lohmann et al. 2016).

Eine Vielzahl an unlöslichen Aerosolen (beispielsweise Mineralstaub, metallische Partikel, Ruß und primäre biologische Partikel) kann die Rolle eines solchen Eiskeims übernehmen (Hoose et al. 2010). Ihre Effizienz (also die Erhöhung der für das Gefrieren notwendigen Temperatur) unterscheidet sich allerdings stark voneinander. Die effizienteste Klasse an Aerosolen bezüglich der Eisnukleation sind biologische Partikel, zu denen unter anderen Bakterien und Pollen zählen. Bakterien gehören zu den effizientesten Partikeln dieser Klasse, da sie bereits wenige Grade unter Null die Eisnukleation auslösen können (siehe Abbildung 2.2). Pollen (und im Rahmen dieser Arbeit somit auch die SPPs) erreichen nach Hader et al. (2014) diese Effizienz nicht, da sie nicht in der Lage sind das Gefrieren oberhalb von -10 °C zu initieren. Nach Pummer et al. (2012) zeigen Pollen unterschiedlicher Arten unterschiedliches Eisnukleationsverhalten, was darauf zurückzuführen ist, dass die Eisaktivität von den Makromolekülen der Pollen abgeleitet wird. Die in dieser Arbeit verwendeten Birkenpollen nukleieren Eis nach Pummer et al. (2012) bei etwa -18 °C. Aufgrund ihrer Größe und Masse werden Pollen allerdings nicht in ausreichend großer Anzahl in Höhen transportiert, die Temperaturen aufweisen, in welchen die biologischen Eisnukleation eintreten kann, und daher zählen biologische Partikel im Allgemeinen als nicht relevant für die Eisbildung in der Atmosphäre. So gibt Hoose et al. (2010) einen Anteil von $1 \cdot 10^{-5}$ % der Eispartikel an, die bei der verwendeten globalen Modellsimulation einen biologischen Eiskeim aufweisen (88 % hiervon sind Pollen (Hoose et al. 2010)). Auch Pummer et al. (2012) erklärt, dass Pollen bisher keine wichtigen atmosphärischen Eiskeime darstellen, da ihre Anzahl in größeren Höhen zu gering ist.

Nach O'Sullivan et al. (2015) besitzen SPP die gleichen eisnukleierenden Eigenschaften wie Pollen, sind aber deutlich kleiner und in deutlich größerer Zahl vorhanden und könnten somit an Bedeutung für die Eisnukleation gewinnen.

3 Modell

Der erste Versuch einer numerischen Wettervorhersage erfolgte gänzlich ohne Unterstützung digitaler Computer durch den britischen Wissenschaftler Lewis Fry Richardson während des ersten Weltkriegs. Wenn die Berechnung auch zu großen Fehlern führte, konnte der prinzipielle Ablauf einer solchen numerischen Wettervorhersage gut dargelegt werden. Nach dem zweiten Weltkrieg erfuhr die numerische Wettervorhersage neuen Aufschwung durch die Ausbreitung des meteorologischen Messnetzes und die Entwicklung digitaler Computer, wodurch die notwendigen Berechnungen in einer angemessenen Zeit vollzogen werden konnten (Holton 2004). Die zu jener Zeit entwickelten sehr einfachen Wettermodelle entwickelten sich aufgrund der stetig steigenden Leistungsfähigkeit der verwendeten Rechnersysteme weiter. Feinere Gitter und kleinere Zeitschritte verbessern hierbei die Qualität der operationellen Wettervorhersage stetig. Auch Klimamodelle erfahren diese Verbesserung und ermöglichen ein besseres Verständnis der langzeitigen Entwicklung des Klimasystems. Neben der Leistungssteigerung der Rechnersysteme ermöglichen auch die Entwicklungen in der Informationstechnik die Umsetzung immer komplexerer Teile der Theorie der numerischen Wettervorhersage in operationellen Wetter- und Klimasystemen. Mittlerweile sind eine Vielzahl an Modellen in Betrieb, welche sich abhängig von ihrem Anwendungsbereich voneinander grundlegend unterscheiden. Neben der Größe des Vorhersagegebietes dienen unter anderem auch Gitterweite, Gitterstruktur, zeitliche Auflösung und numerische Behandlung der Problemstellung als Unterscheidungsmerkmal. Ebenso ist zwischen solchen Modellen zu unterscheiden, die in der Forschung Verwendung finden und daher einen meist sehr allumfassenden Anwendungsbereich haben und jene für den operationellen Betrieb, welche sehr spezialisiert sind.

Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete Wetter- und Klimamodell trägt den Namen ICON-ART. Hierbei handelt es sich um eine Erweiterung des Wetter- und Klimamodells ICON, das seit Anfang 2015 operationell beim Deutschen Wetterdienst (DWD) im Betrieb ist und vollständig auf die hydrostatische Approximation verzichtet. Mit seiner dreieckigen Gitterstruktur bietet es die Möglichkeit die Gitterweite des horizontalen Gitters lokal zu verfeinern. ART erweitert jenes Modell, sodass es in der Lage ist, die Wechselwirkung zwischen Spurenstoffen und der Atmosphäre zu simulieren. Im Folgenden wird ICON-ART näher vorgestellt, wobei zunächst auf das Basismodell ICON und daraufhin auf die Erweiterung ART eingegangen wird.

3.1 ICON

Für die Beschreibung von ICON wird im Folgenden, wenn nicht anders angegeben, auf Zängl et al. (2015) Bezug genommen. Das "ICOsahedral Non-hydrostatic (ICON) modelling framework" ist ein Kooperationsprodukt des Max-Planck-Instituts für Meteorologie (MPI-M) und dem Deutschen Wetterdienst (DWD), mit welchem eine einheitliche Behandlung von globaler Wettervorhersage und Klimamodellierung erreicht werden soll. Die hierfür aufgestellten und im Laufe der Entwicklung er-

reichten Kernziele sind zum einen das Erreichen besserer Erhaltungseigenschaften als jene im GME-Modell (Global Model Europe, Zängl et al. (2015)), was zuvor beim DWD verwendet wurde. Zudem ist exakte lokale Massenerhaltung und massenkonsistenter Spurenstofftransport gewährleistet, um es in der Klimamodellierung verwenden zu können. Ebenso ist Energieerhaltung eine wünschenswerte Eigenschaft, welche allerdings nicht erfüllt werden konnte. Zum anderen mangelt es den bisherigen Modellen an Skalierbarkeit für künftige hochparallele, hochperformante Rechnerarchitekturen, was mit ICON verbessert wurde. Ein weiteres Kernziel ist die Möglichkeit, sowohl eine Kombination aus horizontalem 1-Weg- und 2-Wege-Nesting als auch vertikalem Nesting durchzuführen. Unter dem Begriff des Nestings wird der Prozess der lokalen Gitterverfeinerung verstanden, was bedeutet, dass ein räumlich hoch aufgelöstes regionales Modellgebiet in ein globales Modellgebiet mit geringer Auflösung eingebettet wird. Die Kommunikation zwischen diesen Modellgebieten kann entweder nur in eine Richtung erfolgen, indem das globale Modell lediglich das regionale antreibt (1-Weg-Nesting), oder in beide, sodass das regionalere Modell mit dem globalen rückkoppelt, was dann als 2-Wege-Nesting bezeichnet wird.

Die Grundstruktur der in ICON verwendeten Gitter unterscheidet sich grundlegend von vielen Wetterund Klimamodellen der Vergangenheit. Während diese überwiegend eine quadratische Struktur den Längen- und Breitengraden folgend aufweisen oder über ein spektrales Gitter verfügen, findet bei ICON eine dreieckige Gitterstruktur Anwendung. Dies spiegelt den allgemeinen Trend wider. Eine solche Struktur weist weniger Singularitäten auf, die beispielsweise durch die Konvergenz der Meridiane bei Verwendung eines Längengrad-Breitengrad-Gitters auftreten. Da Singularitäten eine gesonderte und rechenintensive Behandlung erfordern, um die an ihnen auftretenden numerischen Stabilitätseinschränkungen zu umgehen, führt deren Vermeidung zu einer besseren Leistungsfähigkeit des Modells.

Zur Erstellung des Dreiecksgitters in ICON findet ein Ikosaeder Verwendung, was dem Modell einen Teil seines Namens gibt. Ein Ikosaeder besteht aus 20 gleichseitigen Dreiecken, was in insgesamt 30 Kanten und zwölf Ecken resultiert. Dieses Ikosaeder wird anschaulich in die Erde platziert, so dass eine Ecke den Nordpol und die gegenüberliegende Ecke den Südpol berührt. Die übrigen zehn Ecken werden dann auf die Erdoberfläche projiziert. Diese zwölf Punkte auf und ihre Verbindungen entlang der Erdoberfläche, die zu 20 sphärischen Dreiecken führen, dienen als Ausgangspunkt für die Erstellung des unstrukturierten Dreiecksgitters durch kontinuierliche Verfeinerung dieses sphärischen Ikosaeders. Der nächste Schritt ist die sogenannte Root Division. Hierbei werden die bogenförmigen Kanten in n gleichlange Teile unterteilt. Die so entstandenen neuen Eckpunkte werden miteinander verbunden, was zu n^2 gleichseitigen sphärischen Dreiecken in jedem der ursprünglichen Dreiecken führt. Die Bezeichnung Rn beschreibt die vollzogene Root Division. Abschließend erfolgen nun auf den in der Root Division erstellten Dreiecken k Halbierungsschritte, welche mit Bk bezeichnet werden (B für Bisection). Jedes Dreieck wird hierbei k-fach rekursiv durch Halbierung der Kanten in 4 kleinere ebenfalls gleichseitige Dreiecke unterteilt. Das Resultat ist dann ein RnBk-Gitter (Prozess veranschaulicht in Abbildung 3.1). Weitere Optimierung der Zwischen- und der Endgitter erfolgt über die Verwendung der Federdynamik, auf welche hier nicht weiter eingegangen und auf Tomita et al. (2001) verwiesen wird. Die Anzahl an Gitterzellen n_z , Kanten n_k und Eckpunkten n_e ist eindeutig



Abbildung 3.1: **Beispielhaftes Ergebnis einer Gittererstellung mit ICON.** Das hellblaue Basisgitter ist das Resultat der Abbildung des Ikosaeders auf die Erdoberfläche. Die Root Division erfolgt daraufhin mit n = 2, wodurch das dunkelblaue Gitter (R2B00) entsteht. Der erste Bisection-Schritt ruft das grüne Gitter (R2B01) hervor und der zweite Bisection-Schritt, welcher nur auf einem Gebiet in Europa durchgeführt wird, das rote Gitter (R2B02). Quelle: (Giorgetta 2018)

durch die Parameter n und k gegeben:

$$n_z = 20n^2 4^k;$$
 $n_k = 30n^2 4^k;$ $n_e = 10n^2 4^k + 2.$ (3.1)

Die dem Mooreschen Gesetz (Verdoppelung der Anzahl an Transistoren in integrierten Schaltungen alle 18 Monate (ITWissen.info 2018)) folgende Entwicklung hochperformanter Rechnersysteme ermöglicht mittlerweile, auch auf globaler Ebene Gitterweiten zu verwenden, bei denen die hydrostatische Approximation keine Anwendung mehr finden kann. Somit wird auch für globale Modelle ein nicht-hydrostatischer dynamischer Kern notwendig. Dieser ist in ICON implementiert und bildet den zweiten Teil des Namens. Die auf diese Weise erzielte einheitliche Physik für die globale und regionale Skala verhindert zudem Fehler beim Wechsel zwischen diesen Regimes.

Das in ICON verwendete Gleichungssystem basiert auf den von Gassmann und Herzog (2008) vorgestellten prognostischen Variablen und sieht wie folgt aus:

$$\frac{\partial \widehat{v}_{n}}{\partial t} + \frac{\partial \widehat{K}_{h}}{\partial n} + \left(\widehat{\zeta} + f\right)\widehat{v}_{t} + \widehat{w}\frac{\partial \widehat{v}_{n}}{\partial z} = -c_{pd}\widehat{\Theta}_{v}\frac{\partial \overline{\pi}}{\partial n} - F\left(v_{n}\right), \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial \widehat{w}}{\partial t} + \widehat{v}_{h} \cdot \nabla \widehat{w} + \widehat{w} \frac{\partial \widehat{w}}{\partial z} = -c_{pd} \widehat{\Theta}_{v} \frac{\partial \overline{\pi}}{\partial z} - g, \qquad (3.3)$$

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widehat{\Theta}_{\nu}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\rho} \widehat{\boldsymbol{v}} \widehat{\Theta}_{\nu} \right) = \overline{Q}, \qquad (3.4)$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho} \,\widehat{\boldsymbol{\nu}}) = 0, \tag{3.5}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widehat{q}_k}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\rho} \widehat{q}_k \widehat{\boldsymbol{\nu}} \right) = -\nabla \cdot \left(\overline{\boldsymbol{J}_k} + \overline{\rho} q_k'' \boldsymbol{\nu''} \right) + \overline{\sigma}_k$$
(3.6)

mit den prognostischen Variablen v_n als der horizontalen Windkomponente senkrecht zu den Dreieckskanten, w als der vertikalen Windkomponente, ρ als der Dichte und Θ_v als der virtuellen potentiellen Temperatur. Die zu den Dreieckskanten tangentiale Windkomponente v_t ist so gerichtet, dass (v_t, v_n, w) ein Rechtssystem bilden. Der horizontale und der dreidimensionale Windvektor sind mit v_h und v gekennzeichnet. Des Weiteren finden die vertikale Vorticity-Komponente ζ , der Coriolisparameter f, der horizontale Anteil der kinetischen Energie $\widehat{K}_h = \frac{1}{2} (\widehat{v}_n^2 + \widehat{v}_t^2)$ sowie die Exner-Funktion π , die spezifische Wärmekapazität für trockene Luft bei konstantem Druck c_{pd} und konstantem Volumen c_{vd} , die Gaskonstante für trockene Luft R_d und die Schwerebeschleunigung g Anwendung. $F(v_n)$ ist der Quellterm für horizontale Bewegung und \overline{Q} steht für einen diabatischen Hitzequellterm. Bei den verwendeten Mittelungen handelt es sich zum einen um das Hesselberg'sche Mittel $\phi = \widehat{\phi} + \phi''$ (mit $\widehat{\phi} = \frac{\overline{\rho}\phi}{\overline{\rho}}$) und zum anderen um das klassische Reynoldsmittel $\phi = \overline{\phi} + \phi'$. Die Verwendung von Gleichungen in Flussform für ρ und Θ_v ermöglicht hierbei unkompliziert die lokale Massenerhaltung (Rieger et al. 2015).

Die in ICON durchgeführte Ausbreitungsrechnung erfolgt nach Rieger et al. (2015) durch eine Trennung der horizontalen und der vertikalen Advektion, da dies eine effizientere und genauere Berechnung ermöglicht als die Berechnung der dreidimensionalen Advektion. Das liegt darin begründet, dass für beide Advektionsteile dann unterschiedliche Verfahren zur Lösung angewendet werden können (Rieger et al. 2015).

Im Vergleich zu dem hydrostatischen globalen Wettermodell GME, das zuvor beim DWD verwendet wurde, erzielt ICON bereits in der Entwicklungsphase bessere Skillscores, wobei es zugleich deutlich weniger Rechnerressourcen benötigt. Dies hat zur Folge, dass ICON GME im Januar 2015 als Modell zur operationellen Wettervorhersage abgelöst hat.

3.2 Weiterentwicklung von ICON zu ICON-ART

Sofern nicht anders gekennzeichnet, wird für diesen Teil der Arbeit auf Rieger et al. (2015) Bezug genommen. Das Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) entwickelt eine Erweiterung für ICON, welche die Simulation der Wechselwirkung zwischen Spurenstoffen und dem Zustand der Atmosphäre ermöglicht und den Namen ART (Aerosol and Reactive Trace gases) trägt. Am Ende seiner Entwicklung wird ICON-ART die troposphärische und stratosphärische Chemie, Aerosolchemie und -dynamik enthalten sowie den Einfluss auf Strahlung und Bewölkung durch Spurengase und Aerosole berücksichtigen. Die Erweiterung ART wurde bereits zuvor für das Wettervorhersagemodell COSMO verwendet und hatte hierbei ebenfalls das Ziel die Rückkopplung zwischen Aerosolen, Spurengasen und der Atmosphäre zu untersuchen (Vogel et al. 2009; Bangert et al. 2012).

Ein Anwendungsgebiet von ICON-ART ist die Simulation der raumzeitlichen Entwicklung von Spurengasen und Aerosolen, wobei ein besonderes Augenmerk auf der Massenerhaltung liegt. Die Behandlung dieser raumzeitlichen Entwicklung von Spurengasen erfolgt auf Grundlage der folgenden Gleichung:

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widehat{\Psi_{g,l}}}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\widehat{\boldsymbol{\nu}} \overline{\rho} \widehat{\Psi_{g,l}}\right) - \nabla \cdot \overline{\left(\rho \, \boldsymbol{\nu}'' \Psi_{g,l}''\right)} + P_l - L_l + E_l \tag{3.7}$$

mit der Flussdivergenz $\nabla \cdot \left(\widehat{\boldsymbol{v}\rho}\widehat{\boldsymbol{\Psi}_{g,l}}\right)$, die die horizontale und vertikale Advektion beschreibt, der Änderung durch turbulente Flüsse $\nabla \cdot \overline{\left(\rho \boldsymbol{v}'' \boldsymbol{\Psi}_{g,l}''\right)}$, welche in ICON über ein eindimensionales prognostisches TKE-Schema (Turbulent Kinetic Energy) behandelt werden, der Produktionsrate P_l , der



Abbildung 3.2: **Prozessdiagramm von ICON(-ART).** Veranschaulicht ist die Reihenfolge, in der die einzelnen Prozesse für die Ausbreitungsrechnung aufgerufen werden und wie ART mit ICON gekoppelt ist. Die blauen Boxen repräsentieren ICON-Prozesse, während die orangen Boxen auf ART-Prozesse verweisen. Wird ein ICON-Prozess durch ART erweitert, so ist dies mit einem orangen Rahmen um den jeweiligen Prozess gekennzeichnet. Die Zeitintegration wird über den schwarzen Kasten verdeutlicht. Quelle: (Rieger et al. 2015, abgeändert)

Verlustrate L_1 und der Emission E_1 .

Die zeitliche Diskretisierung in der numerischen Implementierung folgt dem Konzept, das auch im Kernmodell ICON Verwendung findet: Die zeitliche Integration von einem Zeitschritt zum folgenden beinhaltet eine Vielzahl von Prozessen, die berechnet werden müssen. Im Falle der Ausbreitungsrechnung sind das die Emission, die Advektion, die Sedimentation, die turbulente Diffusion, das Auswaschen von Aerosol, die chemischen Reaktionen und der subskalige konvektive Transport. Jeder dieser Prozesse nimmt Einfluss auf die Zustandsvariablen. Anstatt alle Prozesse auf den gleichen Initialzustand anzuwenden, werden in ICON-ART die von einem Prozess veränderten Zustandsvariablen als Eingabe für den nachfolgenden Prozess verwendet.

Abbildung 3.2 zeigt schematisch den vollzogenen Prozessablauf von ICON-ART. Blaue Kästen stellen ICON-Prozesse dar, während orange Kästen für ART-Prozesse stehen. Die Zeitintegration im ICON-Modell fängt mit der Berechnung der Dynamik und der Spurenstoffadvektion an. Bei Verwendung von ART erfolgt die Durchführung des Emissionsprozesses zwischen der Dynamik und der Spurenstoffadvektion, welche um zusätzliche Spurenstoffe erweitert wird (gekennzeichnet durch den orangen Rahmen in der Abbildung). Anschließend berechnet ART die Sedimentationsprozesse, wonach die Berechnung der physikalische Parametrisierungen folgt, wofür sowohl ICON als auch ART Beiträge liefern. Die Aufteilung der zu berechnenden physikalischen Prozesse in zwei Klassen ("fast physics" und "slow physics") hat seinen Grund im Berechnungsaufwand jener Prozesse. Die Berechnung weniger aufwändiger Prozesse (beispielsweise die turbulente Diffusion oder die Mikrophysik) erfolgt erwartungsgemäß in jedem Zeitschritt des Modelllaufs. Allerdings ist dies für besonders rechenaufwändige Prozesse, wie Strahlung und Konvektion, nicht der Fall. Um Rechenzeit und Ressourcen zu sparen ohne einen großen negativen Einfluss auf das Ergebnis auszuüben, werden diese in größeren zeitlichen Abständen berechnet. Die Bezeichnungen dieser Klassen erscheinen zunächst etwas kontraintuitiv. Zur "fast physics" gehören jene Prozesse, die im Modell oft berechnet werden und somit ein schnelles Änderungsverhalten im Modell aufweisen, während "slow physics" jene Prozesse beinhaltet, die sich im Modelllauf langsamer verändern, also weniger oft berechnet werden. Die Zuordnung ist also also weitestgehend unabhängig davon, ob der Prozess in der Natur schnell oder langsam abläuft.

Die abschließende Ausgabe beendet den einen Schritt der Zeitintegration und die Prozesskette beginnt von Neuem.

3.3 wichtige Parametrisierungen

Parametrisierungen sind ein integraler Bestandteil eines jeden Wetter- und Klimamodells. Sie ermöglichen die Abbildung von Prozessen, die sich auf Zeit- und Raumskalen abspielen, welche zu klein sind, um vom Modell aufgelöst zu werden. Im Folgenden werden nun zwei Parametrisierungen vorgestellt, die für diese Arbeit von besonderer Bedeutung sind. Zum einen handelt es sich um eine im Jahr 2017 hinzugefügte Parametrisierung der Pollenemission und zum anderen um jene Parametrisierung der heterogenen Eisnukleation, welche im Rahmen dieser Arbeit Verwendung findet.

3.3.1 Pollenemission

Die Pollen, welche im Rahmen dieser Arbeit platzen und die SPP freisetzen, müssen zuvor selbst emittiert werden. Hierfür bietet ICON-ART eine Emissionsparametrisierung, welche von Straub (2017) implementiert wurde.

Grundlage dieser Parametrisierung bildet die EMPOL-Parametrisierung in COSMO-ART, welche bereits in der Pollenvorhersage von MeteoSchweiz Anwendung findet. MeteoSchweiz, das Institut für Meteorologie und Geophysik der Universität Innsbruck und das Institut für Meteorologie und Klimaforschung entwickelten diese Parametrisierung (Zink et al. 2013). Ein wichtiger Bestandteil ist die Trennung des Pollenemissionsprozesses in zwei Unterprozesse, welche sich in ihrer Zeitskala unterscheiden. Während die Pollensaison mehrere Monate andauert, vollzieht sich die Freisetzung der Pollen in wenigen Sekunden bis Stunden. Durch diese Aufteilung können die unterschiedlichen meteorologischen und biologischen Einflussfaktoren der beiden Unterprozesse voneinander unabhängig wirken. Im Folgenden wird auf die Implementierung des Freisetzungsprozesses eingegangen, da bisher noch mit einer konstanten Pollensaison gearbeitet wird. Eine Folge dieser konstanten Pollensaison ist, dass keine Änderung der Variabilität der im Maximalfall freisetzbaren Pollen stattfindet (Straub 2017).

Grundsätzlich geht nach Straub (2017) die EMPOL-Parametrisierung von der Hemmung unter Optimalbedingungen maximal erreichbarer Werte aus. Beispiele dieser Werte sind die Pollenemissionsdauer und die freisetzbare Pollenmenge pro Tag. Das Ergebnis der Emissionsparametrisierung ist ein Pollenfluss, der pro Fläche und Zeitschritt in die Atmosphäre gelangt (Straub 2017).

$$E_{\rm pol} = \frac{R_{\rm pol}}{\Delta t} \cdot f_{\rm E,TKE} \cdot f_{\rm E,RH}$$
(3.8)

 $E_{\rm pol}$ ist hier der Pollenfluss in Anzahl pro Sekunde und $R_{\rm pol}$ das Pollenreservoir in Anzahl. Dieses wird durch die Pollenfreisetzung in einem ersten Schritt gefüllt und ein Teil davon gelangt in einem zweiten Schritt in die Atmosphäre. Das Reservoir ist so etwas wie ein Blüten- oder Pflanzenblatt, welches die freigesetzten und herabfallenden Pollen zunächst aufnimmt. Neben einer Vielzahl weiterer Hemmfunktionen, welche überwiegend in die Berechnung von $R_{\rm pol}$ eingehen und sowohl berechnete Prozesse (zum Beispiel die Regenrate) als auch zufällige Prozesse (zum Beispiel Berührung der Pflanze durch Tiere) berücksichtigen, finden zwei dieser in Gleichung 3.8 Beachtung und hemmen den Anteil der Pollen aus dem Pollenreservoir, der an die Atmosphäre übergeben wird. $f_{\rm E,TKE}$ beschreibt die Hemmung durch Turbulenzverhältnisse über

$$f_{\rm E,TKE} = \frac{1}{1 + \exp\left(-2.1 \cdot \text{TKE} + 4\right)} - 0.017 \tag{3.9}$$

mit der turbulenten kinetischen Energie (TKE) in m² s⁻² als abhängige Größe und $f_{E,RH}$ beschreibt jene durch die relative Feuchte mit

$$f_{\rm E,RH} = \begin{cases} 1 & \text{für} & \text{RH} \le 0.9 \\ 0.5 & \text{für} & 0.90 < \text{RH} \le 0.95 \\ 0 & \text{für} & 0.95 < \text{RH} \le 1. \end{cases}$$
(3.10)

Die herrschende Turbulenz durchmischt die bodennahen Luftschichten, was den Stofftransport in die Atmosphäre beeinflusst, und ist somit auch für die Pollenemission von Bedeutung. Aus Gleichung 3.9 ist abzuleiten, dass eine erhöhte Turbulenz in bodennahen Luftschichten (also ein größerer Wert für TKE) zu einem höheren $f_{E,TKE}$ führt und somit der maximal mögliche Pollenfluss in die Atmosphäre gemäß Gleichung 3.8 nur wenig gehemmt wird. Die relative Feuchte ist deswegen von Bedeutung, da eine erhöhte Luftfeuchtigkeit zu einem stärkeren Anhaften der Pollen auf der Reservoiroberfläche führt. Allerdings ist in Gleichung 3.10 zu erkennen, dass hohe Werte der relativen Feuchte (RH > 90 %) erreicht werden müssen, um eine signifikante Hemmung des Pollenfluss zu bewirken (Straub 2017).

Für weitere Informationen bezüglich der Emissionsparametrisierung von Pollen sei auf Straub (2017) und Zink et al. (2013) verwiesen.



Abbildung 3.3: **Parametrisierung für Immersionsgefrieren der biologischen Partikel.** Veranschaulichung der Parametrisierung des Immersionsgefrierens nach Phillips et al. (2013) über den Anteil an gefrierenden Tropfen, wenn ein biologisches Partikel als Eiskeim fungiert ($\xi_{\text{bio}}(T)$).

3.3.2 Empirische Parametrisierung heterogener Eisnukleation

In ICON-ART ist bereits eine Auswahl an Parametrisierungen zur heterogenen Eisnukleation implementiert. Eine von diesen berücksichtigt explizit biologische Partikel, wurde von Phillips et al. (2013) entwickelt und stellt eine Erweiterung einer Parametrisierung von Phillips et al. (2008) dar. Eine dieser Erweiterungen ist die erwähnte explizite Berücksichtigung von biologischen Partikeln. Diese Parametrisierung findet im Rahmen dieser Arbeit Verwendung und wird daher im Folgenden vorgestellt.

Nach Phillips et al. (2013) wurde die Vorgängerparametrisierung so entwickelt, dass sie vielseitig genug ist, um in der Zukunft auftretende Beobachtungen der Eisnukleationsaktivität verarbeiten zu können. So haben viele Untersuchungen Annahmen unterstützt, welche bei der Entwicklung jener Parametrisierung eingingen. Beispielsweise bestätigen Hoose und Möhler (2012) die Unterdrückung der Eisnukleation durch Staub bei Feuchten unterhalb der Wassersättigung für hohe Temperaturen unter Null (Phillips et al. 2013). Der Grund für eine explizite Verbesserung der Parametrisierung sind neuere Studien der biologischen Eisnukleation. Diese haben die Wahrnehmung der Tatsache gestärkt, dass unterschiedliche Eiskeimarten unterschiedliche Temperaturen aufweisen, bei welchen messbare Eisnukleation auftritt. Diese Variabilität wurde in der Originalversion der Parametrisierung nicht behandelt (Phillips et al. 2013).

Als weitere Folge neuerer Beobachtungen erklären Phillips et al. (2013) die Einführung einer neuen Aerosolklasse, welche speziell für organische PBAPs (primary biological aerosol particles) zuständig ist. In der ursprünglichen Parametrisierung wurden diese Partikel zusammen mit anderen unlöslichen organischen Partikeln behandelt, neben Mineralstaub und metallischem Aerosol sowie Ruß.

Die Originalparametrisierung nach Phillips et al. (2008)

$$n_{\text{IN},\text{X}} = \int_{\log(0,1\,\mu\text{m})}^{\infty} \left\{ 1 - \exp\left[-\mu_{\text{X}}\left(D_{\text{X}}, S_{i}, T\right)\right] \right\} \frac{\mathrm{d}n_{\text{X}}}{\mathrm{d}\log D_{\text{X}}} \mathrm{d}\log D_{\text{X}} \qquad \text{mit}$$
(3.11)

$$\mu_{\mathrm{X}} = H_{\mathrm{X}}\left(S_{i}, T\right) \xi\left(T\right) \left(\frac{\alpha_{\mathrm{X}} n_{\mathrm{IN}, 1, *}}{\Omega_{\mathrm{X}, 1, *}}\right) \times \frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{X}}}{\mathrm{d}n_{\mathrm{X}}} \qquad \text{für} \qquad T < 0\,^{\circ}\mathrm{C} \quad \text{und} \quad 1 < S_{i} \leq S_{i}^{W} \quad (3.12)$$

bleibt auch in Phillips et al. (2013) bestehen. Hier ist $n_{IN,X}$ das Anzahlmischungsverhältnis der Eiskeime, die bei einem Sättigungsverhältnis gegenüber Eis S_i und einer Temperatur T aus der Klasse X aktiviert werden. Ω_X ist die Gesamtoberfläche pro Kilogramm Luft aller unlöslicher Aerosolkerne mit einem Trockendurchmesser D_X . μ_X ist die mittlere Anzahl potentiell aktivierbarer Eisembryos pro Aerosolpartikel. $0 \le H_X(S_i, T) \le 1$ ist ein empirisch bestimmter Anteil, der die reduzierte heterogene Eisnukleation bei beträchtlicher Untersättigung bezüglich Wasser beschreibt. $\xi = \delta_0^1 (T, T_1, T_2)$ evaluiert auf 1, wenn $T < T_1$ gilt, auf 0, wenn $T > T_2$ zutrifft, und nimmt einen entsprechend interpolierten Wert an, wenn $T_1 \le T \le T_2$ (siehe Abbildung 3.3). Es beschreibt die Existenz eines Grenzwertes der Temperatur oberhalb dessen Tropfen nicht gefrieren. Diese Schwellenwerte T_1 und T_2 sind in Phillips et al. (2008) für alle Klassen gleich ($T_1 = -5 \,^{\circ}$ C und $T_2 = -2 \,^{\circ}$ C), während Phillips et al. (2013) diese klassenspezifisch setzt. Für die biologische Aerosolklasse bleiben die Werte allerdings unverändert bei $T_1 = -5 \,^{\circ}$ C und $T_2 = -2 \,^{\circ}$ C. α_X ist der fraktionelle Beitrag der Aerosolklasse X zur Eiskeimkonzentration. $\Omega_{X,1,*}$ und $n_{IN,1,*}$ sind Bezugsgrößen für die Gesamtoberfläche und Anzahl pro Kilogramm Luft, welche aus den zugrunde liegende Messungen bestimmt wurden (Phillips et al. 2008; Phillips et al. 2013).

4 Pollenfragmente und Eisnukleation

Während sich die vorigen Kapitel den theoretischen Grundlagen zu Pollenfragmenten und Eisnukleation und der Einführung in das verwendete Modell ICON-ART widmen, untersucht der folgende Teil der Arbeit den Einfluss von Pollenfragmenten auf die Eisnukleation. Hierfür erfolgt eine Beschreibung, wie die Emission der Pollenfragmente aus den ausgestoßenen Pollen parametrisiert ist, gefolgt von einer Beschreibung des Aufbaus dieser reinen Modellstudie. Hierin wird die Konfiguration des Modells und generelle Informationen zur Auswertung beleuchtet. Dieses Kapitel schließt dann mit der Vorstellung der Ergebnisse der Modellstudie.

4.1 Modellerweiterung um Parametrisierung der SPP-Emission

Um den Einfluss von SPPs auf die Eisnukleation simulieren zu können, ist zunächst eine Erweiterung von ICON-ART notwendig, welche dem Modellsystem ermöglicht SPPs zu emittieren. Da sich der Emissionsprozess auf der Größenskala der einzelnen Pollen abspielt und diese deutlich außerhalb des Auflösungsvermögens von Wetter- und Klimamodellsystemen und somit auch von ICON-ART liegen, handelt es sich bei der Erweiterung um eine Parametrisierung, welche im Folgenden entwickelt und vorgestellt wird.

Grundlage der Emissionsparametrisierung bildet die Arbeit von Zhou (2014), welche unter anderem die zeitliche Entwicklung des Turgordrucks (Druck innerhalb der Polle auf die Pollenwand) beschreibt. Das Verhältnis dieses Turgordruckanstiegs zu einem Druck, der der Wandstärke der Polle entspricht, bestimmt den Anteil der platzenden Pollen (siehe hierzu auch Kapitel 2.1.2). Dieser Pollenanteil wird aus dem Modellgebiet entfernt und eine der entfernten Pollenmasse entsprechende Menge an SPPs hinzugefügt.

Zu Beginn dieser Arbeit wurde in ICON-ART nur eine Pollenart emittiert. Hierbei handelt es sich um Birkenpollen. Dies hat zur Folge, dass auch nur die zur Birkenpolle gehörenden SPPs emittiert und betrachtet werden. Wie aus der Arbeit von Zhou (2014) ersichtlich, ist die relative Feuchte die atmosphärische Größe, die entscheidet, ob es zum Platzen von Pollen kommt. So beschreibt Zhou (2014), dass ein für die Polle spezifischer Wert der relativen Feuchte der umgebenden Luft erreicht werden muss, damit jene Polle platzen kann. Dieser Wert ist höher als die Wasseraktivität des Pollenzytoplasmas (die Wasseraktivität ist eine Art relative Feuchte der Polle), da die Polle vor dem Platzen durch Feuchteaufnahme zunächst anschwellt. In Zhou (2014) wird eine Erhöhung des Pollenradius durch das Anschwellen um $1 - 2 \mu m$ angegeben. Im Rahmen dieser Arbeit wird jener Wert auf $\Delta r_{max} = 1 \mu m$ gesetzt, was in der Motivation der Maximalabschätzung des Einflusses von SPPs begründet liegt. Ein geringerer Anschwellradius führt zu einer geringeren Schwelle der relativen Feuchte für das Platzen der Polle, wodurch die Polle bei geringeren relativen Feuchten platzt, was zu einer erhöhten Anzahl an Platzprozessen führt. Dieser Schwellwert der relativen Feuchte lässt sich aus einem Zusammen-

hang des Wasserpotentials mit der Konzentration des gelösten Materials in der Polle in Kombination mit der Erhaltung der Menge des SPP-Materials bestimmen (Zhou 2014). Es gilt demnach

$$C = -\frac{\pi}{RT} \qquad \text{und} \tag{4.1}$$

$$C_0 V_0 = C_1 V_1 \tag{4.2}$$

mit *C* der Konzentration des gelösten Materials in molm⁻³, π dem Wasserpotential der Polle in Nm⁻², $R \approx 8,314 \,\mathrm{J}\,\mathrm{mol}^{-1}\,\mathrm{K}^{-1}$ der universellen Gaskonstante, *T* der Temperatur in K und *V* dem Volumen des Körpers in m³. Die Indizes 0 und 1 stehen für zwei unterschiedliche Zeitpunkte in der Entwicklung.

Das Wasserpotential der maximal angeschwollenen Polle, was dem Mindestwert des Wasserpotentials der Umgebung fürs Pollenplatzen entspricht, ergibt sich dann zu

$$\pi_{\text{poll,max}} = -C_{\text{poll,max}}RT \tag{4.3}$$

$$= -\frac{C_{\text{poll,init}}V_{\text{poll,init}}}{V_{\text{poll,max}}}RT$$
(4.4)

$$=\frac{\pi_{\text{poll,init}}V_{\text{poll,init}}}{V_{\text{poll,max}}}$$
(4.5)

$$= \pi_{\text{poll,init}} \frac{r_{\text{poll,init}}^3}{\left(r_{\text{poll,init}} + \Delta r_{\text{max}}\right)^3}$$
(4.6)

$$= \frac{RT \ln a_{\mathrm{W,init}}}{M_{\mathrm{W}}} \frac{r_{\mathrm{poll,init}}^3}{\left(r_{\mathrm{poll,init}} + \Delta r_{\mathrm{max}}\right)^3}.$$
(4.7)

Hier ist $M_{\rm W} \approx 1,807 \cdot 10^{-5} \,\mathrm{m^3 \,mol^{-1}}$ das molare Volumen von Wasser und $a_{\rm W,init}$ ein Initialwert der (dimensionslosen) Wasseraktivität der Polle. Nach Zhou (2014) ist $a_{\rm W,init} = 80\%$ eine gerechtfertigte Annahme, welche auch in dieser Arbeit Verwendung findet. Abschließend ist $r_{\rm poll,init}$ der Anfangsradius der betrachteten Polle in m. Für Birkenpollen gilt dabei $r_{\rm poll,init} = 1 \cdot 10^{-5} \,\mathrm{m}$.

Gleichung 4.7 ergibt sich aus Anwendung von Gleichung 2.2. Zudem ist aus Gleichung 2.2 aus diesem Mindestwert des Wasserpotentials der Umgebung eine korrespondierende relative Feuchte berechenbar.

$$\frac{RT\ln \mathrm{RH}_{\mathrm{min}}}{M_{\mathrm{W}}} = \pi_{\mathrm{poll,max}} = \frac{RT\ln a_{\mathrm{W,init}}}{M_{\mathrm{W}}} \frac{r_{\mathrm{poll,init}}^3}{\left(r_{\mathrm{poll,init}} + \Delta r_{\mathrm{max}}\right)^3}$$
(4.8)

$$\Rightarrow \ln \mathrm{RH}_{\mathrm{min}} = \ln a_{\mathrm{W,init}} \frac{r_{\mathrm{poll,init}}^3}{\left(r_{\mathrm{poll,init}} + \Delta r_{\mathrm{max}}\right)^3} \tag{4.9}$$

$$\Rightarrow \mathrm{RH}_{\mathrm{min}} = 84,5\% \tag{4.10}$$

Wird dieser Wert der relativen Feuchte überschritten, so steigt der Turgordruck in der Polle an. Ob eine Polle platzt hängt davon ab, ob der steigende Turgordruck den Wanddruck der Pollenwand überwindet. Um diesen kritischen Turgordruck zu bestimmen wird auf Taylor et al. (2004) Bezug genommen, welche anmerken, dass bei einer relativen Feuchte von $RH_{germ} = 96\%$ eine Vielzahl der Birkenpollen keimen. Nach Grote et al. (2003) erfolgt die Freisetzung von Birken-SPP bei Kontakt mit Wasser über einen Prozess, der einer fehlgeschlagenen Keimung ähnelt. Dementsprechend wird RH_{germ} als Bezugswert für das Pollenplatzen von Birkenpollen verwendet.

Um aus diesem Wert einen kritischen Turgordruck zu bestimmen, wird ein Szenario betrachtet, in dem dieser Wert der relativen Feuchte solange an der Polle anliegt bis diese platzt. Zu diesem Zeitpunkt ist der Wasserfluss in die Polle abgeschlossen. Nach Gleichung 2.3 stoppt der Wasserfluss und damit verbunden der Turgordruckanstieg, wenn

$$\pi_{\rm out} - \pi_{\rm in} - \Delta p = 0 \tag{4.11}$$

mit $\pi_{out/in}$ dem Wasserpotential außerhalb und dem osmotischen Potential innerhalb der Polle in Nm⁻² und Δp der Differenz zwischen Turgordruck und atmosphärischem Druck in Nm⁻². Im genannten Szenario ist der Turgordruck der für das Platzen der Polle kritische Turgordruck, den es zu bestimmen gilt. Hieraus ergibt sich also

$$p_{\text{turgor,final}} - p_0 = \pi_{\text{out}} - \pi_{\text{in}}.$$
(4.12)

In Gleichung 4.12 ist $p_{turgor,final}$ der kritische Turgordruck und p_0 der herrschende atmosphärische Luftdruck. Bei Anwendung von RH_{germ} als kritische relative Feuchte zum Platzen der Polle zur Bestimmung von π_{out} und RH_{min} als Mindestwert, der zum Turgordruckanstieg führt zur Bestimmung von π_{in} , kann hieraus der kritische Turgordruck ermittelt werden. Liegt dieser vor, so platzt die betrachtete Polle.

$$p_{\text{turgor,final}} = p_0 + \frac{RT}{M_{\text{W}}} \left(\ln \text{RH}_{\text{germ}} - \ln \text{RH}_{\text{min}} \right)$$
(4.13)

$$= p_0 + \frac{RT}{M_{\rm W}} \ln \frac{0.96}{0.845} \tag{4.14}$$

Das Verhältnis des tatsächlichen Turgordruckanstiegs zu diesem kritischen Turgordruck $p_{turgor,final}$ bildet die Grundlage zur Bestimmung des Anteils der Pollen, die platzen und SPPs freisetzen. Es folgt nun eine Erklärung mit Bezug auf Zhou (2014), wie sich der tatsächlich wirkende Turgordruck zeitlich entwickelt. Die Grundlagen hierfür bilden die Gleichungen 2.4 und 2.3.

$$p_{\text{turgor},t+1} - p_{\text{turgor},t} = \Delta p_{\text{turgor},t} = E\left(1 - \frac{\rho_t}{\rho_{t+1}}\right)$$
(4.15)

Die Verhältnisse der Dichten entspricht den Verhältnissen der Masse, da zu diesem Zeitpunkt das Volumen der Polle unverändert bleibt.

$$\Delta p_{\text{turgor},t} = E\left(1 - \frac{m_t}{m_{t+1}}\right) = E\frac{\Delta m_t}{m_t + \Delta m_t} \tag{4.16}$$

$$\approx E \frac{\Delta m_t}{m_t} \tag{4.17}$$

Dieser Schritt nimmt an, dass die Massenänderung durch das in die Polle fließendes Wasser im Vergleich zur Gesamtmasse vernachlässigbar klein ist, was durch die Wahl eines entsprechenden Zeitschritts bei der Entwicklung gewährleistet werden kann. Nun findet im Folgenden Gleichung 2.3 Anwendung, wobei der Dichtefluss in einen Massenfluss umgerechnet wird.

$$\Delta p_{\text{turgor},t} = \frac{E}{m_t} Ak \left(\pi_{\text{out}} - \pi_{\text{in}} - p_{\text{turgor},t} + p_0 \right) \rho_{\text{W}} \Delta t$$
(4.18)

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} \approx \frac{E}{m_t} Ak \left(\pi_{\mathrm{out}} - \pi_{\mathrm{in}} - p_{\mathrm{turgor},t} + p_0 \right) \rho_{\mathrm{W}}$$
(4.19)

Der letzte Schritt macht aus der Differenzengleichung eine Differentialgleichung, mit der weitergerechnet wird, wobei eine Umrechnung der Masse in ein Volumen erfolgt sowie eine Vereinfachung des Verhältnisses zwischen Fläche und Volumen eines kugelförmigen Partikels.

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = \frac{EAk}{V} \frac{\rho_{\mathrm{W}}}{\rho_t} \left(\pi_{\mathrm{out}} - \pi_{\mathrm{in}} - p_{\mathrm{turgor},t} + p_0 \right)$$
(4.20)

$$=\frac{3Ek}{r}\frac{\rho_{\rm W}}{\rho_t}\left(\pi_{\rm out}-\pi_{\rm in}-p_{\rm turgor,t}+p_0\right) \tag{4.21}$$

$$\Rightarrow p_{\text{turgor},\Delta t} = p_0 + (\pi_{\text{out}} - \pi_{\text{in}}) \left[1 - \exp\left(-\frac{3Ek}{r} \frac{\rho_{\text{W}}}{\rho_0} \Delta t\right) \right]$$
(4.22)

In dieser Gleichung 4.22, welche eine Lösung der Differentialgleichung darstellt, ist $p_{turgor,\Delta t}$ der Turgordruck nach einem Zeitschritt Δt in Pa, p_0 der initiale Turgordruck in Pa, $\pi_{in/out}$ das osmotische Potential innerhalb und das Wasserpotential außerhalb der Polle in Nm⁻², $E = 2,15 \cdot 10^9$ Nm⁻² der Kompressionsmodul und $k = 5 \cdot 10^{-17}$ ms⁻¹ Pa⁻¹ die Wasserpermeabilität der Polle. *r* ist der Pollenradius in m, $\rho_{W/0}$ die Dichte von Wasser beziehungsweise der Polle in kgm⁻³ und Δt der Zeitschritt in s.

Um den Anteil der Pollen zu bestimmen, welche im betrachteten Zeitschritt platzen, wird zunächst

das Verhältnis des tatsächlichen Turgordruckanstiegs zum kritischen Turgordruckanstieg berechnet $(\frac{Purgor, \Delta r = P0}{Purgor, final = P0})$. Anstelle einer linearen Gewichtung dieses Verhältnissen mit den zur Verfügung stehenden Pollen zur Bestimmung des platzenden Anteils, was eine gleichmäßige Verteilung des Druckanstiegs impliziert, wird stattdessen eine zufällige Verteilung des Druckanstiegs realisiert. Hierfür gilt es eine angemessene Gauß-Funktion zu ermitteln: Da Verhältnisse zwischen den Druckanstiegen betrachtet werden, ergibt sich der Erwartungswert zu $\mu = \frac{1}{2}$, was einer relativen Feuchte von 90,06 % entspricht. Der erste Wendepunkt der Glockenkurve wurde auf eine relativen Feuchte von 88 % gesetzt, wodurch sich ein $\sigma = 0,181925$ ergibt. Der Grund für diese Wahl ist, dass der gesamte relevante Bereich der relativen Feuchte (von 84,5 % bis 96 %) hiermit durch 3 σ abgedeckt wird. So platzen bei einer relativen Feuchte von 96 % insgesamt etwa 99,8 % der sich im betrachteten Volumen befindlichen Pollen. Ist das betrachtete Luftvolumen gesättigt, steigt dieser Anteil auf etwa 99,99999 %. Unter Berücksichtigung, dass auch bei niedrigeren Werten der relativen Feuchte bereits ein Teil der Pollen platzt (bei einer relativen Feuchte von etwa 90 % sind es bis zu 50 % der Pollen) und eine platzende Polle etwas mehr als 1000 SPPs emittiert, ist eine mittlere Ausstoßrate von etwa 1000 SPPs pro Polle zu erwarten.

Es sei hiermit erwähnt, dass die obige Wahl der Parameter, insbesondere die der Standardabweichung, nicht durch Messungen gestützt ist, da hierzu keine vorliegen. Es handelt sich um eine durch die Minimal- und Maximalwerte der relativen Feuchte motivierte, aber weitestgehend freie, Wahl des Autors. Aus diesen Informationen ergibt sich die in Abbildung 4.1 dargestellte Glockenkurve. Mithilfe der zugehörigen Fehlerfunktion können die oben beschriebenen Verhältnisse zwischen tatsächlichem und kritischen Turgordruckanstieg in einen zu platzenden Anteil der Pollen überführt werden. Dieser Pollenanteil wird massenerhaltend in die korrespondierenden SPP umgewandelt. Hierbei sei angemerkt, dass die Dichte der SPP jener der Pollen entspricht und somit nur die dritte Potenz des



Abbildung 4.1: Gauß'sche Glockenkurve für den platzenden Pollenanteil. Auf der Abszisse ist die relative Feuchte aufgetragen, welche zu einem Verhältnis zwischen tatsächlichem und kritischem Turgordruckanstieg führt, auf Basis dessen die Parameter der Gauß-Verteilung ermittelt sind.

Verhältnisses der Radien von Polle zu SPP entscheidend ist für die Bestimmung der Anzahlkonzentration der SPP aus jener der Pollen.

4.2 Aufbau der Modellstudie

Während Kapitel 4.1 sich der für diese Arbeit notwendigen Erweiterung des Modells widmet, indem es die entwickelte Parametrisierung der SPP-Emission vorstellt, geht dieser Teil der Arbeit auf die Art und Weise der Verwendung des Modells ein. Hierbei sei vorab erneut erwähnt, dass es sich bei dieser Arbeit um eine reine Modellstudie handelt, was bedeutet, dass die Daten ausschließlich aus Simulationsläufen generiert werden. Es werden keine Messungen hinzugezogen, was überwiegend darin begründet liegt, dass zum Zeitpunkt der Verfassung dieser Arbeit keine solchen Messreihen zur Verfügung stehen.

Um den Aufbau dieser Modellstudie zu beschreiben, wird zunächst auf die verwendeten Konfigurationen des Modells eingegangen und somit erklärt, wie und unter welchen Voraussetzungen die Daten erzeugt werden. Der abschließende Teil dieses Kapitels beschreibt im Anschluss den weiteren Umgang mit den gewonnenen Daten.

4.2.1 Überblick über verwendete Modellkonfigurationen

Das verwendete Modellsystem ICON-ART erzeugt die Daten für diese Arbeit im sogenannten Limited Area Mode (LAM, zu deutsch etwa: Modus für begrenzte Gebiete). Im Gegensatz zur globalen Herangehensweise beschränkt sich jener Modus auf ein zuvor definiertes Gebiet, benötigt hierfür allerdings neben den Anfangsdaten auch Randdaten, deren Generierung durch einen vorangegangenen globalen ICON-ART-Lauf erfolgt. Das Simulationsgebiet für diese Arbeit bedeckt einen Großteil Europas (siehe Abbildung 4.2), was unter anderem darin begründet liegt, dass die Pollenemission im



Abbildung 4.2: **Simulationsgebiet.** Das Simulationsgebiet erstreckt sich über einen Großteil Europas von 30° westlicher nach 50° östlicher Länge und von 35° nach 75° nördlicher Breite.

Modell zum Zeitpunkt des Verfassens dieser Arbeit lediglich in Europa stattfindet.

Im Allgemeinen handelt es sich bei den Simulationsläufe um drei Experimente, in denen die SPPs zur Eisnukleation beitragen, und deren drei Kontrollläufe, in welchen das nicht der Fall ist. Diese unterscheiden sich lediglich in der Anzahl der emittierten SPPs voneinander. Während ein Experiment-Kontrolllauf-Paar die gesamte platzende Pollenmasse in SPPs umwandelt ("ER100" - für Emissionsrate: 100%), erfolgt dies bei den anderen beiden Experiment-Kontrolllauf-Paaren nur zu 10% ("ER10") und zu 1% ("ER1"). Auf diese Weise haben die emittierten SPPs weiterhin die gleichen physikalischen Eigenschaften (insbesondere Dichte und Größe) und liegen nur in unterschiedlichen Anzahl- und Massenkonzentrationen vor. Dies fügt der Modellstudie eine Sensitivitätskomponente hinzu und ermöglicht so eine Betrachtung der Fragestellung, ab welcher Menge an SPPs die Einflüsse signifikant werden.

Das verwendete Gitter für die Modellläufe trägt die Bezeichnung R2B09 (siehe Kapitel 3), was einer äquivalenten Gitterweite von etwa 5 km entspricht. Die Läufe rechnen beginnend am 29. März 2014 0 UTC zehn Tage in die Zukunft, wobei der Zeitschritt $\Delta t = 10$ s beträgt. Die Wahl dieses langen Simulationszeitraums im Frühling ist durch die damit erzielte starke Unabhängigkeit der Ergebnisse gegenüber vorherrschenden Wetterlagen motiviert, da sich im Simulationszeitraum viele unterschiedliche Wetterlagen gegenseitig ablösen.

4.2.2 Informationen zur Auswertung

Diese Modellstudie stellt eine Maximalabschätzung der Fragestellung dar, inwieweit SPPs die Eisnukleation in Wolken beeinflussen und hat daher überwiegend qualitative statt quantitative Relevanz. Eine sehr große Bedeutung hat das 2D-Histogramm für die Auswertung der von den Modellläufens generierten Daten. In einem solchen sind zwei zu untersuchende Größen auf den Achsen aufgetragen und farblich kodiert an der Koordinate eines Datenpunktbereichs die relative beziehungsweise hier zumeist absolute Häufigkeit jenes Datenpunktbereichs. Im Allgemeinen werden alle Gitterpunkte zu allen Ausgabezeitpunkten (die Modellläufe geben den berechneten Zustand nach jeder simulierten Stunde aus) berücksichtigt, wobei auch durch Filteranwendungen bestimmte Regime betrachtet werden können. Diese beziehen sich überwiegend auf die Temperatur der Gitterzelle, da diese die biologische Eisnukleation von anderen Eisnukleationsprozessen trennt. Ebenso ist neben der Betrachtung aller zehn Tage auch eine gesonderte Betrachtung des Anfangs und des Endes der Simulation von Interesse. Erstere wird durch die Analyse von Tag zwei und drei erfolgen (Entscheidung gegen Tag eins, um den Pollen und SPPs Zeit zu geben emittiert zu werden) und letztere durch jene von Tag neun und zehn. Dies fügt der Analyse neben der Sensitivität gegenüber der SPP-Emission, welches über die unterschiedlichen Modellläufe (ER100, ER10 und ER1) erfolgt, eine weitere Sensititätskomponente hinzu. Diese bezieht sich auf die unterschiedlich fortgeschrittene Entwicklungszeit und somit auf eine unterschiedliche Anzahl an Platzprozessen. Es ist zu vermuten, dass diese insbesondere für die Streuung der Ergebnisse verantwortlich ist.

4.3 Auswertung des Einflusses von Pollenfragmenten auf die Eisbildung in Wolken

Dieser Teil der Arbeit ist der Vorstellung der Ergebnisse der Modellläufe und der daraus erworbenen Erkenntnisse angedacht, nachdem in den vorangegangenen Teilen die Erzeugung und Einordnung jener behandelt wurde.

Die Untersuchung des Einflusses von Pollenfragmenten auf die Eisnukleation in Wolken erfolgt hierbei auf unterschiedlichen Ebenen, welche repräsentativ durch die Größen Eispartikelanzahldichte, effektiver Radius und Niederschlag dargestellt werden. Ein etwaiger Einfluss auf die Eispartikelanzahldichte ist aufgrund der Tatsache, dass SPPs als Eiskeime fungieren, vermutlich überwiegend direkter Natur. Eine Erhöhung der Eiskeimanzahl wird zumeist zu einer Erhöhung der Eispartikelanzahldichte führen, wenn die notwendige Temperatur und Eissättigung erreicht ist. Allerdings ist es auch denkbar, dass die Zufuhr von Eiskeimen, welche bei höheren Temperaturen aktiv werden, wie es bei biologischen Eiskeimen der Fall ist, dazu führt, dass andere Eiskeime keine Feuchte mehr für den Nukleationsprozess zur Verfügung haben. Abhängig vom Angebot an jenen weniger effektiven Eiskeimen kann in diesem Szenario die Eispartikelanzahldichte durch die effektiveren Eiskeime schlussendlich unverändert bleiben oder auch verringert werden. Somit ist auch ein indirekter Effekt neben dem überwiegend direkten Einfluss der SPP auf die Eispartikelanzahldichte zu vermuten. Der effektive Radius der Eispartikel ist unter anderem von der zur Verfügung stehenden Feuchte und der Eispartikelanzahldichte abhängig. Erhöht sich die Eispartikelanzahldichte bei gleichbleibender Feuchte, verteilt sich letztere auf mehr Eispartikel, sodass jedes Eispartikel weniger Feuchte zur Verfügung hat und somit einen kleineren effektiven Radius aufweist. Daher ist der Einfluss der SPPs auf den effektiven Radius vorrangig durch jenen auf die Eispartikelanzahldichte bedingt. Des Weiteren kann früher einsetzende Eisnukleation jedoch auch die für weitere Nukleation zur Verfügung stehende Feuchte beeinflussen und hierüber den effektiven Radius ändern. Folglich ist der Effekt der SPPs auf den effektiven Radius durch die Abhängigkeit dessen von der Feuchte und Eispartikelanzahldichte letzterem nachgelagert. Während der effektive Radius weitestgehend durch zwei Größen beeinflusst ist, spielen beim Niederschlag eine Vielzahl an weiteren Größen eine Rolle. Aufgrund dessen ist eine möglicher Einfluss der SPPs auf diese Größe insbesondere im Vergleich zu den anderen auszuwertenden Größen dieser Arbeit sehr indirekter und weit nachgelagerter Natur. Dennoch ist es von Bedeutung zu erkennen, ob einfache Tendenzen aus den einwirkenden SPPs ableitbar sind und in welchem Maße sich dieser Einfluss auszuwirken sucht.

Die Hauptmotivation zur Untersuchung von SPPs im Rahmen dieser Modellstudie ist, dass diese aufgrund ihrer im Vergleich zu Pollen geringeren Größe und Masse in größere Höhen transportiert werden. Zudem entstehen pro geplatzter Polle eine Vielzahl an SPPs, in etwa 1000 SPPs pro Polle. Was diese beiden Aspekte für eine Auswirkung auf die Horizontalverteilung von SPPs im Vergleich zu den der Polle hat, zeigen die Abbildungen 4.3 und 4.4. Erstere stellt den zeitlichen Verlauf der Horizontalverteilung der Pollen- und SPP-Anzahlkonzentration dar, letztere die Horizontalverteilung am Ende der 10-Tages-Simulation in einer Höhe von etwa 4000 Metern (die mittlere Temperatur in dieser Höhe ist etwa -20 °C). Während die Pollenverteilung (linke Darstellungen in beiden Abbildungen) in dieser Höhe durch niedrige Konzentrationen (bis zu 1 kg⁻¹) und geringe horizontale Ausbreitung gekennzeichnet ist, hat die SPP-Verteilung in den rechten Darstellungen einen deutlich größeren Ein-


Abbildung 4.3: Zeitlicher Verlauf der Pollen- und SPP-Verteilung in 4000 Metern Höhe. Horizontalverteilung der Pollen- (links) und SPP-Anzahlkonzentration (rechts) in einer Höhe von 4000 m zu unterschiedlichen Zeitpunkten der Simulation. Die Zeitpunkte sind (von oben nach unten) 48 h, 96 h, 144 h, 196 h nach Beginn der Simulation. Die SPP bedecken stets ein größeres Gebiet in größerer Anzahlkonzentration als die Pollen.



Abbildung 4.4: **Pollen- und SPP-Verteilung in 4000 Metern Höhe.** Horizontalverteilung der Pollen- (links) und SPP-Anzahlkonzentration (rechts) in einer Höhe von 4000 m am Ende der 10-Tages-Simulation. Es wird deutlich, dass die Anzahlkonzentration der SPP in dieser Höhe um mehrere Größenordnungen höher ist als jene der Pollen. Zudem erstreckt sich die Verteilung der SPP über ein größeres Gebiet.

flussbereich mit deutlich höheren Konzentrationswerten (bis zu $1 \cdot 10^4 \text{ kg}^{-1}$). Zudem zeigt Abbildung 4.3, dass Pollen und insbesondere SPPs, welche beide erst im Laufe der Simulation emittiert werden, Transportprozessen unterliegen. Dieser einfache exemplarische Vergleich bekräftigt zum einen, warum biologische Partikel (in diesem Fall Pollen) bislang keine große Bedeutung in der atmosphärischen Eisnukleation haben, und zum anderen, dass die Betrachtung und Berücksichtigung von SPPs dies ändern zu können vermag.

4.3.1 Eispartikelanzahldichte

Die Eispartikelanzahldichte gibt an, wie viele Eispartikel sich in einem Kilogramm Luft befinden. Aufgrund der Tatsache, dass bei Temperaturen oberhalb von $T_{\text{hom}} = -38$ °C keine homogene Eisnukleation stattfindet und es für die heterogene Variante an Eiskeimen bedarf, ist das Ausmaß der Bildung von Eispartikel stark durch die Verfügbarkeit jener Eiskeime bestimmt. Bei SPPs handelt es sich zudem nicht nur um zusätzliche Eiskeime, sondern auch um eine zusätzlich betrachtete Klasse, welche in Temperaturbereichen eisaktiv ist, in denen dies auf andere Eiskeimklassen nicht zutrifft. Dass die SPP-Konzentration die Eisnukleation und somit auch die Eispartikelanzahldichte beeinflussen kann, insbesondere in Temperaturbereichen der Atmosphäre, die überwiegend biologische Eisnukleation ermöglichen, ist demzufolge zu erwarten.

Abbildung 4.5 zeigt zwei 2D-Histogramme, in welchen die Eispartikelanzahldichte auf die SPP-Konzentration aufgetragen ist. Die rechte Darstellung veranschaulicht das Simulationsergebnis des Experimentlaufs mit 100 %-iger SPP-Erzeugung, während die linke den zugehörigen Kontrolllauf darstellt. Beide Histogramme geben die Anzahl an Gitterpunkten an, welche einer bestimmten Klasse der Eispartikelanzahldichte und der SPP-Konzentration angehören, wobei alle Ausgaben der Modellsimulationen berücksichtigt sind, welche nach jeder simulierten Stunde erfolgen. Aufgrund der zu erwarteten großen Spannweite der beiden betrachteten Größen, sind jene logarithmisch aufgetragen.



Abbildung 4.5: **Histogramme Eispartikelanzahldichte über SPP-Konzentration (ER100).** Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die absolute Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des gesamten Simulationszeitraums, für die T < 274 K gilt. Die linke Darstellung stellt den Kontrolllauf ohne biologische Eisnukleation dar, der rechte den Experimentlauf mit biologischer Eisnukleation.

Die simulationsbedingte Unabhängigkeit der SPP-Konzentration auf die Eispartikelanzahldichte im Kontrolllauf spiegelt sich in der linken Darstellung wider. Es ist zu erkennen, dass die am häufigsten vorkommenden Werte der SPP-Konzentration bei mehreren 100 kg⁻¹ liegen, was bei Berücksichtigung der Tatsache, dass aus einer Polle etwa 1000 SPP werden, den Erwartungen nahe kommt. Des Weiteren ist eine Struktur (Mode) auszumachen, welche sich bei einer Eispartikelanzahldichte von etwa $1 \cdot 10^5$ bis $1 \cdot 10^6$ kg⁻¹ befindet, was bedeutet, dass dieser Bereich der Eispartikelanzahldichte am häufigsten vorkommt. Diese Mode zeigt konstruktionsbedingt (Kontrolllauf) keine Abhängigkeit gegenüber der SPP-Konzentration, sondern ebenfalls lediglich die Verteilung jener wie auch im Bereich kleinerer Eispartikelanzahldichten. Auch im Experimentlauf (rechte Darstellung) sind diese Grundstruktur, welche die SPP-Konzentrationsverteilung beschreibt, und die Mode aus dem Kontrolllauf vorhanden. Auch wenn letztere durch größere Werte der Gitterpunktsanzahl dargestellt ist, zeigt sich weiterhin keine Abhängigkeit zur SPP-Konzentration. Hieraus lässt sich schließen, dass die Änderung der Magnitude dieser Mode in der Tatsache begründet liegt, dass biologische Eisnukleation stattfindet, aber nicht direkt vom Ausmaß jener abhängt. Dies bekräftigt sich weiter, da die Vergrößerung der Amplitude auch bei kleinen SPP-Konzentrationen stattfindet. Die Grundstruktur der SPP-Konzentrationverteilung ist auch in dieser Darstellung unterhalb der Mode auszumachen. Allerdings ist dieser eine zweite Struktur überlagert: Diese erstreckt sich von Eispartikelanzahldichten von etwa 10 kg⁻¹ und SPP-Konzentrationen von etwa 10 kg⁻¹ hin zu Eispartikelanzahldichtewerten von etwa $1 \cdot 10^4$ kg⁻¹ und SPP-Konzentrationen von $1 \cdot 10^4$ kg⁻¹. Im Gegensatz zur anderen Mode, weist diese eine deutliche Abhängigkeit der Eispartikelanzahldichte von der SPP-Konzentration auf. In dieser Mode führt eine Erhöhung der SPP-Konzentration zu einer Erhöhung der Eispartikelanzahldichte. Zudem befinden sich die Eispartikelanzahldichte und die SPP-Konzentration in der selben Größenordnung, woraus sich schließen lässt, dass die Mode durch die biologische Eisnukleation entsteht und die Größe dieser Mode vom Ausmaß der biologischen Eisnukleation abhängt. Bei Betrachtung der Eispartikelanzahldichteverteilung für einen festen Wert der SPP-Konzentration ist die beschriebene bimodale Struktur ebenfalls zu erkennen, insbesondere bei SPP-Werten größer als 1 kg^{-1} : Die Lage der einen Mode ist abhängig von der SPP-Konzentration und die Lage des anderen Mode bleibt stets bei etwa $n_i = 1 \cdot 10^6 \text{ kg}^{-1}$. Diese Beobachtung lässt vermuten, dass die von der SPP-Konzentration abhängige Mode in Temperaturbereichen auftritt, in welchen überwiegend biologische Eisnukleation stattfindet, da die Anzahl der gebildeten Eispartikel hierfür von der Anzahl der zur Verfügung stehenden biologischen Eiskeime abhängt, während die von der SPP-Konzentration unabhängige Mode bei niedrigeren Temperaturen liegt und somit von nicht-biologischen Eisnukleationsprozessen dominiert ist.

Zur Bestätigung dieser Vermutung zeigt Abbildung 4.6 die gleichen Läufe wie die vorige Abbildung 4.5 nach Anwendung eines Filters, durch welchen nur jene Gitterpunkte in den Darstellungen berücksichtigt werden, für die $250 \text{ K} \le T \le 274 \text{ K}$ gilt. Die Wahl dieses Temperaturbereichs ist der Tatsache geschuldet, dass die biologische Eisnukleation hierin dominant ist. Bei Betrachtung beider Darstellungen fällt auf, dass die Mode bei Eispartikelanzahldichten von $1 \cdot 10^5$ bis $1 \cdot 10^6 \text{ kg}^{-1}$, welche in Abbildung 4.5 auftritt, nicht mehr vorhanden ist. Folglich ist diese Mode durch Prozesse bedingt, welche sich nicht im betrachteten Temperaturbereich abspielen, sondern bei niedrigeren Temperaturen. Somit nimmt die biologische Eisnukleation für diese Mode eine untergeordnete Rolle ein. Einer gänzlichen Unabhängigkeit dieser Mode von biologischen Eisnukleationsprozessen steht bereits der Einfluss jener auf die Amplitude der Mode in Abbildung 4.5 entgegen. Die linke Dar-



Abbildung 4.6: Histogramme Eispartikelanzahldichte über SPP-Konzentration (ER100, Temperaturfilter). Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die absolute Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des gesamten Simulationszeitraums, für die $250 \text{ K} \le T \le 274 \text{ K}$ gilt. Die rechte Darstellung stellt den Experimentlauf mit biologischer Eisnukleation dar, die linke den Kontrolllauf ohne biologische Eisnukleation.



Abbildung 4.7: **Differenzhistogramm Eispartikelanzahldichte über SPP-Konzentration (ER100).** Die Ordinate und Abszisse sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die Differenz der absoluten Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte zwischen Experiment und Kontrolllauf. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des gesamten Simulationszeitraums, für die T < 274 K gilt. Es ist ein deutliches Signal bei hohen SPP-Konzentrationen und Eispartikelanzahldichten zu erkennen.

stellung zeigt nun aufgrund des Fehlens jener Mode eine deutlichere Repräsentation der Verteilung der SPP-Konzentration. Diese zeichnet sich in diesem Temperaturbereich dadurch aus, dass sich die am häufigsten vorkommenen Werte im Vergleich zu Abbildung 4.5 der SPP-Konzentration auf einige 1000 kg^{-1} verschieben. Dies ist dadurch erklärbar, dass der gewählte Temperaturbereich eine geringere Höhenerstreckung aufweist und somit viele SPPs im Quellgebiet (also bei den Pollen) berücksichtigt sind, was bei einer SPP-Emissionsrate von etwa 1000 pro Polle die aufgeführten Konzentrationen erklärt. In der rechten Darstellung aus Abbildung 4.6 ist weiterhin die Mode, welche die Abhängigkeit der Eispartikelanzahldichte von der SPP-Konzentration beschreibt, enthalten. Diese führt sich im Vergleich zur rechten Darstellung in Abbildung 4.5 leichter ersichtlich auch zu kleineren Eispartikelanzahldichten und SPP-Konzentrationen fort. Demzufolge bestätigt sich die aufgestellte Vermutung, dass jene Mode in Temperaturbereichen auftritt, die durch die biologische Eisnukleation dominiert sind.

Für eine genauere Untersuchung der bisher gewonnenen Erkenntnisse über den SPP-Einfluss sei auf die Darstellung in Abbildung 4.7 verwiesen. Auch sie stellt ein 2D-Histogramm dar. Allerdings handelt es sich hierbei um das Ergebnis der Differenzbildung der 2D-Histogramme aus Abbildung 4.5 (im Folgenden werden diese Histogramme als Differenzhistogramme bezeichnet). Farblich codiert ist in einem solchen Differenzhistogramm wie viel Gitterpunkte mehr oder weniger der Experimentlauf gegenüber dem Kontrolllauf im betrachteten Datenpunktbereich aufweist. Im dargestellten Differenzhistogramm ist den Erwartungen entsprechend ein Signal im Bereich der von der biologischen Eisnukleation abhängigen Mode zu erkennen. Zudem zeigt die Darstellung unterhalb dieses positi-

ven Signals ein vermutlich hierzu gehörendes negatives Signal. Ein solches negatives Signal ist zu erwarten, da aufgrund der alleinigen Unterscheidung der beiden berücksichtigten Simulationen in der aktivierten biologischen Eisnukleation die Gesamtanzahl an Gitterpunkten in erster Näherung gleich bleibt. Mithilfe dieses negativen Signals ist es nun möglich zu beschreiben, wodurch sich das Signal bildet und wie es mit der biologischen Eisnukleation zusammenhängt. Das negative Signal befindet sich bei kleineren Werten der Eispartikelanzahldichte als das positive Signal selbst, aber bei gleichen Werten der SPP-Konzentration. Die Breite des abgedeckten Bereichs bezüglich der Eispartikelanzahldichte ist abhängig von der SPP-Konzentration. Je größer diese ist, desto weiter erstreckt sich der Bereich der Eispartikelanzahldichte des negativen Signals. Es zeigt, dass durch das Aktivieren der biologischen Eisnukleation weniger Gitterpunkte mit hoher SPP-Konzentration und einer Eispartikelanzahldichte, die kleiner ist als die SPP-Konzentration, entstehen. Das positive Signal darüber, wodurch die zusätzliche Mode entsteht, verdeutlicht, dass sich in diesen Gitterzellen bei aktivierter biologischer Eisnukleation weiterhin die gleiche SPP-Konzentration befindet, aber nun eine Eispartikelanzahldichte vorzufinden ist, welche in der selben Größenordnung ist wie die SPP-Konzentration. Bereits bei der anfänglichen Betrachtung der Darstellungen in Abbildung 4.5 ist aufgefallen, dass auch die nicht-biologische Mode durch die Aktivierung der biologischen Eisnukleation eine Veränderung erfährt, welche sich in der Stärke dieser Mode ausdrückt. Dieses Signal findet sich erwartungsgemäß auch im Differenzhistogramm (Abbildung 4.7) bei SPP-Konzentrationen von $10 - 100 \text{ kg}^{-1}$ und Eispartikelanzahldichten von $1 \cdot 10^5 - 1 \cdot 10^6 \text{ kg}^{-1}$. Aufgrund der deutlich unterschiedlichen Größenordnung zwischen diesen beiden Größen ist ableitbar, dass dieses Signal nicht mit einer Erhöhung der Anzahl an Eispartikeln durch das Vorhandensein zusätzlicher Eiskeime zu erklären ist. Es zeigt sich vielmehr, dass sich dieses positive Signal nicht durch die Erhöhung der Eispartikelanzahldichte bildet, da unterhalb des Signals kein negatives Signal auszumachen ist, das eine Verbindung hierzu darstellt. Ein solches negatives Signal befindet sich allerdings oberhalb des positiven Signals, also bei höheren Werten der Eispartikelanzahldichte. Die Erklärungsgrundlage hierfür ist vermutlich die zur Verfügung stehende Feuchte. Diese wird durch die einsetzende biologische Eisnukleation im Experimentlauf bereits bei relativ hohen Temperaturen zur Eisbildung verwendet und daraufhin weiter zur Vergrößerung der gebildeten Eispartikel. Durch das Absinken der Temperatur werden weitere Aerosolklassen eisaktiv und initiieren mit der Restfeuchte weitere Eisnukleation, wodurch sich weitere Eispartikel bilden. Da durch den biologische Eisnukleationsprozess aber bereits ein Großteil der Feuchte aufgebraucht ist, können insgesamt weniger Aerosolklassen zur Eisnukleation beitragen als wenn es zu keiner biologischen Eisnukleation kommt (Kontrolllauf). Dies erklärt auch, warum das negative Signal bei Eispartikelanzahldichten von etwa $1 \cdot 10^8 \text{ kg}^{-1}$ liegt. Die im Experimentlauf nicht mehr aktivierten Klassen sind aller Voraussicht nach in dieser deutlich größeren Anzahlkonzentration vorhanden. Alternativ zu einer nicht aktivierten Aerosolklasse kann auch der nicht mehr einsetzende homogene Eisnukleationsprozess hierfür verantwortlich sein.

Ein weiterer Punkt, der auffällt, ist die Tatsache, dass in den Differenzhistogrammen kein Signal zu erkennen ist, welches mit dem Hallett-Mossop-Prozess der sekundären Eisproduktion in Verbindung stehen könnte. Bei diesem Prozess findet Eismultiplikation statt (zum Beispiel durch das Zerbrechen der vorhandenen Eispartikel), wodurch die Eispartikelanzahldichte um mehrere Größenordnungen größer ist als jene der primären Eiskeime. Da die SPP-Konzentration und die Eispartikelanzahldichte bei Betrachten der biologischen Mode sich in der selben Größenordnung befinden, ist zu vermuten,



Abbildung 4.8: Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über SPP-Konzentration (ER1 und ER10). 1 %- (links) und 10 %-Simulationsläufe (rechts). Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die Differenz der absoluten Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte zwischen Experiment und Kontrolllauf. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des gesamten Simulationszeitraums, für die T < 274 K gilt. Es ist ein zueinander und zu Abbildung 4.7 vergleichbar deutliches, aber abhängig von der SPP-Emissionsrate weniger stark ausgeprägtes Signal zu erkennen.

dass dieser Hallett-Mossop-Prozess nicht oder nur sehr schwach zum Tragen kommt.

Im vorangegangenen Teil dieser Auswertung ist aufgeführt, wie sich der Einfluss der SPPs auf die Eispartikelanzahldichte bei aktivierter biologischer Eisnukleation bemerkbar macht und wie sich das erklären lässt. Wie sensitiv dieser Einfluss auf die zur Verfügung stehende Anzahl der SPPs ist, zeigen die nun folgenden Differenzhistogramme in Abbildung 4.8. Die Simulation, deren Daten zum linken Histogramm führt, stößt nur noch 1 % der maximal möglichen SPPs aus, während jene für das rechte Histogramm 10% emittiert. Sowohl das 1%- wie auch das 10%-Histogramm zeigen deutlich ein Signal, welches dem aus Abbildung 4.7 entspricht und die Abhängigkeit der Eispartikelanzahldichte von der SPP-Konzentration beschreibt. Die Signale in den Differenzhistogrammen unterscheiden sich allerdings voneinander und von jenem in Abbildung 4.7 bei Betrachtung deren Einflussbereiche. Während in der Basissimulation (siehe Abbildung 4.7) Werte von bis zu mehr als $1 \cdot 10^4 \text{ kg}^{-1}$ für die Eispartikelanzahldichte und SPP-Konzentration erreicht werden, so erstreckt sich das Signal bei der 10 %-Simulation auf etwas über $1 \cdot 10^3 \text{ kg}^{-1}$ und bei der 1 %-Simulation auf nur noch einige 100 kg⁻¹. Dieses Signal liegt, wie oben erkannt, in der Erhöhung der Eiskeimanzahl in Form von SPPs bei aktivierter biologischer Eisnukleation begründet, was des Weiteren durch das ebenfalls vorhandene entsprechende negative Signal unterhalb dieses Signals verdeutlicht ist. Eine Verringerung der SPP-Emissionsrate führt zu einer Verringerung der Anzahl an SPPs in der Atmosphäre. Diese sind weiterhin sehr effizient, wenn die biologische Eisnukleation aktiviert ist, aber durch ihre geringe Anzahl können sich bei sonst gleichen Bedingungen auch nur geringere Anzahlen an Eispartikel bilden. Dass die Reduktion der gesamten SPP-Konzentration im Modelllauf ebendiese Auswirkung auf das positive Signal und das zugehörige negative Signal hat, bestätigt weiter die Vermutung, dass die mit diesem Signal verbundene hinzukommende Mode durch eine Erhöhung der Eispartikelanzahldichte bei steigender SPP-Konzentration entsteht, wenn biologische Eisnukleation berücksichtigt wird. Auch der in der 100 %-Simulation erkannte sekundäre Effekt, bei dem durch die biologische Eisnukleation die Eispartikelanzahldichte jener Gitterzellen reduziert wird, bei denen überwiegend nicht-biologische Eisnukleation stattfindet, ist zu erkennen. Allerdings weniger durch das entsprechende positive Signal, sondern eher durch das negative Signal bei sehr hohen Eispartikelanzahldichten $(1 \cdot 10^7 \text{ bis } 1 \cdot 10^8 \text{ kg}^{-1})$. Vergleichbar zum Signal der biologischen Mode verschiebt sich dieses Signal bei geringerer SPP-Emissionsmenge zu geringeren Werten der SPP-Konzentration. Die Tatsache, dass es allerdings bezüglich der Eispartikelanzahldichte weitestgehend bei ähnlichen Werten vorzufinden ist, bestätigen den indirekten nachgelagerten Effekt, den die biologische Eisnukleation hierauf hat. Die durch die biologische Eisnukleation gebildeten Eispartikel sind zwar in geringerer Anzahl vorhanden, haben aber einen sehr ähnlichen Grenze für weitere Eisnukleation bei geringeren Temperaturen.

Diese Betrachtung der reduzierten Signale veranschaulicht, warum biologische Eisnukleation bislang weitestgehend unberücksichtigt bleibt: Die Pollenkonzentration befindet sich etwa bei 0,1 % der SPP-Konzentration, was selbst ohne Berücksichtigung der erhöhten Größe und Masse zu einer weiteren Verringerung des Signals der biologischen Mode zu führen scheint. Werden letztere auch berücksichtigt, was zur Folge hat, dass die Pollen noch seltener in Temperaturbereiche vordringen, in welchen sie zur Eisnukleation beitragen könnten, so ist der direkte Einfluss der Pollen auf die Eisnukleation kaum auszumachen. Der Effekt auf die nicht-biologische Mode ist zwar weitestgehend unabhängig von der SPP-Konzentration, bedarf aber dennoch der eintretenden biologischen Eisnukleation, die zu dem beschriebenen Feuchteverbrauch führt. Jene wird bei den größeren und schwereren Pollen wie erwähnt wohl kaum erfolgen.

Zur Einschätzung der zeitlichen Entwicklung der beobachteten Signale, stellt Abbildung 4.9 Differenzhistogramme der 100 %-Simulation dar, in welchen lediglich der Anfangs- beziehungsweise Endzeitraum der Simulation berücksichtigt wird. Der Anfangszeitraum beinhaltet die Tage 2 und 3 der Simulation, der Endzeitraum die Tage 9 und 10. Zum Initialzeitpunkt des Modells sind weder Pollen noch SPP in der Atmosphäre. Diese werden erst im Laufe der Simulation emittiert, wodurch der Anfang der Simulation weniger SPP enthält als das Ende. Es handelt sich somit zum Teil ebenfalls um eine Variation der SPP-Konzentration, welche sich allerdings durch eine Variation der Anzahl der Gitterpunkten mit gleichen SPP-Konzentrationen ausdrückt, statt der zuvor betrachteten gleichen Gitterpunktsmenge mit variierender SPP-Konzentration. Die linke Darstellung der Abbildung 4.9 repräsentiert den Anfangszeitraum und zeigt bereits eine deutliche Ausprägung der Signale. Das von der SPP-Konzentration abhängige Signal der biologischen Mode ist mitsamt dem zugehörigen negativen Signal im Vergleich zu den entsprechenden Signalen des Gesamtzeitraums auch bei geringeren SPP-Konzentrationen (bis zu 0,1 kg⁻¹) auszumachen. Auf der anderen Seite sind die größeren Werte von $1 \cdot 10^4 \text{ kg}^{-1}$ aufwärts vergleichsweise weniger stark ausgeprägt. Dieses Phänomen ist bei der rechten Darstellung der Abbildung 4.9 für den Endzeitraum umgekehrt. Das Signal schwindet für SPP-Konzentrationen unterhalb von 10 kg^{-1} , weist allerdings eine stärkere Ausprägung bei den größeren Werten auf. Erklären lässt sich diese Verschiebung des Signaleffektbereichs dadurch, dass es am

Anfang weniger Gitterzellen mit größeren SPP-Konzentrationen gibt, da diese erst aufgebaut werden müssen. Mit fortschreitender Simulationszeit nimmt diese Anzahl zu und die SPPs werden über eine weitere Fläche verteilt, sodass geringe SPP-Konzentrationen immer weiter verbreitet werden und der Einfluss jener im Rauschen untergeht. Bei Betrachtung des Signals zur nicht-biologischen Mode fällt auf, dass sowohl der Anfang als auch das Ende der Simulation dieses aufweisen. Der Anfangszeitraum wirkt in diesem Bereich der Eispartikelanzahldichte etwas verrauschter als der Endzeitraum, zudem dominieren negative Werte diesen Bereich in der linken Darstellung, während in der rechten Darstellung der Großteil des Bereichs von positiven Werten bedeckt ist. Auch das Signal der nicht-biologischen Mode selbst streut zu Anfang mehr als am Ende der Simulation, was durch die im Allgemeinen geringere Menge an berücksichtigten Gitterpunkten erklärbar ist.

Während das Signal der biologischen Mode ähnlich auf die zwei Formen der Variation der SPP-Konzentration (unterschiedlich viel emittieren und zu unterschiedlichen Zeiten betrachten) reagiert, zeigt das Signal der nicht-biologischen Mode unterschiedliche Reaktionen auf die Variationsformen. Die Variation der SPP-Emissionsrate führt überwiegend zu einer Verschiebung des Signals zu kleineren oder größeren SPP-Konzentrationswerten, was insbesondere durch das zugehörige negative Signal deutlich wird (siehe hierzu Abbildung 4.8), wohingegen die Betrachtung unterschiedlicher Zeiträume zu einer Änderung des Streuverhaltens des Signals führt.

Der zurückliegende Teil der Auswertung betrachtet die Abhängigkeit der Eispartikelanzahldichte von der SPP-Konzentration und die Sensitivität der auftretenden Signale und Moden gegenüber Variationen der SPP-Emissionsmenge und bezüglich der zeitlichen Entwicklung. Im Folgenden sind andere



Abbildung 4.9: Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über SPP-Konzentration (ER100, Anfang und Ende). Anfangs- (links) und Endzeitraum (rechts) der Simulation. Die Ordinaten und Aszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die Differenz der absoluten Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte zwischen Experiment und Kontrolllauf. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des genannten Simulationszeitraums, für die T < 274 K gilt. Die Signale sind ähnlich der aus Abbildung 4.7, weisen aber einen unterschiedlichen Effektbereich auf. Am Anfang liegen mehr geringere SPP-Konzentrationen vor und am Ende mehr größere.



Abbildung 4.10: **Differenzhistogramm Eispartikelanzahldichte über Temperatur (ER100).** Die Ordinate und Abszisse sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die Differenz der absoluten Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte zwischen Experiment und Kontrolllauf. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des gesamten Simulationszeitraums, für die T < 274 K gilt. Es ist ein Anstieg der Eispartikelanzahldichten (n_i) bei relativ hohen Temperaturen zu beobachten.

Größen Teil der Untersuchung. So stellt Abbildung 4.10 ein Differenzhistogramm dar, in dem anstelle der SPP-Konzentration die Temperatur der Gitterzelle aufgeführt ist. Aufgrund der Betrachtung von Eispartikeln ist der Ausschnitt bezüglich der Temperatur auf Werte unterhalb von 274 K gesetzt. Auch in dieser Darstellung ist ein deutlich ausgeprägtes positives Signal mit zugehörigem negativem Signal zu erkennen. Durch die biologische Eisnukleation mithilfe von SPPs ist ein Verlust an für die Eisbildung relativ warmen Gitterzellen ($260 \text{ K} \le T \le 274 \text{ K}$) mit geringer Eispartikelanzahldichte $(1 \cdot 10^{-2} \text{ kg}^{-1} \le n_i \le 1 \text{ kg}^{-1})$ und ein Gewinn an ähnlich warmen Gitterzellen mit höherer Eispartikelanzahldichte $(1 \cdot 10^2 \text{ kg}^{-1} \le n_i \le 1 \cdot 10^4 \text{ kg}^{-1})$ zu erkennen. Die Größenordnung der Eispartikelanzahldichte deckt sich mit jenen der biologischen Mode, welche in den vorigen Untersuchungen identifiziert wird (siehe hierzu auch Abbildung 4.7 auf Seite 31). Das Beschriebene deutet darauf hin, dass in jenen Gitterzellen, die diese Erhöhung der Eispartikelanzahldichte im Experimentlauf erfahren, höhere Konzentrationen an SPPs vorliegen, welche durch das Aktivieren der biologischen Eisnukleation als Eiskeime fungieren und dadurch bei diesen relativ hohen Temperaturen neue Eispartikel entsprechend der zugrunde liegenden SPP-Konzentration bilden. Neben dem Signal zur biologischen Mode ist auch ein Signal zur nicht-biologischen Mode in Abbildung 4.10 ersichtlich. Es ist zu erkennen, dass der Experimentlauf (mit aktivierter biologischer Eisnukleation) gegenüber dem Kontrolllauf (keine biologische Eisnukleation) eine reduzierte Anzahl an Gitterzellen mit sehr hoher Eispartikelanzahldichte $(1 \cdot 10^6 - 1 \cdot 10^8 \text{ kg}^{-1})$ und niedrigen Temperaturen (T < 250 K) und einer Erhöhung jener mit etwas geringerer Eispartikelanzahldichte $(1 \cdot 10^5 - 1 \cdot 10^6 \text{ kg}^{-1})$ und ähnlich niedrigen Temperaturen vorweist, was dem Signal zur nicht-biologischen Mode in Abbildung 4.7 (Seite



Abbildung 4.11: **Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über Temperatur (ER1 und ER10).** 1 %-(links) und 10 %-Simulation (rechts). Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die Differenz der absoluten Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte zwischen Experiment und Kontrolllauf. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des genannten Simulationszeitraums, für die T < 274 K gilt. Die Signale sind ähnlich der aus Abbildung 4.10, weisen aber eine Verschiebung des Signals zu geringeren Temperaturen und geringeren Eispartikelanzahldichten auf.

31) entspricht. Die Betrachtung der Eispartikelanzahldichte gegenüber der Temperatur bestätigt insbesondere die Vermutung, dass die beiden Signale zur biologischen und nicht-biologischen Mode in unterschiedlichen Temperaturregimen liegen. Anders als der Vergleich der Abbildungen 4.5 und 4.6, welcher zur gleichen Aussage führt, ist dies hier besser aufgelöst.

Zudem ist ein weiteres Signal mit negativen Werten zu erkennen, welches bei einer Temperatur von 262 K und einer Eispartikelanzahldichte von etwa $1 \cdot 10^{-1} \text{ kg}^{-1}$ beginnt und mit sinkender Temperatur bei größeren Werten der Eispartikelanzahldichte endet. Die Form, die geringe Streuung und die Größenordnungen, in welchen sich das Signal befindet, in Zusammenhang mit der Tatsache, dass es sich hierbei um ein negatives Signal handelt, jene Werte der Gitterpunkte bei Betrachtung von SPPs als biologische Eiskeime also in geringerer Anzahl vorkommen, lassen vermuten, dass es sich hierbei um ein von der homogenen Eisnukleation hervorgerufenes Signal handelt. Aufgrund des erhöhten Aufkommens heterogener Eisnukleation mit SPPs als Eiskeime werden demnach homogene Eisnukleationsprozesse, die in diesen Temperaturbereichen selten vorkommen, weiter unterdrückt.

Zur Untersuchung des Einflusses unterschiedlicher gesamter SPP-Konzentration auf die gewonnenen Erkenntnisse zeigt Abbildung 4.11 die Eispartikelanzahldichte-Temperatur-Differenzhistogramme für den 1%- und den 10%-Lauf. Vergleichbar zur Darstellung in Abbildung 4.10 sind auch in diesen Darstellungen die beschriebenen Signale zu erkennen. Das Signal zur nicht-biologischen Mode (Verlust von Gitterpunkten mit sehr hoher Eispartikelanzahldichte und Zuwachs an solchen mit etwas geringerer Eispartikelanzahldichte bei niedrigen Temperaturen) bleibt weitestgehend unverändert erhalten. Bereits bei der vorigen Betrachtung der Differenzhistogramme in Abbildung 4.8 (Seite 33)

wird vermutet, dass das Signal weitestgehend unabhängig vom Wert der SPP-Konzentration ist und die Verschiebung des Signals zu kleineren SPP-Konzentration lediglich auf die allgemeine Reduktion der SPP-Konzentration bei Verringerung der SPP-Emissionsmenge zurückzuführen ist. Die Tatsache, dass das Signal zur nicht-biologischen Mode in den Darstellungen der Abbildung 4.11 weitestgehend unverändert bleibt, bestätigt diese Vermutung. Im Gegensatz hierzu zeigt das Signal zur biologischen Mode Veränderungen durch die Variation der SPP-Emissionsmenge. Während das zugehörige negative Signal unterhalb dieses an ähnlicher Stelle mit ähnlicher Amplitude bleibt, so verschiebt sich das positve Signal selbst bei verringerter SPP-Ausstoßmenge hin zu geringeren Eispartikelanzahldichten. Dieses Verhalten ist eine weitere Bestätigung der Erkenntnisse aus den Darstellungen in Abbildung 4.8, in welchen das gleiche Verhalten zu beobachten ist, und somit stärkt dies weiter die Vermutung, dass jenes Signal direkt durch die Prozesse der biologischen Eisnukleation entsteht. In den 100%-, 10%- und 1%-Experiment-Kontrolllaufpaaren bilden die gleichen Gitterzellen das Signal zur biologischen Mode. Während sie in den Kontrollläufen die gleichen Charakteristika bezüglich Eispartikelanzahldichte und Temperatur haben, so unterscheiden sie sich in ihrer SPP-Konzentration, welche abhängig ist von der SPP-Emissionsmenge. In den Kontrollläufen ist die SPP-Konzentration für die Eispartikelanzahldichte nicht von Bedeutung, in den Experimentläufen hingegen schon, weswegen sich diese Gitterzellen dann insbesondere bezüglich der Eispartikelanzahldichte voneinander unterscheiden. So bildet sich das negative Signal der biologischen Mode an etwa der gleichen Stelle und Amplitude im Eispartikelanzahldichte-Temperatur-Differenzhistogramm aus (Abbildungen 4.10 und 4.11), das zugehörige positive Signal verschiebt sich allerdings.

Neben den Bestätigungen bereits erworbener Erkenntnisse zeigt Abbildung 4.11 einen weiteren Effekt, den die SPPs und die biologische Eisnukleation auf die Eisbildung ausübt. Das Signal der biologischen Mode verschiebt sich nicht nur zu kleineren Eispartikelanzahldichten, wenn weniger SPPs ausgestoßen werden, sondern auch zu niedrigeren Temperaturen, was insbesondere bei Betrachtung des Maximums der Signale deutlich wird. So befindet sich jenes für die 1 %-Simulation bei etwa 269 K, während die 10 %-Simulation jenes Maximum bei etwa 270 K aufweist und die 100 %-Simulation aus Abbildung 4.10 bei etwa 271 K. Ein möglicher Erklärungsansatz hierfür ist, dass durch die geringere Eiskeimanzahl ein geringerer Wert der Feuchte für die Nukleation aufgebraucht wird und somit weniger Gefrierwärme frei wird als bei höherer Eiskeimanzahl.

Da die Temperatur als Auswahlcharakteristik des dominierenden Eisnukleationsprozesses für diese Untersuchungen stets von Bedeutung ist und eine Repräsentation der Höhe darstellt, in welcher sich die damit verbundenen Prozesse abspielen, zeigt diese abschließende Untersuchung des Einflusses der biologischen Eisnukleation mit SPPs auf die Eispartikelanzahldichte jenen auf deren mittleres Vertikalprofil. Aufgrund der hohen Temperaturen, bei welchen die biologische Eisnukleation stattfindet und zur Bildung der biologischen Mode führt, ist ein Anstieg der Eispartikelanzahldichte in Höhen von wenigen Tausend Metern zu erwarten. Als Effekt auf die nicht-biologische Mode sollte zudem eine Reduktion der Eispartikelanzahldichte in größeren Höhen, in denen die biologische Eisnukleation keinen dominanten Einfluss mehr aufweist, zu beobachten sein, da durch die in den unteren Schichten auftretende Eisnukleation die vorhandene Feuchte verbraucht wird. Um diesen Vermutungen nachzugehen zeigt Abbildung 4.12 drei Vertikalprofile. Die blaue Kurve repräsentiert hierbei den Experimentlauf (mit aktivierter bioloigscher Eisnukleation), die rote den Kontrolllauf (ohne biologische Eisnukleation) und die violette die relative Abweichung, welche von der biologischen



Abbildung 4.12: Vertikalprofile der mittleren Eispartikelanzahldichte (ER100). Die Ordinate ist linear skaliert, die untere Abszisse logarithmisch und die obere Abszisse linear. Mittleres Höhenprofil des Experimentlaufs (blau), mittleres Höhenprofil des Kontrolllaufs (rot) und relative Abweichung der Höhenprofile zueinander (violett). Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des gesamten Simulationszeitraums. Es ist ein Zuwachs der mittleren Eispartikelanzahldichte in den unteren Höhen und eine Abnahme in den oberen Höhen zu sehen.

Eisnukleation mit SPP gegenüber dem Kontrolllauf verursacht wird. Es ist zu erkennen, dass die beiden Profile des Experiment- und Kontrolllaufs einen sehr ähnlichen Verlauf aufweisen. Da die Abszisse logarithmisch skaliert ist, verdeutlicht dies, dass die Profile sich in der gleichen Größenordnung zueinander befinden. Obwohl sie sich qualitativ im Verlauf ähneln, so zeigen sich quantitativ allerdings doch Unterschiede, welche durch die violette Kurve (aufgrund ihrer linearen Abszisse) besser hervortreten. Der Verlauf dieser violetten Kurve bestätigt die beiden oben formulierten Erwartungen, welche an den Einfluss der biologischen Eisnukleation auf das Höhenprofil der Eispartikelanzahldichte aufgestellt werden. Zwischen etwa 600 m und etwa 4000 m Höhe weist das Vertikalprofil der mittleren Eispartikelanzahldichte einen Zuwachs bei aktivierter biologischer Eisnukleation auf. Der Zuwachs erreicht einen relativen Höchstwert von etwa 10 % in etwa 2000 m Höhe. Aufgrund der zu erwarteten Temperaturen in diesem Höhenbereich ist diese Abweichung der biologischen Mode zuzuordnen. Ab 4000 m bis hin zu 10000 m Höhe von etwa 8000 m erreicht. Da diese Höhen mit geringeren Temperaturen verbunden sind, stellt dieses Signal eine Repräsentation des Einflusses der durch SPP ermöglichten biologischen Eisnukleation auf die nicht-biologischen Mode dar.

Der folgende Teil widmet sich erneut dem Signal der biologischen Mode. Aufgrund der relativ starken Erhöhung der mittleren Eispartikelanzahldichte in einer Höhe von ein paar Tausend Metern und



Abbildung 4.13: **Vertikalprofile der mittleren Wolkentropfenanzahldichte (ER100).** Die Ordinate ist linear skaliert, die untere Abszisse logarithmisch und die obere Abszisse linear. Mittleres Höhenprofil des Experimentlaufs (blau), mittleres Höhenprofil des Kontrolllaufs (rot), relative Abweichung der Höhenprofile zueinander (violett). Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des gesamten Simulationszeitraums. Es ist ein starker Verlust an Wolkentropfen in Höhen bis zu etwa 4000 m zu erkennen.

der Tatsache, dass in diesen Höhen auch Wolkentropfen und somit Mischphasenwolken vorhanden sind, ist es von Interesse den Einfluss dieser erhöhten Eispartikelanzahldichte auf die Anzahldichte der Wolkentropfen zu untersuchen. Dementsprechend zeigt Abbildung 4.13 die Untersuchung des mittleren Höhenprofils der Wolkentropfenanzahldichte. Erneut stellt die blaue Kurve die Daten des Experimentlaufs, die rote Kurve jene des Kontrolllaufs und die violette Kurve die relative Abweichung der beiden zueinander dar. Zunächst fällt auf, dass sowohl das Höhenprofil des Experimentlaufs wie auch das des Kontrolllaufs ab einer Höhe von etwa 4000 m mit der Höhe sehr stark abfällt. Dieses verhalten entspricht den Erwartungen, da ab diesen Höhen auch ohne biologische Eisnukleation Eispartikel vorhanden sind, welche auf Grundlage des Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozesses, welcher beschreibt, dass Eispartikel auf Kosten von Wolkentropfen anwachsen, die Feuchte überwiegend für sich beanspruchen und somit zu einer starken Reduktion der Wolkentropfen führen. Bei Betrachtung der relativen Differenz dieser beiden Höhenprofile ist zu erkennen, dass durch die aktivierte biologische Eisnukleation eine starke Reduktion der Wolkentropfenanzahldichte in Höhen zwischen 1000 m und 7000 m erfolgt. Die maximale relative Reduktion der Wolkentropfenanzahldichte liegt in einer Höhe von etwa 4000 m mit einem Wert von etwa 35 % vor. Es zeigt sich also, dass die biologische Eisnukleation im Höhenbereich der biologischen Mode nicht nur zu einer Erhöhung der Eispartikelanzahldichte führt, sondern hierdurch auch zu einer starken Reduktion der Wolkentropfenanzahldichte. Dies hat somit einen starken Einfluss auf die Zusammensetzung der sich bildenden Mischphasenwolken. Dass sich das Maximum des Zuwachses der Eispartikelanzahldichte in niedrigeren Höhen befindet als das Maximum der Abnahme der Wolkentropfenanzahldichte erscheint zunächst etwas kontraintuitiv, lässt sich aber unter anderem durch den wirkenden Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozess erklären. Die Bildung der zusätzlichen Eispartikel durch die biologische Eisnukleation wendet zunächst Feuchte hierfür auf, die nicht mehr für die Bildung von Wolkentropfen verwendet werden kann, was zu einer einfachen Reduktion der Wolkentropfenanzahldichte führt. Da sich nun aber eine erhöhte Anzahl an Eispartikel im betrachteten Luftvolumen befinden, wachsen diese auf Kosten der bereits vorhandenen Wolkentropfen weiter an. Zudem wird auch ein großer Teil der noch nicht in flüssiger oder fester Form gebundener Feuchte für das Anwachsen der Eispartikel aufgewendet, was unter anderem auch die Reduktion der Eispartikelanzahldichte im Bereich der nichtbiologischen erklärt. Ebenso steht nun auch weniger Feuchte für die Bildung neuer Wolkentropfen in Höhen mit geringerer Temperatur, in welchen ohne biologische Eisnukleation weitere Wolkentropfenbildung einsetzen konnte, zur Verfügung. Es handelt sich demnach um einen sich verstärkenden Effekt. Während der direkte Effekt in Höhen der biologische Mode nur zu einer geringen Reduktion der Wolkentropfenanzahldichte führt, weil die Feuchte für die Bildung von Eispartikeln verwendet wird, so unterbinden die gebildeten Eispartikel weitere Bildungsprozesse der Wolkentropfen und entziehen durch den Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozess den bereits vorhandenen Wolkentropfen die Feuchte, sodass hierdurch die Wolkentropfenanzahldichte im zeitlichen Verlauf aktiv reduziert wird. Auf diese Weise lässt sich zum einen die deutlich größere Amplitude der relativen Änderungen (-35 % im Vergleich zu +10 %) und die Verschiebung des maximalen Einflusses in größere Höhen (4000 m im Vergleich zu 2000 m) erklären.

Der direkte Einfluss der SPP-Konzentration über die biologische Eisnukleation auf die Eispartikelanzahldichte ist durch die aufgeführten Untersuchungen gezeigt. Es bildet sich eine zusätzliche, biologische Mode der Eispartikelanzahldichte in Höhen, deren Temperatur überwiegend biologische Eisnukleationsprozesse zulassen. Zudem schwächt sich die nicht-biologische Eismode in großen Höhen ab, was indirekt durch den Verbrauch der zur Verfügung stehenden Feuchte durch die biologische Eisnukleation in den unteren Schichten mit der SPP-Konzentration in Zusammenhang steht. Zudem wird gezeigt, dass nicht nur die Eispartikelanzahldichte beeinflusst wird, sondern hierdurch auch die Wolkentropfenanzahldichte, was insbesondere für Mischphasenwolken, welche sich überwiegend im Höhenbereich der beobachteten biologischen Mode befinden, von großer Bedeutung für deren Zusammensetzung ist. Eine Variation der ausgestoßenen SPP-Konzentration führt zu einer entsprechenden Variation der biologischen Mode, während der Einfluss auf die nicht-biologische Mode weitestgehend unverändert bleibt. Für letztere scheint nur das Auftreten biologischer Eisnukleation von Bedeutung zu sein und weniger das genaue Ausmaß. Die Unterschiede, die auftreten, wenn verschiedene Zeiträume betrachtet werden, rühren überwiegend daher, dass am Anfang der Simulationsläufe keine Pollen oder SPPs vorhanden sind.

4.3.2 Effektiver Radius

Für den folgenden Teil der Arbeit stellt sich nun die Frage, was dieser Einfluss für einen Effekt auf andere Eigenschaften der Eispartikel hat. Hierzu beschäftigt sich dieser Teil mit der Größe der Eispar-



Abbildung 4.14: **Histogramme Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER100).** Ohne (links) und mit biologischer Eisnukleation (rechts). Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die absolute Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des Simulationszeitraums. Geringe effektive Radien sind überwiegend bei hohen Eispartikelanzahldichten zu finden, während größere effektive Radien bei geringeren Eispartikelanzahldichten auftreten.

tikel, wobei der effektive Radius, welcher auch für Strahlungseffekte von Bedeutung ist, Anwendung findet.

Eispartikel kommen in der Atmosphäre in unterschiedlichen Formen und Größen vor. Um eine Vergleichbarkeit der Eispartikel zueinander zu ermöglichen, wird der effektive Radius eingeführt. Dieser steht repräsentativ für die Größe, die ein Eispartikel einnimmt, wenn es in ein sphärisches Partikel überführt wird. Insbesondere ist die Größe des sphärischen Repräsentativpartikels so ermittelt, dass jenes den gleichen strahlungsrelevanten Effekt aufweist wie das tatsächliche Eispartikel. Der effektive Radius ist demnach mit dem Wirkungsquerschnitt des Partikels verbunden und weist die gleichen Zusammenhänge zum Strahlungseffekt auf wie jener. Eine Erhöhung des effektiven Radius führt zu einer erhöhten Absorption der eintreffenden Strahlung durch das Partikel, während eine Verringerung eine erhöhte Reflexion zur Folge hat. Somit ist der effektive Radius nicht nur ein Mittel zum einfachen Größenvergleich zweier unterschiedlich geformter Eispartikel, sondern hat auch Bedeutung für andere Größen. Dieser Auswertungsteil behandelt ebendiesen effektiven Radius und untersucht den Effekt, den die biologische Eisnukleation mit SPPs auf jenen hat.

Abbildung 4.14 zeigt vergleichbar zum vorigen Kapitel 4.3.1 2D-Histogramme, in welchen die Eispartikelanzahldichte auf den effektiven Radius aufgetragen ist. Das linke Histogramm repräsentiert den gesamten Simulationszeitraum des Kontrolllaufs mit deaktivierter biologischer Eisnukleation und das rechte den entsprechenden Experimentlauf, in dem biologische Eisnukleation stattfindet, für das Szenario der vollständigen SPP-Emission. Sie zeigen die Verteilung der effektiven Radien bezüglich der Eispartikelanzahldichte. In beiden Darstellungen treten zwei numerische Artefakte auf, die das Histogramm stark beeinflussen. Eines dieser Artefakte liegt bei $r_{\rm eff} \approx 5 \,\mu\text{m}$ und ein weiteres bei etwas über 20 µm. Diese bilden sich aufgrund von Grenzbedingungen für die Berechnung des effek-



Abbildung 4.15: **Histogramme Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER100, normiert).** mit (links) und ohne biologischer Eisnukleation (rechts). Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die relative Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte für den jeweiligen effektiven Radius. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des Simulationszeitraums. Es ist eine Maximumsverschiebung von großen Eispartikelanzahldichten zu kleineren erkennbar bei steigendem effektiven Radius.

tiven Radius. Befinden sich die zur Berechnung des effektiven Radius notwendigen Größen jenseits bestimmter Grenzen, werden diese aus Stabilitätsgründen auf diesen Grenzwert gesetzt bevor die Berechnung weitergeführt wird. Obwohl eine Vielzahl an Gitterpunkten zu diesen numerischen Artefakten beitragen, ist dennoch sowohl im Kontrolllauf als auch im Experimentlauf ein Absinken des Maximums bei steigendem effektiven Radius außerhalb der numerischen Artefakte erkennbar. Bei kleinen Radien (5 μ m < r_{eff} < 40 μ m) befindet es sich in einem Bereich der Eispartikelanzahldichte von um die $1 \cdot 10^5 \text{ kg}^{-1}$, während es sich bei den größeren Radien ($r_{\text{eff}} > 40 \,\mu\text{m}$) etwa einem Wert von $1 \cdot 10^3$ kg⁻¹ anzunähern scheint. Erklärbar ist dieses Verhalten in erster Näherung dadurch, dass, wenn bei vergleichbarer zur Verfügung stehender Feuchte mehr Eispartikel gebildet werden, jedes dieser sich bildenden Eispartikel die Bildung mit weniger Wasser durchzuführen hat und somit kleinere Partikel entstehen. Sind weniger Eispartikel vorhanden, verteilt sich die gleiche Wassermenge auf eine geringere Anzahl, was zu größeren Partikeln führt. Zudem verdeutlicht Abbildung 4.14, dass kleinere effektive Radien im Allgemeinen häufiger vertreten sind als größere. Dies hat zur Folge, dass der Verlauf des Maximums bei größeren effektiven Radien nicht mehr einfach nachvollzogen werden kann. Um dem entgegenzuwirken stellt Abbildung 4.15 die selben Daten dar wie Abbildung 4.14, allerdings normiert auf die Gesamtzahl der Gitterpunkte einer jeden Klasse des effektiven Radius. Das oben beschriebene Verhalten der Maximumsverschiebung kann bei dieser Form der Darstellung besser nachvollzogen werden. Dass die genannte Erklärung nur bedingt auf das Verhalten des Maximums angewendet werden kann, zeigt die bei größer werdendem effektiven Radius nicht mehr auftretende Verlagerung des maximalen Wertes, sobald ein Wert des effektiven Radius von etwa 90 µm überschritten ist. Der erklärte Zusammenhang zwischen Feuchte, Eispartikelanzahldichte und effektivem Radius behält zwar weiterhin Gültigkeit, aber aller Voraussicht nach ist die gestellte Prämisse des

4 Pollenfragmente und Eisnukleation



Abbildung 4.16: **Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER100).** Absolute (links) und relative Darstellung (rechts). Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die Differenz der absoluten beziehungsweise relativen Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte zwischen Experiment und Kontrolllauf. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des Simulationszeitraums. Es zeichnen sich verschiedene Signale ab, welche sich nur teilweise in beiden Darstellungen befinden. Die absolute Darstellung gibt einen Eindruck zum Einfluss und Ursprung des Signals, während die relative eine Verteilungsverschiebung verdeutlicht.

vergleichbaren Wertes der zur Verfügung stehenden Feuchte nicht mehr gegeben. Ein weiterer Effekt dieser Normierungsbetrachtung ist, dass die numerischen Artefakte weniger stark auftreten und die Darstellung von jenen nicht mehr dominiert wird.

Ein erster Vergleich der beiden absoluten 2D-Histogramme in Abbildung 4.14 zeigt, dass durch die biologische Eisnukleation ein Zuwachs an Gitterpunkten mit effektiven Radien größer als 30 µm und Eispartikelanzahldichten von $1 \cdot 10^3 \text{ kg}^{-1}$ bis $1 \cdot 10^5 \text{ kg}^{-1}$ erfolgt. Ebenso scheinen sich diese zusätzlichen Gitterpunkte weiterhin entlang der Hauptstruktur der Maximumsverschiebung zu orientieren. Dies ist auch bei Betrachtung der relativen 2D-Histogramme ersichtlich (Abbildung 4.15). Allerdings lässt der Vergleich dieser Histogramme vermuten, dass eine starke relative Verschiebung bei festem effektiven Radius zu kleineren Eispartikelanzahldichten erfolgt, insbesondere im Bereich zwischen 40 µm und 80 µm. Um unter anderem dieser Vermutung weiter nachzugehen, zeigt Abbildung 4.16 die Differenzhistogramme der absoluten und der normierten Histogramme aus den vorigen Abbildungen. Das absolute Differenzhistogramm gibt dabei Auskunft, wie sich die Anzahl an Gitterpunkten ändert, während das normierte eine Verschiebung der Struktur verdeutlicht. Beide Differenzhistogramme weisen deutliche Signale auf, welche auf die aktivierte biologische Eisnukleation zurückzuführen sind. Einige dieser Signale sind dabei nur in einer der beiden Darstellungen vertreten. So zeigt die Darstellung der absoluten Häufigkeitsveränderung ein starkes Signal bei geringen effektiven Radien ($r_{\rm eff} < 30 \,\mu m$) und hohen Werten der Eispartikelanzahldichte ($n_{\rm i} \approx 1 \cdot 10^5 \, \rm kg^{-1}$), welches in der normierten Betrachtung nur noch schwach auftritt und der Effekt somit kaum Auswirkung auf die Verteilung in diesem Bereich des effektiven Radius hat. Für eine Erklärung hierfür sei auf das Signal der nicht-biologischen Mode in Abbildung 4.7 (Seite 31) verwiesen. Dieses zeichnet sich durch einen Zuwachs an Gitterpunkten in ebendiesem Bereich der Eispartikelanzahldichte aus, sowie einem Verlust an solchen mit höherer Eispartikelanzahldichte. Ein ähnliches Bild zeigt sich in der linken Darstellung der Abbildung 4.16, was darauf schließen lässt, dass dieses Signal ebenfalls auf den Effekt auf die nicht-biologische Mode zurückzuführen ist. Trotz der Reduktion der Eispartikelanzahldichte findet allerdings keine nennenswerte Verschiebung bezüglich des effektiven Radius statt (bei gleicher Feuchte wäre eine Erhöhung des effektiven Radius zu erwarten), was auf die vermutete Art und Weise der Bildung dieses Signals zurückzuführen ist. Die einsetzende biologische Eisnukleation und das damit verbundene Aufbrauchen der Feuchte, was abschließende Eisnukleationsprozesse im Experimentlauf verhindert, die im Kontrolllauf stattfinden, und somit zu einer Reduktion der Eispartikelanzahldichte führt, reduziert den Feuchtegehalt vermutlich soweit, dass die Nukleationsprozesse, die in beiden Läufen stattfinden, vergleichbare Feuchte zur Verfügung haben. Die aufgrund der biologischen Eisnukleation entstandenen größeren Eiskeime machen bezüglich der Gesamtanzahl an Eispartikeln nur einen sehr geringen Teil aus, womit deren Größe nicht allzu sehr ins Gewicht fällt. Somit bleibt der effektive Radius dieser Gitterzellen nahezu unverändert.

Das normierte Differenzhistogramm zeigt ebenfalls ein ausgeprägtes Signal, welches in der absoluten Darstellung nur schwach auftritt. Bei effektiven Radien größer als 130 µm verschiebt sich die Verteilung deutlich zu Werten der Eispartikelanzahldichte von etwa $1 \cdot 10^3 \text{ kg}^{-1}$ hin. Das absolute Differenzhistogramm zeigt hingegen, dass dieser Effekt nur für eine geringe Anzahl an Gitterzellen auftritt und somit in seiner Bedeutung abfällt. Die Verschiebung hin zu Gitterzellen mit $n_i \approx 1 \cdot 10^3 \text{ kg}^{-1}$ liegt darin begründet, dass es durch die biologische Eisnukleation einen generellen Zuwachs an Gitterzellen mit diesem Wert gibt bei Verlust von Gitterzellen mit geringerer Eispartikelanzahldichte, was ebenfalls bereits bei Betrachtung von Abbildung 4.7 (Seite 31) zu erkennen ist. Somit ist dieses Signal der biologischen Mode zuzuordnen. Die Unabhängigkeit dieses Verhaltens vom effektiven Radius zeigt, dass die Feuchte für jene Gitterzellen nicht der limitierende Faktor ist. Ist biologische Eisnukleation aktiviert und bezüglich der Temperatur möglich, kann die Feuchte der Gitterzellen gehäuft alle Eiskeime für die Nukleation versorgen. Gitterzellen mit mehr Feuchte weisen dann einen größeren effektiven Radius auf als solche mit weniger. Es sei nochmals erwähnt, dass dieses Signal in der absoluten Darstellung nicht auftritt und somit keinen nennenswerten Einfluss auf das Gesamtbild hat, es stützt vielmehr die Existenz einer biologischen Mode.

Ein Signal ist allerdings in beiden Histogrammen vertreten: Das absolute zeigt einen deutlichen Anstieg an Gitterpunkten im effektiven Radiusbereich $50 \,\mu\text{m} \le r_{\text{eff}} \le 130 \,\mu\text{m}$ für Eispartikelanzahldichten im Bereich $1 \cdot 10^3 \,\text{kg}^{-1} \le n_i \le 1 \cdot 10^4 \,\text{kg}^{-1}$. Das Maximum dieses Signals befindet sich bei einem effektiven Radius von etwa 90 μm . Auch im normierten Histogramm ist ein Signal in jenem Gebiet erkennbar. Es zeigt eine starke relative Verschiebung des effektiven Radius zu geringeren Werten der Eispartikelanzahldichte, welches über den gesamten genannten Bereich des effektiven Radius auftritt. Hieraus lässt sich schließen, dass insbesondere bei Eispartikelanzahldichten von etwa $1 \cdot 10^3 \,\text{kg}^{-1}$ effektive Radien im beschriebenen Bereich auftreten. Der Grund hierfür ist, dass, wie im vorigen Teil der Arbeit gezeigt, ein starker Zuwachs an Eispartikelanzahldichten von etwa $1 \cdot 10^3 \,\text{kg}^{-1}$ bei Berücksichtigung biologischer Eisnukleation durch SPPs auftritt und dieses Signal somit auch der biologischen Mode zuzuordnen ist. In der Absolutwertdarstellung ist des Weiteren eine mögliche Quelle dieses Signals auszumachen. Unter der gerechtfertigten Annahme, dass dieses positive Signal zur



Abbildung 4.17: **Differenzhistogramm Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER100, Temperaturfilter).** Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die Differenz der Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte zwischen Experiment und Kontrolllauf. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des Simulationszeitraums, für die 250 K < T < 274 K gilt. Es ist ein deutliches Signal um $r_{\text{eff}} \approx 90 \,\mu\text{m}$ und $n_{\text{i}} \approx 1 \cdot 10^3 \,\text{kg}^{-1}$ zu erkennen.

biologischen Mode gehört, ist ein negatives Signal bei kleineren Werten der Eispartikelanzahldichte zu erwarten. Zudem ist unter der ebenfalls gerechtfertigten Annahme der Feuchtegehalt der entsprechenden Gitterzelle zwischen Experiment- und Kontrolllauf vergleichbar. Dies hat zur Folge, dass die Gitterzellen, die im Bereich des aufgezeigten Signals in der Experimentsimulation hinzugekommen sind, in der Kontrollsimulation bei kleineren Eispartikelanzahldichten und größeren effektiven Radien vorzufinden sind. Es zeigt sich in der absoluten Darstellung tatsächlich ein großer Bereiche negativer Differenz bei geringeren Werten der Eispartikelanzahldichte und effektiven Radien größer als 90 µm. Bei Betrachtung der unterschiedlichen Größenordnung dieser beiden Signale ist allerdings zu vermuten, dass auch weitere Gitterzellen durch die biologische Eisnukleation hinzukommen, die jenseits der gezeigten Darstellung liegen.

Dass das Signal um $r_{eff} = 90 \,\mu\text{m}$ auf die durch SPPs erhöhte biologische Eisnukleationsaktivität zurückzuführen ist und somit der biologischen Mode zuzuordnen ist, bestätigt sich bei Betrachtung von Abbildung 4.17. Diese Darstellung beschränkt sich auf jene Gitterzellen, deren Temperatur zwischen 250 K und 274 K, also in einem von der biologischen Eisnukleation dominierten Bereich, liegt. Homogene und ein Großteil heterogener Eisnukleationsprozesse (abgesehen von biologischer Eisnukleation) benötigen geringere Temperaturen und sind somit nicht in der Darstellung berücksichtigt. Das dargestellte Differenzhistogramm weist eine im Vergleich zur Darstellung in Abbildung 4.16 deutlich stärkere Ausprägung des Signals um $r_{eff} = 90 \,\mu\text{m}$ auf. Insbesondere bleibt das Maximum des Signals beim gleichen effektiven Radius, wobei allerdings der Einfluss des Signals auch einfacher in Richtung kleinerer effektiver Radien auszumachen ist als bei Betrachtung ohne Anwendung des Temperaturfilters. Diese Persistenz des Signals bei Anwendung des biologischen Temperaturfilters bekräftigt seine vermutete Zugehörigkeit zur biologischen Mode. Es lässt sich demnach schließen, dass die biologischen Eisnukleationsprozesse unter Nutzung der SPPs zu einer gehäuften Bildung von Eispartikeln mit effektiven Radien zwischen 30 µm und 150 µm führt mit einem Maximum bei etwa 90 µm. Zudem ist weiterhin das negative Signal in der Abbildung auszumachen, was besagt, dass jene Gitterzellen, die bei aktivierter biologischer Eisnukleation das beschriebene Signal bilden, bei deaktivierter biologischer Eisnukleation, eine deutlich geringere Anzahl an Eispartikeln mit größerem effektiven Radius aufweisen. Des Weiteren ist zu erkennen, dass das Signal, welches bei der Betrachtung aller Temperaturen unter Null (Abbildung 4.16) im Bereich geringer effektiver Radien und hoher Eispartikelanzahldichte auftritt, nicht mehr vorhanden ist. Das bestätigt die zuvor getroffene Vermutung, dass jenes Signal mit dem Signal der nicht-biologischen Mode in Abbildung 4.7 (Seite 31) zusammenhängt, welches sich ebenfalls nicht im Temperaturbereich der biologischen Eisnukleation befindet.

Die vorangegangene Untersuchungen zeigen unter anderem, dass das Signal zur biologischen Mode seine stärkste Ausprägung bei festem effektiven Radius in einem Bereich der Eispartikelanzahldichte um etwa $1 \cdot 10^3 \text{ kg}^{-1}$ hat und dass auch bei nicht aktivierter biologischer Eisnukleation ein Großteil der Gitterzellen bei festgehaltenem effektivem Radius diese Eispartikelanzahldichte aufweist. Des Weiteren zeigt Abbildung 4.8 (Seite 33) der Untersuchung des Einflusses auf die Eispartikelanzahldichte, dass bei sinkendem Anteil an möglicher SPP-Emission der Zuwachs an Gitterzellen sich bei geringeren Eispartikelanzahldichten befindet. Daher ist es von Interesse auch die 10 %- und 1 %-Simulationen bezüglich des effektiven Radius zu untersuchen. In diesen sind weniger Gitterzellen



Abbildung 4.18: **Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER10 und ER1).** 10 % (links) und 1 % (rechts) der maximal möglichen SPP werden ausgestoßen. Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die Differenz der Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte zwischen Experiment und Kontrolllauf. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des Simulationszeitraums. Das Signal um $r_{eff} \approx 90 \,\mu$ m schwächt sich mit geringerem SPP-Anteil ab. Das Signal bei geringen effektiven Radien ist weniger sensitiv gegenüber den ausgestoßenen SPP.

mit Eispartikelanzahldichten von $1 \cdot 10^3 \text{ kg}^{-1}$ enthalten. Es stellt sich die Frage, wie die Signale aus Abbildung 4.16 auf diese Variation reagieren. Grundlegend gibt es hierfür zwei Möglichkeiten: Es ist möglich, dass die Signale weitestgehend erhalten bleiben, sich allerdings zu kleineren Eispartikelanzahldichten verschieben (wie es auch bei der Untersuchungen zur Eispartikelanzahldichte der Fall ist), oder dass sich die Signale stark abschwächen, aber an gleicher Stelle verharren. Um dieser Fragestellung nachzugehen sei auf Abbildung 4.18 verwiesen. Die linke Darstellung repräsentiert die Daten aus der 10 %-Simulation und zeigt ein deutlich weniger stark ausgeprägtes Signal um $r_{\rm eff} = 90 \,\mu m$. Es befindet sich allerdings weiterhin in einer Größenordnung der Eispartikelanzahldichte von $1 \cdot 10^3 \text{ kg}^{-1}$, obwohl die Reduktion der biologischen Eiskeime auch eine Reduktion der Eispartikelanzahldichte impliziert (siehe Abbildungen 4.7 und 4.8 - Seiten 31 und 33). Dies lässt darauf schließen, dass andere Prozesse und Größen der Verschiebung des Maximums zu jenen kleineren Werten der Eispartikelanzahldichte entgegenwirken. Vermutlich hat die Feuchte hier erneut eine bedeutende Rolle. Die gleiche Variation der Feuchte zwischen den einzelnen Gitterzellen führt bei allgemein geringerer Eiskeimanzahl zu größeren absoluten Variationen des effektiven Radius als bei größerer Eiskeimanzahl. Es ist auch zu erkennen, dass der Einflussbereich des Signals bezüglich des effektiven Radius bei kleineren Eispartikelanzahldichten deutlich größer ist als bei den vorigen Betrachtungen. Es ist demnach durchaus eine Verschiebung zu kleineren Eispartikelanzahldichten zu vermuten, allerdings ist hierbei der Effekt auf den effektiven Radius weniger eindeutig. Unter Anwendung dieser Vermutung auf das Szenario der 1 %-Simulation lässt sich diese durch die rechte Darstellung in Abbildung 4.18 bekräftigen. Das Signal zur biologischen Mode ist noch weiter abgeschwächt und über einen größeren Bereich des effektiven Radius verteilt. Die Eispartikelanzahldichten von um die $1 \cdot 10^3 \text{ kg}^{-1}$, welche ein weniger gestreutes Signal bezüglich des effektiven Radius aufweisen würden, treten in dieser Simulation so selten auf, dass eine einfache Identifikation des Signals zur biologischen Mode nicht auszumachen ist. Die wenigen Gitterzellen, auf die das zutrifft, deuten allerdings erneut auf eine leicht bevorzugte Bildung von Eispartikeln mit einem effektiven Radius von etwa 90 µm hin. Es zeigt sich somit, dass das Signal zur biologischen Mode bezüglich des effektiven Radius sehr sensitiv gegenüber der Variation der SPP-Emissionsmenge ist. Eine Verringerung des SPP-Ausstoßs führt zu einer Reduktion der gebildeten Eispartikeln im Rahmen der biologischen Eisnukleation, mit einer breiteren Streuung des resultierenden effektiven Radius. Eine Erhöhung stabilisiert die Verteilung der effektiven Radien um ein Maximum bei etwa 90 µm.

Die Untersuchung des Einflusses auf die Eispartikelanzahldichte (Abbildung 4.8 - Seite 33) führt zur Erkenntnis, dass das Signal zur nicht-biologischen Mode weniger stark von der Variation der emittierten SPP-Konzentrationen ist. Es bedarf lediglich biologischer Partikel, die unter den Bedingungen der biologischen Eisnukleation nukleieren, um den Effekt zu bewirken. Diese Erkenntnis spiegelt sich auf in diesen beiden Darstellungen der Abbildung 4.18 wider, da das Signal zur nicht-biologischen Mode weiterhin vorhanden ist. Die Form und Amplitude der Verteilung dieses Signals bleibt erwartungsgemäß weitestgehend gleich bei Änderung der SPP-Emissionsmenge, allerdings zeigt sich eine Abschwächung des Teils des Signals bei sehr kleinen Werten des effektiven Radius ($r_{\rm eff} \approx 5 \,\mu$ m). Da sich in diesem Bereich eines der zwei am Anfang dieses Auswertungsteils erwähnten Artefakte befindet, ist dies vermutlich numerischen Grenzbedingungen geschuldet. Die Tatsache, dass dieses Signal weitestgehend unabhängig von der genauen SPP-Emissionsmenge ist, zeigt, dass es lediglich des Einsetzens des biologischen Eisnukleationsprozesses bedarf, und bestätigt somit, dass es der



Abbildung 4.19: **Differenzhistogramme Eispartikelanzahldichte über effektiver Radius (ER100, Anfang und Ende).** Tage 2 und 3 (links) und Tage 9 und 10 der Simulation (rechts). Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die Farbskala codiert die Differenz der Häufigkeit entsprechender Gitterpunkte zwischen Experiment und Kontrolllauf. Berücksichtigt sind alle Gitterpunkte des entsprechenden Zeitraums. Es zeigen sich unterschiedliche Zustände des in Abbildung 4.16 erkannten Signals.

nicht-biologischen Mode zugeordnet werden kann.

Nachdem nun die Sensitivität der Signale bezüglich der ausgestoßenen SPP-Menge dargelegt wurde, widmet sich der anschließende Teil der Untersuchung der Sensitivität bezüglich der zeitlichen Entwicklung. Dies hat insbesondere deswegen Bedeutung, da zu Beginn der Simulationen keine Pollen und SPP im Modellgebiet vorhanden sind und somit erst im Laufe der Entwicklungszeit emittiert werden müssen. Dies stellt somit eine weitere Form der Variation der SPP-Konzentration dar. Die Darstellungen in Abbildung 4.19 zeigen die Differenzhistogramme für den Anfangs- und den Endzeitraum. Ersterer berücksichtigt die Tage 2 und 3 der Entwicklung, während letzterer die Tage 9 und 10 betrachtet. Die linke Darstellung für den Anfangszeitraum zeigt ein deutliches, aber im Vergleich zur Darstellung für den gesamten Zeitraum schwächeres Signal der biologischen Mode bei $r_{\rm eff} = 90 \,\mu m$. Dies ist dadurch zu erklären, dass zu Anfang nur ein Teil der SPP-Emissionsprozesse stattfinden und die SPPs noch nicht sehr weit verbreitet sind. Jene emittierten und im Modell vorhandenen SPPs sind allerdings im gleichen Ausmaße vorhanden wie auch in der Gesamtsimulation, daher zeigt die Darstellung qualitativ das gleiche Bild wie bei jener. Es ist aufgrund der geringeren Anzahl an Gitterpunkten, die Berücksichtigung finden, weniger stark ausgeprägt und zeigt ein etwas größeres Streuverhalten. Das gleiche gilt für das negative Signal, welches sich bei kleineren Eispartikelanzahldichten und größeren effektiven Radien befindet. Auch hier ist das Signal weniger scharf konturiert und etwas mehr gestreut als bei der Betrachtung des Gesamtzeitraums. Am Ende des Simulationszeitraums (rechte Darstellung) ist das Signal der biologischen Mode stärker ausgeprägt als beim Anfangszeitraum und ist der Amplitude des Gesamtzeitraums deutlich näher. Dies ist auf die Verbreitung und weiterhin stattfindende Emission der SPPs zurückzuführen. Insbesondere ist sowohl das positive als auch das negative Signal schärfer konturiert und weniger stark gestreut, was besonders auf die stark ausgeweitete Verbreitung der SPPs zurückzuführen ist, wodurch insgesamt mehr Gitterpunkte berücksichtigt werden. Auch das unterschiedlich scharf konturierte Signal der nicht-biologischen Mode bei kleinen effektiven Radien und großen Eispartikelanzahldichten ist ein Anzeichen für die unterschiedlich weit fortgeschrittene Simulation. Während am Anfang nur recht wenige SPPs die Höhen für dieses Signal erreichen und somit eine größere Streuung des Effekts auftritt, sind gen Ende mehr SPPs für den Effekt verantwortlich, so dass die Streuung abnimmt.

Hierbei wird der Wert dieser beiden betrachteten Formen der SPP-Konzentrationsvariation deutlich. Die direkte Änderung der emittierten Menge gibt Aufschluss über den Effekt, wenn die gleichen betrachteten Zellen unterschiedliche SPP-Konzentrationen aufweisen und sich somit unterschiedlich verhalten, während die Variation der Entwicklungszeit die betrachteten Menge an Gitterzellen reduziert, jene aber weiterhin die gleiche SPP-Konzentration aufweisen, was eine Untersuchung bezüglich Stabilität und Streuung der Signale ermöglicht.

Dieser abschließende Teil der Untersuchung des effektiven Radius beschäftigt sich mit dem mittleren Effekt der biologischen Eisnukleation mit SPPs als biologische Eiskeime über das gesamte Simulationsgebiet mithilfe des mittleren Vertikalprofils des effektiven Radius. Abbildung 4.20 stellt jenes Vertikalprofil dar. Zu sehen sind drei Profile: Das blaue zeigt das mittlere Höhenprofil des effektiven Radius für den Experimentlauf (also mit biologischer Eisnukleation), das rote jenes für den Kon-



Abbildung 4.20: **Höhenprofil des effektiven Radius (ER100).** Die Ordinaten und Abszissen sind linear skaliert. Die blaue Kurve zeigt das Höhenprofil mit biologischer Eisnukleation, die rote Kurve jenes ohne biologische Eisnukleation (untere Abszisse) und die violette Kurve zeigt die relative Differenz zwischen den beiden (obere Abszisse). Es ist zum Großteil eine Reduktion des effektiven Radius in Höhen von ein paar Tausend Metern zu erkennen. Allerdings gibt es auch Höhen, in welchen eine Erhöhung zu verzeichnen ist.

trolllauf (ohne biologische Eisnukleation) und das violette die relative Abweichung des Profils des Experimentlaufs von jenem des Kontrolllaufs. Es ist eine starke negative mittlere Änderung ab einer Höhe von etwa 3000 m zu erkennen, welche ihren größten Betrag bei etwa 3200 m mit um die 15 % relativer Abweichung erreicht. Dies bestärkt die Aussage, die zum Signal der biologischen Mode bei $r_{\rm eff} = 90\,\mu{\rm m}$ in Abbildung 4.16 getroffen wird, und dieses Signal mit dem negativen Signal bei größeren effektiven Radien und kleinerer Eispartikelanzahldichte verknüpft. Wie bei der Betrachtung der Abweichung des mittleren Vertikalprofils (Abbildung 4.12) ersichtlich, führt die biologische Eisnukleation bereits in geringeren Höhen zu einem mittleren Zuwachs an Eispartikel, in welchen noch kein Effekt auf den mittleren Wert des effektiven Radius zu verzeichnen ist. Dies lässt darauf schließen, dass ohne biologische Eisnukleation nicht die gesamte Feuchte auf den wenigen vorhandenen Eispartikeln nukleiert, was aufgrund der niedrigen Höhe und somit relativ hohen Temperaturen zu erwarten ist. Die Feuchte ist in diesem Bereich also nicht die limitierende Größe, sondern die Temperatur in Kombination mit den zur Verfügung stehenden Eiskeimen. Erst in solchen Höhen, in denen die Feuchte bereits im Kontrolllauf in Form von Wasser oder Eis gebunden ist, tritt ein mittlerer Effekt auf den effektiven Radius ein, da bei aktivierter biologischer Eisnukleation nun eine vergleichbare Feuchtemenge auf mehr Partikel aufgeteilt wird. Dies erklärt die relative vertikale Verschiebung des Signals auf den effektiven Radius zum Signal auf die Eispartikelanzahldichte. Die Höhe des negativen Signals auf den effektiven Radius ist zudem konsistent mit der Tatsache, dass jenes Signal bei Temperaturen zwischen 250 K und 274 K auftritt (siehe Abbildung 4.17). Demnach ist die Reduktion des mittleren effektiven Radius in dieser Höhe der biologischen Mode zuzuordnen. In einer Höhe von etwa 3500 m ist statt der Reduktion des mittleren effektiven Radius eine abrupte Erhöhung um 6 % festzustellen. Diese wirkt aufgrund der sich darüber anschließenden weiteren negativen Änderung zunächst unerwartet. Dennoch kann dieser abrupte Änderung zumindest qualitativ dadurch erklärt werden, dass, wie an der rechten Darstellung von 4.16 (Seite 44) ersichtlich, eine relative Verschiebung zu Eispartikelanzahldichten von $1 \cdot 10^3 \text{ kg}^{-1}$ stattfindet. Wenn bei weiterhin vergleichbarer Feuchte die Eispartikelanzahldichte von $1 \cdot 10^4 \text{ kg}^{-1}$ auf $1 \cdot 10^3 \text{ kg}^{-1}$ sinkt, was in solchen Szenarien der Fall ist, in denen die biologische Eisnukleation so viel Feuchte für sich beansprucht, dass für weitere Eisnukleation keine mehr zur Verfügung steht, erhöht sich der mittlere effektive Radius. Im Höhenprofil der Eispartikelanzahldichte (Abbildung 4.12) ist zu erkennen, dass in jener Höhe zwar weiterhin eine Erhöhung der mittleren Eispartikelanzahldichte stattfindet, diese allerdings nicht mehr so stark ausgeprägt ist wie ein paar Tausend Meter darunter. Dieses Szenario der Eispartikelanzahldichtereduktion hat somit nur einen dämpfenden Effekt auf die Erhöhung der Eispartikelanzahldichte in diesem Höhenbereich, kann aber aufgrund der zusätzlich zu bedenkenden Feuchte für den effektiven Radius zu einer Umkehr des Vorzeichens führen. Auch die Tatsache, dass oberhalb dieser abrupten positiven Änderungen des effektiven Radius wieder eine starke negative zu verzeichnen ist, bestärkt dieses Erklärung. In diesen Höhen herrschen vermutlich Temperaturen, die es den anderen Partikeln ermöglichen auch mit dieser durch die biologische Eisnukleation reduzierten Feuchte zu nukleieren, und so die gesamte Feuchte auf eine erhöhte Anzahl an Eispartikeln aufzuteilen. Oberhalb dessen nimmt der direkte Effekt der biologischen Eisnukleation auf die Eispartikelanzahldichte ab, was zu einem im Allgemeinen verringerten Signal auf den effektiven Radius führt.

Der Einfluss der SPP-Konzentration über die biologische Eisnukleation auf die Größe der Eispartikel ist durch die aufgeführten Untersuchungen des effektiven Radius gezeigt. In Höhen der biologischen

Mode, in welchen ein Anstieg an Eispartikeln zu verzeichnen ist, ist eine Reduktion des effektiven Radius zu beobachten. Diese Reduktion schwächt sich in Höhen der nicht-biologische Mode ab. Dass keine Erhöhung des effektiven Radius durch die Verringerung der Eispartikelanzahldichte stattfindet, ist auf die stark reduzierte Feuchte durch die biologische Eisnukleation zurückzuführen. Die Verringerung der ausgestoßenen SPP-Menge führt zu einer entsprechenden Abschwächung des Signals der biologischen Mode, während der Einfluss auf die nicht-biologische Mode vergleichbar zur Betrachtung der Eispartikelanzahldichte weitestgehend unbeeinflusst bleibt. Ebenso vergleichbar zur Untersuchung der Eispartikelanzahldichte ist, dass die Unterschiede, die auftreten, wenn verschiede- ne Zeiträume betrachtet werden, darin begründet liegen, dass am Anfang der Simulationsläufe keine Pollen oder SPPs vorhanden sind. Auch für den effektiven Radius gilt, dass eine stabile Aussage insbesondere bei Betrachtung der nicht-biologischen Mode erst getroffen werden kann, wenn die SPPs Zeit hatten, sich zu verteilen.

Aufgrund der Tatsache, dass der effektive Radius auch mit Strahlungseffekten verbunden ist, kann eine Berücksichtigung der biologischen Eisnukleation durch SPP unter anderem von Bedeutung für den Strahlungshaushalt sein, insbesondere in Höhen zwischen 1000 m und 8000 m.

4.3.3 Niederschlag

Als abschließende Größe geht der Niederschlag in den Auswertungsprozess ein. Anders als die Eispartikelanzahldichte, welche direkt durch zusätzlich vorhandene Eiskeime beeinflusst wird, und der effektive Radius, auf den der Einfluss durch jenen auf die Eispartikelanzahldichte etwas nachgelagert



Abbildung 4.21: Verteilung der akkumulierten Niederschlagsdifferenz (ER100). Differenz der akkumulierten Niederschlagsfelder am Ende der Experiment- und Kontrollläufe. Es ist zu erkennen, dass die Änderungen zumeist kleiner Amplitude sind, wobei an einigen Orten auch größere Änderungen auftreten.



Abbildung 4.22: **Histogramme der stündlichen Niederschlagsmenge (ER100).** Die Ordinate ist logarithmisch skaliert, die Abszisse linear. Dargestellt sind das Histogramm für den Experimentlauf (blaue Kurve), jenes für den Kontrolllauf (rote Kurve) und die Differenz der beiden (violette Kurve).

ist und sensitiver gegenüber der zur Verfügung stehenden Feuchte ist, ist der Niederschlag von einer Vielzahl an Größen abhängig, so dass etwaige Einflüsse vermutlich keine sehr großen Amplituden aufweisen und zumeist im Rauschen untergehen.

Abbildung 4.21 zeigt die Karte des Simulationsgebiet, auf welcher das Differenzbild des im Gesamtzeitraum der Simulation akkumulierten Niederschlags am Ende der Experiment- und Kontrollläufe abgebildet ist. Es ist zu erkennen, dass wenn auch Unterschiede vorhanden sind, jene nur sehr schwach ausgeprägt sind. Die wenigen deutlicheren Abweichungen sind zumeist von naheliegenden Abweichungen in die andere Richtung kompensiert, sodass die Abweichungen vermutlich dadurch zustande kommen, dass ein Niederschlagsereignis an einer anderen Stelle stattfindet. Es ist somit zu vermuten, dass der Effekt, den die biologische Eisnukleation unter Verwendung von SPPs als Eiskeime auf den Niederschlag hat, eher Bedeutung für die lokale Vorhersage hat als für die regionale.

Um ein besseres Bild von den herrschenden Abweichungen zu bekommen, beschäftigt sich dieser Teil der Untersuchung nicht mit der akkumulierten, sondern mit der stündlichen Niederschlagsmenge. So sind in Abbildung 4.22 drei Histogramme zur stündlichen Niederschlagsmenge aufgeführt. Die blaue Kurve ist jenes Histogramm für den Experimentlauf, die rote Kurve jenes für den Kontrolllauf und die violette Kurve veranschaulicht die Differenz der beiden anderen Histogramme. Es ist zu erkennen, dass durch die aktivierte biologische Eisnukleation eine Vielzahl an Niederschlagsmengen häufiger vorkommen als bei deaktivierter. Zwischen 4 kg m^{-2} und 12 kg m^{-2} stündlichen Niederschlags weist diese Erhöhung sogar einen relativen Wert von etwa 10 % auf. Bei höheren stündlichen Niederschlags der biologischen Eisnukleation nicht mehr so stark ins Gewicht zu fallen. Dies lässt sich über den Zuwachs an Eispartikeln durch die biologische Eisnukleation mit SPP



Abbildung 4.23: **Histogramme der absoluten stündlichen Niederschlagsdifferenz (ER100).** Alle Niederschlagswerte (links) und nur jene zwischen 4 kg m⁻² und 12 kg m⁻² (rechts). In beiden Fällen gibt es sowohl positive als auch negative Änderungen. Die Verteilung ist für alle Niederschlagswerte sehr schmal, was aufgrund der Vielzahl an Gitterpunkten mit geringen Niederschlagsmengen den Erwartungen entspricht. Das rechte Histogramm zeigt eine breitere Verteilung aufgrund der Nichtberücksichtigung der geringen Niederschlagsmengen.

erklären. Hierdurch kommt es auch in Gitterzellen zur Eisbildung, in welchen ohne die biologischen Eisnukleationsprozesse keine stattfindet, was die biologische Mode bildet. Da in diesen Gitterzellen bei aktivierter biologischer Eisnukleation nun eine erhöhte Anzahl an Eispartikeln vorzufinden ist, kann die Feuchte sich an diesen anlagern und somit mehr Eis bilden. Die Feuchte, die ohne biologische Eisnukleation, nur in der gasförmigen Phase vorhanden ist, ist bei aktivierter biologischer Eisnukleation in einer niederschlagsfähigen Form vorhanden. Treten dann Verhältnisse ein, die zum Niederschlag führen, fällt auch diese hinzugekommene Niederschlagsmenge aus, sodass entweder neue Niederschlagsgebiete entstehen oder solche, die auch ohne biologische Eisnukleation entstehen, sich verstärken. Der Grund, warum hohe stündliche Niederschläge keinen all zu großen Einfluss der SPP-gestützten biologische Eisnukleation erfahren, ist, dass, wenn auch ohne biologische Eisnukleation ein so starkes Regenereignis ausgelöst wird, die limitierende Größe eher die Feuchte ist als die Eiskeimanzahl. Die biologische Eisnukleation wird in diesen Fällen zu einer anderen Verteilung der Feuchte führen, aber weniger zu einer nennenswerten Erhöhung oder Verringerung des niederschlagsfähigen Wassers.

Das linke Histogramm in Abbildung 4.23 zeigt anders als das vorherige die Verteilung der Differenzen des stündlichen Niederschlags. Diese sehr schmale Verteilung zeigt, dass ein Großteil der Gitterpunkte kaum eine Änderung bezüglich der stündlichen Niederschlagsmenge aufweisen. Dies entspricht den Erwartungen, da, wie aus Abbildung 4.22 hervorgeht, der überwiegende Teil des Niederschlagsgebiets von geringen Niederschlagsmengen dominiert ist. Differenzen zwischen zwei geringen Werten sind zumeist klein. Um auch Einflüsse auf Gitterzellen mit höherer stündlicher Niederschlagsmenge besser zu berücksichtigen, ist für das rechte Histogramm dieser Abbildung ein Niederschlagsmenge zwischen 4 kg m⁻² und 12 kg m⁻² liegt. Die Wahl dieses Bereiches ist durch die gewonnenen Erkenntnisse aus der vorigen Abbildung motiviert, da sich in jenem Bereich ein starker



Abbildung 4.24: **Histogramme der relativen stündlichen Niederschlagsdifferenz (ER100).** Jene Gitterpunkte mit geringen absoluten Werten werden nun überwiegend durch die beiden Enden der linken Verteilung repräsentiert. Rechts ist das Histogramm für solche Gitterpunkte gebildet, deren relative Abweichung nicht mehr als 50 % betragen. Der Maximalwert liegt bei leicht positiven Werten von 1 bis 2 %

relativer Anstieg an Gitterpunkten bemerkbar macht. Die Verteilung im rechten Histogramm ist breiter, allerdings zeigt sich auch hier keine große Bevorzugung einer positiven oder negativen Änderung. Dennoch ist eine leicht positive Verschiebung zu vermuten. Durch die Anwendung des Filters findet eine Vielzahl an Gitterpunkten (insbesondere jene mit geringeren Niederschlagsmengen) keine Berücksichtigung. Um möglichst viele Gitterpunkte in die Untersuchung einzubeziehen, aber dennoch den kleinen Niederschlagsmengen keine allzu große Bedeutung zukommen zu lassen, empfiehlt es sich statt der absoluten Differenz auch die relative Differenz zu betrachten. Dies erfolgt im linken Histogramm der Abbildung 4.24. Diese Verteilung zeigt ein anderes Verhalten. Es gibt eine zusätzliche Häufung an Gitterzellen, deren Niederschlagsmenge durch die biologische Eisnukleation fast gänzlich auf null reduziert wird. Ebenso sind weiterhin eine Vielzahl an solchen vertreten, die nur eine sehr geringe Änderung durch den biologischen Eisnukleationsprozess erfahren. Allerdings sind auch solche Gitterpunkte erkennbar, deren Änderungen ein Vielfaches des Werts ohne biologische Eisnukleation aufweisen. Erstere und letztere sind vermutlich überwiegend durch die Gitterzellen mit im Allgemeinen geringer stündlicher Niederschlagsmenge dominiert, da kleine absolute Änderungen bei kleinen Werten oft einen größeren relativen Anteil darstellen. Auf diese Weise sind ein Teil der dominierenden Gitterpunkte geringer Niederschlagsmenge von der Mitte der Verteilung an dessen Enden verschoben, so dass der mittlere Teil um die Null auch einen Einfluss von jenen Gitterpunkten erfährt, bei denen größere stündliche Niederschlagsmengen fallen. Die rechte Darstellung der Abbildung zeigt demzufolge ein Histogramm des Bereichs zwischen -50% und 50\% relativer Änderung, in welchem zu vermuten ist, dass auch Änderungen in Gitterzellen mit viel Niederschlag gut vertreten sind. Anders als bei der absoluten Darstellung des Histogramms zeigt sich, dass der Maximalwert sich bei leicht positiven Änderungen von etwa 1 bis 2 % befindet, was eine leicht positive mittlere Änderungsrate vermuten lässt. Diese leicht positive mittlere Änderungsrate deutet sich auch in der absoluten Darstellung an, ist aber deutlich schwerer auszumachen als bei der relativen Betrachtung. Zudem zeigt die absolute Betrachtung, dass diese positive mittlere Änderung des stündlichen Nieder-



Abbildung 4.25: Zeitlicher Verlauf der mittleren relativen Niederschlagsdifferenz (ER100). Akkumulierte (links) und stündliche Niederschlagsdifferenz (rechts). Es ist eine langzeitliche positive Änderung von etwa 0,9 % nach 10 Tagen auszumachen, wobei die stündlichen Änderungen bis zu +5 % und -2 % reichen.

schlags im Gebietsmittel nur einen kleinen absoluten Wert aufweist, während die relative Betrachtung verdeutlicht, dass dies bei lokaler Betrachtung einen größeren Einfluss ausüben kann.

Um der in den vorigen Histogrammen aufgestellten Vermutung der mittleren Erhöhung der Niederschlagsmenge durch die biologische Eisnukleation weiter nachzugehen, zeigt die linke Darstellung der Abbildung 4.25 den zeitlichen Verlauf der mittleren relativen Änderungrate des flächengemittelten akkumulierten Niederschlags durch biologische Eisnukleation. Im Verlauf der zehn Tage der Simulation sorgt die biologische Eisnukleation mit SPPs für einen Anstieg des mittleren akkumulierten Niederschlags um etwa 0,9 %. Zum einen stimmt dieser Wert gut mit dem Erwartungswert der mittleren relativen Änderung überein, der bei Betrachtung des relativen Histogramms der Differenzen des stündlichen Niederschlags erkannt wird (1 - 2%). Zum anderen ist eine Erhöhung um 0.9% keine allzu große Zahl, bei Berücksichtigung der Tatsache, dass es sich aber um den Mittelwert des Anstiegs über das gesamte Modellgebiet handelt und dieser Anstieg sehr wahrscheinlich nicht gleichmäßig auf alle Gitterpunkte erfolgt, kann dieser Wert für lokale Niederschlagsereignisse an Bedeutung gewinnen. Des Weiteren zeigt sich in der linken Darstellung in Abbildung 4.25, dass es Zeitpunkte gibt, an welchen die Zunahme des Niederschlags stärker ist, aber auch Zeitpunkte, in denen weniger Niederschlag fällt. Dieser Umstand ist in der rechten Darstellung deutlicher dargestellt, da hier die relative stündliche Änderungsrate des flächengemittelten Niederschlags aufgeführt ist. Es ist zu erkennen, dass es mehr positive relative Änderungen gibt als negative und diese auch größere Werte erreichen, was konsistent ist mit der Aussage der linken Abbildung, dass im langzeitlichen Mittel eine Erhöhung des flächengemittelten Niederschlags zu beobachten ist. So gibt es zwei Zeitpunkte, an denen die SPP zu einer um etwa 5 % erhöhten mittleren Niederschlagsmenge führen, die maximale negative Änderung sich hingegen bei etwa 2 % geringer Niederschlagsmenge einfindet. Es lässt sich also sagen, dass die durch SPPs ermöglichte biologische Eisnukleation im Mittel langfristig leichte positive Änderungen der großflächigen mittleren Niederschlagsmenge zur Folge hat. Der stündliche



Abbildung 4.26: Zeitlicher Verlauf der mittleren relativen Niederschlagsdifferenz (ER10). Akkumulierte (links) und stündliche Niederschlagsdifferenz (rechts) der 10%-Simulation. Es ist eine langzeitliche positive Änderung von etwa 0,3% nach 10 Tagen (mit einem vorherigen Wert von 0,5% nach etwas mehr als 5 Tagen) auszumachen, wobei die stündlichen Änderungen bis zu +6% und -2,5% reichen.

Einfluss ist hingegen mit größeren Schwankungen verbunden und kann neben positiven Änderungen auch zu negativen Änderungen durch die biologische Eisnukleation führen.

Nachdem nun der mittlere Effekt erkannt und auch auf seine zeitliche und lokale Relevanz hin betrachtet wurde, stellt sich nun abschließend die Frage, wie sehr dieser Effekt von der ausgestoßenen Menge an SPPs abhängt. In Abbildung 4.26 sind dieselben zwei Darstellungen aufgeführt wie in der vorigen Abbildung 4.25, allerdings sind nun die Daten der 10 %-Simulationen (Anteil am maximaler SPP-Ausstoßmenge) ausgewertet. In der linken Darstellung ist ein deutlicher Rückgang des relativen Anstiegs des flächengemittelten akkumulierten Niederschlags auf etwa 0,3 % nach 10 Tagen im Vergleich zum 100 %-Lauf (Abbildung 4.25) zu erkennen. Der höchste Wert liegt bei etwas mehr als 5 Tagen Simulationszeit. Dort ist eine relative Erhöhung von etwa 0,5 % zu erkennen. Die rechte Darstellung zeigt vergleichbar zu jener der 100 %-Simulation ein zeitlich sehr variables Signal, welches allerdings eine weniger starke mittlere Verschiebung aufweist. Dennoch sind weiterhin größere Spitzenwerte zu erkennen, welche zum Teil auch größer sind als bei der 100 %-Simulation. So ist ein relativer Anstieg von etwa 6 % nach etwas mehr als 5 Tagen Simulationszeit festzustellen. Des Weiteren treten auch negative Differenzen auf, welche sich bis zu etwa 2,5 % erstrecken. Die Tatsache, dass diese Extremwerte betraglich größer sind als bei der 100 %-Simulation, verdeutlicht, wie viele Faktoren in die Niederschlagsbestimmung einfließen. So ist es denkbar, dass ein Niederschlagsereignis durch den verringerten biologischen Einfluss seitens der SPPs erst zu einem späteren Zeitschritt stattfindet und somit den Anstieg dieses Zeitschritts auf Kosten eines vorigen erhöht.

Was eine weitere Reduktion der emittierten SPP-Konzentration um einen Faktor 10 für den Niederschlag bewirkt, zeigen die Darstellungen in Abbildung 4.27. Auch in diesen ist der zeitliche Verlauf der akkumulierten und stündlichen relativen Niederschlagsdifferenz zwischen Experiment- und Kontrolllauf aufgeführt, allerdings für das Szenario, dass nur 1% der maximal möglichen SPP-Menge emittiert wird. Es ist zu erkennen, dass der Effekt immer mehr im atmosphärischen Rauschen untergeht. Ein langzeitlicher Trend, wie in der linken Darstellung zu sehen, ist nicht mehr auszumachen,



Abbildung 4.27: Zeitlicher Verlauf der mittleren relativen Niederschlagsdifferenz (ER1). Akkumulierte (links) und stündliche Niederschlagsdifferenz (rechts) der 1%-Simulation. Es gibt Zeiträume, in denen ein leichter Zuwachs zu verzeichnen ist und Zeiträume mit leichter Abnahme. Langzeitlich scheint keine positive oder negative Tendenz identifizierbar zu sein. Die stündlichen Änderungen erreichen teilweise hohe Amplituden (+5% bis -2,5%), streuen allerdings relativ gleichmäßig um die Null.

weder in die positive noch in die negative Richtung. Lediglich kleinere Zeiträume können eine kleine Änderung über das Rauschen hinweg aufweisen. Diese haben eine Amplitude von etwa 0,2 % und somit im Vergleich zu der 10 %- und der 100 %-Simulation einen deutlichen geringeren Einfluss über einen deutlichen geringeren Zeitraum. Zudem variiert das Vorzeichen der Änderung und lässt somit keine eindeutige Beurteilung einer langzeitlichen Tendenz zu. Diese Erkenntnisse spiegeln sich auch in der rechten Darstellung des zeitlichen Verlaufs der stündlichen relativen Niederschlagsdifferenz wider. Es ist deutlich zu sehen, dass sich im Gegensatz zu den entsprechenden Darstellungen der 10 %- und 100 %-Läufe auch hier keine mittlere Verschiebung ergibt. Die Amplituden erreichen in etwa die gleichen Werte wie in den anderen Simulationsläufen (+5 % bis -2,5 %), allerdings streuen diese deutlicher näher um die Nulllinie anstatt um eine nach oben (oder unten) verschobene.

Diese Untersuchung der Variation der SPP-Emissionsmenge lässt darauf schließen, dass ein Mindestwert an biologischen Eiskeimen emittiert werden muss, um einen langzeitlichen Effekt der biologischen Eisnukleation auf die Niederschlagsmenge zu beobachten. In dieser Arbeit ist dieser Effekt ab einer Emissionsmenge von etwa 100 SPPs pro Polle zu erkennen, was einer verbreiteten SPP-Konzentration von einigen 100 kg^{-1} entspricht. Für einen kurzzeitigen Einfluss sind allerdings auch geringere SPP-Konzentrationen ausreichend. In welche Richtung dieser Einfluss allerdings wirkt, ist nicht auszumachen. Eine Berücksichtigung der biologischen Eisnukleation gewinnt durch die Einführung von SPPs folglich auch für die Niederschlagsmenge an Bedeutung.



Abbildung 4.28: **Schematische Darstellung der Kernaussagen.** Der linke Teil stellt das mittlere Temperaturprofil der Simulation dar, der rechte verdeutlicht die mittlere Wirkung der SPPs auf die Vorgänge in einer Wolke. Die linke Seite der Wolke zeigt die Zusammensetzung, wenn keine SPPs berücksichtigt werden, während die rechte Seite den Einfluss der SPPs darlegt.

4.4 Überblick über die Kernaussagen

Während das vorige Kapitel die Ergebnisse der Simulationsläufe aufzeigt und analysiert, gibt dieser Teil der Arbeit einen Überblick über die dabei gewonnenen Kernaussagen. Diese sind in Abbildung 4.28 schematisch dargestellt. Das mittlere Temperaturprofil der Simulation auf der linken Seite der Darstellung gibt einen Eindruck darüber, welche Temperaturen in den für die Kernaussagen wichtigen Höhen vorherrschen. Die Wolke auf der rechten Seite der Darstellung ist selbst in zwei Seiten und drei Höhenschichten unterteilt. Der linke Teil der Wolke veranschaulicht deren mittleres Aussehen, wenn keine SPPs an der biologischen Eisnukleation teilnehmen, während der rechte Teil die auftretenden Änderungen des Erscheinungsbilds der Wolke verdeutlichen, wenn SPPs berücksichtigt werden. Die Wahl der Höhenschichten von etwa 2000 m ($T \approx 265$ K), 4000 m ($T \approx 255$ K) und 8000 m ($T \approx 230$ K) ist durch die maximale Ausprägung der Kernaussagen in diesen Höhen motiviert.

Die dargestellte Wolke zeigt zunächst, dass die direkten Effekte, welche von der biologischen Eisnukleation durch SPPs hervorgerufen werden, in den unteren Schichten der Wolke wirken. Die für Eisnukleation relativ hohen Temperaturen und die erhöhte Konzentration an SPPs sorgen für einen starken Anstieg an Eispartikeln in Höhen von wenigen Tausend Metern. Der Großteil der Eispartikel in dieser Höhe weisen nun einen SPP-Eiskeim auf, während andere Eiskeime aufgrund der hohen Temperaturen nur wenig vertreten sind. Aufgrund der erhöhten Eisbildung ist zum einen ein leichter Rückgang an Wolkentropfen in Höhen von etwa 2000 m zu beobachten und zum anderen eine Reduktion der Größe der gebildeten Eispartikel, was in der Verteilung der gleichen Feuchte auf mehrere Partikel begründet liegt. In einer Höhe von um die 4000 m erhöht sich der Wert der Eispartikelanzahldichte auch ohne SPPs, da die sinkenden Temperaturen die Aktivierung anderer Eiskeime bewirken. Zudem geht die Wolkentropfenanzahldichte zurück, was zum einen auf die reduzierte Bildung neuer Wolkentropfen und zum anderen auf den wirkenden Wegener-Bergeron-Findeneisen-Prozess (in der Abbildung als "WBF" gekennzeichnet) zurückzuführen ist. Dieser ist bei Berücksichtigung von SPPs aufgrund der bereits in größerer Anzahl vorhandenen Eispartikeln deutlich stärker ausgeprägt, sodass eine starke Reduktion der Wolkentropfenanzahldichte in dieser Höhenschicht gegenüber der Nichtberücksichtigung von SPPs zu beobachten ist.

In den oberen Bereichen der Wolke ist der sekundäre Effekt der SPPs zu beobachten. In diesen Höhen herrschen Temperaturen, bei welchen auch homogene Eisnukleation stattfindet. Sind SPPs nicht als biologische Eiskeime berücksichtigt bilden sich in diesen Höhen eine Vielzahl an Eispartikeln. Im Gegensatz zu den Beobachtungen in den unteren Höhenschichten hat die Berücksichtigung von SPPs in Höhen von etwa 8000 m einen reduzierenden Effekt auf die Eispartikelanzahldichte. Dies lässt sich auf den verstärkt wirkenden Feuchteverbrauch durch die zusätzlich vorhandenen Eispartikel, welche sich in den unteren Schichten bildeten, zurückführen. Die Feuchte hat somit mehr Möglichkeiten sich an bereits vorhandene Eispartikel anzulagern, sodass weniger Feuchte zur Bildung weiterer Eispartikel bei niedrigeren Temperaturen zur Verfügung steht.

Bei Betrachtung des Niederschlags als von unter anderem der Eisbildung in Wolken abhängigen Größe fällt auf, dass die beobachteten Effekte zumeist auf einer räumlichen oder zeitlichen Verschiebung eines Niederschlagsereignisses beruhen. Dennoch zeigt sich, dass die Berücksichtigung der biologischen Eisnukleation durch SPPs auch eine leichte Erhöhung des mittleren Niederschlags zur Folge hat. Diese Wirkung ist in der großräumlichen Betrachtung eher gering, kann aber bei lokaler Betrachtung an Bedeutung gewinnen.

5 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Masterarbeit wird der Einfluss von Pollenfragmenten (auch SPP genannt), welche durch das Platzen von Pollen entstehen, auf die Eisbildung in Wolken untersucht. Hierbei handelt es sich um eine reine Modellstudie unter Verwendung des Modellsystems ICON-ART. Bei ICON-ART handelt es sich um eine Erweiterung des beim DWD operationell verwendeten Wetter- und Klima-modells ICON (ICOsahedral Nonhydrostatic), welches sich durch seine dreieckige Gitterstruktur und einen vollständig nicht-hydrostatischen Kern auszeichnet. ART (Aerosol and Reactive Trace gases) erweitert ICON, indem es die Wechselwirkung zwischen Spurenstoffen und dem Zustand der Atmosphäre simuliert. Da zum Zeitpunkt der Anfertigung dieser Arbeit keine Messungen von SPPs vorliegen, ist eine Einbeziehung von Messdaten für die Auswertung nicht möglich.

Die Vermutung eines Einflusses von SPPs auf die Eisbildung in Wolken ist auf die gute Eisaktivität von biologischen Partikeln zurückzuführen gepaart mit deren kleineren Größen im Vergleich zu Pollen. Hierdurch können SPPs in großer Anzahl in Höhen transportiert werden, in welchen die Temperaturen klein genug sind, um die biologische Eisnukleation zu ermöglichen, welche bereits bei relativ hohen Temperaturen von über -20 °C stattfindet.

Für die Erfassung des Einflusses von SPPs auf die Eisnukleation ist es zunächst notwendig ICON-ART um eine Emissionsparametrisierung für SPPs zu erweitern. Mithilfe dieser werden abhängig von der relativen Feuchte ein Teil der zur Verfügung stehenden Pollen (namentlich Birkenpollen) zum Platzen gebracht. Das bedeutet, die Pollenmasse aus dem Modell zu entfernen und eine äquivalente SPP-Masse hinzuzufügen. Die Pollen, welche hierfür benötigt werden, werden über eine Parametrisierung nach Straub (2017) in das Modell gebracht. Die gewonnenen SPPs sind für die Experimentläufe als biologische Eiskeime zu deklarieren, sodass die verwendete Eisnukleationsparametrisierung nach Phillips et al. (2013), aus jenen Eispartikel erzeugen kann. Für die Kontrollläufe findet dieser letzte Schritt nicht statt. Die Unterschiede zwischen den Experimentläufen und Kontrollläufen sind somit auf die biologische Eisnukleation mithilfe von SPPs als Eiskeimen zurückzuführen. Den Experiment- und Kontrollsimulationen liegt ein R2B09-Gitter zugrunde, welches einen mittleren effektiven Gitterpunktsabstand von etwa 5 km aufweist. Das Simulationsgebiet bedeckt einen Großteil Europas, da die derzeitige Implementierung der Pollenemissionparametrisierung auf Europa beschränkt ist. Die Simulationsdauer beträgt zehn Tage beginnend am 29. März 2014 0 UTC bei Verwendung eines Zeitschritts von zehn Sekunden. Hierdurch wird aufgrund der langen Simulationsdauer im Frühling eine starke Unabhängigkeit von synoptischen Wetterlagen erzielt. Für eine Sensitivitätskomponente der Modellstudie sind drei dieser Experiment-Kontrolllaufpaare durchgeführt. Jene unterscheiden sich durch die Menge der ausgestoßenen SPPs beim Platzen der Pollen: Eine lässt 100 % der maximal möglichen SPPs emittieren, während die zweite nur 10 % ausstößt und die dritte nur 1 %. Zudem finden die Untersuchungen sowohl für den gesamten Simulationszeitraum statt als auch nur für den Anfang und das Ende der Simulation. Auf diese Weise können Informationen über die zeitliche Entwicklung gewonnen werden.

Die erste im Rahmen dieser Arbeit untersuchte Größe ist die Eispartikelanzahldichte. Diese zeigt eine sehr direkte Abhängigkeit zur SPP-Konzentration, wenn biologische Eisnukleation aktiviert ist. In Höhen von etwa 800 m bis etwa 4000 m bilden sich abhängig von der SPP-Konzentration eine zusätzliche Mode der Eispartikelanzahldichte, was eine Erhöhung der mittleren Eispartikelanzahldichte in diesem Höhenbereich von etwa 10 % zur Folge hat. Diese Eisbildung findet in Temperaturbereichen statt, in welchen nur biologische Eisnukleation stattfinden kann, weswegen sie als biologische Mode bezeichnet wird. Der Anfangs- und der Endzeitraum der Simulation, wie auch die Simulationen mit reduzierter SPP-Emission zeigen, dass eine geringere SPP-Konzentration eine geringere Eispartikelanzahldichte in dieser biologische Mode bewirkt. Die Bildung von Eispartikeln in dieser relativ warmen Höhenschicht hat unter anderem aufgrund des Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozess des Weiteren zur Folge, dass die Wolkentropfenanzahldichte deutlich zurückgeht, was einen Einfluss auf die Zusammensetzung von Mischphasenwolken hat. Zudem zeigen die SPPs auch einen Einfluss auf die Eispartikelanzahldichte in Bereichen geringerer Temperatur, in denen auch andere Eisnukleationsprozesse stattfinden (nicht-biologische Mode). Da die SPPs in diesen Bereichen nur einen kleinen Teil der zur Verfügung stehenden Eiskeime bilden, ist dieser Einfluss indirekterer Natur. Weitestgehend unabhängig des SPP-Konzentrationswerts verschiebt sich die Eispartikelanzahldichte hier zu kleineren Werten. Es fällt zudem auf, dass die gebildeten Eispartikel in der biologischen Mode keine Eismultiplikation durch das Bilden von Sekundäreis zur Folge haben.

Der effektive Radius ermöglicht einen Vergleich der Größe der Eispartikel unabhängig von deren Form. Durch die SPPs und die damit verbundene biologische Eisnukleation weisen die gebildeten Eispartikel einen effektiven Radius im Bereich zwischen 30 µm und 150 µm auf, wobei die meisten mit einen effektiven Radius von 90 µm entstehen. Bei geringerer SPP-Emission tritt dieser Effekt weniger stark auf, wobei weiterhin die meisten jener Eispartikel mit einem effektiven Radius von 90 µm gebildet werden. Es bilden sich lediglich weniger Eispartikel durch die Reduktion der SPP-Eiskeime. Ähnlich verhält es sich auch mit den Anfangs- und Endbetrachtungen. Ohne biologische Eisnukleation weisen die wenigen gebildeten Eispartikel einen größeren effektiven Radius auf, wodurch durch die biologische Eisnukleation eine mittlere negative Änderung des effektiven Radius in den Höhenbereichen der biologischen Eisnukleation auftritt. In kälteren Höhenbereichen ist kein Einfluss von SPPs auf den effektiven Radius festzustellen. Die durch die SPPs hervorgerufene Reduktion der Eispartikel geht demnach mit einem entsprechenden Verlust der Feuchte einher, sodass eine Änderung des effektiven Radius nicht stattfindet. Insbesondere wegen des Effekts der SPP auf den effektiven Radius in Höhen von ein paar Tausend Metern ist eine Betrachtung der Strahlung für spätere Arbeiten von Interesse.

Der Niederschlag ist eine Größe, die von einer Vielzahl von Faktoren abhängig ist und nicht nur von der Feuchte und Eispartikelanzahldichte. Daher sind Effekte auf den Niederschlag durch die SPPs zumeist indirekt. So zeigt sich, dass die räumliche Verteilung der akkumulierten Niederschlagsdifferenzen von kleinen Differenzen in beide Richtungen dominiert ist und größere Differenzen zumeist von ähnlich großen kompensierenden Differenzen begleitet sind, so dass die Unterschiede zumeist daher rühren, dass ein Niederschlagsereignis an einer anderen Stelle stattfindet. Ein weiterer Effekt der SPPs ist das erhöhte Auftreten von stündlichen Niederschlagswerten bis zu 12 kg m⁻². Bei Betrachtung von Differenzen stündlicher Niederschlagsmengen fällt allerdings auf, dass eine leichte
Verschiebung zu positiven Werten durch die biologische Eisnukleation mit SPPs stattfindet. Dies bestätigt sich weiter, da die zeitliche Entwicklung des mittleren akkumulierten Niederschlags eine positive Änderung zeigt, wenn SPPs beim Eisnukleationsprozess mitberücksichtigt werden. Diese Änderung des mittleren Niederschlags erreicht nach zehn Tagen einen Wert von etwa 0,9 %. Ebenso zeigt sich, dass, auch wenn die langzeitliche Änderung leicht positiv ist, die stündliche Änderung deutlicheren Schwankungen unterliegt. So sind Änderungen von etwa 5 % mehr mittleren Niederschlags vertreten wie auch Änderungen von etwa 2 % weniger. Bei Reduktion der emittierten SPPs geht der langzeitliche Effekt eines positiven Trends zurück und schwindet sogar im Szenario des 1 %-igen Ausstoßs, was auf eine Mindestmenge der emittierten SPPs schließen lässt, um einen langzeitlichen Trend wahrzunehmen. Dennoch zeigt sich, dass, auch wenn viele Faktoren die modellierte Niederschlagsmenge beeinflussen, durch die alleinige Variation der Aktivität der biologischen Eisnukleation, SPPs langfristig eine mittleren positiven Effekt auf die Niederschlagsmenge haben.

Literatur

- Augustin, S. et al., 2013: Immersion freezing of birch pollen washing water. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **13(21)**, 10989–11003.
- Bangert, M. et al., 2012: Saharan dust event impacts on cloud formation and radiation over Western Europe. *Atmos. Chem. Phys.* (12), 4045–4063.
- D'Amato, G. et al., 2007: Thunderstorm-asthma and pollen allergy. Allergy, 62(1), 11–16.
- Gasch, Philipp et al., 2017: Revealing the meteorological drivers of the September 2015 severe dust event in the Eastern Mediterranean.. *Atmospheric Chemistry & Physics*, **17(22)**.
- Gassmann, A. und H.-J. Herzog, 2008: Towards a consistent numerical compressible non-hydrostatic model using generalized Hamiltonian tools. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 134(635), 1597–1613.
- Giorgetta, M., 2018: Herausforderungen und Motivation für die Entwicklung des ICON Atmosphärenmodells [online]. Verfügbar unter URL: http://www.mpimet.mpg.de/kommunikation/ aktuelles/im-fokus/herausforderungen-und-motivation-fuer-die-entwicklungdes-icon-atmosphaerenmodells/ [Zugriff am 11.09.2018].
- Grote, Monika et al., 2003: Abortive pollen germination: A mechanism of allergen release in birch, alder, and hazel revealed by immunogold electron microscopy. *Journal of Allergy and Clinical Immunology*, **111(5)**, 1017–1023.
- Hader, J. D. et al., 2014: Contribution of pollen to atmospheric ice nuclei concentrations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **14**(**11**), 5433–5449.
- Helbig, Nora et al., 2004: Numerical modelling of pollen dispersion on the regional scale. **20**(1), 3–19.
- Holton, James R, 2004: An Introduction to Dynamic Meteorology. Elsevier Academic Press, 535 S.
- Hoose, C. und O. Möhler, 2012: Heterogeneous ice nucleation on atmospheric aerosols: A review of results from laboratory experiments. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **12(20)**, 9817–9854.
- Hoose, C. et al., 2010: How important is biological ice nucleation in clouds on a global scale?. *Environmental Research Letters*, **5(2)**, 024009.
- Huffman, J. A. et al., 2013: High concentrations of biological aerosol particles and ice nuclei during and after rain. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **13**(13), 6151–6164.
- ITWissen.info, 2018: Mooresches Gesetz [online]. Verfügbar unter URL: http://www.itwissen. info/definition/lexikon/Mooresches-Gesetz-Moores-law.html [Zugriff am 11.09.2018].
- Lohmann, Ulrike et al., 2016: An introduction to clouds: From the microscale to climate. Cambridge University Press, Cambridge, 399 S.
- Lüttge, Ulrich et al., 2010: Botanik: die umfassende Biologie der Pflanzen. Wiley-VCH, Weinheim, 1216 S.
- Masoli, Matthew et al., 2004: The global burden of asthma: executive summary of the GINA Dissemination Committee report. *Allergy*, **59**(**5**), 469–478.

- O'Sullivan, D. et al., 2015: The relevance of nanoscale biological fragments for ice nucleation in clouds. *Scientific reports*, **5**, 8082.
- Phillips, Vaughan T. J. et al., 2008: An Empirical Parameterization of Heterogeneous Ice Nucleation for Multiple Chemical Species of Aerosol. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **65**(9), 2757–2783.
- Phillips, Vaughan T. J. et al., 2013: Improvements to an Empirical Parameterization of Heterogeneous Ice Nucleation and Its Comparison with Observations. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 70(2), 378–409.
- Pruppacher, H und J Klett, 1997. Microphysics of Clouds and Precipitation. Atmospheric and Oceanographic Sciences Library, Vol. 18.
- Pschyrembel, Willibald, 2006: Pschyrembel® Naturheilkunde und alternative Heilverfahren. de Gruyter, Berlin, Boston, 423 S.
- Pummer, B. G. et al., 2012: Suspendable macromolecules are responsible for ice nucleation activity of birch and conifer pollen. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **12**(**5**), 2541–2550.
- Rieger, D. et al., 2015: ICON–ART 1.0–a new online-coupled model system from the global to regional scale. *Geoscientific Model Development*, **8**(**6**), 1659–1676.
- Schäppi, George F. et al., 1997: Concentrations of the major birch tree allergen Bet v 1 in pollen and respirable fine particles in the atmosphere. *Journal of Allergy and Clinical Immunology*, 100(5), 656–661.
- Sénéchal, Hélène et al., 2015: A Review of the Effects of Major Atmospheric Pollutants on Pollen Grains, Pollen Content, and Allergenicity. *TheScientificWorldJournal*, **2015**, 940243.
- Steiner, Allison L. et al., 2015: Pollen as atmospheric cloud condensation nuclei. *Geophysical Research Letters*, **42(9)**, 3596–3602.
- Straub, Jonas, 2017. "Numerische Simulation der Pollenausbreitung in ICON-ART". Unveröffentlichte Bachelorarbeit. Karlsruhe Institut für Technologie.
- Suphioglu, Cenk, 1998: Thunderstorm Asthma Due to Grass Pollen. *International Archives of Allergy and Immunology*, **116(4)**, 253–260.
- Taylor, P. E. et al., 2004: Birch pollen rupture and the release of aerosols of respirable allergens. *Clinical and experimental allergy : Journal of the British Society for Allergy and Clinical Immunology*, 34(10), 1591–1596.
- Taylor, Philip E. et al., 2002: Release of allergens as respirable aerosols: A link between grass pollen and asthma. *Journal of Allergy and Clinical Immunology*, **109**(1), 51–56.
- Tomita, H. et al., 2001: Shallow water model on a modified icosahedral geodesic grid by using spring dynamics. *Journal of Computational Physics*, **174(2)**, 579–613.
- Vogel, B. et al., 2009: The comprehensive model system COSMO-ART-Radiative impact of aerosol on the state of the atmosphere on the regional scale. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9(22), 8661–8680.
- Vogel, Heike et al., 2008: Numerical simulation of birch pollen dispersion with an operational weather forecast system. **52(8)**, 805–814.
- Wang, Junning et al., 2017: Atmospheric pollen dispersion from herbicide-resistant horseweed (Conyza canadensis L.). **33(3)**, 393–406.
- Wardman, AE et al., 2002: Thunderstorm-associated asthma or shortness of breath epidemic: a Canadian case report. *Canadian respiratory journal*, **9(4)**, 267–270.

- Weber, Tommy, 2016: Asthma bronchiale Ursachen, Behandlung und Gefahren [online]. Verfügbar unter URL: http://news.doccheck.com/de/blog/post/4824-asthma-bronchialeursachen-behandlung-und-gefahren/ [Zugriff am 17.09.2018].
- Wozniak, MC et al., 2018: Pollen rupture and its impact on precipitation in clean continental conditions. **45(14)**, 7156–7164.
- Zängl, G. et al., 2015: The ICON (ICOsahedral Non-hydrostatic) modelling framework of DWD and MPI-M: Description of the non-hydrostatic dynamical core. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **141(687)**, 563–579.
- Zhou, Qian, 2014. "Relative Humidity Induced Plant Pollen Grain Rupture and Conceptual Model Development". Diss. Washington State University.
- Zink, K et al., 2013: EMPOL 1.0: a new parameterization of pollen emission in numerical weather prediction models. *Geoscientific Model Development*, **6**(**6**), 1961–1975.

Danksagung

In diesem Teil der Arbeit möchte ich meinen Dank für die Unterstützung zum Ausdruck bringen, die ich von den Menschen meines Umfelds erfuhr. Wenn ich auch nicht jeden einzelnen namentlich erwähnen kann, so möchte ich doch auf eine Auswahl genauer eingehen.

Als Erstes gilt mein Dank Herrn Professor Christoph Kottmeier dafür, dass er sich bereit erklärt die Rolle des Referenten für diese Masterarbeit zu übernehmen sowie für die damit verbundenen Ratschläge für das Verfassen dieser Arbeit.

Ebenso danke ich Frau Professor Corinna Hoose für die Übernahme der Korreferentenrolle und der Begutachtung der Ergebnisse, die im Rahmen dieser Arbeit erzielt wurden, sowie für das Korrekturlesen.

Ich danke im Allgemeinen der gesamten Arbeitsgruppe "Spurenstoffmodellierung und Klimaprozesse" des IMK-TROs, in welcher ich nun seit einigen Jahren Teil bin, sei es im Rahmen meiner Tätigkeiten als wissenschaftliche Hilfskraft oder als Student, der seine Bachelorarbeit oder auch Masterarbeit in dieser Arbeitsgruppe verfasst. Ohne die Unterstützung der Gruppe wäre diese Masterarbeit nicht in diesem Maße gelungen. Insbesondere gilt mein Dank dem Gruppenleiter, Herrn Bernhard Vogel, für das Angebot dieses Themas der Masterarbeit und der unterstützenden Worte und Ratschläge, die den Lauf der Bearbeitung prägten, sowie für das Korrekturlesen. Auch für die fachliche und moralische Begleitung im Laufe dieser Arbeit durch Frau Heike Vogel spreche ich hiermit meinen Dank aus. Zudem möchte ich bei Herrn Simon Gruber für sein zur Verfügung gestelltes Wissen und die Ratschläge zum Thema des effektiven Radius bedanken, sowie bei Herrn Jonas Straub für die Vorstellung der Art und Weise wie Pollen derzeit in ICON-ART behandelt werden.

Abschließend bedanke ich mich für die Unterstützung und das Verständnis, welches ich von meiner Familie und meinen Freunden erfuhr, ohne die das vergangene Jahr wohl auch anders verlaufen wäre.

Erklärung

Ich versichere wahrheitsgemäß, die Arbeit selbstständig verfasst, alle benutzten Hilfsmittel vollständig und genau angegeben und alles kenntlich gemacht zu haben, was aus Arbeiten anderer unverändert oder mit Abänderungen entnommen wurde sowie die Satzung des KIT zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis in der jeweils gültigen Fassung beachtet zu haben.

Karlsruhe, den 18. 10. 2018

Sven Werchner