

Umfassendes Modell für den Einfluss des Aerosols auf die Vorgänge in der Atmosphäre von Ballungsgebieten

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften
der Fakultät für Maschinenbau
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte
Dissertation
von

Dipl.-Ing. Gerold Halmer

Tag der mündlichen Prüfung: 16. April 2012

Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. Dr. h. c. Günter Ernst

1. Korreferent: Prof. Dr.-Ing. habil. Nicolas Moussiopoulos

2. Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Andreas Class

Meiner Mutter und meinem Vater gewidmet.

Diese Arbeit entstand im Rahmen meiner Arbeit am Institut für Technische Thermodynamik in der Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe (TH).

Mein Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr. h. c. Günter Ernst für die stets interessierte und wohlwollende Begleitung meiner Arbeit sowie für wichtige Ratschläge. Herrn Prof. Dr.-Ing habil. Nicolas Moussiopoulos möchte ich für die Anregung dieser Arbeit und den fachlichen Diskussionen danken. Zusätzlich danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Andreas Class für die freundliche Übernahme des Korreferats als zweiter Korreferent.

Ich danke allen Kollegen des Instituts für Technische Thermodynamik, die ebenfalls zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Besonderer Dank gilt Herrn Walter Billet und Herrn Dr. Günter Bräuning für Ihre motivierenden Gespräche.

Ganz besonderer Dank gilt meiner Familie und meinen Freunden für den menschlichen Rückhalt, ohne den diese Arbeit nicht entstanden wäre.

Karlsruhe, 11. Juni 2012

Gerold Halmer

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung.....	1
2	Eigenschaften des Aerosols.....	5
2.1	Aufbau des Aerosols.....	5
2.1.1	Definition.....	5
2.1.2	Größenverteilung der Aerosolpartikel.....	7
2.1.3	Zusammensetzung.....	8
2.2	Verhalten des Aerosols.....	10
2.2.1	Bildung.....	10
2.2.2	Umwandlung und Ausscheidung.....	11
2.3	Auswirkungen des Aerosols.....	14
2.3.1	Einfluss auf die Wolkenbildung.....	14
2.3.2	Einfluss auf das Klima.....	14
2.3.3	Einfluss auf die Sichtweite.....	15
2.3.4	Einfluss auf den Ferntransport von Luftschadstoffen.....	16
2.3.5	Einfluss auf Photolyseraten.....	17
2.3.6	Einfluss auf die Gesundheit.....	17
3	Grundlagen zur Behandlung des Aerosols.....	19
3.1	Aerosoldynamikgleichung.....	19
3.2	Form der Verteilungsfunktion.....	21
3.3	Anwendung der Aerosoldynamikgleichung.....	24
3.3.1	Nukleation.....	26
3.3.2	Koagulation.....	29
3.3.3	Kondensation.....	31

3.3.4	Sedimentation und Deposition.....	33
4	Strahlung und optische Eigenschaften der Atmosphäre.....	35
4.1	Strahlungshaushalt der Erde.....	35
4.2	Optische Eigenschaften des Aerosols.....	42
4.3	Modellmäßige Ermittlung optischer Eigenschaften.....	47
5	Beschreibung der eingesetzten Modelle.....	53
5.1	Aktuelle Online-Kopplung-Modelle.....	53
5.2	MEMO.....	55
5.2.1	Grundgleichungen.....	55
5.2.2	Transformation und Diskretisierung der Grundgleichungen.....	57
5.2.3	Anfangs- und Randbedingungen.....	59
5.3	MARS.....	62
5.3.1	Grundgleichung.....	62
5.3.2	Lösungsverfahren.....	64
5.3.3	Eingabedaten.....	65
5.4	Strahlungsmodell IRIS.....	67
5.4.1	Langwellige Strahlung.....	67
5.4.2	Kurzwellige Strahlung.....	70
5.5	Gesamtmodell.....	73
5.5.1	Das Modul OPAC.....	76
5.5.2	Erweiterung des Strahlungsmodells IRIS.....	80
6	Anwendungen des Gesamtmodells.....	83
6.1	Abstrakter Fall.....	83
6.1.1	Aufbau des Rechengitters.....	83
6.1.2	Meteorologische Eingabedaten.....	84

6.1.3	Vorgaben zum Aerosol.....	86
6.1.4	Ergebnisse des abstrakten Falls.....	88
6.2	Mailand-Fall: Vergleich Einweg-/Zweiwegkopplung.....	100
6.2.1	Anwendungsfall.....	100
6.2.2	Durchgeführte Simulationen.....	101
6.2.3	Rechenergebnisse.....	103
6.3	Mailand-Fall: Variationen mit Zweiwegkopplung.....	126
6.3.1	Art der Variationen.....	126
6.3.2	Rechenergebnisse.....	126
7	Zusammenfassung.....	145
8	Literaturverzeichnis.....	151

1 Einleitung

Aerosol ist ein Gemisch aus kleinsten Partikeln und Luft. Solche Partikel können fest oder flüssig sein.

Die augenscheinliche Wirkung des Aerosols ist die Reduzierung der Sichtweite. Der bekannteste Fall ist der Nebel. Hier behindern kleinste Wassertröpfchen (bei niedrigen Temperaturen auch Eiskristalle) die Sicht. Aber auch andere Substanzen (z. B. Stäube, Ruß) können die Luft trüben. In Ballungsgebieten können bei Inversionswetterlagen Bereiche mit hohen Konzentrationen dieser Substanzen entstehen, was die Sichtweite merklich herabsetzt. Sehr häufig sind die Bereiche mit hoher Aerosolkonzentration scharf von der Umgebung abgegrenzt.

Die durch Menschen erzeugten Aerosolpartikel stammen in industrialisierten Ländern zum großen Teil aus Straßenverkehr, Industrie und Gebäudeheizung. Je nach Großwetterlage, Besiedlungsart und -dichte variiert deren Anteil. Solche Aerosolpartikel werden als primäre Partikel bezeichnet, da sie emittiert werden. Aerosolpartikel, die sich aus gasförmigen Vorläufersubstanzen bilden, werden als sekundäre Partikel bezeichnet. Aerosolpartikel mit natürlicher Herkunft stammen zum großen Teil von Vulkanausbrüchen und Aufwirbelungen (z. B. Saharastaub, Meersalz). Auch Lebendmaterial, wie Pollen, Algen, Sporen, Bakterien und Viren gehören zu den natürlichen Aerosolpartikeln.

Die Herabsetzung der Sichtweite ist nicht die einzige Wirkung des Aerosols. So beeinflussen Aerosole direkt und indirekt den Strahlungshaushalt. Dieser Einfluss wird auch als Strahlungsantrieb bezeichnet. Streuung, Reflexion und Absorption sind die direkten Ursachen des Strahlungsantriebs. Je nach vorliegenden Substanzen variiert ihr Anteil. Die umgebende Luft wird bei überwiegender Reflexion abgekühlt (negativer Strahlungsantrieb) und bei überwiegender Absorption erwärmt (positiver Strahlungsantrieb). Die indirekte Wirkung des Aerosols auf den Strahlungsantrieb ist die Wolkenbildung. Die Aerosolpartikel dienen der Tröpfchen- und Eiskristallbildung als Kondensations- oder Kristallisationskerne. Je mehr Kerne vorhanden sind umso

mehr Tröpfchen und Eiskristalle können sich bilden und umso geringer ist deren Größe. Die Wachstumsphase zu Regentropfen wird dadurch verlängert und die Lebensdauer der Wolke erhöht. Außerdem führt die erhöhte Anzahl an Tröpfchen zu einer verstärkten Streuung des Sonnenlichts.

Der Strahlungsantrieb des Aerosols bewirkt eine Änderung der meteorologischen Größen Temperatur, Druck und Windgeschwindigkeit. Will man mit prognostischen Windfeldmodellen möglichst wirklichkeitsnahe Ergebnisse erzielen, muss man diesen Zusammenhang berücksichtigen.

In dieser Arbeit wird ein Gesamtmodell bestehend aus dem mesoskaligen Grenzschichtmodell MEMO, dem Strahlungsmodell IRIS, einem Optikmodul und einem Chemie- und Ausbreitungsmodell erstellt, mit dem der Einfluss des Aerosols auf den Strahlungshaushalt der Atmosphäre (im Bereich von Ballungsgebieten, Städten) und dadurch auch auf die meteorologischen Größen detailliert berechnet werden kann.

Die Berechnung des Strahlungshaushaltes findet im Strahlungsmodell IRIS statt (Moussiopoulos, 1987 und 1989), das ein Teil des mesoskaligen Grenzschichtmodells MEMO ist (Flassak, 1990). Bisher wurde der Einfluss des Aerosols auf die Strahlung nur durch einen Parameter berücksichtigt, dessen Wert fest vorgegeben wurde (Paltridge und Platt, 1976). In dieser Arbeit wird ein Modell entwickelt, das für jede einzelne Rechenmasche die direkte Wirkung des Aerosols auf den Strahlungshaushalt individuell berücksichtigt. Dazu wird das Strahlungsmodell IRIS so erweitert, dass eine detaillierte Berechnung des Strahlungsantriebs für jede Masche in Abhängigkeit der vorliegenden Aerosolkonzentration möglich ist.

Zur Bestimmung der optischen Parameter Streuung und Absorption wird das Programm OPAC vom Meteorologischen Institut der Universität München (d'Almeida et al., 1991; Hess et al., 1998) in Form eines Moduls dem Programm MEMO hinzugefügt. Mit dem Modul OPAC werden die optischen Parameter für Aerosole unterschiedlicher Zusammensetzung, Größenverteilung und

Konzentration für verschiedene Wellenlängenbereiche der Strahlung berechnet.

Mit dem Chemie- und Ausbreitungsmodell MARS (Kessler, 1994; Sahm, 1998) wird die Aerosoldynamik (Arvanitis, 2004) simuliert. Dazu wurden die Programme MEMO und MARS bisher nacheinander verwendet. Die für MARS benötigten meteorologischen Eingabedaten wurden von MEMO in festen Zeitintervallen in eine Datei geschrieben. Das Programm MARS las dann zu den definierten Zeitpunkten die Daten aus dieser Datei.

Das nichthydrostatische mesoskalige Grenzschichtmodell MEMO und das mesoskalige Chemie- und Ausbreitungsmodell MARS wurden am Institut für Technische Thermodynamik der Universität Karlsruhe entwickelt. Die Weiterentwicklung und Anwendung fand und findet in enger Zusammenarbeit mit dem Laboratory of Heat Transfer and Environmental Engineering der Aristoteles Universität Thessaloniki statt (Moussiopoulos, 1989).

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Programme MEMO und MARS so gekoppelt, dass die Rechenläufe parallel zueinander ausgeführt werden. Der Datenaustausch findet in konstanten aber wählbaren Zeitintervallen während der Laufzeit in beiden Richtungen statt (Zweiweg-Kopplung). Vom Programm MEMO werden weiterhin die meteorologischen Daten zur Verfügung gestellt und zusätzlich werden vom Programm MARS Konzentrationsdaten des Aerosols an das Programm MEMO übergeben.

Die Validierung des überarbeiteten Strahlungsmodells IRIS und des Optikmoduls OPAC findet anhand eines vereinfachten Falles statt (Kapitel 6.1 "Abstrakter Fall"). Eine Kopplung von MEMO und MARS ist hierfür nicht notwendig, denn die Aerosolzusammensetzung wird dabei für MEMO definiert. Dieser Fall besteht aus einem ebenen Gitter mit einheitlicher Landnutzung und einfachen meteorologischen Anfangsbedingungen. Zur Validierung werden unterschiedliche Aerosolzusammensetzungen verwendet.

Mit der Bearbeitung eines wirklichkeitsnahen Falles (Kapitel 6.2 und 6.3 "Mailand Fall") wird die Leistungsfähigkeit des Gesamtmodells beurteilt. Zu diesem Zweck werden die Ergebnisse des erarbeiteten Gesamtmodells mit

Ergebnissen der bisherigen Simulationsmethode verglichen. Wie der Einfluss des Aerosols sich in den Ergebnissen widerspiegelt wird mit Hilfe einer Simulationsreihe untersucht, in der die Konzentrationsangaben des Aerosols im Eingabedatensatz variiert werden.

2 Eigenschaften des Aerosols

2.1 Aufbau des Aerosols

2.1.1 Definition

Aerosol bedeutet wörtlich „in Luft gelöst“.

Ein Aerosol ist also ein Gas, das feste und flüssige Partikel enthält. Im Fall von atmosphärischem Aerosol handelt es sich bei dem Gas um Luft. Die festen und flüssigen Partikel liegen im atmosphärischen Aerosol in unterschiedlicher Größe und in unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung vor.

Als Untergrenze für den Partikeldurchmesser wird im allgemeinen $10^{-3} \mu\text{m}$ angenommen. Bei diesem Partikeldurchmesser unterscheiden sich Aerosolpartikel und Gasmoleküle signifikant in Größe und Masse (Götz et al., 1991). Die Definition des Aerosols liefert selbst keine Angabe für eine obere Größenbegrenzung. Als obere Grenze kann $100 \mu\text{m}$ angesetzt werden. Die Sedimentationsgeschwindigkeit nimmt mit der Partikelgröße zu. So beträgt sie bei einem Partikel mit einem Durchmesser von $100 \mu\text{m}$ rund $30 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$, was einer Fallstrecke von mehr als einem Kilometer in einer Stunde entspricht. Größere Partikel haben somit nur eine kurze Verweilzeit in der Atmosphäre (Ackermann, 1997).

Anders als bei Spurengasen, die allein durch den Parameter Konzentration beschrieben werden können, sind für die Beschreibung von atmosphärischem Aerosol mehrere Parameter notwendig. So sind die Größenverteilung, die chemische Zusammensetzung, die Partikelform, der Phasenzustand und der Mischungszustand des Aerosols entscheidend für sein physikalisches und chemisches Verhalten. Diese Parameter sind zudem nicht voneinander unabhängig, sondern stehen in meist nichtlinearer Wechselwirkung zueinander (Ackermann, 1997).

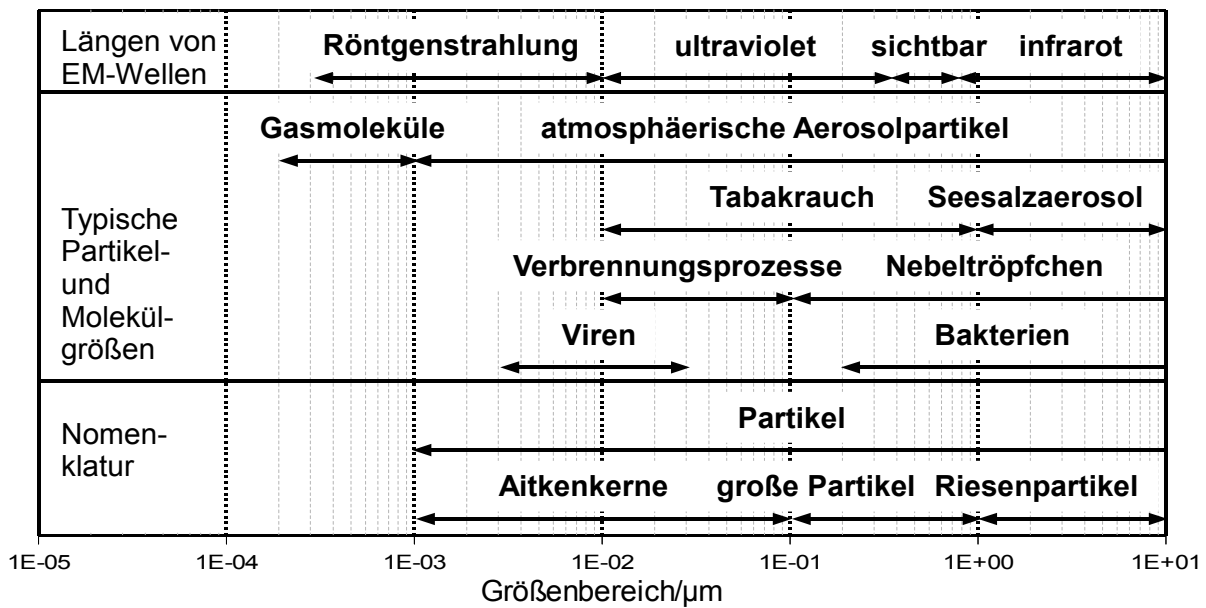


Bild 2.1: Größenbereiche atmosphärischer Aerosolpartikel und Aerosolnomenklatur (Ackermann, 1997).

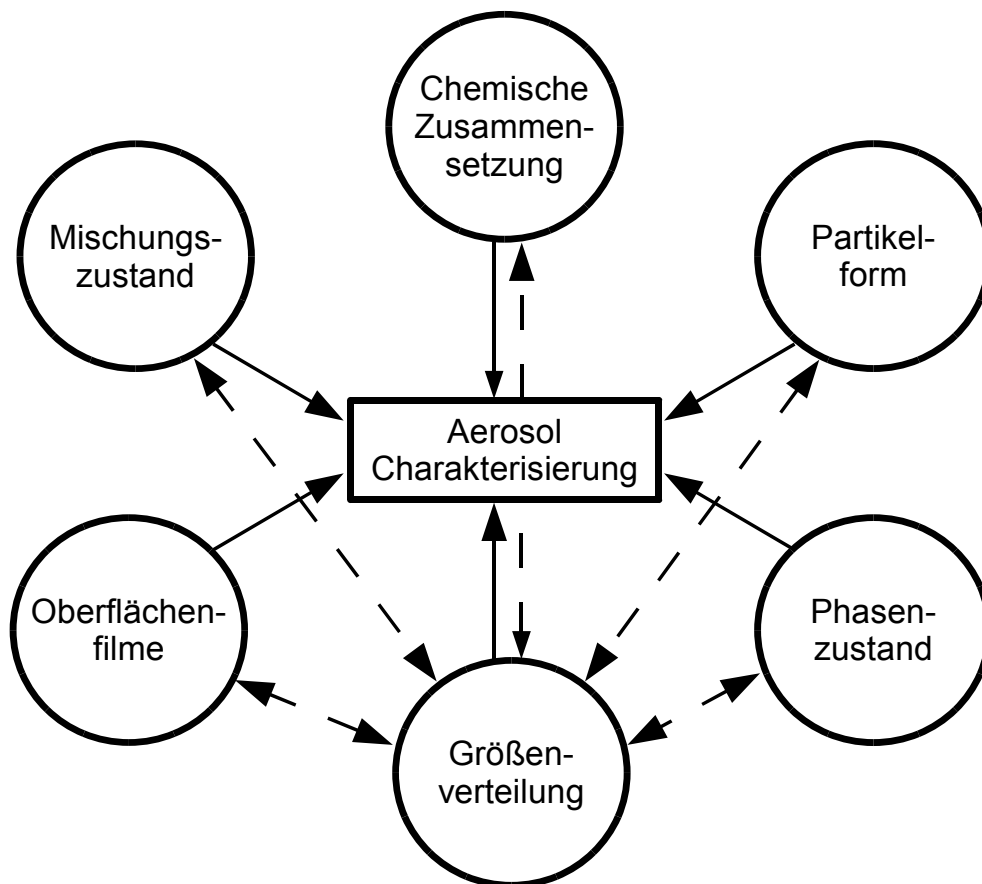


Bild 2.2: Charakterisierung von Aerosolen. Die gestrichelten Linien zeigen die Wechselwirkungen zwischen der Größenverteilung und den anderen Parametern (Ackermann, 1997).

2.1.2 Größenverteilung der Aerosolpartikel

Um die Größe eines Partikels anzugeben wird der Partikelradius oder Partikeldurchmesser verwendet. Da aber die Partikel in Ihrer Gestalt von der Kugelform abweichen, beschreibt der Partikelradius einen Äquivalenzradius. Unter dem Äquivalenzradius wird der Radius einer Kugel verstanden, die das gleiche Volumen besitzt wie das unregelmäßig geformte Partikel (Winkler, 2000).

Die Partikelradien in einem atmosphärischen Aerosol erstrecken sich über mehrere Zehnerpotenzen. Deshalb werden die Partikel oft in grobe Größenklassen eingeteilt. Die deutschen und die englischen Begriffe dieser Einteilung sind in der folgenden Tabelle enthalten. Dabei muss erwähnt werden, dass die deutschen und englischen Begriffe nicht vollständig deckungsgleich sind. Durch die grobe Einteilung ist dies aber nicht besonders wichtig (Winkler, 2000).

Radiusbereich in μm	dt. Bezeichnung nach (1963)	Junge	engl. Bezeichnung nach Whitby u. Sverdrup (1973)
0,01 - 0,1	Aitkenpartikel		Nucleation mode
0,1 - 1	Große Partikel		Accumulation mode
> 1	Riesenpartikel		Coarse mode

Tabelle 2.1: Grobeinteilung des atmosphärischen Aerosols (Winkler, 2000)

Diese Einteilung stellt sich gerade bei der Betrachtung der Lebensdauer des Aerosols als sehr passend heraus, da die verschiedenen Lebensdauer bestimmenden Prozesse in jeweils einer der Klassen besonders wirksam sind (siehe Kapitel 2.2 Verhalten des Aerosols) (Winkler, 2000).

Die Größenverteilungen der Partikel in den jeweiligen Größenklassen sind nicht konstant. Sie können aber durch die Überlagerung von drei Log-Normal-Verteilungen beschrieben werden. Sie sind somit durch folgende Gleichung analytisch darstellbar:

$$n(\ln dp) = \sum_{i=1}^3 \frac{N_i}{\sqrt{2\pi} \ln \sigma_{gi}} e^{-\frac{1}{2} \frac{(\ln dp - \log dp_{gi})^2}{\ln^2 \sigma_{gi}}} \quad (2.1)$$

Hierbei steht N_i für die Anzahlkonzentration der Partikel, σ_{gi} für die Standardabweichung der Verteilung, dp_{gi} für den mittleren Partikeldurchmesser der Verteilung und dp für den Partikeldurchmesser.

Die Größenverteilung der Partikel im Aerosol bleibt während ihres Aufenthaltes in der Atmosphäre nicht konstant. Die Partikel durchlaufen vielfältige Prozesse, die auf die Größenverteilung aber auch auf die chemische Zusammensetzung und andere Charakteristika einwirken. In den Größenspektren der Aerosole spiegeln sich somit die Produktionsmechanismen und die Umwandlungsprozesse wider. Ändern sich diese Mechanismen/Prozesse so verändert sich auch die Größenverteilung der Partikel im Aerosol.

2.1.3 Zusammensetzung

Um ein Aerosol zu beschreiben, ist es wichtig zu wissen, wie es sich aus den darin enthaltenen chemischen Substanzen zusammensetzt. Einerseits können Partikel nur aus einer Substanz bestehen. Hier spricht man von einer komplett äußeren Mischung. Liegen jedoch Partikel vor, die sich jeweils aus allen vorkommenden chemischen Substanzen zusammensetzen, wobei die Massenanteile der einzelnen Substanzen von den Partikeldurchmessern unabhängig sind, spricht man von komplett innerer Mischung. Diese beiden Mischungsarten stellen Idealisierungen dar, die so in der Natur nicht vorkommen. In der Natur liegen Kombinationen dieser Idealisierungen vor. Je nach dem, welcher Prozess auf das Aerosol einwirkt führt dieser eher zu einer äußeren oder zu einer inneren Mischung. Nukleation und Emission von Primärpartikeln führen zur äußeren Mischung, Alterung aufgrund von Koagulation oder Kondensation eines Aerosols zu einer inneren. In Bild 2.3 sind äußere und innere Mischung dargestellt.

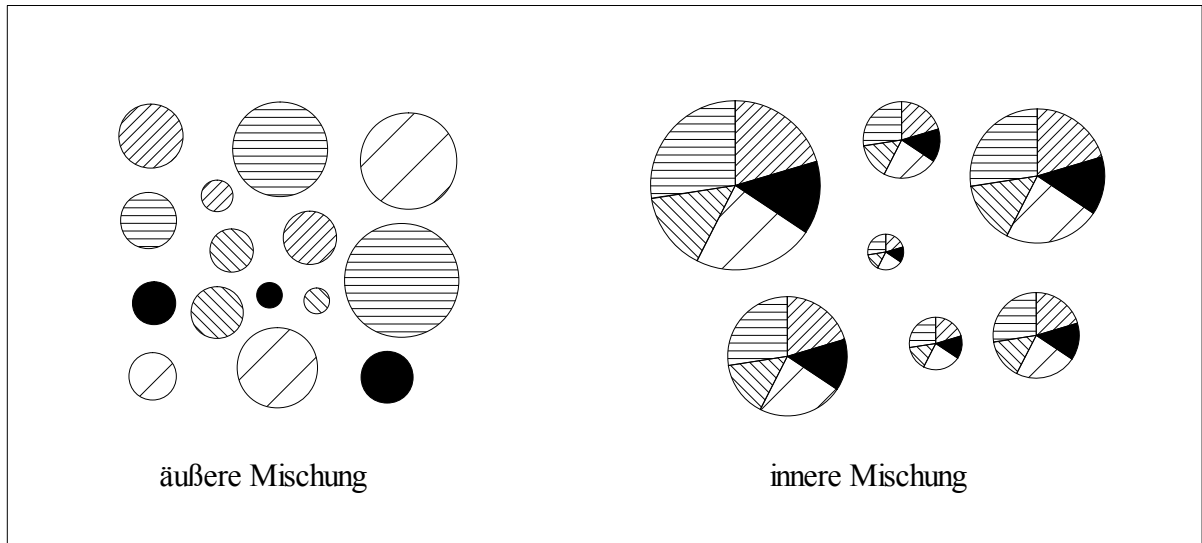


Bild 2.3: Äußere und innere Mischung.

2.2 Verhalten des Aerosols

2.2.1 Bildung

Aerosolpartikel bilden sich auf zwei Arten. Zum einen werden Partikel direkt in die Atmosphäre emittiert (Dispersion). Beispiele dafür sind Verbrennungsprozesse, Aufwirbelung von Bodenmaterial und Zerplatzen von Luftblasen im Meer. Dementsprechend setzt sich dieser Partikeltyp zum Großteil aus Asche, Ruß, organischem Material, Mineralstaub und Seesalz zusammen. Solche Aerosolpartikel werden Primärpartikel genannt.

Zum anderen können Aerosolpartikel auch aus gasförmigen Vorläufersubstanzen entstehen. Durch homogene Nukleation bilden sich sehr kleine Partikel an denen dann wiederum übersättigte Dämpfe kondensieren. Diese Partikel werden als Sekundärpartikel bezeichnet.

Die wahrscheinlich wichtigste Reaktion für die Bildung neuer Teilchen aus der Gasphase ist die Oxidation von Schwefeldioxid zu Schwefelsäure. Ursache ist der sehr niedrige Dampfdruck der Schwefelsäure, vor allem bei Anwesenheit von Wasserdampf oder Ammoniak. Typische Bestandteile der Sekundärpartikel sind Sulfat, Nitrat, Ammonium und Kohlenwasserstoffe (Roedel, 1992).

Partikel, die durch Dispersion in die Atmosphäre gelangen, sind üblicherweise größer als 1 µm. Dagegen besitzen Sekundärpartikel Durchmesser, die kleiner als 1 µm sind.

Die Quellstärke des natürlichen Aerosols wird weltweit auf 2 bis 2,5 Gt/Jahr geschätzt (Roedel, 1992). Etwa 2/3 davon stammen aus direkter Partikelemission und etwa 1/3 entstehen durch Kondensation von Dämpfen aus Gasreaktionen. Die vom Menschen verursachten Emissionen werden auf etwa 0,3 bis 0,4 Gt/Jahr geschätzt (Roedel, 1992). Hier beträgt der Anteil der direkten Partikelemission etwa 1/3 und der Anteil der Kondensation etwa 2/3. Tabelle 2.2 zeigt eine weitergehende Aufschlüsselung dieser Zahlen.

Emissionen von Aerosolpartikeln in Mt/Jahr

Natürliche Quellen:

Emissionen primärer Partikel

Seesalz	1000
Mineralstaub	200-500
Vulkane (ohne Gasemissionen)	10-20
Wald- und Buschfeuer	3-30
Biologisch-organisches Material	80

Emissionen sekundärer Partikel

Sulfat (meist aus $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ und H_2S)	100-200
Nitrat	75-400
Ammonium	250
Partikel aus organischen Dämpfen	75-200
Partikel aus vulkanischen Gasen	15

Anthropogene Quellen:

Emissionen primärer Partikel

Stäube	90-135
--------	--------

Emissionen sekundärer Partikel

Sulfat (meist aus SO_2)	100-200
Nitrat	30-40
Partikel aus Kohlenwasserstoffen und ähnlichem	30

Tabelle 2.2: Abschätzung globaler natürlicher und anthropogener Aerosolquellen (Roedel, 1992)

2.2.2 Umwandlung und Ausscheidung

Aerosolpartikel unterliegen während ihres Aufenthaltes in der Atmosphäre verschiedenen Einflüssen, die sie verändern. Dazu zählt das Wachstum der Partikel durch Kondensationsprozesse. Partikel können aber auch aufgrund von Evaporation von flüchtigen Bestandteilen schrumpfen. Eine Zusammenballung (Koagulation) mehrerer Partikel durch Brownsche Bewegung, führt ebenfalls zu Wachstum, reduziert aber deren Anzahl. Die chemische Zusammensetzung der

Partikel wird durch Oberflächenreaktionen mit umgebenden Substanzen verändert. Bei diesen chemischen Reaktionen kommt es zudem noch zu einem Stoffaustausch zwischen Gas- und Aerosolphase (Ackermann, 1997).

Die Umgebungsfeuchte beeinflusst den Wassergehalt bei wasserlöslichen Partikeln. Sie kann aber auch, so wie die Temperatur, den Phasenzustand des Partikels ändern. Gelangen Aerosolpartikel in Wolken können sie durch nasse Deposition aus der Atmosphäre ausgeschieden werden. Ein weiterer Prozess, der zur Ausscheidung von Partikeln aus der Atmosphäre führt, ist die Sedimentation. Durch Advektion und Diffusion findet ein Transport der Partikel in der Atmosphäre statt (Ackermann, 1997).

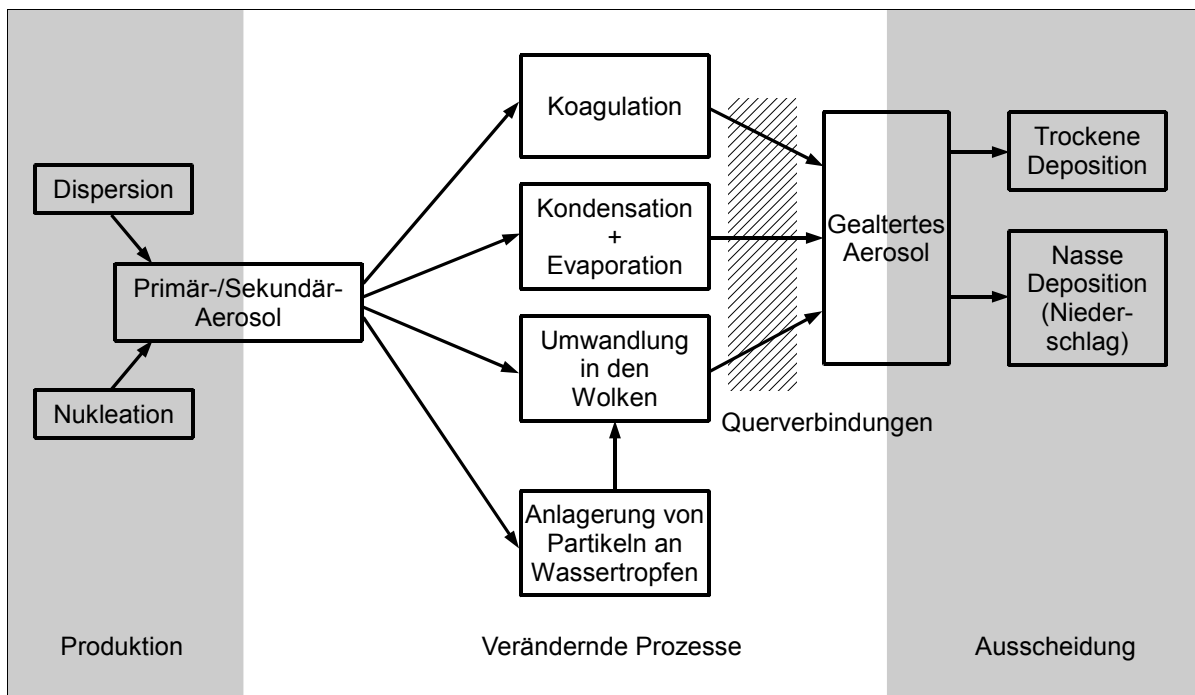


Bild 2.4: Umwandlungs- und Ausscheidungsprozesse in der Troposphäre (nachgezeichnet, Roedel, 1992).

Koagulation als dominanter Prozess für die Umwandlung von Aerosolpartikeln ist in den verschiedenen Größenbereichen unterschiedlich wirksam. So werden große Partikel nur schwach beeinflusst. Bei kleinen Partikeln ist die Koagulation aber stark ausgeprägt.

Die Hauptprozesse die zur Ausscheidung von Partikeln aus der Atmosphäre

führen sind die trockene und die nasse Deposition. Bei sehr großen Teilchen wird die trockene Deposition durch Sedimentation bestimmt. Kleine Partikel ballen sich hingegen durch Brownsche Diffusion zu größeren zusammen. Die Brownsche Bewegung nimmt mit abnehmender Partikelgröße stark zu. Die Verweilzeit von kleinen Partikeln wird daher hauptsächlich von Diffusionsprozessen bestimmt. Das gegenläufige Verhalten zeigt die Sedimentation, deren Einfluss mit zunehmender Partikelgröße deutlich ansteigt. Für Partikel mit Durchmessern von mehr als $10\ \mu\text{m}$ bestimmt die Sedimentation deren Verweilzeit in der Atmosphäre.

Für Partikel im mittleren Größenbereich (zwischen einigen hundertstel Mikrometern und $10\ \mu\text{m}$) ist die nasse Deposition (Ausscheidung durch Regen) der dominierende Prozess, der die Verweilzeit bestimmt. Sie beläuft sich auf etwa 4 bis 6 Tage. Da im mittleren Größenbereich auch die Hauptmasse der Aerosolpartikel liegt ist diese Verweilzeit ein gutes Maß für die Verweilzeit der Aerosolmasse überhaupt (Roedel, 1992).

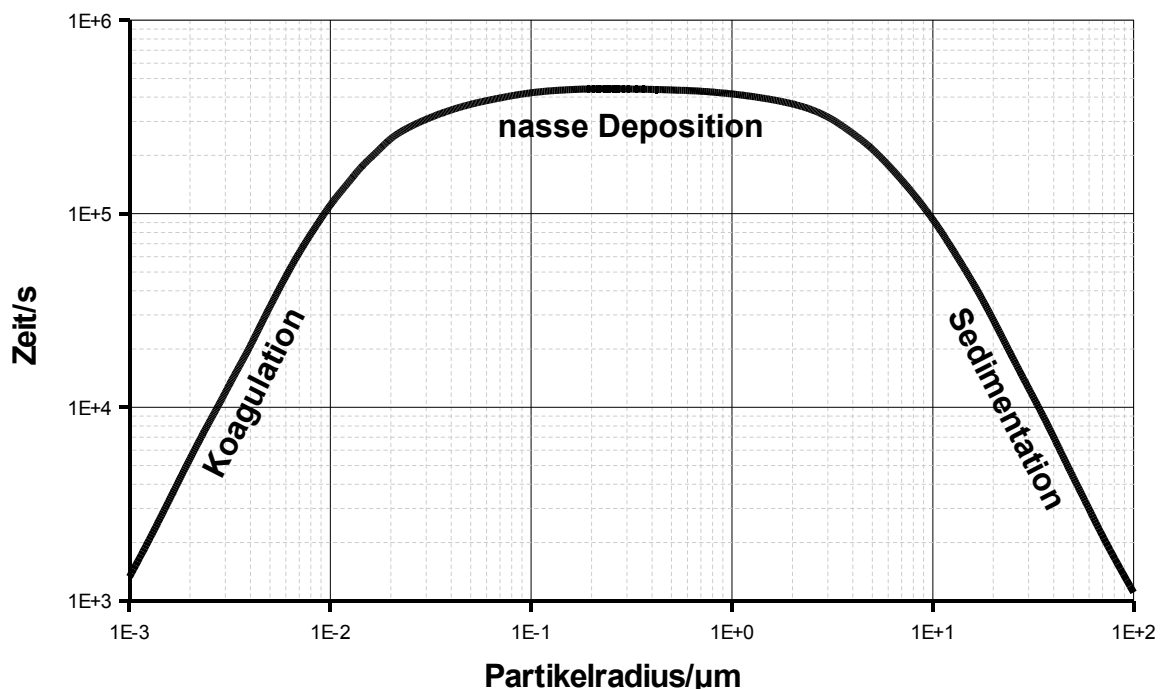


Bild 2.5: Die Verweilzeit von Aerosolpartikeln in der Troposphäre in Abhängigkeit vom Partikelradius (nachgezeichnet, Roedel, 1992).

2.3 Auswirkungen des Aerosols

In diesem Teilkapitel wird kurz auf den Einfluss des Aerosols auf Klima und Luftqualität eingegangen. Damit soll gezeigt werden, dass eine Berücksichtigung dieses Einflusses auch in regionalen Ausbreitungsmodellen sinnvoll, wenn nicht gar notwendig ist.

2.3.1 Einfluss auf die Wolkenbildung

Die Wirkung als Kondensationskeime auf die Wolkenbildung ist der am längsten bekannte Einfluss von Aerosolpartikeln. Übersättigungen reinen Wasserdampfes von mehreren hundert Prozent, welche zur homogenen Nukleation notwendig sind (Tropfenbildung aus reinem Wasserdampf) treten in der Atmosphäre nicht auf. Aus diesem Grund sind Aerosolpartikel zur Wolkenbildung notwendig (Aitken, 1888). Bei Anwesenheit von benetzbaren Aerosolpartikeln ist für die Wolkenbildung schon eine Übersättigung des Wasserdampfes unter 2 % ausreichend (Köhler, 1936). Das Aerosolpartikel stellt als Kondensationskern einen Anfangsradius für den sich bildenden Wolkentropfen zur Verfügung. Durch die dipolaren Eigenschaften der Wassermoleküle werden die Partikel annähernd augenblicklich völlig mit einer Wasserschicht bedeckt. Der Kondensationskern stellt dann eine feuchte Oberfläche mit ausreichend geringer Krümmung für eine weitere, bei niedrigen Übersättigungen stattfindende, Kondensation zur Verfügung (Roedel, 1992). Dieser Vorgang wird als heterogene Kondensation bezeichnet.

Da die Tropfenbildung in Wolken von der Anwesenheit von Partikeln abhängt, wird die Anzahl und Größe der Tropfen von der Aerosolkonzentration mitbestimmt.

2.3.2 Einfluss auf das Klima

Das Aerosol hat auf zwei unterschiedliche Weisen Einfluss auf das Klima, einen direkten und einen indirekten Klimaeffekt (Seinfeld und Pandis, 1997).

Der direkte Einfluss auf das Klima besteht in der Absorption und Reflexion der kurzwelligeren Sonnenstrahlung durch die Aerosolpartikel. Die langwellige

Rückstrahlung von der Erdoberfläche wird ebenfalls zu einem gewissen Teil von den Aerosolpartikeln absorbiert. Dieser Einfluss ist aber weitaus schwächer. Dies bewirkt wiederum, dass der direkte Klimaeffekt zu einer Erhöhung der planetaren Albedo und zu einem negativen Strahlungsantrieb führt (Charlson et al., 1992). Angaben über die Stärke dieses Effekts im globalen Mittel schwanken von $-0,3 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$ (Kiehl und Briegleb, 1993) bis zu $-1,3 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$ (Charlson et al., 1992). In Simulationen neueren Datums (Liao, et al., 2004) beträgt der Einfluss auf den Strahlungshaushalt an der Obergrenze der Atmosphäre $-0,72 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$ und am Boden $-4,04 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$. Die große Differenz wird durch die Rußpartikel im Aerosol verursacht. Die Auswirkung des Rußes auf den Strahlungshaushalt an der Obergrenze der Atmosphäre ist mit $0,58 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$ positiv, am Boden aber mit $-0,97 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$ stark negativ (Liao, et al., 2004). Staubpartikel haben einen ähnlichen Einfluss auf den Strahlungshaushalt (Obergrenze: $0,1 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$; Boden: $-5,3 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$).

Als indirekten Klimaeffekt wird der Einfluss der Aerosolpartikel auf die Anzahl der Wolkentröpfchen, die Lebensdauer der Wolken und die Wolkenalbedo bezeichnet. Auch diese Wirkung der Aerosolpartikel resultiert in einer Veränderung des atmosphärischen Strahlungshaushaltes.

Die Wirkungskette kann so beschrieben werden, dass bei konstantem Wassergehalt durch die Anwesenheit von Aerosolpartikeln die Anzahl der Tröpfchen zunimmt und die Tröpfchengröße abnimmt. Dies führt zu einer Erhöhung der optischen Dicke der Wolke und beeinflusst somit die Wolkenalbedo (Fouquart und Isaka, 1992). Auch die Lebensdauer einer Wolke wird dadurch verlängert, was wiederum zu einer Veränderung der Wolkenbedeckung führt, die ebenfalls Einfluss auf den Strahlungshaushalt der Atmosphäre hat.

2.3.3 Einfluss auf die Sichtweite

Je nach Beschaffenheit der Atmosphäre kann sich die Sichtweite im Fall von Reinluft über mehrere hundert Kilometer erstrecken oder im Fall von stark verschmutzter städtischer Luft nur einige Kilometer betragen. Diese

Reduzierung der Sichtweite ist auf die Streuung und Absorption des Lichts durch die Aerosolpartikel zurückzuführen. Bei einer Streuung nur durch Luftmoleküle läge die Sichtweite bei ca. 390 km (Riemer, 2002). Als einziger gasförmiger Spurenstoff liefert NO₂ durch Absorption einen merklichen Beitrag zur Reduktion der Sichtweite (Ackermann, 1997).

Die Stärke der durch Partikel verursachten Streu- und Absorptionseinflüsse ist sehr von deren Größen abhängig. Für Partikel im Größenbereich von 10⁻² µm bis 10 µm ist die Mie-Streuung der maßgebende Streuprozess. Der Hauptanteil der Streuung an Partikeln findet im Größenbereich von 0,1 µm bis 1 µm statt (Finlayson-Pitts und Pitts, 1986). Weitere Parameter sind die chemische Zusammensetzung und die hygroskopischen Eigenschaften der Partikel, die in Abhängigkeit von der Luftfeuchte die Größe aber auch die chemische Zusammensetzung der Partikel beeinflussen.

Die Absorption der solaren Strahlung wird hauptsächlich von den Anteilen elementaren Kohlenstoffs im Aerosol verursacht. Dieser gelangt hauptsächlich durch Verbrennungsprozesse, wie Holzfeuerung und den Betrieb von Dieselmotoren in die Atmosphäre (Ackermann, 1997).

2.3.4 Einfluss auf den Ferntransport von Luftschadstoffen

Der Aufenthalt von Luftschadstoffen in der Atmosphäre kann sich verlängern, wenn sich Luftschadstoffe aus der Gasphase zu Partikeln zusammenballen oder sich an bestehende Partikel anlagern. Der Grund dafür ist, dass die Geschwindigkeit der trockenen Deposition für Partikel niedriger ist als für die Vorläufersubstanzen in der Gasphase (Ackermann, 1997). Partikel im mittleren Größenbereich werden nur durch Niederschlag (nasse Deposition) effizient ausgeschieden (siehe Bild 2.5). Durch die längere Aufenthaltszeit in der Atmosphäre besteht aber die Möglichkeit, dass sich die zurückgelegten Entfernungen dieser Substanzen vergrößern können. Damit verändert sich die geographische Verteilung der Deposition. Es ist somit möglich, dass Gebiete die ansonsten nur geringe Ablagerungen von bestimmten Substanzen aufweisen dann eine zunehmende Belastung haben.

2.3.5 Einfluss auf Photolyseraten

Die Beeinflussung des atmosphärischen Strahlungshaushalts durch das Aerosol wirkt sich auf die Photolyseraten gasförmiger Luftbeimengungen aus (Ruggaber et al., 1994) . Das bedeutet Aerosolpartikel haben eine Auswirkung auf die Bilanz der gasförmigen Spurenstoffe. Kleine durch Nukleationsprozesse gebildete Partikel sind besonders optisch wirksam. Dies führt dazu, dass aerosoldynamische Prozesse einen potentiellen Einfluss auf die Geschwindigkeit photolytischer Reaktionen haben.

2.3.6 Einfluss auf die Gesundheit

Durch Atmung können Aerosolpartikel in den Körper gelangen und Krankheiten auslösen. Entscheidende Faktoren für die Wirkung auf die Gesundheit sind die Größe, die Anzahl und die chemische Zusammensetzung der Aerosolpartikel (Mohanraj und Azeez, 2004). Wie weltweite Studien zeigen, besteht das Risiko einer Erkrankung durch erhöhte Aerosolkonzentrationen, vor allem in städtischen Gebieten.

Eingeatmete Partikel mit einem Durchmesser von ungefähr 4 µm bis 10 µm lagern sich im Bereich des Rachens und der Luftröhre ab, Partikel im Bereich von ungefähr 1 µm bis 4 µm in den Bronchien. Sind die Partikel kleiner als 1 µm können sie bis in die Aveolen gelangen (Mohanraj und Azeez, 2004).

Starke Belastungen durch Aerosol haben hauptsächlich Auswirkungen auf 3 Organe, die Atemwege, die Blutgefäße und die Atemmembranen (Wände der Bronchien und Bronchialen). Die häufigste durch Aerosol hervorgerufene Lungenerkrankung ist das Asthma. Welche Auswirkungen die chemische Zusammensetzung auf den Gesundheitszustand hat, ist zur Zeit noch nicht befriedigend geklärt.

3 Grundlagen zur Behandlung des Aerosols

Für die Behandlung der Aerosoldynamik wird in dieser Arbeit das Chemie- und Transportmodell MARS verwendet. MARS wurde am Institut für Technische Thermodynamik Fakultät für Maschinenbau, Universität Karlsruhe (TH) in Zusammenarbeit mit dem Laboratory of Heat Transfer and Environmental Engineering, Aristotle University Thessaloniki (Greece) entwickelt. Erweiterungen zur Behandlung des Aerosols wurden von A. Arvanitis an der Aristoteles Universität im Rahmen seiner Doktorarbeit „Mathematical description of aerosol dispersion in urban areas“ entwickelt und in MARS integriert. Dieses Kapitel geht auf die Theorien, die der Arbeit von A. Arvanitis zugrunde liegen ein.

3.1 Aerosoldynamikgleichung

Die Aerosoldynamikgleichung (engl. GDE: general dynamic equation) ist eine Differentialgleichung, die die zeitliche Entwicklung einer Größenverteilung von Aerosolpartikeln beschreibt. Sie berücksichtigt die im Kapitel 2 beschriebenen Effekte auf die Größenverteilung. Die GDE stellt somit eine Überlagerung der auf das Aerosol wirkenden Einflüsse dar. Die kontinuierliche Form der GDE stellt sich wie folgt dar (Friedlander, 1977):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n(V_p)}{\partial t} = & \underbrace{-\nabla \cdot \vec{v} n(V_p)}_{\text{Advektion}} \\
& - \underbrace{\nabla \vec{c}(V_p) n(V_p)}_{\text{äußere Kräfte}} \\
& + \underbrace{\nabla D(V_p) \nabla n(V_p)}_{\text{Diffusion}} \\
& + \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^{V_p} \beta(V_p - \tilde{V}_p, \tilde{V}_p) n(V_p - \tilde{V}_p) n(\tilde{V}_p) d\tilde{V}_p}_{\text{Gewinnterm Koagulation}} \\
& - \underbrace{\int_0^{V_p} \beta(V_p, \tilde{V}_p) n(V_p) n(\tilde{V}_p) d\tilde{V}_p}_{\text{Verlustterm Koagulation}} \\
& + \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} n(V_p)}_{\text{Partikelwachstum}} \\
& + \underbrace{\dot{n}_s(V_p)}_{\text{Quelle}}
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Bei $n(V_p)$ handelt es sich um eine kontinuierliche Verteilungsfunktion und $n(V_p)dV_p$ gibt die Anzahl der Partikel bezogen auf ein Luftvolumen mit einem Partikelvolumen zwischen V_p und V_p+dV_p an.

Wie die GDE zu lösen ist, hängt davon ab, welche Form für die Verteilungsfunktion $n(V_p)$ angenommen wird.

3.2 Form der Verteilungsfunktion

Die mathematische Darstellung der Größenverteilung $n(V_p)$ kann unter bestimmten Voraussetzungen frei gewählt werden. Das bedeutet, dass jede Funktion, die die mathematischen Voraussetzungen erfüllt und die realen Größenverteilungen der Aerosole gut wiedergibt, zur Lösung der GDE herangezogen werden kann. Die mathematischen Voraussetzungen für die Verteilungsfunktion sind zum einen, dass sie nicht-negativ, integrierbar und kontinuierlich ist und zum anderen muss die Dynamik der Größenverteilung mit analytischen Methoden beschreibbar sein (Wilck, 1999).

Ein einfacher Ansatz zur mathematischen Nachbildung einer Größenverteilung ist ihre Aufteilung in mehrere Intervalle für die Partikelgröße. Innerhalb dieser Intervalle wird eine konstante Verteilung über die Partikelgröße angenommen. Diese Methode wird als sektionale Behandlung bezeichnet (Bunz und Sauter, 1980, Gelbard et al., 1980). Der in der Literatur angegebene Bereich für die Anzahl verwendeter Sektionen (Intervalle) bewegt sich zwischen 2 (Pandis et al., 1994) und mehreren hundert.

Einen ähnlichen Ansatz verfolgt die "Continuous" oder "Spline" Technik. Auch hier wird die Verteilungsfunktion in Sektionen unterteilt. Im Gegensatz zur sektionalen Methode wird nun aber die Partikelgröße in einer Sektion nicht mehr als konstant angenommen, sondern durch eine sich an die Kontur der Größenverteilung anschmiegende Funktion (im allgemeinen durch kubische Spline-Funktionen) beschrieben (Tsang und Hippe, 1988). Zusätzlich wird bei dieser Methode noch darauf geachtet, dass die Übergänge von einer Sektion zur anderen fließend (stetig) sind, so dass auch an diesen Stellen die Kontur der wirklichen Größenverteilung gut wiedergegeben wird. Diese Technik erreicht eine sehr hohe Genauigkeit in der mathematischen Beschreibung der Größenverteilung aber auf Kosten einer sehr hohen Rechenleistung (Wilck, 1999).

Eine weitere mögliche mathematische Beschreibung der Größenverteilung liegt in der modalen Behandlung der Aerosoldynamik.

Die modale Behandlung eines Aerosols basiert auf der Annahme, dass die gesamte Größenverteilung des Aerosols durch sich überlappende Verteilungsfunktionen darstellbar ist. Die Anzahl und Art der Verteilungsfunktionen sind zu einem gewissen Grad frei wählbar. Das Aerosol setzt sich aus mehreren Populationen (Moden) zusammen (Whitby et al., 1991). Mit den Verteilungsfunktionen werden diese Moden mathematisch nachgebildet.

Die einfachste Variante einer Verteilungsfunktion, die in der modalen Behandlung des Aerosols verwendet werden kann, ist die monodisperse Verteilung. In ihr haben alle Partikel innerhalb eines Modes die gleiche Größe. Monodisperse Moden werden durch den Partikeldurchmesser und durch die Partikelzahl im Mode definiert (Wilck, 1999).

Für eine genauere Beschreibung der Wirklichkeit können anstatt den monodispersen Verteilungsfunktionen analytische Funktionen, die sich an die Form der Größenverteilung anpassen lassen, verwendet werden. Die Definition solcher Funktionen verlangt nach mindestens 3 Parametern. Dabei handelt es sich um die Zahl aller Partikel, die mittlere Größe der Partikel und um die Spreizung der Verteilung. Es gibt eine größere Zahl an Funktionen, die zur Beschreibung herangezogen werden können (Deepak und Box, 1982). Die wichtigsten Kriterien zur Auswahl einer Funktion sind ihre analytische Einfachheit und ihre Fähigkeit zur Wiedergabe der in Messungen und Experimenten ermittelten typischen "Moden" (Wilck, 1999). Die am häufigsten verwendete Verteilungsfunktion zur Beschreibung von Aerosolmoden ist die Log-Normal-Verteilung (Gleichung 3.2).

$$n(\ln d_p) = \frac{N}{\sqrt{2\pi \ln \sigma_g}} e^{-\frac{1}{2} \frac{(\ln d_p - \log d_{p_g})^2}{\ln^2 \sigma_g}} \quad (3.2)$$

In Gleichung 3.2 beschreibt N die Anzahlkonzentration der Aerosolpartikel, d_p

den Partikeldurchmesser sowie d_{pg} den Mediandurchmesser und σ_g die Standardabweichung der Verteilungsfunktion.

Die mathematischen Eigenschaften der Log-Normal-Verteilung sind für die Modellierung und für die Anpassung an gemessenen Verteilungen sehr gut geeignet. Typische Verteilungen von Aerosolen liegen sehr oft nahe an Log-Normalen. Atmosphärische Aerosolverteilungen können gut durch 3 bis 5 Log-Normal-Moden abgebildet werden (Whitby, 1978).

Das in MARS verwendete Modell zur Behandlung des Aerosols basiert auf dem Ansatz der modalen Methode unter Zuhilfenahme von Log-Normal-Verteilungen für die Beschreibung der Größenverteilung der Aerosolpartikel.

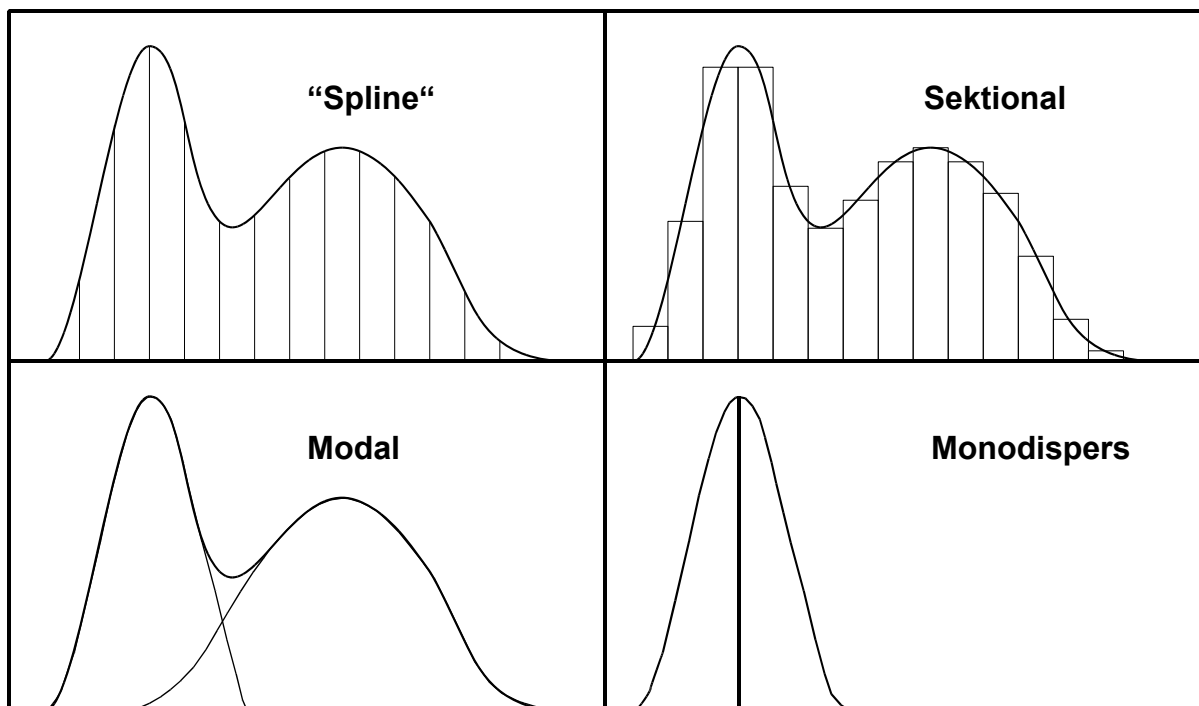


Bild 3.1: Näherungsverfahren zur Darstellung der Größenverteilung (Whitby et al, 1991)

3.3 Anwendung der Aerosoldynamikgleichung

Soll die Aerosoldynamikgleichung (Gleichung 3.1) für mehr als einen Term gelöst werden, so ist es notwendig die Parameter der Verteilungsfunktion durch die gleiche Anzahl integraler Momente zu ersetzen. Die GDE kann dann mit Hilfe dieser integralen Momente gelöst werden (Whitby et al., 1991).

Kommt für die Lösung der GDE eine Log-Normal-Verteilung zur Anwendung, dann ergibt sich für die Momente nach Integration folgende Gleichung:

$$M_k = N d_{pg}^k e^{\left(\frac{k^2}{2} \ln^2 \sigma_g\right)} \quad (3.3)$$

k ist eine natürliche Zahl und gibt die Ordnung des Moments an. Die anderen Parameter entsprechen denen von Gleichung 3.2.

Den Momenten M_0 , M_2 und M_3 können physikalische Größen zugeordnet werden. So entspricht M_0 der Gesamtzahl der Partikel im Mode, $\pi \cdot M_2$ der Gesamtoberfläche und $\pi/6 \cdot M_3$ dem Gesamtvolumen.

Um einen Mode mathematisch beschreiben zu können sind die Berechnungen von 3 Momenten erforderlich, da die zugrundeliegende Verteilungsfunktion von 3 unabhängigen Variablen (N , d_{pg} und σ_g) beschrieben wird. Generell kann jedes Moment zur Lösung der GDE herangezogen werden. Aus numerischen Gesichtspunkten gibt es aber Momente, die zu bevorzugen sind. So ist z.B. für die Berechnung der Koagulation das 6. Moment notwendig. Deshalb werden in MARS die Momente M_0 , M_2 und M_6 zur Berechnung verwendet. Bei drei bekannten Momenten kann jedes andere Moment berechnet werden.

Um die Erhaltungsgleichungen für die Momente der verschiedenen Moden zu bestimmen, sind einige Voraussetzungen einzuhalten:

- Die Koagulationsterme sind auszumultiplizieren und für jeden Mode in Gewinn- und Verlustterm zu unterteilen.
- Für die Aerosolprozesse werden nur gemittelte Größen betrachtet.

- Der Diffusionsterm aus Gleichung 3.1 wird gegenüber der turbulenten Diffusion vernachlässigt.
- Das Strömungsfeld wird als divergenzfrei angenommen.

Dadurch ergeben sich folgende Gleichungen für die Momente der jeweiligen Moden:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} M_{k,i} = & -\bar{u} \frac{\partial M_{k,i}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial M_{k,i}}{\partial y} - \bar{w} \frac{\partial M_{k,i}}{\partial z} \\
& + \frac{\partial}{\partial x} K_{hx} \frac{\partial M_{k,i}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_{hy} \frac{\partial M_{k,i}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_{hz} \frac{\partial M_{k,i}}{\partial z} \\
& - \hat{v}_{sed_{k,i}} \frac{\partial M_{k,i}}{\partial z} - Koag_{k,ii} - Koag_{k,ij} + Kond_{k,i} + Nuk_{k,i} + E
\end{aligned} \tag{3.4}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} M_{k,j} = & -\bar{u} \frac{\partial M_{k,j}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial M_{k,j}}{\partial y} - \bar{w} \frac{\partial M_{k,j}}{\partial z} \\
& + \frac{\partial}{\partial x} K_{hx} \frac{\partial M_{k,j}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_{hy} \frac{\partial M_{k,j}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_{hz} \frac{\partial M_{k,j}}{\partial z} \\
& - \hat{v}_{sed_{k,j}} \frac{\partial M_{k,j}}{\partial z} + Koag_{k,jj} + Koag_{k,ji} + Kond_{k,j} + E_{k,j}
\end{aligned} \tag{3.5}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} M_{k,c} = & -\bar{u} \frac{\partial M_{k,c}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial M_{k,c}}{\partial y} - \bar{w} \frac{\partial M_{k,c}}{\partial z} \\
& + \frac{\partial}{\partial x} K_{hx} \frac{\partial M_{k,c}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_{hy} \frac{\partial M_{k,c}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_{hz} \frac{\partial M_{k,c}}{\partial z} \\
& - \hat{v}_{sed_{k,c}} \frac{\partial M_{k,c}}{\partial z} + E_{k,c}
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Die Bedeutung der in den Gleichungen 3.4 bis 3.6 aufgeführten Größen sind in der folgenden Übersicht aufgeführt:

$M_{k,i}, M_{k,j}, M_{k,c}$ die verschiedenen Momente des Nukleationsmodes, Akkumulations-modes und Grobpartikelmodes

$\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ die Komponenten der mittleren Windgeschwindigkeit in $m \cdot s^{-1}$

K_{hx}, K_{hy}, K_{hz} die Diffusionskoeffizienten für die 3 Raumrichtungen in $m^2 \cdot s^{-1}$

$\hat{v}_{sed_{k,i}}$, $\hat{v}_{sed_{k,j}}$, $\hat{v}_{sed_{k,c}}$	die Sedimentationsgeschwindigkeiten für die verschiedenen Momente des Nukleationsmodes, Akkumulationsmodes, Grobpartikelmodes in $m \cdot s^{-1}$
$Koag_{k,ii}$, $Koag_{k,ij}$	intramodale und intermodale Koagulationsrate für die verschiedenen Momente des Nukleationsmodes
$Koag_{k,jj}$, $Koag_{k,ji}$	intramodale und intermodale Koagulationsrate für die verschiedenen Momente des Akkumulationsmodes
$Kond_{k,i}$	Kondensationsrate des Nukleationsmodes für die Momente $k > 0$
$Kond_{k,j}$	Kondensationsrate des Akkumulationsmodes für die Momente $k > 0$
$Nuk_{k,i}$	Nukleationsrate der verschiedenen Momente des Nukleationsmodes
$E_{k,i}$, $E_{k,j}$, $E_{k,c}$	Emmisionsraten der verschiedenen Momente des Nukleationsmodes, Akkumulationsmodes, Grobpartikelmodes

Die mittleren Windgeschwindigkeiten und die Diffusionskoeffizienten für die 3 Raumrichtungen werden dem Chemie- und Transportmodell MARS von dem Ausbreitungsmodell MEMO zur Verfügung gestellt. Es wird angenommen, dass die turbulente Diffusion der Aerosolpartikel durch dieselben Diffusionskoeffizienten beschrieben werden kann, welche auch für die anderen Transportgrößen verwendet werden.

3.3.1 Nukleation

Der bedeutendste Prozess zur Bildung sekundärer Aerosolpartikel ist die homogene Nukleation im Schwefelsäure/Wasser-System. Die Behandlung der homogenen Nukleation in MARS folgt einer erweiterten klassischen Nukleationstheorie mit überarbeiteter Parametrisierung (Vehkamäki et al., 2002). Die folgende Beschreibung bezieht sich auf diese Veröffentlichung.

Erst bei überschreiten einer kritischen Größe führt die Bildung von Clustern durch Nukleation zu stabilen Teilchen. Die Clusterbildung kann entweder durch

eine Zusammenballung der gasförmigen Schwefelsäuremoleküle untereinander oder mit gasförmigen Wassermolekülen erfolgen. Dabei bilden sich Cluster heraus, die aus ca. 100 Molekülen und einem Radius von ca. 1nm bestehen (Möller, 2000). Ausschlaggebend für die Bildung ist die Änderung der freien Enthalpie des Systems. Kann ein entstehendes Partikel diese Größe nicht erreichen oder ein bisher stabiles Partikel unterschreitet aufgrund von Evaporation die kritische Größe zerfällt das Partikel wieder in die gasförmigen Vorläufersubstanzen. Die folgende Gleichung zeigt für Wasser und eine Säure (hier Schwefelsäure) im Nukleationsbereich den Zusammenhang von Volumen und Anzahl freier (nicht in der Lösung gebundener) Moleküle.

$$\bar{V}_w(x^*) \ln \frac{n_a^{frei}}{n_{a,s}^{frei}(x^*)} = \bar{V}_a(x^*) \ln \frac{n_w^{frei}}{n_{w,s}^{frei}(x^*)} \quad (3.7)$$

Die Größen \bar{V}_w , \bar{V}_a beschreiben die molbezogenen, von der Zusammensetzung des Clusters abhängigen Teilvolumina von Wasser und Säure, n_w^{frei} , n_a^{frei} stehen für die Anzahlkonzentrationen der frei vorhandenen Moleküle von Wasser und Säure im Nukleationsbereich, $n_{w,s}^{frei}(x^*)$, $n_{a,s}^{frei}(x^*)$ sind die Anzahlkonzentrationen von Wasser und Säure im gesättigten Dampf an der Oberfläche der Lösung mit dem molaren Schwefelsäureanteil x. Der Stern indiziert das kritische Cluster.

Bei der Bildung eines Clusters ist die freie Bildungsenthalpie des Systems zunächst positiv. Dies liegt daran, dass bei der “geordneten Clusterbildung“ aus der Gasphase die Abnahme der Entropie (multipliziert mit der Temperatur) größer ist als die Abnahme der Enthalpie. Wird jedoch eine gewisse Größe überschritten, so wird die freie Bildungsenthalpie negativ und die Partikel beginnen spontan zu wachsen. Noch sind diese Partikel (im Folgenden Hydrate genannt) nicht stabil, es sei denn sie befinden sich in einer übersättigten Umgebung.

Die Anzahl der Hydrate $n(1,i)$ in einer Umgebung mit Wasserdampf und gasförmiger Schwefelsäure kann durch die Gleichung nach Alberty (1983) berechnet werden.

$$n(1,i) = K_1 \cdot K_2 \dots K_i \left(\frac{n_w^{frei}}{n_0} \right)^i n_a^{frei} \quad (3.8)$$

In Gleichung 3.8 steht K_i für die Gleichgewichtskonstanten der schrittweisen Addition von Wassermolekülen zu einem Säuremolekül. Die Temperaturabhängigkeit der Konstanten ist bei Noppel et al. (2002) beschrieben. Die Gleichgewichtskonstanten werden bei der Referenzkonzentration des Dampfes $n_0 = p_0/(kT)$ berechnet. Der Referenzdruck p_0 wird dabei auf 1 atm gesetzt, T steht für die Temperatur und k ist die Boltzmannkonstante. Die folgende Gleichung gibt das Verhältnis der Gesamtkonzentration der Säure n_a^{total} (Säuremoleküle in Hydraten gebunden + freie Säuremoleküle) zur Konzentration der freien Säuremoleküle n_a^{frei} in der Gasphase an (Jaeger-Voirol et al. 1987; Noppel, 1998).

$$\frac{n_a^{total}}{n_a^{frei}} = 1 + K_1 \frac{n_w^{frei}}{n_0} + \dots + K_1 \cdot K_2 \dots K_i \left(\frac{n_w^{frei}}{n_0} \right)^i + \dots + K_1 \cdot K_2 \dots K_N \left(\frac{n_w^{frei}}{n_0} \right)^N \quad (3.9)$$

N steht für die Anzahl der Wassermoleküle im größten Hydratverbund, der in die Betrachtung miteinbezogen wird. Zudem wird angenommen, dass die Häufigkeit von Hydraten mit mehr als einem Säuremolekül vernachlässigbar ist und, dass die Wasserdampfkonzentration durch die Bildung von Hydraten nicht merklich verändert wird ($n_v^{frei} = n_w^{total}$).

Die Kelvin-Gleichung gibt den Radius eines kritischen Clusters an:

$$r^* = \frac{2\sigma(x^*)\bar{V}_i(x^*)}{kT \ln(n_i^{frei}/n_{i,s}^{frei}(x^*))} \quad (3.10)$$

Hierbei bedeutet σ die Oberflächenspannung der Lösung. Durch Gleichung 3.7 ist es freigestellt, ob für die Komponente i Wasser oder Schwefelsäure verwendet wird.

Die Arbeit die zur Bildung eines Partikels mit kritischer Größe benötigt wird, ist

$$W^* = \frac{4}{3} \pi r^{*2} \sigma(x^*) \quad (3.11)$$

und der allgemeine Ausdruck für die Nukleationsrate J ist (Trinkhaus, 1983;

Arstila et al., 1999)

$$J = Z \cdot n(1,2) \cdot e^{-\left[\frac{(W^* - W(1,2))}{kT}\right]} \quad (3.12)$$

Die Größen $n(1,2)$ und $W(1,2)$ stehen für die Anzahlkonzentration und die Bildungsenergie von Schwefelsäure-Dihydrate. Bei Z handelt es sich um den kinetischen Faktor. Das Produkt der beiden letzten Terme entspricht der Gleichgewichtskonzentration von kritischen Nukleationskernen (Noppel et al., 2002). Als Referenzgröße wurden Dihydrate (1 Schwefelsäuremolekül an 2 Wassermoleküle gebunden) verwendet. Es kann für die Referenzgröße aber jede andere Clustergröße herangezogen werden von der die Bildungsenergie bekannt ist.

Um nun die Zusammensetzung und den Radius von Clustern mit kritischer Größe und folglich auch die Nukleationsrate bestimmen zu können, müssen die Oberflächenspannung, die Dichte der Lösung und die Sättigungsdrücke für Schwefelsäure und Wasser bekannt sein. Auf eine Darstellung der Berechnung dieser Größen wird hier verzichtet. Eine genaue Beschreibung ist bei Vehkamäki et al. (2002) zu finden.

3.3.2 Koagulation

Das in MARS verwendete Koagulationsmodell folgt der von Whitby (1990) beschriebenen Methode. Um die Komplexität dieses Prozesses auf ein handhabbares Maß zu reduzieren, wurde angenommen, dass Koagulation nur durch Brownsche Bewegung stattfindet und, dass die neue Größenverteilung der Aerosolpartikel ebenfalls einer Log-Normal-Verteilung entspricht. Durch folgende Gleichung wird die zeitliche Änderung des Momentes M_k durch Koagulation beschrieben:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} M_k \right]_{Koag} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty (d_{P1}^3 + d_{P2}^3)^{\frac{k}{3}} \beta(d_{P1}, d_{P2}) [n_i(d_{P1}) + n_j(d_{P1})] [u_i(d_{P2}) + n_j(d_{P2})] d d_{P1} d d_{P2} - \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty (d_{P1}^k + d_{P2}^k) \beta(d_{P1}, d_{P2}) [n_i(d_{P1}) + n_j(d_{P1})] [u_i(d_{P2}) + n_j(d_{P2})] d d_{P1} d d_{P2} \quad (3.13)$$

Die Indizes i und j geben den Mode an, β steht für den Koagulationskoeffizienten, der vom Größenregime abhängig ist. Das bei einer bestimmten Partikelgröße vorliegende Größenregime kann mit Hilfe der Knudsenzahl (das Verhältnis der mittleren freien Weglänge des umgebenden Gases λ_{Luft} und dem Partikeldurchmesser d_p) ermittelt werden.

$$Kn = \frac{2 \cdot \lambda_{Luft}}{d_p} \quad (3.14)$$

Kn	Größenregime
> 10	freimolekulares Regime
1 - 10	Übergangsregime
0,1 - 1	nahes Kontinuumsregime
< 0,1	Kontinuumsregime

Tabelle 3.1: Zuordnung von Knudsenzahlen zu Größenregimen (Riemer, 2002)

Das in MARS verwendete Koagulationsmodell berechnet β für das freimolekulare Regime (β^{fm}) und für das Kontinuumsregime (β^{kn}) (Arvanitis et al., 2002).

$$\beta^{fm} = \left[\frac{3 k_B}{\rho_p} \right]^{0,5} \left[d_{P1}^{0,5} + 2 \frac{d_{P2}}{d_{P1}^{0,5}} + \frac{d_{P2}^2}{d_{P1}^{1,5}} + \frac{d_{P1}^2}{d_{P2}^{1,5}} + 2 \frac{d_{P1}}{d_{P2}^{0,5}} + d_{P2}^{0,5} \right] \quad (3.15)$$

$$\beta^{kn} = 2 \pi (D_{P1} + D_{P2}) (d_{P1} + d_{P2}) \quad (3.16)$$

Hierbei bedeuten k_B die Boltzmannkonstante, ρ_p die Partikeldichte und D_{Pi} die Diffusionskoeffizienten der Partikel.

Wenn für die Beschreibung einer Größenverteilung mehr als ein Mode

verwendet wird, so ergibt sich zwangsläufig, dass Partikel nicht nur eines Modes koagulieren sondern auch unterschiedlicher Moden. Nach einem Vorschlag von Whitby (1991) wird dies dadurch berücksichtigt, dass bei einer Koagulation von Partikeln innerhalb eines Modes das resultierende Partikel in diesem verbleibt und, dass bei einer Koagulation von Partikeln aus zwei verschiedenen Moden das resultierende Partikel dem Mode zugeordnet wird, aus dem das größere Partikel stammte.

Wird die Gleichung 3.13 wie beschrieben aufgeteilt ergibt sich für den Nukleationsmode:

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\partial}{\partial t} M_{ki} \right]_{\text{Koag}} &= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (d_{P1}^3 + d_{P2}^3)^{\frac{k}{3}} \beta(d_{P1}, d_{P2}) n_i(d_{P1}) n_i(d_{P2}) \, d d_{P1} \, d d_{P2} \\
&\quad - \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} d_{P1}^k \beta(d_{P1}, d_{P2}) n_i(d_{P1}) n_i(d_{P2}) \, d d_{P1} \, d d_{P2} \\
&\quad - \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} d_{P2}^k \beta(d_{P1}, d_{P2}) n_i(d_{P1}) n_j(d_{P2}) \, d d_{P1} \, d d_{P2}
\end{aligned} \tag{3.17}$$

und für den Akkumulationsmode:

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\partial}{\partial t} M_{kj} \right]_{\text{Koag}} &= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (d_{P1}^3 + d_{P2}^3)^{\frac{k}{3}} \beta(d_{P1}, d_{P2}) n_j(d_{P1}) n_j(d_{P2}) \, d d_{P1} \, d d_{P2} \\
&\quad - \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} d_{P1}^k \beta(d_{P1}, d_{P2}) n_j(d_{P1}) n_j(d_{P2}) \, d d_{P1} \, d d_{P2} \\
&\quad + \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (d_{P1}^3 + d_{P2}^3)^{\frac{k}{3}} \beta(d_{P1}, d_{P2}) n_i(d_{P1}) n_j(d_{P2}) \, d d_{P1} \, d d_{P2} \\
&\quad - \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} d_{P2}^k \beta(d_{P1}, d_{P2}) n_i(d_{P1}) n_j(d_{P2}) \, d d_{P1} \, d d_{P2}
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Eine genaue Beschreibung der Umsetzung der Koagulationsbehandlung in MARS findet sich bei Arvanitis et al. (2002).

3.3.3 Kondensation

Bei Partikelwachstum durch Kondensation wird Masse aus übersättigter Gasphase an ein bestehendes Partikel angelagert.

Für kugelförmige Partikel wird die zeitliche Änderung des Momentes M_k durch Kondensation wie folgt beschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial t}[M_k]_{Kond} = \frac{2k}{\pi} \psi_T \int_0^{\infty} d_P^{k-3} \psi(d_P) n(d_P) d d_P \quad (3.19)$$

Dabei steht ψ_T für den nicht größenabhängigen Anteil und $\psi(dp)$ für den größenabhängigen Anteil der Wachstumsrate ψ_P . Die Gleichung 3.19 zeigt auch, dass sie auf M_0 , also auf die Anzahlkonzentration, keinen Einfluss hat.

In MARS wird für jeden Mode das Partikelwachstum separat für das freimolekulare Regime und das Kontinuumsregime unter Berücksichtigung des Kelvineffekts berechnet (Arvanitis et al., 2002).

Im freimolekularen Regime wird das Partikelwachstum durch Einschläge von kondensierbaren Molekülen auf die Partikeloberfläche hervorgerufen. Die Änderungsrate des Momentes M_k für dieses Regime wird durch folgende Gleichung beschrieben

$$\frac{\partial}{\partial t}[M_k]_{Kond} = \frac{2k}{\pi} \psi_{Tfm} (M_{k-1} - d_P^* M_{k-2}) = G_k^{fm}, \quad (3.20)$$

wobei

$$\psi_{Tfm} = \frac{\pi V_m}{\sqrt{2\pi m_m k_B T_\infty}} p_s (S_v - 1) \quad (3.21)$$

und

$$d_P^k = \frac{4\sigma V_m}{k_B T_\infty \ln S_v} \quad (3.22)$$

gilt.

Hierbei steht V_m für das Molekülvolumen, m_m für die Masse der Kondensationsspezies, k_B für die Boltzmannkonstante und T_∞ für die Temperatur des Partikels. Der Sättigungsdampfdruck ist durch p_s wiedergegeben, S_v stellt das Sättigungsverhältnis (p_∞/p_s) dar und σ die Oberflächenspannung.

Im Kontinuumsregime ist das Partikelwachstum durch Kondensation ein durch Diffusion getriebener Prozess. Die Änderungsrate des Moments M_k ist hier:

$$\frac{\partial}{\partial t}[M_k]_{Kond} = \frac{2k}{\pi} \psi_{Tkn} (M_{k-2} - d_P^* M_{k-3}) = G_k^{kn}. \quad (3.23)$$

Die Wachstumsrate ψ_{Tkn} ergibt sich wie folgt:

$$\psi_{Tkn} = \frac{2 \pi D_{mg}}{k_B T_\infty} p_s (S_v - 1). \quad (3.24)$$

In dieser Gleichung steht D_{mg} für den Diffusionskoeffizienten.

Ein allgemeiner Ausdruck der Kondensationsrate für beide Regimes kann durch die Mittelung von G_k^{fm} und G_k^{kn} ermittelt werden (Binkowski und Shankar, 1995):

$$G_k = \frac{G_k^{fm} \cdot G_k^{kn}}{G_k^{fm} + G_k^{kn}}. \quad (3.25)$$

3.3.4 Sedimentation und Deposition

Die trockene Deposition wird von den Einflussgrößen Brownsche Diffusion und Sedimentation im Schwerfeld der Erde bestimmt.

Der Brownsche Diffusionskoeffizient lässt sich ausdrücken durch

$$D = \frac{k_B T C_C}{3 \pi \rho_L \nu d_P} \quad (3.26)$$

und die Sedimentationsgeschwindigkeit durch

$$v_{sed} = \frac{g \cdot C_C}{18 \nu} \left(\frac{\rho_P}{\rho_L} \right) d_P^2. \quad (3.27)$$

Hierbei bezeichnet (ρ_P/ρ_L) das Verhältnis der Partikeldichte zur Luftdichte, g die Erdbeschleunigung und ν die kinematische Viskosität. C_C steht für den Cunningham-Korrekturfaktor und kann in der linearisierten Form durch folgende Gleichung beschrieben werden:

$$C_C = 1,0 + 1,246 \frac{2 \lambda_L}{d_P}. \quad (3.28)$$

Für ein Aerosol mit einer kontinuierlichen Größenverteilung müssen diese Größen über das k -te Moment (M_k) gemittelt werden (Kramm et al., 1992). Für den Diffusionskoeffizienten und der Sedimentationsgeschwindigkeit des k -ten Moments gilt nun:

$$\hat{D}_k = \frac{1}{M_k} \int_{-\infty}^{\infty} D(d_P) d_P^k n(d_P) d d_P \quad (3.29)$$

$$\hat{v}_{sed,k} = \frac{1}{M_k} \int_{-\infty}^{\infty} v_{sed} d_P^k n(d_P) dd_P \quad (3.30)$$

Wird für die kontinuierliche Verteilungsfunktion zur Größenbeschreibung der Aerosolpartikel eine Log-Normal-Verteilung herangezogen und der Ausdruck $(2\lambda_L/d_{Pg})$ mit der Knutsenzahl Kn_g gleichgesetzt ergibt eine Integration für \hat{D}_k und $\hat{v}_{sed,k}$ folgende Ausdrücke:

$$\hat{D}_k = \frac{k_B T}{3\pi \nu \rho_L d_{Pg}} e^{-\frac{2k+1}{2} \ln^2 \sigma_g} + 1,246 Kn_g e^{-\frac{4k+4}{2} \ln^2 \sigma_g} \quad (3.31)$$

$$\hat{v}_{sed,k} = \frac{g}{18\nu} \left(\frac{\rho_p}{\rho_L} d_{Pg}^2 \right) e^{-\frac{4k+4}{2} \ln^2 \sigma_g} + 1,246 Kn_g e^{-\frac{2k+1}{2} \ln^2 \sigma_g} \quad (3.32)$$

Nach Slinn und Slinn (1980) ergibt sich die Depositionsgeschwindigkeit des k -ten Moments eines Aerosols mit einer kontinuierlichen Größenverteilung aus folgender Gleichung:

$$\hat{v}_{dep,k} = (r_a + \hat{r}_{d,k} + r_a \hat{r}_{d,k} \hat{v}_{sed,k})^{-1} + \hat{v}_{sed,k}, \quad (3.33)$$

wobei r_a für den aerodynamischen Widerstand steht. Er ist von meteorologischen Größen (Windgeschwindigkeit, thermische Schichtung usw.) abhängig, die von MEMO zur Verfügung gestellt werden. Bei $\hat{r}_{d,k}$ handelt es sich um den Grenzschichtwiderstand. Er lässt sich durch die folgende Gleichung ermitteln:

$$\hat{r}_{d,k} = \left(\left(Sc_k^{-\frac{2}{3}} + 10^{-\frac{3}{St_k}} \right) \left(1 + 0,24 \frac{w_*^2}{u_*^2} \right) \cdot u_* \right)^{-1}. \quad (3.34)$$

Hierbei steht Sc_k für die Schmidtzahl ($Sc_k = \nu / \hat{D}_k$) und St_k für die Stokeszahl ($St_k = (u_*^2 / (g \cdot \nu)) \cdot \hat{v}_{sed,k}$). w_* und u_* stehen für die konvektive Geschwindigkeit und für die Schubspannungsgeschwindigkeit.

4 Strahlung und optische Eigenschaften der Atmosphäre

4.1 Strahlungshaushalt der Erde

Die Sonneneinstrahlung an der Obergrenze der Atmosphäre entspricht in erster Näherung der eines schwarzen Körpers mit einer Strahlungstemperatur von rund 5700 K. Das Maximum der Energieverteilung liegt nach dem Wienschen Verschiebungsgesetz bei einer Wellenlänge von ca. 0,5 μm . Allerdings treten bei der realen Sonnenstrahlung Unterschiede zur idealen Strahlung eines schwarzen Körpers auf. Diese Abweichungen sind durch Absorptionseffekte in der Sonnenatmosphäre bedingt (Roedel, 1992).

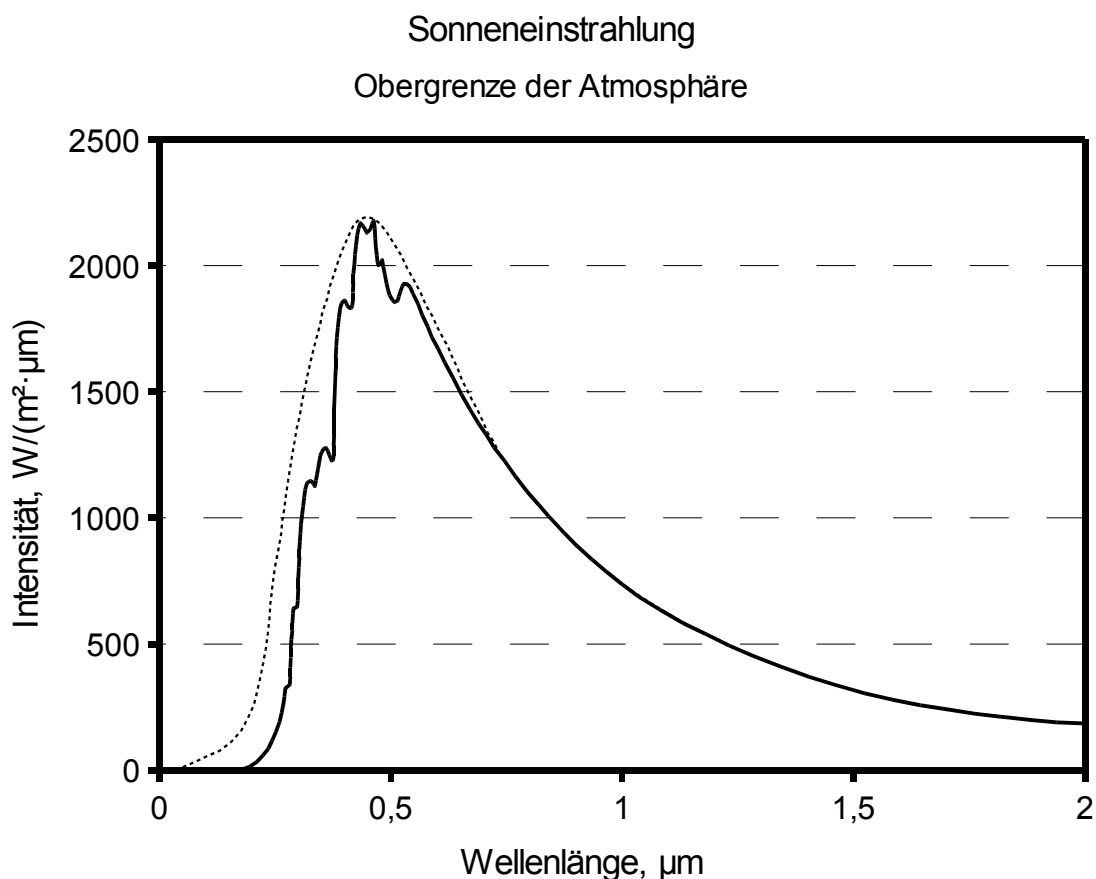


Bild 4.1: Spektrale Verteilung des Sonnenlichts an der Obergrenze der Atmosphäre (Roedel, 1992). Die punktierte Linie entspricht einem schwarzen Körper mit einer Temperatur von 5700 K, die durchgezogene Linie der realen Sonneneinstrahlung.

An der Obergrenze der Atmosphäre beträgt die Energiedichte der Sonnenstrahlung $S_c = 1368 \text{ W/m}^2$. Durch die leicht elliptische Umlaufbahn der Erde um die Sonne schwankt dieser Wert um $\pm 3,4 \%$ im Laufe eines Jahres um den Mittelwert. Der höchste Wert tritt im Januar während des Periheldurchgangs auf und der niedrigste im Juli im Aphel (Roedel, 1992).

Auf dem Weg durch die Atmosphäre ist die Sonneneinstrahlung verschiedenen Einflüssen ausgesetzt. Von der Sonneneinstrahlung werden 30 % in den Weltraum zurückgestrahlt, 20 % in der Atmosphäre und 50 % vom Erdboden absorbiert. Die Absorption der Sonneneinstrahlung beginnt bereits in großen Höhen, verursacht durch das Ozon. Bild 4.2 zeigt eine detaillierte Bilanz der Strahlung (Roedel, 1992).

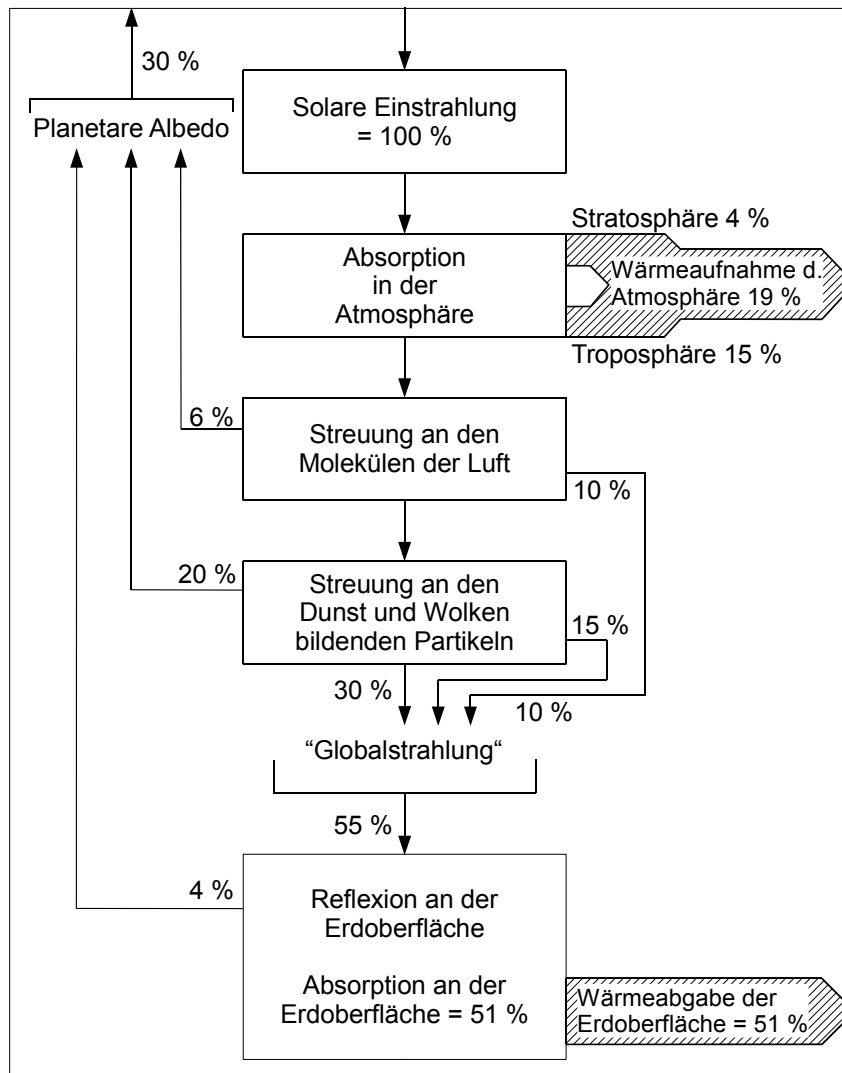


Bild 4.2: Globale Bilanz der Sonneneinstrahlung im System Atmosphäre-Erdoberfläche. Die Unsicherheiten der Angaben betragen $\pm 2 \%$ (Roedel, 1992).

Der Vergleich der solaren Strahlung an der Erdoberfläche mit der an der Obergrenze der Atmosphäre zeigt die Extinktion der Sonneneinstrahlung in der Atmosphäre.

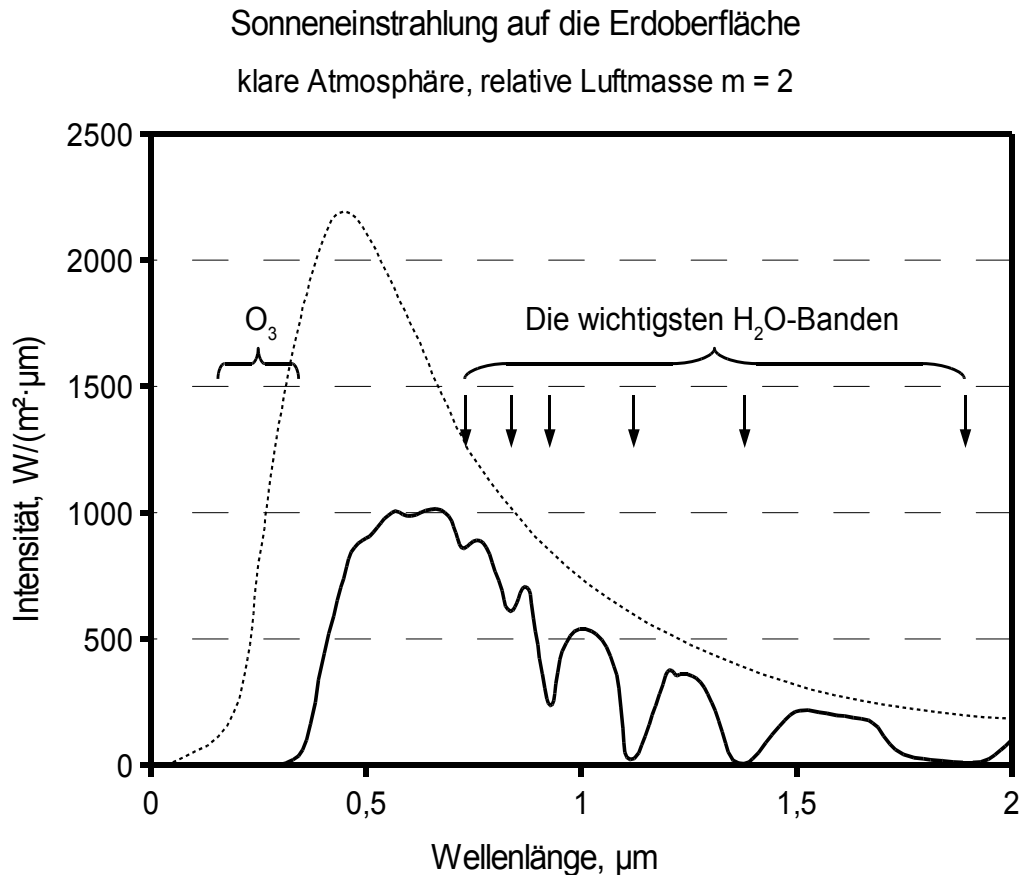


Bild 4.3: Spektrale Verteilung des Sonnenlichts nach Durchgang durch eine klare Atmosphäre. Der Kurve ist ein Lichtweg mit der zweifachen Strecke Zenit-Erdboden (relative Luftmasse $m = 2$) zugrundegelegt. Dies entspricht einem Sonnenstand von 30° über dem Horizont. (nach Möller, 1973)

In Bild 4.3 ist erkennbar, dass das Licht in bestimmten Wellenlängenbereichen durch molekulare Absorption abgeschwächt wird. Ebenfalls erkennbar ist die Abschwächung des gesamten Spektrums durch Streuung (Rayleigh-Streuung). Dabei nimmt der Einfluss der Streuung auf die Extinktion mit abnehmender Wellenlänge deutlich zu. Die Intensität der Rayleigh-Streuung ist in sehr guter Näherung proportional zu λ^{-4} . Dabei steht λ für die Wellenlänge der einfallenden Strahlung. Die Streuung des Lichts nimmt somit mit abnehmender Wellenlänge zu. Eine Folge davon ist die blaue Farbe des Himmelslichtes, aber auch die

stärkere Extinktion der kurzwelligen Strahlung (Bild 4.3) kann dadurch erklärt werden (Roedel, 1992).

Da die Temperaturen der Erdoberfläche und der Atmosphäre (mit allen in ihr verteilten Partikeln) über 0 K liegen, sind sie thermische Strahler. Die Summe der Strahlungen der Erdoberfläche und der Atmosphäre ist die terrestrische Strahlung. Die Erdoberfläche kann als ein strahlender schwarzer Körper betrachtet werden. In einem Temperaturbereich von -30°C bis $+30^{\circ}\text{C}$ liegen nach dem Wienschen Verschiebungsgesetz die Maxima der Energieverteilungen zwischen $11,9\ \mu\text{m}$ und $9,6\ \mu\text{m}$. Der Wellenlängenbereich der terrestrischen Strahlung erstreckt sich von $4\ \mu\text{m}$ bis $100\ \mu\text{m}$. Im globalen Mittel besitzt die Erdoberfläche eine Temperatur von 288 K. Das Maximum der Abstrahlung der Erdoberfläche liegt somit bei $10\ \mu\text{m}$. Die klare Atmosphäre hingegen strahlt nur in bestimmten, von der Gasart abhängigen, Wellenlängenbereichen (Banden). Die zwei Gasarten, die den Hauptanteil zur Strahlung in der Atmosphäre beitragen, sind der Wasserdampf und das Kohlendioxid (Liljequist, 1974).

Wird ein Gebiet der Erdoberfläche mit der Temperatur T_0 betrachtet, dann geht von diesem Gebiet ein Strahlungsstrom $\sigma \cdot T_0^4$ aus. Im Gegenzug wird von der darüberliegenden Atmosphäre den Strom atmosphärischer Gegenstrahlung E_A an die Erdoberfläche abgegeben. Wie oben schon erwähnt ist die Atmosphäre ebenfalls ein thermischer Strahler. Die Differenz dieser beiden Strahlungsströme ist die effektive Ausstrahlung $E_{eff} = \sigma \cdot T_0^4 - E_A$. Sie stellt somit die übertragene Wärme zwischen Erdoberfläche und Atmosphäre dar. Außer in sehr seltenen Fällen ist die effektive Ausstrahlung von der Erdoberfläche nach oben gerichtet (Liljequist, 1974).

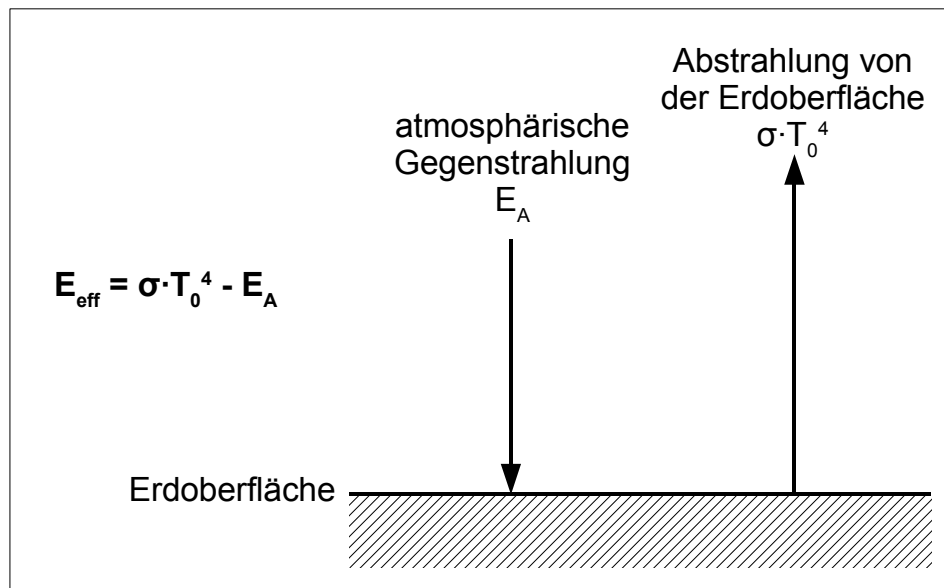


Bild 4.4: Die Strahlungsströme von der Erdoberfläche in die Atmosphäre und aus der Atmosphäre auf die Erdoberfläche. Die Differenz dieser beiden Strahlungsströme ergibt die effektive Ausstrahlung E_{eff} (Liljequist, 1974).

Bei bekannter Temperatur der Erdoberfläche kann ihre Abstrahlung relativ einfach berechnet werden. Die Ermittlung der atmosphärischen Gegenstrahlung ist hingegen sehr viel komplizierter. Die Atmosphäre ist in verschiedene Temperaturschichten unterteilt und auch die Verteilung der Partikel ist nicht homogen. Dies bewirkt, dass die atmosphärische Gegenstrahlung sich aus den Einzelstrahlungen der verschiedenen Schichten zusammensetzt. Bei klarem Himmel beträgt die atmosphärische Gegenstrahlung ca. 75 % der Abstrahlung der Erdoberfläche (Liljequist, 1974).

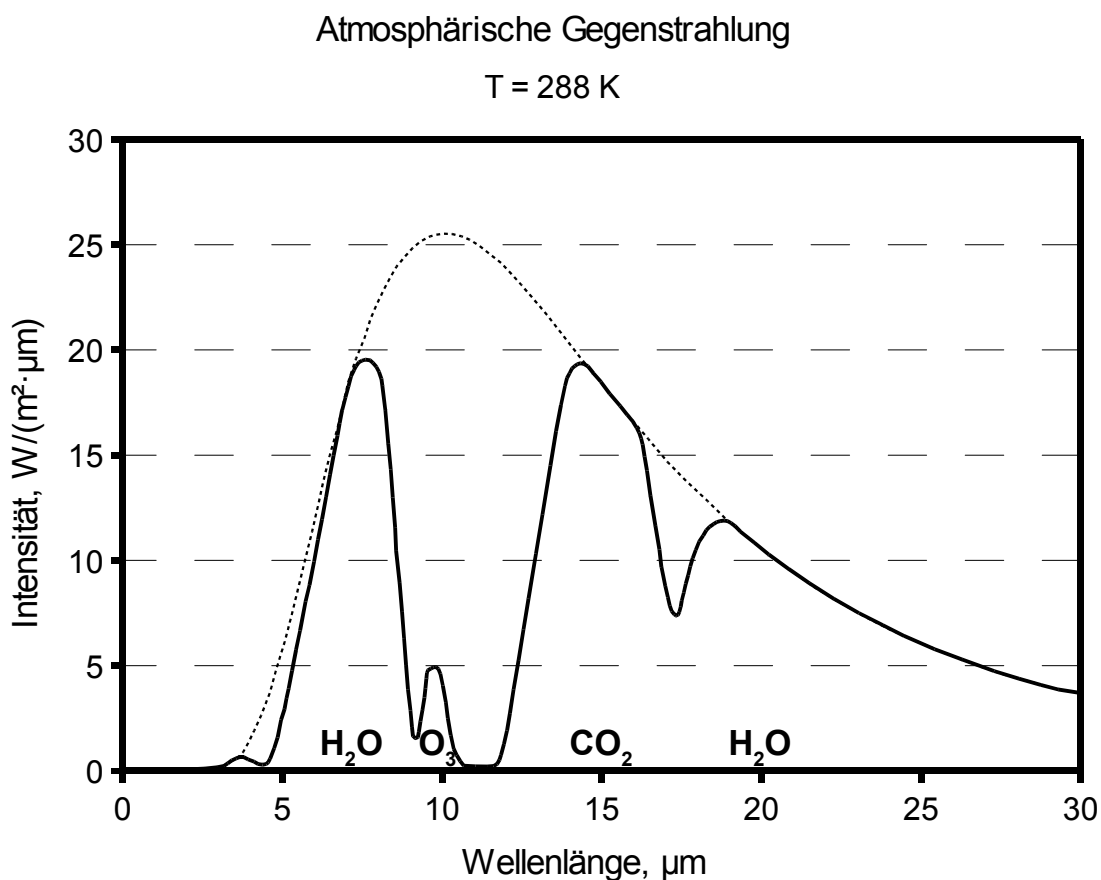


Bild 4.5: Eine spektrale Verteilung der langwelligen atmosphärischen Gegenstrahlung bei klarem Himmel. Die gestrichelte Linie beschreibt die Strahlung eines schwarzen Strahlers mit 288 K (nach Möller, 1973).

Hingegen wird bei Wolkenbedeckung von der Unterseite der Wolkendecke, wie von einem schwarzen Strahler, Strahlung zur Erdoberfläche ausgesendet. Diese Strahlung unterliegt auf ihrem Weg hin zur Erdoberfläche Einflüssen, die zu einer Veränderung führen. Die atmosphärische Gegenstrahlung besitzt in diesem Fall ein kontinuierliches Spektrum. Dadurch kann von der Erdoberfläche keine Abstrahlung mehr in den Weltraum gelangen, es ist kein freier Frequenzbereich für die Ausstrahlung vorhanden. Die Abstrahlung gelangt nun von Oberseite der Wolkendecke aus in den Weltraum (Liljequist, 1974).

In Bild 4.6 ist eine Bilanz der globalen thermischen Strahlungsflüsse von der Erdoberfläche und aus der Atmosphäre aufgeführt.

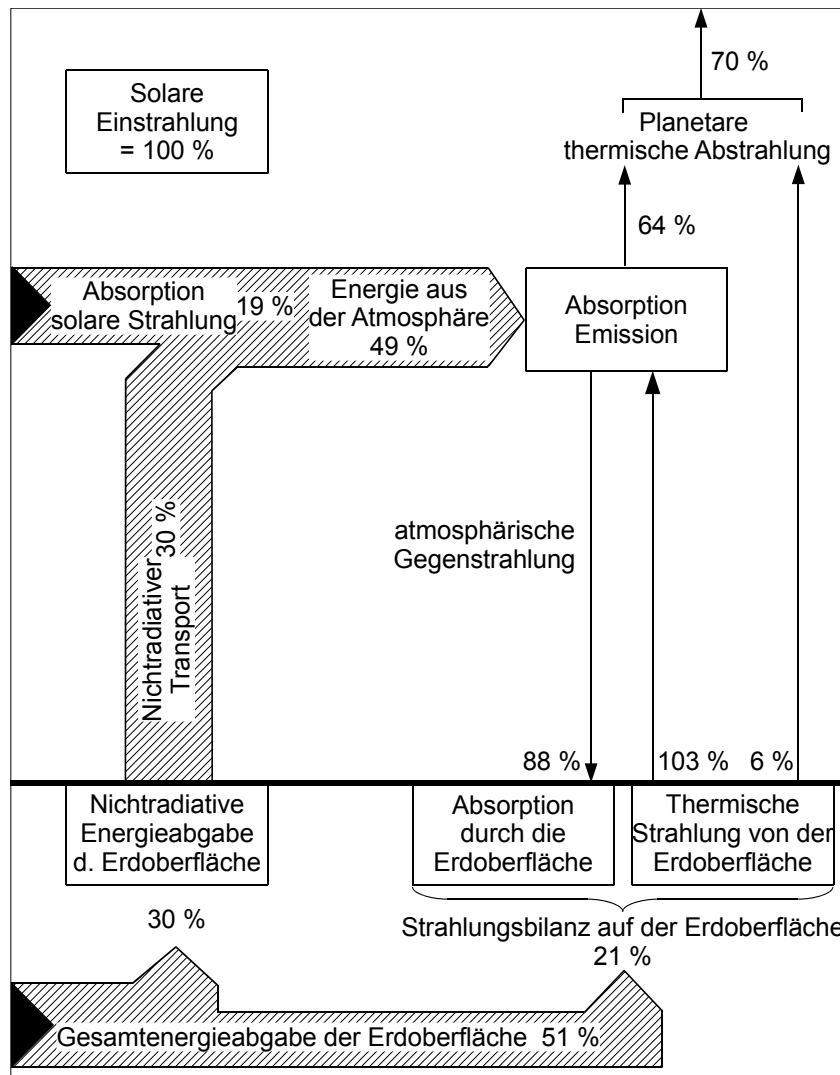


Bild 4.6: Globale Bilanz der Strahlungsflüsse von der Erdoberfläche und aus der Atmosphäre. Die Unsicherheiten der Angaben betragen $\pm 2\%$ (Roedel, 1992).

4.2 Optische Eigenschaften des Aerosols

Die Streuung des Lichts an kugelförmigen Partikeln, deren Durchmesser im Bereich der Wellenlänge liegen, wird mit Hilfe der Mie-Streuung beschrieben. Die Mie-Theorie beschreibt somit die Streuung im Übergangsbereich zwischen dem Rayleigh-Bereich (Partikel sind sehr viel kleiner als die Wellenlänge) und dem Bereich der geometrischen Optik (Partikel sind sehr viel größer als die Wellenlänge).

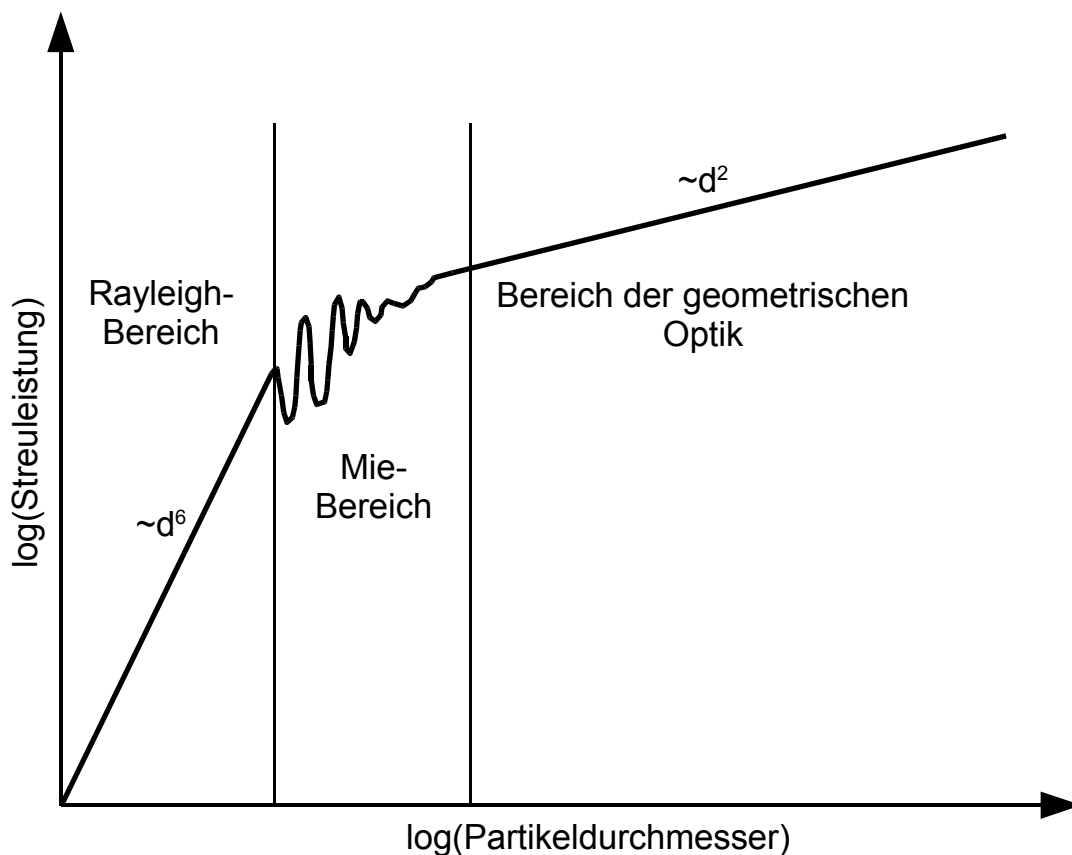


Bild 4.7: Qualitative Darstellung der Streuleistung über den Partikeldurchmesser (nachgezeichnet, Scherer, 2009).

Die Mie-Streuung kann als eine kohärente Anregung einer großen Anzahl von Elementarstrahlern angesehen werden. Der Streuanteil senkrecht zur Strahlungsrichtung ist mit der Beugung an einem kreisförmigen Loch, dessen Durchmesser im Bereich der Wellenlänge liegt, vergleichbar. Durch die Ausdehnung der Partikel in Strahlungsrichtung kommt es, vergleichbar mit

einer Richtantenne, zu einer scharfen Betonung der Vorwärtsstreuung. Dadurch ergeben sich interferenzbedingte Maxima und Minima in der Streuleistung, die wiederum vom Streuwinkel abhängig sind. Die Streuleistung besitzt ein ausgeprägtes Maximum in Vorwärtsrichtung, das sich umso schärfer herausbildet, je größer das streuende Partikel ist. Als Folge der Vorwärtsstreuung ist der Himmel um die Sonne bei dunstigen Verhältnissen in der Atmosphäre aufgehellt. Für die Mie-Streuung ist eine analytische Darstellung der Streuleistung nicht möglich. Für die Mie-Extinktionsquerschnitte kann ebenfalls keine analytische Darstellung angegeben werden. Die auf den Teilchenquerschnitt normierten Extinktionswirkungsquerschnitte (Extinktionsfunktionen E) sind oszillierende Funktionen des Teilchengrößenparameters $\alpha = 2\pi r/\lambda$ (proportional zum Verhältnis von Partikelradius r zu Wellenlänge λ) (Roedel, 1992).

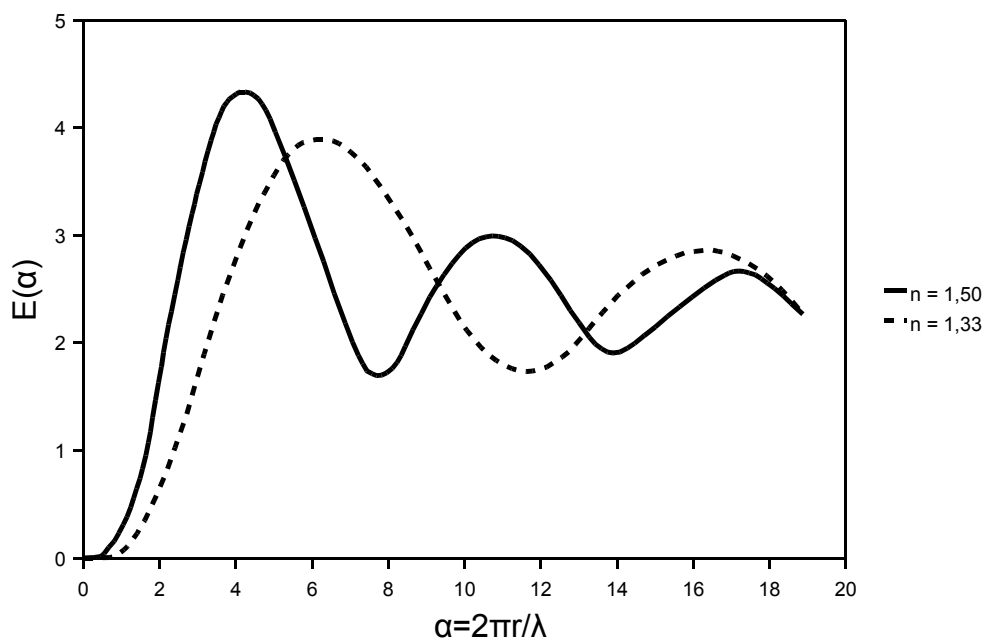


Bild 4.8: Extinktionsfunktionen E als Funktion des Teilchengrößenparameters α für zwei verschiedene Brechungsindizes n des Teilchenmaterials (Hodkinson, 1966).

Die Berechnung des makroskopischen Extinktionskoeffizienten eines polydispersen Aerosols erfolgt anstatt mit dem Produkt aus Anzahldichte und Einzelquerschnitt mit einem Integral über die Verteilung der Partikelgrößen $n(r)$

= dN/dr . Der Extinktionskoeffizient $k_{ex}(\lambda)$ ist dann gegeben durch (Roedel, 1992):

$$k_{ex}(\lambda) = \int_0^{\infty} \pi \cdot r^2 \cdot E(\alpha) \cdot n(r) \, dr. \quad (4.1)$$

Mit der Mie-Theorie lassen sich auch die dimensionslosen Streu- und Absorptionsfunktionen ($k_{sp}(\lambda)$, $k_{ap}(\lambda)$) bestimmen. Mit Hilfe dieser Funktionen können auf die gleiche Weise wie der Extinktionskoeffizient die Streu- und Absorptionskoeffizienten ermittelt werden.

In der Atmosphäre weisen die meisten Substanzen in einem Aerosol einen reflektierenden Einfluss auf die kurzwellige Sonnenstrahlung auf. Die langwellige thermische Abstrahlung der Erde wird dagegen so gut wie nicht reflektiert. Einige Substanzen im Aerosol, vor allem Ruß, absorbieren zudem kurzwellige Sonnenstrahlung. Dabei wird von diesen Substanzen nicht nur das einfallende Licht absorbiert, sondern auch der an der Erdoberfläche und an Wolken reflektierte Teil. Auf die langwellige thermische Abstrahlung der Erde haben diese Substanzen keine absorbierende Wirkung.

Der Einfluss des Aerosols auf den Strahlungshaushalt der Atmosphäre wird nicht nur durch die physikalisch-chemischen Eigenschaften der Aerosole bestimmt, sondern auch durch Umgebungsparameter wie Luftfeuchte, Einfallswinkel der Sonne und Albedo der Erdoberfläche. Sulfatpartikel streuen das Sonnenlicht, aber absorbieren es nicht. Dies führt zu einem negativen Strahlungsantrieb, sprich zu einer Abkühlung. Die Streuung an Sulfatpartikeln ist vom Sonnenstand abhängig. Das Maximum der Streuung liegt bei niedrigem Sonnenstand vor (Schult und Feichter, 1997).

Rußpartikel hingegen führen durch ihre absorbierende Wirkung zu einer Erwärmung der sie umgebenden Luft. Ein weiterer Einfluss auf den Strahlungsantrieb ist der Albedo der Oberfläche unter einer Aerosolschicht. Er besteht darin, dass absorbierende Substanzen im Aerosol die reflektierte Sonnenstrahlung in thermische Strahlung umwandeln und somit den Strahlungsantrieb erhöhen. Demzufolge nimmt der Strahlungsantrieb mit wachsendem Albedo zu (Schult und Feichter, 1997).

Bei wasserlöslichen Substanzen spielt die relative Luftfeuchte ebenfalls eine Rolle bei der Beeinflussung des Strahlungsantriebs. So verändern sich bei wasserlöslichen Partikeln ihre Größen, wenn sich die relative Luftfeuchtigkeit ändert. Dies führt dann wiederum zu einer Änderung der Streuung der Sonneneinstrahlung an diesen Partikeln.

In den Bildern 4.9 bis 4.11 sind diese Zusammenhänge für die Obergrenze der Atmosphäre dargestellt (Schult und Feichter, 1997). Die Kurven der äußeren Mischung sind keine lineare Überlagerung der Kurven der Ausgangssubstanzen Sulfat und Ruß. Die Effekte dieser Substanzen auf die Strahlung sind nicht linear additiv, da das Licht aufgrund der Streuung an Sulfat einen längeren Weg zurücklegt und dadurch die Absorption verstärkt wird.

Nach neueren Modellrechnungen ergibt sich daraus an der Obergrenze der Atmosphäre eine Veränderung des Strahlungshaushalts von $-0,72 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ und an der Erdoberfläche von $-4,04 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ (siehe Kapitel 2.3.2).

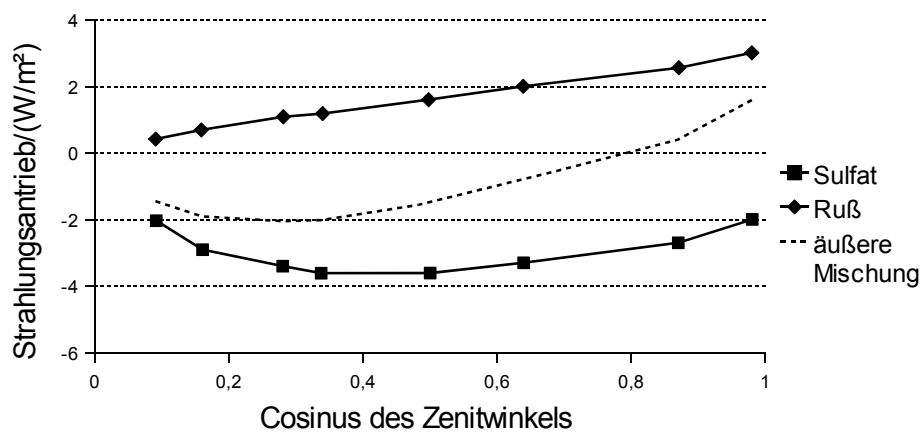


Bild 4.9: Strahlungsantrieb von Sulfat, Ruß und der äußeren Mischung der beiden in Abhängigkeit des Cosinus des Zenitwinkels der Sonne (Schult und Feichter, 1997).

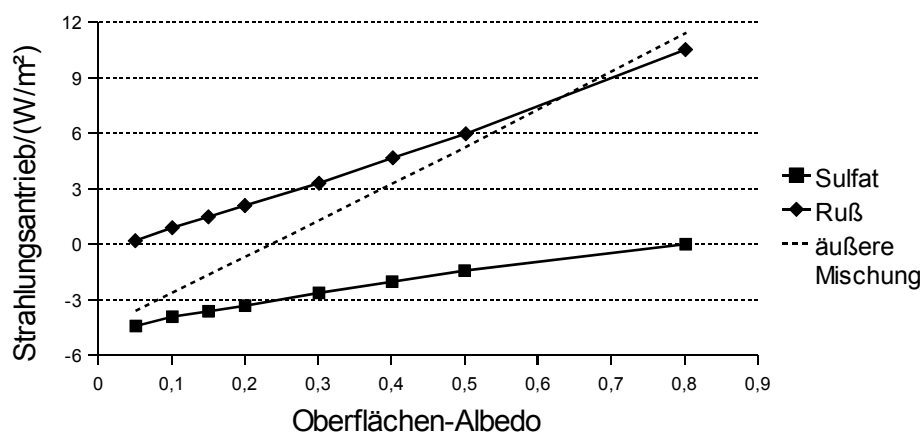


Bild 4.10: Strahlungsantrieb von Sulfat, Ruß und der äußeren Mischung der beiden in Abhängigkeit der Albedo der Oberfläche unterhalb der aerosolführenden Schicht (Schult und Feichter, 1997).

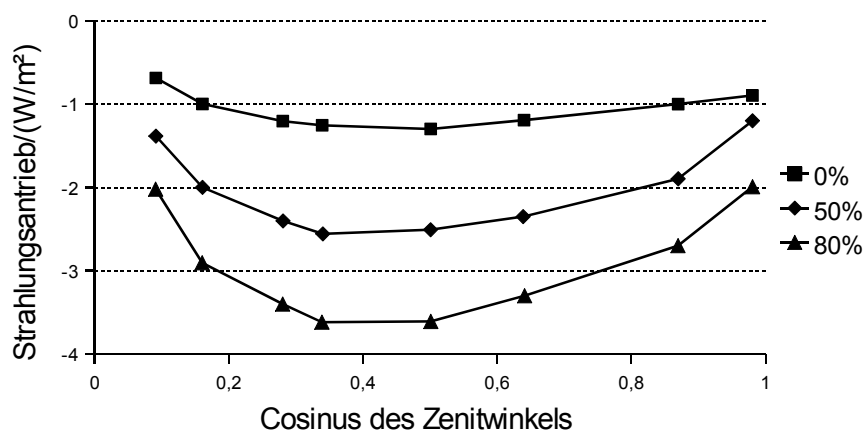


Bild 4.11: Strahlungsantrieb von Sulfat für verschiedene relative Luftfeuchten in Abhängigkeit des Cosinus des Zenitwinkels der Sonne (Schult und Feichter, 1997).

4.3 Modellmäßige Ermittlung optischer Eigenschaften

OPAC ist ein Programm zur Ermittlung optischer Eigenschaften von Aerosolen und Wolken, die aus Einzelkomponenten (externe Mischung) zusammengesetzt werden können. OPAC wurde von G. A. d'Almeida (d'Almeida et al., 1991) entwickelt. Die Datenbasis mit den Eigenschaften der Einzelkomponenten der atmosphärischen Partikel wurde von P. Koepke (Koepke et al. 1997) überarbeitet. Das Programm einschließlich der Datenbasis steht auf den Internetseiten des Meteorologischen Instituts der Universität München zur freien Verfügung zum Download bereit. Das Programm OPAC ist in Hess et al. (1998) ausführlich beschrieben. Die folgende Darstellung bezieht sich auf diese Arbeit.

Die Datenbasis enthält die optischen und mikrophysikalischen Eigenschaften von atmosphärischen Partikeln für den solaren und den terrestrischen Strahlungsbereich. Diese Daten stehen für 6 Arten von Flüssigwasser tragenden Wolken, 3 Arten von Eiswolken und 10 Aerosolkomponenten in ASCII-Dateien zu Verfügung. Die optischen Eigenschaften bestehen aus dem Extinktionskoeffizienten, dem Streukoeffizienten, dem Absorptionskoeffizienten, der Einfachstreueralbedo, dem Asymmetriefaktor und der Phasenfunktion. Diese wurden auf Basis von mikrophysikalischen Daten, wie Größenverteilung und spektralem Brechungsindex, unter der Annahme von sechseckigen Eiskristallen und kugelförmigen Aerosolpartikeln und Wassertropfen berechnet.

Weil in dieser Arbeit der ausschließliche Einfluss des Aerosols auf den Strahlungshaushalt der Atmosphäre untersucht wird, wird in der weiteren Beschreibung des Programms nur auf die Aspekte eingegangen, die sich auf die Behandlung des Aerosols beziehen.

Die optischen Eigenschaften der Aerosole werden unter Zuhilfenahme der Mie-Theorie für 61 Wellenlängen zwischen $0,25 \mu\text{m}$ und $40 \mu\text{m}$ berechnet. Als Einflussparameter kann die relative Luftfeuchte in 8 verschiedenen Stufen der Berechnung vorgegeben werden. Anhand der gewählten Vorgabe für die relative

Luftfeuchtigkeit wird im Fall der wasserlöslichen Aerosolkomponenten die Größenverteilung angepasst. Die Größenverteilungen der 10 Aerosolkomponenten werden durch Log-Normal-Verteilungen beschrieben (siehe Kapitel 2.1.2). Tabelle 4.1 zeigt eine Zusammenstellung mikrophysikalischer Eigenschaften der Aerosolkomponenten. Darin stehen σ für die Standardabweichung und r_{modN} für den mittleren modalen Partikelradius der Log-Normal-Verteilung. r_{modV} ist der mittlere modale Partikelradius der Volumenverteilung. r_{min} und r_{max} geben die Radien für die untere und für die obere Grenze der Verteilung an. Diese werden für die Bestimmung der optischen Eigenschaften mithilfe der Mie-Theorie benötigt. Die Größe ρ steht für die Dichte der Partikel und m^* für die Aerosolmasse in einem Kubikmeter Luft integriert über die Größenverteilung und bezogen auf 1 Partikel pro Kubikzentimeter Luft. Der Term m^* wurde mit einem Begrenzungsradius von $7,5 \mu\text{m}$ berechnet. Die in Tabelle 4.1 aufgeführten Aerosolkomponenten stellen repräsentative Zusammensetzungen von Aerosolen in innerer Mischung unterschiedlicher Herkunft dar.

Komponente	σ	$r_{\text{modN}},$ μm	$r_{\text{modV}},$ μm	$r_{\text{min}},$ μm	$r_{\text{max}},$ μm	$\rho,$ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	$m^*,$ $(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})/$ $(\text{Part}\cdot\text{cm}^{-3})$
wasserunlöslich	2,51	0,471	6,0	0,005	20,0	2,0	2,37E+1
wasserlöslich	2,24	0,0212	0,15	0,005	20,0	1,8	1,34E-3
Ruß	2,00	0,0118	0,05	0,005	20,0	1,0	5,99E-5
Seesalz (Akk.- mode)	2,03	0,209	0,94	0,005	20,0	2,2	8,02E-1
Seesaltz (Grobmode)	2,03	1,75	7,9	0,005	60,0	2,2	2,24E+2
Mineral (Nukl.- mode)	1,95	0,07	0,27	0,005	20,0	2,6	2,78E-2
Mineral (Akk.- mode)	2,00	0,39	1,6	0,005	20,0	2,6	5,53E+0
Mineral (Grobmode)	2,15	1,9	11,0	0,005	60,0	2,6	3,24E+2
Mineral transportiert	2,20	0,5	3,0	0,02	5,0	2,6	1,59E+1
Sulfattropfen	2,03	0,0695	0,31	0,005	20,0	1,7	2,28E-2

Tabelle 4.1: Die 10 in OPAC definierten Aerosolkomponenten und ihre mikrophysikalischen Eigenschaften im trockenen Zustand.

Um unnötig wiederholte Berechnungen der optischen Eigenschaften der Aerosolkomponenten zu vermeiden, sind diese in der bereits erwähnten Datenbasis für 61 Wellenlängen abgespeichert. Die Datenbasis ist aus Einzeldateien, je eine für eine Komponente und relative Luftfeuchte, aufgebaut. Der Inhalt dieser Dateien besteht aus den Größen

$$\begin{aligned} \text{Extinktionskoeffizient} & \quad \sigma_e^1 \cdot \text{km}^{-1}, \\ \text{Streukoeffizient} & \quad \sigma_s^1 \cdot \text{km}^{-1}, \\ \text{Absorptionskoeffizient} & \quad \sigma_a^1 \cdot \text{km}^{-1}, \end{aligned}$$

Phasenfunktion	$p^1(\theta) \cdot (km^{-1} sr^{-1})$,
Einfachstreueralbedo	ω_0 und
Asymmetriefaktor	g .

Die Größen σ_e^1 , σ_s^1 , σ_a^1 und $p^1(\theta)$ sind auf 1 Partikel pro Kubikzentimeter bezogen. Um die absoluten Werte zu erhalten, müssen die spezifischen Größen nur mit der Anzahlkonzentration (Gesamtzahl der Partikel) multipliziert werden.

Die optische Dicke τ des Aerosols wird nach folgender Gleichung berechnet:

$$\tau = \sum_i \int_{H_{j,min}}^{H_{j,max}} \sigma_{e,j}(h) dh = \sum_i \sigma_{e,j}^1 N_j(0) \int_{H_{j,min}}^{H_{j,max}} e^{-\frac{h}{Z_j}} dh. \quad (4.2)$$

In Gleichung 4.2 steht $\sigma_{e,j}^1$ für den Extinktionskoeffizienten in der Schicht j . Das Integral im zweiten Teil der Gleichung enthält das Höhenprofil der Anzahlkonzentration, das durch

$$N(h) = N(0) e^{-\frac{h}{Z}} \quad (4.3)$$

beschrieben wird. Darin ist h die Höhe über der Erdoberfläche in Kilometern und Z die Skalierungshöhe, welche die Form des Profils bestimmt. $N(0)$ ist die Anzahlkonzentration auf Meereshöhe.

Da wohl so gut wie nie der Fall eintritt, dass ein Aerosol nur mit einer Komponente beschrieben werden kann, ist es in OPAC möglich, die einzelnen Aerosolkomponenten, je nach Bedarf, miteinander zu mischen. Daraus entsteht eine äußere Mischung der verwendeten Aerosolkomponenten. Um die optischen Eigenschaften der Mischung (z. B. die optische Dicke) berechnen zu können, werden ihre mikrophysikalischen Eigenschaften benötigt. Die Anzahlkonzentration der Größenverteilung der Mischung wird als

$$N = \sum_i N_i. \quad (4.4)$$

ermittelt.

Bei der Ermittlung der Masse der Mischung muss noch die relative

Luftfeuchtigkeit mitberücksichtigt werden, weil sich die Massen der wässrigen Partikel bei schwankender relativer Luftfeuchtigkeit ändern:

$$m(\rho) = \sum_i m_i(\rho) = \sum_i N_i m_i^*(\rho). \quad (4.5)$$

Der Extinktionskoeffizient der Mischung wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\sigma_e = \sum_i \sigma_{a,i}^1 N_i. \quad (4.6)$$

Die anderen optischen Parameter werden auf die gleiche Weise ermittelt.

Für eine ausführliche Beschreibung von OPAC sei noch einmal auf Hess et al. (1998) verwiesen.

5 Beschreibung der eingesetzten Modelle

5.1 Aktuelle Online-Kopplung-Modelle

Meteorologische Modelle können entweder “offline“ oder “online“ mit Aerosol- und Chemiemodellen gekoppelt werden. Der gegenwärtige Trend der wissenschaftlichen Entwicklung im Bereich Wettervorhersage (unter Berücksichtigung der Atmosphärenchemie) deutet aber auf eine Bevorzugung der Online-Kopplung-Modelle hin. So werden im Folgenden drei Beispiele für aktuelle meteorologische Modelle, die über eine Online-Kopplung zu Aerosol- und Chemiemodellen verfügen, beschrieben.

COSMO-ART ist ein Online-Kopplung-Modell zur Beschreibung des Einflusses von Aerosolpartikel auf den physikalischen und chemischen Zustand der Atmosphäre in regionalen Größenskalen. Es basiert auf das Wettervorhersagemodell COSMO des Deutschen Wetterdienstes. Im Modell COSMO-ART werden physikalische Prozesse, Photochemie und Aerosoldynamik (modaler Ansatz) berechnet (Vogel et al., 2009). Zur Berechnung der Aerosoldynamik wird das Aerosolmodul MADEsoot (Riemer et al., 2003) verwendet. Die Zusammensetzung des Aerosols enthält Ruß, Sulfate, Ammonium, Nitrate, organische Komponenten und Wasser. Zur Beschreibung der Größenverteilung dieser Partikel werden 5 Moden herangezogen (Vogel et al., 2009). Seesalz und Staub im Aerosol werden mit zwei Moden (je ein Mode für feine und grobe Partikel) berücksichtigt (Stanelle et al., 2010) und durch 6 weitere Moden vom Menschen verursachte Partikel. In COSMO-ART wird zur Berechnung des Strahlungshaushalts der Atmosphäre das Strahlungsmodell GRAALS (Ritter und Geleyn, 1992) verwendet. Der Einfluss des Aerosols auf die Strahlungsflüsse wird zur Laufzeit der Berechnung berücksichtigt (Vogel et al., 2009). Für die Berechnung des Aerosoleinflusses auf Wolken ist ein Wolkenmikrophysikmodell (Seifert und Beheng, 2006) und ein Modell zur Berechnung der Wolkenkondensation und Eiskernung (Bangert et al., 2011) in COSMO-ART integriert.

Im Fall von **MetUM** handelt es sich um ein Modell, das für numerische Wettervorhersagen und für Klimaberechnungen in einem weiten Bereich der Längenskala eingesetzt werden kann (Davies et al., 2005). So ist es möglich mit MetUM Klimaberechnungen in Zeitbereichen von Jahrzehnten (Collins et al., 2011) zu bewältigen oder meteorologische Berechnungen mit einer Gitterauflösung von wenigen Kilometern durchzuführen. In MetUM ist das Aerosolmodell CLASSIC (Bellouin et al., 2011) und das Chemie-Aerosol-Modell UKCA (Morgenstern et al., 2009) enthalten. UKCA stellt unterschiedliche Reaktionsmechanismen zur Verfügung. Aus dem Offline-Modell TOMCAT wurde für den Einsatz in MetUM das Aerosolmodell GLOMAP-mode auf Basis eines modalen Ansatzes entwickelt (Mann et al., 2010). Mit GLOMAP-mode werden Sulfate, Seesalz, Staub, Ruß und organische Stoffe in der Aerosolzusammensetzung berücksichtigt. Diese Modelle sind mit dem Kernmodell MetUM über Online-Kopplungen verbunden.

Das Modell **NMMB/BSC-CHEM** (Jorba et al., 2009 und 2011) ist ein Gesamtmodell, bestehend aus einem Chemiemodell mit Online-Kopplung zum Kernmodell NMMB, für die Wettervorhersage im mesoskaligen und globalen Bereich. Es basiert auf das am National Centers of Environmental Prediction (NCEP) entwickelten Modell zur Beschreibung atmosphärischer Vorgänge NMMB (Janjic und Black, 2007). Dieses Modell stellt wiederum eine Weiterentwicklung des mesoskaligen, meteorologischen Modell WRF-NMM dar. Die Weiterentwicklung umfasst den Ausbau zu einem globalen/regionalen, nichthydrostatischen Mehrskalen-Modell mit B-Gitter (Janjic et al., 2011). Aus der Online-Kopplung mit einem Modell zur Beschreibung von Mineralien/Stäuben ist das Modell NMMB/BSC-DUST (Perez et al., 2011) hervorgegangen. Es wurde für Vorhersagen von Wetter und Staubentwicklungen konzipiert. So wird mit NMMB/BSC-DUST der Zyklus von erodiertem Wüstenstaub berechnet. Dabei wird auch über den Einfluss des Aerosols auf den Strahlungshaushalt der Atmosphäre die Rückkopplung auf meteorologische Größen berücksichtigt (Jorba et al., 2011).

5.2 MEMO

Die Berechnung des Stofftransports in der Atmosphäre ist nur mit der Kenntnis des Windfeldes möglich. Dazu wurde am Institut für Technische Thermodynamik Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe das dreidimensionale, prognostische Grenzschichtmodell MEMO entwickelt. Es wurde in enger Zusammenarbeit mit der Aristoteles Universität Thessaloniki weiter entwickelt und angewendet.

An dieser Stelle soll das Modell nur kurz beschrieben werden. Eine ausführliche Beschreibung ist von Flassak (1990) gegeben. Weitere Grundlagen zum Modell finden sich in den Arbeiten von Moussiopoulos (1989), Kunz (1995), Khatib (1998) und Bickmeier (2000). Die folgende Beschreibung von MEMO hat die in der Arbeit von Kunz (1995) zum Vorbild.

5.2.1 Grundgleichungen

MEMO ist ein prognostisches Berechnungsmodell zur Beschreibung der Strömung in der atmosphärischen Grenzschicht. Dazu muss MEMO die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Größen wie potentielle Temperatur, Feuchtegehalt der Luft, Konzentrationen der in der Luft transportierten Stoffe und Turbulenzenergie numerisch lösen. Die Energieerhaltung ist durch die Erhaltungsgleichung für die potentielle Temperatur θ erfüllt. Die potentielle Temperatur ist definiert als:

$$\theta = T \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}} \quad (5.1)$$

Sie ist somit eine Funktion der absoluten Temperatur T und des Druckes p . Hierbei wird die Luft als perfektes Gas betrachtet ($p = \rho \cdot R \cdot T$) mit konstanter spezifischer Wärmekapazität c_p und der spezifischen Gaskonstanten R . Der Referenzdruck p_0 ist ein beliebiger, aber fester Druckwert.

In kartesischen Koordinaten (x', y', z') lauten die Impulserhaltungsgleichungen für die Geschwindigkeitskomponenten u, v, w

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uu)}{\partial x'} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y'} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z'} = \frac{\partial \hat{p}}{\partial x'} + R_u + C_u \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho vu)}{\partial x'} + \frac{\partial(\rho vv)}{\partial y'} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z'} = \frac{\partial \hat{p}}{\partial y'} + R_v + C_v \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho wu)}{\partial x'} + \frac{\partial(\rho wv)}{\partial y'} + \frac{\partial(\rho ww)}{\partial z'} = \frac{\partial \hat{p}}{\partial z'} + R_w + C_w - \rho \cdot g \quad (5.4)$$

die Massenerhaltung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x'} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y'} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z'} = 0 \quad (5.5)$$

und die Erhaltungsgleichung für skalare Größen ψ

$$\frac{\partial(\rho \psi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \psi)}{\partial x'} + \frac{\partial(\rho v \psi)}{\partial y'} + \frac{\partial(\rho w \psi)}{\partial z'} = R_\psi + Q_\psi \quad (5.6)$$

C_u , C_v und C_w sind die kartesischen Komponenten der volumenbezogenen Corioliskraft. Die Terme R_u , R_v , R_w und R_ψ sind Divergenzen der turbulenten Flüsse. Bei Q_ψ handelt es sich um einen Senken- oder Quellterm der betrachteten skalaren Größe.

Der Druck p wird in die Anteile des Grundzustands \bar{p} und der mesoskaligen Abweichung \hat{p} zerlegt:

$$p = \bar{p}(z') + \hat{p}(x', y', z'). \quad (5.7)$$

Der Druckanteil der mesoskaligen Abweichung setzt sich aus dem großräumigen Druckanteil p_g , dem hydrostatischen Druckanteil p_h und dem nichthydrostatischen Druckanteil p_{nh} zusammen:

$$\hat{p} = p_g + p_h + p_{nh} \quad (5.8)$$

Der großräumige Druckanteil wird von der vorherrschenden Wetterlage dem Berechnungsgebiet aufgeprägt und muss bei der Initialisierung des Modells vorgegeben werden. Er wird gemäß

$$-\frac{\partial p_g}{\partial x'} = -\rho \cdot f \cdot v_g; \quad -\frac{\partial p_g}{\partial y'} = \rho \cdot f \cdot u_g \quad (5.9)$$

durch die Geschwindigkeitskomponenten u_g und v_g beschrieben. Der Coriolisparameter f wird aus der Winkelgeschwindigkeit Ω der Erdrotation und

der geographischen Breite ϕ durch die Beziehung

$$f = 2 \cdot |\Omega| \cdot \sin \phi \quad (5.10)$$

gebildet.

Der hydrostatische Druckanteil lässt sich durch die Integration der hydrostatischen Grundgleichung

$$\frac{\partial p_h}{\partial z'} = -\rho \cdot g \quad (5.11)$$

(mit g als die Erdbeschleunigung) ermittelt. Die Dichte ρ wird mit Hilfe der Zustandsgleichung des idealen Gases berechnet.

Zur Bestimmung des nichthydrostatischen Druckanteils wird eine elliptische Differentialgleichung gelöst (Flassak, 1990).

5.2.2 Transformation und Diskretisierung der Grundgleichungen

Die im Kapitel 5.2.1 beschriebenen Grundgleichungen werden in MEMO auf einem Rechengitter gelöst, dessen unterer Rand mit der Geländeoberfläche identisch ist. Um eine Vereinfachung in der Formulierung der unteren Randbedingungen zu erreichen, wird die kartesische Vertikalkoordinate z' auf die bodenfolgende Koordinate η nach folgender Beziehung transformiert:

$$\eta \equiv H \cdot \frac{z' - h(x', y')}{H - h(x', y')} \quad (5.12)$$

$h(x', y')$ stellt die Geländehöhe an der Stelle (x', y') und H den Oberrand des Modells dar. Diese Größen sind für ein einmal festgelegtes Rechengebiet unveränderlich. Die Transformation bewirkt, dass im transformierten Rechengebiet der Modellunterrand zu einer Ebene mit konstanten Koordinatenwerten wird. Um eine nichtäquidistante Verzerrung des Gitters zu ermöglichen, ist die zusätzliche Transformation

$$x = x(x'), y = y(y'), z = z(\eta) \quad (5.13)$$

nötig. $x(x')$, $y(y')$ und $z(\eta)$ sind beliebige monotone Funktionen (Schumann und Volkert, 1984). Die Transformation bewirkt, dass die ursprünglich in kartesischen Koordinaten unregelmäßigen Gitterzellen in ein System aus Einheitswürfeln abgebildet werden. Eine genaue Beschreibung dieser

Transformation findet sich bei Flassak (1990).

Die Erhaltungsgleichungen werden in einem versetzten Gitter nach Harlow und Welch (1965) numerisch mit einem Finite-Differenzen-Verfahren gelöst. In diesem versetzten Gitter sind skalare Größen (θ , ρ , p und V) und vektorielle Größen (u , v und w) an unterschiedlichen Stellen definiert. Die skalaren Größen haben ihren Definitionspunkt im Schwerpunkt der Gitterzelle, bei den vektoriellen Größen liegt der Definitionspunkt im Flächenschwerpunkt der entsprechenden Schnittfläche zwischen zwei Gitterzellen (Bild 5.1). Die Verwendung des versetzten Gitters stellt sicher, dass die austretenden Flüsse den eintretenden Flüssen in der Nachbarzelle entsprechen. Das numerische Verfahren ist somit konservativ. Dies bedeutet es treten keine durch die Diskretisierung verursachten künstliche Quellen und Senken auf.

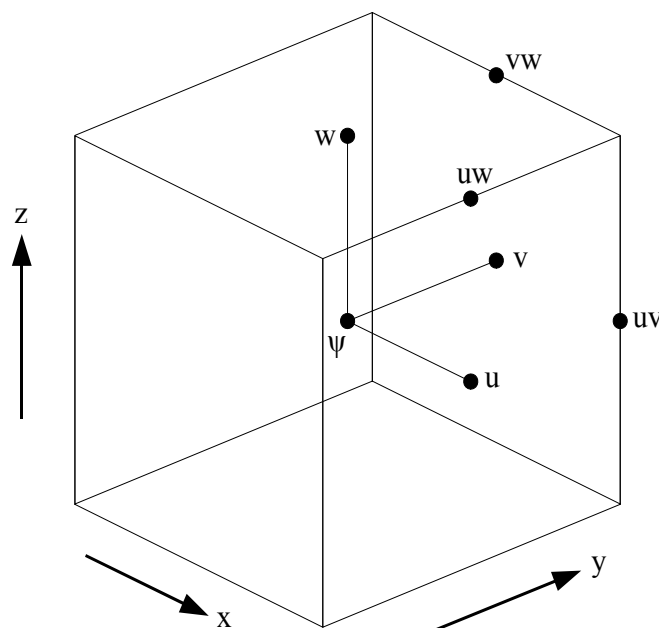


Bild 5.1: Gitterzelle mit den Definitionsorten der Größen (Flassak, 1990).

Die Erhaltungsgleichungen wurden zeitlich mit zwei unterschiedlichen Verfahren diskretisiert. Die Advektionsterme und die Terme der horizontalen Diffusion werden mit dem in zweiter Ordnung genauen, expliziten Adams-Bashforth-Verfahren berechnet. Der nichthydrostatische Druckanteil und die vertikale Diffusion hingegen werden implizit berechnet. Die dafür zu lösende

elliptische Bestimmungsgleichung wird mit einem schnellen Löser, der auf der schnellen Fourier Transformation basiert, gelöst (Flassak und Moussiopoulos, 1989).

5.2.3 Anfangs- und Randbedingungen

Die Gleichungen (5.2) bis (5.6) stellen ein Anfangs-Randwert-Problem dar. Zur Lösung dieses Problems müssen der Anfangszustand im gesamten Gebiet und die zeitliche Entwicklung der Größen an den Modellrändern vorgegeben werden.

Anfangszustand:

Vor der Simulation müssen die Anfangszustände für das Geschwindigkeitsfeld und das Temperaturfeld bestimmt werden. Dazu wird ein diagnostisches Modell, das nach der Methode der objektiven Analyse arbeitet, verwendet (Kunz, 1995). Es werden dabei das Windfeld und die Temperaturverteilung im Rechengebiet auf Grundlage von Messdaten 'rekonstruiert'. Dabei werden die vorhandenen Messdaten auf das gesamte Rechengebiet interpoliert. Das gewonnene Windfeld muss zudem als Nebenbedingung die Kontinuitätsgleichung erfüllen (Moussiopoulos et al., 1988). Kunz (1995) hat die Interpolation für die Geschwindigkeit und die Temperatur ausführlich beschrieben. Die Bestimmung der Anfangsverteilung der Luftfeuchte geschieht in Anlehnung an das von Kunz (1995) beschriebene Verfahren zur Bestimmung des Anfangszustandes der potentiellen Temperatur. Die Interpolation der Luftfeuchte ist bei Bickmeier (2000) beschrieben.

Randbedingungen:

Bei mesoskaligen Modellen besteht das Problem, dass von sechs Rändern des Rechengebiets nur die untere Berandung ein physikalischer Rand ist. Die restlichen fünf Ränder sind künstlich. Künstliche Ränder benötigen aber Randbedingungen, die freie Bewegungen von Störungen vom Inneren des Rechengebiets über den Rand nach außen zulassen, ohne dass es am Rand zu

Reflexionen kommt. Außerdem soll auch die Möglichkeit bestehen, Informationen von außen über die künstlichen Ränder ins Rechengebiet zu übertragen. Im Modell MEMO werden für die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten, die potentielle Temperatur und die Luftfeuchte an den seitlichen Rändern erweiterte Strahlungsrandbedingungen nach Carpenter (1982) verwendet:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -C_{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial n} + \frac{\partial \psi_s}{\partial t} + C_{\psi} \frac{\partial \psi_s}{\partial n} \quad (5.14)$$

In Gleichung (5.14) ist n die Koordinatenrichtung senkrecht zum Rand, C_{ψ} die Phasengeschwindigkeit der Größe ψ und ψ_s die großräumige Lösung der Erhaltungsgleichungen ohne die lokale mesoskalige Abweichung. Die großräumige Lösung ψ_s kann mit Hilfe des zuvor erläuterten diagnostischen Modells auf Grundlage von Messwerten oder mit Hilfe der Mehrgebietsmethode nach Kunz (1995) bestimmt werden. Bei der Mehrgebietsmethode wird das zu betrachtende Rechengebiet in eine Rechnung für ein größeres Gebiet eingebettet. Die Modelllösung des größeren Gebiets entspricht dann ψ_s . Mit der Verwendung dieser Art von Randbedingungen wird erreicht, dass über die seitlichen Ränder hinweg Wellen das Rechengebiet verlassen können ohne dabei größere Reflexionen zu verursachen. Damit wird der Einfluss der Reflexionen auf die Lösung im Rechengebiet stark vermindert.

Um am Rand die Beeinflussung der normal gerichteten Windgeschwindigkeitskomponente durch Druckänderungen zu verhindern, wird für den nichthydrostatischen Druckanteil p_{nh} an den seitlichen Rändern eine homogene Neumann-Randbedingung verwendet.

Am oberen Rand des Rechengebiets wird eine Neumann-Randbedingung für die horizontalen Windgeschwindigkeitskomponenten, für die potentielle Temperatur und für die Luftfeuchte gewählt.

Am physikalischen unteren Rand des Rechengebiets werden die Randbedingungen, außer für den nichthydrostatischen Druckanteil p_{nh} , mit Hilfe der Monin-Obukhov-Ähnlichkeitstheorie ermittelt. Der nichthydrostatische Druckanteil p_{nh} wird aus der Forderung, dass kein Massenfluss senkrecht zur

Bodenoberfläche auftreten darf abgeleitet. Die Temperatur an der Bodenoberfläche wird, außer für Wasserflächen durch die Bilanz von auf- und abwärts gerichteten Energieflüssen am Erdboden ermittelt. Für Wasserflächen wird ein Temperaturwert vorgegeben. Die Bilanzgleichung hat folgende Form:

$$S\downarrow_B - S\uparrow_B + R\downarrow_B - R\uparrow_B - Q_{H,B} - Q_{L,B} - Q_S - Q_A = 0. \quad (5.15)$$

Durch S und R werden in dieser Gleichung die kurz- und langwelligen Strahlungsflüsse ausgedrückt. $Q_{H,B}$ und $Q_{L,B}$ sind die turbulenten fühlbaren bzw. latenten Wärmeströme. Bei Q_S handelt es sich um den Wärmestrom in den Boden und mit Q_A können anthropogene Wärmequellen berücksichtigt werden. Die Berechnung des Strahlungstransports erfolgt mit dem Strahlungsmodell IRIS (Kapitel 5.4).

5.3 MARS

Das Ausbreitungs- und Chemiemodell MARS wird zur Berechnung des Stofftransports und für die Behandlung des Aerosols in der Atmosphäre verwendet. Das Programm MARS wurde am Institut für Technische Thermodynamik Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe in Zusammenarbeit mit dem Laboratory of Heat Transfer and Environmental Engineering, Aristotle University Thessaloniki (Greece) entwickelt. Das Aerosolmodell in MARS wurde von A. Arvanitis an der Aristoteles Universität in Thessaloniki im Rahmen seiner Doktorarbeit „Mathematical description of aerosol dispersion in urban areas“ entwickelt und in MARS integriert. Da die Grundlagen zum Aerosolmodell bereits im Kapitel 3 beschrieben wurden, wird hier nicht mehr darauf eingegangen. Es sollen nun die Grundlagen zur Ausbreitung und Umwandlung von Luftbeimengungen kurz beschrieben werden. Eine ausführliche Beschreibung findet sich bei Kessler (1994) und bei Sahm (1998).

Die für die Ausbreitungsrechnung notwendigen meteorologischen Daten, wie z. B. das Windfeld oder das Temperaturfeld, werden MARS vom prognostischen Berechnungsmodell MEMO zur Verfügung gestellt. Zur Ermittlung der Umwandlungsrate von Luftbeimengungen sind in MARS unterschiedliche Reaktionsmechanismen implementiert, u. a. KOREM (Moussiopoulos, 1989), EMEP (Simpson et al., 1993) und RACM (Stockwell et al., 1997).

5.3.1 Grundgleichung

Der Berechnung der Ausbreitung und Umwandlung von Luftbeimengungen in einem mathematischen Gleichungssystem ist die Massenerhaltung zugrundegelegt:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial u c_i}{\partial x} + \frac{\partial v c_i}{\partial y} + \frac{\partial w c_i}{\partial z} = D_i \left(\frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} \right) + R_i + S_i \quad (5.16)$$

Hierbei stehen c_i für die Konzentration des Stoffes i , u, v, w für die Windgeschwindigkeitskomponenten, D_i für den molekularen Diffusions-

koeffizienten, R_i für die Umwandlungsrate durch chemische Reaktion und S_i für den Quell- und Senkenterm.

Aufgrund der turbulenten Strömung in der Atmosphäre sind die Windgeschwindigkeitskomponenten und ebenso die Stoffkonzentrationen zufälligen Schwankungen unterworfen. Mit der Reynoldsenen Zerlegung in Mittelwert und Schwankung

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + u' \\ v &= \bar{v} + v' \\ w &= \bar{w} + w' \\ c &= \bar{c} + c' \end{aligned} \quad (5.17)$$

und der Annahme, dass

$$\bar{u}' = \bar{v}' = \bar{w}' = \bar{c}' = 0 \quad (5.18)$$

ergibt Gleichung 5.16 nach Einsetzen von 5.17 und Mittelung

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u} \bar{c}_i}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v} \bar{c}_i}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w} \bar{c}_i}{\partial z} + \frac{\partial \overline{u' c_i'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v' c_i'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w' c_i'}}{\partial z} = \\ D_i \left(\frac{\partial^2 \bar{c}_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}_i}{\partial z^2} \right) + R_i + S_i \end{aligned} \quad (5.19)$$

Mit Hilfe der K-Theorie (z. B. Dobbins, 1979) können die Ableitungen der Terme mit den turbulenten Flüßen durch folgende Ausdrücke ersetzt werden:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \overline{u' c_i'}}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \right); & -\frac{\partial \overline{v' c_i'}}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} \right); \\ -\frac{\partial \overline{w' c_i'}}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (5.20)$$

Diese eingeführten Terme bilden eine Analogie zur molekularen Diffusion. Der Tensor des turbulenten Austauschkoefizienten K setzt sich aus drei Komponenten in jeder Koordinatenrichtung zusammen (Calder, 1965). Der turbulente Austauschkoefizient ist nicht direkt ermittelbar. Er muss über eine Parameterisierung, z. B. aus Größen des Strömungsfeldes und der Bodenbeschaffenheit bestimmt werden (Winkler, 1995).

Da die molekulare Diffusion um Größenordnungen kleiner ist als die turbulente, kann sie ihr gegenüber vernachlässigt werden. Nach Einsetzen der Gleichungen

5.20 in Gleichung 5.16 folgt:

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial \bar{u} \bar{c}_i}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v} \bar{c}_i}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w} \bar{c}_i}{\partial z}}_{\text{Advektion}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \right)}_{\text{turbulente Diffusion}} + R_i + S_i \quad (5.21)$$

Diese Gleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung der Konzentrationen der betrachteten Stoffe.

Die ausführliche Vorlage zu dieser Beschreibung findet sich in Kessler (1994).

5.3.2 Lösungsverfahren

Im Modell MARS findet, genauso wie im Modell MEMO, ein geländebeeinflusstes Koordinatensystem Verwendung. Dies bedeutet aber, dass für die numerische Berechnung der Grundgleichung eine Koordinatentransformation durchgeführt werden muss. Die Transformation erfolgt nach dem gleichen Muster wie die im Modell MEMO und ist dort (Kapitel 5.2.2) beschrieben.

Eine weitere Gemeinsamkeit mit dem Modell MEMO besteht darin, dass auch im Modell MARS die Erhaltungsgleichungen in einem versetzten Gitter mit einem Finite-Differenzen-Verfahren gelöst werden. In diesem versetzten Gitter sind die skalaren Größen (z. B. Temperatur und Konzentration) und die vektoriellen Größen (Windgeschwindigkeitskomponenten) an unterschiedlichen Stellen definiert. Der Definitionsort der skalaren Größen befindet sich in den Schwerpunkten der Gitterzellen, für die vektoriellen Größen liegt er in den entsprechenden Schnittflächen zwischen zwei benachbarten Gitterzellen. Auch dies wurde bereits im Kapitel 5.2.2 erläutert.

In MARS findet eine Operatorenzerlegung statt. So werden die Advektion und die horizontale Diffusion mit einem expliziten Lösungsverfahren berechnet, die vertikale Diffusion und die chemische Umwandlung hingegen mit einem impliziten Verfahren.

Die Advektion kann mit einem Verfahren nach Smolarkiewicz (Moussiopoulos, 1989) oder nach einem Flusskorrekturverfahren (Wortmann-Vierthaler und Moussiopoulos, 1995) berechnet werden. Beide Verfahren weisen eine geringe numerische Diffusion auf.

Die Konzentrationsänderungen durch Advektion und Diffusion werden nicht direkt zu den Werten des zurückliegenden Zeitschritts addiert, sondern durch die aktuelle Zeitschrittweite dividiert und als Quellterm dem impliziten Teil hinzugefügt. Diese Vorgehensweise ist vorteilhaft, weil das Ergebnis des impliziten Teils eines Integrationsschritts direkt als Ausgangsbasis für den nächsten Schritt des impliziten Teils verwendet werden kann (Moussiopoulos, 1989).

Zur Beschreibung der chemischen Umwandlung können die bereits zu Beginn des Kapitels 5.3 erwähnten Reaktionsmechanismen KOREM, RACM und EMEP eingesetzt werden. Eine flexible Formulierung der chemischen Kinetik bewirkt eine leichte Austauschbarkeit der Reaktionsmechanismen.

5.3.3 Eingabedaten

Damit mit MARS eine Ausbreitungsrechnung durchgeführt werden kann, benötigt es bestimmte Eingabedaten. Dabei handelt es sich zum einen um meteorologische Daten und zum anderen um Emissionsdaten. Für beide müssen die Angaben innerhalb und an den Rändern des Berechnungsgebietes vorliegen.

Meteorologische Eingabedaten

Voraussetzung für die Berechnung der Ausbreitung von Luftbeimengungen sind Angaben über meteorologische Größen. Es handelt sich hierbei um Angaben zu den Windgeschwindigkeitskomponenten, zur Temperatur und zur Turbulenz.

Für bestimmte Zeitintervalle werden die entsprechenden Daten von MEMO in eine spezielle Ausgabedatei für MARS geschrieben, das dann diese Daten bei Bedarf einliest. Die Gültigkeit der Daten bleibt solange erhalten, bis das Zeitintervall beendet ist und von MEMO neue Daten zur Verfügung gestellt wurden.

Damit die Daten von MEMO auch für MARS passend sind muss das Rechengitter von MEMO mit dem Rechengitter von MARS übereinstimmen.

Emissionsdaten

Voraussetzung für eine Ausbreitungsrechnung ist die Kenntnis der Emissionen der zu betrachtenden Luftbeimengungen. Die Anzahl und die Arten der Luftbeimengungen hängen von dem gewählten Reaktionsmechanismus ab. Die Emissionsdaten werden aber nicht von MEMO zur Verfügung gestellt, sie liegen als Datenbasis vor. Diese setzt sich aus mehreren Dateien zusammen. Die Emissionsdaten können entweder direkt aus Messungen stammen, oder von Berechnungsmodellen die eine Interpolation von Messdaten auf ein Gitter vorgenommen haben.

Das Definitionsgitter für die Emissionsdaten kann in seiner Ausdehnung von dem Gitter für die Ausbreitungsrechnung abweichen. Das Gitter der Ausbreitungsrechnung muss aber vollständig innerhalb des Definitionsgitters liegen. Außerdem sollten die Maschenweiten und die Lagen der Maschen übereinstimmen.

5.4 Strahlungsmodell IRIS

Das Strahlungsmodell IRIS verwendet zur Beschreibung der langwelligen Strahlung die Methode der (Breitband-) Emissivitäten und für die kurzwellige Strahlung ein implizites Verfahren zur Berücksichtigung der Mehrfachstreuung. Eine ausführliche Beschreibung des Strahlungsmodells IRIS findet sich bei Moussiopoulos (1987, 1989). Die folgende Beschreibung folgt dieser. Das Strahlungsmodell IRIS ermöglicht, den Einfluss von Luftbeimengungen und von diagnostisch vorgegebenen Wolkenschichten zu berücksichtigen.

5.4.1 Langwellige Strahlung

Die auf- und abwärtsgerichteten Flüsse der langwelligen Strahlung können aus der Integration der monochromatischen Flüsse $R_{\lambda\uparrow}$ und $R_{\lambda\downarrow}$ über die Wellenlänge λ unter Vernachlässigung der Streuung gewonnen werden.

$$R\uparrow = \int_0^{\infty} R_{\lambda\uparrow} d\lambda \quad (5.22)$$

$$R\downarrow = \int_0^{\infty} R_{\lambda\downarrow} d\lambda \quad (5.23)$$

Die ausführliche Integration der Gleichungen (5.22) und (5.23) ist in Liou (1980) zu finden. Für die im vorliegendem Parametrisierungsschema verwendete Methode der (Breitband-) Emissivitäten (Moussiopoulos, 1989) führt die Integration nach einigen Vereinfachungen zu

$$R\uparrow = \sigma T_0^4 t^f(u, T_0) + \int_0^u \sigma T^4 \Big|_{\hat{u}} \frac{dt^f}{d\hat{u}} \Big|_{u-\hat{u}, T} d\hat{u} \quad (5.24)$$

$$R\downarrow = \int_{u_{\infty}}^u \sigma T^4 \Big|_{\hat{u}} \frac{dt^f}{d\hat{u}} \Big|_{\hat{u}-u, T} d\hat{u} \quad (5.25)$$

Es stehen T_0 für die Bodentemperatur, u für die optische Weglänge, σ für die Stefan-Boltzmann-Konstante und t^f für die (Breitband-) Transmissivität, die sich unter Vernachlässigung der Streuung von langwelliger Strahlung aus

$$t^f(u, T) = 1 - e^f(u, T) \quad (5.26)$$

berechnen lässt. Darin bezeichnet e^f die (Breitband-) Emissivität, die in der Regel empirisch ermittelt werden muss. Für einen klaren wolkenlosen Himmel setzt sie sich aus den Emissivitäten von Wasserdampf e_w^f und Kohlendioxid e_c^f zusammen.

$$e^f = e_w^f + e_c^f - \Delta e_{w,c}^f \quad (5.27)$$

Die Überlappung der Emissivität im 15 μm -Band wird durch den Korrekturterm $\Delta e_{w,c}^f$ berücksichtigt (Staley und Jurica, 1970; Redmond, 1980). Die Werte für e_w^f und e_c^f werden nach Vorschläge von Atwater (1974) und Kondratyev (1969) mittels empirisch gewonnener Funktionen in Abhängigkeit der optischen Weglängen für Wasserdampf und Kohlendioxid bestimmt.

Die zusätzliche Absorption langwelliger Strahlung durch Luftbeimengungen wurde bisher nach Paltridge und Platt (1976) bei der Berechnung der (Breitband-) Transmissivität als Erweiterung der effektiven Transmissivität

$$\tilde{t} = t^f t_p \quad \text{mit} \quad t_p = e^{-\beta k_{ap}^l \Delta H_p} \quad (5.28)$$

berücksichtigt. In dieser Gleichung bezeichnet β den Diffusivitätsfaktor, k_{ap}^l den Koeffizienten langwelliger Absorption durch Luftbeimengungen und ΔH_p das zugehörige optische Weginkrement. Die Berücksichtigung des Aerosols im Strahlungsmodell machte eine Überarbeitung dieses Terms notwendig. Eine genaue Beschreibung der Überarbeitung findet sich im Kapitel 5.5 "Gesamtmodell".

Bei Bewölkung können mehrere Wolkenschichten berücksichtigt werden. Die Voraussetzung hierfür ist, dass die obere und untere Begrenzung einer Wolkenschicht mit den Gitterflächen zusammenfallen. Für jede Wolkenschicht muss der Bedeckungsgrad ε_l bekannt sein. Die Gleichungen (5.24) und (5.25) werden ersetzt durch

$$\begin{aligned}
 R \uparrow = & \epsilon_{c \downarrow}(u) \sigma T_0^4 \tilde{t}(u, T_0) + \int_0^u \epsilon_{c \downarrow}(u - \hat{u}) \sigma T^4 \Big|_{\hat{u}} \frac{d \tilde{t}}{d \hat{u}} \Big|_{u - \hat{u}, T} d \hat{u} \\
 & + \sum_j \epsilon_{l, j} \epsilon_{c \downarrow}(u - U_{ct, j}) \sigma \bar{T}_{c, j}^4 \tilde{t}(u - u_{ct, j}, \bar{T}_{c, j}) \\
 & \quad \forall j: 0 < u_{ct, j} \leq u
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

$$\begin{aligned}
 R \downarrow = & - \int_u^{u_\infty} \epsilon_{c \uparrow}(\hat{u} - u) \sigma T^4 \Big|_{\hat{u}} \frac{d \tilde{t}}{d \hat{u}} \Big|_{\hat{u}, T} d \hat{u} \\
 & + \sum_j \epsilon_{l, j} \epsilon_{c \uparrow}(u_{cb, j} - u) \sigma \bar{T}_{c, j}^4 \tilde{t}(u_{cb, j} - u, \bar{T}_{c, j}) \\
 & \quad \forall j: u \leq u_{cb, j} < u_\infty
 \end{aligned} \tag{5.30}$$

Die Summen in den Gleichungen (5.29) und (5.30) sind Beiträge zu den auf- bzw. abwärts gerichteten Flüssen langwelliger Strahlung aller Wolkenschichten unter- und oberhalb der betrachteten Schicht l . $u_{cb, j}$ und $u_{ct, j}$ sind die Bezeichnungen für die optischen Weglängen an der Unter- bzw. Obergrenze der betrachteten Wolkenschicht. Der Anteil der unter und über der betrachteten Schicht l liegende wolkenlose Himmel ist durch die Parameter

$$\epsilon_{c \downarrow} = \prod_j (1 - \epsilon_{l, j}) \quad \forall j: \hat{u} < u_{ct, j} \leq u \tag{5.31}$$

$$\epsilon_{c \uparrow} = \prod_j (1 - \epsilon_{l, j}) \quad \forall j: u \leq u_{cb, j} < \hat{u} \tag{5.32}$$

gegeben.

Die oben angestellte Betrachtung der Wolken zeigt, dass die Wolkenschichten im Strahlungsmodell IRIS als schwarze Körper mit einem über das Rechengebiet gemittelten, diagnostischen Bedeckungsgrad $\epsilon_{l, j}$ behandelt werden.

Die zeitliche Änderung der Temperatur der Luft in einer mit k bezeichneten Gitterzelle durch die langwellige Strahlung ergibt sich aus

$$\left(\frac{dT}{dt} \right)_k = \frac{g}{c_p} \frac{R \downarrow_k - R \downarrow_{k-1} + R \uparrow_{k-1} + R \uparrow_k}{p_{k-1} - p_k}. \tag{5.33}$$

5.4.2 Kurzwellige Strahlung

In der Atmosphäre wird kurzwellige Strahlung an kleinsten Teilchen gestreut und absorbiert. Die Beschreibung der kurzwelligen Strahlung gestaltet sich einfacher als die der langwelligen Strahlung, da die Emission kurzwelliger Strahlung entfällt. Um die Extinktion der kurzwelligen Strahlung zu ermitteln, werden im Strahlungsmodell IRIS Transmissivitäten und Absorptivitäten bestimmt. Dies geschieht mit über das gesamte solare Spektrum gemittelten Größen. Für eine Schicht im Berechnungsgebiet wird der Fluss der abwärts gerichteten kurzwelligen Strahlung aus der Summe des transmittierten Teils des abwärts gerichteten Flusses und dem reflektierten Teil des aufwärts gerichteten Flusses aus der darüber liegenden Schicht ermittelt. Der aufwärts gerichtete Fluss dieser Schicht wird entsprechend aus der Summe des transmittierten und reflektierten Teil des Flusses aus der darunter liegenden Schicht ermittelt. Dies führt zu folgendem Zusammenhang:

$$S \downarrow_{k-1} = t \downarrow_k S \downarrow_k + r \uparrow_k S \uparrow_{k-1} \quad (5.34)$$

$$S \uparrow_k = t \uparrow_k S \uparrow_{k-1} + r \downarrow_k S \downarrow_k. \quad (5.35)$$

Am Boden ergibt das Verhältnis der aufwärts und abwärts gerichteten Strahlung die Albedo

$$A = \frac{S \uparrow_0}{S \downarrow_0}. \quad (5.36)$$

Die Größen $t \uparrow$, $t \downarrow$, $r \uparrow$ und $r \downarrow$ aus den Gleichungen (5.34) und (5.35) sind die inkrementalen Transmissivitäten und Reflektivitäten. Die Transmissivitäten werden aus

$$t \downarrow_k = \tau \downarrow_{n,k} \tau \downarrow_{ap,k} \tau \downarrow_{sp,k} \tau \downarrow_{c,k} \quad (5.37)$$

$$t \uparrow_k = \tau \uparrow_{n,k} \tau \uparrow_{ap,k} \tau \uparrow_{sp,k} \tau \uparrow_{c,k} \quad (5.38)$$

berechnet. Darin sind die Transmissivitäten für klare Luft

$$\tau \downarrow_{n,k} = \frac{t \downarrow_{n,k-1}}{t \downarrow_{n,k}} \quad (5.39)$$

$$\tau \uparrow_{n,k} = \frac{t \uparrow_{n,k}}{t \uparrow_{n,k-1}} \quad (5.40)$$

mit

$$t \downarrow_{n,k} = t(p_k, m) - a_w(X \downarrow_k) - a_{OZ} \quad (5.41)$$

$$t \uparrow_{n,k} = \frac{t(p_0, \tilde{m})}{t(p_k, \tilde{m})} - a_w(X \uparrow_k) - a_{OZ}. \quad (5.42)$$

Die Extinktion durch permanente Gase $t(p_k, m)$ (Kondratyev, 1969), die Absorption von Wasserdampf $a_w(X \uparrow, \downarrow_k)$ und die von Ozon a_{OZ} werden parametrisiert (Lacis und Hansen, 1974).

Die Absorption und Streuung durch Luftbeimengungen wurden bisher durch die Größen

$$\tau_{ap,k} = \frac{t_{ap,k-1}}{t_{ap,k}} = e^{-k_{ap}^S \Delta Y_k} \quad (5.43)$$

$$\tau_{sp,k} = \frac{t_{sp,k-1}}{t_{sp,k}} = e^{-k_{sp}^S \Delta Y_k} \quad (5.44)$$

berücksichtigt. Die Parameter k_{ap} , k_{sp} sind empirisch anzupassende kurzwellige Absorptions- und Streuungskoeffizienten der Luftbeimengungen. Y ist eine Funktion der optischen Luftmasse. Die Berücksichtigung des Aerosols im Strahlungsmodell machte eine Überarbeitung dieses Terms notwendig. Eine genaue Beschreibung der Überarbeitung findet sich im Kapitel 5.5 "Gesamtmodell".

Bei Bewölkung sind die Faktoren $\tau \uparrow_k$, $\tau \downarrow_k$ ungleich 1 und hängen vom Wolkentyp ab. Für acht verschiedene Wolkentypen werden die von Atwater und Ball (1978) dafür angegebenen Transmissionskoeffizienten benutzt. Fällt die j -te Wolkenschicht in die k -te Höhenschicht, dann lässt sich die Transmissivität durch

$$\tau_{c,k} = \frac{t_{c,k-1}}{t_{c,k}} = 1 - \epsilon_{l,j} (1 - \psi_{c,j}) \quad (5.45)$$

bestimmen. Darin ist $\psi_{c,j}$ die vom Wolkentyp abhängige Transmissivität.

Für die zeitliche Änderung der Temperatur durch kurzwellige Strahlung erhält man schließlich

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_k = \frac{g}{c_p} \frac{S \downarrow_k - S \downarrow_{k-1} + S \uparrow_{k-1} + S \uparrow_k}{p_{k-1} - p_k}. \quad (5.46)$$

5.5 Gesamtmodell

Das in dieser Arbeit zur Untersuchung des Einflusses des Aerosols auf atmosphärische Vorgänge verwendete Gesamtmodell setzt sich aus den Programmen MEMO und MARS zusammen. Das Programm MEMO enthält das Strahlungsmodell IRIS und das Optikmodul OPAC.

Bild 5.2 zeigt den schematischen Aufbau dieses Gesamtmodells und die wichtigsten Abläufe darin.

Das Gesamtmodell ist so aufgebaut, dass die Rechenläufe MEMO und MARS eigenständige Prozesse sind. Beide Rechenläufe benötigen zu Beginn Informationen, wie die jeweiligen Anfangsbedingungen, Angaben zum Aufbau des Gitters und Randbedingungen für definierte Zeitpunkte. Von MEMO werden hauptsächlich meteorologische und geographische Daten benötigt. Die geographischen Daten werden von MARS ebenfalls benötigt. Diese müssen mit denen für MEMO übereinstimmen. Außerdem müssen für MARS Konzentrationsangaben für Gase und Aerosol vorliegen.

Werden die beiden Rechenläufe gestartet, befindet sich MARS zunächst in einer Warteschleife bis Daten von MEMO vorliegen. MEMO startet hingegen sofort.

Der Datenaustausch zwischen beiden Rechenläufen erfolgt über Dateiausgaben in beiden Richtungen. In der Richtung MEMO → MARS werden die aktuellen meteorologischen Daten, wie Windfeld und Temperaturfeld, übergeben. Sind diese Daten übergeben, wird die Simulation in MEMO ebenfalls durch eine Warteschleife unterbrochen. Die Warteschleife in MARS wird beendet, die Daten werden eingelesen und die Simulation startet.

Anhand dieser Daten können nun mit MARS der Transport des Aerosols und der Gase, sowie deren Veränderungen berechnet werden.

Ist die Zeitspanne des von MEMO vorgegebenen Übergabeintervalls abgelaufen findet eine Datenübertragung von MARS zu MEMO statt. Nun werden Konzentrationsangaben des Aerosols für das gesamte Rechengebiet an MEMO übergeben. Mit Abschluss dieses Informationsaustausches wird die

Warteschleife in MARS wieder aktiviert und in MEMO wird die Simulation unter Berücksichtigung der neu eingelesenen Daten fortgesetzt.

Mit Hilfe des Moduls OPAC in MEMO werden anhand der Angaben von MARS die optischen Eigenschaften des Aerosols berechnet. Das Ergebnis wird in das Strahlungsmodell IRIS geladen, das den Strahlungshaushalt unter Berücksichtigung des Aerosoleinflusses ermittelt. Der hat wiederum Einfluss auf die Berechnung der Vorgänge in der Atmosphäre.

Ist das Ende des Übergabeintervalls erreicht, werden von MEMO wieder die gegenwärtigen meteorologischen Daten an MARS übergeben und die Schleife beginnt von vorn. Dieser den Einzelprozessen übergeordnete Gesamtprozess läuft so lange ab, bis das Ende des Zeitraums der Rechnung erreicht ist.

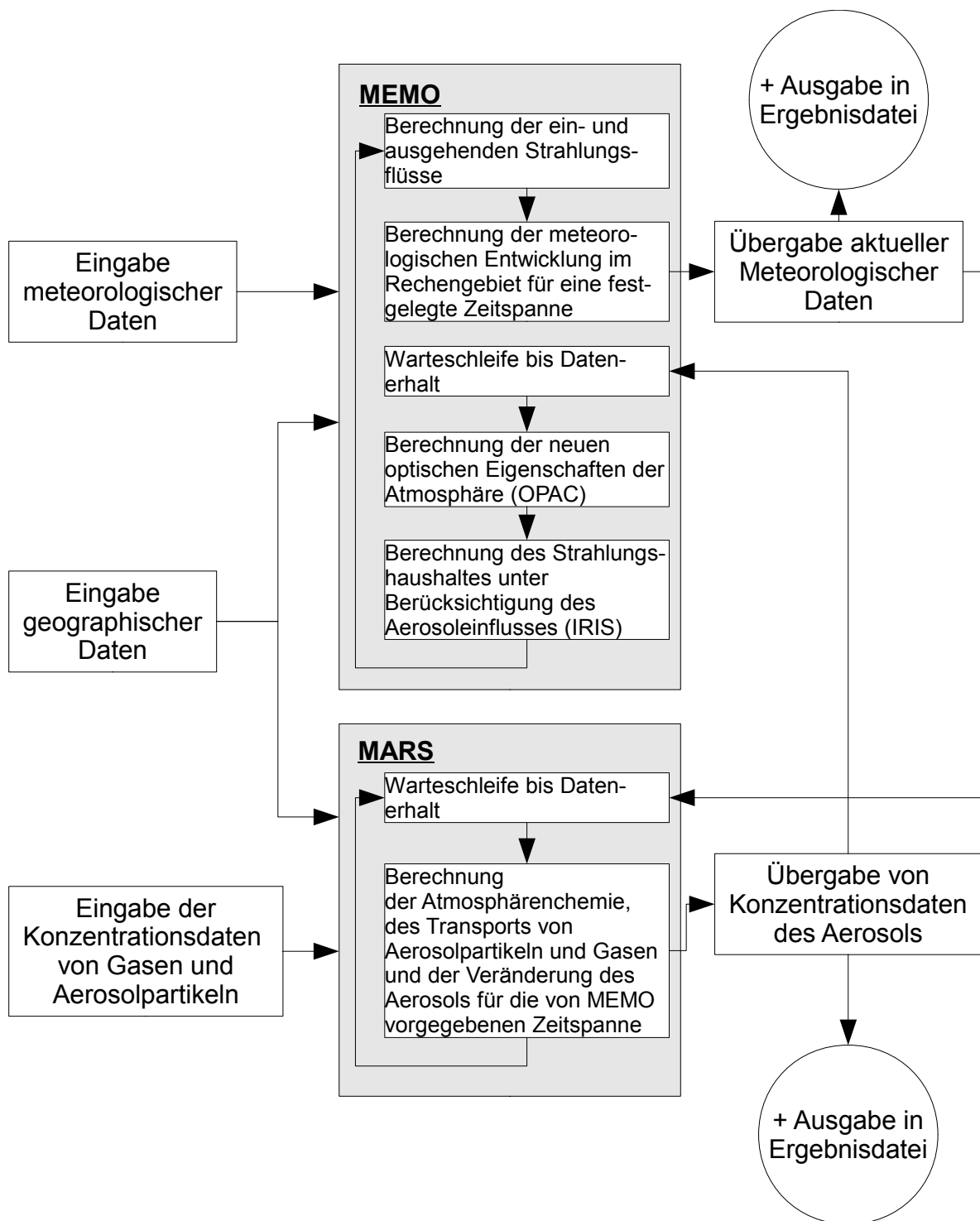


Bild 5.2: Ablaufschema des Gesamtmodells mit Einzelprozessen und Informationsflüssen.

5.5.1 Das Modul OPAC

Bei OPAC handelt es sich um ein eigenständiges Programm zur Berechnung optischer Eigenschaften von Aerosolen und Wolken. Es wurde am Meteorologischen Institut der Universität München entwickelt (Kapitel 4.3 “Modellmäßige Ermittlung optischer Eigenschaften“).

Im Rahmen dieser Arbeit wurde OPAC so umgebaut, dass es sich als Optikmodul in die Struktur von MEMO eingliedert. Dazu waren einige Erweiterungen notwendig.

Optische Eigenschaften des Hintergrundaerosols

Eine Erweiterung berücksichtigt die Aerosolkonzentration und die daraus resultierenden Absorptions- und Streukoeffizienten oberhalb des Berechnungsgebietes. Dazu wird das Gebiet oberhalb des Berechnungsgebietes in drei Bereiche eingeteilt. Der Bereich, der direkt an das Berechnungsgebiet anschließt erstreckt sich bis zu einer Höhe von 6000 m. Besitzt das Rechenggebiet bereits diese Höhe, fällt dieser Bereich weg. Der darauf folgende Bereich (freie Troposphäre) erstreckt sich bis zu einer Höhe von 12000 m. Der dritte Bereich (Stratosphäre) endet bei einer Höhe von 35000 m.

Für den ersten Bereich (direkt am Rechenggebiet anschließend) muss eine Zusammensetzung für das Hintergrundaerosol definiert werden, die möglichst der Aerosolzusammensetzung im Berechnungsgebiet entspricht. Die Angaben entsprechen einem Aerosol in Meereshöhe. Die Konzentration dieses Aerosols ist in horizontaler Richtung konstant und ändert sich nur mit der Höhe. Die Höhenabhängigkeit der Anzahlkonzentration wird durch ein Exponentialprofil mit der Formulierung

$$N(h) = N(0) \cdot e^{-\frac{h}{z}} \quad (5.47)$$

Beschrieben, wobei $N(0)$ für die Anzahlkonzentration auf Meereshöhe steht und h für die Höhe, für die die Anzahlkonzentration berechnet werden soll. z ist eine Skalierungshöhe, die die Profilform festlegt. Für die gewählten Aerosolkomponenten werden jeweils die Anzahlkonzentrationen in 100 m

Schritten ermittelt und anschließend über die gesamte Bereichshöhe summiert. Der Einfluss der relativen Luftfeuchtigkeit auf das Aerosol wird ebenfalls berücksichtigt. Anhand der vorliegenden Aerosolzusammensetzung werden die optischen Eigenschaften unter Verwendung von OPAC für 62 Wellenlängenbereiche berechnet und anschließend für die kurz- und langwelligen Strahlungsbereiche gemittelt. Der kurzwellige Strahlungsbereich erstreckt sich von 0,25 μm bis 4 μm und der langwellige von 4 μm bis 40 μm . Mit dieser Maßnahme wird eine Reduzierung des Einflusses der Gebietshöhe auf das Ergebnis erreicht. Bei horizontal unveränderlichem Aerosol wird der Einfluss der Gebietshöhe völlig beseitigt.

Im Bereich der freien Troposphäre setzt sich das Aerosol aus den Komponenten "Wasserlöslich", "Ruß" und "Wasserunlöslich" zusammen. Der Anteil der Anzahlkonzentration der Einzelkomponente an der Anzahlkonzentration des Gesamtaerosols beträgt für "Wasserlöslich" 60 %, für "Ruß" annähernd 40 % und für "Wasserunlöslich" 0,017 %. Die Anzahlkonzentration auf Meereshöhe beträgt für das Gesamtaerosol 730 Partikel/cm³. Das Höhenprofil der Anzahlkonzentration wird auch hier durch Gleichung 5.47 beschrieben. Die relative Luftfeuchtigkeit wird für den gesamten Höhenbereich auf 50 % gesetzt. Damit wird dem Vorschlag von Hess et al. (1998) gefolgt. Diese Aerosolzusammensetzung ist unveränderlich. Aus diesem Grund geht für den Höhenbereich der freien Troposphäre eine konstante Transmissivität für den kurzwelligen Strahlungsbereich in das Strahlungsmodell IRIS ein.

Auf ähnliche Weise wird mit dem Bereich Stratosphäre verfahren. Das Aerosol hier besteht aus den gleichen Komponenten und den gleichen Anteilen am Gesamtaerosol wie in der freien Troposphäre. Die Anzahlkonzentration des Gesamtaerosols beträgt aber hier nur 3 Partikel/cm³. Dieser Wert ist für den gesamten Höhenbereich der Stratosphäre konstant. Auch hier wird dem Vorschlag von Hess et al. (1998) entsprochen.

Umwandlung von innerer Mischung in äußere Mischung

Im Ausbreitungsmodell MARS wird das Aerosol in innerer Mischung beschrieben. Die Parameter der Verteilungsfunktionen der 3 Moden sind

dadurch nur für das Gesamtaerosol und nicht für die einzelnen Aerosolkomponenten gegeben. Zusätzlich zu diesen Parametern stehen noch die Angaben der Massen der Einzelkomponenten zur Verfügung. Für OPAC müssen die Aerosoldaten in der Ebene der Einzelkomponenten auf einer äußeren Mischung basieren. Dies verlangt eine Umwandlung der Aerosoldaten des Gesamtaerosols von einer Mischungsart zur anderen. Anhand der Massenangaben werden die Anzahlkonzentrationen der Aerosolkomponenten durch Annahme typischer Parameter für ihre Verteilungsfunktionen, wie sie in OPAC Verwendung finden, mit folgender Gleichung ermittelt:

$$N_i = M_{0,i} = \frac{6 \cdot m_{g,i}}{\pi d_{P_{g,i}}^3 \rho_{P_i}} e^{-\left(\frac{9}{2} \ln^2 \sigma_{g,i}\right)}. \quad (5.48)$$

Die Größen N_i und $M_{0,i}$ stehen für die Anzahlkonzentration der Aerosolkomponente i , $m_{g,i}$ ist die Masse der entsprechenden Aerosolkomponente, ρ_{P_i} die Partikeldichte, $d_{P_{g,i}}$ der Mediandurchmesser der Verteilungsfunktion und $\sigma_{g,i}$ ihre Standardabweichung. Diese Umwandlung geschieht unter der Annahme, dass die Aerosolpartikel ihre Kugelform beibehalten. Die Anzahlkonzentrationen der wasserlöslichen Aerosolkomponenten werden in Abhängigkeit der vorliegenden relativen Luftfeuchtigkeit ermittelt. Die Bestimmung der Anzahlkonzentrationen findet in jeder Masche des Berechnungsgebiets separat statt.

Mittlung der optischen Eigenschaften

Mit OPAC werden Absorptions- (k_{ap}) und Streukoeffizienten (k_{sp}) für 62 Wellenlängenbereiche berechnet. Im Strahlungsmodell IRIS wird nur eine Aufteilung der Wellenlängen in kurz- und langwellig unterschieden. Dies erfordert eine Mittelung der Koeffizienten. Zur Mittelung wird die Schwarzkörperfunktion

$$F_0^\lambda(\lambda T) = \frac{\int_0^\lambda e_{\lambda,s}(T, \lambda) d\lambda}{\int_0^\infty e_{\lambda,s}(T, \lambda) d\lambda} \quad (5.49)$$

herangezogen (Polifke und Kopitz, 2005).

Mit der Schwarzkörperfunktion wird der Anteil der Strahlungsenergie für den Wellenlängenbereich von 0 bis λ zur gesamten Strahlungsenergie eines schwarzen Körpers mit der Temperatur T berechnet. Es steht $e_{\lambda,s}(T, \lambda)$ für die Strahlungsintensität eines schwarzen Körpers mit der Temperatur T. $F_0^\lambda(\lambda T)$ Ist eine Funktion des Produkts von $\lambda \cdot T$. Dies ermöglicht, die Schwarzkörperfunktion in allgemeiner Form zu tabellieren. Unabhängig von der Temperatur des schwarzen Körpers kann mit Hilfe dieser Tabelle der Strahlungsanteil für eine betrachtete Wellenlänge berechnet werden. Für die hier vorliegende Arbeit wird eine von Incropera und DeWitt (2002) angegebene Tabelle verwendet.

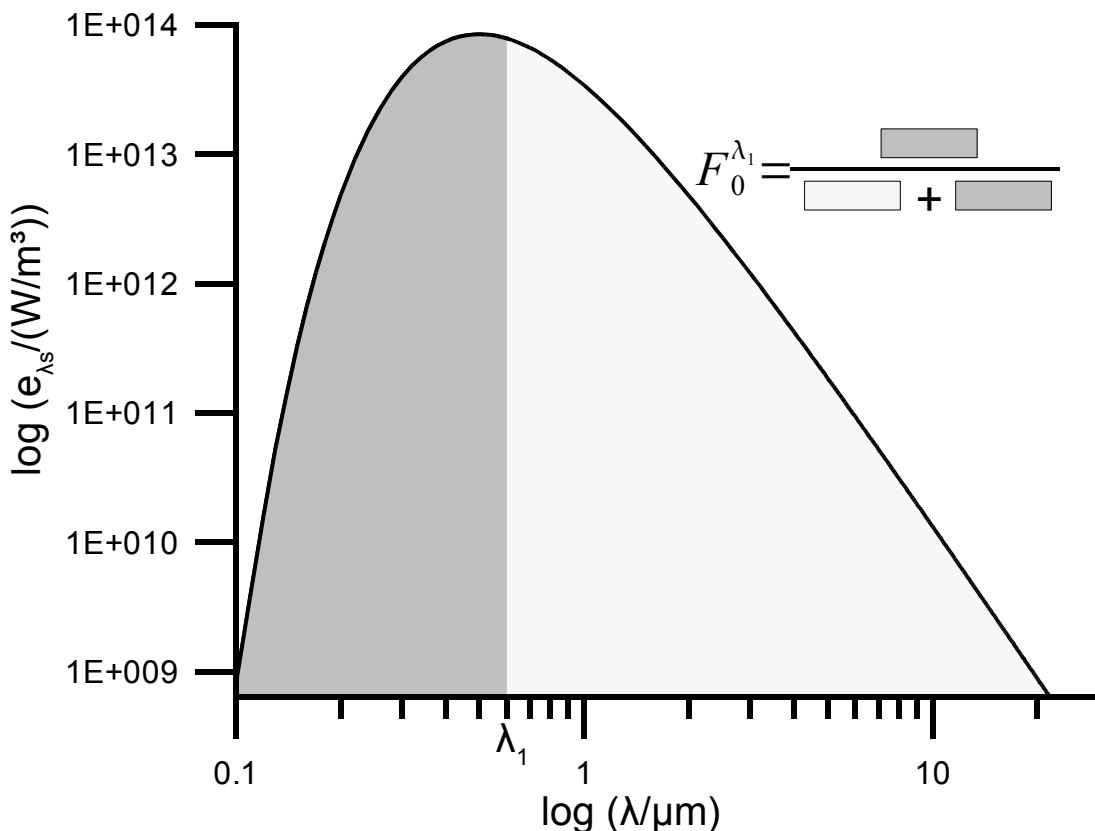


Bild 5.3: Schwarzkörperfunktion zur Bestimmung des Anteils F_0^λ der Strahlungsenergie im Wellenlängenbereich von 0 bis λ zur gesamten Strahlungsenergie eines schwarzen Körpers (nachgezeichnet, Polifke und Kopitz, 2005).

Die spektralen Koeffizienten für Absorption und Streuung sind definiert als

$$k_i(T, \lambda) = \frac{\dot{Q}_{i,\lambda}(\lambda) d\lambda}{\dot{Q}_\lambda(\lambda) d\lambda}, \quad (5.50)$$

mit $\dot{Q}_{i,\lambda}(\lambda)$ für die Strahlungsströme durch Absorption oder Streuung und $\dot{Q}_\lambda(\lambda)$ für den Gesamtstrahlungsstrom. Zur Mittelung der Koeffizienten werden diese für die jeweiligen Wellenlängenbereiche als konstant angesehen.

$$k_i(T, \lambda) = k_{i,n} \text{ für } \lambda_n < \lambda < \lambda_{n+1}, \quad n = 1, \dots, N \quad (5.51)$$

Mit Hilfe der Schwarzkörperfunktion folgt nun

$$k_i(T) = \sum_{n=1}^N k_{i,n} (F_0^\lambda(\lambda_n T) - F_0^\lambda(\lambda_{n-1} T)) \quad (5.52)$$

5.5.2 Erweiterung des Strahlungsmodells IRIS

Bisher wurden im Strahlungsmodell die Absorption und Streuung an Luftbeimengungen, wie in Kapitel 5.4 beschrieben, nur mit zeitlich und räumlich konstanten Parametern berücksichtigt

Mit der Einführung des Optikmoduls OPAC kann nun mit dem Strahlungsmodell IRIS der Einfluss des Aerosols auf die Strahlungsbilanz individuell für jede Masche berücksichtigt werden. Dazu werden aus den mit OPAC berechneten Absorptions- und Streukoeffizienten für jede Masche die Transmissivitäten bestimmt. Im kurzwelligen Strahlungsbereich gehen Absorption und Streuung in die Transmissivität ein, im langwelligen Strahlungsbereich nur die Absorption.

Für die kurzwellige Strahlung ergibt sich die Transmissivität aus

$$t_p = e^{-(k_{as} + k_{ss}) Y} \quad (5.53)$$

mit

$$Y = \int_0^{H_p} M dH'_p. \quad (5.54)$$

Die Parameter k_{as} und k_{ss} stehen für die im kurzwelligen Strahlungsbereich gemittelten Absorptions- und Streukoeffizienten des Aerosols und H_p für die

optische Weglänge. Bei klarer Luft entspricht M der optischen Luftmasse m (Moussiopoulos, 1989):

$$m = \frac{35}{\sqrt{1224 \cos^2 Z + 1}} \quad (5.55)$$

Wobei Z dem Zenitwinkel entspricht.

Für die langwellige Strahlung ergibt sich die Transmissivität aus

$$t_p = e^{-\beta k_{al} \Delta H_p} \quad (5.56)$$

Hierbei ist k_{al} der im langwelligen Strahlungsbereich gemittelte Absorptionskoeffizient des Aerosols und β der Diffusivitätsfaktor. Mit ΔH_p wird das optische Weginkrement angegeben.

6 Anwendungen des Gesamtmodells

6.1 Abstrakter Fall

Der abstrakte Fall ist dazu konzipiert die Funktionsweise des Optikmoduls und die Erweiterung des Strahlungsmodells zu überprüfen. Bei der Gestaltung des abstrakten Falls wurde darauf geachtet, dass die Wirkungskette Aerosol → Strahlung → meteorologische Größen deutlich und möglichst frei von störenden Einflüssen zutage tritt. Dies wird durch ein sehr einfach aufgebautes Rechengitter und durch einen ebenfalls einfachen Aufbau der Modellatmosphäre erreicht. Weitere Folgen dieser Überlegung sind der Verzicht auf eine Kopplung von MEMO und MARS und die Verwendung von standardisierten Aerosolzusammensetzungen. Da die Kopplung von MEMO und MARS entfällt werden die Aerosoldaten zu Beginn der Simulation MEMO vorgegeben.

Das Rechengitter, die meteorologischen Vorgaben und die Annahmen zum Aerosol sind in den folgenden Abschnitten beschrieben. Die Rechenergebnisse werden zeigen, ob die Wirkungskette Aerosol → Strahlung → meteorologische Größen mit Hilfe des Optikmoduls und der Erweiterungen im Strahlungsmodell richtig beschrieben wird.

6.1.1 Aufbau des Rechengitters

Das Berechnungsgebiet des abstrakten Falles hat eine Grundfläche von 20 km mal 10 km. Die Längen der Maschenseiten betragen jeweils 1 km. Die Grundfläche liegt für das gesamte Rechengebiet konstant 150 m über Meeresniveau. Für das Rechengebiet wurden zwei Obergrenzen gewählt, 2500 m und 4000 m. Die kleinste Maschenhöhe am Boden beträgt in beiden Fällen 20 m. Die Höhen der Schichten nehmen zum Oberrand des Rechengebietes hin gemäß einem Streckungsfaktor zu. Das Gebiet mit der Höhe 2500 m enthält 20 Höhenschichten während das Gebiet mit 4000 m Höhe 35 Höhenschichten enthält. Die Anzahl der Höhenschichten in beiden Rechengebieten wurde so gewählt, dass die Schichten im niedrigen Rechengebiet mit den unteren 20

Schichten des höheren Rechengebiets übereinstimmen.

Für die gesamte Grundfläche des Rechengebietes wurde eine einheitliche Landnutzung gewählt. Die Berücksichtigung der Landnutzung findet in MEMO in parametrisierter Form statt. Zur Beschreibung der Landnutzung werden folgende Parameter benötigt:

Bodenwerte:

Aerodynamische Rauhigkeit:	$z_0 = 0,8 \text{ m}$
Temperaturleitfähigkeit :	$k_B = 2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
Wärmeleitfähigkeit:	$\lambda = 4,68 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
Albedo:	$A = 0,2$
Feuchteparameter:	$\beta = 0,05$

Dies entspricht einer Stadt mit niedriger bis mittelhoher Bebauung. Für das Strahlungsmodell müssen der Breitengrad, der Längengrad und das Simulationsdatum angegeben werden. Der Breitengrad beträgt $45,45^\circ$ und der Längengrad $9,283^\circ$. Dies entspricht der Lage von Mailand. Das Simulationsdatum ist der 1. Juli. Die Startzeit ist 22 Uhr. Die Laufzeit der Simulation beträgt 98 Stunden, also 4 Tage und 2 Stunden. Es werden im folgendem die Ergebnisse des 4. Tages vorgestellt.

6.1.2 Meteorologische Eingabedaten

Zum Simulationsbeginn wird ein Windfeld mit nur einer Geschwindigkeitskomponente in Längsrichtung des Rechengebietes vorgegeben. Bis 500 m Höhe folgt das Geschwindigkeitsfeld einem Potenzprofil. Der Wert des Exponenten des Potenzprofils beträgt 0,14. Dies entspricht einem Windprofil bei neutraler Schichtung. Für Höhen größer 500 m bleibt die Windgeschwindigkeit konstant.

Für beide Gebietshöhen (2500 m und 4000 m) folgt das Windfeld dieser

Vorgabe. Das Windprofil für das Rechengebiet mit der Höhe 2500 m ist in Bild 6.1 dargestellt.

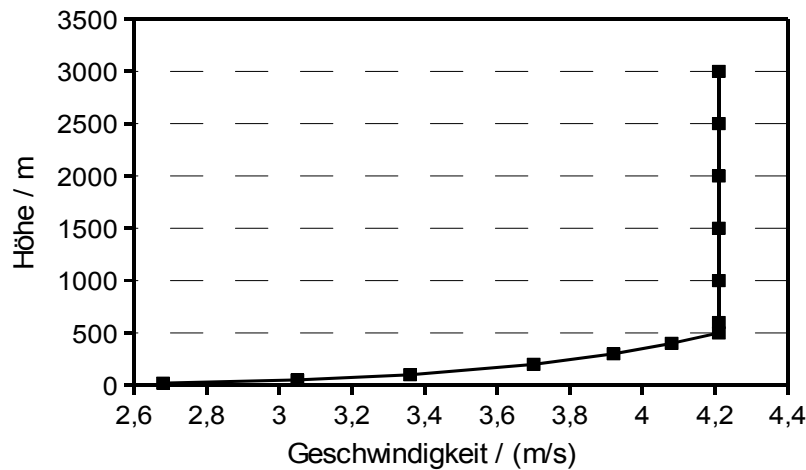


Bild 6.1: Zum Simulationsbeginn vorgegebenes Windprofil (Rechengebiet mit 2500 m Höhe)

Das zum Simulationsbeginn vorgegebene Temperaturprofil folgt ebenfalls der Annahme, dass bis 500 m eine neutrale Schichtung vorliegt. Für die Höhen über 500 m wird eine stabile Schichtung vorgegeben. Die potentielle Temperatur für den Bereich der neutralen Schichtung beträgt 28,6 °C. Für den darüber liegenden stabil geschichteten Bereich nimmt die potentielle Temperatur um 0,3 K auf 100 m zu. Dieses Temperaturprofil ist in Bild 6.2 dargestellt.

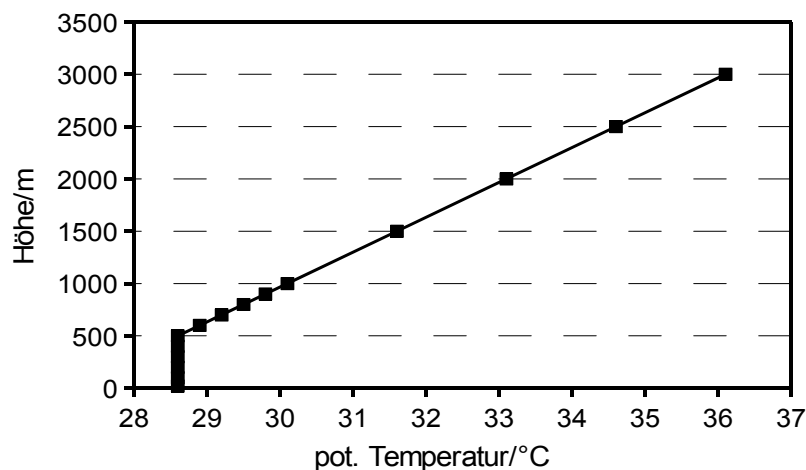


Bild 6.2: Zum Simulationsbeginn vorgegebenes Temperaturprofil (Rechengebiet mit 2500 m Höhe)

Zum Simulationsstart wird im Rechengebiet für die relative Feuchte der konstante Wert 45 % vorgegeben.

6.1.3 Vorgaben zum Aerosol

Im abstrakten Fall wird der Einfluss von vier unterschiedlichen Aerosolzusammensetzungen auf die atmosphärischen Größen untersucht. Diese entsprechen den in der OPAC-Datenbank definierten Zusammensetzungen einer kontinental sauberen (KS), einer kontinental durchschnittlich belasteten (KD), einer kontinental stark belasteten (KB) und einer städtisch belasteten (SB) Luft. Das kontinental saubere Aerosol repräsentiert Landgebiete, die sich in weiter Entfernung von Siedlungsgebieten befinden und nur schwach mit anthropogenen Emissionen belastet sind. Der kontinental durchschnittliche Aerosoltyp gilt für vom Menschen beeinflusste ländliche Gebiete, der kontinental belastete Aerosoltyp hingegen für Landgebiete, die vom Menschen stark beeinflusst sind. Städtische Gebiete, die durch anthropogene Emissionen stark belastet sind, werden durch den städtisch belasteten Aerosoltyp beschrieben. Eine genauere Beschreibung dieser Aerosoltypen findet sich bei Hess et al. (1998).

Diese Aerosoltypen setzen sich wie in Tabelle 6.1 angegeben zusammen:

	wasserunlöslich	wasserlöslich	Ruß
KS	0,15	2600	0
KD	0,4	7000	8300
KB	0,6	15700	34300
SB	1,5	28000	130000

Tabelle 6.1: Zusammensetzungen der vier Aerosoltypen (Konzentrationsangaben in Partikeln pro cm^3)

Die in Tabelle 6.1 angegebenen Aerosolkomponenten “wasserunlöslich“ und “wasserlöslich“ setzen sich wiederum aus mehreren Substanzen zusammen. So wird die Aerosolkomponente “wasserunlöslich“ aus Bodenmaterial und organischem Material gebildet. Die Aerosolkomponente “wasserlöslich“ besteht aus verschiedenen Sulfaten, Nitraten und wasserlöslichen organischen

Substanzen. Die Sulfate und Nitrate stammen aus Kondensations- und Nukleationsprozessen. Die Partikelgrößen der wasserlöslichen Substanzen hängen von der relativen Luftfeuchtigkeit ab. Die Aerosolkomponente “Ruß“ besteht aus Kohlenstoff, der sich gegenüber Strahlung wie ein schwarzer Absorber verhält. Für die Dichte der Rußpartikel wird ein Wert von $1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ angenommen. Dieser Wert ergibt sich aus dem Umstand, dass die Rußpartikel keine massiven Körper sind, sondern einen großen Anteil an Hohlräumen besitzen. Die Zusammensetzungen der Aerosolbestandteile gehen mit leichten Modifikationen auf Arbeiten von Shettle und Fenn (1979), Deepak und Gerber (1983), d'Almeida et al. (1991) zurück. Die Modifikationen sind bei Koepke et al. (1997) beschrieben.

Die in Tabelle 6.1 angegebenen Konzentrationswerte sind Angaben für die Bodenschicht. Über die horizontale Erstreckung des Rechengebiets sind die Konzentrationswerte konstant. Die Abhängigkeit der Konzentration von der Höhe wurde schon im Kapitel 4.3 erläutert und ist durch die Gleichung 4.3 gegeben. Zur Beschreibung der Größenverteilungen der Aerosolkomponenten werden Log-Normal-Verteilungen verwendet (siehe Kapitel 2.1.2 “Größenverteilung der Aerosolpartikel“).

6.1.4 Ergebnisse des abstrakten Falls

Bild 6.3 zeigt die Vertikalprofile der Temperatur berechnet unter Verwendung der vier oben beschriebenen Aerosoltypen. Es sind die Profile für den Zeitpunkt 12 Uhr des vierten Tages aufgetragen. Der Ort dieser Profile liegt bei einer Lauflänge von 10 km in Strömungsrichtung.

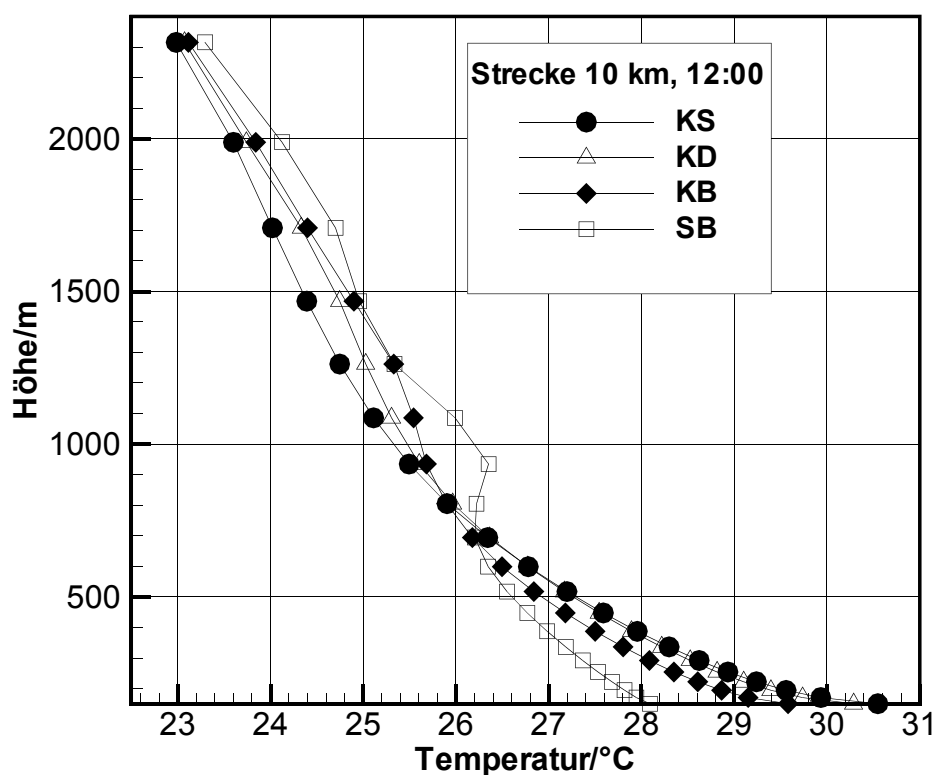


Bild 6.3: Vertikalprofile der Temperatur für die vier Aerosoltypen im Rechengebiet mit 2500 m Höhe. Zeit und Ort der Darstellung sind 12 Uhr des vierten Tages und das Zentrum des Rechengebietes (Höhenangaben bezogen auf Meeressniveau).

Es ist zu erkennen, dass der Profilverlauf davon abhängt, welcher Aerosoltyp für die Simulation verwendet wurde. In Höhen oberhalb von 800 m nehmen die Temperaturen höhere Werte an, wenn die Aerosolkonzentration zunimmt. So liegt für eine bestimmte Höhe beim Aerosoltyp SB die höchste Temperatur vor,

bei KS die niedrigste. Unterhalb von 800 m ist es umgekehrt. Hier sind die Temperaturen niedriger, je höher die Aerosolkonzentrationen sind.

Dies rührt daher, dass die kurzwellige Sonneneinstrahlung auf dem Weg durch die Atmosphäre vom Aerosol aufgrund von Absorption und Reflexion abgeschwächt wird. Vor allem die starke absorptive Wirkung des Ruß auf die kurzwellige Sonneneinstrahlung bewirkt eine Erwärmung der Atmosphäre in größeren Höhen. Durch diese Abschwächung verringert sich der Anteil der kurzwelligen Einstrahlung auf den unteren Atmosphärenbereich und auf die Erdoberfläche. Die langwellige Wärmeabstrahlung wird vom Aerosol nicht so stark beeinflusst wie die kurzwellige Einstrahlung. Die Wärme kann relativ ungehindert vom Aerosol ins Weltall abgestrahlt werden. Dies bewirkt eine Abkühlung des erdnahen Atmosphärenbereichs.

Im unteren Atmosphärenbereich bis zu einer Höhe von 800 m sind die Temperaturverläufe bei den Aerosoltypen KS und KD nahezu gleich. Durch den oben beschriebenen Einfluss des Aerosols auf die Strahlung würde man hier einen größeren Unterschied zwischen den beiden Temperaturprofilen erwarten. Dieser geringe Unterschied lässt sich dadurch erklären, dass die von der Erdoberfläche reflektierte kurzwellige Strahlung durch die höhere Rußkonzentration im Aerosoltyp KD (im Aerosoltyp KS ist kein Ruß vorhanden) zum Teil absorbiert wird und sich dadurch die Lufttemperatur erhöht. Dass die Temperaturen bei den Aerosoltypen KB und SB im unteren Bereich niedriger liegen als bei den Typen KS und KD liegt daran, dass hier für eine starke Absorption nicht mehr genügend reflektierte kurzwellige Strahlung vorhanden ist.

Der Einfluss des Aerosols auf den Strahlungshaushalt der Atmosphäre wirkt sich besonders auf die Stabilität der erdnahen Atmosphäre aus. In Bild 6.4 sind für die vier beschriebenen Aerosoltypen die Profile potentieller Temperaturen aufgetragen.

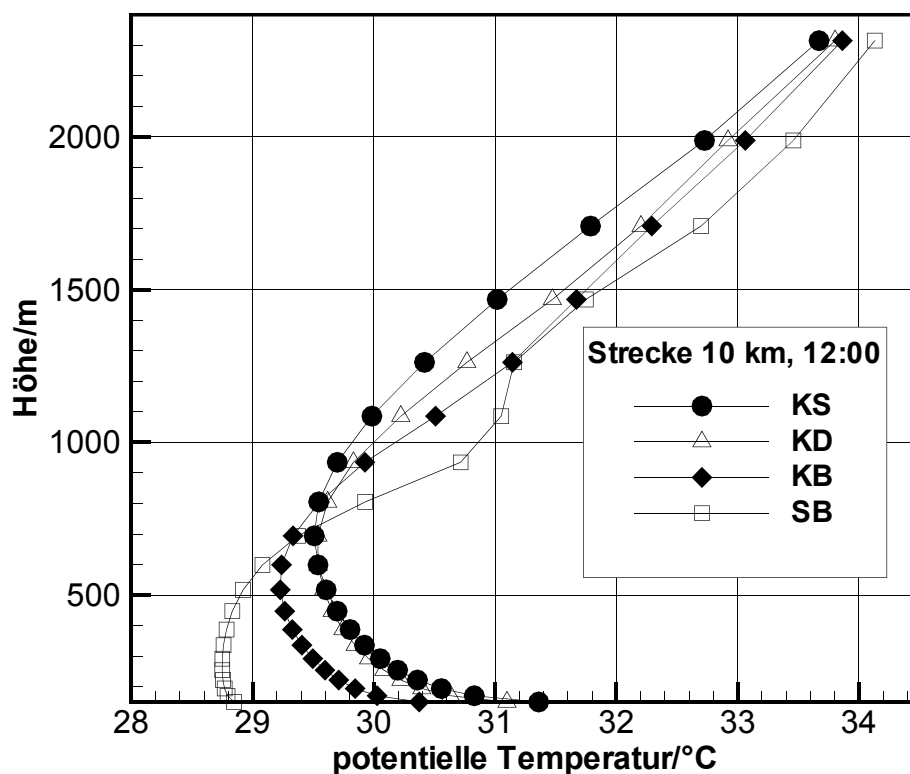


Bild 6.4: Vertikalprofile der potentiellen Temperatur für die vier Aerosoltypen im Rechengebiet mit 2500 m Höhe. Zeit und Ort der Darstellung sind 12 Uhr des vierten Tages und das Zentrum des Rechengebietes (Höhenangaben bezogen auf Meeresniveau).

Es ist zu erkennen wie sich der Beginn der stabilen Schichtung der Atmosphäre mit zunehmender Aerosolkonzentration in kleinere Höhen verschiebt. Am deutlichsten ist dies beim Aerosoltyp SB. Während bei den anderen Aerosoltypen der Verlauf an der Erdoberfläche labil anfängt und schließlich in einer stabilen Schichtung endet, beginnt beim Aerosoltyp SB der Verlauf mit einer nahezu neutralen Schichtung.

In Bild 6.5 sind die Tagesgänge der potentiellen Temperatur, berechnet mit den Aerosoltypen KS (linkes Bild) und SB (rechtes Bild), gegenübergestellt.

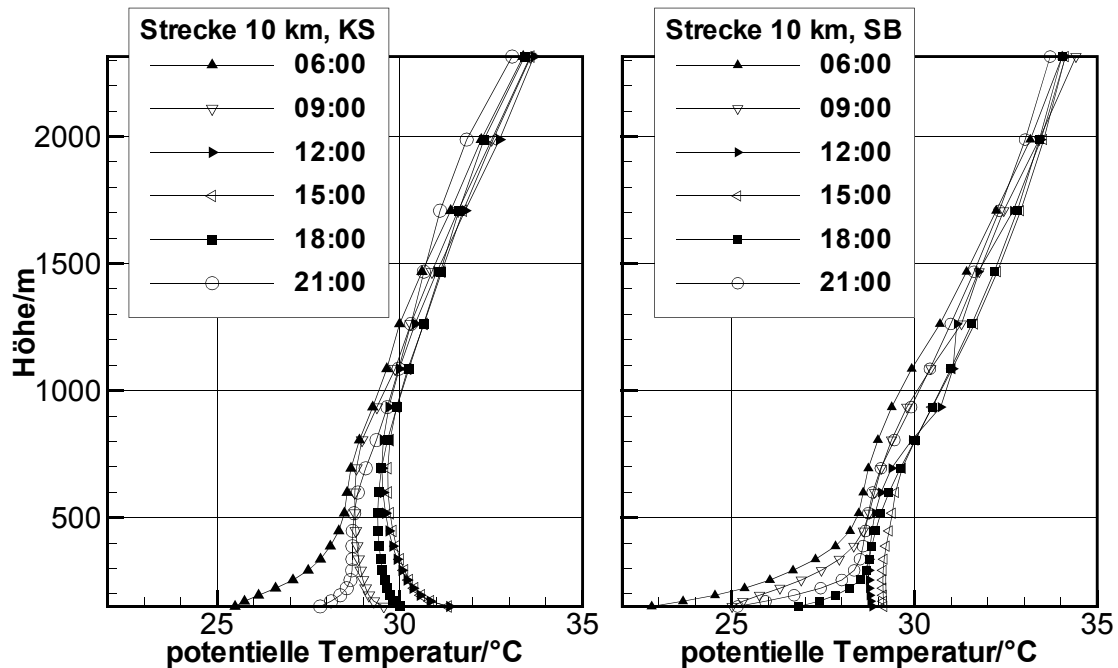


Bild 6.5: Tagesgang der Vertikalprofile der potentiellen Temperatur. Ort der Darstellung ist das Zentrum des Rechengebietes mit 2500 m Höhe (Höhenangaben bezogen auf Meeresniveau). Links: Kontinental sauberer Aerosoltyp; Rechts: Städtisch belasteter Aerosoltyp

Aus den Bildern ist zu erkennen, dass sich nachts eine Inversion ausbildet. Die Abkühlung in diesem Bereich wird vorwiegend durch die Divergenz der Flüsse langwelliger Strahlung und weniger durch die turbulente Diffusion verursacht, da der turbulente Austauschkoefizient nachts sehr klein ist (Flassak, 1990). Die Inversion ist beim Aerosoltyp SB sehr viel stärker ausgeprägt als beim Aerosoltyp KS. Die Inversionen unterscheiden sich nicht so sehr in ihrer Höhe, sondern vielmehr in ihrem Temperaturgradienten. Nach Sonnenaufgang nimmt die Bodentemperatur aufgrund der kurzwelligigen Sonneneinstrahlung zu und heizt die darüberliegende Luft auf. Beim kontinental sauberem Aerosol führt dies zu einer immer stärker werdenden Labilisierung der Atmosphäre, die ihre stärkste Ausprägung um die Mittagszeit erreicht. Danach tritt wieder eine

Stabilisierung ein. Im Fall des städtisch belasteten Aerosols tritt ebenfalls mit der Zeit eine Abschwächung der Stabilität ein. Sie endet aber mit einer neutralen Schichtung in der Mittagszeit. Danach stabilisiert sich die Atmosphäre wieder.

Auch bei diesem Vergleich der Tagesgänge ist zu erkennen, dass bei der höheren Aerosolkonzentration weniger kurzweilige Sonneneinstrahlung auf die Bodenoberfläche trifft und dadurch die darüber liegende Luft weniger stark aufgeheizt wird als im Fall des kontinental sauberen Aerosols.

Nun soll untersucht werden ob die Aerosolkonzentration durch die Beeinflussung des Temperaturprofils auch einen Einfluss auf das Strömungsfeld hat. Dazu werden die Geschwindigkeitsprofile aus den Berechnungen mit der höchsten Aerosolkonzentration (städtisch belastet) und mit der niedrigsten Aerosolkonzentration (kontinental sauber) den jeweiligen Temperaturprofilen gegenübergestellt.

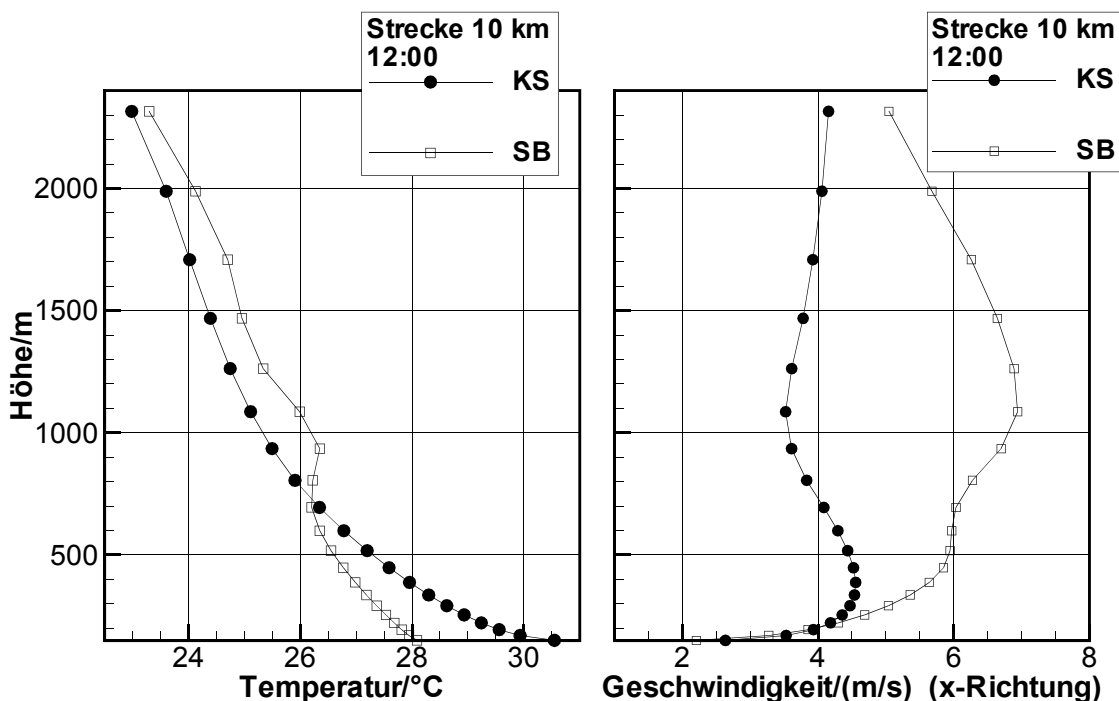


Bild 6.6: Temperaturprofil und Geschwindigkeitsprofil für die Aerosolkonzentrationen kontinental sauber (KS) und städtisch belastet (SB). Ort der Darstellung ist das Zentrum des Rechengebietes mit 2500 m Höhe (Höhenangaben bezogen auf Meeresniveau). Links: Temperatur; Rechts: Geschwindigkeit in Längsrichtung des Rechengebiets

Es ist zu erkennen, dass die Geschwindigkeit mit dem Aerosoltyp SB höher ist als mit dem Aerosoltyp KS. Dieser Unterschied der Geschwindigkeiten lässt sich zum Teil dadurch erklären, dass durch die unterschiedlichen Aufheizungen der Atmosphäre in den beiden Fällen (zu erkennen im linken Diagramm von Bild 6.6) es auch zu unterschiedlichen Ausdehnungen der Luftschichten kommt. Im Fall des Aerosoltyps KS ist die durch Aerosol verursachte Aufheizung kaum oder gar nicht vorhanden, da bei diesem Aerosoltyp der Rußanteil fehlt, der die kurzwellige Strahlung am stärksten absorbiert. Im Fall des Aerosoltyps SB absorbiert der vorhandene Ruß die kurzwellige Strahlung und heizt dadurch die umgebenden Luftschichten auf. Dadurch nimmt das Volumen der betreffenden Luftschichten zu, was zu einer Zunahme der Strömungsgeschwindigkeit führt. Dies führt zu einer Beschleunigung der Strömung, die am Eintritt in das Rechengbiet einsetzt und auf einer Strecke von ungefähr $\frac{3}{4}$ der Gebietslänge anhält. Von da an verändert sich das Strömungsprofil fast nicht mehr. Diese Entwicklung des Strömungsprofils über die Lauflänge ist in Bild 6.7 dargestellt. Es ist aber erstaunlich, dass es in den betreffenden Luftschichten zu einer so hohen Geschwindigkeitszunahme kommt. Diese kann nicht nur allein durch eine Volumenzunahme der Luft erklärt werden. Vermutlich tragen auch Temperaturgradienten durch Vorgaben von Randbedingungen am Einströmrand bei, die zu Druckgradienten zwischen Einströmrand und Mitte des Rechengbietes führen.

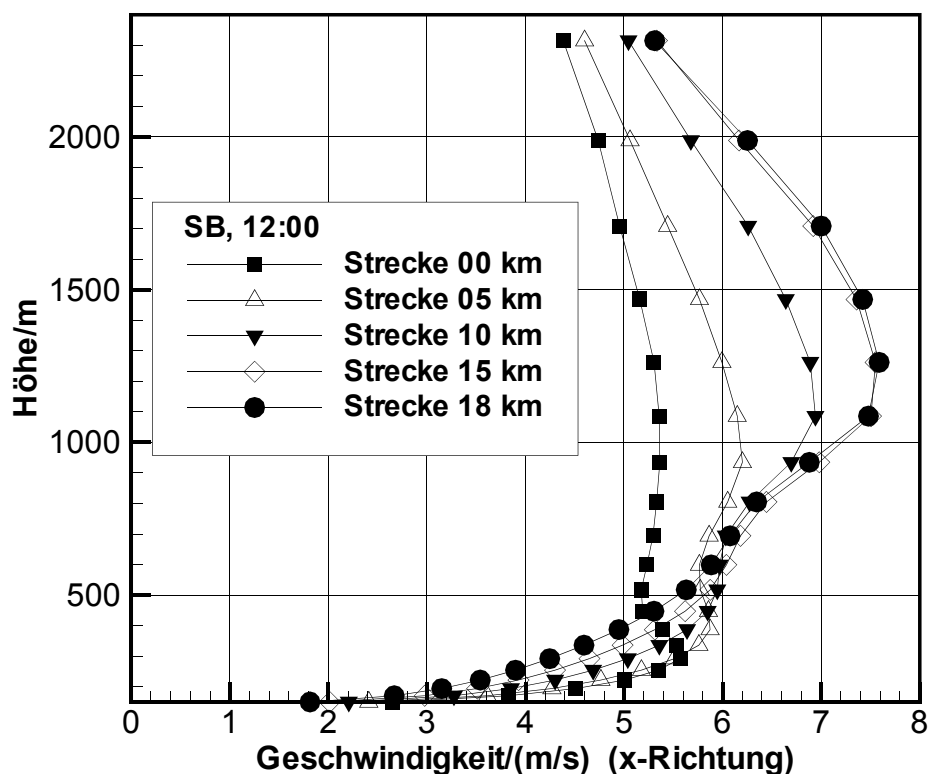


Bild 6.7: Entwicklung des Geschwindigkeitsprofils über die Lauflänge des Rechengebiets mit 2500 m Höhe (Höhenangaben bezogen auf Meeresniveau).

Zum Abschluss des Kapitels “abstrakter Fall“ wird der Einfluss der Rechengebietshöhe auf die Berechnungsergebnisse untersucht. Hierzu findet eine Gegenüberstellung der Temperaturprofile mit den verschiedenen Aerosoltypen für die Gebietshöhen 2500 m und 4000 m mit und ohne Berücksichtigung der Hintergrundkonzentration (siehe Kapitel 5.4.1) statt. Die Gegenüberstellungen sind in den Bildern 6.8 - 6.11 zu sehen.

In Bild 6.8 fällt auf, dass das Temperaturprofil mit der geringeren Gebietshöhe nahezu Deckungsgleich mit dem der höheren Gebietshöhe ist. Dies gilt für beide Fälle, mit und ohne Berücksichtigung der Hintergrundkonzentration. Auch unterscheiden sich die beiden Fälle kaum voneinander. Der Grund dafür ist, dass die Aerosolkonzentration des Typs KS so gering ist, dass das Aerosol die Strahlungsbilanz der Atmosphäre nicht nennenswert beeinflusst.

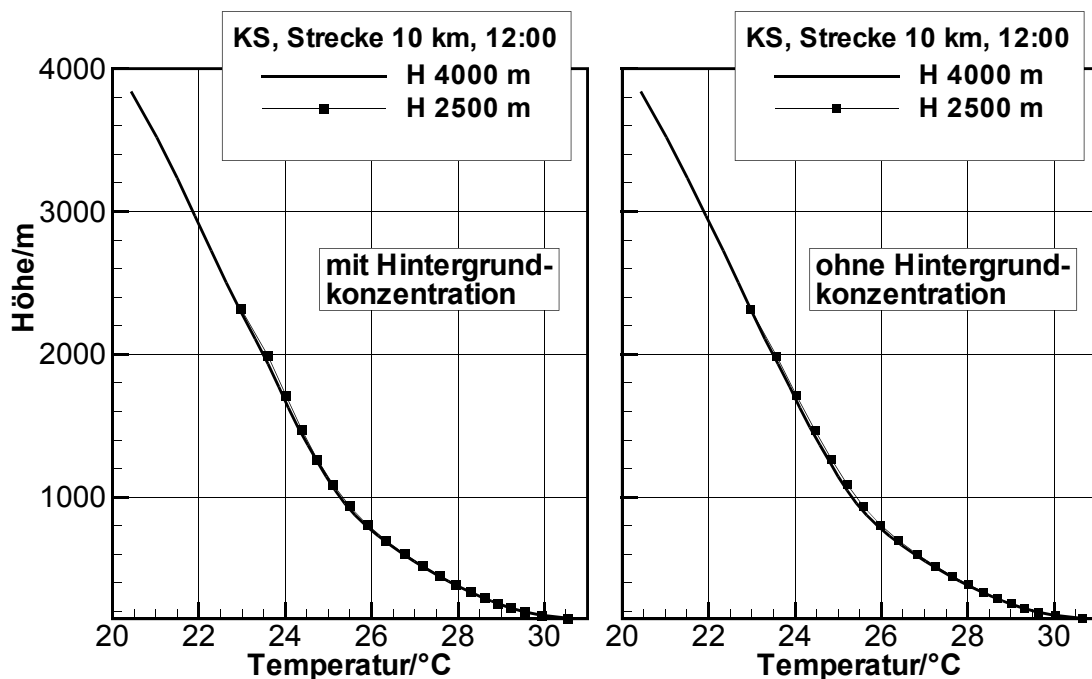


Bild 6.8: Temperaturprofile mit und ohne Berücksichtigung der Hintergrundkonzentration. Ergebnisse für Aerosoltyp KS. Ort der Darstellung ist das Zentrum des Rechengebietes mit 2500 m und 4000 m Höhe (Höhenangaben bezogen auf Meeresniveau). Links: Mit Hintergrundkonzentration; Rechts: Ohne Hintergrundkonzentration

Auch mit dem Aerosoltyp KD sind die Temperaturprofile sehr ähnlich (Bild 6.9). Der Grund für die noch gute Übereinstimmung ist in der Erläuterung zum Bild 6.8 angegeben. Die Abweichungen sind jedoch etwas deutlicher zu erkennen als im Bild 6.8.

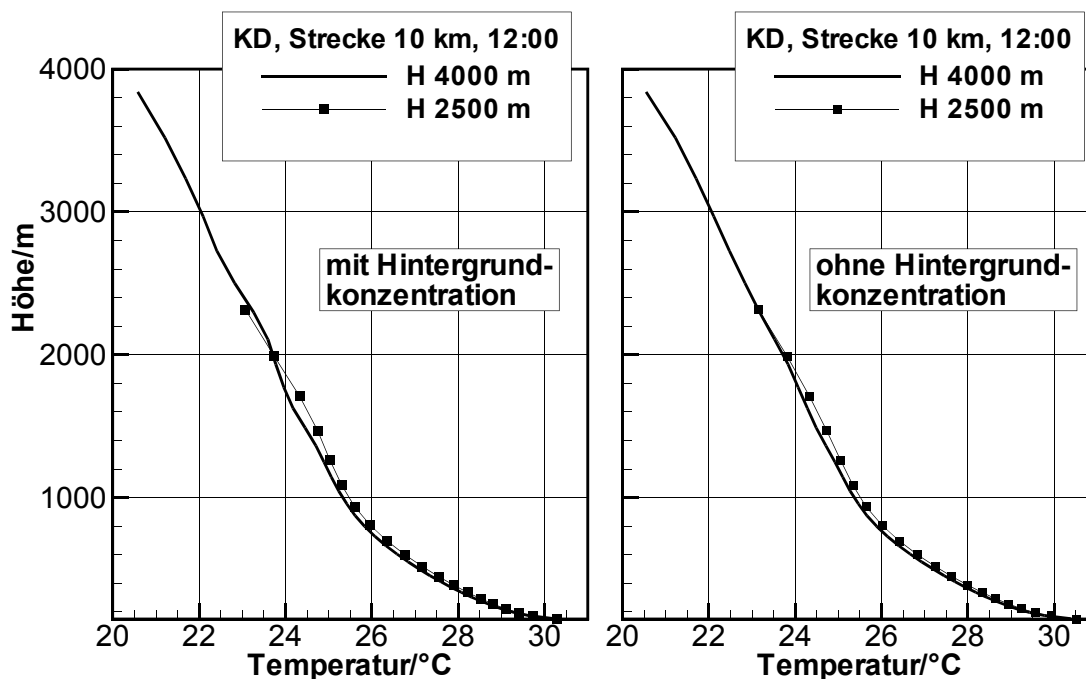


Bild 6.9: Temperaturprofile mit Aerosoltyp KD, unter den gleichen Bedingungen wie in Bild 6.8. Links: Mit Hintergrundkonzentration; Rechts: Ohne Hintergrundkonzentration

In Bild 6.10 sind ohne Berücksichtigung der Hintergrundkonzentration deutliche Unterschiede der Temperaturprofile des höheren und des niedrigeren Gitters zu sehen.

Im Höhenbereich 600 m bis 2000 m sind die Temperaturen bei niedrigerem Rechenggebiet höher als bei höherem Rechenggebiet. Das Temperaturprofil hat eine ausgeprägte Ausbuchtung. Dies liegt daran, dass ohne Berücksichtigung der Hintergrundkonzentration am Oberrand des Rechenggebiets mit 2500 m Höhe eine höhere Dichte eingehender kurzwelliger Strahlung vorliegt als im 4000 m hohen Rechenggebiet auf gleicher Höhe. Im höheren Rechenggebiet ist die eingehende kurzwellige Strahlung bereits durch das Aerosol abgeschwächt,

wenn sie die Höhe von 2500 m erreicht. Da die Absorption der eingehenden Strahlung, hauptsächlich verursacht durch den Rußanteil im Aerosol, auf einer kürzeren Strecke als im höheren Gitter stattfindet, kommt es im betrachteten Höhenbereich zu einer stärkeren Temperaturzunahme.

Diese Fehler können, wie im linken Teil der Bild 6.10 zu sehen, durch die Berücksichtigung der Hintergrundkonzentration reduziert werden. In diesem Fall haben die Temperaturprofile sehr ähnliche Verläufe. Durch die Berücksichtigung der Hintergrundkonzentration wird die Einstrahlung an der Obergrenze des niedrigeren Gitters soweit abgeschwächt, dass in beiden Gittern bei 2500 m Höhe annähernd die gleiche Dichte der kurzwelligen Einstrahlung vorliegt.

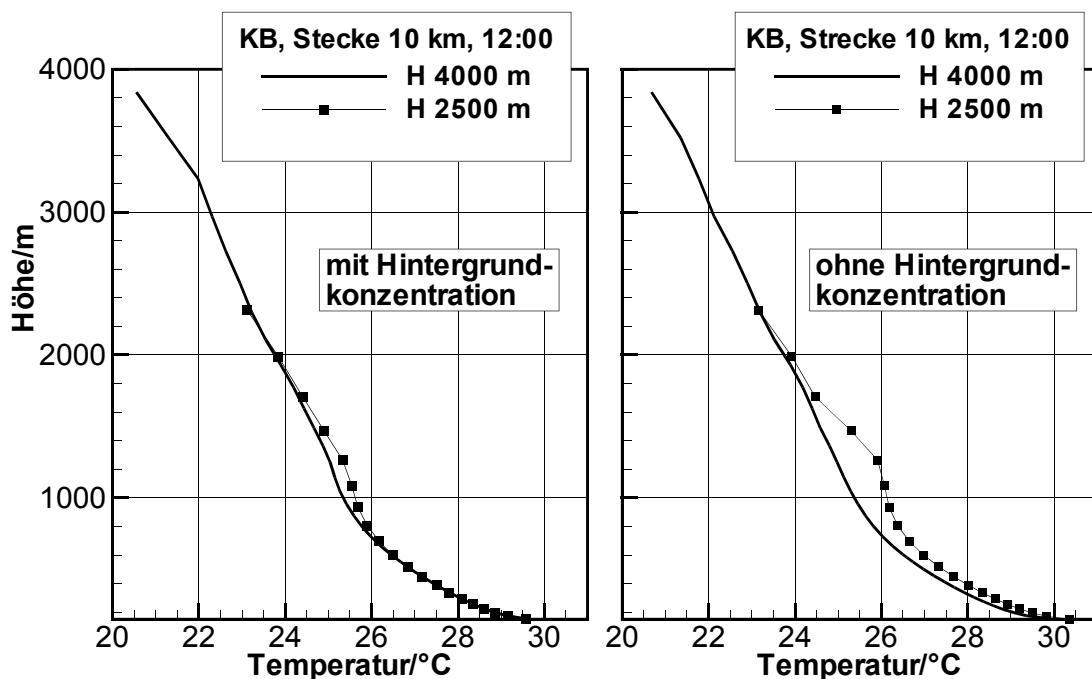


Bild 6.10: Temperaturprofile auf Basis des Aerosoltyps KB, sonst liegen die gleichen Bedingungen wie in Bild 6.8 vor. Links: Mit Hintergrundkonzentration; Rechts: Ohne Hintergrundkonzentration

Im Bild 6.11 zeigt sich dies durch die größere Aerosolkonzentration des Typs SB gegenüber dem Typ KB verstärkt.

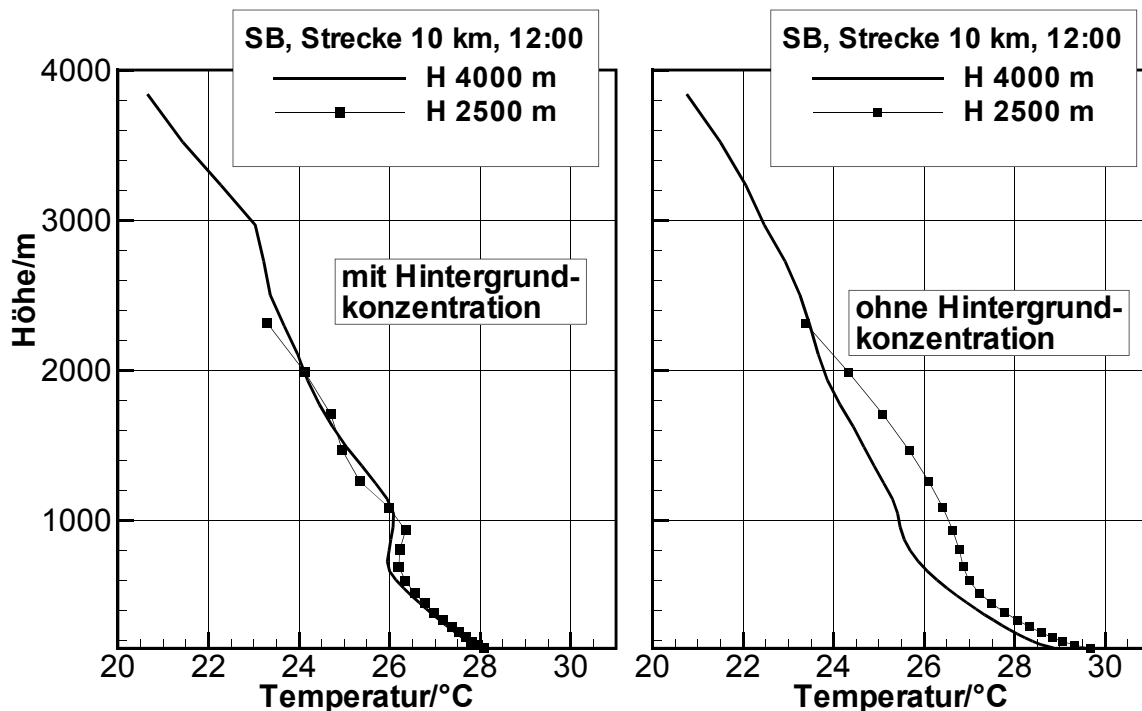


Bild 6.11: Temperaturprofile auf Basis des Aerosoltyps SB, sonst gleiche Bedingungen wie in Bild 6.8. Links: Mit Hintergrundkonzentration; Rechts: Ohne Hintergrundkonzentration

Zusammenfassend: Das Aerosol beeinflusst den Strahlungshaushalt der Atmosphäre und damit deren meteorologischen Zustand. So führen zunehmende Aerosolkonzentrationen in größeren Höhen zu einer Temperaturzunahme. In Bodennähe führen sie hingegen zu niedrigeren Temperaturen. Dies bewirkt eine Stabilisierung der Luftschichten. Weiterhin wurde festgestellt, dass der Einfluss auf die Temperatur die Strömungsgeschwindigkeit verändert. Die Erhöhung der Lufttemperatur führt zu einer Zunahme des Luftvolumens was eine Beschleunigung bewirkt. Die Höhe der Geschwindigkeitszunahme ist aber erstaunlich und kann nicht vollständig auf die Volumenzunahme der Luft zurückgeführt werden.

Mit Berücksichtigung der Hintergrundkonzentration des Aerosols lässt sich der

Einfluss der Höhe des Rechengebiets stark vermindern. Dadurch werden die Ergebnisse weitgehend unabhängig von der Gebietshöhe.

6.2 Mailand-Fall: Vergleich Einweg-/Zweiwegkopplung

Anhand des Mailand-Falles sollen die im Kapitel „Abstrakter Fall“ beschriebenen Erweiterungen im Strahlungsmodell von MEMO und die Online-Kopplung von MEMO und MARS für einen realen Fall untersucht werden.

Bei dem Mailand-Fall handelt es sich um einen Satz von Konzentrations- und Meteorologiedaten für die Region um die Stadt Mailand. Die Konzentrationsdaten umfassen Angaben über Partikel in den Größenklassen PM₁, PM_{2.5} und PM₁₀ sowie Angaben über verschiedene gasförmige Bestandteile der Luft, wie z.B. NO, NO₂, SO₄ und verschiedene Typen von Kohlenwasserstoffen. Diese Daten standen im Rahmen des CITYDELTA-Projekts öffentlich zur Verfügung. Das CITYDELTA-Projekt stellt Konzentrationsdaten von 8 europäischen Städten (Berlin, Kopenhagen, Kattowitz, London, Marseille, Paris und Prag) zur Verfügung.

Im Folgenden werden das Rechengebiet und die Eingabedaten erläutert. Zur Bearbeitung des Mailandfalles wurden die Programme MEMO und MARS verwendet, die zu diesem Zweck auf zwei Arten miteinander gekoppelt wurden. Im Kapitel 6.2.2 werden diese Kopplungsarten beschrieben. Die Ergebnisse aus Rechenreihen beider Kopplungsarten und unterschiedlich langen Kopplungsintervallen werden einander gegenübergestellt, mit Messwerten verglichen und diskutiert. Um die Abhängigkeit der Rechenergebnisse von den Konzentrationsdaten abzuschätzen, werden diese in Schritten von +50 %, +100 % und +200 % variiert.

6.2.1 Anwendungsfall

Die Stadt Mailand ist die Hauptstadt der gleichnamigen Provinz und der Region Lombardei. Die Region Lombardei hat eine Ausdehnung von 24000 km² und liegt zum großen Teil in der Po-Ebene. Auf dieser Fläche leben ca. 9 Millionen Einwohner. Die Stadt selbst hat 1,8 Millionen Einwohner. Die Region grenzt im Norden an die Alpen im Westen an den Piemont, im Süden an den nördlichen Apennin und im Osten an Venetien. Die Landschaft der Region ist von Hügeln und Tälern geprägt.

6.2.2 Durchgeführte Simulationen

Mit den Modellen MEMO und MARS wurden für einen Zeitraum von 7 Tagen die meteorologische Entwicklung und der Transport von Luftbeimengungen (insbesondere Aerosol) berechnet. Zu diesem Zweck wurden die beiden Programme miteinander gekoppelt. Das Hauptziel dieser Berechnungen liegt in der Bestimmung des Einflusses der Aerosolkonzentration auf die meteorologischen Größen. Dazu wurden die beiden Programme auf unterschiedliche Weise gekoppelt:

1. Bei Einwegkopplung von MEMO und MARS übergibt MEMO in bestimmten Schrittweiten meteorologische Daten wie Windgeschwindigkeit und Temperatur an MARS. Von MARS wird nichts an MEMO zurückgeliefert.
2. Bei der Zweiwegkopplung von MEMO und MARS werden wie bei der Einwegkopplung meteorologische Daten von MEMO an MARS übergeben. Zusätzlich werden aber nun von MARS Konzentrationsdaten des Aerosols an MEMO übergeben. Mit diesen Daten wird im Programm MEMO die Abschwächung der Sonneneinstrahlung durch das Aerosol berechnet.

Um zu bestimmen, ob die Schrittweite der Übergabe ebenfalls einen nennenswerten Einfluss auf die Ergebnisse hat, wurden mit beiden Kopplungsmethoden Rechnungen mit unterschiedlich langen Übergabeintervallen unternommen. Dabei wurden für beide Kopplungsmethoden Schrittweiten von 6 und 60 Minuten verwendet.

In horizontaler Richtung wurden 30 x 30 Gitterpunkte mit einer konstanten Maschenweite von 5 km gewählt. Das Rechengebiet umfasst somit eine Fläche von 150 km x 150 km. Es ist in Bild 6.12 dargestellt. Die Topographie erscheint in diesem Bild geglättet, da für eine Rechenmasche (5 km x 5 km) eine mittlere Höhe berechnet wurde.

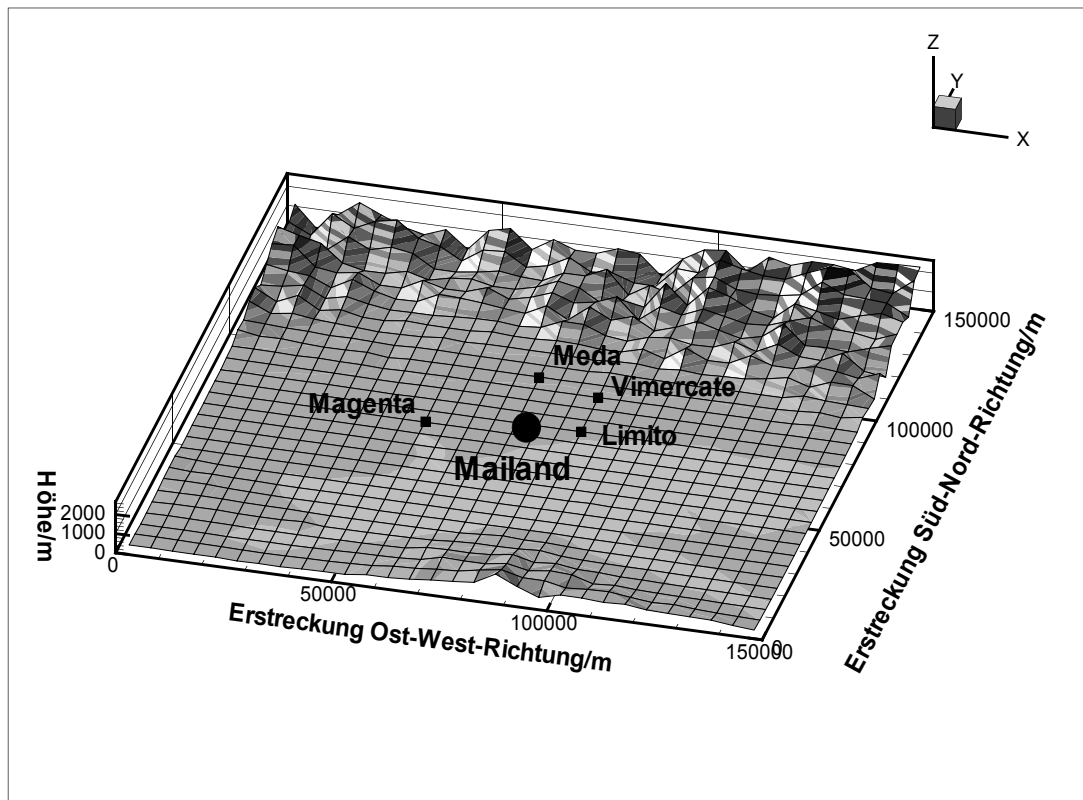


Bild 6.12: Bodenschicht des Rechengebiets.

In vertikaler Richtung wurden 25 Gitterpunkte mit einer minimalen Maschenweite von 20 m (unterste Schicht) verwendet. Der obere Rand des Simulationsgebiets befindet sich in einer Höhe von 6000 m. Die Startzeiten der Rechnungen waren jeweils 0 Uhr. Die Zeitschritte für MEMO wurden mit 1,5 s fest vorgegeben. Im Fall von MARS wird die Zeitschrittweite vom Programm anhand eines Fehlerkriteriums selbst bestimmt.

Messwerte der **Emission** und der **Konzentration** stehen aus dem Projekt CITYDELTA zur Verfügung. Die Daten sind für ein Gebiet von 310 km in Ost-West-Richtung und 300 km in Nord-Süd-Richtung gegeben. Deren Auflösung beträgt 5 km x 5 km. In der Höhe sind sie für die unteren 3 Schichten gegeben. Der Ursprung des Gebietes (Ecke Süd-West) liegt beim Längengrad $7,55^\circ$ und beim Breitengrad $44,16^\circ$. Das Projekt stellt die Daten für das gesamte Jahr 1999 zur Verfügung.

Für die Rechnungen wird nur ein Ausschnitt dieses Datensatzes benötigt. Das Rechengebiet der Programme MEMO und MARS wurde so gewählt, dass seine Einzelmaschen auf die Maschen der Konzentrationsdaten fallen. Bei der

Positionierung wurde außerdem darauf geachtet, dass das Zentrum von Mailand sich in der Mitte des Rechengebiets befindet. Dadurch ergaben sich für den Ursprung des Rechengebiets (Ecke Süd-West) der Längengrad von $8,241^\circ$ und der Breitengrad von $44,47$.

Für die Vorgaben der **Windgeschwindigkeit** und der **Temperatur** wurden Werte verwendet, die am Flughafen Linate Mailand gemessen wurden. Die Position des Messortes zum Ursprung des Rechengebiets beträgt in Ost-West-Richtung $82,21$ km und in Nord-Süd-Richtung $73,14$ km. Aus dem zur Verfügung stehenden Zeitraum der vorhandenen Daten wurden 7 Tage ausgewählt, vom 1.4.1999 bis zum 7.4.1999.

Für den Vergleich der berechneten Konzentrationsdaten mit gemessenen Daten stehen PM10-Messwerte für die Standorte Limite, Meda, Vimercate und Magenta zur Verfügung.

Für die Anfangsverteilung des Feuchtgehalts wurde angenommen, dass im gesamten Gebiet (zu Beginn der Simulationen) eine konstante relative Feuchte von 45% vorliegt.

6.2.3 Rechenergebnisse

Für die vier Messorte Limite, Meda, Vimercate und Magenta werden die aus den verschiedenen Simulationen erhaltenen Aerosolkonzentrationsdaten untereinander und mit Messwerten verglichen. Für die Rechnungen wurden die bereits erwähnten Kopplungsarten (Einweg- und Zweiwegkopplung) und Zeitschrittweiten variiert. Die Rechnungen werden wie folgt bezeichnet:

Einwegkopplung mit sechs-minütigem Übergabeintervall = 06Min_E

Einwegkopplung mit sechzig-minütigem Übergabeintervall = 60Min_E

Zweiwegkopplung mit sechs-minütigem Übergabeintervall = 06Min_Z

Zweiwegkopplung mit sechzig-minütigem Übergabeintervall = 60Min_Z.

a) Konzentrationsverlauf in der Schicht über dem Boden

In den Bildern 6.13 und 6.14 sind die Konzentrationsverläufe des Aerosols

(PM10) aus vier Rechnungen und die der Messwerte für 7 Tage (168 Stunden) für den Ort Limito aufgetragen. Auffällig sind die Abweichungen der Rechenergebnisse von den Messwerten am Beginn und am Ende der Zeitreihe. Diese sind dort größer als in der Zwischenzeit. Während die PM10-Reihen der Zweiwegkopplung (Bild 6.14) nach ungefähr 24 Stunden bis etwa 150 Stunden in ihren Verläufen recht gut mit den gemessenen Konzentrationswerten übereinstimmen, sieht man bei den PM10-Reihen der Einwegkopplung (Bild 6.13) große Abweichungen. So zeigen sich bei den PM10-Reihen der Einwegkopplung große Unterschiede in den Spitzenwerten der Konzentrationen zu Beginn der Zeitreihe. Im Mittelteil bewegen sich die PM10-Reihen der Einwegkopplung über weite Bereiche gegenläufig zur Messwertreihe. Auch bei den PM10-Reihen der Zweiwegkopplung sind im Mittelteil gegenläufiges Verhalten zu erkennen. Diese sind aber geringer, vor allem für die Reihe mit sechs-minütigem Übergabeintervall. Diese Reihe gibt bis zur 144. Stunde die Ausschläge der gemessenen Konzentrationswerte am besten wieder.

Ein Vergleich der beiden Konzentrationsreihen der Einwegkopplung, ergibt einen fast identischen Verlauf. Nicht ganz so ausgeprägt gilt dies auch für die Konzentrationsreihen der Zweiwegkopplung. Hier treten an einzelnen Stellen größere Unterschiede auf.

Statistische Vergleiche der 4 Datenreihen aus den Rechnungen mit der Messreihe ergeben nachstehende Korrelationskoeffizienten. Der optische Eindruck beim Vergleich der Reihen wird durch die statistische Auswertung bestätigt.

	Korrelationskoeffizient
Einweg-Kopplung 6 Minuten	-0,15
Einweg-Kopplung 60 Minuten	-0,16
Zweiweg-Kopplung 6 Minuten	0,33
Zweiweg-Kopplung 60 Minuten	0,16

Tabelle 6.2: Korrelationskoeffizienten der berechneten Datenreihen zur Messreihe für den Standort Limito.

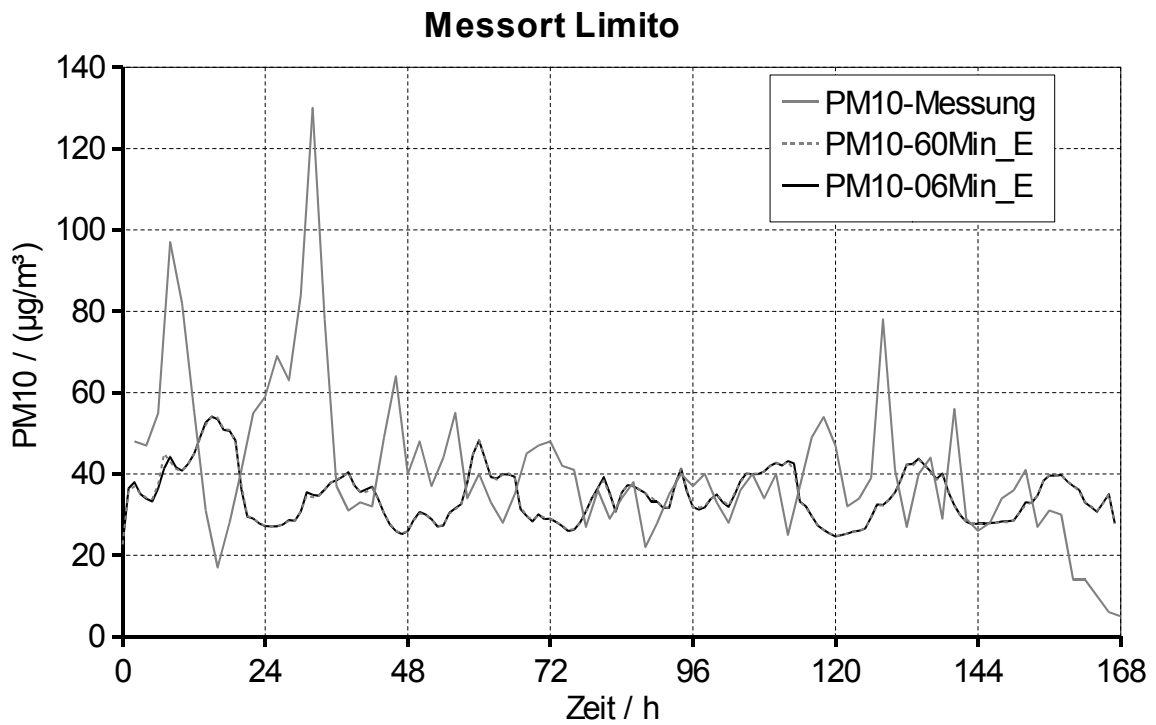


Bild 6.13: Konzentrationsreihen für 7 Tage am Ort Limito (Messung und Einwegkopplung).

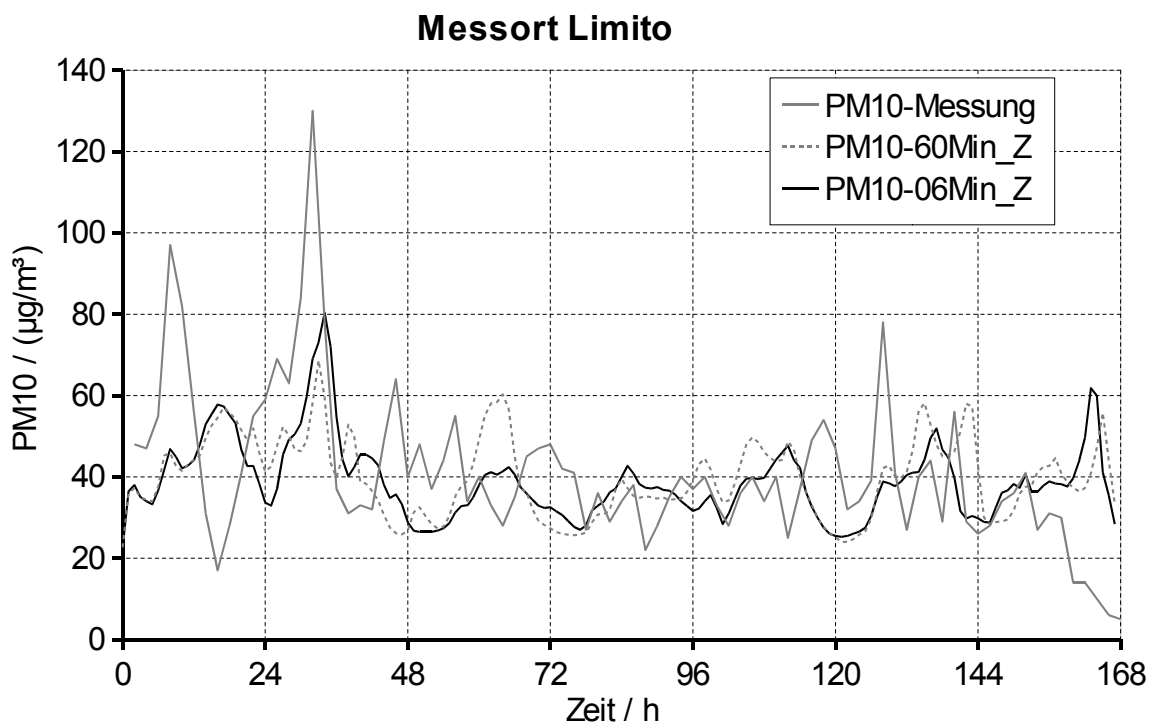


Bild 6.14: Konzentrationsreihen für 7 Tage am Ort Limito (Messung und Zweiwegkopplung).

Die Bilder 6.15 und 6.16 zeigen die Konzentrationsreihen für den Ort Meda. Trotz der geringeren Schwankungen zwischen Spitzen- und Minimalwerten der Ergebnisse der Zweiwegkopplung gegenüber denen der Messwerte und den an manchen Stellen (z. B. in den Bereichen um 60 Stunden und um 110 Stunden) vorhandenen "Phasenverschiebungen", fällt sofort die gute Übereinstimmung der Reihen auf (Bild 6.16). Es zeigt sich zwar auch hier gegenläufiges Verhalten (z. B. in den Bereichen 20 bis 27 Stunden und 130 bis 136 Stunden), das aber am grundsätzlichen Bild der Übereinstimmung nichts ändert. Auch in diesem Diagramm werden die Messwerte durch die Konzentrationsreihe der Zweiwegkopplung mit dem sechs-minütigem Übergabeintervall besser wiedergegeben als durch die Reihe mit dem sechzig-minütigem Übergabeintervall. Die Ergebnisse der Einwegkopplung (Bild 6.15) weichen auch hier wieder stärker von den Messwerten ab, als die aus der Zweiwegkopplung.

Die zwei Reihen der Einwegkopplung verlaufen nahezu identisch. Die Reihen der Zweiwegkopplung sind sich zwar sehr ähnlich, zeigen aber an manchen Stellen deutliche Unterschiede.

Für alle Simulationsreihen gilt, dass sie die durchschnittliche Konzentration der Messreihe gut wiedergeben.

Die Korrelationskoeffizienten der Reihen der Zweiweg-Kopplung sind deutlich größer als die der Einweg-Kopplung.

	Korrelationskoeffizient
Einweg-Kopplung 6 Minuten	-0,01
Einweg-Kopplung 60 Minuten	-0,01
Zweiweg-Kopplung 6 Minuten	0,24
Zweiweg-Kopplung 60 Minuten	0,18

Tabelle 6.3: Korrelationskoeffizienten der berechneten Datenreihen zur Messreihe für den Standort Meda.

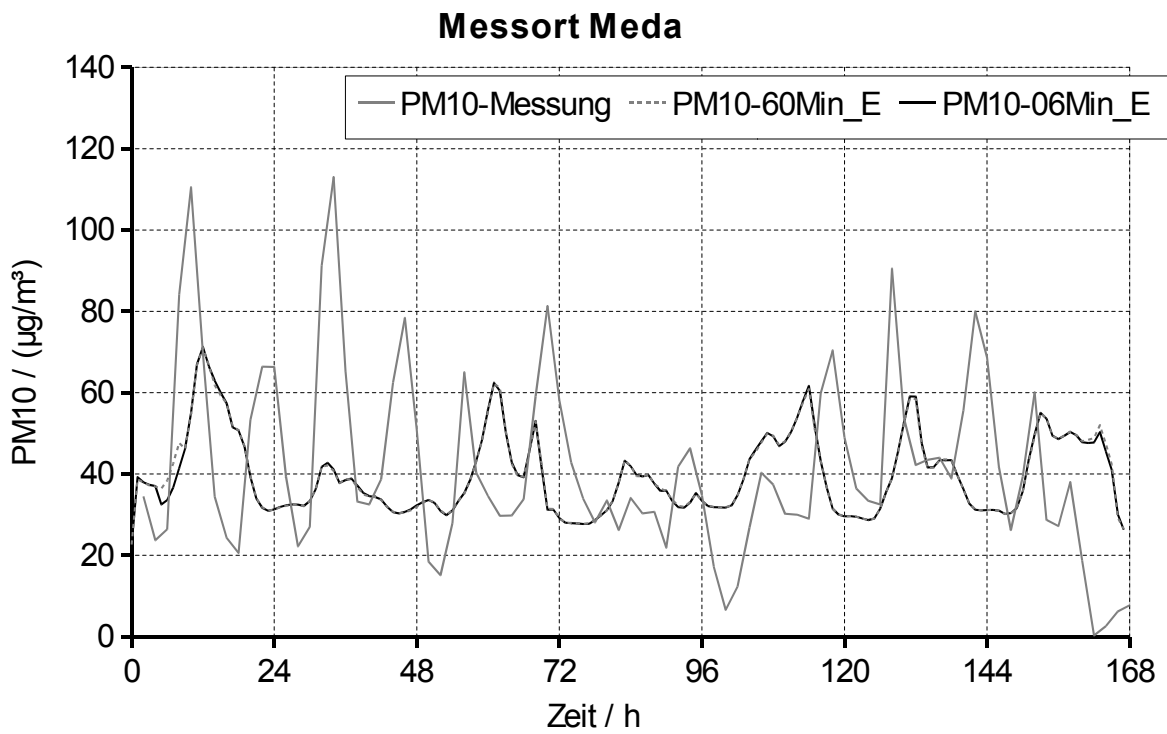


Bild 6.15: Konzentrationsreihen für 7 Tage am Ort Meda (Messung und Einwegkopplung).

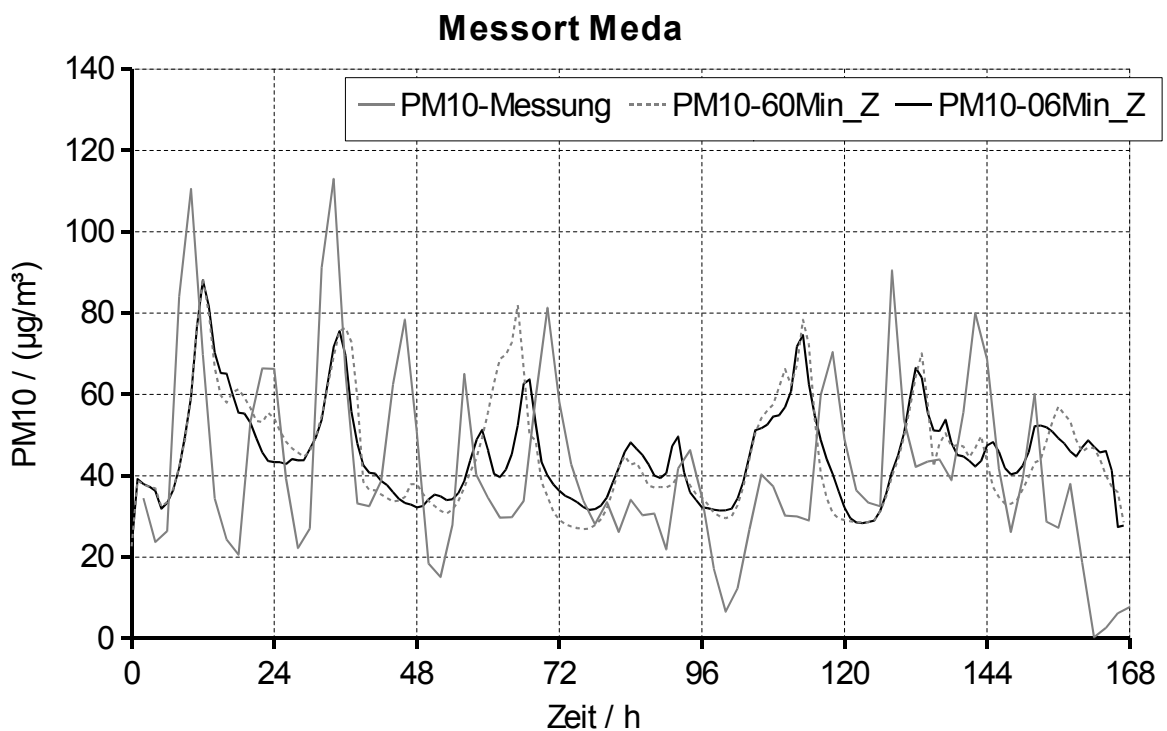


Bild 6.16: Konzentrationsreihen für 7 Tage am Ort Meda (Messung und Zweiwegkopplung).

In den Bildern 6.17 und 6.18 sind die Konzentrationsreihen für den Ort Vimercate aufgetragen. Deutlich zu erkennen ist, dass für alle berechneten Konzentrationsreihen die durchschnittliche Konzentrationsstärke gegenüber der gemessenen Reihe zu hoch liegt. Die Konzentrationsverläufe der Reihen der Einwegkopplung (Bild 6.17) sind durchweg niedriger als die der Zweiwegkopplung (Bild 6.18) und somit näher an den Messwerten. Für den Fall Vimercate berechnet MARS zu hohe PM10-Konzentrationen. Durch die Rückkopplung mit MEMO wird durch die Stabilisierung der bodennahen Atmosphäre, worauf später noch eingegangen wird, die PM10-Konzentration erhöht. Dies ist der Grund dafür, dass die Konzentrationsreihen der Zweiwegkopplung im Schnitt deutlich über denen der Einwegkopplung liegen. Die Konzentrationsreihen der Zweiwegkopplung stimmen jedoch in ihren Steigungen besser mit denen der Messreihe überein.

Auch hier zeigen sich beim Vergleich der Konzentrationsreihen der Einwegkopplung so gut wie keine Unterschiede. Die beiden Reihen der Zweiwegkopplung sind sich zwar wieder sehr ähnlich, aber auch hier sind an einzelnen Stellen deutliche Unterschiede zu erkennen.

Trotz der durchweg höheren Konzentrationsstärke der beiden Reihen der Zweiweg-Kopplung sind die Korrelationskoeffizienten für diese wieder größer als für die der Einweg-Kopplung.

	Korrelationskoeffizient
Einweg-Kopplung 6 Minuten	-0,04
Einweg-Kopplung 60 Minuten	-0,01
Zweiweg-Kopplung 6 Minuten	0,25
Zweiweg-Kopplung 60 Minuten	0,26

Tabelle 6.4: Korrelationskoeffizienten der berechneten Datenreihen zur Messreihe für den Standort Vimercate.

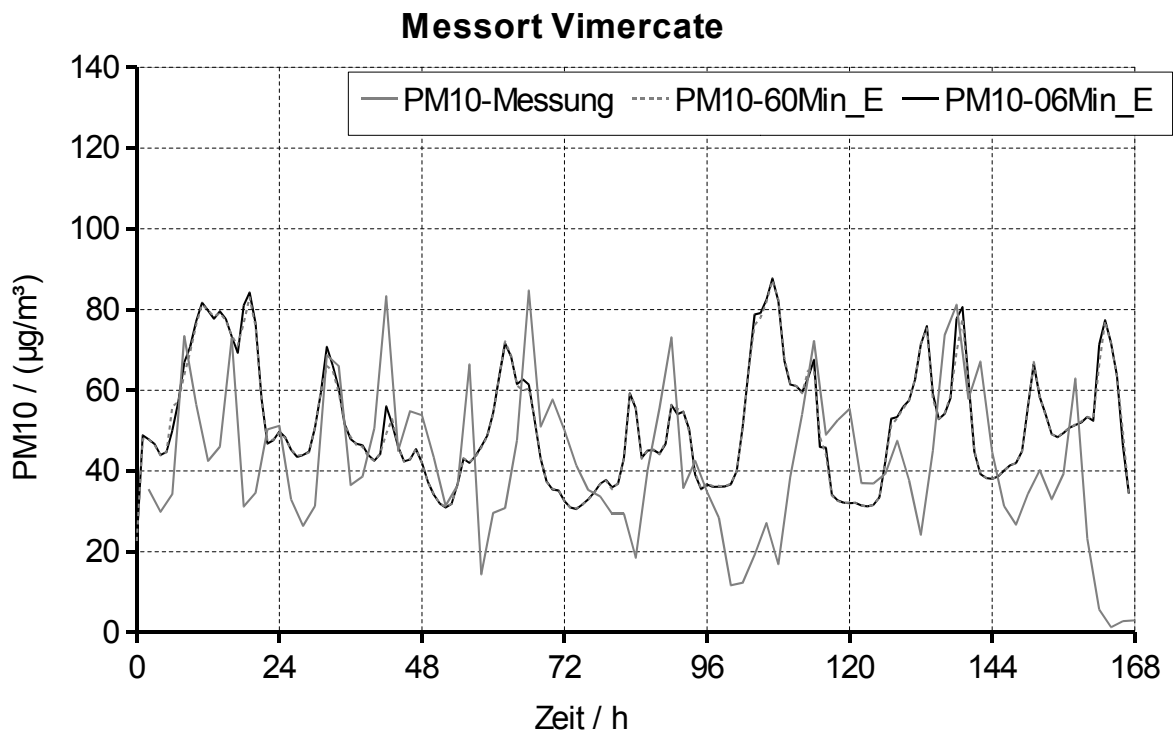


Bild 6.17: Konzentrationsreihen für 7 Tage, Ort Vimercate (Messung und Einwegkopplung).

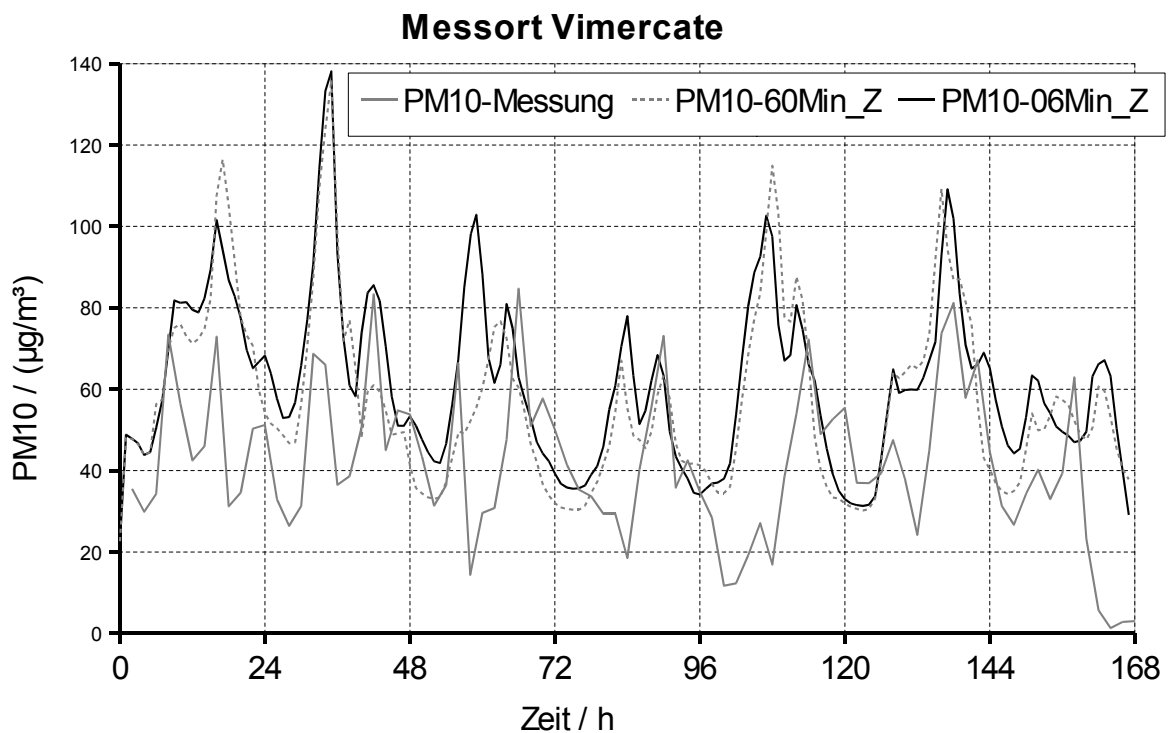


Bild 6.18: Konzentrationsreihen für 7 Tage, Ort Vimercate (Messung und Zweiwegkopplung).

Die Bilder 6.19 und 6.20 zeigen die Konzentrationsverläufe von PM10 für den Ort Magenta. Hier fällt vor allem auf, dass die Frequenz der Messreihe von keiner berechneten Reihe gut wiedergegeben wird. Durch die höhere Frequenz der beiden Konzentrationsreihen der Zweiwegkopplung (Bild 6.20) folgen diese dem Verlauf der Messreihe besser als die anderen beiden Reihen (Bild 6.19). Für alle berechneten Konzentrationsreihen gilt, dass die Amplituden wesentlich geringer ausfallen als bei der Messreihe.

Der Vergleich der Konzentrationsreihen der beiden Kopplungsarten ergibt das gewohnte Bild, die Reihen aus der Einwegkopplung sind nahezu identisch, die aus der Zweiwegkopplung sind sich sehr ähnlich unterscheiden sich aber an einzelnen Stellen merklich.

Der optische Eindruck der schlechten Übereinstimmung von Simulation und Messung wird durch kleine Korrelationskoeffizienten bestätigt. Die Korrelationskoeffizienten der beiden Konzentrationsreihen der Zweiwegkopplung sind dennoch wieder größer als die der beiden Konzentrationsreihen der Einweg-Kopplung.

		Korrelationskoeffizient
Einweg-Kopplung	6 Minuten	-0,03
Einweg-Kopplung	60 Minuten	-0,04
Zweiweg-Kopplung	6 Minuten	0,12
Zweiweg-Kopplung	60 Minuten	0,17

Tabelle 6.5: Korrelationskoeffizienten der berechneten Datenreihen zur Messreihe für den Standort Magenta.

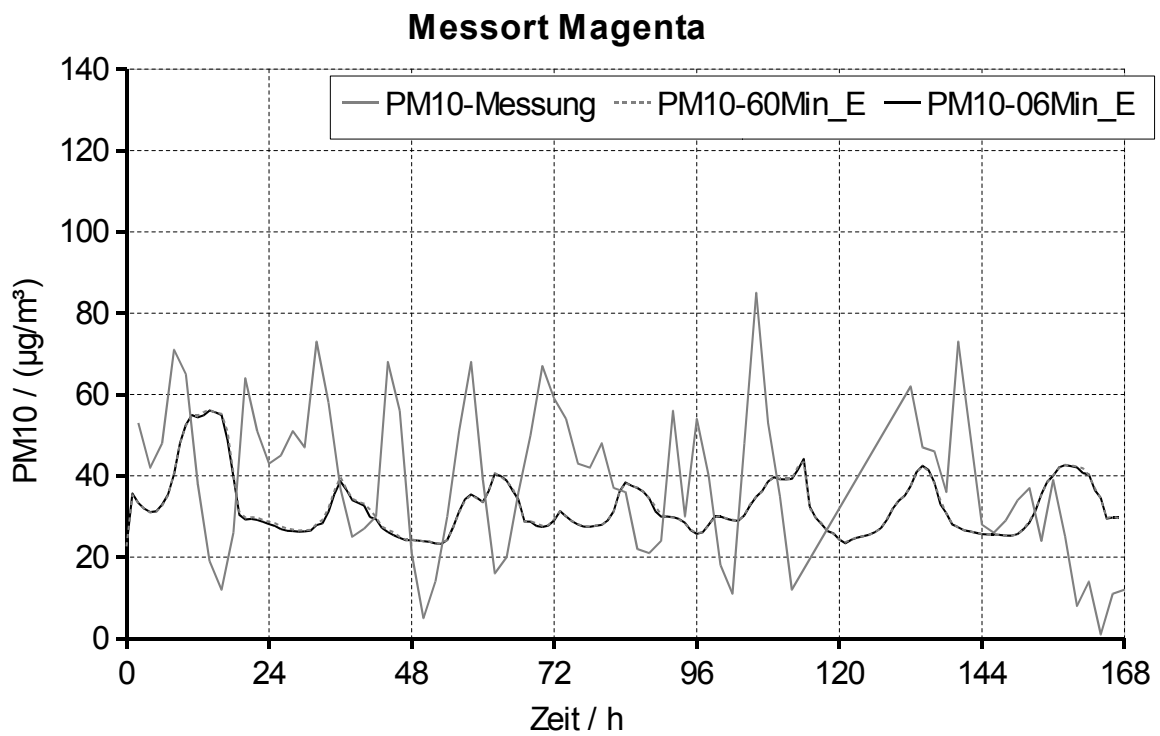


Bild 6.19: Konzentrationsreihen für 7 Tage, Ort Magenta (Messung und Einwegkopplung).

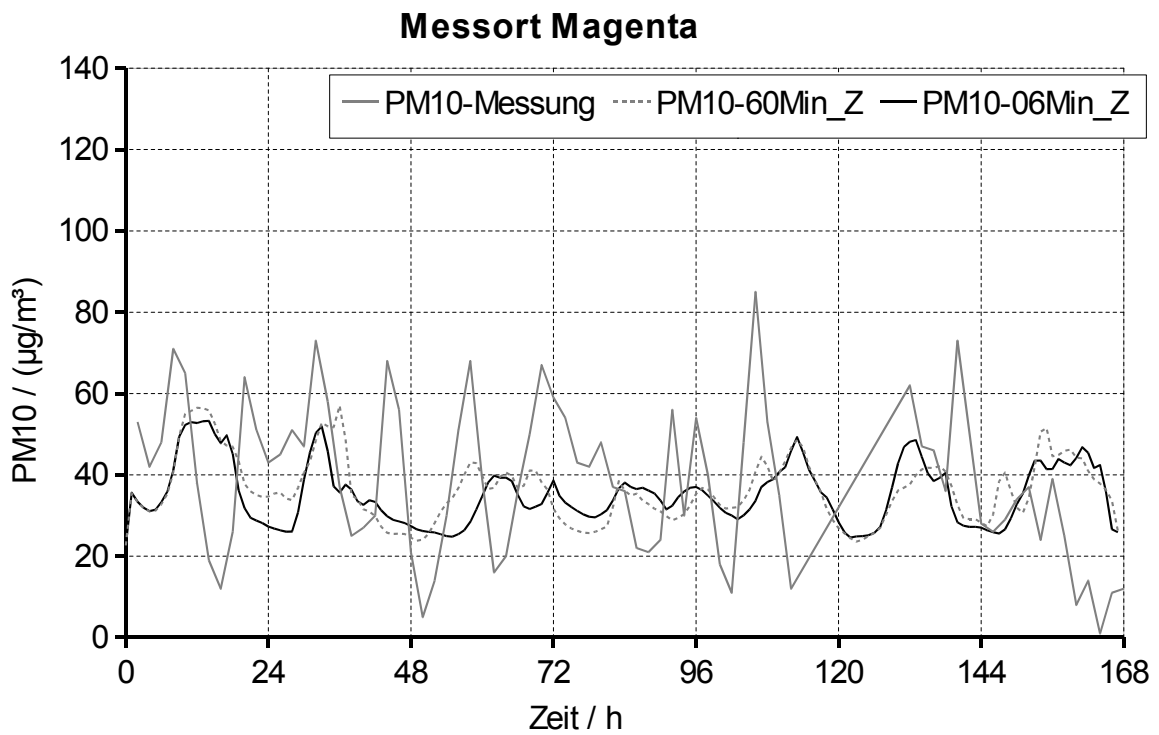


Bild 6.20: Konzentrationsreihen für 7 Tage, Ort Magenta (Messung und Zweiwegkopplung).

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass für die Orte Limito, Meda und Vimercate die qualitativen Verläufe der beiden berechneten PM10-Reihen der Zweiwegkopplung befriedigend mit denen der Messreihe übereinstimmen. Die beiden PM10-Reihen der Einwegkopplung weisen stärkere Abweichungen auf. In einzelnen Bereichen folgt an den Orten Limito und Meda vor allem die PM10-Reihe aus der Zweiwegkopplung mit sechs-minütigem Übergabeintervall auch quantitativ gut den Messwerten. Nur für den Ort Magenta liegen keine befriedigenden Übereinstimmungen der Rechenergebnisse mit den Messwerten vor.

Dass die Rechenergebnisse an manchen Stellen merklich von den Messergebnissen abweichen, liegt wohl unter anderem daran, dass die Gitterauflösung mit je 5 km Länge in den horizontalen Richtungen recht grob ist. Mit einer feineren Auflösung der verwendeten Konzentrationsdaten und des Rechengitters würden wahrscheinlich bessere Ergebnisse erzielt. Auch eine Erweiterung der Aerosoleingabedaten über die drei unteren Rechenschichten hinaus könnten zu einer Verbesserung der Ergebnisse führen.

Über den Einfluss der Länge der Übergabeintervalle lässt sich Folgendes festhalten:

- Bei der Einwegkopplung hat die Weite des Übergabeintervalls einen sehr geringen Einfluss auf das Ergebnis. Im Fall der Zweiwegkopplung ist der Einfluss größer. Hier sind sich die Ergebnisse zwar ähnlich, aber an einzelnen Stellen treten deutliche Unterschiede auf.
- Die Ergebnisse aus der Zweiwegkopplung mit sechs-minütigem Übergabeintervall weisen außer am Ort Magenta die besten Übereinstimmungen mit den Messwerten auf.

b) Temperaturverlauf in der Bodenschicht

Die Bilder 6.21 bis 6.24 zeigen Temperaturreihen der Einwegkopplung und der Zweiwegkopplung. Bei den Rechnungen mit Einwegkopplung findet durch die fehlende Rückkopplung von MARS die Berechnungen in MEMO ohne

Aerosoleinfluss statt, was zu identischen Temperaturreihen führt. Aus diesem Grund wird im Folgenden von diesen beiden Temperaturreihen nur eine dargestellt (06Min_E). Die Temperaturreihen der Zweiwegkopplung (06Min_Z, 60Min_Z) an den vier bekannten Orten sind zu Beginn bis etwa zur sechsten Stunde gleich. Dies kommt daher, dass alle Rechnungen die gleichen Startwerte haben und um 0 Uhr beginnen. Da nachts das Aerosol keinen Einfluss auf die Sonneneinstrahlung hat, verlaufen alle Temperaturreihen gleich. Erst mit dem Aufgehen der Sonne stellt sich ein Unterschied der Temperaturreihen ein, der bis zum Ende besteht. Ab diesem Zeitpunkt liegen die Temperaturen der beiden Reihen aus der Zweiwegkopplung immer niedriger als die der Reihe aus der Einwegkopplung. Dies gilt auch für die Nacht, da das Temperaturniveau schon bei Sonnenuntergang niedriger ist.

Es lässt sich also festhalten, dass die Rückkopplung von MARS an MEMO einen deutlichen Einfluss auf die Ergebnisse für die bodennahe Temperatur hat. Wie sich die Temperaturen im Höhenverlauf verhalten wird später noch gezeigt.

Zunächst sollen aber die Unterschiede der beiden Temperaturreihen der Zweiwegkopplung diskutiert werden. Beide Kurven haben einen ähnlichen Verlauf und unterscheiden sich nur in den Nachtphasen etwas. In den Bereichen mit etwas unterschiedlichem Verlauf der beiden Temperaturkurven haben auch die zugehörigen Konzentrationsreihen unterschiedliche Verläufe. So zeigt sich, dass bei einem höheren Temperaturverlauf die zugehörige Konzentrationsreihe einen niedrigeren Verlauf hat. Die Ähnlichkeit der Temperaturreihen ist um einiges stärker ausgeprägt, als die der Konzentrationsreihen.

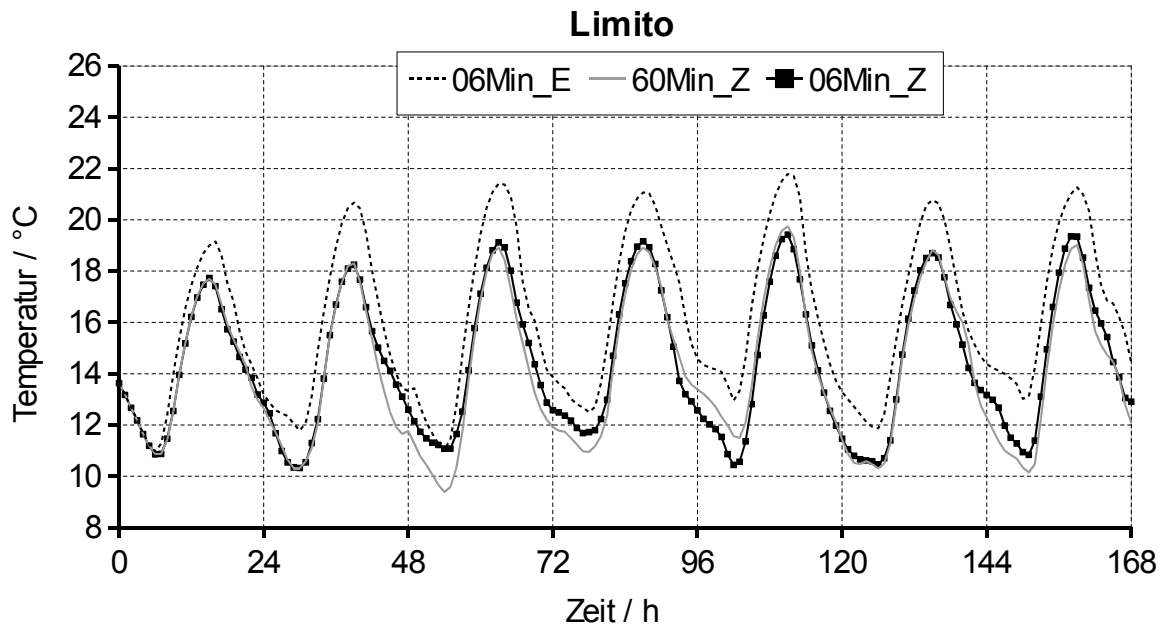


Bild 6.21: Temperaturreihen für 7 Tage am Ort Limito.

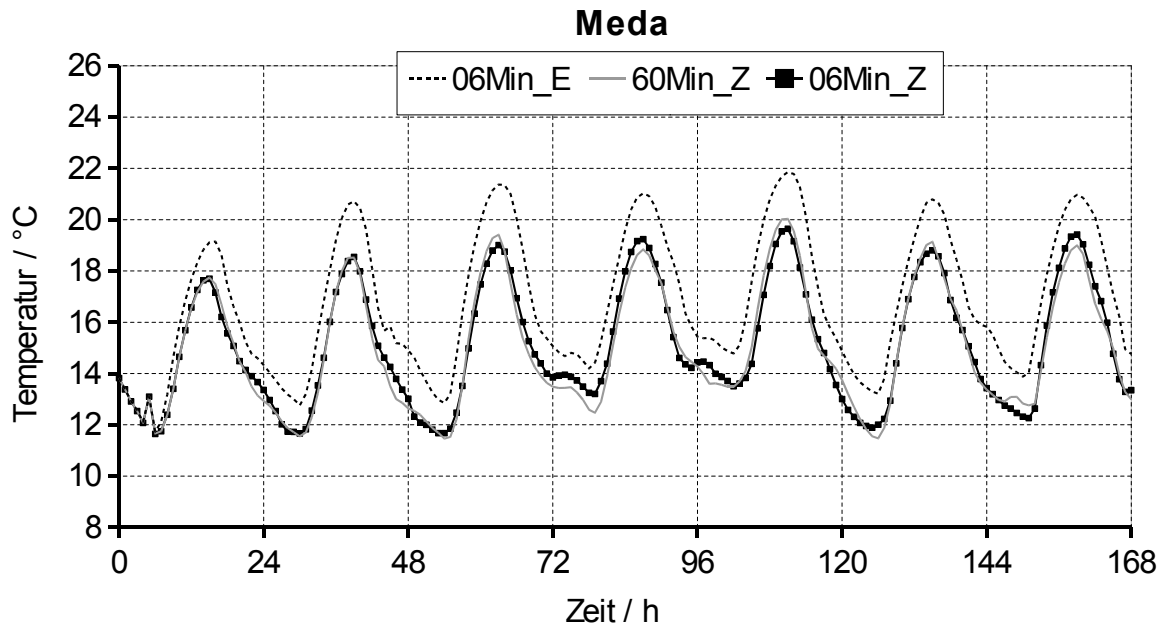


Bild 6.22: Temperaturreihen für 7 Tage am Ort Meda.

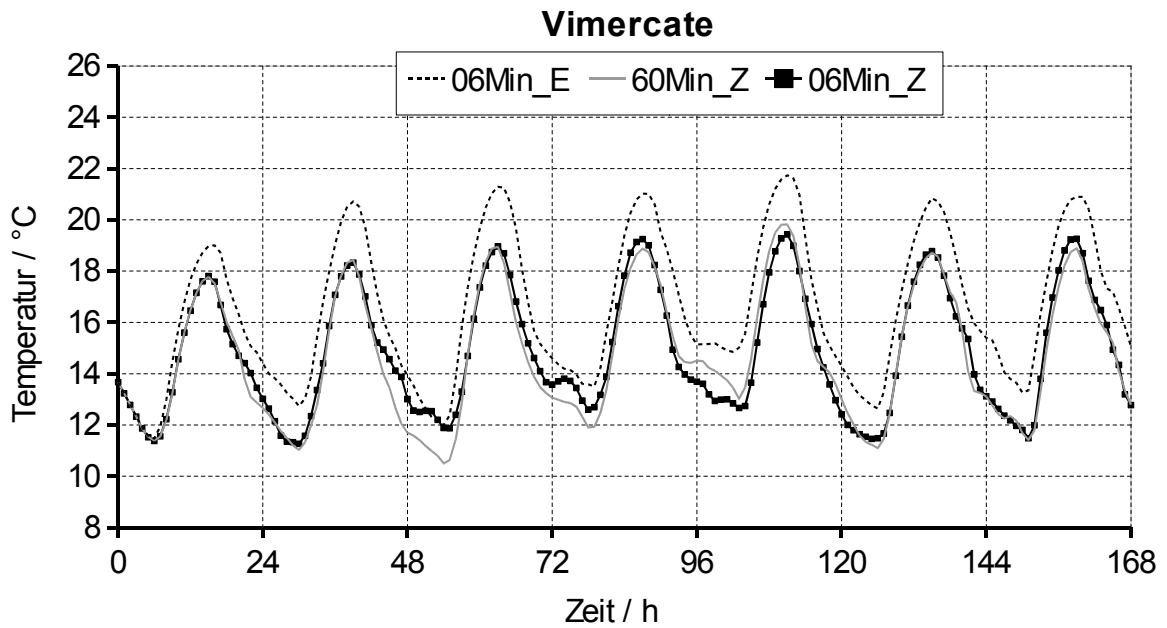


Bild 6.23: Temperaturreihen für 7 Tage am Ort Vimercate.

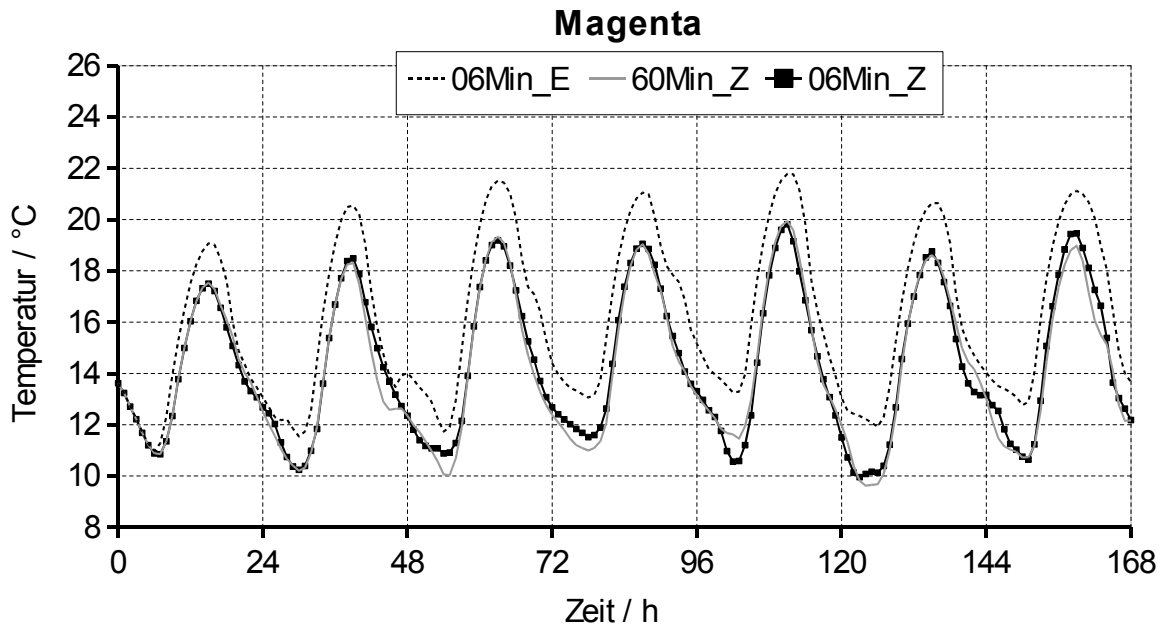


Bild 6.24: Temperaturreihen für 7 Tage am Ort Magenta.

c) Schichtung der Atmosphäre

In diesem Abschnitt werden für die vier bekannten Standorte Höhenprofile der potentiellen Temperatur aus den bereits beschriebenen Rechnungen miteinander verglichen. Damit soll die Frage beantwortet werden, wie die Schichtung der Atmosphäre mit den Konzentrationswerten des Aerosols am Boden zusammen hängt. Dazu sind in den folgenden Diagrammen Tagesgänge der Höhenprofile der potentiellen Temperatur aus der Einwegkopplung und aus der Zweiwegkopplung für den 6. Tag im 3 Stunden Abstand aufgetragen. Im Fall der Einwegkopplung werden nur die Ergebnisse aus der Simulation mit sechzigminütigem Übergabeintervall berücksichtigt. Durch die fehlende Rückkopplung liegt kein Einfluss des Aerosols auf die meteorologischen Größen vor. Sie sind somit von der Länge des Übergabeintervalls unabhängig. Die Auftragung der Tagesgänge beginnt mit 6 Uhr.

Die Bilder 6.25 bis 6.27 zeigen die Entwicklungen der potentiellen Temperatur am Standort Limito.

6 Uhr:

Für alle drei Rechnungen liegt bei 6 Uhr (Bild 6.25) stabile Schichtung vor. Der Boden konnte sich während der Nacht durch Abstrahlung abkühlen. Dies führte dazu, dass die darüber liegenden Luftschichten sich ebenfalls abkühlten und so eine Schichtung entstand, in der die potentielle Temperatur mit der Höhe zunimmt. Da nachts der Einfluss des Aerosols auf die Sonneneinstrahlung nicht vorhanden ist, liegen zu Beginn des Tages die drei Höhenprofile dicht zusammen. Dass die potentielle Temperatur in der unteren Schicht bei der Zweiwegkopplung niedriger ist als bei der Einwegkopplung liegt daran, dass im Fall der beiden Zweiwegkopplungen das Temperaturniveau am Abend zuvor schon niedriger war als bei den Einwegkopplungen. Die Bilder 6.13 und 6.14 zeigen, dass ab etwa 2 Uhr nachts für den 6. Tag die Konzentrationswerte wohl durch zunehmende anthropogene Emissionen (Verkehr) steigen. Dies zeigen alle Rechnungen in gleichem Maße. Der gemeinsame Verlauf der Ergebnisse hält bis nach 7 Uhr an. Die Konzentrationsreihen aus der Einwegkopplung stagnieren von da an für 1 bis 2 Stunden, während die Konzentrationen aus den

Zweiwegkopplung weiter steigen.

9 Uhr:

Bild 6.25 zeigt den Grund für dieses Verhalten. Die stabile Schichtung der Atmosphäre ist im Fall der Einwegkopplung um 9 Uhr im bodennahen Bereich durch die Aufheizung des Bodens einer neutralen Schichtung gewichen. Die Höhe dieser neutralen Schicht beträgt etwa 250 m. Durch diese Destabilisierung kommt es zu einer verstärkten Vermischung der Luft über die Höhe, was zu einer Absenkung der Aerosolkonzentration in der unteren Schicht führt. Die Schichtung der Atmosphäre aus der Zweiwegkopplung ist zu diesem Zeitpunkt immer noch stabil, was durch das weitere Einbringen von Aerosolpartikeln in die Luft und die fehlende Durchmischung der Atmosphäre zu einem weiteren Ansteigen der Konzentration führt. Der Einfluss des Aerosols auf die Sonneneinstrahlung führt zu einer zeitlichen Verlängerung der Phase stabiler bodennaher Atmosphäre.

12 Uhr:

Die Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 12 Uhr sind in Bild 6.26 zu sehen. Nun hat sich auch in den beiden Fällen der Zweiwegkopplung eine neutrale bodennahe Schicht herausgebildet. Nur in den unteren Schichten sind in beiden Profilen Bereiche leicht labiler Schichtung zu erkennen. Die Höhenprofile der potentiellen Temperatur aus der Zweiwegkopplung liegen in den unteren Schichten immer noch sehr dicht zusammen. Es ist nur ein kleiner Unterschied zu erkennen. Der Verlauf der potentiellen Temperatur mit dem sechzig-minütigen Übergabeintervall weist eine etwas stärkere negative Steigung auf, als die mit dem sechs-minütigen Übergabeintervall. Dieser Unterschied schlägt sich im Verlauf der jeweiligen Aerosolkonzentration nieder (Bild 6.14). Die etwas stärkere Durchmischung im Fall des sechzig-minütigen Übergabeintervalls lässt die Konzentration nicht so weit ansteigen, wie im Fall mit dem sechs-minütigen Übergabeintervall. Das Höhenprofil der potentiellen Temperatur der Einwegkopplung weicht von den beiden anderen ab. Zum einen liegt die Bodentemperatur sichtlich höher und zum anderen hat die neutrale Schichtung eine größere vertikale Ausdehnung. In den unteren Schichten hat

sich eine labile Schichtung eingestellt.

15 Uhr:

Um 15 Uhr (Bild 6.26) liegt bei den beiden Rechnungen mit Zweiwegkopplung keine labile Schicht im Bodenbereich mehr vor. Die neutrale Schicht hat sich in beiden Fällen nach oben ausgedehnt. Bei der Zweiwegkopplung mit dem sechsminütigen Übergabeintervall ist dies stärker ausgeprägt. Dies ist wohl auch der Grund dafür, dass die Aerosolkonzentration aus der Rechnung mit dem sechzigminütigen Übergabeintervall höher liegt, als aus der Rechnung mit sechsminütigen Übergabeintervall. Das Höhenprofil der potentiellen Temperatur aus der Einwegkopplung zeigt bis etwa 700 m eine labile Schichtung, gefolgt von einer etwa 300 m starken neutralen Schichtung. Es weist außerdem einen Beginn einer stabilen Schichtung auf, der etwa 300 m höher liegt als bei den Höhenprofilen der Zweiwegkopplung. Vergleicht man die PM10-Werte der Einwegkopplung mit denen der Zweiwegkopplung (Bild 6.13 und Bild 6.14) zum Zeitpunkt 135 Stunden erkennt man, dass die PM10-Werte der Einwegkopplung niedriger sind als die der Zweiwegkopplung (Die größere labile Schicht hat eine größere Durchmischung zur Folge).

18 Uhr:

Um 18 Uhr (Bild 6.27) ist in keinem Profil eine labile Schichtung mehr zu sehen. Bei Sonnenuntergang kühlt die Bodenoberfläche und die darüber liegende Luftschicht aus. Es hat sich in allen drei Fällen eine stabile Schichtung in den unteren Schichten gebildet. Darüber liegt in allen drei Fällen eine neutrale Schichtung, der wiederum eine stabile Schichtung folgt. Während der Konzentrationsverlauf der Einwegkopplung seit der Mittagszeit mit leichten Schwankungen doch recht unverändert geblieben ist weisen die beiden Verläufe der Zweiwegkopplung hier je ein Maximum der Konzentration auf. Die geringere Durchmischung dieser beiden Fälle und der anhaltende Ausstoß von Aerosolpartikeln führte mit der Zeit zu einem Ansteigen der Aerosolkonzentration.

21 Uhr:

Bild 6.27 zeigt für alle drei Profile eine nun durchgehend stabile Schichtung. Dass die Aerosolkonzentration in allen drei Fällen sinkt, liegt wohl am geringer werdenden Ausstoß von Aerosolpartikeln (Rückgang des Verkehrs).

Die Betrachtung der atmosphärischen Schichtung zeigt, dass die Rückkopplung von MARS an MEMO einen deutlichen Einfluss auf die meteorologischen Zustandsgrößen hat, der sich wiederum auf die Verläufe der Aerosolkonzentrationen auswirkt. Es konnte auch gezeigt werden, dass der Einfluss der Schichtung der Atmosphäre auf den Konzentrationsverlauf durch die Hin- und Rückkopplung der beiden Programme richtig wiedergegeben wird.

Die zeitlichen Entwicklungen der Höhenprofile der potentiellen Temperatur an den Orten Meda, Vimercate und Magenta sind in den Bildern 6.28 bis 6.36 dargestellt. Auch hier zeigen sich das gleiche Verhalten und die gleichen Zusammenhänge, wie sie für den Ort Limito erläutert wurden.

Höhenprofile der potentiellen Temperatur am Ort Limito:

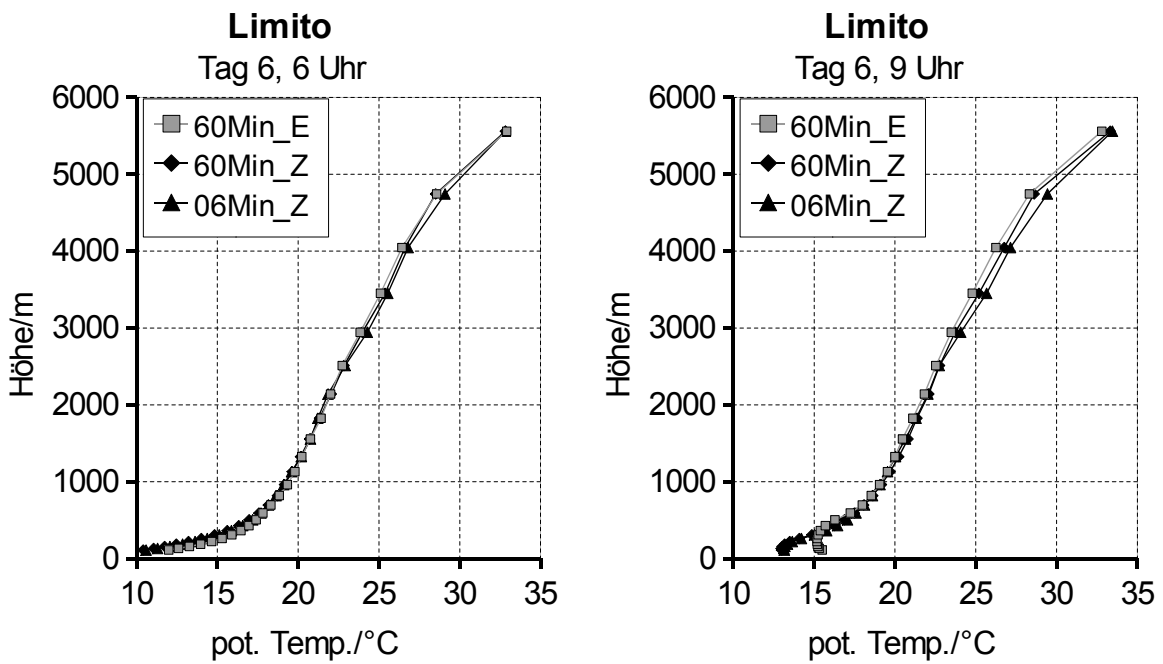


Bild 6.25: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 6 und 9 Uhr.

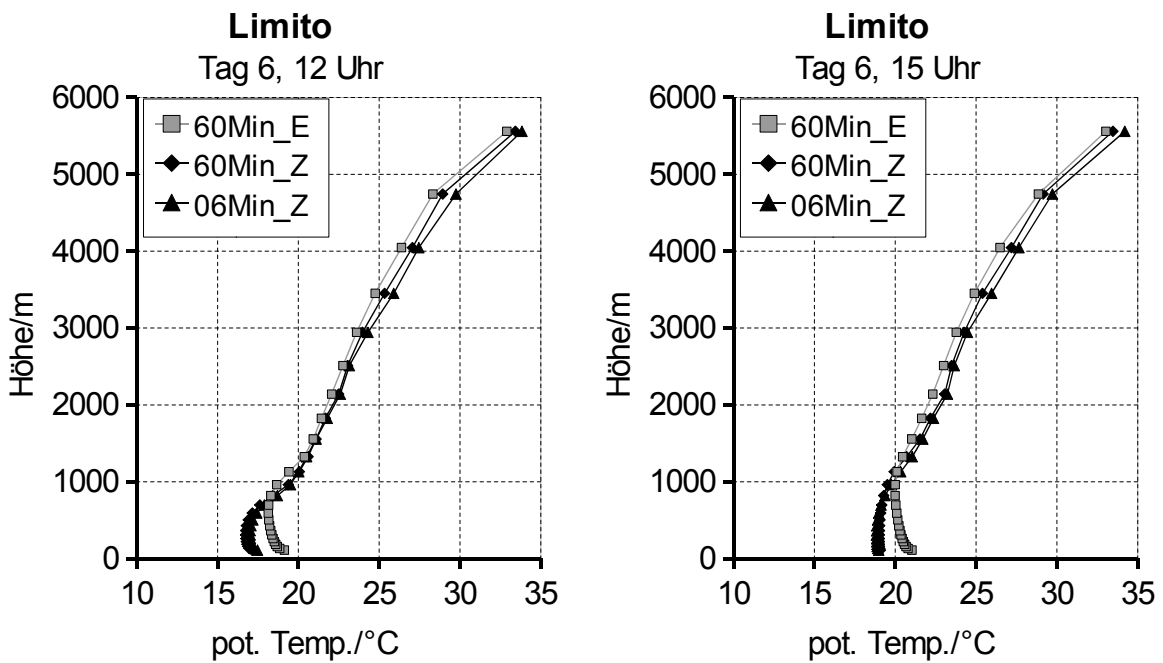


Bild 6.26: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 12 und 15 Uhr.

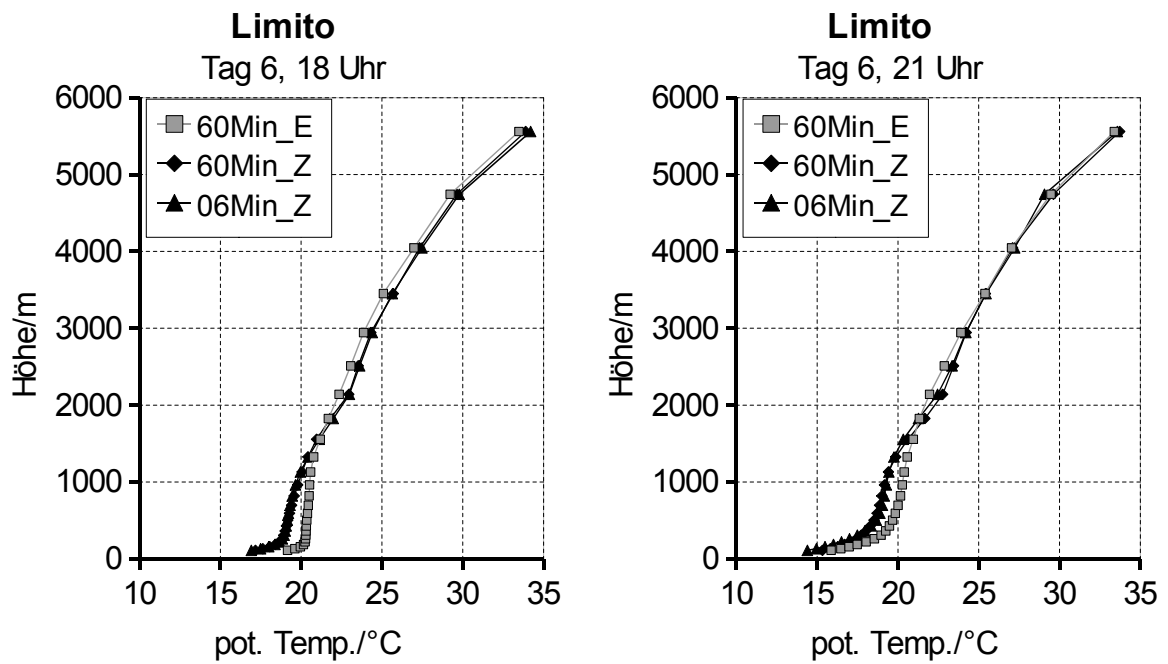


Bild 6.27: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 18 und 21 Uhr.

Höhenprofile der potentiellen Temperatur am Ort Meda:

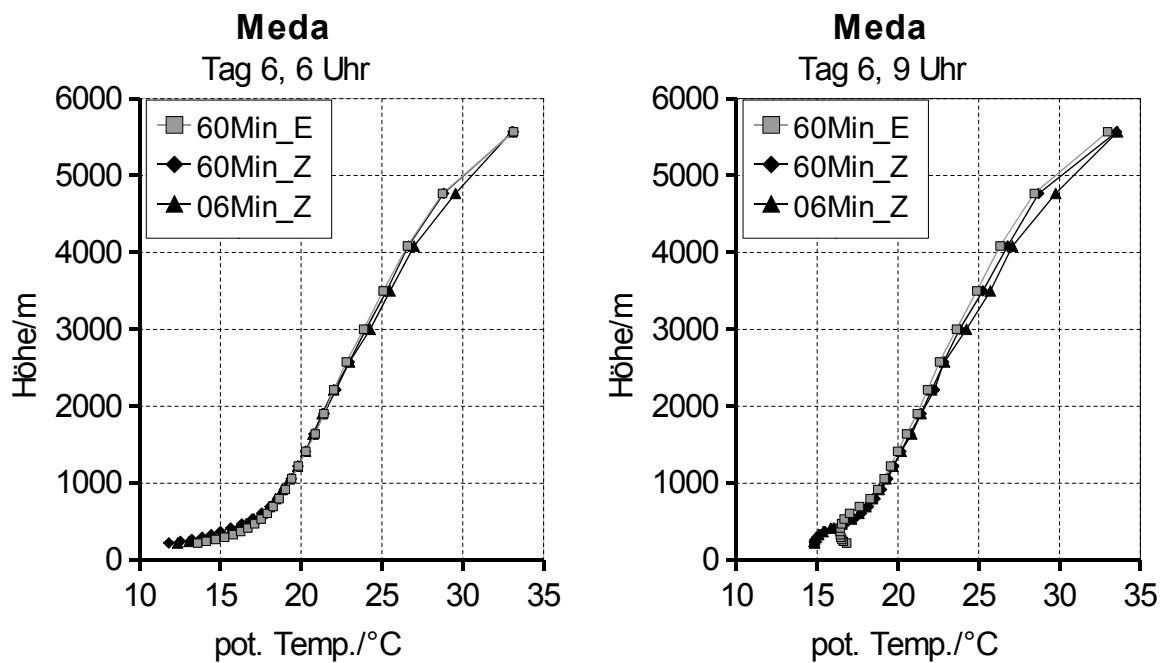


Bild 6.28: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 6 und 9 Uhr.

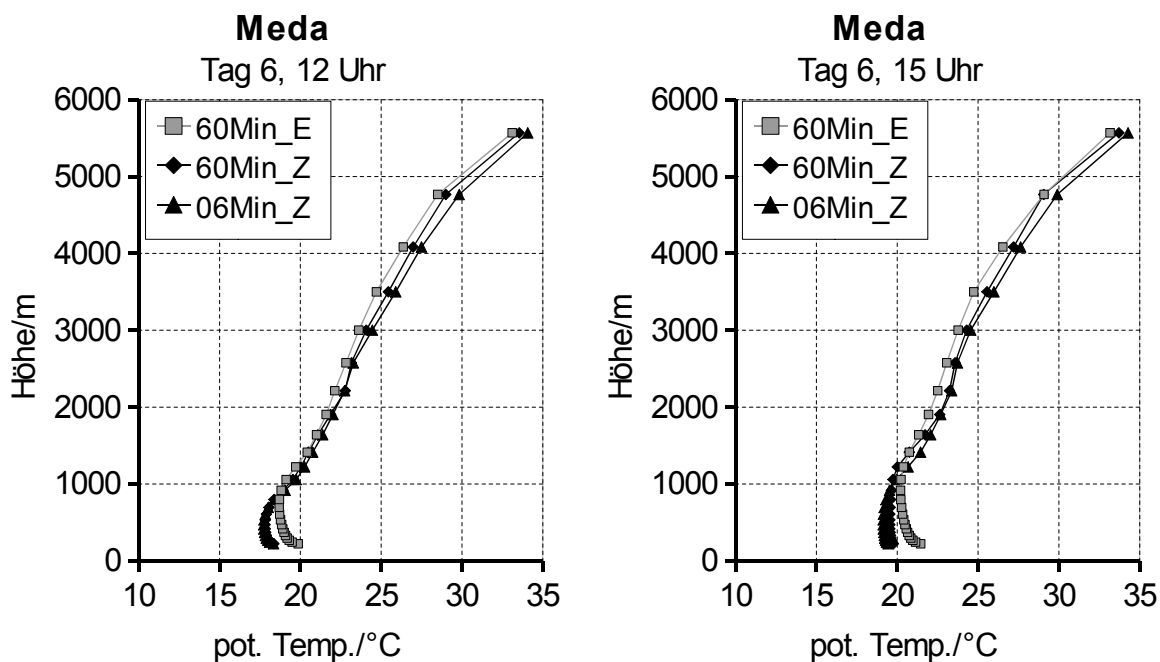


Bild 6.29: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 12 und 15 Uhr.

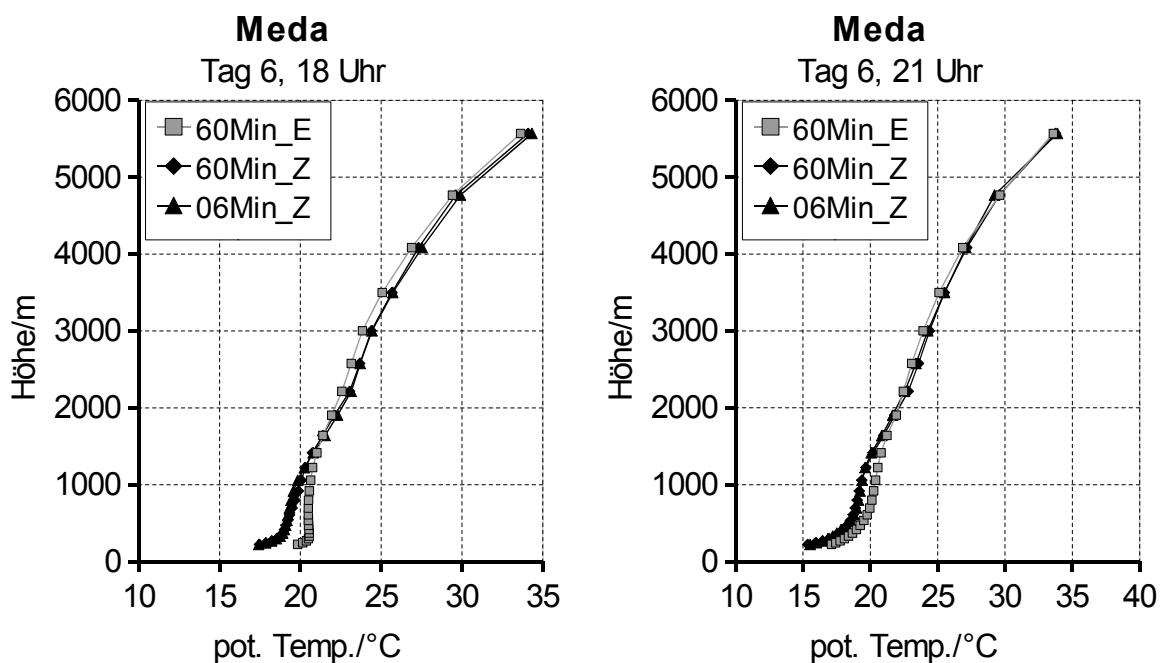


Bild 6.30: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 18 und 21 Uhr.

Höhenprofile der potentiellen Temperatur am Ort Vimercate:

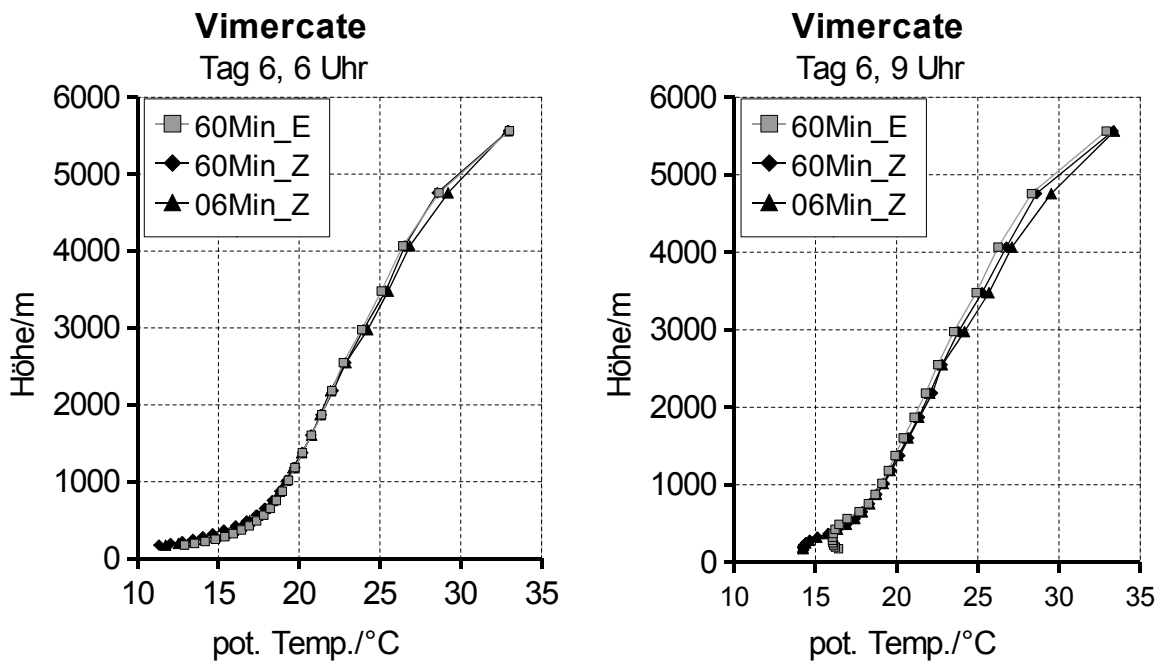


Bild 6.31: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 6 und 9 Uhr.

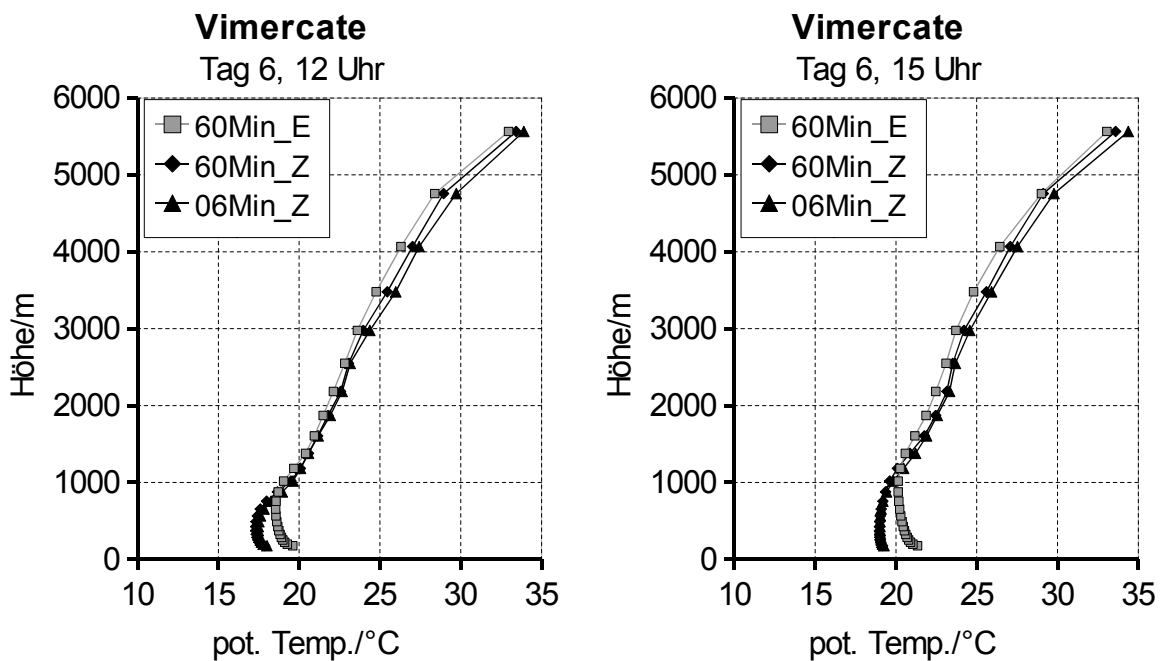


Bild 6.32: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 12 und 15 Uhr.

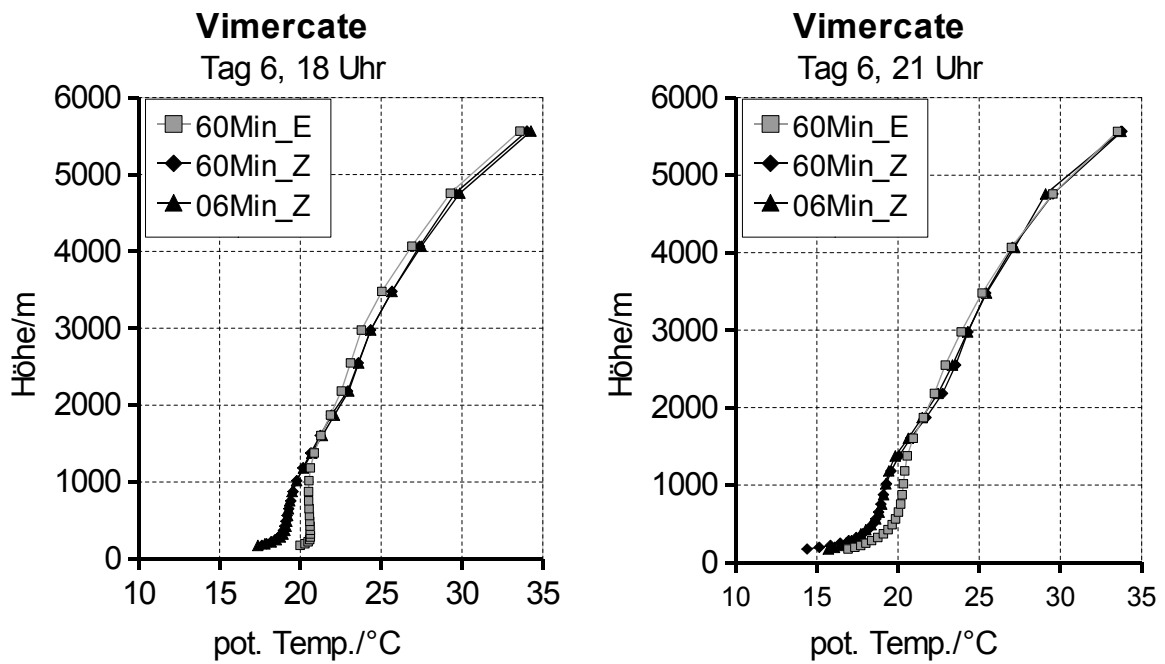


Bild 6.33: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 18 und 21 Uhr.

Höhenprofile der potentiellen Temperatur am Ort Magenta:

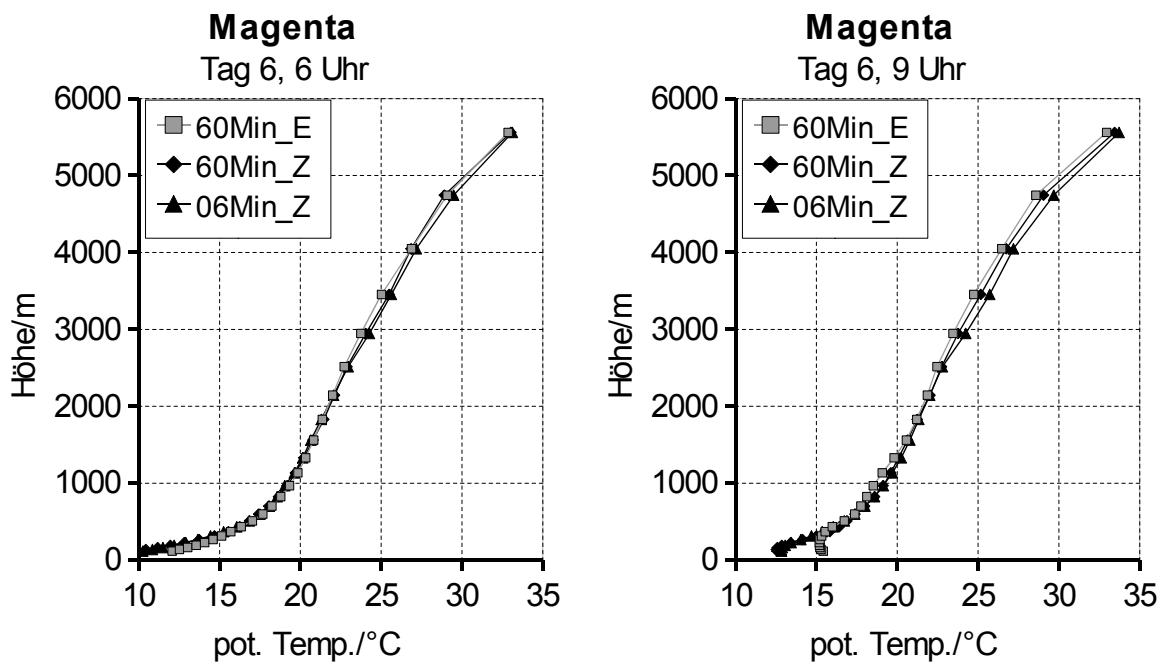


Bild 6.34: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 6 und 9 Uhr.

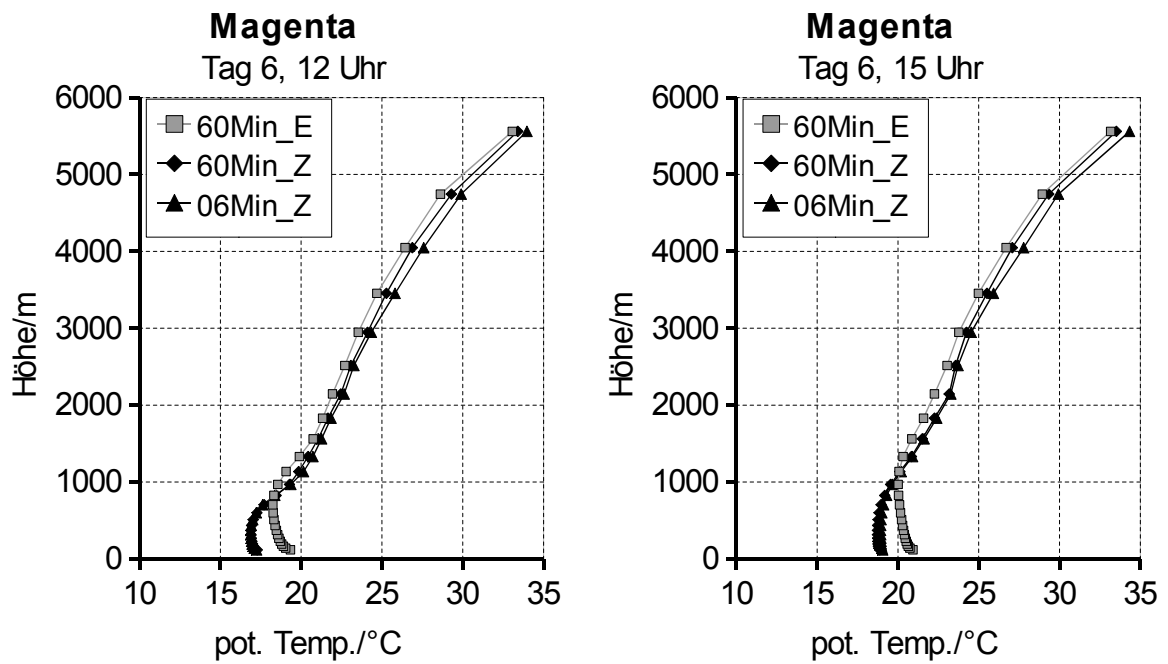


Bild 6.35: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 12 und 15 Uhr.

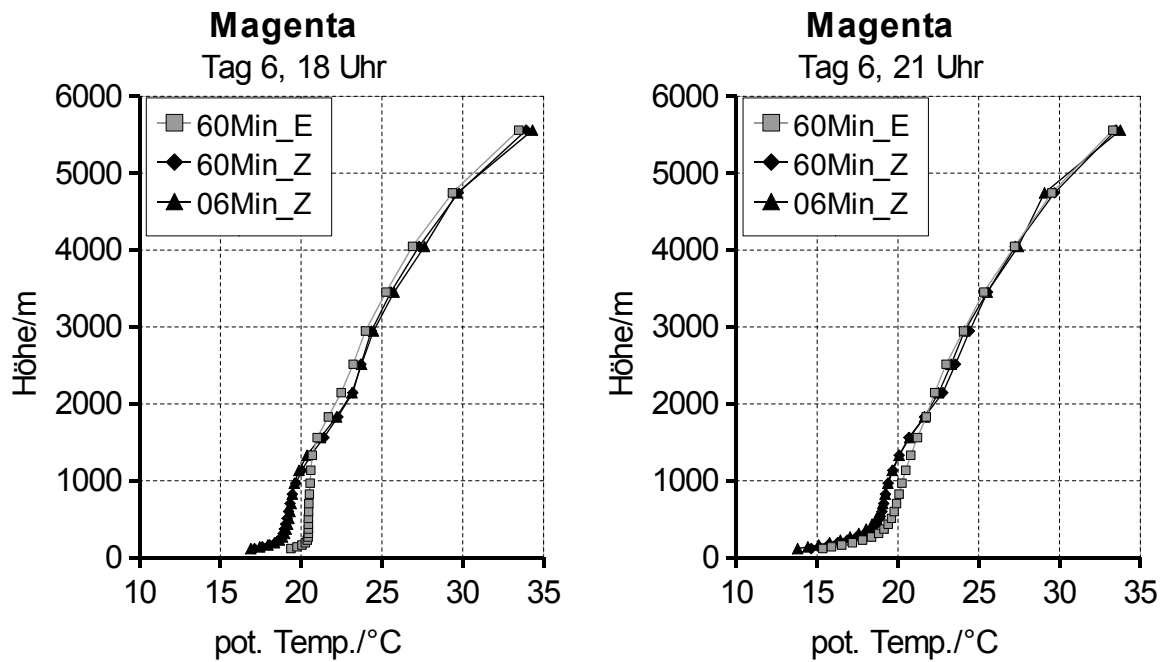


Bild 6.36: Höhenprofile der potentiellen Temperatur für 18 und 21 Uhr.

6.3 Mailand-Fall: Variationen mit Zweiwegkopplung

6.3.1 Art der Variationen

In diesem Kapitel wird der Einfluss der Aerosolkonzentration auf das Gesamtsystem untersucht. Dazu werden die Emissionsdaten und die Anfangs- und Randwerte der Konzentration, wie sie vom Projekt CITYDELTA zur Verfügung gestellt wurden, in den Schritten +50 %, +100 % und +200 % variiert. Vergleiche mit den Ergebnissen für die unveränderten Daten sollen den Einfluss des Aerosols auf die meteorologischen Größen zeigen. Als Grundlage des Vergleichs dienen die Ergebnisse aus der Rechnung mit Zweiwegkopplung und sechzig-minütigem Übergabeintervall von Kapitel 6.2. Für die Variationsrechnungen werden ebenfalls die Zweiwegkopplung mit sechzig-minütigem Übergabeintervall verwendet. Das Rechengebiet ist dasselbe, wie es für die Untersuchungen in Kapitel 6.2 verwendet wurde. Die meteorologischen und topografischen Eingabedaten sind ebenfalls die von Kapitel 6.2.

6.3.2 Rechenergebnisse

Der Einfluss der Konzentration auf das atmosphärische Gesamtsystem wurde für die 4 Messorte Limite, Meda, Vimercate und Magenta untersucht. Für den Standort Limite werden die Rechenergebnisse eingehend analysiert.

Zunächst werden für die 4 Messorte die Verläufe der Bodentemperatur der auf die Erdoberfläche treffenden langwelligen Strahlung gegenübergestellt.

Die Ergebnisse der Variationen (Bild 6.37 bis Bild 6.44) weisen nur geringe Abweichungen voneinander auf. Tagsüber sind die Temperaturverläufe nahezu gleich. Dies gilt auch für die Verläufe der langwelligen Strahlung. Nachts treten etwas größere Unterschiede auf. Für alle 4 Messorte zeigt ein Vergleich des Temperaturdiagramms mit dem Diagramm für langwellige Einstrahlung auf die Erdoberfläche, dass in beiden Diagrammen die Ergebnisse aus den Variationsrechnungen (+50%, +100%, +200%) auf die gleiche Weise vom Vergleichsergebnis (00%) abweichen.

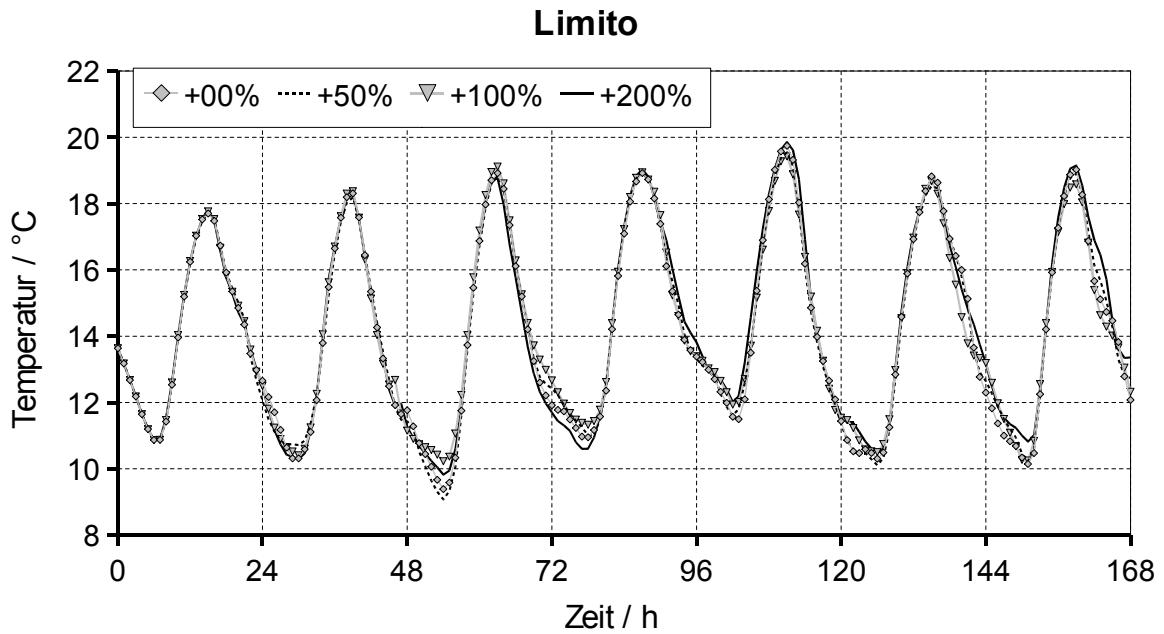


Bild 6.37: Temperaturreihen für 7 Tage am Ort Limito.

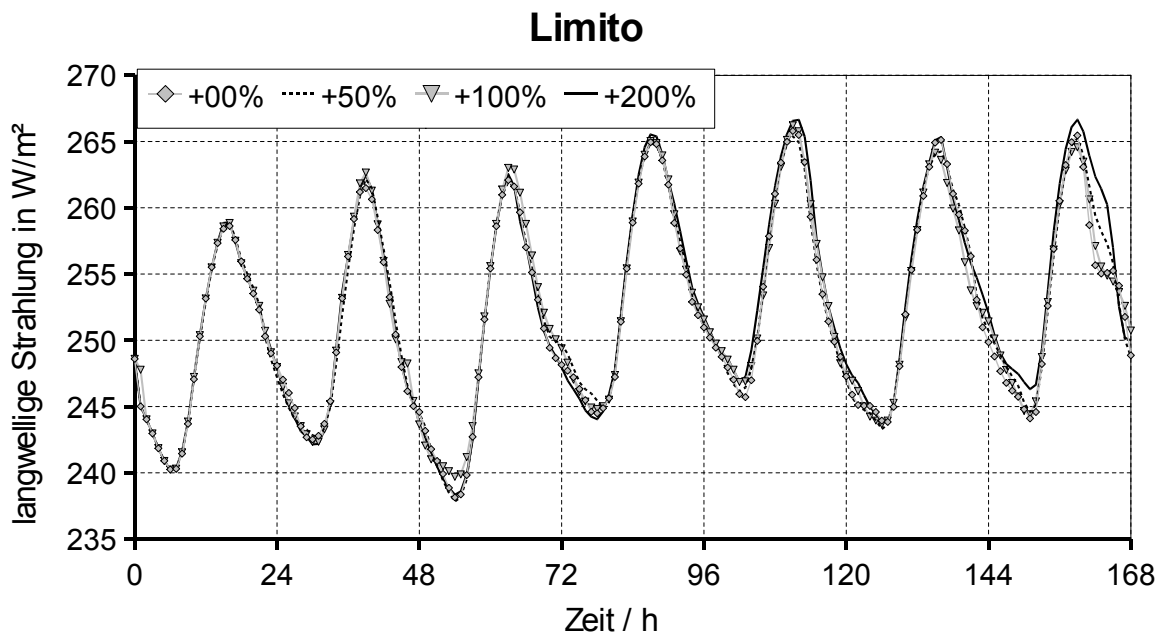


Bild 6.38: Reihen langwelliger Bodeneinstrahlung für 7 Tage am Ort Limito.

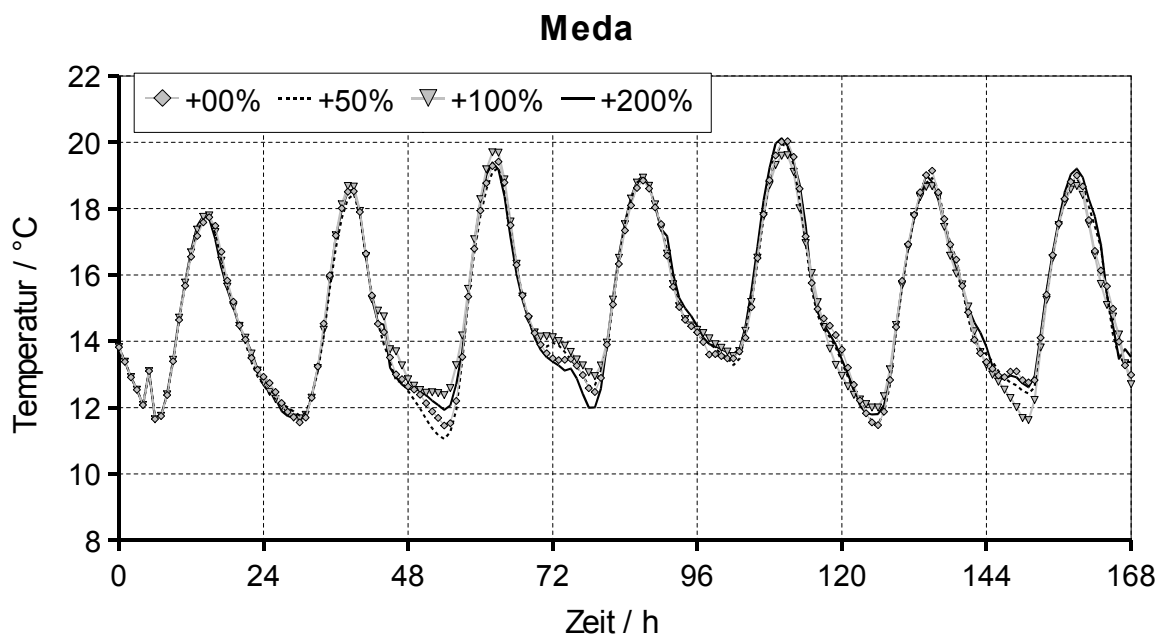


Bild 6.39: Temperaturreihen für 7 Tage am Ort Meda.

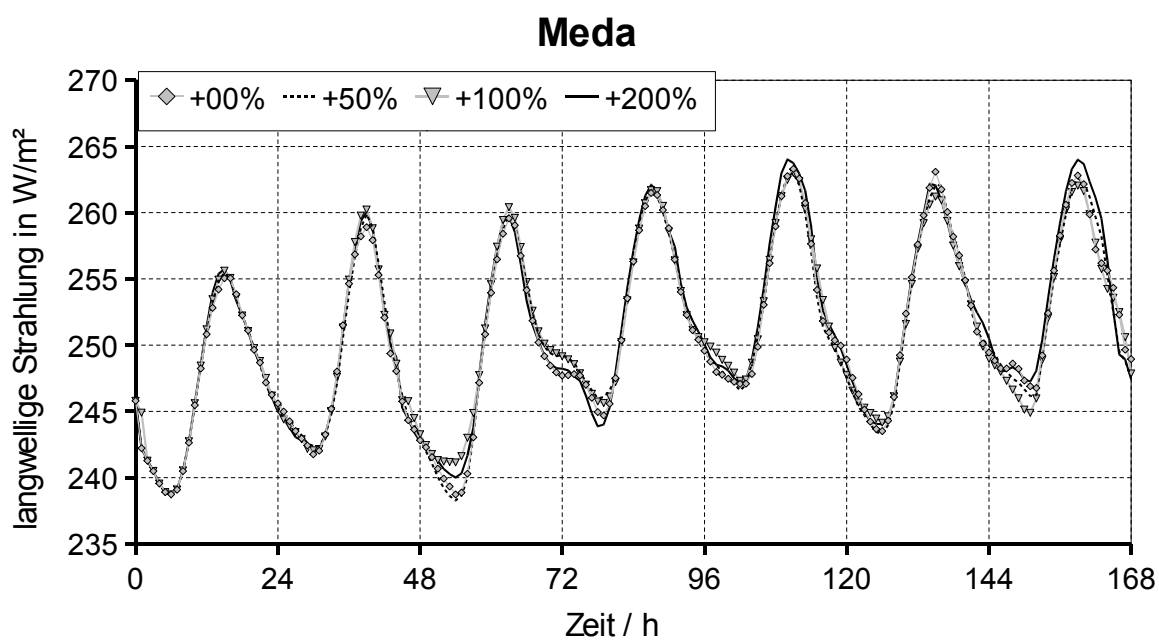


Bild 6.40: Reihen langwelliger Bodeneinstrahlung für 7 Tage am Ort Meda.

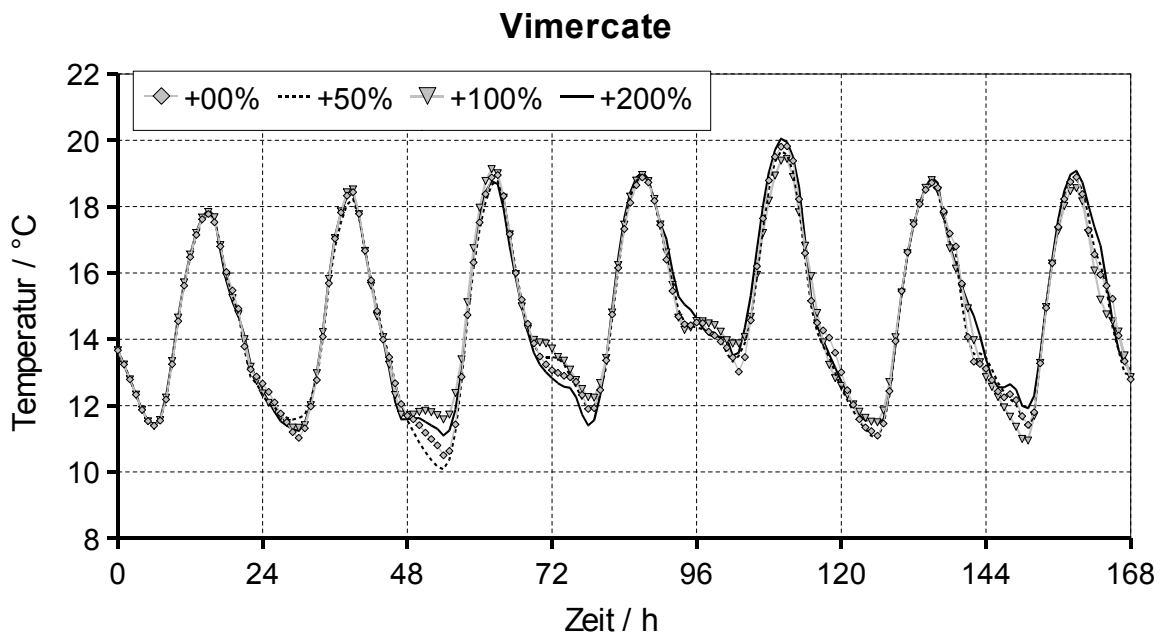


Bild 6.41: Temperaturreihen für 7 Tage am Ort Vimercate.

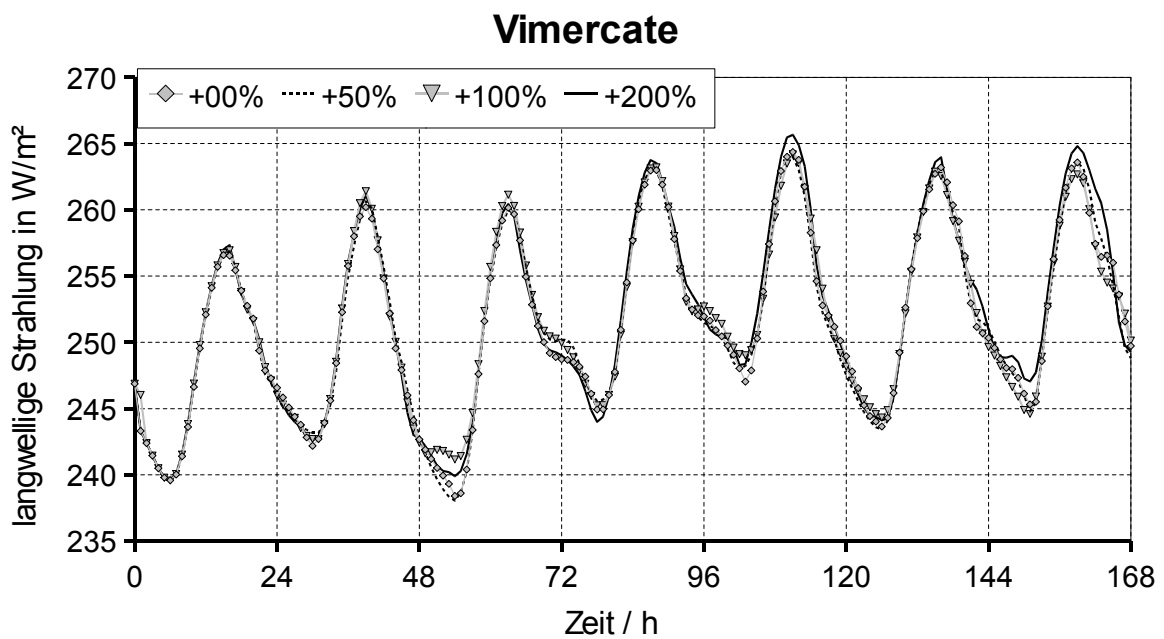


Bild 6.42: Reihen langwelliger Bodeneinstrahlung für 7 Tage am Ort Vimercate.

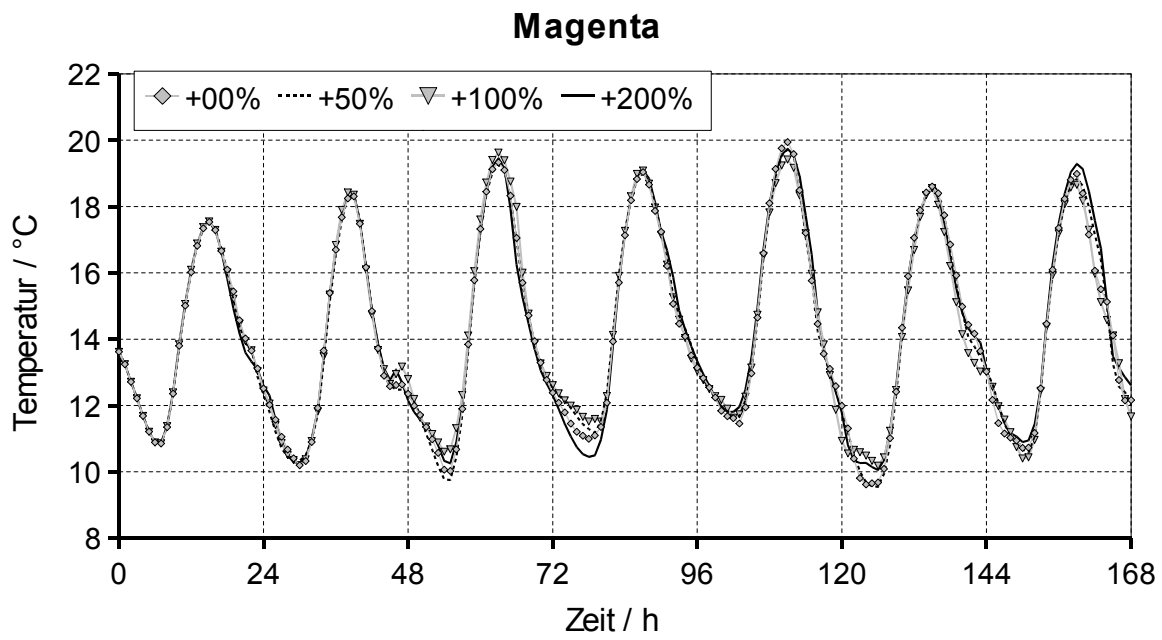


Bild 6.43: Temperaturreihen für 7 Tage am Ort Magenta.

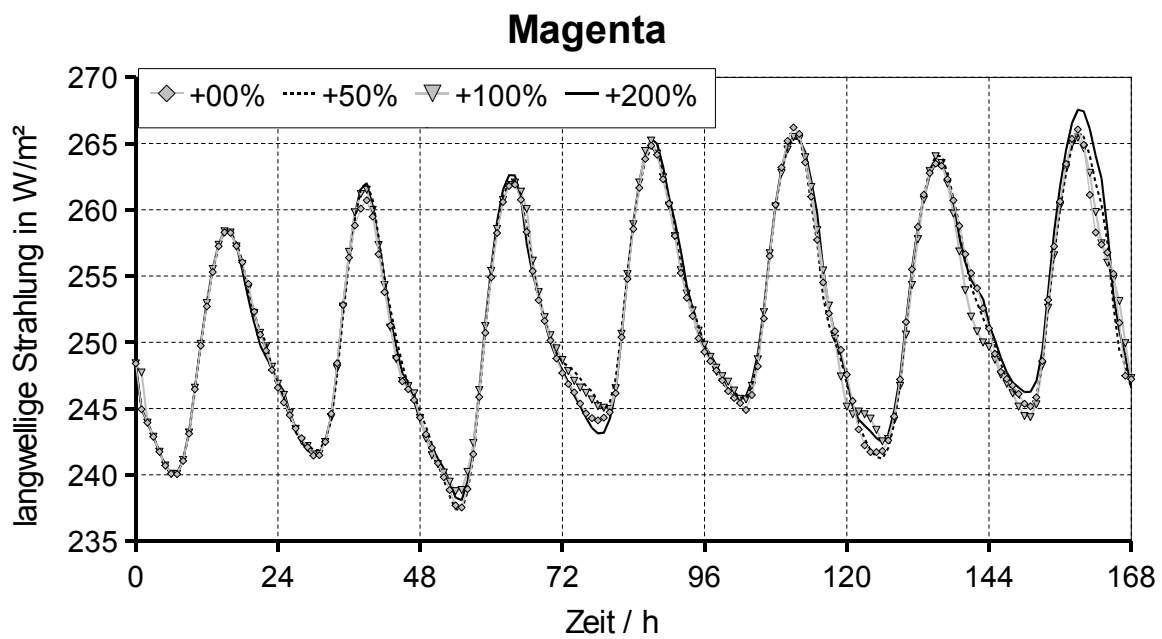


Bild 6.44: Reihen langwelliger Bodeneinstrahlung für 7 Tage am Ort Magenta.

In den Bildern 6.45 bis 6.52 sind für den Zeitraum 132 Stunden (6. Tag 12 Uhr) bis 150 Stunden (7. Tag 6 Uhr) Abweichungen der Ergebnisse aus den Variationsrechnungen (Temperatur und langwellige Einstrahlung auf die Erdoberfläche) vom Vergleichsergebnis dargestellt.

Es liegt ein eindeutiger Zusammenhang zwischen den Kurven der Abweichung langwelliger Bodeneinstrahlung und den dazugehörigen Kurven der Temperaturabweichung vor. So stimmen die Verläufe für die jeweilige Variation in Richtung und Lage überein. Steigt die Abweichung der Temperatur bei einer Variation an, so steigt auch die Abweichung langwelliger Strahlung an. Liegt eine Temperaturabweichung über allen anderen so liegt auch die Abweichung der langwelligigen Strahlung über allen anderen. Dies gilt auch in umgekehrter Richtung. Die einzige Ausnahme dieser guten Übereinstimmung liegt am Standort Magenta ab etwa der Stunde 144 vor. Dieser eindeutige Zusammenhang zwischen Temperatur und langwelliger abwärtsgerichteter Strahlung lässt die Folgerung zu, dass die bodennahe Temperatur in der Nacht maßgeblich von der langwelligen Einstrahlung aus höheren Luftschichten bestimmt wird. Dies bedeutet, dass bei einer Temperaturabweichung in die positive Richtung die darüber liegenden Luftschichten wärmer sein müssen, als in der Ausgangsrechnung.

Ein eindeutiger Zusammenhang zwischen der Variationsstärke und den Änderungen der Temperatur und der Strahlung ist nicht festzustellen. Die Temperaturen in den höheren Luftschichten ändern sich offensichtlich nicht im gleichen Maße wie die Konzentration. Dies liegt daran, dass durch den Einfluss des Aerosols auf den Strahlungshaushalt auch die meteorologischen Größen beeinflusst werden, was auch zu einer Änderung der Windverhältnisse führt.

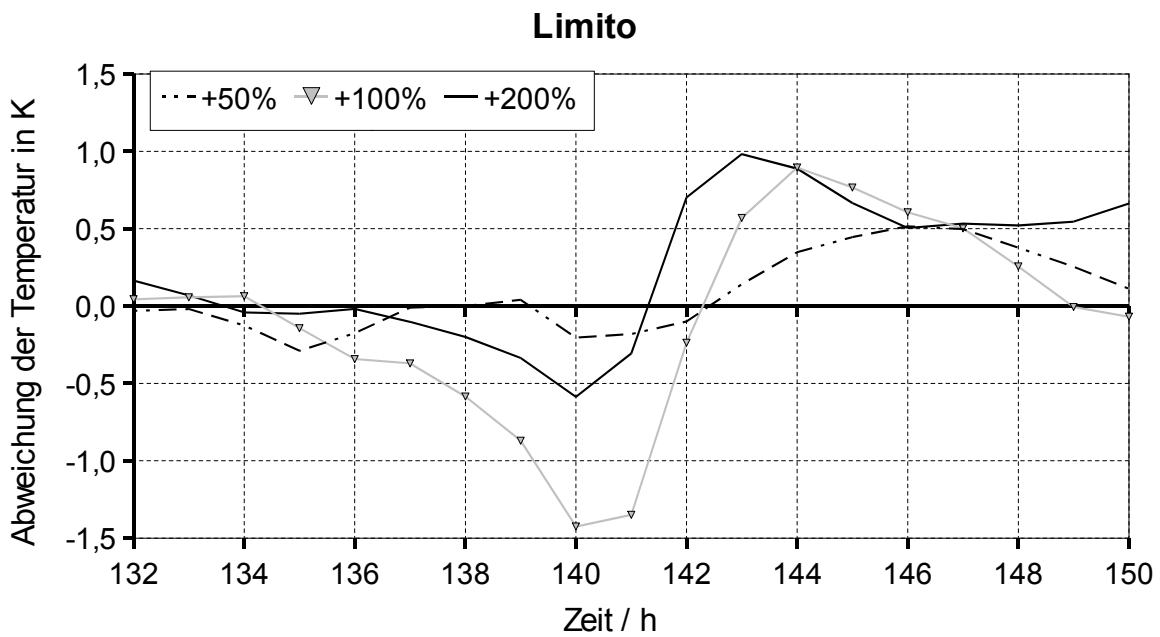


Bild 6.45: Abweichungen der Bodentemperatur aus Variationsrechnungen von der Vergleichstemperatur am Ort Limito für den Zeitraum 6. Tag 12 Uhr bis 7. Tag 6 Uhr.

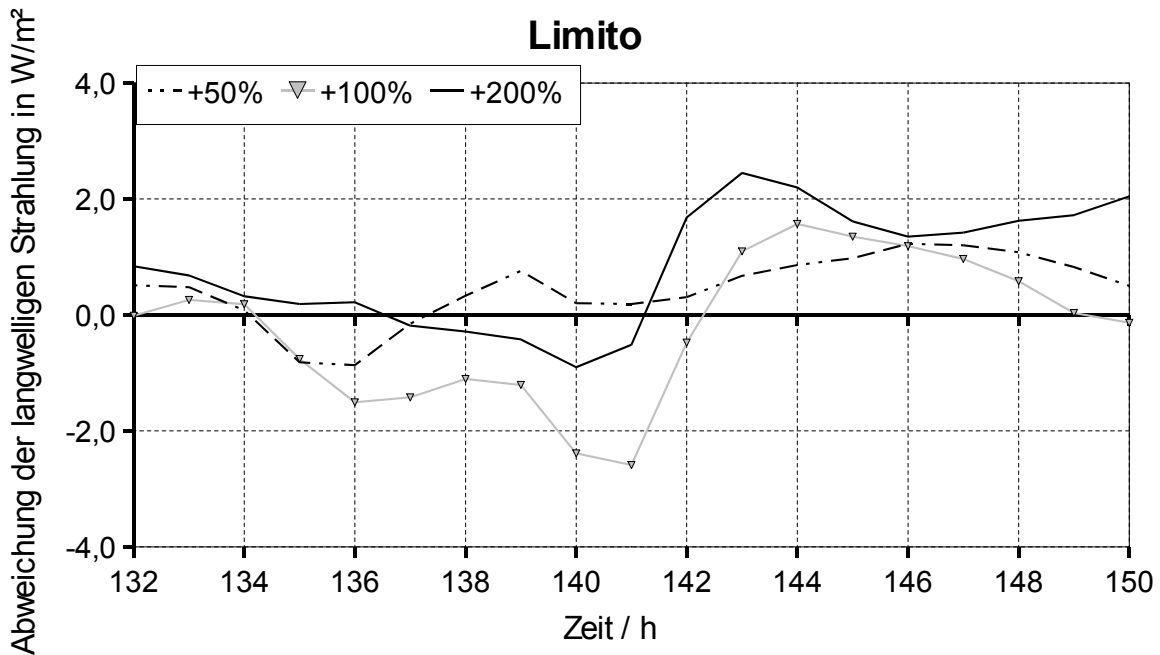


Bild 6.46: Abweichungen langwelliger Bodeneinstrahlung aus Variationsrechnungen von der Vergleichseinstrahlung am Ort Limito für den Zeitraum 6. Tag 12 Uhr bis 7. Tag 6 Uhr.

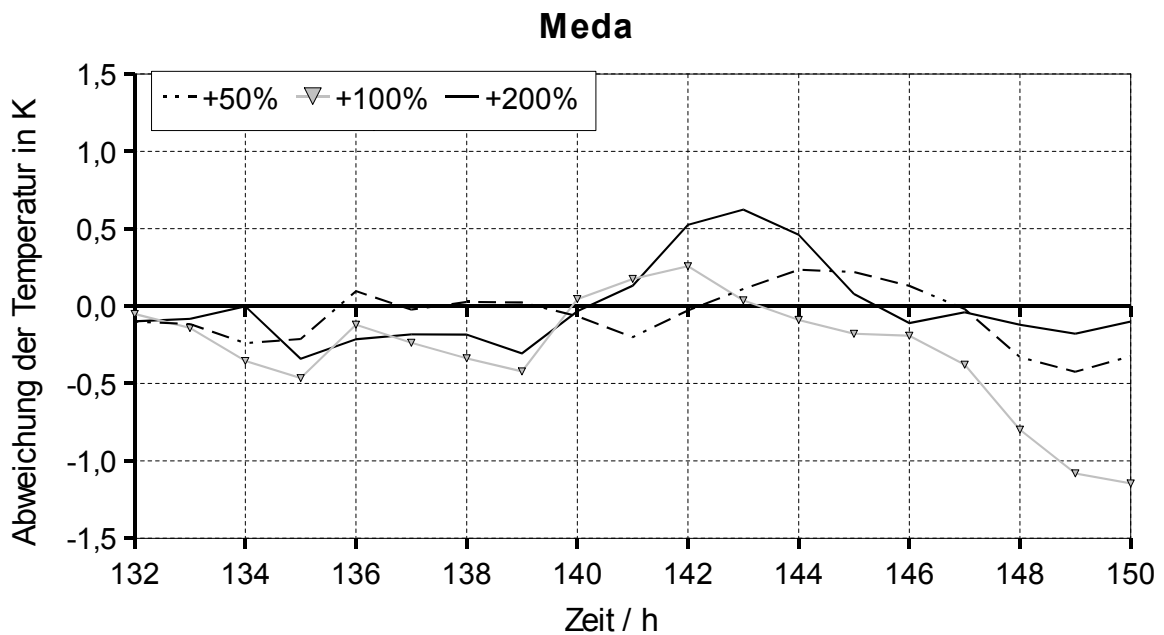


Bild 6.47: Abweichungen der Bodentemperatur aus Variationsrechnungen von der Vergleichstemperatur am Ort Meda für den Zeitraum 6. Tag 12 Uhr bis 7. Tag 6 Uhr.

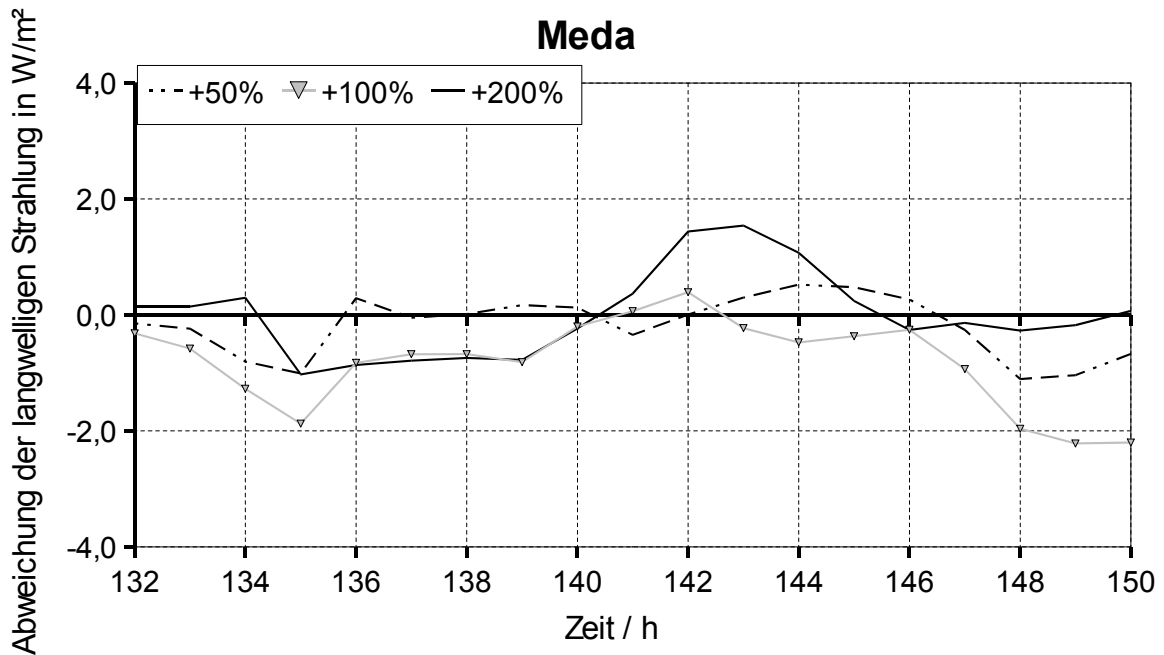


Bild 6.48: Abweichungen langwelliger Bodeneinstrahlung aus Variationsrechnungen von der Vergleichseinstrahlung am Ort Meda für den Zeitraum 6. Tag 12 Uhr bis 7. Tag 6 Uhr.

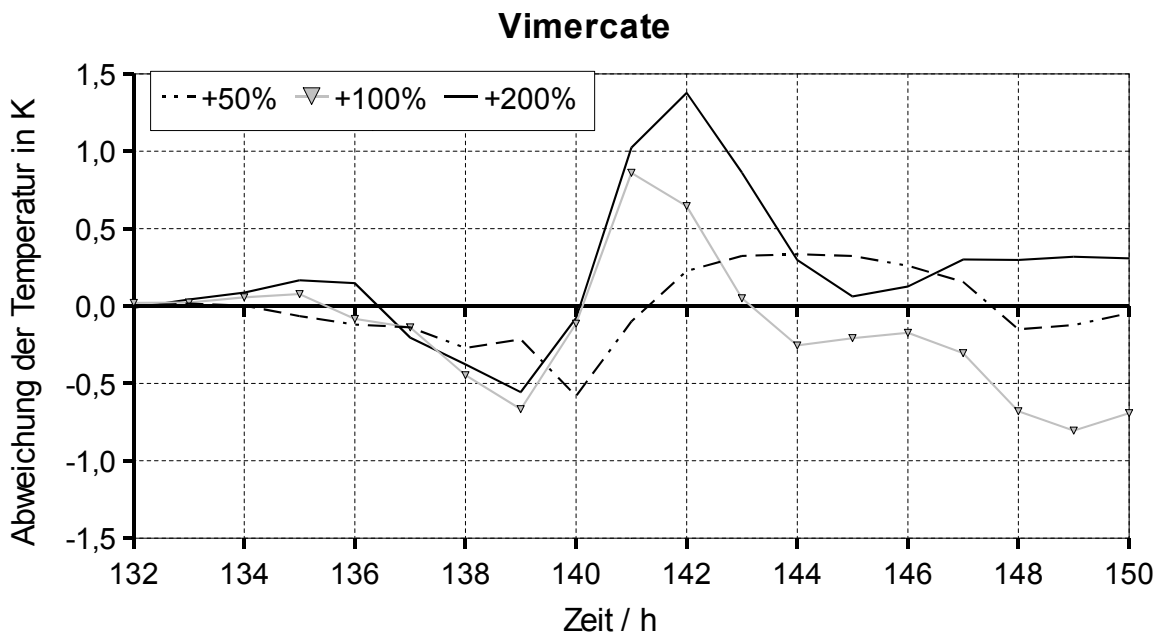


Bild 6.49: Abweichungen der Bodentemperatur aus Variationsrechnungen von der Vergleichstemperatur am Ort Vimercate für den Zeitraum 6. Tag 12 Uhr bis 7. Tag 6 Uhr.

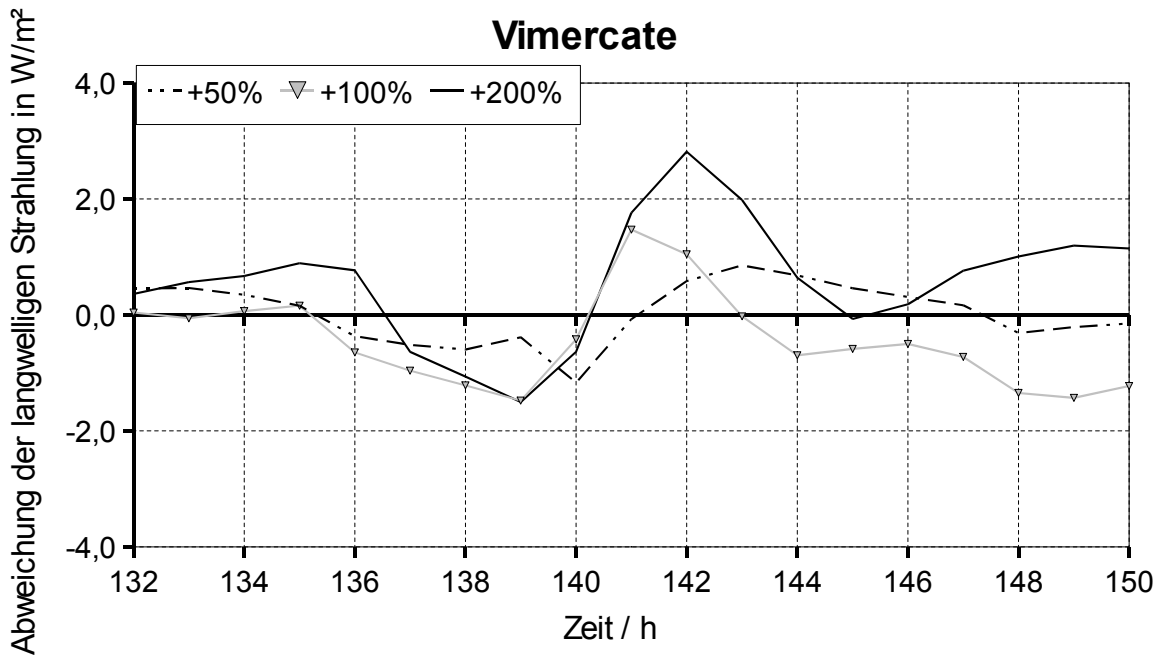


Bild 6.50: Abweichungen langwelliger Bodeneinstrahlung aus Variationsrechnungen von der Vergleichseinstrahlung am Ort Vimercate für den Zeitraum 6. Tag 12 Uhr bis 7. Tag 6 Uhr.

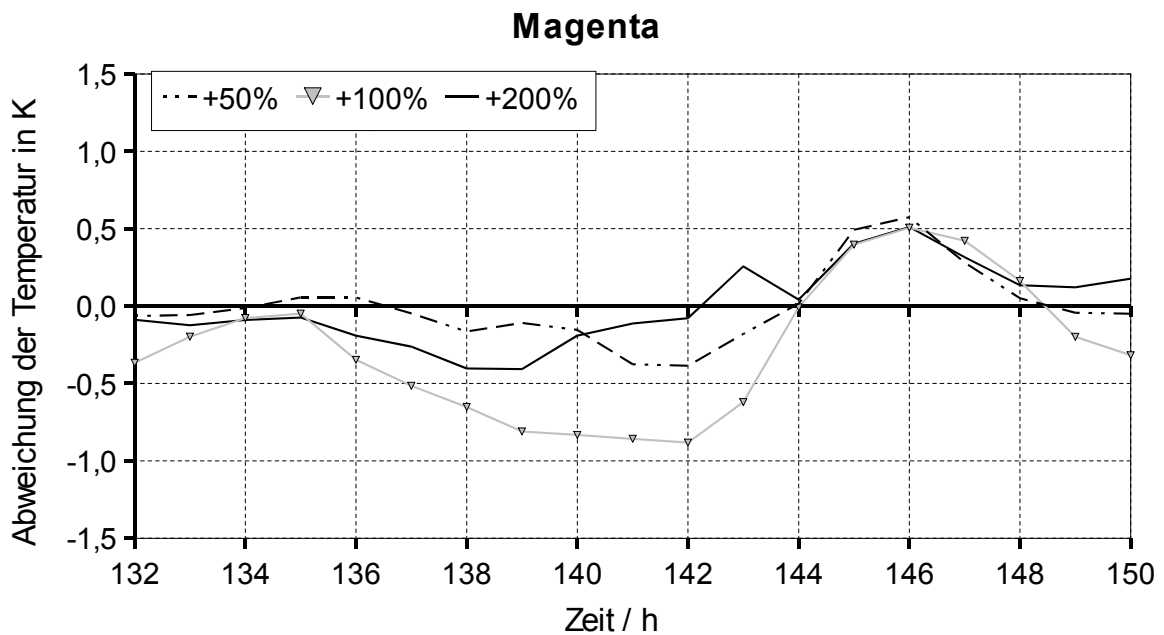


Bild 6.51: Abweichungen der Bodentemperatur aus Variationsrechnungen von der Vergleichstemperatur am Ort Magenta für den Zeitraum 6. Tag 12 Uhr bis 7. Tag 6 Uhr.

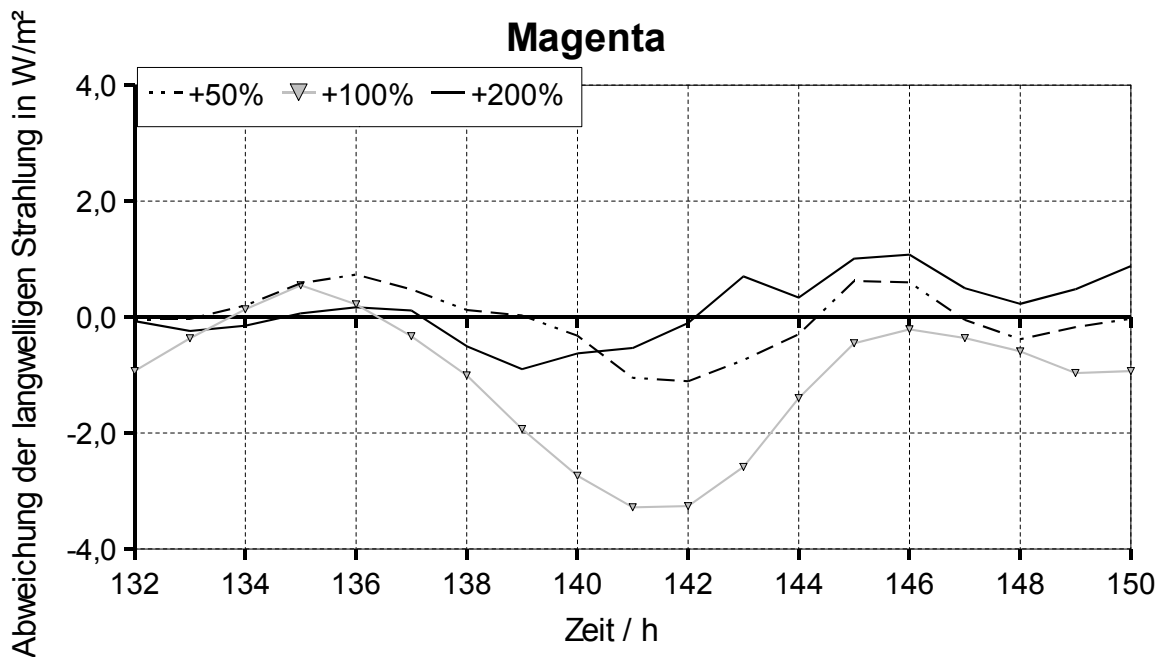


Bild 6.52: Abweichungen langwelliger Bodeneinstrahlung aus Variationsrechnungen von der Vergleichseinstrahlung am Ort Magenta für den Zeitraum 6. Tag 12 Uhr bis 7. Tag 6 Uhr.

Zur genaueren Betrachtung des Einflusses der Aerosolkonzentration auf die meteorologischen Zustandsgrößen sind in Bild 6.53 bis Bild 6.59 Höhenprofile der horizontalen Geschwindigkeiten für den Ort Limito dargestellt. Die Geschwindigkeitskomponente u steht für den zur südlichen und nördlichen Kante des Rechengebietes parallelen Anteil der Geschwindigkeit (x-Richtung). Die Geschwindigkeitskomponente v verläuft parallel zur östlichen und westlichen Kante des Rechengebiets (y-Richtung). Ist der Wert für die Komponente u positiv weist der Geschwindigkeitszeiger in Ostrichtung. Bei einem positiven Wert für v weist der Zeiger in Nordrichtung. Die Darstellung gilt für einen 3 Stunden Rhythmus beginnend mit dem 6. Tag um 12 Uhr und endet am 7. Tag um 6 Uhr. Dieser Zeitraum wurde ausgewählt, weil hier die Abweichungen der Bodentemperatur und der langwelligen Strahlung der einzelnen Variationen schon früh am Tag beginnen.

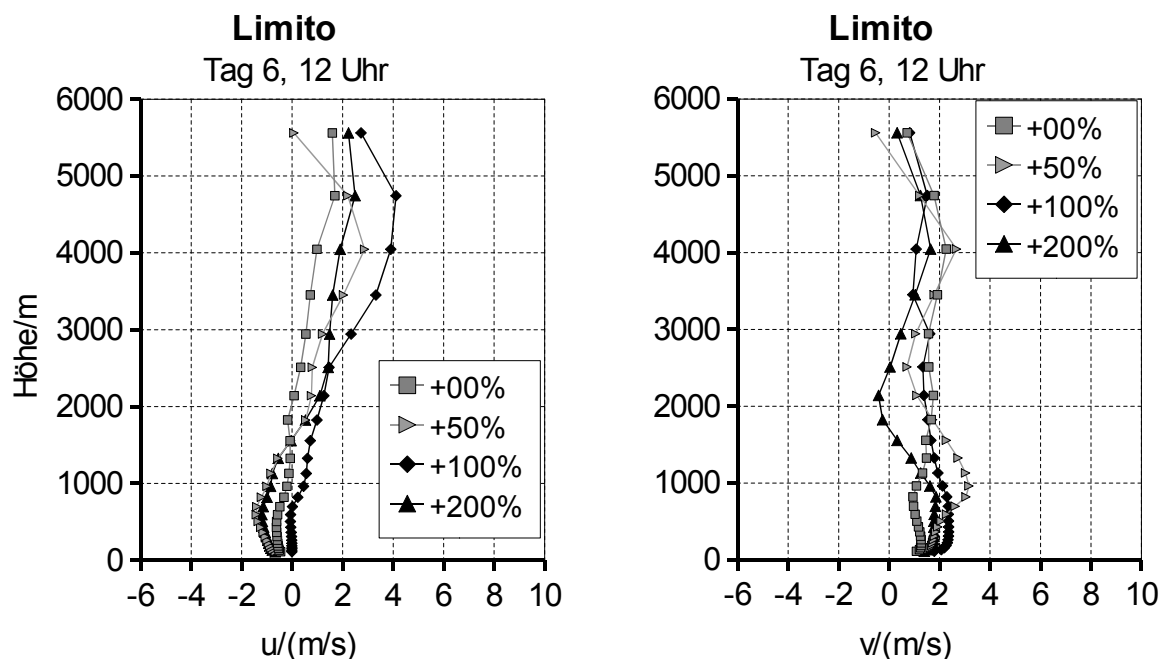


Bild 6.53: Höhenprofile der Geschwindigkeitskomponenten u (links) und v (rechts) für 12 Uhr des 6. Tages.

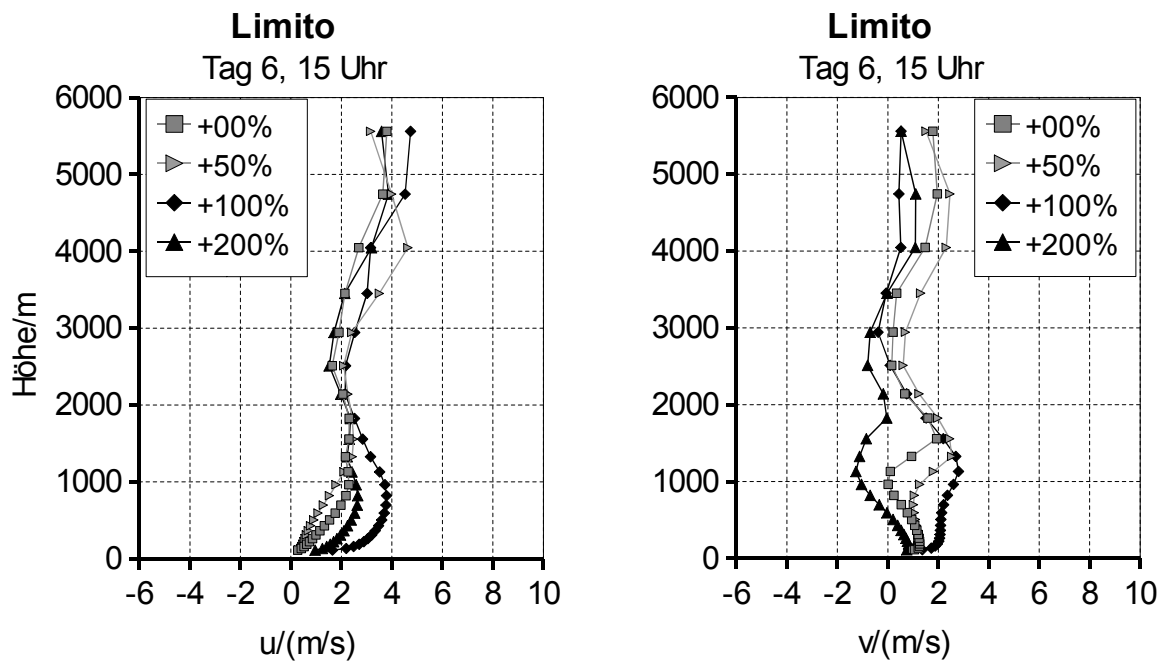


Bild 6.54: Höhenprofile der Geschwindigkeitskomponenten u (links) und v (rechts) für 15 Uhr des 6. Tages.

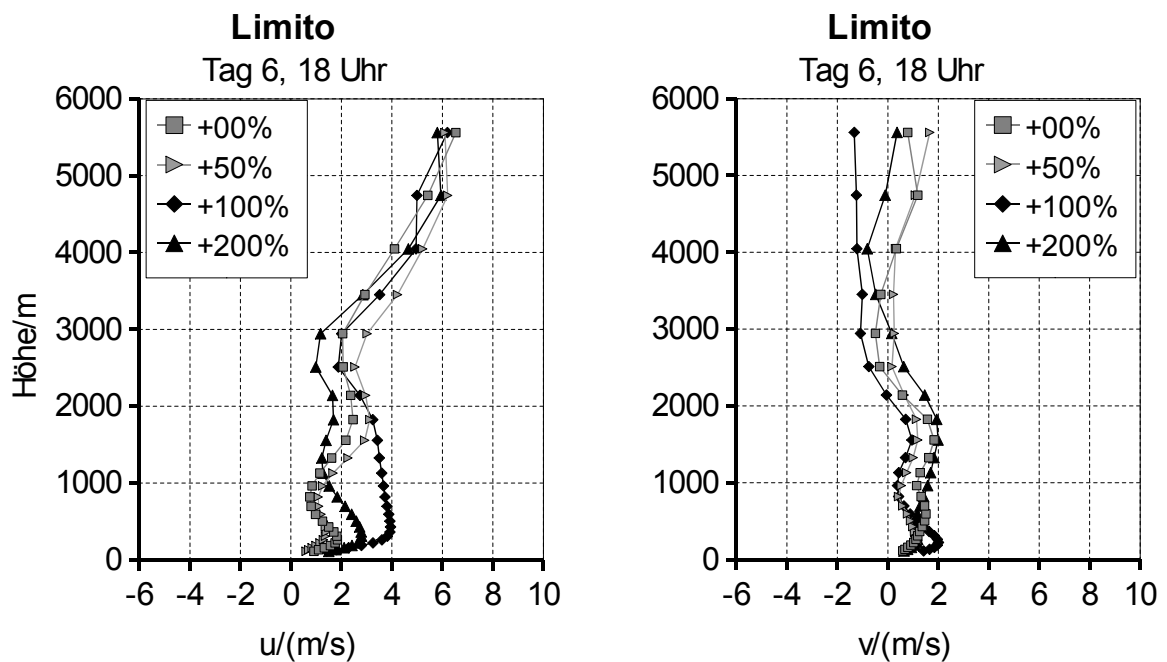


Bild 6.55: Höhenprofile der Geschwindigkeitskomponenten u (links) und v (rechts) für 18 Uhr des 6. Tages.

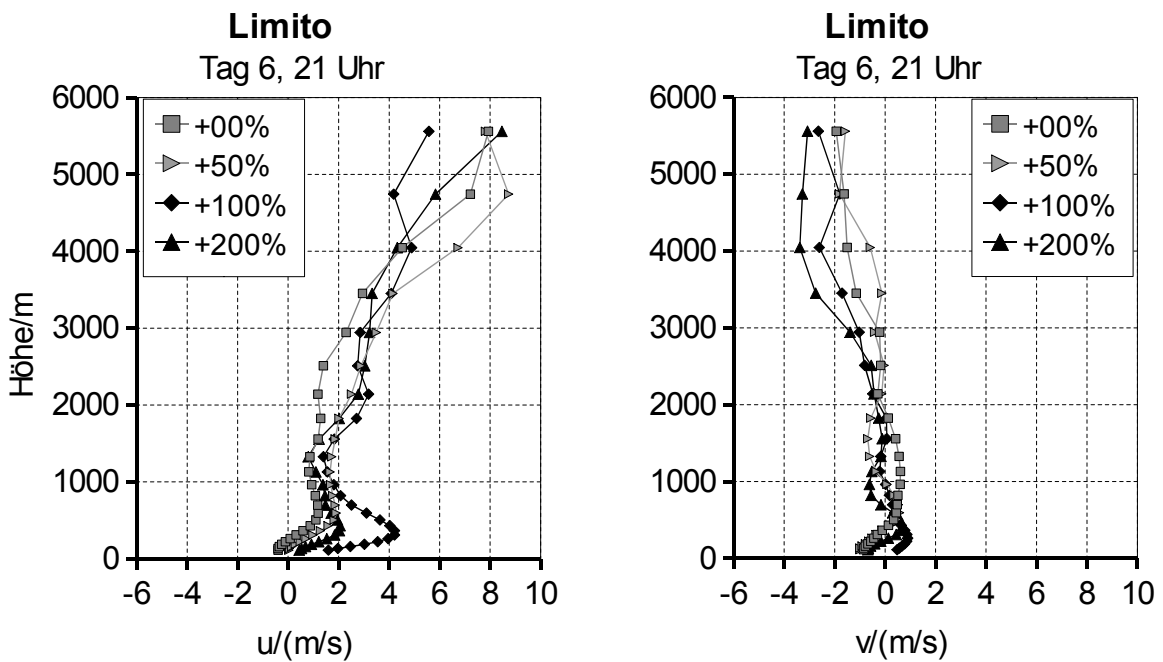


Bild 6.56: Höhenprofile der Geschwindigkeitskomponenten u (links) und v (rechts) für 21 Uhr des 6. Tages.

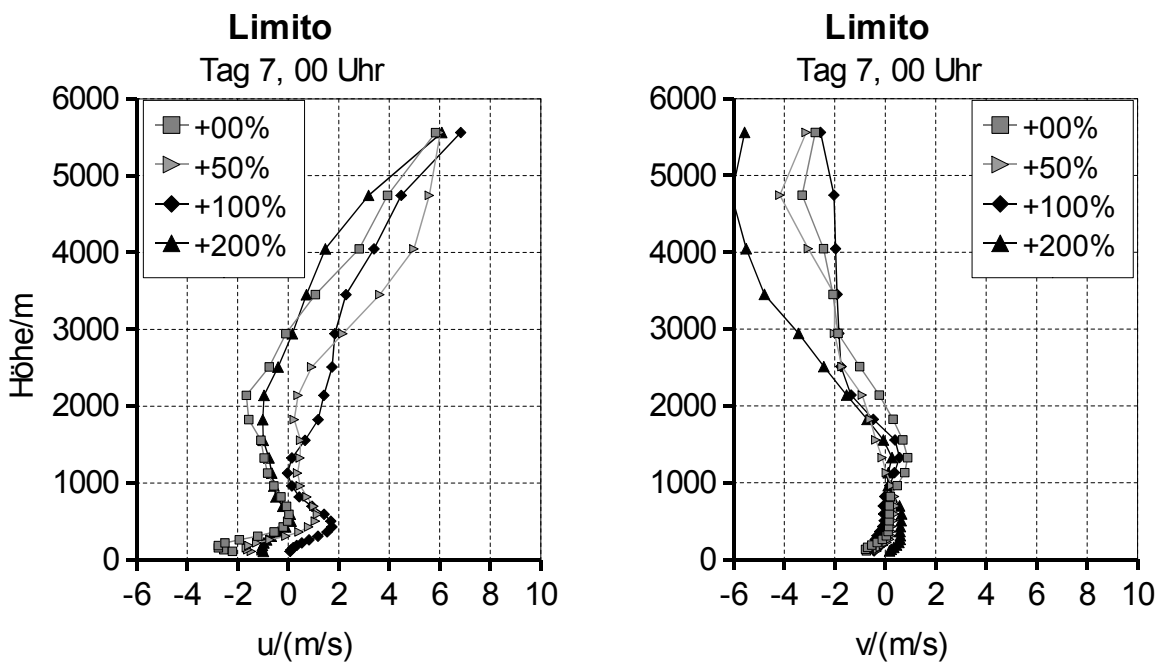


Bild 6.57: Höhenprofile der Geschwindigkeitskomponenten u (links) und v (rechts) für 0 Uhr des 7. Tages.

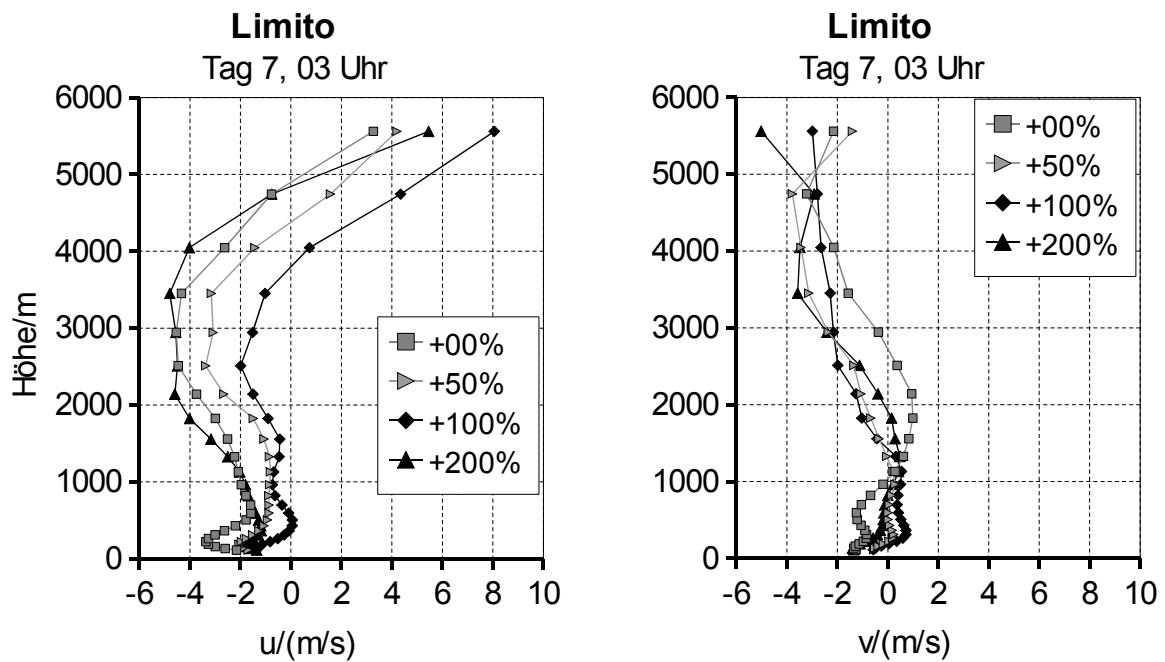


Bild 6.58: Höhenprofile der Geschwindigkeitskomponenten u (links) und v (rechts) für 3 Uhr des 7. Tages.

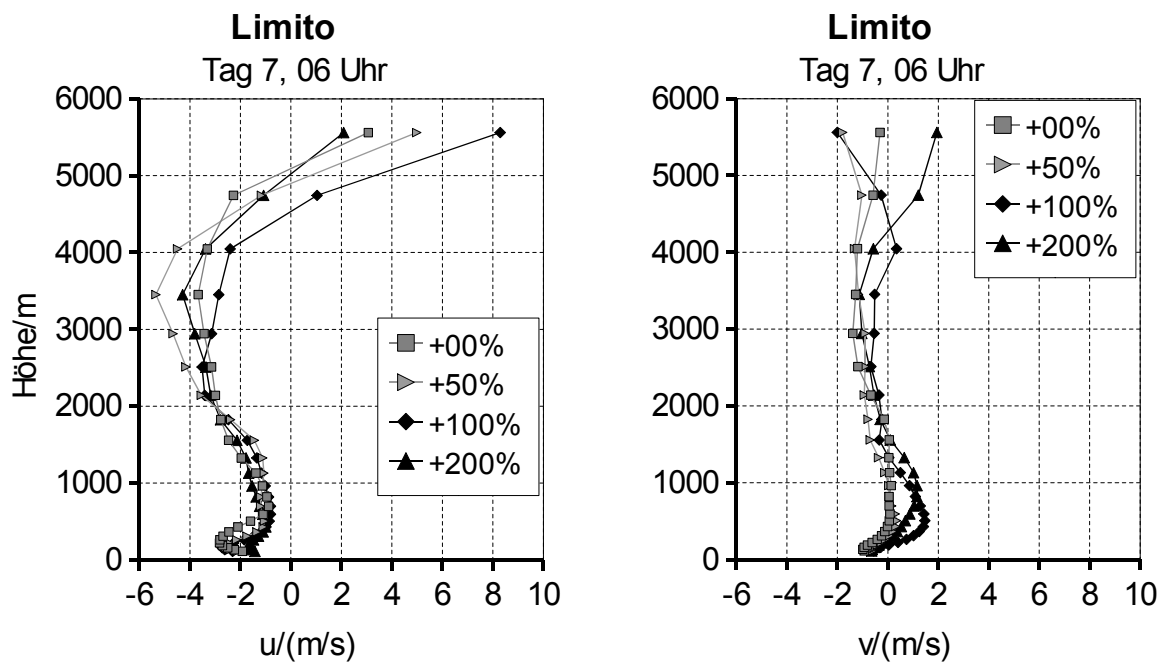


Bild 6.59: Höhenprofile der Geschwindigkeitskomponenten u (links) und v (rechts) für 6 Uhr des 7. Tages.

Auch hier ist kein eindeutiger Zusammenhang zwischen der Aerosolkonzentration und dem Verlauf der Geschwindigkeit sichtbar. Die

Geschwindigkeitsprofile für alle Aerosolkonzentrationen verlaufen für alle aufgeführten Zeitpunkte ähnlich. Es bildet sich auch keine von der Variation abhängige Verschiebung oder Verstärkung/Abschwächung der Geschwindigkeit aus. Dabei fällt auf, dass sich die Geschwindigkeitsprofile teilweise kreuzen.

Das Verhalten der Geschwindigkeit und auch das der zuvor gezeigten Temperatur und langwelligen Strahlung (Bild 6.37 bis Bild 6.52) führt zu dem Schluss, dass die Aerosolkonzentration den Strahlungshaushalt und damit die meteorologischen Zustandsgrößen (Temperatur, Druck) beeinflusst und so zu unterschiedlichen Windgeschwindigkeiten führt, was wiederum eine Auswirkung auf den Aerosoltransport und die räumliche Aerosolverteilung hat. Dieser Wirkungskreis führt zu so komplexen Ergebnissen, dass aus diesen kein direkter Zusammenhang zwischen der Aerosolkonzentration und den meteorologischen Zustandsgrößen und den Windgeschwindigkeiten erkennbar ist. Der Zusammenhang, der ganz sicher besteht, schon weil sich die Ergebnisse quantitativ aber nicht qualitativ unterscheiden, wird durch die Rückkopplung überdeckt.

Abschließend werden Höhenprofile der Aerosolkonzentration (Bild 6.60 bis Bild 6.63) für verschiedene Zeitpunkte aufgeführt. Die Zeitpunkte stimmen mit denen der Geschwindigkeitsprofile (Bild 6.53 bis Bild 6.59) überein. Zur Erinnerung wird noch einmal erwähnt, dass Konzentrationsdaten für die Eingabe in MARS nur für die unteren 3 Schichten vorhanden sind. Die Diagramme zeigen, dass sich in den unteren Schichten die Aerosolkonzentrationen gemäß den Variationen verhalten. So liegt bei der stärksten Variation auch die größte Konzentration vor. Mit der Höhe treten Abweichungen von diesem Verhalten auf. Im bodennahen Bereich sind die Konzentrationsunterschiede bei großer Ausgangskonzentration erwartungsgemäß größer als bei niedriger Ausgangskonzentration. Auffällig ist außerdem die Übereinstimmung der Konzentrationen im höheren Bereich von Mittag bis zum Abend. Erst mit einsetzender Nacht fächern sich die Konzentrationen auf. Ein ähnliches Verhalten zeigten auch die Bodentemperatur und die langwellige Strahlung. Im Gegensatz dazu nähern sich nachts die

Konzentrationen in den unteren Schichten gegenseitig an. Die Ausgangskonzentration nimmt in diesen Zeiträumen kleinere Werte an, was zu einer geringeren Spreizung bei ihrer Variation führt.

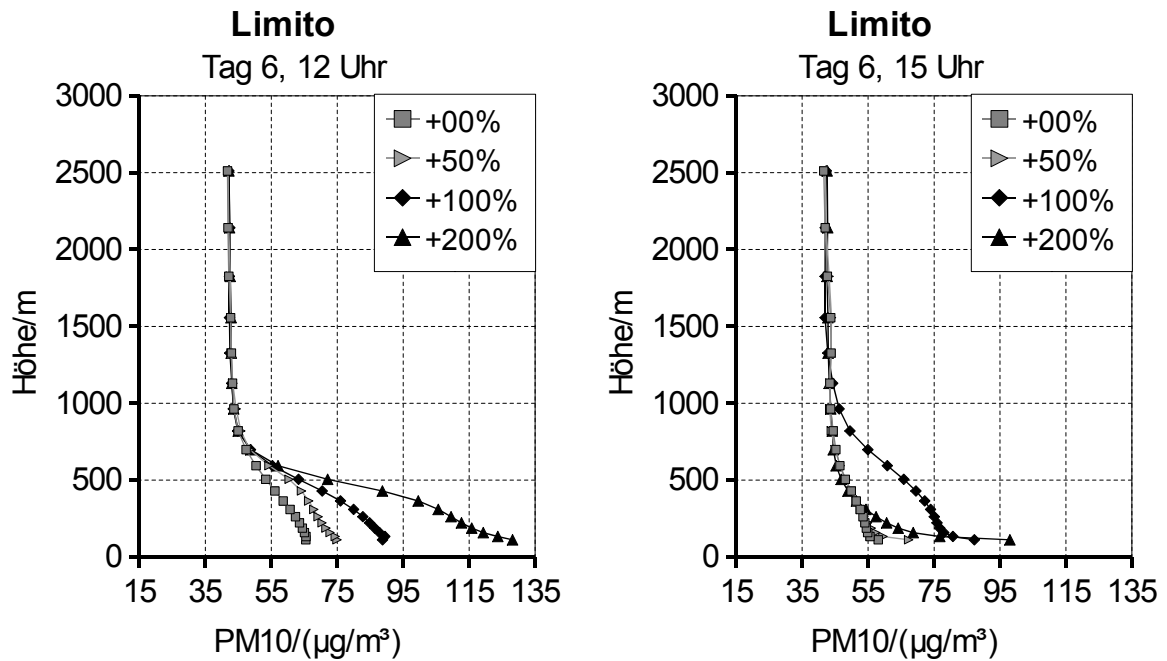


Bild 6.60: Höhenprofile der Aerosolkonzentrationen für 12 und 15 Uhr des 6. Tages.

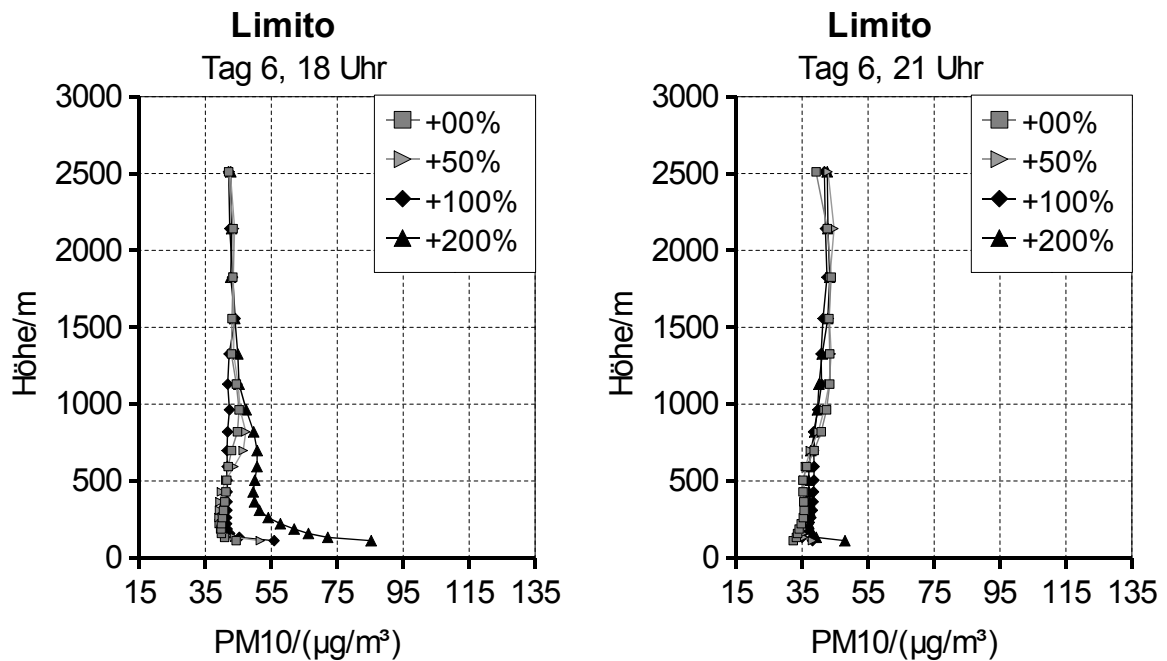


Bild 6.61: Höhenprofile der Aerosolkonzentrationen für 18 und 21 Uhr des 6. Tages.

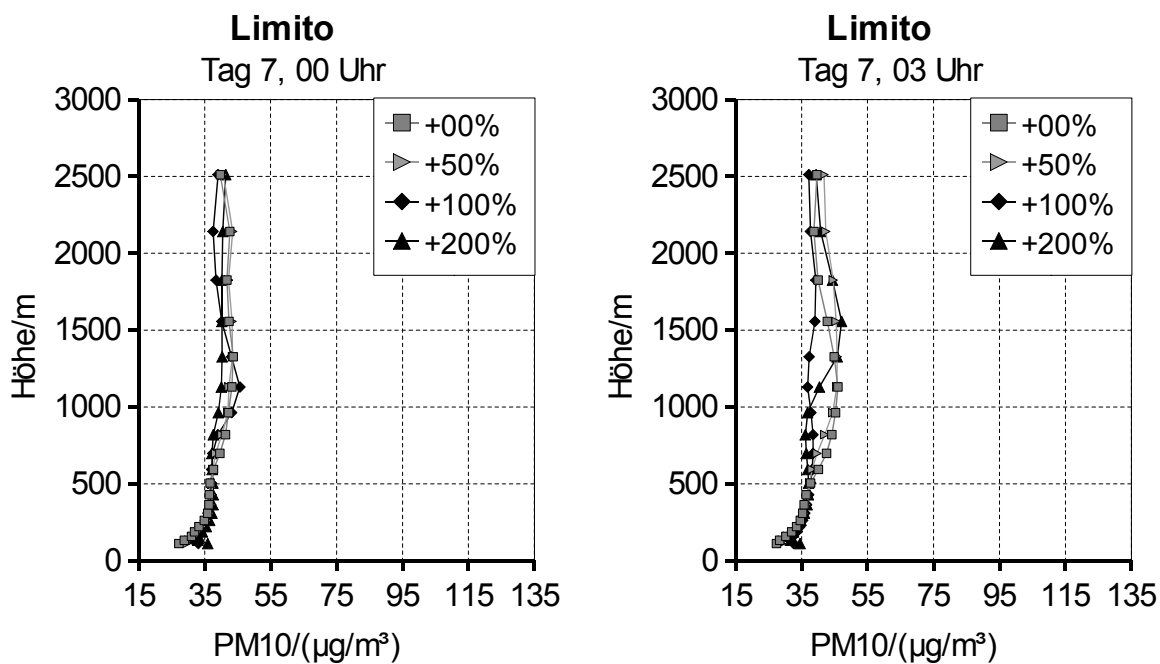


Bild 6.62: Höhenprofile der Aerosolkonzentrationen für 0 und 3 Uhr des 7. Tages.

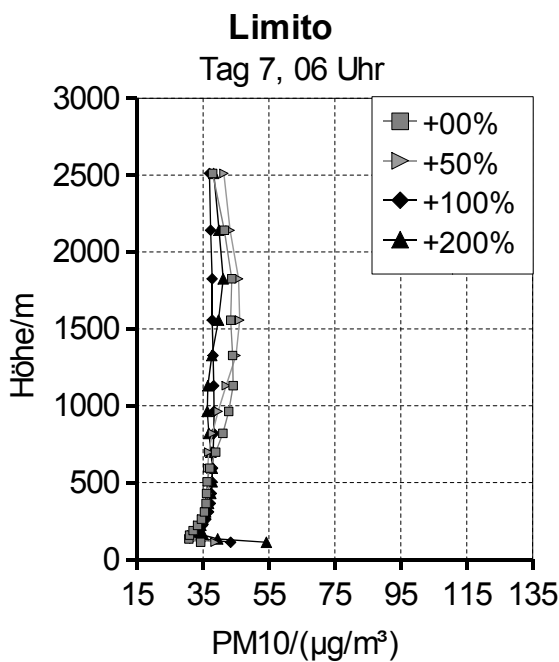


Bild 6.63: Höhenprofile der Aerosolkonzentrationen für 6 Uhr des 7. Tages.

Es lässt sich festhalten:

Die Variation der Aerosolkonzentration verändert die gesamten Rechenergebnisse. Die Ergebnisse weisen deutliche Unterschiede auf, verhalten sich aber ähnlich. Durch die Komplexität der Simulationen ist es nicht möglich anhand der Ergebnisse einen direkten Zusammenhang zwischen der Konzentration und einer bestimmten Zustandsgröße zu erkennen. Die Höhenprofile der Aerosolkonzentration verlaufen wie erwartet. In den unteren Rechenebenen, für die in konstanten Zeitabständen Konzentrationswerte vorgegeben wurden, verhalten sich die Konzentrationen entsprechend ihrer Abweichung von der Ausgangskonzentration. Auch ist die Spreizung der Konzentrationen bei größerem Ausgangswert höher, als bei niedrigerem. Nicht genau erklärbar ist das Verhalten der Konzentration im oberen Höhenbereich: vom Mittag bis zum Abend stimmen die Konzentrationen überein. Nachts fallen sie immer mehr auseinander. Dafür kommt es in den Nachtstunden zu einer stärker werdenden Übereinstimmung der Konzentrationen im unteren Höhenbereich, was damit zusammenhängt, dass die Ausgangskonzentration kleinere Werte annimmt und dadurch ihre Variation zu einer geringeren Spreizung der Konzentrationsvorgaben führt.

Die Variation der Aerosolkonzentration führt das hier entwickelte Gesamtmodell der Zweiwegkopplung von MEMO und MARS an seine Leistungsgrenze.

Die vorliegende Arbeit kann auch einen Beitrag zum europäischen Programm "ESSEM COST Action ES1004" (URL: www.cost.eu/domains_actions/essem/Actions/ES1004, 30. Januar 2012) liefern, das sich zum Ziel gesetzt hat solche umfassende Modelle zu erarbeiten. Die Wechselwirkung zwischen den verschiedenen atmosphärischen Prozessen soll dabei in Zweiwegkopplung beschrieben werden.

7 Zusammenfassung

In der Atmosphäre kommt es durch die direkte Wirkung des Aerosols auf den Strahlungshaushalt (Strahlungsantrieb) zu einer Beeinflussung der Strömungsverhältnisse, was wiederum Auswirkungen auf den Stofftransport hat. Aus diesem Grund ist es notwendig den Strahlungsantrieb des Aerosols bei numerischen Berechnungen von atmosphärischen Vorgängen zu berücksichtigen. Die Rechnerkapazitäten sind nun groß genug, dass in 3-dimensionalen Rechenmodellen dies für jede Masche des Gitters individuell geschehen kann.

In dieser Arbeit wurde ein Gesamtmodell erstellt, das aus mehreren Einzelmodellen zusammengesetzt ist. Mit dem Gesamtmodell werden meteorologische Zustandsgrößen, Windgeschwindigkeiten, Strahlungsflüsse in der Atmosphäre, Transport von Luftbeimengungen, Atmosphärenchemie und Aerosoldynamik in sich geschlossen simuliert. Die im Gesamtmodell zusammengeführten Einzelmodelle sind das nichthydrostatische mesoskalige Grenzschichtmodell MEMO, das in MEMO integrierte Strahlungsmodell IRIS, das in MEMO neu eingefügte Optikmodul OPAC und das mesoskalige Chemie- und Ausbreitungsmodell MARS.

MEMO (Flassak, 1990), IRIS (Moussiopoulos, 1987 und 1989) und MARS (Kessler, 1994; Sahn, 1998) wurden am Institut für Technische Thermodynamik der Universität Karlsruhe entwickelt. Die Weiterentwicklung und Anwendung fand und findet in enger Zusammenarbeit mit dem Laboratory of Heat Transfer and Environmental Engineering der Aristoteles Universität Thessaloniki statt, wo im Rahmen der Doktorarbeit von A. Arvanitis MARS mit einem Modell zur Simulation der Aerosoldynamik erweitert wurde (Arvanitis, 2004). Das Programm OPAC, zur Berechnung optischer Parameter von Aerosolen unterschiedlicher Zusammensetzungen, entstand am Meteorologischen Institut der Universität München (d'Almeida et al., 1991; Hess et al., 1998).

Mit dem Programm MEMO werden meteorologische Vorgänge simuliert. Das

Programm MARS simuliert den Transport von Luftbeimengungen, die Atmosphärenchemie und die Aerosoldynamik. Bisher arbeiteten die Programme MEMO und MARS in zwei getrennten aufeinander folgenden Rechenläufen mit einem Datentransfer von MEMO zu MARS. Die von MARS benötigten meteorologischen Eingabedaten wurden mit MEMO in festen Zeitintervallen in eine Datei geschrieben. Das Programm MARS las dann zu den definierten Zeitpunkten die Daten aus dieser Datei (Einweg-Kopplung).

Im neu entwickelten Gesamtmodell sind MEMO und MARS zwei getrennte, parallele Rechenläufe, zwischen denen periodisch während der Laufzeit (Länge des Übergabeintervalls ist wählbar) ein Datenaustausch in beiden Richtungen statt findet (Zweiweg-Kopplung). Vom Programm MEMO werden weiterhin an das Programm MARS meteorologische Daten übergeben. In umgekehrter Richtung werden von MARS für jede Masche des Rechengitters die Daten der Aerosolzusammensetzung übergeben.

Der Einfluss des Aerosols auf den Strahlungshaushalt wurde bisher im Strahlungsmodell IRIS nur durch einen Parameter mit fest vorgegebenem Wert berücksichtigt (Paltridge und Platt, 1976). Damit der Einfluss des Aerosols auf den Strahlungshaushalt für jede Masche im Rechengbiet individuell, je nach vorliegendem Aerosol, berechnet wird, wurde in der vorliegenden Arbeit das Strahlungsmodell IRIS erweitert. Die Berechnung des Strahlungsantriebs erfolgt für den kurzwelligen und für den langwelligen Strahlungsbereich getrennt. Voraussetzungen hierfür sind die optischen Parameter (Absorption und Streuung) der lokal vorliegenden Aerosole. Dazu wurde das Optikmodul OPAC in MEMO eingefügt. Damit stehen die optischen Parameter für jede Masche und für 62 Wellenlängenbereiche zur Verfügung. In einer neu entwickelten Routine werden die optischen Parameter für den kurzwelligen und für den langwelligen Strahlungsbereich gemittelt. Diese Mittelung basiert auf der Schwarzkörperfunktion (Polifke und Kopitz, 2005; Incropera und DeWitt, 2002). Die Art der Beschreibung des Aerosols ist in den Programmen MEMO (OPAC) und MARS durch unterschiedliche Anforderungen verschieden. Für die Berechnungen im Optikmodul OPAC muss die Beschreibung eines Aerosols

äußerer Mischung vorliegen, MARS stellt jedoch Aerosoldaten basierend auf einer inneren Mischung zur Verfügung (Beschreibung der Mischungsarten in Kapitel 2.1.3). Zur Umwandlung der Beschreibung von innerer Mischung in äußere Mischung wurde eine Umrechnungsroutine entwickelt.

Zusätzlich wurde das Strahlungsmodell IRIS mit einer Routine zur Berechnung des eingehenden kurzwelligigen Strahlungsflusses, in Abhängigkeit der Hintergrundkonzentration des Aerosols, erweitert. Die Berechnungen in dieser Routine können mit Hilfe von Parametern auf unterschiedliche Bedingungen flexibel und einfach angepasst werden. Damit kann ein Einfluss der Höhe des Rechengebiets auf die Ergebnisse fast vollständig vermieden werden.

Zur Validierung des überarbeiteten Strahlungsmodells IRIS und des Optikmoduls OPAC wurde ein möglichst einfacher Anwendungsfall geschaffen, an dem die Wirkungen unterschiedlicher Aerosole auf den Strahlungshaushalt sichtbar gemacht werden konnten. Eine Kopplung von MEMO und MARS fand hierbei nicht statt, da Aerosolzusammensetzungen für MEMO definiert wurden. Dem Optikmodul wurden zeitlich und horizontal konstante Aerosolkonzentrationen vorgeben. Die Konzentrationen nehmen mit zunehmender Höhe entsprechend einer Exponentialfunktion ab. Es wurden Simulationen mit vier unterschiedlichen Aerosolzusammensetzungen durchgeführt.

Die Ergebnisse zeigen, dass Aerosole den Strahlungshaushalt der Atmosphäre beeinflussen und damit auch deren meteorologischen Zustand. So führen zunehmende Aerosolkonzentrationen in größeren Höhen zu einer Temperaturzunahme. In Bodennähe führen sie hingegen zu niedrigeren Temperaturen. Der Übergang liegt bei einer Höhe von 800 m (Bild 6.3). Ursache der Temperaturzunahme oberhalb von 800 m ist die starke absorptive Wirkung des Rußes auf die kurzwellige Sonneneinstrahlung. Die mit zunehmender Aerosolkonzentration stärker werdende Abschwächung der kurzwelligigen Sonneneinstrahlung im oberen Höhenbereich bewirkt die zunehmende Absenkung der Temperatur im unteren Höhenbereich, die wiederum eine wachsende Stabilisierung der umgebenden Luftschichten zur

Folge hat (Bild 6.4). In der Simulation mit der geringsten Aerosolbelastung (KS = Kontinental Sauber) stellt sich für den 4. Tag 12 Uhr auf halber Länge des Rechengebiets in der untersten Rechenschicht eine Temperatur von 30,6 °C ein. In der Simulation mit der stärksten Aerosolbelastung (SB = Städtisch Belastet) sind es 28,1 °C. Zum gleichen Zeitpunkt in 900 m Höhe beträgt die Temperatur in der Simulation SB 26,3 °C und in der Simulation KS 25,5 °C. Bild 6.3 zeigt diesen Sachverhalt. Weiterhin wurde festgestellt, dass durch die Beeinflussung der Temperaturen die Strömungsgeschwindigkeiten verändert werden. Die Erhöhung der Lufttemperatur führt zu einer Zunahme des Luftvolumens was bei stabiler Schichtung eine Beschleunigung bewirkt (Bild 6.6). Mit Berücksichtigung der Hintergrundkonzentration des Aerosols lässt sich der Einfluss der Höhe des Rechengebiets stark vermindern (Bild 6.8 bis Bild 6.11). Dadurch werden die Ergebnisse weitgehend unabhängig von der Gebietshöhe.

Die Beurteilung der Leistungsfähigkeit des Gesamtmodells fand anhand eines realen Falles statt (Großraum Mailand). Es wurde untersucht, wie sich die Ergebnisse aus Simulationen mit Zweiweg-Kopplung gegenüber denen der Einweg-Kopplung verbesserten und welchen Einfluss eine Änderung der Länge des Übergabeintervalls auf die Ergebnisse hat. Mit beiden Kopplungsarten wurden Simulationen mit Übergabeintervallen von 6 Minuten und 60 Minuten durchgeführt. Die Ergebnisse der Simulationen mit Zweiweg-Kopplung (Gesamtmodell) weisen deutlich bessere Übereinstimmungen mit den Messdaten auf, als die Ergebnisse der Simulationen mit Einweg-Kopplung und unverändertem Strahlungsmodell (Bild 6.13 bis Bild 6.20). Statistische Vergleiche zwischen Aerosolkonzentrationen von Messungen und Simulationen für eine Woche zeigen dies. So sind die Korrelationskoeffizienten der Konzentrationsreihen des Gesamtmodells durchweg deutlich höher als die der Konzentrationsreihen der Einweg-Kopplung. Ein Einfluss der Länge des Übergabeintervalls auf die Ergebnisse der Einweg-Kopplung ist nicht oder nur sehr gering vorhanden. Die Ergebnisse der Zweiweg-Kopplung weisen hingegen für die beiden Übergabeintervalle Unterschiede auf (Bild 6.13 bis Bild 6.20). Die Konzentrationsreihen aus der Zweiweg-Kopplung mit dem kurzen

Übergabeintervall nähern sich den Messergebnissen besser an, als mit dem langen Übergabeintervall.

Für variierte Aerosolkonzentrationen im Eingabedatensatz wurde der Einfluss des Aerosols auf die Ergebnisse untersucht. Die gesamten Ergebnisse unterscheiden sich quantitativ aber nicht qualitativ. Durch die Komplexität der Simulationen ist es nicht möglich anhand der Ergebnisse einen direkten Zusammenhang zwischen den Varietäten der Aerosolkonzentration und bestimmten Zustandsgrößen zu erkennen. Die Höhenprofile der Aerosolkonzentration verlaufen grundsätzlich wie erwartet (Bild 6.60 bis Bild 6.63). In den unteren 3 Rechenebenen, für die zeitlich periodisch Konzentrationswerte vorgegeben wurden (Messorte und Orte denen Aerosolkonzentrationen vorgegeben wurden sind verschieden), verhalten sich die berechneten Konzentrationen entsprechend ihrer Variation. Auch ist die Spreizung der Konzentrationen bei größerem Ausgangswert höher, als bei niedrigerem. Nicht genau erklärbar ist das Verhalten der Konzentration im oberen Höhenbereich.

8 Literaturverzeichnis

Ackermann, I.J. (1997)

MADE: Entwicklung und Anwendung eines Aerosol-Dynamikmodells für dreidimensionale Chemie-Transport-Simulationen in der Troposphäre, Mitteilungen aus dem Institut für Geophysik und Meteorologie, Universität zu Köln, Nr. 115

Aitken, J. (1888)

On the number of dust particles in the atmosphere, Nature 37, 428-430

d'Almeida, G. A., P. Koepke und E. P. Shettle (1991)

Atmospheric Aerosols: Global Climatology and Radiative Characteristics, A. Deepak Publishing, 561 S.

Alberty, R. (1983)

Physical Chemistry, John Wiley, New York

Arstila, H., P. Korhonen und M. Kulmala (1999)

Ternary nucleation: Kinetics and application to water-ammonia-hydrochloric acid system, J. Aerosol Sci. 30, 131-138

Arvanitis, A., N. Moussiopoulos und S. Kephelopoulos (2002)

Development and testing of an aerosol module for regional/urban scales, in Bruno Sportisse Hrsg., *Air pollution modeling and simulation: proceeding: Second Conference on Air Pollution Modeling and Simulation*, APMS'01, Champs-sur-Marne, Springer, 277-288

Arvanitis, A., (2004),

Mathematical description of aerosol dispersion in urban areas, PhD thesis, Laboratory of Heat Transfer and Environmental Engineering, Aristoteles University Thessaloniki

Atwater, M. A. (1974)

The radiation model, CEM Rep., 5131-4099, 67-82

Atwater, M. A. und J. T. Ball (1978)

Intraregional variations of solar radiation in the Eastern U.S., J. Appl. Meteor., 17, 1116-1125

Bangert, M., C. Kottmeier, B. Vogel und H. Vogel (2011)

Regional scale effects of the aerosol cloud interaction simulated with an online coupled comprehensive chemistry model, Atmos. Chem. Phys., 11, 4411-4423

Bellouin N., J. Rae, A. Jones, C. Johnson, J. Haywood und O. Boucher (2011)

Aerosol forcing in the Climate Model Intercomparison Project (CMIP5) simulations by HadGEM2-ES and the role of ammonium nitrate, J. Geophys. Res., 116, D20206

Bickmeier, W. (2000)

Einfluss von Wolken in einem mesoskaligen Modell der atmosphärischen Grenzschicht, Shaker Verlag, Aachen, Berichte aus der Umwelttechnik, 84 Seiten

Binkowski, F. S., U. Shankar (1995)

The regional particulate matter model 1. Model description and preliminary results, J. Geophys. Res. Vol. 100, 26191-26209

Bunz, H. und H. Sauter (1980)

Aerosol behaviour in a closed vessel under the regime of natural turbulent convection-II. Computer code calculations, J. Atmos. Sci. 15, 354-358

Calder, K. L. (1965)

On the equation of atmospheric Diffusion, Quart. J. Meteorol. Soc., 91, 514-571

Carpenter, K. (1982)

Note on the paper 'radiational condition for the lateral boundaries of limited area numerical models' by Miller M. and Thrope A. (Q.J. 107, 615-628), Quart. J. Royal Meteorol. Soc., 108, 717-719

Charlson, R. J., S. E. Schwartz, J. M. Hales, R. D. Cess, J. A. Coakley, J. E. Hansen und D. J. Hofmann (1992)

Climate forcing by anthropogenic aerosols, Science 255, 423-430

Collins, W. J., N. Bellouin, M. Doutriaux-Boucher, N. Gedney, P. Halloran, T. Hinton, J. Hughes, C. D. Jones, M. Joshi, S. Liddicoat, G. Martin, F. O'Connor, J. Rae, C. Senior, S. Sitch, I. Totterdell, A. Whitshire and S. Woodward (2011)

Development and evaluation of an Earth-System model – HadGEM2, Geosci. Model Dev., 4, 1051-1075

Davies, T., M. J. P. Cullen, A. J. Macolm, M. H. Mawson, A. Staniforth, A. A. White and N. Wood (2005)

A new dynamical core for the Met Office's global and regional modeling of the atmosphere, Q. J. R. Meteorol. Soc., 131, 1759-1782

Deepak, A. und G. P. Box (1982)

Representation of aerosol size distribution data by analytic models, In Atmospheric Aerosols-Their Formation, Optical Properties and Effects (Edited by A. Deepak), pp. 79-109, Spectrum Press, Hampton, Virginia

Deepak, A. und H. E. Gerber, Eds. (1983)

Report of the experts meeting on aerosols and their climatic effects, WCP-55, 107 pp., (Erhältlich von World Meteorological Organization, Case Postale 5, 1211 Genf, Schweiz)

Dobbins, R. A. (1979)

Atmospheric Motion and Air Pollution. An Introduction for Students of Engineering and Science, John Wiley & Sons, New York, 323 Seiten

Finlayson-Pitts, B. J. und J. N. Pitts (1986)

Atmospheric Chemistry: Fundamentals and Experimental Techniques, John Wiley and Sons, New York

Flassak, T. und N. Moussiopoulos (1989)

A fully vectorized fast elliptic solver of the Helmholtz equation, Application of Supercomputers in Engineering, herausgegeben von C. A. Brebbia und A. Peters, S. 67-77, Elsevier, Amsterdam

Flassak, T. (1990)

Ein nicht-hydrostatisches Modell zur Beschreibung der Dynamik der planetaren Grenzschicht, VDI-Verlag, Düsseldorf, Fortschr.-Ber., VDI Reihe 15 Nr. 74, 205 Seiten

Foucart, Y. und H. Isaka (1992)

Sulfur emission, CCN, clouds and climate: a review, Ann. Geophysicae 10, 462-471

Friedlander, S. K. (1977)

Smoke, Dust and Haze, John Wiley and Sons, New York

Gelbard, F., Y. Tambour und J. H. Seinfeld (1980)

Sectional representations for simulating aerosol dynamics, J. Colloid Interface Sci. 76, 541-556

Götz, G., E. Meszaros und G. Vali (1991)

Atmospheric Particles and Nuclei, Akademiai Kiado, Budapest

Harlow, F. H. und J. E. Welch (1965)

Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface, The Physics of Fluids, Vol. 8(12), 2182-2189

Hess, M., P. Koepke und I. Schult (1998)

Optical Properties of Aerosols and Clouds: The Software Package OPAC, Bulletin of the American Meteorological Society, Vol. 79, 831-844

Hodkinson, J. R. (1966)

The optical measurement of aerosols, in "Aerosol Science", C. N. Davies (Hrsg), Academic Press, London, 287-357

Incropera, F. P. und D. P. DeWitt (2002)

Fundamentals of Heat and Mass Transfer, John Wiley & Sons, 5. Auflage

Jaecker-Voirol, A., P. Mirabel und H. Reiss (1987)

Hydrates in supersaturated binary sulfuric acid-water vapor: A reexamination, J. Chem. Phys. 87, 4849-4852

Janjic, Z. I. und T. L. Black (2007)

An ESMF unified model for a broad range of spatial and temporal scales, Geophysical Research Abstracts, Vol. 9, 05025

Janjic, Z., T. Janjic und R. Vasic (2011)

A Class of Conservative Fourth-Order Advection Schemes and Impact of Enhanced Formal Accuracy on Extended-Range Forecasts, Mon. Weather Rev., 139, 1556-1568

Jorba, O., C. Perez, K. Karsten, Z. Janjic, D. Dabdub und J. M. Baldasano (2009)

Development of an integrated chemical weather prediction system for environmental applications at meso to global scales: NMMB/BSC-CHEM, EMS Annual Meeting Abstracts, Vol. 6, EMS2009-368

Jorba, O., C. Perez, K. Haustein, Z. Janjic, J. M. Baldasano, D. Dabdub, A. Badia, und M. Spada (2011)

The NMMB/BSC-CHEM online chemical weather prediction system: current status of development and feedback interactions, Geophysical Research Abstracts, Vol. 13, EGU2011-4223

Junge, C. E. (1963)

Air chemistry and radioactivity, Academic Press, New York, 382 S.

Kessler C. (1994)

Entwicklung eines effizienten Lösungsverfahrens zur modellmäßigen Beschreibung der Ausbreitung und chemischen Umwandlung reaktiver Luftschadstoffe, Shaker Verlag, Aachen, Berichte aus der Umwelttechnik, 148 Seiten

Khatib, I. (1998)

Verfahren zur Verknüpfung von mesoskaligen und mikroskaligen Modellen der atmosphärischen Grenzschicht, VDI-Verlag, Düsseldorf, Fortschr.-Ber., VDI Reihe 15 Nr. 205, 124 Seiten

Kiehl, J. T. und B. P. Briegleb (1993)

The Relative Roles of Sulfate Aerosols and Greenhouse Gases in Climate Forcing, Science 260, 311-314

Koepke P., M. Hess, I. Schult und E. P. Shettle (1997)

Global Aerosol Data Set, MPI Meteorologie Hamburg Report No. 243, 44S

Köhler, H. (1936)

The nucleus in and the growth of hygroscopic droplets, Trans. Faraday Soc. 32, 1152

Kondratyev, K. Y. (1969)

Radiation in the atmosphere, Internat. Geophys. Ser. Bd. 12, New York/London, 915 Seiten

Kramm, G., D. Beheng und H. Müller (1992)

Modeling of vertical transport of polydispersed aerosol particles in the atmospheric surface layer, in „*Precipitation Scavenging and Atmospheric Surface Exchange*“, S. Schwartz und W. G. N. Slinn (Hrsg.), Vol. 1, Hemisphere, Bristol, Pa., 1125-1141

Kunz, R. (1995)

Entwicklung einer Mehrgebietsmethode für hochauflösende prognostische Modelle der atmosphärischen Grenzschicht, VDI-Verlag, Düsseldorf, Fortschr.-Ber., VDI Reihe 7 Nr. 276, 114 Seiten

Lacis, A. A. und J. E. Hansen (1974)

A parameterization for the absorption of solar radiation in the earths atmosphere, Journal of the Atmospheric Sciences, Vol. 31, 118-133

Liao, H., J. H. Seinfeld, P. J. Adams und L. J. Mickley (2004)

Global radiative forcing of coupled tropospheric ozone and aerosols in a unified general circulation model, Journal of Geophysical Research Vol. 109, No. D16207

Liljequist, G.H. (1974)

Allgemeine Meteorologie, Friedr. Vieweg + Sohn, Braunschweig

Liou, K. N. (1980)

An introduction to atmospheric radiation, Academic Press, 392 S.

Mann, G. W., K. S. Carslaw, D. V. Spracklen, D. A. Ridley, P. T. Manktelow, M. P. Chipperfield, S. J. Pickering und C. E. Johnson (2010)

Description and evaluation of GLOMAP-mode: a modal global aerosol microphysics model for the UKCA composition-climate model, Geosci. Model Dev., 3, 519-551

Moharanj, R., P. A. Azeez (2004)

Health effects of airbourne particulate matter and the Indian scenario, Current science 87, 741-748

Möller, D. (2000)

Kapitel 1.2 Atmosphärische Multiphasenchemie, in „*Handbuch der Umweltveränderungen und Ökotoxologie-Atmosphäre*“, R. Guderian und Günter Gunkel (Hrsg.), Vol. 1B, Springer, Berlin, S. 39-145.

Möller, F. (1973)

Einführung in die Meteorologie, Band 2 BI-Hochschultaschenbücher Nr. 276 und Nr. 288, Bibliogr. Inst., Mannheim

Morgenstern, O., P. Braesicke, F. M. O'Connor, A. C. Bushell, C. E. Johnson, S. M. Osprey und J. A. Pyle (2009)

Evaluation of the new UKCA climate-composition model – Part I: The stratosphere, Geosci. Model Dev., 2, 43-57

Moussiopoulos, N. (1987)

An efficient scheme to calculate radiative transfer in mesoscale models, Environmental Software, 2(4), 172-191

Moussiopoulos, N., T. Flassak und G. A. Knittel (1988)

A refined diagnostic wind model, Environmental Software, 3, 85-94

Moussiopoulos, N. (1989)

Mathematische Modellierung mesoskaliger Ausbreitung in der Atmosphäre, VDI-Verlag, Düsseldorf, Fortschr.-Ber., VDI Reihe 15 Nr. 64, 316 Seiten

Noppel, M. (1998)

Binary nucleation of water-sulfuric acid system: A revision of the classical hydrates interaction model, J. Chem. Phys. 109, 9052-9056

Noppel, M., H. Vehkamäki und M. Kulmala (2002)

An improved model for hydrate formation in sulfuric-acid water nucleation, J. Chem. Phys. 116, 218-228

Paltridge, G. W. und C. M. R. Platt (1976)

Radiative Processes in Meteorology and Climatology, Elsevier, 318
Seiten

Pandis, S. N., L. M. Russel und J. H. Seinfeld (1994)

*The relationship between DMS flux and CCN concentration in
remote marine regions*, J. Geophys. Res. Vol. 99, 16945-16957

Perez, C., K. Haustein, Z. Janjic, O. Jorba, N. Huneus, J. M. Baldasano, T.
Black, S. Basart, S. Nickovic, R. L. Miller, J. P. Perlwitz, M.
Schulz und M. Thomson (2011)

*Atmospheric dust modeling from meso to global scales with the
online NMMB/BSC-DUST model – Part 1: Model description,
annual simulations and evaluation*, Atmos. Chem. Phys., 11,
13001-13027

Polifke, W. und J. Kopitz (2005)

Wärmeübertragung: Grundlagen und numerische Methoden,
Pearson Studium.

Redmond, K. (1980)

An emissivity parameterization suitable for climate modeling, Mon.
Wea. Rev., 108, 663-667

Riemer, N. (2002)

Numerische Simulationen zur Wirkung des Aerosols auf die Troposphärische Chemie und die Sichtweite, Wissenschaftliche Berichte des Instituts für Meteorologie und Klimaforschung der Universität Karlsruhe, Nr. 29

Riemer, N., H. Vogel, B. Vogel, T. Antilla, A. Kiendler-Scharr und T. F. Mentel (2003)

Relative importance of organic coatings for the heterogeneous hydrolysis of N₂O₅ during summer in Europe, J. Geophys. Res., 114, D17307

Ritter, B. und J. F. Geleyn (1992)

A comprehensive radiation scheme for numerical weather prediction models with potential applications in climate simulations, Mon. Weather Rev., 120, 303-325

Roedel, W. (1992)

Physik der Umwelt, Springer, Berlin.

Ruggaber, A., R. Dulgi und T. Nakajima (1994)

Modeling radiation quantities and photolysis frequencies in the troposphere, J. Atmos. Chem 18, 171-210

Sahm, P. (1998)

Kopplung eines nicht-hydrostatischen prognostischen Grenzschichtmodells und eines mesoskaligen Ausbreitungsmodells für reaktive Stoffe, VDI-Verlag, Düsseldorf, Fortschr.-Ber., VDI Reihe 15 Nr. 199, 170 Seiten

Scherer V. (2009)

Skriptum zum Fachlaborversuch: Strömungsmessung mit der Laser-Doppler-Anemometrie (LDA), Gemeinschaftsfachlabor Energietechnik, Lehrstuhl für Energieanlagen und Energieprozesstechnik, Ruhr-Universität Bochum, Fakultät für Maschinenbau, Institut für Energietechnik

Schult, I. und J. Feichter (1997)

Effect of black carbon and sulfate aerosols on the Global Radiation Budget, J. Geophys. Res. Vol. 102, 30107-30117

Seifert, A. und K. D. Beheng (2006)

A two-moment cloud microphysics parameterization for mixed-phase clouds. Part 1: Model description, Meteorol. Atmos. Phys., 92, 45-66

Seinfeld, J. H. und S. Pandis (1997)

Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change, John Wiley and Sons, New York

Shettle, E. P. und R. W. Fenn (1979)

Models for the aerosols of the lower atmosphere and the effects of humidity variations on their optical properties, AFGL-TR-79-0214, 94 pp., (Erhältlich von AFCRL, Hanscom Field, Bedford, MA 01731)

Simpson, D., Y. Andersson-Skölt und M. Jenkin (1993)

Updating the chemical Scheme for the EMEP MSC-W Model: Current Status, Report EMEP MSC-W Note 2/93, The Norwegian Meteorological Institute, Oslo

Slinn, S. A. und W. G. N. Slinn (1980)

Prediction of particle deposition on natural waters, Atmos. Environ. 16, 1785-1794

Staley, D. O. und G. M. Jurica (1970)

Flux emissivity tables for water vapor, carbon dioxide and ozone, Jou. Appl. Met., 9, 365-372

Stanelle, T., B. Vogel, H. Vogel, D. Bäumer und C. Kottmeier (2010)

Feedback between dust particles and atmospheric process over West Africa during dust episodes in March 2006 and June 2007, Atmos. Chem. Phys., 10, 10771-10788

Stockwell, W. R., F. Kirchner, und M. Kuhn (1997)

A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling, J. Geophys. Res. Vol. 102, 25847-25879

Trinkhaus, H. (1983)

Theory of the nucleation of multicomponent precipitates, Phys. Rev.B. 27, 7372-7378

Tsang, T. H. und J. M. Hippe (1988)

Asymptotic behaviour of aerosol growth in the free molecule regime, Aerosol Sci. Technol. 8, 265-278

Vehkamäki, H., M. Kulmala, I. Napari, K. E. J. Lehtinen, C. Timmreck, M. Noppel und A. Laaksonen (2002)

An improved parameterization for sulfuric acid-water nucleation rates for tropospheric and stratospheric conditions, Journal of Geophysical Research, Vol. 107, NO. D22, 4622

Vogel, B., H. Vogel, D. Bäumer, M. Bangert, K. Lundgren, R. Rinke und T. Stanelle (2009)

The comprehensive model system COSMO-ART – Radiative impact of Aerosol on the state of the atmosphere on the regional scale, Atmos. Chem. Phys., 9, 8661-8680

Whitby, E. R. (1990)

Modal aerosol dynamics modeling, Ph.D. thesis, University of Minnesota

Whitby, E. R., P. H. McMurry, U. Shankar und F. S. Binkowski (1991)

Modal Aerosol Dynamics Modeling, Tech. Rep. 600/3-91/020, U. S. Environmental Protection Agency , New York, (verfügbar als NTIS PB91-161729/AS von Natl. Tech. Inf. Serv., Springfield, Va.)

Whitby, K.T. (1978)

The physical characteristic of sulfur aerosols, Atmos. Env. 12, 135-159

Whitby, K.T. und G.M. Sverdrup (1973)

California aerosols: Their physical and chemical characteristics, Adv. Environ. Sci. Technol. 10, 477.

Wilck, M (1999)

Modal Modelling of Multicomponent Aerosols, Verlag für Wissenschaft und Forschung, Akademische Abhandlungen zu den Geowissenschaften, Berlin

Winkler, C. (1995)

Mathematische Modellierung der quellnahen Ausbreitung von Emissionen, VDI-Verlag, Düsseldorf, Fortschr.-Ber., VDI Reihe 7 Nr. 268, 134 Seiten

Winkler, P. (2000)

Kapitel 1.1 Atmosphärisches Aerosol, in „*Handbuch der Umweltveränderungen und Ökotoxologie-Atmosphäre*“, R. Guderian und Günter Gunkel (Hrsg.), Vol. 1B, Springer, Berlin, S. 1-39.

Wortmann-Vierthaler M. und N. Moussiopoulos (1995)

Numerical test of a refined flux corrected transport (FCT) advection scheme, Environmental Software, 10, 157-175