

**Untersuchungen zum Einfluss turbulenter  
Kollisionskernel auf die Entwicklung von konvektiven  
Wolken mit einem neu entwickelten Lagrangeschen  
Wolkenmodell**

Von der Fakultät für Mathematik und Physik  
der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover  
zur Erlangung des Grades

Doktorin der Naturwissenschaften  
- Dr. rer. nat. -

genehmigte Dissertation  
von  
Dipl.-Met. Theres Riechelmann  
geboren am 18.04.1984 in Heiligenstadt

2014

Referent: Prof. Dr. Dieter Etling  
Korreferent: Prof. Dr. Siegfried Raasch  
Tag der Promotion: 6. Dezember 2013

# Kurzfassung

Die Prozesse der warmen Wolken- und Niederschlagsbildung umfassen die Aktivierung von Aerosolen, das Tropfenwachstum durch Kondensation und das Tropfenwachstum durch Kollision und Koaleszenz. Obwohl Wolken hochgradig turbulent sind, wurde der Einfluss der Turbulenz bei bisherigen Ansätzen zur Modellierung der Prozesse fast immer vernachlässigt. Neuere Untersuchungen mit direkten numerischen Simulationsmodellen haben gezeigt, dass Turbulenz einen verstärkenden Einfluss auf das Tropfenwachstum durch Kollision haben kann. Inzwischen wurden auch Parametrisierungen für diesen Effekt entwickelt. Ziel dieser Arbeit ist es zu untersuchen, wie sich die mit der Turbulenz einhergehenden Änderungen der Kollisionswahrscheinlichkeit auf die räumliche und zeitliche Entwicklung der Tropfenspektren einer dreidimensionalen Wolke auswirkt.

Zur Untersuchung dieser Fragestellung wurde ein neues Lagrangesches Wolkenmodell (Lagrangian Cloud Model, LCM) entwickelt. Dafür wurde das in dem Large-eddy Simulationsmodell (LES-Modell) PALM implementierte Lagrangesche Partikelmodell um die Prozesse der warmen Wolkenmikrophysik erweitert. Diese Kombination ermöglicht es Aerosole und Tropfen in das vom LES-Modell simulierte Strömungsfeld freizusetzen und deren Bewegung und Entwicklung zu verfolgen. Um realistische Anzahlkonzentrationen zu erreichen, wurde das Konzept der Supertropfen verwendet. Dabei steht ein simuliertes Partikel stellvertretend für eine große Anzahl von Aerosolen oder Tropfen mit den gleichen Eigenschaften. In dem LCM werden die wolken- und niederschlagsbildenden Prozesse vollständig durch die Supertropfen repräsentiert. Ein Vergleich des neu entwickelten LCMs mit zwei gängigen Wolkenphysikparametrisierungen zeigt, dass das LCM die Entwicklung und typischen Eigenschaften einer einzelnen, idealisierten Wolke und auch die eines komplexeren Wolkenfeldes reproduzieren kann.

Für die Untersuchungen zum Einfluss der Turbulenz auf das Tropfenwachstum durch Kollision und Koaleszenz wurden zwei verschiedene turbulente Kollisionswahrscheinlichkeiten implementiert. Diese Parametrisierungen berücksichtigen die gleichen Turbulenzeinflüsse, wurden aber für verschiedene Turbulenzzustände hergeleitet. Ein Vergleich mit dem nicht-turbulenten Fall für eine idealisierte, einzelne Wolke zeigt, dass beide Parametrisierungen eine Verstärkung des Tropfenwachstums durch Kollision und Koaleszenz zur Folge haben. Allerdings unterscheidet sich der Einfluss erheblich. Die Parametrisierung, die auf einem schwächeren Turbulenzzustand basiert, bewirkt eine mäßige Zunahme der Niesel- und Regentropfenanzahl. Bei der Parametrisierung, die für Wolken typische Turbulenzzustände berücksichtigt, wird neben der vermehrten Bildung auch das Wachstum der Niesel- und Regentropfen beschleunigt. Dadurch erreicht der maximale Niesel- und Regenwassergehalt im Vergleich zum nicht-turbulenten Fall doppelt so hohe Werte. Der Einfluss dieses turbulenten Verstärkungsfaktors wurde auch für eine Simulation eines komplexeren Wolkenfeldes untersucht, das auf Messwerten basiert. Im Vergleich zu dem nicht-turbulenten Fall ist der Niesel- und Regenwassergehalt um den Faktor 1,5 höher.

**Schlagworte:** Lagranges Wolkenmodell, konvektive Wolken, turbulente Kollision



# Abstract

The cloud and precipitation formation include the activation of aerosols, the droplet growth by condensation/evaporation and the droplet growth by collision and coalescence. Clouds are extremely turbulent. However, the influence of turbulence is nearly always neglected in cloud simulation models. Recent studies with direct numerical simulations indicate that turbulence can enhance droplet growth by collision. Meanwhile parameterizations of this effect have been developed. The aim of this work is to examine the turbulence induced changes of the collision probability on the spatial and temporal development of the droplet spectra in a three dimensional cloud.

A new Lagrangian cloud model (LCM) has been developed to study this question. Therefore, the Lagrangian particle model implemented in the large-eddy simulation (LES) model PALM has been expanded in order to include the warm cloud microphysics. This combination provides the possibility to release aerosols and droplets into the flow field simulated by LES in order to trace the droplet transport and evolution. In order to handle the extremely large number of aerosols and droplets within a cloud, the concept of a super-droplet, which represents a large number of real aerosols and droplets of the same characteristics, is introduced. Within the LCM the super-droplets represent all warm cloud microphysical processes.

Comparisons of the newly developed LCM with two common cloud physic parameterizations show that the LCM reproduces the general development and typical features of a single, idealized cloud and of more complex cloud fields. To analyze the influence of turbulence on droplet growth due to collision and coalescence two different turbulent collision kernels were implemented. The parameterizations consider almost the same turbulence effects, but have been derived for different turbulence states.

A comparison with a non-turbulent kernel for an idealized, single cloud shows that both parametrizations enhance the droplet growth by collision and coalescence. However, the influence differs significantly. The parameterization based on weaker turbulence results in a moderate increase of the drizzle and rain droplets. The parameterization based on typical turbulence for clouds yields a higher number of drizzle and rain droplets and furthermore enhances their growth rate. Therefore, the maximum drizzle and rain water content is twice as high compared to the non-turbulent case. The influence of the latter turbulent collision kernel has additionally been examined for a complex cloud field, which is based on measurements. Compared to the non-turbulent case the drizzle and rain water content is increased by a factor of 1.5.

**Keywords:** Lagrangian cloud model, convective clouds, turbulent collision



# Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	VI
Tabellenverzeichnis	IX
Symbolverzeichnis	XIII
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Grundlagen und Stand der Forschung</b>	<b>5</b>
2.1 Entstehung von warmen Wolken . . . . .	5
2.2 Simulationen von warmen Wolken mit LES-Modellen . . . . .	13
2.2.1 Spektralmodelle . . . . .	13
2.2.2 Bulk-Modelle . . . . .	14
2.2.3 Lagrangesche Wolkenmodelle . . . . .	15
<b>3 Modellbeschreibung</b>	<b>19</b>
3.1 Das LES-Modell PALM . . . . .	19
3.1.1 Wolkenphysikparametrisierung mit Bulk-Modellen . . . . .	23
3.2 Das Lagrangesche Tropfenmodell . . . . .	30
3.2.1 Definition der Tropfen . . . . .	31
3.2.2 Tropfenadvektion . . . . .	32
3.2.3 Heterogene Nukleation der Tropfen . . . . .	33
3.2.4 Tropfenwachstum durch Kondensation und Evaporation . . . . .	35
3.2.5 Tropfenwachstum durch Koagulation . . . . .	37
3.2.6 Numerische Implementierung und Parallelisierung . . . . .	44
<b>4 Simulation einer idealisierten Wolke</b>	<b>45</b>
4.1 Konfiguration . . . . .	45
4.2 Entwicklung der Wolke und Vergleich mit Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen . . . . .	47
4.3 Sensitivitätsstudien . . . . .	56
4.3.1 Zeitschritt . . . . .	57
4.3.2 Anzahl der Supertropfen . . . . .	64
4.4 Untersuchung zum Einfluss der turbulenten Kollisionskernel . . . . .	70
<b>5 Simulation von Passatwindwolken</b>	<b>77</b>
5.1 Konfiguration . . . . .	77
5.2 Vergleich mit Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen . . . . .	80
5.3 Untersuchung zum Einfluss des turbulenten Kollisionskerns . . . . .	85
<b>6 Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>95</b>

<b>Anhang</b>	<b>99</b>
A Tropfenwachstum durch Koagulation . . . . .	100
A.1 Nachweis zur Massenerhaltung . . . . .	100
A.2 Parametrisierungen der turbulenten Kollisionskernel . . . . .	101
A.3 Untersuchung zur Konvergenz des Tropfenwachstums durch Koagulation für steigende Supertropfenanzahlen . . . . .	104
B Abbildungen zur Simulation einer idealisierten Wolke mit einem Ein-Momenten-Schema . . . . .	111
C Veröffentlichung . . . . .	112
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>140</b>
<b>Lebenslauf</b>	<b>153</b>
<b>Veröffentlichungen</b>	<b>155</b>

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematische Darstellung der räumlichen Skalenbereiche von Wolken.	2
2.1	Schematische Darstellung der Köhlerkurve. . . . .	9
3.1	Schematische Darstellung des Wichtungsfaktors. . . . .	31
3.2	Schematische Darstellung zum Tropfenwachstum durch Koagulation. .	38
3.3	Schematische Darstellung zum Tropfenwachstum durch „interne“ Koagulation. . . . .	39
3.4	Vergleich von turbulenten und nicht-turbulenten Kollisionskerneln. . .	43
4.1	Anfängliche Vertikalprofile der Simulationen einer idealisierten Wolke.	46
4.2	y-z-Schnitte und Vertikalprofile der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen nach 800 s Simulationszeit. . . . .	49
4.3	y-z-Schnitte und Vertikalprofile der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen nach 1200 s Simulationszeit. . . . .	50
4.4	y-z-Schnitte und Vertikalprofile der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen nach 1600 s Simulationszeit (I). . . . .	51
4.5	y-z-Schnitte und Vertikalprofile der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen nach 1600 s Simulationszeit (II). . . . .	52
4.6	y-z-Schnitte und Vertikalprofile des Niesel- und Regenwassergehaltes der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen nach 1600 s Simulationszeit. . . . .	53
4.7	Zeitreihe der Niederschlagsmenge der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen. . . . .	53
4.8	Zeitreihen der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen. . . . .	55
4.9	Zeitreihen der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Zeitschritten (I). . . . .	58
4.10	Zeitreihen der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Zeitschritten (II). . . . .	59
4.11	Vertikalprofile der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Zeitschritten. . . . .	61
4.12	Tropfenspektren der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Zeitschritten. . . . .	63
4.13	Zeitreihen der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Supertropfenanzahlen (I). . . . .	65

---

4.14	Zeitreihen der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Supertropfenanzahlen (II). . . . .	66
4.15	Vertikalprofile der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Supertropfenanzahlen. . . . .	68
4.16	Tropfenspektren der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Supertropfenanzahlen. . . . .	69
4.17	Zeitreihen der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Kollisionskernen (I). . . . .	72
4.18	Zeitreihen der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Kollisionskernen (II). . . . .	73
4.19	Vertikalprofile der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Kollisionskernen. . . . .	74
4.20	Tropfenspektren der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Kollisionskernen. . . . .	76
5.1	Vertikalprofile der großskaligen Quell- und Tendenzterme der Passatwindwolkenimulationen. . . . .	78
5.2	Dreidimensionales Feld des Flüssigwassergehaltes einer Passatwindwolkenimulation. . . . .	81
5.3	Zeitreihen der Passatwindwolkenimulationen mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen und verschiedenen Kollisionskernen. . . . .	82
5.4	Vertikalprofile der Passatwindwolkenimulationen mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen und verschiedenen Kollisionskernen. . . . .	85
5.5	Zeitreihen der letzten Stunde der Passatwindwolkenimulationen mit LCM und unterschiedlichen Kollisionskernen. . . . .	87
5.6	Vertikalprofile der Passatwindwolkenimulationen mit LCM und unterschiedlichen Kollisionskernen. . . . .	88
5.7	Tropfenspektren der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Koagulationsfunktionen. . . . .	91
A.1	Vergleich von turbulentem und nicht-turbulentem Kollisionskernel. . . . .	103
A.2	Tropfenspektren der Simulationen zum Tropfenwachstum durch Koagulation (I). . . . .	105
A.3	Tropfenspektren für Simulationen zum Tropfenwachstum durch Koagulation (II). . . . .	106
A.4	Tropfenspektren für Simulationen zum Tropfenwachstum durch Koagulation (III). . . . .	107
A.5	Tropfenspektren für Simulationen zum Tropfenwachstum durch Koagulation (IV). . . . .	108
A.6	Tropfenspektren für Simulationen zum Tropfenwachstum durch Koagulation (V). . . . .	109
A.7	Tropfenspektren für Simulationen von Tropfenwachstum durch Koagulation (VI). . . . .	110
B.1	y-z-Schnitte und Vertikalprofile der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen nach 800 s Simulationszeit. . . . .	111

B.2 y-z-Schnitte und Vertikalprofile der Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen nach 1200 s Simulationszeit. . . . . 112



# Tabellenverzeichnis

4.1	Übersicht der Simulationsparameter zum Einfluss der Supertropfenanzahl.	64
5.1	Übersicht zu Simulationsparametern der Passatwindwolkenimulationen.	80
5.2	Mittelwerte und Standardabweichungen der in Abb. 5.3 dargestellten Größen. . . . .	83
5.3	Mittelwerte und Standardabweichungen der in Abb. 5.5 dargestellten Größen. . . . .	86



# Symbolverzeichnis

## Abkürzungen

1MOM	Ein-Momenten-Schema
2MOM	Zwei-Momenten-Schema
AAAS	American Association for the Advancement of Science
ACTOS	Airborne Cloud Turbulence Observation System
AW	Parametrisierung nach Ayala et al. (2008a) und Wang und Grabowski (2009)
BOMEX	Barbados Oceanographic and Meteorological EXperiment
CARRIBA	Cloud, Aerosol, Radiation and tuRbulence in the trade wInd regime over BARbados
CN	Condensation Nuclei
CCN	Cumulus Condensation Nuclei
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
DNS	Direkte Numerische Simulation
Hall	Parametrisierung nach Hall (1980)
HLRN	Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen
KS	Parametrisierung nach Kunnen et al. (2013) und Siewert (2013, persönliche Kommunikation)
LCM	Lagrangian Cloud Model
LES	Large-Eddy Simulation
LWP	Liquid Water Path
MPI	Message Passing Interface
PALM	PARallelized Large-eddy simulation Model
RA	Rain Amount
RICO	Rain In Cumulus over the Ocean
RWP	Rain Water Path
SGS	SubGrid-scale
TCC	Total Cloud Cover
TKE	Turbulente Kinetische Energie

## Griechische Symbole

$\alpha$	Parameter der Gammaverteilung
$\alpha_{\text{au}}, \beta_{\text{au}}, \sigma_{\text{au}}$	Koeffizienten für Parametrisierung der Autokonversion
$\Gamma$	Gamma-Funktion
$\Gamma^g, \Gamma^t$	Geometrischer und turbulenter geometrischer Kollisionskernel
$\delta_{ij}$	Kronecker-Symbol
$\Delta s$	Charakteristische Gitterweite des Modells
$\Delta t$	Zeitschritt

$\Delta V$	Gittervolumen
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	Gitterweite in den drei Raumrichtungen
$\epsilon$	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie
$\epsilon_{ijk}$	Alternierender Einheitstensor
$\varepsilon$	Verhältnis der molekularen Massen von Wasser und trockener Luft
$\eta_E, \eta_G, \eta_T$	Turbulente Verstärkungsfaktoren für Kollisionseffizienz, geometrischen Kollisionskernel und Kollisionskernel
$\theta$	Potentielle Temperatur
$\theta_l$	Potentielle Flüssigwassertemperatur
$\theta_v$	Potentielle virtuelle Temperatur
$\lambda, \lambda_r$	Parameter der Gammaverteilung
$\mu, \mu_r$	Parameter der Gammaverteilung
$\nu$	Kinematische Viskosität der Luft
$\nu, \nu_c, \nu_r$	Parameter der Gammaverteilung
$\Pi$	Exner-Funktion
$\rho$	Dichte von trockener Luft
$\rho_b$	Luftdichte am Erdboden
$\rho_l$	Dichte von Wasser
$\sigma$	Oberflächenspannung von Wasser, Standardabweichung
$\sigma_{gc}$	Geometrische Standardabweichung
$\tau$	Zeitkonstante
$\tau_p$	Relaxationszeit
$\Phi_{au}$	Dimensionslose Autokonversionsrate
$\Phi_{akk}$	Dimensionslose Akkreszenzrate
$\Phi_{br}$	Dimensionslose Rate für das Zerplatzen von Regentropfen
$\Phi_{sk}$	Dimensionslose Selbsteinfangsrate
$\phi$	Geografische Breite
$\Omega$	Winkelgeschwindigkeit der Erde

## Lateinische Symbole

$a$	Bedeckungsgrad
$a, b, c$	Koeffizienten für Parametrisierung der Fallgeschwindigkeit
$a_1, a_1, a_1$	Koeffizienten für Parametrisierung der Autokonversion
$b_1, b_1, b_1$	Koeffizienten für Parametrisierung der Autokonversion
$c_1, c_1, c_1$	Koeffizienten für Parametrisierung der Autokonversion
$a_v, b_v$	Koeffizienten für Parametrisierung des Ventilationskoeffizienten
$A$	Wichtungsfaktor
$c_p$	Spezifische Wärmekapazität für trockene Luft bei konst. Druck
$C_D$	Reibungskoeffizient
$D$	Diffusionskoeffizient von Wasserdampf in Luft
$e$	Subskalige turbulente kinetische Energie
$e_s$	Sättigungsdampfdruck
$e_{s,r}$	Sättigungsdampfdruck über einem Tropfen
$e_{s,s}$	Sättigungsdampfdruck über einer Lösung
$e_{s,\infty}$	Sättigungsdampfdruck über ebener Fläche
$e_v$	Dampfdruck
$E^g, E^t$	Kollisionseffizienz und turbulente Kollisionseffizienz

$E^{\text{Koal}}$	Koaleszenzeffizienz
$f, f_c, f_r$	Anzahldichteverteilungsfunktion für Tropfen, Wolken- und Regentropfen
$f_i$	Coriolisparameter
$f$	relative Feuchte
$f_v$	Ventilationskoeffizient
$F_A, F_G, F_R$	Auftriebs-, Gravitations- und Reibungskraft
$F_d, F_k$	Einfluss von Wasserdampfdiffusion und thermischer Diffusion
$F_{\text{sec}}$	Sedimentationsfluss der Wolkentropfen
$F_{\text{ser}}$	Sedimentationsfluss der Regentropfen
$g$	Gravitationsbeschleunigung, Massendichteverteilungsfunktion
$g_{r_m r_n}$	Radiale Verteilungsfunktion
$G$	Koeffizient für Tropfenwachstum durch Kondensation
$i, j, k$	Einheitsvektoren in x-, y- und z-Richtung
$i_s$	Van't Hoff-Faktor
$k_{\text{au}}, k_{\text{au}}^{\text{turb}}$	Koeffizienten für Parametrisierung der Autokonversion
$k_{\text{akk}}$	Koeffizient für Parametrisierung der Akkreszenz
$k_{\text{br}}$	Koeffizient für Parametrisierung des Zerplatzens von Regentropfen
$k_{\text{eva}}$	Koeffizient für Parametrisierung der Regentropfen Evaporation
$k_{\text{sec}}$	Koeffizient für Parametrisierung der Wolkentropfensedimentation
$k_{\text{sk}}$	Koeffizient für Parametrisierung des Selbsteinfangs
$K$	Koagulationsfunktion
$K^g, K^t$	Kollisionskernel für ruhende und turbulente Umgebungsluft
$K_1, K_2$	Koeffizienten für Parametrisierung von SGS-Flüssen
$K_a$	Thermische Leitfähigkeit der Luft
$K_h, K_m$	Turbulenter Diffusionskoeffizient für Wärme und Impuls
$l$	Mischungsweglänge
$L_v$	Verdunstungswärme
$m$	Masse
$m_a$	Molekulare Masse von trockener Luft
$m_s$	Molekulare Masse der gelösten Substanz
$m_l$	Molekulare Masse von Wasser
$M_c^k, M_r^k$	Momente k-ter Ordnung von $f_t(x)$
$M_s$	Masse der gelösten Substanz
$n, m$	Zählvariablen
$N_c, N_r$	Anzahldichte von Wolken- und Regentropfen
$N_p$	Anzahl der Partikel in einem Gittervolumen
$p$	Druck
$p^*$	Stördruck
$p_{\text{ref}}$	Referenzdruck
$q$	Gesamtwassergehalt
$q_c$	Wolkenwassergehalt
$q_l$	Flüssigwassergehalt
$q_{\text{krit}}$	Kritischer Wert von $q_l$ für Niederschlagsbildung
$q_r$	Regenwassergehalt
$q_s$	Sättigungsfeuchte
$q_v$	Spezifische Feuchte
$Q_{q_v}, Q_{u_k}, Q_\theta$	Quell- und Senkenterme für $q_v, u_k$ und $\theta$

$r$	Radius
$r_0$	Radius zur Trennung von Wolken- und Regentropfen
$r_{\text{au}}$	Koeffizient für Parametrisierung der Autokonversion
$r_{\text{eq}}$	Koeffizient für Parametrisierung des Zerplatzens von Regentropfen
$r_k$	Kritischer Radius
$r_{\text{max}}$	Maximaler Radius
$r_c, r_r$	Wolken- und Regentropfenradius
$R_a$	Gaskonstante für trockene Luft
$R_v$	Gaskonstante für Wasserdampf
$Re$	Reynoldszahl
$Re_p$	Reynoldszahl eines Partikels
$Re_\lambda$	Reynoldszahl der Taylor-Mikroskala
$S$	Übersättigung
$S_k$	Kritische Übersättigung
$S_{(\dots)}^{au}$	Quellterm durch Autokonversion
$S_{(\dots)}^{akk}$	Quellterm durch Akkreszenz
$S_{(\dots)}^{br}$	Quellterm durch Zerplatzen von Regentropfen
$S_{(\dots)}^{eva}$	Quellterm durch Evaporation von Regentropfen
$S_{(\dots)}^{sec}$	Quellterm durch Sedimentation von Wolkentropfen
$S_{(\dots)}^{ser}$	Quellterm durch Sedimentation von Regentropfen
$S_{(\dots)}^{sk}$	Quellterm durch Selbstkollision
$Sc$	Schmidt-Zahl
$t$	Zeit
$T$	Lufttemperatur
$u, v, w, u_i$	Komponenten der Windgeschwindigkeit (i=1, 2, 3)
$u'$	„Root-Mean-Square“-Strömungsgeschwindigkeit
$u_g$	Geostrophischer Wind
$U, V, W, V_i$	Komponenten der Partikelgeschwindigkeit (i=1, 2, 3)
$v_t$	Endgültige Fallgeschwindigkeit
$V_t$	Endgültige Fallgeschwindigkeit der Partikel
$\vec{W}_{r_m r_n}$	Radiale Relativgeschwindigkeit
$x, y, z, x_i$	Kartesische Koordinaten (i=1, 2, 3)
$x, x_c, x_r$	Masse von Tropfen, Wolken- und Regentropfen
$x_0$	Masse zur Trennung von Wolken- und Regentropfen
$X, Y, Z, X_i$	Koordinaten der Partikelposition (i=1, 2, 3)

## Indizes und Mittelungen einer Größe $\Psi$

$\Psi^*$	Abweichung vom Grundzustand
$\Psi''$	Subskalige Fluktuation
$\Psi_0$	Grundzustand
$\Psi_{\text{cl}}$	Mittelwert über alle als Wolke identifizierten Gittervolumen
$(\Psi)_{\text{Nied}}$	Quell- und Senkenterme aufgrund der Niederschlagsbildung
$\bar{\Psi}$	Gefilterte oder gemittelte Größe
$\langle \Psi \rangle$	Mittelwert über beide horizontalen Raumrichtungen

## Sonstige Symbole

$\partial$	Partieller Differentialoperator
$\int$	Integral-Operator



# 1 Einleitung

Wolken haben eine große Bedeutung für die Atmosphäre: Sie beeinflussen den Strahlungshaushalt der Erde, sind am Wärme-, Feuchte- und Impulstransport beteiligt, sind ein wesentlicher Bestandteil des Wasserkreislaufs und verändern die chemische Zusammensetzung der Atmosphäre (z. B. Lamb und Verlinde, 2011). Aufgrund der zahlreichen Wechselwirkungen haben sie einen großen Einfluss sowohl auf das Wetter als auch auf die Entwicklung des Klimas (z. B. Stephens, 2005). Eine möglichst korrekte Repräsentation der Wolken und ihrer Prozesse ist deshalb für numerische Wetter- und Klimamodelle unverzichtbar.

Ihre große Bedeutung macht Wolken seit mehr als 200 Jahren zum Gegenstand wissenschaftlicher Untersuchungen (z. B. Howard, 1803; Grabowski und Wang, 2013). Trotz der umfangreichen Erforschung sind einige Prozesse der Wolken- und Niederschlagsbildung noch immer nicht vollständig verstanden. Die Ursachen dafür liegen vor allem bei den komplexen Eigenschaften der Wolken. Die offenen Fragen betreffen neben den Prozessen der Eisphase auch das Tropfenwachstum in „warmen“ Wolken, d. h. Wolken bei Temperaturen über 0 °C. Warme Wolken sind für etwa 70 % des tropischen und etwa 30 % des weltweiten Niederschlags verantwortlich (Lau und Wu, 2003). Sie bestehen aus Tropfen, die sich in einer komplexen dreidimensionalen, turbulenten Strömung bewegen und mit ihr wechselwirken (Bodenschatz et al., 2010). Die Größe der Tropfen liegt zwischen 1 µm und einigen mm im Radius, während die Ausdehnung einzelner Wolken bis in den Kilometerbereich reichen kann. Wolken umfassen demnach eine große Spanne von räumlichen und damit verbunden auch zeitlichen Skalen. Eine Übersicht der Prozesse, die die Bildung und Dynamik von Wolken umfassen und beeinflussen, ist in Abbildung 1 dargestellt. Obwohl diese Prozesse auf unterschiedlichen Skalen stattfinden, sind sie stark miteinander gekoppelt. Die kollektive Wirkung der mikroskaligen Prozesse hat deshalb einen großen Einfluss auf die großskaligen Eigenschaften der Wolke und umgekehrt. Die Prozesse der Mikrophysik warmer Wolken, also die Bildung der Wolkentropfen in Abhängigkeit von der Art und Anzahl der vorhandenen Aerosole sowie das Tropfenwachstum durch Kondensation und später durch Kollision und Koalenzenz, finden im Mikrometer und Millimeterbereich statt. Sie bestimmen die Entwicklung des Tropfenspektrums und damit u. a. die Niederschlagsmenge, die Lebensdauer, die optischen Eigenschaften und die Größe der gesamten Wolke (Shaw, 2003). Auf der anderen Seite beeinflusst die turbulente Strömung der Wolke das Einmischen von untersättigter Umgebungsluft (Entrainment) sowie die Mischungsprozesse innerhalb der Wolke und dementsprechend auch die lokale Entwicklung der Temperatur, Feuchte und Aerosolkonzentration, die wiederum die Tropfenbildung und das Tropfenwachstum durch Kondensation steuern (Bodenschatz et al., 2010). Die turbulente Strömung im Inneren der Wolke wird dabei lokal durch die bei den Phasenumwandlungen frei werdende latente Wärme und den damit verbundenen Auftriebskräften angetrieben. Zusätzlich wird die turbulente Strömung auch durch die strahlungsbedingte Abkühlung an der Obergrenze und Instabilitäten an den Grenzflächen der Wolke beeinflusst (Devenish et al., 2012). Aufgrund der inhomogenen

Erzeugung ist die Turbulenz in Wolken inhomogen, intermittierend und instationär (Bodenschatz et al., 2010).

Die Wechselwirkungen zwischen der Wolkendynamik und der Wolkenmikrophysik sind ein komplexes Mehrskalen- und Mehrphasen-Problem (Grabowski und Wang, 2013). Eine umfassende Untersuchung dieser Prozesse durch Messungen, Laborexperimente oder numerische Modelle gestaltet sich daher schwierig, so dass es immer noch offene Fragen bei der Wolken- und Niederschlagsbildung und -entwicklung gibt, besonders im Bereich der Wolkenmikrophysik. Ein wichtiges ungeklärtes Problem der Mikrophysik warmer Wolken ist die Frage nach dem Mechanismus, der das Tropfenwachstum für die Radien zwischen  $15\ \mu\text{m}$  und  $40\ \mu\text{m}$  antreibt (Grabowski und Wang, 2013). In diesem Größenbereich ist sowohl das Wachstum durch Kondensation als auch das Wachstum durch Kollision und Koaleszenz (auch Koagulation genannt) sehr ineffektiv, weshalb dieser Bereich auch als Kondensations-Koagulations-Flaschenhals (engl. *condensation-coalescence bottleneck*) bezeichnet wird. Das Wachstum durch Kondensation ist für kleine Tropfen bis  $10\ \mu\text{m}$  sehr effizient (Seinfeld und Pandis, 2006). Die Wachstumsrate nimmt aber mit zunehmendem Radius  $r$  ( $\sim 1/r$ ) ab und ist nach bisherigen Erkenntnissen in Wolken zu gering, um Tropfen mit Radien von mehr als  $20\ \mu\text{m}$  durch reines Kondensationswachstum zu bilden. Ursache dafür ist die geringe Übersättigung in den Wolken und die relativ kurze Zeitspanne von  $\approx 10^3\ \text{s}$ , die den Tropfen zum Wachstum zur Verfügung steht, bevor sie im aufsteigenden Kern den oberen Rand der Wolke erreicht haben (Grabowski und Wang, 2013). Die Bildung großer Tropfen erfordert daher das Tropfenwachstum durch Koagulation. Dies wird nach bisherigen Erkenntnissen aber erst effizient, wenn die größten Tropfenradien  $\approx 40\ \mu\text{m}$  erreicht haben (Pruppacher und Klett, 1997). Trotzdem zeigen Beobachtungen, dass das Tropfenwachstum von kleinen Wolkentröpfchen zu Regentropfen in Kumuluswolken über dem Ozean sogar sehr schnell ablaufen und Niederschlag mit Tropfenradien von mehr als  $100\ \mu\text{m}$  in 25 – 35 Minuten entstehen kann (Saunders, 1965). Es gibt mehrere mögliche Mechanismen zur Erklärung dieser offenen Fragestellung: Entrainment von ungesättigter Umgebungsluft, Einfluss von sehr großen Aerosolen, Einfluss der Turbulenz auf die Übersättigung sowie Einfluss der Turbulenz auf die Kollision und Koaleszenz.

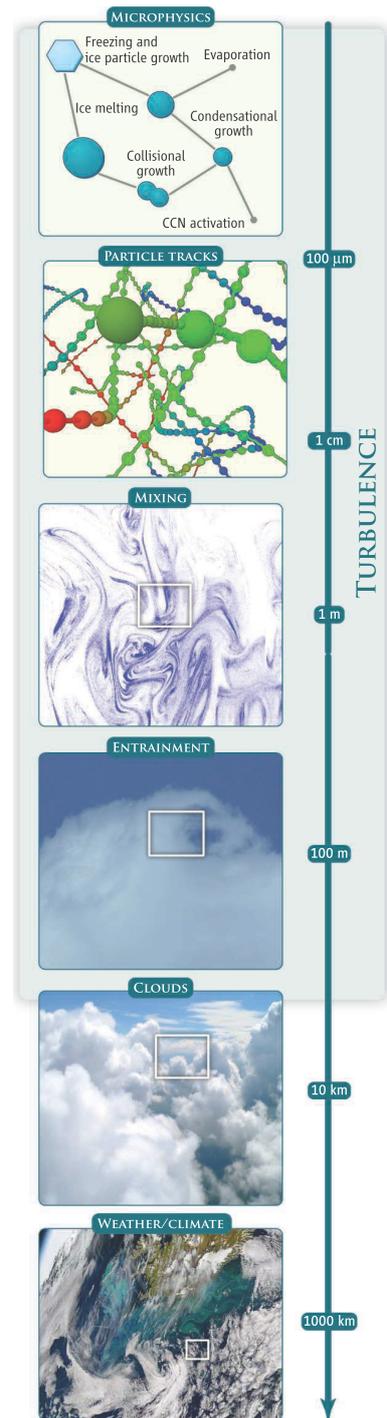


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung der räumlichen Skalenbereiche von Wolken, nach Bodenschatz et al. (2010) mit Genehmigung der AAAS.

Ein anderes Problem der Wolkenmikrophysik ist der noch ungeklärte Unterschied zwischen gemessenen und simulierten Wolkentropfenspektren im aufsteigenden, adiabatischen Kern der Wolke. Die gemessenen Tropfenspektren zeigen häufig eine Verbreiterung, die weder durch Messfehler noch durch rein adiabatisches Kondensationswachstum erklärt werden kann (Brennguier und Chaumat, 2001). Als mögliche Ursache für die Verbreiterung der Tropfenspektren wird der Einfluss der Turbulenz in Form von Entrainment und dem sogenannten *large-eddy hopping* diskutiert. Das Einmischen von ungesättigter Luft kann zur teilweisen Verdunstung von Tropfen und durch neu eingebrachte Aerosole auch zur Bildung von neuen Tropfen führen (z. B. Lasher-Trapp et al., 2005). Dadurch können Tropfengrößen, die kleiner als der adiabatische Wert sind, erklärt werden. Die Theorie des *large-eddy hopping* basiert auf dem Zusammenspiel von kleinskaliger und großskaliger Turbulenz und besagt, dass Tropfen aus einem Bereich der Wolke nicht wie bisher angenommen einen ähnlichen Weg durch die Wolke verfolgt haben müssen, sondern unterschiedliche Trajektorien und damit auch verschiedene Wachstumshistorien haben können (Grabowski und Wang, 2013). Dadurch können Tropfengrößen über dem adiabatischen Wert erklärt werden (z. B. Lasher-Trapp et al., 2005). Ob dieser Effekt tatsächlich einen Einfluss auf das Tropfenspektrum realer Wolken hat, wurde aber bisher noch nicht systematisch untersucht.

Diese Beispiele verdeutlichen, dass der Einfluss der turbulenten Strömung auf die verschiedenen Skalen der Wolken- und Niederschlagsbildung von großer Bedeutung, aber noch nicht vollständig verstanden ist. Das umfasst das Entrainment und die Durchmischung auf den größeren Skalen ( $\approx 1 - 100$  m) genauso wie den kleinskaligen Einfluss auf die Strömungsfelder und Tropfenbahnen. Außerdem betrifft es neben der Tropfenbildung und dem Wachstum durch Kondensation vor allem das Wachstum durch Koagulation. Neben dem Flaschenhalseffekt und dem *large-eddy hopping* beschäftigen sich konkrete Fragestellungen u. a. mit der durch Entrainment hervorgerufenen Aktivierung von Aerosolen oberhalb der Wolkenbasis (die sogenannte *in-cloud activation*, z. B. Slawinska et al., 2012; Wyszogrodzki et al., 2011) sowie mit dem Einfluss der kleinskaligen Turbulenz auf die Tropfenverteilung (z. B. Khain et al., 2007; Ayala et al., 2008a) und die Fall- und Relativgeschwindigkeiten der Tropfen (z. B. Good et al., 2012). Einen umfassenden Überblick zum aktuellen Stand der Untersuchungen geben Devenish et al. (2012) oder Grabowski und Wang (2013).

Die Problematik des Turbulenzeinflusses ist seit Jahrzehnten bekannt (z. B. East und Marshall, 1954), allerdings fehlten in der Vergangenheit geeignete Methoden, um die komplexen Wechselwirkungen zu untersuchen. Inzwischen stehen hochentwickelte Werkzeuge zur Untersuchung der unterschiedlichen Skalen zur Verfügung. Neben den experimentiellen Weiterentwicklungen, wie z. B. der Messplattform ACTOS für hochauflösende Messungen (*Airborne Cloud Turbulence Observation System*, Siebert et al., 2006) und Zwei-Phasen-Windkanälen mit Partikelverfolgung (z. B. Bordás et al., 2013), gehören dazu vor allem numerische Modelle, wie beispielsweise Euler-Lagrange-Modelle, bei denen die Tropfen explizit berechnet werden. Eine Form der Euler-Lagrange-Modelle sind die sogenannten Lagrangeschen Wolkenmodelle (engl. *Lagrangian Cloud Model*, LCM), die eine Kombination aus einem Grobstruktursimulationsmodell (engl. *large-eddy simulation model*, LES-Modell) mit einem Lagrangeschen Partikelmodell darstellen. LES-Modelle basieren auf dem Prinzip der Skalentrennung. Anstatt wie direkte numerische Simulationsmodelle (DNS-Modelle) das gesamte Turbulenzspektrum explizit aufzulösen, zerlegen sie die Strömung in zwei Teile: Die großen und energiereichen Wirbel werden explizit durch numerische Verfahren berechnet, wohingegen die klei-

nen und energiearmen Wirbel parametrisiert werden. Dies hat den Vorteil, dass auch stark turbulente Strömungen mit hohen Reynoldszahlen<sup>1</sup> simuliert werden können, da nicht alle Skalen aufgelöst werden müssen. In LCMs repräsentieren die simulierten Partikel (die sog. Supertropfen) die Aerosole und Tropfen, deren Trajektorien in dem vom LES-Modell simulierten turbulenten Strömungsfeld berechnet werden. Um realistische Anzahlen zu erreichen, wird das Konzept des Wichtungsfaktors verwendet. Dabei steht ein Supertropfen stellvertretend für eine große Anzahl von tatsächlichen Aerosolen oder Tropfen mit den gleichen Eigenschaften. Die physikalischen Prozesse der Supertropfen, wie der Transport inklusive der Sedimentation, die Tropfenbildung durch Aktivierung von Aerosolen und das Tropfenwachstum durch Kondensation bzw. Verdunstung, können in Wechselwirkung mit der Strömung direkt berechnet bzw. im Fall des Tropfenwachstums durch Koagulation parametrisiert werden. Dadurch ist die Dynamik und Mikrophysik der Wolke direkt an die Partikelprozesse gekoppelt und umgekehrt. Prozesse, wie das Ausfallen von Niederschlag oder der großskalige Einfluss von Entrainment und Mischungsprozessen, sind auf diese Weise automatisch und explizit implementiert.

LCMs haben im Gegensatz zu den traditionell verwendeten, rein Eulerschen Wolkenmodellen keine Schwierigkeiten mit der Aktivierung/Deaktivierung von Aerosolen und das Tropfenspektrum wird nicht künstlich durch numerische Diffusion verbreitert (Andrejczuk et al., 2010). Anders als die inzwischen recht häufig verwendete Kombination aus DNS-Modellen mit Lagrangeschen Partikelmodellen (z. B. Ayala et al., 2008a; Franklin et al., 2007; Lanotte et al., 2009; Kumar et al., 2012), sind LCMs in der Lage, komplette Wolken und Wolkenfelder zu simulieren. LCMs eignen sich daher besonders für Untersuchungen zu Fragestellungen bezüglich des großskaligen Turbulenzeinflusses (z. B. durch Entrainment hervorgerufene zusätzliche Tropfenbildung) oder um den Einfluss von kleinskaligen Parametrisierungen (z. B. turbulenter Kollision) auf die Entwicklung der Wolke zu testen.

Zu diesem Zweck wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit ein neues LCM für die Simulation von warmen Wolken entwickelt. Der Unterschied zu den beiden parallel dazu entwickelten LCMs von Shima et al. (2009) und Andrejczuk et al. (2008, 2010) liegt vor allem bei der Berechnung des Tropfenwachstums durch Koagulation. Bei dem hier vorgestellten LCM wird das Koagulationswachstum durch einen statistischen Ansatz, basierend auf der Kollisionsrate und den Kollisionswahrscheinlichkeiten, parametrisiert. Dafür stehen erstmals auch zwei verschiedene Kollisionswahrscheinlichkeiten, sogenannte Kollisionskernel, zur Verfügung, die neben den geometrischen Faktoren auch den Einfluss von kleinskaliger Turbulenz berücksichtigen. Neben der Validierung und Charakterisierung des neu entwickelten LCMs besteht das Ziel dieser Arbeit darin, den Einfluss dieser Wahrscheinlichkeiten auf die räumliche und zeitliche Entwicklung der Tropfen zu untersuchen, um zu klären, ob damit das Flaschenhalsproblem gelöst werden kann. Dafür wird der Einfluss für zwei verschiedene Situationen, eine idealisierte, einzelne Wolke und ein komplexes, quasi-stationäres Wolkenfeld, das auf Messwerten basiert, untersucht. Die Validierung und Charakterisierung des LCMs erfolgt ebenfalls anhand dieser beiden Konfigurationen und wird durch einen Vergleich mit zwei gängigen Wolkenphysikparametrisierungen und zwei Sensitivitätsstudien durchgeführt.

---

<sup>1</sup>Die Reynoldszahl ist eine dimensionslose Kennzahl, die das Verhältnis von Trägheits- zu Reibungskräften darstellt (z. B. Stull, 2009).

## 2 Grundlagen und Stand der Forschung

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Prozesse der Niederschlagsbildung in warmen Wolken und die damit verbundenen offenen Fragestellungen diskutiert. Es folgt ein Überblick zu den unterschiedlichen Konzepten zur Simulation von warmen Wolken mit LES-Modellen. Außerdem werden bisherige Entwicklungen im Bereich der LCMs vorgestellt und mit dem neu entwickelten Modell verglichen.

Einen weiterführenden, umfassenden Überblick zu den Grundlagen der Wolken- und Niederschlagsentwicklung geben z. B. Pruppacher und Klett (1997) sowie Lamb und Verlinde (2011). Detaillierte Informationen zum Thema Aerosole sind in Seinfeld und Pandis (2006) zu finden.

### 2.1 Entstehung von warmen Wolken

In WMO (1992) sind Wolken wie folgt definiert: „Eine Wolke besteht aus winzigen Wasser- und/oder Eisteilchen, die in der Luft schweben und gewöhnlich die Erdoberfläche nicht berühren. In einer Wolke können auch noch größere Wasser- oder Eisteilchen enthalten sein und andere flüssige oder feste Teilchen, wie sie in Abgasen, Rauch oder Staub vorkommen.“ Darüber hinaus werden warme Wolken in WMO (1992) definiert als: „[...] Wolken bei Temperaturen über 0 °C, die dementsprechend neben trockener Luft, Wasserdampf und Aerosolen nur flüssige Wassertropfen enthalten.“ Ein Aerosol ist dabei eine luftgetragene Substanz in der Atmosphäre, die aus festen Teilen oder flüssigen Tropfen besteht (WMO, 1992). Aerosole entstehen z. B. durch Verbrennungsprozesse, Gisch, Winderosion, Vulkanausbrüche oder chemische Reaktionen in der Atmosphäre und können aus komplexen Verbindungen von anorganischen, organischen, festen und löslichen Substanzen bestehen (z. B. Seinfeld und Pandis, 2006). In Abhängigkeit von ihrer Zusammensetzung variiert die Größe der Aerosole zwischen  $\approx 0,001 - 10 \mu\text{m}$  (Rogers und Yau, 1989). Die Aerosolkonzentration in der Atmosphäre ist ortsabhängig und im Allgemeinen aufgrund der höheren Emission über den Kontinenten deutlich höher als über den Ozeanen. Aerosole sind eine notwendige Komponente für die Bildung von Tropfen. Die Art und Anzahl der vorhandenen Aerosole beeinflusst deshalb einige Wolkeneigenschaften, wie z. B. die Anzahldichte der Tropfen. Dementsprechend werden in Abhängigkeit von ihrem Entstehungsort maritime und kontinentale Wolken unterschieden. Maritime Wolken weisen eine geringere Anzahldichte der Wolkentropfen als kontinentale auf, deswegen ist der mittlere Tropfenradius in maritimen Wolken größer. Die typische Anzahldichte der Wolkentropfen liegt bei  $\approx 50 - 1000 \text{ cm}^{-3}$  und kann für sehr große Tropfen  $1 \text{ dm}^{-3} - 1 \text{ m}^{-3}$  betragen (Rogers und Yau, 1989; Pruppacher und Klett, 1997). Der mittlere Tropfenradius von maritimen Wolken liegt bei etwa  $10 \mu\text{m}$ , der von kontinentalen Wolken bei etwa  $5 \mu\text{m}$  (Laube und Höller, 1988). Diese Werte können in Abhängigkeit von der Wolkenart, der geografischen Lage und dem Alter der Wolke variieren. Im Allgemeinen liegt der typische Radius der für die Tropfenbildung relevanten Aerosole bei  $0,1 \mu\text{m}$  (Rogers und Yau, 1989). Die Radien der Wassertropfen in warmen Wolken liegen zwischen einem  $\mu\text{m}$  und mehreren mm (Pruppacher und Klett,

1997). Dabei bezeichnet man Tropfen mit Radien zwischen  $2\ \mu\text{m}$  und  $50\ \mu\text{m}$  als Wolkentropfen (WMO, 1992) und größere Tropfen (mit Radius  $r > 50\ \mu\text{m}$ ) als Niesel- und Regentropfen<sup>1</sup>. Der Flüssigwassergehalt von warmen Kumuluswolken erreicht Werte bis zu einigen  $\text{g m}^{-3}$  (z. B. Pruppacher und Klett, 1997), wobei eine Wolke üblicherweise ab  $0,01\ \text{g m}^{-3}$  als solche definiert wird (z. B. van Zanten et al., 2011).

Wolken entstehen durch Abkühlung von feuchter Luft durch Hebung, Durchmischung und/oder Strahlungsabkühlung, wenn der Sättigungswert der Feuchte erreicht wird und sich Wolkentropfen bilden. Die turbulente Strömung innerhalb von Wolken kann durch hohe Reynoldszahlen, niedrige Dissipationsraten der turbulenten kinetischen Energie (im Vergleich zu vielen technischen Strömungen) und moderaten Geschwindigkeitsfluktuationen charakterisiert werden (Shaw, 2003). Die Dissipationsrate, ein Maß für die Turbulenz, ist dabei in Wolken z. T. mehr als zwei Größenordnungen größer als in der wolkenfreien Umgebung (Siebert et al., 2006). Die Ursache dafür ist, dass in der Wolke durch das Freisetzen latenter Wärme bei Phasenumwandlungen und den damit verbundenen Auftriebskräften (vor allem an der Wolkenbasis und dem Wolkenrand), durch langwellige Ausstrahlung am Oberrand der Wolke und durch Instabilitäten an der Scherschicht zwischen der Wolke und ihrer Umgebung turbulente kinetische Energie erzeugt wird (Grabowski und Clark, 1993; Grabowski und Wang, 2013). Die typischen Eigenschaften der turbulenten Strömung variieren je nach Wolkentyp und Entwicklungsstadium. Messungen zeigen, dass die mittlere Dissipationsrate in Kumuluswolken im Bereich von  $\approx 100\ \text{cm}^2\ \text{s}^{-3}$  und die Geschwindigkeitsfluktuationen bei  $\approx 1\ \text{m s}^{-1}$  liegen (Grabowski und Wang, 2013). Daraus lassen sich typische Größenskalen von 100 m, typische Zeitskalen von 100 s und eine Reynoldszahl im Bereich von  $10^7$  für die energietragenden Wirbel ableiten (Grabowski und Wang, 2013). Die Struktur der Turbulenzbewegung im Dissipationsbereich kann mit Hilfe der Reynoldszahl der Taylor-Mikroskala  $\approx 10^4$  und der Kolmogorov-Länge  $\approx 0,8\ \text{mm}$  charakterisiert werden (Grabowski und Wang, 2013).<sup>2</sup> Die Werte der Dissipationsrate unterliegen starken Fluktuationen innerhalb der Wolke, die bis zu einem Faktor von 50 in einem Bereich von 15 m betragen können (Siebert et al., 2006). Die maximalen Werte liegen dabei im oberen Bereich der Wolke, nahe der Wolkenobergrenze (z. B. Gerber et al., 2008; Seifert et al., 2010). Aufgrund der geringen Volumendichte der Tropfen ( $\approx 10^{-6}$ ) kann ihr direkter Einfluss auf die turbulente Strömung vernachlässigt werden (z. B. Shaw, 2003). Die Tropfen beeinflussen die Wolkendynamik aber entscheidend durch das Freisetzen latenter Wärme bei der Kondensation und die Abkühlung bei der Evaporation.

Alle Prozesse, die sich mit der Tropfenbildung und dem Tropfenwachstum in Wolken beschäftigen, werden als Wolkenmikrophysik bezeichnet (siehe auch Abbildung 1). Dazu gehören in warmen Wolken die Nukleation, das Tropfenwachstum durch Kondensation oder Evaporation und das Tropfenwachstum durch Kollision und Koaleszenz, die im Folgenden vorgestellt werden.

Nukleation (lat. *nucleus* = Kern) beschreibt im Allgemeinen die Bildung von Kernen oder Teilchen, bei denen eine freie Energiebarriere überschritten werden muss (Rogers und Yau, 1989). Im Bereich der Wolkenmikrophysik wird damit die Bildung von Wolkentropfen bezeichnet, wobei zwischen homogener und heterogener Nukleation unterschieden wird. Homogene Nukleation ist die spontane Bildung von Wassertropfen

---

<sup>1</sup>Niederschlag wird erst als Regen bezeichnet, wenn der Tropfenradius  $250\ \mu\text{m}$  übersteigt. Niederschlag mit kleineren Tropfengrößen (typischerweise mit  $r \approx 100\ \mu\text{m}$ ) wird Niesel- oder Sprühregen genannt.

<sup>2</sup>Die Taylor-Mikroskala ist die Größe der kleinsten sich ausbildenden Turbulenz und die Kolmogorov-Länge beschreibt die Größe der kleinsten Turbulenzelemente (z. B. Stull, 2009).

durch zufällige Kollisionen von Wassermolekülen, das bedeutet ohne den Einfluss einer Fremdsubstanz (Lamb und Verlinde, 2011). Damit die dadurch entstehenden, sehr kleinen Tropfen stabil sind, muss ihre Größe einen kritischen Radius überschreiten. Dieser kritische Radius hängt von dem Sättigungsdampfdruck ab, für den die flüssige und die gasförmige Phase im Gleichgewicht stehen. Dieser Zusammenhang wird durch die Köhlertheorie (Köhler, 1936) beschrieben. Da die Bindung der Wassermoleküle innerhalb einer gekrümmten Oberfläche, wie der eines Wassertropfens, schwächer ist als in einer ebenen Oberfläche, ist der Sättigungsdampfdruck über einem Tropfen erhöht (z. B. Liljequist, 1984). Je kleiner der Tropfen ist, umso größer wird der benötigte Sättigungsdampfdruck (Krümmungseffekt). Damit sehr kleine Tropfen stabil werden können, müssen deshalb sehr hohe Übersättigungen (in Bezug auf eine ebene, reine Wasseroberfläche) erreicht werden. Selbst ein Tropfen mit einem Radius von  $0,01 \mu\text{m}$ , der aus mehr als  $3 \cdot 10^5$  Wassermolekülen besteht, bräuchte z. B. noch eine Übersättigung von mehr als 10 %, um stabil zu sein (Rogers und Yau, 1989). Da so hohe Übersättigungen in Wolken auf der Erde nicht vorkommen, spielt die homogene Nukleation von flüssigen Wassertropfen hier keine Rolle (Rogers und Yau, 1989).

Heterogene Nukleation ist die Bildung von Wassertropfen durch Anlagerung von Wassermolekülen an bestimmte atmosphärische Aerosole, sogenannte Kondensationskerne. Kondensationskerne (engl. *condensation nuclei*, CN) sind Aerosole, die Nukleation fördern oder ermöglichen, indem sie die freie Energiebarriere, die für das Erreichen des stabilen Radius notwendig ist, herabsetzen. Dafür kommen zwei Mechanismen in Frage: das Bereitstellen einer genügend großen Oberfläche bei unlöslichen Aerosolen oder das Herabsetzen des Sättigungsdampfdruckes aufgrund des Lösungseffektes bei löslichen Stoffen. Bei neutralen, unlöslichen Aerosolen sind die Sättigungsdampfdrücke für kleine Tropfen genauso hoch wie im homogenen Fall. Diese Partikel müssen deshalb sehr groß sein, damit sich bei gemäßigten Übersättigungen trotz des Krümmungseffektes stabile Tropfen bilden, z. B.  $r = 1 \mu\text{m}$  bei 0,1 % Übersättigung oder  $r = 0,1 \mu\text{m}$  bei 1 % Übersättigung<sup>3</sup>. Wasserlösliche Aerosole sind meist hydrophil und die im Tropfen gelösten Substanzen verringern den Sättigungsdampfdruck im Vergleich zu reinen Wassertropfen (z. B. Liljequist, 1984). Durch diesen sogenannten Lösungseffekt ist die Übersättigung, die für die Bildung eines stabilen Tropfens notwendig ist, deutlich geringer als bei der homogenen Nukleation. Häufig sind solche Tropfen schon bei relativen Feuchten unter 100 % stabil, d. h. im Gleichgewicht mit ihrer Umgebung. Da in der Luft immer Aerosole vorhanden sind, die bei relativ kleinen Übersättigungen als CN wirken, steigt die Übersättigung in Wolken auf der Erde typischerweise nicht über 10 % an und bleibt meist sogar unter 1 % (Pruppacher und Klett, 1997). CN, deren kritische Übersättigung unter 10 % ( $r > 0,01 \mu\text{m}$ ) und damit im für Wolken realistischen Bereich liegt, nennt man auch Wolkenkondensationskerne (engl. *cumulus condensation nuclei*, CCN).

Es ist zu beachten, dass die Verflüssigung von festen, löslichen Aerosolen (hygrokopischen Salzen) zu einem Tropfen durch Absorption von Wassermolekülen keine Nukleation darstellt, sondern als Deliqueszenz bezeichnet wird (Lamb und Verlinde, 2011). Die Grund dafür ist, dass bei der Umwandlung eines festen Stoffes in eine Flüssigkeit die Entropie erhöht wird, bei Nukleation die Entropie jedoch verringert wird. Die relative Feuchte, die benötigt wird, damit sich ein fester Stoff auflöst, ist eine charakteristische Stoffeigenschaft und wird Deliqueszenzpunkt oder Fließpunkt genannt. Der Deliqueszenzpunkt der typischen reinen Salze der Atmosphäre liegt bei unter 80 %

<sup>3</sup>Bei wasserlöslichen Aerosolen genügt hier schon ein Radius von  $0,01 \mu\text{m}$  (Rogers und Yau, 1989).

(z. B. für Natriumchlorid (NaCl) bei 76 % und für Ammoniumsulfat ((NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) bei 80 %, Möller, 2003).

Eine notwendige Voraussetzung für die Bildung von Wolkentropfen durch heterogene Nukleation ist die Aktivierung der neu gebildeten Tropfen. Dabei müssen die Tröpfchen analog zur homogenen Nukleation eine freie Energiebarriere überwinden. Diese Barriere kann veranschaulicht werden, wenn man die Köhlertheorie in Form der sogenannten Köhlerkurve betrachtet, wie sie schematisch in Abbildung 2.1 dargestellt ist. Die Köhlerkurve beschreibt dabei den prinzipiellen Verlauf der Übersättigung über einem Tropfen aus nicht reinem Wasser als Funktion des Radius und gibt die Kombination des Krümmungseffektes ( $\sim r^{-1}$ ) und Lösungseffektes ( $\sim r^{-3}$ ) wieder (z. B. Liljequist, 1984). Das Maximum der Köhlerkurve stellt in diesem Fall die freie Energiebarriere dar (Lamb und Verlinde, 2011). Abbildung 2.1 zeigt, dass für sehr kleine Tropfen der Einfluss des Lösungseffektes dominiert und die Übersättigung im Gleichgewichtszustand unter dem Wert null liegt. Mit zunehmendem Radius nimmt der Einfluss des Lösungseffektes aufgrund der zunehmenden Verdünnung ab, während der Einfluss des Krümmungseffektes zunimmt. Die Kurve erreicht ihr Maximum bei der sogenannten kritischen Übersättigung und dem zugehörigen kritischen Radius. Für Radien oberhalb des kritischen Wertes nimmt der Einfluss des Krümmungseffektes langsam ab und die Gleichgewichtskurve geht auf den Wert null zurück. Die Aktivierung der Tropfen beschreibt den Prozess des Anwachsens der aufgequollenen CCN durch Kondensation über den kritischen Radius hinweg bis hin zu den Wolkentropfen. In diesem Fall ist mit der Aktivierung keine Phasenumwandlung sondern eine Änderung im Wachstumsverhalten der Tropfen verbunden, da die Tröpfchen schon vorher flüssig sind (Lamb und Verlinde, 2011). Im inaktivierten Fall ist für die Änderung des Tropfenradius immer eine Änderung der Umgebungfeuchte notwendig. Der Tropfen befindet sich in einem stabilen Gleichgewichtszustand und kehrt auch bei kleinen, zufälligen Änderungen immer wieder in den Gleichgewichtszustand zurück. Nach Überwindung des kritischen Radius ändert sich die Reaktion der Tropfen auf die Änderung der Umgebungfeuchte. Bei zufälligen Störungen kann der Tropfen ohne weitere Erhöhung der Übersättigung anwachsen und so die Größe eines Wolkentropfen erreichen. Es herrscht ein instabiles Gleichgewicht und die zugehörigen CCN werden als aktiviert bezeichnet. Der kritische Radius stellt demnach die Grenze zwischen aufgequollenen CCN und Wolkentropfen bzw. aktivierten CCN dar (Rogers und Yau, 1989).

Die Bildung von Wolkentropfen durch Aktivierung von CCN findet (außer bei sehr starken Aufwinden von  $\approx 10 \text{ m s}^{-1}$ ) vor allem an der Wolkenbasis (in den untersten 100 m) statt, wo der Sättigungswert der aufsteigenden feuchten Luft ein Maximum erreicht (Devenish et al., 2012). Durch Mischungsprozesse und Entrainment werden aber auch oberhalb der Wolkenbasis, vor allem am Wolkenrand, neue CCN eingebracht und aktiviert. Neuere numerische Untersuchungen zeigen, dass diese *in-cloud activation* in Kumuluswolken nahezu höhenkonstante mittlere Tropfenkonzentrationen zur Folge hat, die auch bei Messungen beobachtet wurden (Wyszogrodzki et al., 2011; Slawinska et al., 2012). Der Einfluss des Entrainments und der *in-cloud activation* auf die Entwicklung des Tropfenspektrums und die damit verbundenen Eigenschaften der Wolke sind allerdings noch nicht vollständig geklärt. Eine Ursache dafür ist, dass die Aktivierung, Deaktivierung und Reaktivierung von CCN sowie ihre Veränderung durch das Tropfenwachstum durch Koagulation (dem sogenannten *cloud processing*) bei numerischen Modellen häufig vernachlässigt oder stark vereinfacht wird (Grabowski und Wang, 2013). Da LCMs diese Prozesse direkt berechnen und auch das großskalige

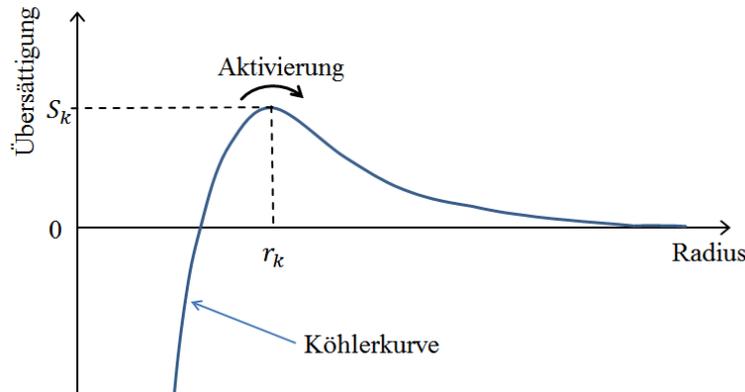


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Köhlerkurve. Die Gleichgewichtskurve zeigt den Verlauf der Übersättigung über einem nicht reinen Wassertropfen in Abhängigkeit vom Tropfenradius (angelehnt an Lamb und Verlinde, 2011).  $S_k$  kennzeichnet die kritische Übersättigung mit dem zugehörigen kritischem Radius  $r_k$ , die für die Aktivierung der Tropfen erreicht werden muss.

Entrainment auflösen können, eignen sie sich hervorragend für solche Untersuchungen.

Nach der Bildung der Wolkentropfen können diese in Abhängigkeit von der Umgebungfeuchte bei Übersättigung durch Kondensation anwachsen oder bei Untersättigung durch Evaporation ihre Masse verringern. Das Tropfenwachstum kann weiter durch die Köhlertheorie beschrieben werden, wobei der Einfluss des Krümmungs- und Lösungseffektes bei Tropfengrößen mit Radien größer als ein  $\mu\text{m}$  vernachlässigt werden kann (Rogers und Yau, 1989). Das Wachstum ist dann vor allem vom Radius und der Übersättigung abhängig. Dabei ist die Entwicklung proportional zum Reziproken des Tropfenradius, d. h. der Einfluss nimmt mit zunehmendem Tropfenradius ab. Daraus resultiert, dass kleine Tropfen (in Bezug auf ihren Radius) schneller wachsen als große Tropfen. Bei reinem Tropfenwachstum durch Kondensation würde das Tropfenspektrum demnach mit der Zeit schmaler werden. Das Tropfenwachstum durch Kondensation bzw. Evaporation hängt außerdem von der Übersättigung ab, die wiederum klein- und großskaligen turbulenten Schwankungen unterliegt. DNS-Untersuchungen zeigen, dass kleinskalige Schwankungen der Übersättigung aufgrund der schnellen Tropfenbewegungen im Mittel keinen Einfluss auf das Tropfenwachstum haben, insbesondere auch deshalb, weil das Kondensationswachstum reversibel ist (z. B. Vaillancourt et al., 2002). Allerdings konnte ebenfalls gezeigt werden, dass kleinskalige Turbulenz in Kombination mit gröberskaliger Turbulenz, dem large-eddy hopping, einen Einfluss auf die Entwicklung des Tropfenspektrums haben kann (z. B. Lasher-Trapp et al., 2005). Dieser Effekt beschreibt, dass Tropfen durch kleinskalige Schwankungen zwischen verschiedenen gröberskaligen Strömungen wechseln können. Das führt dazu, dass Tropfen in einem Bereich der Wolke unterschiedliche Wachstumshistorien haben und durch Bereiche mit unterschiedlichen CCN- und Tropfenkonzentrationen, Übersättigungen oder vertikalen Geschwindigkeiten beeinflusst werden. Dadurch kann sich das Tropfenspektrum verbreitern. Systematische Untersuchungen mit hochauflösenden numerischen Modellen und für Wolken typischen Bedingungen zu dieser Theorie stehen noch aus (Grabowski und Wang, 2013).

Die hier verwendete Köhlertheorie basiert auf verschiedenen Annahmen, z. B. dass die

Temperaturdifferenz zwischen dem Tropfen und der Umgebungsluft klein ist, dass die Umgebungsluft nicht in Bewegung ist und demnach der Massen- und Wärmetransport nur durch molekulare Prozesse (Diffusion und Wärmeleitung) beeinflusst wird (Lamb und Verlinde, 2011). Diese Annahmen gelten für kleine Tropfen, aber nicht mehr für Niesel- und Regentropfen. Niesel- und Regentropfen haben eine Fallgeschwindigkeit, die im Gegensatz zu der von Wolkentropfen nicht vernachlässigt werden kann. Durch die Fallbewegung des Tropfens wird der Massen- und Wärmetransport verstärkt und so das Tropfenwachstum beeinflusst. Dieser Einfluss wird als Ventilationseffekt bezeichnet. Er muss dementsprechend bei der Beschreibung von Niesel- und Regentropfen zusätzlich berücksichtigt werden. Der Ventilationseffekt spielt vor allem bei der Verdunstung von Niesel- und Regentropfen eine entscheidende Rolle. Das Wachstum von Niesel- und Regentropfen durch Kondensation kann im Vergleich zum Wachstum durch Koagulation vernachlässigt werden.

Ein anderer Wachstumsprozess für Wolkentropfen ist das Wachstum durch Koagulation, also durch Kollision und Koaleszenz (von lat. *coalescere* = zusammenfließen) mit anderen Tropfen. Tropfen können miteinander kollidieren, wenn sie unterschiedlich auf den Einfluss der Gravitation, elektrische Anziehungskräfte oder turbulente Strömungen reagieren. Im Allgemeinen dominieren dabei die Gravitationseffekte, d. h. dass verschiedene Größen, Dichten oder Formen der Tropfen unterschiedliche Fallgeschwindigkeiten zur Folge haben (Lamb und Verlinde, 2011). Tropfen mit höherer Fallgeschwindigkeit können langsamer fallende Tropfen einholen, aufgrund von Trägheit mit ihnen kollidieren und schließlich zusammenfließen. Dabei wächst der schneller fallende Tropfen (der Kollektor) auf Kosten des eingesammelten Tropfens an.

Um das Tropfenwachstum durch Koagulation zu beschreiben, wird die sogenannte Koagulationsfunktion (engl. *collection kernel*, z. B. Rogers und Yau, 1989) verwendet. Sie ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, dass zwei Tropfen miteinander kollidieren und zusammenfließen. Für ruhende Umgebungsluft kann die Koagulationsfunktion aus der geometrischen Betrachtung der Tropfenkollision hergeleitet werden und beschreibt das effektive Sammelvolumen der Tropfen pro Zeiteinheit (Herbert und Beheng, 1986). Die Koagulationsfunktion bestimmt sich demnach aus dem Volumen, das die beiden Tropfen pro Zeiteinheit durchstreichen<sup>4</sup>, und der Kollisions- und Koaleszenzeffizienz. Die Kollisionseffizienz repräsentiert dabei die Wechselwirkungen der Strömungsfelder der beiden Tropfen. Diese hydrodynamischen Strömungseffekte, wie beispielsweise das Umströmen eines kleinen, nahezu trägheitsfreien Tropfens um den Kollektor herum oder das „Einfangen“ eines Tropfens im Leewirbel des Kollektors<sup>5</sup>, beeinflussen die Trajektorien der Tropfen und damit die Kollisionswahrscheinlichkeit. Die Kollisionseffizienz wird als Quotient der tatsächlich stattfindenden Kollisionen zu allen im geometrischen Sammelvolumen möglichen Kollisionen definiert (Lamb und Verlinde, 2011). Die Koaleszenzeffizienz beschreibt die Wahrscheinlichkeit, mit der die kollidierenden Tropfen zusammenfließen. Die theoretische Bestimmung der Kollisions- und Koaleszenzeffizienzen wird z. B. durch Deformation der Tropfen und Wirbelablösungen im Strömungsfeld erschwert (Seinfeld und Pandis, 2006). Für ruhende Umgebungsluft können die Effizienzen basierend auf theoretischen Berechnungen oder Laborexperimenten approximiert werden (beispielsweise Hall, 1980; Rogers und Yau, 1989). Die Ergebnisse zeigen, dass die Kollisionseffizienzen stark von den Tropfenradien abhängen. Alle Kollisionen mit

---

<sup>4</sup>Dieses Volumen kann durch das Produkt der Querschnittsfläche mit der Differenz der Fallgeschwindigkeit berechnet werden

<sup>5</sup>Dieser Effekt kann zu Kollisionseffizienzen größer als eins führen (Rogers und Yau, 1989).

Tropfen kleiner als  $5\ \mu\text{m}$  können aufgrund der geringen Trägheit und dem entsprechend passiven Verhalten der Tropfen vernachlässigt werden (Lamb und Verlinde, 2011). Kollisionseffizienzen von mehr als 10 % treten erst bei Kollisionen zwischen Kollektoren ab etwa  $20\ \mu\text{m}$  Radius und relativ großen Tropfen ab etwa  $10\ \mu\text{m}$  Radius auf, wobei Werte über 80 % erst für Radien ab  $50\ \mu\text{m}$  und  $10\ \mu\text{m}$  erreicht werden (Rogers und Yau, 1989; Lamb und Verlinde, 2011). Die Koaleszenzeffizienz nimmt mit zunehmender Größe der eingesammelten Tropfen ab und ist für Tropfenradien kleiner als  $100\ \mu\text{m}$  näherungsweise eins (Rogers und Yau, 1989). Das Tropfenwachstum durch Koagulation setzt demnach erst effektiv ein, wenn die größten Tropfen eine entsprechende Größe erreicht haben und die Differenz zu den kleinsten Tropfen groß genug ist, d. h. wenn sich ein relativ breites Spektrum von unterschiedlich großen Wolkentropfen gebildet hat, von denen einige einen Radius größer als etwa  $20\ \mu\text{m}$  erreicht haben (Rogers und Yau, 1989). Mit zunehmendem Radius wird das Koagulationswachstum immer effektiver und dominiert die Wachstumsprozesse von großen Wolken- und Regentropfen. Ein typischer Regentropfen mit einem Radius von  $1\ \text{mm}$  ist das Resultat von rund  $10^6$  Kollisionen (Lamb und Verlinde, 2011). Dabei nimmt der Radius des Kollektors durch die positive Rückkopplung<sup>6</sup> exponentiell mit der Zeit zu. Im Vergleich dazu folgt das Tropfenwachstum durch Kondensation dem Verlauf einer Wurzelfunktion.

Die Koagulation von Tropfen in einer turbulenten Strömung ist deutlich komplexer und wird vor allem seit der letzten Jahrtausendwende intensiv mit Hilfe von hochentwickelten Werkzeugen, vor allem mit Kombinationen von DNS-Modellen und Lagrangeschen Partikelmodellen, untersucht (z. B. Wang und Grabowski, 2009). Durch kleinskalige Turbulenz können die Geschwindigkeiten der Tropfen, die hydrodynamischen Wechselwirkungen (die Kollisions- und Koaleszenzeffizienzen) und die räumliche Verteilung der Tropfen beeinflusst werden. Dabei verändert die turbulente Strömung nicht nur den Betrag, sondern auch die Richtung der Tropfengeschwindigkeit und damit den Winkel, mit dem die Tropfen aufeinander treffen. Die Kollisionswahrscheinlichkeit hängt deshalb neben der Differenz der Fallgeschwindigkeiten auch von dem turbulenten, dreidimensionalen Transport der Tropfen ab, so dass im turbulenten Fall die relative Radialgeschwindigkeit der Tropfen betrachtet werden muss. Diese berücksichtigt neben der Differenz der vertikalen Fallgeschwindigkeiten auch den Einfluss von Scherungen und lokalen Beschleunigungen (Grabowski und Wang, 2013). DNS-Ergebnisse zeigen, dass die Turbulenzeffekte die Relativgeschwindigkeit von kollidierenden Tropfen in Abhängigkeit vom Radius erhöhen, wobei die Relativgeschwindigkeit mit zunehmender Dissipationsrate und Reynoldszahl der Taylor-Mikroskala zunimmt (Ayala et al., 2008a). Für Tropfen mit  $10\ \mu\text{m}$  und  $20\ \mu\text{m}$  Radius hat Franklin et al. (2005) beispielsweise eine Erhöhung von 7,3 % bzw. 15 % für Dissipationsraten von  $280\ \text{cm}^2\ \text{s}^{-3}$  bzw.  $656\ \text{cm}^2\ \text{s}^{-3}$  gefunden. Die erhöhten Tropfengeschwindigkeiten und veränderten Kollisionswinkel beeinflussen auch die aerodynamischen Wechselwirkungen der Strömungsfelder (Grabowski und Wang, 2013). Wang et al. (2008) und Wang und Grabowski (2009) haben gezeigt, dass der Einfluss der kleinskaligen Turbulenz eine signifikante Erhöhung der Kollisionseffizienzen zur Folge haben kann. Der Verstärkungsfaktor hängt dabei nichtlinear vom Verhältnis der Tropfenradien ab und nimmt mit zunehmender Dissipationsrate zu. Er erreicht typische Werte zwischen 1 und 5 (Wang und Grabowski, 2009). Die kleinskalige Turbulenz kann auch die räumliche Verteilung von gleich großen Tropfen

<sup>6</sup>Das Anwachsen der Tropfenmasse führt zu einer höheren Fallgeschwindigkeit sowie zu einem größeren Kollisionsquerschnitt und begünstigt damit das weitere Wachstum durch Koagulation.

beeinflussen und zu einer höheren Tropfendichte in Regionen mit geringer Vorticity führen. Ursache dafür ist der Zentrifugaleffekt in Regionen mit hoher Vorticity. Der Effekt konnte für Tropfen mit und ohne Einfluss von Gravitation nachgewiesen werden (Squires und Eaton, 1990; Wang und Maxey, 1993; Grabowski und Wang, 2013). Die inhomogene Verteilung der Tropfen wird in Abhängigkeit von der Tropfengröße und dem Turbulenzzustand durch die radiale Verteilungsfunktion beschrieben. Durch diesen Effekt wird vor allem die Kollisionswahrscheinlichkeit von ähnlich großen Tropfen erhöht, die ohne den Turbulenzeinfluss aufgrund der nahezu gleich großen Fallgeschwindigkeit vernachlässigt werden konnte.

Die genannten turbulenten Einflüsse auf die Kollisionswahrscheinlichkeit können mit Hilfe des turbulenten Kollisionskerns berücksichtigt werden. Der Kern berechnet sich aus der Querschnittsfläche der Tropfen, der relativen Radialgeschwindigkeit, der radialen Verteilungsfunktion, der Kollisionseffizienz und dem turbulenten Verstärkungsfaktor für die Kollisionseffizienz. Für ruhende Umgebungsluft reduziert sich der turbulente Kollisionskern auf die oben genannte Form für geometrische Kollisionen. Multipliziert man den Kollisionskern mit der Koaleszenzeffizienz erhält man die bereits erwähnte Koagulationsfunktion. Parametrisierungen für die durch Turbulenz beeinflussten Terme wurden z. B. von Franklin (2008), Kunnen et al. (2013) oder Ayala et al. (2008a) und Wang und Grabowski (2009) entwickelt. Dabei zeigt die Parametrisierung nach Ayala et al. (2008a) und Wang und Grabowski (2009), die im Folgenden als AW-Parametrisierung bezeichnet wird, dass kleinskalige Turbulenzeffekte den Kollisionskern und damit auch die Koagulationsfunktion um einen Faktor von maximal 2 bis 3 bzw. 4 bis 5 (bei einer Dissipationsrate von  $100 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$  bzw.  $400 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$ ) gegenüber der nicht-turbulenten Form erhöhen können. Bei unterschiedlich großen Tropfen ist dafür vor allem der turbulente Verstärkungsfaktor für die Kollisionseffizienz verantwortlich, bei nahezu gleich großen Tropfen die radiale Verteilungsfunktion (Grabowski und Wang, 2013).

Mit Hilfe der Parametrisierungen kann untersucht werden, wie sich der turbulente Kollisionskern auf das Tropfenwachstum auswirkt und ob dadurch das Flaschenhalsproblem gelöst werden kann. Erste Studien zeigen, dass die Berücksichtigung der Turbulenzeffekte die Bildung von Niederschlag beschleunigt. Xue et al. (2008) hat den Einfluss des Koagulationswachstums auf die Entwicklung eines Tropfenspektrums berechnet und gezeigt, dass turbulente Kollisionskern zu einer Beschleunigung des Tropfenwachstums führen. Dadurch wird auch die Zeit, die für die Bildung von Nieseltropfen benötigt wird, deutlich reduziert (40 % bei Verwendung von AW-Parametrisierung). Grabowski und Wang (2009) haben den Einfluss des turbulenten Kollisionskerns auf die Niederschlagsbildung in einem aufsteigenden, adiabatischen Luftpaket untersucht. Dabei wurden neben dem Koagulationswachstum auch die Nukleation und das Tropfenwachstum durch Kondensation berücksichtigt. Sie konnten zeigen, dass sich die Zeit bis zum Einsetzen des Niederschlags bei Berücksichtigung der Turbulenzeffekte auf die Tropfenkollision um 25 % bis 40 % reduziert hat. Seifert et al. (2010) und Wyszogrodzki et al. (2013) haben den Einfluss des turbulenten Kollisionskerns auf die Entwicklung von flachen Kumuluswolken mit LES für unterschiedliche CCN-Konzentrationen untersucht. Seifert et al. (2010) fand heraus, dass der Turbulenzeinfluss das Tropfenwachstum beschleunigt und die Niesel- und Regenwassermenge in Wolken erhöht, insbesondere nahe der Wolkenobergrenze, wo die Dissipationsrate ihr Maximum erreicht. Außerdem nimmt auch die Niederschlagsmenge am Boden zu. Die Simulationen zeigen allerdings, dass die Niederschlagsmenge und auch das Verhältnis der Niederschlagsmengen von

Simulationen mit und ohne Turbulenzeinfluss von der räumlichen Auflösung der Simulation abhängt. Wyszogrodzki et al. (2013) haben zwei Mechanismen für die erhöhte Niederschlagsmenge bei Berücksichtigung der Turbulenz identifiziert. Zum einen setzt durch das beschleunigte Tropfenwachstum der Koagulationsprozess früher ein, so dass während des Lebenszyklus der Wolke mehr Niesel- und Regenwasser gebildet wird. Zum anderen wird durch den früher einsetzenden Niederschlag der Auftrieb innerhalb der Wolke erhöht, so dass die vertikale Erstreckung der Wolke zunimmt und damit auch der Flüssigwassergehalt.

Untersuchungen zum Einfluss der Turbulenz auf die Entwicklung der Tropfenpopulation unter für Wolken typischen Bedingungen (also auch mit Berücksichtigung der gröberskaligen Turbulenzeffekte) stellen immer noch eine große Herausforderung dar. Eine Quantifizierung des Einflusses ist zur Zeit aufgrund der Abhängigkeit der Ergebnisse von der räumlichen Auflösung und dem verwendeten turbulenten Kollisionskernel kaum möglich. Hinzu kommt, dass alle auf DNS basierten Parametrisierungen aus Rechenkapazitätsgründen für Reynoldszahlen der Taylor-Mikroskala hergeleitet und verifiziert wurden, die deutlich unter denen von typischen Wolken liegen (bei DNS kleiner als 100 im Gegensatz zu  $10^4$  in Wolken). Bei den Untersuchungen wurden demnach nicht alle für die Tropfeninteraktion relevanten turbulenten Skalen aufgelöst. Um diesen Effekt zu berücksichtigen, wurde der aus DNS gewonnene turbulente Kollisionskernel für die AW-Parametrisierung für eine Reynoldszahl der Taylor-Mikroskala von 20000 extrapoliert. Dieser Einfluss und die Richtigkeit der Extrapolation muss zukünftig mit leistungsstärkeren Computern untersucht werden (Devenish et al., 2012). Neben der Verbesserung und Erweiterung der bisherigen Parametrisierungen der turbulenten Kollisionskernel sollen diese in Zukunft auch anhand von Laborexperimenten oder tropfenauflösenden Modellen validiert werden (Grabowski und Wang, 2013).

## 2.2 Simulationen von warmen Wolken mit LES-Modellen

LES-Modelle sind besonders gut für die Simulationen von warmen Wolken geeignet, da sie in der Lage sind, ganze Wolken und Wolkenfelder zu simulieren und dabei große Teile der turbulenten Strukturen aufzulösen. Da LES-Modelle nicht alle Skalen explizit berechnen, müssen die subskaligen wolkenphysikalischen Prozesse mit Hilfe der aufgelösten Informationen parametrisiert werden. Die dafür verwendeten Ansätze basieren auf den bisher bekannten Theorien und Beobachtungen und haben unterschiedliche Komplexitätsstufen. Im Allgemeinen werden für die Simulationen von warmen Wolken mit LES-Modellen drei verschiedene Ansätze verwendet, die im Folgenden vorgestellt werden: Spektralmodelle, Bulk Modelle und LCMs (Straka, 2009).

### 2.2.1 Spektralmodelle

Spektralmodelle berechnen die Entwicklung des Tropfenspektrums. Dazu wird die räumliche und zeitliche Änderung der Tropfengrößenverteilungsfunktion durch eine Bilanzgleichung prognostiziert. Die spektrale Bilanzgleichung berücksichtigt neben den dynamischen Wechselwirkungen mit der Strömung, wie z.B. dem Transport, auch die wolkenmikrophysikalischen Prozesse wie Nukleation, Verdunstung, Kondensation, Kollision und Zerschlagen. Durch diese umfassende Beschreibung ist die Methode sehr genau und kann detaillierte Informationen liefern. Für die Berechnung dieser Gleichung wird der Größenbereich der Tropfen in diskrete Klassen unterteilt, weshalb

diese Modelle auch als Klassenmodelle (engl. *bin models*) bezeichnet werden. Da die spektrale Bilanzgleichung im Allgemeinen nicht analytisch lösbar ist, muss sie für jede Tropfenklasse numerisch gelöst werden. Dementsprechend erhöht sich die Anzahl der prognostischen Gleichungen in Abhängigkeit von der Anzahl der Größenklassen. Dabei muss die Anzahl der Klassen groß genug sein, um die Breite des Tropfenspektrums ausreichend darstellen zu können und die künstliche Verbreiterung des Spektrums durch numerische Diffusion zu verhindern (Andrejczuk et al., 2010). Um die Nukleation von Aerosolen zu beschreiben, werden zweidimensionale Spektralmodelle genutzt, die neben den Tropfenklassen auch Aerosolklassen prognostizieren. Der Nachteil dieser Methode ist der enorme Rechenaufwand, der ihre Anwendung in dreidimensionalen Simulationen stark einschränkt. Außerdem haben Spektralmodelle häufig Probleme mit der Deaktivierung und Reaktivierung von Aerosolen, insbesondere nach dem Tropfenwachstum durch Koagulation (Andrejczuk et al., 2010). Zusätzlich treten Fehler durch numerische Diffusion auf, die z. B. zur künstlichen Verbreiterung des Tropfenspektrums führen können.

### 2.2.2 Bulk-Modelle

Die grundlegende Idee von Bulk-Modellen ist, anstatt der gesamten Tropfengrößenverteilung nur die Momente des Tropfenspektrums (also integrale Größen wie beispielsweise die Massendichte und Anzahldichte) zu prognostizieren. Dadurch sind diese Modelle deutlich weniger rechenintensiv als Spektralmodelle. Bei den Bulk-Modellen wird nur die Änderung integraler Größen des Tropfenspektrums betrachtet, und die wolkenmikrophysikalischen Prozesse werden in Form von zeitlichen Änderungen dieser Größen beschrieben. Um die Niederschlagsbildung zu beschreiben, wird nach der Idee von Kessler (1969) das Tropfenspektrum in Wolkentropfen bzw. Niesel- und Regentropfen aufgespalten, da sich deren Eigenschaften zum Teil deutlich unterscheiden. So können z. B. die Fallgeschwindigkeiten von Wolkentropfen vernachlässigt werden, während die der Regentropfen mehrere Meter pro Sekunde betragen können. Die Grenze zwischen Wolkentropfen und Niesel- und Regentropfen wird bei einer Masse von  $2,6 \cdot 10^{-10}$  kg gezogen, das entspricht einem Radius von  $40 \mu\text{m}$  (Beheng und Doms, 1986; Seifert und Beheng, 2001). Dieser Grenzwert wurde durch numerische Lösungen der spektralen Bilanzgleichung bestimmt und entspricht dem Minimum der sich typischerweise entwickelnden bimodalen Tropfenverteilung. Die Aufteilung des Tropfenspektrums erfolgt demnach basierend auf den unterschiedlichen Tropfeneigenschaften und nicht nur, um die Parametrisierung zu vereinfachen. Für die Tropfengrößenverteilungen werden Verteilungsfunktionen wie z. B. Gammafunktionen angenommen.

Für die Bilanzgleichungen der Momente müssen die Einflüsse der wolkenmikrophysikalischen Prozesse auf deren Entwicklung parametrisiert werden. Dafür gibt es verschieden komplexe Ansätze, die auf empirischen Zusammenhängen oder numerischen Lösungen der spektralen Bilanzgleichung basieren. Durch die Aufteilung in Wolkentropfen bzw. Niesel- und Regentropfen wird auch das Tropfenwachstum durch Koagulation in Teilprozesse aufgeteilt. Die Bildung von Niesel- und Regentropfen durch Koagulation von Wolkentropfen wird dabei als Autokonversion bezeichnet, das Anwachsen von Niesel- und Regentropfen durch Einsammeln von Wolkentropfen als Akkreszenz und das Anwachsen durch Einsammeln gleichartiger Tropfen als Selbsteinfang. Bei den Bulk-Modellen wird zwischen Ein-, Zwei- und Drei-Momenten-Schemen unterschieden, wobei sich der Name aus der Anzahl der prognostizierten Momente der

Tropfengrößenverteilung ergibt. Zu den bekanntesten und verbreitetsten Bulk-Modellen für flache Konvektion (also warme Wolke) gehört das Ein-Momenten-Schema von Kessler (1969) und das Zwei-Momenten-Schema von Seifert und Beheng (2006). Variationen dieser beiden Parametrisierungen sind auch in dem in dieser Arbeit verwendeten LES-Modell PALM (*Parallelized large-eddy simulation model*, Raasch und Etling (1991, 1998); Raasch und Schröter (2001)) implementiert und werden detailliert in Abschnitt 3.1.1 vorgestellt. Die Vorteile der Bulk-Modelle sind die einfache Implementierung und der vergleichsweise geringe Rechenaufwand. Die Nachteile liegen darin, dass die wolkenmikrophysikalischen Prozesse für die Parametrisierung zum Teil stark vereinfacht werden und die Modelle keine detaillierten Informationen zur Entwicklung des Tropfenspektrums liefern können.

### 2.2.3 Lagrangesche Wolkenmodelle

Bei einem LCM wird die räumliche und zeitliche Entwicklung der Tropfen in dem thermodynamischen Strömungsfeld der Wolke berechnet. Dies wird durch die Kombination eines LES-Modells mit einem Lagrangeschen Partikelmodell ermöglicht. Dabei werden die Trajektorien der Partikel in dem vom LES-Modell simulierten Strömungsfeld berechnet und ihr Wachstum infolge der wolkenmikrophysikalischen Prozesse prognostiziert. Die simulierten Partikel repräsentieren die Aerosole oder Wolkentropfen. Um realistische Aerosol- oder Tropfenkonzentrationen zu erreichen, wird das Konzept des Wichtungsfaktors verwendet. Dabei steht ein simuliertes Partikel (ein sog. Supertropfen) stellvertretend für eine große Anzahl von tatsächlichen Aerosolen oder Wolkentropfen mit den gleichen Eigenschaften. In einem LCM werden die wolkenmikrophysikalischen Prozesse vollständig durch die Supertropfen repräsentiert. Das beinhaltet den Transport, die Aktivierung der Aerosole, das Tropfenwachstum durch Kondensation bzw. Evaporation und das Tropfenwachstum durch Koagulation. Dadurch ist die Entwicklung der Wolke direkt an die physikalischen Prozesse der einzelnen Aerosole und Tropfen gekoppelt und der Einfluss der aufgelösten Turbulenz und des Entrainments werden ganz automatisch berücksichtigt. Die Kopplung zwischen dem Strömungsmodell und dem Partikelmodell ist dabei beidseitig gerichtet. Die Supertropfen werden gemäß ihrer Masse mit der aufgelösten Strömung transportiert, beeinflussen diese aber wiederum auch durch den Kondensations- bzw. Evaporationsprozess und die damit verbundene Freisetzung der latenten Wärme und die Reduzierung des Wasserdampfes. Im Gegensatz zu Eulerschen Wolkenmodellen (Bulk- und Spektralmodellen) hat das LCM keine Schwierigkeiten mit der Aktivierung/Deaktivierung von Aerosolen, und das Tropfenspektrum wird nicht künstlich durch numerische Diffusion verbreitert (Andrejczuk et al., 2010). LCMs eignen sich daher besonders gut, um Fragestellungen bezüglich der in-cloud activation oder des large-eddy hoppings zu untersuchen. Die wolkenphysikalischen Prozesse werden allerdings indirekt durch numerische Diffusion beeinflusst, da die thermodynamischen Strömungsfelder mit LES berechnet werden. Außerdem kommt es durch die Verwendung des Konzepts des Wichtungsfaktors zu statistischen Fehlern und Ungenauigkeiten. Ein weiterer Nachteil ist, dass nicht alle wolkenphysikalischen Prozesse explizit berechnet werden können und einige Prozesse, wie z. B. die Tropfenkollision und der Einfluss der Subskala, geeignet parametrisiert werden müssen.

Die Entwicklung der LCMs wurde erst in den letzten Jahren durch die zunehmende Verfügbarkeit von Computerressourcen (sowohl Rechenleistung und Speicherplatz)

ermöglicht, denn trotz des Wichtungsfaktorkonzepts müssen für Wolkensimulationen mit einem LCM immer noch enorme Partikelzahlen bewältigt werden. Dies ist notwendig, um eine ausreichende Datenbasis für die statistischen Analysen gewährleisten zu können. Neben dem hier vorgestellten LCM sind zur Zeit nur zwei andere Modelle für die Simulation von warmen Wolken<sup>7</sup> bekannt, die zeitgleich entwickelt wurden: ein LCM von Shima et al. (2009) und ein LCM von Andrejczuk et al. (2008, 2010). Alle drei Modelle nutzen das Konzept des Wichtungsfaktors und haben den Transport, die Nukleation von löslichen Aerosolen<sup>8</sup> sowie das Tropfenwachstum durch Kondensation bzw. Evaporation und Koagulation implementiert. Der grundlegende Unterschied zwischen den LCMs liegt bei der Berechnung des Tropfenwachstums durch Koagulation.

Shima et al. (2009) nutzen ein Wahrscheinlichkeitsverfahren basierend auf einer Monte-Carlo-Simulation für die Berechnung der Koagulation. Dabei wird davon ausgegangen, dass die Kollisionsstatistik der Supertropfen innerhalb eines gut durchmischten Gittervolumens durch die Kollision von zufällig generierten Supertropfenpaaren repräsentiert werden kann. Dies hat den Vorteil, dass anstelle von  $O(N_p^2)$  Kollisionen, wobei  $N_p$  die Anzahl der Supertropfen innerhalb eines Gittervolumens ist, nur  $O(N_p)$  Kollisionen berechnet werden müssen. Um die geringere Anzahl an Kollisionen zu kompensieren, wird die Koagulationswahrscheinlichkeit der Supertropfenpaare mit der Anzahl der Supertropfen des Gittervolumens hochskaliert. Bei diesem Ansatz ist die Koagulationswahrscheinlichkeit von zwei Supertropfen gleich der entsprechenden Koagulationsfunktion multipliziert mit dem Verhältnis von Zeitschritt zu Gittervolumen. Für die Gültigkeit des Ansatz muss gewährleistet sein, dass das Gittervolumen und der verwendete Zeitschritt klein genug sind, so dass die Tropfen gut durchmischt sind und die hochskalierte Koagulationswahrscheinlichkeit kleiner als eins ist. Das Tropfenwachstum durch Koagulation wird durch die Zunahme des Radius des größeren Supertropfens und durch die Abnahme des Wichtungsfaktors des kleineren Supertropfens realisiert.

Andrejczuk et al. (2010) verwenden für die Tropfenkoagulation ein Schema, bei dem Kollisionen von Supertropfen nur innerhalb sogenannter Kollisions-Gitterboxen zugelassen werden. Dazu wird jedes Gittervolumen in acht gleich große Kollisions-Gitterboxen unterteilt. Im Vergleich zu einem Ansatz, bei dem alle Tropfen eines Gittervolumens miteinander kollidieren können, beschleunigt diese Annahme die Berechnung um etwa einen Faktor acht, da anstatt  $N_p(N_p - 1)/2$  Kollisionen im Schnitt nur noch  $N_p(N_p/8 - 1)/2$  Kollisionen berechnet werden müssen. Dabei muss allerdings gewährleistet sein, dass in den Kollisions-Gitterboxen immer noch genügend Supertropfen für eine ausreichende Statistik vorhanden sind. Das Tropfenwachstum durch Koagulation innerhalb der Kollisions-Gitterboxen wird mit einem zweidimensionalen Klassen-Schema mit 20 Klassen für Aerosole ( $0,005 - 3 \mu\text{m}$ ) und 30 Klassen für Tropfen ( $1 - 500 \mu\text{m}$ ) berechnet. Durch die Koagulation ändern sich die Wichtungsfaktoren der existierenden Supertropfen und neue Supertropfen mit entsprechend größeren Tropfenradien werden gebildet. Um das Anwachsen der Supertropfenanzahl einzuschränken, werden neue Supertropfen nur gebildet, wenn deren Wichtungsfaktor einen Schwellwert ( $1 \text{ Wolkentropfen in } 100 \text{ m}^3$ ) überschreitet. Zusätzlich wird die Anzahl der Supertropfen nach der Koagulation beschränkt, d. h. Supertropfen mit nahezu gleichen Eigenschaften werden unter bestimmten Umständen zu einem Supertropfen zusammengefasst.

---

<sup>7</sup>Es gibt außerdem ein LCM von Sölch und Kärcher (2010) und Unterstrasser und Sölch (2010) das für die Simulation von reinen Eiswolken entwickelt wurde.

<sup>8</sup>Andrejczuk et al. (2008, 2010) haben auch die Nukleation von unlöslichen Aerosolen und einer Mischung aus löslichen und unlöslichen Aerosolen implementiert.

Bei dem in der vorliegenden Arbeit verwendeten LCM wird ein statistischer Ansatz für die Berechnung des Tropfenwachstums durch Koagulation verwendet. Dabei ist das Wachstum der Supertropfen proportional zur sogenannten Kollisionsrate, dem Produkt aus der Anzahl der Tropfenpaare pro Gittervolumen mit deren Kollisionskernel. Dementsprechend wird eine gleichmäßige Verteilung der Supertropfen in dem Gittervolumen angenommen. Die Koagulation der Supertropfen führt, anders als bei Andrejczuk et al. (2010), nicht zur Bildung von neuen Supertropfen, sondern ähnlich wie bei Shima et al. (2009) zur Modifizierung der Tropfenradien und Wichtungsfaktoren der beteiligten Supertropfen. Die Änderung des Supertropfenradius durch Kollision beschreibt damit das mittlere Wachstum aller Tropfen, die durch ihn vertreten werden. Im Gegensatz zu Shima et al. (2009) werden alle möglichen Kollisionen der Supertropfen eines Gittervolumens miteinander berücksichtigt. Zusätzlich zu den Kollisionen der Supertropfen wird bei dem hier vorgestellten Modell erstmals auch das Anwachsen des Supertropfens durch die Koagulation der von ihm repräsentierten Tropfen berücksichtigt. Ein weiterer Unterschied zu den existierenden LCMs liegt bei den Koagulationsfunktionen. Während die anderen Modelle ausschließlich die Koagulationsfunktion für ruhende Umgebungsluft nutzen, sind in dem hier vorgestellten Modell zusätzlich zwei Koagulationsfunktionen implementiert, die den Einfluss der subskaligen Turbulenz mit Hilfe eines turbulenten Kollisionskerns berücksichtigt.

Bisher wurden die LCMs kaum für wissenschaftliche Anwendungen genutzt. Der Schwerpunkt lag vor allem bei der Entwicklung und Validierung der Modelle. Insbesondere Shima et al. (2009) haben zunächst nur eine zweidimensionale Simulation einer idealisierten, maritimen Kumuluswolke veröffentlicht. Mittlerweile wurde aber gezeigt, dass das Modell auch für dreidimensionale Simulationen von Passatwindwolken geeignet ist (Arabas und Shima, 2013). Andrejczuk et al. (2010) haben ihr LCM für Simulationen von Stratokumuluswolken verwendet und sich dabei auf den Einfluss von Aerosolen konzentriert.



## 3 Modellbeschreibung

Im folgenden Kapitel wird das Lagrangesche Wolkenmodell vorgestellt. Es besteht aus dem Grobstrukturmodell PALM und dem darin implementierten Tropfenmodell.<sup>1</sup> PALM (*Parallelized large-eddy simulation model*, Raasch und Etling, 1991, 1998; Raasch und Schröter, 2001; Riechelmann et al., 2012) wird seit den 90er Jahren am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover von Prof. Dr. Siegfried Raasch und seiner Arbeitsgruppe entwickelt. In diesem Kapitel werden zunächst die grundlegenden Gleichungen von PALM und die für diese Arbeit relevanten numerischen Verfahren eingeführt. Einen Schwerpunkt bildet dabei die Parametrisierung der Wolkenphysik mit Hilfe von Bulk-Modellen, die in den Kapiteln 4 und 5 Vergleichsergebnisse zu den LCM-Simulationen liefern. Ein umfassender Überblick über weitere in PALM implementierte Verfahren und deren Anwendungsgebiete ist in der PALM-Dokumentation<sup>2</sup> und z. B. in Letzel (2007), Steinfeld (2009) und Gryschka (2010) zu finden. Im zweiten Teil des Kapitels wird das im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelte Tropfenmodell mit den grundlegenden Prinzipien, wolkenphysikalischen Modellgleichungen und numerischen Verfahren vorgestellt.

### 3.1 Das LES-Modell PALM

PALM ist ein Grobstrukturmodell und basiert damit auf dem Prinzip der Skalentrennung. Dabei werden die großen, energiereichen Strukturen (auch Grobstruktur genannt) explizit berechnet, wohingegen die kleinen, energiearmen Strukturen mit Hilfe eines Subskalen-Modells (SGS-Modell, vom engl. *subgrid-scale model*) parametrisiert werden. Das SGS-Modell simuliert dabei die Dissipation, also den Transport der Energie von den aufgelösten Skalen zu den Subskalen, und nutzt dazu die universellen Eigenschaften der Turbulenz im Inertialbereich. Im Gegensatz zu DNS, die alle Skalen des Spektrums auflösen, können mit LES auch stark turbulente Strömungen mit hohen Reynoldszahlen simuliert werden. Die Trennung der Skalen findet mit Hilfe einer Filterung im Inertialbereich des Energiespektrums statt. In PALM wird die Kontrollvolumenmethode nach Schumann (1975) verwendet, bei der die Filterung implizit durch die Diskretisierung der Modellgleichungen auf das numerische Gitter stattfindet. Die aufgelösten Größen repräsentieren das räumliche Mittel über die jeweilige Gitterbox und sind an diskreten Punkten im Modellgitter definiert. Sie werden im Folgenden durch einen Überstrich, z. B.  $\bar{\Psi}$ , gekennzeichnet. Der subskalige Anteil beschreibt die lokalen, kleinskaligen Turbulenzen, die nicht explizit vom Modell aufgelöst werden, und wird durch das Symbol  $\Psi''$ , z. B.  $\Psi''$ , gekennzeichnet.

Die grundlegenden Modellgleichungen von PALM sind die gefilterten Erhaltungsgleichungen für Impuls (Navier-Stokes-Gleichungen), Masse (Kontinuitätsgleichung),

---

<sup>1</sup>Alle in dieser Arbeit vorgestellten Simulationen wurden auf der SGI Altix des Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) in Hannover und Berlin mit der PALM Version 3.9, Revision 1072 durchgeführt.

<sup>2</sup><http://palm.muk.uni-hannover.de/>

Energie (erster Hauptsatz der Thermodynamik, ausgedrückt durch die potentielle Temperatur) und Feuchte. Für die Schließung wird zusätzlich noch eine prognostische Gleichung für die turbulente kinetische Energie (TKE) gelöst. Mit diesen Gleichungen können turbulente Strömungen vollständig beschrieben werden. PALM nutzt die Boussinesq-approximierte Form der Navier-Stokes-Gleichungen. Bei der Boussinesq-Approximation (z. B. Dutton und Fichtl, 1969) werden die thermodynamischen Variablen für den Druck  $p$ , die Dichte  $\rho$  und die potentielle Temperatur  $\theta$  in einen horizontal homogenen, stationären und hydrostatischen Grundzustand (gekennzeichnet durch den Index 0) und die Abweichung davon (gekennzeichnet durch das Symbol \*) zerlegt. Bei Konvektion kann vorausgesetzt werden, dass die Abweichungen klein gegenüber dem Grundzustand sind (z. B.  $\rho^* \ll \rho_0$  bzw.  $\rho^*/\rho_0 \ll 1$ ). Folglich können fast alle Dichteabweichungen vernachlässigt werden. Die Dichte wird deshalb als konstant angenommen und Dichteunterschiede werden nur für die archimedischen Auftriebskräfte berücksichtigt. In PALM werden die mit dem Grundzustand normierten Dichteschwankungen des archimedischen Auftriebsterms, mit Hilfe der Zustandsgleichung für ideale Gase, durch Schwankungen der potentiellen virtuellen Temperatur  $\theta_v$  ausgedrückt (Stull, 2009):

$$-\frac{\rho^*}{\rho_0} \approx \frac{\theta_v^*}{\theta_{v,0}} \approx \frac{\theta_v - \langle \theta_v \rangle}{\langle \theta_v \rangle} . \quad (3.1)$$

$\theta_v$  ist über die Beziehung  $\theta_v = \theta(1 + 0,61q_v - q_1)$  definiert, wobei  $q_v$  die spezifische Feuchte,  $q_1$  den Flüssigwassergehalt (engl. *liquid water specific humidity*) und  $\langle \rangle$  den Mittelwert über die beiden horizontalen Raumrichtungen kennzeichnet. Durch die Boussinesq-Approximation kann die Strömung als inkompressibel betrachtet werden und die Kontinuitätsgleichung vereinfacht sich zur Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes. Aufgrund der Inkompressibilität können keine Schallwellen auftreten. Für die in PALM verwendete Form der Navier-Stokes-Gleichung ergibt sich damit

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_k \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} = -\epsilon_{ijk} f_j \bar{u}_k + \epsilon_{i3k} f_3 u_{gk} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i} + g \frac{\bar{\theta}_v - \langle \bar{\theta}_v \rangle}{\langle \bar{\theta}_v \rangle} \delta_{i3} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{u_i'' u_k''} \right) + Q_{u_k} , \quad (3.2)$$

für die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 , \quad (3.3)$$

für den ersten Hauptsatz der Thermodynamik

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{u_i'' \theta''} \right) + \left( \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} \right)_{\text{Nied}} + Q_{\theta} , \quad (3.4)$$

und für die Bilanzgleichung der Feuchte

$$\frac{\partial \bar{q}_v}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{q}_v}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{u_i'' q_v''} \right) + \left( \frac{\partial \bar{q}_v}{\partial t} \right)_{\text{Nied}} + Q_{q_v} . \quad (3.5)$$

Dabei kennzeichnet  $u_i$  mit  $(i = 1, 2, 3)$  die drei Komponenten des Windvektors,  $t$  die Zeit,  $x_i$  den Ort in kartesischen Koordinaten,  $\epsilon_{ijk}$  den alternierenden Einheitstensor (Levi-Civita-Tensor),  $f_i = (0; 2\Omega \cos\phi; 2\Omega \sin\phi)$  die Coriolisparameter,  $\Omega$  die Winkelgeschwindigkeit der Erde,  $\phi$  die geografische Breite,  $u_g$  den geostrophischen Wind,  $p^*$  den Stördruck,  $g$  die Gravitationsbeschleunigung,  $\delta_{ij}$  das Kronecker-Symbol und  $(\dots)_{\text{Nied}}$

die Quell- und Senkenterme aufgrund der Niederschlagsbildung (d. h. Kondensation und Evaporation).  $Q_{u_k}$ ,  $Q_\theta$  und  $Q_{q_v}$  sind zusätzliche Quell- und Senkenterme, mit denen z. B. großskalige Antriebe oder Tendenzen berücksichtigt werden können. Die molekulare Reibung wird vernachlässigt, da diese bei großen Reynoldszahlen etwa fünf Größenordnungen kleiner ist als die turbulente Reibung. Für die Schließung der Modellgleichungen wird ein Ansatz 1,5-facher Ordnung nach Deardorff (1980) mit einer prognostischen Gleichung für die subskalige turbulente kinetische Energie (SGS-TKE)  $\bar{e} = \frac{1}{2} \overline{u_i'' u_j''}$  verwendet:

$$\frac{\partial \bar{e}}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{e}}{\partial x_j} = - \left( \overline{u_i'' u_j''} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{g}{\bar{\theta}_v} \overline{u_3'' \theta_v''} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \overline{u_j'' \left( e'' + \frac{p''}{\rho_0} \right)} \right] - \epsilon . \quad (3.6)$$

Hier kennzeichnet  $\epsilon$  die Dissipationsrate. Dabei wird davon ausgegangen, dass der Energietransport durch subskalige Strukturen analog zur molekularen Diffusion beschrieben werden kann. Dementsprechend werden die SGS-Flüsse der gefilterten Gleichung (3.2) unter Verwendung eines Deformationsansatzes und die SGS-Flüsse der Gleichungen (3.4)–(3.6) mit Hilfe von Gradientansätzen mit den aufgelösten Größen verknüpft:

$$\overline{u_i'' u_j''} = -K_m \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) , \quad (3.7)$$

$$\overline{u_i'' \theta''} = -K_h \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} , \quad (3.8)$$

$$\overline{u_i'' q_v''} = -K_h \frac{\partial \bar{q}_v}{\partial x_i} , \quad (3.9)$$

$$\overline{u_i'' \theta_v''} = -K_h \frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial x_i} , \quad (3.10)$$

$$\overline{u_i'' \left( e'' + \frac{p''}{\rho_0} \right)} = -2K_m \frac{\partial \bar{e}}{\partial x_i} . \quad (3.11)$$

Dabei sind  $K_m$  und  $K_h$  die turbulenten Diffusionskoeffizienten für Impuls und Wärme.  $K_m$  kann mit Hilfe der SGS-TKE  $\bar{e}$  und der lokalen Mischungsweglänge  $l$ ,  $K_h$  über einen Mischungswegansatz berechnet werden:

$$K_m = 0,1 l \sqrt{\bar{e}} , \quad (3.12)$$

$$K_h = \left( 1 + \frac{2l}{\Delta s} \right) K_m . \quad (3.13)$$

$\Delta s$  kennzeichnet die charakteristische Gitterweite, die über  $\Delta s = (\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z)^{\frac{1}{3}}$  bestimmt werden kann. Die Mischungsweglänge  $l$  kann als charakteristische Turbulenzlänge aufgefasst werden (Schlichting und Gersten, 1997). Anschaulich gesehen ist die Mischungsweglänge ein Maß für die Wirbelgröße und wird in Abhängigkeit von der Schichtung über

$$l = \begin{cases} \min \left( 0,7z, \Delta s, 0,76 \sqrt{\bar{e}} \left( \frac{g}{\bar{\theta}_{v0}} \frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial z} \right)^{-\frac{1}{2}} \right) & \text{für } \frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial z} > 0 \\ \min(0,7z, \Delta s) & \text{für } \frac{\partial \bar{\theta}_v}{\partial z} \leq 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

berechnet.  $\epsilon$  kann durch

$$\epsilon = \left( 0,19 + 0,74 \frac{l}{\Delta s} \right) \frac{\bar{e}^{3/2}}{l} \quad (3.15)$$

bestimmt werden.

Um das prognostische Gleichungssystem (3.2)-(3.5) und (3.6) numerisch lösen zu können, muss es räumlich und zeitlich diskretisiert werden. Für die räumliche Diskretisierung werden in PALM finite Differenzen verwendet. Das dabei verwendete Gitter entspricht einem rechtwinkligen, versetzten Gitter vom Typ ARAKAWA-C (Arakawa und Lamb, 1977). Bei diesem Gittertyp sind die skalaren Größen im Mittelpunkt der Gittervolumen definiert, während die Komponenten der vektoriellen Größen jeweils um eine halbe Gitterweite dazu versetzt angeordnet sind. Jedes Gittervolumen wird durch die äquidistanten Gitterweiten  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  und  $\Delta z$  aufgespannt. Die Advektion wird mit Hilfe eines Verfahrens fünfter Ordnung nach Wicker und Skamarock (2002) berechnet. Für die zeitliche Diskretisierung wird ein Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung (z. B. Durran, 1999) verwendet. Der Zeitschritt ist im Allgemeinen variabel, erfüllt aber immer sowohl das Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium (CFL-Kriterium) als auch das Diffusionskriterium, um die numerische Stabilität zu gewährleisten. Der theoretisch maximal mögliche Zeitschritt wird zusätzlich noch mit einem Sicherheitsfaktor von 0,9 multipliziert. Bei der zeitlichen Integration der Navier-Stokes-Gleichungen (3.2) muss aufgrund der Boussinesq-Approximation die Divergenzfreiheit des Strömungsfeldes gewährleistet werden. Dazu wird ein Prädiktor-Korrektor-Verfahren verwendet, bei dem die Poissongleichung für den Stördruck nach jedem Zeitschritt gelöst wird (z. B. Fröhlich, 2006).

Die Randbedingungen für die lateralen Ränder werden in den hier vorgestellten Simulationen zyklisch gewählt. Für die Randbedingungen am oberen Rand des Modellgebietes werden für die Geschwindigkeitsfelder und den Stördruck Dirichlet-Randbedingungen angenommen. Für die SGS-TKE, die potentielle Temperatur und die spezifische Feuchte werden Neumann-Randbedingungen verwendet. Dabei wird der Vertikalgradient für die potentielle Temperatur und die spezifische Feuchte aus dem Initialprofil bestimmt und zeitlich konstant gehalten. Der untere Modellrand entspricht dem Erdboden und ist somit strömungsundurchlässig. Dies entspricht einer Dirichlet-Randbedingung für die Vertikalgeschwindigkeit und fordert außerdem eine Neumann-Randbedingung für den Stördruck. Für die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten werden Haftreibungsbedingungen gewählt und dementsprechend Dirichlet-Randbedingung verwendet. Für die SGS-TKE, die potentielle Temperatur und die spezifische Feuchte werden auch am unteren Modellrand Neumann-Randbedingungen gewählt. In der untersten Modellebene zwischen dem Erdboden und der ersten vertikalen Gitterpunktebene wird eine Prandtl-Schicht angenommen. Dort wird der Einfluss des Erdbodens auf die Strömung, also die Reibung und der SGS-Skalaraustausch mit der Atmosphäre, mit Hilfe der Monin-Obukhov-Ähnlichkeitstheorie (Monin und Obukhov, 1954) parametrisiert. Eine detaillierte Beschreibung zur Prandtl-Schicht in PALM und der Parametrisierung ist bei Schröter (2003) und Uhlenbrock (2006) zu finden.

PALM ist in der Programmiersprache FORTRAN90 geschrieben, parallelisiert und für den Einsatz auf Massivparallelrechnern optimiert. Die Parallelisierung basiert auf dem Prinzip der Gebietszerlegung und der Prozessorkommunikation mittels *Message-Passing-Interface* (MPI). Die Zerlegung des Modellgebiets in Teilgebiete kann in eine oder beide horizontale Raumrichtungen erfolgen (siehe auch Raasch und Schröter, 2001).

### 3.1.1 Wolkenphysikparametrisierung mit Bulk-Modellen

In PALM können wolkenphysikalische Prozesse warmer Wolken mit Hilfe von zwei verschiedenen Bulk-Modellen simuliert werden. Das dabei verwendete Konzept geht auf Kessler (1969) zurück. Es basiert auf der Unterteilung der Niederschlagsteilchen in Wolkentropfen (gekennzeichnet durch Index c) und Niesel- und Regentropfen (gekennzeichnet durch Index r) und der Formulierung der wolkenphysikalischen Prozesse als zeitliche Änderungen der Momente der jeweiligen Tropfenverteilung. Demnach werden nur die Momente der Tropfenverteilungen, z. B.

$$M_c^k = \int_0^{x_0} x^k f(x) dx = \int_0^\infty x^k f_c(x) dx \quad \text{und} \quad (3.16)$$

$$M_r^k = \int_{x_0}^\infty x^k f(x) dx = \int_0^\infty x^k f_r(x) dx \quad (3.17)$$

prognostiziert. Dabei ist  $f(x)$  die Anzahldichteverteilung der Tropfen bezüglich der Tropfenmasse  $x$  und  $xf(x)$  die Massendichteverteilungsfunktion, die üblicherweise mit  $g(x)$  gekennzeichnet wird. Die Trennung zwischen den Wolkentropfen und den Niesel- und Regentropfen findet bei der Tropfenmasse  $x_0 = 2,6 \cdot 10^{-10}$  kg bzw. dem Tropfenradius  $r_0 = 40 \mu\text{m}$  statt (Beheng und Doms, 1986; Seifert und Beheng, 2001). Die nullten Momente der Anzahldichteverteilungen der Wolken- bzw. Niesel- und Regentropfen bezüglich der Tropfenmassen entsprechen den Anzahldichten der Tropfen  $M_c^0 = N_c$  bzw.  $M_r^0 = N_r$ . Das erste Moment wird auch als Massendichte bezeichnet und entspricht dem Produkt von Wassergehalt und Luftdichte,  $M_c^1 = q_c \rho$  und  $M_r^1 = q_r \rho$ . Die Luftdichte  $\rho$  wird dafür aufgrund der Inkompressibilität in PALM mit Hilfe des hydrostatischen Druckes und der allgemeinen Gasgleichung berechnet. Der Flüssigwassergehalt  $q_l$  ergibt sich aus der Summe des Wolkenwassergehaltes  $q_c$  und des Niesel- und Regenwassergehaltes  $q_r$ . Es wird angenommen, dass die Anzahldichteverteilungen der Wolkentropfen sowie der Niesel- und Regentropfen bezüglich der Tropfenmassen durch generalisierte Gammaverteilungen der Form

$$f(x) = \alpha x^\mu e^{-\lambda x^\nu} \quad (3.18)$$

mit den Parametern  $\mu$  und  $\nu$  beschrieben werden können (z. B. Seifert und Beheng, 2006).  $\alpha$  und  $\lambda$  können mit Hilfe der entsprechenden Anzahl- und Massendichte berechnet werden:

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

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

$\bar{x} = \rho q / N$  ist dabei die mittlere Tropfenmasse und  $\Gamma$  die Gammafunktion. Mit Hilfe dieser Verteilung lassen sich alle in der Wolkenphysik üblichen Tropfenverteilungen darstellen, z. B. mit  $\nu = 1$  eine klassische Gammaverteilung und mit  $\nu = 1$  und  $\mu = 0$  eine Exponentialverteilung.

Bei dem hier verwendeten Ansatz wird die Anzahldichte der Wolkentropfen  $N_c$  als konstant vorausgesetzt und standardmäßig ein für maritime Wolken typischer Wert von  $N_c = 70 \text{ cm}^{-3}$  gewählt. Der Wolkenwassergehalt  $q_c$  wird mit Hilfe der Sättigungsadjustierung (engl. *saturation-adjustment*) diagnostiziert. Dazu werden die prognostischen

Gleichungen für  $\theta$  (3.4) und  $q_v$  (3.5) durch prognostische Gleichungen für den Gesamtwassergehalt  $q = q_v + q_c + q_r$

$$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{u_i'' q''} \right) + \left( \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} \right)_{\text{Nied}} \quad (3.21)$$

und die potentielle Flüssigwassertemperatur  $\theta_1$  ersetzt

$$\frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{u_i'' \theta_1''} \right) + \left( \frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial t} \right)_{\text{Nied}} \quad (3.22)$$

Der Einfluss des Niederschlags<sup>3</sup> geht mit Hilfe von zusätzlichen Quelltermen  $(\partial \bar{q} / \partial t)_{\text{Nied}}$  und  $(\partial \bar{\theta}_1 / \partial t)_{\text{Nied}}$  in die prognostischen Gleichungen für  $\bar{q}$  und  $\bar{\theta}_1$  ein.  $\theta_1$  ist dabei die potentielle Temperatur, die ein Luftpaket nach Verdunstung des in ihm enthaltenen Flüssigwassers durch einen reversiblen feuchtadiabatischen Abstieg annähme (Betts, 1973). Hier wird die Näherung von Emanuel (1994)

$$\theta_1 = \theta - \frac{L_v}{c_p} \frac{\theta}{T} q_1 = \theta - \frac{L_v}{c_p} \frac{1}{\Pi} q_1 \quad (3.23)$$

mit der Verdunstungswärme  $L_v$ , der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck  $c_p$ , der Exner-Funktion  $\Pi = (p/p_{\text{ref}})^{R_a/c_p}$ , der Gaskonstante für trockene Luft  $R_a$  und dem Referenzdruck  $p_{\text{ref}} = 1000$  hPa verwendet. Der Vorteil liegt darin, dass  $q$  und  $\theta_1$  bei feuchtadiabatischen Prozessen (ohne Niederschlags-, Strahlungs- und Gefrierprozesse) Erhaltungsgrößen darstellen. Ihre Verwendung geht auf Ogura (1963) und Orville (1965) zurück.

Die diagnostische Berechnung von  $q_c$  mit Hilfe von  $q$ ,  $\theta_1$  und der Sättigungsadjustierung, also die Parametrisierung des Kondensationsprozesses, ist ausführlich in Cuijpers und Duynkerke (1993) beschrieben. Es handelt sich um ein 0%-oder-100%-Schema, d. h. ein Gittervolumen ist entweder vollständig gesättigt oder vollständig ungesättigt. Subskalige Kondensationsvorgänge werden vernachlässigt. Ein Gittervolumen gilt als gesättigt, wenn der Gesamtwassergehalt oberhalb der diagnostisch bestimmbar Sättigungsfeuchte  $q_s$  liegt. Im gesättigten Fall ist der Wolkenwassergehalt  $q_c$  die Differenz des Gesamtwassergehalts, des Niesel- und Regenwassergehaltes und der Sättigungsfeuchte:

$$\bar{q}_c = \max(0, \bar{q} - \bar{q}_r - \bar{q}_s) \quad (3.24)$$

Es wird davon ausgegangen, dass jegliche Übersättigung sofort kondensiert, so dass bei diesem Schema keine Übersättigungen auftreten. Die Nukleation wird nur implizit berücksichtigt. Für  $\theta_v$  aus (3.2) und  $u_3' \theta_v'$  aus (3.6) gilt entsprechend:

$$\bar{\theta}_v = \left( \bar{\theta}_1 + \frac{L_v}{c_p} \frac{1}{\Pi} \bar{q}_1 \right) (1 + 0,61 \bar{q} - 1,61 \bar{q}_c) \quad \text{und} \quad (3.25)$$

$$\overline{u_3' \theta_v'} = -K_1 K_h \left( \frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial x_3} \right) - K_2 K_h \left( \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_3} \right) \quad (3.26)$$

mit

$$\left. \begin{aligned} K_1 &= 1 + 0,61 \bar{q} \\ K_2 &= 0,61 \bar{\theta} \end{aligned} \right\} \text{für } q_c = 0 \text{ und} \quad (3.27)$$

<sup>3</sup>Niederschlag bezeichnet hier die Sedimentation von Wolken-, Niesel- und Regentropfen.

$$\left. \begin{aligned} K_1 &= \frac{1 - \bar{q} + 1,61\bar{q}_s \left(1 + 0,622 \frac{L_v}{RT}\right)}{1 + 0,622 \frac{L_v}{RT} \frac{L_v}{c_p T} \bar{q}_s} \\ K_2 &= \bar{\theta} \left( \left( \frac{L_v}{c_p T} \right) K_1 - 1 \right) \end{aligned} \right\} \text{für } q_c > 0 . \quad (3.28)$$

$T$  ist dabei die Temperatur.

Für die Berechnung der Momente der Regentropfen stehen in PALM ein Ein-Momenten-Schema und ein Zwei-Momenten-Schema zur Verfügung, die im Folgenden vorgestellt werden.

### Ein-Momenten-Schema

Bei diesem Schema wird nur das erste Moment der Anzahldichteverteilungsfunktion der Niesel- und Regentropfen bezüglich der Teilchenmasse, in Form der Niederschlagsmenge, bestimmt. Dazu wird die Bildung des Niesel- und Regenwassers durch ein vereinfachtes Kessler-Schema (Kessler, 1969) parametrisiert. Unter der Annahme, dass das Niesel- und Regenwasser nur durch Autokonversion von Wolkentropfen entsteht und es das entsprechende Gittervolumen als Niederschlag unmittelbar verlässt, kann die Niederschlagsrate durch einen einfachen empirischen Ansatz bestimmt werden. Für die Quell- und Senkenterme aus (3.21) und (3.22) gilt:

$$\left( \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} \right)_{\text{Nied}} = \begin{cases} -(\bar{q} - q_{\text{krit}})/\tau & \text{für } \bar{q} > q_{\text{krit}} \\ 0 & \text{für } \bar{q} \leq q_{\text{krit}} \end{cases} \quad \text{und} \quad (3.29)$$

$$\left( \frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial t} \right)_{\text{Nied}} = -\frac{L_v}{c_p} \frac{1}{\Pi} \left( \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} \right)_{\text{Nied}} . \quad (3.30)$$

Demnach wird Niesel- und Regenwasser in Form von Niederschlag gebildet, sobald  $\bar{q}$  den kritischen Wert  $q_{\text{krit}} = 0,5 \text{ g kg}^{-1}$  überschreitet.  $\tau = 1000 \text{ s}$  ist dabei eine Zeitkonstante. Andere Niesel- und Regentropfenprozesse, wie z. B. das Wachstum durch Kondensation, die Akkreszenz, die Verdunstung oder die Sedimentation, werden bei diesem Schema vernachlässigt. Dadurch ist diese Parametrisierung völlig unabhängig von der Form des Tropfenspektrums und der Anzahldichte, und die Ergebnisse sollten dementsprechend kritisch betrachtet werden.

### Zwei-Momenten-Schema

Neben dem vereinfachten Ein-Momenten-Schema ist in PALM auch das Zwei-Momenten-Schema von Seifert und Beheng (2006) implementiert. Dieses Schema prognostiziert neben dem ersten Moment der Anzahldichteverteilungsfunktion der Niesel- und Regentropfen bezüglich der Teilchenmasse auch das nullte Moment, die Anzahldichte  $N_r$ . Dafür werden zwei zusätzliche prognostische Gleichungen für  $N_r$  und  $q_r$  gelöst. Das Schema von Seifert und Beheng (2006) berücksichtigt dabei die Autokonversion (au), die Akkreszenz (akk), den Selbsteinfang (sk), das Zerplatzen von Regentropfen (br) und die Verdunstung von Niesel- und Regentropfen (eva) inklusive des sogenannten Ventilationseffektes. Zusätzlich sind auch die Sedimentation von Wolkentropfen (Nieselregen, sec) nach Ackerman et al. (2009), die Sedimentation von Niesel- und Regentropfen (ser) nach Stevens und Seifert (2008) und der Einfluss von Turbulenz auf die Autokonversion

nach Seifert et al. (2010) implementiert. Das Wachstum der Niesel- und Regentropfen durch Kondensation wird auch hier vernachlässigt.

Für die Quell- und Senkenterme von  $\bar{q}$  und  $\bar{\theta}_1$  gilt hier:

$$\left(\frac{\partial \bar{q}}{\partial t}\right)_{\text{Nied}} = S_q^{\text{sec}} + S_q^{\text{ser}} \quad \text{und} \quad (3.31)$$

$$\left(\frac{\partial \bar{\theta}_1}{\partial t}\right)_{\text{Nied}} = -\frac{L_v}{c_p} \frac{1}{\pi} \left(\frac{\partial \bar{q}}{\partial t}\right)_{\text{Nied}}. \quad (3.32)$$

Dabei repräsentiert  $S_q^{\text{sec}} = (\partial \bar{q} / \partial t)_{\text{sec}}$  die Änderung des Gesamtwassergehaltes aufgrund der Sedimentation von Wolkentropfen und  $S_q^{\text{ser}} = (\partial \bar{q} / \partial t)_{\text{ser}}$  die Änderung des Gesamtwassergehaltes aufgrund der Sedimentation von Niesel- und Regentropfen. Für die prognostischen Gleichungen von  $N_r$  und  $q_r$  ergibt sich analog dazu:

$$\frac{\partial \bar{N}_r}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{N}_r}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{u_i'' N_r''} \right) + S_{N_r}^{\text{au}} + S_{N_r}^{\text{sk}} + S_{N_r}^{\text{br}} + S_{N_r}^{\text{ser}} + S_{N_r}^{\text{eva}} \quad \text{und} \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial \bar{q}_r}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{q}_r}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{u_i'' q_r''} \right) + S_{q_r}^{\text{au}} + S_{q_r}^{\text{akk}} + S_{q_r}^{\text{ser}} + S_{q_r}^{\text{eva}}. \quad (3.34)$$

Für die Anzahldichteverteilung der Niesel- und Regentropfen wird nach Stevens und Seifert (2008) eine Gammaverteilung (siehe Gleichung (3.18)) mit  $\nu_r = 1$  und

$$\mu_r = 10 (1 + \tanh [1200(2\bar{r}_r - 0,0014)]) \quad (3.35)$$

angenommen. Hier ist  $\bar{r}_r = (3\bar{x}_r / (4\pi\rho_1))^{(1/3)}$  der mittlere Regentropfenradius mit der Dichte von Wasser  $\rho_1$ .

Die hier verwendeten Parametrisierungen der mikrophysikalischen Prozesse werden im Folgenden kurz vorgestellt.

**Autokonversion** Die Autokonversion beschreibt die Bildung von Niesel- und Regentropfen durch die Koagulation von Wolkentropfen. Nach Seifert und Beheng (2001) kann dieser Prozess durch

$$S_{q_r}^{\text{au}} = \frac{k_{\text{au}}}{20x_0} \frac{(\nu_c + 2)(\nu_c + 4)}{(\nu_c + 1)^2} \cdot q_c^2 \bar{x}_c^2 \left[ 1 + \frac{\Phi_{\text{au}}(\tau)}{(1 - \tau)^2} \right] \rho_b \quad (3.36)$$

mit der dimensionslosen internen Zeitskala für Koagulation  $\tau$

$$\tau = 1 - \frac{q_c}{q_c + q_r} \quad (3.37)$$

und der dimensionslosen Autokonversionsrate  $\Phi_{\text{au}}(\tau)$

$$\Phi_{\text{au}}(\tau) = 600\tau^{0,68} (1 - \tau^{0,68})^3 \quad (3.38)$$

parametrisiert werden. Dabei ist  $\nu_c = 1$ ,  $\rho_b$  die Luftdichte am Erdboden und  $k_{\text{au}} = 9,44 \cdot 10^9 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-2} \text{ s}^{-1}$  wurde aus dem Kollisionskernel von Long (1974) übernommen. Für die neugebildeten Niesel- und Regentropfen wird der Radius  $r_0 = 40 \mu\text{m}$  angenommen. Für die Anzahldichte der Niesel- und Regentropfen gilt deshalb

$$S_{N_r}^{\text{au}} = \rho \frac{S_{q_r}^{\text{au}}}{x_0} \quad (3.39)$$

und für den Quellterm des Gesamtwassergehaltes ergibt sich

$$S_q^{\text{au}} = -S_{q_r}^{\text{au}}. \quad (3.40)$$

**Einfluss der Turbulenz auf die Autokonversion** Die Parametrisierung der Autokonversion nach Seifert und Beheng (2001) berücksichtigt nur geometrische Kollisionen, d. h. der Einfluss der turbulenten Strömung auf die Koagulation der Wolkentropfen wird vernachlässigt. Seifert et al. (2010) haben, basierend auf der AW-Parametrisierung des turbulenten Kollisionskerns (siehe auch Abschnitt 3.2.5), eine Beschreibung des Turbulenzeinflusses für das Zwei-Momenten-Schema entwickelt. Dabei wird  $k_{\text{au}}$  durch  $k_{\text{au}}^{\text{turb}}$  ersetzt:

$$k_{\text{au}}^{\text{turb}} = k_{\text{au}} \left\{ 1 + \epsilon \text{Re}_\lambda^{1/4} \left[ \alpha_{\text{au}} \exp \left( - \left[ \frac{\bar{r}_c - r_{\text{au}}}{\sigma_{\text{au}}} \right]^2 \right) + \beta_{\text{au}} \right] \right\}. \quad (3.41)$$

$\bar{r}_c = (3\bar{x}_c / (4\pi\rho_l))^{(1/3)}$  ist dabei der mittlere Wolkentropfenradius,  $\beta_{\text{au}} = 3,09 \cdot 10^{-4}$  und die Parameter  $\alpha_{\text{au}}$ ,  $r_{\text{au}}$  und  $\sigma_{\text{au}}$  lassen sich durch

$$\alpha_{\text{au}} = \frac{a_1 + a_2\nu_c}{1 + a_3\nu_c}, \quad r_{\text{au}} = \frac{b_1 + b_2\nu_c}{1 + b_3\nu_c} \quad \text{und} \quad \sigma_{\text{au}} = \frac{c_1 + c_2\nu_c}{1 + c_3\nu_c} \quad (3.42)$$

berechnen. Für die Konstanten gilt  $a_1 = 8,69 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^3$ ,  $a_2 = -7,38 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^3$ ,  $a_3 = -1,4 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^3$ ,  $b_1 = 11,45 \text{ } \mu\text{m}$ ,  $b_2 = 9,68 \text{ } \mu\text{m}$ ,  $b_3 = 0,62 \text{ } \mu\text{m}$ ,  $c_1 = 4,82$ ,  $c_2 = 4,8$  und  $c_3 = 0,76$ . Der Turbulenzeinfluss wird durch die Abhängigkeit von der Dissipationsrate  $\epsilon$  und der Reynoldszahl der Taylor-Mikroskala  $\text{Re}_\lambda$  berücksichtigt. Zur Vereinfachung wird  $\text{Re}_\lambda$  allerdings, basierend auf der Annahme der homogenen Turbulenz, durch

$$\text{Re}_\lambda = \frac{6}{11} \left( \frac{l}{0,93} \right)^{2/3} \left( \frac{15}{\nu} \right)^{1/2} \epsilon^{1/6} \quad (3.43)$$

ersetzt. Dabei kennzeichnet  $\nu$  die kinematische Viskosität der Luft. Die Gleichungen (3.41) und (3.43) zeigen, dass die Abhängigkeit des Autokonversionsprozesses von  $\text{Re}_\lambda$ , also vom Turbulenzzustand der kleinsten ausgebildeten Turbulenzskalen, deutlich geringer ist als die Abhängigkeit von  $\epsilon$ . Seifert et al. (2010) extrapolieren die AW-Parametrisierung nur bis zu einer Dissipationsrate von  $\epsilon = 600 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$  und verwenden für höhere Dissipationsraten die Werte von  $\epsilon = 600 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$ .

**Akkreszenz** Das Wachstum der Niesel- und Regentropfen durch Koagulation mit Wolkentropfen ist proportional zum Wolkenwassergehalt  $q_c$  und dem Niesel- und Regenwassergehalt  $q_r$ . Seifert und Beheng (2006) parametrisieren dementsprechend die Zunahme des Niesel- und Regenwassergehalts durch

$$S_{q_r}^{\text{akk}} = k_{\text{akk}} q_c q_r \Phi_{\text{akk}}(\tau) (\rho_b \rho)^{0,5}, \quad (3.44)$$

mit der dimensionslosen Akkreszenzrate  $\Phi_{\text{akk}}$

$$\Phi_{\text{akk}}(\tau) = \left( \frac{\tau}{\tau + 5 \cdot 10^{-5}} \right)^4 \quad (3.45)$$

und dem Faktor  $k_{\text{akk}} = 4,33 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , basierend auf den Kollisionseffizienzen. Für den Quellterm von  $\bar{q}$  gilt entsprechend:

$$S_q^{\text{akk}} = -S_{q_r}^{\text{akk}}. \quad (3.46)$$

**Einfluss der Turbulenz auf die Akkreszenz** Der turbulente Kollisionskernel der AW-Parametrisierung beeinflusst die Tropfenkollision für Tropfengrößen bis zu einem Radius von 100  $\mu\text{m}$  und damit außer der Autokonversion auch das Tropfenwachstum durch Akkreszenz. Seifert et al. (2010) haben auch für diesen Effekt eine Beschreibung des Turbulenzeinflusses für das Zwei-Momenten-Schema entwickelt. Dabei wird in Gleichung 3.44  $k_{\text{akk}}$  durch  $k_{\text{akk}}^{\text{turb}}$  ersetzt. Für  $k_{\text{akk}}^{\text{turb}}$  gilt:

$$k_{\text{akk}}^{\text{turb}} = k_{\text{akk}} \cdot (1,0 + 0,05 \cdot \min(600,0 \epsilon \cdot 10^4)^{0,25}) . \quad (3.47)$$

Für  $\epsilon = 400 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$  ergibt sich damit eine moderate Erhöhung der Akkreszenzrate um 18 % (Seifert et al., 2010).

**Selbsteinfang** Mit Selbsteinfang wird das Wachstum von Niesel- und Regentropfen durch Koagulation mit anderen Niesel- und Regentropfen bezeichnet. Dadurch verringert sich die Anzahldichte der Niesel- und Regentropfen  $N_r$ , was nach Seifert und Beheng (2006) durch

$$S_{N_r}^{\text{sk}} = -k_{\text{sk}} N_r q_r \Phi_{\text{sk}} (\rho_b \rho)^{0,5} \quad (3.48)$$

mit  $k_{\text{sk}} = 7,12 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$  und der dimensionslosen Selbsteinfangrate  $\Phi_{\text{sk}} = 1$  parametrisiert wird.

**Zerplatzen von Regentropfen** Große Regentropfen können bei der Kollision mit anderen Tropfen in kleinere Regentropfen zerplatzen. Diese Zunahme der Regentropfenanzahl wird nach Seifert und Beheng (2006) für mittlere Regentropfenradien mit  $\bar{r}_r > 150 \mu\text{m}$  durch

$$S_{N_r}^{\text{br}} = -(k_{\text{br}} \Phi_{\text{br}} + 1) S_{N_r}^{\text{sk}} \quad (3.49)$$

berücksichtigt. Dabei ist  $\Phi_{\text{br}} = \bar{r}_r - r_{\text{eq}}$ ,  $r_{\text{eq}} = 550 \mu\text{m}$  und  $k_{\text{br}} = 2000 \text{ m}^{-1}$ .

**Sedimentation von Wolkentropfen** Die Sedimentation des Wolkenwassers kann mit Hilfe des Sedimentationsflusses der Wolkentropfen beschrieben werden. Dafür wird eine logarithmische Normalverteilung der Wolkentropfen angenommen. Die endgültige Fallgeschwindigkeit wird mit Hilfe des Gesetzes von Stokes bestimmt. Nach Ackerman et al. (2009) gilt für den Sedimentationsfluss:

$$F_{\text{sec}} = k_{\text{sec}} \left( \frac{3}{4\pi\rho_l N_c} \right)^{2/3} \exp\left(5 \ln(\sigma_{\text{gc}})^2\right) (\rho q_c)^{5/3} . \quad (3.50)$$

Dabei ist  $k_{\text{sec}} = 1,2 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1} \text{ s}^{-1}$  und  $\sigma_{\text{gc}} = 1,3$  die geometrische Standardabweichung der logarithmischen Normalverteilung (Geoffroy et al., 2010). Der Quellterm von  $\bar{q}$  ergibt sich aus der Divergenz von  $F_{\text{sec}}$ :

$$S_q^{\text{sec}} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial F_{\text{sec}}}{\partial z} . \quad (3.51)$$

**Sedimentation von Niesel- und Regentropfen** Der Einfluss der Sedimentation der Niesel- und Regentropfen kann mit Hilfe der Sedimentationsgeschwindigkeit in

Abhängigkeit vom Tropfenradius bestimmt werden. Nach Stevens und Seifert (2008) gilt

$$F_{N_r}^{\text{ser}} = \left( a - b(1 + c/\lambda_r)^{\mu_r+1} \right) N_r \quad \text{und} \quad (3.52)$$

$$F_{q_r}^{\text{ser}} = \left( a - b(1 + c/\lambda_r)^{\mu_r+4} \right) q_r, \quad (3.53)$$

mit  $a = 9,65 \text{ m s}^{-1}$ ,  $b = 9,8 \text{ m s}^{-1}$  und  $c = 1200 \text{ m}^{-1}$ .  $\lambda_r$  ist eine Funktion von  $\bar{x}_r$  und  $\mu_r$ :

$$\lambda_r = \left[ \frac{\pi \rho_l}{6 \bar{x}_r} (\mu_r + 3)(\mu_r + 2)(\mu_r + 1) \right]^{1/3}. \quad (3.54)$$

Um die Quellterme von  $\bar{N}_r$  und  $\bar{q}_r$  zu berechnen, müssen die Divergenzen der Sedimentationsflüsse gebildet werden:

$$S_{N_r}^{\text{ser}} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial F_{N_r}^{\text{ser}}}{\partial z} \quad \text{und} \quad (3.55)$$

$$S_{q_r}^{\text{ser}} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial F_{q_r}^{\text{ser}}}{\partial z}. \quad (3.56)$$

$S_{q_r}^{\text{ser}}$  ist der Niederschlagsfluss. Da hier hohe Fallgeschwindigkeiten bis zu  $9,65 \text{ m s}^{-1}$  erreicht werden können, muss bei der numerischen Implementation darauf geachtet werden, dass die Lösung stabil bleibt. Um dies zu gewährleisten, wird in Abhängigkeit von der lokalen CFL-Zahl ein sog. *flux limiter* nach van Leer (1977) verwendet und gegebenenfalls ein Teilzeitschritt eingefügt. Ein zu großer Zeitschritt würde die mikrophysikalische Interaktion der fallenden Tropfen mit den Tropfen der Umgebung verhindern. Überschreitet die CFL-Zahl den Wert von 2 wird anstelle des Teilzeitschrittes der Zeitschritt des Modells reduziert, um diese Interaktion zu gewährleisten. Eine ausführliche Beschreibung zu der Vorgehensweise ist in Stevens und Seifert (2008) zu finden.

**Verdunstung von Niesel- und Regentropfen mit Ventilationseffekt** Für die Berechnung dieses Einflusses wird eine Parametrisierung von Seifert (2008) verwendet. Sie basiert darauf, dass die Massenänderung eines einzelnen Tropfens mit Radius  $r$  aufgrund von Verdunstung durch

$$\left( \frac{dx_r}{dt} \right)_{\text{eva}} = 4\pi r_r G f_v S \quad \text{mit} \quad (3.57)$$

$$G = \left[ \frac{\rho_l R_v T}{D e_s(T)} + \frac{\rho_l L_v}{K_a T} \left( \frac{L_v}{R_v T} - 1 \right) \right]^{-1} \quad (3.58)$$

berechnet werden kann. Dabei ist  $S = (q - q_r - q_c)/q_s - 1$  die Übersättigung,  $G$  beschreibt den Einfluss der Wasserdampfdiffusion und der thermischen Diffusion mit der Gaskonstante für Wasserdampf  $R_v$ , dem Sättigungsdampfdruck  $e_s$ , der thermische Leitfähigkeit der Luft  $K_a$ , dem Diffusionskoeffizient von Wasserdampf in Luft  $D$  und dem Ventilationskoeffizient  $f_v = a_v + b_v \text{Sc}^{1/3} \text{Re}^{1/2}$  mit der Schmidt-Zahl  $\text{Sc}$ , der Reynoldszahl eines fallendes Niesel- oder Regentropfens  $\text{Re}$  und den Konstanten  $a_v = 0,78$  und  $b_v = 0,308$ .  $\text{Sc}$  wird als konstant angenommen und nimmt den für die Atmosphäre typischen Wert  $\text{Sc} = \nu/D = 0,71$  an. Für die Berechnung von  $\text{Re} = 2r_r v_t(r)/\nu$  wird die endgültige Fallgeschwindigkeit  $v_t(r)$  benötigt und nach Rogers et al. (1993) durch

$$v_t(r) = a - b e^{-2cr_r} \quad (3.59)$$

### 3.2 Das Lagrangesche Tropfenmodell

mit  $a = 9,65 \text{ m s}^{-1}$ ,  $b = 9,8 \text{ m s}^{-1}$  und  $c = 600 \text{ m}^{-1}$  parametrisiert. Diese Parametrisierung von  $v_t$  ist etwas genauer als die in Gleichung (3.52) verwendete Annäherung mit der Potenzfunktion. Die Integration von (3.57) unter der Annahme einer Gamma-Verteilung für die Niesel- und Regentropfen liefert den Quellterm des Niesel- und Regenwassergehaltes:

$$S_{q_r}^{\text{eva}} = \frac{4\pi}{\rho} N_{r_0} G \bar{f}_v S \quad \text{mit} \quad (3.60)$$

$$N_{r_0} = \frac{N_r \lambda_r^{\mu_r+1}}{\Gamma(\mu_r+1)} . \quad (3.61)$$

Dabei wird der mittlere Ventilationskoeffizient  $\bar{f}_v$  durch eine Potenzreihenentwicklung

$$\begin{aligned} \bar{f}_v = & a_v \Gamma(\mu_r+2) \lambda_r^{-(\mu_r+2)} + b_v \text{Sc}^{(1/3)} \left(\frac{a}{\nu}\right)^{0,5} \Gamma(\mu_r+5/2) \lambda_r^{-(\mu_r+5/2)} \\ & \cdot \left[ 1 - \frac{1}{2} \frac{b}{a} \left(\frac{\lambda_r}{c+\lambda_r}\right)^{(\mu_r+5/2)} - \frac{1}{8} \left(\frac{b}{a}\right)^2 \left(\frac{\lambda_r}{c+\lambda_r}\right)^{(\mu_r+5/2)} - \dots \right] \end{aligned} \quad (3.62)$$

approximiert. Für die Quellterme von  $q$  und  $N_r$  ergibt sich:

$$S_q^{\text{eva}} = -S_{q_r}^{\text{eva}} \quad \text{und} \quad (3.63)$$

$$S_{N_r}^{\text{eva}} = k_{\text{eva}} \rho_1 \bar{x}_r^{-1} S_{q_r}^{\text{eva}} , \quad (3.64)$$

mit  $k_{\text{eva}} = 0,7$ .

## 3.2 Das Lagrangesche Tropfenmodell

In PALM ist ein Lagrangesches Partikelmodell implementiert, mit dem die Bewegungen Lagrangescher Partikel in der vom LES-Modell simulierten turbulenten Strömung berechnet werden können. Dieser Teil des Modells ist ebenfalls parallelisiert und wurde bisher schwerpunktmäßig für die Berechnung von Footprints genutzt (z. B. Steinfeld et al., 2008; Markkanen et al., 2009, 2010). Dabei werden passive, d. h. masselose Partikel verwendet, um in Ausbreitungsrechnungen einen Zusammenhang zwischen den gemessenen Konzentrationen und den Flüssen des passiven Skalars sowie dessen Quellen zu bestimmen (Steinfeld, 2009).

Im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit wurde das Lagrangesche Partikelmodell dahingehend erweitert, dass die Lagrangeschen Partikel in der Lage sind, Aerosole und Tropfen und die damit verbundene Wolkenphysik zu repräsentieren. Für diese Anwendung müssen die Partikel massebehaftet sein und außerdem die notwendigen wolkenmikrophysikalischen Prozesse durchlaufen. In diesem Kapitel werden die dafür erforderlichen Gleichungen und ihre Implementationen dargelegt. Eine erste Version des hier vorgestellten Tropfenmodells wurde bereits in der im Abschnitt C eingebundenen Veröffentlichung von Riechelmann et al. (2012) beschrieben. Allerdings wurde das Modell seit der Veröffentlichung um die Nukleation und den Ventilationseffekt erweitert und das Konzept des Tropfenwachstums durch Koagulation in Zusammenarbeit mit Prof. Dr. Lian-Ping Wang grundlegend verändert. Die Erweiterung der Nukleation war notwendig, um die CCN Aktivierung und das anfängliche Tropfenwachstum durch Kondensation korrekt zu beschreiben. Der Ventilationseffekt wurde eingeführt, nachdem frühere Simulationen ohne diesen Effekt gezeigt haben, dass die in den Wolken

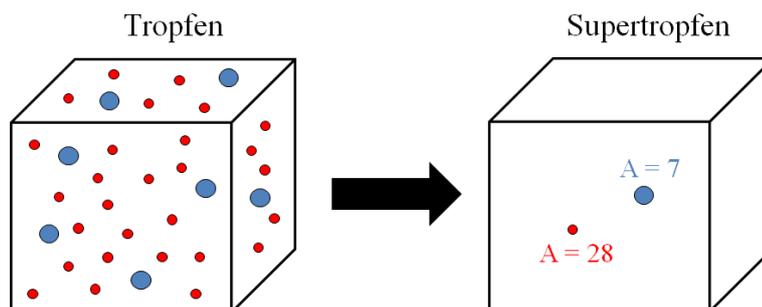


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung des Wichtungsfaktors. Die Supertropfen (rechts) repräsentieren jeweils alle Tropfen (links) mit den gleichen Eigenschaften. Der Wichtungsfaktor  $A$  gibt dabei die Anzahl der repräsentierten Tropfen wieder.

entstandenen Niesel- und Regentropfen zu langsam verdunsten und damit eine zu hohe Niederschlagsmenge am Boden erzeugen. Die Berechnung des Tropfenwachstums durch Koagulation wurde erneuert, da die neue Methode die Massenerhaltung auch ohne zusätzliche Anpassung des Wichtungsfaktors gewährleistet und zusätzlich die zuvor vernachlässigte sogenannte interne Kollision beinhaltet. Um eine geschlossene Modellbeschreibung zu erreichen, wird die für die vorliegende Arbeit verwendete Modellversion deshalb an dieser Stelle vollständig vorgestellt.

### 3.2.1 Definition der Tropfen

Für die Simulation von Wolken mit Hilfe des eingebetteten Lagrangeschen Partikelmodells müssen die Aerosole, Wolken-, Niesel- und Regentropfen durch Partikel repräsentiert werden. Aufgrund der enormen Anzahldichten ist es nicht möglich, alle Aerosole und Tropfen einzeln zu simulieren. Deshalb wird das Konzept des Wichtungsfaktors verwendet. Dabei repräsentiert jedes simulierte Partikel eine große Anzahl von realen Aerosolen bzw. Tropfen mit den gleichen Eigenschaften. Die simulierten Partikel werden auch als Supertropfen bezeichnet. Der Wichtungsfaktor  $A$  gibt hier an, wie viele (reale) Aerosole bzw. Tropfen durch einen Supertropfen repräsentiert werden. Zur Veranschaulichung ist die Definition des Wichtungsfaktors beispielhaft in Abbildung 3.1 dargestellt. Das linke Gittervolumen zeigt eine Tropfenverteilung mit zwei unterschiedlichen Tropfengrößen. Im rechten Gittervolumen ist dargestellt, wie diese Verteilung mit Hilfe der Supertropfen repräsentiert werden kann. Dabei werden alle Tropfen mit den gleichen Eigenschaften (hier Farbe und Größe) durch einen Supertropfen mit entsprechendem Wichtungsfaktor  $A$  vertreten.

In dem Lagrangeschen Partikelmodell wird jeder Supertropfen durch eine Reihe von Eigenschaften charakterisiert, die zeitlich variieren können. Zu diesen Eigenschaften gehören u. a. der Radius  $r$ , die Geschwindigkeitskomponenten  $V_i$ , die Koordinaten des Freisetzungsortes, die aktuelle Position  $X_i$ , der Wichtungsfaktor  $A$ , das Alter und die gelöste Aerosolmasse  $M_s$ . Je nach Größe repräsentiert ein Supertropfen ein Aerosol, einen Wolken-, Niesel- oder Regentropfen. Dabei wird angenommen, dass alle Supertropfen kugelförmig sind. Tatsächlich weichen erst größere Regentropfen ( $r > 2$  mm) signifikant von dieser Annäherung ab (Pruppacher und Klett, 1997). Außerdem werden die Supertropfen als Punkt-Partikel behandelt, d. h. die Strömung innerhalb der Tropfen sowie die Deformierung der Tropfen, z. B. bei gegenseitiger Annäherung,

wird vernachlässigt.

Im LCM wird das gesamte Flüssigwasser durch die Supertropfen verkörpert, d. h. im Gegensatz zu den Bulk Modellen wird durch die LES die prognostische Gleichung für  $q_v$  (3.5) anstelle von  $q$  (3.21) gelöst. Der Flüssigwassergehalt  $q_l$  wird hier durch das Aufsummieren der Volumina der Supertropfen eines Gittervolumens  $\Delta V$  berechnet:

$$q_l = \frac{\rho_l}{\rho_0 \Delta V} \sum_{n=1}^{N_p} A_n \cdot \frac{4}{3} \pi r_n^3 . \quad (3.65)$$

Dabei ist  $N_p$  die Anzahl der Supertropfen des entsprechenden Gittervolumens. Zur Verbesserung der Lesbarkeit werden hier und im Folgenden die Überstriche, die die gefilterten Größen der LES kennzeichnen, weggelassen.

#### 3.2.2 Tropfenadvektion

Die Bewegung der Supertropfen wird durch ihre aktuelle Position  $X_i$  und Geschwindigkeit  $V_i = dX_i/dt$  beschrieben. Dabei wird angenommen, dass sich jeder Supertropfen unabhängig von den anderen Supertropfen bewegt und keine aerodynamischen Wechselwirkungen zwischen den Supertropfen stattfinden. Diese Annahme kann aufgrund der geringen Volumendichte der Wolkentropfen getroffen werden. Die Bewegungsgleichung eines Supertropfens der Masse  $m$  ergibt sich, analog zu der eines realen Tropfens, aus der Summe der auf ihn wirkenden Kräfte:

$$m \frac{dV_i}{dt} = F_{G_i} + F_{A_i} + F_{R_i} . \quad (3.66)$$

Dabei beschreibt  $F_{G_i} = -\delta_{i3} m g$  die Gravitationskraft,  $F_{A_i} = \delta_{i3} m g \rho_0 / \rho_l$  die archimedische Auftriebskraft und  $F_{R_i}$  die Reibungskraft. Da die Dichte von Wasser deutlich größer ist als die Dichte von Luft ( $\rho_l \gg \rho_0$ ), können hier andere Kräfte, wie z. B. die virtuelle Masse durch die Beschleunigung der Strömung und die Basset-Kraft zur Berücksichtigung zuvor erfolgter Beschleunigungsvorgänge, vernachlässigt werden. Die Reibungskraft  $F_{R_i}$  ist proportional zum dynamischen Druck  $1/2 \rho_0 [u_i(X_i) - V_i]^2$ , der Querschnittsfläche des Supertropfens  $\pi r^2$  und dem Widerstandsbeiwert  $C_D$ .  $C_D$  ist ein empirischer Faktor, der alle nicht geometrischen Komponenten der Reibungskraft beinhaltet. Er hängt vom Strömungszustand ab, der mit Hilfe der Partikelreynoldszahl des Supertropfens  $Re_p = 2r \cdot |u_i(X_i) - V_i| / \nu$  beschrieben wird. Damit ergibt sich für die Reibungskraft (Lamb und Verlinde, 2011):

$$F_{R_i} = 6\pi \rho_0 \nu r [u_i(X_i) - V_i] (C_D Re_p / 24) . \quad (3.67)$$

Niedrige  $Re_p < 0,25$  kennzeichnen dabei schleichende Umströmungen im Stokes-Bereich, höhere  $Re_p$  hingegen Umströmungen mit Wirbeln hinter dem Supertropfen. Der Widerstandsbeiwert  $C_D$  wird mit dem nichtlinearen Widerstandsgesetz  $C_D = 24/Re_p \cdot (1 + 0,15 Re_p^{0,687})$  (z. B. Clift et al., 1978; Ayala et al., 2008b) berechnet, da das Gesetz von Stokes mit  $C_D = 24/Re_p$  nur für Tropfen mit einem Radius  $r \leq 30 \mu\text{m}$  gültig ist (Pruppacher und Klett, 1997). Für die Bewegungsgleichung eines Supertropfens mit dem Radius  $r$  ergibt sich demnach:

$$\frac{dV_i}{dt} = \frac{1}{\tau_p} [u_i(X_i) - V_i] - \delta_{i3} (1 - \rho_0 / \rho_l) g . \quad (3.68)$$

$\tau_p$  ist die Relaxationszeit des Tropfens, d. h. die Zeit, die er braucht, um nach Änderungen der Strömung wieder in einen Gleichgewichtszustand zurückzukehren:

$$\tau_p^{-1} = \frac{9\nu\rho_0}{2r^2\rho_l} \cdot (1 + 0,15\text{Re}_p^{0,687}) . \quad (3.69)$$

Ein fallender Supertropfen wird so lange beschleunigt, bis das Gleichgewicht von  $F_G$  und  $F_A + F_R$  erreicht ist. Die Fallgeschwindigkeit des Supertropfens erreicht dann einen maximalen, konstanten Wert, die sogenannte endgültige Fallgeschwindigkeit  $V_t$ .

Im Gegensatz zu dem Lagrangeschen Footprint Modell (z. B. Steinfeld, 2009) werden für die Advektion der Supertropfen keine subskaligen Geschwindigkeiten berücksichtigt. Ursache dafür ist, dass das für passive Partikel verwendete Monte-Carlo-Schema nach Weil et al. (2004) nicht für massebehaftete Partikel gültig ist. Da für die Implementierung von subskaligen Geschwindigkeiten für massebehaftete Partikel bisher kein geeignetes Modell zur Verfügung steht, wird deren Einfluss, z. B. auf die Koagulationsfunktion der Tropfen, stattdessen parametrisiert (siehe Abschnitt 3.2.5).

Für die zeitliche Diskretisierung wird hier das explizite Euler-Verfahren mit einem konstanten Zeitschritt<sup>4</sup> verwendet. Analog zum Strömungsmodell sind die Randbedingungen für die lateralen Ränder zyklisch gewählt. Am unteren und oberen Rand werden die Super-Tropfen dagegen absorbiert. Die für die Berechnung von Gleichung (3.68) benötigten Strömungsgeschwindigkeiten  $u_i(X_i)$  werden von den acht umgebenden LES-Gitterpunkten mit Hilfe von bilinearer Interpolation (horizontal) und linearer Interpolation (vertikal) zu der jeweiligen Tropfenposition interpoliert. Dieses Verfahren ist detailliert in Steinfeld (2009) beschrieben.

### 3.2.3 Heterogene Nukleation der Tropfen

Da die homogene Nukleation auf der Erde keine Rolle spielt, ist in dem hier vorliegenden Modell nur die heterogene Nukleation implementiert. Zur Zeit umfasst dies die Bildung von Wolkentropfen an löslichen CN, z. B. Natriumchlorid (NaCl) oder Ammoniumsulfat ( $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ ), da diese für die bisherigen Simulationen von Passatwindwolken über dem Meer relevant sind<sup>5</sup>. Dabei wird die Masse der löslichen Substanz als Eigenschaft jedes Supertropfens gespeichert. Zu Beginn der Simulation befinden sich die Tropfen gemäß der Masse ihrer löslichen Substanz und ihrer Umgebungsfeuchte im thermodynamischen Gleichgewichtszustand. Im Laufe der Simulation können die Tropfen in Abhängigkeit von der Umgebungstemperatur und -feuchte bei Übersättigung durch Kondensation anwachsen und bei Untersättigung durch Evaporation ihre Masse verringern. Die beiden Prozesse hängen primär von der molekularen Wasserdampfdiffusion sowie der thermischen Diffusion ab und können deshalb mit Hilfe derselben Diffusionsgleichung beschrieben werden. Hierzu wird der Ansatz von Mason (1971) für einen einzelnen, kugelförmigen, stationären Tropfen verwendet. Konkurrenzeffekte zwischen Tropfen werden demnach vernachlässigt. Diese Annahme kann getroffen werden, da der mittlere Abstand zwischen den Wolkentropfen ( $\approx 2 \text{ mm}$  bei einer Konzentration von  $100 \text{ cm}^{-3}$ ) deutlich größer ist als der Bereich um den Tropfen, der durch das Kondensationswachstum beeinflusst wird ( $\approx 10r$ ) (z. B. Sedunov, 1974). Die verwendete Diffusionsgleichung basiert auf dem Fick'schen Diffusionsgesetz für Wasserdampf. Das Diffusionsgesetz

<sup>4</sup>Eine Sensitivitätsstudie zum verwendeten Zeitschritt ist in Abschnitt 4.3.1 dokumentiert.

<sup>5</sup>Wachstumsgleichungen für nicht-lösliche und ein Gemisch aus löslichen und nicht-löslichen CN können nach Andrejczuk et al. (2008) in das Modell integriert werden.

besagt, dass der Fluss des Wasserdampfes zum Tropfen hin proportional zum Gradient der Wasserdampfkonzentration multipliziert mit dem Diffusionskoeffizienten ist. Da mit der Kondensation auch das Freisetzen latenter Wärme verbunden ist, wird analog dazu auch die Diffusion der freiwerdenden latenten Wärme mit dem Fick'schen Diffusionsgesetz beschrieben. Durch eine Kombination der beiden Diffusionsgleichungen mit Hilfe der Clausius-Clayperon Gleichung, kann die Änderung des Tropfenradius  $r$  durch Kondensation bzw. Evaporation schließlich mit Hilfe von

$$r \frac{dr}{dt} = \frac{S - ar^{-1} + br^{-3}}{F_k + F_d} \quad \text{mit} \quad F_k = \left( \frac{L_v}{R_v T} - 1 \right) \frac{L_v \rho_l}{K_a T} \quad \text{und} \quad F_d = \frac{\rho_l R_v T}{D e_s(T)} \quad (3.70)$$

approximiert werden (Rogers und Yau, 1989). Die Änderung der Tropfengröße hängt dabei vom Radius  $r$  und dem Sättigungszustand  $S - ar^{-1} + br^{-3}$  ab.  $S = (e_v/e_s) - 1$  kennzeichnet die Übersättigung und  $e_v$  den Dampfdruck. Durch  $F_d$  wird außerdem der Einfluss der Wasserdampfdiffusion und durch  $F_k$  der Einfluss der thermischen Diffusion berücksichtigt.

Der Term  $ar^{-1}$  beschreibt den Einfluss des sogenannten Krümmungseffekts, der den erhöhten Sättigungsdampfdruck über einer gekrümmten Oberfläche im Vergleich zu einer ebenen Wasseroberfläche charakterisiert. Die Größe der Übersättigung hängt von der Krümmung der Oberfläche, d.h. dem Tropfenradius  $r$ , ab. Dies wird durch die Gleichung von Kelvin  $e_{s,r}/e_{s,\infty} = \exp(ar^{-1}) \approx 1 + ar^{-1}$  mit  $a = 2\sigma/(\rho_l R_v T)$  (Thompson, 1870) beschrieben, wobei  $e_{s,r}$  der Sättigungsdampfdruck über einem Tropfen,  $e_{s,\infty}$  der Sättigungsdampfdruck über einer ebenen Fläche und  $\sigma$  die Oberflächenspannung von Wasser ist. Der Term  $br^{-3}$  beschreibt den Einfluss des sogenannten Lösungseffekts: In Wassertropfen gelöste Substanzen (z. B. NaCl) verringern den Sättigungsdampfdruck im Vergleich zu reinen Wassertropfen (z. B. Liljequist, 1984). Diese Verringerung des Dampfdruckes wird durch das Raoult'sche Gesetz beschrieben,  $e_{s,s}/e_s = 1 - br^{-3}$  (Rogers und Yau, 1989). Für schwache Lösungen ist  $b = 3i_s m_l M_s / (4\pi \rho_l m_s)$ , wobei  $e_{s,s}$  der Sättigungsdampfdruck über der Lösung,  $m_l$  die molekulare Masse von Wasser,  $m_s$  die molekulare Masse der gelösten Substanz und  $i_s$  der van't Hoff-Faktor ist. Der van't Hoff-Faktor ist abhängig von der chemischen Zusammensetzung der Lösung und ihrem Dissoziationsgrad, z. B.  $i_s \approx 2$  für Natriumchlorid (z. B. Rogers und Yau, 1989). Der Lösungseffekt ist proportional zur Konzentration des gelösten Stoffes und damit zum Tropfenvolumen.

Die Kombination des Krümmungseffektes ( $\sim ar^{-1}$ ) und Lösungseffektes ( $\sim br^{-3}$ ) beschreibt den prinzipiellen Verlauf der Übersättigung über einem Tropfen aus nicht reinem Wasser als Funktion des Radius (z. B. Liljequist, 1984):

$$S = ar^{-1} - br^{-3} . \quad (3.71)$$

Dieser Zusammenhang ist auch in Abbildung 2.1 (Kapitel 2.1) dargestellt.  $r_k$  kennzeichnet den kritischen Tropfenradius, der für die Aktivierung der Tropfen überschritten werden muss.  $r_k$  und die kritische Übersättigung  $S_k$  können mit Gleichung (3.71) berechnet werden. Es gilt:

$$r_k = \sqrt{3b/a} \quad \text{und} \quad (3.72)$$

$$S_k = \sqrt{4a^3/(27b)} . \quad (3.73)$$

$r_k$  liegt für typische Tropfen zwischen  $0,1 \mu\text{m}$  und  $1 \mu\text{m}$  (Rogers und Yau, 1989). In den hier vorgestellten Simulationen wurden Aerosole aus NaCl mit einer Aerosolmasse von  $10^{-15} \text{g}$  als CN verwendet.<sup>6</sup> Der kritische Radius dieser CN liegt nach Gleichung (3.73) für den simulierten Temperaturbereich von etwa  $280 - 310 \text{K}$  zwischen  $0,62 \mu\text{m} < r_k < 0,67 \mu\text{m}$ , die zugehörige kritische Übersättigung liegt bei  $0,00125 < S_k < 0,00095$ . Supertropfen mit Radien  $r > 1 \mu\text{m}$  gelten deshalb als aktiviert und werden als Wolkentropfen angesehen.

Die Gleichung (3.70) kann nicht analytisch gelöst werden und muss deshalb numerisch berechnet werden. Dazu wurde in Zusammenarbeit mit Fabian Hoffmann und Prof. Dr. Siegfried Raasch das Rosenbrock Verfahren vierter Ordnung zur Berechnung von steifen Differentialgleichungen nach Press et al. (1996) implementiert.

### 3.2.4 Tropfenwachstum durch Kondensation und Evaporation

Nach der Aktivierung der Tropfen kann das Tropfenwachstum durch Kondensation bzw. Evaporation ohne Berücksichtigung des Krümmungs- und Lösungseffektes berechnet werden. Dadurch lässt sich Gleichung (3.70) folgendermaßen vereinfachen:

$$r \frac{dr}{dt} = \frac{S}{F_k + F_d}. \quad (3.74)$$

Da die rechte Seite der Gleichung nun unabhängig vom Tropfenradius  $r$  ist, kann die Gleichung analytisch gelöst werden. Die Integration von (3.74) führt zu:

$$r(t) = \sqrt{r_0^2 + 2 \cdot \Delta t \cdot \left( \frac{S}{F_k + F_d} \right)}. \quad (3.75)$$

$\Delta t$  repräsentiert hier den Zeitschritt. Die Gleichungen (3.70) und (3.75) wurden für einen einzelnen, kugelförmigen und stationären Tropfen hergeleitet. Dabei wird u. a. die Annahme getroffen, dass die Temperaturdifferenz zwischen der Tropfenoberfläche und deren Umgebung vernachlässigt werden kann. Zusätzlich wird vorausgesetzt, dass das Temperatur- und Feuchtefeld um den Tropfen herum kugelsymmetrisch ist (Mason, 1971). Das gilt nur für Tropfen, deren Fallgeschwindigkeit vernachlässigt werden kann. Bei größeren Tropfen mit höheren Fallgeschwindigkeiten ändern sich die Feuchte- und Temperaturgradienten im Umfeld des Tropfens und werden an der in Fallrichtung zugewandten Seite maximal (Rogers und Yau, 1989). Dadurch wird der Wasserdampf- und Wärmetransport an dieser Seite effizienter. Um diesen Effekt (auch Ventilationseffekt genannt) zu berücksichtigen, werden empirisch bestimmte Ventilationskoeffizienten verwendet. Da die Koeffizienten für Temperatur und Feuchte sehr ähnlich sind, wird häufig ein gemeinsamer Ventilationskoeffizient  $f_v$  verwendet. Dieser ist als Quotient der Massenänderung des Tropfens mit und ohne Ventilationseffekt definiert (Pruppacher und Klett, 1997):

$$f_v = \frac{dm/dt}{dm_0/dt} = \frac{\text{Massenänderung für fallenden Tropfen}}{\text{Massenänderung für ruhenden Tropfen}}. \quad (3.76)$$

<sup>6</sup>Um die Simulationen einfach zu halten und den Einfluss der Aerosole zu minimieren, wird hier kein Aerosolspektrum mit verschiedenen löslichen CCN sondern nur NaCl mit einer Stoffmasse verwendet. In der Natur bestehen kleine CCN vor allem aus Ammoniumsulfat. Da sich der Unterschied aber nur in der Dichte und der molekularen Masse bemerkbar macht, ist der Einfluss gering und bewirkt lediglich eine Verschiebung von  $r_k$  und  $S_k$ .

$f_v$  kann basierend auf der Theorie der Aerodynamik experimentell bestimmt werden. Nach Rogers und Yau (1989) gilt:

$$f_v = \begin{cases} 1,00 + 0,09\text{Re}_p, & \text{für } \text{Re}_p \leq 2,5 \\ 0,78 + 0,28\text{Re}_p^{1/2}, & \text{für } \text{Re}_p > 2,5 . \end{cases} \quad (3.77)$$

Für einen ruhenden Tropfen ist  $f_v = 1$ , wobei  $f_v$  mit zunehmender Fallgeschwindigkeit ebenfalls zunimmt. Der Einfluss des Ventilationseffektes auf das Tropfenwachstum durch Kondensation kann im Allgemeinen vernachlässigt werden (Rogers und Yau, 1989). Diese Annahme lässt sich treffen, da zum einen der Effekt bei kleinen Tropfen aufgrund der geringen Fallgeschwindigkeit minimal ist, und zum anderen, weil das Tropfenwachstum durch Kondensation bei großen Tropfen im Vergleich zum Wachstum durch Koagulation eine untergeordnete Rolle spielt. Einen entscheidenden Einfluss hat der Ventilationseffekt jedoch bei der Evaporation von großen Tropfen (Rogers und Yau, 1989), z. B. wenn diese aus der Wolke heraus in untersättigte Bereiche fallen. Deshalb wird der Effekt in dem hier vorgestellten LCM nur für große Tropfen ( $r > 40 \mu\text{m}$ ) in untersättigten Umgebungen ( $S < 0$ ) berücksichtigt. Dazu wird der Ventilationsfaktor  $f_v$  zur rechten Seite von (3.74) multipliziert (z. B. Straka, 2009):

$$r \frac{dr}{dt} = f_v \frac{S}{F_k + F_d} . \quad (3.78)$$

$\text{Re}_p$  und damit auch  $f_v$  sind von  $r$  abhängig, wodurch die Lösung von (3.78) die Anwendung des Rosenbrockverfahren erfordert. Testrechnungen haben aber gezeigt, dass die Änderung von  $f_v$  pro Zeitschritt sehr gering ist und daher vernachlässigt werden kann.  $f_v$  wird deshalb mit Hilfe des aktuellen Tropfenradius berechnet und für die Integration von Gleichung (3.78) als konstant angesehen, so dass die Gleichung analytisch lösbar ist.

Für die Berechnung der heterogenen Nukleation und des anschließenden Tropfenwachstums durch Kondensation bzw. Evaporation mit (3.70), (3.75) und (3.78) werden  $e_v$  und  $e_s$  mit Hilfe der spezifischen Feuchte  $q_v$  (z. B. Rogers und Yau, 1989)

$$e_v = \frac{p \cdot q_v}{\varepsilon + q_v(1 - \varepsilon)} \quad (3.79)$$

und der Clausius-Clapeyron-Gleichung (z. B. Rogers und Yau, 1989)

$$e_s = e_0 \cdot \exp\left(\frac{L_v}{R_v} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right) \quad (3.80)$$

berechnet. Dabei ist  $\varepsilon = m_l/m_a = 0,622$  das Verhältnis der molekularen Massen von Wasser und trockener Luft. Die Konstanten sind  $e_0 = 611 \text{ Pa}$  und  $T_0 = 273,15 \text{ K}$ . Die benötigten Werte von  $p$ ,  $q_v$  und  $T$  stammen aus der LES und werden analog zur Strömungsgeschwindigkeit  $u_i$  mit Hilfe von bilinearer Interpolation zu der jeweiligen Tropfenposition interpoliert. Das Tropfenwachstum durch Kondensation bzw. Evaporation wird für jeden Supertropfen zu jedem Zeitschritt berechnet. Die dadurch hervorgerufene Änderung des Flüssigwassergehaltes eines Gittervolumens pro Zeitschritt ergibt sich aus der Summe der Volumenänderungen der einzelnen Tropfen durch Kondensation bzw. Evaporation. Für den Quellterm der spezifischen Feuchte  $q_v$  aufgrund der Kondensation bzw. Evaporation aus (3.5) gilt demnach:

$$\left(\frac{\partial q_v}{\partial t}\right)_{\text{Nied}} \approx -\frac{\rho_l}{\rho_0 \Delta V \Delta t} \sum_{n=1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} A_n (r_n^{*3} - r_n^3) . \quad (3.81)$$

Dabei kennzeichnet  $r^*$  den durch Kondensation bzw. Evaporation veränderten Tropfenradius nach einem Zeitschritt. Der Quellterm der potentiellen Temperatur  $\theta$  aus (3.4), der den Einfluss der freiwerdenden latenten Wärme aufgrund der Kondensation oder Evaporation der Tropfen beschreibt, kann analog dazu mit

$$\left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t}\right)_{\text{Nied}} = -\frac{L_v}{c_p} \frac{1}{\Pi} \left(\frac{\partial \bar{q}_v}{\partial t}\right)_{\text{Nied}} \quad (3.82)$$

berechnet werden.

Bei der hier verwendeten Berechnung des Tropfenwachstums durch Kondensation bzw. Evaporation werden außerdem einige Effekte zweiter Ordnung vernachlässigt, wie z. B. kinetische Effekte. Diese betreffen sehr kleine Tropfen, deren Weglänge in der gleichen Größenordnung wie die Weglänge der Wassermoleküle ist. Dadurch wird der molekulare Transfer von Wasserdampf und Wärme beeinflusst. Es kann jedoch gezeigt werden, dass dieser Effekt nur in den ersten Sekunden des Tropfenwachstums von Bedeutung ist (Rogers und Yau, 1989), die bisher nicht Gegenstand der Untersuchung sind. Für zukünftige Untersuchungen, z. B. zur Aktivierung von CCN, kann dieser Effekt allerdings eine Rolle spielen.

### 3.2.5 Tropfenwachstum durch Koagulation

#### Konzept

Das Tropfenwachstum durch Koagulation in turbulenter Strömung ist sehr komplex und im Detail noch nicht vollständig verstanden. Deshalb werden für diese Berechnung im vorliegenden Modell einige Annahmen getroffen und Vereinfachungen vorgenommen. Durch das Konzept der Supertropfen kann die Kollision der einzelnen Tropfen nicht direkt, sondern nur mit Hilfe eines statistischen Ansatzes berechnet werden. Dabei ist das Wachstum der Supertropfen proportional zur sogenannten Kollisionsrate. Die Kollisionsrate ist das Produkt der Anzahl der Tropfenpaare pro Gittervolumen mit deren Koagulationsfunktionen, wobei eine homogene Verteilung der Tropfen in dem Gittervolumen angenommen wird. Außerdem wird vereinfachend angenommen, dass Tropfen, die miteinander kollidieren, immer auch zusammenfließen. Somit wird für die Koaleszenzeffizienz ein Wert von 100 % vorausgesetzt ( $E^{\text{Koal}} = 1$ ). Eine Kollision führt folglich immer zum Anwachsen des größeren Tropfens, während der kleine Tropfen verschwindet. Dabei bleibt der Flüssigwassergehalt erhalten, während die Tropfenanzahl um eins abnimmt. Die Annahme für die Koaleszenzeffizienz wird zur Vereinfachung üblicherweise für alle Tropfen mit  $r < 100 \mu\text{m}$  getroffen (Rogers und Yau, 1989). Eine Kollision kann neben dem Zusammenfließen auch ein Zerschlagen in mehrere kleine Tropfen zur Folge haben. Dieser Effekt wird hier ebenfalls vernachlässigt, da er nur für Regentropfen relevant ist, die in den hier vorgestellten Simulationen so gut wie nie auftreten. Eine weitere Vereinfachung ist, dass die Kollision von zwei Supertropfen nicht zur Bildung eines neuen Supertropfens führt, sondern zur Modifizierung der Tropfenradien und Wichtungsfaktoren der beteiligten Supertropfen. Dies verfälscht alle Kollisionen, bei denen die Kollisionseffizienz kleiner als 100 % ist, denn unter realen Umständen kollidieren in solchen Fällen nicht alle durch die Supertropfen repräsentierten Tropfen miteinander. Für die durch Koagulation angewachsenen Tropfen müsste demnach ein neuer, größerer Supertropfen erzeugt werden. Dadurch ergäbe sich ein stetiger Anstieg der Supertropfenanzahl, der einen schwer abzuschätzenden,

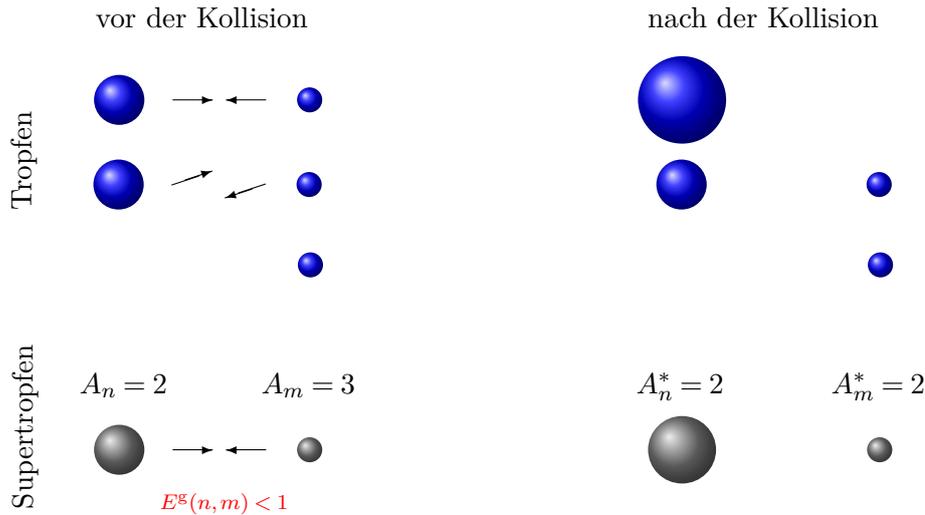


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung zum Tropfenwachstum durch Koagulation für Tropfen und Supertropfen. Eine Kollisionseffizienz kleiner als 100 % ( $E^g < 1$ ) bewirkt, dass nicht alle Tropfenpaare miteinander kollidieren. Die Supertropfen beschreiben das mittlere Wachstum der von ihnen repräsentierten Tropfen. Für die Radien der Supertropfen gilt:  $r_n^* > r_n$  und  $r_m^* = r_m$ .

stetig steigenden Bedarf an Computerressourcen (d. h. Speicherplatz und Rechenzeit) zur Folge hat, der nur mit Einschränkungen praktisch umsetzbar ist. Deshalb wird im vorliegenden Modell auf die Neubildung von Supertropfen verzichtet und der Einfluss der Kollision stattdessen statistisch, d. h. durch Modifizierung der Tropfenradien und Wichtungsfaktoren der beteiligten Supertropfen, repräsentiert. Die Änderung des Supertropfenradius durch Kollision beschreibt dann das mittlere Wachstum aller Tropfen, die durch ihn vertreten werden. Dabei geht allerdings die Information über die Varianz der Größe der Tropfen eines Supertropfens verloren. Für die Berechnung der Kollision muss deshalb eine ausreichend große Anzahl an Supertropfen in einem Gittervolumen gewährleistet sein. Diese Anzahl ist vergleichbar mit der notwendigen Anzahl der Tropfenklassen beim Spektralmodell.

Zur Veranschaulichung ist diese Vorgehensweise schematisch in Abbildung 3.2 dargestellt. Die Ausgangssituation zeigt zwei große Tropfen und drei kleine Tropfen in einem Gittervolumen. Aufgrund der hydrodynamischen Wechselwirkungen zwischen den Tropfen wird angenommen, dass nur eines der Tropfenpaare miteinander kollidiert. Da die Koaleszenzeffizienz 100 % beträgt, sammelt von diesem Tropfenpaar der größere Tropfen den kleineren Tropfen ein und wächst dadurch an, während der kleinere Tropfen verschwindet. Die Tropfen des anderen Tropfenpaares behalten ihre Ausgangsgröße bei, so dass nach der Kollision vier Tropfen mit drei unterschiedlichen Größen existieren. Werden die Tropfen durch Supertropfen repräsentiert, gibt es zu Beginn einen großen Supertropfen  $r_n$  mit dem Wichtungsfaktor  $A_n = 2$  und einen kleinen Supertropfen  $r_m$  mit dem Wichtungsfaktor  $A_m = 3$ . Der Effekt der hydrodynamischen Wechselwirkungen wird durch die Kollisionseffizienz  $E^g(r_n, r_m) < 1$  repräsentiert. Durch die Kollision der Supertropfen miteinander wächst der Radius des größeren Supertropfens zu  $r_n^*$  an, während der Wichtungsfaktor gleich bleibt  $A_n^* = A_n = 2$ . Für den kleineren Supertropfen gilt, dass der Radius gleich bleibt ( $r_m^* = r_m$ ) und der Wichtungsfaktor

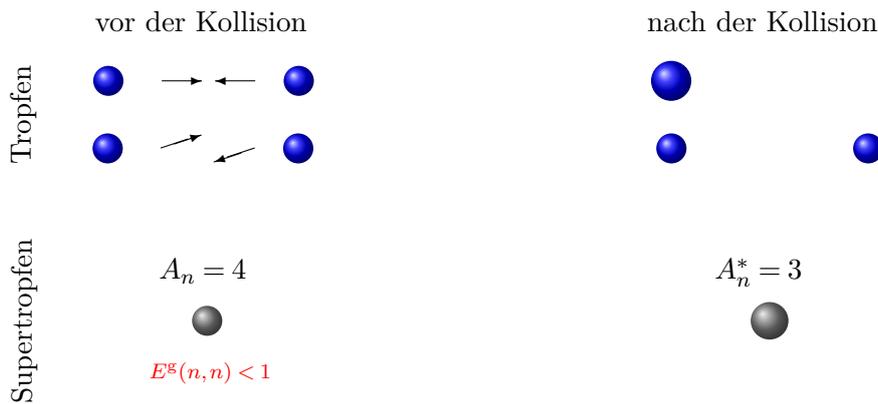


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung zum Tropfenwachstum durch „interne“ Koagulation, d. h. für Koagulation von gleichgroßen Tropfen, die durch denselben Supertropfen repräsentiert werden.  $E^S$  kennzeichnet die Kollisionseffizienz. Für die Radien der Supertropfen gilt:  $r_n^* > r_n$ .

auf  $A_m^* = 2$  abnimmt. Nach der Kollisionen ist der größere Supertropfen angewachsen und repräsentiert aufgrund des statistischen Ansatzes das mittlere Wachstum der von ihm repräsentierten Tropfen.

Betrachtet man turbulente Strömungen, so können nicht nur Tropfen mit unterschiedlichen Größen, sondern auch gleichgroße Tropfen miteinander kollidieren. Dieser Fall ist in Abbildung 3.3 dargestellt. In diesem Beispiel können zwei gleichgroße Tropfen miteinander kollidieren und einen entsprechend größeren Tropfen bilden. Auch dieser Prozess wird beim Wachstum der Supertropfen berücksichtigt. Dafür werden Kollisionen von Tropfen betrachtet, die durch denselben Supertropfen repräsentiert werden. Durch diese „internen“ Kollisionen bleibt das repräsentierte Volumen des Supertropfens gleich, während der Wichtungsfaktor auf  $A_n^* = 3$  abnimmt. Demzufolge erhöht sich der Radius zu  $r_n^*$ .

### Wachstumsgleichungen

Das Wachstum durch Koagulation wird für jeden Supertropfen zu jedem Zeitschritt bestimmt. Dabei können gemäß des statistischen Ansatzes alle Supertropfen eines Gittervolumens miteinander kollidieren. Das Wachstum wird durch Variation der Radien und Wichtungsfaktoren der Supertropfen repräsentiert. Für die Berechnung dieser Größen werden die Bilanzgleichungen der Masse und Wichtungsfaktoren der Supertropfen sowie die Massenerhaltung verwendet. Dabei gilt, dass Supertropfen durch die Koagulation mit kleineren Supertropfen an Masse gewinnen, wobei der Wichtungsfaktor gleich bleibt und der Radius zunimmt. Durch Koagulation mit größeren Supertropfen dagegen verringert sich der Wichtungsfaktor der Supertropfen und ihre Masse, wobei der Radius gleich bleibt. Durch die „interne“ Koagulation verringert sich bei gleich bleibender Masse der Wichtungsfaktor und der Radius nimmt zu. Sortiert man die Supertropfen eines Gittervolumens ihrer Größe nach mit  $r_n < r_{n+1}$ , so kann die Masse, die der  $n$ -te Supertropfen durch Koagulation mit den kleineren Supertropfen

gewinnt, durch

$$\sum_{m=1}^{n-1} \frac{4\pi}{3} \rho_1 K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m}{\Delta V} \frac{A_n}{\Delta V} \right] r_m^3 \Delta V \Delta t \quad (3.83)$$

beschrieben werden. Dabei ist  $\sum_{m=1}^{n-1} [A_m/\Delta V \cdot A_n/\Delta V]$  die Anzahl der entsprechenden Tropfenpaare pro Gittervolumen und  $\sum_{m=1}^{n-1} K(r_m, r_n) [A_m/\Delta V \cdot A_n/\Delta V]$  die zugehörige Kollisionsrate. Äquivalent dazu kann die Masse, die der  $n$ -te Supertropfen durch Koagulation an die größeren Supertropfen abgibt, mit

$$\sum_{m=n+1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} \rho_1 K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m}{\Delta V} \frac{A_n}{\Delta V} \right] r_n^3 \Delta V \Delta t \quad (3.84)$$

beschrieben werden. Die Masse des  $n$ -ten Supertropfens nach einem Zeitschritt ist demnach:

$$\frac{4\pi}{3} \rho_1 A_n r_n^3 + \sum_{m=1}^{n-1} \frac{4\pi}{3} \rho_1 K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] r_m^3 \Delta t - \sum_{m=n+1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} \rho_1 K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] r_n^3 \Delta t . \quad (3.85)$$

Für den Wichtungsfaktor des  $n$ -ten Supertropfens gilt, dass er durch „interne“ Koagulation um

$$K(r_n, r_n) \left[ \frac{A_n(A_n - 1)}{2\Delta V} \right] \Delta t \quad (3.86)$$

und durch die Koagulation mit größeren Supertropfen um

$$\sum_{m=n+1}^{N_p} K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] \Delta t \quad (3.87)$$

verringert wird. Der Wichtungsfaktor des  $n$ -ten Supertropfens nach einem Zeitschritt ist demnach:

$$A_n^* = A_n - K(r_n, r_n) \left[ \frac{A_n(A_n - 1)}{2\Delta V} \right] \Delta t - \sum_{m=n+1}^{N_p} K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] \Delta t . \quad (3.88)$$

Der Radius des  $n$ -ten Supertropfens nach einem Zeitschritt kann nun mit Hilfe der Massenerhaltung unter Berücksichtigung von (3.88) und (3.85) berechnet werden:

$$\begin{aligned} & \frac{4\pi}{3} \rho_1 A_n \left[ 1 - K(r_n, r_n) \frac{(A_n - 1)}{2\Delta V} \Delta t - \sum_{m=n+1}^{N_p} K(r_m, r_n) \frac{A_m}{\Delta V} \Delta t \right] r_n^{*3} \\ &= \frac{4\pi}{3} \rho_1 A_n r_n^3 + \sum_{m=1}^{n-1} \frac{4\pi}{3} \rho_1 K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] r_m^3 \Delta t - \sum_{m=n+1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} \rho_1 K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] r_n^3 \Delta t . \end{aligned} \quad (3.89)$$

Es gilt:

$$r_n^* = \left\{ \frac{r_n^3 + \sum_{m=1}^{n-1} K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m}{\Delta V} \right] r_m^3 \Delta t - \sum_{m=n+1}^{N_p} K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m}{\Delta V} \right] r_n^3 \Delta t}{\left[ 1 - K(r_n, r_n) \frac{(A_n - 1)}{2\Delta V} \Delta t - \sum_{m=n+1}^{N_p} K(r_m, r_n) \frac{A_m}{\Delta V} \Delta t \right]} \right\}^{1/3} . \quad (3.90)$$

Der Nachweis, dass mit (3.88) und (3.90) die Gesamtmasse der Supertropfen in einem Gittervolumen exakt erhalten bleibt, ist im Anhang (A.1) dokumentiert. Für die Berechnung von (3.88) und (3.90) müssen die Supertropfen zu jedem Zeitschritt ihrer Größe nach sortiert werden (siehe auch Abschnitt 3.2.6).

### Koagulationsfunktion

Ein wichtiger Faktor für die Berechnung des Tropfenwachstums durch Koagulation ist die Koagulationsfunktion  $K(r_m, r_n)$ , die ein Maß für die Koagulationswahrscheinlichkeit der beiden Tropfen mit  $r_m$  und  $r_n$ ,  $r_n > r_m$  darstellt. Da in dem hier vorgestellten LCM die Koaleszenzeffizienz  $E^{\text{Koal}}$  eins gesetzt wird, ist die Koagulationsfunktion gleich dem Kollisionskernel. Für ruhende Umgebungsluft (im Folgenden mit Index  $g$  für engl. *gravitational* gekennzeichnet) kann der Kollisionskernel  $K^g(r_m, r_n) = K(r_m, r_n)/E^{\text{Koal}}$  aus der geometrischen Betrachtung der Kollision von zwei Tropfen hergeleitet werden (z. B. Pruppacher und Klett, 1997).  $K^g(r_m, r_n)$  hängt im Wesentlichen von dem Volumen ab, das die beiden Tropfen pro Zeiteinheit durchstreichen. Dieses Volumen entspricht der Querschnittsfläche  $\pi(r_m + r_n)^2$ , multipliziert mit der Differenz der Fallgeschwindigkeiten der beiden Tropfen  $|V_t(r_n) - V_t(r_m)|$ , und wird als geometrischer Kollisionskernel  $\Gamma^g$  bezeichnet. Berücksichtigt man darüber hinaus die hydrodynamischen Wechselwirkungen der Strömungsfelder der Tropfen in Form der Kollisionseffizienzen  $E^g(r_m, r_n)$ , erhält man für den Kollisionskernel  $K^g(r_m, r_n)$ :

$$K^g(r_m, r_n) = \pi(r_m + r_n)^2 \cdot |V_t(r_n) - V_t(r_m)| \cdot E^g(r_m, r_n) \quad (3.91)$$

$$= \Gamma^g(r_m, r_n) \cdot E^g(r_m, r_n) . \quad (3.92)$$

Dabei ist  $V_t$  die endgültige Fallgeschwindigkeit des Tropfens. Für die Berechnung von (3.91) werden in dem hier vorgestellten LCM deshalb nicht die tatsächlichen Geschwindigkeiten der Supertropfen verwendet, sondern  $V_t$  der repräsentierten Tropfen. Diese werden in Abhängigkeit vom Radius nach Beard (1976) (Pruppacher und Klett, 1997, S. 416-418) berechnet. Für die Bestimmung der Kollisionseffizienzen  $E^g(r_m, r_n)$  wurden zwei verschiedene Wertetabellen implementiert: Tabelle 8.2 von Rogers und Yau (1989) und Tabelle 1 von Hall (1980). Beide Tabellen sind eine Zusammenstellung von verschiedenen theoretischen Untersuchungen und numerischen Berechnungen. Zwischen den gegebenen Werten der Tabellen wird jeweils bilinear interpoliert. Für die in dieser Arbeit vorgestellten Simulationen wurde ausschließlich die Tabelle von Hall (1980) verwendet, da sie für die AW-Parametrisierung des turbulenten Kollisionskernels und in vergleichbaren Studien verwendet wurde (z. B. Wyszogrodzki et al., 2013).  $K^g(r_m, r_n)$  mit  $E^g(r_m, r_n)$  aus der Tabelle von Hall (1980) wird im Folgenden als Hall-Kernel bezeichnet.

Für turbulente Umgebungsluft kann der turbulente Kollisionskernel  $K^t(r_m, r_n, \epsilon)$  allgemein durch (z. B. Grabowski und Wang, 2013)

$$K^t(r_m, r_n, \epsilon) = \pi(r_m + r_n)^2 \cdot 2 \left\langle \left| \vec{W}_{r_m r_n} \right| \right\rangle \cdot g_{r_m r_n} \cdot \eta_E E^g(r_m, r_n) \quad (3.93)$$

$$= \Gamma^t(r_m, r_n) \cdot E^t(r_m, r_n) = \eta_G \Gamma^g(r_m, r_n) \cdot \eta_E E^g(r_m, r_n) \quad (3.94)$$

$$= \eta_T \cdot K^g(r_m, r_n) \quad (3.95)$$

beschrieben werden. Hier ist  $W_{r_m r_n}$  die radiale Relativgeschwindigkeit der Tropfen,  $g_{r_m r_n}$  repräsentiert die radiale Verteilungsfunktion, und  $\eta_G = \Gamma^t/\Gamma^g$  bzw.  $\eta_E = E^t/E^g$

stehen für die turbulenten Verstärkungsfaktoren des geometrischen Kollisionskerns  $\Gamma^g(r_m, r_n)$  bzw. der Kollisionseffizienz  $E^g(r_m, r_n)$ .  $\Gamma^t$  steht für den turbulenten geometrischen Kollisionskern und  $\eta_T = \eta_G \eta_E$  ist der Verstärkungsfaktor des Kollisionskerns aufgrund von Turbulenz. Diese Größen beschreiben die verschiedenen Einflüsse der Turbulenz auf die Tropfenkollision. Aufgrund der turbulenten Strömung wird die Bewegung der Tropfen durch Scherungen und lokale Beschleunigungen verändert, so dass die Differenz der Tropfengeschwindigkeit nicht mehr durch die maximalen Fallgeschwindigkeiten beschrieben werden kann. Deshalb wird diese durch die mittlere radiale Relativgeschwindigkeit  $\langle |\vec{W}_{r_m r_n}| \rangle$  ersetzt.  $\langle \rangle$  kennzeichnet dabei das Mittel über alle Richtungen (Ayala et al., 2008a). Die turbulente Strömung kann außerdem dazu führen, dass sich die Tropfen innerhalb des Strömungsfeldes ungleichmäßig verteilen und z. B. in Regionen mit niedriger Vorticity ansammeln. Dieser Effekt ist von der Turbulenzintensität und dem Tropfenradius abhängig. Der Einfluss der inhomogenen Verteilung wird durch die radiale Verteilungsfunktion  $g_{r_m r_n}$  beschrieben. Durch die turbulente Strömung werden auch die Strömungsfelder der einzelnen Tropfen beeinflusst, die sich wiederum auf die Kollisionseffizienzen auswirken. Die dadurch verursachte Zunahme der Kollisionswahrscheinlichkeit wird durch den Faktor  $\eta_E$  beschrieben.

Für diese subskaligen turbulenten Einflüsse stehen verschiedene Parametrisierungen zur Verfügung. In dem hier vorgestellten LCM ist die AW-Parametrisierung und die Parametrisierung nach Kunnen et al. (2013) und Siewert (2013, persönliche Kommunikation) implementiert. Die AW-Parametrisierung bietet Funktionen für  $\langle |\vec{W}_{r_m r_n}| \rangle$  und  $g_{r_m r_n}$  sowie einen Datensatz für  $\eta_E$ , so dass der turbulente Kollisionskern  $K^t(r_m, r_n, \epsilon)$  bestimmt werden kann. Dabei basieren die Funktionen für  $\langle |\vec{W}_{r_m r_n}| \rangle$  und  $g_{r_m r_n}$  auf einem theoretischen Modell, welches anschließend mit Hilfe von DNS validiert und spezifiziert wurde (Ayala et al., 2008a).  $\langle |\vec{W}_{r_m r_n}| \rangle$  und  $g_{r_m r_n}$  sind in Abhängigkeit von der Dissipationsrate  $\epsilon$  und der Reynoldszahl der Taylor-Mikroskala  $Re_\lambda = u' \lambda / \nu = u' \sqrt{15 / (\epsilon \nu)}$  gegeben.  $u'$  ist die „Root-Mean-Square“-Strömungsgeschwindigkeit, die von AW für die Berechnung von konvektiven Wolken durch  $u' = 202(\epsilon/400)^{1/3}$  (in  $\text{cm s}^{-1}$  für  $\epsilon$  in  $\text{cm}^2 \text{s}^{-3}$ ) näherungsweise bestimmt wird. Damit ergibt sich für  $Re_\lambda \approx 2 \cdot 10^4$ . Die konkreten Formulierungen von  $\langle |\vec{W}_{r_m r_n}| \rangle$  und  $g_{r_m r_n}$  sind im Anhang A.2 aufgelistet. Für die Berechnung von  $\eta_E$  wird bei der AW-Parametrisierung ein Datensatz von Grabowski und Wang (2009, Tabelle 1) verwendet, der mit Hilfe einer hybriden DNS für  $\epsilon = 100 \text{ cm}^2 \text{s}^{-3}$  und  $\epsilon = 400 \text{ cm}^2 \text{s}^{-3}$  erstellt wurde. Die Werte von  $\eta_E$  für andere  $\epsilon < 600 \text{ cm}^2 \text{s}^{-3}$  wurden Seifert et al. (2010) folgend durch lineare Inter- oder Extrapolation berechnet. Für  $\epsilon > 600 \text{ cm}^2 \text{s}^{-3}$  wurde der extrapolierte Wert für  $\epsilon = 600 \text{ cm}^2 \text{s}^{-3}$  verwendet. Der turbulente Kollisionskern  $K^t(r_m, r_n, \epsilon)$ , der sich aus der AW-Parametrisierung und den Kollisionseffizienzen von Hall (1980) ergibt, wird im Folgenden als AW-Kern bezeichnet.

Die Parametrisierung von Kunnen et al. (2013) und Siewert (2013, persönliche Kommunikation) stellt eine Funktion für  $\eta_G(r_m, r_n, \epsilon)$  zur Verfügung, mit deren Hilfe der turbulente geometrische Kollisionskern  $\Gamma^t(r_m, r_n, \epsilon)$  berechnet werden kann. Diese Funktion basiert auf DNS, bei denen Datensätze für  $\langle |\vec{W}_{r_m r_n}| \rangle$  und  $g_{r_m r_n}$  für diskrete  $\epsilon$  und  $r$  erzeugt wurden. Diese Daten wurden anschließend zu einer kontinuierlichen Funktion von  $\Gamma^t$  in Abhängigkeit von  $\epsilon$ ,  $r_m$  und  $r_n$  gefittet. Die Formeln für  $\Gamma^t(r_m, r_n, \epsilon)$  sind ebenfalls im Anhang A.2 zu finden. Der turbulente Kollisionskern  $K^t(r_m, r_n, \epsilon)$ , der sich aus dem turbulenten geometrischen Kollisionskern  $\Gamma^t(r_m, r_n, \epsilon)$

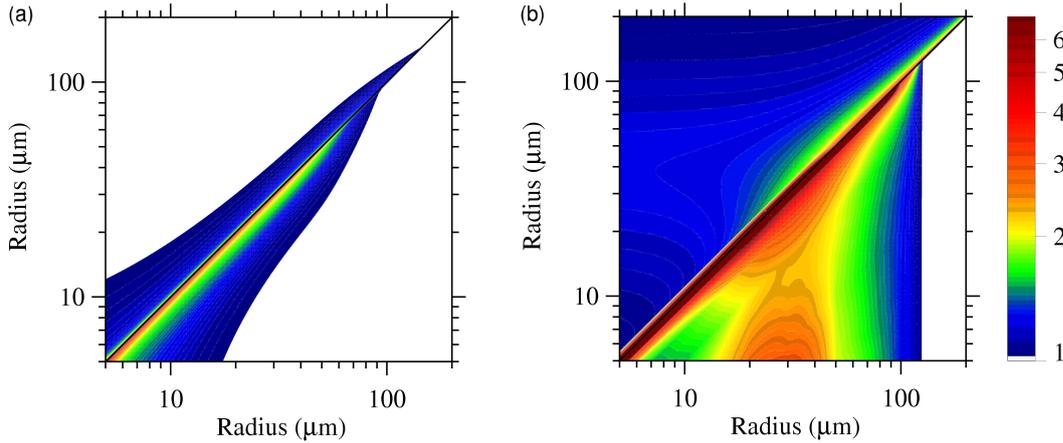


Abbildung 3.4: Verhältnis des turbulenten KS-Kerns zum nicht-turbulenten Hall-Kern (a) und des turbulenten AW-Kerns zum nicht-turbulenten Hall-Kern (b), entspricht dem Verstärkungsfaktor  $\eta_T$  des Kollisionskerns aufgrund von Turbulenz. Der Bereich oberhalb der von links unten nach rechts oben verlaufenden Bilddiagonalen zeigt Werte für eine Dissipationsrate von  $\epsilon = 50 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$  und der Bereich unterhalb der Diagonalen Werte für eine Dissipationsrate von  $250 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$ . Das Verhältnis ist auf der Diagonalen nicht definiert, da der Hall-Kern dort Null ist.

und den Kollisionseffizienzen von Hall (1980) mit  $\eta_E = 1$  ergibt, wird im Folgenden als Kunnen-Siewert-Kern bzw. KS-Kern bezeichnet. Um die beiden Parametrisierungen besser miteinander vergleichen zu können, wird auch ein turbulenter Kollisionskern  $K^t(r_m, r_n, \epsilon)$  mit  $\Gamma^t(r_m, r_n, \epsilon)$  und den Kollisionseffizienzen von Hall (1980), sowie mit  $\eta_E$  von der AW-Parametrisierung berechnet, die als KS\*-Kern bezeichnet wird.

Die für die Berechnung der Kernel notwendigen Werte von  $\epsilon$  werden für jedes Gittervolumen durch das LES-Modell berechnet. Für eine nicht-turbulente Strömung mit  $\epsilon = 0 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$  gilt:  $g_{r_m r_n} = 1$ ,  $\eta_E = 1$  und  $\langle |\vec{W}_{Rr}| \rangle = |V_t(r_n) - V_t(r_m)|/2$ . In diesem Fall sind der AW-Kern, der KS-Kern und der KS\* identisch zum Hall-Kern. Für turbulente Strömungen mit  $\epsilon > 0$  können die turbulenten Kernel gegenüber dem Hall-Kern deutlich höhere Werte annehmen. In Abbildung 3.4 ist das Verhältnis des KS-Kerns zum Hall-Kern (a) und des AW-Kerns zum Hall-Kern (b), also der Verstärkungsfaktor des Kollisionskerns  $\eta_T$  aufgrund von Turbulenz, für zwei verschiedene Turbulenzzustände in Abhängigkeit von den Tropfenradien dargestellt. Die Werte links und oberhalb der Diagonalen zeigen die Quotienten der jeweiligen Kernel für  $\epsilon = 50 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$  und rechts und unterhalb der Diagonalen für  $\epsilon = 250 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$ . Da der Hall-Kern für gleichgroße Tropfen Null ist, ist auf der Diagonalen, d. h. für gleichgroße Tropfen, kein Wert definiert und  $\eta_T \rightarrow \infty$ . Die Ergebnisse zeigen, dass nur für Tropfen mit  $r < 100 \text{ µm}$  bzw.  $r < 200 \text{ µm}$  eine Verstärkung des Kollisionskerns durch Turbulenz stattfindet. Größere Tropfen werden aufgrund ihrer großen Trägheit nicht beeinflusst. Die Größe des Verstärkungsfaktors für die kleineren Tropfen hängt sehr stark vom verwendeten turbulenten Kernel ab. Mit dem AW-Kern werden für Tropfen mit  $r < 100 \text{ µm}$  bzw.  $r < 200 \text{ µm}$  typischerweise Werte zwischen 1 und 5 erreicht, wobei die Werte für  $\epsilon = 250 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$  größer sind als für  $\epsilon = 50 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$ . Der Verstärkungsfaktor ist in den Bereichen besonders groß, wo der nicht-turbulente Kollisionskern sehr klein ist, z. B. für nahezu gleich große Tropfen ( $r_2/r_1 \rightarrow 1$ ) aufgrund der ähnlichen

Fallgeschwindigkeiten. Ein großer Verstärkungseffekt ist auch dort zu sehen, wo die nicht-turbulente Kollisionseffizienz klein ist, also für sehr unterschiedlich große Tropfen mit  $r_2/r_1 \ll 1$  (Grabowski und Wang, 2013). Der Effekt der radialen Verteilungsfunktion  $g_{r_m r_n}$  hat dabei den größten Einfluss auf den Verstärkungsfaktor, vor allem für nahezu gleich große Tropfen, die Änderung der radialen Relativgeschwindigkeit  $\langle |\vec{W}_{r_m r_n}| \rangle$  den geringsten (Seifert et al., 2010). Die Verstärkung der Kollisionseffizienz beeinflusst vor allem unterschiedliche Tropfengrößen.

Die Zunahme des Verstärkungsfaktors mit ansteigender Dissipationsrate ist auch bei dem KS-Kernel zu sehen, allerdings werden nur maximale Werte von 2 bis 3 erreicht und der Radienbereich, für den Verstärkungen auftreten, ist deutlich geringer. Die Unterschiede sind darin begründet, dass  $\eta_E = 1$  und dass beim AW-Kernel die Werte für  $\langle |\vec{W}_{r_m r_n}| \rangle$  und  $g_{r_m r_n}$  aus DNS mit  $Re_\lambda \approx 40$  auf für Wolken typische Werte mit  $Re_\lambda \approx 10^4$  extrapoliert wurden. Die Werte von  $\langle |\vec{W}_{r_m r_n}| \rangle$  und  $g_{r_m r_n}$  aus DNS stimmen bei beiden Kernen gut überein, da sie einen sehr ähnlichen  $Re_\lambda$  Bereich charakterisieren. Durch die Extrapolation beim AW-Kernel nimmt  $g_{r_m r_n}$  aber deutlich zu und bewirkt dadurch die deutlich größere Verstärkung. Ob die für große  $Re_\lambda$  extrapolierten Werte korrekt sind, muss allerdings erst durch weitere Untersuchungen geklärt werden. Bisher ist es aufgrund des enormen Rechenaufwandes noch nicht möglich DNS in diesem Turbulenzbereich durchzuführen. Da  $g_{r_m r_n}$  der Grund für die Abweichungen zwischen dem AW- und KS-Kernel ist, erreicht auch die Verstärkung für den KS\*-Kernel nur geringfügig größere Werte als für den KS-Kernel (siehe Abbildung A.1 im Anhang A.2).  $\eta_E$  erreicht sein Maximum allerdings bei unterschiedlich großen Tropfen, so dass der durch Turbulenz beeinflusste Tropfenradienbereich für den KS\*-Kernel etwas größer als beim KS-Kernel ist.

Der Vergleich der turbulenten Verstärkungsfaktoren zeigt, dass die Parametrisierungen und insbesondere die zugrunde liegenden Eigenschaften der turbulenten Strömung einen großen Einfluss auf den turbulenten Kollisionskernel haben.

### 3.2.6 Numerische Implementierung und Parallelisierung

Das Lagrangesche Partikelmodell ist wie das Strömungsmodell in FORTRAN90 geschrieben. Die Partikelinformationen werden dabei mit Hilfe eines dafür generierten Datentyps gespeichert. Jedes Element dieses Datentyps beschreibt ein vollständiges Partikel mit allen seinen Eigenschaften. Dadurch wird der gesamte Partikel Datensatz mit einem eindimensionalen Feld dieses Datentyps beschrieben. Das Lagrangesche Partikelmodell ist analog zum Strömungsmodell basierend auf dem Prinzip der Gebietszerlegung (2D, in x- und y-Richtung) parallelisiert. Dadurch speichert und berechnet jedes Prozessorelement nur die Partikel, die sich in seinem Teilgebiet befinden. Die Kommunikation zwischen den Prozessorelementen wird durch MPI realisiert. Nach jedem Zeitschritt werden die Partikel entsprechend ihrer Position und ihrer Größe sortiert, so dass die Partikel eines Gittervolumens hintereinander im Speicher liegen. Dadurch wird der Zugriff auf den Zwischenspeicher optimiert und insbesondere die Berechnung des Tropfenwachstums durch Koagulation beschleunigt. Der dafür verwendete Sortieralgorithmus sowie die Parallelisierung sind ausführlich in Riechelmann et al. (2012, unter *Numerical techniques of the particle model*) beschrieben (siehe Anhang C). Zur weiteren Optimierung der Rechenzeit werden die Koagulationsfunktionen in Abhängigkeit der Tropfenradien und der Dissipationsrate zu Beginn der Simulation berechnet und in einer 2D bzw. 3D Nachschlagetabelle gespeichert.

## 4 Simulation einer idealisierten Wolke

Im folgenden Kapitel werden erste Anwendungen des entwickelten LCMs vorgestellt. Im Fokus steht dabei die Charakterisierung des Modells. Dazu gehört eine Vergleichssimulation mit zwei anderen Wolkenphysikparametrisierungen sowie zwei Studien, die die Sensitivität des Modells in Bezug auf Modellparameter untersuchen. Im letzten Abschnitt des Kapitels wird außerdem der Einfluss der unterschiedlichen turbulenten Kollisionskernel untersucht.

Für diese erste Charakterisierung des LCMs wird eine einfache und kontrollierbare Situation mit überschaubarem Rechenaufwand gewählt, die umfassende Untersuchungen und Parameterstudien ermöglicht. Dabei handelt es sich um eine idealisierte, einzelne Wolke, die mit Hilfe einer aufsteigenden, quasi-zweidimensionalen Warmluftblase ausgelöst wird. Quasi-zweidimensional bedeutet in diesem Fall, dass die Warmluftblase in x-Richtung homogen ist. Dadurch kann die Länge der Wolke und somit die Größe der Datenbasis über die Länge des Modellgebiets gesteuert werden. Ein weiterer Vorteil davon ist, dass die Ausgabegrößen für die statistische Auswertung entlang der x-Achse gemittelt werden können. Das Konzept der idealisierten Wolke ist besonders für erste Charakterisierungen, Parameterstudien und Modellvergleiche geeignet. Vergleichbare Konzepte werden z. B. von Wyszogrodzki et al. (2013) und Grabowski et al. (2010) verwendet.

### 4.1 Konfiguration

Die idealisierte Wolke wird durch eine aufsteigende Warmluftblase erzeugt. Dazu wird zu Beginn der Simulation in Bodennähe eine Störung der potentiellen Temperatur  $\theta^*$  in Form von einer zweidimensionalen Normalverteilung

$$\theta^*(y, z) = \theta_0 \cdot \exp \left[ -0,5 \cdot \left( \left( \frac{y - y_c}{a_y} \right)^2 + \left( \frac{z - z_c}{a_z} \right)^2 \right) \right] \quad (4.1)$$

aufgeprägt. Die dadurch hervorgerufene maximale Temperaturdifferenz wird durch  $\theta_0 = 0,2$  K repräsentiert.  $y_c = 1920$  m und  $z_c = 190$  m kennzeichnen das Zentrum der Warmluftblase und  $a_y = a_z = 150$  m die Standardabweichung. Die durch (4.1) initialisierte Warmluftblase ist in x-Richtung homogen und wird hier deshalb als quasi-zweidimensional bezeichnet.

Das Modellgebiet hat eine Größe von  $1,6 \text{ km} \times 3,84 \text{ km} \times 3,83 \text{ km}$ . Die Gitterweite ist isotrop und beträgt 20 m. Die anfänglichen Vertikalprofile der potentiellen Temperatur  $\theta$  und spezifischen Feuchte  $q_v$  basieren auf Messungen der BOMEX-Kampagne (*Barbados Oceanographic and Meteorological Experiment*, Holland und Rasmusson, 1973) von flachen Kumuluswolken in der Passatwindregion, die von Siebesma und Cuijpers (1995) und Siebesma et al. (2003) für LES-Simulationen linear approximiert wurden. Die entsprechenden Profile sind in Abbildung 4.1(a) und 4.1(b) dargestellt. Um die Konfiguration einfach zu halten, werden bei diesen Simulationen keine anderen Anfangs-

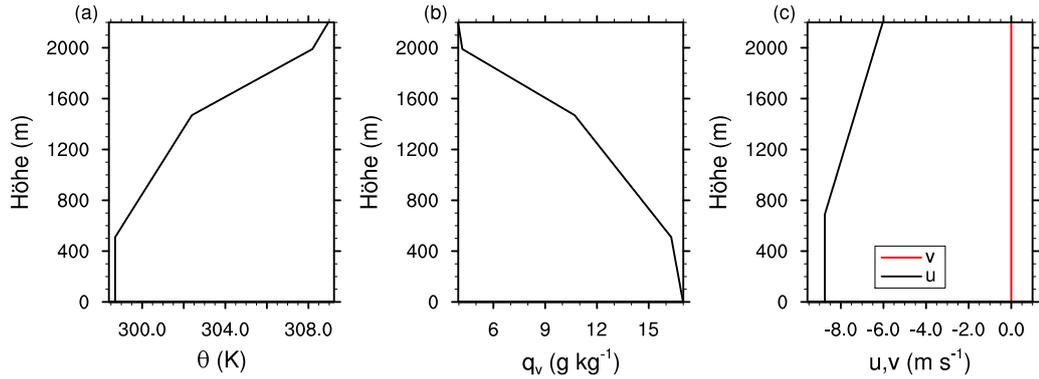


Abbildung 4.1: Anfängliche Vertikalprofile von den Simulationen einer idealisierten Wolke, die analog zur BOMEX-Konfiguration von Siebesma et al. (2003) gewählt wurden. Dargestellt sind die potentielle Temperatur  $\theta$  (a), die spezifische Feuchte  $q_v$  (b) und der geostrophische Wind  $u_g$  und  $v_g$  (c).

und Randbedingungen der BOMEX-Konfiguration von Siebesma et al. (2003) wie z. B. mittlerer Wind (siehe Abbildung 4.1 (c)) und großskalige Quell- und Tendenzterme verwendet. Zu Beginn der Simulation werden lediglich einmalig zufällige Störungen auf das horizontale Geschwindigkeitsfeld aufgeprägt, um die Symmetrie der Anfangsbedingungen zu durchbrechen und Turbulenz anzuregen. Diese Störungen haben eine maximale Amplitude von  $0,25 \text{ m s}^{-1}$  und werden zwischen  $z = 50 \text{ m}$  und  $z = 1270 \text{ m}$  aufgeprägt.

Für die Simulationen mit dem LCM werden zu Beginn der Simulation Supertropfen im gesamten Modellgebiet bis in eine Höhe von 2800 m freigesetzt.<sup>1</sup> Zur Vereinfachung haben alle Supertropfen anfänglich die gleiche lösliche Aerosolmasse von  $M_s = 10^{-15} \text{ g NaCl}$ . Die Anfangsradien können allerdings variieren und werden mit Hilfe der Diffusionsgleichung (3.70) entsprechend der jeweiligen lokalen Temperatur und spezifischen Feuchte berechnet. Die anfänglichen Radien variieren zwischen  $0,06 \mu\text{m}$  und  $0,1 \mu\text{m}$ . Der mittlere Abstand der Supertropfen beträgt zu Beginn  $4,5 \text{ m}$ . Im Mittel befinden sich damit knapp 88 Supertropfen in jedem Gittervolumen und etwa 188,8 Millionen im gesamten Modellgebiet. Alle Supertropfen haben zu Beginn einen Wichtungsfaktor von  $A = 9,0 \cdot 10^9$  und repräsentieren damit eine Anzahldichtekonzentration von rund  $99 \text{ cm}^{-3}$ . Die Supertropfen werden am oberen und unteren Modellrand absorbiert, für die horizontalen Ränder werden zyklische Randbedingungen gewählt. Standardmäßig wird der nicht-turbulente Kollisionskernel, der Hall-Kernel, verwendet. Dementsprechend werden diese Simulationen im Folgenden mit LCM Hall gekennzeichnet.

Neben den Simulationen mit dem LCM wird die idealisierte Wolke auch mit den beiden anderen in PALM implementierten Wolkenphysikparametrisierungen simuliert, dem Ein-Momenten-Schema und dem Zwei-Momenten-Schema ohne Turbulenzeinfluss auf die Autokonversion und Akkreszenz (siehe Abschnitt 3.1.1). Diese Simulationen werden im Folgenden mit 1MOM und 2MOM Long gekennzeichnet. Bei der 2MOM

<sup>1</sup>Aufgrund der Inversion der potentiellen Temperatur zwischen 1500 m und 2000 m (siehe Abbildung 4.1 (a)) wird das vertikale Anwachsen der Wolke abgebremst, so dass die maximale Wolkenobergrenze unterhalb von 2200 m liegt (siehe Abbildung 4.8 (e)). Aerosole, die sich deutlich oberhalb dieser Wolke befinden haben keinen Einfluss auf die Wolkenentwicklung und können deshalb vernachlässigt werden.

Long-Simulation werden bis auf den Turbulenzeinfluss alle in Abschnitt 3.1.1 vorgestellten Prozesse berücksichtigt, d. h. Autokonversion, Akkreszenz, Selbsteinfang, Zerplatzen von Regentropfen, Verdunstung von Niesel- und Regentropfen inklusive Ventilationseffekt sowie Sedimentation von Wolken-, Niesel- und Regentropfen. Für die Wolkentropfenkonzentration wird ein Wert von  $100 \text{ cm}^{-3}$  gewählt, analog zu der durch die Supertropfen repräsentierten Anzahlkonzentration.

Die idealisierte Wolke wird über einen Zeitraum von 1800 s simuliert. Für die LCM-Simulationen wird ein fester Zeitschritt von  $\Delta t = 0,1 \text{ s}$  und für die Simulationen mit 1MOM und 2MOM ein variabler Zeitschritt von  $\Delta t \approx 3,5 \text{ s}$  verwendet.

## 4.2 Entwicklung der Wolke und Vergleich mit Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen

Die Entwicklung der anfänglichen Warmluftblase hängt maßgeblich von den Eigenschaften der Grenzschicht ab. Die hier simulierte typische Grenzschicht der Passatwindzone besteht aus drei Schichten: einer gut durchmischten Schicht mit neutraler Schichtung ( $z < 520 \text{ m}$ ), einer bedingt-labilen Schicht, die nur für gesättigte Luftpakete labil geschichtet ist ( $520 \text{ m} < z < 1500 \text{ m}$ ) und einer Inversionsschicht mit stabiler Schichtung ( $z > 1500 \text{ m}$ ). Die flache Kumulusbewölkung in der Passatwindzone bildet sich im Allgemeinen in der bedingt-labilen Schicht, oberhalb von aufsteigenden Warmluftblasen, die sich durch Erwärmung vom Boden ablösen (Stull, 2009). Diese sogenannten Passatwindwolken erreichen eine vertikale Erstreckung von bis zu 2 km und produzieren aufgrund ihrer geringen Lebensdauer in der Regel keinen Niederschlag (Betts, 1973).

Bei den hier vorgestellten Simulationen wird die Wolke ebenfalls durch eine in Bodennähe freigesetzte Warmluftblase ausgelöst. Diese steigt zunächst innerhalb der gut durchmischten Grenzschicht auf. Nach etwa 460 s erreicht sie die bedingt-labile Schicht in der die Kondensationsprozesse einsetzen. Dabei werden CCN aktiviert und die entstandenen Wolkentropfen wachsen durch Kondensation an. Die Basis der entstehenden Wolke liegt bei etwa  $z = 550 \text{ m}$ . Durch die bei der Kondensation freiwerdende latente Wärme steigt die Warmluftblase weiter auf. Innerhalb der Wolke können dadurch die Wolkentropfen durch Kondensation weiter anwachsen und später vor allem durch Koagulation größere Niesel- und Regentropfen gebildet werden. Im Folgenden werden Tropfen mit  $1 \mu\text{m} < r < 40 \mu\text{m}$  als Wolkentropfen und Tropfen mit  $r \geq 40 \mu\text{m}$ , analog zu Seifert und Beheng (2001), als Niesel- und Regentropfen bezeichnet. Im weiteren Verlauf wird das vertikale Anwachsen der Wolke schließlich durch die Inversion abgebremst, so dass die Wolkenobergrenze in einer Höhe zwischen 2000 m und 2200 m liegt. Entrainment von trockenerer Umgebungsluft und das Ausfallen von Niesel- und Regentropfen führen schließlich zur Auflösung der Wolke.

Diese zeitliche Entwicklung der idealisierten Wolke ist anhand von drei Simulationszeitpunkten (800 s, 1200 s und 1600 s) in den Abbildungen 4.2, 4.3 und 4.4 für die Simulationen LCM Hall und 2MOM Long dargestellt. Die Abbildungen zeigen mittlere y-z-Schnitte und Vertikalprofile innerhalb der Wolken von der Vertikalgeschwindigkeit  $w$  (a-c), der turbulenten kinetischen Energie  $e$  (d-f), des Flüssigwassergehaltes  $q_l$  (g-i) und der relativen Feuchte  $f$  (j-l). Zusätzlich dazu ist in Abbildung 4.6 der Niesel- und Regenwassergehalt  $q_r$  nach 1600 s dargestellt. Die Ergebnisse der 1MOM-Simulation sind für große Teile des Simulationszeitraums nahezu identisch mit denen von 2MOM Long, da die Entwicklung der Wolke bis 1200 s fast ausschließlich von den Kondensationsprozessen bestimmt wird.

sationsprozessen abhängt und diese bei 1MOM und 2MOM Long mit dem gleichen Ansatz parametrisiert werden. Zugunsten der Übersichtlichkeit werden die Ergebnisse von 1MOM für 800 s und 1200 s deshalb nur im Anhang B (Abbildungen B.1 und B.2) dargestellt. Die mittleren y-z-Schnitte und Vertikalprofile innerhalb der Wolken von 1MOM und LCM Hall nach 1600 s zeigt Abbildung 4.5.

Nach 800 s Simulationszeit befindet sich die Warmluftblase in der bedingt-labilen Schicht. Durch das Einsetzen der Kondensationsprozesse hat sich bei allen drei Simulationen zu diesem Zeitpunkt eine Wolke gebildet (siehe Abbildung 4.2 (g-i) und B.1 (g-i)). Dabei ist zu erkennen, dass die vertikale Erstreckung der Wolke aufgrund der niedrigeren Wolkenbasis und der höheren Wolkenobergrenze bei 2MOM Long/1MOM im Vergleich zu LCM Hall größer ist. Außerdem treten bei 2MOM Long/1MOM im Vergleich zu LCM Hall innerhalb der Wolke keine Übersättigungen auf und die Feuchte liegt konstant bei 100 % (siehe Abbildung 4.2 (j-l) und B.1 (j-l)). Die Ursache für diese Unterschiede liegt in der Parametrisierung des Kondensationsprozesses bei 2MOM Long/1MOM: Der Wolkenwassergehalt wird mit Hilfe der Sättigungsadjustierung diagnostiziert, wobei jegliche Übersättigung sofort kondensiert und dementsprechend keine Übersättigungen auftreten. Auf der anderen Seite verdunstet das Wolkenwasser bei Untersättigung sofort, so dass die relative Feuchte innerhalb der Wolken immer 100 % beträgt solange kein Niesel- oder Regenwasser  $q_r$  vorhanden ist. Die Nukleation und das Tropfenwachstum durch Kondensation werden bei dieser Parametrisierung nur implizit berücksichtigt. Bei der Simulation mit LCM werden diese Prozesse jedoch explizit berechnet, d. h. für die Aktivierung und das Tropfenwachstum ist Übersättigung notwendig. Da diese Prozesse später einsetzen ist der Flüssigwassergehalt  $q_l$  und die Größe der Wolke bei der LCM-Simulation geringer. In Folge dessen wird weniger latente Wärme freigesetzt, wodurch auch die vertikale Geschwindigkeit  $w$  (siehe Abbildung 4.2 (a-c) und B.1 (a-c)) und die TKE  $e$  (siehe Abbildung 4.2 (d-f) und B.1 (d-f)) bei LCM Hall geringer sind als bei 2MOM Long/1MOM. Zu diesem Zeitpunkt sind die Abweichungen allerdings noch gering, da die Wolke erst wenige Minuten alt ist, so dass die räumliche Verteilung der Größen und die Form der Wolke gut übereinstimmen. Die Maximalwerte von  $e$  werden an den äußeren und vor allem oberen Rändern der Wolke erreicht, da dort der Einfluss von Mischungsprozessen und Entrainment von trockenerer Umgebungsluft am größten ist (siehe Abbildung 4.2 (e,f) und B.1 (e,f)). Durch die Mittelung entlang der x-Achse bei den y-z-Schnitten werden die Maximalwerte allerdings insbesondere am Rand der Wolke verwischt und abgeflacht dargestellt. Bei LCM ist das Maximum von  $f$  im Kern der Wolke nahe der Wolkenbasis zu finden (siehe Abbildung 4.2 (j,l)), in dem Bereich wo der Einfluss des Entrainments am geringsten ist.  $q_l$  nimmt innerhalb der Wolke mit zunehmender Höhe zu, da das mittlere Alter und somit die mittlere Größe der hauptsächlich an der Wolkenbasis aktivierten Wolkentropfen mit der Höhe zunimmt (siehe Abbildung 4.2 (g-i) und B.1 (g-i)). Der Verlauf von  $w$  zeigt die aufsteigende Warmluftblase und die ausgleichende Absinkbewegungen am Rand der Wolke (siehe Abbildung 4.2 (a-c) und B.1 (a-c)).

Mit zunehmendem Alter der Wolke nehmen auch die Differenzen zu, die aus dem früher einsetzenden Kondensationswachstum bei 2MOM Long/1MOM im Vergleich zu LCM Hall resultieren. Nach 1200 s Simulationszeit sind bei allen Größen in Abbildung 4.3 bzw. B.2 bereits deutliche Unterschiede zwischen LCM Hall und 2MOM Long/1MOM zu erkennen. Zu diesem Zeitpunkt ist die Wolke weiter angewachsen, wobei lediglich der obere Teil der Wolke bei 2MOM Long/1MOM bereits die Inversionsschicht erreicht hat. Die fortlaufenden Kondensationsprozesse innerhalb der Wolke

## 4.2 Entwicklung der Wolke und Vergleich mit Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen

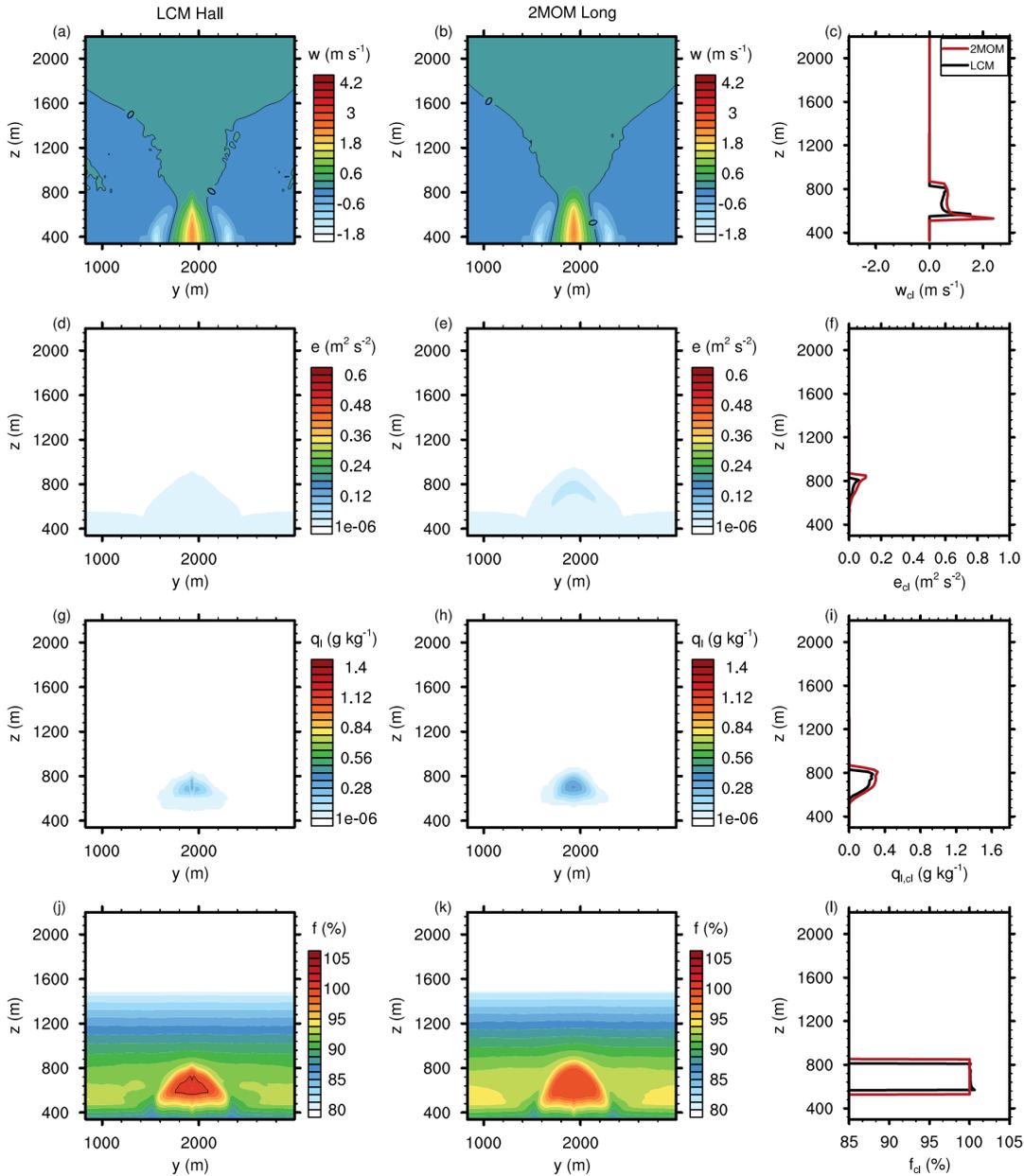


Abbildung 4.2: y-z-Schnitte und Vertikalprofile von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit einem Lagrangeschen Wolkenmodell LCM (links) und einem Zwei-Momenten-Schema 2MOM (Mitte) nach 800 s Simulationszeit. Die Simulationen werden mit nicht-turbulentem Kollisionskernel (Hall- bzw. Long-Kernel) durchgeführt. Dargestellt sind die Vertikalgeschwindigkeit  $w$  (a-c), die turbulente kinetische Energie  $e$  (d-f), der Flüssigwassergehalt  $q_l$  (g-i) und die relative Feuchte  $f$  (j-l). Die y-z-Schnitte sind in x-Richtung gemittelt; die Vertikalprofile zeigen die mittleren Werte innerhalb der Wolken für LCM (schwarz) und 2MOM (rot). Gittervolumen werden als Wolke identifiziert, wenn der darin enthaltene Flüssigwassergehalt größer als  $0,01 \text{ g kg}^{-1}$  ist. Die schwarzen Linien repräsentieren die Isolinien  $w = 0 \text{ m s}^{-1}$  in (a,b) bzw.  $f = 100 \%$  in (j,k).

## 4.2 Entwicklung der Wolke und Vergleich mit Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen

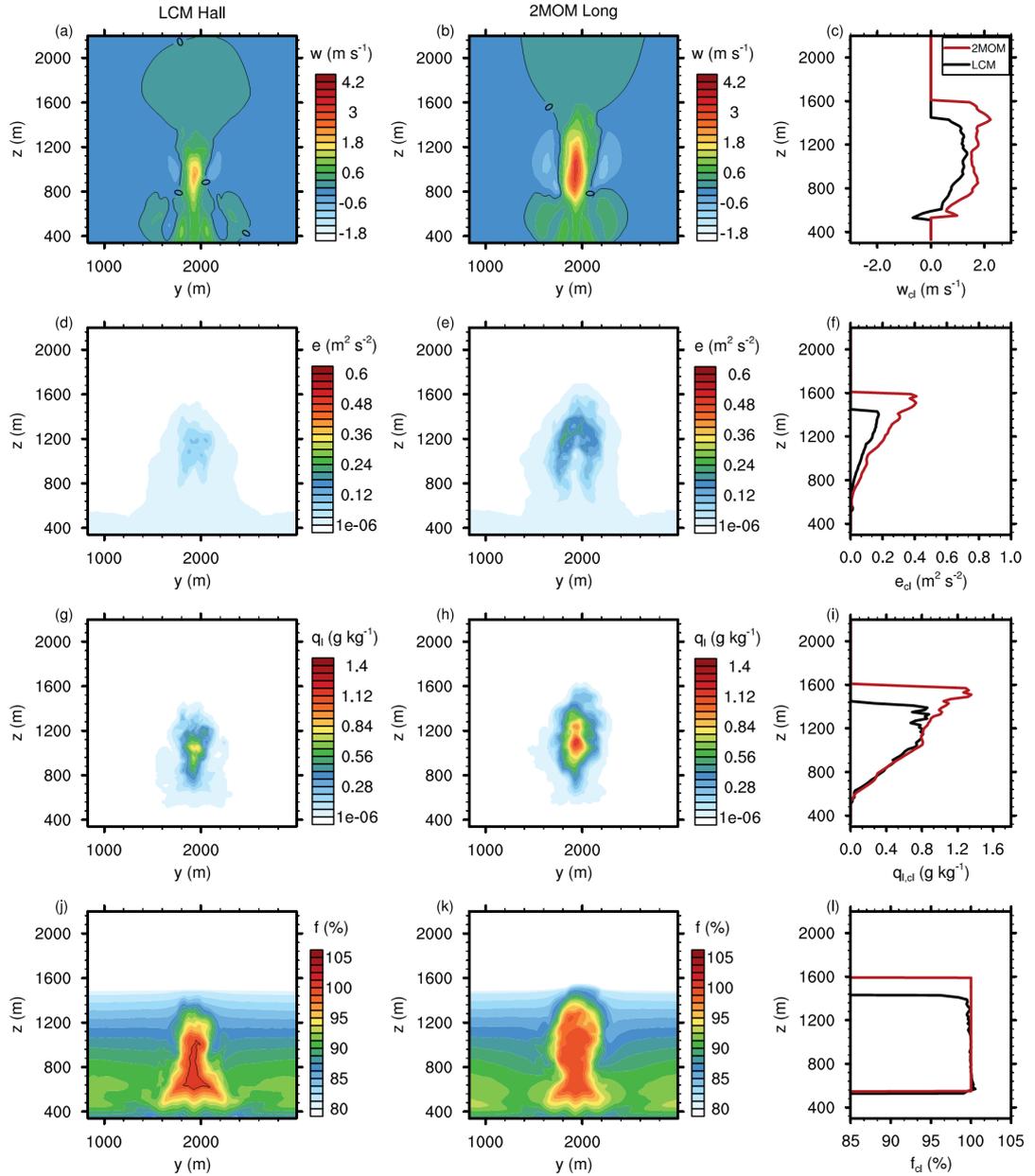


Abbildung 4.3:  $y$ - $z$ -Schnitte und Vertikalprofile von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit LCM und 2MOM nach 1200 s Simulationszeit (analog zu Abb. 4.2).

haben zu einer deutlichen Zunahme von  $q_1$  und damit zusammenhängend auch von  $w$  und schließlich  $e$  geführt (siehe Abbildung 4.3 (a-i) und B.2 (a-i)). Dabei sind die Maximalwerte von  $w$ ,  $e$  und  $q_1$  sowie die vertikale Erstreckung der Wolke erwartungsgemäß bei 2MOM Long/1MOM deutlich größer als bei LCM Hall. Die qualitativen Verläufe der Profile von  $w$ ,  $e$ ,  $q_1$  und  $f$  innerhalb der Wolke sind im Vergleich zum vorherigen Zeitpunkt gleich geblieben und stimmen für alle drei Simulationen überein. Bei den einzelnen Modellen fallen Unterschiede der räumlichen Verteilung von  $e$  und  $q_1$  zwischen den  $y$ - $z$ -Schnitten (entlang der  $x$ -Achse gemittelt) und den Profilen (über

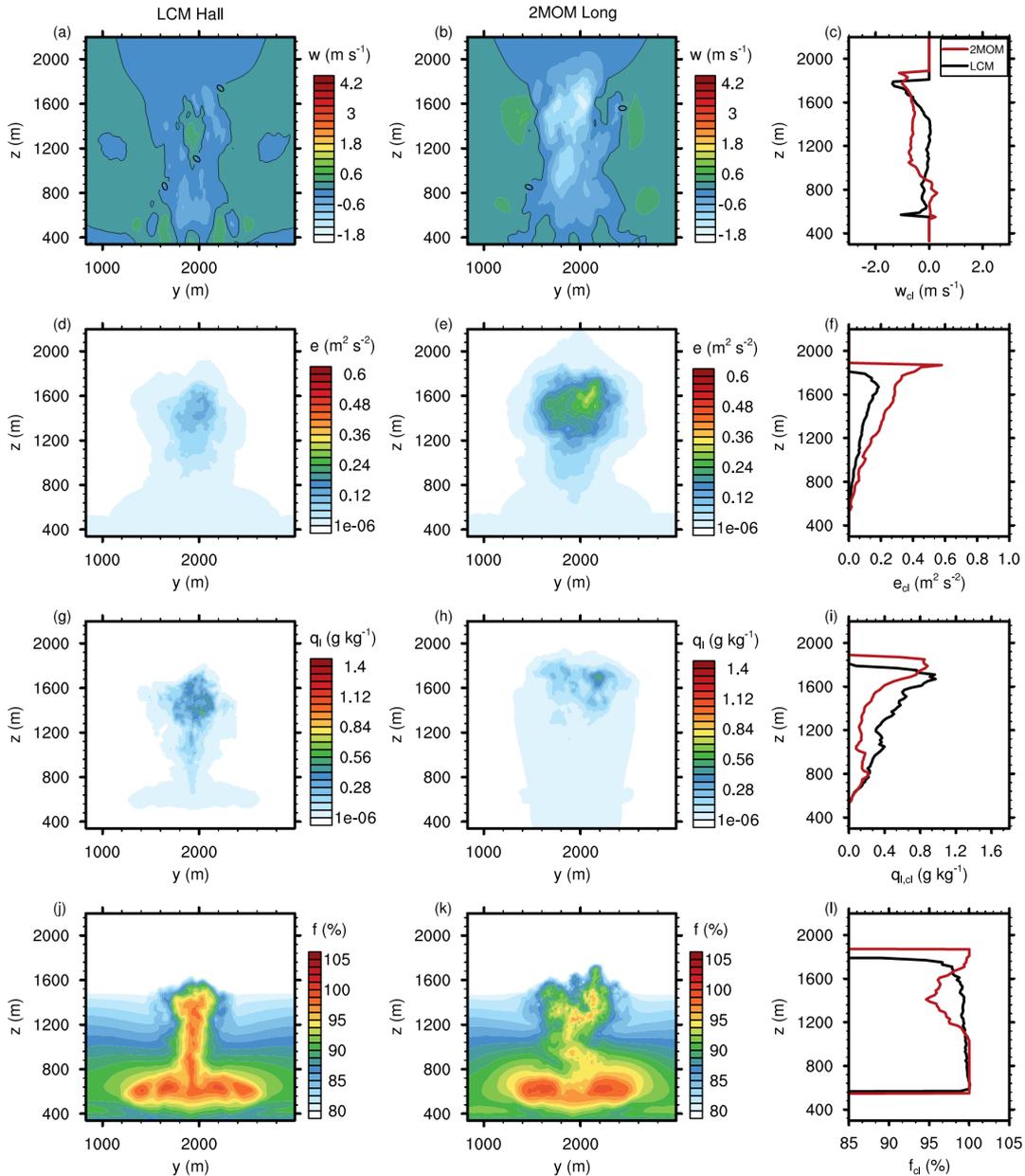


Abbildung 4.4: y-z-Schnitte und Vertikalprofile von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit LCM und 2MOM nach 1600 s Simulationszeit (analog zu Abb. 4.2).

die Wolkenbereiche gemittelt) auf, besonders im oberen Bereich der Wolke. Diese Differenzen werden durch die verschiedenen Mittelungen hervorgerufen. Die zufälligen Störungen zu Beginn der Simulation führen dazu, dass sich die Warmluftblase im gesamten Modellgebiet unterschiedlich entwickelt. Dadurch variiert auch die vertikale Erstreckung und Wolkenobergrenze, so dass bei der Mittelung entlang der x-Achse vor allem in größeren Höhen über Bereiche mit und ohne Wolke gemittelt wird, wodurch sich ein geringerer Mittelwert ergibt. Wie bereits erwähnt werden auch die Maximalwerte dadurch verwischt und abgeflacht. Im Gegensatz dazu werden die Profile nur über Wolkenbereiche gemittelt.

## 4.2 Entwicklung der Wolke und Vergleich mit Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen

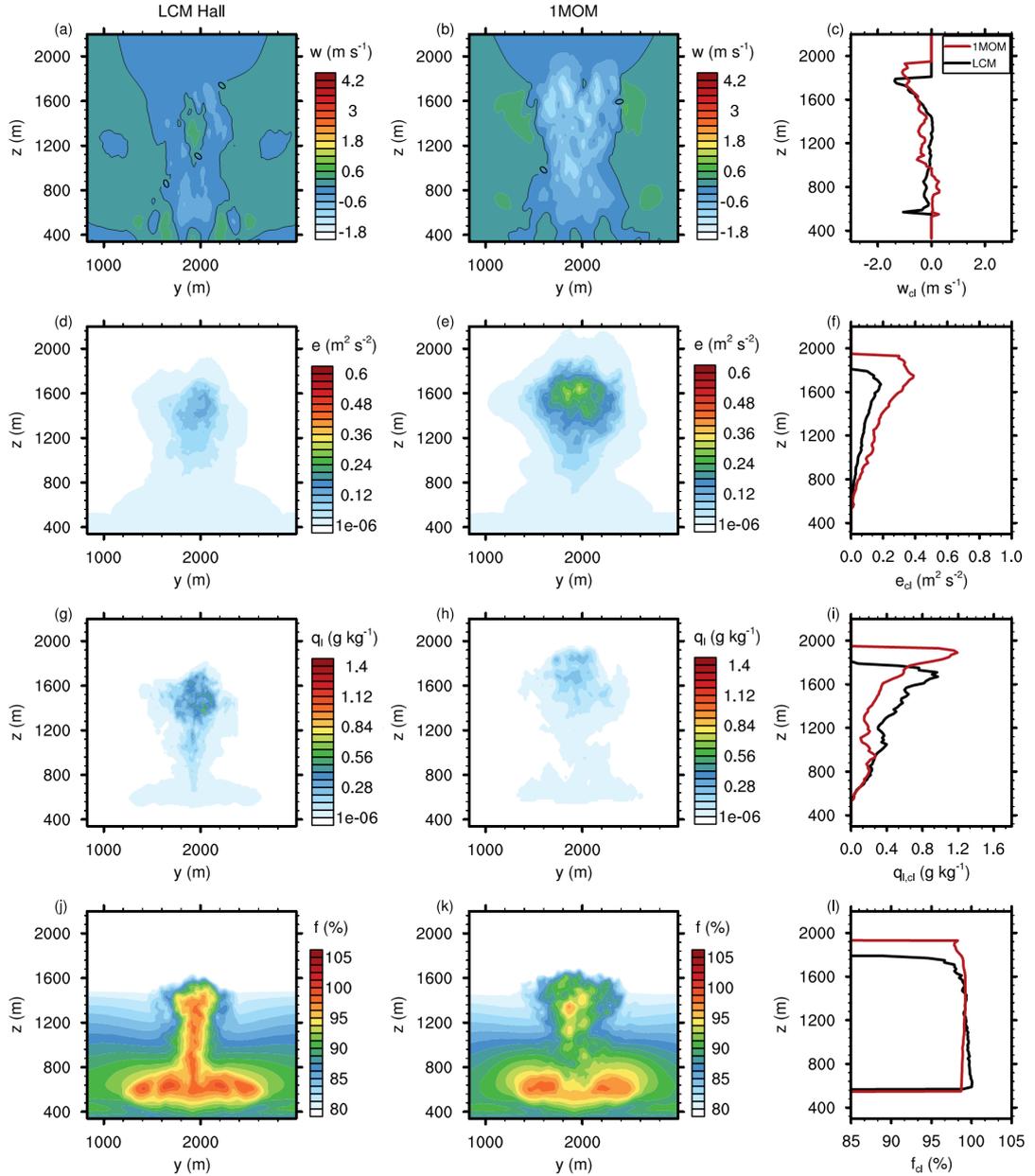


Abbildung 4.5:  $y$ - $z$ -Schnitte und Vertikalprofile von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit LCM und 1MOM nach 1600 s Simulationszeit (analog zu Abb. 4.2).

Im weiteren Verlauf der Simulation wächst die Wolke weiter an. Innerhalb der Inversionsschicht wird die Aufwärtsbewegung durch die negativ werdende Differenz der virtuellen Temperatur zur Umgebung abgebremst und die Wolke dehnt sich horizontal aus. Durch den zunehmenden Einfluss des Entrainments nimmt dabei auch die relative Feuchte innerhalb der Wolke weiter ab. Dadurch kommt es vermehrt zu Evaporation der Wolkentropfen, was eine Temperaturabnahme und damit das Einsetzen von Abwärtsbewegungen zur Folge hat. Die Wolke löst sich auf. Nach 1600 s Simulationszeit hat dieser Prozess bei 2MOM Long und 1MOM bereits eingesetzt und  $q_i$  hat sich im Vergleich zum vorherigen Zeitpunkt verringert (siehe Abbildung 4.4 (h,i) und 4.5 (h,i)). Damit

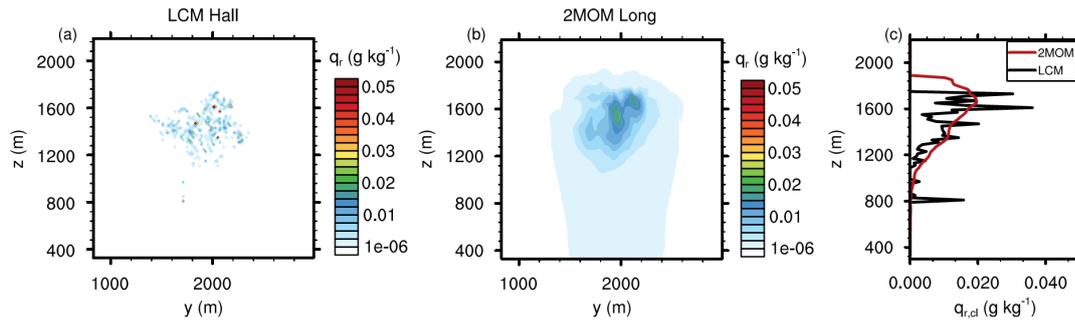


Abbildung 4.6: y-z-Schnitte und Vertikalprofile des Regenwassergehaltes  $q_r$  von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit LCM und 2MOM nach 1600 s Simulationszeit (analog zu Abb. 4.2).

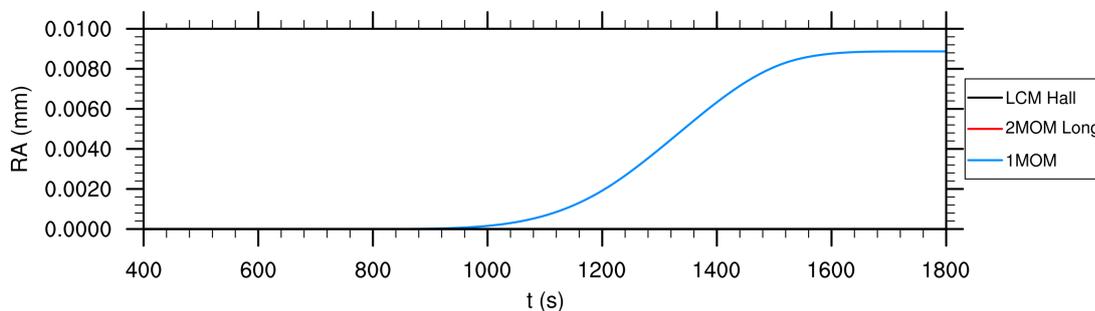


Abbildung 4.7: Zeitreihen der mittleren Niederschlagsmenge RA am Boden von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit LCM Hall, 2MOM Long und 1MOM.

einhergehend ist der gesamte obere Wolkenbereich durch negative  $w$  gekennzeichnet (siehe Abbildung 4.4 (b,c) und 4.5 (b,c)). Bei der LCM-Simulation ist aufgrund der verzögerten Entwicklung noch ein kleiner Bereich mit minimalen Aufwinden vorhanden (siehe Abbildung 4.4 (a,c)). Als Ausgleichsbewegung zu den Abwinden am Rand der Wolke haben sich unterhalb der Wolkenbasis neue Aufwinde gebildet, die dort die Wolke erhalten. Die qualitativen Verläufe der Profile von  $e$  und  $q_l$  stimmen bei allen Modellen überein und zeigen kaum Veränderungen zu den vorherigen Zeitpunkten. Auffällig ist allerdings der veränderte Verlauf des Profils von  $f$  bei 2MOM Long, mit einem Minimum in einer Höhe von etwa 1400 m. Relative Feuchten kleiner als 100% innerhalb der Wolke können bei 2MOM Long aufgrund des Vorhandenseins von Niesel- und Regenwasser entstehen. Sie treten in Gittervolumen auf, in denen das gesamte Wolkenwasser verdunstet ist, aber noch genug Niesel- und Regenwasser vorhanden ist, um das Gittervolumen als Wolke zu identifizieren. Abbildung 4.6 (b,c) zeigt, dass in den entsprechenden Höhen  $q_r$  vorhanden ist. Die Verdunstung des Wolkenwassers im Bereich des Minimums von  $f$  ist auf Entrainment zurückzuführen.

Auch in den anderen Modellen hat sich seit dem letzten Zeitpunkt Niesel- und Regenwasser gebildet, dass in Form von  $q_r$  im Bereich der Wolke (2MOM Long und LCM, Abbildung 4.6) bzw. als Niederschlagsmenge am Boden RA (engl. *rain amount*, 1MOM, Abbildung 4.7) zu finden ist. Die 2MOM Long und LCM-Simulationen zeigen dabei eine gute Übereinstimmung des qualitativen Verlaufs von  $q_r$  innerhalb der Wolke, mit maximalen Werten im oberen Drittel, wo das Tropfenwachstum durch Koagulation

typischerweise am größten ist. Die Ursache für die größere Variation von  $q_r$  bei LCM Hall im Vergleich zu 2MOM Long ist, dass  $q_r$  bei der LCM Simulation durch die Supertropfen bestimmt wird.  $q_r$  ist dementsprechend null wenn keine Supertropfen mit  $r \geq 40 \mu\text{m}$  im Gittervolumen vorhanden sind. Da die Niesel- und Regentropfenzkonzentration in flachen Kumuluswolken sehr gering ist (im Bereich von einigen Tropfen pro  $l^{-3}$ , Pruppacher und Klett, 1997), variiert die räumliche Verteilung von  $q_r$  stark und hängt, wie später noch diskutiert wird, auch von der Anzahl der Supertropfen ab. Bei 2MOM Long ist  $q_r$  dagegen ein skalares Feld, das, vor allem auch aufgrund von physikalischer Diffusion, einen stetigen Verlauf aufweist. Deshalb treten dort keine vergleichbaren Schwankungen auf. Die Unterschiede bei der Wolkenobergrenze können auf die verzögerte Entwicklung der LCM-Simulation im Vergleich zu 1MOM/2MOM Long zurückgeführt werden. 1MOM produziert im Vergleich zu den anderen Simulationen Niederschlag am Boden (engl. *rain amount*, RA, siehe Abbildung 4.7), da bei dieser Wolkenphysikparametrisierung kein  $q_r$  gebildet wird, sondern  $q_l > q_{l,\text{krit}} = 0,5 \text{ g kg}^{-1}$  unter Berücksichtigung einer Zeitkonstante direkt in RA umgewandelt wird. Eigentlich ist diese Simulation so konfiguriert, dass kein signifikanter Niederschlag am Boden beobachtet wird, da ausfallende Niesel- und Regentropfen in der Regel auf dem Weg zum Erdboden verdunsten. Dieser Prozess wird bei 1MOM allerdings nicht berücksichtigt. Andere Vergleiche mit Spektralmodellen haben außerdem gezeigt, dass diese Art der Parametrisierung die Autokonversionsrate insbesondere im anfänglichen Stadium der Wolkenentwicklung überschätzt und in Folge dessen zu früh Niederschlag gebildet wird (z. B. Shiino, 1983; Beheng und Doms, 1986).

Die Unterschiede der Wolkenentwicklung der einzelnen Simulationen und ihre Ursachen sind noch einmal zusammenfassend in Abbildung 4.8 anhand der Zeitreihen für den Gesamtbedeckungsgrad<sup>2</sup> (engl. *total cloud cover*, TCC) (a), den mittleren Flüssigwasserpfad<sup>3</sup> (engl. *liquid water path*, LWP) (b), den mittleren Niesel- und Regenwasserpfad<sup>4</sup> (engl. *rain water path*, RWP) (c), die maximale Vertikalgeschwindigkeit  $w_{\text{max}}$  (d) und die maximale Wolkenobergrenze  $z_{\text{ct}}$  (e) dargestellt. Die Mittelwerte beziehen sich dabei auf das gesamte Modellgebiet. Die anfänglichen Verläufe von TCC,  $w_{\text{max}}$  und  $z_{\text{ct}}$  zeigen deutlich, dass sich die Wolke bei der LCM-Simulation trotz gleicher Vertikalgeschwindigkeit der Warmluftblase deutlich später bildet als bei 2MOM Long und 1MOM. Dies begründet sich in der bereits angesprochenen expliziten Simulation des Nukleationsprozesses beim LCM im Vergleich zur vereinfachten Sättigungsadjustierung bei 1MOM/2MOM Long. Der weitere Verlauf von TCC zeigt, dass die zeitliche Verschiebung der Wolkenentwicklung bei LCM während der gesamten Simulation bestehen bleibt und mit zunehmender Zeit größer wird. Die Verläufe von LWP, RWP und  $z_{\text{ct}}$  machen zusätzlich deutlich, dass die Wolke bei LCM nicht nur zeitlich versetzt entsteht, sondern auch etwas unterschiedliche Eigenschaften entwickelt. So ist z. B. bei LCM die maximale Wolkenobergrenze und damit die vertikale Ausdehnung, der maximale LWP und der maximale RWP geringer als bei 1MOM und 2MOM Long. Die Unterschiede lassen sich jedoch alle auf die zeitliche Verzögerung des Einsetzens der Nukleations- und Kondensationsprozesse zurückführen, die nach der Bildung auch das Wachstum

<sup>2</sup>Der Gesamtbedeckungsgrad entspricht dem Anteil der vertikalen Säulen, die mindestens ein als Wolke identifiziertes Gittervolumen beinhalten.

<sup>3</sup>Der mittlere Flüssigwasserpfad entspricht dem räumlichen Mittel des vertikal integrierten  $q_l$ , der über das Modellgebiet gemittelt wird.

<sup>4</sup>Der mittlere Niesel- und Regenwasserpfad entspricht dem räumlichen Mittel des vertikal integrierten  $q_r$ .

## 4.2 Entwicklung der Wolke und Vergleich mit Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen

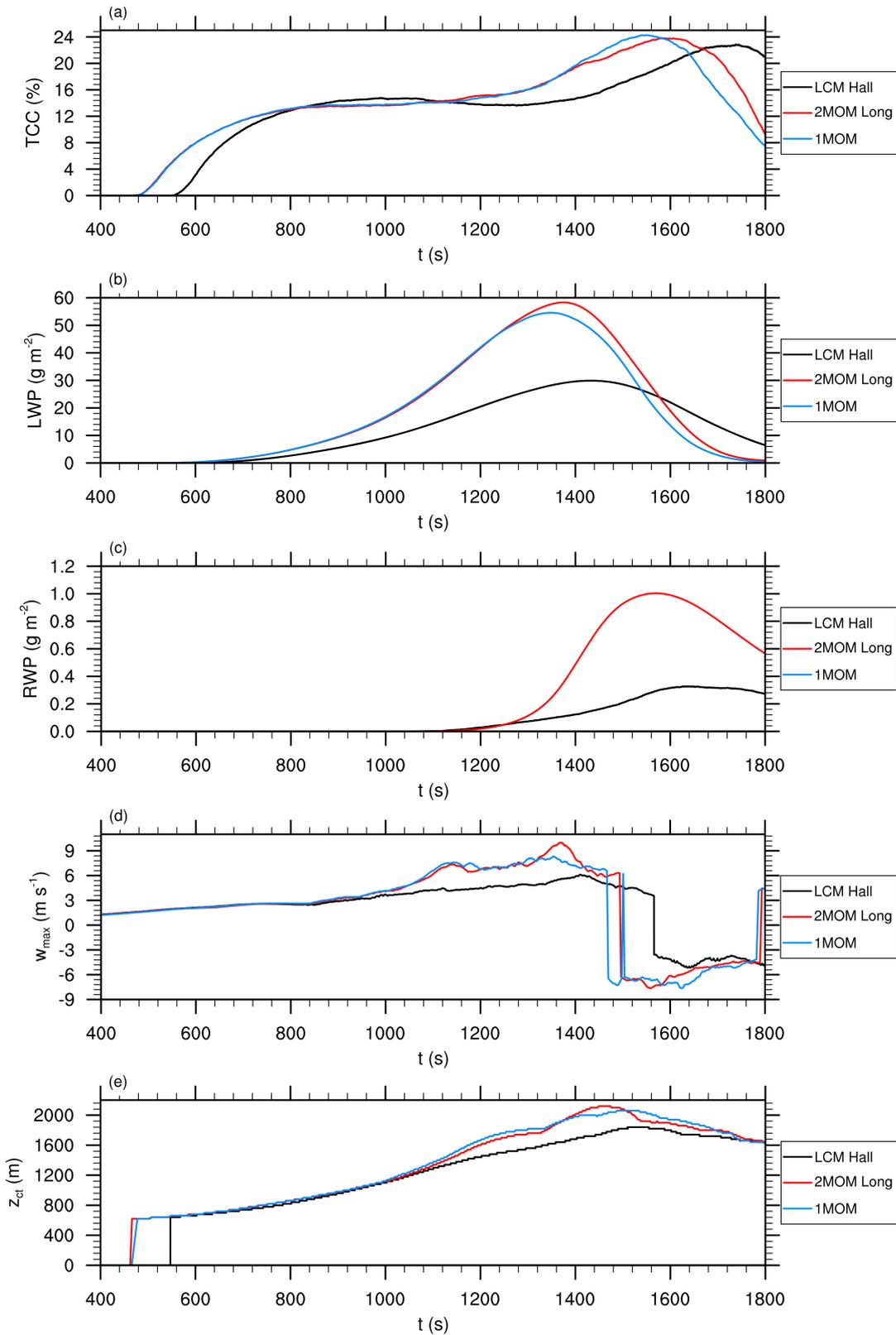


Abbildung 4.8: Zeitreihen von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit LCM Hall, 2MOM Long und 1MOM. Dargestellt sind der Gesamtbedeckungsgrad TCC (a), der mittlere Flüssigwasserpfad LWP (b), der mittlere Regenwasserpfad RWP (c), die vom Betrag her maximale Vertikalgeschwindigkeit  $w_{\max} = \max(|w|) \cdot \text{sign}(w)$  (d) und die maximale Wolkenobergrenze  $z_{\text{ct}}$  (e).

der Wolke determinieren. Durch das frühere Einsetzen der Kondensationsprozesse bei 1MOM/2MOM Long wird innerhalb der bedingt-labilen Schichtung mehr  $q_1$  gebildet und dadurch mehr latente Wärme freigesetzt, die den Auftrieb und damit  $w$  vergrößert. Dadurch steigt auch  $z_{ct}$  an. Zusätzlich führt die größere Menge an LWP, die zu Beginn vor allem aus Wolkenwasser  $q_c$  besteht, dazu, dass durch Koagulation mehr RWP und bei 1MOM RA entstehen kann. Die Unterschiede werden auch dadurch verstärkt, dass bei diesem Setup die Wolkenentwicklung über große Teile hinweg durch die Nukleations- und Kondensationsprozesse dominiert wird. Diese Dominanz verdeutlicht der Vergleich der Ergebnisse von 1MOM und 2MOM Long, bei dem erst nach etwa 1300 s Simulationszeit erkennbare Differenzen auftreten<sup>5</sup>.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass das hier vorgestellte LCM die generelle Entwicklung der idealisierten Wolke mit ihren typischen Charakteristika im Vergleich zu den Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen reproduzieren kann. Die aufgetretenen Differenzen können vor allem auf die explizite Berechnung der Nukleation und des Tropfenwachstums durch Kondensation im LCM zurückgeführt werden, wohingegen diese Prozesse bei den Bulk-Modellen nur parametrisiert werden. Vergleichbare Unterschiede wurden auch bei Vergleichen von Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen mit Spektralmodellen beobachtet (z. B. Clark, 1973; Soong, 1974; Shiino, 1983). Für eine vollständige Validierung des Modells reicht dieser Vergleich allerdings nicht aus, dafür wäre ein Vergleich mit Messungen oder einem Spektralmodell wünschenswert. Ein Vergleich mit Messungen ist allerdings aufgrund der extremen Inhomogenität und der komplexen turbulenten Strömung von Wolken, sowie der an den Wolken- und Niederschlagsbildung beteiligten räumlichen und zeitlichen Skalen extrem schwierig. Ebenso ist ein Vergleich mit einem dreidimensionalen Spektralmodell aufgrund fehlenden Kooperationspartner (weltweit werden nur zwei bis drei geeignete Modelle betrieben) im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich gewesen. Allerdings ist eine Gegenüberstellung von Teilen des LCMs mit einem eindimensionalen Spektralmodell bereits in Planung. Dabei wird das Tropfenwachstum durch Koagulation und die Sedimentation der Tropfen für eine idealisierte Wolke verglichen.

### 4.3 Sensitivitätsstudien

Im Folgenden wird die Abhängigkeit der LCM-Simulationen von zwei wichtigen numerischen Modellparametern untersucht. Dabei handelt es sich um den Modellzeitschritt und die anfängliche Anzahl der Supertropfen. Diese beiden Parameter haben direkten Einfluss auf die für die Simulation notwendigen Computerressourcen. Auf der anderen Seite beeinflussen sie aber auch physikalische Prozesse innerhalb der Simulation, insbesondere die der Wolkenmikrophysik. Dabei werden die genauesten Ergebnisse für möglichst kleine Zeitschritte und eine möglichst hohe Anzahl von Supertropfen erwartet. Andererseits nimmt die erforderliche Rechenzeit mit abnehmendem Zeitschritt und zunehmender Supertropfenanzahl drastisch zu (Bedarf wächst linear mit sinkendem  $\Delta t$  und proportional zu  $N_p^2$ ). Zusätzlich steigt mit zunehmender Supertropfenanzahl auch der Speicherplatzbedarf. In diesem Abschnitt werden deshalb die Einflüsse dieser beiden Parameter untersucht. Das Ziel besteht darin die numerischen Grenzen des Modells zu untersuchen und ein Optimum aus bestmöglicher Genauigkeit bei geringstmöglichem

---

<sup>5</sup>Die beiden Simulationen unterscheiden sich nur bei der Parametrisierung der Niesel- und Regentropfenbildung.

Resourcenaufwand zu finden.

### 4.3.1 Zeitschritt

Der für die LCM-Simulation verwendete Zeitschritt beeinflusst von den wolkenmikrophysikalischen Prozessen vor allem die Nukleation und das Tropfenwachstum durch Kondensation bzw. Evaporation. Entscheidend ist dabei die zeitliche Entwicklung der Über- bzw. Untersättigung. Wird der Zeitschritt zu groß gewählt, können z. B. die in aufsteigenden Luftpaketen entstehenden Übersättigungen nicht hinreichend durch Kondensation abgebaut werden und werden deshalb zu groß. Dadurch wachsen wiederum die Wolkentropfen unverhältnismäßig schnell an. Auf der anderen Seite wird auch die Verdunstung der Wolkentropfen beeinflusst. Bei der Verdunstung von Wolkentropfen wird Wasserdampf frei, so dass die Untersättigung ausgeglichen wird. Während eines Zeitschrittes wird dieser Prozess aber nicht berücksichtigt, so dass bei zu großen Zeitschritten die Untersättigung zu stark anwachsen kann und dadurch die Tropfen zu schnell verdunsten. Außerdem wird durch den Zeitschritt auch das Tropfenwachstum durch Koagulation beeinflusst. Für die Parameterstudie werden vier LCM-Simulationen mit der in Abschnitt 4.1 beschriebenen Konfiguration durchgeführt. Der Zeitschritt variiert zwischen 0,05 s, 0,1 s, 0,5 s und 1 s. Die Simulation mit  $\Delta t = 0,1$  s stellt die Vergleichssimulation dar, deren Ergebnisse zum großen Teil in Abschnitt 4.2 vorgestellt werden.

Ein Vergleich der Wolkenentwicklung für die vier Simulationen mit unterschiedlichen Zeitschritten ist in Abbildung 4.9 anhand der Zeitreihen des Gesamtbedeckungsgrades TCC (a), des mittleren Flüssigwasserpfad LWP (b), des mittleren Niesel- und Regenwasserpfad RWP (c), der mittleren Wolkentropfenkonzentration  $N_c$  (d) und der mittleren Niesel- und Regentropfenkonzentration  $N_r$  (e) dargestellt. Ergänzend dazu zeigt Abbildung 4.10 die Zeitreihen des mittleren Wolkentropfenradius  $r_c$  (a), des mittleren Niesel- und Regentropfenradius  $r_r$  (b), des mittleren effektiven Radius  $r_{\text{eff}}$  (c) und des maximalen Radius  $r_{\text{max}}$  (d). In einem Gittervolumen ist  $r_{\text{eff}}$  definiert als

$$r_{\text{eff}} = \frac{\int_0^\infty n(r)r^3 dr}{\int_0^\infty n(r)r^2 dr} ,$$

$r_c$  und  $r_r$  als

$$r_c = \frac{\int_{1\mu\text{m}}^{40\mu\text{m}} n(r)r^4 dr}{\int_{1\mu\text{m}}^{40\mu\text{m}} n(r)r^3 dr} \quad \text{und} \quad r_r = \frac{\int_{40\mu\text{m}}^\infty n(r)r^4 dr}{\int_{40\mu\text{m}}^\infty n(r)r^3 dr} .$$

Die Tropfenradien  $r_c$  und  $r_r$  werden nur über die Gittervolumen gemittelt, die Wolken- bzw. Niesel- und Regentropfen enthalten. Alle anderen mittleren Größen beziehen sich allerdings auf das gesamte Modellgebiet.<sup>6</sup>

Die zeitlichen Verläufe in den Abbildungen 4.9 und 4.10 zeigen allesamt, dass die Wolkenentwicklung bei den vier Simulationen zu Beginn der Simulation nahezu identisch ist. Abweichungen sind erst nach 1100 s erkennbar, wenn der äußere Antrieb der Warmluftblase nachlässt und der Einfluss der Kondensationsprozesse, des Tropfenwachstums durch Koagulation und des Entrainments auf die Wolkenentwicklung zunimmt. Die deutlichsten Unterschiede sind bei den Niesel- und Regentropfengrößen  $r_r$ ,  $N_r$  und entsprechend RWP, sowie bei  $r_{\text{max}}$  zu sehen. Die Verläufe der Zeitreihen zeigen dabei

<sup>6</sup>Die Mittelung über das gesamte Modellgebiet ist der Grund dafür, dass z. B. die Wolkentropfenkonzentration deutlich kleiner als die innerhalb von Wolken ist.

### 4.3 Sensitivitätsstudien

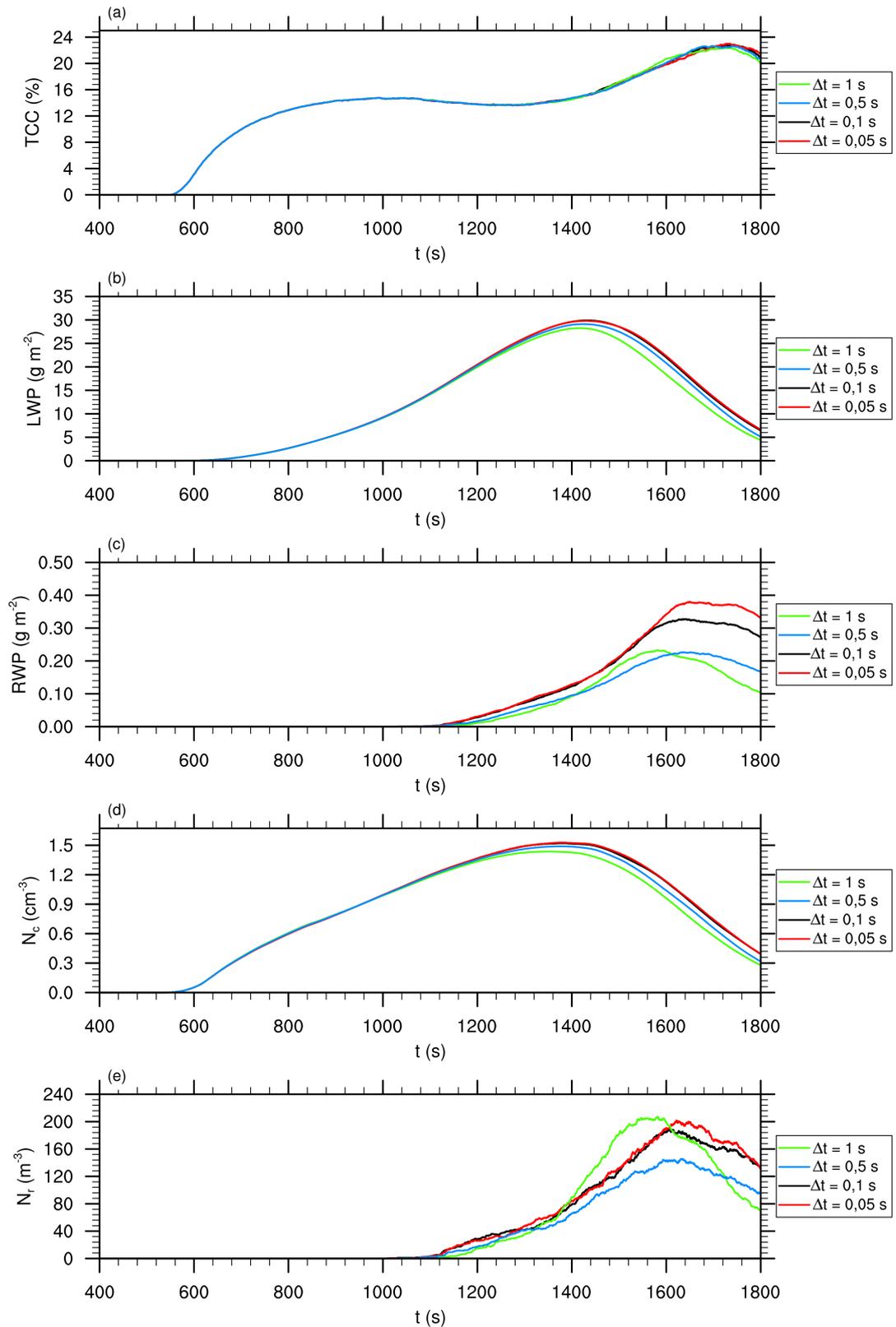


Abbildung 4.9: Zeitreihen von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Zeitschritten (1 s (grün), 0,5 s (blau), 0,1 s (schwarz) und 0,05 s (rot)). Dargestellt sind der Gesamtbedeckungsgrad TCC (a), der mittlere Flüssigwasserpfad LWP (b), der mittlere Regenwasserpfad RWP (c), die mittlere Wolkentropfenkonzentration  $N_c$  (d) und die mittlere Regentropfenkonzentration  $N_r$  (e).

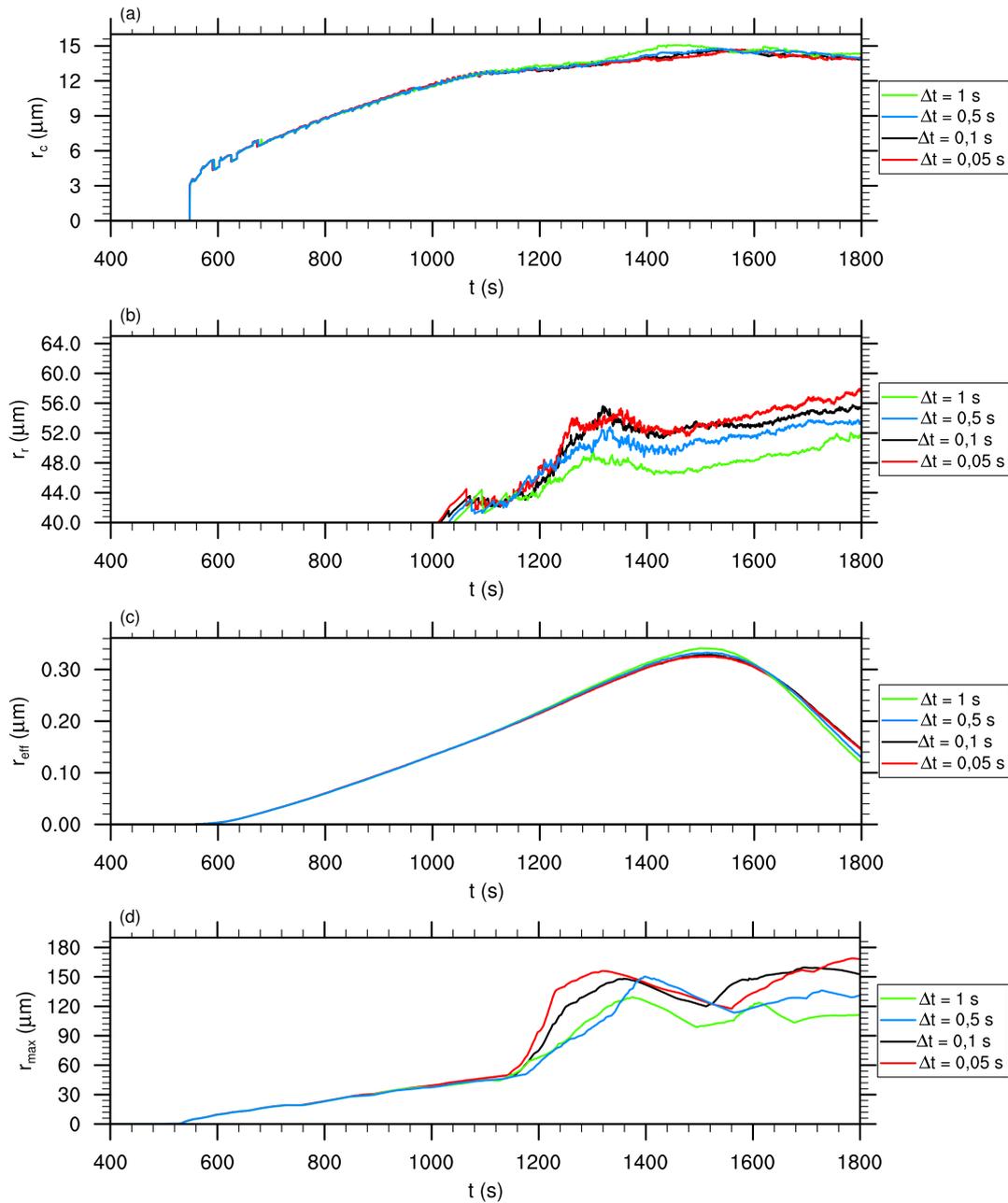


Abbildung 4.10: Zeitreihen von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Zeitschritten (analog zu Abb. 4.9). Dargestellt sind der mittlere Wolkentropfenradius  $r_c$  (a), der mittlere Regentropfenradius  $r_r$  (b), der mittlere effektive Radius  $r_{\text{eff}}$  (c) und der maximale Radius  $r_{\text{max}}$  (d).  $r_{\text{eff}}$  bezieht sich dabei auf das gesamte Modellgebiet.

eine deutliche Konvergenz, von den geringsten Werten aus der Simulation mit dem größten Zeitschritt ( $\Delta t = 1$  s) hin zu den Simulationen mit den kleinsten Zeitschritten ( $\Delta t = 0,05$  s und  $\Delta t = 0,1$  s), bei denen die größten Werte erreicht werden. Die gleiche Verteilung ist auch bei LWP und  $N_c$  zu sehen. Die einzige Ausnahme bildet  $N_r$ , wo der Verlauf der Simulation mit dem größten Zeitschritt deutliche Abweichungen zeigt.

Dabei muss beachtet werden, dass  $q_r$  während der gesamten Simulation deutlich kleiner ist als der  $q_c$ . Deshalb unterliegen die auf den Niesel- und Regentropfen basierenden Größen RWP,  $r_r$ ,  $N_r$  und  $r_{\max}$  einem größeren statistischen Rauschen und sind im Vergleich zu den auf Wolkentropfen basierenden Größen besonders sensitiv gegenüber Änderungen.

Die Ergebnisse in 4.9 und 4.10 deuten darauf hin, dass die beobachtete Abhängigkeit vom verwendeten Zeitschritt erwartungsgemäß von der Nukleation und dem Tropfenwachstum durch Kondensation verursacht wird, da  $N_c$  und LWP mit kleiner werdendem Zeitschritt zunehmen. Analog dazu nehmen auch  $N_r$  und dementsprechend RWP zu. Dieses Verhalten lässt vermuten, dass die Zunahme von LWP aufgrund des kleineren Zeitschrittes dazu führt, dass das Tropfenwachstum durch Koagulation verstärkt wird. Wenn die Unterschiede allein durch eine Änderung des Tropfenwachstums durch Koagulation hervorgerufen werden würden, dann hätte  $N_c$  bzw. LWP bei den Simulationen mit vermehrtem RWP abnehmen oder aufgrund des geringen RWP zumindest gleich bleiben müssen. Die Zeitreihen weisen außerdem auf eine Konvergenz hin, d. h. dass die Unterschiede zwischen den Simulationen mit kleiner werdendem Zeitschritt geringer werden. Allerdings hängen fast alle gezeigten Größen stark vom jeweiligen Gesamtbedeckungsgrad ab, da die meisten auf Mittelungen des gesamten Modellgebietes basieren. Um zu zeigen, dass die Konvergenz auch bei anderen Ausgabegrößen zu beobachten ist, werden im Folgenden auch Vertikalprofile und Tropfenspektren diskutiert. Abbildung 4.11 zeigt dazu zunächst die von 1400 s bis 1600 s zeitlich gemittelten Vertikalprofile des Flüssigwassergehaltes  $q_l$  (a), des Niesel- und Regenwassergehaltes  $q_r$  (b), des Bedeckungsgrades  $a$  (c), des Flüssigwassergehaltes in Wolken  $q_{l,cl}$  (d), des Niesel- und Regenwassergehaltes in Wolken  $q_{r,cl}$  (e), der Tropfenkonzentration in Wolken  $N_{cl}$  (f), der Niesel- und Regentropfenkonzentration in Wolken  $N_{r,cl}$  (g), der Wolkentropfenkonzentration in Wolken  $N_{c,cl}$  (h) und des effektiven Radius in Wolken  $r_{\text{eff},cl}$  (i).  $N_{cl}$  berücksichtigt dabei im Gegensatz zu  $N_{r,cl}$  und  $N_{c,cl}$  alle Tropfen innerhalb der Wolke unabhängig von ihrem Radius, dementsprechend auch sehr kleine Wolkentropfen mit  $r < 1 \mu\text{m}$  und CCN. Ein Vergleich der Verläufe von  $q_l$  und  $q_r$  mit  $q_{l,cl}$  und  $q_{r,cl}$  verdeutlicht beispielhaft, dass auch die über das gesamte Modellgebiet gemittelten Profile (siehe (a) und (b)) von  $a$  abhängen. Deshalb ist es sinnvoll auch Profile zu analysieren, die nur über die Wolkenbereiche gemittelt werden. Bei den Profilen innerhalb der Wolke muss andererseits beachtet werden, dass in Bereichen mit geringem  $a$  die Datenbasis entsprechend gering ist und dort deshalb größere statistische Schwankungen auftreten.

Die bei den Zeitreihen in den Abbildungen 4.9 und 4.10 beobachtete Konvergenz der Ergebnisse ist auch bei den mittleren Profilen in Abbildung 4.11 zu sehen, besonders bei  $q_l$ ,  $q_{l,cl}$ ,  $N_{cl}$  und  $N_{c,cl}$ . Bei allen Profilen treten außerdem zwischen den beiden Simulationen mit den niedrigsten Zeitschritten ( $\Delta t = 0,05 \text{ s}$  und  $\Delta t = 0,1 \text{ s}$ ) lediglich minimale Abweichungen auf. Besonders interessant ist der Verlauf von  $r_{\text{eff},cl}$  nahe der Wolkenbasis, d. h. in dem Bereich, in dem die maximalen Übersättigungen auftreten (siehe z. B. Abbildung 4.3 (1)). Hier ist deutlich zu erkennen, dass der effektive Radius mit größer werdendem Zeitschritt zunimmt. Dies ist auf die bereits erwähnte Zeitabhängigkeit der Nukleation und des Tropfenwachstum durch Kondensation zurückzuführen, bei dem bei größeren Zeitschritten die Übersättigung zunimmt und die Wolkentropfen deshalb stärker anwachsen. Oberhalb der Wolkenbasis nimmt die Übersättigung und damit auch der Einfluss dieses Effekts ab. Dabei wachsen die bei der Wolkenbasis aktivierten Wolkentropfen zunächst durch Kondensation und später auch durch Koagulation weiter an, so dass der effektive Radius mit der Höhe zunimmt.

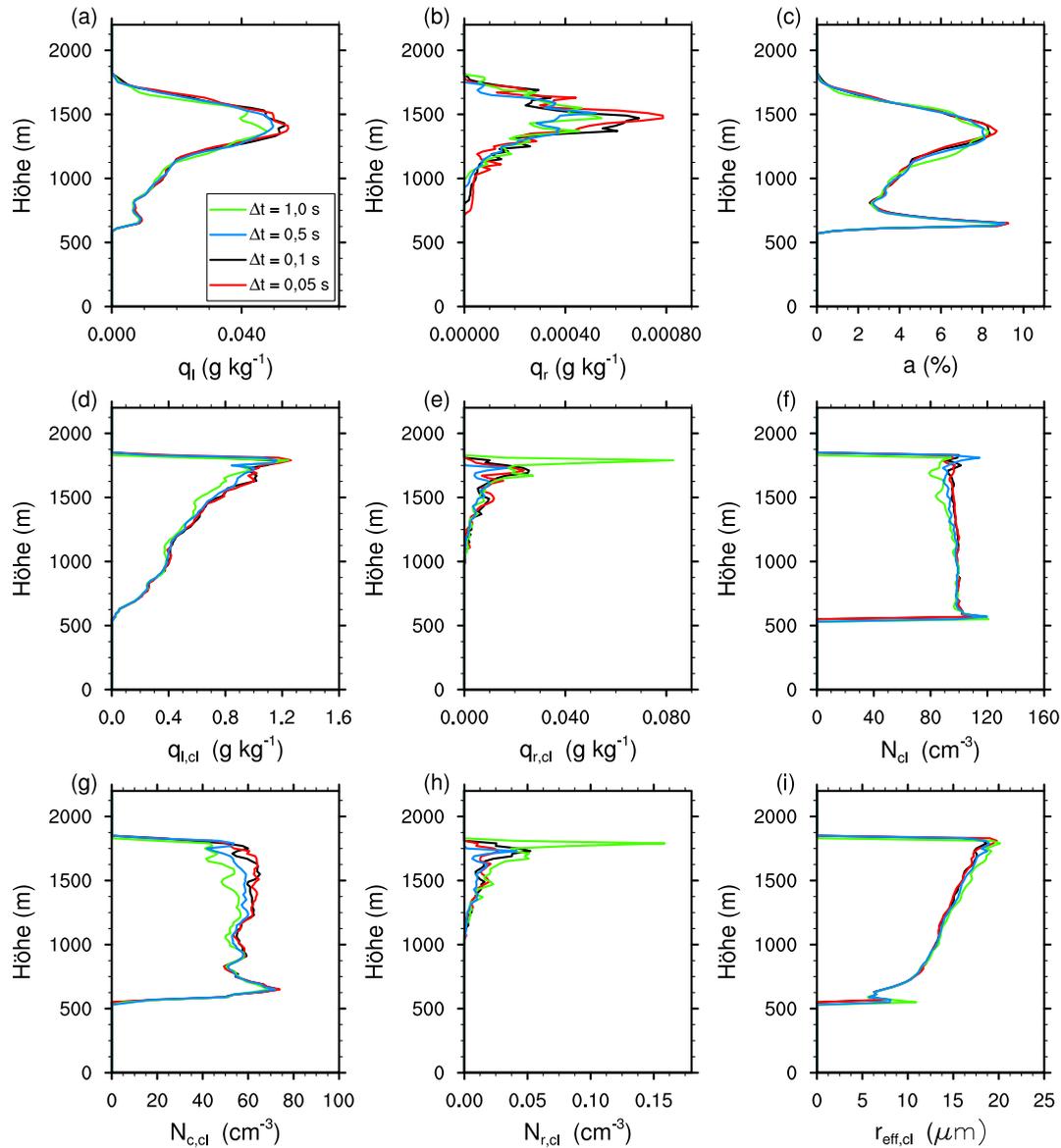


Abbildung 4.11: Zeitlich gemittelte Vertikalprofile von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Zeitschritten (analog zu Abb. 4.9). Dargestellt sind der Flüssigwassergehalt  $q_l$  (a), der Regenwassergehalt  $q_r$  (b), der Bedeckungsgrad  $a$  (c), der Flüssigwassergehalt in Wolken  $q_{l,cl}$  (d), der Regenwassergehalt in Wolken  $q_{r,cl}$  (e), die Tropfenkonzentration in Wolken  $N_{cl}$  (f), die Regentropfenkonzentration in Wolken  $N_{r,cl}$  (g), die Wolkentropfenkonzentration in Wolken  $N_{c,cl}$  (h) und der effektive Radius in Wolken  $r_{eff,cl}$  (i). Die Profile werden über den Simulationszeitraum von 1400 s bis 1600 s gemittelt. Gittervolumen werden als Wolke identifiziert, wenn der darin enthaltene Flüssigwassergehalt größer als  $0,01 \text{ g kg}^{-1}$  ist.

Die maximalen Werte werden nahe der Wolkenobergrenze erreicht. Die Verläufe zeigen außerdem, dass  $r_{eff,cl}$  im oberen Bereich der Wolke mit abnehmendem Zeitschritt abnimmt. Die Ursache dafür ist, dass die Wolkentropfenanzahl innerhalb der Wolke mit kleiner werdendem Zeitschritt zunimmt, siehe Abbildung 4.11 (g). Die Profile von

$N_{c,cl}$  zeigen dabei die zugehörigen typischen Verläufe in konvektiven Wolken, mit einem Maximum an der Wolkenbasis und einem nahezu höhenkonstanten Verlauf innerhalb der Wolke, der auf Entrainment und die dadurch hervorgerufene zusätzliche Aktivierung von CCN oberhalb der Wolkenbasis zurückgeführt werden kann (Wyszogrodzki et al., 2013; Slawinska et al., 2012). Als einzige Größen zeigen  $N_{r,cl}$  und damit auch  $q_{r,cl}$  aufgrund ihrer großen statistischen Schwankungen keine eindeutige Konvergenz der Verläufe. Die großen räumlichen Variationen dieser Felder sind z. B. auch bei der räumlichen Verteilung von  $q_{r,cl}$  in dem mittleren y-z-Schnitt der Vergleichssimulation in Abbildung 4.6(a) zu sehen. Sie werden durch die geringe Anzahl der Niesel- und Regentropfen innerhalb der Wolke ausgelöst. Interessant ist auch die Zunahme von  $a$  im oberen Bereich der Wolke mit abnehmender Größe des Zeitschrittes (siehe (a)), die aufgrund des größeren Bedeckungsgrades im unteren Bereich kaum beim zeitlichen Verlauf von TCC (siehe Abbildung 4.9 (a)) sichtbar ist. Diese Zunahme bewirkt, dass die Unterschiede, die innerhalb der Wolke bei  $q_{c,cl}$  bzw.  $q_{r,cl}$  auftreten, bei Betrachtung des gesamten Modellgebiets vergrößert werden und erklärt damit die deutlich größeren Differenzen bei den Vertikalprofilen von  $q_c$  bzw.  $q_r$  und den mittleren/integrierten Größen in den Abbildungen 4.9 und 4.10.

Mit kleiner werdendem Zeitschritt nimmt demnach die Anzahl der Wolkentropfen im oberen Bereich der Wolken aufgrund von vermehrter Nukleation oder verminderter Evaporation der Wolkentropfen zu. Dadurch wird mehr latente Wärme freigesetzt, die eine größere horizontale<sup>7</sup> Ausdehnung der Wolke in diesem Bereich bewirkt. In Folge dessen nehmen auch die über das gesamte Modellgebiet gemittelten/integrierten Wolken- und Regenwassergrößen mit abnehmendem Zeitschritt zu. Die Verläufe des maximalen Radius (siehe Abbildung 4.10 (d)) deuten außerdem darauf hin, dass auch das Tropfenwachstum durch Koagulation mit kleiner werdendem Zeitschritt verstärkt wird, vor allem dadurch, dass mehr Wolkentropfen für die Autokonversion und Akkreszenz zur Verfügung stehen.

Diese Ergebnisse werden auch durch die in Abbildung 4.12 dargestellten Tropfenspektren nach 1600 s Simulationszeit bestätigt. Gezeigt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  mit linearer Ordinatenenteilung (a) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  mit linearer und logarithmischer Ordinatenenteilung (b und c). Die Spektren stellen den Mittelwert über den gesamten Wolkenbereich dar. Die Tropfenradien werden für die Darstellungen in 89 Tropfenklassen unterteilt, deren Breite exponentiell zunimmt<sup>8</sup>. Die verschiedenen Darstellungen helfen dabei, die einzelnen Bereiche des Tropfenspektrums besser charakterisieren zu können.  $n(r)$  (a) zeigt beispielsweise, dass sich aus der anfänglich nahezu monodispersen Tropfenverteilung ein Tropfenspektrum mit einem Maximum bei etwa 8  $\mu\text{m}$  gebildet hat. Diese Form der Darstellung verdeutlicht abermals, dass die mittlere Anzahl der Tropfen für  $r > 10 \mu\text{m}$  stark abnimmt und die Niesel- und Regentropfenkonzentration in konvektiven Wolken sehr gering ist. Deshalb unterliegen die räumliche Verteilung dieser Größen großen statistischen Schwankungen, die noch dadurch verstärkt werden, dass die großen Tropfen häufig nur durch einige wenige Supertropfen repräsentiert werden. Nichtsdestotrotz beinhalten die großen Tropfen einen nicht vernachlässigbaren Teil der Flüssigwassermasse (siehe (c)). Die größten Tropfen erreichen zu diesem Zeitpunkt einen maximalen Radius von  $r \approx 140 \mu\text{m}$  (c). Die Spektren zeigen ebenfalls die bereits diskutierte Zunahme von  $n(r)$  und  $g(\ln r)$  im

<sup>7</sup>Die maximale Wolkenobergrenze ist bei allen Simulationen nahezu identisch.

<sup>8</sup>Die Bereiche von  $0,01 \mu\text{m} \leq r < 0,1 \mu\text{m}$  und  $0,1 \mu\text{m} \leq r < 1 \mu\text{m}$  sind in jeweils zehn gleich große Klassen unterteilt. Für  $r > 1 \mu\text{m}$  nimmt die Klassenbreite mit  $0,25r + 10 \cdot 0^{0,055r}$  zu.

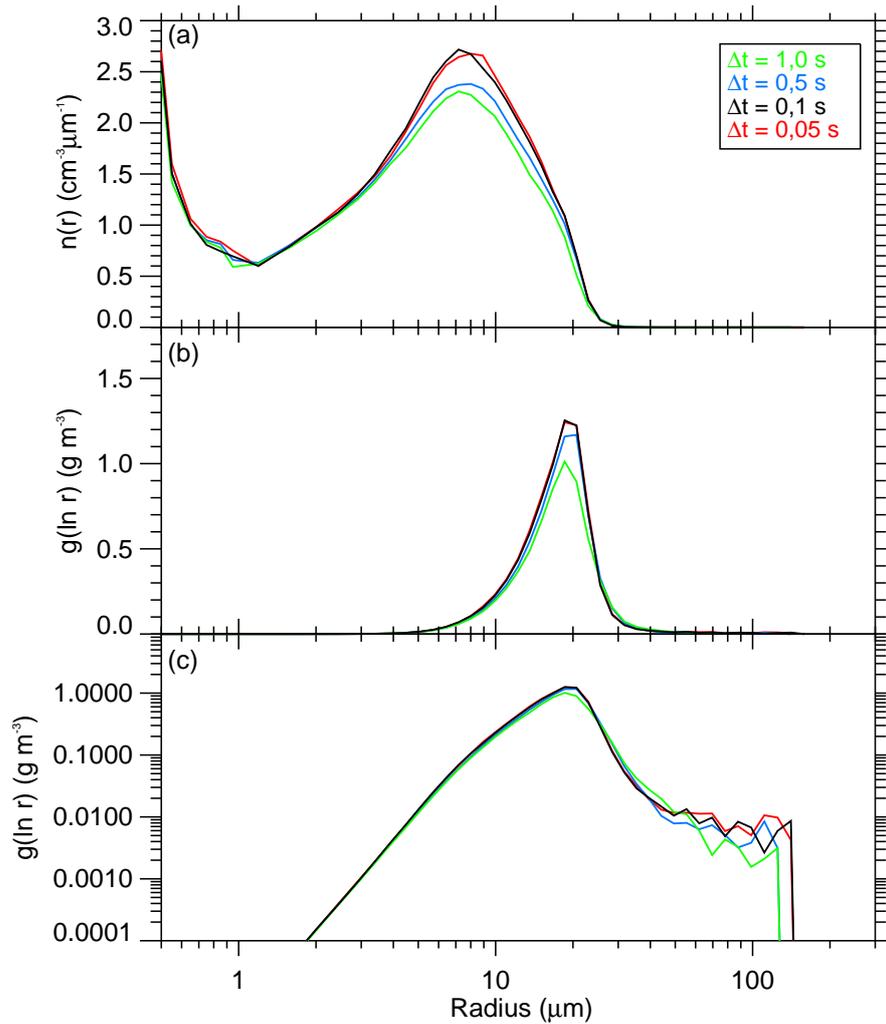


Abbildung 4.12: Tropfenspektren von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Zeitschritten (analog zu Abb. 4.9) nach 1600 s Simulationszeit. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  (a) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  in (b) und (c), gemittelt über die gesamte Wolke.

Bereich der Wolkentropfen und von  $g(\ln r)$  für die Niesel- und Regentropfen mit kleiner werdendem Zeitschritt, wobei eine deutliche Konvergenz der Ergebnisse sichtbar ist.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass der Zeitschritt erwartungsgemäß den größten Einfluss auf die Nukleation und das Tropfenwachstum durch Kondensation hat, die wiederum auch eine Änderung des Tropfenwachstums durch Koagulation zur Folge hat. Die Ergebnisse der Simulationen dieser idealisierten Wolke zeigen eine klare Konvergenz, so dass zwischen den Simulationen mit  $\Delta t = 0,05$  s und  $\Delta t = 0,1$  s nur minimale Unterschiede auftreten. Bei dem hier vorgestellten LCM reicht demnach ein Zeitschritt von  $\Delta t = 0,1$  s für die Simulation von konvektiven Wolken aus, um den Einfluss des Zeitschrittes zu minimieren.

Bezeichnung	Mittlerer Abstand (m)	Anfänglicher Wichtungsfaktor	Mittlere Supertropfenanzahl ( $\text{Gv}^{-1}$ )
	5,85	$1,97 \cdot 10^{10}$	$\approx 40$
	4,5	$9,0 \cdot 10^9$	$\approx 88$
	4,0	$6,32 \cdot 10^9$	$\approx 125$
	3,125	$3,013 \cdot 10^9$	$\approx 262$

Tabelle 4.1: Übersicht der Simulationsparameter zum Einfluss der Supertropfenanzahl. Der angegebene mittlere Abstand ist für alle Raumrichtungen isotrop.

### 4.3.2 Anzahl der Supertropfen

Die Anzahl der Supertropfen im Modell beeinflusst fast ausschließlich das Tropfenwachstum durch Koagulation. Dabei führt eine größere Anzahl von Supertropfen im Modell dazu, dass das Tropfenspektrum insbesondere im Bereich der großen Tropfen besser aufgelöst werden kann. Da die wolkenphysikalischen Prozesse (Advektion, Nukleation bzw. Kondensationswachstum und Tropfenwachstum durch Koagulation) zu jedem Zeitschritt für jeden Supertropfen berechnet werden müssen, nimmt allerdings der Rechenaufwand und Speicherbedarf mit steigender Supertropfenanzahl zu ( $\propto N_p^2$ ).

Für die Untersuchung zur Abhängigkeit der Ergebnisse von der Supertropfenanzahl wird ebenfalls die in Abschnitt 4.1 beschriebene Konfiguration verwendet, wobei die anfängliche, mittlere Supertropfenanzahl zwischen rund 40, 88, 125 und 262 Supertropfen pro Gittervolumen variiert. Für die Änderung der Supertropfenanzahl wurde der mittlere Abstand zwischen den anfänglichen Supertropfen und der initiale Wichtungsfaktor modifiziert. Eine Übersicht dieser Simulationsparameter ist in Tabelle 4.3.2 dargestellt. Die repräsentierte Konzentration der anfänglichen CCN wurde dabei konstant gehalten. Wie bereits erwähnt beeinflusst die Supertropfenanzahl primär das Tropfenwachstum durch Koagulation, das für die Bildung von Niesel- und Regentropfen von Bedeutung ist. Deshalb wird bei dieser Parameterstudie auf die explizite Berechnung der Nukleation verzichtet, um Rechenzeit einzusparen, d. h. der Lösungs- und Krümmungseffekt werden vernachlässigt. Damit sinkt der Anteil der Rechenzeit, der für die Berechnung des Tropfenwachstums durch Kondensation benötigt wird, von etwa 55 % der Gesamtrechenzeit auf etwa 15 %. Die Ergebnisse der Vergleichssimulation mit rund 88 Supertropfen pro Gittervolumen sind damit nicht mehr identisch zu denen, die in Abschnitt 4.2 und 4.3.1 vorgestellt werden.

Die Simulationsergebnisse werden im Folgenden anhand von Zeitreihen, mittleren Profilen und instantanen Tropfenspektren diskutiert, analog zu Abschnitt 4.3.1. Abbildung 4.13 zeigt dazu die zeitliche Entwicklung des Gesamtbedeckungsgrades TCC (a), des mittleren Flüssigwasserpfadef LWP (b), des mittleren Regenwasserpfadef RWP (c) und der mittleren Wolkentropfenkonzentration  $N_c$  (d) für die vier Simulationen. Zusätzlich dazu, sind die Zeitreihen von der mittleren Niesel- und Regentropfenkonzentration  $N_r$  (a), dem mittleren Wolkentropfenradius  $r_c$  (b), dem mittleren Niesel- und Regentropfenradius  $r_r$  (c), dem effektiven Radius  $r_{\text{eff}}$  (d) und dem maximalen Radius  $r_{\text{max}}$  (e) in Abbildung 4.14 dargestellt. Die gemittelten Größen außer  $r_c$  und  $r_r$  beziehen sich dabei auf das gesamte Modellgebiet. Die anfängliche Entwicklung der Wolke ist erwartungsgemäß bei allen Simulationen nahezu identisch, Unterschiede entwickeln sich erst, wenn der Einfluss des Tropfenwachstums durch Koagulation nach etwa 1000 s

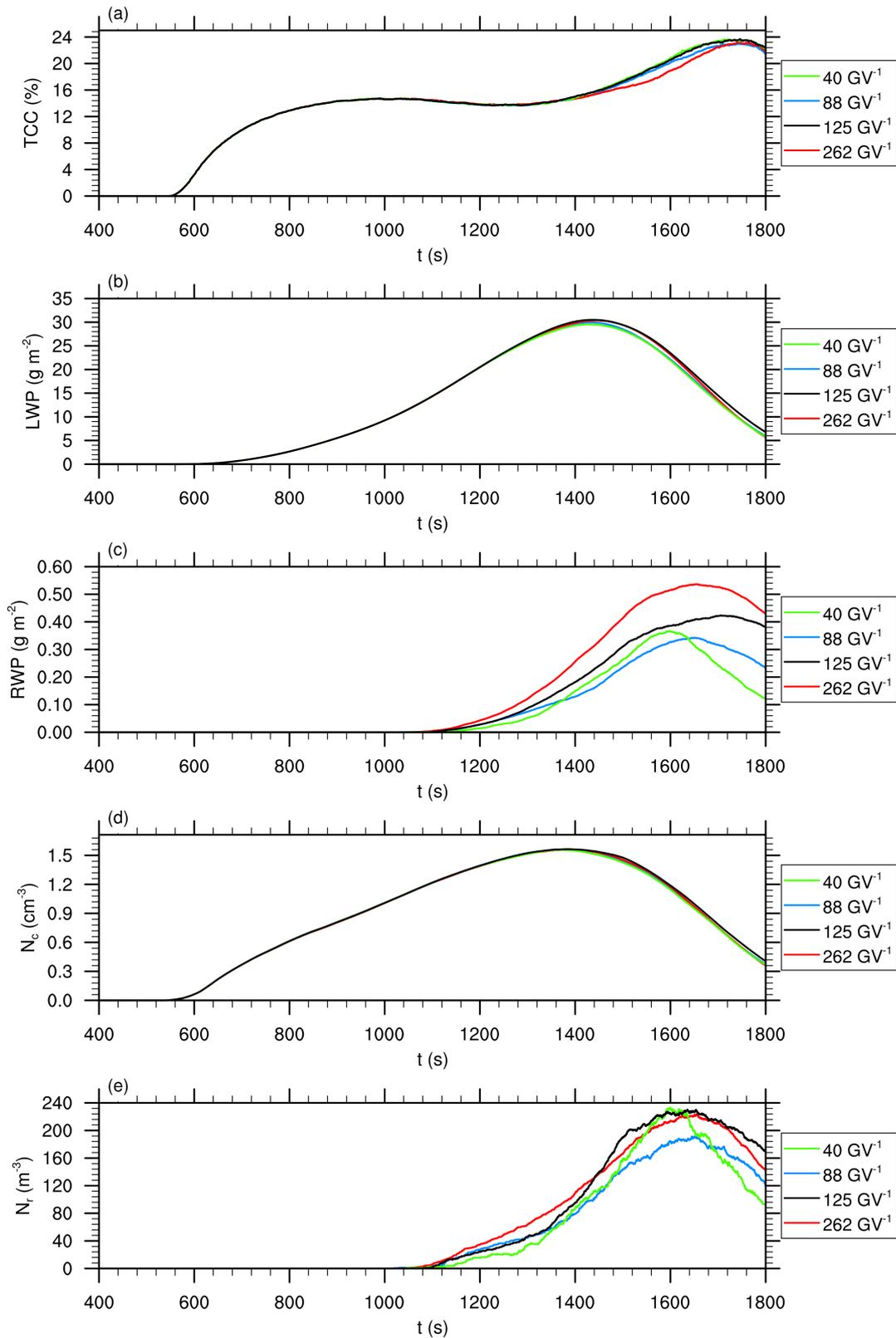


Abbildung 4.13: Zeitreihen von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Supertropfenanzahlen (im Mittel 40 (grün), 88 (blau), 125 (schwarz) und 262 (rot) pro Gittervolumen ( $\text{GV}^{-1}$ )). Dargestellt sind der Gesamtbedeckungsgrad TCC (a), der mittlere Flüssigwasserpfad LWP (b), der mittlere Regenwasserpfad RWP (c), die mittlere Wolkentropfenkonzentration  $N_c$  (d) und die mittlere Regentropfenkonzentration  $N_r$  (e).

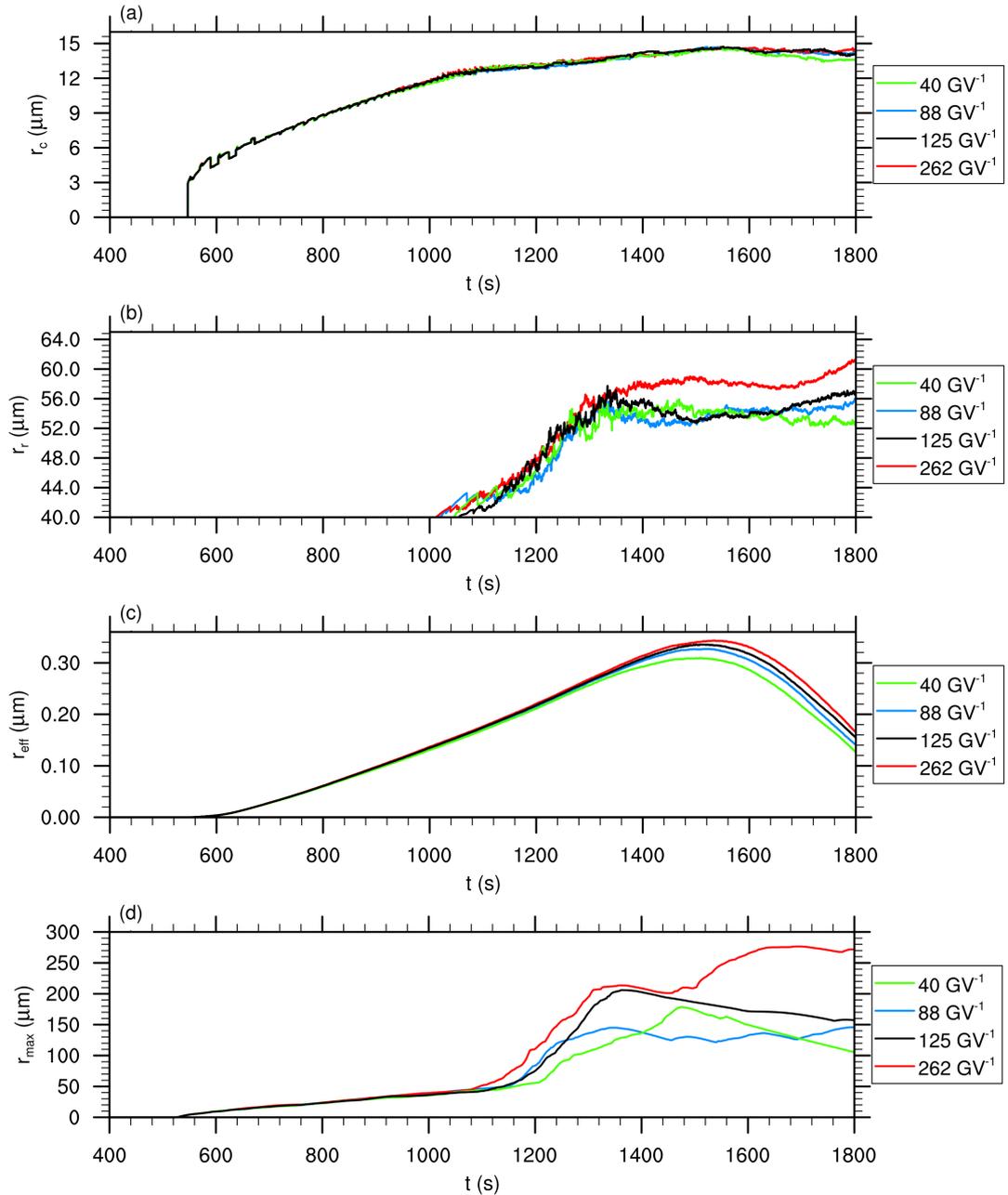


Abbildung 4.14: Zeitreihen von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Supertropfenanzahlen (analog zu Abb. 4.13). Dargestellt sind der mittlere Wolkentropfenradius  $r_c$  (a), der mittlere Regentropfenradius  $r_r$  (b), der effektive Radius  $r_{\text{eff}}$  (c) und der maximale Radius  $r_{\text{max}}$  (d).

Simulationszeit zunimmt. RWP,  $N_r$ ,  $r_r$  und  $r_{\text{max}}$ , also die Größen, die auf den Niesel- und Regentropfen basieren, zeigen erwartungsgemäß die größten Abweichungen. Da  $\text{RWP} \ll \text{LWP}$  und der Gesamtbedeckungsgrad TCC der einzelnen Simulationen variiert, unterliegen diese Größen relativ großen statistischen Schwankungen. Nichtsdestotrotz ist zu erkennen, dass RWP,  $N_r$ ,  $r_r$  und  $r_{\text{max}}$  mit zunehmender Supertropfenanzahl

ansteigen. Dieser Trend ist auch bei der zeitlichen Entwicklung von  $r_{\text{eff}}$  zu beobachten. Die Abweichungen bei LWP,  $N_c$  und  $r_c$  dagegen sind erwartungsgemäß nur minimal.

Abbildung 4.15 zeigt ergänzend dazu die von 1400 s bis 1600 s zeitlich gemittelten Vertikalprofile des Flüssigwassergehaltes  $q_l$  (a), des Regenwassergehaltes  $q_r$  (b), des Bedeckungsgrades  $a$  (c), des Flüssigwassergehaltes in Wolken  $q_{l,\text{cl}}$  (d), des Niesel- und Regenwassergehaltes in Wolken  $q_{r,\text{cl}}$  (e), der Tropfenkonzentration in Wolken  $N_{\text{cl}}$  (f), der Niesel- und Regentropfenkonzentration in Wolken  $N_{r,\text{cl}}$  (g), der Wolkentropfenkonzentration in Wolken  $N_{c,\text{cl}}$  (h) und des effektiven Radius in Wolken  $r_{\text{eff},\text{cl}}$  (i). Die Vertikalprofile von  $N_{c,\text{cl}}$ ,  $q_{l,\text{cl}}$ ,  $N_{\text{cl}}$  und  $r_{\text{eff},\text{cl}}$  zeigen ebenfalls nur einen geringen Einfluss der anfänglichen Supertropfenanzahl. Abweichungen sind nur im oberen Bereich der Wolke zu finden, wo das Tropfenwachstum durch Koagulation typischerweise am stärksten ist und deshalb auch die Anzahl und Größe der Niesel- und Regentropfen ihr Maximum erreicht. In diesem Bereich nehmen die Wolkentropfengrößen  $N_{c,\text{cl}}$ ,  $q_{l,\text{cl}}$ ,  $N_{\text{cl}}$  und  $r_{\text{eff},\text{cl}}$  mit zunehmender Supertropfenanzahl ab und gehen auch in tieferen Höhen auf Null zurück. Das deutet auf vermehrtes Einsammeln der Wolkentropfen durch Tropfenwachstum durch Koagulation hin. Auffällig ist vor allem das Maximum von  $r_{\text{eff},\text{cl}}$  in der Nähe der Wolkenbasis für die Simulation mit 262 Supertropfen  $\text{Gv}^{-1}$ . Die hier betrachteten Größen liefern keine eindeutige Begründung für diesen Wert. Um eine belastbare Ursache zu ermitteln, sind weitere Analysen notwendig. Eine mögliche Erklärung für dieses Verhalten ist, dass das Maximum von einem Niesel- oder Regentropfen verursacht wird, der sich während des Mittelungszeitraums beim Fallen in diesem Bereich aufhält. Für diese Erklärung würde auch die im Vergleich zu den anderen Simulationen tiefere Wolkenbasis in diesem Zeitraum sprechen. Die Vertikalprofile von  $q_{r,\text{cl}}$  und  $N_{r,\text{cl}}$  weisen abermals recht große statistische Schwankungen auf, die allerdings mit zunehmender Supertropfenanzahl abnehmen. Die Profile zeigen außerdem, dass im oberen Bereich der Wolke die Simulationen mit weniger Supertropfen deutlich höhere Werte als die Vergleichssimulationen mit mehr Supertropfen erreichen. Das Maximum bei den Simulationen mit den größten Supertropfenanzahlen liegt tiefer innerhalb der Wolke. Dieser Verlauf bestätigt die Vermutung, dass sich bei dieser Simulationen bereits Niesel- und Regentropfen gebildet haben, die groß genug zum Fallen sind. Der Verlauf von  $q_r$  zeigt, dass die im gesamten Modellgebiet entstandene Niesel- und Regenwassermenge für die beiden Simulationen mit den meisten Supertropfen in diesem Zeitraum etwas größer ist als bei den Vergleichssimulationen. Der Bedeckungsgrad  $a$  zeigt vor allem im oberen Bereich der Wolke Unterschiede zwischen den Simulationen, wobei der Bedeckungsgrad mit zunehmender Supertropfenanzahl abnimmt.

Abbildung 4.16 zeigt die über den gesamten Wolkenbereich gemittelten Tropfenspektren nach 1600 s Simulationszeit. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  mit linearer Ordinatenenteilung (a), das Anzahldichtespektrum  $n(\ln r)$  mit logarithmischer Ordinatenenteilung (b) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  mit linearer und logarithmischer Ordinatenenteilung (c und d). Analog zu der Darstellung in Abschnitt 4.3.1 werden die Tropfenradien für die Darstellungen in 89 Tropfenklassen unterteilt, deren Breite exponentiell zunimmt. Bei  $n(r)$  in (a) ist zu erkennen, dass sich aus der anfänglich monodispersen Verteilung eine Verteilung mit Maximum bei  $r = 8 \mu\text{m}$  gebildet hat. Dabei nimmt der Maximalwert der Verteilung mit zunehmender Supertropfenanzahlen ab<sup>9</sup>. Dieser Verlauf lässt vermuten, dass das Tropfenwachstum

<sup>9</sup>Die Unterschiede der Anzahldichteverteilung für  $r < 2 \mu\text{m}$  im Vergleich zu Abbildung 4.12 werden durch das Vernachlässigen des Krümmungs- und Lösungseffektes verursacht.

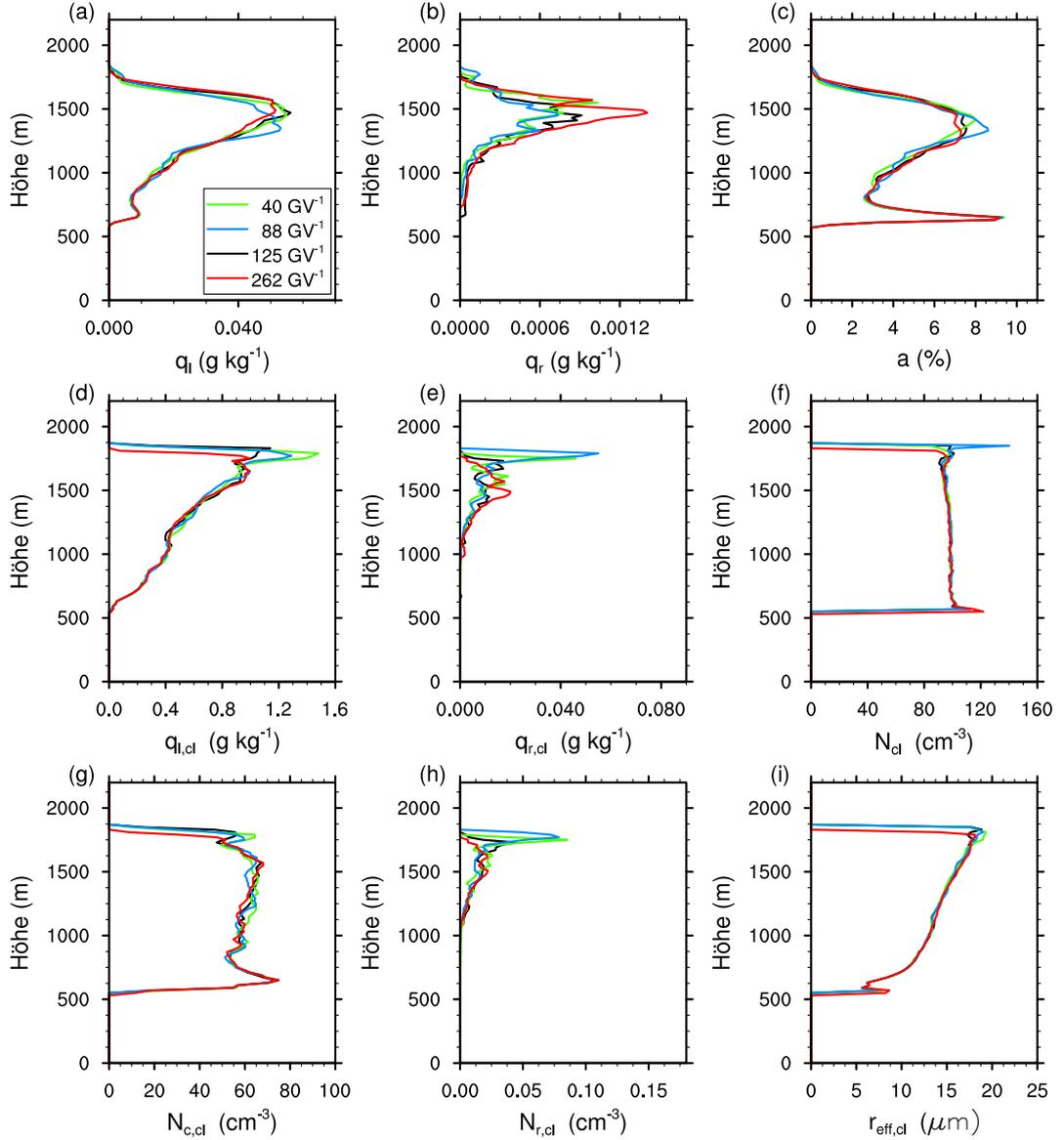


Abbildung 4.15: Zeitlich gemittelte Vertikalprofile von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit Supertropfenanzahlen (analog zu Abb. 4.13). Dargestellt sind der Flüssigwassergehalt  $q_l$  (a), der Regenwassergehalt  $q_r$  (b), der Bedeckungsgrad  $a$  (c), der Flüssigwassergehalt in Wolken  $q_{l,cl}$  (d), der Regenwassergehalt in Wolken  $q_{r,cl}$  (e), die Tropfenkonzentration in Wolken  $N_{cl}$  (f), die Regentropfenkonzentration in Wolken  $N_{r,cl}$  (g), die Wolkenkonzentration in Wolken  $N_{c,cl}$  (h) und der effektive Radius in Wolken  $r_{eff,cl}$  (i). Die Profile werden über den Simulationszeitraum von 1400 s bis 1600 s gemittelt. Gittervolumen werden als Wolke identifiziert, wenn der darin enthaltene Flüssigwassergehalt größer als  $0,01 \text{ g kg}^{-1}$  ist.

durch Koagulation bei diesen Simulationen verstärkt ist und deshalb vermehrt Wolken-tropfen abgebaut werden. Bei  $g(\ln r)$  ist aufgrund der Schwankungen im Niesel- und Regentropfenbereich bis auf die Zunahme der maximalen Radien mit zunehmender Supertropfenanzahl kein Trend zu erkennen.  $n(r)$  und  $n(\ln r)$  zeigen, dass die Anzahl

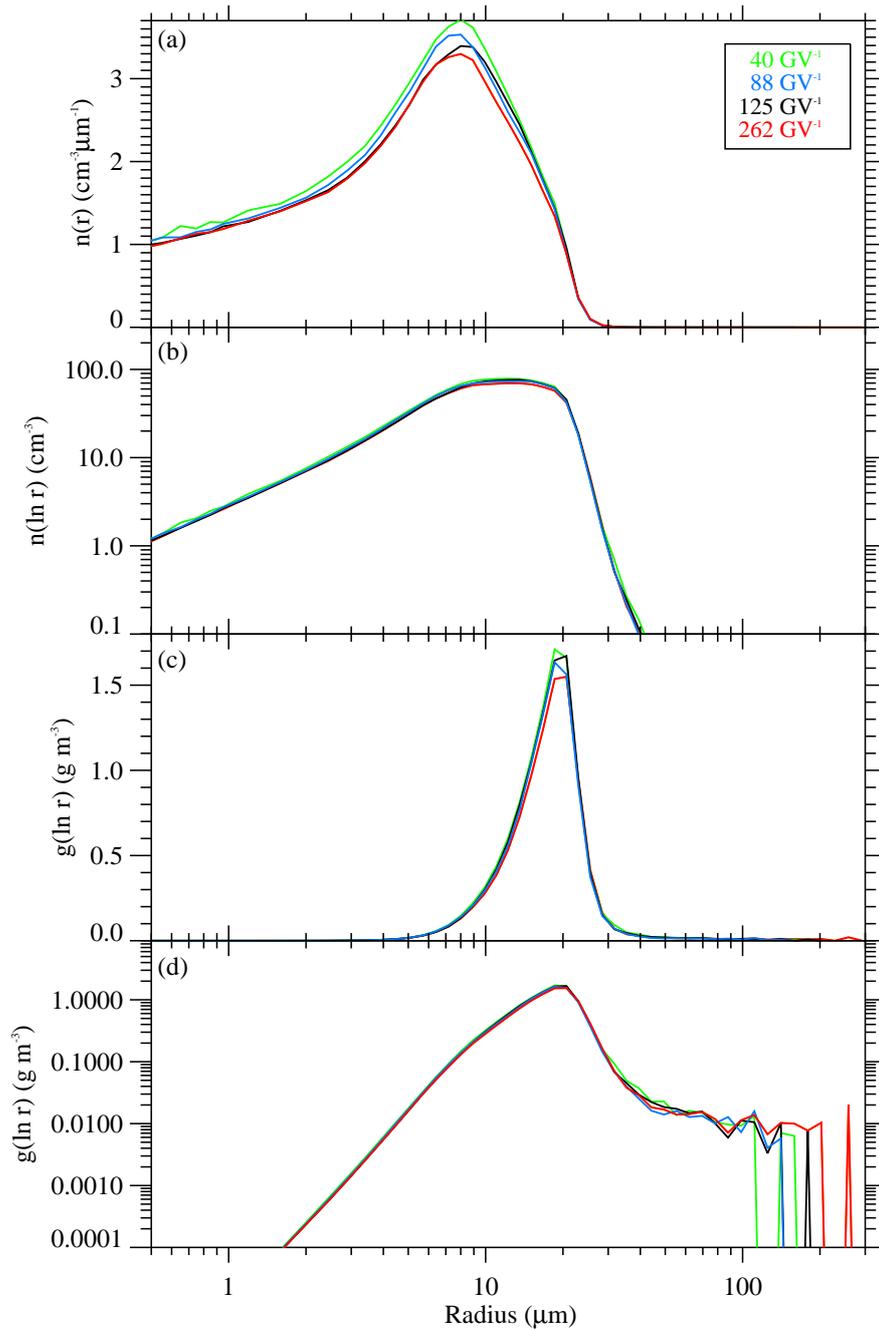


Abbildung 4.16: Tropfenspektren von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Supertropfenanzahlen (analog zu Abb. 4.13) nach 1600 s Simulationszeit. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  (a), das Anzahldichtespektrum  $n(\ln r)$  (b) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  in (c) und (d). Die Spektren wurden über die gesamte Wolke gemittelt.

der Niesel- und Regentropfenkonzentration auch bei den Simulationen mit höheren Supertropfenanzahlen immer noch sehr gering ist. Deshalb werden die größten Tropfen weiterhin nur durch einzelne Supertropfen repräsentiert, was zu großen Variationen bei der Verteilung von  $g(\ln r)$  insbesondere für  $r < 100 \mu\text{m}$  führt.

Die Untersuchung zum Einfluss der Supertropfenanzahl hat gezeigt, dass die Anzahl der Supertropfen durchaus einen Einfluss auf die Entwicklung der idealisierten Wolke hat. Die größten Unterschiede treten für die Niesel- und Regentropfengrößen auf, wobei eine steigende Supertropfenanzahl eine Verstärkung des Tropfenwachstums durch Koagulation bewirkt. Die Ergebnisse zeigen zwar einen Trend, aber noch keine eindeutige Konvergenz. Eine Ursache dafür ist, dass bei den in dieser Arbeit betrachteten flachen konvektiven Wolken die Niesel- und Regentropfenkonzentration sehr gering (im Bereich von einigen Tropfen pro  $l^{-3}$ , Pruppacher und Klett, 1997) ist und deshalb großen statistischen Schwankungen unterliegt. Hinzu kommt, dass durch die Verwendung des Supertropfenansatzes für die Repräsentation eines solchen Tropfenspektrums nur eine begrenzte Anzahl von Supertropfen zu Verfügung stehen. Die Kombination dieser Effekte sorgt dafür, dass die Niesel- und Regentropfen beim LCM nur durch wenige Supertropfen repräsentiert werden. Deshalb ist es schwierig, statistisch fundierte Aussagen über diesen wichtigen Bereich des Spektrums zu treffen. Die Parameterstudie hat gezeigt, dass auch eine Erhöhung der anfänglichen Supertropfenkonzentration auf rund 262 pro Gittervolumen nicht ausreicht, um bei der Simulation dieser idealisierten Wolke eine eindeutige Konvergenz in diesem Bereich zu erzielen. Bei LCM-Simulationen sollten deshalb immer möglichst viele Supertropfen verwendet werden. Außerdem sollten für Vergleiche von LCM-Simulationen die gleiche Supertropfenanzahl verwendet werden. Diese Schwachstelle des LCM sollte bei der Interpretation von den LCM-Ergebnissen berücksichtigt werden. Eine Möglichkeit die Schwäche des LCM zu beseitigen besteht darin, die Supertropfen aus diesem Bereich des Spektrums aufzusplitten, um so die Anzahl und somit statistische Datenbasis zu erhöhen. Damit die Anzahl der Supertropfen während der Simulation nicht stetig zunimmt, könnten im Gegenzug dazu Supertropfen mit ähnlichen Eigenschaften aus den Größenbereichen mit hohen Anzahldichten zusammengefasst werden. Unterstrasser und Sölch (2013) haben dazu eine Methode für ihr LCM für Eiswolken entwickelt. Ob diese Methode auch auf warme Wolken übertragbar ist, muss noch überprüft werden.

Um zu zeigen, dass die Schwäche des LCM durch die geringe Niesel- und Regentropfenkonzentration und nicht durch die verwendete Methode für die Berechnung des Tropfenwachstums durch Koagulation verursacht wird, wurde eine weitere Parameterstudie durchgeführt. Hierbei wurde das reine Tropfenwachstum durch Koagulation in einem Gittervolumen mit ruhender Umgebungsluft für zwei verschiedene Anfangsspektren betrachtet. Die Parameterstudie zeigt, dass bei entsprechend breiten, anfänglichen Tropfenspektren eine eindeutige Konvergenz der Tropfenspektrenentwicklung für zunehmende Supertropfenanzahlen erkennbar ist. Details zu dieser Untersuchung sind im Anhang A.3 zu finden.

#### 4.4 Untersuchung zum Einfluss der turbulenten Kollisionskernel

Ein zentrales Ziel dieser Arbeit besteht darin, den Einfluss von Turbulenz auf das Tropfenwachstum durch Koagulation und damit auf die zeitliche und räumliche Entwicklung des Tropfenspektrums zu untersuchen. Da die Turbulenz, die die Kollision und Koaleszenz der Tropfen beeinflusst, nicht explizit vom LCM aufgelöst werden kann, wurden zu diesem Zweck zwei turbulente Kollisionskernel in das LCM implementiert. Der AW-Kernel und der KS-Kernel parametrisieren dabei mehrere subgrid-skalige Tur-

bulenzeinflüsse: den Einfluss der Turbulenz auf die relative Tropfengeschwindigkeit und auf die Verteilung der Tropfenkonzentration, sowie beim AW-Kernel auch den Einfluss der Turbulenz auf die hydrodynamischen Wechselwirkungen der Strömungsfelder der Tropfen. Beide Kernel basieren auf DNS-Simulationen und sind in Abhängigkeit von der Tropfengröße und der Dissipationsrate gegeben. Eine ausführliche Beschreibung der Kernel ist in Abschnitt 3.2.5 gegeben. Sie unterscheiden sich vor allem durch den Turbulenzzustand den sie beschreiben. Der AW-Kernel wurde extrapoliert um für konvektive Wolken typische Werte von  $Re_\lambda$  zu erreichen, der KS-Kernel nicht.

Ein erster Vergleich der turbulenten Kollisionskernel mit dem nicht-turbulenten Kollisionskernel anhand der hervorgerufenen Verstärkungsfaktoren hat deutliche Unterschiede zwischen den Kernen gezeigt (siehe Abbildung 3.4). In diesem Abschnitt wird nun untersucht, in wie weit sich die Verstärkungsfaktoren der Tropfenkollision tatsächlich bei der Entwicklung der Tropfen in einer Wolke bemerkbar machen. Dazu wird erneut die in Abschnitt 4.1 beschriebene Konfiguration für eine idealisierte Wolke verwendet. Es werden vier Simulationen mit unterschiedlichen Kollisionskernen durchgeführt: mit dem Hall-Kernel, dem AW-Kernel, dem KS-Kernel und dem KS\*-Kernel, der zusätzlich die AW-Parametrisierung der Verstärkung der Kollisionseffizienzen beinhaltet. Die Ergebnisse werden wieder anhand der Zeitreihen, Vertikalprofile und Tropfenspektren analysiert. Abbildung 4.17 zeigt dazu die zeitliche Entwicklung des Gesamtbedeckungsgrades TCC (a), des mittleren Flüssigwasserpfades LWP (b), des mittleren Regenwasserpfades RWP (c) und der mittleren Wolkentropfenkonzentration  $N_c$  (d) für die vier Simulationen. Zusätzlich sind die Zeitreihen von der mittleren Niesel- und Regentropfenkonzentration  $N_r$  (a), dem mittleren Wolkentropfenradius  $r_c$  (b), dem mittleren Niesel- und Regentropfenradius  $r_r$  (c), dem effektiven Radius  $r_{eff}$  (d) und dem maximalen Radius  $r_{max}$  (e) in Abbildung 4.18 dargestellt. Die gemittelten Größen außer  $r_c$  und  $r_r$  beziehen sich dabei auf das gesamte Modellgebiet. Die zeitliche Entwicklung der simulierten Wolken ist erwartungsgemäß zu Beginn der Simulation identisch. Unterschiede zwischen den Simulationen treten erst auf, nachdem das Tropfenwachstum durch Koagulation einsetzt und an Bedeutung gewinnt. Da das Tropfenwachstum durch Koagulation vor allem die Bildung und das Wachstum von Niesel- und Regentropfen beeinflusst, zeigen die damit verbundenen Größen RWP,  $N_r$ ,  $r_r$  und  $r_{max}$  die größten Unterschiede bei der zeitlichen Entwicklung. Dabei ist erkennbar, dass die Bildung der ersten Niesel- und Regentropfen bei Verwendung des AW-Kernels etwas früher einsetzt. Im weiteren Verlauf der Wolkenentwicklung nehmen die Unterschiede zwischen den Simulationen mit turbulentem AW-Kernel und dem nicht-turbulenten Hall-Kernel deutlich zu, so dass bei der AW-Simulation im Vergleich zur Simulation mit Hall nach 1640s Simulationszeit fast doppelt soviel  $N_r$  und RWP im Modellgebiet enthalten ist. Die turbulente Verstärkung des Tropfenwachstum durch Koagulation mit AW-Kernel bewirkt dabei sowohl eine Zunahme der Niesel- und Regentropfenkonzentration  $N_r$ , als auch eine Zunahme der mittleren und maximalen Tropfenradien  $r_r$  und  $r_{max}$ . Der Einfluss der beiden anderen turbulenten Kollisionskernel KS und KS\* ist deutlich geringer. Bei  $r_r$  und  $r_{max}$  sind beispielsweise kaum Unterschiede zu der Simulation mit Hall-Kernel erkennbar. Die Simulationen mit dem KS- und KS\*-Kernel zeigen allerdings analog zum AW-Kernel eine Zunahme der Niesel- und Regentropfenkonzentration im Modellgebiet, die wiederum eine Zunahme des RWP im Vergleich zum Hall-Kernel bewirkt. Die durch die Verstärkung der Tropfenkoagulation entstandene Zunahme ist erwartungsgemäß für KS\* größer als für KS. Sie liegt allerdings nur bei maximal 30% und ist damit deutlich geringer als bei der Simulation mit AW-Kernel. Aufgrund des

#### 4.4 Untersuchung zum Einfluss der turbulenten Kollisionskernel

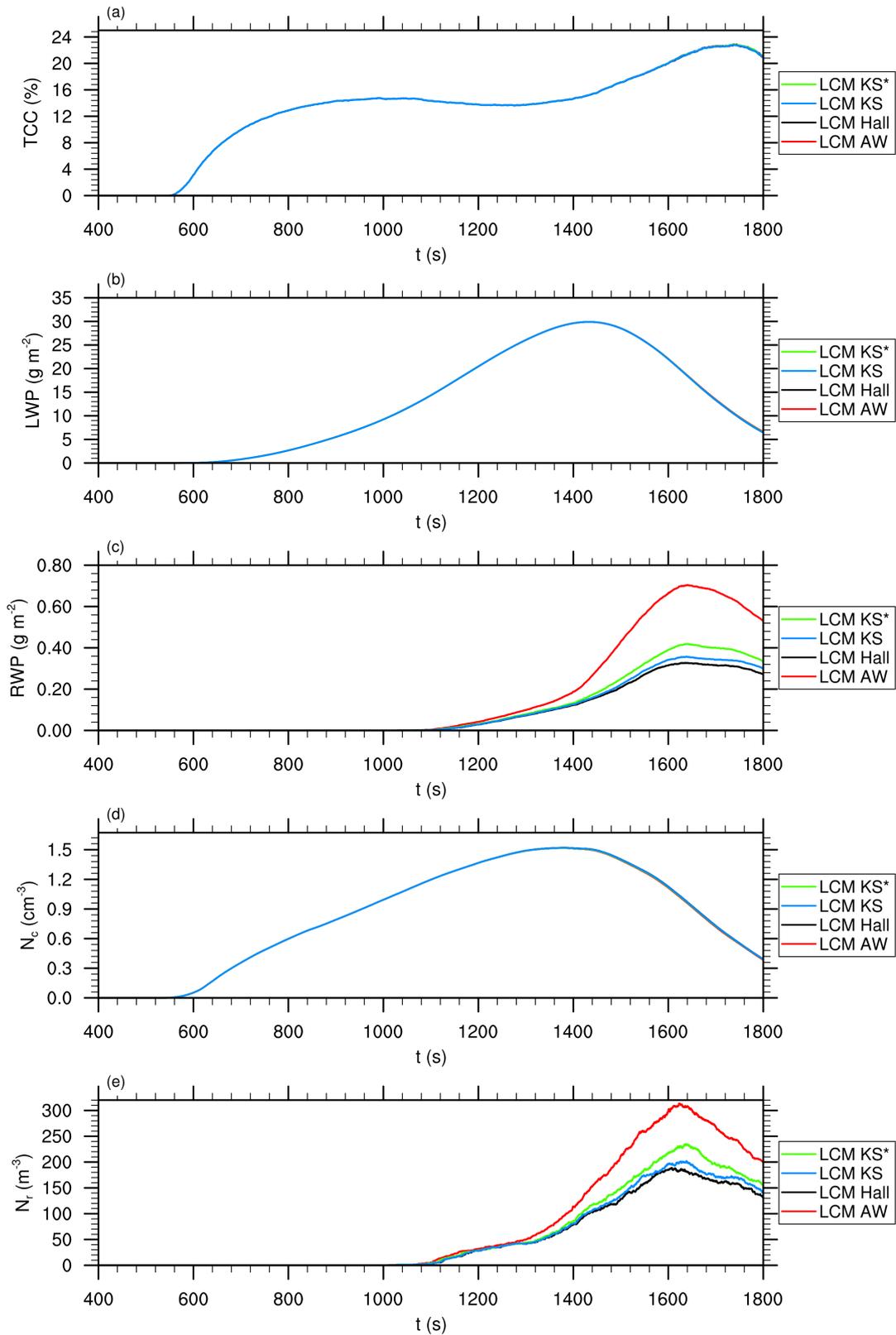


Abbildung 4.17: Zeitreihen von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Kollisionskernen (KS\*-Kernel (grün), KS-Kernel (blau), Hall-Kernel (schwarz) und AW-Kernel (rot)). Dargestellt sind der Gesamtbedeckungsgrad TCC (a), der mittlere Flüssigwasserpfad LWP (b), der mittlere Regenwasserpfad RWP (c), die mittlere Wolkentropfenkonzentration  $N_c$  (d) und die mittlere Regentropfenkonzentration  $N_r$  (e).

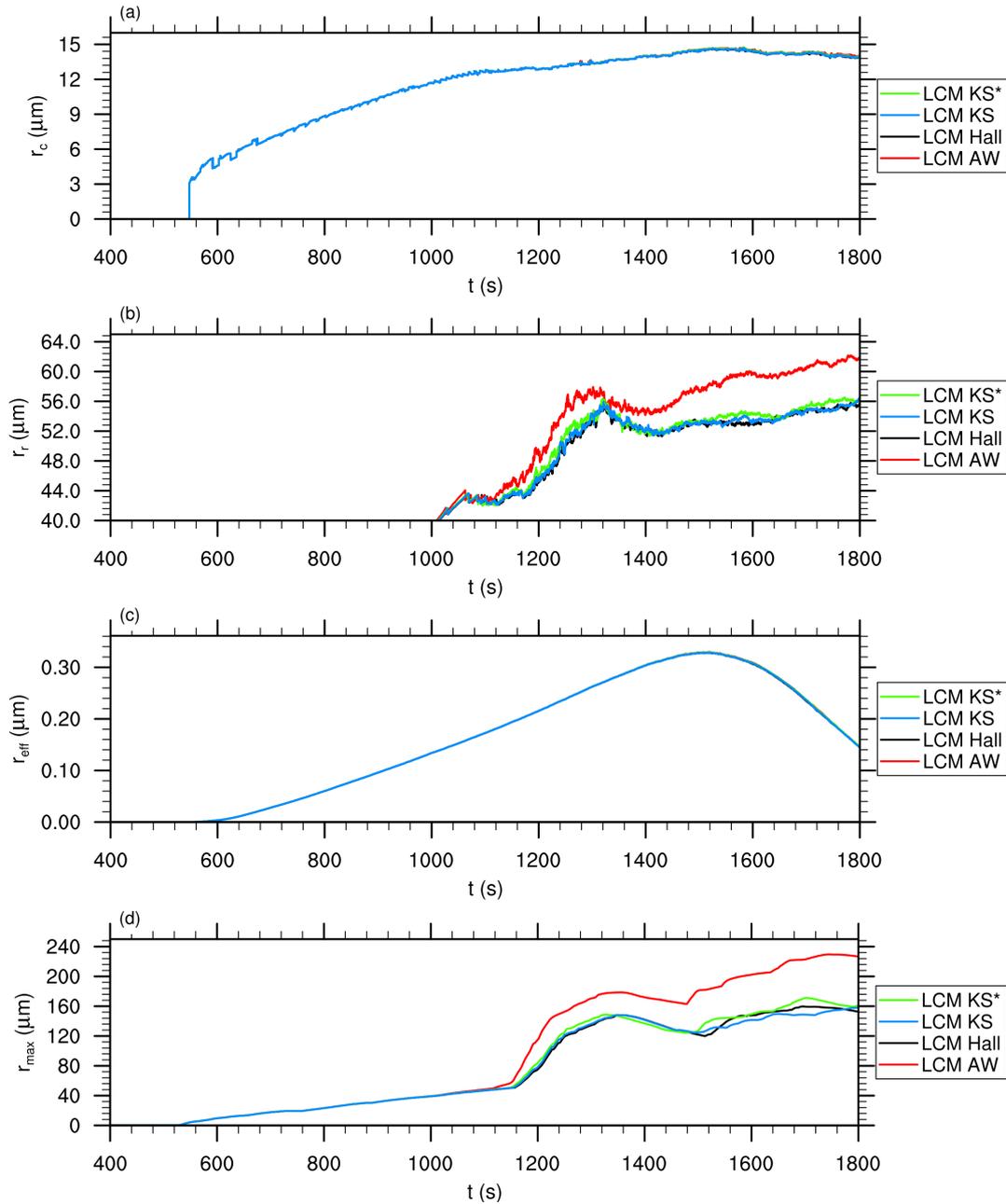


Abbildung 4.18: Zeitreihen von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Kollisionskernen (analog zu Abb. 4.17). Dargestellt sind der mittlere Wolkentropfenradius  $r_c$  (a), der mittlere Regentropfenradius  $r_r$  (b), der effektive Radius  $r_{\text{eff}}$  (c) und der maximale Radius  $r_{\text{max}}$  (d).

geringen Niesel- und Regenwassergehaltes im Modellgebiet sind kaum Auswirkungen auf LWP,  $N_c$ ,  $r_c$  und  $r_{\text{eff}}$  zu beobachten.

Abbildung 4.19 zeigt die Vertikalprofile des Flüssigwassergehaltes  $q_l$  (a), des Niesel- und Regenwassergehaltes  $q_r$  (b), des Bedeckungsgrades  $a$  (c), des Flüssigwassergehaltes in Wolken  $q_{l,\text{cl}}$  (d), des Niesel- und Regenwassergehaltes in Wolken  $q_{r,\text{cl}}$  (e), der Tropfenkonzentration in Wolken  $N_{\text{cl}}$  (f), der Niesel- und Regentropfenkonzentration in Wolken

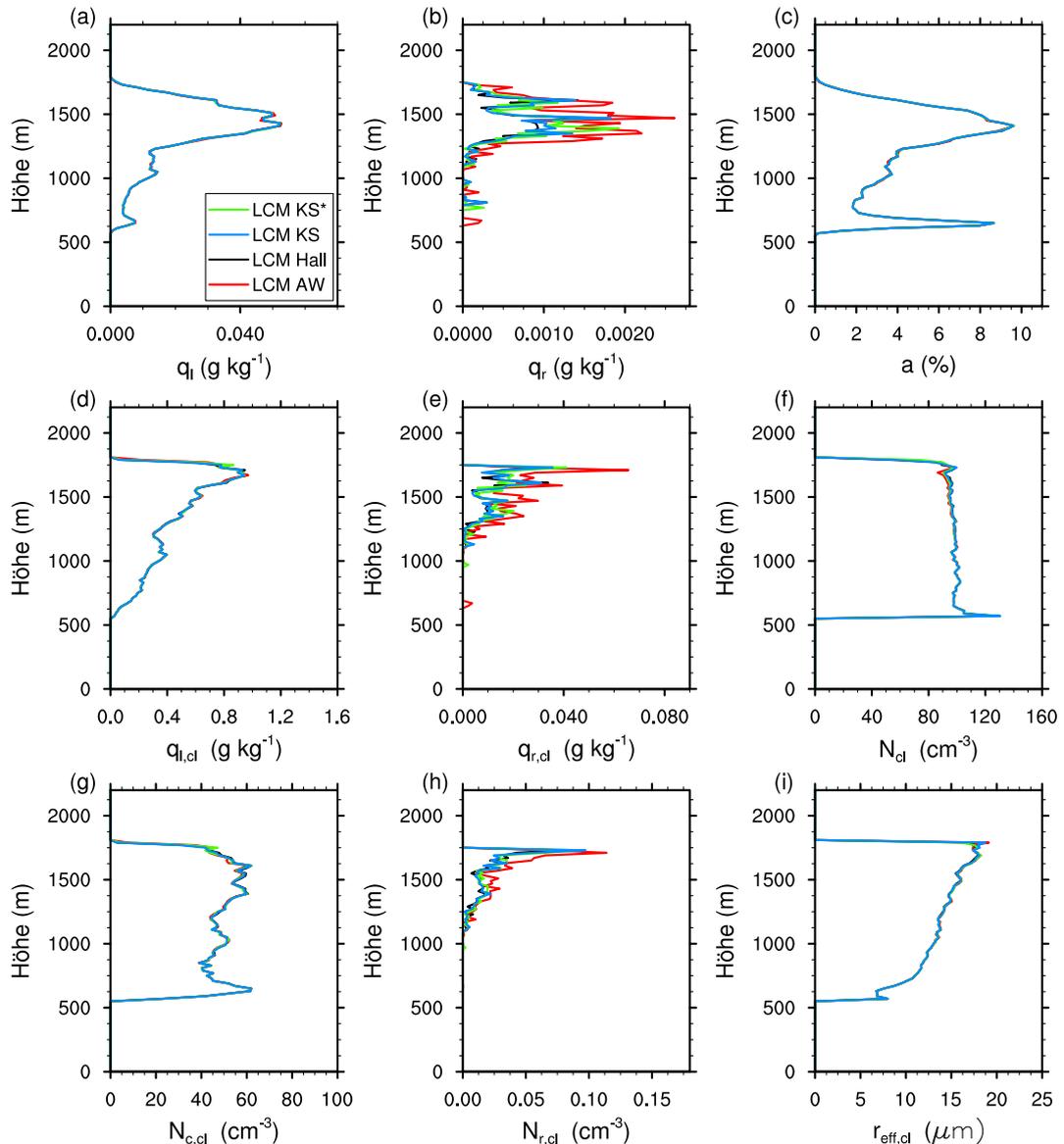


Abbildung 4.19: Vertikalprofile von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Kollisionskernen nach 1600s (analog zu Abb. 4.17). Dargestellt sind der Flüssigwassergehalt  $q_l$  (a), der Regenwassergehalt  $q_r$  (b), der Bedeckungsgrad  $a$  (c), der Flüssigwassergehalt in Wolken  $q_{l,cl}$  (d), der Regenwassergehalt in Wolken  $q_{r,cl}$  (e), die Tropfenkonzentration in Wolken  $N_{cl}$  (f), die Regentropfenkonzentration in Wolken  $N_{r,cl}$  (g), die Wolkentropfenkonzentration in Wolken  $N_{c,cl}$  (h) und der effektive Radius in Wolken  $r_{eff,cl}$  (i). Gittervolumen werden als Wolke identifiziert, wenn der darin enthaltene Flüssigwassergehalt größer als  $0,01 \text{ g kg}^{-1}$  ist.

$N_{r,cl}$  (g), der Wolkentropfenkonzentration in Wolken  $N_{c,cl}$  (h) und des effektiven Radius in Wolken  $r_{eff,cl}$  (i) nach 1600s Simulationszeit, also etwa zu dem Zeitpunkt, zu dem bei den Zeitreihen die größten Unterschiede auftreten. Signifikante Unterschiede zwischen den einzelnen Simulationen sind wieder nur für die Niesel- und Regentropfengrößen  $q_r$ ,  $q_{r,cl}$  und  $N_{r,cl}$  erkennbar, die größten Abweichungen treten dabei zwischen den

Simulationen mit AW- und Hall-Kernel auf. Die Zunahme von  $N_{r,cl}$  und  $q_{r,cl}$  findet in allen Höhenbereichen der Wolke statt. Bei der Simulation mit KS\* ist im Vergleich zum KS-Kernel in der unteren Wolkenhälfte eine leichte Zunahme von  $N_{r,cl}$  zu beobachten. Die anderen Größen zeigen lediglich minimale Abweichungen. Die Vertikalprofile zeigen etwas mehr Variationen in den jeweiligen Verläufen, da hier im Gegensatz zu den Vertikalprofilen in Abbildung 4.11 und 4.15, keine zeitliche Mittelung durchgeführt wurde. Stattdessen wurde für den Vergleich der Zeitpunkt mit den vermutlich größten Unterschieden gewählt. Die Werte von  $q_r$  und  $q_{r,cl}$  unterhalb der Wolkenbasis kennzeichnen ausfallende Niesel- und Regentropfen. Die Abnahme von  $N_r$  im oberen Bereich der Wolke bei der Simulation mit AW-Kernel deutet ebenfalls auf ausfallende Niesel- und Regentropfen hin.

Die in Abbildung 4.20 gezeigten Tropfenspektren bestätigen die bisherigen Beobachtungen zum Einfluss der turbulenten Kollisionskernel. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  mit linearer Ordinatenenteilung (a) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  mit linearer und logarithmischer Ordinatenenteilung (b und c). Die Spektren stellen den Mittelwert über den gesamten Wolkenbereich dar. Die Tropfenradien werden für die Darstellungen in 89 Tropfenklassen unterteilt, deren Breite exponentiell zunimmt. Das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  zeigt eine geringe Abnahme der Wolkentropfenkonzentration, insbesondere im Bereich des Maximums, wobei bei der Simulation mit AW-Kernel die Abnahme am größten ist. Diese Verringerung ist auf die Verstärkung des Tropfenwachstums durch turbulente Koagulation zurückzuführen, bei der die Niesel- und Regentropfen auf Kosten der Wolkentropfen anwachsen. Die damit verbundene Zunahme der Niesel- und Regentropfenkonzentration ist in den Massendichtespektren  $g(\ln r)$  zu sehen, die die Abnahme im Wolkentropfenbereich (siehe Abbildung (c)) und die Zunahme im Niesel- und Regentropfenregime zeigen. Dabei nimmt bei den Simulationen mit KS- und KS\*-Kernel im Vergleich zum Hall-Kernel die Massendichte vor allem im Bereich zwischen  $30 \mu\text{m} \lesssim r \lesssim 100 \mu\text{m}$  zu, die maximalen Radien bleiben gleich. Bei der Simulation mit AW-Kernel liegt dagegen der größte Tropfenradius bei rund  $200 \mu\text{m}$  im Gegensatz zu  $140 \mu\text{m}$  bei den Vergleichssimulationen. Zusätzlich dazu nimmt die Massendichte im gesamten Tropfenbereich mit  $r > 30 \mu\text{m}$  deutlich zu. Durch die Zunahme der Anzahl- und Massendichte nehmen auch die bei der Simulation mit Hall-Kernel beobachteten starken statistischen Schwankungen in diesem Bereich ab.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass alle betrachteten turbulenten Kollisionskernel die zeitliche und räumliche Entwicklung des Tropfenspektrums dieser idealisierten, einzelnen Wolke im Vergleich zu dem nicht-turbulenten Kollisionskernel (Hall-Kernel) beeinflussen. Wie schon der Vergleich der Verstärkungsfaktoren vermuten ließ, ist dabei der Einfluss des AW-Kernels am größten und der des KS-Kernels am geringsten. Der Turbulenzeinfluss auf die Koagulation bewirkt bei den Simulationen mit KS- und KS\*-Kernel vor allem eine Zunahme der Niesel- und Regentropfenkonzentration, wobei die mittlere Größe der Niesel- und Regentropfen vergleichbar mit der beim Hall-Kernel ist. Bei der Simulation mit AW-Kernel wird zusätzlich zu der vermehrten Bildung von Niesel- und Regentropfen auch ein beschleunigtes Wachstum dieser Tropfen beobachtet. Dies führt dazu, dass sowohl die Niesel- und Regenwasserkonzentration, als auch der Niesel- und Regenwassergehalt zeitweise doppelt so groß sind, wie die beim Hall-Kernel beobachteten Werte. Der KS-Kernel verstärkt also vor allem das Wachstum von großen Wolkentropfen durch Koagulation hin zu Niesel- und Regentropfen. Der AW-Kernel beschleunigt darüber hinaus auch das Wachstum der Niesel- und Regentropfen.

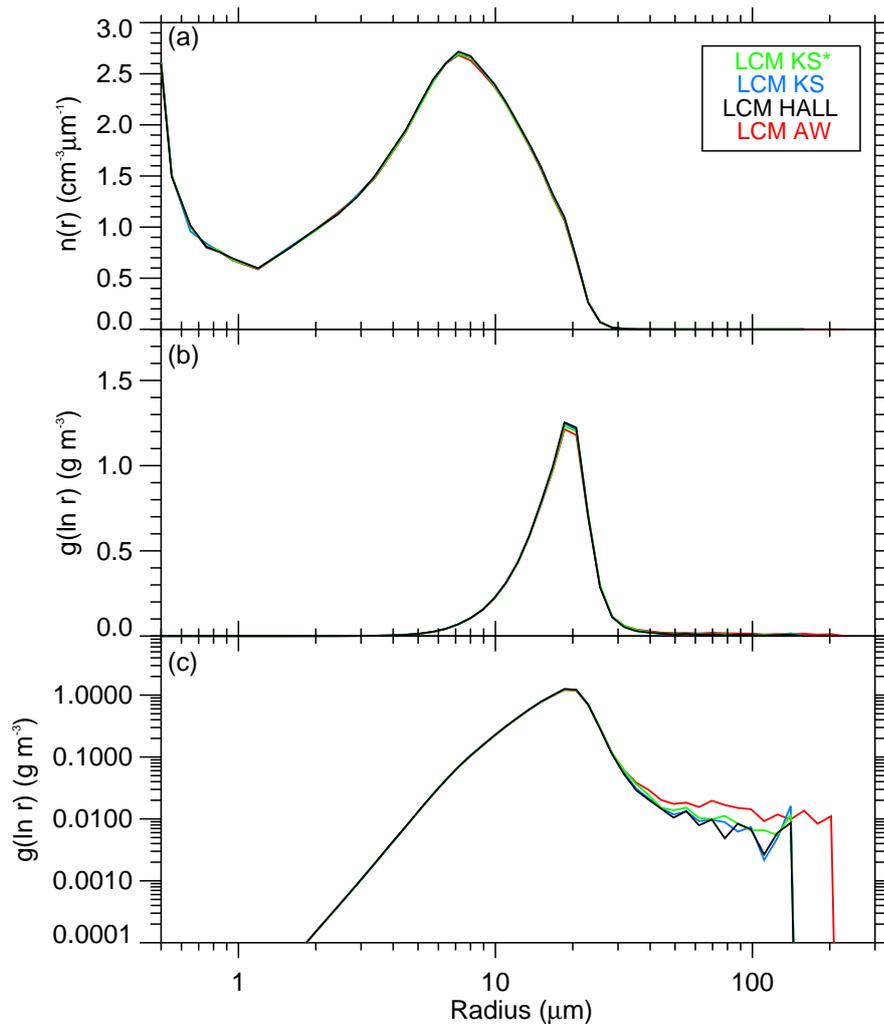


Abbildung 4.20: Tropfenspektren von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit unterschiedlichen Kollisionskernen (analog zu Abb. 4.17) nach 1600 s Simulationszeit. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  (a) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  in (b) und (c), gemittelt über die gesamte Wolke.

Ähnliche Studien haben vergleichbare Ergebnisse für den AW-Kernel gefunden. Xue et al. (2008) haben bei Untersuchungen mit einem eindimensionalen Spektralmodell ebenfalls eine signifikante Zunahme des Tropfenwachstums des AW-Kernels im Vergleich zum Hall-Kernel beobachtet, insbesondere im Bereich von  $20 \mu\text{m} \lesssim r \lesssim 100 \mu\text{m}$ . Damit verbunden war auch das frühere Einsetzen von Niederschlag. Dieser Effekt konnte bei dieser Studie nicht beobachtet werden, da hier aufgrund der Simulationskonfiguration kein signifikanter Niederschlag zu beobachten ist. Die aus der Wolke ausfallenden Niesel- und Regentropfen verdunsten in der Regel bevor sie den Boden erreichen. Aufgrund der idealisierten Simulationskonfiguration sind Rückschlüsse auf realistische Wolken jedoch schwierig. Deshalb wird im nächsten Abschnitt ein komplexeres Wolkenfeld, dessen Antrieb auf Messungen basiert, untersucht.

## 5 Simulation von Passatwindwolken

Passatwindwolken sind flache Kumuluswolken, die vor allem über dem Ozean in der Passatwindzone entstehen. Sie stehen seit den 1950-er Jahren im Fokus der Wolkenforschung (z. B. Stommel, 1947, 1951), da in dieser Region die Wolkenbildung unter nahezu einheitlichen, weniger komplizierten Bedingungen stattfindet als beispielsweise über Land in den mittleren Breiten (Siebert et al., 2013). Außerdem treten Passatwindwolken in großen Bereichen dieser Zone auf und beeinflussen damit, als Teil der Hadley-Zirkulation, auch die globale Zirkulation (z. B. Stevens, 2005). Sie verstärken beispielsweise den turbulenten, vertikalen Transport von Wärme- und Feuchte in der Grenzschicht wodurch die Grenzschichthöhe und infolgedessen auch die Verdunstungsrate am Boden zunimmt (Betts, 1973; Tiedtke et al., 1988). Passatwindwolken spielen außerdem eine wichtige Rolle beim Strahlungshaushalt der Passatwindzone (z. B. Grabowski und Wang, 2013). Zu den bisherigen Studien zu Passatwindwolken gehören auch eine Reihe von Messkampagnen, z. B. BOMEX, RICO (*Rain In Cumulus over the Ocean*, Rauber et al., 2007) und CARRIBA (*Cloud, Aerosol, Radiation and tuRbulence in the trade wInd regime over BARbados*, Siebert et al., 2013). Ein Teil der Messwerte der BOMEX- und RICO-Kampagne, meist ein Zeitraum ohne mesoskalige Störungen und mit keinem oder wenig Niederschlag, wurde in den vergangenen Jahren häufig als Grundlage für numerische Simulationen (z. B. Siebesma und Cuijpers, 1995; Heus und Jonker, 2008; Seifert et al., 2010; Matheou et al., 2011; Slawinska et al., 2012; Wyszogrodzki et al., 2013) und für LES-Modellvergleiche (Siebesma et al., 2003; van Zanten et al., 2011) verwendet. Die daraus entwickelten Konfigurationen produzieren Wolkenfelder, deren mittlere Eigenschaften über mehrere Stunden hinweg quasi-stationär sind. Diese Fälle eignen sich besonders für Untersuchungen mit dem hier vorgestellten LCM, da sie auf Messwerten basieren und trotzdem nicht zu komplex sind. Außerdem ermöglichen sie einen Vergleich mit anderen LES-Modellen und Wolkenphysikparametrisierungen. Mit Hilfe einer Konfiguration zur BOMEX-Kampagne wird im Folgenden gezeigt, dass das LCM in der Lage ist, größere Wolkenfelder über einen längeren Zeitraum hinweg zu simulieren. Der Vergleich mit anderen Wolkenphysikparametrisierungen und Beobachtungen der Messkampagne zeigt, dass das LCM dabei die charakteristischen Eigenschaften der Grenzschicht der Passatwindzone reproduzieren kann. Im Gegensatz zu der idealisierten Wolke, die in Kapitel 4 analysiert wird, bilden sich bei dieser Simulation realistische Wolken und Wolkenfelder aus. Deshalb ist dieser Fall auch besonders für Untersuchungen zum Einfluss eines turbulenten Kollisionskerns auf die Entwicklung der Tropfenspektren geeignet.

### 5.1 Konfiguration

Die Modellkonfiguration dieser Studie basiert auf der Konfiguration der BOMEX-Kampagne von Siebesma et al. (2003), die für eine Vergleichsstudie von zehn LES-Modellen entwickelt wurde. Die anfänglichen Profile der potentiellen Temperatur und der spezifischen Feuchte wurden bereits in Abschnitt 4.1 und Abbildung 4.1 (a,b) vor-

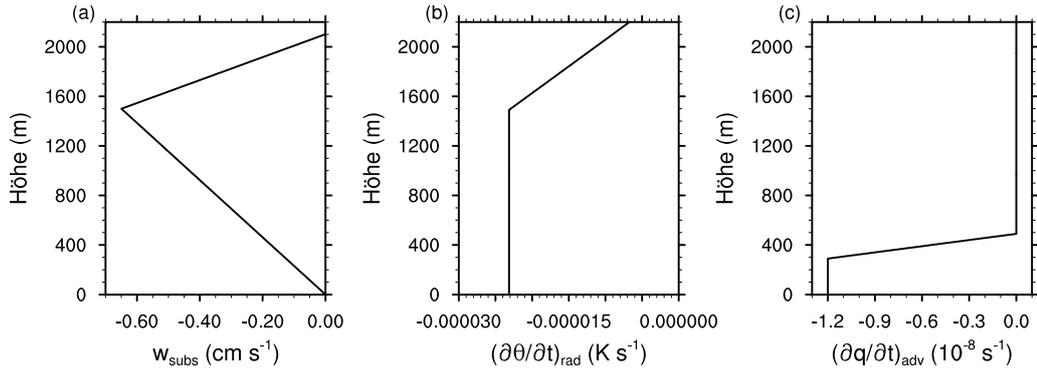


Abbildung 5.1: Zeitlich invariante Vertikalprofile der großskaligen Quell- und Tendenzterme der Passatwindwolkenimulationen, analog zur BOMEX Konfiguration von Siebesma et al. (2003): (a) Absinken  $w_{\text{subs}}$ , (b) Abkühlung durch langwellige Ausstrahlung  $(\partial\theta/\partial t)_{\text{rad}}$  und (c) bodennahe Advektion von trockenerer Luft  $(\partial q_v/\partial t)_{\text{adv}}$  und

gestellt. Die Grenzschicht wird durch einen geostrophischen Wind angetrieben, dessen anfängliche Profile in Abbildung 4.1 (c) gezeigt sind. Neben diesen Größen wird ein lineares Profil der anfänglichen SGS-TKE mit  $e = (1 - z/3000 \text{ m})^2 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$  vorgegeben. Am unteren Rand des Modellgebietes werden horizontal homogene, konstante Werte für den kinematischen sensiblen Wärmestrom  $(\overline{w''\theta''})_{z=0} = 8 \cdot 10^{-3} \text{ K m s}^{-1}$ , den kinematischen Feuchtestrom  $(\overline{w''q''})_{z=0} = 5,2 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$  und die Impulsflüsse in Form der Schubspannungsgeschwindigkeit  $u^* = 0,28 \text{ m s}^{-1}$  vorgegeben. Der Einfluss von großskaligen Gradienten und Antrieben sorgt dafür, dass die Simulation trotz der konstanten Flüsse am Boden über mehrere Stunden hinweg quasi-stationär bleibt. In diesem Fall handelt es sich dabei um großflächiges Absinken  $w_{\text{subs}}$ , bodennahe Advektion von trockenerer Luft  $(\partial q_v/\partial t)_{\text{adv}}$  und die Abkühlung durch langwellige Ausstrahlung  $(\partial\theta/\partial t)_{\text{rad}}$ . Diese Größen gehen als zusätzliche Quellterme  $Q_\Psi = -w_{\text{subs}} \cdot \partial\Psi/\partial z$  mit  $\Psi = \{u, v, \theta, q_v\}$ ,  $Q_{q_v} = (\partial q_v/\partial t)_{\text{adv}}$ ,  $Q_\theta = (\partial\theta/\partial t)_{\text{rad}}$  in die prognostischen Gleichungen (3.2), (3.5) und (3.4) ein und sind in Abbildung 5.1 dargestellt. Für den Bodendruck wird 1015 hPa und für die geografische Breite  $\phi = 15^\circ$  entsprechend der Lage von Barbados angenommen. Um die anfängliche Konvektion auszulösen, werden zu Beginn der Simulation kleine zufällige Störungen auf das Feld der Temperatur und der spezifischen Feuchte mit einer maximalen Amplitude von 0,1 K bzw.  $0,025 \text{ g kg}^{-1}$  in den untersten 1600 m aufgeprägt. Ab einer Höhe von  $z = 2200 \text{ m}$  wird eine Rayleigh-Dämpfung auf die prognostischen Größen angewendet. Damit werden Schwerewellen, die durch Konvektion in der atmosphärischen Grenzschicht angeregt werden und Instabilitäten im Modell auslösen können, gedämpft und ihre Reflexion am oberen Modellrand unterbunden.

Die Modellgebietsgröße für diese Studie beträgt  $6,4 \text{ km} \times 6,4 \text{ km} \times 3,0 \text{ km}$ . Im Gegensatz zu der Standardgitterweite von  $\Delta x = \Delta y = 100 \text{ m}$  und  $\Delta z = 40 \text{ m}$  von Siebesma et al. (2003) wird hier allerdings eine Gitterweite von  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 20 \text{ m}$  verwendet. Der Grund dafür ist, dass bei LES-Simulationen manche Eigenschaften der Passatwindwolken, wie beispielsweise ihre Größe, ihr Flüssigwassergehalt und auch der Bedeckungsgrad, von der Gitterweite abhängig sind (Brown, 1999; Matheou et al., 2011; Heinze, 2013). Das liegt u. a. daran, dass durch eine höhere Auflösung auch kleinere Wolken und Prozesse an den Wolkenrändern (z. B. Entrainment) aufgelöst werden

können. Heinze (2013) hat gezeigt, dass eine isotrope Gitterweite von 20 m im Gegensatz zu der Standardgitterweite von Siebesma et al. (2003) für den hier betrachteten BOMEX-Fall ausreicht, um hinreichend konvergente Ergebnisse zu produzieren.

Die Konfiguration der Supertropfen ist nahezu identisch zu der, die für die Studie der idealisierten Wolke verwendet wurde (siehe 4.1). Dabei werden die Supertropfen zu Beginn der Simulation im gesamten Modellgebiet bis zu einer Höhe von 2500 m freigesetzt. Sie sind gleichmäßig in den Gittervolumen verteilt und haben einen mittleren Abstand von 4 m. Der anfängliche Wichtungsfaktor aller Supertropfen liegt bei  $8 \cdot 10^9$ . Daraus ergibt sich eine mittlere Supertropfenanzahl von 125 pro Gittervolumen, die eine anfängliche Tropfenkonzentration von  $125 \text{ cm}^{-3}$  repräsentieren. Die Gesamtanzahl der Supertropfen liegt bei 1,589 Milliarden. Alle von den Supertropfen repräsentierten Tropfen beinhalten eine lösliche Masse von  $10^{-15} \text{ g NaCl}$  (Hauptbestandteil von Meersalz), so dass die Tropfen einen anfänglichen Gleichgewichtsradius entsprechend der lokalen relativen Feuchte zwischen  $0,06 \mu\text{m}$  und  $0,1 \mu\text{m}$  annehmen. Durch die einheitliche Masse des gelösten Stoffes wird eine nahezu monodisperse anfängliche Tropfenverteilung erzeugt. Diese Vereinfachung wird getroffen, um Einflüsse eines anfänglichen Aerosolspektrums auf die Ergebnisse auszuschließen. Da mit der Studie auch der Einfluss eines turbulenten Kollisionskerns untersucht werden soll, wird jeweils eine Simulation mit Hall-Kern und eine Simulation mit AW-Kern durchgeführt, die im Folgenden mit LCM Hall bzw. LCM AW bezeichnet werden. Auf die Simulation mit dem KS-Kern wird an dieser Stelle verzichtet, da die Untersuchung in Abschnitt 4.4 gezeigt hat, dass der Einfluss dieses turbulenten Kollisionskerns nur gering ist.

Um die Ergebnisse des LCMs mit anderen Wolkenphysikparametrisierungen vergleichen zu können, wird die Simulation auch mit dem in PALM implementierten Bulk-Modell simuliert, einmal ohne Niederschlag (im Folgenden Bulk) und einmal mit dem Zwei-Momenten-Schema. Das Bulk-Modell ohne Niederschlag wird hier anstelle des Ein-Momenten-Schemas gewählt, weil dieser Modelltyp auch bei der LES-Vergleichsstudie von Siebesma et al. (2003) zum Einsatz kam. Außerdem hat der Vergleich des Ein-Momenten-Schemas mit dem LCM und dem Zwei-Momenten-Schema in Abschnitt 4.2 gezeigt, dass das Ein-Momenten-Schema durch das Vernachlässigen der Verdunstung des Niesel- und Regenwassers und durch Überschätzung der Autokonversion zu früh und zu viel Niederschlag bildet. Bei der Simulation mit dem Zwei-Momenten-Schema werden alle in Abschnitt 3.1.1 vorgestellten Prozesse berücksichtigt, d. h. Autokonversion, Akkreszenz, Selbsteinfang, Zerplatzen von Regentropfen, Verdunstung von Regentropfen inklusive des Ventilationseffektes sowie Sedimentation von Wolken- und Regentropfen. Dabei wird analog zu den LCM-Simulationen auch jeweils eine Simulation mit und eine ohne Einfluss der Turbulenz auf die Autokonversion und Akkreszenz durchgeführt. Im Folgenden werden diese Simulationen entsprechend der verwendeten Parametrisierungen als 2MOM AW bzw. 2MOM Long bezeichnet. Für die Wolken-Tropfenkonzentration wird hier ein Wert von  $120 \text{ cm}^{-3}$  gewählt, da dieser dem mittleren Wert der Tropfenkonzentration in den Wolken der LCM-Simulationen entspricht.

Für die Studie wird ein Zeitraum von drei Stunden simuliert, wobei die ersten zwei Stunden die sogenannte Einschwingphase darstellen, in der sich die Konvektion entwickelt und das typische Überschießen stattfindet. Deshalb konzentrieren sich die Auswertungen auf die letzte Stunde der Simulation. Für die LCM-Simulationen wird ein fester Zeitschritt von  $\Delta t = 0,1 \text{ s}$  und für die Simulationen mit Bulk-Schema ein variabler Zeitschritt von  $\Delta t \approx 1,6 \text{ s}$  verwendet. Einen Überblick über die wichtigsten Simulationsparameter gibt Tabelle 5.1.

Bezeichnung	Gitterpunkte $L_x \times L_y \times L_z$	Gitterweite (m)	Wolkenphysik- parametrisierung	Kollisions- kernel
LCM Hall	$320 \times 320 \times 160$	20	LCM	Hall
LCM AW	$320 \times 320 \times 160$	20	LCM	AW
2MOM Long	$320 \times 320 \times 160$	20	Bulk mit Zwei-Mom.-Schema	Long
2MOM AW	$320 \times 320 \times 160$	20	Bulk mit Zwei-Mom.-Schema	AW
Bulk	$320 \times 320 \times 160$	20	Bulk ohne Niederschlag	-

Tabelle 5.1: Übersicht zu den wichtigsten Simulationsparametern der Passatwindwolken-simulationen. Die angegebene Gitterweite ist für alle Raumrichtungen isotrop.

## 5.2 Vergleich mit Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der BOMEX-Simulationen des LCMs mit denen der Bulk-Parametrisierungen Bulk, 2MOM AW und 2MOM Long verglichen. Der Schwerpunkt liegt dabei auf den Eigenschaften der sich entwickelnden Wolken. Eine ausführliche Beschreibung zu der allgemeinen Grenzschichtentwicklung für diesen BOMEX Fall ist bei Heinze (2013) zu finden. Auf den Vergleich mit den Ergebnissen des LES-Modellvergleichs von Siebesma et al. (2003) wird an dieser Stelle ebenfalls verzichtet. Ein Grund dafür ist, dass hier eine höhere Auflösung verwendet wird und bekannt ist, dass insbesondere die Wolkeneigenschaften von der Gitterweite abhängig sind. Außerdem wurden die Ergebnisse von Bulk bzw. Bulk und einer früheren Modellversion des LCMs bereits bei Heinze (2013) bzw. Riechelmann et al. (2012) (im Anhang C) mit denen des LES-Modellvergleichs verglichen. Dabei wurde in beiden Studien auch die Gitterweitenabhängigkeit mit Hilfe des Bulk-Modells untersucht. Die Vergleiche haben gezeigt, dass beide Parametrisierungen die mittleren Eigenschaften der Grenzschicht in guter Übereinstimmung mit den Teilnehmern des LES-Modellvergleichs wiedergeben können. Bei dem Modellvergleich von Siebesma et al. (2003) wurden allerdings nur einfache Wolkenphysikparametrisierungen ohne Niederschlagsberechnung verwendet. Zum einen sollte der Vergleich damit vereinfacht werden. Zum anderen trat während der Messkampagne kaum Niederschlag (im Mittel  $0,2 \text{ mm d}^{-1}$ , Holland und Rasmusson, 1973) auf, weshalb die niederschlagsbildenden Prozesse für die mittlere Entwicklung der Grenzschicht nur eine untergeordnete Rolle spielen. Der LES-Modellvergleich von Siebesma et al. (2003) hat auch gezeigt, dass der Flüssigwassergehalt und die davon abhängigen Größen aufgrund des geringen Bedeckungsgrades großen zeitlichen Schwankungen unterliegen, die die statistischen Auswertungen erschweren. Nichtsdestotrotz ist dieser Fall gut für die Untersuchung von Wolken- und Niederschlagsbildenden Prozessen geeignet und wird, auch aus Mangel an Alternativen, regelmäßig für entsprechende Studien verwendet (z. B. Heus und Jonker, 2008; Seifert et al., 2010; Dawe und Austin, 2011; Slawinska et al., 2012; Wyszogrodzki et al., 2013). Hier steht, im Gegensatz zu den Untersuchungen in Riechelmann et al. (2012) (im Anhang C), der Vergleich des LCM mit dem Zwei-Momenten-Schema im Vordergrund, der es ermöglicht, auch Größen wie den Regenwassergehalt und die Niederschlagsmenge zu untersuchen.

Die ersten zwei Stunden der Simulation stellen die Einschwingphase dar, in denen sich die Turbulenz voll entwickelt und die ersten Wolken gebildet werden. Danach stellt sich ein quasi-stationärer Zustand ein, der durch permanente Bildung, Entwicklung und Auflösung von Passatwindwolken gekennzeichnet ist. Abbildung 5.2 zeigt dazu beispielhaft das dreidimensionale Feld des Flüssigwassergehaltes der Simulation mit

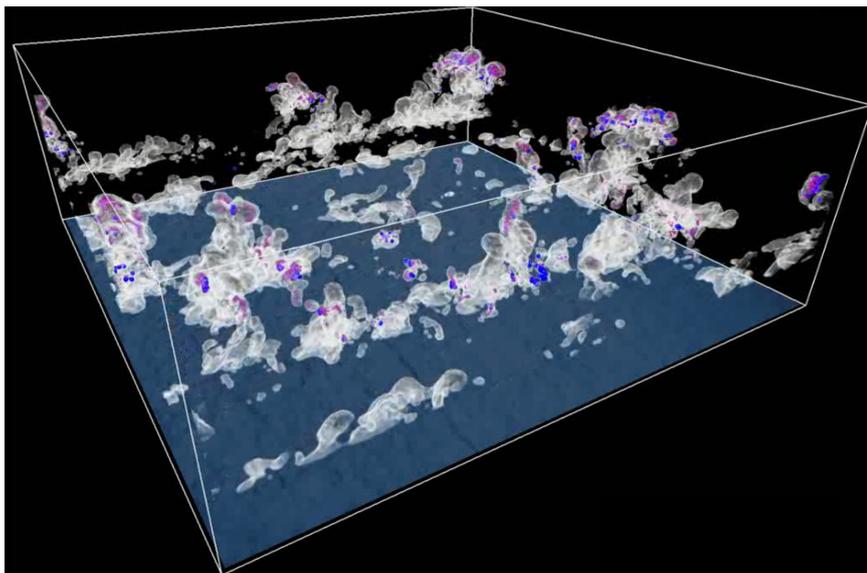


Abbildung 5.2: Dreidimensionales Feld des Flüssigwassergehaltes  $q_l$  nach 10800 s simulierter Zeit von der Passatwindwolken simulation mit LCM AW. Die weißen Gebiete repräsentieren einen Wert von  $q_l = 0,01 \text{ g kg}^{-1}$ , die mittelgrauen von  $q_l = 0,28 \text{ g kg}^{-1}$  und die dunkelgrauen Gebiete von  $q_l = 0,56 \text{ g kg}^{-1}$ . Die pinkfarbenen bzw. dunkelblauen Isooberflächen repräsentieren dabei Bereiche mit großen Wolken- bzw. Niesel- und Regentropfen, in denen der mittlere Radius größer als  $18 \mu\text{m}$  bzw.  $40 \mu\text{m}$  ist.

LCM AW nach drei Stunden simulierter Zeit. Die pinkfarbenen bzw. dunkelblauen Isooberflächen repräsentieren dabei Bereiche mit großen Wolken- bzw. Niesel- und Regentropfen (mit mittlerem Radius größer als  $18 \mu\text{m}$  bzw.  $40 \mu\text{m}$ ), die sich, wie auch hier zu sehen, typischerweise im oberen Drittel der Wolke befinden. Der mittlere Gesamtbedeckungsgrad ist relativ gering und liegt zwischen 22 – 25 %. Die Wolken bewegen sich mit dem mittleren Wind nach Westen und andere Bomex-Studien haben gezeigt, dass sie wahrscheinlich eine Lebensdauer zwischen einigen Minuten und einer Stunde haben (Dawe und Austin, 2011). Sie treten zwischen 500 m und 1500 m Höhe in dem Bereich mit bedingt-labiler Schichtung auf. Das simulierte Wolkenfeld ist geprägt von vielen kleinen, kurzlebigen Wolken und einigen hochreichenden, langlebigen Wolken, die die Inversion erreichen (Dawe und Austin, 2011). Um die Eigenschaften der zufällig verteilten Wolken miteinander vergleichen zu können, werden vor allem Zeitreihen integraler Größen sowie zeitlich und räumlich gemittelte Profile betrachtet, die sich auf das gesamte Modellgebiet oder die Wolkenbereiche beziehen. Siebesma et al. (2003) und van Zanten et al. (2011) folgend, werden dafür Gittervolumen mit  $q_l > 0,01 \text{ g kg}^{-1}$  als Wolke definiert. Die Profile werden jeweils über die letzte Stunde der Simulation gemittelt, wobei bei den LCMs ein Profil pro Sekunde und bei den Bulk- bzw. 2MOM-Simulationen ein Profil pro Zeitschritt (etwa 1,6s) in das Mittel einfließt. Profile, die sich nur auf Wolkenbereiche beziehen, werden mit dem Index cl gekennzeichnet.

Die Entwicklung von einigen ausgewählten Zeitreihen ist in Abbildung 5.3 dargestellt. Dabei gibt der Gesamtbedeckungsgrad TCC in (a) den Anteil von vertikalen Säulen an, die mindestens ein als Wolke gekennzeichnetes Gittervolumen besitzen. Der Flüssigwasserpfad LWP in (b) und der Regenwasserpfad RWP in (c) stellen den

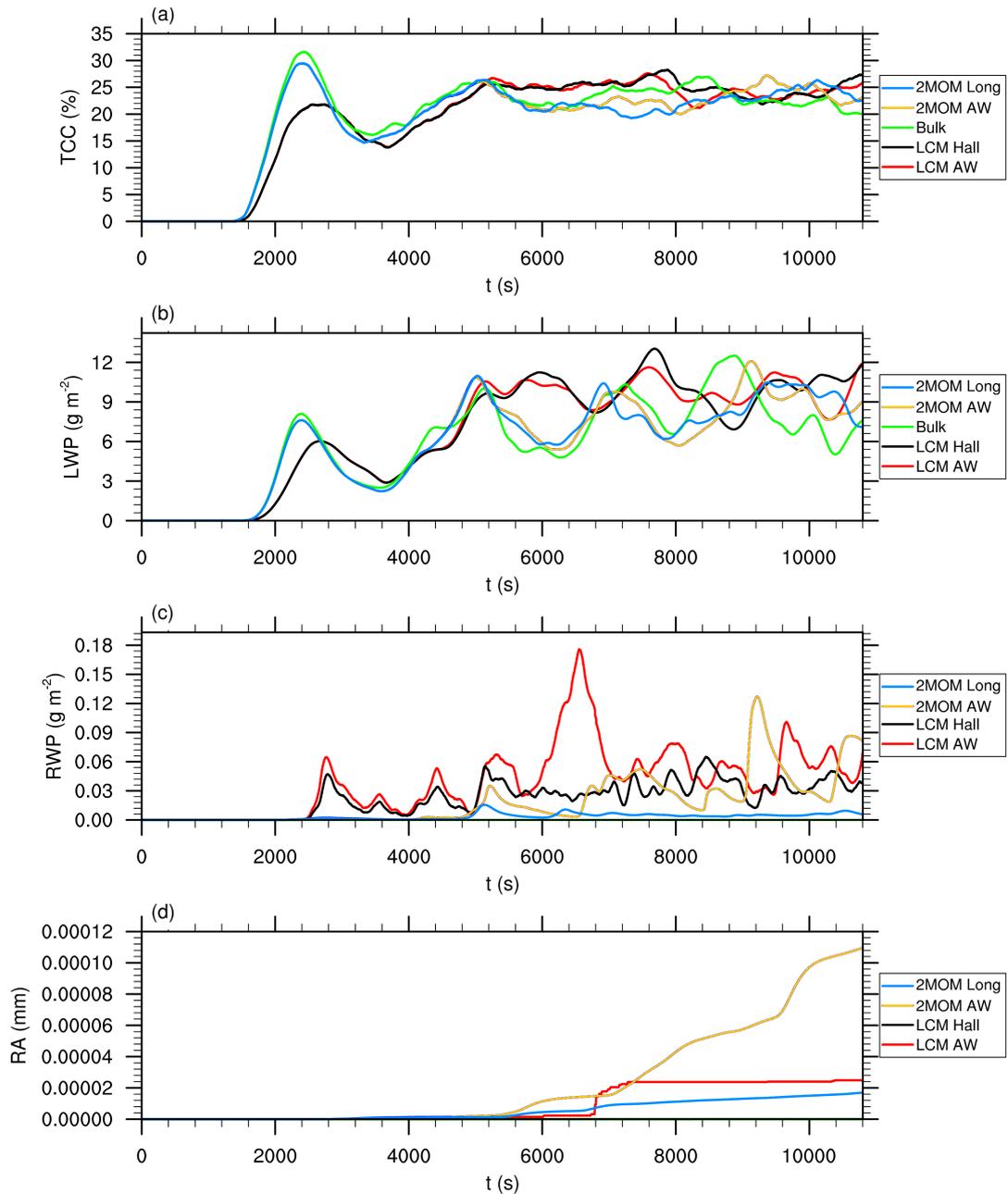


Abbildung 5.3: Zeitreihen von den Passatwindwolkenimulationen mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen (Zwei-Momenten-Schema 2MOM, Bulk-Modell Bulk und Lagrangesches Wolkenmodell LCM). Die Simulationen mit Niederschlagsbildung (2MOM, LCM) wurden mit einem nicht-turbulenten Kollisionskernel (Long bzw. Hall) und einem turbulenten Kollisionskernel (AW) durchgeführt. Dargestellt sind der Gesamtbedeckungsgrad TCC (a), der mittlere Flüssigwasserpfad LWP (b), der mittlere Regenwasserpfad RWP (c) und die mittlere, akkumulierte Niederschlagsmenge am Boden RA (d).

	$\overline{TCC}$ ( $\sigma_{TCC}$ ) in %	$\overline{LWP}$ ( $\sigma_{LWP}$ ) in $\text{g kg}^{-1}$	$\overline{RWP}$ ( $\sigma_{RWP}$ ) in $\text{g kg}^{-1}$	RA in $\text{mm h}^{-1}$
LCM Hall	24,7 (1,7)	10,1 (1,5)	$3,6 \cdot 10^{-2}$ ( $1,1 \cdot 10^{-2}$ )	$2,1 \cdot 10^{-8}$
LCM AW	24,3 (1,5)	9,9 (1,1)	$5,5 \cdot 10^{-2}$ ( $1,7 \cdot 10^{-2}$ )	$2,4 \cdot 10^{-6}$
2MOM Long	22,8 (1,9)	8,5 (1,3)	$5,2 \cdot 10^{-3}$ ( $1,3 \cdot 10^{-3}$ )	$7,5 \cdot 10^{-6}$
2MOM AW	23,3 (1,8)	8,5 (1,6)	$4,5 \cdot 10^{-2}$ ( $2,8 \cdot 10^{-2}$ )	$9,0 \cdot 10^{-5}$
Bulk	23,3 (1,9)	8,5 (2,1)	-	-

Tabelle 5.2: Mittelwerte und Standardabweichungen der letzten Stunde des Simulationszeitraums der in Abbildung 5.3 dargestellten Größen.

mittleren, vertikal integrierten Flüssig- bzw. Regenwassergehalt dar. Dabei werden für den Flüssigwassergehalt alle Tropfen berücksichtigt, wohingegen der Radius von Niesel- und Regentropfen mindestens  $40 \mu\text{m}$  groß sein muss. Die zeitliche Entwicklung des TCC und LWP zeigt, dass die ersten Wolken nach etwa 1600 s gebildet werden, wenn sich die Konvektion entwickelt hat. Da diese Wolken gleichzeitig entstehen und eine ähnliche Lebensdauer haben, kann dadurch das erste Maximum und anschließende Minimum erklärt werden. Die langsamere Entwicklung der anfänglichen Wolken bei den LCM-Simulationen im Vergleich zu den Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen und das daraus resultierende geringere Maximum wurden bereits bei der Simulation der idealisierten Wolke in Abschnitt 4.2 beobachtet und diskutiert. Die Ursache dafür ist die explizite Berechnung der Nukleation und des Kondensationswachstum im LCM, im Gegensatz zur Sättigungsadjustierung bei den Bulk-Wolkenphysikparametrisierungen. Die Einschwingphase wird von den Analysen ausgenommen. Die Mittelwerte und Standardabweichungen der letzten Stunde sind für die in Abbildung 5.3 dargestellten Größen in Tabelle 5.2 zusammengefasst. Die Mittelwerte zeigen sowohl für TCC als auch LWP eine gute Übereinstimmung der einzelnen Simulationen. Dabei liegen die Abweichungen zwischen den einzelnen Modellen in der Größenordnung der durch die z. T. starken zeitlichen Schwankungen hervorgerufenen großen Standardabweichung. Deutliche Unterschiede zwischen den verschiedenen Modellen aber auch den verwendeten Kollisionskernen sind beim RWP (Abb. 5.3 (c)) und der mittleren Niederschlagsmenge am Boden (RA, Abb. 5.3 (d)) zu erkennen<sup>1</sup>. Dabei fällt auf, dass beide Simulationen mit turbulentem AW-Kernel einen größeren Niesel- und Regenwassergehalt und mehr Niederschlag produzieren als die Vergleichssimulationen mit nicht-turbulentem Hall- bzw. Long-Kernel. Dieses Ergebnis stimmt mit denen aus Abschnitt 4.4 von der Simulation der idealisierten Wolke und Erkenntnissen anderer Studien (z. B. Seifert et al., 2010; Xue et al., 2008; Wyszogrodzki et al., 2013) überein. Dabei ist RWP bei LCM AW im Vergleich zu LCM Hall um den Faktor 1,5 erhöht und der Unterschied von 2MOM Long zu 2MOM AW liegt sogar im Bereich von Faktor 10. Für alle Simulationen mit Niederschlagsberechnung ist der RWP außerdem mindestens eine Größenordnung kleiner als der LWP, so dass die Niederschlagsprozesse, wie bei Siebesma et al. (2003) vermutet, keinen signifikanten Einfluss auf die mittlere Verteilung des Flüssigwassergehaltes haben. Die mittleren Niederschlagsmengen am Boden passen zu den Beobachtungen (im Mittel  $0,2 \text{ mm d}^{-1} = 0,0083 \text{ mm h}^{-1}$  bei Holland und Rasmusson, 1973) und Ergebnissen vergleichbarer Studien ( $< 10^{-4} \text{ mm h}^{-1}$  bzw.  $0,25 \text{ mm h}^{-1}$  ohne bzw. mit

<sup>1</sup>Bei der Simulation mit Bulk ist die Niederschlagsbildung nicht enthalten, deshalb sind RWP und RA für Bulk gleich null.

Turbulenzeffekt bei Wyszogrodzki et al., 2013) überein. Dabei sind die globalen Maxima des RWP bei LCM AW und 2MOM AW mit größeren Niederschlagsereignisse gekoppelt. Das bedeutet, dass diese mit Sedimentation von Niesel- und Regentropfen verbunden sind. Auf der anderen Seite kann die Niederschlagsmenge auch durch Sedimentation von Wolkentropfen zunehmen. Ein Rückgang des RWP kann außer durch Niederschlag auch durch Verdunstung der Regentropfen erfolgen.

Abbildung 5.4 zeigt die mittleren Vertikalprofile der potentiellen Temperatur (a), der spezifischen Feuchte (b), des Bedeckungsgrades (c), des Flüssigwassergehaltes (d), des Regenwassergehaltes (e) und des Flüssigwassergehaltes in Wolken (f) der einzelnen Simulationen. Dabei zeigen die nahezu identischen Profile von  $\theta$  und  $q_v$  stellvertretend, dass die mittleren Eigenschaften der Grenzschicht durch die unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen nicht beeinflusst werden. Das liegt zum einen daran, dass der von den verschiedenen Modellen prognostizierte Flüssigwassergehalt in der gleichen Größenordnung liegt und zum anderen an dem geringen Gesamtbedeckungsgrad. Das Profil des Bedeckungsgrades  $a$  zeigt eine gute Übereinstimmung der verschiedenen Simulationsergebnisse. Er erreicht sein Maximum erwartungsgemäß nahe der Wolkenbasis, wo der Wind maximal ist und große Feuchtegradienten vorherrschen (van Zanten et al., 2011). Das Maximum ist mit 8,3 % bei den LCM-Simulationen etwas größer als bei den Bulk-/2MOM-Simulationen mit 7,6 %. Beim Profil von  $q_r$  (Abb. 5.4 (e)) ist der bei 2MOM AW auftretende Niederschlag sowie der kontinuierliche Charakter des Feldes deutlich zu erkennen. Der Niederschlag ist dabei die Ursache dafür, dass  $q_r$  bei 2MOM AW innerhalb der Wolkenschicht niedrigere Werte als bei den LCM-Simulationen annimmt. Nichtsdestotrotz zeigen die Profile von  $q_r$  auch wieder, dass Simulationen mit AW-Kernel im Vergleich zum Hall-/Long-Kernel bei gleicher Wolkenphysikparametrisierung mehr Regenwasser produzieren. Die Profile von  $q_l$  (Abb. 5.4 (d)) zeigen durchgehend größere Werte für die LCM-Simulationen und im oberen Bereich der Wolkenschicht auch unterschiedliche Verläufe der Kurven. Aufgrund des geringen Bedeckungsgrades können solche deutlichen Unterschiede allerdings schon durch geringe Unterschiede von  $a$  hervorgerufen werden, insbesondere bei Vertikalprofilen, bei denen über das gesamte Modellgebiet gemittelt wurde. Der Vergleich von  $q_l$  mit  $q_{l,cl}$ , also dem mittleren Flüssigwassergehalt innerhalb der Wolken, zeigt außerdem, dass die über das gesamte Modellgebiet gemittelten Profile aufgrund des geringen Bedeckungsgrades auch keine Rückschlüsse über den Verlauf innerhalb der Wolken zulassen. Die Profile von  $q_{l,cl}$  zeigen im Gegensatz zu  $q_l$ , dass der qualitative Verlauf bei allen Simulationen gleich ist. Die Maximalwerte unterscheiden sich aber vor allem bei 2MOM AW und Bulk deutlich. Die niedrigeren Werte von 2MOM AW im oberen Bereich der Wolke werden durch das Ausfallen von Niederschlag erklärt. Bulk erreicht dagegen größere Maximalwerte, da hier kein Niederschlag ausfallen kann. Die Profile zeigen außerdem, dass die Wolkenober- und Untergrenzen nahezu identisch sind und nur bei Bulk die Wolkenobergrenze minimal höher liegt.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass das LCM für diesen Fall mit Passatwindwolkenbedeckung gut mit der einfacheren (Bulk) und auch komplexeren (2MOM) Wolkenphysikparametrisierung des Bulk-Modells und den Beobachtungen übereinstimmt. Das LCM ist außerdem in der Lage die charakteristischen Eigenschaften der Wolken zu reproduzieren. Der einzige Unterschied ist die deutlich größere Niederschlagsmenge bei 2MOM AW. Die Ursache dafür besteht offensichtlich darin, dass beim Zwei-Momenten-Schema das vorhandene Niesel- und Regenwasser schneller ausfällt und auch den Boden erreicht. Eine Ursache für das schnellere Ausfallen beim Zwei-

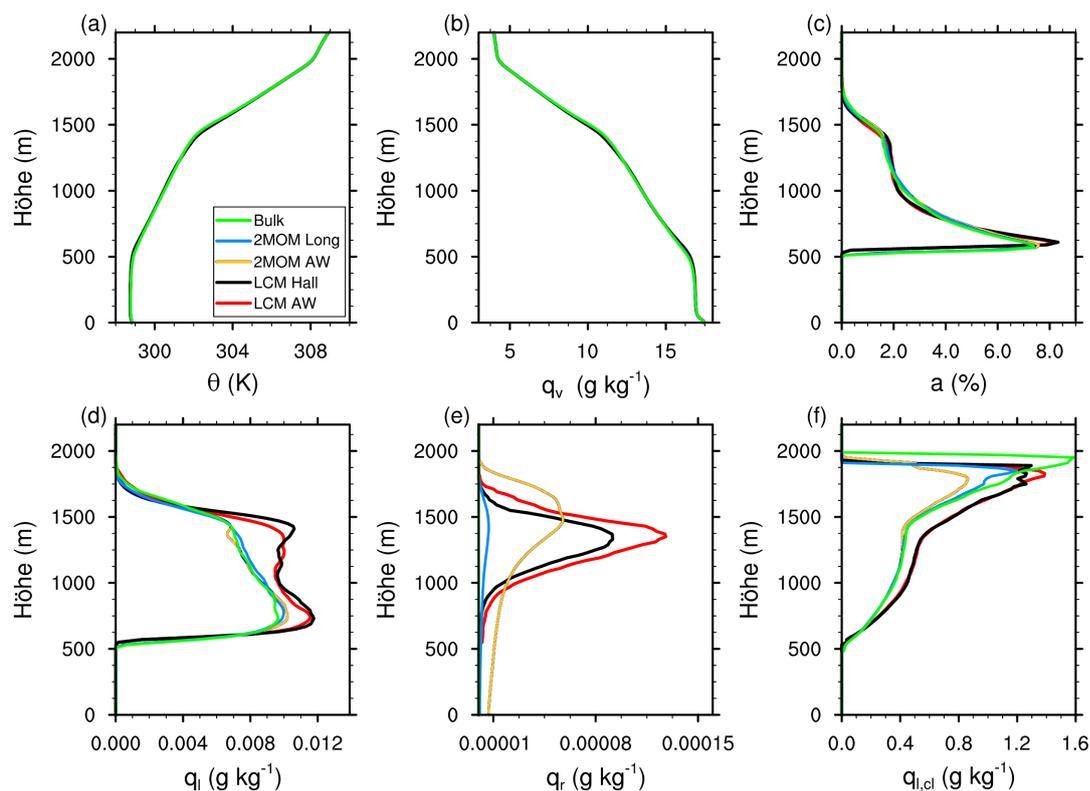


Abbildung 5.4: Zeitlich gemittelte Vertikalprofile von den Passatwindwolken Simulationen mit unterschiedlichen Wolkenphysikparametrisierungen und verschiedenen Kollisionskernen (analog zu Abb. 5.3). Dargestellt sind die potentiellen Temperatur  $\theta$  (a), die spezifische Feuchte  $q_v$  (b), der Bedeckungsgrad  $a$  (c), der Flüssigwassergehalt  $q_l$  (d), der Regenwassergehalt  $q_r$  (e) und der Flüssigwassergehalt in Wolken  $q_{l,cl}$  (f). Die Profile wurden über die letzte Stunde des Simulationszeitraums gemittelt. Gittervolumen werden als Wolke identifiziert, wenn der darin enthaltene Flüssigwassergehalt größer als  $0,01 \text{ g kg}^{-1}$  ist.

Momenten-Schema können Unterschiede bei der Abschätzung der mittleren Niesel- und Regentropfengröße aufgrund der vorgegebenen Verteilungsfunktion und eine damit verbundene höhere Fallgeschwindigkeit der Niesel- und Regentropfen sein. Da der turbulente Kollisionskernel das Wachstum der Niesel- und Regentropfen beschleunigt, wirkt sich der Effekt bei dieser Simulation entsprechend deutlicher aus. Alle anderen Unterschiede können auf den Niederschlag oder statistische Schwankungen des Bedeckungsgrades zurückgeführt werden.

### 5.3 Untersuchung zum Einfluss des turbulenten Kollisionskernels

In diesem Abschnitt wird der BOMEX-Fall dazu genutzt, den im vorigen Abschnitt bereits erwähnten Einfluss des turbulenten Kollisionskernels genauer zu untersuchen. Dafür werden die LCM-Simulationsergebnisse verwendet, da diese durch die explizite Berechnung der Tropfen deutlich mehr und detaillierte Informationen, vor allem zu

	$\overline{N_c}$ ( $\sigma_{N_c}$ ) in $\text{cm}^{-3}$	$\overline{N_r}$ ( $\sigma_{N_r}$ ) in $\text{m}^{-3}$	$\overline{r_c}$ ( $\sigma_{r_c}$ ) in $\mu\text{m}$	$\overline{r_r}$ ( $\sigma_{r_r}$ ) in $\mu\text{m}$	$\overline{r_{\max}}$ ( $\sigma_{r_{\max}}$ ) in $\mu\text{m}$
LCM Hall	0,97 (0,11)	24,7 (7,0)	12,8 (0,3)	52,9 (1,8)	184,9 (31,8)
LCM AW	0,95 (0,08)	31,1 (9,0)	13,0 (0,4)	55,9 (2,5)	124,6 (17,7)

Tabelle 5.3: Mittelwerte und Standardabweichungen der in Abbildung 5.5 dargestellten Größen.

den Tropfengrößen und -konzentrationen, liefern.

In Abschnitt 5.2 wurde anhand der Abbildungen 5.3 und 5.4 bereits gezeigt, dass die mittlere Entwicklung der Grenzschicht und der darin enthaltenen Wolken bei LCM AW und LCM Hall, abgesehen von statistischen Fluktuationen, nahezu identisch ist. Das beinhaltet insbesondere die räumliche Verteilung (TCC und  $a$ ), die vertikale Erstreckung (z. B. bei  $a$  erkennbar) und den Flüssigwassergehalt (LWP,  $q_l$  und  $q_{l,cl}$ ) der Wolken. Deutliche Unterschiede zeigen dagegen der Niesel- und Regenwassergehalt (RWP und  $q_r$ ) und die Niederschlagsmenge (RA), die erwartungsgemäß bei LCM AW, also der Simulation mit turbulentem Kollisionskernel, deutlich höher sind als bei der Vergleichssimulation LCM Hall. Das ist auch bei den Zeitreihen der letzten Stunde des Simulationszeitraums von (a) der mittleren Wolkentropfenkonzentration  $N_c$ , (b) der mittleren Niesel- und Regentropfenkonzentration  $N_r$ , (c) des mittleren Wolkentropfenradius  $r_c$ , (d) des mittleren Niesel- und Regentropfenradius  $r_r$  und (e) des maximalen Radius  $r_{\max}$  in Abbildung 5.5 zu erkennen.  $N_c$  und  $N_r$  wurden über das gesamte Modellgebiet gemittelt,  $r_c$  und  $r_r$  nur über die Bereiche mit Wolken- bzw. Niesel- und Regentropfen. Dabei zeigt sich, dass die Ursache für den erhöhten RWP bei LCM AW sowohl die größere mittlere Niesel- und Regentropfenkonzentration  $N_r$  ( $31,1 \text{ m}^{-3}$  gegenüber  $24,7 \text{ m}^{-3}$ ) als auch der größere mittlere Niesel- und Regentropfenradius  $r_r$  ( $55,9 \mu\text{m}$  gegenüber  $52,9 \mu\text{m}$ ) ist. Dabei liegen die unterschiedlichen Werte von  $N_r$  aufgrund der starken zeitlichen Schwankungen allerdings noch im Bereich der einfachen Standardabweichung. Die über die letzte Stunde gemittelten Mittelwerte sind als dünn gestrichelte Linien in Abbildung 5.5 eingezeichnet und auch zusammen mit den Standardabweichungen in Tabelle 5.3 zu finden. Der Einfluss des turbulenten Kollisionskerns bewirkt auch einen deutlich größeren mittleren maximalen Tropfenradius  $r_{\max}$  bei LCM AW. Die mittlere Wolkentropfenkonzentration  $N_c$  und der mittlere Wolkentropfenradius  $r_c$  der beiden Simulationen sind dagegen nahezu identisch und ihre Differenz kleiner als die Standardabweichungen. Die Werte in Abbildung 5.5 werden z. T. allerdings durch Unterschiede im Bedeckungsgrad beeinflusst.

Einen unbeeinflussteren und detaillierten Überblick liefern die Vertikalprofile in Abbildung 5.6, die über die als Wolken identifizierten Gittervolumen<sup>2</sup> und die letzte Stunde des Simulationszeitraum gemittelt wurden. Dargestellt sind (a) der Flüssigwassergehalt  $q_{l,cl}$ , (b) der Niesel- und Regenwassergehalt  $q_{r,cl}$ , (c) der Wolkentropfenradius  $r_{c,cl}$ , (d) die Wolkentropfenkonzentration  $N_{c,cl}$ , (e) die Niesel- und Regentropfenkonzentration  $N_{r,cl}$ , (f) die Tropfenkonzentration  $N_{cl}$ , (g) die Änderung des Wolkenwassergehaltes durch Kondensation  $(dq_c/dt)_{cl}^{\text{Kond}}$ , (h) die Änderung des Niesel- und Regenwasserge-

<sup>2</sup>Um den Einfluss von ausfallenden Niesel- und Regentropfen zu minimieren, insbesondere unterhalb der Wolkenbasis, wurde für die Identifizierung als Wolke neben dem Grenzwert des Flüssigwassergehaltes auch das Vorhandensein von Wolkentropfen in dem entsprechenden Gittervolumen gefordert. Demnach gehören Niesel- und Regentropfen außerhalb der Wolke nicht zur Wolke.

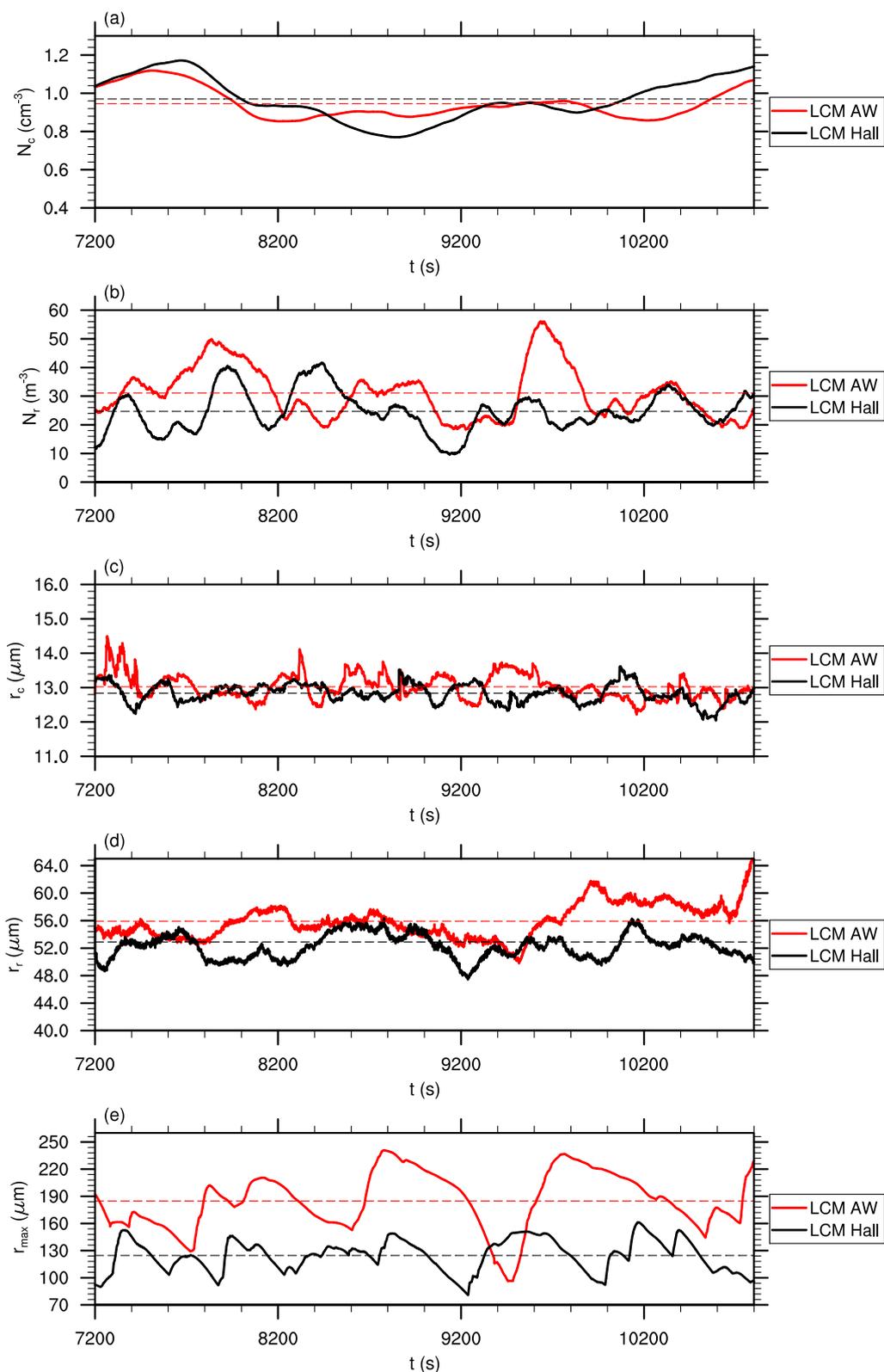


Abbildung 5.5: Zeitreihen der letzten Stunde des Simulationszeitraums der Passatwindwolkenimulationen mit LCM und unterschiedlichen Kollisionskernen (AW und Hall). Dargestellt sind die mittlere Wolkentropfenkonzentration  $N_c$  (a), die mittlere Regentropfenkonzentration  $N_r$  (b), der mittlere Wolkentropfenradius  $r_c$  (c), der mittlere Regentropfenradius  $r_r$  (d) und der maximale Radius  $r_{\max}$  (e). Die dünn gestrichelten Linien zeigen den jeweiligen Mittelwert des dargestellten Zeitraums.

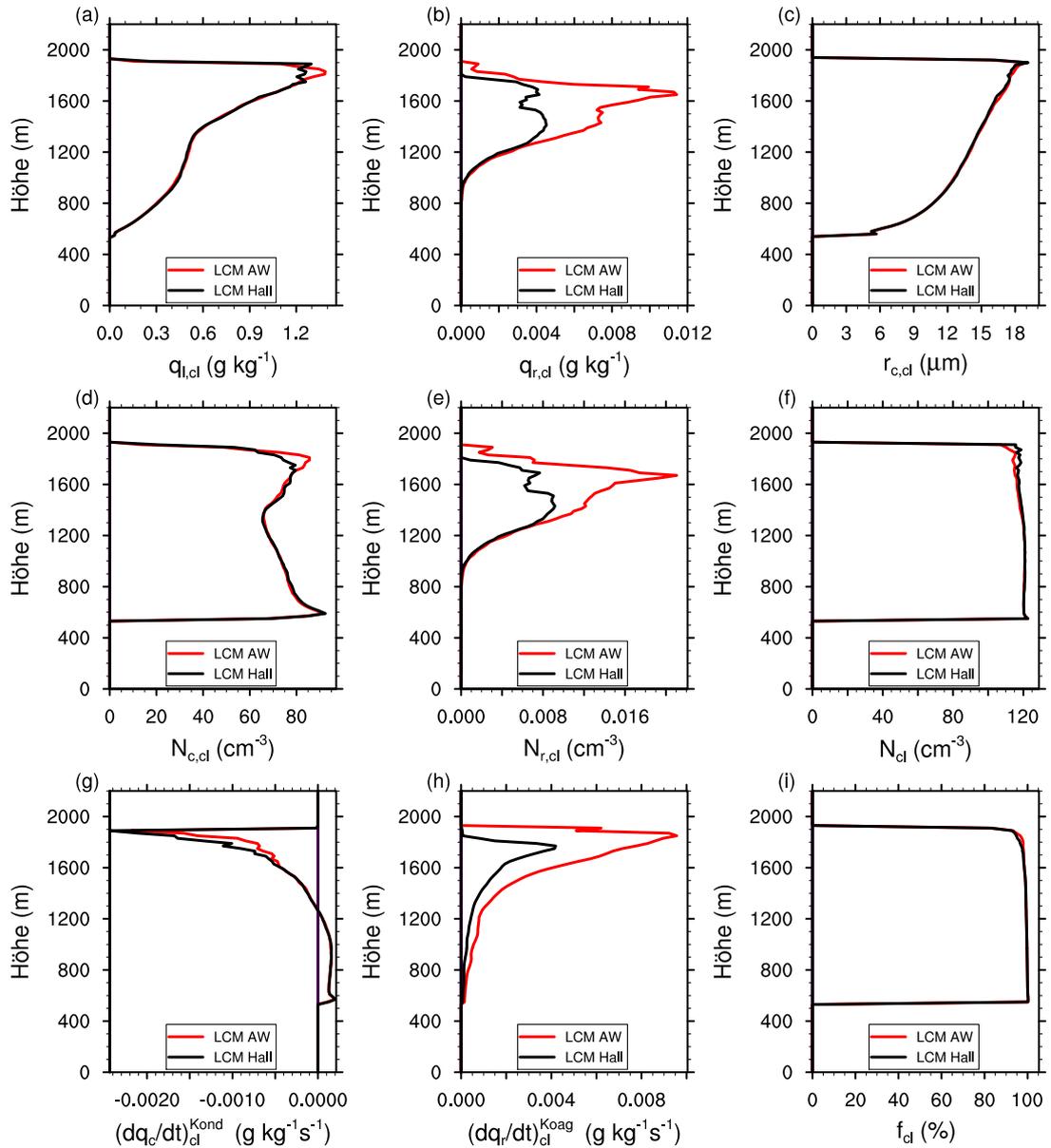


Abbildung 5.6: Zeitlich gemittelte Vertikalprofile der Passatwindwolkenimulationen mit LCM und unterschiedlichen Kollisionskernen (AW und Hall). Dargestellt sind der Flüssigwassergehalt in Wolken  $q_{l,cl}$  (a), der Regenwassergehalt in Wolken  $q_{r,cl}$  (b), der Wolkentropfenradius in Wolken  $r_{c,cl}$  (c), die Wolkentropfenkonzentration in Wolken  $N_{c,cl}$  (d), die Regentropfenkonzentration in Wolken  $N_{r,cl}$  (e), die Tropfenkonzentration in Wolken  $N_{cl}$  (f), die Änderung des Wolkenwassergehaltes in Wolken durch Kondensation  $(dq_c/dt)_{cl}^{\text{Kond}}$  (g), die Änderung des Regenwassergehaltes in Wolken durch Koagulation  $(dq_r/dt)_{cl}^{\text{Koag}}$  (h) und die relative Feuchte in Wolken  $f_{cl}$  (i). Die Profile wurden über die letzte Stunde des Simulationszeitraums gemittelt. Gittervolumen werden als Wolke identifiziert, wenn sie Wolkentropfen enthalten und der darin enthaltene Flüssigwassergehalt größer als  $0,01 \text{ g kg}^{-1}$  ist.

haltes durch Koagulation  $(dq_r/dt)_{cl}^{Koag}$  und (i) die relative Feuchte  $f_{cl}$  in den Wolken. Die Profile von  $q_{l,cl}$ ,  $r_{c,cl}$  und  $N_{c,cl}$  bestätigen erneut die bereits gewonnene Erkenntnis, dass die Eigenschaften der Wolkentropfen bei beiden Simulationen nahezu identisch sind. Die Abweichungen im oberen Bereich der Wolken, wo  $q_{l,cl}$ ,  $N_{c,cl}$  und  $f_{cl}$  bei LCM AW größere Werte annehmen, können wahrscheinlich auf Entrainment von trockener Luft und der dadurch hervorgerufenen Evaporation von Niesel- und Regentropfen zurückgeführt werden. Die Größen, die durch die Niesel- und Regentropfenverteilung beeinflusst werden,  $q_{r,cl}$  und  $N_{r,cl}$ , sind dagegen erwartungsgemäß bei LCM AW deutlich größer, wobei der qualitative Verlauf der Profile ähnlich ist. Das Maximum von  $q_{r,cl}$  und  $N_{r,cl}$  wird im oberen Drittel der Wolke erreicht und ist bei LCM AW im Vergleich zu LCM Hall mehr als doppelt so groß.

Die Profile der Wolkentropfenkonzentration in Wolken (Abb. 5.6 (d)) zeigen auf den ersten Blick einen unerwarteten Verlauf. Nach dem üblichen Maximum an der Wolkenbasis, nimmt die Anzahl der Wolkentropfen mit zunehmender Höhe ab, erreicht ein Minimum in etwa 1400 m Höhe und oberhalb davon, in 1750 m bzw. 1800 m Höhe, ein zweites Maximum. Vergleichbare Simulationen (z. B. Slawinska et al., 2012) zeigen allerdings einen nahezu höhenkonstanten Verlauf der Wolkentropfenkonzentration, der auf Entrainment und die dadurch hervorgerufene zusätzliche Aktivierung von CCN oberhalb der Wolkenbasis zurückgeführt werden kann (Wyszogrodzki et al., 2011; Slawinska et al., 2012). Diese Diskrepanz lässt sich durch die hier verwendete Definition der Wolkentropfen erklären. Hier dargestellt sind nur Tropfen mit  $1 \mu\text{m} < r < 40 \mu\text{m}$ , d. h. sehr kleine Wolkentröpfchen mit  $r \leq 1 \mu\text{m}$  und Niesel- und Regentropfen mit  $r \geq 40 \mu\text{m}$  werden dabei nicht berücksichtigt. Das Profil der Tropfenkonzentration aller Größen in den Wolken (Abb. 5.6 (f)) zeigt den erwarteten höhenkonstanten Verlauf. Da die Differenz zwischen  $N_{c,cl}$  und  $N_{cl}$  nicht durch die sehr geringe Niesel- und Regentropfenkonzentration  $N_{r,cl}$  in (e) erklärt werden kann, folgt daraus, dass es sich bei den zum höhenkonstanten Verlauf fehlenden Tropfen um sehr kleine Wolkentropfen/aktivierte  $CCN^3$  mit  $r \leq 1 \mu\text{m}$  und/oder nicht-aktivierte CCN handeln muss. Da bei dieser Simulation, im Gegensatz zu den vergleichbaren Simulationen von Wyszogrodzki et al. (2011) und Slawinska et al. (2012), keine Unterscheidung zwischen aktivierten und nicht-aktivierten CCN vorgenommen wurde, kann die Diskrepanz hier nicht eindeutig erklärt werden<sup>4</sup>. Das hier gezeigte Profil von  $N_{c,cl}$  spiegelt lediglich den Verlauf der Wolkentropfenkonzentration mit  $r \geq 1 \mu\text{m}$  wieder.

Abb. 5.6 (i) zeigt die mittleren Vertikalprofile der relativen Feuchte  $f_{cl}$  innerhalb der Wolken. Bis auf den obersten, durch statistische Schwankungen und Entrainment geprägten Bereich, sind sie bei beiden Simulationen nahezu identisch. Beide Verläufe erreichen ein Maximum von  $f = 100,25 \%$  knapp oberhalb der Wolkenbasis in etwa 560 m Höhe, wobei sich der Bereich mit Übersättigung über die untersten 120 m der Wolke erstreckt. Darüber nimmt die relative Feuchte aufgrund von zunehmendem Entrainment von trockenerer Luft mit der Höhe ab. Dieser Verlauf spiegelt sich in Abb. 5.6 (g), dem Verlauf der zeitlichen Änderung des Wolkenwassergehaltes durch Kondensation  $(dq_c/dt)_{cl}^{Kond}$ , wieder. Dabei wächst der Wolkenwassergehalt im unteren Bereich

<sup>3</sup>Der kritische Radius für die Aktivierung der CCN liegt bei etwa  $0,6 \mu\text{m}$  und wird bei einer Übersättigung von etwa  $0,1 \%$  erreicht.

<sup>4</sup>Eine von der vorliegenden Arbeit unabhängige Studie zum Einfluss des Entrainments und der zusätzlichen Aktivierung von CCN oberhalb der Wolkenbasis mit dem LCM wird derzeit von Fabian Hoffmann (Masterstudent am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover) durchgeführt.

der Wolke durch Kondensation an und nimmt im oberen Teil der Wolke ( $z > 1250$  m) durch Verdunstung ab. Das Minimum und damit die maximale Abnahme des Wolkenwassergehaltes durch Verdunstung liegt an der Wolkenobergrenze. In diesem Bereich spielt neben dem Entrainment der sehr trockenen Umgebungsluft der Inversionsschicht auch das Detrainment<sup>5</sup> eine große Rolle und erreicht dort maximale Werte (siehe auch Siebesma et al., 2003; van Zanten et al., 2011). Bei den Profilen der zeitlichen Änderung des Niesel- und Regenwassergehaltes durch Koagulation  $(dq_r/dt)_{cl}^{Koag}$  (Abb. 5.6 (h)) zeigen sich deutlichere Unterschiede zwischen den beiden Simulationen. Die Werte von LCM AW sind durchgängig größer, das Maximum sogar mehr als doppelt so groß, als die Werte der Vergleichssimulation. Der quantitative Verlauf der Profile ist ähnlich. Bei beiden nimmt das Wachstum des Niesel- und Regenwassergehaltes erwartungsgemäß mit zunehmender Höhe und mittlerem Wolkentropfenradius zu. Das Maximum wird im oberen Bereich der Wolke, knapp unterhalb der Wolkenobergrenze, erreicht. Aufgrund der geringen mittleren Niesel- und Regentropfenkonzentration  $N_{r,cl}$  in dieser Höhe fällt das Maximum jedoch nicht mit dem Maximum des Niesel- und Regenwassergehaltes  $q_{r,cl}$  zusammen.

Mit Hilfe der Profile von  $f_{cl}$ ,  $(dq_c/dt)_{cl}^{Kond}$  und  $(dq_r/dt)_{cl}^{Koag}$  kann nun der Verlauf von  $N_{c,cl}$  verstanden werden. Die in der aufsteigenden Luft enthaltenen CCN werden an der Wolkenbasis aktiviert und wachsen beim weiteren Aufsteigen in der Wolke aufgrund der vorherrschenden Übersättigung durch Kondensation zu Wolkentropfen an. Das Maximum von  $N_{c,cl}$  liegt dementsprechend knapp oberhalb der Wolkenbasis. Mit zunehmender Höhe wachsen die Wolkentropfen weiter durch Kondensation und einsetzendes Koagulationswachstum an (siehe  $r_{c,cl}$  in (c)). Währenddessen nimmt die Wolkentropfenkonzentration durch Entrainment von trockenerer Luft und das Koagulationswachstum ab. Dabei entstehen durch Koagulation zunächst größere Wolkentropfen. Dieser Prozess ist deshalb nicht im Profil von  $(dq_r/dt)_{cl}^{Koag}$  zu sehen. Durch den mit der Entfernung zur Wolkenbasis steigenden mittleren Tropfenradius nimmt auch die Effizienz des Koagulationswachstums zu, so dass die Wolkentropfenkonzentration immer stärker abnimmt und Niesel- und Regentropfen gebildet werden. Das zweite Maximum von  $N_{c,cl}$  im oberen Bereich der Wolke wurde auch schon von Slawinska et al. (2012) beobachtet. Es basiert wahrscheinlich auf statistischen Schwankungen aufgrund der geringeren Datenbasis in diesem Bereich und wird dadurch verursacht, dass nur Wolken, die nicht so stark von Entrainment beeinflusst werden eine solche Höhe erreichen (Slawinska et al., 2012). Die größeren Werte von  $N_{c,cl}$  in diesem Bereich bei LCM AW hängen dabei mit der höheren relativen Feuchte  $f_{cl}$  (Abb. 5.6 (i)) und der damit verbundenen geringeren Verdunstung der vorhandenen Wolken-, Niesel- und Regentropfen (Abb. 5.6 (g)) zusammen.

Abbildung 5.7 zeigt ergänzend zu den bisherigen Analysen instantane Tropfenspektren von LCM AW nach 9000 s Simulationszeit für verschiedene Höhen. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  mit linearer Ordinatenenteilung (a), das Anzahldichtespektrum  $n(\ln r)$  mit logarithmischer Ordinatenenteilung (b) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  mit linearer und logarithmischer Ordinatenenteilung (c und d) für fünf verschiedene Höhen (600 m, 800 m, 1000 m, 1200 m und 1400 m). Die Spektren stellen den Mittelwert über den gesamten Wolkenbereich in der entsprechenden Höhe dar. Die Tropfenradien werden für die Darstellungen in 89 Tropfenklassen unterteilt, deren Breite exponentiell zunimmt. Ein Vergleich der instantanen Tropfenspektren der un-

---

<sup>5</sup>Detrainment bezeichnet das Mischen von Wolkenluft in die Umgebungsluft.

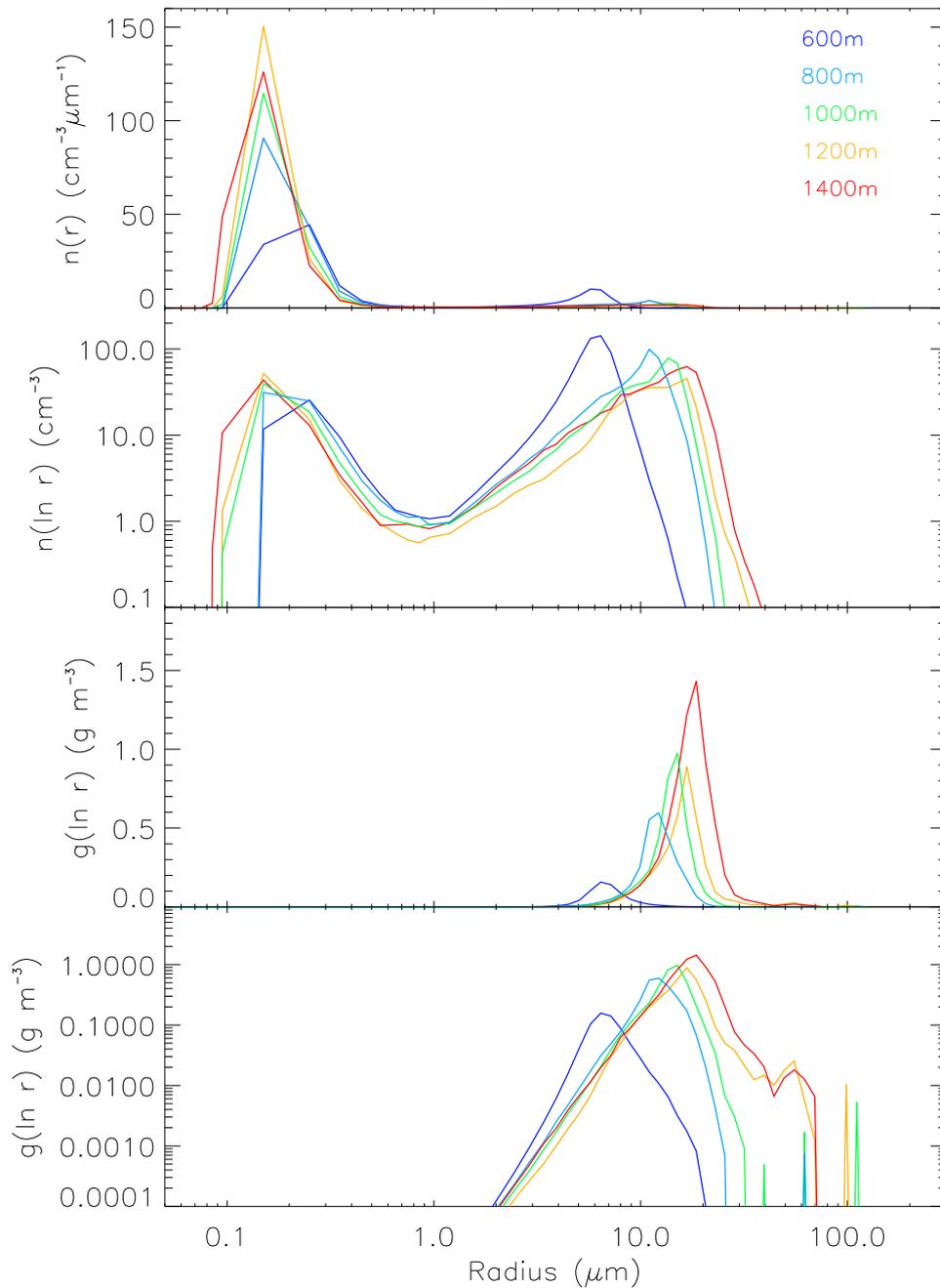


Abbildung 5.7: Instantane Tropfenspektren von LCM AW nach 9000 s Simulationszeit für fünf verschiedene Höhen (600 m, 800 m, 1000 m, 1200 m und 1400 m). Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  (a), das Anzahldichtespektrum  $n(\ln r)$  (b) und die Masendichtespektren  $g(\ln r)$  in (c) und (d). Die Spektren wurden über alle Wolkenbereiche in der entsprechenden Höhe gemittelt.

terschiedlichen Simulationen ist an dieser Stelle nicht sinnvoll, da die Spektren sehr stark von den Eigenschaften der vorhandenen Wolken, wie z. B. der Entwicklungsphase oder der Mächtigkeit, abhängen. Da bei dieser Simulation permanent Wolken gebildet werden, anwachsen und zerfallen variieren auch die Tropfenspektren dementsprechend,

so dass in Bezug auf den Turbulenzeinfluss keine fundierten Aussagen daraus abgeleitet werden können.

Der Fokus bei dieser Abbildung liegt dementsprechend auf der Variation der Spektren mit der Höhe. Der Verlauf von  $n(r)$  und  $n(\ln r)$  zeigt dabei, dass sich aus der anfänglich nahezu monodispersen Verteilung ein bimodales Spektrum ausgebildet hat. Dabei liegt ein Maximum im Bereich der nicht-aktivierten CCN ( $r \approx 0,15 \mu\text{m}$ ) und das zweite Maximum im Bereich der Wolkentropfen mit  $5 \mu\text{m} \lesssim r \lesssim 15 \mu\text{m}$ , wobei sich das zweite Maximum mit zunehmender Höhe innerhalb der Wolke zu größeren Radien hin verschiebt. Das Minimum liegt etwas oberhalb vom kritischen Radius für die Aktivierung der CCN, der bei  $r \approx 0,6 \mu\text{m}$  liegt.  $n(r)$  zeigt außerdem, dass die Anzahldichte der CCN in der Nähe der Wolkenbasen (bei 600 m) verglichen zu größeren Höhen deutlich kleiner ist. Dieser Effekt wird durch die vermehrte Aktivierung von CCN im Bereich der Wolkenbasen verursacht. Oberhalb der Wolkenbasen nimmt die Anzahldichte durch Entrainment mit der Höhe zu, wobei der Effekt der in-cloud activation dagegen wirkt.  $n(\ln r)$  und  $g(\ln r)$  zeigen sehr schön, wie der mittlere Tropfenradius und die Breite des Tropfenspektrums mit zunehmender Höhe innerhalb der Wolken zunimmt. Dabei verschiebt sich das zweite Maximum zu größeren Radien hin, während die Konzentration der kleineren Wolkentropfen abnimmt. Das Spektrum von  $g(\ln r)$  in (d) zeigt außerdem, wie der Einfluss des Tropfenwachstums durch Koagulation mit der Höhe zunimmt. In einer Höhe von 1000 m sind vereinzelte Niesel- und Regentropfen zu sehen, bei denen es sich sehr wahrscheinlich um fallende Tropfen aus größeren Höhen handelt. Das charakteristische zweite Maximum des Massendichtespektrums ist im oberen Bereich der Wolken, bei 1200 m und 1400 m zu sehen, dort wo das Tropfenwachstum durch Koagulation am stärksten ist.

Zusammenfassend kann man feststellen, dass der turbulente Kollisionskern der AW-Parametrisierung einen deutlichen Einfluss auf die räumliche und zeitliche Entwicklung der Passatwindwolken hat. Die größten Unterschiede im Vergleich zu LCM Hall werden dabei erwartungsgemäß bei den Niesel- und Regentropfengrößen erreicht. Dabei nimmt sowohl die Niesel- und Regentropfenkonzentration als auch die mittlere und maximale Größe der Niesel- und Regentropfen zu. Der Einfluss der AW-Parametrisierung reicht demnach von den größeren Wolkentropfen bis hin zu den Niesel- und Regentropfen. RWP nimmt dabei um den Faktor  $\approx 1,5$  zu. Die Größen, die auf dem Wolkentropfengehalt basieren, zeigen nur minimale Abweichungen zwischen LCM Hall und LCM AW, die aufgrund der Schwankungen des Bedeckungsgrades im Bereich der Standardabweichung liegen.

Die Ergebnisse stimmen mit denen vergleichbarer Studien (z. B. Seifert et al., 2010; Wyszogrodzki et al., 2013) überein. Seifert et al. (2010) und Wyszogrodzki et al. (2013) haben ebenfalls den Einfluss des AW-Kerns auf die Entwicklung von flachen Kumuluswolken untersucht, allerdings mit LES und einem Zwei-Momenten-Schema bzw. einem Spektralmodell und für unterschiedliche CCN-Konzentrationen. Seifert et al. (2010) fanden heraus, dass der Turbulenzeinfluss das Tropfenwachstum beschleunigt und die Niesel- und Regenwassermenge in Wolken erhöht, insbesondere nahe der Wolkenobergrenze, wo die Dissipationsrate ihr Maximum erreicht. Da Seifert et al. (2010) eine feuchtere Grenzschicht simuliert haben, konnten sie auch eine Zunahme der Niederschlagsmenge am Boden beobachten. Die Simulationen zeigen allerdings, dass die Niederschlagsmenge und auch das Verhältnis der Niederschlagsmengen von Simulationen mit und ohne Turbulenzeinfluss von der räumlichen Auflösung der Simulation abhängt. Wyszogrodzki et al. (2013) haben zwei Mechanismen für die erhöhte

Niederschlagsmenge bei Berücksichtigung der Turbulenz identifiziert. Zum einen setzt durch das beschleunigte Tropfenwachstum der Koagulationsprozess früher ein, so dass während des Lebenszyklusses der Wolke mehr Niesel- und Regenwasser gebildet wird. Zum anderen wird durch den früher einsetzenden Niederschlag der Auftrieb innerhalb der Wolke erhöht, so dass die vertikale Erstreckung der Wolke zunimmt und damit auch der Flüssigwassergehalt. Der erste Effekt konnte bei den hier vorgestellten Simulationen auch beobachtet werden. Der zweite Effekt, der durch den früher einsetzenden Niederschlag hervorgerufen wird, konnte bei diesen BOMEX-Simulationen aufgrund der geringen Niederschlagsmenge nicht untersucht werden. Wyszogrodzki et al. (2013) hatten den erhöhten Niederschlag bei BOMEX-Simulationen mit deutlich geringeren CCN-Konzentrationen simuliert.

Die vergleichbaren Studien und die hier vorgestellten Ergebnisse deuten darauf hin, dass der Turbulenzeinfluss auf die Tropfenkoagulation das Flaschenhalsproblem lösen oder zumindest verringern kann. Die Größe der Verstärkung hängt allerdings stark von der verwendeten Parametrisierung und möglicherweise noch anderen Simulationsparametern (z. B. Gitterweite und Supertropfenanzahl) ab, so dass die Interpretation der quantitativen Werte schwierig bleibt.



## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel der Arbeit bestand darin, den Einfluss der mit turbulenten Strömungen einhergehenden Änderungen der Kollisionswahrscheinlichkeit auf die räumliche und zeitliche Entwicklung von Tropfenspektren dreidimensionaler warmer Wolken zu untersuchen.

Für die Untersuchung dieser Fragestellung wurde ein neues Lagrangesches Wolkenmodell (LCM) aus dem LES-Modell PALM und dem darin implementierten Lagrangeschen Partikelmodell entwickelt. Die Kombinationen eines LES-Modells und eines Lagrangeschen Partikelmodells ermöglicht es Partikel in die vom LES-Modell aufgelöste Strömung freizusetzen und deren Bewegung und Entwicklung zu verfolgen. Bei einem LCM repräsentieren die Partikel Aerosole oder Tropfen und können alle warmen wolkenmikrophysikalischen Prozesse durchlaufen. Um dies zu erreichen, wurde das Lagrangesche Partikelmodell um die Advektion von massebehafteten Partikeln mit der aufgelösten Strömung, die Aktivierung von löslichen Aerosolen, das Tropfenwachstum durch Kondensation und Evaporation inklusive des Ventilationseffektes sowie eine Parametrisierung für das Tropfenwachstum durch Kollision und Koaleszenz erweitert. Um realistische Anzahlkonzentrationen der Aerosole und Tropfen zu erreichen, wurde das Konzept der Supertropfen verwendet. Dabei steht ein simuliertes Partikel, ein sogenannter Supertropfen, stellvertretend für eine große Anzahl von Aerosolen oder Tropfen mit den gleichen Eigenschaften. Die Parametrisierung des Tropfenwachstums erfolgt mit Hilfe eines statistischen Ansatzes, der auf der Kollisionsrate und den Kollisionswahrscheinlichkeiten basiert. Dazu wurden neben den traditionell verwendeten Kollisionswahrscheinlichkeiten erstmals auch zwei Kollisionskernel implementiert, die den Einfluss von Turbulenzeffekten auf die Tropfenkollision berücksichtigen. Die Parametrisierung des Koagulationswachstums stellt dabei den größten Unterschied des entwickelten LCMs zu den bisher existierenden LCMs für warme Wolken dar.

Das entwickelte LCM wurde mit Hilfe von zwei weit verbreiteten, ebenfalls in PALM implementierten Wolkenphysikparametrisierungen validiert und charakterisiert: einem Ein-Momenten-Schema und einem Zwei-Momenten-Schema. Dazu wurden zwei verschiedene Konfigurationen, eine idealisierte, einzelne Wolke und ein komplexeres Wolkenfeld, das auf Messwerten basiert, mit den drei verschiedenen Wolkenphysikmodellen simuliert. Dabei konnte gezeigt werden, dass das LCM die generelle Entwicklung der Wolken mit ihren typischen Charakteristika reproduzieren kann und dabei zusätzlich Informationen über die räumliche und zeitliche Entwicklung der Tropfenspektren liefert. Die beim Vergleich aufgetretenen Unterschiede waren zum einen eine Verzögerung der zeitlichen Entwicklung der Wolke und zum anderen eine geringere Niederschlagsmenge am Boden. Beide konnten auf vereinfachte Parametrisierungen bei den Momenten-Schemen, die Sättigungsadjustierung und die Annahme eines Tropfenspektrums für die Berechnung der Tropfensedimentation, zurückgeführt werden, deren Berechnung im LCM explizit durchgeführt wird.

Desweiteren wurden zwei Sensitivitätsstudien vorgestellt, die den Einfluss der beiden wohl wichtigsten numerischen Parameter im LCM untersucht haben: die des Zeitschrittes und die der Supertropfenanzahl. Beide Parameter beeinflussen sowohl

die mikrophysikalischen Prozesse, als auch die für die Durchführung der Simulation notwendige Rechenkapazität. Die Untersuchungen haben gezeigt, dass der Zeitschritt vor allem die Aktivierung der CCN und das Tropfenwachstum durch Kondensation bzw. Evaporation beeinflusst und darüber nur indirekt das Koagulationswachstum. Mit kleiner werdenden Zeitschritten wurde dabei insbesondere im oberen Bereich der Wolke eine Zunahme der Wolkentropfenkonzentration beobachtet, die auf vermehrte Aktivierung von CCN hindeutet. Die Ergebnisse haben eine eindeutige Konvergenz aufgezeigt, die darauf schließen lässt, dass ein Zeitschritt von 0,1 s für die Simulation von flachen konvektiven Wolken ein Optimum aus Genauigkeit und benötigter Rechenzeit darstellt.

Die Parameterstudie zur Supertropfenanzahl hat dagegen eine Schwachstelle des LCMs aufgezeigt: Bei der Simulation von warmen Wolken mit geringen Niesel- und Regentropfenkonzentrationen ist die Entwicklung der Wolken z. T. von der Supertropfenanzahl abhängig. Die Ursache dafür ist, dass für die Repräsentation des Tropfenspektrums nur eine begrenzte Anzahl von Supertropfen zu Verfügung stehen. Bei kleinen Niesel- und Regentropfenkonzentrationen werden diese Tropfen beim LCM daher nur durch einzelne Supertropfen repräsentiert. Demzufolge unterliegen alle Größen, die auf diesem Tropfenbereich basieren, starken statistischen Schwankungen. Dabei nimmt der Niesel- und Regenwassergehalt mit zunehmender Supertropfenanzahl durch die bessere Auflösung des Tropfenspektrums zu und die Schwankungen nehmen ab. Für Simulationen mit LCM sollte deshalb eine möglichst hohe Anzahl an Supertropfen verwendet werden und diese Schwachstelle muss bei der Interpretation von LCM-Ergebnissen berücksichtigt werden. Durch Untersuchungen des reinen Tropfenwachstums durch Koagulation in einem Gittervolumen mit ruhender Umgebungsluft konnte außerdem gezeigt werden, dass diese Schwachstelle durch das Zusammenspiel mit geringen Niesel- und Regentropfenkonzentrationen und nicht durch die verwendete Parametrisierung des Tropfenwachstums durch Koagulation verursacht wird.

Nichtsdestotrotz haben LCMs den Vorteil, dass die physikalischen Prozesse der Tropfen direkt in Wechselwirkung mit der Strömung berechnet bzw. im Fall des Tropfenwachstums durch Koagulation parametrisiert werden können. Dadurch ist die Dynamik und Mikrophysik der Wolke an die Partikelprozesse gekoppelt und umgekehrt. Prozesse, wie das Ausfallen von Niederschlag oder der großskalige Einfluss von Entrainment und Mischungsprozessen, sind auf diese Weise automatisch implementiert. Im Gegensatz zu den traditionell verwendeten, rein Eulerschen Wolkenmodellen haben LCMs außerdem keine Schwierigkeiten mit der Aktivierung/Deaktivierung von Aerosolen und das Tropfenspektrum wird nicht künstlich durch numerische Diffusion verbreitert. Zusätzlich sind LCMs in der Lage, komplette Wolken und Wolkenfelder über mehrere Stunden hinweg zu simulieren. Sie sind deshalb ideal dafür geeignet den Einfluss von kleinskaligen Parametrisierungen wie z. B. von turbulenten Kollisionskernen auf die gesamtheitliche Entwicklung der Wolke zu untersuchen.

Zu diesem Zweck wurden zwei turbulente Kollisionskernel in das LCM implementiert: der Kernel nach Ayala et al. (2008a) und Wang und Grabowski (2009) und der Kernel nach Kunnen et al. (2013) und Siewert, (2013, persönliche Kommunikation). Beide Kernel parametrisieren dabei mehrere subgrid-skalige Turbulenzeinflüsse: den Einfluss der Turbulenz auf die relative Tropfengeschwindigkeit und auf die räumliche Verteilung der Tropfenkonzentration, sowie beim AW-Kernel auch den Einfluss der Turbulenz auf die hydrodynamischen Wechselwirkungen der Strömungsfelder der Tropfen. Sie unterscheiden sich jedoch durch den Turbulenzzustand den sie beschreiben. Da es

aufgrund des enormen Rechenaufwandes noch nicht möglich ist direkte numerische Simulationen in dem Turbulenzbereich von realen Wolken mit Reynoldszahl der Taylor-Mikroskala im Bereich von  $10^4$  durchzuführen, wurden die Parametrisierungen zunächst für einen deutlich schwächeren Turbulenzzustand mit Taylor-Reynoldszahlen unter 100 bestimmt. Der Einfluss der Turbulenz auf die relative Tropfengeschwindigkeit und auf die räumliche Verteilung der Tropfenkonzentration wurden von Ayala et al. (2008a) anschließend mit Hilfe eines theoretischen Modells für den für Wolken typischen Turbulenzbereich extrapoliert. Der Vergleich der beiden Kernel zeigt, dass sich dadurch die Verstärkungen, die im Vergleich zu dem nicht-turbulenten Kernel auftreten, deutlich unterscheiden. Diese Unterschiede sind auch bei den Wolkensimulationen wiederzufinden. Dabei wurde zunächst eine idealisierte, einzelne Wolke mit beiden turbulenten und einem nicht-turbulenten Kernel simuliert. Die Ergebnisse zeigen, dass beide turbulenten Kollisionskernel die zeitliche und räumliche Entwicklung des Tropfenspektrums im Vergleich zu dem nicht-turbulenten Kollisionskernel beeinflussen. Dabei wird insbesondere die Bildung von Niesel- und Regentropfen verstärkt. Dieser Prozess wird durch die vermehrte Kollision von nahezu gleich großen Tropfen hervorgerufen, die auf die inhomogene Verteilung der Tropfen innerhalb der turbulenten Strömung zurückgeführt werden kann. Da dieser Effekt stark von dem aufgelösten Turbulenzzustand der Strömung abhängt, ist dieser Effekt bei Verwendung des AW-Kernels deutlich größer. Bei dem AW-Kernel wird zusätzlich auch der Turbulenzeinfluss auf die hydrodynamischen Wechselwirkungen der Strömungsfelder der Tropfen berücksichtigt. Dieser Effekt beeinflusst vor allem Tropfen mit deutlich unterschiedlichen Tropfengrößen und ermöglicht es großen Wolken- und Nieseltropfen kleine Wolkentropfen effizienter einzusammeln. Dadurch wird das Tropfenwachstum der großen Wolken- und Nieseltropfen verstärkt und beschleunigt. Bei der Simulation mit dem AW-Kernel konnte im Vergleich zur Simulation mit nicht-turbulentem Kernel demnach eine vermehrte Anzahl von Niesel- und Regentropfen mit größeren mittleren Radien beobachtet werden. Diese Kombination führte dazu, dass der Niesel- und Regenwassergehalt um bis zu einen Faktor zwei erhöht war. Der Einfluss des KS-Kernels war deutlich geringer und führte bei dieser Simulationskonfiguration nur zu einer Erhöhung um etwa 30%. Der Einfluss des AW-Kernels wurde auch für realistischere Bedingungen - einem auf Messwerten basierenden Wolkenfeld - untersucht. Auch hier konnte ein beschleunigtes Wachstum der Niesel- und Regentropfen und eine erhöhte Niesel- und Regentropfenzkonzentration beobachtet werden. Der Einfluss auf den mittleren Niesel- und Regenwasserpfad lag dabei im Vergleich zur Simulation mit nicht-turbulentem Kernel bei etwa 1,5. Eine Aussage über die mögliche Verstärkung der Niederschlagsmenge am Boden und dem früheren Einsetzen von Niederschlag ist aufgrund der verwendeten Simulationskonfigurationen ohne signifikanten Niederschlag nicht möglich.

Diese Untersuchungen lassen vermuten, dass der Turbulenzeinfluss auf die Tropfenkoagulation das Flaschenhalsproblem lösen oder zumindest verringern kann. Die Größe der turbulenten Verstärkung hängt allerdings stark von der verwendeten Parametrisierung und dem darin berücksichtigten Turbulenzzustand ab. Außerdem hängt der Verstärkungsfaktor sehr wahrscheinlich auch von Simulationsparametern wie z. B. der Gitterweite und der Supertropfenanzahl ab. Eine Quantifizierung des Turbulenzeffektes auf das Tropfenwachstum durch Koagulation für realistische Wolken ist deshalb zur Zeit noch nicht möglich.

Um dies zu Erreichen müssen sowohl die DNS für die Bestimmung der turbulenten Kollisionskernel als auch das LCM verbessert und erweitert werden. Mögliche Ansatz-

punkte beim LCM sind neben der Abhängigkeit von den Supertropfenanzahlen, z. B. die Implementierung eines verbesserten Zeitschrittverfahrens für die Tropfenadvektion (bisher das explizite Euler-Verfahren) und die Implementierung von subgridskaligen Geschwindigkeiten für die Tropfenadvektion. Eine Möglichkeit, die Abhängigkeit des LCM von der Supertropfenanzahl zu verringern, besteht darin, die Supertropfen aus dem Niesel- und Regentropfenbereich des Spektrums aufzusplitten, um so die Anzahl und statistische Datenbasis zu erhöhen. Damit die Anzahl der Supertropfen während der Simulation nicht stetig zunimmt, könnten im Gegenzug dazu Supertropfen mit ähnlichen Eigenschaften aus den Größenbereichen mit hohen Anzahldichten zusammengefasst werden. Unterstrasser und Sölch (2013) haben dazu eine Methode für ihr Eiswolken-LCM entwickelt. Ob diese Methode auch auf warme Wolken übertragbar ist, muss noch überprüft werden. Außerdem steht auch eine vollständige Validierung des LCMs z. B. durch einen Vergleich mit Messungen oder einem Spektralmodell noch aus. Ein Vergleich mit Messungen ist allerdings aufgrund der extremen Inhomogenität und der komplexen turbulenten Strömung von Wolken, sowie der an den Wolken- und Niederschlagsbildung beteiligten räumlichen und zeitlichen Skalen extrem schwierig. Ebenso ist ein Vergleich mit einem dreidimensionalen Spektralmodell aufgrund fehlender Kooperationspartner (weltweit werden nur zwei bis drei geeignete Modelle betrieben) im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich gewesen. Allerdings ist eine Gegenüberstellung von Teilen des LCMs mit einem eindimensionalen Spektralmodell bereits in Planung. Dabei wird das Tropfenwachstum durch Koagulation und die Sedimentation der Tropfen für eine idealisierte Wolke verglichen.

Neben den Verbesserungen am Modell sollten auch die Untersuchungsmethoden weiter ausgebaut werden. Mit Hilfe von Tools zur Wolkenidentifizierung und -verfolgung (z. B. Heus et al., 2009) könnten Statistiken zur Lebensdauer und Größenverteilung der Wolke angefertigt werden. Außerdem könnte die Datenbasis für die statistischen Untersuchungen durch einen längeren Simulationszeitraum vergrößert werden. Hinzu kommt auch die Simulation eines Wolkenfelds mit signifikantem Niederschlag.

Unabhängig vom Einfluss der Turbulenz auf das Koagulationswachstum ist das LCM auch besonders für Untersuchungen zu Fragestellungen bezüglich des etwas gröberskaligen Turbulenzeinflusses - z. B. dem Einfluss von Entrainment und die dadurch hervorgerufene zusätzliche Tropfenbildung - geeignet. Neuere numerische Untersuchungen zeigen, dass diese in-cloud activation in Kumuluswolken nahezu höhenkonstante mittlere Tropfenkonzentrationen zur Folge hat, die auch bei Messungen beobachtet wurden (Wyszogrodzki et al., 2011; Slawinska et al., 2012). Der Einfluss des Entrainments und der in-cloud activation auf die Entwicklung des Tropfenspektrums und die damit verbundenen Eigenschaften der Wolke sind allerdings noch nicht vollständig geklärt. Eine Ursache dafür ist, dass die Aktivierung, Deaktivierung und Reaktivierung von CCN sowie ihre Veränderung durch das Tropfenwachstum durch Koagulation (dem sogenannten cloud processing) bei numerischen Modellen häufig vernachlässigt oder stark vereinfacht wird (Grabowski und Wang, 2013). Da LCMs diese Prozesse direkt berechnen und auch das großskalige Entrainment auflösen können, eignen sie sich hervorragend für solche Untersuchungen.

# Anhang

## A Tropfenwachstum durch Koagulation

### A.1 Nachweis zur Massenerhaltung

Die Anzahl aller Tropfen eines Gittervolumens  $N$  ist durch

$$N = \sum_{n=1}^{N_p} A_n$$

gegeben. Für die Gesamtmasse aller Tropfen  $M$  gilt:

$$M = \rho_l \sum_{n=1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} A_n r_n^3 .$$

Mit Hilfe von Gleichung (3.88), Gleichung (3.90) und  $K(r_m, r_n) = K(r_n, r_m)$  kann gezeigt werden, dass die Gesamtmasse aller Tropfen während des Tropfenwachstums durch Koagulation erhalten bleibt:

$$\begin{aligned} \rho_l \sum_{n=1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} A_n r_n^3 &= \rho_l \sum_{n=1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} A_n^* r_n^{*3} \\ &= \rho_l \sum_{n=1}^{N_p} \left\{ \frac{4\pi}{3} A_n r_n^3 + \sum_{m=1}^{n-1} \frac{4\pi}{3} K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] r_m^3 \Delta t - \sum_{m=n+1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] r_n^3 \Delta t \right\} \\ &= \rho_l \sum_{n=1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} A_n r_n^3 + \rho_l \left\{ \sum_{n=1}^{N_p} \sum_{m=1}^{n-1} \frac{4\pi}{3} K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] r_m^3 \Delta t - \sum_{n=1}^{N_p} \sum_{m=n+1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] r_n^3 \Delta t \right\} \\ &= \rho_l \sum_{n=1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} A_n r_n^3 + \rho_l \left\{ \sum_{n=1}^{N_p} \sum_{m=1}^{n-1} \frac{4\pi}{3} K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] r_m^3 \Delta t - \sum_{m=1}^{N_p} \sum_{n=m+1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} K(r_n, r_m) \left[ \frac{A_n A_m}{\Delta V} \right] r_m^3 \Delta t \right\} \\ &= \rho_l \sum_{n=1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} A_n r_n^3 . \end{aligned}$$

Die Anzahl der Tropfen pro Gittervolumen ändert sich nach dem Tropfenwachstum durch Koagulation zu

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{N_p} A_n^* &= \sum_{n=1}^{N_p} \left\{ A_n - K(r_n, r_n) \left[ \frac{A_n (A_n - 1)}{2\Delta V} \right] \Delta t - \sum_{m=n+1}^{N_p} K(r_m, r_n) \left[ \frac{A_m A_n}{\Delta V} \right] \Delta t \right\} \\ &= \sum_{n=1}^{N_p} A_n - \frac{\Delta t}{\Delta V} \left\{ \sum_{n=1}^{N_p} K(r_n, r_n) \frac{A_n (A_n - 1)}{2} + \sum_{n=1}^{N_p} \sum_{m=n+1}^{N_p} K(r_m, r_n) A_m A_n \right\} \\ &= \sum_{n=1}^{N_p} A_n - \frac{\Delta t}{2\Delta V} \left\{ \sum_{n=1}^{N_p} K(r_n, r_n) A_n A_n - \sum_{n=1}^{N_p} K(r_n, r_n) A_n + 2 \sum_{n=1}^{N_p} \sum_{m=n+1}^{N_p} K(r_m, r_n) A_m A_n \right\} \\ &= \sum_{n=1}^{N_p} A_n - \frac{\Delta t}{2\Delta V} \left\{ - \sum_{n=1}^{N_p} K(r_n, r_n) A_n + \sum_{n=1}^{N_p} \sum_{m=1}^{N_p} K(r_m, r_n) A_m A_n \right\} \\ &= \sum_{n=1}^{N_p} A_n - \frac{\Delta t}{2\Delta V} \sum_{n=1}^{N_p} \sum_{m=1}^{N_p} K(r_m, r_n) A_m A_n + \frac{\Delta t}{2\Delta V} \sum_{n=1}^{N_p} K(r_n, r_n) A_n \quad [*] \\ &\approx \sum_{n=1}^{N_p} A_n - \frac{\Delta t}{2\Delta V} \sum_{n=1}^{N_p} \sum_{m=1}^{N_p} K(r_m, r_n) A_m A_n \end{aligned}$$

$$\sum_{n=1}^{N_p} A_n^* \approx \sum_{n=1}^{N_p} A_n - \frac{\Delta t \Delta V}{2} \int_{n=1}^{N_p} \int_{m=1}^{N_p} K(r_m, r_n) n(r_m) n(r_n) dr_m dr_n .$$

Demzufolge ist

$$\frac{d}{dt} \left[ \sum_{n=1}^{N_p} \frac{A_n}{\Delta V} \right] = -\frac{1}{2} \int_{n=1}^{N_p} \int_{m=1}^{N_p} K(r_m, r_n) n(r_m) n(r_n) dr_m dr_n ,$$

was exakt der Momentengleichung der Partikelanzahldichte entspricht (z. B. in Wang et al., 2007, Gleichung (3)). Der letzte Terms der Zeile mit [\*] kann aufgrund der endlichen Größe des Systems vernachlässigt werden (ausführliche Erklärung dazu in Wang et al., 2006, Abschnitt 3.2).

## A.2 Parametrisierungen der turbulenten Kollisionskernel

### Parametrisierung nach Ayala et al. (2008a)

Die AW-Parametrisierung liefert  $\langle |W_{r_n}| \rangle$  und  $g_{r_n}$  als Funktion der Tropfenradien  $r_n$  mit  $n = \{1, 2\}$ , der Dissipationsrate  $\epsilon$  und der Reynoldszahl für die Taylor-Mikroskala  $Re_\lambda$ . Die Herleitung und ausführliche Beschreibung der Parametrisierung ist in Ayala et al. (2008a) zu finden. Für  $\langle |W| \rangle$  ergibt sich

$$\langle |W| \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left( \sigma^2 + \frac{\pi}{8} (\tau_{p1} - \tau_{p2})^2 |g|^2 \right)^{1/2}$$

$$\text{mit } \sigma^2 = \left\langle \left( v'(2) \right)^2 \right\rangle + \left\langle \left( v'(1) \right)^2 \right\rangle - 2 \left\langle \left( v'(2) v'(1) \right) \right\rangle ,$$

$$\left\langle \left( v'(k) \right)^2 \right\rangle = \frac{u'^2}{\tau_{pk}} [b_1 d_1 \Psi(c_1, e_1) - b_1 d_2 \Psi(c_1, e_2) - b_2 d_1 \Psi(c_2, e_1) + b_2 d_2 \Psi(c_2, e_2)] ,$$

$$\left\langle \left( v'(2) v'(1) \right) \right\rangle = \frac{u'^2 f_2(r_n)}{\tau_{p1} \tau_{p2}} [b_1 d_1 \Phi(c_1, e_1) - b_1 d_2 \Phi(c_1, e_2) - b_2 d_1 \Phi(c_2, e_1) + b_2 d_2 \Phi(c_2, e_2)] ,$$

$$f_2(r_n) = \frac{1}{2(1-2\beta^2)^{1/2}} \left\{ \left( 1 + \sqrt{1-2\beta^2} \right) \cdot \exp \left[ -\frac{2r_n}{(1 + \sqrt{1-2\beta^2}) L_e} \right] - \left( 1 - \sqrt{1-2\beta^2} \right) \cdot \exp \left[ -\frac{2r_n}{(1 - \sqrt{1-2\beta^2}) L_e} \right] \right\} ,$$

$$b_1 = \frac{1 + \sqrt{1-2z^2}}{2\sqrt{1-2z^2}} ,$$

$$b_2 = \frac{1 - \sqrt{1-2z^2}}{2\sqrt{1-2z^2}} ,$$

$$c_1 = \frac{(1 + \sqrt{1-2z^2}) T_L}{2} ,$$

$$c_2 = \frac{(1 - \sqrt{1-2z^2}) T_L}{2} ,$$

$$d_1 = \frac{1 + \sqrt{1-2\beta^2}}{2\sqrt{1-2\beta^2}} ,$$

$$d_2 = \frac{1 - \sqrt{1-2\beta^2}}{2\sqrt{1-2\beta^2}} ,$$

$$e_1 = \frac{(1 + \sqrt{1-2\beta^2}) L_e}{2} ,$$

$$e_2 = \frac{(1 - \sqrt{1-2\beta^2}) L_e}{2} ,$$

$z = \tau_{\Gamma}/T_L$  und  $\beta = \sqrt{2}\lambda/L_e$ . Für  $v_{p1} > v_{p2}$  gilt weiter

$$\begin{aligned} \Phi(\alpha, \phi) = & \left\{ \frac{1}{((v_{p2}/\phi) - (1/\tau_{p2}) - (1/\alpha))} - \frac{1}{((v_{p1}/\phi) + (1/\tau_{p1}) + (1/\alpha))} \right\} \cdot \\ & \frac{v_{p1} - v_{p2}}{2\phi((v_{p1} - v_{p2})/\phi + (1/\tau_{p1}) + (1/\tau_{p2}))^2} + \\ & \left\{ \frac{4}{((v_{p2}/\phi)^2 - (1/\tau_{p2}) - (1/\alpha))^2} - \frac{1}{((v_{p2}/\phi) + (1/\tau_{p2}) + (1/\alpha))^2} - \right. \\ & \left. \frac{1}{((v_{p2}/\phi) - (1/\tau_{p2}) - (1/\alpha))^2} \right\} \cdot \\ & \frac{v_{p2}}{2\phi((1/\tau_{p1}) - (1/\alpha) + ((1/\tau_{p2}) + (1/\alpha))(v_{p1}/v_{p2}))} + \\ & \left\{ \frac{2\phi}{((v_{p1}/\phi)^2 + (1/\tau_{p1}) + (1/\alpha))} - \frac{2\phi}{((v_{p2}/\phi) - (1/\tau_{p2}) - (1/\alpha))} \right. \\ & \left. - \frac{v_{p1}}{((v_{p1}/\phi) + (1/\tau_{p1}) + (1/\alpha))^2} + \frac{v_{p2}}{((v_{p2}/\phi) - (1/\tau_{p2}) - (1/\alpha))^2} \right\} \cdot \\ & \frac{1}{2\phi((v_{p1} - v_{p2})/\phi + (1/\tau_{p1}) + (1/\tau_{p2}))} , \end{aligned}$$

mit  $\Psi(\alpha, \phi)$  für  $k = \{1, 2\}$

$$\Psi(\alpha, \phi) = \frac{1}{(1/\tau_{pk}) + (1/\alpha) + (v_{pk}/\phi)} - \frac{v_{pk}}{2\phi((1/\tau_{pk}) + (1/\alpha) + (v_{pk}/\phi))^2} .$$

Für  $g_{r_n}$  folgt

$$g_{12} = \left( \frac{\eta^2 + r_c^2}{r_n^2 + r_c^2} \right)^{C_1/2} , \text{ mit } C_1 = \frac{y(St)}{(|g|/(v_k/\tau_k))f_3(\text{Re}_\lambda)} ,$$

$$\begin{aligned} y(St) = & -0,1988St^4 + 1,5275St^3 - 4,2942St^2 + 5,3406St \text{ und} \\ f_3(\text{Re}_\lambda) = & 0,1886 \exp\left(\frac{20,306}{\text{Re}_\lambda}\right) \text{ für} \\ St \equiv & \max(St_2, St_1) . \end{aligned}$$

Für  $r_c$  gilt

$$\left( \frac{r_c}{\eta} \right)^2 = |St_2 - St_1| F(a_{0g}, \text{Re}_\lambda) \text{ mit}$$

$$a_{0g} = a_0 + \frac{\pi}{8} \left( \frac{|g|}{v_k/\tau_k} \right)^2 \text{ und}$$

$$F(a_{0g}, \text{Re}_\lambda) = 20,115 \left( \frac{a_{0g}}{\text{Re}_\lambda} \right)^{1/2} .$$

### Parametrisierung nach Kunnen et al. (2013) und Siewert

Die Parametrisierung von Kunnen et al. (2013) und Siewert (2013, persönliche Kommunikation) liefert den turbulenten geometrischen Kollisionskernel  $\Gamma^t(r_m, r_n, \epsilon)$ , aus dem der turbulente Kollisionskernel  $K^t(r_m, r_n, \epsilon)$  mit  $\eta_E$  und  $E^g$  bestimmt werden kann:

$$K^t(r_m, r_n, \epsilon) = \Gamma^t(r_m, r_n, \epsilon) \cdot \eta_E(r_m, r_n, \epsilon) E^g(r_m, r_n) .$$

Für  $r_n > r_m$ , mit  $r_n$  und  $r_m$  in  $\mu\text{m}$  und  $\epsilon$  in  $\text{cm}^2 \text{s}^{-3}$  gilt:

$$\Gamma^t(r_m, r_n, \epsilon) = \eta_G(r_m, r_n - r_m, \epsilon) \Gamma^g(r_m, r_n) + \chi(r_m, r_n - r_m, \epsilon) \eta_G(r_m, 5, \epsilon) \Gamma^g(r_m + 5, r_m)$$

mit

$$\begin{aligned} \eta_G(r_m, \alpha(r_n - r_m, \epsilon), \mu(r_n - r_m, \epsilon), \sigma(r_n - r_m, \epsilon)) &= \\ 1 + \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot \exp\left(-\frac{(r_m - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) , & \\ \alpha(r_n - r_m, \epsilon) = 16,88 \cdot \exp(-0,184(r_n - r_m)) \cdot \epsilon^{0,2852} , & \\ \mu(r_n - r_m, \epsilon) = (-0,0052(r_n - r_m)^2 + 0,145(r_n - r_m) + 3,5) \cdot \frac{3,8\epsilon + 1915}{\epsilon + 85} , & \\ \sigma(r_n - r_m, \epsilon) = \frac{(r_n - r_m) + 155}{(r_n - r_m) + 25} \cdot \frac{\epsilon + 1300}{\epsilon + 166} \text{ und} & \\ \chi(r_m, r_n - r_m, \epsilon) = \exp(-(r_n - r_m)^2) \cdot \frac{60r_m}{r_m^2 - 47,44r_m + 1713} \cdot \frac{\epsilon}{\epsilon + 1848} . & \end{aligned}$$

### Abbildung zum turbulenten Verstärkungsfaktor des KS\*-Kernels

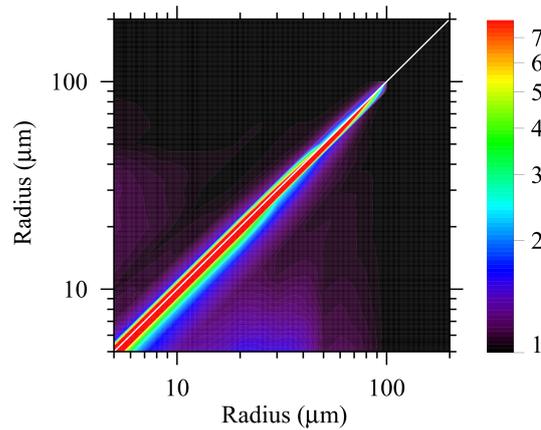


Abbildung A.1: Verhältnis des turbulenten KS\*-Kernels zum nicht-turbulenten Hall-Kernel (entspricht dem Verstärkungsfaktor  $\eta_T$  des Kollisionskernels aufgrund von Turbulenz). Der obere, linke Bereich zeigt Werte für eine Dissipationsrate von  $\epsilon = 50 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$  und der untere, rechte Bereich für eine Dissipationsrate von  $250 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$ . Das Verhältnis ist auf der Diagonalen nicht definiert, da der Hall-Kernel dort Null ist.

### A.3 Untersuchung zur Konvergenz des Tropfenwachstums durch Koagulation für steigende Supertropfenanzahlen

Um das Tropfenwachstum durch Koagulation in Abhängigkeit von der Supertropfenanzahl genauer zu analysieren, wird dieser Prozess unabhängig von den anderen wolkenphysikalischen Prozessen untersucht. Dazu wird die zeitliche Entwicklung eines anfänglichen Tropfenspektrums im Wolken-, Niesel- und Regentropfenbereich in einem einzelnen Gittervolumen mit  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 20$  m durch reines Koagulationswachstum mit dem Hall-Kernel betrachtet. Die Anzahl der anfänglichen Supertropfen variiert zwischen 27, 64, 125, 216 und 512, wobei die repräsentierte Tropfenkonzentration konstant bleibt. Für das Anfangsspektrum wurde zunächst ein sehr breites, eher unrealistisches Tropfenspektrum mit Maximum bei  $r \approx 35$   $\mu\text{m}$  gewählt. Das Spektrum entspricht einer Log-Normalverteilung mit  $\sigma = 0,4$ . Die zeitliche Entwicklung ist in den Abbildungen A.2 bis A.4 dargestellt. Für die Darstellungen wird das Spektrum in 89 Tropfenklassen unterteilt, deren Breite exponentiell zunimmt. Nach 200 s Simulationszeit in Abbildung A.2 sind erste Unterschiede zwischen den einzelnen Simulationen zu erkennen, wobei die Simulationen mit den wenigsten Supertropfen (27 und 64) schon zu diesem Zeitpunkt Probleme damit haben das breite Spektrum ausreichend darzustellen. Dies tritt besonders im Bereich der kleinsten Tropfen auf, die am effektivsten durch Koagulation eingesammelt werden. Nach 600 s in Abbildung A.3 ist das Tropfenwachstum weiter fortgeschritten und die Anzahl und Größe der größten Tropfen mit  $r > 100$   $\mu\text{m}$  hat deutlich zugenommen, während die Tropfenanzahl im Wolkentropfenbereich weiter abnimmt. Dabei zeigt sich, dass die Größe der größten Tropfen bei den Simulationen mit den niedrigsten Supertropfenanzahlen (27 und 64) deutlich kleiner ist, als bei den Vergleichssimulationen. Diese Unterschiede nehmen im weiteren Verlauf der Simulation zu. Nach 1400 s in A.4 sind z. T. sehr große Unterschiede zwischen den Simulationen zu sehen, vor allem für die mit wenig Supertropfen. Für die Simulationen mit mind. 125 Supertropfen pro Gittervolumen ist eine deutliche Konvergenz zu sehen und die Unterschiede sind trotz des extremen Tropfenwachstums gering.

Für den zweiten Fall wurde ein etwas natürlicheres, schmaleres Spektrum mit Maximum bei  $r \approx 30$   $\mu\text{m}$  gewählt. Das Spektrum entspricht ebenfalls einer Log-Normalverteilung mit  $\sigma = 0,15$ . Die zeitliche Entwicklung dieses Spektrums ist in den Abbildungen A.5 bis A.7 dargestellt. Auch hier ist schon relativ am Anfang der Entwicklung nach 200 s zu sehen, dass die Simulationen mit wenig Supertropfen das Spektrum schlechter auflösen können. Mit zunehmender Zeit wachsen auch hier die Tropfen an, so dass sich das Tropfenspektrum verbreitert und die Anzahl der Wolkentropfen abnimmt (siehe Abbildung A.6 nach 1000 s). Aufgrund des schmaleren Anfangsspektrums läuft die zeitliche Entwicklung aber deutlich langsamer ab, da die Kollisionswahrscheinlichkeiten geringer sind. Nach 1400 s sind wieder deutliche Unterschiede zwischen den einzelnen Simulationen zu sehen, vor allem für die größten Tropfen. Aber auch hier ist eine deutliche Konvergenz hin zu den großen Supertropfenanzahlen zu erkennen.

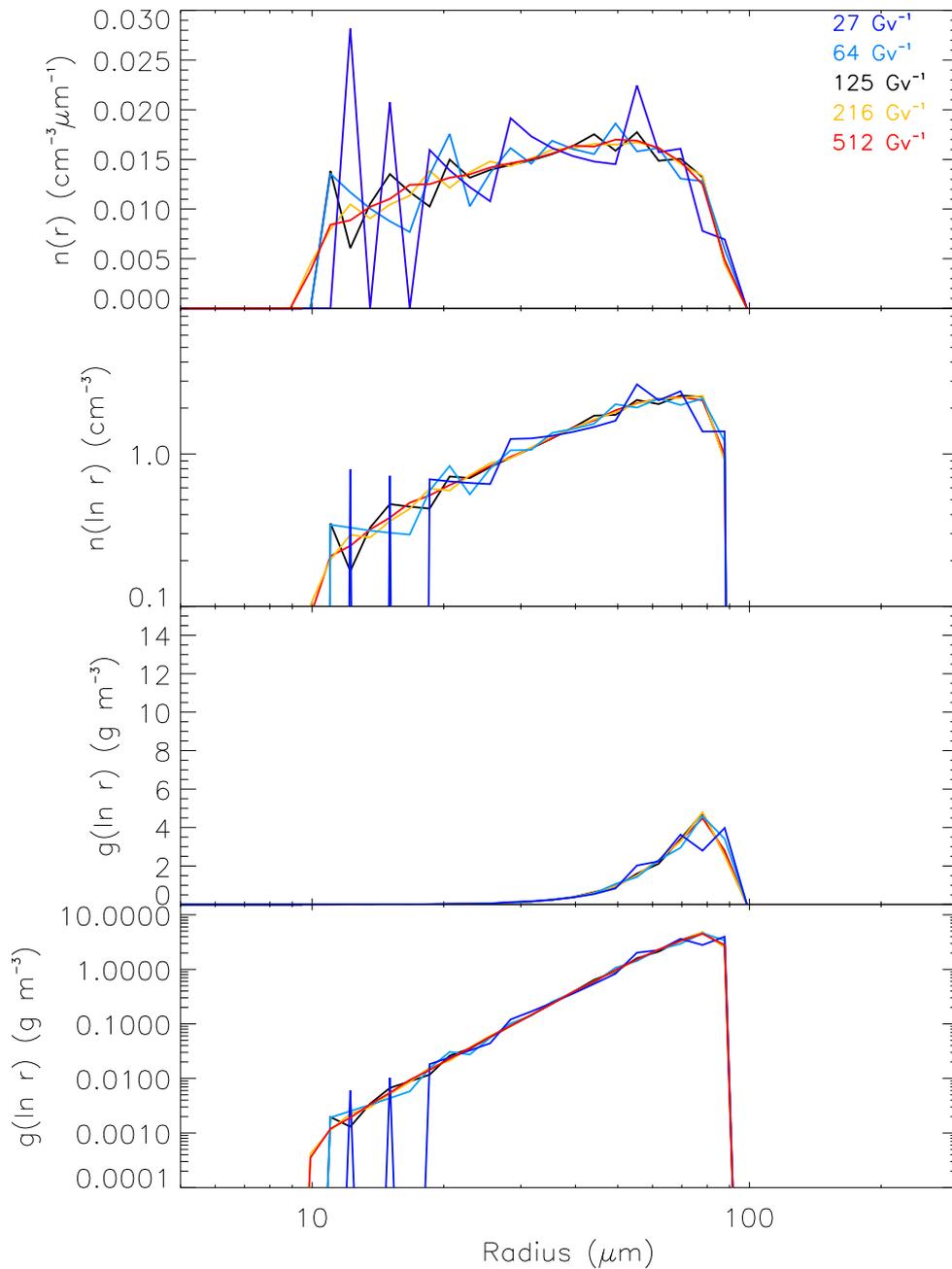


Abbildung A.2: Simulationen zur zeitlichen Entwicklung eines breiten Tropfenspektrums in einem Gittervolumen durch reines Koagulationswachstum mit dem Hall-Kernel nach 200 s Simulationszeit für 27, 64, 125, 216 und 512 Supertropfen. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  (a), das Anzahldichtespektrum  $n(\ln r)$  (b) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  in (c) und (d).

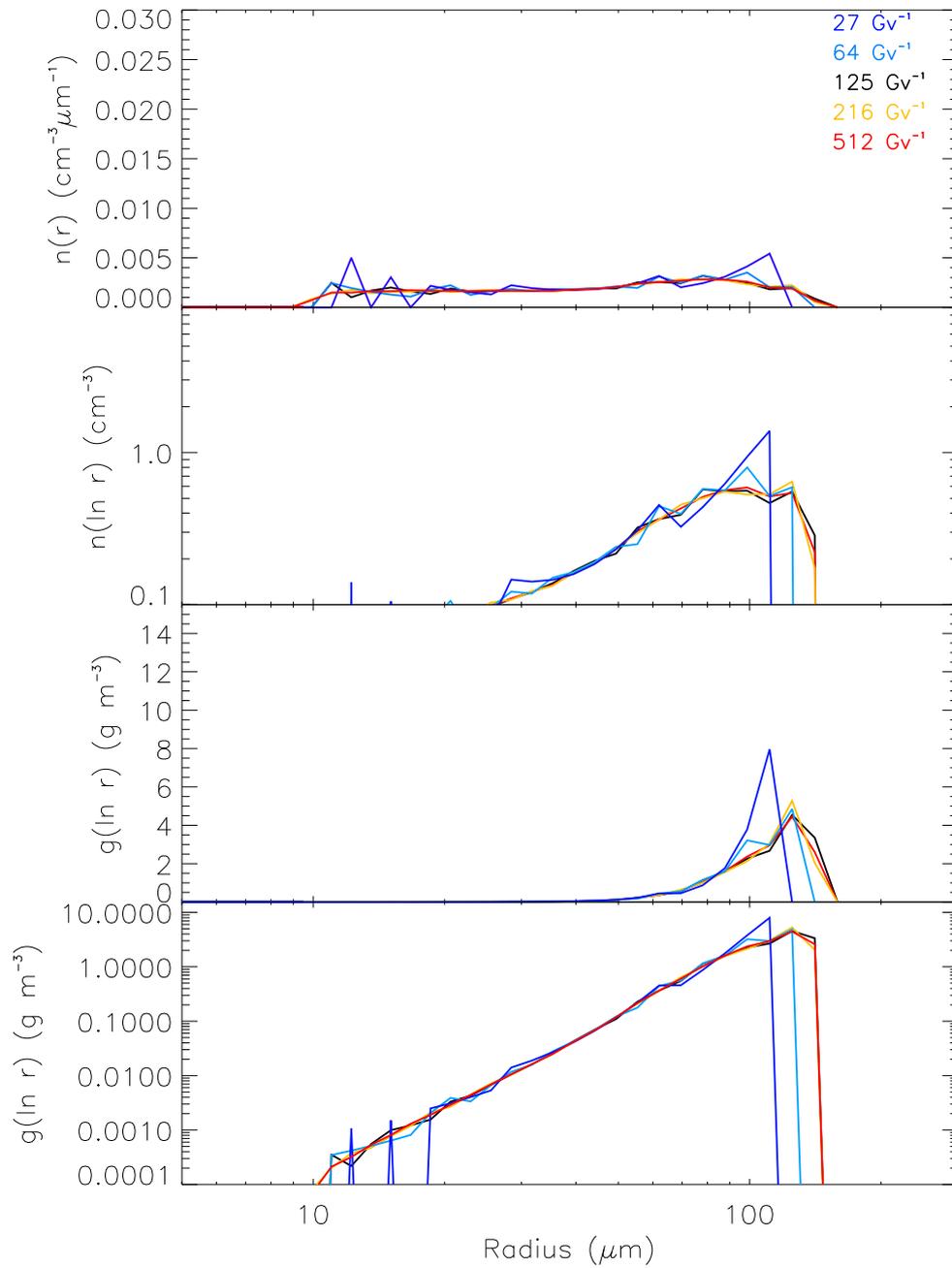


Abbildung A.3: Simulationen zur zeitlichen Entwicklung eines breiten Tropfenspektrums in einem Gittervolumen durch reines Koagulationswachstum mit dem Hall-Kernel nach 600 s Simulationszeit für 27, 64, 125, 216 und 512 Supertropfen. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  (a), das Anzahldichtespektrum  $n(\ln r)$  (b) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  in (c) und (d).

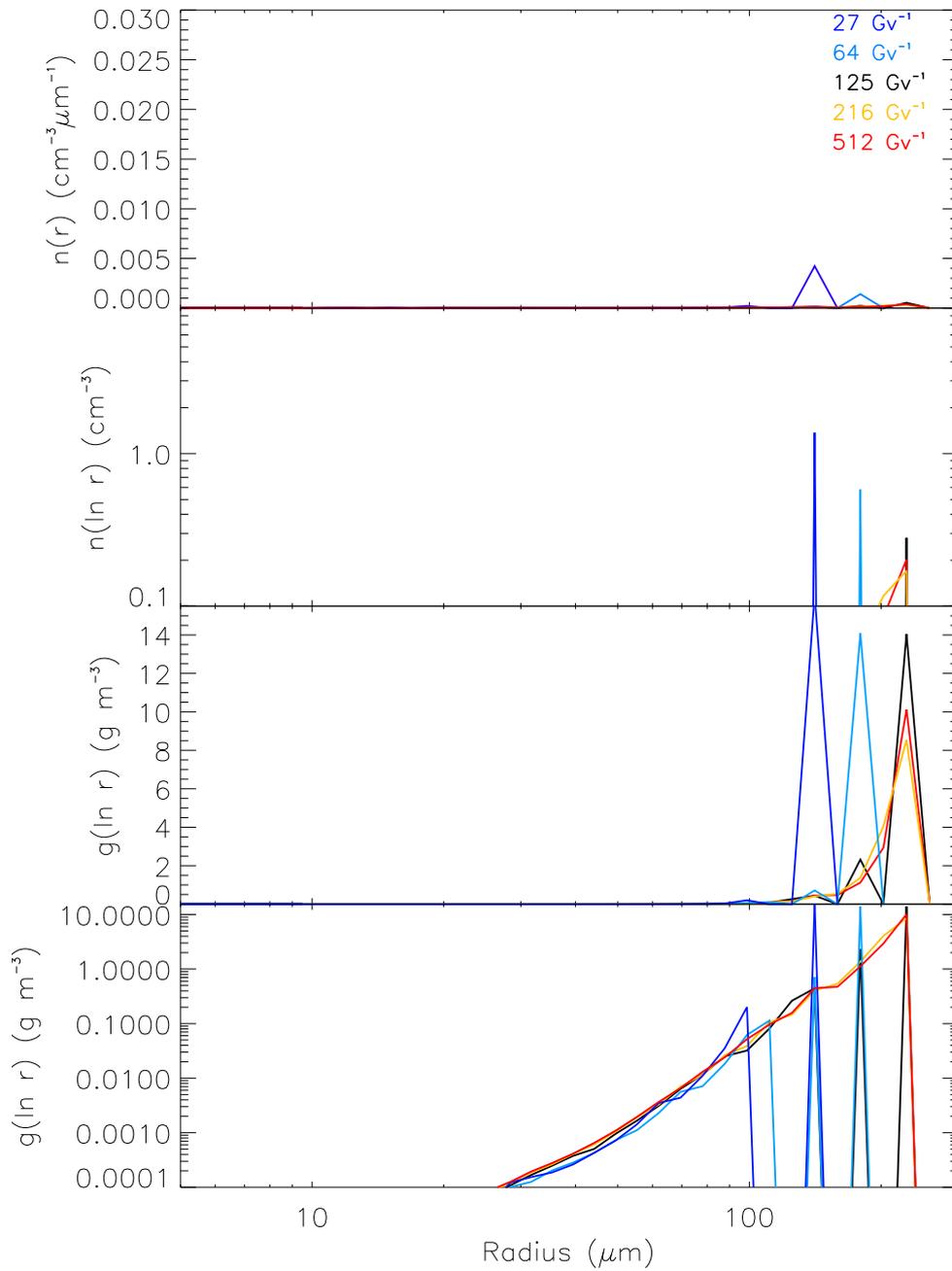


Abbildung A.4: Simulationen zur zeitlichen Entwicklung eines breiten Tropfenspektrums in einem Gittervolumen durch reines Koagulationswachstum mit dem Hall-Kernel nach 1400 s Simulationszeit für 27, 64, 125, 216 und 512 Supertropfen. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  (a), das Anzahldichtespektrum  $n(\ln r)$  (b) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  in (c) und (d).

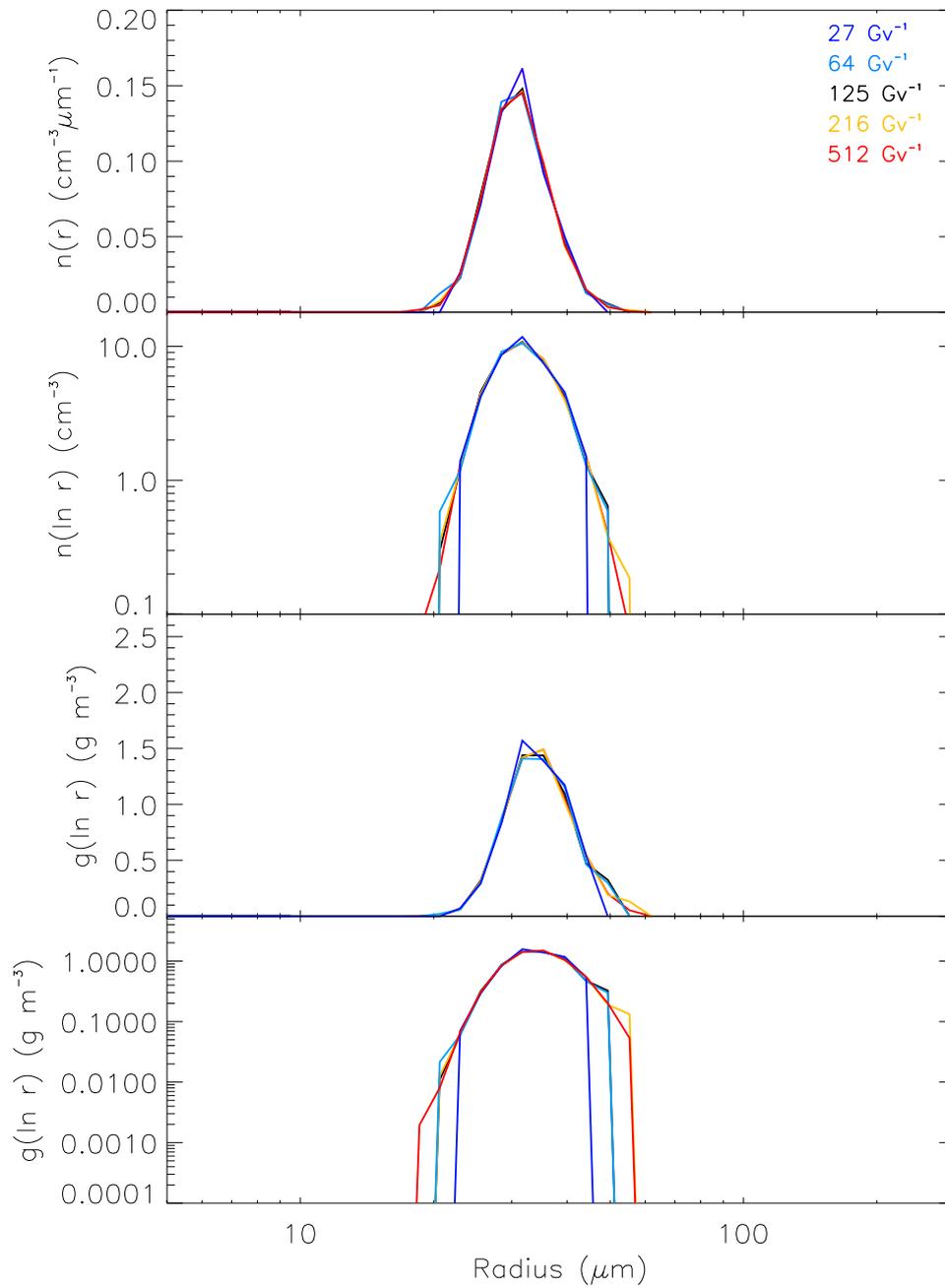


Abbildung A.5: Simulationen zur zeitlichen Entwicklung eines schmalen Tropfenspektrums in einem Gittervolumen durch reines Koagulationswachstum mit dem Hall-Kernel nach 200 s Simulationszeit für 27, 64, 125, 216 und 512 Supertropfen. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  (a), das Anzahldichtespektrum  $n(\ln r)$  (b) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  in (c) und (d).

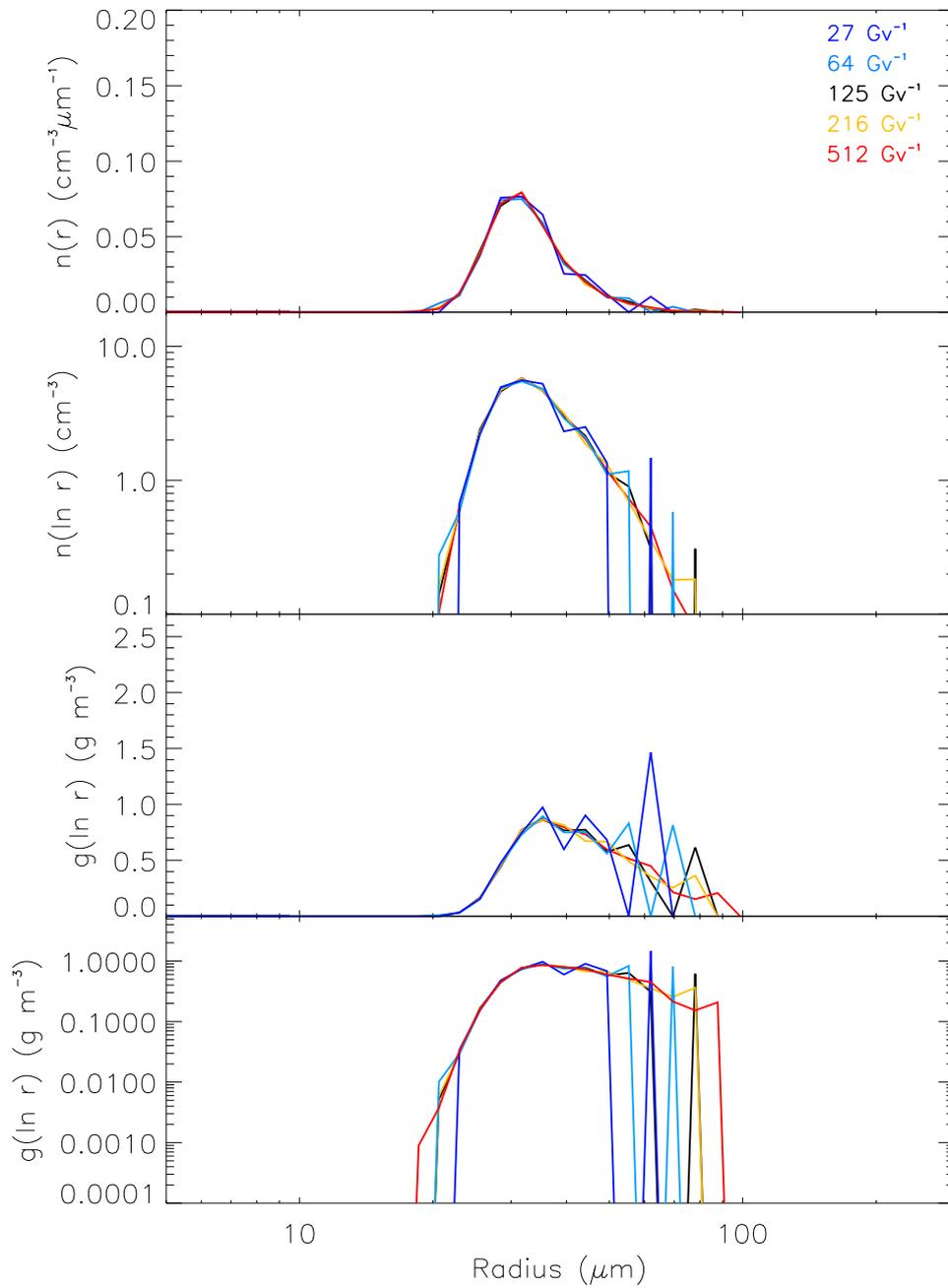


Abbildung A.6: Simulationen zur zeitlichen Entwicklung eines schmalen Tropfenspektrums in einem Gittervolumen durch reines Koagulationswachstum mit dem Hall-Kernel nach 1000 s Simulationszeit für 27, 64, 125, 216 und 512 Supertropfen. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  (a), das Anzahldichtespektrum  $n(\ln r)$  (b) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  in (c) und (d).

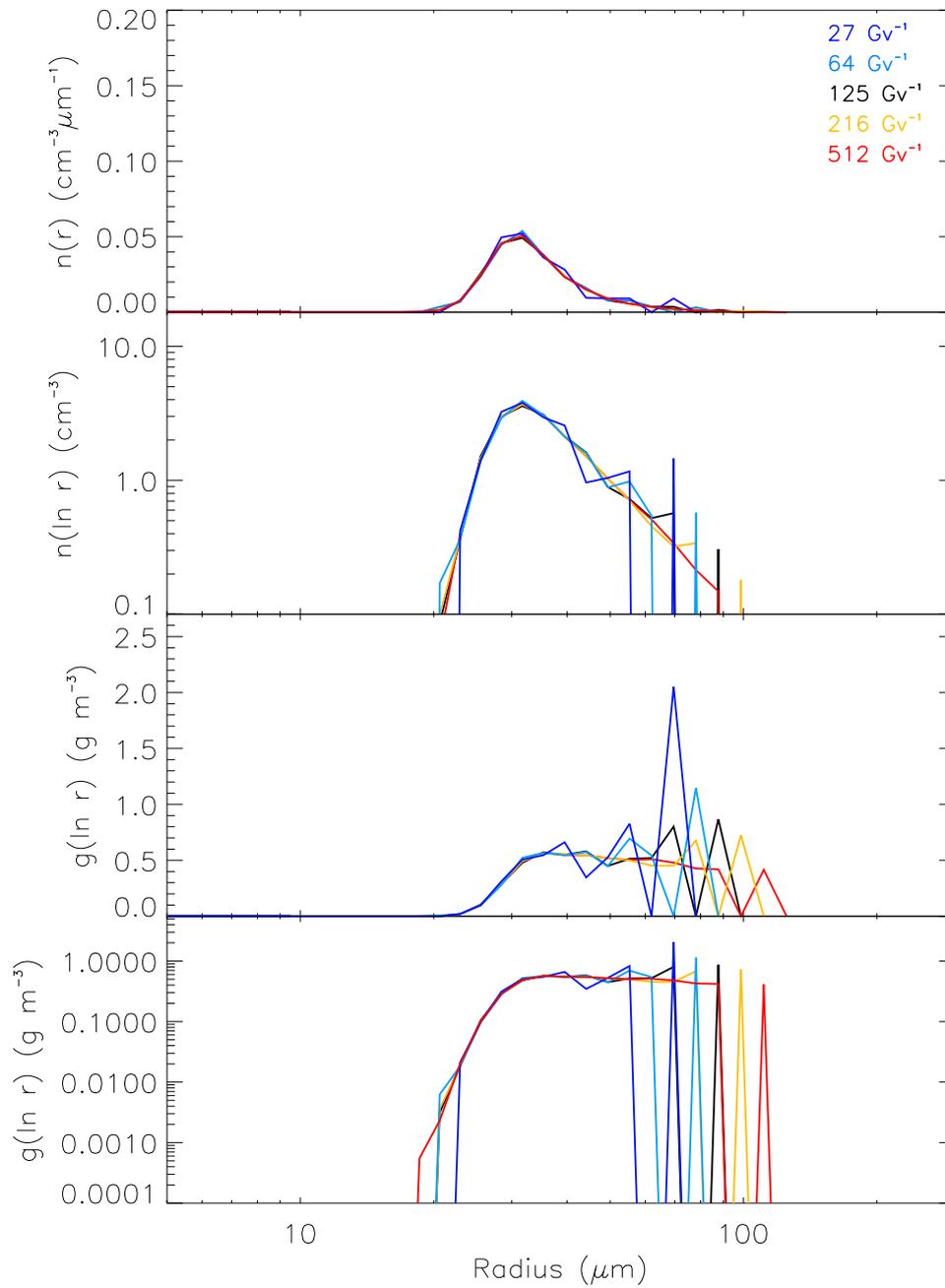


Abbildung A.7: Simulationen zur zeitlichen Entwicklung eines schmalen Tropfenspektrums in einem Gittervolumen durch reines Koagulationswachstum mit dem Hall-Kernel nach 1400 s Simulationszeit für 27, 64, 125, 216 und 512 Supertropfen. Dargestellt sind das Anzahldichtespektrum  $n(r)$  (a), das Anzahldichtespektrum  $n(\ln r)$  (b) und die Massendichtespektren  $g(\ln r)$  in (c) und (d).

## B Abbildungen zur Simulation einer idealisierten Wolke mit einem Ein-Momenten-Schema

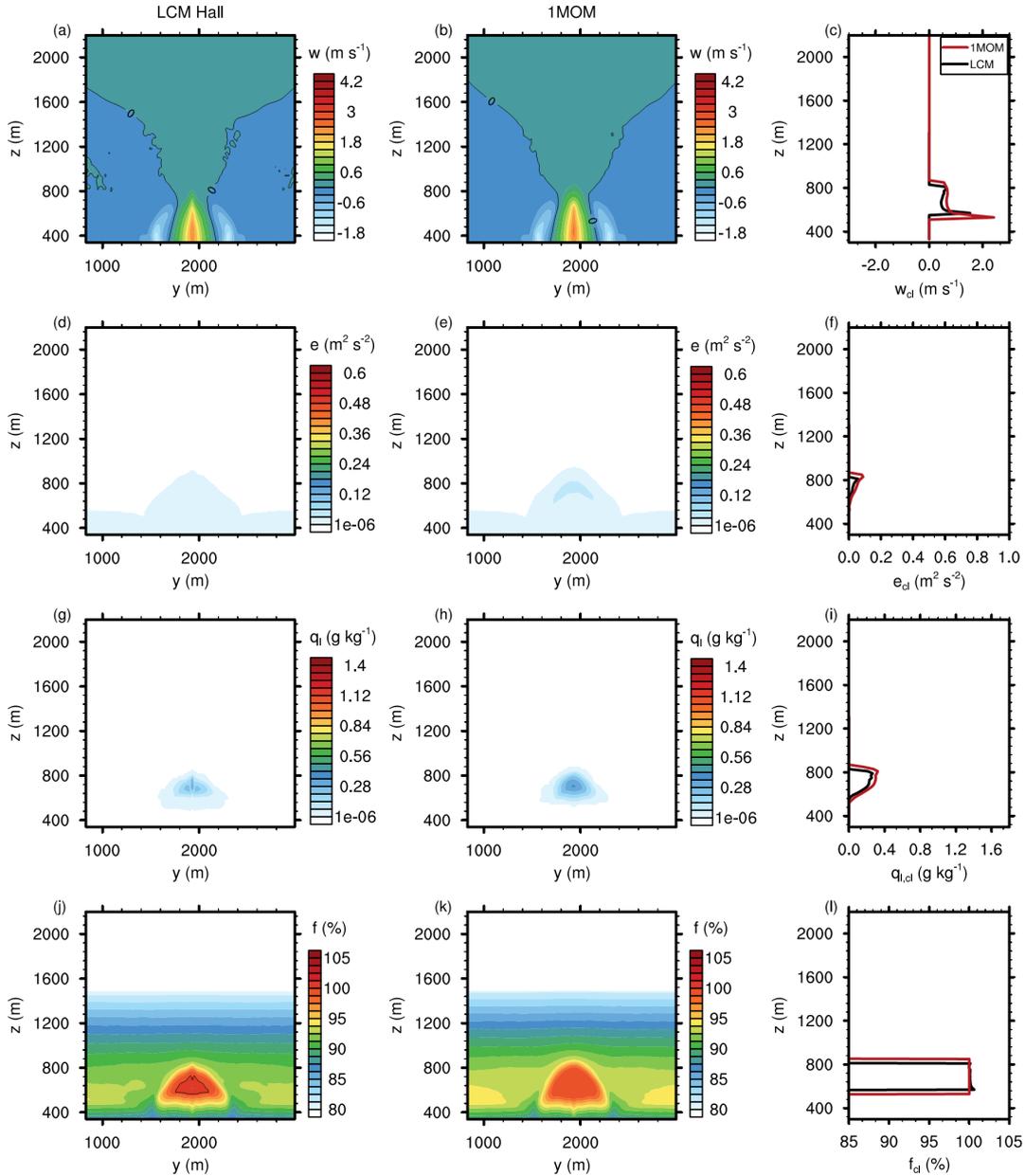


Abbildung B.1: y-z-Schnitte und Vertikalprofile von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit LCM (links) und 1MOM (Mitte) nach 800s Simulationszeit. Die LCM-Simulation wurde mit Hall-Kernel durchgeführt. Dargestellt sind die Vertikalgeschwindigkeit  $w$  (a-c), die turbulente kinetische Energie  $e$  (d-f), der Flüssigwassergehalt  $q_l$  (g-i) und die relative Feuchte  $f$  (j-l). Die y-z-Schnitte wurden in x-Richtung gemittelt; die Vertikalprofile zeigen die mittleren Werte innerhalb der Wolken. Gittervolumen werden als Wolke identifiziert, wenn  $q_l > 0,01 \text{ g kg}^{-1}$  ist. Die schwarzen Linien repräsentieren die Isolinien  $w = 0 \text{ m s}^{-1}$  in (a,b) bzw.  $f = 100\%$  in (j,k).

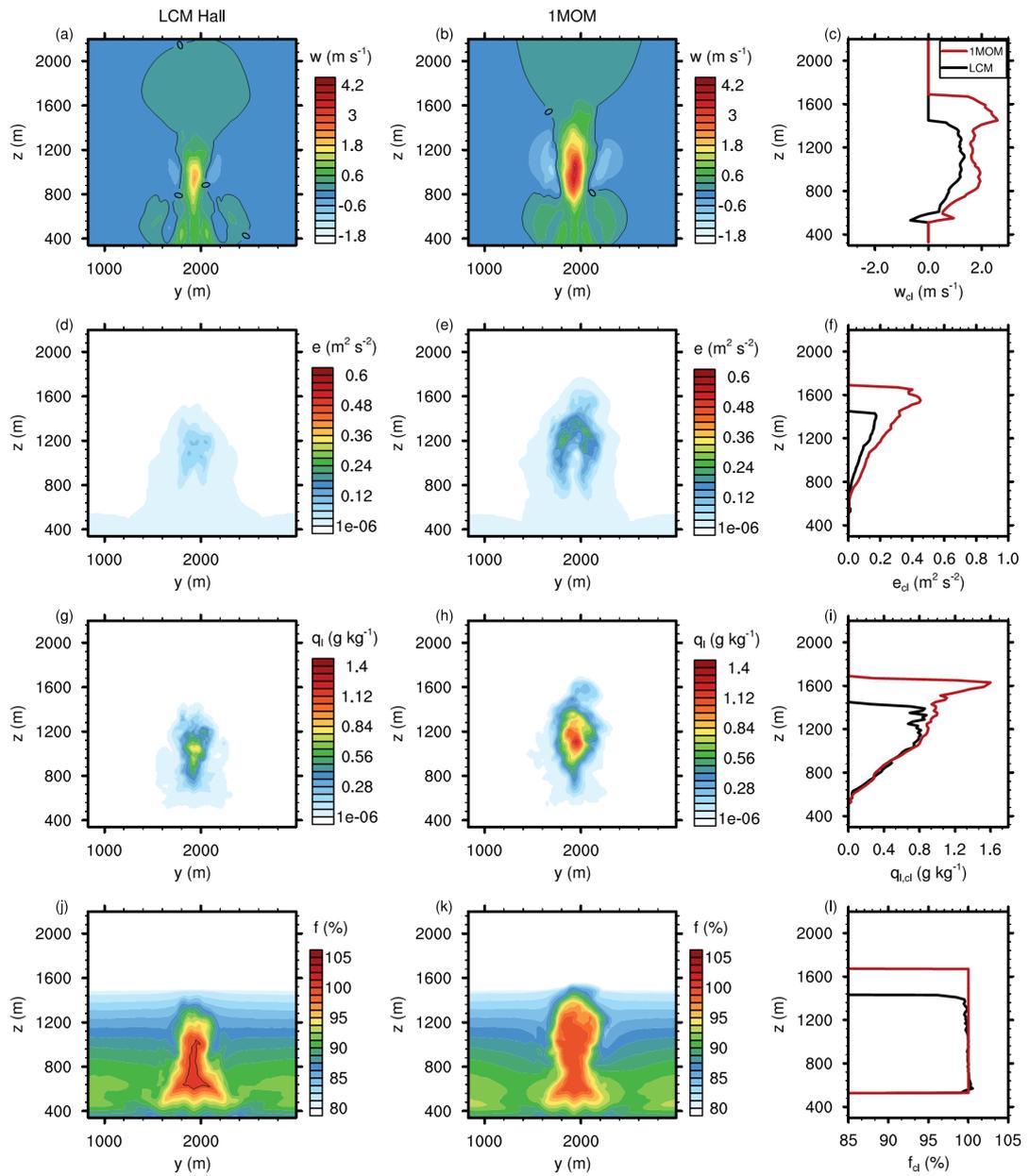


Abbildung B.2: y-z-Schnitte und Vertikalprofile von den Simulationen einer idealisierten Wolke mit LCM und 1MOM nach 1200 s Simulationszeit (analog zu Abb. B.1).

## **A new method for large-eddy simulations of clouds with Lagrangian droplets including the effects of turbulent collision**

**T Riechelmann<sup>1,3</sup>, Y Noh<sup>2</sup> and S Raasch<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover, Herrenhäuser Strasse 2, 30419 Hannover, Germany

<sup>2</sup> Department of Atmospheric Sciences, Yonsei University, 50 Yonsei-ro, Seodaemun-gu, Seoul 120-749, Korea

E-mail: [t.riechelmann@muk.uni-hannover.de](mailto:t.riechelmann@muk.uni-hannover.de)

*New Journal of Physics* **14** (2012) 065008 (27pp)

Received 20 December 2011

Published 21 June 2012

Online at <http://www.njp.org/>

doi:10.1088/1367-2630/14/6/065008

**Abstract.** In this paper, a new Lagrangian cloud model (LCM) is introduced in which the flow field is simulated by large-eddy simulation, and the droplets are treated as Lagrangian particles responding to the simulated flow field. In order to handle the extremely large number of droplets within a cloud, the concept of a super-droplet, which represents a large number of real droplets of the same size, is introduced, and the number of contributing real droplets is called the weighting factor. A novel method is developed to realize the collision/coalescence of droplets, in which the consequent variation of the droplet spectrum is represented in terms of the modification of the radius and weighting factor of super-droplets, while keeping the number of super-droplets unchanged. Using an idealized single cloud and trade wind cumuli, the LCM is shown to reproduce the general features of shallow cumulus clouds in agreement with traditional bulk models. The droplet spectrum simulated by the LCM, using collision kernels with and without the effects of turbulence, also shows a pattern consistent with the spectral bin model. Furthermore, the sensitivity of the LCM to two model parameters, the time step and the number of super-droplets, is examined.

<sup>3</sup> Author to whom any correspondence should be addressed.

**Contents**

<b>1. Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2. The model</b>	<b>4</b>
2.1. Fluid model . . . . .	4
2.2. Particle model . . . . .	6
2.3. Collection kernel . . . . .	9
2.4. Particle–turbulence interaction . . . . .	10
<b>3. Simulations of an idealized single cloud</b>	<b>11</b>
3.1. Simulation setup . . . . .	11
3.2. Cloud evolution . . . . .	12
3.3. Effects of turbulence on microphysics . . . . .	15
3.4. Sensitivity to model parameters . . . . .	18
<b>4. Simulations of the shallow cumulus case BOMEX</b>	<b>20</b>
4.1. Simulation setup . . . . .	20
4.2. Comparison with the intercomparison results . . . . .	21
<b>5. Conclusion</b>	<b>23</b>
<b>Acknowledgments</b>	<b>24</b>
<b>Appendix. Numerical techniques of the particle model</b>	<b>24</b>
<b>References</b>	<b>26</b>

**1. Introduction**

To simulate particle-laden turbulent flows, the Lagrangian model, which calculates the trajectories of individual particles under a turbulent velocity field simulated by large-eddy simulation (LES) or direct numerical simulation (DNS), is more natural than the Eulerian model, which calculates the variation of the particle concentration field (see, e.g., [1, 2]). It is also important to note that the dynamics and microphysics of a cloud are directly related to the physical process of individual droplets, such as condensation, collision, transport and settling in the Lagrangian cloud model (LCM).

An LCM can realize the initiation of rain naturally by the motion of droplets settling gravitationally in turbulent flows, since the settling velocity is calculated directly. The transport of droplets, responding to the velocity field in a cloud, can reflect the different response of individual droplets depending on different inertial and gravitational forces, without resorting to the assumption of eddy diffusivity. Meanwhile, as pointed out by Andrejczuk *et al* [3], a Lagrangian model can avoid difficulties associated with the conversion from cloud condensation nuclei (CCN) into cloud droplets and the artificial broadening of the droplet spectrum in the spectral bin model. It should also be mentioned that particle–turbulence interaction, such as preferential concentration, droplet acceleration associated with the intermittency of turbulence and interaction of droplets with supersaturation fluctuation, which may exert an influence on cloud microphysics, can be understood only from Lagrangian perspectives (e.g. [4–6]).

Nonetheless, most of the cloud models developed so far followed the Eulerian model, using either the bulk model or the spectral bin method for microphysics. The bulk method calculates a

small number of bulk variables, such as vapor mass, cloud water mass and rain mass [7–10]. It does not require much computational cost, but depends heavily on the assumptions of the basic microphysical processes, such as the assumed size distribution of droplets. The spectral bin method solves the integral–differential equation that describes the evolution of droplet spectra, called the stochastic collection equation (SCE), assuming that the distribution of cloud droplets within a grid box is uniform [11–13].

In the spectral bin model the evolution of the droplet spectrum is mainly controlled by the collection kernel  $K(R, r)$ , which represents the probability that a droplet of radius  $R$  collects a droplet of radius  $r$  per unit time, given that both are present with unit concentration. To solve the SCE, the droplet spectrum must be discretized into bins. If the number of bins is not sufficient, the spectral bin method suffers from the numerical diffusion of the droplet spectrum, which leads to an earlier onset of rainfall [3, 14]. On the other hand, the computational cost for calculating the SCE at every grid point with a sufficiently large number of bins becomes insurmountably high.

The progress in LCMs could not be realized until recently because of two challenging problems. One is how to handle the extremely large number of droplets within a cloud, which makes it practically impossible to realize the motion of all droplets. However, the total number of droplets is important in the simulation of a cloud, because it determines the total liquid water content (LWC). The other problem is how to realize the collisions of Lagrangian droplets, followed by coalescence, whose process is highly complicated and sensitive to the fine-scale turbulence structure.

Only two groups are known to the authors so far who attempted to develop an LCM recently: Andrejczuk *et al* [3, 15] and Shima *et al* [16]. In both the cases, each simulated droplet is assumed to represent a large number of droplets; it is referred to as a ‘super-droplet’ by Shima *et al* [16]. As to the collision process, Shima *et al* [16] used a Monte Carlo scheme for the collision of simulated droplets, in which collisions between randomly sampled pairs of droplets are calculated, while assuming that the resulting droplet statistics are equivalent to those from the collision between all super-droplets. On the other hand, Andrejczuk *et al* [3] used a scheme in which collisions are assumed to occur between super-droplets within a subdivided grid box, and new super-droplets are created as the outcome of the collisions.

In this work, we have developed a new LCM. Similarly to Andrejczuk *et al* [3, 15] and Shima *et al* [16], in our model the flow field is simulated by LES and the concept of ‘super-droplets’ is applied. Thereby a single super-droplet represents a large number of real droplets of the same size, and the number of contributing droplets to a super-droplet is called a ‘weighting factor’. However, in contrast to the existing LCMs, the droplet collision in our LCM is realized in a radically different way. Instead of considering individual collision events between super-droplets explicitly, we choose a statistical approach in which the growth of the droplet size after a large number of collision events is determined by the background droplet spectrum and turbulence, and the outcome is described in terms of the modification of the radius and weighting factor. In this approach the creation/annihilation of droplets after collision/coalescence is not necessary. A detailed description is presented in section 2.

The collection kernel plays a critical role in the calculation of droplet growth by collision/coalescence in the present scheme, as in the case of the spectral bin model. The gravitational kernel with collision efficiencies from Hall [11] (hereafter called the Hall kernel) has been widely used, which considers only gravitational collision independent of turbulence. However, recent studies of the collection kernel through either DNS [17–19] or

a kinematic/stochastic representation of turbulence [20] reveal that turbulence enhances the collision frequency significantly. The main mechanisms of enhancing the collision frequency are the enhanced relative velocity between colliding droplets, the preferential concentration and the enhanced collision efficiency. Ayala *et al* [17] developed a new collision kernel including the effects of turbulence based on the analysis of DNS data (hereafter called AW kernel), and Wang and Grabowski [21] showed using a spectral bin model that the AW kernel can explain the observed droplet broadening between 10 and 50  $\mu\text{m}$ , which could not be predicted from the Hall kernel.

The purpose of this paper is to propose a new LCM, which has the potential to provide new insight for the understanding of cloud physics and to validate it. Section 2 discusses the fluid and particle models and their numerical implementation. Following that, the developed LCM is applied to the simulation of shallow cumulus convection of warm clouds: for an idealized single cloud and trade wind cumuli corresponding to the Barbados Oceanographic and Meteorological Experiment (BOMEX; [22]) shallow cumulus case. The case of a single cloud, idealized as a rising air bubble, is presented in section 3. Here the characteristics of cloud dynamics and microphysics are analyzed and compared with the traditional bulk model results. The simulation of the LCM is carried out with different collection kernels, the Hall and the AW kernel, in order to clarify the effects of turbulence on droplet growth. The idealized single cloud is also used for sensitivity tests of model parameters such as the time step and the number of super-droplets. In section 4, the validity of the model is further examined for the BOMEX data in comparison with other model results. Concluding remarks are given in section 5.

## 2. The model

### 2.1. Fluid model

The LES model used in this work is PALM (PARallelized Large-Eddy Simulation Model; [23]), which is designed for optimal performance and high scalability on massively parallel computer architectures [23]. PALM has been successfully applied to various geophysical applications including the convective boundary layer (see, e.g., [24–26]). It has also been applied to simulate the motion of Lagrangian particles in turbulent flows, such as particle settling, dispersion and footprint problems [27, 28].

PALM is based on the non-hydrostatic incompressible Boussinesq equation and the equations for the conservation of mass, energy and moisture, which are filtered over the grid size, as

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\varepsilon_{ijk} f_j u_k + \varepsilon_{i3k} f_3 u_{gk} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p^*}{\partial x_i} + g \frac{\theta_v - \theta_{v0}}{\theta_{v0}} \delta_{i3} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{u_i'' u_j''} \right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u_j \frac{\partial \theta}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{u_j'' \theta''} \right) + \frac{L_e}{c_p \Pi} \Phi, \quad (3)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u_j \frac{\partial q}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{u_j'' q''} \right) - \Phi. \quad (4)$$

Here  $u_i$  are the velocity components ( $u, v, w$ );  $x_i$  are the Cartesian coordinates ( $x, y, z$ ),  $f_i$  are the Coriolis parameters,  $u_g$  is the geostrophic wind,  $\rho_0$  is the density of dry air,  $p^*$  is the so-called perturbation pressure,  $g$  is the gravitational acceleration and  $\theta_v = \theta (1 + 0.608q - q_1)$  is the virtual potential temperature with potential temperature  $\theta$ , specific humidity  $q$  and liquid water mixing ratio  $q_1$ . Furthermore,  $L_e$  is the latent heat of evaporation,  $c_p$  is the specific heat of dry air at constant pressure,  $\Pi = (p/p_0)^{R_d/c_p}$  is the Exner function with the reference pressure  $p_0 = 1000$  hPa and the gas constant  $R_d$ , and  $\Phi$  is the source/sink term of  $q_1$  through the condensation/evaporation process. In the present model  $q_1$  and  $\Phi$  are calculated by the particle model described in section 2.2. All the variables in the equations are filtered ones, but the overbar indicating filtered quantities is omitted except for the subgrid-scale (SGS) flux terms for readability. The variables with the double prime represent the SGS components. Molecular diffusion and radiation processes are generally neglected, but radiative cooling is included in one of our simulation setups (see section 4.1).

The filtering is realized by averaging over discrete grid volumes after Schumann [29]. The SGS turbulence is parameterized according to Deardorff [30] that includes a prognostic equation for the SGS turbulent kinetic energy (SGS-TKE)  $e$  ( $=\frac{1}{2}\overline{u_i''u_i''}$ ):

$$\frac{\partial e}{\partial t} + u_j \frac{\partial e}{\partial x_j} = - \left( \overline{u_i''u_j''} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{g}{\theta_{v_0}} \overline{u_3''\theta_v''} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \overline{u_j'' \left( e'' + \frac{p''}{\rho_0} \right)} \right] - \varepsilon. \quad (5)$$

Here  $\varepsilon$  is the dissipation rate. The SGS fluxes in the filtered equations (1) and (3)–(5) are parameterized using the SGS eddy viscosity and diffusivity  $K_m$  and  $K_h$  as

$$\overline{u_i''u_j''} = -K_m \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (6)$$

$$\overline{u_i''\theta''} = -K_h \frac{\partial \theta}{\partial x_i}, \quad (7)$$

$$\overline{u_i''q''} = -K_h \frac{\partial q}{\partial x_i}, \quad (8)$$

$$\overline{u_i'' \left( e'' + \frac{p''}{\rho_0} \right)} = -2K_m \frac{\partial e}{\partial x_i}. \quad (9)$$

Here  $K_m$  and  $K_h$  are calculated by

$$K_m = c_m l \sqrt{e}, \quad (10)$$

$$K_h = \left( 1 + \frac{2l}{\Delta s} \right) K_m, \quad (11)$$

where  $c_m = 0.1$  and  $\Delta s = \sqrt[3]{\Delta x \Delta y \Delta z}$ . The SGS mixing length  $l$  is calculated by

$$l = \min \left( 0.7z, \Delta s, 0.76\sqrt{e} \left( \frac{g}{\theta_{v_0}} \frac{\partial \theta_v}{\partial z} \right)^{-\frac{1}{2}} \right) \quad \text{for } \frac{\partial \theta_v}{\partial z} > 0 \quad \text{and} \quad (12)$$

$$l = \min (0.7z, \Delta s) \quad \text{for } \frac{\partial \theta_v}{\partial z} \leq 0, \quad (13)$$

where  $z$  is the distance from the bottom. The dissipation rate  $\varepsilon$  is given by

$$\varepsilon = \left( 0.19 + 0.74 \frac{l}{\Delta s} \right) \frac{e^{3/2}}{l}. \quad (14)$$

The model equations are discretized by finite differences. In the present study, a fifth-order advection scheme of Wicker and Skamarock [31] and a third-order Runge–Kutta time step scheme [32] are used. To ensure a divergence-free wind field, a predictor–corrector method is used where the Poisson equation for the perturbation pressure is solved after every time step. For a more detailed description of PALM, see [23, 33].

In addition to LCM, PALM also has the option for a traditional one moment bulk cloud model (see, e.g., [23, 34]). In this model prognostic equations for the liquid water potential temperature and total water content are solved following Ogura [35] and Orville [36]. The condensation scheme follows Cuijpers and Duynkerke [37] and is an all-or-nothing method, where a grid volume is regarded as unsaturated when the total water content is below the saturation value, and saturated otherwise. In the saturated case  $q_1$  is calculated by the difference between the total water content and the saturation value.

## 2.2. Particle model

Within the model each particle is defined by a set of features (position, velocity components, radius, weighting factor, etc), which are stored as components of a FORTRAN90-derived data type variable. One element of this data type defines a complete particle with its entire features and the whole set of particles is stored in a one-dimensional (1D) array of this derived data type. The particle model of PALM is parallelized using the domain-decomposition concept, as in the fluid model. Therefore the particles are handled by and stored in the memory of the processors assigned to those subdomains where the particles are located. The particle model includes a sorting algorithm which speeds up the performance by avoiding cache misses. For this purpose the particles are sorted at each time step. The sorting determines all particles belonging to the same grid box and also sorts them according to their size which accelerates the calculation of the collision/coalescence process. For more details on the parallelization and sorting technique, see the [appendix](#).

*2.2.1. Definition and characteristics of a super-droplet.* In the present model, in order to handle the extremely large number of droplets, the concept of a super-droplet is introduced, similarly to Andrejczuk *et al* [3, 15] and Shima *et al* [16]. A single super-droplet represents a large number of real droplets of the same size, and the number of droplets contributing to a super-droplet is called the ‘weighting factor’  $A_n(t)$ .  $A_n(t)$  can be defined equivalently as the ratio of the total volume of a large number of real droplets represented by a super-droplet to that of a super-droplet.

The super-droplets experience all cloud microphysical processes in the model, and represent the LWC  $L$  by

$$L = \rho_0 q_1 = \frac{\rho_l}{\Delta V} \sum_{n=1}^{N_p} A_n \cdot \frac{4}{3} \pi r_n^3, \quad (15)$$

where  $\rho_l$  is the density of liquid water,  $\Delta V$  is the volume of a grid box,  $N_p$  is the number of super-droplets in a grid box and  $r_n$  is the droplet radius. Note that  $q_l$  obtained from (15) is used to calculate  $\theta_v$  ( $=\theta(1+0.608q - q_l)$ ).

2.2.2. *Advection of droplets.* Since  $\rho_0/\rho_l \ll 1$ , the motion of each droplet can be simulated by

$$\frac{dX_i}{dt} = V_i \quad \text{and} \quad \frac{dV_i}{dt} = \frac{1}{\tau_p} [u_i(X_i) - V_i] - \delta_{i3}(1 - \rho_0/\rho_l) g, \quad (16)$$

where  $X_i$  is the droplet position,  $V_i$  is the droplet velocity,  $u_i(X_i)$  is the fluid velocity at the droplet position and  $\tau_p$  is the droplet relaxation time. The inertial response time  $\tau_p$  is calculated using the nonlinear drag law [38]:

$$\tau_p^{-1} = \frac{9\nu\rho_0}{2r^2\rho_l} \cdot (1 + 0.15Re_p^{0.687}) \quad \text{with} \quad Re_p = \frac{2r \cdot |\vec{u}(\vec{X}) - \vec{V}|}{\nu}, \quad (17)$$

which yields a good prediction of the terminal velocity [39]. The nonlinear drag law is used because the Stokes law is only valid for droplets with a radius up to  $30 \mu\text{m}$  [40]. Here  $Re_p$  is the droplet Reynolds number and  $\nu$  is the molecular viscosity of air. For these calculations, the velocity components of the flow field are interpolated to the current droplet position from the surrounding eight grid points of the respective PALM grid box by bilinear interpolation. SGS velocity fluctuations for the droplet advection are not considered.

2.2.3. *Droplet growth due to condensation/evaporation.* The droplet growth due to the condensation/evaporation process is calculated using the equation suggested by Mason [41] as

$$r \frac{dr}{dt} = \frac{S - 1}{F_k + F_d} \quad \text{with} \quad S = \frac{e_v}{e_s}, \quad F_k = \left( \frac{L_e}{R_v T - 1} \right) \frac{L_e \rho_l}{K T} \quad \text{and} \quad F_d = \frac{\rho_l R_v T}{D e_s(T)}, \quad (18)$$

where  $S$  is supersaturation,  $e_v$  the vapor pressure and  $e_s$  the saturation vapor pressure over a plane surface,  $F_k$  is the term associated with heat conduction,  $R_v$  is the individual gas constant for water,  $T$  is the temperature,  $K$  is the coefficient of thermal conductivity of air,  $F_d$  is the term associated with vapor diffusion and  $D$  is the coefficient of diffusion of water vapor in air. This approach neglects the temperature difference between the droplet and its environment as well as the solution and curvature effects on the droplet's equilibrium vapor pressure; thus the activation process of aerosol particles is not implemented. The radius of all super-droplets is initially given by  $r = 1 \mu\text{m}$ , which corresponds to the typical size of the smallest droplet/activated CCN. It also corresponds to the typical size of the smallest bin in the spectral bin model [8–10]. We take this simplified condition as an initial approach, because the activation process is not important in the evolution of shallow convection and the droplet growth by collision/coalescence, which are the main concern in this work. The activation process, which can actually be more naturally represented in the LCM, can be included in the next stage, as was done by Andrejczuk *et al* [15].

To evaluate (18),  $e_v$  and  $e_s$  are calculated from  $q$  and  $\theta$ , which are computed by the fluid model (3) and (4), and interpolated to the droplet position. The changes of  $q$  and  $\theta$  are induced by the change in LWC from the condensation/evaporation of all droplets within the respective

grid box. The change in LWC by condensation/evaporation per unit time is calculated by the particle model as

$$\Phi \Delta t = \frac{\rho_1}{\rho_0 \Delta V} \sum_{n=1}^{N_p} \frac{4\pi}{3} A_n (r_n^{*3} - r_n^3), \quad (19)$$

where  $r^*$  is the droplet radius modified by condensation/evaporation after one time step.

*2.2.4. Droplet growth due to collision and coalescence.* Firstly, we reinterpret the collision/coalescence of two droplets as the growth of the larger droplet and the disappearance of the smaller droplet. According to this interpretation, after each collision/coalescence between two super-droplets, the larger super-droplet increases its radius while keeping the weighting factor invariant and the smaller super-droplet decreases its weighting factor while keeping its radius invariant. For example, if a collision occurs between the super-droplets with the radius  $R$  and  $r$  ( $R > r$ ) and the weighting factors  $A_R$  and  $A_r$ ,  $R$  increases to  $[R^3 + (\Delta A/A_R)r^3]^{1/3}$  and  $A_r$  decreases to  $A_r - \Delta A$ . In this way, we can avoid the creation/annihilation of super-droplets after collision/coalescence. In the present model the evolution of droplet spectra is accomplished by calculating  $dR/dt$  and  $\Delta A$ , which are described in the following.

Secondly, we calculate the increase in the radius of the collector droplet ( $dR/dt$ ) using a statistical approach, instead of considering individual collision events between super-droplets, as was done by Andrejczuk *et al* [3] and Shima *et al* [16]. That is, we consider the growth by collision/coalescence given the background droplet spectrum and turbulence. It also implies the growth of the mean radius of real droplets belonging to a super-droplet, resulting from a large number of collisions with real droplets within a grid box during  $\Delta t$ . The present approach is conceptually similar to the mean field theory in which the  $n$ -body system is replaced by a one-body system with a chosen good external field that replaces the interaction of all the particles with an arbitrary particle [42].

Following this approach, the increase of the radius of a collector droplet can be calculated using the continuous growth equation as (e.g. [43])

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{3R^2} \int_0^R r^3 K(R, r) n(r) dr, \quad (20)$$

where  $K(R, r)$  is the collection kernel and  $n(r)$  the number density of droplets. In the present model we assume that the droplet distribution is uniform within a grid box and thus neglect the effect of the distance between droplets, as in the spectral bin model. Accordingly, the radius of a collector droplet after one time step by collision/coalescence  $R^*$  is calculated in the model by

$$R^* = R + \frac{\Delta t}{3R^2 \Delta V} \sum_{n=1}^{N_R} A_n K(R, r_n) r_n^3, \quad (21)$$

where  $N_R$  is the total number of super-droplets with  $r_n < R$  within a grid box. In the present model, the generation of the variance of the droplet size within a super-droplet after collision/coalescence is ignored.

According to the stochastic collection model (e.g. [43]), the total number of coalescence to this particular droplet with  $R$  per unit time experienced by droplets with  $r$  ( $r < R$ ) is proportional to (e.g. [43])

$$K(R, r) n(r). \quad (22)$$

Therefore we assume that the decrease of the weighting factor of each collected super-droplet with  $r_n < R$  is given by

$$A_n^* = A_n[1 - \alpha K(R, r_n)] \quad (23)$$

with a constant  $\alpha$  which results from the requirement of mass conservation.

The conservation of LWC during the collision/coalescence process requires

$$A_R R^{*3} + \sum_{n=1}^{N_R} A_n^* r_n^3 = A_R R^3 + \sum_{n=1}^{N_R} A_n r_n^3. \quad (24)$$

This leads to the evaluation of  $\alpha$  at the collision/coalescence of a collector droplet with the size  $R$  as

$$\alpha = \frac{A_R(R^{*3} - R^3)}{\sum_{n=1}^{N_R} A_n K(R, r_n) r_n^3}. \quad (25)$$

This collision/coalescence process is repeated for all super-droplets, except the smallest one, starting from the largest one during one time step. For example, after the super-droplets are sorted according to their size as  $\{(r_1, A_1), \dots, (r_{N_p}, A_{N_p})\}$ , the changes in the radius of the largest super-droplet  $r_{N_p}$  and  $A_n$  ( $n = 1, \dots, N_p - 1$ ) are calculated by (21), (23) and (25) first. The resulting values of  $A_n$  ( $n = 1, \dots, N_p - 1$ ) are then used to calculate the changes of  $r_{N_p-1}$  and  $A_n$  ( $n = 1, \dots, N_p - 2$ ). The process is repeated until  $A_n$  ( $n = 1, 2$ ) is used to calculate  $r_2$  and  $A_1$ . As a result, for each super-droplet, except the smallest one, the increase of the radius by (21) is calculated only once during one time step. On the other hand the decrease of the weighting factor by (23) and (25) is repeated as many times as the number of super-droplets larger than itself. In this way the growth of the droplet radius by collision according to (21) and the decrease of the total number of droplets by coalescence to other droplets according to (23) are satisfied simultaneously for a given super-droplet, while LWC is conserved. The numerical technique for droplet sorting is described in the [appendix](#).

### 2.3. Collection kernel

In this work, two different collection kernels are applied: the traditional Hall kernel, which considers only gravitational collision, and the AW kernel, which includes the effects of turbulence on droplet collision parameterized based on the analysis of DNS results.

The Hall kernel is expressed in the following form (e.g. [43]):

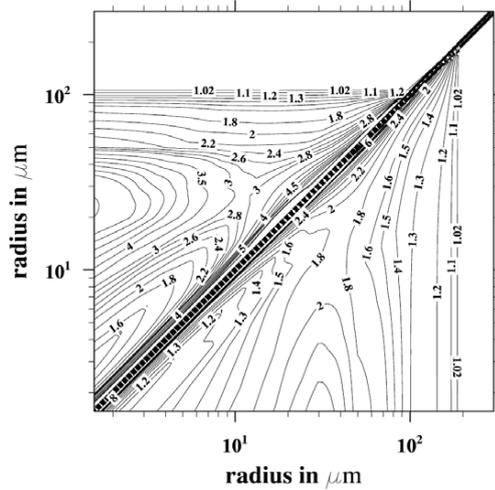
$$K(R, r) = \pi(R+r)^2 \cdot |\vec{V}_t(R) - \vec{V}_t(r)| \cdot E^g, \quad (26)$$

where  $\vec{V}_t$  is the terminal velocity of a droplet, and  $E^g$  is the collision efficiency. The coalescence efficiency is assumed to be unity. The terminal velocities used in (26) are calculated by semi-empirical formulae of Beard [44].

The AW kernel incorporates the effects of turbulence by extending the Hall kernel as

$$K(R, r) = \pi(R+r)^2 \cdot 2\langle |\vec{W}_{Rr}| \rangle \cdot g_{Rr} \cdot \eta_E E^g, \quad (27)$$

where  $\langle |\vec{W}_{Rr}| \rangle$  is the average radial relative velocity between two droplets with radius  $R$  and  $r$ ,  $g_{Rr}$  is the radial distribution function and  $\eta_E$  is the turbulent enhancement factor for the collision efficiency  $E^g$ . It includes three turbulence effects:  $\langle |\vec{W}_{Rr}| \rangle$  describes how the relative velocity between two colliding droplets is modified in a turbulent flow field,  $g_{Rr}$  represents the effect of



**Figure 1.** The ratio of the turbulent collection kernel (AW kernel) to the Hall kernel for the flow dissipation rates of 400 and 100  $\text{cm}^2 \text{s}^{-3}$  in the upper-left and lower-right parts of the figure, respectively. The ratio on the diagonal is undefined due to the zero value of the Hall kernel. The flow rms velocity is assumed to be 202  $\text{cm s}^{-1}$  in both cases. (Reproduced from Grabowski and Wang [47] with permission).

preferential concentration on the droplet distribution due to the turbulent flow and  $\eta_E$  describes how turbulence affects the flow field around droplets and thus influences the collision efficiency.

For  $\langle |\vec{W}_{Rr}| \rangle$  and  $g_{Rr}$ , Ayala *et al* [17] developed a parameterization based on theoretical formulations and compared it with DNS results. These parameterizations are provided as functions of the dissipation rate  $\varepsilon$  and the Taylor-microscale Reynolds number  $Re_\lambda$  ( $= u'\lambda/\nu = u'^2\sqrt{15}/(\varepsilon\nu)$ ;  $u'$  is the flow rms fluctuation velocity and calculated from  $\varepsilon$  in the AW kernel). The enhancement factor  $\eta_E$  is obtained in terms of  $\varepsilon$  by analyzing the hybrid DNS results of Wang and Grabowski (see table 1 in [21]). The information on  $\varepsilon$  and  $Re_\lambda$  is provided by LES of the flow field at each grid box in the present model.

Note that, in the absence of turbulence effects,  $\langle |\vec{W}_{Rr}| \rangle = |\vec{V}_t(R) - \vec{V}_t(r)|/2$  and  $g_{Rr} = \eta_E = 1$ , and the AW kernel is reduced to the Hall kernel. It should also be mentioned that the AW kernel has been developed and validated using (hybrid) DNS at relatively low values of  $Re_\lambda$ , and its validity needs to be confirmed for higher values of  $Re_\lambda$ , corresponding to observed clouds (e.g. [45]).

Figure 1 shows the ratio of the AW kernel to the Hall kernel for  $\varepsilon = 1 \times 10^{-2}$  and  $4 \times 10^{-2} \text{ m}^2 \text{ s}^{-3}$ . A noticeable enhancement occurs for droplets less than 100  $\mu\text{m}$ , and the overall enhancement is moderate with a value ranging from 1.0 to 5.0. Here the effect of preferential concentration  $g_{Rr}$  has the largest influence, followed by the turbulence enhancement on the collision efficiency  $\eta_E$  and the radial relative velocity  $\langle |\vec{W}_{Rr}| \rangle$  [46].

#### 2.4. Particle–turbulence interaction

It is important to remark that the particle–turbulence interaction associated with the fine-scale turbulence structure (or the SGS turbulence), such as the droplet acceleration associated with

the intermittency of turbulence, preferential concentration and supersaturation fluctuation (see, e.g., [4]), is not treated explicitly in the present LES model, and its effect is supposed to be included only through the SGS parameterization, such as the collection kernel. Only the effect of preferential concentration is parameterized in the collection kernel so far in the present model.

Based on the assumption of uniform droplet distribution within a grid box, only the droplet size distribution within a grid box, not the detailed information on droplet location within a grid, is relevant for determining the droplet growth from both condensation and collision, in the present model, as in the spectral bin model. The flow field generated by LES mainly contributes to the transport of droplets, and the motion of droplets affects the fluid motion only thermodynamically; that is, modifications of the grid-averaged values  $\theta$ ,  $q$  and  $q_1$  by condensation/evaporation, represented by  $\Phi$  in (3) and (4), lead to the change of  $\theta_v$  in (1). Here  $\Phi$  is calculated by the change of total volume of droplets from condensation/evaporation in a grid box in the particle model (19). This implies that both the evolution of droplet spectra and the particle–fluid coupling are not sensitive to the exact location of droplets within the grid in the present model.

Therefore, the SGS velocity fluctuation of droplets (e.g. [48, 49]) and the higher-order interpolation schemes for the velocity field (e.g. [50, 51]) are not likely to play a significant role in the present model, unlike the case of DNS simulating fine-scale particle–turbulence interaction.

### 3. Simulations of an idealized single cloud

In the first step, the simulation of an idealized single cloud in the form of a rising warm air bubble is used to examine the new LCM scheme. The bulk model is also carried out for comparison and hereafter called BULK. Furthermore the LCM is simulated with two different collection kernels, the Hall kernel and the AW kernel, with the aim to investigate the effects of turbulence on the droplet growth. These two simulations are called LCM HALL and LCM AW, respectively.

#### 3.1. Simulation setup

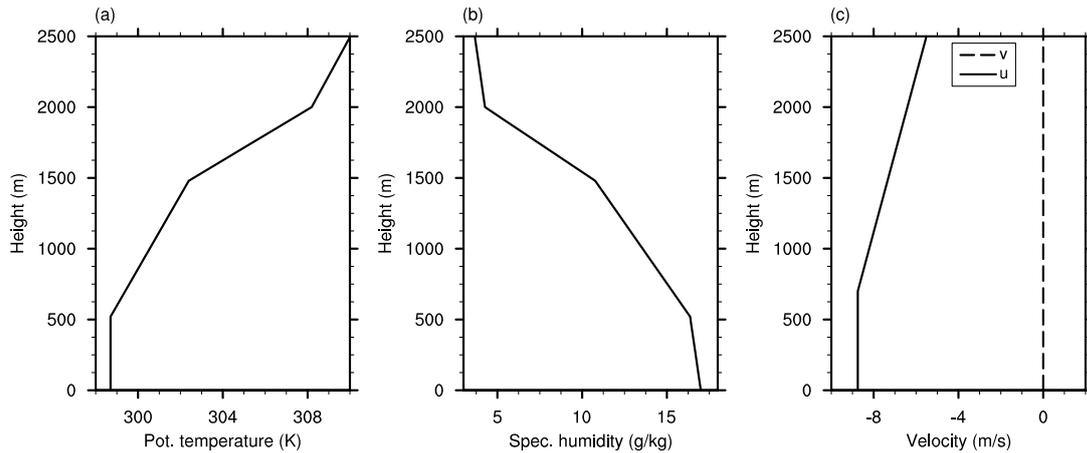
A 2D rising warm air bubble is triggered by an initial potential temperature difference  $\theta^*$  given by

$$\theta^*(y, z) = \theta_0 \cdot \exp \left[ -0.5 \left( \left( \frac{y - y_c}{a_y} \right)^2 + \left( \frac{z - z_c}{a_z} \right)^2 \right) \right], \quad (28)$$

where  $y_c = 1920$  m and  $z_c = 170$  m mark the center of the bubble,  $a_y = 200$  m and  $a_z = 150$  m the radius of the bubble and  $\theta_0 = 0.2$  K the maximum temperature difference. It is homogeneous in the  $x$ -direction. The model domain is  $1280$  m  $\times$   $3840$  m  $\times$   $3840$  m along the  $x$ ,  $y$  and  $z$  directions with a grid spacing of 20 m in all directions. The boundary conditions are related to those of the BOMEX case, e.g. the initial profiles of potential temperature and specific humidity, as shown in figures 2(a) and (b), were derived by linear approximation of the BOMEX observations [22]. These are the same profiles as those used in the LES intercomparison experiment [52]. Note that there is no background wind for this idealized case. The BOMEX case will be discussed further in section 4. The LCM simulations use a constant time step of 0.1 s, while the BULK simulation uses a variable time step with an average value of around

**Table 1.** Summary of the main simulation parameters for the idealized case.

	Number of grid points	Domain size $L_x \times L_y \times L_z$ (m)	Grid spacing (m)	Time step (s)	Weighting factor	Cloud micro-physics scheme
BULK	$64 \times 192 \times 192$	$1280 \times 3840 \times 3840$	20	$\approx 3$	–	Bulk
LCM HALL	$64 \times 192 \times 192$	$1280 \times 3840 \times 3840$	20	0.1	$9 \times 10^9$	LCM, Hall kernel
LCM AW	$64 \times 192 \times 192$	$1280 \times 3840 \times 3840$	20	0.1	$9 \times 10^9$	LCM, AW kernel

**Figure 2.** Initial profiles of (a) potential temperature, (b) specific humidity and (c) the horizontal wind components  $u$  and  $v$ , from [52]. For the simulation of an idealized single cloud the horizontal wind is set to zero.

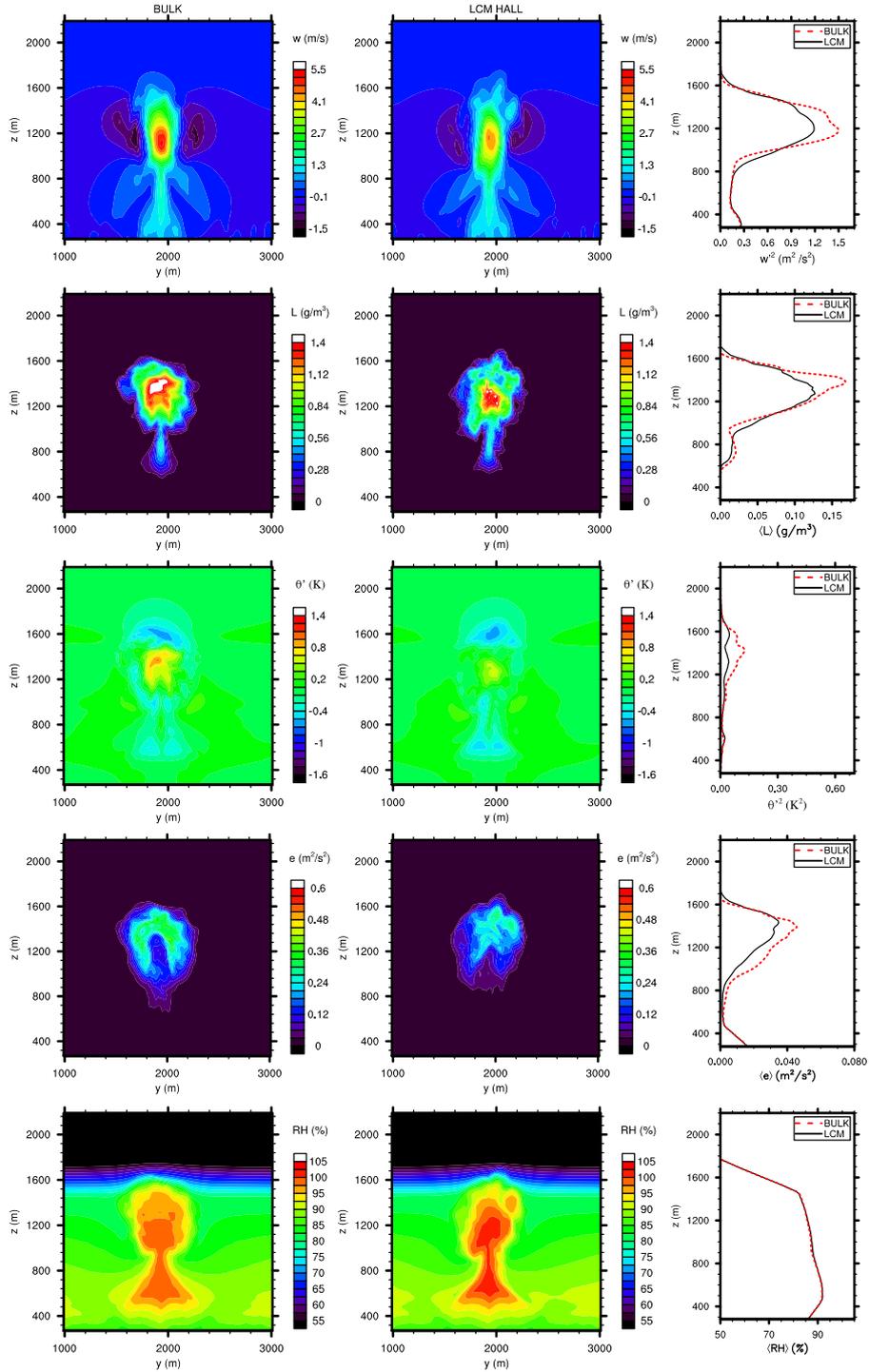
3 s. The very small time step is required in the LCM simulation for the accurate calculation of condensation given by (18). Note that the typical length and time scales of large eddies in moderate cumulus convection are estimated as  $10^2$  m and  $10^2$  s [4].

The super-droplets are released at the beginning of the simulation and uniformly distributed all over the model domain, up to a height of  $2800 \text{ m}^4$ . The average distance of the super-droplets is initially 4.5 m, yielding a total number of roughly  $1.5 \times 10^8$  and about 87 super-droplets per grid box. Using a weighting factor of  $9 \times 10^9$  a droplet concentration of approximately  $100 \text{ cm}^{-3}$  is represented. All initial droplets have the same radius  $r = 1 \mu\text{m}$ . For an overview of the main simulation parameters see table 1. The simulated time for all simulations is 30 min, during which the cloud reaches the inversion layer and fully develops.

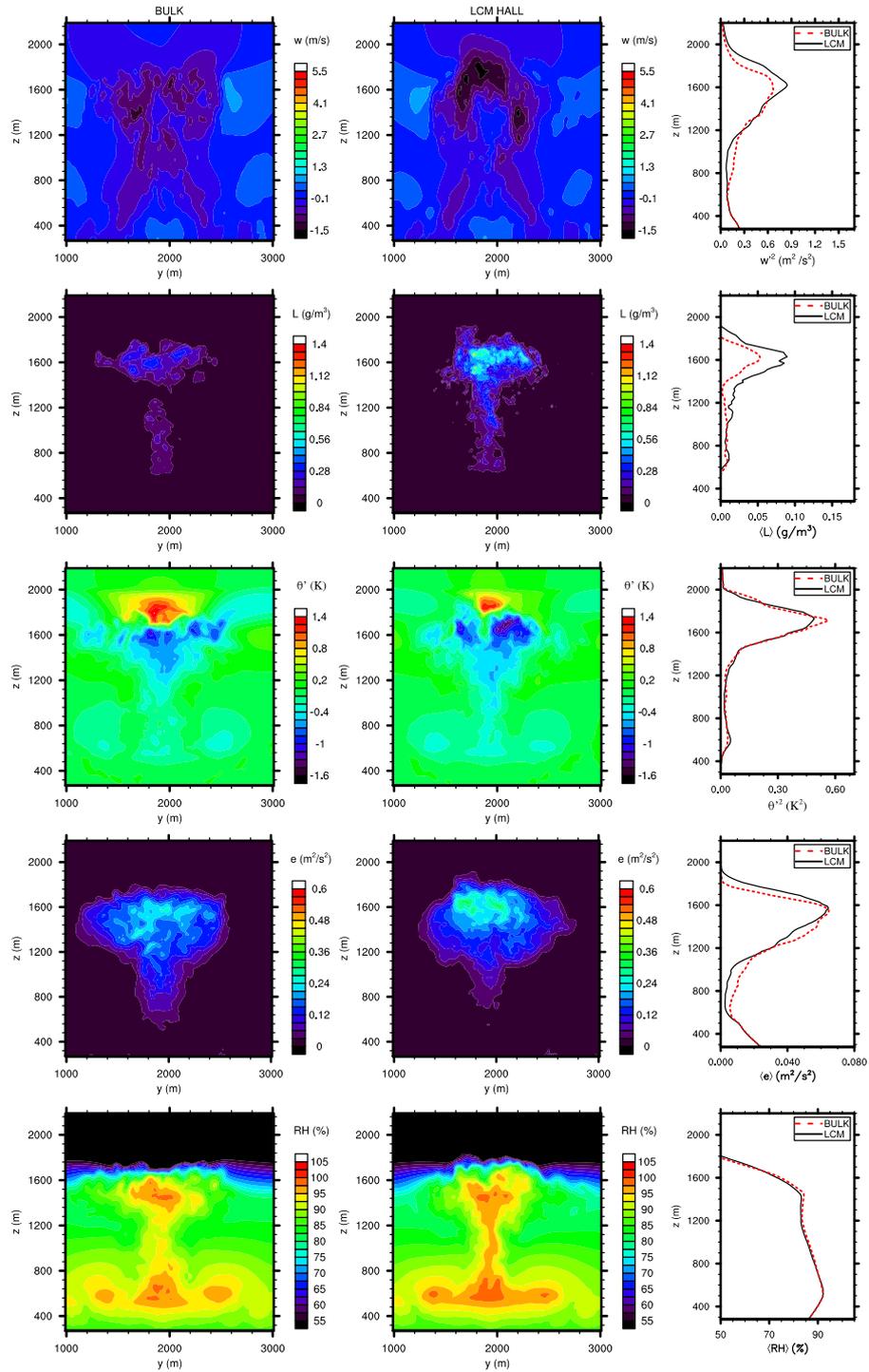
### 3.2. Cloud evolution

Figures 3 and 4 show the vertical cross sections of the vertical velocity of the flow  $w$ , the LWC  $L$ , the potential temperature deviation  $\theta' = \theta - \langle \theta \rangle$  (where  $\langle \theta \rangle$  is the horizontally averaged value), the SGS-TKE  $e$  and the relative humidity (RH), averaged along the  $x$  direction at  $t = 1200$  and  $1600$  s for both, BULK and LCM HALL. The vertical profiles of the horizontal

<sup>4</sup> Due to the initial potential temperature profile with strong inversions, the developing cloud does not exceed a height of about 2000 m. Following that, droplets located clearly above that height are of no use and can be omitted to save computational resources.



**Figure 3.**  $y$ - $z$  cross sections and vertical profiles of vertical velocity  $w$ , LWC  $L$ , potential temperature deviation  $\theta'$ , SGS-TKE  $e$  and relative humidity (RH) at  $t = 1200$  s (left: BULK; middle: LCM; right: vertical profiles). The profiles show the horizontal average and the cross sections show the average over the  $x$  direction. For the vertical profiles,  $w^2$  and  $\theta'^2$  are plotted instead of  $w$  and  $\theta'$ .



**Figure 4.**  $y$ - $z$  cross sections and vertical profiles of vertical velocity  $w$ , LWC  $L$ , potential temperature deviation  $\theta'$ , SGS-TKE  $e$  and the RH at  $t = 1600$  s (left: BULK; middle: LCM; right: vertical profiles). The profiles show the horizontal average and the cross sections show the average over the  $x$  direction. For the vertical profiles,  $w^2$  and  $\theta'^2$  are plotted instead of  $w$  and  $\theta'$ .

averages are compared with it too. For the vertical profiles,  $w'^2$  and  $\theta'^2$  are plotted instead of  $w$  and  $\theta'$ . Here the cloud reaches the maximum rising velocity at  $t \approx 1200$  s before impinging on the inversion layer at  $z = 1500$  m.

Both models reproduce the typical pattern of an idealized single convective cloud (e.g. [11, 12, 14, 53–55]). At  $t = 1200$  s the cross section of the vertical velocity shows the dipole pattern associated with a rising air bubble. The maximum values of  $\theta'$  and  $L$  appear at the center of the cloud, since the entrainment and mixing of environmental dry air decrease the values near the boundaries. The negative  $\theta'$  near the top of the cloud is due to evaporation of droplets through the mixing of the cloudy air with the entrained dry air. The maximum value of  $e$  appears near the top of the cloud, across which strong entrainment occurs, and the maximum value of RH appears in the lower part of the cloud, which is affected by the vertical advection of humid air with lower  $\theta'$  from below. The cloud spreads horizontally after impinging on the inversion layer at  $t = 1600$  s. The upward motion comes to an end, and the lower portion of the cloud is occupied by negative values of  $\theta'$  because of intensive evaporation. The results indicate that the LCM reproduces the evolution of the idealized cloud consistent with the bulk model.

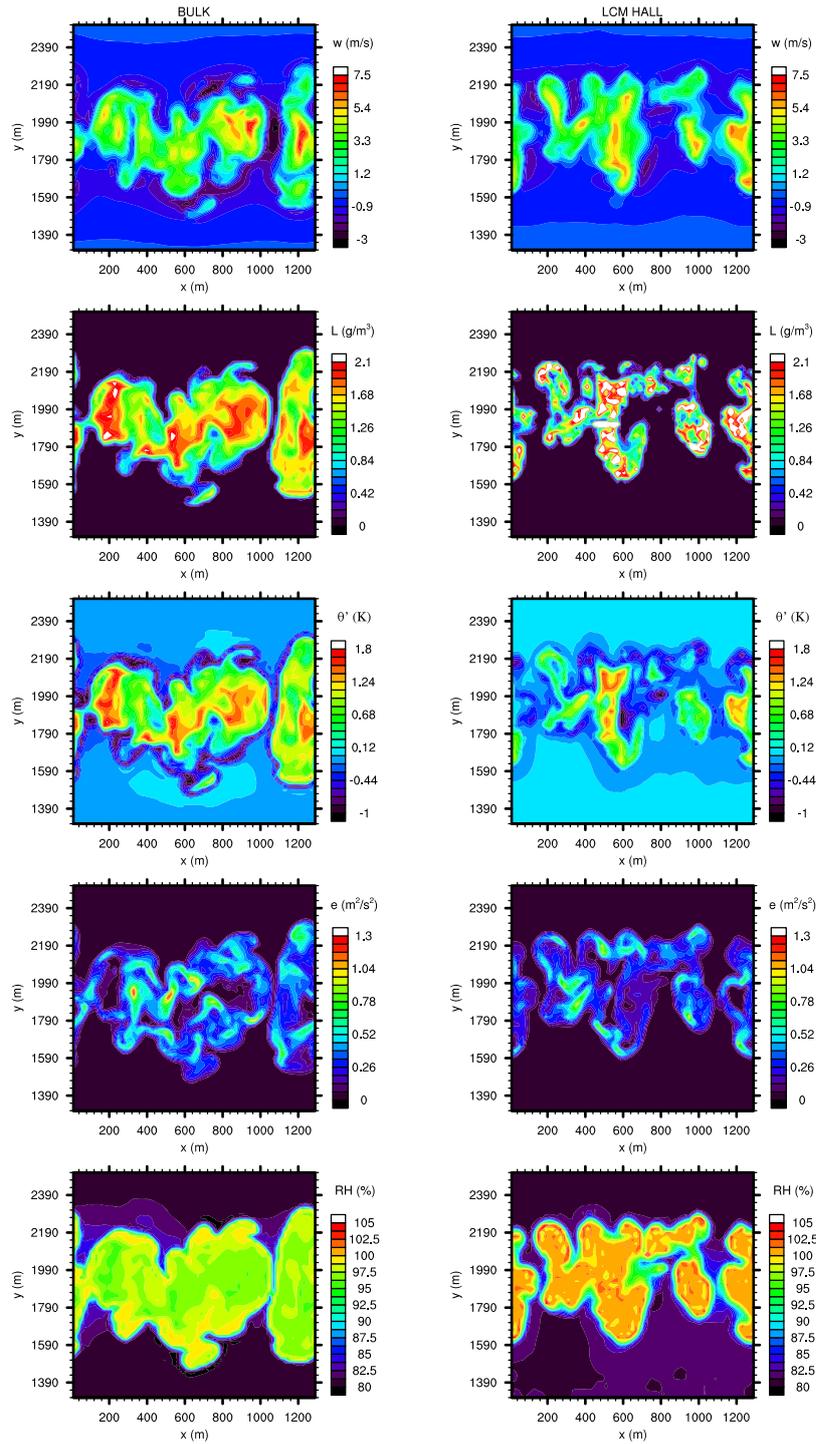
Nevertheless, some differences in cloud evolution appear between the two models owing to the difference in cloud microphysics schemes. Unlike LCM, BULK cannot get RH larger than 100% due to the all-or-nothing condensation scheme in which the difference between the total water content and the saturation value is instantly converted into  $q_1$ . Therefore at  $t = 1200$  s the BULK simulation shows larger values of  $L$ , thus inducing larger  $\theta'$  due to the release of latent heat and consequently larger  $w$  and  $e$ . On the other hand, at  $t = 1600$  s,  $L$  in BULK becomes smaller than in that LCM, because droplet growth by collision at a later stage makes the evaporation in LCM smaller than that in BULK. A similar contrast is also found in the comparison of cumulus cloud models with the one-moment bulk model and spectral bin models [14, 53].

The distributions of corresponding variables in the horizontal cross section at  $z = 1400$  m and  $t = 1200$  s, shown in figure 5, reveal the turbulent nature of cumulus convection. The length scale of fluctuations is comparable to the cloud itself. The location of the maximum  $w$ ,  $L$ ,  $\theta'$  and RH, which appear in the most interior region of the cloud, also fluctuates accordingly. However, the values of SGS-TKE are lower in this most interior region. Meanwhile, the fluctuation of LWC in LCM is stronger in magnitude and smaller in the horizontal scale than the fluctuation of LWC in BULK.

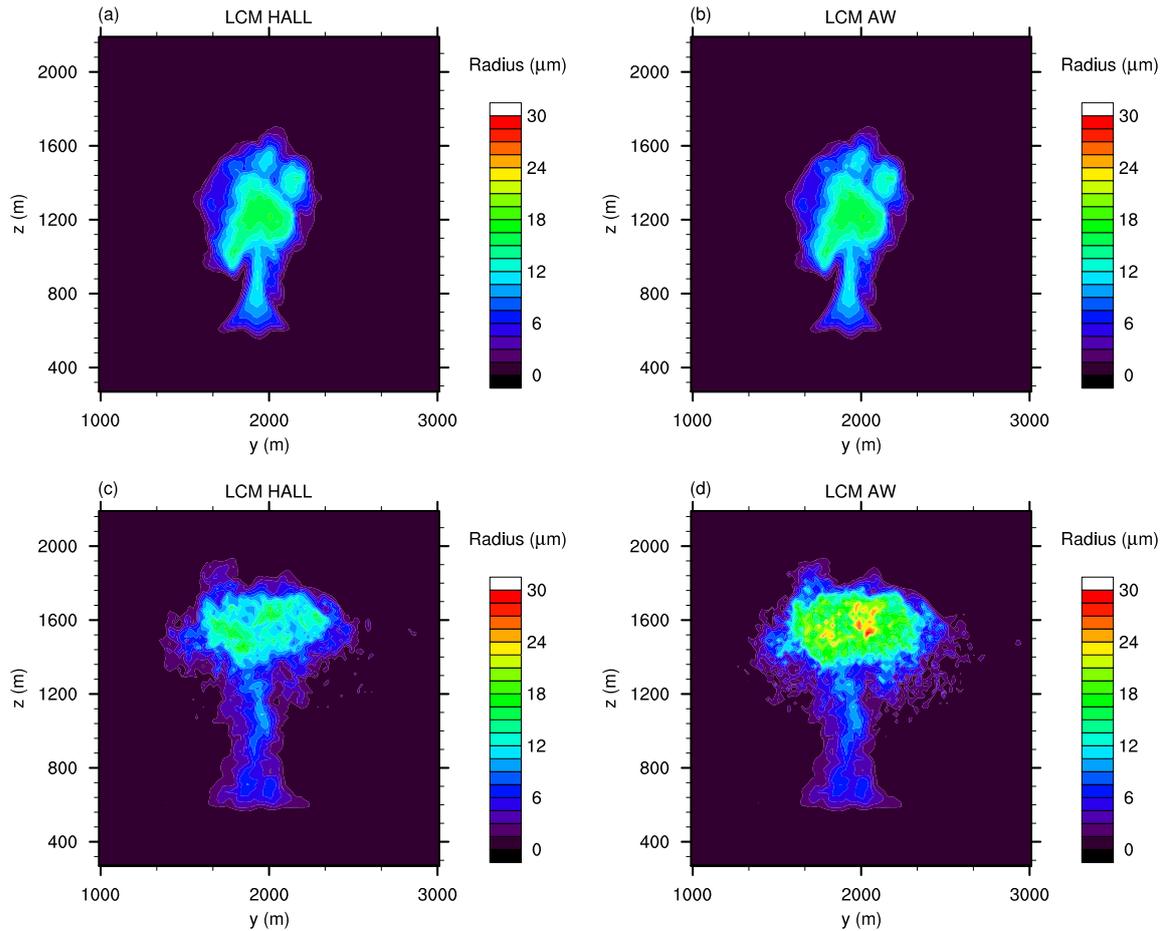
The LCM with the AW kernel produces almost the same results as the results for LCM HALL shown in figures 3 and 4, implying that the effect of microphysics on the dynamical process of shallow convection is insignificant in this case.

### 3.3. Effects of turbulence on microphysics

Figure 6 shows the distribution of the mean radius of the droplets at each grid point. The maximum values, which appear in the center of the cloud, are more than two times larger in the AW kernel panel (d) than in the Hall kernel panel (c) at  $t = 1600$  s, although no noticeable difference is observed at  $t = 1200$  s panels (a) and (b). One can also notice that in both cases the mean radius in the center of this idealized cloud is several times larger than that near the edge of the cloud, which can be understood from the higher level of supersaturation and dissipation rate at the center, as can be expected from figures 3 and 4.



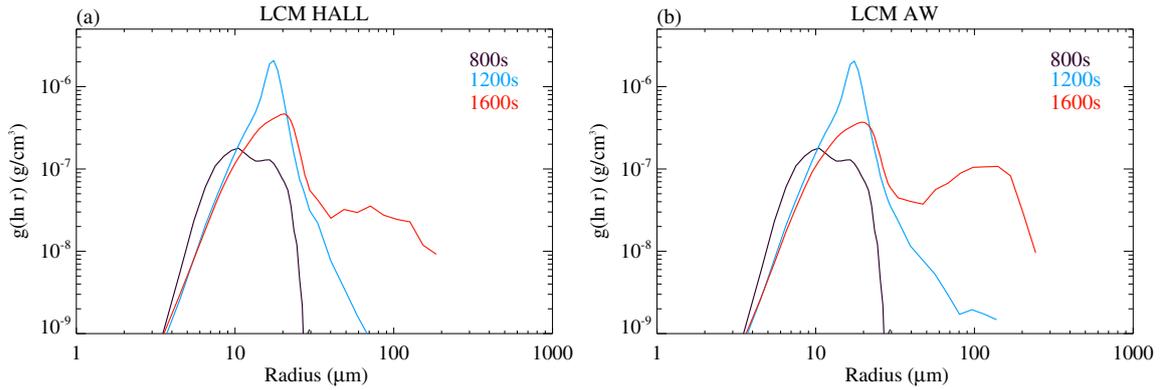
**Figure 5.** The  $x$ - $y$  cross sections of vertical velocity  $w$ , LWC  $L$ , potential temperature deviation  $\theta'$ , SGS-TKE  $e$  and the RH at  $z = 1400$  m and  $t = 1200$  s (left: bulk model; right: LCM).



**Figure 6.** The  $y$ - $z$  cross section of the droplet radius, averaged over the  $x$  direction (left: Hall kernel; right: AW kernel): (a, b) at  $t = 1200$  s; (c, d) at  $t = 1600$  s.

The difference in droplet growth is more clearly identified in the mass density distribution  $g(\ln r)$ , shown in figure 7. Here  $g(\ln r)$  is obtained using the mass of the super-droplets inside the cloud, multiplied by the respective weighting factor. The cloud is defined as the region where  $L > 1 \times 10^{-2} \text{ g m}^{-3}$ . Both distributions show almost identical shapes at  $t = 800$  s, but a difference starts appearing for larger radius in the spectrum at  $t = 1200$  s. From  $t = 800$  to  $1200$  s the radius with the maximum  $g(\ln r)$  increases to  $20 \mu\text{m}$ , while the spectral band becomes narrower, suggesting the dominance of the condensational process. From  $t = 1200$  to  $1600$  s, however, the spectral transfer of droplets occurs from  $r \approx 20 \mu\text{m}$  to  $r > 50 \mu\text{m}$ , and leads to the bimodal distribution, which characterizes the typical collision/coalescence process (e.g. [56]). This transition to the bimodal distribution is clearly identified in the case of the AW kernel with the second peak near  $100 \mu\text{m}$ .

Using a spectral bin model, Xue *et al* [57] showed that the AW kernel enhances the droplet growth significantly in comparison with the Hall kernel, especially in the region between  $20$  and  $100 \mu\text{m}$ , and thus shortens the rain initiation time by  $20$ – $40\%$ . For example, when



**Figure 7.** Evolution of the mass density distribution within the cloud with (a) the Hall kernel and (b) AW kernel.

$\varepsilon = 300 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$  and  $u' = 202 \text{ cm s}^{-1}$ , the percentage of mass for droplets larger than  $100 \mu\text{m}$  at  $t = 1800 \text{ s}$  is 76 and 0.32%, respectively, for the AW and Hall kernels. Although a direct comparison is difficult because of different conditions, the present result, shown in figure 7, appears to be consistent with these results. Using parameterizations of the autoconversion and accretion processes based on the AW kernel for a bulk microphysical model, Seifert *et al* [46] also showed that rain formation is significantly enhanced when including the turbulence effects on collisions in LES of trade wind cumuli.

### 3.4. Sensitivity to model parameters

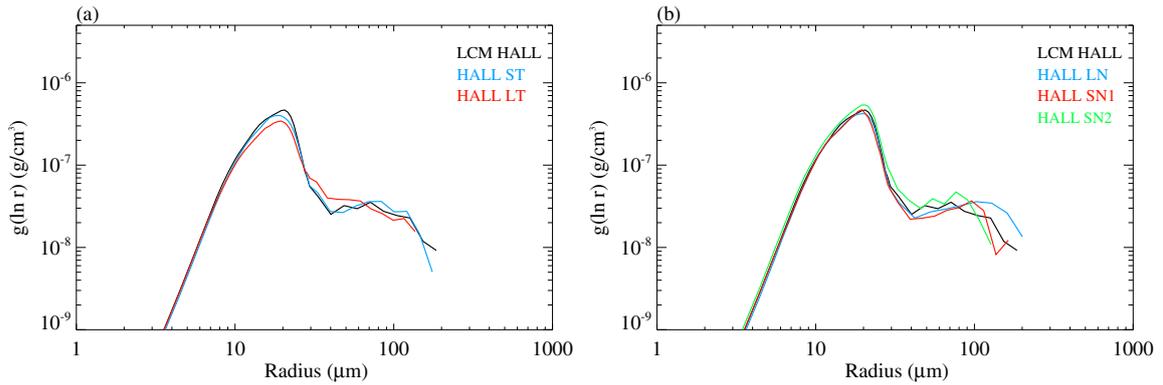
In order to verify the validity of the new model it is important to examine the sensitivity of the model solution to the numerical parameters of the model. The parameters that are most likely to affect the model results are the time step size and the number of super-droplets. It is important to find optimum values, which produce accurate results with minimum computational demands (e.g. computing time and memory space), considering the high computational demand of the present model. More accurate model results are expected with a smaller time step and a larger number of super-droplets. Meanwhile, the computational demands increase drastically with decreasing time step size and increasing the number of super-droplets.

The time step size is expected to influence the condensation/evaporation process by affecting the level of supersaturation. On the other hand, the number of super-droplets is important in the calculation of the collision/coalescence process, because the number of super-droplets per grid box has to be large enough to properly represent the droplet distribution for the collision/coalescence process. For the sensitivity tests we repeated LCM HALL with different time step sizes and super-droplet numbers, as shown in table 2. The weighting factor is modified according to the change in the number of super-droplets in order to keep the number of real droplets invariant. The number of super-droplets within a grid box is changed accordingly; for example, from  $\approx 186$  super-droplets for the largest super-droplet number (HALL LN) to  $\approx 26$  droplets for the smallest one (HALL SN2) (see table 2).

Figure 8(a) compares the mass density distributions after 1600 s with different time steps. The results for LCM HALL and the mass density distribution with the shorter time step (HALL

**Table 2.** Summary of simulation parameters for sensitivity studies.

	Time step (s)	Weighting factor	The number of super-droplets per grid box	Total number of super-droplets
LCM HALL	0.1	$9 \times 10^9$	$\approx 87$	$\approx 1.5 \times 10^8$
HALL ST	0.05	$9 \times 10^9$	$\approx 87$	$\approx 1.5 \times 10^8$
HALL LT	1.0	$9 \times 10^9$	$\approx 87$	$\approx 1.5 \times 10^8$
HALL LN	0.1	$\approx 4 \times 10^9$	$\approx 186$	$\approx 3.2 \times 10^8$
HALL SN1	0.1	$\approx 1 \times 10^{10}$	$\approx 77$	$\approx 1.3 \times 10^8$
HALL SN2	0.1	$\approx 3 \times 10^{10}$	$\approx 26$	$\approx 4.5 \times 10^7$

**Figure 8.** Mass density distribution of simulations: (a) LCM HALL, HALL ST and HALL LT and (b) LCM HALL, HALL LN, HALL SN1 and HALL SN2 after  $t = 1600$  s.

ST) are very close, although the first peak near  $20 \mu\text{m}$  is slightly smaller in HALL ST. Small differences for larger droplets ( $> 30 \mu\text{m}$ ) imply that the effect on the collision/coalescence process is only small. On the other hand, the mass density distribution with the longer time step (HALL LT) shows not only a decrease of the first peak near  $20 \mu\text{m}$ , but also a significant modification for larger droplets, indicating that large time steps affect the droplet growth due to collision/coalescence as well.

The mass density distributions after 1600 s in figure 8(b) show that the results with different numbers of super-droplets are quite similar, except for the case with the smallest number of super-droplets (HALL SN2). In particular, the largest droplet radii in HALL SN2 are much smaller than those in the other simulations. This suggests that an initial number of 26 super-droplets per grid box is too small to provide a sufficient droplet statistic.

Overall, the sensitivity studies show that a time step of 0.1 s and an initial number of  $\approx 80$  super-droplets per grid box are approximately the limiting values for robust model results. The information on the optimum values of these parameters is important, because the computational demands increase drastically with a decrease in time step size and an increase in the number of super-droplets in terms of computing time and memory requirement.

#### 4. Simulations of the shallow cumulus case BOMEX

To further validate the presented LCM scheme, we carry out a simulation for the shallow cumulus case BOMEX [22]. It is a trade wind cumulus case whose behavior is remarkably steady, and for which there were no apparent complications from precipitation or mesoscale advection. Furthermore, the BOMEX observation was used for an intercomparison of LES (Siebesma *et al* [52]), so the simulation of this case allows us to examine whether the new model produces results that are consistent with those from existing models. All LES models participating in the intercomparison study used a simple one-moment bulk model similar to our bulk model [52].

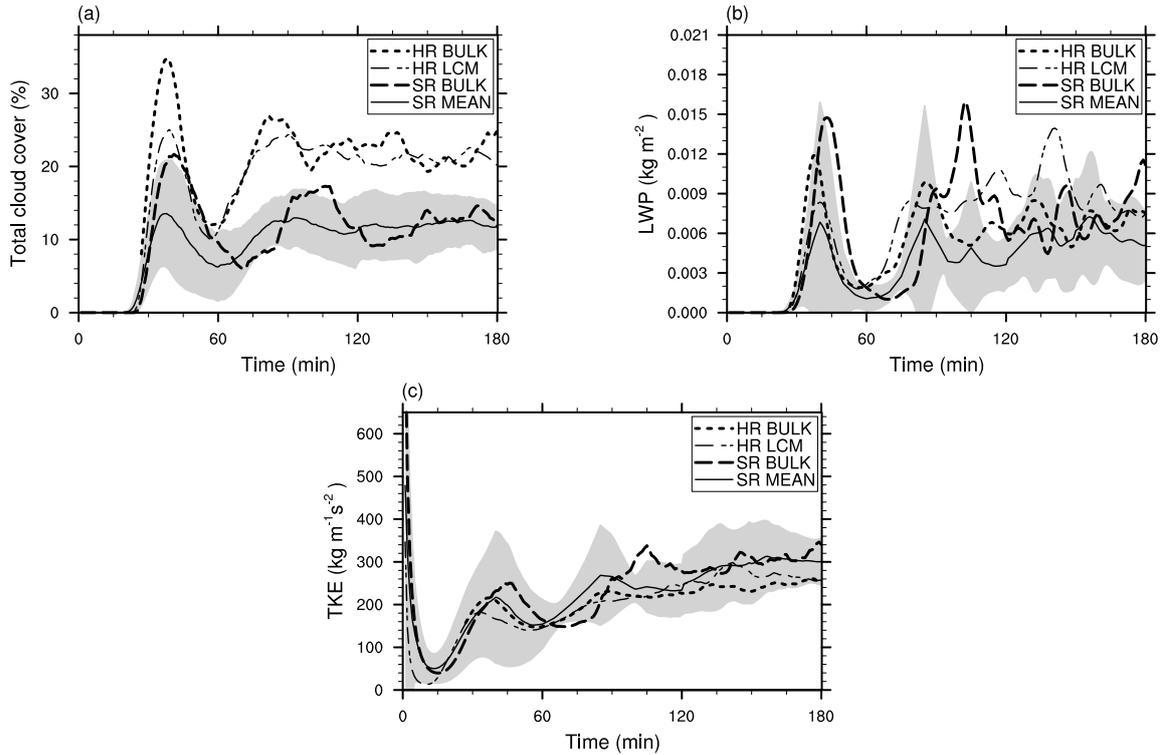
##### 4.1. Simulation setup

The initial and boundary conditions of all our BOMEX simulations closely follow those used by the LES intercomparison study (Siebesma *et al* [52]), which simulated the BOMEX observations (see [22]). The initial profiles of the potential temperature, the specific humidity and the horizontal velocity components have already been presented in figure 2. Furthermore, an initial profile for the TKE is prescribed as  $1 - z/3000 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$ . The surface boundary conditions include a constant surface sensible heat flux of  $8 \times 10^{-3} \text{ K m s}^{-1}$ , a constant surface latent heat flux of  $5.2 \times 10^{-5} \text{ ms}^{-1}$  and a total momentum flux determined by  $u^* = 0.28 \text{ ms}^{-1}$ . Large-scale forcing terms such as subsidence, radiative cooling and low-level drying are also prescribed following Siebesma *et al* [52]. To trigger convection, small random perturbations of the potential temperature and specific humidity fields are initially added to the lowest 1600 m. All simulations use a model domain of  $6400 \text{ m} \times 6400 \text{ m} \times 3000 \text{ m}$ . Siebesma *et al* [58] used a grid spacing of 100 m in the horizontal and 40 m in the vertical direction. However, a much higher resolution with a grid size as small as 20 m is inevitable in the LCM in order to perform the collision/coalescence process properly under the assumption of homogeneity of droplet distribution within a grid box. On the other hand, it is known that some quantities from the LES of trade wind cumuli are sensitive to the grid resolution, especially the size of the clouds, the cloud cover and the average LWC [59, 60]. Therefore, we perform the simulations of LCM and BULK with a grid spacing of 20 m, hereafter referred to as HR LCM and HR BULK, and perform an additional BULK with standard resolution equivalent to that used in the intercomparison [52], hereafter referred to as SR BULK, that is, 100 m in the horizontal and 40 m in the vertical direction. Matheou *et al* [60] suggested that grid convergence is achieved for a grid spacing of 20 m for the case of nonprecipitating shallow cumulus convection. Only the Hall kernel is used as a collection kernel in the LCM in this case. The average time step is about 4 s for the SR BULK simulation and about 1.6 s for the HR BULK simulation. The HR LCM case uses a fixed time step of 0.1 s. An overview of the main simulation parameters is given in table 3.

The settings of the super-droplets are close to those used for the idealized case in section 3.1: all super-droplets are released at the beginning of the simulation, they are uniformly distributed all over the model domain up to a height of 2800 m and have the same initial radius of  $r = 1 \mu\text{m}$ . For this case the initial super-droplet distance is 4 m. With a weighting factor of  $1 \times 10^{10}$  this results in a represented droplet concentration of approximately  $150 \text{ cm}^{-3}$  and a total number of super-droplets of roughly  $1.7 \times 10^9$  (about 125 per grid box).

**Table 3.** Summary of the main simulation parameters for the BOMEX case.

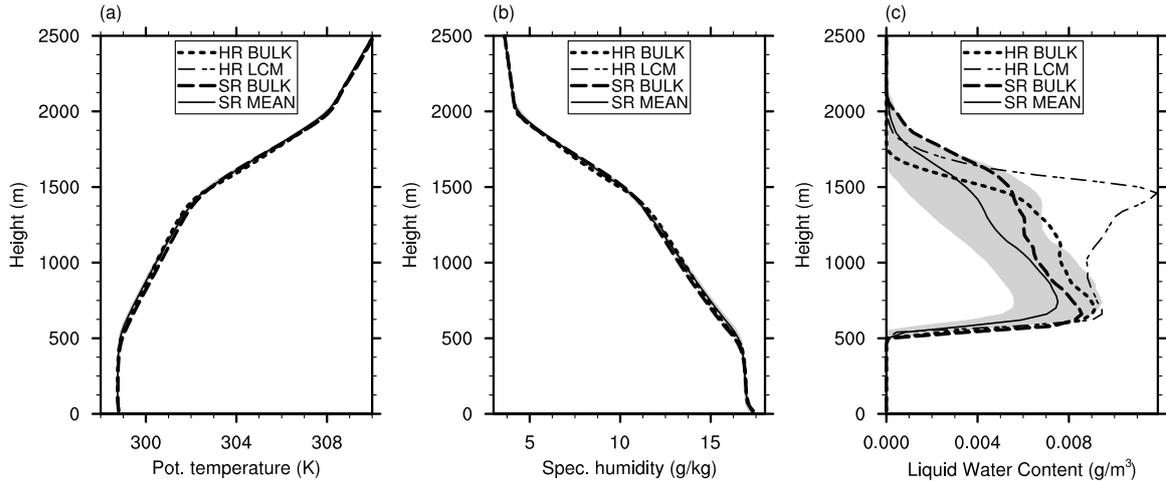
	Number of grid points	Domain size $L_x \times L_y \times L_z$ (m)	Horizontal grid spacing (m)	Vertical grid spacing (m)	Cloud micro-physics scheme
SR BULK	$64 \times 64 \times 75$	$6400 \times 6400 \times 3000$	100	40	Bulk
HR BULK	$320 \times 320 \times 160$	$6400 \times 6400 \times 3000$	20	20	Bulk
HR LCM	$320 \times 320 \times 160$	$6400 \times 6400 \times 3000$	20	20	LCM, Hall kernel



**Figure 9.** Time series of (a) total cloud cover, (b) the vertically integrated LWP and (c) the vertically integrated TKE. The black solid lines indicate the mean over all the model results of Siebesma *et al* [52]. The gray bands around this mean have a width that is twice the standard deviation of the model results of Siebesma *et al* [52].

#### 4.2. Comparison with the intercomparison results

Figure 9 shows the temporal evolution of the total cloud cover, the liquid water path (LWP) and the vertically integrated TKE for our simulations in comparison with the results of Siebesma *et al* [52]. The total cloud cover is defined by Siebesma *et al* [52] as the fraction of vertical columns that contain liquid water, and the same definition is applied to the cases of SR BULK and HR BULK. In the HR LCM simulation, however, a small amount of water exists in every grid box because of the initially uniform distribution of super-droplets. Thus, in this case, only model columns that contain at least one grid cell with  $L > 1 \times 10^{-2} \text{ g m}^{-3}$  are defined as cloudy



**Figure 10.** Mean profiles averaged over 1 h (hours 2–3) of (a) the potential temperature, (b) the specific humidity and (c) the LWC. The black solid lines indicate the mean over all model results of Siebesma *et al* [52]. The gray bands around this mean have a width that is twice the standard deviation of the model results of Siebesma *et al* [52].

columns. As reported by Siebesma *et al* [52], all models are in a spin-up phase during the first two hours of the simulation.

Good agreement is found between the present simulations and Siebesma *et al* [52] in the cases of LWP and TKE. The cloud cover is still in a good agreement with that in Siebesma *et al* [52], while the resolution is the same as that in Siebesma *et al* [52] (SR BULK). However, the cloud cover from the high-resolution models, HR LCM and HR BULK, is much higher than that in [52]. According to the recent sensitivity experiments of Matheou *et al* [60], the cloud cover increases substantially with increasing model resolution in LES of shallow convection. They performed LES of trade wind cumuli from the RICO (Rain in Cumulus over the Ocean, [61]) field experiment and observed an increase of the cloud cover with grid spacing from about 7% for  $\Delta x = 80$  m to about 25% for  $\Delta x = 20$  m. Even though these simulations are not directly comparable to ours, a total cloud cover of 20–25% in our high-resolution simulations is consistent with that found by Matheou *et al* [60] for a grid spacing of 20 m.

A selection of mean profiles averaged over 1 h (hours 2–3) is shown in figure 10. Siebesma *et al* [52] found excellent model-to-model agreement in the vertical profiles of potential temperature and specific humidity, but a rather large variation in LWC. They attributed this to the low cloud cover in the simulations, which yields a strong dependence of LWC on a relatively few saturated grid points. The vertical profiles of potential temperature and specific humidity from the present simulations also show good agreement with Siebesma *et al* [52], but LWC shows large variability.

Matheou *et al* [60] showed that the LWC in the upper parts of clouds increases with grid resolution, which is related to the increase of cloud cover. In agreement with this, the present high-resolution simulation results, HR BULK and HR LCM, also show the larger LWC in the upper parts of clouds. It is found in particular that the LWC from HR LCM is substantially larger in the upper part than other results. It should be mentioned that none of the models participating

in the intercomparison used a sophisticated microphysics scheme such as the spectral bin model and therefore the growth of the droplet size was not taken into account. As shown in the idealized single-cloud experiment (figures 2 and 3), the growth of the droplet size suppresses evaporation, and this may lead to higher LWC in the upper parts of clouds.

In conclusion, the present simulation results, including LCM, show good agreement with the previous intercomparison results of the LES of shallow convection [52]. The disagreement seen in the cloud cover and in the vertical profiles of LWC may be attributed to the insufficient resolution and the lack of microphysics scheme in the models participating in the intercomparison.

## 5. Conclusion

In this paper, we introduce a new LCM in which the flow field is calculated by LES and the droplets are treated as Lagrangian particles, and we show that the new model produces results that are consistent with those of existing cloud models. LCM simulations of an idealized single cloud and trade wind cumuli (the BOMEX case) reproduce general features of shallow cumulus clouds that are in agreement with traditional bulk models. The droplet spectrum simulated by the LCM, using the collection kernels with and without the effect of turbulence (the Hall kernel and the Ayala–Wang kernel), is also consistent with those predicted by the spectral bin model. The sensitivity tests of the LCM for two model parameters, the time step and the number of super-droplets, show that a maximum time step size of 0.1 s and a minimum number of about 80 initial super-droplets per grid box are necessary for the convergence of solutions.

In the new LCM, in order to handle the extremely large number of droplets within a cloud, the concept of a super-droplet, which represents a large number of real droplets of the same size, is introduced, and the number of contributing real droplets is called a weighting factor. A novel method is developed to realize the collision/coalescence of droplets, in which the consequent variation of the droplet spectrum is represented in terms of the modification of the radius and weighting factor of super-droplets while keeping the number of super-droplets invariant. Furthermore, we use a statistical approach to calculate the droplet growth by collision/coalescence given the background droplet spectrum and turbulence, in contrast to Andrejczuk *et al* [3] and Shima *et al* [16] who considered individual collision events between super-droplets.

This work illustrates that the new LCM can be a valid and promising approach for the simulation of clouds. Once it is developed successfully, the LCM, which is a more natural approach to simulate particle-laden turbulent flows such as clouds, has many advantages over traditional cloud models. In the LCM, the dynamics and microphysics of a cloud are directly related to the physical processes of individual droplets; for example, precipitation and condensation are naturally realized by individual droplets, and the evolution of the droplet spectrum is determined directly by the growth of individual droplets.

Meanwhile, for more realistic simulation of clouds, further improvement of the model in various aspects needs to be made in the future. The collision/coalescence scheme and the collection kernel should be verified definitely and further elaborated, possibly by using information from DNS with high Reynolds numbers. It is also necessary to include the activation process of CCN in the LCM. The efficiency of the numerical code must be improved to overcome the extremely large number of super-droplets. Finally, for a more rigorous verification of the model, the LCM results must be directly compared with observation data: especially for

observations including precipitation, in which the advantage of the Lagrangian model can be more clearly identified (e.g. the Rain in Cumulus over the Ocean (RICO) field study [61, 62]), or for observations with high-resolution turbulence measurements (e.g., ACTOS (Airborne Cloud Turbulence Observations System) [63]).

## Acknowledgments

We thank Professor Lian-Ping Wang (University of Delaware) for providing the turbulent collision kernel. All simulations have been carried out on IBM-Regatta and SGI-ICE systems of the North-German Supercomputing Alliance (HLRN) and the Supercomputing Center/Korea Institute of Science and Technology Information (KISTI; KSC-2010-C2-0002). This work was funded by grant no. Et/14-2 within the SPP 1276 MetStröm program of the German Research Foundation (DFG), by DFG grant 446 KOR-113/217/0-1 within the agreement about scientific cooperation between DFG and the Korean Science and Engineering Foundation (KOSEF) and by the National Research Foundation of Korea grant funded by the Korean Government (MEST; NRF-2009-C1AAA001-0093068).

## Appendix. Numerical techniques of the particle model

### A.1. Parallelization

Parallelization of the PALM code is achieved by 2D domain decomposition along both the horizontal directions  $x$  and  $y$ , while the communication is realized by the message passing interface (MPI; for details see [23]). The embedded particle model follows the domain-decomposition concept. Particles are handled by and stored in the memory of the processors assigned to those subdomains where the particles have been released. A particle is defined by a set of features (position, velocity components, diameter, weighting factor, etc). For a better handling, these features are not stored as separate variables but as the components of a derived data type variable. One element of this data type defines a complete particle and the whole set of particles is stored in a 1D array of this derived data type. Whenever a particle crosses a subdomain boundary, its data are transferred to the respective neighboring subdomain (processor) by using MPI.SENDRECV. Transfers are done after each time step. The respective particles are stored in send buffers. Before sending them, the number of particles to be transferred  $n\_send$  is sent to the receiving processor and it is checked if the particle array of this processor has enough free elements to store them. If not, the size  $n\_old$  of the particle array is automatically increased by de-allocating and subsequently allocating this array with the new size  $n\_old + n\_send$ . The particles received are directly stored in the particle array starting from the index  $n\_old + 1$ . In the next step, the particle array elements are resorted by shifting the array elements to eliminate the ‘holes’ caused by those particles that left the subdomain.

### A.2. Sort mechanism

For an efficient realization of the collision/coalescence process it is necessary to determine and sort all particles belonging to the same grid box. As already mentioned all particle features  $j$  (such as the current particle coordinates or velocity components) are stored in 1D arrays  $P_j$ ,

dimensioned as  $P_j(N)$ , where  $N$  is the number of particles in use. At the initial stage of a model run, the particle data are sorted following the sequence of grid point data stored in the memory. For example,  $P_j(1 : 10)$  contains data of those particles located in grid box (1,1,1),  $P_j(11 : 20)$  those of particles in (2,1,1) and so on. If the number of particles in each box is known, the particles of this box (i.e. their respective array index) can be easily accessed. The second advantage of storing particles in this order is that it is computationally very efficient because it takes advantage of the cache mechanism avoiding time-consuming cache misses. If, for example, the new particle coordinate  $x$  for the next time step is calculated following (16) in a loop like

```
DO  n = 1, N
    P(n)%x = P(n)%x + P(n)%speed_x * EXP(-delta_t/tau_p) &
            + u_int * (1.0 - EXP(-delta_t/tau_p))
ENDDO
```

where `speed_x` is the particle velocity in the  $x$ -direction, `delta_t` is the time step, `tau_p` is the particle relaxation time  $\tau_p$  and `u_int` is the  $u$ -component of the velocity field of the fluid as interpolated from the neighboring grid points, then the  $u$ -velocity grid point data are accessed in this loop in the order in which they are stored in memory.

During the simulation, due to turbulent mixing, the correlation between the particles and the grid boxes gets lost. Although the data of the first particle are still stored in  $P_j(1)$ , the particle now probably stays in a box far away from that where it was initially started. Carrying out the above loop now requires more or less random access to the memory to obtain the velocity data needed for interpolation. This causes a large number of cache misses which significantly slows down the computational speed, especially for large grids whose data do not fit into the cache. Therefore a re-sorting of the particles is performed after each time step to avoid the cache miss. The sorting is carried out in such a way that the original correlation between the sequence of particle data and the sequence of grid point data stored in memory is re-established. This method yields a great advantage, especially for the calculation of the collision/coalescence process. To determine the particles in the vicinity of a particle under consideration would need a nested loop search like

```
DO  n = 1, N
    DO  k = 1, N
        IF ( k /= n ) THEN
            IF ( ABS( P(k)%x - P(n)%x ) < threshold ) THEN ...
        ENDIF
    ENDDO
ENDDO
```

if the particles are not stored in a consecutive order and would require an order of  $N^2$  operations. If particles are sorted according to the grid boxes, however, the particle collisions within these boxes can be calculated very fast using a loop like

```
DO  n = n_start(i,j,k), n_end(i,j,k)
    ...
ENDDO
```

where `n_start` and `n_end` are the lower and upper indices of those particles within grid box  $(i, j, k)$ . This method only requires a number of operations of the order of  $N$ .

To further simplify and speed up the calculation of the collision/coalescence process, the particles are additionally sorted according to their size within each grid box. In our model the collision/coalescence process is calculated using the continuous growth equation (see (20)). Thus the growth of each particle  $R$  depends on the number and size of all particles with  $r < R$  within the same grid box. Following that, each calculation would need a nested loop search, similar to the one shown above, to determine all smaller particles. If the particles are already sorted according to their size, however, the necessary information can be easily accessed without further calculations. Therefore the additional particle sorting is done at every time step in each grid box.

## References

- [1] Crowe C T, Troutt T R and Chung J N 1996 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **28** 11–44
- [2] Toschi F and Bodenschatz E 2009 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **41** 375–404
- [3] Andrejczuk M, Grabowski W W, Reisner J and Gadian A 2010 *J. Geophys. Res.* **115** D22214
- [4] Shaw R A 2003 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **35** 183–227
- [5] Bodenschatz E, Malinowski S P, Shaw R A and Stratmann F 2010 *Science* **327** 970–1
- [6] Vaillancourt P A and Yau M K 2000 *Bull. Am. Meteor. Soc.* **81** 285–98
- [7] Kessler E 1969 *Meteor. Monogr.* **10** 84
- [8] Seifert A and Beheng K D 2001 *Atmos. Res.* **59–60** 265–81
- [9] Ziegler C L 1985 *J. Atmos. Sci.* **42** 1487–509
- [10] Khairoutdinov M and Kogan Y 2000 *Mon. Weather Rev.* **128** 229–43
- [11] Hall W D 1980 *J. Atmos. Sci.* **37** 2486–507
- [12] Kogan Y L 1991 *J. Atmos. Sci.* **48** 1160–89
- [13] Khain A, Pokrovsky A and Pinsky M 2004 *J. Atmos. Sci.* **61** 2963–82
- [14] Shiino J I 1983 *J. Meteor. Soc. Japan* **61** 629–55
- [15] Andrejczuk M, Reisner J M, Henson B, Dubey M K and Jeffery C A 2008 *J. Geophys. Res.* **113** D19204
- [16] Shima S, Kusano K, Kawano A, Sugiyama T and Kawaharab S 2009 *Q. J. R. Meteor. Soc.* **135** 1307–20
- [17] Ayala O, Rosa B and Wang L P 2008 *New J. Phys.* **10** 075016
- [18] Wang L P, Ayala O, Rosa B and Grabowski W W 2008 *New J. Phys.* **10** 075013
- [19] Franklin C N, Vaillancourt P A and Yau M K 2007 *J. Atmos. Sci.* **64** 938–54
- [20] Pinsky M, Khain A, Grits B and Shapiro M 2006 *J. Atmos. Sci.* **63** 2131–9
- [21] Wang L P and Grabowski W W 2009 *Atmos. Sci. Lett.* **10** 1–8
- [22] Holland J and Rasmusson E 1973 *Mon. Weather Rev.* **101** 44–55
- [23] Raasch S and Schröter M 2001 *Meteor. Z.* **10** 363–72
- [24] Letzel M and Raasch S 2003 *J. Atmos. Sci.* **60** 2328–41
- [25] Kanda M, Inagaki A, Letzel M, Raasch S and Watanabe T 2004 *Bound.-Layer Meteor.* **110** 381–404
- [26] Raasch S and Franke T 2011 *J. Geophys. Res.* **116** D16120
- [27] Noh Y, Kang I, Herold M and Raasch S 2006 *Phys. Fluids* **18** 085109
- [28] Steinfeld G, Raasch S and Markkanen T 2008 *Bound.-Layer Meteor.* **129** 225–48
- [29] Schumann U 1975 *J. Comput. Phys.* **18** 376–404
- [30] Deardorff J W 1980 *Bound.-Layer Meteor.* **4** 495–527
- [31] Wicker L J and Skamarock W C 2002 *Mon. Weather Rev.* **130** 2088–97
- [32] Williamson J H 1980 *J. Comput. Phys.* **35** 48–56
- [33] Raasch S and Etling D 1998 *J. Phys. Oceanogr.* **28** 1786–02
- [34] Schröter M, Raasch S and Jansen H 2005 *J. Atmos. Sci.* **62** 2023–32
- [35] Ogura Y 1963 *J. Atmos. Sci.* **20** 407–24
- [36] Orville J D 1965 *J. Atmos. Sci.* **22** 684–99

- [37] Cuijpers J W M and Duynkerke P G 1993 *J. Atmos. Sci.* **50** 3894–08
- [38] Clift R, Grace J R and Weber M E 1978 *Bubbles, Drops and Particles* (New York: Academic)
- [39] Wang L P, Ayala O, Xue Y and Grabowski W W 2006 *J. Atmos. Sci.* **63** 2397–401
- [40] Pruppacher H R and Klett J D 1997 *Microphysics of Clouds and Precipitation* 2nd edn (Dordrecht: Kluwer)
- [41] Mason B J 1971 *The Physic of Clouds* 2nd edn (Oxford: Clarendon)
- [42] Stanley H E 1971 *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford: Oxford University Press)
- [43] Rogers R R and Yau M K 1989 *A Short Course in Cloud Physics* (New York: Pergamon)
- [44] Beard K V 1976 *J. Atmos. Sci.* **33** 851–64
- [45] Khain A, Pokrovsky A and Pinsky M 2007 *Atmos. Res.* **86** 1–20
- [46] Seifert A, Nuijens L and Stevens B 2010 *Q. J. R. Meteor. Soc.* **136** 1753–62
- [47] Grabowski W W and Wang L P 2009 *Atmos. Chem. Phys.* **9** 2335–53
- [48] Shotorban B and Mashayek F 2006 *J. Turbulence* **7** 1–13
- [49] Armenio V, Piomelli U and Fiorotto V 1999 *Phys. Fluids* **11** 3030–42
- [50] Yeung P K 2002 *Annu. Rev. Fluid Dyn.* **34** 115–42
- [51] Choi J I, Yeo K and Lee C 2004 *Phys. Fluids* **16** 779–93
- [52] Siebesma A P *et al* 2003 *J. Atmos. Sci.* **60** 1201–19
- [53] Clark T L 1973 *J. Atmos. Sci.* **30** 857–78
- [54] Takahashi T 1981 *J. Atmos. Sci.* **38** 1991–2013
- [55] Soong S T 1974 *J. Atmos. Sci.* **31** 1262–85
- [56] Berry E X and Reinhardt R L 1974 *J. Atmos. Sci.* **31** 1825–31
- [57] Xue Y, Wang L P and Grabowski W W 2008 *J. Atmos. Sci.* **65** 331–56
- [58] Siebesma A P and Cuijpers J W M 1995 *J. Atmos. Sci.* **52** 650–66
- [59] Brown A R 1999 *Q. J. R. Meteor. Soc.* **125** 469–82
- [60] Matheou G, Chung D, Nuijens L, Stevens B and Teixeira J 2011 *Mon. Weather Rev.* **139** 2918–39
- [61] Rauber R M *et al* 2007 *Bull. Am. Meteor. Soc.* **88** 1912–28
- [62] vanZanten M C *et al* 2011 *J. Adv. Model. Earth Syst.* **3** M06001
- [63] Siebert H, Lehmann K, Wendisch M, Franke H, Maser R, Schell D, Saw E W and Shaw R A 2006 *Bull. Am. Meteor. Soc.* **87** 1727–38



# Literaturverzeichnis

- Ackerman, A., et al., 2009: Large-eddy simulations of a drizzling, stratocumulus-topped marine boundary layer. *Mon. Wea. Rev.*, **137**, 1083–1110, doi:10.1175/2008MWR2582.1.
- Andrejczuk, M., W. W. Grabowski, J. Reisner, und A. Gadian, 2010: Cloud aerosol interactions for boundary layer stratocumulus in the lagrangian cloud model. *J. Geophys. Res.*, **115**, D22 214, doi:10.1029/2010JD014248.
- Andrejczuk, M., J. M. Reisner, B. Henson, M. K. Dubey, und C. A. Jeffery, 2008: The potential impacts of pollution on a nondrizzling stratus deck: Does aerosol number matter more than type? *J. Geophys. Res.*, **113**, D19 204, doi:10.1029/2007JD009445.
- Arabas, S. und S.-i. Shima, 2013: Large eddy simulations of trade-wind cumuli using particle-based microphysics with monte-carlo coalescence. *J. Atmos. Sci.*, **70**.
- Arakawa, A. und V. R. Lamb, 1977: Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. *General circulation models of the atmosphere*, J. Chang, Hg., Academic Press, Methods in Computational Physics, Bd. 17., 173–265.
- Ayala, O., B. Rosa, und L.-P. Wang, 2008a: Effects of turbulence on the geometric collision rate of sedimenting droplets. Part 2. Theory and parameterization. *New J. Phys.*, **10**, 075 016.
- Ayala, O., B. Rosa, L.-P. Wang, und W. W. Grabowski, 2008b: Effects of turbulence on the geometric collision rate of sedimenting droplets. Part 1. Results from direct numerical simulation. *New J. Phys.*, **10**, 075 015.
- Beard, K. V., 1976: Terminal velocity and shape of cloud and precipitation drops aloft. *J. Atmos. Sci.*, **33**, 851–864.
- Beheng, K. D. und G. Doms, 1986: A general formulation of collection rates of cloud and raindrops using the kinetic equation and comparison with parameterizations. *Contrib. Atmos. Phys.*, **59**, 66–84.
- Betts, A. K., 1973: Non-precipitating cumulus convection and its parameterization. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **99**, 178–196.
- Bodenschatz, E., S. P. Malinowski, R. A. Shaw, und F. Stratmann, 2010: Can we understand clouds without turbulence? *Science*, **327**, 970–971.
- Bordás, R., C. Roloff, D. Thévenin, und R. Shaw, 2013: Experimental determination of droplet collision rates in turbulence. *New J. Phys.*, **15**, 045 010.

- Brenguier, J.-L. und L. Chaumat, 2001: Droplet spectra broadening in cumulus clouds. Part i: Broadening in adiabatic cores. *J. Atmos. Sci.*, **58**, 628–641, doi:10.1175/1520-0469(2001)058<0628:DSBICC>2.0.CO;2.
- Brown, A. R., 1999: The sensitivity of large-eddy simulations of shallow cumulus convection to resolution and subgrid model. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **125**, 469–482.
- Clark, T. L., 1973: Numerical modeling of the dynamics and microphysics of warm cumulus convection. *J. Atmos. Sci.*, **30**, 857–878, doi:10.1175/1520-0469(1973)030<0857:NMOTDA>2.0.CO;2.
- Clift, R., J. R. Grace, und M. E. Weber, 1978: *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press, New York, 380 S.
- Cuijpers, J. W. M. und P. G. Duynkerke, 1993: Large eddy simulation of trade wind cumulus clouds. *J. Atmos. Sci.*, **50**, 3894–3908.
- Dawe, J. T. und P. H. Austin, 2011: The influence of the cloud shell on tracer budget measurements of les cloud entrainment. *J. Atmos. Sci.*, **68**, 2909–2920.
- Deardorff, J. W., 1980: Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorol.*, **4**, 495–527, doi:10.1007/BF00119502.
- Devenish, B. J., et al., 2012: Droplet growth in warm turbulent clouds. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **138**, 1401–1429, doi:10.1002/qj.1897.
- Durrant, D. R., 1999: *Numerical methods for wave equations in geophysical fluid dynamics*. Springer, New York, 465 S.
- Dutton, J. A. und G. H. Fichtl, 1969: Approximate equations of motion for gases and liquids. *J. Atmos. Sci.*, **26**, 241–254, doi:10.1175/1520-0469(1969)026<0241:AEOMFG>2.0.CO;2.
- East, T. W. R. und J. S. Marshall, 1954: Turbulence in clouds as a factor in precipitation. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **80**, 26–47.
- Emanuel, K. A., 1994: *Atmospheric Convection*. Oxford University Press, New York, 592 S.
- Franklin, C. N., 2008: A warm rain microphysics parameterization that includes the effect of turbulence. *J. Atmos. Sci.*, **65**, 1795–1816.
- Franklin, C. N., P. A. Vaillancourt, und M. K. Yau, 2007: Statistics and parameterizations of the effect of turbulence on the geometric collision kernel of cloud droplets. *J. Atmos. Sci.*, **64**, 938–954, doi:10.1175/JAS3872.1.
- Franklin, C. N., P. A. Vaillancourt, M. K. Yau, und P. Bartello, 2005: Collision rates of cloud droplets in turbulent flow. *J. Atmos. Sci.*, **62**, 2451–2466.
- Fröhlich, J., 2006: *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner, Wiesbaden, 416 S.

- Geoffroy, O., J.-L. Brenguier, und F. Burnet, 2010: Parametric representation of the cloud droplet spectra for LES warm bulk microphysical schemes. *Atmos. Chem. Phys.*, **10**, 4835–4848, doi:10.5194/acp-10-4835-2010.
- Gerber, H. E., G. M. Frick, J. B. Jensen, und J. G. Hudson, 2008: Entrainment, mixing, and microphysics in trade-wind cumulus. *J. Meteorol. Soc. Japan*, **86**, 87–106.
- Good, G. H., S. Gerashchenko, und Z. Warhaft, 2012: Intermittency and inertial particle entrainment at a turbulent interface: the effect of the large-scale eddies. *J. Fluid Mech.*, **694**, 371–398.
- Grabowski, W. W. und T. L. Clark, 1993: Cloud-environment interface instability: Part II: Extension to three spatial dimensions. *J. Atmos. Sci.*, **50**, 555–573, doi:10.1175/1520-0469(1993)050<0555:CEIPI>2.0.CO;2.
- Grabowski, W. W., O. Thouron, J.-P. Pinty, und J.-L. Brenguier, 2010: A hybrid bulk-bin approach to model warm-rain processes. *J. Atmos. Sci.*, **67**, 385–399.
- Grabowski, W. W. und L.-P. Wang, 2009: Diffusional and accretional growth of water drops in a rising adiabatic parcel: Effects of the turbulent collision kernel. *Atmos. Chem. Phys.*, **9**, 2335–2353.
- Grabowski, W. W. und L.-P. Wang, 2013: Growth of cloud droplets in a turbulent environment. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **45**, 293–324, doi:10.1146/annurev-fluid-011212-140750.
- Gryschka, M., 2010: Untersuchungen zur Entwicklung von Rollenkonvektion in Kaltluftausbrüchen mittels Grobstruktursimulationen. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, 110 S.
- Hall, W. D., 1980: A detailed microphysical model within a two-dimensional dynamic framework: Model description and preliminary results. *J. Atmos. Sci.*, **37**, 2486–2507.
- Heinze, R., 2013: Large-eddy simulation von bewölkten grenzschichten zur untersuchung von bilanzen der statistischen momente zweiter ordnung und zur Überprüfung von turbulenzmodellen. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, 178 S.
- Herbert, F. und K. D. Beheng, 1986: Scavenging of airborne particles by collision with water drops - Model studies on the combined effect of essential microdynamic mechanisms. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **35**, 201–211.
- Heus, T., H. J. Jonker, H. E. Van den Akker, E. J. Griffith, M. Koutek, und F. H. Post, 2009: A statistical approach to the life cycle analysis of cumulus clouds selected in a virtual reality environment. *J. Geophys. Res.: Atmos.*, **114** (D6).
- Heus, T. und H. J. J. Jonker, 2008: Subsiding shells around shallow cumulus clouds. *J. Atmos. Sci.*, **65**, 1003–1018.
- Holland, J. und E. Rasmusson, 1973: Measurement of atmospheric mass, energy, and momentum budgets over a 500-kilometer square of tropical ocean. *Mon. Wea. Rev.*, **101**, 44–55.

- Howard, L., 1803: On the modifications of clouds, and on the principles of their production, suspension, and destruction; being the substance of an essay read before the askesian society in the session 1802-3. *Philosophical Magazine Series 1*, **17:65**, 5–11, doi:10.1080/14786440308676365.
- Kessler, E., 1969: On distribution and continuity of water substance in atmospheric circulations. *Meteorol. Monogr.*, **10**, 84.
- Khain, A., A. Pokrovsky, und M. Pinsky, 2007: Critical comments to results of investigations of drop collisions in turbulent clouds. *Atmos. Res.*, **86**, 1–20.
- Köhler, H., 1936: The nucleus in and the growth of hygroscopic droplets. *Transactions of the Faraday Society*, **32**, 1152–1161.
- Kumar, B., F. Janetzko, J. Schumacher, und R. A. Shaw, 2012: Extreme responses of a coupled scalar-particle system during turbulent mixing. *New Journal of Physics*, **14**, 115 020.
- Kunnen, R. P. J., C. Siewert, M. Meinke, W. Schröder, und K. D. Beheng, 2013: Numerically determined geometric collision kernels in spatially evolving isotropic turbulence relevant for droplets in clouds. *Atmos. Res.*, **127**, 8–21, doi:10.1016/j.atmosres.2013.02.003.
- Lamb, D. und J. Verlinde, 2011: *Physics and chemistry of clouds*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 584 S.
- Lanotte, A. S., A. Seminara, und F. Toschi, 2009: Cloud droplet growth by condensation in homogeneous isotropic turbulence. *J. Atmos. Sci.*, **66**, 1685–1697, doi:10.1175/2008JAS2864.1.
- Lasher-Trapp, S. G., W. A. Cooper, und A. M. Blyth, 2005: Broadening of droplet size distributions from entrainment and mixing in a cumulus cloud. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **131**, 195–220, doi:10.1256/qj.03.199.
- Lau, K. M. und H. T. Wu, 2003: Warm rain processes over tropical oceans and climate implications. *Geophys. Res. Lett.*, **30**, doi:10.1029/2003GL018567.
- Laube, M. und H. Höller, 1988: 5.2. 3 Condensation and sublimation. *Physical and Chemical Properties of the Air*, Springer, 42–53.
- Letzel, M. O., 2007: High resolution large-eddy simulation of turbulent flow around buildings. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, 108 S.
- Liljequist, G. H., 1984: *Allgemeine Meteorologie*. 3. überarb. und erw. Aufl., Vieweg, Braunschweig, 396 S.
- Long, A. B., 1974: Solutions to the droplet collection equation for polynomial kernels. *J. Atmos. Sci.*, **31**, 1040–1052.
- Markkanen, T., G. Steinfeld, N. Kljun, S. Raasch, und T. Foken, 2009: Comparison of conventional lagrangian stochastic footprint models against LES driven footprint estimates. *Atmos. Chem. Phys.*, **9**, 5575–5586.

- Markkanen, T., G. Steinfeld, N. Kljun, S. Raasch, und T. Foken, 2010: A numerical case study on footprint model performance under inhomogeneous flow conditions. *Meteorol. Z.*, **19**, 539–547.
- Mason, B. J., 1971: *The Physics of Clouds*. 2. Aufl., Clarendon Press, Oxford, 671 S.
- Matheou, G., D. Chung, L. Nuijens, B. Stevens, und J. Teixeira, 2011: On the fidelity of large-eddy simulation of shallow precipitating. *Mon. Wea. Rev.*, **139**, 2918–2939, doi:10.1175/2011MWR3599.1.
- Möller, D., 2003: *Luft: Chemie, Physik, Biologie, Reinhaltung, Recht*. de Gruyter, Berlin, 750 S.
- Monin, A. S. und A. M. Obukhov, 1954: Osnovnye zakonomernosti turbulentnogo peremeshivaniya v prizemnom sloe atmosfery (Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground, in Russian). *Trudy geofiz. inst. AN SSSR*, **24**, 1963–1987.
- Ogura, Y., 1963: The evolution of a moist convective element in a shallow, conditionally unstable atmosphere: A numerical calculation. *J. Atmos. Sci.*, **20**, 407–424.
- Orville, J. D., 1965: A numerical study of the initiation of cumulus clouds over mountainous terrain. *J. Atmos. Sci.*, **22**, 684–699.
- Press, W. H., S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, und B. P. Flannery, 1996: *Numerical Recipes in Fortran 90: The Art of Parallel Scientific Computing*. 2. Aufl., Cambridge University Press, Cambridge, 1495 S.
- Pruppacher, R., H. und J. D. Klett, 1997: *Microphysics of Clouds and Precipitation*. 2. Aufl., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 954 S.
- Raasch, S. und D. Etling, 1991: Numerical simulation of rotating turbulent thermal convection. *Beitr. Phys. Atmosph.*, **64**, 185–199.
- Raasch, S. und D. Etling, 1998: Modeling deep ocean convection: Large eddy simulation in comparison with laboratory experiments. *J. Phys. Oceanog.*, **28**, 1786–1802.
- Raasch, S. und M. Schröter, 2001: PALM - a large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol. Z.*, **10**, 363–372.
- Rauber, R. M., et al., 2007: Rain in shallow cumulus over the ocean: The RICO campaign. *Bull. Am. Meteor. Soc.*, **88**, 1912–1928.
- Riechelmann, T., Y. Noh, und S. Raasch, 2012: A new method for large-eddy simulations of clouds with lagrangian droplets including the effects of turbulent collision. *New J. Phys.*, **14**, 065 008, doi:10.1088/1367-2630/14/6/065008.
- Rogers, R. R., R. M. Baumgardner, S. A. Ethier, D. A. Carter, und W. L. Ecklund, 1993: Comparison of raindrop size distributions measured by radar wind profiler and by airplane. *J. Appl. Meteor.*, **32**, 694–699, doi:10.1175/1520-0450(1993)032<0694:CORSDM>2.0.CO;2.
- Rogers, R. R. und M. K. Yau, 1989: *A Short Course in Cloud Physics*. 3. Aufl., Pergamon Press, New York, 293 S.

- Saunders, P. M., 1965: Some characteristics of tropical marine showers. *J. Atmos. Sci.*, **22**, 167–175, doi:10.1175/1520-0469(1965)022<0167:SCOTMS>2.0.CO;2.
- Schlichting, H. und K. Gersten, 1997: *Grenzschicht-Theorie*. 9. Aufl., Springer Verlag, 851 S.
- Schröter, M., 2003: Untersuchung der Evolution von Konvektionsstrukturen bei Kaltluftausbrüchen mit Hilfe eines parallelisierten Grubstrukturmodells. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, 119 S.
- Schumann, U., 1975: Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. *J. Comp. Phys.*, **18**, 376–404.
- Sedunov, J. S., 1974: *Physics of drop formation in the atmosphere*. Wiley, New York, 234 S.
- Seifert, A., 2008: On the parameterization of evaporation of raindrops as simulated by a one-dimensional rainshaft model. *J. Atmos. Sci.*, **65**, 3608–3619, doi:10.1175/2008JAS2586.1.
- Seifert, A. und K. D. Beheng, 2001: A double-moment parameterization for simulating autoconversion, accretion and selfcollection. *Atmos. Res.*, **59**, 265–281, doi:10.1016/S0169-8095(01)00126-0.
- 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, doi:10.1007/s00703-005-0112-4.
- Seifert, A., L. Nuijens, und B. Stevens, 2010: Turbulence effects on warm-rain autoconversion in precipitating shallow convection. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **136**, 1753–1762, doi:10.1002/qj.684.
- Seinfeld, J. H. und S. N. Pandis, 2006: *Atmospheric Chemistry and Physics: from Air Pollution to Climate Change*. 2. Aufl., John Wiley, Hoboken, New Jersey, 1203 S.
- Shaw, R. A., 2003: Particle-turbulence interactions in atmospheric clouds. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **35**, 183–227, doi:10.1146/annurev.fluid.35.101101.161125.
- Shiino, J.-I., 1983: Evolution of raindrops in an axisymmetric cumulus model: Part I. Comparison of the parameterized with non-parameterized microphysics. *J. Meteorol. Soc. Japan*, **61**, 629–655.
- Shima, S., K. Kusano, A. Kawano, T. Sugiyamaa, und S. Kawaharab, 2009: The super-droplet method for the numerical simulation of clouds and precipitation: A particle-based and probabilistic microphysics model coupled with a non-hydrostatic model. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **135**, 1307–1320, doi:10.1002/qj.441.
- Siebert, H., K. Lehmann, M. Wendisch, H. Franke, R. Maser, D. Schell, E. W. Saw, und R. A. Shaw, 2006: Probing finescale dynamics and microphysics of clouds with helicopter-borne measurements. *Bull. Am. Meteor. Soc.*, **87**, 1727–1738.
- Siebert, H., et al., 2013: The fine-scale structure of the trade wind cumuli over barbados - an introduction to the CARRIBA project. *Atmos. Chem. Phys.*, **13**, 10 061–10 077, doi:10.5194/acpd-13-10061-2013.

- Siebesma, A. P. und J. W. M. Cuijpers, 1995: Evaluation of parametric assumptions for shallow cumulus convection. *J. Atmos. Sci.*, **52**, 650–666.
- Siebesma, A. P., et al., 2003: A large eddy simulation intercomparison study of shallow cumulus convection. *J. Atmos. Sci.*, **60**, 1201–1219.
- Slawinska, J., W. W. Grabowski, H. Pawlowska, und H. Morrison, 2012: Droplet activation and mixing in large-eddy simulation of a shallow cumulus field. *J. Atmos. Sci.*, **69**, 444–462.
- Sölch, I. und B. Kärcher, 2010: A large-eddy model for cirrus clouds with explicit aerosol and ice microphysics and lagrangian ice particle tracking. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **136**, 2074–2093.
- Soong, S.-T., 1974: Numerical simulation of warm rain development in an axisymmetric cloud model. *J. Atmos. Sci.*, **31**, 1262–1285, doi:10.1175/1520-0469(1974)031<1262: NSOWRD>2.0.CO;2.
- Squires, K. D. und J. K. Eaton, 1990: Particle response and turbulence modification in isotropic turbulence. *Phys. Fluids A*, **2**, 1191.
- Steinfeld, G., 2009: Die Beurteilung von Turbulenzmess- und Analyseverfahren der Mikrometeorologie durch virtuelle Messungen innerhalb von Grobstruktursimulationen. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, 110 S.
- Steinfeld, G., S. Raasch, und T. Markkanen, 2008: Footprints in homogeneously and heterogeneously driven boundary layers derived from a lagrangian stochastic particle model embedded into large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorol.*, **129**, 225–248.
- Stephens, G. L., 2005: Cloud feedbacks in the climate system: A critical review. *J. Climate*, **18**, 237–273.
- Stevens, B., 2005: Atmospheric moist convection. *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, **33**, 605–643.
- Stevens, B. und A. Seifert, 2008: Understanding macrophysical outcomes of microphysical choices in simulations of shallow cumulus convection. *J. Meteorol. Soc. Japan*, **86**, 143–162.
- Stommel, H., 1947: Entrainment of air into a cumulus cloud. *J. Meteor.*, **4**, 91–94, doi:10.1175/1520-0469(1947)004<0091:EOAIAC>2.0.CO;2.
- Stommel, H., 1951: Entrainment of air into a cumulus cloud. *J. Meteor.*, **8**, 127–129, doi:10.1175/1520-0469(1951)008<0127:EOAIAC>2.0.CO;2.
- Straka, J. M., 2009: *Cloud and precipitation microphysics: principles and parameterizations*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 392 S.
- Stull, R. B., 2009: *An introduction to boundary layer meteorology*. Springer, Dordrecht, 670 S.
- Thompson, W., 1870: On the equilibrium of vapour at a curved surface of a liquid. *Proc. R. Soc. Edinb.*, **7**.

- Tiedtke, M., W. Heckley, und J. Slingo, 1988: Tropical forecasting at ecmwf: The influence of physical parametrization on the mean structure of forecasts and analyses. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **114**, 639–664.
- Uhlenbrock, J., 2006: Numerische Untersuchung der konvektiven Grenzschicht über realen heterogenen Landoberflächen mit einem Grobstrukturmodell. Dissertation, Universität Hannover, 168 S.
- Unterstrasser, S. und I. Sölch, 2010: Study of contrail microphysics in the vortex phase with a lagrangian particle tracking model. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **10**, 10 003–10 015.
- Unterstrasser, S. und I. Sölch, 2013: Speeding up a lagrangian ice microphysics code. *Geosci. Model Dev. Discuss.*, **6**, 3787–3817, doi:10.5194/gmdd-6-3787-2013.
- Vaillancourt, P. A., M. K. Yau, P. Bartello, und W. W. Grabowski, 2002: Microscopic approach to cloud droplet growth by condensation. Part II: Turbulence, clustering, and condensational growth. *J. Atmos. Sci.*, **59**, 3421–3435, doi:10.1175/1520-0469(2002)059<3421:MATCDG>2.0.CO;2.
- van Leer, B., 1977: Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection. *J. Comp. Phys.*, **23**, 276–299, doi:10.1016/0021-9991(77)90095-X.
- van Zanten, M. C., et al., 2011: Controls on precipitation and cloudiness in simulations of trade-wind cumulus as observed during rico. *J. Adv. Model. Earth Syst.*, **3**, doi:10.1029/2011MS000056.
- Wang, L.-P., O. Ayala, B. Rosa, und W. W. Grabowski, 2008: Turbulent collision efficiency of heavy particles relevant to cloud droplets. *New J. Phys.*, **10**, 075 013.
- Wang, L.-P. und W. W. Grabowski, 2009: The role of air turbulence in warm rain initiation. *Atmos. Sci. Let.*, **10**, 1–8, doi:10.1002/asl.210.
- Wang, L.-P. und M. R. Maxey, 1993: Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, **256**, 27–27.
- Wang, L.-P., Y. Xue, O. Ayala, und W. W. Grabowski, 2006: Effects of stochastic coalescence and air turbulence on the size distribution of cloud droplets. *Atmos. Res.*, **82**, 416–432.
- Wang, L.-P., Y. Xue, und W. W. Grabowski, 2007: A bin integral method for solving the kinetic collection equation. *J. Comp. Phys.*, **226**, 59–88.
- Weil, J. C., P. P. Sullivan, und C. H. Moeng, 2004: The use of large-eddy simulations in lagrangian particle dispersion models. *J. Atmos. Sci.*, **61**, 2877–2887.
- Wicker, L. J. und W. C. Skamarock, 2002: Time-splitting methods for elastic models using forward time schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **130**, 2088–2097.
- WMO, 1992: *International meteorological vocabulary*, Bd. No. 182. WMO, 784 S.

- Wyszogrodzki, A. A., W. W. Grabowski, und L.-P. Wang, 2011: Activation of cloud droplets in bin-microphysics simulation of shallow convection. *Acta Geophysica*, **59**, 1168–1183, doi:10.2478/s11600-011-0052-y.
- Wyszogrodzki, A. A., W. W. Grabowski, L. P. Wang, und O. Ayala, 2013: Turbulent collision-coalescence in maritime shallow convection. *Atmos. Chem. Phys.*, **13**, 8471–8487.
- Xue, Y., L.-P. Wang, und W. W. Grabowski, 2008: Growth of cloud droplets by turbulent collision-coalescence. *J. Atmos. Sci.*, **65**, 331–356.



# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen Menschen danken, die mich bei meiner Dissertation unterstützt haben. Als erstes möchte ich mich bei Prof. Dr. Siegfried Raasch für seine Betreuung und Unterstützung bedanken, insbesondere für seinen fachlichen Rat, seine Anregungen und nützlichen Hinweise beim Lösen von Problemen. Bedanken möchte ich mich auch bei Prof. Dr. Dieter Etling für die Initiative des DFG-Projektes, die diese Arbeit erst ermöglicht hat und insbesondere für die Übernahme des Referats dieser Dissertation.

Meinen Projektpartnern des DFG-Projektes, vor allem Prof. Dr. Klaus Beheng und Christoph Siewert, danke ich für ihren fachlichen Rat, die konstruktiven Diskussionen und die Gruppentreffen in sehr angenehmer Atmosphäre. Prof. Dr. Lian-Ping Wang und Prof. Dr. Yign Noh möchte ich für ihre wertvollen Hinweise zur Weiterentwicklung des Lagrangeschen Wolkenmodells danken. Für die Bereitstellung der turbulenten Kollisionskernel danke ich Christoph Siewert und Prof. Dr. Lian-Ping Wang.

Alle im Rahmen dieser Arbeit vorgestellten Simulationen, wurden auf den Rechnern des Norddeutschen Verbunds für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) durchgeführt. Für die kompetente Unterstützung bei der Durchführung der Simulationen danke ich den Mitarbeitern des HLRN und vor allem Gabriel Gaus.

Meinen (ehemaligen) Kollegen am Institut für Meteorologie und Klimatologie und insbesondere der LES-Arbeitsgruppe danke ich für die angenehme Arbeitsatmosphäre und konstruktive Zusammenarbeit. Ein besonders großer Dank für die teilweise oder gänzliche Durchsicht meiner Arbeit und die wertvollen Rückmeldungen gebührt Barbara Franke, Stefan Riechelmann, Fabian Hoffmann, Kai Niermann, Ingrid Niermann und Björn Maronga.

Mein herzlichster Dank gilt meiner Familie und meinem Mann Stefan Riechelmann. Vielen Dank für euer Verständnis dafür, dass ich in der Endphase meiner Arbeit so wenig Zeit für euch hatte. Danke, dass ihr immer an mich geglaubt habt, ein offenes Ohr für meine Sorgen hattet und mich stets wieder aufgebaut habt wenn es nötig war.

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen des DFG-Schwerpunktprojektes SPP 1276 MetStröm unter den Projektnummern ET 8/14-1, ET 8/14-2 und ET 8/14-3 gefördert.



# Lebenslauf

## Persönliche Daten

Name                   Theres Riechelmann geb. Franke  
Geburtsdatum        18.04.1984  
Geburtsort            Heiligenstadt  
Familienstand        verheiratet

## Bildungsweg

seit 02/2008         Promotionsstudium an der Fakultät für Mathematik und Physik  
                          der Leibniz Universität Hannover  
  
10/2002-12/2007     Studium im Fach Meteorologie an der Leibniz Universität Hannover  
                          Diplomarbeit zum Thema *Numerische Simulationen von Staubteu-  
                          feln in der atmosphärischen Grenzschicht*  
  
08/1994-06/2002     St. Josef Gymnasium Dingelstädt  
                          Abschluss: Abitur  
  
08/1990-06/1994     Grundschule Dingelstädt

## Beruflicher Werdegang

seit 02/2008         Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Meteorologie und  
                          Klimatologie der Leibniz Universität Hannover  
                          Aktuelle Projekte: *Investigations on in-cloud turbulence effects on  
                          drop growth and precipitation formation* und *The impact of entrain-  
                          ment and mixing on the fine-structure of cloud turbulence*

## Auslandsaufenthalte und International Summer Schools

09/2010             Fluctuations and Turbulence in the Microphysics and Dynamics of  
                          Clouds, Porquerolles, Frankreich  
  
07/2008             Atmospheric Boundary Layers, Les Houches, Frankreich  
  
08/2006             Aviation, Weather and Atmosphere, Braunschweig, Deutschland  
  
08/2005-09/2005     Studentische Hilfskraft an der Yonsei University, Seoul, Korea



# Veröffentlichungen

## Publikationen

**Riechelmann, T., Y. Noh und S. Raasch, 2012:** A new method for large-eddy simulations of clouds with Lagrangian droplets including the effects of turbulent collision. *New J. Phys.*, **14**, 065008, doi: 10.1088/1367-2630/14/6/065008.

**Raasch, S. und T. Franke, 2011:** Structure and formation of dust-devil-like vortices in the atmospheric boundary layer - A high resolution numerical study. *J. Geophys. Res.*, **116**, D16120, doi: 10.1029/2011JD016010.

## Konferenzbeiträge

**Riechelmann, T., Y. Noh, S. Raasch und D. Etling, 2013:** Untersuchungen zum Einfluss von Turbulenz auf das Wachstum von Wolkentropfen mit einem Lagrangeschen Wolkenmodell. *DACH*, Innsbruck, Österreich.

**Riechelmann, T., Y. Noh und S. Raasch, 2012:** A new method for large-eddy simulations of warm clouds with Lagrangian droplets. *First International Education Forum on Energy and Environment*, Big Island, Hawaii, USA.

**Riechelmann, T., Y. Noh und S. Raasch, 2012:** A new method for large-eddy simulations of clouds with Lagrangian droplets including the effects of turbulent collision. *16th International Conference on Clouds and Precipitation*, Leipzig, Deutschland.

**Noh, Y., J. J. Lee, T. Riechelmann und S. Raasch, 2012:** Dynamical and microphysical property of cloud droplets simulated by a new Lagrangian cloud model. *16th International Conference on Clouds and Precipitation*, Leipzig, Deutschland.

**Franke, T., R. Kunnen und H. Noppel, 2011:** The influence of cloud turbulence on droplet growth and precipitation. *International Metström Conference, Multiple Scales in Fluid Dynamics and Meteorology*, Berlin, Deutschland.

**Franke, T. und S. Raasch, 2010:** Large-eddy simulation of convective clouds with explicit simulation of cloud droplets via Lagrangian particles. *13th AMS Conference on Cloud Physics*, Portland (OR), USA.

**Franke, T. und S. Raasch, 2008:** Large-eddy simulation of dust devils in the atmospheric boundary layer. *18th AMS Symposium on Boundary Layers and Turbulence*, Stockholm, Schweden.

**Franke, T. und S. Raasch, 2007:** Numerische Simulation von Staubteufeln in der atmosphärischen Grenzschicht. *DACH*, Hamburg, Deutschland.