

# **Parametrisierung und Simulation des Auswaschens von Aerosolpartikeln**

**Diplomarbeit im Fach Meteorologie**

Vorgelegt von

**Sarah Isabelle Wolff**

November 2010

**INSTITUT FÜR METEOROLOGIE UND KLIMAFORSCHUNG**

KIT - Universität des Landes Baden-Württemberg und nationales Forschungszentrum der Helmholtz-Gemeinschaft



# Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und ohne unerlaubte Hilfsmittel angefertigt habe.

Karlsruhe, den 10.11.2010

Sarah Isabelle Wolff



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Grundlagen des troposphärischen Aerosols</b>	<b>5</b>
2.1. Entstehung und Lebenslauf . . . . .	5
2.2. Größenverteilung und deren mathematische Beschreibung . . . . .	9
2.3. Wechselwirkungsprozesse mit Wolken . . . . .	12
<b>3. Prognostische Behandlung im COSMO-Modell</b>	<b>13</b>
3.1. Kurze Beschreibung des COSMO-Modells . . . . .	13
3.1.1. Prognostische Gleichungen und deren Lösungen . . . . .	14
3.2. Das Zwei-Momenten-Wolkenmikrophysikschema . . . . .	17
3.2.1. Theoretische Formulierung . . . . .	18
<b>4. Das Auswaschen von Aerosolpartikeln infolge von Wolkentropfenbildung</b>	<b>23</b>
4.1. Die theoretische Beschreibung des Nucleation Aerosol Scavenging . . . . .	23
4.2. Die Parametrisierung im COSMO-Modell . . . . .	27
4.2.1. Bisherige Parametrisierung im Zwei-Momenten-Schema . . . . .	28
4.2.2. Erweiterung der Parametrisierung um Aerosolprozesse . . . . .	29
4.2.3. Aktivierungsparametrisierung nach Reutter (2009a und 2009b) . . . . .	30
4.2.4. Parametrisierung nach Abdul-Razzak und Ghan (1998 und 2000) . . . . .	32
4.3. Idealisierte Simulationen unter Verwendung der verschiedenen Parametrisierungen	35
4.3.1. Grundzustand und Ausgangsbedingungen . . . . .	36
4.3.2. Auswertung der Simulationen . . . . .	39
<b>5. Das Auswaschen von Aerosolpartikeln infolge von Tropfen</b>	<b>47</b>
5.1. Die theoretische Beschreibung des Collision Aerosol Scavenging . . . . .	48
5.1.1. Berechnung des Kollisions-Kernel nach Slinn . . . . .	48
5.1.2. Berechnung des Kollisions-Kernel nach Herbert und Beheng . . . . .	54
5.2. Eine neue Formulierung des effektiven Tropfenkollektorradius . . . . .	59
5.2.1. Aufbau des Trajektorienmodells . . . . .	60
5.2.2. Beschreibung der Simulationen . . . . .	65
5.2.3. Auswertung und Erstellung einer Regressionsfunktion . . . . .	67
5.3. Implementierung in das COSMO-Modell . . . . .	75
5.4. Sensitivitätsstudien mit COSMO . . . . .	79
<b>6. Zusammenfassung</b>	<b>87</b>

<b>A. Anhang</b>	<b>91</b>
A.1. Akkumulierter Gesamtniederschlag am Boden . . . . .	91
A.2. Zeitreihe der gemittelten Flüssigwassergehalte verschiedenener Hydrometeorarten .	92
<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>93</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>97</b>

# 1. Einleitung

Von je her sind Wolken und Niederschlag von sehr großen Interesse für die Menschheit. Gerade in der heutigen Zeit wird versucht, bewusst darauf Einfluss zu nehmen. Bei den Olympischen Sommerspielen 2008 in Peking wurde zum Beispiel versucht, jegliche Art von Niederschlag durch sogenanntes 'Impfen' von der Hauptstadt fernzuhalten. Beim Impfen handelt es sich um die Verteilung von Trockeneis oder Silberjodid in der Atmosphäre, wodurch instantan die Niederschlagsbildung angefacht wird. So kann zwar der Niederschlag an sich nicht verhindert werden, wohl aber das Gebiet, in dem dieser fällt, beeinflusst werden.

Nicht nur sportliche und gesellschaftliche Ereignisse hängen stark vom Niederschlag ab, sondern im hohem Maße auch die Wirtschaft. Starke Hagelereignisse können zum Beispiel die Ernte eines Jahres in einer ganzen Regionen zerstören oder auch Tausende von Fahrzeugen beschädigen, wenn diese nicht überdacht abgestellt werden. Studien haben gezeigt, dass rund fünf Prozent des Bruttoinlandproduktes westlicher Industriestaaten vom Wetter abhängen (Maier, 2001). Daher ist es sehr wichtig, Wettermodelle zu besitzen, die eine gute Niederschlagsprognose liefern können.

Das ist allerdings mit den meisten heutigen Modellen nur bedingt möglich, da sie nur eine sehr vereinfachte Darstellung der Wolkenmikrophysik besitzen. Das operationelle Wettermodell des Deutschen Wetterdienstes, kurz COSMO (Consortium for Small Scale Modeling)-Modell, verwendet zum Beispiel für die Parametrisierung der Wolkenmikrophysik ein recht einfaches Schema (Doms, 2002), welches prognostische Gleichungen für die Massendichten der Hydrometeorklassen Wolkentropfen, Regentropfen, Wolkeneis, Schnee und Graupel löst. Da die Massendichte das erste Moment der Partikelverteilungsfunktion hinsichtlich deren Masse darstellt, wird ein derartiges Wolkenphysikschema auch als Ein-Momenten-Schema bezeichnet. Zudem sind im COSMO-Modell nur die wichtigsten Umwandlungsprozesse zwischen den Hydrometeoren berücksichtigt, so dass das Schema effizient ist und hinsichtlich der operationellen Vorhersage von Niederschlag am Boden ausreichende Genauigkeit bietet.

Um mit dem COSMO-Modell eine verbesserte Prozessbeschreibung und vielleicht auch eine verbesserte Niederschlagsprognose liefern zu können, wurde am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) ein ergänzendes Modul entwickelt, das sogenannte Zwei-Momenten-Schema. Hierbei wird mit der Anzahldichte noch ein weiteres Moment der Größenverteilungsfunktion für jede Hydrometeorart prognostiziert. Zudem enthält das Modul eine weitere Hydrometeorklasse, den Hagel (Seifert, 2002; Seifert und Beheng, 2006a; Seifert et al., 2006; Noppel et al., 2006; Blahak, 2008; Noppel et al., 2010; Blahak, 2010). Mit Hilfe des zweiten Momentes besitzen die

Regentropfen nun zum Beispiel nicht mehr im gesamten Modell den gleichen mittleren Radius, sondern es kann Gebiete mit besonders großen beziehungsweise kleinen Tropfen geben. Außerdem werden innerhalb des Moduls deutlich mehr Umwandlungsprozesse zwischen den einzelnen Hydrometeoren als bisher berücksichtigt. Dabei werden für die meisten Prozesse, die näherungsweise quantifizierbar oder bekannt sind, zum Teil neuartige Parametrisierungen angewendet. Solche Zwei- oder Mehr-Momenten-Verfahren werden derzeit weltweit verstärkt entwickelt, da sie einen für detaillierte dreidimensionale atmosphärische Simulationen über größeren Modellgebieten handhabbaren Kompromiss zwischen noch genaueren spektralen Parametrisierungen und den einfachen Ein-Momenten-Parametrisierungen darstellen.

Ein wichtiger Aspekt, der in diesem Modul noch nicht berücksichtigt wird, ist der Einfluss von Aerosolpartikeln auf die Wolken- und Niederschlagsbildung. Da es in der Atmosphäre praktisch unmöglich ist, Tropfen aus reinem Wasser zu bilden, geschieht die Wolkentropfenbildung meist mit Hilfe von Aerosolpartikeln, die in diesem Zusammenhang als Kondensationskerne bezeichnet werden. Gibt es zum Beispiel in einer Region wenige Aerosole, so können dort auch nur wenige Tropfen gebildet werden und die Prozesse in der Wolke, die zur Bildung größerer Partikel führen, laufen anders ab als wenn viele Aerosole vorhanden gewesen wären. Da im COSMO-Modell aber explizit keine Aerosole existieren, kann auch deren Einfluss auf die Tropfenbildung nicht korrekt wiedergegeben werden.

Außerdem können Wolken- und Regentropfen auch wiederum Einfluss auf die Aerosolpopulation haben. So können Aerosole durch Tropfen aus der Atmosphäre entfernt werden. Bei diesem als Auswaschen oder Scavenging bezeichneten Prozess wird meist zwischen zwei verschiedenen Mechanismen unterschieden. Bei dem einen Mechanismus werden die Partikel dadurch aus der Atmosphäre entfernt, dass sie als Kondensationskerne bei der Tropfenbildung dienen. Sie werden dann vollständig oder teilweise in den Tropfen gelöst und können in Form von Niederschlag aus der Atmosphäre ausgeschieden werden. Dieser Prozess wird Nucleation Aerosol Scavenging (NAS) bezeichnet. Zudem können Aerosole durch das sogenannte Collision Aerosol Scavenging (CAS) aus der Atmosphäre ausgewaschen werden. Dabei werden die Aerosolpartikel in Folge von Kollisionen mit bereits vorhandenen Tropfen in diese aufgenommen und so aus der Atmosphäre entfernt. Diese durch das Auswaschen verringerte Anzahl an Aerosolpartikeln kann wiederum Einfluss auf die Anzahl neu gebildeter Tropfen nehmen. Daher könnte die Berücksichtigung dieses Prozesses bei der Berechnung von Wolken und Niederschlag sich als wichtig herausstellen.

Ziel der Arbeit ist es, eine einfache und geeignete Parametrisierung für Aerosole, deren Einfluss auf die Tropfenbildung und das Auswaschen der Partikel durch Wolken- und Regentropfen innerhalb des Zwei-Momenten-Schemas zu entwickeln. Im Rahmen dessen muss eine passende Beschreibung für das NAS gefunden werden. Dafür werden zunächst ausgewählte Parametrisierungen aus der Literatur zusammen mit der Advektion und der turbulenten Diffusion einer neu eingeführten Aerosolanzahldichte in das Zwei-Momenten-Schema implementiert. Dies erlaubt es, ausgehend von einem vorzugebenden Anfangszustand, den Transport und die Wechselwirkung von



Aerosolen mit Tropfen innerhalb einer wolkenbeladenen Atmosphäre zu beschreiben. Nachfolgend werden Simulationen unter Verwendung der verschiedenen Schemata durchgeführt, so dass Unterschiede analysiert werden können. Zudem wird im Rahmen dieser Arbeit eine Näherung für das CAS entwickelt. Da dafür bisher keine geeignete, vollständige Parametrisierung existiert, wird zunächst ein Trajektorienmodell entwickelt, mit welchem das CAS unter Zugrundelegung einer Potentialströmung explizit berechnet werden kann. Mit Hilfe dieses Modells wird dann eine neue Parametrisierung für das CAS entwickelt. Anschließend werden wiederum Simulationen durchgeführt, um den Einfluss von CAS auf die Wolken- und Niederschlagsbildung beurteilen zu können.

Die Arbeit gliedert sich dabei wie folgt; In Kapitel 2 werden zunächst die Grundlagen von Aerosolen erläutert. Dabei wird im ersten Abschnitt auf ihre Entstehung und ihren Lebenslauf eingegangen. Im zweiten auf ihre Größenverteilung sowie deren mathematischer Beschreibung und im dritten auf mögliche Wechselwirkungen der Aerosole mit Tropfen. Kapitel 3 gibt einen Überblick über das verwendete Wettermodell COSMO und das ergänzende Modul, das Zwei-Momenten-Schema. Im darauffolgenden Kapitel wird dann auf das NAS eingegangen. Dabei wird in dem ersten Abschnitt dieses Kapitels die theoretische Beschreibung des NAS näher erläutert, im zweiten mögliche Parametrisierungen des NAS für das Zwei-Momenten-Schema und im dritten werden Sensitivitätsstudien zu den verschiedenen Parametrisierungen vorgestellt. Im fünften Kapitel wird dann auf das CAS näher eingegangen, wobei sich der erste Abschnitt wieder der theoretischen Beschreibungen widmet und der zweite sich mit der Entwicklung des numerischen Trajektorienmodells für das CAS sowie der daraus resultierenden Parametrisierung befasst. Im darauffolgenden Abschnitt werden Simulationen und deren Ergebnisse vorgestellt und diskutiert. Die Arbeit schließt in Kapitel 6 mit einer Zusammenfassung.



## 2. Grundlagen des troposphärischen Aerosols

Als Aerosolpartikel bezeichnet man ein luftgetragenes Teilchen mit einer Größenordnung von circa 10 nm bis 10  $\mu\text{m}$  (Roedel, 2000). In Bodennähe gibt es über den Kontinenten im Mittel etwa  $10^4$  Partikel pro Kubikzentimeter, wobei in Reinluftgebieten ihre Anzahl auf  $10^3$  zurückgehen und in stark belasteten städtischen Gebieten bis auf  $10^5$  steigen kann. Über den Meeren ist ihre Anzahldichte deutlich geringer und liegt bei circa  $10^2$  bis  $10^3$  Partikel pro Kubikzentimeter. Sowohl über den Kontinenten als auch über den Meeren nimmt die Anzahl der Aerosolpartikel stark mit der Höhe ab. Die Massendichte der Aerosolpartikel ist trotz ihrer großen Anzahldichte sehr klein. Sie liegt bei etwa 30 bis 150  $\mu\text{g m}^{-3}$ .

Das folgende Kapitel soll einen Überblick über die Eigenschaften von Aerosolpartikeln geben, wobei der Fokus auf dem troposphärischen Aerosol liegen soll. Auf das stratosphärische Aerosol wird nicht näher eingegangen, da es auf Wolkenprozesse in der Troposphäre, die in dieser Arbeit untersucht werden sollen, praktisch keinen Einfluss hat. Der erste Abschnitt dieses Kapitels soll einen allgemeinen Überblick über die Entstehung und den Lebenslauf des troposphärischen Aerosols geben. Im zweiten wird dann auf die Größenverteilung des troposphärischen Aerosols sowie dessen mathematische Beschreibung näher eingegangen und im dritten wird ein kurzer Überblick über die möglichen Wechselwirkungen der Aerosole mit der Wolken- und Niederschlagsbildung gegeben.

### 2.1. Entstehung und Lebenslauf

Aerosolpartikel werden vorwiegend durch zwei dominante Prozesse in die Atmosphäre eingebracht. Zum einen können sie durch homogene Kondensation übersättigter Dämpfe aus der Gasphase heraus entstehen, zum anderen durch Aufwirbelung und Dispergierung von Partikeln von der Erdoberfläche in die Atmosphäre gelangen. Die Partikel liegen dabei schon in kondensierter Form, zum Beispiel in Form von Mineralstaub oder Seesalzspray, vor.

Aerosolpartikel, die durch homogene Kondensation entstehen, werden auch als Nukleationsaerosolpartikel bezeichnet. Ihre Radien betragen meist nur wenige hundertstel Mikrometer. Die Dämpfe, aus denen sie gebildet werden, können durch chemische Reaktionen aus den ursprünglichen Bestandteilen der Atmosphäre entstehen, wie zum Beispiel Schwefelsäuredampf aus Schwefeldioxid. Allerdings wird der Sättigungsdampfdruck, der für die homogene Nukleation einer einzelnen Molekülspezies, die sogenannte homomolekulare homogene Nukleation, nötig

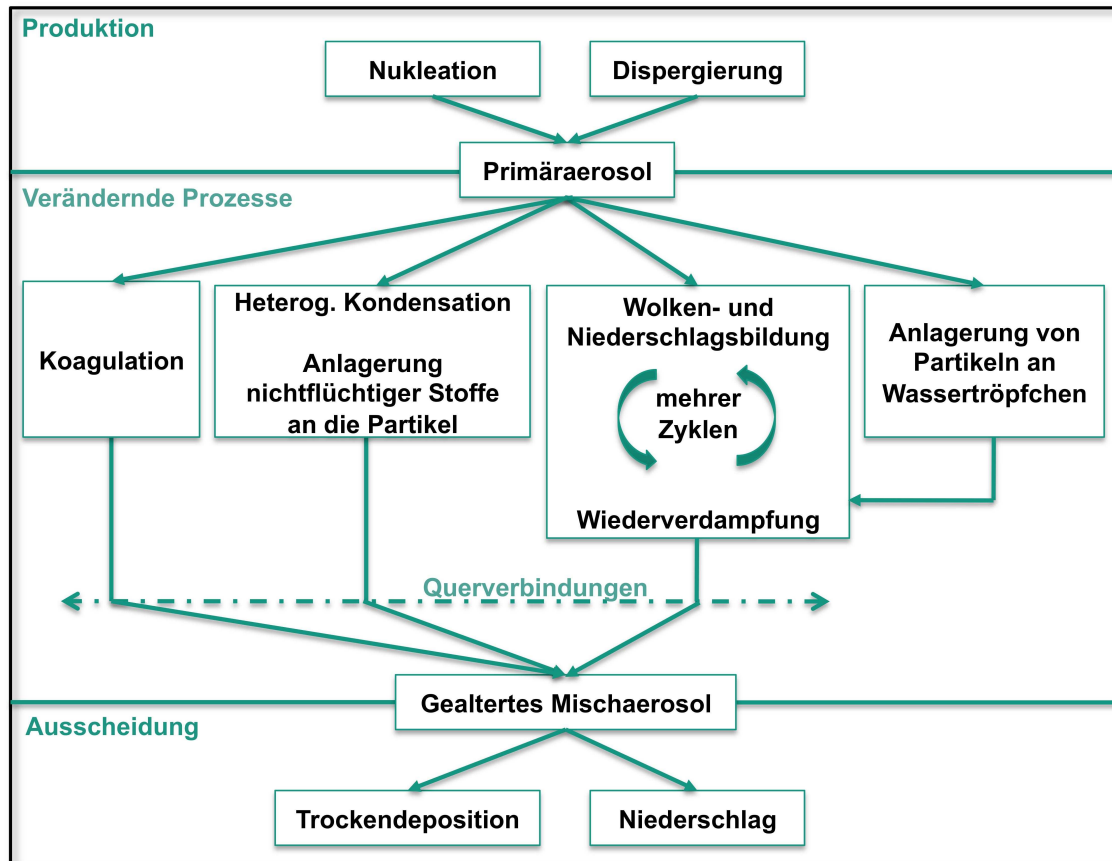
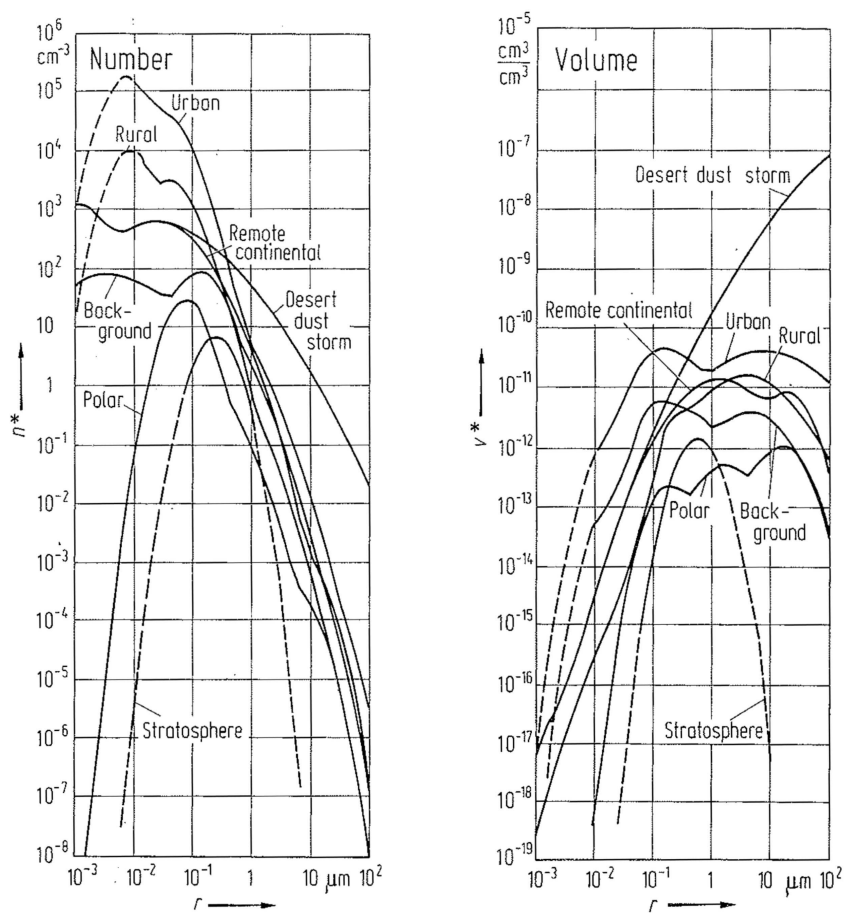


Abbildung 2.1.: Umwandlungsprozesse von Aerosolpartikeln

wäre, in der Atmosphäre meist nicht erreicht. Sie ist daher praktisch unmöglich. Stattdessen sind üblicherweise mehrere Komponenten gleichzeitig an der homogenen Nukleation in der Atmosphäre beteiligt. Solche sogenannte heteromolekulare Systeme besitzen, wenn ihre Mischung exotherm ist, einen deutlich geringeren Sättigungsdampfdruck, der in der Atmosphäre erreicht werden kann. Außerdem tritt in der Atmosphäre auch die sogenannte heterogene Nukleation auf. Dabei kondensiert der Gasdampf an bereits vorhandenen Aerosolpartikeln. Durch diesen Prozess entstehen allerdings keine neuen Partikel, sondern die bereits vorhandenen werden nur größer.

Als Dispersionsaerosole bezeichnet man all jene Aerosole, die durch den anderen dominierenden Mechanismus, das Aufwirbeln, in die Atmosphäre gelangen. Sie besitzen meist Radien zwischen  $1 \mu\text{m}$  und  $10 \mu\text{m}$ . Beim Aufwirbeln über Landoberflächen (z.B. Wüsten) werden die Teilchen dabei zunächst horizontal die Bodenoberfläche entlang transportiert, bis sie sich etwa an „Abreißkanten“ in die Luft erheben oder an kleinen Hindernissen abprallen und in die Luft „springen“ (Saltation). Kleinere Partikel können durch diesen Prozess kaum in die Atmosphäre gelangen, da bei diesen der Wind, der tangential zur Oberfläche weht, die Adhäsionskräfte nicht überwinden kann. Damit Aerosole überhaupt von der Erdoberfläche aufgewirbelt werden können, müssen nach Fuchs (1964) Windgeschwindigkeiten von  $2 \text{ m/s}$  bis  $4 \text{ m/s}$  erreicht werden. Auch von Meeresoberflächen werden

Seesalzpartikel in die Atmosphäre abgegeben. Bevor Seesalz in die Atmosphäre gelangen kann, muss dies erst noch gebildet werden. Dies kann z.B. beim Brechen von Wasserwellen aus dem entstehenden Wassertröpfchennebel (spray) oder auch schon bei schwächeren Winden geschehen, werden durch den Wind kleine Luftblasen unter die Meeresoberfläche gebracht und, sobald diese dann wieder die Meeresoberfläche erreichen, zerplatzen sie und kleine Meerwassertropfen gelangen in die Luft. Die durch diese Prozesse einmal gebildeten Seewassertropfen verdampfen dann im Folgenden, wobei kleine Seesalzkerne beziehungsweise Seesalzaerosole in der Atmosphäre übrigbleiben.



(a) Anzahldichteverteilung  $n^* = dN/d(\ln r)$  mit dem Partikelradius  $r$  in  $\mu\text{m}$

(b) Volumendichteverteilung  $v^* = dV/d(\ln r)$  mit dem Partikelradius  $r$  in  $\mu\text{m}$

Abbildung 2.2.: Aerosolverteilungen basierend auf Feldmessungen aus aller Welt und von verschiedenen Autoren, wobei die Aerosole in städtischen Gebieten (urban), stadtnahen Gebieten (remote continental), in der Troposphäre (background), in Polargebieten (polar), in Wüstenstaubstürmen (desert dust storm) und in der Stratosphäre (stratosphere) unterschieden werden (Jaenicke, 1985).

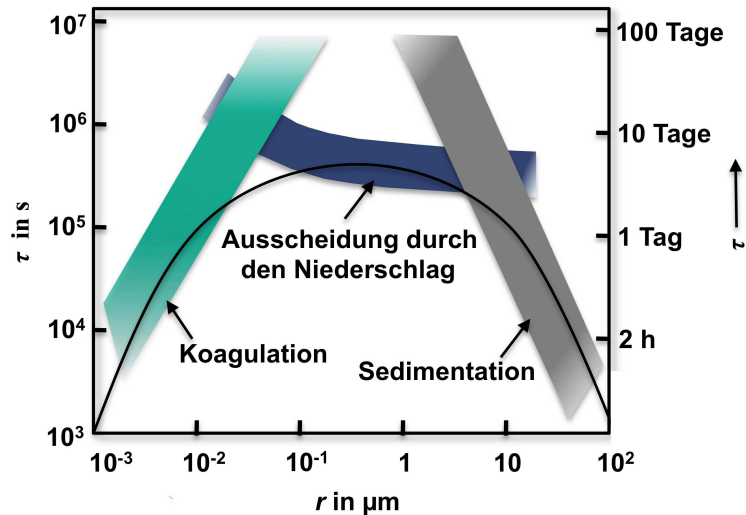


Abbildung 2.3.: Verweilzeit der Aerosolpartikel in Abhängigkeit von ihrem Radius

Je nachdem ob Aerosole durch Nukleation oder Aufwirbelung in die Atmosphäre gelangen, besitzen sie charakteristische Eigenschaften und Größenverteilungen. Allerdings bleiben diese primären Eigenschaften nicht lange erhalten. Sobald sich die Aerosolpartikel in der Atmosphäre befinden, durchlaufen sie vielfältige Prozesse, die zu Änderungen ihrer Eigenschaften und Größenverteilungen führen. Abbildung 2.1 zeigt schematisch die wichtigsten Prozesse, die Aerosole während ihres Lebenslaufes beeinflussen können. Je nachdem welche dieser Prozesse in einer Region überwiegen, stellt sich dort eine ganz charakteristische Größenverteilung ein. Diese charakteristischen Größenverteilungen sind in Abbildung 2.2 zu erkennen. So werden in polaren Gebieten und der Stratosphäre praktisch keine Aerosolpartikel durch homogene Kondensation gebildet, so dass die Verteilungen keine kleinen Partikel aufweisen. Ein anderes Beispiel sind die Aerosolverteilungen in Wüstenstaubstürmen. Hierbei gelangen extrem viele Dispersionsaerosole in die Atmosphäre, weswegen die Anzahl der großen Aerosolpartikel (hier mineralische Staubpartikel) im Vergleich zu den Verteilungen sonstiger Gebiete deutlich erhöht ist.

Die Lebensdauer der Aerosolpartikel in der Troposphäre ist durch drei Mechanismen geprägt, was in Abbildung 2.3 schematisch als Funktion des Partikelradius dargestellt ist. Zudem ist in der Abbildung der jeweilige dominierende Prozess für die verschiedenen Partikelgrößen angegeben. Aerosole mit Radien zwischen einigen hundertstel Mikrometer und circa zehn Mikrometer werden vor allem in Folge nasser Ausscheidung durch den Regen aus der Atmosphäre entfernt. Ihre Lebensdauer beträgt im Durchschnitt etwa vier bis sechs Tage. Bei Aerosolpartikeln, deren Radien kleiner als  $0,1 \mu\text{m}$  sind, nimmt die Effizienz, mit der sie durch den Regen aus der Atmosphäre entfernt werden, langsam ab. Stattdessen nimmt die Bedeutung der Koagulation mit kleiner werdenden Radius zu. Bei sehr großen Partikeln wiederum ist die Sedimentation der dominierende Prozess.

## 2.2. Größenverteilung und deren mathematische Beschreibung

Typische Volumenspektren von Aerosolen, sogenannte Whitby-Spektren, weisen drei charakteristische Bereiche auf, die auch als Moden bezeichnet werden. Ein solches Spektrum ist in Abbildung 2.4 schematisch dargestellt.

Die kleinste Mode innerhalb dieser Spektren wird als Nukleationsmode bezeichnet. Die Aerosolpartikel dieser Mode besitzen einen mittleren Radius von circa  $0,018 \mu\text{m}$  und entstehen hauptsächlich durch homogene Nukleation. Da sie jedoch sehr schnell durch Koagulation von anderen Partikeln aufgenommen werden, beträgt ihre Lebensdauer in der Troposphäre nur wenige Stunden und es müssen kontinuierlich neue Partikel nachgebildet werden. Obwohl diese Mode zahlenmäßig die größte ist, ist ihr Beitrag zur Gesamtmasse sehr gering.

Die nächstgrößere Mode heißt Akkumulationsmode. Der Schwerpunkt dieser Mode liegt bei etwa  $0,1 \mu\text{m}$ . Der dominierende Prozess, durch den Teilchen dieser Mode gebildet werden, ist die Koagulation aus Teilchen der Nukleationsmode. Da vor allem etwas größere Teilchen mit den kleineren koagulieren und nicht kleine mit kleinen, entsteht eine Lücke zwischen den beiden Moden im Volumenspektrum. Diese wird erst mit der Zeit aufgefüllt. Massemäßig ist diese Mode deutlich größer als die Nukleationsmode. Ihr Beitrag zur Gesamtmasse liegt zwischen 30% und 60%.

Partikel der größten Mode werden als große Partikel oder Grobaerosole bezeichnet. Ihre Radien

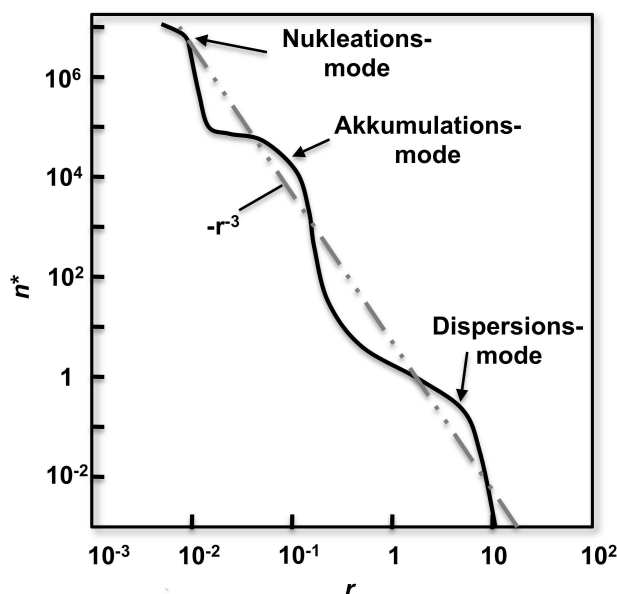


Abbildung 2.4.: Aus Whitby-Spektrum abgeleitetes Anzahldichtespektrum sowie das Junge-Spektrum (strichpunktiert)

sind alle größer als  $1 \mu\text{m}$  und es handelt sich bei ihnen fast ausschließlich um Dispersionsaerosole.

Diese typischen Bereiche sind teils auch in Abbildung 2.2 erkennbar. Ein Beispiel dafür ist die Verteilung der Aerosole in den polaren Gebieten. Bei anderen Verteilungen sind die Moden weniger gut erkennbar. Dies kann zwei Gründe haben. Zum einen kann es sein, dass hier, wie im Fall des stratosphärischen Aerosols, starke Aerosolquellen fehlen, so dass die Nukleationsmode sowie die Mode der Grobaerosole praktisch nicht vorhanden ist. Ein weiterer Grund, warum die einzelnen Moden nicht so gut erkennbar sind, liegt im Altern der Aerosole, wodurch die Lücken zwischen den einzelnen Moden in Folge von Koagulation aufgefüllt worden sind und somit nicht mehr so markant hervortreten.

Heutzutage wird jede einzelne dieser Moden meist mit einer log-normalen Verteilungsfunktion beschrieben. Es hat sich gezeigt, dass diese relativ einfache Funktion eine passende Beschreibung für die beobachteten Verteilungsspektren ist. Die Anzahldichteverteilungsfunktion  $f_{ap}(\ln r_{ap})$ , wie diese Darstellung häufig bezeichnet wird, ist folgendermaßen definiert (Pruppacher, 1996)

$$f_{ap}(\ln r_{ap}) = \frac{N_{ap}}{\sqrt{2\pi} \ln \sigma_{ap}} \exp \left[ -\frac{\ln^2 \left( \frac{r_{ap}}{\bar{r}_{ap}} \right)}{2 \ln^2 \sigma_{ap}} \right]. \quad (2.1)$$

Dabei ist  $r_{ap}$  der Radius eines trockenen Aerosolpartikels einer Mode,  $\bar{r}_{ap}$  der modale Radius der Mode und  $\sigma_{ap}$  ist ein dimensionsloser Breitenparameter bezogen auf die Längeneinheit, in welcher die Radien eingesetzt werden. Für die Gesamtanzahl der Aerosole  $N_{ap}$  gilt allgemein

$$N_{ap} = \int_{-\infty}^{\infty} f_{ap}(\ln r_{ap}) d(\ln r_{ap}). \quad (2.2)$$

Zudem gibt es noch eine weitere klassische Beschreibung der Größenverteilung für Aerosole größer als  $0,1 \mu\text{m}$ , die bis heute Anwendung findet. Es handelt sich dabei um das sogenannte Jungespektrum (Pruppacher 1996)

$$\frac{dN_{ap}}{d(\ln r_{ap})} = A_{Junge} r_{ap}^{-\alpha_{Junge}}. \quad (2.3)$$

Dabei bezeichnet  $d_{ap}$  den Durchmesser eines trockenen Aerosolpartikels und  $\alpha_{Junge}$  sowie  $A_{Junge}$  konstante Parameter der Verteilung. Junge fand desweiteren heraus, dass  $\alpha_{Junge}$  für viele gemessene Verteilungen kaum variiert und ungefähr den Wert drei besitzt.

Diese klassische Beschreibung stellt allerdings keinen Widerspruch zu der log-normalen Verteilungsfunktion dar. So basiert das Gesetz allein auf Feldmessungen von gealtertem troposphärischem Aerosol, wobei nur Partikel mit Radien größer  $0,1 \mu\text{m}$  mit den damals verfügbaren Messgeräten gemessen werden konnten. Daher ist das Gesetz folglich nur für Aerosole größer



als  $0,1 \mu\text{m}$  anwendbar. Da es sich des Weiteren um gealtertes Aerosol handelte, sind die Lücken zwischen den einzelnen Moden nicht so markant. Zur approximativen Beschreibung kann das relativ glatte Jungespektrum verwendet werden.

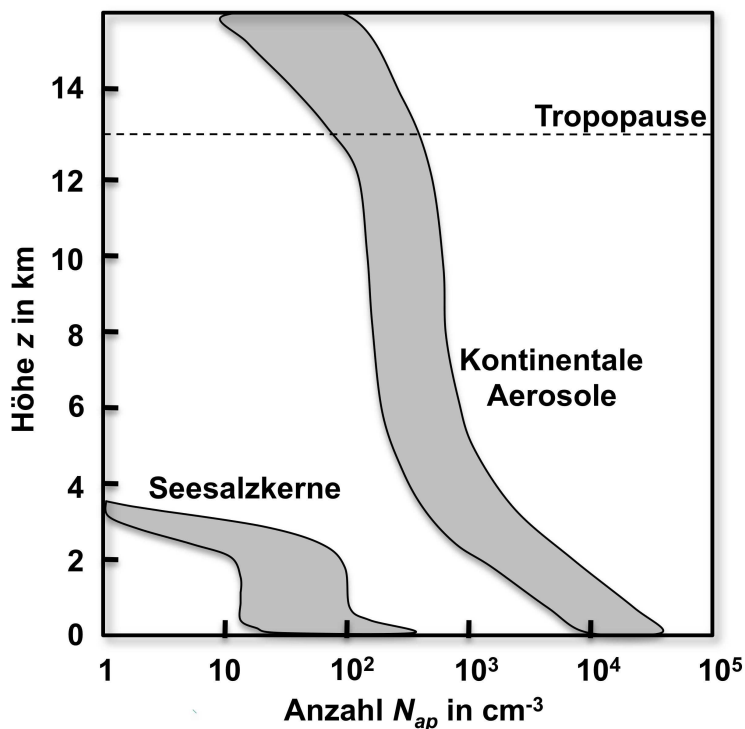


Abbildung 2.5.: Schematische Darstellung der Teilchenanzahldichte als Funktion der Höhe

In Abbildung 2.5 ist die Höhenverteilung für kontinentale und maritime Aerosole schematisch dargestellt. Dabei treten große Unterschiede zwischen den unterschiedlichen Regionen auf. So nimmt über den Ozeanen schon nach wenigen hundert Metern die Konzentration der Aerosole rasch ab und in etwa drei Kilometern Höhe sind praktisch keine Aerosolpartikel mehr vorhanden. Der Grund hierfür liegt zum einen in der Zusammensetzung der Aerosole. Diese sind so gut wasserlöslich, dass fast alle als Kondensationskerne in Tropfen aufgenommen werden. Zum anderen fehlt über den Ozeanen intensive thermische Konvektion sowie starke Bodenreibung, so dass die vertikale Durchmischung der Luft hier längst nicht so effizient wie über den Kontinenten stattfinden kann. Über den Kontinenten nimmt die Konzentration nicht ganz so stark mit der Höhe ab. Zwar ist sie in circa fünf Kilometern auf ein Hunderstel gegenüber der am Boden zurückgegangen, bleibt aber bis zur Tropopause annähernd konstant.

### 2.3. Wechselwirkungsprozesse mit Wolken

Wie in Abbildung 2.1 symbolisiert können Aerosole durch Wolken- und Regentropfen aus der Atmosphäre ausgewaschen werden. Dabei werden meist zwei verschiedene Prozesse voneinander unterschieden. Der eine Mechanismus wird mit Nucleation Aerosol Scavenging (NAS) und der andere mit Collision Aerosol Scavenging (CAS) bezeichnet. Physikalisch handelt es sich dabei um zwei völlig unterschiedliche Prozesse.

Das NAS tritt bei der Wolkentropfenbildung auf. Dadurch dass es in der Troposphäre praktisch unmöglich ist, Tropfen aus reinem Wasser zu bilden, geschieht dies meist mit Hilfe von Aerosolpartikeln, sogenannten Kondensationskernen. Deswegen kann die Konzentration von Aerosolen in der Luft einen entscheidenden Einfluss auf die Bildung von Wolken und Niederschlag haben. Ist sie in einer Region gering, so gibt es nur wenige Kondensationskerne und nur wenige Tropfen können aus diesen gebildet werden.

Der andere Mechanismus, auch CAS genannt, beschreibt das Auswaschen von Aerosolen infolge von Kollisionen mit schon vorhandenen Tropfen. Dabei können die Kollisionen durch ganz verschiedene Effekte ausgelöst werden. Sie können zum Beispiel durch elektrische sowie thermo- und diffusiophoretische Kräfte induziert werden oder auch durch die Gravitationskraft hervorgerufen werden. Ein Unterschied zwischen diesen beiden Prozessen zueinander ist der Einfluss der Zeit. Je länger sich nämlich ein Partikel in einer Wolke befindet, desto wahrscheinlicher ist es, dass es mit einem Tropfen kollidiert.

Allgemein werden aber durch beide Mechanismen der Atmosphäre Aerosole und damit auch potentielle Kondensationskerne entzogen. Da diese dann im Weiteren nicht mehr für die Bildung neuer Tropfen zur Verfügung stehen, kann es sein, dass die Neubildung von Tropfen in Folge des Auswaschens deutlich abnimmt ist und in Ausnahmefällen vielleicht sogar ganz unterbunden wird.

Welchen Einfluss genau die Aerosole auf die Wolken- und Niederschlagsbildung besitzen und wie weit das Auswaschen der Aerosole diese beeinflusst, ist jedoch bis heute nicht vollständig geklärt. Dies liegt vor allem in der Komplexität des Problems an sich, zudem aber auch in der Verfügbarkeit experimenteller Daten. So gibt es nur wenige Feldmessungen, die den Einfluss von Aerosolen auf die Tropfenbildung untersuchen.

## **3. Prognostische Behandlung im COSMO-Modell**

Um den Einfluss von Aerosolen und des Auswaschens von Aerosolen auf die Wolken- und Niederschlagsbildung untersuchen zu können, sollen im Rahmen dieser Arbeit idealisierte numerische Simulationen durchgeführt werden. Als Basis sollen dafür das COSMO-Modell und das Zwei-Momenten-Schema dienen.

Im folgenden Kapitel wird ein kurzer Überblick über das COSMO-Modell gegeben werden. Dabei werden im ersten Abschnitt des Kapitels das COSMO-Modell selbst, dessen prognostische Gleichungen und die numerische Lösung derer beschrieben, während im Zweiten das ergänzende Modul, das Zwei-Momenten-Schema erläutert wird.

### **3.1. Kurze Beschreibung des COSMO-Modells**

Bei dem Wettervorhersagemodell COSMO des Deutschen Wetterdienstes (DWD) (Doms und Schättler, 2002; Schättler et al., 2006) handelt es sich um ein nicht-hydrostatisches Vorhersagemodell. COSMO bedeutet Consortium for Small-Scale Modelling. Das COSMO-Modell basiert auf den thermohydrodynamischen Gleichungen, die kompressible Strömungen in einer feuchten Atmosphäre beschreiben. Im COSMO-Modell werden viele physikalische Prozesse (z.B. Turbulenz, Strahlungseffekte, Wolkenphysik) in Form verschiedener Parametrisierungsschemata berücksichtigt. Das Gitter, in dem die Modellgleichungen gelöst werden, ist eines, in dem die geographischen Koordinaten geeignet rotiert werden. Geeignet heißt hier, dass der geographische Nordpol so verschoben wird, dass im eigentlichen Modellgebiet die Größe der einzelnen Gitterzellen nicht stark variiert. In der Vertikalen wird eine generalisierte geländefolgende Koordinate verwendet.

Der DWD entwickelte die erste Version des COSMO-Modells. Zusammen mit dem übergeordneten Europamodell, dem sogenannten Global-Modell (GME), und in Verbindung mit einer entsprechenden Datenassimilation findet es seit 1999 Anwendung in der operationellen Vorhersage des DWD und wird seitdem ständig weiterentwickelt.

### 3.1.1. Prognostische Gleichungen und deren Lösungen

Das COSMO-Modell beruht auf den dynamischen Grundgleichungen (Euler-Gleichungen) ohne jegliche Skalenapproximation. Turbulenz wird durch die Reynoldsmittelung berücksichtigt. Da der Anwendungsbereich des COSMO-Modells sowohl die meso- $\beta$ - als auch die meso- $\gamma$ -Skala beinhalten soll und nicht-hydrostatische Effekte auf kleinen Skalen eine wichtige Rolle spielen, werden diese bei der Berechnung der Vertikalgeschwindigkeit durch eine prognostische Gleichung berücksichtigt. Die Lösung beinhaltet dadurch auch Schallwellen, die einen sehr kleinen Zeitschritt bei der Integration erfordern. Im COSMO-Modell wird ein "time-splitting"-Verfahren verwendet, wie es zuerst von (Klemp und Wilhelmson, 1978) vorgestellt wurde, um die numerische Effizienz zu verbessern. Massenerhaltung ist im COSMO-Modell nicht a priori gegeben, sie hängt vielmehr von der numerischen Genauigkeit ab.

Um eine möglichst geeignete mathematische Beschreibung der Atmosphäre zu erhalten, wird diese als ideales Gasgemisch aus trockener Luft, Wasserdampf, Flüssigwasser und gefrorenem Wasser angesehen. Für die wolkenmikrophysikalischen Prozesse wird, wie in dieser Arbeit, das Zwei-Momenten-Schema (Seifert, 2002) verwendet. Diese Parametrisierung unterscheidet Flüssigwasser und gefrorenes Wasser in sieben Hydrometeorarten, um die Wolkenmikrophysik besser darstellen zu können (siehe Kapitel 3.2).

Im COSMO-Modell gibt es eine Reihe thermodynamischer Approximationen. So werden zum Beispiel molekulare Flüsse mit Ausnahme der Diffusionsflüsse von Flüssigwasser und gefrorenem Wasser gänzlich vernachlässigt, da sie deutlich kleiner als die turbulenten Flüsse sind. In der Drucktendenzgleichung wird der Einfluss der diffusiven Flüsse von Wasser und der von Phasenänderungen vernachlässigt. Des Weiteren wird in der Temperaturgleichung die spezifische Wärmekapazität feuchter Luft durch die trockener Luft genähert. Ganz vernachlässigt werden in dieser Gleichung zudem die Auftriebswärmefluss, der Feuchtefluss und die Dissipation in Folge von Reibung.

Daraus ergeben sich folgende Gleichungen, die als prognostische Variablen den Wind mit seinen drei Komponenten, den Druck, die Temperatur und die verschiedenen Phasen von Wasser beinhalten (Variablen siehe Symbolverzeichnis)

Impulsbilanzgleichung

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

Drucktendenzgleichung

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

Temperaturgleichung

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

Bilanzgleichung für Wasserdampf

$$\rho \frac{dx_v}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \overline{F_v} - (I_f + I_l) \quad (3.4)$$

Bilanzgleichung für Wolkenwasser

$$\rho \frac{dx_{l,f}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot (p_{v,p} \vec{v} + \overline{F_{v,p}}) + I_{l,f} \quad (3.5)$$

Gasgleichung

$$\rho = \frac{p}{R_d \left[ 1 + \left( \frac{R_v}{R_d} - 1 \right) x_v + x_l + x_f \right] T} \quad (3.6)$$

Diabatische Wärmeproduktion

$$Q_h = l_v I_l + l_s I_f - \vec{\nabla} \cdot (\vec{H}_f + \vec{R}) \quad (3.7)$$

Die obigen Gleichungen sind in jedem starr rotierenden Koordinatensystem gültig. Im COSMO-Modell werden die Gleichungen vor der Implementierung noch in geographische Koordinaten mit einer geländefolgenden Vertikalkoordinate transformiert.

Zudem werden alle thermodynamischen Variablen als Summe eines Grundzustandes und einer Abweichung von diesem dargestellt. Der Grundzustand ist horizontal homogen, zeitunabhängig, im hydrostatischen Gleichgewicht, befindet sich in Ruhe und die Atmosphäre wird als trocken angenommen.

Der Grund für die Einführung eines solchen Referenzzustandes liegt darin, dass dadurch numerische Fehler verringert werden. So verschwinden in der Bewegungsgleichung die Terme, die den horizontalen Druckgradienten beinhalten, falls die Abweichung des Druckes von seinem Referenzwert nicht allzu groß ist. Für jede thermodynamische Variable  $\Psi$  an einem beliebigen Ort gilt damit

$$\Psi(\lambda, \varphi, z, t) = \Psi_0(z) + \Psi'(\lambda, \varphi, z, t), \quad (3.8)$$

wobei  $\lambda$  die geographische Länge,  $\varphi$  die geographische Breite,  $z$  die Höhe und  $t$  die Zeit bezeichnet.  $\Psi_0$  beschreibt den Anteil einer thermodynamischen Variable des Grundzustandes und  $\Psi'$  den der Abweichung.

Die Diskretisierung der Euler-Gleichungen erfolgt mit der Methode der zentrierten finiten Differenzen zweiter Ordnung. Diese werden auf einem regulären, rechtwinkligen Gitter berechnet. In der Horizontalen wird ein Arakawa-C-Gitter und in der Vertikalen ein Lorenz-Staggered-Gitter mit einem rotierten geographischen Koordinatensystem verwendet. In Abbildung 3.1 ist eine Gitterzelle dieses Typs dargestellt. In der Grafik bezeichnen  $u$ ,  $v$  und  $w$  die Komponenten des

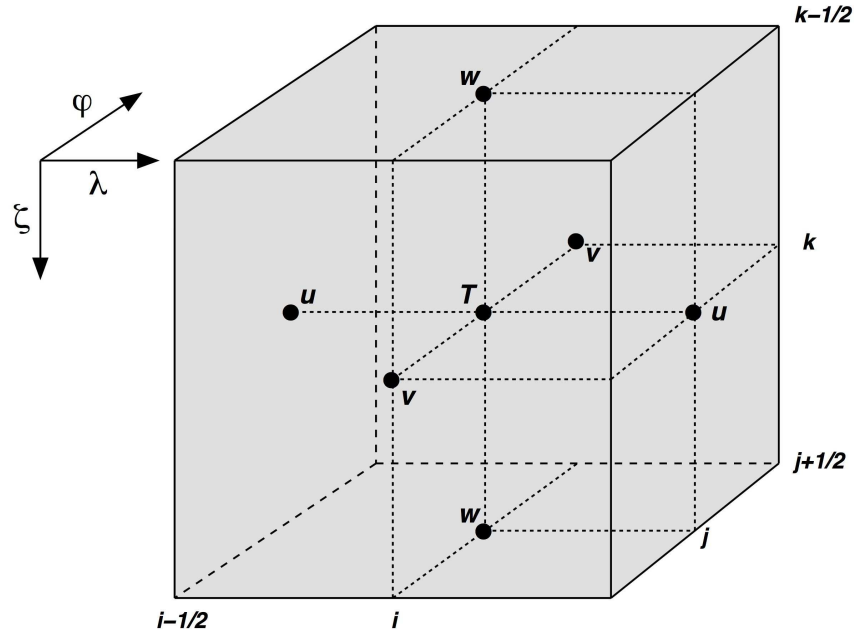


Abbildung 3.1.: Gittervolumen mit Anordnung der prognostischen Variablen auf einem Arakawa-C / Lorenz-Staggered Gitter. T repräsentiert hierbei alle skalaren Variablen (Doms und Schättler, 2002)

Windvektors und  $T$  steht stellvertretend für alle intensiven Größen.

Die Zeitintegration erfolgt mittels eines festen Zeitschrittes  $\Delta t$ . Zwecks numerischer Stabilität ist dabei auf die Einhaltung des CFL-Kriteriums  $u_{prop} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$  zu achten, wobei  $\Delta x$  den horizontalen Gitterabstand und  $u_{prop}$  die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Schallwellen bezeichnet. im COSMO-Modell können verschiedene Zeitintegrations-Schemata verwendet werden. In dieser Arbeit findet das Zwei-Schritt-Runge-Kutta-Verfahren Anwendung. Wie bereits erwähnt wird ein "time-splitting"-Verfahren nach Klemp und Wilhelmson (1978) zur Verbesserung der numerischen Effizienz eingesetzt. Innerhalb dieses Verfahrens werden die prognostischen Gleichungen in zwei Anteile unterteilt, wobei der eine Teil die Änderungen, die direkt mit den Schallwellen und Schwerewellen zusammenhängen, berücksichtigt und der andere Änderungen durch langsame Moden beinhaltet.

Für jede thermodynamische Variable  $\Psi$  gilt damit

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = s_{\Psi} + f_{\Psi}, \quad (3.9)$$

wobei  $f_{\Psi}$  den Term, der durch die Kräfte der langsamen Moden verursacht wird, und  $s_{\Psi}$  den durch akustische und Schwerewellen verursachten Quellterm beschreibt. Um die explizite Zeitintegration nun effizienter zu machen, wird ein kleiner Zeitschritt  $\Delta t_s$  für die schnellen Änderungen  $s_{\Psi}$  und

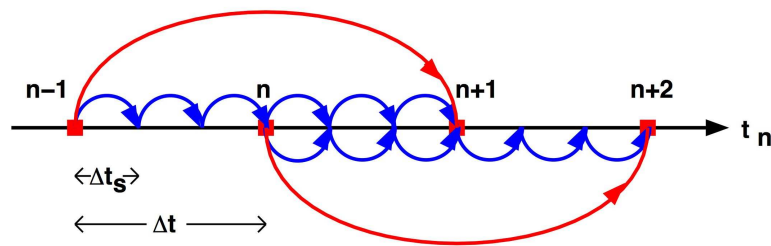


Abbildung 3.2.: Schematische Darstellung des Klemp-Wilhelmsen “time-splitting”-Algorithmus (Doms und Schättler, 2002)

ein ganzes Vielfaches davon  $\Delta t$  für die langsamen Änderungen  $f_\psi$  bestimmt. Berechnet werden die kleinen Änderungen so für jeden Zeitschritt  $\Delta t_s$  und die langsamen Änderungen nur für die größeren Zeitschritte  $\Delta t$  (siehe Abbildung 3.2). Dadurch wird der Rechenaufwand deutlich reduziert.

Ein wichtiger Punkt für die numerische Lösung der Gleichungen ist das Einspeisen von Anfangswerten zu Beginn der Simulation sowie das Einspeisen von Randwerten während der Simulation. Als Anfangsdaten können hierbei Daten aus dem Globalmodell mit kleinerer Auflösung oder idealisierte Daten verwendet werden. Während der Simulation können die Randdaten aus externen Datensätzen benutzt werden oder es können periodische sowie feste Ränder verwendet werden. Damit an den Rändern kein numerisches Rauschen auftritt, wird an den seitlichen Rändern die Relaxationsmethode nach Davies (1976 und 1983) und am Oberrand die Rayleigh-Dämpfung verwendet.

Da es sehr rechenintensiv wäre, alle physikalischen Prozesse vollständig während der Simulation zu lösen, werden sie im COSMO-Modell durch Parametrisierungen genähert. So wird zum Beispiel subskalige Turbulenz innerhalb der Grenzschicht und in der freien Atmosphäre mit Hilfe einer prognostischen Schließung der Ordnung 2,5 nach Mellor und Yamada (1974) approximiert. Eine weitere Parametrisierung, die die Wolkenmikrophysik besser darstellen soll, ist das schon erwähnte Zwei-Momenten-Schema nach Seifert (2002). Zudem werden in der Strahlenabsorption, der Berechnung der Oberflächenflüsse und der Konvektion Parametrisierungen verwendet.

## 3.2. Das Zwei-Momenten-Wolkenmikrophysikschema

Wolken sind ein sehr wichtiger Teil der Atmosphäre und des Klimasystems. Daher sollte ihnen und ihrer expliziten Darstellung in Wettermodellen besondere Aufmerksamkeit geschenkt werden. Da jede einzelne Wolke selbst ein sehr kompliziertes nichtlineares Teilsystem der Atmosphäre ist, fällt es schwer, dies in den Modellen umfassend darzustellen. Es muss ein Kompromiss gefunden

werden zwischen der detaillierten, aber sehr zeitintensiven Darstellung mit Hilfe spektraler Bilanzgleichungen der Verteilungsfunktionen vieler Hydrometeorarten und einer groben, aber sehr effizienten Parametrisierung, die nur einzelne Integrale der Verteilungsfunktion beinhaltet.

Seifert und Beheng (Seifert, 2002 und 2006a) entwickelten in diesem Zusammenhang für das COSMO-Modell das Zwei-Momenten-Schema. Innerhalb dieser Parametrisierung wird die Entwicklung der Masse sowie der Anzahldichte für die sechs verschiedenen Hydrometeorarten Wolkentropfen, Regentropfen, Wolkeneis, Schnee, Graupel sowie für den Wasserdampf berechnet. Blahak (2010) erweiterte dieses Schema um eine weitere Hydrometeorart, den Hagel.

### 3.2.1. Theoretische Formulierung

Jede Wolke ist ein polydisperses heterogenes System. Im Allgemeinen werden die Eigenschaften eines solchen Systems durch die Momente der Anzahldichteverteilungsfunktion  $f(x)$  beschrieben. Diese Momente werden meist auf die Teilchenmasse bezogen. Exemplarisch wird im Folgenden auf die Momente der Tropfenanzahldichteverteilungsfunktion  $f_w(x)$  eingegangen. Das  $k$ -te Moment ist dann mit der Masse  $x$  definiert als

$$M_w^k = \int_0^\infty x^k f_w(x) dx. \quad (3.10)$$

Die Tropfenanzahldichteverteilungsfunktion  $f_w(x)$  wird dabei oft durch eine generalisierte  $\Gamma$ -Funktion mit vier Parametern genähert. Es gilt

$$f_w(x) = Ax^\nu e^{-\lambda x^{-\mu}}. \quad (3.11)$$

Falls  $\mu = 1$  ist, reduziert sich die generalisierte  $\Gamma$ -Verteilung auf die klassische  $\Gamma$ -Verteilung, im Fall von  $\nu = \mu - 1$  auf die Weibull-Verteilung und im Fall von  $\mu = 1$  sowie  $\nu = 0$  auf einer Exponentialverteilung. Die Parameter  $A$  und  $\lambda$  können mit Hilfe der Massendichte von Flüssigwasser  $L$  und der Anzahldichte  $N$  der Tropfen wie folgt berechnet werden

$$A = \frac{\mu N}{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{\mu}\right)} \lambda^{\frac{\nu+1}{\mu}} \quad (3.12)$$

und

$$\lambda = \left[ \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+2}{\mu}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{\mu}\right)} \bar{x} \right]^{-\mu}, \quad (3.13)$$

wobei  $\bar{x} = \frac{L}{N}$  die mittlere Masse bezeichnet.



Für die Prozesse der flüssigen Phase wird die Tropfenanzahldichteverteilungsfunktion mit Hilfe der Tropfentrennmasse  $x^*$  in die Anzahldichteverteilungsfunktion von Wolkentropfen  $f_c(x)$  und die von Regentropfen  $f_r(x)$  aufgeteilt. Kessler (1969) war der erste, der diese beiden Partikelklassen, die Wolken- und Regentropfen, definierte. Die Grundidee dabei war, dass Wolken- und Regentropfen über völlig unterschiedliche Eigenschaften verfügen können. So besitzen Wolkentropfen vernachlässigbare Fallgeschwindigkeiten, während die Fallgeschwindigkeiten der Regentropfen mehrere Meter pro Sekunde betragen können. Zudem weisen Wolkentropfen anders als Regentropfen ein gasähnliches Verhalten auf. Kessler selbst machte damals jedoch keine Aussage über die Tropfentrennmasse  $x^*$ . Diese wurde erst später durch die numerischen Lösung der stochastischen Koagulationsgleichung bestimmt (Pruppacher und Klett, 1996). Sie ist gegeben als  $x^* = 2,6 \cdot 10^{-10}$  kg, was einem Radius von  $r^* = 40 \mu\text{m}$  entspricht (Beheng, 1986b). Unter Verwendung von  $x^*$  lassen sich folgende Momente der Verteilungsfunktion bilden

$$\text{im Wolkentropfenbereich: } M_c^k = \int_0^{x^*} x^k f_w(x) dx = \int_0^\infty x^k f_c(x) dx \quad (3.14)$$

$$\text{im Regentropfenbereich: } M_r^k = \int_{x^*}^\infty x^k f_w(x) dx = \int_0^\infty x^k f_r(x) dx. \quad (3.15)$$

Innerhalb des Zwei-Momente-Schemas werden das nullte sowie das erste Moment als unabhängige Variablen verwendet. Das nullte Moment entspricht der Anzahldichte der Wolkentropfen  $M_c^0 = N_c$  sowie der Anzahldichte der Regentropfen  $M_r^0 = N_r$  und das erste der Massendichte von Wolkentropfen  $M_c^1 = L_c$  und Regentropfen  $M_r^1 = L_r$ . Die Massendichte wird auch als Flüssigwassergehalt bezeichnet.

Im kartesischen Koordinatensystem  $(\vec{r}, t)$  lautet die Bilanzgleichung für ein Moment der partiellen Anzahldichteverteilungsfunktion  $M_i^k(\vec{r}, t)$  mit  $i \in \{c, r\}$

$$\frac{\partial M_i^k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [\vec{v} M_i^k] - \vec{\nabla} \cdot [K_h \vec{\nabla} M_i^k] + \frac{\partial}{\partial z} [\overline{v_{i,k}} M_i^k] = S_i^k. \quad (3.16)$$

Dabei ist  $K_h$  der turbulente Wärmediffusionskoeffizient,  $\overline{v_{i,k}}$  die mittleren Sedimentationsgeschwindigkeit eines Momentes  $M_i^k$  und  $S_i^k$  fasst die Quellterme eines Momentes  $M_i^k$  zusammen.

Innerhalb der Bilanzgleichungen werden Umwandlungsprozesse zwischen den einzelnen Partikelklassen sowie die Nukleationsprozesse mit Hilfe des Quellterms berücksichtigt. Abbildung 3.3 stellt alle diese Umwandlungsprozesse, die innerhalb des Zwei-Momenten-Schemas berücksichtigt werden, schematisch dar.

Die einzelnen Prozesse sind im Modell als Näherungen implementiert. So lautet zum Beispiel die exakte Form der Kollisions- bzw. Koagulationsfunktion von Tropfenstößen unter Vernachlässigung hydrodynamischer Strömungseffekte (Pruppacher und Klett, 1996)

$$K_g(x', x'') = \pi(r' + r'')^2 |v_T(r') - v_T(r'')| = K_g(r', r''), \quad (3.17)$$

wobei  $x'$  und  $x''$  die Massen der beiden Stoßpartner,  $r'$  und  $r''$  deren Radien und  $v_T$  die Sedimentationsgeschwindigkeiten der Partikel sind. Im Modell wird die Kollisions- bzw. Koagulationsfunktion von Tropfen durch folgenden Ansatz nach Long (1974) approximiert

$$\tilde{K}(x', x''; k_c, k_r) = \begin{cases} k_c(x'^2 + x''^2), & x', x'' < x^* \\ k_r(x' + x''), & \text{sonst} \end{cases}. \quad (3.18)$$

Bei  $k_c$  und  $k_r$  handelt es sich hierbei um Parameter, die von Seifert (2002) numerisch bestimmt wurden. Sie besitzen die Zahlenwerte  $k_c = 9,44 \cdot 10^9 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-3} \text{ s}^{-1}$  sowie  $k_r = 5,78 \cdot 10^3 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

Im Vergleich zu den meisten heutigen Wolken-Modellen wird im Zwei-Momenten-Schema auch die Nukleation von Wolkentropfen explizit berechnet. Dabei werden Nachschlagetabellen nach Segal und Khain (2006) verwendet (siehe Kapitel 4.2.1).

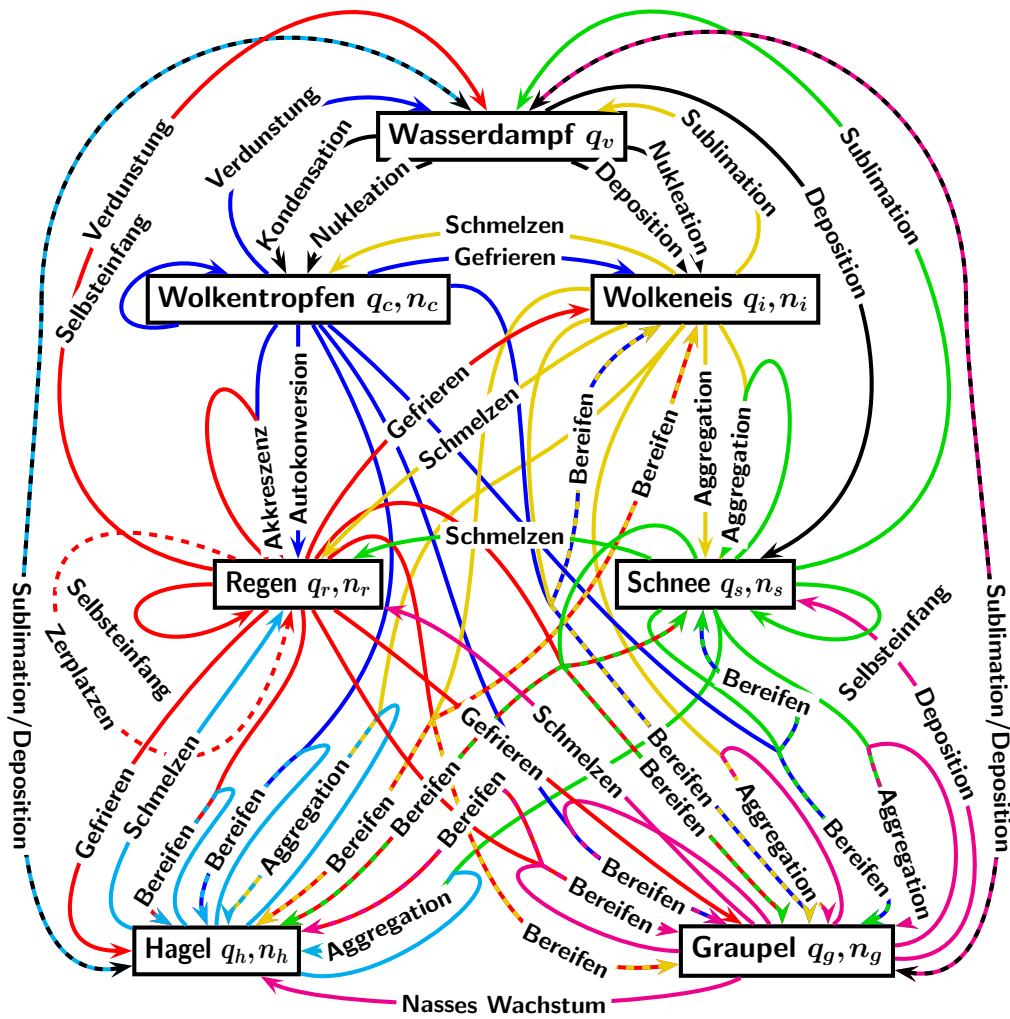


Abbildung 3.3.: Schematische Darstellung der wolkenmikrophysikalischen Prozesse



## **4. Das Auswaschen von Aerosolpartikeln infolge von Wolkentropfenbildung**

Wie eingangs bereits erwähnt, ist in der Troposphäre die Bildung von Wolkentropfen aus reinem Wasser praktisch unmöglich, weil die dazu nötige Übersättigung von mehreren hundert Prozent in der Atmosphäre nicht vorkommt. Sie findet vielmehr mit Hilfe von Aerosolpartikeln statt, die als Kondensationskeime wirken. In dieser Form können Aerosolpartikel einen großen Einfluss auf die Wolkentropfenbildung und damit auch die Entwicklung von Wolken und Niederschlag besitzen. Gibt es in einer Region nur wenige Aerosole, so stehen dementsprechend auch nur wenige Kondensationskerne für die Wolkentropfenbildung zur Verfügung und dementsprechend können auch nur wenige Tropfen gebildet werden. Außerdem werden der Atmosphäre durch die Wolkentropfenbildung wiederum Aerosole entzogen, die im weiteren Verlauf nicht mehr als Kondensationskerne dienen können.

Das folgende Kapitel widmet sich diesem Themenkreis, wobei zuerst die physikalischen Vorgänge bei der Tropfenbildung an Aerosolen behandelt werden. Im Anschluss daran werden verschiedene Möglichkeiten der Parametrisierung vorgestellt, die in Rahmen der vorliegenden Arbeit in das Zwei-Momenten-Schema implementiert worden sind beziehungsweise die dort schon enthalten waren. Außerdem wurde mit Hilfe einer rudimentären prognostischen Behandlung der Anzahldichte von Aerosolen und bereits aktivierten Aerosolen als transportierte Variablen eine einfache und effiziente Möglichkeit der Verbesserung der Aktivierungsbehandlung im Zwei-Momenten-Schema geschaffen, die für einfache idealisierte Sensitivitätsstudien gedacht ist und die in Abschnitt 4.2.2 beschrieben wird. Das Kapitel schließt mit den Ergebnisse einer idealisierten Studie einer warmluftblasenausgelösten konvektiven Einzelzelle, an Hand derer der Einfluss der verschiedenen Parametrisierungen untersucht wurde.

### **4.1. Die theoretische Beschreibung des Nucleation Aerosol Scavenging**

Aerosolpartikel können wie eingangs erwähnt aus der Atmosphäre entfernt werden, indem sie als Kondensationskerne dienen und somit von Tropfen aufgenommen werden. Dies geschieht immer, wenn vorhandene Aerosole in ein wasserdampfübersättigtes Gebiet gelangen. Hier wird ein Teil von ihnen durch Nukleation zu Kondensationskernen aktiviert. Die Anzahl der aktivierten Partikel ist im Wesentlichen davon abhängig, wie groß die kritische Übersättigung ist und welche

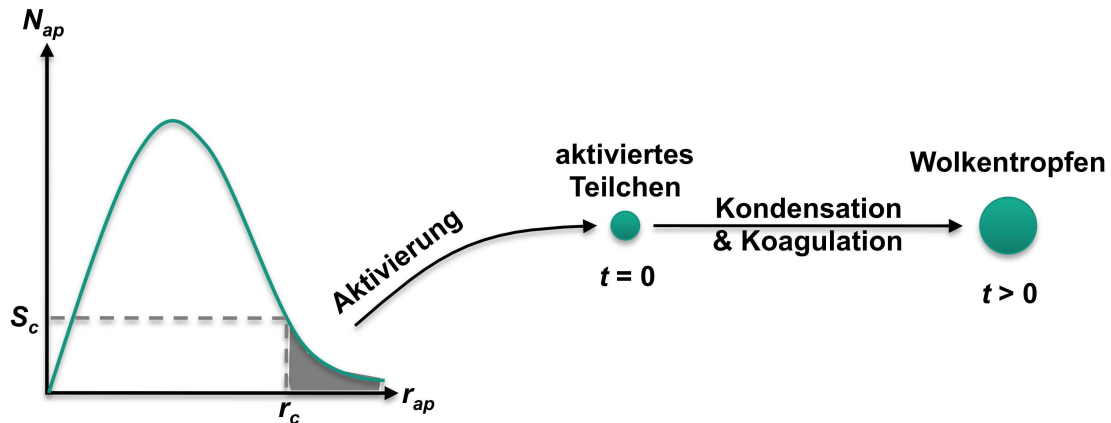


Abbildung 4.1.: Schematische Darstellung des NAS

Größenverteilung die Partikel besitzen.

Zudem können Aerosolpartikel auch innerhalb von Eiswolken aktiviert werden. Hier existieren neben den Kondensationskernen noch sogenannte Eiskeime. Dabei handelt es sich meist um wasserunlösliche Mineralstaub oder ähnlichen Partikeln. Da aber bis heute die Theorie der Nukleation in der Eisphase noch nicht hinreichend genau geklärt ist, werden nachfolgend diese Prozesse nicht behandelt.

In der Wolkenmikrophysik wird die im Allgemeinen sehr schnell ablaufende Nukleation als quasi unendlich schneller Prozess im thermodynamischen Gleichgewicht angesehen. Die Zeit spielt bei der numerischen Behandlung also keine Rolle. Aerosole, die bei einer gegebenen Übersättigung aktiviert werden, können im weiteren Verlauf in Folge von Wachstum durch Kondensation und Koagulation zu Wolkentropfen anwachsen.

In Folge des Wachstums von aktivierten Teilchen zu Wolkentropfen besteht bereits die Möglichkeit Aerosolpartikel schon während der Wolkentropfenbildung aus der Atmosphäre zu entfernen. Dieser Auswaschprozess wird nachfolgend mit Nucleation Aerosol Scavenging (NAS) bezeichnet. In Abbildung 4.1 ist er schematisch dargestellt.

Unter der Annahme, dass Aerosole wasserlöslich sind und die Bildung von Kondensationskernen ein quasistatischer reversibler Prozess ist, kann mit Hilfe des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik, genauer aus dem Beitrag der Phasenumwandlungen zur Dissipationsfunktion, eine exakte Gleichung für den Sättigungsdampfdruck bei Phasengleichgewicht für einen Lösungstropfen mit Radius  $r$  hergeleitet werden (Beheng, 2008).

Dessen thermodynamisches Gleichgewichtsverhalten wird dann durch zwei gegensätzlich wirkende Effekte bestimmt: zum einen ist der Sättigungsdampfdruck über einer gekrümmten Oberfläche

größer als über einer geraden (Thompson-Effekt), gleichzeitig wird er aber durch gelöste Salzionen in der Flüssigkeit erniedrigt (Raoult'sches Gesetz). Die resultierende Gleichgewichts-Übersättigung  $S = p_{wd}/p_{wd,\infty} - 1$  wird dann durch die bekannte Köhler-Formulierung (Köhler, 1922) in Abhängigkeit des Tropfenradius beschrieben.  $p_{wd}$  bezeichnet den Sättigungsdampfdruck über der gekrümmten Lösungsfläche und  $p_{wd,\infty}$  denjenigen über der ebenen Wasserfläche. Für die sogenannte Köhler-Kurve gilt in guter Näherung

$$S = A_{Köhler}r^{-1} - B_{Köhler}r^{-3}. \quad (4.1)$$

Die Konstanten  $A_{Köhler}$  und  $B_{Köhler}$  berücksichtigen hierbei die beiden auftretenden Effekte, den Krümmungseffekt durch  $A_{Köhler}$  und den Lösungseffekt durch  $B_{Köhler}$ . Für sie gilt (Variablen siehe Symbolverzeichnis)

$$A_{Köhler} = \frac{2M_w\sigma_w}{RT\rho_w} \quad (4.2)$$

$$B_{Köhler} = \frac{3\nu\phi_s\epsilon M_w m_{ap}}{M_{ap}\rho_w}. \quad (4.3)$$

In Abbildung 4.2 ist die Köhler-Kurve schematisch für eine konstante Salzmasse dargestellt. Auf der Abszisse ist hierbei der Tropfenradius  $r$  logarithmisch aufgetragen und auf der Ordinate das Sättigungsverhältnis  $p_{wd}/p_{wd,\infty}$  beziehungsweise die Übersättigung  $S = p_{wd}/p_{wd,\infty} - 1$ . Kurve 1 in der Abbildung spiegelt den Krümmungseffekt und Kurve 2 den Lösungseffekt wieder. Die Köhlerkurve, Kurve 3, ergibt sich als Summe beider. Sie besitzt ein Maximum bei  $(r_c, S_c)$ . Dabei gilt

$$r_c = \sqrt{\frac{3B_{Köhler}}{A_{Köhler}}} \quad \text{und} \quad S_c = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{A_{Köhler}^3}{3B_{Köhler}}}. \quad (4.4)$$

Mit Hilfe der Köhler-Kurve können nun verschiedene Szenarien theoretisch betrachtet werden.

Wird zum Beispiel die Übersättigung  $S$  langsam von Werten kleiner null bis zur kritischen Übersättigung  $S_c$  erhöht, so wird an einem Aerosolpartikel Wasser kondensieren, wobei es immer einen Gleichgewichtsradius, der kleiner oder gleich dem kritischen Radius  $r_c$  ist, annehmen wird. Dieser wird von null bis auf den kritischen Radius bei Erreichen der kritischen Übersättigung anwachsen. Oberhalb der kritischen Übersättigung existiert kein Gleichgewichtsradius mehr; der Tropfen würde in diesem Fall unaufhaltsam wachsen.

Interessant ist auch der Bereich zwischen der Übersättigung  $S = 0$  und der kritischen Übersättigung  $S_c$ . Wird eine spontane Übersättigung innerhalb dieses Bereichs hergestellt, so existieren immer zwei Gleichgewichtsradien  $r_1$  und  $r_2$  gleichzeitig. Einer dieser beiden Radien ist dabei stabil, während der andere labil ist. So führt eine infinitesimale Radienzunahme bei  $r_1$  dazu, dass sich der Tropfen in einem Zustand mit höheren Gleichgewichtsdampfdruck befindet. Er gibt dann spontan soviel Wasserdampf ab, dass er wieder seinen ursprünglichen Gleichgewichtsradius

$r_1$  erreicht. Dieser Radius ist demnach stabil. Eine infinitesimale Radienzunahme bei  $r_2$  führt hingegen dazu, dass sich der Tropfen in einem Zustand mit kleinerem Gleichgewichtsdampfdruck befindet. Er wächst infolge dessen unaufhaltsam weiter. Findet eine infinitesimale Radienabnahme bei  $r_2$  statt, befindet er sich in einem Gebiet mit höherem Gleichgewichtsdampfdruck. Er verdunstet daraufhin solange, bis er auf der anderen Seite der kritischen Übersättigung wieder die Köhler-Kurve erreicht. Somit lässt sich abschließend festhalten, dass alle Radien kleiner als der kritische Radius stabil und alle Radien größer als der kritische Radius instabil sind. Häufig wird dabei auch von dem stabilen und dem labilen Ast der Köhler-Kurve gesprochen.

Lösungstropfen können also dann unbeschränkt wachsen, wenn für ihre Radien  $r > r_c$  gilt. Um Partikel zu aktivieren, müssen sie vom stabilen Ast auf den labilen überführt werden. Dafür muss in der Umgebung die kritische Übersättigung erreicht werden. Für die Aerosole bedeutet dies, dass all diejenigen von ihnen aktiviert werden, deren kritische Übersättigung kleiner als die aktuelle Wasserdampfübersättigung ist.

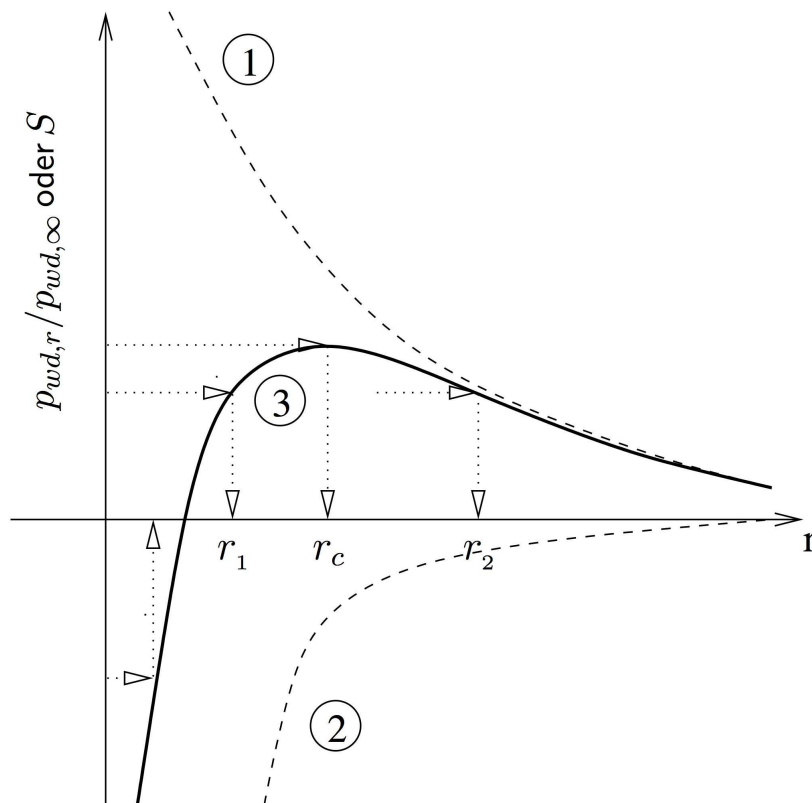


Abbildung 4.2.: Schematische Darstellung des Sättigungsverhältnis  $p_{wd,r}/p_{wd,\infty}$  (oder der Übersättigung) als Funktion des Gleichgewichtsradius  $r$  von Tropfen (Köhler-Kurve) für eine konstante Salzmasse (Beheng, 2009).



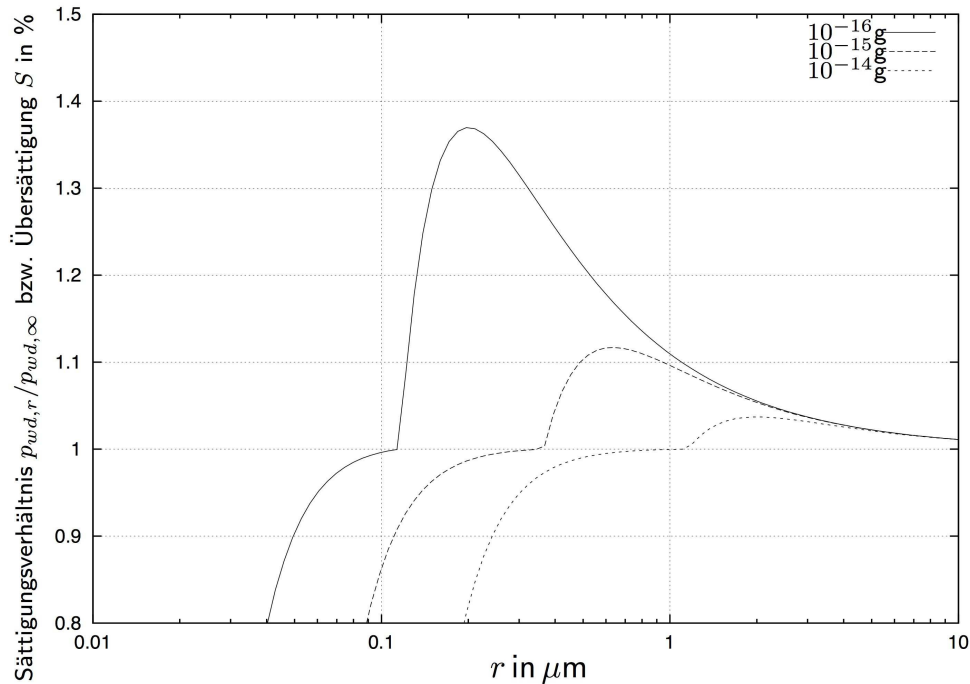


Abbildung 4.3.: Sättigungsverhältnis  $\frac{p_{wd}}{p_{wd,\infty}}$  als Funktion des Gleichgewichtsradius  $r$  von Tropfen (Köhler-Kurve) für unterschiedlich konstante Salzmassen bei  $T = 20^\circ\text{C}$  (Beheng, 2009).

Die kritische Übersättigung der einzelnen Aerosolpartikel ist dabei nicht allein von ihrem Radius, sondern auch von ihrer chemischen Zusammensetzung abhängig. So ergeben sich für Aerosole mit unterschiedlichen Salzmassen unterschiedliche Köhler-Kurven. In Abbildung 4.3 sind die Köhler-Kurven für drei verschiedene Salzmassen dargestellt. Darin ist gut erkennbar, dass der kritische Radius mit zunehmender Salzmasse zunimmt, während die kritische Übersättigung abnimmt. Große Aerosole werden also schon bei kleiner Übersättigung  $S$  aktiviert als kleinere derselben Art.

## 4.2. Die Parametrisierung im COSMO-Modell

Obwohl die exakte Theorie sicherlich die adäquateste Darstellung der Nukleation wäre, ist diese jedoch nicht für das COSMO-Modell und das Zwei-Momenten-Schema geeignet. Denn zum einen wäre der Rechenaufwand zu groß und zum anderen ist die Berechnung der Übersättigung ein allgemeines Problem im COSMO-Modell, da sie stark mit Fehlern belastet ist. Deswegen ist eine Parametrisierung, die sich nicht auf die Übersättigung, sondern im Wesentlichen auf die Größenverteilungsparameter der Aerosole und auf die Vertikalgeschwindigkeit stützt, eine bessere Methode die Nukleation im Modell darzustellen. In den folgenden Abschnitten werden verschiedene derartige Parametrisierungen aus der Literatur für die Nukleation vorgestellt.

### 4.2.1. Bisherige Parametrisierung im Zwei-Momenten-Schema

Bislang ist die Nukleation von Wolkentropfen innerhalb des Zwei-Momenten-Schemas mit Hilfe der Nachschlagetabellen von Segal und Khain (2006), nachfolgend mit SK06 abgekürzt, implementiert, wobei die Tabellen 4a-d, 5a-d und 6a-d verwendet werden. SK06 wollten mit diesen Nachschlagetabellen Wolkenmodellen eine effiziente Parametrisierung der Wolkentropfenanzahl an der Wolkenbasis bereitstellen.

Die Tabellen beruhen dabei auf den Ergebnissen eines sehr genauen mikrophysikalischen Wolkenmodells. Dies ist ein spektrales Modell, das zur Beschreibung der Größenverteilung der Aerosole 2000 Größenklassen benutzt. Unter Verwendung eines Zeitschrittes von 0,001 s soll zudem eine sehr detaillierte Beschreibung des Wachstums und der Transformation der Aerosolpartikel zu Wolkentropfen ermöglicht werden. Die Aerosole werden dabei als vollkommen löslich angenommen. Zudem beinhaltet das Modell auch eine detaillierte Beschreibung der Kollisionen von Tropfen untereinander. Für die Tabellen bestimmten die Autoren die Anzahl der aktivierten Aerosole in einer Schicht von 10 - 20 m oberhalb der Wolkenuntergrenze für verschiedene Anfangszustände der Umgebung.

In den Nachschlagetabellen ist die Anzahl der an der Wolkenbasis nukleierten Wolkentropfen als Funktion von vier Parametern angegeben. Die Parameter sind: (1) die Konzentration der Kondensationskerne beziehungsweise der Aerosolteilchen  $N_{ap}$ , (2) die Vertikalgeschwindigkeit an der Wolkenbasis, (3) die Breite der Verteilungsfunktion der Kondensationskerne und (4) der mittlere Aerosolradius. Die Tabellen sind dabei sowohl für konvektive als auch für stratiforme Wolken anwendbar, da in den Tabellen die Werte für die Vertikalgeschwindigkeit an der Wolkenbasis zwischen 0,5 und 5 m s<sup>-1</sup> liegen. Für die Konzentration der Kondensationskerne liegen die Werte der Nachschlagetabellen in einem Intervall von 200 cm<sup>-3</sup> bis 6400 cm<sup>-3</sup>. Für die Breite der Verteilungsfunktion der Kondensationskerne liegt das Intervall zwischen 0,1 und 0,5 und für den mittleren Aerosolradius zwischen 0,02 μm und 0,04 μm. Ferner kamen SK06 zu dem Ergebnis, dass der ausschlaggebende Faktor für die Anzahl der gebildeten Wolkentropfen die Anzahl der Kondensationskerne ist. Die drei anderen Parameter spielen nur eine untergeordnete Rolle.

Im Zwei-Momenten-Schema wird zu Beginn eines Zeitschrittes im Rahmen eines Prozess-Splitting-Verfahrens vor den allen anderen Parametrisierungen des Schemas die Nukleation berechnet. Dabei wird zuerst geprüft, ob an einem Gitterpunkt überhaupt Übersättigung und eine Vertikalbewegung nach oben vorliegt. Ist dies der Fall, wird die Anzahl der Wolkentropfen für diesen Gitterpunkt mit Hilfe der Nachschlagetabellen von SK06 bestimmt. Liegt die in der betroffenen Gitterzelle schon vorhandene Wolkentropfenanzahl unter der so bestimmten, werden instantan die fehlenden Wolkentropfen mit einem vordefinierten Radius nachgebildet. Sollte am Ende des Zeitschrittes, nach der Berechnung der anderen Wolkenprozesse, immer noch Übersättigung an einem Gitterpunkt vorliegen, so wird abschließend eine sogenannte Sättigungsadjustierung durchgeführt, bei der aller „übersättigter“ Wasserdampf den Wolkentropfen zugeschlagen wird.

nun immer noch Übersättigung an einem Gitterpunkt vorliegen, so wird zum Schluss der Nukleationsparametrisierung eine Sättigungsadjustierung durchgeführt.

### 4.2.2. Erweiterung der Parametrisierung um Aerosolprozesse

Die Parametrisierung, wie sie bislang im Zwei-Momenten-Schema implementiert ist, weist zwei große Mängel auf. Beide treten dabei in Verbindung mit der Darstellung der Aerosole innerhalb des Modells auf.

So handelt es sich zum einen um den begrenzenden Faktor bei der Bildung neuer Wolkentropfen. In der bisherigen Parametrisierung wird hierfür die aktuelle Wolkentropfenanzahl an einem Gitterpunkt verwendet. Liegt also die Anzahl der Wolkentropfen, die mit Hilfe der Nachschlagetabellen von SK06 berechnet wird, unter der aktuellen, werden instantan Tropfen nachgebildet. Dabei ist es vollkommen unerheblich, wie viele Wolkentropfen insgesamt schon an einem einzelnen Gitterpunkt gebildet und vielleicht schon zu Regentropfen umgewandelt wurden. Das Modell besitzt also hinsichtlich der Gesamtzahl der gebildeten Wolkentropfen keinerlei Gedächtnis. So kann es vorkommen, dass in Summe an einem Gitterpunkt deutlich mehr Wolkentropfen gebildet werden, als überhaupt Aerosole vorhanden sind. Eigentlich sollten in der Parametrisierung wie in der Realität alle Aerosole nur einmal aktiviert werden können und im Weiteren dem Modell als Kondensationskerne entzogen werden.

Zum anderen vernachlässigt die bisherige Parametrisierung den dynamischen Einfluss der Konvektion bei der Wolkentropfenbildung. In der Atmosphäre werden durch Konvektion permanent neue Aerosole aus der Grenzschicht zur Wolkenbasis advehiert. Dadurch existiert in der Realität ein ständiges Reservoir an nicht aktivierten Aerosolen an der Basis. In der Parametrisierung wird allerdings eine zeitlich und räumlich konstante Verteilung der Aerosole angenommen. Der dynamische Effekt kann also nicht berücksichtigt werden. Falls alle Aerosole in einem Gebiet aktiviert sein sollten, gibt es bisher keinerlei Möglichkeit noch nicht aktivierte Aerosole dorthin zu advehieren. Die Bildung neuer Wolkentropfen wäre demnach nicht mehr möglich.

Diese beiden Mängel sind mit Hilfe zweier neuer Variablen zu beheben. Zum einen handelt es sich dabei um die Aerosolanzahl  $N_{ap}$ , die den dynamischen Einfluss darstellt, und zum anderen um die Anzahl der aktivierten Aerosole  $N_{ac}$ , die als begrenzender Faktor für die Neubildung von Wolkentropfen verwendet wird.

Für diese beiden neuen Variablen sollen die folgenden einfachen Bilanzgleichungen gelten

$$\frac{\partial N_{ap}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [\vec{v}(\vec{r}, t) N_{ap}(\vec{r}, t)] = 0. \quad (4.5)$$

$N_{ap}$  wird also als einfacher passiver Tracer behandelt, so dass die Aerosolzahl der Einfachheit halber keine Quellen am Boden und auch keine Quellen durch homogene Nukleation aus der Gasphase aufweist. Sie dient hier lediglich dazu, sich die durch Wolken „ungestörte“ Anzahl zu merken.

Die Anzahl der aktivierten Aerosole kann ebenso wie die Aerosolanzahl durch Advektion verändert werden, aber zudem kann sie sich in Folge der Bildung neuer Wolkentropfen erhöhen. Demnach muss für ihre Bilanzgleichung gelten

$$\frac{\partial N_{ac}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [\vec{v}(\vec{r}, t) N_{ac}(\vec{r}, t)] = S_{ac}. \quad (4.6)$$

Die an einem Gitterpunkt tatsächlich vorhandene Zahl freier, nicht in Tropfen gebundener Aerosole ist dann durch die Differenz  $N_{ap} - N_{ac}$  gegeben.

An dieser Stelle sei angemerkt, dass  $N_{ap}$  als nulltes Moment der Aerosolanzahldichteverteilung aufzufassen kann, das durch die Gleichungen (2.1) und (2.2) gegeben ist. Die Parameter dieser Verteilung stecken wiederum als Annahme in den Nachschlagetabellen von SK06.

Zur zeitlichen Integration dieser beiden Bilanzgleichungen werden noch Anfangs- und Randwerte benötigt. Hierfür kann entweder eine realistische gemessene, eine von einem anderen Modell simulierte oder eine idealisierte räumliche Verteilung gewählt werden. Da in den Bilanzgleichungen der Aerosole allerdings jegliche Aerosolphysik und Quellen vernachlässigt werden, sei an dieser Stelle angemerkt, dass diese Art der Behandlung nur in Simulationen mit beschränkter Simulationszeit verwendet werden kann.

### 4.2.3. Aktivierungsparametrisierung nach Reutter (2009a und 2009b)

Die Verwendung der Nachschlagetabellen nach SK06 ist eine Verbesserung des bisherigen Verfahrens, Nukleation innerhalb des Zwei-Momenten-Schemas zu parametrisieren, aber mit einer maximalen Aufwindgeschwindigkeit an der Wolkenbasis von  $5 \text{ m s}^{-1}$  ist ihr Gültigkeitsbereich stark eingeschränkt. Schon bei normalen Gewittern in den mittleren Breiten treten Vertikalgeschwindigkeiten von über  $10 \text{ m s}^{-1}$  auf. Aus diesem Grund entwickelte Reutter (2009a und 2009b), im Folgenden mit R09 abgekürzt, neue Nachschlagetabellen deren Werte Vertikalgeschwindigkeiten an der Wolkenbasis von  $0,25 \text{ m s}^{-1}$  bis  $20 \text{ m s}^{-1}$  umfassen. Auch für die Aerosolanzahl erweiterte er den Gültigkeitsbereich auf  $200 \text{ cm}^{-3}$  bis  $10^5 \text{ cm}^{-3}$ .

R09 verwendete hierfür ein von Simmel (2002 und 2006) entwickeltes spektrales Modell. Es besitzt eine detaillierte Beschreibung der Wolkenmikrophysik allerdings ohne Kollision-Koaleszenz Prozesse und Vermischungsprozesse an den Wolkenrändern. Vorherige Sensitivitätsstudien hatten gezeigt, dass sich durch Vernachlässigung dieser Prozesse eine deutlich höhere Effektivität errei-

chen lässt und zu den exakten Berechnungen nur eine minimale Abweichung von unter 1% auftritt. Aerosole werden im Vergleich zu dem Modell, das SK06 verwendet haben, nicht als vollständig wasserlöslich angenommen. Bei R09 kann der Hygroskopizitätsparameter frei gewählt werden. Für die Auflösung der Aerosol- und Tropfenverteilung werden im Modell 264 log-normal angeordnete Größenklassen zwischen 1nm und 3,5 nm und für die zeitliche Auflösung ein Zeitschritt von 0,01 s verwendet. Als Abbruchkriterium wird das Erreichen eines Flüssigwassergehaltes von  $8 \text{ g kg}^{-1}$  benutzt. Für die Nachschlagetabellen wird dann nach Abbruch jedes Modelllaufes die Anzahl der gebildeten Wolkentropfen bestimmt. Hierbei werden alle Wolkentropfen berücksichtigt, deren Radius größer ist als der kritische Radius bei der jeweiligen Übersättigung.

R09 stellte bei seinen Untersuchungen im Vergleich zu SK06 fest, dass nicht allein die Anzahl der Aerosole der ausschlaggebende Faktor der gebildeten Wolkentropfenanzahl ist. Vielmehr ist der Quotient aus Vertikalgeschwindigkeit an der Wolkenbasis und der Anzahl der Aerosole der entscheidende Faktor. Dabei konnten drei verschiedene Regime unterschieden werden: das “aerosol limited”-Regime, das “updraft-limited”-Regime und das “aerosol- and updraft-sensitive”-Regime. In dem “aerosol limited”-Regime ist der Quotient  $w/N_{ap}$  circa  $10^{-3} \text{ m s}^{-1} \text{ cm}^{-3}$ . Die Anzahl der aktivierten Aerosole ist in diesem Regime proportional zur Anzahl der vorhandenen Aerosole, wobei etwa 90% der vorhandenen Aerosole aktiviert werden. Falls der Quotient  $w/N_{ap}$  Werte von circa  $10^{-4} \text{ m s}^{-1} \text{ cm}^{-3}$  erreicht, handelt es sich um das “updraft-limited”- Regime. Hierbei ist die Anzahl der gebildeten Wolkentropfen proportional zur Aufwindgeschwindigkeit, wobei nur etwa 20% der vorhandenen Aerosole aktiviert werden. Falls der Quotient  $w/N_{ap}$  etwa  $0,5 \cdot 10^{-3} \text{ m s}^{-1} \text{ cm}^{-3}$  beträgt, wird von dem “aerosol- and updraft-sensitive”-Regime gesprochen. Die Bildung der Wolkentropfen ist in diesem Regime weder proportional zur Aufwindgeschwindigkeit noch zur Anzahl der vorhandenen Aerosole. Insgesamt werden zwischen 20% und 90% der Aerosole aktiviert.

Da bei den Nachschlagetabellen von R09 auch die Hygroskopizität variiert wurde, konnte nun auch ihr Einfluss auf die Bildung der Wolkentropfen untersucht werden. Dabei wurde festgestellt, dass die Anzahl der aktivierten Aerosole nur sehr schwach von der Hygroskopizität abhängt. Nur bei Aerosolpopulationen mit sehr geringen Werten für die Hygroskopizität ist der Einfluss etwas stärker.

Genauso wie bei der erweiterten Parametrisierung von SK06 sollen auch bei der Parametrisierung nach R09 die Variablen der Anzahl der Aerosolpartikel  $N_{ap}$  und der Anzahl der aktivierten Aerosole  $N_{ac}$  im COSMO-Modell verwendet werden. So unterscheidet sich diese Parametrisierung also nur durch die Nachschlagetabellen selbst von der erweiterten “Segal und Khain”-Parametrisierung.

#### 4.2.4. Parametrisierung nach Abdul-Razzak und Ghan (1998 und 2000)

Allgemein ist die Berechnung der Nukleation der Wolkentropfen mit Hilfe von Nachschlagetabellen eine sehr zeiteffektive Parametrisierung. Ein Nachteil dieser Tabellen ist jedoch, dass sie nur wenige Stützstellen haben, zwischen denen grundsätzlich interpoliert werden muss, wodurch sich Ungenauigkeiten einschleichen. Da jedoch eine detaillierte, mikrophysikalische Beschreibung der Nukleation sehr rechenintensiv ist und die Auflösung von Wettervorhersagemodellen zudem noch viel zu schlecht für eine solch detaillierte Beschreibung ist, stellt dies keine Alternative zu den bisher verwendeten Nachschlagetabellen dar. Für wolkenauflösende Wettervorhersagemodelle ist daher die einzig praktikable Alternative die Verwendung einer analytischen Form der Darstellung des Nukleationsprozesses, die den Prozess an sich realistisch beschreibt und ausreichend genau ist. Allerdings macht die Komplexität der maßgebenden Gleichungen es praktisch unmöglich, diesen analytischen Ausdruck ohne weitere Vereinfachungen zu erhalten. Denn es sollen für die Berechnung der Anzahl der gebildeten Wolkentropfen sowohl die dynamischen Eigenschaften als auch die physikalischen und chemischen Eigenschaften der Aerosole berücksichtigt werden.

Twomey (1959) leitete in diesem Zusammenhang eine Approximation für die Übersättigung  $S_{max}$ , die in einem Luftpaket, das adiabatisch und gleichförmig aufsteigt, entsteht, her. Bis heute findet diese Näherung in den meisten Parametrisierungen breite Anwendung. Twomey verwendete zudem einen empirischen Ansatz für die Anzahl der aktivierten Aerosole bei einer gegebenen maximalen Übersättigung  $S_{max}$ . Danach gilt

$$N_{ac} = c S_{max}^k, \quad (4.7)$$

wobei es sich bei  $c$  und  $k$  um empirisch bestimmte konstante Parameter handelt. Diese können durch Feldmessungen bestimmt werden. Für  $k$  sind meist Werte zwischen 0,2 und 0,5 angegeben. Ansonsten gibt es bei der Parametrisierung nach Twomey (1959) keinerlei direkten Einfluss aerosolspezifischer Eigenschaften auf die Anzahl der gebildeten Wolkentropfen, sei es die Anzahl der Aerosole, ihr mittlerer Durchmesser oder ihre Zusammensetzung.

Ein Nachteil dieser Parametrisierung ist die Form des Aktivierungsspektrums an sich. Gemessene Spektren weisen oft eine spezielle Krümmung auf, die aber mit dem einfachen Potenzansatz nach Gleichung 4.10 so nicht reproduzierbar ist. Daher gibt es Ansätze, die die Parameter  $c$  und  $k$  für ausgewählte Bereiche der Übersättigung variieren, oder andere, die das Spektrum durch eine hypergeometrische Funktion approximieren. Da die hypergeometrische Funktion allerdings in der numerischen Auswertung sehr rechenintensiv ist, ist sie keine wirkliche Alternative zu dem Potenzgesetz nach Twomey. Abschließend lässt sich über die Parametrisierung nach Twomey (1959) festhalten, dass sie zwar durch ihre sehr einfache Form sehr effektiv ist, aber leider auch sehr ungenau. Als neue Parametrisierung ist sie daher keine wirkliche Alternative zu den Nachschlagetabellen nach SK06.

Eine bessere Approximation als das Potenzgesetz nach Twomey stellen sowohl Khvorostyanov und Curry (1999, 2006 und 2008) als auch Shipway und Abel (2009) zur Verfügung. Ihre Herleitung beginnen sie dabei bei der Gleichgewichtsthermodynamik von Lösungstropfen in einer wasserdampfübersättigten Atmosphäre von Köhler (Köhler 1922), so dass auch aerosol-spezifische Einflüsse berücksichtigt werden können. Für die Aerosole gehen sie desweiteren von einer log-normalen Größenverteilung aus. Unter Verwendung Ansatzes für die Übersättigung nach Twomey (1959) und nach verschiedenen algebraischen Approximationen erhalten sie dann einen algebraischen Ausdruck für das Aktivierungsspektrum in Abhängigkeit der Übersättigung. Nach Integration dieses Spektrums über die Übersättigung erhält man die Anzahl der aktivierten Aerosole. Hierbei handelt es sich wie bei Twomey (1959) um ein Potenzgesetz. Innerhalb dieses Potenzgesetzes sind die beiden Parameter  $c$  und  $k$  allerdings keine Konstanten mehr, sondern kontinuierliche Funktionen in Abhängigkeit der Übersättigung und der Aerosoleigenschaften.

Als neue Parametrisierung für das Zwei-Momenten-Schema wird aber wieder eine andere Approximation gewählt. Dabei handelt es sich um die Parametrisierung von Abdul-Razzak und Ghan (1998 und 2000), nachfolgend mit AR98 abgekürzt. Diese Approximation kann sowohl für monomodale als auch für multimodale Aerosolpopulationen verwendet werden. Da der monomodale Ansatz gute Übereinstimmung mit beobachteten Anzahlen aktivierter Aerosole aufgewiesen hat, werden im Zwei-Momente-Schema zunächst nur dieser implementiert.

AR98 nimmt bei der analytischen Approximation der Aerosole eine einzelne log-normale Aerosolverteilung in Abhängigkeit des Radius an, wonach gilt

$$f_{ap}(\ln r_{ap}) = \frac{N_{ap}}{\sqrt{2\pi} \ln \sigma_{ap}} \exp \left[ -\frac{\ln^2 \left( \frac{r_{ap}}{\bar{r}_{ap}} \right)}{2 \ln^2 \sigma_{ap}} \right]. \quad (4.8)$$

Dabei ist  $r_{ap}$  der Radius eines trockenen Aerosolpartikels einer Mode,  $\bar{r}_{ap}$  der mittlere geometrische Radius der Verteilung und  $\sigma_{ap}$  dessen geometrische Standardabweichung.

Aerosole sind im Allgemeinen eine Mischung aus verschiedenen chemischen Bestandteilen. AR98 geht im Zuge des monomodalen Ansatz davon aus, dass die Mischung anfangs gut durchmischt ist, so dass für die gesamte Aerosolverteilung einheitliche chemische Eigenschaften angenommen werden können. Sollte jedoch die Mischung nicht gut durchmischt und sollten starke Unterschiede der Eigenschaften festzustellen sein, sollte in dem Zusammenhang doch der multimodale Zusammenhang gewählt werden.

Die Anzahl der aktivierten Aerosole kann mit Hilfe der Gleichung 4.8 ermittelt werden, indem die Anzahldichteverteilung ab Radius des kleinsten aktivierten Aerosolpartikels  $r_{c,min}$  bis Unendlich integriert wird. Es gilt also unter Verwendung der Fehlerfunktion erf

$$N_{ac} = \int_{r_{c,min}}^{\infty} f_{ap}(\ln r_{ap}) d(\ln r_{ap}) = \frac{N_{ap}}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{\ln \left( \frac{r_{c,min}}{\bar{r}_{ap}} \right)}{\sqrt{2} \ln \sigma_{ap}} \right) \right]. \quad (4.9)$$

Mit Hilfe der Theorie der heterogenen Nukleation lässt sich nun ein Zusammenhang zwischen der kritischen Übersättigung und dem kritischen Radius herleiten. Dieser ist durch das Maximum der Köhler-Kurve gegeben (vergleiche. Kapitel 4.1) und lautet

$$S_c = \frac{2}{\sqrt{B_{Köhler}}} \left[ \frac{A_{Köhler}}{3 r_c} \right]^{\frac{3}{2}}. \quad (4.10)$$

Mit Hilfe dieses Zusammenhangs lässt sich die Anzahl der aktivierten Aerosole so umformen, dass sie im Folgenden nicht mehr abhängig vom Aerosolradius ist, sondern von der Übersättigung. Nach Gleichung 4.10 gilt für den kleinsten aktivierten Aerosolpartikel

$$S_{max} = \frac{2}{\sqrt{B_{Köhler}}} \left[ \frac{A_{Köhler}}{3 r_{c,min}} \right]^{\frac{3}{2}} \quad (4.11)$$

und für den mittlere geometrische Radius der Verteilung

$$S_{mean} = \frac{2}{\sqrt{B_{Köhler}}} \left[ \frac{A_{Köhler}}{3 \bar{r}_{ap}} \right]^{\frac{3}{2}} \quad (4.12)$$

und folglich für die Anzahl der aktivierten Aerosole

$$N_{ac} = \int_{r_{c,min}}^{\infty} f_{ap}(\ln r_{ap}) d(\ln r_{ap}) = \frac{N_{ap}}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{2 \ln \left( \frac{S_{mean}}{S_{max}} \right)}{3 \sqrt{2} \ln \sigma_{ap}} \right) \right]. \quad (4.13)$$

Das Problem liegt nun darin, die zeitliche Änderung der Übersättigung eines Luftpaketes, das gleichförmig adiabatisch aufsteigt, zu berechnen. AR98 leitet dafür zunächst eine exakte Gleichung der zeitlichen Änderung der Übersättigung her. Da die exakte analytische Lösung dieser Gleichung praktisch unmöglich ist und die genaue numerische Lösung zu rechenintensiv, um sie in wolkenauflösenden Modellen zu implementieren, löst er diese zuerst für spezielle Fälle numerisch, um damit eine geeignete Parametrisierung für  $S_{mean}/S_{max}$  herleiten zu können.

Allerdings weist die Parametrisierung, wie sie in Abdul-Razzak und Ghan (1998) angegeben ist, leider Fehler auf. Durch Vergleich mit der Lösung der multimodalen Parametrisierung (Abdul-Razzak und Ghan, 2000) lässt sich jedoch der richtige Ausdruck für  $S_c/S_{max}$  herleiten. Danach gilt

$$\frac{S_{mean}}{S_{max}} = \left[ f_1(\ln \sigma_{ap}) \left( \frac{\zeta_{Razzak}}{\eta_{Razzak}} \right)^{\frac{3}{2}} + f_2(\ln \sigma_{ap}) \left( \frac{S_c^2}{\eta_{Razzak}} \right)^{\frac{3}{4}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.14)$$

und somit für die Anzahl der aktivierten Aerosole



$$N_{ac} = \frac{N_{ap}}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left[ f_1(\ln \sigma_{ap}) \left( \frac{\zeta_{Razzak}}{\eta_{Razzak}} \right)^{\frac{3}{2}} + f_2(\ln \sigma_{ap}) \left( \frac{S_c^2}{\eta_{Razzak}} \right)^{\frac{3}{4}} \right]^{\frac{1}{2}} \right]. \quad (4.15)$$

Bei  $\zeta_{Razzak}$  und  $\eta_{Razzak}$  aus Gleichung 4.17 und 4.18 handelt es sich um Parameter der Approximation. Für sie gilt

$$\zeta_{Razzak} = \frac{2}{3} \left( \frac{\alpha_{Razzak} w}{G_{Razzak}} \right)^{1/2} A_{Khler} \quad (4.16)$$

und

$$\eta_{Razzak} = \frac{(\alpha_{Razzak} w / G_{Razzak})^{3/2}}{2\pi \rho_w \gamma_{Razzak} N_{ap}}. \quad (4.17)$$

Für die darin verwendeten Parameter gilt desweiteren (Variablen siehe Symbolverzeichnis)

$$\alpha_{Razzak} = \frac{g M_w l_v}{c_{pd} R T^2} - \frac{g M_{air}}{R T} \quad (4.18)$$

$$\gamma_{Razzak} = \frac{R T}{p_s M_w} + \frac{M_w l_v^2}{c_{pd} p M_{air} T} \quad (4.19)$$

$$G_{Razzak} = \frac{1}{\frac{\rho_w R T}{p_s D_v M_w} + \frac{l_v \rho_w}{k_{air} T} \left( \frac{l_v M_w}{T R} - 1 \right)}. \quad (4.20)$$

### 4.3. Idealisierte Simulationen unter Verwendung der verschiedenen Parametrisierungen

Um die verschiedenen Approximationen der Nukleation von Wolkentropfen bewerten zu können, wurden im Folgenden für jede Parametrisierung Simulationen mit COMSO und dem Zwei-Momenten-Schema durchgeführt. Damit die Ergebnisse im Anschluss möglichst gut miteinander vergleichbar sind, werden für alle Simulationen dieselben Anfangsbedingungen und derselbe Grundzustand der Atmosphäre gewählt. Lediglich die Aerosolkonzentration sowie die Breite der Aerosolverteilung wird variiert, wobei für alle Simulationen jeweils ein maritimer und ein kontinentaler Fall in Hinsicht auf die Aerosole gerechnet wird. Dadurch soll der Einfluss der Aerosoleigenschaften auf die unterschiedlichen Parametrisierungen bewertet werden können.

Um im Folgenden den Vergleich der verschiedenen Parametrisierungen übersichtlicher zu gestalten, werden Abkürzungen für die Simulationen unter Verwendung der einzelnen Parametrisierungen eingeführt (siehe Tabelle 4.1). Dabei handelt es sich zum einen um die Parametrisierung

wie sie bisher im Zwei-Momenten-Schema implementiert ist (siehe Kapitel 4.2.1). und die ich kurz mit *SimAlt* bezeichnen möchte. Zudem werden zwei weitere Simulationen auf Grundlage der Nachschlagetabellen von SK06 vorgestellt, wobei bei diesen beiden der Einfluss der neuen Aerosolvariablen untersucht werden soll. Bei der einen Simulation wird nur der Einfluss der Variablen  $N_{ap}$ , also der Anzahl der Aerosole, untersucht; sie wird kurz *SimAdv* genannt. Bei der anderen Simulation wird sowohl der Einfluss der Variable  $N_{ap}$  als auch der Variablen  $N_{ac}$ , der Anzahl der aktivierten Aerosole, untersucht (siehe Kapitel 4.2.2). Diese weitere Simulation wird kurz mit *SimAkt* bezeichnet werden. Außerdem werden noch zwei weitere Simulationen durchgeführt, die beide den Einfluss der Variablen  $N_{ap}$  und  $N_{ac}$  berücksichtigen, aber statt SK06 andere Parametrisierungen für die Nukleation verwenden. Dabei handelt es sich einerseits um die Parametrisierung nach R09 (siehe Kapitel 4.2.3), nachfolgend kurz mit *SimReu* bezeichnet, und zum anderen um die analytische Approximation nach AR98 (siehe Kapitel 4.2.4), kurz *SimAdb*.

Tabelle 4.1.: Kurzer Überblick über die in den Simulationen verwendeten Approximationen

Simulation	Nukleationsparametrisierung	Kapitel
<i>SimAlt</i>	Nachschlagetabellen nach SK06	4.2.1
<i>SimAdv</i>	Nachschlagetabellen nach SK06	4.2.2, jedoch ohne Verwendung von $N_{ac}$
<i>SimAkt</i>	Nachschlagetabellen nach SK06	4.2.2
<i>SimReu</i>	Nachschlagetabellen nach R09	4.2.3
<i>SimAdb</i>	Analytische Parametrisierung nach AR98	4.2.4

### 4.3.1. Grundzustand und Ausgangsbedingungen

Die vertikalen Profile der potentiellen Temperatur  $\Theta$  und der relativen Feuchte  $r_d$  werden bei den Simulationen durch einen idealisierten Radiosondenaufstieg initialisiert. Die Daten werden dabei in Anlehnung an die Profile von Weisman und Klemp (1982) erstellt. Danach ist die potentielle Temperatur  $\Theta$  und die relative Feuchte  $r_d$  in Abhängigkeit der Höhe  $z$  gegeben als

$$\Theta(z) = \begin{cases} \Theta_0 + (\Theta_{tr} - \Theta_0) \left( \frac{z}{z_{tr}} \right)^{\frac{5}{4}}, & z \leq z_{tr} \\ \Theta_{tr} \exp \left[ \frac{g}{c_p T_{tr}} (z - z_{tr}) \right], & z > z_{tr} \end{cases} \quad (4.21)$$

und

$$r_d(z) = \begin{cases} r_{max} - (r_{max} - r_{min}) \left( \frac{z}{z_{tr}} \right)^{\frac{5}{4}}, & z \leq z_{tr} \\ r_{min}, & z > z_{tr} \end{cases} \quad (4.22)$$

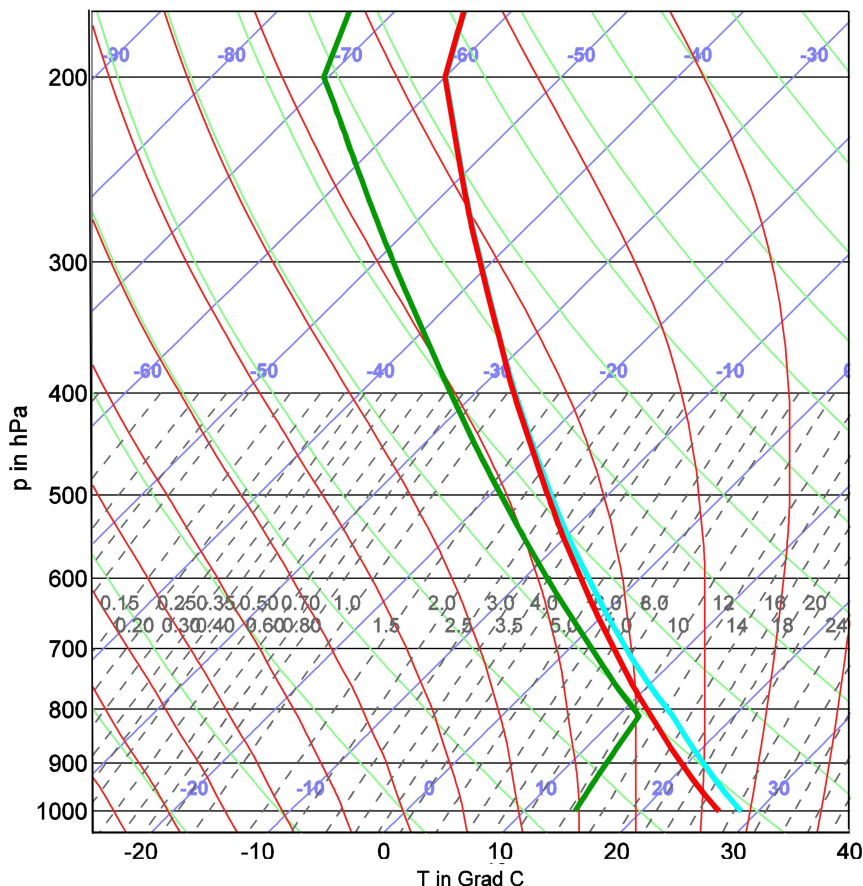


Abbildung 4.4.: Skew-T-log-p-Diagramm des Vertikalprofils der Temperatur (rot), der Taupunkttemperatur (grün) und der virtuellen Temperatur (cyan)

mit  $z_{tr} = 12$  km,  $\Theta_0 = 300$ K,  $\Theta_{tr} = 338$ K,  $r_{min} = 0,25$  und  $r_{max} = 1,0$ . Zudem wird in Bodennähe das Mischungsverhältnis durch eine obere Schranke von  $q_{max} = 11$  g kg<sup>-1</sup> begrenzt, wodurch eine gut durchmischte Grenzschicht beschrieben werden soll. In Abbildung 4.4 ist das resultierende Profil in Form eines Skew-T-log-p-Diagramms dargestellt.

Für das Vertikalprofil der Horizontalwindkomponenten wird ein analytischer Ansatz der Form

$$\vec{v}(z) = \begin{pmatrix} u(z) \\ v(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_\infty \tanh\left(\frac{z}{z_s}\right) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

mit  $z_s = 3$  km und  $u_\infty = 5$  m s<sup>-1</sup> gewählt. Das Windprofil besitzt danach nur einen Geschwindigkeitsscherungsanteil. Es ist in Abbildung 4.5 dargestellt.

Ein wichtiger Parameter, der die Möglichkeit konvektiver Umlagerungen erfasst, ist die konvektiv verfügbare potentielle Energie **CAPE** (convective available potential energy). Sie ist definiert als

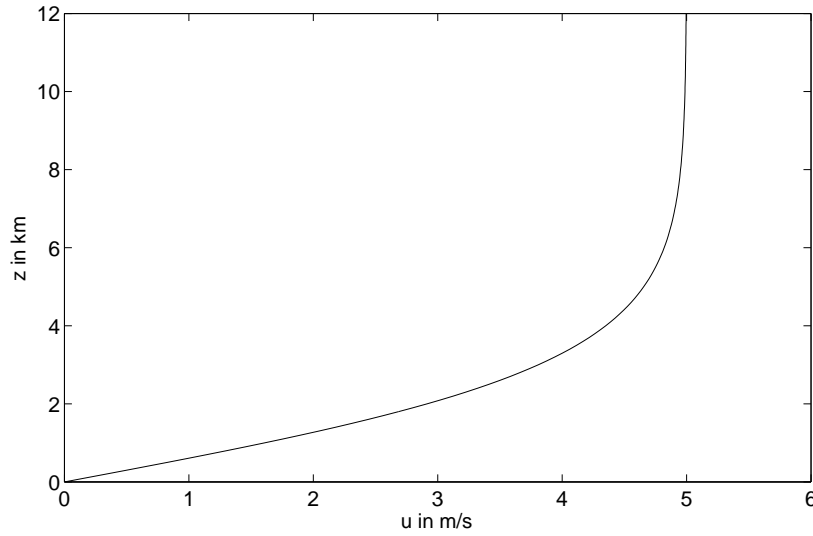


Abbildung 4.5.: Vertikalprofil der Windgeschwindigkeit

$$\mathbf{CAPE} = R_l \int_{p_A}^{p_{WO}} (T_{v,p} - T_{v,u}) d(\ln p), \quad (4.24)$$

wobei  $R_l$  die Gaskonstante für feuchte Luft ist,  $p_A$  der Druck im Niveau der freien Konvektion,  $p_{WO}$  der Druck an der Wolkenobergrenze,  $T_{v,p}$  die Temperatur des aufsteigenden Luftpaketes und  $T_{v,u}$  die Temperatur der Umgebung ist.

Für den Grundzustand, wie er in den Simulationen gewählt ist, beträgt **CAPE**  $908 \text{ J kg}^{-1}$ . Daraus folgt, dass der Grundzustand potentiell instabil geschichtet ist. Damit Konvektion auftreten kann, muss diesefolglich erst ausgelöst werden, zum Beispiel in Form einer Temperaturstörung oder Hebung. In den Simulationen wird den Grundzustandsbedingungen eine Temperaturstörung in Form einer Warmluftblase aufgeprägt. Weisman und Klemp (1982) folgend besitzt sie die Form

$$T(x, y, z) = T_0(z) + \Delta T_b \cos \left[ \frac{\pi}{2} \sqrt{\left( \frac{x - x_{b,c}}{x_{b,r}} \right)^2 + \left( \frac{y - y_{b,c}}{y_{b,r}} \right)^2 + \left( \frac{z - z_{b,c}}{z_{b,r}} \right)^2} \right]^2, \quad (4.25)$$

wobei  $\Delta T_b = 2 \text{ K}$ ,  $x_{b,r} = y_{b,r} = 10 \text{ km}$  und  $z_{b,r} = z_{b,c} = 1,4 \text{ km}$  ist. Horizontal befindet sich die Warmluftblase bei  $x_{b,c} = 30 \text{ km}$  und  $y_{b,c} = 40 \text{ km}$ .

Für das Aerosolfeld der Modellläufe wird angenommen, dass zu Beginn der Simulationen die Partikel horizontal homogen verteilt sind sowie ihre Anzahl in den ersten zwei Höhenkilometern konstant ist und danach exponentiell mit der Höhe abfällt. In Folge des exponentiellen Abfalls sollen sich dann in vier Kilometer Gesamthöhe nur noch halb so viele Partikel wie in Bodennähe

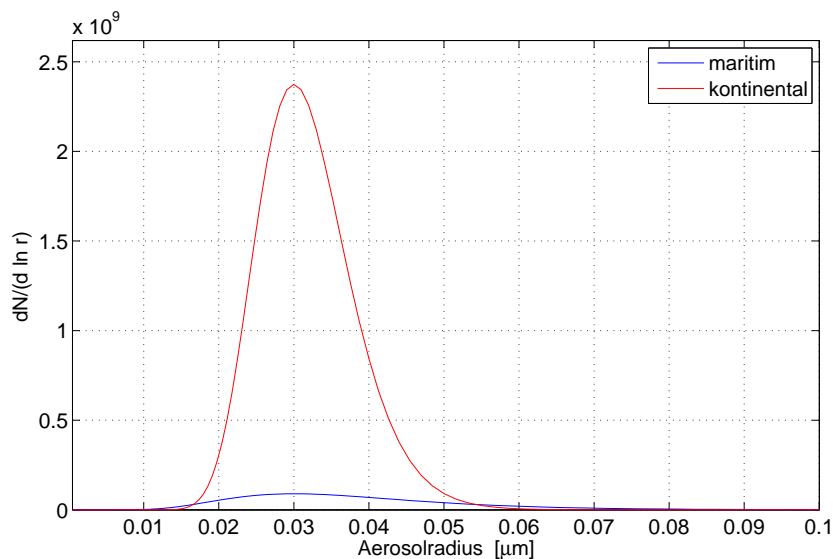


Abbildung 4.6.: Anzahldichteverteilungsfunktion der Aerosolpopulationen für den maritimen (blau) und den kontinentalen Fall (rot).

befinden.

Wie bereits erwähnt, wird für alle Simulationen jeweils ein maritimer und kontinentaler Modellauf in Hinsicht auf die Aerosole durchgeführt. Je nachdem, welches dieser beiden Regime gewählt wird, wird die Aerosolkonzentration am Boden und die Breite der Aerosolverteilung variiert. Beim kontinentalen Fall beträgt die Konzentration am Boden  $1190 \cdot 10^6 \text{ m}^{-3}$  und die Breite der Verteilung  $\sigma = 1,221$ . Für das maritime Regime ist die Konzentration am Boden  $90 \cdot 10^6 \text{ m}^{-3}$  und die Breite der Verteilung  $\sigma = 1,492$ . Beide Regime besitzen dabei den gleichen mittleren Radius von  $0,03 \text{ } \mu\text{m}$  (siehe Abbildung 4.6). Die chemischen Eigenschaften der Aerosole werden hingegen nicht variiert. Es wird angenommen, dass Aerosole ausschließlich aus Ammoniumsulfat bestehen, wonach ihre Dichte  $\rho_{ap} 1770 \text{ kg m}^{-3}$  beträgt und ihre molare Masse  $M_{ap} 0,132 \text{ kg mol}^{-1}$ .

Zudem wird für alle Simulationen dasselbe Modellgebiet gewählt. Es hat eine horizontale Ausdehnung von  $80 \text{ km} \times 80 \text{ km}$  mit einer Gitterauflösung von  $500 \text{ m}$ . In der Vertikalen besitzt es  $60$  Schichten. Der Zeitschritt beträgt drei Sekunden und der Simulationszeitraum jeder Simulation  $150 \text{ min}$ .

### 4.3.2. Auswertung der Simulationen

Im Folgenden werden die Ergebnisse der idealisierten Simulationen einer einzelnen konvektiven Zelle unter maritimen sowie kontinentalen Bedingungen vorgestellt. In Abbildung 4.7 ist die über das Modellgebiet gemittelte Niederschlagsrate in  $\text{g s}^{-1} \text{ m}^{-2}$  dargestellt. Die einzelnen Kurven

symbolisieren dabei jeweils eine Simulation.

Für den maritimen Fall (siehe Abbildung 4.7(a)) ist an sich die zeitliche Entwicklung der Niederschlagsrate für alle Parametrisierungen sehr ähnlich. So setzt bei allen der Niederschlag nach etwa 40 min ein und erreicht sein Maximum nach circa 60 min Simulationszeit. Nach dem Maximum nimmt die Niederschlagsrate wieder schnell ab, so dass nach 90 min kaum mehr Niederschlag fällt. Wohingegen sich die Parametrisierungen voneinander unterscheiden, ist der Absolutwert des Maximums der einzelnen Simulationen. Dabei können die fünf Simulationen in zwei Gruppen unterteilt werden: die eine Gruppe, bei der ein maximaler Wert von circa  $0,04 \text{ g s}^{-1} \text{ m}^{-2}$  erreicht wurde, bestehend aus *SimAlt* und *SimAdv* und die andere bestehend aus *SimAkt*, *SimReu* und *SimAbd*, bei der nur eine maximale Niederschlagsrate von  $0,03 \text{ g s}^{-1} \text{ m}^{-2}$  erreicht wurde. Eine Besonderheit, die aber nur bei *SimAlt* auftritt, ist ein Nebenmaximum der Niederschlagsrate nach etwa 110 min Simulationszeit.

Genauso wie im maritimen Fall wird auch im kontinentalen Fall der zeitlichen Verlauf durch die Verwendung der unterschiedlichen Parametrisierungen fast nicht beeinflusst (siehe Abbildung 4.7(b)). Anders aber als unter maritimen Bedingungen lassen sich die verschiedenen Simulationen nun nicht mehr in dieselben Gruppen einteilen. So sind zwar die Verläufe der Niederschlagsraten von *SimAkt*, *SimReu* und *SimAbd* auch unter kontinentalen Bedingungen fast identisch, aber die von *SimAlt* und *SimAdv* unterscheiden sich deutlich voneinander. Diesmal weist *SimAlt* sogar starke Ähnlichkeit mit den Simulationen um *SimAbd* auf.

Markant ist zudem der Einfluss der unterschiedlichen Aerosolregime auf die Niederschlagsrate und somit auf den Gesamtniederschlag, der im Modellgebiet während der Simulation fällt, wobei die Gesamtniederschlagsmenge dabei der Fläche unter den einzelnen Kurven in Abbildung 4.7 entspricht. So setzt der Niederschlag unter kontinentalen Bedingungen erst etwa 15 min später ein als unter maritimen, intensiviert sich dann aber deutlich schneller, so dass in beiden Fällen nach etwa 60 min das Maximum erreicht ist. Anders als unter maritimen Bedingungen, bei denen der Niederschlag nach dem Hauptmaximum praktisch zum Erliegen kommt, tritt unter kontinentalen Bedingungen ein zweites Niederschlagsmaximum nach circa 115 min Simulationszeit auf. Der größte Unterschied zwischen den unterschiedlichen Bedingungen besteht aber in Hinblick auf den Gesamtniederschlag, der ist nämlich im kontinentalen Fall höher als im maritimen. Dieser Effekt tritt bei *SimAkt*, *SimReu* und *SimAbd* im Vergleich zu den anderen beiden Simulationen sogar noch verstärkt auf, wohingegen er bei *SimAdv* deutlich schwächer vorhanden ist.

Um auch die räumliche Verteilung des Niederschages untersuchen zu können, ist in Abbildung 4.8 der akkumulierte Gesamtniederschlag am Boden nach 150 min dargestellt. Da sich auch im Weiteren sehr große Ähnlichkeit der Simulationen *SimAkt*, *SimReu* und *SimAbd* gezeigt haben, ist hier nur *SimAbd* repräsentativ für alle drei Simulationen abgebildet, wobei sich die anderen beiden im Anhang befinden.

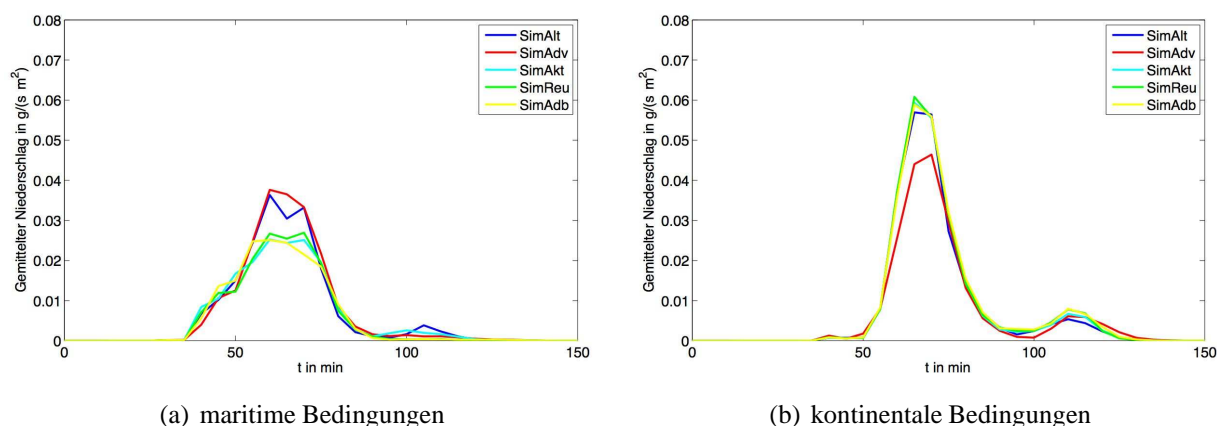
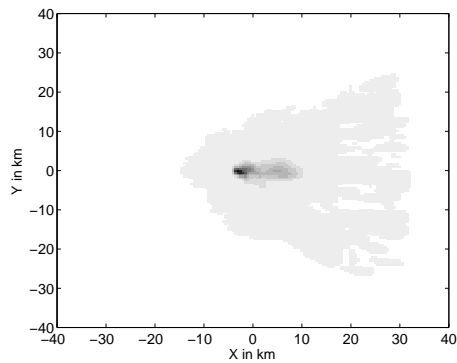
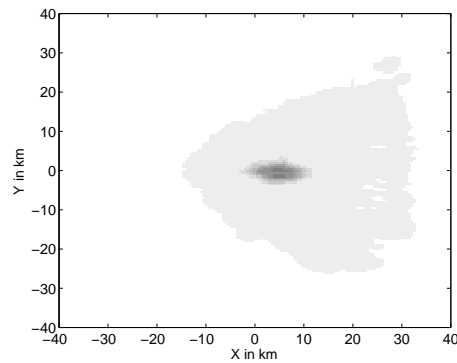
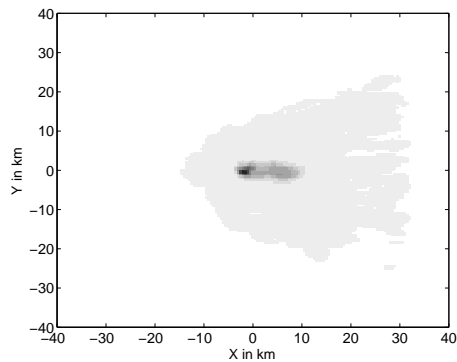
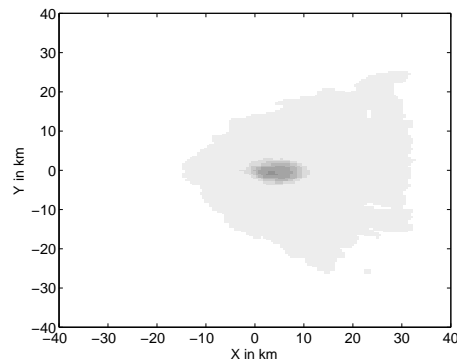
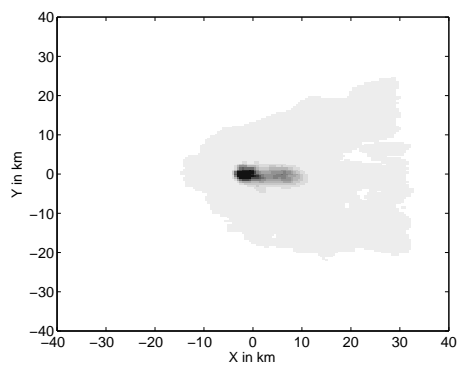
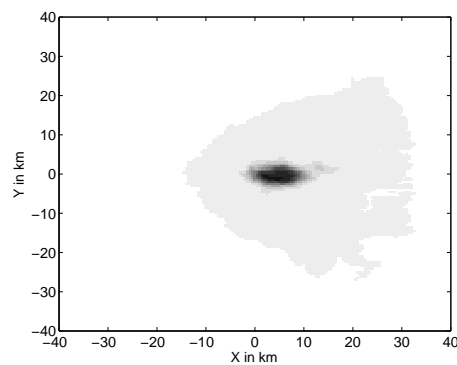


Abbildung 4.7.: Zeitreihe der über das Modellgebiet gemittelten Niederschlagsrate in  $\text{g s}^{-1} \text{m}^{-2}$

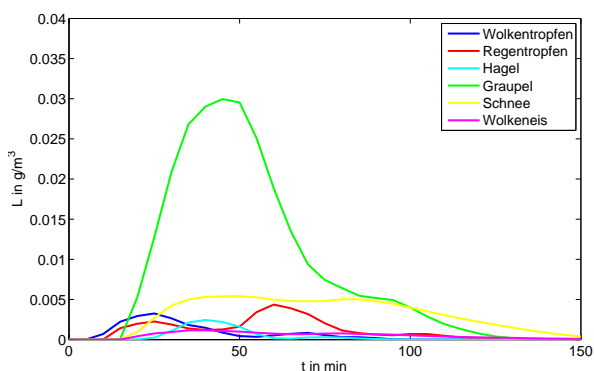
Sowohl unter maritimen Bedingungen als auch unter kontinentalen sind nur sehr kleine Unterschiede zwischen den unterschiedlichen Simulationen in Abbildung 4.8 festzustellen. So ist das Gebiet, in dem Niederschlag fällt bei allen ungefähr identisch. Zudem ist bei allen Modellläufen der Niederschlagskanal recht eng und beginnt ungefähr an der gleichen Stelle bei  $x = 0$  km und  $y = 0$  km. Einzig bei *SimAbd* fällt der Niederschlag räumlich etwas zentrierter, so dass das Maximum hier ausgeprägter ist als bei *SimAlt* und *SimAdv*.

Wo jedoch Unterschiede in dieser Abbildung festzustellen sind, ist beim Vergleich der einzelnen Simulationen unter den verschiedenen Bedingungen. So ist das Niederschlagsgebiet im kontinentalen Fall am rechten seitlichen Rand nicht so ausgefranst wie im maritimen. Dies ist konsistent mit den Beobachtungen aus Abbildung 4.7, bei denen der Niederschlag unter kontinentalen Bedingungen bis kurz vor Ende der Simulation angehalten hat. Ein weiterer Unterschied tritt in Bezug auf den Niederschlagskanal auf. So beginnt dieser unter kontinentalen Bedingungen zwar etwas später, ist dann aber deutlich stärker, wobei auch dieser Effekt schon in Abbildung 4.7 in Bezug auf das Hauptmaximum erwähnt wurde.

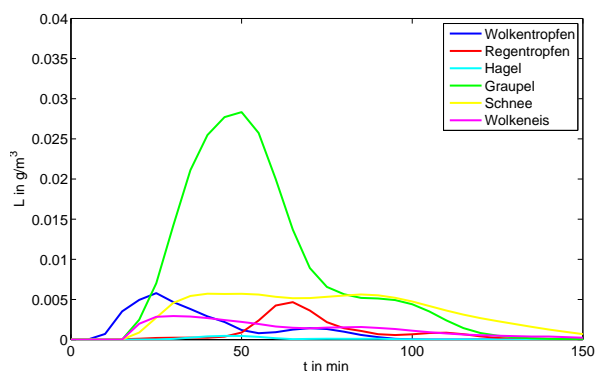
In Abbildung 4.9 sind die Zeitreihen der über das Modellgebiet gemittelten Flüssigwassergehalte der verschiedenen Hydrometeorarten dargestellt. Wie in Abbildung 4.8 befinden sich auch jetzt die Abbildungen von *SimAkt* und *SimReu* wegen ihrer sehr großen Ähnlichkeit mit *SimAbd* im Anhang. Warum und wie in den unterschiedlichen Simulationen die teils so verschiedenen Niederschläge gebildet werden, kann mit Abbildung 4.9 nicht geklärt werden. So sind zum Beispiel die beiden Abbildungen für *SimAlt* und *SimAbd* unter maritimern Bedingungen (siehe Abbildung 4.9(a) und 4.9(e)) sehr ähnlich zueinander und trotzdem ist die zeitliche Entwicklung der Niederschlagsrate mit ihrem Maximum sehr verschieden (siehe Abbildung 4.7). Um die genauen Ursachen für die unterschiedlichen Niederschläge bestimmen zu können, müssen hierfür andere Methoden verwendet werden.

(a) *SimAlt* - maritime Bedingungen(b) *SimAlt* - kontinentale Bedingungen(c) *SimAdv* - maritime Bedingungen(d) *SimAdv* - kontinentale Bedingungen(e) *SimAbd* - maritime Bedingungen(f) *SimAbd* - kontinentale BedingungenAbbildung 4.8.: Akkumulierter Gesamtniederschlag am Boden in  $\text{kg m}^{-2}$  nach 150 min

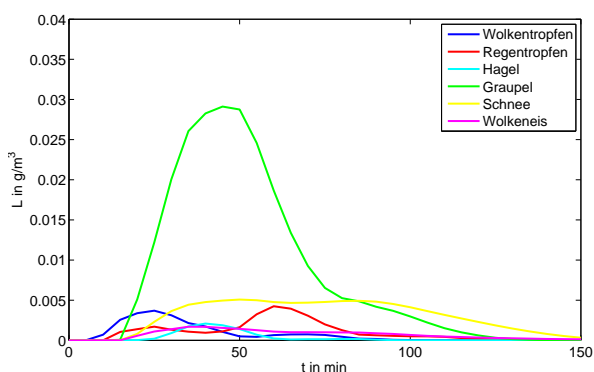




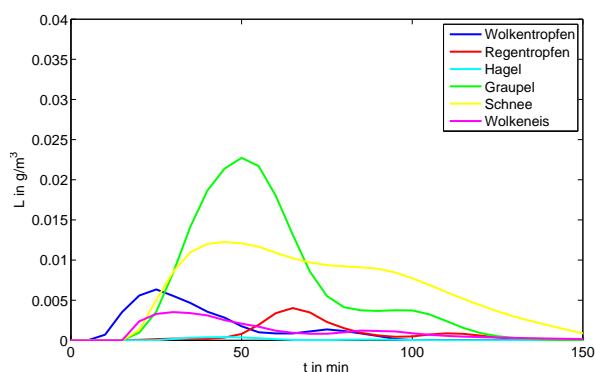
(a) *SimAlt* - maritime Bedingungen



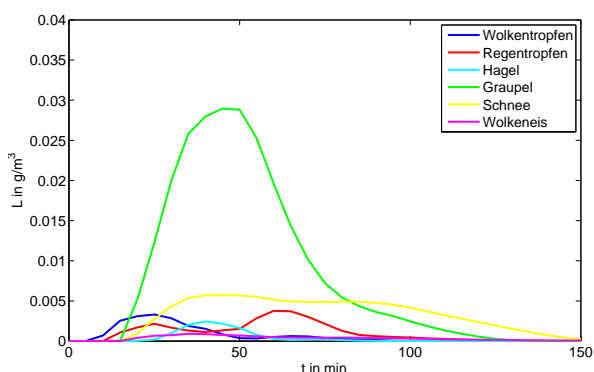
(b) *SimAlt* - kontinentale Bedingungen



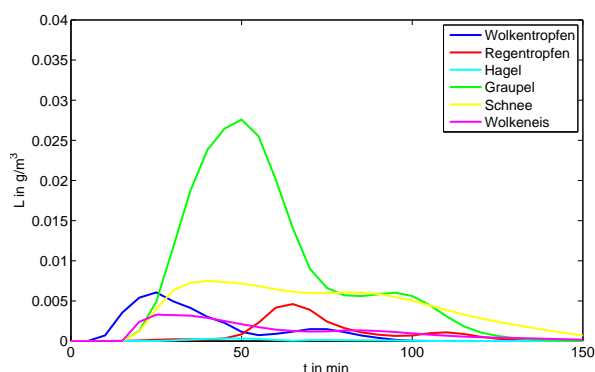
(c) *SimAdv* - maritime Bedingungen



(d) *SimAdv* - kontinentale Bedingungen



(e) *SimAbd* - maritime Bedingungen



(f) *SimAbd* - kontinentale Bedingungen

Abbildung 4.9.: Zeitreihe der über das Modellgebiet gemittelten Flüssigwassergehalte der verschiedenen Hydrometeorarten in  $\text{g m}^{-3}$

Was jedoch in der Abbildung 4.9 markant ist, ist der Unterschied der Zeitreihen der Hydrometeore von *SimAdv* zu denen der anderen Simulationen. So ist im maritimen Fall das Verhältnis von gebildeten Wolken- und Regenwasser deutlich größer als bei den übrigen Simulationen. Im kontinentalen Fall wird hingegen bei *SimAdv* fast doppelt so viel Schnee wie bei den anderen Modellläufen gebildet. Die Verwendung nur einer Aerosolvariable führt also zu sehr starken Unterschieden in der Niederschlagsbildung.

In Abbildung 4.10 sind die im Modellgebiet maximal auftretenden Auf- und Abwindgeschwindigkeiten dargestellt. Hierbei sind sowohl im maritimen wie auch im kontinentalen Fall nur marginale Unterschiede zwischen den einzelnen Simulationen zu erkennen. Lediglich *SimAlt* sticht ein wenig hervor, da es fast immer die größten Werte besitzt und zudem beim kontinentalen Fall ein drittes Maximum bei etwa 130 min aufweist, das sonst bei keiner Simulation zu finden ist. Wirklich markante Unterschiede weist jedoch auch *SimAlt* zu den anderen Simulationen nicht auf.

Gut zu erkennen ist bei allen Simulationen das typische Verhalten gewöhnlicher Einzelzellen wie es von Weisman und Klemp (1982) beschrieben wird. So ist das Erliegen des Aufwindes in Folge von Niederschlag in allen Simulationen deutlich erkennbar, sowie das bimodale Verhalten gewöhnlicher konvektiver Zellen.

Zusammenfassend lässt sich über die Ergebnisse der Simulationen sagen, dass es nicht so sehr relevant ist, welche der gängigen Nukleationsparametrisierungen für die Wolkentropfenbildung verwendet wird, sondern vielmehr die Darstellung der Aerosole in Form der beiden Variablen  $N_{ap}$  und  $N_{ac}$ . Zudem hat sich in Abbildung 4.9 gezeigt, dass es dabei wichtig ist, beide Variablen zu verwenden, da die Vernachlässigung einer, zu ganz anderen Effekte führen kann.

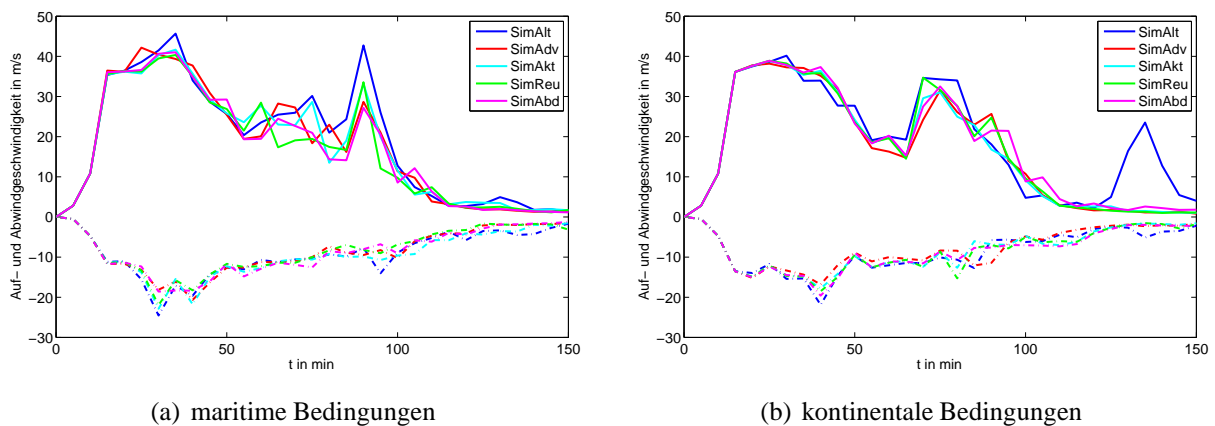


Abbildung 4.10.: Zeitreihe der maximal auftretenden Auf- und Abwindgeschwindigkeiten in  $\text{m s}^{-1}$

Zudem hat sich beim Vergleich der Simulationen unter kontinentalen und maritimen Bedingungen gezeigt, dass eine Aerosolkonzentrationserhöhung zu mehr Niederschlag führt. Dieser Effekt wurde durch die Verwendung der neuen Parametrisierungen in *SimAkt*, *SimReu* und *SimAbd* sogar noch verstärkt. Konnte jedoch andererseits unter Verwendung nur einer Aerosolvariable im Fall von *SimAdv* auch stark abgeschwächt werden.

Als Parametrisierung für das Zwei-Momenten-Schema wird im Folgenden die Parametrisierung von Abdul-Razzak und Ghan (1998) verwendet. Zwar wurden an sich keine großen Unterschiede zwischen den Näherungen festgestellt, aber in Hinsicht auf eine bessere Darstellung der Aerosole im Zwei-Momenten-Schema, sollte die analytische Form gewählt werden.



## 5. Das Auswaschen von Aerosolpartikeln infolge von Tropfen

Dadurch dass Aerosole jetzt innerhalb des Zwei-Momenten-Schemas implementiert sind, kann nun auch der Prozess des Auswaschens der Aerosolpartikel und die daraus resultierende Rückkopplung auf die Wolken und Niederschlagsbildung berücksichtigt werden. Wie eingangs bereits erwähnt, können Aerosole durch zwei Prozesse aus der Atmosphäre ausgewaschen werden: durch das sogenannte Nucleation Aerosol Scavenging (NAS), dessen Parametrisierung und Implementation im COSMO-Modell bereits im vorigen Kapitel diskutiert wurde, und durch das Collision Aerosol Scavenging (CAS). Physikalisch handelt es sich dabei um zwei ganz unterschiedliche Mechanismen.

Voraussetzung für das CAS ist das Vorhandensein von Wolken- und/ oder Regentropfen. Die Aerosolpartikel können dann mit den Tropfen kollidieren und so in diese inkorporiert werden. Hierbei unterscheidet man meist zwischen zwei Effekten: dem In-Cloud-Effekt, der die Kollisionen der Partikel mit den Tropfen innerhalb einer Wolke berücksichtigt, und dem Below-Cloud-Effekt, der die Kollisionen mit Niederschlagstropfen unter einer Wolke berücksichtigt.

In der Atmosphäre wird das CAS durch verschiedene Mechanismen ausgelöst. Es kann zum Beispiel durch Brown'sche Diffusion sowie thermo- und diffusiophoretische Kräfte induziert werden, desweiteren aber auch durch hydrodynamische und elektrische Effekte. Hingegen spielt hier im Gegensatz zum NAS die Wirkung von Aerosolen als Kondensationskeime keine Rolle. Ein weiterer Unterschied zum NAS ist der Einfluss der Zeit beim CAS. Je länger sich Aerosole in Gebieten mit Tropfen aufhalten, desto größer ist deren Wahrscheinlichkeit mit den Tropfen zu kollidieren und desto mehr Partikel werden durch CAS aus der Atmosphäre entfernt.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels soll nun zuerst die theoretische Behandlung des CAS kurz vorgestellt werden, wobei speziell auf zwei Ansätze zur Berechnung des Kollisions-Kernels eingegangen wird. Im Weiteren wird ein Trajektorienmodell beschrieben, mit dessen Hilfe eine Regressionsfunktion für den effektive Tropfenkollektorradius erstellt wurde. Mit Hilfe der neuen Regressionsfunktion wurde dann eine Parametrisierung in das Zwei-Momenten-Schema implementiert, mit der im Weiteren einer idealisierten Studie einer konvektiven Einzelzelle durchgeführt wurde, womit der Einfluss des CAS untersucht werden sollte.

## 5.1. Die theoretische Beschreibung des Collision Aerosol Scavenging

Mathematisch wird der Auswaschprozess infolge von Tropfenkollisionen meist mit Hilfe von Partikelverlustraten beschrieben. Für die zeitliche Änderung der Partikelanzahldichte  $f_{ap}(r_{ap})$  folgt dann (Seinfeld und Pandis, 1997)

$$\frac{\partial f_{ap}(r_{ap}, t)}{\partial t} = -\lambda_{ap}(r_{ap}, t)f_{ap}(r_{ap}, t), \quad (5.1)$$

wobei  $r_{ap}$  den Aerosolpartikelradius,  $t$  die Zeit,  $f_{ap}(r_{ap}, t)$  die Anzahldichteverteilungsfunktion der Aerosolpartikel und  $\lambda_{ap}(r_{ap}, t)$  die vom Partikelradius abhängige Verlustrate bezeichnet. Unter der Annahme dass die Partikel nach der Kollision nicht vom Tropfen abprallen und dass ausschließlich Zweierstöße stattfinden, wird die Partikelverlustrate im Allgemeinen mit Hilfe des sogenannten Kollisions-Kernel  $K_{ap}(r_{dr}, r_{ap})$  definiert, wobei  $r_{dr}$  den Tropfenradius bezeichnet. Danach gilt

$$\lambda_{ap}(r_{ap}, t) = \int_0^{\infty} K_{ap}(r_{dr}, r_{ap})f_w(r_{dr}, t)dr_{dr} \quad (5.2)$$

mit der Tropfenanzahldichteverteilungsfunktion  $f_w(r_{dr}, t)$ .

Für die Berechnung der Partikelverlustrate und des Kollisions-Kernels existieren sehr unterschiedliche Ansätze. Im Folgenden sollen zwei dieser Ansätze genauer erläutert werden.

### 5.1.1. Berechnung des Kollisions-Kernel nach Slinn

Eine Möglichkeit, den Kollisions-Kernel und damit die Partikelverlustrate herzuleiten, beruht auf der Betrachtung eines fallenden Tropfens in der Atmosphäre. Dieser spannt bei seinem Fall einen Zylinder auf, wobei dann davon ausgegangen wird, dass alle Partikel, die sich in diesem Zylinder befinden, mit dem Tropfen kollidieren. Den Querschnitt dieses Zylinders bezeichnet man im Allgemeinen als geometrischen Wirkungsquerschnitt  $A_{wirk,g}$ . Er ist definiert als

$$A_{wirk,g} = \pi(r_{dr} + r_{ap})^2. \quad (5.3)$$

Diese vereinfachte Betrachtung vernachlässigt aber ganz den Einfluss des fallenden Tropfens auf das ihn umgebende Strömungsfeld. Für ein Aerosolpartikel bedeutet dies, dass es nicht notwendigerweise mit dem Tropfen kollidiert, auch wenn es sich im geometrischen Wirkungsquerschnitt befindet (siehe Abbildung 5.1). Daher wird ein weiterer Wirkungsquerschnitt, der sogenannte effektive Wirkungsquerschnitt  $A_{wirk,e}$ , eingeführt. Nur wenn sich ein Partikel in diesem befindet, kollidiert es mit dem Tropfen. Wegen der Divergenz der Stromlinien ist der effektive Wirkungsquerschnitt eines fallenden Tropfens meist kleiner als der geometrische. Zudem kann es

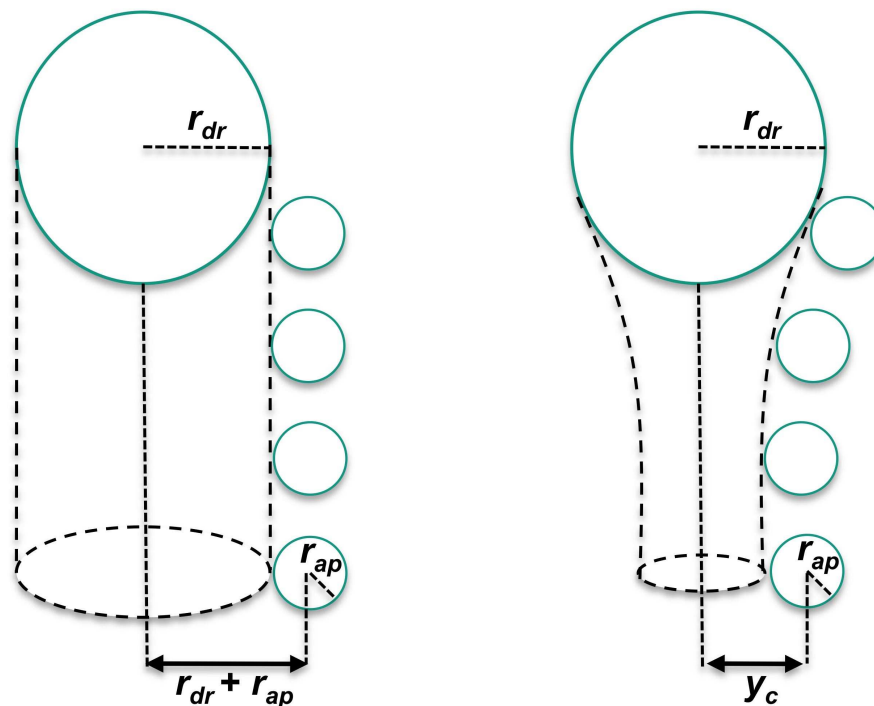


Abbildung 5.1.: Schematische Darstellung des geometrischen (links) und effektiven Wirkungsquerschnittes (rechts) für die Kollision von einem Tropfen mit Radius  $r_{dr}$  und einem Aerosolpartikel mit Radius  $r_{ap}$ .

sein, dass Aerosolpartikel auch in Folge anderer Effekte nicht mit dem Tropfen kollidieren. Diese können zum einen durch den Zustand der Atmosphäre, wie zum Beispiel durch Turbulenz, oder zum anderen durch aerosolspezifische Eigenschaften wie zum Beispiel der Ladung oder Mobilität verursacht werden.

Aus diesen beiden effektiven Wirkungsquerschnitten lässt sich dann die sogenannte Kollisionseffizienz  $E$  bilden. Sie ist allgemein definiert als

$$E = \frac{A_{\text{wirk},e}}{A_{\text{wirk},g}}. \quad (5.4)$$

Beträgt die Kollisionseffizienz also eins, kollidieren nach 5.4 alle Partikel innerhalb des geometrischen Wirkungsquerschnittes mit dem fallenden Tropfen. Ist sie größer als eins, so ist der effektive Wirkungsquerschnitt grösser als der geometrische. Im Normalfall gilt für die Kollisionseffizienz jedoch  $0 < E < 1$ .

Mit Hilfe der Kollisionseffizienz kann dann der Kollisions-Kernel und folglich auch die Partikelverlustrate nach Seinfeld und Pandis (1998) berechnet werden aus

$$\begin{aligned}
\lambda_{ap}(r_{ap}, t) &= \int_0^{\infty} K_{ap}(r_{dr}, r_{ap}) f_w(r_{dr}, t) dr_{dr} \\
&= \int_0^{\infty} \pi r_{dr}^2 w_{dr}(r_{dr}) \epsilon_{Slinn} E(r_{dr}, r_{ap}) f_w(r_{dr}) dr_{dr}
\end{aligned} \tag{5.5}$$

mit der Fallgeschwindigkeit des Tropfens  $w_{dr}$  und der Retentionseffizienz  $\epsilon_{Slinn}$ . Studien von Pruppacher und Klett (1996) haben gezeigt, dass die Wahrscheinlichkeit des Abprallens eines Partikels nach dessen Kollision mit einem Niederschlagstropfen sehr gering ist. Daher kann die Retentionseffizienz in (5.5) in guter Näherung gleich eins gesetzt werden.

Wie die Trajektorienberechnung ist aber auch die Berechnung der Kollisionseffizienz ein schwieriges Problem. Slinn (1983) formuliert für die Herleitung seiner semi-empirischen Näherung der Kollisionseffizienz zunächst alle Gleichungen in dimensionsloser Form, die für die Berechnung der Partikel-Tropfen-Kollisionen benötigt werden. Mit Hilfe der darin enthaltenen dimensionslosen Kennzahlen bestimmt er dann die relevanten Prozesse.

Nach Slinn (1983) lauten die grundlegenden Gleichungen in dimensionsloser Form (Variablen siehe Symbolverzeichnis):

Bewegungsgleichung für inkompressible, stationäre Strömungen

$$\vec{v}^* \cdot \vec{\nabla} \vec{v}^* = -\frac{1}{Eu} \vec{\nabla} \vec{p}^* + \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{v}^* \tag{5.6}$$

Diffusionsgleichung für die Aerosolpartikel

$$\vec{v}^* \cdot \vec{\nabla} n_{ap} = \vec{\nabla} \left( \frac{1}{Pe} \vec{\nabla} n_{ap} - \vec{v}_{ap, drift}^* n_{ap} \right) \tag{5.7}$$

Bewegungsgleichung für die Aerosolpartikel

$$\vec{v}_{ap}^*(r_{ap}) \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_{ap}^*(r_{ap}) = -\frac{\vec{v}_{ap, drift}^*(r_{ap})}{St} + \frac{2r_{dr}}{w_{dr}^2(r_{dr})} \vec{F}_{Slinn} \tag{5.8}$$

Hierbei treten folgende dimensionslose Kennzahlen auf (Variablen siehe Symbolverzeichnis)

- Die Reynoldszahl  $Re$ , die das Verhältnis von spezifischer Impulskonvektion zu spezifischen Impulsdiffusion angibt. Sie ist definiert als

$$Re = \frac{2r_{dr} w_{dr}(r_{dr}) \rho_{air}}{\eta_{air}} \tag{5.9}$$



- Die Eulerzahl  $E_u$ , die das Verhältnis von dynamischem zu statischem Druck angibt. Für sie gilt

$$E_u = \frac{\rho_{air} w_{dr}^2(r_{dr})}{p_0}. \quad (5.10)$$

- Die Pecletzahl  $Pe$ , die das Verhältnis von konvektiven zum diffusiven Stofftransport angibt. Sie ist definiert als

$$Pe = \frac{2r_{dr} w_{dr}(r_{dr})}{D_{ap}} = Re Sc_{ap}, \quad (5.11)$$

wobei  $Sc_{ap}$  die Schmidtzahl der Aerosolpartikel bezeichnet. Es gilt

$$Sc_{ap} = \frac{\eta_{air}}{\rho_{air} D_{ap}}, \quad (5.12)$$

mit dem Diffusionskoeffizienten der Aerosolpartikel

$$D_{ap} = \frac{k_b T_{air} C_c}{6\pi \eta_{air} r_{dr}}. \quad (5.13)$$

Hierbei bezeichnet  $C_c$  den Cunninghamkorrekturfaktor, der nach Frielander (1977) mit Hilfe der freien Weglänge  $\lambda_{air}$  und des Partikeldurchmessers  $r_{ap}$  berechnet werden kann durch

$$C_c = 1 + 2,493 \frac{\lambda_{air}}{2r_{ap}} + 0,84 \frac{\lambda_{air}}{2r_{ap}} \exp\left(-0,435 \frac{2r_{ap}}{\lambda_{air}}\right). \quad (5.14)$$

- Die Stokeszahl  $St$ , die das Verhältnis von Widerstandskraft und Reibung angibt und sich berechnen lässt aus

$$St = \frac{\tau_{ap} w_{dr}(r_{dr})}{r_{dr}}, \quad (5.15)$$

wobei  $\tau_{ap}$  die Partikelrelaxationszeit bezeichnet, für die gilt

$$\tau_{ap} = \frac{m_{ap} C_c}{6\pi \eta_{air} r_{dr}}. \quad (5.16)$$

Zudem werden noch zwei weitere dimensionslose Größen berücksichtigt, die zwar nicht in den obigen Gleichungen auftreten, aber dennoch eine wichtige Rolle bei den Partikel-Tropfen-Kollisionen spielen. Es handelt sich dabei zum einen um das Verhältnis von Partikelradius zu Tropfenradius  $v = r_{ap}/r_{dr}$  und zum anderen um das Verhältnis von der dynamischen Viskosität von Wasser zu der von Luft  $W = \eta_w/\eta_{air}$ .

Slinn (1977 und 1983) geht davon aus, dass die Kollisionseffizienz  $E$  von sechs der oben genannten dimensionslosen Kennzahlen abhängt

$$E = E(\text{Re}, \text{Eu}, \text{Sc}_{ap}, \nu, W, \text{St}). \quad (5.17)$$

Anhand experimentell ermittelter Daten und der Abhängigkeit nach (5.17) leitet Slinn eine semiempirische Formel für die Kollisionseffizienz her, wobei er drei dominierende Prozesse berücksichtigt: die Brown'sche Diffusion, die Trägheitsimpaktion und die Interzeption, die den Einfluss der Partikelgröße widerspiegelt. Nach Slinn (1977 und 1983) ist die Kollisionseffizienz  $E$  dann gegeben durch die Summe der Anteile der einzelnen Prozesse

$$E = E_{BD} + E_{Imp} + E_{Int}, \quad (5.18)$$

wobei die Anteile folgendermaßen berechnet werden

- Der Anteil der Brown'schen Diffusion

$$E_{BD}(r_{ap}, r_{dr}) = \frac{1}{\text{Re Sc}_{ap}} \left( 1 + 0,4\text{Re}^{1/2}\text{Sc}_{ap}^{1/3} + 0,16\text{Re}^{1/2}\text{Sc}_{ap}^{1/2} \right) \quad (5.19)$$

- Der Anteil der Trägheitsimpaktion

$$E_{Imp}(r_{ap}, r_{dr}) = \left( \frac{\rho_w}{\rho_{ap}} \right)^{1/3} \left( \frac{\text{St} - \text{St}^*}{\text{St} - \text{St}^* + 2/3} \right)^{2/3} \quad (5.20)$$

- Der Anteil der Interzeption

$$E_{Int}(r_{ap}, r_{dr}) = 4\nu \left( W + \left( 1 + \text{Re}^{1/2} \right) \nu \right) \quad (5.21)$$

Hierbei bezeichnet  $\text{St}^*$  eine kritische Stokeszahl, die die untere Grenze für Impaktion darstellt und für  $\text{St} < \text{St}^*$  findet keine Impaktion statt. Nach Slinn ist sie definiert als

$$\text{St}^* = \frac{1,2 + \frac{1}{12} \ln(1 + \text{Re})}{1 + \ln(1 + \text{Re})}. \quad (5.22)$$

In experimentellen Studien wurde für die Kollisionseffizienz, wie Slinn (1977 und 1983) sie angibt, gute Übereinstimmung für Partikel mit Radien kleiner  $0,1 \mu\text{m}$  und Partikel mit Radien größer  $1 \mu\text{m}$  gezeigt. Dazwischen zeigten sich allerdings teils große Abweichungen der Theorie von den Experimenten.

Weitere Untersuchungen zeigten, dass diese Abweichungen reduziert werden können, indem weitere physikalische Effekte berücksichtigt werden. Hierbei handelt es sich um die thermo- sowie diffusio-phoretischen Kräfte und um die elektrischen Kräfte. Für die Kollisionseffizienz folgt dann unter Berücksichtigung dieser Kräfte

$$E = E_{BD} + E_{Int} + E_{Imp} + E_{Therm} + E_{Diff} + E_e, \quad (5.23)$$

wobei die neuen Beiträge wie folgt berechnet werden können:

- Der Anteil der thermophoretischen Kräfte  $E_{Therm}$  nach Davenport und Peters (1978)

$$E_{Therm}(r_{ap}, r_{dr}) = \frac{4\alpha_{Therm}(2 + 0,6\text{Re}^{1/2}\text{Pr}^{1/3})(T_{air} - T_s)}{10\rho w_{dr}(r_{dr})r_{dr}} \quad (5.24)$$

$T_s$  bezeichnet hierbei die Temperatur an der Tropfenoberfläche und  $\text{Pr}$  die Prandtlzahl, die definiert ist als

$$\text{Pr} = \frac{c_{pd}\eta_{air}}{k_{air}}. \quad (5.25)$$

$\alpha_{Therm}$  symbolisiert in 5.24 den thermophoretischen Koeffizienten. Er kann nach Talbot et al. (1980) berechnet werden durch

$$\alpha_{Therm} = 2c_s \frac{k^* + c_t \text{Kn}}{(1 + 3c_m \text{Kn})(1 + k^* + 2c_t \text{Kn})} C_c. \quad (5.26)$$

Hierbei bezeichnet  $\text{Kn}$  die Knudsenzahl, die definiert ist als  $\text{Kn} = \lambda_{air}/r_{ap}$ , und  $k^*$  das Verhältnis von der Wärmeleitfähigkeit von Luft  $k_{air}$  zu der des Aerosolpartikels  $k_{ap}$ . Bei  $c_m$ ,  $c_s$  und  $c_t$  handelt es sich um Konstanten, die nach Batchelor und Shen (1985) folgende Werte annehmen

$$c_m = 1,146, \quad c_s = 1,147, \quad c_t = 2,20.$$

- Der Anteil der diffusiophoretischen Kräfte  $E_{Diff}$  nach Davenport und Peters (1978)

$$E_{Diff}(r_{ap}, r_{dr}) = \frac{4\beta_{Diff} \left(2 + 0,6\text{Re}^{1/2}\text{Sc}_v^{1/3}\right) \left(\frac{p_{wd}(T_s)}{T_s} \frac{p_{wd}(T_{air})r_d}{T_{air}}\right)}{2w_{dr}(r_{dr})r_{dr}}. \quad (5.27)$$

Hierbei bezeichnet  $\text{Sc}_v$  die Schmidtzahl für Wasserdampf in Luft, die berechnet werden kann aus

$$\text{Sc}_v = \frac{\eta_{air}}{\rho_{air}D_v} \quad (5.28)$$

und  $\beta_{Diff}$  den diffusiophoretischen Koeffizienten, der definiert ist als

$$\beta_{Diff} = \frac{T_{air}D_v}{p} \left(\frac{M_w}{M_{air}}\right)^{1/2}. \quad (5.29)$$

- Der Anteil der elektrischen Kraft  $E_e$  nach Adam und Semonin (1970), wobei der Einfluss eines äußeren Feldes vernachlässigt wird,

$$E_e(r_{ap}, r_{dr}) = \frac{16kC_c q_{dr} q_{ap}}{12\pi\eta_{air}r_{dr}^2 r_{ap} w_{dr}(r_{dr})} \quad (5.30)$$

mit der Konstanten  $k = 9 \cdot 10^9 \text{ Nm}^2\text{C}^{-2}\text{s}^{-1}$  und  $q_{dr}$  sowie  $q_{ap}$ , die die elektrischen Ladungen des Tropfens und des Partikels darstellen. Nach Pruppacher und Klett (1996) gilt für diese

$$q_{dr} = 4a_{Slinn}\alpha_{Slinn}r_{dr}^2 \quad (5.31)$$

$$q_{ap} = 4a_{Slinn}\alpha_{Slinn}r_{ap}^2 \quad (5.32)$$

mit der Konstanten  $a_{Slinn} = 0,83 \cdot 10^{-6}$  und einem empirischen Parameter  $\alpha_{Slinn}$ , der Werte zwischen null und sieben annehmen kann, wobei null neutralen und sieben sehr stark geladenen Tropfen (wie zum Beispiel in einer Gewitterwolke) entspricht.

Zusammenfassend folgt demnach für die Kollisionseffizienz

$$\begin{aligned} E = & \frac{1}{\text{Re} \text{Sc}_{ap}} \left( 1 + 0,4\text{Re}^{1/2}\text{Sc}_{ap}^{1/2} + 0,16\text{Re}^{1/2}\text{Sc}_{ap}^{1/2} \right) + \\ & + \left( \frac{\rho_w}{\rho_{ap}} \right)^{1/3} \left( \frac{\text{St} - \text{St}^*}{\text{St} - \text{St}^* + 2/3} \right)^{2/3} + 4v \left( W + \left( 1 + \text{Re}^{1/2} \right) v \right) + \\ & + \frac{4\alpha_{Therm}(2 + 0,6\text{Re}^{1/2}\text{Pr}^{1/3})(T_{air} - T_s)}{10pw_{dr}(r_{dr})r_{dr}} + \\ & + \frac{4\beta_{Diff} \left( 2 + 0,6\text{Re}^{1/2}\text{Sc}_v^{1/3} \right) \left( \frac{p_{wd}(T_s)}{T_s} \frac{p_{wd}(T_{air})r_d}{T_{air}} \right)}{2w_{dr}(r_{dr})r_{dr}} + \\ & + \frac{16kC_c q_{dr} q_{ap}}{12\pi\eta_{air}r_{dr}^2 r_{ap} w_{dr}(r_{dr})}. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Mit Hilfe von (5.5) und (5.33) kann dann die Partikelverlustrate bestimmt werden.

### 5.1.2. Berechnung des Kollisions-Kernel nach Herbert und Beheng

Eine andere Möglichkeit die Partikelverlustrate  $\lambda_{ap}(r_{ap}, t)$ , im Folgenden auch spektraler Scavenging-Koeffizient genannt, zu berechnen, stellen Herbert und Beheng zur Verfügung. Diese Variante beruht auf einer theoretischen Herleitung des Kollisions-Kernels  $K_{ap}(r_{dr}, r_{ap})$ , hier auch Scavenging-Koagulationsfunktion genannt.

Allgemein ist die Scavenging-Koagulationsfunktion ein Maß dafür, wie viele Aerosolpartikel pro Zeiteinheit durch Kollision mit Tropfen in einem bestimmten Luftvolumen entfernt werden. Hierbei wird angenommen, dass alle Aerosolpartikel durch die Kollisionen in den Tropfen inkorporiert werden. Die Scavenging-Koagulationsfunktion ist demnach proportional zum Integral der Teilchenflussdichte  $\vec{I}_{ap}$  aller auf einen Tropfen mit Radius  $r_{dr}$  auftreffenden Aerosolpartikel mit Radius  $r_{ap}$  über die effektive Kollektortropfenoberfläche  $A_{eff}$ . Als Formel gilt (Bayer et al., 1987)

$$K_{ap}(r_{dr}, r_{ap}) \sim \int_{A_{eff}} |\vec{I}_{ap} \cdot d\vec{f}|. \quad (5.34)$$

Mit Hilfe der Terme der irreversiblen Prozesse hat Herbert (1978) eine allgemeine Form für die Teilchenflussdichte hergeleitet. Sie lautet

$$\vec{I}_{ap} = -\rho D_{ap} \vec{\nabla} x_{ap} + \rho x_{ap} B_{ap} \left( -m_{ap} \left[ (\alpha_{ap} - \alpha_{air}) \vec{\nabla} p + \frac{d(\vec{v}_{ap} - \vec{v})}{dt} \right] + \vec{F}_v + \vec{F}_t + \vec{F}_e \right), \quad (5.35)$$

wobei die Terme folgende Kräfte erfassen:

- Die Brownsche Diffusion  $-\rho D_{ap} \vec{\nabla} x_{ap}$  mit der Gesamtdichte  $\rho$ , der Diffusivität  $D_{ap}$  des Aerosolpartikel und seinem Massenbruch  $x_{ap}$ .
- Sedimentations- und Trägheitskräfte  $-m_{ap} \rho x_{ap} B_{ap} \left[ (\alpha_{ap} - \alpha_{air}) \vec{\nabla} p + \frac{d(\vec{v}_{ap} - \vec{v})}{dt} \right]$  mit der Masse des Aerosolpartikels  $m_{ap}$ , seiner Mobilität  $B_{ap}$ , dem Druck  $p$ , der Partikelgeschwindigkeit  $\vec{v}_{ap}$ , der baryzentrischen Geschwindigkeit  $\vec{v}$  und dem spezifischen Volumen des Aerosolpartikels  $\alpha_{ap}$  sowie dem von trockener Luft  $\alpha_{air}$ .
- Elektrische Kräfte  $\vec{F}_e$  sowie diffusio- und thermophoretische Kräfte  $\vec{F}_v$  und  $\vec{F}_t$ .

Für die Berechnung der Scavenging-Koagulationsfunktion spaltet Herbert (1986) im Folgenden die Teilchenflussdichte  $\vec{I}_{ap}$  in zwei Anteile auf. Der eine berücksichtigt nur die Sedimentations- und Trägheitskräfte, die proportional zur Partikelmasse sind, nachfolgend auch mechanische Effekte genannt, die proportional zur Partikelmasse sind, und der andere alle sonstigen Effekte.

Zuerst wird der Anteil der Teilchenflussdichte, der alle Effekte außer den mechanischen berücksichtigt, weiter betrachtet. Dieser Anteil der Teilchenflussdichte  $\vec{I}_{ap,1}$  lautet

$$\vec{I}_{ap,1} = -\rho D_{ap} \vec{\nabla} x_{ap} + \rho x_{ap} B_{ap} \left( \vec{F}_v + \vec{F}_t + \vec{F}_e \right). \quad (5.36)$$

Um ein stationäres Profil der Partikel um den Kollektor-Tropfen zu erhalten, nehmen Herbert und Beheng (1986) an, dass dieser Teil der Teilchenflussdichte divergenzfrei ist. Für Kugelsymmetrie kann dies beschrieben werden mit

$$D_{ap} \xi_{ap} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dx_{ap}}{dr} \right) - B_{ap} H \frac{dx_{ap}}{dr} = 0. \quad (5.37)$$

Hierbei bezeichnet  $\xi_{ap}$  den sogenannten Ventilationskoeffizienten der Aerosolpartikel,  $r$  die radiale Abstandscoordinate der Partikel zum Tropfenmittelpunkt und  $H$  den Einfluss der elektrischen sowie thermo- und diffusiophoretischen Kräfte. Desweiteren wird angenommen, dass es sich bei den elektrischen sowie phoretischen Kräfte um Zentralkräfte handelt. Damit folgt für  $H$

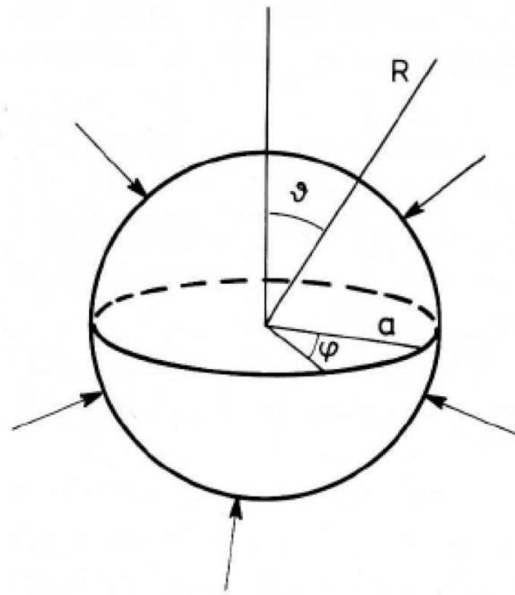


Abbildung 5.2.: Die effektive Tropfenoberfläche für eine radial gerichtete Partikelflussdichte  $2 \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(\vartheta_{air}) a^2 d\vartheta_{air} d\phi = 4\pi a^2$  mit  $a = r_{dr}$  und  $R = r$  (Herbert und Beheng, 1986).

$$H = r^2(F_e + \xi_\nu F_\nu + \xi_t F_t) = \text{const}, \quad (5.38)$$

unter Verwendung der Ventilationskoeffizienten  $\xi_\nu$  und  $\xi_t$ , die den hydrodynamischen Einfluss sich bewegender Tropfen korrigieren sollen. Für Gleichung (5.37) ergibt sich mit den Randbedingungen

$$x_{ap}(r = r_{dr}) = 0 \quad \text{und} \quad x_{ap}(r \rightarrow \infty) = x_{ap,0} \quad (5.39)$$

als Lösung für die Partikelkonzentration  $x_{ap}(r)$  in Abhängigkeit des radialen Abstandes  $r$

$$x_{ap}(r) = x_{ap,0} \frac{\exp \left[ \frac{B_{ap} H}{\xi_{ap} D_{ap} r_{dr}} \left( 1 - \frac{r_{dr}}{r} \right) \right] - 1}{\exp \left[ \frac{B_{ap} H}{\xi_{ap} D_{ap} r_{dr}} \right] - 1}. \quad (5.40)$$

Der Anteil der Scavenging-Koagulationsfunktion  $K_{ap,1}$ , der alle Effekte außer den mechanischen berücksichtigt, ist definiert als der Fluss der Partikel integriert über die effektive Tropfenoberfläche  $A_{eff}$ . Nach Abbildung 5.41 ist diese gegeben durch

$$A_{eff} = 4\pi r_{dr}^2. \quad (5.41)$$

und damit die Scavenging-Koagulationsfunktion  $K_{ap,1}$  durch

$$K_{ap,1} = \frac{1}{\rho x_{ap,0}} \left| \int_{4\pi r_{dr}^2} \vec{I}_{ap,1} \cdot d\vec{f} \right|. \quad (5.42)$$

Setzt man (5.40) in (5.36) ein, erhält man dann

$$K_{ap,1} = \frac{4\pi B_{ap} H}{\exp\left(\frac{B_{ap} H}{\xi_{ap} D_{ap} r_{dr}}\right) - 1}. \quad (5.43)$$

Für den Anteil der Scavenging-Koagulationsfunktion  $K_{ap,2}$ , der nur mechanische Effekte berücksichtigt, ist die Teilchenflussdichte  $\vec{I}_{ap,2}$  gegeben als

$$\vec{I}_{ap,2z} = -\rho x_{ap} B_{ap} m_{ap} \left[ (\alpha_{ap} - \alpha_{air}) \vec{\nabla} p + \frac{d(\vec{v}_{ap} - \vec{v})}{dt} \right]. \quad (5.44)$$

Unter Verwendung der hydrostatischen Approximation

$$\alpha_{air} \vec{\nabla} p = \vec{g} \quad (5.45)$$

im Druckterm, wobei  $\vec{g}$  die Gravitationsbeschleunigung bezeichnet, und unter der Annahme, dass die baryzentrische Geschwindigkeit sich nicht während der Umströmung des Aerosolpartikels um einen Regentropfen ändert, was ein weit verbreiteter Ansatz in der Trajektorienberechnung ist, folgt für die vertikale Komponente des mechanischen Anteils der Teilchenflussdichte  $I_{ap,2z}$

$$I_{ap,z} = -\rho x_{ap} B_{ap} m_{ap} g_* \left( 1 + \frac{dw_{ap}/dt}{g_*} \right) \quad \text{mit} \quad g_* = g \left( \frac{\alpha_{air} - \alpha_{ap}}{\alpha_{ap}} \right). \quad (5.46)$$

Mit (5.46) und der effektiven Tropfenkollektoroberfläche  $A_{eff}$ , die nach Abbildung 5.3 gegeben ist durch

$$A_{eff} = \pi r_{dr}^2, \quad (5.47)$$

folgt nach der Definition des mechanischen Anteils der Scavenging-Koagulationsfunktion  $K_{ap,2}$  unter der Annahme von  $x_{ap} = x_{ap,0}$

$$K_{ap,2} = \frac{1}{\rho x_{ap,0}} \left| \int_{\pi r_{dr}^2} I_{ap,2z} df \right| = B_{ap} m_{ap} g_* \pi y_c^2. \quad (5.48)$$

Hierbei bezeichnet  $y_c$  den effektiven Tropfenkollektorradius, für den gilt

$$y_c^2 = r_{dr}^2 \left( 1 + \int_{\pi r_{dr}^2} \frac{dw_{ap}/dt}{\pi r_{dr}^2 g_*} df \right). \quad (5.49)$$

Da die analytische Lösung des effektiven Tropfenkollektorradius sehr aufwendig ist, wählten Herbert und Beheng (1986) dafür einen semi-empirischen Ansatz. Dieser wurde allerdings sehr einfach

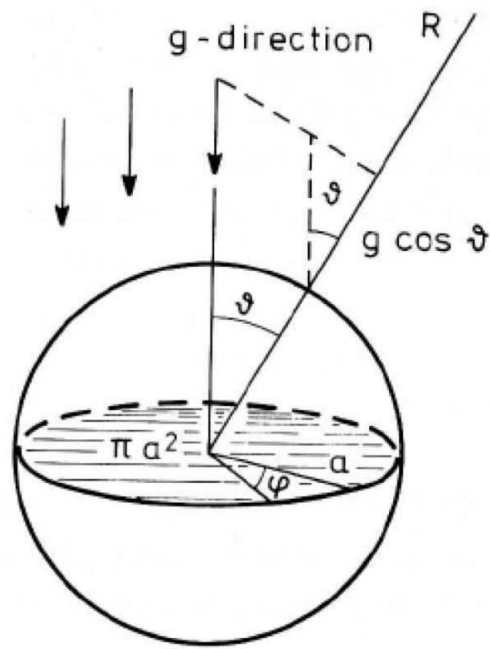


Abbildung 5.3.: Die effektive geometrische Tropfenoberfläche für die vertikale nach unten gerichtete Komponente einer Partikelflussdichte  $\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \cos(\vartheta_{air}) \sin(\vartheta_{air}) a^2 d\vartheta_{air} d\phi = \pi a^2$  mit  $a = r_{dr}$  und  $R = r$  (Herbert und Beheng, 1986).

gewählt, da in der Größenordnung von  $0,5 \mu\text{m}$  bis  $1 \mu\text{m}$  nicht viele Messwerte zur Verfügung standen, obwohl dort schon mechanische Effekte eine wichtige Rolle spielen. Bei dem Ansatz handelt es sich um einen Potenzansatz der Form

$$y_c = r_{dr} \left( \frac{r_{ap}}{r_0} \right)^{\alpha_0} \quad (5.50)$$

mit den Konstanten  $r_0$  und  $\alpha_0$ , für deren Bestimmung Daten eines Trajektorienmodells von Grover et al. (1977) und Leong et al. (1982) verwendet wurden.

Die totale Scavenging-Koagulationsfunktion ist dann gerade die Summe der beiden einzelnen Anteile  $K_{ap1}$  und  $K_{ap2}$ . Sie ist demnach gegeben durch

$$K_{ap} = \frac{4\pi B_{ap} H}{\exp\left(\frac{B_{ap} H}{\xi_{ap} D_{ap} r_{dr}}\right) - 1} + B_{ap} m_{ap} g_* \pi y_c^2. \quad (5.51)$$

Mit Hilfe von (5.51) und der Tropfenanzahldichteverteilungsfunktion  $f_w(r_{dr}, t)$  kann dann die Partikelverlustrate  $\lambda_{ap}(r_{ap}, t)$  nach (5.2) berechnet werden.



## 5.2. Eine neue Formulierung des effektiven Tropfenkolektorradius

Allgemein ist der Ansatz zur Berechnung der Partikelverlustrate, wie ihn Herbert und Beheng hergeleitet haben (siehe Kapitel 5.1.2), eine gute Parametrisierung, da sie zum einen auf einer geschlossenen Theorie beruht. Einzig die Berechnung des Tropfenkolektorradius nach (5.50) weist zwei Mängel auf, weswegen er in dieser Arbeit nicht verwendet, sondern eine neue Formulierung dafür hergeleitet werden soll.

Der eine Mangel besteht dabei darin, dass der effektive Tropfenkolektorradius nach (5.50) für große Aerosolradien nicht gegen einen Grenzwert strebt, sondern beliebig groß werden kann. Nach der ursprünglichen Definition in (5.49) gibt es aber einen solchen oberen Grenzwert. Dieser wird dann erreicht, wenn für sehr große Aerosolpartikel die Trägheitskräfte gegenüber der Gravitationskraft vernachlässigt werden können und das Aerosolpartikel dann nicht mehr dem Strömungsfeld um den Kollektortropfen folgt, sondern eine geradlinige Bewegung ausführt. Mathematisch bedeutet dies, dass  $dw_{ap}/dt$  gerade null wird, und mit Hilfe von (5.49) folgt dann für den effektiven Tropfenkolektorradius

$$\lim_{r_{ap} \rightarrow \infty} y_c = r_{dr}. \quad (5.52)$$

Wobei an dieser Stelle angemerkt sei, dass in (5.49) schon eine Näherung für den effektiven Tropfenkolektorradius durchgeführt wurde. Eigentlich müsste hierbei neben dem Tropfenradius auch der Partikelradius berücksichtigt werden und gelten

$$\lim_{r_{ap} \rightarrow \infty} \left( \frac{y_c}{r_{dr} + r_{ap}} \right) = 1. \quad (5.53)$$

Da die Aerosolpartikel aber meist deutlich kleiner als die Tropfen sind, ist diese Näherung nach (5.52) für den Größenordnungsbereich, in dem die Parametrisierung des Auswaschens verwendet werden soll, gerechtfertigt.

Ein weiterer Mangel der Näherung des effektiven Tropfenkolektorradius liegt in der Bestimmung der Konstanten  $r_0$  und  $\alpha_0$  in (5.50). Hierbei werden Daten aus Trajektorienmodellen von Grover et al. (1977) und Leong et al. (1982) verwendet. Diese Modelle berücksichtigen nämlich nicht nur den alleinigen Einfluss von Trägheits- und Sedimentationskräften, sondern auch noch phoretische und elektrische Kräfte. Diese sollen aber gar nicht bei dem effektiven Tropfenkolektorradius im Rahmen der Theorie von Herbert und Beheng (1986) berücksichtigt werden (siehe 5.1.2).

Aus diesem Grund soll im folgenden Abschnitt nun eine neue Näherung für den effektiven Tropfenkolektorradius bestimmt werden. Dabei soll sowohl eine Approximation des Kollektorradius für eine laminare Umströmung des Tropfens als auch für eine idealisiert turbulente Umströmung

hergeleitet werden. Da die üblichen Ansätze bei der analytischen Lösung von (5.49) keinen Erfolg brachten, wird im Weiteren das Augenmerk auf eine numerische Lösung der Gleichung gelegt. Hierfür wurde zunächst ein Trajektorienmodell für Aerosolpartikel im der Umgebung eines fallenden Tropfens erstellt, das nur den Einfluss mechanischer Effekte beinhaltet. Mit Hilfe der damit erhaltenen Daten wird dann im Weiteren eine neue Näherung für den effektiven Tropfenkollektorradius hergeleitet.

### 5.2.1. Aufbau des Trajektorienmodells

Ausgangspunkt des Trajektorienmodells ist die Bewegungsgleichung eines Aerosolpartikels. Unter der Annahme dass nur die Reibungskraft  $\vec{F}_R$ , die Gravitationskraft  $\vec{F}_G$  und die archimedische Auftriebskraft  $\vec{F}_A$  wirken, gilt für die Beschleunigung  $\vec{a}_{ap}$  eines Aerosolpartikels mit der Masse  $m_{ap}$

$$m_{ap}\vec{a}_{ap} = \vec{F}_G + \vec{F}_A - \vec{F}_R. \quad (5.54)$$

Wird desweiteren angenommen, dass alle Aerosolpartikel kugelförmig sind, folgt für die Gravitationskraft

$$\vec{F}_G = m_{ap}\vec{g} = \frac{4}{3}\pi r_{ap}^3 \rho_{ap}\vec{g}, \quad (5.55)$$

wobei  $r_{ap}$  den Aerosolradius,  $\rho_{ap}$  seine Materialdichte und  $\vec{g}$  die Schwerebeschleunigung bezeichnen.

Für die archimedische Auftriebskraft folgt analog

$$\vec{F}_A = -m_{air}\vec{g} = -\frac{4}{3}\pi r_{ap}^3 \rho_{air}\vec{g}, \quad (5.56)$$

wobei  $m_{air}$  die durch das Aerosolpartikel verdrängte Luft und  $\rho_{air}$  die Luftdichte ist. Unter der Annahme dass die Luft trocken ist, ist die Dichte nach der Gleichung für ein ideales Gas gegeben durch

$$\rho_{air} = \frac{p}{R_d T} \quad (5.57)$$

mit dem Druck  $p$ , der Gaskonstanten trockener Luft  $R_d$  und der Temperatur  $T$ .

Nach Seinfeld und Pandis (1997) kann die Reibungskraft in Abhängigkeit der Reynoldszahl  $Re$  näherungsweise berechnet werden durch

$$\vec{F}_R = \begin{cases} 6\pi\eta_{air}r_{ap}\vec{v}_{rel}, & \text{Re} < 1, 0 \\ \frac{18,5}{8}\pi\rho_{air}^{0,4}\eta_{air}^{0,6}(2r_{ap})^{1,4}\vec{v}_{rel}|\vec{v}_{rel}|^{0,4}, & \text{Re} \geq 1, 0 \end{cases}. \quad (5.58)$$

Hierbei ist  $\eta_{air}$  die dynamische Viskosität von Luft und  $\vec{v}_{rel}$  die relative Geschwindigkeit eines Aerosolpartikels zur umgebenden Luftströmung. Sie ist definiert als

$$\vec{v}_{rel} = \vec{v}_{ap} - \vec{v}_{Umgebung}. \quad (5.59)$$

Befindet sich also die Luft um ein Aerosolpartikel in Ruhe, so ist die relative Geschwindigkeit mit der Geschwindigkeit des Aerosolpartikels identisch und es gilt  $\vec{v}_{Umgebung} = \vec{v}_{ap}$ . Im Modell wird für die Geschwindigkeit der umgebenden Luftströmung angenommen, dass sich diese in Ruhe befindet und nur durch den fallenden Niederschlagstropfen eine Störung erfährt. Die genaue Wahl des Geschwindigkeitsfelds der Tropfenströmung kann dann für jede Simulation frei gewählt werden.

Zudem wird für die Berechnung der Reibungskraft nach (5.58) neben dem äußeren Strömungsfeld auch die Reynoldszahl des fallenden Aerosolpartikels benötigt. Um dabei die numerische Effektivität des Modells möglichst hoch zu halten, wird hierfür eine Nachschlagetabelle von Seinfeld und Pandis (1997) (siehe Tabelle 5.1) verwendet. In der Tabelle sind abhängig von den Partikeldurchmessern die Reynoldszahlen für fallenden Aerosolpartikel bei Endfallgeschwindigkeit sowie bei einer Temperatur von 298 K und einem Druck von 1 atm angegeben. Da sich doppelt-logarithmisch aufgetragen ein linearer Zusammenhang zwischen dem Aerosoldurchmesser und der zugehörigen Reynoldszahl zeigt, können im Modell die Reynoldszahlen für beliebige Aerosoldurchmesser zwischen 0,1  $\mu\text{m}$  und 300  $\mu\text{m}$  durch algebraische Interpolation mit Hilfe dieser Tabelle bestimmt werden.

Zusammenfassend folgt dann für die Bewegungsgleichung des Aerosolpartikels unter Verwendung von (5.58) für die Reibungskraft  $\vec{F}_R$

$$m_{ap}\vec{a}_{ap} = \frac{4}{3}\pi(\rho_{ap} - \rho_{air})r_{ap}^3\vec{g} - \vec{F}_R. \quad (5.60)$$

### Numerische Lösung

Da das Problem rotationssymmetrisch zur vertikalen Achse ist, löst das Trajektorienmodell nur den radialen Anteil des Problems. Im Modellgebiet befindet sich dann der Kollektortropfen genau im Ursprung und der Startpunkt einer Trajektorien eines Aerosolpartikels wird gewählt, wie in Abbildung 5.4 skizziert. Danach ist er gegeben durch

$$x_i = -7r_{dr} \quad \text{und} \quad y_i = y_o + i \cdot d_y, \quad (5.61)$$

Tabelle 5.1.: Reynoldszahlen für fallende Aerosolpartikel bei Endfallgeschwindigkeit und einer Temperatur von  $T = 298\text{K}$

Durchmesser in $\mu\text{m}$	Reynoldszahl
0,1	$7 \cdot 10^{-9}$
1	$2,8 \cdot 10^{-6}$
10	$2,5 \cdot 10^{-3}$
20	0,02
60	0,4
100	2
300	20

wobei  $y_o$   $0,05 \mu\text{m}$  und  $d_y$   $0,1 \mu\text{m}$  beträgt und  $i$  eine ganze natürliche Zahl bezeichnet.

Bevor jedoch die Trajektorien der Aerosolpartikel von den Startpunkten aus mit Hilfe von (5.60) numerisch gelöst werden können, muss diese Differentialgleichung zweiter Ordnung zunächst in ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung umgewandelt werden.

Mit Hilfe der allgemeinen Definition der zeitliche Änderung des Ortes  $\vec{s}_{ap}$  eines Aerosolpartikels

$$\dot{\vec{s}}_{ap} = \frac{d\vec{s}_{ap}}{dt} = \vec{v}_{ap} \quad (5.62)$$

$$\ddot{\vec{s}}_{ap} = \frac{d^2\vec{s}_{ap}}{(dt)^2} = \vec{a}_{ap} \quad (5.63)$$

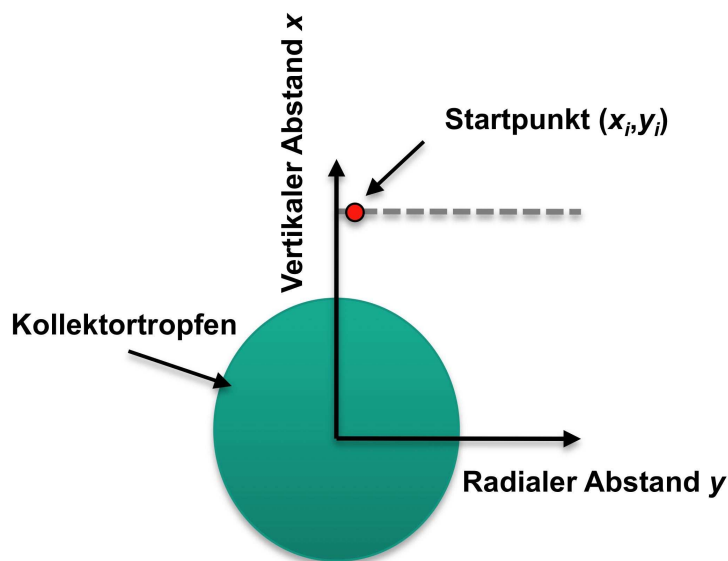


Abbildung 5.4.: Schematische Darstellung der Trajektorienstartpunkte

und unter Verwendung von

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{s}_{ap} \\ \dot{\vec{s}}_{ap} \end{pmatrix}, \quad (5.64)$$

folgt dann

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \begin{pmatrix} \dot{\vec{s}}_{ap} \\ \ddot{\vec{s}}_{ap} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{\vec{s}}_{ap} \\ \frac{\frac{4}{3}\pi(\rho_{ap} - \rho_{air})r_{ap}^3\vec{g} - \vec{F}_R}{m_{ap}} \end{pmatrix}. \quad (5.65)$$

Für die praktische Umsetzung wird die Euler-Cauchy Formel verwendet

$$\vec{u}(t_2) = \vec{u}(t_1) + (t_2 - t_1) \frac{d\vec{u}}{dt}(t_1) = \vec{u}(t_1) + d\vec{u}(t_1). \quad (5.66)$$

Leider neigt das Modell zu numerischer Instabilität. Dies liegt daran, dass die Werte von  $du_1$  in einem Intervall von circa  $[0; 10]$  liegen und die von  $du_2$  in einem von circa  $[0; 10^{20}]$ . Ist der gewählte Zeitschritt also etwas zu groß, so treten viel zu große Beschleunigungen auf, und ist er etwas zu klein, so liegt die Änderung des Ortes unter der numerischen Auflösung des Modells und der Aerosolpartikel bewegt sich nicht. Aus diesem Grund ist innerhalb des Modells eine Zeitschrittweitensteuerung eingebaut, wobei dann sowohl die Änderung der Geschwindigkeit  $du_2$  als auch die Änderung des Ortes  $du_1$  ein oberer Grenzwert eingeführt wird.

So darf die Änderung der Geschwindigkeit  $du_2$  infolge der auftretenden Reibungskräfte maximal  $0,0005 \text{ m s}^{-1}$  betragen. Für den maximalen Zeitschritt folgt danach

$$dt \leq 0,0005 \text{ m s}^{-1} \frac{m_{ap}}{|\vec{F}_R(t_1)|}. \quad (5.67)$$

Zudem darf der Zeitschritt nicht den anderen Grenzwert überschreiten. Er muss so klein gewählt werden, dass bei einer Partikelgeschwindigkeit  $|\vec{v}_{ap}|$  von  $10 \text{ m s}^{-1}$  sich der Partikelort um maximal ein Hunderstel des Tropfenradius ändern darf. Als Formel gilt

$$dt \leq \frac{r_{dr}}{100 |\vec{v}_{ap}|}. \quad (5.68)$$

Während einer Simulation wird dann zu Beginn eines Integrationsschrittes der maximal mögliche Zeitschritt nach (5.67) und (5.68) berechnet, wobei der kleinere der beiden dann verwendet wird.

Das Modell kann in dieser Form Trajektorien ausrechnen, Ziel war aber eigentlich effektive Tropfenkolektorradien zu bestimmen. Aus diesem Grund werden für einen einzelnen Tropfenradius die Trajektorien vieler Aerosolpartikel mit verschiedenen Startpunkten nach (5.61) berechnet. Aus der

Integration über alle Anfangsorte, bei denen die Aerosolteilchen vom Kollektortropfen eingefangen wurden, ergibt sich der effektive Wirkungsquerschnitt des Tropfens. Es gilt demnach für den effektiven Wirkungsquerschnitt  $A_{Wirk,e}$

$$A_{Wirk,e} = \int_0^{\infty} 2\pi y_i n(y_i) dy_i \quad (5.69)$$

mit

$$n(y_i) = \begin{cases} 1, & \text{falls eingefangen} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.70)$$

In einer Simulation gilt ein Partikel dann vom Tropfen als eingefangen, wenn es beim Durchschreiten der horizontalen Achse, einen kritischen Wert von  $r_{krit} = r_{dr} + r_{ap}$  zum Tropfenmittelpunkt unterschreitet. Das Modell geht also an sich davon aus, dass ein Partikel nach der Kollision mit dem Tropfen immer in diesen inkorporiert wird.

Mit Hilfe des nach (5.69) berechneten effektiven Wirkungsquerschnitt kann dann der effektiven Kollektorradius bestimmt werden durch

$$y_c = \sqrt{\frac{A_{Wirk,e}}{\pi}} \quad (5.71)$$

Um bei der Bestimmung des effektiven Kollektorradius für eine turbulente Umströmung den stochastischen Charakter der Turbulenz auszugleichen, wird ein Ensemble aus vierzig einzelnen Simulationen des effektiven Tropfenkollektorradius gebildet. Die einzelnen Simulationen unterscheiden sich dabei in dem äußeren Strömungsfeld. Dies wird für jede Simulation neu bestimmt und unterscheidet sich somit von Simulation zu Simulation. Der resultierende Tropfenkollektorradius für eine turbulente Tropfenströmung ist dann gerade das arithmetische Mittel.

Auf diese Weise wird für jeden Tropfenradius der effektive Tropfenkollektorradius in Abhängigkeit eines Aerosolpartikelradius berechnet, wobei der Aerosolpartikelradius zwei obere Werte nicht überschreiten darf. Der eine ist Folge der Verwendung der Tabelle 5.1 zur Bestimmung der Reynoldszahl. Denn da in dieser nur Reynoldszahlen für Aerosole bis  $300 \mu\text{m}$  angegeben sind, darf auch im Modell der Partikelradius  $300 \mu\text{m}$  nicht überschreiten. Zudem existiert im Modell noch eine weitere obere Schranke für den Partikelradius, die da herrührt, dass nur solange

$$\frac{m_{ap}}{m_{dr}} \leq 10^{-3} \quad (5.72)$$

erfüllt ist, nach Beard (1974) angenommen werden kann, dass ein Aerosolpartikel keinen Einfluss auf das Strömungsfeld um den fallenden Niederschlagstropfen hat. Umformuliert lässt sich (5.72) auch in Abhängigkeit der Radien und der Dichten schreiben als

$$r_{ap} \leq r_{dr} (10^{-3} \rho_{ap} / \rho_w). \quad (5.73)$$

### 5.2.2. Beschreibung der Simulationen

Wie bereits erwähnt sollen mit Hilfe der Daten des Trajektorienmodells die Näherungsformeln für den effektiven Tropfenkollectorradius bei einer laminaren sowie bei einer turbulenten Tropfenumströmung hergeleitet werden. Je nachdem welche Umströmung simuliert werden soll, muss ein äußeres Strömungsfeld des Modells vorgegeben werden.

Im Falle der Bestimmung des effektiven Tropfenkollectorradius für eine laminare Tropfenumströmung wird eine Potentialströmung für das äußere Strömungsfeld angenommen. Dies ist allgemein durch Wirbel- und Reibungsfreiheit definiert. In kartesischen Koordinaten ist es nach Oertel (2008) gegeben durch

$$\vec{v}_{Umgebung}(x, y, r) = \begin{pmatrix} u_{Umgebung}(x, y, r) \\ v_{Umgebung}(x, y, r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_\infty + \frac{r_{dr}^3}{2} u_\infty \frac{r^3 - 3rx^2}{r^6} \\ -\frac{r_{dr}^3}{2} u_\infty \frac{3rxy}{r^6} \end{pmatrix}, \quad (5.74)$$

wobei  $x$  den vertikalen Abstand zum Tropfenmittelpunkt,  $y$  den radialen Abstand zum Tropfen-

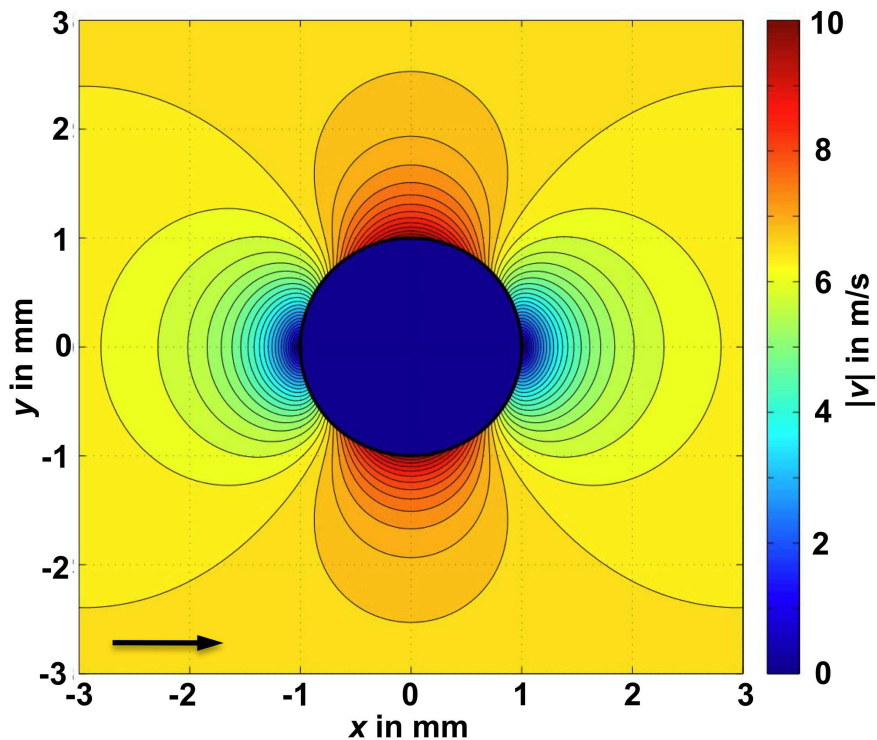


Abbildung 5.5.: Geschwindigkeitsfeld einer laminaren Tropfenumströmung bei einem Tropfenradius von  $r_{dr} = 1$  mm. Anströmgeschwindigkeit  $u_\infty$  in Pfeilrichtung

mittelpunkt in  $y$ -Richtung und  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  den Betrag des Ortsvektors zum Tropfenmittelpunkt bezeichnen.  $u_\infty$  symbolisiert die Fallgeschwindigkeit des Niederschlagstropfen, die nach Atlas et al. (1973) unter Normbedingungen genähert werden kann durch

$$u_\infty = 9,65 - 10,30 \exp(-1200 r_{dr}) \quad (5.75)$$

mit dem Tropfenradius  $r_{dr}$  in m und  $u_\infty$  in  $\text{m s}^{-1}$ . In Abbildung 5.5 ist das Potentialströmungsfeld um einen Tropfen mit einem Radius von einem Millimeter dargestellt.

Auch für die approximierte Darstellung einer turbulenten Tropfenumströmung wird als Ausgangspunkt die Potentialströmung gewählt. Jetzt wird jedoch eine künstliche Grenzschicht eingebaut, deren Dicke  $\delta$  der Prandtl-Schicht entspricht., Nach Oertel (2008) gilt für diese

$$\delta = \frac{2r_{dr}}{\sqrt{\text{Re}}} \quad (5.76)$$

Da im Falle der turbulenten Umströmung die Randbedingung  $\vec{v}_{Umgebung}(r = r_{dr}) = 0$  gelten soll, nimmt die Strömungsgeschwindigkeit innerhalb der künstlichen Grenzschicht bis zum Wert null an der Tropfenoberfläche ab. Die Geschwindigkeitsabnahme erfolgt dabei logarithmisch. Da sich nach numerischer Auswertung gezeigt hat, dass die genaue Form der logarithmischen Abnahme keinen großen Einfluss auf die Ergebnisse des Trajektorienmodells besitzen, wird sie frei gewählt als

$$\vec{v}_{Umgebung}(r) = \vec{v}_{Umgebung}(r + \delta) \frac{\ln\left(1 + 4\frac{(r-r_{dr})}{\delta}\right)}{\ln 5} \quad (5.77)$$

Mit Hilfe von (5.74), (5.76) und (5.77) kann für jeden Abstand  $r$  zum Kollektormittelpunkt eine genau definierte Geschwindigkeit berechnet werden. Um zusätzlich den stochastischen Charakter der Turbulenz innerhalb der Grenzschicht darzustellen, wird ein weiterer Abstand  $r^*$  zum Tropfenmittelpunkt zufällig in einem Bereich von  $r - l_{turb}$  bis  $r + l_{turb}$  bestimmt.  $l_{turb}$  entspricht dabei dem Prandtlischen Mischungsweg  $l_{prandtl}$  und ist nach Oertel (2008) gegeben durch

$$l_{turb} = l_{prandtl} = \kappa (r - r_{dr}) \quad (5.78)$$

mit der von-Kármánsche Konstante  $\kappa$ , für die nach Etling (2002) meist der Wert 0,41 verwendet wird. Mit Hilfe des so bestimmten  $r^*$  wird dann die stochastische Variation der Strömungsgeschwindigkeit durch

$$\vec{v}_{Umgebung}(r) = \vec{v}_{Umgebung}(r^*) \quad (5.79)$$

dargestellt. Das so ermittelte Strömungsfeld ist in Abbildung 5.6 für einen Tropfen mit einem Millimeter Radius dargestellt. Im Vergleich mit Abbildung 5.5 erkennt man hier gut die turbulente Abnahme der Strömungsgeschwindigkeit hin zur Tropfenoberfläche.



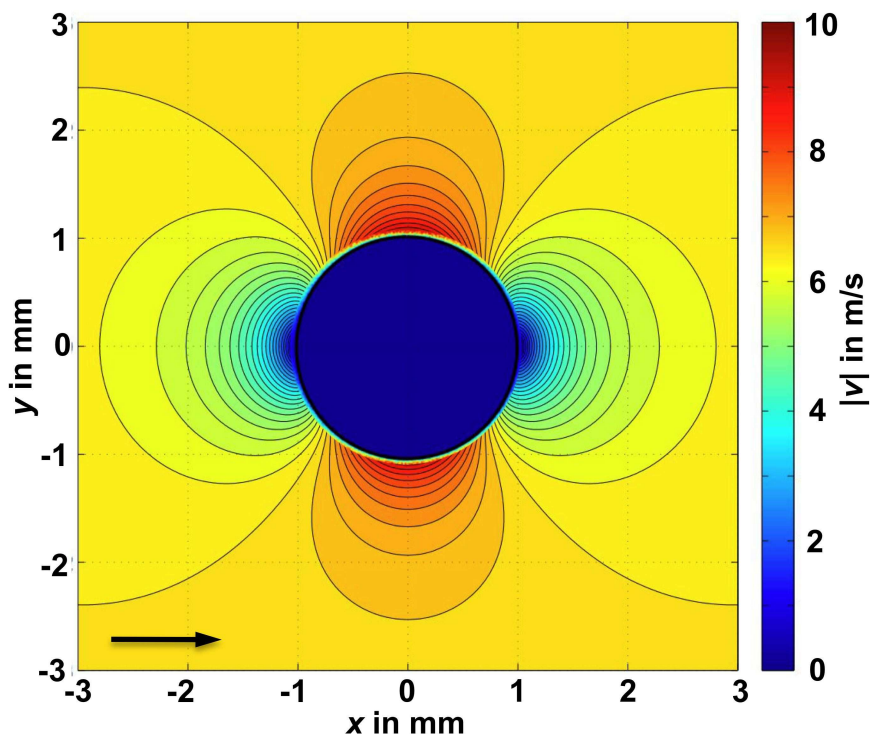


Abbildung 5.6.: Geschwindigkeitsfeld einer turbulenten Tropfenumströmung bei einem Tropfenradius von  $r_{dr} = 1$  mm. Anströmgeschwindigkeit  $u_\infty$  in Pfeilrichtung

Mit Hilfe dieser beiden äußeren Strömungsfelder werden dann die Berechnung der effektiven Tropfenkollectorradien für Tropfen von 0,1 mm bis 5 mm sowie für Aerosolpartikel von 0,1  $\mu\text{m}$  bis zu den größten zulässigen Radien (siehe Kapitel 5.2.1) durchgeführt.

Hierbei werden für alle Simulationen diesselben äußeren Bedingungen mit einer Temperatur von 298 K und einem Druck von 1000 hPa gewählt. Desweiteren wird die Luft als trocken angenommen und die Materialdichte von Wasser beträgt  $1000 \text{ kg m}^{-3}$  sowie die der Aerosolpartikel  $1770 \text{ kg m}^{-3}$ .

### 5.2.3. Auswertung und Erstellung einer Regressionsfunktion

Bei der Auswertung der Ergebnisse und der Erstellung der Regressionsfunktion werden im Folgenden die beiden Fälle der laminaren und der turbulenten Tropfenumströmung getrennt voneinander untersucht, wobei mit dem laminaren Fall begonnen wird.

In Abbildung 5.7 ist der numerisch bestimmte effektive Tropfenkollectorradius in Abhängigkeit des Partikelradius für den laminaren Fall dargestellt. Hierbei entsprechen die einzelnen Kurven jeweils einem konstanten Tropfenradius. Deutlich zu erkennen, ist die Wirkung der einzelnen Kräfte in Abhängigkeit des Partikelradius. So strebt der effektive Kollectorradius für sehr kleine

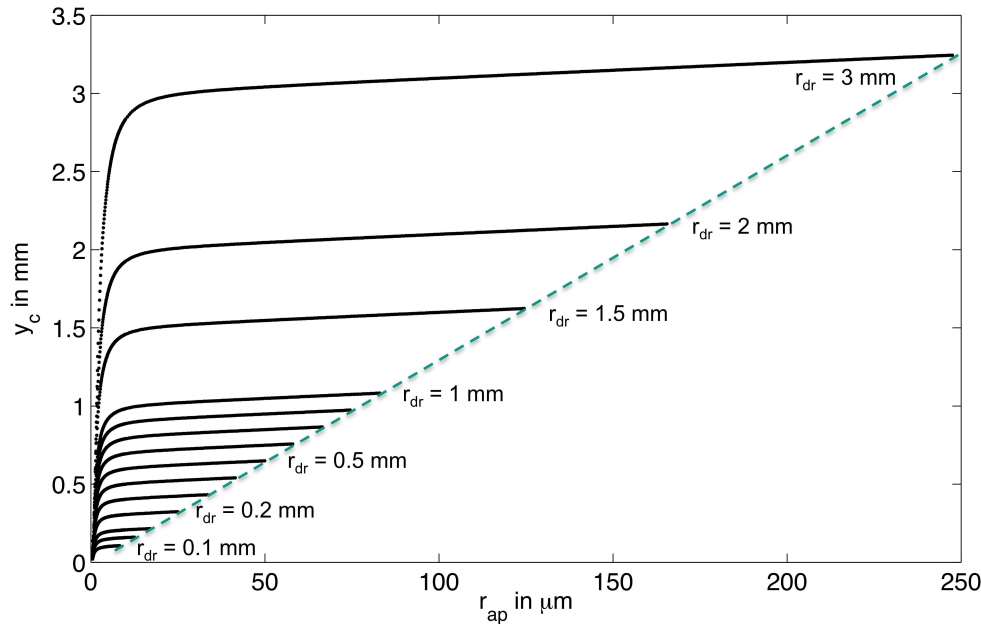


Abbildung 5.7.: Numerisch bestimmte effektive Tropfenkolektorradien  $y_c$  in mm in Abhängigkeit der Aerosolradien  $r_{ap}$  in  $\mu m$ . Die einzelnen Kurven symbolisieren jeweils den angegebenen konstanten Tropfenradius  $r_{dr}$  – laminarer Fall

Partikel gegen null, da in diesem Größenordnungsbereich vor allem die Reibungskräfte auf die Partikel wirken und die Trägheitskräfte vernachlässigt werden können. Ohne Wirkung der Trägheitskräfte folgen die Partikel dann den Stromlinien um den Tropfen und kollidieren mit diesem nicht. Für große Partikel hingegen kann die Reibungskraft gegenüber den Trägheitskräften vernachlässigt werden. In Folge der Trägheitskräfte führen die Partikel dann eine fast geradlinige Bewegungen im Nahbereich des Tropfens aus. Demzufolge entspricht der effektive Wirkungsquerschnitt der Tropfen dann gerade dem geometrischen Wirkungsquerschnitt und der effektive Tropfenkolektorradius der Summe aus Tropfenradius und Aerosolradius. Gut zu erkennen ist dieses Verhalten an den rechten Enden der einzelnen Kurven in Abbildung 5.7, wo der effektive Tropfenkolektorradius fast dem Tropfenradius entspricht und nur langsam mit größer werdendem Partikelradius zunimmt. Zudem ist in der Abbildung gut zu erkennen, ab wann die Wirkung der Trägheitskräfte einsetzt. Dies geschieht im Bereich der markanten Änderung der Steigung der einzelnen Kurven, die schon bei sehr kleinen Partikeln von einer Größenordnung von etwa  $5 \mu m$  bis  $10 \mu m$  auftritt.

Um die spätere Auswertung der Partikelverlustrate mathematisch möglichst einfach zu gestalten, wird im Folgenden angenommen, dass die Abhängigkeiten des effektiven Tropfenkolektorradius vom Tropfenradius und vom Aerosolradius unabhängig sind. Mit Hilfe dieser Näherung kann dann bei der Berechnung der Partikelverlustrate nach (5.2) die Abhängigkeit vom Partikelradius aus dem Integral hinausgezogen werden, so dass das Integral nur noch vom Partikelradius unabhängige Terme beinhaltet.

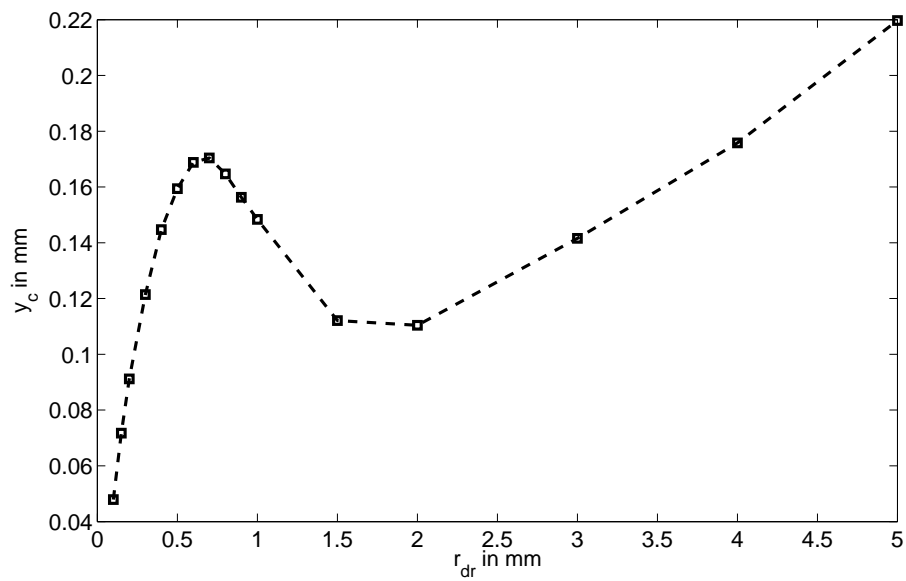
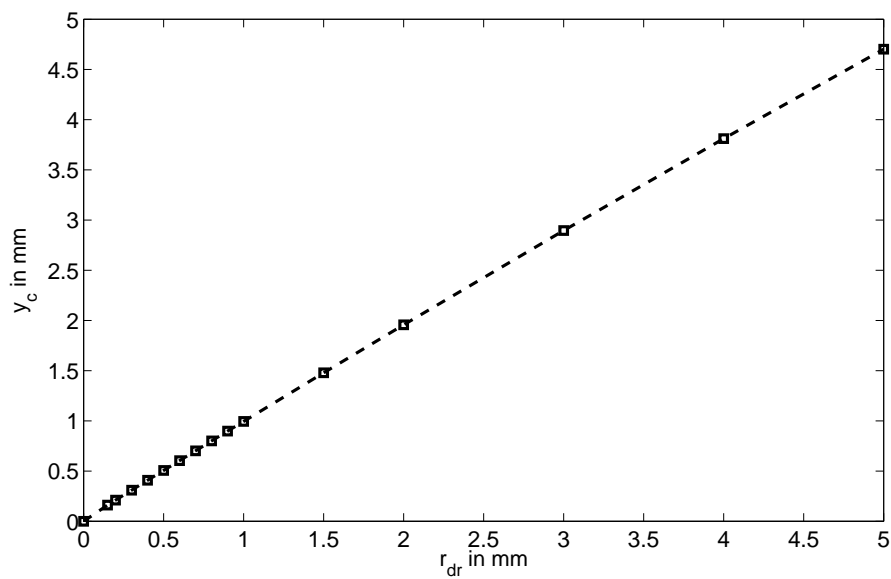
(a)  $r_{ap} = 0,9\mu\text{m}$ (b)  $r_{ap} = 12,5\mu\text{m}$ 

Abbildung 5.8.: Effektiver Tropfenkollectorradius  $y_c$  in mm über den Tropfenradien  $r_{dr}$  in mm bei konstantem Aerosolradius  $r_{ap}$  – laminarer Fall

Als Formel soll demnach für den effektiven Tropfenkollectorradius gelten

$$y_c(r_{dr}, r_{ap}) = y_{c1}(r_{dr}) \cdot y_{c2}(r_{ap}). \quad (5.80)$$

Da sich die Endpunkte der einzelnen Graphen in Abbildung 5.7 auf einer Geraden befinden, liegt die Vermutung nahe, dass ein linearer Zusammenhang zwischen dem effektiven Kollektorradius und dem Tropfenradius vorliegt. Bei der weiteren Auswertung hat sich jedoch gezeigt, dass diese Vermutung zwar für mittlere bis sehr große Aerosolradien gut erfüllt ist, nicht jedoch für sehr kleine Aerosolradien. In Abbildung 5.8 ist stellvertretend für diese beiden Fälle der effektive Tropfenkolektorradius über dem Tropfenradius bei konstantem Partikelradien aufgetragen. Der Grund der Abweichung vom linearen Zusammenhang im Bereich kleiner Radien liegt vermutlich in der Verwendung der Näherung der Reibungskraft nach Gleichung (5.58). So ist genau in dem Bereich, in dem die Reynoldszahl etwa eins beträgt und die Näherung folglich eine Fallunterscheidung vornimmt, der lineare Zusammenhang nicht gegeben.

Im Folgenden wird dennoch der lineare Zusammenhang zwischen dem effektiven Tropfenkolektorradius und dem Tropfenradius angenommen, da bis auf den Bereich sehr kleiner Partikelradien dieser eine sehr gute Übereinstimmung mit den Modelldaten aufweist.

Für die weitere Untersuchung der Abhängigkeit des effektiven Tropfenkolektorradius vom Aerosolradius wird dann zunächst der lineare Zusammenhang mit dem Tropfenradius eliminiert (siehe Abbildung 5.9 - schwarze Kurven). Die Form der dabei entstandenen Kurven legt die Vermutung nahe, dass eine der drei folgenden Funktionen eine gute Näherung sein könnte

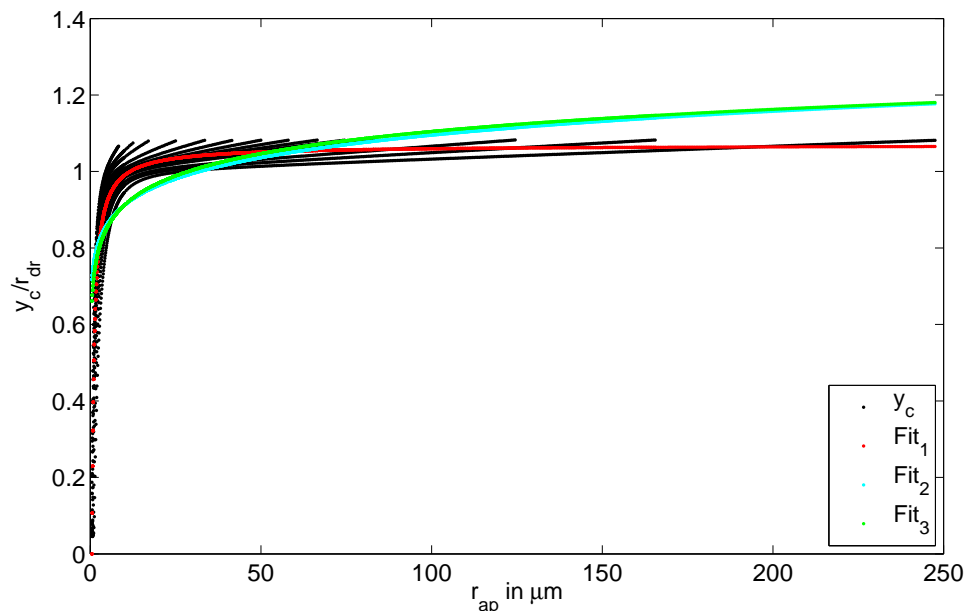


Abbildung 5.9.: Quotient  $y_c/r_{dr}$  aus effektivem Tropfenkolektorradius und Tropfenradius über den Aerosolradius  $r_{ap}$  in  $\mu\text{m}$ . Die rote, grüne und blaue Kurve symbolisieren die verschiedenen Regressionsfunktionen – laminarer Fall

$$f_1(r_{ap}) = -ar_{ap}^{-b} + c \quad (5.81)$$

$$f_2(r_{ap}) = a \ln(br_{ap} + c) + d \quad (5.82)$$

$$f_3(r_{ap}) = a \left( \frac{r_{ap}}{b} \right)^e + c, \quad (5.83)$$

wobei gilt  $a, b, c, d, e \in \mathbb{R}^+$  mit der Einschränkung für  $e \leq 1, 0$ .

Mit Hilfe der Methode der nichtlinearen kleinsten Quadrate wurden die Parameter  $a$  bis  $e$  für die einzelnen Regressionsfunktionen bestimmt. Es ergeben sich die Fit-Funktionen

$$f_1(r_{ap}) = -3,081 \cdot 10^{-6} r_{ap}^{-0,8832} + 1,07 \quad (5.84)$$

$$f_2(r_{ap}) = 0,08365 \ln(2,216 \cdot 10^4 r_{ap} + 5,003 \cdot 10^{-9}) + 1,038 \quad (5.85)$$

$$f_3(r_{ap}) = 3,349 \left( \frac{r_{ap}}{124,2} \right)^{0,07966} + 2,581 \cdot 10^{-8} \quad (5.86)$$

In Abbildung 5.9 sind diese Funktionen neben den exakten Werten farbig dargestellt. Es ist deutlich erkennbar, dass die Funktion  $f_1(r_{ap}) = -3,081 \cdot 10^{-6} r_{ap}^{-0,8832} + 1,07$  die beste Approximation der Modelldaten ist. Dies spiegelt sich auch in den Standardabweichungen der Fits wider. So beträgt die Standardabweichung für (5.84) nur 0,0546, wohingegen die beiden anderen Funktionen Werte von über 0,1 besitzen. Ein anderer wichtiger Punkt bei der Wahl der Regressionsfunktion ist die Existenz einer oberen Schranke für den effektiven Tropfenkollektorradius. Wie bereits erwähnt soll die neue Regressionsfunktion diese wichtige physikalische Eigenschaft besitzen. Die Approximation nach (5.84) weist so einen Grenzwert auf. Aus diesem Grund und natürlich da dieser Fit auch die beste Übereinstimmung mit den exakten Werten zeigte, wird als Näherung für den effektiven Tropfenkollektorradius bei einer laminaren Tropfenumströmung gewählt.

Zusammenfassend ergibt sich dann die Näherung für den effektiven Tropfenkollektorradius in Abhängigkeit vom Tropfen- und Aerosolradius

$$y_c = r_{dr} \left( 1,07 - 3,081 \cdot 10^{-6} r_{ap}^{-0,8832} \right), \quad (5.87)$$

mit  $r_{dr}$ ,  $r_{ap}$  sowie  $y_c$  in m.

Im Folgenden soll nun die Regressionsfunktion des effektiven Tropfenkollektorradius bei einer turbulenten Tropfenumströmung erstellt werden. In Abbildung 5.10 sind die numerisch berechneten effektiven Tropfenkollektorradien in Abhängigkeit des Partikelradius dargestellt, wobei die

einzelnen Kurven einem konstanten jeweiligen Tropfenradius entsprechen. Diesmal nimmt der Tropfenradius allerdings nur Werte zwischen 0,1 mm und 0,8 mm an, da aus Zeitgründen die Simulation für größere Tropfen abgebrochen werden musste.

Gut zu erkennen ist der Einfluss des turbulenten äußeren Strömungsfeldes im Bereich sehr kleiner Partikel. Anders als beim laminaren Fall geht hier der effektive Tropfenkollektorradius nicht auf null zurück, sondern nur auf Werte von etwa 0,1 mm bis 0,2 mm. Physikalisch lässt sich dieser Effekt dadurch erklären, dass in diesem Größenordnungsbereich erneut die Trägheitskräfte in Bezug auf die Reibungskräfte vernachlässigt werden können und sehr kleinen Partikel exakt den Stromlinien folgen. Die Stromlinien führen im turbulenten Fall aber nicht alle am Tropfen vorbei, wie es bei einer reinen Potentialströmung der Fall wäre, sondern in Folge der Turbulenz weisen direkt auf die Tropfenoberfläche. So gibt es immer ein paar Aerosolpartikel, die mit dem Tropfen kollidieren, so dass der effektive Tropfenkollektorradius im turbulenten Fall nicht auf null zurückgeht.

In Bezug auf große Partikel weisen die Kurven in der Abbildung 5.10 das gleiche Verhalten auf wie die in Abbildung 5.7. Wie bei der Annahme einer laminaren Tropfenumströmung kann die Reibungskraft im Vergleich zu den Trägheitskräften vernachlässigt werden, so dass die Kurven für große Partikel einen annähernd horizontalen Verlauf aufweisen. Ein Unterschied zwischen den Simulationen der laminaren und denen der turbulenten Tropfenumströmung besteht im Übergangsbereich, in dem der Einfluss der Trägheitskräfte auf die Partikelbewegung erkennbar wird. So

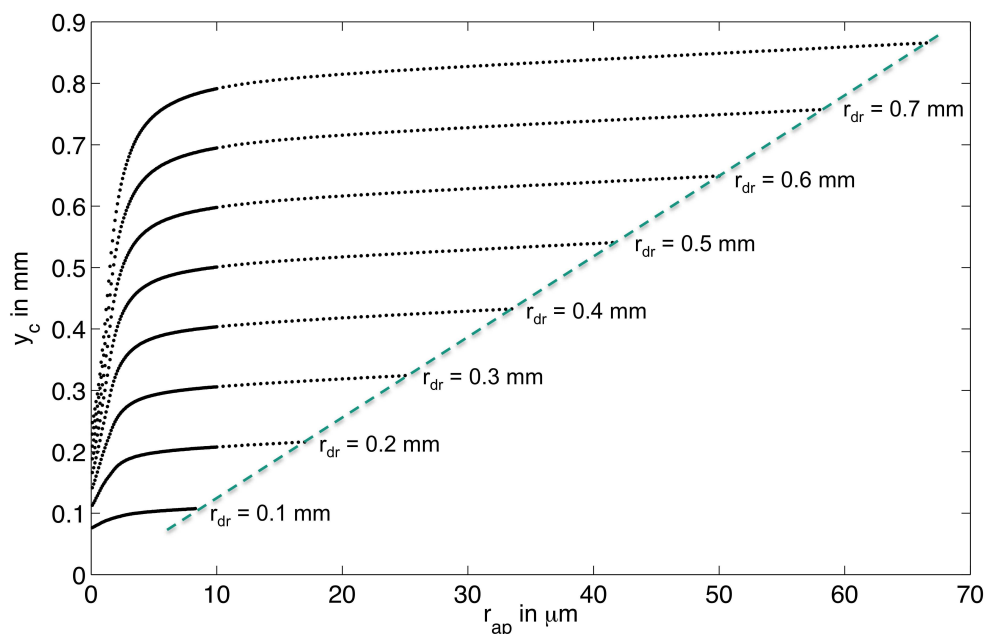


Abbildung 5.10.: Numerisch bestimmte effektive Tropfenkollektorradien  $y_c$  in mm in Abhängigkeit der Aerosolradien  $r_{ap}$  in  $\mu m$ . Die einzelnen Kurven symbolisieren jeweils den angegebenen konstanten Tropfenradius  $r_{dr}$  – turbulenter Fall

liegt dieser Bereich für den turbulenten Fall bei etwa  $2 \mu\text{m}$  bis  $5 \mu\text{m}$ , während er beim laminaren Fall bei etwa  $5 \mu\text{m}$  bis  $10 \mu\text{m}$  auftritt. Grund dafür könnte sein, dass die Geschwindigkeiten im Nahbereich des Tropfens bei reiner Potentialströmung größer sind als bei der idealisierten turbulenten Umströmung und somit auch die Reibungskraft auf die Partikel größer ist. Demzufolge ist der Einfluss der Trägheitskräfte im turbulenten Fall erst bei größeren Partikeln zu beobachten, wenn auch hier die Geschwindigkeit größere Werte erreicht hat.

Analog zum laminaren Fall sei auch für den turbulenten Fall die Abhängigkeit des effektiven Tropfenkollektorradius vom Tropfen- und Aerosolradius unabhängig. Daher soll nach Gleichung (5.2.3) gelten

$$y_c(r_{dr}, r_{ap}) = y_{c1}(r_{dr}) \cdot y_{c2}(r_{ap}).$$

Da sich die Endpunkte der einzelnen Kurven erneut auf einer Geraden befinden, liegt die Vermutung nahe, dass wieder ein linearer Zusammenhang zwischen dem effektiven Kollektorradius und dem Tropfenradius vorliegt. Anders als bei der laminaren Tropfenumströmung bestätigt sich diese Vermutung bei Auswertung der Modelldaten. In Abbildung 5.11 ist der lineare Zusammenhang für den größten effektiven Kollektorradius eines Tropfens über dessen Radius exemplarisch dargestellt.

Um im Folgenden die Abhängigkeit des effektiven Tropfenkollektorradius vom Aerosolradius untersuchen zu können, wird zunächst wieder der lineare Zusammenhang mit dem Tropfenradius

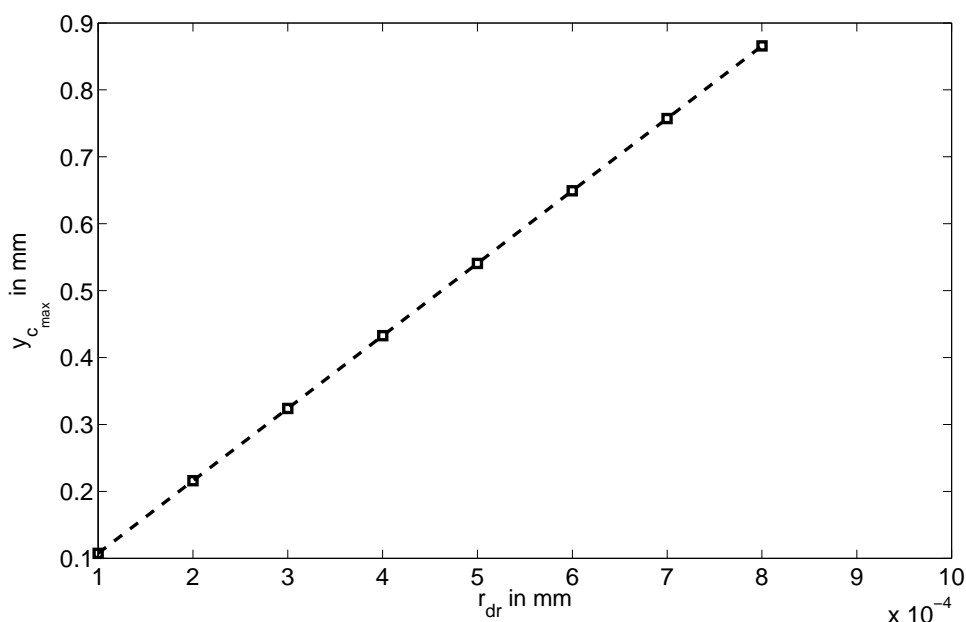


Abbildung 5.11.: Größter effektiver Tropfenkollektorradius  $y_c$  in mm über den Tropfenradius  $r_{dr}$  in mm – turbulenter Fall

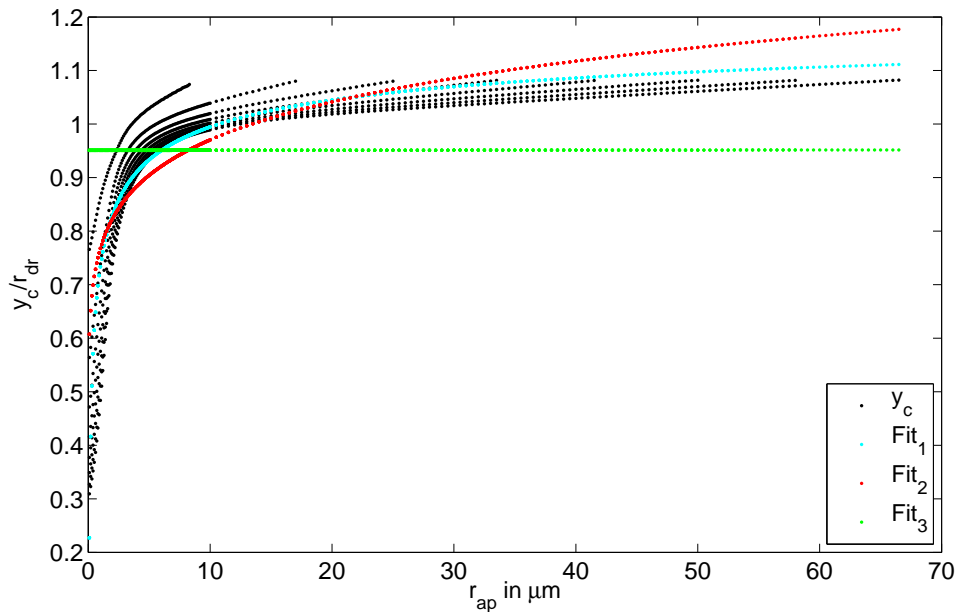


Abbildung 5.12.: Quotient  $y_c/r_{dr}$  aus effektivem Tropfenkolektorradius und Tropfenradius über den Aerosolradius  $r_{ap}$  in  $\mu\text{m}$ . Die rote, grüne und blaue Kurve symbolisieren die verschiedenen Regessionsfunktionen – turbulenter Fall

eliminiert (siehe Abbildung 5.12 - schwarze Kurven). Da die Form der dabei entstandenen Kurven eine sehr ähnliche Form wie im laminaren Fall haben, werden dieselben Ansatzfunktionen nach (5.81), (5.82) und (5.83) zur Näherung des effektiven Tropfenkolektorradius verwendet. Analog zum laminaren Fall wird die Methode der nichtlinearen kleinsten Quadrate zur Bestimmung die Parameter  $a$  bis  $e$  für die einzelnen Regessionsfunktionen verwendet. Es ergeben sich die Fit-Funktionen

$$f_1(r_{ap}) = -0,01007r_{ap}^{-0,288} + 1,272 \quad (5.88)$$

$$f_2(r_{ap}) = 1,004 \ln(11,02r_{ap} + 0,9756) + 0,9757 \quad (5.89)$$

$$f_3(r_{ap}) = 4,81 \left( \frac{r_{ap}}{74,64} \right)^{0,1018} + 2,382 \cdot 10^{-9}. \quad (5.90)$$

Auch diesmal hat sich der Fit  $f_1(r_{ap}) = -0,01007r_{ap}^{-0,288} + 1,272$  als beste Approximation für das Problem herausgestellt. Einerseits besitzt er wieder einen oberen Grenzwert un andererseits die kleinste Standardabweichung zu den exakten Werten mit nur 0,0623.

Zusammenfassend gilt dann für die Approximation des effektiven Kollektorradius für den turbulenter Fall in Abhängigkeit des Tropfen- und des Aerosolradius



$$y_c = r_{dr} \left( 1, 272 - 0, 01007 r_{ap}^{-0,288} \right). \quad (5.91)$$

### 5.3. Implementierung in das COSMO-Modell

Aufgrund der Tatsache dass es sich bei dem Ansatz von Slinn um einen semi-empirischen Ansatz handelt, der zudem durch eine nicht stetig-differenzierbare Funktion beschrieben wird (siehe Abbildung 5.13), wird als Parametrisierung des Collision Aerosol Scavenging im Zwei-Momenten-Schema der Ansatz nach Herbert und Beheng (siehe Kapitel 5.1.2) verwendet, der auf einer geschlossenen Theorie beruht. Als Näherung für den effektiven Tropfenkolektorradius wird hierbei die Näherung nach Kapitel 5.2.2 verwendet.

Wie anfangs des Kapitels bereits erwähnt, wird die zeitliche Änderung der Aerosolanzahldichteverteilung infolge von CAS meist unter Verwendung der Partikelverlustrate beschrieben. Nach Gleichung (5.1) gilt

$$\frac{\partial f_{ap}(r_{ap}, t)}{\partial t} = -\lambda_{ap}(r_{ap}, t) f_{ap}(r_{ap}, t)$$

mit der Partikelverlustrate  $\lambda_{ap}$ , die nach Gleichung (5.2) definiert ist als

$$\lambda_{ap}(r_{ap}, t) = \int_0^{\infty} K_{ap}(r_{dr}, r_{ap}) f_w(r_{dr}, t) dr_{dr}.$$

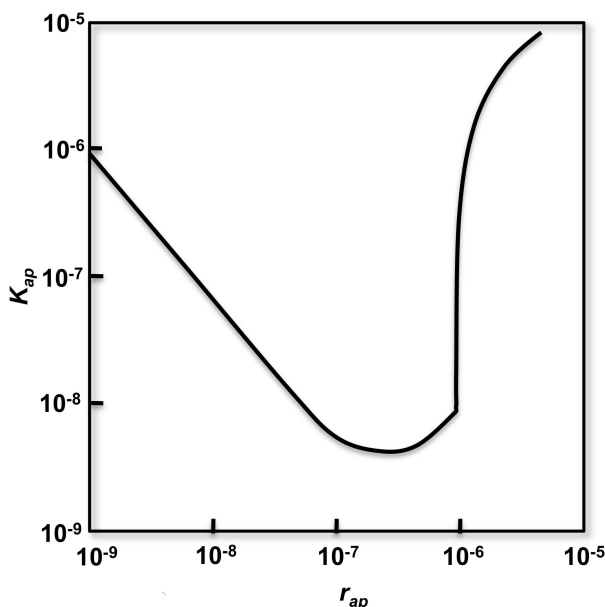


Abbildung 5.13.: Schematische Darstellung des Kollisions-Kernel nach Slinn

Nach der Integration über die Zeit folgt für die Aerosolanzahldichteverteilung

$$f_{ap}(r_{ap}, t) = f_{ap}(r_{ap}, t_0) \exp \left[ - \int_{t_0}^t \lambda_{ap}(r_{ap}, t') dt' \right]. \quad (5.92)$$

Unter der Annahme eines stationären Tropfenspektrums  $f_{w,o}(r_{dr})$  für den Zeitraum, über den integriert wird, kann Gleichung (5.92) vereinfacht werden zu

$$f_{ap}(r_{ap}, t) = f_{ap}(r_{ap}, t_0) \exp [-\lambda_{ap,o}(r_{ap})(t - t_0)] \quad (5.93)$$

mit

$$\lambda_{ap,o}(r_{ap}) = \int_0^\infty K_{ap}(r_{dr}, r_{ap}) f_{w,o}(r_{dr}) dr_{dr}. \quad (5.94)$$

Da jedoch die exakte Berechnung des Kollisions-Kernel und der Partikelverlustrate nach Herbert und Beheng (1986) von vielen verschiedenen Variablen abhängig und somit sehr aufwändig ist, soll im COSMO-Modell eine approximierte Form für den Kollisions-Kernel, wie ihn Beheng (1986a) erstellt hat, implementiert werden.

Bei der Näherung des Kollisions-Kernels nach Beheng (1986a) werden zum einen die elektrischen Coulombkräfte vernachlässigt und zum anderen Regressionsfunktionen bei dem Anteil des Kollisions-Kernels  $K_{ap,1}(r_{dr}, r_{ap})$  verwendet, der keine mechanischen Effekte berücksichtigt. Hiermit soll die Berechnung zeitlich effizienter werden. Für den Anteil des Kollisions-Kernels  $K_{ap,1}$  gilt dann nach Beheng (1986a)

$$K_{ap,1}(r_{dr}, r_{ap}) = r_{dr} G(r_{ap}) \quad (5.95)$$

mit

$$G(r_{ap}) = 4\pi B_{ap} \frac{F_1(r_{ap}) + F_2(r_{ap})}{\exp \left[ \frac{F_1(r_{ap}) + F_2(r_{ap})}{k_B T} \right] - 1}, \quad (5.96)$$

wobei  $k_B$  die Boltzmann-Konstante ist.

Bei  $F_1(r_{ap})$  und  $F_2(r_{ap})$  handelt es sich um die Regressionsfunktionen, die durch numerische Auswertung der exakten Gleichung für  $K_{ap,1}(r_{dr}, r_{ap})$  bestimmt wurden.  $F_1(r_{ap})$  beschreibt hierbei den Anteil der diffusiophoretischen Kräfte und  $F_2(r_{ap})$  den der thermophoretischen. Sie können beide berechnet werden mit  $r_{ap}$  in  $\mu\text{m}$  durch

$$F_i(r_{ap}) = \begin{cases} 10^{-12} R_i r_{ap}^{\alpha_i \ln r_{ap} + \beta_i}, & r_{ap_{min}} \leq r_{ap} < r_{ap_c} \\ 10^{-12} S_i r_{ap}^{\gamma_i}, & r_{ap_c} \leq r_{ap} \leq r_{ap_{max}} \end{cases} \quad \text{mit } i = 1, 2. \quad (5.97)$$

Tabelle 5.2.: Werte von  $R_1$  für bestimmte Werte der Temperatur  $T$ , des Luftdrucks  $p$  und der relativen Feuchte  $r_d$ , wobei für  $r_d = 101\%$  die gleichen Werte wie für  $r_d = 99\%$  verwendet werden.

	$p \setminus r_d$	80%	99%	100%
$T = 273,15K$	$700hPa$	120,18	5,87	$0,44 \cdot 10^{-2}$
$T = 273,15K$	$1000hPa$	65,43	3,22	$0,257 \cdot 10^{-2}$
$T = 293,15K$	$700hPa$	249,07	11,82	$0,115 \cdot 10^{-1}$
$T = 293,15K$	$1000hPa$	150,51	7,21	$0,544 \cdot 10^{-2}$

$r_{apmin}$ ,  $r_{apmax}$  sowie  $r_{apc}$  bezeichnen hierbei konstante Partikelradien; für sie gilt  $r_{apmin} = 1 \mu\text{m}$ ,  $r_{apmax} = 100 \mu\text{m}$  und  $r_{apc} = 40 \mu\text{m}$ .  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  und  $\gamma_i$  sind Konstanten, die folgende Werte besitzen

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= -0,111 & \beta_1 &= 0.931 & \gamma_1 &= 0.734 \\ \alpha_2 &= -0.079 & \beta_2 &= 1.197 & \gamma_2 &= 1.057. \end{aligned}$$

$R_i$  und  $S_i$  sind Parameter, die von der Temperatur  $T$ , dem Luftdruck  $p$  und der Luftfeuchte  $r_d$  abhängen. Der Gültigkeitsbereich für diese Parameter ist bei Temperaturen auf Werte zwischen 273,15 K und 293,15 K beschränkt, bei Luftdrücken auf Werte zwischen 700 hPa und 1000 hPa und bei der relativen Feuchten auf Werte zwischen 80% und 101%. Der Parameter  $R_1$  wird mit Hilfe der Tabelle 5.2 bestimmt, wobei er zwischen den dort angegebenen Werten linear interpoliert. Für den Parameter  $S_1$  folgt dann

$$S_1 = 0,74 R_1.$$

Die Berechnung von  $R_2$  und  $S_2$  erfolgt abhängig von der relativen Luftfeuchte. Für Werte unter 100% gilt

$$R_2 = 0,59 R_1 \quad S_2 = 0,48 R_1$$

und für Werte über 100% bis maximal 101%

$$R_2 = 0,20 R_1 \quad S_2 = 0,16 R_1.$$

Für den mechanischen Anteil der Scavenging-Funktion  $K_{ap,2}(r_{dr}, r_{ap})$  gilt nach (5.48)

$$K_{ap,2} = B_{ap} m_{ap} g_* \pi (y_c(r_{ap}, r_{dr}))^2.$$

Unter Verwendung der Näherungen für den effektiven Kollektorradius  $y_c$  nach (5.87) und (5.91) folgt dann

- für eine laminare Tropfenumströmung

$$K_{ap,2}(r_{dr}, r_{ap}) = r_{dr}^2 B_{ap} m_{ap} g_* \pi (1,07 - 3,081 \cdot 10^{-6} r_{ap}^{-0,8832})^2 = r_{dr}^2 H(r_{ap}). \quad (5.98)$$

- für eine turbulente Tropfenumströmung

$$K_{ap,2}(r_{dr}, r_{ap}) = r_{dr}^2 B_{ap} m_{ap} g_* \pi (1,272 - 0,01007 r_{ap}^{-0,288})^2 = r_{dr}^2 H(r_{ap}). \quad (5.99)$$

Zusammenfassend gilt demnach für den approximierten Kollisions-Kernel

$$K_{ap}(r_{dr}, r_{ap}) = r_{dr} G(r_{ap}) + r_{dr}^2 H(r_{ap}). \quad (5.100)$$

Damit lässt sich die Partikelverlustrate in genäherter Form berechnen durch

$$\lambda_{ap,o}^*(r_{ap}) = G(r_{ap}) I_1(r_{dr_{min}}) + H(r_{ap}) I_2(r_{dr_{min}}) \quad (5.101)$$

mit den Integralen über die Tropfenverteilungsfunktion

$$I_1(r_{dr_{min}}) = \int_{r_{dr_{min}}}^{\infty} r_{dr} f_{w,o}(r_{dr}) dr_{dr} \quad (5.102)$$

$$I_2(r_{dr_{min}}) = \int_{r_{dr_{min}}}^{\infty} r_{dr}^2 f_{w,o}(r_{dr}) dr_{dr}, \quad (5.103)$$

$$(5.104)$$

wobei bei der Berechnung der Tropfenintegrale eine untere Grenze  $r_{dr_{min}}$  verwendet werden muss. Der Grund hierfür liegt in der Herleitung des Kollisions-Kernel, genauer gesagt in der Herleitung der Partikelflussdichte. Hierbei wurde angenommen, dass  $r_{ap} \ll r_{dr}$  ist. Für die numerische Auswertung wird daher meist der Ansatz  $r_{dr_{min}} = 10 r_{ap}$  verwendet.

Mit Hilfe von (5.93) sowie (5.101) und (5.104) kann dann die zeitliche Änderung der Aerosolanzahldichteverteilungsfunktion und damit die Änderung der Anzahl der Aerosole im Zwei-Momenten-Schema berechnet werden

$$\Delta N_{ap} = \int_{-\infty}^{\infty} (f_{ap}(\ln r_{ap}, t) - f_{ap}(\ln r_{ap}, t_o)) d(\ln r_{ap}). \quad (5.105)$$

$$(5.106)$$

Analog zu der Anzahl der aktivierten Aerosole wird für die durch das CAS ausgewaschenen Aerosole die Anzahldichte der ausgewaschenen Aerosole  $N_{sc}$  eingeführt. Für ihre Bilanzgleichung gilt analog zu Gleichung (4.6)

$$\frac{\partial N_{sc}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [\vec{v}(\vec{r}, t) N_{sc}(\vec{r}, t)] = S_{sc}, \quad (5.107)$$

wobei  $S_{sc}$  dann mit Hilfe von (5.106) berechnet wird.

Die an einem Gitterpunkt tatsächlich vorhandene Zahl freier, nicht in Tropfen gebundener Aerosole ist dann durch die Differenz  $N_{ap} - N_{ac} - N_{sc}$  gegeben.

## 5.4. Sensitivitätsstudien mit COSMO

Im Folgenden werden die Ergebnisse idealisierter Simulationen für eine konvektive Einzelzelle vorgestellt. Hierbei soll sowohl der Einfluss von CAS an sich auf das System als auch der Einfluss hinsichtlich der angenommenen Tropfenumströmung in den Simulationen untersucht werden. Als Nukleationsparametrisierung wurde bei allen Modellläufen die Parametrisierung nach Abdul-Razzak und Ghan (siehe Kapitel 4.2.4) verwendet.

Zudem wurden für alle Simulationen dieselben Ausgangsbedingungen und derselbe Grundzustand wie bei den Simulationen hinsichtlich der unterschiedlichen Nukleationsparametrisierungen gewählt (siehe Kapitel 4.3.1). Analog zu den NAS-Simulationen aus dem vorigem Kapitel wurden auch bei diesen die Auswirkung der unterschiedlicher Aerosolkonzentrationen auf die Simulationen untersucht, wobei dieselben Ausgangsbedingungen verwendet wurde.

Um im Folgenden die Auswertung der Ergebnisse möglichst übersichtlich zu gestalten, werden Abkürzungen für die einzelnen Simulationen eingeführt (siehe Tabelle 5.3). Dabei wird die Simulation, bei der nur NAS berücksichtigt und CAS vernachlässigt wurde, im Folgenden kurz mit *SimNas* bezeichnet. Zudem wurden zwei weitere Modellläufe gestartet. Diese berechneten sowohl NAS als auch CAS, wobei zum einen eine laminare Tropfenumströmung um die Kollektortropfen angenommen wurde und zum anderen eine turbulente. Die Simulation, die eine laminare Umströmung annahm, wird nachfolgend kurz *SimLam* bezeichnet, und die, die eine turbulente annahm, mit *SimTurb*.

Tabelle 5.3.: Kurzer Überblick über die in den Simulationen verwendeten Approximationen

Simulation	Berücksichtigte Prozesse	Kapitel oder Gleichung
<i>SimNas</i>	Nur NAS	Kapitel 4.2.4
<i>SimLam</i>	Sowohl NAS als auch CAS, wobei eine laminare Tropfenumströmung angenommen wurde	NAS: Kapitel 4.2.4 CAS: Gleichung (5.100) mit (5.96) und (5.98)
<i>SimTurb</i>	Sowohl NAS als auch CAS, wobei eine turbulente Tropfenumströmung angenommen wurde	NAS: Kapitel 4.2.4 CAS: Gleichung (5.100) mit (5.96) und (5.99)

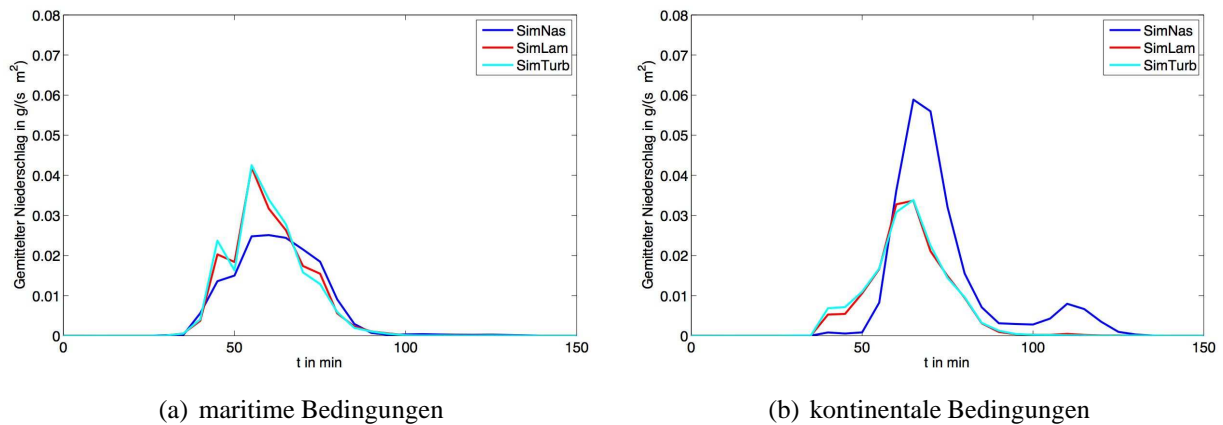
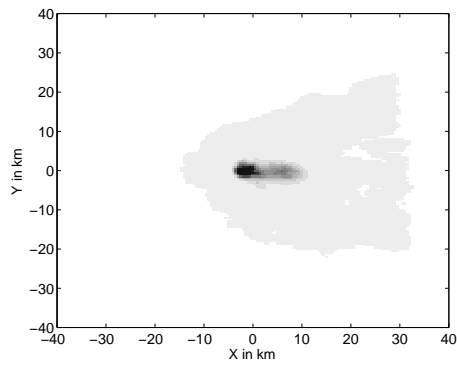
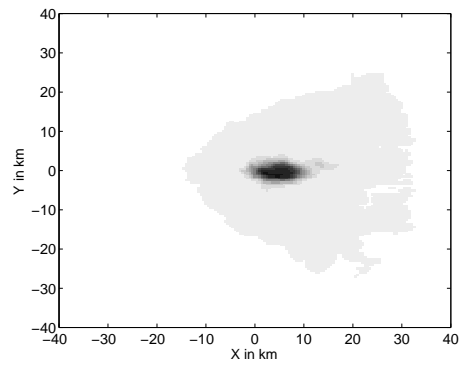
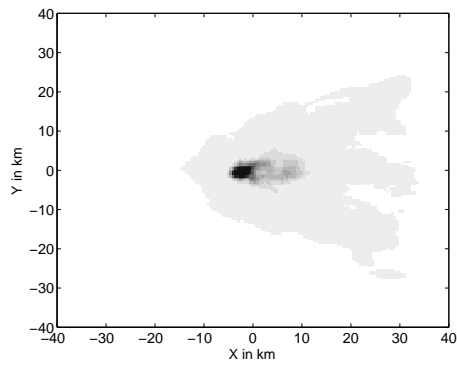
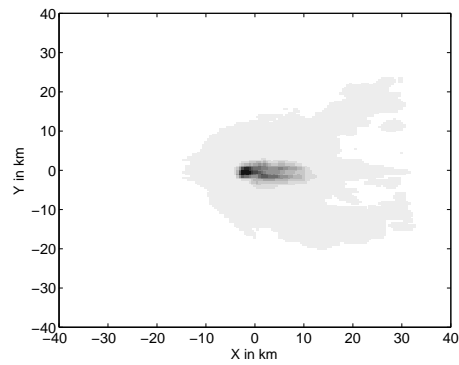
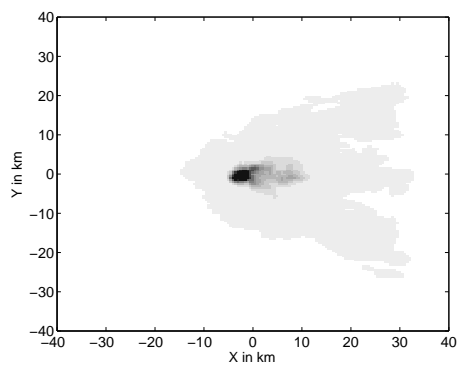
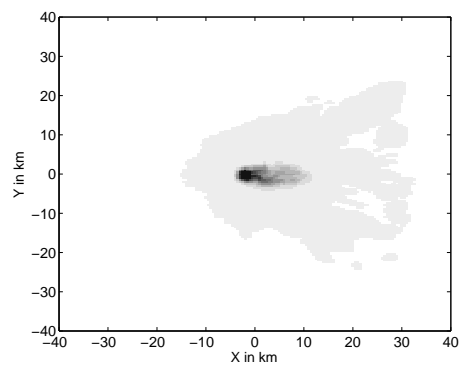


Abbildung 5.14.: Zeitreihe der über das Modellgebiet gemittelten Niederschlagsrate in  $\text{g s}^{-1} \text{m}^{-2}$

In Abbildung 5.14 ist die Zeitreihe der über das Modellgebiet gemittelten Niederschlagsrate in  $\text{g s}^{-1} \text{m}^{-2}$  dargestellt. Deutlich zu erkennen, ist unter maritimen Bedingungen der Unterschied zwischen der Simulation, die nur NAS berechnet, und denen, die sowohl NAS als auch CAS berechnen (siehe Abbildung 5.14(a)). So setzt zwar bei allen Simulationen der Niederschlag ungefähr zur gleichen Zeit ein, nimmt aber dann bei den Simulationen *SimLam* und *SimTurb*, die auch CAS berechnen, deutlich stärker zu als bei *SimNas*. Zudem weist an sich der zeitliche Verlauf der Niederschlagsrate von *SimLam* und *SimTurb* zwei Niederschlagsmaxima auf, eines nach etwa 45 min und ein weiteres, stärkeres nach circa 55 min. *SimNas* besitzt dahingegen nur eines, das ungefähr zur gleichen Zeit erreicht wird, wie das zweite bei anderen beiden Simulationen. Zudem unterscheiden sich die Hauptmaxima der Simulationen in ihrem absoluten Betrag. So erreicht das Maximum von *SimLam* und *SimTurb* Werte von knapp über  $0,04 \text{ g s}^{-1} \text{m}^{-2}$ , während das von *SimNas* Werte von nur knapp  $0,03 \text{ g s}^{-1} \text{m}^{-2}$  erreicht. Beim weiteren zeitlichen Verlauf der Niederschlagsrate treten keine großen Unterschiede mehr auf. In allen Simulationen nimmt die Niederschlagsintensität nach Erreichen des Maximums bei etwa 55 min stark ab, so dass nach circa 80 min kaum noch Niederschlag fällt.

Genauso wie unter maritimen Bedingungen lassen sich die Simulationen unter kontinentalen Bedingungen in dieselben Gruppen einteilen (siehe Abbildung 5.14(b)). Diesmal sind aber die Unterschiede zwischen *SimNas* und *SimLam* beziehungsweise *SimNas* und *SimTurb* deutlich stärker. So setzt der Niederschlag diesmal nicht mehr bei allen Simulationen zur gleichen Zeit ein, sondern bei *SimLam* und *SimTurb* schon nach circa 40 min und bei *SimNas* erst nach etwa 50 min. Alle Simulationen erreichen dann fast zur selben Zeit ihr Maximum. Die absoluten Werte variieren jedoch stark untereinander. Während bei *SimNas* Werte von fast  $0,06 \text{ g s}^{-1} \text{m}^{-2}$  erreicht werden, erreicht das Maximum bei *SimLam* und *SimTurb* Werte von nur knapp über  $0,03 \text{ g s}^{-1} \text{m}^{-2}$ . Aber auch nach Erreichen des Maximums treten bei den Simulationen diesmal weitere Unterschiede auf. So besitzt die Simulation *SimNas* ein zweites, schwaches Niederschlagsereignis bei etwa 110 min, das bei *SimLam* und *SimTurb* nicht existiert. Hier nimmt der Niederschlag nach Erreichen des

(a) *SimNas* - maritime Bedingungen(b) *SimNas* - kontinentale Bedingungen(c) *SimLam* - maritime Bedingungen(d) *SimLam* - kontinentale Bedingungen(e) *SimTurb* - maritime Bedingungen(f) *SimTurb* - kontinentale BedingungenAbbildung 5.15.: Akkumulierter Gesamtniederschlag am Boden in  $\text{kg m}^{-2}$  nach 150 min

Maximums bei etwa 60 min stark ab und hört nach circa 90 min fast ganz auf.

Gerade in Bezug auf den Unterschied zwischen maritimen Bedingungen und kontinentalen Bedingungen ist die Berücksichtigung des Auswaschens in Folge von CAS markant. So führt eine Erhöhung der Aerosole bei Vernachlässigung des CAS zu einer deutlichen Niederschlagserrhöhung, während die Berücksichtigung des CAS zu einer Verringerung führt. Die Sensitivität wird also umgekehrt. Zudem wird durch den Einfluss des CAS auch das Auftreten des sekundären Niederschlages nach etwa 110 min unterdrückt.

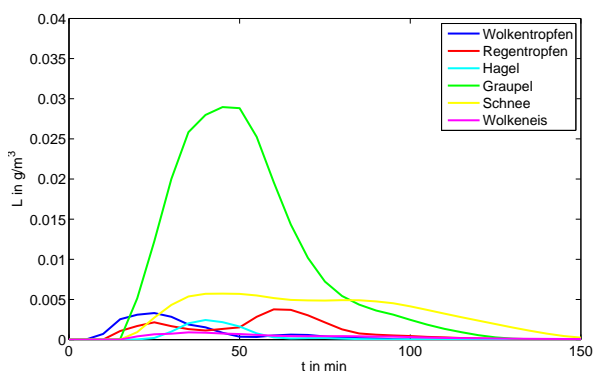
Die umgekehrte Sensitivität lässt sich auch bei den Feldern des im Modellgebiet gefallenem Gesamtniederschlags am Boden erkennen (siehe Abbildung 5.15). Beim Vergleich der Simulationen unter maritimen Bedingungen zu denen unter kontinentalen ist bei *SimNas* eine Ausbreitung des Niederschlagsgebietes mit einem deutlich ausgeprägterem Maximum zu erkennen, während sich bei *SimLam* und *SimTurb* das Niederschlagsgebiet gerade am rechten seitlichen Rand stark verkleinert und auch die Intensität des Niederschlagsmaximum verringert hat. An sich ist ohne Berücksichtigung des CAS der Einfluss der Aerosolkonzentrationserhöhung deutlich ausgeprägter und zudem positiv, während er mit CAS schwächer und negativ ist.

In Abbildung 5.16 ist die Zeitreihe der über das Modellgebiet gemittelten Flüssigwassergehalte der verschiedenen Hydrometeorarten dargestellt. Deutlich zu erkennen sind jeweils die Unterschiede zwischen den Simulationen *SimLam* und *SimNas* beziehungsweise *SimTurb* und *SimNas*, wobei sich auch in dieser Abbildung *SimLam* und *SimTurb* sehr ähneln.

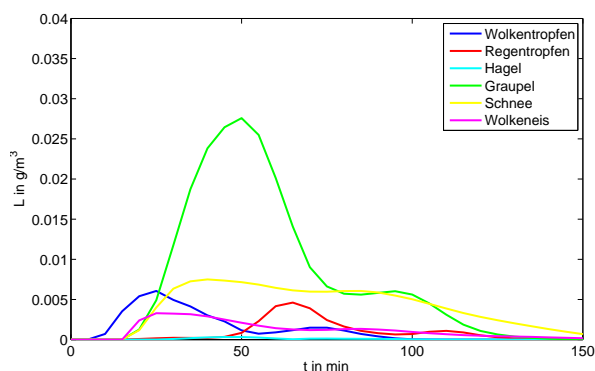
Bei Vergleich der Simulationen *SimNas* mit *SimLam* und *SimTurb* fällt unter maritimen Bedingungen auf, dass bei den Simulationen, die CAS berücksichtigen, im Vergleich zu *SimNas* deutlich weniger Wolkenwasser gebildet wird, dafür aber mehr Regenwasser und Graupel. Die deutlich verringerte Bildung von Wolkenwasser kann dann der Grund sein, warum bei den beiden Simulationen der Regen deutlich früher einsetzt. So sind bei *SimLam* und *SimTurb* in Folge der geringeren Menge an Wolkenwasser die Wolkentropfen im Durchschnitt größer, wodurch deutlich schneller Regentropfen aus diesen gebildet werden können und der Niederschlag in Folge dessen früher einsetzt. Denn allgemein nimmt die Effizienz der Bildung von Regenwasser mit größer werdenden Wolkentropfen zu.

Auch unter kontinentalen Bedingungen sind markante Unterschiede zwischen *SimNas* und *SimLam* und *SimTurb* zu erkennen. Dabei wird bei *SimNas* zum einen wieder deutlich mehr Wolkenwasser gebildet, aber zudem scheinen die Prozesse dann im Weiteren eher in der Eisphase abzulaufen. So setzt bei *SimNas* schon nach etwa 20 min die Bildung von Wolkeneis und Schnee ein, während bei den Simulationen *SimLam* und *SimTurb* dies erst etwa 10 min später geschieht. Im Gegensatz dazu wird bei *SimLam* und *SimTurb* schon sehr früh Regenwasser gebildet, während bei *SimNas* dessen Bildung erst etwa bei Erreichen des Niederschlagsmaximum einsetzt. Allgemein

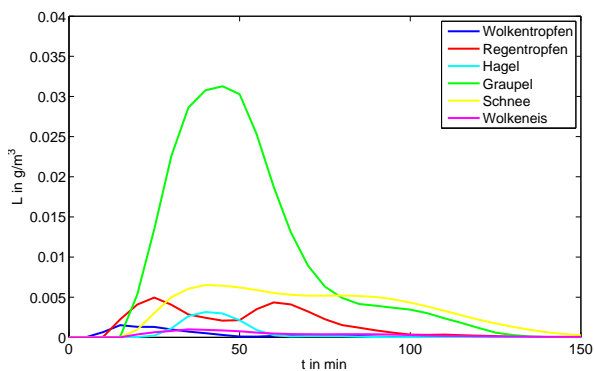




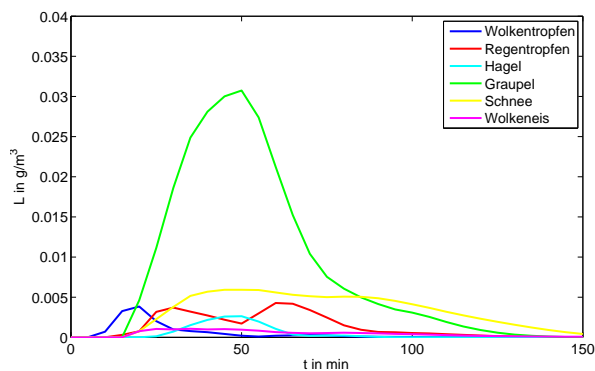
(a) *SimNas* - maritime Bedingungen



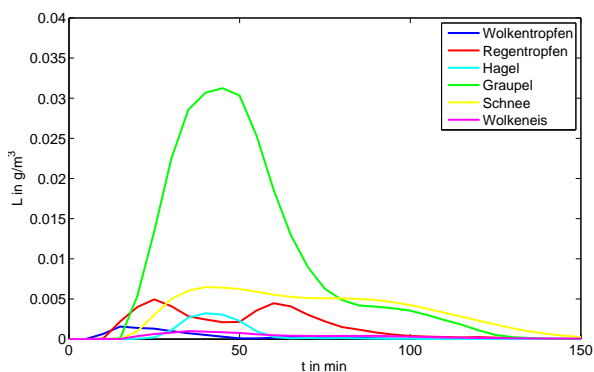
(b) *SimNas* - kontinentale Bedingungen



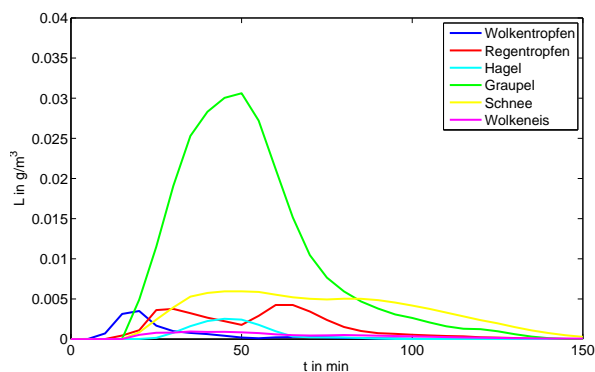
(c) *SimLam* - maritime Bedingungen



(d) *SimLam* - kontinentale Bedingungen



(e) *SimTurb* - maritime Bedingungen



(f) *SimTurb* - kontinentale Bedingungen

Abbildung 5.16.: Zeitreihe der über das Modellgebiet gemittelten Flüssigwassergehalte der verschiedenen Hydrometeorarten in  $\text{g m}^{-3}$

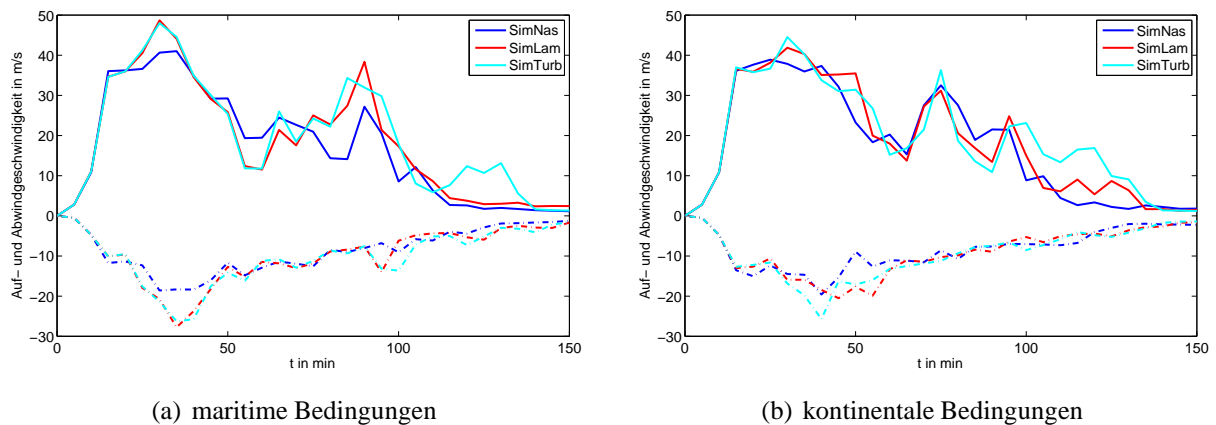


Abbildung 5.17.: Zeitreihe der maximal auftretenden Auf- und Abwindgeschwindigkeiten in  $\text{m s}^{-1}$

scheinen bei *SimNas* die Prozesse verstärkt in der Eisphase stattzufinden, während sie sich bei *SimLam* und *SimTurb* eher in der flüssigen Phase abspielen. Wie bei Seifert (2006b) erläutert, führen vermehrte Prozesse in der Eisphase zu einem etwa zehn minütigen späteren Einsetzen des Niederschlages, was sich mit den Beobachtungen dieser Simulationen decken würde. Nach ihm fällt aber auch durch die verstärkt in der Eisphase auftretenden Prozesse weniger Niederschlag aus einer konvektiven Zelle, was sich so nicht mit den Ergebnissen deckt. Welche Effekte aber genau dafür verantwortlich sind, kann nur mit Hilfe von Abbildung 5.16 nicht geklärt werden.

Obwohl doch sehr großen Unterschiede zwischen den Simulationen in Bezug auf den Niederschlag sowie auf die zeitliche Entwicklung der Flüssigwassergehalte der Hydrometeorarten auftreten, sind sich die in den Simulationen maximal auftretenden Auf- und Abwindgeschwindigkeiten doch recht ähnlich (siehe Abbildung 5.17). Gut zu erkennen ist die bimodale Struktur wie Weisman und Klemp (1982) sie beschreiben, wobei diese bei den Simulationen mit CAS deutlicher ausgeprägter ist. Im maritimen Fall liegt der Grund hierfür wahrscheinlich darin, dass bei *SimLam* und *SimTurb* im Vergleich zu *SimNas* deutlich mehr Niederschlag fällt, wodurch im Abwindschlauch stärkere Verdunstung auftritt und sich ein ausgeprägterer Cold Pool bildet. In Folge dessen werden dann grössere Vertikalgeschwindigkeiten erreicht, die die Bildung einer Sekundärzelle verstärken.

Abschließend lässt sich mit Hilfe der Ergebnisse der Simulationen festhalten, dass es eine entscheidene Rolle spielt, ob CAS berücksichtigt wird oder nicht. So wird die Sensitivität auf die Aerosolkonzentration bei Berücksichtigung von CAS sogar umgedreht. Mit CAS fällt unter maritimen Bedingungen mehr Niederschlag als unter kontinentalen, während ohne CAS unter kontinentalen mehr als unter maritimen fällt. Auch sonst sind die Unterschiede zwischen den Simulationen sehr groß. So tritt unter kontinentalen Bedingungen eine ganz andere zeitliche Entwicklung des Niederschlages ohne CAS auf als mit. Einerseits setzt der Niederschlag ohne Berücksichtigung des CAS erst später ein, erreicht dann aber ein deutlich größeres Maximum und

besitzt zudem ein zweites Niederschlagsereignis, das unter Berücksichtigung von CAS gar nicht auftritt.

Welche Tropfenumströmung für die Umströmung der Kollektortropfen bei der Parametrisierung des CAS angenommen wurde, hat jedoch keinen großen Einfluss auf die Simulationen, so dass die Unterschiede zwischen diesen Simulationen marginal ist. Hierbei sei aber erwähnt, dass auch der Unterschied im äußeren Strömungsfeld um den Kollektortropfen bei der Berechnung der Partikeltrajektorien (siehe Kapitel 5.2.2) nicht sehr groß ist. Es wird zum Beispiel kein Einfangen der Partikel in Folge von Leewirbeln hinter den Tropfen berücksichtigt. Beide Parametrisierungen des effektiven Tropfenkollektorradius sind sich daher also an sich sehr ähnlich.



## 6. Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war es, eine geeignete Parametrisierung zur Berechnung des Auswaschens von Aerosolen für das Zwei-Momenten-Schema zu entwickeln, um wolkenmikrophysikalische Prozesse hinsichtlich ihrer Wechselwirkung mit Aerosolpartikeln besser darstellen zu können. Dabei musste zum einen eine Näherung für das Auswaschen in Folge der Wolkentropfenbildung, dem Nucleation Aerosol Scavenging (NAS), gefunden werden und zum anderen eine für das Auswaschen in Folge von Tropfen-Partikel-Kollisionen, dem Collision Aerosol Scavenging (CAS). In Folge dieser beiden Prozesse können Aerosole einem System entzogen werden, so dass die Aerosole diesem nicht mehr als Kondensationskerne zur Verfügung stehen. Somit kann das Auswaschen direkten Einfluss auf die Bildung von Wolkentropfen haben.

Da bisher im Zwei-Momenten-Schema Aerosole nicht vorhanden waren, musste für diese zunächst eine geeignete Darstellung implementiert werden. Als einfache und effektive Möglichkeit wurde die rudimentäre Darstellung der Aerosole mit Hilfe von Anzahldichten gewählt. Bei den Anzahldichten handelt es sich einerseits um die Gesamtanzahl der Aerosole und andererseits um die Anzahl der Aerosole, die durch NAS ausgewaschen werden, sowie die Anzahl derer, die durch CAS ausgewaschen werden. Für die zeitliche Behandlung der Aerosole wurden neben der reinen Advektion weder Quellen noch Aerosolprozesse an sich berücksichtigt. Lediglich der Prozess des Auswaschens wurde bei den Anzahldichten berücksichtigt. Aus diesem Grund ist diese Darstellung der Aerosole nur für idealisierte Studien auf einer begrenzten Zeitskala geeignet.

Um das Auswaschen von Aerosolen in Folge der Wolkentropfenbildung im Modell geeignet darzustellen, wurden zunächst verschiedene gängige Parametrisierungen aus der Literatur (Segal und Kain, 2006; Reutter, 2009a und 2009b; Abdul-Razzak und Ghan, 1998) implementiert. Daraufhin wurde in idealisierten Simulationen der Einfluss der unterschiedlichen Näherungen auf die Wolken- und Niederschlagsbildung untersucht, um anschließend eine davon als neue Parametrisierung für das Zwei-Momenten-Schema zu bestimmen.

Desweiteren musste eine passende Parametrisierung für das CAS gefunden werden. Hierfür wurde ein Ansatz von Herbert und Beheng (1986) gewählt und durch eine neue Regressionsfunktion zur Berechnung des effektiven Tropfenkollektorradius erweitert. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Trajektorienmodell entwickelt, mit dem exakte Werte des effektiven Tropfenkollektorradius in Abhängigkeit des Aerosol- und des Kollektortropfenradius berechnet werden können. Innerhalb des Modells kann dabei für den Kollektortropfen eine laminare sowie eine turbulente Strömung angenommen werden. Mit Hilfe der Daten dieses Modells wurden dann die neuen Regressi-

onsfunktionen erstellt, die nachfolgend mit dem Ansatz nach Herbert und Beheng (1986) als Parametrisierung des CAS im Zwei-Momenten-Schema implementiert wurde.

Anhand mehrerer idealisierter Modellrechnungen wurde der Einfluss des NAS und CAS auf eine gewöhnliche konvektive Zelle untersucht. Um dabei auch den Einfluss der Aerosole auf die verschiedenen Simulationen bewerten zu können, wurde jeder Modellauf unter maritimen sowie kontinentalen Bedingungen berechnet. Diese Bedingungen unterscheiden sich einerseits in der Gesamtanzahl der Aerosole sowie andererseits in ihrer Größenverteilung. Bei der Auswertung der Ergebnisse zeigten sich zum Teil deutliche Unterschiede, die bei der Berücksichtigung von NAS und CAS auftraten.

So wurde bei der Untersuchung der verschiedenen NAS-Parametrisierungen festgestellt, dass es nicht relevant ist, welche der gängigen Näherungen in den Simulationen verwendet wird, sondern vielmehr dass NAS überhaupt Berücksichtigung findet. So ging der Niederschlag unter maritimen Bedingungen in Folge des NAS zum Beispiel deutlich zurück, während er unter kontinentalen Bedingungen sogar leicht verstärkt wurde. Allgemein zeigte sich in den Simulationen, dass durch die Erhöhung der Aerosolkonzentration, der Niederschlag des konvektiven Systems verstärkt wurde. Dieser Effekt wird noch weiter verstärkt, wenn NAS berücksichtigt wird. Außerdem war in den Simulationen markant, dass falls in diesen nur die Gesamtanzahl der Aerosole berücksichtigt wurde, nicht aber die Anzahl der durch das NAS ausgewaschenen Aerosole, deutliche Unterschiede in den Ergebnissen auftraten. So war zum einen der Effekt durch die Aerosolkonzentrationserhöhung fast nicht mehr vorhanden und zum anderen wurden in der Wolke teils ganz andere Hydrometeore verstärkt gebildet. Es ist also sehr wichtig, dass bei der Berücksichtigung des NAS beide Aerosolvariablen verwendet werden und nicht nur eine, da sonst unter Umständen ganz andere Effekte auftreten können.

Zudem wurden Modellläufe durchgeführt, mit denen der Einfluss des CAS auf die Wolken- und Niederschlagsbildung untersucht wurde. Für die Parametrisierung des CAS in den Simulationen wurde dabei zum einen eine laminare Tropfenumströmung angenommen und zum anderen eine turbulente. Beim Vergleich der beiden Simulationen zeigte sich aber, dass der Einfluss nur gering ist und beide Modellläufe fast identische Ergebnisse liefern. Wiederum zeigten sich jedoch große Unterschiede zwischen den Simulationen, die CAS berücksichtigen, und denen, die dies nicht tun. So fiel unter maritimen Bedingungen in Folge der Berücksichtigung des CAS mehr Niederschlag im Vergleich zu der Simulation ohne CAS und unter kontinentalen verringerte sich dieser sehr stark in Folge des CAS. Sehr markant war der Einfluss der Aerosolkonzentrationserhöhung bei diesen Simulationen. So führte die Erhöhung der Aerosole ohne Berücksichtigung des CAS zu einer Verstärkung des Niederschlages, während mit Berücksichtigung des CAS sich der Niederschlag verringerte. CAS hat folglich die Sensitivität auf die Aerosolkonzentrationserhöhung umgekehrt.

Abschließend lässt sich festhalten, dass sich in den Modellläufen deutliche Unterschiede in Folge der Berücksichtigung des NAS und des CAS gezeigt haben. Folglich sollten in allen wolkenauflö-

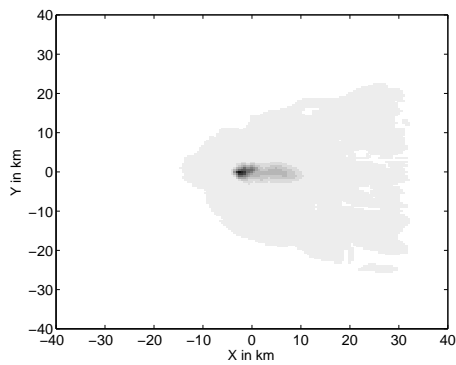
senden Modellen diese beiden Prozesse implementiert sein. Da sich in den Simulationen zudem herausgestellt hat, dass beide Prozesse für die Wolken- und Niederschlagsbildung wichtig sind, sollte hierbei keiner der beiden vernachlässigt werden.



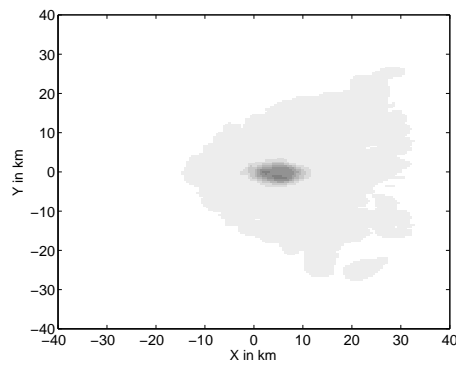


# A. Anhang

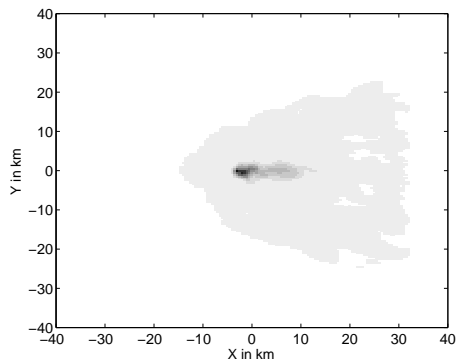
## A.1. Akkumulierter Gesamtniederschlag am Boden



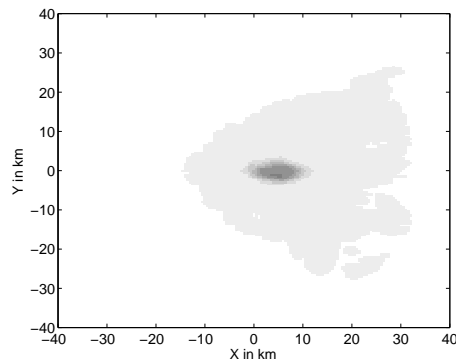
(a) *SimReu* - maritime Bedingungen



(b) *SimReu* - kontinentale Bedingungen



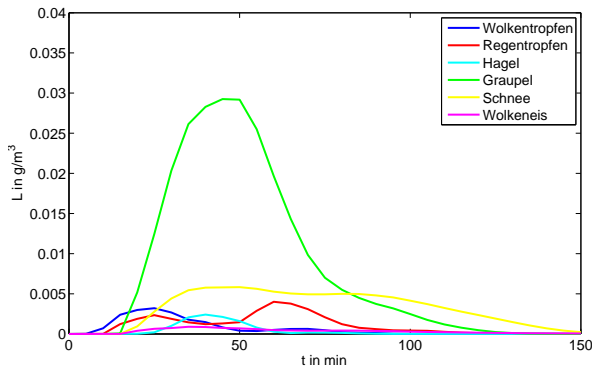
(c) *SimAkt* - maritime Bedingungen



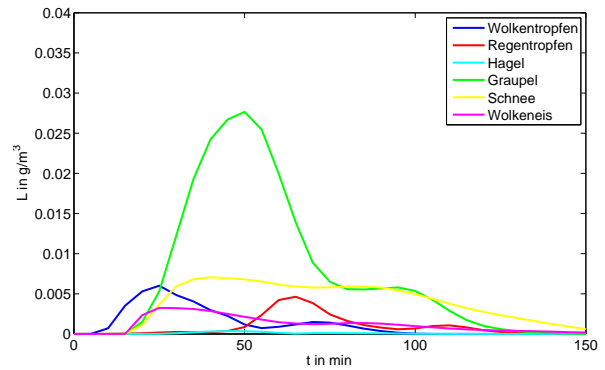
(d) *SimAkt* - kontinentale Bedingungen

Abbildung A.1.: Akkumulierter Gesamtniederschlag am Boden in  $\text{kg m}^{-2}$  nach 150 min

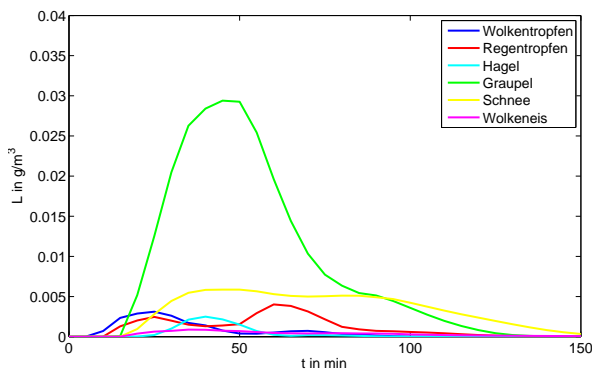
## A.2. Zeitreihe der gemittelten Flüssigwassergehalte verschiedenerer Hydrometeorarten



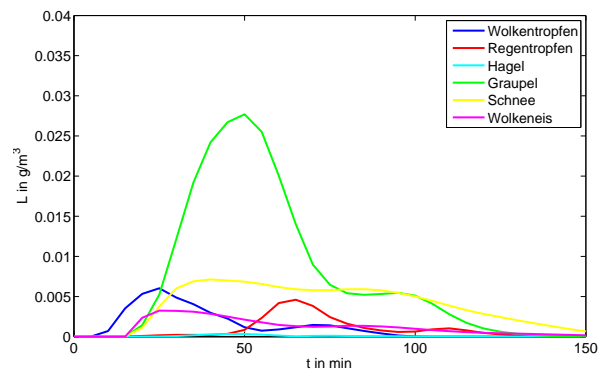
(a) *SimReu* - maritime Bedingungen



(b) *SimReu* - kontinentale Bedingungen



(c) *SimAkt* - maritime Bedingungen



(d) *SimAkt* - kontinentale Bedingungen

Abbildung A.2.: Zeitreihe der über das Modellgebiet gemittelten Flüssigwassergehalte der verschiedenen Hydrometeorarten in  $\text{g m}^{-3}$

# Symbolverzeichnis

## Lateinische Symbole

$\vec{a}_{ap}$	Beschleunigung eines Aerosolpartikels
$A_{eff}$	effektive Kollektortropfenoberfläche
$A_{wirk,e}$	effektiver Wirkungsquerschnitt
$A_{wirk,g}$	geometrischer Wirkungsquerschnitt
$B_{ap}$	Mobilität eines Aerosolpartikels
$c_{pd}$	spezifische Wärme von trockener Luft bei konstantem Druck
$c_{vd}$	spezifische Wärme von trockener Luft bei konstantem Volumen
$C_c$	Cunningham-Korrekturfaktor
$d_{ap}$	Durchmesser eines Aerosolpartikels
$D_{ap}$	Diffusivität eines Aerosolpartikels
$D_v$	Diffusivität von Wasser
$E$	Kollisionseffizienz
Eu	Eulerzahl
$f_{ap}$	Anzahldichteverteilungsfunktion der Aerosolpartikel
$f_c$	Anzahldichteverteilungsfunktion der Wolkentropfen
$f_r$	Anzahldichteverteilungsfunktion der Regentropfen
$f_w$	Anzahldichteverteilungsfunktion der Tropfen
$\vec{F}_e$	elektrische Kräfte
$\vec{F}_t$	thermophoretische Kräfte
$\vec{F}_v$	diffusiophoretische Kräfte
$\vec{F}_A$	archimedische Auftriebskraft
$\vec{F}_G$	Gravitationskraft
$\vec{F}_R$	Reibungskraft
$\vec{F}_{Stinn}$	externe wirkende Kräfte
$\overline{F}_f = \overline{\rho v'' x_f}$	turbulenter Fluss von Eis
$\overline{F}_l = \overline{\rho v'' x_l}$	turbulenter Fluss von Flüssigwasser
$\overline{F}_v = \overline{\rho v'' x_v}$	turbulenter Fluss von Wasserdampf
$\vec{g}$	Gravitationsbeschleunigung
$\vec{H}$	Funktion zur Berücksichtigung der elektrischen sowie thermo- und diffusiophoretischen Kräfte
$\vec{H}_f$	fühlbarer Wärmestrom
$I_f$	Phasenfluss von Eis
$I_l$	Phasenfluss von Wasser

$\vec{I}_{ap}$	Teilchenflussdichte der Aerosolpartikel
$\vec{I}_{ap,1}$	Anteil der Teilchenflussdichte der Aerosolpartikel ohne Berücksichtigung mechanischer Effekte
$\vec{I}_{ap,2}$	Anteil der Teilchenflussdichte der Aerosolpartikel unter Berücksichtigung nur mechanischer Effekte
$k_B$	Boltzmann-Konstante
$k_{air}$	Wärmeleitfähigkeit von Luft
$k_{ap}$	Wärmeleitfähigkeit der Aerosolpartikel
$k^* = k_{air}/k_{ap}$	Verhältnis der Wärmeleitfähigkeit von Luft und Aerosolpartikel
$K_{ap}$	Scavenging-Koagulationsfunktion
$K_{ap,1}$	Anteil der Scavenging-Koagulationsfunktion ohne Berücksichtigung mechanischer Effekte
$K_{ap,2}$	Anteil der Scavenging-Koagulationsfunktion unter Berücksichtigung nur mechanischer Effekte
Kn	Knudsenzahl
$l_s$	Sublimationswärme
$l_v$	Verdampfungswärme
$m_{air}$	Masse der durch ein Aerosolpartikel verdrängten Luft
$m_{ap}$	Masse eines Aerosolpartikels
$m_{dr}$	Masse eines Tropfens
$M_{air}$	molare Masse von trockener Luft
$M_{ap}$	molare Masse der Aerosolpartikel
$M_w$	molare Masse von Wasser
$n_{ap}$	Anzahldichte der Aerosolpartikel
$N_{ac}$	Anzahl der aktivierten Aerosolpartikel
$N_{ap}$	Anzahl der Aerosolpartikel
$N_{sc}$	Anzahl der durch CAS ausgewaschenen Aerosolpartikel
$p$	Druck
$p^*$	dynamischer Druck
$p_0$	statischer Druck
$p_{ed}$	Sättigungsdampfdruck Eis-Wasserdampf
$p_{wd}$	Sättigungsdampfdruck Flüssigwasser-Wasserdampf
$\vec{p}_f$	Niederschlagsfluss von Eis
$\vec{p}_l$	Niederschlagsfluss von Wasser
Pe	Pecletzahl
Pr	Prandtlzahl
$q$	Mischungsverhältnis
$q_{ap}$	elektrische Ladung eines Aerosolpartikels
$q_{dr}$	elektrische Ladung eines Tropfens
$Q_h$	diabatische Wärmeproduktion
$r$	radiale Abstandskoordinate zum Tropfenmittelpunkt

$r_{ap}$	Radius eines Aerosolpartikels
$\bar{r}_{ap}$	modaler Radius der Aerosolpartikelverteilungsfunktion
$r_c$	Gleichgewichtsradius bei kritischer Übersättigung
$r_d$	relative Luftfeuchte
$r_{dr}$	Radius eines Tropfens
$\vec{r}$	Ortsvektor
$R$	allgemeine Gaskonstante
$R_d$	Gaskonstante von trockener Luft
$R_l$	Gaskonstante von feuchter Luft
$R_v$	Gaskonstante von Wasserdampf
$\vec{R}$	Flussdichte kurzweiliger und langweiliger Strahlung
Re	Reynoldszahl
$\vec{s}_{sp}$	Ort eines Aerosolpartikels
$S$	Übersättigung
$S_c$	kritische Übersättigung
$S_{max}$	kritische Übersättigung für den kleinsten aktivierten Aerosolpartikel
$S_{mean}$	kritische Übersättigung für den Aerosolpartikel mit modalem Radius
$S_i^k$	Quellterm hinsichtlich des Momentes $M_i^k$
$Sc_{ap}$	Schmidtzahl der Aerosolpartikel
$Sc_v$	Schmidtzahl für Wasserdampf in Luft
St	Stokeszahl
$St^*$	kritische Stokeszahl
$t$	Zeit
$T$	Temperatur
$T_{air}$	Lufttemperatur
$T_s$	Temperatur an der Tropfenoberfläche
$\bar{T} = \overline{\rho v'' v''}$	turbulenter Impulsfluss
$u_\infty$	Endfallgeschwindigkeit eines Niederschlagstropfen
$v''$	turbulente Geschwindigkeitsfluktuation
$\vec{v}$	baryzentrische Geschwindigkeit
$\vec{v}^*$	dimensionslose baryzentrische Geschwindigkeit
$\vec{v}_{ap}$	Geschwindigkeit eines Aerosolpartikels
$\vec{v}_{ap}^*$	dimensionslose Geschwindigkeit eines Aerosolpartikels
$\vec{v}_{ap,drift}^*$	dimensionslose Driftgeschwindigkeit eines Aerosolpartikels
$\vec{v}_{rel}$	relative Geschwindigkeit eines Aerosolpartikels zur umgebenden Strömung
$\vec{v}_{Umgebung}$	Geschwindigkeit der umgebenden Luftströmung
$\overline{v_{i,k}}$	mittlere Sedimationsgeschwindigkeit hinsichtlich des Momentes $M_i^k$
$w$	Vertikalgeschwindigkeit eines aufsteigenden Luftpaketes
$w_{dr}$	Fallgeschwindigkeit eines Niederschlagstropfens
$W = \eta_w / \eta_{air}$	Verhältnis aus der dynamischen Viskosität von Wasser zu der von Luft
$x_{ap}$	Massenbruch eines Aerosolpartikels

$x_f$	Massenbruch von Eis
$x_l$	Massenbruch von Flüssigwasser
$x_v$	Massenbruch von Wasserdampf
$y_c$	effektiver Tropfenkollektorradius

## Griechische Symbole

$\alpha_{air}$	spezifisches Volumen trockener Luft
$\alpha_{ap}$	spezifisches Volumen der Aerosolpartikel
$\alpha_w$	spezifisches Volumen von Wasser
$\alpha_{Therm}$	thermophoretischer Koeffizient
$\beta_{Diff}$	diffusiophoretischer Koeffizient
$\delta$	Höhe der turbulenten Grenzschicht um einen Tropfen
$\epsilon$	Massenbruch des wasserlöslichen Anteils eines Aerosolpartikels
$\epsilon_{Slinn}$	Retentionseffizienz
$\eta_{air}$	dynamische Viskosität von Luft
$\eta_w$	dynamische Viskosität von Wasser
$\Theta$	potentielle Temperatur
$\kappa$	von-Karman'sche Konstante
$\lambda_{air}$	freie Weglänge in Luft
$\lambda_{ap}$	spektraler Scavenging-Koeffizient
$\nu$	Anzahl der Ionen, die ein wasserlösliches Aerosol an das Wasser abgibt
$\xi_{ap}$	Ventilationskoeffizient eines Aerosolpartikels
$\xi_t$	Ventilationskoeffizient der thermophoretischen Kräfte
$\xi_v$	Ventilationskoeffizient der diffusiophoretischen Kräfte
$\rho$	Gesamtdichte
$\rho_{air}$	Dichte der Luft
$\rho_{ap}$	Dichte der Aerosolpartikel
$\rho_d$	Partialdichte der trockenen Luft
$\rho_f$	Partialdichte von Eis
$\rho_l$	Partialdichte von Flüssigwasser
$\rho_v$	Partialdichte von Wasserdampf
$\rho_w$	Dichte von Flüssigwasser
$\sigma_{ap}$	dimensionsloser Breitenparameter der Aerosolverteilungsfunktion
$\sigma_w$	Oberflächenspannung von Wasser
$\tau_{ap}$	Relaxationszeit der Aerosolpartikel
$v = r_{ap}/r_{dr}$	Verhältnis aus Partikelradius zu Tropfenradius
$\phi_s$	osmotischer Koeffizient einer wässrigen Lösung
$\vec{\Omega}$	konstante Winkelgeschwindigkeit der rotierenden Erde

# Literaturverzeichnis

- Abdul-Razzak, H., S. J. Ghan und C. Rivera-Carpio, 1998:** A parametrization of aerosol activation: 1. Single Aerosol type. *J. Geophys. Res.*, 103, D6, 6123-6131.
- Abdul-Razzak, H. und S. J. Ghan, 2000:** A parametrization of aerosol activation: 2. Multiple Aerosol types. *J. Geophys. Res.*, 105, D5, 6837-6844.
- Ackermann, I. J., 1997:** Entwicklung und Anwendung eines Aerosol-Dynamikmodells für dreidimensionale Chemie-Transport-Simulationen in der Troposphäre. *Mitteilungen aus dem Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität zu Köln*, 115, Köln.
- Adam, J. R. und R. G. Semonin, 1970:** Collection efficiencies of raindrops for submicron particulates. *Precipitation Scavenging 1970*, CONF 7006001, 151-160, U.S. Atomic Energy Commission.
- Atlas, D., R. C. Srivastava und R. S. Sekhon, 1973:** Doppler Radar Characteristics of Precipitation at vertical Incidence. *Rev. Geophys. Space Phys.*, 11, No.1, 1-35.
- Bayer, D., K. D. Beheng und F. Herbert, 1987:** Numerische Modellierung von atmosphärischen Auswaschprozessen. *Berichte des Instituts für Meteorologie und Geophysik der Universität Frankfurt/Main*, Nr. 70, Frankfurt.
- Beard, K. V. und S. N. Grover, 1974:** Numerical Collision Efficiencies for small raindrops colliding with micron size particles. *J. Atmos. Sci.*, Volume 31, 543-550.
- Beheng, K. D., 1986a:** On the effect of various drop size spectra on the spectral scavenging coefficient calculates by an approximate semi-analytical scheme. *Meteorol. Rdsch.*, 39, 93-97.
- Beheng, K. D. und G. Doms, 1986b:** A general Formulation of Collection Rates of Cloud and Raindrops Using the Kinetic Equation and Comparison with Parametrizations. *Beitr. Phys. Atmos.*, 59, No.1.
- Beheng, K. D., 2008:** *Thermodynamik und Statik der Atmosphäre*. Unveröffentlichtes Skript zur Vorlesung Wolkenphysik, Universität Karlsruhe (TH).
- Beheng, K.D., 2009:** *Wolkenphysik - Skript zur Vorlesung 2009/2010*. Unveröffentlichtes Skript zur Vorlesung Wolkenphysik, Universität Karlsruhe (TH).
- Blahak, U., 2008:** Towards a Better Representation of High Density Ice Particles in a State-of-the-Art Two-Moment Bulk Microphysical Scheme. *Extended abstract, International Conference on Clouds and Precipitation*, 7. – 11. Juli 2008, Cancun.
- Blahak, U., 2010:** Towards a better representation of hail in a state-of-the-art two-moment bulk microphysic scheme. Part 1: Description. *in preparation*.

- Davies, H. C., 1976:** A lateral boundary formulation for multi-level prediction models. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 102, 405-418.
- Davies, H. C., 1983:** Limitations of some common lateral boundary schemes used in regional NWP. *Mon. Wea. Rev.*, 111, 1002-1012.
- Davenport, H. M. und L. K. Peters, 1978:** Field studies of atmospheric particulate concentration changes during precipitation. *Atmos. Environ.*, 12, 997-1008.
- Doms, G. und U. Schättler, 2002:** A Description of the Nonhydrostatic Regional Model LM. Part 1: Dynamics and Numerics. *Download unter <http://www.cosmo-model.org>.*
- Etling, D., 2002:** *Theoretische Meteorologie*. Springer-Verlag, 376 S.
- Fuchs, NA, 1964:** *The mechanics of aerosols*. Pergamon, Oxford.
- Ghan, S. J., C. C. Chuang und J. E. Penner, 1993:** A parametrization of cloud droplet nucleation part 1: single aerosol type. *Atmos. Res.*, 30, 197-221.
- Grover, S. N., H. R. Pruppacher und A. E. Hamielec, 1977:** A numerical determination of the efficiency with which spherical aerosol particles collide with spherical water drops due to inertial impaction and phoretic and electric forces. *J. Atmos. Sci.*, Volume 34, 1655-1663.
- Herbert, F., 1978:** A theoretical Model to describe the Motion of Aerosol Partikel Due to the Combined Action of Inertia, Brownian Diffusion and Phoretic and Electric Forces. *J. Atmos. Sci.*, 35, 1744-1750.
- Herbert, F. und K. D. Beheng, 1986:** Scavenging of Airborne Particles by Collision with Water Drops - Model Studies on the Combined Effect of Essential Microdynamic Mechanism. *Meteor. Atmos. Phys.*, 35, 201-211.
- Junge, C., 1955:** The size distribution and aging of natural aerosols as determined from electrical and optical data on the atmosphere. *J. Meteor.*, 12, 13-25.
- Junge, C., 1963:** *Air Chemistry and Radioactivity*. Academic. Press, New York.
- Kessler, E., 1969:** On the distribution and continuity of water substances in atmospheric circulations. *Meteor. Monogr.*, 10 (32), American Meteorological Society.
- Khvorostyanov, V. I. und J. A. Curry, 1999:** A simple analytical model of aerosol properties without account for hygroscopic growth. 1: Equilibrium size spectra and cloud condensation nuclei activity spectra. *J. Geophys. Res.*, 104, D2, 2175-2184.
- Khvorostyanov, V. I. und J. A. Curry, 2006:** Aerosol size spectra and CCN activity spectra: Reconciling the lognormal, algebraic and power laws. *J. Geophys. Res.*, 111, D12202, doi:10.1029/2005JD006532.
- Khvorostyanov, V. I. und J. A. Curry, 2008:** Kinetics of Cloud droplet Formation and Its Parametrization for Cloud and Climate Models. *J. Atmos. Sci.*, 65, 2784-2802.
- Klemp, J. B. und R. B. Wilhelmson, 1978:** The Simulation of Three-Dimensional Convective Storm Dynamics. *J. Atmos. Sci.*, 35, 1070-1096.
- Köhler, H., 1922:** Zur Kondensation des Wasserdampfes in der Atmosphäre. *Geof. Publ.*, Vol. 2, No. 6.



- Leong, K. H., K. V. Beard und H. Z. Ochs, 1982:** Laboratory measurements of particle capture by evaporating cloud drops. *J. Atmos. Sci.*, 39, 1130-1140.
- Long, A. B., 1974:** Solutions to the droplet collection equation for polynomial kernels. *J. Atmos. Sci.*, 31, 1040-1052.
- Maier, G., 2001:** Die aufs Wetter wetten. *Die Zeit*, 43.
- Mellor, G. L. und T. Yamada, 1974:** A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers. *J. Atmos. Sci.*, 31, 1791-1806.
- Noppel, H., U. Blahak, K. D. Beheng und A. Seifert, 2006:** A two-moment cloud microphysics scheme with two process-separated modes of graupel. *12. AMS Conference on Cloud Physics, 10. – 14.7.2006, Madison, Wisconsin, available online: <http://ams.confex.com/ams/pdfpapers/113532.pdf>.*
- Noppel, H., U. Blahak, A. Seifert und K. D. Beheng, 2010:** Simulations of a hailstorm and the impact of CCN using an advanced two-moment cloud microphysical scheme. *Atmos. Res.*, doi:10.1016/j.atmosres.2009.09.008.
- Oertel, H. und M. Böhle, 2008:** *Strömungsmechanik*. Vieweg und Teubner, 428 S.
- Pruppacher, H. R. und J. D. Klett, 1996:** *Microphysics of Clouds and Precipitation*. Kluwer Acad. Pub., 976 S.
- Reutter, P. H., S. Trentmann, M. Simmel, D. Rose, S. S. Gunthe, H. Wernli, M. O. Andfeae und U. Pöschl, 2009a:** Aerosol- and updraft-limited regimes of cloud droplet formation: influence of particle number, size and hygroscopicity on the activation of cloud condensation nuclei (CCN). *Atmos. Chem. Phys.*, 9, 7067-7080.
- Reutter, P. H., 2009b:** *Numerical simulations of microphysical processes in pyro-convective clouds*. Dissertation, Johannes Gutenberg-Universität in Mainz.
- Roedel, W., 2000:** *Physik unserer Umwelt*. Springer Verlag, 498 S.
- Schady, A., 1998:** *Modellierung von Aerosolprozessen mit KAMM / DRAIS*. Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (TH).
- Schättler, U., G. Doms und G. Schraff, 2008:** A Description of the Nonhydrostatic Regional COSMO-Model. Part 7: Users's Guide. *Download unter <http://www.cosmo-model.org>.*
- Segal, Y. und A. Khain, 2006:** Dependence of droplet concentration an aerosol conditions in different cloud types: Application to droplet concentration parametrization of aerosol conditions. *J. Geophys. Res.*, 111:D15240.
- Seifert, A., 2002:** *Parametrisierung wolkenmikrophysikalischer Prozesse und Simulation konvektiver Mischwolken*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- Seifert, A. und K. D. Beheng, 2006a:** A two-moment cloud microphysics parametrization for mixed-phase clouds. Part 1: Model description. *Meteor. Atmos. Phys.*, 92, 45-66.
- Seifert, A. und K. D. Beheng, 2006b:** A two-moment cloud microphysics parametrization for mixed-phase clouds. Part 2: Maritime vs. continental deep convection storms. *Meteor. Atmos. Phys.*, 92, 67-82.

- Seinfeld, J. H. und S. N. Pandis, 1997:** *Atmospheric Chemistry and Physics - From Air Pollution to Climate Change*. John Wiley & Sons, New York.
- Shipway, B. J. und S. J. Abel, 2009:** Analytical estimation of cloud droplet nucleation based on an underlying aerosol population. *Atmos. Res.*, doi:10.1016/j.atmosres.2009.10.005.
- Simmel, M. und S. Wurzler, 2006:** Condensation and activation in sectional cloud microphysical model. *Atmos. Res.*, 80, 218-236.
- Slinn, W. G. N., 1977:** Some approximations for the wet and dry removal of particles and gases from the atmosphere. *Water, Air, and Soil Pollut.*, 7, 513-543.
- Slinn, W. G. N., 1983:** Precipitation scavenging, in *Atmospheric Sciences and Power Production 1979*. In Chap 11. Division of Biomedical Environmental Research, U.S. Department of Energy, Washington, D.C.
- Simmel, M., T. Trautmann und G. Tetzlaff, 2002:** Numerical solution of the stochastic collection equation - comparison of the Linear Discrete Method with other methods. *Atmos. Res.*, 61, 135-148.
- Talbot, L., R. K. Cheng, R. W. Schefer, D. R. Willis, 1980:** Thermophoresis in a Heated Boundary Layer. *J. Fluid Mech.*, 101 (4), 737-758.
- Twomey, S., 1959:** The nuclei of natural cloud formation, 2. The supersaturation in natural clouds and the variation of cloud droplet concentration. *Pure Appl. Geophys.*, 43, 243-249.
- Weisman, M. L. und J. B. Klemp, 1982:** The dependency of numerically simulated convective storms on vertical wind shear and buoyancy. *Mon. Wea. Rev.*, 110, 504-520.

**Sarah Isabelle Wolff**

**Diplomarbeit im Fach Meteorologie: Parametrisierung und Simulation des Auswaschens von  
Aerosolpartikeln**

**Zeitraum: 21.10.2009 – 10.11.2010**

**Referent: Prof. Dr. K. Beheng Korreferent: Prof. Dr. Ch. Kottmeier**

**Zusammenfassung:**