

# **Numerische Simulationen zur Wechselwirkung zwischen Aerosol und Wolken**

Diplomarbeit im Fach Meteorologie  
von

**Daniel Rieger**

August 2012



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

Referent:

Prof. Dr. Christoph Kottmeier

Korreferent:

Prof. Dr. Thomas Leisner

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>11</b>
2.1	Gleichgewichtszustände . . . . .	11
2.1.1	Gleichgewicht über einer ebenen Oberfläche . . . . .	12
2.1.2	Gleichgewicht über einem Wassertropfen . . . . .	13
2.1.3	Gleichgewicht über einer Lösung . . . . .	14
2.1.4	Gleichgewicht über einem Lösungstropfen . . . . .	15
2.1.5	Tropfenwachstum . . . . .	18
2.2	Berechnung der Anzahl und Masse aktivierter Partikeln . . . . .	19
2.2.1	Gleichungen für die Anzahldichte . . . . .	20
2.2.2	Gleichungen für die Massendichte . . . . .	20
2.2.3	Bestimmung unbekannter Terme . . . . .	20
2.2.4	Anzahldichte der aktivierten Partikeln . . . . .	21
2.2.5	Masse der aktivierten Partikeln . . . . .	22
2.3	Aktivierung . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Modellsystem</b>	<b>27</b>
3.1	COSMO . . . . .	28
3.1.1	Wolkenschema . . . . .	30
3.2	COSMO-ART . . . . .	31
3.2.1	Aerosolbehandlung . . . . .	32
3.2.2	Erweitertes Wolkenschema in COSMO-ART . . . . .	34
3.3	Zwei-Momenten Wolkenmikrophysikschema . . . . .	35
3.3.1	Nucleation Aerosol Scavenging . . . . .	36
<b>4</b>	<b>Simulationen</b>	<b>39</b>
4.1	Wetterlage . . . . .	41
4.2	Modellstudie April 2008 . . . . .	43
4.2.1	Ausgangssituation . . . . .	43
4.2.2	Sensitivitätsstudien (SENS) . . . . .	46
4.2.3	Einfluss von vorgeschriebenem Aerosol auf Niederschlag (INDE) . . . . .	49

4.2.4	Modellstudie mit prognostiziertem Aerosol (ARTF) . . . . .	54
4.2.5	Quantifizierung des Nucleation Aerosol Scavenging und dessen Einfluss auf Wolkeneigenschaften. . . . .	67
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>75</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>77</b>
<b>A</b>	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>83</b>



# 1. Einleitung

Für das Klimasystem Erde unterliegen sowohl die Eigenschaften der in der Atmosphäre vorkommenden Stoffe, als auch die Prozesse, die auf diese wirken, vielfältigen Wechselwirkungen. Unter Eigenschaften versteht man z.B. ihre Konzentration oder chemische Zusammensetzung. Prozesse stellen Phasenübergänge und chemische Reaktionen dar. Die Auswirkungen anthropogener, also durch den Menschen verursachten, Änderungen auf den Atmosphärenzustand lassen sich häufig nur schwer abschätzen. Modellstudien bieten die Möglichkeit, Änderungen qualitativ und auch quantitativ zu erfassen. Um ein besseres Verständnis zu bekommen, müssen die physikalischen Prozesse hierbei so genau wie möglich von den Modellen wiedergegeben werden. Der Einfluss atmosphärischen Aerosols auf die Wolken- und Niederschlagsbildung stellt einen großen Unsicherheitsfaktor dar. In der vorliegenden Diplomarbeit werden deshalb einerseits Modellstudien zur Quantifizierung der Wechselwirkung angestellt und andererseits zusätzliche Wechselwirkungen zwischen Wolken und Aerosolen in das Modellsystem COSMO-ART implementiert.

Als Aerosole bezeichnet man suspendierte und flüssige Teilchen in der Atmosphäre. Unterschieden werden sie nach ihren Eigenschaften. Kriterien zur Klassifizierung können zum Beispiel die Entstehung (anthropogen, biogen), die Art des Materials (organisch, anorganisch) oder auch die Größe sein. So fasst die gängige Bezeichnung PM10 (**P**articulate **M**atter), gemeinhin bekannt als Feinstaub, die Masse aller Immissionen von Aerosol mit einem aerodynamischen Durchmesser kleiner als  $10\ \mu\text{m}$  zusammen. Um eine möglichst genaue mathematische Beschreibung der Größenverteilung zu erhalten, unterteilt man die Gesamtverteilung in mehrere Moden. Am weitesten verbreitet ist die Einteilung in Nukleations-, Aitken-, Akkumulations- und Grobpartikelmode. Die **Nukleationsmode** umfasst Partikel mit einem mittleren Durchmesser bis zu 10 nm. Die Durchmesser der Partikel in der **Aitkenmode** betragen zwischen 10 nm und 100 nm. Die Bezeichnungen der Moden resultieren unter anderem aus der Art, in der Partikel dieser Größenordnungen für gewöhnlich entstehen. Diese sind größtenteils durch Nukleation aus der Gasphase entstanden, in der Nukleationsmode homogen, in der Aitkenmode heterogen auf der Oberfläche eines festen Partikels. Die Anzahl der Partikel, die sich in diesen beiden Moden befinden, ist vergleichsweise hoch, jedoch tragen diese nur sehr wenig zur Gesamtmasse der Aerosole bei (Seinfeld und Pandis, 2006). Partikel der **Akkumulationsmode** besitzen einen Durchmesser zwischen  $0,1\ \mu\text{m}$  und  $2,5\ \mu\text{m}$ . Diese entstehen zum Teil durch Koagulation. Die Prozesse, die zu einer Verringerung der Aerosolkonzentration führen, sind in der Akkumulationsmode am ineffizientesten, was zu dieser Bezeichnung führt (Seinfeld und Pandis, 2006). Größere Partikel, das sind vor allem Mineralstaubpartikel, werden der so genannten **Coarse Mode** (Grobpartikelmode)

zugerechnet. Eine weitere gängige Klassifizierung beschreibt sowohl Entstehung als auch Zusammensetzung des Aerosols. So entstehen **primäre Aerosole** durch direkte Emission. Beispiele hierfür sind Mineralstaub-, Seesalz-, Ruß-, Pollen- oder Vulkanaschepartikel. Im Gegensatz dazu bilden sich **sekundäre Aerosole** erst durch die Kondensation von gasförmigen Substanzen wie Schwefelsäure oder Salpetersäure. Dabei bieten die primären Aerosole häufig die Oberfläche, auf der die Kondensation stattfindet, und bilden den Kern des sekundären Aerosols.

Wolken gehören zu den wichtigsten Elementen der Atmosphäre und nehmen eine Schlüsselposition ein (Siehe auch Seinfeld und Pandis (2006)). Für die Entstehung von warmen Wolken, die in dieser Diplomarbeit betrachtet werden, ist eine relative Luftfeuchtigkeit von mehr als 100 % notwendig. Die Übersättigung, also der Anteil Wasserdampf, der sich oberhalb der Sättigung befindet, übersteigt selten einen Wert von 1 % (Twomey, 1959). Die Rolle der Wolken in der Atmosphäre charakterisieren Seinfeld und Pandis (2006) mit folgenden Stichpunkten:

- Wolken modifizieren den Strahlungshaushalt, indem sie zum einen Einstrahlung der Sonne in den Weltraum zurückwerfen und zum anderen langwellige, von der Erdoberfläche emittierte Strahlung absorbieren.
- Wolken stellen einen wichtigen Teil des globalen und regionalen hydrologischen Kreislaufs dar.
- Wolkentropfen transportieren Aerosolpartikel zur Erdoberfläche (nasse Deposition).
- Wolken dienen als Medium für chemische Flüssigphasenreaktionen und für die Produktion sekundärer Aerosole.
- Wolken verändern maßgebend den vertikalen Transport in der Atmosphäre. Auf- (updrafts) und Abwinde (downdrafts) bestimmen die vertikale Verteilung der Aerosole und Spurengase in der Atmosphäre.

Der anthropogene Einfluss auf das Klimasystem wird mittels des Strahlungsantriebs quantifiziert (Intergovernmental Panel on Climate Change, IPCC). Der Strahlungsantrieb ist definiert als die Änderung der Netto-Einstrahlung in  $\text{W m}^{-2}$  an der Tropopause (IPCC, 2007) und drückt den Einfluß eines Faktors auf das Gleichgewicht von einfallender zu abgehender Energie aus. Prozesse, die positive Werte besitzen, tendieren dazu, die Erdatmosphäre zu erwärmen, Prozesse mit negativen Werten diese abzukühlen. Der Gesamttrend zeigt einen positiven Wert,  $1,6 \text{ W m}^{-2}$  [  $0,6$  bis  $2,4 \text{ W m}^{-2}$  ]. Von den Prozessen, die hierzu beitragen, zeigen Aerosole den stärksten gegenläufigen Betrag. Dies liegt an dem Einfluss, den sie auf Strahlung und Wolkenbildung haben (IPCC, 2007).

Aerosole anthropogenen Ursprungs, also hauptsächlich Sulfat, organische Kohlenstoffverbindungen, Ruß, Nitrat und Staub, bewirken insgesamt einen abkühlenden Effekt auf das Klimasystem (IPCC, 2007). Mittels Absorption und Streuung beeinflussen sie direkt den Strahlungshaushalt des Klimasystems. Dabei spielen auch die Eigenschaften des Aerosols eine wichtige Rolle. So streut zum Beispiel Aerosol mit einem Durchmesser zwischen  $0,1 \mu\text{m}$  und  $2,0 \mu\text{m}$  das meiste

Licht pro Masse (IPCC, 2001). Des Weiteren sind auch die Absorptionseigenschaften der Partikel entscheidend, die insbesondere bei Ruß sehr ausgeprägt sind (IPCC, 2001). Der Einfluss auf den Strahlungshaushalt durch Extinktion wird im klimatologischen Sinne als **direkter Aerosoleffekt** bezeichnet. Der Strahlungsantrieb wird mit  $-0,5 \text{ W m}^{-2}$  [ $-0,9$  bis  $-0,1 \text{ W m}^{-2}$ ] abgeschätzt (IPCC, 2007).

Die **indirekten Aerosoleffekte** beschreiben den Einfluss von Aerosolpartikeln auf die Wolken- und Niederschlagsbildung. Darunter versteht man die Bildung eines Wolkentropfens durch Kondensation von Wasserdampf auf der Oberfläche eines Aerosolpartikels, also eines Wolkenkondensationskeims (CCN, cloud condensation nuclei). Überschreitet der Wolkentropfen einen kritischen Durchmesser, so wächst er bei konstanter Luftfeuchtigkeit weiter an. Die Partikel werden nun als aktiviert bezeichnet. Im Gegensatz dazu bezeichnet man die Bildung eines Wolkentropfens aus reinem Wasser ohne Aerosolkern als homogene Nukleation. Für Wasser findet in der Atmosphäre nahezu ausschließlich der Vorgang der heterogenen Nukleation statt, was in den Abschnitten 2.1.2 und 2.1.4 physikalisch begründet wird. Die Aktivierung eines Wolkentropfens wird in Abschnitt 2.3 genauer beschrieben.

Eine Erhöhung der Wolkenkondensationskeime kann die Albedo, also das Verhältnis aus reflektierter und einfallender Strahlung, der Wolken erhöhen (Twomey, 1974). Dies beeinflusst den globalen klimatologischen Strahlungshaushalt und wird in diesem Zusammenhang als der **erste indirekte Aerosoleffekt** oder **Twomey-Effekt** bezeichnet. Besonders ausgeprägt lässt er sich bei der Bewölkung über Schiffsrouten beobachten (z.B. bei Radke et al. 1989).

Durch die erhöhte Anzahl an Wolkenkondensationskeimen wachsen Wolkentropfen nicht mit derselben Geschwindigkeit zu Regentropfen an. Dies führt, verglichen mit einer Wolke in reiner Luft, zu einer verspäteten Niederschlagsbildung oder unterdrückt diese ganz. Somit kann sich die Lebensdauer der Wolke verlängern. Der Einfluss dessen auf den globalen klimatologischen Strahlungshaushalt wird als **zweiter indirekter Aerosoleffekt** oder **Albrecht-Effekt** bezeichnet (Albrecht, 1989). Die Quantifizierung der indirekten Aerosoleffekte erweist sich als schwierig und ist der größte Unsicherheitsfaktor in der Bestimmung des anthropogenen Strahlungsantriebs. Aus Messungen ergibt sich ein Strahlungsantrieb durch die indirekten Aerosoleffekte von  $-0,7 \text{ W m}^{-2}$  [ $-1,8$  bis  $-0,3 \text{ W m}^{-2}$ ] (IPCC, 2007).

Die indirekten Aerosoleffekte besitzen nicht immer die Intensität, die man theoretisch erwarten würde. Deshalb weisen Stevens und Feingold (2009) darauf hin, dass es sich bei den Aerosol-Wolken Wechselwirkungen um ein gepuffertes System (buffered system) handelt. Demzufolge werden Aerosoleffekte häufig durch einen, ähnlich der Lenz'schen Regel, entgegengesetzten Prozess gepuffert, also abgeschwächt. Als Beispiel für einen mikrophysikalischen Puffer führen sie an, dass Änderungen in der Zusammensetzung der Aerosolverteilung, die ohne weitere Effekte zu weniger Wolkentropfen führen würden, gleichzeitig zu lokal erhöhten Übersättigungen führen, wodurch kleinere Partikel aktiviert werden können.

Die bisher diskutierten Prozesse beziehen sich auf warme Wolken. Der Einfluss von Aerosolpartikeln auf die Eisbildung ist aufgrund der Vielzahl der heterogenen Eiskristallnukleationsformen noch wenig verstanden (Lohmann und Feichter, 2005). Im Gegensatz zu Wolkenkondensationskeimen bestehen Eiskondensationskeime (IN, ice nuclei) meistens aus wasserunlöslichen Aero-

solen wie Staub, Ruß und biologischen Partikeln. So zeigt zum Beispiel Lohmann (2002), dass Rußpartikel als Kontakteiskeime, also als Partikel, die bei Kontakt mit unterkühltem Wasser den Gefriervorgang initiieren, wirken können. Eine Zusammenfassung der durch Aerosole ausgelösten Prozesse in Misch- und Eiswolken findet sich bei Lohmann und Feichter (2005).

Die Temperaturerhöhung, die aus dem hohen Absorptionsvermögen von Ruß resultiert, kann die Bewölkung reduzieren. Das Auflösen von Passatcumuli kann durch das Erhitzen von Rußpartikeln durch die Sonnenstrahlung beschleunigt werden. Dieser Einfluss auf den globalen klimatologischen Strahlungshaushalt wird **semi-direkter Aerosoleffekt** genannt und bewirkt eine Erwärmung des Klimasystems (Ackerman et al., 2000). Lohmann und Feichter (2001) kommen zu dem Ergebnis, dass der semi-direkte Aerosoleffekt auf der globalen Skala kleiner als andere Aerosoleffekte ist, jedoch regional einen hohen Einfluss haben kann.

Die Deposition von Aerosolen erfolgt auf unterschiedliche Weisen. Die **Sedimentation** resultiert aus einer mittleren nach unten gerichteten Bewegung der Partikeln. Erreicht es den Boden, haftet es an und ist somit kein Aerosolpartikel mehr. Die **trockene Deposition** erfolgt ohne Sedimentationsgeschwindigkeit durch Anhaften an Vegetation oder Orographie. Die **nassee Deposition** geschieht durch ein Auswaschen durch Hydrometeore, also zum Beispiel Regentropfen oder Schneeflocken. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten: Das so genannte **collision aerosol scavenging** bezeichnet das Einfangen von Aerosolpartikeln durch Kollision mit Hydrometeoriten. Das **Nucleation Aerosol Scavenging**, im Folgenden **NAS**, beschreibt den Vorgang des Auswaschens von Wolkenkondensationskeimen, die in der Wolke aktiviert worden sind, und durch Niederschlag aus dieser Wolke zur Erdoberfläche transportiert werden können.

Der Einfluss von Aerosol auf Wolken- und Niederschlagsbildung lässt sich nur schwer quantifizieren. So stellt Khain (2009) fest, dass die Ergebnisse von Studie zu Studie voneinander abweichen. Ob Aerosol zu erhöhtem oder vermindertem Niederschlag führt, lässt sich nicht pauschal sagen (Rosenfeld et al., 2008; Small et al., 2009). Vielmehr müssen Studien angestellt werden, die den Aerosoleffekt auf verschiedene Wolkenarten untersuchen (Stevens und Feingold, 2009). Solomos et al. (2011) stellen in ihrer Arbeit zum Einfluss von Mineralstaub und Seesalz auf Wolken und Niederschlag fest, dass eine prognostische Beschreibung der Aerosolverteilung in einem hochaufgelösten Modellsystem die Vorhersage des 24-Stunden Niederschlags verbessert. Außerdem wird eine Verzögerung des Niederschlags bei Wolken in Gebieten mit hoher Aerosolkonzentration konstatiert. Seifert et al. (2012) finden in ihren Modellstudien, dass verschiedene Annahmen zu Wolkenkondensationskeimen und Eiskeimen großen Einfluss auf die Eigenschaften von Wolken haben. Jedoch wird im Mittel nur ein geringer Einfluss auf den Niederschlag gefunden.

Das NAS kann regional einen großen Einfluss auf die Aerosolverteilung haben. Dies kann wiederum einen Einfluss auf die weitere Wolkentropfenbildung und somit auf die Niederschlagsbildung haben. So zeigen Browse et al. (2012), dass der Aerosolzyklus der Arktis, im Sommer mit niedrigen Konzentrationen, im Winter mit hohen Konzentrationen, durch die Temperaturabhängigkeit des NAS bedingt ist. Auch bei globalen Modellsystemen kann das NAS eine Rolle spielen. Croft et al. (2010) zeigen in ihrer Arbeit, dass eine diagnostische oder prognostische Vorhersage des NAS im Vergleich zu vorgeschriebenen Raten zwar zu Lasten der Rechenzeit geht, das Ergebnis jedoch deutlich verbessert wird. Wolff (2010) zeigt in ihren Untersuchungen, dass die Berücksichtigung

sichtigung des NAS im Modellsystem wichtig ist und zu deutlichen Unterschieden im Niederschlag führen kann. Abgesehen von Advektion und dem Auswaschen der Partikel werden bei Wolff (2010) keine weiteren Aerosolprozesse berücksichtigt. Bangert et al. (2011) zeigen, dass die Nukleation sekundärer Partikel über Wolken stark erhöht ist. Dies ist durch eine effizientere Photochemie, feuchte Bedingungen und den starken vertikalen Transport bedingt. Das NAS kann hierauf ebenfalls einen Einfluss haben.

Wie eingangs erwähnt dient eine möglichst exakte Beschreibung physikalischer Vorgänge in Modellen dazu, die Prozesse in der Atmosphäre besser zu verstehen und zukünftige Zustände möglichst treffend vorherzusagen. Einer der größten Unsicherheitsfaktoren stellt noch immer die Niederschlagsvorhersage dar, da sich die relevanten Prozesse konvektiver Systeme häufig subskalig, also auf Skalen kleiner der Auflösung des Modells, abspielen. Auch die hohe räumliche und zeitliche Variabilität der beteiligten Größen macht es schwierig, präzise Vorhersagen zu treffen. So werden Stürme oftmals an einem falschen Ort oder mit einer falschen Intensität dargestellt. Eine genauere Beschreibung der Herausforderungen der Niederschlagsvorhersage findet sich zum Beispiel bei Cuo et al. (2011). Um die Entstehung von Wolkentropfen und Wolkeneis möglichst exakt wiederzugeben, muss die Aktivierung von Aerosolpartikeln in Betracht gezogen werden. Dazu ist sowohl eine geeignete numerische Beschreibung des Vorgangs der Aktivierung, als auch die Kenntnis der Aerosolverteilung erforderlich. Dies ist beides im Regionalmodell COSMO-ART gegeben.

Das Modellsystem COSMO-ART (**C**osortium for **S**mall Scale **M**odelling - **A**erosols and **R**eactive **T**race Gases) ist ein online-gekoppeltes Modell, basierend auf dem operationellen Wettervorhersagemodell des deutschen Wetterdienstes, COSMO. COSMO-ART ist am Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) entwickelt worden und dient zur Studie der Wechselwirkungen von Aerosolen und Spurengasen mit der Atmosphäre auf der regionalen Skala. Die Simulation der Wechselwirkungen wird durch die online-Kopplung ermöglicht. Das bedeutet, dass den Atmosphärenzustand kennzeichnende Variablen auf dem selben Gitter berechnet werden wie die für die Aerosolverteilung benötigten Variablen. Außerdem werden derselbe numerische Zeitschritt und identische numerische Verfahren gewählt (Vogel et al., 2009).

Ein erweitertes Wolkenschema (Seifert und Beheng, 2006) ermöglicht den Einfluss von Aerosolpartikeln auf die Mikrophysik von Wolken. In diesem Schema werden zwei Momente, die Anzahl und die Masse, von Hydrometeoren berechnet. Es werden sechs Hydrometeorklassen unterschieden: Wolkentropfen, Wolkeneis, Regen, Schnee, Graupel und Hagel. Im Modellsystem ist das Wolkenschema an die Aerosolverteilung gekoppelt, wodurch sich Aerosol-Wolken-Wechselwirkungen untersuchen lassen (Bangert et al., 2012). Eine physikalische Beschreibung des Zwei-Momenten Wolkenmikrophysikschemas findet sich in Kap. 3.3, eine genauere Beschreibung der Umsetzung in COSMO-ART findet sich in Kap. 3.2.2.

Zielsetzung der vorliegenden Diplomarbeit ist es, den Einfluss von Seesalzaerosol auf postfrontale, flache Konvektion zu quantifizieren. Dazu werden zunächst erste Fallstudien mit einer horizontalen Auflösung von 2,8 km für einen Zeitraum von vier Tagen im April 2008 gemacht. Eine von Baldauf et al. (2011) durchgeführte Studie zu diesem Zeitraum ergibt, dass das operationelle

COSMO-DE Modellsystem in der Lage ist, die postfrontale Konvektion zu beschreiben. Jedoch sind die Konvektionzellen größer und nicht derart weitverbreitet wie bei den Beobachtungen. In dieser Diplomarbeit wird untersucht, ob sich dies besser darstellen lässt. Dazu wird ein Modellsystem verwendet, das einerseits die Aerosolkonzentration prognostisch beschreibt und andererseits ein erweitertes Wolkenschema benutzt, das die physikalischen Prozesse vergleichsweise genau wiedergibt. Die Besonderheit dieser Fallstudie besteht darin, dass dieses komplexe Modellsystem noch nicht in einer derart hohen Auflösung genutzt worden ist und dies somit zu neuen Erkenntnissen führen kann. Danach wird das Modellsystem um den Vorgang des NAS erweitert und eine weitere Fallstudie für den o.g. Zeitraum durchgeführt. Eine weitere Zielsetzung ist es somit, den Einfluss des NAS auf die Aerosolverteilung und die Niederschlagsbildung zu untersuchen.

Diese Diplomarbeit gliedert sich wie folgt: In Kap. 2 werden die theoretischen Grundlagen beschrieben. In Kap. 3 findet sich eine detailliertere Beschreibung der Modellsysteme COSMO und COSMO-ART. Außerdem wird auf die Umsetzung des NAS im Modellsystem näher eingegangen. Kapitel 4 zeigt zunächst die Ergebnisse hochaufgelöster Fallstudien mit dem Zwei-Momenten-Wolkenmikrophysikschema. Im Anschluss wird das NAS aktiviert und die Modellläufe werden miteinander verglichen. Eine abschließende Zusammenfassung mit einem Ausblick findet sich dann in Kap. 5.

## 2. Theorie

In diesem Kapitel werden die physikalischen Grundlagen näher beleuchtet. Zunächst werden dazu Gleichgewichtszustände zwischen Wasser flüssiger und gasförmiger Phase betrachtet. Zuerst geschieht dies für eine ebene Oberfläche, dann für eine gekrümmte Oberfläche, eine ebene Oberfläche mit gelöstem Partikel und abschließend für eine gekrümmte Oberfläche mit gelöstem Partikel. Es zeigt sich, dass sich Wolkentropfen in der Atmosphäre nur durch Kondensation auf Aerosolpartikeln bilden können. Anhand der resultierenden, für das Tropfenwachstum gültigen Köhlergleichung werden Aussagen über die Entstehung von Regentropfen gemacht. Im Anschluss wird die Berechnung der Anzahl und Masse aktivierter Partikel genauer beschrieben. Die Aktivierung von Aerosolpartikeln wird in Kap. 2.3 betrachtet.

### 2.1 Gleichgewichtszustände

Um die Gleichgewichtszustände zwischen Wasser flüssiger und gasförmiger Phase beschreiben zu können, müssen zunächst einige thermodynamische Beziehungen beschrieben werden. Dies resultiert dann in der Clausius-Clapeyron-Gleichung. Dieser Abschnitt folgt dem Lehrbuch von Seinfeld und Pandis (2006). In der Thermodynamik existiert zusätzlich zu den mechanischen Energieformen (kinetische und potentielle Energie) die innere Energie  $u_e$ . Um die innere Energie verständlich zu machen, betrachtet man eine infinitesimale Änderung, welche sich durch den ersten Hauptsatz der Thermodynamik, Gl. 2.1, beschreiben lässt.

$$du_e = d'q + d'w, \quad (2.1)$$

wobei  $d'q$  eine infinitesimale Wärmezufuhr (oder -abfuhr) kennzeichnet und  $d'w$  für die infinitesimale Arbeit, die das System verrichtet, steht. In einem System aus mehreren Komponenten ist die innere Energie  $u_e$  eine Funktion von der Entropie  $s_e$ , dem Volumen  $v_e$  und der Anzahl der Mole  $n_k$  der einzelnen Spezies:

$$u_e = \text{fct}(s_e, v_e, n_1, \dots, n_k). \quad (2.2)$$

Bildet man das totale Differential von  $u_e$ , so erhält man:

$$du_e = \left( \frac{\partial u_e}{\partial s_e} \right)_{v_e, n_k} ds_e + \left( \frac{\partial u_e}{\partial v_e} \right)_{s_e, n_k} dv_e + \left( \frac{\partial u_e}{\partial n_k} \right)_{s_e, v_e} dn_k. \quad (2.3)$$

Dies lässt sich auch schreiben als (Seinfeld und Pandis, 2006):

$$du_e = Tds_e - pdv_e + \sum_{k=1}^{\kappa} \mu_k dn_k, \quad (2.4)$$

$\mu_k$  bezeichnet das chemische Potential der Komponente  $k$ ,  $p$  den Druck,  $T$  die Temperatur und  $\kappa$  die Anzahl der betrachteten Komponenten. Diese Gleichung ist auch als Gibbsche Fundamentalgleichung bekannt. Im Folgenden wird das Gleichgewicht über einer ebenen Wasseroberfläche untersucht. Dabei befinden sich Wasser und Wasserdampf im thermodynamischen Gleichgewicht ( $du_e = 0$ ). Dadurch erhält man mittels Gl. 2.4 im thermodynamischen Gleichgewicht betrachtet Gl. 2.5 und, geht man davon aus, dass die Zustandsvariablen unabhängige Variablen darstellen, daraus Gl. 2.6 (Pruppacher und Klett, 1978).

$$0 = Tds_e - pdv_e + \sum_{k=1}^{\kappa} \mu_k dn_k \quad (2.5)$$

$$\sum_{k=1}^{\kappa} \mu_k dn_k = 0. \quad (2.6)$$

Gleichung 2.6 bildet nun die Grundlage, um das Gleichgewicht zwischen Flüssigwasser und Wasserdampf zu betrachten. Im Folgenden wird dies zunächst über einer ebenen Oberfläche, dann über einem reinen Wassertropfen, einer Lösung mit Aerosol und Wasser mit ebener Oberfläche und schließlich über einem Lösungstropfen geschehen.

### 2.1.1 Gleichgewicht über einer ebenen Oberfläche

Zunächst wird das Sättigungsgleichgewicht zwischen Flüssigwasser und Wasserdampf über einer ebenen Wasseroberfläche betrachtet. Ausgangspunkt ist Gl. 2.6 für zwei Komponenten, also  $\kappa = 2$ . In einem abgeschlossen System gilt außerdem  $\sum_{k=1}^{\kappa} dn_k = 0$ , da sich die Gesamtanzahl der Mole nicht ändern kann. Somit gilt bei den zwei Komponenten Flüssigwasser (Index  $w$ ) und Wasserdampf (Index  $v$ ):

$$dn_w = -dn_v, \quad (2.7)$$

und somit:

$$\mu_w = \mu_v. \quad (2.8)$$

Gleichung 2.8 definiert das chemische Gleichgewicht zwischen Wasserdampf und Flüssigwasser. Aus Gl. 2.8 ergibt sich, dass auch  $d\mu_w = d\mu_v$  gelten muss. Bildet man daraus das totale Differential, so erhält man zunächst Gl. 2.9 und durch Umformungen die Clausius-Clapeyron-Gleichung in differentieller Form Gl. 2.11:

$$\frac{\partial \mu_w}{\partial T} dT + \frac{\partial \mu_w}{\partial p} dp = \frac{\partial \mu_v}{\partial T} dT + \frac{\partial \mu_v}{\partial p} dp \quad (2.9)$$

$$-s_{ew} dT + \bar{v}_w dp = -s_{ev} dT + \bar{v}_v dp \quad (2.10)$$

$$\frac{dp}{dT} = \frac{s_{ev} - s_{ew}}{\bar{v}_v - \bar{v}_w}, \quad (2.11)$$

wobei  $\bar{v}_w$  und  $\bar{v}_v$  das molare Volumen von Flüssigwasser respektive Wasserdampf bezeichnet. Die Verdampfungswärme  $l_{wv}$  ist definiert als die Differenz der Enthalpien  $\Delta h$  und somit:

$$s_{ev} - s_{ew} = \Delta s_e = \frac{\Delta h}{T} = \frac{l_{wv}}{T}. \quad (2.12)$$

Beachtet man nun, dass das molare Volumen von Wasserdampf deutlich größer als das von Flüssigwasser ist (Gl. 2.13), erhält man mit Hilfe der Zustandsgleichung für ideale Gase (Gl. 2.14) eine andere Form der Clausius-Clapeyron-Gleichung (Gl. 2.15):

$$\bar{v}_v \gg \bar{v}_w \quad (2.13)$$

$$p_v \bar{v}_v = R_v T \quad (2.14)$$

$$\frac{d \ln p}{dT} = \frac{l_{wv}}{R_v T^2}, \quad (2.15)$$

wobei  $R_v$  die Gaskonstante für Wasserdampf darstellt. Eine integrale Form der Clausius-Clapeyron-Gleichung lautet:

$$e^0(T) = e^0(T_0) \exp \left( \frac{l_{wv}}{R_v} \left( \frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) \right). \quad (2.16)$$

Der Sättigungsdampfdruck wurde hier an Stelle von  $p$  mit dem sonst üblichen  $e^0$  gekennzeichnet.  $T_0$  tritt hier als Integrationskonstante auf und beschreibt die Temperatur eines Referenzzustands  $e^0(T_0)$ .

### 2.1.2 Gleichgewicht über einem Wassertropfen

Die Clausius-Clapeyron-Gleichung, wie sie im vorherigen Abschnitt abgeleitet worden ist, gibt das Gleichgewicht zwischen Flüssigwasser und Wasserdampf über einer ebenen Wasseroberfläche wieder. Für das Tropfenwachstum in der Atmosphäre ist jedoch das Wachstum über einer gekrümmten (Tropfen-) Oberfläche interessant. Eine Gleichung, die diesen Gleichgewichtszustand beschreibt, wird nun abgeleitet. Die resultierende Gleichung ist als Kelvin-Gleichung bekannt. Ausgangspunkt ist die Differenz der Gibbsschen freien Energie vor und nach der Tropfenbildung.

$$\Delta G = G_{Tropfen} - G_{Wasserdampf}. \quad (2.17)$$

Spezifiziert man die Terme und vernachlässigt das Volumen des Flüssigwassers gegenüber dem Volumen des Wasserdampfs, so erhält man bei konstanter Temperatur (siehe auch Seinfeld und Pandis (2006); Butt et al. (2003)):

$$\Delta G = -\frac{4}{3}\pi \left(\frac{D_D}{2}\right)^3 \frac{RT}{\bar{v}_w} \ln \frac{e}{e^0} + 4\pi \left(\frac{D_D}{2}\right)^2 \sigma_w. \quad (2.18)$$

Hier beschreibt  $D_D$  den Durchmesser des Tropfens,  $R$  die allgemeine Gaskonstante,  $T$  die Temperatur,  $e^0$  den Wasserdampfdruck über einer ebenen Oberfläche,  $e$  Wasserdampfdruck bei einer gekrümmten Oberfläche und  $\sigma_w$  die Oberflächenspannung. Diese Funktion weist in  $D_D^*$  ein Maximum auf.  $D_D^*$  ist ein metastabiler Punkt und gibt somit nach dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik einen Gleichgewichtsradius des Tropfens hinsichtlich der Oberflächenspannung  $\sigma_w$ , dem molaren Volumen von Wasser  $\bar{v}_w$ , dem Sättigungsdampfdruck über einer ebenen Fläche  $e^0$  und dem Sättigungsdampfdruck im Gleichgewicht über der gekrümmten Fläche  $e_{eq}$  wieder (Gl. 2.19):

$$D_D^* = \frac{4\sigma_w \bar{v}_w}{RT \ln \frac{e_{eq}}{e^0}}. \quad (2.19)$$

Daraus lässt sich eine Beziehung für  $e_{eq}(D_D)$  ableiten, die Kelvin-Gleichung:

$$e_{eq} = e^0 \exp\left(\frac{4\sigma_w \bar{v}_w}{RT D_D}\right). \quad (2.20)$$

Die Kelvin-Gleichung zeigt, dass der Wasserdampfdruck über einer gekrümmten Oberfläche immer größer ist, als über einer ebenen Oberfläche. Dies wird auch als **Kelvin-Effekt** bezeichnet. Wird nur dieser betrachtet, so würde ein entstehender Tropfen sofort wieder verdampfen, da der Gleichgewichtsdampfdruck bei kleinem Tropfenradius sehr groß ist und für  $D_D \rightarrow 0$  gegen unendlich strebt. Die homogene Nukleation von reinen Wassertropfen spielt somit in der Atmosphäre nur eine untergeordnete Rolle.

### 2.1.3 Gleichgewicht über einer Lösung

Die Kelvin-Gleichung lässt vermuten, dass für die Entstehung von Wolkentropfen in der Atmosphäre nicht die homogene, sondern die heterogene Nukleation entscheidend ist. In diesem Abschnitt wird nun das Gleichgewicht über einer Lösung betrachtet werden. Zunächst wird eine ebene Oberfläche betrachtet. Das chemische Potential eines idealen Gases ist gegeben durch (Seinfeld und Pandis, 2006):

$$\mu_v = \mu_v^0(T) + RT \ln e. \quad (2.21)$$

Dabei beschreibt  $\mu_v^0$  das chemische Standardpotential und  $e$  den Partialdruck des Wasserdampfs. Für eine ideale chemische Lösung geben Seinfeld und Pandis (2006) folgende Gleichung:

$$\mu_w = \mu_w^0(T) + RT \ln x_w, \quad (2.22)$$

$x_w$  gibt hierbei den Molenbruch des Flüssigwassers an. Zwischen dem Wasserdampf und der idealen Lösung herrscht genau dann ein chemisches Gleichgewicht, wenn Gleichung 2.8 erfüllt ist. Daraus ergibt sich:

$$\mu_v^0(T) + RT \ln e = \mu_w^0(T) + RT \ln x_w. \quad (2.23)$$

Dies lässt sich umformen zu:

$$e = \exp\left(\frac{\mu_w^0(T) - \mu_v^0(T)}{RT}\right) x_w = K(T, p)x_w. \quad (2.24)$$

Da für reines Wasser der Gleichgewichtsdampfdruck gleich dem reinen Wassers sein muss, also für  $x_w = 1$  die Beziehung  $e = e^0$  gelten muss, folgt daraus zwingend, dass  $K(T, p) = e^0$  sein muss.

Somit ergibt sich für den Gleichgewichtsdampfdruck über einer Lösung das Gesetz von Raoult:

$$e = e^0 x_w. \quad (2.25)$$

#### 2.1.4 Gleichgewicht über einem Lösungstropfen

In diesem Abschnitt wird nun das Wachstum eines Lösungstropfens näher betrachtet. Dies geschieht durch die Kombination des Kelvin-Effekts (Gl. 2.20) und des Raoult-Effekts (Gl. 2.25). Ausgehend von einer Lösung mit flacher Oberfläche lässt sich  $e$  aus Gleichung 2.25 für  $e^0$  in Gleichung 2.20 einsetzen. Daraus ergibt sich dann:

$$\frac{e_{eq}(D_D)}{e^0 x_w} = \exp\left(\frac{4\bar{v}_w \sigma_w}{RT D_D}\right), \quad (2.26)$$

wobei  $D_D$  den Durchmesser des Tropfens kennzeichnet und den Radius aus Gleichung 2.20 ersetzt. Das Volumen des Tropfens lässt sich ausdrücken als:

$$\frac{1}{6} \pi D_D^3 = n_w \bar{v}_w + n_s \bar{v}_s. \quad (2.27)$$

Hierbei sind  $\bar{v}_w$  und  $\bar{v}_s$  molare Volumen von Wasser (Index  $w$ ) und des gelösten Stoffs (Index  $s$ ). Analog kennzeichnen  $n_w$  und  $n_s$  die Mole der Stoffe. Der Molenbruch  $x_w$  des Wassers lässt sich mittels Gl. 2.28 beschreiben und etwas umgeformt und kombiniert mit Gl. 2.27 ergibt sich Gl. 2.29:

$$x_w = \frac{n_w}{n_w + n_s} \quad (2.28)$$

$$\frac{1}{x_w} = 1 + \frac{n_s}{n_w} = 1 + \frac{n_s \bar{v}_w}{\frac{\pi}{6} D_D^3 - n_s \bar{v}_s}. \quad (2.29)$$

Ersetzt man nun den Molenbruch des Wassers in Gl. 2.26 mit dem Ergebnis aus Gl. 2.29, so erhält man:

$$\ln\left(\frac{e_{eq}(D_D)}{e^0}\right) = \frac{4\bar{v}_w\sigma_w}{RTD_D} - \ln\left(1 + \frac{n_s\bar{v}_w}{\frac{\pi}{6}D_D^3 - n_s\bar{v}_s}\right). \quad (2.30)$$

Beachtet man nun, dass das Volumen des gelösten Stoffes deutlich geringer ist als das des Tropfens, also  $n_s\bar{v}_s \ll \frac{\pi}{6}D_D^3$ , und, dass sich das mol spezifische Volumen des Wassers näherungsweise durch Masse und Dichte ausdrücken lässt, erhält man:

$$\ln\left(\frac{e_{eq}}{e^0}\right) = \frac{4M_w\sigma_w}{RT\rho_w D_D} - \ln\left(1 + \frac{6n_s M_w}{\rho_w \pi D_D^3}\right) \quad (2.31)$$

$$\text{mit: } \bar{v}_w \approx \frac{M_w}{\rho_w}. \quad (2.32)$$

Da  $\left(\frac{6n_s\bar{v}_w}{\pi D_D^3}\right)$  gegen 0 geht und da  $\ln(1+x) \approx x$  für kleine  $x$  beträgt, lässt sich Gl. 2.31 auch in folgender Form schreiben:

$$\ln(S) = \frac{4M_w\sigma_w}{RT\rho_w D_D} - \frac{6n_s M_w}{\pi\rho_w D_D^3} \quad (2.33)$$

$$\text{mit: } S = \frac{e_{eq}}{e^0}, \quad (2.34)$$

wobei  $S$  als Sättigung bezeichnet wird. Gl. 2.33 wird als Köhlergleichung bezeichnet. Zusammengefasst ergibt dies:

$$\ln\left(\frac{e_{eq}}{e^0}\right) = \frac{A}{D_D} - \frac{B}{D_D^3} \quad (2.35)$$

$$\text{mit: } A = \frac{4M_w\sigma_w}{RT\rho_w} \quad (2.36)$$

$$\text{und: } B = \frac{6n_s M_w}{\pi\rho_w}. \quad (2.37)$$

Die Köhlergleichung gibt den Wasserdampfdruck über einem Lösungstropfen mit Radius  $D_D$  an. Dabei werden der Kelvin-Effekt, der im thermodynamischen Gleichgewicht einen erhöhten Wasserdampfdruck eines Tropfens im Vergleich zu einer ebenen Oberfläche bedingt und der Raoult-Effekt, der im Gleichgewicht die Erniedrigung des Wasserdampfdrucks über einer Lösung im Vergleich zu reinem Wasser beschreibt, beachtet.

In Abb. 2.1 ist die resultierende Köhlerkurve für einen Lösungstropfen mit Natriumchlorid als Aerosolanteil zu sehen. Die Köhlerkurve weist auch für andere Stoffe als NaCl und für verschiedene trockene Durchmesser des Aerosols einen ähnlichen charakteristischen Verlauf auf. In Abb. 2.2 ist der Verlauf mehrerer Köhlerkurven bei unterschiedlichen trockenen Durchmessern  $D_P$  zu sehen. Das Maximum tritt bei einem kritischen Tropfendurchmesser  $D_c$  auf. Dieser lässt sich aus Gl. 2.35 berechnen:

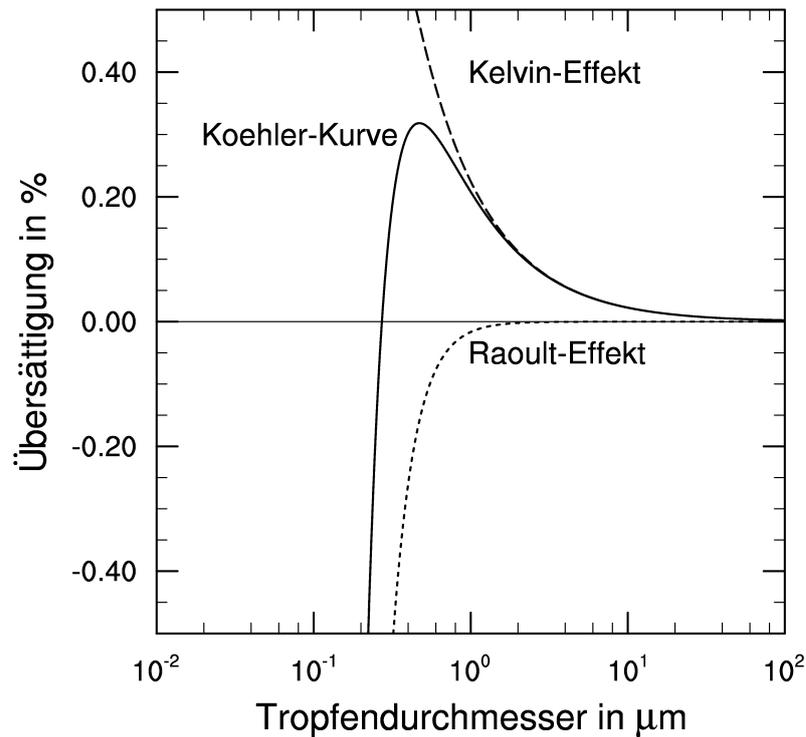


Abbildung 2.1: *Durchgezogene Linie*: Köhlerkurve für einen Natriumchlorid (NaCl) Lösungstropfen mit trockenem Aerosoldurchmesser  $D_P = 0,05 \mu\text{m}$  bei  $20^\circ\text{C}$ . *Gestrichelte Linie*: Kelvin-Effekt und *gepunktete Linie*: Raoult-Effekt.

$$D_c = \left( \frac{3B}{A} \right)^{1/2}, \quad (2.38)$$

bei einer kritischen Sättigung  $S_c$  von:

$$\ln S_c = \left( \frac{4A^3}{27B} \right)^{1/2}. \quad (2.39)$$

Die Übersättigung  $s$  ist definiert als der Anteil Wasserdampf, der die Sättigung übersteigt:

$$s = \frac{e}{e^0} - 1 = S - 1 \quad (2.40)$$

$$\text{und: } \ln(S) = \ln(s + 1) = s, \quad (2.41)$$

da die Übersättigung in der Atmosphäre nur selten 1% übersteigt (Twomey, 1959). Für die kritische Sättigung  $S_c$  und kritische Übersättigung  $s_c$  ergibt sich derselbe Zusammenhang:

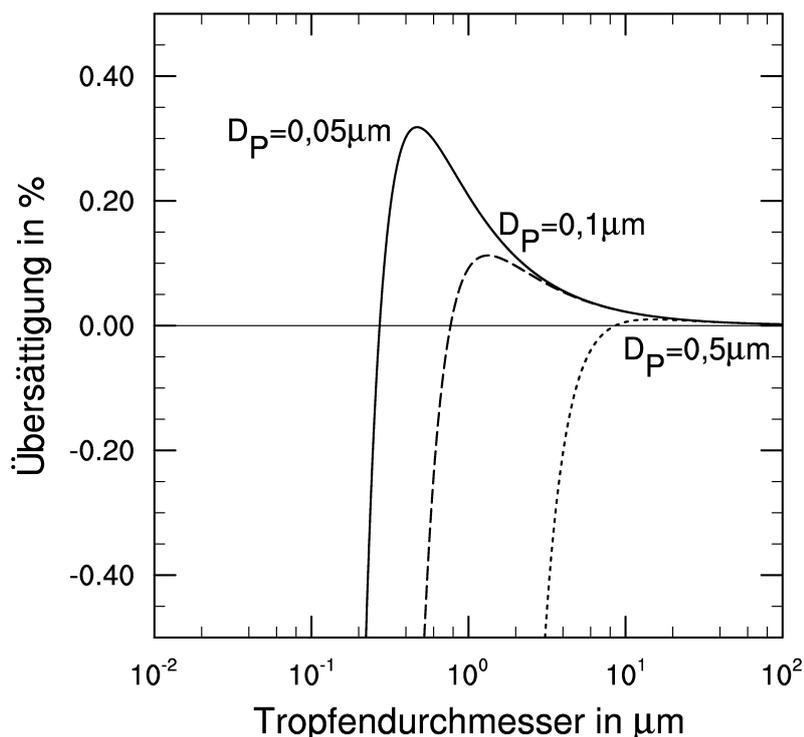


Abbildung 2.2: Köhlerkurve wie in Abb. 2.1 mit verschiedenen trockenen Durchmessern des Aerosolanteils. *Durchgezogene Linie*: Trockener Durchmesser  $D_P = 0,05 \mu\text{m}$ , *gestrichelte Linie*: Trockener Durchmesser  $D_P = 0,1 \mu\text{m}$ , *gepunktete Linie*: Trockener Durchmesser  $D_P = 0,5 \mu\text{m}$ .

$$s_c = S_c - 1 \quad (2.42)$$

und:  $\ln(S_c) = s_c. \quad (2.43)$

### 2.1.5 Tropfenwachstum

Mittels der Köhlertheorie lassen sich Aussagen über das Tropfenwachstum machen. Die Grundlage bildet Gl. 2.35, deren charakteristischer Verlauf in den Abb. 2.1 und 2.2 am Beispiel von Natriumchlorid (NaCl) aufgezeigt wird. Eine approximierete Form von Gl. 2.35 lässt sich mit der Übersättigung im Gleichgewicht  $s_{eq}$  angeben als:

$$s_{eq} = \frac{A}{D_D} - \frac{B}{D_D^3}. \quad (2.44)$$

Für das Wachstum eines Tropfens ist die gegebene Übersättigung  $s$  entscheidend. Ist die Übersättigung größer als im Gleichgewicht, also  $s > s_{eq}$ , so wächst der Tropfen durch Kondensation von Wasserdampf an. Ist sie kleiner, also  $s < s_{eq}$ , schrumpft er durch Evaporation.

Im Folgenden wird nun untersucht, ob der Gleichgewichtszustand, der durch die Köhlerkurve

gegeben wird, stabil ist. In Abb. 2.2 ist zu sehen, dass die Köhlerkurven ein Maximum besitzen. Der kritische Durchmesser dieses Maximums ist gegeben durch Gl. 2.38. Erfährt ein Tropfen mit einem Durchmesser, der kleiner als der kritische Durchmesser ist ( $D_D < D_c$ ), einen Zuwachs an Wassermolekülen, so ist seine Gleichgewichtsübersättigung größer als die Übersättigung der Umgebung ( $s_{eq} > s$ ). Er wird wieder auf seine Ausgangsgröße schrumpfen. Verliert der Tropfen einige Wassermoleküle, so ist seine Gleichgewichtsübersättigung kleiner als die Übersättigung der Umgebung,  $s_{eq} < s$ , und wächst somit wieder an. Somit ist der Gleichgewichtszustand für  $D_D < D_c$  ein stabiler Zustand.

Für einen Tropfen mit einem größeren Durchmesser als dem kritischen ( $D_D > D_c$ ) ergibt sich bei einem Zuwachs an Wassermolekülen eine geringere Übersättigung als in der Umgebung ( $s_{eq} < s$ ). Der Tropfen wächst also weiter an. Durch einen Verlust von Wassermolekülen besitzt der Tropfen eine höhere Gleichgewichtsübersättigung als seine Umgebung. Somit schrumpft er weiter durch Evaporation. Daraus folgt, dass der Gleichgewichtszustand für  $D_D > D_c$  instabil ist.

Aus den Stabilitätsbetrachtungen ist ersichtlich, dass ein Tropfen, der den kritischen Durchmesser überschreitet, zur Größe eines Wolkentropfens weiterwachsen wird. In diesem Fall spricht man von der Aktivierung des Aerosolpartikels. Für die kritische Übersättigung erhält man aus Gl. 2.39:

$$s_c = \left( \frac{4A^3 \rho_w M_s}{27\nu_s \rho_s M_w D_P^3} \right)^{1/2} = \left( \frac{4A^3}{27B'D_P^3} \right)^{1/2}. \quad (2.45)$$

Hierbei ist  $\nu_s$  die Anzahl der Ionen, in die der Aerosolpartikel dissoziiert (z.B. für NaCl ist  $\nu_s = 2$ ). Der Übersichtlichkeit wegen wird die Größe  $B' = \frac{B}{D_P^3}$  eingeführt. In Abb. 2.2 kann man sehen, dass für eine Übersättigung von  $s = 0,2\%$  Aerosolpartikel mit einem trockenen Durchmesser von  $D_P = 0,1 \mu\text{m}$  aktiviert werden. Aerosolpartikel mit einem Durchmesser von  $D_P = 0,05 \mu\text{m}$  werden jedoch nicht aktiviert.

## 2.2 Berechnung der Anzahl und Masse aktivierter Partikeln

In den vorangehenden Kapiteln wurde die Köhlertheorie und somit die Aktivierung von Partikeln beschrieben. In diesem Kapitel werden nun die Gleichungen formuliert, die benötigt werden, um die Gesamtanzahl und die Gesamtmasse der aktivierten Aerosolpartikel zu berechnen.

Um die aerosol-dynamischen Prozesse in der Atmosphäre effizient zu beschreiben, werden häufig vereinfachte mathematische Beschreibungen der Größenverteilung des atmosphärischen Aerosols verwendet. Dabei gibt die lognormale Verteilung häufig die Realität sehr gut wieder (Seinfeld und Pandis, 2006).

Das Modellsystem COSMO-ART beinhaltet bereits eine lognormale Anzahldichteverteilung für die Aerosolpartikel. Die genauere Beschreibung dieser erfolgt daher im Kapitel zu COSMO-ART (Kap. 3.2.1). An dieser Stelle wird nun auf die Zusammenhänge zwischen Anzahl- und Massendichte lognormaler Größenverteilungen und die aus dieser Betrachtungsweise resultierenden Gleichungen zur Aerosolaktivierung näher eingegangen. Einer der Vorteile lognormaler Verteilungen besteht darin, dass Anzahl-, Oberflächen- und Volumendichteverteilungen die selbe Standardabweichung besitzen (Seinfeld und Pandis, 2006). Es ergibt sich ein Zusammenhang zwischen dem

mittleren Durchmesser einer Anzahldichteverteilung und einer Volumendichteverteilung:

$$\ln \bar{D}_{Pv} = \ln \bar{D}_{Pl} + 3 \ln^2 \sigma_l. \quad (2.46)$$

Dabei ist  $\bar{D}_{Pv}$  der mittlere Durchmesser einer Volumendichteverteilung,  $\bar{D}_{Pl}$  der mittlere Durchmesser einer Anzahldichteverteilung und  $\sigma_l$  die Standardabweichung. Mittels der Dichte des Aerosols lässt sich auch eine entsprechende Beziehung für Massendichteverteilungen ableiten:

$$\ln \bar{D}_{Pm} = \ln \bar{D}_{Pl} + 3 \ln^2 \sigma_l, \quad (2.47)$$

wobei  $\bar{D}_{Pm}$  der mittlere Durchmesser einer Massendichteverteilung ist.

### 2.2.1 Gleichungen für die Anzahldichte

Ist nun die Übersättigung  $s$  bekannt, so lässt sich für eine trockene Größenverteilung  $n(D_D)$  die Anzahldichte der aktivierten Partikel  $N$  bestimmen:

$$N(s) = \int_{D_P(s)}^{\infty} n(D_P) dD_P. \quad (2.48)$$

Transformiert man dies nun in den Raum der kritischen Übersättigung  $s_c$ , erhält man:

$$N(s) = - \int_0^s n(s_c) ds_c. \quad (2.49)$$

Aus der Transformationsbeziehung ergibt sich  $n(s_c)$  (Fountoukis und Nenes, 2005):

$$n(s_c) = \frac{dN}{ds_c} = \frac{dN}{d \ln D_P} \frac{d \ln D_P}{ds_c} = n(D_P) \frac{d \ln D_P}{ds_c}. \quad (2.50)$$

### 2.2.2 Gleichungen für die Massendichte

Analog zur Anzahldichte ergibt sich folgendes Gleichungssystem für die Massendichte  $M$ :

$$M(s) = \int_{D_P(s)}^{\infty} m(D_P) dD_P \quad (2.51)$$

$$M(s) = - \int_0^s m(s_c) ds_c \quad (2.52)$$

$$m(s_c) = \frac{dM}{ds_c} = \frac{dM}{d \ln D_P} \frac{d \ln D_P}{ds_c} = m(D_P) \frac{d \ln D_P}{ds_c}. \quad (2.53)$$

### 2.2.3 Bestimmung unbekannter Terme

Mit den in Kap. 2.2.1 und Kap. 2.2.2 abgeleiteten Gleichungen lässt sich die Anzahl- und Massendichte der aktivierten Aerosolpartikel bestimmen. Die Größen  $n(s_c)$  und  $m(s_c)$  lassen sich mittels der Gln. 2.50 und 2.53 bestimmen. Die Größe  $\frac{d \ln D_P}{ds_c}$ , die zur Bestimmung benötigt wird,

kann aus der Köhlertheorie abgeleitet werden. Löst man Gl. 2.45 nach  $\ln D_P$  auf und leitet nach  $s_c$  ab, so ergibt sich die gesuchte Größe:

$$\frac{d \ln D_P}{ds_c} = -\frac{2}{3s_c}. \quad (2.54)$$

Aus Gl. 2.45 lässt sich auch das Verhältnis des Durchmessers eines einzelnen Tropfens,  $D_P$ , zum mittleren geometrischen Durchmesser einer Verteilung,  $\bar{D}_{Pg}$  bestimmen. Diese Beziehung wird benötigt, um einen Zusammenhang zwischen dem mathematischen Raum der kritischen Übersättigung  $s_c$  und dem Raum des Durchmessers  $D_P$  herzustellen. Bildet man den Quotienten von Gl. 2.45 für  $D_P$  zu  $\bar{D}_{Pg}$ , so erhält man:

$$\frac{D_P}{\bar{D}_{Pl}} = \left( \frac{\bar{s}_l}{s_c} \right)^{2/3}, \quad (2.55)$$

$\bar{s}_l$  stellt die kritische Übersättigung eines Partikel mit Durchmesser  $\bar{D}_{Pl}$  dar. Als Ansatz für die Verteilungsfunktionen der Anzahl- ( $n(D_P)$ ) und Massendichte ( $m(D_P)$ ) kann eine lognormale Verteilung angenommen werden. Diese hat folgende Struktur:

$$n_l(D_P) = \frac{dN_l}{d \ln D_P} = \frac{N_l}{\sqrt{2\pi \ln \sigma_l}} \exp \left( -\frac{\ln^2 \frac{D_P}{\bar{D}_{Pl}}}{2 \ln^2 \sigma_l} \right) \quad (2.56)$$

$$m_l(D_P) = \frac{dM_l}{d \ln D_P} = \frac{M_l}{\sqrt{2\pi \ln \sigma_l}} \exp \left( -\frac{\ln^2 \frac{D_P}{\bar{D}_{Pl}}}{2 \ln^2 \sigma_l} \right), \quad (2.57)$$

$N_l$  bezeichnet die Gesamtanzahldichte der Mode  $l$ , dementsprechend bezeichnet  $M_l$  die Gesamt-massendichte derselben.

## 2.2.4 Anzahldichte der aktivierten Partikeln

Aus den abgeleiteten Beziehungen kann nun die Gesamtanzahldichte der aktivierten Partikel berechnet werden. Dazu wird zunächst eine lognormal verteilte Anzahldichte (Gl. 2.56) mittels Gl. 2.55 in den Raum der kritischen Übersättigung übertragen. Die Berechnung der Gesamtanzahldichte findet sich auch bei Fountoukis und Nenes (2005).

$$n_l(s_c) = -\frac{2N_l}{3s_c \sqrt{2\pi \ln \sigma_l}} \exp \left[ -\frac{\ln^2 \left( \frac{\bar{s}_l}{s_c} \right)^{2/3}}{2 \ln^2 \sigma_l} \right]. \quad (2.58)$$

Eingesetzt in Gl. 2.49 erhält man eine Gleichung für die Gesamtanzahldichte:

$$- \int_0^s n_l(s_c) ds_c = \frac{N_l}{\sqrt{\pi}} \int_y^\infty \exp(-y'^2) dy', \quad (2.59)$$

$$\text{mit } y = \frac{2 \ln \frac{\bar{s}_l}{s_c}}{3\sqrt{2} \ln \sigma_l}. \quad (2.60)$$

Das Integral von  $y$  bis  $\infty$  lässt sich nun in zwei Integrale, die separat lösbar sind, aufteilen:

$$- \int_0^s n_l(s_c) ds_c = \frac{N_l}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int_0^\infty \exp(-y'^2) dy'}_{=\frac{\sqrt{\pi}}{2}} - \frac{N_l}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int_0^y \exp(-y'^2) dy'}_{=\frac{\text{erf}(y)\sqrt{\pi}}{2}}. \quad (2.61)$$

Dabei stellt erf die sogenannte Fehlerfunktion dar:

$$\text{erf}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y \exp(-y'^2) dy'. \quad (2.62)$$

Als Ergebnis für die Gesamtanzahldichte der aktivierten Partikeln erhält man dann:

$$N(s) = - \int_0^s n_l(s_c) ds_c = \frac{N_l}{2} \left[ 1 - \text{erf} \left( \frac{2 \ln \frac{\bar{s}_l}{s_c}}{3\sqrt{2} \ln \sigma_l} \right) \right]. \quad (2.63)$$

### 2.2.5 Masse der aktivierten Partikeln

Analog zur Gesamtanzahldichte  $N(s)$  der aktivierten Partikeln lässt sich auch die Gesamtmasse-  
siedichte der aktivierten Partikeln,  $M(s)$ , bestimmen. Die Standardabweichung der lognormalen  
Verteilung ist, wie oben erwähnt, dieselbe, also  $\sigma_l$ . Jedoch muss zur Bestimmung des mittleren  
Durchmessers der lognormalen Masseverteilung die Transformationsbeziehung 2.47 benutzt wer-  
den. Zunächst wird daher ein mittlerer Durchmesser der Masseverteilung  $\bar{D}_{Pm,l}$  für die Mode  
 $l$  eingeführt.  $M_l$  bezeichnet die Gesamtmasse-  
siedichte der Mode  $l$ . Für die Gesamtmasse-  
siedichte aktivierter Partikeln ergibt sich daher aus Gl. 2.52, Gl. 2.53, Gl. 2.54 und Gl. 2.57:

$$M(s) = - \int_0^s m_l(s_c) ds_c = - \int_0^s m_l(D_P) \frac{d \ln D_P}{ds_c} ds_c \quad (2.64)$$

$$= \int_0^s \frac{2M_l}{3s_c \sqrt{2\pi} \ln \sigma_l} \exp \left[ -\frac{\ln^2 \frac{D_P}{\bar{D}_{Pm,l}}}{2 \ln^2 \sigma_l} \right] ds_c. \quad (2.65)$$

Um auch bei der Gesamtmasse-  
siedichte im Raum der kritischen Übersättigung rechnen zu kön-  
nen wird nun die Gl. 2.47 auf Gl. 2.65 angewandt, also der mittlere Durchmesser der Masse-  
siedichte-  
verteilung  $\bar{D}_{Pm}$  durch den mittleren Durchmesser der Anzahldichte-  
verteilung  $\bar{D}_{Pg}$  ersetzt.  
Anschließend wird die Gleichung mittels der Gl. 2.55 vollständig in den Raum der kritischen  
Übersättigung übertragen.

$$M(s) = \int_0^s \frac{2M_l}{3s_c \sqrt{2\pi} \ln \sigma_l} \exp \left[ - \left( \frac{\ln \frac{D_P}{D_{Pl}} - 3 \ln^2 \sigma_l}{\sqrt{2} \ln \sigma_l} \right)^2 \right] ds_c \quad (2.66)$$

$$= \int_0^s \frac{2M_l}{3s_c \sqrt{2\pi} \ln \sigma_l} \exp \left[ - \left( \frac{2 \ln \frac{s_l}{s_c}}{3\sqrt{2} \ln \sigma_l} - \frac{3 \ln \sigma_l}{\sqrt{2}} \right)^2 \right] ds_c. \quad (2.67)$$

Daraus ergibt sich:

$$- \int_0^s m_l(s_c) ds_c = \frac{M_l}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int_0^\infty \exp(-y'^2) dy'}_{=\frac{\sqrt{\pi}}{2}} - \frac{M_l}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int_0^y \exp(-y'^2) dy'}_{=\frac{\operatorname{erf}(y)\sqrt{\pi}}{2}} \quad (2.68)$$

$$\text{mit } y = \left( \frac{2 \ln \frac{s_l}{s_c}}{3\sqrt{2} \ln \sigma_l} - \frac{3 \ln \sigma_l}{\sqrt{2}} \right). \quad (2.69)$$

Somit beträgt die Gesamtmassendichte der aktivierten Partikel:

$$M(s) = - \int_0^s m_l(s_c) ds_c = \frac{M_l}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{2 \ln \frac{s_l}{s_c}}{3\sqrt{2} \ln \sigma_l} - \frac{3 \ln \sigma_l}{\sqrt{2}} \right) \right]. \quad (2.70)$$

## 2.3 Aktivierung

Die Aktivierung eines Partikels zum Wolkentropfen hängt davon ab, ob die maximale Übersättigung  $s_{max}$  in einer Wolke die kritische Übersättigung des Partikels überschreitet, also ob  $s_{max} \geq s_c$  ist. In diesem Abschnitt wird eine Funktion für  $\frac{ds(t)}{dt}$  abgeleitet, um daraus die maximale Übersättigung  $s_{max}$  zu bestimmen. Das Wasserdampfverhältnis  $x_v$  ist definiert als:

$$x_v = \frac{m_v}{m_a} = \frac{M_w e}{M_a p}. \quad (2.71)$$

Dabei bezeichnet  $m_v$  die Wasserdampfmasse,  $m_a$  die Masse des Luftpakets,  $M_w$  und  $M_a$  die Molmassen des Wassers respektive des Luftpakets und  $p$  den Luftdruck. Kombiniert man die Gln. 2.40 und 2.71 und bildet das Differential nach der Zeit, so erhält man:

$$s = \frac{M_a p}{M_w e^0} x_v - 1 \quad (2.72)$$

$$\frac{ds}{dt} = \frac{M_a p}{M_w e^0} \frac{dx_v}{dt} + \frac{M_a}{M_w e^0} x_v \frac{dp}{dt} - \frac{M_a p}{M_w (e^0)^2} x_v \frac{de^0}{dt} \quad (2.73)$$

$$\Rightarrow \frac{ds}{dt} = \frac{M_a p}{M_w e^0} \frac{dx_v}{dt} - (1 + s) \left( \frac{1}{e^0} \frac{de^0}{dt} - \frac{1}{p} \frac{dp}{dt} \right). \quad (2.74)$$

Die hydrostatische Approximation lässt sich für einen quasistationären Zustand mit der Annahme, dass die Temperatur des Luftpakets gleich der Umgebungstemperatur  $T$  ist, wie folgt ausdrücken:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{pM_a}{RT}gW. \quad (2.75)$$

Die Größe  $W$  steht hier für die Vertikalgeschwindigkeit und  $g$  für die Erdbeschleunigung. Mittels der Clausius-Clapeyron-Gleichung (2.11 und 2.12) lässt sich die Änderung des Sättigungsdampfdrucks beschreiben als:

$$\frac{de^0}{dt} = \frac{de^0}{dT} \frac{dT}{dt} \quad (2.76)$$

$$\Rightarrow \frac{de^0}{dt} = \frac{l_{wv}M_w e^0}{RT^2} \frac{dT}{dt}. \quad (2.77)$$

Die Änderung der Temperatur lässt sich aus einem adiabatischen und einem isobaren Anteil zusammensetzen (Pruppacher und Klett, 1978). Entrainment wird hierbei vernachlässigt:

$$\frac{dT}{dt} = \underbrace{-\frac{g}{c_P}W}_{\text{adiabatisch}} - \underbrace{\frac{l_{wv}}{c_P} \frac{dx_v}{dt}}_{\text{isobar}}. \quad (2.78)$$

Hier bezeichnet  $c_P$  die spezifische Wärmekapazität von Luft bei konstantem Druck. Da hier von Prozessen in der Eisphase abgesehen wird, muss für den Wolkenwassermischungsanteil  $x_c$  gelten:

$$\frac{dx_v}{dt} = -\frac{dx_c}{dt}. \quad (2.79)$$

Somit ergibt sich für die Änderung der Übersättigung:

$$\frac{ds}{dt} = \alpha W - \gamma \frac{dx_c}{dt} \quad (2.80)$$

$$\text{mit: } \alpha = \left( \frac{l_{wv}M_w g}{c_P R T^2} - \frac{gM_a}{RT} \right) \quad (2.81)$$

$$\text{und } \gamma = \left( \frac{pM_a}{e^0 M_w} + \frac{l_{wv}^2 M_w}{c_P R T^2} \right) \frac{dx_c}{dt}. \quad (2.82)$$

Das Gleichungssystem ist nun bis auf die Größe  $x_c$  bekannt. Diese lässt sich für kugelförmige Tropfen der Anzahldichteverteilung  $n(s')$  aus folgender Gleichung bestimmen:

$$x_c = \frac{\pi}{6} \frac{\rho_D}{\rho_a} \int_0^s D_P^3 n(s') ds'. \quad (2.83)$$

Wird nun das zeitliche Differential von Gl. 2.83 gebildet, so erhält man:

$$\frac{dx_c}{dt} = \frac{\pi}{2} \frac{\rho_D}{\rho_a} \int_0^s D_P^2 \frac{dD_P}{dt} n(s') ds'. \quad (2.84)$$

Für die hier angegebene Gl. 2.84 ist noch keine analytische Lösung gefunden worden. Stattdessen wird auf Parametrisierungen (z.B. von Abdul-Razzak et al. (1998); Abdul-Razzak und Ghan (2000, 2002) oder Fountoukis und Nenes (2005); Barahona et al. (2010)) zurückgegriffen. Das Gleichungssystem aus Gl. 2.33, Gl. 2.63, Gl. 2.80 und Gl. 2.84 kann nun mit Hilfe geeigneter Parametrisierungen gelöst und in Modellen verwendet werden. In den genannten Abschnitten sind nur Flüssigwasser und Dampf behandelt worden. Eine Parametrisierung für die Entstehung von Eispartikeln ist zum Beispiel in Barahona und Nenes (2009a,b) gegeben.



### 3. Modellsystem

In dieser Diplomarbeit wird die Wechselwirkung von Aerosolpartikeln mit Wolken und deren Einfluss auf die regionale Verteilung des Niederschlags mit Hilfe des numerischen Modellsystems COSMO-ART untersucht. Durch die Weiterentwicklung des Modellsystems im Rahmen dieser Diplomarbeit, wird der Übergang von Aerosolpartikeln in Wolkentropfen und die Freisetzung bei darauf folgender Evaporation konsistent beschrieben. Dazu ist es notwendig, einerseits die Größenverteilung und Zusammensetzung der Aerosole zu beschreiben und andererseits den Vorgang der Aktivierung effizient und genau wiederzugeben.

Die Beschreibung von Aerosol-Wolken-Niederschlagswechselwirkungen geschieht in der Regel durch zwei Arten von Modellen. Einerseits werden hochaufgelöste Modelle mit komplexen Mikrophysikenschemata dazu verwendet, den Einfluss von Aerosol auf einen bestimmten Typus von Wolken zu betrachten. Da diese Simulationen nur für bestimmte Arten von Wolken durchgeführt werden, wird das Simulationsgebiet vergleichsweise klein gehalten. Andernfalls würde die Komplexität des Modells einen zu hohen Rechenaufwand fordern. Beispiele, in diesen Fällen für Passatcumuli, finden sich unter anderem bei Xue et al. (2008) oder Stevens und Seifert (2008).

Andererseits werden globale Zirkulationsmodelle, so genannte GCM (General Circulation Model), dazu verwendet, das zukünftige Klima abzuschätzen. Bei diesen Klimaläufen wird sowohl eine niedrige räumliche als auch eine niedrige zeitliche Auflösung gewählt um die Rechenkapazitäten nicht zu überschreiten. Aus dem selben Grund werden auch für einige Prozesse Parametrisierungen gewählt. So kann die Aktivierung von Aerosolpartikeln zu Wolkentropfen numerisch nicht derart aufwendig wie in einem Wolkenmodell beschrieben werden, sondern es muss auf eine effiziente Parametrisierung zurückgegriffen werden, wie durch Roelofs et al. (2006). Auch für die Aerosolverteilung und die chemischen Prozesse, die zur Bildung sekundärer Aerosolpartikel führen, müssen geeignete Beschreibungen gewählt werden. So verwenden zum Beispiel Roelofs et al. (2010) vier lösliche und drei unlösliche intern gemischte Aerosolmoden zur Beschreibung der Aerosolverteilung.

Eine weitere Möglichkeit zur Beschreibung von Aerosol-Wolken-Niederschlag-Wechselwirkungen bieten regionale Wettervorhersagemodelle in Kombinationen mit der Berechnung von Gas- und Aerosolverteilung und chemischen Umwandlungsprozessen. Diese Modelle beschreiten einen Weg zwischen der hochaufgelösten Betrachtung einzelner Wolken und der groben globalen Betrachtung eines Klimamodells. Dies eröffnet eine Vielzahl von Möglichkeiten, Modellstudien jenseits der gängigen Methoden durchzuführen und bietet somit großes Potenzial. Ein Modell dieser Kategorie ist das regionale Modellsystem COSMO-ART, das in dieser Diplomarbeit verwendet

und weiterentwickelt wird. Dieses wird im Folgenden eingehender beschrieben.

### 3.1 COSMO

Das COSMO-Modell (COSMO = **C**osortium for **S**mall Scale **M**odelling) bezeichnet das nichthydrostatische numerische Wettervorhersagemodell des deutschen Wetterdienstes (DWD). Operationell wird das Modell seit 1999 genutzt, damals noch unter dem Namen LM (Lokal-Modell). Anwendungen findet das Modell auf der Meso- $\beta$  und Meso- $\gamma$  Skala, operationell als COSMO-EU für Europa mit einer horizontalen Auflösung von 7 km und 40 vertikalen Schichten und als COSMO-DE für Deutschland mit einer horizontalen Auflösung von 2,8 km und 50 vertikalen Schichten. Die Rand- und Anfangswerte für COSMO-EU liefern Globalmodelle wie das des deutschen Wetterdienstes (GME) oder das Integrated Forecast System (IFS) des europäischen Zentrums für mittelfristige Wettervorhersagen (EZMW). Zusätzlich wird im operationellen Betrieb eine Datenassimilation durchgeführt. COSMO-EU liefert wiederum die Rand- und Anfangswerte für COSMO-DE. Dieser Vorgang wird im Allgemeinen als nesting bezeichnet. Numerisch werden die Randbedingungen mittels der Relaxationsmethode nach Davies mit dem Modell gekoppelt. An der Modellobergrenze wird die Rayleigh-Dämpfung verwendet.

Für das Koordinatensystem ist bei COSMO ein generalisiertes, geographisches System mit zeitunabhängiger Höhenkoordinate gewählt worden. Die geländefolgende Vertikalkoordinate  $\zeta = \zeta(\lambda, \Phi, z)$  ist eine Funktion der Breiten- und Längenkoordinaten ( $\lambda$  und  $\Phi$ ) und der geometrischen Höhe  $z$ . Die Wahl dieses Koordinatensystems wirft das Problem auf, dass der geometrische Abstand zweier Längengrade eine Funktion der geographischen Breite ist. Außerdem stellen die Pole eine Singularität dar. Eine geeignete Rotation des Koordinatensystems löst diese beiden Probleme. Dazu wird der Nordpol derart verschoben, dass der Äquator durch das Simulationsgebiet verläuft. Numerisch wird das Koordinatensystem durch ein Arakawa C-Gitter in der Horizontalen und ein gestaffeltes Lorenz-Gitter (Lorenz vertical grid staggering) in der Vertikalen umgesetzt. Subskalige Prozesse, also Vorgänge, deren typische Ausdehnung unter dem Gitterabstand der gewählten Auflösung liegt, werden durch Parametrisierungen beschrieben.

Das nicht-hydrostatische, kompressible Grundgleichungssystem von COSMO findet sich bei Doms et al. (2011a). Die hier genannten Gleichungen sind bereits Reynoldsgemittelt, wodurch die turbulenten Flüsse in den Gleichungen auftauchen. Auf Mittelungssymbole wird in diesem Gleichungssystem verzichtet. Die Legende dazu findet sich in Tab. 3.1.

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = -\nabla p + \rho \vec{g} - 2\vec{\Omega} \times (\rho \vec{v}) - \nabla \cdot \mathbb{T} \quad (3.1)$$

$$\frac{dp}{dt} = - \left( \frac{c_p}{c_v} \right) p \nabla \cdot \vec{v} + \left( \frac{c_p}{c_v} - 1 \right) Q_h \quad (3.2)$$

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = \frac{dp}{dt} + Q_h \quad (3.3)$$

$$\rho \frac{dq^v}{dt} = -\nabla \cdot \vec{F}^v - (I^w + I^f) \quad (3.4)$$

$$\rho \frac{dq^{w,f}}{dt} = -\nabla \cdot (\vec{P}^{w,f} + \vec{F}^{w,f}) + I^{w,f} \quad (3.5)$$

$$\rho = p \left[ R_d \left( 1 + \left( \frac{R_v}{R_d} - 1 \right) q^v - q^w - q^f \right) T \right]^{-1} \quad (3.6)$$

mit den Indizes $k =$	$d$	für trockene Luft
	$v$	für Wasserdampf
	$w$	für Flüssigwasser
	$f$	für Eis

$\rho$	Dichte	$\vec{v}$	Windgeschwindigkeit
$t$	Zeit	$p$	Druck
$\vec{g}$	Erdbeschleunigung	$\vec{\Omega}$	Winkelgeschwindigkeit d. Erde
$\mathbb{T}$	Reynolds. Spannungstensor	$q^k$	spezif. Massenverhältnis
$Q_h$	diabat. Erwärmung/Abkühlung	$I^k$	Quellen/Senken (Phasenübergänge)
$\vec{F}^k$	turbulente Flüsse	$\vec{P}^k$	Niederschlag
$R_k$	spezifische Gasekonstante		

Tabelle 3.1: Formelzeichen, die in den Gln. 3.1 bis 3.6 verwendet werden.

Diese Gleichungen (3.1 bis 3.6) werden daraufhin in ein rotiertes Koordinatensystem transferiert. Als nächstes wird ein horizontal homogener, stationärer und hydrostatischer Grundzustand eingeführt. Dazu wird jeder Zustandsvariablen ein Grundwert und eine Abweichung davon zugewiesen. Dabei verschwinden unter anderem die horizontalen Druckgradientterme im Grundzustand in der Bewegungsgleichung, was bei nur geringer Abweichung des Drucks vom Referenzzustand den Rechenfehler verringert. Das Ergebnis dieser Umformungen besteht aus einer Reihe prognostischer Differentialgleichungen, die im Modell mittels der Methode finiter Differenzen gelöst werden. Bei der Zeitintegration kommt ein sogenanntes time-splitting-Verfahren nach Klemp und Wilhelmson (1978) zum Einsatz. Dabei werden die Gleichungen in einen schnellen und einen langsamen Teil aufgeteilt und mit unterschiedlichen Zeitschritten gelöst, was die numerische Effizienz verbessert.

### 3.1.1 Wolkenschema

Das Wolkenschema im operationellen COSMO-Modell ist ein sogenanntes Bulk-Wasser-Kontinuitäts-Schema. Dieses Wolkenmodell wird in dieser Diplomarbeit bei den Simulationen teilweise für Referenzläufe genutzt. Daher wird kurz auf das Wolkenschema eingegangen, um Unterschiede zum erweiterten Wolkenschema aufzuzeigen.

Bulk-Wasser-Kontinuitäts-Wolkenschemata bedienen sich einer möglichst geringen Anzahl an Wasserkategorien und prognostizieren direkt den spezifischen Massenanteil  $q^k$  der Wasserkategorie  $k$ . Dies geschieht auf Grundlage von Bilanzgleichungen. Eine Bilanzgleichung für  $q^k$  hat folgende Form:

$$\frac{\partial q^k}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla q^k - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P^k}{\partial z} = S^k - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \vec{F}^k \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \text{mit: } \quad k = c & \quad \text{für Wolkenwasser} \\ k = f & \quad \text{für Wolkeneis} \\ k = r & \quad \text{für Regen} \\ k = sn & \quad \text{für Schnee} \\ k = g & \quad \text{für Graupel.} \end{aligned}$$

Dabei steht  $S^k$  für die wolkenmikrophysikalischen Quellen und Senken und  $P^k$  für die dazugehörigen Niederschlags- und Sedimentationsflüsse. Einen genaueren Überblick liefert Doms et al. (2011b).

Nun werden die Wasserkategorien weiter klassifiziert: Einerseits in den Teil mit vernachlässigbarer Fallgeschwindigkeit, der also keinen Niederschlag darstellt, und andererseits in einen Teil, der durch seine Fallgeschwindigkeit zu Niederschlag führt. Zur ersten Kategorie gehören Wolkenwasser und -eis. Zur zweiten Kategorie gehören Regen, Schnee und Graupel. Damit lässt sich auch Gl. 3.7 aufteilen:

$$\frac{\partial q^{c,i}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla q^{c,i} = S^{c,i} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \vec{F}^{c,i} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial q^{r,sn,g}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla q^{r,sn,g} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P^{r,sn,g}}{\partial z} = S^{r,sn,g}. \quad (3.9)$$

Der Benutzer des Modellsystems COSMO hat die Wahl, wieviele Wasserkategorien berücksichtigt werden und ob die Gleichungen prognostisch oder diagnostisch gelöst werden.

Für die Parametrisierung der Kondensationsrate wird in COSMO auf eine Sättigungsadjustierung zurückgegriffen. Die folgende Beschreibung orientiert sich an Doms et al. (2011b). Die Sättigungsadjustierung basiert darauf, dass die relative Feuchte 100 % nicht überschreitet. Da sich die Übersättigung in Wolken für gewöhnlich unter 1 % befindet, wird hier von einer guten Näherung ausgegangen. Tritt eine Abweichung von diesem Sättigungsgleichgewicht auf, werden  $q_v$  und  $q_c$

isobarisch einem gesättigtem Wert angepasst, wobei die latente Wärme berücksichtigt wird. Dabei wird immer von einer ausreichenden Anzahl Wolkenkondensationskeimen ausgegangen.

## 3.2 COSMO-ART

Auf Grundlage des regionalen numerischen Wettervorhersagemodells COSMO ist am Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) des Karlsruher Institut für Technologie (KIT) ein Ausbreitungs- und Chemiemodell für Gase und Aerosole entwickelt worden, das Modellsystem COSMO-ART (**A**erosol and **R**eactive **T**race **G**ases). Einen Überblick über dieses Modellsystem bietet Vogel et al. (2009), woran sich diese Zusammenfassung auch orientiert. Das Modellsystem COSMO-ART ist vollständig online-gekoppelt. Dies bedeutet, dass Aerosol- und Gasvariablen gleichzeitig und auf demselben Gitter wie die meteorologischen Variablen des operationellen COSMO-Modells berechnet werden. Bei der Entwicklung des Modellsystems ist darauf Wert gelegt worden, dass für den Transport skalarer Größen (z.B. Temperatur, Feuchte oder Aerosolkonzentration) identische numerische Methoden gewählt werden. Dies gilt auch für die hochreichende Konvektion mit dem Tiedke-Schema, siehe dazu auch Tiedtke (1989) und Tröndle (2008). Zusätzlich ist auch die Strahlung voll gekoppelt, wodurch Wechselwirkungen von Aerosolpartikeln mit Strahlung berücksichtigt und Photolysefrequenzen berechnet werden können. Die modulare Struktur sorgt für Flexibilität und ermöglicht es, gezielt unterschiedlichste Fragestellungen zu untersuchen.

Die chemischen Reaktionen in der Gasphase werden durch den Chemiemechanismus RADMK (Regional Acid Deposition Model Version Karlsruhe) berücksichtigt. Dieser basiert auf dem Chemiemechanismus von Stockwell et al. (1990), beinhaltet jedoch verschiedene Verbesserungen. Mit der erweiterten Version von MADEsoot (Modal Aerosol Dynamics Model for Europe extended by Soot) lässt sich die Aerosolgrößenverteilung und -zusammensetzung berechnen. Wie der Name bereits sagt, wird das Aerosol modal betrachtet, was bedeutet, dass sich die Gesamtgrößenverteilung, in diesem Fall der Anzahldichte, durch mehrere einzelne Verteilungen ergibt. Die Einteilung der Moden und die zugrundeliegenden Gleichungen werden in Kap. 3.2.1 nochmals eingehender beschrieben. Die trockene Deposition erfolgt nach Slinn (1977); der Auswaschprozess infolge von Niederschlag wird ebenfalls berücksichtigt (Rinke, 2008).

Die Emissionen natürlicher Stoffe werden in Abhängigkeit des Atmosphärenzustandes und der Landnutzung parametrisiert und ihre Berechnung erfolgt gekoppelt im Modellsystem. Auf diese Weise werden auch Seesalz (Lundgren, 2006), Mineralstaub (Vogel et al., 2006), Pollen (Zink, 2009) und biogene Emissionen (Vogel et al., 1995) berechnet. Anthropogene Emissionen werden dem Modell in hoher Auflösung zur Verfügung gestellt. Im Zuge der Vulkanausbrüche des Eyjafjallajökull und des Grimsvötn auf Island, die zu Flugverboten über weiten Teilen Europas geführt haben, wurde das Modellsystem auch zur Simulation der Ausbreitung der Aschefahne genutzt (Wintzen, 2012).

Der Aufbau des Modellsystems COSMO-ART ist schematisch auch nochmals in Abb. 3.1 zu sehen.

Wie auch bei dem operationellen Wettervorhersagemodell COSMO gibt es bei COSMO-ART

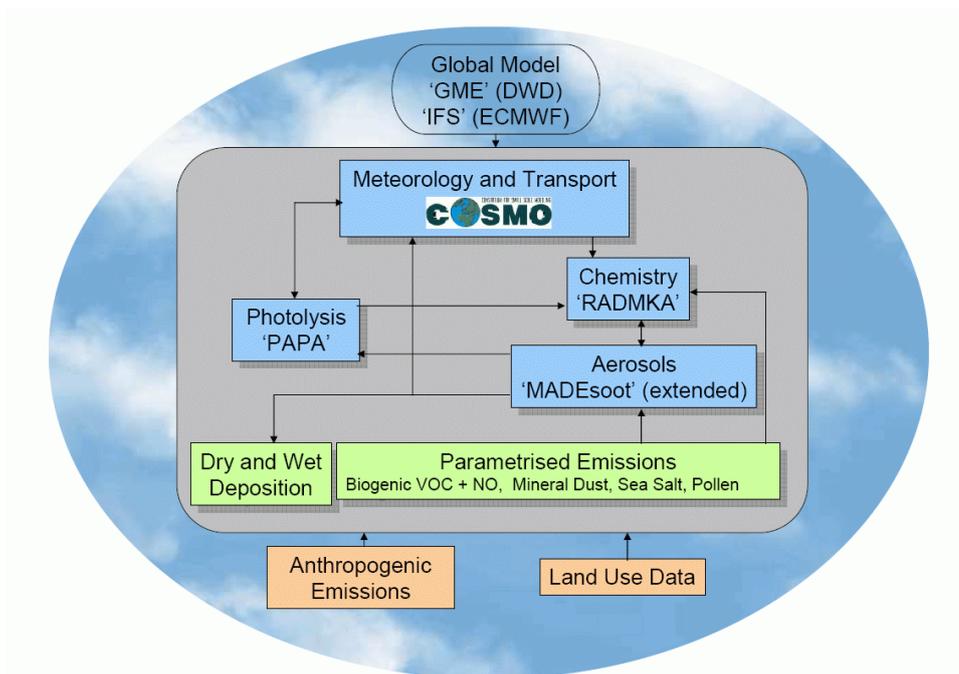


Abbildung 3.1: Das Modellsystem COSMO-ART (Vogel et al., 2009)

die Möglichkeit, ein kleineres Modellgebiet in ein größeres zu nisten. In dieser Diplomarbeit ist von dieser Funktion Gebrauch gemacht worden, um Seesalzemissionen der Nordsee auch im COSMO-DE Modellgebiet berücksichtigen zu können.

### 3.2.1 Aerosolbehandlung

Die Aerosolgrößenverteilung und -zusammensetzung stellen die grundlegenden Größen der Aerosolphysik dar. Ein Ziel von COSMO-ART ist es, diese Größen zu beschreiben. Gemessene Größenverteilungen bestehen aus einer Reihe von Werten für eine Vielzahl von Durchmessern. Für viele Anwendungen ist es deshalb ungünstig, all diese Werte einzeln mitzuführen (Seinfeld und Pandis, 2006). Aus diesem Grund wird die Aerosolgrößenverteilung in COSMO-ART modal betrachtet. Kennzeichnend für eine modale Betrachtungsweise ist es, die Gesamtgrößenverteilung in mehrere einzelne, durch mathematische Funktionen beschriebene Moden aufzuteilen. Dabei wird die Anzahldichte einer Mode  $l$  mit  $N_l$ , die Gesamtanzahldichte aller Moden mit  $N_{ges}$  bezeichnet:

$$N_{ges} = \sum_l N_l. \quad (3.10)$$

Die Anzahldichte einer Mode lässt sich durch die Größenverteilungsfunktion  $n_l$  in Abhängigkeit vom Durchmesser des Aerosols  $D_p$  beschreiben.

Mode	Chemische Zusammensetzung	$\sigma_l$	$\bar{D}_P$
<i>if</i>	$\text{SO}_4^{2-}$ , $\text{NO}_3^-$ , $\text{NH}_4^+$ , $\text{H}_2\text{O}$ , SOA	1,7	0,01 $\mu\text{m}$
<i>ic</i>	$\text{SO}_4^{2-}$ , $\text{NO}_3^-$ , $\text{NH}_4^+$ , $\text{H}_2\text{O}$ , SOA, Ruß	1,7	0,08 $\mu\text{m}$
<i>jf</i>	$\text{SO}_4^{2-}$ , $\text{NO}_3^-$ , $\text{NH}_4^+$ , $\text{H}_2\text{O}$ , SOA	2,0	0,07 $\mu\text{m}$
<i>jc</i>	$\text{SO}_4^{2-}$ , $\text{NO}_3^-$ , $\text{NH}_4^+$ , $\text{H}_2\text{O}$ , SOA, Ruß	2,0	0,08 $\mu\text{m}$
<i>s</i>	Ruß	1,4	0,08 $\mu\text{m}$
<i>seasa</i>	Seesalz	1,9	0,2 $\mu\text{m}$
<i>seasb</i>	Seesalz	2,0	2,0 $\mu\text{m}$
<i>seasc</i>	Seesalz	1,7	12,0 $\mu\text{m}$
<i>dusta</i>	Mineralstaub	1,5	1,7 $\mu\text{m}$
<i>dustb</i>	Mineralstaub	1,6	6,7 $\mu\text{m}$
<i>dustc</i>	Mineralstaub	1,7	14,2 $\mu\text{m}$

Tabelle 3.2: Chemische Zusammensetzung, Standardabweichung  $\sigma_l$  und Mediandurchmesser  $\bar{D}_P$  bezüglich der Anzahldichte der vier intern gemischten Moden und Ruß (Vogel et al., 2009), der Seesalzmoden (Lundgren, 2010) und die Standardabweichung und der Mediandurchmesser bezüglich der Massendichte der Mineralstaubmoden (Stanelle, 2008). SOA steht für sekundäres organisches Aerosol.

$$N_l = \int_0^{\infty} n_l(D_P) dD_P \quad (3.11)$$

$$\text{und somit: } n_l = \frac{dN_l}{dD_P}. \quad (3.12)$$

Ein häufig verwendeter mathematischer Ansatz für eine Einzelverteilung stellt die lognormale Verteilung dar (Seinfeld und Pandis, 2006):

$$n_l(D_P) = \frac{N_l}{\sqrt{2\pi} D_P \ln \sigma_l} \exp\left(-\frac{\ln^2 \frac{D_P}{D_{Pl}}}{2 \ln^2 \sigma_l}\right). \quad (3.13)$$

Dabei stellt  $\bar{D}_{Pl}$  den Mediandurchmesser und  $\sigma_l$  die Standardabweichung der Verteilung dar. Diese Darstellung gilt für die Anzahldichte des Aerosols. Für die entsprechende Gleichung für die Massendichte ergibt sich eine äquivalente Form.

Im Modellsystem COSMO-ART sind derzeit 12 einzelne Moden enthalten. Diese unterscheiden sich sowohl in ihrer Zusammensetzung, als auch in ihrer Größenverteilung. Die Zusammensetzung der vier intern gemischten Moden *if*, *ic*, *jf*, *jc* und der Rußmode *s* werden in Tab. 3.2 näher erläutert. Außerdem ist in dieser Tabelle der Mediandurchmesser und die Standardabweichung der Seesalzmoden aufgeführt.

Die Moden  $if$  und  $jf$  repräsentieren sekundäre Partikel aus Sulfat, Ammonium, Nitrat, organischen Komponenten und Wasser. Sie entstehen durch Nukleation aus der Gasphase. In der Mode  $s$  liegt der reine Ruß vor, während  $ic$  und  $jc$  gealterte Koagulate aus Ruß und den oben genannten Stoffen der Moden  $if$  und  $jf$  sind. Es existieren je zwei Größenbereiche für die intern gemischten Partikel mit und ohne Ruß. Dabei steht das  $i$  für die Aitken-Mode und das  $j$  für die Akkumulationsmode. Desweiteren existieren drei Moden für Seesalz (Lundgren, 2006) und drei Moden für den Mineralstaub (Vogel et al., 2006). Pollen (Zink, 2009) oder Vulkanaschepartikel werden als monodisperse Partikel berücksichtigt.

Im Modellsystem wird für jede Mode das folgende Gleichungssystem für die Anzahldichte gelöst. Ein entsprechendes Gleichungssystem für die Massendichte wird ebenfalls gelöst, da die Terme der Gleichungen jedoch eine äquivalente Bedeutung haben, wird es hier nicht weiter aufgeführt. Eine vollständige Beschreibung findet sich bei Vogel et al. (2009). Zunächst wird die Anzahldichte der Partikel der Mode  $l$  mit der Anzahldichte der Luftmoleküle  $N_{Luft}$  normiert; Die resultierende, normierte Anzahldichte wird mit  $\Psi_l$  bezeichnet (Gleichung 3.14). Desweiteren wird das Hesselbergmittel verwendet (Gl. 3.15), gekennzeichnet durch das Dach.

$$\Psi_l = \frac{N_l}{N_{Luft}} \quad (3.14)$$

$$\hat{\Psi}_l = \frac{\overline{\rho\Psi_l}}{\bar{\rho}} \quad (3.15)$$

Die Bilanzgleichung für die gemittelte, normierte Anzahldichte, die für jede Mode  $l$  vom Modellsystem gelöst wird, hat folgende Form:

$$\frac{\partial \hat{\Psi}_l}{\partial t} = - \underbrace{\hat{v} \cdot \nabla \hat{\Psi}_l}_{\text{Advektion}} - \underbrace{\bar{v}_{sed,l} \frac{\partial \hat{\Psi}_l}{\partial z}}_{\text{Sedimentation}} + \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \nabla \cdot F^{\Psi,l}}_{\text{turb.Fluesse}} - \bar{W}_l - \bar{C}a_l + \bar{N}u_l \quad (3.16)$$

Dabei steht  $\hat{v}$  für den Windvektor,  $\bar{v}_{sed,l}$  für die Sedimentationsgeschwindigkeit,  $F^{\Psi,l}$  für die turbulenten Flüsse und  $\bar{W}_l$  für den Wash-Out.  $\bar{C}a_l$  gibt die Änderung durch Koagulation wieder und  $\bar{N}u_l$  den Zuwachs durch Nukleation aus der Gasphase. Somit ergibt sich die zeitliche Änderung der Anzahldichtekonzentration aus - von links nach rechts - der Advektion, der Sedimentation, den turbulenten Flüssen, dem Wash-Out, Koagulations- und Nukleationsprozessen.

### 3.2.2 Erweitertes Wolkenschema in COSMO-ART

Das Modellsystem COSMO-ART besitzt zusätzlich zum COSMO-Wolkenschema, wie es in Kap. 3.1.1 beschrieben worden ist, auch ein alternatives Schema (Bangert et al., 2012).

Zusätzlich zur Berechnung der spezifischen Massenanteile, wie sie durch die Sättigungsadjustierung geschieht, wird auch die Anzahl der aktivierten Partikel, wie es in Kap. 2.3 beschrieben ist, bestimmt. Die Aktivierungsparametrisierung berechnet explizit, wieviele Partikel aktiviert werden. Dies erlaubt es, den Einfluss von Aerosol auf Wolken- und Niederschlagsbildung zu untersuchen. Diese Methode stellt die exaktere physikalische Beschreibung des Vorgangs der Wolken-

und Niederschlagsbildung dar, sie ist jedoch mit einem höheren numerischen Aufwand verbunden. Teil des erweiterten Wolkenschemas von COSMO-ART ist außerdem das in Kap. 3.3 beschriebene Zwei-Momenten-Wolkenmikrophysikschema (Seifert und Beheng, 2006). Dieses erlaubt die Prognose von Anzahldichte- und Massendichtekonzentration und liefert zudem eine erweiterte Beschreibung der Wolkenmikrophysikalischen Prozesse.

### 3.3 Zwei-Momenten Wolkenmikrophysikschema

Zusätzlich zur Aktivierung von Aerosolpartikeln zu Wolkentropfen, die bereits näher beschrieben worden ist, bildet die Wolkenmikrophysik einen entscheidenden Teil der Modellierung von Wolken. Die Beschreibung der Wolkenmikrophysik stellt noch immer eine Herausforderung dar. Jede einzelne Wolke ist ein sehr komplexes nichtlineares Teilsystem der Atmosphäre. Deshalb besteht die Schwierigkeit in der Modellierung von Wolken im Kompromiss zwischen einer sehr detaillierten, jedoch zeitaufwändigen Beschreibung durch spektrale Bilanzgleichungen und einer ungenaueren, aber effizienteren Parametrisierung, welche bestimmte integrale Größenverteilungen berechnet (Seifert und Beheng, 2006).

In diesem Abschnitt werden die Grundlagen des Zwei-Momenten Schemas zusammengefasst, das von Seifert und Beheng (2001, 2006) entwickelt worden ist. Das Schema ist dazu in der Lage sowohl Massen- als auch Anzahldichten der sechs Hydrometeorotypen Wolkentropfen, Regentropfen, Wolkeneis, Schnee, Graupel und Hagel vorherzusagen.

Die Eigenschaften einer Wolke lassen sich mit den Momenten  $M_w^n$  der Anzahldichteverteilungsfunktion für Tropfen  $f_w(m)$  im Bezug auf die Masse  $m$  beschreiben. Das  $n$ -te Moment ist gegeben als:

$$M_w^n = \int_0^\infty m^n f_w(m) dm. \quad (3.17)$$

Die ersten drei Momente ( $n = 0, 1, 2$ ) beschreiben die Anzahldichte  $N$ , die Massendichte  $L$ , also den Flüssigwassergehalt, und ein Maß  $Z$ , das proportional zur Radarreflektivität ist. Für die Tropfenanzahldichteverteilungsfunktion wählen Seifert und Beheng (2001) eine generalisierte  $\Gamma$ -Funktion mit den vier Parametern  $A^*$ ,  $\nu$ ,  $\lambda$  und  $\mu$ .

$$f_w(m) = A^* m^\nu \exp(-\lambda m^{-\mu}). \quad (3.18)$$

Die Koeffizienten  $A^*$  und  $\lambda$  lassen sich mit Hilfe der Anzahldichte  $N$  und dem Flüssigwassergehalt  $L$  ausdrücken als:

$$A^* = \frac{\mu N}{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{\mu}\right)} \lambda^{\frac{\nu+1}{\mu}} \quad (3.19)$$

$$\lambda = \left[ \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+2}{\mu}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{\mu}\right)} \bar{x} \right]^{-\mu}, \quad (3.20)$$

mit der Gammafunktion

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} \tau^{x-1} e^{-\tau} d\tau. \quad (3.21)$$

Die Koeffizienten  $\mu$  und  $\nu$  ergeben sich aus der Exponentialverteilungsfunktion bezüglich des Durchmessers eines Regentropfens. Berechnet man diese in Abhängigkeit der Partikelmasse statt des Durchmessers, so ergibt sich eine Gammaverteilung mit  $\mu = 1/3$  und  $\nu = -2/3$ . Im Folgenden wird nun aufgrund der unterschiedlichen Fallgeschwindigkeiten zwischen Wolken- und Regentropfen unterschieden. Diese Annahme beruht auf dem Kessler-Schema von 1969. Die Tropfenmasse  $m^*$  trennt die Wolken- von den Regentropfen. Der Zahlenwert ist aus einer numerischen Lösung der stochastischen Koagulationsgleichung bestimmt und wird mit  $m^* = 2,6 \cdot 10^{-10}$  kg angegeben, was einem Tropfenradius von  $r^* = 40 \mu\text{m}$  entspricht. Damit lassen sich die Momente der Verteilungsfunktion wie folgt schreiben:

$$\text{Wolkentropfen:} \quad M_c^n = \int_0^{m^*} m^n f_w(m) dm = \int_0^{\infty} m^n f_c(m) dm \quad (3.22)$$

$$\text{Regentropfen:} \quad M_r^n = \int_{m^*}^{\infty} m^n f_w(m) dm = \int_0^{\infty} m^n f_r(m) dm. \quad (3.23)$$

Die Bilanzgleichung für das Moment  $n$  ergibt sich in kartesischen Koordinaten als:

$$\frac{\partial M_k^n}{\partial t} + \nabla \cdot [\vec{v} M_k^n] - \nabla \cdot [K_h \nabla M_k^n] + \frac{\partial}{\partial z} [\bar{v}_{sed,k} M_k^n] = S_k^n. \quad (3.24)$$

Dabei ist  $K_h$  der turbulente Diffusionskoeffizient und  $\bar{v}_{sed,k}$  die Sedimentationsgeschwindigkeit.  $S_k^n$  beschreibt die Quell- und Verlustterme durch Nukleation, Kondensation und Verdunstung, Kollision, Koaleszenz und Break Up. Der Term  $-\nabla \cdot [K_h \nabla M_k^n]$  parametrisiert die turbulenten Flüsse der Hydrometeore.

### 3.3.1 Nucleation Aerosol Scavenging

Im Zuge dieser Arbeit wird das Modellsystem um das Nucleation Aerosol Scavenging (NAS) erweitert. Bis zu diesem Zeitpunkt liegen aktivierte Aerosole weiter unverändert vor und können auch mehrmals zur Aktivierung eines Wolkentropfens beitragen. Die Berechnung der Anzahl-

$k_s$	aktivierte Spezies	korrespondierende Aerosolmode
1	Sulfat	<i>if,ic,jf,jc</i>
2	Ammonium	<i>if,ic,jf,jc</i>
3	Nitrat	<i>if,ic,jf,jc</i>
4	organische Verbindungen	<i>if,ic,jf,jc</i>
5	Seesalz	<i>seasa,seasb,seasc</i>
6	Ruß	<i>ic,jc</i>
7	Mineralstaub	<i>dusta,dustb,dustc</i>

Tabelle 3.3: Reduzierte Anzahl aktivierter Spezies  $k_s$ 

dichte der aktivierten Aerosole, hier  $N_l^{act}$ , und ihrer Massendichte, hier  $M_l^{act}$ , erfolgt mittels den Gln. 2.63 und 2.70. Dies geschieht für jede Mode  $l$ . Die Massendichte einer Spezies nach dem NAS,  $M_k$ , errechnet sich aus der Massendichte der Spezies vor dem Vorgang,  $M_{alt,k}$ , und einem Faktor  $f_l$ , der den Anteil des aktivierten Aerosols an der Mode angibt. An dieser Stelle wird angenommen, dass jede Spezies  $k$  einer Mode  $l$  zu einem modenspezifischen prozentualen Anteil aktiviert wird.

$$M_k = M_{alt,k} - f_l M_k^{act} \quad |_{l \ni k} \quad (3.25)$$

$$\text{mit: } f_l = \frac{M_l^{act}}{\sum_{k,k \in l} M_{alt,k}}. \quad (3.26)$$

Für die Massendichte der Partikel, die aktiviert sind, wird eine reduzierte Anzahl an Spezies  $k_s$  eingeführt, die mehrere ähnliche Spezies unterschiedlicher Moden zusammenfasst. Einen Überblick über die reduzierte Anzahl aktivierter Spezies gibt Tab. 3.3. Die Massendichte neu aktivierter Partikel ergibt dann zusammen mit der bereits vorhandenen Massendichte aktivierter Partikel,  $M_{k_s,alt}^{act}$ , die neue Massendichte aktivierter Partikel  $M_{k_s}^{act}$ .

$$M_{k_s}^{act} = M_{k_s,alt}^{act} + \sum_{k,k \in k_s} f_l M_k^{act}. \quad (3.27)$$

Für die Massendichte aktivierter Partikel  $M_{k_s}^{act}$  sind neue Größen in das Modellsystem eingebaut worden. Diese werden konsistent zum spezifischen Wolkenwasseranteil ausgebreitet (Gln. 3.28 und 3.29).

$$\text{Wolkenwasser: } \frac{dq_c}{dt} + \bar{v} \nabla q_c = S^c + Q^c - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \vec{F}^c \quad (3.28)$$

$$\text{Akt. Aerosol: } \frac{dM_{k_s}^{act}}{dt} + \bar{v} \nabla M_{k_s}^{act} = S^{act} + Q^{act} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \vec{F}^{act}, \quad (3.29)$$

wobei  $\vec{v}$  für den Windvektor,  $S^c$  für mikrophysikalische Prozesse und  $Q^c$  für Quellterme des spezifischen Wolkenwasseranteils steht. Die Größe  $S^{act}$  steht für mikrophysikalische Prozesse,  $Q^{act}$  für Quellterme der Massendichte aktivierter Aerosolpartikel.  $Q^{act}$  (Gl. 3.27) und  $Q^c$  werden aus der Aktivierung der Partikel bestimmt und somit konsistent behandelt. Für die weiteren Transportterme gilt:  $S^{act} = 0$ .

Die Anzahldichte aktivierter Partikel  $N_l^{act}$  wird im Modellsystem von der Anzahldichte vorhandener Partikel abgezogen. Da die Wolkentropfenanzahldichte vom Modell explizit beschrieben wird, ist es nicht notwendig, die Anzahldichte aktivierter Partikel im Modellsystem weiter zu nutzen. Bei mikrophysikalischen Prozessen kann auf die Wolkentropfenanzahldichte zurückgegriffen werden.

## 4. Simulationen

In dieser Diplomarbeit werden Sensitivitätsstudien durchgeführt, um den Einfluss von Seesalzaerosol auf Systeme, bei denen postfrontale Konvektion auftritt, zu untersuchen und einen quantitativen Vergleich zwischen Simulationen mit vorgegebenen konstanten Aerosoleigenschaften, wie sie zumeist in atmosphärischen Modellen verwendet werden, und einem voll gekoppelten Modellsystem mit prognostischer Aerosolverteilung und Aerosol-Wolken-Wechselwirkungen zu ziehen. Desweiteren wird das Modellsystem COSMO-ART um den Vorgang des *nucleation aerosol scavenging* erweitert und die Auswirkung dessen auf die Aerosolverteilung und den Niederschlag untersucht.

Zunächst wird die Großwetterlage während des Simulationszeitraums erläutert und erklärt, was dieses Ereignis für weitere Untersuchungen mit diesem Modellsystem auszeichnet. Im Anschluss werden die Ergebnisse erster Sensitivitätsstudien präsentiert. Da signifikante Unterschiede zwischen simulierter und beobachteter Radarreflektivität auftreten, wird im Folgenden die Sensitivität gegenüber den meteorologischen Start- und Randwerten untersucht. Bei diesen Simulationen wird zunächst von einer konstanten Aerosolverteilung ausgegangen, anschließend werden die Ergebnisse eines Modelllaufs mit einer simulierten Aerosolverteilung präsentiert. Als Simulationszeitraum ist der 23.4.2008 bis 25.4.2008 gewählt worden.

Das Simulationsgebiet des operationellen Modells COSMO-DE ist in Abb. 4.1 dargestellt. Es ist mit *Region 1* gekennzeichnet, umfasst Deutschland und angrenzende Nationen und stellt auch das Simulationsgebiet der Modellläufe dieser Diplomarbeit dar. *Region 2* ist hier zur Verdeutlichung eingezeichnet, da diese später genutzt wird, um die Niederschlagsbildung eingehender zu untersuchen. Die räumliche Auflösung der Simulation beträgt  $0,025^\circ$ , also  $\sim 2,8$  km. Das erweiterte Wolkenschema des Modellsystems COSMO-ART, wie es in Kap. 3.2.2 beschrieben ist, ist bis dato noch nicht mit einer horizontalen Auflösung von  $2,8$  km genutzt worden. Das Besondere hierbei ist, dass Simulationen auf dieser Skala konvektionsauflösend sind. In der Vertikalen verwendet das Modell 50 nicht-äquidistanten Schichten.

Als Rand- und Anfangswerte werden bei den ersten Sensitivitätsstudien (SENS) COSMO-EU Analysedaten für den 23.4.2008 bis zum 25.4.2008 verwendet. Einen Überblick über die verwendeten Daten mit Verweis auf das Kapitel, in dem die Modellläufe ausgewertet werden, findet sich in Tab. 4.1. Rand- und Anfangswerte für Aerosol und Gas werden bei SENS nicht verwendet. In den folgenden Läufen wird nur der 25.4.2008 simuliert und Daten eines Vorhersagelaufs von COSMO-DE als Rand- und Initialwerte genutzt. Die Einschwingzeit des Modells fällt weg, da die Eingabedaten aus dem Datenassimilationszyklus des Deutschen Wetterdienstes (DWD)

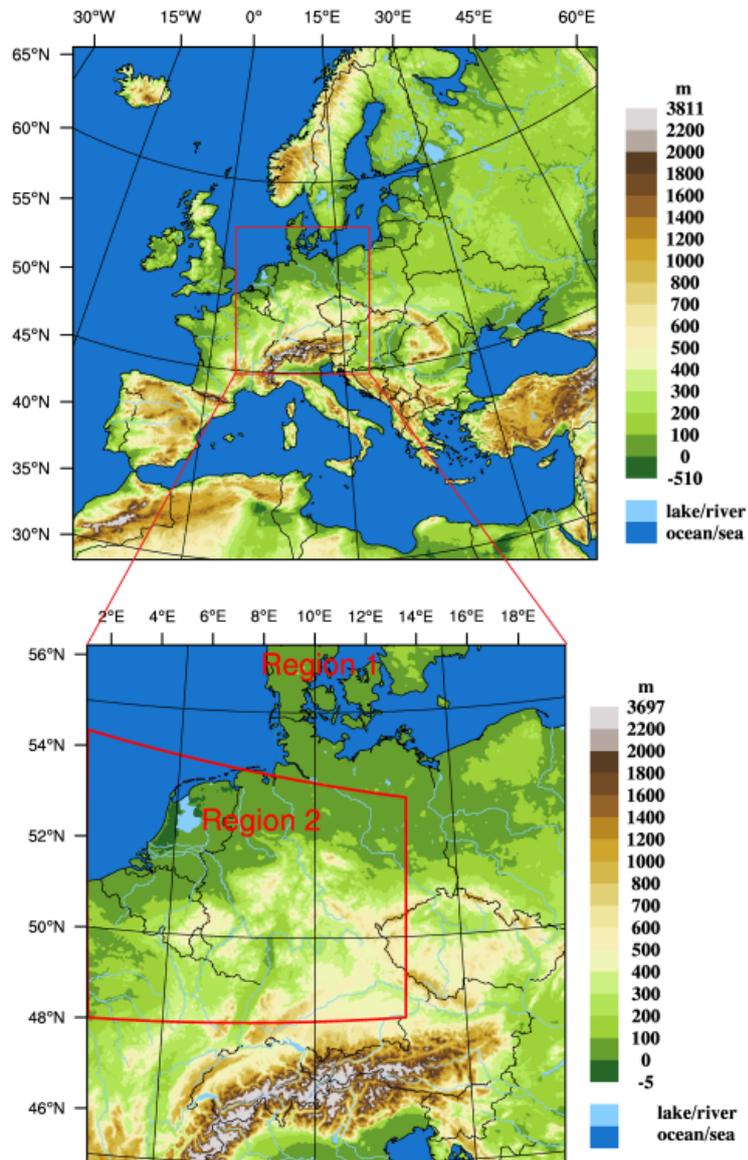


Abbildung 4.1: Oben: Simulationsgebiet des COSMO-EU Laufs mit Modellorographie. Unten: COSMO-DE Modellgebiet mit Orographie (Region 1). Region 2 wird in dieser Diplomarbeit zur Auswertung charakteristischer Strukturen verwendet.

Modelllauf	Auswertung in	Meteorol. Werte	ART Werte
SENS	Kap. 4.2.2	COSMO-EU Analyse	-
INDE	Kap. 4.2.3	COSMO-DE Vorhersage	-
ARTF	Kap. 4.2.4	COSMO-DE Vorhersage	COSMO-ART-EU

Tabelle 4.1: Überblick über die verschiedenen Modellstudien und die dafür benutzten Rand- und Anfangswerte, sowohl meteorologische als auch für Gas und Aerosol (ART).

in Offenbach stammen. Für die anschließenden Modellläufe, bei denen COSMO-ART die Aerosolverteilung simuliert (ARTF) ist zunächst ein Lauf mit  $0,0625^\circ$ , also  $\sim 7$  km, horizontaler Auflösung mit 40 vertikalen Schichten, angetrieben durch COSMO-EU Analysedaten, gemacht worden. Dieser liefert die Rand- und Anfangswerte der Gas- und Aerosolkonzentrationen. Die meteorologischen Werte stammen hier ebenfalls aus der COSMO-DE Vorhersage.

Für die Zeitintegration ist das Runge-Kutta-Verfahren zunächst mit einem Zeitschritt von 25 s gewählt. Dies entspricht dem Wert des operationellen Modellsystems COSMO-DE. Für Simulationen mit prognostizierter Aerosolverteilung und Modellläufen, die zum Vergleich herangezogen werden, ist der Zeitschritt auf 10 s verringert worden. Für die Berechnung der Advektion wird das Semi-Lagrange-Schema benutzt.

## 4.1 Wetterlage

Im Folgenden wird die Wetterlage kurz beschrieben. Da für die Auswertung der Simulationen hauptsächlich der 24. und 25. April 2008 entscheidend sind, beschränkt sich die Analyse der Wetterlage auf die genannten Tage.

Am 24. April 2008, 0 UTC befindet sich ein Rücken in 500 hPa Geopotential über Frankreich und Westdeutschland (Abb. 4.2(a)). Über den britischen Inseln liegt ein Trog, dessen minimales Geopotential im Nordatlantik, südwestlich von Island, zu finden ist. Ein weiterer Trog erstreckt sich über Russland, die Ukraine und Ungarn. Das Geopotential in 500 hPa und der Bodendruck sind in Abb. 4.2(a) zu sehen.

Während des 24. Aprils wandert der Rücken nach Westen und befindet sich am 25. April, 0 UTC, über Polen, der Ostsee und dem südlichen Skandinavien (Abb. 4.2(b)). Der Höhentrog hat zu diesem Zeitpunkt die britischen Inseln passiert und liegt nun über der Nordsee, mit Ausläufern bis nach Norddeutschland. Das minimale Geopotential bleibt stationär südwestlich Islands. Über der Biskaya bildet sich ein Rücken aus.

Die Anströmungsrichtung in 500 hPa wechselt vom 24. auf den 25. April von Südwest nach Nordwest. Der Transport von Seesalz aus der Nordsee über Deutschland wird dadurch begünstigt. In der Bodenanalyse des Deutschen Wetterdiensts vom 24. April 2008, 0 UTC, (Abb. 4.2(c)) liegt ein Tiefdruckgebiet südwestlich von Island. Eine davon ausgehende Okklusionsfront befindet sich über Island und der Nordsee östlich der britischen Inseln und teilt sich vor der niederländischen Nordseeküste in Warm- und Kaltfront. Die Warmfront reicht über Westdeutschland bis nach Nor-

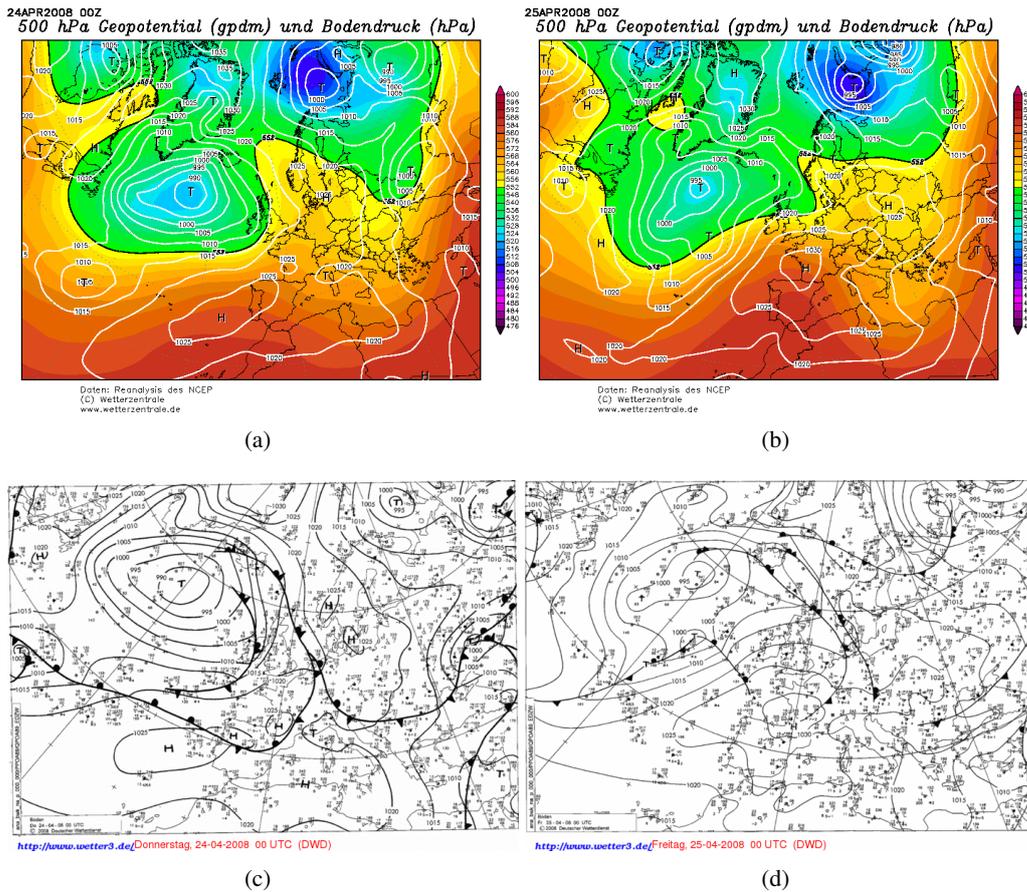


Abbildung 4.2: Simulierter Bodendruck (weiße Linien) und 500hPa Geopotential (gefüllte farbige Flächen) für (a) 24. April 2008, 0 UTC und (b) 25. April 2008, 0 UTC, *NCEP Reanalysis* (National Centers for Environmental Prediction, USA), *Quelle: www.wetterzentrale.de*. Bodendruck für (c) 24. April 2008, 0 UTC und (d) 25. April 2008, 0 UTC, *Analyse des DWD*, *Quelle: www.wetter3.de*.

ditalien, die Kaltfront über Frankreich bis nach Spanien. Von diesem Tiefdruckgebiet geht eine weitere Okklusionsfront aus. Diese reicht bis nach Irland und geht über dem Atlantik in eine Kaltfront über. Bodenhochdruckgebiete liegen über dem südlichen Skandinavien und Spanien und Portugal.

Im Laufe des Tages verharrt das Minimum des Tiefdruckgebiets stationär südwestlich von Island, was aufgrund der räumlichen Übereinstimmung von Höhen- und Bodentief zu erwarten ist. Das Tiefdruckgebiet besitzt nur noch wenig Entwicklungspotential und deintensiviert sich. Das oben genannte System aus Warm- und Kaltfront okkludiert und passiert Deutschland. Die zweite Kaltfront, die am 24. April, 0 UTC, noch über dem Atlantik liegt, passiert zum 25. April, 0 UTC, Deutschland (Abb. 4.2(d)). Über den Pyrenäen befindet sich ein ausgeprägtes Bodenhoch. Am Boden ändert sich die Anströmungsrichtung von West nach Nordwest. Dies begünstigt einen verstärkten Transport von Seesalz von der Nordsee nach Deutschland.

Die Passage der Kaltfront ist der Grund für die Wahl dieser spezifischen Wetterlage als Simulationszeitraum für eine Fallstudie. Bei der postfrontalen Konvektion, also der auftretenden Ku-

mulusbewölkung, ist ein Einfluss des Seesalzaerosols auf die Niederschlagsbildung ohne großen Einfluss von Wolkeneis zu erwarten. Dies ermöglicht eine Quantifizierung des Einflusses von Aerosol auf die Niederschlagsbildung. Im Folgenden werden die Ergebnisse der Modellsimulationen vorgestellt.

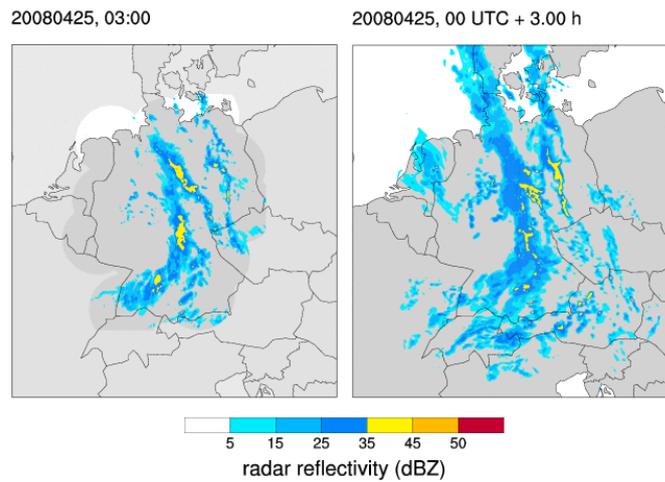
## 4.2 Modellstudie April 2008

An dieser Stelle wird eine Modellstudie präsentiert, bei der Aerosol-Wolken-Wechselwirkungen gezielt untersucht werden. Am Vor- und Nachmittag des 25. April 2008 ist über Deutschland eine nördliche Anströmung ausgeprägt. Eine Front hat im Laufe des Morgens Deutschland passiert. Die nördliche Anströmung sorgt für Seesalztransport von der Nordsee über Deutschland. Dieses Fallbeispiel stellt die erste Studie dar, in welcher die Aerosol-Wolken-Wechselwirkung mit COSMO-ART mit einer konvektionsauflösenden räumlichen Auflösung von 2,8 km untersucht wird. Aufgrund dessen werden zunächst Sensitivitätsstudien durchgeführt. Die Zielsetzung besteht darin, die konvektiven Ereignisse, die sich auf Radarbildern beobachten lassen, möglichst treffend zu beschreiben. Anschließend werden Studien mit verschiedenen vorgeschriebenen, konstanten Aerosolszenarien - einem extrem maritimem, einem gemäßigt maritimem und einem kontinentalen - präsentiert. Da dies die Art und Weise darstellt, wie Aerosol in den meisten Modellsystemen im Zuge der Wolken- und Niederschlagsbildung berücksichtigt wird, wird im Anschluss ein Vergleich der Ergebnisse mit den Ergebnissen eines COSMO-ART Modelllaufs mit simulierter Aerosolverteilung und Aerosol-Wolken-Wechselwirkung angestellt. Ziel ist es, die Unterschiede einer konstanten zu einer prognostizierten Aerosolverteilung zu quantifizieren.

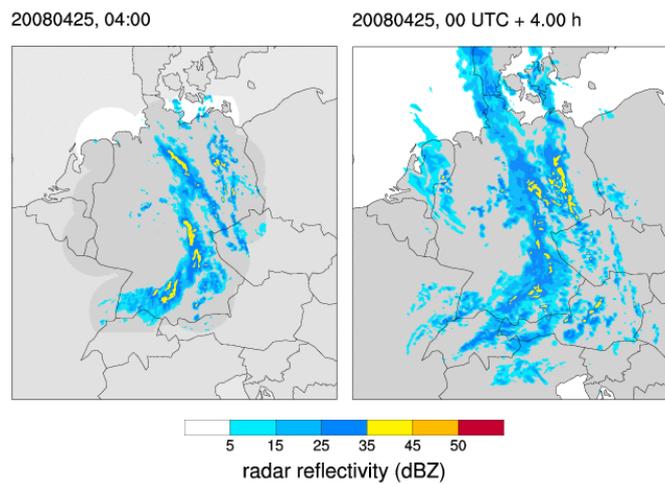
### 4.2.1 Ausgangssituation

Ausgangspunkt der Fallstudie ist eine Simulation, die vom Deutschen Wetterdienst mit COSMO und Zwei-Momenten-Wolkenmikrophysikschema durchgeführt worden ist (Axel Seifert (2011), persönliche Kommunikation). Diese wird von hier an als *DWDsim* bezeichnet. Bei der betrachteten Fallstudie wird vermutet, dass das Aerosol einen signifikanten Einfluss auf die Niederschlagsbildung nach einer Frontpassage haben könnte. An dieser Stelle sowie im Folgenden ist mit konvektiver Niederschlagsbildung keine hochreichende Konvektion, sondern die postfrontale Konvektion und Kumuli-Bildung, die in diesem Fallbeispiel eine Rolle spielt, gemeint. Deshalb kann auch davon ausgegangen werden, dass es sich primär um warme Wolken handelt und Eis nur eine untergeordnete Rolle spielt. Diese Beispielwetterlage zeichnet sich durch einen erhöhten Seesalztransport von der Nordsee nach Deutschland aus. Ergebnisse von *DWDsim* zu verschiedenen Zeitpunkten und der Vergleich zu Radarbildern sind in den Abb. 4.3(a) bis 4.4(c) zu sehen. In dieser Simulation ist das Zwei-Momenten-Wolkenmikrophysikschema genutzt worden. Auf den Abb. 4.3(a) bis 4.3(c) ist die Frontpassage nochmals zu sehen. Auf den Abb. 4.4(a) bis 4.4(c) lässt sich die angesprochene postfrontale, konvektive Bewölkung sowohl im Radarbild als auch bei der simulierten Radarreflektivität gut erkennen.

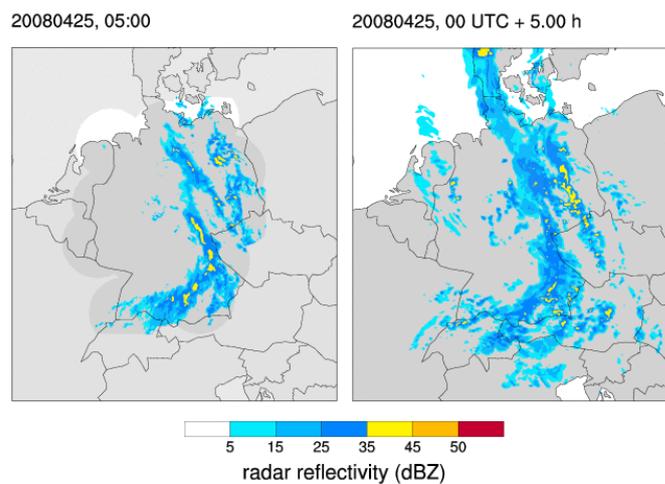
Im Folgenden werden Simulationen der betrachteten Situation mit COSMO-ART unter Verwen-



(a)

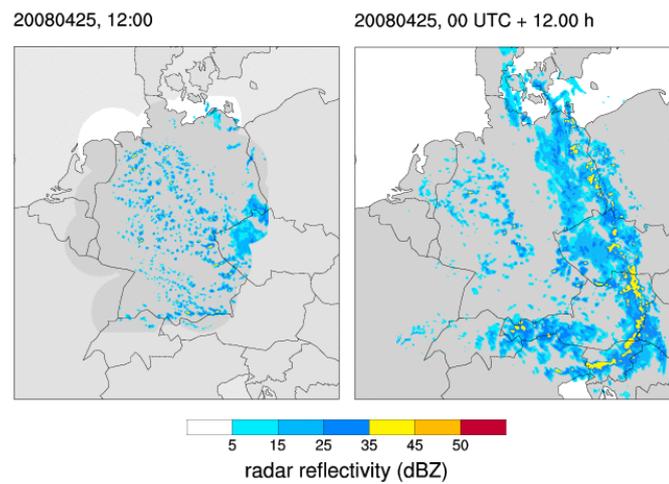


(b)

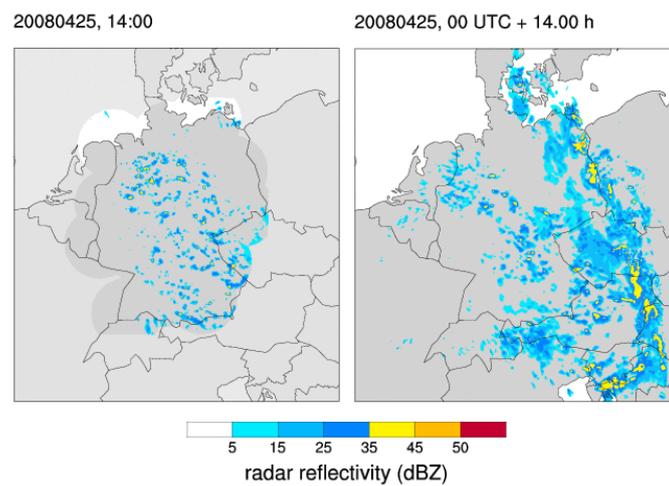


(c)

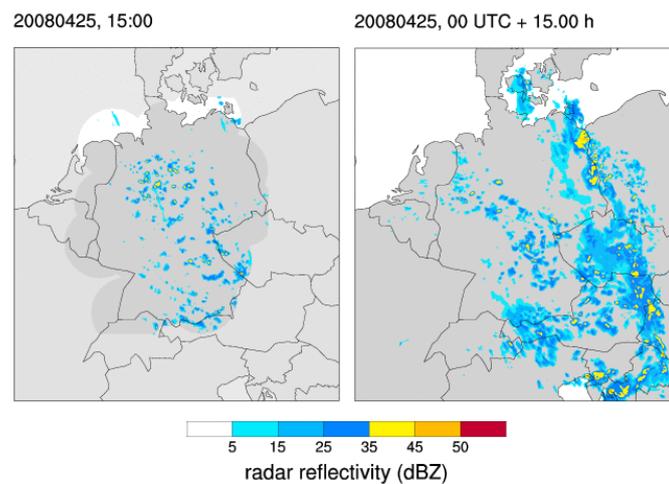
Abbildung 4.3: Radarbilder (jeweils links) und synthetisches Radarbild aus der Simulation *DWD-sim* (jeweils rechts) des Fallbeispiels. (a) für 3 UTC, (b) für 4 UTC und (c) für 5 UTC (Axel Seifert (2011), persönliche Kommunikation).



(a)



(b)



(c)

Abbildung 4.4: Radarbilder (jeweils links) und synthetisches Radarbild aus der Simulation *DWD-sim* (jeweils rechts) des Fallbeispiels. (a) für 12 UTC, (b) für 14 UTC und (c) für 15 UTC (Axel Seifert (2011), persönliche Kommunikation).

dung des Zwei-Momenten Mikrophysikschemas vorgestellt, in welchen die Sensitivität der post-frontalen Bewölkung auf unterschiedliche meteorologische Größen untersucht wird. Ziel ist es, die beobachtete post-frontale Bewölkung zu reproduzieren.

#### 4.2.2 Sensitivitätsstudien (SENS)

Zunächst wird ein gekoppelter Modelllauf von COSMO-ART mit Zwei-Momenten-Wolkenmikrophysikschema präsentiert, der die Ergebnisse von *DWDsim* reproduzieren soll. Dabei werden Randdaten eines COSMO-EU Analyselaufs für den Zeitraum vom 23.4.2008 bis 25.4.2008 genutzt. Da dieser Modelllauf die Ergebnisse von *DWDsim* nicht reproduzieren kann, werden Sensitivitätsstudien durchgeführt, um herauszufinden, woher diese Diskrepanz rührt. Diese werden nun eingehend beschrieben.

Modelllaufbezeichnung	Beschreibung
2MOMREF	COSMO-ART und Zwei-Momenten-Schema
PRE100	feste Konzentration von 100 Partikeln $\text{cm}^{-3}$
PRE1000	Wie PRE100, nur mit 1000 Partikeln $\text{cm}^{-3}$
WMIN05	Wie PRE1000, mit $w_{min} = 0,5 \text{ m s}^{-1}$

Tabelle 4.2: Bezeichnung der Modellläufe

Als erstes Grundscenario dient der eben beschriebene Modelllauf mit Zwei-Momenten-Wolkenmikrophysikschema und COSMO-ART, im Folgenden als *2MOMREF* abgekürzt. Dieser Lauf prognostiziert auf Basis anthropogener und natürlicher Emissionen eine Aerosolverteilung, die als CCN zur Verfügung stehen. Einen Überblick über die Bezeichnung der verschiedenen Läufe bietet Tab. 4.2. Ausgehend vom Grundscenario ist zunächst die Behandlung der Aerosole mit COSMO-ART durch eine vorgeschriebene, feste Konzentration von Wolkenkondensationskeimen (CCN) im gesamten Modellgebiet ersetzt worden, da die Vermutung nahe liegt, dass zu wenige Seesalzpartikel von der Nordsee advehiert werden, die dann als CCN wirken können. Dabei sind Konzentrationen von 1000 Partikeln  $\text{cm}^{-3}$  und 100 Partikeln  $\text{cm}^{-3}$  vorgeschrieben worden. Für die vorgeschriebenen Partikel wird eine log-normale Größenverteilung mit einem Durchmesser von  $d = 2 \mu\text{m}$  und eine Standardabweichung von  $\sigma = 2$  verwendet, was den Werten der mittleren Seesalzmode in COSMO-ART entspricht. In einem weiteren Modelllauf wird untersucht, ob die in den Wolken auftretenden Vertikalgeschwindigkeiten vom Modell aufgrund der Auflösung nicht erfasst werden kann und daher die Übersättigung zu niedrig ist. Dies würde dazu führen, dass zu wenige Partikel aktiviert werden, wodurch die Wolkentropfenanzahl unterschätzt wird. Dazu wird bei der Berechnung der Aktivierung der Aerosolpartikel die Vertikalgeschwindigkeit, falls sie geringer als  $w_{min} = 0,5 \text{ m s}^{-1}$  ist, auf eben diesen Wert gesetzt.

Die simulierte Radarreflektivität am 25.4.2008, 12 UTC, für die verschiedenen Sensitivitätsläufe ist in Abb. 4.5(a) bis 4.5(d) dargestellt. Betrachtet man den *2MOMREF* Modelllauf und vergleicht es mit der gemessenen Radarreflektivität und dem Ergebnis von *DWDsim* in Abb. 4.4(a), so kann

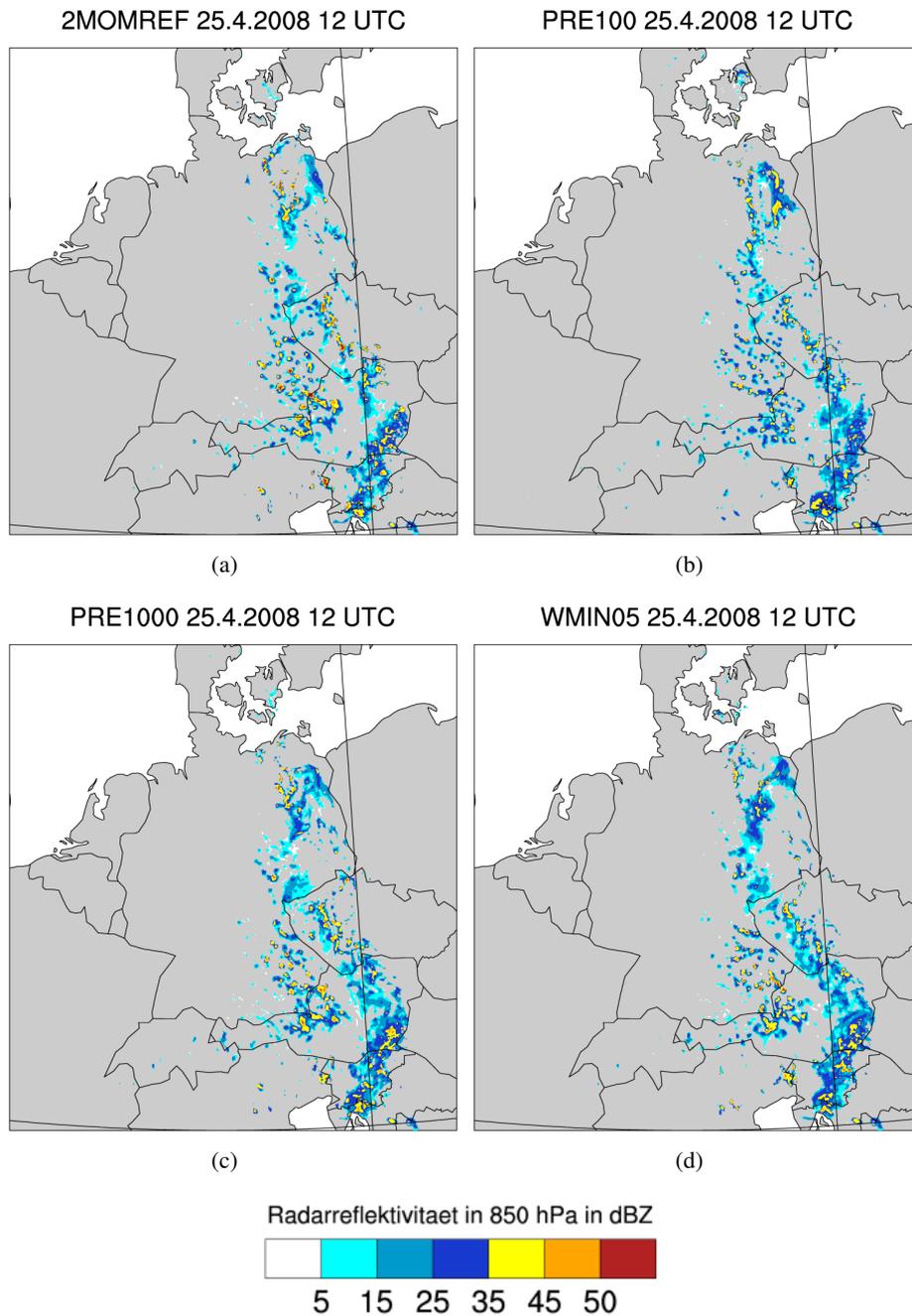


Abbildung 4.5: Simulierte Radarreflektivitaet am 25.4.2008 12 UTC in 850 hPa für (a) 2MOMREF, (b) 100PRE, (c) 1000PRE und (d) WMIN05.

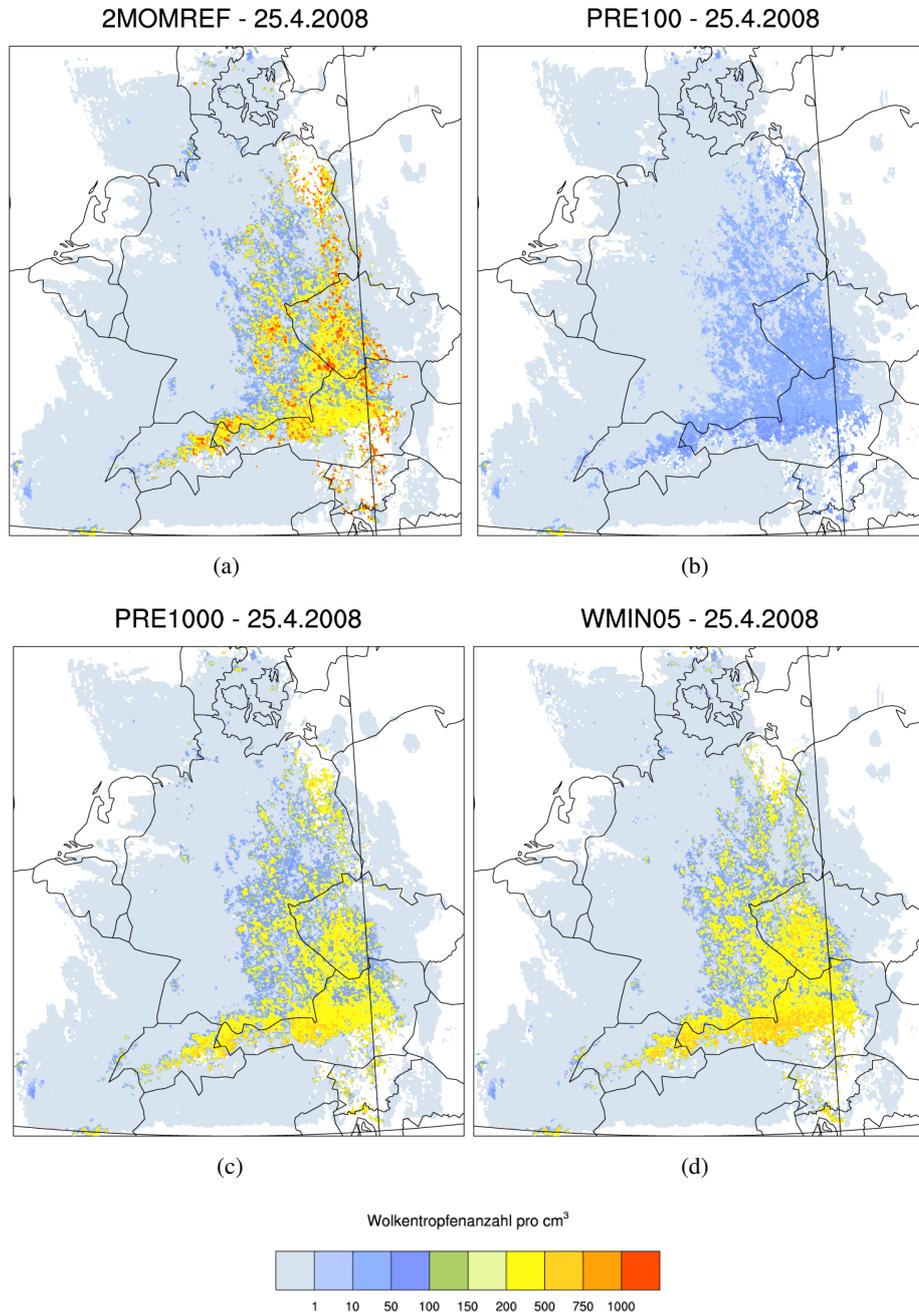


Abbildung 4.6: Zeitlicher Median der Wolkentropfenanzahl am 25.4.2008 in 850 hPa für (a) 2MOMREF, (b) 100PRE, (c) 1000PRE und (d) WMIN05.

man erkennen, dass die postfrontalen konvektiven Ereignisse im Bereich von Nordwestdeutschland in *2MOMREF* nicht wiedergegeben werden. Dies trifft nicht nur für 12 UTC, sondern für das gesamte Ereignis zu. Sowohl bei den Simulationen mit vorgeschriebener CCN-Anzahl, als auch bei den Simulation mit einer vorgeschriebenen minimalen Vertikalgeschwindigkeit lässt ein Vergleich mit dem simulierten Radarbild keine signifikante Verbesserung erkennen. Betrachtet man den zeitlichen Median der Wolkentropfenzahldichte (Abb. 4.6(a) bis 4.6(d)), lässt sich jedoch ein deutlicher Unterschied zwischen den einzelnen Läufen feststellen. So bilden sich bei *2MOMREF*, wo offensichtlich auch die höchste Anzahl an CCN vorliegt, die meisten Wolkentropfen aus. Dementsprechend finden sich bei *PRE1000* und *WMIN05*, die dieselbe Anzahl an Wolkenkondensationskeimen vorliegen haben, jeweils eine ähnliche Anzahl an Wolkentropfen, jedoch weniger als in *2MOMREF*. Die wenigsten Wolkentropfen ergeben sich bei *PRE100*.

Für die räumliche Verteilung der postfrontalen, konvektiven Bewölkung ergibt sich durch die beschriebenen Änderungen an CCN-Anzahl und Vertikalgeschwindigkeit keine Verbesserung hinsichtlich der Messdaten. Hieraus lässt sich schließen, dass nicht mikrophysikalische Prozesse in den Wolken, sondern großskalige Prozesse, wie z.B. die Advektion von feuchter Luft in das untersuchte Gebiet, in den Simulationen nicht richtig wiedergegeben werden. Deshalb wird an dieser Stelle nicht weiter auf die Ergebnisse dieser Modellläufe eingegangen und im Folgenden die Randdaten ersetzt.

Von hier an liefert ein operationeller COSMO-DE Modelllauf die meteorologischen Start- und Randdaten für alle weiteren Modellsimulationen. Für diese ist eine Datenassimilation durchgeführt worden, es fließen also Werte aus Beobachtungen ein. Dabei zeigt sich, dass die konvektiven Strukturen, die auf den Radarbildern in Nordwestdeutschland zu sehen sind, nun gut im Vergleich mit den Radardaten wiedergegeben werden. Dies lässt sich zum Beispiel in den Abb. 4.7(a) bis 4.7(d) anhand des gemessenen Radarbilds und der synthetischen Radarbildern aus drei Läufen mit vorgeschriebenen CCN erkennen.

### 4.2.3 Einfluss von vorgeschriebenem Aerosol auf Niederschlag (INDE)

Für die folgenden Modellstudien werden zunächst drei Aerosolszenarien vorgegeben. Diese werden wie durch Segal und Khain (2006) beschrieben gewählt. Einen Überblick bietet Tab. 4.3. Diese Simulationen sollen dazu dienen, den Einfluss unterschiedlicher vorgeschriebener Aerosolkonzentrationen auf den Niederschlag zu untersuchen. Diese kontrollierten Bedingungen ermöglichen es später, die Ergebnisse eines Modelllaufs mit prognostiziertem Aerosol und gekoppelter Aerosol-Wolken-Wechselwirkung genauer einzuordnen. Auf den simulierten Radarbildern der Modellläufe lassen sich die konvektiven Strukturen klar erkennen (Abb. 4.7(b) bis 4.7(d)). Nun lassen sich diese Modellläufe weiter auswerten und später mit einem Modelllauf vergleichen, bei dem COSMO-ART die Aerosolverteilung prognostiziert.

Im Vergleich zu den Radarbildern wird in diesen Simulationen einerseits die kleinskalige konvektive Bewölkung sehr gut wiedergegeben, andererseits liegt auch die Ausdehnung der Front in Zugrichtung im Vergleich zur ursprünglichen Simulation näher an den gemessenen Radardaten. Unterschiede zwischen den einzelnen Szenarien lassen sich in der simulierten Radarreflektivität

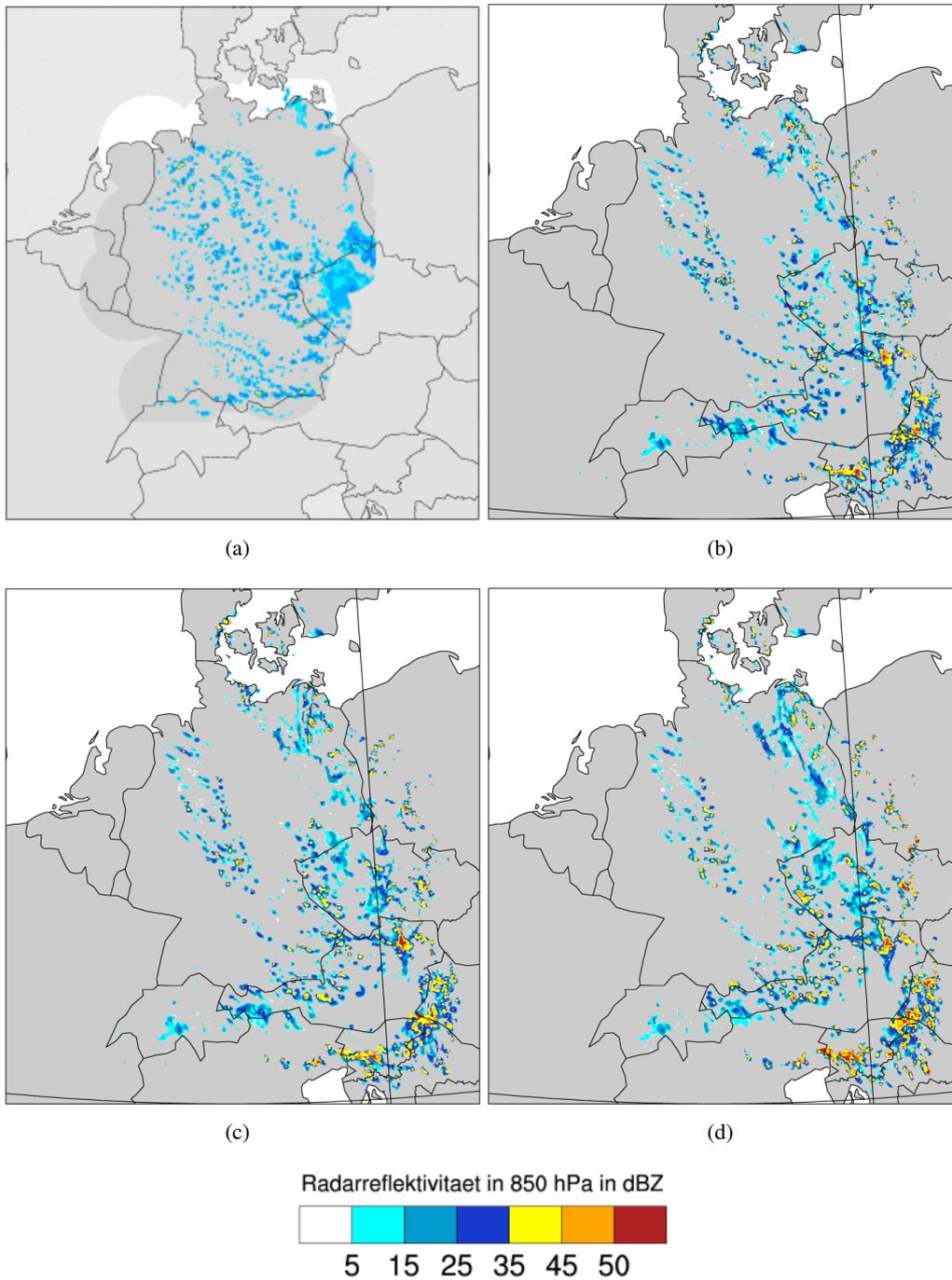


Abbildung 4.7: (a) gemessene Radarreflektivitaet am 25.4.2012, 12 UTC. Synthetisches Radarbild für ein (b) extremes maritimes, (c) gemäßigtes maritimes (d) kontinentales Aerosolszenario am 25.4.2012, 12 UTC

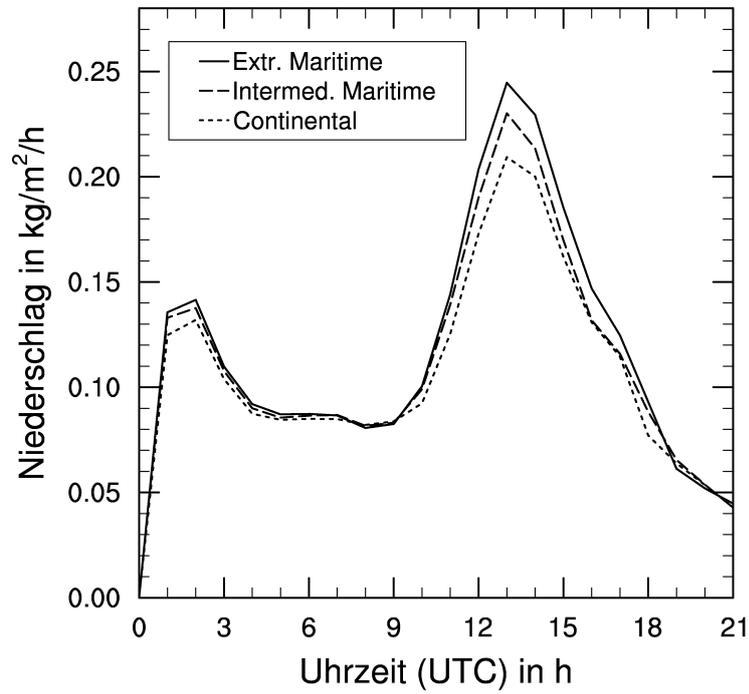
Modelllaufbezeichnung	Beschreibung	
Ext. Mar.	Extremes maritimes Szenario	$n = 100, d = 0,08, \sigma = 2,5$
Int. Mar.	Gemäßigtes maritimes Szenario	$n = 400, d = 0,08, \sigma = 2,5$
Kont	Kontinentales Szenario	$n = 1700, d = 0,08, \sigma = 1,68$

Tabelle 4.3: Bezeichnung der Aerosolszenarien.  $n$  steht für die Partikelanzahl pro  $\text{cm}^3$ ,  $d$  für den mittleren Durchmesser des Aerosols in  $\mu\text{m}$  und  $\sigma$  für die Standardabweichung.

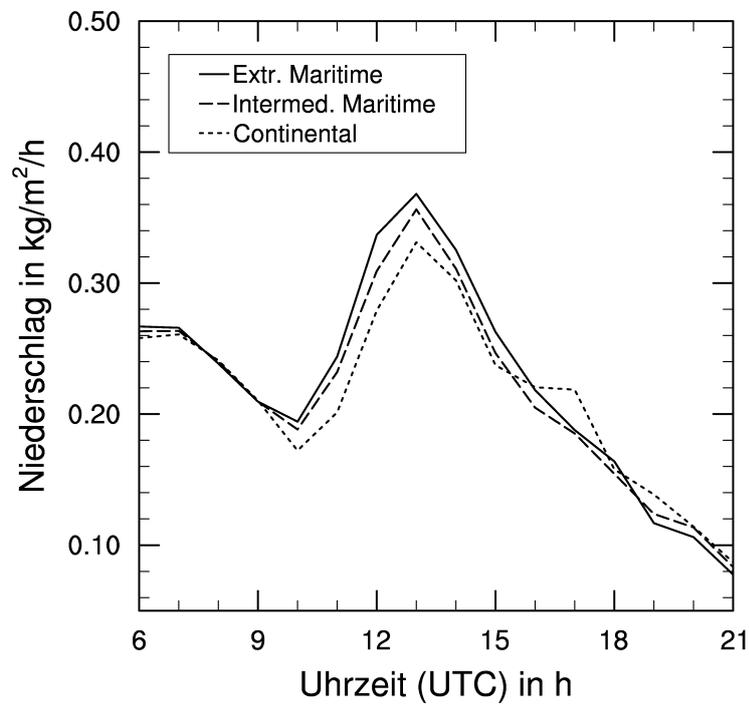
kaum erkennen. In Abb. 4.8(a) der räumlich gemittelte Niederschlag für *Region 1* und in Abb. 4.8(b) für *Region 2* als Funktion der Zeit dargestellt. Für *Region 1*, also dem gesamten Modellgebiet, ist über den Tag ein Grundniveau von ca.  $0,08 \text{ kg m}^{-2} \text{ h}^{-1}$  zu sehen, das nicht unterschritten wird. Da der frontale Niederschlag über den gesamten Tag im Modellgebiet vorhanden ist, liegt die Vermutung nahe, dass es sich bei diesem Grundniveau um den frontalen Niederschlag handelt. Interessant ist der Ausschlag auf Werte bis zu  $0,25 \text{ kg m}^{-2} \text{ h}^{-1}$  zwischen 12 und 15 UTC. Um zu untersuchen, ob dieser zusätzliche Niederschlag zu dieser Zeit durch die postfrontale Konvektion verursacht wird, wird das Flächenmittel für *Region 2* genauer untersucht. Dieses Gebiet ist derart gewählt, dass zu den betreffenden Stunden die Front auf dem simulierten Radarbild nicht in diesem Bereich zu finden ist, sondern nur die konvektiven Ereignisse. Es zeigt sich, dass hier ein Maximum mit Werten bis zu  $0,38 \text{ kg m}^{-2} \text{ h}^{-1}$  zum selben Zeitpunkt zu finden ist. Dies zeigt, dass es sich dabei um den Niederschlag aus dem konvektiven Ereignis handelt.

Wie eingangs erwähnt kann eine erhöhte Anzahl an CCN zu einer längeren Lebensdauer der Wolke führen. Bei hohen CCN Konzentrationen entstehen im Vergleich zu niedrigen CCN Konzentrationen mehr und daher kleinere Wolkentropfen, welche weniger effizient durch Kollisionen zu Regentropfen anwachsen. Deshalb lässt sich ein systematischer Unterschied zwischen dem kontinentalen und dem extrem maritimen Szenario feststellen. Im kontinentalen Szenario ist systematisch weniger Niederschlag als in den anderen Szenarien vorhanden. Dementsprechend ist im extrem maritimen Szenario der meiste Niederschlag vorhanden und das gemäßigte maritime Szenario liegt dazwischen. Die weniger effizientere und damit langsamere Niederschlagsbildung zeigt sich auch im systematisch verspäteten Anstieg des Niederschlags im kontinentalen Szenario. Dies entspricht den Erwartungen, die man zur Niederschlagsbildung in eisfreien Wolken hat.

Zur weiteren Analyse dienen Vertikalschnitte des räumlich gemittelten Wolkenwassergehalts und der Wolkentropfenanzahl im Zeitverlauf (Abb. 4.9(a) bis 4.9(d)). Dabei wird das gemäßigt maritime Szenario nicht weiter analysiert, da sich Aussagen am besten am Unterschied zwischen extrem maritimen zu kontinentalem Szenario festmachen lassen und das gemäßigt maritime Szenario Werte zwischen diesen Szenarien liefert. Auch auf Wolkeneis wird hier nicht eingegangen, da es bei diesen konvektiven Ereignissen nur eine untergeordnete Rolle spielt. Durch *Region 2* verläuft bis ca. 9 UTC noch die Front, danach ist hauptsächlich konvektive Bewölkung vorhanden. Dies zeigt sich auch im Vertikalschnitt des Wolkenwasseranteils (Abb. 4.9(a) und 4.9(c)) und der Wolkentropfenanzahl (Abb. 4.9(b) und 4.9(d)). Zu Beginn dominiert der Frontdurchgang sowohl Wolkenwasseranteil als auch Wolkentropfenanzahl. Gegen 9 UTC ändert sich die Struktur



(a)



(b)

Abbildung 4.8: Gebietsmittel des Niederschlags für den 25.4.2008. (a) für Region 1 und (b) für Region 2.

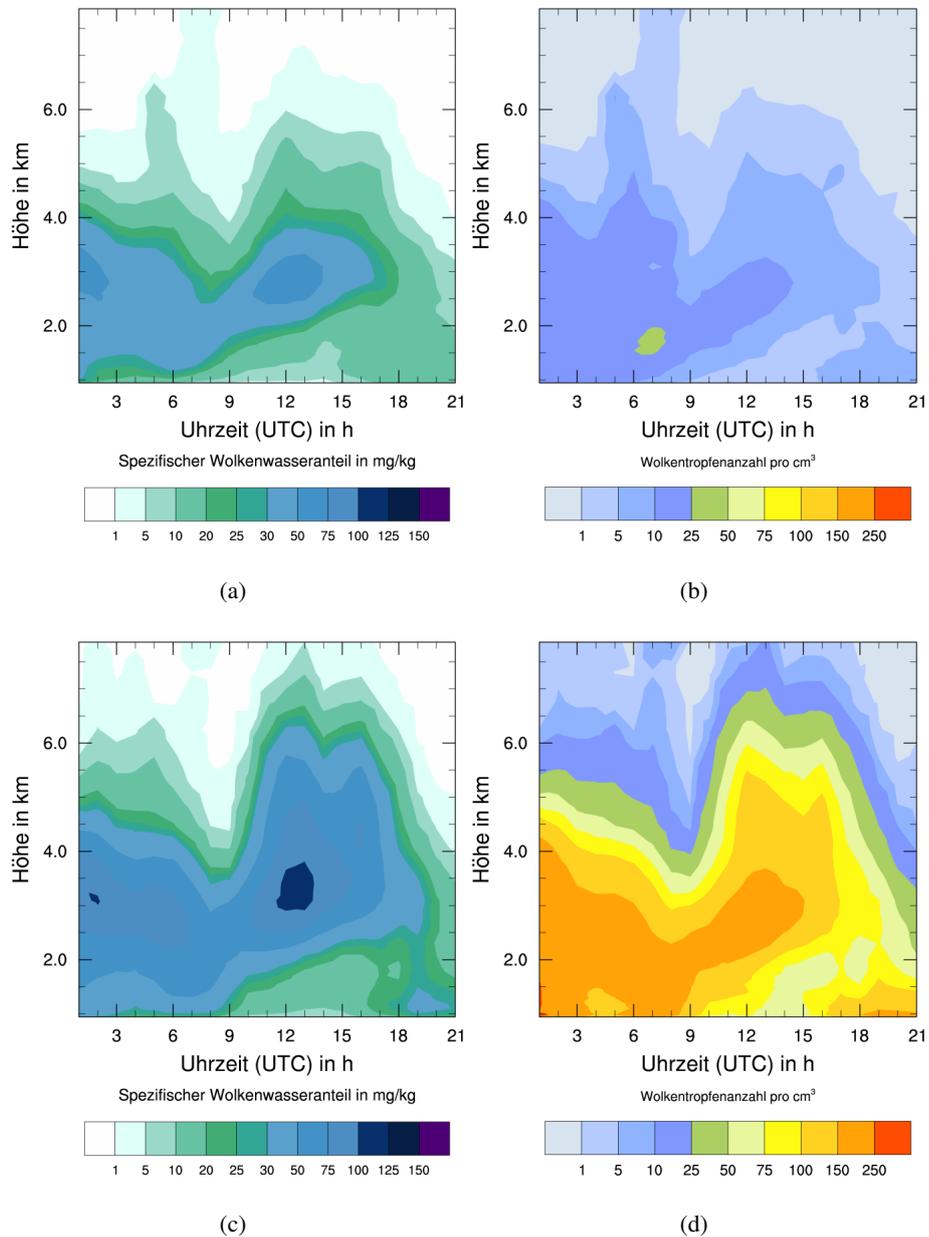


Abbildung 4.9: Räumlich gemittelter Vertikalschnitt im Zeitverlauf für *Region 2*. (a) Wolkenwassergehalt und (b) Wolkentropfenanzahl für extremes maritimes Szenario. (c) Wolkenwassergehalt und (d) Wolkentropfenanzahl für kontinentales Szenario. In die Mittel fließen nur Gitterpunkte ein, an denen Bewölkung vorhanden ist.

des Vertikalschnitts und es lässt sich eine vertikale Verlagerung des maximalen Wertes mit fortschreitender Zeit beobachten. So liegt der maximale spezifische Wolkenwasseranteil um 9 UTC im extrem maritimen Szenario in einer Höhe von ca. 2 km. Um 15 UTC lässt er sich in ca. 3 km finden. Im kontinentalen Szenario verlagert sich der maximale Wert im selben Zeitraum von ca. 2,5 km zu ca. 3,5 km. Dieser Anstieg des Maxima des spezifischen Wolkenwasseranteils lässt sich auf die postfrontale Konvektion zurückführen.

Abbildung 4.10(a) zeigt die Differenz des Gesamtniederschlags am 25.4.2008 von 0 UTC bis 21 UTC für das extrem maritime abzüglich des kontinentalen Szenarios. Der höhere Niederschlag im extrem maritimen gegenüber dem kontinentalen Szenario, wie er sich anhand des Flächenmittels feststellen ließ, lässt sich in dieser Darstellung nicht erkennen. Hervorstechend ist jedoch, dass Maxima der beiden Läufe räumlich versetzt zueinander zu finden sind. Deshalb wird in Abb. 4.10(b) der zweidimensionale Korrelationskoeffizient zwischen den jeweiligen Niederschlagsmustern dargestellt. Dabei fällt auf, dass im angesprochenen Zeitraum bis ca. 9 UTC ein hoher Korrelationskoeffizient ermittelt wird, also der frontale Niederschlag von unterschiedlichen Aerosolszenarien kaum beeinflusst wird. Daraufhin sinkt der Korrelationskoeffizient mit dem Einsetzen des konvektiven Niederschlags. Gegen Ende des konvektiven Ereignisses, gegen 18 UTC, steigt der Korrelationskoeffizient wieder an. Die verwendeten unterschiedlichen Aerosolkonzentrationen haben somit einen signifikanten Einfluss auf die räumliche Verteilung des Niederschlags, welcher in postfrontaler, konvektiver Bewölkung gebildet wird.

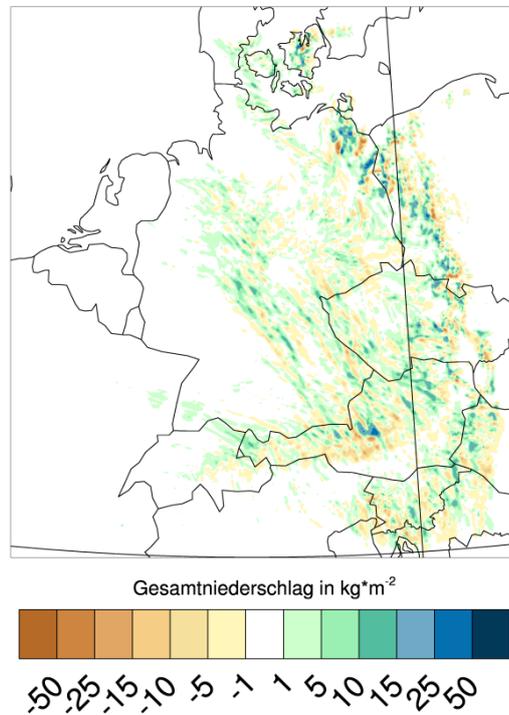
Betrachtet man die Differenz des Gesamtniederschlags (Abb. 4.10(a)) sieht man, dass erhöhte Aerosolkonzentrationen den Niederschlag systematisch verzögern. Dies lässt sich daran erkennen, dass positive Werte in der Niederschlagsdifferenz, in Zugrichtung gesehen, vor negativen Werten auftreten.

#### 4.2.4 Modellstudie mit prognostiziertem Aerosol (ARTF)

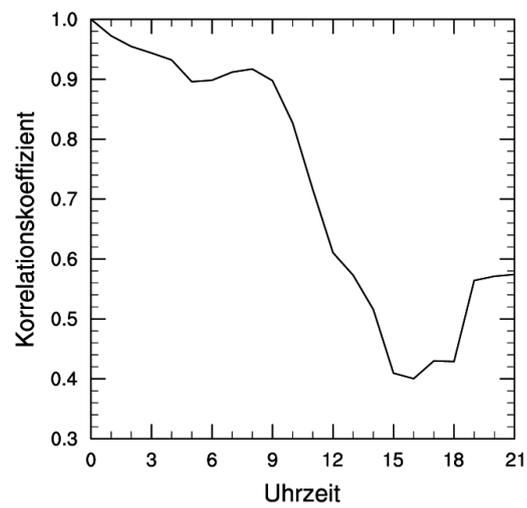
Im Folgenden wird untersucht, wie sich eine auf Basis von natürlichen und anthropogenen Emissionen simulierte Aerosolverteilung auf die Eigenschaften der Wolken und die Verteilung des Niederschlags auswirkt. Das Modellsystem COSMO-ART bietet die Möglichkeit, die Aktivierung von prognostiziertem Aerosol zu beschreiben und die Auswirkungen auf Wolken- und Niederschlagsbildung zu untersuchen. Dieser Modelllauf wird im Folgenden als *2MOM-ART* bezeichnet.

Die Rand- und Initialwerte für das Aerosol bei diesem Modelllauf liefert ein COSMO-ART-EU-Lauf. Für den Ruß werden aus technischen Gründen keine Start- und Randkonzentrationen gesetzt. Für den Integrationszeitschritt wird hier aufgrund numerischer Stabilität statt der zuvor genutzten 25 s ein Wert von 10 s gewählt. Modellläufe, die zum Vergleich dienen, sind mit 10 s wiederholt worden, zeigen jedoch nur geringfügige Abweichungen zu ihrem Pendant mit 25 s. Die Auswertung in diesem Abschnitt geschieht einheitlich für Läufe mit einem Integrationszeitschritt von 10 s.

Die postfrontale konvektive Bewölkung, wie sie auch bei den Läufen mit vorgeschriebenem Aerosol (*INDE*) zu erkennen war, zeigt sich auch auf den simulierten Radarbildern des *2MOM-ART*



(a)



(b)

Abbildung 4.10: (a) Gesamtniederschlagsdifferenz des extrem maritimen Szenarios abzüglich des kontinentalen Szenarios für den 25.04.2008, 0 bis 21 UTC. (b) Zweidimensionaler Korrelationskoeffizient der Niederschlagsdifferenz für den simulierten stündlichen Niederschlag.

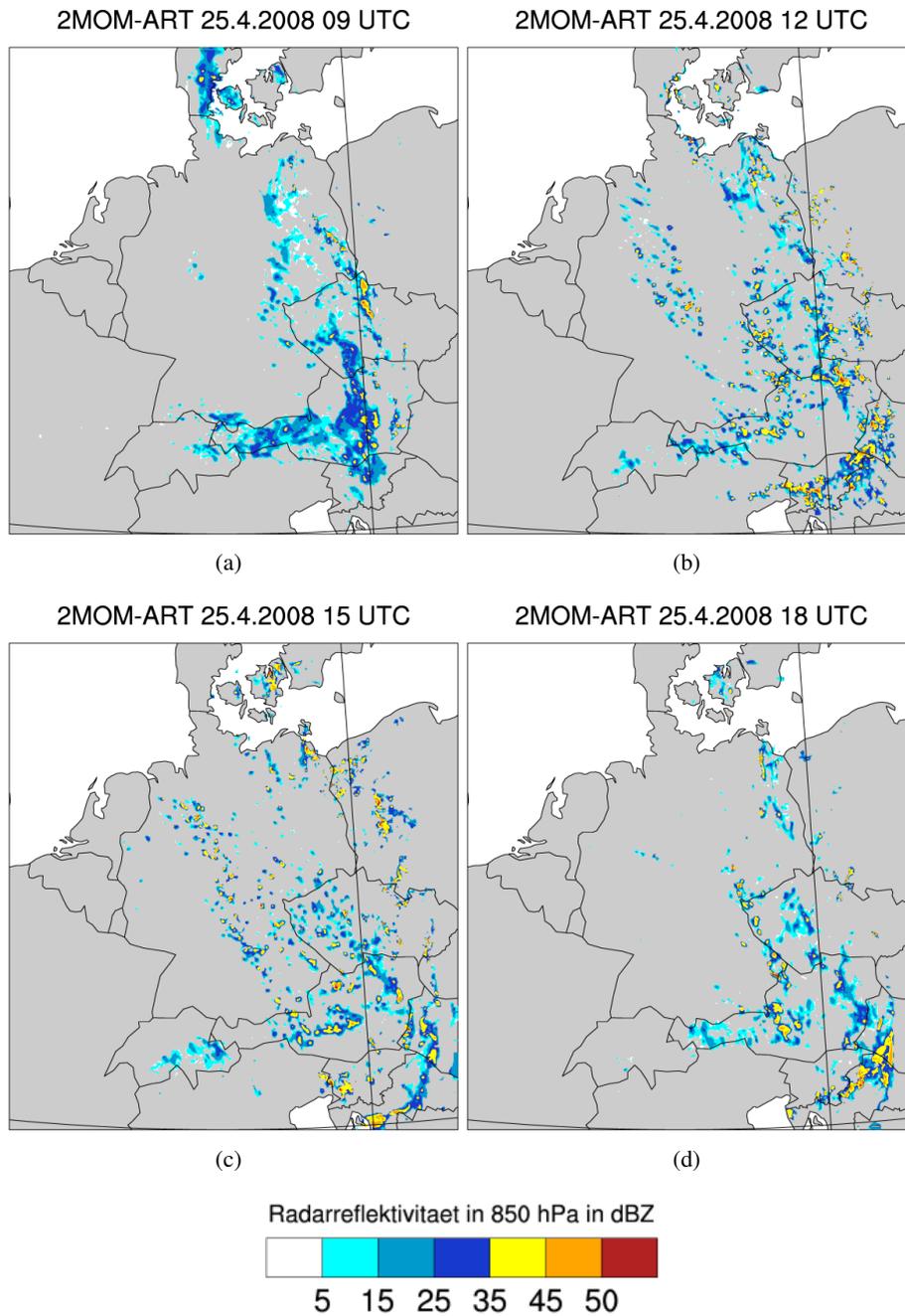


Abbildung 4.11: Dargestellt ist die Radarreflektivität in 850 hPa am 25.4.2008 zu den Terminen (a) 9 UTC, (b) 12 UTC, (c) 15 UTC, (d) 18 UTC

Modelllaufs (Abb. 4.11(a) bis 4.11(d)). Gegen 9 UTC ist der frontale Niederschlag über weiten Teilen von Österreich, der Schweiz, Tschechien und Nordostdeutschland noch sehr ausgeprägt. Drei Stunden später lassen sich über Deutschland Strukturen mit sehr geringer räumlicher Ausdehnung erkennen. Diese weisen eine ähnliche Struktur wie die gemessenen Radarechos (Abb. 4.4(a) und 4.4(c)) auf. Um 15 UTC steigt die Anzahl der kleinräumigen Strukturen an. Um 18 UTC lässt sich anhand der simulierten Radarreflektivität kaum noch postfrontale Konvektion erkennen. Sowohl die postfrontale Konvektion als auch die Front entsprechen eher dem Radarbild, als es durch die Simulationen mit dem operationellen COSMO-Wolkenschema durch Baldauf et al. (2011) geschehen ist.

Da sich anhand der Radarreflektivität nur der Niederschlag, jedoch nicht die Bewölkung betrachten lässt, ist in den Abb. 4.12(a) bis 4.12(d) der vertikal integrierte Gesamtwolkenwassergehalt dargestellt. Aus diesem lässt sich direkt auf die Bewölkung durch warme Wolken und Mischwolken zurückschließen. Gegen 9 UTC (Abb. 4.12(a)) lassen sich noch Teile der frontalen Bewölkung über Österreich und der Schweiz ausmachen. Die postfrontale konvektive Bewölkung setzt in Franken, der Oberpfalz, dem südwestlichen Sachsen und Nordrhein-Westfalen ein. Drei Stunden später lassen sich von Nordwest- bis Südostdeutschland kleinräumige Strukturen ausmachen, die zum Teil nur wenige Modellgitterpunkte räumliche Ausdehnung haben. Ähnliche Strukturen lassen sich 15 UTC ebenfalls beobachten, jedoch lässt sich im Gegensatz zur Radarreflektivität keine Intensivierung erkennen. Dies lässt sich dadurch erklären, dass die Wolkenbildung vor der Niederschlagsbildung stattfindet. Somit steigt der Gesamtwolkenwassergehalt zeitlich vor dem Niederschlag an, sofern dieser einsetzt. Um 18 UTC ist kaum noch Bewölkung durch warme Wolken im Modellgebiet vorhanden.

Um einen Vergleich mit Satellitendaten erheben zu können ist es nötig, sowohl den integrierten Wolkenwassergehalt als auch den integrierten Wolkeneisgehalt zu betrachten, diese sind in den Abb. 4.13(a) bis 4.14(d) dargestellt. Um 9 UTC (Abb. 4.13(a) und 4.13(b)) bildet das Wolkeneis eine hufeisenförmige Struktur aus, die sich über der östlichen, südlichen und westlichen Grenze Deutschlands befindet. Auf dem entsprechenden Satellitenbild ist die hufeisenförmige Struktur ähnlich ausgeprägt und nahezu weiß, was auf einem Infrarotsatellitenbild für eine niedrige Temperatur und somit eine Eiswolke spricht. Über großen Teilen Deutschlands ist in der Modellsimulation kein Wolkeneis zu finden, jedoch vereinzelte kleinräumige Strukturen aus Wolkenwasser. Auf dem Satellitenbild tauchen über Deutschland kleinskalige, graue Strukturen auf, was für höhere Temperaturen und somit auch eine niedrigere Höhe spricht. Das Modellsystem gibt die konvektive Bewölkung in diesem Bereich gut wieder. Um 12 UTC ist in der Modellsimulation im Westen Deutschlands deutlich weniger Wolkeneis zu finden. Auf dem Satellitenbild ist dies zwar auch zu erkennen, jedoch sind großflächigere Strukturen vorhanden als in der Modellsimulation. Der südliche Teil der um 9 UTC analysierten Hufeisenstruktur verlagert sich sowohl im Modelllauf, als auch in den Beobachtungen weiter nach Süden. Über Deutschland treten nun viele kleinskalige Wolkenwasser und Wolkeneisstrukturen auf, die sich auch auf dem Satellitenbild als gräuliche bis weiße Strukturen ausmachen lassen. Gegen 15 UTC besitzen diese Strukturen sowohl im Modell als auch in den Beobachtungen eine größere horizontale Ausdehnung. Im südwestlichen Bereich des Simulationsgebiets unterschätzt das Modellsystem den Wolkenwasser- und Wolkeneisgehalt.

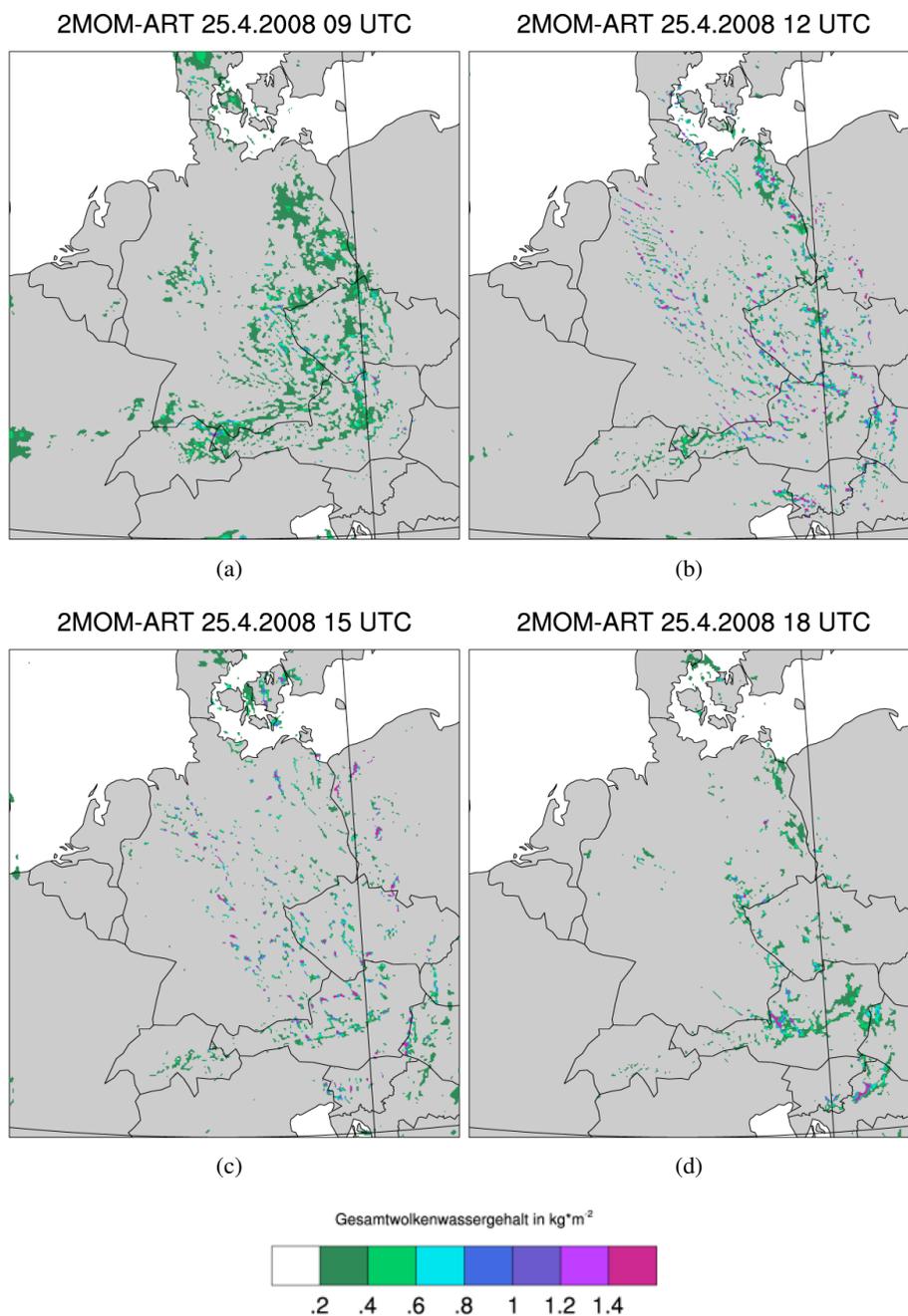


Abbildung 4.12: Vertikal integrierter Gesamtwolkenwassergehalt am 25.4.2008 zu den Terminen (a) 9 UTC, (b) 12 UTC, (c) 15 UTC, (d) 18 UTC

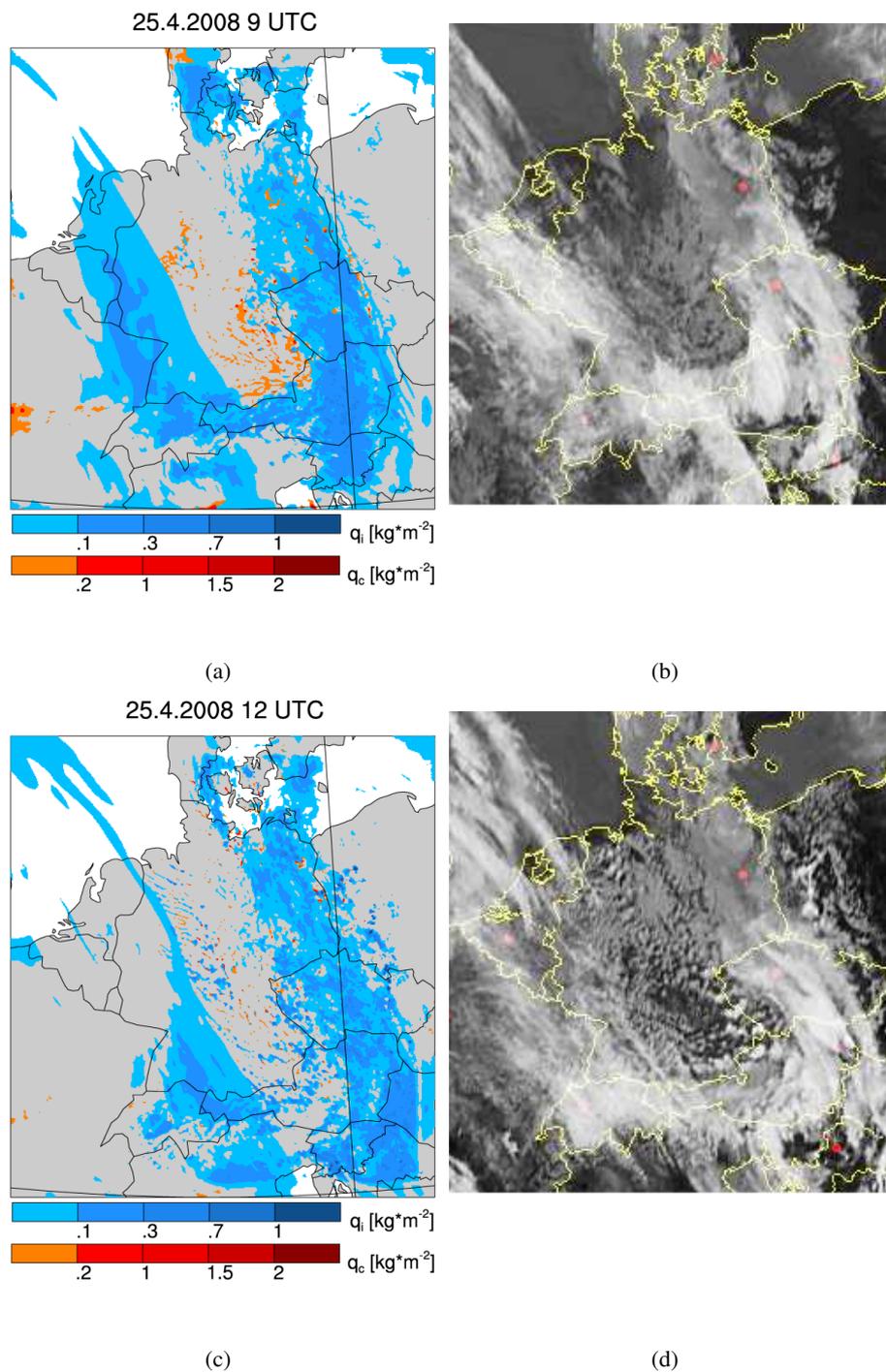


Abbildung 4.13: (a),(c): Vertikal integrierter Wolkenwassergehalt (rot) und Wolkeneisgehalt (blau) am 25.4.2008, 9 UTC und 12 UTC. (b),(d): Entsprechendes Satellitenbild (IR), *Quelle: Sat24.com, EUMETSAT.*

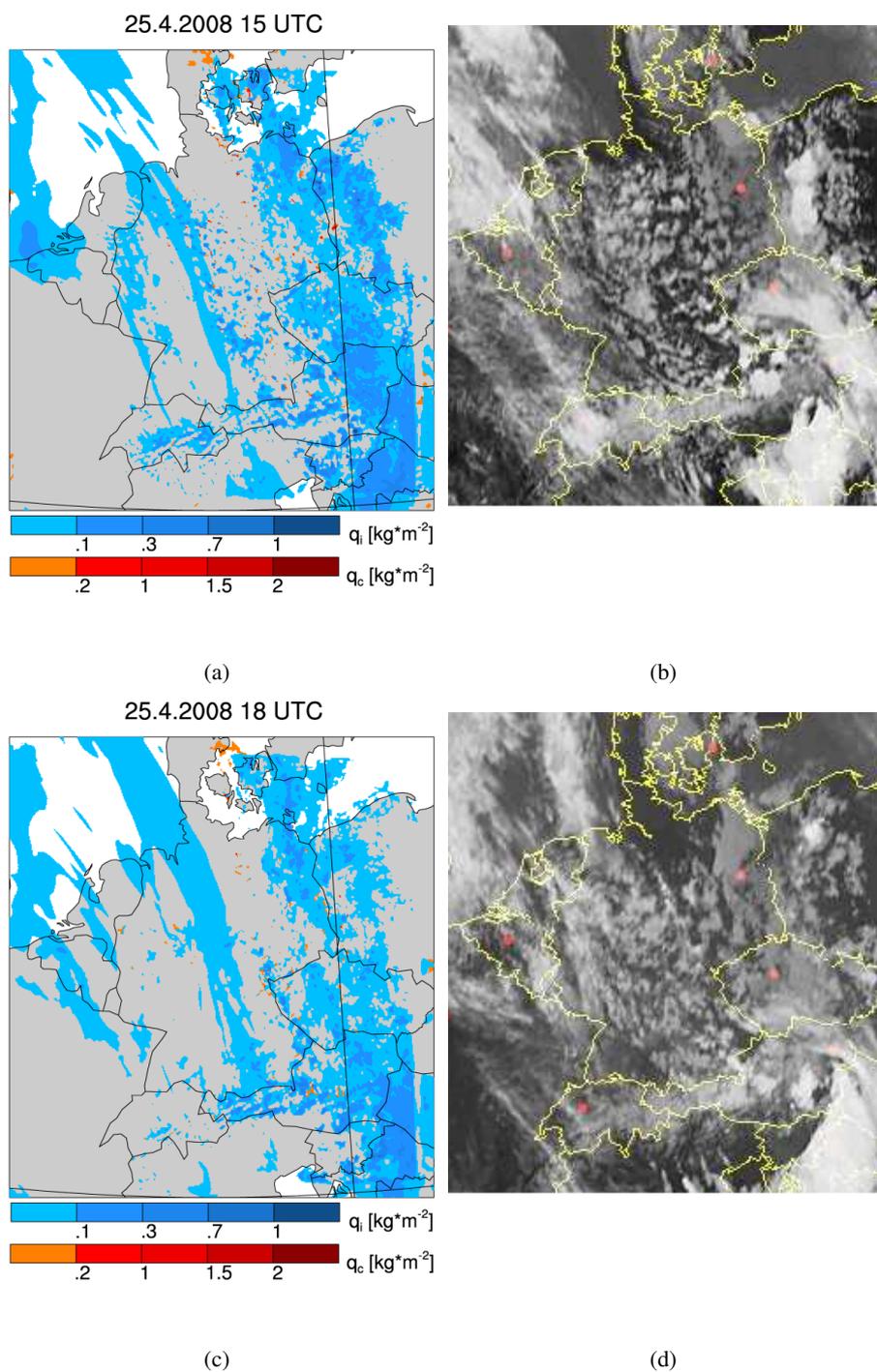


Abbildung 4.14: (a),(c): Vertikal integrierter Wolkenwassergehalt (rot) und Wolkeneisgehalt (blau) am 25.4.2008, 15 UTC und 18 UTC. (b),(d): Entsprechendes Satellitenbild (IR), *Quelle: Sat24.com, EUMETSAT.*

Der östliche Bereich des Modellgebiets wird gut wiedergegeben. Drei Stunden später haben sich auf dem Satellitenbild über Deutschland größere Zellen gebildet, die im Modelllauf teilweise wiedergegeben werden. Die großskaligen Strukturen stimmen gut miteinander überein.

Alles in allem gibt das Modellsystem die großskaligen Strukturen sehr gut wieder. Die Anzahl und Verteilung der kleinskaligen Strukturen, die als konvektive Bewölkung analysiert worden sind, werden durch das Modell bis 15 UTC gut beschrieben. Gegen 18 UTC nimmt deren Anzahl im Modellsystem ab, es bilden sich jedoch keine größeren Zellen, wie dies in den Beobachtungen geschieht.

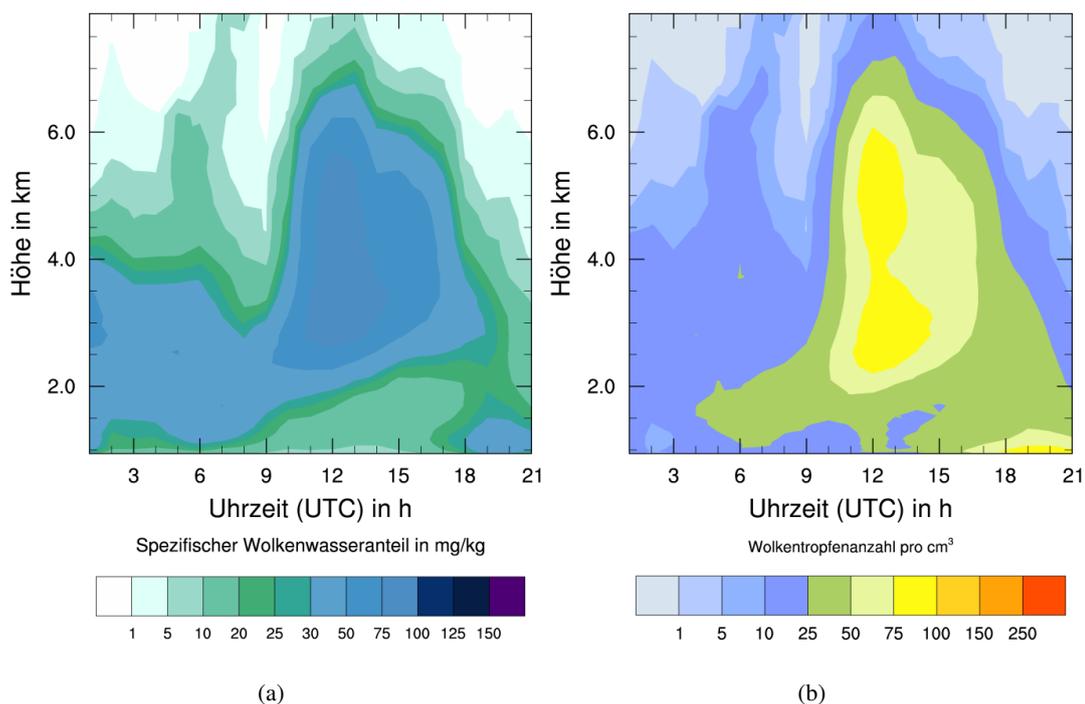


Abbildung 4.15: Räumlich gemittelter Vertikalschnitt im Zeitverlauf für *Region 2*. (a) Spezifischer Wolkenwasseranteil und (b) Wolkentropfenanzahl. In die Mittel fließen nur Gitterpunkte ein, an denen Bewölkung vorhanden ist.

In Abb. 4.15(a) ist ein horizontal gemittelter Vertikalschnitt des spezifischen Wolkenwasseranteils für *Region 2* (siehe Abb. 4.1) dargestellt. Bis 8 UTC liegt der spezifische Wolkenwasseranteil zwischen 2 und 4 km Höhe im horizontalen Mittel zwischen 30 und 50  $\text{mg kg}^{-1}$ . Nach 8 UTC steigt die mittlere Höhe und die vertikale Erstreckung dieses Bereichs an. So liegt er um 13 UTC zwischen 2,5 km und 6 km. Ein maximaler Wert des horizontalen Mittels von über 75  $\text{mg kg}^{-1}$  lässt sich zwischen 12 und 13 UTC in einer Höhe von 4 km finden. Dieser Anstieg der Höhe, in der sich der maximale spezifische Wolkenwasseranteil befindet, mit der Zeit, geschieht durch die postfrontale Konvektion. Diese Struktur ist bereits in Kap. 4.2.3 für die Szenarien mit vorgeschriebenem Aerosol (*INDE*) analysiert worden. Vergleicht man diese Szenarien (Abb. 4.9(a) und 4.9(c)) mit dem Ergebnis des *2MOM-ART* Laufs, so lässt sich erkennen, dass das kontinentale Szenario einen höheren Wolkenwasseranteil und das extrem maritime Szenario einen niedrigeren Wolkenwasseranteil als das Szenario mit prognostizierter Aerosolverteilung aufweist. Dies kann

damit erklärt werden, dass im extrem maritimen Szenario weniger CCN zur Verfügung stehen, die Wolkentropfen dadurch schneller und effizienter durch Kollision untereinander anwachsen und dadurch zu mehr Niederschlag führen. Im kontinentalen Szenario stehen dementsprechend mehr CCN zur Verfügung, was zu einer erhöhten Anzahl an Wolkentropfen und somit einer weniger effizienten Niederschlagsbildung führt. Um diese Aussage zu verifizieren, ist in Abb. 4.15(b) die Wolkentropfenanzahl als horizontal gemittelter Vertikalschnitt dargestellt. Eine äquivalente Darstellung der Wolkentropfenanzahl der *INDE* Szenarien findet sich in den Abb. 4.9(b) und 4.9(d). Hier lässt sich eine ähnliche Struktur wie im Wolkenwassergehalt erkennen. Die vom *2MOM-ART* Modelllauf prognostizierte Wolkentropfenanzahl ist höher als die des extrem maritimen und niedriger als die des kontinentalen Modelllaufs. Dies unterstützt die Aussage, dass bei *2MOM-ART* mehr CCN als im extrem maritimen, jedoch weniger als im kontinentalen Szenario vorhanden sind.

Die Anzahl der CCN wird in *2MOM-ART* durch die vom Modell prognostizierte Aerosolverteilung bestimmt. In Abb. 4.16(a) ist die horizontale Verteilung der Partikel der Aitken- und Akkumulationsmoden in 850 hPa um 9 UTC und 15 UTC gegeben. Im östlichen Bereich des Modellgebiets sind höhere Konzentrationen als im westlichen Teil zu sehen. In der für die konvektiven Ereignisse relevanten Region liegt die Anzahlkonzentration der Partikel aus Aitken- und Akkumulationsmoden von 700 bis über 1500 Partikeln pro  $\text{cm}^3$ . Diese Partikel besitzen kleinere Durchmesser. Zur Wolkentropfenbildung tragen zunächst die größeren Partikel bei, weshalb in Abb. 4.16(c) die horizontale Verteilung der Seesalzkonzentration in 850 hPa um 9 UTC und 15 UTC dargestellt ist. Es lässt sich erkennen, wie die Strömung aus nördlichen Richtungen das Seesalz von der Nordsee über Deutschland advehiert. Dabei ergeben sich Konzentrationen von 20 bis zu 50 Partikeln pro  $\text{cm}^3$  in *Region 2*. Es resultieren Gesamtkonzentrationen, die größer sind, als für das extrem maritime Szenario verwendet, und für einen großen Teil des Gebiets in etwa dem kontinentalen Szenario entsprechen. In den Abb. 4.16(b) und 4.16(d) ist ein Vertikalschnitt des horizontalen Mittels der Partikelanzahlkonzentrationen über der Zeit zu sehen. Die Konzentration der Partikel der Aitken- und Akkumulationsmoden ist am Boden am höchsten und nimmt in allen Höhen mit der Zeit ab. Die Konzentration des Seesalzes ist zu Beginn in einer Höhe von 2 km am höchsten und nimmt mit der Zeit zu. Gegen 9 UTC findet sich die maximale Konzentration am Boden und sie nimmt mit der Höhe ab. Dies bleibt bis zum Ende des Zeitraums so. Eine Besonderheit in dieser Simulation äußert sich in der Abnahme der Konzentration von anthropogenen Partikeln der Akkumulations- und Aitkenmoden und der gleichzeitigen Zunahme der Konzentration von Seesalzpartikeln. Daraus lässt sich schließen, dass die kontinentale Luftmasse, geprägt durch einen hohen Anteil anthropogener Aerosole, durch die maritime Luftmasse aus dem Norden verdrängt wird, die hohe Seesalzkonzentrationen in sich trägt.

Um Unterschiede des *2MOM-ART* Szenarios zu den *INDE* Szenarien im Niederschlag zu betrachten, wird in Abb. 4.17(a) der zeitliche Verlauf des gemittelten Niederschlags für *Region 1* dargestellt. Neben den genannten Modellläufen ist auch ein Referenzlauf *REF* dargestellt, der mit dem operationellen COSMO-Wolkenschema, in welchem nur das Massenmischungsverhältnis von Wolkenwasser prognostisch berechnet wird, gerechnet ist. Der Niederschlag des *2MOM-ART* Modelllaufs liegt nahezu über den gesamten Zeitraum innerhalb des von den verschiedenen vor-

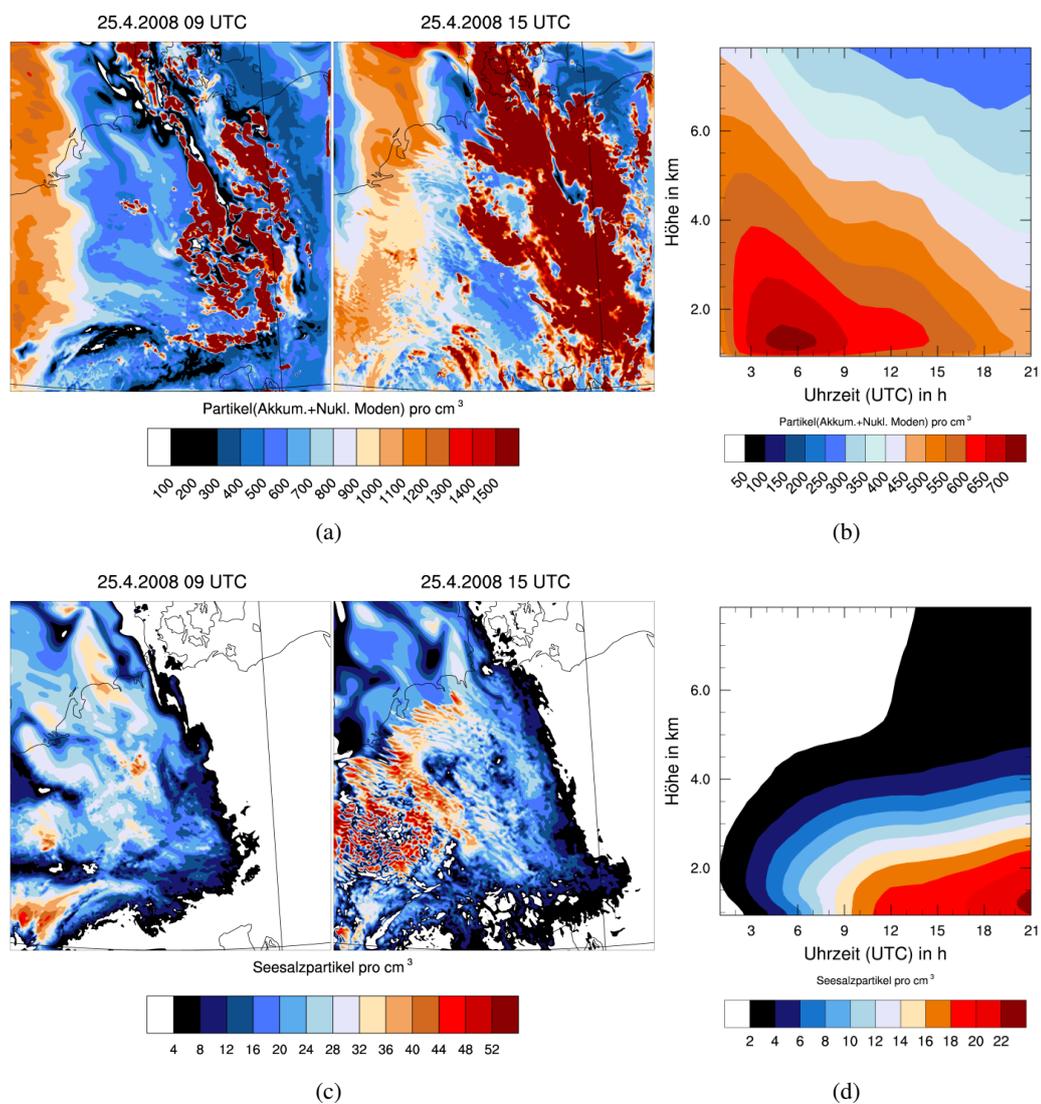
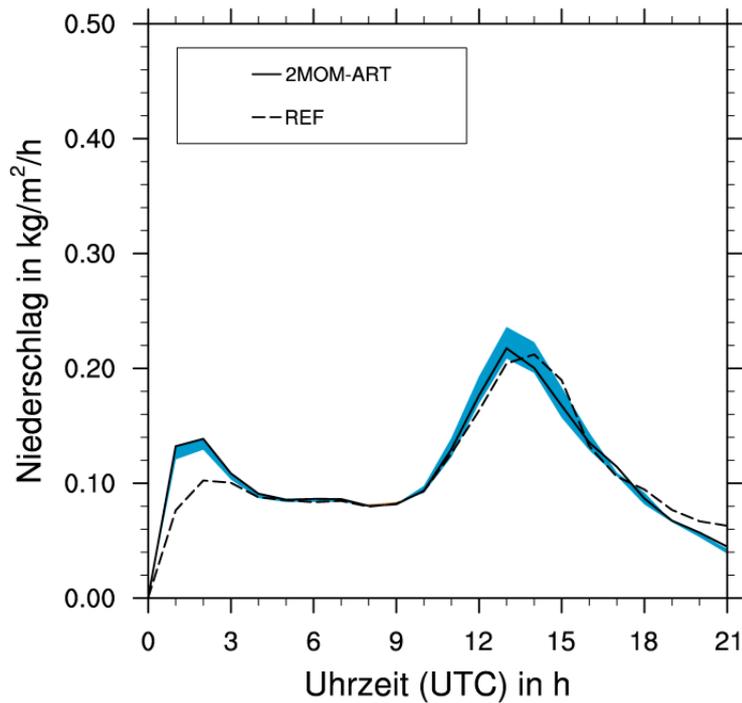
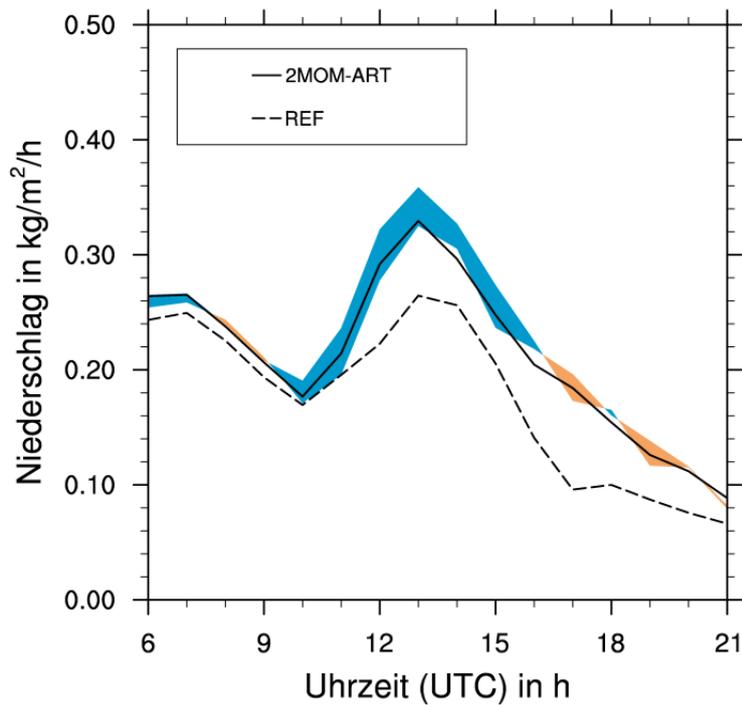


Abbildung 4.16: Horizontale Verteilung der Anzahlkonzentration für (a) Aitken- und Akkumulationsmoden und (c) Seesalzmoden in 850 hPa. Vertikalschnitt der räumlich gemittelten Anzahlkonzentration im Zeitverlauf für *Region 2* von (b) Aitken- und Akkumulationsmoden (d) Seesalzmoden. In die Mittel fließen nur Gitterpunkte ein, an denen Bewölkung vorhanden ist.

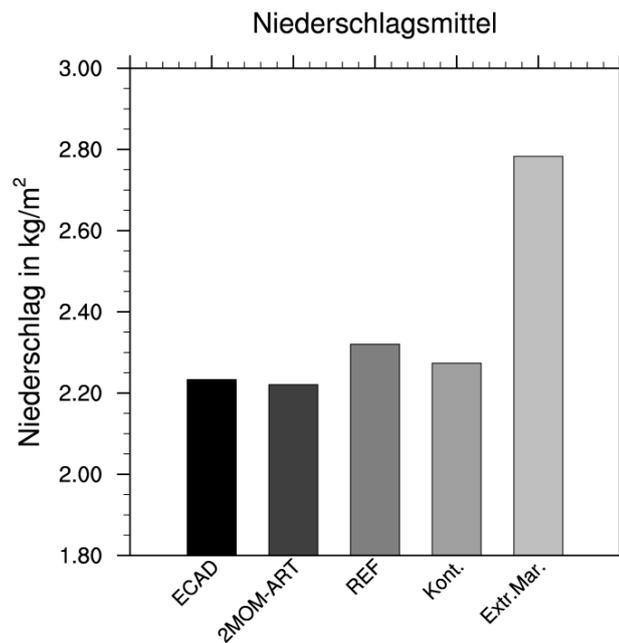


(a)



(b)

Abbildung 4.17: Gemittelter Niederschlag für (a) Region 1 und (b) Region 2. Die durchgezogene Linie stellt das Ergebnis des *2MOM-ART* Modelllaufs dar, die gestrichelte Linie das Ergebnis des *REF* Modelllaufs. Die schattierten Flächen geben den Bereich an, der durch die vorgeschriebenen Aerosolszenarien (*INDE*) aufgespannt wird. Bei einem blauen Farbton gibt das extrem maritime Szenario die obere und das kontinentale Szenario die untere Grenze an. Bei bräunlichem Farbton gibt das kontinentale Szenario die obere Grenze und das extrem maritime Szenario die untere Grenze wieder.



(a)

Abbildung 4.18: Mittlerer Niederschlag an den Messstationen in *Region 2* zwischen dem 25.4.2008, 6 UTC dem 26.4.2008, 6 UTC. Im Vergleich dazu der mittlere Niederschlag an den entsprechenden Gitterpunkten der Modellläufe für den 25.4.2008 zwischen 6 UTC und 21 UTC. (Zwischen 25.4.2008, 22 UTC, und 26.4., 6 UTC, lässt sich anhand von Radarbildern kein Niederschlag im gewählten Gebiet mehr beobachten)

geschriebenen Aerosolszenarien aufgespannten Bereichs. Der Niederschlag ist niedriger als im extrem maritimen Szenario und leicht höher als im kontinentalen Szenario. Dies ist konsistent mit den Ergebnissen, dass die Anzahl der CCN durch die prognostizierte Aerosolverteilung im Bereich zwischen dem extrem maritimen und dem kontinentalen Szenario liegt. Die Simulation *REF* prognostiziert in der Zeit zwischen 0 und 3 UTC weniger Niederschlag als die Läufe mit Zwei-Momenten-Wolkenmikrophysikschema. Zu dieser Zeit dominiert der frontale Niederschlag. Auch später lassen sich Abweichungen erkennen. Um die Abweichung des Niederschlags im Bereich und zu Zeitpunkten der postfrontalen Konvektion besser betrachten zu können, ist in Abb. 4.17(b) dieselbe Darstellung für *Region 2* abgebildet. Zwischen 6 und 9 UTC sind kaum Unterschiede zwischen den Modellläufen zu erkennen, lediglich *REF* prognostiziert systematisch weniger Niederschlag. Gegen 10 UTC setzt die postfrontale Konvektion ein, der Niederschlag steigt zunächst im extrem maritimen Szenario, dann im *2MOM-ART* Szenario und zuletzt im kontinentalen Szenario an. Diese systematische Verzögerung des Niederschlags um ca. eine halbe Stunde zeigt den Einfluss der Aerosolpartikel auf die Effizienz der Niederschlagsbildung. Der maximale Niederschlag fällt bei allen Szenarien gegen 13 UTC. Im maritimen Szenario fällt der meiste Niederschlag. Danach nimmt der Niederschlag wieder ab, teilweise liegen das kontinentale Szenario und das Szenario mit prognostischer Aerosolverteilung über dem extrem maritimen Szenario, was auch in Teilen auf die systematischen Verzögerung des Niederschlags zurückgeführt werden kann. *REF* prognostiziert über die Dauer des konvektiven Ereignisses weit weniger

Niederschlag als die anderen Szenarien. In Abb. 4.18(a) wird der mittlere Niederschlag von 58 Messstationen in *Region 2* aus dem ECA&D Datensatz (European Climate Assessment & Dataset) (Tank et al., 2002; Klok und Tank, 2009) mit dem Niederschlag der Modellläufe verglichen. Die Berechnung des mittleren Niederschlags aus den Modellläufen erfolgt konsistent an dem der jeweiligen Messstation nächsten Gitterpunkt. Sowohl der *2MOM-ART* Modelllauf, als auch *REF* und *Kont* liegen sehr nahe an den Beobachtungen mit Abweichungen kleiner als 10 %. Das extrem maritime Szenario prognostiziert dagegen im Mittel ca. 25 % mehr Niederschlag als die Messungen. Trotz der zuvor festgestellten, deutlichen Unterschiede im zeitlichen Verlauf des Gebietsmittels zwischen *REF* und *2MOM-ART*, lassen sich hier kaum Unterschiede erkennen. Das gute Ergebnis von *REF* lässt sich unter anderem darauf zurückführen, dass numerische Wettervorhersagemodelle optimiert werden, die Niederschlagsmenge treffend vorherzusagen. Die gute Vergleichbarkeit des *2MOM-ART* Modelllaufs mit Beobachtungsdaten zeigt, dass das Modellsystem in dieser Fallstudie die realen Gegebenheiten gut wiedergeben kann.

#### 4.2.5 Quantifizierung des Nucleation Aerosol Scavenging und dessen Einfluss auf Wolkeneigenschaften.

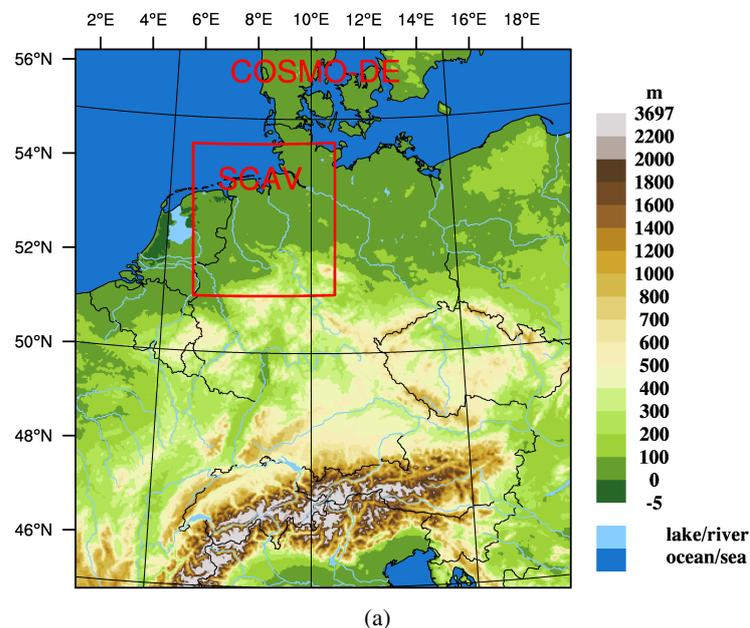


Abbildung 4.19: COSMO-DE Modellgebiet und das Simulationsgebiet für den *SCAV*- und den *NOSCAV*-Modelllauf.

In den bisherigen Studien mit COSMO-ART wurde der Übergang der Aerosolpartikel in den Wolkentropfen bei ihrer Aktivierung nicht explizit berücksichtigt. Da dieses Nucleation Aerosol Scavenging (NAS) eine Senke des atmosphärischen Aerosols darstellt, wurde COSMO-ART um diesen Prozess in dieser Diplomarbeit erweitert (Kap. 3.3.1). Damit bietet sich die Möglichkeit, den Einfluss des NAS auf den Niederschlag und die Aerosolkonzentrationen zu quantifizieren. Zu diesem Zweck sind zwei Modellläufe gestartet worden. Ein Modelllauf mit aktiviertem NAS, genannt *SCAV*, und einer mit deaktiviertem NAS, *NOSCAV*.

Das Modellsetup entspricht dem des *2MOM-ART* Modelllaufs, jedoch ist aus Gründen der Rechendauer ein Ausschnitt des ursprünglichen Gebiets gewählt worden. Dieses ist in Abb. 4.19(a) dargestellt. Es umfasst den Nordwesten Deutschlands, den östlichen Teil der Niederlande und den südöstlichen Teil der Nordsee.

Anhand der simulierten Radarreflektivität wird untersucht, ob frontale und konvektive Bewölkung auch im kleineren *SCAV*-Modellgebiet hinreichend wiedergegeben werden (Abb. 4.20(a) bis 4.20(c)). Um 3 UTC werden Radarreflektivitäten über Nordwestdeutschland von bis zu 45 dBZ simuliert. Die Ausläufer des frontalen Niederschlags werden, so zeigt der Vergleich mit den gemessenen Daten aus Abb. 4.3(a), gut wiedergegeben. Dies gilt sowohl für die Radarreflektivität nördlich der Elbe, als auch für die Strukturen im südöstlichen Teil des *SCAV*-Modellgebiets. Um 12 UTC sind deutlich kleinskaligere Strukturen zu erkennen. Hierbei handelt es sich um die post-frontale, konvektive Bewölkung. Die Maxima der Radarreflektivität liegen mit bis zu 45 dBZ im gleichen Bereich, wie diese auch in den Messungen, Abb. 4.4(a), zu erkennen sind. Vergleicht man

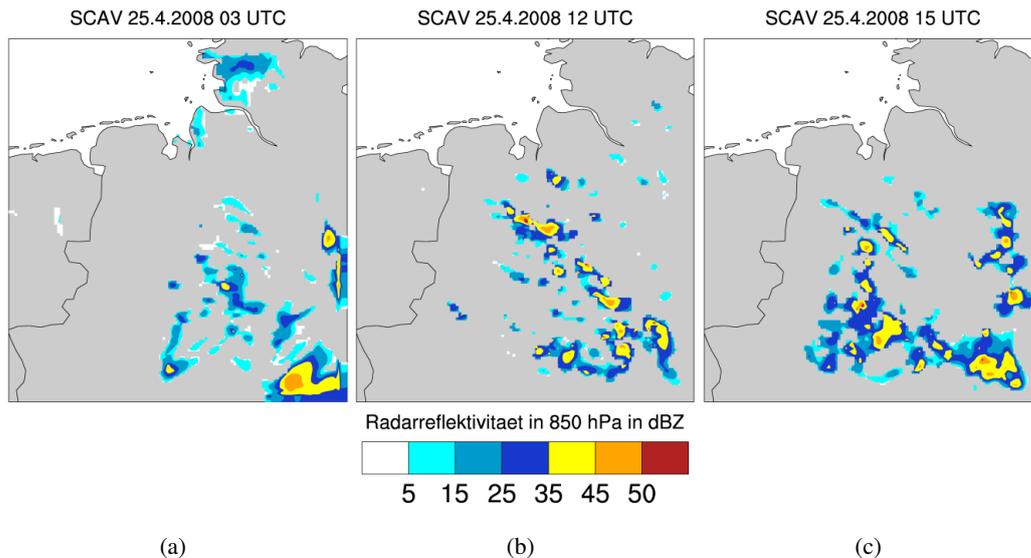


Abbildung 4.20: Simulierte Radarreflektivität in 850 hPa im SCAV Modelllauf am 25.4.2008 um (a) 3 UTC, (b) 12 UTC und (c) 15 UTC.

die simulierte Radarreflektivität um 15 UTC mit der gemessenen 4.4(c), so stimmen nicht nur die Intensität und Ausdehnung der konvektiven Strukturen, sondern auch ihre räumliche Verteilung gut überein. Die konvektiven Strukturen werden somit auch bei den Simulationen im kleineren Modellgebiet erfasst und daher kann der Einfluss von Aerosol auf die konvektive Bewölkung untersucht werden. Zunächst wird auf die Aerosolverteilung eingegangen.

In Abb. 4.21(a) ist die von COSMO-ART prognostizierte Anzahlkonzentration von Seesalz in 850 hPa um 12 UTC zu sehen. In der linken Grafik ist das NAS nicht aktiviert. Der Transport des Seesalz von der Nordsee über Deutschland wird anhand der horizontalen Verteilung deutlich sichtbar. Zum Vergleich ist in der rechten Grafik die simulierte Verteilung bei aktiviertem NAS zu sehen. Vor allem im südöstlichen Bereich lassen sich deutliche Unterschiede in der Horizontalverteilung erkennen. Ein Vergleich mit simulierten Radarreflektivitäten zeigt, dass in Bereichen, in denen eine erhöhte Radarreflektivität simuliert wird, bei aktiviertem NAS deutlich geringere Anzahlkonzentrationen des Seesalzes vorzufinden sind. Dies zeigt, dass die Partikel, die zur Wolkenbildung und letztendlich zum Niederschlag geführt haben, im Bereich der Wolke und des Niederschlags im Modell nicht mehr als Aerosolpartikel, sondern als aktivierte Partikel innerhalb der Wolkentropfen vorliegen. Abbildung 4.21(b) zeigt die Anzahlkonzentration der Seesalzpartikel um 15 UTC. Auch hier lässt sich bei aktiviertem NAS im Südosten des Modellgebiets eine deutlich geringere Anzahlkonzentration des Seesalzes erkennen. Dies deckt sich mit den vergleichsweise hohen Werten der Radarreflektivität in Abb. 4.20(c). Die Anzahlkonzentration der Partikel liegt in diesem Bereich ohne NAS zwischen 24 und 32 Partikeln pro  $cm^3$ , bei aktiviertem NAS zwischen 0 und 12 Partikel pro  $cm^3$ . Im zentralen Bereich des Modellgebiets lässt sich ebenfalls ein Unterschied in der Aerosolkonzentration bei aktiviertem NAS beobachten. Jedoch ist der Unterschied hier geringer, mit Werten von 28 bis 40 Partikeln pro  $cm^3$  im Gegensatz zu 16 bis 28 Partikeln pro  $cm^3$  bei aktiviertem NAS.

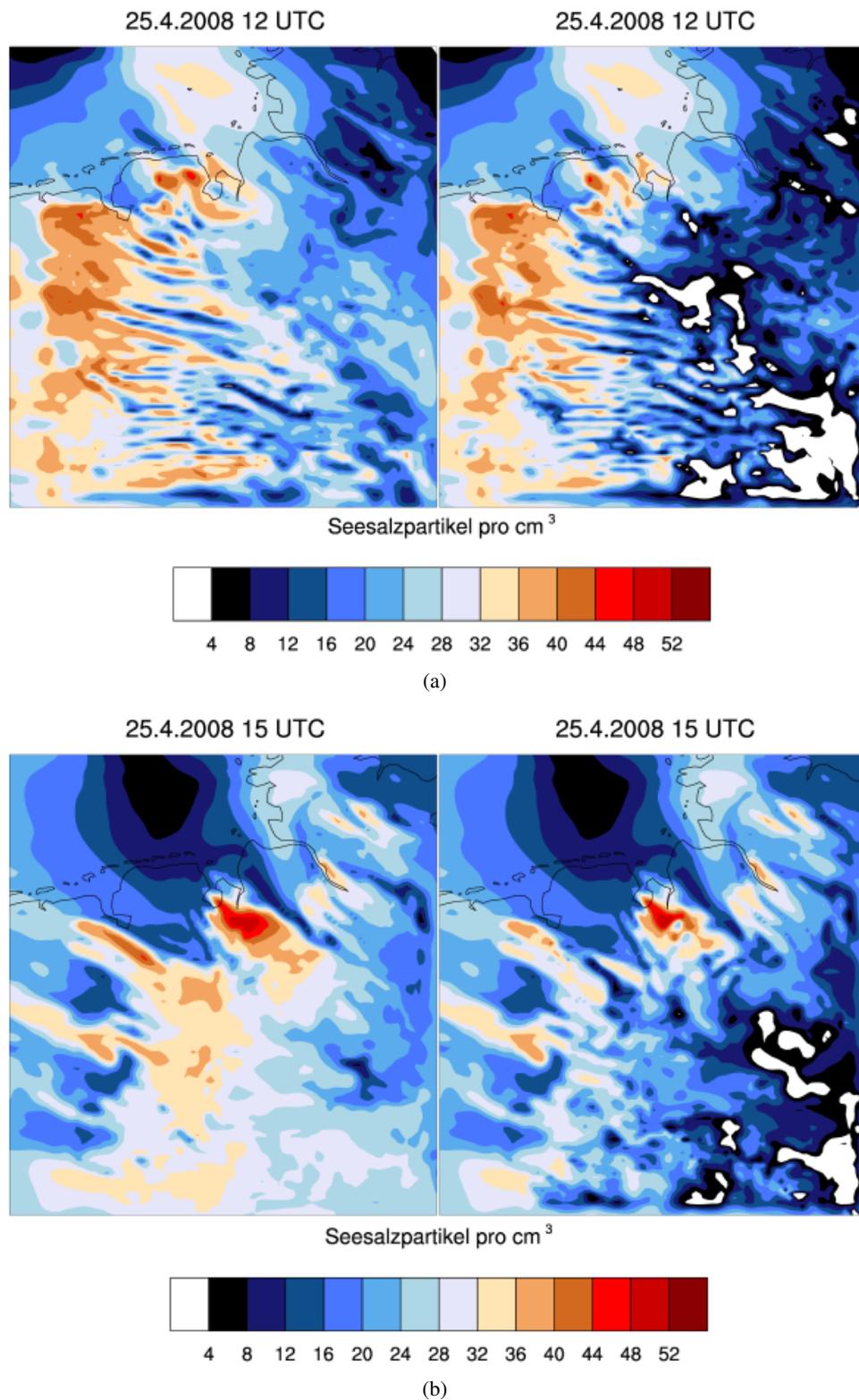


Abbildung 4.21: Prognostizierte Horizontalverteilung der Anzahlkonzentration des Seesalzes in  $850 \text{ hPa}$  im NOSCAV (links) und SCAV Modelllauf (rechts) um (a) 12 UTC und (b) 15 UTC.

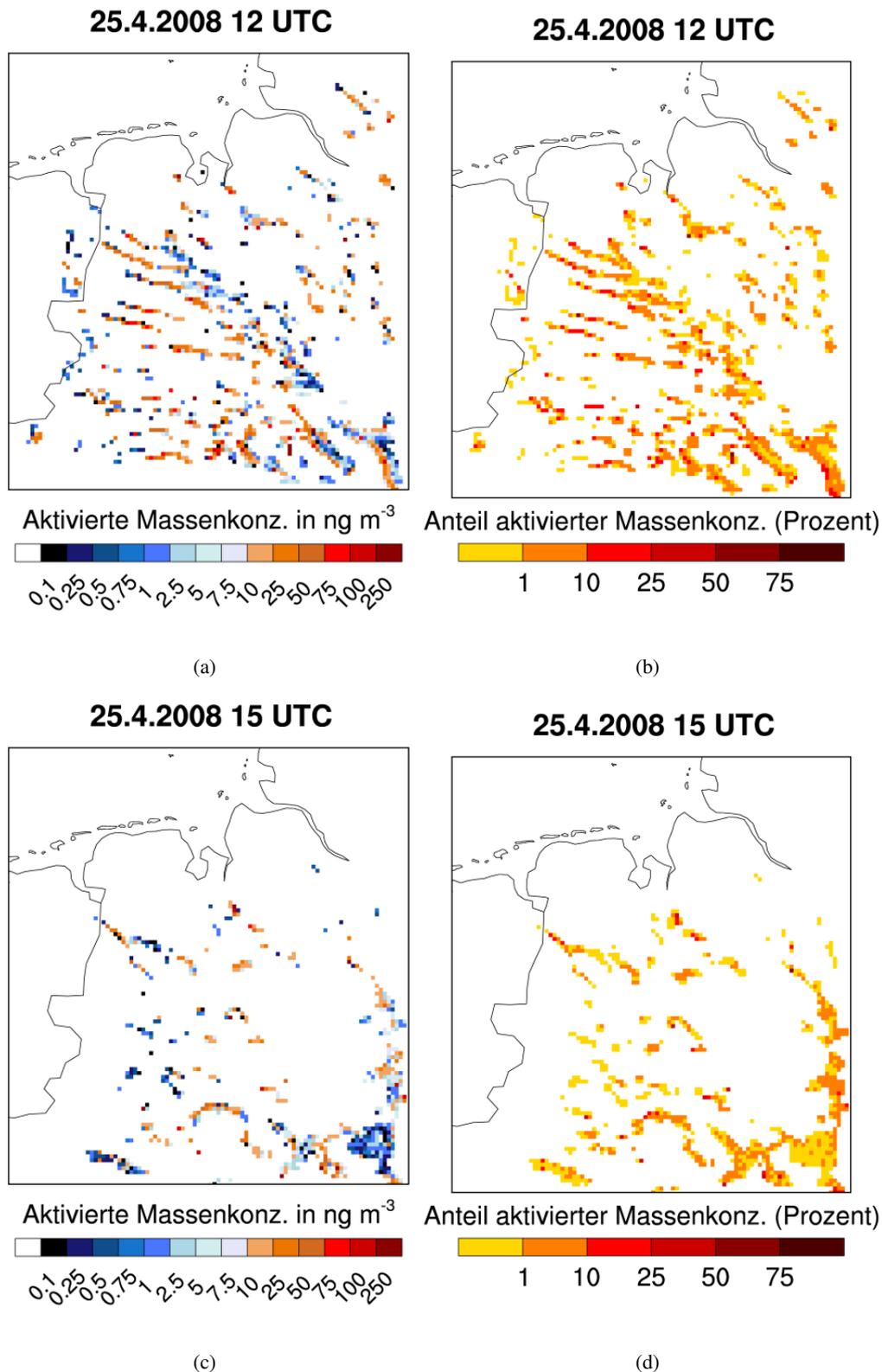
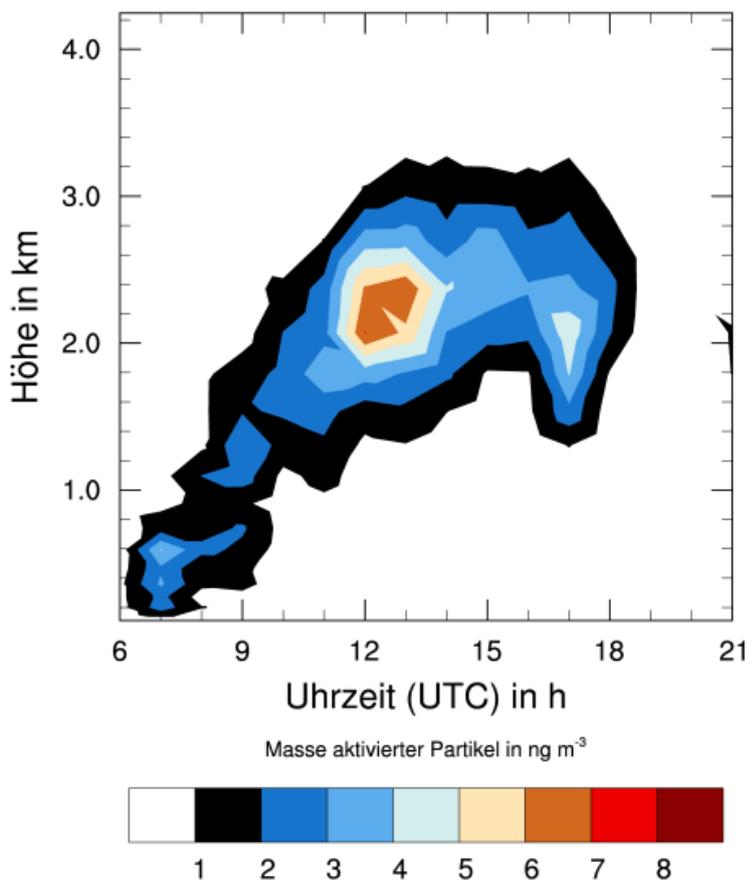


Abbildung 4.22: Vertikal gemittelte Massenkonzentration der aktivierten Partikel in Wolken bis in 3,3 km Höhe um (a) 12 UTC und (c) 15 UTC. Vertikal gemittelter prozentualer Massenanteil der aktivierten Partikel in Wolken bis in 3,3 km Höhe an der Gesamtmassenkonzentration an Partikeln (inkl. aktivierter Partikel) in Wolken um (b) 12 UTC und (d) 15 UTC. In die Mittel fließen nur Gitterpunkte ein, an denen Bewölkung vorhanden ist.

Es stellt sich heraus, dass der Anteil aktivierter Partikel an der Gesamtanzahl von Partikeln sehr unterschiedlich sein kann. Um dem Rechnung zu tragen, ist in Abb. 4.22(a) die vertikal gemittelte Massenkonzentration aktivierter Partikel in Wolken bis in 3,3 km Höhe zu sehen. Dabei ist zu beachten, dass es sich nicht nur um frisch aktivierte Partikel handelt, sondern auch Partikel vorliegen, die bereits in Wolken weitertransportiert worden sind. In den meisten Bereichen finden sich mittlere Massenkonzentrationen zwischen  $1 \text{ ng m}^{-3}$  und  $100 \text{ ng m}^{-3}$ . Da dies keine anschauliche Größe ist, ist in Abb. 4.22(b) der prozentuale Anteil dieser Partikel an der Gesamtmassenkonzentration dargestellt. Es zeigt sich, dass in Wolken zwischen 1 % und 50 % der vorliegenden Aerosolmasse an der Bildung von Wolkentropfen beteiligt ist. In einigen Modellgitterpunkten werden sogar Werte von 100 % erreicht. Die länglichen Strukturen, die sich von Nordwest nach Südwest beobachten lassen, verdeutlichen die Zugbahn von Wolken, in denen einerseits frisches Aerosol aktiviert wird und andererseits vorhandenes aktiviertes Aerosol mittransportiert wird. Die Abb. 4.22(c) und 4.22(d) zeigen dieselbe Darstellung um 15 UTC. Auch hier lassen sich ähnlich hohe Werte finden, allerdings hat sich die Wolkenbildung deintensiviert. Dementsprechend liegt weniger aktiviertes Aerosol in Wolken vor. Somit lassen sich auch Transportprozesse in diesen Abbildungen kaum beobachten. Der Anteil aktivierter Aerosolmassenkonzentration beträgt hier zwischen 1 % und 25 %. Wie man sieht, trägt ein großer Teil des vorhandenen Aerosols zur Wolkenbildung bei.

Da bisher nur vertikal gemittelte Ergebnisse diskutiert worden sind, ist in Abb. 4.23(a) ein horizontal gemittelter Vertikalschnitt im Zeitverlauf abgebildet. Die um 9 UTC einsetzende Konvektion lässt sich in der Anzahl aktivierter Partikel wiederfinden. Der Bereich maximaler Konzentrationen gewinnt mit der Zeit an Höhe. Liegt dieser Bereich um 9 UTC noch bei ca. 1,2 km, so ist er gegen 13 UTC in einer Höhe von ca. 2,4 km zu finden. Ab diesem Zeitpunkt nimmt auch die Gesamtmassenkonzentration wieder ab. Da gegenwärtig der einzig mögliche Verlustterm für aktivierte Masse der Transportterm darstellt, kann davon ausgegangen werden, dass sich die Strukturen mit der höchsten Massendichte aktivierter Partikel zu diesem Zeitpunkt aus dem Modellgebiet bewegen. Die Höhe des Bereichs maximaler aktivierter Massenkonzentration bleibt ab 13 UTC zunächst konstant und fällt schließlich gegen 18 UTC auf einen Wert von 2,2 km. Nach 18 UTC sind kaum noch aktivierte Partikel vorhanden. Die Konvektion setzt im SCAV-Bereich des COSMO-DE Modellgebiets bereits gegen 13 UTC aus.

In Kap. 4.2.4 ist bereits das Verhältnis von Seesalz- zu anthropogenem Aerosol untersucht worden. An dieser Stelle wird nun untersucht, welches Aerosol wieviel zur Entstehung von Wolkentropfen beiträgt. Dazu ist in Abb. 4.24(a) der zeitliche Verlauf der mittleren aktivierten Massenkonzentration von Seesalz und anthropogenem Aerosol dargestellt. Zwischen 3 UTC und 6 UTC liegt das anthropogene Aerosol bei Werten von ca.  $0,1 \text{ ng m}^{-3}$ , das Seesalz zwischen  $0,1 \text{ ng m}^{-3}$  und  $0,3 \text{ ng m}^{-3}$ . Die aktivierte Massenkonzentration beider Aerosolspezies liegen in derselben Größenordnung. Dieses Ergebnis ist sicherlich nicht repräsentativ für das gesamte COSMO-DE Modellgebiet, da sich die *SCAV-Region* in Küstennähe befindet und somit vergleichsweise hohe Seesalzkonzentrationen vorliegen. Ab 7 UTC bis 18 UTC setzt die postfrontale Konvektion ein, die aktivierte Massenkonzentration von Seesalz erreicht Werte von bis zu  $0,5 \text{ ng m}^{-3}$ , während die aktivierte Massenkonzentration des anthropogenen Aerosols auf Werte von ca.  $0,02 \text{ ng m}^{-3}$



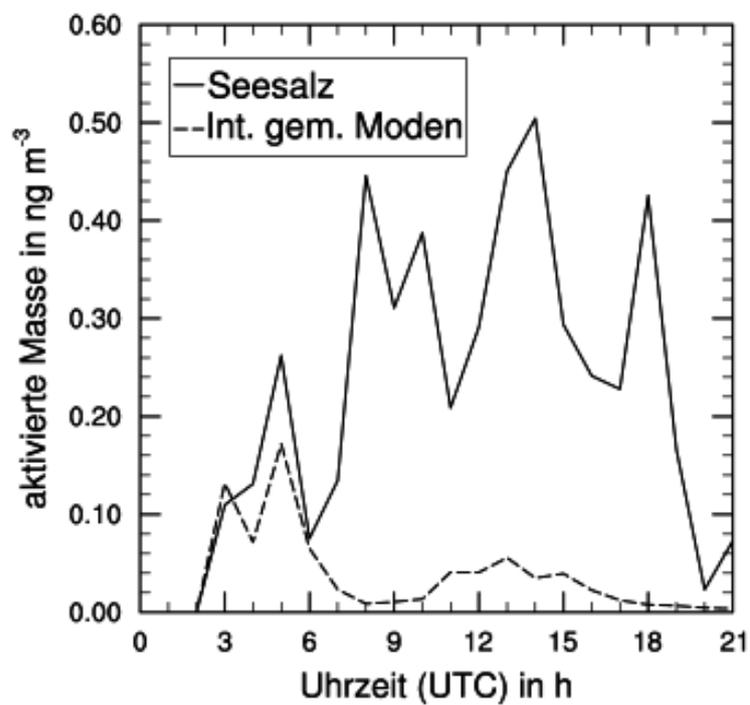
(a)

Abbildung 4.23: Horizontal gemittelter Vertikalschnitt im Zeitverlauf der Massenkonzentration aktivierter Partikel. In das Mittel fließen nur Gitterpunkte ein, an denen Bewölkung vorhanden ist.

sinkt. Dies liegt an der nördlichen Anströmung, wodurch Seesalz advehiert und anthropogenes Aerosol aus dem Modellgebiet transportiert wird. Somit hat das Seesalz bei der hier vorliegenden Bewölkung einen sehr großen Einfluss auf die Wolkenbildung.

Durch das NAS liegen insgesamt weniger potenzielle CCN vor, was aufgrund einer niedrigeren Anzahl an Wolkentropfen potentiell zu einem erhöhten Niederschlag führen kann. Aus diesem Grund ist in Abb. 4.25(a) der horizontal gemittelte Niederschlagsverlauf zu sehen. Zwischen 9 UTC und 15 UTC liegt der Niederschlag des *SCAV*-Modelllaufs bis zu 10 % über dem Niederschlag von *NOSCAV*. Nach 15 UTC sind die Unterschiede zwischen den beiden Modellläufen nur sehr gering, teilweise ist auch der Niederschlag von *NOSCAV* höher als der von *SCAV*. Dies kann aber auch daran liegen, dass durch das NAS weniger Aerosol vorhanden ist und dadurch der Niederschlag nicht nur intensiver, sondern auch zeitlich früher fällt. Über das gesamte Niederschlagsereignis zeigt sich, dass durch NAS die Niederschlagsmenge erhöht wird.

Mittels der *SCAV* Modellstudie konnte zunächst gezeigt werden, dass das NAS erfolgt und die aktivierten Partikel konsistent transportiert werden. Ferner ist ein deutlicher Einfluss auf die Horizontalverteilung des Seesalzaerosols, auf Wolkenbildung und Niederschlag festgestellt worden.



(a)

Abbildung 4.24: Horizontal gemittelte Massenkonzentration aktivierter Partikel im Zeitverlauf. Die Massenkonzentration der intern gemischten Moden beinhaltet die Komponenten der Moden  $if$ ,  $ic$ ,  $jf$  und  $jc$  und  $s$  nach Tab. 3.2.

Im Bereich von Wolken lässt sich eine deutliche Abnahme des Seesalzaerosols erkennen, dies führt in der Folge zu einer niedrigeren Partikelanzahl und zu einer Zunahme im Niederschlag.

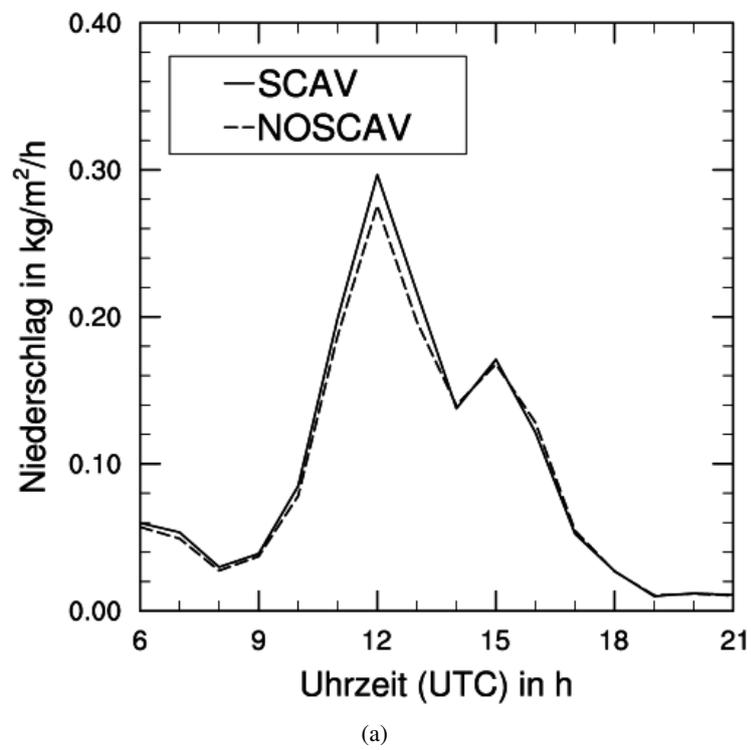


Abbildung 4.25: Räumlich gemittelter Niederschlag im Zeitverlauf.

## 5. Zusammenfassung

Die Vorhersage von Niederschlag mithilfe numerischer Simulationsmodelle stellt noch immer eine große Herausforderung dar. Die Beschreibung der physikalischen Vorgänge in Modellsystemen ist je nach Auflösung des Modellgitters nur mittels geeigneter Parametrisierungen möglich. Das Modellsystem COSMO-ART enthält eine numerische Beschreibung der an den Wechselwirkungen zwischen Aerosol, Wolken und Niederschlag beteiligten Prozesse. Da der Einfluss des Aerosols auf den Niederschlag wiederum die Aerosolverteilung beeinflusst, lässt sich nur in wenigen Fällen die einfache Annahme, mehr Aerosol führe zu weniger Niederschlag, nachweisen. Vielmehr muss hierbei von nichtlinearen Effekten ausgegangen werden. Um diese zu untersuchen, werden Modellstudien an bestimmten Wolkentypen durchgeführt.

Für diese Diplomarbeit wurde eine Modellstudie für den 25.4.2008 präsentiert. Ausgangspunkt war die Vermutung, dass bei diesem Ereignis die Seesalzadvektion von der Nordsee über Deutschland eine große Rolle bei der Bildung postfrontaler Konvektion spielt. Dies konnte quantifiziert werden. Zunächst wurden Sensitivitätsstudien durchgeführt, um herauszufinden, wie sich die konvektive Bewölkung durch das Modell so beschreiben lässt, wie sie auf den Radardaten zu sehen ist. Dabei wurde eine hohe Sensitivität des Systems gegenüber den Rand- und Initialwerten festgestellt. Danach wurde anhand vorgeschriebener Aerosolszenarien der Einfluss der Aerosolverteilung auf die Wolken- und Niederschlagsbildung untersucht. Es wurde eine systematische Verzögerung des Niederschlags in der Simulation, in welcher eine kontinentale Aerosolverteilung angenommen wurde, im Vergleich zu einer Simulation mit maritimer, also niedrigerer Aerosolkonzentration konstatiert. Die Niederschlagsmenge ist ebenfalls niedriger im Vergleich zu einer kontinentalen Aerosolhintergrundkonzentration. Diesen Untersuchungen folgte eine Simulation, in der die Aerosolverteilung prognostisch beschrieben wurde und als CCN zur Wolkenbildung beiträgt. Die Ergebnisse dieser Simulation wurden mit Radar- und Satellitenbildern und Niederschlagsmessungen verglichen. Es wurde eine sehr gute Übereinstimmung festgestellt. Der mittlere Niederschlag aus der untersuchten postfrontalen, konvektiven Bewölkung, lag in einem Bereich zwischen extrem maritimen und kontinentalen Szenario, zu Beginn sehr ähnlich dem kontinentalen Szenario. Mit fortschreitender Advektion maritimer Luftmassen aus Norden ließ sich eine Annäherung an die maritimen Szenarien beobachten.

Bisher wurde in COSMO-ART der Übergang der Aerosolpartikel in die Wolkentropfen bei deren Aktivierung nicht berücksichtigt. Da dies eine wichtige Senke des atmosphärischen Aerosols darstellt wurde in dieser Arbeit das Modellsystem um diesen Vorgang, das sogenannte Nucleation Aerosol Scavenging (NAS), erweitert. Das aktivierte Aerosol wird im weiterentwickelten Modell-

system konsistent mit dem Wolkenwasseranteil transportiert. Mikrophysikalische Verlustterme im aktivierten Aerosol, z.B. durch Niederschlag oder Verdampfen der Wolken, werden nicht berücksichtigt. Die Untersuchungen des NAS führten zu der Erkenntnis, dass im Bereich von Wolken deutliche Veränderungen der Aerosolverteilung festgestellt werden konnten. Auch der mittlere Niederschlag stieg aufgrund der geringeren Anzahl verfügbarer Wolkenkondensationskeime zeitweise um bis zu 10 % an. Aufgrund des maritimen Charakters der Luftmassen in dem gewählten Modellgebiet dominierte das Seesalz die Wolkenbildung und somit die in den Wolkentropfen vorhandene Aerosolmasse.

Neben dem Einfluss von Aerosol auf postfrontale, konvektive Bewölkung, kann das in dieser Arbeit erweiterte Modellsystem dazu verwendet werden, den Einfluss von Aerosol auf Wolken- und Niederschlagsbildung unter Berücksichtigung des NAS bei verschiedenen Wolkentypen zu bestimmen. Dies leistet einen Beitrag dazu, den viel diskutierten potentiellen Einfluss des Aerosols auf unser Wetter und Klima zu quantifizieren.

# Literaturverzeichnis

- Abdul-Razzak, H. und S. Ghan, 2000: A parameterization of aerosol activation 2. Multiple aerosol types. *J. Geophys. Res.-Atmos.*, **105 (D5)**, 6837–6844.
- Abdul-Razzak, H. und S. Ghan, 2002: A parameterization of aerosol activation - 3. Sectional representation. *J. Geophys. Res.-Atmos.*, **107 (D3)**.
- Abdul-Razzak, H., S. Ghan, und C. Rivera-Carpio, 1998: A parameterization of aerosol activation - 1. Single aerosol type. *J. Geophys. Res.-Atmos.*, **103 (D6)**, 6123–6131.
- Ackerman, A., O. Toon, D. Stevens, A. Heymsfield, V. Ramanathan, und E. Welton, 2000: Reduction of tropical cloudiness by soot. *Science*, **288 (5468)**, 1042–1047.
- Albrecht, B., 1989: Aerosols, cloud microphysics, and fractional cloudiness. *Science*, **245 (4923)**, 1227–1230.
- Baldauf, M., A. Seifert, J. Foerstner, D. Majewski, M. Raschendorfer, und T. Reinhardt, 2011: Operational Convective-Scale Numerical Weather Prediction with the COSMO Model: Description and Sensitivities. *Mon. Weather Rev.*, **139 (12)**, 3887–3905.
- Bangert, M., C. Kottmeier, B. Vogel, und H. Vogel, 2011: Regional scale effects of the aerosol cloud interaction simulated with an online coupled comprehensive chemistry model. *Atmos. Chem. Phys.*, **11 (9)**, 4411–4423.
- Bangert, M., et al., 2012: Saharan dust event impacts on cloud formation and radiation over western europe. *Atmos. Chem. Phys.*, **12 (9)**, 4045–4063.
- Barahona, D. und A. Nenes, 2009a: Parameterizing the competition between homogeneous and heterogeneous freezing in cirrus cloud formation - monodisperse ice nuclei. *Atmos. Chem. Phys.*, **9 (2)**, 369–381.
- Barahona, D. und A. Nenes, 2009b: Parameterizing the competition between homogeneous and heterogeneous freezing in ice cloud formation - polydisperse ice nuclei. *Atmos. Chem. Phys.*, **9 (16)**, 5933–5948.
- Barahona, D., R. E. L. West, P. Stier, S. Romakkaniemi, H. Kokkola, und A. Nenes, 2010: Comprehensively accounting for the effect of giant CCN in cloud activation parameterizations. *Atmos. Chem. Phys.*, **10 (5)**, 2467–2473.

- Browse, J., K. S. Carslaw, S. R. Arnold, K. Pringle, und O. Boucher, 2012: The scavenging processes controlling the seasonal cycle in arctic sulphate and black carbon aerosol. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, **12**, 3409–3465.
- Butt, H.-J., K. Graf, und M. Kappl, 2003: *Physics and chemistry of interfaces*. Wiley-VCH, Weinheim.
- Croft, B., et al., 2010: Influences of in-cloud aerosol scavenging parameterizations on aerosol concentrations and wet deposition in echam5-ham. *Atmos. Chem. Phys.*, **10**, 1511–1543.
- Cuo, L., T. C. Pagano, und Q. J. Wang, 2011: A Review of Quantitative Precipitation Forecasts and Their Use in Short- to Medium-Range Streamflow Forecasting. *J. Hydrometeorol.*, **12** (5), 713–728.
- Doms, G., U. Schättler, und M. Baldauf, 2011a: *A Description of the Nonhydrostatic Regional Model LM - Part 1: Dynamics and Numerics*.
- Doms, G., et al., 2011b: *A Description of the Nonhydrostatic Regional Model LM - Part 2: Physical Parameterization*.
- Fountoukis, C. und A. Nenes, 2005: Continued development of a cloud droplet formation parameterization for global climate models. *J. Geophys. Res.-Atmos.*, **110** (D11).
- IPCC, A., 2001: *Third Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change - Climate Change 2001: Working Group I: The Scientific Basis*. GRID-Arendal.
- IPCC, A., 2007: *Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.
- Khain, A. P., 2009: Notes on state-of-the-art investigations of aerosol effects on precipitation: a critical review. *Environ. Res. Lett.*, **4** (1).
- Klemp, J. B. und R. B. Wilhelmson, 1978: The simulation of three-dimensional convective storm dynamics. *J. Atmos. Sci.*, **35**, 1070–1096.
- Klok, E. J. und A. M. G. K. Tank, 2009: Updated and extended European dataset of daily climate observations. *Int. J. of Climatol.*, **29** (8), 1182–1191.
- Lohmann, U., 2002: A glaciation indirect aerosol effect caused by soot aerosols. *Geophys. Res. Lett.*, **29** (4).
- Lohmann, U. und J. Feichter, 2001: Can the direct and semi-direct aerosol effect compete with the indirect effect on a global scale? *Geophys. Res. Lett.*, **28** (1), 159–161.
- Lohmann, U. und J. Feichter, 2005: Global indirect aerosol effects: a review. *Atmos. Chem. Phys.*, **5**, 715–737.

- Lundgren, K., 2006: Numerical simulation of the spatial and temporal distribution of sea salt particles on the regional scale. Masterarbeit, Department of Meteorology Stockholm University.
- Lundgren, K., 2010: Direct Radiative Effects of Sea Salt on the Regional Scale. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe.
- Pruppacher, H. R. und J. D. Klett, 1978: *Microphysics of clouds and precipitation*. Reidel, Dordrecht [u.a.].
- Radke, L., J. Coakley, und M. King, 1989: Direct and remote-sensing observations of the effects of ships on clouds. *Science*, **246 (4934)**, 1146–1149.
- Rinke, R., 2008: Parametrisierung des Auswaschens von Aerosolpartikeln durch Niederschlag. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe.
- Roelofs, G., P. Stier, J. Feichter, E. Vignati, und J. Wilson, 2006: Aerosol activation and cloud processing in the global aerosol-climate model ECHAM5-HAM. *Atmos. Chem. Phys.*, **6**, 2389–2399.
- Roelofs, G. J., H. ten Brink, A. Kiendler-Scharr, G. de Leeuw, A. Mensah, A. Minikin, und R. Otjes, 2010: Evaluation of simulated aerosol properties with the aerosol-climate model ECHAM5-HAM using observations from the IMPACT field campaign. *Atmos. Chem. Phys.*, **10 (16)**, 7709–7722.
- Rosenfeld, D., U. Lohmann, G. B. Raga, C. D. O’Dowd, M. Kulmala, S. Fuzzi, A. Reissell, und M. O. Andreae, 2008: Flood or drought: How do aerosols affect precipitation? *Science*, **321 (5894)**, 1309–1313.
- Segal, Y. und A. Khain, 2006: Dependence of droplet concentration on aerosol conditions in different cloud types: Application to droplet concentration parameterization of aerosol conditions. *J. Geophys. Res.-Atmos.*, **111 (D15)**.
- Seifert, A. und K. Beheng, 2001: A double-moment parameterization for simulating autoconversion, accretion and selfcollection. *Atmos. Res.*, **59 (SI)**, 265–281.
- Seifert, A. und K. Beheng, 2006: A two-moment cloud microphysics parameterization for mixed-phase clouds. Part 1: Model description. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **92 (1-2)**, 45–66.
- Seifert, A., C. Köhler, und K. D. Beheng, 2012: Aerosol-cloud-precipitation effects over germany as simulated by a convective-scale numerical weather prediction model. *Atmos. Chem. Phys.*, **12 (2)**, 709–725.
- Seinfeld, J. H. und S. N. Pandis, 2006: *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. John Wiley & Sons.
- Slinn, W., 1977: Some approximations for the wet and dry removal of particles and gases from the atmosphere. *Water, Air, and Soil Pollution*, **7**, 513–543, 10.1007/BF00285550.

- Small, J. D., P. Y. Chuang, G. Feingold, und H. Jiang, 2009: Can aerosol decrease cloud lifetime? *Geophys. Res. Lett.*, **36**.
- Solomos, S., G. Kallos, J. Kushta, M. Astitha, C. Tremback, A. Nenes, und Z. Levin, 2011: An integrated modeling study on the effects of mineral dust and sea salt particles on clouds and precipitation. *Atmos. Chem. Phys.*, **11**, 873–892.
- Stanelle, T., 2008: Wechselwirkungen von Mineralstaubpartikeln mit thermodynamischen und dynamischen Prozessen in der Atmosphäre über Westafrika. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe.
- Stevens, B. und G. Feingold, 2009: Untangling aerosol effects on clouds and precipitation in a buffered system. *Nature*, **461 (7264)**, 607–613.
- Stevens, B. und A. Seifert, 2008: Understanding macrophysical outcomes of microphysical choices in simulations of shallow cumulus convection. *J. Meteorol. Soc. Jpn.*, **86**, 143–162.
- Stockwell, W. R., P. Middleton, und J. S. Chang, 1990: The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modelling. *J. Geophys. Res.*, **95**, 16 343–16 367.
- Tank, A., et al., 2002: Daily dataset of 20th-century surface air temperature and precipitation series for the European Climate Assessment. *Int. J. of Climatol.*, **22**, 1441–1453, Data and metadata available at <http://eca.knmi.nl>.
- Tiedtke, M., 1989: A comprehensive mass flux scheme for cumulus parameterization in large-scale models. *Mon. Weather Rev.*, **117 (8)**, 1779–1800.
- Tröndle, T. W., 2008: Parametrisierung der subskaligen Konvektion für Spurenstoffe mittels des Tiedtke-Schemas in COSMO-ART. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe.
- Twomey, S., 1959: The nuclei of natural cloud formation part I: The chemical diffusion method and its application to atmospheric nuclei. *Pure and Applied Geophysics Volume 43, Number 1*, 227-242, DOI: 10.1007/BF01993559.
- Twomey, S., 1974: Pollution and the planetary albedo. *Atmos. Environ.*, **8 (12)**, 1251–1256.
- Vogel, B., F. Fiedler, und H. Vogel, 1995: Influence of topography and biogenic volatile organic compounds emission in the state of baden-württemberg on ozone concentrations during episodes of high air temperatures. *J. Geophys. Res.*, **100**, 22 907–22 928.
- Vogel, B., C. Hoose, H. Vogel, und C. Kottmeier, 2006: A model of dust transport applied to the dead sea area. *Meteorol. Z.*, **15**, 611–624.
- Vogel, B., H. Vogel, D. Baeumer, M. Bangert, K. Lundgren, R. Rinke, und T. Stanelle, 2009: The comprehensive model system COSMO-ART - Radiative impact of aerosol on the state of the atmosphere on the regional scale. *Atmos. Chem. Phys.*, **9 (22)**, 8661–8680.

- Wintzen, A., 2012: Numerische Simulationen von anthropogenem und sekundärem Aerosol während des Ausbruchs des Eyjafjallajökull. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Karlsruher Institut für Technologie (KIT).
- Wolff, S. I., 2010: Parametrisierung und Simulation des Auswaschens von Aerosolpartikeln. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Karlsruher Institut für Technologie (KIT).
- Xue, H., G. Feingold, und B. Stevens, 2008: Aerosol effects on clouds, precipitation, and the organization of shallow cumulus convection. *J. Atmos. Sci.*, **65** (2), 392–406.
- Zink, K., 2009: Modellierung der Ausbreitung von Ambrosiapollen mit COSMO-ART. Diplomarbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe.



# A. Symbolverzeichnis

$A$	Parameter in der Köhlergleichung
$A^*$	Parameter in der Gammafunktion
$B$	Parameter in der Köhlergleichung
$B'$	Parameter in der Köhlergleichung
$c_p$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
$c_v$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
$D_c$	kritischer Tropfendurchmesser
$D_D$	Tropendurchmesser
$D_D^*$	Metastabiles Maximum von $D_D$
$D_P$	Partikeldurchmesser (trocken)
$\bar{D}_{Pv}$	mittlerer Durchmesser einer Volumendichteverteilung
$\bar{D}_{Pl}$	mittlerer Durchmesser einer Anzahldichteverteilung
$\bar{D}_{Pm}$	mittlerer Durchmesser einer Massendichteverteilung
$d'q$	infinitesimale Wärmezufuhr
$d'w$	infinitesimale Arbeit
$e$	Dampfdruck
$e^0$	Sättigungsdampfdruck
$e_{eq}$	Sättigungsdampfdruck im Gleichgewicht
$f_k$	prozentualer Anteil der Spezies $k$ an ihrer Mode $l$
$f_w$	Anzahldichteverteilungsfunktion
$\vec{F}^k$	turbulente Flüsse der Spezies $k$
$g / \vec{g}$	Erdbeschleunigung (skalar / vektoriell)
$G$	Gibbssche freie Energie
$h$	Enthalpie
$I^k$	Phasenübergänge der Spezies $k$
$l_{wv}$	Verdampfungswärme
$K_h$	turbulenter Diffusionskoeffizient
$L$	Flüssigwassergehalt
$m$	Massendichteverteilung
$m_l$	Massendichteverteilung der Mode $l$
$m_k$	Masse der Spezies $k$

$m^*$	Trennmasse von Wolken- und Regentropfen
$M$	Massendichte aktivierter Partikel
$M_{act,l}$	Massendichte aktivierter Partikel der Mode $l$
$M_k$	Molmasse der Spezies $k$
$M_k$	Massendichte der Spezies $k$ nach dem Scavenging
$M_{alt,k}$	Massendichte der Spezies $k$ vor dem Scavenging
$M_{k_s,act}$	Massendichte aktivierter Partikel der Spezies $k_s$
$M_l$	Gesamtmassendichte der Mode $l$
$M_k^n$	$n$ -ter Moment der Spezies $k$
$n$	Anzahldichteverteilung
$n_l$	Anzahldichteverteilung der Mode $l$
$N$	Anzahldichte aktivierter Partikel
$N_{act,l}$	Anzahldichte aktivierter Partikel der Mode $l$
$N_l$	Anzahldichte der Mode $l$
$N_{ges}$	Gesamtanzahldichte aller Moden
$N_{Luft}$	Anzahldichte der Luftmoleküle
$n_k$	Anzahl der Mole der Spezies $k$
$p$	Druck
$\vec{P}^k/P^k$	Niederschlag der Spezies $k$ (vektoriell / skalar)
<b>P</b>	Reynoldscher Spannungstensor
$q_k$	spezifischer Massenanteil der Spezies $k$
$Q_h$	diabatische Erwärmung/Abkühlung
$Q_l$	Quellterme (Feuchte)
$Q_{act}$	Quellterme (aktivierte Partikel)
$r^*$	Radius, der Wolken- und Regentropfen trennt
$R$	allgemeine Gaskonstante
$R_k$	spezifische Gaskonstante der Spezies $k$
$s_e$	Entropie eines Systems
$s$	Übersättigung
$s_c$	kritische Übersättigung
$s_{eq}$	Übersättigung im Gleichgewicht
$S$	Sättigung
$S_c$	kritische Sättigung
$S^k$	Wolkenmikrophysikalische Quellen und Senken
$S_l$	Transportterme (Feuchte)
$S_{act}$	Mikrophysikalische Terme (aktivierte Partikel)
$t$	Zeit
$T$	Temperatur
$T_0$	Temperatur eines Referenzzustands
$u_e$	innere Energie

$\vec{v}$	Windgeschwindigkeit
$v_e$	Volumen eines Systems
$\bar{v}_{sed,l}$	Sedimentationsgeschwindigkeit der Mode $l$
$W$	Vertikalgeschwindigkeit
$x_k$	Molenbruch der Spezies $k$
$\bar{v}_k$	molares Volumen der Spezies $k$
$z$	Höhe
$Z$	Maß, das Proportional zur Radarreflektivität ist
$\lambda$	Parameter in der Gammafunktion
$\mu$	Parameter in der Gammafunktion
$\mu_k$	chemisches Potential der Spezies $k$
$\mu_k^0$	chemisches Standardpotential der Spezies $k$
$\nu$	Parameter in der Gammafunktion
$\rho_k$	Dichte der Spezies $k$
$\sigma_l$	Standardabweichung einer Anzahldichteverteilung
$\sigma_w$	Oberflächenspannung von Wasser
$\Psi_l$	normierte Anzahldichte der Mode $l$
$\vec{\Omega}$	Winkelgeschwindigkeit

## Indizes

$v$	Wasserdampf
$w$	Flüssigwasser
$f$	Eis
$a$	umgebendes Luftpaket
$s$	gelöster Stoff
$c$	Wolkenwasser
$r$	Regen
$sn$	Schnee
$g$	Graupel



# Danksagung

Zu guter Letzt möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Diplomarbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gebührt hierbei Herrn Prof. Dr. Christoph Kottmeier für die Ermöglichung dieser Diplomarbeit und Herrn Prof. Dr. Thomas Leisner für die Übernahme des Koreferats.

Desweiteren möchte ich mich bei Herrn Dr. Bernhard Vogel bedanken. Dafür dass er beim Thema der Diplomarbeit auf meine Wünsche einging und mich bei der Durchführung und Ausarbeitung stets darin unterstützte, das Potential, das diesem Thema innewohnt, auszuschöpfen.

In diesem Zuge möchte ich mich auch bei Dr. Max Bangert bedanken, der bei den meisten Fragen, die ich hatte, die erste Anlaufstelle war und diese stets hilfreich mit Geduld und viel Humor beantworten konnte.

Ich möchte mich auch bei allen weiteren Mitgliedern der Arbeitsgruppe für ihre Unterstützung und ihre offene Ohren bei Fragen bedanken. Einen besonderen Dank möchte ich an dieser Stelle einerseits Frau Dr. Heike Vogel für ihre Unterstützung bei programmierspezifischen Angelegenheiten und andererseits meinen Zimmergenossinnen Dipl.-Met. Isabel Kraut und Dr. Kristina Lundgren für die angenehme Arbeitsatmosphäre aussprechen.

Mein Dank richtet sich auch an Jochen Förstner und Axel Seifert vom Deutschen Wetterdienst. Jochen Förstner verdanke ich die Randdaten, für die eigens für diese Diplomarbeit der Vorhersagezyklus zu diesem Zeitpunkt wiederholt wurde. Von Axel Seifert stammt die Idee, diesen konkreten Zeitraum zu untersuchen.

Ein ganz besonderer Dank richtet sich auch an meine Eltern, Heike und Erhard Rieger, die mich während meines gesamten Studiums unterstützt haben und es damit erst ermöglicht haben.

Ich möchte mich auch bei Andrea Huber bedanken, deren Korrekturvorschläge eine große Hilfe für mich waren.

Abschließend danke ich meiner Freundin Cornelia für die vielfältige Unterstützung, sei es moralisch oder durch Korrekturvorschläge, die sie mir während meiner Diplomarbeit zukommen ließ.



# Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbst verfasst und nur die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe.

Ich bin damit einverstanden, dass diese Arbeit in Bibliotheken eingestellt wird und vervielfältigt werden darf.

Karlsruhe, den 3. August 2012

Name