



JOHANNES GUTENBERG  
UNIVERSITÄT MAINZ

---

# Direkte Interaktion von Hydrometeoren durch Diffusion in Mischphasenwolken

---

Dissertation  
zur Erlangung des Grades  
„Doktor der Naturwissenschaften“  
(Dr. rer. nat.)

am Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik  
der Johannes Gutenberg-Universität in Mainz

Manuel Baumgartner  
geboren in Lörrach

Mainz, Juni 2016

---

**1. Gutachter**

**2. Gutachter**

**Tag der mündlichen Prüfung** 04.11.2016

# Zusammenfassung

Mischphasenwolken sind durch die Koexistenz von flüssigen Wassertropfen und Eiskristallen gekennzeichnet. Da flüssiges Wasser und Eis verschiedene Sättigungsdampfdrücke besitzen, ist diese Mischung thermodynamisch nicht stabil. Es findet eine Wechselwirkung zwischen den Hydrometeoren durch Diffusion von Wasserdampf sowie Wärmeleitung statt. Hierbei können die vorhandenen Eiskristalle auf Kosten der Tropfen anwachsen, was als Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozess bezeichnet wird. Dieser Prozess tritt in Mischphasenwolken häufig auf und kann zur Bildung von Niederschlag beitragen, was dessen physikalisch konsistente Modellierung erforderlich macht.

Ziel dieser Arbeit ist es, eine physikalisch konsistente Parametrisierung des Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozesses zu entwickeln, die sich in grob aufgelösten Modellen zur Wettervorhersage einsetzen lässt. Zunächst werden hierzu die Wachstumsgleichungen untersucht, welche das Diffusionswachstum eines einzelnen Hydrometeors modellieren. In der klassischen Maxwell-Theorie werden diese Wachstumsgleichungen durch weitere Annahmen vereinfacht, weshalb die Maxwell-Theorie rekapituliert und die getroffenen Annahmen herausgestellt werden. Schliesslich wird eine asymptotische Lösung der Wachstumsgleichungen beschrieben.

Der nächste Schritt besteht in der Formulierung der notwendigen Modellgleichungen, welche die Interaktion der Hydrometeore durch Diffusion beschreiben. Für einen Spezialfall wird die Existenz einer eindeutigen Lösung der Modellgleichungen gezeigt. In einem Referenzmodell werden die Modellgleichungen numerisch approximiert. Hierbei wird zur räumlichen Diskretisierung eine Finite-Elemente-Methode auf einem an die Hydrometeore angepasstem Tetraedergitter verwendet. Die Interaktion der Hydrometeore wird durch Simulationen mit dem Referenzmodell veranschaulicht. Um die Anpassung des Tetraedergitters an die Hydrometeore zu vermeiden, wird eine räumliche Diskretisierung mit der verallgemeinerten Finite-Elemente-Methode vorgeschlagen. Aus konzeptioneller Sicht werden hierbei zusätzliche Funktionen in den Approximationsraum der Finite-Elemente-Methode eingefügt, welche die gesuchte Lösung in der Nähe der Hydrometeore approximieren.

Mithilfe von Simulationsresultaten des Referenzmodells wird eine Parametrisierung des Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozesses für Bulk-Mikrophysik Parametrisierungen entwickelt. Diese berücksichtigt die inhärente Lokalität des Prozesses und trägt daher zur physikalisch konsistenten Repräsentation bei. Die Parametrisierung wird in ein Luftpaketmodell integriert, womit idealisierte Simulationen durchgeführt werden. Es zeigen sich ähnliche Effekte wie in der Literatur dokumentiert, beispielsweise ist der Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozess in Abwinden deutlicher ausgeprägt als in Aufwinden. Zuletzt werden die weiteren Schritte zur Eingliederung der Parametrisierung in ein grösseres Modell zur Wettervorhersage skizziert, das die Mikrophysik in einem statistischen Sinne berücksichtigt.

---

# Abstract

Mixed-phase clouds are characterized by the coexistence of liquid water droplets and ice crystals. This composition is thermodynamically unstable because liquid water and ice have different saturation vapour pressures and diffusion of water vapour as well as heat conduction occurs. This allows ice crystals to grow at the expense of the droplets, which is called Wegener-Bergeron-Findeisen-process. This process is frequently active in mixed-phase clouds and may contribute to precipitation. Therefore, a physically consistent modelling is necessary.

The goal of this thesis is the development of a physically consistent parametrisation of the Wegener-Bergeron-Findeisen-process, which may be employed in models for weather forecasts with coarse resolution. To achieve this goal, first the growth equations describing the diffusional growth of a hydrometeor are analysed. Because those equations are simplified in classical Maxwellian theory, the theory is reviewed and the assumptions are emphasized. Finally, an asymptotic solution of the growth equations is derived.

In the next step, the governing model equations are formulated describing the interaction of hydrometeors by diffusion. Existence and uniqueness of an exact solution is shown for a special case. Within a reference model the model equations are approximated numerically. For the spatial discretization a finite element method is utilised on a tetrahedron mesh which is fitted to the hydrometeors. The interaction of the hydrometeors is illustrated by simulation results obtained with the reference model. In order to avoid the fitting of the mesh to the hydrometeors, a spatial discretization with the generalised finite element method is proposed. This method consists in adding special function into the approximation space of the finite element method, approximating the solution locally around the hydrometeors.

With the help of simulation results obtained by the reference model, a parametrization for the Wegener-Bergeron-Findeisen-process in bulk parametrizations is developed. It includes the locality of the process and therefore contributes to its physically consistent representation. The parametrization is introduced into a parcel model. Parcel model simulation results show a similar behaviour as previous studies report, e.g. the Wegener-Bergeron-Findeisen-process is more pronounced in downdraughts compared to updraughts. Finally, the next steps for an integration of the parametrization in a larger model for weather forecasts are outlined, which represents microphysics only in a statistical sense.

---

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Entwicklung einer Wolke . . . . .	2
1.2	Der Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozess . . . . .	5
1.3	Zielsetzung und Struktur der Arbeit . . . . .	8
<b>2</b>	<b>Betrachtung eines einzelnen Hydrometeors</b>	<b>11</b>
2.1	Wachstumsgleichungen . . . . .	11
2.2	Oberflächenkrümmung . . . . .	12
2.2.1	Hauptkrümmungen für Rotationsflächen . . . . .	15
2.2.2	Sättigungsdampfdruck über einem kugelförmigen Tropfen . . . .	16
2.2.3	Sättigungsdampfdruck über einem ellipsoidförmigen Eiskristall .	17
2.2.4	Gemittelter Sättigungsdampfdruck über einem ellipsoidförmigen Eiskristall . . . . .	18
2.2.5	Größenordnung und Vergleiche . . . . .	21
2.3	Maxwell-Theorie . . . . .	23
2.3.1	Tropfen . . . . .	23
2.3.2	Herleitung der approximierten Form am Beispiel des Tropfens . .	27
2.3.3	Eiskristall . . . . .	29
2.3.4	Korrekturen der Maxwell-Theorie . . . . .	31
2.4	Die vollständigen Wachstumsgleichungen für einen Tropfen . . . . .	32
2.5	Asymptotische Betrachtung . . . . .	33
2.5.1	Entdimensionalisierung . . . . .	35
2.5.2	Approximation des Sättigungsdampfdrucks . . . . .	37
2.5.3	Entdimensionalisierung mit approximiertem Sättigungsdampfdruck	38
2.5.4	Gleichgewichtsverhalten . . . . .	40
2.5.5	Asymptotische Approximation . . . . .	41
2.5.6	Der Fall des Eiskristalls . . . . .	48
2.6	Regularisierung . . . . .	50
<b>3</b>	<b>Beschreibung des Modells</b>	<b>55</b>
3.1	Formulierung des Modells . . . . .	55
3.1.1	Modellgleichungen . . . . .	55
3.1.2	Annahmen und Vereinfachungen . . . . .	57
3.2	Entdimensionalisierung . . . . .	58
3.2.1	Gleichungen in Luft . . . . .	58
3.2.2	Randbedingungen an den Hydrometeoren . . . . .	60
3.3	Analytische Betrachtung . . . . .	62
3.3.1	Ein generisches Problem . . . . .	66

3.3.2	Definition des Iterationsoperators . . . . .	68
3.3.3	Kontraktionseigenschaft für kleine Zeiten . . . . .	70
3.3.4	Grosse Zeiten . . . . .	73
3.3.5	Anwendung auf das Modell . . . . .	73
3.3.6	Verallgemeinerungen . . . . .	76
<b>4</b>	<b>Numerische Betrachtung</b>	<b>79</b>
4.1	Schwache Form der Modellgleichungen . . . . .	79
4.1.1	Galerkin-Verfahren . . . . .	80
4.1.2	Zeitliche Diskretisierung . . . . .	82
4.2	Standard Finite-Elemente-Methode . . . . .	84
4.3	Beispielsimulationen . . . . .	86
4.3.1	Einzelner Hydrometeor . . . . .	86
4.3.2	Interaktion zwischen zwei Hydrometeoren . . . . .	87
4.3.3	Interaktion zwischen mehreren Hydrometeoren . . . . .	89
4.4	Betrachtung des lokalen Gleichgewichts . . . . .	94
4.5	Verallgemeinerte Finite-Elemente-Methode . . . . .	96
4.5.1	Idee der verallgemeinerten Finite-Elemente-Methode . . . . .	96
4.5.2	Einbettungsmethode . . . . .	98
4.5.3	Anwendung auf das Modell . . . . .	99
<b>5</b>	<b>Bulk-Modell</b>	<b>107</b>
5.1	Herleitung des Modells . . . . .	108
5.1.1	Das lokale Eiskristall-Tropfen-System . . . . .	108
5.1.2	Parameterwahl . . . . .	116
5.1.3	Illustration des Modells . . . . .	120
5.1.4	Diskussion des Modellansatzes . . . . .	122
5.1.5	Approximative Gleichungen . . . . .	124
5.2	Box-Modell . . . . .	128
5.2.1	Beschreibung des Box-Modells . . . . .	129
5.2.2	Beispielsimulationen mit dem Box-Modell . . . . .	134
5.3	Umsetzung für eine Bulk-Beschreibung . . . . .	145
5.4	Fazit . . . . .	148
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>151</b>
<b>A</b>	<b>Approximierte Form am Beispiel des Tropfens</b>	<b>155</b>
<b>B</b>	<b>Approximation an den Sättigungsdampfdruck</b>	<b>159</b>
B.1	Approximation . . . . .	159
B.2	Wachstumsgleichung mit approximiertem Sättigungsdampfdruck . . . . .	160
<b>C</b>	<b>Physikalische Parametrisierungen</b>	<b>163</b>
C.1	Konstanten . . . . .	163
C.2	Diffusivität . . . . .	163
C.3	Thermale Konduktivität . . . . .	163
C.3.1	Thermale Konduktivität von trockener Luft . . . . .	163



C.3.2	Thermale Konduktivität von feuchter Luft . . . . .	164
C.4	Dichten . . . . .	165
C.4.1	Dichte von Wasser . . . . .	165
C.4.2	Dichte von Eis . . . . .	165
C.5	Spezifische Wärmekapazitäten . . . . .	165
C.5.1	Spezifische Wärmekapazität von Wasser . . . . .	165
C.5.2	Spezifische Wärmekapazität von Eis . . . . .	166
C.5.3	Spezifische Wärmekapazität von feuchter Luft . . . . .	166
C.6	Latente Wärme . . . . .	166
C.6.1	Latente Wärme von Wasser . . . . .	166
C.6.2	Latente Wärme von Eis . . . . .	166
C.7	Sättigungsdampfdruck . . . . .	167
C.7.1	Sättigungsdampfdruck über Wasser . . . . .	167
C.7.2	Sättigungsdampfdruck über Eis . . . . .	167
C.8	Oberflächenspannung von Wasser . . . . .	167
 <b>Abkürzungsverzeichnis</b>		 <b>169</b>
 <b>Symbolverzeichnis</b>		 <b>171</b>
 <b>Literatur</b>		 <b>175</b>
 <b>Danksagung</b>		 <b>185</b>



# Abbildungsverzeichnis

1.1	Sättigungsdampfdrücke von flüssigem Wasser und Eis . . . . .	6
1.2	Veranschaulichung des Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozesses . . . . .	7
2.1	Reale Eiskristallformen . . . . .	17
2.2	Temperaturabhängigkeit der Krümmungsfaktoren . . . . .	22
2.3	Krümmungseffekt in Abhängigkeit des Tropfenradius . . . . .	22
2.4	Vergleich von Mittelungsformel und exakter Dampfdruckformel . . . . .	23
2.5	Vergleich der Wachstumsgleichungen für einen Tropfen mit Radius $10\ \mu\text{m}$	34
2.6	Vergleich der Wachstumsgleichungen für einen Tropfen mit Radius $30\ \mu\text{m}$	34
2.7	Wachstumsgleichung mit konstanten Koeffizienten . . . . .	37
2.8	Diskriminantenabschätzung für die Gleichgewichtstemperaturgleichung .	41
2.9	Kleinere Lösung der Gleichgewichtstemperaturgleichung . . . . .	42
2.10	Obere Schranke für die zweite Lösung der Gleichgewichtstemperatur . .	47
2.11	Illustration der asymptotischen Lösung für kleines $\varepsilon$ . . . . .	49
2.12	Illustration der asymptotischen Lösung für grosses $\varepsilon$ . . . . .	49
2.13	Köhlerkurve . . . . .	52
2.14	Modellvorstellung eines Tropfens mit Aerosol . . . . .	52
3.1	Luftpaket mit einem Hydrometeor . . . . .	56
4.1	Abweichungen der Wachstumsgleichungen vom Referenzmodell . . . . .	87
4.2	Übersättigung um einen einzelnen Eiskristall . . . . .	88
4.3	Übersättigung um zwei Hydrometeore in wasserübersättigter Umgebung	89
4.4	Übersättigung um zwei Hydrometeore in eisuntersättigter Umgebung . .	90
4.5	Übersättigung um mehrere Hydrometeore in eisuntersättigter Umgebung	92
4.6	Entwicklung der Tropfenmasse bei mehreren Hydrometeoren in eisunter- sättigter Umgebung . . . . .	93
4.7	Übersättigung um mehrere Hydrometeore in wasserübersättigter Umgebung	93
4.8	Entwicklung der Tropfenmasse bei mehreren Hydrometeoren in wasser- übersättigter Umgebung . . . . .	94
4.9	Übersättigung um zwei Hydrometeore mit der GFEM . . . . .	102
4.10	Hydrometeormassen für zwei Hydrometeore mit der GFEM . . . . .	102
4.11	Bewegter Eiskristall mit der GFEM . . . . .	103
4.12	Tropfenmasse bei vorbeibewegendem Eiskristall mit der GFEM . . . . .	104
5.1	Modellvorstellung der lokalen Eiskristall-Tropfen Anordnung . . . . .	109
5.2	Schematische Aufteilung eines kubusförmigen Luftpaketes . . . . .	117
5.3	Bestimmung des Verteilungsparameters mit 14 Tropfen . . . . .	119
5.4	Bestimmung des Verteilungsparameters mit 38 Tropfen . . . . .	120

5.5	Modellbeispiel für Eisuntersättigung . . . . .	121
5.6	Modellbeispiel für Eisuntersättigung mit weniger Tropfen . . . . .	121
5.7	Modellbeispiele für weitere Feuchteregime . . . . .	122
5.8	Modellbeispiel mit Extremfällen . . . . .	125
5.9	Vereinfachte Gleichungen ohne Diffusion . . . . .	127
5.10	Box-Modell mit $w = 0 \text{ m s}^{-1}$ und $N_d = 40$ . . . . .	136
5.11	Sättigungsverhältnis im Box-Modell mit $w = 0 \text{ m s}^{-1}$ und $N_d = 40$ . . .	137
5.12	Box-Modell mit $w = 0 \text{ m s}^{-1}$ und $N_d = 500$ . . . . .	138
5.13	Temperaturverlauf im Box-Modell mit $w = 0 \text{ m s}^{-1}$ und $N_d = 500$ . . .	138
5.14	Box-Modell mit $w = 0 \text{ m s}^{-1}$ , $N_d = 500$ und Wasserübersättigung . . .	139
5.15	Box-Modell mit $w = -1 \text{ m s}^{-1}$ und $N_d = 200$ . . . . .	140
5.16	Box-Modell mit $w = -1 \text{ m s}^{-1}$ und $N_d = 500$ . . . . .	141
5.17	Box-Modell mit $w = 1 \text{ m s}^{-1}$ und $N_d = 500$ . . . . .	142
5.18	Sättigungsverhältnis im Box-Modell mit $w = 1 \text{ m s}^{-1}$ und $N_d = 500$ . . .	142
5.19	Box-Modell mit $w = 1 \text{ m s}^{-1}$ und $N_d = 500$ bei Wasserübersättigung . .	143
5.20	Box-Modell mit $w = 1 \text{ m s}^{-1}$ und $N_d = 500$ bei Wasserübersättigung . .	143
B.1	Exponenten der Sättigungsdampfdrücke . . . . .	160
B.2	Approximationsfehler im Fall des Wassers . . . . .	161
B.3	Approximationsfehler im Fall des Eises . . . . .	161
B.4	Wachstumsgleichung mit approximiertem Sättigungsdampfdruck . . . .	162

# Tabellenverzeichnis

4.1	Experimentelle Konvergenzordnung der GFEM . . . . .	105
5.1	Tropfentemperaturen im Vergleich zur asymptotischen Gleichgewichtstemperatur . . . . .	123
5.2	Eiskristalltemperaturen im Vergleich zur asymptotischen Gleichgewichtstemperatur . . . . .	124
5.3	Relative Fehler der approximativen Gleichungen . . . . .	128
C.1	Verwendete physikalische Konstanten . . . . .	164



# Kapitel 1

## Einleitung

Dem Anwenden muss das  
Erkennen vorausgehen.

---

(Max Planck, 1858 – 1947)

Wolken sind ein vertrautes Phänomen in der Atmosphäre. Sie treten sehr häufig auf und bedecken zu einem grossen Anteil die Erde (Hobbs, 1993, Kapitel 4). Die Wolke selbst ist ein Gemisch, bestehend aus kleinen Partikeln kondensierten Wassers in der Luft (Wang, 2013, Kapitel 1). Das kondensierte Wasser ist hierbei aufgeteilt auf flüssige Tropfen und Eispartikel. Daher lassen sich Wolken in drei Typen unterteilen: Wasserwolken, Eiswolken und Mischphasenwolken. Eine Wasserwolke besteht lediglich aus Tropfen von flüssigem Wasser, eine Eiswolke aus Eiskristallen und in einer Mischphasenwolke sind sowohl flüssige Tropfen als auch Eiskristalle vorhanden. Der Sammelbegriff für Wolkenpartikel, die mehrheitlich aus flüssigem Wasser oder Eis bestehen, ist *Hydrometeor*.

Die genannten Wolken treten in der unteren Schicht der Erdatmosphäre auf, der Troposphäre. Diese enthält über 99 % des gesamten atmosphärischen Wassers und damit auch die Wolken. Abhängig von der geographischen Breite, besitzt die Troposphäre eine Höhe zwischen 8 km und 16 km (Lamb und Verlinde, 2011, Kapitel 2.3.1). Sie zeichnet sich durch einen Temperaturabfall mit zunehmender Höhe aus. Die nächsthöhere atmosphärische Schicht heisst Stratosphäre und die Grenze zwischen diesen beiden Schichten wird durch ein Temperaturminimum ausgezeichnet, denn in der Stratosphäre steigt die Temperatur mit der Höhe wieder an (Lamb und Verlinde, 2011, Kapitel 2.3.1). In höheren Schichten oberhalb der Troposphäre können ebenfalls wolkenähnliche Strukturen existieren, beispielsweise polare Stratosphärenwolken. Diese bestehen allerdings nicht hauptsächlich aus Wasser (Wang, 2013, Kapitel 1.2).

Aufgrund der Temperaturabnahme mit zunehmender Höhe in der Troposphäre, treten Wasserwolken im unteren Teil und Eiswolken im oberen Teil der Troposphäre auf. Da Mischphasenwolken sowohl flüssige Tropfen als auch Eiskristalle enthalten, treten diese im mittleren Teil der Troposphäre auf, zumeist in Höhen oberhalb der Temperaturgrenze von 0 °C. Mischphasenwolken sind auf der Erde ein häufiges Phänomen (Zhang u. a., 2010; Korolev u. a., 2003). In der Arktis machen diese Wolken im Sommer sogar einen Anteil von 50 % aus (Mioche u. a., 2015). Der Fokus dieser Arbeit liegt auf Wachstumsprozessen von Hydrometeoren in Mischphasenwolken.

Obwohl in Mischphasenwolken die Temperatur üblicherweise unter 0 °C liegt, enthalten sie einen wesentlichen Anteil flüssiger Tropfen. Tatsächlich kann Wasser bis zu einer Temperatur von knapp über –40 °C flüssig bleiben. Flüssiges Wasser mit einer Temperatur unter 0 °C wird *unterkühltes Wasser* genannt. Dieser Zustand ist allerdings

ein metastabiler Zustand, denn die thermodynamisch stabile Phase in diesem Temperaturbereich ist die Eisphase (Rogers und Yau, 1989, Kapitel 6). Je näher die Temperatur von unterkühltem Wasser bei  $-40\text{ °C}$  liegt, desto höher ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich im flüssigen Wasser ein stabiler Eiskeim bildet, welcher das flüssige Wasser gefrieren lässt. Ein solcher Eiskeim ist durch eine zufällige, eisähnliche Anordnung der Wassermoleküle oder eine andere Substanz gegeben (Rogers und Yau, 1989, Kapitel 9). Je grösser die vorhandene Wassermenge ist, desto wahrscheinlicher wird die Bildung eines Eiskeims und damit auch das Gefrieren des flüssigen Wassers. Dies erklärt, dass beispielsweise ein See bereits ab  $0\text{ °C}$  eine Eisschicht ausbildet, denn die zur Verfügung stehende Wassermenge ist um ein Vielfaches grösser als die eines Wolkentropfens. Entsprechend hoch ist die Wahrscheinlichkeit für die Bildung eines Eiskeims. Die Wassermenge in einem Wolkentropfen hingegen ist deutlich kleiner und der Tropfen kann lange als unterkühlter Tropfen existieren. Aus diesem Grund kann eine Wolke auch bei Temperaturen unter  $0\text{ °C}$  viel flüssiges Wasser in Form von Tropfen enthalten.

Eine wesentliche Motivation für das Studium von Wolken ist die Erklärung und Vorhersage von Niederschlag. Es ist bekannt, dass ein Teil des Niederschlags aus Wasserwolken fällt (Devenish u. a., 2012). Dieser wird als *warmer Niederschlag* bezeichnet, da bei dessen Entstehung kein Eis beteiligt war. In den Tropen erreicht der Anteil des warmen Niederschlags sogar einen Anteil von 70 % (Lau und Wu, 2003). Für die Entstehung von warmem Niederschlag ist die Bildung von Regentropfen notwendig, die im Vergleich zu Wolkentropfen um den Faktor 100 grösser sind. Regentropfen entstehen durch das Kollidieren und anschliessende Zusammenfliessen von kleineren Tropfen (Rogers und Yau, 1989, Abbildung 6.1 und Kapitel 8).

Im Gegensatz zu warmem Niederschlag, kann Niederschlag auch unter Beteiligung von Eis gebildet werden. Offensichtlich ist bei Schneefall oder Niederschlag in Form von Graupel die Eisphase beteiligt. Allerdings kann auch flüssiger Regen durch fallende Eiskristalle verursacht werden, wenn diese beim Fallen zwischen der Wolkenunterkante und dem Erdboden schmelzen. Durch die Beteiligung des Eises sind die möglichen Entstehungsmechanismen für den Niederschlag vielfältiger. Daher wird vermutet, dass dieser den Anteil des weltweiten Niederschlags dominiert, was die Bedeutung von Mischphasenwolken unterstreicht. Ein Hinweis für die Richtigkeit dieser Vermutung für den Niederschlag über den Kontinenten wird in Mülmenstädt u. a. (2015) gegeben.

Auch für die Niederschlagsbildung über die Eisphase ist die Bildung von grossen Hydrometeoren entscheidend, die durch ihr Gewicht nach unten ausfallen. Hierbei kann der Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozess (WBF) helfen, der die Interaktion von Eiskristallen und Tropfen durch Diffusion beschreibt. Dieser Prozess steht im Fokus dieser Arbeit. Die physikalischen Hintergründe dieses Prozesses werden in Abschnitt 1.2 erläutert, nachdem in Abschnitt 1.1 die allgemeine Entwicklung einer Wolke skizziert wurde.

## 1.1 Entwicklung einer Wolke

Am Anfang der Wolkenentstehung steht die Bildung der Hydrometeore. Damit diese in der Atmosphäre entstehen können, sind *Aerosole* nötig. Dies sind flüssige oder feste Schwebstoffe in der Luft, an die sich Wasser aus der Gasphase anlagern kann. Der Vorgang



der Entstehung eines Tropfens wird *Aktivierung* genannt, im Fall eines Eiskristalls *Nukleation*. Die Aktivierung von flüssigen Tropfen findet bei einer relativen Feuchte bezüglich Wasser RH von knapp über 100 % statt. Der exakte Wert der benötigten relativen Feuchte hängt von den Eigenschaften des Aerosols ab (Wang, 2013, Kapitel 6). Die genaue Definition der relativen Feuchte erfolgt in Abschnitt 1.2. Die Nukleation von Eiskristallen an Aerosolen verläuft analog, sobald die relative Feuchte bezüglich Eis RHi bei 100 % liegt. Neben der Nukleation von Eis an einem Aerosol, kann auch Eis durch das Gefrieren von flüssigen Tropfen neu entstehen (Hoose und Möhler, 2012). In dieser Arbeit wird die Nukleation von Hydrometeoren nicht betrachtet.

Nach der Nukleation sind die entstandenen Hydrometeore üblicherweise sehr klein. Ein neu nukleierter Tropfen besitzt einen typischen Radius zwischen  $0.1\ \mu\text{m}$  und  $1\ \mu\text{m}$  (Rogers und Yau, 1989, Kapitel 6). Ist die relative Feuchte bezüglich Wasser höher als 100 %, so diffundiert Wasserdampf zum Tropfen und kondensiert, wodurch der Tropfen anwächst. Durch das Diffusionswachstum kann der Tropfen bis zu einem Radius von ungefähr  $20\ \mu\text{m}$  anwachsen, bevor die Diffusion von Wasserdampf zum Tropfen zu langsam wird (Khain u. a., 2000, Abschnitt 2.1.2). Ein typischer Wolkentropfen ist kugelförmig mit einem Radius zwischen  $10\ \mu\text{m}$  und  $15\ \mu\text{m}$  (Pruppacher und Beard, 1970; Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 2.1.3). Daher ist die Diffusion der entscheidende Prozess für dessen Entstehung. Das weitere Wachstum bis hin zur Grösse eines typischen Regentropfens von  $1000\ \mu\text{m}$ , erfolgt durch Kollisionen sowie das Einsammeln von kleineren Tropfen durch fallende grössere Tropfen (Rogers und Yau, 1989, Kapitel 8).

Die möglichen Grössen und Formen von Eiskristallen sind ungleich vielfältiger, im Vergleich zu denen der Tropfen. Abhängig von der Temperatur und der verfügbaren Wasserdampfmenge in der Umgebung, bilden sich sechseckige Eiskristalle in Plättchen- oder Nadelform, an deren Ecken sich zusätzlich Dendriten ausbilden können (Libbrecht, 2001). Bei einer Kollision der Eiskristalle werden diese, im Gegensatz zu Tropfen, nicht zusammenfliessen, sondern an einer Stelle zusammengefröhen. Deshalb ergeben sich viele verschiedene mögliche Formen von Eiskristallen. Die Grössen der Eiskristalle sind ebenfalls sehr unterschiedlich. Die Durchmesser der plättchenförmigen sowie die Längen der nadelförmigen Eiskristalle bewegen sich zwischen  $20\ \mu\text{m}$  und  $2\ \text{mm}$  (Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 2.2.1). Ein typischer Durchmesser für in einer Mischphasenwolke schwebende plättchen- und nadelförmige Eiskristalle ist  $300\ \mu\text{m}$  (Auer und Veal, 1970). Analog zum Wachstum von Tropfen durch Kollisionen, können auch Eiskristalle anwachsen. Hierbei kann in einer Mischphasenwolke ein Eiskristall nicht nur mit einem anderen Eiskristall kollidieren, sondern auch mit Tropfen. Ein Eiskristall hat bei einer Kollision auch nicht notwendigerweise eine Plättchen- oder Nadelform, sondern kann auch in Form von Hagel, Graupel oder einer Schneeflocke vorliegen. Daher sind eine Vielzahl verschiedener Kollisionen möglich (Khain u. a., 2000, Abschnitt 4.5). Die Vielfalt der möglichen Formen und Wechselwirkungen der Eiskristalle macht deren korrekte Repräsentation in Modellen, nicht nur bei der Berücksichtigung von Kollisionen, schwierig. So hängen beispielsweise die Fallgeschwindigkeit und die Strahlungseigenschaften von der Form der Eiskristalle ab (Heymsfield und Iaquinta, 2000; Wendisch u. a., 2007). Als Kompromiss zwischen der Formvielfalt in der Natur und einer praktikablen Modellierung, werden in Modellen ellipsoidförmige Eiskristalle angenommen (Lamb und Verlinde, 2011, Kapitel 8.3.5).

Der üblicherweise zur Beschreibung des Diffusionswachstums von Hydrometeoren verwendeten Maxwell-Theorie liegt die Annahme über eine genügend grosse Distanz zwischen den Hydrometeoren zugrunde, vergleiche Kapitel 2. Ist der Abstand zwischen den Hydrometeoren gross genug, so kann von einem unabhängigen Diffusionswachstum ausgegangen werden. Innerhalb einer Wolke ist die Luft jedoch sehr turbulent, das heisst es bilden sich viele zerfallende Verwirbelungen (Bodenschatz u. a., 2010). Aus Laborexperimenten ist bekannt, dass sich Tropfen aufgrund der Turbulenz nicht gleichmässig anordnen, sondern sich in bestimmten Bereichen häufen (zum Beispiel Wood u. a., 2005). In diesen Bereichen ist das Wachstum nicht unabhängig und es müssen die lokalen Interaktionen berücksichtigt werden, was bereits in Srivastava (1989) angemerkt wurde. Ein Ansatz, den Wettbewerb der Hydrometeore um den zur Verfügung stehenden Wasserdampf zu modellieren, findet sich in Fukuta (1992). In Marshall und Langleben (1954) wird ein Modell für die Interaktion zwischen Tropfen und Eiskristallen vorgeschlagen. In Kapitel 5 werden Anregungen aus den genannten Arbeiten kombiniert, um ein neues Modell für die lokale Interaktion zwischen Tropfen und Eiskristallen zu formulieren. Dieses Modell ist speziell auf die Modellierung des WBF zugeschnitten, vergleiche Abschnitt 1.2.

Die Turbulenz innerhalb der Wolke wirkt sich nicht nur auf das Diffusionswachstum der Hydrometeore aus. Beispielsweise wird in einer Wasserwolke die Kollisionseffizienz eines Tropfens durch die Turbulenz erhöht. Dies beschleunigt den Prozess zur Bildung grosser Tropfen, die letztendlich Niederschlag erzeugen (Devenish u. a., 2012, Abschnitt 4.2.7). Da die Turbulenz auf alle Hydrometeore einwirkt, wird in Mischphasenwolken auch die Wahrscheinlichkeit von Kollisionen zwischen Eiskristallen und Tropfen erhöht (Khain u. a., 2000, Abschnitt 4.5.2).

Die Anhäufung von Tropfen durch die Turbulenz wurde einerseits durch Laborexperimente und andererseits durch numerische Simulationen gezeigt. Letztere sind jedoch nur eingeschränkt auf den Fall einer realen Wolke übertragbar, denn die in den Simulationen verwendeten Reynoldszahlen, welche die Intensität der Turbulenz beschreiben, waren weit unter den Werten einer realen Wolke (Vaillancourt und Yau, 2000, Abschnitt 3). Direkte Beobachtungen von Tropfenanhäufungen in realen Wolken sind nicht vorhanden, jedoch zeigen Auswertungen von Messgeräten deren Existenz (Kostinski und Shaw, 2001). Daher liegt die Vermutung nahe, dass ähnliche Anhäufungen von Tropfen und Eiskristallen in Mischphasenwolken existieren, die den WBF begünstigen.

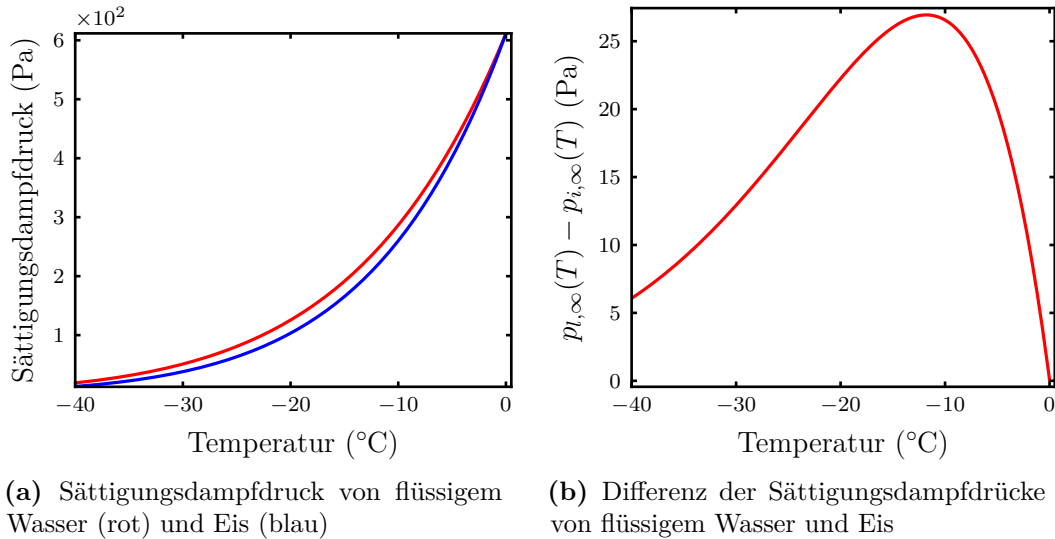
Ein weiterer lokaler Effekt durch die Anhäufung von Hydrometeoren kann die Abschirmung einzelner Hydrometeore sein, die hierdurch schneller oder langsamer durch die Diffusion wachsen können (Castellano und Avila, 2011). Die Anhäufungen können durch röhrenartige Wirbel hervorgerufen werden, welche durch die Turbulenz entstehen und an deren Rändern sich die Hydrometeore ansammeln. Innerhalb dieser Röhren kann sich eine hohe relative Feuchte ausbilden, die sogar Nukleation neuer Hydrometeore verursacht (Shaw u. a., 1998). Die unklaren aber zentralen Fragen für das Zusammenspiel zwischen Turbulenz und den vorgestellten Effekten lauten:

- Wie häufig treten Anhäufungen von Hydrometeoren auf?
- Wie lange bleiben Anhäufungen von Hydrometeoren bestehen?

Mit anderen Worten sind die typischen Längen- und Zeitskalen der Anhäufungen unklar. Die Antworten auf diese Fragen entscheiden über die Relevanz der lokalen Effekte auf die Entwicklung einer gesamten Wolke. In Vaillancourt u. a. (2001) und Vaillancourt u. a. (2002) wurde mithilfe einer numerischen Simulation das Verhalten von Tropfen in einer turbulenten Umgebung untersucht. Auch hier wurden Anhäufungen von Tropfen beobachtet, allerdings hatten diese nur eine geringe Auswirkung auf das Diffusionswachstum der gesamten Tropfenpopulation. Dieses Resultat deutet auf einen vernachlässigbaren Effekt der Turbulenz auf das Diffusionswachstum in Wasserwolken hin. Die Rahmenbedingungen dieser Simulationen entsprechen dem inneren Kern einer Wolke. In der Einmischzone am Rand der Wolke, in der trockene Umgebungsluft in die Wolke eingemischt wird, sind die Rahmenbedingungen deutlich inhomogener. In dieser Zone könnte der lokale Effekt eine weitaus grössere Rolle spielen, worauf idealisierte Simulationen von Celani u. a. (2005) und Celani u. a. (2007) hindeuten. Die Simulationen sind aber aufgrund der verwendeten Vereinfachungen sowie Rahmenbedingungen nur mit Vorsicht auf den Fall einer realen Wolke übertragbar (Grabowski und Wang, 2013, Abschnitt 3.3). Die genannten Studien beziehen sich auf den Fall einer Wasserwolke. In einer Mischphasenwolke kann sich die Situation durch die Präsenz der Eiskristalle jedoch ändern. Die aufgeworfenen Fragen über das Zusammenspiel von Turbulenz und Diffusionswachstum sowie nach der Relevanz für die Gesamtentwicklung einer Wolke lassen sich im Moment nicht definitiv beantworten und bedürfen weiterer Forschung.

## 1.2 Der Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozess

Wir betrachten eine ebene Oberfläche von reinem, flüssigem Wasser. In der Luft oberhalb der Wasseroberfläche sei Wasserdampf mit einem Partialdruck  $p_v$  vorhanden. Auf molekularer Ebene betrachtet, findet an der Wasseroberfläche ein ständiger Austausch von Wassermolekülen zwischen dem gasförmigen und flüssigen Zustand statt (Lamb und Verlinde, 2011, Abschnitt 3.1). Falls mehr Wassermoleküle aus der flüssigen Phase in die Gasphase wechseln, so verdampft das flüssige Wasser. Wechseln mehr Wassermoleküle aus der Gasphase in die flüssige Phase, so kondensiert Wasserdampf. Diese Szenarien lassen sich mit dem Partialdruck  $p_v$  des Wasserdampfes in Verbindung bringen. Beim Verdampfen des Wassers ist der Partialdruck  $p_v$  niedrig, bei der Kondensation hingegen hoch. Es gibt einen Druck  $p_{l,\infty}$  des Wasserdampfes, bei dem exakt die gleiche Menge an Wassermolekülen verdampft wie kondensiert. Dieser Druck heisst *Sättigungsdampfdruck* und hängt von der Temperatur  $T$  des flüssigen Wassers ab. Hat der Wasserdampf den Partialdruck  $p_{l,\infty}(T)$ , so sind das flüssige Wasser und der Wasserdampf im thermodynamischen Gleichgewicht und es findet kein Nettoaustausch von Wassermolekülen zwischen den beiden Phasen des Wassers statt. Das Konzept des Sättigungsdampfdrucks lässt sich auch auf den Fall einer ebenen Eisoberfläche übertragen. Den zugehörigen Sättigungsdampfdruck über Eis notieren wir mit  $p_{i,\infty}$ . Parametrisierungen dieser Sättigungsdampfdrücke, in Abhängigkeit von der Temperatur des flüssigen Wassers oder des Eises, finden sich in Abschnitt C.7. Die entscheidende Beobachtung für den WBF ist, dass der Sättigungsdampfdruck von unterkühltem Wasser höher ist als der Sättigungsdampfdruck von Eis, vergleiche Abbildung 1.1a. Die Differenz  $p_{l,\infty}(T) - p_{i,\infty}(T)$  der Sättigungsdampfdrücke ist bei ungefähr  $-11.7^\circ\text{C}$  maximal, siehe Abbildung 1.1b.



**Abbildung 1.1:** Vergleich der Sättigungsdampfdrücke von flüssigem Wasser und Eis im Temperaturbereich von  $-40\text{ °C}$  bis  $0\text{ °C}$ .

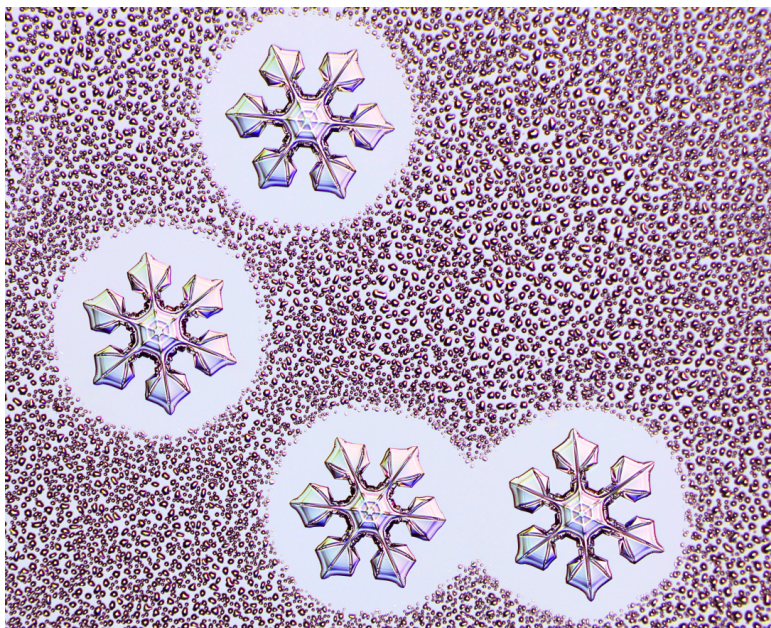
Wir betrachten wie zuvor ein System, in dem sich flüssiges Wasser, Eis und Wasserdampf bei einer Temperatur zwischen  $-40\text{ °C}$  und  $0\text{ °C}$  befinden. Ist der Wasserdampfdruck  $p_v$  höher als der Sättigungsdampfdruck  $p_{l,\infty}(T)$  des flüssigen Wassers, so liegt eine Übersättigung bezüglich Wasser und Eis vor und es kondensiert Wasserdampf in die flüssige und feste Phase. Diese Situation kann durch die Sättigungsverhältnisse  $S_\infty$  bezüglich Wasser und  $S_{\infty,i}$  bezüglich Eis beschrieben werden, die durch

$$S_\infty := \frac{p_v}{p_{l,\infty}(T)} \quad \text{und} \quad S_{\infty,i} := \frac{p_v}{p_{i,\infty}(T)} \quad (1.1)$$

definiert sind. Ein Wert der Sättigungsverhältnisse über 1 bedeutet eine Übersättigung bezüglich der jeweiligen Phase und ein Wert unter 1 eine Untersättigung. Beträgt der Wert des Sättigungsverhältnisses genau 1, so liegt ein Gleichgewicht bezüglich der jeweiligen Phase vor. In der Meteorologie wird dies auch durch die relativen Feuchten RH bezüglich Wasser und RH<sub>i</sub> bezüglich Eis ausgedrückt, die durch (1.1) definiert sind, aber als prozentuale Angabe

$$\text{RH} := S_\infty \cdot (100\%) \quad \text{und} \quad \text{RH}_i := S_{\infty,i} \cdot (100\%) \quad (1.2)$$

ausgedrückt werden. Die obige Situation kann daher durch  $S_\infty > 1$  und  $S_{\infty,i} > 1$  charakterisiert werden. Ist der Wasserdampfdruck  $p_v$  niedriger als der Sättigungsdampfdruck  $p_{i,\infty}(T)$ , gilt also  $S_\infty < 1$  und  $S_{\infty,i} < 1$ , so liegt eine Untersättigung bezüglich Wasser und Eis vor und beide kondensierte Phasen verdampfen. Die dritte Möglichkeit ist eine Untersättigung bezüglich Wasser und eine Übersättigung bezüglich Eis, das heißt es gilt  $S_\infty < 1$  und  $S_{\infty,i} > 1$ . In diesem Fall verdampft das flüssige Wasser und es findet eine Kondensation auf das Eis statt. Flüssiges Wasser und Eis können ausserhalb des Tripelpunktes  $T = 273.16\text{ K}$ ,  $p = 611.657\text{ Pa}$  niemals thermodynamisch stabil koexistieren. Durch Verdampfen einer Phase wird der Partialdruck  $p_v$  erhöht und durch



**Abbildung 1.2:** Experimentelle Veranschaulichung des Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozesses von Libbrecht (o.D.). Der niedrigere Sättigungsdampfdruck des Eises sorgt in der Umgebung eines Eiskristalls für eine Untersättigung bezüglich Wasser und lässt die Tropfen lokal verdampfen. Hierdurch können die Eiskristalle auf Kosten der Tropfen anwachsen.

Kondensation vermindert. Ist beispielsweise eine Sättigung bezüglich flüssigem Wasser erreicht, so gilt zwar  $S_\infty = 1$  bezüglich dem flüssigen Wasser, aber  $S_{\infty,i} > 1$  bezüglich des Eises. Es liegt daher eine Übersättigung bezüglich Eis vor, was eine Kondensation von Wasserdampf auf das Eis verursacht. Hierdurch entsteht eine Untersättigung bezüglich des flüssigen Wassers und es beginnt zu verdampfen. Dies ist der physikalische Grund für die thermodynamische Instabilität eines Systems in dem sich unterkühltes Wasser und Eis befinden, die als WBF bekannt ist.

Eine Veranschaulichung des WBF ist in Abbildung 1.2 dargestellt. Die Eiskristalle haben gemäss Abbildung 1.1 einen niedrigeren Sättigungsdampfdruck als die umgebenden Tropfen. Daher verursachen sie in ihrer Umgebung eine Untersättigung bezüglich Wasser, was die Tropfen dort verdampfen lässt. Die Eiskristalle können auf Kosten der umgebenden Tropfen anwachsen. Dieser Mechanismus wurde von Wegener (1911), Bergeron (1949) und Findeisen (1938) im Zusammenhang mit der Niederschlagsbildung durch die Eisphase in Mischphasenwolken beschrieben. Die Eiskristalle befinden sich in einer bezüglich Eis übersättigten Umgebung, wodurch diese anwachsen können, was die Bildung der für Niederschlag benötigten grossen Eiskristalle unterstützt. Eine weitere Auswirkung des WBF auf eine Mischphasenwolke ist deren allmähliche Vereisung, das heisst das flüssige Wasser wird kontinuierlich durch die Eiskristalle verdampft, bis letztlich nur noch Eiskristalle vorhanden sind (Wang, 2013, Abschnitt 4.12; Korolev, 2007).

In Abbildung 1.2 ist die Lokalität des WBF klar ersichtlich. In der direkten Umgebung des Eiskristalls bildet sich eine Untersättigung bezüglich Wasser, welche die dortigen Tropfen verdampfen lässt. Durch die Kondensation des Wasserdampfes auf die Eiskristalle, wird der Wasserdampfdruck  $p_v$  jedoch auch insgesamt geringer, was eine globale Auswirkung des WBF repräsentiert. Üblicherweise wird in Modellen ausschliesslich dieser globale Effekt berücksichtigt, was in der direkten Anwendung der Maxwell-Theorie auf das Diffusionswachstum der Hydrometeore begründet liegt. Konzeptionell wird die räumliche Variation des Wasserdampfdrucks und des Sättigungsverhältnisses vernachlässigt. Die Hydrometeore reagieren ausschliesslich auf den gemittelten, globalen Wert. In Abbildung 1.2 wird der globale Wert des Sättigungsverhältnisses  $S_\infty$  bezüglich flüssigen Wassers bei 1 liegen. Die Eiskristalle sind eine Senke für den Wasserdampf und daher besitzt  $S_\infty$  in deren Umgebung einen Wert unter 1.

Wie im vorangegangenen Abschnitt angedeutet, kann die Turbulenz für eine Anhäufung von Hydrometeoren sorgen, was die Betrachtung der lokalen Variation der Sättigungsverhältnisse erfordert. Mit anderen Worten kann die Relevanz der lokalen Interaktion der Hydrometeore für das Diffusionswachstum durch die Turbulenz zunehmen.

### 1.3 Zielsetzung und Struktur der Arbeit

In den vorherigen Abschnitten wurde die mögliche Bedeutung der lokalen Interaktion auf das Diffusionswachstum von Hydrometeoren in Mischphasenwolken angedeutet. Ziel der Arbeit ist es, eine Beschreibung der lokalen Interaktion durch Diffusion zwischen Eiskristallen und den umgebenden Tropfen zu finden. Das weitere Ziel besteht darin, diese Beschreibung in eine Form zu bringen, die potentiell in einem grösseren Modell verwendet werden kann, beispielsweise einem Large-Eddy-Simulation-Modell (LES) oder einem Modell für die Wettervorhersage.

In Kapitel 2 werden zunächst die Wachstumsgleichungen für das Diffusionswachstum eines einzelnen Hydrometeors vorgestellt und untersucht. Hierbei wird auf die Berechnung des Sättigungsdampfdrucks für einen Hydrometeor eingegangen, denn durch die Oberflächenkrümmung des Hydrometeors werden die Werte im Vergleich zum Fall einer ebenen Oberfläche verändert. Anschliessend wird die klassische Maxwell-Theorie zur Beschreibung des Diffusionswachstums eines Hydrometeors rekapituliert und die hierbei getroffenen Annahmen und Vereinfachungen hervorgehoben. Abschliessend wird eine asymptotische Lösung der Wachstumsgleichungen hergeleitet. Diese ist zwar keine exakte Lösung der Gleichungen, erfasst jedoch die wichtigsten Eigenschaften.

Kapitel 3 beschäftigt sich mit der Formulierung und Entdimensionalisierung der Gleichungen, welche die Interaktion zwischen den Hydrometeoren durch die Diffusion beschreiben. Zudem wird für einen Spezialfall die Existenz und Eindeutigkeit einer exakten Lösung der Modellgleichungen gezeigt.

Die Modellgleichungen aus Kapitel 3 werden implementiert und numerisch gelöst, um die lokale Interaktion mithilfe eines Referenzmodells studieren zu können. Die relevante Numerik wird in Kapitel 4 beschrieben. Die Modellgleichungen werden im Referenzmodell mit der Finite-Elemente-Methode (FEM) gelöst. Zudem wird die Verallgemeinerte Finite-Elemente-Methode („Generalized finite element method“) (GFEM) als alternative numerische Methode zur Lösung der Modellgleichungen vorgestellt.

In Kapitel 5 wird ein neues Modell beschrieben, das die Berücksichtigung der lokalen Interaktion erlaubt und potentiell in ein LES-Modell integriert werden kann. Damit ist eine physikalisch konsistente Repräsentation des WBF möglich.

Abschliessend folgt in Kapitel 6 eine Zusammenfassung des Inhalts der Arbeit sowie ein Ausblick, wie die in dieser Arbeit gezeigten Themen weiter vertieft werden können.

In Anhang C werden die physikalischen Parametrisierungen aufgelistet, die in den Berechnungen im Rahmen dieser Arbeit verwendet wurden.





# Kapitel 2

## Betrachtung eines einzelnen Hydrometeors

In diesem Kapitel betrachten wir das Verhalten eines einzelnen Hydrometeors bezüglich der Diffusion von Wasserdampf und Wärmeleitung. In Abschnitt 2.1 werden zunächst die Gleichungen angegeben, die das Diffusionswachstum eines Hydrometeors bestimmen. In Abschnitt 2.2 beleuchten wir den Effekt einer gekrümmten Oberfläche auf den Sättigungsdampfdruck. Abschnitt 2.3 ist der klassischen Theorie von Maxwell über das Wachstum von Hydrometeoren gewidmet. Da die Maxwell-Theorie in der Praxis meist zur Beschreibung des Wachstums von Hydrometeoren benutzt wird, werden wir diese Theorie rekapitulieren und zusätzlich die getroffenen Annahmen und Vereinfachungen herausstellen. Im Rahmen der Maxwell-Theorie wird die Temperaturgleichung aus dem System der Wachstumsgleichungen eliminiert. Daher wird in Abschnitt 2.4 das vollständige Gleichungssystem angegeben. In Abschnitt 2.5 konstruieren wir, unter gewissen Annahmen, eine asymptotische Näherung der Wachstumsgleichungen. Zuletzt gehen wir in Abschnitt 2.6 auf eine Regularisierung der Wachstumsgleichungen ein, die für den Fall eines verdampfenden Hydrometeors singulär sind.

### 2.1 Wachstumsgleichungen

Wir bezeichnen mit  $\omega$  einen Hydrometeor, also einen Wassertropfen oder einen Eiskristall, bestehend aus reinem Wasser oder reinem Eis. Dieser Hydrometeor befindet sich in einer Umgebung aus feuchter Luft, das heisst einem Gasgemisch aus Wasserdampf und trockener Luft. Die feuchte Luft definiert durch ihre Temperatur zusätzlich ein Temperaturfeld in der Umgebung des Hydrometeors. Wir bezeichnen die Dichte des Wasserdampfes mit  $\rho_v$  und die Temperatur mit  $T$ . Die Gleichungen, welche die Interaktion des Hydrometeors mit dem umgebenden Wasserdampf- und Temperaturfeld beschreiben, sind durch

$$\frac{dm_\omega}{dt} = \alpha_\omega \int_{\partial\omega} D(\rho_v, T) \langle \nabla \rho_v, N \rangle d\sigma, \quad (2.1a)$$

$$m_\omega c_{p,\omega} \frac{dT_\omega}{dt} = L_\omega \frac{dm_\omega}{dt} + \int_{\partial\omega} K(\rho_v, T) \langle \nabla T, N \rangle d\sigma \quad (2.1b)$$

gegeben, wobei  $m_\omega$  die Masse und  $T_\omega$  die Temperatur des Hydrometeors  $\omega$  bezeichnen. Darüber hinaus bezeichnet  $\alpha_\omega$  den Akkomodationskoeffizienten, welcher die Effektivität, mit der Wassermoleküle aus der Dampfphase in den Hydrometeor aufgenommen werden, angibt und einen Wert im Intervall  $[0, 1]$  besitzt (Davis, 2006),  $D$  die Diffusivität,  $K$  die thermale Konduktivität,  $c_{p,\omega}$  die spezifische Wärmekapazität und  $L_\omega$  die latente Wärme

eines Phasenübergangs. Der Vektor  $N$  bezeichnet die Oberflächennormale von  $\omega$ . Die Integranden aus (2.1) ergeben sich aus dem Fickschen Gesetz über die Diffusion und dem Fourierschen Gesetz über die Wärmeleitung (Lebon u. a., 2008, Kapitel 2.1).

Die Gleichung (2.1a) beschreibt die Kontinuitätsgleichung für die Wassermasse, (2.1b) repräsentiert die Energieerhaltung, die wie nachfolgend beschrieben aus der Thermodynamik resultiert. Die aufgrund eines Phasenübergangs verursachte Wärmeänderung  $dQ_{\text{Phasenübergang}}$  ist durch

$$dQ_{\text{Phasenübergang}} = L_{\omega}(T_{\omega}) dm_{\omega} \quad (2.2)$$

gegeben. Ferner wird durch die Wärmeleitung Wärme vom Tropfen, gemäss dem Fourierschen Gesetz, wegtransportiert. Die entstehende Wärmeänderung durch Konduktion sei  $dQ_{\text{Konduktion}}$  und ist durch

$$\frac{dQ_{\text{Konduktion}}}{dt} = \int_{\partial\omega} K(\rho_v, T) \langle \nabla T, N \rangle d\sigma \quad (2.3)$$

gegeben. Das bedeutet, die Gesamtwärmeänderung des Tropfens ist

$$dQ = dQ_{\text{Phasenübergang}} + dQ_{\text{Konduktion}} = L_{\omega}(T_{\omega}) dm_{\omega} + dQ_{\text{Konduktion}}. \quad (2.4)$$

Da der Phasenübergang isobar ist, folgt aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik, welcher die Energieerhaltung beschreibt, die Gleichung  $dQ = c_{p,\omega}(T_{\omega})m_{\omega} dT_{\omega}$  (Kondepudi und Prigogine, 1998, Kapitel 2.2). Zusammen mit (2.2) und (2.4) folgt

$$c_{p,\omega}(T_{\omega})m_{\omega} dT_{\omega} = L_{\omega}(T_{\omega}) dm_{\omega} + dQ_{\text{Konduktion}}. \quad (2.5)$$

Das Bilden der zeitlichen Ableitung von (2.5) liefert mit (2.3) die Temperaturgleichung (2.1b). Wir bemerken bereits an dieser Stelle, dass die Gleichungen (2.1) in  $m_{\omega} = 0$  singular sind. Dies werden wir in Abschnitt 2.6 genauer diskutieren.

## 2.2 Oberflächenkrümmung

In diesem Abschnitt beschreiben wir den Einfluss einer gekrümmten Oberfläche auf den Sättigungsdampfdruck eines Hydrometeors. Der Sättigungsdampfdruck ist derjenige Druck des Wasserdampfes, welcher benötigt wird, damit der aus Wasser bestehende Hydrometeor weder anwächst noch verdunstet. Tatsächlich stellt sich ein „dynamisches Gleichgewicht“ ein. Das bedeutet, es gehen genauso viele Wassermoleküle von der Dampfphase in die entsprechende kondensierte Phase des Hydrometeors über wie umgekehrt.

Die Krümmung eines Hydrometeors bewirkt eine Änderung des Sättigungsdampfdrucks gegenüber dem Sättigungsdampfdruck über einer entsprechenden ebenen Wasseroberfläche. Im Folgenden zeigen wir, dass der Sättigungsdampfdruck über einer konvexen Wasseroberfläche höher ist als über einer ebenen Wasseroberfläche. Dieser Krümmungseffekt lässt sich durch das chemische Potential beschreiben. In dieser Darstellung folgen wir im Wesentlichen Wang (2013, Kapitel 5).

Die Gibbs-Duhem-Gleichung aus der Thermodynamik (Kondepudi und Prigogine, 1998, Kapitel 5.2) liefert

$$\frac{\partial \mu}{\partial p} = V_{\text{mol}}, \quad (2.6)$$

falls die Temperatur konstant ist und keine Änderung in den Stoffmengen auftritt. Hierbei bezeichnen  $\mu$  das chemische Potential,  $p$  den Druck und  $V_{\text{mol}}$  das molare Volumen. Durch (2.6) kann das chemische Potential von flüssigem Wasser und Wasserdampf berechnet und daraus der Krümmungseffekt abgeleitet werden. Wir betrachten den Fall eines Tropfens. Da die Gibbs-Duhem-Gleichung allgemein gilt, überträgt sich die folgende Diskussion direkt auf den Fall eines Eispartikels. Speziell für den Fall eines Eiskristalls können jedoch auch die Wulff-Gleichungen verwendet werden, um die Abhängigkeit des Sättigungsdampfdrucks von den Oberflächeneigenschaften zu beschreiben (Defay u. a., 1966, Kapitel XVII, 4).

Für flüssiges Wasser verwenden wir einen Index „l“. Aus der Inkompressibilität von flüssigem Wasser folgt die Konstanz des molaren Volumens  $V_{\text{mol},l}$  und aus (2.6) ergibt sich das chemische Potential

$$\mu_l(p_l, T_l) = \mu_{l,0}(T_l) + p_l V_{\text{mol},l} \quad (2.7)$$

für flüssiges Wasser. Für den Wasserdampf gilt die ideale Gasgleichung  $p_v V_{\text{mol},v} = R^* T_v$  (Kondepudi und Prigogine, 1998, Kapitel 1.3) mit der universellen Gaskonstante  $R^*$ , dem Wasserdampfpartialdruck  $p_v$ , dem molaren Volumen von Wasserdampf  $V_{\text{mol},v}$  und der Temperatur  $T_v$  des Wasserdampfes. Setzen wir die ideale Gasgleichung in (2.6) ein und integrieren nach  $p_v$ , ergibt sich für das chemische Potential des Wasserdampfes

$$\mu_v(p_v, T_v) = \mu_{v,0}(T_v) + R^* T_v \log(p_v). \quad (2.8)$$

Für die Ableitungen der chemischen Potentiale (2.7) und (2.8) gilt

$$d\mu_l = \frac{\partial \mu_{l,0}}{\partial T_l}(T_l) dT_l + V_{\text{mol},l} dp_l, \quad (2.9a)$$

$$d\mu_v = \left( \frac{\partial \mu_{v,0}}{\partial T_v}(T_v) + R^* \log(p_v) \right) dT_v + \frac{R^* T_v}{p_v} dp_v. \quad (2.9b)$$

Mit  $p_l - p_v = \Delta p$  für die Druckdifferenz erhalten wir  $dp_l = dp_v + d(\Delta p)$ . Damit kann (2.9a) zu

$$d\mu_l = \frac{\partial \mu_{l,0}}{\partial T_l}(T_l) dT_l + V_{\text{mol},l} dp_v + V_{\text{mol},l} d(\Delta p) \quad (2.10)$$

umgeschrieben werden. Da es im thermodynamischen Gleichgewicht keine Wärmeleitung gibt, ist  $T_v = T_l =: T$  konstant, insbesondere gilt  $dT = 0$ . Das thermodynamische Gleichgewicht ist durch  $d\mu_l = d\mu_v$  charakterisiert (Kondepudi und Prigogine, 1998, Kapitel 7.1; Job und Herrmann, 2006, Abschnitt 9). Aufgrund dieser Gleichgewichtsbedingung folgt aus (2.9) und (2.10)

$$V_{\text{mol},l} d(\Delta p) + V_{\text{mol},l} dp_v = \frac{R^* T}{p_v} dp_v = V_{\text{mol},v} dp_v. \quad (2.11)$$

Hierbei wurde die ideale Gasgleichung angewendet. Nach einer Äquivalenzumformung ergibt sich

$$V_{\text{mol},l} d(\Delta p) = (V_{\text{mol},v} - V_{\text{mol},l}) dp_v \approx V_{\text{mol},v} dp_v = \frac{R^*T}{p_v} dp_v = R^*T d(\log(p_v)), \quad (2.12)$$

wobei die übliche Approximation  $V_{\text{mol},v} - V_{\text{mol},l} \approx V_{\text{mol},v}$  verwendet wurde, denn das Volumen von einem Mol Wasserdampf ist um ein Vielfaches grösser als das Volumen von einem Mol flüssigem Wasser oder auch Eis. Der Effekt der Krümmung auf den Sättigungsdampfdruck ergibt sich aus (2.12) bei einer Integration vom „flachen Zustand“ zum „gekrümmten Zustand“. Dazu sei  $p_{l,\infty}$  der Sättigungsdampfdruck von Wasser über einer ebenen Oberfläche. Es folgt

$$\log\left(\frac{p_v}{p_{l,\infty}(T)}\right) = \int_{p_{l,\infty}(T)}^{p_v} d\log(p'_v) = \int_0^{\Delta p} \frac{V_{\text{mol},l}}{R^*T} dp' = \frac{V_{\text{mol},l}\Delta p}{R^*T} \quad (2.13)$$

beziehungsweise

$$p_v = p_{l,\infty}(T) \exp\left(\frac{V_{\text{mol},l}\Delta p}{R^*T}\right). \quad (2.14)$$

Im letzten Schritt verwenden wir für die Druckdifferenz  $\Delta p$  die Formel von Laplace (Defay u. a., 1966, Kapitel I, 3)

$$\Delta p = \sigma_l(\kappa_1 + \kappa_2). \quad (2.15)$$

Hierbei bezeichnet  $\sigma_l$  die Oberflächenspannung von Wasser sowie  $\kappa_1, \kappa_2$  die Hauptkrümmungen der Oberfläche. Die Formel von Laplace gilt auch allgemeiner, zum Beispiel für eine Eisoberfläche, wenn die Oberflächenspannung entsprechend ersetzt wird. Da die Hauptkrümmungen vom Ort auf der Oberfläche abhängen, ist der Druckunterschied  $\Delta p$  ebenfalls vom Ort auf der Oberfläche abhängig. Durch Einsetzen der Formel von Laplace in (2.14) ergibt sich

$$p_v = p_{l,\infty}(T) \exp\left(\frac{V_{\text{mol},l}\sigma_l(T)}{R^*T}(\kappa_1 + \kappa_2)\right) = p_{l,\infty}(T) \exp\left(\frac{\sigma_l(T)}{R_v\rho_l(T)T}(\kappa_1 + \kappa_2)\right), \quad (2.16)$$

wobei  $R_v$  die spezielle Gaskonstante für Wasserdampf und  $\rho_l$  die Dichte von Wasser bezeichnen. Im letzten Schritt wurden die Gleichungen  $\rho_l V_{\text{mol}} = M_{\text{mol}}$ , mit der molaren Masse  $M_{\text{mol}}$  von Wasser, sowie  $R_v M_{\text{mol}} = R^*$  verwendet. Beide Gleichungen folgen direkt aus den Definitionen.

Die Konsequenz aus (2.16) ist ein grösserer Sättigungsdampfdruck über einem konvexen Hydrometeor im Vergleich zu einer ebenen Wasseroberfläche. Folglich benötigt ein Tropfen einen höheren Wasserdampfdruck als eine ebene Wasseroberfläche, um nicht zu verdampfen, vergleiche Abschnitt 2.2.2.

In der gesamten Diskussion des Krümmungseffekts wurde stets ein Kontinuum angenommen, sowohl für die Dampfphase als auch für die kondensierte Phase des Hydrometeors. Diese Annahme trifft jedoch für sehr kleine Hydrometeore nicht zu, insbesondere wenn der Hydrometeor lediglich aus wenigen Molekülen besteht. In diesem Fall wird beispielsweise bereits die Definition des Begriffs der Oberflächenspannung problematisch. Letztlich muss hier die etwas philosophische Frage beantwortet werden, ab wie vielen Molekülen ein Molekülverband als ein Hydrometeor angesehen werden kann.

### 2.2.1 Hauptkrümmungen für Rotationsflächen

Als Modell für einen Tropfen oder ein Eispartikel werden Rotationskörper verwendet. Ein Tropfen wird als Kugel und ein Eispartikel als Ellipsoid modelliert. Aus diesem Grund berechnen wir in diesem Abschnitt die Hauptkrümmungen einer beliebigen Rotationsfläche.

Sei  $I \subset \mathbb{R}$  ein Intervall und  $\gamma : I \rightarrow \mathbb{R}^2$  eine differenzierbare, injektive Kurve mit  $\gamma'(t) \neq 0$  und Koordinatendarstellung  $\gamma(t) = (a(t), b(t))$ . Die zugehörige Rotationsfläche wird durch

$$\begin{aligned} \varphi : I \times \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\ (t, \theta) &\mapsto \begin{pmatrix} a(t) \cdot \cos(\theta) \\ a(t) \cdot \sin(\theta) \\ b(t) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.17)$$

parametrisiert (Lee, 1997, Exercise 3.3). Durch die Tangentialvektoren

$$\frac{\partial}{\partial x_1} := \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \begin{pmatrix} a'(t) \cos(\theta) \\ a'(t) \sin(\theta) \\ b'(t) \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial x_2} := \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} = \begin{pmatrix} -a(t) \sin(\theta) \\ a(t) \cos(\theta) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

wird eine Basis der Tangentialräume definiert. Aus diesen Basisvektoren ergibt sich durch Anwendung des Vektorprodukts der nicht normierte Normalenvektor

$$\tilde{N} := \frac{\partial}{\partial x_1} \times \frac{\partial}{\partial x_2} = a(t) \begin{pmatrix} -b'(t) \cos(\theta) \\ -b'(t) \sin(\theta) \\ a'(t) \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Wegen  $\|\tilde{N}\|^2 = a(t)^2 [b'(t)^2 + a'(t)^2] =: a(t)^2 g(t)$  ist

$$N := \frac{\tilde{N}}{\|\tilde{N}\|} = \frac{1}{\sqrt{g(t)}} \begin{pmatrix} -b'(t) \cos(\theta) \\ -b'(t) \sin(\theta) \\ a'(t) \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

ein normierter Normalenvektor.

Mithilfe der zweiten Fundamentalform der Fläche kann der sogenannte „Form-Operator“  $s$  definiert werden. Dieser liefert für jeden Punkt  $q$  der Fläche einen Endomorphismus  $s_q$  auf dem Tangentialraum der Fläche am Punkt  $q$ . Die Eigenwerte des Endomorphismus  $s_q$  sind die Hauptkrümmungen der Fläche am Punkt  $q$  (Lee, 1997, Kapitel 8). Die Darstellung des Formoperators in der Basis (2.18) des Tangentialraums wird durch die Weingarten-Gleichung (Lee, 1997, Gleichung 8.3) ermöglicht. Diese besagt

$$s_q \left( \frac{\partial}{\partial x_1} \right)_q = -\frac{\partial N}{\partial t}(t_0, \theta_0) \quad \text{und} \quad s_q \left( \frac{\partial}{\partial x_2} \right)_q = -\frac{\partial N}{\partial \theta}(t_0, \theta_0), \quad (2.21)$$

mit  $q = \varphi(t_0, \theta_0)$ . Führen wir die entsprechenden Berechnungen durch, ergibt sich

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{1}{g(t)} \begin{pmatrix} -(b''(t)\sqrt{g(t)} - b'(t)f(t)) \cos(\theta) \\ -(b''(t)\sqrt{g(t)} - b'(t)f(t)) \sin(\theta) \\ a''(t)\sqrt{g(t)} - a'(t)f(t) \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \frac{\partial N}{\partial \theta} = \frac{1}{\sqrt{g(t)}} \begin{pmatrix} b'(t) \sin(\theta) \\ -b'(t) \cos(\theta) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

mit

$$f(t) := \frac{d}{dt} \left( \sqrt{g(t)} \right) = \frac{b''(t)b'(t) + a''(t)a'(t)}{\sqrt{g(t)}}. \quad (2.23)$$

Damit ergibt sich

$$s \left( \frac{\partial}{\partial x_1} \right) = -\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{b''(t)\sqrt{g(t)} - b'(t)f(t)}{a'(t)g(t)} \frac{\partial}{\partial x_1} \quad (2.24)$$

für das Bild des ersten Basisvektors. Die Gleichheit in den ersten beiden Komponenten ist offensichtlich. Für die dritte Komponente lässt sich das mit  $(\sqrt{g(t)})^2 = a'(t)^2 + b'(t)^2$  einfach nachrechnen. Das Bild des zweiten Basisvektors ist

$$s \left( \frac{\partial}{\partial x_2} \right) = -\frac{\partial N}{\partial \theta} = \frac{b'(t)}{a(t)\sqrt{g(t)}} \frac{\partial}{\partial x_2}. \quad (2.25)$$

Aufgrund von (2.24) und (2.25) ist der Form-Operator  $s$  bereits in jedem Punkt diagonal und die Hauptkrümmungen sind

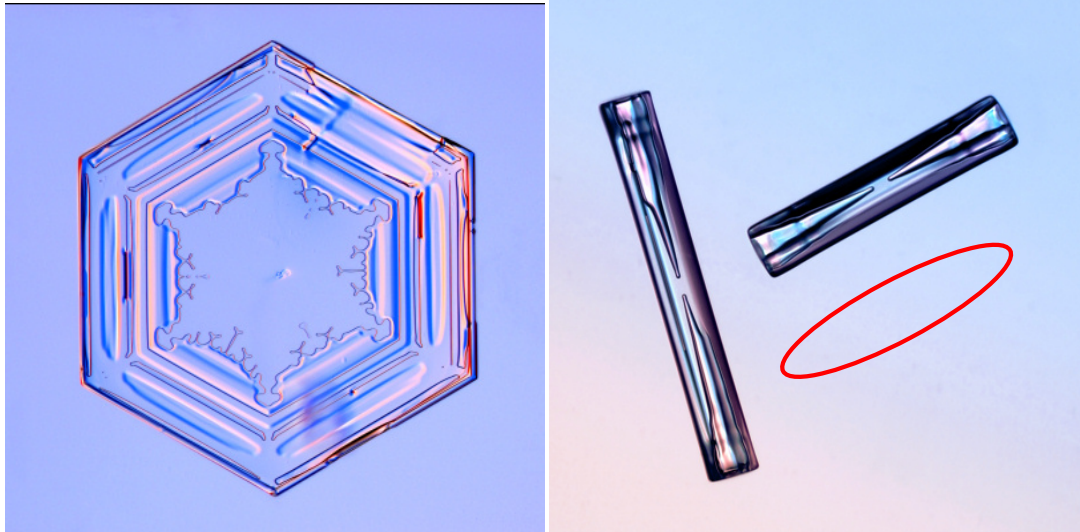
$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \frac{b''(t)\sqrt{g(t)} - b'(t)f(t)}{a'(t)g(t)} = \dots = \frac{b''(t)a'(t) - b'(t)a''(t)}{g(t)^{\frac{3}{2}}}, \\ \kappa_2 &= \frac{b'(t)}{a(t)\sqrt{g(t)}}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

### 2.2.2 Sättigungsdampfdruck über einem kugelförmigen Tropfen

Das gängige Modell für einen Wolkentropfen ist eine Kugel. Dieses Modell stimmt für Tropfen mit einem Radius unter  $140 \mu\text{m}$  mit der Realität überein. Für grössere Tropfen, wie beispielsweise Regentropfen, ist dieses Modell aber ungeeignet (Pruppacher und Beard, 1970). Da ein typischer Wolkentropfen einen Radius von  $10 \mu\text{m}$  besitzt, ist die Annahme einer Kugelform berechtigt.

Wir berechnen nun den Sättigungsdampfdruck für einen kugelförmigen Tropfen mit Radius  $r_d$ . Dessen Oberfläche ist eine Sphäre, welche die Rotationsfläche eines Kreises mit gleichem Radius ist. Der Kreis wird durch

$$\begin{aligned} \gamma : \left( -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right) &\rightarrow \mathbb{R}^2 \\ t &\mapsto (r_d \cos(t), r_d \sin(t)) \end{aligned} \quad (2.27)$$



(a) Plättchenförmiger Eiskristall

(b) Nadelförmige Eiskristalle

**Abbildung 2.1:** Reale plättchen- und nadelförmige Eiskristalle von Libbrecht (o.D.). Für den nadelförmigen Eiskristall wurde eine mögliche Approximation eingefügt.

parametrisiert, das heisst es gilt  $a(t) = r_d \cos(t)$  und  $b(t) = r_d \sin(t)$  in der Notation von Abschnitt 2.2.1. Für die Hauptkrümmungen folgt aus (2.26)

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= \frac{-r_d \sin(t) \cdot (-r_d) \sin(t) - r_d \cos(t) \cdot (-r_d) \cos(t)}{(r_d^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{r_d}, \\ \kappa_2 &= \frac{r_d \cos(t)}{r_d \cos(t) \sqrt{r_d^2}} = \frac{1}{r_d}.\end{aligned}\tag{2.28}$$

Daraus ergibt sich mit (2.16) die Sättigungsdampfdruckformel

$$p_v = p_{l,\infty}(T) \exp\left(\frac{2\sigma_l(T)}{R_v \rho_l(T) T r_d}\right).\tag{2.29}$$

Aus (2.29) folgt die Unabhängigkeit des Sättigungsdampfdrucks vom Ort auf der Kugeloberfläche. Zusätzlich zeigt die Formel, dass der Sättigungsdampfdruck für kleine Radien sehr gross wird.

### 2.2.3 Sättigungsdampfdruck über einem ellipsoidförmigen Eiskristall

In der Atmosphäre treten sehr viele verschiedene Formen von Eiskristallen auf. Allerdings gibt es, abhängig von den aktuellen Umgebungsbedingungen, zwei sehr typische Formen, dünne Plättchen und lange Nadeln (Libbrecht, 2005). Ein üblicher Kompromiss für die Modellierung von Eiskristallen ist die Ellipsoidform. Durch das Verhältnis der Halbachsen des Ellipsoides lassen sich sowohl die plättchenförmigen als auch die nadelförmigen Eiskristalle annähern, vergleiche Abbildung 2.1. Daher werden wir ebenfalls ellipsoidförmige Eiskristalle betrachten. Wir nehmen ausserdem an, dass zwei der drei

Halbachsen des Ellipsoides gleich lang sind und modellieren den Ellipsoid als Rotationskörper einer Ellipse um die  $z$ -Achse im  $\mathbb{R}^3$ . Die Halbachsen in der  $x$ - $y$ -Ebene besitzen die gleiche Länge  $L_b$ . Die Länge der Halbachse in  $z$ -Richtung sei  $L_a$ . Die Ellipse, die in der  $x$ - $z$ -Ebene liegt und die Grundkurve des Ellipsoides darstellt, kann durch

$$\begin{aligned} \gamma : \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) &\rightarrow \mathbb{R}^2 \\ t &\mapsto (L_b \cos(t), L_a \sin(t)) \end{aligned} \quad (2.30)$$

parametrisiert werden. Es gilt  $a(t) = L_b \cos(t)$  und  $b(t) = L_a \sin(t)$  in der Notation aus Abschnitt 2.2.1. Für die Hauptkrümmungen ergibt sich mit (2.26)

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \frac{-L_a \sin(t) \cdot (-L_b) \sin(t) - L_a \cos(t) \cdot (-L_b) \cos(t)}{(L_b^2 \sin^2(t) + L_a^2 \cos^2(t))^{\frac{3}{2}}} = \frac{L_a L_b}{(L_b^2 \sin^2(t) + L_a^2 \cos^2(t))^{\frac{3}{2}}}, \\ \kappa_2 &= \frac{L_a \cos(t)}{L_b \cos(t) \sqrt{L_b^2 \sin^2(t) + L_a^2 \cos^2(t)}} = \frac{L_a}{L_b \sqrt{L_b^2 \sin^2(t) + L_a^2 \cos^2(t)}}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Offensichtlich hängen die Hauptkrümmungen vom Ort auf der Oberfläche des Ellipsoides ab. Mit (2.16) folgt für den Sättigungsdampfdruck, mit dem Parametrisierungsparameter  $t$ , die Formel

$$p_v(t) = p_{i,\infty}(T) \exp\left(\frac{\sigma_i(T)}{R_v \rho_i(T) T} (\kappa_1(t) + \kappa_2(t))\right) \quad \text{mit} \quad -\frac{\pi}{2} < t < \frac{\pi}{2}. \quad (2.32)$$

Hierbei ist  $\sigma_i$  die Oberflächenspannung von Eis,  $p_{i,\infty}$  der Sättigungsdampfdruck über einer ebenen Eisoberfläche und  $\rho_i$  die Dichte von Eis.

#### 2.2.4 Gemittelter Sättigungsdampfdruck über einem ellipsoidförmigen Eiskristall

Wir betrachten nun speziell prolata Ellipsoide, das heisst die Halbachse  $L_a$  entlang der  $z$ -Achse ist länger als die Halbachse  $L_b$ . Das liefert „langgezogene“ Ellipsoide, die als Modell eines nadelförmigen Eiskristalls dienen, vergleiche Abbildung 2.1b. Da die Sättigungsdampfdruckformel aus 2.2.3 vom Ort auf der Oberfläche abhängt, wird in diesem Abschnitt eine Formel für den Sättigungsdampfdruck hergeleitet, die als ein Mittelwert der ortsabhängigen Formel angesehen werden kann. Tatsächlich kann die Diskussion dieses Abschnitts auch analog für oblate Ellipsoide durchgeführt werden, das heisst für Ellipsoide mit  $L_a < L_b$ .

Zum prolaten Ellipsoid definieren wir die Exzentrizität  $\varepsilon$  als

$$\varepsilon := \sqrt{1 - \left(\frac{L_b}{L_a}\right)^2}. \quad (2.33)$$

Das Volumen  $V$  und die Oberfläche  $A$  des Ellipsoides sind durch

$$V(L_a, L_b) = \frac{4}{3} \pi L_a L_b^2 \quad \text{und} \quad A(L_a, L_b) = 2\pi L_b^2 \left(1 + \frac{L_a}{L_b} \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon}\right) \quad (2.34)$$



gegeben. Um einen mittleren Dampfdruck zu erhalten, verwenden wir die freie Helmholtz-Energie aus der Thermodynamik (Kondepudi und Prigogine, 1998, Kapitel 5.1). Dazu nehmen wir an, dass sich der Eiskristall in einem abgeschlossenen Kasten im Gleichgewicht mit Wasserdampf befindet. Das gesamte System habe das Volumen  $V_{\text{tot}}$  und das Volumen des Wasserdampfes sei  $V'' = V_{\text{tot}} - V$ . Zudem sei die Temperatur konstant und das System befinde sich im Gleichgewicht. Für eine infinitesimale Verschiebung der Oberfläche sind die Hauptsätze der Thermodynamik durch  $T d_i S = -\sigma_i dA$ , mit der Oberflächenspannung  $\sigma_i$  und dem irreversiblen Anteil der Entropie  $d_i S$  sowie  $T d_e S = dQ = dU + p dV_{\text{tot}}$  gegeben (Kondepudi und Prigogine, 1998, Kapitel 5.1). Durch Addition erhalten wir

$$T dS = T (d_e S + d_i S) = dU + p dV_{\text{tot}} - \sigma_i dA \quad (2.35)$$

oder umgeschrieben

$$\begin{aligned} dU &= T dS - p dV_{\text{tot}} + \sigma_i dA \\ &= T dS - p_i dV - p_v dV'' + \sigma_i dA, \end{aligned} \quad (2.36)$$

wobei  $p_i$  der Druck im Inneren des Partikels und  $p_v$  der Wasserdampfdruck ist. Mit der Definition der freien Helmholtz-Energie  $F = U - ST$  ergibt sich

$$\begin{aligned} dF &= dU - T dS - S dT \\ &= T dS - p_i dV - p_v dV'' + \sigma_i dA - T dS \\ &= -p_i dV - p_v dV'' + \sigma_i dA. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Hierbei wurde  $dT = 0$  benutzt, denn die Temperatur ist konstant.

Das Gleichgewicht wird durch das Minimum der freien Helmholtz-Energie  $F$  charakterisiert (Kondepudi und Prigogine, 1998, Kapitel 5.1), daher muss die Minimierungsbedingung  $dF = 0$  gelten. Deshalb betrachten wir eine irreversible Kontraktion oder Expansion des Volumens  $V$  in Richtung Gleichgewicht. Da  $V_{\text{tot}} = V + V''$  konstant ist, ergibt sich für die Ableitung  $dV'' = -dV$ . Mit  $\Delta p = p_i - p_v$  folgt für das Differential der freien Helmholtz-Energie

$$dF = -\Delta p dV + \sigma_i dA. \quad (2.38)$$

Im Folgenden werden wir die Differentiale von  $V = V(L_a, L_b)$  und  $A(L_a, L_b)$  berechnen, um das Differential (2.38) mithilfe der Längen  $L_a$  und  $L_b$  zu schreiben. Aufgrund der Minimierungsbedingung  $dF = 0$  gilt für (2.38) im Gleichgewicht

$$0 = -\Delta p dV + \sigma_i dA \quad (2.39)$$

und es folgt ein Ausdruck für die Druckdifferenz  $\Delta p$ .

Mit den Ableitungen

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial L_a} = \frac{L_b^2}{\varepsilon L_a^3} \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial L_a} (\arcsin(\varepsilon)) = \frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial L_a} = \frac{L_b^2}{L_a^3 \varepsilon \sqrt{1-\varepsilon^2}} \quad (2.40)$$

folgt für die partielle Ableitung der Oberfläche  $A$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial A}{\partial L_a} &= 2\pi L_b \left( \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} + L_a \frac{\partial}{\partial L_a} \left( \frac{\arcsin \varepsilon}{\varepsilon} \right) \right) \\
 &= 2\pi L_b \frac{\arcsin \varepsilon}{\varepsilon} + \frac{2\pi L_a L_b}{\varepsilon^2} \left( \frac{L_b^2 \varepsilon}{L_a^3 \varepsilon \sqrt{1-\varepsilon^2}} - \arcsin(\varepsilon) \frac{L_b^2}{\varepsilon L_a^3} \right) \\
 &= 2\pi L_b \left( 1 - \frac{L_b^2}{\varepsilon^2 L_a^2} \right) \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} + \frac{2\pi L_b^3}{\varepsilon^2 L_a^2 \sqrt{1-\varepsilon^2}}.
 \end{aligned} \tag{2.41}$$

Aus den Ableitungen

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial L_b} = -\frac{L_b}{L_a^2 \varepsilon} \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial L_b} (\arcsin(\varepsilon)) = -\frac{L_b}{L_a^2 \varepsilon \sqrt{1-\varepsilon^2}} \tag{2.42}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial A}{\partial L_b} &= 4\pi L_b + 2\pi L_a \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} + \frac{2\pi L_a L_b}{\varepsilon^2} \left( -\frac{L_b \varepsilon}{L_a^2 \varepsilon \sqrt{1-\varepsilon^2}} + \arcsin(\varepsilon) \frac{L_b}{L_a^2 \varepsilon} \right) \\
 &= 4\pi L_b + 2\pi \left( L_a + \frac{L_b^2}{\varepsilon^2 L_a} \right) \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} - \frac{2\pi L_b^2}{L_a \varepsilon^2 \sqrt{1-\varepsilon^2}}.
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

Für die Ableitungen des Volumens gilt

$$\frac{\partial V}{\partial L_a} = \frac{4}{3}\pi L_b^2 \quad \text{und} \quad \frac{\partial V}{\partial L_b} = \frac{8}{3}\pi L_a L_b. \tag{2.44}$$

Durch Einsetzen der Ableitungen (2.41) und (2.43) der Oberfläche sowie (2.44) des Volumens in die Minimierungsbedingung (2.39) ergibt sich

$$\begin{aligned}
 0 &= -\Delta p \frac{4}{3}\pi L_b^2 dL_a - \Delta p \frac{8}{3}\pi L_a L_b dL_b \\
 &\quad + \sigma_i \left( 2\pi L_b \left( 1 - \frac{L_b^2}{\varepsilon^2 L_a^2} \right) \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} + \frac{2\pi L_b^3}{\varepsilon^2 L_a^2 \sqrt{1-\varepsilon^2}} \right) dL_a \\
 &\quad + \sigma_i \left( 4\pi L_b + 2\pi \left( L_a + \frac{L_b^2}{\varepsilon^2 L_a} \right) \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} - \frac{2\pi L_b^2}{L_a \varepsilon^2 \sqrt{1-\varepsilon^2}} \right) dL_b.
 \end{aligned} \tag{2.45}$$

Aus (2.45) folgen die zwei unabhängigen Bedingungen

$$\Delta p \frac{4}{3}\pi L_b^2 = 2\sigma_i \pi L_b \left( 1 - \frac{L_b^2}{\varepsilon^2 L_a^2} \right) \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} + \frac{2\sigma_i \pi L_b^3}{\varepsilon^2 L_a^2 \sqrt{1-\varepsilon^2}}, \tag{2.46a}$$

$$\Delta p \frac{8}{3}\pi L_a L_b = 4\sigma_i \pi L_b + 2\sigma_i \pi \left( L_a + \frac{L_b^2}{\varepsilon^2 L_a} \right) \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} - \frac{2\sigma_i \pi L_b^2}{L_a \varepsilon^2 \sqrt{1-\varepsilon^2}}. \tag{2.46b}$$

Addieren von (2.46a) zum Doppelten von (2.46b), ergibt für die Druckdifferenz

$$\begin{aligned}
 3\Delta p &= \frac{3\sigma_i}{2L_b} \left( 1 - \frac{L_b^2}{\varepsilon^2 L_a^2} \right) \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} + \frac{3\sigma_i}{2\varepsilon^2 L_a^2 \sqrt{1-\varepsilon^2}} \\
 &\quad + \frac{3\sigma_i}{2L_a} + \frac{3\sigma_i}{4L_a L_b} \left( L_a + \frac{L_b^2}{\varepsilon^2 L_a} \right) \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} - \frac{3\sigma_i L_b}{4L_a^2 \varepsilon^2 \sqrt{1-\varepsilon^2}} \\
 &= \frac{3\sigma_i}{L_a} + \frac{3\sigma_i}{L_b} \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon}
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

und schliesslich

$$\Delta p = \frac{\sigma_i}{L_a} + \frac{\sigma_i}{L_b} \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon}. \quad (2.48)$$

Wird (2.48) in die generische Dampfdruckformel (2.14) eingesetzt, folgt die gemittelte Dampfdruckformel

$$p_v = p_{i,\infty}(T) \exp\left(\frac{\sigma_i(T)}{R_v \rho_i(T) T} \left(\frac{1}{L_a} + \frac{1}{L_b} \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon}\right)\right). \quad (2.49)$$

Ist das Verhältnis der Längen von kurzer Halbachse  $L_b$  zu langer Halbachse  $L_a$  konstant, ist die Exzentrizität  $\varepsilon$  ebenfalls konstant, vergleiche (2.33).

Im Spezialfall der Kugel gilt  $L_a = L_b$  sowie  $\varepsilon = 0$ . Aus  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\arcsin(\varepsilon)}{\varepsilon} = 1$  folgt für die gemittelte Dampfdruckformel (2.49)

$$p_v = p_{i,\infty}(T) \exp\left(\frac{2\sigma_i(T)}{R_v \rho_i(T) T L_a}\right). \quad (2.50)$$

Das entspricht dem Resultat der genaueren Betrachtung aus Abschnitt 2.2.1.

### 2.2.5 Grössenordnung und Vergleiche

In diesem Abschnitt diskutieren wir die Grössenordnung des Krümmungseffektes sowie die Güte der Mittelung aus Abschnitt 2.2.4. Hierzu wird angenommen, dass die Hydrometeore im Gleichgewicht mit dem umgebenden Wasserdampf sind. In diesem Fall ist der Wasserdampfdruck  $p_v$  identisch mit dem benötigten Sättigungsdampfdruck. Die Übersättigung

$$s_x := \frac{p_v}{p_{x,\infty}(T)} - 1, \quad (2.51)$$

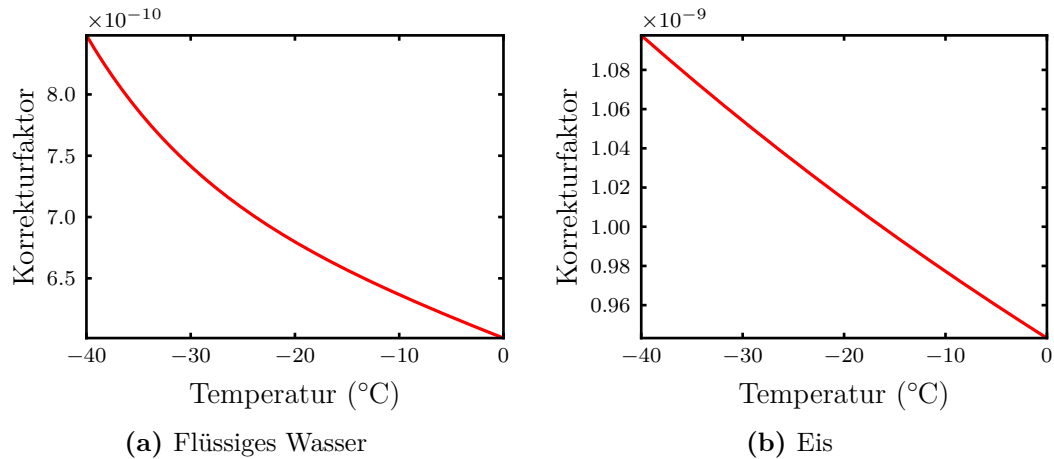
mit  $x \in \{l, i\}$ , gibt die Intensität des Krümmungseffektes an.

Für einen kugelförmigen Tropfen oder Eiskristall ist der Korrekturfaktor im Exponenten der Exponentialfunktion von (2.29), (2.32) und (2.49) von der Gestalt

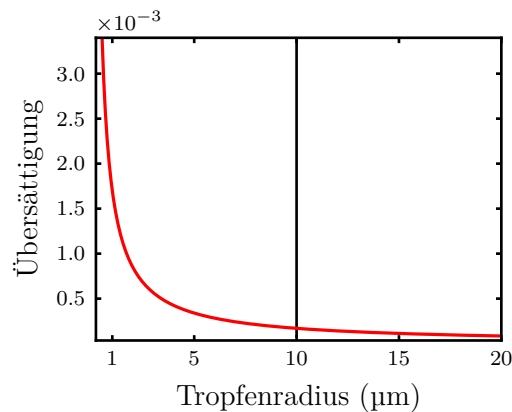
$$\frac{\sigma_x(T)}{R_v \rho_x(T) T}. \quad (2.52)$$

Der relevante Temperaturbereich für Mischphasenwolken ist  $-40^\circ\text{C} \leq T \leq 0^\circ\text{C}$ . Daher wird der Korrekturfaktor (2.52) im Folgenden in diesem Temperaturbereich betrachtet. In Abbildung 2.2 ist der Korrekturfaktor für den Fall von flüssigem Wasser (Abbildung 2.2a) sowie von Eis (Abbildung 2.2b) abgebildet.

In beiden Fällen sind die Werte ähnlich und der Wert des Korrekturfaktors ist bei  $T = -40^\circ\text{C}$  am grössten. In Abbildung 2.3 ist die Übersättigung  $s_l$  für einen Tropfen bei einer Temperatur  $T = -40^\circ\text{C}$  im Radienbereich  $0.5 \mu\text{m} \leq r_d \leq 20 \mu\text{m} = 20 \cdot 10^{-6} \text{m}$  abgebildet. Da bei dieser Temperatur der Korrekturfaktor gemäss Abbildung 2.2a maximal ist, gibt Abbildung 2.3 den maximalen Effekt der Krümmung für verschiedene Tropfenradien an. Mit abnehmendem Radius steigt die Übersättigung  $s_l$  an. Für einen Radius von  $1 \mu\text{m}$  gilt  $s_l \approx 1.7 \cdot 10^{-3}$ , was vernachlässigbar ist. Da ein typischer Wolken tropfen einen Radius von  $10 \mu\text{m}$  besitzt (Rogers und Yau, 1989, Kapitel 6), kann der Krümmungseffekt für Tropfen vernachlässigt werden.



**Abbildung 2.2:** Temperaturabhängigkeit des Krümmungsfaktors (2.52) für den Fall von flüssigem Wasser und Eis.



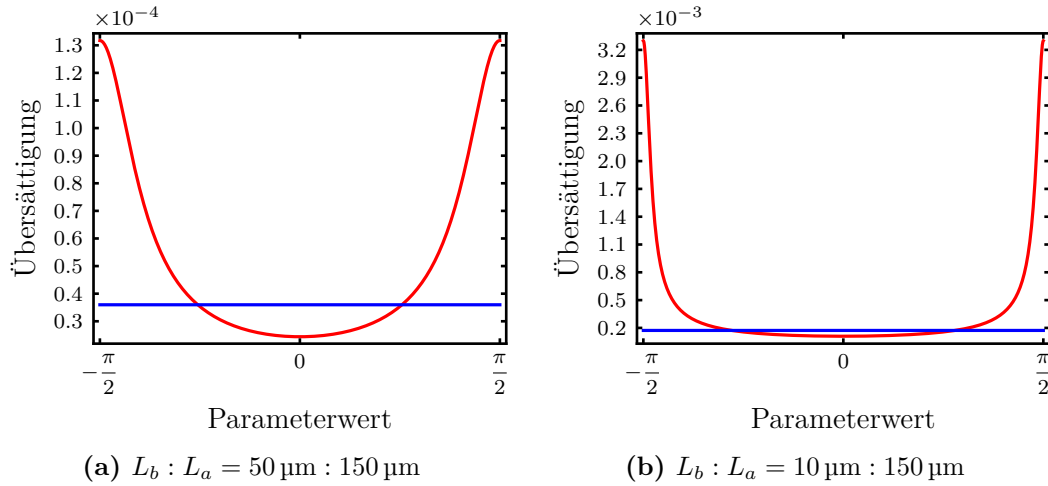
**Abbildung 2.3:** Übersättigung  $s_l$  aus (2.51) für verschiedene Tropfenradien bei  $T = -40^\circ\text{C}$ . Die vertikale Linie kennzeichnet einen Tropfenradius von  $10\ \mu\text{m}$ .

Für den Eiskristall ergibt sich ein ähnliches Bild, denn gemäss Abbildung 2.2 sind die Korrekturfaktoren für einen Tropfen und einen Eiskristall sehr ähnlich. Daher können wir die Krümmung für einen kugelförmigen Eiskristall ab einem Radius von  $1\ \mu\text{m}$  ebenfalls vernachlässigen.

Vor dem Vergleich der Mittelungsformel für den ellipsoidförmigen Eiskristall aus Abschnitt 2.2.4 mit der exakten Formel aus Abschnitt 2.2.3 sei darauf hingewiesen, dass in der exakten Formel die Ortsvariation lediglich vom Parameter  $t$  abhängt, vergleiche (2.32). Die Parameterwerte

$$t \rightarrow -\frac{\pi}{2} \quad \text{und} \quad t \rightarrow \frac{\pi}{2} \tag{2.53}$$

entsprechen den „Spitzen“ des nadelförmigen Eiskristalls. In Abbildung 2.4 ist der Wert der Übersättigung  $s_i$  für eine Temperatur von  $T = -40^\circ\text{C}$  dargestellt, denn der Korrekturfaktor wird bei dieser Temperatur maximal (Abbildung 2.2b). Das Verhältnis der Längen der Halbachsen zueinander ist in einem Fall  $L_b : L_a = 1 : 3$  und im



**Abbildung 2.4:** Vergleich der Übersättigung  $s_i$ , berechnet mit der Mittelung (2.49) (blaue Kurve), zur exakten Dampfdruckformel (2.32) (rote Kurve) entlang des Eisellipsoids, parametrisiert durch  $t$  bei konstanter Temperatur  $T = -40^\circ\text{C}$ .

anderen Fall  $L_b : L_a = 1 : 15$ . In beiden Fällen ist eine erhöhte Übersättigung an den Spitzen des Eisellipsoids gegenüber der Mitte (Parameterwert  $t = 0$ ) erkennbar. Die Mittelungsformel liefert tatsächlich einen mittleren Wert für die Übersättigung. Die Änderung des Sättigungsdampfdrucks aufgrund des Krümmungseffekts ist jedoch auch in diesem Fall klein und kann vernachlässigt werden.

## 2.3 Maxwell-Theorie

In diesem Abschnitt rekapitulieren wir die Maxwell-Theorie, die das Wachstum eines bereits vorhandenen Hydrometeors, unter der Annahme eines räumlichen Gleichgewichts, beschreibt. Im Zuge der schrittweisen Darstellung, werden die dabei getroffenen Annahmen explizit herausgestellt. Die Maxwell-Theorie gründet auf einer Diskussion des Feuchtkugelthermometers von Maxwell (Maxwell, 1877). Darin verwendet er das Konzept eines ausgedehnten Wasserdampf- und Temperaturfeldes. Mithilfe dieser Feldvorstellung kann auch das Wachstum von Hydrometeoren beschrieben werden, weshalb dieser Artikel als Grundstein der Maxwell-Theorie angesehen wird.

### 2.3.1 Tropfen

Wir werden zunächst die Maxwell-Theorie für das Diffusionswachstum eines Tropfens darstellen. Dabei folgen wir der klassischen Herleitung aus Rogers und Yau (1989, Kapitel 7). Der Tropfen wird mit  $\omega_d$  bezeichnet.

Die Ausbreitung von Wasserdampf und Wärme erfolgt durch Diffusion gemäss dem Fickschen und Fourierschen Gesetz. Mathematisch bedeutet dies, dass das Wasserdampf- und Temperaturfeld ausserhalb eines Hydrometeors jeweils der partiellen Differential-

gleichung

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_v}{\partial t} &= \operatorname{div}(D(\rho_v, T)\nabla \rho_v), \\ \rho_f c_{p,f} \frac{\partial T}{\partial t} &= \operatorname{div}(K(\rho_v, T)\nabla T)\end{aligned}\tag{2.54}$$

genügt, vergleiche auch Abschnitt 3.1.1. Hierbei bezeichnet  $\rho_f$  die Dichte und  $c_{p,f}$  die spezifische Wärmekapazität von feuchter Luft. Die partiellen Differentialgleichungen (2.54) sind parabolische Gleichungen, weshalb sie eine instantane Informationsausbreitung erlauben (Evans, 1998, Kapitel 2.3.1(b)). Dieses unphysikalische Verhalten kann durch den Cattaneo-Ansatz umgangen werden (Cattaneo, 1958). Im vorliegenden Fall wird diese Modifikation allerdings nicht betrachtet, da die relevanten Abstände der Hydrometeore klein sind und die Werte der Koeffizienten  $D, K$  eine sehr schnelle Informationsausbreitung rechtfertigen.

**Annahme 1**

Sei  $\omega_d \subset \mathbb{R}^3$  ein einzelner Tropfen, repräsentiert durch eine Kugel. Der Tropfen hat für alle Zeiten dieselbe Form. Ausserdem ist der  $\mathbb{R}^3$  isotrop und das gesamte System ausserhalb des Tropfens ist zu jedem Zeitpunkt im thermodynamischen Gleichgewicht.

Aufgrund dieser Annahme hat der Tropfen keinerlei andere Objekte in endlicher Reichweite und wechselwirkt ausschliesslich mit den Umgebungswerten im Unendlichen. Die Form eines realen Wolkentropfens ist in sehr guter Näherung kugelförmig (Pruppacher und Beard, 1970), was die getroffene Annahme über die Form rechtfertigt. Um die Gleichungen (2.54) zu vereinfachen, wird eine weitere Annahme getroffen.

**Annahme 2**

Die Diffusivität  $D$ , die thermale Konduktivität  $K$ , die Dichte der feuchten Luft  $\rho_f$  und die spezifische Wärmekapazität der feuchten Luft  $c_{p,f}$  sind konstant.

Der konstante Wert der Diffusivität wird mit  $D_0$  und der konstante Wert der thermalen Konduktivität mit  $K_0$  bezeichnet. Durch diese Annahme können die Gleichungen (2.54) umgeschrieben werden zu

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_v}{\partial t} &= D_0 \Delta \rho_v, \\ \rho_f c_{p,f} \frac{\partial T}{\partial t} &= K_0 \Delta T.\end{aligned}\tag{2.55}$$

Aufgrund der Isotropie aus Annahme 1 sind die Lösungen der Gleichungen (2.55) rotationssymmetrisch. Aus Annahme 1 folgt auch, dass die Zeitableitungen verschwinden, denn zu jedem einzelnen Zeitpunkt befindet sich das System im thermodynamischen Gleichgewicht. Dies bedeutet allerdings nicht, dass die Randwerte ebenfalls zeitlich konstant sind. Insbesondere können sich die Bedingungen an der Tropfenoberfläche zeitlich ändern. Jedoch bewirkt jede solche Änderung eine instantane Reaktion der Felder auf den jeweiligen räumlichen Gleichgewichtszustand.

Da die zeitlichen Ableitungen in (2.55) verschwinden, ergeben sich zwei Laplace-Gleichungen

$$0 = \Delta \rho_v, \quad (2.56a)$$

$$0 = \Delta T, \quad (2.56b)$$

welche die Felder für die Wasserdampfdichte und die Temperatur beschreiben. Ohne Einschränkung diskutieren wir im Folgenden nur die Gleichung für die Wasserdampfdichte, da die Temperaturgleichung die identische Struktur besitzt. Da die Lösungen von (2.56) rotationssymmetrisch sind, folgt für die exakte Lösung von (2.56a) die Darstellung

$$\rho_v(R) = c_1 - \frac{c_2}{R}, \quad (2.57)$$

wobei  $R$  die radiale Koordinate vom Tropfenmittelpunkt bezeichnet und  $c_1, c_2$  reelle Konstanten sind. Sei  $\rho_{v,\infty}$  die Wasserdampfdichte im Unendlichen und  $\rho_{v,d}$  die konstante Wasserdampfdichte an der Oberfläche des Tropfens  $\omega_d$  (Isotropie aus Annahme 1). Aus (2.57) folgt die exakte Lösung

$$\rho_v(R) = \rho_{v,\infty} - \frac{r_d}{R}(\rho_{v,\infty} - \rho_{v,d}) \quad (2.58)$$

von (2.56a) mit dem Tropfenradius  $r_d$ .

Nun behandeln wir die Randbedingung für die Wasserdampfdichte. Diese ist wegen Abschnitt 2.1 gegeben durch

$$\frac{dm_d}{dt} = \alpha_d \int_{\partial\omega_d} D(\rho_v, T) \langle \nabla \rho_v, N \rangle d\sigma, \quad (2.59)$$

wobei  $m_d$  die Masse des Tropfens  $\omega_d$  und  $\alpha_d$  den Akkomodationskoeffizienten bezeichnet. Der Akkomodationskoeffizient kann als Wahrscheinlichkeit interpretiert werden, mit der ein Wassermolekül aus der Gasphase beim Auftreffen auf die Tropfenoberfläche in die flüssige Phase übergeht (Fukuta und Walter, 1970). Aufgrund der Isotropie aus Annahme 1 ist der Integrand entlang  $\partial\omega_d$  konstant. Wegen der Sphärenform des Tropfens ergibt sich

$$\frac{dm_d}{dt} = \alpha_d D_0 \int_{\partial\omega_d} \langle \nabla \rho_v, N \rangle d\sigma = \alpha_d D_0 4\pi r_d^2 \frac{d\rho_v}{dR}(r_d). \quad (2.60)$$

Die auftretende Ableitung in (2.60) kann aus der obigen Lösung (2.58) der Laplace-Gleichung berechnet werden:

$$\frac{d\rho_v}{dR}(R) = \frac{r_d(\rho_{v,\infty} - \rho_{v,d})}{R^2}. \quad (2.61)$$

Auswerten von (2.61) an der Stelle  $R = r_d$  und Einsetzen in (2.60) ergibt für die Änderungsrate der Tropfenmasse

$$\frac{dm_d}{dt} = 4\pi \alpha_d r_d D_0 (\rho_{v,\infty} - \rho_{v,d}). \quad (2.62)$$

Analog erhalten wir für die exakte Lösung der Temperaturgleichung

$$T(R) = T_\infty - \frac{r_d}{R}(T_\infty - T_d), \quad (2.63)$$

wobei  $T_d$  die konstante Temperatur des Tropfens und  $T_\infty$  die Umgebungstemperatur bezeichnen.

**Annahme 3**

Die Temperatur innerhalb des Tropfens ist uniform. Zusätzlich ist der Temperaturexaustausch an der Tropfenoberfläche so effizient, dass jede Erwärmung oder Abkühlung des Tropfens sofort durch die Umgebung ausgeglichen wird.

Der erste Teil von Annahme 3 besagt, dass der Tropfen eine wohldefinierte Temperatur besitzt. Andernfalls müsste die Wärmeleitung innerhalb des Tropfens berücksichtigt werden. Aufgrund der schnellen Wärmeleitung innerhalb des Tropfens, kann diese vernachlässigt werden (Squires, 1952).

Aus dem zweiten Teil von Annahme 3 folgt, dass die zeitliche Ableitung der Temperatur in (2.1b) verschwindet, denn jegliche Wärmeänderung durch Phasenübergänge wird sofort durch die Konduktion ausgeglichen. Die spezifische Wärmekapazität und die latente Wärme aus (2.1) werden an der Tropfentemperatur  $T_d$  ausgewertet (Isotropie aus Annahme 1). Der Integrand im Oberflächenintegral ist wiederum konstant. Mit der latenten Wärme  $L_{lv}$  für den Übergang von flüssigem Wasser in Dampf ergibt sich aus (2.1b)

$$\begin{aligned} L_{lv}(T_d) \frac{dm_d}{dt} &= - \int_{\partial\omega_d} K(\rho_v, T) \langle \nabla T, N \rangle d\sigma \\ &= -K_0 \int_{\partial\omega_d} \langle \nabla T, N \rangle d\sigma \\ &= -K_0 \frac{T_\infty - T_d}{r_d} 4\pi r_d^2 = 4\pi r_d K_0 (T_d - T_\infty) \end{aligned} \quad (2.64)$$

und schliesslich mit (2.62)

$$\frac{\rho_{v,\infty} - \rho_{v,d}}{T_d - T_\infty} = \frac{K_0}{\alpha_d L_{lv}(T_d) D_0}. \quad (2.65)$$

Die Wasserdampfdichte  $\rho_{v,d}$  an der Oberfläche des Tropfens erhalten wir aus der Gleichgewichtsforderung in Annahme 1, das heisst die Dichte  $\rho_{v,d}$  ist entlang der Oberfläche durch die Sättigungsdampfdichte gegeben, die in Abschnitt 2.2.2 bestimmt wurde. Mit Hilfe der idealen Gasgleichung  $p_v = \rho_{v,d} R_v T_d$  folgt aus der Sättigungsdampfdruckformel (2.29)

$$\rho_{v,d} = \frac{p_{l,\infty}(T_d)}{R_v T_d} \exp\left(\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right). \quad (2.66)$$

Mit (2.65) erhalten wir eine implizite Gleichung

$$\frac{K_0}{\alpha_d L_{lv}(T_d) D_0} (T_d - T_\infty) = \rho_{v,\infty} - \frac{p_{l,\infty}(T_d)}{R_v T_d} \exp\left(\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right), \quad (2.67)$$



die numerisch nach  $T_d$  gelöst werden muss.

Um die zeitliche Evolution eines Tropfens anhand der Maxwell-Theorie zu berechnen, muss die Differentialgleichung (2.62) mit der algebraischen Nebenbedingung (2.67) gelöst werden. In der Praxis wird stattdessen eine weiter vereinfachte Form der Wachstumsgleichungen verwendet, die wir in Abschnitt 2.3.2 diskutieren werden.

Die getroffenen Annahmen der Maxwell-Theorie sind in einer realen Wolke nie erfüllt. Beispielsweise besteht eine Wolke nach Definition aus vielen Tropfen – im Gegensatz zu Annahme 1, in der die Situation eines einzelnen Tropfens gefordert wird. Die gängige Rechtfertigung für die Anwendung der Maxwell-Theorie auf eine reale Wolke besteht darin, dass die Abstände der Tropfen im Mittel untereinander gross genug sind, um die Tropfen als unabhängig betrachten zu können (Squires, 1952; Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 2.1.5). Allerdings gibt es Hinweise auf „Anhäufungen“ von Tropfen in einer realen Wolke, die durch Turbulenz entstehen (Kostinski und Shaw, 2001; Pinsky und Khain, 2003; Lehmann u. a., 2007). Diese Anhäufungen können die Umgebungsbedingungen einzelner Hydrometeore ändern und damit auch deren Wachstum (Castellano und Avila, 2011). Es bleibt allerdings die Frage bestehen, ob die Auswirkungen gross genug sind, um das gesamte Tropfenspektrum einer Wolke zu beeinflussen (Shaw, 2003; Vaillancourt und Yau, 2000).

Die weiteren Annahmen der Maxwell-Theorie implizieren, dass sich die lokale Tropfenumgebung nicht abrupt ändert. Bei schnellen Änderungen der Umgebungsbedingungen liefert die Maxwell-Theorie tatsächlich falsche Änderungsraten für das Tropfenwachstum (Nix und Fukuta, 1973). In der Realität können abrupte Änderungen der Umgebungsbedingungen, beispielsweise in Gewitterwolken, durch starke Auf- oder Abwinde auftreten (Bott, 2012, Kapitel 13.1.1).

### 2.3.2 Herleitung der approximierten Form am Beispiel des Tropfens

Die Differentialgleichung (2.62) für die Massenänderung des Tropfens enthält die ebenfalls unbekannte Temperatur  $T_d$  des Tropfens. Die Tropfentemperatur ist durch die implizite Gleichung (2.67) bestimmt. Mit weiteren Vereinfachungen ist es möglich diese Nebenbedingung zu eliminieren und die gängige Gleichung

$$\frac{dm_d}{dt} = \frac{4\pi r_d(S_\infty - 1)}{\left(\frac{L_{lv}(T_\infty)}{R_v T_\infty} - 1\right) \frac{L_{lv}(T_\infty)}{K_0 T_\infty} + \frac{R_v T_\infty}{\alpha_d D_0 p_{l,\infty}(T_\infty)}} \quad (2.68)$$

für die Massenänderung eines Tropfen herzuleiten. Hierbei bezeichnet

$$S_\infty := \frac{\rho_{v,\infty}}{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)} = \frac{\rho_{v,\infty} R_v T_\infty}{p_{l,\infty}(T_\infty)} \quad (2.69)$$

das Umgebungssättigungsverhältnis. In Anhang A wird die detaillierte Herleitung von (2.68) dargestellt. Die wesentliche Beobachtung hierbei ist, dass die Tropfentemperatur  $T_d$ , die als Lösung von (2.67) bestimmt ist, aufgrund von Annahme 3 der Gleichgewichtstemperatur entspricht. Für die Approximation wird daher die eigentliche Tropfentemperatur durch die Gleichgewichtstemperatur ersetzt. Da die Tropfentemperatur sehr schnell auf die Gleichgewichtstemperatur relaxiert, liefert dieses Vorgehen gute Resultate, vergleiche die Beispielrechnungen aus Abschnitt 2.4. Der physikalische Grund für die schnelle Relaxation der Temperatur ist die effiziente Wärmeleitung in der Luft.

Ein Zwischenresultat in der Herleitung von (2.68) ist

$$\frac{dm_d}{dt} = \frac{4\pi r_d \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} \left(1 - S_\infty + S_\infty \frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right)}{\left(1 - \frac{L_{lv}(T_\infty)}{R_v T_\infty}\right) \frac{L_{lv}(T_d)}{K_0 T_d} - \frac{1}{\alpha_d D_0 \rho_{v,d}}}. \quad (2.70)$$

Aus diesem Zwischenresultat folgt (2.68) durch die Approximation  $T_d \approx T_\infty$ , das heisst die Tropfentemperatur wird durch die Umgebungstemperatur ersetzt. Diese Approximation ist ebenfalls wegen der effizienten Wärmeleitung durch die Luft gerechtfertigt. In der Herleitung von (2.70) wurde die Approximation

$$\exp\left(-\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right) \approx 1 - \frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d} \quad (2.71)$$

durchgeführt, um die Exponentialfunktion aus der Sättigungsdampfdruckformel (2.29) zu eliminieren, siehe (A.11). Diese Approximation ist lediglich für kleine Argumente der Exponentialfunktion anwendbar. Allerdings ist das Argument der Exponentialfunktion in diesem Fall nicht unbedingt klein, da für kleine Tropfen der Radius  $r_d$  klein ist und daher das Argument gross. Vielmehr ist das Argument für  $r_d \rightarrow 0$  unbeschränkt. Mit anderen Worten ist dieser Approximationsschritt nur für genügend grosse Tropfen anwendbar. Für kleine Tropfen wird die Approximation (2.71) beliebig schlecht. Dennoch wird die resultierende Massengleichung (2.68) angewandt, um das Verdampfen von Tropfen zu beschreiben. Im Endresultat (2.68) wurde der Term (2.71) komplett durch 1 ersetzt und somit der Krümmungseffekt vernachlässigt.

Aus der in der Literatur gebräuchlichen Herleitung von (2.68), welche in Anhang A beschrieben wird, ist das genaue Vorgehen nicht klar ersichtlich. Eine wesentlich transparentere Darstellung findet sich in Srivastava und Coen (1992). Die Autoren zeigen, dass die Herleitung aus Anhang A der Berechnung der Temperaturdifferenz  $T_d - T_\infty$  durch eine Taylorapproximation der Wasserdampfdichten entspricht: Die Rechnung

$$\begin{aligned} \rho_{v,\infty} - \rho_{v,d} &= \rho_{v,l,\infty}(T_\infty) S_\infty - \rho_{v,l,\infty}(T_d) \exp\left(\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right) \\ &\stackrel{(*)}{\approx} \rho_{v,l,\infty}(T_\infty) S_\infty - \rho_{v,l,\infty}(T_d) \\ &\stackrel{(**)}{\approx} \rho_{v,l,\infty}(T_\infty) S_\infty - \rho_{v,l,\infty}(T_\infty) - \frac{d\rho_{v,l,\infty}}{dT}(T_\infty) (T_d - T_\infty) \\ &= \rho_{v,l,\infty}(T_\infty) (S_\infty - 1) - \frac{d\rho_{v,l,\infty}}{dT}(T_\infty) (T_d - T_\infty), \end{aligned} \quad (2.72)$$

wobei bei (\*) die Krümmung vernachlässigt und bei (\*\*) die Taylorentwicklung von  $\rho_{v,l,\infty}$  um  $T_\infty$  bis zum linearen Term durchgeführt wurde, liefert einen Ausdruck für die Differenz der Wasserdampfdichten mithilfe der Temperaturdifferenz. Wird die Differenz der Wasserdampfdichten in (2.65) durch (2.72) ersetzt, folgt die Gleichung

$$T_d - T_\infty = \frac{\alpha_d L_{lv}(T_d) D_0 \rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{K_0 + \alpha_d L_{lv}(T_d) D_0 \frac{d\rho_{v,l,\infty}}{dT}(T_\infty)} (S_\infty - 1) \quad (2.73)$$

für die Tropfentemperatur. Wird die Temperaturdifferenz in (A.6b) mit (2.73) ersetzt und die Ableitung

$$\frac{d\rho_{v,l,\infty}}{dT}(T_\infty) \quad (2.74)$$

mithilfe der Clausius-Clapeyron-Gleichung (A.1) berechnet, ergibt sich ebenfalls das Resultat (2.68). Der Vorteil dieser Darstellung besteht darin, dass erkennbar wird, wie sich genauere Approximationen konstruieren lassen. Wird in (2.72) die Taylorreihe nicht nach dem linearen Term, sondern beispielsweise nach dem quadratischen Term abgebrochen, lässt sich eine genauere Approximation konstruieren (Srivastava und Coen, 1992).

### 2.3.3 Eiskristall

Für den Fall eines Eiskristalls werden dieselben Annahmen wie im Fall des Tropfens in Abschnitt 2.3.1 getroffen. Lediglich die Annahme 1 wird modifiziert, um die komplizierte Geometrie eines Kristalls zu berücksichtigen.

#### Annahme 1, Fall Eis

Sei  $\omega_i \subset \mathbb{R}^3$  ein einzelner Eiskristall. Der Eiskristall hat für alle Zeiten dieselbe Form. Die Oberfläche des Eiskristalls bildet eine Isofläche für die Wasserdampfdichte und die Temperatur. Zu jedem Zeitpunkt ist das gesamte System ausserhalb des Eiskristalls im thermodynamischen Gleichgewicht.

Diese Annahme ermöglicht es, eine Analogie zur Elektrostatik zu ziehen und damit letztlich die Wachstumsgleichung für die Masse des Eiskristalls zu finden (Jeffreys, 1918). Eine derartige Analogie zur Elektrostatik hat bereits Maxwell in seinem Artikel über das Feuchtkugelthermometer gezogen (Maxwell, 1877).

Wir werden im Folgenden kurz auf die Berechnung der Kapazität eines Kondensators eingehen. In der anschliessenden Beschreibung der Analogie wird der Kondensator dem Eiskristall entsprechen.

Ein Kondensator  $\tilde{\omega}$  ist in der Elektrostatik durch zwei räumlich voneinander getrennte Leiter mit gleicher Ladungsmenge und unterschiedlichem Vorzeichen der Ladungen definiert (Küpfmüller u. a., 2008, Kapitel 12.1). Zwischen den Elektroden entsteht ein elektrisches Feld  $E$ , das pro Punkt proportional zur Spannungsdifferenz  $\text{diff}(U)$  ist. Daraus folgt, dass der elektrische Fluss ebenfalls proportional zur Spannungsdifferenz ist, was letztlich impliziert, dass die Ladung  $Q$  selbst proportional zur Spannungsdifferenz ist (Küpfmüller u. a., 2008, Kapitel 7 und 12.1). Die Proportionalitätskonstante heisst Kapazität  $C_e$ , also  $\text{diff}(U)C_e = Q$ . Ein einzelner Leiter kann immer noch als ein Kondensator angesehen werden. Hierzu wird angenommen, dass sich der zugehörige zweite Leiter im Unendlichen befindet.

Wir betrachten nun den Fall eines einzelnen Leiters. Sei  $\gamma$  ein Weg, der im Unendlichen startet und an einem Punkt  $p$  auf der Leiteroberfläche  $\partial\tilde{\omega}$  endet. Da das elektrische Feld ein totales Differential ist (Küpfmüller u. a., 2008, Kapitel 6), folgt für die Spannungsdifferenz

$$\text{diff}(U) = \int_{\gamma} E \, ds = \int_{\gamma} dU = U(\infty) - U(p). \quad (2.75)$$

Weil die Leiteroberfläche eine Isofläche für das Potential  $U$  ist, gilt

$$\text{diff}(U) = U(\infty) - U_{\partial\tilde{\omega}}, \quad (2.76)$$

wobei mit  $U_{\partial\tilde{\omega}}$  das konstante Potential entlang der Oberfläche  $\partial\tilde{\omega}$  bezeichnet wird. Aus dem Gauss-Gesetz (Küpfmüller u. a., 2008, Kapitel 7) folgt

$$C_e (U_\infty - U_{\partial\tilde{\omega}}) = Q = \varepsilon_0 \int_{\partial\tilde{\omega}} \langle E, N \rangle d\sigma, \quad (2.77)$$

mit der elektrischen Feldkonstante  $\varepsilon_0$  (Permittivität von Vakuum).

Nun betrachten wir die Analogie. Hierzu wird der Leiter  $\tilde{\omega}$  als Eiskristall  $\omega_i$  und die elektrische Spannung  $U$  als die Wasserdampfdichte  $\rho_v$  interpretiert, das heisst  $\nabla\rho_v$  entspricht dem elektrischen Feld  $E$  (Lamb und Verlinde, 2011, Kapitel 8.3.1; Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 13.3). Aus (2.77) folgt, mit Annahme 2 über die Konstanz der Diffusivität,

$$4\pi C D_0 (\rho_{v,\infty} - \rho_{v,i}) = \int_{\partial\omega_i} \langle D_0 \nabla \rho_v, N \rangle d\sigma. \quad (2.78)$$

Zudem wurde die Kapazität  $C$  des Eiskristalls durch

$$C := \frac{C_e}{4\pi\varepsilon_0} \quad (2.79)$$

definiert und  $\rho_{v,i}$  bezeichnet die Wasserdampfdichte an der Oberfläche des Eiskristalls  $\omega_i$ . Mithilfe dieser Analogie erhalten wir die Änderungsgleichung für die Masse  $m_i$  des Eiskristalls

$$\frac{dm_i}{dt} = \alpha_i \int_{\partial\omega_i} \langle D_0 \nabla \rho_v, N \rangle d\sigma = 4\pi\alpha_i C D_0 (\rho_{v,\infty} - \rho_{v,i}), \quad (2.80)$$

wobei wir den Akkomodationskoeffizienten  $\alpha_i$  für den Eiskristall eingefügt haben. Wir nehmen diesen als eine Konstante an. Für reale Eiskristalle hängt der Akkomodationskoeffizient von der Temperatur  $T_i$  und der lokalen Übersättigung an der Oberfläche des Eiskristalls ab (Libbrecht, 2005).

Für das Oberflächenintegral der Temperatur gilt analog

$$\int_{\partial\omega_i} \langle \nabla T, N \rangle d\sigma = 4\pi C (T_\infty - T_i), \quad (2.81)$$

mit der Temperatur  $T_i$  des Eiskristalls. Wie im Fall des Tropfens, folgt die Gleichgewichtsbedingung

$$\frac{\rho_{v,\infty} - \rho_{v,i}}{T_i - T_\infty} = \frac{K_0}{\alpha_i L_{iv}(T_i) D_0} \quad (2.82)$$

mit der latenten Wärme  $L_{iv}$  für den Phasenübergang von Eis zu Wasserdampf. Bei einem kugelförmigen Eiskristall ist die Kapazität durch  $C = r_i$  gegeben, also durch den Radius  $r_i$  der Eiskugel. Insbesondere nimmt (2.80) in diesem Fall die gleiche Form an wie die Massenänderungsgleichung eines Tropfens, vergleiche dazu (2.62).

Eine wichtige Bemerkung, zur hier präsentierten Theorie von Maxwell für das Wachstum von Eiskristallen, betrifft die Form der Eiskristalle. Diese wird durch eine festgeschriebene Kapazität vorausgesetzt (Mason, 1953), vergleiche Annahme 1. Daher kann mit dieser Theorie keine Formänderung eines wachsenden Eiskristalls beschrieben werden.

Es gibt Erweiterungen zu dieser Theorie, in welcher simultan zu den hier dargelegten Wachstumsgleichungen auch eine Gleichung für die Kapazität gelöst wird. Damit wird auch eine Änderung der Eiskristallform zugelassen (Chen und Lamb, 1994).

Annahme 1 für den Eiskristall besagt, dass die Wasserdampfdichte entlang der Oberfläche konstant ist. Diese Annahme ist jedoch in der Realität nicht erfüllt. Einen ersten Hinweis darauf gab es in Abschnitt 2.2.3, denn bereits im einfachen Ellipsoidmodell war die Sättigungsdampfdichte abhängig vom Ort. Tatsächlich ist gerade die Ortsabhängigkeit der Sättigungsdampfdichte verantwortlich für die Ausbildung der vielen faszinierenden Formen, in die sich Eiskristalle entwickeln (Libbrecht, 2005). In der Modellstudie Wood u. a. (2001) wurden Übersättigungen entlang der Oberfläche eines hexagonalen nadelförmigen Eiskristalls direkt berechnet. Das Resultat dieser Modellstudie zeigt ebenfalls eine ortsabhängige und daher nicht konstante Übersättigung entlang der Oberfläche.

### 2.3.4 Korrekturen der Maxwell-Theorie

In diesem Abschnitt werden wir kurz gängige Korrekturen der Maxwell-Theorie ansprechen. Diese Korrekturen bestehen aus zusätzlichen Faktoren in der Massengleichung (2.62) für einen Tropfen oder (2.80) für einen Eiskristall. Das Ziel dieser Korrekturen besteht darin, physikalische Prozesse zu berücksichtigen, die zum Beispiel durch die in der Theorie getroffenen Annahmen ausgeschlossen wurden.

#### Thermaler Akkomodationskoeffizient

In der Differentialgleichung (2.1a) für die Änderung der Masse eines Hydrometeors  $\omega$  haben wir den Akkomodationskoeffizienten  $\alpha_\omega$  berücksichtigt. Dieser kann als die Wahrscheinlichkeit interpretiert werden, mit der ein Wassermolekül aus der Dampfphase in die kondensierte Phase übergeht.

Für die Temperaturgleichung (2.1b) kann ebenfalls ein solcher Effizienzfaktor  $\beta_\omega$  eingeführt werden. Die Definition dieses Faktors ist (Fukuta und Walter, 1970)

$$\beta_\omega = \frac{T'_\omega - T_\infty}{T_\omega - T_\infty}. \quad (2.83)$$

Hierbei bezeichnet  $T'_\omega$  die Temperatur der Wassermoleküle, welche die kondensierte Phase verlassen. Daher gibt  $\beta_\omega$  die Effizienz an, mit der die von der kondensierten Phase in die Dampfphase übergehenden Moleküle ihre Energie beibehalten können. Der gängige Wert dieses Koeffizienten in der Literatur sowohl für Tropfen als auch für Eiskristalle ist  $\beta_\omega = 1$ , obwohl direkte Messungen schwierig und mit grossen Unsicherheiten behaftet sind (Fukuta und Walter, 1970; Hall und Pruppacher, 1976; Shaw und Lamb, 1999; Wang, 2013, Kapitel 9.1.2).

#### Diskrete Schicht

In der Maxwell-Theorie dominiert die Vorstellung eines Kontinuums aus Wassermolekülen bis an die Oberfläche eines Hydrometeors. Experimentelle Beobachtungen hingegen deuten die Existenz einer dünnen Schicht über dem Hydrometeor an, in welcher die diskrete Natur der Gasteilchen berücksichtigt werden muss (Langmuir, 1918). Werden diese Ideen detailliert ausgeführt (zum Beispiel Squires, 1952; Fukuta und Walter, 1970; Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 13.1.1), ergeben sich Korrekturfaktoren

für die Massengleichung, die von den Akkomodationskoeffizienten und dem Radius abhängen. Für einen typischen Wolkentropfen mit einem Radius  $r_d = 15 \mu\text{m}$  sind die Korrekturfaktoren sehr nahe bei 1 und werden daher oft vernachlässigt.

### Ventilationskoeffizient

Eine zentrale Annahme der Maxwell-Theorie besteht in der Existenz ungestörter Felder für die Wasserdampfdichte und die Temperatur um einen Hydrometeor. Da diese Annahme in der Realität nie erfüllt ist, wird ein Ventilationskoeffizient als Faktor in die Massengleichung aufgenommen. Dieser ist als das Verhältnis der Massenänderung eines Hydrometeors in einer gestörten Umgebung zur Massenänderung in einer ungestörten Umgebung definiert (Wang, 2013, Kapitel 9.3 und 9.4.1). Der Ventilationskoeffizient hängt von der Schmidt- und der Reynoldszahl ab, die Eigenschaften der Luftströmung um den Hydrometeor beschreiben.

### Aerosol

Ein typischer Hydrometeor besteht nicht aus reinem Wasser, sondern enthält noch andere Stoffe. Diese verändern vornehmlich den Sättigungsdampfdruck des Hydrometeors. In Abschnitt 2.6 werden wir auf diesen Aspekt weiter eingehen.

## 2.4 Die vollständigen Wachstumsgleichungen für einen Tropfen

Bei der Herleitung der Wachstumsgleichungen für einen Tropfen in Abschnitt 2.3.1 wurde explizit Annahme 3 benutzt, welche die Zeitableitung in der Tropfentemperaturgleichung eliminiert. Wir lassen diese Annahme nun fallen und beschreiben zusätzlich die Differentialgleichung für die Tropfentemperatur, die sich aus den Grundgleichungen für das Hydrometeorwachstum aus Abschnitt 2.1 ergibt.

Aus der Temperaturgleichung (2.1b) folgt, mit gleicher Behandlung des Oberflächenintegrals wie bei der Herleitung der Massengleichung in Abschnitt 2.3.1,

$$\begin{aligned} m_d c_{p,l}(T_d) \frac{dT_d}{dt} &= L_{lv}(T_d) \frac{dm_d}{dt} + \int_{\partial\omega_d} K(\rho_v, T) \langle \nabla T, N \rangle d\sigma \\ &= L_{lv}(T_d) \frac{dm_d}{dt} + K_0 \frac{dT}{dR}(r_d) 4\pi r_d^2 \\ &= L_{lv}(T_d) \frac{dm_d}{dt} + 4\pi r_d K_0 (T_\infty - T_d), \end{aligned} \quad (2.84)$$

wobei  $c_{p,l}$  die spezifische Wärmekapazität von Wasser bezeichnet. In (2.84) wurde ausgenutzt, dass der Tropfen kugelförmig ist. Ersetzen wir die Änderungsrate der Masse durch (2.62) und verwenden

$$m_d = \frac{4}{3} \pi \rho_l(T_d) r_d^3 \quad (2.85)$$

in (2.84), ergibt sich aus (2.1) das folgende System von gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\frac{dm_d}{dt} = 4\pi \alpha_d D_0 \left( \frac{3}{4\pi \rho_l(T_d)} \right)^{\frac{1}{3}} m_d^{\frac{1}{3}} (\rho_{v,\infty} - \rho_{v,d}), \quad (2.86a)$$

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{4\pi}{c_{p,l}(T_d)} \left( \frac{3}{4\pi\rho_l(T_d)} \right)^{\frac{1}{3}} m_d^{-\frac{2}{3}} (\alpha_d L_w(T_d) D_0 (\rho_{v,\infty} - \rho_{v,d}) + K_0 (T_\infty - T_d)) \quad (2.86b)$$

für die zeitliche Entwicklung eines Tropfens. Die Wasserdampfdichte an der Oberfläche ist wegen Abschnitt 2.2.2 gegeben durch

$$\begin{aligned} \rho_{v,d}(r_d, T_d) &= \frac{p_{l,\infty}(T_d)}{R_v T_d} \exp\left(\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right) \\ &= \frac{p_{l,\infty}(T_d)}{R_v T_d} \exp\left(\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d} \left(\frac{4\pi\rho_l(T_d)}{3}\right)^{\frac{1}{3}} m_d^{-\frac{1}{3}}\right). \end{aligned} \quad (2.87)$$

Hierbei sind die Diffusivität und die thermale Konduktivität aus den Umgebungsbedingungen durch  $D_0 = D(p_\infty, T_\infty)$  und  $K_0 = K(\rho_{v,\infty}, T_\infty)$ , mit dem Umgebungsgesamtdruck  $p_\infty$ , gegeben. Insgesamt sind diese Gleichungen auch für einen kugelförmigen Eiskristall gültig, wenn die physikalischen Parametrisierungen für das Eis angepasst werden.

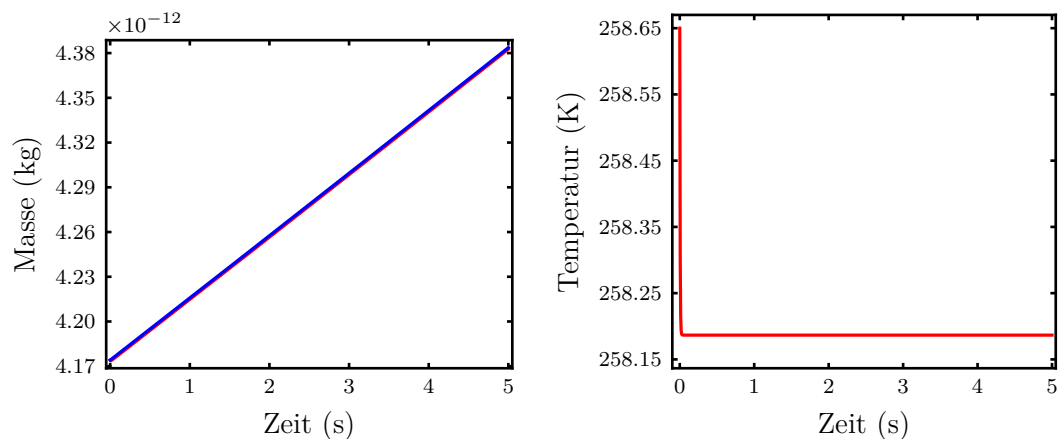
Wir bemerken auch hier, dass (2.86) eine Singularität für verschwindende Massen aufweist. Das heisst, mit diesen Gleichungen kann kein vollständiges Verdampfen eines Hydrometeors beschrieben werden. Auf diesen Punkt werden wir in Abschnitt 2.6 zurückkommen.

An zwei numerischen Beispielen wird nun die Lösung der approximativen Wachstumsgleichung (2.68) mit dem Verlauf der Lösung der vollständigen Wachstumsgleichungen (2.86) verglichen. Wir betrachten einen Tropfen bei einer Umgebungstemperatur  $T_\infty = -15^\circ\text{C}$ , einem Umgebungsgesamtdruck  $p_\infty = 650\text{ hPa}$  und einem Sättigungsverhältnis von  $S_\infty = 1.01$ . Die Anfangstemperatur des Tropfens betrage  $T_d(0) = -14.5^\circ\text{C}$ . Im ersten Beispiel wird das Wachstum eines Tropfens mit Anfangsradius  $r_d(0) = 10\ \mu\text{m}$  gezeigt, siehe Abbildung 2.5. Aus der Abbildung ist erkennbar, dass die Lösung der Tropfenmasse der approximativen Gleichung gut mit der Lösung der genaueren Gleichung übereinstimmt (Abbildung 2.5a). Die Tropfentemperatur relaxiert sehr schnell auf die Gleichgewichtstemperatur, die in der approximativen Gleichung implizit benutzt wird (Abbildung 2.5b).

Im zweiten Beispiel habe der Tropfen einen Anfangsradius von  $r_d(0) = 30\ \mu\text{m}$  und ansonsten identische Bedingungen wie zuvor, siehe Abbildung 2.6. In diesem Beispiel ist die Relaxationszeit der Tropfentemperatur auf die Gleichgewichtstemperatur grösser (Abbildung 2.6b) im Vergleich zum kleineren Tropfen. Dies erklärt die anfängliche Abweichung in der Tropfenmasse (Abbildung 2.6a). Nachdem die Temperatur auf ihren Gleichgewichtswert relaxiert hat, sind die Steigungen der beiden Kurven für die Masse gleich.

## 2.5 Asymptotische Betrachtung

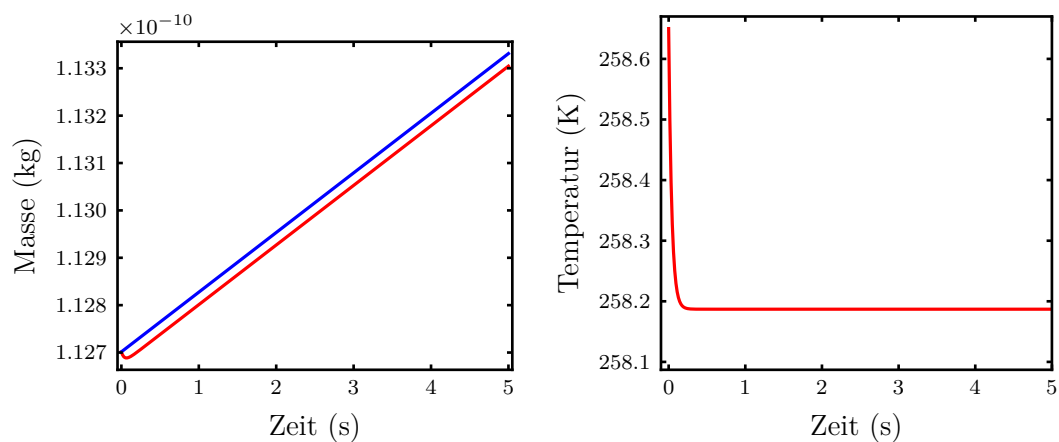
In diesem Abschnitt werden wir die Wachstumsgleichungen aus Abschnitt 2.4 zunächst entdimensionalisieren, um die Struktur dieser Gleichungen besser zu erkennen. In Abschnitt 2.5.5 werden wir eine asymptotische Näherung der Wachstumsgleichungen, unter gewissen Annahmen, herleiten. Hierzu wird ein kleiner Parameter  $\varepsilon$  eingeführt und das



(a) Masse des Tropfens, berechnet mit den vollständigen Wachstumsgleichungen (rote Kurve) und der approximativen Wachstumsgleichung (blaue Kurve)

(b) Temperatur des Tropfens, berechnet mit den vollständigen Wachstumsgleichungen

**Abbildung 2.5:** Vergleich der vollständigen Wachstumsgleichungen mit der approximativen Wachstumsgleichung für einen Tropfen mit Anfangsradius  $10 \mu\text{m}$ .



(a) Masse des Tropfens, berechnet mit den vollständigen Wachstumsgleichungen (rote Kurve) und der approximativen Wachstumsgleichung (blaue Kurve)

(b) Temperatur des Tropfens, berechnet mit den vollständigen Wachstumsgleichungen

**Abbildung 2.6:** Vergleich der vollständigen Wachstumsgleichungen mit der approximativen Wachstumsgleichung für einen Tropfen mit Anfangsradius  $30 \mu\text{m}$ .



ursprüngliche Problem in Teilprobleme, gemäss der Ordnungen in  $\varepsilon$ , zerlegt. Falls diese Teilprobleme lösbar sind, kann aus deren Lösung eine asymptotische Näherung der Lösung des ursprünglichen Problems konstruiert werden. Wir werden diesen Formalismus auf die Wachstumsgleichungen anwenden und die ersten beiden Ordnungen der asymptotischen Näherung berechnen.

### 2.5.1 Entdimensionalisierung

In den Wachstumsgleichungen (2.86) besitzen alle vorkommenden Variablen eine physikalische Dimension. Um Variablen mit einer physikalischen Dimension von dimensionslosen zu unterscheiden, notieren wir jede Variable mit physikalischer Dimension mit  $\widehat{\phantom{x}}$ . Die einzigen Ausnahmen stellen die Referenzgrössen und die Gaskonstante  $R_v$  dar. Für die Referenzgrössen  $m_{d,c}$ ,  $T_{d,c}$ ,  $t_c$  der Masse, Temperatur und Zeit wählen wir typische Grössen. Für die Entdimensionalisierung selbst sind die konkreten Werte der Referenzgrössen unwichtig. Erst bei Konstruktion der asymptotischen Näherung werden diese Werte wichtig. Da die Referenzgrössen typische Werte des betrachteten Systems besitzen sollten, werden wir die Referenztemperatur als die Umgebungstemperatur wählen, also  $T_{d,c} = \widehat{T_\infty}$ . Die Referenzmasse eines Tropfens sei diejenige Masse, die sich für einen Tropfenradius von  $15 \mu\text{m}$  ergibt, was einem typischen Tropfenradius entspricht (Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 2.1.3; Wang, 2013, Kapitel 2.5). Die Referenzzeit sei  $t_c = 1 \text{ s}$ . Die Umgebungsbedingungen des Systems seien gegeben durch die Umgebungstemperatur  $\widehat{T_\infty}$  und die Wasserdampfdichte  $\widehat{\rho_{v,\infty}}$  in der Umgebung. Das Sättigungsverhältnis ist als

$$S_\infty = \frac{\widehat{\rho_{v,\infty}} R_v \widehat{T_\infty}}{\widehat{p_{l,\infty}}(\widehat{T_\infty})} = \frac{\widehat{p_{v,\infty}}}{\widehat{p_{l,\infty}}(\widehat{T_\infty})} \quad (2.88)$$

definiert. Mithilfe der Referenzgrössen definieren wir die dimensionslosen Grössen durch

$$m_d := \frac{\widehat{m}_d}{m_{d,c}}, \quad T_d := \frac{\widehat{T}_d}{T_{d,c}}, \quad t := \frac{\widehat{t}}{t_c} \quad (2.89)$$

und erhalten damit für die Ableitungen

$$\frac{dm_d}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\widehat{m}_d(\widehat{t})}{m_{d,c}} \right) = \frac{t_c}{m_{d,c}} \frac{d\widehat{m}_d}{d\widehat{t}} \quad \text{sowie} \quad \frac{dT_d}{dt} = \frac{t_c}{T_{d,c}} \frac{d\widehat{T}_d}{d\widehat{t}}. \quad (2.90)$$

Nach der Entdimensionalisierung ergeben sich aus (2.86) die Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{dm_d}{dt} &= \widetilde{\alpha}_1 m_d^{\frac{1}{3}} - \widetilde{\alpha}_2 \frac{m_d^{\frac{1}{3}} p_{l,\infty}(T_d)}{T_d} \exp\left(\frac{\alpha}{T_d m_d^{\frac{1}{3}}}\right), \\ \frac{dT_d}{dt} &= \widetilde{\beta}_1 \frac{1}{m_d^{\frac{2}{3}}} - \widetilde{\beta}_2 \frac{p_{l,\infty}(T_d)}{T_d m_d^{\frac{2}{3}}} \exp\left(\frac{\alpha}{T_d m_d^{\frac{1}{3}}}\right) - \widetilde{\beta}_3 \frac{T_d}{m_d^{\frac{2}{3}}}. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Hierbei wurden die dimensionslose Funktion

$$p_{l,\infty}(T) = \frac{\widehat{p_{l,\infty}}(T_{d,c} T)}{\widehat{p_{l,\infty}}(\widehat{T_\infty})} \quad (2.92)$$

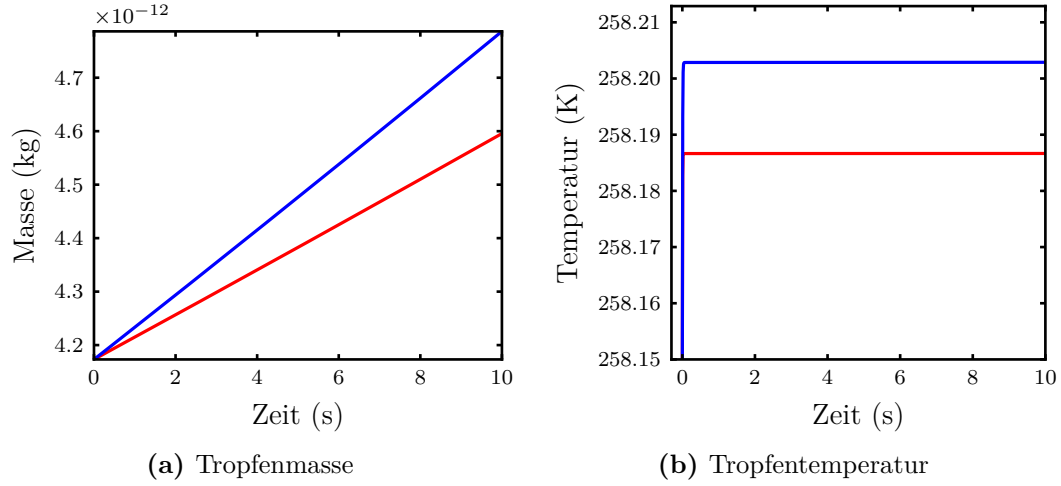
sowie die Bezeichnung

$$\widehat{r}_d = \left( \frac{3\widehat{m}_d}{4\pi\widehat{\rho}_l(\widehat{T}_d)} \right)^{\frac{1}{3}} =: \widehat{C}_K \widehat{m}_d^{\frac{1}{3}} \quad (2.93)$$

eingeführt. Die dimensionslosen Koeffizienten in (2.91) sind durch

$$\begin{aligned} \alpha(\widehat{T}_d) &= \frac{2\widehat{\sigma}_l(\widehat{T}_d)}{R_v\widehat{\rho}_l(\widehat{T}_d)\widehat{C}_K T_{d,c} m_{d,c}^{\frac{1}{3}}}, \\ \widetilde{\alpha}_1(\widehat{p}_\infty, \widehat{T}_\infty, S_\infty) &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \cdot \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} S_\infty, \\ \widetilde{\alpha}_2(\widehat{p}_\infty, \widehat{T}_\infty) &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \cdot \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{R_v T_{d,c} m_{d,c}^{\frac{2}{3}}}, \\ \widetilde{\beta}_1(\widehat{T}_d, \widehat{p}_\infty, \widehat{T}_\infty, S_\infty) &= \frac{4\pi\widehat{C}_K t_c}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_d) T_{d,c} m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( \frac{\alpha_d \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_d) \widehat{D}_0 \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty} S_\infty + \widehat{K}_0 \widehat{T}_\infty \right), \\ \widetilde{\beta}_2(\widehat{T}_d, \widehat{p}_\infty, \widehat{T}_\infty) &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_d) \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \cdot \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_d) R_v T_{d,c}^2 m_{d,c}^{\frac{2}{3}}}, \\ \widetilde{\beta}_3(\widehat{T}_d, \widehat{T}_\infty) &= \frac{4\pi\widehat{K}_0 \widehat{C}_K t_c}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_d) m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \end{aligned} \quad (2.94)$$

gegeben. Damit sind die Wachstumsgleichungen (2.86) entdimensionalisiert. Bei den dimensionslosen Koeffizienten handelt es sich teilweise noch um Funktionen der gesuchten Tropfentemperatur. Daher werden wir alle Koeffizienten an der Umgebungstemperatur  $\widehat{T}_\infty$  auswerten. Lediglich die Parametrisierung für den Sättigungsdampfdruck wird beibehalten, vergleiche (2.92). Würde diese ebenfalls an der Umgebungstemperatur ausgewertet, dann führte dies zu systematischen Fehlern, vergleiche hierzu Abbildung 2.7. In dieser Abbildung sind die Lösungen der Wachstumsgleichungen (2.91) aufgetragen, einmal mit variablen Koeffizienten und einmal mit konstanten Koeffizienten. Die Umgebungs- und Anfangsbedingungen sind identisch mit der Berechnung von Abbildung 2.5. Im Fall der konstanten Koeffizienten wurde insbesondere (2.92) an der Umgebungstemperatur ausgewertet. Aus der Abbildung ist ersichtlich, dass dies einen systematischen Fehler verursacht, sowohl in der Tropfenmasse (Abbildung 2.7a) als auch in der Tropfentemperatur (Abbildung 2.7b). Obwohl der Fehler in der Tropfentemperatur klein ist, verursacht dieser einen Fehler in der Tropfenmasse. Der Grund hierfür liegt darin, dass die Tropfenmasse äusserst sensitiv von der Differenz  $\widehat{\rho}_{v,\infty} - \widehat{\rho}_{v,d}$  abhängt, vergleiche (2.86a). Durch den Fehler in der Tropfentemperatur wird auch die Differenz  $\widehat{\rho}_{v,\infty} - \widehat{\rho}_{v,d}$  verändert, was die Abweichung in der Tropfenmasse erklärt. Werden lediglich die Koeffizienten (2.94) an der Umgebungstemperatur ausgewertet, aber (2.92) variabel belassen, so ist die zugehörige Lösungskurve nicht von der exakten Kurve zu unterscheiden.



**Abbildung 2.7:** Verlauf der Tropfenmasse und der Tropfentemperatur gemäss der Wachstumsgleichung (2.91) mit an den Umgebungsbedingungen ausgewerteten dimensionslosen Koeffizienten (2.94). Die rote Kurve zeigt die Lösung mit variablem Sättigungsdampfdruck, die blaue Kurve die Lösung mit konstantem Sättigungsdampfdruck ausgewertet an der Umgebungstemperatur.

### 2.5.2 Approximation des Sättigungsdampfdrucks

Um die entdimensionalisierten Wachstumsgleichungen (2.91) analytisch weiter betrachten zu können, wird eine Approximation des Sättigungsdampfdrucks in (2.92) benötigt, die analytisch besser zugänglich ist als die Referenzparametrisierung (C.19) aus Murphy und Koop (2005). Eine einfache polynomielle Approximation an die Werte von  $\log(p_{l,\infty}(T))$  wie in Abschnitt B.1 ist problematisch und führt nicht unbedingt zu zufriedenstellenden Resultaten, vergleiche dazu Abschnitt B.2.

Eine Alternative wird durch Srivastava und Coen (1992) motiviert, die bereits in Abschnitt 2.3.2 angedeutet wurde. Hierzu wird der Sättigungsdampfdruck  $\widehat{p}_{l,\infty}$  um die Umgebungstemperatur  $\widehat{T}_\infty$  in eine Taylorreihe entwickelt und diese nach dem quadratischen Term abgebrochen. Die benötigten Ableitungen werden mithilfe der Clausius-Clapeyron-Gleichung (A.1) berechnet. Aus der Clausius-Clapeyron-Gleichung folgt

$$\frac{\widehat{p}_{l,\infty}'(\widehat{T}_\infty)}{\widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)} = \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty^2}. \quad (2.95)$$

Mithilfe der Quotientenregel ergibt sich daraus für die zweite Ableitung

$$\frac{\widehat{p}_{l,\infty}''(\widehat{T}_\infty)}{\widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)} = \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty^3} \left( \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty} - 2 \right). \quad (2.96)$$

Wir bemerken noch, dass in der Herleitung von (2.96) die Annahme gemacht wurde, dass die latente Wärme nicht von der Temperatur abhängt. Diese Annahme ist gerechtfertigt, da die Differenz der Temperaturen  $\widehat{T}_\infty, \widehat{T}_d$  sehr klein und die latente Wärme eine differenzierbare Funktion ist. Daher gilt  $\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_d) \approx \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)$ .

Die Entwicklung von  $\widehat{p}_{l,\infty}$  in (2.92) bis zum quadratischen Term ergibt

$$\begin{aligned}
 p_{l,\infty}(T_d) &= \frac{\widehat{p}_{l,\infty}(T_{d,c}T_d)}{\widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)} \\
 &\approx 1 + \frac{\widehat{p}_{l,\infty}'(\widehat{T}_\infty)}{\widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}(T_{d,c}T_d - \widehat{T}_\infty) + \frac{\widehat{p}_{l,\infty}''(\widehat{T}_\infty)}{2\widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}(T_{d,c}T_d - \widehat{T}_\infty)^2 \\
 &= C_0 + C_1T_d + C_2T_d^2,
 \end{aligned} \tag{2.97}$$

mit den dimensionslosen Koeffizienten

$$\begin{aligned}
 C_0 &:= 1 + \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v\widehat{T}_\infty} \left( \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{2R_v\widehat{T}_\infty} - 2 \right), \\
 C_1 &:= \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)T_{d,c}}{R_v\widehat{T}_\infty^2} \left( 3 - \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v\widehat{T}_\infty} \right), \\
 C_2 &:= \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)T_{d,c}^2}{2R_v\widehat{T}_\infty^3} \left( \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v\widehat{T}_\infty} - 2 \right).
 \end{aligned} \tag{2.98}$$

Da die Clausius-Clapeyron-Gleichung allgemein gilt, insbesondere auch für den Fall von Eis, folgt für den Sättigungsdampfdruck über Eis die gleiche Approximation, wenn die physikalischen Parametrisierungen in (2.98) bezüglich des Eises notiert werden.

### 2.5.3 Entdimensionalisierung mit approximiertem Sättigungsdampfdruck

Wir setzen nun in die entdimensionalisierten Wachstumsgleichungen (2.91) die durch (2.97) approximierte dimensionslose Funktion (2.92) ein. Dies ergibt die Gleichungen

$$\begin{aligned}
 \frac{dm_d}{dt} &= \alpha_1 m_d^{\frac{1}{3}} - \left( \frac{\alpha_2}{T_d} - \alpha_3 + \alpha_4 T_d \right) m_d^{\frac{1}{3}} \exp\left( \frac{\alpha}{T_d m_d^{\frac{1}{3}}} \right), \\
 \frac{dT_d}{dt} &= \frac{\beta_1}{m_d^{\frac{2}{3}}} - \left( \frac{\beta_2}{T_d} - \beta_3 + \beta_4 T_d \right) \frac{1}{m_d^{\frac{2}{3}}} \exp\left( \frac{\alpha}{T_d m_d^{\frac{1}{3}}} \right) - \beta_5 \frac{T_d}{m_d^{\frac{2}{3}}}
 \end{aligned} \tag{2.99}$$

mit den finalen dimensionslosen Koeffizienten

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 = \widetilde{\alpha}_1 &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty) S_\infty}{R_v \widehat{T}_\infty m_{d,c}^{\frac{2}{3}}}, \\
 \alpha_2 = \widetilde{\alpha}_2 C_0 &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{R_v T_{d,c} m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( 1 + \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty} \left( \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{2R_v \widehat{T}_\infty} - 2 \right) \right), \\
 \alpha_3 = -\widetilde{\alpha}_2 C_1 &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty) \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v^2 \widehat{T}_\infty^2 m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty} - 3 \right), \\
 \alpha_4 = \widetilde{\alpha}_2 C_2 &= \frac{2\pi\alpha_d \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty) \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty) T_{d,c}}{R_v^2 \widehat{T}_\infty^3 m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty} - 2 \right), \\
 \beta_1 = \widetilde{\beta}_1 &= \frac{4\pi \widehat{C}_K t_c}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_\infty) T_{d,c} m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( \frac{\alpha_d \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty) \widehat{D}_0 \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty) S_\infty + \widehat{K}_0 \widehat{T}_\infty}{R_v \widehat{T}_\infty} \right), \\
 \beta_2 = \widetilde{\beta}_2 C_0 &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty) \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_\infty) R_v T_{d,c}^2 m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( 1 + \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty} \left( \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{2R_v \widehat{T}_\infty} - 2 \right) \right), \\
 \beta_3 = -\widetilde{\beta}_2 C_1 &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)^2 \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_\infty) R_v^2 T_{d,c} \widehat{T}_\infty^2 m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty} - 3 \right), \\
 \beta_4 = \widetilde{\beta}_2 C_2 &= \frac{2\pi\alpha_d \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)^2 \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_\infty) R_v^2 \widehat{T}_\infty^3 m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( \frac{\widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty} - 2 \right), \\
 \beta_5 = \widetilde{\beta}_3 &= \frac{4\pi \widehat{K}_0 \widehat{C}_K t_c}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_\infty) m_{d,c}^{\frac{2}{3}}}.
 \end{aligned} \tag{2.100}$$

Aufgrund von

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{3}{2} m_d^{\frac{2}{3}} \right) = m_d^{-\frac{1}{3}} \frac{dm_d}{dt} \tag{2.101}$$

bietet sich die Substitution

$$x(t) := \frac{3}{2} m_d(t)^{\frac{2}{3}} \tag{2.102}$$

an. Einsetzen von (2.102) in (2.99) liefert das transformierte System

$$\begin{aligned}
 \frac{dx}{dt} &= \alpha_1 - \left( \frac{\alpha_2}{T_d} - \alpha_3 + \alpha_4 T_d \right) \exp \left( \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\alpha}{T_d x^{\frac{1}{2}}} \right), \\
 \frac{2}{3} x \frac{dT_d}{dt} &= \beta_1 - \left( \frac{\beta_2}{T_d} - \beta_3 + \beta_4 T_d \right) \exp \left( \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\alpha}{T_d x^{\frac{1}{2}}} \right) - \beta_5 T_d.
 \end{aligned} \tag{2.103}$$

Vernachlässigen der Krümmung, das heisst Ersetzen des Exponentialterms durch 1, ergibt

$$T_d \frac{dx}{dt} = -\gamma_1 T_d^2 - \gamma_2 + \gamma_3 T_d, \tag{2.104a}$$

$$xT_d \frac{dT_d}{dt} = -\delta_1 T_d^2 - \delta_2 + \delta_3 T_d \quad (2.104b)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} \gamma_1 &:= \alpha_4, & \delta_1 &:= \frac{3}{2}(\beta_4 + \beta_5), \\ \gamma_2 &:= \alpha_2, & \delta_2 &:= \frac{3}{2}\beta_2, \\ \gamma_3 &:= \alpha_1 + \alpha_3, & \delta_3 &:= \frac{3}{2}(\beta_1 + \beta_3). \end{aligned} \quad (2.105)$$

Das Vernachlässigen des „Krümmungsterms“ in (2.103) ist gemäss Abschnitt 2.2.5 für Hydrometeore ab einem Radius von  $1 \mu\text{m}$  gerechtfertigt. Im Folgenden wird stets angenommen, dass die Hydrometeore gross genug sind, um die Krümmung zu vernachlässigen. Alle dimensionslosen Koeffizienten (2.105) hängen von der Umgebungstemperatur  $\widehat{T}_\infty$  und dem Umgebungsdruck  $\widehat{p}_\infty$  ab, wobei der Druck ausschliesslich in den Wert  $\widehat{D}_0$  für die Diffusivität eingeht. Die Koeffizienten  $\gamma_3$  und  $\delta_3$  hängen zusätzlich vom Umgebungssättigungsverhältnis  $S_\infty$  ab.

### 2.5.4 Gleichgewichtsverhalten

Aus den Abbildungen 2.5 und 2.6 ist bereits ersichtlich, dass die Tropfentemperatur auf eine Gleichgewichtstemperatur relaxiert. Eine solche Gleichgewichtstemperatur ist durch das Verschwinden der rechten Seite von (2.104b) charakterisiert. Das bedeutet, alle Gleichgewichtstemperaturen lösen die Gleichung

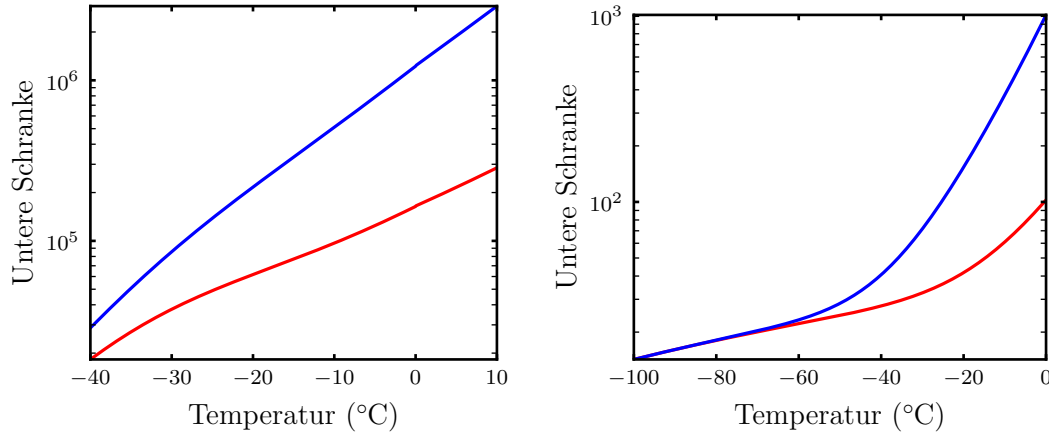
$$0 = -\delta_1 T_{\text{GG}}^2 - \delta_2 + \delta_3 T_{\text{GG}}. \quad (2.106)$$

Die Lösungen dieser quadratischen Gleichung sind

$$T_{\text{GG}} = \frac{\delta_3 + \sqrt{\delta_3^2 - 4\delta_1\delta_2}}{2\delta_1} \quad \text{und} \quad T'_{\text{GG}} = \frac{\delta_3 - \sqrt{\delta_3^2 - 4\delta_1\delta_2}}{2\delta_1}. \quad (2.107)$$

Für relevante atmosphärische Werte sind diese Lösungen immer reell und verschieden, denn die Diskriminante verschwindet nicht, vergleiche Abbildung 2.8a. Für diese Abbildung wurde das Sättigungsverhältnis  $S_\infty = 0.5$  gewählt, um eine untere Abschätzung für die Diskriminante zu erhalten. Dieses Sättigungsverhältnis ist deutlich niedriger als beobachtete Werte in Wolken (Korolev und Isaac, 2006). Für den Fall eines kugelförmigen Eiskristalls ist die Diskriminante ebenfalls grösser als 0, siehe Abbildung 2.8b. Da die Werte der Diskriminante durch die Referenzwerte der Masse und Temperatur des Hydrometeors lediglich skaliert werden, ist die konkrete Wahl der Referenzwerte für das Vorzeichen der Diskriminante unwichtig. Für Abbildung 2.8 wurden die Referenzwerte  $T_{d,c} = 0^\circ\text{C}$  und  $3m_{d,c} = 4\pi\widehat{\rho}_l(T_{d,c})(10 \cdot 10^{-6} \text{ m})^3$  für den Tropfen sowie  $T_{i,c} = -15^\circ\text{C}$  und  $3m_{i,c} = 4\pi\widehat{\rho}_i(T_{i,c})(100 \cdot 10^{-6} \text{ m})^3$  für den Eiskristall gewählt.

Mithilfe von (2.106) sehen wir, dass die zugehörige Parabel nach unten geöffnet ist, denn  $\delta_1 > 0$ . Daher ist die grössere Gleichgewichtstemperatur  $T_{\text{GG}}$  ein positiver Attraktor und die kleinere Gleichgewichtstemperatur  $T'_{\text{GG}}$  ein negativer Attraktor für die Temperaturgleichung (2.104b). Die kleinere Lösung  $T'_{\text{GG}}$  ist für relevante atmosphärische Werte im Vergleich zur Umgebungstemperatur sehr klein, wie Abbildung 2.9 zeigt.



(a) Fall des Tropfens: Die Kurven sind stets oberhalb von  $1.8 \cdot 10^4$

(b) Fall des Eiskristalls: Die Kurven sind stets oberhalb von 14

**Abbildung 2.8:** Untere Schranke für die Diskriminante von (2.106) für die Umgebungsdrücke 1013 hPa (rote Kurve) und 100 hPa (blaue Kurve). Für das Sättigungsverhältnis wurde  $S_\infty = 0.5$  als untere Schranke verwendet.

Dies ist der Grund dafür, dass im Folgenden nur die Lösung  $T_{GG}$  verwendet wird. In Abbildung 2.9 ist die dimensionsbehaftete kleinere Lösung  $\widehat{T}'_{GG}$  dargestellt, denn die dimensionsbehafteten Gleichgewichtstemperaturen sind unabhängig von der Wahl der Referenzwerte für die Masse und Temperatur der Hydrometeore.

Aus dieser Diskussion kann, wegen der Struktur von (2.104a), eine konstante „Grenzmassenänderungsrate“ ermittelt werden. Da die Temperatur sehr schnell auf  $T_{GG}$  relaxiert, gilt nach der Relaxation für die Änderungsrate von  $x$

$$\frac{dx}{dt} = -\gamma_1 T_{GG} - \frac{\gamma_2}{T_{GG}} + \gamma_3. \quad (2.108)$$

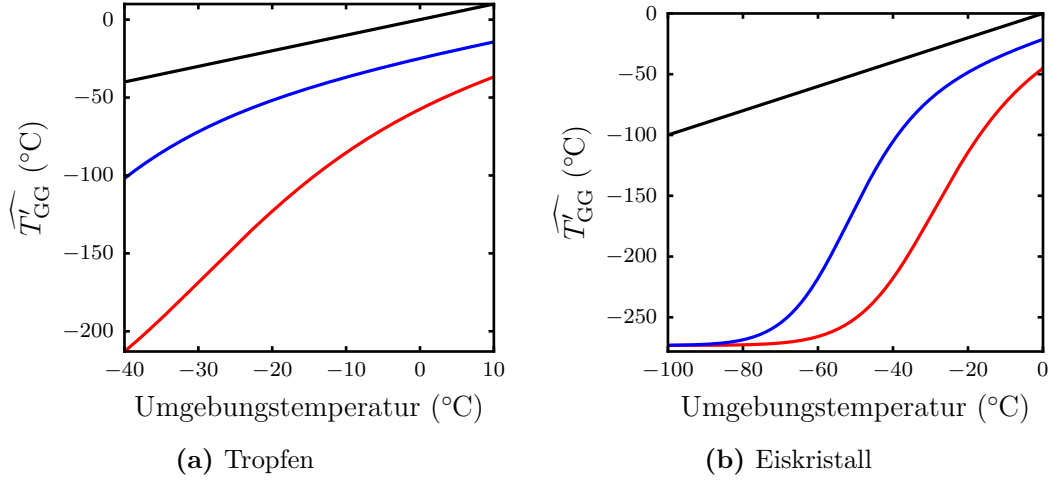
Dies bedeutet, dass sich  $x$  nach kurzer Zeit wie eine affin-lineare Funktion verhält, vergleiche dazu auch Abbildung 2.6. Ausgedrückt mit der Masse  $m_d$ , ergibt sich das einfache Potenzgesetz

$$\frac{dm_d}{dt} = \left( -\gamma_1 T_{GG} - \frac{\gamma_2}{T_{GG}} + \gamma_3 \right) m_d^{\frac{1}{3}}. \quad (2.109)$$

Für einen kugelförmigen Eiskristall, der ebenfalls gross genug ist um die Krümmung zu vernachlässigen, gilt mutatis mutandis dasselbe Potenzgesetz. Ein solches Potenzgesetz für die Masse ist für grössere Wetter- und Klimamodelle nützlich, in denen die Mikrophysik mithilfe der Momentenmethode berechnet wird (für den Fall von Eis siehe zum Beispiel (Koenig, 1971; Spichtinger und Gierens, 2009); vergleiche auch Abschnitt 5.3).

### 2.5.5 Asymptotische Approximation

Nach der Entdimensionalisierung werden wir nun die asymptotische Approximation der entdimensionalisierten Wachstumsgleichungen (2.104) konstruieren. Anzumerken ist,



**Abbildung 2.9:** Kleinere Lösung  $\widehat{T'_{GG}}$  von (2.106) für die Umgebungsdrücke 1013 hPa (rote Kurve) und 100 hPa (blaue Kurve) im Vergleich zur Umgebungstemperatur. Die schwarze Kurve kennzeichnet die Identität. Für das Sättigungsverhältnis wurde  $S_\infty = 0.5$  als untere Schranke verwendet.

dass in (2.104a) die gesuchte Funktion  $x$  auf der rechten Seite nicht mehr vorkommt. Daher lässt sich die exakte Lösung als

$$\begin{aligned}
 x(t) &= x(0) + \int_0^t \frac{dx}{dt}(s) ds \\
 &= x(0) + \int_0^t \left( -\gamma_1 T_d(s) - \frac{\gamma_2}{T_d(s)} + \gamma_3 \right) ds \\
 &= x(0) + \gamma_3 t - \gamma_1 \int_0^t T_d(s) ds - \gamma_2 \int_0^t \frac{1}{T_d(s)} ds
 \end{aligned} \tag{2.110}$$

schreiben. Einsetzen der exakten Lösung (2.110) in die Temperaturgleichung aus (2.104) liefert

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{Z(t)}{N(t)} \tag{2.111}$$

mit den Funktionen

$$\begin{aligned}
 Z(t) &= -\delta_1 T_d^2 - \delta_2 + \delta_3 T_d, \\
 N(t) &= (x(0) + \gamma_3 t) T_d - \gamma_1 T_d \int_0^t T_d(s) ds - \gamma_2 T_d \int_0^t \frac{1}{T_d(s)} ds.
 \end{aligned} \tag{2.112}$$

Aus Abschnitt 2.5.4 ist bekannt, dass die Lösung der Temperaturgleichung auf die Gleichgewichtstemperatur  $T_{GG}$  relaxiert. Darüber hinaus folgt aus numerischen Simulationen der Wachstumsgleichungen, dass diese Gleichgewichtstemperatur nur wenig von der Anfangstemperatur abweicht, zumindest in den für die Atmosphäre relevanten



Fällen, vergleiche auch Abbildungen 2.5 und 2.6. Wir machen daher den folgenden Ansatz (Holmes, 2013, Kapitel 6): Die Anfangsbedingung von Gleichung (2.111) sei gegeben durch

$$T_d(0) = T_{GG} + \varepsilon. \quad (2.113)$$

Die Gleichgewichtstemperatur  $T_{GG}$  erfüllt (2.106), daher ist für  $\varepsilon = 0$  die exakte Lösung von (2.111) durch die konstante Funktion  $T_d(t) = T_{GG}$  gegeben.

Für die gesuchte Lösung machen wir den Ansatz

$$T_d(t) = T_0(t) + \varepsilon T_1(t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (2.114)$$

Dieser Ansatz wird in (2.111) eingesetzt, um eine approximative Lösung für  $T_d$  zu erhalten. Wegen (2.110) liefert diese ebenfalls eine approximative Lösung für  $x$ . Die Integrale im Nenner von (2.111) werden termweise ausgewertet. Mit der Entwicklung

$$\frac{1}{T_d} = (T_0 + \varepsilon T_1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2))^{-1} = \frac{1}{T_0} - \varepsilon \frac{T_1}{T_0^2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (2.115)$$

folgt für diese Integrale

$$\int_0^t T_d(s) ds = \int_0^t T_0(s) ds + \varepsilon \int_0^t T_1(s) ds + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (2.116a)$$

$$\int_0^t \frac{1}{T_d(s)} ds = \int_0^t \frac{1}{T_0(s)} ds - \varepsilon \int_0^t \frac{T_1(s)}{T_0^2(s)} ds + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (2.116b)$$

Einsetzen von (2.116a) und (2.116b) in den Nenner  $N$  aus (2.111) liefert die Entwicklung

$$\begin{aligned} N &= (x(0) + \gamma_3 t) T_d - \gamma_1 T_d \int_0^t T_d(s) ds - \gamma_2 T_d \int_0^t \frac{1}{T_d(s)} ds \\ &= \left( (x(0) + \gamma_3 t) T_0 - \gamma_1 T_0 \int_0^t T_0(s) ds - \gamma_2 T_0 \int_0^t \frac{1}{T_0(s)} ds \right) \\ &\quad + \varepsilon \left( (x(0) + \gamma_3 t) T_1 - \gamma_1 T_0 \int_0^t T_1(s) ds - \gamma_1 T_1 \int_0^t T_0(s) ds \right. \\ &\quad \left. - \gamma_2 T_1 \int_0^t \frac{1}{T_0(s)} ds + \gamma_2 T_0 \int_0^t \frac{T_1(s)}{T_0^2(s)} ds \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &=: N_0 + \varepsilon N_1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (2.117)$$

Für den Zähler  $Z$  von (2.111) folgt mit der Darstellung

$$T_d^2 = T_0^2 + \varepsilon 2T_0 T_1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (2.118)$$

die Entwicklung

$$\begin{aligned} Z &= -\delta_1 T_d^2 - \delta_2 + \delta_3 T_d \\ &= \left( -\delta_1 T_0^2 - \delta_2 + \delta_3 T_0 \right) + \varepsilon \left( -2\delta_1 T_0 T_1 + \delta_3 T_1 \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &=: Z_0 + \varepsilon Z_1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (2.119)$$

Der gesamte Quotient  $\frac{Z}{N}$  lässt sich in

$$\begin{aligned}\frac{Z}{N} &= \left( Z_0 + \varepsilon Z_1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right) \cdot \left( \frac{1}{N_0} - \varepsilon \frac{N_1}{N_0^2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right) \\ &= \frac{Z_0}{N_0} + \varepsilon \left( \frac{Z_1}{N_0} - Z_0 \frac{N_1}{N_0^2} \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\end{aligned}\quad (2.120)$$

entwickeln. Da wir eine reguläre Entwicklung (2.114) angesetzt haben, erhalten wir eine Entwicklung der linken Seite von (2.111) als

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{dT_0}{dt} + \varepsilon \frac{dT_1}{dt} + \mathcal{O}(\varepsilon^2).\quad (2.121)$$

Um die Funktionen  $T_0$  und  $T_1$  zu berechnen, werden nacheinander die Probleme der führenden Ordnung  $\mathcal{O}(1)$  sowie der ersten Ordnung  $\mathcal{O}(\varepsilon)$  betrachtet.

In der führenden Ordnung  $\mathcal{O}(1)$  ergibt sich das Problem

$$\frac{dT_0}{dt} = \frac{Z_0}{N_0} = \frac{-\delta_1 T_0^2 - \delta_2 + \delta_3 T_0}{(x(0) + \gamma_3 t) T_0 - \gamma_1 T_0 \int_0^t T_0(s) ds - \gamma_2 T_0 \int_0^t \frac{1}{T_0(s)} ds}\quad (2.122)$$

mit der Anfangsbedingung  $T_0(0) = T_{\text{GG}}$ . Wie zuvor bemerkt, wird dieses Problem durch die konstante Funktion  $T_0(t) = T_{\text{GG}}$  eindeutig gelöst. Insbesondere gilt wegen (2.106)

$$Z_0(t) = -\delta_1 T_{\text{GG}}^2 - \delta_2 + \delta_3 T_{\text{GG}} = 0\quad (2.123)$$

sowie

$$\begin{aligned}N_0(t) &= (x(0) + \gamma_3 t) T_{\text{GG}} - \gamma_1 T_{\text{GG}}^2 t - \gamma_2 t = x(0) T_{\text{GG}} + (\gamma_3 T_{\text{GG}} - \gamma_1 T_{\text{GG}}^2 - \gamma_2) t \\ &=: x(0) T_{\text{GG}} + Qt\end{aligned}\quad (2.124)$$

mit

$$Q := \gamma_3 T_{\text{GG}} - \gamma_1 T_{\text{GG}}^2 - \gamma_2.\quad (2.125)$$

Zuerst wird der Fall  $Q \neq 0$  betrachtet und anschliessend der Fall  $Q = 0$ .

In Ordnung  $\mathcal{O}(\varepsilon)$  erhalten wir das Problem

$$\frac{dT_1}{dt} = \frac{Z_1}{N_0} - Z_0 \frac{N_1}{N_0^2} = \frac{Z_1}{N_0} = \frac{-2\delta_1 T_{\text{GG}} + \delta_3}{x(0) T_{\text{GG}} + Qt} T_1\quad (2.126)$$

mit der Anfangsbedingung  $T_1(0) = 1$ , das durch

$$T_1(t) = \exp \left( \int_0^t \frac{-2\delta_1 T_{\text{GG}} + \delta_3}{x(0) T_{\text{GG}} + Qs} ds \right)\quad (2.127)$$

gelöst wird. Das Integral im Argument der Exponentialfunktion lässt sich zu

$$\int_0^t \frac{-2\delta_1 T_{\text{GG}} + \delta_3}{x(0) T_{\text{GG}} + Qs} ds = \frac{-2\delta_1 T_{\text{GG}} + \delta_3}{Q} \log \left( 1 + \frac{Q}{x(0) T_{\text{GG}}} t \right)\quad (2.128)$$

berechnen. Damit folgt für (2.127) die Darstellung

$$T_1(t) = \exp\left(\frac{-2\delta_1 T_{\text{GG}} + \delta_3}{Q} \log\left(1 + \frac{Q}{x(0)T_{\text{GG}}}t\right)\right). \quad (2.129)$$

Insgesamt erhalten wir eine Approximation an  $T_d$  der Ordnung 1 durch

$$\begin{aligned} T_d(t) &= T_0(t) + \varepsilon T_1(t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= T_{\text{GG}} + \varepsilon \exp\left(\frac{-2\delta_1 T_{\text{GG}} + \delta_3}{Q} \log\left(1 + \frac{Q}{x(0)T_{\text{GG}}}t\right)\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (2.130)$$

Aus (2.110) lässt sich hieraus eine Approximation der Ordnung 1 an  $x$  gewinnen. Durch Einsetzen folgt

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) + \gamma_3 t - \gamma_1 \int_0^t T_d(s) \, ds - \gamma_2 \int_0^t \frac{1}{T_d(s)} \, ds \\ &= x(0) + \gamma_3 t - \gamma_1 \int_0^t T_0(s) \, ds - \varepsilon \gamma_1 \int_0^t T_1(s) \, ds - \gamma_2 \int_0^t \frac{1}{T_0(s)} \, ds \\ &\quad + \varepsilon \gamma_2 \int_0^t \frac{T_1(s)}{T_0(s)^2} \, ds + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= x(0) + \frac{Q}{T_{\text{GG}}}t + \varepsilon \frac{\gamma_2 - \gamma_1 T_{\text{GG}}^2}{T_{\text{GG}}^2} \int_0^t T_1(s) \, ds + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (2.131)$$

Das auftretende Integral lässt sich auswerten zu

$$\begin{aligned} \int_0^t T_1(s) \, ds &= \int_0^t \exp\left(\frac{-2\delta_1 T_{\text{GG}} + \delta_3}{Q} \log\left(1 + \frac{Q}{x(0)T_{\text{GG}}}s\right)\right) \, ds \\ &= x(0)T_{\text{GG}} \frac{\left(\frac{x(0)T_{\text{GG}} + Qt}{x(0)T_{\text{GG}}}\right)^{\frac{Q + \delta_3 - 2\delta_1 T_{\text{GG}}}{Q}} - 1}{Q + \delta_3 - 2\delta_1 T_{\text{GG}}}. \end{aligned} \quad (2.132)$$

Eingesetzt in (2.131), ergibt sich

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) + \frac{Q}{T_{\text{GG}}}t + \varepsilon \frac{\gamma_2 - \gamma_1 T_{\text{GG}}^2}{T_{\text{GG}}^2} x(0)T_{\text{GG}} \frac{\left(\frac{x(0)T_{\text{GG}} + Qt}{x(0)T_{\text{GG}}}\right)^{\frac{Q + \delta_3 - 2\delta_1 T_{\text{GG}}}{Q}} - 1}{Q + \delta_3 - 2\delta_1 T_{\text{GG}}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= x(0) + \frac{Q}{T_{\text{GG}}}t + \varepsilon x(0) \frac{\gamma_2 - \gamma_1 T_{\text{GG}}^2}{T_{\text{GG}}} \frac{\left(\frac{x(0)T_{\text{GG}} + Qt}{x(0)T_{\text{GG}}}\right)^{\frac{Q + \delta_3 - 2\delta_1 T_{\text{GG}}}{Q}} - 1}{Q + \delta_3 - 2\delta_1 T_{\text{GG}}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (2.133)$$

Wir erkennen, dass die Funktion  $x$  in führender Ordnung eine affin-lineare Funktion ist, was zur Schlussfolgerung aus Abschnitt 2.5.4 passt. Aufgrund der Transformation (2.102), verhält sich die Masse  $m_d$  in führender Ordnung wie eine Potenzfunktion. Die Temperaturapproximation (2.130) erklärt die schnelle Relaxation auf den Gleichgewichtswert  $T_{\text{GG}}$ .

Die eben hergeleitete Approximation basiert auf der Annahme  $Q = \gamma_3 T_{\text{GG}} - \gamma_1 T_{\text{GG}}^2 - \gamma_2 \neq 0$ , denn diese Grösse steht im Nenner von (2.128). Wir betrachten nun den Fall  $Q = 0$  und diskutieren zunächst, unter welchen Umständen dieser Fall eintritt. Hierzu sei  $Q$  die Funktion

$$Q(T) := -\gamma_1 T^2 + \gamma_3 T - \gamma_2. \quad (2.134)$$

Es muss daher die Frage geklärt werden, unter welchen Bedingungen  $Q(T_{\text{GG}}) = 0$  gilt. Aus den Definitionen der dimensionslosen Koeffizienten (2.105), (2.94) und (2.100) folgt

$$\begin{aligned} Q(T) &= -\gamma_1 T^2 + \gamma_3 T - \gamma_2 = -\alpha_4 T^2 + (\alpha_1 + \alpha_3) T - \alpha_2 \\ &= -\widetilde{\alpha}_2 \left( C_2 T^2 + C_1 T + C_0 \right) + \widetilde{\alpha}_1 T \\ &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{D}_0 \widehat{C}_K t_c \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{R_v m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( -\frac{C_2 T^2 + C_1 T + C_0}{T_{d,c}} + \frac{S_\infty}{\widehat{T}_\infty} \right). \end{aligned} \quad (2.135)$$

An dieser Stelle verwenden wir erstmals die konkrete Wahl der Referenzgrössen. Aufgrund der Wahl  $T_{d,c} = \widehat{T}_\infty$  folgt aus (2.135) die Bedingung

$$S_\infty = C_2 T^2 + C_1 T + C_0 \quad (2.136)$$

für eine Nullstelle von  $Q$ . Zusätzlich schreiben wir die definierende Gleichung (2.106) für  $T_{\text{GG}}$  ebenfalls mithilfe der Definitionen der entdimensionalisierten Koeffizienten (2.105), (2.94) und (2.100) als

$$\begin{aligned} 0 &= -\delta_1 T_{\text{GG}}^2 - \delta_2 + \delta_3 T_{\text{GG}} = \frac{3}{2} \left( -(\beta_4 + \beta_5) T_{\text{GG}}^2 - \beta_2 + (\beta_1 + \beta_3) T_{\text{GG}} \right) \\ &= \frac{3}{2} \left( -(\widetilde{\beta}_2 C_2 + \widetilde{\beta}_3) T_{\text{GG}}^2 - \widetilde{\beta}_2 C_0 + (\widetilde{\beta}_1 - \widetilde{\beta}_2 C_1) T_{\text{GG}} \right) \\ &= \frac{3}{2} \left( -\widetilde{\beta}_2 (C_2 T_{\text{GG}}^2 + C_1 T_{\text{GG}} + C_0) - \widetilde{\beta}_3 T_{\text{GG}}^2 + \widetilde{\beta}_1 T_{\text{GG}} \right). \end{aligned} \quad (2.137)$$

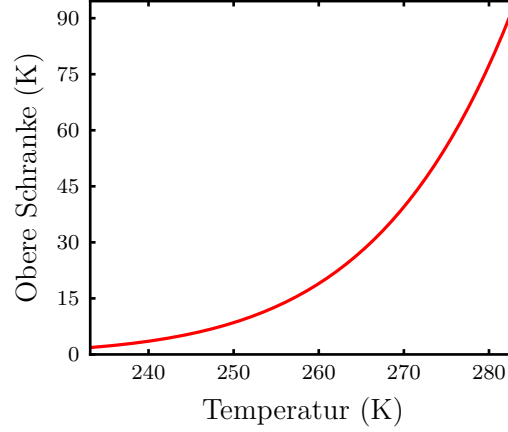
Nehmen wir nun an, dass  $Q(T_{\text{GG}}) = 0$  gilt. Auswerten von (2.136) an der Stelle  $T_{\text{GG}}$  und Einsetzen in (2.137) liefert

$$\begin{aligned} 0 &= \widetilde{\beta}_2 S_\infty + \widetilde{\beta}_3 T_{\text{GG}}^2 - \widetilde{\beta}_1 T_{\text{GG}} \\ &= \frac{4\pi \widehat{C}_K t_c}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_\infty) m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( \frac{\alpha_d \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty) \widehat{D}_0 \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty) S_\infty}{R_v \widehat{T}_\infty^2} (1 - T_{\text{GG}}) + \widehat{K}_0 T_{\text{GG}} (T_{\text{GG}} - 1) \right) \\ &= \frac{4\pi \widehat{C}_K t_c}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_\infty) m_{d,c}^{\frac{2}{3}}} \left( \frac{\alpha_d \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty) \widehat{D}_0 \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty) S_\infty}{R_v \widehat{T}_\infty^2} - \widehat{K}_0 T_{\text{GG}} \right) (1 - T_{\text{GG}}). \end{aligned} \quad (2.138)$$

Diese Bedingung kann nur für  $T_{\text{GG}} = 1$  oder

$$T_{\text{GG}} = \frac{\alpha_d \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_\infty) \widehat{D}_0 \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty) S_\infty}{R_v \widehat{K}_0 \widehat{T}_\infty^2} \quad (2.139)$$

erfüllt werden. Tatsächlich ist die Lösung (2.139) nicht relevant, denn für atmosphärische Werte, bei welchen Mischphasenwolken auftreten, ist diese zu klein. In Abbildung 2.10 ist



**Abbildung 2.10:** Obere Schranke für den Ausdruck in (2.139), multipliziert mit einer maximalen Referenztemperatur von  $10^\circ\text{C}$  für relevante atmosphärische Werte, bei welchen Mischphasenwolken auftreten.

eine obere Schranke für den Ausdruck in (2.139) für Temperaturen  $-40^\circ\text{C} \leq \widehat{T}_\infty \leq 10^\circ\text{C}$  dargestellt. Hieraus folgt, dass (2.139) durchgängig unter  $100\text{K}$  liegt und daher im Fall von Mischphasenwolken nicht auftreten kann. Für die Abbildung wurde die Diffusivität  $\widehat{D}_0$  für den kleinsten relevanten Umgebungsdruck  $\widehat{p}_\infty = 250\text{hPa}$  ausgewertet (für andere Umgebungsdrücke ist  $\widehat{D}_0$  kleiner). Für das Umgebungssättigungsverhältnis wurde  $S_\infty = 1.1$  angenommen, was für die Atmosphäre sehr hoch wäre (Rogers und Yau, 1989, Kapitel 6; Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 2.2.1). Wir folgern daher, dass  $Q(T_{\text{GG}}) = 0$  nur für  $T_{\text{GG}} = 1$  auftreten kann. Aufgrund unserer Wahl der Referenztemperatur folgt  $\widehat{T}_{\text{GG}} = T_{d,c}T_{\text{GG}} = T_{d,c} = \widehat{T}_\infty$ . Mithilfe der Konstruktion der Approximation für den Sättigungsdampfdruck (2.97) und (2.136) folgern wir

$$S_\infty = C_2 T_{\text{GG}}^2 + C_1 T_{\text{GG}} + C_0 = C_2 + C_1 + C_0 = 1. \quad (2.140)$$

Daher kann der Fall  $Q(T_{\text{GG}}) = 0$  nur dann eintreten, falls  $T_{\text{GG}} = S_\infty = 1$  gilt. Mit diesen Vorbereitungen zeigen wir auch für den Fall  $Q(T_{\text{GG}}) = 0$  eine asymptotische Näherung, indem die Herleitung der Näherung für den Fall  $Q(T_{\text{GG}}) \neq 0$  entsprechend angepasst wird. In (2.124) ergibt sich für den Nenner  $N_0$  die Darstellung

$$N_0(t) = x(0)T_{\text{GG}} = x(0). \quad (2.141)$$

Mit (2.141) vereinfacht sich (2.126) für die erste Ordnung der Temperaturentwicklung zu

$$\frac{dT_1}{dt} = \frac{-2\delta_1 T_{\text{GG}} + \delta_3}{x(0)T_{\text{GG}}} T_1 = \frac{-2\delta_1 + \delta_3}{x(0)} T_1. \quad (2.142)$$

Die Anfangsbedingung ist wie zuvor  $T_1(0) = 1$ . Dieses Problem besitzt die Lösung

$$T_1(t) = \exp\left(\frac{-2\delta_1 + \delta_3}{x(0)} t\right). \quad (2.143)$$

Daher gilt für die Temperatur die asymptotische Näherung

$$T_d(t) = T_{\text{GG}} + \varepsilon \exp\left(\frac{-2\delta_1 + \delta_3}{x(0)} t\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (2.144)$$

Verwenden wir (2.131), setzen dort  $Q = 0$  sowie (2.143) ein, erhalten wir eine Approximation von Ordnung 1 an  $x$ :

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) + \varepsilon \frac{\gamma_2 - \gamma_1 T_{\text{GG}}^2}{T_{\text{GG}}^2} \int_0^t \exp\left(\frac{-2\delta_1 + \delta_3}{x(0)} s\right) ds + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= x(0) + \varepsilon (\gamma_2 - \gamma_1) \frac{x(0)}{-2\delta_1 + \delta_3} \left( \exp\left(\frac{-2\delta_1 + \delta_3}{x(0)} t\right) - 1 \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (2.145)$$

Aus den asymptotischen Approximationen (2.145) und (2.144) geht hervor, dass beide ein schnelles Abklingen auf einen konstanten Wert beschreiben. Dies ist auch physikalisch plausibel, denn für den hier betrachteten Fall mit  $Q(T_{\text{GG}}) = 0$  gilt insbesondere (2.140). Nach Konstruktion der Approximation des Sättigungsdampfdrucks in Abschnitt 2.5.2 und wegen  $T_{\text{GG}} = 1$  sowie  $\widehat{T_{\text{GG}}} = T_{d,c} T_{\text{GG}} = \widehat{T_{\infty}}$  bedeutet (2.140), dass die Umgebungssättigung  $S_{\infty}$  mit dem Sättigungsverhältnis

$$\frac{p_{l,\infty}(T_{d,c} T_{\text{GG}})}{p_{l,\infty}(\widehat{T_{\infty}})} \quad (2.146)$$

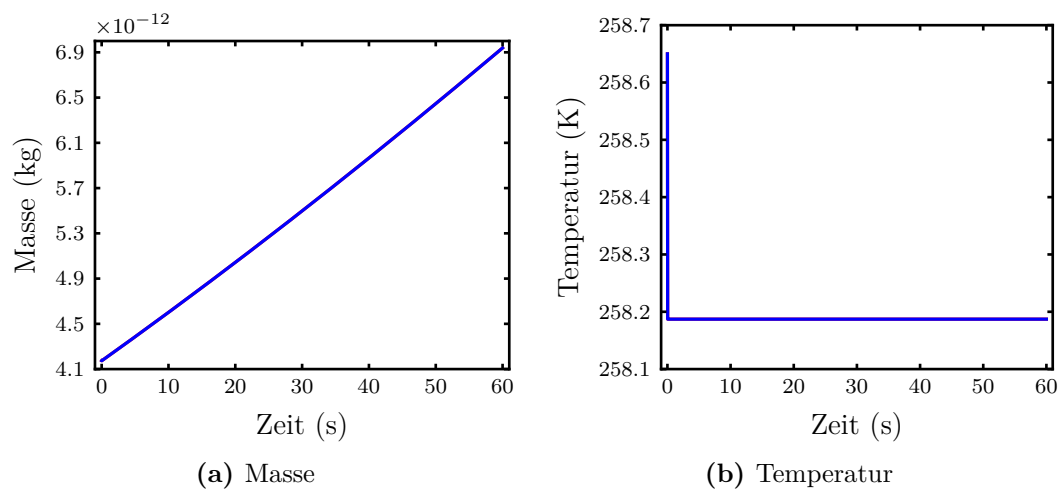
an der Oberfläche des Tropfens übereinstimmt. Mit anderen Worten: Sobald die Tropfentemperatur ihren Gleichgewichtswert erreicht hat, verschwindet die rechte Seite von (2.104a) und die Masse des Tropfens ändert sich nicht mehr, da er sich im Gleichgewicht mit der Umgebung befindet.

Wir illustrieren die Güte der hergeleiteten asymptotischen Näherung anhand von zwei Beispielen. Beide Male wählen wir eine Umgebungstemperatur von  $\widehat{T_{\infty}} = -15^\circ\text{C}$ , einen Umgebungsgesamtdruck  $\widehat{p_{\infty}} = 650\text{ hPa}$ , ein Sättigungsverhältnis  $S_{\infty} = 1.01$  und einen Anfangsradius von  $\widehat{r_d}(0) = 10\ \mu\text{m}$  für den Tropfen. Abbildung 2.11 zeigt den Verlauf der numerischen Lösung der entdimensionalisierten Wachstumsgleichungen (2.104) und der asymptotischen Näherung für den Fall einer Anfangstemperatur von  $\widehat{T_d}(0) = \widehat{T_{\infty}} + 0.5$ , also  $\varepsilon = 0.5$ . Die Lösung von (2.104) wurde numerisch mit dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren (Hairer u. a., 1993, Kapitel II.1, Tabelle 1.2), mit einem Zeitschritt von  $\Delta t = 1 \cdot 10^{-3}\text{ s}$ , berechnet. Die abgebildeten Lösungskurven sind nicht zu unterscheiden. Tatsächlich liegt der relative Fehler unter  $1.1 \cdot 10^{-6}$ , wobei der Fehler in der Masse der grössere ist. Der relative Fehler zur numerischen Lösung der vollständigen Wachstumsgleichungen (2.86) ist kleiner als  $3.5 \cdot 10^{-3}$ .

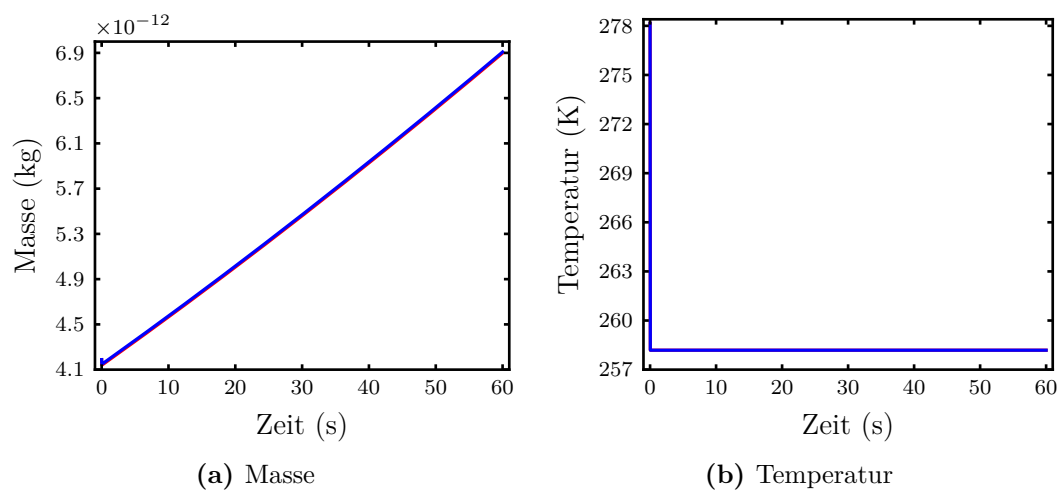
Die Herleitung der asymptotischen Näherung basiert auf der Annahme, dass  $\varepsilon = T_d(0) - T_{\text{GG}}$  klein ist. Auch wenn dies nicht erfüllt ist, ergibt sich eine gute Approximation, wie Abbildung 2.12 mithilfe des obigen Beispiels illustriert. Hierzu wurde die Anfangstemperatur des Tropfens  $20^\circ\text{C}$  oberhalb der Umgebungstemperatur gewählt, also  $\varepsilon = 20$ . Selbst in diesem Fall ist der relative Fehler der asymptotischen Näherung zu den entdimensionalisierten Gleichungen (2.104) kleiner als  $1.7 \cdot 10^{-3}$ . Auch diesmal ist der Fehler in der Masse der grössere. Der relative Fehler zur Lösung der vollständigen Gleichungen (2.86) ist kleiner als  $5.5 \cdot 10^{-3}$ .

### 2.5.6 Der Fall des Eiskristalls

In Abschnitt 2.5.5 haben wir die asymptotische Approximation der Wachstumsgleichungen für den Fall eines kugelförmigen Tropfens betrachtet. Nirgendwo wurde hierbei



**Abbildung 2.11:** Vergleich der numerischen Lösung von (2.104) (rote Kurve) mit der asymptotischen Näherung für  $\varepsilon = 0.5$  (blaue Kurve).



**Abbildung 2.12:** Vergleich der numerischen Lösung von (2.104) (rote Kurve) mit der asymptotischen Näherung für  $\varepsilon = 20$  (blaue Kurve).

allerdings eine spezielle Eigenschaft des Tropfens benutzt. Daher sind die hergeleiteten Näherungslösungen (2.133) und (2.130) beziehungsweise (2.145) und (2.144) auch für einen kugelförmigen Eiskristall gültig. In diesem Fall müssen lediglich alle Parametrisierungen bezüglich Eis benutzt werden.

## 2.6 Regularisierung

Wir haben bereits in Abschnitt 2.1 bemerkt, dass die von uns in dieser Form betrachteten Wachstumsgleichungen (2.1) singularär werden, wenn die Masse des Hydrometeors verschwindet. Insbesondere deshalb kann mit diesen Gleichungen nicht das komplette Verdampfen eines Hydrometeors beschrieben werden. Der Grund für diese Singularität liegt darin, dass die Wachstumsgleichungen aus Abschnitt 2.1 auf einer Herleitung beruhen, die ein Kontinuum voraussetzt. Für einen verdampfenden Hydrometeor wird allerdings ab einem gewissen Punkt die diskrete Natur wichtig und das Modell aus (2.1) ist nicht länger in der Lage den betrachteten physikalischen Prozess zu beschreiben. Von dort an ist ein anderes Modell nötig. Auch der Krümmungseffekt, der in Abschnitt 2.2 betrachtet wurde, basiert auf einer Kontinuumsannahme. Das heisst, es wird angenommen, dass „genügend“ Wassermoleküle vorhanden sind – was für kleine Hydrometeore nicht erfüllt ist.

Die nachfolgende Bemerkung betrifft die Stabilitätseigenschaften des Hydrometeors aufgrund des Krümmungseffekts. Betrachten wir beispielsweise einen Tropfen, dann muss der Partialdruck  $p_v$  des Wasserdampfes an der Tropfenoberfläche mit dem Sättigungsdampfdruck (2.29) übereinstimmen, damit der Tropfen im Gleichgewicht ist. Dies ist allerdings ein instabiles Gleichgewicht. Falls der Druck  $p_v$  ein wenig kleiner ist, beginnt der Tropfen zu verdampfen, da er sich in einem untersättigten Umfeld befindet, siehe (2.62) für die Masse. Folglich wird der Tropfenradius noch kleiner und wegen (2.29) wiederum, müsste der Wasserdampfdruck noch höher sein, um den Tropfen zu stabilisieren. Der Tropfen wird daher immer weiter verdampfen (Wang, 2013, Kapitel 5.11). Übertragen auf die Realität folgt hieraus, dass es in der Atmosphäre sehr grosse Übersättigungen geben müsste, damit die Tropfen nicht verdampfen und sich Wolken bilden oder halten können. Passend grosse Übersättigungen werden allerdings nicht beobachtet (Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 2.1.1).

Die Erklärung dafür, dass doch Wolken beobachtet werden, obwohl die benötigten Übersättigungen in der Atmosphäre nicht erreicht werden, liefern Aerosole. Das sind Schwebepartikel wie zum Beispiel Salz, Staub oder Schwefelsäuretropfen. An diesen bilden sich die Hydrometeore (Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 9; Howell, 1949). Durch die Anwesenheit des Aerosols im Hydrometeor wird der Sättigungsdampfdruck verändert („Raoult-Effekt“; Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 4.6). Diese Änderung des Sättigungsdampfdrucks stabilisiert den Hydrometeor, wodurch das eingangs beschriebene Problem der Singularität in den Wachstumsgleichungen umgangen wird. Mathematisch wird die für verschwindende Massen nach oben unbeschränkte Sättigungsdampfdruckkurve eines aus reinem Wasser bestehenden Hydrometeors (gestrichelte rote Linie in Abbildung 2.13) durch eine nach oben beschränkte Sättigungsdampfdruckkurve ersetzt (durchgezogene rote Linie in Abbildung 2.13).



Tatsächlich entstehen die meisten Hydrometeore an einem Aerosol und bestehen daher nicht aus reinem Wasser (Howell, 1949). Insofern ist es gerechtfertigt Hydrometeore zu betrachten, die nicht nur aus reinem Wasser bestehen, um die Wachstumsgleichungen zu stabilisieren. Allerdings wird hierdurch die Singularität in den Wachstumsgleichungen für reine Wasserpartikel nicht behoben, denn das fundamentale Problem der Konstruktion eines Modells, welches vom Kontinuum bis zur diskreten Skala gültig ist, bleibt ungelöst. Im Folgenden wird das Konzept eines Aerosols innerhalb eines Hydrometeors präzisiert.

Zunächst gehen wir auf den stabilisierenden Effekt des Aerosols ein, da es den Krümmungseffekt abschwächt. Das Aerosol ändert die Gleichung für den Sättigungsdampfdruck insofern, als dass die allgemeine Gleichung für den Sättigungsdampfdruck (2.16) zu

$$p_v = p_{l,\infty}(T) a_w \exp\left(\frac{\sigma_l(T)}{R_v \rho_l(T) T} (\kappa_1 + \kappa_2)\right) \quad (2.147)$$

modifiziert wird. Hierbei ist  $a_w$  die Aktivität des Aerosols. Diese hängt vom konkreten Aerosol sowie der Konzentration des Aerosols im Hydrometeor ab (Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 6.5). Es gibt verschiedene Ansätze die Aktivität zu beschreiben (Lamb und Verlinde, 2011, Kapitel 3.5.3). Wir benutzen hier die „ $\kappa$ -Köhler Theorie“, denn diese hat den Vorteil, dass der Typ des Aerosols lediglich in Form eines einzelnen Parameters  $\kappa$  eingeht. Für die Aktivität gilt gemäss dieser Theorie

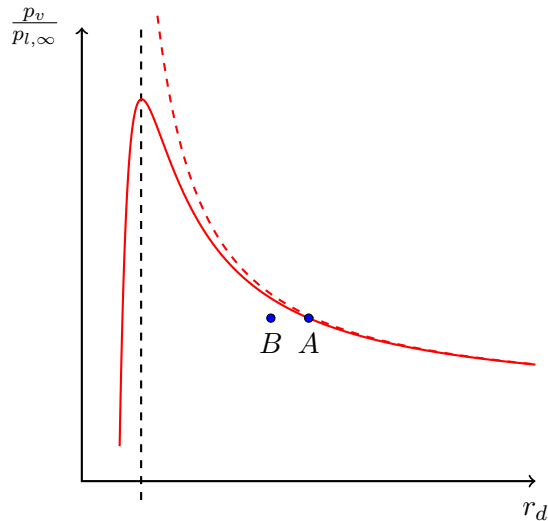
$$\frac{1}{a_w} = 1 + \kappa \frac{V_a}{V_l}, \quad (2.148)$$

wobei  $V_a$  das Volumen des Aerosols und  $V_l$  das Volumen des Wassers bezeichnen (Petters und Kreidenweis, 2007). Für das Sättigungsverhältnis

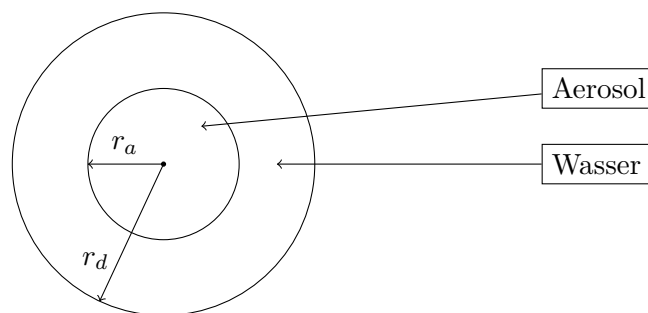
$$S = \frac{p_v}{p_{l,\infty}(T)} = a_w \exp\left(\frac{\sigma_l(T)}{R_v \rho_l(T) T} (\kappa_1 + \kappa_2)\right) \quad (2.149)$$

resultieren Kurven, wie in Abbildung 2.13 für den Fall eines Tropfens angedeutet. Eine solche Kurve heisst „Köhlerkurve“ und beschreibt eine Gleichgewichtskurve (Köhler, 1936). Ein Tropfen definiert durch seinen aktuellen Radius  $r_d$  und Sättigungsverhältnis  $S$  einen Punkt im Diagramm aus Abbildung 2.13. Liegt dieser Punkt auf der Köhlerkurve, beispielsweise am Punkt  $A$ , ist der Tropfen im Gleichgewicht. Verdunstet ein kleiner Teil des Tropfens, so ist der zugehörige Punkt  $B$  nicht mehr auf der Köhlerkurve. Der Punkt  $B$  befindet sich unter der Köhlerkurve, weshalb sich der Tropfen in einer untersättigten Umgebung befindet. Er wird solange weiter verdampfen, bis er wieder ein Gleichgewicht erreicht. Übertragen auf das Diagramm aus Abbildung 2.13 heisst das, der Punkt  $B$  bewegt sich solange horizontal nach links, bis die Köhlerkurve erreicht ist. In diesem Sinne ist der Bereich rechts des Extremwertes der Köhlerkurve instabil, denn jede kleine Abweichung von der Köhlerkurve bewirkt ein Entfernen des zugehörigen Punktes im Diagramm von der Kurve. Hingegen ist der Bereich links des Extremwertes der Köhlerkurve in diesem Sinne stabil, denn jede kleine Abweichung von der Köhlerkurve resultiert in einer erneuten Annäherung des Punktes an die Kurve. Der physikalische Grund liegt darin begründet, dass, bei einem kleinen Masseverlust, der Tropfen sich in einer übersättigten Umgebung befindet und daher wieder anwächst.

Die Existenz des Aerosols wird auch dazu verwendet, um die Singularität der Wachstumsgleichungen zu umgehen. Die zugehörige Modellvorstellung des Tropfens ist in



**Abbildung 2.13:** Die durchgezogene Linie zeigt den Einfluss der Aktivität  $a_w$  auf das Sättigungsverhältnis. Die gestrichelte Linie gibt den reinen Krümmungseffekt an (vergleiche Wang, 2013, Abbildung 5.8).



**Abbildung 2.14:** Konzeptionelle Modellvorstellung eines Tropfens  $\omega_d$  mit Radius  $r_d$ , der ein Aerosol enthält.

Abbildung 2.14 angedeutet. Der (Lösungs-)Tropfen  $\omega_d$  besteht aus einem „Aerosolkern“, umgeben von flüssigem Wasser. Sei  $r_d$  der Tropfenradius,  $r_a$  der Radius des Aerosolkerns im Tropfen sowie  $r_w := r_d - r_a \geq 0$  die „Dicke“ der Wasserschicht auf dem Aerosolkern. Ausserdem sei  $m_a$  die Aerosolmasse und  $m_w$  die Masse des Wassers des Tropfens. Zur Modellvorstellung aus Abbildung 2.14 treffen wir die folgende Annahme:

**Annahme**  
 Der Tropfen  $\omega_d$  besitzt eine uniforme Temperatur und interagiert ausschliesslich über das Tropfenwasser mit der Umgebung.

Der erste Teil der Annahme schliesst insbesondere eine Wärmeleitung im Inneren des Tropfens aus. Für die neuen Wachstumsgleichungen ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{dm_w}{dt} &= \alpha_d \int_{\partial\omega_d} D(\rho_v, T) \langle \nabla \rho_v, N \rangle d\sigma, \\ (m_a c_{p,a} + m_w c_{p,l}) \frac{dT_d}{dt} &= L_{lv} \frac{dm_w}{dt} + \int_{\partial\omega_d} K(\rho_v, T) \langle \nabla T, N \rangle d\sigma, \end{aligned} \quad (2.150)$$

wobei  $c_{p,a}$  die spezifische Wärmekapazität des Aerosols bezeichnet. Für den Fall eines Eiskristalls wird eine analoge Modellvorstellung benutzt. Ein ähnliches Bild wird auch verwendet, um das Schmelzen von Eiskristallen zu beschreiben (Wang, 2013, Kapitel 10.10; Lamb und Verlinde, 2011, Kapitel 8.4).

Für die Aktivität (2.148) folgt in diesem Modell

$$a_w = \frac{r_d^3 - r_a^3}{r_d^3 + (\kappa - 1) r_a^3}, \quad (2.151)$$

was die Dampfdruckformel

$$p_v = p_{l,\infty}(T_d) \frac{(r_w + r_a)^3 - r_a^3}{(r_w + r_a)^3 + (\kappa - 1) r_a^3} \exp\left(\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d (r_w + r_a)}\right) \quad (2.152)$$

liefert.

Die entdimensionalisierten Wachstumsgleichungen (2.150), für den Fall eines Tropfens wie in Abbildung 2.14, sind

$$\begin{aligned} \frac{dm_w}{dt} &= \alpha_1 (m_w + \alpha_2)^{\frac{1}{3}} \left( 1 - \frac{m_w p_{l,\infty}(T_d)}{(m_w + \alpha_3) \alpha_4 T_d} \exp\left(\frac{\alpha_5}{T_d (m_w + \alpha_2)^{\frac{1}{3}}}\right) \right), \\ \frac{dT_d}{dt} &= \frac{(m_w + \alpha_2)^{\frac{1}{3}}}{m_w + \beta_1} \left( \beta_2 - \frac{\beta_2 m_w p_{l,\infty}(T_d)}{(m_w + \alpha_3) \alpha_4 T_d} \exp\left(\frac{\alpha_5}{T_d (m_w + \alpha_2)^{\frac{1}{3}}}\right) + \beta_3 (\beta_4 - T_d) \right). \end{aligned} \quad (2.153)$$

Die Notation ist analog zu derjenigen aus Abschnitt 2.5.1. Hierbei ist

$$p_{l,\infty}(T) = \frac{\widehat{p_{l,\infty}}(T_c T)}{\widehat{p_{l,\infty}}(\widehat{T_\infty})} \quad (2.154)$$

die dimensionslose Sättigungsdampfdruckfunktion aus (2.92). Mit

$$\widehat{C}_l(\widehat{T}_d) = \left( \frac{3}{4\pi \widehat{\rho}_l(\widehat{T}_d)} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.155)$$

und

$$\widehat{\rho}_{v,\infty} = \frac{\widehat{p_{l,\infty}}(\widehat{T_\infty})}{R_v \widehat{T_\infty}} S_\infty \quad (2.156)$$

sind die dimensionslosen Koeffizienten durch

$$\begin{aligned}
 \alpha_1(\widehat{T}_d, \widehat{p}_\infty, \widehat{T}_\infty, \widehat{S}_\infty) &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{D}_0 t_c \widehat{C}_l \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{R_v \widehat{T}_\infty m_c^{\frac{2}{3}}} S_\infty, \\
 \alpha_2(\widehat{T}_d) &= \frac{4\pi \widehat{r}_a^3 \widehat{\rho}_l(\widehat{T}_d)}{3m_c}, \\
 \alpha_3(\widehat{T}_d) &= \kappa \frac{4\pi \widehat{r}_a^3 \widehat{\rho}_l(\widehat{T}_d)}{3m_c} = \kappa \alpha_2, \\
 \alpha_4(\widehat{T}_\infty, \widehat{S}_\infty) &= \frac{T_c}{\widehat{T}_\infty} S_\infty, \\
 \alpha_5(\widehat{T}_d) &= \frac{2\sigma_l(\widehat{T}_d)}{R_v \widehat{\rho}_l(\widehat{T}_d) \widehat{C}_l T_c m_c^{\frac{1}{3}}}, \\
 \beta_1(\widehat{T}_d) &= \frac{\widehat{m}_a \widehat{c}_{p,a}(\widehat{T}_d)}{m_c \widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_d)}, \\
 \beta_2(\widehat{T}_d, \widehat{p}_\infty, \widehat{S}_\infty) &= \frac{4\pi\alpha_d \widehat{D}_0 t_c \widehat{C}_l \widehat{L}_{lv}(\widehat{T}_d) \widehat{p}_{l,\infty}(\widehat{T}_\infty)}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_d) R_v T_c \widehat{T}_\infty m_c^{\frac{2}{3}}} S_\infty, \\
 \beta_3(\widehat{T}_d) &= \frac{4\pi \widehat{K}_0 \widehat{C}_l t_c}{\widehat{c}_{p,l}(\widehat{T}_d) m_c^{\frac{2}{3}}}, \\
 \beta_4(\widehat{T}_\infty) &= \frac{\widehat{T}_\infty}{T_c}
 \end{aligned} \tag{2.157}$$

gegeben, wobei die Masse

$$\widehat{m}_a = \frac{4}{3} \pi \widehat{\rho}_a(\widehat{T}_d) \widehat{r}_a^3 \tag{2.158}$$

des Aerosols verwendet wurde und  $\widehat{\rho}_a$  die Dichte des Aerosols bezeichnet. In den Gleichungen (2.153) ist der Fall eines komplett verdampfenden Hydrometeors enthalten. Physikalisch bedeutet dies, dass, falls der Tropfen komplett verdunstet ist, das trockene Aerosol zurück bleibt. Tatsächlich tritt im Modell der Gleichungen (2.153) kein komplettes Verdampfen des Wassers ein, denn das Verdampfen des Hydrometeors wird im stabilen Bereich der Köhlerkurve gestoppt. Daher bleibt in dieser Beschreibung beim Verdampfen nicht das trockene, sondern ein „aufgequollenes“ Aerosol, also ein Dunstpartikel, zurück. Die Existenz solcher Dunstpartikel wird oft beobachtet (zum Beispiel McFiggans u. a., 2006; Koren u. a., 2007; Guibert u. a., 2003; Kaaden u. a., 2009).

# Kapitel 3

## Beschreibung des Modells

In Kapitel 2 wurden die Modellgleichungen für einen einzelnen Hydrometeor eingeführt und analysiert. In diesem Kapitel wird das Modell um die dazugehörigen Diffusionsgleichungen erweitert, die innerhalb der feuchten Luft zwischen den Hydrometeoren gelten. In Abschnitt 3.1 wird zunächst das gesamte Modell formuliert und auf die getroffenen Vereinfachungen eingegangen, bevor in Abschnitt 3.2 die Gleichungen entdimensionalisiert werden, um sie in Kapitel 4 numerisch zu lösen. In Abschnitt 3.3 wird die Frage der exakten Lösbarkeit der Modellgleichungen erörtert.

### 3.1 Formulierung des Modells

#### 3.1.1 Modellgleichungen

In diesem Abschnitt wird das physikalische Modell formuliert, welches die Interaktion der Hydrometeore durch Diffusion beschreibt. Hierzu sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  ein beschränktes Gebiet, das ein Luftpaket modelliert. Zunächst wird der Fall eines einzelnen Hydrometeors  $\omega \subset \subset \Omega$  im Luftpaket betrachtet, vergleiche Abbildung 3.1. Die Geometrie des Hydrometeors  $\omega$  hängt von der Zeit ab, also  $\omega = \omega(t)$ , denn der Hydrometeor kann anwachsen, verdampfen oder seine Position ändern. Das Luftpaket besteht ansonsten aus feuchter Luft. Da die Interaktion zwischen den Hydrometeoren durch Änderungen im Wasserdampfdruck  $\rho_v$  und Temperaturfeld  $T$  stattfindet, werden im Folgenden diese Felder betrachtet. Sowohl der Wasserdampf als auch die Wärme breiten sich durch Diffusion aus (Lebon u. a., 2008, Kapitel 2.4). Daher erfüllen die zugehörigen Felder die Diffusionsgleichungen

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial t} = \operatorname{div} (D(\rho_v, T) \nabla \rho_v) + f_{\rho_v}, \quad (3.1a)$$

$$f(\rho_v, T) \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div} (K(\rho_v, T) \nabla T) + f_T \quad (3.1b)$$

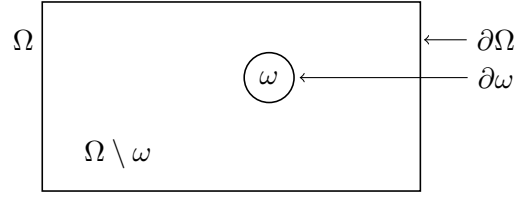
im Gebiet  $\Omega \setminus \omega(t)$  der feuchten Luft, mit  $f(\rho_v, T) = \rho_f c_{p,f}$ . Die Funktionen  $f_{\rho_v}$ ,  $f_T$  modellieren extern verursachte Quellen und Senken. Bei einem adiabatisch aufsteigenden abgeschlossenen Luftpaket wären

$$f_{\rho_v} = 0 \quad \text{und} \quad f_T = -g \rho_f w(t), \quad (3.2)$$

mit der Erdbeschleunigung  $g$  und der vertikalen Auftriebsgeschwindigkeit  $w$ , vergleiche dazu Unterabschnitt 5.2.1.

Entlang des äusseren Randes  $\partial\Omega$  des Luftpaketes seien entweder die Dirichlet-Randbedingungen

$$\rho_v = \rho_{v,\infty}, \quad T = T_\infty, \quad (3.3)$$



**Abbildung 3.1:** Schematisches Bild eines Luftpaketes  $\Omega$ , das einen Hydrometeor  $\omega$  enthält.

oder die homogenen Neumann-Randbedingungen

$$\langle D(\rho_v, T) \nabla \rho_v, N^\Omega \rangle = 0, \quad \langle K(\rho_v, T) \nabla T, N^\Omega \rangle = 0 \quad (3.4)$$

vorgegeben, wobei die Dirichlet-Randbedingungen auch zeitabhängig sein können. Hierbei bezeichnet  $N^\Omega$  den äusseren Normalenvektor an  $\Omega$ .

Das Gebiet  $\Omega \setminus \omega(t)$  der feuchten Luft wird zusätzlich durch die Oberfläche  $\partial\omega$  des Hydrometeors berandet. Entlang dieser Oberfläche seien Dirichlet-Randbedingungen vorgegeben, die sich aus der Hydrometeormasse  $m_\omega$  sowie der Hydrometeor-temperatur  $T_\omega$  ergeben. Die zugehörigen Gleichungen

$$\frac{dm_\omega}{dt} = \alpha_\omega \int_{\partial\omega} D(\rho_v, T) \langle \nabla \rho_v, N^\omega \rangle d\sigma, \quad (3.5a)$$

$$m_\omega c_{p,\omega} \frac{dT_\omega}{dt} = L_\omega \frac{dm_\omega}{dt} + \int_{\partial\omega} K(\rho_v, T) \langle \nabla T, N^\omega \rangle d\sigma \quad (3.5b)$$

für die Hydrometeormasse und -temperatur wurden bereits in Abschnitt 2.1 angegeben. Aus der Temperaturgleichung (3.5b) folgt direkt die Dirichlet-Randbedingung für die Temperaturgleichung (3.1b) entlang des Randes  $\partial\omega$  des Hydrometeors. Die Dirichlet-Randbedingung für die Wasserdampfdichte ist hingegen abhängig von der Geometrie von  $\omega$ , vergleiche Abschnitt 2.2.

Bisher wurde das Modell lediglich für einen einzelnen Hydrometeor formuliert. Die Verallgemeinerung auf mehrere Hydrometeore ist allerdings offensichtlich, sofern keine Kollisionen der Hydrometeore und keine Sedimentation auftreten. Dies wird im Folgenden stets angenommen. Für einen typischen Radius der Wolkentropfen von  $10 \mu\text{m}$ , ist die Wahrscheinlichkeit einer Kollision gering, sofern die Umgebung nicht vollständig turbulent ist (Lamb und Verlinde, 2011, Kapitel 9; Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 14).

Das beschriebene Modell besteht im Wesentlichen aus zwei Diffusionsgleichungen. Die Schwierigkeiten resultieren aus der Kopplung dieser Diffusionsgleichungen an die Eigenschaften der Hydrometeore sowie verschiedener involvierter Längenskalen. Ein typischer Eiskristall ist meist mindestens um den Faktor 10 grösser als ein typischer Tropfen. Die Kopplung der Diffusionsgleichungen an die Eigenschaften der Hydrometeore wird durch ihre zeitlich veränderliche Geometrie erschwert. In der Realität ist die Geometrie der Hydrometeore nicht nur abhängig von der Zeit, sondern auch von der gesuchten Lösung selbst, das heisst von den lokalen Eigenschaften der Hydrometeore.

### 3.1.2 Annahmen und Vereinfachungen

Um einige der zuvor beschriebenen Schwierigkeiten zu umgehen, werden in diesem Unterabschnitt Vereinfachungen des Modells aus 3.1.1 diskutiert.

#### Form der Hydrometeore

Bei unserer Behandlung des Modells wird die Form der Hydrometeore vorgegeben. Konkret wird ein Wassertropfen durch eine Kugel und ein Eiskristall durch einen prolaten oder oblaten Ellipsoiden repräsentiert. Eine Größenänderung der Hydrometeore wird zugelassen. Im Fall der Kugel ändert sich der Radius und im Fall des Ellipsoiden ändern sich die Längen der Halbachsen. Hierbei wird das Verhältnis der langen zur kurzen Halbachse konstant gehalten, um die Form des Ellipsoiden nicht zu verändern.

Im vollständigen Modell hingegen muss die Form der Hydrometeore mitberechnet werden, das bedeutet, die Position und die Form ihrer Oberfläche sind unbekannt. Ein solches Problem fällt in die Klasse der „Stefan-Probleme“ (zum Beispiel Oleinik u. a., 1993). Diese Probleme sind, insbesondere von einem numerischen Standpunkt aus betrachtet, nicht einfach zu lösen, denn die Oberfläche kann sich in komplizierte Formen entwickeln. In letzter Zeit wurden hierfür die Level-Set-Methode in Kombination mit der erweiterten Finite-Elemente-Methode benutzt, die ein Spezialfall der GFEM ist (Sethian, 1999; Chessa u. a., 2002; Zabarar u. a., 2006). Für einen Eiskristall ist allerdings bereits die Formulierung der physikalischen Prozesse an der Oberfläche, die für deren zeitliche Entwicklung verantwortlich sind, unklar und Gegenstand der Forschung (Libbrecht, 2005; Langer, 1980). Für die Beschreibung der Interaktion zwischen den Hydrometeoren ist die genaue Form der Oberfläche vermutlich weniger wichtig. Bereits in kurzer Entfernung vom Hydrometeor, stimmen die Felder der Wasserdampfdichte sowie der Temperatur beinahe mit den Feldern eines kugelförmigen Hydrometeors überein (Lamb und Verlinde, 2011, Kapitel 8.3.4).

#### Eigenschaften der Hydrometeore

Analog zur Annahme 3 der Maxwell-Theorie aus Abschnitt 2.3.1, sei die Temperatur eines Hydrometeors  $\omega$  uniform. Insbesondere ist  $T_\omega$  entlang des Randes  $\partial\omega$  konstant. Die Wasserdampfdichte  $\rho_{v,\omega}$  entlang des Randes  $\partial\omega$  sei durch die Sättigungsdampfdichte gegeben, die sich aus dem Sättigungsdampfdruck ergibt, vergleiche Abschnitt 2.2. Falls eine nicht-uniforme Temperaturverteilung im Hydrometeor zugelassen wird, muss auch die Wärmeausbreitung innerhalb des Hydrometeors berechnet werden, um konsistent zu bleiben.

#### Koeffizienten

In (3.1) treten die Koeffizientenfunktionen  $f$ ,  $D$  und  $K$  auf, die ihrerseits von den gesuchten Lösungen abhängen. Wir werden diese Abhängigkeit ignorieren und die Funktionen an den Umgebungsbedingungen auswerten. Diese Annahme ist insofern gerechtfertigt, als dass sich die Werte der Koeffizientenfunktionen im relevanten Bereich nur wenig ändern.

### Position der Hydrometeore

In den numerischen Simulationen mit dem Referenzmodell werden die Positionen der Hydrometeore fixiert, um den Rechenaufwand zu verringern. Allerdings wird an den entsprechenden Stellen darauf hingewiesen wie der Fall von sich bewegenden Hydrometeoren berücksichtigt werden kann.

## 3.2 Entdimensionalisierung

In diesem Abschnitt werden die Modellgleichungen aus Unterabschnitt 3.1.1 entdimensionalisiert, wobei zunächst die Diffusionsgleichungen und danach die Wachstumsgleichungen der Hydrometeore betrachtet werden.

Analog zur Notation aus Unterabschnitt 2.5.1 werden dimensionsbehaftete Größen mit dem Symbol  $\hat{\phantom{x}}$  gekennzeichnet. Um die Entdimensionalisierung durchzuführen, sei  $l_c$  eine Referenzlänge und  $t_c$  eine Referenzzeit. Die räumliche Variable sei  $\hat{x}$  und die zeitliche Variable  $\hat{t}$ . Mithilfe der Referenzgrößen definieren wir die dimensionslosen Variablen

$$x = \frac{\hat{x}}{l_c} \quad \text{und} \quad t = \frac{\hat{t}}{t_c}. \quad (3.6)$$

Zusätzlich seien  $\rho_{v,c}$  und  $T_c$  Referenzgrößen für die Wasserdampfdichte und die Temperatur. Die zugehörigen dimensionslosen Lösungsfunktionen sind durch

$$\rho_v(x, t) = \frac{\hat{\rho}_v(\hat{x}, \hat{t})}{\rho_{v,c}} \quad \text{und} \quad T(x, t) = \frac{\hat{T}(\hat{x}, \hat{t})}{T_c} \quad (3.7)$$

gegeben. Für die Entdimensionalisierung wurden Referenzwerte für jede auftretende physikalische Größe individuell gewählt. In einer Dimensionsanalyse hingegen werden lediglich Referenzwerte für die Basisgrößen gewählt. Die entsprechenden Referenzwerte für abgeleitete Größen ergeben sich daraus. Bei der Dimensionsanalyse werden daher die Verhältnisse der beteiligten Größen erhalten, was bei unserer Entdimensionalisierung nicht notwendigerweise zutrifft. Vielmehr werden in unserem Fall die Werte der physikalischen Größen homogener gestaltet, was bei numerischen Rechnungen von Vorteil ist.

### 3.2.1 Gleichungen in Luft

Zunächst werden die zeitlichen Ableitungen der dimensionslosen Variablen (3.7) bestimmt. Für die Wasserdampfdichte gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_v}{\partial t}(x, t) &= \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{\rho_{v,c}} \hat{\rho}_v(\hat{x}, \hat{t}) \right) = \frac{1}{\rho_{v,c}} \left( \underbrace{\frac{\partial \hat{\rho}_v}{\partial \hat{x}}(\hat{x}, \hat{t})}_{=0} \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\rho}_v}{\partial \hat{t}}(\hat{x}, \hat{t}) \frac{\partial \hat{t}}{\partial t} \right) \\ &= \frac{t_c}{\rho_{v,c}} \frac{\partial \hat{\rho}_v}{\partial \hat{t}}(\hat{x}, \hat{t}) \end{aligned} \quad (3.8)$$

und analog für die zeitliche Ableitung der Temperatur

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = \frac{t_c}{T_c} \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}}(\hat{x}, \hat{t}). \quad (3.9)$$



Da in den Diffusionsgleichungen (3.1) der Laplace-Operator auftritt, werden die ersten beiden räumlichen Ableitungen der dimensionslosen Grössen (3.7) benötigt. Die Berechnungen werden ebenfalls beispielhaft anhand der Wasserdampfdichte durchgeführt. Für die erste Ableitung in Richtung  $x_i$  ergibt sich

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial x_i}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{\rho_{v,c}} \widehat{\rho}_v(\widehat{x}, \widehat{t}) \right) = \frac{1}{\rho_{v,c}} \frac{\partial \widehat{\rho}_v}{\partial \widehat{x}_i}(\widehat{x}, \widehat{t}) \frac{\partial \widehat{x}_i}{\partial x_i} = \frac{l_c}{\rho_{v,c}} \frac{\partial \widehat{\rho}_v}{\partial \widehat{x}_i}(\widehat{x}, \widehat{t}) \quad (3.10)$$

und für die zweite Ableitung

$$\frac{\partial^2 \rho_v}{\partial x_i^2}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{l_c}{\rho_{v,c}} \frac{\partial \widehat{\rho}_v}{\partial \widehat{x}_i}(\widehat{x}, \widehat{t}) \right) = \frac{l_c^2}{\rho_{v,c}} \frac{\partial^2 \widehat{\rho}_v}{\partial \widehat{x}_i^2}(\widehat{x}, \widehat{t}). \quad (3.11)$$

Für die Temperatur gilt analog

$$\frac{\partial T}{\partial x_i}(x, t) = \frac{l_c}{T_c} \frac{\partial \widehat{T}}{\partial \widehat{x}_i}(\widehat{x}, \widehat{t}) \quad \text{und} \quad \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2}(x, t) = \frac{l_c^2}{T_c} \frac{\partial^2 \widehat{T}}{\partial \widehat{x}_i^2}(\widehat{x}, \widehat{t}). \quad (3.12)$$

In den Vereinfachungen aus Unterabschnitt 3.1.2 wurde die Konstanz der Koeffizientenfunktionen  $f$ ,  $D$  und  $K$  aus (3.1) angenommen. Wir notieren die zugehörigen Konstanten mit  $\widehat{f}_0$ ,  $\widehat{D}_0$  und  $\widehat{K}_0$ . Mithilfe der eben berechneten Ableitungen lässt sich die dimensionslose Form von (3.1a) als

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_v}{\partial t}(x, t) &= \frac{t_c}{\rho_{v,c}} \frac{\partial \widehat{\rho}_v}{\partial \widehat{t}}(\widehat{x}, \widehat{t}) = \frac{t_c}{\rho_{v,c}} \widehat{D}_0 \Delta_{\widehat{x}} \widehat{\rho}_v(\widehat{x}, \widehat{t}) + \frac{t_c}{\rho_{v,c}} \widehat{f}_{\rho_v}(\widehat{x}, \widehat{t}) \\ &= \frac{t_c \widehat{D}_0}{\rho_{v,c}} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \widehat{\rho}_v}{\partial \widehat{x}_i^2}(\widehat{x}, \widehat{t}) + \frac{t_c}{\rho_{v,c}} \widehat{f}_{\rho_v}(\widehat{x}, \widehat{t}) \\ &= \frac{t_c \widehat{D}_0}{\rho_{v,c}} \sum_{i=1}^3 \frac{\rho_{v,c}}{l_c^2} \frac{\partial^2 \rho_v}{\partial x_i^2}(x, t) + \frac{t_c}{\rho_{v,c}} \widehat{f}_{\rho_v}(\widehat{x}, \widehat{t}) \\ &= \frac{t_c \widehat{D}_0}{l_c^2} \Delta_x \rho_v(x, t) + \frac{t_c}{\rho_{v,c}} \widehat{f}_{\rho_v}(\widehat{x}, \widehat{t}) \\ &= \frac{t_c \widehat{D}_0}{l_c^2} \Delta_x \rho_v(x, t) + f_{\rho_v}(x, t) \end{aligned} \quad (3.13)$$

darstellen, wobei

$$f_{\rho_v}(x, t) := \frac{t_c}{\rho_{v,c}} \widehat{f}_{\rho_v}(\widehat{x}, \widehat{t}) \quad (3.14)$$

gesetzt wurde. Das entsprechende Resultat für die Temperaturgleichung lautet

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = \frac{t_c \widehat{K}_0}{l_c^2 \widehat{f}_0} \Delta_x T(x, t) + f_T(x, t) \quad (3.15)$$

mit

$$f_T(x, t) := \frac{t_c}{T_c \widehat{f}_0} \widehat{f}_T(\widehat{x}, \widehat{t}). \quad (3.16)$$

Damit sind die Gleichungen, die in der feuchten Luft zwischen den Hydrometeoren gelten, entdimensionalisiert.

### 3.2.2 Randbedingungen an den Hydrometeoren

Der nächste Schritt der Entdimensionalisierung betrifft die Oberflächenintegrale in den Randbedingungen (3.5) der Hydrometeore. Um die Entdimensionalisierung der Integrale durchzuführen, wird ein etwas allgemeinerer Standpunkt eingenommen. Sei dazu  $S \subset \mathbb{R}^3$  eine zweidimensionale, kompakte, differenzierbare Mannigfaltigkeit ohne Rand, die abgeschlossen und orientierbar ist. Sei  $F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  die Streckung  $p \mapsto p/l_c$ . Diese ist ein Diffeomorphismus auf  $\mathbb{R}^3$  mit inverser Abbildung  $F^{-1}(p) = l_c p$ . Die Differentiale der beiden Abbildungen in einem Punkt  $p \in \mathbb{R}^3$  (in den Koordinaten des  $\mathbb{R}^3$ ) sind durch

$$(DF)_p = \frac{1}{l_c} \text{Id} \quad \text{und} \quad (D(F^{-1}))_p = l_c \text{Id} \quad (3.17)$$

gegeben. Neben der Fläche  $S$  betrachten wir die gestreckte Fläche  $F(S)$  sowie eine differenzierbare Funktion  $h : S \rightarrow \mathbb{R}$ . Um die Funktion  $h$  über die Fläche integrieren zu können, wird noch die Volumenform  $d\sigma$  von  $S$  benötigt. Diese Volumenform gehöre zur Riemannschen Metrik auf  $S$ , die durch Einschränkung der euklidischen Metrik von  $\mathbb{R}^3$  auf die Fläche entsteht. Für die Transformation des Integrals von  $h$  über die Fläche gilt (Boothby, 1975, Kapitel VI.2, Theorem 2.2)

$$\int_S h \, d\sigma = \int_{F^{-1}(F(S))} h \, d\sigma = \int_{F(S)} (h \circ F^{-1})(F^{-1})^* d\sigma, \quad (3.18)$$

wobei  $(F^{-1})^*$  die Zurückholungsabbildung für Tensorfelder bezüglich  $F^{-1}$  bezeichnet (Boothby, 1975, Kapitel V.5, Theorem 5.5). Nach Definition der Zurückholung der Volumenform für einen Punkt  $p \in S$  und Tangentialvektoren  $X, Y \in T_{F(p)}F(S)$  gilt

$$\begin{aligned} ((F^{-1})^* d\sigma)_{F(p)}(X, Y) &= (d\sigma)_{F^{-1}(F(p))} \left( (D(F^{-1}))_{F(p)} X, (D(F^{-1}))_{F(p)} Y \right) \\ &= l_c^2 \cdot (d\sigma)_p(X, Y). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Der letzte Schritt ist formal nicht ganz korrekt, denn die Differentialform  $d\sigma$  ist nur für Vektoren aus dem Tangentialraum  $T_p S$  definiert. Wir benutzen diese Notation dennoch, denn der Isomorphismus  $(DF^{-1})_{F(p)} : T_{F(p)}F(S) \rightarrow T_p S$  ist wegen (3.17) bis auf eine Konstante die Identitätsabbildung. Formal müssten wir die Identitätsabbildung aus (3.17) mithilfe von lokalen Koordinaten neu ausdrücken. Zu beachten ist hier, dass der Streckfaktor  $l_c^2$  berücksichtigt wurde. Letztlich ergibt sich die Aussage, dass bei einer Integraltransformation, durch die Zurückholung der Volumenform (3.19), der Faktor  $l_c^2$  hinzukommt.

In unserem Fall ist die Fläche durch die Oberfläche des Hydrometeors  $\hat{\omega}$  gegeben, wobei das Symbol  $\hat{\phantom{x}}$  eine Darstellung mit dimensionsbehafteten Koordinaten kennzeichnet. Die Transformation  $F$  entspricht der Entdimensionalisierung (3.6) und daher gilt  $x = F(\hat{x})$  sowie  $\omega = F(\hat{\omega})$ . Für die Wasserdampfdichte ist die über  $\partial\hat{\omega}$  zu integrierende Funktion wegen (3.5a) durch

$$\hat{D} \left( \hat{\rho}_v, \hat{T} \right) \langle \nabla_{\hat{x}} \hat{\rho}_v, N^{\hat{\omega}} \rangle \quad (3.20)$$

gegeben. Verknüpfen dieser Abbildung mit  $F^{-1}$  und Verwenden von (3.7) sowie (3.10) ergibt die Umrechnung

$$\begin{aligned}
 & \left( \widehat{D} \left( \widehat{\rho}_v, \widehat{T} \right) \langle \nabla_{\widehat{x}} \widehat{\rho}_v, N^{\widehat{\omega}} \rangle \circ F^{-1} \right) (x) \\
 &= \widehat{D} \left( \widehat{\rho}_v(F^{-1}(x)), \widehat{T}(F^{-1}(x)) \right) \left\langle \frac{\rho_{v,c}}{l_c} \nabla_x \rho_v(x), N^{\widehat{\omega}}(F^{-1}(x)) \right\rangle \\
 &= \widehat{D} \left( \widehat{\rho}_v(\widehat{x}), \widehat{T}(\widehat{x}) \right) \frac{\rho_{v,c}}{l_c} \langle \nabla_x \rho_v(x), N^{\omega}(x) \rangle \\
 &= \widehat{D} \left( \rho_{v,c} \rho_v(x), T_c T(x) \right) \frac{\rho_{v,c}}{l_c} \langle \nabla_x \rho_v(x), N^{\omega}(x) \rangle.
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Wird dieses Resultat, zusammen mit der Darstellung der durch  $F^{-1}$  zurückgeholtene Volumenform (3.19), in die Integraltransformation (3.18) eingesetzt, folgt für das Oberflächenintegral

$$\int_{\widehat{\partial \omega}} \widehat{D} \left( \widehat{\rho}_v, \widehat{T} \right) \langle \nabla_{\widehat{x}} \widehat{\rho}_v, N^{\widehat{\omega}} \rangle \widehat{d\sigma} = \rho_{v,c} l_c \int_{\partial \omega} \widehat{D} \left( \rho_{v,c} \rho_v, T_c T \right) \langle \nabla_x \rho_v, N^{\omega} \rangle d\sigma. \tag{3.22}$$

Die eben durchgeführte Herleitung ist analog auch für das Oberflächenintegral der Temperatur anwendbar und liefert

$$\int_{\widehat{\partial \omega}} \widehat{K} \left( \widehat{\rho}_v, \widehat{T} \right) \langle \nabla_{\widehat{x}} \widehat{T}, N^{\widehat{\omega}} \rangle \widehat{d\sigma} = T_c l_c \int_{\partial \omega} \widehat{K} \left( \rho_{v,c} \rho_v, T_c T \right) \langle \nabla_x T, N^{\omega} \rangle d\sigma. \tag{3.23}$$

Mit dem Transformationsverhalten der Oberflächenintegrale (3.22) und (3.23), werden die Randbedingungen (3.5) an der Oberfläche des Hydrometeors dimensionslos geschrieben. Mit der Referenzmasse  $m_{\omega,c}$  des Hydrometeors  $\omega$  gilt für die Änderung der Masse

$$\begin{aligned}
 \frac{dm_{\omega}}{dt} &= \frac{d}{dt} \left( \frac{\widehat{m}_{\omega}}{m_{\omega,c}} \right) = \frac{t_c}{m_{\omega,c}} \alpha_{\widehat{\omega}} \int_{\widehat{\partial \omega}} \widehat{D} \left( \widehat{\rho}_v, \widehat{T} \right) \langle \nabla_{\widehat{x}} \widehat{\rho}_v, N^{\widehat{\omega}} \rangle \widehat{d\sigma} \\
 &= \frac{t_c \alpha_{\widehat{\omega}} \rho_{v,c} l_c}{m_{\omega,c}} \int_{\partial \omega} \widehat{D} \left( \rho_{v,c} \rho_v, T_c T \right) \langle \nabla_x \rho_v, N^{\omega} \rangle d\sigma
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

und für die Temperaturänderung

$$m_{\omega,c} m_{\omega} \widehat{c}_{p,\widehat{\omega}} \frac{T_c}{t_c} \frac{dT_{\omega}}{dt} = \widehat{L}_{\omega} \frac{m_{\omega,c}}{t_c} \frac{dm_{\omega}}{dt} + T_c l_c \int_{\partial \omega} \widehat{K} \left( \rho_{v,c} \rho_v, T_c T \right) \langle \nabla_x T, N^{\omega} \rangle d\sigma, \tag{3.25}$$

die zu

$$\begin{aligned}
 \frac{dT_{\omega}}{dt} &= \frac{l_c t_c}{T_c m_{\omega,c} m_{\omega} \widehat{c}_{p,\widehat{\omega}}} \left( \widehat{L}_{\omega} \alpha_{\widehat{\omega}} \rho_{v,c} \int_{\partial \omega} \widehat{D} \left( \rho_{v,c} \rho_v, T_c T \right) \langle \nabla_x \rho_v, N^{\omega} \rangle d\sigma \right. \\
 &\quad \left. + T_c \int_{\partial \omega} \widehat{K} \left( \rho_{v,c} \rho_v, T_c T \right) \langle \nabla_x T, N^{\omega} \rangle d\sigma \right)
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

umgestellt werden kann.

### 3.3 Analytische Betrachtung

Das Ziel dieses Abschnitts ist der Beweis der Existenz und Eindeutigkeit einer exakten Lösung für ein generisches Problem, das in Unterabschnitt 3.3.1 beschrieben wird. Mithilfe der eindeutigen Lösbarkeit des generischen Problems wird die Existenz und Eindeutigkeit einer exakten Lösung in einem Spezialfall des Modells aus Abschnitt 3.1 gefolgert.

Das generische Problem aus 3.3.1 wird mittels einer Iteration auf einem Banach-Raum gelöst. Die Definition des zugehörigen Iterationsoperators erfolgt in 3.3.2. In Unterabschnitt 3.3.3 wird gezeigt, dass dieser Operator für kleine Zeiten eine Kontraktion auf einem Banach-Raum ist. Der Fixpunktsatz von Banach (Schweizer, 2013, Theorem 16.1) garantiert die Existenz und Eindeutigkeit einer exakten Lösung des generischen Problems für kleine Zeiten. Abschliessend wird der Fall beliebig langer Zeiten in 3.3.4 betrachtet. Die Übertragung der Lösbarkeit des generischen Problems auf das Modell aus Abschnitt 3.1 erfolgt in 3.3.5. Diese Übertragung erfordert zusätzliche Annahmen. Die Diskussion möglicher Abschwächungen dieser Annahmen findet in Unterabschnitt 3.3.6 statt. Die hier angewandte Beweisstrategie, mit einer Iteration auf einem Banach-Raum, findet sich in der Literatur, um die eindeutige Existenz einer Lösung für nichtlineare Reaktions-Diffusionsgleichungen zu zeigen (Schweizer, 2013, Kapitel 16.2; Evans, 1998, Kapitel 9.2).

Nachfolgend werden Notationen sowie Resultate aus der Literatur für den Beweis zusammengestellt. Mit  $L^2(\mathcal{U})$  wird der Raum der quadratintegrierbaren Funktionen auf einem Gebiet  $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$  bezeichnet. Das Gebiet habe einen lipschitzstetigen Rand, das heisst der Rand kann stückweise durch eine lipschitzstetige Funktion dargestellt werden (Dobrowolksi, 2010, Kapitel 6.1). In diese Klasse fallen insbesondere Gebiete mit einem stückweise glatten Rand. Der Raum  $L^2(\mathcal{U})$  ist ein Banach-Raum bezüglich der Norm

$$\|f\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 = \int_{\mathcal{U}} |f|^2 \, dx \quad (3.27)$$

und ein Hilbertraum mit dem Skalarprodukt

$$(u, v)_{L^2(\mathcal{U})} := \int_{\mathcal{U}} uv \, dx. \quad (3.28)$$

Darauf aufbauend werden die Sobolev-Räume  $H^l(\mathcal{U})$  für  $l \geq 0$  in  $\mathbb{R}$  benötigt, die Unterräume von  $L^2(\mathcal{U})$  sind (Dobrowolksi, 2010, Kapitel 5.3 und 6.10). Die Sobolev-Räume sind ebenfalls Banach-Räume und die Norm auf  $H^1(\mathcal{U})$  ist durch

$$\|f\|_{H^1(\mathcal{U})}^2 = \|f\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 + \sum_{i=1}^n \left\| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 \quad (3.29)$$

gegeben. Die auftretenden Ableitungen sind im schwachen Sinne zu verstehen (Evans, 1998, Abschnitt 5.2.1): Existiert eine Funktion  $h \in L^2(\mathcal{U})$  so, dass

$$\int_{\mathcal{U}} f(x) \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(x) \, dx = - \int_{\mathcal{U}} h(x) \varphi(x) \, dx \quad (3.30)$$

für alle Testfunktionen

$$\varphi \in C_0^\infty(\mathcal{U}) := \{\varphi : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R} \mid \varphi \in C^\infty(\mathcal{U}) \text{ hat kompakten Träger in } \mathcal{U}\} \quad (3.31)$$

erfüllt ist, so heisst  $h$  die schwache Ableitung von  $f$  (in die  $i$ -te Koordinatenrichtung) und wir schreiben

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} := h. \quad (3.32)$$

Mit  $H_0^1(\mathcal{U})$  wird der Unterraum aller Funktionen aus  $H^1(\mathcal{U})$  bezeichnet, die auf dem Rand  $\partial\mathcal{U}$  des Gebiets  $\mathcal{U}$  verschwinden (zum Beispiel Dobrowolksi, 2010, Definition 6.9). Es gelten die stetigen Einbettungen

$$H^1(\mathcal{U}) \hookrightarrow L^2(\mathcal{U}) \hookrightarrow H^{-1}(\mathcal{U}), \quad (3.33)$$

wobei  $H^{-1}(\mathcal{U}) = (H_0^1(\mathcal{U}))'$  den Dualraum von  $H_0^1(\mathcal{U})$  bezeichnet.

Wir betrachten schwache Lösungen von partiellen Differentialgleichungen. Eine schwache Lösung einer gegebenen partiellen Differentialgleichung ist eine Sobolev-Funktion, welche die Gleichung im distributionellen Sinn erfüllt (Dobrowolksi, 2010, Kapitel 9.1; Schweizer, 2013, Kapitel 3.3). Konkret bedeutet dies, dass die auf einem Gebiet  $\mathcal{U}$  definierte partielle Differentialgleichung mit einer Testfunktion  $\varphi \in C_0^\infty(\mathcal{U})$  multipliziert und anschliessend integriert wird, um die distributionelle Darstellung zu erhalten. Am Beispiel der Poisson-Gleichung

$$\begin{aligned} -\Delta u &= k \quad \text{auf } \mathcal{U}, \\ u &= 0 \quad \text{auf } \partial\mathcal{U} \end{aligned} \quad (3.34)$$

ergibt dieses Vorgehen, mit dem Integralsatz von Gauss (Amann und Escher, 2008, Kapitel XII, Theorem 3.15), die schwache Form

$$\int_{\mathcal{U}} \langle \nabla u, \nabla \varphi \rangle dx = \int_{\mathcal{U}} k \varphi dx, \quad (3.35)$$

die für alle  $\varphi \in C_0^\infty(\mathcal{U})$  erfüllt sein soll (Evans, 1998, Kapitel 6.2). An Stelle der starken Form (3.34) die schwache Form (3.35) der partiellen Differentialgleichung zu betrachten hat mehrere Vorteile. Die Anforderungen an die Glattheit der Lösung werden abgeschwächt, denn in der schwachen Form muss die Lösung lediglich eine integrierbare erste Ableitung besitzen, wohingegen die starke Form die punktweise Existenz einer zweiten Ableitung erfordert. Für die Existenz von Lösungen der starken Form werden relativ starke Annahmen an die Regularität des Randes  $\partial\mathcal{U}$  sowie der rechten Seite  $k$  benötigt (Schweizer, 2013, Kapitel 5.2), das heisst der Rand muss lokal immer als Graph einer mindestens stetig differenzierbaren Funktion dargestellt werden können. Die Existenz einer schwachen Lösung hingegen erfordert eine weitaus geringere Regularität (Schweizer, 2013, Theorem 6.10).

Da wir uns mit zeitabhängigen Gleichungen beschäftigen, werden zeitabhängige Funktionenräume benötigt, die sogenannten Bochner-Räume (Schweizer, 2013, Kapitel 10). Sei  $Y$  ein Banach-Raum und  $s > 0$  eine reelle Zahl. Der zeitabhängige  $L^2$ -Raum ist durch

$$L^2(0, s; Y) := \left\{ f : [0, s] \rightarrow Y \mid \int_0^s \|f(t)\|_Y^2 dt < \infty \right\} \quad (3.36)$$

mit der Norm

$$\|f\|_{L^2(0,s;Y)}^2 := \int_0^s \|f(t)\|_Y^2 dt \quad (3.37)$$

gegeben. Für eine Funktion  $f \in L^2(0, s; Y)$  wird die zeitliche distributionelle Ableitung benötigt (Schweizer, 2013, Definition 10.6). Dazu sei  $\varphi \in C_0^\infty((0, s))$  eine beliebige Testfunktion, also eine beliebig oft differenzierbare Funktion mit kompaktem Träger in  $(0, s)$ . Die  $Y$ -wertige Distribution

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle : C_0^\infty((0, s)) &\rightarrow Y \\ \varphi &\mapsto \int_0^s f(t)\varphi'(t) dt \end{aligned} \quad (3.38)$$

heisst distributionelle (Zeit-)Ableitung von  $f$ . Kann diese Distribution durch ein Element  $g \in L^2(0, s; Y)$  dargestellt werden, gilt

$$\int_0^s f(t)\varphi'(t) dt = - \int_0^s g(t)\varphi(t) dt \quad (3.39)$$

für alle  $\varphi \in C_0^\infty((0, s))$ , so heisst die Distribution (3.38) regulär und  $g$  die schwache (Zeit-)Ableitung von  $f$ . In diesem Fall notieren wir

$$\frac{\partial f}{\partial t} := g. \quad (3.40)$$

Der zeitabhängige Sobolev-Raum  $H^1(0, s; Y)$  ist durch

$$H^1(0, s; Y) = \left\{ f \in L^2(0, s; Y) \mid \left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle \text{ ist regulär} \right\} \quad (3.41)$$

mit der Norm

$$\|f\|_{H^1(0,s;Y)} = \|f\|_{L^2(0,s;Y)} + \left\| \frac{\partial f}{\partial t} \right\|_{L^2(0,s;Y)} \quad (3.42)$$

definiert.

Darüber hinaus wird der Spuroperator  $T : H^1(\mathcal{U}) \rightarrow H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})$  benötigt. Dieser ist die eindeutige stetige Fortsetzung des Einschränkungsopeators von  $C^\infty(\mathcal{U})$  auf  $H^1(\mathcal{U})$ , der eine stetige Funktion auf dem Gebiet  $\mathcal{U}$  auf den Rand  $\partial\mathcal{U}$  einschränkt. Hierbei bezeichnet  $H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})$  den gebrochenen Sobolev-Raum auf dem Rand des Gebiets  $\mathcal{U}$  (Dobrowolksi, 2010, Kapitel 6.10). Der Spuroperator  $T$  ist zwischen den angegebenen Räumen stetig und surjektiv. Zusätzlich gibt es einen stetigen Operator  $\mathcal{E} : H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U}) \rightarrow H^1(\mathcal{U})$ , der rechtsinvers zu  $T$  ist, das heisst er erfüllt (Dobrowolksi, 2010, Satz 6.41)

$$T \circ \mathcal{E} = \text{Id}_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})}. \quad (3.43)$$

Zu einer Funktion  $\xi \in H^{\frac{1}{2}}(\mathcal{U})$  sei  $\mathcal{E}[\xi] \in H^1(\mathcal{U})$  die durch  $\mathcal{E}$  fortgesetzte Funktion und  $u_\xi \in H^1(\mathcal{U})$  die eindeutige schwache Lösung des Dirichlet-Problems

$$\begin{aligned} \Delta u_\xi &= 0 && \text{in } \mathcal{U}, \\ u_\xi &= \mathcal{E}[\xi] && \text{auf } \partial\mathcal{U}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Die Lösung erfüllt die Abschätzung (Schweizer, 2013, Theorem 6.10)

$$\|u_\xi\|_{H^1(\mathcal{U})} \leq C \|\mathcal{E}[\xi]\|_{H^1(\mathcal{U})} \leq C \|\xi\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})}. \quad (3.45)$$

Wir definieren den linearen Operator  $E : H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U}) \rightarrow H^1(\mathcal{U})$  durch  $E[\xi] := u_\xi$ . Wegen Abschätzung (3.45) ist  $E$  stetig. Der Operator  $E$  setzt eine Funktion vom Rand  $\partial\mathcal{U}$  des Gebiets harmonisch in das Innere  $\mathcal{U}$  fort.

Um später darauf verweisen zu können, wird an dieser Stelle ein Satz über die Existenz und Eindeutigkeit einer schwachen Lösung der Diffusionsgleichung angegeben. Eine matrixwertige Funktion  $A \in C^1(\overline{\mathcal{U}}, \mathbb{R}^{n \times n})$  heisst hierbei elliptisch, falls es eine Konstante  $\gamma > 0$  gibt, so dass für alle Vektoren  $\xi \in \mathbb{R}^n$  und Punkte  $x \in \mathcal{U}$  die Ungleichung

$$\langle \xi, A(x)\xi \rangle_{\text{Euklidisch}} \geq \gamma \|\xi\|_{\text{Euklidisch}}^2 \quad (3.46)$$

erfüllt ist (Schweizer, 2013, Kapitel 6.1).

**Satz 3.3.1.** *Sei  $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$  ein beschränktes Gebiet mit Lipschitz-Rand,  $u_0 \in L^2(\mathcal{U})$  und  $T_{\text{Ende}} > 0$ . Sei  $L$  ein elliptischer Differentialoperator, definiert durch*

$$L[u] = -\operatorname{div}(A\nabla u) + \langle b, \nabla u \rangle_{\text{Euklidisch}} + cu \quad (3.47)$$

mit einem elliptischen  $A \in C^1(\overline{\mathcal{U}}, \mathbb{R}^{n \times n})$  und Koeffizienten  $b, c \in L^\infty(\mathcal{U})$ . Randbedingungen seien durch eine Funktion  $G \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U})) \cap H^1(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))$  gegeben. Für alle  $f \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))$  besitzt das Problem

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + L[u] &= f & \text{in } \mathcal{U} \times (0, T_{\text{Ende}}), \\ u &= T[G] & \text{auf } \partial\mathcal{U} \times (0, T_{\text{Ende}}), \\ u(0) &= u_0 & \text{in } \mathcal{U} \end{aligned} \quad (3.48)$$

eine eindeutige Lösung

$$u \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U})) \quad \text{mit} \quad \frac{\partial u}{\partial t} \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U})). \quad (3.49)$$

Zudem hat  $u$  einen stetigen Repräsentanten  $u \in C^0([0, T_{\text{Ende}}]; L^2(\mathcal{U}))$ .

*Beweis.* Siehe Schweizer (2013, Theorem 11.8).  $\square$

Da die exakte Lösung gemäss Satz 3.3.1 einen stetigen Repräsentanten hat, ist für diesen die Anfangsbedingung im klassischen Sinne erfüllt. Im Fall  $A = \text{Id}$  und  $b = c = 0$  in (3.47) ergibt sich der Laplace-Operator  $L = -\Delta$ .

Aus Evans, 1998, Kapitel 7.1.2 entnehmen wir, dass die exakte Lösung von (3.48) der Abschätzung

$$\begin{aligned} \|u\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))} + \left\| \frac{\partial u}{\partial t} \right\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))} &\leq C \left( \|f\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))} \right. \\ &\quad \left. + \|G\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))} + \left\| \frac{\partial G}{\partial t} \right\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))} + \|u_0\|_{L^2(\mathcal{U})} \right), \end{aligned} \quad (3.50)$$

mit einer Konstanten  $C$ , genügt. Insbesondere besagt diese Abschätzung, dass die Lösung stetig von den Anfangs- und Randbedingungen sowie der rechten Seite abhängt. In diesem Kapitel wird durch  $C$  generell eine generische Konstante bezeichnet, deren Wert sich von einem Schritt zum nächsten ändern kann.

### 3.3.1 Ein generisches Problem

In diesem Unterabschnitt wird das generische Problem vorgestellt und Satz 3.3.2 über dessen eindeutige Lösbarkeit formuliert. Zusätzlich wird der Lösungsraum  $X$  definiert und gezeigt, dass dieser ein Banach-Raum ist.

Zu einer reellen Zahl  $T_{\text{Ende}} > 0$  betrachten wir das generische Problem

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= D\Delta u \quad \text{in } \mathcal{U} \text{ mit } 0 < t < T_{\text{Ende}}, \\ u(0) &= u_0 \quad \text{in } \mathcal{U}, \\ u(t) &= g(t) \quad \text{auf } \partial\mathcal{U} \text{ mit } 0 < t < T_{\text{Ende}} \end{aligned} \tag{3.51}$$

auf einem beschränkten Gebiet  $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$  mit lipschitzstetigem Rand. Hierbei bezeichnet  $D > 0$  eine Konstante und  $u_0 \in H^1(\mathcal{U})$  einen gegebenen Anfangswert.

Die Funktion  $g : [0, T_{\text{Ende}}] \rightarrow H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})$  sei die Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dt} &= F[g, u], \\ g(0) &= T[u_0] \end{aligned} \tag{3.52}$$

und

$$F : H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U}) \times X \rightarrow H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U}) \tag{3.53}$$

sei eine lipschitzstetige Funktion mit der Lipschitzkonstanten  $L$ .

Der Raum  $X$  sei durch

$$X := \left\{ u \in L^2\left(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U})\right) \left| \frac{\partial u}{\partial t} \in L^2\left(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U})\right) \right. \right\} \tag{3.54}$$

definiert und mit der Norm

$$\|u\|_X := \|u\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))} + \left\| \frac{\partial u}{\partial t} \right\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))} \tag{3.55}$$

versehen. Tatsächlich gilt die stetige Einbettung  $X \hookrightarrow C^0([0, T_{\text{Ende}}]; L^2(\mathcal{U}))$  (Schweizer, 2013, Proposition 10.8). Mit anderen Worten besitzt jedes Element in  $X$  einen stetigen Repräsentanten mit Werten in  $L^2(\mathcal{U})$ .

Es sei angemerkt, dass die Probleme (3.51) und (3.52) gekoppelt sind. Die exakte Lösung der partiellen Differentialgleichung (3.51) geht als Parameter in die gewöhnliche Differentialgleichung (3.52) ein, während die exakte Lösung von (3.52) die Randbedingung für (3.51) liefert. Das Problem (3.51) ist ein Analogon zur Modellgleichung (3.1) und die gewöhnliche Differentialgleichung (3.52) auf dem Rand ist das Analogon zu den Randbedingungen (3.5) der Modellgleichungen. Es ist möglich in Gleichung (3.51) den zusätzlichen Summanden  $cu$ , mit einer Funktion  $c \in L^\infty(0, T_{\text{Ende}}; L^\infty(\mathcal{U}))$ , zu betrachten. Auch Quellterme wie in (3.1) können berücksichtigt werden. Die nachfolgenden Argumente übertragen sich auch auf diese Fälle.

In den Unterabschnitten 3.3.2 bis 3.3.4 dieses Kapitels wird der nachfolgende Satz über die Lösbarkeit des beschriebenen generischen Problems gezeigt.



**Satz 3.3.2.** *Sei  $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$  ein beschränktes Gebiet mit einem Lipschitz-Rand. Seien  $u_0 \in H^1(\mathcal{U})$  sowie  $T_{\text{Ende}} > 0$  eine reelle Zahl. Sei  $F$  aus (3.53) eine lipschitzstetige Funktion, das heisst es existiert ein  $L > 0$  in  $\mathbb{R}$  so, dass*

$$\|F[g_1, w_1] - F[g_2, w_2]\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})} \leq L \left( \|g_1 - g_2\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})} + \|w_1 - w_2\|_X \right) \quad (3.56)$$

für alle  $(g_1, w_1), (g_2, w_2) \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U}) \times X$  erfüllt ist. Dann haben die Gleichungen (3.51) und (3.52) eine eindeutige Lösung im Raum  $X$ .

Im Beweis des Satzes wird ein Iterationsoperator auf dem Raum  $X$  betrachtet, der in Unterabschnitt 3.3.2 definiert wird. Das Ziel ist die Anwendung des Fixpunktsatzes von Banach. Hierfür muss sichergestellt werden, dass der Raum  $X$  ein Banach-Raum bezüglich der Norm (3.55) ist, was im Folgenden gezeigt wird.

Sei  $(u_k)_{k \in \mathbb{N}}$  eine Cauchyfolge in  $X$ . Nach Definition der Norm von  $X$  ist  $(u_k)_{k \in \mathbb{N}}$  eine Cauchyfolge in  $L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))$  und die Folge der zeitlichen Ableitungen

$$\left( \frac{\partial u_k}{\partial t} \right)_{k \in \mathbb{N}} \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U})) \quad (3.57)$$

eine Cauchyfolge in  $L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))$ . Beide Räume sind Banach-Räume (Schweizer, 2013, Theorem 10.1), daher existieren ein  $u \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))$  und ein  $v \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))$  mit

$$\begin{aligned} u_k &\rightarrow u \quad \text{für } k \rightarrow \infty \quad \text{in } L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U})), \\ \frac{\partial u_k}{\partial t} &\rightarrow v \quad \text{für } k \rightarrow \infty \quad \text{in } L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U})). \end{aligned} \quad (3.58)$$

Angesichts der stetigen Einbettungen (3.33) sind  $u_k, u$  auch Funktionen mit Werten in  $H^{-1}(\mathcal{U})$ . Wir zeigen, dass  $u$  zeitlich schwach differenzierbar ist und die zeitliche Ableitung  $\frac{\partial u}{\partial t}$  mit  $v$  übereinstimmt. Daraus folgt unmittelbar die Konvergenz  $u_k \rightarrow u$  in  $X$ . Sei dazu  $\varphi \in C_0^\infty((0, T_{\text{Ende}}))$  eine beliebige Testfunktion.

Einerseits gilt wegen der Beschränktheit von  $\varphi'$  und den Einbettungen (3.33)

$$\begin{aligned} &\left\| \int_0^{T_{\text{Ende}}} u(t) \varphi'(t) dt - \int_0^{T_{\text{Ende}}} u_k(t) \varphi'(t) dt \right\|_{H^{-1}(\mathcal{U})} = \left\| \int_0^{T_{\text{Ende}}} (u(t) - u_k(t)) \varphi'(t) dt \right\|_{H^{-1}(\mathcal{U})} \\ &\leq \max_{0 \leq t \leq T_{\text{Ende}}} |\varphi'(t)| \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|u(t) - u_k(t)\|_{H^{-1}(\mathcal{U})} dt \\ &\leq C \max_{0 \leq t \leq T_{\text{Ende}}} |\varphi'(t)| \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|u(t) - u_k(t)\|_{H^1(\mathcal{U})} dt \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (3.59)$$

und daher für  $k \rightarrow \infty$

$$\int_0^{T_{\text{Ende}}} u_k(t) \varphi'(t) dt \rightarrow \int_0^{T_{\text{Ende}}} u(t) \varphi'(t) dt \quad (3.60)$$

in  $H^{-1}(\mathcal{U})$ . Andererseits gilt wegen der Beschränktheit von  $\varphi$

$$\begin{aligned} \left\| \int_0^{T_{\text{Ende}}} \frac{\partial u_k}{\partial t}(t) \varphi(t) dt - \int_0^{T_{\text{Ende}}} v(t) \varphi(t) dt \right\|_{H^{-1}(\mathcal{U})} &= \left\| \int_0^{T_{\text{Ende}}} \left( \frac{\partial u_k}{\partial t}(t) - v(t) \right) \varphi(t) dt \right\|_{H^{-1}(\mathcal{U})} \\ &\leq \max_{0 \leq t \leq T_{\text{Ende}}} |\varphi(t)| \int_0^{T_{\text{Ende}}} \left\| \frac{\partial u_k}{\partial t}(t) - v(t) \right\|_{H^{-1}(\mathcal{U})} dt \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (3.61)$$

und daher für  $k \rightarrow \infty$

$$\int_0^{T_{\text{Ende}}} \frac{\partial u_k}{\partial t}(t) \varphi(t) dt \rightarrow \int_0^{T_{\text{Ende}}} v(t) \varphi(t) dt \quad (3.62)$$

in  $H^{-1}(\mathcal{U})$ . Da alle  $u_k$  zeitlich schwach differenzierbar sind, ergibt sich für  $k \rightarrow \infty$

$$\int_0^{T_{\text{Ende}}} u(t) \varphi'(t) dt \leftarrow \int_0^{T_{\text{Ende}}} u_k(t) \varphi'(t) dt = - \int_0^{T_{\text{Ende}}} \frac{\partial u_k}{\partial t}(t) \varphi(t) dt \rightarrow - \int_0^{T_{\text{Ende}}} v(t) \varphi(t) dt \quad (3.63)$$

in  $H^{-1}(\mathcal{U})$ . Die Testfunktion  $\varphi$  war beliebig, deshalb folgt mit Definition (3.39) die schwache Differenzierbarkeit von  $u$  mit schwacher Ableitung  $v$ . Damit ist  $X$  ein Banach-Raum.

### 3.3.2 Definition des Iterationsoperators

Im Folgenden wird der Iterationsoperator  $A : X \rightarrow X$  definiert und gezeigt, dass dieser tatsächlich in den Raum  $X$  abbildet.

Sei  $w \in X$  ein beliebiges Element. Zu dieser Funktion betrachten wir im ersten Schritt die exakte Lösung  $g \in C^1([0, T_{\text{Ende}}]; H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U}))$  von (3.52) mit dem Parameter  $w$ . Daher erfüllt die Funktion  $g$  die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dt} &= F[g, w], \\ g(0) &= T[u_0]. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Die rechte Seite  $F$  wurde als lipschitzstetig angenommen. Dies impliziert die eindeutige Lösbarkeit des Problems (3.64) auf dem gesamten Intervall  $[0, T_{\text{Ende}}]$  (Amann, 1990, Propositionen 7.6 und 7.8).

Im zweiten Schritt sei  $u \in X$  die exakte Lösung von

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= D\Delta u \quad \text{auf } \mathcal{U} \text{ mit } 0 < t < T_{\text{Ende}}, \\ u(0) &= u_0 \quad \text{auf } \mathcal{U}, \\ u(t) &= g(t) \quad \text{auf } \partial\mathcal{U} \text{ mit } 0 < t < T_{\text{Ende}}. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Der Operator  $A$  wird durch  $A[w] := u$  definiert und nach Definition ist ein Fixpunkt des Operators  $A$  eine Lösung des generischen Problems (3.51) und (3.52). Um Satz 3.3.2

zu beweisen, muss daher die eindeutige Existenz eines Fixpunkts von  $A$  in  $X$  gezeigt werden.

Wir werden nun zeigen, dass der Operator  $A$  in den Raum  $X$  abbildet, das heisst für ein Element  $w \in X$  gilt  $A[w] \in X$ . Wegen Satz 3.3.1 entspricht der Raum  $X$  dem Lösungsraum für parabolische Gleichungen (3.65). Um die Aussage  $A[w] \in X$  zu beweisen, reicht es daher aus, die Voraussetzungen von Satz 3.3.1 zu überprüfen. Die zu überprüfende Voraussetzung betrifft die Existenz einer Funktion  $G \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U})) \cap H^1(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))$ , die nach Einschränkung auf den Rand  $\partial\mathcal{U}$  des Gebiets gerade  $g$  ergibt. Sei die Funktion  $G : [0, T_{\text{Ende}}] \rightarrow H^1(\mathcal{U})$  durch

$$G(t) := E[g(t)] \quad (3.66)$$

definiert, mit dem stetigen harmonischen Fortsetzungsoperator  $E$ . Wegen

$$\begin{aligned} \|G(t)\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))}^2 &= \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|E[g(t)]\|_{H^1(\mathcal{U})}^2 dt \\ &\leq C \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|g(t)\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})}^2 dt \leq CT_{\text{Ende}} < +\infty, \end{aligned} \quad (3.67)$$

ist  $G \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))$ . Es wurde hierzu die Beschränktheit der stetigen Funktion  $g$  auf dem kompakten Intervall  $[0, T_{\text{Ende}}]$  benutzt. Mithilfe der stetigen Einbettungen (3.33) folgt aus (3.67) direkt  $G \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))$ . Es bleibt zu zeigen, dass  $G$  in der Zeit schwach differenzierbar ist und diese Ableitung ebenfalls in  $L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))$  liegt. Dazu sei  $\varphi \in C_0^\infty((0, T_{\text{Ende}}))$  eine beliebige Testfunktion. Für die distributionelle Zeitableitung von  $G$  gilt

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{dG}{dt} \right\rangle [\varphi] &= \int_0^{T_{\text{Ende}}} G(t) \varphi'(t) dt = \int_0^{T_{\text{Ende}}} E[g(t)] \varphi'(t) dt \\ &= \int_0^{T_{\text{Ende}}} E[g(t) \varphi'(t)] dt \stackrel{(*)}{=} E \left[ \int_0^{T_{\text{Ende}}} g(t) \varphi'(t) dt \right] \\ &= -E \left[ \int_0^{T_{\text{Ende}}} F[g(t), w] \varphi(t) dt \right] \stackrel{(*)}{=} - \int_0^{T_{\text{Ende}}} E[F[g(t), w]] \varphi(t) dt. \end{aligned} \quad (3.68)$$

An den Stellen  $(*)$  wurde jeweils die Stetigkeit von  $E$  benutzt. Die Funktion

$$t \mapsto E[F[g(t), w]] \quad (3.69)$$

ist in  $L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))$  enthalten, da  $g$  eine in  $t$  stetige Funktion über einem kompakten Intervall ist. Damit ist die distributionelle Zeitableitung regulär und es folgt die gewünschte Aussage  $G \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U})) \cap H^1(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))$  sowie die Wohldefiniertheit des Operators  $A$ .

### 3.3.3 Kontraktionseigenschaft für kleine Zeiten

Nach der Definition des Iterationsoperators  $A$ , wird in diesem Unterabschnitt die Abschätzung (3.86) gezeigt. Ist die Zielzeit  $T_{\text{Ende}} > 0$  genügend klein, ergibt sich aus dieser Abschätzung die gewünschte Kontraktionseigenschaft für den Operator  $A$ .

Seien  $w_1, w_2$  beliebige Elemente aus  $X$ . Die Funktionen  $A[w_1], A[w_2] \in X$  sind Lösungen der partiellen Differentialgleichung (3.65), mit den zugehörigen Randfunktionen  $g_1, g_2$ , die jeweils eine Gleichung vom Typ (3.52) mit den Parametern  $w_1, w_2 \in X$  erfüllen. Wir definieren die Differenz  $u := A[w_1] - A[w_2] \in X$ . Diese Differenz wird letztlich in der Norm von  $X$  durch  $\|w_1 - w_2\|_X$  abgeschätzt. Mindestens im Distributionssinn erfüllt die Differenz  $u$  die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial A[w_1]}{\partial t} - \frac{\partial A[w_2]}{\partial t} = D\Delta A[w_1] - D\Delta A[w_2] = D\Delta u && \text{auf } \mathcal{U} \times (0, T_{\text{Ende}}), \\ u(t) &= A[w_1](t) - A[w_2](t) = g_1(t) - g_2(t) && \text{auf } \partial\mathcal{U} \times (0, T_{\text{Ende}}), \\ u(0) &= u_0 - u_0 = 0 && \text{auf } \mathcal{U}. \end{aligned} \tag{3.70}$$

Mit anderen Worten ist  $u$  die exakte Lösung einer Diffusionsgleichung. Durch die Definition  $v := u - (G_1 - G_2)$  wird die inhomogene Randbedingung in (3.70) eliminiert. Die Funktion  $v$  erfüllt wegen (3.70) und (3.66) die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} &= D\Delta v + D\Delta(G_1 - G_2) - \frac{\partial(G_1 - G_2)}{\partial t} =: D\Delta v + f && \text{auf } \mathcal{U} \times (0, T_{\text{Ende}}), \\ v(0) &= u(0) - (G_1(0) - G_2(0)) = -E[T[u_0] - T[u_0]] = 0 && \text{auf } \mathcal{U} \times (0, T_{\text{Ende}}), \\ v &= 0 && \text{auf } \partial\mathcal{U} \end{aligned} \tag{3.71}$$

mit

$$f(t) := -\frac{\partial(G_1 - G_2)}{\partial t}(t). \tag{3.72}$$

Aufgrund von (3.68) ist  $f$  eine Funktion  $f : [0, T_{\text{Ende}}] \rightarrow H^{-1}(\mathcal{U})$ . Wir schätzen  $f(t)$  durch

$$\begin{aligned} \|f(t)\|_{H^{-1}(\mathcal{U})} &= \left\| \frac{\partial(G_1 - G_2)}{\partial t}(t) \right\|_{H^{-1}(\mathcal{U})} \\ &= \|E[F[g_1(t), w_1]] - E[F[g_2(t), w_2]]\|_{H^{-1}(\mathcal{U})} \\ &\leq C \|E[F[g_1(t), w_1]] - E[F[g_2(t), w_2]]\|_{H^1(\mathcal{U})} \\ &\leq C \|F[g_1(t), w_1] - F[g_2(t), w_2]\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})} \\ &\leq CL \left( \|g_1(t) - g_2(t)\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})} + \|w_1 - w_2\|_X \right) \\ &\leq CL(L_1 \|w_1 - w_2\|_X + \|w_1 - w_2\|_X) \\ &= C \|w_1 - w_2\|_X, \end{aligned} \tag{3.73}$$

mit einer Konstanten  $L_1 > 0$ , ab. In dieser Abschätzung wurden nacheinander die folgenden Tatsachen benutzt: Die Einbettung  $H^1(\mathcal{U}) \rightarrow H^{-1}(\mathcal{U})$  ist stetig, die Stetigkeit des Operators  $E$ , die Lipschitzeigenschaft von  $F$  sowie die lipschitzstetige Abhängigkeit der Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung (3.64) vom Parameter, bei identischem

Anfangswert (Amann, 1990, Theorem 8.4 und Bemerkung 8.5)

$$\|g_1(t) - g_2(t)\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})} \leq L_1 \|w_1 - w_2\|_X. \quad (3.74)$$

Aus (3.73) ergibt sich insbesondere die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|f\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))} &= \left( \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|f(t)\|_{H^{-1}(\mathcal{U})}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \leq \left( C^2 \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|w_1 - w_2\|_X^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= CT_{\text{Ende}}^{\frac{1}{2}} \|w_1 - w_2\|_X. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Multiplikation von (3.71) mit der exakten Lösung  $v$  liefert für  $\varepsilon > 0$  die Abschätzung

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|v(t)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 + D \|\nabla v(t)\|_{L^2(\mathcal{U})} &= f(t) [v] \leq \|f(t)\|_{H^{-1}(\mathcal{U})} \|v(t)\|_{H^1(\mathcal{U})} \\ &\leq \frac{1}{2\varepsilon} \|f(t)\|_{H^{-1}(\mathcal{U})}^2 + \frac{\varepsilon}{2} \|v(t)\|_{H^1(\mathcal{U})}^2 \\ &= \frac{1}{2\varepsilon} \|f(t)\|_{H^{-1}(\mathcal{U})}^2 + \frac{\varepsilon}{2} \|v(t)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 + \frac{\varepsilon}{2} \|\nabla v(t)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2. \end{aligned} \quad (3.76)$$

Wird  $\varepsilon > 0$  klein genug gewählt, kann die Gültigkeit der Ungleichung

$$\frac{d}{dt} \|v(t)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 + C_1 \|\nabla v(t)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 \leq C_2 \|v(t)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 + C_3 \|f(t)\|_{H^{-1}(\mathcal{U})}^2 \quad (3.77)$$

mit positiven Konstanten  $C_1, C_2, C_3$  sichergestellt werden. Anwendung der Gronwall-Ungleichung (Amann und Escher, 2006, Kapitel VII, Lemma 1.15) ergibt für  $t \in [0, T_{\text{Ende}}]$

$$\begin{aligned} \|v(t)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 &\leq \exp(C_2 t) \left( \|v(0)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 + C_3 \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|f(s)\|_{H^{-1}(\mathcal{U})}^2 ds \right) \\ &\leq C \left( \|v(0)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 + \|f\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))}^2 \right) \\ &= C \|f\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))}^2 \\ &\leq CT_{\text{Ende}} \|w_1 - w_2\|_X^2, \end{aligned} \quad (3.78)$$

wobei  $v(0) = 0$  sowie die Abschätzung aus (3.75) verwendet wurden.

Aufgrund von (3.77) folgt mit  $v(0) = 0$  ausserdem die Ungleichung

$$\|v(t)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 + C_1 \int_0^t \|\nabla v(s)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 ds \leq C_2 \int_0^t \|v(s)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 ds + C_3 \int_0^t \|f(s)\|_{H^{-1}(\mathcal{U})}^2 ds \quad (3.79)$$

und wegen (3.78) sowie (3.75) schliesslich

$$\begin{aligned} \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|\nabla v(s)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 ds &\leq C_2 \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|v(s)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 ds + C_3 \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|f(s)\|_{H^{-1}(\mathcal{U})}^2 ds \\ &\leq C \left( T_{\text{Ende}}^2 + T_{\text{Ende}} \right) \|w_1 - w_2\|_X^2 \\ &= CT_{\text{Ende}} \|w_1 - w_2\|_X^2. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Nach diesen Vorbereitungen kann die Differenz  $A[w_1] - A[w_2] = u = v + (G_1 - G_2)$  abgeschätzt werden. Für die  $X$ -Norm von  $u$  gilt

$$\begin{aligned} \|u\|_X &= \|u\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))} + \left\| \frac{\partial u}{\partial t} \right\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))} \\ &\leq \|v\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))} + \|G_1 - G_2\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))} \\ &\quad + \left\| \frac{\partial v}{\partial t} \right\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))} + \left\| \frac{\partial}{\partial t} (G_1 - G_2) \right\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))}. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Wir benutzen die vorbereiteten Abschätzungen, um jeden der vier Terme in (3.81) einzeln durch  $\|w_1 - w_2\|_X$  nach oben zu beschränken.

Für den ersten Term gilt mit (3.78) und (3.80)

$$\begin{aligned} \|v\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))}^2 &= \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|v(s)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 ds + \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|\nabla v(s)\|_{L^2(\mathcal{U})}^2 ds \\ &\leq C \left( T_{\text{Ende}}^2 \|w_1 - w_2\|_X^2 + T_{\text{Ende}} \|w_1 - w_2\|_X^2 \right) \\ &= CT_{\text{Ende}} \|w_1 - w_2\|_X^2. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Mithilfe von (3.67) und (3.74) ergibt sich für den zweiten Term die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|G_1 - G_2\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U}))}^2 &\leq C \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|g_1(s) - g_2(s)\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})}^2 ds \\ &\leq CT_{\text{Ende}} \|w_1 - w_2\|_X^2. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Mit Abschätzung (3.50) sowie  $v(0) = 0$  und (3.75) folgt für den dritten Term

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\partial v}{\partial t} \right\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))}^2 &\leq C \|f\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))}^2 \\ &\leq CT_{\text{Ende}} \|w_1 - w_2\|_X^2. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Für den vierten Term werden (3.68), die Stetigkeit des Fortsetzungsoperators, die Lipschitzstetigkeit von  $F$  sowie (3.74) verwendet. Dies ergibt

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\partial}{\partial t} (G_1 - G_2) \right\|_{L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U}))}^2 &= \int_0^{T_{\text{Ende}}} \left\| \frac{\partial}{\partial t} (G_1 - G_2) \right\|_{H^{-1}(\mathcal{U})}^2 ds \\ &\leq C \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|E[F[g_1(s), w_1] - F[g_2(s), w_2]]\|_{H^1(\mathcal{U})}^2 ds \\ &\leq C \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|F[g_1(s), w_1] - F[g_2(s), w_2]\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})}^2 ds \\ &\leq CL^2 \int_0^{T_{\text{Ende}}} \|g_1(s) - g_2(s)\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})}^2 + \|w_1 - w_2\|_X^2 ds \\ &\leq CT_{\text{Ende}} \|w_1 - w_2\|_X^2. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Einsetzen der einzelnen Abschätzungen (3.82), (3.83), (3.84) und (3.85) in (3.81) liefert

$$\|A[w_1] - A[w_2]\|_X = \|u\|_X \leq CT_{\text{Ende}}^{\frac{1}{2}} \|w_1 - w_2\|_X. \quad (3.86)$$

Dies bedeutet, dass der Operator  $A$  für  $T_{\text{Ende}} < \frac{1}{C^2}$  eine Kontraktion auf dem Banach-Raum  $X$  ist. Die Stetigkeit des Operators folgt aus der stetigen Abhängigkeit der Lösungen von (3.51) und (3.52) von den jeweiligen Anfangs- und Randbedingungen sowie den Parametern.

Der Fixpunktsatz von Banach (Schweizer, 2013, Theorem 16.1) garantiert für  $T_{\text{Ende}} < \frac{1}{C^2}$  die Existenz und Eindeutigkeit eines Fixpunkts  $u \in X$ . Damit haben wir die Existenz einer eindeutigen Lösung für das Problem (3.51) und (3.52) für kleine Zeiten  $T_{\text{Ende}}$  gezeigt.

### 3.3.4 Grosse Zeiten

Im vorangegangenen Unterabschnitt wurde der Beweis von Satz 3.3.2 für genügend kleine  $T_{\text{Ende}} > 0$  erbracht. Für ein beliebiges  $T_{\text{Ende}} > 0$  wird das Zeitintervall  $[0, T_{\text{Ende}}]$  in kleinere Intervalle unterteilt, für die mit dem vorherigen Argument die Lösbarkeit gefolgert werden kann. Dazu sei  $T_1 < \frac{1}{C^2}$ . Auf dem Teilintervall  $[0, T_1]$  ist das generische Problem (3.51) und (3.52) lösbar. Für das Teilintervall  $[T_1, 2T_1]$  sei  $u(T_1)$  der Startwert für das generische Problem. Da die Länge dieses Teilintervalls ebenfalls genügend klein ist, ergibt sich durch die obige Argumentation eine Lösung auf dem Intervall  $[0, 2T_1]$ . Induktiv wird auf diese Weise das komplette Zeitintervall  $[0, T_{\text{Ende}}]$  in endlich vielen Schritten ausgeschöpft.

Wie bei der Diskussion des maximalen Existenzintervalls bei gewöhnlichen Differentialgleichungen, ergibt sich auch hier die Eindeutigkeit auf dem gesamten Zeitintervall. Dieses Vorgehen wird auch in Schweizer (2013) im Beweis von Theorem 16.4 benutzt, um die Existenz und Eindeutigkeit einer exakten Lösung der Reaktions-Diffusionsgleichung auf dem gesamten Zeitintervall zu beweisen.

Damit ist Satz 3.3.2 vollständig gezeigt.

### 3.3.5 Anwendung auf das Modell

In diesem Unterabschnitt wird auf die Anwendung des analytischen Resultats aus Satz 3.3.2 auf das in Abschnitt 3.1 beschriebene Modell eingegangen. Für eine zeitlich unveränderliche Geometrie, das heisst für räumlich fixierte und in der Grösse unveränderliche Hydrometeore, wird der Satz über die eindeutige Lösbarkeit direkt übertragen. Im folgenden Unterabschnitt 3.3.6 wird die Verallgemeinerung auf sich bewegende Hydrometeore diskutiert.

Das Modell aus Abschnitt 3.1 besteht aus einem System von partiellen Differentialgleichungen, gekoppelt mit einem System von gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Randwerte. Das Resultat aus Satz 3.3.2 hingegen wurde nicht für ein System von Gleichungen formuliert. Allerdings wurde im Beweis nirgends verwendet, dass es sich lediglich um eine einzelne Funktion handelt. Daher überträgt sich die Aussage auch auf das System von Gleichungen.

Für die Übertragung der analytischen Resultate bezeichne  $\mathcal{U}$  das Luftpaket ohne die Hydrometeore. Entlang des äusseren Randes des Luftpaketes sind Dirichlet- oder

Neumann-Randbedingungen vorgegeben. Eine inhomogene Dirichlet-Randbedingung kann in die gewöhnliche Differentialgleichung für die Randwerte integriert werden. Eine Neumann-Randbedingung modifiziert lediglich die rechte Seite der partiellen Differentialgleichung durch einen weiteren additiven Term. Der restliche Rand des Gebiets  $\mathcal{U}$  besteht aus Rändern der Hydrometeore. Entlang dieser Ränder werden die Randbedingungen durch (3.5) bestimmt.

Die gewöhnliche Differentialgleichung (3.5) für die Randwerte eines Hydrometeors  $\omega$  reduziert sich im Modell zu einer gewöhnlichen Differentialgleichung im  $\mathbb{R}^2$ , denn es wurde eine uniforme Temperaturverteilung im Hydrometeor vorausgesetzt, vergleiche 3.1.2. Die Temperatur  $T_\omega(t)$  des Hydrometeors  $\omega$  definiert zu jedem Zeitpunkt eine Funktion  $\partial\omega \ni x \mapsto T_\omega(t)$ . Da diese Funktion entlang  $\partial\omega$  konstant ist, liegt sie in  $H^{\frac{1}{2}}(\partial\omega)$  und damit auch in  $H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})$ . Die Wasserdampfdichte entlang der Oberfläche  $\partial\omega$  eines Hydrometeors stimmt aufgrund der Annahmen aus Unterabschnitt 3.1.2 mit der Sättigungsdampfdichte überein. Wegen Abschnitt 2.2 gilt für Punkte  $x \in \partial\omega$

$$\rho_{v,\omega}(x) = \frac{p_{y,\infty}(T_\omega)}{R_v T_\omega} \exp\left(\frac{\sigma_y(T_\omega)}{R_v \rho_y(T_\omega) T_\omega} (\kappa_1(x) + \kappa_2(x))\right), \quad (3.87)$$

wobei  $y \in \{l, i\}$  den Aggregatzustand des Hydrometeors angibt,  $\sigma_y$  die Oberflächenspannung,  $\rho_y$  die Dichte und  $\kappa_1, \kappa_2$  die Hauptkrümmungen bezeichnen. Letztere werden von der Form des Hydrometeors bestimmt.

Im Allgemeinen lässt die Kenntnis der Masse  $m_\omega$  keinen Rückschluss auf die Form des Hydrometeors zu. Hat  $\omega$  jedoch eine Kugelform, so bestimmt die Masse deren Radius  $r_\omega$  durch

$$m_\omega = \frac{4}{3} \pi \rho_y(T_\omega) r_\omega^3 \quad (3.88)$$

und (3.87) vereinfacht sich, gemäss Unterabschnitt 2.2.2, zu

$$\rho_{v,\omega} = \frac{p_{y,\infty}(T_\omega)}{R_v T_\omega} \exp\left(\frac{2\sigma_y(T_\omega)}{R_v \rho_y(T_\omega) T_\omega r_\omega}\right). \quad (3.89)$$

Insbesondere ist in diesem Fall  $\rho_{v,\omega}$  entlang  $\partial\omega$  konstant. Wird für den Hydrometeor eine Ellipsoidform angenommen, so sind die Hauptkrümmungen nicht mehr konstant, aber beschränkt, vergleiche Unterabschnitt 2.2.3.

Damit die in Abschnitt 2.6 angesprochene Singularität der Gleichung (3.5) kein Problem darstellt, können die regularisierten Wachstumsgleichungen (2.150) anstelle von (3.5) verwendet werden.

Eine Alternative zur Verwendung der regularisierten Wachstumsgleichungen bietet die Tatsache, dass ein physikalisches Problem betrachtet wird. Als solches sind lediglich Massen und Temperaturen in einem Rechteck  $R := [m_{\min}, m_{\max}] \times [T_{\min}, T_{\max}] \subset \mathbb{R}^2$  relevant, wobei  $0 < m_{\min} < m_{\max}$  und  $0 < T_{\min} < T_{\max}$  gilt. Auf dem Rechteck  $R$  ist die rechte Seite aus (3.5) beliebig oft differenzierbar und beschränkt. Wird die rechte Seite von (3.5) mit einer Abschneidefunktion multipliziert, ergibt sich ebenfalls eine neue rechte Seite, die in  $\mathbb{R}^2$  beschränkt ist. Eine Abschneidefunktion ist hierbei eine beliebig oft differenzierbare Funktion, die auf dem Rechteck  $R$  konstant 1 ist und ausserhalb schnell auf 0 abfällt.



Es bleibt die Interpretation der Normalenableitungen, die in den Integralen über den Rand  $\partial\omega$  eines Hydrometeors in (3.5) auftreten. Die Interpretation wird für die Lösung  $u$  des generischen Problems aus Unterabschnitt 3.3.1 diskutiert. Zunächst wird die Dirichlet-Randbedingung des generischen Problems (3.51) durch die Definition  $v := u - G$  mit  $G(t) := E[g(t)]$  in eine rechte Seite kodiert. Wie in (3.71), erfüllt diese Funktion die Gleichung

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D\Delta u - \frac{\partial G}{\partial t} = D\Delta v + D\Delta G - \frac{\partial G}{\partial t} = D\Delta v - \frac{\partial G}{\partial t}, \quad (3.90)$$

denn  $E$  ist die harmonische Fortsetzung. Wegen (3.68) gilt  $\frac{\partial G}{\partial t}(t) \in H^1(\mathcal{U})$ , was die verbesserte Regularität

$$v \in L^\infty\left(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U})\right) \quad \text{und} \quad \frac{\partial v}{\partial t} \in L^2\left(0, T_{\text{Ende}}; L^2(\mathcal{U})\right) \quad (3.91)$$

der Lösung  $v$  impliziert (Schweizer, 2013, Proposition 11.12). Aufgrund von

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t) = \frac{\partial v}{\partial t}(t) - \frac{\partial G}{\partial t}(t) \in L^2(\mathcal{U}) \quad (3.92)$$

überträgt sich diese Regularität auf  $u$ .

Für die Lösung  $u$  bedeutet dies einerseits  $u(t) \in H^1(\mathcal{U})$  und andererseits

$$\Delta u(t) = \frac{1}{D} \frac{\partial u}{\partial t}(t) \in L^2(\mathcal{U}). \quad (3.93)$$

Mit Hu (2008, Theorem 2.1) ergibt sich, aufgrund von (3.93), die Existenz eines Funktionals  $\mu(t) \in H^{-\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U}) = \left(H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})\right)'$ , das eine Verallgemeinerung der Normalenableitung auf dem Rand des Gebiets ist und die Greensche-Formel

$$\int_{\mathcal{U}} \langle \nabla u(t), \nabla \varphi \rangle dx = \mu [T[\varphi]] - \int_{\mathcal{U}} \Delta u(t) \varphi dx \quad (3.94)$$

für alle  $\varphi \in H^1(\mathcal{U})$  erfüllt. In diesem Sinne können die in den Randbedingungen auftretenden Randintegrale verstanden werden. Das Randintegral

$$\int_{\partial\mathcal{U}} \langle \nabla u, N \rangle d\sigma \quad (3.95)$$

wird als die Anwendung des Funktionals  $\mu$  auf die konstante Funktion  $1 \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\mathcal{U})$  interpretiert, demnach als  $\mu[1]$ .

Für die Existenz einer verallgemeinerten Normalenableitung, die eine Greensche-Formel (3.94) erfüllt, ist mindestens die Regularität  $\Delta u(t) \in (H^1(\mathcal{U}))'$  erforderlich (Hu, 2008, Bemerkung 2.1). Für ein beliebiges Element  $\eta \in H^1(\mathcal{U})$  ist diese Regularitätsanforderung im Allgemeinen nicht erfüllt, denn es gilt lediglich  $\Delta \eta \in H^{-1}(\mathcal{U}) = (H_0^1(\mathcal{U}))'$ . Damit  $\Delta \eta \in (H^1(\mathcal{U}))'$  erfüllt ist, muss das Funktional  $\Delta \eta$  von  $H_0^1(\mathcal{U})$  stetig auf  $H^1(\mathcal{U})$  fortgesetzt werden. Eine derartige Fortsetzung ist wegen des Satzes von Hahn-Banach

immer möglich, jedoch im Allgemeinen nicht eindeutig (Dobrowolksi, 2010, Korollar 3.13).

Damit wurde das generische Problem auf das Modell aus Abschnitt 3.1 angewandt und das Resultat aus Satz 3.3.2 über die eindeutige Lösbarkeit überträgt sich auf das Modell. Die Voraussetzung ist allerdings, dass sich das Gebiet der feuchten Luft zeitlich nicht verändert. Insbesondere dürfen sich auch die Grössen der Hydrometeore nicht verändern. Der Satz zeigt daher die Existenz und Eindeutigkeit einer exakten Lösung, wenn die Annahme 1 der Maxwell-Theorie aus Unterabschnitt 2.3.1 über die Unveränderlichkeit der Geometrie der Hydrometeore angewandt wird.

### 3.3.6 Verallgemeinerungen

Im vorangegangenen Unterabschnitt wurde aus der Kenntnis der eindeutigen Lösbarkeit des generischen Problems auf die eindeutige Lösbarkeit der Modellgleichungen geschlossen. Dabei war die Voraussetzung einer zeitlich unveränderlichen Geometrie wichtig. Diese Voraussetzung wird im Folgenden etwas abgeschwächt und eine Bewegung der Hydrometeore zugelassen.

In Unterabschnitt 3.1.2 wurde angenommen, dass keine Kollisionen der Hydrometeore auftreten. Zusätzlich wird auch die Annahme über die Unveränderlichkeit der Grössen der Hydrometeore beibehalten. Solange keine Hydrometeore das Luftpaket verlassen, ist das Gebiet  $\mathcal{U}(t_0)$  der feuchten Luft zum Zeitpunkt  $t_0$  diffeomorph zum Gebiet  $\mathcal{U}(0) =: \mathcal{U}_0$  der feuchten Luft zu Beginn. Mit anderen Worten existiert ein Diffeomorphismus

$$\phi : \mathcal{U}_0 \times [0, T_{\text{Ende}}] \rightarrow \mathcal{V}, \quad (3.96)$$

der das Gebiet der feuchten Luft  $\mathcal{U}(t)$  zum Zeitpunkt  $t$  diffeomorph auf  $\mathcal{U}_0$  abbildet. Hierbei sei

$$\mathcal{V} := \bigcup_{0 \leq t \leq T_{\text{Ende}}} (\mathcal{U}(t) \times \{t\}). \quad (3.97)$$

Dieser Diffeomorphismus ist unabhängig von der gesuchten Lösung, denn die Bewegung der Hydrometeore wird durch das Geschwindigkeitsfeld der umgebenden Luft bestimmt. Hierbei wird jede Rückkopplung der Hydrometeore auf die Luftbewegung vernachlässigt.

Durch den Diffeomorphismus  $\phi$  werden die Diffusionsgleichungen, die auf dem deformierten Gebiet  $\mathcal{V}$  definiert sind, in elliptische Gleichungen auf dem Referenzgebiet  $\mathcal{U}_0 \times [0, T_{\text{Ende}}]$  transformiert. Auch die Randbedingungen (3.5) werden auf  $\partial\mathcal{U}_0 \times [0, T_{\text{Ende}}]$  transformiert. Auf die transformierten Gleichungen kann das Existenz- und Eindeutigkeitsresultat angewandt werden. Durch den Diffeomorphismus (3.96) ergibt sich die eindeutige Existenz einer Lösung auf dem deformierten Gebiet  $\mathcal{V}$  (Límaco u. a., 2002, Theorem 2.2). Hierbei ist entscheidend, dass in der Herleitung von Satz 3.3.2 an keiner Stelle die spezielle Struktur der Gleichung verwandt wurde. Es war lediglich von Bedeutung, dass der Hauptteil elliptisch ist. Diese Bemerkung ist für die transformierte Gleichung insofern wichtig, als dass diese im Hauptteil zusätzliche Terme aufgrund der Transformation durch den Diffeomorphismus enthält. Damit haben wir den Fall von sich bewegenden, aber in ihrer Form und Grösse unveränderlichen sowie nicht kollidierenden oder ausfallenden Hydrometeoren behandelt.

Eine weitere Abschwächung der Voraussetzungen, um auch eine Grössenänderung der Hydrometeore zuzulassen, ist mit dem vorgeführten Beweis nicht einfach zu realisieren.

Prinzipiell wäre es möglich auch für diesen Fall einen Iterationsoperator  $A$ , wie in Unterabschnitt 3.3.2, auf dem Raum

$$X := \left\{ u \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\Omega)) \mid \frac{\partial u}{\partial t} \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\Omega)) \right\}, \quad (3.98)$$

mit dem Luftpaket  $\Omega$ , zu definieren. Die Schwierigkeiten ergeben sich beim Nachweis der Kontraktionseigenschaft. Zu zwei Elementen  $w_1, w_2 \in X$  muss hierzu die Norm von  $A[w_1] - A[w_2]$  klein sein. Da die Felder  $w_1, w_2$  jedoch völlig unterschiedliche Wachstumseigenschaften der Hydrometeore hervorrufen können, ist der Vergleich der Bilder unter  $A$  schwierig.



# Kapitel 4

## Numerische Betrachtung

In diesem Kapitel werden die Modellgleichungen aus Abschnitt 3.1 numerisch gelöst. Es wird ein Referenzmodell beschrieben, das zur räumlichen Diskretisierung die FEM verwendet. Mithilfe des Referenzmodells wird die lokale Interaktion durch Diffusion studiert. Entsprechende Simulationsbeispiele finden sich in Abschnitt 4.3. In Abschnitt 4.1 wird zunächst die schwache Formulierung der Modellgleichungen hergeleitet. Diese stellt die Basis für die FEM dar. Da die FEM einem Galerkin-Verfahren entspricht, wird dieses in Unterabschnitt 4.1.1 allgemein beschrieben und in Unterabschnitt 4.1.2 die zeitliche Diskretisierung der Modellgleichungen erläutert. Abschnitt 4.2 enthält die Beschreibung der FEM. In Abschnitt 4.4 wird auf die Verbindung der exakten Lösung einer Diffusionsgleichung zur entsprechenden Gleichgewichtslösung eingegangen. Dieser Zusammenhang wird in Abschnitt 4.5 für die GFEM verwendet, die als alternative räumliche Diskretisierung vorgeschlagen wird.

### 4.1 Schwache Form der Modellgleichungen

Sowohl die FEM als auch die GFEM bauen auf der schwachen Formulierung einer partiellen Differentialgleichung auf. Infolgedessen wird in diesem Abschnitt die schwache Formulierung der Modellgleichungen (3.1) angegeben. Zusätzlich wird die zeitliche und räumliche Diskretisierung beschrieben, wobei die räumliche Diskretisierung generisch durch ein Galerkin-Verfahren erfolgt.

Gemäss der Annahmen aus Abschnitt 3.1.2, werden die Koeffizientenfunktionen der Modellgleichungen (3.1) als konstant angenommen. Die zugehörigen Werte seien  $D_0$ ,  $K_0$  und  $f_0$ . In starker Form sind die Modellgleichungen durch

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial t} = D_0 \Delta \rho_v + f_{\rho_v} \quad \text{auf } \mathcal{U} \text{ mit } 0 \leq t < T_{\text{Ende}}, \quad (4.1a)$$

$$f_0 \frac{\partial T}{\partial t} = K_0 \Delta T + f_T \quad \text{auf } \mathcal{U} \text{ mit } 0 \leq t < T_{\text{Ende}} \quad (4.1b)$$

gegeben. Hierbei bezeichnet  $\mathcal{U}$  das Gebiet der feuchten Luft. In den durchgeführten Simulationen wurde stets  $f_{\rho_v} = f_T = 0$  gesetzt. Im Rahmen einer übersichtlichen Darstellung werden zu jedem Zeitpunkt  $0 \leq t \leq T_{\text{Ende}}$  die Dirichlet-Randbedingungen

$$\rho_v(t) = \rho_{v,\infty}(t), \quad T(t) = T_\infty(t) \quad (4.2)$$

entlang  $\partial \mathcal{U}$  vorgegeben und zu fast jedem Zeitpunkt sei  $\rho_{v,\infty}(t), T_\infty(t) \in H^1(\mathcal{U})$  erfüllt. Neumann-Randbedingungen werden in der schwachen Form durch einen weiteren Summanden der rechten Seite berücksichtigt.

Für einen Zeitpunkt  $t$  werden (4.1a) und (4.1b) jeweils mit einer Testfunktion  $\varphi \in C_0^\infty(\mathcal{U})$  multipliziert und anschliessend über das Gebiet  $\mathcal{U}$  integriert. Mit dem Integralsatz von Gauss folgen für jede Testfunktion  $\varphi$  die Gleichungen

$$\int_{\mathcal{U}} \frac{\partial \rho_v}{\partial t}(t, x) \varphi(x) \, dx + D_0 \int_{\mathcal{U}} \langle \nabla \rho_v(t, x), \nabla \varphi(x) \rangle \, dx = \int_{\mathcal{U}} f_{\rho_v}(t, x) \varphi(x) \, dx, \quad (4.3a)$$

$$f_0 \int_{\mathcal{U}} \frac{\partial T}{\partial t}(t, x) \varphi(x) \, dx + K_0 \int_{\mathcal{U}} \langle \nabla T(t, x), \nabla \varphi(x) \rangle \, dx = \int_{\mathcal{U}} f_T(t, x) \varphi(x) \, dx. \quad (4.3b)$$

Damit diese Gleichungen Sinn ergeben, wird von den Lösungen die Glattheit

$$\rho_v, T \in L^2\left(0, T_{\text{Ende}}; H^1(\mathcal{U})\right) \quad \text{und} \quad \frac{\partial \rho_v}{\partial t}, \frac{\partial T}{\partial t} \in L^2\left(0, T_{\text{Ende}}; H^{-1}(\mathcal{U})\right) \quad (4.4)$$

gefordert (Evans, 1998, Kapitel 7.1.1.b). Damit lautet die schwache Formulierung von (4.1) und (4.2): Finde Funktionen  $\rho_v, T : [0, T_{\text{Ende}}] \rightarrow H^1(\mathcal{U})$  mit der Regularität (4.4), die für beliebige Testfunktionen  $\varphi \in C_0^\infty(\mathcal{U})$  und fast alle Zeitpunkte  $t$  die Identitäten (4.3a) und (4.3b) sowie

$$\rho_v(t) - \rho_{v,\infty}(t), T(t) - T_\infty(t) \in H_0^1(\mathcal{U}) \quad (4.5)$$

erfüllen. Mit der letztgenannten Eigenschaft wird die Einhaltung der Dirichlet-Randbedingungen (4.2) sichergestellt.

Aufbauend auf der schwachen Formulierung, werden die Modellgleichungen diskretisiert. Dazu ist eine Diskretisierung sowohl im Raum als auch in der Zeit erforderlich, die im Folgenden separat ausgeführt werden. Um die schwachen Gleichungen übersichtlich darzustellen, wird noch eine zusätzliche Notation eingeführt. Zum Gebiet  $\mathcal{U}$  sei die Bilinearform  $a_{\mathcal{U}}$  durch

$$\begin{aligned} a_{\mathcal{U}} : H^1(\mathcal{U}) \times H^1(\mathcal{U}) &\rightarrow \mathbb{R} \\ (u, v) &\mapsto \int_{\mathcal{U}} \langle \nabla u, \nabla v \rangle \, dx \end{aligned} \quad (4.6)$$

definiert. Mit dieser Notation lassen sich die schwachen Gleichungen (4.3) für beliebiges  $\varphi \in C_0^\infty(\mathcal{U})$  kurz als

$$\left( \frac{\partial \rho_v}{\partial t}(t), \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})} + D_0 \cdot a_{\mathcal{U}}(\rho_v(t), \varphi) = (f_{\rho_v}(t), \varphi)_{L^2(\mathcal{U})} \quad (4.7a)$$

$$f_0 \left( \frac{\partial T}{\partial t}(t), \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})} + K_0 \cdot a_{\mathcal{U}}(T(t), \varphi) = (f_T(t), \varphi)_{L^2(\mathcal{U})} \quad (4.7b)$$

schreiben, wobei  $(\cdot, \cdot)_{L^2(\mathcal{U})}$  das Skalarprodukt von  $L^2(\mathcal{U})$  bezeichnet.

#### 4.1.1 Galerkin-Verfahren

Zur räumlichen Diskretisierung von (4.7) werden sowohl die FEM als auch die GFEM verwendet, was beides verschiedene Ausprägungen eines Galerkin-Verfahrens sind. Aus

diesem Grund wird zunächst das Galerkin-Verfahren allgemein beschrieben (zum Beispiel Temam, 1977, Kapitel 1 § 3.1; Hackbusch, 1996, Kapitel 8.1.1). Einen geschichtlichen Hintergrund zum Galerkin-Verfahren bis hin zur FEM bietet Gander und Wanner (2012).

Seien  $X, Y$  Banach-Räume,  $A : X \rightarrow Y$  ein gegebener Operator und  $f \in Y$  ein gegebenes Element. Gesucht ist ein Element  $u \in X$ , das die Operatorgleichung

$$A[u] = f \tag{4.8}$$

erfüllt. Sei  $S \subset X$  ein endlichdimensionaler Unterraum und  $P : X \rightarrow S$  ein Projektionsoperator. Mittels des Operators  $P$  wird die Gleichung (4.8) auf den Unterraum  $S$  projiziert und dort gelöst. Dies liefert eine Lösung  $u_S \in S$  von (4.8), falls das auf  $S$  projizierte Problem lösbar ist. Die Lösung  $u_S \in S$  ist eine Approximation an die gesuchte Lösung  $u \in X$  des vollständigen Problems. Die Approximationsgüte von  $u_S$  an die exakte Lösung  $u$  wird durch den Abstand von  $u$  zum Unterraum  $S$  bestimmt.

Die Konstruktion der approximativen Lösung  $u_S \in S$  erfolgt durch die Projektion des Problems auf einen Unterraum. Der Operator  $A$  bleibt hierbei unverändert. Dies ist ein grundlegender Unterschied zum Verfahren der finiten Differenzen für partielle Differentialgleichungen. In diesem Fall entspricht der Operator  $A$  einem Differentialoperator und die auftretenden Ableitungen werden durch finite Differenzenausdrücke ersetzt (Braess, 2013, Kapitel 1 § 3), wodurch insbesondere der Operator verändert wird.

Im Folgenden nehmen wir die Existenz einer aufsteigenden Folge von Unterräumen  $S_n \subset X$  an, das heisst es gilt

$$S_n \subset S_{n+1} \tag{4.9}$$

für alle  $n \in \mathbb{N}$ . Die Vereinigung aller Unterräume sei dicht in  $X$ :

$$\overline{\bigcup_{n \in \mathbb{N}} S_n} = X. \tag{4.10}$$

Zu jedem Unterraum  $S_n$  existiere ein Projektionsoperator  $P_n : X \rightarrow S_n$ . Mit diesem Projektionsoperator lässt sich das Problem (4.8), wie zuvor für den einzelnen Unterraum  $S$ , auf den zugehörigen Unterraum  $S_n$  projizieren und dort lösen, sofern die projizierten Probleme lösbar sind. Es ergibt sich eine Folge  $u_{S_n} \in S_n$  von approximativen Lösungen. Dieses Vorgehen wird als Galerkin-Verfahren bezeichnet.

Aufgrund der Bedingungen (4.9) und (4.10), kann die Konvergenz der Folge  $u_{S_n}$  der Approximationen gegen die gesuchte exakte Lösung  $u$  von (4.8) erwartet werden. Ob das Galerkin-Verfahren, so wie es beschrieben wurde, zum Erfolg führt, hängt von den konkreten Eigenschaften des Raumes  $X$ , der Folge von Unterräumen  $S_n$  sowie den Eigenschaften der involvierten Operatoren  $A$  und  $P_n$  ab. In der Numerik wird die Folge der Unterräume an einem Index  $m$  abgebrochen und die zugehörige approximative Lösung  $u_{S_m} \in S_m$  als numerische Approximation definiert.

Die vorangegangene Beschreibung des Galerkin-Verfahrens ist sehr abstrakt gehalten und bietet keine konkrete Anleitung zur Lösung eines gegebenen Problems, da die Wahl der Unterräume nicht spezifiziert wurde. Diese Flexibilität ist allerdings eine Stärke des Verfahrens, denn es kann nicht nur in der Numerik eingesetzt werden, sondern auch um die Existenz von kontinuierlichen Lösungen zu beweisen. So wird das Galerkin-Verfahren in den Existenzbeweisen der Diffusionsgleichung (Evans, 1998, Kapitel 7.1.2) oder den Navier-Stokes-Gleichungen eingesetzt (Temam, 1977). Im Fall

der Diffusionsgleichung wird ausgenutzt, dass der Raum  $X$  ein separabler Hilbert-Raum ist, was auch die Stetigkeit der Projektionsoperatoren  $P_n$  sicherstellt. Um die endlichdimensionalen Unterräume  $S_n$  zu definieren, wird eine Basis aus Eigenfunktionen des Operators verwendet, was letztlich die Bedingung (4.10) impliziert.

Im restlichen Teil des Abschnitts wird ein Schritt des Galerkin-Verfahrens für den Spezialfall eines linearen Operators  $A : X \rightarrow X'$  auf einem Banach-Raum  $X$  beschrieben, der in den Dualraum  $X'$  von  $X$  abbildet. In diesem Fall kann, anstelle von (4.8), auch die variationelle Formulierung

$$(A[u])[\varphi] = f[\varphi] \tag{4.11}$$

für alle  $\varphi \in X$  verwendet werden. Diese Sichtweise reflektiert insbesondere die schwachen Gleichungen (4.7). Sei  $S \subset X$  ein endlichdimensionaler Unterraum der Dimension  $N$  mit Basis  $e_1, \dots, e_N$ . Die Projektion von (4.11) auf den Unterraum  $S$  ist durch die Einschränkung von (4.11) auf Testfunktionen  $\varphi \in S$  gegeben. Die gesuchte Lösung  $u_S \in S$  besitzt eine Basisdarstellung

$$u_S = \sum_{j=1}^N x_j e_j \tag{4.12}$$

mit unbekanntem Koeffizienten  $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{R}$ . Einsetzen von (4.12) in (4.11) ergibt

$$\sum_{j=1}^N x_j (A[e_j])[\varphi] = f[\varphi] \tag{4.13}$$

für beliebige  $\varphi \in S$ . Aufgrund der Linearität reicht es aus, (4.13) nacheinander mit den Basisvektoren  $e_1, \dots, e_N$  von  $S$  zu testen. Das liefert das lineare Gleichungssystem

$$\sum_{j=1}^N (A[e_j])[e_i] = f[e_i] \quad \text{für } 1 \leq i \leq N. \tag{4.14}$$

Mit der Matrix

$$M := \left( (A[e_j])[e_i] \right)_{i,j \in \{1, \dots, N\}} \tag{4.15}$$

sowie den Vektoren

$$b := (f[e_1], \dots, f[e_N])^T \quad \text{und} \quad x := (x_1, \dots, x_N)^T \tag{4.16}$$

schreibt sich das Gleichungssystem (4.14) in kompakter Matrixnotation als  $Mx = b$ . Der Vektor  $x$  enthält die unbekanntem Koeffizienten der approximativen Lösung  $u_S \in S$ . Der eben beschriebene lineare Fall ist im Fall der Modellgleichungen (4.7) relevant, da diese einen linearen Operator definieren.

### 4.1.2 Zeitliche Diskretisierung

In diesem Abschnitt wird die zeitliche Diskretisierung der schwachen Gleichungen (4.7) beschrieben. Sei  $M$  eine natürliche Zahl und  $\tau > 0$  eine Schrittweite. Das zeitliche Gitter wird durch  $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_M = T_{\text{Ende}}$  mit  $t_{k+1} - t_k = \tau$  für alle



$0 \leq k \leq M - 1$  definiert. Die numerischen Näherungen an  $\rho_v(t_k)$  und  $T(t_k)$  seien mit  $\rho_v^k$  und  $T^k$  bezeichnet. Zur zeitlichen Diskretisierung wird das implizite Verfahren von Euler verwendet. Die zugehörige Diskretisierung von (4.7) ist

$$\left( \frac{\rho_v^{k+1} - \rho_v^k}{\tau}, \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})} + D_0 a_{\mathcal{U}}(\rho_v^{k+1}, \varphi) = \left( f_{\rho_v}^{k+1}, \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})}, \quad (4.17a)$$

$$f_0 \left( \frac{T^{k+1} - T^k}{\tau}, \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})} + K_0 a_{\mathcal{U}}(T^{k+1}, \varphi) = \left( f_T^{k+1}, \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})} \quad (4.17b)$$

oder umgestellt

$$\left( \rho_v^{k+1}, \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})} + \tau D_0 a_{\mathcal{U}}(\rho_v^{k+1}, \varphi) = \left( \rho_v^k, \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})} + \tau \left( f_{\rho_v}^{k+1}, \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})}, \quad (4.18a)$$

$$f_0 \left( T^{k+1}, \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})} + \tau K_0 a_{\mathcal{U}}(T^{k+1}, \varphi) = f_0 \left( T^k, \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})} + \tau \left( f_T^{k+1}, \varphi \right)_{L^2(\mathcal{U})} \quad (4.18b)$$

für beliebiges  $\varphi \in H_0^1(\mathcal{U})$ . Sind die Näherungslösungen zu einem Zeitpunkt  $t_k$  bekannt, so ist (4.18) ein System von elliptischen Problemen für die Lösung zum nachfolgenden Zeitpunkt  $t_{k+1}$ .

Das implizite Verfahren von Euler ist ein Runge-Kutta-Verfahren. Es besitzt die Ordnung 1 und weist sehr gute Stabilitätseigenschaften auf, da es ein L-stabiles Verfahren ist (Hairer und Wanner, 1996, Kapitel IV.3). Die L-Stabilität ist durch zwei Eigenschaften charakterisiert. Einerseits ist das Verfahren A-stabil und andererseits werden „hochfrequente“ Lösungskomponenten gedämpft. Diese Dämpfung bewirkt, dass mögliche unphysikalische Oszillationen in der Lösung entweder sofort unterdrückt oder zumindest stark gedämpft werden. Die A-Stabilität des Verfahrens bedeutet, dass die numerische Lösung der Dahlquistischen Testgleichung, selbst für grosse Zeitschritte, stets beschränkt bleibt (Hairer und Wanner, 1996, Kapitel IV, Definition 2.1). Hierdurch wird eine Einschränkung an die zeitliche Schrittweite  $\tau$  aus Stabilitätsgründen vermieden.

Es ist möglich, anstelle des impliziten Verfahrens von Euler, ein anderes Runge-Kutta-Verfahren zur zeitlichen Diskretisierung zu verwenden, um eine höhere Ordnung zu erzielen. Wichtig ist, ein A-stabiles Verfahren zu wählen, da die aus der räumlichen Diskretisierung einer partiellen Differentialgleichung resultierende gewöhnliche Differentialgleichung  $y' = F(y)$  für gewöhnlich sehr steif ist (Hanke-Bourgeois, 2009, Beispiel 77.11). Die Steifigkeit einer gewöhnlichen Differentialgleichung verursacht Schwierigkeiten bezüglich der Stabilität bei deren numerischen Lösung. Damit ein Runge-Kutta-Verfahren eine stabile numerische Lösung erzeugt, muss im Allgemeinen eine Schrittweitenbegrenzung eingehalten werden. Lediglich für A-stabile Verfahren entfällt diese Schrittweitenbegrenzung und das Verfahren erzeugt auch für grosse Schrittweiten eine stabile Lösung (erstes Erscheinen des Begriffs „Steifigkeit“: Curtiss und Hirschfelder, 1952; numerische Behandlung steifer Differentialgleichungen: Hairer und Wanner, 1996). Der Grund für die auftretende Steifigkeit liegt in unserem Fall darin begründet, dass der Laplace-Operator unbeschränkt grosse, negative Eigenwerte besitzt (Evans, 1998, Kapitel 6.5). Dies überträgt sich auf die gewöhnliche Differentialgleichung  $y' = F(y)$ , die aus der räumlichen Diskretisierung entsteht und das Differential von  $F$  besitzt sehr grosse negative Eigenwerte. Eigenwerte des Differentials mit grossem, negativem Realteil sind nicht die einzige Quelle für Steifigkeit bei gewöhnlichen Differentialgleichungen. Dies ist ein Grund dafür,

dass bisher keine umfassende, exakte Definition des Begriffs „Steifigkeit“ gegeben wurde (Söderlind u. a., 2014; eine rigorose Definition über Asymptotik: Marschallik, 2015).

Es verbleibt die zeitliche Diskretisierung der Randbedingungen (3.5) an den Hydrometeoren. Zu den Approximationen  $m_\omega^k$  und  $T_\omega^k$ , an die Masse und die Temperatur des Hydrometeors  $\omega$  zum Zeitpunkt  $t_k$ , werden die neuen Approximationen für den Zeitpunkt  $t_{k+1}$  explizit durch

$$\begin{aligned} m_\omega^{k+1} &= m_\omega^k + \tau \alpha_\omega D_0 \int_{\partial\omega} \langle \nabla \rho_v^{k+1}, N^\omega \rangle d\sigma, \\ T_\omega^{k+1} &= T_\omega^k + \frac{\tau}{m_\omega^k c_{p,\omega}} \left( L_\omega m_\omega^{k+1} + K_0 \int_{\partial\omega} \langle \nabla T^{k+1}, N^\omega \rangle d\sigma \right) \end{aligned} \quad (4.19)$$

berechnet.

Ausgehend vom Zeitpunkt  $t_k$ , werden zunächst die neuen Felder  $\rho_v^{k+1}$ ,  $T^{k+1}$  zum Zeitpunkt  $t_{k+1}$  aus (4.18) bestimmt. Anschliessend werden die Masse und Temperatur der Hydrometeore gemäss (4.19) aktualisiert. Mithilfe von  $m_\omega^{k+1}$  und  $T_\omega^{k+1}$  werden die für den nächsten Zeitschritt benötigten Randbedingungen an der Oberfläche des Hydrometeors  $\omega$  für die elliptischen Gleichungen (4.18) berechnet.

Formal wurde ein Operatorsplitting durchgeführt, bei dem abwechselnd das Wasserdampf- und Temperaturfeld sowie die Eigenschaften der Hydrometeore berechnet werden. Ein solches Operatorsplitting wurde bereits im Beweis der Existenz und Eindeutigkeit einer exakten Lösung in Abschnitt 3.3 verwendet.

Alternativ zur hier beschriebenen Reihenfolge der Diskretisierung, kann auch vor der zeitlichen eine räumliche Diskretisierung mit einem Galerkin-Verfahren durchgeführt werden. Hierbei ergeben sich dieselben Gleichungen wie in (4.18). Die approximativen Lösungen  $\rho_v^{k+1}$  und  $T^{k+1}$  sind dann allerdings nicht in den kontinuierlichen Räumen

$$\begin{aligned} X_{\rho_v} &= \left\{ u \in H^1(\mathcal{U}) \mid u - \rho_{v,\infty}(t) \in H_0^1(\mathcal{U}) \right\}, \\ X_T &= \left\{ u \in H^1(\mathcal{U}) \mid u - T_\infty(t) \in H_0^1(\mathcal{U}) \right\}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

sondern in entsprechenden endlichdimensionalen Unterräumen  $S_{\rho_v} \subset X_{\rho_v}$  und  $S_T \subset X_T$  enthalten.

## 4.2 Standard Finite-Elemente-Methode

Für die räumliche Diskretisierung wird in diesem Abschnitt die Standard Finite-Elemente-Methode beschrieben. Die räumliche Diskretisierung der Modellgleichungen mit dieser Methode ergibt das Referenzmodell, mit dem die auftretenden Effekte der lokalen Interaktion zwischen den Hydrometeoren studiert werden.

Die Konstruktion der FEM involviert ein Gitter, welches das Gebiet  $\mathcal{U}$  ausschöpft, in dem die gestellten Gleichungen zu lösen sind. Hierzu wird ein zulässiges Tetraedergitter verwendet. Die Zulässigkeit bedeutet, dass sich zwei verschiedene, aber schneidende Tetraeder lediglich in einem gemeinsamen Eckpunkt oder in einer kompletten gemeinsamen Seitenfläche treffen (Knabner und Angermann, 2003, Definition 3.19). Die Eckpunkte der Tetraeder des Gitters seien mit  $p_1, \dots, p_N$  bezeichnet. Die Konstruktion des

endlichdimensionalen Unterraums  $S$  in der FEM beruht darauf, pro Tetraeder einen Polynomraum zu wählen. Der Unterraum  $S$  besteht aus allen Funktionen auf dem Gitter, die stückweise ein Element des gewählten Polynomraums definieren, das heißt die Einschränkung auf ein Tetraeder ergibt ein Element des zugehörigen Polynomraums. Ein Tetraeder, zusammen mit dem gewählten Polynomraum, heißt „finites Element“ (Braess, 2013, Kapitel II, Definition 5.8). Die für das Galerkin-Verfahren benötigte Folge von Unterräumen wird durch Verfeinerungen des Tetraedergitters gewonnen.

Wir wählen auf jedem Tetraeder den Polynomraum bestehend aus Polynomen von Grad 1. Ein Element aus  $S$  ist eine stetige Funktion auf dem Gitter, deren Einschränkung auf ein Tetraeder eine affin-lineare Funktion ist. Eine Basis von  $S$  ergibt sich aus den stückweise linearen Funktionen  $e_i$ , die durch die Bedingung  $e_i(p_j) = \delta_{ij}$  definiert sind. Die Funktion  $e_i$  hat den Wert 1 am Knoten  $p_i$  und den Wert 0 an jedem anderen Knoten des Gitters. Formal ist  $S$  durch  $S = \text{span}\{e_i \mid 1 \leq i \leq N\}$  definiert. Da die Funktionen  $e_1, \dots, e_N$  linear unabhängig sind, hat der Raum  $S$  die Dimension  $N$ , was der Anzahl der Eckpunkte des Gitters entspricht. Jede der Funktionen  $e_i$  ist stetig und liegt daher im Raum  $H^1(\mathcal{U})$ , insbesondere gilt  $S \subset H^1(\mathcal{U})$  (Braess, 2013, Satz 5.2). Sei  $h$  der maximale Durchmesser der Tetraeder im verwendeten Gitter. Durch wiederholte Verfeinerungen des Gitters, kann  $h \rightarrow 0$  erreicht werden. Die zugehörige Familie von Unterräumen sei mit  $S_h$  bezeichnet. Die FEM ist das Galerkin-Verfahren mit der Familie  $S_h$  von Unterräumen.

Aus der Konvergenztheorie für die FEM folgt die Konvergenz der numerischen Approximationen gegen die exakte Lösung. Parametrisiert durch den Gitterparameter  $h$  und gemessen in der Sobolevnorm, ist die Ordnung der Konvergenz 1. Für die  $L^2$ -Norm kann sogar die Ordnung 2 gezeigt werden (Knabner und Angermann, 2003, Theorem 3.29). Diese Konvergenzordnung ist ausreichend, denn das zur Zeitdiskretisierung verwendete implizite Euler-Verfahren besitzt ebenfalls die Konvergenzordnung 1. Der komplette Algorithmus besitzt die Konvergenzordnung 1, was das Minimum der Konvergenzordnungen der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung ist (Knabner und Angermann, 2003, Satz 6.13). Die angegebenen Konvergenzordnungen setzen eine gewisse Regularität der exakten Lösung voraus. Die Fehleranalyse für die FEM benötigt die Regularität  $H^2(\mathcal{U})$  der exakten Lösung im Raum. Diese Forderung ist erfüllt, sofern der Rand des Gebietes ein Lipschitzrand ist (Schweizer, 2013, Proposition 11.12), was in unserem Problem gegeben ist.

In der bisherigen Diskussion der FEM wurde angenommen, dass das Tetraedergitter das Gebiet  $\mathcal{U}$  ausschöpft. Dies ist nur dann möglich, wenn der Rand des Gebiets  $\mathcal{U}$  stückweise durch Ebenen berandet wird. In unserem Fall ist die Oberfläche eines Hydro meteors, der einen Teil des Randes der feuchten Luft  $\mathcal{U}$  ausmacht, durch die Oberfläche eines Ellipsoiden gegeben und daher nicht stückweise eben. Dieser Rand wird nicht exakt aufgelöst, sondern durch eine stückweise ebene Approximation ersetzt. Die Approximation des Randes ergibt sich durch die Näherung mit Seitenflächen der Tetraeder des Gitters. Die Knoten der „Randtetraeder“ liegen auf der Oberfläche des betreffenden Ellipsoiden. Durch diese Randapproximation können die Oberflächenintegrale aus (3.5) einfach berechnet werden. Eine exakte Anpassung der Seitenflächen der Tetraeder an die Oberfläche des Ellipsoiden wäre durch sogenannte isoparametrische Elemente möglich (Braess, 2013, Kapitel III § 2). Die Verwendung solcher Elemente resultiert allerdings in einem erhöhten Aufwand bei der Implementation und dem Rechenaufwand.

Um eine Neukonstruktion des Gitters in jedem Zeitschritt aufgrund des Wachstums der Hydrometeore zu vermeiden, werden die Position sowie die Grösse der Hydrometeore im Referenzmodell vorab fixiert. Die Grössenänderung der Hydrometeore wird daher nicht als eine geometrische Grössenänderung, sondern durch die Änderung der Masse  $m_\omega$  berücksichtigt.

### 4.3 Beispielsimulationen

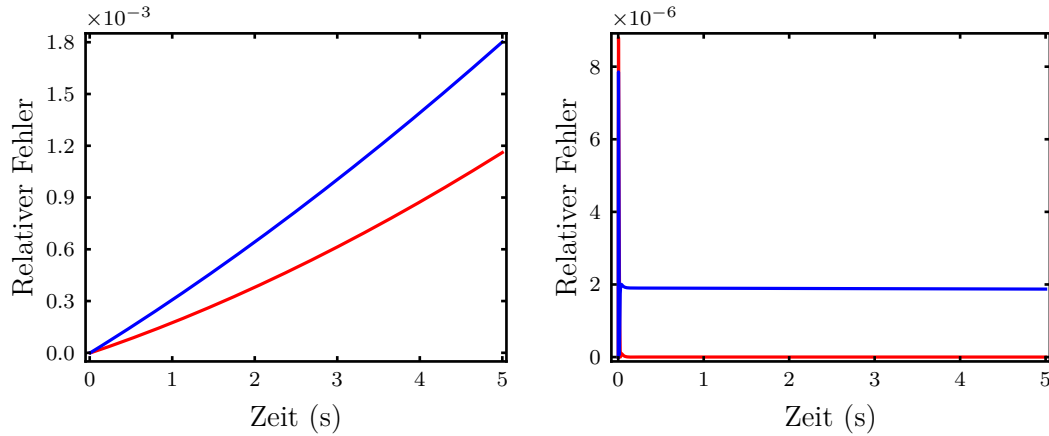
In diesem Abschnitt werden Simulationen mit dem Referenzmodell vorgestellt. In jedem der Fälle wurde ein unstrukturiertes Tetraedergitter verwendet, das mit dem frei verfügbaren Programm „TetGen“ erzeugt wurde (Si, 2015). Das jeweilige Gitter ist an die Grösse der Hydrometeore angepasst, so dass die Hydrometeore durch das Gitter aufgelöst werden. In allen Beispielen beträgt die Umgebungstemperatur  $T_\infty = -15^\circ\text{C}$ , was eine Dirichlet-Randbedingung für die Temperaturgleichung (4.18b) entlang des Aussenrandes des Luftpaketes ist. Die Dirichlet-Randbedingung für die Wasserdampfdichte ergibt sich aus dem Sättigungsverhältnis  $S_\infty$  bezüglich Wasser oder  $S_{\infty,i}$  bezüglich Eis der Umgebung. Die Temperatur und Wasserdampfdichte an den Oberflächen der Hydrometeore zu Beginn der Simulation sind durch die Umgebungswerte gegeben. Zusätzlich nehmen wir  $f_{\rho_v} = f_T = 0$  in (4.18) an.

Die Skalierung der räumlichen Variablen erfolgt in allen Simulationen durch  $l_c = 1 \cdot 10^{-4}$  m, vergleiche Abschnitt 3.2. Das zeitliche Integrationsintervall ist in allen Fällen  $[0\text{s}, 5\text{s}]$  mit dem Zeitschritt  $\tau = 1 \cdot 10^{-3}$  s. Die Darstellung der Felder erfolgt durch Konturlinien entlang eines zweidimensionalen Schnittes durch das Gebiet auf der Höhe  $z = 0$ . In den Unterabschnitten 4.3.1 und 4.3.2 ist das Gebiet des Luftpaketes stets  $[-20, 20]^3 \subset \mathbb{R}^3$ , in Unterabschnitt 4.3.3 das Gebiet  $[-25, 25]^3 \subset \mathbb{R}^3$ . Die unskalierten Gebiete sind daher  $[-0.002\text{ m}, 0.002\text{ m}]^3$  und  $[-0.0025\text{ m}, 0.0025\text{ m}]^3$ . Die Tropfenradien betragen stets  $10\ \mu\text{m}$ , was einem skalierten Radius von 0.1 entspricht.

#### 4.3.1 Einzelner Hydrometeor

Wir werden zwei Simulationen mit jeweils einem Hydrometeor betrachten, wobei der Hydrometeor in einem Fall ein Tropfen und im anderen Fall ein Eiskristall mit langer Halbachse  $150\ \mu\text{m}$  und kurzer Halbachse  $10\ \mu\text{m}$  ist. Die skalierten Längen der Halbachsen des Eiskristalls sind 1.5 und 0.1. In beiden Fällen wird am Rand des Gebiets eine Übersättigung bezüglich Wasser von 1% vorgegeben. Dies entspricht dem Sättigungsverhältnis  $S_\infty = 1.01$  beziehungsweise  $S_{\infty,i} \approx 1.169$ .

Der Tropfen befindet sich in einer bezüglich Wasser übersättigten Umgebung, weshalb er anwächst. Es bietet sich ein Vergleich der zeitlichen Entwicklungen der Tropfenmasse und Tropfentemperatur aus diesem Referenzmodell mit der Lösung der vollständigen Wachstumsgleichungen aus Abschnitt 2.4 sowie der asymptotischen Lösung aus Abschnitt 2.5 an. In Abbildung 4.1 sind die relativen Abweichungen zur Lösung des Referenzmodells dargestellt. Die Abweichungen in der Temperatur sind sehr klein, siehe Abbildung 4.1b. Hingegen wird die Abweichung in der Masse mit der Zeit grösser, siehe Abbildung 4.1a. Dies könnte durch die nicht geometrisch berücksichtigte Grössenänderung des Tropfens in der FEM-Simulation verursacht werden.



(a) Relative Abweichungen in der Tropfenmasse

(b) Relative Abweichungen in der Tropfentemperatur

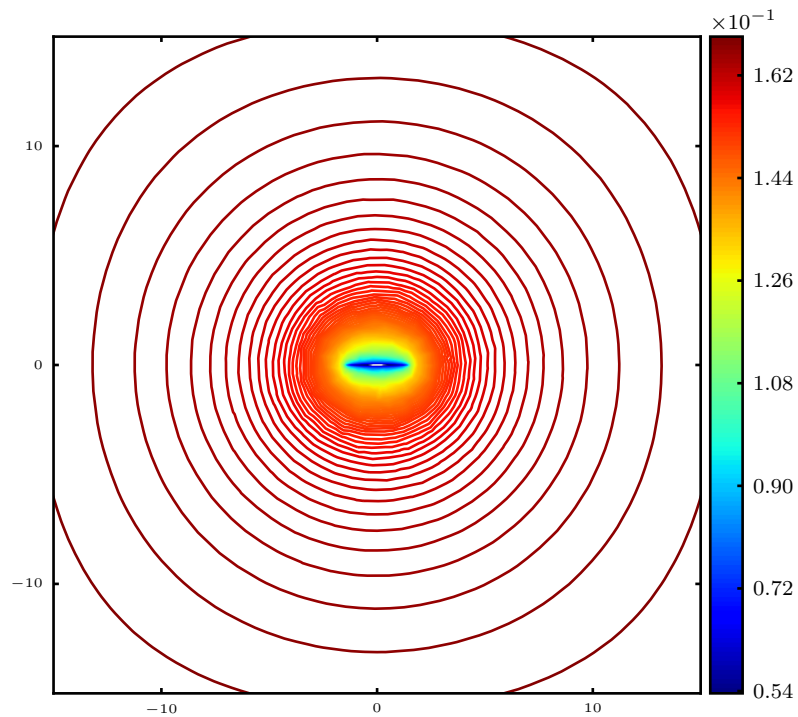
**Abbildung 4.1:** Relative Abweichungen der Lösung der vollständigen Wachstumsgleichungen (2.86) (rote Kurve) sowie der asymptotischen Näherung aus Abschnitt 2.5 (blaue Kurve) vom Referenzmodell für einen einzelnen Tropfen.

In Abbildung 4.2 ist die Übersättigung  $S_{\infty,i} - 1$  bezüglich Eis um den Eiskristall dargestellt. Der Eiskristall befindet sich in einer bezüglich Wasser übersättigten Umgebung, wodurch er eine starke Senke für den Wasserdampf darstellt und anwächst. Bemerkenswert ist der rasche Übergang des Wasserdampfgebietes von der Ellipsoidform zur Kugelform, der auch in der Literatur dokumentiert ist (zum Beispiel Libbrecht, 2005, Abschnitt 2.4; Lamb und Verlinde, 2011, Abbildung 8.24). Für einen Hydrometeor in der Nähe des Eiskristalls bedeutet dies, dass die konkrete Form des Eiskristalls für die lokale Interaktion nicht relevant ist, solange ein Mindestabstand zum Eiskristall nicht unterschritten wird.

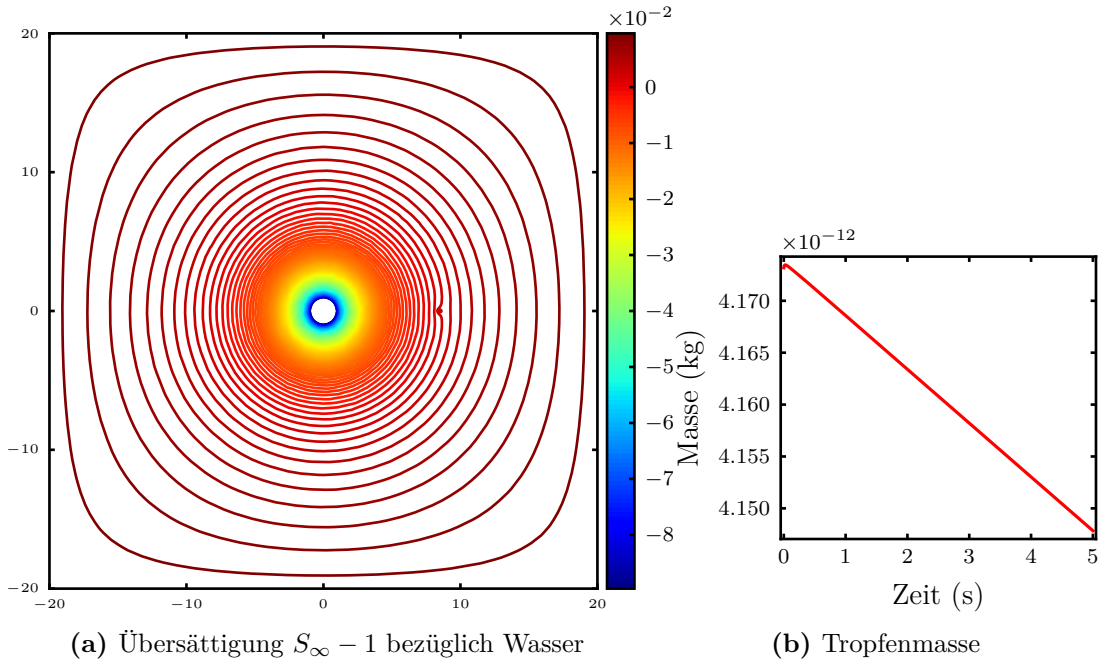
### 4.3.2 Interaktion zwischen zwei Hydrometeoriten

Die Interaktion zwischen einem kugelförmigen Eiskristall und einem Tropfen in einer bezüglich Wasser übersättigten Umgebung mit  $S_{\infty} = 1.01$  ist in Abbildung 4.3 veranschaulicht. Aufgrund der Differenz der Sättigungsdampfdrücke von Eis und flüssigem Wasser ist die Umgebung auch bezüglich Eis übersättigt. Der Eiskristall mit Mittelpunkt  $(0, 0, 0)$  ist eine Senke für den Wasserdampf, was eine lokale Untersättigung um den Tropfen mit Mittelpunkt  $(8.5, 0, 0)$  zur Folge hat, vergleiche Abbildung 4.3a. Obwohl die Umgebung bezüglich Wasser übersättigt ist, beginnt der Tropfen zu verdampfen, vergleiche Abbildung 4.3b. Dies verdeutlicht den lokalen Charakter der Interaktion zwischen den Hydrometeoriten.

In einer bezüglich Eis untersättigten Umgebung kann die Nähe eines Tropfens zum Eiskristall auch eine Verzögerung beim Verdampfen bewirken, da durch den Einfluss des Eiskristalls als Wasserdampfquelle die Untersättigung um den Tropfen vermindert wird. Für ein Sättigungsverhältnis  $S_{\infty} = 0.86$  (entspricht dem Sättigungsverhältnis  $S_{\infty,i} \approx 0.995$  bezüglich Eis) ist in Abbildung 4.4a, für dieselbe Konfiguration der Hydrometeore wie zuvor, die Übersättigung bezüglich Eis dargestellt. Wegen  $S_{\infty,i} < 1$



**Abbildung 4.2:** Übersättigung  $S_{\infty,i} - 1$  bezüglich Eis in der Umgebung eines Eiskristalls mit langer Halbachse  $150 \mu\text{m}$  und kurzer Halbachse  $10 \mu\text{m}$  zum Zeitpunkt  $5 \text{ s}$  in einer bezüglich Wasser übersättigten Umgebung mit  $S_{\infty} = 1.01$ .



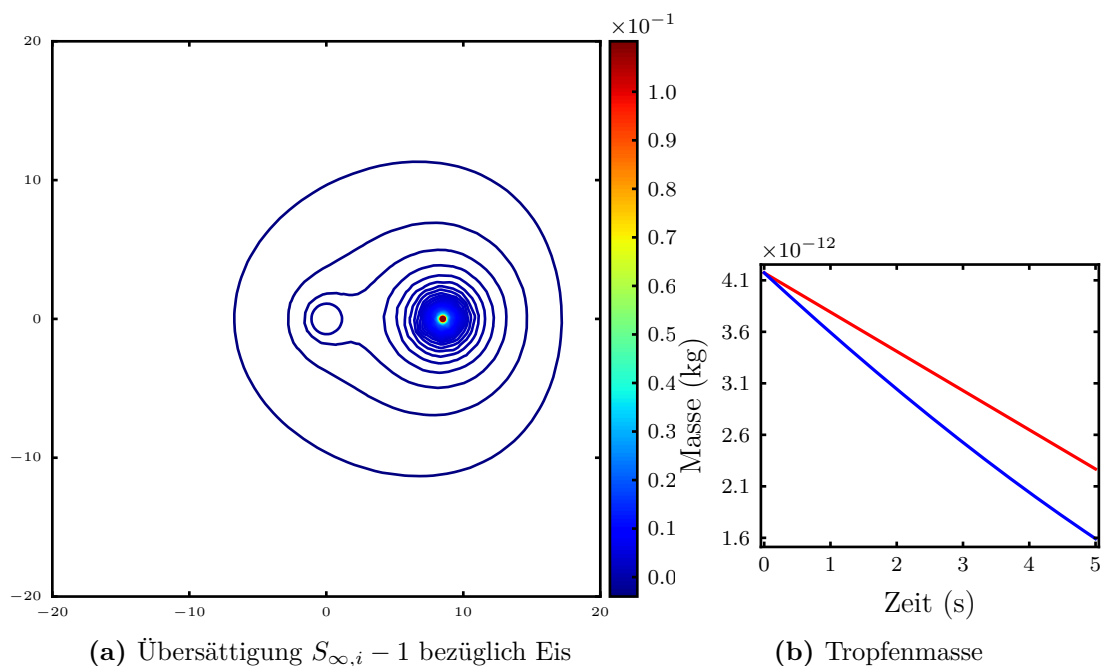
**Abbildung 4.3:** Übersättigung  $S_\infty - 1$  bezüglich Wasser zum Zeitpunkt 5 s zwischen einem kugelförmigen Eiskristall bei  $(0, 0, 0)$  und einem Tropfen bei  $(8.5, 0, 0)$  mit  $S_\infty = 1.01$  (linkes Bild) sowie die zeitliche Entwicklung der Tropfenmasse (rechtes Bild).

ist die Umgebung bezüglich Eis untersättigt und der Eiskristall beginnt zu verdampfen. Der freigesetzte Wasserdampf diffundiert auch in Richtung des Tropfens und mindert auf diese Weise die Untersättigung um den Tropfen. Dies verlangsamt die Verdampfung des Tropfens im Vergleich zur Situation ohne den Eiskristall, siehe Abbildung 4.4b.

### 4.3.3 Interaktion zwischen mehreren Hydrometeoren

Um die Interaktion zwischen einem Eiskristall und mehreren Tropfen in seiner Umgebung zu veranschaulichen, werden 38 Tropfen um einen kugelförmigen Eiskristall mit Mittelpunkt  $(0, 0, 0)$  im Abstand 8.5 platziert. Die Mittelpunkte der Tropfen entsprechen den Integrationspunkten der Lebedev-Integrationsformel, denn diese sind auf einer Sphäre gleichmässig verteilt (Lebedev, 1976). Zusätzlich werden sechs weitere Tropfen mit grösserem Abstand zum Eiskristall platziert. Fünf Tropfen oberhalb des Eiskristalls bilden eine lokale Ansammlung von Tropfen und ein einzelner Tropfen befindet sich weit rechts des Eiskristalls, vergleiche die rötlichen Punkte in Abbildung 4.5a.

Zunächst sei die Umgebung bezüglich flüssigem Wasser und Eis untersättigt, mit dem Sättigungsquotienten  $S_\infty = 0.86$  (beziehungsweise  $S_{\infty,i} \approx 0.995$  bezüglich Eis). In Abbildung 4.5a ist die Übersättigung  $S_{\infty,i} - 1$  bezüglich Eis dargestellt. Wie aufgrund der bezüglich Wasser untersättigten Umgebung zu erwarten, verdampfen alle Tropfen in der Umgebung des Eiskristalls, siehe Abbildung 4.6a. Da ein verdampfender Hydrometeor Wasserdampf freisetzt, wird lokal um den betreffenden Hydrometeor die Wasserdampfkonzentration erhöht. In Abbildung 4.5a ist der lokale Anstieg der Wasserdampfkonzentration anhand der rötlichen und grünlichen Farben um die Tropfen zu

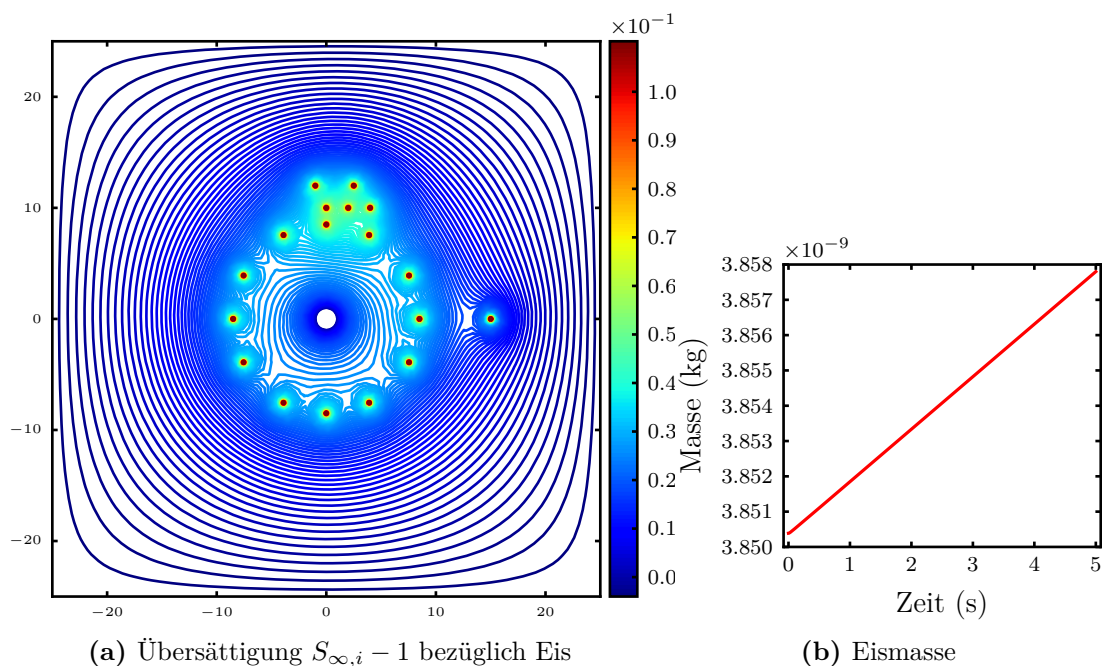


**Abbildung 4.4:** Übersättigung  $S_{\infty,i} - 1$  bezüglich Eis zum Zeitpunkt 5 s zwischen einem kugelförmigen Eiskristall bei  $(0, 0, 0)$  und einem Tropfen bei  $(8.5, 0, 0)$  mit  $S_{\infty} = 0.86$  (linkes Bild) sowie die zeitliche Entwicklung der Tropfenmasse (rechtes Bild). Die rote Kurve zeigt die Entwicklung der Tropfenmasse im Referenzmodell mit Eiskristall und die blaue Kurve ohne den Eiskristall.

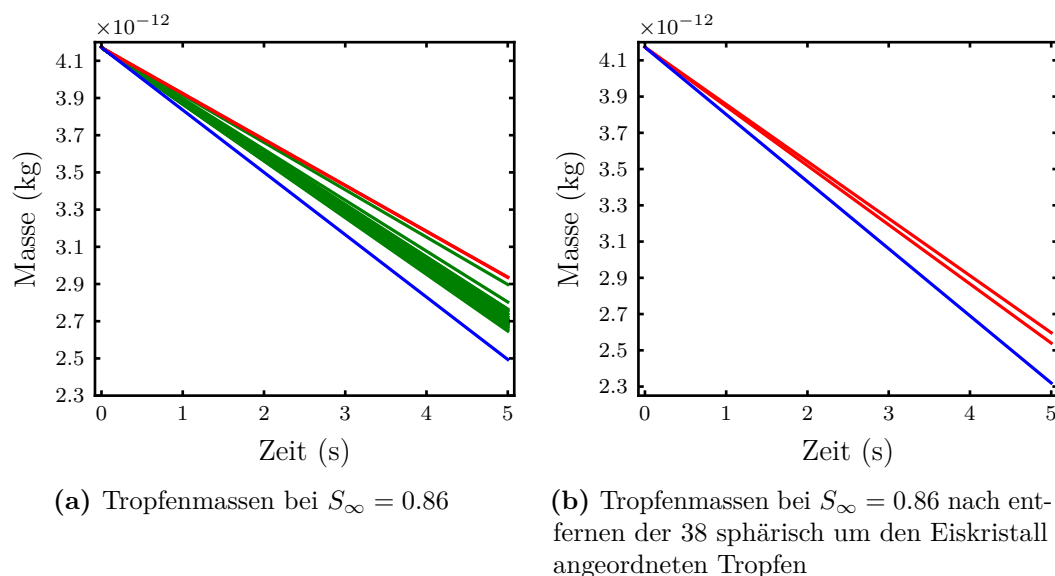


erkennen. Die beiden inneren Tropfen der Tropfenanhäufung oberhalb des Eiskristalls, mit Mittelpunkten  $(2, 10, 0)$  und  $(4, 10, 0)$ , profitieren vom freigesetzten Wasserdampf der umgebenden Tropfen. Durch die lokal erhöhte Wasserdampfkonzentration befinden sich die inneren Tropfen der Tropfenanhäufung in einem weniger untersättigten Umfeld und verdampfen daher langsamer (rote Kurven in Abbildung 4.6a). Dies ist ein Abschirmeffekt, denn die umgebenden Tropfen schirmen die inneren Tropfen von der massiven Untersättigung der Umgebung ab. Ähnliche Abschirmeffekte werden auch in anderen Studien beobachtet (Castellano u. a., 2004; Castellano und Avila, 2011). Durch die Präsenz und das Verdampfen der 38 sphärisch um den Eiskristall angeordneten Tropfen, wird die Wasserdampfkonzentration um den von den Tropfen umgebenen Eiskristall erhöht. Die Konzentration um den Eiskristall wird soweit erhöht, dass sich sogar eine leichte Übersättigung bezüglich Eis um den Eiskristall bildet. Dies erlaubt es dem Eiskristall anzuwachsen, vergleiche Abbildung 4.5b, obwohl die Umgebung auch bezüglich Eis untersättigt ist. Der einzelne Tropfen mit Mittelpunkt  $(15, 0, 0)$  bleibt vom Einfluss des Eiskristalls weitestgehend unberührt (blaue Kurve in Abbildung 4.6a), da die 38 sphärisch um den Eiskristall angeordneten Tropfen die Wirkung des Eiskristalls abschirmen. Dieser Abschirmeffekt kann durch das Entfernen der sphärisch angeordneten Tropfen veranschaulicht werden. In diesem Fall verdampfen alle verbleibenden Tropfen schneller, vergleiche Abbildung 4.6b. Der zeitliche Verlauf der Masse des einzelnen Tropfens bleibt jedoch weitestgehend unverändert, was den Abschirmeffekt des Eiskristalls durch die sphärisch angeordneten Tropfen belegt. Der Abschirmeffekt der kleinen Tropfenanordnung oberhalb des Eiskristalls hingegen bleibt bestehen. Die beiden Tropfen innerhalb dieser Anhäufung mit Mittelpunkten  $(2, 10, 0)$  und  $(4, 10, 0)$  verdampfen langsamer (rote Kurven in Abbildung 4.6b), im Vergleich zum einzelnen Tropfen (blaue Kurve). Die inneren Tropfen wurden wiederum von der massiven Untersättigung bezüglich Wasser der Umgebung abgeschirmt.

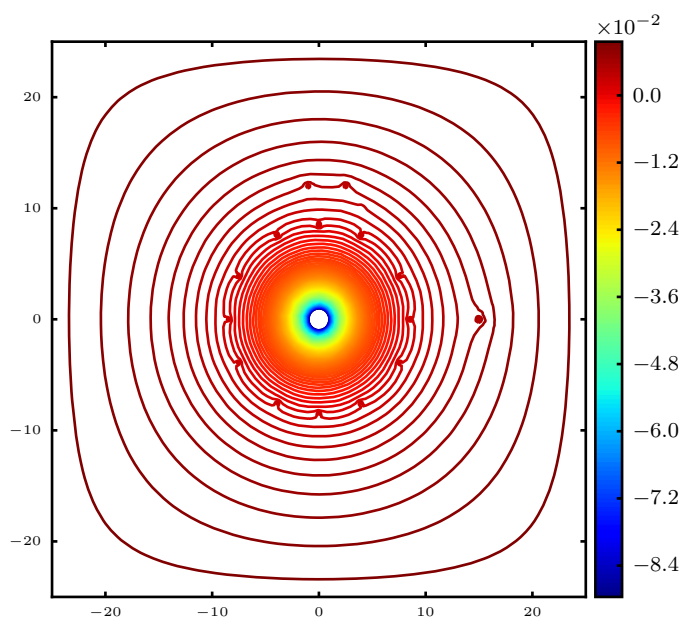
Für dieselbe Hydrometeorkonfiguration wie zuvor, zeigt Abbildung 4.7 die Übersättigung bezüglich Wasser, wenn die Umgebungsbedingung zu  $S_\infty = 1.01$  geändert wird, was einer Übersättigung bezüglich Wasser und Eis entspricht. Hier zeigt sich ein weit geringerer Einfluss der Tropfen auf das Wasserdampfgebiet. Im zeitlichen Verlauf der Tropfenmassen zeigen sich dieselben Abschirmungseffekte wie zuvor, siehe Abbildung 4.8. Aufgrund der Übersättigung wächst der Eiskristall an und deformiert das Wasserdampfgebiet in seiner Umgebung. Insbesondere wird lokal um den Eiskristall eine Untersättigung bezüglich Wasser verursacht. Die 38 sphärisch um den Eiskristall angeordneten Tropfen befinden sich innerhalb der lokalen Untersättigung, die vom Eiskristall verursacht wird. Dies erklärt das Verdampfen der Tropfen, vergleiche die grünen Kurven in Abbildung 4.8. Der Tropfen weit rechts des Eiskristalls mit Mittelpunkt  $(15, 0, 0)$  bleibt vom Einfluss des Eiskristalls weitestgehend unberührt, weshalb er aufgrund der übersättigten Umgebung anwächst (blaue Kurve in Abbildung 4.8). Mit anderen Worten haben die den Eiskristall umgebenden Tropfen dessen Einfluss vermindert, was dem bereits zuvor beschriebenen Abschirmeffekt entspricht. Im Vergleich zum Tropfen weit rechts des Eiskristalls, ist das Wachstum der beiden Tropfen innerhalb der Tropfenanhäufung deutlich vermindert (rote Kurven in Abbildung 4.8 im Vergleich zur blauen Kurve). Der Grund liegt wiederum in einem Abschirmeffekt. In diesem Fall werden die inneren Tropfen der Tropfenanhäufung von der Übersättigung in der Umgebung abgeschirmt.



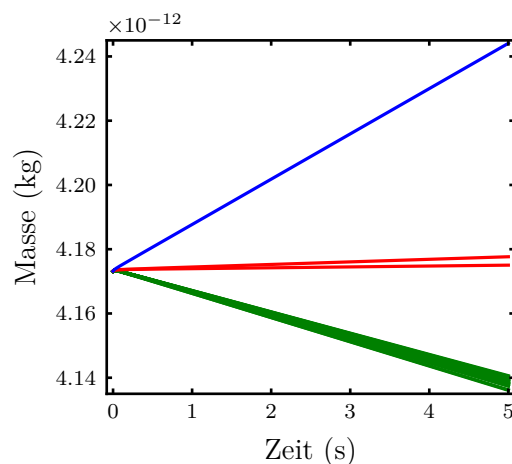
**Abbildung 4.5:** Übersättigung  $S_{\infty,i} - 1$  bezüglich Eis zum Zeitpunkt 5 s in der Umgebung eines kugelförmigen Eiskristalls mit Radius  $100 \mu\text{m}$  in einer eisuntersättigten Umgebung mit  $S_{\infty} = 0.86$ . Der Eiskristall ist von 38 Tropfen umgeben, die auf einer Sphäre angeordnet sind. In der Schnittebene sind zusätzlich 6 weitere Tropfen vorhanden (linkes Bild). Zeitlicher Verlauf der Eismasse (rechtes Bild).



**Abbildung 4.6:** Entwicklung der Tropfenmassen bei 38 gleichmässig auf einer Sphäre um den Eiskristall verteilten Tropfen (grüne Kurven) sowie einem einzelnen Tropfen bei  $(15, 0, 0)$  des Eiskristalls (blaue Kurve). Die roten Kurven kennzeichnen die Tropfenmassen der beiden Tropfen mit Mittelpunkten  $(2, 10, 0)$  und  $(4, 10, 0)$  innerhalb einer Tropfenanhäufung oberhalb des Eiskristalls.



**Abbildung 4.7:** Übersättigung  $S_\infty - 1$  bezüglich Wasser zum Zeitpunkt 5 s in derselben Konfiguration wie in Abbildung 4.5a mit  $S_\infty = 1.01$ .



**Abbildung 4.8:** Wie in Abbildung 4.6, jedoch bei einem Sättigungsverhältnis  $S_\infty = 1.01$ .

Die in diesem Unterabschnitt gezeigten Simulationen illustrieren die vielfältigen Möglichkeiten der lokalen Interaktion zwischen den Hydrometeoren. Kommen sich die Hydrometeore genügend nahe, so wird das Sättigungsverhältnis der Umgebung unwichtig und es dominieren die lokalen Effekte. Hierzu zählen auch Abschirmeffekte durch Anhäufungen von Hydrometeoren, bei denen die inneren Hydrometeore von den Umgebungsbedingungen oder dem Einfluss anderer Hydrometeore abgeschirmt werden. Je nach Umgebungsbedingungen können die Abschirmeffekte einen positiven oder negativen Einfluss auf die Wachstumsrate der abgeschirmten Hydrometeore haben. In gängigen Wettermodellen werden diese lokalen Effekte allerdings nicht berücksichtigt. Vielmehr wird in den Modellen die in Abschnitt 2.3 beschriebene Maxwell-Theorie für das Diffusionswachstum der Hydrometeore verwendet. Daher können die Hydrometeore ausschliesslich über die Umgebungsbedingungen  $S_\infty$  und  $T_\infty$  miteinander interagieren und die jeweiligen Wachstumsraten sind allein durch die Umgebungsbedingungen bestimmt.

#### 4.4 Betrachtung des lokalen Gleichgewichts

Die exakte Lösung einer Diffusionsgleichung konvergiert lokal sehr schnell gegen die Gleichgewichtslösung. Diese Konvergenz ist der Gegenstand dieses Abschnitts und wird im nachfolgenden Abschnitt 4.5 bei der Konstruktion der GFEM angewandt.

Um die Darstellung übersichtlich zu gestalten, wird die Diffusionsgleichung des generischen Problems aus Abschnitt 3.3.1

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u}{\partial t} &= D\Delta u & \text{in } \gamma \times (0, T_{\text{Ende}}), \\
 u(0) &= u_0 & \text{in } \gamma, \\
 u(t) &= g & \text{auf } \partial\gamma \times (0, T_{\text{Ende}}),
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

auf einem beschränkten Gebiet  $\gamma$  mit glattem Rand betrachtet. Hierbei ist  $D > 0$  eine positive Konstante und  $g \in H^1(\gamma)$ . Die „Gleichgewichtsversion“ von (4.21) ist durch die

zeitunabhängige Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &= D\Delta v \quad \text{in } \gamma, \\ v &= g \quad \text{auf } \partial\gamma \end{aligned} \quad (4.22)$$

gegeben. Beide Gleichungen besitzen eine eindeutige Lösung (vergleiche Satz 3.3.1 und Schweizer, 2013, Theorem 6.10). Die Funktion  $f$  sei durch  $f(t) := \|u(t) - v\|_{L^2(\gamma)}^2$  definiert, die mindestens im schwachen Sinne differenzierbar ist. Aufgrund von

$$T[u(t) - v] = T[u(t)] - T[v] = g - g = 0 \quad (4.23)$$

ist die Differenz  $u(t) - v$  für jeden Zeitpunkt im Raum  $H_0^1(\gamma)$  enthalten und es gilt die Poincaré-Ungleichung

$$\|u(t) - v\|_{L^2(\gamma)}^2 \leq s^2 \|\nabla(u(t) - v)\|_{L^2(\gamma)}^2, \quad (4.24)$$

wobei  $s$  die Kantenlänge eines Würfels bezeichnet, der  $\mathcal{U}$  enthält (Braess, 2013, Kapitel II, § 1, Satz 1.5). Mit der Poincaré-Ungleichung (4.24) wird die Ableitung von  $f$  abgeschätzt

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt}(t) &= 2 \int_{\gamma} (u(t) - v) \frac{\partial}{\partial t} (u(t) - v) \, dx = 2 \int_{\gamma} (u(t) - v) \frac{\partial u}{\partial t}(t) \, dx \\ &= 2D \int_{\gamma} (u(t) - v) \Delta u(t) \, dx = 2D \int_{\gamma} (u(t) - v) \Delta (u(t) - v) \, dx \\ &= -2D \int_{\gamma} |\nabla(u(t) - v)|^2 \, dx = -2D \|\nabla(u(t) - v)\|_{L^2(\gamma)}^2 \\ &\leq -\frac{2D}{s^2} \|u(t) - v\|_{L^2(\gamma)}^2 = -\frac{2D}{s^2} f(t). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Mithilfe der Gronwall-Ungleichung (Amann und Escher, 2006, Kapitel VII, Lemma 1.15) ergibt sich die Abschätzung

$$\|u(t) - v\|_{L^2(\gamma)}^2 = f(t) \leq f(0) \exp\left(\int_0^t -\frac{2D}{s^2} \, dz\right) = \|u_0 - v\|_{L^2(\gamma)}^2 \exp\left(-\frac{2D}{s^2} t\right). \quad (4.26)$$

Diese Abschätzung impliziert eine exponentielle Konvergenzgeschwindigkeit in  $L^2(\gamma)$  der Lösung der Diffusionsgleichung (4.21) gegen die Gleichgewichtslösung von (4.22).

Gemäss der Regularitätstheorie für elliptische und parabolische Gleichungen (Schweizer, 2013, Theoreme 6.14 und 11.12), haben die Lösungen  $u$  und  $v$  die Regularität

$$u \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^2(\gamma)) \quad \text{und} \quad v \in H^2(\gamma), \quad (4.27)$$

was die Regularität  $u - v \in L^2(0, T_{\text{Ende}}; H^2(\gamma))$  der Differenz impliziert. Aufgrund der Glattheitsannahmen an das Gebiet  $\gamma$ , ergibt sich durch ein Interpolationsargument (Adams und Fournier, 2003, Theorem 5.2) für fast alle Zeitpunkte

$$\|u(t) - v\|_{H^1(\gamma)} \leq C \|u(t) - v\|_{H^2(\gamma)}^{\frac{1}{2}} \|u(t) - v\|_{L^2(\gamma)}^{\frac{1}{2}}. \quad (4.28)$$

Mit (4.26) folgt aus (4.28) die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|u(t) - v\|_{H^1(\gamma)}^2 &\leq C \|u(t) - v\|_{H^2(\gamma)} \|u(t) - v\|_{L^2(\gamma)} \\ &\leq C \|u_0 - v\|_{L^2(\gamma)} \|u(t) - v\|_{H^2(\gamma)} \exp\left(-\frac{D}{s^2}t\right). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Die auftretende  $H^2(\gamma)$ -Norm der Differenz  $u_0 - v$  lässt sich mit der Regularitätstheorie durch Normen der Anfangs- und Randwerte beschränken. Es folgt die Konvergenz in  $H^1(\gamma)$  der Funktion  $u$  gegen die Gleichgewichtslösung  $v$  mit exponentieller Geschwindigkeit.

## 4.5 Verallgemeinerte Finite-Elemente-Methode

Neben der klassischen FEM aus Abschnitt 4.2, wird die GFEM als alternative räumliche Diskretisierungsmethode vorgeschlagen. In Unterabschnitt 4.5.1 wird die GFEM und in Unterabschnitt 4.5.2 die Einbettungsmethode vorgestellt. Die Anwendung dieser Verfahren auf die Modellgleichungen aus Abschnitt 4.1 wird in Unterabschnitt 4.5.3 diskutiert. Der wesentliche Vorteil der GFEM gegenüber der FEM besteht darin, dass nicht bereits in der Formulierung des Verfahrens auf ein Gitter zurückgegriffen wird, was eine Adaption des Gitters an die Hydrometeore erübrigt. Für die Darstellung der GFEM in Unterabschnitt 4.5.1 folgen wir Babuška u. a. (2004).

### 4.5.1 Idee der verallgemeinerten Finite-Elemente-Methode

In Unterabschnitt 4.1.2 wurde gezeigt, dass zur Lösung der zeitdiskreten Modellgleichungen in jedem Zeitschritt ein elliptisches Problem gelöst werden muss. Aus diesem Grund wird die GFEM anhand des generischen elliptischen Problems

$$\begin{aligned} L[u] &= f \quad \text{in } \Omega, \\ u &= 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \end{aligned} \quad (4.30)$$

präsentiert. Hierbei sei  $\Omega$  ein beschränktes Gebiet und  $L$  ein elliptischer Differentialoperator. In der schwachen Form von Gleichung (4.30) ist ein  $u \in H_0^1(\Omega)$  gesucht, das  $L[u] = f$  im Distributionssinn erfüllt.

Die Konstruktion der GFEM erfolgt über eine Aufteilung des Gebiets  $\Omega$  in Teilgebiete. Es wird angenommen, dass auf jedem dieser Teilgebiete Funktionen bekannt sind, welche die gesuchte Lösung in einer gewählten Norm gut approximieren. Die lokalen Approximationen auf den Teilgebieten werden anschliessend mithilfe einer Teilung der Eins zu einer globalen Approximation der gesuchten Lösung zusammengesetzt. Diese Konstruktion wird im Folgenden beschrieben.

Seien  $\gamma_1, \dots, \gamma_m$  offene Teilgebiete von  $\Omega$  mit

$$\gamma_i \subset \Omega \quad \text{und} \quad \Omega = \bigcup_{i=1}^m \gamma_i. \quad (4.31)$$

Aufgrund der zweiten Bedingung bilden die Teilgebiete eine offene Überdeckung von  $\Omega$ . Zusätzlich sei eine Familie  $\{\phi_i\}_{i=1}^m$  von Funktionen mit den Eigenschaften

$$\phi_i(x) = 0 \quad \text{für } x \in \Omega \setminus \gamma_i \text{ und } 1 \leq i \leq m, \quad (4.32)$$

$$\sum_{i=1}^m \phi_i(x) = 1 \quad \text{für alle } x \in \Omega, \quad (4.33)$$

$$\|\phi_i\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C_1 \quad \text{für } 1 \leq i \leq m, \quad (4.34)$$

$$\|\nabla \phi_i\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \frac{C_2}{\text{diam}(\gamma_i)} \quad \text{für } 1 \leq i \leq m \quad (4.35)$$

gegeben. Diese Familie von Funktionen bildet eine Teilung der Eins zur offenen Überdeckung  $\{\gamma_i\}_{i=1}^m$  des Gebiets  $\Omega$ . Die Frage nach der Existenz von Teilgebieten sowie der zugehörigen Teilung der Eins sind unkritisch. Zu einer Wahl von Teilgebieten kann stets eine Teilung der Eins konstruiert werden (Melenk und Babuška, 1996, Abschnitt 3.5).

Zu jedem Teilgebiet  $\gamma_i$  und einer Zahl  $n(i) \in \mathbb{N}$  seien  $\xi_{i,1}, \dots, \xi_{i,n(i)} \in H_0^1(\Omega)$  gegebene Funktionen. Für das Teilgebiet  $\gamma_i$  wird der lokale Ansatzraum durch

$$S_i := \text{span}\{\xi_{ij} \mid 1 \leq j \leq n(i)\} \subset H_0^1(\Omega) \quad (4.36)$$

definiert. Durch eine entsprechende Wahl der erzeugenden Funktionen von  $S_i$ , kann Vorwissen über die gesuchte Lösung  $u$  auf dem Teilgebiet  $\gamma_i$  in den lokalen Ansatzraum eingefügt werden (Babuška u. a., 2004, Abschnitt 5).

Der globale Ansatzraum, das heisst der endlichdimensionale Unterraum des Galerkin-Verfahrens, wird mithilfe der Teilung der Eins durch

$$S := \left\{ \sum_{i=1}^m \phi_i \xi_i \mid \xi_i \in S_i \right\} \quad (4.37)$$

aus den lokalen Ansatzräumen  $S_i$  konstruiert. Der globale Ansatzraum ist im kontinuierlichen Lösungsraum von Gleichung (4.30) enthalten, das heisst es gilt  $S \subset H_0^1(\Omega)$  (Babuška u. a., 2004, Theorem 3.1). Entsprechend der Definition des globalen Ansatzraumes (4.37), ist die globale approximative Lösung durch eine Linearkombination der Funktionen  $\phi_i \xi_{ij}$  mit  $1 \leq i \leq m$  und  $1 \leq j \leq n(i)$  gegeben, die den Raum  $S$  aufspannen.

Die GFEM ist das Galerkin-Verfahren mit dem endlichdimensionalen Raum  $S$  aus (4.37). Im Gegensatz zur Beschreibung des Galerkin-Verfahrens aus Abschnitt 4.1.1, wurde hier keine Familie von endlichdimensionalen Unterräumen angegeben und damit auch Konvergenzfragen ausgeblendet. In der Praxis wird der Unterraum  $S$  meist mithilfe eines Gitters definiert und so, wie in der FEM, eine Familie von Unterräumen erzeugt. Die Ansatzfunktionen der FEM auf dem Gitter werden hierbei durch passende Funktionen lokal ergänzt (Fries und Belytschko, 2010). Diesen Ansatz werden wir in Unterabschnitt 4.5.3 ebenfalls verfolgen.

Die wesentliche Stärke der GFEM besteht darin, dass jegliche Vorabinformation über die gesuchte Lösung, durch eine geschickte Wahl der lokalen Ansatzräume, berücksichtigt werden kann. Weist die Lösung beispielsweise eine Singularität auf, so kann in den lokalen Ansatzraum eine Funktion aufgenommen werden, die diese Singularität modelliert. In der Literatur wird diese Flexibilität dazu benutzt, um beispielsweise das Verhalten von Rissen in Materialien zu beschreiben. Entlang des Risses wird in den lokalen Ansatzraum eine Sprungfunktion aufgenommen, denn es ist vorab bekannt, dass die Werte der gesuchten Lösung entlang des Risses springen (Belytschko u. a., 2009). Dies kann sehr elegant formuliert werden und ist unter dem Begriff „XFEM“ (extended finite element method)

bekannt (Fries und Belytschko, 2010). Insbesondere muss, im Vergleich zur FEM, kein Gitter an die zeitlich veränderliche Position des Risses angepasst werden, was deutlich aufwändiger ist. In Unterabschnitt 4.5.3 werden wir Gleichgewichtslösungen um die Hydrometeore in den Ansatzraum einfügen.

In der vorgeführten Darstellung der GFEM wurde bereits die Rolle der lokalen Ansatzräume betont. Diese sollten so gewählt werden, dass sie lokal, also auf dem betreffenden Teilgebiet, eine möglichst gute Näherung an die gesuchte Lösung darstellen. Die Güte der lokalen Approximation überträgt sich aufgrund des folgenden Satzes auf die globale Lösung (siehe Babuška u. a., 2004, Theorem 3.2).

**Satz 4.5.1.** *Sei  $u$  die exakte Lösung des elliptischen Problems (4.30) auf einem Gebiet  $\Omega$ . Sei  $\{\gamma_i\}_{i=1}^m$  eine offene Überdeckung von  $\Omega$  mit zugehöriger Teilung der Eins  $\{\phi_i\}_{i=1}^m$  wie in (4.31), mit den Eigenschaften (4.32) - (4.35). Auf jedem Teilgebiet  $\gamma_i$  enthalte der lokale Ansatzraum  $S_i$  ein Element  $\xi_i \in S_i$  mit der Approximationseigenschaft*

$$\|u - \xi_i\|_{L^2(\gamma_i)} \leq \varepsilon_1(i), \quad (4.38)$$

$$\|u - \xi_i\|_{H^1(\gamma_i)} \leq \varepsilon_2(i). \quad (4.39)$$

Dann gelten für  $\xi = \sum_{i=1}^m \phi_i \xi_i$  die Abschätzungen

$$\|u - \xi\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C \sum_{i=1}^m \varepsilon_1(i)^2, \quad (4.40)$$

$$\|u - \xi\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C_1 \sum_{i=1}^m \frac{\varepsilon_1(i)^2}{\text{diam}(\gamma_i)} + C_2 \sum_{i=1}^m \varepsilon_2(i)^2. \quad (4.41)$$

Die Norm in (4.39) und (4.41) kann durch die zugehörige Energienorm der schwachen Formulierung des elliptischen Problems (4.30) ersetzt werden. In unserem Fall ist die Energienorm zur Norm von  $H^1(\Omega)$  äquivalent. Die Bedeutung von Satz 4.5.1 liegt in der Verknüpfung der lokalen und globalen Approximationseigenschaft.

Die GFEM enthält die klassische FEM als einen Spezialfall. Anwenden von Satz 4.5.1 auf diesen Spezialfall ergibt ein Konvergenzresultat für die FEM. Allerdings ist die auf diese Weise erhaltene Konvergenzordnung nicht notwendigerweise optimal (Babuška u. a., 2004, Abschnitt 4).

## 4.5.2 Einbettungsmethode

In der Formulierung des Modells wurde die Gültigkeit der Modellgleichungen im Gebiet der feuchten Luft  $\mathcal{U}$  innerhalb des Luftpaketes  $\Omega$  gefordert. Mit einem Hydrometeor  $\omega \subset \Omega$  hängen diese Gebiete durch

$$\Omega = \mathcal{U} \cup \omega \quad (4.42)$$

zusammen. Die Erweiterung auf mehrere Hydrometeore ist offensichtlich. Aufgrund der Hydrometeore ist das Gebiet  $\mathcal{U}$  der feuchten Luft durchsetzt mit kleinen Teilgebieten, auf denen die Modellgleichungen nicht gelten. Um eine numerische Approximation mit der FEM zu erhalten, wird das Gebiet  $\mathcal{U}$  durch ein Tetraedergitter diskretisiert. Um die



kleinen Hydrometeore aufzulösen, muss das Gitter an diese angepasst werden, was zu sehr kleinen Tetraedern in der Umgebung der Hydrometeore führt. Um die Anpassung zu vermeiden, wird das Gebiet  $\mathcal{U}$  zum Gebiet  $\Omega$  des gesamten Luftpaketes erweitert, bei welchem die Hydrometeore  $\omega = \Omega \setminus \mathcal{U}$  nicht ausgespart werden. Mit anderen Worten wird das ursprüngliche Gebiet  $\mathcal{U}$ , auf dem die Modellgleichungen gelten, durch das fiktive Gebiet  $\omega = \Omega \setminus \mathcal{U}$  erweitert. Diese Sichtweise trägt in der Literatur den Namen „Fictitious Domain Method“ oder „Embedding Domain Method“ (Glowinski und Pan, 1992; Zhou und Saito, 2013; Angot u. a., 1999). Durch die Kombination mit einem Strafterm, der mit einem kleinen Parameter  $\varepsilon > 0$  eingeführt wird, werden die gestellten Gleichungen vom ursprünglichen Gebiet  $\mathcal{U}$  auf das grössere Gebiet  $\Omega$  übertragen. Im Grenzwert  $\varepsilon \rightarrow 0$  ergibt sich die gesuchte Lösung auf dem ursprünglichen Gebiet  $\mathcal{U}$ .

Die in jedem Zeitschritt auf dem erweiterten Gebiet  $\Omega$  zu lösenden Gleichungen haben die Form (Angot, 2005)

$$\left( M_\varepsilon \rho_v^{k+1}, \varphi \right)_{L^2(\Omega)} + \tau D_0 a_\Omega(M_\varepsilon \rho_v^{k+1}, \varphi) = \left( M_\varepsilon \rho_v^k, \varphi \right)_{L^2(\Omega)} + \tau \left( M_\varepsilon \overline{f_{\rho_v}^{k+1}}, \varphi \right)_{L^2(\Omega)}, \quad (4.43a)$$

$$f_0 \left( M_\varepsilon T^{k+1}, \varphi \right)_{L^2(\Omega)} + \tau K_0 a_\Omega(M_\varepsilon T^{k+1}, \varphi) = f_0 \left( M_\varepsilon T^k, \varphi \right)_{L^2(\Omega)} + \tau \left( M_\varepsilon \overline{f_T^{k+1}}, \varphi \right)_{L^2(\Omega)} \quad (4.43b)$$

für beliebige  $\varphi \in H_0^1(\Omega)$  mit

$$M_\varepsilon(x) := \begin{cases} 1 & \text{falls } x \in \mathcal{U} \\ \frac{1}{\varepsilon} & \text{falls } x \in \Omega \setminus \mathcal{U} \end{cases}. \quad (4.44)$$

Diese Gleichungen unterscheiden sich in ihrer Form von den ursprünglichen Gleichungen (4.18) auf  $\mathcal{U}$  lediglich durch die Funktion  $M_\varepsilon$  sowie der Verwendung des gesamten Luftpaketes  $\Omega$  anstatt  $\mathcal{U}$ . Die Funktionen  $\overline{f_{\rho_v}^{k+1}}$  und  $\overline{f_T^{k+1}}$  stimmen auf  $\mathcal{U}$  mit den gegebenen rechten Seiten  $f_{\rho_v}^{k+1}$  und  $f_T^{k+1}$  überein. Innerhalb eines Hydrometeors  $\omega \subset \Omega \setminus \mathcal{U}$  gelte

$$\overline{f_{\rho_v}^{k+1}} = \rho_{v,\omega} \quad \text{und} \quad \overline{f_T^{k+1}} = T_\omega, \quad (4.45)$$

wobei  $\rho_{v,\omega}, T_\omega \in H^1(\omega)$  Fortsetzungen der Randwerte entlang der Oberfläche  $\partial\omega$  des Hydrometeors in das Innere  $\omega$  bezeichnen. Die elliptischen Probleme (4.43) sind für jedes  $\varepsilon > 0$  lösbar und die entsprechenden Lösungen konvergieren auf  $\mathcal{U}$  für  $\varepsilon \rightarrow 0$  gegen die Lösung des ursprünglichen Problems (4.18) (Angot, 2005, Theorem 3.1).

### 4.5.3 Anwendung auf das Modell

In diesem Unterabschnitt wird die Anwendung der beschriebenen Verfahren auf die Modellgleichungen (4.18) diskutiert. Durch die Einbettungsmethode sind auf dem Gebiet  $\Omega$ , das als Vereinigung des Gebiets der feuchten Luft  $\mathcal{U}$  sowie der Hydrometeore entsteht, für jedes  $\varepsilon > 0$  die Gleichungen (4.43) zu lösen. Zur räumlichen Diskretisierung von (4.43) wird die GFEM verwendet. Hierzu wird ein Tetraedergitter auf  $\Omega$  betrachtet, das aus einem kartesischen Punktgitter entsteht. Analog zur FEM seien stückweise lineare, stetige Funktionen auf dem Gitter gegeben. Deren Träger definieren Teilgebiete von  $\Omega$ , wie sie in der Definition der GFEM gefordert werden, vergleiche Unterabschnitt 4.5.1.

Die exakten Lösungen der Diffusionsgleichungen relaxieren lokal sehr schnell auf die Gleichgewichtslösung, vergleiche Abschnitt 4.4. Daher wird lokal um die Hydrometeore eine Gleichgewichtslösung in den Ansatzraum eingefügt. Wir nehmen die Hydrometeore als Kugeln an. Ähnlich zu Abschnitt 2.3.1, kann in diesem Fall für die Gleichgewichtslösung der Diffusionsgleichungen, lokal um den Hydrometeor, eine explizite Formel angegeben werden. Innerhalb einer Kugelschale mit innerem Radius  $r_d > 0$ , der dem Radius des Hydrometeors entspricht, und äusserem Radius  $r_\infty > r_d$ , ist die Lösung von  $\Delta\xi = 0$  durch

$$\xi(R) = \frac{\xi_\infty r_\infty - \xi_d r_d}{r_\infty - r_d} - \frac{\xi_\infty - \xi_d}{r_\infty - r_d} \frac{r_d r_\infty}{R} \quad (4.46)$$

gegeben, wobei  $R$  die radiale Koordinate mit Ursprung im Mittelpunkt der Kugel ist. Entlang des inneren Randes nimmt  $\xi$  den Wert  $\xi_d$  an, entlang des äusseren Randes den Wert  $\xi_\infty$ . Der durch die stückweise linearen Ansatzfunktionen der FEM aufgespannte Raum wird für jeden Hydrometeor durch eine solche Gleichgewichtslösung für die Wasserdampfdichte und die Temperatur erweitert.

Die stückweise linearen Ansatzfunktionen seien mit  $\tilde{N}_j$  bezeichnet, wobei  $j \in J$  die Menge der Gitterknoten durchläuft. Die Menge aller Hydrometeore sei  $L$ . Für einen Hydrometeor  $\omega_l$  mit  $l \in L$ , sei  $\tilde{\phi}_l$  die Funktion, die innerhalb der Kugel mit Radius  $r_\infty$  um den Hydrometeor konstant 1 ist und anschliessend linear auf 0 abfällt. Weiter sei für alle  $x \in \Omega$

$$B(x) := \sum_{j \in J} \tilde{N}_j(x) + \sum_{l \in L} \tilde{\phi}_l(x) = 1 + \sum_{l \in L} \tilde{\phi}_l(x), \quad (4.47)$$

dann bilden die Funktionen

$$N_j := \frac{\tilde{N}_j}{B} \quad \text{und} \quad \phi_l := \frac{\tilde{\phi}_l}{B} \quad (4.48)$$

eine Teilung der Eins. Die numerische Approximation der GFEM ist durch

$$\underbrace{\sum_{j \in J} a_j N_j(x)}_{\text{FEM-Anteil}} + \sum_{l \in L} b_l \phi_l(x) \xi_l(x) \quad (4.49)$$

gegeben, wobei  $a_j$  und  $b_l$  unbekannte, reelle Koeffizienten sind, die von der Zeit abhängen. Der erste Teil der Approximation (4.49) entspricht einem FEM-Anteil auf dem groben Gitter, der zweite Teil berücksichtigt die Erweiterungsfunktionen. Anhand der Approximation (4.49) wird klar, dass zu den  $|J|$  Freiheitsgraden des FEM-Anteils noch  $|L|$  Freiheitsgrade hinzukommen, was der Anzahl der Hydrometeore entspricht. Da die Funktionen  $\phi_l$  lokal um den Hydrometeor den konstanten Wert 1 besitzen, stimmt der Summand  $\phi_l \xi_l$  in (4.49) dort mit der entsprechenden Gleichgewichtslösung  $\xi_l$  überein. In jedem Zeitschritt wird die Gleichgewichtslösung gemäss der aktuellen Werte der Wasserdampfdichte und Temperatur an der Oberfläche des Hydrometeors angepasst. Die Werte  $\xi_d$  an der Oberfläche der Hydrometeore ergeben sich aus den Eigenschaften der Hydrometeore. Um die Werte  $\xi_\infty$  zu bestimmen, wird die numerische Lösung an den Lebedev-Punkten, die auf der Sphäre mit Radius  $r_\infty$  um den Hydrometeor liegen, ausgewertet und gemittelt.

Die auftretenden Integrale über den Rand, der als kugelförmig angenommenen Hydrometeore, werden mithilfe der Lebedev-Integration berechnet (Lebedev, 1976). Die

numerische Approximation der in der Massen- und Steifigkeitsmatrix auftretenden Integrale, erfolgt mittels Gauss-Integrationsformeln für Tetraeder (Gellert und Harbord, 1991). Um eine ausreichend gute Approximation dieser Integrale sicherzustellen, werden die Tetraeder, die nahe an einem Hydrometeor liegen, für die Berechnung der Integrale weiter unterteilt und die gewählte Gauss-Integrationsformel in jedem der entstehenden Teiltetraeder angewandt. Die Konvergenz der vorgeschlagenen GFEM, für sukzessive Verfeinerungen des Tetraedergitters, ist durch Satz 4.5.1 sichergestellt, da der FEM-Anteil in (4.49) eine immer genauere Approximation liefert.

Aufgrund der prinzipiellen Unabhängigkeit der GFEM von einem Gitter, kann auch eine Bewegung der Hydrometeore zugelassen werden. Es muss jedoch sichergestellt werden, dass keine Kollisionen der Hydrometeore auftreten und sich kein Hydrometeor aus dem Gebiet bewegt. Diese Fälle bedürfen einer gesonderten Untersuchung.

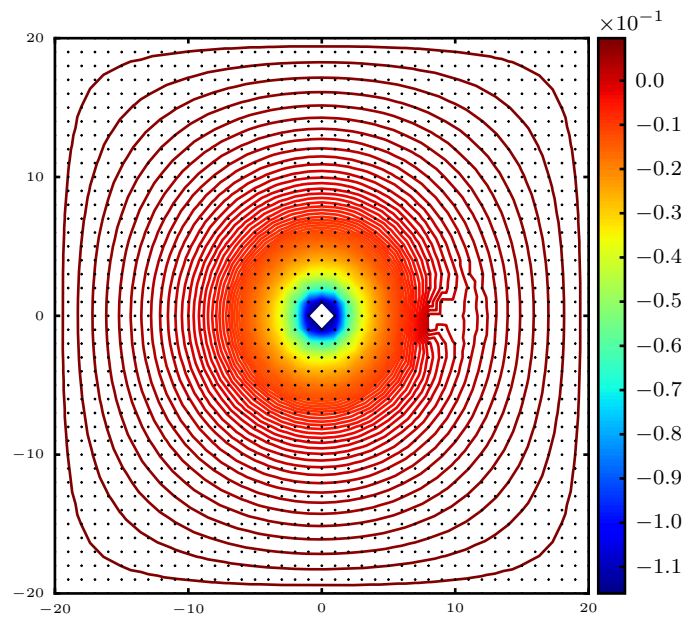
### Beispielsimulationen

In den folgenden Beispielsimulationen wird stets ein Tetraedergitter auf dem Gebiet  $[-20, 20] \subset \mathbb{R}^3$  verwendet, das sich aus einem kartesischen Punktgitter mit Punktabstand 1 ergibt. Die Umgebungstemperatur sei  $T_\infty = -15^\circ\text{C}$ , der Umgebungsdruck  $p_\infty = 650\text{ hPa}$ , das Sättigungsverhältnis  $S_\infty = 1.01$  und der Skalierungsfaktor für die räumlichen Variablen  $l_c = 1 \cdot 10^{-4}\text{ m}$ . Das Zeitintervall sei  $[0\text{ s}, 5\text{ s}]$  und die zeitliche Schrittweite  $\tau = 1 \cdot 10^{-2}\text{ s}$ . Der Radius  $r_\infty$  in der Gleichgewichtslösung (4.46) wurde als  $r_\infty = r_d + 1.1d$  angesetzt, wobei  $d$  den maximalen Durchmesser der Tetraeder des Gitters bezeichnet.

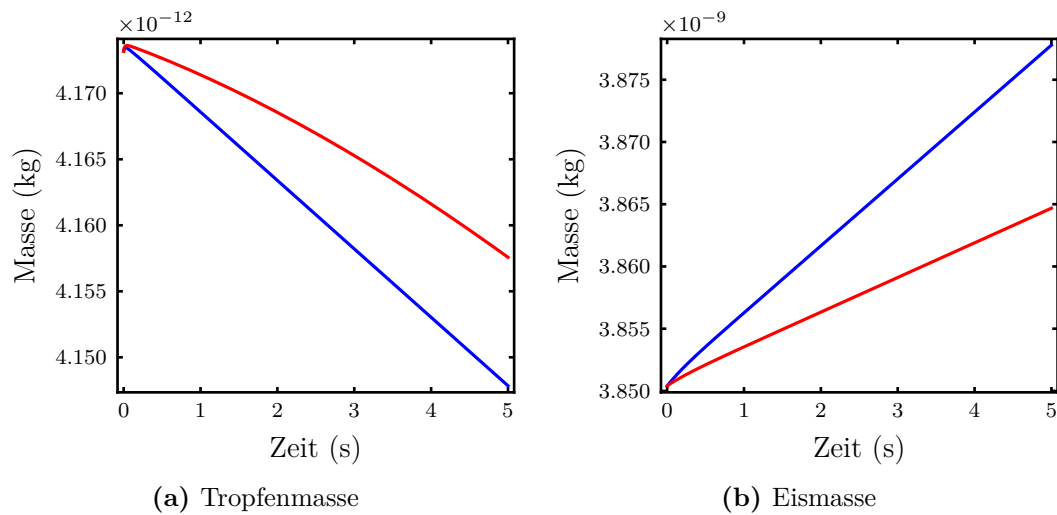
Analog zu Unterabschnitt 4.3.2 seien ein kugelförmiger Eiskristall mit Mittelpunkt in  $(0, 0, 0)$  und Radius  $100\ \mu\text{m}$  sowie ein Tropfen mit Mittelpunkt in  $(8.5, 0, 0)$  und Radius  $10\ \mu\text{m}$  gegeben. In Abbildung 4.9 ist die Übersättigung  $S_\infty - 1$  bezüglich Wasser dargestellt. Die Gitterpunkte innerhalb der Schnittebene sind durch schwarze Punkte markiert. Insbesondere werden die Hydrometeore nicht durch das Gitter aufgelöst. Obwohl die räumliche Auflösung in der vorliegenden Simulation sehr grob ist, zeigt sich eine qualitativ gute Übereinstimmung zum Resultat des Referenzmodells aus Abbildung 4.3, in dem die Hydrometeore durch das Gitter aufgelöst wurden. Mit der vorliegenden groben räumlichen Auflösung werden die Hydrometeore nicht aufgelöst. Vielmehr wird deren Präsenz lediglich durch die in den Ansatzraum eingefügte Gleichgewichtslösung berücksichtigt. Dennoch zeigt sich im zeitlichen Verlauf der Hydrometeormassen eine qualitativ gute Übereinstimmung, vergleiche Abbildung 4.10.

Dieses Beispiel illustriert die Möglichkeit, mit der vorgeschlagenen GFEM die lokale Interaktion von Hydrometeoren auf einem groben Gitter zu simulieren. Eine genaue quantitative Übereinstimmung mit Resultaten aus dem Referenzmodell kann hierbei aufgrund der groben Auflösung nicht erwartet werden. Ungeachtet dessen werden die wesentlichen Eigenschaften der Lösung erfasst.

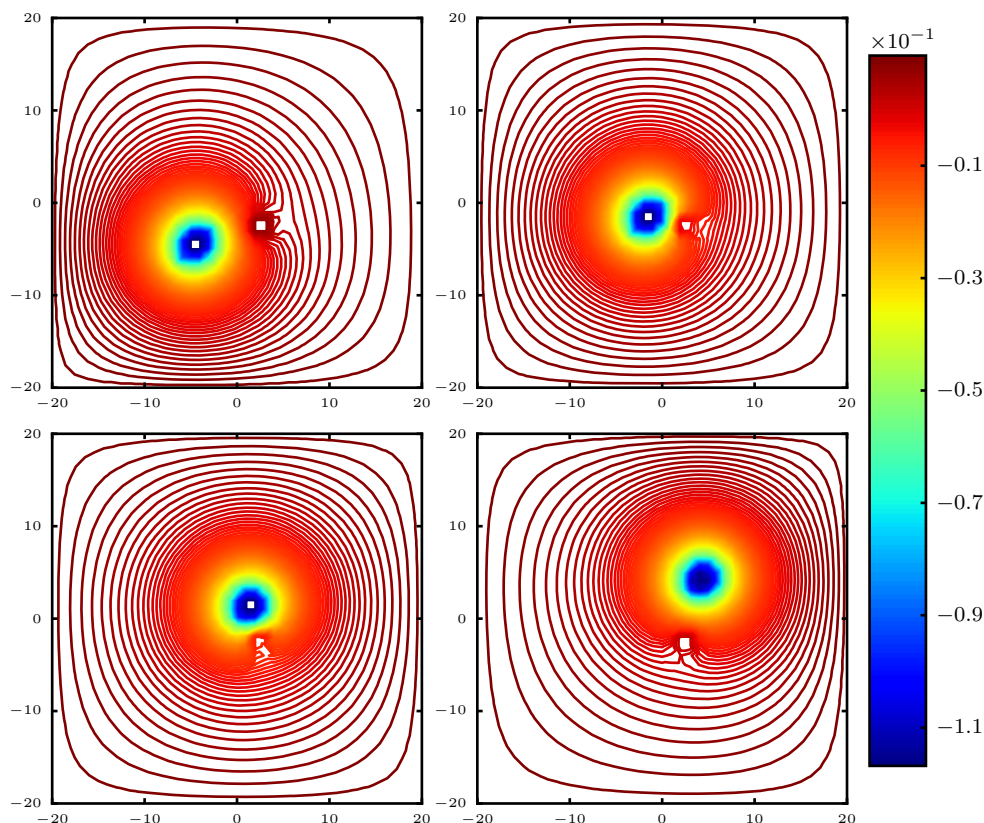
Das zweite Beispiel schliesst einen sich bewegenden Hydrometeor ein. Ein Eiskristall mit Radius  $100\ \mu\text{m}$  bewegt sich entlang einer geraden Linie von  $(-10, -10, 0)$  in 5 s zum Punkt  $(10, 10, 0)$ . Zusätzlich ist ein Tropfen an der Stelle  $(2.5, -2.5, 0)$  mit Radius  $10\ \mu\text{m}$  vorhanden, der sich nicht bewegt. Abbildung 4.11 zeigt die Übersättigung bezüglich Wasser zu verschiedenen Zeitpunkten. Anhand der Tropfenmasse lässt sich die Passage des Eiskristalls deutlich erkennen, vergleiche Abbildung 4.12. Zunächst ist der Einfluss



**Abbildung 4.9:** Übersättigung  $S_\infty - 1$  bezüglich Wasser um einen Tropfen und einen Eiskristall zum Zeitpunkt 5 s, berechnet mit der GFEM mit  $S_\infty = 1.01$ . Die schwarzen Punkte zeigen die Position der Gitterpunkte in der Schnittebene.



**Abbildung 4.10:** Zeitlicher Verlauf der Massen des Tropfen (linkes Bild) und des Eises (rechtes Bild). Die roten Kurven zeigen das Resultat der GFEM-Simulation, die blauen Kurven das Resultat des Referenzmodells.



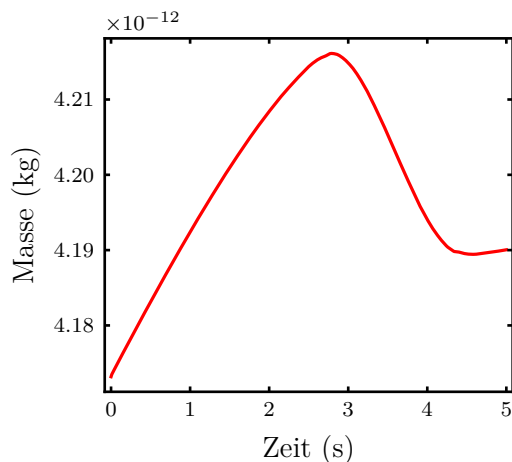
**Abbildung 4.11:** Übersättigung  $S_\infty - 1$  bezüglich Wasser, um einen sich entlang einer geraden Linie an einem an  $(2.5, -2.5, 0)$  fixierten Tropfen vorbei bewegendem Eiskristall. Die obere Zeile zeigt die Übersättigung zu den Zeitpunkten 2 s (links) und 3 s (rechts), die untere Zeile zu den Zeitpunkten 4 s (links) und 5 s (rechts).

des Eiskristalls nur gering. Je weiter er sich dem Tropfen nähert, desto langsamer wächst der Tropfen an. In der Zeitspanne von 3 s bis 4 s verdunstet er sogar aufgrund der durch den Eiskristall hervorgerufenen Untersättigung. Dies illustriert die bereits angedeutete Möglichkeit, mit der GFEM auch sich bewegende Hydrometeore zu berücksichtigen.

Im abschließenden Beispiel wird die räumliche Konvergenzordnung des beschriebenen Verfahrens geschätzt. Hierzu werden auf dem Gebiet  $[-2, 2]^3 \subset \mathbb{R}^3$  verschiedene feine Tetraedergitter betrachtet, die aus einem regelmässigen Punktgitter mit Punktabstand  $h$  entstehen. Im Gebiet  $[-2, 2]^3$  ist ein einzelner Tropfen mit Anfangsradius  $10 \mu\text{m}$  und Mittelpunkt  $(0, 0, 0)$  vorhanden. Die numerische Lösung wird mit einer zeitlichen Schrittweite  $\tau = 1 \cdot 10^{-4} \text{ s}$  berechnet. Die numerischen Lösungen werden zum Zeitpunkt  $1.1 \cdot 10^{-3} \text{ s}$  miteinander verglichen, was 11 Zeitschritten entspricht. Um die räumliche Konvergenzordnung in der Norm  $\|\cdot\|_Y$  eines Raumes  $Y \in \{L^2(\Omega), H^1(\Omega)\}$  zu schätzen, nehmen wir einen Zusammenhang

$$\|u_h - u\|_Y = Ch^p + \mathcal{O}(h^{p+1}) \quad (4.50)$$

an. Hierbei sei  $u$  die exakte Lösung,  $u_h$  die mit einem Punktabstand  $h$  berechnete numerische Lösung und  $C$  eine von  $h$  unabhängige Konstante. Der Zusammenhang



**Abbildung 4.12:** Zeitlicher Verlauf der Tropfenmasse bei sich vorbei bewegendem Eiskristall.

(4.50) bedeutet, dass das numerische Verfahren mit der Ordnung  $p$  konvergiert. Da wir die exakte Lösung nicht kennen, können wir lediglich numerische Approximationen miteinander vergleichen. Seien  $u_h, u_{h/2}, u_{h/4}$  numerische Approximationen für jeweils feinere Gitter. Für die Differenz von zwei aufeinanderfolgenden Approximationen gilt wegen (4.50)

$$\begin{aligned} \|u_h - u_{h/2}\|_Y &\leq \|u_h - u\|_Y + \|u_{h/2} - u\|_Y \\ &= Ch^p + C\left(\frac{h}{2}\right)^p + \mathcal{O}(h^{p+1}) \\ &= Ch^p \left(1 + \frac{1}{2^p} + \mathcal{O}(h)\right). \end{aligned} \quad (4.51)$$

Für den Quotient zweier solcher Differenzen kann wegen (4.51) das Verhalten

$$\frac{\|u_h - u_{h/2}\|_Y}{\|u_{h/2} - u_{h/4}\|_Y} \sim \frac{Ch^p \left(1 + \frac{1}{2^p} + \mathcal{O}(h)\right)}{C\left(\frac{h}{2}\right)^p \left(1 + \frac{1}{2^p} + \mathcal{O}(h)\right)} = 2^p \frac{1 + \frac{1}{2^p} + \mathcal{O}(h)}{1 + \frac{1}{2^p} + \mathcal{O}(h)} \sim 2^p \quad (4.52)$$

für kleine  $h$  erwartet werden. Die räumliche Konvergenzordnung  $p$  wird deshalb durch die experimentelle Konvergenzordnung

$$\text{EOC}_Y := \frac{1}{\log(2)} \log \left( \frac{\|u_h - u_{h/2}\|_Y}{\|u_{h/2} - u_{h/4}\|_Y} \right) \quad (4.53)$$

geschätzt. Tabelle 4.1 zeigt die Resultate für verschiedene Punktabstände  $h$ . Für  $h \rightarrow 0$  deutet sich eine etwas bessere Konvergenzordnung der GFEM im Vergleich zur FEM an, welche die Ordnung 1 in der Sobolevnorm und Ordnung 2 in der Norm von  $L^2(\Omega)$  besitzt.

$h$	$\ u_h - u_{h/2}\ _{H^1(\Omega)}$	$\text{EOC}_{H^1(\Omega)}$	$\ u_h - u_{h/2}\ _{L^2(\Omega)}$	$\text{EOC}_{L^2(\Omega)}$
1	0.017035	–	0.008332	–
1/2	0.011362	0.584274	0.003323	1.326296
1/4	0.007353	0.627806	0.001899	0.806890
1/8	0.002761	1.413332	0.000251	2.918179

**Tabelle 4.1:** Experimentelle Konvergenzordnung für die GFEM bei abnehmendem Abstand  $h$  der Gitterpunkte.





# Kapitel 5

## Bulk-Modell

In Kapitel 3 wurde ein Modell für die Beschreibung der Interaktion von Hydrometeoren vorgestellt, das jeden Hydrometeor explizit einbezieht. Die Interaktion zwischen den Hydrometeoren ergab sich dabei aus der Diffusion von Wasserdampf und Wärme durch die Luft, welche die einzelnen Hydrometeore umgibt. Der Vorteil dieses Modells besteht darin, dass es auf grundlegenden physikalischen Prinzipien beruht. Aus praktischer Sicht ist diese Art der Beschreibung lediglich für das Studium der Interaktion von wenigen Hydrometeoren nutzbar, denn sobald die Zahl der Hydrometeore ansteigt, wird der Aufwand für eine numerische Simulation immens.

Im Hinblick auf Modelle für die Wettervorhersage oder Klimaprognose, kann diese detaillierte Beschreibung schon deshalb nicht verwendet werden, da die relevanten Raum- und Zeitskalen nicht aufgelöst werden können. Darüberhinaus wird in diesen Modellen die Mikrophysik in einem statistischen Sinne behandelt. Die Hydrometeore werden mithilfe einer Grössenverteilung beschrieben – ein „spektrales Modell“. Hierbei werden, neben der in dieser Arbeit betrachteten Diffusion, viele weitere Wechselwirkungen zwischen Hydrometeoren berücksichtigt, beispielsweise Kollisionsprozesse. Die Grössenverteilung der Hydrometeore erfüllt eine partielle Differentialgleichung vom Typ einer Erhaltungsgleichung. Aus der Grössenverteilung ergeben sich die physikalisch relevanten Grössen durch Integration der Verteilung, die sogenannten Momente (Khain u. a., 2015, Abschnitt 2). Für die numerische Lösung der partiellen Differentialgleichung der Grössenverteilung werden sowohl Standardverfahren wie finite Volumen als auch weiter spezialisierte Methoden verwendet (zum Beispiel Berry und Reinhardt, 1974; Bott, 1998). Da in einem Modell zur Wettervorhersage in jedem diskreten Volumen des Modells eine separate Grössenverteilung für die Hydrometeore benötigt wird, ist der Aufwand für diesen Ansatz, das heisst die numerische Berechnung der Grössenverteilung, sehr gross.

Anstatt die zeitliche Evolution der Grössenverteilung zu berechnen, wird die „Momentenmethode“ verwendet (Hulburt und Katz, 1964). Hierbei werden aus der partiellen Differentialgleichung der Grössenverteilung durch Integration die entsprechenden Gleichungen für die relevanten Momente gewonnen und anschliessend gelöst. Das Gleichungssystem für die physikalisch relevanten Momente enthält im Allgemeinen weitere Momente und muss künstlich geschlossen werden (Tzivion u. a., 1987; Feingold u. a., 1988). Mit der Vorgabe des Typs der Grössenverteilung kann das Schliessungsproblem umgangen werden (Seifert und Beheng, 2001; Seifert und Beheng, 2006). Da sich allerdings der Typ der Grössenverteilung mit der Zeit aufgrund von Kollisionsprozessen ändert (Warner, 1969; Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 2.1.3), ergibt sich ein Fehler durch die Festlegung eines Typs der Verteilung. Um den Fehler zu vermindern, wird

das Massenspektrum der Hydrometeore in verschiedene Klassen eingeteilt und für jede Klasse eine Verteilung festgelegt (zum Beispiel Seifert und Beheng, 2006; Sant u. a., 2013).

Da Hydrometeore in einem Bulk-Modell lediglich durch eine statistische Grössenverteilung beschrieben werden, sind Informationen über deren räumliche Verteilung nicht verfügbar, zumindest nicht im betrachteten diskreten Volumen. Aus diesem Grund kann der WBF von diesen Modellen nicht als Resultat der direkten, lokalen Interaktion von Eiskristallen und Tropfen erfasst werden. Es ist nur eine indirekte Interaktion über das Hintergrundfeld möglich (Korolev, 2007; Korolev und Mazin, 2003; Pinsky u. a., 2015).

In diesem Kapitel werden wir ein Modell beschreiben, das eine direkte Interaktion zwischen Eiskristallen und Tropfen, auch in einer statistischen (Bulk-)Beschreibung, berücksichtigen kann. In Abschnitt 5.1 wird dieses Modell hergeleitet und veranschaulicht, während in Abschnitt 5.2 die Integration dieses Modells in ein Box-Modell beschrieben wird. Abschliessend wird in Abschnitt 5.3 auf die Formulierung des Modells im Kontext der Momentenmethode eingegangen.

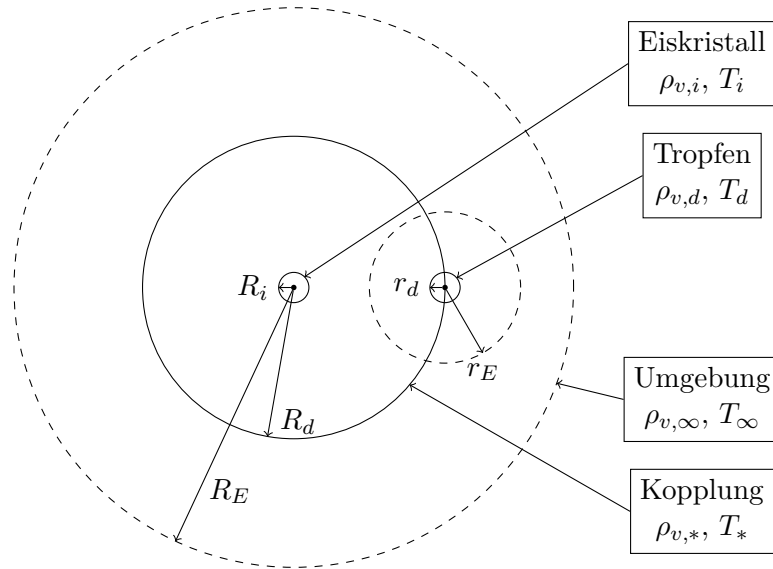
## 5.1 Herleitung des Modells

### 5.1.1 Das lokale Eiskristall-Tropfen-System

Wir betrachten einen Eiskristall sowie einen Tropfen in einer Konfiguration wie in Abbildung 5.1 skizziert. Der kugelförmige Eiskristall befinde sich in der Mitte und habe den Radius  $R_i$ . Die Dampfdichte und die Temperatur an der Oberfläche des Eiskristalls seien mit  $\rho_{v,i}$  und  $T_i$  bezeichnet. In einer Entfernung  $R_d$ , dem „Interaktionsradius“, vom Mittelpunkt des Eiskristalls befinde sich der Tropfen mit Radius  $r_d$ . Die Dampfdichte und die Temperatur an der Tropfenoberfläche seien  $\rho_{v,d}$  und  $T_d$ . Der Radius  $R_E$  vom Mittelpunkt des Eiskristalls bezeichne den „Einflussradius“ des Eiskristalls. Dies ist derjenige Radius, innerhalb dessen der Eiskristall das Wasserdampf- und Temperaturfeld nicht vernachlässigbar beeinflusst. Die zugehörige Kugel mit Radius  $R_E$  um den Eiskristall bezeichnen wir als „Einflusskugel“ des Eiskristalls. Analog sei  $r_E$  der Einflussradius des Tropfens und die Kugel mit Radius  $r_E$  um den Tropfenmittelpunkt sei die Einflusskugel des Tropfens. Die Werte für die Wasserdampfdichte und die Temperatur am Rand der Einflusskugel des Eiskristalls seien durch die Umgebungswerte  $\rho_{v,\infty}$  und  $T_\infty$  gegeben. Die entsprechenden Werte am Interaktionsradius seien  $\rho_{v,*}$  für die Wasserdampfdichte und  $T_*$  für die Temperatur. Die beiden Hydrometeore werden durch die Werte  $\rho_{v,*}$  und  $T_*$  am Interaktionsradius gekoppelt.

Zusätzlich wird angenommen, dass beide Hydrometeore eine gewisse Menge Aerosol enthalten, um die Singularität in den Wachstumsgleichungen zu umgehen, vergleiche Abschnitt 2.6. Hierzu wird die Modellvorstellung aus Abbildung 2.14 verwendet, das heisst die Aufteilung des Hydrometeors in einen trockenen Aerosolkern umgeben von Wasser. Die zugehörigen Aerosolradien seien  $r_a$  für den Tropfen und  $R_a$  für den Eiskristall.

Um die Eigenschaften des Eiskristalls und des Tropfens besser unterscheiden zu können, werden in diesem Kapitel grosse Buchstaben für Massen und Radien verwendet, die sich auf den Eiskristall beziehen. Kleine Buchstaben für Massen und Radien beziehen sich hingegen auf den Tropfen.



**Abbildung 5.1:** Modellvorstellung der lokalen Anordnung eines Eiskristall-Tropfen-Systems. Innerhalb der Einflusskugel mit Radius  $R_E$  des Eiskristalls befindet sich der Tropfen. Der Interaktionsradius ist  $R_d$ , die dortigen Werte der Wasserdampfdichte und der Temperatur sind  $\rho_{v,*}$  und  $T_*$ , mit deren Hilfe die Kopplung der Hydrometeore erfolgt. Hierbei beziehen sich Grossbuchstaben auf Eigenschaften des Eiskristalls und Kleinbuchstaben auf Eigenschaften des Tropfens.

In diesem Modell betrachten wir sowohl das Wasserdampf- als auch das Temperaturfeld der Hydrometeore als sphärisch-symmetrisch innerhalb der jeweiligen Einflusskugeln. Hierbei akzeptieren wir, dass implizit nicht genau die Situation aus Abbildung 5.1 vorliegt. Vielmehr wird der in Abbildung 5.1 am Interaktionsradius lokalisierte Tropfen durch die Symmetrieannahme zu einer Sphäre um den Eiskristall „verschmiert“, das bedeutet der Tropfen wird zu einer kontinuierlichen Quelle oder Senke für den Wasserdampf.

Die Idee dieses Modells besteht darin, dass der Eiskristall durch seine Anwesenheit ein Wasserdampf- und Temperaturfeld erzeugt und damit am Interaktionsradius  $R_d$  Werte vorgibt. Da sich der Tropfen am Interaktionsradius befindet, definieren die vom Eiskristall vorgegebenen Werte die Umgebungswerte des Tropfens am Rand der Einflusskugel des Tropfens. Dies bedeutet konzeptionell, dass die Sphäre um den Eiskristall mit Interaktionsradius  $R_d$  zu einer künstlichen Kugelschale der Dicke  $2r_E$  erweitert wird. Innerhalb dieser Kugelschale sind die Werte für die Wasserdampfdichte und die Temperatur konstant mit den Werten  $\rho_{v,*}$  und  $T_*$ . Abhängig von diesen Werten wächst oder verdampft der Tropfen, wodurch wiederum die Wasserdampfdichte und Temperatur am Interaktionsradius verändert werden. Im Folgenden wird diese Idee umgesetzt.

Die exakten Lösungen der Laplace-Gleichungen (2.56) für den Eiskristall innerhalb der Einflusskugel sind durch

$$\begin{aligned}\rho_v(R) &= \frac{\rho_{v,\infty}R_E - \rho_{v,i}R_i}{R_E - R_i} + \frac{(\rho_{v,i} - \rho_{v,\infty})R_iR_E}{R_E - R_i} \frac{1}{R}, \\ T(R) &= \frac{T_\infty R_E - T_i R_i}{R_E - R_i} + \frac{(T_i - T_\infty)R_iR_E}{R_E - R_i} \frac{1}{R}\end{aligned}\quad (5.1)$$

gegeben, wobei  $R$  die radiale Koordinate mit Ursprung im Mittelpunkt des Eiskristalls bezeichnet. Die Felder aus (5.1) geben die ungestörten Felder an, die der Eiskristall durch seine Anwesenheit erzeugt. Die Werte der ungestörten Felder am Interaktionsradius sind daher  $\rho_v(R_d)$  für die Wasserdampfdichte und  $T(R_d)$  für die Temperatur.

Analog gilt für die exakten Lösungen von (2.56) innerhalb der Einflusskugel des Tropfens

$$\begin{aligned}\widehat{\rho}_v(r) &= \frac{\rho_{v,*}r_E - \rho_{v,d}r_d}{r_E - r_d} + \frac{(\rho_{v,d} - \rho_{v,*})r_d r_E}{r_E - r_d} \frac{1}{r}, \\ \widehat{T}(r) &= \frac{T_*r_E - T_d r_d}{r_E - r_d} + \frac{(T_d - T_*)r_d r_E}{r_E - r_d} \frac{1}{r},\end{aligned}\quad (5.2)$$

wobei  $r$  die radiale Koordinate mit Ursprung im Mittelpunkt des Tropfens bezeichnet.

Wir verwenden die regularisierten Wachstumsgleichungen (2.150), um das Wachstum der Hydrometeore zu beschreiben. Wie in der Herleitung der Maxwell-Gleichung in den Abschnitten 2.3.1 und 2.4, ergeben sich aus der Darstellung der Felder (5.2) um den Tropfen die Wachstumsgleichungen

$$\begin{aligned}\frac{dm_w}{dt} &= 4\pi\alpha_d D_0 r_d r_E \frac{\rho_{v,*} - \rho_{v,d}}{r_E - r_d}, \\ \frac{dT_d}{dt} &= \frac{4\pi r_d r_E (L_{lv}(T_d)\alpha_d D_0 (\rho_{v,*} - \rho_{v,d}) + K_0(T_* - T_d))}{(m_a c_{p,a,d}(T_d) + m_w c_{p,l}(T_d)) (r_E - r_d)}\end{aligned}\quad (5.3)$$

für den Tropfen. Die Diffusivität und die thermale Konduktivität wurden hierbei als konstant angenommen, mit den Werten  $D_0$  und  $K_0$  der Umgebung. Aufgrund der Modellvorstellung aus Abbildung 2.14, gilt für die Aerosolmasse im Tropfen

$$m_a = \frac{4}{3}\pi\rho_{a,d}(T_d)r_a^3 \quad \text{und} \quad m_w = \frac{4}{3}\pi\rho_l(T_d)(r_d^3 - r_a^3) \quad (5.4)$$

für die Wassermasse des Tropfens, wobei  $c_{p,a,d}$  die spezifische Wärmekapazität und  $\rho_{a,d}$  die Dichte des im Tropfen vorhandenen Aerosols bezeichnen.

Für den Eiskristall ergeben sich analog die Wachstumsgleichungen

$$\begin{aligned}\frac{dM_w}{dt} &= 4\pi\alpha_i D_0 R_i R_d \frac{\rho_{v,*} - \rho_{v,i}}{R_d - R_i}, \\ \frac{dT_i}{dt} &= \frac{4\pi R_i R_d (\alpha_i D_0 L_{iv}(T_i) (\rho_{v,*} - \rho_{v,i}) + K_0 (T_* - T_i))}{(M_a c_{p,a,i}(T_i) + M_w c_{p,i}(T_i)) (R_d - R_i)},\end{aligned}\quad (5.5)$$

wobei in diesem Fall als äussere Randwerte die Bedingungen  $\rho_{v,*}$  und  $T_*$  am Interaktionsradius  $R_d$  verwendet wurden. Die Gesamtmasse des Eiskristalls ist  $M_w + M_a$ , mit der Wassermasse  $M_w$  in Form von Eis und der Aerosolmasse  $M_a$ . Wie für den Tropfen, ergibt die Modellvorstellung aus Abbildung 2.14 für die einzelnen Massen die Gleichungen

$$M_a = \frac{4}{3}\pi\rho_{a,i}(T_i)R_a^3 \quad \text{und} \quad M_w = \frac{4}{3}\pi\rho_i(T_i)(R_i^3 - R_a^3). \quad (5.6)$$

Hierbei ist  $c_{p,a,i}$  die spezifische Wärmekapazität und  $\rho_{a,i}$  die Dichte des im Eiskristall enthaltenen Aerosols.

Zur Kopplung beider Hydrometeore müssen Gleichungen für die Wasserdampfdichte  $\rho_{v,*}$  und die Temperatur  $T_*$  am Interaktionsradius angegeben werden. Wie in der

Maxwell-Theorie nehmen wir für die Temperatur an, dass Wärmefluktuationen sehr schnell ausgeglichen werden und setzen

$$T_*(t) := T(R_d). \quad (5.7)$$

Hierbei ist  $T(R_d)$  der Wert des ungestörten Temperaturfeldes (5.1) am Interaktionsradius  $R_d$ . Aus der Definition (5.7) folgt zum einen, dass die Umgebungstemperatur für den Tropfen der Temperatur entspricht, welche der Eiskristall durch sein ungestörtes Temperaturfeld vorgibt. Zum anderen verursacht der Tropfen keine Temperaturänderung am Interaktionsradius. Dieser Punkt wird in Unterabschnitt 5.1.4 nochmals aufgegriffen. Für die zeitliche Ableitung von (5.7) gilt

$$\frac{dT_*}{dt} = \frac{d}{dt} \left( T(R_d) \right). \quad (5.8)$$

Nachfolgend wird die Kopplung der Wasserdampfdichte beschrieben. Diese Kopplung ist eine Kombination aus drei Komponenten. Die erste Komponente besteht aus der Vorgabe der Wasserdampfdichte durch das ungestörte Wasserdampfgebiet (5.1) des Eiskristalls. In der zweiten Komponente wird die Modifikation des Vorgabewertes durch den Tropfen berücksichtigt. Die dritte Komponente beschreibt die Diffusion des Wasserdampfes vom Interaktionsradius in die Umgebung. Die einzelnen Komponenten werden nacheinander beschrieben und schliesslich zu einer Gleichung für die Änderungsrate von  $\rho_{v,*}$  zusammengefügt.

Der Vorgabewert des Eiskristalls ist, wie im Fall der Temperatur, durch die Auswertung des ungestörten Feldes der Wasserdampfdichte als  $\rho_v(R_d)$  gegeben. Die zugehörige Änderungsrate des Vorgabewertes  $\rho_v(R_d)$  ist

$$\frac{d}{dt} \left( \rho_v(R_d) \right). \quad (5.9)$$

Um die Modifikation durch den Tropfen zu erfassen, berechnen wir zunächst die Rate  $J_d$ , mit der Wasserdampf über den Rand der Einflusskugel  $b_E$  des Tropfens ausgetauscht wird. Diese Rate ist, wegen der Darstellung des Wasserdampfgebietes (5.2), durch

$$J_d = - \int_{\partial b_E} \langle D_0 \nabla \widehat{\rho}_v, N \rangle d\sigma = -D_0 \frac{\rho_{v,*} - \rho_{v,d}}{r_E - r_d} \frac{r_d}{r_E} 4\pi r_E^2 = -4\pi D_0 r_d r_E \frac{\rho_{v,*} - \rho_{v,d}}{r_E - r_d} \quad (5.10)$$

gegeben. Hierbei bezeichnet  $N$  den äusseren Normalenvektor der Kugel  $b_E$ . Der von einem verdampfenden Tropfen freigesetzte Wasserdampf soll sich in einer typischen Zeitspanne uniform in ein Volumen  $V$  ausbreiten. Die konkrete Wahl von  $V$  wird in Kürze präzisiert werden. Die als uniform angenommene Wasserdampfdichte  $\rho_{v,*}$  innerhalb der künstlichen Kugelschale wird daher durch die Rate  $J_d/V$  beeinflusst. Durch die Annahme der Kugelsymmetrie muss diese Rate entsprechend skaliert werden, denn gemäss der Modellvorstellung aus Abbildung 5.1 soll sich der Tropfen lediglich an einer einzelnen Stelle befinden. Hierzu sei

$$V_k := \frac{\frac{4}{3}\pi \left( (R_d + r_E)^3 - (R_d - r_E)^3 \right)}{\frac{4}{3}\pi r_E^3} = \frac{(R_d + r_E)^3 - (R_d - r_E)^3}{r_E^3}, \quad (5.11)$$

was als die Anzahl von Tropfeneinflusskugeln angesehen werden kann, die in die künstliche Kugelschale um den Eiskristall passen. Skalieren der Rate  $J_d/V$  durch (5.11) ergibt  $J_d/V_k V$ . Diese Form erlaubt sofort die Erweiterung auf  $N_d$  gleiche Tropfen, die sich alle am Interaktionsradius  $R_d$  befinden. In diesem Fall wird die Rate  $J_d/V_k V$  zu

$$N_d \frac{J_d}{V_k V} \quad (5.12)$$

abgeändert. Der Fall von  $N_d$  beliebig platzierten Tropfen innerhalb der Einflusskugel des Eiskristalls lässt sich durch die Definition einer Durchschnittsmasse auf den zuvor diskutierten Fall zurückführen. Hierzu seien  $N_d$  Tropfen mit den Massen  $m_{d,1}, m_{d,2}, \dots, m_{d,N_d}$  vorhanden. Die Durchschnittsmasse sei durch das arithmetische Mittel

$$m_d := \frac{1}{N_d} \sum_{k=1}^{N_d} m_{d,k} \quad (5.13)$$

definiert. Anschliessend werden die  $N_d$  Tropfen als gleiche Tropfen der Masse  $m_d$  am Interaktionsradius  $R_d$  behandelt. Mit anderen Worten werden die  $N_d$  gegebenen Tropfen durch  $N_d$  Tropfen ersetzt, die alle gleiche Masse  $m_d$ , Menge und Typ von Aerosol sowie den gleichen Abstand zum Eiskristall besitzen. Diese Form der Berücksichtigung mehrerer Tropfen ignoriert jede Interaktion zwischen den Tropfen. Dies ist streng genommen inkonsistent. Um zusätzlich die Interaktion zwischen den Tropfen einzubeziehen, sind genaue Informationen über die relativen Positionen der Tropfen zueinander sowie zum Eiskristall nötig. Diese Art von Information ist allerdings weder für reale Wolken noch in Modellen vorhanden. Darüberhinaus müsste zu jedem Zeitpunkt, für eine beliebige Tropfenanordnung, analytisch eine Laplace-Gleichung in der Einflusskugel des Eiskristalls gelöst werden. Da dies nicht möglich ist, wird die Interaktion zwischen den Tropfen vernachlässigt. Der so entstehende Fehler kann im Allgemeinen nicht abgeschätzt werden. Je ähnlicher sich die Tropfen in ihren Eigenschaften sind, desto kleiner ist jedoch der Fehler, der durch die Mittelung der Massen entsteht.

Für die dritte Komponente der Wasserdampfkopplung betrachten wir die Diffusion von Wasserdampf vom Interaktionsradius in die Umgebung. Die Idee des Modells basiert auf der Vorgabe eines ungestörten Wasserdampfes (5.1) durch den Eiskristall, das aufgrund der Anwesenheit des Tropfens verändert wird. Da das ungestörte Feld einen Gleichgewichtszustand beschreibt, kann der Wert  $\rho_v(R_d)$  als Referenz angesehen werden. Ist der aktuelle Wert  $\rho_{v,*}$  beispielsweise höher als der Gleichgewichtswert  $\rho_v(R_d)$ , so findet eine Diffusion von Wasserdampf statt, um die Differenz auszugleichen und der aktuelle Wert  $\rho_{v,*}$  relaxiert auf den Gleichgewichtswert.

Motiviert durch das Ficksche Gesetz über die Diffusion, sei

$$- \int_{\partial B_d} D_0 \frac{\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)}{R_E - R_d} d\sigma = -4\pi R_d^2 D_0 \frac{\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)}{R_E - R_d} \quad (5.14)$$

die Rate, mit der Wasserdampf aus  $B_d$  austritt, wobei  $B_d$  die Kugel um den Eismittelpunkt mit Radius  $R_d$  bezeichnet. Die Änderung der Kopplungsdichte  $\rho_{v,*}$  durch Diffusion von der Kugel  $B_d$  in die Umgebung ist daher durch

$$- \int_{\partial B_d} D_0 \frac{\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)}{R_E - R_d} d\sigma \frac{1}{\frac{4}{3}\pi R_d^3} = -3D_0 \frac{1}{R_d} \frac{\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)}{R_E - R_d} \quad (5.15)$$

gegeben. Die Wahl der Rate (5.14) als Koeffizient von  $\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)$  in (5.15) ist eine Möglichkeit für die Skalierung von  $\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)$ , also für die Relaxationsrate von  $\rho_{v,*}$  auf den Gleichgewichtswert  $\rho_v(R_d)$ . Diese sollte durch eine direkte Messung überprüft und gegebenenfalls korrigiert werden.

Die vollständige Änderungsrate für die Kopplungsdichte  $\rho_{v,*}$  wird durch die Kombination der einzelnen Komponenten (5.9), (5.12) und (5.15) als

$$\frac{d\rho_{v,*}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \rho_v(R_d) \right) + N_d \frac{J_d}{V_k V} - \frac{3D_0}{R_d} \frac{\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)}{R_E - R_d} \quad (5.16)$$

definiert.

Um diese Gleichungen zu verwenden, muss das Volumen  $V$  spezifiziert werden, das heisst das Volumen in welches sich der Wasserdampf eines verdampfenden Tropfens in einer typischen Zeit uniform verteilt. Um diese Definition einfacher zu gestalten, wird zuvor noch eine zweite Interpretation der Rate  $J_d/V_k V$  angegeben. Mit dem Volumen

$$V_{\text{KS}} = \frac{4}{3} \pi \left( (R_d + r_E)^3 - (R_d - r_E)^3 \right) \quad (5.17)$$

der künstlichen Kugelschale um den Eiskristall, gilt für (5.11)

$$V_k = \frac{V_{\text{KS}}}{\frac{4}{3} \pi r_E^3} \quad (5.18)$$

und daher

$$\frac{J_d}{V_k V} = \frac{J_d}{V_{\text{KS}}} \frac{\frac{4}{3} \pi r_E^3}{V}. \quad (5.19)$$

Der erste Faktor beschreibt die Änderung der Wasserdampfdichte in der Kugelschale, wenn der gesamte freigesetzte Wasserdampf darin aufgenommen wird. Der zweite Faktor entspricht einer Skalierung und gibt den Anteil an, der tatsächlich in die Kugelschale übergeht.

Für das Volumen  $V$  wählen wir

$$V := \frac{4}{3} \pi (nr_E)^3 = \frac{4}{3} \pi n^3 r_E^3 \quad (5.20)$$

mit einer reellen Zahl  $n$ , deren Wahl in Abschnitt 5.1.2 präzisiert wird. Dies bedeutet, in der ersten Interpretation, dass der freigesetzte Wasserdampf des Tropfens in einer typischen Zeit uniform auf eine Kugel mit dem  $n$ -fachen Einflussradius des Tropfens aufgeteilt wird. Im Rahmen der zweiten Interpretation entspricht

$$\frac{\frac{4}{3} \pi r_E^3}{V} = \frac{\frac{4}{3} \pi r_E^3}{\frac{4}{3} \pi n^3 r_E^3} = \frac{1}{n^3} \quad (5.21)$$

einem Skalierungsfaktor und es geht lediglich der  $1/n^3$ -fache Teil des vom Tropfen freigesetzten Wasserdampfs in die Kugelschale über, um die dortige Wasserdampfdichte  $\rho_{v,*}$  zu beeinflussen.

Im Folgenden werden die Abstände  $R_E$ ,  $r_E$  und  $R_d$  genauer erläutert. Die ersten beiden Grössen sind die Einflussradien eines Eiskristalls oder eines Tropfens. Für die

Abhängigkeit der Einflussradien vom jeweiligen Hydrometeorradius nehmen wir einen konstanten Abstand an und definieren

$$\begin{aligned} R_E &:= R_i + \mathcal{D}_i, \\ r_E &:= r_d + \mathcal{D}_d, \end{aligned} \quad (5.22)$$

wobei  $\mathcal{D}_i, \mathcal{D}_d$  die entsprechenden konstanten Abstände sind. Analog wird der Einflussradius als

$$R_d := R_i + \mathcal{D}_0 \quad (5.23)$$

mit einer Konstanten  $\mathcal{D}_0$  definiert, die  $0 < \mathcal{D}_0 < \mathcal{D}_i$  erfüllt.

Aus diesen Betrachtungen folgt die komplette Modellbeschreibung für die Wechselwirkung des Eiskristalls mit dem Tropfen als System von gewöhnlichen Differentialgleichungen in den Variablen

$$x = (m_w, T_d, M_w, T_i, \rho_{v,*}, T_*) \quad (5.24)$$

durch

$$\frac{dm_w}{dt} = 4\pi\alpha_d D_0 r_d r_E \frac{\rho_{v,*} - \rho_{v,d}}{r_E - r_d}, \quad (5.25a)$$

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{4\pi r_d r_E (\alpha_d D_0 L_{lv}(T_d) (\rho_{v,*} - \rho_{v,d}) + K_0 (T_* - T_d))}{(m_a c_{p,a,d}(T_d) + m_w c_{p,l}(T_d)) (r_E - r_d)}, \quad (5.25b)$$

$$\frac{dM_w}{dt} = 4\pi\alpha_i D_0 R_i R_d \frac{\rho_{v,*} - \rho_{v,i}}{R_d - R_i}, \quad (5.25c)$$

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{4\pi R_i R_d (\alpha_i D_0 L_{iv}(T_i) (\rho_{v,*} - \rho_{v,i}) + K_0 (T_* - T_i))}{(M_a c_{p,a,i}(T_i) + M_w c_{p,i}(T_i)) (R_d - R_i)}, \quad (5.25d)$$

$$\frac{d\rho_{v,*}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \rho_v(R_d) \right) + N_d \frac{J_d}{V_k V} - \frac{3D_0}{R_d} \frac{\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)}{R_E - R_d}, \quad (5.25e)$$

$$\frac{dT_*}{dt} = \frac{d}{dt} \left( T(R_d) \right). \quad (5.25f)$$

Um das Gleichungssystem (5.25) vollständig darzustellen, müssen die zeitlichen Ableitungen

$$\frac{d}{dt} \left( \rho_v(R_d) \right) \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt} \left( T(R_d) \right) \quad (5.26)$$

der Hintergrundfelder (5.1) am Interaktionsradius berechnet werden. Da die Darstellungen des Wasserdampf- und Temperaturfeldes in (5.1) ähnlich sind, reicht es aus, die Ableitung des Wasserdampfes zu berechnen. Die Ableitung des Temperaturfeldes wird analog berechnet. Durch Auswerten des Wasserdampfes am Interaktionsradius  $R_d$  folgt

$$\rho_v(R_d) = \frac{\rho_{v,\infty} R_E - \rho_{v,i} R_i}{R_E - R_i} + \frac{(\rho_{v,i} - \rho_{v,\infty}) R_i R_E}{(R_E - R_i) R_d}, \quad (5.27)$$

was aufgrund der zeitabhängigen Radien  $R_i, R_d, R_E$  und Oberflächendichte  $\rho_{v,i}$  eine Funktion von der Zeit  $t$  ist. Nach den Definitionen (5.22) und (5.23) unterscheiden sich die auftretenden Radien lediglich um eine Konstante vom Radius  $R_i$  des Eiskristalls und es folgt

$$\frac{dR_E}{dt} = \frac{dR_d}{dt} = \frac{dR_i}{dt}. \quad (5.28)$$



Die zeitliche Ableitung von  $\rho_v(R_d)$  ist durch

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left( \rho_v(R_d) \right) &= \frac{R_E}{R_E - R_i} \left( 1 - \frac{R_i}{R_d} \right) \frac{d\rho_{v,\infty}}{dt} + \frac{R_i}{R_E - R_i} \left( \frac{R_E}{R_d} - 1 \right) \frac{d\rho_{v,i}}{dt} \\ &\quad + \frac{\rho_{v,i} - \rho_{v,\infty}}{R_E - R_i} \left( \frac{R_E + R_i}{R_d} - \frac{R_i R_E}{R_d^2} - 1 \right) \frac{dR_i}{dt} \end{aligned} \quad (5.29)$$

gegeben. Für die zeitliche Ableitung von  $T(R_d)$  ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left( T(R_d) \right) &= \frac{R_E}{R_E - R_i} \left( 1 - \frac{R_i}{R_d} \right) \frac{dT_\infty}{dt} + \frac{R_i}{R_E - R_i} \left( \frac{R_E}{R_d} - 1 \right) \frac{dT_i}{dt} \\ &\quad + \frac{T_i - T_\infty}{R_E - R_i} \left( \frac{R_E + R_i}{R_d} - \frac{R_i R_E}{R_d^2} - 1 \right) \frac{dR_i}{dt}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Die Umgebungsbedingungen  $\rho_{v,\infty}$  und  $T_\infty$  werden hier als konstant angenommen, weshalb die zeitlichen Ableitungen dieser Grössen in (5.29) und (5.30) verschwinden. In Abschnitt 5.2 hingegen wird ein Luftpaket betrachtet, das seine Höhe ändert. In diesem Fall sind die Umgebungsbedingungen nicht länger konstant und die Ableitungen müssen berücksichtigt werden, können aber direkt aus der vertikalen Bewegung abgeleitet werden.

Zur Vervollständigung der Darstellungen (5.29) und (5.30) fehlt noch die Berechnung der zeitlichen Ableitungen der Oberflächendichte  $\rho_{v,i}$  und der Temperatur  $T_i$  des Eiskristalls. Zur Berechnung der Ableitung der Oberflächendichte  $\rho_{v,i}$  werden sowohl die Krümmung als auch der Einfluss des Aerosols vernachlässigt. Damit folgt für die Oberflächendichte

$$\rho_{v,i} = \frac{p_{i,\infty}(T_i)}{R_v T_i} a_{w,i} \exp \left( \frac{2\sigma_i(T_i)}{R_v \rho_i(T_i) T_i R_i} \right) \approx \frac{p_{i,\infty}(T_i)}{R_v T_i}. \quad (5.31)$$

In (5.31) kann nicht einfach die Temperatur  $T_i$  des Eiskristalls durch die Umgebungstemperatur  $T_\infty$  ersetzt werden, da sich sonst systematische Fehler ergeben, vergleiche hierzu die Diskussion in Unterabschnitt 2.5.1. Die Ableitung dieser approximierten Form kann mithilfe der Clausius-Clapeyron-Gleichung (A.1) berechnet werden und es ergibt sich

$$\frac{d\rho_{v,i}}{dt} \approx \frac{d}{dt} \left( \frac{p_{i,\infty}(T_i)}{R_v T_i} \right) \frac{dT_i}{dt} = \frac{p_{i,\infty}(T_i)}{R_v T_i^2} \left( \frac{L_{iv}(T_i)}{R_v T_i} - 1 \right) \frac{dT_i}{dt}. \quad (5.32)$$

Aufgrund der Modellvorstellung aus Abbildung 2.14 für den Eiskristall berechnet sich die zugehörige Wassermasse als

$$M_w = \frac{4}{3} \pi \rho_i(T_i) \left( R_i^3 - R_a^3 \right). \quad (5.33)$$

Wird die Abhängigkeit der Eisdichte von der Temperatur vernachlässigt, folgt aus (5.33)

$$\frac{dM_w}{dt} \approx \frac{4}{3} \pi \rho_i(T_i) \frac{d}{dt} \left( R_i^3 - R_a^3 \right) = 4 \pi \rho_i(T_i) R_i^2 \frac{dR_i}{dt}. \quad (5.34)$$

Umstellen dieser Gleichung, Verwendung der Konstanz des Aerosolradius  $R_a$  sowie (5.25c), liefert für die zeitliche Ableitung des Eiskristallradius

$$\frac{dR_i}{dt} = \frac{1}{4 \pi \rho_i(T_i) R_i^2} \frac{dM_w}{dt} = \frac{\alpha_i D_0}{\rho_i(T_i) R_i} \frac{R_d \rho_{v,*} - \rho_{v,i}}{R_d - R_i}. \quad (5.35)$$

Für den zweiten Summanden in der Änderungsrate der Kopplungsdichte (5.25e) wird im Folgenden eine weitere Darstellung aufgezeigt, die für konkrete Berechnungen praktikabler ist. Hierzu wird die Definition der Rate  $J_d$  aus (5.10) sowie Gleichung (5.25a) für die Änderung der Wassermasse des Tropfens verwendet. Für die Rate  $J_d$  ergibt sich damit

$$J_d = -4\pi D_0 r_d r_E \frac{\rho_{v,*} - \rho_{v,\infty}}{r_E - r_d} = -\frac{1}{\alpha_d} \frac{dm_w}{dt}. \quad (5.36)$$

Mit (5.36) folgt für (5.25e) die Darstellung

$$\frac{d\rho_{v,*}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \rho_v(R_d) \right) - \frac{N_d}{\alpha_d V_k V} \frac{dm_w}{dt} - \frac{3D_0}{R_d} \frac{\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)}{R_E - R_d}. \quad (5.37)$$

### 5.1.2 Parameterwahl

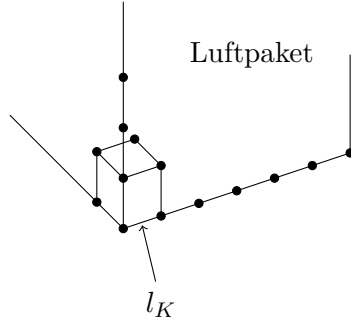
Das in Unterabschnitt 5.1.1 beschriebene Modell besitzt die Parameter  $\mathcal{D}_i$ ,  $\mathcal{D}_d$ ,  $\mathcal{D}_0$ ,  $N_d$  aus (5.22) und (5.23) sowie  $n$  aus (5.20). Der Parameter  $N_d$  gibt die Anzahl der Tropfen an, die sich innerhalb der Einflusskugel des Eiskristalls befinden.

Der Parameter  $\mathcal{D}_i$  bestimmt die Grösse der Einflusskugel des Eiskristalls. Für grössere Werte von  $\mathcal{D}_i$  vergrössert sich das Volumen der Einflusskugel des Eiskristalls. In diesem Fall sollte auch die Anzahl  $N_d$  der Tropfen innerhalb der Einflusskugel des Eiskristalls vergrössert werden, da eine grössere Einflusskugel mehr Tropfen enthalten wird. Die Parameter  $\mathcal{D}_0$  und  $n$  steuern die Stärke der Interaktion zwischen dem Eiskristall und den Tropfen. Wird  $\mathcal{D}_0$  vergrössert, das heisst der Abstand der Tropfen vom Eiskristall erhöht, so verringert sich die Stärke der Interaktion. Den gegenteiligen Effekt hat eine Erhöhung des Parameters  $n$ . Es ist zu beachten, dass der Parameter  $n$  kubisch in das Gleichungssystem eingeht, vergleiche (5.21). Insbesondere wird die Interaktionsstärke bereits durch eine moderate Erhöhung von  $n$  stark vermindert.

In diesem Unterabschnitt wird eine mögliche Wahl dieser Parameter beschrieben. Dazu werden nicht systematisch alle Kombinationen der Parameterwerte im Rahmen einer Parameterstudie betrachtet. Vielmehr soll eine mögliche realistische Wahl der Parameter anhand von typischen Umgebungsbedingungen innerhalb einer Mischphasenwolke aufgezeigt werden. Für diesen Fall sei die Umgebungstemperatur  $T_\infty = -15^\circ\text{C}$ , der Umgebungsgesamtdruck  $p_\infty = 650 \text{ hPa}$  und das Sättigungsverhältnis bezüglich flüssigem Wasser  $S_\infty = 1.01$ , was der Umgebungswasserdampfdichte  $\rho_{v,\infty} \approx 1.622 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$  entspricht. Wir betrachten bei diesen Umgebungsbedingungen ein Eiskristall-Tropfen-System wie in Unterabschnitt 5.1.1 beschrieben. Der Eiskristall habe einen Radius von  $R_i = 100 \mu\text{m}$  und der Tropfen einen Radius von  $r_d = 10 \mu\text{m}$ . Die Temperatur beider Hydrometeore entspreche der Umgebungstemperatur.

#### Parameter $\mathcal{D}_0$ für den Tropfenabstand

Der Parameter  $\mathcal{D}_0$  aus (5.23) gibt den Abstand des Interaktionsradius von der Oberfläche des Eiskristalls an. Um diesen Parameter abzuschätzen, wird eine perfekte uniforme Tropfenverteilung angenommen. Sei  $\mathcal{N}$  die Anzahl Tropfen pro Kubikmeter Luft. Die perfekte uniforme Verteilung liegt vor, wenn die Tropfen an den Eckpunkten kleiner Kuben positioniert sind, die das betrachtete Volumen ausschöpfen, vergleiche die Schemazeichnung in Abbildung 5.2. Die Kantenlänge  $l_K$  eines kleinen Kubus beträgt in



**Abbildung 5.2:** Schematische Aufteilung eines kubusförmigen Luftpaketes in kleinere Kuben für eine perfekte uniforme Verteilung der Tropfen.

diesem Fall

$$l_K = \frac{1}{\sqrt[3]{\mathcal{N}} - 1}. \quad (5.38)$$

Der Eiskristall sei in der Mitte eines solchen kleinen Kubus. Dann hat der Eiskristall den maximalen Abstand von den Tropfen. Der Abstand vom Mittelpunkt des Eiskristalls zum Mittelpunkt des nächsten Tropfens beträgt

$$\frac{\sqrt{3}}{2} l_K = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{1}{\sqrt[3]{\mathcal{N}} - 1}. \quad (5.39)$$

Dieser Wert kann als Abschätzung für  $R_0 = R_i + \mathcal{D}_0$  verwendet werden. Ein Wert für die Tropfenanzahl in Mischphasenwolken ist durch  $\mathcal{N} = 1000 \text{ cm}^{-3} = 1 \cdot 10^9 \text{ m}^{-3}$  gegeben (Korolev und Mazin, 2003). Mit diesem Wert ergibt sich für den eingangs beschriebenen typischen Fall ein Eis-Tropfen-Abstand von  $\mathcal{D}_0 \approx 7.67 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ , was ungefähr 7.5 Eiskristallradien entspricht. Wir verwenden diesen Wert für  $\mathcal{N}$ , auch wenn dieser grösser ist als ein typischerweise zu beobachtender Wert von  $\mathcal{N} = 70 \text{ cm}^{-3}$  in Mischphasenwolken (Korolev u. a., 2003; Zhao und Lei, 2014), mit dem sich  $\mathcal{D}_0 \approx 20 \cdot 10^{-4} \text{ m}$  ergibt, was ungefähr 20 Eiskristallradien entspricht. Der Grund für die Verwendung des grösseren Wertes für  $\mathcal{N}$  liegt darin, dass der Fokus der Arbeit auf einer lokalen Anhäufung von Tropfen um den Eiskristall liegt. In diesem Fall ist die Annahme über die perfekte uniforme Tropfenverteilung in der gesamten Wolke nicht mehr erfüllt. Innerhalb der lokalen Anhäufung der Tropfen ist die Anzahlkonzentration  $\mathcal{N}$  höher. Um diesen Effekt zu berücksichtigen, wurde für die obige Abschätzung der grössere Wert für  $\mathcal{N}$  verwendet.

### Parameter $\mathcal{D}_i$ und $\mathcal{D}_d$ für die Einflussradien

Die Parameter  $\mathcal{D}_i$  und  $\mathcal{D}_d$  beschreiben einen konstanten Abstand für die Oberflächen der Hydrometeore zu den Rändern der Einflusskugeln. Mithilfe der klassischen Maxwell-Theorie aus Abschnitt 2.3, lassen sich Werte für diese Parameter abschätzen. Das ungestörte Feld der Wasserdampfdichte um den kugelförmigen Eiskristall ist durch

$$\rho_v(R) = \rho_{v,\infty} - \frac{R_i(\rho_{v,\infty} - \rho_{v,i})}{R} \quad (5.40)$$

gegeben. Sei  $\xi > 0$  eine vorgegebene Toleranz für die maximale relative Abweichung von  $\rho_v(R)$  vom uniformen Hintergrundfeld  $\rho_{v,\infty}$ . Gesucht ist  $R_E$  derart, dass für die relative Abweichung die Ungleichung

$$\frac{|\rho_v(R) - \rho_{v,\infty}|}{\rho_{v,\infty}} \leq \xi \quad (5.41)$$

für  $R \geq R_E$  erfüllt ist. Mit (5.40) folgt hierfür die Bedingung

$$\frac{R_i}{\xi \rho_{v,\infty}} |\rho_{v,\infty} - \rho_{v,i}| \leq R_E. \quad (5.42)$$

Um die Oberflächendichte  $\rho_{v,i}$  abzuschätzen, wird die Krümmung vernachlässigt sowie die Sättigungsdampfdichte

$$\rho_{v,i} = \frac{p_{i,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty} \quad (5.43)$$

der Umgebung angesetzt. Der benötigte Abstand wird schliesslich aus  $\mathcal{D}_i = R_E - R_i$  berechnet.

Unter den Bedingungen des eingangs beschriebenen typischen Falles, folgt für die Toleranz  $\xi = 10^{-3}$  der Wert  $\mathcal{D}_i \approx 0.0144$  m, was ungefähr 144 Eisradien entspricht. Bei analogem Vorgehen folgt für den Tropfen  $\mathcal{D}_d = r_E - r_d(0) \approx 8.9 \cdot 10^{-5}$  m, was etwa 9 Tropfenradien entspricht.

### Anzahlparameter $N_d$

Um eine typische Anzahl von Tropfen innerhalb der Einflusskugel des Eiskristalls abzuschätzen, verwenden wir die charakteristische Anzahlkonzentration  $\mathcal{N} = 70 \text{ cm}^{-3}$  (Korolev u. a., 2003; Zhao und Lei, 2014). Mit  $\mathcal{D}_i = 144R_i$  folgt für die Anzahl der Tropfen innerhalb der Einflusskugel

$$N_d = \mathcal{N} \frac{4}{3} \pi (R_i + \mathcal{D}_i)^3 = \mathcal{N} \frac{4}{3} \pi (145 \cdot R_i)^3 \approx 894. \quad (5.44)$$

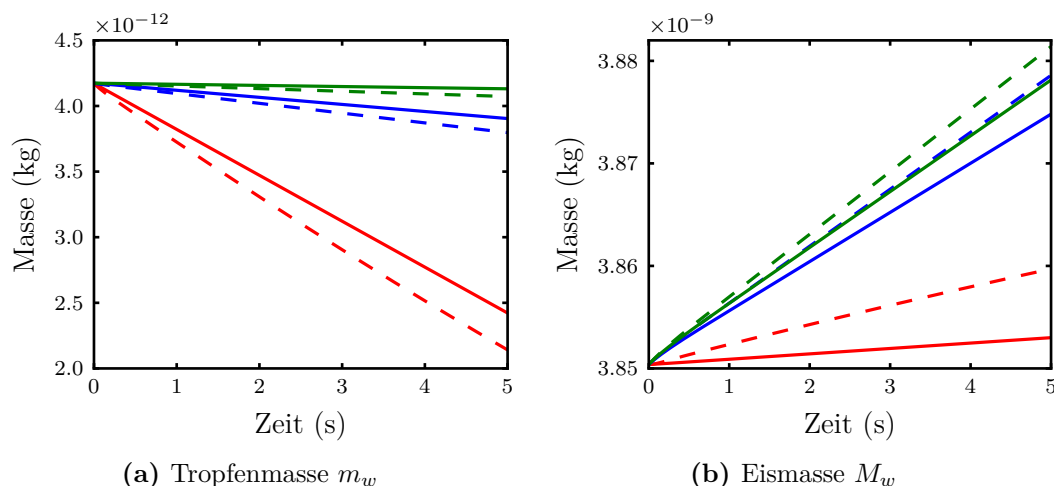
Nicht alle dieser Tropfen besitzen den Abstand  $R_d$  vom Mittelpunkt des Eiskristalls. Insbesondere ist der Einfluss der Tropfen geringer, je weiter sie vom Eiskristall entfernt sind. Wir nehmen heuristisch an, dass die Tropfen im Abstand  $R_d/3$  den grössten Einfluss auf den Eiskristall haben und dritteln den Radius der Einflusskugel. Dies ergibt die Anzahl

$$N_d = \mathcal{N} \frac{4}{3} \pi \left( \frac{R_i + \mathcal{D}_0}{3} \right)^3 = \mathcal{N} \frac{4}{3} \pi \left( \frac{145}{3} R_i \right)^3 \approx 32. \quad (5.45)$$

Mit diesen Annahmen ist die Wahl  $N_d = 40$  gerechtfertigt. Durch die mit der Turbulenz verbundenen Anhäufungen von Hydrometeoren kann die Anzahl jedoch stark variieren.

### Verteilungsparameter $n$

Der Parameter  $n$  aus (5.20) ist der kritische Parameter des Systems, denn dieser bestimmt bei festem Interaktionsradius die Stärke der Interaktion zwischen dem Eiskristall und dem Tropfen. Gemäss der zweiten Interpretation aus (5.21) gibt dieser Parameter an, wie viel des von einem verdampfenden Tropfen freigesetzten Wasserdampfs in die künstliche Kugelschale übergeht und damit die Kopplungsdichte  $\rho_{v,*}$  beeinflusst. Im Fall  $n = 1$

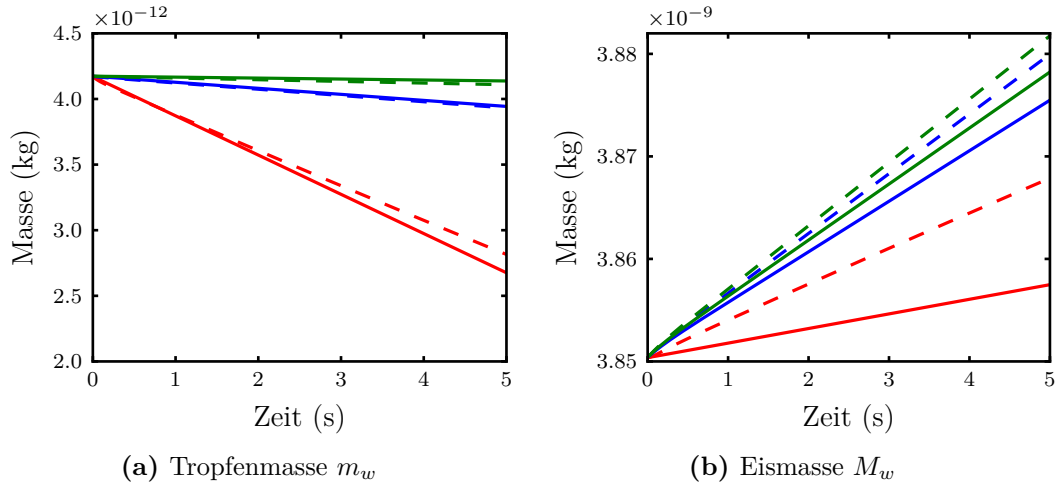


**Abbildung 5.3:** Vergleich der zeitlichen Entwicklung der Hydrometeormassen, berechnet mit dem Bulk-Modell (gestrichelt) und dem Referenzmodell (durchgezogen) bei  $N_d = 14$  Tropfen innerhalb der Einflusskugel des Eiskristalls und den Feuchteregimen  $RH = 86\%$  (rot),  $RH = 99\%$  (blau) und  $RH = 101\%$  (grün).

geht der gesamte Wasserdampf in die Kugelschale über, im Fall  $n > 1$  der  $1/n^3$ -fache Anteil des vom Tropfen freigesetzten Wasserdampfs. Der restliche Anteil wird an die Umgebung abgegeben. Wir wählen für unsere Berechnungen  $n = 1.8$ . Dieser Wert wird im Folgenden durch den Vergleich zu FEM-Simulationen begründet. Idealerweise sollte der Wert dieses Parameters jedoch aus Beobachtungen der tatsächlichen lokalen Interaktion zwischen Eiskristallen und Tropfen bestimmt werden. Allerdings sind entsprechende Beobachtungsdaten nicht bekannt.

Um den gewählten Verteilungsparameter zu begründen, wird ein Vergleich des Modells aus Abschnitt 5.1.1 mit dem Referenzmodell durchgeführt. Hierbei werden die zeitlichen Entwicklungen der Tropfen- und Eiskristallmasse verglichen. Als Umgebungsbedingungen werden die eingangs beschriebenen Werte verwendet. Als Tropfenanzahl werden die Werte  $N_d = 14$  sowie  $N_d = 38$  verwendet und die Tropfen sind beide Male 7.5 Eiskristallradien von der Oberfläche des Eiskristalls entfernt. Die Konfiguration der FEM-Simulation entspricht derjenigen aus Unterabschnitt 4.3.3, wobei in diesem Fall nur die  $N_d$  Tropfen an den Lebedev-Punkten um den Eiskristall vorhanden sind.

In Abbildung 5.3a sind die zeitlichen Entwicklungen der Tropfenmasse für die drei Feuchteregime  $RH = 86\%$ ,  $RH = 99\%$  und  $RH = 101\%$  bei  $N_d = 14$  umgebenden Tropfen abgebildet, die mit dem Bulk-Modell sowie dem Referenzmodell berechnet wurden. Es zeigt sich, dass mit der Parameterwahl  $n = 1.8$  eine zufriedenstellende Übereinstimmung erreicht wird. Dabei werden die Tropfenmassen vom Modell etwas unterschätzt, die Eiskristallmassen hingegen überschätzt, siehe Abbildung 5.3b. Wird die Anzahl der Tropfen innerhalb der Einflusskugel des Eiskristalls auf  $N_d = 38$  erhöht, ergibt sich ein ähnliches Bild, vergleiche Abbildung 5.4. Bei numerischen Experimenten zeigt sich, dass die Überschätzung in der Eismasse durch einen anderen Wert für  $n$  reduziert werden kann. Allerdings wird in diesem Fall die Übereinstimmung für die Tropfenmassen schlechter.

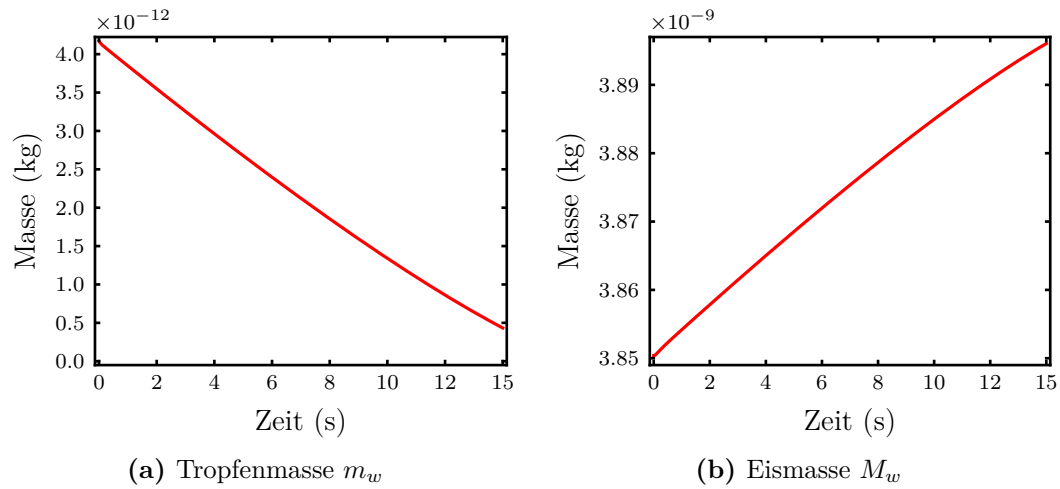


**Abbildung 5.4:** Wie in Abbildung 5.3 mit  $N_d = 38$  Tropfen innerhalb der Einflusskugel des Eiskristalls.

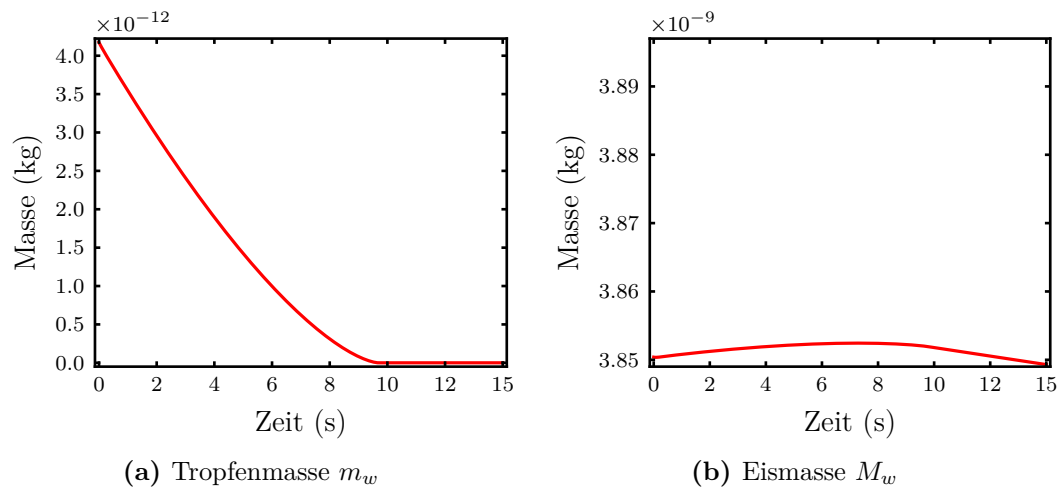
### 5.1.3 Illustration des Modells

In diesem Abschnitt illustrieren wir das Verhalten des entwickelten Modells (5.25) anhand einer Beispielsituation. Hierzu sei die Umgebungstemperatur  $T_\infty = -15^\circ\text{C}$  und der Umgebungsdruck  $p_\infty = 650\text{ hPa}$ . Alle Hydrometeore haben zu Beginn Umgebungstemperatur und die Anfangsradien für die Tropfen und den Eiskristall seien  $r_d(0) = 10\ \mu\text{m}$  und  $R_i(0) = 100\ \mu\text{m}$ . Die restlichen Parameter haben die im vorangegangenen Abschnitt 5.1.2 beschriebenen Werte. Wir werden nacheinander die Feuchteregime  $\text{RH} = 85\%$ ,  $\text{RH} = 93.2\%$  und  $\text{RH} = 101\%$  betrachten. Das erste Regime ist untersättigt und das letzte übersättigt, jeweils bezüglich flüssigem Wasser und Eis. Das Feuchteregime  $\text{RH} = 93.2\%$  ist übersättigt bezüglich Eis, aber untersättigt bezüglich flüssigem Wasser. Die Differentialgleichungen (5.25) wurden mit dem BDF2-Verfahren (Hairer u. a., 1993, Kapitel III.1 Gleichung 1.22') und der Schrittweite  $\Delta t = 1 \cdot 10^{-3}\text{ s}$  gelöst.

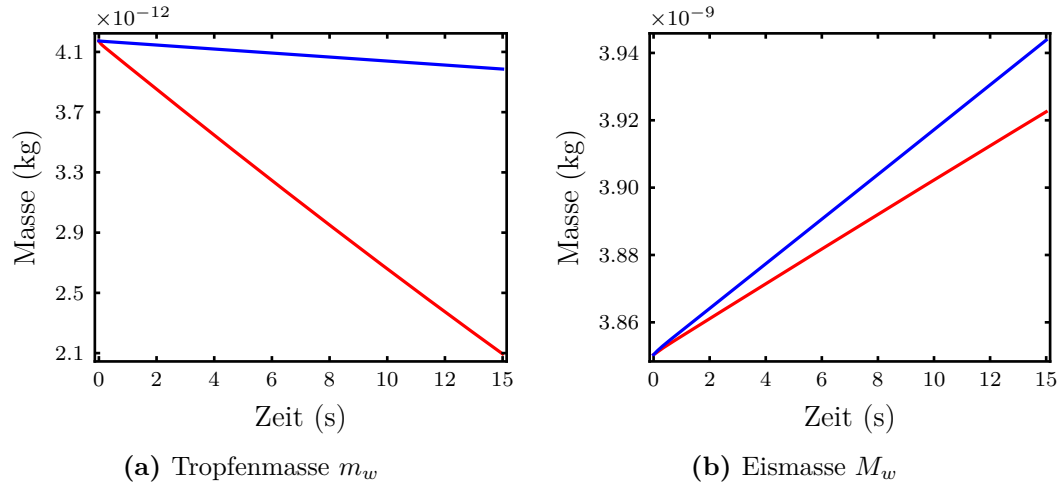
Der zeitliche Verlauf der Tropfen- und Eismasse im untersättigten Regime  $\text{RH} = 85\%$  ist in Abbildung 5.5 dargestellt. Aus der Abbildung ist erkennbar, dass die Tropfen verdampfen und der Eiskristall anwächst. Dies illustriert die lokale Interaktion zwischen den Hydrometeoren. Gemäss der klassischen Maxwell-Theorie aus Abschnitt 2.3, das bedeutet ohne jegliche direkte Interaktion der Hydrometeore, müssten sowohl die Tropfen als auch der Eiskristall verdampfen, da sich das gesamte System in einer untersättigten Umgebung befindet. Wird jedoch die direkte Interaktion berücksichtigt, so reicht der freigesetzte Wasserdampf der verdampfenden Tropfen aus, um für den Eiskristall lokal eine Übersättigung zu schaffen und diesen hierdurch anwachsen zu lassen. Der lokale Charakter dieser Interaktion kann deutlicher gezeigt werden, wenn die Anzahl der Tropfen in der Einflusskugel des Eiskristalls von  $N_d = 40$  auf  $N_d = 5$  reduziert wird, siehe Abbildung 5.6. Die Tropfen sind nach 9 s verdampft, siehe Abbildung 5.6a. Hierdurch entfällt die lokale Wasserdampfquelle für den Eiskristall. Wegen der Relaxation in (5.25e), wird der Eiskristall nun den Umgebungsbedingungen ausgesetzt und beginnt, aufgrund der Untersättigung in der Umgebung, zu verdampfen, siehe Abbildung 5.6b.



**Abbildung 5.5:** Zeitlicher Verlauf der Tropfen- und Eiskristallmasse für das Bulk-Modell bei RH = 85 % und  $N_d = 40$  Tropfen.



**Abbildung 5.6:** Zeitlicher Verlauf der Tropfen- und Eiskristallmasse für das Bulk-Modell bei RH = 85 % und  $N_d = 5$ .



**Abbildung 5.7:** Zeitlicher Verlauf der Tropfen- und Eiskristallmasse für das Bulk-Modell bei RH = 93.2% (rote Kurve) und RH = 101% (blaue Kurve).

In den Feuchteregimen RH = 93.2% und RH = 101% sind die zeitlichen Verläufe der Tropfen- und Eismassen qualitativ gleich, siehe Abbildung 5.7. In beiden Fällen ist die Umgebung bezüglich Eis übersättigt. Im Fall RH = 101% ist auch eine Übersättigung bezüglich flüssigem Wasser vorhanden und gemäss der Maxwell-Theorie wird ein Anwachsen der Tropfen erwartet. Die Tropfen sind jedoch genügend nahe am Eiskristall und beginnen zu verdampfen, siehe Abbildung 5.7a, denn durch den lokalen Einfluss verursacht der Eiskristall eine Untersättigung bezüglich Wasser.

#### 5.1.4 Diskussion des Modellansatzes

Bereits Srivastava (1989) kritisierte die Verwendung der Maxwell-Theorie für die Beschreibung des Tropfenwachstums. Es wurde die Notwendigkeit einer lokalen Betrachtung herausgestellt, da die Wasserdampfdichte in einem Luftpaket räumlich variabel ist und das Tropfenwachstum entscheidend von dieser abhängt. Mit der lokalen Betrachtungsweise können diese Variationen besser berücksichtigt werden. Der Bezug des lokalen Wertes zum globalen Wert der Wasserdampfdichte wird durch eine Relaxation des lokalen Wertes auf den globalen Wert sichergestellt. Diese Ideen wurden im Modell aus Abschnitt 5.1.1 ebenfalls verwendet. Im vorgestellten Modell wurde explizit ein lokales Volumen um den Eiskristall definiert und der Effekt, der sich darin befindlichen Tropfen, auf die Wasserdampfdichte einbezogen. Ein ähnliches Konzept findet sich in Marshall und Langleben (1954). Die Autoren betrachten ebenfalls ein lokales Volumen um einen Eiskristall. Der Effekt der Tropfen wird hingegen durch eine kontinuierliche Tropfenverteilung modelliert. Hierdurch werden separate Wachstumsgleichungen für die Tropfen innerhalb des lokalen Volumens vermieden. Der Modellansatz aus Abschnitt 5.1.1 kombiniert diese Ideen. Zusätzlich wurde bei der Konstruktion des Modells darauf geachtet mit den Informationen auszukommen, die üblicherweise in numerischen Modellen verfügbar sind.



Tropfen- anzahl	Umgebungs- feuchte	Tropfen- temperatur	Asymptotische Gleichgewichtstemperatur	Relative Abweichung
$N_d = 14$	RH = 86 %	257.6269 K	257.6272 K	$1.16 \cdot 10^{-6}$
$N_d = 14$	RH = 99 %	258.1159 K	258.1128 K	$1.20 \cdot 10^{-5}$
$N_d = 14$	RH = 101 %	258.1907 K	258.1871 K	$1.39 \cdot 10^{-5}$
$N_d = 38$	RH = 86 %	257.6276 K	257.6272 K	$1.55 \cdot 10^{-6}$
$N_d = 38$	RH = 99 %	258.1160 K	258.1128 K	$1.24 \cdot 10^{-5}$
$N_d = 38$	RH = 101 %	258.1907 K	258.1871 K	$1.39 \cdot 10^{-5}$

**Tabelle 5.1:** Vergleich der Grenztemperatur der Tropfen in den FEM-Simulationen mit der asymptotischen Gleichgewichtstemperatur aus (2.106).

Im Gegensatz zur Kopplungsgleichung (5.25e) für die Wasserdampfdichte  $\rho_{v,*}$ , werden lokale Effekte der Tropfen in der Kopplungsgleichung (5.25f) für die Temperatur  $T_*$  nicht berücksichtigt. In der Herleitung des Modells wurde dies durch die effiziente Wärmeleitung in der Luft begründet. Um dies zu verdeutlichen, werden die Grenztemperaturen der Hydrometeore in der Beispielsituation aus Unterabschnitt 5.1.3 betrachtet. Es wird die Gleichgewichtstemperatur aus der direkten FEM-Simulation durch das Referenzmodell mit der asymptotischen Gleichgewichtstemperatur (2.106) verglichen. Unterscheiden sich diese Temperaturen wesentlich, ist das ein Hinweis auf eine lokale Interaktion zwischen den Hydrometeoren, denn die asymptotische Gleichgewichtstemperatur wird ausschliesslich durch die Umgebungswerte bestimmt. In diesem Fall sollte die lokale Interaktion in der Temperaturgleichung (5.25f) berücksichtigt werden. Da in den FEM-Simulationen jeweils 14 oder 38 Tropfen um den Eiskristall verteilt sind, wurden deren individuelle Grenztemperaturen arithmetisch gemittelt. Wichtig hierbei ist, dass sich die Grenztemperaturen der einzelnen Tropfen nie mehr als  $1 \cdot 10^{-4}$  K voneinander unterscheiden. Tabelle 5.1 enthält die gemittelten Grenztemperaturen der Tropfen sowie die zugehörige asymptotische Gleichgewichtstemperatur. Es zeigen sich nur geringe absolute und relative Abweichungen. In Tabelle 5.2 sind die analogen Werte für den Eiskristall aufgetragen. Auch in diesem Fall zeigen sich nur geringe absolute und relative Abweichungen. Aus diesen Resultaten schliessen wir, dass keine weiteren Terme in der Kopplungsgleichung für die Temperatur  $T_*$  erforderlich sind.

Abschliessend wird die Wahl der Parameter aus Abschnitt 5.1.2 näher beleuchtet. In diesem Abschnitt wurde auf die Unsicherheiten bei der Parameterwahl hingewiesen, da entsprechende Beobachtungsdaten nicht verfügbar sind. Allerdings können Extremfälle betrachtet werden, die den möglichen Effekt der lokalen Interaktion bei Verwendung des vorgeschlagenen Modells veranschaulichen. Hierzu wird die Interaktionsgleichung (5.37) in die generische Form

$$\frac{d\rho_{v,*}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \rho_v(R_d) \right) - \frac{N_d}{V_k V} \frac{dm_w}{dt} - C (\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)), \quad (5.46)$$

mit einem Parameter  $C > 0$ , gebracht. Für den Parameter  $C$  bieten sich die zwei Extremfälle

- (1)  $C = 0$ ,

Tropfen- anzahl	Umgebungs- feuchte	Eiskristall- temperatur	Asymptotische Gleichgewichtstemperatur	Relative Abweichung
$N_d = 14$	RH = 86 %	258.1393 K	258.1338 K	$2.13 \cdot 10^{-5}$
$N_d = 14$	RH = 99 %	258.6582 K	258.6575 K	$2.71 \cdot 10^{-6}$
$N_d = 14$	RH = 101 %	258.7374 K	258.7375 K	$3.87 \cdot 10^{-7}$
$N_d = 38$	RH = 86 %	258.1466 K	258.1338 K	$4.95 \cdot 10^{-5}$
$N_d = 38$	RH = 99 %	258.6593 K	258.6575 K	$6.96 \cdot 10^{-6}$
$N_d = 38$	RH = 101 %	258.7376 K	258.7375 K	$3.86 \cdot 10^{-7}$

**Tabelle 5.2:** Vergleich der Grenztemperatur des Eiskristalls in den FEM-Simulationen mit der asymptotischen Gleichgewichtstemperatur aus (2.106).

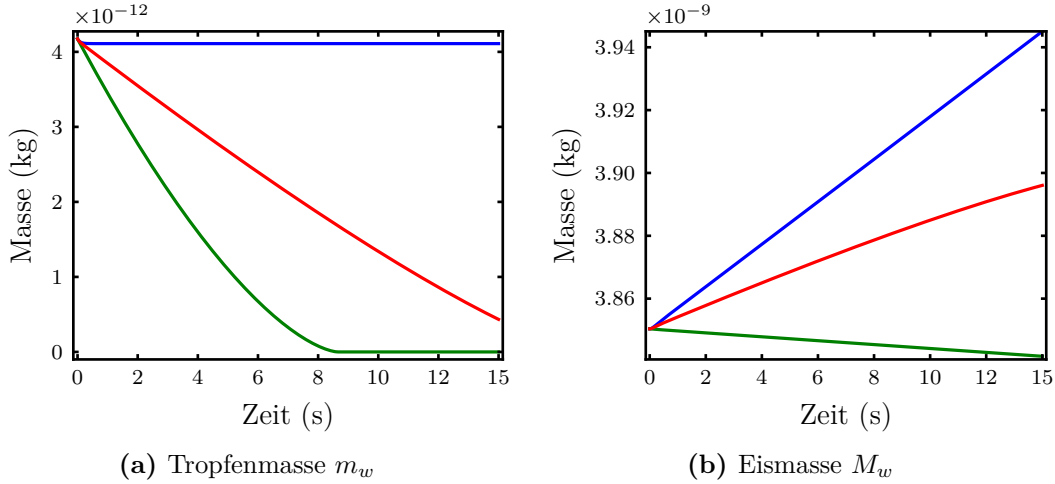
(2)  $C \rightarrow \infty$

an. Der erste Extremfall entspricht der Vernachlässigung der Relaxation der Kopplungsdichte  $\rho_{v,*}$  auf den Gleichgewichtswert  $\rho_v(R_d)$ . Konzeptionell wird hierbei die Diffusion von Wasserdampf vom Interaktionsradius in die Umgebung vernachlässigt. Die Wasserdampfdichte am Interaktionsradius kann daher nur durch das Anwachsen oder Verdampfen der Hydrometeore verändert werden. Im zweiten Extremfall wird eine instantane Relaxation auf den Gleichgewichtswert betrachtet. Dies kommt der Sichtweise der Maxwell-Theorie nahe. Der Unterschied zur Maxwell-Theorie, also der Vernachlässigung der lokalen Interaktion, besteht in der Verwendung der Kopplungswerte  $\rho_{v,*}$  und  $T_*$ , an Stelle der Umgebungswerte  $\rho_{v,\infty}$  und  $T_\infty$  in den Wachstumsgleichungen der Tropfen (5.25a) und (5.25b). Zur Veranschaulichung sind in Abbildung 5.8 die zeitlichen Entwicklungen der Tropfen- und Eiskristallmasse, zusammen mit den entsprechenden Extremfällen abgebildet, wobei das Szenario aus Unterabschnitt 5.1.3 mit RH = 85 % und  $N_d = 40$  verwendet wurde. Da gerade im bezüglich Wasser untersättigten Bereich die lokale Interaktion wichtig sein kann, zeigen die Graphen der Extremfälle einen entsprechend grossen Abstand zueinander.

### 5.1.5 Approximative Gleichungen

In Unterabschnitt 2.3.2 wurde eine Möglichkeit aufgezeigt, die Wachstumsgleichungen eines Hydrometeors zu vereinfachen. Hierbei wurde die Temperaturgleichung des Hydrometeors eliminiert. Analog dazu können die Temperaturgleichungen (5.25b) und (5.25d) eliminiert werden. Werden die entsprechenden Berechnungen wie in Abschnitt 2.3.2 ausgeführt, ergibt sich die approximative Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{dm_w}{dt} &= \frac{4\pi}{\left(\frac{L_{lv}(T_\infty)}{R_v T_\infty} - 1\right) \frac{L_{lv}(T_\infty) a_w}{K_0 T_\infty} + \frac{R_v T_\infty a_w}{\alpha_d D_{0pl,\infty}(T_\infty)}} \frac{r_d r_E}{r_E - r_d} (S_* - a_w) \\ &=: G_l \frac{r_d r_E}{r_E - r_d} (S_* - a_w) \end{aligned} \quad (5.47)$$



**Abbildung 5.8:** Zeitlicher Verlauf der Tropfen- und Eiskristallmasse für das Bulk-Modell bei  $RH = 85\%$  und  $N_d = 40$  (rote Kurve). Die möglichen Extremfälle entsprechen  $C = 0$  (blaue Kurve) und  $C \rightarrow \infty$  (grüne Kurve) in der Kopplungsgleichung (5.46).

für die Änderung der Tropfenmasse und

$$\begin{aligned} \frac{dM_w}{dt} &= \frac{4\pi}{\left(\frac{L_{iv}(T_\infty)}{R_v T_\infty} - 1\right) \frac{L_{iv}(T_\infty) A_w}{K_0 T_\infty} + \frac{R_v T_\infty A_w}{\alpha_i D_0 p_{i,\infty}(T_\infty)}} \frac{R_i R_d}{R_d - R_i} (S_{*,i} - A_w) \\ &=: G_i \frac{R_i R_d}{R_d - R_i} (S_{*,i} - A_w) \end{aligned} \quad (5.48)$$

für die Änderung der Eiskristallmasse. Mit  $a_w$  wird die Aktivität des Aerosols im Tropfen und mit  $A_w$  die Aktivität des Aerosols im Eiskristall bezeichnet. Die Sättigungsverhältnisse  $S_*$  und  $S_{*,i}$  sind durch

$$S_* = \frac{\rho_{v,*} R_v T_\infty}{p_{l,\infty}(T_\infty)} \quad \text{sowie} \quad S_{*,i} = \frac{\rho_{v,*} R_v T_\infty}{p_{i,\infty}(T_\infty)} \quad (5.49)$$

gegeben.

Zusätzlich zur Eliminierung der Temperaturgleichungen der Hydrometeore werden wir Gleichung (5.25f) für die Kopplungstemperatur  $T_*$  ignorieren, denn diese beschreibt lediglich die zeitliche Entwicklung des Vorgabewertes der Temperatur durch den Eiskristall. Da jedoch die Kopplungstemperatur in Gleichung (5.25e) der Kopplungsdichte im Vorgabewert  $\rho_v(R_d)$  des Eiskristalls enthalten ist, muss die Berechnung des Vorgabewertes angepasst werden. Eine Anpassung ist auf zwei Arten möglich:

- (1) Approximation der Oberflächendichte,
- (2) Grenzfall  $R_E \rightarrow \infty$ .

Für die erste Möglichkeit werden dieselben Gleichungen (5.27) und (5.29) verwendet und die Oberflächendichte  $\rho_{v,i}$  durch

$$\rho_{v,i} \approx \frac{p_{i,\infty}(T_i)}{R_v T_i} \approx \frac{p_{i,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty} \quad (5.50)$$

approximiert. Hierbei wurde, analog zu (5.31), zunächst der Einfluss der Krümmung und des Aerosols vernachlässigt und anschliessend die Temperatur  $T_i$  des Eiskristalls durch die Umgebungstemperatur  $T_\infty$  ersetzt. Hierdurch ergibt sich eine direkte Übertragung der ursprünglichen Gleichung für die Kopplungsdichte und die Kopplung ist unverändert. Allerdings bleibt die Gleichung für die Kopplungsdichte  $\rho_{v,*}$  weiterhin kompliziert.

Die zweite Möglichkeit zur Approximation des Vorgabewertes  $\rho_v(R_d)$  liefert eine etwas einfachere Gleichung für die Kopplungsdichte  $\rho_{v,*}$ . Hierzu wird der Grenzfall  $R_E \rightarrow \infty$  in (5.27) betrachtet. Mit derselben Approximation an die Oberflächendichte  $\rho_{v,i}$  wie in der ersten Möglichkeit, ergibt sich für den Vorgabewert

$$\begin{aligned}
 \rho_v(R_d) &\approx \rho_{v,\infty} + (\rho_{v,i} - \rho_{v,\infty}) \frac{R_i}{R_d} \\
 &= \rho_{v,\infty} + \left( \frac{p_{i,\infty}(T_i)}{R_v T_i} A_w \exp\left(\frac{2\sigma_i(T_i)}{R_v \rho_i(T_i) T_i R_i}\right) - \rho_{v,\infty} \right) \frac{R_i}{R_d} \\
 &\approx \rho_{v,\infty} + \left( \frac{p_{i,\infty}(T_i)}{R_v T_i} - \rho_{v,\infty} \right) \frac{R_i}{R_d} \\
 &\approx \rho_{v,\infty} + \left( \frac{p_{i,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty} - \rho_{v,\infty} \right) \frac{R_i}{R_d}.
 \end{aligned} \tag{5.51}$$

Für die Berechnung der zeitlichen Ableitung werden (5.35) sowie die Clausius-Clapeyron-Gleichung wie in (5.32) verwendet. Damit folgt

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}(\rho_v(R_d)) &\approx \left(1 - \frac{R_i}{R_d}\right) \frac{d\rho_{v,\infty}}{dt} + \frac{R_i}{R_d} \frac{d}{dt} \left( \frac{p_{i,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty} \right) \\
 &\quad + \left( \frac{p_{i,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty} - \rho_{v,\infty} \right) \frac{R_d - R_i}{R_d^2} \frac{dR_i}{dt} \\
 &= \left(1 - \frac{R_i}{R_d}\right) \frac{d\rho_{v,\infty}}{dt} + \frac{R_i}{R_d} \frac{p_{i,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty^2} \left( \frac{L_{iw}(T_\infty)}{R_v T_\infty} - 1 \right) \frac{dT_\infty}{dt} \\
 &\quad + \left( \frac{p_{i,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty} - \rho_{v,\infty} \right) \frac{R_d - R_i}{R_d^2} \frac{dR_i}{dt} \\
 &= \left(1 - \frac{R_i}{R_d}\right) \frac{d\rho_{v,\infty}}{dt} + \frac{R_i}{R_d} \frac{p_{i,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty^2} \left( \frac{L_{iw}(T_\infty)}{R_v T_\infty} - 1 \right) \frac{dT_\infty}{dt} \\
 &\quad + \left( \frac{p_{i,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty} - \rho_{v,\infty} \right) \frac{R_d - R_i}{4\pi \rho_i(T_\infty) R_i^2 R_d^2} \frac{dM_w}{dt}.
 \end{aligned} \tag{5.52}$$

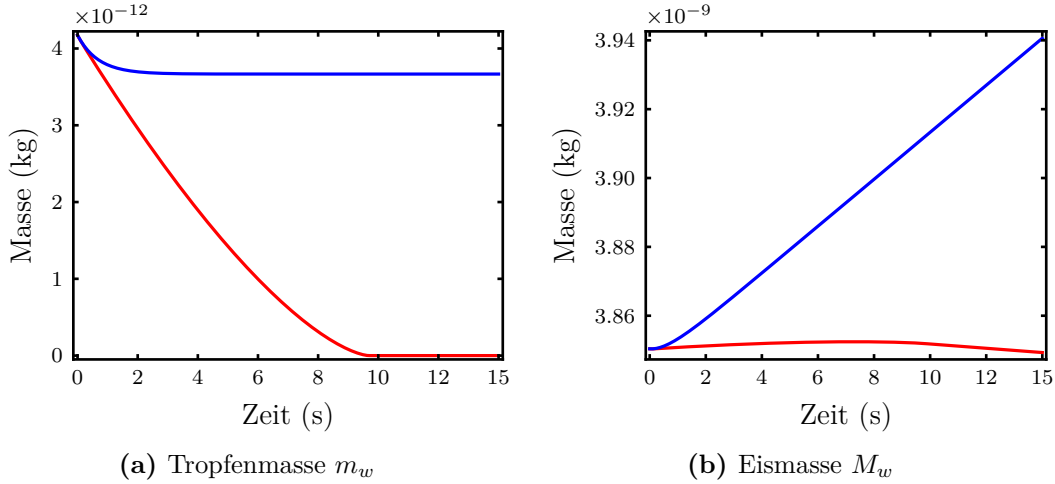
Auch in diesem Fall werden die zeitlichen Ableitungen der Umgebungswasserdampfdichte  $\rho_{v,\infty}$  und der Umgebungstemperatur  $T_\infty$  als 0 angenommen. Diese Ableitungen werden hingegen bei der Betrachtung eines Luftpaketes in Abschnitt 5.2 relevant.

Zusammenfassend besteht das vereinfachte Modell aus den prognostischen Variablen

$$x = (m_w, M_w, \rho_{v,*}) \tag{5.53}$$

und den zugehörigen Gleichungen

$$\frac{dm_w}{dt} = G_l \frac{r_d r_E}{r_E - r_d} (S_* - a_w), \tag{5.54a}$$



**Abbildung 5.9:** Zeitlicher Verlauf der Tropfen- und Eiskristallmasse berechnet mit dem vollständigen Modell (rote Kurve) und den vereinfachten Gleichungen (blaue Kurve). In (5.54c) wurde hierbei der letzte Summand entfernt.

$$\frac{dM_w}{dt} = G_i \frac{R_i R_d}{R_d - R_i} (S_{*,i} - A_w), \quad (5.54b)$$

$$\frac{d\rho_{v,*}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \rho_v(R_d) \right) - \frac{N_d}{\alpha_d V_k V} \frac{dm_w}{dt} - \frac{3D_0}{R_d} \frac{\rho_{v,*} - \rho_v(R_d)}{R_E - R_d}. \quad (5.54c)$$

Sowohl die Vorgabedichte  $\rho_v(R_d)$  des Eiskristalls als auch deren zeitliche Ableitung können entweder mit denselben Gleichungen wie im vollständigen Modell (zuvor diskutierte erste Möglichkeit) oder mit den weiter vereinfachten Gleichungen (5.51) und (5.52) berechnet werden (zuvor diskutierte zweite Möglichkeit).

Das vereinfachte Modell besitzt, neben den Variablen  $m_w$  und  $M_w$  für die Wassermassen des Tropfens und des Eiskristalls, noch eine dritte Variable für die Wasserdampfdichte am Interaktionsradius. Wünschenswert wäre ein vereinfachtes Modell, das lediglich die Variablen für die Wassermassen beinhaltet. Wäre in (5.54c) der Relaxationsanteil, das heisst der dritte Summand, nicht vorhanden, so könnte die rechte Seite dieser Gleichung – approximativ – als eine Zeitableitung geschrieben werden. In diesem Fall wäre die Elimination dieser Gleichung ebenfalls möglich. Tatsächlich kann dieser Summand nicht entfernt werden, da dies zu unphysikalischem Verhalten führt. Wir illustrieren dieses unphysikalische Verhalten anhand des Beispiels aus Abschnitt 5.1.3 mit  $RH = 85\%$  und  $N_d = 5$  Tropfen. In Abbildung 5.9 ist die Lösung des vollständigen Gleichungssystems (5.25) sowie die Lösung des vereinfachten Systems (5.54) abgebildet, wobei der letzte Summand in (5.54c) entfernt wurde. Dies entspricht dem Extremfall  $C = 0$  aus dem vorangegangenen Abschnitt 5.1.4. Zu Beginn verdunstet der Tropfen und setzt hierbei Wasserdampf frei. Da der Eiskristall als alleinige Senke diesen Wasserdampf nicht genügend schnell abbaut, kann sich der Tropfen stabilisieren und verdunstet nicht weiter, siehe Abbildung 5.9a. Die Kopplungsdichte  $\rho_{v,*}$  wurde durch das anfängliche Verdampfen des Tropfens erhöht und bewirkt ein schnelleres sowie länger andauerndes Wachstum des Eiskristalls, siehe Abbildung 5.9b.

$m_w$	Möglichkeit (1)	Möglichkeit (2)
RH = 101 %	$1.04 \cdot 10^{-3}$	$5.37 \cdot 10^{-3}$
RH = 93.2 %	$2.31 \cdot 10^{-3}$	$2.76 \cdot 10^{-3}$
RH = 85 %	$1.55 \cdot 10^{-2}$	$1.92 \cdot 10^{-2}$
<hr/>		
$M_w$		
RH = 101 %	$1.24 \cdot 10^{-4}$	$1.27 \cdot 10^{-4}$
RH = 93.2 %	$9.94 \cdot 10^{-5}$	$1.01 \cdot 10^{-4}$
RH = 85 %	$7.31 \cdot 10^{-5}$	$7.27 \cdot 10^{-5}$

**Tabelle 5.3:** Relative Fehler der approximativen Gleichungen in der Wassermasse  $m_w$  der Tropfen und der Wassermasse  $M_w$  des Eiskristalls im Vergleich zur Lösung des vollständigen Modells. Die Spalten entsprechen den im Unterabschnitt 5.1.5 vorgestellten Möglichkeiten zur Approximation von  $\rho_v(R_d)$ .

### Beispiel für die Approximationsgüte

Um die Güte der approximativen Gleichungen zu illustrieren, verwenden wir das in Unterabschnitt 5.1.3 beschriebene Beispiel und geben die relativen Fehler in der Wassermasse  $m_w$  der Tropfen sowie in der Wassermasse  $M_w$  des Eiskristalls an. Tabelle 5.3 enthält die relativen Abweichungen in  $m_w$  und  $M_w$  der Lösung der approximativen Gleichungen zur Referenzlösung von (5.25). Die jeweiligen Lösungen wurden numerisch mit dem BDF2-Verfahren (Hairer u. a., 1993, Kapitel III.1 Gleichung 1.22') mit einem Zeitschritt  $\Delta t = 1 \cdot 10^{-3}$  s auf dem Zeitintervall [0 s, 15 s] berechnet. Da im vorangegangenen Abschnitt zwei Möglichkeiten zur Approximation vorgestellt wurden, sind in Tabelle 5.3 die relativen Abweichungen für beide Möglichkeiten angegeben. Es zeigt sich, dass Möglichkeit (1), das heisst die Approximation der Oberflächendichte des Eiskristalls, etwas genauere Resultate liefert als Möglichkeit (2).

In diesen Fällen tritt kein vollständiges Verdampfen von Tropfen auf. Dies wird hingegen in den Box-Modell Simulationen in Abschnitt 5.2.2 auftreten und nach einer kompletten Verdampfung kann die Approximationsgüte schlechter sein als in Tabelle 5.3 gezeigt. Der Grund liegt möglicherweise im Auftreten von systematischen Fehlern bei der einfachen Approximation der Wasserdampfdichte an der Oberfläche der Hydrometeore, vergleiche die Diskussion in Unterabschnitt 2.5.1.

## 5.2 Box-Modell

In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie das Modell aus Abschnitt 5.1 in ein sogenanntes „Box-Modell“ eingebettet werden kann. Einem Box-Modell liegt die Idee eines thermodynamisch abgeschlossenen Luftpaketes zugrunde, das eine vorgegebene adiabatische Vertikalbewegung ausführt. Thermodynamische Abgeschlossenheit bedeutet, dass kein Massen- oder Energieaustausch des Luftpaketes mit der Umgebung stattfindet. Das Box-Modell wird dazu verwendet, die zeitlichen Verläufe der Konzentrationen der verschiedenen Formen des Wassers zu berechnen. Aus diesem Grund eignet sich ein

Box-Modell zum Studium des Verhaltens einer einzelnen Wolke (Wang, 2013, Kapitel 12; Rogers und Yau, 1989, Kapitel 3).

Für das Box-Modell betrachten wir im Folgenden ein thermodynamisch abgeschlossenes Luftpaket. Die Temperatur  $T_\infty$  und der Druck  $p_\infty$  der feuchten Luft im Luftpaket seien uniform. Das Wasser im Luftpaket sei aufgeteilt auf Wasserdampf, Tropfen und Eispartikel. Die zugehörigen Massen seien  $M_v$  für den Dampf,  $M_l$  für das flüssige Tropfenwasser und  $M_i$  für das feste Eiswasser. Zudem befinde sich trockene Luft der Masse  $M_t$  im Luftpaket. Aufgrund der Abgeschlossenheitsannahme sind die Masse der trockenen Luft  $M_t$  sowie die Gesamtwassermasse  $M_v + M_l + M_i$  konstant.

### 5.2.1 Beschreibung des Box-Modells

#### Luftpaket

Die Atmosphäre befindet sich in guter Näherung im hydrostatischen Gleichgewicht (Holton, 2004, Kapitel 2.3.4), weshalb die vertikale Druckänderung durch

$$\frac{dp_\infty}{dz} = -g\rho_\infty \quad (5.55)$$

beschrieben werden kann. Hierbei bezeichnet  $g$  die Erdbeschleunigung und  $\rho_\infty$  die Dichte der feuchten Luft. Besitzt das Luftpaket die Vertikalgeschwindigkeit  $w(t)$ , folgt aus (5.55) die Druckgleichung

$$\frac{dp_\infty}{dt} = \frac{dp_\infty}{dz} \frac{dz}{dt} = -g\rho_\infty w(t) = -g \frac{p_\infty}{\bar{R}T_\infty} w(t), \quad (5.56)$$

wobei die ideale Gasgleichung für feuchte Luft verwendet wurde. Die spezielle Gaskonstante  $\bar{R}$  für die feuchte Luft ist durch

$$\bar{R} = R_t \left( 1 + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \frac{q_v}{1 + q_v} \right) \quad (5.57)$$

gegeben (Rogers und Yau, 1989, Kapitel 2). Das Mischungsverhältnis  $q_v$  des Wasserdampfes sowie die Konstante  $\varepsilon$ , die das Verhältnis der speziellen Gaskonstante  $R_t$  von trockener Luft zur speziellen Gaskonstante  $R_v$  von Wasserdampf angibt, sind durch

$$q_v = \frac{M_v}{M_t} \quad \text{und} \quad \varepsilon = \frac{R_t}{R_v} \approx 0.622 \quad (5.58)$$

definiert.

Wegen der Vertikalbewegung ändert sich neben dem Druck auch die Temperatur  $T_\infty$ . Solange keine Kondensation im Luftpaket auftritt, folgt aus der Energieerhaltung die Gleichung (Pruppacher und Klett, 1997, Kapitel 12; oder Wang, 2013, Kapitel 12)

$$c_{p,f} dT_\infty - \bar{\alpha} dp_\infty = 0. \quad (5.59)$$

Das in (5.59) auftretende spezifische Volumen  $\bar{\alpha}$  der feuchten Luft ist durch  $\bar{\alpha}\rho_\infty = 1$  definiert und die spezifische Wärmekapazität  $c_{p,f}$  der feuchten Luft ist als

$$c_{p,f} = c_{p,t} \left( 1 + \left( \frac{c_{p,v}}{c_{p,t}} - 1 \right) \frac{q_v}{1 + q_v} \right) \quad (5.60)$$

gegeben (Rogers und Yau, 1989, Kapitel 2). Hierbei ist  $c_{p,t}$  die spezifische Wärmekapazität von trockener Luft. Mit der Druckgleichung (5.56) ergibt sich aus (5.59) die Differentialgleichung

$$\frac{dT_\infty}{dt} = \frac{\bar{\alpha}}{c_{p,f}} \frac{dp_\infty}{dt} = -g \frac{\bar{\alpha}}{c_{p,f}} \rho_\infty w(t) = -\frac{g}{c_{p,f}} w(t) \quad (5.61)$$

für die Temperaturänderung im Luftpaket ohne Kondensation.

Wird die Kondensation mit einbezogen, so muss neben der Temperaturänderung, aufgrund der Vertikalbewegung des Luftpaketes, auch die latente Wärme beim Anwachsen oder Verdampfen der Hydrometeore berücksichtigt werden. Gemäss Abschnitt 2.1 ändert sich die Temperatur  $T_k$  eines Hydrometeors  $\omega_k$  nach der Gleichung

$$c_{p,k} m_k \frac{dT_k}{dt} = L \frac{dm_k}{dt} + \int_{\partial\omega_k} K \langle \nabla T, N \rangle d\sigma, \quad (5.62)$$

wobei  $c_{p,k}$  die spezifische Wärmekapazität des Hydrometeors  $\omega_k$  bezeichnet,  $m_k$  seine Masse,  $L$  die latente Wärme,  $K$  die thermale Konduktivität und  $N$  den Normalenvektor an die Oberfläche  $\partial\omega_k$ . Insbesondere ist die Wärmemenge, die vom Hydrometeor an das Luftpaket abgegeben wird, nur durch die thermale Konduktion bestimmt, also dem zweiten Summanden auf der rechten Seite von (5.62). Mit anderen Worten ist die vom Hydrometeor  $\omega_k$  abgegebene Wärmemenge  $-dQ_{\text{Konduktion}}$  an das Luftpaket durch die Rate

$$-\frac{dQ_{\text{Konduktion}}}{dt} = \int_{\partial\omega_k} K \langle \nabla T, N \rangle d\sigma \quad (5.63)$$

bestimmt. Für die Wärmeänderung des Luftpaketes durch Konduktion gilt

$$c_{p,f}(M_v + M_t) dT_\infty = -dQ_{\text{Konduktion}} \quad (5.64)$$

und mit (5.63) ergibt sich die Rate

$$\frac{dT_\infty}{dt} = -\frac{1}{c_{p,f}(M_v + M_t)} \int_{\partial\omega_k} K \langle \nabla T, N \rangle d\sigma. \quad (5.65)$$

Da die Wärmeänderungen des Luftpaketes durch den Aufstieg und durch Konduktion unabhängig sind, ergibt sich die Gesamtwärmeänderung als die Summe von (5.61) und (5.65) zu

$$\frac{dT_\infty}{dt} = -\frac{g}{c_{p,f}} w(t) - \frac{1}{c_{p,f}(M_v + M_t)} \sum_k \int_{\partial\omega_k} K \langle \nabla T, N \rangle d\sigma. \quad (5.66)$$

Die Summe in (5.66) erstreckt sich über alle im Luftpaket enthaltenen Hydrometeore.

In der Literatur wird für die Temperaturänderung die Gleichung

$$\frac{dT_\infty}{dt} = -\frac{g}{c_{p,f}} w(t) + \frac{1}{c_{p,f}(M_v + M_t)} \sum_k L \frac{dm_k}{dt} \quad (5.67)$$

anstelle von Gleichung (5.66) angegeben, siehe beispielsweise Pruppacher und Klett (1997, Gleichung 12.15; mit angepasster Notation). Gleichung (5.67) wird unter der



Annahme eines räumlichen und zeitlichen thermodynamischen Gleichgewichts hergeleitet. Tatsächlich geht die hier hergeleitete Gleichung (5.66) in diesem Fall in (5.67) über, denn im Gleichgewicht muss die von einem Hydrometeor abgeführte Wärme durch Konduktion gerade der zugeführten Wärme durch die Kondensation oder Verdampfung entsprechen. In diesem Fall verschwindet die linke Seite in (5.62) und es folgt die Äquivalenz von (5.66) und (5.67). In Kapitel 2 wurde auf die schnelle Relaxation der Temperatur eines Hydrometeors auf die entsprechende Gleichgewichtstemperatur hingewiesen. Daher verschwindet die zeitliche Ableitung der Temperatur des Hydrometeors in (5.62) sehr schnell und (5.67) ist eine adäquate Approximation an (5.66).

### Hydrometeore innerhalb des Luftpaketes

Für die Einbettung des Modells aus Abschnitt 5.1 in das Box-Modell, wird zuerst die Beschreibung der Wassermassen präzisiert. Die Gesamtmasse der flüssigen Tropfen sei  $M_l$ . Diese Gesamtmasse teilen wir auf in die Gesamtmasse  $M_l^i$  aller Tropfen, die sich innerhalb einer Einflusskugel eines Eiskristalls befinden, und in die Gesamtmasse  $M_l^a$  aller Tropfen, die sich ausserhalb jeder Einflusskugel von Eiskristallen befinden. Die Gesamtmasse aller Eiskristalle sei  $M_i$ . Entsprechend der Massen werden auch die Temperaturen der Hydrometeore in  $T_d^i$ ,  $T_d^a$  und  $T_i$  aufgeteilt.

Wir nehmen ab jetzt monodisperse Massenverteilungen an. Wie in Abschnitt 5.1, sei  $N_d$  die Anzahl der Tropfen innerhalb jeder Einflusskugel eines Eiskristalls,  $\mathcal{N}_i$  die Anzahl Eiskristalle pro Kilogramm trockener Luft und  $\mathcal{N}_d^a$  die Anzahl Tropfen pro Kilogramm trockener Luft ausserhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle. Für die Gesamtmasse der Eiskristalle gilt  $M_i = \mathcal{N}_i M_w$ , wobei  $M_w$  die Masse eines einzelnen Eiskristalls bezeichnet, vergleiche Abschnitt 5.1.1. Zusätzlich sind die Mischungsverhältnisse  $q_l^a$  für alle Tropfen ausserhalb von Eiseinflusskugeln und  $q_l^i$  für alle Tropfen innerhalb von Eiseinflusskugeln durch

$$q_l^a := \frac{M_l^a}{M_t} \quad \text{und} \quad q_l^i := \frac{M_l^i}{M_t} \quad (5.68)$$

definiert. Mit diesen Definitionen ergeben sich die Gleichungen

$$q_i = \mathcal{N}_i M_w \quad \text{sowie} \quad q_l = q_l^a + q_l^i = \mathcal{N}_d^a m_w^a + N_d \mathcal{N}_i m_w^i. \quad (5.69)$$

Wie in Abschnitt 5.1.1, werden stets kugelförmige Hydrometeore angenommen. Daher lassen sich die Oberflächenintegrale in (5.66) wie in (2.60) berechnen. Für die Temperaturgleichung (5.66) ergibt sich damit

$$\begin{aligned} \frac{dT_\infty}{dt} &= -\frac{g}{c_{p,f}} w(t) - \frac{1}{c_{p,f}(M_v + M_t)} (\mathcal{N}_d^a M_t 4\pi r_d^a K_0 (T_\infty - T_d^a) \\ &\quad + N_d \mathcal{N}_i M_t 4\pi r_d^i K_0 (T_\infty - T_d^i) + \mathcal{N}_i M_t 4\pi R_i K_0 (T_\infty - T_i)) \\ &= -\frac{g}{c_{p,f}} w(t) - \frac{4\pi K_0 M_t}{c_{p,f}(M_v + M_t)} (\mathcal{N}_d^a r_d^a (T_\infty - T_d^a) \\ &\quad + N_d \mathcal{N}_i r_d^i (T_\infty - T_d^i) + \mathcal{N}_i R_i (T_\infty - T_i)) \\ &= -\frac{g}{c_{p,f}} w(t) - \frac{4\pi K_0}{c_{p,f}(1 + q_v)} (\mathcal{N}_d^a r_d^a (T_\infty - T_d^a) \\ &\quad + N_d \mathcal{N}_i r_d^i (T_\infty - T_d^i) + \mathcal{N}_i R_i (T_\infty - T_i)). \end{aligned} \quad (5.70)$$

Hierbei wurde ausgenutzt, dass beispielsweise  $\mathcal{N}_i M_t$  die Anzahl der Eiskristalle im Luftpaket angibt und dass

$$\frac{M_t}{M_v + M_t} = \frac{1}{1 + \frac{M_v}{M_t}} = \frac{1}{1 + q_v}, \quad (5.71)$$

mit dem Mischungsverhältnis  $q_v$  des Wasserdampfes, gilt. Für die Gleichgewichtsversion (5.67) der Temperaturgleichung folgt analog

$$\begin{aligned} \frac{dT_\infty}{dt} &= -\frac{g}{c_{p,f}} w(t) + \frac{1}{c_{p,f}(M_v + M_t)} \left( \mathcal{N}_d^a M_t L_{lv}(T_d^a) \frac{dm_w^a}{dt} \right. \\ &\quad \left. + N_d \mathcal{N}_i M_t L_{lv}(T_d^i) \frac{dm_w^i}{dt} + \mathcal{N}_i M_t L_{iv}(T_i) \frac{dM_w}{dt} \right) \\ &= -\frac{g}{c_{p,f}} w(t) + \frac{1}{c_{p,f}(1 + q_v)} \left( \mathcal{N}_d^a L_{lv}(T_d^a) \frac{dm_w^a}{dt} \right. \\ &\quad \left. + N_d \mathcal{N}_i L_{lv}(T_d^i) \frac{dm_w^i}{dt} + \mathcal{N}_i L_{iv}(T_i) \frac{dM_w}{dt} \right). \end{aligned} \quad (5.72)$$

Aufgrund der thermodynamischen Abgeschlossenheit des Luftpaketes und der damit verbundenen Massenerhaltung innerhalb des Paketes, sind die Grössen  $M_t$  und  $M_v + M_l + M_i$  konstant. Folglich gilt für das Mischungsverhältnis  $q_v$  des Wasserdampfes

$$\frac{dq_v}{dt} = -\frac{dq_l^a}{dt} - \frac{dq_l^i}{dt} - \frac{dq_i}{dt} = -\mathcal{N}_d^a \frac{dm_w^a}{dt} - \mathcal{N}_i \left( N_d \frac{dm_w^i}{dt} + \frac{dM_w}{dt} \right). \quad (5.73)$$

### Gleichungen des Box-Modells

Mit den beiden vorangegangenen Unterabschnitten haben wir alle notwendigen Gleichungen für das Box-Modell beschrieben. Die Gleichung (5.56) für die Druckänderung, zusammen mit der Gleichung (5.70) für die Temperaturänderung, beschreiben die Effekte der Vertikalbewegung des Luftpaketes sowie den Einfluss der latenten Wärme bei der Kondensation. Insbesondere in der Darstellung der Temperaturgleichung wurde die Annahme über monodisperse Massenverteilungen verwendet.

Die Differentialgleichungen der Mischungsverhältnisse der Hydrometeore sind wegen (5.69) durch

$$\frac{dq_i}{dt} = \mathcal{N}_i \frac{dM_w}{dt}, \quad (5.74a)$$

$$\frac{dq_l^a}{dt} = \mathcal{N}_d^a \frac{dm_w^a}{dt}, \quad (5.74b)$$

$$\frac{dq_l^i}{dt} = N_d \mathcal{N}_i \frac{dm_w^i}{dt} \quad (5.74c)$$

gegeben. Das Mischungsverhältnis des Wasserdampfes erfüllt (5.73). Die Entwicklung der Eismasse  $M_w$  und die Masse  $m_w^i$  der Tropfen innerhalb der Einflusskugeln von Eiskristallen sind durch die Modellgleichungen (5.25) aus Abschnitt 5.1.1 bestimmt. Die Tropfen ausserhalb der Einflusskugeln werden durch die Maxwell-Theorie beschrieben,

das heisst  $m_w^a$  und  $T_d^a$  erfüllen (2.86). Damit sind die prognostischen Variablen des Box-Modells

$$x = \left( p_\infty, T_\infty, N_d, q_v, m_w^a, T_d^a, m_w^i, T_d^i, M_w, T_i, \rho_{v,*}, T_* \right). \quad (5.75)$$

Wir werden in den Berechnungen stets voraussetzen, dass  $N_d$  konstant ist. Falls für  $N_d$  allerdings auch eine Gleichung angegeben werden kann, modelliert diese den Austausch von Tropfen aus den Einflusskugeln der Eiskristalle in die Umgebung. Eine passende Gleichung für diesen Austausch muss aus Informationen gewonnen werden, die nicht in diesem Modell enthalten sind. Konkret ist eine Kopplung an die Intensität der Turbulenz denkbar, denn diese ändert die Positionen der Hydrometeore oder bewirkt eine Häufung von Hydrometeoren in gewissen Bereichen (Vaillancourt und Yau, 2000; Grabowski und Wang, 2013). Zusätzlich zur Vernachlässigung des Tropfenaustausches werden im beschriebenen Box-Modell die Nukleation sowie die Sedimentation von Hydrometeoren nicht berücksichtigt. Mit Nukleation wird die Neuentstehung von Hydrometeoren beschrieben und mit Sedimentation deren Ausfallen aus dem Luftpaket.

### Weitere Zusammenhänge für das Box-Modell

Im letzten Teil dieses Abschnitts werden weitere, insbesondere für die Implementierung, relevanten Gleichungen angegeben. Durch die Vorgabe des Umgebungssättigungsverhältnisses  $S_\infty$  bezüglich Wasser gilt für den Partialdruck  $p_{v,\infty}$  des Wasserdampfes  $p_{v,\infty} = S_\infty p_{l,\infty}(T_\infty)$ . Aus dem Daltonschen Gesetz kann der Partialdruck  $p_{t,\infty}$  der trockenen Luft aus der Vorgabe des Gesamtdrucks  $p_\infty$  durch

$$p_{t,\infty} = p_\infty - p_{v,\infty} = p_\infty - S_\infty p_{l,\infty}(T_\infty) \quad (5.76)$$

berechnet werden. Die zugehörigen Dichten folgen mithilfe der idealen Gasgleichung als

$$\rho_{v,\infty} = \frac{p_{v,\infty}}{R_v T_\infty} = \frac{S_\infty p_{l,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty} \quad \text{und} \quad \rho_{t,\infty} = \frac{p_{t,\infty}}{R_t T_\infty}. \quad (5.77)$$

Die in (5.77) benötigten Partialdrücke lassen sich auch aus der Kenntnis des Wasserdampfemischungsverhältnisses  $q_v$  gewinnen. Sei hierzu  $V$  ein beliebiges Volumen, dann gilt wegen der idealen Gasgleichung

$$q_v = \frac{M_v}{M_t} = \frac{\frac{M_v}{V}}{\frac{M_t}{V}} = \frac{\frac{p_{v,\infty}}{R_v T_\infty}}{\frac{p_{t,\infty}}{R_t T_\infty}} = \frac{R_t}{R_v} \frac{p_{v,\infty}}{p_{t,\infty}} = \varepsilon \frac{p_{v,\infty}}{p_{t,\infty}}. \quad (5.78)$$

Aufgrund des Daltonschen Gesetzes folgt mit (5.78) für den Gesamtdruck

$$p_\infty = p_{t,\infty} + p_{v,\infty} = \varepsilon \frac{p_{v,\infty}}{q_v} + p_{v,\infty} = \left( \frac{\varepsilon}{q_v} + 1 \right) p_{v,\infty} \quad (5.79)$$

und daher für den Partialdruck des Wasserdampfes sowie die Wasserdampfdichte

$$p_{v,\infty} = \frac{p_\infty q_v}{\varepsilon + q_v} \quad \text{und} \quad \rho_{v,\infty} = \frac{p_{v,\infty}}{R_v T_\infty} = \frac{p_\infty q_v}{R_v T_\infty (\varepsilon + q_v)}. \quad (5.80)$$

Sind der Flüssigwassergehalt („liquid water content“) (LWC) und der Eiswassergehalt („ice water content“) (IWC) bekannt, so können über

$$q_i = \frac{\text{IWC}}{\rho_{t,\infty}} \quad \text{und} \quad q_l = \frac{\text{LWC}}{\rho_{t,\infty}} \quad (5.81)$$

die Mischungsverhältnisse für das Eis und das flüssige Wasser berechnet werden. Wird die Anzahl  $N_d$  von Tropfen in den Einflusskugeln der Eiskristalle sowie die Radien der Hydrometeore vorgegeben, ergibt sich aus der Kenntnis des LWC und IWC mit (5.81)

$$\mathcal{N}_i = \frac{q_i}{M_w} \quad \text{und} \quad \mathcal{N}_d^a = \frac{q_l^a}{m_w^a} = \frac{q_l - N_d \mathcal{N}_i m_w^i}{m_w^a}. \quad (5.82)$$

Die zeitlichen Verläufe der Sättigungsverhältnisse bezüglich flüssigem Wasser  $S_\infty$  und bezüglich Eis  $S_{\infty,i}$  können aus den Modellvariablen durch

$$S_\infty = \frac{p_{v,\infty}}{p_{l,\infty}(T_\infty)} = \frac{p_\infty - \rho_{t,\infty} R_t T_\infty}{p_{l,\infty}(T_\infty)} \quad \text{und} \quad S_{i,\infty} = S_\infty \frac{p_{l,\infty}(T_\infty)}{p_{i,\infty}(T_\infty)} \quad (5.83)$$

berechnet werden.

In Gleichung (5.29) für die Änderungsrate der Kopplungsdichte ist die zeitliche Ableitung der Umgebungsdichte  $\rho_{v,\infty}$  enthalten. Diese lässt sich aus der Darstellung (5.80) mit den Modellvariablen berechnen als

$$\frac{d\rho_{v,\infty}}{dt} = \frac{q_v}{R_v T_\infty (\varepsilon + q_v)} \frac{dp_\infty}{dt} + \frac{\varepsilon p_\infty}{R_v T_\infty (\varepsilon + q_v)^2} \frac{dq_v}{dt} - \frac{p_\infty q_v}{R_v T_\infty^2 (\varepsilon + q_v)} \frac{dT_\infty}{dt}. \quad (5.84)$$

### 5.2.2 Beispielsimulationen mit dem Box-Modell

In diesem Abschnitt werden Resultate von Simulationen des zuvor beschriebenen Box-Modells gezeigt. Für die durchgeführten Simulationen wurden verschiedene Parameter variiert:

- Der Interaktionsradius  $R_d$  durch verschiedene Wahlen für den Parameter  $\mathcal{D}_0$  aus (5.23), nämlich

$$\mathcal{D}_0 \in \{5R_i, 15R_i, 30R_i, 50R_i, 100R_i\} \quad (5.85)$$

mit dem Anfangsradius  $R_i = 100 \mu\text{m}$  der Eiskristalle.

- Die Anzahl  $N_d$  der Tropfen innerhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle, nämlich

$$N_d \in \{40, 100, 200, 500\}. \quad (5.86)$$

- Das Sättigungsverhältnis  $S_\infty$  bezüglich Wasser, nämlich

$$S_\infty \in \{0.847, 0.932, 1.01\}. \quad (5.87)$$

Diese Werte entsprechen den Sättigungsverhältnissen

$$S_{\infty,i} \in \{0.98, 1.079, 1.169\} \quad (5.88)$$

bezüglich Eis.

- Die Vertikalgeschwindigkeit  $w$  des Luftpaketes, nämlich

$$w \in \{0 \text{ m s}^{-1}, -1 \text{ m s}^{-1}, 1 \text{ m s}^{-1}\}. \quad (5.89)$$

Gemäss der Diskussion in Unterabschnitt 5.1.2, ist eine Abschätzung der möglichen Parameterwerte schwierig, denn entsprechende Beobachtungsdaten sind nicht verfügbar. Insbesondere die Abschätzung der Anzahl  $N_d$  von Tropfen innerhalb der Eiseinflusskugeln unterliegt einer sehr grossen Unsicherheit, da die kleinskalige Turbulenz für die Anhäufungen der Hydrometeore verantwortlich ist. Daher ist jeder Wert zwischen den in Unterabschnitt 5.1.2 abgeschätzten  $N_d = 30$  bis  $N_d = 800$  Tropfen möglich, was die Parameterwahl aus (5.86) erklärt.

Aufgeteilt nach den verwendeten Vertikalgeschwindigkeiten, werden diese Resultate im Folgenden diskutiert und abschliessend zusammengefasst. Zuvor wird noch die Wahl von typischen Werten für den LWC und IWC sowie von typischen Radien für die Hydrometeore diskutiert.

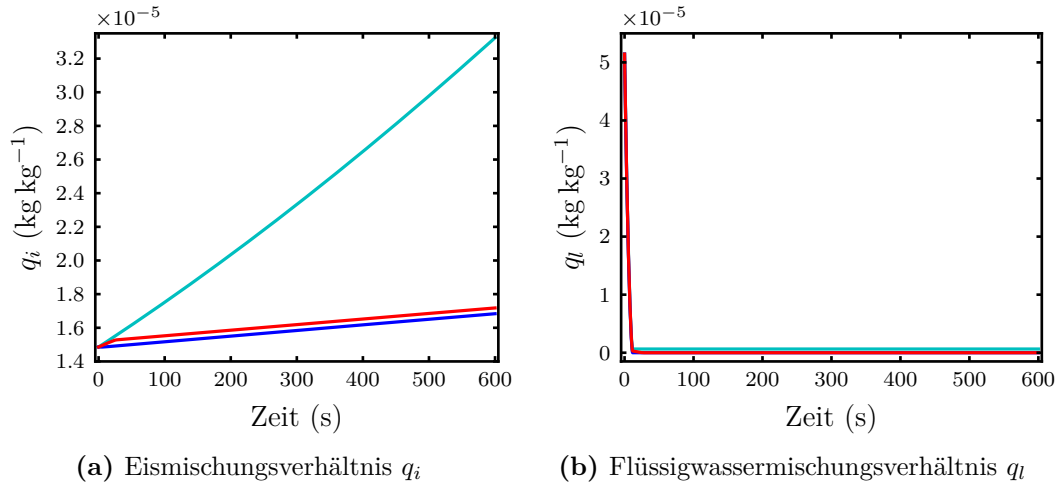
Ergebnisse von direkten Beobachtungsstudien in Mischphasenwolken finden sich beispielsweise in Fleishauer u. a., 2002; Hobbs u. a., 2001; Pinto u. a., 2001; Noh u. a., 2013; Zhao und Lei, 2014; Lloyd u. a., 2015; Verlinde u. a., 2007. In Korolev u. a. (2003) wurden Daten aus verschiedenen Messflügen gesammelt und analysiert. In allen Studien zeigt sich eine deutliche Streuung der mikrophysikalischen Parameter, insbesondere in den Werten des LWC und IWC. Als typische Werte verwenden wir  $\text{LWC} = 0.045 \text{ g m}^{-3}$  (Korolev u. a., 2003) sowie  $\text{IWC} = 0.013 \text{ g m}^{-3}$  (Fleishauer u. a., 2002). Der Wert für den IWC ist etwas kleiner als der durchschnittliche Wert von  $0.04 \text{ g m}^{-3}$  aus Korolev u. a. (2003). Es ist allerdings zu beachten, dass in diesen Durchschnittswert auch Messdaten von Flüssigwasserwolken eingegangen sind. Ein typischer Wert aus den vorgenannten Studien für die Radien der Tropfen ist  $10 \mu\text{m}$ . Die Variabilität in den Grössen der Eiskristalle ist hingegen grösser. Aus den Studien geht hervor, dass die Eiskristalle in Mischphasenwolken häufig kleiner sind als in Eiswolken (Korolev u. a., 2003). Ein mittlerer Radius für einen Eiskristall von  $100 \mu\text{m}$  scheint angebracht.

Für die Temperatur  $T_\infty$  sowie den Gesamtdruck  $p_\infty$  des Luftpaketes zu Beginn der Simulationen wurden  $T_\infty = -15^\circ\text{C}$  und  $p_\infty = 650 \text{ hPa}$  gewählt. In den Abbildungen der gezeigten Resultate werden stets auch Extremfälle gezeigt, um die mögliche Intensität der lokalen Interaktion zu verdeutlichen. Die Extremfälle sind durch  $C = 0$ , was der in Abschnitt 5.1.4 beschriebenen Vernachlässigung der Relaxation der Kopplungsdichte auf den Gleichgewichtswert entspricht, sowie der klassischen Berechnung, ohne die Berücksichtigung der lokalen Interaktion, gegeben. Die zugehörigen Kurven der Extremfälle werden in den Abbildungen durch „ohne Relaxation“, für den Fall  $C = 0$ , und „klassisch“, für den Fall der Vernachlässigung der lokalen Interaktion, referenziert.

### Vertikalgeschwindigkeit $w = 0 \text{ m s}^{-1}$

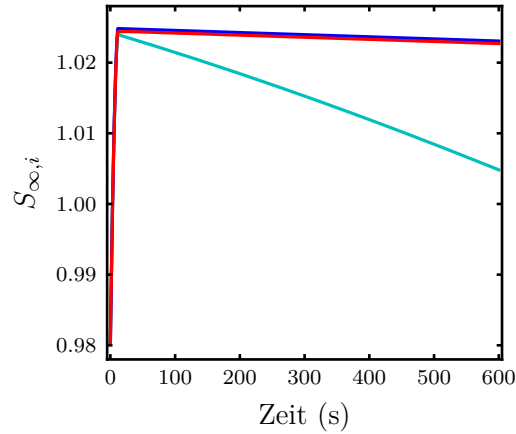
Zuerst wird ein Luftpaket mit verschwindender Vertikalgeschwindigkeit betrachtet. Dieses kommt der Sichtweise aus der Herleitung des Modells in Abschnitt 5.1 am nächsten.

Im ersten Fall seien  $N_d = 40$  Tropfen in der Einflusskugel von jedem Eiskristall vorhanden. Der Abstand der Tropfen vom Eiskristall sei  $\mathcal{D}_0 = 5R_i = 5 \cdot 100 \mu\text{m}$  und für die Umgebungssättigung gelte  $S_\infty = 0.847$ , was einem Sättigungsverhältnis von  $S_{\infty,i} = 0.98$



**Abbildung 5.10:** Box-Modell Simulation mit  $w = 0 \text{ m s}^{-1}$ ,  $N_d = 40$  Tropfen in jeder Einflusskugel der Eiskristalle bei einer Umgebungssättigung  $S_\infty = 0.847$  und einem Tropfenabstand von  $\mathcal{D}_0 = 5R_i$ . Die Kurven entsprechen dem Resultat für das vollständige Modell (rot), dem Extremfall „klassisch“ (blau) sowie dem Extremfall „ohne Relaxation“ (cyan).

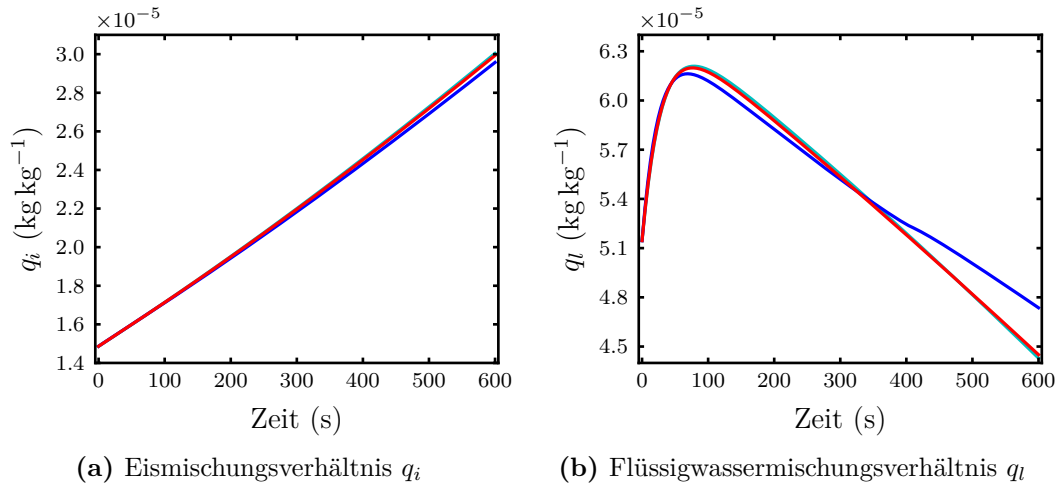
bezüglich Eis entspricht. Insbesondere ist die Umgebung bezüglich Eis und Wasser untersättigt. Die zeitliche Entwicklung des Mischungsverhältnisses  $q_i$  bezüglich Eis und des Mischungsverhältnisses  $q_l$  bezüglich Wasser sind in Abbildung 5.10 dargestellt. Die Bandbreite der möglichen Werte, die durch die Kurven der beiden Extremfälle markiert wird, ist in diesem untersättigten Regime sehr gross. Die Kurve für das Mischungsverhältnis des Eises verläuft solange entlang der Kurve für den Extremfall „ohne Relaxation“, bis alle Tropfen innerhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle verdampft sind, vergleiche Abbildung 5.10a. Beim ersten Knick der Kurve für das Mischungsverhältnis  $q_l$  des Wassers in Abbildung 5.10b, sind alle Tropfen ausserhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle verdampft, es gilt  $q_l^a = 0$ . Beim zweiten Knick dieser Kurve sind auch alle Tropfen innerhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle verdampft, es gilt zusätzlich  $q_l^i = 0$ . Durch die Präsenz der Eiskristalle wird die lokale Wasserdampfdichte  $\rho_{v,*}$  im Vergleich zur Umgebungswasserdampfdichte  $\rho_{v,\infty}$  erhöht, da die Umgebung bezüglich Eis untersättigt ist. Die Tropfen innerhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle befinden sich daher in einem etwas weniger untersättigten Umfeld und verdampfen langsamer. Dieser Effekt wurde bereits in Unterabschnitt 4.3.2 beschrieben. Die Tropfen ausserhalb der Einflusskugeln sind der massiven Untersättigung der Umgebung ausgesetzt und verdampfen schneller. Der Knick in der Kurve des Eismischungsverhältnisses  $q_i$  in Abbildung 5.10a fällt mit dem Zeitpunkt der vollständigen Verdampfung der Tropfen innerhalb der Einflusskugeln zusammen. Hierdurch entfällt die lokale Wasserdampfquelle für die Eiskristalle und sie wachsen langsamer an. Die verdampften Tropfen haben dem Luftpaket genügend Wasserdampf zugeführt, so dass sich eine Übersättigung bezüglich Eis gebildet hat, vergleiche Abbildung 5.11. Aus diesem Grund wachsen die Eiskristalle weiter an, obwohl das Luftpaket zu Beginn der Simulation bezüglich Eis untersättigt war.



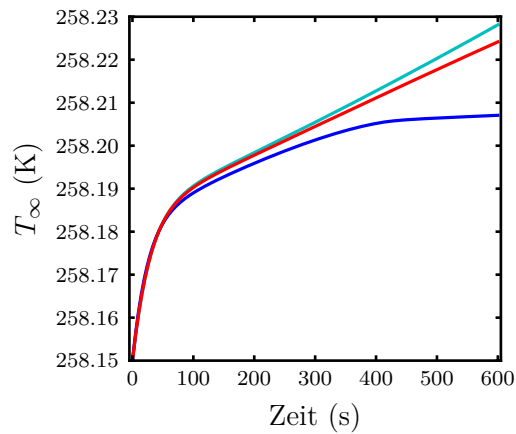
**Abbildung 5.11:** Zeitliche Entwicklung des Sättigungsverhältnisses  $S_{\infty,i}$  bezüglich Eis für dieselbe Simulation wie in Abbildung 5.10.

In einer bezüglich Wasser übersättigten Umgebung mit  $S_{\infty} = 1.01$ , ist der lokale Effekt in den Massenmischungsverhältnissen nur wenig sichtbar. Lediglich für kleine Entfernungen der Tropfen in den Einflusskugeln vom jeweiligen Eiskristall ist ein Effekt zu beobachten. Der lokale Effekt tritt unter diesen Umgebungsbedingungen typischerweise für  $\mathcal{D}_0 = 5R_i$  auf. Falls eine moderate Entfernung von  $\mathcal{D}_0 = 30R_i$  der Tropfen vom Eiskristall vorgeschrieben wird, so ist selbst mit der hohen Tropfenanzahl von  $N_d = 500$  der lokale Effekt bei  $S_{\infty} = 1.01$  vernachlässigbar, wie Abbildung 5.12 demonstriert. Die Kurven für die Mischungsverhältnisse weichen nur wenig von den Kurven des Extremfalles „klassisch“ ab, welche dem Vernachlässigen der lokalen Interaktion entsprechen. In Abbildung 5.13 ist der zeitliche Verlauf der Temperatur  $T_{\infty}$  des Luftpaketes dargestellt. Im Vergleich zur klassischen Simulation, in welcher der lokale Effekt vernachlässigt wird, ist das Luftpaket durch die Berücksichtigung der lokalen Effekte wärmer. Diese Erwärmung wird durch das Freisetzen von latenter Wärme beim Diffusionswachstum der Hydrometeore verursacht. Die Erwärmung des Luftpaketes hält auch nach 100 s an, wenn die Tropfenmasse bereits abnimmt und die Tropfen durch ihre Verdampfung das Luftpaket kühlen. Daher wird die beobachtete Erwärmung durch das Anwachsen der Eiskristalle hervorgerufen.

Der in den durchgeführten Simulationen grösste Temperatureffekt trat bei einem Sättigungsverhältnis  $S_{\infty} = 1.01$  bezüglich Wasser in der Umgebung sowie  $N_d = 500$  Tropfen in jeder Eiseinflusskugel mit einem Tropfenabstand  $\mathcal{D}_0 = 5R_i$  auf, vergleiche Abbildung 5.14a. Das Flüssigwassermischungsverhältnis nimmt bereits nach kurzer Zeit wieder ab, vergleiche Abbildung 5.14b. Dies zeigt erneut, dass die beobachtete Erwärmung durch die erhöhte Wachstumsrate der Eiskristalle hervorgerufen wird. Die Erhöhung der Wachstumsrate wird durch die Anzahl  $N_d$  der Tropfen in jeder Eiseinflusskugel sowie dem Umgebungsmischungsverhältnis beeinflusst. Ist das Luftpaket zu Beginn bezüglich Wasser übersättigt, so erzeugt der Eiskristall lokal eine Untersättigung bezüglich Wasser und die verdampfenden Tropfen innerhalb der Einflusskugel erhöhen die Wachstumsrate des Eiskristalls. Ist das Luftpaket zu Beginn bezüglich Wasser untersättigt, so existieren aus Sicht der Tropfen in den Einflusskugeln zwei Wasserdampfsenken, nämlich der

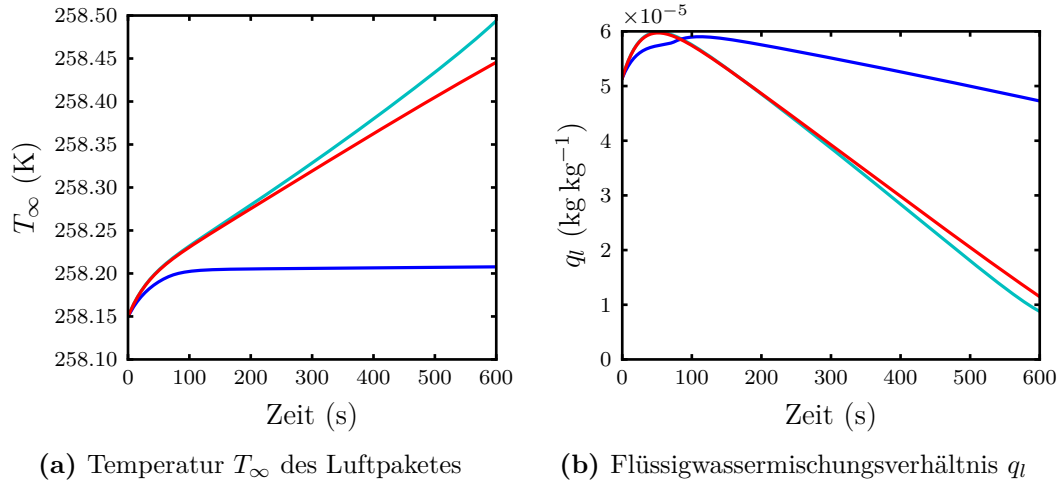


**Abbildung 5.12:** Box-Modell Simulation mit  $w = 0 \text{ m s}^{-1}$ ,  $N_d = 500$  Tropfen in jeder Einflusskugel der Eiskristalle bei einer Umgebungssättigung  $S_\infty = 1.01$  und einem Tropfenabstand von  $\mathcal{D}_0 = 30R_i$ . Die Kurven entsprechen dem Resultat für das vollständige Modell (rot), dem Extremfall „klassisch“ (blau) sowie dem Extremfall „ohne Relaxation“ (cyan).



**Abbildung 5.13:** Zeitliche Entwicklung der Temperatur des Luftpaketes für dieselbe Simulation wie in Abbildung 5.12.





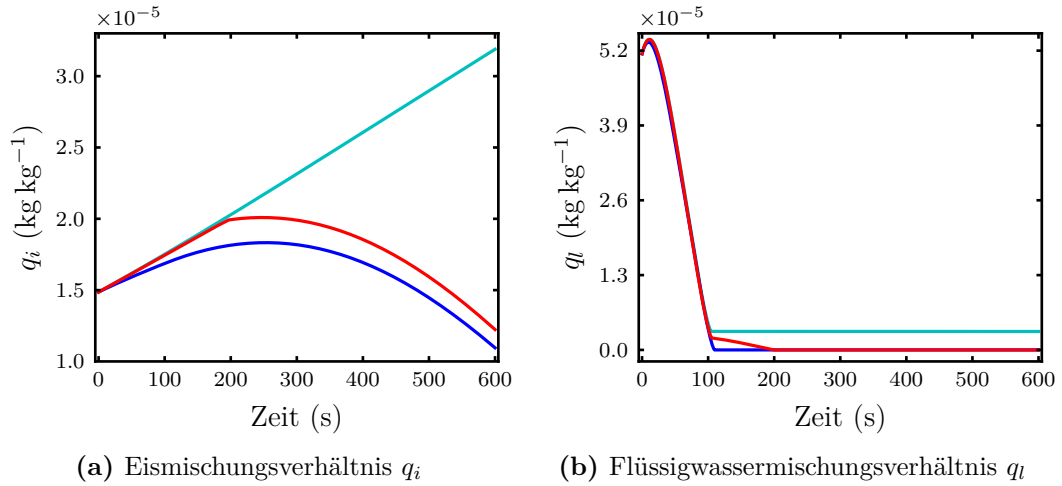
**Abbildung 5.14:** Box-Modell Simulation mit  $w = 0 \text{ m s}^{-1}$ ,  $N_d = 500$  Tropfen in jeder Einflusskugel der Eiskristalle bei einer Umgebungssättigung  $S_\infty = 1.01$  und einem Tropfenabstand von  $\mathcal{D}_0 = 5R_i$ . Die Kurven entsprechen dem Resultat für das vollständige Modell (rot), dem Extremfall „klassisch“ (blau) sowie dem Extremfall „ohne Relaxation“ (cyan).

Eiskristall und die Umgebung. Daher wird die Wachstumsrate der Eiskristalle nicht so stark erhöht wie im Fall einer bezüglich Wasser übersättigten Umgebung. Mit anderen Worten ist eine Auswirkung der lokalen Interaktion auf die Temperatur des Luftpaketes in bezüglich Wasser übersättigten Umgebungen zu erwarten.

### Vertikalgeschwindigkeit $w = -1 \text{ m s}^{-1}$

In einem Abwind der Geschwindigkeit  $w = -1 \text{ m s}^{-1}$  nimmt die Sättigung aufgrund der Abwärtsbewegung des Luftpaketes ab. Daher wird ein Verdampfen der Hydrometeore erwartet. Im Fall eines Tropfenabstands von  $\mathcal{D}_0 = 5R_i$ , einer Tropfenanzahl von  $N_d = 200$  und einem Sättigungsverhältnis  $S_\infty = 1.01$ , ergeben sich die Kurven für die Mischungsverhältnisse aus Abbildung 5.15. Aus dem Verlauf des Mischungsverhältnisses des Eises in Abbildung 5.15a wird deutlich, dass die Eiskristalle im Vergleich zum Extremfall „klassisch“ länger existieren können. Durch den lokalen Effekt können auch die Tropfen innerhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle länger existieren, was die Knicke in der Kurve von Abbildung 5.15b erklärt. Durch das lokale Feld der Wasserdampfdichte um den Eiskristall befinden sich die Tropfen innerhalb der Einflusskugel in einem weniger untersättigten Umfeld als die Tropfen ausserhalb der Einflusskugeln. Der erste Knick kennzeichnet das vollständige Verdampfen der Tropfen ausserhalb aller Einflusskugeln und der zweite Knick das vollständige Verdampfen der Tropfen innerhalb der Einflusskugeln. Die Nähe zu den Eiskristallen ermöglicht den Tropfen in diesem Beispiel bis zu 100s länger zu existieren. Wird der Abstand  $\mathcal{D}_0$  der Tropfen von den Eiskristallen vergrössert, so wird der Effekt geringer.

Für eine Entfernung der Tropfen vom Eiskristall von  $\mathcal{D}_0 = 30R_i$ , dem Sättigungsverhältnis  $S_\infty = 1.01$  und  $N_d = 500$  Tropfen, ist der lokale Effekt auch für eine moderate



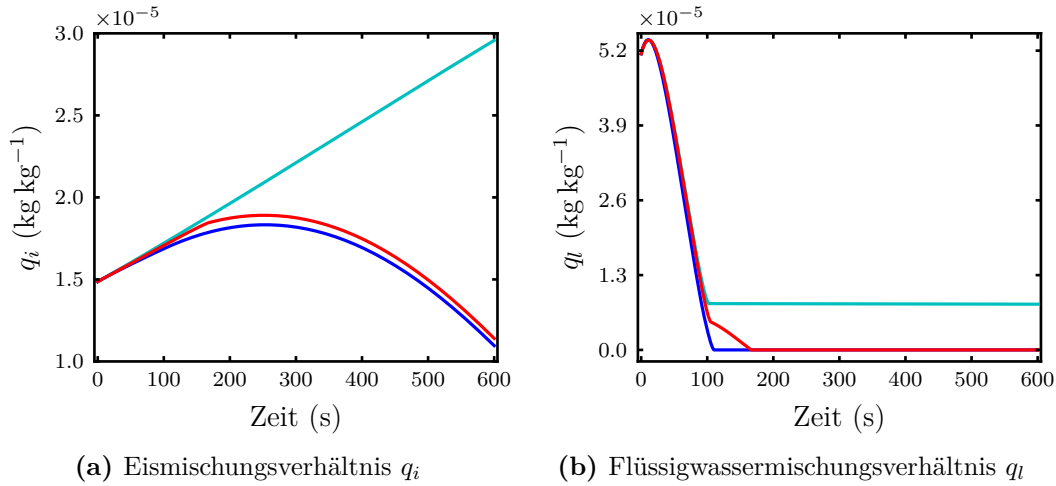
**Abbildung 5.15:** Box-Modell Simulation mit  $w = -1 \text{ m s}^{-1}$ ,  $N_d = 200$  Tropfen in jeder Einflusskugel der Eiskristalle bei einer Umgebungssättigung  $S_\infty = 1.01$  und einem Tropfenabstand von  $\mathcal{D}_0 = 5R_i$ . Die Kurven entsprechen dem Resultat für das vollständige Modell (rot), dem Extremfall „klassisch“ (blau) sowie dem Extremfall „ohne Relaxation“ (cyan).

Entfernung der Tropfen vom Eiskristall sichtbar, vergleiche Abbildung 5.16. Wichtig für die Sichtbarkeit des lokalen Effekts ist hierbei die Erhöhung der Anzahl von Tropfen innerhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle. Auch in diesem Fall verzögert sich das komplette Verdampfen der Tropfen innerhalb der Einflusskugeln um ungefähr 50 s, vergleiche Abbildung 5.16b.

Die Änderung der Temperatur  $T_\infty$  des Luftpaketes ist in den durchgeführten Simulationen mit negativer Vertikalgeschwindigkeit vernachlässigbar. Im Fall einer verschwindenden Vertikalgeschwindigkeit wurde erklärt, dass ein sichtbarer Temperatureffekt nur in bezüglich Wasser übersättigten Umgebungen zu erwarten ist. Durch den Abstieg des Luftpaketes nehmen die Sättigungsverhältnisse jedoch kontinuierlich ab und nach kurzer Zeit ist das Luftpaket bezüglich Wasser untersättigt.

### Vertikalgeschwindigkeit $w = 1 \text{ m s}^{-1}$

Für Aufwinde ist der lokale Effekt in den durchgeführten Simulationen nicht signifikant sichtbar. Selbst für das bezüglich Wasser massiv untersättigte Regime  $S_\infty = 0.847$  mit einem geringen Tropfenabstand von  $\mathcal{D}_0 = 5R_i$  und einer hohen Tropfenanzahl von  $N_d = 500$ , ist der lokale Effekt für die Eiskristalle klein, vergleiche Abbildung 5.17a. Durch den Aufstieg kühlt sich das Luftpaket kontinuierlich ab, wodurch das Sättigungsverhältnis erhöht wird. Bemerkenswert ist, dass die Tropfen innerhalb der Einflusskugeln die Zeit bis zur Sättigung des Luftpaketes bezüglich Wasser überbrücken können, während alle Tropfen ausserhalb der Einflusskugeln bereits durch die anfängliche Untersättigung bezüglich Wasser verdampft sind. Die Sättigung bezüglich Wasser tritt nach ungefähr 200 s ein, vergleiche Abbildung 5.18. Da in diesem Box-Modell keine Nukleation berücksichtigt wird, nimmt das Sättigungsverhältnis monoton zu. Dies führt


 (a) Eismischungsverhältnis  $q_i$ 

 (b) Flüssigwassermischungsverhältnis  $q_l$ 

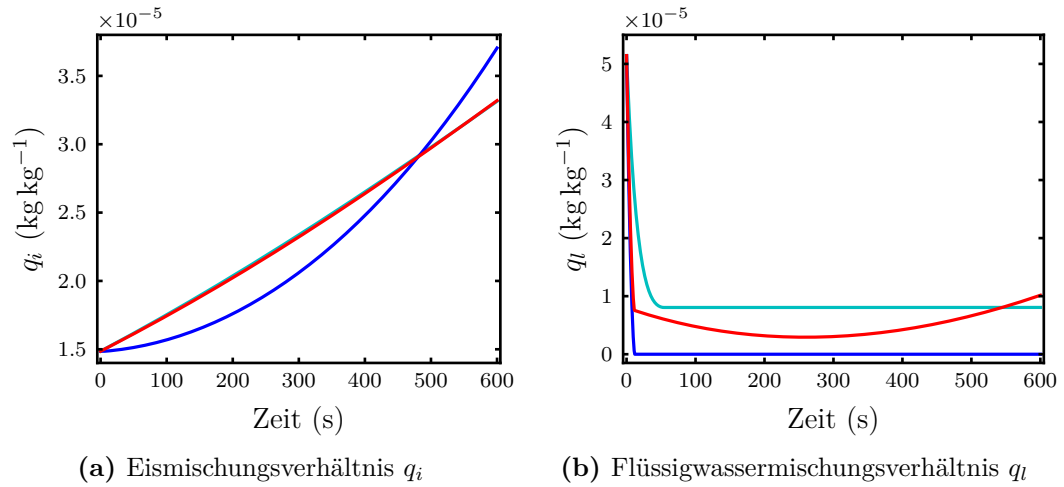
**Abbildung 5.16:** Box-Modell Simulation mit  $w = -1 \text{ m s}^{-1}$ ,  $N_d = 500$  Tropfen in jeder Einflusskugel der Eiskristalle bei einer Umgebungssättigung  $S_\infty = 1.01$  und einem Tropfenabstand von  $\mathcal{D}_0 = 30R_i$ . Die Kurven entsprechen dem Resultat für das vollständige Modell (rot), dem Extremfall „klassisch“ (blau) sowie dem Extremfall „ohne Relaxation“ (cyan).

zu unrealistisch hohen Übersättigungen bezüglich Wasser von 10% nach ungefähr 350 s. In der Realität werden solche Übersättigungen durch die Aktivierung neuer Tropfen und anschließendem Anwachsen schnell abgebaut (Lamb und Verlinde, 2011, Kapitel 10).

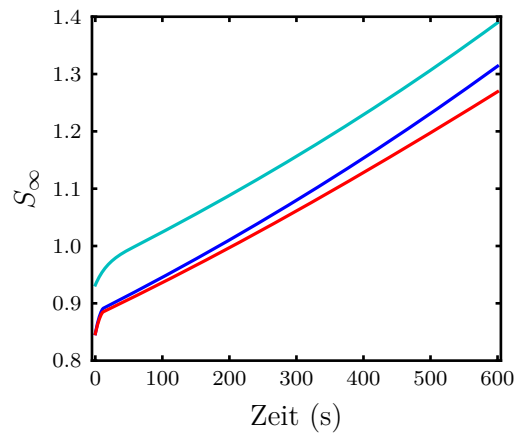
Betrachten wir hingegen ein Luftpaket mit anfänglichem Sättigungsverhältnis  $S_\infty = 1.01$ , das heisst einer Übersättigung bezüglich Wasser. Mit einem Tropfenabstand von  $\mathcal{D}_0 = 5R_i$  sowie  $N_d = 500$  Tropfen pro Eiseinflusskugeln, ergeben sich die zeitlichen Verläufe der Mischungsverhältnisse aus Abbildung 5.19. Die Eiskristalle weisen ein leicht erhöhtes Wachstum auf, im Vergleich zum Fall ohne Berücksichtigung der lokalen Interaktion, wohingegen die Tropfen weniger stark anwachsen. Dennoch reicht das leicht erhöhte Wachstum der Eiskristalle aus, um die Temperatur des Luftpaketes um ungefähr 0.25 K zu erhöhen, vergleiche Abbildung 5.20a. Hierbei bleibt das Sättigungsverhältnis bezüglich Wasser in einem realistischen Rahmen, vergleiche Abbildung 5.20b. Innerhalb der mit der Vertikalgeschwindigkeit  $1 \text{ m s}^{-1}$  durchgeführten Simulationen entspricht dieser Fall dem ausgeprägtesten Temperatureffekt.

### Zusammenfassung der Simulationen

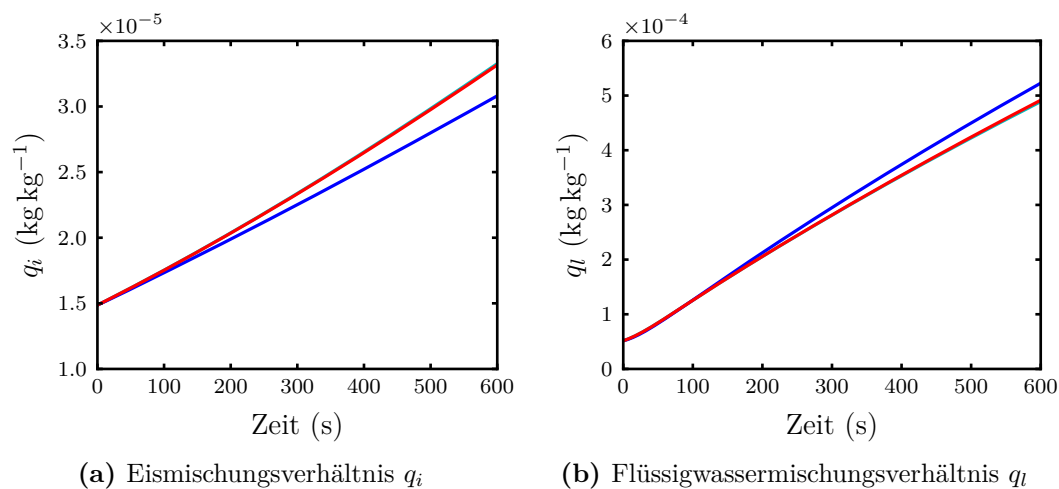
Mit den durchgeführten Simulationen wurde gezeigt, dass der Effekt der lokalen Interaktion zwischen den Hydrometeoren umso deutlicher wird, je kleiner der Abstand der Tropfen vom Eiskristall ist und je mehr Tropfen innerhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle vorhanden sind. Mit anderen Worten wird der Effekt der lokalen Interaktion durch eine Verminderung von  $\mathcal{D}_0$  oder eine Erhöhung von  $N_d$  verstärkt. Diese Abhängigkeit von den Parametern konnte aufgrund der Konstruktion des lokalen Interaktionsmodells in Abschnitt 5.1.1 erwartet werden und ist unabhängig von den anderen Parametern. Die Simulationen wurden stets mit einem Eiskristallradius von  $R_i = 100 \mu\text{m}$  durchgeführt.



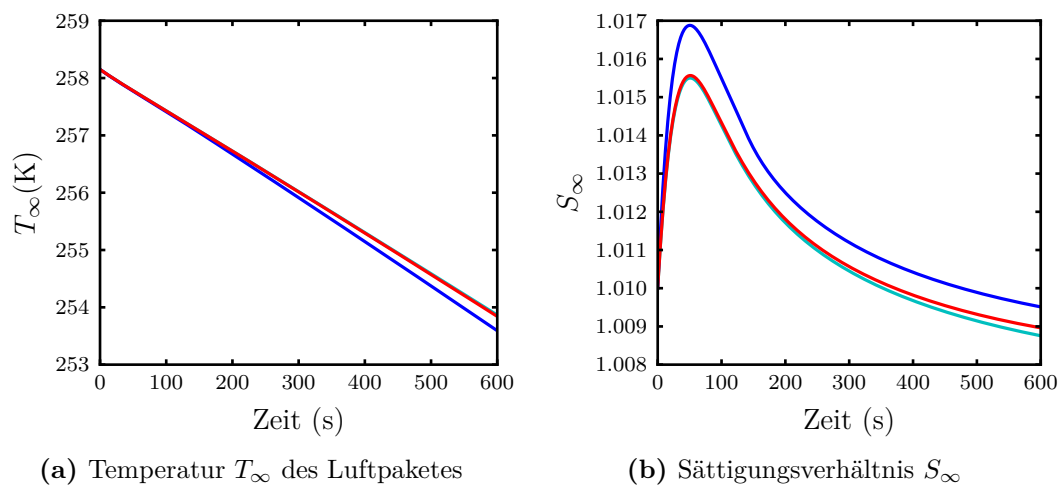
**Abbildung 5.17:** Box-Modell Simulation mit  $w = 1 \text{ m s}^{-1}$ ,  $N_d = 500$  Tropfen in jeder Einflusskugel der Eiskristalle bei einer Umgebungssättigung  $S_\infty = 0.847$  und einem Tropfenabstand von  $\mathcal{D}_0 = 5R_i$ . Die Kurven entsprechen dem Resultat für das vollständige Modell (rot), dem Extremfall „klassisch“ (blau) sowie dem Extremfall „ohne Relaxation“ (cyan).



**Abbildung 5.18:** Zeitliche Entwicklung des Sättigungsverhältnisses  $S_\infty$  bezüglich flüssigem Wasser für dieselbe Simulation wie in Abbildung 5.17.



**Abbildung 5.19:** Box-Modell Simulation mit  $w = 1 \text{ m s}^{-1}$ ,  $N_d = 500$  Tropfen in jeder Einflusskugel der Eiskristalle bei einer Umgebungssättigung  $S_\infty = 1.01$  und einem Tropfenabstand von  $\mathcal{D}_0 = 5R_i$ . Die Kurven entsprechen dem Resultat für das vollständige Modell (rot), dem Extremfall „klassisch“ (blau) sowie dem Extremfall „ohne Relaxation“ (cyan).



**Abbildung 5.20:** Zeitliche Entwicklung der Temperatur  $T_\infty$  des Luftpaketes sowie des Sättigungsverhältnisses  $S_\infty$  bezüglich Wasser für dieselbe Simulation wie in Abbildung 5.19.

Ein veränderter Eiskristallradius ändert lediglich die Änderungsrate der Eiskristallmasse und damit die generelle Intensität und Dauer der lokalen Interaktion, aber nicht den qualitativen Einfluss der Parameter  $\mathcal{D}_0$  und  $N_d$ .

Führt das Luftpaket keine Vertikalbewegung aus, so bewirkt die lokale Interaktion die Verstärkung des Wachstums der Eiskristalle, insbesondere in einer bezüglich Wasser untersättigten Umgebung. Dies passt zur Simulation des Referenzmodells mit mehreren Hydrometeoren in einer bezüglich Wasser und Eis untersättigten Umgebung, vergleiche Unterabschnitt 4.3.3. Im Vergleich zur Simulation mit einer Wasserübersättigung in der Umgebung, ist hier die lokale Interaktion deutlicher ausgeprägt.

Durch eine Abwärtsbewegung wird eine vormals bezüglich Wasser übersättigte Umgebung, aufgrund der durch den Abstieg verbundenen adiabatischen Erwärmung, untersättigt. Die lokale Interaktion bewirkt in diesem Fall eine Verzögerung beim Verdampfen der Hydrometeore. Wichtig für einen deutlich ausgeprägten Effekt der lokalen Interaktion ist hierbei eine Übersättigung des Luftpaketes bezüglich Wasser zu Beginn des Abstiegs. Auf diese Weise diffundiert nur sehr wenig des von den Tropfen innerhalb der Einflusskugeln freigesetzten Wasserdampfs in die Umgebung und der Eiskristall kann lange anwachsen. Ist das Luftpaket hingegen bereits zu Beginn des Abstiegs untersättigt, so verdampfen die Tropfen innerhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle sehr schnell. Da die Umgebung bezüglich Wasser untersättigt ist, wird ein grosser Anteil des von den verdampfenden Tropfen freigesetzten Wasserdampfs, aufgrund des Relaxationsterms (5.25e), aus den Einflusskugeln der Eiskristalle an die Umgebung abgegeben. Aus diesem Grund können die Eiskristalle nicht lange von dem freigesetzten Wasserdampf profitieren und der Effekt der lokalen Interaktion ist gering.

In einer Aufwärtsbewegung ist der Effekt der lokalen Interaktion kaum sichtbar. Diese Beobachtung passt ebenfalls zu den Ergebnissen der Simulationen mit dem Referenzmodell in Unterabschnitt 4.3.3, bei welchen die lokale Interaktion in einer bezüglich Wasser übersättigten Umgebung nur wenig sichtbar ist.

Eine deutliche Ausprägung der lokalen Interaktion wird primär durch die Abstände der Tropfen von den Eiskristallen sowie der Anzahl der Tropfen innerhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle gesteuert. Zusätzlich können die lokalen Effekte durch den Abstieg eines bezüglich Wasser übersättigten Luftpaketes verstärkt werden.

Diese Schlussfolgerungen stimmen mit der theoretischen Arbeit von Korolev (2008) überein. In dieser Arbeit wurden verschiedene Wachstumsregime der Hydrometeore in einer Mischphasenwolke identifiziert und mit Vertikalgeschwindigkeiten in Verbindung gebracht, bei welchen diese auftreten. Zur Identifikation der Regime wurde ein Box-Modell mit monodisperser Grössenverteilung der Hydrometeore betrachtet. Lokale Interaktionen zwischen den Hydrometeoren wurden nicht berücksichtigt. Es wurde gezeigt, dass der WBF nur in Abwinden aktiv ist und seine maximale Effizienz bei einer Vertikalgeschwindigkeit um  $w = 0 \text{ m s}^{-1}$  besitzt. Obwohl die Schlussfolgerungen mithilfe des idealisierten Falles eines Luftpaketes gezogen wurden, scheinen diese allgemein zu gelten. Hierauf deuten Simulationen mit einem LES von realen, in Messkampagnen vermessenen Wolken hin (Fan u. a., 2011).

Der lokale Effekt zeigt sich auch in einer Modifikation der Temperatur  $T_\infty$  des Luftpaketes. Hierbei ist ein Einfluss der lokalen Interaktion vor allem im Fall einer verschwindenden Vertikalgeschwindigkeit erkennbar. Ist das Luftpaket bezüglich Wasser übersättigt, so können die Eiskristalle von den Tropfen in ihren Einflusskugeln profi-

tieren und ihre Wachstumsrate erhöhen. Hierbei wird mehr latente Wärme durch die erhöhte Wachstumsrate der Eiskristalle freigesetzt, welche das Luftpaket erwärmt. Ist das Luftpaket bezüglich Wasser untersättigt, so diffundiert der von den verdampfenden Tropfen innerhalb der Einflusskugeln freigesetzte Wasserdampf nicht ausschliesslich zum Eiskristall, sondern zusätzlich in die Umgebung. Die Eiskristalle steigern ihre Wachstumsrate nicht wie im zuvor diskutierten Fall und der Effekt der latenten Wärme ist geringer.

Da die Erwärmung des Luftpaketes durch die lokale Interaktion auf einer gesteigerten Freisetzung von latenter Wärme durch die Eiskristalle beruht, hängt dieser Effekt von der Wachstumsrate der Eiskristalle sowie deren Anzahl ab. Die Wachstumsrate wird durch eine erhöhte Anzahl Tropfen innerhalb der Einflusskugel erhöht, die sich möglichst nahe am Eiskristall befinden. Im Fall einer nichtverschwindenden Vertikalgeschwindigkeit ist eine Änderung der Luftpakettemperatur durch die lokale Interaktion lediglich in einem Aufwind mit einer hohen Anzahl Tropfen innerhalb der Einflusskugeln feststellbar, die sich nahe am Eiskristall befinden.

Die durchgeführten Simulationen zeigen eine Beeinflussung der Temperatur des Luftpaketes vor allem in einem Luftpaket mit verschwindender Vertikalgeschwindigkeit. Da die Temperatur eines Luftpaketes direkt mit dem Auftrieb in Verbindung steht (Rogers und Yau, 1989, Kapitel 3), kann selbst eine kleine Temperaturänderung ausreichen, um eine Vertikalbewegung auszulösen. Ob die in den vorangegangenen Beispielen beobachtete Temperaturänderung des Luftpaketes ausreicht, hängt von der Schichtungsstabilität der Atmosphäre ab. In einer labilen Schichtung wäre eine leichte Modifikation der Temperatur ausreichend, um eine Vertikalbewegung auszulösen. In einer stabil geschichteten Atmosphäre hingegen ist das nicht möglich.

### 5.3 Umsetzung für eine Bulk-Beschreibung

In der Einleitung dieses Kapitels wurde angedeutet, dass in Wetter- oder Klimamodellen die Mikrophysik mittels der Momentenmethode in einem statistischen Sinne berücksichtigt wird. Die zugrunde liegende Gleichung dieser Methodik wird im Folgenden für das Modell aus Abschnitt 5.1 entwickelt. Die Darstellung orientiert sich an Hulburt und Katz (1964).

Die Beschreibung eines Eiskristall-Tropfen-Systems, wie in Abschnitt 5.1.1, erfolgt in der vereinfachten Version über die Variablen  $m_w$ ,  $M_w$ ,  $\rho_{v,*}$  und  $N_d$ , also über die Wassermasse des Tropfens, die Wassermasse des Eiskristalls, die Wasserdampfdichte am Interaktionsradius und die Anzahl Tropfen innerhalb der Einflusskugel des Eiskristalls, vergleiche Abschnitt 5.1.5. Sind die Werte dieser Variablen bekannt, so ist der Zustand des Eiskristall-Tropfen-Systems ebenfalls bekannt. Mit anderen Worten definiert jedes Eiskristall-Tropfen-System genau einen Punkt im Phasenraum, der durch die Variablen  $m_w$ ,  $M_w$ ,  $\rho_{v,*}$ ,  $N_d$  aufgespannt wird. Die zeitliche Entwicklung des Systems definiert eine Kurve in diesem Phasenraum.

Die zentrale Annahme besteht darin, dass so viele Eiskristall-Tropfen-Systeme vorhanden sind um die, durch diese Systeme repräsentierten, zugehörigen Punkte im Phasenraum als ein Kontinuum zu betrachten. In diesem Fall können die einzelnen Punkte sinnvoll durch eine gemeinsame Verteilungsfunktion  $f$  beschrieben werden. Sei

genauer

$$f(t, m_w, M_w, \rho_{v,*}, N_d) dm_w dM_w d\rho_{v,*} dN_d \quad (5.90)$$

die Anzahl Punkte zum Zeitpunkt  $t$  im Quader

$$[m_w, m_w + dm_w] \times [M_w, M_w + dM_w] \times [\rho_{v,*}, \rho_{v,*} + d\rho_{v,*}] \times [N_d, N_d + dN_d]. \quad (5.91)$$

Der Wert  $f(t, m_w, M_w, \rho_{v,*}, N_d)$  der Verteilungsfunktion gibt die Anzahl der Eiskristall-Tropfen-Systeme zum Zeitpunkt  $t$  an, deren Eigenschaften durch  $(m_w, M_w, \rho_{v,*}, N_d)$  gegeben sind. Die Gesamtzahl  $N(t)$  aller Systeme zum Zeitpunkt  $t$  ist

$$N(t) = \int_{\mathbb{R}^4} f(t, m_w, M_w, \rho_{v,*}, N_d) d(m_w, M_w, \rho_{v,*}, N_d). \quad (5.92)$$

Durch Normierung von  $f$  mit (5.92) ergibt sich eine Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Mit den vereinfachten Gleichungen (5.54) ist die zeitliche Entwicklung eines einzelnen Eiskristall-Tropfen-Systems durch ein System

$$\frac{dm_w}{dt} = \eta_d(m_w, M_w, \rho_{v,*}, N_d), \quad (5.93a)$$

$$\frac{dM_w}{dt} = \eta_i(m_w, M_w, \rho_{v,*}, N_d), \quad (5.93b)$$

$$\frac{d\rho_{v,*}}{dt} = \eta_r(m_w, M_w, \rho_{v,*}, N_d), \quad (5.93c)$$

$$\frac{dN_d}{dt} = \eta_N(m_w, M_w, \rho_{v,*}, N_d) \quad (5.93d)$$

von gewöhnlichen Differentialgleichungen beschrieben, wobei eine Gleichung für die Entwicklung von  $N_d$  eingefügt wurde. Aus der Erhaltung der repräsentierenden Punkte der Eiskristall-Tropfen-Systeme im Phasenraum, folgt mit (5.93) für die Verteilung  $f$  die partielle Differentialgleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial m_w} (\eta_d f) + \frac{\partial}{\partial M_w} (\eta_i f) + \frac{\partial}{\partial \rho_{v,*}} (\eta_r f) + \frac{\partial}{\partial N_d} (\eta_N f) = 0. \quad (5.94)$$

Bereits in Abschnitt 5.2.1 wurde angemerkt, dass Gleichung (5.93d) nicht aus der Betrachtung der einzelnen Eiskristall-Tropfen-Systeme gewonnen werden kann. Daher wird im Folgenden stets  $\eta_N = 0$  angenommen. Für die kollektive Beschreibung aller Eiskristall-Tropfen-Systeme muss also die partielle Differentialgleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial m_w} (\eta_d f) + \frac{\partial}{\partial M_w} (\eta_i f) + \frac{\partial}{\partial \rho_{v,*}} (\eta_r f) = 0 \quad (5.95)$$

nach  $f$  gelöst werden. Ist (5.95) nach  $f$  gelöst, so ist die Entwicklung aller Eiskristall-Tropfen-Systeme in einem statistischen Sinne bekannt. Beim Übergang von der Einzelbeschreibung der Systeme (5.93) zur gemeinsamen Beschreibung über die Verteilung  $f$ , geht die individuelle „Geschichte“ der Systeme verloren. Die Verteilung  $f$  gibt lediglich an, wie viele Systeme einer gewissen Konfiguration zum Zeitpunkt  $t$  vorhanden sind, jedoch nicht, welche Entwicklung der Systeme zu diesem Zustand geführt hat.



Wir formulieren das Problem der Bulk-Beschreibung (5.95) präziser. Seien  $0 < a_d < A_d$ ,  $0 < b_i < B_i$ ,  $0 < c < C$  reelle Zahlen und  $\Omega := [a_d, A_d] \times [b_i, B_i] \times [c, C]$  der zugehörige Quader. Sei  $f_0 : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  eine gegebene, nichtnegative Funktion mit Träger in  $\Omega$ . Zu einer gegebenen Maximalzeit  $T > 0$  ist eine Funktion

$$f : [0, T] \times \mathbb{R}^3 \rightarrow [0, \infty) \quad \text{mit} \quad f(t, \cdot) = f_0(\cdot) \quad (5.96)$$

und Träger in  $\Omega$  gesucht, die Gleichung (5.95) erfüllt. Durch Übergang zur schwachen Formulierung von (5.95), können die Anforderungen an die Differenzierbarkeit von  $f$  abgeschwächt werden.

Bei Beobachtungen werden die Gesamtmassen  $q_l$  der Tropfen und  $q_i$  der Eiskristalle gemessen. Diese hängen mit der Verteilungsfunktion  $f$  über

$$q_l(t) = \int_{\mathbb{R}^3} m_w f(t, m_w, M_w, \rho_{v,*}) \, d(m_w, M_w, \rho_{v,*}) =: \mu_{(1,0,0)}(t), \quad (5.97a)$$

$$q_i(t) = \int_{\mathbb{R}^3} M_w f(t, m_w, M_w, \rho_{v,*}) \, d(m_w, M_w, \rho_{v,*}) =: \mu_{(0,1,0)}(t), \quad (5.97b)$$

zusammen, wobei für reelle Zahlen  $k_1, k_2, k_3 \geq 0$  das  $(k_1, k_2, k_3)$ -te Moment von  $f$  durch

$$\mu_{(k_1, k_2, k_3)}(t) := \int_{\mathbb{R}^3} x_1^{k_1} x_2^{k_2} x_3^{k_3} f(t, x_1, x_2, x_3) \, d(x_1, x_2, x_3) \quad (5.98)$$

definiert ist. Das nullte Moment ergibt wegen (5.92) die Gesamtanzahl der Eiskristall-Tropfen-Systeme, also  $N(t) = \mu_{(0,0,0)}(t)$ . Da die Verteilung  $f$  kompakten Träger hat, existieren alle Momente für  $(k_1, k_2, k_3) \in \mathbb{N}^3$ . Die zeitliche Entwicklung der Gesamtmasse  $q_l$  ist mit (5.95), dem Satz von Fubini, partieller Integration sowie der Notation  $x := (m_w, M_w, \rho_{v,*})$  durch

$$\begin{aligned} \frac{d\mu_{(1,0,0)}}{dt} &= \frac{dq_l}{dt} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d}{dt} (m_w f) \, dx = \int_{\mathbb{R}^3} m_w \frac{\partial f}{\partial t} \, dx \\ &= - \int_{\mathbb{R}^3} m_w \frac{\partial}{\partial m_w} (\eta_d f) \, dx - \int_{\mathbb{R}^3} m_w \frac{\partial}{\partial M_w} (\eta_i f) \, dx - \int_{\mathbb{R}^3} m_w \frac{\partial}{\partial \rho_{v,*}} (\eta_r f) \, dx \\ &\stackrel{(*)}{=} - \int_{\mathbb{R}^3} m_w \frac{\partial}{\partial m_w} (\eta_d f) \, dx \\ &= - \int_{\mathbb{R}^2} \left( \int_{\mathbb{R}} m_w \frac{\partial}{\partial m_w} (\eta_d f) \, dm_w \right) d(M_w, \rho_{v,*}) \\ &= - \int_{\mathbb{R}^2} \left( [m_w \eta_d f]_{m_w \rightarrow -\infty}^{m_w \rightarrow \infty} - \int_{\mathbb{R}} \eta_d f \, dm_w \right) d(M_w, \rho_{v,*}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \eta_d f \, dx \end{aligned} \quad (5.99)$$

gegeben. An der Stelle (\*) wurde benutzt, dass die hinteren beiden Integrale verschwinden. Für das mittlere Integral beispielsweise gilt aufgrund des Satzes von Fubini

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} m_w \frac{\partial}{\partial M_w} (\eta_i f) \, dx &= \int_{\mathbb{R}^2} m_w \left( \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial}{\partial M_w} (\eta_i f) \, dM_w \right) d(m_w, \rho_{v,*}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} m_w [\eta_i f]_{M_w \rightarrow -\infty}^{M_w \rightarrow \infty} d(m_w, \rho_{v,*}) = 0. \end{aligned} \quad (5.100)$$

Dieses Argument lässt sich entsprechend auch auf das dritte Integral anwenden. Analog zur Berechnung (5.99) der zeitlichen Ableitung von  $q_l$  gilt

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{d\mu_{(0,1,0)}}{dt} = \int_{\mathbb{R}^3} \eta_i f \, dx \quad \text{und} \quad \frac{d\rho_{v,*}}{dt} = \frac{d\mu_{(0,0,1)}}{dt} = \int_{\mathbb{R}^3} \eta_r f \, dx. \quad (5.101)$$

Werden die Funktionen  $\eta_d, \eta_i, \eta_r$  in (5.99) und (5.101) eingesetzt und die entstehenden rechten Seiten mithilfe weiterer Momente ausgedrückt, ergibt sich ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen für die drei ersten Momente  $\mu_{(1,0,0)}, \mu_{(0,1,0)}, \mu_{(0,0,1)}$ , wobei die ersten beiden dieser Momente beobachtbare Größen repräsentieren. Falls dieses System, durch eventuelle Zunahme von weiteren Momenten, geschlossen wird, so kann die Lösung der partiellen Differentialgleichung (5.95) komplett umgangen werden. Ob dieser Fall eintritt, hängt von der konkreten Struktur der Funktionen  $\eta_d, \eta_i, \eta_r$  ab. Der Ansatz beruht auf der Tatsache, dass die Kenntnis aller Momente einer Verteilung auf dem Quader  $\Omega$  die Verteilung selbst bereits eindeutig bestimmt (Existenz: Stockbridge, 2003; Eindeutigkeit: Dvurečenskij u. a., 2002, Abschnitt 3).

## 5.4 Fazit

Obwohl die partielle Differentialgleichung (5.95) das Modell für das Diffusionswachstum der Hydrometeore ist, wird diese in Wetter- oder Klimamodellen aus rechentechnischen Gründen nicht gelöst. Vielmehr werden die aus (5.95) gewonnenen Gleichungen der Momente gelöst, vergleiche (5.99) und (5.101). Da das resultierende Gleichungssystem für die Momente im Allgemeinen nicht geschlossen ist, muss eine Schliessung künstlich erfolgen. Eine gängige Möglichkeit besteht in der Vorgabe des Typs der Verteilung (Seifert und Beheng, 2001). Allerdings ändert sich im Allgemeinen der Typ der exakten Lösung von (5.95) mit der Zeit (zum Beispiel Beheng und Herbert, 1986) und es ergeben sich systematische Fehler durch die Vorgabe des Typs der Verteilung. Gleichwohl zeigt sich in Anwendungen eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit Modellen, welche die partielle Differentialgleichung für die Größenverteilung lösen, wie die Beispielrechnungen von Seifert u. a. (2006) zeigen.

In diesem Kapitel wurde ein neues Bulk-Modell entwickelt, das eine Berücksichtigung der lokalen Interaktion zwischen einem Eiskristall und umgebenden Tropfen erlaubt. Das Bulk-Modell bietet die Möglichkeit, den WBF als direkte Interaktion zwischen einem Eiskristall und den Tropfen einzubeziehen, im Gegensatz zur ausschliesslichen Interaktion über ein Hintergrundfeld. Damit kann der WBF physikalisch konsistent berücksichtigt

werden. Es wurde aufgezeigt, wie das Bulk-Modell im Kontext der statistischen Bulk-Beschreibung von Hydrometeoren durch die partielle Differentialgleichung (5.95) und der Momentenmethode verwendet werden kann. Dies erlaubt eine Integration im Rahmen eines LES und damit das Studium der Auswirkungen der lokalen Interaktion von Hydrometeoren auf eine ganze Wolke. Als Vorstufe wurde das entwickelte Bulk-Modell in ein Box-Modell integriert, das den Aufstieg eines Luftpaketes modelliert und einige Simulationen präsentiert. In diesen zeigt sich ein Einfluss der Berücksichtigung der lokalen Interaktion auf das Diffusionswachstum der Hydrometeore sowie die Temperatur des Luftpaketes. Das Bulk-Modell enthält Parameter, deren Werte momentan nicht aus direkten Beobachtungen abgeleitet werden können. Deshalb wurde eine mögliche Wahl dieser Parameter diskutiert.

Das beschriebene Box-Modell berücksichtigt lediglich eine monodisperse Verteilung der einzelnen Hydrometeorklassen. In einem zukünftigen Schritt sollten nicht-monodisperse Verteilungen verwendet werden. Hierbei muss jedoch eine Verteilung gewählt werden, die mindestens von der Eismasse  $M_w$  und der Masse  $m_w^i$  der Tropfen innerhalb der Einflusskugeln der Eiskristalle abhängt. Würden separate Verteilungen für die Eiskristalle und die Tropfen innerhalb der Einflusskugeln gewählt, so ginge jegliche Kopplung der Hydrometeore verloren. In der in Abschnitt 5.3 präsentierten Formulierung hängt die Verteilung  $f$  sogar noch zusätzlich von der Kopplungsdichte ab.



# Kapitel 6

## Zusammenfassung und Ausblick

Mache die Dinge so einfach wie  
möglich – aber nicht einfacher.

---

*(Albert Einstein, 1879 – 1955)*

Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der Beschreibung der lokalen Interaktion durch Diffusion zwischen Eiskristallen und Tropfen, das heisst dem WBF. Der physikalische Hintergrund dieser Interaktion wurde in Kapitel 1 erläutert. Die Interaktion zwischen den beiden kondensierten Formen des Wassers wurde bereits früh beschrieben (Wegener, 1911; Bergeron, 1949; Findeisen, 1938). In diesen Studien wurde dem WBF eine zentrale Rolle bei der Niederschlagsbildung beigemessen, da das erhöhte Wachstum der Eiskristalle die schnellere Bildung von grossen Hydrometeoren ermöglicht, was eine Voraussetzung für Niederschlag ist. Allerdings ist der WBF nicht ständig in einer Mischphasenwolke aktiv, sondern hängt von den Vertikalgeschwindigkeiten der einzelnen Luftpakete in der Wolke ab (Korolev, 2008; Fan u. a., 2011).

In beinahe allen Betrachtungen wird die Lokalität des WBF vernachlässigt und durch eine nicht-lokale Interaktion ersetzt. Dies entspricht einer Mittelung der Bedingungen in einem Luftpaket und jeder Hydrometeor wächst oder verdampft als Reaktion auf die aktuellen, gemittelten Werte der Wasserdampfdichte und der Temperatur. Insbesondere wird hierbei angenommen, dass jeder einzelne Hydrometeor im betreffenden Luftpaket denselben Bedingungen ausgesetzt ist (Srivastava, 1989). Dies ist solange gerechtfertigt, wie der mittlere Abstand zwischen den einzelnen Hydrometeoren genügend gross ist, was aus der Annahme einer gleichmässigen Verteilung der Hydrometeore folgt (Squires, 1952, Abschnitt II(a)). Durch Beobachtungen und theoretische Überlegungen zur Rolle der Turbulenz in Wolken, wird die Annahme einer gleichmässigen Verteilung der Hydrometeore jedoch fragwürdig, da sie eine Anhäufung von Hydrometeoren in einigen Bereichen bewirkt (Kostinski und Shaw, 2001; Wood u. a., 2005). In diesen Anhäufungen ist die gegenseitige Beeinflussung der Hydrometeore nicht zu vernachlässigen, insbesondere auch nicht die Interaktion durch Diffusion. Ob die lokalen Effekte allerdings die Entwicklung der gesamten Wolke signifikant ändern, hängt von der Häufigkeit und Lebensdauer der turbulenten Strukturen ab, welche die Anhäufungen der Hydrometeore verursachen (Devenish u. a., 2012, Abschnitt 4).

In der Literatur werden oft die Anhäufungen von Tropfen betrachtet. In einer Mischphasenwolke sind zusätzlich Eiskristalle vorhanden und es liegt die Vermutung nahe, dass ebenfalls Anhäufungen von Tropfen um Eiskristalle entstehen. Auch in diesen Fällen stehen jedoch direkte Beobachtungen in realen Wolken aus. Ein Eiskristall stellt üblicherweise eine starke Senke für den Wasserdampf dar, weshalb eine grosse Auswirkung

auf das Wachstum der umgebenden Tropfen in einer Anhäufung erwartet wird. Diese Beeinflussung findet tatsächlich statt, was im Rahmen dieser Arbeit gezeigt wurde.

In Kapitel 2 wurden zunächst die Wachstumsgleichungen eines einzelnen Hydrometeors untersucht. Diese Wachstumsgleichungen beschreiben die zeitliche Entwicklung der Masse und Temperatur eines Hydrometeors in Abhängigkeit von den Umgebungsbedingungen. Zusätzlich wurde die Herleitung der gängigen Maxwell-Gleichung rekapituliert, welche die zeitliche Entwicklung der Masse eines Hydrometeors in Abhängigkeit der Umgebungssättigung beschreibt. Hierbei wurden die in der Herleitung getroffenen Annahmen herausgestellt sowie die Verbindung der Maxwell-Gleichung zu den vollständigen Wachstumsgleichungen aufgezeigt. Es wurde eine asymptotische Lösung der vollständigen Wachstumsgleichungen für den Fall eines sphärischen Hydrometeors hergeleitet, die eine gute Approximation an die exakte Lösung ist. Anhand der asymptotischen Lösung lassen sich die wesentlichen Eigenschaften der exakten Lösung ablesen. Zuletzt erfolgte eine Diskussion der Singularität der Wachstumsgleichungen. Die Singularität ergibt sich aus der Kontinuumsannahme, die den Wachstumsgleichungen zugrunde liegt. Hier wäre die Entwicklung eines erweiterten Modells wünschenswert, das den physikalisch korrekten Übergang von der Kontinuumsbeschreibung zur diskreten Beschreibung, auf Basis von Molekülwechselwirkungen, ermöglicht. Mit einem derartigen Modell könnte das komplette Verdampfen eines Hydrometeors physikalisch konsistent beschrieben werden.

In Kapitel 3 wurden die Wachstumsgleichungen der einzelnen Hydrometeore durch Diffusionsgleichungen für die Wasserdampfdichte und Temperatur ergänzt. Diese beschreiben die räumliche und zeitliche Verteilung des Wasserdampfes sowie der Wärme um die Hydrometeore und damit deren Interaktion durch die Diffusion. Die Modellgleichungen wurden entdimensionalisiert sowie die Existenz und Eindeutigkeit einer exakten Lösung in einem Spezialfall gezeigt. Die Annahmen in diesem Spezialfall bestehen darin, dass die Hydrometeore ihre Grösse nicht verändern dürfen und keine Veränderungen in der Anzahl der Hydrometeore auftreten. Letzteres schliesst Nukleation, Sedimentation sowie Kollisionen aus. Der Beweis stützt sich auf die Anwendung des Fixpunktsatzes von Banach. Das gezeigte Resultat sollte weiter verallgemeinert werden, um die im Spezialfall vernachlässigten Prozesse mit einzuschliessen. Bereits die Berücksichtigung einer Grösßenänderung der Hydrometeore erfordert wahrscheinlich eine veränderte Beweisstrategie und wäre ein interessantes zukünftiges Projekt.

Kapitel 4 befasst sich mit der numerischen Lösung der in Kapitel 3 vorgestellten Modellgleichungen, für den Fall sich nicht bewegender Hydrometeore. Hierzu wurde das implizite Verfahren von Euler in der Zeit sowie die FEM im Ort verwendet. Diese Implementierung dient als Referenzmodell, um die möglichen Effekte der lokalen Interaktion zu studieren. Es stellt sich heraus, dass durch die lokale Interaktion das Wachstumsverhalten eines Hydrometeors deutlich verändert wird. Beispielsweise kann ein Eiskristall in einem bezüglich Eis untersättigten Umfeld durch das Verdampfen von Tropfen in seiner Umgebung für begrenzte Zeit stabilisiert werden. Er wird hierdurch länger vor dem Verdampfen bewahrt oder wächst sogar an. Zudem sind Abschirmeffekte zu beobachten, die das Diffusionswachstum einzelner Hydrometeore beeinflussen.

Im Hinblick auf die numerische Approximation der vorgestellten Modellgleichungen, wurde für die räumliche Diskretisierung, neben der FEM, die GFEM vorgeschlagen. Diese zeichnet sich im Gegensatz zur FEM durch den Verzicht auf ein Gitter bei der Beschreibung des Verfahrens aus und gehört daher zur Klasse der gitterfreien Verfahren

---

(Babuška u. a., 2003). In einer konkreten Berechnung wird jedoch ein Gitter meist als Hilfskonstruktion verwendet. Das Ziel der Anwendung der GFEM auf die in dieser Arbeit betrachteten Modellgleichungen besteht darin, ein grobes Gitter zu verwenden, das die Hydrometeore nicht explizit auflöst. Dies erlaubt auch die Erweiterung auf sich bewegende Hydrometeore bei vertretbarem Rechenaufwand, was in dieser Arbeit jedoch nicht weiter ausgeführt wurde. Interessant wäre hier eine Quantifizierung der Approximationsgüte auf einem groben Gitter im Kontrast zu Konvergenzresultaten, die ein beliebiges Verfeinern des Gitters voraussetzen. Werden ausschliesslich kugelförmige Hydrometeore betrachtet, so motiviert die Kombination der FEM in Verbindung mit der asymptotischen Lösung der Wachstumsgleichungen ein weiteres Approximationsverfahren. Mit der FEM, auf einem nicht an die Hydrometeore angepassten Gitter, werden die Felder der Wasserdampfdichte und Temperatur im Raum approximiert. Durch einen Quellen- oder Senkenterm erfolgt die Ankopplung der Hydrometeore. Die asymptotische Lösung wird hierbei im Quellen- oder Senkenterm verwendet, um die verschiedenen Längenskalen zu überbrücken. Ein ähnlicher Ansatz findet sich in Zhang und Prosperetti (2005).

Zuletzt wurde in Kapitel 5 ein neues Bulk-Modell entwickelt, das die lokale Interaktion zwischen einem Eiskristall und umgebenden Tropfen berücksichtigt, was eine zentrale Zielsetzung innerhalb der Arbeit ist. Der WBF wird hierdurch physikalisch konsistent als ein räumlich lokaler Prozess repräsentiert. Das Bulk-Modell unterscheidet sich von den direkten Simulationen aus Kapitel 4 durch eine statistische Betrachtung der Hydrometeore. Bei der Konstruktion des Bulk-Modells wurde darauf geachtet, nicht mehr Informationen zu verwenden, als in einem grösseren numerischen Modell typischerweise verfügbar sind, zum Beispiel in einem LES. Die im Bulk-Modell enthaltenen Parameter können weiter angepasst und verfeinert werden. So ist eine Erweiterung der Parameter dahingehend denkbar, den momentanen Zustand des Systems zu berücksichtigen und Abhängigkeiten von der Temperatur oder der Grösse der Hydrometeore einzuführen. Allerdings wäre in erster Linie der Vergleich zu direkten Beobachtungen der lokalen Interaktion in Wolken wünschenswert. Des Weiteren wurde das Bulk-Modell in die Beschreibung eines adiabatisch aufsteigenden Luftpaketes integriert. Hierbei wurden analoge Beobachtungen wie in Korolev (2008) bezüglich des WBF gemacht. Die lokale Interaktion der Hydrometeore ist in Abwinden ausgeprägter als in Aufwinden. Zudem ist sie bei einem stillstehenden Luftpaket am besten ausgeprägt, das heisst bei einer Vertikalgeschwindigkeit von  $0 \text{ m s}^{-1}$ . Im nächsten Schritt sollte die Integration des Bulk-Modells in ein LES erfolgen. Damit könnte die Auswirkung der Berücksichtigung der lokalen Interaktion auf eine ganze Wolke in einem realistischeren Rahmen studiert werden.

Diese Arbeit stellt einen Beitrag zu den verschiedenen Aspekten der Modellierung des Diffusionswachstums von Hydrometeoren dar. Die relevanten Aspekte wurden in den einzelnen Kapiteln betrachtet, wobei stets die Interaktion zwischen einem Eiskristall und Tropfen im Vordergrund steht, da diese den WBF kennzeichnet. Die direkte Modellierung der lokalen Interaktion resultiert in einem Mehrskalensproblem, denn die Grössen eines Eiskristalls und eines Tropfens sind sehr unterschiedlich. Dies macht die numerische Lösung der Modellgleichungen schwierig. Zugleich ist dieser Zugang nicht zur Simulation einer kompletten Wolke geeignet. Mit dem entwickelten Bulk-Modell kann die lokale Interaktion zwischen Eiskristallen und Tropfen in wolkenauflösenden

Modellen berücksichtigt werden, insbesondere wenn die Hydrometeore räumlich nicht homogen verteilt sind. Auch wenn der WBF in Mischphasenwolken nicht ständig aktiv ist, stellt die Interaktion zwischen Eiskristallen und Tropfen einen wichtigen Prozess dar, der die Entwicklung der Wolke beeinflusst. Das entwickelte Bulk-Modell liefert daher einen Beitrag zur physikalisch konsistenten Modellierung von Mischphasenwolken.



# Anhang A

## Approximierte Form am Beispiel des Tropfens

Dieser Anhang enthält die detaillierte Herleitung der Maxwell-Gleichung (2.68) für einen Tropfen aus der in Abschnitt 2.3.1 vorgestellten Theorie. Für die Darstellung folgen wir Rogers und Yau (1989, Kapitel 7).

Ein wichtiges Element der Herleitung ist die Clausius-Clapeyron-Gleichung (Rogers und Yau, 1989, Kapitel 2)

$$\frac{dp_{v,\infty}}{p_{v,\infty}} = d(\log(p_{v,\infty})) = \frac{L(T)}{R_v T^2} dT. \quad (\text{A.1})$$

Diese Gleichung beschreibt den Sättigungsdampfdruck  $p_{v,\infty}$  eines Gases. Mit  $L$  wird die latente Wärme dieses Stoffes für den Phasenübergang vom flüssigen oder festen Zustand in den gasförmigen Zustand bezeichnet.

Die Clausius-Clapeyron-Gleichung wird für den Fall von flüssigem Wasser, mit dem Sättigungsdampfdruck  $p_{l,\infty}$  und der latenten Wärme  $L_{lv}$ , angewandt. Mit der idealen Gasgleichung  $p_{l,\infty} = \rho_{v,l,\infty} R_v T$ , wobei  $\rho_{v,l,\infty}$  die Sättigungsdampfdichte über einer ebenen Oberfläche aus flüssigem Wasser bezeichnet, gilt für (A.1)

$$d(\log(\rho_{v,l,\infty})) = \frac{d\rho_{v,l,\infty}}{\rho_{v,l,\infty}} = \frac{L_{lv}(T)}{R_v} \frac{dT}{T^2} - \frac{dT}{T}. \quad (\text{A.2})$$

Nach einer Integration der Gleichung (A.2) von der Tropfentemperatur  $T_d$  bis zur Umgebungstemperatur  $T_\infty$ , ergibt sich

$$\log\left(\frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)}\right) = \frac{L_{lv}(T_\infty)}{R_v} \frac{T_\infty - T_d}{T_\infty T_d} - \log\left(\frac{T_\infty}{T_d}\right). \quad (\text{A.3})$$

Bei dieser Integration wurde die Unabhängigkeit der latenten Wärme  $L_{lv}$  von der Temperatur angenommen. Für Wasser ist diese Annahme im Allgemeinen problematisch, vergleiche Murphy und Koop (2005).

Wir treffen die Annahme  $T_\infty \approx T_d$ . Das bedeutet, die Tropfentemperatur ist nahe der Umgebungstemperatur. Aus diesem Grund ist das Vernachlässigen der Temperaturabhängigkeit der latenten Wärme bei der Integration von (A.2) gerechtfertigt. Mit

$$\frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} = 1 + \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty) - \rho_{v,l,\infty}(T_d)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} \quad \text{sowie} \quad \frac{T_\infty}{T_d} = 1 + \frac{T_\infty - T_d}{T_d} \quad (\text{A.4})$$

und der Approximation  $\log(1+x) \approx x$  für kleine  $x$ , ergibt sich aus (A.3)

$$\frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty) - \rho_{v,l,\infty}(T_d)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} = \frac{T_d - T_\infty}{T_d} \left(1 - \frac{L_{lv}(T_\infty)}{R_v T_\infty}\right). \quad (\text{A.5})$$

Nun verwenden wir die Wachstumsgleichung (2.62) für die Masse sowie Gleichgewichtsbedingung (2.65) für die Temperatur und erhalten

$$\frac{dm_d}{dt} = 4\pi\alpha_d r_d D_0 (\rho_{v,\infty} - \rho_{v,d}) \quad (\text{A.6a})$$

$$= \frac{4\pi r_d K_0}{L_{lv}(T_d)} (T_d - T_\infty) \quad (\text{A.6b})$$

$$= \frac{4\pi r_d K_0 T_d}{L_{lv}(T_d) \left(1 - \frac{L_{lv}(T_\infty)}{R_v T_\infty}\right)} \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty) - \rho_{v,l,\infty}(T_d)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)}, \quad (\text{A.6c})$$

wobei im letzten Schritt die Temperaturdifferenz mit (A.5) ersetzt wurde. Umgeschrieben lautet diese Gleichung

$$\left(1 - \frac{L_{lv}(T_\infty)}{R_v T_\infty}\right) \frac{L_{lv}(T_d)}{4\pi K_0 r_d T_d} \frac{dm_d}{dt} = \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty) - \rho_{v,l,\infty}(T_d)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)}. \quad (\text{A.7})$$

Aus der Wachstumsgleichung (2.62) folgt mit der Sättigungsdampfdruckformel (2.29)

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi\alpha_d D_0 r_d \rho_{v,d}} \frac{dm_d}{dt} &= \frac{\rho_{v,\infty} - \rho_{v,d}}{\rho_{v,d}} = \frac{\rho_{v,\infty} - \rho_{v,l,\infty}(T_d) \exp\left(\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d) \exp\left(\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right)} \\ &= \frac{\rho_{v,\infty} \exp\left(-\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right) - \rho_{v,l,\infty}(T_d)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Subtraktion dieser Gleichung von (A.7) liefert

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi r_d} \left( \left(1 - \frac{L_{lv}(T_\infty)}{R_v T_\infty}\right) \frac{L_{lv}(T_d)}{K_0 T_d} - \frac{1}{\alpha_d D_0 \rho_{v,d}} \right) \frac{dm_d}{dt} \\ = \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty) - \rho_{v,\infty} \exp\left(-\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)}. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Die rechte Seite von (A.9) kann mit dem Umgebungssättigungsquotienten (2.69) sowie

$$\frac{\rho_{v,\infty}}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} = \frac{\rho_{v,\infty}}{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)} \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} = S_\infty \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} \quad (\text{A.10})$$

weiter zu

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty) - \rho_{v,\infty} \exp\left(-\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} &= \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} \left(1 - S_\infty \exp\left(-\frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right)\right) \\ &\approx \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} \left(1 - S_\infty \left(1 - \frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right)\right) \\ &= \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} \left(1 - S_\infty + S_\infty \frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

---

umgeformt werden. Hierbei wurde die Approximation  $\exp(x) \approx 1 + x$  verwendet. Dieser Approximationsschritt wird in Abschnitt 2.3.2 diskutiert. Durch Kombination von (A.9) mit (A.11) folgt das Zwischenresultat

$$\frac{dm_d}{dt} = \frac{4\pi r_d \frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} \left(1 - S_\infty + S_\infty \frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d}\right)}{\left(1 - \frac{L_{lv}(T_\infty)}{R_v T_\infty}\right) \frac{L_{lv}(T_d)}{K_0 T_d} - \frac{1}{\alpha_d D_0 \rho_{v,d}}}. \quad (\text{A.12})$$

Die Maxwell-Gleichung (2.68) ergibt sich aus dem Zwischenresultat (A.12) und den folgenden weiteren Schritten. Im Nenner von (A.12) wird die Tropfentemperatur  $T_d$  durch die Umgebungstemperatur  $T_\infty$  substituiert. Ausserdem wird die Sättigungsdampfdichte  $\rho_{v,d}$  an der Tropfenoberfläche durch die Sättigungsdampfdichte

$$\rho_{v,l,\infty}(T_\infty) = \frac{p_{l,\infty}(T_\infty)}{R_v T_\infty} \quad (\text{A.13})$$

einer ebenen Wasseroberfläche bei Umgebungstemperatur ersetzt. Der Zähler von (A.12) wird durch

$$\frac{\rho_{v,l,\infty}(T_\infty)}{\rho_{v,l,\infty}(T_d)} = 1 \quad (\text{A.14})$$

weiter vereinfacht, was mit der bereits angedeuteten Approximation  $T_d \approx T_\infty$  begründet wird. Der Term

$$S_\infty \frac{2\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d r_d} \quad (\text{A.15})$$

wird vernachlässigt. Der Faktor

$$\frac{\sigma_l(T_d)}{R_v \rho_l(T_d) T_d} \quad (\text{A.16})$$

ist tatsächlich sehr klein, vergleiche Abbildung 2.2a. Für kleine Tropfenradien  $r_d$  wächst der Term (A.15) allerdings an, was letztlich die Approximation verschlechtert.



# Anhang B

## Approximation an den Sättigungsdampfdruck

Dieser Anhang ist der Herleitung von Approximationen an die Parametrisierungen der Sättigungsdampfdrücke über flüssigem Wasser und Eis gewidmet. Abschnitt B.1 enthält die Herleitung der Approximationen sowie Fehlerbetrachtungen. In Abschnitt B.2 wird gezeigt, dass die Nutzung dieser Approximationen jedoch zu systematischen Fehlern führt, wenn sie in Verbindung mit den Wachstumsgleichungen von Hydrometeoren angewandt werden.

### B.1 Approximation

Die Parametrisierungen für die Sättigungsdampfdrücke  $p_{l,\infty}$  und  $p_{i,\infty}$  über einer ebenen Wasser- und Eisoberfläche, sind in Abschnitt C.7 angegeben. Beide Parametrisierungen sind auf einem grossen Temperaturbereich gültig, haben jedoch auch eine sehr komplizierte Gestalt. Schränken wir den Temperaturbereich ein, lassen sich einfachere Approximationen der Gestalt

$$\exp(q(T)), \tag{B.1}$$

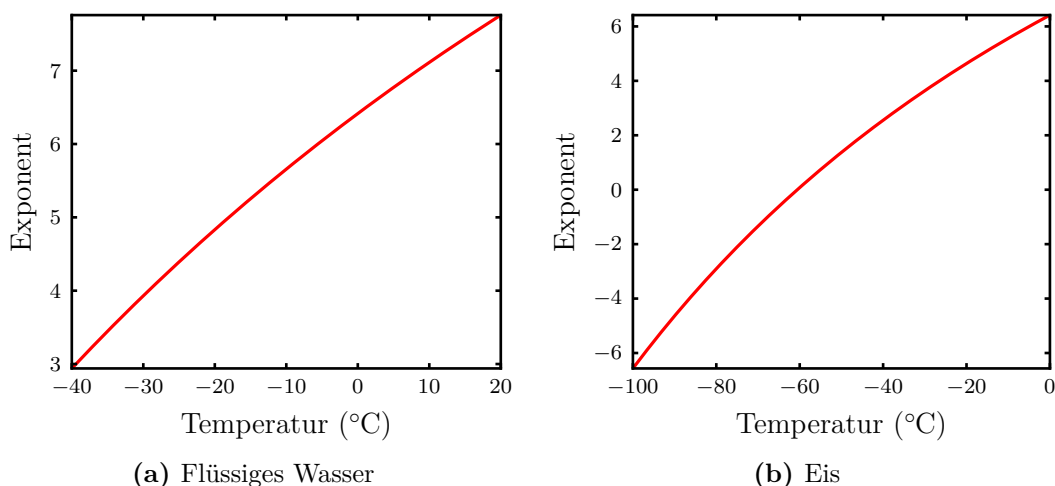
mit einem Polynom  $q$ , an die Sättigungsdampfdrücke  $p_{l,\infty}(T)$  aus (C.19) und  $p_{i,\infty}(T)$  aus (C.20) konstruieren. Betrachte hierzu die in Abbildung B.1 gezeigten „Exponenten“  $\log(p_{l,\infty}(T))$  und  $\log(p_{i,\infty}(T))$  der Sättigungsdampfdrücke. Der Temperaturbereich wurde im Fall des flüssigen Wassers auf  $233.15 \text{ K} \leq T \leq 293.15 \text{ K}$  und im Fall des Eises auf  $173.15 \text{ K} \leq T \leq 273.15 \text{ K}$  eingeschränkt. In beiden Fällen ist aus Abbildung B.1 erkennbar, dass die Exponenten einen polynomiellen Verlauf aufweisen. Daher werden wir die Funktionen  $\log(p_{l,\infty}(T))$  und  $\log(p_{i,\infty}(T))$ , auf den jeweiligen eingeschränkten Temperaturbereichen, durch ein quadratisches beziehungsweise kubisches Polynom approximieren. Die Berechnung der Koeffizienten des Polynoms  $q$  aus (B.1) erfolgt mittels der Methode der kleinsten Quadrate (Hanke-Bourgeois, 2009, Kapitel 11).

Für den Fall des Sättigungsdampfdrucks über flüssigem Wasser ergibt sich im Temperaturbereich  $233.15 \text{ K} \leq T \leq 293.15 \text{ K}$  die Näherung

$$p_l(T) \approx \exp\left(a_0 T^2 + a_1 T + a_2\right) \tag{B.2}$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} a_0 &= -0.000342045714592, \\ a_1 &= 0.259792809556930, \\ a_2 &= -39.020396811911112. \end{aligned} \tag{B.3}$$



**Abbildung B.1:** Verlauf der „Exponenten“  $\log(p_{l,\infty}(T))$  und  $\log(p_{i,\infty}(T))$  der Parametrisierungen der Sättigungsdampfdrücke (C.19) und (C.20) für einen eingeschränkten Temperaturbereich.

In Abbildung B.2 sind die Fehler der Approximation (B.2) dargestellt. Der absolute Fehler ist kleiner als 33 Pa, vergleiche Abbildung B.2a und der relative Fehler ist kleiner als 0.02, vergleiche Abbildung B.2b. Im Fall von Mischphasenwolken ist lediglich der Temperaturbereich  $233.15 \text{ K} \leq T \leq 273.15 \text{ K}$ , also  $-40 \text{ °C} \leq T \leq 0 \text{ °C}$  relevant. Für diesen Temperaturbereich ist der absolute Fehler kleiner als 3.9 Pa und der relative Fehler kleiner als 0.018.

Im Fall des Sättigungsdampfdrucks über Eis, ergibt sich für Temperaturen  $173.15 \text{ K} \leq T \leq 273.15 \text{ K}$  die Approximation

$$p_i(T) \approx \exp(b_0 T^3 + b_1 T^2 + b_2 T + b_3) \quad (\text{B.4})$$

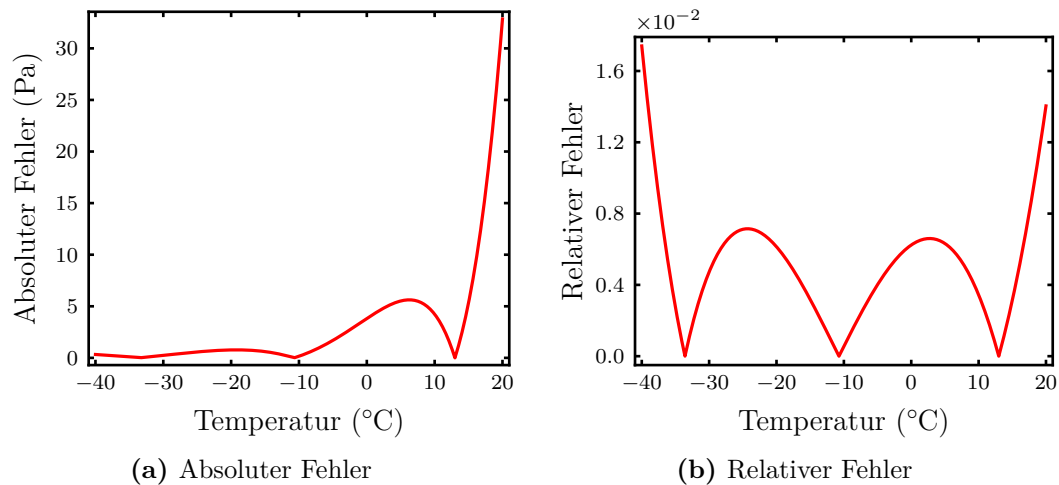
mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} b_0 &= 0.000002552944884, \\ b_1 &= -0.002283497521822, \\ b_2 &= 0.761143656120302, \\ b_3 &= -83.131589944390697. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

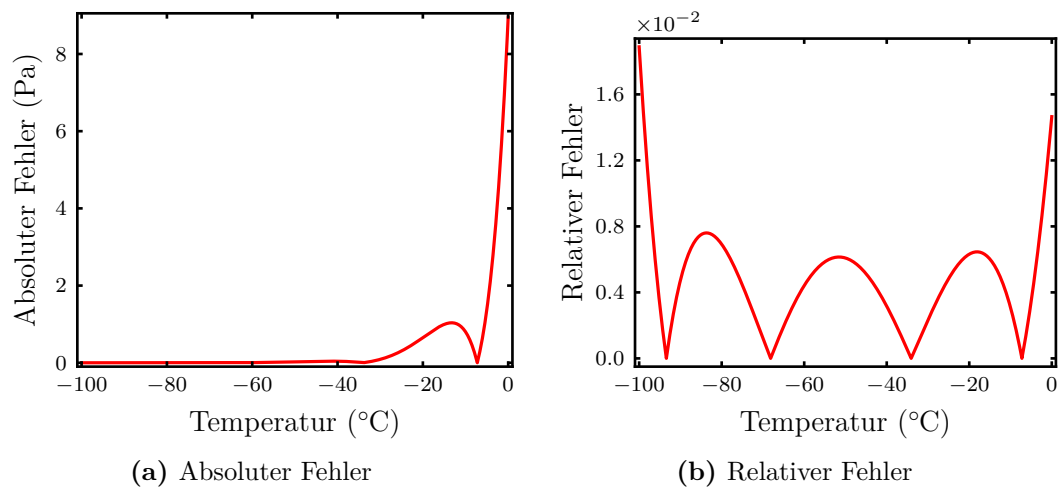
Die Fehler der Approximation (B.4) an die Parametrisierung für den Sättigungsdampfdruck über Eis sind in Abbildung B.3 aufgetragen. Der absolute Fehler ist in Abbildung B.3a dargestellt und kleiner als 9 Pa. Der relative Fehler aus Abbildung B.3b ist kleiner als 0.02. Im für Mischphasenwolken relevanten Temperaturbereich  $233.15 \text{ K} \leq T \leq 273.15 \text{ K}$  ist der absolute Fehler kleiner als 9 Pa und der relative Fehler kleiner als 0.015.

## B.2 Wachstumsgleichung mit approximiertem Sättigungsdampfdruck

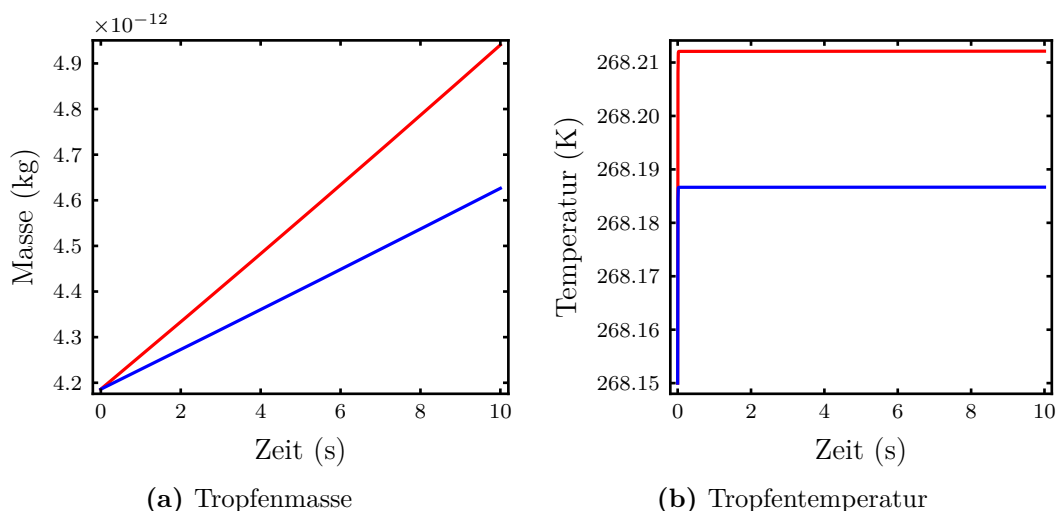
In Abschnitt 2.5.2 wurde der Sättigungsdampfdruck, der in den Wachstumsgleichungen (2.91) vorkommt, mithilfe der Clausius-Clapeyron-Gleichung approximiert. Es wurde



**Abbildung B.2:** Absoluter und relativer Fehler der Approximation (B.2) im Temperaturbereich  $233.15 \text{ K} \leq T \leq 293.15 \text{ K}$ .



**Abbildung B.3:** Absoluter und relativer Fehler der Approximation (B.4) im Temperaturbereich  $173.15 \text{ K} \leq T \leq 273.15 \text{ K}$ .



**Abbildung B.4:** Verlauf der Tropfenmasse und der Tropfentemperatur, wenn in der Wachstumsgleichung (2.91) die Referenzparametrisierung (rote Kurve) oder die Approximation (blaue Kurve) für den Sättigungsdampfdruck benutzt wird.

darauf hingewiesen, dass eine einfachere Approximation nicht unbedingt zu zufriedenstellenden Resultaten führt. Dies wird nun, anhand der im vorhergehenden Abschnitt B.1 hergeleiteten Approximation, illustriert.

Hierzu betrachten wir einen Tropfen bei einer Umgebungstemperatur  $T_\infty = -5^\circ\text{C}$ , einem Umgebungsdruck  $p_\infty = 650$  Pa und einem Umgebungssättigungsverhältnis (bezüglich flüssigem Wasser)  $S_\infty = 1.01$ . Der Tropfen habe einen Anfangsradius von  $10\ \mu\text{m}$  und die Anfangstemperatur entspreche der Umgebungstemperatur. Die Wachstumsgleichungen (2.91) werden numerisch gelöst, wobei einmal die Referenzparametrisierung (C.19) und einmal die Approximation (B.2) für den Sättigungsdampfdruck verwendet werden. Die Resultate sind in Abbildung B.4 dargestellt. Sowohl im Verlauf der Tropfenmasse (Abbildung B.4a) als auch in der Tropfentemperatur (Abbildung B.4b) sind deutliche Abweichungen erkennbar.

Diese Abweichungen haben ihren Ursprung in der grossen Abweichung der Approximation (B.2) von der Referenz (C.19), vergleiche hierzu die Fehlerkurve in Abbildung B.2a an der Stelle  $-5^\circ\text{C}$ . Betrüge die Umgebungstemperatur beispielsweise  $T_\infty = -10^\circ\text{C}$ , wären die Abweichungen in den Resultaten geringer, da bei dieser Temperatur die Approximation besser ist.



# Anhang C

## Physikalische Parametrisierungen

In diesem Anhang werden die in dieser Arbeit verwendeten physikalischen Parametrisierungen und Konstanten aufgelistet. Eine physikalische Parametrisierung bezeichnet hierbei einen funktionalen Zusammenhang, welcher den Wert einer physikalischen Grösse in Abhängigkeit anderer physikalischer Grössen beschreibt. Diese funktionalen Zusammenhänge sind empirische Formeln, die an verfügbare Messergebnisse angepasst wurden. Alle hier zitierten Parametrisierungen und Konstanten wurden auf SI-Einheiten gebracht.

### C.1 Konstanten

Die verwendeten Konstanten sind der Tabelle C.1 zu entnehmen. Die speziellen Gaskonstanten für Wasserdampf  $R_v$  und trockene Luft  $R_t$  wurden, gemäss ihren Definitionen, berechnet durch

$$R_v = \frac{R^*}{M_{\text{mol}}} \quad \text{und} \quad R_t = \frac{R^*}{M_{\text{mol,t}}}. \quad (\text{C.1})$$

### C.2 Diffusivität

In Hall und Pruppacher (1976) wird für die Diffusivität  $D$  von Luft die Parametrisierung

$$D(p, T) = 2.11 \cdot 10^{-5} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{1.94} \frac{p_0}{p} \quad (\text{C.2})$$

angegeben, die im Temperaturbereich 193.15 K bis 313.15 K gültig ist. Sie liefert Werte in der SI-Einheit  $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$  und es gilt  $T_0 = 273.15 \text{ K}$ ,  $p_0 = 101\,325 \text{ Pa}$ . Hierbei bezeichnet  $p$  den Gesamtdruck.

### C.3 Thermale Konduktivität

#### C.3.1 Thermale Konduktivität von trockener Luft

Die thermale Konduktivität  $K_t(T)$  von trockener Luft wird in Kannuluik und Carman (1951) untersucht. Dort wird die Formel

$$K_t(T) = 418.68 \cdot 5.75 \cdot 10^{-5} \cdot (1 + 0.00317(T - 273.15) - 0.0000021(T - 273.15)^2) \quad (\text{C.3})$$

angegeben, welche im Temperaturbereich 90.15 K bis 491.15 K Gültigkeit hat. Die Werte von (C.3) haben die Einheit  $\text{cal cm}^{-1} \text{sec}^{-1} \text{°C}^{-1}$ . Der Umrechnungsfaktor auf

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung	Quelle
$M_{\text{mol}}$	0.01801528	$\text{kg mol}^{-1}$	Molare Masse von Wasser	Picard u. a. (2008)
$M_{\text{mol,t}}$	0.02896546	$\text{kg mol}^{-1}$	Molare Masse von trockener Luft	Picard u. a. (2008)
$R^*$	8.314472	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$	Universelle Gaskonstante	Picard u. a. (2008)
$R_v$	461.52333	$\text{m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$	Spezielle Gaskonstante für Wasserdampf	–
$R_t$	287.04781	$\text{m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$	Spezielle Gaskonstante für trockene Luft	–
$\sigma_i$	0.109	$\text{kg s}^{-2}$	Oberflächenspannung von Eis	Ketcham und Hobbs (1969)
$c_{p,t}$	1005	$\text{m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$	Spezifische Wärmekapazität von trockener Luft	Rogers und Yau (1989)

**Tabelle C.1:** Verwendete physikalische Konstanten. Die speziellen Gaskonstanten wurden gemäss (C.1) berechnet.

SI-Einheiten ist

$$1 \text{ cal cm}^{-1} \text{ sec}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1} = 418.68 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1} = 418.68 \text{ kg m s}^{-3} \text{ K}^{-1}. \quad (\text{C.4})$$

### C.3.2 Thermale Konduktivität von feuchter Luft

Aus Pruppacher und Klett (1997, Gleichung 13-18c) ergibt sich für die Konduktivität  $K$  der feuchten Luft die Parametrisierung

$$K(\rho_v, T) = K_t(T) \cdot \left( 1 - \left( 1.17 - 1.02 \frac{\widetilde{K}_v(T)}{\widetilde{K}_t(T)} \right) \frac{q_v}{q_v + \varepsilon} \right). \quad (\text{C.5})$$

Die Werte besitzen die SI-Einheit  $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1} = \text{kg m s}^{-3} \text{K}^{-1}$ . Hierbei sind

$$\begin{aligned} \widetilde{K}_t(T) &= \frac{K_t(T)}{418.68}, \\ \widetilde{K}_v(T) &= (3.78 + 0.02 \cdot (T - 273.15)) \cdot 10^{-5}, \\ \varepsilon &= \frac{R_t}{R_v} \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

mit dem Wasserdampf-mischungsverhältnis  $q_v$ . Der Quotient aus (C.5) kann mit  $q_v = \varepsilon p_v / p_t$  zu

$$\frac{q_v}{q_v + \varepsilon} = \frac{\varepsilon \frac{p_v}{p_t}}{\varepsilon \frac{p_v}{p_t} + \varepsilon} = \frac{\frac{p_v}{p_t}}{\frac{p_v}{p_t} + 1} = \frac{p_v}{p_v + p_t} \quad (\text{C.7})$$

angepasst werden, wobei  $p_v$  den Partialdruck des Wasserdampfes und  $p_t$  den Partialdruck von trockener Luft bezeichnen.

## C.4 Dichten

### C.4.1 Dichte von Wasser

Für den Temperaturbereich von 239.74 K bis 283.15 K findet sich in Hare und Sorensen (1987) für die Dichte  $\rho_l$  von flüssigem Wasser die Parametrisierung

$$\begin{aligned} \rho_l(T) = & 999.86 + 6.69 \cdot 10^{-2}(T - 273.15) - 8.486 \cdot 10^{-3}(T - 273.15)^2 \\ & + 1.518 \cdot 10^{-4}(T - 273.15)^3 - 6.9484 \cdot 10^{-6}(T - 273.15)^4 \\ & - 3.6449 \cdot 10^{-7}(T - 273.15)^5 - 7.497 \cdot 10^{-9}(T - 273.15)^6. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Diese Parametrisierung liefert Werte in der zugehörigen SI-Einheit  $\text{kg m}^{-3}$ . Für den Temperaturbereich von 273.15 K bis 423.15 K wird in Kell (1975) die Parametrisierung

$$\rho_l(T) = \frac{F(T)}{1 + 16.87985 \cdot 10^{-3}(T - 273.15)} \quad (\text{C.9})$$

angegeben, wobei die Funktion  $F$  durch

$$\begin{aligned} F(T) = & 999.8395 + 16.945176(T - 273.15) - 7.9870401 \cdot 10^{-3}(T - 273.15)^2 \\ & - 46.170461 \cdot 10^{-6}(T - 273.15)^3 + 105.56302 \cdot 10^{-9}(T - 273.15)^4 \\ & - 280.54253 \cdot 10^{-12}(T - 273.15)^5 \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

gegeben ist. Auch (C.9) liefert Werte in der SI-Einheit  $\text{kg m}^{-3}$ .

### C.4.2 Dichte von Eis

Die Parametrisierung

$$\rho_i(T) = 916.7 - 0.175(T - 273.15) - 0.0005(T - 273.15)^2 \quad (\text{C.11})$$

für die Dichte  $\rho_i$  von Eis ist in Bogdan (1997) für Temperaturen von 228 K bis 273.15 K angegeben. Sie liefert Werte in der SI-Einheit  $\text{kg m}^{-3}$ .

## C.5 Spezifische Wärmekapazitäten

### C.5.1 Spezifische Wärmekapazität von Wasser

In Pruppacher und Klett (1997, Formeln 3-15 und 3-16) werden zwei Parametrisierungen für die spezifische Wärmekapazität  $c_{p,l}$  von flüssigem Wasser für verschiedene Temperaturbereiche angegeben. Für den Temperaturbereich von 236.15 K bis 273.15 K

$$\begin{aligned} c_{p,l}(T) = & 4186.8 \cdot \left( 1.000983 - 2.7052 \cdot 10^{-3}(T - 273.15) - 2.3235 \cdot 10^{-5}(T - 273.15)^2 \right. \\ & \left. + 4.3778 \cdot 10^{-6}(T - 273.15)^3 + 2.7136 \cdot 10^{-7}(T - 273.15)^4 \right) \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

und für den Temperaturbereich von 273.15 K bis 308.15 K

$$c_{p,l}(T) = 4186.8 \cdot \left( 0.9979 + 3.1 \cdot 10^{-6}(T - 238.15)^2 + 3.8 \cdot 10^{-9}(T - 238.15)^4 \right). \quad (\text{C.13})$$

In dieser Form liefern beide Parametrisierungen Werte in der SI-Einheit  $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1} = \text{m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$ , denn wir haben den folgenden Umrechnungsfaktor eingefügt:

$$1 \text{ cal g}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1} = 4186.8 \text{ J kg}^{-1} \text{K}^{-1} = 4186.8 \text{ m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}. \quad (\text{C.14})$$

### C.5.2 Spezifische Wärmekapazität von Eis

Eine Parametrisierung für die molare Wärmekapazität  $c_{p,i,\text{mol}}(T)$  von Eis wird in Murphy und Koop (2005) für Temperaturen über 20 K angegeben als

$$c_{p,i,\text{mol}}(T) = -2.0572 + 0.14644T + 0.06163T \exp\left(-\left(\frac{T}{125.1}\right)^2\right). \quad (\text{C.15})$$

Die spezifische Wärmekapazität  $c_{p,i}$  ergibt sich aus (C.15) nach Division mit der molaren Masse  $M_{\text{mol}}$  von Wasser, vergleiche Tabelle C.1. Die entstehende Parametrisierung besitzt die SI-Einheit  $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1} = \text{m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$ .

### C.5.3 Spezifische Wärmekapazität von feuchter Luft

Für die spezifische Wärmekapazität  $c_{p,f}$  von feuchter Luft verwenden wir die Parametrisierung

$$c_{p,f} = c_{p,t} \left(1 + 0.9 \frac{\rho_v}{\rho_d}\right) \quad (\text{C.16})$$

aus Rogers und Yau (1989), die bereits Werte in der SI-Einheit  $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1} = \text{m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$  liefert. Hierbei wird eine Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärmekapazität  $c_{p,t}$  von trockener Luft vernachlässigt.

## C.6 Latente Wärme

### C.6.1 Latente Wärme von Wasser

Die Parametrisierung

$$L_{lv,\text{mol}}(T) = 56579 - 42.212 \cdot T + \exp(0.1149 \cdot (281.6 - T)) \quad (\text{C.17})$$

für die molare latente Wärme von Wasser entnehmen wir Murphy und Koop (2005). Diese ist gültig für Temperaturen von 236 K bis 273.16 K. Die latente Wärme  $L_{lv}$  mit der SI-Einheit  $\text{J kg}^{-1} = \text{m}^2 \text{s}^{-2}$  folgt nach einer Division von (C.17) durch die molare Masse  $M_{\text{mol}}$ , vergleiche Tabelle C.1.

### C.6.2 Latente Wärme von Eis

Aus Murphy und Koop (2005) ergibt sich die Parametrisierung

$$L_{iv,\text{mol}}(T) = 46782.5 + 35.8925T - 0.07414T^2 + 541.5 \exp\left(-\left(\frac{T}{123.75}\right)^2\right) \quad (\text{C.18})$$

für die molare latente Wärme von Eis. Diese Parametrisierung ist gültig für Temperaturen ab 30 K. Durch Division von (C.18) mit der molaren Masse  $M_{\text{mol}}$  von Wasser, siehe Tabelle C.1, folgt eine Parametrisierung mit der SI-Einheit  $\text{J kg}^{-1} = \text{m}^2 \text{s}^{-2}$ .

## C.7 Sättigungsdampfdruck

### C.7.1 Sättigungsdampfdruck über Wasser

Der Sättigungsdampfdruck  $p_{l,\infty}$  über einer ebenen Wasseroberfläche kann nach Murphy und Koop (2005) parametrisiert werden durch

$$\begin{aligned} \log(p_{l,\infty}(T)) = & 54.842763 - \frac{6763.22}{T} - 4.21 \log(T) + 0.000367 \cdot T \\ & + \tanh(0.0415 \cdot (T - 218.8)) \cdot \left( 53.878 - \frac{1331.22}{T} - 9.44523 \cdot \log(T) + 0.014025 \cdot T \right). \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

Diese Parametrisierung liefert Werte in der SI-Einheit  $\text{Pa} = \text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$  und ist gültig im Temperaturbereich von 123 K bis 332 K.

### C.7.2 Sättigungsdampfdruck über Eis

Der Sättigungsdampfdruck  $p_{i,\infty}$  über einer ebenen Eisoberfläche kann nach Murphy und Koop (2005) durch

$$\log(p_{i,\infty}(T)) = 9.550426 - \frac{5723.265}{T} + 3.53068 \cdot \log(T) - 0.00728332 \cdot T \quad (\text{C.20})$$

parametrisiert werden. Diese Parametrisierung liefert Werte in der SI-Einheit  $\text{Pa} = \text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$  und ist gültig für Temperaturen ab 110 K.

## C.8 Oberflächenspannung von Wasser

Mit zusätzlichen Messdaten hat Prof. Borrmann die Koeffizienten der Parametrisierung aus Pruppacher und Klett (1997, Formel 5-12) angepasst zu

$$\begin{aligned} \sigma_l(T) = & 0.001 \cdot \left( 75.7901 - 0.139649(T - 273.15) - 4.62016 \cdot 10^{-4}(T - 273.15)^2 \right. \\ & - 2.92323 \cdot 10^{-5}(T - 273.15)^3 + 1.29287 \cdot 10^{-6}(T - 273.15)^4 \\ & \left. - 1.70799 \cdot 10^{-8}(T - 273.15)^5 + 7.25066 \cdot 10^{-11}(T - 273.15)^6 \right). \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

Diese Parametrisierung liefert Werte in der SI-Einheit  $\text{N m}^{-1} = \text{kg s}^{-2}$  und ist gültig im Temperaturbereich von 233.15 K bis 373.15 K.



# Abkürzungsverzeichnis

FEM Finite-Elemente-Methode

GFEM Verallgemeinerte Finite-Elemente-Methode („Generalized finite element method“)

IWC Eiswassergehalt („ice water content“)

LES Large-Eddy-Simulation-Modell

LWC Flüssigwassergehalt („liquid water content“)

WBF Wegener-Bergeron-Findeisen-Prozess





# Symbolverzeichnis

$\alpha_i$	Akkomodationskoeffizient des Eiskristalls
$\alpha_d$	Akkomodationskoeffizient des Tropfens
$\alpha_\omega$	Akkomodationskoeffizient des Hydrometeors $\omega$
$a_w$	Aktivität eines Aerosols im Hydrometeor
$\rho_v$	Dichte des Wasserdampfes
$\rho_{v,*}$	Wasserdampfdichte in der Entfernung des Interaktionsradius vom Mittelpunkt des sphärischen Eiskristalls
$\rho_i$	Dichte von Eis
$\rho_f$	Dichte der feuchten Luft
$\rho_l$	Dichte von flüssigem Wasser
$\rho_\infty$	Dichte der feuchten Luft in der Umgebung
$\rho_{v,i}$	Wasserdampfdichte an der Oberfläche eines Eiskristalls
$\rho_{v,\omega}$	Wasserdampfdichte an der Oberfläche eines Hydrometeors $\omega$
$\rho_{v,d}$	Wasserdampfdichte an der Oberfläche eines Tropfens
$\rho_{v,\infty}$	Umgebungswasserdampfdichte
$D$	Diffusivität der feuchten Luft
$D_0$	Konstanter Wert der Diffusivität von feuchter Luft
$p_{t,\infty}$	Partialdruck der trockenen Luft in der Umgebung
$p_\infty$	Gesamtdruck in der Umgebung
$p_{v,\infty}$	Partialdruck des Wasserdampfes in der Umgebung
$p_v$	Partialdruck des Wasserdampfes
$f_0$	Konstanter Wert der Koeffizientenfunktion $f$ der Temperaturgleichung
$g$	Erdbeschleunigung
$\bar{R}$	Spezielle Gaskonstante von feuchter Luft
$R_v$	Spezielle Gaskonstante von Wasserdampf
$R_t$	Spezielle Gaskonstante von trockener Luft
$R^*$	Universelle Gaskonstante
$\omega_i$	Eiskristall

$\omega$	Hydrometeor
$\omega_d$	Tropfen
$K$	Thermale Konduktivität von feuchter Luft
$K_0$	Konstanter Wert der thermalen Konduktivität von feuchter Luft
$L_{iv}$	Latente Wärme für einen Phasenübergang von Eis zu Wasserdampf
$L_{lv}$	Latente Wärme für einen Phasenübergang von flüssigem Wasser zu Wasserdampf
$L_\omega$	Latente Wärme für einen Phasenübergang der kondensierten Phase des Hydrometeors $\omega$ in Wasserdampf
$m_a$	Masse des Aerosols in einem Tropfen
$m_i$	Masse des Eiskristalls
$m_\omega$	Masse des Hydrometeors $\omega$
$m_d$	Masse des Tropfens
$m_w$	Masse des Wassers in einem Tropfen der Aerosol enthält
$M_v$	Gesamtmasse des Wasserdampfes im Luftpaket
$M_i$	Gesamtmasse des Eises im Luftpaket
$M_t$	Gesamtmasse der trockenen Luft im Luftpaket
$M_l$	Gesamtmasse des flüssigen Wassers im Luftpaket
$M_l^a$	Gesamtmasse der Tropfen im Luftpaket, die nicht in einer Eiseinflusskugel enthalten sind
$M_l^i$	Gesamtmasse der Tropfen im Luftpaket, die sich innerhalb einer Eiseinflusskugel befinden
$q_l^a$	Mischungsverhältnis der Tropfen ausserhalb aller Eiseinflusskugeln
$q_l^i$	Mischungsverhältnis der Tropfen innerhalb aller Eiseinflusskugeln
$q_v$	Mischungsverhältnis des Wasserdampfes
$\sigma_i$	Oberflächenspannung von Eis
$\sigma_l$	Oberflächenspannung von Wasser
$\mathcal{D}_0$	Abstandsparameter für den Interaktionsradius des Eiskristalls
$\mathcal{D}_d$	Abstandsparameter für den Einflussradius des Tropfens
$\mathcal{D}_i$	Abstandsparameter für den Einflussradius des Eiskristalls
$R_E$	Einflussradius des Eiskristalls
$r_E$	Einflussradius des Tropfens
$R_d$	Interaktionsradius: Abstand des Tropfens vom Mittelpunkt des sphärischen Eiskristalls

$R_a$	Radius des Aerosolkerns in einem Eiskristall
$r_a$	Radius des Aerosolkerns in einem Tropfen
$r_i$	Radius des kugelförmigen Eiskristalls
$r_d$	Radius des kugelförmigen Tropfens
$p_{i,\infty}$	Sättigungsdampfdruck über einer ebenen Eisoberfläche
$p_{l,\infty}$	Sättigungsdampfdruck über einer ebenen Wasseroberfläche
$S_{\infty,i}$	Sättigungsverhältnis der Umgebung bezüglich Eis
$S_{\infty}$	Sättigungsverhältnis der Umgebung bezüglich flüssigem Wasser
$T_d^a$	Temperatur eines Tropfens, der sich nicht in einer Eiseinflusskugel befindet
$T_d^i$	Temperatur eines Tropfens, der sich in einer Eiseinflusskugel befindet
$T_{GG}$	Dimensionslose Gleichgewichtstemperatur
$T_i$	Temperatur des Eiskristalls
$T_*$	Temperatur in der Entfernung des Interaktionsradius vom Mittelpunkt des sphärischen Eiskristalls
$T_\omega$	Temperatur des Hydrometeors $\omega$
$T_d$	Temperatur des Tropfens
$T$	Temperatur
$T_\infty$	Umgebungstemperatur in grosser Entfernung eines Hydrometeors
$c_{p,a}$	Spezifische Wärmekapazität von Aerosol
$c_{p,i}$	Spezifische Wärmekapazität von Eis
$c_{p,f}$	Spezifische Wärmekapazität von feuchter Luft
$c_{p,\omega}$	Spezifische Wärmekapazität des Hydrometeors $\omega$
$c_{p,t}$	Spezifische Wärmekapazität von trockener Luft
$c_{p,l}$	Spezifische Wärmekapazität von flüssigem Wasser



# Literatur

- ADAMS, R. A. und FOURNIER, J. J. (2003). *Sobolev Spaces*. Second Edition. Bd. 140. Pure and Applied Mathematics. Elsevier Academic Press.
- AMANN, H. (1990). *Ordinary Differential Equations*. Bd. 13. de Gruyter Studies in Mathematics. Berlin: Walter de Gruyter & Co.
- AMANN, H. und ESCHER, J. (2006). *Analysis II*. Zweite Auflage. Grundstudium Mathematik. Basel: Birkhäuser.
- AMANN, H. und ESCHER, J. (2008). *Analysis III*. Zweite Auflage. Grundstudium Mathematik. Basel: Birkhäuser.
- ANGOT, P. (2005). “A unified fictitious domain model for general embedded boundary conditions”. In: *Comptes Rendus Mathématique* 341.11, S. 683–688.
- ANGOT, P., BRUNEAU, C.-H. und FABRIE, P. (1999). “A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows”. In: *Numerische Mathematik* 81.4, S. 497–520.
- AUER, A. H. J. und VEAL, D. L. (1970). “The Dimension of Ice Crystals in Natural Clouds”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 27.6, S. 919–926.
- BABUŠKA, I., BANERJEE, U. und OSBORN, J. E. (2003). “Survey of meshless and generalized finite element methods: A unified approach”. In: *Acta Numerica* 12, S. 1–125.
- BABUŠKA, I., BANERJEE, U. und OSBORN, J. E. (2004). “Generalized finite element methods – main ideas, results and perspective”. In: *International Journal of Computational Methods* 1.1, S. 67–103.
- BEHENG, K. D. und HERBERT, F. (1986). “Mathematical studies on the aerosol concentration in drops changing due to particle scavenging and redistribution by coagulation”. In: *Meteorology and Atmospheric Physics* 35.4, S. 212–219.
- BELYTSCHKO, T., GRACIE, R. und VENTURA, G. (2009). “A review of extended/generalized finite element methods for material modeling”. In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17.4, S. 043001.
- BERGERON, T. (1949). “The Problem of Artificial Control of Rainfall on the Globe”. In: *Tellus* 1.1, S. 32–43.
- BERRY, E. X. und REINHARDT, R. L. (1974). “An Analysis of Cloud Drop Growth by Collection: Part I. Double Distributions”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 31.7, S. 1814–1824.
- BODENSCHATZ, E., MALINOWSKI, S. P., SHAW, R. A. und STRATMANN, F. (2010). “Can We Understand Clouds Without Turbulence?” In: *Science* 327.5968, S. 970–971.
- BOGDAN, A. (1997). “Thermodynamics of the curvature effect on ice surface tension and nucleation theory”. In: *J. Chem. Phys.* 106, S. 1921–1929.
- BOOTHBY, W. M. (1975). *An Introduction to Differentiable Manifolds and Riemannian Geometry*. New York: Academic Press.

- BOTT, A. (1998). “A Flux Method for the Numerical Solution of the Stochastic Collection Equation”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 55.13, S. 2284–2293.
- BOTT, A. (2012). *Synoptische Meteorologie*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- BRAESS, D. (2013). *Finite Elemente*. 5. Auflage. Springer-Lehrbuch Masterclass. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- CASTELLANO, N. E. und AVILA, E. E. (2011). “Vapour density field of a population of cloud droplets”. In: *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics* 73.16, S. 2423–2428.
- CASTELLANO, N. E., AVILA, E. E. und SAUNDERS, C. P. (2004). “Theoretical model of the Bergeron-Findeisen mechanism of ice crystal growth in clouds”. In: *Atmospheric Environment* 38.39, S. 6751–6761.
- CATTANEO, C. (1958). “Sur une forme de l'équation de la chaleur éliminant le paradoxe d'une propagation instantanée”. In: *Comptes Rendus Hebdomadaires Des Seances De L Academie Des Sciences* 247.4, S. 431–433.
- CELANI, A., FALKOVICH, G., MAZZINO, A. und SEMINARA, A. (2005). “Droplet condensation in turbulent flows”. In: *EPL (Europhysics Letters)* 70.6, S. 775.
- CELANI, A., MAZZINO, A., SEMINARA, A. und TIZZI, M. (2007). “Droplet condensation in two-dimensional Bolgiano turbulence”. In: *Journal of Turbulence* 8, N17.
- CHEN, J.-P. und LAMB, D. (1994). “The Theoretical Basis for the Parameterization of Ice Crystal Habits: Growth by Vapor Deposition”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 51.9, S. 1206–1222.
- CHESSA, J., SMOLINSKI, P. und BELYTSCHKO, T. (2002). “The extended finite element method (XFEM) for solidification problems”. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 53.8, S. 1959–1977.
- CURTISS, C. und HIRSCHFELDER, J. (1952). “Integration of Stiff Equations”. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 38.3, S. 235–243.
- DAVIS, E. (2006). “A history and state-of-the-art of accommodation coefficients”. In: *Atmospheric Research* 82.3-4, S. 561–578.
- DEFAY, R., PRIGOGINE, I., BELLEMANS, A. und EVERETT, D. (1966). *Surface Tension and Adsorption*. Longmans.
- DEVENISH, B. J., BARTELLO, P., BRENGUIER, J.-L., COLLINS, L. R., GRABOWSKI, W. W., IJZERMANS, R. H. A., MALINOWSKI, S. P., REEKS, M. W., VASSILICOS, J. C., WANG, L.-P. und WARHAFT, Z. (2012). “Droplet growth in warm turbulent clouds”. In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 138.667, S. 1401–1429.
- DOBROWOLSKI, M. (2010). *Angewandte Funktionalanalysis*. 2., korrigierte und überarbeitete Auflage. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- DVUREČENSKIJ, A., LAHTI, P. und YLINEN, K. (2002). “The uniqueness question in the multidimensional moment problem with applications to phase space observables”. In: *Reports on Mathematical Physics* 50.1, S. 55–68.
- EVANS, L. C. (1998). *Partial Differential Equations*. Bd. 19. Graduate Studies in Mathematics. American Mathematical Society.
- FAN, J., GHAN, S., OVCHINNIKOV, M., LIU, X., RASCH, P. J. und KOROLEV, A. V. (2011). “Representation of Arctic mixed-phase clouds and the Wegener-Bergeron-Findeisen process in climate models: Perspectives from a cloud-resolving study”. In: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 116.D1.

- FEINGOLD, G., TZIVION, S. und LEVIN, Z. (1988). “Evolution of Raindrop Spectra. Part I: Solution to the Stochastic Collection/Breakup Equation Using the Method of Moments”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 45.22, S. 3387–3399.
- FINDEISEN, W. (1938). “Die Kolloidmeteorologischen Vorgänge bei der Niederschlagsbildung”. In: *Meteor. Z* 55, S. 121–133.
- FLEISHAUER, R. P., LARSON, V. E. und HAAR, T. H. V. (2002). “Observed Microphysical Structure of Midlevel, Mixed-Phase Clouds”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 59.11, S. 1779–1804.
- FRIES, T.-P. und BELYTSCHKO, T. (2010). “The extended/generalized finite element method: An overview of the method and its applications”. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 84.3, S. 253–304.
- FUKUTA, N. und WALTER, L. A. (1970). “Kinetics of Hydrometeor Growth from a Vapor-Spherical Model”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 27.8, S. 1160–1172.
- FUKUTA, N. (1992). “Theories of Competitive Cloud Droplet Growth and Their Application to Cloud Physics Studies”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 49.13, S. 1107–1114.
- GANDER, M. J. und WANNER, G. (2012). “From Euler, Ritz, and Galerkin to Modern Computing”. In: *SIAM Review* 54.4, S. 627–666.
- GELLERT, M. und HARBORD, R. (1991). “Moderate degree cubature formulas for 3-D tetrahedral finite-element approximations”. In: *Communications in Applied Numerical Methods* 7.6, S. 487–495.
- GLOWINSKI, R. und PAN, T.-W. (1992). “Error estimates for fictitious domain/penalty/finite element methods”. In: *Calcolo* 29.1, S. 125–141.
- GRABOWSKI, W. W. und WANG, L.-P. (2013). “Growth of Cloud Droplets in a Turbulent Environment”. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 45.1, S. 293–324.
- GUIBERT, S., SNIDER, J. R. und BRENGUIER, J.-L. (2003). “Aerosol activation in marine stratocumulus clouds: 1. Measurement validation for a closure study”. In: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 108.D15.
- HACKBUSCH, W. (1996). *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen: mit Beispielen und Übungsaufgaben*. Teubner.
- HAIRER, E., NØRSETT, S. P. und WANNER, G. (1993). *Solving Ordinary Differential Equations I*. Second Revised Edition. Bd. 8. Springer Series in Computational Mathematics. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- HAIRER, E. und WANNER, G. (1996). *Solving Ordinary Differential Equations II*. Second Revised Edition. Bd. 14. Springer Series in Computational Mathematics. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- HALL, W. D. und PRUPPACHER, H. R. (1976). “The Survival of Ice Particles Falling from Cirrus Clouds in Subsaturated Air”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 33.10, S. 1995–2006.
- HANKE-BOURGEOIS, M. (2009). *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*. 3. Auflage. Studium. Wiesbaden: Vieweg+Teubner.
- HARE, D. E. und SORENSEN, C. M. (1987). “The density of supercooled water. II. Bulk samples cooled to the homogeneous nucleation limit”. In: *The Journal of Chemical Physics* 87.8, S. 4840–4845.
- HEYMSFIELD, A. J. und IAQUINTA, J. (2000). “Cirrus Crystal Terminal Velocities”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 57.7, S. 916–938.

- HOBBS, P. V. (1993). *Aerosol-Cloud-Climate Interactions*. Academic Press.
- HOBBS, P. V., RANGNO, A. L., SHUPE, M. und UTTAL, T. (2001). “Airborne Studies of Cloud Structures over the Arctic Ocean and Comparisons with Retrievals from Ship-Based Remote Sensing Measurements”. In: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres (1984–2012)* 106.D14, S. 15029–15044.
- HOLMES, M. H. (2013). *Introduction to Perturbation Methods*. Second Edition. Bd. 20. Texts in Applied Mathematics. New York: Springer-Verlag.
- HOLTON, J. R. (2004). *An Introduction to Dynamic Meteorology*. Fourth Edition. Bd. 88. International Geophysics Series. Elsevier Academic Press.
- HOOSE, C. und MÖHLER, O. (2012). “Heterogeneous ice nucleation on atmospheric aerosols: a review of results from laboratory experiments”. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 12.20, S. 9817–9854.
- HOWELL, W. E. (1949). “The Growth of Cloud Drops in Uniformly Cooled Air”. In: *Journal of Meteorology* 6.2, S. 134–149.
- HU, Q. (2008). “Generalized Normal Derivatives and their Applications in DDMs with Nonmatching Grids and DG Method”. In: *Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications* 1.4, S. 383–409.
- HULBURT, H. und KATZ, S. (1964). “Some problems in particle technology”. In: *Chemical Engineering Science* 19.8, S. 555–574.
- JEFFREYS, H. (1918). “XXX. Some Problems of Evaporation”. In: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 35.207, S. 270–280.
- JOB, G. und HERRMANN, F. (2006). “Chemical potential—a quantity in search of recognition”. In: *European Journal of Physics* 27.2, S. 353–371.
- KAADEN, N., MASSLING, A., SCHLADITZ, A., MÜLLER, T., KANDLER, K., SCHÜTZ, L., WEINZIERL, B., PETZOLD, A., TESCHE, M., LEINERT, S., DEUTSCHER, C., EBERT, M., WEINBRUCH, S. und WIEDENSOHLER, A. (2009). “State of mixing, shape factor, number size distribution, and hygroscopic growth of the Saharan anthropogenic and mineral dust aerosol at Tinfou, Morocco”. In: *Tellus B* 61.1, S. 51–63.
- KANNULUIK, W. G. und CARMAN, E. H. (1951). “The Temperature Dependence of the Thermal Conductivity of Air”. In: *Australian Journal of Chemistry* 4.3, S. 305–314.
- KELL, G. S. (1975). “Density, thermal expansivity, and compressibility of liquid water from 0.deg. to 150.deg.. Correlations and tables for atmospheric pressure and saturation reviewed and expressed on 1968 temperature scale”. In: *Journal of Chemical & Engineering Data* 20.1, S. 97–105.
- KETCHAM, W. M. und HOBBS, P. V. (1969). “An experimental determination of the surface energies of ice”. In: *Philosophical Magazine* 19.162, S. 1161–1173.
- KHAIN, A. P., BEHENG, K. D., HEYMSFIELD, A. J., KOROLEV, A. V., KRICHAK, S. O., LEVIN, Z., PINSKY, M., PHILLIPS, V., PRABHAKARAN, T., TELLER, A., HEEVER, S. C. VAN DEN und YANO, J.-I. (2015). “Representation of microphysical processes in cloud-resolving models: Spectral (bin) microphysics versus bulk parameterization”. In: *Reviews of Geophysics* 53.2, S. 247–322.
- KHAIN, A. P., OVTCHINNIKOV, M., PINSKY, M., POKROVSKY, A. und KRUGLIAK, H. (2000). “Notes on the state-of-the-art numerical modeling of cloud microphysics”. In: *Atmospheric Research* 55.3-4, S. 159–224.



- KNABNER, P. und ANGERMANN, L. (2003). *Numerical Methods for Elliptic and Parabolic Partial Differential Equations*. Bd. 44. Texts in Applied Mathematics. New York: Springer-Verlag.
- KOENIG, L. R. (1971). "Numerical Modeling of Ice Deposition". In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 28.2, S. 226–237.
- KÖHLER, H. (1936). "The nucleus in and the growth of hygroscopic droplets". In: *Trans. Faraday Soc.* 32, S. 1152–1161.
- KONDEPUDI, D. und PRIGOGINE, I. (1998). *Modern Thermodynamics*. Chichester: John Wiley & Son.
- KOREN, I., REMER, L. A., KAUFMAN, Y. J., RUDICH, Y. und MARTINS, J. V. (2007). "On the twilight zone between clouds and aerosols". In: *Geophysical Research Letters* 34.8.
- KOROLEV, A. V. (2007). "Limitations of the Wegener-Bergeron-Findeisen Mechanism in the Evolution of Mixed-Phase Clouds". In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 64.9, S. 3372–3375.
- KOROLEV, A. V. (2008). "Rates of phase transformations in mixed-phase clouds". In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 134.632, S. 595–608.
- KOROLEV, A. V. und ISAAC, G. A. (2006). "Relative Humidity in Liquid, Mixed-Phase, and Ice Clouds". In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 63.11, S. 2865–2880.
- KOROLEV, A. V., ISAAC, G. A., COBER, S. G., STRAPP, J. W. und HALLETT, J. (2003). "Microphysical characterization of mixed-phase clouds". In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 129.587, S. 39–65.
- KOROLEV, A. V. und MAZIN, I. P. (2003). "Supersaturation of Water Vapor in Clouds". In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 60.24, S. 2957–2974.
- KOSTINSKI, A. B. und SHAW, R. A. (2001). "Scale-dependent droplet clustering in turbulent clouds". In: *Journal of Fluid Mechanics* 434, S. 389–398.
- KÜPFMÜLLER, K., MATHIS, W. und REIBIGER, A. (2008). *Theoretische Elektrotechnik*. 18. Auflage. Springer-Lehrbuch. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- LAMB, D. und VERLINDE, J. (2011). *Physics and Chemistry of Clouds*. Cambridge: Cambridge University Press.
- LANGER, J. S. (1980). "Instabilities and pattern formation in crystal growth". In: *Rev. Mod. Phys.* 52 (1), S. 1–28.
- LANGMUIR, I. (1918). "The Evaporation of Small Spheres". In: *Phys. Rev.* 12 (5), S. 368–370.
- LAU, K. M. und WU, H. T. (2003). "Warm rain processes over tropical oceans and climate implications". In: *Geophysical Research Letters* 30.24.
- LEBEDEV, V. (1976). "Quadratures on a sphere". In: *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics* 16.2, S. 10–24.
- LEBON, G., JOU, D. und CASAS-VÁZQUEZ, J. (2008). *Understanding Non-Equilibrium Thermodynamics*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- LEE, J. M. (1997). *Riemannian Manifolds: an Introduction to Curvature*. Bd. 176. Graduate Texts in Mathematics. New York: Springer-Verlag.
- LEHMANN, K., SIEBERT, H., WENDISCH, M. und SHAW, R. A. (2007). "Evidence for inertial droplet clustering in weakly turbulent clouds". In: *Tellus B* 59.1, S. 57–65.
- LIBBRECHT, K. G. Bilder wurden von Prof. K. Libbrecht aufgenommen und mit seiner Erlaubnis in dieser Arbeit verwendet.

- LIBBRECHT, K. G. (2001). “Morphogenesis on ice: The physics of snow crystals”. In: *Engineering and Science* 64.1, S. 10–19.
- LIBBRECHT, K. G. (2005). “The physics of snow crystals”. In: *Reports on Progress in Physics* 68.4, S. 855–895.
- LÍMACO, J., MEDEIROS, L. und ZUAZUA, E. (2002). “Existence, uniqueness and controllability for parabolic equations in non-cylindrical domains”. In: *Matemática Contemporânea* 23.Part II, S. 49–70.
- LLOYD, G., CHOULARTON, T. W., BOWER, K. N., GALLAGHER, M. W., CONNOLLY, P. J., FLYNN, M., FARRINGTON, R., CROSIER, J., SCHLENCZEK, O., FUGAL, J. und HENNEBERGER, J. (2015). “The origins of ice crystals measured in mixed-phase clouds at the high-alpine site Jungfraujoch”. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 15.22, S. 12953–12969.
- MARSCHALIK, P. (2015). “Asymptotisch schnelle Übergänge und der Steifheitsbegriff bei gewöhnlichen Differentialgleichungen”. Diss. Freie Universität Berlin.
- MARSHALL, J. S. und LANGLEBEN, M. P. (1954). “A Theory of Snow-Crystal Habit and Growth”. In: *Journal of Meteorology* 11.2, S. 104–120.
- MASON, B. J. (1953). “The growth of ice crystals in a supercooled water cloud”. In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 79.339, S. 104–111.
- MAXWELL, J. C. (1877). “Diffusion”. In: *reprinted in W.D. Niven (Ed.), The Scientific Papers of James Clerk Maxwell* 2, S. 625–645.
- MCFIGGANS, G., ARTAXO, P., BALTENSPERGER, U., COE, H., FACCHINI, M. C., FEINGOLD, G., FUZZI, S., GYSEL, M., LAAKSONEN, A., LOHMANN, U., MENTEL, T. F., MURPHY, D. M., O'DOWD, C. D., SNIDER, J. R. und WEINGARTNER, E. (2006). “The effect of physical and chemical aerosol properties on warm cloud droplet activation”. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 6.9, S. 2593–2649.
- MELLENK, J. und BABUŠKA, I. (1996). “The partition of unity finite element method: Basic theory and applications”. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 139.1-4, S. 289–314.
- MIOCHE, G., JOURDAN, O., CECCALDI, M. und DELANOË, J. (2015). “Variability of mixed-phase clouds in the Arctic with a focus on the Svalbard region: a study based on spaceborne active remote sensing”. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 15.5, S. 2445–2461.
- MÜLMENSTÄDT, J., SOURDEVAL, O., DELANOË, J. und QUAAS, J. (2015). “Frequency of occurrence of rain from liquid-, mixed-, and ice-phase clouds derived from A-Train satellite retrievals”. In: *Geophysical Research Letters* 42.15, S. 6502–6509.
- MURPHY, D. M. und KOOP, T. (2005). “Review of the vapour pressures of ice and supercooled water for atmospheric applications”. In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 131.608, S. 1539–1565.
- NIX, N. und FUKUTA, N. (1973). “Nonsteady-state theory of droplet growth”. In: *The Journal of Chemical Physics* 58.4, S. 1735–1740.
- NOH, Y.-J., SEAMAN, C. J., HAAR, T. H. V. und LIU, G. (2013). “In Situ Aircraft Measurements of the Vertical Distribution of Liquid and Ice Water Content in Mid-latitude Mixed-Phase Clouds”. In: *Journal of Applied Meteorology and Climatology* 52.1, S. 269–279.
- OLEINIK, O. A., PRIMICERIO, M. und RADKEVICH, E. V. (1993). “Stefan-like problems”. In: *Meccanica* 28.2, S. 129–143.

- PETTERS, M. D. und KREIDENWEIS, S. M. (2007). “A single parameter representation of hygroscopic growth and cloud condensation nucleus activity”. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 7.8, S. 1961–1971.
- PICARD, A., DAVIS, R. S., GLÄSER, M. und FUJII, K. (2008). “Revised formula for the density of moist air (CIPM-2007)”. In: *Metrologia* 45.2, S. 149–155.
- PINSKY, M. und KHAIN, A. P. (2003). “Fine Structure of Cloud Droplet Concentration as Seen from the Fast-FSSP Measurements. Part II: Results of In Situ Observations”. In: *Journal of Applied Meteorology* 42.1, S. 65–73.
- PINSKY, M., KHAIN, A. P. und KOROLEV, A. V. (2015). “Phase transformations in an ascending adiabatic mixed-phase cloud volume”. In: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 120.8, S. 3329–3353.
- PINTO, J. O., CURRY, J. A. und INTRIERI, J. M. (2001). “Cloud-aerosol interactions during autumn over Beaufort Sea”. In: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 106.D14, S. 15077–15097.
- PRUPPACHER, H. R. und BEARD, K. V. (1970). “A wind tunnel investigation of the internal circulation and shape of water drops falling at terminal velocity in air”. In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 96.408, S. 247–256.
- PRUPPACHER, H. R. und KLETT, J. D. (1997). *Microphysics of Clouds and Precipitation*. Second revised and enlarged edition. Bd. 18. Atmospheric and Oceanographic Sciences Library. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.
- ROGERS, R. und YAU, M. (1989). *A Short Course in Cloud Physics*. Third Edition. International Series in Natural Philosophy. Butterworth-Heinemann.
- SANT, V., LOHMANN, U. und SEIFERT, A. (2013). “Performance of a Triclass Parameterization for the Collision-Coalescence Process in Shallow Clouds”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 70.6, S. 1744–1767.
- SCHWEIZER, B. (2013). *Partielle Differentialgleichungen*. Bd. 10. Springer-Lehrbuch Masterclass. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- SEIFERT, A. und BEHENG, K. D. (2001). “A double-moment parameterization for simulating autoconversion, accretion and selfcollection”. In: *Atmospheric Research* 59–60, S. 265–281.
- SEIFERT, A. und BEHENG, K. D. (2006). “A two-moment cloud microphysics parameterization for mixed-phase clouds. Part 1: Model description”. In: *Meteorology and Atmospheric Physics* 92.1, S. 45–66.
- SEIFERT, A., KHAIN, A. P., POKROVSKY, A. und BEHENG, K. D. (2006). “A comparison of spectral bin and two-moment bulk mixed-phase cloud microphysics”. In: *Atmospheric Research* 80.1, S. 46–66.
- SETHIAN, J. (1999). *Level Set Methods and Fast Marching Methods*. Bd. 3. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge: Cambridge University Press.
- SHAW, R. A. (2003). “Particle-Turbulence Interactions in Atmospheric Clouds”. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 35.1, S. 183–227.
- SHAW, R. A. und LAMB, D. (1999). “Experimental determination of the thermal accommodation and condensation coefficients of water”. In: *The Journal of Chemical Physics* 111.23, S. 10659–10663.
- SHAW, R. A., READE, W. C., COLLINS, L. R. und VERLINDE, J. (1998). “Preferential Concentration of Cloud Droplets by Turbulence: Effects on the Early Evolution of

- Cumulus Cloud Droplet Spectra”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 55.11, S. 1965–1976.
- SI, H. (2015). “TetGen, a Delaunay-Based Quality Tetrahedral Mesh Generator”. In: *ACM Trans. Math. Softw.* 41.2, 11:1–11:36.
- SÖDERLIND, G., JAY, L. und CALVO, M. (2014). “Stiffness 1952–2012: Sixty years in search of a definition”. In: *BIT Numerical Mathematics* 55.2, S. 531–558.
- SPICHTINGER, P. und GIERENS, K. M. (2009). “Modelling of cirrus clouds – Part 1a: Model description and validation”. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 9.2, S. 685–706.
- SQUIRES, P. (1952). “The Growth of Cloud Drops by Condensation. I. General Characteristics”. In: *Australian Journal of Chemistry* 5.1, S. 59–86.
- SRIVASTAVA, R. C. (1989). “Growth Of Cloud Drops by Condensation: A Criticism of Currently Accepted Theory and a New Approach”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 46.7, S. 869–887.
- SRIVASTAVA, R. C. und COEN, J. L. (1992). “New Explicit Equations for the Accurate Calculation of the Growth and Evaporation of Hydrometeors by the Diffusion of Water Vapor”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 49.17, S. 1643–1651.
- STOCKBRIDGE, R. H. (2003). “The problem of moments on polytopes and other bounded regions”. In: *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 285.2, S. 356–375.
- TEMAM, R. (1977). *Navier-Stokes Equations*. Amsterdam: North-Holland Publishing Company.
- TZIVION, S., FEINGOLD, G. und LEVIN, Z. (1987). “An Efficient Numerical Solution to the Stochastic Collection Equation”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 44.21, S. 3139–3149.
- VAILLANCOURT, P. A., YAU, M. K., BARTELLO, P. und GRABOWSKI, W. W. (2002). “Microscopic Approach to Cloud Droplet Growth by Condensation. Part II: Turbulence, Clustering, and Condensational Growth”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 59.24, S. 3421–3435.
- VAILLANCOURT, P. A., YAU, M. K. und GRABOWSKI, W. W. (2001). “Microscopic Approach to Cloud Droplet Growth by Condensation. Part I: Model Description and Results without Turbulence”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 58.14, S. 1945–1964.
- VAILLANCOURT, P. A. und YAU, M. K. (2000). “Review of Particle-Turbulence Interactions and Consequences for Cloud Physics”. In: *Bulletin of the American Meteorological Society* 81.2, S. 285–298.
- VERLINDE, J., HARRINGTON, J. Y., YANNUZZI, V. T., AVRAMOV, A., GREENBERG, S., RICHARDSON, S. J., BAHRMANN, C. P., MCFARQUHAR, G. M., ZHANG, G., JOHNSON, N. u. a. (2007). “The Mixed-Phase Arctic Cloud Experiment”. In: *Bulletin of the American Meteorological Society* 88.2, S. 205–221.
- WANG, P. K. (2013). *Physics and Dynamics of Clouds and Precipitation*. Cambridge: Cambridge University Press.
- WARNER, J. (1969). “The Microstructure of Cumulus Cloud. Part I. General Features of the Droplet Spectrum”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 26.5, S. 1049–1059.
- WEGENER, A. (1911). *Thermodynamik der Atmosphäre*. Leipzig: J. A. Barth.

- WENDISCH, M., YANG, P. und PILEWSKIE, P. (2007). “Effects of ice crystal habit on thermal infrared radiative properties and forcing of cirrus”. In: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 112.D8.
- WOOD, A., HWANG, W. und EATON, J. (2005). “Preferential concentration of particles in homogeneous and isotropic turbulence”. In: *International Journal of Multiphase Flow* 31.10-11, S. 1220–1230.
- WOOD, S. E., BAKER, M. B. und CALHOUN, D. (2001). “New model for the vapor growth of hexagonal ice crystals in the atmosphere”. In: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 106.D5, S. 4845–4870.
- ZABARAS, N., GANAPATHYSUBRAMANIAN, B. und TAN, L. (2006). “Modelling dendritic solidification with melt convection using the extended finite element method”. In: *Journal of Computational Physics* 218.1, S. 200–227.
- ZHANG, D., WANG, Z. und LIU, D. (2010). “A global view of midlevel liquid-layer topped stratiform cloud distribution and phase partition from CALIPSO and CloudSat measurements”. In: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 115.D4.
- ZHANG, Z. und PROSPERETTI, A. (2005). “A second-order method for three-dimensional particle simulation”. In: *Journal of Computational Physics* 210.1, S. 292–324.
- ZHAO, Z. und LEI, H. (2014). “Aircraft observations of liquid and ice in midlatitude mixed-phase clouds”. In: *Advances in Atmospheric Sciences* 31.3, S. 604–610.
- ZHOU, G. und SAITO, N. (2013). “Analysis of the fictitious domain method with penalty for elliptic problems”. In: *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics* 31.1, S. 57–85.



# Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei XXX und XXX bedanken, die es mir als „Fachfremden“ ermöglicht haben, an diesem interessanten Thema aus der Meteorologie zu arbeiten. Ein besonderer Dank geht hierbei an XXX für die kontinuierlich gute Betreuung, die geduldige Beantwortung vieler Fragen und für genauso viele fruchtbare Diskussionen.

Für kritisches und sehr gründliches Korrekturlesen sowie das Finden von Orthografiefehlern geht ein grosser Dank an XXX, XXX und XXX.

Ein besonderer Dank geht an XXX für die Unterstützung, das Aufbauen und nicht zuletzt für das gründliche Korrekturlesen.

Des Weiteren möchte ich mich bei allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe für ein sehr angenehmes Arbeitsklima und häufige interessante Diskussionen während der Pausen bedanken.