

# **Austauschprozesse an Tropopausenfalten extratropischer Zyklonen**

## **Dissertation**

zur Erlangung des Grades  
“Doktor der Naturwissenschaften”

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

**Christiane Hofmann**

geb. am 13. September 1984 in Mainz

Mainz, den 11. September 2014

D77 - Mainzer Dissertationen

Datum der mündlichen Prüfung: 8. Dezember 2014

---

# Zusammenfassung

Troposphärisches Ozon ist bekannt als wichtiges Oxidationsmittel und als Vorläufergas hoch reaktiver Radikale. Es zählt zu den wichtigsten Treibhausgasen und wirkt bei hohen Konzentrationen an der Erdoberfläche giftig für alle Lebewesen. Zwar wird der Großteil des troposphärischen Ozons photochemisch produziert, ein erheblicher Anteil hat aber stratosphärischen Ursprung und wird entlang von Tropopausenfalten in Zyklonen in die Troposphäre transportiert. Dieser Transport von Luftmassen aus der Stratosphäre in die Troposphäre (STT) kann zu einem kurzzeitigen, starken Ozonanstieg am Boden führen und langfristig die Chemie der Troposphäre beeinflussen. Die Quantifizierung des Ozonintrages und die Identifizierung der dafür verantwortlichen Prozesse ist mit großen Unsicherheiten belastet und ein aktuelles Forschungsthema.

Aufgrund ihrer groben Auflösung ist es mit globalen Modellen nicht möglich, die Details dieser STT-Prozesse zu erfassen. Deshalb wird in dieser Arbeit das Modellsystem MECO(n) genutzt, welches das regionale Atmosphärenchemie- und Klimamodell COSMO/MESSy mit dem globalen Chemie-Klimamodell ECHAM5/MESSy (EMAC) koppelt. Eine einheitliche Prozessparametrisierung ermöglicht konsistente, simultane Simulationen in verschiedenen Modellauflösungen. Ein als Teil dieser Arbeit neu entwickeltes Submodell erlaubt die Initialisierung künstlicher, passiver Tracer in Abhängigkeit verschiedener Variablen. Mit einem auf diese Weise freigesetzten, stratosphärischen Tracer lässt sich Ozon mit stratosphärischer Herkunft von solchem, das photochemisch produziert wurde, unterscheiden.

Im Rahmen einer Fallstudie werden die Austauschprozesse an einer Tropopausenfalte sowohl aus der Eulerischen, als auch aus der Lagrangeschen Perspektive betrachtet. Die Analyse der STT-Prozesse zeigt, dass Luftmassen aus der Stratosphäre durch turbulente und diabatische Prozesse am Rand der Tropopausenfalte in die Troposphäre gelangen und anschließend bis zum Boden transportiert werden. Diese absinkenden, stratosphärischen Luftmassen führen in den Simulationen zu Ozonanstiegen am Boden, die mit Beobachtungsdaten evaluiert werden können. Es wird gezeigt, dass die Ergebnisse der feiner auflösenden Modellinstanz gut mit den Messungen übereinstimmen.

In einer Lagrangeschen Analyse lassen sich Mischungszeitskalen für STT-Prozesse bestimmen. Es wird gezeigt, dass Luftpakete, die sich länger als zehn Stunden in der Troposphäre aufhalten, diese durch den Eintrag ihrer stratosphärischen Tracereigenschaften beeinflussen und daher nicht vernachlässigbar sind. Eine weitere Studie gibt Aufschluss über die Effektivität der Mischung an Tropopausenfalten: Fast die gesamte Luftmasse, die sich zu einem bestimmten Zeitpunkt in der Tropopausenfalte befindet, gelangt innerhalb von zwei Tagen in die Troposphäre.



## abstract

Tropospheric ozone is well known as an important oxidant and a precursor for highly reactive radicals. It is one of the most important greenhouse gases and toxic to all living creatures in case of high concentrations occurring at the earth' surface. Although a large fraction of tropospheric ozone is produced photochemically, significant amounts of ozone have stratospheric origin and are transported to the troposphere along deep tropopause folds in cyclones. This transport of air masses from the stratosphere to the troposphere (STT) can lead to peaked ozone concentrations at ground level and hereby influence the long-term trend of tropospheric ozone. The quantification of the amount of ozone input and the identification of responsible processes are subject to a high level of uncertainty and therefore a current topic of research.

Because of their coarse resolution, global models are not able to simulate these STT-processes in detail. Therefore we use the global and regional atmospheric chemistry model system MECO(n), which couples the limited-area atmospheric chemistry and climate model COSMO/MESSy to the global model ECHAM5/MESSy for Atmospheric Chemistry (EMAC). Using similar process parametrisations, the system allows for very consistent, simultaneous simulations in different spatial resolutions. As a part of this thesis a new submodel has been developed, enabling the release of artificial, passive tracers dependent on certain variables. Initialising an artificial stratospheric tracer that way makes it possible to distinguish between ozone with stratospheric origin and those which has been photochemically produced.

Within the scope of a case study, we investigate the exchange processes in the vicinity of a tropopause fold from Eulerian and Lagrangian point of view. Air parcels, entering the troposphere due to turbulent and diabatic processes along the tropopause fold, are transported deep into the lower troposphere. Simulated ozone enhancements at ground level, caused by descending stratospheric air masses, are evaluated with observational data. It is shown that the results of the finer resolved, regional model instance coincide well with the measurements.

Within the framework of a Lagrangian study, mixing time-scales for STT-processes are determined. It is shown, that air parcels, staying in the troposphere longer than ten hours, influence the troposphere by inserting their stratospheric tracer properties and are therefore not negligible. Furthermore, the effectivity of mixing along a tropopause fold is analysed, showing that almost all of the air masses being once in the tropopause fold are transported into the troposphere during the following two days.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>v</b>
<b>1 Einleitung und Ziele</b>	<b>1</b>
1.1 Die Atmosphäre der Erde . . . . .	1
1.1.1 Troposphäre, Stratosphäre und Tropopause . . . . .	2
1.2 Stratosphären-Troposphären-Austausch (STE) . . . . .	5
1.2.1 STE - globale Aspekte . . . . .	6
1.2.2 STE in den Extratropen - bevorzugte Regionen und Prozesse . . . . .	7
1.3 Quellen, Senken und die Bedeutung von Ozon . . . . .	11
1.3.1 ... in der Stratosphäre . . . . .	11
1.3.2 ... in der Troposphäre . . . . .	13
1.4 Analysemethoden . . . . .	15
1.5 Ziele und Gliederung der Arbeit . . . . .	18
<b>2 Modell, Daten und Methoden</b>	<b>21</b>
2.1 Das Modellsystem MECO(n) . . . . .	21
2.1.1 MESSy . . . . .	21
2.1.2 ECHAM5/MESSy . . . . .	22
2.1.3 COSMO/MESSy . . . . .	23
2.1.4 MECO(n) . . . . .	24
2.2 Beobachtungsdaten . . . . .	25
2.2.1 Bodenmessungen . . . . .	25
2.2.2 Ozonsonden . . . . .	25
2.3 Methoden . . . . .	26
2.3.1 Tracerinitialisierung mit PTRACINI . . . . .	26
2.3.2 Trajektorienrechnung mit LAGRANTO . . . . .	29
2.3.3 Turbulenzindex . . . . .	29
2.3.4 Algorithmus zur Zyklonenidentifikation . . . . .	29
2.3.5 Taylordiagramm . . . . .	30

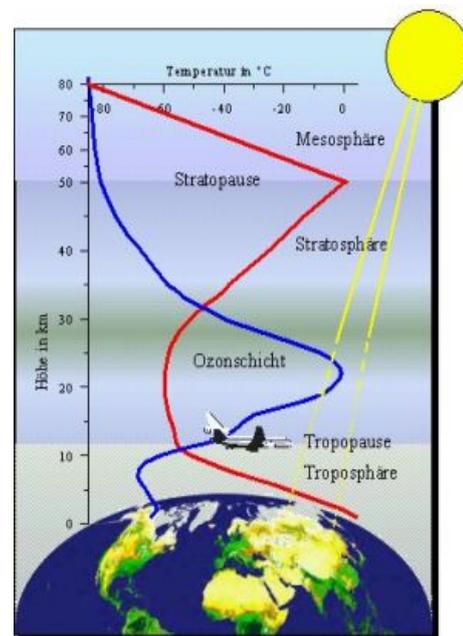
<b>3</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>31</b>
3.1	Synoptische Situation . . . . .	31
3.2	Simulationen . . . . .	33
3.2.1	Modellkonfiguration . . . . .	33
3.2.2	Tracerinitialisierung . . . . .	37
3.3	Einfluss von stratosphärischen Luftmassen auf bodennahe Ozonkonzentrationen . . . . .	40
3.3.1	Evaluation der Ergebnisse der verschiedenen MECO(n)-Instanzen	40
3.3.2	Detaillierte Analyse des Tracertransportes . . . . .	54
3.4	Sensitivitätsstudien mit variierender Modellkonfiguration . . . . .	61
3.4.1	Rückkopplung durch Chemie . . . . .	61
3.4.2	Variation von Initialisierungs- und Startzeitpunkt . . . . .	61
3.4.3	Variation des Initialisierungskriteriums . . . . .	70
3.4.4	Variation der vertikalen Modellauflösung . . . . .	71
3.5	Austauschprozesse an der Tropopausenfalte . . . . .	77
3.5.1	Bevorzugte Austauschregionen und Mischungszeitskalen . . . . .	77
3.5.2	Quantifizierung des Austausches an der Tropopausenfalte . . . . .	94
<b>4</b>	<b>Schlussfolgerungen</b>	<b>101</b>
4.1	Zusammenfassung und Diskussion . . . . .	101
4.2	Ausblick . . . . .	109
<b>A</b>	<b>Übersicht der aktiven MESSy-Submodelle</b>	<b>113</b>
<b>B</b>	<b>Entwicklung verschiedener Variablen entlang von Trajektorien</b>	<b>115</b>
<b>C</b>	<b>Tracerzeitreihen von EMAC</b>	<b>119</b>
<b>D</b>	<b>Abkürzungen, Variablen und Einheiten</b>	<b>123</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>127</b>
	<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>128</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>139</b>

# Kapitel 1

## Einleitung und Ziele

### 1.1 Die Atmosphäre der Erde

Die Erde ist von einer gasförmigen Hülle, der Erdatmosphäre, umschlossen, die sich vertikal zwischen der Erdoberfläche und etwa 10000 km ausdehnt. Aufgrund ihrer vertikalen Temperaturstruktur lässt sich die Erdatmosphäre in verschiedene Schichten einteilen. In den unteren 80 km der Atmosphäre befinden sich die Troposphäre, die Stratosphäre sowie die Mesosphäre (Abb. 1.1 und Kap. 1.1.1). Die Hauptbestandteile des Gasgemisches dieser Schichten sind gut durchmischt. Es setzt sich zusammen aus 78,1% Stickstoff, 20,9% Sauerstoff und 0,93% Argon und anderen Edelgasen. Aufgrund von Kondensation und Evaporation variiert das Mischungsverhältnis von Wasserdampf in der Troposphäre zwischen 0 und 3%. Auch die Konzentrationen der Spurengase ist in der Atmosphäre räumlich und zeitlich sehr variabel, zusammen tragen sie ca. 1% zu dem Gasgemisch der Atmosphäre bei. Trotz ihres geringen Anteils haben einige Spurengase großen Einfluss auf die Strahlungsbilanz und damit auf die Temperatur der Atmosphäre. Kohlenstoffdioxid ( $\text{CO}_2$ ), Methan ( $\text{CH}_4$ ), Ozon ( $\text{O}_3$ ) und Distickstoffmonoxid ( $\text{N}_2\text{O}$ ) zählen neben Wasserdampf ( $\text{H}_2\text{O}$ ) zu den bedeutendsten Treibhausgasen. Sie absorbieren und emittieren unter an-



**Abbildung 1.1:** Schematischer Aufbau der Erdatmosphäre bis 80 km Höhe mit Temperatur- (rot) und Ozonprofil (blau) (Quelle: [http://www.dwd.de/-Spezielle Nutzer, Schulen, Klima und Umwelt](http://www.dwd.de/-Spezielle%20Nutzer,%20Schulen,%20Klima%20und%20Umwelt), Stand: 11.06.2014).

derem die terrestrische, langwellige Strahlung und tragen auf diese Weise zum natürlichen Treibhauseffekt bei. Letzterer führt zu einem Ansteigen der mittleren Oberflächentemperatur der Erde von  $-18^{\circ}\text{C}$  auf  $15^{\circ}\text{C}$  und ermöglicht dadurch das Leben auf der Erde. Während der letzten 150 Jahre ist die Konzentration der Treibhausgase durch anthropogen verursachte Emissionen angestiegen, wodurch eine Zunahme der globalen Temperatur verursacht wird. Die Verbrennung fossiler Brennstoffe (Kohle, Erdöl, Erdgas) führt dabei beispielsweise zu zusätzlichen  $\text{CO}_2$ -Emissionen, die Intensivierung der Viehzucht verursacht eine erhöhte Methanproduktion. Neben den Treibhausgasen werden durch anthropogene Emissionen flüchtige, organische Verbindungen (Kohlenwasserstoffe, VOCs) und weitere, oft gesundheitsschädliche Stoffe in die Troposphäre eingetragen. Die Troposphäre besitzt jedoch eine gewisse Selbstreinigungskraft, die das Ansteigen der Konzentrationen dieser Spezies verhindert. Durch Oxidationsprozesse werden VOCs in Moleküle überführt, die über Trockendeposition oder Niederschlag wieder aus der Troposphäre entfernt werden. Die Oxidationsfähigkeit der Troposphäre wird durch das hochreaktive Hydroxylradikal (OH) bestimmt, dessen Hauptquelle das Ozon ist.

Troposphärisches Ozon hat demnach großen Einfluss auf die Chemie der Troposphäre, zählt zu den wichtigsten Treibhausgasen und ist, bei hohen Konzentrationen an der Erdoberfläche, gesundheitsschädlich für alle Lebewesen. In der Stratosphäre absorbiert Ozon die gefährlichen Teile der ultravioletten Strahlung (UV-Strahlung), ermöglicht dadurch erst das Leben auf der Erde und hat großen Einfluss auf die Strahlungsbilanz der unteren Stratosphäre.

Wie die Ozonverteilungen in Troposphäre und Stratosphäre zu Stande kommen und welche Quellen und Senken das Ozon hat wird in den Abschnitten 1.3.1 und 1.3.2 beschrieben. Die folgenden Kapitel geben zunächst einleitend eine Übersicht über die sich in ihren thermischen, chemischen und dynamischen Eigenschaften stark unterscheidenden Atmosphärenschichten Troposphäre und Stratosphäre (Kap. 1.1.1) sowie über die Austauschprozesse zwischen ihnen (Kap. 1.2).

### **1.1.1 Troposphäre, Stratosphäre und Tropopause**

Die energiereiche, solare Strahlung erwärmt die Erdoberfläche, wird dort als langwellige, terrestrische Strahlung emittiert und führt damit zu einer Erwärmung der darüber liegenden Schichten. Die Troposphäre ist daher grundsätzlich charakterisiert durch eine Temperaturabnahme mit der Höhe, im Mittel um  $6,5^{\circ}\text{C km}^{-1}$ . Ihre vertikale Ausdehnung ist abhängig von der geographischen Breite und liegt zwischen 6 km an den Polen und 18 km am Äquator. Die Troposphäre beinhaltet 75% bis 90% der Gesamtmasse sowie fast den gesamten Wasserdampf der Atmosphäre. Erwärmte Luftmassen am Boden steigen aufgrund von Hebungsprozessen oder Konvektion auf und kühlen dabei trockenadiabatisch ab. Kommt es zur Kondensation wird latente Wärme freigesetzt, die ein weiteres Aufsteigen der Luftmassen ermöglicht. Kalte Luftmassen aus höheren, troposphärischen Regionen oder durch Verdunstung auskühlende Luftmassen sinken

dagegen ab. Aufgrund dieser ständigen auf- und absteigenden Luftmassen ist die Troposphäre eine gut durchmischte Atmosphärenschicht.

In der oberhalb der Troposphäre liegenden Stratosphäre bleibt die Temperatur in den unteren Schichten mit der Höhe konstant oder nimmt leicht zu. Im oberen Teil der Stratosphäre steigt die Temperatur deutlich an. Durch diese stabile Schichtung der Stratosphäre werden starke Vertikalbewegungen unterdrückt. Grund für die Temperaturzunahme ist die Ozonschicht (Kap. 1.3.1), in der die kurzwellige Solarstrahlung absorbiert wird.

### Tropopausendefinitionen

Als Tropopause wird die Grenze zwischen Troposphäre und Stratosphäre bezeichnet. Um Austauschprozesse zwischen Stratosphäre und Troposphäre (engl.: stratosphere-troposphere-exchange, STE) diagnostizieren zu können (Kap. 1.2) wird eine eindeutige Definition der Tropopause benötigt. Die Stratosphäre unterscheidet sich von der Troposphäre in ihren thermischen, chemischen und dynamischen Eigenschaften (Kap. 1.1.1). Die im Folgenden aufgeführten Tropopausendefinitionen basieren auf diesen unterschiedlichen Eigenschaften.

- **Thermische Tropopause**

Traditionell wird die Tropopause über den vertikalen Temperaturgradienten bestimmt. Dabei gilt die Tropopause nach Definition der World Meteorological Organization (WMO) als unterstes Niveau, bei dem das Temperaturgefälle (engl.: lapse rate) kleiner als 0,002 K/m wird und in einer Schicht von mindestens 2 km über diesem Niveau diesen Wert nicht überschreitet (World Meteorological Organization 1957). Auf diese Weise lässt sich der Übergang von Troposphäre zu Stratosphäre sehr einfach bestimmen. Allerdings ist die Definition der thermischen Tropopause in Regionen mit Tropopausenfalten (Kap. 1.2.2) nicht eindeutig, da auf der Höhe des Strahlstroms (engl.: Jetstream) Diskontinuitäten entstehen. Die thermische Tropopause ist daher keine kontinuierliche, zweidimensionale Fläche im Raum. Außerdem lässt sie sich in horizontalen, zweidimensionalen Feldern nicht bestimmen. Die thermische Tropopause ist daher zur Analyse dynamischer oder chemischer Transportvorgänge eher ungeeignet.

- **Dynamische Tropopause**

Um dynamische Prozesse zu analysieren bietet sich die Verwendung der Potentiellen Vorticity (PV) an (Reed 1955; Shapiro 1980). Sie ist nach Ertel (1942) wie folgt definiert:

$$PV = \frac{1}{\rho} \vec{\eta} \cdot \vec{\nabla} \Theta, \quad (1.1)$$

dabei ist  $\rho$  die Dichte,  $\Theta$  die potentielle Temperatur und  $\vec{\eta} = \vec{\zeta} + 2\vec{\Omega}$  die absolute Vorticity, mit  $\vec{\Omega}$  dem Vektor der Erdrotation und  $\vec{\zeta} = \vec{\nabla} \times \vec{u}$  der relativen Vorticity.

Die Änderung der PV lässt sich durch einen Reibungs- und einen diabatischen Term beschreiben:

$$\frac{D}{Dt}PV = \frac{1}{\rho}(\vec{\nabla} \times \vec{F}) \cdot \vec{\nabla}\Theta + \frac{1}{\rho}\vec{\eta} \cdot \vec{\nabla}\dot{\Theta}. \quad (1.2)$$

Hier bezeichnet  $\vec{F}$  die Summe aller nicht konservativen Kräfte,  $\dot{\Theta} = \frac{D\Theta}{Dt}$  die diabatische Heizrate. Für den Fall einer adiabatischen und reibungsfreien Strömung ist die PV demnach materiell erhalten (Hoskins et al. 1985). Aufgrund ihrer stabilen Schichtung sind die PV-Werte der Stratosphäre sehr groß, in der Troposphäre im Mittel eher klein.

Das ursprüngliche Konzept der dynamischen Tropopause basiert auf dem isentropen Gradienten der PV (Reed 1955). Kunz et al. (2011) zeigen, dass die PV-Werte der dynamischen Tropopause in den Extratropen in Abhängigkeit von Jahreszeit, potentieller Temperatur und geographischer Breite zwischen 1,5 und 5 pvu (1 pvu =  $10^{-6} \text{ m}^2\text{s}^{-1}\text{K kg}^{-1}$ ) variieren. Zur Vereinfachung werden meistens feste PV-Werte als Tropopausendefinition verwendet. Am häufigsten Verwendung findet die 2pvu-Tropopause (Holton et al. 1995). Aufgrund der undefiniertheit der PV am Äquator wird in den Tropen nicht die PV, sondern die potentielle Temperatur als dynamische Tropopause verwendet.

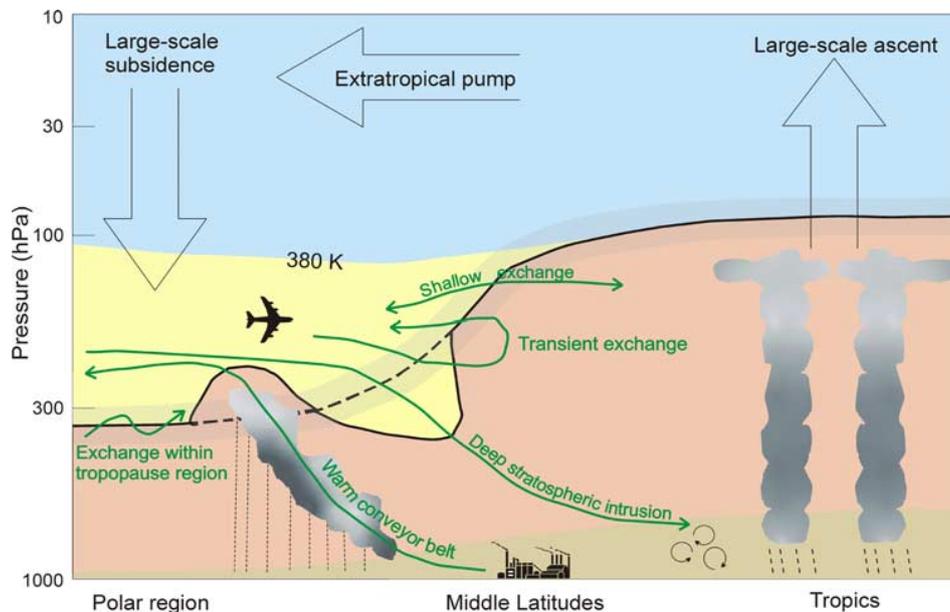
- **Chemische Tropopause**

Chemisch lässt sich die Tropopause über sogenannte Tracer definieren. Tracer sind Indikatoren für bestimmte Zustände, Prozesse oder Regionen. Häufig werden Spurenstoffe, die in dem betrachteten Bereich der Atmosphäre eine geringe Hintergrundkonzentration haben und chemisch nahezu inert sind, als Tracer verwendet. Durch ihre Analyse lassen sich Ausbreitung und Mischungsprozesse der Luftmassen untersuchen.

Aufgrund seiner geringen Konzentrationen in der Troposphäre und dem starken Anstieg in der Stratosphäre (Abb. 1.1) kann beispielsweise Ozon als natürlicher, stratosphärischer Tracer betrachtet und zur Definition der chemischen Tropopause genutzt werden. Dazu werden häufig bestimmte Ozonmischungsverhältnisse (Wild 2007: 150 ppb; Hsu et al. 2005: 100 ppb) oder Ozongradienten (Bethan et al. 1996: 60 ppb/km über eine Schichtdicke von mind. 200 m) verwendet. Aufgrund der Variabilität von Ozon sind die gewählten Tropopausenwerte abhängig von der Saison und der geographischer Breite (Zahn et al. 2002).

Neben natürlichen Tracern wie Ozon lassen sich auch künstliche Tracer zur Beschreibung der Tropopause nutzen. Prather et al. (2011) definieren einen künstlichen Tracer E90. Dieser hat eine Zerfallszeit von 90 Tagen und wird kontinuierlich an der Erdoberfläche emittiert. Die Tropopause lässt sich durch eine Fläche konstanter Mischungsverhältnisse (Isofläche) des E90-Tracers beschreiben und ist unabhängig von Saison und geographischer Breite.

## 1.2 Stratosphären-Troposphären-Austausch (STE)



**Abbildung 1.2:** Großskalige Zirkulation und STE-Prozesse. Die mittlere Lage der Tropopause ist dargestellt durch die schwarze, dicke Linie. Die blaue Region entspricht der sogenannten „overworld“ (Holton et al. 1995), in der die Isentropen über 380 K vollständig in der Stratosphäre liegen. Die gelbe Region ist die untere Stratosphäre, in der die Isentropen die Tropopause schneiden. Die rosa Region stellt die freie Troposphäre dar, während die braune Region der planetaren Grenzschicht entspricht. Auswölbungen der gelben und rosanen Region stellen Tropopausenanomalien bzgl. der mittleren Tropopausenlage (gestrichelte Linie) dar. Breite Pfeile kennzeichnen den Transport durch die globale Zirkulation. Mit Trajektorien, eingezeichnet als grüne Pfeile, werden STE-relevante Prozesse dargestellt (aus Stohl et al. 2003).

Austauschprozesse zwischen Stratosphäre und Troposphäre haben großen Einfluss auf das Klima und beeinflussen die Lebensbedingungen auf der Erde (Solomon et al. 2010). Kleine Änderungen in den Konzentrationen der Treibhausgase in der unteren Stratosphäre und oberen Troposphäre (engl.: upper tropospheric/lower stratosphere, UTLS) haben signifikanten Einfluss auf den Strahlungsantrieb (Forster und Shine 1997; Zhang et al. 2004; Riese et al. 2012). Der Transport stratosphärischer, ozonreicher Luftmassen in die Troposphäre beeinflusst die troposphärischen Ozonkonzentrationen und damit die Chemie und Strahlung in der Troposphäre (Kap. 1.3.2). Transport von troposphärischen, zum Teil stark verschmutzten Luftmassen in die Stratosphäre, stört die Gleichgewichte von Chemie und Strahlung in der Stratosphäre.

### 1.2.1 STE - globale Aspekte

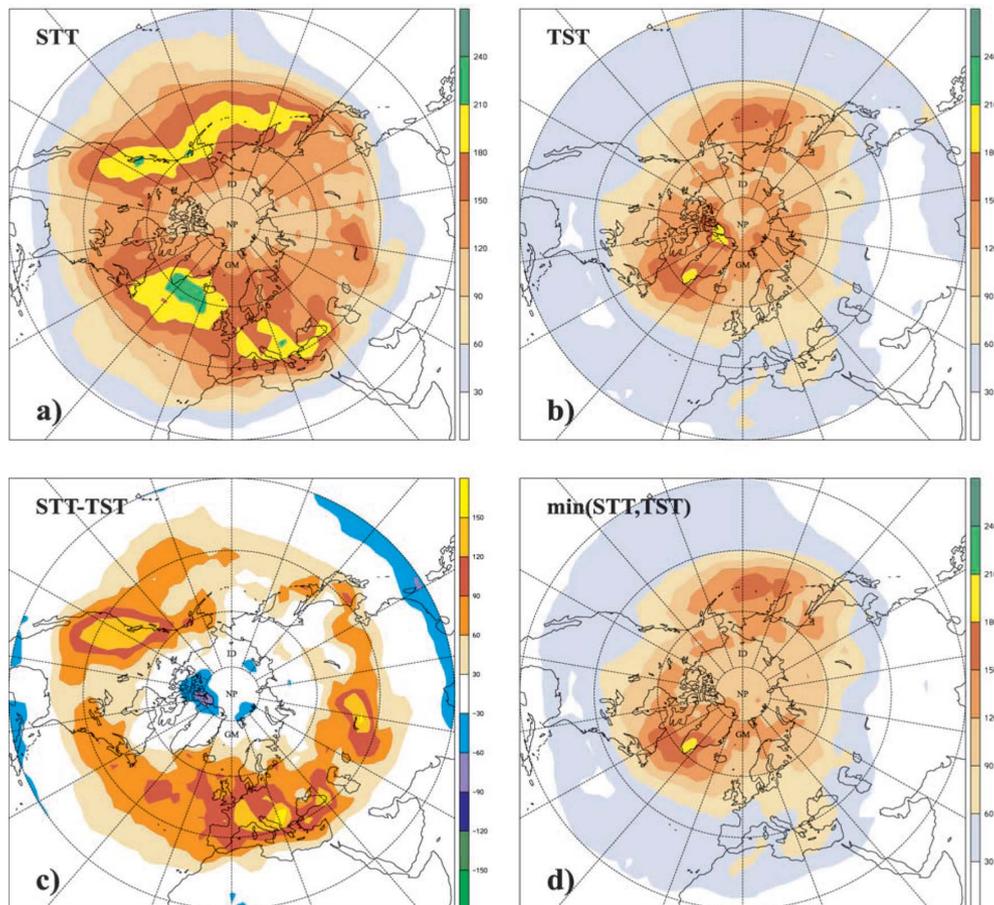
Die Verteilung der Tracer in der UTLS-Region wird, neben den chemischen Prozessen, durch die stratosphärische Zirkulation bestimmt (Holton et al. 1995). Diese wurde erstmals von Brewer (1949) und Dobson (1956) beschrieben und umfasst alle stratosphärischen Tracertransportprozesse, sowohl die Residualzirkulation, verbunden mit dem Netto-Massentransport, als auch bidirektionale Mischungsprozesse (Boenisch et al. 2011).

Die Residualzirkulation beschreibt den Netto-Massentransport, bei dem Luftmassen in den Tropen in die Stratosphäre gelangen, in der Stratosphäre polwärts und in den mittleren und hohen Breiten abwärts in die Troposphäre transportiert werden (Abb. 1.2, breite Pfeile). Der Transport in der Stratosphäre lässt sich in einen flachen und einen tiefen Zweig (engl.: shallow and deep branch) einteilen (Boenisch et al. 2011). Der flache Zweig verläuft zwischen 380 K und 500 K innerhalb einer durch die Tropen kontrollierten Übergangsregion (engl.: tropical controlled transition layer) in die Extratropen (Rosenlof et al. 1997), während der tiefe Zweig in der oberen Stratosphäre und Mesosphäre verläuft (Birner und Boenisch 2011). In beiden Fällen wird der Transport angetrieben durch das Brechen von planetaren Wellen auf unterschiedlichen Skalen (Plumb 2002). In der extratropischen Stratosphäre ist das Brechen von Schwerewellen ein zusätzlicher Antrieb (McLandress und Shepherd 2009). Der Wellenantrieb wird auch als extratropische Pumpe (engl.: extratropical pump, Abb. 1.2) bezeichnet (Holton et al. 1995).

Während die Transportzeit der Residualzirkulation etwa fünf Jahre beträgt, finden die bidirektionalen Mischungsprozesse auf Transport- und Mischungszeitskalen in der Größenordnung von Wochen statt (Shepherd 2003). Quasi-isentrop kommen sie in der gesamten Stratosphäre und in der Mesosphäre vor, zwischen Stratosphäre und Troposphäre treten sie als STE-Ereignisse auf (z.B.: „shallow exchange“ in Abb. 1.2) (Boenisch et al. 2011). Diese bidirektionalen Massenflüsse über die Tropopause haben zwar keinen Einfluss auf die Massenbilanz, können allerdings die chemische Zusammensetzung der Luftmassen ändern und damit die Chemie sowohl in der Troposphäre als auch in der Stratosphäre beeinflussen (Gettelman et al. 2011). Bei den Mischungsprozessen handelt es sich daher um den irreversiblen Teil der Tracertransportprozesse, der letztendlich zu einem Austausch von Spurenstoffen zwischen zwei verschiedenen Reservoirs führt.

Auf Grundlage der Residualzirkulation lässt sich für die Extratropen netto ein Abwärtstransport stratosphärischer Luftmassen berechnen (Appenzeller et al. 1996b), ohne die klein- und mesoskaligen Mischungsprozesse (Abb. 1.2, grüne Pfeile) im Detail zu analysieren. Die Betrachtung des Netto-Massentransportes über die Tropopause ist allerdings unzureichend bei der Analyse von Tracerbudgets (Stohl et al. 2003). Um beispielsweise den Einfluss von STE auf das troposphärische Ozon zu untersuchen ist es daher notwendig, die einzelnen STE-Prozesse im Detail zu analysieren.

### 1.2.2 STE in den Extratropen - bevorzugte Regionen und Prozesse



**Abbildung 1.3:** Geographische Verteilung des jährlichen, nordhemisphärischen (a) STT-, (b) TST-, (c) Netto- (STT - TST) und (d) bidirektionalen ( $\min(\text{STT}, \text{TST})$ ) Massenflusses über die Tropopause. Die Analyse basiert auf einer 15-jährigen Klimatologie von STE-Trajektorien. Die Massenflüsse sind farbig dargestellt in  $\text{kg km}^{-2} \text{s}^{-1}$  (aus Sprenger und Wernli (2003), ausführliche Beschreibung im Text).

In dieser Arbeit werden STE-Ereignisse in den mittleren Breiten auf der Nordhemisphäre untersucht. Im Folgenden werden daher ausschließlich die STE-Prozesse in den Extratropen beschrieben. STE-Prozesse der Tropen sind in Stohl et al. (2003) zusammengefasst. Um zwischen Austauschprozessen von der Stratosphäre in die Troposphäre und von der Troposphäre in die Stratosphäre zu unterscheiden, werden die Abkürzungen STT (Stratosphären-Troposphären-Transport) und TST (Troposphären-Stratosphären-Transport) eingeführt.

Die bevorzugten Regionen der STT-Ereignisse sind zonal und saisonal variabel. Sprenger

und Wernli (2003) zeigen, dass im Winter, Frühling und Herbst die meisten Ereignisse entlang der Zyklonenzugbahnen über Nordatlantik und -pazifik auftreten, im Winter und Frühling zusätzlich über dem Mittelmeer. Im Sommer befinden sich die bevorzugten Regionen dagegen über den Kontinenten, insbesondere über Südosteuropa und Zentralasien (Sprenger und Wernli 2003; Skerlak et al. 2014). Im Gegensatz dazu ist die saisonale und zonale Variabilität der TST-Ereignisse deutlich geringer. Deutliche Maxima treten südlich und nördlich von Grönland auf. Die geographische Verteilung der jährlichen STT- und TST-Massenflüsse über die Tropopause sind in Abb. 1.3 (a) und (b) dargestellt und zeigen, dass TST-Ereignisse, verglichen mit den STT-Ereignissen, in nördlicheren Regionen der Extratropen auftreten. Diese klimatologischen Ergebnisse stimmen mit der Studie von Juckes (2000) überein, in der theoretisch erhöhter TST-Fluss in den nördlichen Regionen und erhöhter STT-Fluss in den südlichen Regionen der Extratropen abgeleitet wird. Dabei finden die STT-Prozesse in einem Bereich von etwa 150 hPa unterhalb, die TST-Prozesse etwas oberhalb der klimatologischen Tropopause statt (Wernli und Bourqui 2002). Sprenger und Wernli (2003) zeigen, dass der Netto-Austausch (Abb. 1.3 c, Differenz zwischen STT- und TST-Massenfluss) grundsätzlich die Dominanz der STT-Ereignisse in den mittleren Breiten wiedergibt. Maxima des abwärtsgerichteten Massenflusses befinden sich über den USA und Mitteleuropa, in den Ausgangsregionen des Strahlstroms. Diese Regionen befinden sich stromabwärts der Zyklonenzugbahnen über dem Nordpazifik und Nordatlantik. Das Maximum des bidirektionalen Austauschs (Abb. 1.3 d,  $\min(\text{STT}, \text{TST})$ ) befindet sich südlich von Grönland und erstreckt sich über den Nordatlantik. In dieser Region findet demnach starker Austausch in beide Richtungen statt, der zwar nicht zum Netto-Massenfluss beiträgt, aber Einfluss auf die Chemie und den Tracertransport hat (Gettelman et al. 2011). Stromabwärts über den Kontinenten dagegen, in Regionen in denen barokline Wellen typischerweise brechen, dominiert der STT-Fluss. Diese Region wurde bereits in Studien von Danielsen (1968) als bevorzugte Region für STT-Ereignisse in den Extratropen identifiziert.

Das Brechen der baroklinen Wellen in Bereichen, in denen der Strahlstrom seine maximalen Geschwindigkeiten erreicht und die daraus folgenden Störungen der Tropopause sind verbunden mit dem Auftreten von Tropopausenfalten (Abb. 1.4). STT-Prozesse an Tropopausenfalten können den Transport von stratosphärischen Luftmassen bis in die planetare Grenzschicht verursachen und werden im nächsten Abschnitt detaillierter betrachtet. Außerdem treten STT-Ereignisse in der Umgebung von mesoskaligen, konvektiven Systemen (Mullendore et al. 2005), bei Gewittern (Wang 2003), durch das Brechen von Schwerewellen (Lamarque et al. 1996) sowie durch den scherungs- (Appenzeller et al. 1996a) und strahlungsbedingten (Forster und Wirth 2000) Zerfall von abgeschnürten Tiefdruckgebieten (engl.: Cut-Off-Low) und Tropopausenfilamenten (engl.: Streamer) auf. In der Umgebung von Wolken führen die damit verbundenen diabatischen Effekte, wie Strahlungskühlung oder latentes Heizen, zu STT-Prozessen (Lamarque und Hess 1994; Wirth 1995). In wolkenfreien Regionen ist das Auftreten von Turbulenz, verursacht durch Konvektion, Windscherung, Strahlung oder das Brechen von Schwerewellen, verantwortlich

für den STT (Shapiro 1980; Stohl et al. 2003).

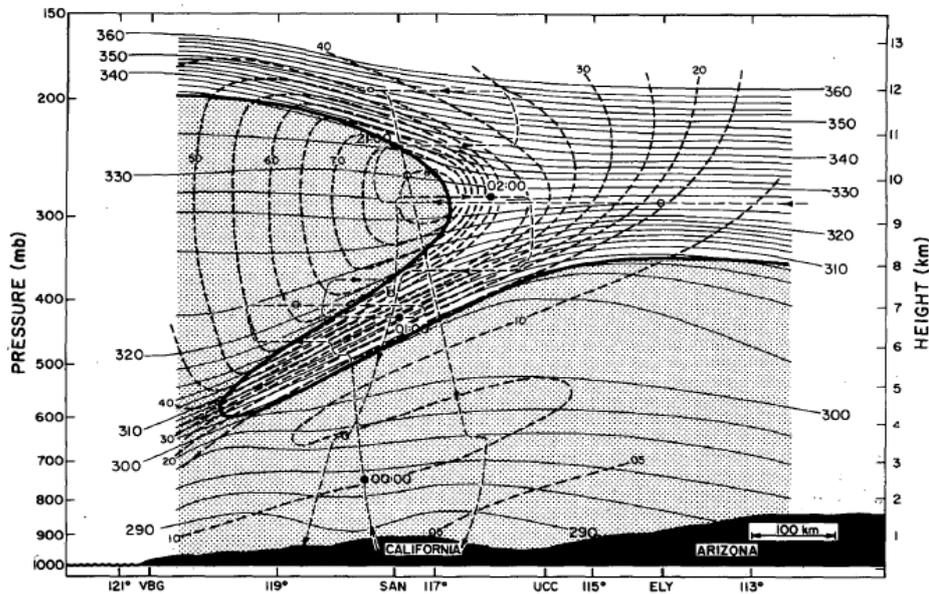
Der TST-Massenfluss in den Extratropen ist geringer als der STT-Massenfluss (Abb. 1.3 b). Luftmassen, die durch einen TST-Prozess in den Extratropen in die Stratosphäre gelangen, erreichen lediglich die untere Stratosphäre (Abb. 1.2, gelber Bereich). Um die „overworld“ (Abb. 1.2, blauer Bereich) zu erreichen, wäre aufgrund der stabilen Schichtung der Stratosphäre ein extremer Anstieg der potentiellen Temperatur der Luftmassen notwendig. Da die Strahlung hierfür nicht ausreicht, beeinflussen TST-Prozesse der Extratropen ausschließlich die untere Stratosphäre (Stohl et al. 2003).

In zahlreichen Studien werden diabatische Prozesse als Ursache für den TST identifiziert (Rood et al. 1997), insbesondere Strahlungseffekte im Zusammenhang mit Antizyklo- nen (Zierl und Wirth 1997). Bei hochreichender Konvektion kann es zu einem Durchsto- ßen (engl.: overshoot) der Tropopause und damit dem Eintrag von feuchter Luft in die Stratosphäre kommen (Poulida et al. 1996; Wang 2003; Hegglin et al. 2004). Auch das Brechen von Schwerewellen zählt zu den potentiellen TST-Prozessen (Lamarque et al. 1996; Schilling et al. 1999). Konopka und Pan (2012) analysieren Mischungsprozesse in der Umgebung des Jetstreams und zeigen, dass fast alle Mischungsprozesse auf der strato- sphärischen, zyklonalen Seite des Strahlstroms stattfinden und wahrscheinlich durch turbulente Prozesse ausgelöst werden. In Zyklonen kommt es vor der Kaltfront zu He- bungsprozessen entlang der warmen, feuchten Transportbänder (engl.: warm conveyor belt). Aufgrund des starken, diabatischen Heizens durch das Freisetzen latenter Wärme werden Luftmassen aus der unteren Troposphäre in die obere Troposphäre transportiert. Strahlung, Scherung oder Turbulenz können schließlich den TST dieser Luftmassen ver- ursachen (Wernli und Bourqui 2002; Stohl 2001; Joos und Wernli 2012).

### **Die Rolle von Tropopausenfalten**

Ein Großteil der beobachteten STE-Prozesse in den Extratropen findet in Regionen mit Höhentrogen oder abgeschnürten Höhentiefdruckgebieten statt, die wiederum sehr häufig zur Entstehung von Tropopausenfalten führen (Shapiro 1980; Bush und Peltier 1994; Bourqui 2006; Skerlak et al. 2014). STT-Prozesse in Verbindung mit Tropopausenfalten werden häufig auch als trockene Intrusion (engl.: dry intrusion) oder als trockener Luft- strom (engl.: dry airstream) von Zyklonen bezeichnet (Cooper et al. 2004).

Tropopausenfalten entstehen in dem baroklinen Bereich unterhalb des Strahlstroms (Abb. 1.4) aufgrund einer ageostrophischen Zirkulation (Keyser und Shapiro 1986). Dabei sind Tropopausenfalten zunächst nicht zwangsweise mit STE-Prozessen verbunden. Bei der Ausbildung der Tropopausenfalte ist die PV (Gl. 1.1.1) erhalten und das Absinken der stratosphärischen Luftmassen zunächst reversibel (Shapiro 1980). Sowohl diabatische als auch turbulente Mischungsprozesse an der Falte können zu Mischung zwischen strato- sphärischen und troposphärischen Luftmassen und schließlich zur Rückbildung der Falte führen: Forster und Wirth (2000) beschreiben, dass sich die filamentartigen PV-Strukturen nach einigen Tagen aufgrund von Strahlungsprozessen auflösen. Die Lebensdauer von



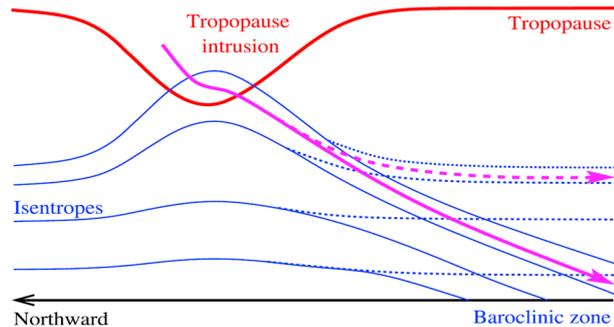
**Abbildung 1.4:** Querschnitt durch eine Tropopausenfalte. Dargestellt ist die potentiellen Temperatur (in K; dünne, durchgezogene Linien), die Windgeschwindigkeit (in m/s; dicke, gestrichelte Linie), der Flugweg während einer Messkampagne (dünne, gestrichelte Linie) sowie die potentielle Vorticity (in  $100 \times 10^{-7} \text{ K s}^{-1} \text{ mb}^{-1}$ ; dicke, durchgezogene Linie) als Tropopause. Der gepunktete Bereich entspricht der Troposphäre (aus Shapiro 1980).

Falten kann ebenfalls durch das Auftreten von Turbulenz verkürzt werden (Shapiro 1980). Bourqui (2006) zeigt, dass die nicht-konservativen Prozesse einer Kumuluswolke den Zerfall der Falte und damit die STT-Ereignisse initialisieren.

Basierend auf Messdaten macht Shapiro (1980) die Annahme, dass etwa die Hälfte des Ozons, das in eine Tropopausenfalte transportiert wird, schließlich auch in die Troposphäre gelangt. Dabei werden den Tracern innerhalb der Falte bereits zu 50% troposphärische Eigenschaften zugeordnet. Cooper et al. (2004) zeigen mit einer Trajektorienstudie, dass 22% der Luftmasse in einer Falte innerhalb von 7,5 Tagen in die Troposphäre transportiert werden. Dieser Anteil steigt auf 90% innerhalb von zwei Tagen, wenn ausschließlich der untere Teil (unter 600 hPa) der Tropopausenfalte betrachtet wird.

Tropopausenfalten sind dreidimensionale Strukturen und in horizontalen PV-Feldern (z.B. auf Isentropen oder Druckniveaus) als schmale, weit zum Äquator ausgehende PV-Filamente, sogenannte stratosphärische Streamer, zu erkennen. Sprenger et al. (2007) zeigen, dass an über 50% aller Streamer STT-Ereignisse stattfinden. Dabei ist der Massenfluss durch STT-Ereignisse größer ( $1,74 \cdot 10^{12} \text{ kg/h}$ ) als durch TST-Ereignisse ( $0,92 \cdot 10^{12} \text{ kg/h}$ ). STT-Ereignisse finden bevorzugt an der stromaufwärts gelegenen (westlichen) Seite, TST-Ereignisse an der stromabwärts gelegenen (nordöstlichen) Seite der Streamer statt. 15% aller Streamer sind verbun-

den mit sogenannten tiefreichenden STT-Prozessen (engl.: deep exchange events), durch die stratosphärische Luftmassen bis in die planetare Grenzschicht transportiert werden. Diese tiefreichenden STT-Ereignisse finden an ausgeprägten Tropopausenfalten statt, die tief in die Troposphäre eindringen (Stohl und Trickl 1999). Nach Bourqui und Trepanier (2010) lässt sich die Bewegung der Luftpakete bei tiefreichenden STT-Prozessen in drei Phasen beschreiben: Das Überschreiten der Tropopause findet in der Umgebung von niedrigen Tropopausenstrukturen statt. Anschließend sinken die Luftpakete entlang der geneigten Isentropen quasi-adiabatisch ab, ihre potentielle Temperatur nimmt dabei etwa um ein 1 K pro Tag ab. In der unteren Troposphäre verteilen sich die Luftpakete schließlich in Abhängigkeit der dort vorherrschenden, synoptischen Strömung. Voraussetzung für tiefreichende STT-Ereignisse ist das Vorhandensein einer baroklinen Zone am Boden, die zu einer weiteren Neigung der Isentropen führt (Abb. 1.5). Durch diese tiefreichenden STT-Ereignisse kann stratosphärisches Ozon bis in die planetare Grenzschicht transportiert werden (Skerlak et al. 2014).



**Abbildung 1.5:** Schematische Darstellung eines typischen, extratropischen, tiefreichenden STT-Ereignisses. Die rote Linie kennzeichnet die dynamische Tropopause. Blaue Linien stellen Isentropen dar, die durch die Tropopausenanomalie verformt sind. Durchgezogene (gestrichelte) Linien entsprechen den Isentropen, falls am Boden in der Nähe der Tropopausenfalte eine (keine) barokline Zone auftritt. Die pinken Linien stellen die entsprechenden Trajektorien für diese beiden Fälle dar (aus Bourqui und Trepanier 2010).

## 1.3 Quellen, Senken und die Bedeutung von Ozon

### 1.3.1 ... in der Stratosphäre

Etwa 90% des Ozons befinden sich in der Stratosphäre, 75% bilden im Höhenbereich von 15 bis 30 km die Ozonschicht. Durch die Absorption der UV-Strahlung in der Ozonschicht gelangt die für Lebewesen gefährliche Strahlung mit geringerer Intensität an die Erdoberfläche. Änderungen der chemischen Zusammensetzung in der UTLS-Region haben großen Einfluss auf den Strahlungsantrieb. Die simulierten Strahlungseffekte von Wasserdampf und Ozon sind dabei besonders sensitiv auf die Unsicherheiten der Mi-

schung in dieser Region. Für Ozon wird der größte Einfluss dieser Unsicherheiten in der extratropischen unteren Stratosphäre beobachtet (Riese et al. 2012).

Die Entstehung der vertikalen Ozonverteilung sowie der Ozonschicht lassen sich mit dem Chapman-Reaktionsmechanismus beschreiben (Chapman 1930). Durch hochenergetische UV-Strahlung (Wellenlänge  $\lambda = 180 - 240 \text{ nm}$ ) wird die Photodissoziation eines Sauerstoffmoleküls ( $\text{O}_2$ ) in zwei Sauerstoffatome ( $\text{O}$ ) ermöglicht (Gl. 1.3). Zusammen mit einem weiteren Sauerstoffmolekül und einem beliebigen Stoßparameter  $M$  bildet sich Ozon ( $\text{O}_3$ ) (Gl. 1.4). UV-Strahlung ( $\lambda = 200 - 300 \text{ nm}$ ) trägt ebenfalls zur Photolyse und damit zum Abbau, von Ozon bei (Gl. 1.5). Durch Rekombination bilden sich aus dem entstandenen Sauerstoffatom und einem weiteren Ozonmolekül zwei Sauerstoffmoleküle (Gl. 1.6).



Dabei ist  $h\nu$  das Produkt aus dem Planckschen Wirkungsquantum  $h$  und der Frequenz  $\nu$  von Licht der Wellenlänge  $\lambda$ .

Aus dem Gleichgewicht der Reaktionen 1.3 - 1.6 lässt sich die Ozonkonzentration in der Atmosphäre berechnen. Dabei ergibt sich ein vertikales Ozonprofil, mit maximalen Ozonwerten in einer Schicht zwischen 15 und 30 km (Abb. 1.1). Oberhalb dieser Schicht liegt eine geringere Dichte der Sauerstoffmoleküle vor, unterhalb kommt weniger der intensiven UV-Strahlung an.

Berücksichtigt man zur Berechnung der stratosphärischen Ozonchemie ausschließlich den Chapman-Mechanismus, stellen sich im Gleichgewicht zu hohe Ozonkonzentrationen ein. Katalytische Prozesse sorgen für den zusätzlichen, effektiven Ozonabbau. Dabei handelt es sich um eine Folge von Elementarreaktionen, in der eine Substanz  $X$ , bei der es sich meistens um Radikale wie beispielsweise das Hydroxyl-Radikal ( $\text{OH}$ ) oder Stickstoffmonoxid ( $\text{NO}$ ) handelt, verbraucht (Gl. 1.7) und anschließend neu produziert (Gl. 1.8) wird. In der Bilanz (Gl. 1.9) bleibt dabei die Konzentration der Substanz  $X$  unverändert, Ozon dagegen wird abgebaut.



In der unteren Stratosphäre hat Ozon eine Lebensdauer von mehreren Monaten. Seine Konzentration wird hier vielmehr durch die meteorologische Dynamik, als durch die chemischen Prozesse bestimmt. Daher eignet sich Ozon als dynamischer Tracer für stratosphärische Luftmassen.

### 1.3.2 ... in der Troposphäre

Ozon in der Troposphäre ist eines der bedeutendsten Treibhausgase und hat großen Einfluss auf die Chemie. Es ist die Hauptquelle des Hydroxylradikals (OH) und bestimmt auf diese Weise die Oxidationsfähigkeit der Troposphäre. Troposphärisches Ozon wird photochemisch produziert und abgebaut, eine weitere Quelle ist der Eintrag aus der Stratosphäre, eine weitere Senke die Trockendeposition. Im Folgenden werden die wichtigsten Produktions- und Abbauprozesse des Ozons beschrieben.

Ausgangspunkt zahlreicher Oxidationsprozesse in der Troposphäre ist die Photolyse von Ozon (Levy 1971). Bei der Photodissoziation von Ozon bei Wellenlängen kleiner 320 nm entstehen angeregte Sauerstoffatome ( $O(^1D)$ ) (Gl. 1.10). Durch Stöße mit molekularem Stickstoff ( $N_2$ ) oder Sauerstoff ( $O_2$ ) als Stoßpartner (M) werden die angeregten Sauerstoffatome wieder in den Grundzustand überführt (Gl. 1.11) und es kommt schließlich zur Ozonrückbildung (Gl. 1.12). Ein geringer Teil ( $\approx 1\%$ ) der angeregten Sauerstoffatome reagiert mit Wasser (Gl. 1.12). Diese Reaktion ist die Hauptquelle des OH-Radikals.



Die entstandenen OH-Radikale sind hochreaktiv. Ihre Hauptsenke ist die Oxidation von Kohlenstoffmonoxid (CO) und Methan ( $CH_4$ ). Zusätzliche lokale Senken sind Kohlenwasserstoffe (VOCs), wie beispielsweise das in Wäldern emittierte Isopren ( $C_5H_8$ ).

Während der Oxidation von Kohlenstoffmonoxid und Methan kann Ozon photochemisch erzeugt und abgebaut werden. Ozonproduktions- und abbauraten werden dabei durch das Vorhandensein von Stickstoffoxiden ( $NO_x = NO + NO_2$ ) und UV-Strahlung bestimmt.

Bei der Oxidation von CO reagieren die in Gl. 1.13 produzierten OH-Radikale schnell zu  $HO_2$  (Gln. 1.14 und 1.15).



Liegen in unbelasteter Luft geringe  $NO_x$ -Konzentrationen vor, wird das  $HO_2$  über die Reaktion mit  $O_3$  zurück in OH umgewandelt (Gl. 1.16). Diese Reaktionskette führt netto zu einem Ozonabbau.

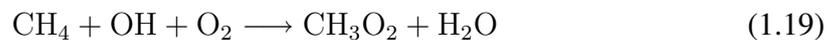


Liegen tagsüber ausreichend hohe Mischungsverhältnisse von  $NO_x$  vor ( $\gtrsim 10$  ppt), führt die CO-Oxidation dagegen zur Bildung von Ozon. Über  $HO_2$ , entstanden in Gl. 1.15, wird

NO in NO<sub>2</sub> umgewandelt (Gl. 1.17). Bei Wellenlängen < 430 nm wird das entstandene NO<sub>2</sub> photolysiert (Gl. 1.18) und schließlich Ozon nach Gl. 1.12 produziert. Auf diese Weise führt tagsüber ein Anstieg von NO zur Ozonproduktion.



Ähnliches gilt für die Methanoxidation: Durch das OH-Radikal wird Methan oxidiert (Gl. 1.19). Bei Anwesenheit von NO kommt es zur Bildung von NO<sub>2</sub> (Gl. 1.20). Letzteres wird schließlich, wie während der CO-Oxidation, photolysiert und es kommt zur Ozonproduktion (Gln. 1.18 und 1.12). Die Methanoxidation bei niedrigen NO<sub>x</sub>-Konzentrationen und in der Nacht hat keinen Einfluss auf das Ozon.



NO<sub>x</sub> reguliert demnach die chemischen Produktions- und Abbauprozesse des troposphärischen Ozons. In den Extratropen entstehen Stickoxide hauptsächlich durch die Verbrennung fossiler Brennstoffe, wie sie vor allem bei Kraftfahrzeugen vorkommen. Natürliche Quellen, vor allem in den niedrigen Breiten, sind die Biomassenverbrennung und Blitze. Während NO<sub>x</sub> aus Erdböden emittiert wird, sind die Konzentrationen über dem Ozean sehr niedrig.

Erhöhte NO<sub>x</sub>-Konzentrationen in den mittleren Breiten liegen daher vor allem in städtischen Regionen und Ballungsgebieten vor und verursachen einen für diese Regionen typischen Tagesgang im Ozon. Nach Sonnenaufgang kommt es zur photochemischen Produktion von Ozon. Maximalwerte werden in den Nachmittagsstunden erreicht. Nach Sonnenuntergang wird Ozon nach Gl. 1.16 abgebaut. In ländlichen Gebieten oder an höher gelegenen Stationen lässt sich dieser Tagesgang aufgrund niedrigerer NO<sub>x</sub>-Konzentrationen nicht beobachten.

Laut aktuellem Bericht des „Intergovernmental Panel on Climate Change“ (IPCC; Myhre et al. 2013) werden, basierend auf der Modellvergleichsstudie von Young et al. (2013), global jährlich 4877±853 Tg Ozon chemisch produziert. Der Ozonabbau liegt bei 4260±645 Tg. Daraus ergibt sich global betrachtet netto eine chemische Ozonproduktion von jährlich 618±275 Tg. Die Trockendeposition ist neben den chemischen Prozessen ein weiterer Abbauprozess des troposphärischen Ozons. Dabei reagiert Ozon mit organischen Verbindungen (z.B. Pflanzen) an der Erdoberfläche. Jährlich werden auf diese Weise 1094±264 Tg Ozon abgebaut (Myhre et al. 2013). Als zweite Quelle des troposphärischen Ozons gilt der Eintrag von stratosphärischem Ozon. Die Menge des Eintrages wird in den globalen Studien durch die Annahme einer ausgeglichenen Ozonbilanz erhalten. So gelangen laut IPCC-Report jährlich 477±96 Tg des stratosphärischen Ozons

durch Stratosphären-Troposphären-Austausch (STE) in die Troposphäre. Verglichen mit der photochemischen Ozonproduktion ( $4877 \pm 853$  Tg/a) tragen STE-Prozesse zwar nur 9% zum globalen, troposphärischen Ozon bei, der Eintrag des stratosphärischen Ozons in die obere Troposphäre hat allerdings maximalen Einfluss auf die Strahlungsbilanz. Im IPCC-Report wird langfristig ein Anstieg des stratosphärischen Ozonflusses in die Troposphäre prognostiziert. Grund dafür ist die Erholung des stratosphärischen Ozons sowie eine prognostizierte Beschleunigung der großskaligen Zirkulation (Hegglin und Shepherd 2009).

Die Quantifizierung des Ozoneintrages in die Troposphäre durch STE-Prozesse ist aktuell noch mit großen Unsicherheiten behaftet. Die Wahl unterschiedlicher Modelle oder Tropopausendefinitionen führt zu großen Unterschieden in der Berechnung der globalen, jährlichen Ozoneinträge durch STE. In einer Modellvergleichsstudie liegen die Ergebnisse in einem Bereich zwischen 340 und 1440 Tg (Wild 2007). Verglichen mit der photochemischen Ozonproduktion liegt der Anteil des stratosphärischen Beitrags zum troposphärischen Ozon in diesen Modellstudien zwischen 5 und 20%. Tatsächlich ist der stratosphärische Beitrag zum troposphärischen Ozon deutlich höher, da der maximale Eintrag in den Extratropen im Winter und Frühling stattfindet, wenn troposphärisches Ozon eine lange Lebenszeit hat (Stohl et al. 2003). Roelofs und Lelieveld (1997) schätzen den stratosphärischen Beitrag am troposphärischen Ozon durchschnittlich auf 40%. Lelieveld und Dentener (2000) zeigen, dass im Jahr 1993 fast 50% des troposphärischen Ozons aus der Stratosphäre stammen, obwohl der STE-Beitrag verglichen mit der photochemischen Produktion des Ozons nur 17% beträgt.

Um zu bestimmen, wie gut Modelle bestimmte Aspekte des Ozonbudgets erfassen, ist es notwendig, weitere Fallstudien auf Prozessebene durchzuführen (Stohl et al. 2003). Nur, wenn die einzelnen STE-Prozesse verglichen mit Beobachtungen, im Modell korrekt wiedergegeben werden, lassen sich die einzelnen Beiträge zum Ozonbudget exakt quantifizieren.

## 1.4 Analysemethoden

In Abschnitt 1.2.1 wurde beschrieben, dass es auf Grundlage der globalen, meridionalen Zirkulation möglich ist, den Netto-Massentransport über die Tropopause zu berechnen (Appenzeller et al. 1996b). Da bidirektionale Massenflüsse über die Tropopause allerdings die chemische Zusammensetzung der Luftmassen ändern und damit die Chemie beeinflussen können, ist eine detaillierte Analyse der STE-Prozesse notwendig.

Verschiedene Methoden wurden entwickelt, um STE-Prozesse in Simulationsergebnissen von globalen und regionalen Modellen zu analysieren. Der am häufigsten genutzte Eulerische Ansatz beruht auf der Methode von Wei (1987). Er basiert auf einem gene-

ralisierten Koordinatensystem, bei dem ein funktioneller Zusammenhang zwischen der Vertikalkoordinate und der PV angenommen wird. Dieser Ansatz ist allerdings aufgrund der Aufhebung großer numerischer Terme mit großen Ungenauigkeiten behaftet (Wirth 1995). Deutliche Verbesserungen in der Genauigkeit der Eulerischen Methode werden durch die Verwendung der PV als Vertikalkoordinate und des PV-Budgets erreicht (Wirth und Egger 1999). Diese Methode ist allerdings in den meisten Modellen nicht anwendbar. In anderen Implementierungen sind die Berechnungen der lokalen STT und TST-Flüsse sehr sensibel auf die Wahl der Initialisierungsdaten (Gettelman und Sobel 2000).

Verglichen mit dem Eulerischen Ansatz liefert die Lagrangesche Methode zuverlässigere Ergebnisse über den tatsächlichen STE-Fluss im Modell (Wirth und Egger 1999). Allerdings entsteht ein Teil dieses Flusses im Modell aufgrund numerischer Diffusion, die nicht notwendiger Weise einen physikalischen Prozess repräsentiert, der in der realen Atmosphäre tatsächlich auftritt. Wernli und Bourqui (2002) führen in ihrer Studie ein Kriterium bezüglich der Aufenthaltszeit (engl.: residence time) ein. Damit sollen Trajektorien eliminiert werden, die sich nach dem STT (TST) nur kurze Zeit in der Troposphäre (Stratosphäre) aufhalten. STE-Ereignisse, die durch numerische Diffusion oder Interpolationsfehler in der Trajektorienberechnung in der Umgebung der stark strukturierten Tropopause entstehen, werden dadurch ausgeschlossen. Wernli und Bourqui (2002) vermuten, dass Trajektorien mit kurzen Aufenthaltszeiten, die nicht aufgrund von Fehlern entstehen aber mit dem Kriterium ebenfalls eliminiert werden, einen vernachlässigbaren, chemischen Einfluss haben. James et al. (2003) berechnen, dass mehr als 90% aller STE-Trajektorien, innerhalb von sechs Stunden erneut die Tropopause überqueren. Die Mischung entlang dieser Trajektorien sei nur wenig signifikant für die troposphärische Chemie. Da die Berechnung separierter STT- und TST-Flüsse daher stark von der Wahl des Aufenthaltszeitkriteriums abhängt und zu einer dramatischen Überschätzung des chemischen STE-Effektes führen kann, wird in Bourqui (2006) eine Mindestaufenthaltszeit von acht Stunden empfohlen.

Neben den Unsicherheiten die mit den Eulerischen und Lagrangeschen Analysemethoden verbunden sind, spielt die räumliche Auflösung der zu Grunde liegenden Daten eine wichtige Rolle bei der Quantifizierung von STE-Prozesse an Tropopausenfalten. Bourqui (2006) zeigt, dass gröbere horizontale Auflösungen aufgrund der zu groben Darstellung der Tropopausenfalte zu einer starken Unterschätzung der STT-Ereignisse führt. In der Studie von Gray (2003) wird mit steigender Modellauflösung erhöhter Tracertransport in die untere Troposphäre festgestellt.

Die richtige Darstellung des Ozons in der unteren Stratosphäre ist entscheidend, um den Transport von stratosphärischen Tracern in die freie Troposphäre korrekt wiederzugeben (Roelofs et al. 2003). Zusätzlich müssen die Entwicklung der Tropopausenfalte, filamentartige Strukturen sowie Abbauprozesse durch Chemie und Deposition korrekt simuliert werden (Lin et al. 2012). Um den Eintrag von stratosphärischen Tracern in die Grenzschicht zu erfassen, ist die Erfassung zusätzlicher, mesoskaliger Prozesse, wie

beispielsweise der nächtliche, niedrige Strahlstrom (engl.: Low-Level-Jet) am Oberrand von Bodeninversionen oder das Brechen gebirgsinduzierter Lee-Wellen, notwendig (Johnson und Viezee 1981). Cristofanelli et al. (2003) zeigen im Rahmen einer Modellvergleichsstudie, dass es mit globalen Modellen mit Gitterweiten größer  $1,85^\circ$  nicht möglich ist, den Transport von stratosphärischen Tracern bis zum Boden zu erfassen. Lagrangesche Analysen zeigen, dass der Transport stratosphärischer Luftmassen bis in die untere Troposphäre mit dem Auftreten erhöhter Ozonwerte, sowohl an hoch als auch an niedrig gelegenen Bodenmessstationen übereinstimmt (Lefohn et al. 2011).

In den letzten Jahren wurden daher neue Ansätze entwickelt, um den stratosphärischen Ozonbeitrag und insbesondere die Ozonkonzentrationen am Boden, mit Modellen besser zu erfassen. Zhang et al. (2011) verwenden das globale Modell GEOS-Chem. Sie zeigen, dass die Simulationsergebnisse des Ozons am Boden deutlich verbessert werden, wenn für die Zielregion eine regionale, höher auflösende Instanz ( $0,5^\circ \times 0,67^\circ$ ) verwendet wird. Stratosphärische Intrusionen werden allerdings nicht korrekt wiedergegeben. Lefohn et al. (2013) verwenden ein gekoppeltes System, bestehend aus dem globalen GEOS-Chem und drei Instanzen des regionalen CAMx (Comprehensive Air quality Model with extension). Mit der hochauflösenden Instanz, die eine horizontale Auflösung von 12 km hat, werden Ozonerhöhungen am Boden, verursacht durch absinkende stratosphärische Luftmassen, besser erfasst. Der stratosphärische Beitrag wird allerdings weiterhin unterschätzt, da dem Ozon nur eine stratosphärische Herkunft zugeordnet wird, wenn es oberhalb von 10 km in die Troposphäre eintritt. Lin et al. (2012) zeigen, dass es mit dem GFDL AM3, einem globalen Chemie-Klima-Modell mit einer horizontalen Auflösung von 50 km, prinzipiell möglich ist, Ozonerhöhungen am Boden durch absinkende stratosphärische Luftmassen zu erfassen und zu diagnostizieren. Der relative Beitrag von STE zum Ozon am Boden wird in Verbindung mit stratosphärischen Intrusionen mit 40 - 60% etwa 2 - 3 mal höher abgeschätzt, als in früheren Studien. Das Modell hat allerdings Schwierigkeiten, plötzliche, stark ansteigende Ozonerhöhungen zum richtigen Zeitpunkt am richtigen Ort wiederzugeben. Als Gründe dafür werden die begrenzte Auflösung von Orographie und von mesoskaligen Prozessen, unzureichende Darstellung der Grenzschichtdynamik und fehlende Ozonsenken angegeben.

Die Analysemethoden der STE-Ereignisse und der damit verbundenen Prozesse sind mit großen Unsicherheiten behaftet. Die Bestimmung der Genauigkeit, mit der die Modelle die einzelnen STE-Prozesse repräsentieren, erfordert weitere detaillierte Fallstudien (Stohl et al. 2003). Höhere horizontale Auflösungen in den Modellen ermöglichen, in Fallstudien den STE-Beitrag von beobachteten Ozonerhöhungen am Boden zu bestimmen (Zhang et al. 2011; Lefohn et al. 2013; Lin et al. 2012). Um diese Ergebnisse zu bestätigen und im Rahmen von Vergleichsstudien zu evaluieren sind weitere Fallstudien mit hochauflösenden Chemiemodellen notwendig (Lin et al. 2012).

## 1.5 Ziele und Gliederung der Arbeit

Um den Einfluss der STE-Prozesse quantifizieren zu können, ist eine detaillierte Analyse der STT- und TST-Prozesse notwendig. Ziel dieser Arbeit ist es, das Verständnis dieser STE-Prozesse zu verbessern. Dazu werden Simulationen mit dem neu entwickelten Modellsystem MECO(n) durchgeführt. Basierend auf den Simulationsdaten, die neben den dynamischen auch die chemischen Felder enthalten, lassen sich Trajektorienstudien durchführen. Die STE-Prozesse werden auf diese Weise konsistent, sowohl aus der Lagrangeschen als auch aus der Eulerischen Perspektive, analysiert. Folgende Fragen sollen im Rahmen dieser Analyse beantwortet werden:

### 1. Unterscheidet sich der Tracertransport in den beiden MECO(n)-Instanzen?

Das Modellsystem MECO(n) (Kap. 2.1.4) beinhaltet die zwei Basismodelle ECHAM (Kap. 2.1.2) und COSMO (Kap. 2.1.3), die sich unter anderem durch ihre Auflösung unterscheiden. Verschiedene Studien zeigen, dass der Tracertransport über die Tropopause in Modellen sehr sensitiv auf die Modellauflösung ist: Durch eine Erhöhung der Auflösung wird die numerische Diffusion reduziert und es kommt zu einer Abnahme des Massenflusses über die Tropopause (Cristofanelli et al. 2003; Land et al. 2002; Rind et al. 2007). Hier wird untersucht, inwiefern sich der Tracertransport in den beiden Modellinstanzen unterscheidet.

### 2. Ist es mit dem Modellsystem MECO(n) möglich, den Transport von Tracern aus der Stratosphäre bis an die Erdoberfläche zu erfassen?

Während Frontpassagen von Tiefdruckgebieten werden an Bodenstationen häufig erhöhte Ozonkonzentrationen gemessen. In verschiedenen Studien wird gezeigt, dass diese Ozonerhöhungen mit dem Absinken stratosphärischer Luftmassen verbunden sind (Lefohn et al. 2013; Lin et al. 2012). Mit globalen Chemie-Klima-Modellen ist es allerdings bisher nicht möglich, die beobachteten Ozonerhöhungen im Modell räumlich und zeitlich korrekt zu erfassen.

Im Rahmen einer Fallstudie, in der sich ein Tiefdruckgebiet mit ausgeprägter Tropopausenfalte über Europa entwickelt, wird der Tracertransport aus der Stratosphäre zur Erdoberfläche mit dem Modellsystem MECO(n) untersucht. Aus den simulierten Ozonerhöhungen am Boden sollen Rückschlüsse auf die Herkunft des Ozons gezogen werden. Dazu wurde im Rahmen dieser Arbeit ein neues Submodell entwickelt, das die Initialisierung künstlicher Tracer unter bestimmten Bedingungen ermöglicht. Mit Hilfe eines künstlichen, stratosphärischen Tracers lassen sich auf diese Weise Ozonerhöhungen am Boden auf stratosphärische Einträge zurückführen.

**3. Wie sensitiv sind die Simulationsergebnisse bezüglich Modellauflösung, Tropopausendefinition und Tracerinitialisierung?**

In globalen Modellen werden die STE-Prozesse nur unzureichend erfasst (Roelofs et al. 2003), der stratosphärische Beitrag zum troposphärischen Ozonbudget dadurch unterschätzt (Lin et al. 2012). Durch eine erhöhte horizontale Auflösung wird der Transport von stratosphärischen Luftmassen in die untere Stratosphäre von Modellen besser wiedergegeben (Zhang et al. 2011; Lefohn et al. 2013; Lin et al. 2012). In dieser Arbeit wird das Modellsystem MECO(n) verwendet, welches chemisch und dynamisch konsistente Simulationen in verschiedenen Auflösungen auf globaler und regionaler Skala ermöglicht. Der Tracertransport wird in Abhängigkeit der Modellauflösung untersucht und mit Beobachtungsdaten evaluiert. Durch Sensitivitätsstudien, in denen die Tracerinitialisierung, die vertikale Modellauflösung und die Definition der dynamischen Tropopause variiert wird, werden die Ergebnisse auf ihre Robustheit getestet.

**4. Welche Prozesse verursachen den STE?**

Sowohl diabatische (Forster und Wirth 2000) als auch turbulente Prozesse (Shapiro 1980) können Ursache für STE-Prozesse entlang von Tropopausenfalten sein. Die Kombination von Eulerischen und Lagrangeschen Analyseansätzen ermöglicht die Bestimmung der einzelnen Prozesse, die in dieser Fallstudie für den Transport von stratosphärischer Luft in die untere Troposphäre verantwortlich sind.

**5. Gibt es in der Umgebung der Tropopausenfalte bevorzugte Regionen für STE-Ereignisse und welchen Einfluss hat dabei das Aufenthaltszeitkriterium?**

In der Analyse von Sprenger et al. (2007) werden STT-Ereignisse an stratosphärischen Streamern bevorzugt an der stromaufwärts gelegenen Seite identifiziert, während die TST-Ereignisse bevorzugt stromabwärts auftreten. Sprenger et al. (2007) wählen dabei ein Aufenthaltszeitkriterium von vier Tagen. Um zu bestimmen, welchen Einfluss die Wahl des Aufenthaltskriterium auf die Identifizierung von STE-Ereignissen hat, werden sowohl STT- als auch TST Trajektorien im gesamten Simulationsgebiet analysiert.

**6. Auf welchen Zeitskalen findet Mischung statt?**

Die Zeitskalen, auf denen entlang von Tropopausenfalten Mischung zwischen stratosphärischer und troposphärischer Luft stattfindet, sind unzureichend bekannt (Stohl et al. 2003). Durch die Verwendung einer Mindestaufenthaltszeit in Lagrangeschen Analysen werden möglicherweise Mischungsprozesse auf kleineren Zeitskalen ausgeschlossen (Bourqui 2006). Eine Lagrangesche Analyse, der die dynamischen und chemischen Daten des MECO(n)-Systems zu Grunde liegen, ermöglicht die Darstellung von Mischungszeitskalen entlang von STE-Trajektorien.

Zusätzlich wird die geographische Lage der STE-Ereignisse relativ zu der Tropopausenfalte exakt bestimmt und auf diese Weise ein Zusammenhang zwischen STE-Region und Aufenthaltszeit hergestellt.

#### 7. **Wie effektiv ist die Mischung an einer Tropopausenfalte?**

Shapiro (1980) hat auf der Grundlage von Messdaten abgeschätzt, dass etwa 50% der Luftmassen aus der Tropopausenfalte in die Troposphäre transportiert werden und die Luftmassen innerhalb der Tropopausenfalte bereits zu 50% troposphärische Tracereigenschaften haben. Diese Abschätzungen werden in einer Trajektorienstudie überprüft. Um die Effektivität der Mischung an Tropopausenfalten zu quantifizieren, wird das Verhältnis zwischen TST- und STT-Prozessen an Tropopausenfalten bestimmt. Zusätzlich wird die Zusammensetzung der Luftmassen innerhalb von Tropopausenfalten analysiert.

Einleitend wird in Kap. 2 das Modellsystem MECO(n) beschrieben, sowie verwendete Beobachtungsdaten und Analysemethoden vorgestellt. Die synoptische Situation der Fallstudie wird in Kap. 3.1 dargestellt, die verwendete Modellkonfiguration und die Initialisierung der Tracer in Kap. 3.2.1. Die Analyse des Einflusses stratosphärischer Luftmassen auf bodennahe Ozonkonzentrationen beginnt in Kap. 3.3.1 mit der Evaluation der Modellergebnisse unterschiedlicher Auflösungen mit Beobachtungsdaten. Eine detaillierte Analyse des Tracertransportes und der zu Grunde liegenden Prozesse erfolgt in Kap. 3.3.2, bevor die Ergebnisse in Kap. 3.4 auf ihre Robustheit getestet werden. Abschnitt 3.5 umfasst die Analyse der STE-Prozesse an der Tropopausenfalte aus der Lagrangeschen Perspektive. Dabei werden bevorzugte Austauschregionen und Mischungszeitskalen (Kap. 3.5.1), sowie die STE-Bilanz an der Tropopausenfalte (Kap. 3.5.2) bestimmt. Abschließend werden die Ergebnisse in Kap. 4 zusammengefasst und diskutiert.

## Kapitel 2

# Modell, Daten und Methoden

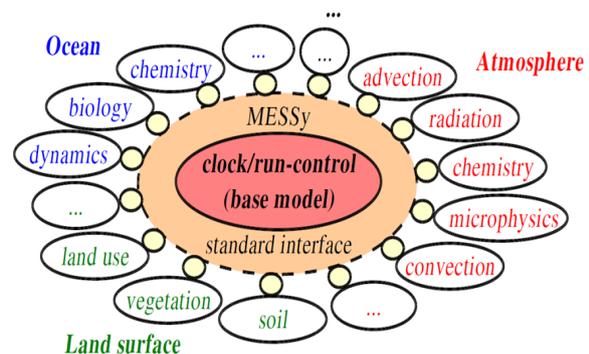
### 2.1 Das Modellsystem MECO(n)

Die Modellsimulationen in dieser Arbeit werden mit dem neu entwickelten Modellsystem MECO(n) („MESSy-fied ECHAM- and COSMO models nested **n**-times“) durchgeführt. In den folgenden Abschnitten werden die einzelnen Komponenten des Systems beschrieben.

#### 2.1.1 MESSy

Die Entwicklung des „Modular Earth Submodel System (MESSy)“ begann 2001 am Max-Planck-Institut für Chemie in Mainz. Dem 2013 gegründeten „MESSy Consortium“ gehören heute neun Institute an. MESSy besteht aus einem stets erweiterbaren Satz aus Submodellen zur Beschreibung diverser Prozesse, einer Infrastruktur, mit der sich die Prozesse koppeln lassen und einem Kodierungsformat.

Eine der Grundideen von MESSy ist die Modularisierung: Jeder spezifische Prozess ist als selbstständiges, unabhängiges Submodell programmiert, das individuell an- und ausgeschaltet werden kann. Dabei handelt es sich sowohl um Submodelle, die physikalische und chemische Prozesse beschreiben, als auch um diagnostische Submodelle. Zusätzlich enthält MESSy



**Abbildung 2.1:** Die Idee von MESSy: Über eine standardisierte Schnittstelle werden verschieden Submodelle an die Basismodelle gekoppelt (aus Jöckel et al. 2005).

Zusätzlich enthält MESSy

sogenannte generische Submodelle. Diese bilden die Infrastruktur, um die prozessorientierten und diagnostischen Submodelle über eine standardisierte Schnittstelle an ein Basismodell zu koppeln (engl: interface, Abb. 2.1). Beispielsweise stellt das generische Submodell CHANNEL (Tab. A.1, Jöckel et al. 2010) unter anderem die Infrastruktur für das Datenmanagement zur Verfügung: Damit Datenfelder, wie z.B. die Temperatur, zwischen den verschiedenen Submodellen ausgetauscht werden können, wird jedem Feld („channel“-Objekt) ein sogenannter „channel“ zu geordnet, über den das „channel“-Objekt jederzeit aufgerufen werden kann. Auf diese Weise wird ein flexibler und effizienter Datenaustausch zwischen den Submodellen ermöglicht.

In dieser Arbeit wird die MESSy-Version 2.42 genutzt, die über fünfzig Submodelle enthält. Eine Kurzbeschreibung aller hier verwendeten, prozessorientierten und diagnostischen Submodelle befindet sich in Tabelle A.1. Ausführliche Informationen zu allen Submodellen lassen sich in den dort angegebenen Referenzen sowie auf <http://www.messy-interface.org/> (Stand: 15.04.2014) nachlesen. Als Basismodelle werden in dieser Arbeit sowohl das globale Klimamodell ECHAM5 (Kap. 2.1.2), als auch das nicht-hydrostatische atmosphärische Regionalmodell COSMO (Kap. 2.1.3) verwendet. Die Struktur der einzelnen Submodelle sowie die Implementierung von MESSy in ECHAM5 sind in Jöckel et al. (2005) beschrieben, die Implementierung von MESSy in COSMO in Kerkweg und Jöckel (2012a).

### 2.1.2 ECHAM5/MESSy

Als ECHAM5 wird die fünfte Generation des globalen Klimamodells ECHAM bezeichnet. Dieses basiert auf dem spektralen Wettervorhersagemodell des europäischen Zentrums für mittelfristige Wettervorhersage (ECMWF, Simmons et al. 1989) und wurde vom Max-Planck-Institut für Meteorologie in **Hamburg** für Klimasimulationen entwickelt (Roeckner et al. 2003). Unter der Leitung des Max-Planck-Institutes für Chemie in Mainz wurde ECHAM5 durch MESSy (Kap. 2.1.1) erweitert zum ECHAM5/MESSy für Atmosphärenchemie, kurz EMAC (Jöckel et al. 2006). In dieser Arbeit wird die Version 5.3.02 des ECHAM5-Modells verwendet.

Die Atmosphärendynamik lässt sich mit den Navier-Stokes-Gleichungen, bestehend aus der Newtonschen Bewegungsgleichung, der Massenerhaltung, dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik und der idealen Gasgleichung, beschreiben. In EMAC werden diese in der Form der primitiven Gleichungen, die unter anderem die hydrostatische Approximation beinhalten, verwendet. Die prognostischen Variablen sind dabei Vorticity, Divergenz, Temperatur, der natürliche Logarithmus des Bodendrucks sowie die Mischungsverhältnisse verschiedener Feuchtegrößen. Während für letztere die Navier-Stokes-Gleichungen über finite Differenzen im Gitterpunktraum gelöst werden, wird für die anderen Variablen die globale, spektrale Methode angewendet. Hier werden die Felder nicht durch eine endliche Anzahl an Gitterpunkten, sondern durch Kugelfunktionen approximiert. Die ho-

horizontale Auflösung wird durch die sogenannten „Dreiecksabbrechung“ (engl.: triangular truncation) bestimmt. Als Vertikalkoordinate wird in EMAC eine hybride Druckkoordinate verwendet. Ab einer gewissen Höhe geht dabei die geländefolgende Koordinate auf konstante Druckflächen über. Die Zeitintegration erfolgt über das Leapfrog-Schema, das drei Zeitebenen benutzt. Feuchtegrößen und Tracer werden mit dem semi-lagrangeschen Transportschema transportiert. Eine detaillierte Modellbeschreibung von ECHAM5 befindet sich in Roeckner et al. (2003).

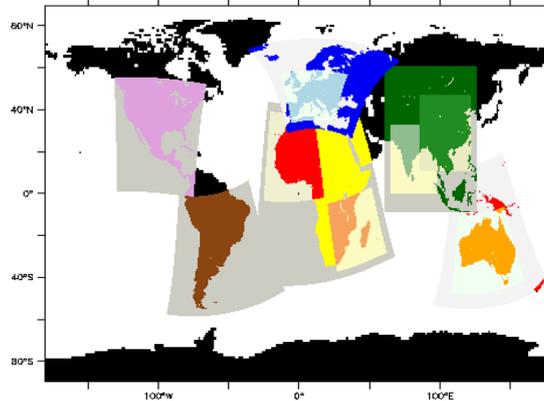
### 2.1.3 COSMO/MESSy

Das **C**onsortium for **S**mall-Scale **M**odelling (COSMO) wurde im Oktober 1998 gegründet, um eines der ersten nicht-hydrostatischen atmosphärischen Regionalmodelle zu entwickeln. Im Dezember 1999 wurde das Modell vom Deutschen Wetterdienst (DWD) erstmals zur operationellen Wettervorhersage eingesetzt. Neben dem DWD gehören dem COSMO heute die nationalen Wetterdienste von der Schweiz, Italien, Griechenland, Polen, Rumänien und Russland an. Diese Mitglieder arbeiten an der Weiterentwicklung und Verbesserung des Modells, sowohl für die operationelle Vorhersage, als auch zu Forschungszwecken (Doms et al. 2011; <http://www.cosmo-model.org/> (Stand: 12.06.2014)). Die CLM („Climate Limited-Area Modeling“) Gemeinschaft entwickelte das COSMO-Modell für langfristige Klimasimulationen zum sogenannten COSMO-CLM System (Rockel et al. 2008; <http://www.clm-community.eu> (Stand: 12.06.2014)). Im Jahr 2012 wurde COSMO-CLM durch MESSy (Kap. 2.1.1) erweitert zum COSMO-CLM/MESSy (Kerkweg und Jöckel 2012a). In dieser Arbeit wird die Version 4.21 von COSMO-CLM/MESSy verwendet, die im Folgenden kurz als COSMO bezeichnet wird.

Die hydro-thermodynamischen Gleichungen werden ungefiltert, d.h. ohne kompressible und hydrostatische Näherung, verwendet und damit auch für die Vertikalbewegung gelöst. Ihre Formulierung bezieht sich auf einen hydrostatischen Grundzustand der Atmosphäre. Die prognostischen Variablen in COSMO sind die drei Windgeschwindigkeitskomponenten, die Druckabweichungen vom Grundzustand, die Temperatur, die turbulente kinetische Energie und verschiedene Feuchtevariablen. In der Horizontalen werden rotierte, sphärische Koordinaten verwendet. Die geländefolgende Vertikalkoordinate kann sowohl druck- als auch höhenbasiert gewählt werden. Die numerische Lösung der transformierten Gleichungen erfolgt nach der Methode der finiten Differenzen (Gitterpunktmethode) auf einem Arakawa-C/Lorenz-Staggering-Gitter. In COSMO sind verschieden Zeitintegrationsschemata implementiert, in dieser Arbeit wird das Runge-Kutta-Schema mit seinen zwei Zeitebenen verwendet. Feuchtegrößen und Tracer werden mit einem semi-lagrangeschen Transportschema transportiert. Eine detaillierte Modellbeschreibung des COSMO-Modells befindet sich in Doms et al. (2011).

### 2.1.4 MECO(n)

Das Modellsystem MECO(n) („MESSy-fied ECHAM- and COSMO models nested n-times“) beinhaltet zwei unterschiedliche Basismodelle: Das globale Chemie-Klimamodell ECHAM5/MESSy (EMAC, Kap. 2.1.2) und das regionale Atmosphärenchemie- und Klimamodell COSMO-CLM/MESSy (COSMO, Kap. 2.1.3). Die Verwendung der Infrastruktur MESSy (Kap. 2.1.1) ermöglicht die Kopplung verschiedener Submodelle an die Basismodelle. Auf diese Weise lassen sich für beide Basismodelle dieselben Prozessparametrisierungen verwenden und es entsteht eine hohe Konsistenz zwischen den Modellinstanzen. Dabei können beliebig viele COSMO-Instanzen ineinander bzw. in die globale EMAC-Instanz geschachtelt (engl.: nested) werden. In Abb. 2.2 ist exemplarisch eine MECO(12)-



**Abbildung 2.2:** Beispiel einer MECO(12)-Konfiguration: Zwölf regionale COSMO/MESSy-Instanzen sind ineinander bzw. direkt in die globale ECHAM5/MESSy-Instanz geschachtelt (aus Kerkweg und Jöckel 2012b).

Konfiguration mit zwölf COSMO-Instanzen dargestellt. Die Kopplung zwischen der globalen EMAC-Instanz und den regionalen COSMO-Instanzen erfolgt on-line über die Software „Multi-Model-Driver“ (MMD), die in MESSy integriert ist. Dabei können COSMO-Instanzen entweder mit Initial- und Randdaten des Globalmodells oder einer gröber auflösenden COSMO-Instanz angetrieben werden. Durch die on-line-Kopplung ist keine Speicherung der Randfelder notwendig. Außerdem können Simulationen für verschiedene Regionen gleichzeitig durchgeführt werden. Die technischen Details der Kopplungsstrategie in MECO(n) sind in Kerkweg und Jöckel (2012b) zusammengefasst.

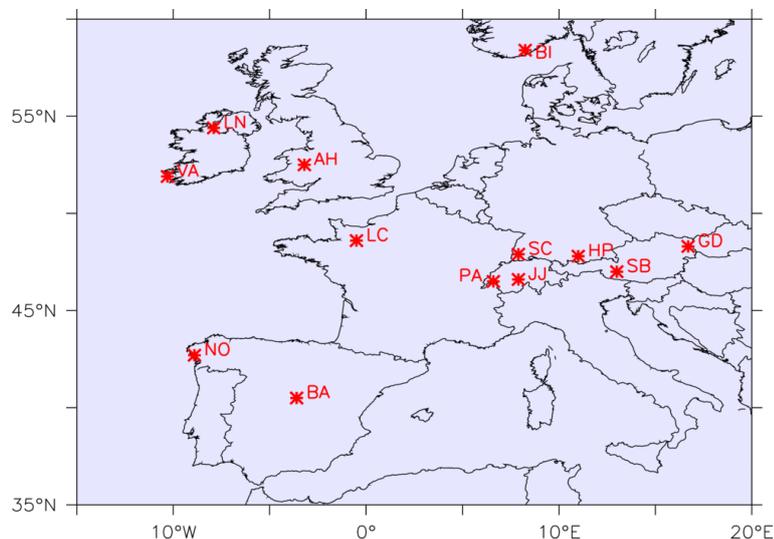
## 2.2 Beobachtungsdaten

### 2.2.1 Bodenmessungen

In Kap. 3.3.1 werden die Simulationsergebnisse anhand von Ozon-Bodenmessungen evaluiert. Diese wurden im Rahmen des EMEP-Programms („European Monitoring and Evaluation Programme“ <http://www.emep.int/>, Stand: 16.04.2014) erstellt und werden durch NILU („Norwegian Institute for Air Research“) auf der Datenplattform EBAS (<http://ebas.nilu.no/>, Stand: 16.04.2014) zur Verfügung gestellt. Die Ozonmessungen erfolgen stündlich durch die Messungen von UV-Absorption und werden als Massenkonzentration in der Einheit  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  angegeben. In Tab. 2.1 und Abb. 2.3 ist die geographische Lage aller in dieser Arbeit verwendeten EMEP-Messstationen eingetragen.

### 2.2.2 Ozonsonden

In den Abschnitten 3.3.1 und 3.4.4 werden simulierte Temperatur- und Ozonprofile mit Messdaten von Ozonsonden des „World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre (WOUDC)“ verglichen (<http://www.woudc.org/> (Stand: 02.05.2013)). Während die Messung in Hohenpeißenberg mit einer Brewer-Mast-Sonde erfolgt, verwenden die anderen Stationen (Tab. 2.1) ECC- („Electrochemical Concentration Cell“)-



**Abbildung 2.3:** Geographische Lage der Messstationen. Die Stationskürzel sind in Tab. 2.1 erläutert.

Sonden. Gemessen wird der Partialdruck von Ozon. Die geographische Lage der in dieser Arbeit verwendeten Orte, an denen Ozonsondenaufstiege durchgeführt werden, ist in Tab. 2.1 und Abb. 2.3 eingetragen.

Stationsname (Netzwerk)	Kür- zel	Breite [° '"]	Länge [° '"]	Stations- höhe [m]	Höhe in EMAC [m]	Höhe in COSMO [m]
Aston Hill (E)	AH	52 30 14 N	3 1 59 W	370	113	219
Barajas (W)	BA	40 28 12 N	3 34 48 W	631	975	608
Birkenes (E)	BI	58 23 18 N	8 15 7 E	219	400	174
Gänserndorf (E)	GD	48 20 5 N	16 43 50 E	161	401	150
Hohenpeißenberg (W)	HP	47 48 0 N	11 1 0 E	976	1197	754
Jungfrauoch (E)	JJ	46 32 51 N	7 59 6 E	3578	1270	2168
La Coulonche (E)	LC	48 38 0 N	0 27 0 W	309	78	231
Lough Navar (E)	LN	54 26 35 N	7 52 12 W	126	60	86
Noya (E)	NO	42 43 41 N	8 55 25 W	683	125	176
Payerne (W)	PA	46 29 24 N	6 34 12 E	491	1017	431
Schauinsland (E)	SC	47 54 53 N	7 54 31 E	1205	745	470
Sonnblick (E)	SB	47 3 16 N	12 57 30 E	3106	1072	2186
Valentia (W)	VA	51 55 48 N	10 15 0 W	14	25	85

**Tabelle 2.1:** Übersicht der geographischen Lagen der Messstationen des EMEP- (E) sowie des WOUDC-Netzwerkes (W). Zusätzlich angegeben ist die Höhe der Gitterbox, in der die geographischen Koordinaten der Messstation der entsprechenden Modellinstanz liegen.

## 2.3 Methoden

### 2.3.1 Tracerinitialisierung mit PTRACINI

Das neue diagnostische MESSy-Submodell PTRACINI (**P**rognostic **TRAC**er **INI**tialisation) wurde als Teil dieser Arbeit entwickelt. PTRACINI ermöglicht die Initialisierung von künstlichen Tracern in Abhängigkeit von anderen Variablen.

Zur Anwendung von PTRACINI werden beliebige Tracer zunächst mit Hilfe der MESSy-Submodelle PTRAC oder TREXP (Tab. A.1) definiert. In diesen Submodellen können den Tracern bestimmte Eigenschaften zugeordnet werden. So lassen sich beispielsweise Tracer definieren, die unabhängig von konvektiven Ereignissen transportiert werden oder die Gegenstand eines Zerfallsprozesses mit einer konstanten Zerfallsgeschwindigkeit sind.

Mit PTRACINI werden die Bedingungen festgelegt, unter denen der Tracer initialisiert wird. Dazu wird für beliebige Datenfelder entweder ein Maximalwert (z.B.  $PV > 2$  pvu) oder ein Vergleichsfeld (z.B.  $T \leq T_{2m}$ ) angegeben. Für die Bedingung zusätzlich benötigte, nicht-diagnostische Felder, wie beispielsweise der Horizontalwind oder die äquivalentpotentielle Temperatur, können in PTRACINI berechnet werden. Die Initialisierungsbedingungen (CRIT, vgl. Namelist-Einstellungen unten) werden entweder zu einem bestimmten Zeitpunkt ( $INI1STEP = T$ , einmalige Initialisierung) oder in

festgelegten Intervallen (`INI1STEP = F`, kontinuierliche Initialisierung) abgefragt. Sind alle Bedingungen für einen Tracer zum Initialisierungszeitpunkt erfüllt, wird das Mischungsverhältnis<sup>1</sup> dieses Tracers in der entsprechenden Gitterbox auf 100 ppb gesetzt. Die Initialisierung kann ebenfalls erfolgen, falls die angegebenen Bedingungen nicht erfüllt sind (`IFNOT = T`). Um die künstlichen Tracer in den MECO(n)-Instanzen vergleichbar zu initialisieren, lässt sich das Initialisierungsgebiet beschränken (`DOMAIN`). Über MMD (Kap. 2.1.4) werden die Randfelder der Tracer an die COSMO-Instanz übergeben. Ob die Felder der COSMO-Instanz nicht-physikalisch an Randdaten angepasst werden, (`RELAX`, Relaxation) lässt sich optional einschalten.

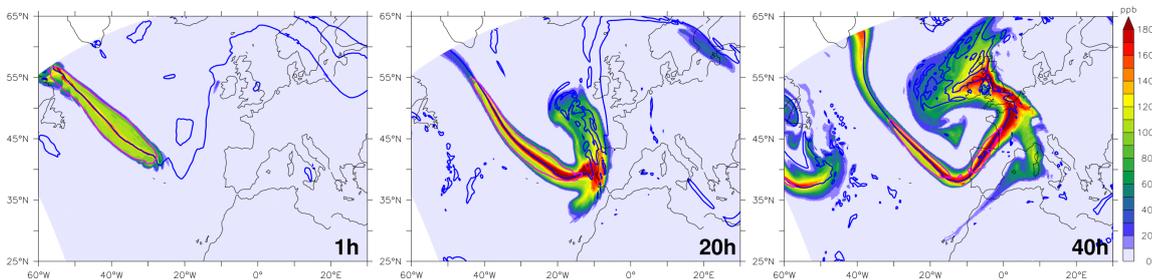
Folgendes Beispiel soll die Anwendungsmöglichkeiten des Submodells verdeutlichen: Werden für die EMAC-Instanz folgende Namelist-Einstellungen gewählt, lassen sich Tracer im Strahlstrom initialisieren:

```

TRINI(1)%INI1STEP = F
TRINI(1)%EMIS_IOEVENT = 1,'steps','first',680
TRINI(1)%RELAX = T !only for COSMO
TRINI(1)%EVENT_START = 2010,03,24,00,06,00
TRINI(1)%IFNOT = F
TRINI(1)%DOMAIN = F
TRINI(1)%TRACER = 'Jet','trop','','','','','','',
TRINI(1)%CRIT(1)='ptracini','wind','>=' ,50,""
TRINI(1)%CRIT(2)='COSMO','press','<=' ,75000,""
TRINI(1)%CRIT(3)='COSMO','press','>=' ,15000,""
TRINI(1)%CRIT(4)='tropop','PV','<' ,2,""
TRINI(2)%INI1STEP = F
TRINI(2)%EMIS_IOEVENT = 1,'steps','first',680
TRINI(2)%RELAX = T !only for COSMO
TRINI(2)%EVENT_START = 2010,03,24,00,06,00
TRINI(2)%IFNOT = F
TRINI(2)%DOMAIN = F
TRINI(2)%TRACER = 'Jet','strat','','','','','','',
TRINI(2)%CRIT(1)='ptracini','wind','>=' ,50,""
TRINI(2)%CRIT(2)='COSMO','press','<=' ,75000,""
TRINI(2)%CRIT(3)='COSMO','press','>=' ,15000,""
TRINI(2)%CRIT(4)='tropop','PV','>=' ,2,""

```

<sup>1</sup>Bei allen in dieser Arbeit betrachteten Mischungsverhältnissen handelt es sich ausschließlich um Volumenmischungsverhältnisse. Diese werden in der Einheit ppb (parts per billion, 1 ppb = 10<sup>-9</sup>) angegeben.



**Abbildung 2.4:** Tracerinitialisierung im Strahlstrom. Dargestellt ist die Summe der Mischungsverhältnisse von  $\text{Jet}_{\text{trop}}$  und  $\text{Jet}_{\text{strat}}$  (farbig, in ppb) auf der 310K-Isentrope, eine (links), zwanzig (mittig) und vierzig (rechts) Stunden nach Simulationsstart. Die blaue Kontur kennzeichnet die dynamische Tropopause ( $\text{PV} = 2$  pvu), die pinke Kontur das Geschwindigkeitsmaximum des Strahlstroms (Wind = 50 m/s).

Initialisiert werden zwei Tracer,  $\text{Jet}_{\text{trop}}$  ( $\text{TRINI}(1)\% \text{TRACER}$ ) und  $\text{Jet}_{\text{strat}}$  ( $\text{TRINI}(2)\% \text{TRACER}$ ). Dabei wird der Tracer  $\text{Jet}_{\text{trop}}$  im troposphärischen Teil ( $\text{PV} < 2$  pvu,  $\text{TRINI}(1)\% \text{CRIT}(4)$ ),  $\text{Jet}_{\text{strat}}$  im stratosphärischen Teil ( $\text{PV} \geq 2$  pvu,  $\text{TRINI}(2)\% \text{CRIT}(4)$ ) des Geschwindigkeitsmaximums des Strahlstroms (Wind  $> 50$  m/s zwischen 150 und 750 hPa,  $\text{CRIT}(3-5)$ ) initialisiert. Wie in Kap. 2.1.1 beschrieben, ist für den Aufruf der Felder („channel“-Objekte, z.B.: PV) ebenfalls die Angabe des „channels“ (z.B.: tropop) notwendig. Beide Tracer werden kontinuierlich initialisiert ( $\text{INI1STEP} = \text{F}$ ). Die Bedingungen werden hier zu jedem Zeitschritt (Intervall = steps) abgefragt, das Mischungsverhältnis wird bei Erfüllung der Bedingungen auf 100 ppb gesetzt.

Abbildung 2.4 zeigt als Ergebnis dieser Initialisierung die Summe der Tracer  $\text{Jet}_{\text{trop}}$  und  $\text{Jet}_{\text{strat}}$ . Eine Stunde nach Initialisierung (Abb. 2.4 links) beträgt das Mischungsverhältnis innerhalb des Geschwindigkeitsmaximums des Strahlstroms 100 ppb, entlang der dynamischen Tropopause über 180 ppb. Durch die kontinuierliche Initialisierungsmethode kennzeichnen Mischungsverhältnisse größer 100 ppb Bereiche, in denen bereits Mischung zwischen dem troposphärischen und stratosphärischen Strahlstromtracer stattgefunden hat. Mit fortschreitender Simulationsdauer (Abb. 2.4 mittig und rechts) wird der Tracer in die Ausgangsregion des Geschwindigkeitsmaximums des Strahlstroms transportiert, am Trogrand teilt sich die Strömung in einen südlichen und einen nördlichen Teil auf. Auch nach 40 Stunden liegt die Mischungsregion von  $\text{Jet}_{\text{trop}}$  und  $\text{Jet}_{\text{strat}}$  innerhalb des Geschwindigkeitsmaximums des Strahlstroms lediglich in einem schmalen Band um die dynamische Tropopause, außerhalb findet die Mischung dagegen großflächiger statt. Das neu entwickelte MESSy-Submodel PTRACINI wird in dieser Arbeit verwendet, um Tracertransportprozesse zu analysieren und Mischungsregionen zu identifizieren.

### 2.3.2 Trajektorienrechnung mit LAGRANTO

In Kap. 3.5 wird die zeitliche Entwicklung atmosphärischer Variablen entlang von Trajektorien betrachtet. Für diese Lagrangesche Analyse wird das Trajektorienmodell LAGRANTO (**LAGR**angian **AN**alysis **TO**ol, Wernli und Davies 1997) verwendet. Die Berechnung und Selektion der Trajektorien erfolgt dabei in folgenden Schritten: Zunächst wird mit einem iterativem Verfahren eine große Zahl von Trajektorien aus einer zuvor definierten Startregion berechnet. Anschließend werden dynamisch und physikalisch interessante Parameter (z.B. PV, Druck oder Ozon) entlang dieser Trajektorien bestimmt. Mit einem frei wählbaren, objektiven Selektionskriterium (z.B. PV zum Startzeitpunkt  $< 2$  pvu) werden die Trajektorien schließlich selektiert und können graphisch dargestellt und analysiert werden.

Eine detaillierte Beschreibung von LAGRANTO findet man in Wernli und Davies (1997).

### 2.3.3 Turbulenzindex

Der sogenannte Turbulenzindex (TI) wird zur Bestimmung von Regionen mit erhöhter Turbulenz verwendet. Er lässt sich wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned} \text{TI} &= \text{DEF} \times \text{VWS} = \sqrt{\text{DD}^2 + \text{DS}^2} \times \text{VWS} \\ &= \left[ \left( \frac{\delta u}{\delta x} - \frac{\delta v}{\delta y} \right)^2 + \left( \frac{\delta v}{\delta x} + \frac{\delta u}{\delta y} \right)^2 \right]^{0,5} \times \frac{(\Delta u^2 + \Delta v^2)^{0,5}}{\Delta z}. \end{aligned}$$

Dabei beschreibt der erste Teil des Index die Deformation (DEF) aufgrund von Dehnung (DD) und Scherung (DS). Der zweite Teil beinhaltet die vertikale Windscherung (VWS).  $u$  und  $v$  sind die horizontalen Windkomponenten,  $x$ ,  $y$  und  $z$  die Maße der Gitterbox. Die Einheit von TI ist  $10^{-7} \text{s}^{-2}$ , die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von Turbulenz steigt mit wachsendem TI. Eine detaillierte Beschreibung und Herleitung des Turbulenzindex befindet sich in Ellrod und Knapp (1992).

### 2.3.4 Algorithmus zur Zyklonenidentifikation

Zur Beschreibung des Druckverlaufes der Zyklone in der Fallstudie wird das in Wernli und Schwierz (2006) beschriebene Identifikationsverfahren für Zyklonen angewendet. Der Algorithmus funktioniert in folgenden Schritten: Zunächst werden für alle Zeiten die Gitterpunkte des Bodendruckfeldes als lokale Minima festgehalten, deren Wert kleiner ist als der der unmittelbaren Nachbarn. Für jedes dieser lokalen Minima wird die äußerste geschlossene Druckkontur bestimmt, die nur das eine lokale Druckminimum enthält. Die von dieser Linie eingeschlossene Fläche wird als Zyklone bezeichnet. Anschließend werden für alle identifizierten Zyklonen weitere Parameter (z.B. geographische

Lage des Druckminimums, Größe der Zyklone) berechnet. Die Zugbahn der Zyklone wird anschließend über ein einfaches Verfolgungsverfahren (engl.: tracking) bestimmt.

### **2.3.5 Taylordiagramm**

Mit Taylordiagrammen (Taylor 2001) lässt sich graphisch darstellen, wie gut beispielsweise Simulationsergebnisse und Beobachtungen übereinstimmen. Die Übereinstimmung wird dabei durch die statistischen Größen Korrelation, Standardabweichung und Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers (engl.: route mean square error, RMSE) quantifiziert. Diese Methode wird häufig zur Evaluierung von Modellen oder in Modellvergleichsstudien angewendet.

Die Korrelation zwischen Modell und Beobachtung lässt sich dabei als Winkel ablesen, die Standardabweichung ist proportional zum radialen Abstand zum Ursprung und der RMSE ist proportional zur Distanz der Punkte zwischen Beobachtung und Modell. Eine detaillierte Beschreibung, Formeln zur Berechnung der statistischen Größen sowie Beispiele sind in Taylor (2001) zusammengefasst.

# Kapitel 3

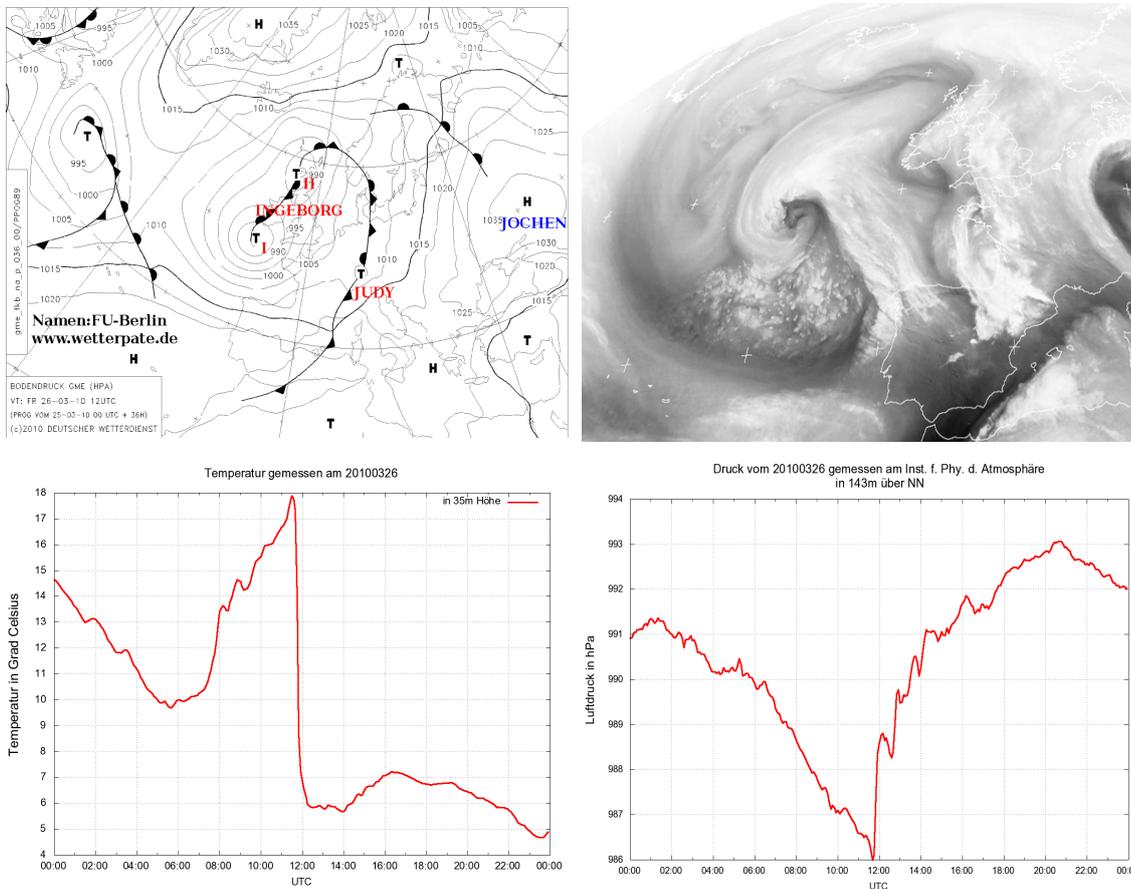
## Ergebnisse

Die Quantifizierung des Einflusses der STE-Ereignisse auf das troposphärische Ozonbudget erfordert ein umfassendes Verständnis der beteiligten Prozesse. Ziel dieser Arbeit ist es, das Verständnis von STE-Prozessen in der Umgebung von Tropopausenfalten zu verbessern. Dazu wird in dem Ergebnisteil dieser Arbeit eine detaillierte Analyse einer Zyklonenfallstudie mit einer ausgeprägten Tropopausenfalte durchgeführt.

Abschnitt 3.1 beschreibt einleitend die synoptische Situation mit der Entwicklung des Tiefdruckgebietes, bevor die Simulationseinstellungen des MECO(n)-Systems in Kap. 3.2 dargestellt werden. Auflösungsabhängige Unterschiede zwischen den Modellinstanzen werden in Kap. 3.3.1 mit Beobachtungsdaten evaluiert. Die detaillierte Analyse der STT-Ereignisse in Kap. 3.3.2 gibt unter anderem Aufschluss über bevorzugte STT-Regionen und die für den STT verantwortlichen Prozesse. In Sensitivitätsexperimenten werden die Simulationsergebnisse anschließend auf ihre Robustheit getestet (Kap. 3.4). Bevorzugte Austauschregionen, Mischungszeitskalen und die Effektivität der Mischung an der Tropopausenfalte werden in Kap. 3.5 aus der Lagrangeschen Perspektive analysiert.

### 3.1 Synoptische Situation

In der Fallstudie wird die Entwicklung eines Tiefdruckgebietes namens „Ingeborg“ untersucht, das sich am 23. März 2010 als Randtief eines mächtigen Tiefdruckkomplexes vor Neufundland bildet. Am 25. März, 0 UTC ist das Tiefdruckgebiet mit seinem ausgeprägten Frontensystem im Wasserdampfsatellitenbild (Abb. 3.1, oben rechts) zu erkennen. „Ingeborg“ erreicht seine maximale Intensität mit einem minimalen Kerndruck von unter 969,5 hPa am 25. März, 6 UTC (Abb. 3.1, oben links; s. auch Kap. 3.3.1, Abb. 3.5, links) südwestlich von Irland. Das zu diesem Zeitpunkt bereits okkludierte Frontensystem erstreckt sich bis an den afrikanischen Kontinent. Dadurch strömen vor dem Frontensystem



**Abbildung 3.1:** Synoptische Beobachtungen und Analysen des Tiefdruckgebietes „Ingeborg I“. Oben: 36h-Prognose des Globalmodells GME (Majewski et al. 2002) für den Bodendruck am 26. März 2010, 12 UTC (links, Quelle: <http://www.met.fu-berlin.de/>, Stand: 07.01.2014), Wasserdampf-Satellitenbild am 25. März 2010, 0 UTC (rechts, Quelle: <http://www.sat.dundee.ac.uk>, Stand: 07.01.2014). Unten: Zeitreihen von Temperatur- (links) und Druckmessungen (rechts) an der Wetterstation in Mainz (Quelle: <http://www.staff.uni-mainz.de/friederi/>, Stand: 07.01.2014).

warme, subtropische Luftmassen aus südlichen Regionen nach Mitteleuropa, während hinter der Bodenfront kalte Luft aus nördlichen Regionen herantransportiert wird. Die so entstandene starke barokline Zone entlang der Front verursacht bei Frontpassage einen markanten Temperaturabfall und Druckanstieg (Abb. 3.1, unten). Im Laufe des 26. März teilt sich das Tiefdruckzentrum auf: „Ingeborg I“ über dem Südwesten Großbritanniens löst sich am 27. März auf, während „Ingeborg II“ zunächst über Schottland stagniert. Außerdem entwickelt sich am 26. März auf dem Frontensystem von „Ingeborg“ ein neues Randtief namens „Judy“. Die mit ihm verbundenen Hebungsprozesse führen zur

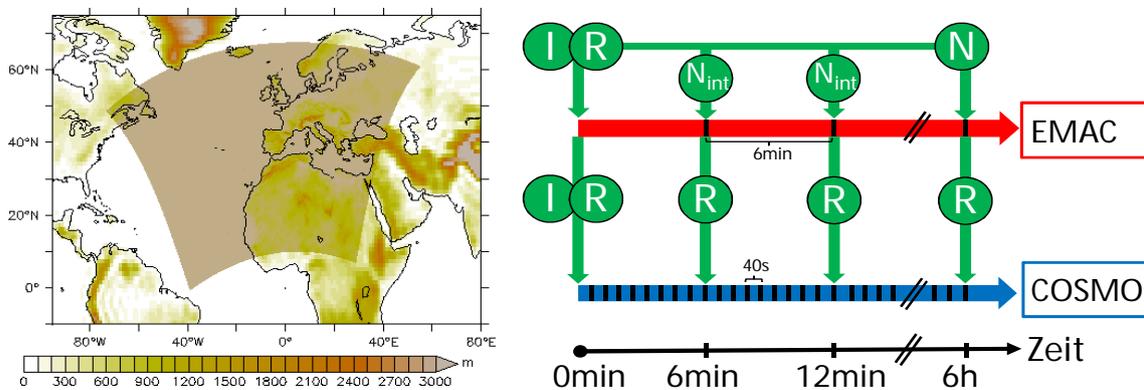
Entwicklung eines starken Niederschlagsgebietes entlang der Front.

Bereits im Vorfeld dieser Arbeit haben meine Co-Autoren und ich diese meteorologische Situation mit dem Modellsystem MECO(n) (Kap. 2.1.4) untersucht und die Simulationsergebnisse mit Niederschlagsbeobachtungen, ECMWF-Analysen und klassischen, off-line COSMO-Simulationen verglichen (Hofmann et al. 2012). Unterschiede zwischen den off-line und MECO(n)-Simulationen liegen in der Größenordnung der Streuung (engl.: spread) einer möglichen Ensemble-Vorhersage. Wir haben gezeigt, dass es mit dem Modellsystem MECO(n) möglich ist, die meteorologische Entwicklung der Tiefdrucksysteme „Ingeborg“ und „Judy“ verglichen mit Analysedaten und Beobachtungen richtig wiederzugeben. Dies ist Grundvoraussetzung für eine korrekte Erfassung des Tracertransportes während der Entwicklung der Tiefdruckgebiete.

## 3.2 Simulationen

### 3.2.1 Modellkonfiguration

#### Nesting und Kopplung



**Abbildung 3.2:** Modellkonfiguration. Links: Simulationsgebiet der COSMO-Instanz (grau schattiert), geschachtelt in die EMAC-Instanz. Dargestellt ist die Höhe der Topografie (farbig, in m ü. NHN). Rechts: Schematisches Schaubild zur zeitlichen Entwicklung der Simulation. Abkürzungen stehen für Rand(R)-, Initialisierungs(I)-, Nudging(N)- und zeitlich interpolierte Nudgingdaten (N<sub>int</sub>). Weitere Beschreibung im Text.

Um mit den Simulationen zur Analyse der Fallstudie den Großteil der Entwicklung des Tiefdrucksystems zu erfassen, ist sowohl ein großes Simulationsgebiet für die

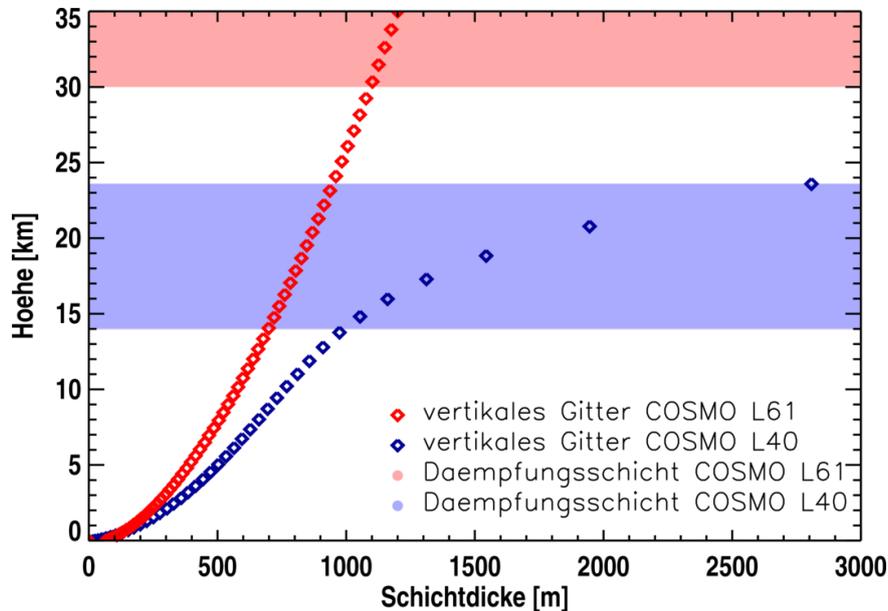
COSMO-Instanz (Nordatlantik und Europa, vgl. Abb. 3.2, links), als auch eine lange Simulationsperiode (24. - 28. März 2010) notwendig. Verschiedene Testsimulationen haben gezeigt, dass eine Verkleinerung des Modellgebietes vor allem im Süden zu unerwünschten Randeffekten führt, die starken Einfluss auf die Entwicklung des Frontensystems haben. Ein Verkürzen der Simulationsperiode verhindert, dass der Tracertransport während der gesamten Entwicklung des Tiefdrucksystems analysiert werden kann.

Um Interpolationsfehler aufgrund der großen Auflösungsunterschiede zwischen der globalen EMAC-Instanz und der höher auflösenden COSMO-Instanz zu vermeiden, haben Hofmann et al. (2012) für die meteorologische Evaluation der Fallstudie zwei ineinander geschachtelte COSMO-Instanzen verwendet. Testsimulationen haben allerdings gezeigt, dass diese Interpolationsfehler für das hier verwendete, sehr große Modellgebiet der COSMO-Instanz vernachlässigbar sind. Um die Rechenzeit und Speicherkapazität möglichst gering zu halten, wird für die Simulationen in dieser Arbeit daher eine einfache MECO(1)-Konfiguration verwendet (Abb. 3.2). Im Folgenden wird die regionale COSMO-Instanz des Modellsystems kurz mit COSMO, die globale EMAC-Instanz mit EMAC bezeichnet.

COSMO erhält zu Beginn der Simulation die Anfangsbedingungen von EMAC. Im Laufe der Simulation werden zu jedem 6-minütigen EMAC-Zeitschritt Randdaten von dem groben EMAC- auf das feine COSMO-Gitter interpoliert. In COSMO wird mit einem Zeitschritt von 40 Sekunden gerechnet. EMAC wird zu Beginn der Simulation mit ECMWF-Analysen initialisiert. Damit ein direkter Vergleich mit Messdaten möglich ist, wird EMAC während der Simulation an ECMWF-Analysen relaxiert (engl.: Nudging). Diese sogenannten „Nudgingdaten“ liegen alle sechs Stunden vor und werden für jeden EMAC-Zeitschritt zeitlich linear interpoliert (Abb. 3.2, rechts).

### Auflösungen

In Kapitel 3.3 liegt der Fokus auf dem Abwärtstransport stratosphärischer Luftmassen bis in die untere Troposphäre. Da hierfür stratosphärische Prozesse eher eine untergeordnete Rolle spielen, wird eine vertikale Modellauflösung verwendet, die bis etwa 10 hPa reicht (L31 für EMAC, L40 für COSMO). Horizontal wird in EMAC die spektrale Auflösung T106 ( $\approx 1,125^\circ$ ) verwendet, in COSMO ein Gitterpunktabstand von  $0,125^\circ$ . Für die Lagrangesche Analyse in Kap. 3.5 dagegen ist die UTLS-Region von Interesse. Um in diesem Bereich eine möglichst gute vertikale Auflösung zu haben, werden für COSMO 61 vertikale Schichten verwendet, die bis zu einem Höhenbereich von 35 km reichen (Abb. 3.3). Um den gesamten Bereich vertikal auch mit dem EMAC zu erfassen, muss hier auf eine horizontal schlechter auflösende EMAC-Version für die mittlere Atmosphäre (MA) T63L47MA ( $\approx 1,875^\circ$ , Druck auf der obersten Modellschicht etwa 0,01 hPa) umgestiegen werden. Die Ausgabe der Modellfelder findet für beide MECO(n)-Instanzen stündlich statt.



**Abbildung 3.3:** Vertikales Gitter der COSMO-Instanz mit 40 (blau) bzw. 61 Modellschichten (rot). Bei der Variante mit 40 Schichten handelt es sich um die operationelle Einstellung der COSMO-EU-Modellversion, wobei der Beginn der Dämpfungsschicht am Modelloberrand (farbige Bereiche) von 11 km auf 14 km geändert wurde. Das Gitter mit 61 Schichten wurde am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) in der Arbeitsgruppe von Dr. Roland Ruhnke entwickelt und für Anwendungen in der UTLS-Region getestet.

### Submodelle

Aufgrund der hohen Anzahl an Tracern, für die jeweils die dazugehörigen Reaktionsgleichungen gelöst werden müssen, verbraucht die Berechnung der Chemie in MECO(n) deutlich mehr Rechen- und Speicherkapazitäten als die Berechnung der Dynamik. Daher wird in dieser Arbeit nur die Referenzsimulation in Kap. 3.3 mit voller Chemieberechnung durchgeführt. Die Wahl der MESSy-Submodelle unterscheidet sich in Simulationen mit (Index „chem“) und ohne (Index „nochem“) Chemieberechnung. Tabelle 3.1 gibt einen Überblick über die prozessorientierten Submodelle für die verschiedenen Instanzen, welche in den verschiedenen Simulationen genutzt werden. Für alle aktiven Submodelle befindet sich eine Kurzbeschreibung in Tab. A.1.

Die verwendeten Submodelle und ihre Einstellungen sind denen der EMAC-Evaluierungssimulation (Jöckel et al. 2010) sehr ähnlich. Die Quecksilber- und Bromchemie in der Troposphäre hat keinen Einfluss auf die in dieser Arbeit betrachteten Prozesse und wird daher nicht berechnet. Gegenüber der Evaluierungssimulation wird zusätzlich

Submodell	EMAC <sub>chem</sub>	COSMO <sub>chem</sub>	EMAC <sub>nochem</sub>	COSMO <sub>nochem</sub>
AIRSEA	+	+		
CLOUD	+		+	
CONVECT	+		+	
CVTRANS	+	+	+	+
DDEP	+	+		
GWAVE	+			
H2O	+			
JVAL	+	+		
LNOX	+	+		
M7	+	+		
MECCA	+	+		
MSBM	+	+		
QBO	+			
RAD4ALL	+			
SCAV	+	+		
SEDI	+	+		
TNUDGE	+	+		

**Tabelle 3.1:** Verwendete, prozessorientierte MESSy-Submodelle. Der Index „chem“ kennzeichnet Modellinstanzen der Referenzsimulation, der Index „nochem“ Modellinstanzen ohne Chemieberechnung (Beschreibung im Text).

das Submodell GWAVE verwendet, während DRYDEP, OFFLEM und ONLEM durch ihre Weiterentwicklungen DDEP, OFFEMIS und ONEMIS ersetzt werden.

### Spin-Up-Simulation

Um geeignete Initialfelder für die Tracer zu erhalten, muss vor dem Start des Modellsystems MECO(n) zunächst eine sogenannte „Spin-Up-Simulation“ durchgeführt werden. Für die Fallstudie dieser Arbeit wird diese Simulation zunächst vom 1. Januar 2009 bis zum 20. März 2010 in der spektralen Auflösung T42L90 ( $\approx 2,8^\circ$ , Druck auf der obersten Modellschicht etwa 0,01 hPa) gerechnet und dann in der entsprechenden EMAC-Auflösung (T106L31 bzw. T63L47MA) bis zum Simulationsstart von EMAC weitergeführt. Die Submodelle und deren Einstellungen für die Spin-Up-Simulation entsprechen denen der Simulation EMAC<sub>chem</sub> (Tab. 3.1).

Druck [hPa]	PV [pvu]	QV [g/kg]	künstl. Tracer
< 150	beliebig	beliebig	⇒ STRATO
150-900	$\geq 2$	$\leq 1$	⇒ STRATO
150-900	$\geq 2$	$> 1$	⇒ TROPO
150-900	< 2	beliebig	⇒ TROPO
> 900	beliebig	beliebig	⇒ TROPO

**Tabelle 3.2:** Bedingungen zur Initialisierung der künstlichen Tracer TROPO und STRATO.

### Emissionen

Für die Spin-Up-Simulation und die MECO(n)-Simulation mit Chemieberechnung werden Emissionsdaten benötigt. Da die Emissionsdaten für das Jahr 2010 zum Zeitpunkt der Simulationsdurchführungen nicht vorlagen, werden die der Vorjahre verwendet: Emissionen durch Biomassenverbrennung werden durch den Emissionsdatensatz der Global Fire Emission Database (GFED Version 3.1, Giglio et al. 2010) für das Jahr 2009 beschrieben. Die anthropogenen Emissionen entsprechen den Emissionsszenarien des fünften IPCC-Berichtes (IPCC-AR5, Moss et al. 2010) für das Jahr 2000.

### 3.2.2 Tracerinitialisierung

In dieser Arbeit werden chemische, passive und künstliche Tracer betrachtet. Die Unterschiede werden im Folgenden erläutert:

- **Chemische Tracer**

Als chemische Tracer werden Tracer bezeichnet, die chemisch prozessiert, abgebaut, sedimentiert o.ä. werden. Dabei handelt es sich um die Tracer, die von dem Modellsystem bei eingeschalteter Chemie (Tab. 3.1, Index „chem“) berechnet werden.

- **Passive Tracer**

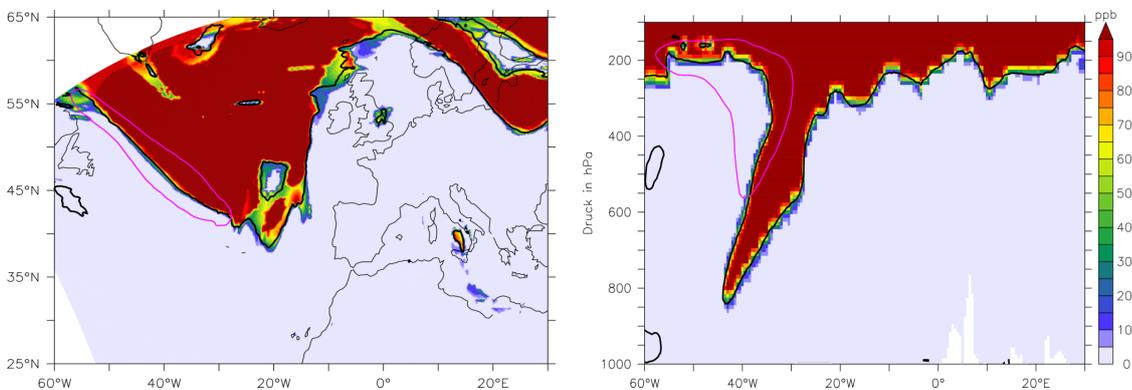
Um lediglich den Transport der Tracer zu betrachten, lassen sich beliebige, auch chemisch aktive Tracer zu Beginn der Simulation aus der EMAC-Spin-Up-Simulation (Kap. 3.2.1) initialisieren. Während der Simulation werden diese Tracer nur advehiert und konvektiv sowie diffusiv transportiert. Eine chemische Prozessierung der Tracer findet nicht statt. Abbauprozesse werden vernachlässigt. In dieser Arbeit wird Ozon als passiver Tracer verwendet.

- **Künstliche Tracer**

Mit Hilfe des MESSy-Submodells PTRACINI lassen sich künstliche, passive Tra-

cer unter verschiedenen Bedingungen mit unterschiedlichen Eigenschaften initialisieren (Kap. 2.3.1). In Kap. 3.3 wird ein künstlicher, stratosphärischer Tracer (STRATO) sowie ein künstlicher, troposphärischer Tracer (TROPO) unter den in Tab. 3.2 gelisteten Bedingungen zu Beginn der Simulation initialisiert. Für jeden Gitterpunkt wird entweder STRATO oder TROPO mit einem Mischungsverhältnis von 100 ppb versehen. Abbildung 3.4 zeigt exemplarisch die Verteilung des stratosphärischen Tracers eine Stunde nach Initialisierung in COSMO. In Kap. 3.5 wird zusätzlich ein kontinuierlich initialisierter, stratosphärischer Tracer (STRATO<sub>kont</sub>) benutzt. Die Initialisierung gemäß der Bedingungen für STRATO (Tab. 3.2) wird dabei in jedem Zeitschritt durchgeführt. Während der Simulation stellt EMAC die Felder des entsprechenden künstlichen Tracers für COSMO als Randdaten zur Verfügung. Die berechneten Transportprozesse sind mit denen der passiven Tracer identisch.

Als weiterer künstlicher Tracer wird ein sogenannter E90-Tracer verwendet. Prather et al. (2011) haben gezeigt, dass er als Maß für die Lage und den Abstand zur Tropopause in der Stratosphäre verwendet werden kann (Kap. 1.1.1). Er ist bereits in der Spin-up-Simulation (Kap. 3.2.1) enthalten, hat Bodenquellen und eine exponentielle Zerfallszeit von 90 Tagen. Nach ausreichend langer Simulationsperiode ist er in der Troposphäre nahezu homogen verteilt, während sein Mischungsverhältnis in der Stratosphäre mit der Höhe abnimmt.

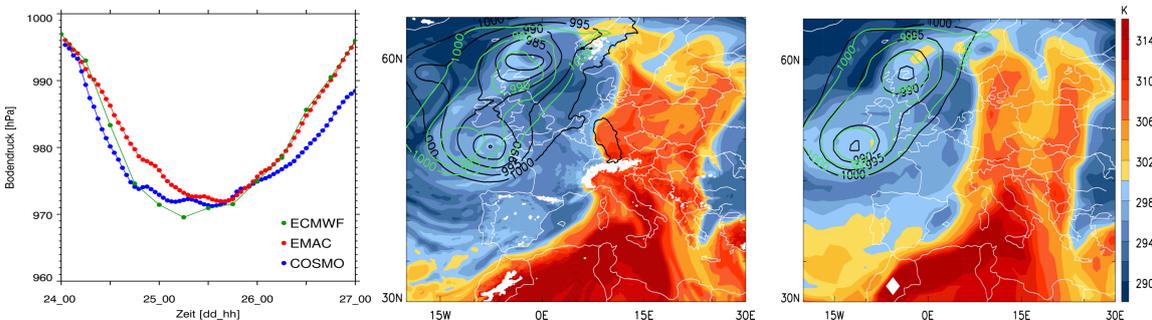


**Abbildung 3.4:** Mischungverhältnisse des stratosphärischen Tracers (farbig, in ppb) eine Stunde nach Initialisierung in COSMO auf der 310K-Isentrope (links) und in einem vertikalen Querschnitt entlang 45°N (rechts). Die schwarze Kontur kennzeichnet die dynamische Tropopause (PV = 2 pvu), die pinkfarbene Kontur das Geschwindigkeitsmaximum des Strahlstroms (Wind = 50 m/s).

### 3.3 Einfluss von stratosphärischen Luftmassen auf bodennahe Ozonkonzentrationen

Um den Einfluss von stratosphärischen Luftmassen auf bodennahe Ozonkonzentrationen zu untersuchen, umfasst Kap. 3.3.1 eine Evaluation der Ergebnisse der verschiedenen Modellinstanzen mit Beobachtungsdaten. Anschließend, in Kap. 3.3.2, wird der Tracertransport in COSMO im Detail analysiert.

#### 3.3.1 Evaluation der Ergebnisse der verschiedenen MECO(n)-Instanzen



**Abbildung 3.5:** Meteorologische Situation in ECMWF-Analysen und Simulationen der MECO(n)-Instanzen. Links: Zeitliche Entwicklung des Bodendruckminimums (in hPa) von Tiefdruckgebiet „Ingeborg I“ in ECMWF-Analysen (grün), COSMO (blau) und EMAC (rot). Äquivalentpotentielle Temperatur ( $\Theta_e$ , in K) auf 850 hPa (farbig) und Bodendruck (schwarze Konturen) am 26. März, 12 UTC für COSMO (mittig) und EMAC (rechts). Überlagert sind Konturen des Bodendruckes der ECMWF-Analysen (grün).

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der verschiedenen MECO(n)-Instanzen miteinander verglichen. Wie in Kap. 3.2.1 beschrieben, wurde die meteorologische Evaluation bereits durchgeführt und in Hofmann et al. (2012) publiziert. Wir haben gezeigt, dass Simulationen mit dem MECO(n)-System die Entwicklung des Tiefdrucksystems zwischen dem 24. und 28. März 2010 grundsätzlich gut erfassen. Verglichen mit der Modellkonfiguration in Hofmann et al. (2012) findet in dieser Arbeit eine gröbere horizontale Auflösung ( $0,125^\circ$  statt  $0,0625^\circ$ ) sowie ein größeres Simulationsgebiet für COSMO Anwendung. Abbildung 3.5 zeigt, dass die synoptische Situation auch mit diesen Einstellungen gut wiedergegeben wird: Verglichen mit ECMWF-Analysen wird die zeitliche Entwicklung des minimalen Bodendruckes des Tiefdruckgebietes „Ingeborg I“ (Abb. 3.1) innerhalb der ersten zwei Simulationstage von COSMO gut erfasst (Abb. 3.5, links). In EMAC liegt der minimale Bodendruck in diesem Zeitraum 3 - 5 hPa zu

hoch. Anschließend stimmen die Ergebnisse von EMAC gut mit den Analysen überein, der minimale Bodendruck in COSMO wird zu niedrig simuliert. Die Bestimmung des Bodendruckminimums erfolgte dabei nach dem in Kap. 2.3.4 beschriebenen Verfahren zur Zyklonenidentifikation.

Die Lage der Bodenfront ist in den Feldern der äquivalentpotentiellen Temperatur auf 850 hPa zu erkennen (Abb. 3.5, mittig und rechts). Sie erstreckt sich am 26. März, 0 UTC in beiden Instanzen, übereinstimmend mit den Bodenanalysen (Abb. 3.1 a), über ganz Westeuropa. In COSMO sind die Gradienten der äquivalentpotentiellen Temperatur entlang der Front deutlich größer als in EMAC. Die Position des Tiefdruckzentrums (Konturen in Abb. 3.5) befindet sich in EMAC westlicher als in COSMO. Die Lage des Tiefdruckgebietes in EMAC stimmt dabei besser mit den Analysen (grüne Konturen) überein.

Insgesamt wird die meteorologische Situation auch mit der hier verwendeten Modellkonfiguration gut erfasst. Die Lage der Front stimmt in beiden Instanzen mit den Analysen überein. Ab dem dritten Simulationstag weichen die Ergebnisse von COSMO von den Analysen ab: Die Position des Tiefdruckzentrums liegt zu weit östlich und der minimale Bodendruck wird zu niedrig simuliert. Welchen Einfluss dies auf den Tracertransport hat wird in Kap. 3.4.2 untersucht.

Die folgenden Abschnitte enthalten eine Untersuchung des Tracertransportes während dieser meteorologischen Situation. Zunächst erfolgt eine großräumige Analyse der Verteilung der künstlichen Tracer, bevor anschließend die Entwicklung an einzelnen Orten betrachtet wird. Die auflösungsabhängigen Unterschiede zwischen den Modellinstanzen werden schließlich mit Messergebnissen evaluiert.

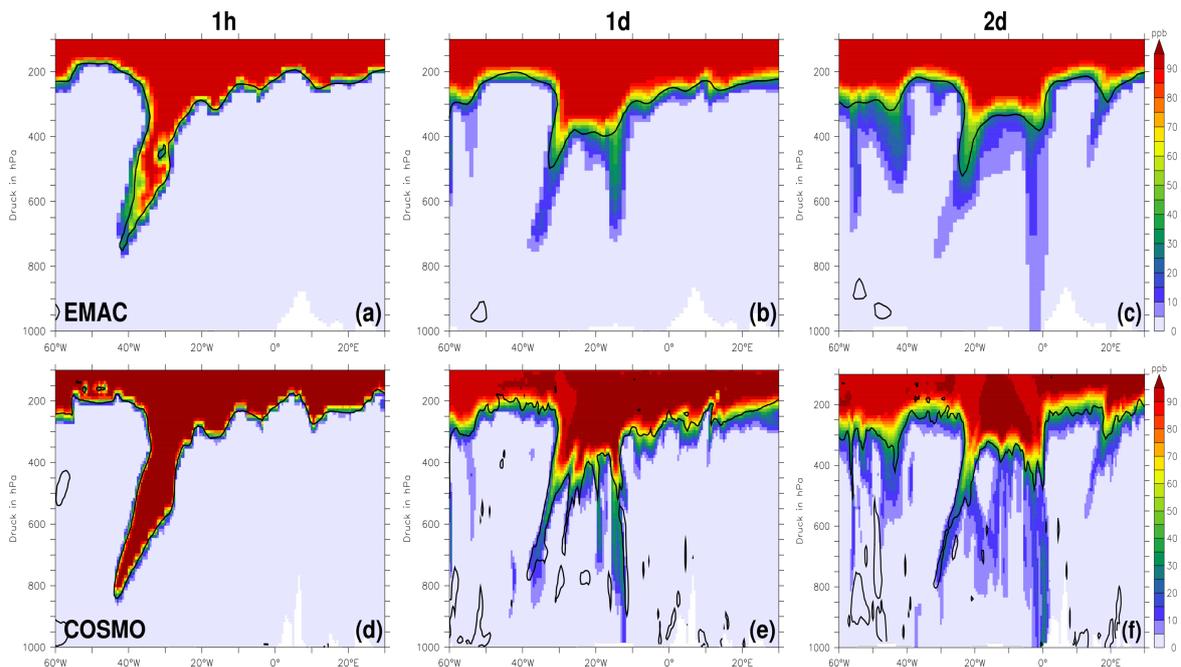
### **Auflösungsabhängige Unterschiede**

Werden die künstlichen Tracer wie in Kap. 3.2.2 beschrieben initialisiert, treten während der Simulation deutliche Unterschiede im Tracertransport zwischen den beiden Modellinstanzen von MECO(n) auf. Abbildung 3.6 stellt die Entwicklung der Mischungsverhältnisse des künstlichen, stratosphärischen Tracers STRATO zu verschiedenen Zeitpunkten in vertikalen Querschnitten entlang 45° N in den beiden Modellinstanzen dar. Während STRATO bereits einen Tag nach Initialisierung bis zur untersten Modellschicht von COSMO transportiert wird (Abb. 3.6 e), erreicht er diese in EMAC erst einen Tag später und mit deutlich niedrigeren Mischungsverhältnissen (Abb. 3.6 c). Deutlich zu erkennen sind auch die feineren Strukturen der dynamischen 2pvu-Tropopause in COSMO.

Ähnliche Unterschiede lassen sich bei der horizontalen Tracerverteilung auf der untersten Modellschicht feststellen (Abb. 3.7). In beiden Instanzen haben die stratosphärischen Tracer zwanzig Stunden nach Initialisierung die unterste Modellschicht erreicht (Abb. 3.7 a, b), in COSMO allerdings mit deutlich höheren Mischungsverhältnissen. Dass diese

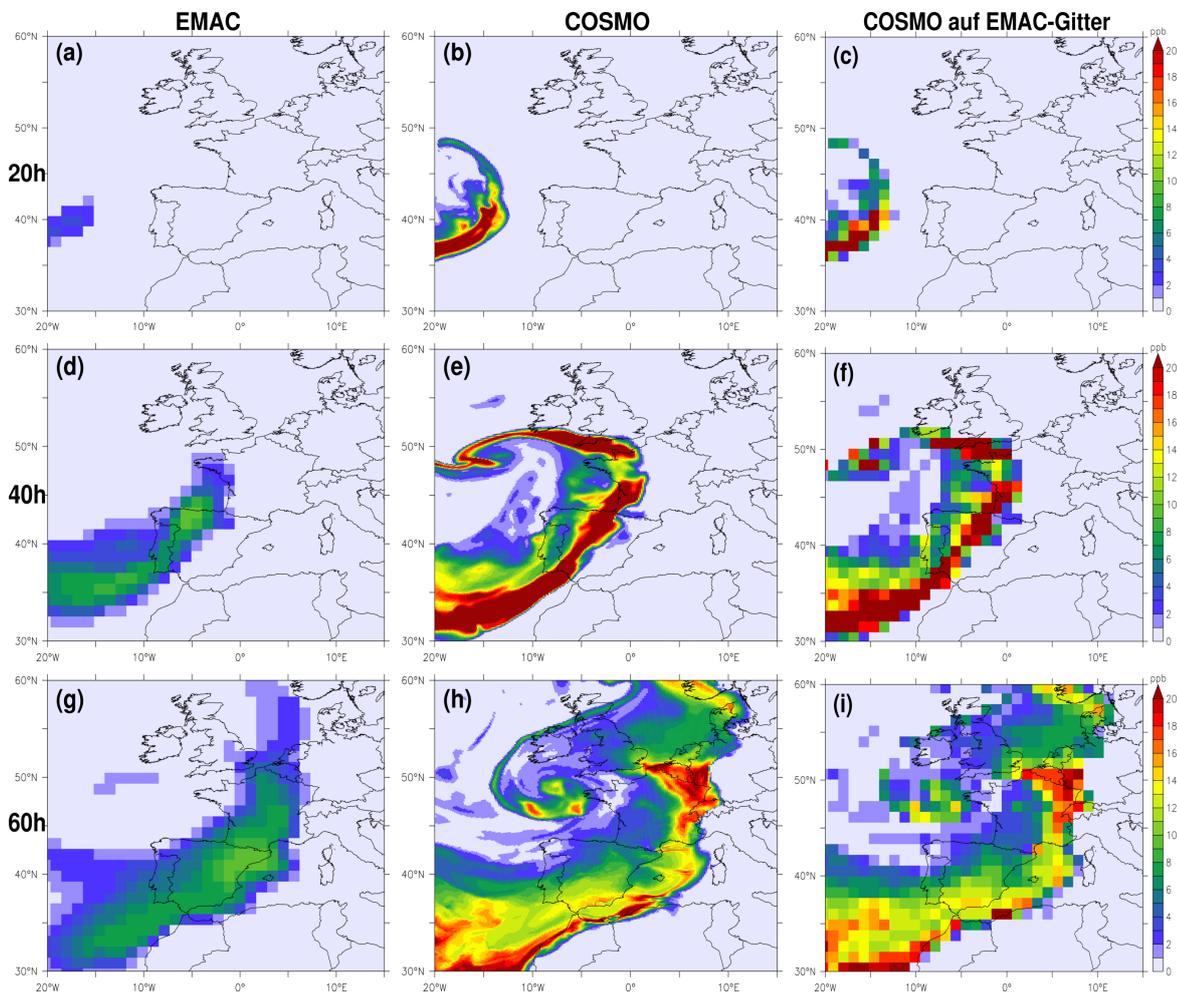
Erscheinung nicht nur aufgrund der feineren Auflösung zu erkennen ist, zeigt die rechte Spalte von Abb. 3.7, in der die Ergebnisse von COSMO auf das grobe Gitter interpoliert wurden. Verglichen mit den Ergebnissen von EMAC (Abb. 3.7, linke Spalte), sind die Mischungsverhältnisse auch nach der Interpolation noch deutlich höher.

Vergleicht man die Mischungsverhältnisse der Tracer auf der untersten Modellschicht mit der Entwicklung des Tiefdruckgebietes (Kap. 3.1), so lässt sich eine Verbindung zwischen den Mischungsverhältnissen und dem Frontensystem herstellen: Der stratosphärische Tracer erreicht die unterste Modellschicht direkt hinter der Kaltfront. Im Laufe der Simulation wirkt das okkludierende Frontensystem als Barriere, sodass der stratosphärische Tracer sich ausschließlich westlich der Front, im Kaltsektor der Zyklone, verteilt. Aufgrund des stetigen Abwärtstransportes durch die Tropopausenfalte liegen die höchsten Mischungsverhältnisse direkt hinter der Kaltfront vor, sodass hier starke Gradienten im Mischungsverhältnis entstehen. In COSMO sind zusätzlich feine Strukturen mit erhöhten Mischungsverhältnissen im Bereich des Tiefdruckzentrums zu erkennen. Auf letztere wird in Kap. 3.3.2 näher eingegangen.



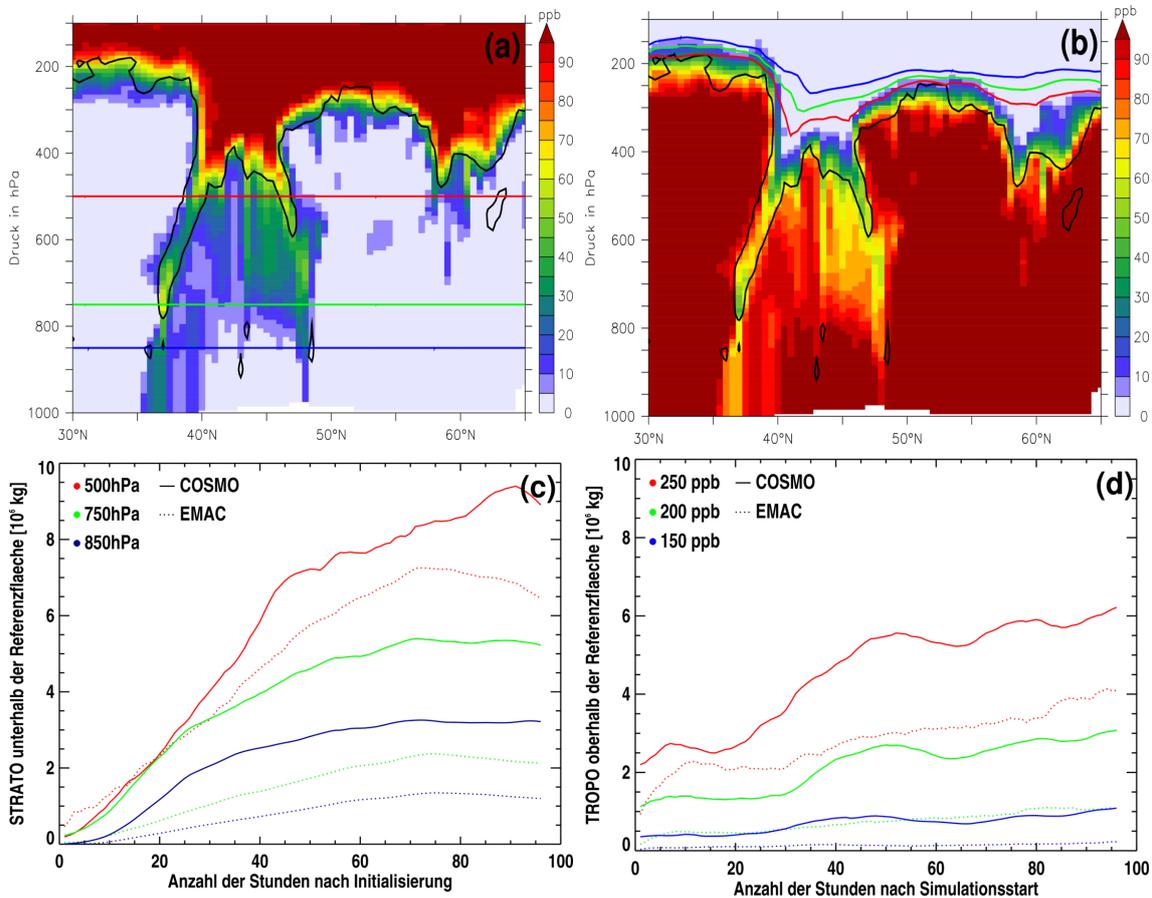
**Abbildung 3.6:** Mischungsverhältnisse des stratosphärischen Tracers (farbig, in ppb) in vertikalen Querschnitten entlang  $45^{\circ}\text{N}$  für EMAC (a - c) und COSMO (d - f) eine Stunde (a, d), einen Tag (b, e) und zwei Tage (c, f) nach Initialisierung.

Die künstlichen Tracer werden mit einem Mischungsverhältnis von 100 ppb initialisiert und nicht mit einer festgelegten Masse. Während die Initialisierung in COSMO regional



**Abbildung 3.7:** Mischungsverhältnisse des stratosphärischen Tracers (farbig, in ppb) auf der untersten Modellschicht in EMAC (a, d, g), in COSMO (b, e, h) und in COSMO interpoliert auf das grobe EMAC-Gitter (c, f, i), 20 (a - c), 40 (d - f) und 60 Stunden (g - i) nach Initialisierung.

begrenzt ist, wird in EMAC global initialisiert. Die Gesamtmassen der initialisierten künstlichen Tracer beider Instanzen sind daher nicht vergleichbar. Um dennoch den Tracertransport zwischen beiden Modellinstanzen objektiv vergleichen zu können, wird der Tracertransport relativ zu verschiedenen Referenzflächen betrachtet. Dazu wird die Masse der künstlichen Tracer unterhalb (STRATO) bzw. oberhalb (TROPO) einer Referenzfläche berechnet, falls sich diese Fläche unterhalb (STRATO) bzw. oberhalb (TROPO) der dynamischen 2p<sub>vu</sub>-Tropopause (schwarze Linie in Abb. 3.8 a, b) befindet. Als Referenzflächen werden Isoflächen bestimmter Felder bezeichnet. Um die transportierte Masse der künstlichen Tracer unter bzw. über die entsprechende Referenzfläche bestimmen zu können, sollte diese Fläche die Tropopause möglichst selten schneiden.



**Abbildung 3.8:** Oben: Mischungsverhältnisse (farbig, in ppb) des (a) stratosphärischen Tracers mit Referenzflächen (Druck = 500 hPa (rot), 750 hPa (grün) und 850 hPa (blau)) und des (b) troposphärischen Tracers mit Referenzflächen (E90 = 250 ppb (rot), 200 ppb (grün), 150 ppb (blau)) am 25. März, 0 UTC in COSMO. Die schwarze Kontur kennzeichnet die dynamische 2pvu-Tropopause. Unten: Tracertransport der künstlichen Tracer STRATO (c) und TROPO (d) unter bzw. über die verschiedenen Referenzflächen im Analysegebiet (45°W - 15°E, 30°N - 60°N). Weitere Beschreibung im Text.

Zusätzlich wird vorausgesetzt, dass die Felder unterhalb bzw. oberhalb der dynamischen 2pvu-Tropopause einen kontinuierlichen Gradienten aufweisen. In der Troposphäre werden daher Isobaren, in der Stratosphäre „E90“-Flächen (Kap. 3.2.2) als Referenzflächen gewählt. Diese sind in Abb. 3.8 (a) und (b) eingezeichnet. Weitere mögliche Referenzflächen haben sich als ungeeignet herausgestellt: Während beispielsweise PV-Flächen separate positive Anomalien aufweisen und damit die exakte Bestimmung der Referenzfläche erschweren, schneiden Isentropen sehr häufig die Tropopause.

Referenzfläche	500 hPa	750 hPa	850 hPa	250 ppb	200 ppb	150 ppb
mittl. norm. Differenz $\phi$	0,191	0,889	0,959	0,474	0,993	1,355

**Tabelle 3.3:** Unterschiede im Massentransport zwischen den Modellinstanzen. Die mittlere, normierte Differenz  $\phi$  entspricht der Summe der stündlichen Differenzen, dividiert durch den Mittelwert (Gl. 3.1). Referenzflächen wie in Abb. 3.8.

In Abb. 3.8 (c) sind die berechneten Massen des stratosphärischen Tracers STRATO unterhalb der entsprechenden Referenzflächen (farbig) im Laufe der Simulation in EMAC (gepunktete Linien) und COSMO (durchgezogene Linien) dargestellt. Abbildung 3.8 (d) zeigt dies entsprechend für den troposphärischen Tracer TROPO. Die Massen werden jeweils für ein Analysegebiet berechnet, das sich zwischen 45°W und 15°E sowie zwischen 30°N und 60°N erstreckt.

Die Tracer werden bereits innerhalb der ersten Simulationsstunde unter (STRATO) bzw. über (TROPO) die Referenzfläche nahe der Tropopause transportiert, sodass sich bereits der erste Ausgabewert nach einer Stunde von Null unterscheidet. Da die E90-Referenzfläche von 250 ppb am nächsten an der Tropopause liegt, ist dieser Effekt hier am größten. Vergleicht man die Ergebnisse der beiden MECO(n)-Instanzen (gleichfarbige Linien), so entspricht der vertikale Abstand der Linien gerade dem Unterschied der Tracermassen, die unter bzw. über die entsprechenden Referenzfläche transportiert wurden. Dieser Abstand nimmt für alle Referenzflächen mit der Zeit zu. Die Unterschiede im Tracertransport zwischen den Modellinstanzen treten demnach während der gesamten Simulationsperiode auf.

Von den Zeitreihen der Tracermassen ( $m$ ) lassen sich nach Gl. 3.1 mittlere, normierte Differenzen ( $\phi$ ) berechnen. Dazu wird zunächst der über die Zeit ( $t$ ) gemittelte Unterschied zwischen den Instanzen bestimmt (Zähler in Gl. 3.1) und anschließend mit der mittleren Masse (Nenner in Gl. 3.1) normiert. Die Ergebnisse sind in Tab. 3.3 dargestellt. Je weiter das Referenzniveau von der Tropopause entfernt ist, um so größer ist die mittlere, normierte Differenz. Mit wachsendem Abstand zur Tropopause wächst demnach der Unterschied im Massentransport zwischen den Modellinstanzen.

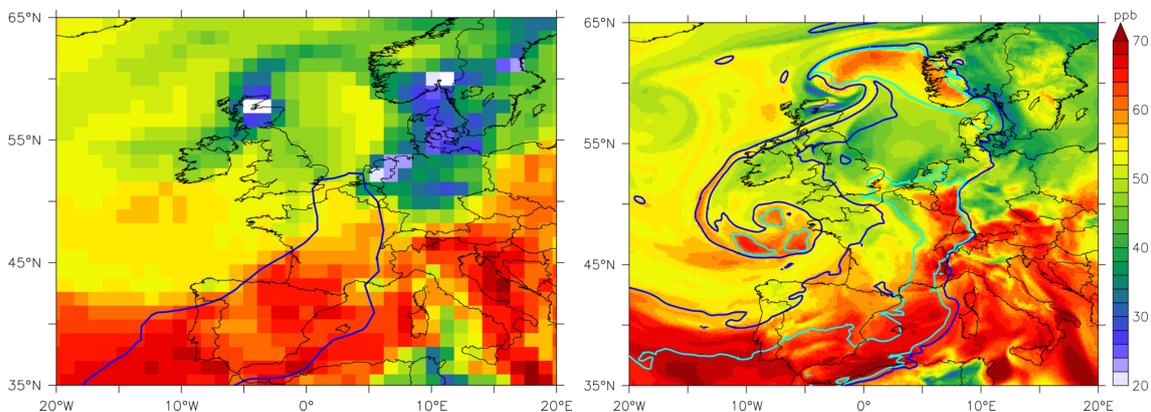
$$\phi = \frac{\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (m_{COSMO}[t] - m_{EMAC}[t])}{\frac{1}{2n} \sum_{t=1}^n (m_{COSMO}[t] + m_{EMAC}[t])} \quad (3.1)$$

Zusammenfassend lässt sich zu dem Massentransport von der Stratosphäre in die Troposphäre bzw. umgekehrt Folgendes festhalten:

- Stratosphärische Tracer haben am Boden im höher auflösenden COSMO größere

Mischungsverhältnisse als im grob auflösenden EMAC.

- In COSMO wird während der gesamten Simulationsperiode in dem betrachteten Analysegebiet ( $-45^{\circ}$  -  $15^{\circ}$ E,  $30^{\circ}$  -  $60^{\circ}$ N) mehr Tracermasse aus der Stratosphäre in die Troposphäre transportiert als in EMAC.
- In COSMO wird ebenfalls mehr Tracermasse aus der Troposphäre in die Stratosphäre transportiert.
- Je weiter die Referenzfläche von der Tropopause entfernt ist, desto größer ist der Unterschied im Massentransport zwischen den Modellinstanzen.

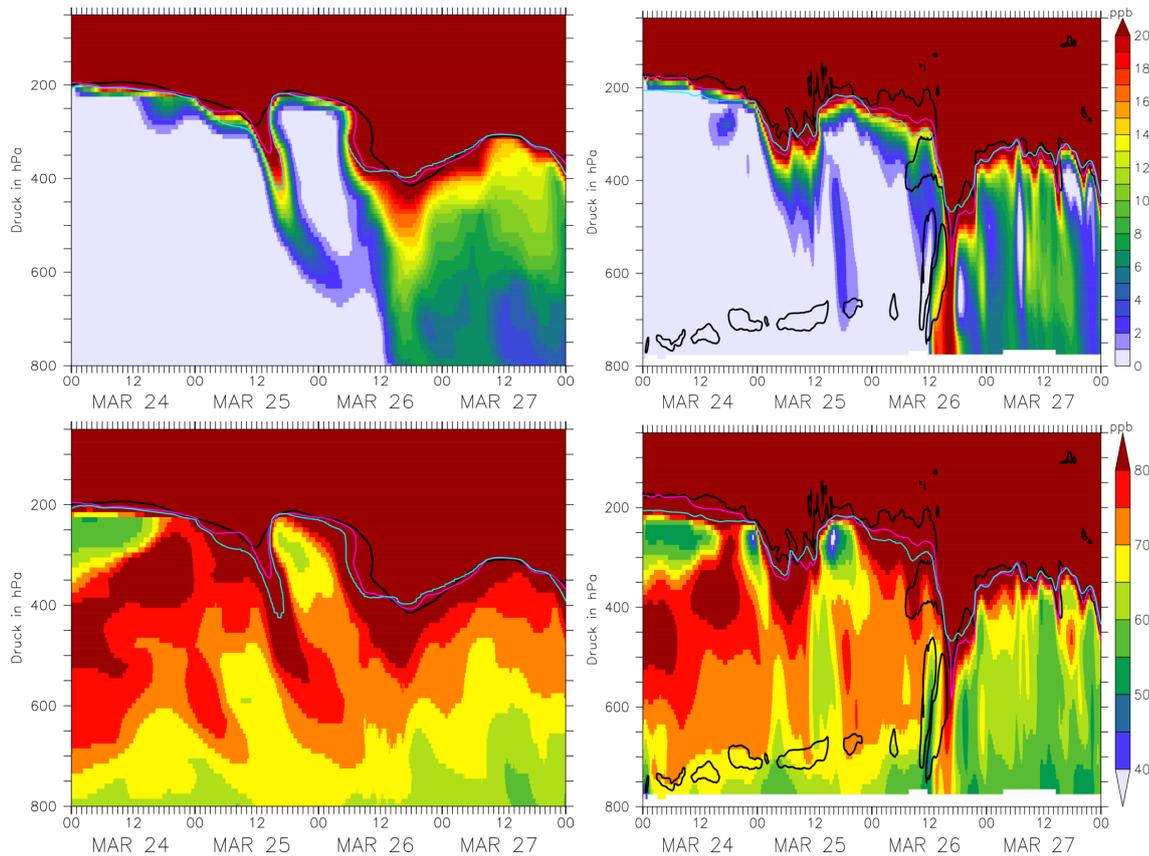


**Abbildung 3.9:** Mischungsverhältnisse von Ozon (farbig, in ppb) auf der untersten Modellschicht für EMAC (links) und COSMO (rechts) und Konturen des stratosphärischen Tracers für 10 ppb (türkis) und 3 ppb (blau) am 26.März, 12 UTC.

In Abb. 3.9 ist das Ozonmischungsverhältnis auf der untersten Modellschicht dargestellt. Zusätzlich sind Regionen, in denen das Mischungsverhältnis des stratosphärischen Tracers oberhalb von 10 ppb (türkis) bzw. 3 ppb (blau) liegt, gekennzeichnet. Vor allem in COSMO (rechts) befinden sich in den Regionen, in denen maximale Werte des stratosphärischen Tracers erreicht werden, auch erhöhte Ozonwerte. Auffällig sind hier die Ozonerhöhungen in Südwestdeutschland, zwischen Großbritannien und Norwegen, sowie in der Umgebung des Tiefdruckzentrums westlich von Frankreich. In EMAC lässt sich ebenfalls eine leichte Ozonerhöhung in der Umgebung des Tiefdruckzentrums erkennen. Die Mischungsverhältnisse des stratosphärischen Tracers liegen hier allerdings unterhalb von 10 ppb (Abb. 3.7 g).

Dieser Zusammenhang zwischen dem stratosphärischen Tracer und Ozon lässt sich auch in Zeitreihen der Tracer an einzelnen Stationen beobachten. Abbildung 3.10 zeigt dies exemplarisch für die Station am Jungfraujoch (Tab. 2.1). Dargestellt sind Zeitreihen des stratosphärischen Tracers (oben) und von Ozon (unten), sowie die Lage der dynamischen

2pvu-Tropopause (schwarz). Um eine möglichst hohe zeitliche Auflösung zu erhalten, werden die Felder während der Simulation jeden Zeitschritt an der entsprechenden geographischen Position der Station ausgegeben.



**Abbildung 3.10:** Zeitreihen der Tracer am Jungfraujoch. Dargestellt sind die Mischungsverhältnisse (farbig, in ppb) des stratosphärischen Tracers (oben) und von Ozon (unten) für EMAC (links) und COSMO (rechts). Konturen sind eingezeichnet für PV = 2 pvu (schwarz), Ozon = 100 ppb (türkis) und STRATO = 25 ppb (pink).

Die Zeitreihen des stratosphärischen Tracers (Abb. 3.10, oben) zeigen, dass der künstliche Tracer in beiden Modellinstanzen am 26. März, 12 UTC die unterste Modellschicht erreicht hat. Während die Mischungsverhältnisse am Boden in EMAC in den folgenden vier Stunden auf Maximalwerte um 10 ppb steigen, ist in COSMO ein starker, kurzzeitiger Anstieg auf über 20 ppb zu erkennen. Dieser starke Gradient ist in der gesamten Troposphäre vorhanden. Nach dem Anstieg sinken die Mischungsverhältnisse, wie in EMAC, auf etwa 10 ppb ab.

Deutlich zu erkennen sind auch die feineren Strukturen der dynamischen 2pvu-

### 3.3. Einfluss von stratosphärischen Luftmassen auf bodennahe Ozonkonzentrationen 47

Tropopause (schwarze Konturen). Die Tropopausenfalte ist in COSMO stärker ausgebildet und erstreckt sich am 26. März, 12 UTC bis etwa 500 hPa, während sie in EMAC nur bis 400 hPa reicht. Die 2pvu-Konturen in der unteren Troposphäre entstehen durch diabatische Prozesse, in diesem Fall die Niederschlagsbildung bei Frontpassage. In EMAC sind diese PV-Anomalien niedriger ( $<1$  pvu, nicht dargestellt). Grund dafür ist möglicherweise, dass der frontale Niederschlag in EMAC zu weit nördlich und zu schwach simuliert wird (Hofmann et al. 2012).

In den Ozonmischungsverhältnissen (Abb. 3.10, unten) lassen sich ähnliche Strukturen wie in den Mischungsverhältnissen des stratosphärischen Tracers finden. Vor allem in der Tropopausenregion stimmt der Verlauf der Isolinien (STRATO = 25 ppb, Ozon = 100 ppb) gut überein. Auch die Ozonmischungsverhältnisse steigen am 26. März, 12 UTC am Boden in COSMO stark an. Während man in den Mischungsverhältnissen des stratosphärischen Tracers auch in EMAC noch eine Zunahme erkannt hat, bleibt das Ozon in der unteren Troposphäre am 26. März, 12 UTC zunächst konstant, bevor es ab 18 UTC sogar abnimmt.

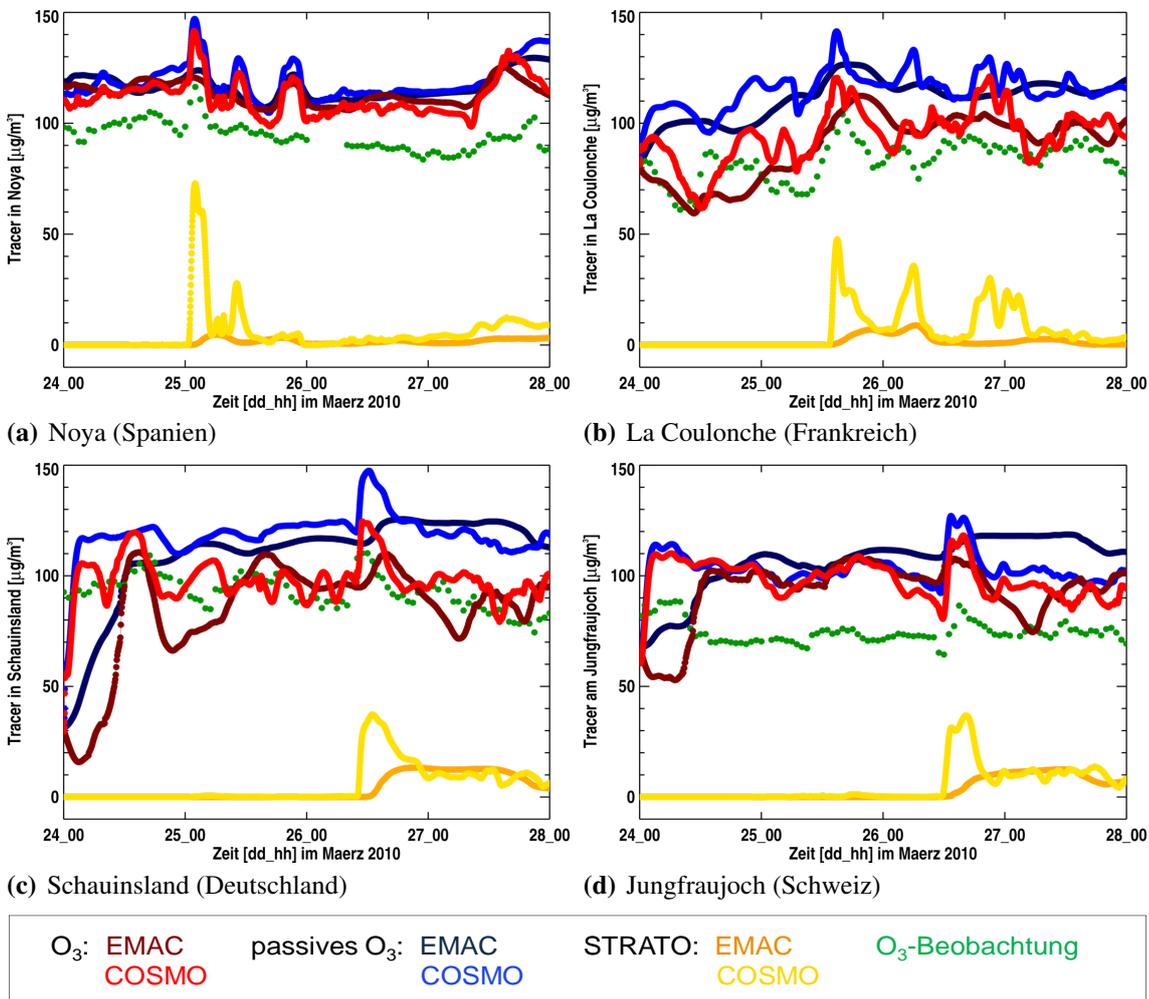
#### **Evaluation der Ergebnisse mit Messdaten**

In diesem Abschnitt werden die Unterschiede im Tracertransport zwischen den beiden Modellinstanzen evaluiert. Dazu werden die künstlichen, stratosphärischen Tracer STRATO sowie Ozonfelder zunächst mit stündlichen Beobachtungsdaten des EMEP-Netzwerkes (Kap. 2.2.1) und anschließend mit Ozonsondenmessdaten von WOUDC (Kap. 2.2.2) an verschiedenen Stationen in Europa verglichen. Tabelle 2.1 sowie die Abb. 2.3 fassen die Lage und die Höhe der einzelnen Beobachtungsstationen zusammen.

**Bodenmessungen** Neben der im vorherigen Abschnitt beschriebenen Bodenmessstation am Jungfrauoch, werden hier ebenfalls die Ergebnisse der Stationen Noya, La Coulonche und Schauinsland evaluiert. Zeitreihen der Tracer an den verschiedenen Stationen sind in Abb. 3.11 dargestellt. Da die Messwerte der EMEP-Stationen in der Einheit  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  angegeben sind, werden die Mischungsverhältnisse der simulierten Tracer entsprechend umgerechnet, der stratosphärische Tracer zum besseren Vergleich anschließend mit dem Faktor 0,05 skaliert.

In den Messungen (grün) ist an allen Stationen zum Zeitpunkt der Frontpassage (Abb. 3.7) eine Erhöhung des Ozons für einige Stunden zu erkennen (Noya: 25. März, 2 UTC; La Coulonche: 25. März, 14 UTC; Schauinsland: 26. März, 12 UTC; Jungfrauoch: 26. März, 12 UTC).

Mit Hilfe des stratosphärischen Tracers (gelb) lässt sich die Ozonerhöhung zum Zeitpunkt der Frontpassage auf Luftmassen mit stratosphärischem Ursprung zurückführen, da der Anstieg im Ozon gleichzeitig mit dem des stratosphärischen Tracers erfolgt.



**Abbildung 3.11:** Zeitreihen der Tracer (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) auf der untersten Modellschicht und in Beobachtungen an verschiedenen Stationen.

Betrachtet man das chemisch aktive Ozon (rot), so wird zum Zeitpunkt der Frontpassage in beiden Modellinstanzen ebenfalls ein Anstieg simuliert. Amplitude und Zeitpunkt des Anstieges in COSMO (hell) stimmen allerdings besser mit den gemessenen Ozonwerten überein als in EMAC (dunkel). So steigt das Ozon beispielsweise an der Station in Noya (Abb. 3.11 a) am 25. März, 2 UTC in EMAC um weniger als  $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$  an, während das Ozon von Beobachtung und COSMO um mehr als  $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$  zunimmt. An den Stationen in La Coulonche (Abb. 3.11 b) und Schauinsland (Abb. 3.11 c) erfolgt der Anstieg zeitversetzt: Die maximalen Ozonwerte in EMAC treten etwa drei Stunden nach den Maxima in den Beobachtungen und COSMO auf.

Erwartungsgemäß sind die Massen des passiven Ozons (blau), aufgrund der fehlenden

chemischen Abbauprozesse in der Troposphäre (Kap. 1.3.2), an allen Stationen in beiden Modellinstanzen höher als in den Beobachtungen. An den Stationen Noya (Abb. 3.11 a) und Jungfraujoch (Abb. 3.11 d) sind die Unterschiede zwischen passivem und aktivem Ozon nur gering, die modellierten Massen sind verglichen mit den Beobachtungen deutlich zu hoch. Beide Stationen liegen abgelegen von Regionen mit hohen  $\text{NO}_x$ -Emissionen und weisen daher, übereinstimmend mit den Beobachtungen, keinen Tagesgang im Ozon (Kap. 1.3.2) auf. Fehlende nächtliche, chemische Abbauprozesse sind demnach nicht der Grund für die zu hohen Ozonwerte an diesen Stationen. In La Coulonche (Abb. 3.11 b) und Schauinsland (Abb. 3.11 c) dagegen führen diese chemischen Prozesse zum Ozonabbau. Die Masse des chemisch aktiven Tracers stimmt hier besser mit den Beobachtungen überein, ist aber im Mittel ebenfalls leicht erhöht.

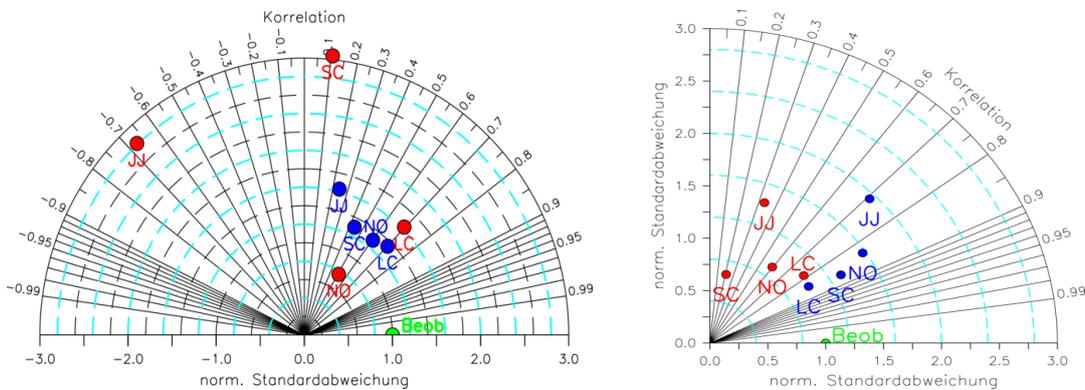
An den Stationen La Coulonche (Abb. 3.11 b) und Schauinsland (Abb. 3.11 c) treten in den mit COSMO simulierten Ozonzeitreihen viele, von der Beobachtung abweichende, Fluktuationen auf. Aus dem direkten Vergleich mit den Zeitreihen des passiven Ozons geht hervor, dass diese Abweichungen großteils durch die chemischen Prozesse im Modell entstehen. Anstiege im passiven Ozon, die nicht in den Zeitreihen des stratosphärischen Tracer auftreten (z.B. in Noya am 25. März, 18 UTC), entstehen durch transportiertes, troposphärisches Ozon, das sich mindestens seit Simulationsbeginn in der Troposphäre befindet.

Auffällig sind außerdem die zu niedrigen Startwerte an den Stationen Schauinsland (Abb. 3.11 c) und Jungfraujoch (Abb. 3.11 d). Sie entstehen, da an diesen Orten die Initialisierungsfelder der Spin-Up-Simulation (Kap. 3.2.1) zu geringe Werte liefern.

Für alle Stationen in Abb. 3.11 lässt sich zusammenfassen, dass mit COSMO Ozonanstiege, verursacht durch das Absinken stratosphärischer Luftmassen, zeitlich und in ihrer Stärke korrekt simuliert werden. Das gröber auflösende EMAC gibt keinen der durch das STT-Ereignis verursachten Ozonanstiege korrekt wieder.

Um eine objektive Aussage über die Qualität der Simulationsergebnisse der beiden Modellinstanzen zu machen eignen sich sogenannte Taylordiagramme (Kap. 2.3.5), welche die drei statistischen Größen Korrelation, Standardabweichung und Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers (engl.: route mean square error, RMSE) zusammenfassen. In Abb. 3.12 ist links ein Taylordiagramm für den gesamten Simulationszeitraum von vier Tagen, rechts für den zeitlichen Bereich von zwölf Stunden vor bzw. nach Frontpassage an der entsprechenden Beobachtungsstation dargestellt. Die Beobachtungsdaten liegen als Stundenmittel vor. Da die Modellausgabe an den Beobachtungsstationen hochfrequenter ist (6-minütig), wurden die Modelldaten zur Berechnung der statistischen Maße stündlich gemittelt.

Betrachtet man den gesamten Zeitraum (Abb. 3.12, links), so fallen zunächst die Stationen Jungfraujoch (JJ) und Schauinsland (SC) auf, deren statistische Maße für EMAC signifikant schlechter sind als für die entsprechende Station in COSMO. Für die Station in La Coulonche (LC) zeigen COSMO und EMAC beide eine Korrelation von 0,7, RMSE und



**Abbildung 3.12:** Taylordiagramme für die gesamte Simulationsperiode (links) und  $\pm 12$  Stunden nach Frontpassage (rechts). Die statistischen Maße (Korrelation, normierte Standardabweichung, RMSE) sind für die einzelnen Stationen (Stationskürzel aus Tab. 2.1) für COSMO (blau) und EMAC (rot) relativ zu den Beobachtungen (grün) aufgetragen.

Standardabweichung liegen in COSMO näher an der Beobachtung als in EMAC. Für die Station in Noya (NO) sind die statistischen Unterschiede zwischen den Modellinstanzen am geringsten. Für beide Instanzen werden für die Stationen Jungfrauoch und Schauinsland die geringsten Übereinstimmungen zwischen Beobachtung und Modell gefunden, die Stationen in Noya und La Coulonche schneiden deutlich besser ab. Vergleicht man diese Ergebnisse mit den Zeitreihen in Abb. 3.11, dann lassen sich die schlechten Ergebnisse an den Stationen Jungfrauoch und Schauinsland durch die starken Abweichungen in den ersten Stunden nach Initialisierung der Tracer erklären. Da sich das Ozon in COSMO schneller der Beobachtung annähert, sind die Abweichungen insgesamt geringer als in EMAC.

Der Effekt der zu niedrigen Initialisierung wurde in Abb. 3.12 rechts ausgeschlossen, indem ausschließlich ein Zeitraum von zwölf Stunden vor und nach der Frontpassage betrachtet wird. Der Zeitpunkt der Frontpassage wird über das Ozonmaximum in den Beobachtungen festgelegt. Während an allen Stationen in COSMO höhere Korrelation zwischen Modell und Beobachtung erreicht werden als in EMAC, weisen alle Stationen in EMAC eine geringere Abweichung in der Standardabweichung auf. Diese erhöhten Abweichungen in der Standardabweichung entstehen in COSMO aufgrund der häufigen Fluktuationen, hervorgerufen durch chemische Prozesse (vgl. Beschreibung zu Abb. 3.11). Vergleicht man die Stationen untereinander, so schneiden erneut die Simulationsergebnisse der Station Jungfrauoch in beiden Instanzen am schlechtesten ab. Sie haben, verglichen mit den anderen Stationen, die geringste Korrelation, den größten RMSE und in COSMO ebenfalls die größte Standardabweichung.

Mit den Taylordiagrammen lassen sich die subjektiven Eindrücke der Abb. 3.11 bestätigen: Die Korrelation zwischen den simulierten und den beobachteten Ozonwerten ist deutlich besser in COSMO als in EMAC. Das simulierte Ozon liegt allerdings teilweise

deutlich zu hoch und weist eine hohe Variabilität auf. Dies wird durch erhöhte RMSE-Werte und Abweichungen in der Standardabweichung gegenüber den Beobachtungen wiedergegeben.

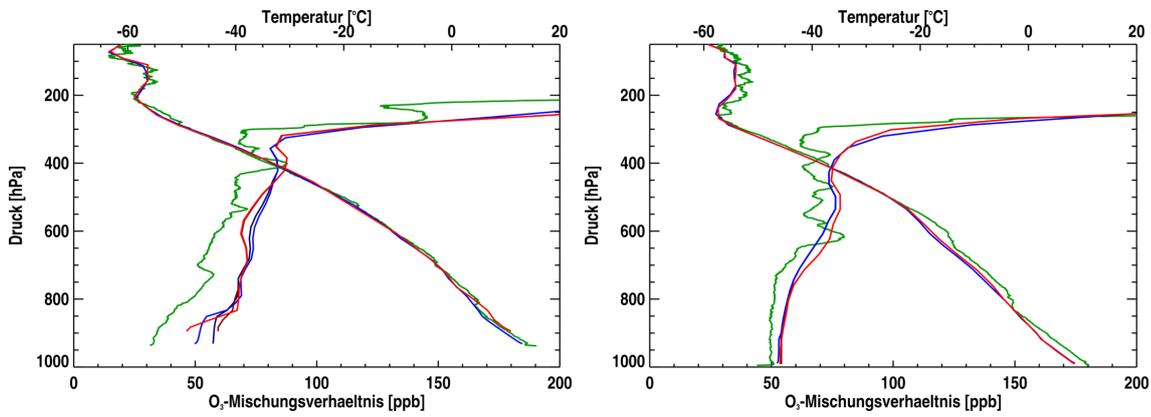
**Sondenmessungen** In Abb. 3.13 werden die Modellergebnisse mit vertikalen Ozon- und Temperaturprofilen von Ozonsonden verglichen.

Betrachtet man zunächst die Temperaturprofile, so stimmen diese in der mittleren und oberen Troposphäre bis zur Tropopause zu allen Zeiten gut mit den Beobachtungen überein. Oberhalb der Tropopause treten am dritten Tag nach Simulationsstart (Abb. 3.13 d, f) in beiden Instanzen Abweichungen auf.

Aufgrund der unterschiedlichen Orographie und der damit verbundenen unterschiedlichen Höhen der unteren Modellschichten (Tab. 2.1) in beiden Modellinstanzen, unterscheiden sich die Temperaturprofile am stärksten in der unteren Troposphäre. Die Stationshöhe von Hohenpeißenberg und Payerne ist in EMAC deutlich zu hoch (Tab. 2.1). An der Station in Payerne wird dadurch ein zu geringer Druck, in Hohenpeißenberg zu niedrige Temperaturen für die unterste Modellschicht in EMAC simuliert.

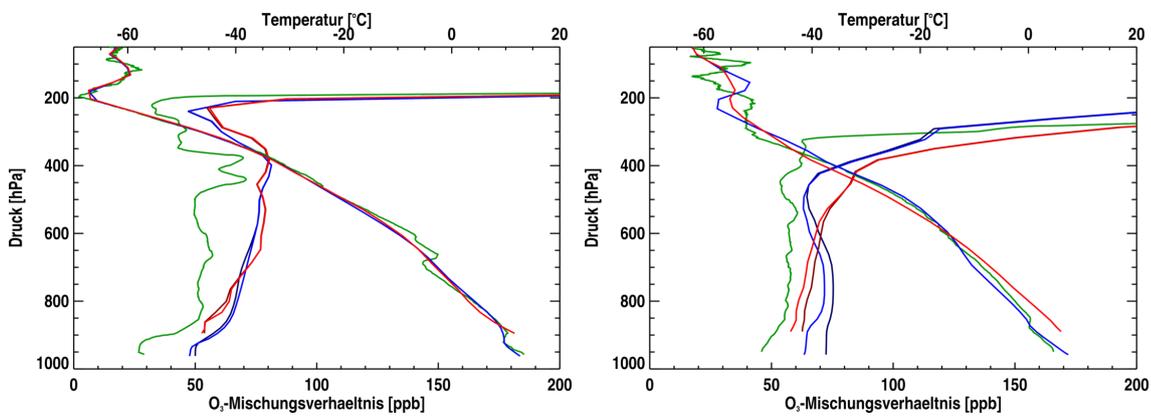
Die simulierten Ozonwerte liegen auch hier, wie bereits in dem Vergleich mit Bodenmessungen gezeigt (Abb. 3.11 a, d), in der gesamten Troposphäre für beide Instanzen zu hoch. Aktives (hell) und passives Ozon (dunkel) unterscheiden sich ausschließlich in der Troposphäre, am größten sind die Unterschiede in der unteren Troposphäre. Aufgrund der fehlenden chemischen Abbauprozesse (Kap. 1.3.2) sind die Ozonmischungsverhältnisse der passiven Tracer hier größer. Änderungen durch chemische Prozesse in der Stratosphäre sind innerhalb der kurzen Simulationsperiode nicht zu erkennen. Die Ozonanomalien in der Tropopausenregion werden von beiden Modellinstanzen nicht erfasst. Sie werden in Kap. 3.4 näher analysiert.

Die Evaluation der Simulationsergebnisse lässt sich wie folgt zusammenfassen: Zu Beginn dieses Kapitels wurde gezeigt, dass in den Simulationen mit der horizontal feiner auflösenden COSMO-Instanz des MECO(n)-Systems mehr Tracermasse über die Tropopause transportiert wird, als in der grob auflösenden EMAC-Instanz. Dabei sind die auftretenden Unterschiede umso größer, je weiter die betrachtete Referenzfläche von der Tropopause entfernt liegt. Dies wird bei der Analyse des Transportes des stratosphärischen Tracers bestätigt: Verglichen mit der EMAC-Instanz erreicht im COSMO deutlich mehr Tracermasse die untere Troposphäre und führt dort zu kurzzeitigen, starken Anstiegen der Mischungsverhältnisse. Diese Anstiege lassen sich auch in den Zeitreihen des Ozons beobachten, die sich auf diese Weise auf stratosphärische Beiträge zurückführen lassen. Der Vergleich dieser Simulationsergebnisse mit Messdaten zeigt, dass die Ergebnisse von COSMO gut mit den Beobachtungen übereinstimmen: Die durch absinkende, stratosphärische Luftmassen verursachten Ozonerhöhungen am Boden werden in COSMO erfasst und sogar zum korrekten Zeitpunkt und mit der richtigen Amplitude wiedergegeben.



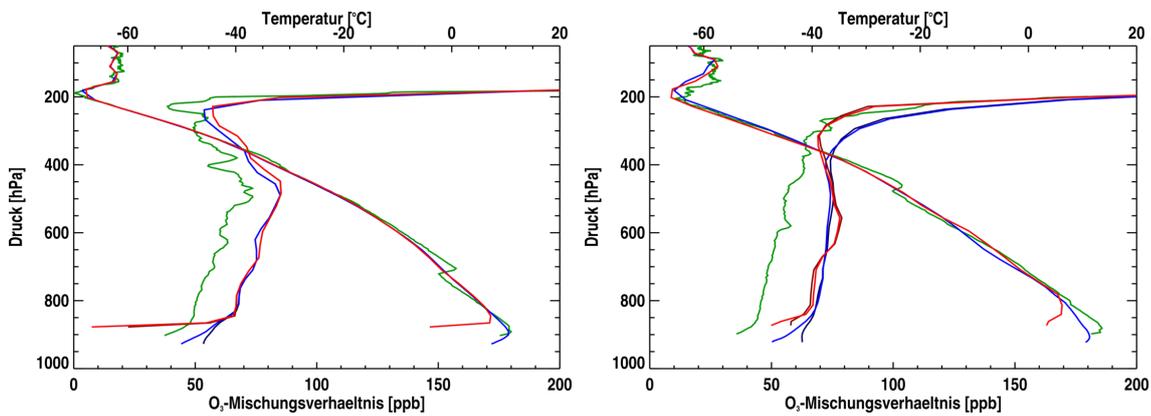
(a) Barajas, 24. März, 11 UTC

(b) Valencia, 24. März, 11 UTC



(c) Payerne, 24. März, 11 UTC

(d) Payerne, 26. März, 11 UTC



(e) Hohenpeißenberg, 24. März, 5 UTC

(f) Hohenpeißenberg, 26. März, 5 UTC

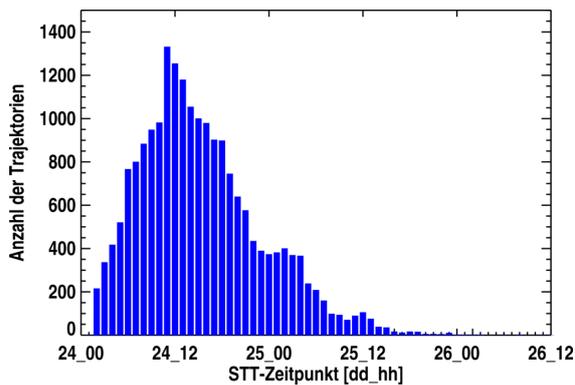
O<sub>3</sub>, Temperatur: EMAC, COSMO, Beobachtung  
 passives O<sub>3</sub>: EMAC, COSMO

**Abbildung 3.13:** Vertikalprofile von Ozon (in ppb) und Temperatur (in °C) an verschiedenen Stationen (vgl. Tab. 2.1).

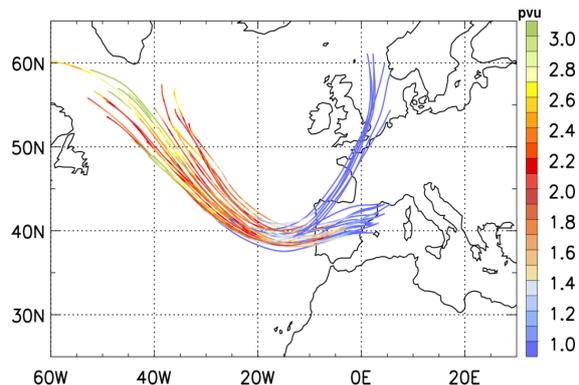
### 3.3.2 Detaillierte Analyse des Tracertransportes

Die in Kap. 3.3.1 festgestellte Übereinstimmung zwischen Beobachtungen und Simulationsergebnissen der COSMO-Instanz soll im Folgenden genutzt werden, um die STT-Ereignisse im Detail zu analysieren. Folgende offenen Fragen sollen beantwortet werden:

- Aus welchen stratosphärischen Regionen kommen die Luftmassen, die den Ozonanstieg am Boden verursachen?
- Gibt es bevorzugte Regionen in denen STT stattfindet?
- Welche Prozesse verursachen STT?
- Wo lassen sich Ozonerhöhungen am Boden beobachten?



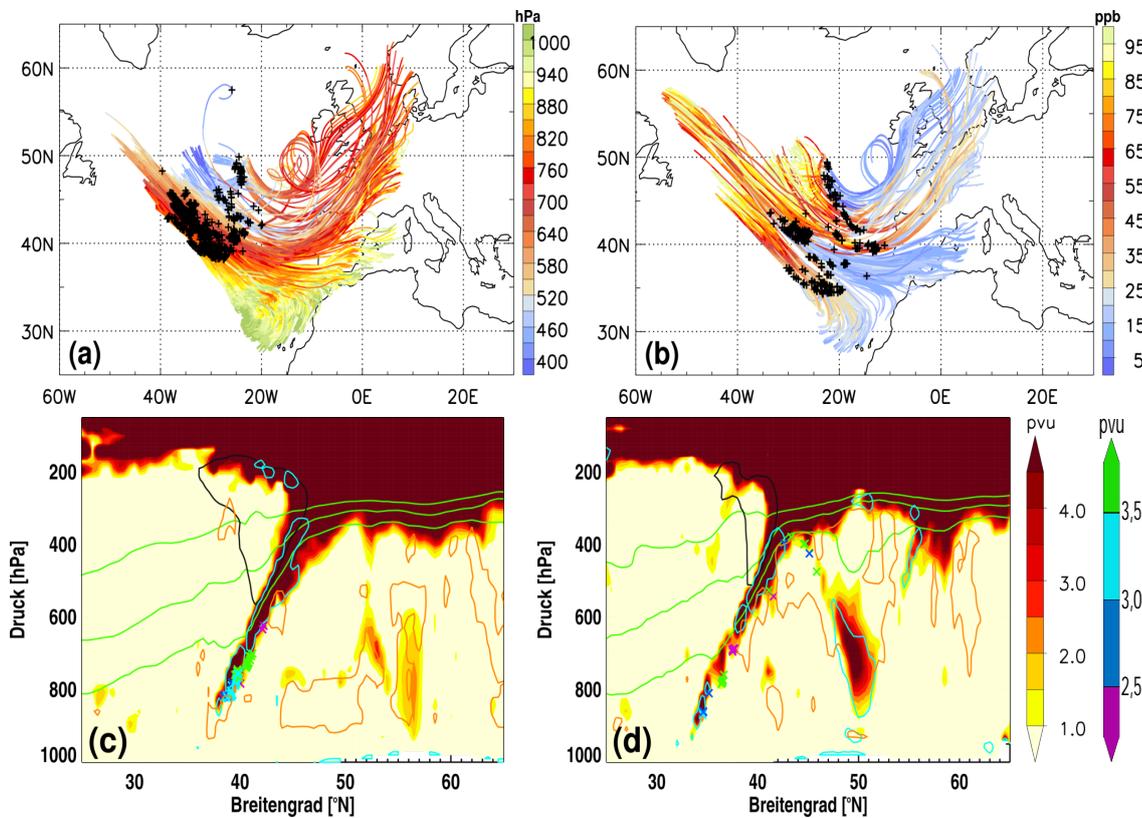
**Abbildung 3.14:** Anzahl der Trajektorien in Abhängigkeit des STT-Zeitpunktes in COSMO.



**Abbildung 3.15:** 59h-Rückwärtstrajektorien in EMAC (farbig: PV in pVU), gestartet am 26. März, 12 UTC (Kriterium:  $STRATO_{Start} > 10$  ppb unterhalb von 700 hPa,  $PV_{Ende} > 2$  pVU).

Die STT-Ereignisse werden mit Hilfe von Rückwärtstrajektorien, die mit LAGRANTO (Kap. 2.3.2) berechnet wurden, analysiert. Die Initialisierung erfolgt an den Gitterpunkten der jeweiligen Modellinstanz, falls das Mischungsverhältnis des stratosphärischen Tracers in der unteren Troposphäre (COSMO:  $< 3000$  m, EMAC:  $> 700$  hPa) zum Zeitpunkt der maximalen Mischungsverhältnisse am Boden (26. März, 12 UTC),  $> 10$  ppb ist. In Abb. 3.9 ist diese Region für die COSMO-Instanz durch eine türkise Linie gekennzeichnet (tatsächliches Initialisierungsgebiet:  $30^{\circ}W - 15^{\circ}E$ ,  $25^{\circ}N - 64^{\circ}N$ ). Um ausschließlich Trajektorien zu analysieren, die aus der Stratosphäre kommen, wird für die Trajektorien zusätzlich am 24. März, 1 UTC (erster Ausgabezeitpunkt nach Simulationsstart) eine  $PV > 2$  pVU gefordert.

Während sich in COSMO nach diesen Kriterien etwa 20000 Trajektorien selektieren

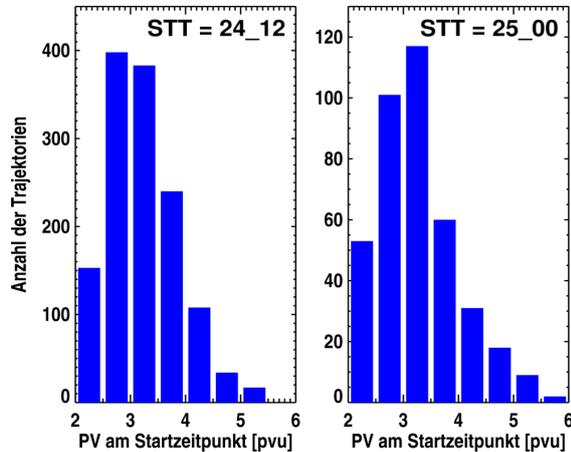


**Abbildung 3.16:** Oben: 59h-Rückwärtstrajektorien, gestartet am 26. März, 12 UTC (Kriterium:  $\text{STRATO}_{\text{Start}} > 10 \text{ ppb}$  unterhalb von 3000 m,  $\text{PV}_{\text{Ende}} > 2 \text{ pvu}$ ), deren STT-Punkt am 24. März, 12 UTC (a, farbig: Druck in hPa) bzw. 25. März, 0 UTC (b, farbig: STRATO in ppb) liegt. Kreuze kennzeichnen die Lage der STT-Punkte. Unten: PV (in pvu) in vertikalen Querschnitten zum STT-Zeitpunkt der Trajektorien (c:  $30^\circ\text{W}$ , 24. März, 12 UTC, b:  $21^\circ\text{W}$ , 25. März, 0 UTC). Konturen stellen das Geschwindigkeitsmaximum des Strahlstroms (Wind = 50 m/s, schwarz), den Turbulenzindex (TI = 8, türkis), den Wolkenbedeckungsgrad (70%, orange) und Isentropen ( $\Theta = 300, 310, 320 \text{ K}$ , grün) dar. Kreuze kennzeichnen die STT-Punkte, ihre Farbe die PV (in pvu) zum Startzeitpunkt der Trajektorien (24. März, 01 UTC).

lassen, erhält man in EMAC lediglich 25 Trajektorien. Für die geringe Anzahl der in EMAC berechneten Trajektorien gibt es zwei Gründe: Die Anzahl der Gitterpunkte im Initialisierungsgebiet ( $45^\circ$  Länge  $\times$   $40^\circ$  Breite) liegt für COSMO (Gitterpunktabstand  $0,125^\circ$ , ca. 15 Modellschichten unterhalb von 3000 m) um etwa das 120-fache höher, als für EMAC (Gitterpunktabstand  $1,125^\circ$ , ca. 10 Modellschichten unterhalb von 700 hPa). Zusätzlich wurde bereits gezeigt (Abb. 3.7), dass das Mischungsverhältnis des stratosphärischen Tracers in EMAC in der unteren Troposphäre geringer ist, als in COSMO. Das Selektionskriterium  $\text{STRATO} > 10 \text{ ppb}$  wird daher für die Gitterpunkte in EMAC seltener erfüllt.

Die Verläufe der Trajektorien in den beiden Instanzen (Abb. 3.15 und Abb. 3.16 a, b) sind sehr ähnlich: Ausgehend vom Startpunkt in der Stratosphäre östlich von Neufundland verlaufen sie südostwärts über den Nordatlantik. Dabei nehmen PV, Druck und das Mischungsverhältnis des stratosphärischen Tracers entlang der Trajektorien ab, bevor sich das Bündel in der unteren Troposphäre hinter der Front auffächert.

In Kap. 3.3.1 wurde bereits gezeigt, dass der Tracertransport in COSMO besser mit den Beobachtungen übereinstimmt als in EMAC. Da sich die Transportwege in den Instanzen offensichtlich nicht unterscheiden, wird die detaillierte Analyse im Folgenden ausschließlich mit den Trajektorien der COSMO-Instanz durchgeführt.



**Abbildung 3.17:** PV (in pvu) am Startzeitpunkt (24. März, 1 UTC) der Trajektorien, deren STT-Punkt am 24. März, 12 UTC (links) bzw. am 25. März, 0 UTC (rechts) liegt.

Zur Analyse wird zunächst entlang der 20000 Trajektorien der Zeitpunkt bestimmt, an dem die PV der Luftpakete erstmals  $< 2$  pvu wird (STT-Punkt). Für die meisten Luftpakete findet der STT am 24. März, 12 UTC statt, also etwa zwei Tage bevor sie sich in der unteren Troposphäre befinden (Abb. 3.14).

Abb. 3.16 (a) und (b) zeigt Trajektorien mit jeweils gleichem STT-Zeitpunkt, exemplarisch mit STT am 24. März, 12 UTC (a) und STT am 25. März, 0 UTC (b). Entlang der Trajektorien ist der Druck (a) und das Mischungsverhältnis des stratosphärischen Tracers (b) farbig dargestellt, zusätzliche Variablen und deren mittlere Änderung entlang der Trajektorien des entsprechenden Bündels sind in Tab. B.1 und Tab. B.2 zusammengefasst. Abbildung 3.16 (c) und (d) zeigt die PV in vertikalen Querschnitten durch die STT-Region (c:  $30^\circ\text{W}$ , d:  $21^\circ\text{W}$ ). Die Kreuze in Abb. 3.16 kennzeichnen die Lage der STT-Ereignisse. In den unteren Abbildungen sind sie mit dem Wert der PV eingefärbt, mit der die Trajektorien in der Stratosphäre starten.

**Aus welchen stratosphärischen Regionen kommen die Luftmassen, die den Ozonanstieg am Boden verursachen?**

Die Verläufe der Trajektorien (Abb. 3.16 a, b) sind trotz der unterschiedlichen STT-Zeitpunkte sehr ähnlich. Wie oben beschrieben starten sie gebündelt in der Stratosphäre

östlich von Neufundland und verlaufen südostwärts über den Nordatlantik. Dieser Verlauf stimmt mit der horizontalen Lage des Strahlstroms überein, der sein Maximum mit Windgeschwindigkeiten von ca. 70 m/s auf etwa 300 hPa erreicht (Abb. 3.4, links und Abb. 3.16 c, d). Das Trajektorienbündel mit STT am 24. März, 12 UTC (Abb. 3.16 a) startet im Mittel bei einem Druck von 608 hPa und bei Windgeschwindigkeiten von 27,0 m/s (Tab. B.1), das Bündel mit STT am 25. März, 0 UTC bei einem mittleren Druck von 488 hPa und Windgeschwindigkeiten von 25,3 m/s (Tab. B.2). Dass die Trajektorien trotz der hohen Druckniveaus tatsächlich in der Stratosphäre starten, zeigen die mittleren Startwerte von PV (3,22 pvu bzw. 3,25 pvu) und Ozon (90,6 ppb bzw. 105,2 ppb). Abbildung 3.17 zeigt die Verteilung der PV-Werte der Trajektorien zum Startzeitpunkt. In beiden Bündeln starten die meisten Trajektorien mit einer PV zwischen 2,5 pvu und 3,5 pvu, also in Bereichen nahe der Tropopause. Die Startregion der Trajektorien befindet sich demnach unterhalb des Jetmaximums und bereits innerhalb der Tropopausenfalte.

### **Gibt es bevorzugte Regionen in denen STT stattfindet?**

Die STT-Punkte der Trajektorienbündel sind in Abb. 3.16 durch Kreuze gekennzeichnet. Aufgrund der Propagation der Tropopausenfalte liegen die STT-Punkte am 25. März, 0 UTC südöstlicher als zwölf Stunden zuvor. Die Druckwerte betragen am STT-Zeitpunkt durchschnittlich etwa 700 hPa (Tab. B.1 und B.2). Abbildung 3.16 (d) zeigt allerdings, dass sich die STT-Punkte vertikal entlang der gesamten Tropopausenfalte verteilen können. Je südlicher die Trajektorien verlaufen, desto höher sind die Druckniveaus auf denen STT stattfindet (Abb. 3.16 a). Luftpakete, die auf diesen hohen Druckniveaus troposphärisch werden, befinden sich anschließend direkt in der unteren Troposphäre. Dass die Luftpakete auch in der Spitze der Falte aus der Stratosphäre kommen, zeigen die PV-Werte des Trajektorienstartpunktes (farbige Kreuze in Abb. 3.16 c, d), die teilweise oberhalb von 3,5 pvu liegen.

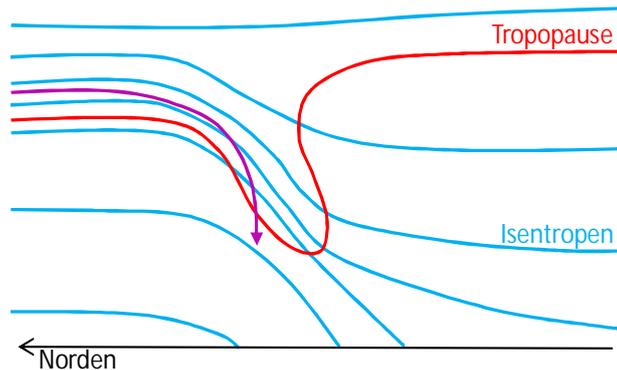
### **Welche Prozesse verursachen STT?**

Alle STT-Punkte befinden sich an der nordwestlichen Seite der Falte, die Luftpakete treten damit in Zugrichtung der Falte in die Troposphäre ein. Die Trajektorien steigen bis zum STT-Punkt diabatisch ab (Tab. B.1 und B.2, Abnahme in  $\Theta$ ).

Ein diabatischer Abstieg wurde auch in der Analyse von Bourqui und Trepanier (2010) festgestellt und auf die troposphärische Strahlungskühlung in der wolkenfreien Troposphäre zurückgeführt (maximal 1,7 K/d, Zierl und Wirth 1997). Die hier auftretende Kühlung ist mit einem Gradienten größer als 4 K/d allerdings deutlich stärker. Ebenfalls ist die Troposphäre gerade im STT-Bereich nicht wolkenfrei (vgl. Wolkenbedeckungsgrad in Abb. 3.16 c, d). Die starke, diabatische Abkühlung in der Falte wird daher

offensichtlich durch Strahlungsprozesse oberhalb der Wolken hervorgerufen. Slingo et al. (1982) zeigen, dass die Strahlungsheizraten in einer dünnen Schicht oberhalb der Wolken bis zu 10 K/d betragen können.

In der Studie von Bourqui und Trepanier (2010) wird beschrieben, dass die Trajektorien entlang der geneigten Isentropen in die Troposphäre absinken (Abb. 1.5). Dies ist in der hier vorgestellten Fallstudie nicht der Fall. Die stark geneigten Isentropen kreuzen die Tropopause auf der südwestlichen Seite der Falte, während die STT-Punkte an der nordöstlichen Seite liegen (Abb. 3.16 c, d). Die Luftpakete erreichen die Troposphäre, da sie aufgrund ihres diabatischen Abstieges auf niedrige Isentropen gelangen, die sich vollständig in der Troposphäre befinden. In Abb. 3.18 sind die STT-Ereignisse dieser Fallstudie, in Anlehnung an Abb. 1.5, nochmals schematisch dargestellt.

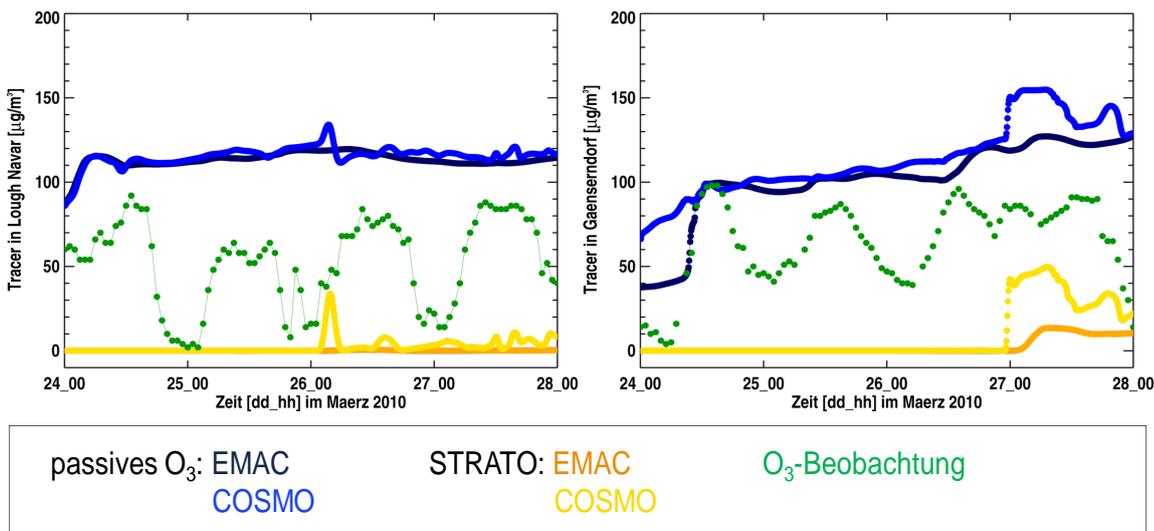


**Abbildung 3.18:** Schematische Darstellung des STT-Ereignisses. Die rote Linie kennzeichnet die Tropopause, blaue Linien stellen Isentropen dar. Die pinkle Linie symbolisiert die Trajektorie eines Luftpaketes, dessen STT-Punkt an der Nordseite der Tropopausenfalte liegt.

Die STT-Punkte liegen alle im Bereich von Wolken (Abb. 3.16 c, d). Dass STT-Ereignisse an der Falte durch Wolken initialisiert werden können, zeigt die Studie von Bourqui (2006), in der die STT-Ereignisse an Streamern einsetzen, sobald sich eine Wolke an der Tropopause befindet. In der hier vorgestellten Fallstudie verursachen offenbar sowohl diabatische, als auch turbulente Prozesse den STT: Neben den Wolken und dem damit verbundenen, diabatischen Heizen treten entlang der gesamten Tropopausenfalte zusätzlich turbulente Prozesse auf (türkise Linie in Abb. 3.16 c, d), die ebenfalls Auslöser für die STT-Prozesse sein können und zu der damit verbundenen PV-Abnahme führen. Nach dem Eintritt in die Troposphäre findet der Transport quasi-isentrop statt. Die barokline Zone am Boden und die damit verbundene Neigung der Isentropen verursacht den weiteren Abstieg der Luftpakete. Die synoptische Situation und das damit verbundene Windfeld bestimmen die Bewegungsrichtung der Luftpakete. In dieser Fallstudie werden die Luftpakete nach dem STT zunächst weiter nach Südosten transportiert, bevor sie sich später entlang der Kaltfront verteilen (Abb. 3.16 a, b). Während der Ausbreitung der Luftpakete in der Troposphäre entwickelt sich das Tiefdruckgebiet weiter. Am Boden kommt es durch die Intensivierung der baroklinen Zone zur Ausbildung einer Kaltfront. In der Höhe verlagert sich der Strahlstrom und die damit verbundene Tropopausenfalte auf die Trogvorderseite. Am 26. März, 12 UTC befinden sich daher die abgesunkenen,

stratosphärischen Luftmassen, deren STT-Punkt an der nordöstlichen Seite der Falte lag, schließlich westlich der Falte.

### Wo lassen sich Ozonerhöhungen am Boden beobachten?



**Abbildung 3.19:** Zeitreihen der Tracer in Lough Navar (links) und Gänserndorf (rechts) auf der untersten Modellschicht in COSMO und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).

Durch die Ozonzeitreihen in Abb. 3.11 konnte gezeigt werden, dass die an den Bodenstationen gemessenen Ozonerhöhungen durch absinkende, stratosphärische Luftmassen verursacht werden. Aufgrund der isolierten Lage dieser Stationen, die sich an der Küste oder auf Bergen befinden, zeigen die Beobachtungszeitreihen keinen oder nur mäßigen Tagesgang im Ozon. Die Maxima, die aus dem Transport stratosphärischer Luft resultieren, sind deutlich zu erkennen. Aber auch an nicht isoliert liegenden Stationen mit starkem Tagesgang im Ozon erreichen die absinkenden, stratosphärischen Luftmassen den Boden. Abbildung 3.19 zeigt dies exemplarisch für die Stationen in Lough Navar und Gänserndorf, an denen die gemessenen Ozonzeitreihen den typischen Ozontagesgang (vgl. Kap. 1.3.2) aufweisen. Bei Frontpassage (Lough Navar: 25. März, 20 UTC, Gänserndorf: 26. März, 22 UTC) steigen die nächtlichen Ozonwerte kurzzeitig stark an. Mit Hilfe der passiven Tracer lassen sich diese Anstiege auf absinkende Luftmassen mit stratosphärischer Herkunft zurückführen. Grund für die Zeitverschiebung zwischen beobachtetem und simuliertem Traceranstieg an der Station Lough Navar (Abb. 3.19, links) ist die zu östliche Lage des Okklusionbereiches des Tiefdruckgebietes der Simulation (s. Kap. 3.4, Abb. 3.25).

Die Zeitreihen zeigen, dass die stratosphärischen Luftmassen den Boden nicht nur an

### 3.3. Einfluss von stratosphärischen Luftmassen auf bodennahe Ozonkonzentrationen 59

den isolierten, zum Teil außerhalb der Grenzschicht liegenden Stationen erreichen. Die ozonreichen Luftmassen werden großflächig hinter der Front bis zum Boden transportiert und führen an allen Stationen zu Ozonerhöhungen. An Stationen mit starkem Tagesgang können die stratosphärischen Ozonbeiträge mit Hilfe der künstlichen, stratosphärischen Tracer identifiziert werden.

## 3.4 Sensitivitätsstudien mit variierender Modellkonfiguration

In diesem Abschnitt wird die Sensitivität der Ergebnisse aus Kap. 3.3.1 bezüglich der Modellkonfiguration untersucht. Dazu werden im Folgenden Simulationsstart, Initialisierungszeitpunkt und -kriterien sowie die vertikale Modellauflösung variiert.

### 3.4.1 Rückkopplung durch Chemie

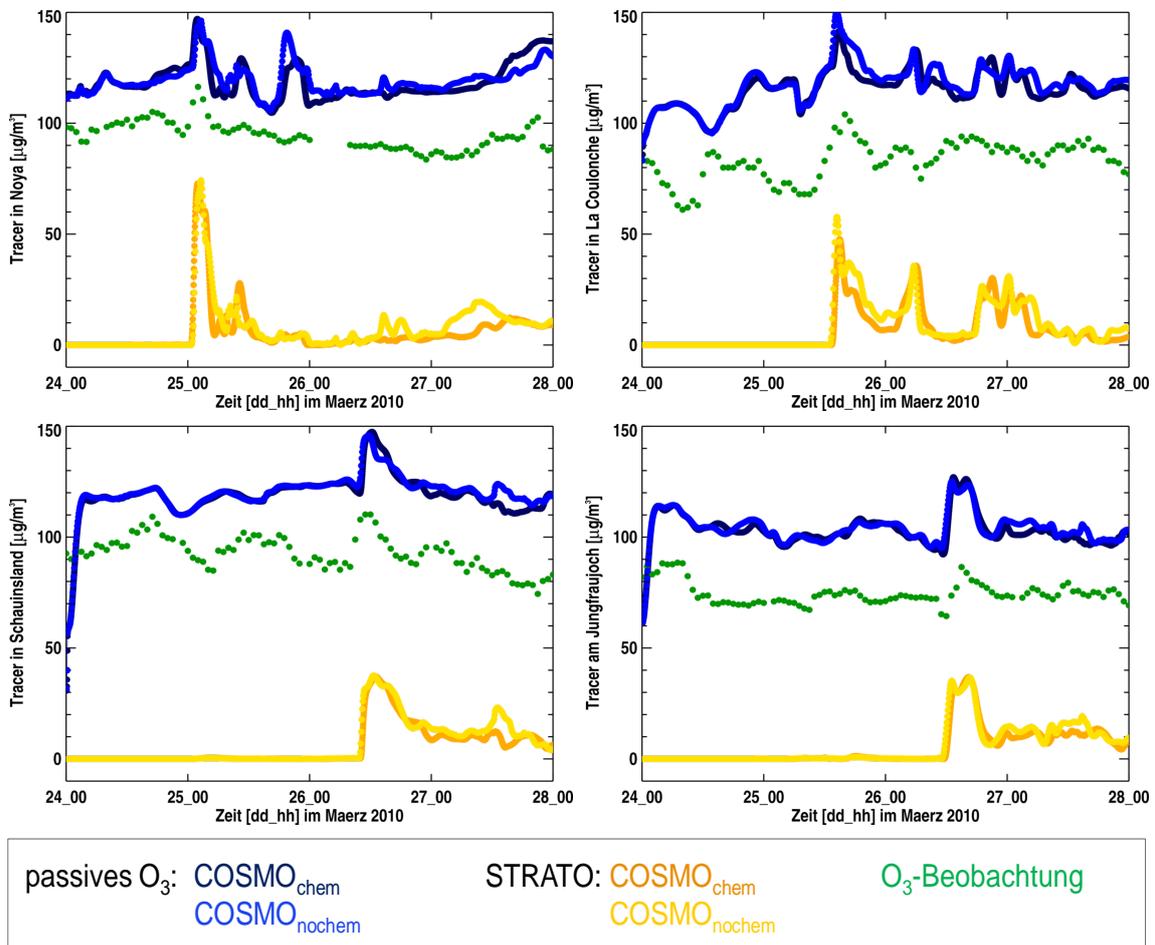
In der Referenzsimulation in Kap. 3.3.1 wurde gezeigt, dass es mit der COSMO-Instanz des Modellsystems möglich ist, Ozonerhöhungen durch absinkende, stratosphärische Luftmassen am Boden zu erfassen und zum korrekten Zeitpunkt mit der richtigen Amplitude zu simulieren. Der in dieser Referenzsimulation beobachtete Anstieg im Ozon am Boden ist sowohl im chemisch prozessierten, als auch in dem passiven Ozontracer zu erkennen (Abb. 3.11). Chemische Prozesse beeinflussen Strahlung und Mikrophysik und damit indirekt auch die Dynamik. Daher verändert die Chemieberechnung im Referenzlauf nicht nur die Mischungsverhältnisse der chemisch aktiven Tracer, sondern hat über die Dynamik auch Einfluss auf die passiven Tracer. Ein Vergleich zwischen der Referenzsimulation und einer Simulation ohne Chemieberechnung zeigt, dass die Unterschiede in der Troposphäre über die Simulationsperiode von vier Tagen nur gering sind. In Abb. 3.20 werden dazu die passiven Tracer in der Referenzsimulation (dunkel) und die passiven Tracern einer Simulation ohne Chemieberechnung (hell) auf der untersten Modellschicht miteinander verglichen. Die auftretenden Unterschiede in den COSMO-Simulationen sind sehr gering. Der Zeitpunkt und die Amplitude des Ozonanstieges bei Frontpassage bleibt an allen Stationen unverändert.

In der EMAC-Instanz treten in dieser und den folgenden Sensitivitätsstudien nur minimale, kaum erkennbare Unterschiede in den Zeitreihen der Tracer auf. Die zugehörigen Abbildungen befinden sich im Anhang C.

Aufgrund der geringen Unterschiede zwischen Simulationen mit und ohne Chemieberechnung, werden alle zusätzlichen Simulationen in diesem Abschnitt ohne Chemieberechnung durchgeführt, um mit der vorhandenen Rechenzeit möglichst viele Sensitivitätsstudien durchführen zu können.

### 3.4.2 Variation von Initialisierungs- und Startzeitpunkt

Für die Referenzsimulation in Kap. 3.3.1 wurden alle Tracer bei Simulationsstart am 24. März, 0 UTC initialisiert. Wie sensitiv die Ergebnisse auf die Variation von Initialisierungs- und Simulationsstartzeitpunkt sind, wird im Folgenden getestet.



**Abbildung 3.20:** Zeitreihen der Tracer (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) in Simulationen mit (dunkel) und ohne Chemie (hell) und in Beobachtungen (grün).

### Variation des Initialisierungszeitpunktes des stratosphärischen Tracers

Zur Untersuchung der Sensitivität des Initialisierungszeitpunktes werden zusätzliche künstliche, stratosphärische Tracer zu unterschiedlichen Zeitpunkten nach denselben Kriterien wie in der Referenzsimulation (Tab. 3.2) initialisiert. Ihre Kennzeichnung erfolgt über den entsprechenden Initialisierungszeitpunkt als Index, z.B. wird STRATO<sub>i2500</sub> demnach am 25. März, 0 UTC initialisiert.

**STRATO<sub>i2400</sub> und STRATO<sub>i2406</sub>:** Zu Beginn der Simulation werden die Anfangsbedingungen von dem groben EMAC-Gitter auf das feinere COSMO-Gitter interpoliert. Künstliche Tracer, die zu diesem Zeitpunkt in COSMO initialisiert werden, unterschei-

den sich von denen in EMAC ausschließlich aufgrund der Interpolation der Felder auf das feinere Gitter. Um zu erfassen, welchen Einfluss die in COSMO selbstständig entwickelte Dynamik hat, wird STRATO<sub>i2406</sub> erst sechs Stunden nach Übergabe der Anfangsbedingungen initialisiert. Ein Vergleich der Zeitreihen in Abb. 3.21 zeigt nur geringfügige Unterschiede zwischen STRATO<sub>i2400</sub> und STRATO<sub>i2406</sub>. Während die Maximalwerte bei Frontpassage von STRATO<sub>i2406</sub> an den Stationen Schauinsland und Jungfrauoch etwas höher als die von STRATO<sub>i2400</sub> liegen, sind sie an den anderen Stationen etwas niedriger. Die zeitliche Entwicklung von STRATO<sub>i2400</sub> und STRATO<sub>i2406</sub> sind sehr ähnlich, lediglich an der Station Schauinsland unterscheiden sich die Maxima um etwa drei Stunden. Der Zeitpunkt des beobachteten Maximums stimmt besser mit STRATO<sub>i2400</sub> überein.

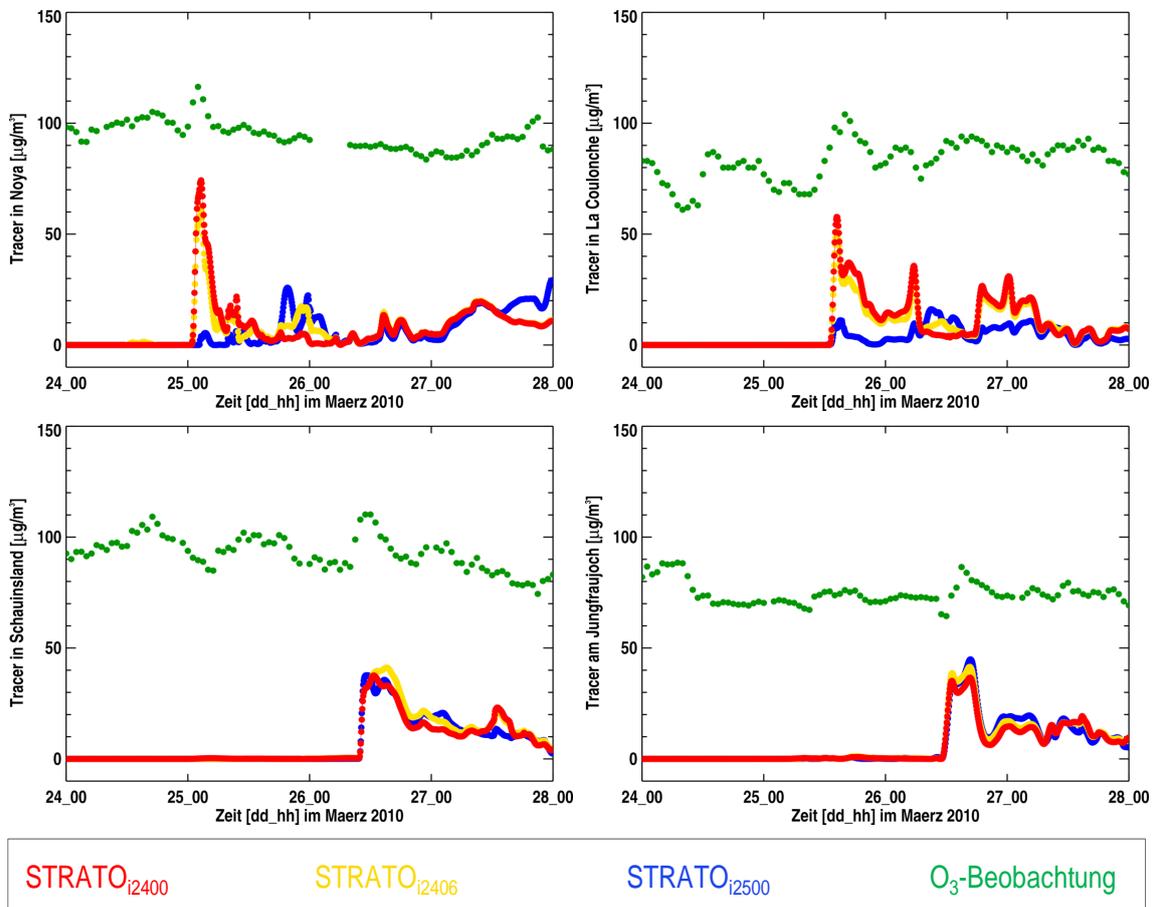
**STRATO<sub>i2400</sub> und STRATO<sub>i2500</sub>:** Mit STRATO<sub>i2500</sub> wird untersucht, ob sich die Ergebnisse verbessern, wenn der Tracer zeitlich näher am zu beobachteten Ereignis initialisiert wird. Für die Stationen Noya und La Coulonche, an denen die Frontpassage bereits am 25. März stattfindet, wird STRATO<sub>i2500</sub> nicht mehr bis zum Boden transportiert und zeigt daher kaum Signal bei Frontpassage. An den Stationen Schauinsland und Jungfrauoch sind die Unterschiede zwischen STRATO<sub>i2500</sub> und STRATO<sub>i2400</sub> in COSMO sehr gering. Bei späterer Initialisierung findet, übereinstimmend mit den Beobachtungsdaten, an der Station in Schauinsland kein erneuter Anstieg am 27. März, 15 UTC statt. Am Jungfrauoch wird für STRATO<sub>i2500</sub> ein geringerer Maximalwert simuliert. In EMAC liegen die Zeitreihen von STRATO<sub>i2500</sub> unterhalb von STRATO<sub>i2400</sub>, das Maximum aus den Beobachtungen wird hier noch deutlicher unterschätzt (Abb. C.2).

Verglichen mit den beobachteten Zeitreihen führt die spätere Initialisierung der Tracer demnach nicht zu einer verbesserten Erfassung des Traceranstieges bei Frontpassage. An einzelnen Stationen werden die Erhöhungen aufgrund der geringeren zur Verfügung stehenden Transportzeit bei späterer Initialisierung nicht mehr erfasst.

### Variation des Startzeitpunktes

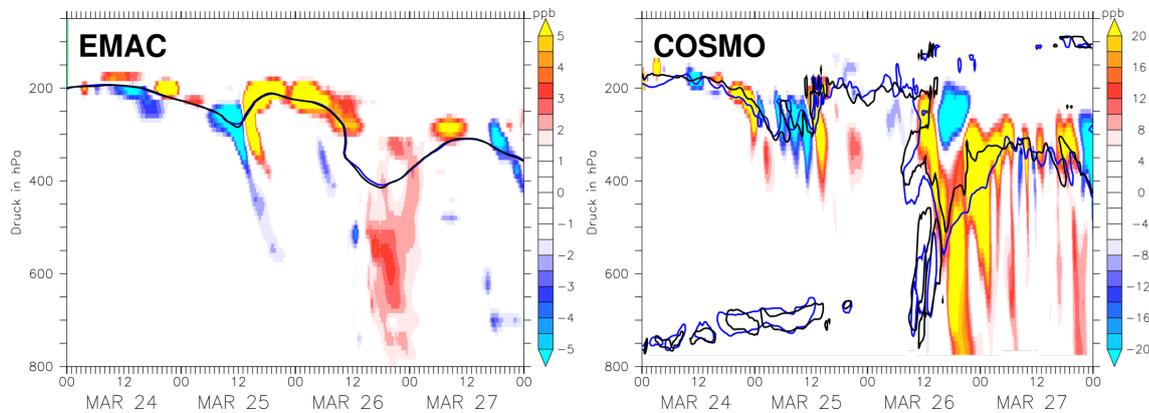
Die bisherigen Analysen der Transportprozesse verwendeten ausschließlich Ergebnisse von Simulationen, die am 24. März, 0 UTC gestartet wurden. Hier wird untersucht, welche Auswirkung eine Veränderung des Startzeitpunktes der Simulation bei gleichzeitiger Initialisierung der Tracer hat. Die Betrachtung zweier zusätzlicher Simulationen mit identischer Modellkonfiguration, die am 23. März, 0 UTC bzw. am 25. März, 0 UTC starten, soll Aufschluss über die Folgen eines veränderten Startzeitpunktes geben. Zur Unterscheidung der künstlichen Tracer erfolgt zusätzlich zur oben eingeführten Kennzeichnung für den Initialisierungszeitpunkt eine Kennzeichnung mit dem Startzeitpunkt der Simulation. Beispielsweise entstammt der Tracer STRATO<sub>i2400, s23</sub> einer am 23. März, 0 UTC gestarteten Simulation und wurde am 24. März, 0 UTC initialisiert.

**STRATO<sub>i2400, s23</sub> und STRATO<sub>i2400, s24</sub>:** In dem Zeitraum von 24 Stunden zwischen dem



**Abbildung 3.21:** Zeitreihen der künstlichen Tracer in Abhängigkeit des Initialisierungszeitpunktes auf der untersten Modellschicht in COSMO und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).

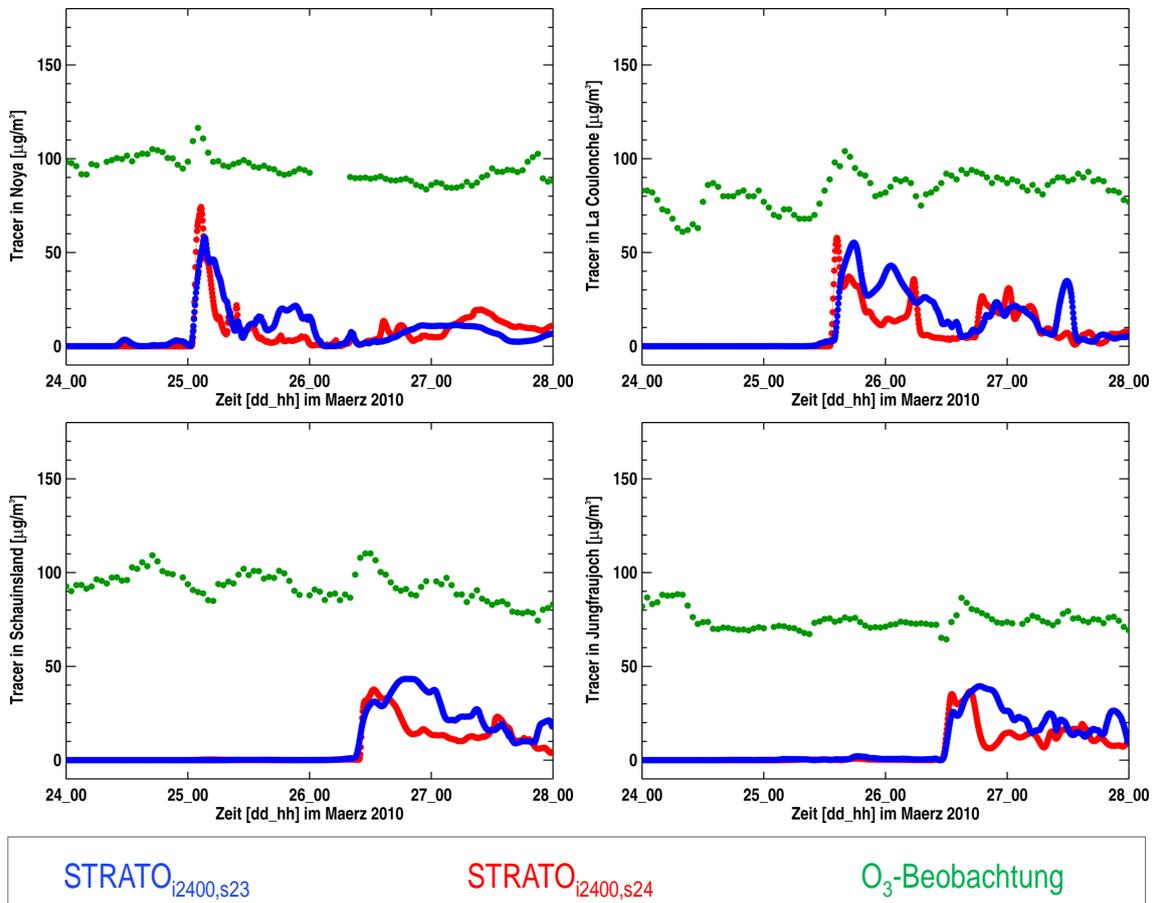
Start der Simulation und der Tracerinitialisierung von STRATO<sub>i2400, s23</sub> entwickelt sich die Dynamik der beiden Modellinstanzen selbstständig. Zum Zeitpunkt der Initialisierung liegen daher unterschiedliche meteorologische Bedingungen für die Simulationen mit unterschiedlichem Startzeitpunkt vor. Abbildung 3.22 zeigt die Zeitreihen der Differenz der künstlichen Tracer, exemplarisch für die Station am Jungfraujoch. Unterschiede in der simulierten Tropopausenhöhe führen zu einer unterschiedlichen Initialisierung der Tracer und damit zu Differenzen in den Mischungsverhältnissen der Tracer in der Tropopausenregion. Mit fortschreitender Simulationszeit werden die stratosphärischen Tracer in die Troposphäre transportiert und die Differenzfelder zeigen schließlich auch in der unteren Troposphäre Signale. Die Unterschiede sind für den gesamten Simulationszeitraum in EMAC deutlich niedriger als in COSMO (Darstellung in Abb. 3.22 mit unterschiedlicher Farbskala). Während des mit der Frontpassage einhergehenden Ozonanstieges am Jungfraujoch (ab 26. März, 12 UTC, Kap. 3.3.1) zeigen die Tracer in beiden Mo-



**Abbildung 3.22:** Unterschiede der Zeitreihen der Tracer am Jungfraujoch in Simulationen mit unterschiedlichem Startzeitpunkt. Dargestellt ist die Differenz der Mischungsverhältnisse der stratosphärischen Tracer ( $\text{STRATO}_{i2400,s23} - \text{STRATO}_{i2400,s24}$ ; farbig, in ppb), sowie die Konturen der dynamischen Tropopause ( $\text{PV} = 2 \text{ pvu}$ ) der am 23. (blau) bzw. 24. März 2010 (schwarz) gestarteten Simulation für EMAC (links) und COSMO (rechts). Abbildung 3.10 zeigt die entsprechenden absoluten Felder der Mischungsverhältnisse des stratosphärischen Tracers mit Simulationsstart am 24. März.

dellinstanzen in der gesamten Troposphäre nahezu keinen Unterschied. Nach Erreichen der Maximalwerte sechs Stunden später allerdings bleibt  $\text{STRATO}_{i2400,s23}$  in COSMO für den Zeitraum von etwa fünf Stunden in der gesamten Troposphäre deutlich erhöht, während  $\text{STRATO}_{i2400,s24}$  wieder abnimmt (Abb. 3.22). In EMAC ist ebenfalls eine Erhöhung des Tracers in der früher gestarteten Simulation zu beobachten. Diese ist aber deutlich niedriger und erreicht nicht die unterste Modellschicht. Vergleicht man diese Ergebnisse mit den Beobachtungen (Abb. 3.23, rechts unten), so stimmen die Ergebnisse der später gestarteten COSMO-Instanz deutlich besser mit den beobachteten Ozonwerten überein. Auch in den Messungen sinken die Ozonwerte am Boden nach Erreichen des Maximums schnell wieder auf den Hintergrundwert ab. Die Unterschiede in EMAC treten nicht auf der untersten Modellschicht auf und können daher nicht mit Beobachtungsdaten verglichen werden (Abb. C.3).

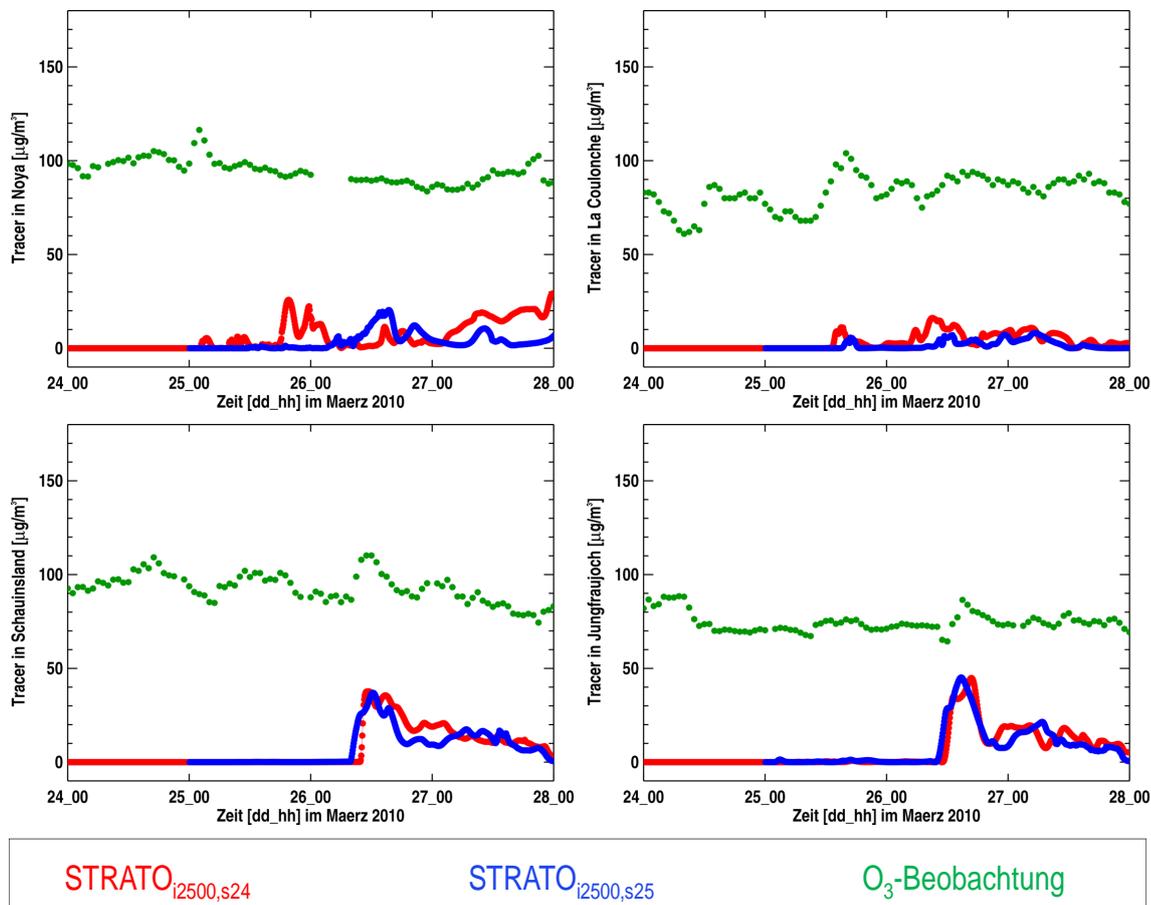
Der Vergleich von  $\text{STRATO}_{i2400,s23}$  und  $\text{STRATO}_{i2400,s24}$  liefert auch bei Betrachtung weiterer Stationen ähnliche Ergebnisse wie für die des Jungfraujoches (Abb. 3.23). Die durch absinkende, stratosphärische Luftmassen verursachten Anstiege von  $\text{STRATO}_{i2400,s23}$  und  $\text{STRATO}_{i2400,s24}$  beginnen zwar an allen Stationen zum gleichen Zeitpunkt, Amplituden und Zeitraum des Anstieges unterscheiden sich allerdings deutlich aufgrund der sich unterschiedlich entwickelnden meteorologischen Situation. An allen Stationen stimmen die Ergebnisse des Tracers in der am 24. März, 0 UTC gestarteten Simulation deutlich besser mit den Verläufen der beobachteten Ozonwerte überein, als in der Simulation mit Start am 23. März, 0 UTC.



**Abbildung 3.23:** Zeitreihen der künstlichen Tracer STRATO<sub>i2400</sub> in Abhängigkeit des Startzeitpunktes auf der untersten Modellschicht in COSMO und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).

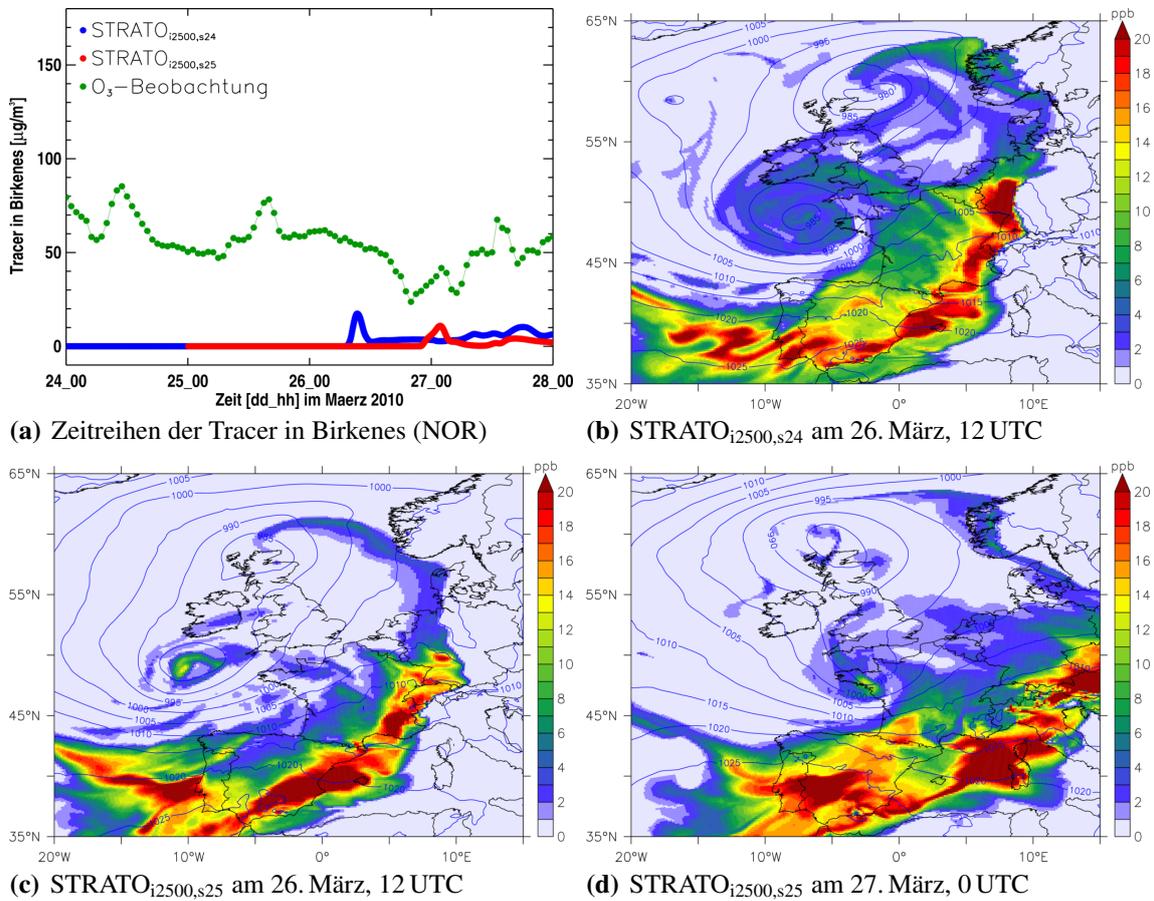
**STRATO<sub>i2500,s24</sub> und STRATO<sub>i2500,s25</sub>:** Bei Initialisierung des stratosphärischen Tracers am 25. März, 0 UTC werden die beobachteten Anstiege an den Stationen Noya und La Coulonche (Abb. 3.24, oben), unabhängig vom Simulationsstartzeitpunkt, nicht erfasst. Da die Frontpassage an diesen Stationen schon am 25. März stattfindet, reicht die Zeit nach der Initialisierung nicht mehr aus, um die Tracer aus der Stratosphäre bis an den Boden zu transportieren.

An den Stationen Schauinsland und Jungfraujoch führt der spätere Simulationsstart zu einer geringen Verbesserung des Tracertransportes (Abb. 3.24, unten). Übereinstimmend mit den Beobachtungsdaten beginnt der Anstieg bei Simulationsstart am 25. März etwa zwei Stunden früher, als bei Simulationstart am 24. März. Die Unterschiede sind aber deutlich geringer, als in dem Vergleich von STRATO<sub>i2400,s23</sub> und STRATO<sub>i2400,s24</sub> (Abb. 3.23). Die meteorologische Situation wird offensichtlich in den Simulationen mit



**Abbildung 3.24:** Zeitreihen des künstlichen Tracers STRATO<sub>i2500</sub> in Abhängigkeit des Startzeitpunktes auf der untersten Modellschicht in COSMO und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).

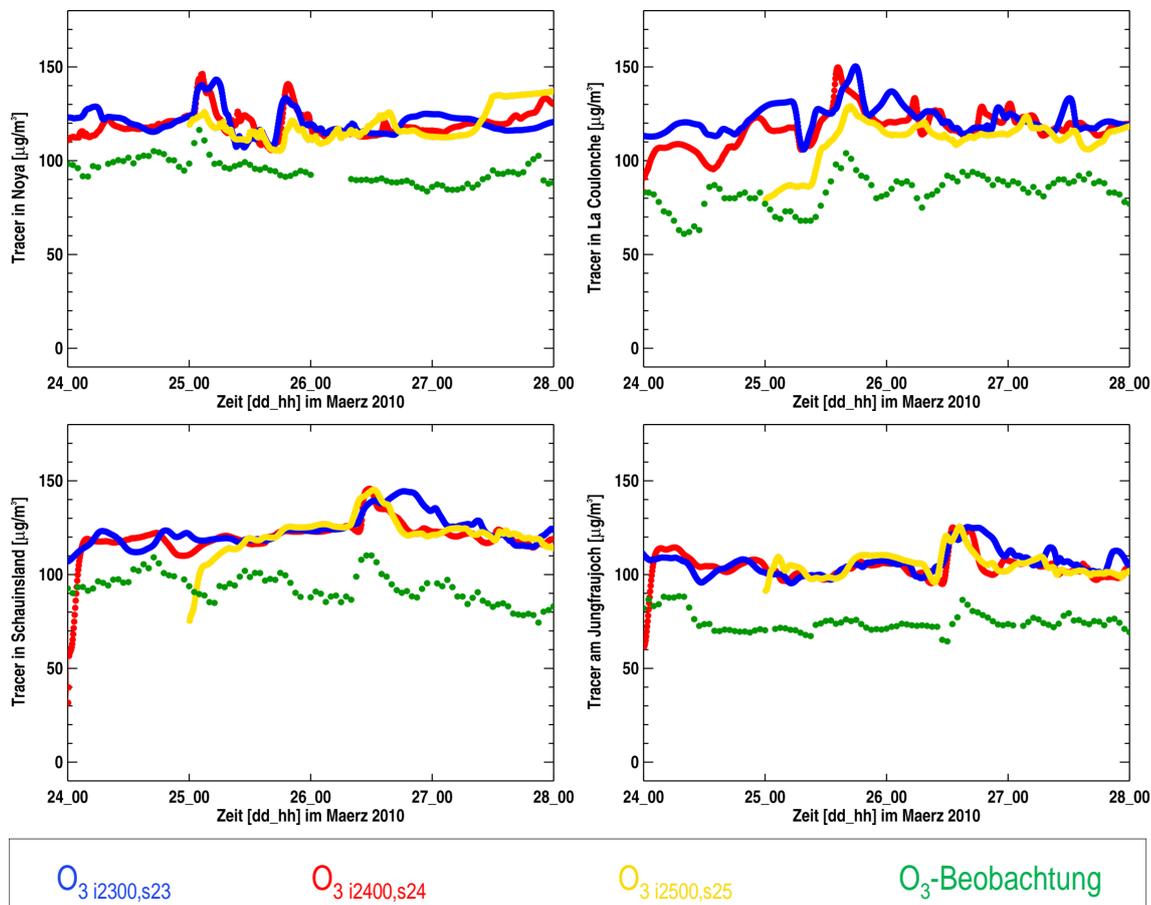
Startzeitpunkt am 24. und 25. März ähnlich gut erfasst, während ein Start am 23. März zu deutlichen Abweichungen in der Repräsentation der Zyklonenentwicklung führt. Südlich von  $50^\circ\text{N}$  bleibt die Lage der Front bei früherem Simulationsstart unverändert. (Abb. 3.25 b und c). Wird die meteorologische Situation, wie in diesem Fall die Frontpassage, durch die früher gestartete Simulation genauso gut erfasst wie in der Simulation mit späterem Startzeitpunkt, hat die Wahl des Simulationsstartzeitpunktes nur geringe Auswirkungen auf den Tracertransport. Abweichungen in der Meteorologie können allerdings große Unterschiede verursachen. Wie in der meteorologischen Evaluation bereits gezeigt (Abb. 3.5), wird die Lage des südlichen Tiefdruckzentrums bei Simulationsstart am 24. März, 0 UTC in COSMO zu weit östlich simuliert. Dies hat zur Folge, dass die okkludierte Front in den nördlichen Regionen zu schnell propagiert. In Norwegen wird daher das Maximum von STRATO<sub>i2500,s24</sub> verglichen mit den Ozonbeobachtungen zwölf Stunden zu früh erreicht. In der am 25. März, 0 UTC gestarteten Simulation wird die



**Abbildung 3.25:** (a): Zeitreihen von STRATO<sub>i2500,s24</sub> (blau), STRATO<sub>i2500,s25</sub> (rot) und Ozonbeobachtung (grün) in Birkenes in COSMO (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ). (b - d): STRATO<sub>i2500,s24</sub> (b) bzw. STRATO<sub>i2500,s25</sub> (c, d) (farbig, in ppb), sowie Konturen des Bodendruckes auf der untersten Modellschicht am 26. März, 12 UTC (b, c) bzw. am 27. März, 0 UTC (d).

Lage des Tiefdruckzentrums verbessert wiedergegeben (Abb. 3.25 c). Die Maxima von Ozonbeobachtung und STRATO<sub>i2500,s25</sub> stimmen zeitlich überein (Abb. 3.25 a).

Falls durch die Änderung des Startzeitpunktes der Simulation die meteorologische Situation in der Umgebung einer Station besser erfasst wird, führt dies zu einem verbesserten Transport der stratosphärischen Tracer durch den der beobachtete Anstieg bei Frontpassage besser erfasst wird.



**Abbildung 3.26:** Zeitreihen der passiven Ozontracer in Simulationen mit unterschiedlichem Start- und Initialisierungszeitpunkt auf der untersten Modellschicht in COSMO und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).

### Variation des Initialisierungszeitpunktes des passiven Ozontracers:

Die passiven Ozontracer werden zum Simulationsstartzeitpunkt aus der Spin-Up-Simulation (Kap. 3.2.1) initialisiert. Da die chemischen Prozesse nicht erst während der laufenden Simulation ausgeschaltet werden können, stimmen für das passive Ozon Initialisierungs- und Simulationsstartzeitpunkt stets überein. Die Zeitreihen des passiven Ozons in Abb. 3.26 unterscheiden sich daher sowohl in Simulationsstart- als auch in Initialisierungszeitpunkt.

Die Analyse der künstlichen, stratosphärischen Tracer hat gezeigt, dass die Änderung des Initialisierungszeitpunktes nur geringen Einfluss auf die Ergebnisse hat. Ausschlaggebend für die Übereinstimmung von Beobachtung und Simulation ist vielmehr der Startzeitpunkt der Simulation. Daher lassen sich auch in den passiven Ozontracern

gleiche Entwicklungen wie bei den künstlichen Tracern in Simulationen mit unterschiedlichen Startzeiten feststellen. Simulationen, die bereits am 23. März gestartet wurden, zeigen die Ozonerhöhung in COSMO über einen zu langen Zeitraum nach Frontpassage und leicht verspätet. Das passive Ozon der am 25. März gestarteten Simulation weist an den Stationen Schauinsland und Jungfraujoch leichte Verbesserungen auf. Die Form des Maximums stimmt hier, verglichen mit der am 24. März gestarteten Simulation, besser mit den Beobachtungen überein. Die Ozonanstiege in Noya und La Coulonche werden allerdings nicht erfasst, da die Zeit zwischen Initialisierung und Frontpassage für den Transport der Tracer aus der Stratosphäre bis zum Boden nicht ausreicht.

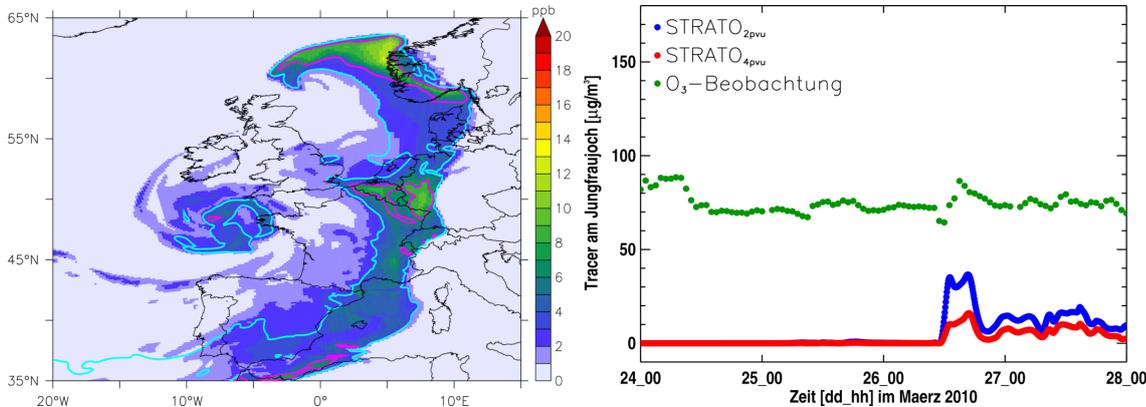
Bezüglich der Variation von Initialisierungs- und Startzeitpunkt lassen sich aus den Sensitivitätsexperimenten folgende Punkte zusammenfassen:

- Der Transport der Tracer in die untere Troposphäre ist nahezu unabhängig vom Initialisierungszeitpunkt der Tracer, solange der Zeitraum zwischen Initialisierung und Beobachtungsereignis ausreichend groß ist.
- Ein späterer Simulationsstart führt zu Verbesserungen im Tracertransport, falls die meteorologische Situation besser erfasst wird.
- In EMAC führt weder eine Änderung des Initialisierungszeitpunktes, noch eine Änderung des Simulationsstartzeitpunktes zu einer deutlichen Veränderung des Tracertransportes in die untere Troposphäre.

### 3.4.3 Variation des Initialisierungskriteriums

In der Literatur werden unterschiedliche PV-Werte zur Definition der dynamischen Tropopause gewählt (Kap. 1.1.1), die zwischen 1,5 und 5 pvu variieren. Für die Referenzsimulation in Kap. 3.3.1 wurde die Tropopause durch die am häufigsten verwendete 2pvu-Fläche definiert. In einer weiteren Sensitivitätsstudie wird hier untersucht, ob stratosphärische Tracer auch bis in die untere Troposphäre transportiert werden, wenn die 4pvu-Fläche als Tropopause gewählt wird.

Abb. 3.27 zeigt links  $\text{STRATO}_{4\text{pvu}}$  am 26. März, 12 UTC auf der untersten Modellschicht. Die Konturen kennzeichnen Bereiche, in denen das Mischungsverhältnis von  $\text{STRATO}_{2\text{pvu}}$  aus der Referenzsimulation am Boden größer 10 ppb (türkis) und größer 20 ppb (pink) ist. Die Bereiche in denen die beiden stratosphärischen Tracer am Boden ihre Maximalwerte erreichen stimmen überein. Demnach werden die Tracer, die mit einer  $\text{PV} > 4$  pvu initialisiert wurden, auf gleiche Weise bis zur untersten Modellschicht transportiert. Lediglich die Beträge der Mischungsverhältnisse unterscheiden sich. Auch in den Zeitreihen der Tracer, in Abb. 3.27 rechts exemplarisch für die Station am Jungfraujoch dargestellt, beginnt der Anstieg von  $\text{STRATO}_{4\text{pvu}}$  (rot) gleichzeitig mit dem von  $\text{STRATO}_{2\text{pvu}}$  (blau). Zwar unterscheiden sich die Massen der beiden Tracer, welche



**Abbildung 3.27:** Links: Mischungsverhältnisse von STRATO<sub>4pvu</sub> (farbig, in ppb) auf der untersten Modellschicht am 26. März, 12 UTC in COSMO. Konturen kennzeichnen STRATO<sub>2pvu</sub> (türkis: 10 ppb, pink: 20 ppb). Rechts: Zeitreihen von STRATO<sub>4pvu</sub> und STRATO<sub>2pvu</sub> in COSMO und Ozonbeobachtungen am Jungfraujoch (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).

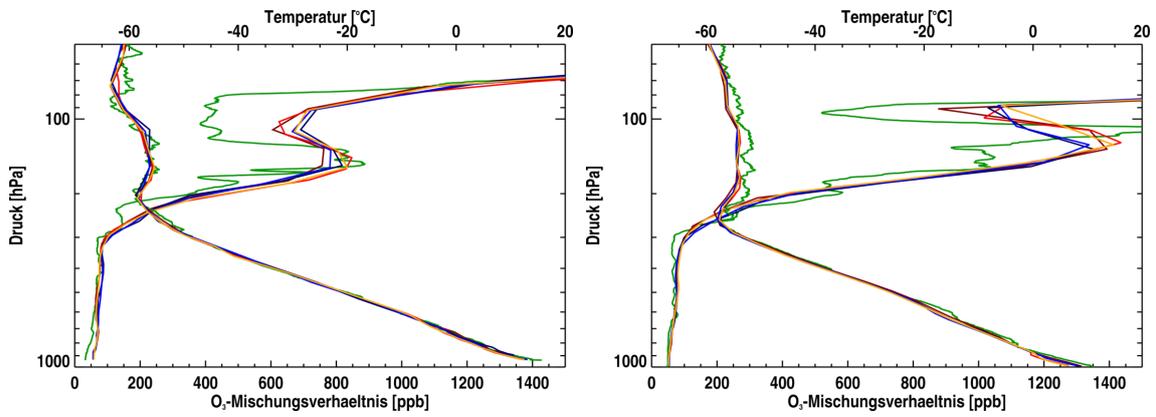
die unterste Modellschicht erreichen, der Transport der Tracer findet aber unabhängig von der Wahl des Tropopausenwertes statt.

### 3.4.4 Variation der vertikalen Modellauflösung

Um für die Trajektorienstudien in Kap. 3.5 eine möglichst gute Auflösung in der UTLS-Region zu erhalten, wird die vertikale Auflösung der Modellinstanzen verändert. In COSMO wird hier auf die 61-Schichten Variante zurückgegriffen (Abb. 3.3). Durch die Erhöhung der Anzahl der Modellschichten von 40 auf 61 wird eine höhere Auflösung in der Tropopausenregion erreicht und das Modellgebiet vertikal von etwa 14 km auf 30 km Höhe gestreckt. Im Rahmen einer weiteren Sensitivitätsstudie wird untersucht, wie groß die Unterschiede zwischen den Instanzen mit verschiedenen Auflösungen sind, ob die höhere Auflösung in der UTLS-Region zu Verbesserungen führt und welchen Einfluss sie auf die Tracerkonzentrationen am Boden hat.

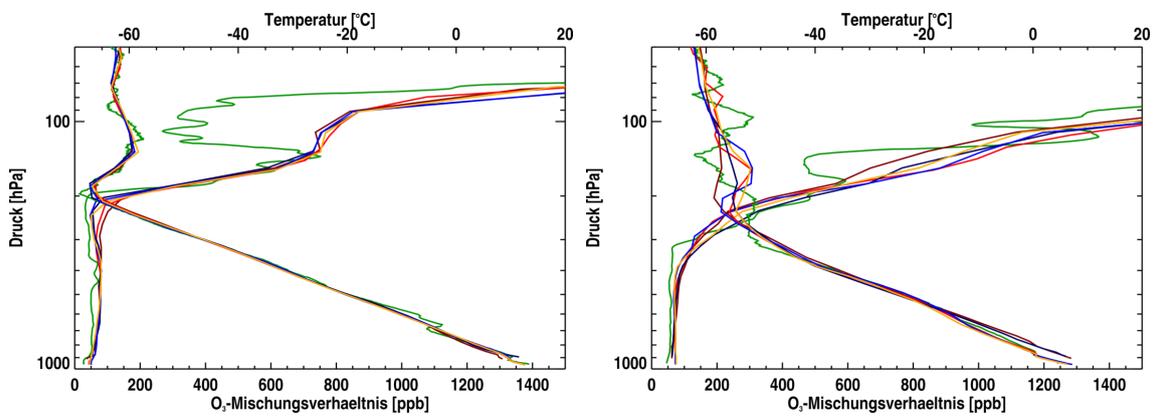
Damit EMAC im MECO(n)-System auch in 30 km Höhe noch Randdaten für COSMO liefern kann, muss für die globale Instanz eine EMAC-Version für die mittlere Atmosphäre (MA) mit der Auflösung T63L47MA, und damit eine niedrigere horizontale Auflösung ( $1,875^\circ$  statt  $1,125^\circ$ ), gewählt werden. Um auszuschließen, dass Unterschiede in den Simulationen aufgrund der unterschiedlichen Auflösung der Antriebsdaten entstehen, wird COSMO mit 40 Vertikalschichten in einer weiteren Simulation mit EMAC in T63L47MA-Konfiguration gekoppelt. In den Abb. 3.28 und 3.29 werden die Ergebnisse der unterschiedlich auflösenden Modellinstanzen miteinander verglichen.

Abbildung 3.28 zeigt vertikale Temperatur- und Ozonprofile aus Simulationen der



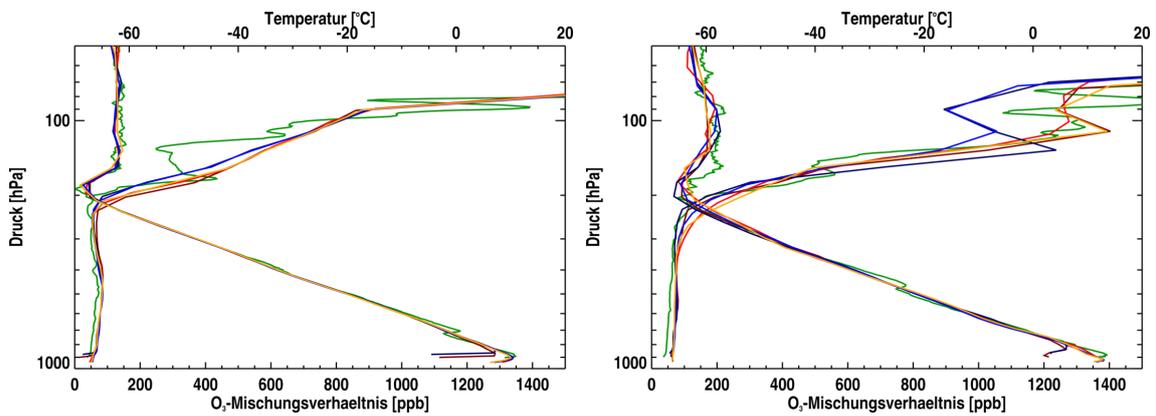
(a) Barajas, 24. März, 11 UTC

(b) Valentia, 24. März, 11 UTC



(c) Payerne, 24. März, 11 UTC

(d) Payerne, 26. März, 11 UTC



(e) Hohenpeißenberg, 24. März, 5 UTC

(f) Hohenpeißenberg, 26. März, 5 UTC

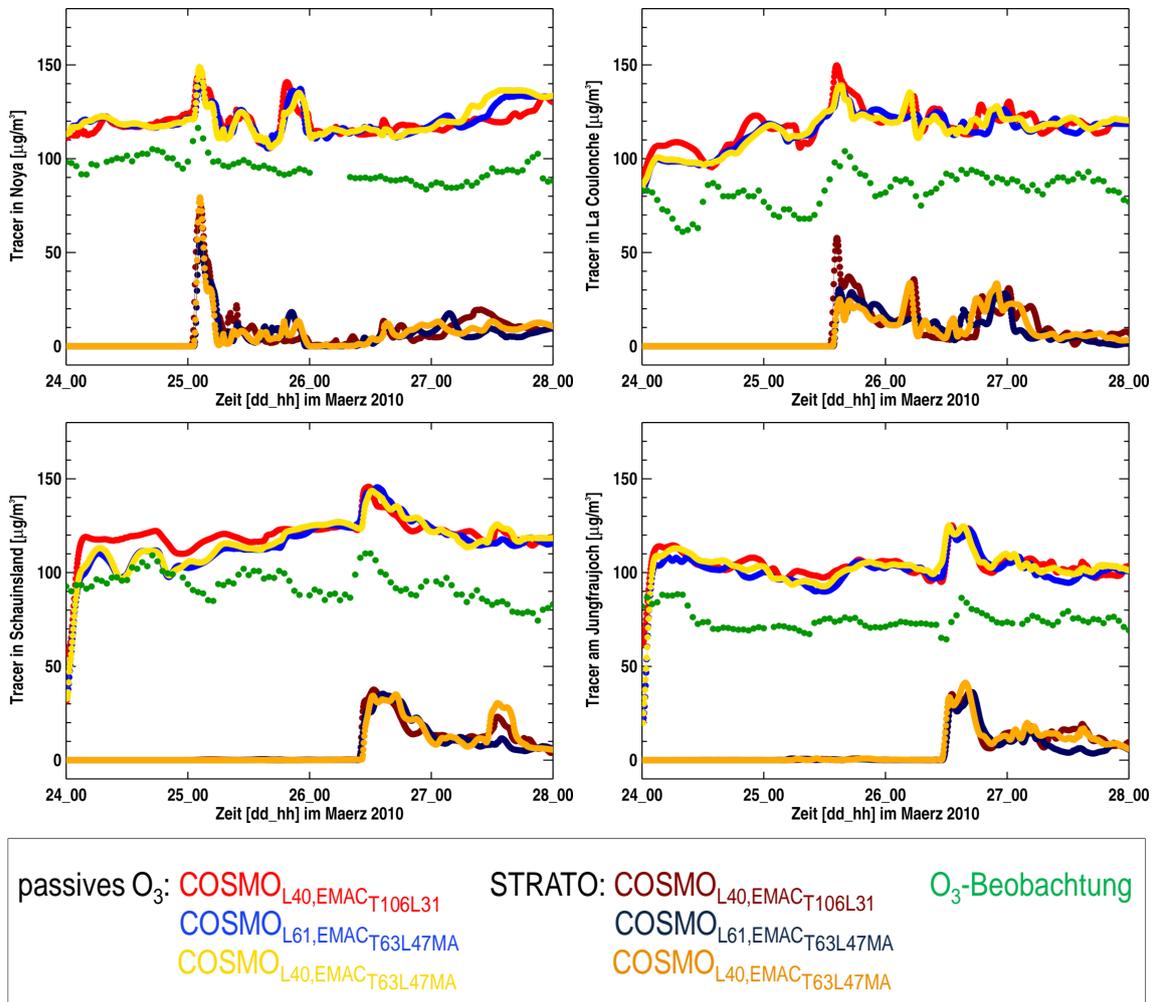


Abbildung 3.28: Vertikalprofile von Ozon (in ppb) und Temperatur (in °C) an verschiedenen Stationen (vgl. Tab. 2.1) für Simulationen mit unterschiedlichen Auflösungen.

Modellinstanzen mit den unterschiedlichen Auflösungen sowie Beobachtungen von Ozonsonden. In der unteren Troposphäre stimmen die Temperaturen in allen COSMO-Instanzen besser mit den Beobachtungen überein, als in den EMAC-Instanzen. Die Unterschiede zwischen den simulierten Temperaturprofilen sind so gering, dass sich nicht bestimmen lässt, mit welcher vertikalen Auflösung die besseren Ergebnisse erreicht werden. Abweichungen im Temperaturprofil zwischen Beobachtung und Simulationen treten lediglich am 26. März, 11 UTC in Payerne auf (Abb. 3.28 d). Hier wird das beobachtete Profil in der unteren Stratosphäre allerdings in keiner Modellinstanz erfasst. Auch in den Ozonprofilen sind die Unterschiede in den Simulationen in der mittleren und unteren Troposphäre minimal. In der Region der thermischen Tropopause wird die Ozonstruktur in Abb. 3.28 (c), (e) und (f) besser von den Instanzen in der ursprünglichen Modellkonfiguration (blau) erfasst, während die Vorteile oberhalb von 150 hPa bei der vertikal höher auflösenden Konfiguration liegen (rot in Abb. 3.28 a, b, f). Obwohl für  $\text{COSMO}_{\text{L40, EMAC}_{\text{T63L47MA}}}$  und  $\text{COSMO}_{\text{L61, EMAC}_{\text{T63L47MA}}}$  identische Initialisierungs- und Randdaten verwendet werden, stimmen die Profile von  $\text{COSMO}_{\text{L40, EMAC}_{\text{T63L47MA}}}$  in Abb. 3.28 (a) und (b) in der UTLS-Region besser mit denen von  $\text{COSMO}_{\text{L40, EMAC}_{\text{T106L31}}}$  als mit  $\text{COSMO}_{\text{L61, EMAC}_{\text{T63L47MA}}}$  überein. Die bereits innerhalb kurzer Zeit nach Simulationsstart auftretenden Unterschiede entstehen in diesem Fall eher aufgrund der Interpolation auf die unterschiedlichen vertikalen Gitter, als durch die sich unterschiedlich entwickelnde Dynamik in COSMO. Im Gegensatz dazu zeigt das Ergebnis von  $\text{COSMO}_{\text{L40, EMAC}_{\text{T63L47MA}}}$  am 26. März, 5 UTC in Hohenpeißenberg (gelb in Abb. 3.28 f), dass die verbesserten Ozonergebnisse in COSMO nicht aufgrund der höheren vertikalen Modellauflösung in dieser Region, sondern vielmehr durch die besseren Randdaten von EMAC entstanden sind.

In Abb. 3.30 ist der stratosphärische Tracer in der EMAC-Simulation mit der Auflösung T63L47MA dargestellt. Ein Vergleich mit den Ergebnissen der Referenzsimulation (Abb. 3.7 g bzw. Abb. 3.10, oben links) zeigt deutliche Unterschiede: Die Propagation der Front in  $\text{EMAC}_{\text{T63L47MA}}$  erfolgt langsamer, sodass die stratosphärischen Tracer hinter der Front etwa sechs Stunden später in die untere Troposphäre gelangen. Zusätzlich geschieht der Abwärtstransport über einen längeren Zeitraum, sodass bei Frontpassage in  $\text{EMAC}_{\text{T63L47MA}}$  geringere Gradienten auftreten.

Trotz der Unterschiede in EMAC sind die Zeitreihen von COSMO (hell) mit unterschiedlichen vertikalen Auflösungen sehr ähnlich. Zwar wird in der Simulation mit höherer vertikaler Auflösung (Abb. 3.29, blau) das Maximum an der Station La Coulonche leicht unterschätzt und an der Station Schauinsland treten die erhöhten Werte über einen etwas zu langen Zeitraum auf, der sprunghafte Anstieg in den Zeitreihen wird aber an allen Stationen zum richtigen Zeitpunkt erfasst. Verglichen mit der Simulation mit der ursprünglichen Auflösung (rot) sind die größten Unterschiede am ersten Simulationstag zu erkennen. Die Ergebnisse der durch die gröber auflösende EMAC-Instanz angetriebenen COSMO-Instanzen (blau, gelb) stimmen hier trotz der unterschiedlichen vertikalen

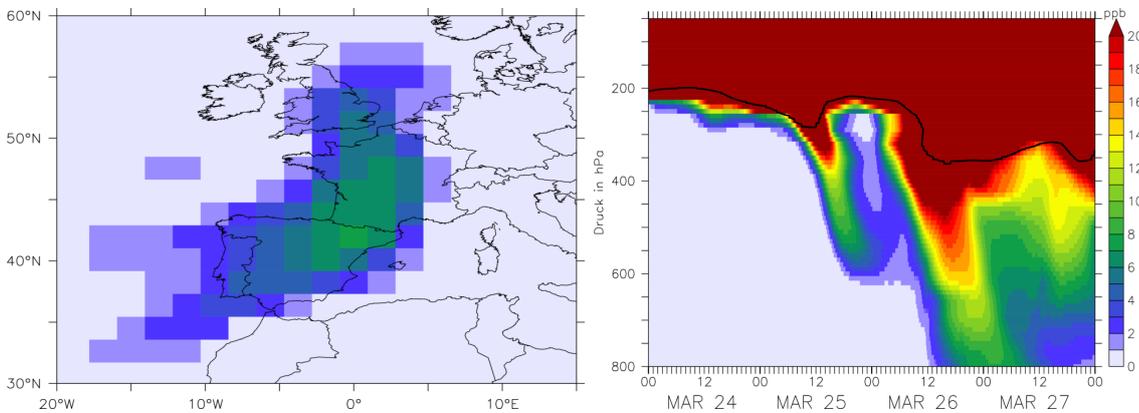


**Abbildung 3.29:** Zeitreihen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) der passiven Ozontracer (hell) und der künstlichen, stratosphärischen Tracer (dunkel) in Abhängigkeit der vertikalen Auflösung in COSMO und Ozonbeobachtungen (grün).

Auflösung überein. Die Unterschiede zu den Ergebnissen von COSMO<sub>L40,EMAC<sub>T106L31</sub></sub> (rot), deren Verlauf besser mit den Beobachtungen übereinstimmt, treten somit aufgrund der unterschiedlichen Initialisierungsdaten auf.

Insgesamt sind die Differenzen aufgrund der unterschiedlich auflösenden Modellinstanzen sehr gering. Durch den Vergleich mit Beobachtungsdaten lassen sich die Abweichungen zwischen den Modellinstanzen wie folgt einordnen:

- Die Temperatur wird, unabhängig von der vertikalen Modellauflösung, in der unteren Troposphäre in COSMO besser erfasst als in EMAC.



**Abbildung 3.30:** Mischungsverhältnisse des stratosphärischen Tracers (in ppb) in EMAC<sub>T63L47MA</sub> auf der untersten Modellschicht (links) und in Zeitreihen am Jungfraujoch (rechts). Die schwarze Linie kennzeichnet die dynamische Tropopause (PV = 2 pvu).

- In den Ozonprofilen zeigen sich Vorteile der ursprünglichen Modellauflösungen (T106L31 für EMAC, L40 für COSMO) auf Tropopausenniveau.
- In der unteren Stratosphäre stimmen die Ergebnisse mit der vertikal höher auflösenden Modellkonfiguration besser mit den gemessenen Profilen überein.
- Abweichungen zwischen den Ozonzeitreihen am Boden treten am ersten Simulationstag aufgrund der unterschiedlichen Initialisierungsdaten auf.

Die Experimente in diesem Kapitel sollen Aufschluss über die Sensitivität der Simulationsergebnisse bezüglich der Variation von Simulationsstart, Initialisierungszeitpunkt und -kriterien sowie der vertikalen Modellauflösung geben. Vergleiche der Simulationen in denen die Tracer zu unterschiedlichen Zeitpunkten initialisiert werden zeigen, dass der Transport der Tracer in die untere Troposphäre unabhängig von dem Initialisierungszeitpunkt der künstlichen Tracer ist. Dabei muss allerdings der Zeitraum zwischen Freisetzung der Tracer und Beobachtungsereignis groß genug sein, um den Tracertransport aus der Stratosphäre bis zum Boden zu ermöglichen. In Hofmann et al. (2012) wurde bereits gezeigt, dass die mit der Entwicklung des Tiefdruckgebietes verbundene Frontpassage deutliche Abweichungen von den Beobachtungen aufweist, falls der Startzeitpunkt der Simulation mehr als zwei Tage vom Beobachtungsereignis entfernt liegt. Dies trifft ebenfalls für den Tracertransport zu, sodass ein späterer Simulationsstart zu einem verbesserten Tracertransport aus der Stratosphäre in die Troposphäre führt. Wird als Initialisierungskriterium des stratosphärischen Tracers die 4pvu-Fläche statt der 2pvu-Fläche als dynamische Tropopause gewählt, so bleiben die Strukturen der Tracer am Boden unverändert. Zwar gelangt weniger Masse des Tracers in die untere Troposphäre, STT-Prozesse und Regionen bleiben aber gleich. Auch die

Variation der vertikalen Modellauflösung hat nur geringfügige Auswirkungen auf die Repräsentation des Tracertransportes: Lediglich die unterschiedlichen Initialisierungsdaten zu Simulationsbeginn führen später zu den Unterschieden in der Verteilung der Tracer.

## 3.5 Austauschprozesse an der Tropopausenfalte

In diesem Kapitel werden mit Hilfe von Trajektorienstudien bevorzugte Austauschregionen in der Umgebung von Tropopausenfalten bestimmt. Abschnitt 3.5.1 widmet sich der Analyse von STT- und TST-Trajektorien im gesamten Modellgebiet, während in Abschnitt 3.5.2 der Austausch in unmittelbarer Umgebung der Tropopausenfalte untersucht wird.

Die Evaluation in Kap. 3.3.1 hat gezeigt, dass es lediglich mit der COSMO-Instanz des Modellsystems möglich ist, das Absinken der stratosphärischen Luftmassen übereinstimmend mit den Beobachtungen zu simulieren. Auch die Trajektorienanalyse zu der Fallstudie in Kap. 3.3.2 führte zu der Erkenntnis, dass Austauschprozesse in EMAC aufgrund der groben Auflösung nicht im Detail analysierbar sind. Die Trajektorienberechnungen mit LAGRANTO (Kap. 2.3.2) werden in diesem Abschnitt daher ausschließlich in der COSMO-Instanz durchgeführt.

Um in der unteren Stratosphäre und der obereren Troposphäre (UTLS-Region) eine möglichst gute Auflösung zu erhalten, wird für COSMO das vertikale Gitter mit 61 Schichten verwendet (Abb. 3.3 und Kap. 3.4.4). Wie in der Sensitivitätsstudie in Kap. 3.4 gezeigt, wird der Tracertransport auch in dieser Modellauflösung, verglichen mit den Beobachtungen, gut erfasst.

Um die Lagrangesche Analyse der STE-Prozesse auch am 24. März zu ermöglichen, wird die fünftägige Simulation bereits am 23. März gestartet. In Kap. 3.4 wurde in einem Sensitivitätsexperiment gezeigt, dass die Ozonerhöhungen am Boden bei früherem Simulationsstart nicht mehr räumlich und zeitlich korrekt erfasst werden. Ursache dafür sind aber nicht veränderte Tracertransportprozesse, sondern eine leichte Verschiebung des Tiefdruckzentrums (Abb. 3.25). Die Analyse der STE-Prozesse ist daher prinzipiell auch in der Simulation mit früherem Startzeitpunkt möglich.

Die Simulation enthält keine Chemieberechnung, das hier betrachtete Ozon entspricht dem in Kap. 3.2.2 eingeführten, passiven Ozon. Dieses passive Ozon unterscheidet sich während der kurzen Simulationsperiode nur in der unteren Troposphäre von dem chemisch aktivem Ozon (Abb. 3.13). Diese Vereinfachung hat daher keinen Einfluss auf die Analyse der STE-Ereignisse.

### 3.5.1 Bevorzugte Austauschregionen und Mischungszeitskalen

In den meisten Studien wird eine Mindestaufenthaltszeit der Trajektorien in der Troposphäre bzw. der Stratosphäre vorausgesetzt, bevor die Trajektorien als STT- bzw. TST-Trajektorien ausgewählt werden. Diese liegt in der Literatur zwischen acht Stunden und zehn Tagen (Kap. 1.4). Aufgrund der kurzen Simulationsperiode in der regionalen COSMO-Instanz werden hier keine Mindestaufenthaltszeiten gefordert. Daher werden im Folgenden sowohl Trajektorien analysiert, die sich nur kurzzeitig auf der anderen

Tropopausenseite aufhalten als auch solche, die länger als einen Tag dort bleiben. Mit Hilfe der Tracer lassen sich zusätzlich Aussagen bezüglich der unterschiedlichen Mischungszeitskalen entlang dieser Trajektorien machen.

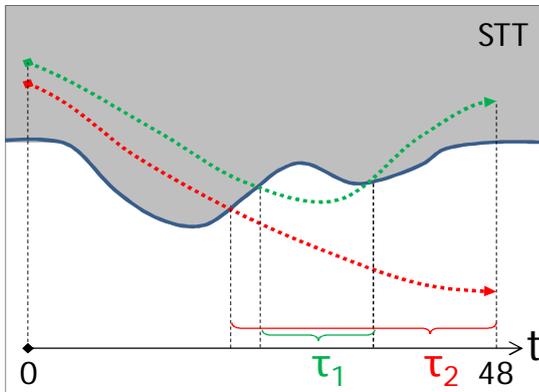
### STT-Regionen

In diesem Abschnitt werden bevorzugte Regionen für STT-Prozesse bestimmt. Dazu erfolgt die Initialisierung der Trajektorien in folgenden Schritten:

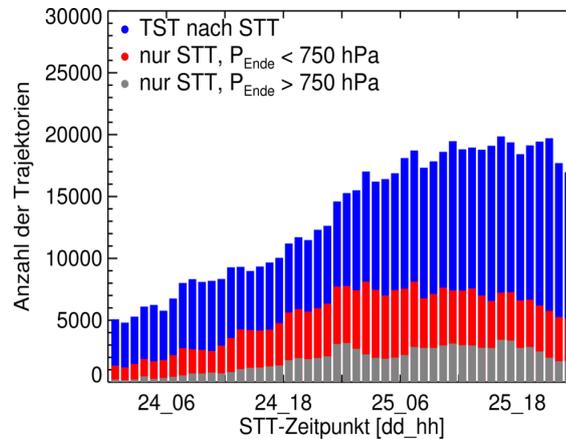
1. Initialisierung von 18-stündigen Rückwärtstrajektorien in folgendem Gebiet:  
Höhe: 2 - 15 km, Breite: 30°N - 60°N, Länge: 45°W-15°E.
2. Selektion der Rückwärtstrajektorien, die in der Troposphäre ( $PV_{\text{start}} < 1,5$  pvu) starten und in der Stratosphäre ( $PV_{\text{Ende}} > 2,5$  pvu) im Modellgebiet enden.
3. Berechnung von 48-stündigen Vorwärtstrajektorien, ausgehend von den Endpunkten der selektierten Rückwärtstrajektorien.
4. Selektion aller Vorwärtstrajektorien, die zum STT-Zeitpunkt stratosphärische Eigenschaften haben ( $\text{STRATO}_{\text{kont, STT}} > 80$  ppb), sich vor dem STT mindestens sechs Stunden in der Stratosphäre aufgehalten haben und im Modellgebiet enden.

Dabei wird als STT-Zeitpunkt die Stunde bezeichnet, zu der entlang der Vorwärtstrajektorie die PV zum ersten Mal einen Wert  $\leq 2$  pvu annimmt. Bleiben die PV-Werte bis zum Endpunkt der Vorwärtstrajektorie  $< 2$  pvu, ergibt sich die Aufenthaltszeit in der Troposphäre aus der Differenz zwischen 48 Stunden und der Stunde des STT-Zeitpunktes (Abb. 3.31:  $\tau_2$  für rote Trajektorie). Steigt die PV entlang der Trajektorie zu einer bestimmten Stunde erneut auf Werte  $> 2$  pvu, wird dieser Zeitpunkt als TST-Punkt bezeichnet. Die Aufenthaltszeit ergibt sich aus der Differenz zwischen TST- und STT-Zeitpunkt (Abb. 3.31:  $\tau_1$  für grüne Trajektorie).

Durch die Selektion der Rückwärtstrajektorien im zweiten Schritt (vgl. Aufzählung) werden Trajektorien ausgeschlossen, die zwischen STT-Zeitpunkt und Stunde 18 wieder stratosphärisch werden. Die im vierten Schritt geforderte anfängliche Mindestaufenthaltszeit in der Stratosphäre führt zum Ausschluss derjenigen Luftpakete, die sich vor dem STT nur kurzzeitig in der Stratosphäre befinden. Zum STT-Zeitpunkt werden zusätzlich stratosphärische Eigenschaften des Luftpaketes vorausgesetzt, um sicher zu gehen, dass die Trajektorien tatsächlich aus der Stratosphäre und nicht aus einer troposphärischen, z.B. diabatisch produzierten, PV-Anomalie stammen. Das Kriterium  $\text{STRATO}_{\text{kont, STT}} > 80$  ppb bezieht sich dabei auf einen zusätzlichen stratosphärischen Tracer, der nach denselben Initialisierungskriterien wie STRATO (Tab. 3.2), allerdings zu jedem Zeitschritt, kontinuierlich initialisiert wird. Obwohl der Tracer in der Stratosphäre jeden Zeitschritt



**Abbildung 3.31:** Schematische Darstellung zur Bestimmung der Aufenthaltszeit in der Troposphäre. Dargestellt sind Stratosphäre (graue Fläche), Troposphäre (weiße Fläche), dynamische Tropopause (blaue Linie) sowie exemplarische STT-Trajektorien, deren Endpunkt in der Troposphäre (rot) bzw. in der Stratosphäre (grün) liegt. Weitere Beschreibung im Text.

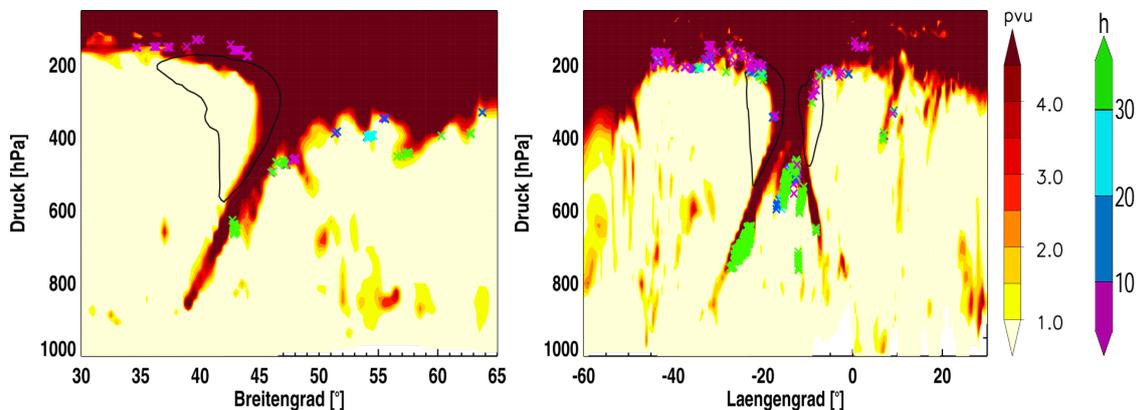


**Abbildung 3.32:** Anzahl der Trajektorien in Abhängigkeit des STT-Zeitpunktes. Die Farben kennzeichnen Trajektorien mit TST nach STT (blau), Trajektorien ohne TST nach STT die auf Druckniveaus  $< 750$  hPa enden (rot) und solche, die auf Druckniveaus  $> 750$  hPa enden (grau).

auf ein Mischungsverhältnis von 100 ppb gesetzt wird, wird als Kriterium ein Mischungsverhältnis von 80 ppb vorausgesetzt, da nach Definition des STT-Punktes (PV entlang der Trajektorie erstmals  $\leq 2$  pvu) das Initialisierungskriterium für STRATO<sub>kont</sub> ( $PV \geq 2$ ) am STT-Punkt bereits nicht mehr erfüllt wäre. Außerdem werden auf diese Weise ebenfalls Regionen einbezogen, in denen sich stratosphärische Luftmassen auf höheren Druckniveaus oder bei größeren Feuchten befinden.

Abbildung 3.33 zeigt exemplarisch die STT-Punkte entlang vertikaler Querschnitte zu verschiedenen Zeitpunkten. STT-Ereignisse treten demnach entlang der gesamten dynamischen Tropopause auf. Betrachtet man allerdings die Aufenthaltszeit, welche die Trajektorien nach dem STT in der Troposphäre haben (Farbe der Kreuze in Abb. 3.33), so sind diese auf den niedrigeren Druckniveaus meistens gering. Luftpakete, die entlang der Tropopausenfalte in die Troposphäre eintreten, bleiben dagegen meist länger als 30 Stunden troposphärisch. Im Folgenden wird untersucht, ob diese Einteilung für alle Zeitpunkte und Regionen im Modellgebiet zutrifft.

Abbildung 3.32 gibt einen Überblick über alle Trajektorien, deren STT-Punkt am 24. oder 25. März liegt. Die Zahl der STT-Ereignisse variiert im Laufe der zwei Tage zwischen 5000 und 20000 STT-Ereignissen pro Stunde. Dabei lässt sich ein kontinuierlicher Anstieg innerhalb der ersten 30 Stunden beobachten. Anschließend bleibt die



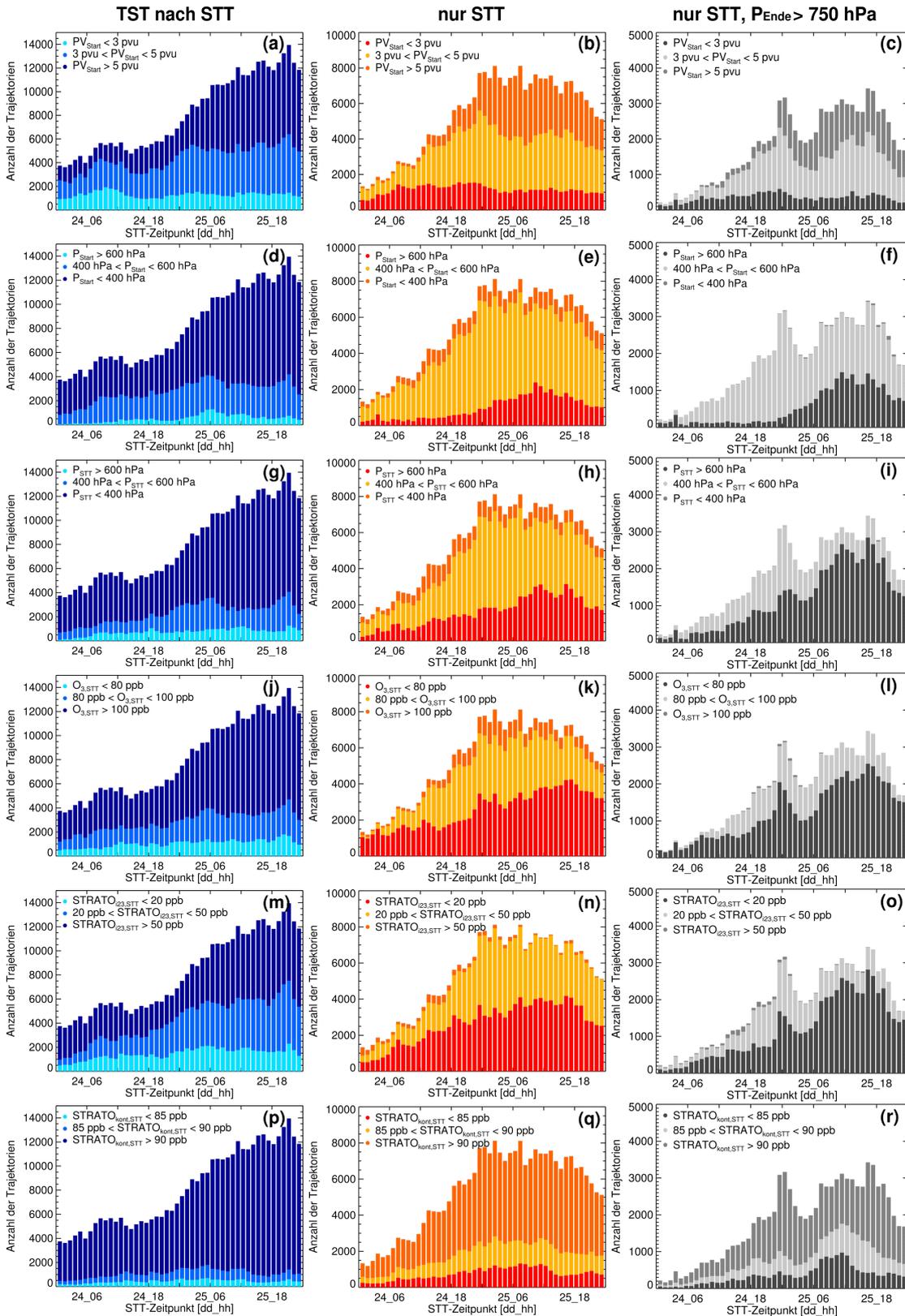
**Abbildung 3.33:** Vertikalschnitte durch das Modellgebiet (links: 30°E, 24. März, 12 UTC, rechts: 40°N, 25. März, 12 UTC). Dargestellt ist die PV (farbig, in pvu) sowie das Geschwindigkeitsmaximum des Strahlstroms (Wind = 50 m/s, Kontur). Kreuze kennzeichnen die STT-Punkte der Trajektorien, ihre Farbe die Aufenthaltszeit in der Troposphäre (in h).

Gesamtzahl der STT-Ereignisse nahezu konstant, bevor sie in den letzten Stunden wieder abnimmt. Diese Entwicklung der Anzahl der STT-Ereignisse stimmt mit dem Verlauf des minimalen Bodendrucks im Tiefdruckzentrum überein (Abb. 3.5). Je intensiver das Tiefdruckgebiet bzw. je ausgeprägter die Tropopausenfalte, desto mehr STT-Ereignisse finden statt.

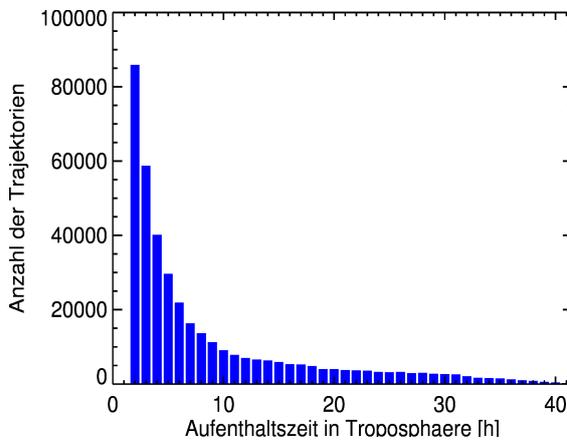
Aufgrund der oben beschriebenen Initialisierungsschritte für die Trajektorien, finden alle STT-Ereignisse zwischen Stunde 7 und Stunde 17 der 48h-Trajektorien statt. 60% der Trajektorien, die während dieser 10 Stunden in die Troposphäre eintreten, enden zwei Tage später erneut in der Stratosphäre (Abb. 3.32, blauer Bereich) und befinden sich demnach nur eine begrenzte Zeit in der Troposphäre. Im Folgenden werden STT-Ereignisse mit und ohne TST nach dem STT getrennt betrachtet.

### Trajektorien, die nach dem STT wieder stratosphärisch werden

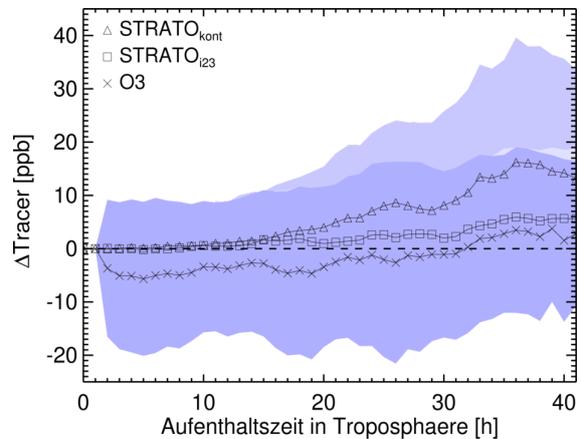
Die Anzahl der Trajektorien, die sich nur kurze Zeit in der Troposphäre aufhalten, steigt kontinuierlich über die zwei Tage an (Abb. 3.34, linke Spalte). Sowohl Start- als auch STT-Punkte befinden sich bei dem Großteil der Trajektorien auf niedrigen Druckniveaus < 400 hPa (Abb. 3.34 d, g). Mehr als die Hälfte aller Trajektorien, deren STT-Punkt am 25. März liegt, starten bei stratosphärische PV-Werten > 5 pvu (Abb. 3.34 a). Die meisten dieser Luftpakete bleiben dabei vor der Rückkehr in die Stratosphäre nur wenige Stunden in der Troposphäre, 61% aller betrachteten Luftpakete kehren innerhalb der ersten sechs Stunden bereits wieder in die Stratosphäre zurück (Abb. 3.35). Aufenthaltszeiten von einer Stunde wurden bereits bei der Auswahl der Trajektorien ausgeschlossen, würden den Anteil der nur kurzzeitig in die Stratosphäre eintretenden Trajektorien aber nochmals erhöhen.



**Abbildung 3.34:** Trajektorien in Abhängigkeit des STT-Zeitpunktes. Sie sind unterteilt in Trajektorien mit TST nach STT (blau), Trajektorien ohne TST (rot) und solche ohne TST, die auf Druckniveaus > 750 hPa enden (grau). Analysiert werden PV (PV<sub>Start</sub> in pvu, a - c) und Druck (P<sub>Start</sub> in hPa, d - f) zum Startzeitpunkt der Trajektorien, sowie Druck (P<sub>STT</sub> in hPa, g - i), Mischungsverhältnisse des passiven Ozontracers (O<sub>3,STT</sub> in ppb, j - l) und der künstlichen Tracer (STRATO<sub>23,STT</sub> in ppb, m - o und STRATO<sub>kont,STT</sub> in ppb, p - r) zum STT-Zeitpunkt.



**Abbildung 3.35:** Anzahl der Trajektorien mit TST nach STT in Abhängigkeit ihrer Aufenthaltszeit in der Troposphäre.



**Abbildung 3.36:** Änderung der Mischungsverhältnisse von  $\text{STRATO}_{\text{kont}}$  (Dreiecke),  $\text{STRATO}_{i23}$  (Quadrate) und Ozon (Kreuze) zwischen dem STT-Zeitpunkt und dem TST-Zeitpunkt ( $\Delta\text{Tracer} = \text{Tracer}_{\text{STT}} - \text{Tracer}_{\text{TST}}$ , in ppb).

Abbildung 3.36 zeigt die Änderung der Mischungsverhältnisse von  $\text{STRATO}_{\text{kont}}$ ,  $\text{STRATO}_{i23}$  und Ozon zwischen STT- und TST-Zeitpunkt. Bei  $\text{STRATO}_{i23}$  handelt es sich um einen künstlichen, stratosphärischen Tracer, der zu Simulationsbeginn am 23. März einmalig nach den Kriterien aus Tab. 3.2 initialisiert wurde.

Innerhalb der ersten zehn Stunden, in denen 74% der Trajektorien in die Stratosphäre zurückkehren, lässt sich keine Änderung der künstlichen Tracer entlang der Trajektorien feststellen,  $\Delta\text{STRATO}$  bleibt Null (Abb. 3.36). Die PV dieser Luftpakete nimmt zwar auf Werte  $< 2$  pvu ab, die Tracereigenschaften ändern sich allerdings nicht. Die Luftpakete kehren kurze Zeit später in die Stratosphäre zurück, ohne dass sie troposphärische Eigenschaften angenommen haben.

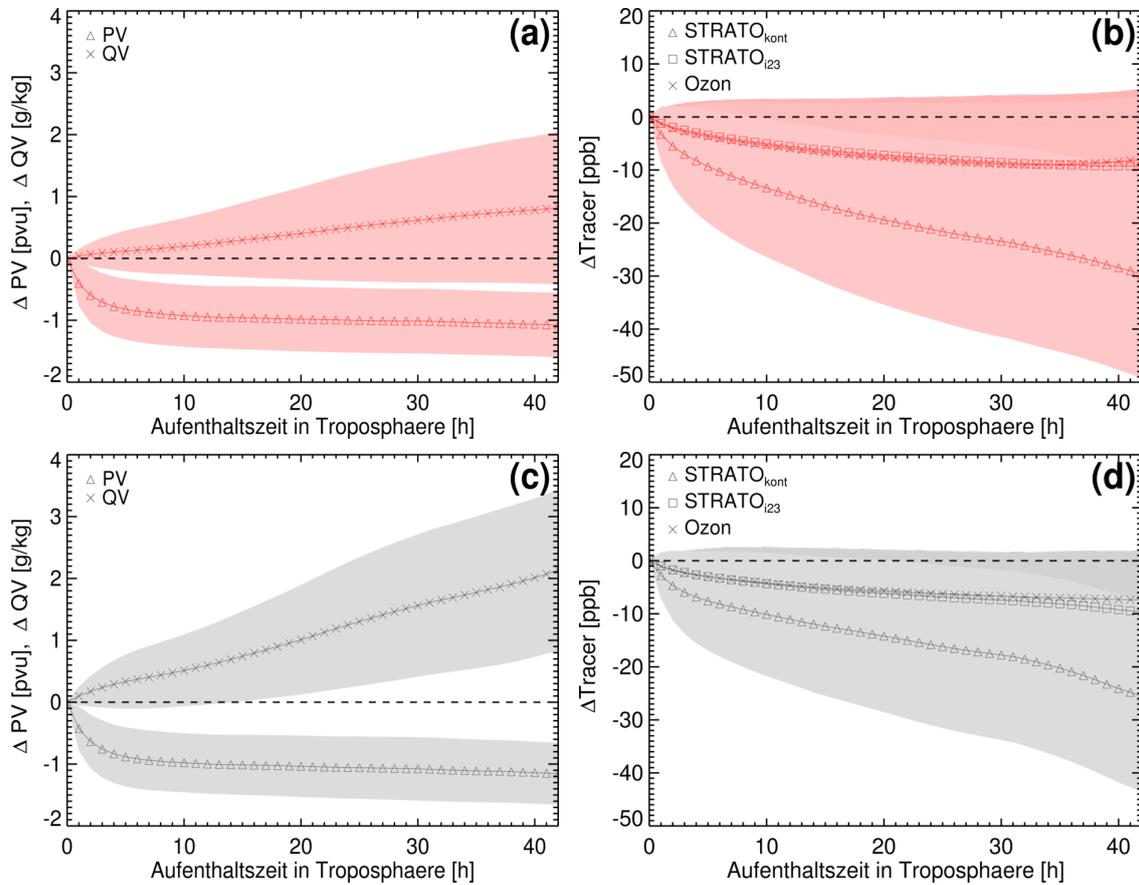
Vor allem in dem Bereich von Tropopausenanomalien stimmen die dynamische und chemische Tropopause nicht überein (Kap. 1.1.1 und Abb. 3.10), die Ozonwerte sind demnach nicht gleichmäßig auf der 2pvu-Fläche verteilt. Es ist daher möglich, dass der STT-Punkt bei niedrigen bzw. der TST-Punkt bei hohen Ozonwerten liegt. Wie mit den künstlichen Tracern gezeigt wurde, findet während der kurzen Aufenthaltszeit in der Troposphäre keine Mischung statt, die Luftpakete behalten ihren Ozonwert nach dem STT, ihr troposphärischer Aufenthalt endet nach dem TST in einem stratosphärischen Bereich mit höheren Ozonwerten. Diese Trajektorien weisen daher am TST-Punkt höhere Ozonwerte auf, als am STT-Punkt,  $\Delta\text{Ozon}$  wird negativ (Abb. 3.36).

Für die restlichen 26% der Trajektorien, die eine troposphärische Aufenthaltszeit

von mehr als zehn Stunden haben bevor sie in die Stratosphäre zurückkehren, steigt die Änderung der Mischungsverhältnisse mit der Aufenthaltszeit an. Während sich die Luftpakete in der Troposphäre befinden, gelangen sie demnach in Regionen von Luftmassen mit troposphärischen Eigenschaften. Je länger die Luftpakete vor dem TST in der Troposphäre bleiben, desto mehr troposphärische Eigenschaften bringen sie schließlich mit zurück in die Stratosphäre. So beträgt beispielsweise die Abnahme des Mischungsverhältnisses des kontinuierlich initialisierten, stratosphärischen Tracers nach 35 Stunden durchschnittlich 15 ppb. Hätten die Luftpakete zum STT-Zeitpunkt vollständige stratosphärische Eigenschaften, würden sie innerhalb der 35 Stunden Aufenthaltszeit in der Troposphäre demnach bis zu 15% ihrer stratosphärischen Tracereigenschaften in die Troposphäre eintragen. Die Änderungen von Ozon und STRATO<sub>123</sub>, die einmalig zu Simulationsbeginn initialisiert wurden und daher in der Umgebung der Tropopause bereits vermischt sind, beträgt maximal 7 ppb. Dies zeigt, dass die Luftmassen, die sich nahe der Tropopause befinden, keine vollständigen stratosphärischen Eigenschaften haben. Das Mischungsverhältnis des stratosphärischen Tracers, der zu Simulationsbeginn mit 100 ppb initialisiert wurde, beträgt beispielsweise zum STT-Zeitpunkt bei 52% der Trajektorien weniger als 50 ppb (Abb. 3.34 m). Der Unterschied zwischen dem Mischungsverhältnis am STT-Punkt und in der Troposphäre ist daher gering und ändert sich während des Aufenthaltes in der Troposphäre weniger als bei dem kontinuierlichen Tracer. Dieser Punkt wird bei der Analyse der Trajektorien, die nach dem STT troposphärisch bleiben, nochmals diskutiert.

Die Ergebnisse der Analyse der STT-Trajektorien, die nach dem STT wieder stratosphärisch werden, lässt sich wie folgt zusammenfassen:

- 61% aller betrachteten Luftpakete kehren innerhalb der ersten sechs Stunden wieder in die Stratosphäre zurück (Abb. 3.35). Dabei wurden Aufenthaltszeiten von einer Stunde bereits bei der Auswahl der Trajektorien ausgeschlossen.
- Befinden sich Trajektorien weniger als zehn Stunden in der Troposphäre, ändern sich ihre Tracereigenschaften nicht, es findet also keine Mischung mit der troposphärischen Luft statt. Die troposphärische Chemie wird durch diese Trajektorien nicht beeinflusst.
- Haben die Luftmassen dagegen eine troposphärische Aufenthaltszeit, die größer als zehn Stunden ist, dann findet Mischung statt. Die Chemie der Troposphäre wird durch den Eintrag stratosphärischer Eigenschaften beeinflusst.
- Bei einer troposphärischen Aufenthaltszeit von 35 Stunden verlieren die Luftmassen durchschnittlich 15% ihrer ursprünglichen Eigenschaften an die Troposphäre (Abb. 3.36).



**Abbildung 3.37:** Änderung der Variablen entlang der Trajektorien in Abhängigkeit ihrer Aufenthaltszeit in der Troposphäre. PV (in pvu), spezifische Feuchte (QV, in g/kg) (a, c) STRATO<sub>kont</sub>, STRATO<sub>i23</sub> und Ozon (in ppb) (b, d) für alle Trajektorien, die troposphärisch enden (a, b) und solche, die unterhalb von 750 hPa enden (c, d). Aufgetragen ist jeweils die über alle Startzeitpunkte zwischen dem 23. März, 6 UTC und dem 26. März, 0 UTC gemittelte Differenz zwischen dem Wert der Variablen zum STT-Zeitpunkt und nach entsprechender Aufenthaltszeit. Die farbigen Flächen entsprechen der Standardabweichung.

### Trajektorien, die nach dem STT troposphärisch bleiben

Betrachtet man alle Trajektorien, die bis zu ihrem Endpunkt nach zwei Tagen troposphärisch bleiben (Abb. 3.32, rote und graue Bereiche und Abb. 3.34, mittlere Spalte), so finden die häufigsten STT-Ereignisse am 25. März zwischen 0 und 12 UTC statt. Sowohl beim Start- als auch beim STT-Zeitpunkt ist der Druck der Trajektorien nur in 13% der Fälle geringer als 400 hPa (Abb. 3.34 e, h). Ausgehend von diesen Druckniveaus würde man daher 87% der Trajektorien bereits einen troposphärischen Ursprung zuordnen. An den PV-Werten zum Startzeitpunkt der Trajektorien (Abb. 3.34 b), vor allem bei STT am 25. März, erkennt man allerdings deutlich den stratosphärischen Ursprung:

79% aller Trajektorien starten mit PV-Werten  $> 3$  pvu, bei 33% der Trajektorien liegt der Startwert der PV über 5 pvu und damit eindeutig in der Stratosphäre. Luftpakete, die in die Troposphäre eintreten, stammen aus dem Bereich oberhalb einer bereits stark abgesunkenen Tropopause. Zwischen Start- und STT-Zeitpunkt nimmt der Druck entlang der Trajektorien nochmals zu (Abb. 3.34 h), die Luftpakete sinken demnach ab und verlassen die Stratosphäre schließlich am Rand der Tropopausenfalte.

Die grauen Bereiche der Abb. 3.32 und 3.34 beschreiben die Trajektorien, die in der unteren Troposphäre unterhalb von 750 hPa enden. Dabei handelt es sich um die sogenannten tiefreichenden STT-Ereignisse (Kap. 1.2.2). Wie in der Fallstudie in Kap. 3.3 gezeigt wurde, verursachen diese absinkenden, stratosphärischen Luftmassen einen messbaren Ozonanstieg am Boden. Bezogen auf die Gesamtzahl aller troposphärisch bleibenden Trajektorien enden ungefähr ein Drittel aller Trajektorien unterhalb von 750 hPa. Die Startpunkte dieser Trajektorien liegen stets unterhalb von 400 hPa (Abb. 3.34 f), die STT-Punkte zum Großteil sogar unterhalb von 600 hPa (Abb. 3.34 i). Aber auch hier lassen sich der Ursprungsregion aufgrund der hohen PV-Werte zum Startzeitpunkt stratosphärische Eigenschaften zuordnen (Abb. 3.34 a). Wann die Luftpakete sich vor dem STT zuletzt tief in der Stratosphäre, d.h. außerhalb des Troges aufgehalten haben, lässt sich aufgrund der begrenzten Simulationsperiode nicht feststellen.

In Abb. 3.37 wird die zeitliche Entwicklung verschiedener Parameter nach dem STT-Zeitpunkt verglichen. Um analog zu den vorherigen Abbildungen alle STT-Zeitpunkte am 24. und 25. März zu erfassen, werden Trajektorien mit Startzeitpunkt zwischen dem 23. März, 6 UTC und dem 26. März, 0 UTC analysiert. Erwartungsgemäß nimmt die spezifische Feuchte entlang der Trajektorien mit steigender Aufenthaltszeit in der Troposphäre zu, während die PV abnimmt (Abb. 3.37 a). Da die Endpunkte der Trajektorien auch in der mittleren oder oberen, und damit trockeneren, Troposphäre liegen können, ist die durchschnittliche Zunahme der Feuchte sehr gering. Sie nimmt innerhalb der ersten 30 Stunden linear um 0,02 g/kg pro Stunde ab. Trajektorien, die ausschließlich in der unteren Troposphäre enden (Abb. 3.37 c) weisen mit 0,05 g/kg pro Stunde erwartungsgemäß eine höhere Feuchtezunahme auf. Die Änderung der anderen Variablen ist unabhängig von der Lage des Endpunktes in der Troposphäre. Bei allen STT-Trajektorien die troposphärisch bleiben ist die Abnahme der PV in den ersten Stunden nach dem STT aufgrund der hohen Gradienten an der Tropopause am größten. In der Zeit, in der sich das Luftpaket zwischen 10 und 40 Stunden in der Troposphäre befindet, bleibt die PV im Mittel konstant und nimmt mit etwa 1 pvu den durchschnittlichen, troposphärischen PV-Wert an.

Abbildung 3.37 (b) und (d) zeigen die Änderung der Tracer  $\text{STRATO}_{\text{kont}}$  (Dreiecke),  $\text{STRATO}_{123}$  (Quadrate) und Ozon (Kreuze) nach dem STT-Zeitpunkt. Sowohl oberhalb, als auch unterhalb von 750 hPa nimmt  $\text{STRATO}_{\text{kont}}$  stetig mit der troposphärischen Aufenthaltszeit ab. Die Mischungsverhältnisse nach 40 Stunden sind durchschnittlich um 30 ppb, in der unteren Troposphäre um 25 ppb, kleiner als am STT-Punkt. Die Abnahme im Ozon und  $\text{STRATO}_{123}$  ist, wie in Abb. 3.34, deutlich geringer. Sie beträgt innerhalb

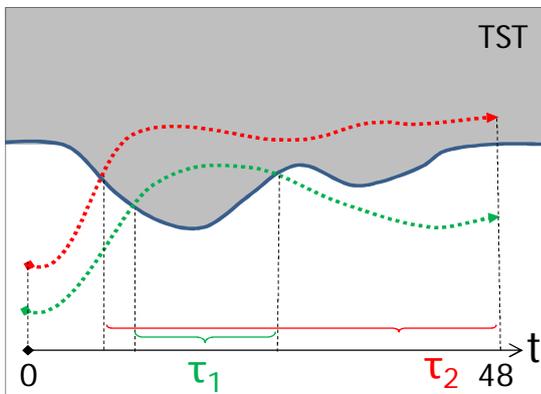
von 40 Stunden etwa 10 ppb.

Die Tracer Ozon und  $\text{STRATO}_{i23}$  wurden einmalig zu Simulationsbeginn initialisiert, im Laufe der Simulation konnte Mischung stattfinden. Ihre Mischungsverhältnisse weisen daher bereits am STT-Punkt troposphärische Werte auf (Abb. 3.34 k, l, n, o). Demgegenüber wird das Mischungsverhältnis des kontinuierlich initialisierten, stratosphärischen Tracers  $\text{STRATO}_{\text{kont}}$  in der Stratosphäre bei jedem Zeitschritt erneut auf 100 ppb gesetzt. Da sich der STT-Punkt per Definition (PV erstmals  $\leq 2\text{pvu}$ ) bereits in der Troposphäre befindet, wird dort ein Mischungsverhältnis von  $\text{STRATO}_{\text{kont}} > 80\text{ ppb}$  gefordert. Die unterschiedlichen Mischungsverhältnisse der beiden künstlichen, stratosphärischen Tracer  $\text{STRATO}_{i23}$  und  $\text{STRATO}_{\text{kont}}$  am STT-Punkt sind bei dem Vergleich von Abb. 3.34 (n) und (o) mit Abb. 3.34 (q) und (r) deutlich zu erkennen.

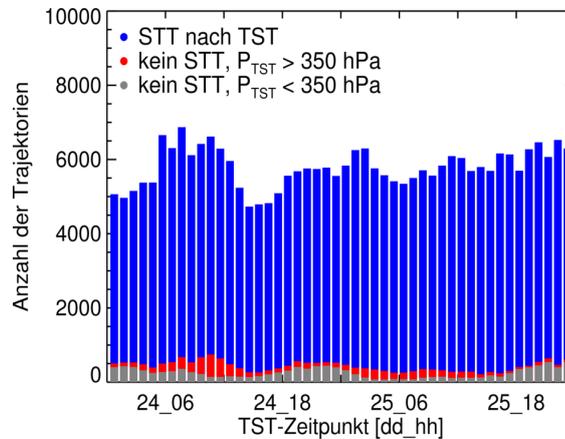
Die Luftmassen innerhalb der Tropopausenfalte, an der die meisten STT-Prozesse stattfinden (Abb. 3.33), haben demnach sowohl stratosphärische als auch troposphärische Tracereigenschaften. Die Änderung der Mischungsverhältnisse nach einer troposphärischen Aufenthaltszeit von 40 Stunden ist daher für die bereits vermischten Tracer Ozon und  $\text{STRATO}_{i23}$  geringer als für den kontinuierlich initialisierten Tracer. Wie genau sich die Luftmassen in der Tropopausenfalte zusammensetzen und wie die Mischung am Rand der Falte erfolgt, wird in Kapitel 3.5.2 untersucht.

Die Analyse der STT-Trajektorien in diesem Abschnitt lässt sich wie folgt zusammenfassen:

- Die meisten STT-Ereignisse finden statt, wenn das Tiefdruckgebiet sein Druckminimum erreicht.
- Bei 60% aller STT-Ereignisse kehren die Luftpakete innerhalb von zwei Tagen wieder in die Stratosphäre zurück. 61% der zurückkehrenden Trajektorien haben eine troposphärische Aufenthaltszeit von weniger als sechs Stunden.
- Entlang von Trajektorien, die weniger als zehn Stunden in der Troposphäre bleiben, findet im Mittel keine Mischung statt (Abb. 3.36).
- Trajektorien, die weniger als zehn Stunden in der Troposphäre bleiben, starten in höheren Regionen und mit höheren PV-Werten als STT-Trajektorien, die troposphärisch bleiben. Letztere starten unterhalb von 400 hPa, in Regionen mit niedriger Tropopause.
- Für Trajektorien, die innerhalb von zwei Tagen nicht in die Stratosphäre zurückkehren, nehmen die Mischungsverhältnisse der stratosphärischen Tracer nach dem STT kontinuierlich ab.
- Bereits am STT-Punkt haben die Luftmassen sowohl stratosphärische als auch troposphärische Tracereigenschaften.



**Abbildung 3.38:** Schematische Darstellung zur Bestimmung der Aufenthaltszeit in der Stratosphäre. Dargestellt sind Stratosphäre (graue Fläche), Troposphäre (weiße Fläche), dynamische Tropopause (blaue Linie) sowie exemplarische TST-Trajektorien, deren Endpunkt in der Troposphäre (blau) bzw. in der Stratosphäre (rot) liegt. Weitere Beschreibung im Text.



**Abbildung 3.39:** Anzahl der Trajektorien in Abhängigkeit des TST-Zeitpunktes. Die Farben kennzeichnen Trajektorien mit STT nach TST (blau), Trajektorien ohne STT nach TST, deren TST-Punkt auf Druckniveaus  $> 350$  hPa liegt (rot) und solche, deren TST-Punkt sich auf Druckniveaus  $< 350$  hPa befindet (grau).

### TST-Regionen

Zur Bestimmung von bevorzugten TST-Regionen werden die Trajektorien nach folgenden Schritten initialisiert und selektiert:

1. Initialisierung von 18h-Rückwärtstrajektorien in folgendem Gebiet:  
Höhe: 3 - 20 km, Breite:  $30^{\circ}\text{N} - 60^{\circ}\text{N}$ , Länge:  $45^{\circ}\text{W} - 15^{\circ}\text{E}$
2. Selektion der Rückwärtstrajektorien, die in der Stratosphäre ( $PV_{\text{start}} > 2,5$  pvu) starten und in der Troposphäre ( $PV_{\text{Ende}} < 1,5$  pvu) im Modellgebiet enden.
3. Berechnung von 48-stündigen Vorwärtstrajektorien, ausgehend von den Endpunkten der selektierten Rückwärtstrajektorien.
4. Selektion aller Vorwärtstrajektorien, die zum TST-Zeitpunkt stratosphärische Eigenschaften haben ( $\text{STRATO}_{\text{kont,TST}} > 80$  ppb), sich vor dem TST mindestens sechs Stunden in der Troposphäre aufgehalten haben und im Modellgebiet enden.

Die Trajektorien werden also analog zu den STT-Trajektorien ausgewählt. Auch hier werden zum TST-Zeitpunkt stratosphärische Tracereigenschaften vorausgesetzt, um Übergänge in troposphärische Regionen mit positiven PV-Anomalien auszuschließen.

Als TST-Punkt wird die Stunde bezeichnet, zu der die PV entlang der Vorwärtstrajektorie erstmalig einen Wert  $\geq 2$  pvu annimmt. Bleiben die PV-Werte anschließend bis zum Ende der Trajektorie  $> 2$  pvu, so ergibt sich die Aufenthaltszeit des Luftpaketes in der Stratosphäre aus der Differenz zwischen 48 und der Stunde des TST-Zeitpunktes (Abb. 3.38:  $\tau_2$  für rote Trajektorie). Nimmt die PV zu einer bestimmten Stunde erneut auf Werte  $< 2$  pvu ab, so wird diese Stunde als STT-Zeitpunkt bezeichnet (Abb. 3.38:  $\tau_1$  für grüne Trajektorie).

Abbildung 3.39 zeigt die Gesamtzahl der Trajektorien in Abhängigkeit ihres TST-Zeitpunktes. Verglichen mit den STT-Trajektorien (Abb. 3.32) liegt die Gesamtzahl der TST-Ereignisse (insgesamt 277933) in der Region deutlich niedriger, als die Anzahl der STT-Ereignisse (insgesamt 645120).

Die bei den STT-Trajektorien festgestellte Abhängigkeit zwischen der Anzahl der STT-Ereignisse und der Intensität des Tiefdruckgebietes lässt sich hier nicht beobachten. Während 40% der STT-Trajektorien bis zum Endzeitpunkt in der Troposphäre bleiben, halten sich lediglich 7% der TST-Trajektorien bis zum Endzeitpunkt in der Stratosphäre auf (Abb. 3.32 und 3.39, blauen Bereiche). Bei 93% aller Trajektorien nimmt die PV nur kurzzeitig stratosphärische Werte an. Alle Trajektorien, die nach zwei Tagen in der Stratosphäre enden, sind in Abb. 3.39 (roter und grauer Bereich) und Abb. 3.40 (mittlere Spalte) dargestellt. Trajektorien mit TST-Punkt auf Druckniveaus  $> 350$  hPa werden in Abb. 3.40 nochmals getrennt betrachtet (rechte Spalte).

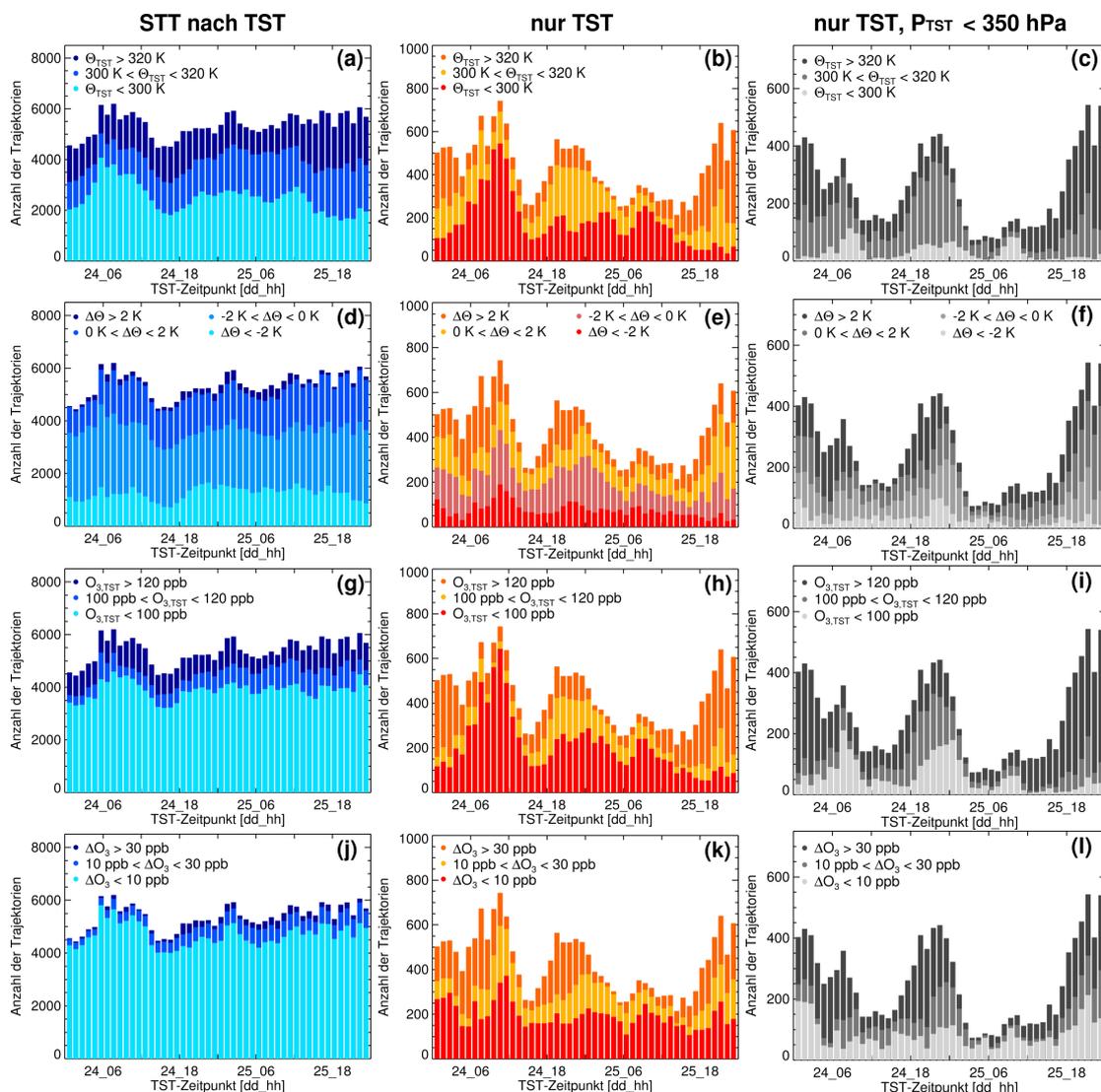
#### **Trajektorien, die nach dem TST wieder troposphärisch werden**

93% aller TST-Trajektorien verlassen die Stratosphäre bereits nach wenigen Stunden. Für den Großteil dieser Trajektorien liegt der TST-Punkt auf Isentropen unterhalb von 300 K und bei Ozonmischungsverhältnissen  $< 100$  ppb (Abb. 3.40 a, g), also im Bereich einer niedrigen Tropopause. 60% der Luftpakete befinden sich beim TST auf höheren Isentropen als beim anschließenden STT, sie steigen demnach diabatisch ab (Abb. 3.40 d).

Während sich die Luftpakete in der Stratosphäre aufhalten findet kaum Mischung statt. Die Änderung des Ozonmischungsverhältnisses liegt in 88% der Fälle unterhalb von 10 ppb (Abb. 3.40 j). Die PV dieser Luftpakete nimmt zwar kurzzeitig stratosphärische Werte an, die Tracereigenschaften bleiben allerdings troposphärisch.

#### **Trajektorien, die nach dem TST stratosphärisch bleiben**

Nur 7% der berechneten TST-Trajektorien befinden sich auch nach zwei Tagen noch in der Stratosphäre (Abb. 3.39, rote und graue Bereiche und Abb. 3.40, mittlere Spalte). Im Vergleich zu den in der Troposphäre endenden Trajektorien liegt der TST-Punkt durchschnittlich auf höheren Isentropen, sowie bei höheren Ozonmischungsverhältnissen (Abb. 3.40 b, h). Bei 41% der Trajektorien liegt der TST-Punkt auf Druckniveaus  $> 350$  hPa. Werden diese Trajektorien ausgeschlossen (Abb. 3.40, rechts), so wächst der



**Abbildung 3.40:** TST-Trajektorien in Abhängigkeit des TST-Zeitpunktes. Sie sind unterteilt in Trajektorien mit STT nach TST (blau), Trajektorien ohne STT (rot) und solche ohne STT, deren TST-Punkt auf Druckniveaus  $< 350$  hPa liegt (grau). Analysiert werden die potentielle Temperatur ( $\Theta$  in K, a - c) und der passive Ozontracer ( $O_3$  in ppb, g - i) zum TST-Zeitpunkt der Trajektorien, sowie die Änderung der potentiellen Temperatur ( $\Delta\Theta = \Theta_{\text{Ende}} - \Theta_{\text{TST}}$  in K, d - f) und des passiven Ozontracers ( $\Delta O_3 = O_{3,\text{Ende}} - O_{3,\text{TST}}$  in ppb, j - l).

Anteil der Trajektorien, deren Ozonmischungsverhältnis um mehr als 30 ppb zunimmt, von 30% auf 44% (Abb. 3.40 l). Der Anteil der diabatisch aufsteigenden Trajektorien nimmt zwar zu, trotzdem steigen immer noch 52% der Trajektorien diabatisch ab (Abb. 3.40 c). Da die Stratosphäre oberhalb der Troposphäre liegt, verbindet man TST-Prozesse

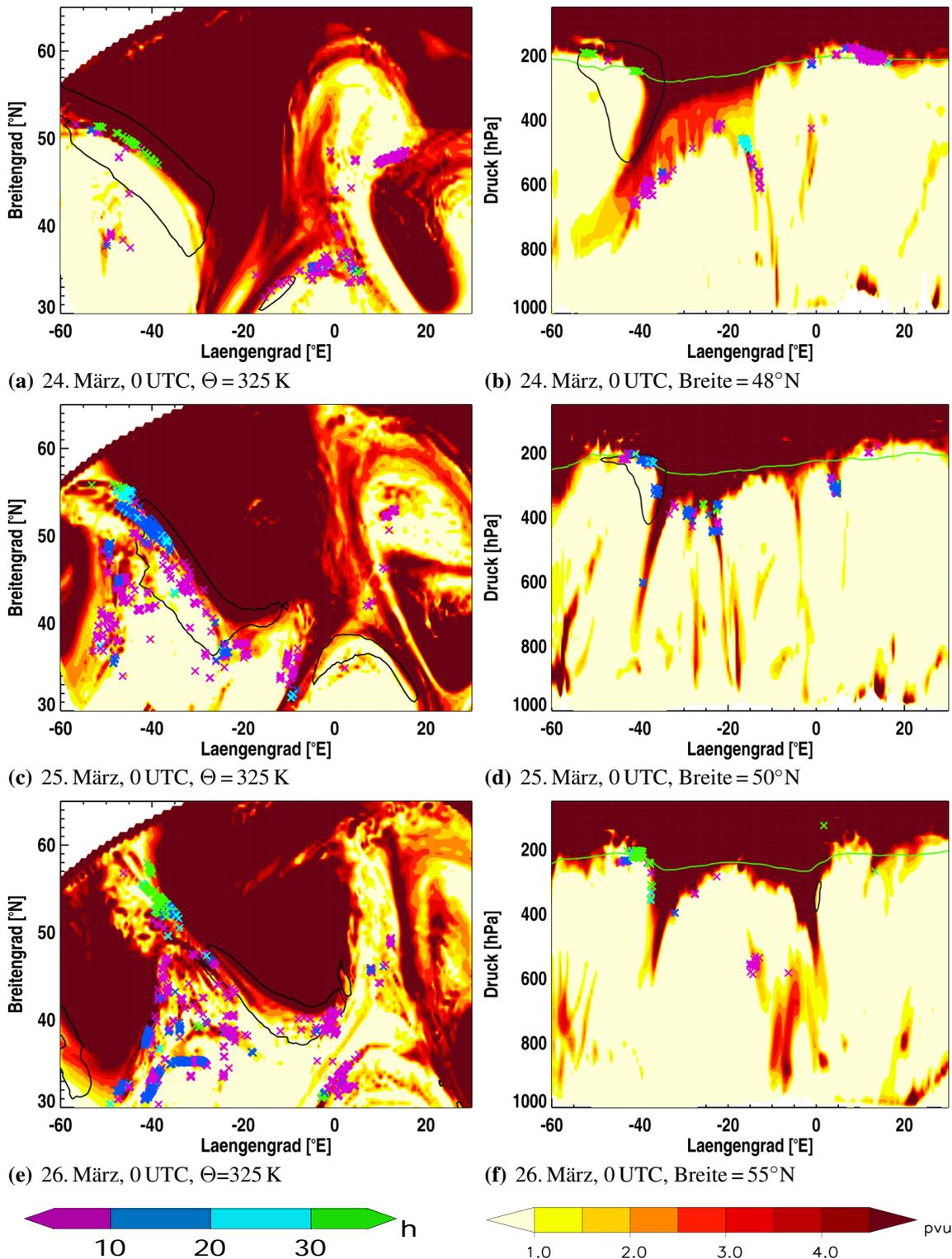
intuitiv mit aufsteigenden Luftmassen. Diabatisches Absteigen in Verbindung mit TST-Prozessen ist aber nicht ungewöhnlich. In der theoretischen Studie von Juckes (2000) werden TST-Prozesse im Zusammenhang mit diabatischem Aufsteigen beschrieben. Bei polwärtsgerichteten Bewegungen von Luftpaketen liegt die Tropopausenhöhe oberhalb der mittleren Tropopausenhöhe. In hohen Breiten nimmt die potentielle Temperatur der Luftpakete aufgrund diabatischer Effekte ab. Gleichzeitig sinkt die Tropopause relativ zu den Luftpaketen ab, sodass es zu TST-Ereignissen kommt (vgl. Abb. 5 in Juckes 2000). Zwar können die Autoren keine Aussage über die Aufenthaltszeit machen, die sich die Luftpakete nach diesen TST-Ereignissen in der Stratosphäre befinden, ihr Auftreten sei allerdings häufiger als TST-Ereignisse, die mit diabatischem Aufstieg verbunden sind.

In Abb. 3.41 ist die Lage der TST-Punkte relativ zu den PV-Strukturen exemplarisch für drei Zeitpunkte dargestellt. Für die Abbildungen auf der 325K-Isentrope werden dazu alle TST-Punkte ausgewählt, deren potentielle Temperatur zum TST-Zeitpunkt  $325\text{ K} \pm 2\text{ K}$  beträgt. Für die vertikalen Querschnitte wird ein Intervall von  $\pm 0.5^\circ$  verwendet.

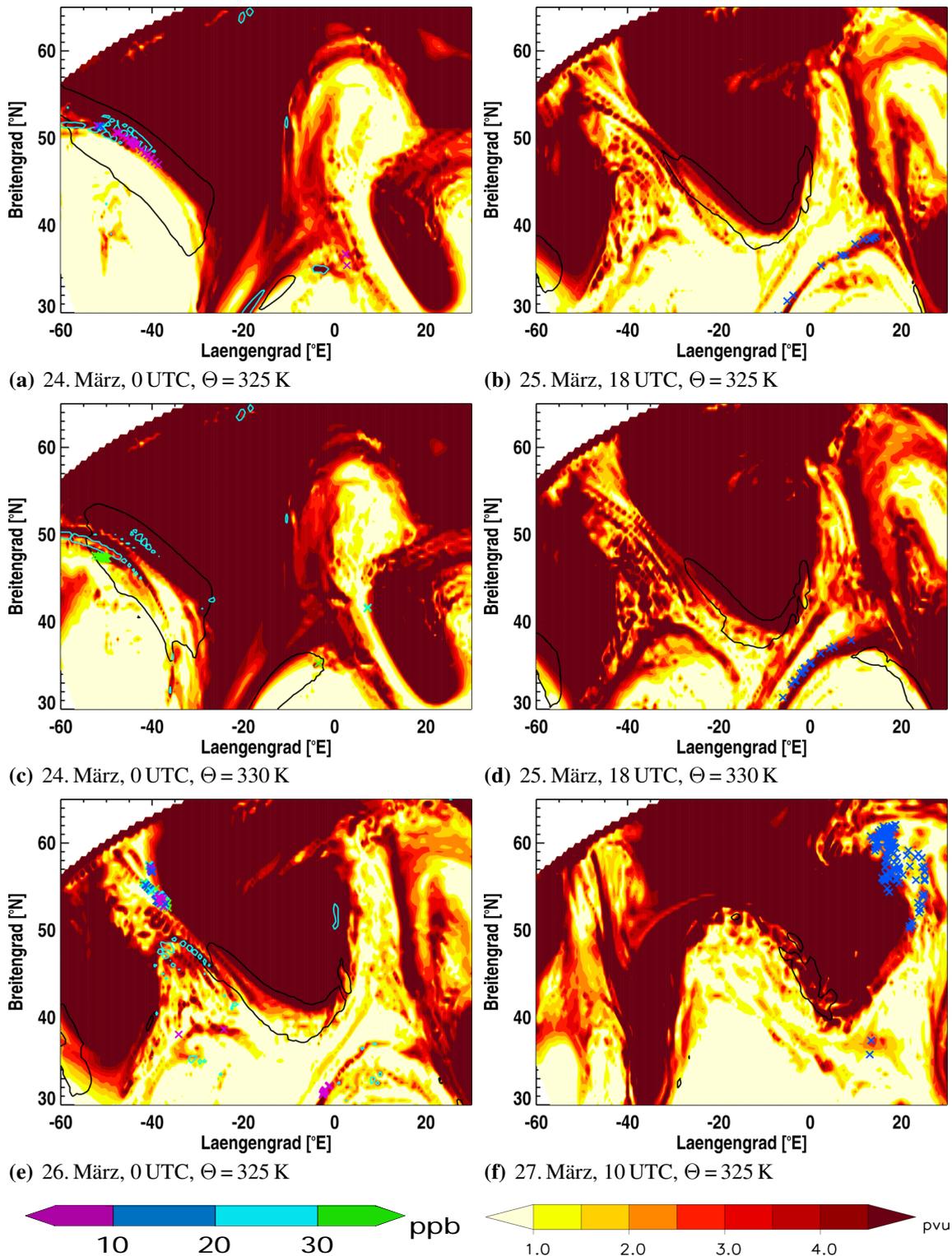
Die meisten TST-Prozesse finden in der Umgebung des Strahlstroms, einer stark turbulenten Region (Kap. 3.3.2) statt. Wie in Abb. 3.39 bereits gezeigt, verweilen die meisten Trajektorien weniger als 30 Stunden in der Stratosphäre und kehren wieder in die Troposphäre zurück (Farbe der Kreuze in Abb. 3.41). TST-Punkte der Trajektorien, die länger als 30 Stunden stratosphärisch bleiben (grüne Kreuze in Abb. 3.41), liegen bevorzugt entlang der Achse des Strahlstroms in der Eingangsregion des Bereiches der maximalen Geschwindigkeit (engl.: Jetstreak). In den vertikalen Querschnitten befinden sich die TST-Punkte von Trajektorien mit langen Aufenthaltszeiten meist am Oberrand des Strahlstroms. Findet der TST unterhalb statt, also auf niedrigeren Isentropen, bleiben die Trajektorien nur vereinzelt länger als 30 Stunden stratosphärisch. Allerdings erreichen in der Region am Oberrand des Strahlstroms auch zahlreiche TST-Trajektorien die Stratosphäre, die sie kurze Zeit später wieder verlassen. Während beispielsweise keine der in Abb. 3.41 (d) dargestellten Trajektorien bis zum Endpunkt nach zwei Tagen in der Stratosphäre bleibt, enden bei gleicher Lage der TST-Punkte einen Tag später die meisten Luftpakete mit stratosphärischen PV-Werten.

Entlang der Achse des Strahlstroms treten häufig Turbulenzen auf (türkise Linie in Abb. 3.42 a, c). Möglicherweise findet entlang der Achse des Strahlstroms ein ständiger Austausch zwischen Stratosphäre und Troposphäre statt, sodass die PV der Luftpakete entlang der Trajektorien stark variiert. In dieser Studie wurde allerdings den Trajektorien, die nach ihrem TST wieder troposphärisch werden, lediglich eine bestimmte Aufenthaltszeit in der Stratosphäre zugeordnet. Ob die PV anschließend erneut stratosphärische Werte annimmt, wird hier nicht beachtet.

Die TST-Punkte der Trajektorien, die nach dem TST stratosphärisch bleiben (Abb. 3.41, grüne Kreuze), sind in Abb. 3.42 mit der Änderung des Ozonmischungsverhältnisses in der Stratosphäre eingefärbt ( $\Delta O_3 = O_{3,\text{Ende}} - O_{3,\text{TST}}$ , links). Die rechten Abbildungen zei-



**Abbildung 3.41:** Lage der TST-Punkte in horizontalen (links) und vertikalen (rechts) Querschnitten durch das Modellgebiet am 24. (oben), 25. (mittig) und 26. (unten) März, 0 UTC. Dargestellt ist die PV (farbig, in pvu) sowie das Geschwindigkeitsmaximum des Jetstreaks (Wind = 50 m/s, schwarze Kontur). Die Isentropen der horizontalen Darstellung (links) sind in den vertikalen Querschnitten eingezeichnet (rechts, grüne Kontur). Kreuze kennzeichnen die TST-Punkte entlang der Trajektorien, ihre Farbe die Aufenthaltszeit in der Stratosphäre (in h).



**Abbildung 3.42:** Lage der TST- (links) und Endpunkte (rechts) von TST-Trajektorien. Die TST-Punkte sind eingefärbt mit der Änderung des passiven Ozontracers in der Stratosphäre ( $\Delta O_3 = O_{3, \text{Ende}} - O_{3, \text{TST}}$ , in ppb). Farbiger dargestellt ist die PV auf Isentropen (in pvu), Konturen kennzeichnen das Geschwindigkeitsmaximum des Strahlstroms (Wind = 50 m/s, schwarz) sowie Bereiche erhöhter Turbulenz (TI = 7, türkis). Zeitpunkt und Isentrope der rechten Abbildungen entsprechen dem Mittelwert des Trajektorienbündels zum Endzeitpunkt.

gen die Lage der Endpunkte dieser Trajektorien nach zwei Tagen. Da die TST-Punkte am 25. März, 18 UTC unterschiedliche vertikale Positionen haben (Abb. 3.41 b), werden sie in Abb. 3.42 horizontal sowohl auf 325 K (oben), als auch auf 330 K (mittlere Reihe) dargestellt. Während die Änderung des Ozons entlang der Trajektorien, deren TST-Punkt auf der 325 K-Isentrope liegt (Abb. 3.42 a), sehr gering ist, nimmt das Mischungsverhältnis im Ozon bei allen Trajektorien mit TST-Punkt auf 330 K (Abb. 3.42 c) um über 30 ppb zu. Die Endpunkte der Trajektorien liegen in beiden Fällen in der gleichen Region, südöstlich des Strahlstroms in einem schmalen PV-Filament (Abb. 3.42 b, c). Obwohl die Luftpakete nach dem TST offensichtlich unabhängig von ihrer potentiellen Temperatur am TST-Punkt transportiert werden, findet nur entlang der Trajektorien die auf 330 K starten Mischung statt.

Betrachtet man allerdings die Trajektorien, die beispielsweise am 26. März, 0 UTC auf 325 K in die Stratosphäre gelangen (Abb. 3.42 e), so variiert die Änderung des Mischungsverhältnisses auch auf dieser Isentropen sehr stark. Die vertikale TST-Position liegt erneut am Oberrand einer Tropopausenfalte, allerdings außerhalb des Strahlstroms und damit nicht in Regionen erhöhter Turbulenz. Da sich auch keine Wolken in diesem Bereich befinden (nicht dargestellt), sind es möglicherweise Strahlungseffekte, die den TST-Prozess verursachen. Die Endpunkte dieser Trajektorien befinden sich geschlossen in einer Region am nordöstlichen Rand des Troges (Abb. 3.42 f).

Während die Trajektorien mit TST-Punkt am 24. März alle südöstlich des Troges enden (Abb. 3.42 a - d), werden die Luftpakete bei ähnlicher TST-Region zwei Tage später nach Nordosten transportiert (Abb. 3.42 e, f). Diese Ergebnisse der Lagrangeschen Analyse stimmen mit der Ausbreitung der Tracer nach Initialisierung im Strahlstrom (Abb. 2.4) gut überein. Luftmassen, die im maximalen Geschwindigkeitsbereich des Strahlstroms starten, werden schnell in dessen Ausgangsregion transportiert. Anschließend wird die Strömung in eine Nord- und eine Südströmung aufgespalten. Mischung findet dabei innerhalb des maximalen Geschwindigkeitsbereich des Strahlstroms lediglich, zumindest auf der hier betrachteten Zeitskala, in einem engen Band entlang der dynamischen 2pvu-Tropopause statt (Abb. 2.4).

Experimentelle Studien zeigen allerdings, dass sich auch auf weiter von der Tropopause entfernten Isentropen troposphärische Tracereigenschaften beobachtet lassen, die auf kürzlich stattgefunden Mischung hinweisen (Fischer et al. 2000; Hoor et al. 2004). Die kurze Simulationsdauer von fünf Tagen und die darauf basierenden 48h-Trajektorien reichen offenbar nicht aus, um irreversible TST-Prozesse zu diagnostizieren und vollständig zu analysieren. Aufgrund der auch am Trajektorienende bestehenden Nähe zur Tropopause lässt sich nicht ausschließen, dass die Luftpakete später erneut in die Troposphäre zurückkehren. Eine vollständige Analyse irreversibler Mischungsprozesse durch TST-Prozesse ist mit der hier angewendeten Methode nicht möglich und erfordert neue Analysetechniken (vgl. Diskussion in Kap. 4).

Dennoch konnten in der hier vorgestellten Trajektorienstudie potentielle TST-Regionen identifiziert werden. Die Ergebnisse lassen sich in folgenden Punkten zusammenfassen:

- Die Gesamtzahl der TST-Ereignisse in der betrachteten Region liegt deutlich niedriger, als die Anzahl der STT-Ereignisse.
- Entlang 93% aller TST-Trajektorien nimmt die PV nach kurzer stratosphärischer Aufenthaltszeit wieder troposphärische Werte an. Ob anschließend ein erneuter TST-Prozess entlang der Trajektorie stattfindet, wird hier nicht untersucht. Diese Trajektorien starten bevorzugt auf niedrigen Isentropen.
- Die Hälfte der TST-Trajektorien steigt nach dem TST diabatisch ab.
- Werden ausschließlich TST-Punkte auf Druckniveaus  $< 350$  hPa betrachtet, steigt der Anteil der Trajektorien, deren Ozonmischungsverhältnis sich um mehr als 30 ppb ändert.
- Bleiben die Luftpakete bis zu ihrem Ende stratosphärisch und ändern sich ihre Tracereigenschaften entlang der Trajektorie deutlich, so liegt der TST-Punkt bevorzugt am Oberrand des Strahlstroms in einer Region erhöhter Turbulenz.

### 3.5.2 Quantifizierung des Austausches an der Tropopausenfalte

In den vorherigen Abschnitten wurde gezeigt, dass turbulente und diabatische Prozesse an Tropopausenfalten sowohl STT-, als auch TST-Ereignisse initialisieren. Für die Trajektorien mit TST-Ereignissen entlang der Falte wurden allerdings geringe Aufenthaltszeiten bestimmt (Abb. 3.41). Dennoch führen sie dazu, dass die chemische Zusammensetzung der Luftmassen in der Falte bereits troposphärische Tracereigenschaften aufweist (vgl. Diskussion zu Abb. 3.34). Um zu bestimmen, wie sich die Luftmassen in der Falte zusammensetzen, werden in diesem Abschnitt Ursprungs- und Zielregion der Luftpakete innerhalb der Falten analysiert. Dabei sollen folgende Fragen beantwortet werden:

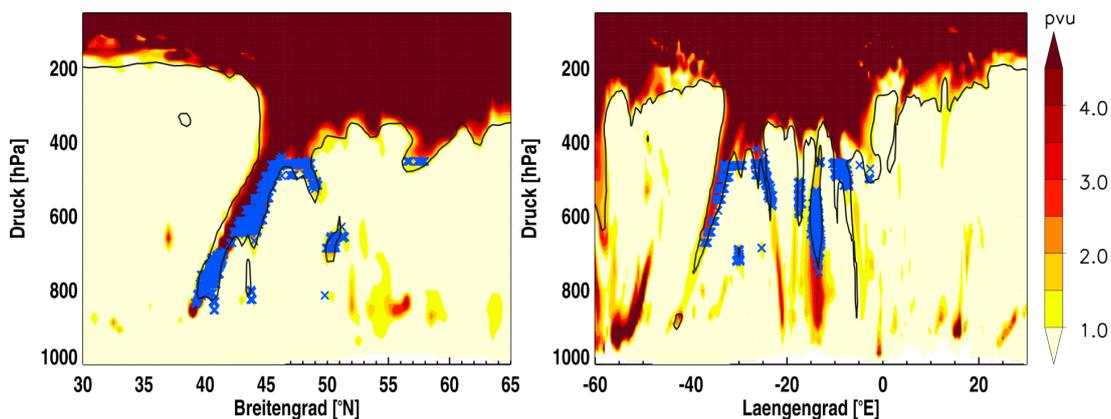
- Wie groß ist der Anteil der Luftmassen, die aus der Falte in die Troposphäre gelangen?
- Woher kommen die Luftmassen, die sich in der Falte befinden?
- Sind Ursprungs- und Zielregion voneinander abhängig?
- Wie hoch ist der Anteil der Luftpakete, die an einem STE-Ereignis beteiligt sind?
- Wie sensitiv ist die Analyse bezüglich der Tropopausendefinition?

Dazu werden Trajektorien an den Gitterpunkten initialisiert, an denen die folgenden Bedingungen zwischen dem 24. März, 1 UTC und dem 25. März, 23 UTC erfüllt sind:  $PV > 2$  pvu,  $STRATO_{kont} > 80$  ppb, Höhe  $< 6000$  m, Länge:  $45^\circ W - 15^\circ E$ , Breite:  $30^\circ N - 60^\circ N$ .

STRATO<sub>kont</sub> wird, wie im vorherigen Abschnitt, als zusätzliches Kriterium verwendet, um die Trajektorien tatsächlich in der Tropopausenfalte und nicht in diabatisch produzierten PV-Anomalien in der Troposphäre zu initialisieren.

Von den entsprechend bestimmten Startpunkten werden zunächst 48h-Vorwärtstrajektorien berechnet. Liegen die Endpunkte dieser Trajektorien innerhalb des Simulationsgebietes, folgt anschließend von diesen Endpunkten aus die Berechnung von 72h-Rückwärtstrajektorien. Dadurch werden Informationen über die Position der Luftpakete bis zu 24 Stunden vor ihrem Aufenthalt in der Tropopausenfalte erhalten. Der Endpunkt der Rückwärtstrajektorie wird daher im Folgenden auch als Ursprungsregion der Luftpakete bezeichnet. Trajektorien, deren Ursprungsregionen außerhalb des Simulationsgebietes liegt, werden ausgeschlossen.

Bei der Analyse werden demnach Trajektorien betrachtet, die zu einem bestimmten Zeitpunkt in ihrer Ursprungsregion innerhalb des Simulationsgebietes starten, sich 24 Stunden später in einer Tropopausenfalte befinden und wiederum 48 Stunden später ihre Zielregion erreichen.

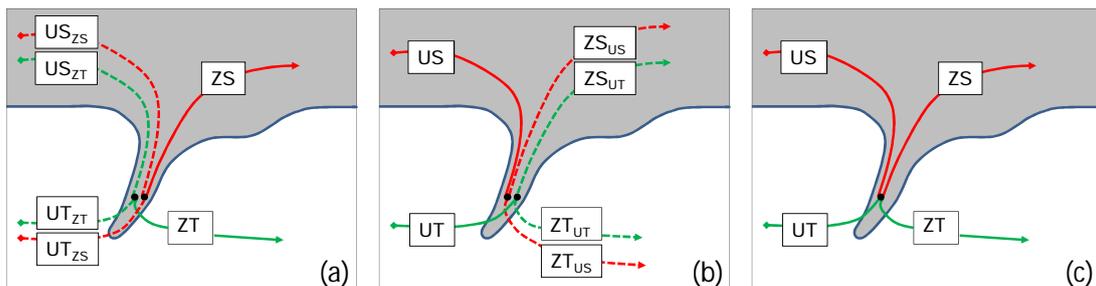


**Abbildung 3.43:** Position der Luftpakete in der Tropopausenfalte (Kreuze) am 24. März, 12 UTC entlang 30°W (links) und am 25. März, 12 UTC entlang 50°N (rechts). Dargestellt ist die PV (farbig, in pvu) und das Mischungsverhältnis von STRATO<sub>kont</sub> (80 ppb, schwarze Kontur).

Abbildung 3.43 zeigt die Position der Luftpakete in der Tropopausenfalte, also 24 Stunden nachdem sie in ihrer Ursprungsregion gestartet sind, exemplarisch für zwei Zeitpunkte. Sie liegen sowohl in der stark ausgeprägten Tropopausenfalte (Abb. 3.43, links), als auch in schmalen Tropopausenfilamenten (Abb. 3.43, rechts). Aufgrund der westlichen Lage der Falte befinden sich die Ursprungsregionen der Luftpakete in der ausgeprägten Falte (Abb. 3.43, links) teilweise außerhalb des Simulationsgebietes. Da Trajektorien, die das Simulationsgebiet verlassen, nicht betrachtet werden, verteilen sich die Positionen der analysierten Luftpakete (Kreuze) in diesem Fall nicht auf die gesamte Falte.

Zur Bestimmung des Anteils der aus der Falte in die Troposphäre transportierten Luftpakete, wird die PV in der Zielregion analysiert. Ist diese  $\geq 2$  pvu, ist die Zielregion der entsprechenden Trajektorie die Stratosphäre, andernfalls die Troposphäre. Nach Festlegung der Zielregion wird auf gleiche Weise die Ursprungsregion drei Tage zuvor bestimmt. In Abb. 3.44 (a) ist dies nochmals schematisch dargestellt: Ausgehend von der Position in der Falte werden die Trajektorien in solche mit troposphärischer Zielregion (ZT) und stratosphärischer Zielregion (ZS) eingeteilt. In Abhängigkeit dieser Zielregion wird danach die Ursprungsregion (UT bzw. US) bestimmt. Absolute und relative Zahlen für diese Analyse sind in Tab. 3.4 in den gleichbenannten Zeilen ZS und ZT zusammengefasst. Die ersten beiden Spalten beziehen sich auf die in Abb. 3.43 dargestellten Beispiele. Für den 24. März, 12 UTC werden entlang des Längengrades 30°W insgesamt 738 Trajektorien berechnet, von denen 717, also 97%, zwei Tage später in der Troposphäre enden. Von diesen 97% wiederum haben 38% ihren Ursprung drei Tage zuvor in der Stratosphäre, 62% sind in der Troposphäre gestartet. Bestimmt man umgekehrt die Zielregion in Abhängigkeit der Endregion (Abb. 3.44 b und Tab. 3.4, Zeilen US und UT), so besteht die Tropopausenfalte in dem Beispiel aus Abb. 3.43 links zu 38% aus Luftmassen mit stratosphärischem Ursprung, von denen schließlich 97% in der Troposphäre enden.

Für das zweite Beispiel (Abb. 3.43, rechts), in dem anstatt der stark ausgeprägten Tropopausenfalte lediglich schmale Tropopausenfilamente vorliegen, werden sehr ähnliche Ergebnisse erreicht. Auch hier wird der Großteil der Luftpakete (87%) aus der Falte in die Troposphäre transportiert, die Ursprungsregion aller Trajektorien liegt zu 59% in der Stratosphäre.



**Abbildung 3.44:** Schemaskizzen zur Analyse der Trajektorien, die sich zu einem bestimmten Zeitpunkt in der Tropopausenfalte befinden. Dargestellt sind Stratosphäre (graue Fläche), Troposphäre (weiße Fläche) und dynamische Tropopause (blaue Linie). Die Pfeile entsprechen TST- bzw. STT-Trajektorien. Ihre Bezeichnung setzt sich zusammen aus Abkürzungen, die kennzeichnen, ob die Ursprungs- bzw. Zielregion (erster Buchstabe, U bzw. Z) eine troposphärische oder stratosphärische Region (zweiter Buchstabe, S bzw. T) ist. Zusätzlich wird die Ursprungsregion (Zielregion) in Abhängigkeit der Zielregion (Ursprungsregion) im Index gekennzeichnet.

Im gesamten Initialisierungsgebiet werden pro Stunde etwa 20000 Startpunkte bestimmt, sodass die gesamte Analyse über 47 Stunden etwa eine Million Trajektorien umfasst. Die Ergebnisse sind in der letzten Spalte in Tab. 3.4 dargestellt. Übereinstimmend mit den Ergebnissen der zwei Beispiele, wird fast die gesamte Luftmasse (94%) aus der Tropopausenfalte in die Troposphäre transportiert. Dieses Verhalten ist unabhängig von der Ursprungsregion ( $US_{ZT} = UT_{ZT} = ZT$ ). Durchschnittlich kommen etwa die Hälfte aller Luftpakete in der Falte aus der Troposphäre (56%). Auch die Ursprungsregion ist unabhängig von der Zielregion der Trajektorien ( $ZS_{UT} \approx ZT_{UT} \approx UT$ ). Aufgrund dieser Unabhängigkeit von Ursprungs- und Zielregion lassen sich die Schemata aus Abb. 3.43 (a) und (b) wie in Abb. 3.43 (c) dargestellt vereinfachen.

Wie in Kapitel 1.1.1 beschrieben, werden in der Literatur unterschiedliche PV-Werte zur Definition der dynamischen Tropopause gewählt. Um die Sensitivität dieser Trajektorienstudie auf die gewählte Definition der Tropopause zu testen, wird die Studie erneut, diesmal mit einer dynamischen Tropopause von 3 pvu, durchgeführt (Tab. 3.5, 1. Spalte). In einer weiteren Analyse wird die Tropopause als ein PV-Band ( $2 \text{ pvu} < PV \leq 3 \text{ pvu}$ ) definiert (Tab. 3.5, rechte Spalte). Ein STE-Ereignis findet nach dieser Definition nur statt, wenn die PV am Startpunkt (Endpunkt)  $> 3 \text{ pvu}$  und am Endpunkt (Startpunkt) der Trajektorie  $< 2 \text{ pvu}$  ist. Auf diese Weise werden Trajektorien ausgeschlossen, deren PV sich um weniger als 1 pvu ändert. Die Region des PV-Bandes wird im Folgenden als Tropopausenregion (TP) bezeichnet und als neue, potentielle Ziel- (ZTP) und Ursprungsregion (UTP) in Tab. 3.5 (graue Bereiche) eingeführt.

Verglichen mit der Analyse, die auf der dynamischen 2pvu-Tropopause basiert, nimmt die Gesamtzahl der Trajektorien bei Verwendung der 3pvu-Tropopause von durchschnittlich 21512 auf 11661 Trajektorien pro Stunde ab. In den Analysen, in denen die dynamische 2pvu-Tropopause verwendet wird, wird für ungefähr die Hälfte der Luftmassen aus der Falte (44%) eine stratosphärische Ursprungsregion bestimmt. Die PV-Variation dieser Luftmassen ist allerdings häufig sehr gering. Mit Betrachtung des PV-Bandes lässt sich zeigen, dass der Anteil der Trajektorien mit stratosphärischem Ursprung auf 19% sinkt, wenn eine PV-Variation von mindestens 1 pvu vorausgesetzt wird. Demnach liegt die Ursprungsregion von 24% der Trajektorien innerhalb der Tropopausenregion.

Unabhängig von der Tropopausendefinition hängen Ursprungs- und Zielregion in allen Analysen nicht voneinander ab. Die meisten Luftpakete in der Tropopausenfalte (97% bei Verwendung der 3pvu-Tropopause, 94% sonst), enden zwei Tage später in der Troposphäre.

In dieser Analyse lässt sich zusätzlich der Anteil der Luftpakete in der Tropopausenfalte bestimmen, die innerhalb des Analysezeitraumes an einem STE-Ereignis beteiligt sind (Tab. 3.4 und 3.5, Spalten mit gelben Bereichen). Dabei wird ein Ereignis nur dann als STE-Ereignis betrachtet, wenn der Startpunkt der Trajektorie in der Stratosphäre (Troposphäre) und der Zielpunkt in der Troposphäre (Stratosphäre) liegt (Abb. 3.43,

US<sub>ZT</sub>- und UT<sub>ZS</sub>-Trajektorien). Trajektorien, die in der Troposphäre (Abb. 3.43, US<sub>ZT</sub>- und UT<sub>ZT</sub>-Trajektorien) oder in der Tropopausenregion ( $2 < PV \leq 3$ ) starten und enden, werden nicht zu den STE-Prozessen gezählt, obwohl sie kurzzeitig stratosphärische PV-Werte annehmen. Wie in Kap. 3.5.1 gezeigt, findet entlang dieser „transienten“ Ereignisse keine Mischung statt.

Der relative Anteil der Trajektorien, die an einem STE-Ereignis beteiligt sind, hängt wiederum von der Wahl der Tropopausendefinition ab. Während bei Verwendung der 2p<sub>vu</sub>-Tropopause 44% aller Trajektorien an einem STE-Ereignis beteiligt sind, sind es bei Betrachtung des PV-Bandes 19%. In diesem Fall liegen von 81% aller Trajektorien sowohl Start- als auch Endpunkt in der Troposphäre oder der Tropopausenregion. Das Verhältnis zwischen STT- und TST-Ereignissen ist unabhängig von der Tropopausendefinition: Bei etwa 90% aller STE-Ereignissen handelt es sich um STT-Ereignisse.

Zur Zusammenfassung dieses Abschnittes werden die einleitend gestellten Fragen beantwortet:

- **Wie groß ist der Anteil der Luftmassen, die aus der Falte in die Troposphäre gelangen?**

Fast die gesamten Luftmassen (94%), die sich zu einem bestimmten Zeitpunkt in einer Tropopausenfalte unterhalb von 6000 m befinden, enden zwei Tage später in der Troposphäre. Dass fast alle Luftpakete aus der Falte in die Troposphäre transportiert werden, ist unabhängig von der Wahl der Tropopausendefinition.

- **Woher kommen die Luftmassen, die sich in der Falte befinden?**

Bei der Wahl der 2p<sub>vu</sub>-Tropopause kommen die Luftmassen in der Falte in etwa zu gleichen Teilen aus der Troposphäre (56%) bzw. aus der Stratosphäre (44%). Der Anteil der Trajektorien mit stratosphärischer Herkunft ist geringer bei Betrachtung der 3p<sub>vu</sub>-Tropopause (25%) bzw. des Tropopausenbandes (19%). 24% der Trajektorien befinden sich bereits am Startpunkt in der Tropopausenregion ( $2 \text{ pvu} < PV < 3 \text{ pvu}$ ).

- **Sind Ursprungs- und Zielregion voneinander abhängig?**

Die STE-Ereignisse finden unabhängig von der Ursprungsregion der Trajektorien statt. Dass entlang einer Trajektorie, deren Ursprung in der Stratosphäre liegt, ein STT-Ereignis stattfindet, ist beispielsweise genauso wahrscheinlich wie für ein aus der Troposphäre kommendes Luftpaket.

- **Wie hoch ist der Anteil der Luftpakete, die an einem STE-Ereignis beteiligt sind?**

Bei der Wahl der 2p<sub>vu</sub>-Tropopause findet entlang von 44% der Trajektorien ein STE-Ereignis statt. Betrachtet man die 3p<sub>vu</sub>-Tropopause oder das Tropopausenband nimmt der Anteil der Luftpakete, die sich sowohl am Start- als auch am Ziel-

dd_hh		24_12		25_12		24_01 - 25_23	
Region		30°W		50°N		-45-15°E, 30-60°N	
PV <sub>TP</sub>		2		2		2	
Anzahl		738		858		21512±2039	
		abs [#]	rel [%]	abs [#]	rel [%]	abs [#]	rel [%]
ZS	alle	21	3	109	13	1368±249	6±1
	US	9	43	57	52	599±179	43±8
	UT	12	57	52	48	769±140	57±8
ZT	alle	717	97	749	87	20143±2063	94±1
	US	272	38	441	59	8741±1112	44±5
	UT	445	62	308	41	11401±1773	56±5
US	alle	281	38	498	58	9341±1192	44±5
	ZS	9	3	57	11	599±179	6±2
	ZT	272	97	441	89	8741±1112	94±1
UT	alle	457	62	360	42	12717±1821	56±5
	ZS	12	3	52	14	769±140	6±1
	ZT	445	97	308	86	11401±1773	94±1
STE	alle	284	38	493	57	9510±1129	44±4
	STT	272	96	441	89	8741±1112	92±2
	TST	12	4	52	11	769±140	8±2
kein STE	alle	454	62	365	43	12000±1641	56±4
	T→T	445	98	308	84	11401±1773	95±2
	S→S	9	2	57	16	599±179	5±2

**Tabelle 3.4:** Analyse von Ursprungs- und Zielregion der Luftpakete in der Falte. Zusammengefasst sind drei Analysen, die sich in Zeit (dd\_hh) und Gebiet (Region) unterscheiden. Die rot und grün eingefärbten Zeilen entsprechen den Pfeilen in Abb. 3.44 (c). In den Spalten mit gelben Bereichen ist angegeben, wie hoch der Anteil der Trajektorien ist, die an einem STE-Ereignis beteiligt sind. Als Tropopause wird die dynamische 2pvu-Tropopause (PV<sub>TP</sub>) verwendet. Für die Analysen über mehrere Stunden sind zusätzlich die Standardabweichungen angegeben. Die Abkürzungen entsprechen denen aus Abb. 3.44, eine detaillierte Beschreibung befindet sich im Text.

dd_hh		24_01 - 25_23		24_01 - 25_23	
Region		-45-15°E, 30-60°N		-45-15°E, 30-60°N	
PV <sub>TP</sub>		3		2 - 3	
Anzahl		11661±1600		21512±2039	
		abs [#]	rel [%]	abs [#]	rel [%]
ZS	alle	298±120	3±1	507±135	2±1
	US	89±55	27±14	117±71	21±11
	UT	208±79	73±14	281±69	57±9
	UTP			108±26	22±6
ZT	alle	11364±1566	97±1	20144±2064	94±1
	US	2830±1339	25±12	3713±1853	19±10
	UT	8533±1620	75±12	11401±1773	56±5
	UTP			5029±1631	25±5
ZTP	alle			862±131	4±1
	US			187±120	21±13
	UT			488±95	57±9
	UTP			187±29	22±6
US	alle	2920±1386	25±12	4017±2033	19±10
	ZS	89±55	3±1	117±72	3±1
	ZT	2830±1339	97±1	3713±1853	93±2
	ZTP			186±120	4±1
UT	alle	8742±1627	75±12	12171±1822	56±5
	ZS	208±79	2±1	281±69	2±1
	ZT	8533±1620	98±1	11402±1773	94±1
	ZTP			488±95	4±1
UTP	alle			5324±1650	24±6
	ZS			108±25	2±1
	ZT			5028±1631	94±2
	ZTP			186±29	4±1
STE	alle	3038±1360	26±12	3995±1879	19±10
	STT	2830±1339	93±7	3712±1853	89±9
	TST	208±79	7±7	282±69	11±9
kein STE	alle	8622±1591	74±12	17518±3148	81±10
	T→T	8533±1620	99±1	17214±3313	98±1
	S→S	89±55	1±1	304±187	2±1

**Tabelle 3.5:** Analyse von Ursprungs- und Zielregion in Abhängigkeit der Tropopausendefinition. Als dynamische Tropopause (PV<sub>TP</sub>) werden 2 pvu (Analyse in Tab. 3.4), 3 pvu und ein Bereich von 2 - 3 pvu verwendet. Abkürzungen und Definitionen wie in Tab. 3.4 und Abb. 3.44, detaillierte Beschreibung im Text.

punkt in der Troposphäre befinden, auf etwa 80% zu. Unabhängig von der Tropopausendefinition handelt es sich bei etwa 90% aller auftretenden STE-Ereignisse um STT-Ereignisse.

# Kapitel 4

## Schlussfolgerungen

### 4.1 Zusammenfassung und Diskussion

Troposphärisches Ozon hat großen Einfluss auf die Chemie der Troposphäre, zählt zu den wichtigsten Treibhausgasen und ist, bei hohen Konzentrationen an der Erdoberfläche, gesundheitsschädlich für alle Lebewesen. STE-Prozesse, durch die stratosphärische, ozonreiche Luftmassen in die Troposphäre gelangen, sind neben der Photochemie die wichtigste Quelle des troposphärischen Ozons. Die Quantifizierung des Ozoneintrages durch STE-Prozesse ist mit großen Unsicherheiten behaftet und ein aktuelles Forschungsthema.

STT-Prozesse in den Extratropen treten bevorzugt entlang der Zyklonenzugbahnen, speziell in der Umgebung von Tropopausenfalten, auf. Tropopausenfalten entstehen in Zyklonen unterhalb des Strahlstroms, in einem baroklinen Bereich mit hohen, vertikalen Windscherungen und starken, meridionalen Temperaturgradienten. Während die Absinkbewegung der stratosphärischen Luftmassen bei der Entstehung einer Tropopausenfalte zunächst ein reversibler Vorgang ist, können diabatische und turbulente Prozesse an den Rändern der Tropopausenfalten irreversible Mischung zwischen stratosphärischen und troposphärischen Luftmassen verursachen.

Eine detaillierte Analyse der Austauschprozesse an der Tropopausenfalte einer sich über Europa entwickelnden Zyklone bildet den Hauptteil dieser Arbeit. Für die Simulationen wird das Modellsystem MECO(n) genutzt, welches die Analyse des Tracertransportes sowohl auf globaler, als auch auf regionaler Skala, ermöglicht. Die Austauschprozesse lassen sich mit Hilfe künstlicher, stratosphärischer und troposphärischer Tracer identifizieren, die mit Hilfe eines neuen, als Teil dieser Arbeit entwickelten, MESSy-Submodells zusätzlich initialisiert werden.

Mit der Beantwortung der einleitend gestellten Fragen werden die Ergebnisse dieser Arbeit im Folgenden zusammengefasst, mit anderen Studien verglichen und diskutiert:

### 1. Unterscheidet sich der Tracertransport in den beiden MECO(n)-Instanzen?

Verschiedene Studien zeigen, dass der Tracertransport über die Tropopause sehr sensitiv auf die Modellauflösung ist: Durch die Erhöhung der Auflösung wird die numerische Diffusion reduziert und es kommt zu einer Abnahme des Massenflusses über die Tropopause (Cristofanelli et al. 2003; Land et al. 2002; Rind et al. 2007). Gray (2003) separieren zwischen horizontaler und vertikaler Modellauflösung und zeigen, dass eine Erhöhung der vertikalen Auflösung, wie oben beschrieben, zu einer Abnahme des Tracertransportes führt. Durch eine Erhöhung der horizontalen Modellauflösung werden dagegen auch feine Strukturen wie Tropopausenfilamente erfasst und dadurch der Tracertransport über die Tropopause erhöht.

In Kap. 3.3.1 dieser Arbeit wird der Tracertransport in den beiden Modellinstanzen von MECO(n) verglichen. Während die vertikalen Auflösungen von COSMO und EMAC zumindest in der mittleren und oberen Troposphäre ähnlich sind (Kap. 3.2.1), hat COSMO eine deutlich höhere horizontale Auflösung ( $0,125^\circ$ ) als EMAC ( $1,125^\circ$ ). Der Vergleich der Tracermassen, die über die Tropopause unter- bzw. über verschiedene Referenzflächen transportiert werden, zeigt, dass in COSMO erhöhter Tracertransport über die Tropopause stattfindet. Sowohl aus der Stratosphäre in die Troposphäre, als auch umgekehrt, wird in COSMO mehr Tracermasse relativ zu verschiedenen Referenzflächen transportiert (Abb. 3.8). Diese Unterschiede sind umso größer, je weiter die betrachtete Referenzfläche von der Tropopause entfernt ist. Wie in der Studie von Gray (2003) führt auch im MECO(n)-System die höhere, horizontale Auflösung in der COSMO-Instanz zu einem erhöhten Tracertransport aus der Stratosphäre in die mittlere und vor allem in die untere Troposphäre.

### 2. Ist es mit dem Modellsystem MECO(n) möglich, den Transport von Tracern aus der Stratosphäre bis an die Erdoberfläche zu erfassen?

Frühere Studien haben gezeigt, dass Frontpassagen mit dem Abwärtstransport stratosphärischer Luftmassen verbunden sind (Lefohn et al. 2013; Lin et al. 2012). An Bodenmessstationen werden daher hinter Kaltfronten häufig erhöhte Ozonwerte beobachtet. In den hier durchgeführten Simulationen weisen die künstlichen, stratosphärischen Tracer und das Ozon im Bereich von Tropopausenfalten sehr ähnliche Strukturen auf (Abb. 3.10). Durch einen Vergleich der beiden Tracer ist es möglich, Ozonerhöhungen am Boden auf stratosphärische Einträge zurückzuführen (Abb. 3.11). Sowohl in EMAC als auch in COSMO werden künstliche, stratosphärische Tracer während der Frontpassage des Tiefdruckgebietes bis zur untersten Modellschicht transportiert. Die feiner auflösende COSMO-Instanz simuliert dabei höhere

Mischungsverhältnisse und stärkere Gradienten (Abb. 3.7). Wie eine Evaluation dieser Simulationsergebnisse mit Bodenmessungen von Ozon zeigt, stimmen die Ergebnisse von COSMO gut mit den Ozonbeobachtungen überein: Ozonanstiege am Boden, verursacht durch das Absinken stratosphärischer Luftmassen, werden zum richtigen Zeitpunkt, am passenden Ort und mit übereinstimmender Amplitude erfasst. Die gröber auflösende EMAC-Instanz gibt dagegen keinen der durch das STT-Ereignis verursachten Ozonanstiege richtig wieder (Kap. 3.3.1).

Sowohl der Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Bodenmessungen, als auch mit Sondenmessungen zeigt allerdings in beiden Modellinstanzen von MECO(n) im Mittel eine Überschätzung des troposphärischen Ozons. COSMO erhält die Initialisierungswerte von EMAC. Da für EMAC Emissionen der Vorjahre verwendet werden (Kap. 3.2.1), ist nicht von einer exakten Übereinstimmung von Modell und Beobachtung auszugehen. Außerdem wurde bereits in früheren Studien gezeigt, dass in EMAC, im Vergleich zu anderen Modellen, erhöhtes Ozon simuliert wird (Young et al. 2013). Zanis et al. (2014) vergleichen die Ergebnisse einer 12-Jahres-Klimatologie mit Beobachtungsdaten und zeigen für alle Stationen eine Überschätzung des bodennahen Ozons in EMAC.

Trotz der Abweichungen in den absoluten Ozonwerten zeigen die Ergebnisse, dass es mit der COSMO-Instanz möglich ist, die relativen Ozonerhöhungen durch absinkende, stratosphärische Luftmassen wiederzugeben. Dieses Ergebnis unterstreicht die Qualität des MECO(n)-Systems: Während es mit anderen Chemie-modellen noch nicht gelungen ist, durch STT-Prozesse verursachte Ozonanstiege am Boden zeitlich, räumlich und in ihrer Amplitude korrekt zu erfassen (Lin et al. 2012; Lefohn et al. 2013; Zhang et al. 2011), liefert die COSMO-Instanz des MECO(n)-Systems mit den Beobachtungen übereinstimmende Ergebnisse.

### 3. Wie sensitiv sind die Simulationsergebnisse bezüglich Modellauflösung, Tropopausendefinition und Tracerinitialisierung?

Die COSMO-Instanz des Modellsystems liefert mit den Beobachtungen übereinstimmende Ergebnisse (Punkt 2). Wie robust diese Ergebnisse sind wird durch die Variation der Tracerinitialisierung, der vertikalen Modellauflösung und der Definition der dynamischen Tropopause getestet.

Sensitivitätsexperimente zeigen, dass der Transport der Tracer in die untere Troposphäre unabhängig von dem Initialisierungszeitpunkt der künstlichen Tracer ist. Der Zeitraum zwischen Initialisierung und Beobachtungsereignis muss allerdings ausreichend groß sein, damit die Tracer aus der Stratosphäre bis zum Boden transportiert werden können (Abb. 3.24).

In Hofmann et al. (2012) haben wir empfohlen, COSMO möglichst zeitnah am zu beobachteten Ereignis zu initialisieren, da die on-line gekoppelte COSMO-Instanz

des MECO(n)-Systems die synoptische Situation ab dem dritten Simulationstag schlechter erfasst, als eine gewöhnliche, off-line COSMO-Simulation. Dies trifft auch für die in Kap. 3.4 durchgeführten Sensitivitätsstudien zu: Wird die meteorologische Situation durch einen späteren Simulationsstart besser erfasst, so führt dies auch bezüglich des Tracertransportes zu Verbesserungen in COSMO (Abb. 3.25).

In den bisher beschriebenen Simulationen wurde die 2pvu-Fläche als dynamische Tropopause definiert. Findet die Initialisierung der stratosphärischen Tracer relativ zu der dynamischen 4pvu-Tropopause statt, gelangt zwar weniger Tracermasse des stratosphärischen Tracers bis auf die untere Modellschicht, die Strukturen am Boden bleiben aber unverändert (Abb. 3.27). Der Tracertransport aus der Stratosphäre und die dafür verantwortlichen Prozesse (Punkt 4) sind daher unabhängig von der Definition der dynamischen Tropopause.

Auch die Variation der vertikalen Modellauflösung hat vernachlässigbaren Einfluss auf die Repräsentation des Tracertransportes: Wird die vertikale Auflösung in COSMO in der UTLS-Region erhöht, so treten die größten Unterschiede am ersten Simulationstag aufgrund der unterschiedlichen Initialisierungsdaten auf (Abb. 3.29). Die Ozonanstiege nach Frontpassage werden aber in allen Auflösungen der COSMO-Instanz gut erfasst.

#### 4. Welche Prozesse verursachen den STE?

Kapitel 3.3.2 zeigt im Rahmen einer detaillierten Analyse der Fallstudie, dass die Luftmassen, die den beobachteten Ozonanstieg am Boden verursachen, aus einer stratosphärischen Region unterhalb des Strahlstroms kommen. Sie befinden sich bereits 60 Stunden zuvor innerhalb der Tropopausenfalte bei stratosphärischen PV-Werten (Abb. 3.16, oben), ihre STT-Region liegt durchschnittlich auf etwa 700 hPa (Tab. B.1 und B.2). Aufgrund der zeitlich und räumlich begrenzten Simulationsperiode ist es in dieser Studie nicht möglich, die Luftpakete weiter zurückzuverfolgen.

Bourqui und Trepanier (2010) beschreiben, dass die Luftpakete in mit ausgeprägten Tropopausenfalten verbundenen STT-Ereignissen entlang der Isentropen absinken und die Troposphäre erreichen, wenn die Isentropen die Tropopause kreuzen.

Im Gegensatz dazu erfahren die Luftpakete in der hier vorgestellten Fallstudie mit über 4 K/d eine hohe, diabatische Kühlung. Ursache dafür sind wahrscheinlich die an der Vorderseite der Falte entstehenden Wolken, über denen die Strahlungskühlung bis zu 10 K/d betragen kann (Slingo et al. 1982). Die Luftpakete gelangen durch diese diabatischen Prozesse auf niedrigere Isentropen, die bereits in der Troposphäre liegen (Abb. 3.18). Der Austausch wird zusätzlich durch turbulente Prozesse begünstigt, die entlang der Tropopausenfalte stattfinden (Abb.

3.16, unten). Aufgrund dieser turbulenten und diabatischen Prozesse gelangen die Luftpakete auf der nordöstlichen Seite der ausgeprägten Tropopausenfalte in die Troposphäre.

#### **5. Gibt es in der Umgebung der Tropopausenfalte bevorzugte Regionen für STE-Ereignisse und welchen Einfluss hat dabei das Aufenthaltszeitkriterium?**

In einer Lagrangeschen Analyse werden sowohl STT- als auch TST-Ereignisse in der Umgebung der Tropopausenfalte analysiert (Kap. 3.5.1). Die Anzahl der bestimmten STT-Ereignisse liegt dabei um etwa das 3-fache höher, als die Anzahl der TST-Ereignisse (Abb. 3.32). Diese Dominanz der STT-Ereignisse in dieser Region wurde bereits in früheren, klimatologischen Studien festgestellt: Die berechneten STT-Netto-Massenflüsse über die Tropopause sind entlang der Zyklonenzugbahnen maximal über den Kontinenten, in Bereichen in denen Tropopausenfalten auftreten (Abb. 1.3 a, c). Sprenger et al. (2007) berechnen den Massenfluss von STE-Ereignissen in Verbindung mit stratosphärischen Streamern und zeigen ebenfalls die Dominanz der STT-Flüsse gegenüber dem TST.

Während die Anzahl der TST-Ereignisse über den Analysezeitraum von zwei Tagen nahezu konstant ist, stimmt die Anzahl der STT-Ereignisse mit dem Verlauf des minimalen Bodendrucks im Tiefdruckzentrum überein (Abb. 3.5 und 3.32). Je intensiver das Tiefdruckgebiet bzw. je ausgeprägter die Tropopausenfalte ist, desto mehr STT-Ereignisse finden statt. Dieses Ergebnis stimmt mit der Studie von Cooper et al. (2004) überein, in der 57% der Austauschprozesse einer Falte stattfinden, während die Falte ihre maximale Tiefe besitzt.

Um zu bestimmen, welchen Einfluss die Wahl des Aufenthaltszeitkriteriums (Kap. 1.4) auf die Identifizierung von STE-Ereignissen hat, werden alle Trajektorien zunächst ohne dieses Kriterium berechnet (Kap. 3.5.1). 93% aller Trajektorien, entlang denen ein TST-Ereignis stattfindet, enden zwei Tage später erneut in der Troposphäre. Während sich die TST-Punkte der schnell in die Troposphäre zurückkehrenden Trajektorien entlang der gesamten dynamischen Tropopause verteilen, liegen die TST-Regionen von Trajektorien mit stratosphärischen Aufenthaltszeiten über 30 Stunden vorzugsweise oberhalb des Strahlstroms (Abb. 3.41). Mehr als die Hälfte der Luftpakete steigt während dem TST-Ereignis diabatisch ab, d.h. die Luftpakete werden von hohen zu niedrigen Isentropen transportiert (Abb. 3.40). Dies stimmt überein mit der theoretischen Studie von Juckes (2000), die TST-Prozesse im Zusammenhang mit diabatischem Aufsteigen beschreibt.

Bei den STT-Trajektorien kehren 60% aller Trajektorien wieder in die Troposphäre zurück, 61% davon innerhalb der ersten sechs Stunden (Abb. 3.34). Eine Aufenthaltszeit von einer Stunde wurde bei der Analyse von Beginn an ausgeschlossen

und würde diesen Anteil nochmals erhöhen. Dieses Ergebnis liegt im Bereich der 15-Jahres-Klimatologie von James et al. (2003). Dort wurde gezeigt, dass durchschnittlich 90% aller Trajektorien innerhalb von sechs Stunden wieder in die Stratosphäre zurückkehren. STT-Trajektorien mit einer geringen Aufenthaltszeit, starten in höheren Regionen und mit höheren PV-Werten als STT-Trajektorien die troposphärisch bleiben (Abb. 3.34). Letztere haben ihren Ursprung in Regionen unterhalb von 400 hPa, ihr STT-Punkt liegt durchschnittlich in Regionen mit sehr niedriger Tropopause unterhalb von 600 hPa.

## 6. **Auf welchen Zeitskalen findet Mischung statt?**

In verschiedenen Studien wird vermutet, dass die in Punkt 5 beschriebenen Trajektorien mit einer kurzen Aufenthaltszeit großteils durch numerische Diffusion oder Interpolationsfehler bei Trajektorienberechnung in der Umgebung der stark strukturierten Tropopause entstehen (Wernli und Bourqui 2002, James et al. 2003). Daher werden sie in Trajektorienstudien meistens durch die Verwendung eines Mindestaufenthaltszeitkriteriums ausgeschlossen. Es wird vermutet, dass die Mischung entlang dieser Trajektorien gering und ihr Einfluss auf die troposphärische Chemie damit nicht signifikant ist (Wernli und Bourqui 2002, James et al. 2003, Bourqui 2006).

In Kap. 3.5.1 wird die Mischung entlang der STT-Trajektorien analysiert, um diese Vermutung zu überprüfen. Es wird gezeigt, dass sich die Tracereigenschaften entlang von Trajektorien mit einer Aufenthaltszeit unter zehn Stunden in der Troposphäre im Mittel nicht ändern (Abb. 3.37). Sie sind damit tatsächlich nicht signifikant für die Chemie der Troposphäre.

Bourqui (2006) hat Trajektorien auf Daten unterschiedlicher horizontaler und zeitlicher Auflösungen gerechnet, um ein Aufenthaltszeitkriterium festzulegen. Die Anzahl der Trajektorien, die sich nur wenige Stunden in der Troposphäre aufhalten, konvergiert in den unterschiedlichen Berechnungen nach acht Stunden (vgl. Abb. 13 in Bourqui 2006). Basierend auf dieser Analyse wird ein Aufenthaltszeitkriterium größer acht Stunden empfohlen. Mit unserer Studie, die auf der Analyse der Änderung der Mischungsverhältnisse von Tracern entlang der Trajektorien basiert, kann dieses Ergebnis bestätigt werden.

Haben die Luftmassen dagegen eine höhere Aufenthaltszeit, dann findet Mischung statt und die Chemie der Troposphäre wird durch den Eintrag stratosphärischer Eigenschaften beeinflusst (Abb. 3.36). Durch die Verwendung eines Mindestaufenthaltszeitkriteriums größer zehn Stunden werden Trajektorien ausgeschlossen, welche die Troposphäre durch den Eintrag stratosphärischer Eigenschaften beeinflussen.

Entlang dieser Trajektorien nehmen die Mischungsverhältnisse der stratosphä-

rischen Tracer nach dem STT kontinuierlich ab (Abb. 3.37). Bereits bei einer Aufenthaltszeit von einem Tag verlieren die Luftpakete bis zu 10% ihrer ursprünglichen Eigenschaften. Da chemische und dynamische Tropopause speziell in dem Bereich von Tropopausenfalten voneinander abweichen, haben die Luftmassen am STT-Punkt bereits keine rein stratosphärischen Tracereigenschaften mehr (Abb. 3.34). An der Falte hat offensichtlich bereits Mischung zwischen troposphärischer und stratosphärischer Luft stattgefunden.

## 7. Wie effektiv ist die Mischung an einer Tropopausenfalte?

Um die Effektivität der Mischung an Tropopausenfalten zu quantifizieren, wird das Verhältnis zwischen TST- und STT-Prozessen an Tropopausenfalten bestimmt, indem die Initialisierung von Trajektorien direkt in der Tropopausenfalte stattfindet (Kap. 3.5.2). Shapiro (1980) hat auf der Grundlage von Messdaten abgeschätzt, dass die Hälfte des Ozons, das in eine Tropopausenfalte transportiert wird, später auch in die Troposphäre gelangt. Für Tropopausenfalten wird daher eine Effektivitätsrate von 50% bestimmt. Cooper et al. (2004) zeigen mit einer Trajektorienstudie, dass 22% der Luftmasse in einer Falte innerhalb von 7,5 Tagen in die Troposphäre transportiert werden. Dieser Anteil steigt auf 90% innerhalb von zwei Tagen, wenn ausschließlich der untere Teil (unter 600 hPa) der Tropopausenfalte betrachtet wird.

In der Studie in Kap. 3.5.2 werden Trajektorien in der Falte unterhalb von 6000 m initialisiert, was etwa einem Druckniveau von 450 hPa entspricht (Abb. 3.43). Es wird gezeigt, dass fast die gesamten Luftmassen (94%), die sich zu einem bestimmten Zeitpunkt in einer Tropopausenfalte befinden, zwei Tage später in der Troposphäre enden. Dieses Ergebnis ist unabhängig von der Definition der dynamischen Tropopause: Während in Cooper et al. (2004) die 1,5 pvu-Fläche Anwendung findet, führt die Studie in Kap. 3.5.2, in der sowohl die 2pvu-, als auch die 3pvu-Tropopause betrachtet werden, zu demselben Ergebnis (Tab. 3.4 und 3.5). Gegenüber der Studie von Cooper et al. (2004) bezieht sich die hier vorgestellte Analyse nicht nur auf eine einzelne, ausgeprägte Tropopausenfalte, sondern auf das gesamte Gebiet und damit auch auf schmale Tropopausenfilamente (Abb. 3.43).

Shapiro (1980) vermutet, dass die Luftmassen in der Tropopausenfalte zu 50% troposphärische Tracereigenschaften haben. Bei Verwendung der 2pvu-Tropopause stimmt dieses Ergebnis mit unseren Studien überein: In Kap. 3.5.1 wurde gezeigt, dass die Luftmassen, die sich in der Tropopausenfalte befinden, keine vollständigen stratosphärischen Eigenschaften haben (Abb. 3.34). Das Mischungsverhältnis des stratosphärischen Tracers, der zu Simulationsbeginn mit 100 ppb initialisiert wurde, beträgt beispielsweise zum STT-Zeitpunkt bei 52% der Trajektorien weniger als

50 ppb (Abb. 3.34 m). Die Analyse in Kap. 3.5.2 ergab, dass diese Luftmassen zu nahezu gleichen Teilen aus der Troposphäre (56%) bzw. aus der Stratosphäre (44%) kommen (Tab. 3.4 und 3.5). Dieses Verhältnis ist allerdings abhängig von der Wahl der Tropopausendefinition. Der Anteil der Trajektorien mit stratosphärischer Herkunft wird geringer bei Betrachtung der 3pvu-Tropopause (25%) bzw. eines Tropopausenbandes (19%). Ein Viertel (24%) der Luftpakete befindet sich bereits 24 Stunden zuvor innerhalb des Tropopausenbandes.

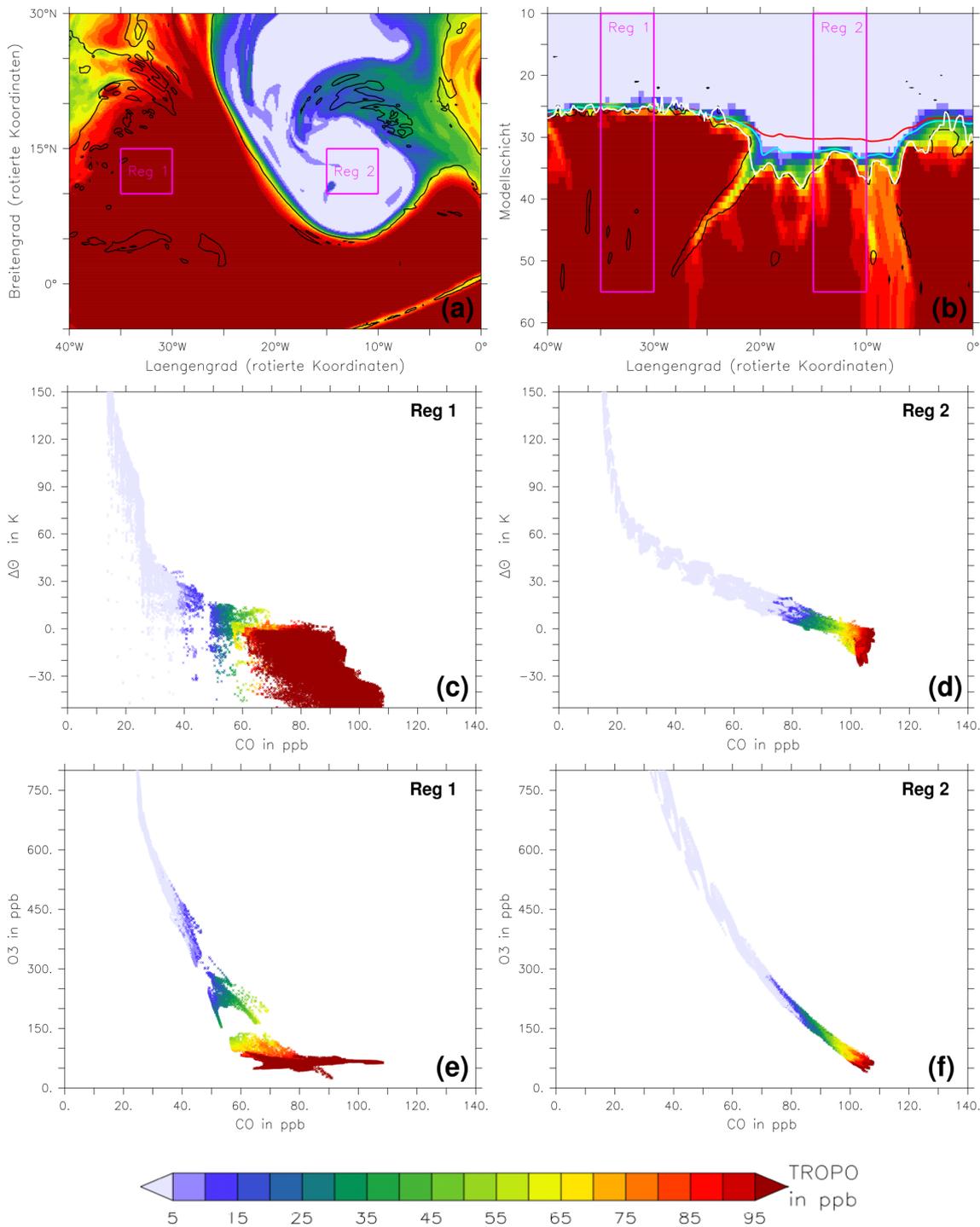
Auch der Anteil der an einem STE-Prozess beteiligten Luftpakete, die sich zu einem bestimmten Zeitpunkt innerhalb der Tropopausenfalte befinden, ist abhängig von der Tropopausendefinition. Bei der Wahl der 2pvu-Tropopause findet entlang von 44% der Trajektorien ein STE-Ereignis statt. Betrachtet man die 3pvu-Tropopause oder das Tropopausenband nimmt der Anteil der Luftpakete, die sich sowohl am Start- als auch am Zielpunkt in der Troposphäre befinden, auf etwa 80% zu. Dass es sich bei etwa 90% aller auftretenden STE-Ereignisse um STT-Ereignisse handelt, ist dagegen unabhängig von der Tropopausendefinition.

## 4.2 Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde gezeigt, dass es mit dem MECO(n)-Systems möglich ist, den Tracertransport, insbesondere STE-Prozesse, realistisch wiederzugeben. Die Vergleichbarkeit von Modell- und Messdaten sind Grundvoraussetzung, um z.B. Daten von Messkampagnen auszuwerten und zu interpretieren. Das MECO(n)-Modellsystem stellt hierfür ein geeignetes Werkzeug dar: Während in der EMAC-Instanz eine konsistente, globale Atmosphärenchemie berechnet wird, stellt die COSMO-Instanz eine Art „Zoom“- Funktion dar, mit der sich die für das betrachtete Ereignis verantwortlichen Prozesse identifizieren lassen. Auf diese Weise lassen sich mit MECO(n) beispielsweise für zukünftige Flugzeugmesskampagnen hochaufgelöste, chemische und dynamische Modelldaten gewinnen, die eine bessere Interpretation der Messdaten ermöglichen.

Des Weiteren hat die Analyse gezeigt, dass der Eintrag von stratosphärischen, ozonreichen Luftmassen in die untere Troposphäre in globalen, grob auflösenden Modellen unterschätzt wird. Mit diesen globalen Atmosphärenchemiemodellen werden üblicherweise Klimasimulationen gerechnet. Eine weitere Studie mit dem MECO(n)-System könnte Aufschluss geben, welchen Effekt diese Unterschätzung des Ozoneintrages auf die globale, troposphärische Chemie und damit auf die Ergebnisse der Klimasimulationen hat: Wie in Kap. 3.3 gezeigt, ermöglichen COSMO-Instanzen in Bereichen der Zyklonenzugbahnen eine verbesserte Erfassung der STE-Prozesse an Tropopausenfalten und des damit verbundenen, stratosphärischen Ozoneintrages in die untere Troposphäre. Aktuell wird eine 2-Wege-Kopplung in MECO(n) entwickelt, mit der in Zukunft die Rückwirkungen der regionalen COSMO-Instanzen auf die globale Ebene erlaubt und deren Auswirkungen in Klimasimulationen analysiert werden können. Mit einer solchen Studie könnte bestimmt werden, welchen Einfluss die Unterschätzung des stratosphärischen Ozoneintrages auf globaler Skala hat.

Die Lagrangesche Analyse der TST-Prozesse hat gezeigt, dass die kurze Simulationsdauer von fünf Tagen und die darauf basierenden 48h-Trajektorien nicht ausreichen, um irreversible TST-Prozesse zu diagnostizieren und vollständig zu analysieren. Als qualitatives Maß zur Diagnose irreversibler Mischung hat sich die Analyse von Tracerkorrelationen und -profilen etabliert (Fischer et al. 2000; Hoor et al. 2002; Pan et al. 2006). In Tracerprofilen aus Flugzeugmessungen, bei denen als Vertikalkoordinate die potentielle Temperatur relativ zur lokalen Tropopause verwendet wird, lässt sich etwa 20 - 30 K oberhalb der dynamischen Tropopause ein Knick beobachten. Dieser ist die Obergrenze einer Mischungsschicht junger troposphärischer und stratosphärischer Luftmassen (Hoor et al. 2004). Welche Prozesse für die Entstehung dieser Schicht verantwortlich sind und warum sie in Tracerprofilen so gut definiert ist, ist bislang unbekannt. Dass in zukünftigen Studien mit MECO(n) diese Schicht detaillierter analysiert werden könnte, zeigen die in Abb. 4.1 dargestellten ersten Analyseansätze: Die Form der Tracerprofile (c, d) stimmt qualitativ mit den Beobachtungen überein (Abb. 6 a in Hoor et al. 2004). Analog zu den gemessenen Profilen weisen auch die simulierten Profile,



**Abbildung 4.1:** Troposphärischer Tracer (TROPO<sub>i2300</sub>, farbig, in ppb) auf 315 K (a), im vertikalen Querschnitt entlang von 12,5°N (b), sowie in Tracerprofilen (c, d) und Tracerkorrelationen (e, f). Konturen kennzeichnen die dynamische Tropopause (PV = 2 pvu, schwarz), die berechnete lokale Tropopause ( $\Delta\theta = 0$  K, weiß) und Isolinien für Ozon (O<sub>3</sub> = 200 ppb, türkis) und Kohlenstoffmonoxid (CO = 60 ppb, rot). In den Tracerprofilen von CO (in ppb) wird als Vertikalkoordinate die potentielle Temperatur relativ zur lokalen Tropopause verwendet ( $\Delta\theta$ , in K) (c, d). Die Tracerkorrelationen zeigen O<sub>3</sub> in Abhängigkeit von CO (in ppb). Die Regionen, für welche die Profile und Korrelationen erstellt wurden, sind in (a) und (b) gekennzeichnet.

wenn auch bei höheren  $\Delta\Theta$ -Werten, einen Knick auf. Mit Hilfe des künstlichen, troposphärischen Tracers könnten in neuen Simulationen mit längeren Simulationsperioden die Zeitskalen bestimmt werden, auf denen die Mischung troposphärischer Luftmassen in die Mischungsschicht bzw. in darüberliegende Luftschichten stattfindet. Pan et al. (2006) zeigen, dass beobachtete Mischungslinien, die in Tracerkorrelationen kürzlich aufgetretene Mischung kennzeichnen, in Simulationen reproduziert werden können. Bislang ist es aber unbekannt, wie und auf welchen Zeitskalen aus den Mischungslinien die beobachteten Tracerkorrelationen entstehen und wie sich letztere entwickeln. Auch diese Entwicklung könnte mit Hilfe der künstlichen Tracer analysiert werden. Die Dauer der fünftägigen Simulation reicht zwar zur Bildung einzelner Mischungslinien in Korrelationen des stratosphärischen und troposphärischen Tracers aus (nicht dargestellt), um daraus die Entstehung der beobachteten Tracerprofile zu analysieren sind auch hier Studien mit längeren Simulationsperioden notwendig. Neben der Entstehung von Mischungsschicht und Korrelation ist auch deren Entwicklung interessant. Erste Analysen zeigen, dass die Form stark von der synoptischen Situation abhängt: Profile und Korrelationen im Bereich eines Troges (Abb. 4.1, Region 2) unterscheiden sich aufgrund ihrer kompakteren Struktur deutlich von solchen, die außerhalb des Trogbereiches liegen (Abb. 4.1, Region 1).

Sowohl bezüglich der STE-Prozesse, als auch über die Effektivität der Mischung an einer Tropopausenfalte wurden in dieser Arbeit neue Erkenntnisse erlangt. Letztendlich kann man aber keine Aussage darüber machen, wie repräsentativ die Ergebnisse der hier betrachteten Fallstudie für Austauschprozesse an Tropopausenfalten in anderen Regionen, zu anderen Jahreszeiten oder in Zyklonen mit weniger stark ausgeprägten Tropopausenfalten sind. Die Berechnung weiterer Fallstudien ist daher eine notwendige Voraussetzung, um die hier gefundenen Ergebnisse zu überprüfen.



## Anhang A

# Übersicht der aktiven MESSy-Submodelle

Submodell	Kurzbeschreibung	Referenzen
AIRSEA	Austausch von Tracern zwischen Luft und Ozean	Pozzer et al. (2006)
CLOUD	Wolkenberechnung	Roeckner et al. (2006), Jöckel et al. (2006)
CONVECT	Konvektionsparametrisierungen	Tost et al. (2006b)
CVTRANS	Konvektiver Tracertransport	Tost (2006)
DDEP	Trockene Deposition von Tracern und Aerosolen	Kerkweg et al. (2006a)
GWAVE	Parametrisierungen nicht-orographischer Schwerewellen	Roeckner et al. (2003)
H2O	Stratosphärischer Wasserdampf und seine Rückkopplung	Jöckel et al. (2006)
JVAL	Photolyseraten	Landgraf und Crutzen (1998), Jöckel et al. (2006)
LNOX	NO <sub>x</sub> -Produktion durch Blitze	Tost et al. (2007), Jöckel et al. (2010)
M7	Aerosol-Mikrophysik	Vignati et al. (2004), Kerkweg et al. (2008)
MECCA	Troposphärische und stratosphärische Chemieberechnung	Sander et al. (2011), Jöckel et al. (2010)
MSBM	Mehrphasenchemie der Stratosphäre	Jöckel et al. (2010)
OFFEMIS	Vorgeschriebene Emissionen für Tracer und Aerosole	Kerkweg et al. (2006b)
ONEMIS	Während der Simulation berechnete Emissionen für Tracer und Aerosole	Kerkweg et al. (2006b)
PTRAC	Definition prognostischer Tracer	Jöckel et al. (2008)

Fortsetzung auf nächster Seite

Submodell	Kurzbeschreibung	Referenzen
PTRACINI	Initialisierung prognostischer Tracer unter bestimmten Bedingungen	Kap. 2.3.1
QBO	Newtonsche Relaxation der quasi-biennale Oszillation (QBO)	Giorgetta und Bengtsson (1999), Jöckel et al. (2006)
RAD4ALL	Strahlungsberechnung	Roeckner et al. (2006), Jöckel et al. (2006)
SCAV	Nasse Deposition und Scavenging von Tracern und Aerosolen	Tost et al. (2006a)
SCOUT	Stationäre, hochfrequente Ausgabe der Modelldaten	Jöckel et al. (2010)
SEDI	Sedimentieren von Aerosolen	Kerkweg et al. (2006a)
TNUDGE	Newtonsche Relaxation benutzerdefinierter Tracer	Kerkweg et al. (2006b)
TREXP	Initialisierung von Tracern an Punktquellen mit Zerfallszeiten	Jöckel et al. (2010)
TROPOP	Tropopausenberechnung und weitere Diagnostik	Jöckel et al. (2006)
VISO	Isoflächen und -karten	Jöckel et al. (2010)

**Tabelle A.1:** Referenzen und Kurzbeschreibungen zu den verwendeten MESSy-Submodellen (prozessorientiert und diagnostisch) in Anlehnung an Jöckel et al. (2010). Ausführliche Beschreibungen können in den angegebenen Referenzen und auf <http://www.messy-interface.org/> (Stand: 24.01.2014) nachgelesen werden.

## Anhang B

### Entwicklung verschiedener Variablen entlang von Trajektorien

dd_hh	P [hPa]	$\Theta$ [K]	PV [pvu]	QV [g/kg]	STRATO [ppb]	O <sub>3</sub> [ppb]	Wind [m/s]
24_01	608 ± 80	290 ± 2	3,22 ± 0,63	0,15 ± 0,17	94,1 ± 16,0	90,6 ± 10,5	27,0 ± 4,7
24_02	617 ± 79	290 ± 2	3,36 ± 0,70	0,17 ± 0,19	91,3 ± 17,0	90,4 ± 10,6	26,8 ± 4,7
24_03	627 ± 79	289 ± 2	3,50 ± 0,83	0,18 ± 0,21	88,8 ± 16,7	90,1 ± 10,6	26,7 ± 4,7
24_04	636 ± 79	289 ± 2	3,63 ± 0,86	0,21 ± 0,22	85,5 ± 16,3	89,5 ± 10,4	26,6 ± 4,8
24_05	647 ± 79	289 ± 2	3,89 ± 1,05	0,27 ± 0,25	82,3 ± 15,5	88,7 ± 10,0	26,7 ± 5,0
24_06	656 ± 79	289 ± 2	4,23 ± 1,37	0,37 ± 0,34	78,5 ± 15,1	87,7 ± 9,6	26,8 ± 5,3
24_07	665 ± 79	288 ± 3	4,51 ± 1,69	0,48 ± 0,46	75,1 ± 15,3	86,7 ± 9,6	26,4 ± 5,5
24_08	674 ± 80	287 ± 3	4,97 ± 1,98	0,64 ± 0,56	70,4 ± 15,3	85,3 ± 9,2	25,7 ± 5,3
24_09	683 ± 81	287 ± 2	4,94 ± 1,95	0,88 ± 0,64	61,9 ± 14,8	82,3 ± 8,9	24,4 ± 5,0
24_10	694 ± 83	286 ± 2	4,43 ± 1,74	1,15 ± 0,70	53,5 ± 13,4	79,2 ± 8,6	23,0 ± 4,7
24_11	707 ± 84	285 ± 2	3,08 ± 0,91	1,38 ± 0,73	46,1 ± 11,4	76,4 ± 7,7	21,9 ± 4,4
24_12	721 ± 86	285 ± 2	1,30 ± 0,47	1,65 ± 0,85	39,3 ± 10,4	73,7 ± 7,3	20,7 ± 4,3
24_13	733 ± 87	285 ± 2	1,04 ± 0,53	1,81 ± 0,90	36,0 ± 9,3	72,6 ± 6,6	20,0 ± 4,2
24_14	744 ± 88	285 ± 2	0,79 ± 0,52	1,95 ± 0,96	33,5 ± 8,5	71,6 ± 6,2	19,4 ± 4,2
24_15	753 ± 90	285 ± 2	0,62 ± 0,47	2,07 ± 1,01	32,0 ± 8,1	71,1 ± 5,9	19,0 ± 4,1
24_16	763 ± 92	285 ± 2	0,51 ± 0,46	2,19 ± 1,06	31,0 ± 7,7	70,8 ± 5,7	18,7 ± 4,1
24_17	772 ± 93	285 ± 2	0,43 ± 0,44	2,29 ± 1,11	30,2 ± 7,7	70,6 ± 5,5	18,4 ± 4,1
24_18	781 ± 93	285 ± 2	0,37 ± 0,42	2,39 ± 1,15	29,7 ± 7,9	70,5 ± 5,5	17,9 ± 4,2
24_19	790 ± 92	285 ± 2	0,34 ± 0,41	2,47 ± 1,19	29,3 ± 7,9	70,5 ± 5,4	17,5 ± 4,2
24_20	797 ± 91	285 ± 2	0,33 ± 0,41	2,57 ± 1,21	28,8 ± 7,8	70,4 ± 5,1	17,0 ± 4,2
24_21	805 ± 90	285 ± 1	0,32 ± 0,42	2,65 ± 1,24	28,3 ± 7,6	70,4 ± 4,9	16,8 ± 4,2
24_22	812 ± 89	285 ± 1	0,31 ± 0,41	2,74 ± 1,27	27,9 ± 7,6	70,3 ± 4,8	16,6 ± 4,3
24_23	819 ± 88	285 ± 1	0,32 ± 0,43	2,83 ± 1,30	27,4 ± 7,8	70,2 ± 4,9	16,5 ± 4,5
25_00	826 ± 87	285 ± 1	0,32 ± 0,44	2,91 ± 1,33	27,1 ± 8,0	70,2 ± 5,0	16,4 ± 4,7
25_01	833 ± 86	285 ± 1	0,31 ± 0,43	3,02 ± 1,37	26,7 ± 8,2	70,1 ± 5,1	16,3 ± 4,9

Fortsetzung auf nächster Seite

dd_hh	P [hPa]	$\Theta$ [K]	PV [pvu]	QV [g/kg]	STRATO [ppb]	O <sub>3</sub> [ppb]	Wind [m/s]
25_02	838 ± 85	285 ± 1	0,30 ± 0,42	3,13 ± 1,40	26,4 ± 8,2	70,0 ± 5,2	16,1 ± 5,0
25_03	843 ± 84	285 ± 1	0,27 ± 0,38	3,23 ± 1,43	26,1 ± 8,3	69,9 ± 5,1	16,0 ± 5,1
25_04	848 ± 84	285 ± 1	0,28 ± 0,38	3,34 ± 1,45	25,8 ± 8,3	69,8 ± 5,2	15,7 ± 5,3
25_05	854 ± 83	285 ± 1	0,26 ± 0,33	3,45 ± 1,46	25,5 ± 8,3	69,7 ± 5,1	15,3 ± 5,3
25_06	860 ± 83	285 ± 1	0,24 ± 0,32	3,56 ± 1,47	25,1 ± 8,1	69,5 ± 4,9	14,8 ± 5,4
25_07	867 ± 84	285 ± 1	0,22 ± 0,32	3,69 ± 1,46	24,7 ± 7,8	69,3 ± 4,6	14,2 ± 5,5
25_08	874 ± 84	285 ± 1	0,20 ± 0,30	3,82 ± 1,45	24,2 ± 7,6	69,0 ± 4,2	13,5 ± 5,6
25_09	882 ± 83	285 ± 1	0,18 ± 0,27	3,93 ± 1,44	23,8 ± 7,5	68,8 ± 4,0	12,7 ± 5,5
25_10	888 ± 82	286 ± 1	0,17 ± 0,28	4,05 ± 1,43	23,5 ± 7,4	68,7 ± 3,8	12,0 ± 5,5
25_11	894 ± 83	286 ± 1	0,16 ± 0,31	4,17 ± 1,41	23,2 ± 7,3	68,7 ± 3,6	11,2 ± 5,4
25_12	900 ± 82	286 ± 1	0,15 ± 0,25	4,28 ± 1,41	22,9 ± 7,2	68,7 ± 3,5	10,5 ± 5,5
25_13	905 ± 81	286 ± 1	0,14 ± 0,24	4,37 ± 1,40	22,6 ± 7,1	68,7 ± 3,4	10,0 ± 5,6
25_14	911 ± 80	286 ± 1	0,13 ± 0,24	4,47 ± 1,39	22,4 ± 7,0	68,6 ± 3,3	9,7 ± 5,6
25_15	916 ± 79	286 ± 1	0,13 ± 0,25	4,56 ± 1,39	22,1 ± 7,0	68,5 ± 3,2	9,5 ± 5,6
25_16	921 ± 78	286 ± 1	0,12 ± 0,24	4,64 ± 1,40	21,8 ± 6,9	68,4 ± 3,2	9,4 ± 5,5
25_17	926 ± 77	286 ± 1	0,11 ± 0,23	4,73 ± 1,40	21,6 ± 6,8	68,3 ± 3,2	9,3 ± 5,3
25_18	930 ± 75	287 ± 1	0,11 ± 0,22	4,82 ± 1,42	21,3 ± 6,8	68,2 ± 3,1	9,1 ± 5,1
25_19	934 ± 74	287 ± 1	0,11 ± 0,22	4,92 ± 1,43	21,1 ± 6,8	68,0 ± 3,0	8,9 ± 4,9
25_20	938 ± 73	287 ± 1	0,11 ± 0,23	5,02 ± 1,44	20,8 ± 6,7	67,8 ± 3,0	8,6 ± 4,7
25_21	942 ± 72	287 ± 1	0,10 ± 0,22	5,11 ± 1,45	20,6 ± 6,6	67,6 ± 2,9	8,3 ± 4,6
25_22	944 ± 71	287 ± 1	0,10 ± 0,21	5,19 ± 1,47	20,3 ± 6,4	67,5 ± 2,9	8,0 ± 4,5
25_23	947 ± 69	287 ± 1	0,09 ± 0,21	5,26 ± 1,47	20,0 ± 6,3	67,3 ± 2,9	7,7 ± 4,5
26_00	950 ± 69	287 ± 1	0,09 ± 0,22	5,32 ± 1,48	19,7 ± 6,1	67,1 ± 3,0	7,5 ± 4,4
26_01	952 ± 68	287 ± 1	0,09 ± 0,22	5,38 ± 1,49	19,4 ± 5,9	66,9 ± 3,0	7,2 ± 4,4
26_02	954 ± 67	287 ± 1	0,09 ± 0,21	5,44 ± 1,50	19,2 ± 5,7	66,7 ± 3,1	6,9 ± 4,3
26_03	957 ± 66	287 ± 1	0,09 ± 0,21	5,50 ± 1,50	18,9 ± 5,6	66,6 ± 3,2	6,6 ± 4,2
26_04	959 ± 65	287 ± 1	0,09 ± 0,21	5,55 ± 1,48	18,6 ± 5,5	66,4 ± 3,3	6,4 ± 4,1
26_05	961 ± 65	287 ± 1	0,09 ± 0,21	5,60 ± 1,47	18,4 ± 5,3	66,3 ± 3,3	6,2 ± 4,1
26_06	962 ± 65	287 ± 1	0,09 ± 0,22	5,65 ± 1,45	18,1 ± 5,1	66,1 ± 3,5	6,0 ± 4,1
26_07	964 ± 65	287 ± 1	0,09 ± 0,22	5,70 ± 1,45	17,8 ± 4,9	66,0 ± 3,7	5,9 ± 4,1
26_08	966 ± 64	287 ± 1	0,08 ± 0,20	5,75 ± 1,45	17,5 ± 4,7	65,8 ± 4,0	5,9 ± 4,0
26_09	967 ± 65	287 ± 1	0,07 ± 0,18	5,81 ± 1,45	17,3 ± 4,5	65,9 ± 3,9	5,8 ± 4,0
26_10	969 ± 64	287 ± 1	0,07 ± 0,20	5,86 ± 1,45	17,0 ± 4,3	66,1 ± 3,7	5,8 ± 3,9
26_11	970 ± 64	287 ± 1	0,07 ± 0,18	5,92 ± 1,44	16,8 ± 4,1	66,4 ± 3,7	5,9 ± 3,8
26_12	971 ± 63	287 ± 1	0,07 ± 0,29	5,98 ± 1,45	16,6 ± 3,9	66,6 ± 3,8	5,9 ± 3,8

**Tabelle B.1:** Mittelwerte und Standardabweichungen für Variablen entlang der Trajektorien, deren STT-Punkt am 24. März, 12 UTC liegt. Angegeben sind Tag und Stunde (dd\_hh), Druck (P, in hPa), potentielle Temperatur ( $\Theta$ , in K), potentielle Vorticity (PV, in pvu), spezifische Feuchte (QV, in g/kg), stratosphärischer Tracer (STRATO, in ppb), Ozon (O<sub>3</sub>, in ppb) und horizontale Windgeschwindigkeit (Wind, in m/s).

dd_hh	P [hPa]	$\Theta$ [K]	PV [pvu]	QV [g/kg]	STRATO [ppb]	O <sub>3</sub> [ppb]	Wind [m/s]
24_01	488 ± 109	293 ± 3	3,25 ± 0,73	0,05 ± 0,05	87,9 ± 19,7	105,2 ± 16,6	25,3 ± 8,6
24_02	495 ± 110	293 ± 3	3,39 ± 0,75	0,06 ± 0,08	86,6 ± 19,3	105,1 ± 16,9	25,2 ± 8,3
24_03	502 ± 111	293 ± 3	3,51 ± 0,80	0,08 ± 0,11	85,7 ± 18,4	105,0 ± 17,0	25,3 ± 8,3
24_04	510 ± 112	293 ± 3	3,65 ± 0,89	0,09 ± 0,14	84,0 ± 17,4	104,8 ± 17,2	25,7 ± 8,3
24_05	518 ± 114	293 ± 3	3,80 ± 0,97	0,10 ± 0,16	82,5 ± 16,6	104,8 ± 17,3	26,4 ± 8,4
24_06	526 ± 114	293 ± 3	4,00 ± 1,09	0,11 ± 0,17	81,1 ± 15,8	104,8 ± 17,3	27,3 ± 8,5
24_07	535 ± 116	293 ± 3	4,27 ± 1,26	0,12 ± 0,18	79,2 ± 14,9	104,6 ± 17,1	27,8 ± 8,5
24_08	545 ± 117	292 ± 3	4,46 ± 1,44	0,15 ± 0,22	77,0 ± 15,0	104,1 ± 16,8	27,9 ± 8,4
24_09	553 ± 117	292 ± 3	4,60 ± 1,63	0,18 ± 0,26	74,5 ± 15,7	103,4 ± 16,3	27,7 ± 8,5
24_10	561 ± 117	292 ± 3	4,69 ± 1,86	0,21 ± 0,30	71,6 ± 16,2	102,6 ± 15,8	27,4 ± 8,7
24_11	569 ± 118	292 ± 3	4,80 ± 2,01	0,24 ± 0,35	69,2 ± 16,6	102,1 ± 15,5	27,1 ± 8,7
24_12	577 ± 120	292 ± 3	4,91 ± 2,01	0,28 ± 0,40	66,8 ± 16,4	101,5 ± 15,5	26,9 ± 8,6
24_13	584 ± 122	292 ± 3	5,25 ± 2,13	0,34 ± 0,46	64,6 ± 17,2	100,9 ± 15,8	26,5 ± 8,4
24_14	593 ± 124	292 ± 3	5,33 ± 2,10	0,46 ± 0,52	61,0 ± 18,3	99,5 ± 16,1	26,0 ± 8,2
24_15	602 ± 124	291 ± 3	5,34 ± 1,92	0,58 ± 0,59	57,4 ± 19,3	97,6 ± 16,2	25,4 ± 7,9
24_16	610 ± 124	291 ± 3	5,38 ± 2,04	0,67 ± 0,64	54,3 ± 19,7	95,6 ± 15,7	25,0 ± 7,7
24_17	616 ± 124	291 ± 3	5,25 ± 2,17	0,76 ± 0,72	51,2 ± 20,0	93,8 ± 15,5	24,7 ± 7,6
24_18	623 ± 124	290 ± 3	5,08 ± 2,19	0,87 ± 0,81	47,7 ± 19,1	91,5 ± 14,8	24,2 ± 7,4
24_19	630 ± 124	290 ± 2	4,83 ± 1,77	0,98 ± 0,89	44,0 ± 18,0	89,2 ± 13,8	23,8 ± 7,0
24_20	637 ± 124	290 ± 2	4,56 ± 1,72	1,11 ± 1,01	40,7 ± 17,3	87,1 ± 13,5	23,0 ± 6,2
24_21	645 ± 125	289 ± 2	3,99 ± 1,49	1,26 ± 1,16	37,5 ± 17,1	84,8 ± 13,4	22,2 ± 5,6
24_22	653 ± 126	289 ± 2	3,26 ± 1,00	1,38 ± 1,27	34,8 ± 17,1	82,8 ± 13,5	21,5 ± 5,0
24_23	662 ± 127	289 ± 2	2,51 ± 0,54	1,48 ± 1,32	32,5 ± 17,0	81,0 ± 13,2	20,9 ± 4,5
25_00	670 ± 128	289 ± 2	1,61 ± 0,35	1,60 ± 1,42	30,1 ± 16,0	78,9 ± 12,2	20,4 ± 4,4
25_01	677 ± 129	288 ± 2	1,18 ± 0,45	1,71 ± 1,50	28,1 ± 15,2	77,2 ± 11,5	20,4 ± 4,6
25_02	682 ± 130	288 ± 2	1,03 ± 0,50	1,80 ± 1,54	26,8 ± 14,5	76,2 ± 11,0	20,4 ± 4,9
25_03	687 ± 132	288 ± 2	0,87 ± 0,47	1,89 ± 1,60	25,4 ± 13,8	75,1 ± 10,4	20,3 ± 5,1
25_04	690 ± 134	289 ± 2	0,74 ± 0,46	1,96 ± 1,66	24,5 ± 13,3	74,5 ± 10,0	20,0 ± 5,2
25_05	693 ± 136	289 ± 2	0,69 ± 0,51	2,01 ± 1,72	24,1 ± 12,9	74,3 ± 9,8	19,8 ± 5,5
25_06	697 ± 137	289 ± 2	0,64 ± 0,48	2,08 ± 1,78	23,3 ± 11,1	73,7 ± 8,3	19,7 ± 5,8
25_07	703 ± 138	289 ± 2	0,59 ± 0,45	2,13 ± 1,83	22,7 ± 10,4	73,2 ± 7,5	19,4 ± 6,1
25_08	709 ± 139	289 ± 2	0,52 ± 0,40	2,19 ± 1,86	22,3 ± 9,9	72,8 ± 7,0	19,1 ± 6,4
25_09	717 ± 140	289 ± 2	0,48 ± 0,40	2,25 ± 1,89	21,9 ± 9,3	72,5 ± 6,7	19,0 ± 6,7
25_10	725 ± 141	289 ± 2	0,46 ± 0,39	2,30 ± 1,93	21,7 ± 8,8	72,5 ± 6,5	18,9 ± 7,0
25_11	733 ± 143	289 ± 2	0,44 ± 0,38	2,35 ± 1,95	21,3 ± 8,2	72,3 ± 6,3	18,6 ± 7,3
25_12	742 ± 144	289 ± 2	0,42 ± 0,37	2,41 ± 1,99	21,0 ± 7,8	72,1 ± 6,2	18,2 ± 7,5
25_13	752 ± 144	289 ± 2	0,41 ± 0,35	2,46 ± 2,01	20,9 ± 7,5	72,0 ± 6,1	17,6 ± 7,6
25_14	759 ± 144	289 ± 2	0,44 ± 0,38	2,51 ± 2,04	20,7 ± 7,4	71,9 ± 6,1	17,1 ± 7,7
25_15	767 ± 144	289 ± 2	0,44 ± 0,37	2,56 ± 2,07	20,5 ± 7,1	71,6 ± 5,9	16,7 ± 7,8
25_16	774 ± 144	289 ± 2	0,43 ± 0,36	2,66 ± 2,10	20,2 ± 6,8	71,3 ± 5,8	16,3 ± 7,7
25_17	781 ± 143	289 ± 2	0,44 ± 0,36	2,74 ± 2,14	19,9 ± 6,6	71,0 ± 5,6	15,8 ± 7,5
25_18	788 ± 142	289 ± 2	0,44 ± 0,37	2,84 ± 2,17	19,6 ± 6,4	70,7 ± 5,4	15,4 ± 7,4

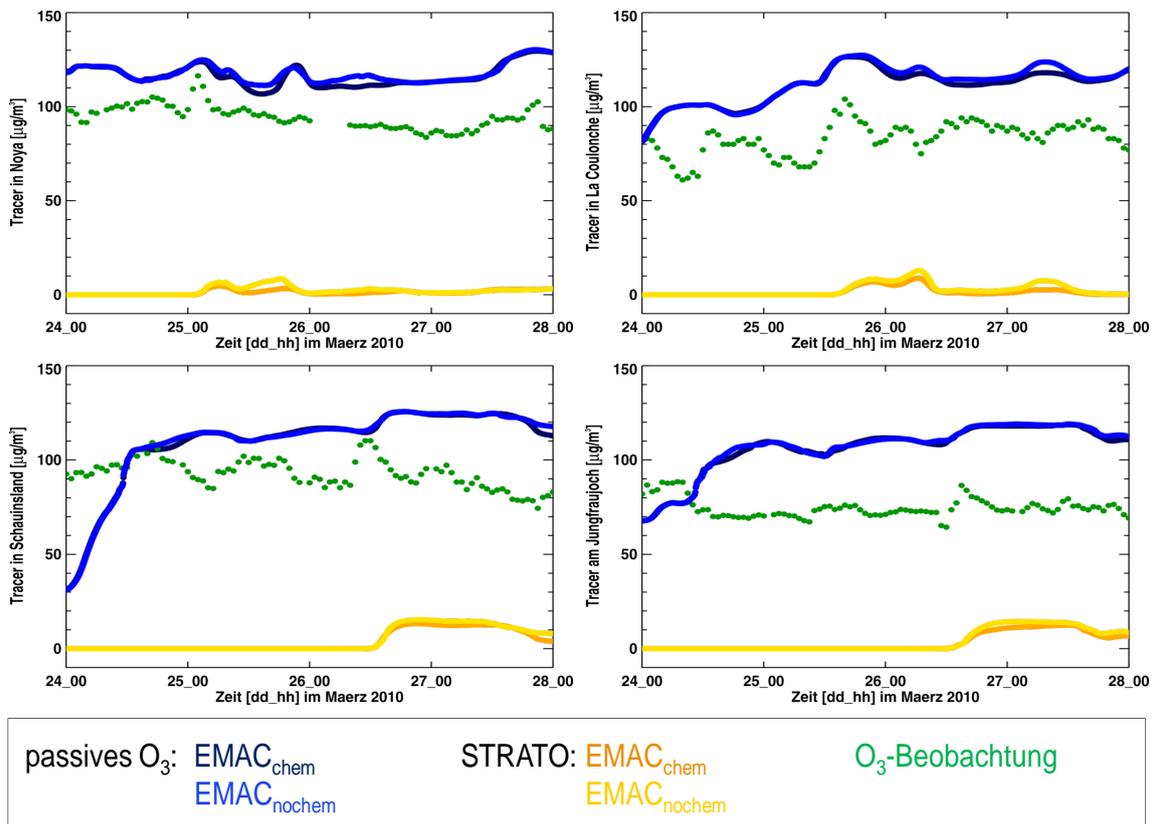
Fortsetzung auf nächster Seite

dd_hh	P [hPa]	$\Theta$ [K]	PV [pvu]	QV [g/kg]	STRATO [ppb]	O <sub>3</sub> [ppb]	Wind [m/s]
25_19	796 ± 141	289 ± 2	0,42 ± 0,35	2,93 ± 2,20	19,3 ± 6,3	70,4 ± 5,2	14,9 ± 7,2
25_20	801 ± 140	289 ± 2	0,43 ± 0,38	3,04 ± 2,25	19,1 ± 6,2	70,0 ± 5,1	14,4 ± 7,0
25_21	805 ± 140	289 ± 2	0,45 ± 0,43	3,12 ± 2,29	18,9 ± 6,1	69,8 ± 5,1	13,8 ± 6,8
25_22	810 ± 140	289 ± 2	0,45 ± 0,40	3,20 ± 2,32	18,7 ± 5,9	69,6 ± 5,0	13,3 ± 6,6
25_23	816 ± 139	289 ± 2	0,43 ± 0,39	3,28 ± 2,36	18,6 ± 5,8	69,4 ± 5,0	12,9 ± 6,4
26_00	823 ± 136	289 ± 2	0,42 ± 0,39	3,37 ± 2,39	18,5 ± 5,7	69,2 ± 5,0	12,6 ± 6,3
26_01	830 ± 134	288 ± 2	0,42 ± 0,40	3,45 ± 2,42	18,3 ± 5,5	69,0 ± 5,0	12,3 ± 6,2
26_02	837 ± 131	288 ± 2	0,42 ± 0,43	3,56 ± 2,44	18,2 ± 5,3	68,8 ± 4,9	12,0 ± 6,2
26_03	845 ± 128	288 ± 2	0,38 ± 0,38	3,68 ± 2,45	18,0 ± 5,0	68,5 ± 4,9	11,6 ± 6,1
26_04	852 ± 125	288 ± 2	0,39 ± 0,38	3,80 ± 2,45	17,9 ± 4,8	68,3 ± 4,9	11,3 ± 6,0
26_05	860 ± 122	288 ± 2	0,37 ± 0,41	3,91 ± 2,44	17,7 ± 4,6	68,0 ± 5,0	11,0 ± 5,8
26_06	868 ± 119	288 ± 2	0,39 ± 0,52	4,02 ± 2,44	17,5 ± 4,4	67,8 ± 5,0	10,8 ± 5,8
26_07	876 ± 116	288 ± 2	0,32 ± 0,38	4,13 ± 2,43	17,2 ± 4,3	67,6 ± 4,9	10,7 ± 5,9
26_08	883 ± 114	287 ± 2	0,28 ± 0,34	4,23 ± 2,42	16,9 ± 4,1	67,4 ± 4,8	10,6 ± 6,0
26_09	890 ± 110	287 ± 2	0,26 ± 0,34	4,35 ± 2,40	16,6 ± 4,0	67,3 ± 4,7	10,5 ± 6,2
26_10	897 ± 105	287 ± 2	0,24 ± 0,32	4,47 ± 2,39	16,3 ± 3,9	67,3 ± 4,6	10,6 ± 6,5
26_11	903 ± 100	287 ± 2	0,23 ± 0,39	4,59 ± 2,36	15,9 ± 3,7	67,3 ± 4,5	10,7 ± 6,8
26_12	906 ± 99	288 ± 2	0,21 ± 0,36	4,71 ± 2,37	15,7 ± 3,7	67,4 ± 4,7	10,7 ± 7,2

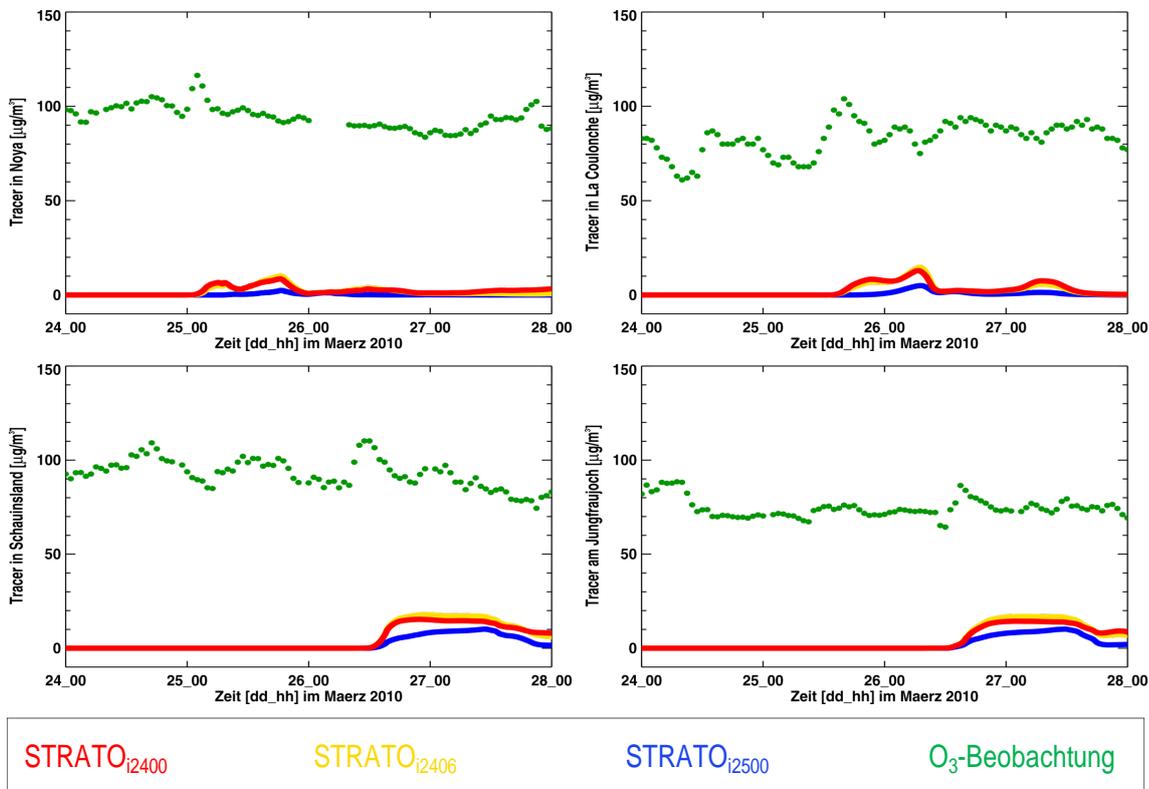
**Tabelle B.2:** Mittelwerte und Standardabweichungen für Variablen entlang der Trajektorien, deren STT-Punkt am 25. März, 0 UTC liegt. Angegeben sind Tag und Stunde (dd\_hh), Druck (P, in hPa), potentielle Temperatur ( $\Theta$ , in K), potentielle Vorticity (PV, in pvu), spezifische Feuchte (QV, in g/kg), stratosphärischer Tracer (STRATO, in ppb), Ozon (O<sub>3</sub>, in ppb) und horizontale Windgeschwindigkeit [Wind, in m/s].

## Anhang C

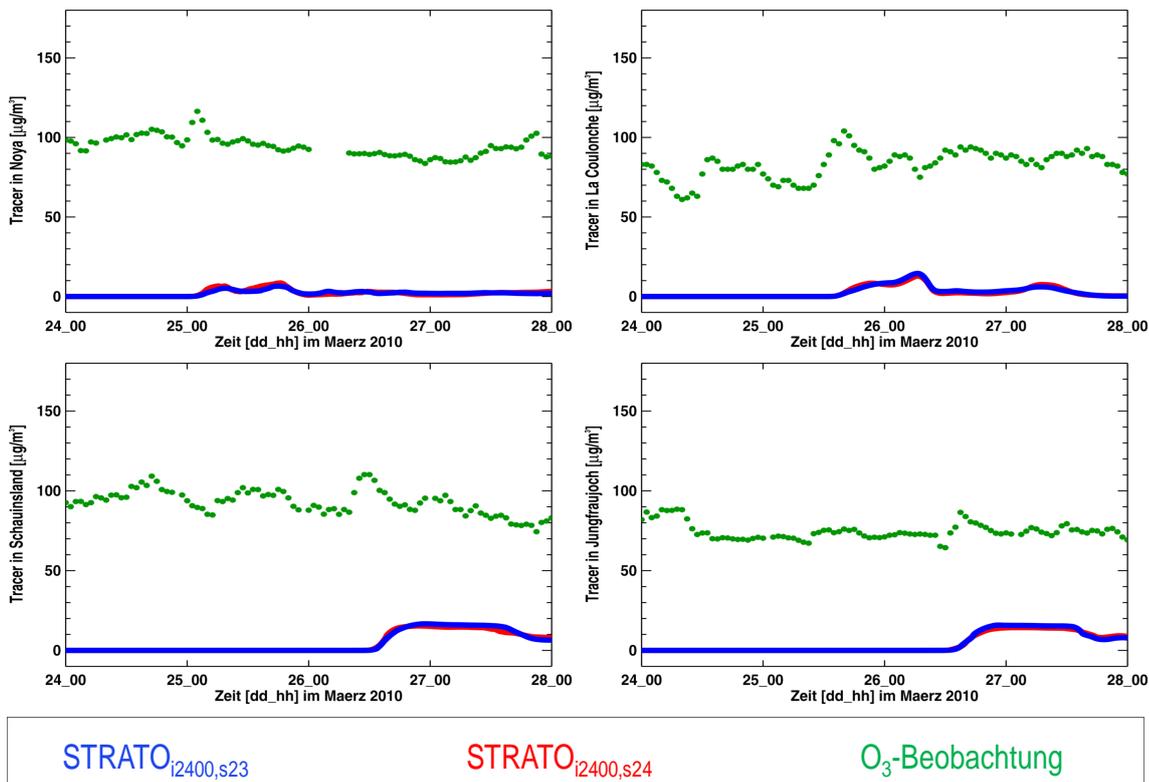
### Tracerzeitreihen von EMAC



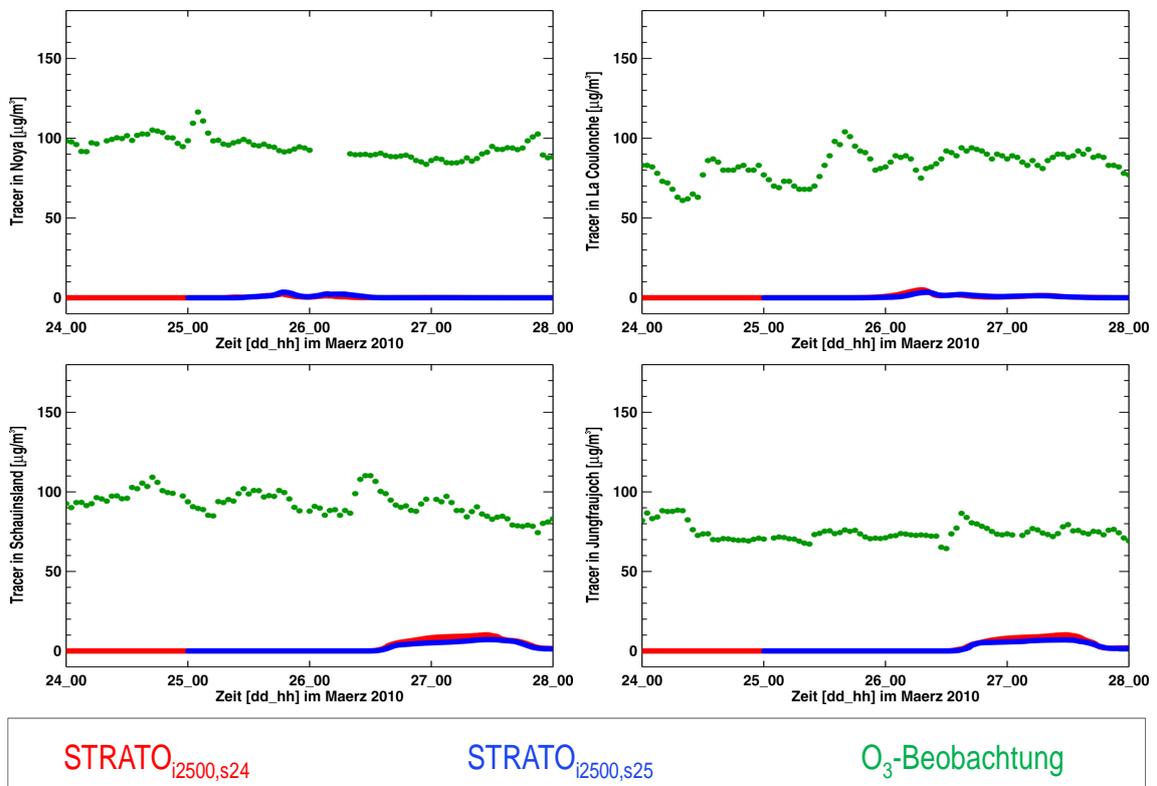
**Abbildung C.1:** Vergleich von Zeitreihen der passiven Tracer in Simulationen mit (dunkel) und ohne Chemie (hell) auf der untersten Modellschicht in EMAC und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).



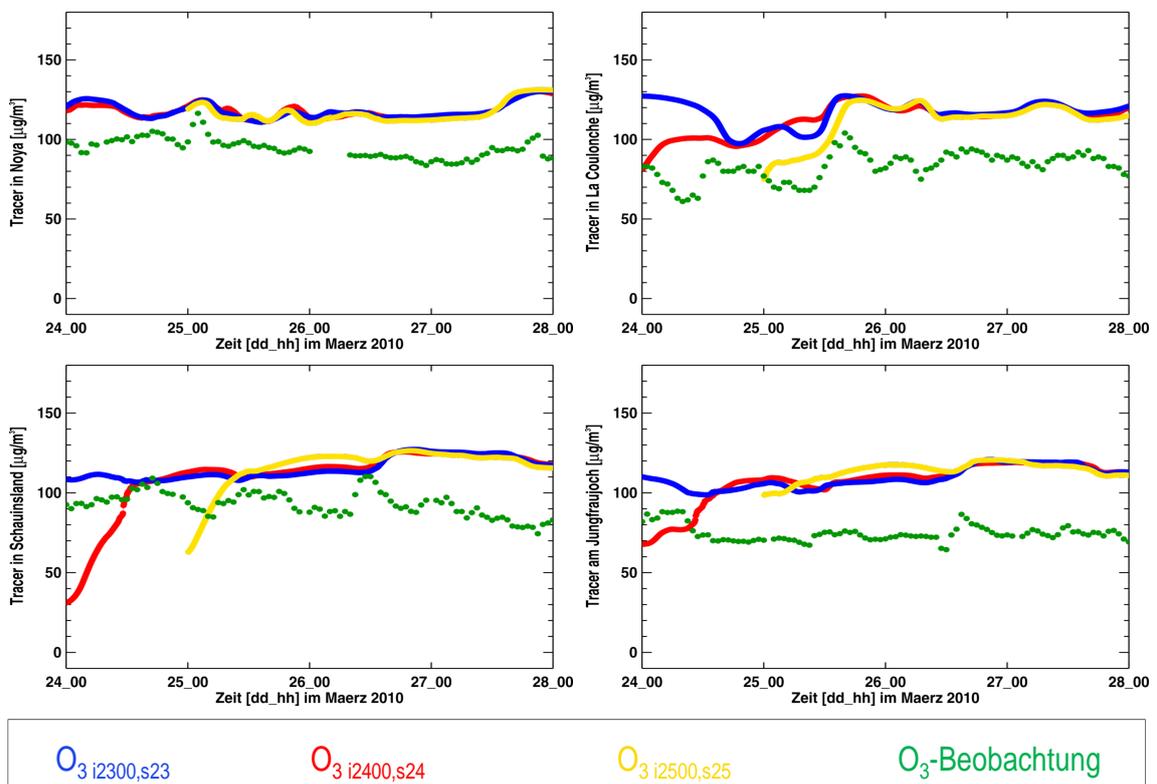
**Abbildung C.2:** Zeitreihen der künstlichen Tracer in Abhängigkeit des Initialisierungszeitpunktes auf der untersten Modellschicht in EMAC und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).



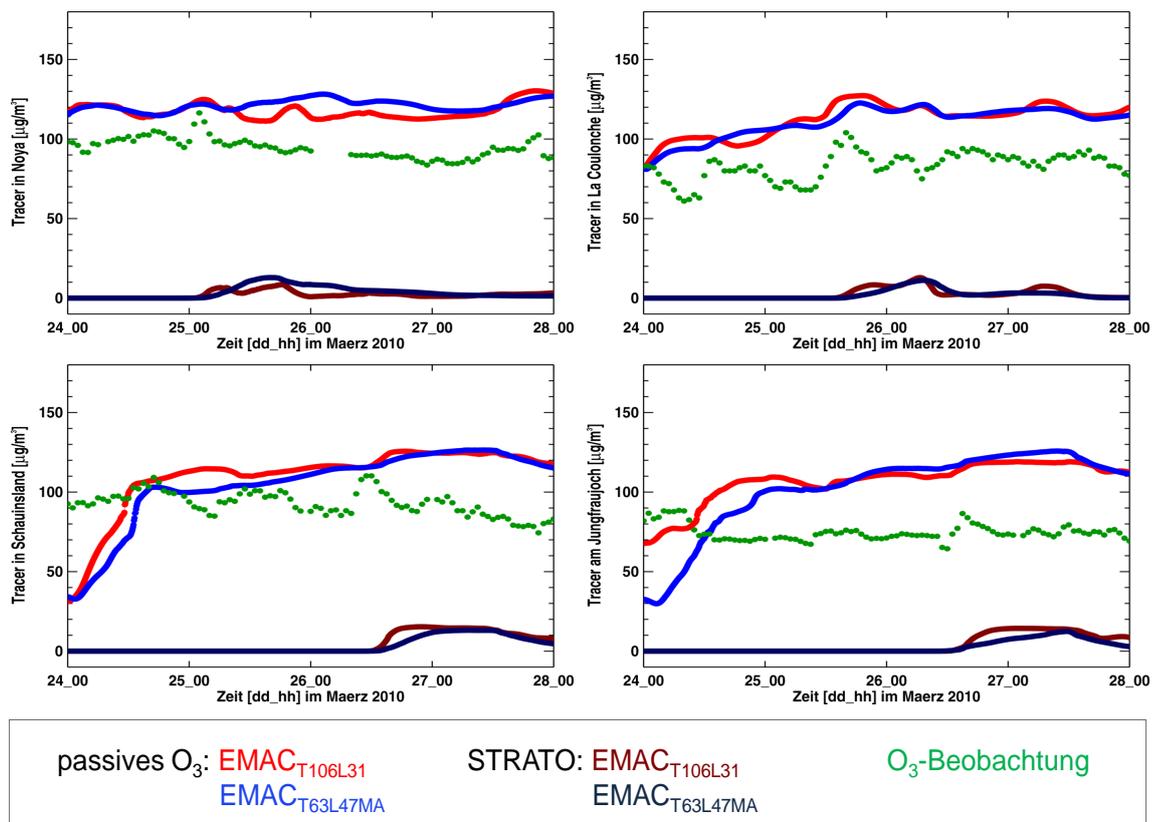
**Abbildung C.3:** Zeitreihen des künstlichen Tracers STRATO<sub>i2400</sub> in Abhängigkeit des Startzeitpunktes auf der untersten Modellschicht in EMAC und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).



**Abbildung C.4:** Zeitreihen des künstlichen Tracers  $\text{STRATO}_{i2500}$  in Abhängigkeit des Startzeitpunktes auf der untersten Modellschicht in EMAC und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).



**Abbildung C.5:** Zeitreihen der passiven Ozontracer in Simulationen mit unterschiedlichen Start- und Initialisierungszeitpunkt auf der untersten Modellschicht in EMAC und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).



**Abbildung C.6:** Zeitreihen der passiven Ozontracer (hell) und der künstlichen, stratosphärischen Tracer (dunkel) in Abhängigkeit der vertikalen Auflösung auf der untersten Modellschicht in EMAC und Ozonbeobachtungen (in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).

---

## Anhang D

# Abkürzungen, Variablen und Einheiten

### Abkürzungen

CAMx	Comprehensive Air quality Model with extension
CLM	Climate Limited-Area Modeling
COSMO	Consortium for Small-Scale Modelling; hier verwendet als Abkürzung für COSMO/MESSy-Instanz
COSMO-EU	Konfiguration von COSMO für Europa
DEF	Deformation
DS	Deformation durch Scherung
DD	Deformation durch Dehnung
DWD	Deutscher Wetterdienst
E90	Tracer mit Zerfallskonstante von 90 Tagen
EBAS	Datenplattform für atmosphärische, chemische und physikalische Beobachtungsdaten
ECC	Electrochemical Concentration Cell
ECHAM	Kombination aus ECMWF und Hamburg
ECHAM5	Modellversion 5.3.02 des ECHAM-Modells
ECMWF	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
EMAC	ECHAM5/MESSy for Atmospheric Chemistry; hier verwendet als Abkürzung für EMAC-Instanz
EMEP	European Monitoring and Evaluation Programme
GFDL AM3	Atmospheric component of the Geophysical Fluid Dynamics Laboratory coupled model
GFED	Global Fire Emission Database
GME	Globalmodell des DWD

IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change
IPCC-AR5	Fifth Assessment Report of the IPCC
FCKW	Fluorchlorkohlenwasserstoffe
KIT	Karlsruher Institut für Technologie
LAGRANTO	Lagrangian Analysis Tool
MA	mittlere Atmosphäre
MECO(n)	MESSy-fied ECHAM- and COSMO models nested n-times
MESSy	Modular Earth Submodel System
METEOSAT	Meteorological satellite
MMD	Multi-Model-Driver
NILU	Norwegian Institute for Air Research
NO <sub>x</sub>	Stickoxide
PV	Potenielle Vorticity
RMSE	route mean square error
STE	stratosphere-troposphere-exchange
STRATO	künstlicher, stratosphärischer Tracer
STT	Stratosphären-Troposphären-Transport
TI	Turbulenzindex
TP	Tropopausenregion
TST	Troposphären-Stratosphären-Transport
TROPO	künstlicher, troposphärischer Tracer
US	Ursprungsregion Stratosphäre
UT	Ursprungsregion Troposphäre
UTC	Coordinated Universal Time
UTLS	upper tropospherer/lower stratosphere
UTP	Ursprungsregion Tropopausenregion
UV	ultraviolett
LAGRANTO	Lagrangian Analysis Tool
VOC	Volatile organic compounds
VWS	Vertikale Windscherung
WMO	World Meteorological Organisation
WOUDC	World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre
ZS	Zielregion Stratosphäre
ZT	Zielregion Troposphäre
ZTP	Zielregion Tropopausenregion

## Variablen

$h$	Plancksches Wirkungsquantum
$m$	Masse der Tracer
$P$	Druck
$PV$	Potentielle Vorticity
$QV$	spezifische Feuchte
$t$	Zeit
$T$	Temperatur
$T_{2m}$	Temperatur in 2 m über Grund
$TI$	Turbulenzindex
$u$	zonale Windkomponente
$\vec{u}$	Vektor der horizontalen Windgeschwindigkeit
$v$	meridionale Windkomponente
$x$	Gitterboxbreite in zonale Richtung
$y$	Gitterboxbreite in meridionale Richtung
$z$	Gitterboxhöhe
$\vec{\zeta}$	Absolute Vorticity
$\vec{\eta}$	Relative Vorticity
$\lambda$	Wellenlänge des Lichtes
$\nu$	Frequenz des Lichtes
$\rho$	Luftdichte
$\tau$	Aufenthaltszeit
$\Theta$	Potentielle Temperatur
$\Theta_e$	Äquivalentpotentielle Temperatur
$\dot{\Theta}$	Diabatische Heizrate
$\Phi$	mittlere normierte Differenz
$\vec{\Omega}$	Vektor der Erdrotation

## Chemische Elemente und Summenformeln

$C_5H_8$	Isopren
$CH_4$	Methan
$CH_3O$	Methylradikal
$CH_3O_2$	Methylperoxyradikal
$CO$	Kohlenstoffmonoxid
$CO_2$	Kohlenstoffdioxid
$HO_2$	Hydroperoxyradikal
$H_2O$	Wasser
$N_2$	Stickstoffmolekül
$NO$	Stickstoffmonoxid
$NO_2$	Stickstoffdioxid
$N_2O$	Distickstoffoxid
$O$	Sauerstoffatom
$O_2$	Sauerstoffmolekül
$O_3$	Ozon
$OH$	Hydroxyl-Radikal
$O^1D$	angeregtes Sauerstoffatom

## Einheiten

a	Jahr
C	Celsius
d	Tag
g	Gramm
h	Stunde
hPa	Hektopascal, $1 \text{ hPa} = 100 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-2}$
K	Kelvin
kg	Kilogramm
km	Kilometer
m	Meter
m ü. NHN	Meter über Normalhöhennull
$m^3$	Kubikmeter
min	Minute
$\mu\text{g}$	Mikrogramm, $1 \mu\text{g} = 10^{-6} \text{g}$
ppb	parts per billion, $1 \text{ ppb} = 10^{-9}$
ppt	parts per trillion, $1 \text{ ppt} = 10^{-12}$
pvu	potential vorticity units, $1 \text{ pvu} = 10^{-6} \text{K m}^2 \text{kg}^{-1} \text{s}^{-1}$
s	Sekunde
Tg	Teragramm, $1 \text{ Tg} = 10^{12} \text{g}$

# Tabellen und Abbildungen

## Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematischer Aufbau der Erdatmosphäre . . . . .	1
1.2	Großskalige Zirkulation und STE-Prozesse . . . . .	5
1.3	Geographische Verteilung des Massenflusses über die Tropopause auf der Nordhemisphäre . . . . .	7
1.4	Querschnitt durch eine Tropopausenfalte . . . . .	10
1.5	Schematische Darstellung eines typischen, extratropischen, tiefreichenden STT-Ereignisses . . . . .	11
2.1	Die Idee von MESSy . . . . .	21
2.2	Beispiel einer MECO(12)-Konfiguration . . . . .	24
2.3	Geographische Lage der Messstationen . . . . .	25
2.4	Tracerinitialisierung im Strahlstrom . . . . .	28
3.1	Synoptische Beobachtungen und Analysen des Tiefdruckgebietes . . . . .	32
3.2	Modellkonfiguration: Simulationsgebiet und schematische Darstellung der zeitlichen Entwicklung . . . . .	33
3.3	Vertikales Gitter der COSMO-Instanz . . . . .	35
3.4	Mischungsverhältnisse des stratosphärischen Tracers eine Stunde nach Initialisierung in COSMO . . . . .	39
3.5	Meteorologischen Situation in ECMWF-Analysen und Simulationen der MECO(n)-Instanzen . . . . .	40
3.6	Mischungsverhältnisse des stratosphärischen Tracers entlang 45°N . . . . .	42
3.7	Mischungsverhältnisse des stratosphärischen Tracers auf der untersten Modellschicht . . . . .	43
3.8	Tracertransport relativ zu verschiedenen Referenzflächen . . . . .	44
3.9	Mischungsverhältnisse von Ozon auf der untersten Modellschicht am 26. März, 12 UTC . . . . .	46
3.10	Tracerzeitreihen am Jungfraujoch . . . . .	47
3.11	Tracerzeitreihen an verschiedenen Stationen . . . . .	49

3.12	Taylor diagramme . . . . .	50
3.13	Vertikalprofile von Ozon und Temperatur . . . . .	53
3.14	Anzahl der Trajektorien in Abhängigkeit des STT-Zeitpunktes in COSMO . . . . .	54
3.15	Trajektorien in EMAC . . . . .	54
3.16	Trajektorien und PV in vertikale Querschnitte zur Analyse der STT-Punkte in COSMO . . . . .	55
3.17	PV am Startzeitpunkt der Trajektorien . . . . .	56
3.18	Schematische Darstellung des STT-Ereignisses . . . . .	58
3.19	Tracerzeitreihen in Lough Navar und Gänserndorf in COSMO. . . . .	59
3.20	Tracerzeitreihen in Simulationen mit und ohne Chemie in COSMO . . . . .	62
3.21	Tracerzeitreihen in Abhängigkeit des Initialisierungszeitpunktes in COSMO . . . . .	64
3.22	Unterschiede der Zeitreihen der stratosphärischen Tracer in Simulationen mit unterschiedlichem Startzeitpunkt . . . . .	65
3.23	Tracerzeitreihen in Abhängigkeit des Startzeitpunktes bei Initialisierung am 24. März, 0 UTC in COSMO . . . . .	66
3.24	Tracerzeitreihen in Abhängigkeit des Startzeitpunktes bei Initialisierung am 25. März, 0 UTC in COSMO . . . . .	67
3.25	Zeitreihen der Tracer in Birkenes und STRATO <sub>i2500</sub> sowie Bodendruck auf der untersten Modellschicht in Simulationen mit unterschiedlichem Startzeitpunkt . . . . .	68
3.26	Ozonzeitreihen in Simulationen mit unterschiedlichen Start- und Initialisierungszeitpunkt in COSMO . . . . .	69
3.27	Mischungsverhältnisse der stratosphärischen Tracer mit unterschiedlichen Tropopausendefinitionen in COSMO . . . . .	71
3.28	Vertikalprofile von Ozon und Temperatur für Simulationen mit unterschiedlicher Auflösung . . . . .	72
3.29	Tracerzeitreihen in Abhängigkeit der vertikalen Auflösung in COSMO . . . . .	74
3.30	Mischungsverhältnisse des stratosphärischen Tracers in EMAC <sub>T63L47MA</sub> . . . . .	75
3.31	Schematische Darstellung zur Bestimmung der Aufenthaltszeit in der Troposphäre . . . . .	79
3.32	Anzahl der Trajektorien in Abhängigkeit des STT-Zeitpunktes . . . . .	79
3.33	STT-Punkte in Vertikalschnitten. . . . .	80
3.34	Analyse der Trajektorien in Abhängigkeit des STT-Zeitpunktes . . . . .	81
3.35	Anzahl der Trajektorien in Abhängigkeit ihrer Aufenthaltszeit in der Troposphäre . . . . .	82
3.36	Änderung der Mischungsverhältnisse zwischen STT und TST . . . . .	82
3.37	Änderung der Variablen entlang der Trajektorien in Abhängigkeit ihrer Aufenthaltszeit in der Troposphäre . . . . .	84
3.38	Schematische Darstellung zur Bestimmung der Aufenthaltszeit in der Stratosphäre . . . . .	87
3.39	Anzahl der Trajektorien in Abhängigkeit des TST-Zeitpunktes . . . . .	87

3.40	Analyse der Trajektorien in Abhängigkeit des TST-Zeitpunktes . . . . .	89
3.41	Lage der TST-Punkte in horizontalen und vertikalen Querschnitten durch das Modellgebiet . . . . .	91
3.42	Lage von TST- und Endpunkten sowie die Traceränderung entlang der Trajektorien . . . . .	92
3.43	Position der Luftpakete in der Tropopausenfalte . . . . .	95
3.44	Schemaskizzen zur Trajektorienanalyse . . . . .	96
4.1	Troposphärischer Tracer in Tracerprofile und -korrelationen in verschiedenen Regionen . . . . .	110
C.1	Tracerzeitreihen in Simulationen mit und ohne Chemie in EMAC . . . . .	119
C.2	Tracerzeitreihen in Abhängigkeit des Initialisierungszeitpunktes in EMAC . . . . .	120
C.3	Tracerzeitreihen in Abhängigkeit des Startzeitpunktes bei Initialisierung am 24. März, 0 UTC in EMAC . . . . .	120
C.4	Tracerzeitreihen in Abhängigkeit des Startzeitpunktes bei Initialisierung am 25. März, 0 UTC in EMAC . . . . .	121
C.5	Zeitreihen der passiven Ozontracer in Simulationen mit unterschiedlichen Start- und Initialisierungszeitpunkt in EMAC . . . . .	121
C.6	Tracerzeitreihen in Abhängigkeit der vertikalen Auflösung in EMAC . . . . .	122

## Tabellenverzeichnis

2.1	Übersicht der geographischen Lagen der Messstationen . . . . .	26
3.1	Verwendete, prozessorientierte MESSy-Submodelle in den verschiedenen Simulationen . . . . .	36
3.2	Bedingungen zur Tracerinitialisierung . . . . .	38
3.3	Unterschiede im Massentransport zwischen den Modellinstanzen . . . . .	45
3.4	Analyse von Ursprungs- und Zielregion der Luftpakete in der Falte . . . . .	99
3.5	Analyse von Ursprungs- und Zielregion in Abhängigkeit der Tropopausendefinition . . . . .	100
A.1	Referenzen und Kurzbeschreibungen zu den verwendeten MESSy-Submodellen (prozessorientiert und diagnostisch) . . . . .	114
B.1	Mittelwerte und Standardabweichungen für Variablen entlang der Trajektorien mit STT-Punkt am 24. März, 12 UTC . . . . .	116
B.2	Mittelwerte und Standardabweichungen für Variablen entlang der Trajektorien mit STT-Punkt am 25. März, 0 UTC . . . . .	118



---

## Literatur

- Appenzeller, C., H. Davies und W. Norton (1996a). Fragmentation of stratospheric intrusions. *J. Geophys. Res.* *101*, 1435–1456.
- Appenzeller, C., J. Holton und K. Rosenlof (1996b). Seasonal variation of mass transport across the tropopause. *J. Geophys. Res.* *101*, 15071–15078.
- Bethan, S., G. Vaughan und S. Reid (1996). A comparison of ozone and thermal tropopause heights and the impact of tropopause definition on quantifying the ozone content of the troposphere. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* *122*, 929–944.
- Birner, T. und H. Boenisch (2011). Residual circulation trajectories and transit times into the extratropical lowermost stratosphere. *Atmos. Chem. Phys.* *11*, 817–827.
- Boenisch, H., A. Engel, T. Birner, P. Hoor, D. W. Tarasick und E. A. Ray (2011). On the structural changes in the Brewer-Dobson circulation after 2000. *Atmos. Chem. Phys.* *11*, 3937–3948.
- Bourqui, M. (2006). Stratosphere-troposphere exchange from the Lagrangian perspective: a case study and method sensitivities. *Atmos. Chem. Phys.* *6*, 2651–2670.
- Bourqui, M. S. und P. Y. Trepanier (2010). Descent of deep stratospheric intrusions during the IONS August 2006 campaign. *J. Geophys. Res.* *115*, D18301, doi:10.1029/2009JD01318.
- Brewer, A. (1949). Evidence for a world circulation provided by the measurements of helium and water vapour distribution in the stratosphere. *75*, 351–363.
- Bush, A. und W. Peltier (1994). Tropopause folds and synoptic-scale baroclinic wave life-cycles. *J. Atmos. Sci.* *51*, 1581–1604.
- Chapman, S. (1930). A Theory of Upper-Atmospheric ozone. *Mem. Roy. Meteor. Soc.* *3*, 103–125.
- Cooper, O., C. Forster, D. Parrish, E. Dunlea, G. Hubler, F. Fehsenfeld, J. Holloway, S. Oltmans, B. Johnson, A. Wimmers und L. Horowitz (2004). On the life cycle of a stratospheric intrusion and its dispersion into polluted warm conveyor belts. *J. Geophys. Res.* *109*, D23S09, doi:10.1029/2003JD004006.

- Cristofanelli, P., P. Bonasoni, W. Collins, J. Feichter, C. Forster, P. James, A. Kentarchos, P. Kubik, C. Land, J. Meloen, G. Roelofs, P. Siegmund, M. Sprenger, C. Schnabel, A. Stohl, L. Tobler, L. Tositti, T. Trickl und P. Zanis (2003). Stratosphere-to-troposphere transport: A model and method evaluation. *J. Geophys. Res.* 108, 8525, doi:10.1029/2002JD002600.
- Danielsen, E. (1968). Stratospheric-tropospheric exchange based on radioactivity ozone and potential vorticity. *J. Atmos. Sci.* 25, 502–518.
- Dobson, G. (1956). Origin and distribution of the polyatomic molecules in the atmosphere. *Proc. R. Soc. London* 236, 187–193.
- Doms, G., U. Schättler und M. Baldauf (2011). A Description of the Nonhydrostatic Regional COSMO-Model, Part I: Dynamics and Numerics. URL: <http://www.cosmo-model.org/content/model/documentation/core/cosmoDyncsNumcs.pdf>, (Stand: 15.04.2014). Deutscher Wetterdienst, Offenbach, Deutschland.
- Ellrod, G. und D. Knapp (1992). An Objective Clear-Air Turbulence Forecasting Technique - Verification and Operational Use. *Wea. Forecast.* 7, 150–165.
- Ertel, H. (1942). Ein Neuer Hydrodynamischer Wirbelsatz. *Meteorol. Z.* 59, 271–281.
- Fischer, H., F. Wienhold, P. Hoor, O. Bujok, C. Schiller, P. Siegmund, M. Ambaum, H. Scheeren und J. Lelieveld (2000). Tracer correlations in the northern high latitude lowermost stratosphere: Influence of cross-tropopause mass exchange. *Geophys. Res. Lett.* 27, 97–100.
- Forster, C. und V. Wirth (2000). Radiative decay of idealized stratospheric filaments in the troposphere. *J. Geophys. Res.* 105, 10169–10184.
- Forster, P. und K. Shine (1997). Radiative forcing and temperature trends from stratospheric ozone changes. *J. Geophys. Res.* 102, 10841–10855.
- Gottelman, A., P. Hoor, L. L. Pan, W. J. Randel, M. I. Hegglin und T. Birner (2011). The extratropical upper troposphere and lower stratosphere. *Rev. Geophys.* 49, RG3003, doi:10.1029/2011RG000355.
- Gottelman, A. und A. Sobel (2000). Direct diagnoses of stratosphere-troposphere exchange. *J. Atmos. Sci.* 57, 3–16.
- Giglio, L., J. T. Randerson, G. R. van der Werf, P. S. Kasibhatla, G. J. Collatz, D. C. Morton und R. S. DeFries (2010). Assessing variability and long-term trends in burned area by merging multiple satellite fire products. *Biogeosciences* 7, 1171–1186.
- Giorgetta, M. und L. Bengtsson (1999). Potential role of the quasi-biennial oscillation in the stratosphere-troposphere exchange as found in water vapor in general circulation model experiments. *J. Geophys. Res.* 104, 6003–6019.

- Gray, S. (2003). A case study of stratosphere to troposphere transport: The role of convective transport and the sensitivity to model resolution. *J. Geophys. Res.* 108, 4590, doi:10.1029/2002JD003317.
- Hegglin, M., D. Brunner, H. Wernli, C. Schwierz, O. Martius, P. Hoor, H. Fischer, U. Parchatka, N. Spelten, C. Schiller, M. Krebsbach, U. Weers, J. Staehelin und T. Peter (2004). Tracing troposphere-to-stratosphere transport above a mid-latitude deep convective system. *Atmos. Chem. Phys.* 4, 741–756.
- Hegglin, M. und T. Shepherd (2009). Large climate-induced changes in ultraviolet index and stratosphere-to-troposphere ozone flux. *Nat. Geosci.* 2, 687–691.
- Hofmann, C., A. Kerkweg, H. Wernli und P. Jöckel (2012). The 1-way on-line coupled atmospheric chemistry model system MECO(n) - Part 3: Meteorological evaluation of the on-line coupled system. *Geosci. Model Dev.* 5, 129–147.
- Holton, J. R., P. Haynes, A. R. Douglass, R. B. Rood und L. Pfister (1995). Stratosphere-troposphere exchange. *Rev. Geophys.* 33, 403–439.
- Hoor, P., H. Fischer, L. Lange, J. Lelieveld und D. Brunner (2002). Seasonal variations of a mixing layer in the lowermost stratosphere as identified by the CO-O-3 correlation from in situ measurements. *J. Geophys. Res.* 107, 4044, doi:10.1029/2000JD000289.
- Hoor, P., C. Gurk, D. Brunner, M. Hegglin, H. Wernli und H. Fischer (2004). Seasonality and extent of extratropical TST derived from in-situ CO measurements during SPURT. *Atmos. Chem. Phys.* 4, 1427–1442.
- Hoskins, B. J., M. E. McIntyre und A. W. Robertson (1985). On the use and significance of isentropic potential vorticity maps. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 111, 877–946.
- Hsu, J., M. Prather und O. Wild (2005). Diagnosing the stratosphere-to-troposphere flux of ozone in a chemistry transport model. *J. Geophys. Res.* 110, D19305, doi:10.1029/2005JD006045.
- James, P., A. Stohl, C. Forster, S. Eckhardt, P. Seibert und A. Frank (2003). A 15-year climatology of stratosphere-troposphere exchange with a Lagrangian particle dispersion model - 2. Mean climate and seasonal variability. *J. Geophys. Res.* 108, 8522, doi:10.1029/2002JD002639.
- Johnson, W. B. und W. Viezee (1981). Stratospheric ozone in the lower troposphere - I. Presentation and interpretation of aircraft measurements. *Atmos. Environ.* 15, 1309–1323.
- Joos, H. und H. Wernli (2012). Influence of microphysical processes on the potential vorticity development in a warm conveyor belt: a case-study with the limited-area model COSMO. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 138, 407–418.

- Juckes, M. (2000). The descent of tropospheric air into the stratosphere. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 126, 319–337.
- Jöckel, P., A. Kerkweg, J. Buchholz-Dietsch, H. Tost, R. Sander und A. Pozzer (2008). Technical Note: Coupling of chemical processes with the Modular Earth Submodel System (MESSy) submodel TRACER. *Atmos. Chem. Phys.* 8, 1677–1687.
- Jöckel, P., A. Kerkweg, A. Pozzer, R. Sander, H. Tost, H. Riede, A. Baumgaertner, S. Gromov und B. Kern (2010). Development cycle 2 of the Modular Earth Submodel System (MESSy2). *Geosci. Model Dev.* 3, 717–752.
- Jöckel, P., R. Sander, A. Kerkweg, H. Tost und J. Lelieveld (2005). Technical Note: The Modular Earth Submodel System MESSy - a new approach towards Earth System Modeling. *Atmos. Chem. Phys.* 5, 433–444.
- Jöckel, P., H. Tost, A. Pozzer, C. Brühl, J. Buchholz, L. Ganzeveld, P. Hoor, A. Kerkweg, M. G. Lawrence, R. Sander, B. Steil, G. Stiller, M. Tanarhte, D. Taraborrelli, J. van Aardenne und J. Lelieveld (2006). The atmospheric chemistry general circulation model ECHAM5/MESSy1: Consistent simulation of ozone from the surface to the mesosphere. *Atmos. Chem. Phys.* 6, 5067–5104.
- Kerkweg, A., J. Buchholz, L. Ganzeveld, A. Pozzer, H. Tost und P. Jöckel (2006a). Technical Note: An implementation of the dry removal processes DRY DEPosition and SEDimentation in the Modular Earth Submodel System (MESSy). *Atmospheric Chemistry and Physics* 6, 4617–4632.
- Kerkweg, A., P. Jöckel, A. Pozzer, H. Tost, R. Sander, M. Schulz, P. Stier, E. Vignati, J. Wilson und J. Lelieveld (2008). Consistent simulation of bromine chemistry from the marine boundary layer to the stratosphere – Part 1: Model description, sea salt aerosols and pH. *Atmos. Chem. Phys.* 8, 5899–5917.
- Kerkweg, A. und P. Jöckel (2012a). The 1-way on-line coupled atmospheric chemistry model system MECO(n) - Part 1: Description of the limited-area atmospheric chemistry model COSMO/MESSy. *Geosci. Model Dev.* 5, 87–110.
- Kerkweg, A. und P. Jöckel (2012b). The 1-way on-line coupled atmospheric chemistry model system MECO(n) - Part 2: On-line coupling with the Multi-Model-Driver (MMD). *Geosci. Model Dev.* 5, 111–128.
- Kerkweg, A., R. Sander, H. Tost und P. Jöckel (2006b). Technical note: Implementation of prescribed (OFFLEM), calculated (ONLEM), and pseudo-emissions (TNUDGE) of chemical species in the Modular Earth Submodel System (MESSy). *Atmos. Chem. Phys.* 6, 3603–3609.
- Keyser, D. und M. Shapiro (1986). A review of the structure and dynamics of upper-level frontal zones. *Mon. Wea. Rev.* 114, 452–499.

- Konopka, P. und L. L. Pan (2012). On the mixing-driven formation of the Extratropical Transition Layer (ExTL). *J. Geophys. Res.* 117, D18301, doi:10.1029/2012JD017876.
- Kunz, A., P. Konopka, R. Mueller und L. L. Pan (2011). Dynamical tropopause based on isentropic potential vorticity gradients. *J. Geophys. Res.* 116, D01110, doi:10.1029/2010JD014343.
- Lamarque, J. und P. Hess (1994). Cross-tropopause mass-exchange and potential vorticity budget in a simulated tropopause folding. *J. Atmos. Sci.* 51, 2246–2269.
- Lamarque, J., A. Langford und M. Proffitt (1996). Cross-tropopause mixing of ozone through gravity wave breaking: Observation and modeling. *J. Geophys. Res.* 101, 22969–22976.
- Land, C., J. Feichter und R. Sausen (2002). Impact of vertical resolution on the transport of passive tracers in the ECHAM4 model. *Tellus Ser. B*, 54, 344–360.
- Landgraf, J. und P. Crutzen (1998). An efficient method for online calculations of photolysis and heating rates. *J. Atmos. Sci.* 55, 863–878.
- Lefohn, A. S., C. Emery, D. Shadwick, H. Wernli, J. Jung und S. J. Oltmans (2013). Estimates of background surface ozone concentrations in the United States based on model-derived source apportionment. *Atmos. Environ.* 84, 275–288.
- Lefohn, A. S., H. Wernli, D. Shadwick, S. Limbach, S. J. Oltmans und M. Shapiro (2011). The importance of stratospheric-tropospheric transport in affecting surface ozone concentrations in the western and northern tier of the United States. *Atmos. Environ.* 45, 4845–4857.
- Lelieveld, J. und F. Dentener (2000). What controls tropospheric ozone? *J. Geophys. Res.* 105, 3531–3551.
- Levy, H. (1971). Normal Atmosphere - Large Radical and Formaldehyde Concentrations Predicted. *Science* 173, 141–143.
- Lin, M., A. M. Fiore, O. R. Cooper, L. W. Horowitz, A. O. Langford, H. Levy, II, B. J. Johnson, V. Naik, S. J. Oltmans und C. J. Senff (2012). Springtime high surface ozone events over the western United States: Quantifying the role of stratospheric intrusions. *J. Geophys. Res.* 117, D00V22, doi:10.1029/2012JD018151.
- Majewski, D., D. Liermann, P. Prohl, B. Ritter, M. Buchhold, T. Hanisch, G. Paul, W. Wergen und J. Baumgardner (2002). The operational global icosahedral-hexagonal gridpoint model GME: Description and high-resolution tests. *Mon. Wea. Rev.* 130, 319–338.
- McLandress, C. und T. G. Shepherd (2009). Simulated Anthropogenic Changes in the Brewer-Dobson Circulation, Including Its Extension to High Latitudes. *J. Clim.* 22, 1516–1540.

- Moss, R. H., J. A. Edmonds, K. A. Hibbard, M. R. Manning, S. K. Rose, D. P. van Vuuren, T. R. Carter, S. Emori, M. Kainuma, T. Kram, G. A. Meehl, J. F. B. Mitchell, N. Nakicenovic, K. Riahi, S. J. Smith, R. J. Stouffer, A. M. Thomson, J. P. Weyant und T. J. Wilbanks (2010). The next generation of scenarios for climate change research and assessment. *Nature* 463, 747–756.
- Mullendore, G., D. Durran und J. Holton (2005). Cross-tropopause tracer transport in midlatitude convection. *J. Geophys. Res.* 110, D06113, doi:10.1029/2004JD00505.
- Myhre, G., D. Shindell, F.-M. Bréon, W. Collins, J. Fuglestedt, J. Huang, D. Koch, J.-F. Lamarque, D. Lee, B. Mendoza, T. Nakajima, A. Robock, G. Stephens, T. Takemura und H. Zhang (2013). Anthropogenic and Natural Radiative Forcing. In: *Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change* [Stocker, T.F., D. Qin, G.-K. Plattner, M. Tignor, S.K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex and P.M. Midgley (eds.)]. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.
- Pan, L., P. Konopka und E. Browell (2006). Observations and model simulations of mixing near the extratropical tropopause. *J. Geophys. Res.* 111, D05106, doi:10.1029/2005JD006480.
- Plumb, R. (2002). Stratospheric transport. *J. Meteorol. Soc. Japan* 80, 793–809.
- Poulida, O., R. Dickerson und A. Heymsfield (1996). Stratosphere-troposphere exchange in a midlatitude mesoscale convective complex. *J. Geophys. Res.* 101, 6823–6836.
- Pozzer, A., P. Jöckel, R. Sander, J. Williams, L. Ganzeveld und J. Lelieveld (2006). Technical Note: The MESSy-submodel AIRSEA calculating the air-sea exchange of chemical species. *Atmos. Chem. Phys.* 6, 5435–5444.
- Prather, M. J., X. Zhu, Q. Tang, J. Hsu und J. L. Neu (2011). An atmospheric chemist in search of the tropopause. *J. Geophys. Res.* 116, D04306, doi:10.1029/2010JD014939.
- Reed, R. (1955). A study of a characteristic type of upper level frontogenesis. *J. Meteorol.* 12, 226–237.
- Riese, M., F. Ploeger, A. Rap, B. Vogel, P. Konopka, M. Dameris und P. Forster (2012). Impact of uncertainties in atmospheric mixing on simulated UTLS composition and related radiative effects. *J. Geophys. Res.* 117, D16305, doi:10.1029/2012JD017751.
- Rind, D., J. Lerner, J. Jonas und C. McLinden (2007). Effects of resolution and model physics on tracer transports in the NASA Goddard Institute for Space Studies general circulation models. *J. Geophys. Res.* 112, D09315, doi:10.1029/2006JD007476.

- Rockel, B., A. Will und A. Hense (2008). The Regional Climate Model COSMO-CLM(CCLM). *Meteorol. Z.* 17, 347–348.
- Roeckner, E., R. Brokopf, M. Esch, M. Giorgetta, S. Hagemann, L. Kornblueh, E. Manzini, U. Schlese und U. Schulzweida (2006). Sensitivity of simulated climate to horizontal and vertical resolution in the ECHAM5 atmosphere model. *J. Clim.* 19, 3771–3791.
- Roeckner, E., G. Bäuml, L. Bonaventura, R. Brokopf, M. Esch, M. Giorgetta, S. Hagemann, I. Kirchner, L. Kornblueh, E. Manzini, A. Rhodin, U. Schlese, U. Schulzweida und A. Tompkins (2003). The atmospheric general circulation model ECHAM5. PART I: Model description. URL: [https://www.mpimet.mpg.de/fileadmin/publikationen/Reports/max\\_scirep\\_349.pdf](https://www.mpimet.mpg.de/fileadmin/publikationen/Reports/max_scirep_349.pdf), (Stand 14.04.2014). MPI-Report 349, Max Planck Institut für Meteorologie in Hamburg, Deutschland.
- Roelofs, G., A. Kentarchos, T. Trickl, A. Stohl, W. Collins, R. Crowther, D. Hauglustaine, A. Klonecki, K. Law, M. Lawrence, R. von Kuhlmann und M. van Weele (2003). Intercomparison of tropospheric ozone models: Ozone transport in a complex tropopause folding event. *J. Geophys. Res.* 108, 8529, doi:10.1029/2003JD003462.
- Roelofs, G. und J. Lelieveld (1997). Model study of the influence of cross-tropopause O-3 transports on tropospheric O-3 levels. *Tellus Ser. B*, 49, 38–55.
- Rood, R., A. Douglass, M. Cerniglia und W. Read (1997). Synoptic-scale mass exchange from the troposphere to the stratosphere. *J. Geophys. Res.* 102, 23467–23485.
- Rosenlof, K., A. Tuck, K. Kelly, J. Russell und M. McCormick (1997). Hemispheric asymmetries in water vapor and inferences about transport in the lower stratosphere. *J. Geophys. Res.* 102, 13213–13234.
- Sander, R., A. Baumgaertner, S. Gromov, H. Harder, P. Jöckel, A. Kerkweg, D. Kubistin, E. Regelin, H. Riede, A. Sandu, D. Taraborrelli, H. Tost und Z.-Q. Xie (2011). The atmospheric chemistry box model CAABA/MECCA-3.0. *Geosci. Model Dev.* 4, 373–380.
- Schilling, T., F. Lubken, F. Wienhold, P. Hoor und H. Fischer (1999). TDLAS trace gas measurements within mountain waves over northern Scandinavia during the POLSTAR campaign in early 1997. *Geophys. Res. Lett.* 26, 303–306.
- Shapiro, M. (1980). Turbulent mixing within tropopause folds as a mechanism for the exchange of chemical-constituents between the stratosphere and troposphere. *J. Atmos. Sci.* 37, 994–1004.
- Shepherd, T. (2003). Large-scale atmospheric dynamics for atmospheric chemists. *Chem. Rev.* 103, 4509–4531.

- Simmons, A., D. Burridge, M. Jarraud, C. Girard und W. Wergen (1989). The ECM-WF medium-range prediction model: Development of the numerical formulation and the impact of increased resolution. *Meteorol. Atmos. Phys.* 40, 28–60.
- Skerlak, B., M. Sprenger und H. Wernli (2014). A global climatology of stratosphere-troposphere exchange using the ERA-Interim data set from 1979 to 2011. *Atmos. Chem. Phys.* 14, 913–937.
- Slingo, A., R. Brown und C. Wrench (1982). A field-study of nocturnal stratocumulus; iii. high-resolution radiative and microphysical observations. *108*, 145–165.
- Solomon, S., K. H. Rosenlof, R. W. Portmann, J. S. Daniel, S. M. Davis, T. J. Sanford und G.-K. Plattner (2010). Contributions of Stratospheric Water Vapor to Decadal Changes in the Rate of Global Warming. *Science* 327, 1219–1223.
- Sprenger, M. und H. Wernli (2003). A northern hemispheric climatology of cross-tropopause exchange for the ERA15 time period (1979-1993). *J. Geophys. Res.* 108, 8521, doi:10.1029/2002JD002636.
- Sprenger, M., H. Wernli und M. Bourqui (2007). Stratosphere-troposphere exchange and its relation to potential vorticity streamers and cutoffs near the extratropical tropopause. *J. Atmos. Sci.* 64, 1587–1602.
- Stohl, A. (2001). A 1-year Lagrangian “climatology” of airstreams in the Northern Hemisphere troposphere and lowermost stratosphere. *J. Geophys. Res.* 106, 7263–7279.
- Stohl, A., P. Bonasoni, P. Cristofanelli, W. Collins, J. Feichter, A. Frank, C. Forster, E. Gerasopoulos, H. Gaggeler, P. James, T. Kentarchos, H. Kromp-Kolb, B. Kruger, C. Land, J. Meloen, A. Papayannis, A. Priller, P. Seibert, M. Sprenger, G. Roelofs, H. Scheel, C. Schnabel, P. Siegmund, L. Tobler, T. Trickl, H. Wernli, V. Wirth, P. Zanis und C. Zerefos (2003). Stratosphere-troposphere exchange: A review, and what we have learned from STACCATO. *J. Geophys. Res.* 108, 8516, doi:10.1029/2002JD002490.
- Stohl, A. und T. Trickl (1999). A textbook example of long-range transport: Simultaneous observation of ozone maxima of stratospheric and North American origin in the free troposphere over Europe. *J. Geophys. Res.* 104, 30445–30462.
- Taylor, K. E. (2001). Summarizing multiple aspects of model performance in a single diagram. *J. Geophys. Res.* 106, 7183–7192.
- Tost, H. (2006). Global Modelling of Cloud, Convection and Precipitation Influences on Trace Gases and Aerosols. URL: <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:hbz:5N-07314>, (Stand: 27.01.2014). Dissertation, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Deutschland.

- Tost, H., P. Jöckel, A. Kerkweg, R. Sander und J. Lelieveld (2006a). Technical note: A new comprehensive SCAVenging submodel for global atmospheric chemistry modelling. *Atmos. Chem. Phys.* 6, 565–574.
- Tost, H., P. Jöckel und J. Lelieveld (2006b). Influence of different convection parameterisations in a GCM. *Atmos. Chem. Phys.* 6, 5475–5493.
- Tost, H., P. Jöckel und J. Lelieveld (2007). Lightning and convection parameterisations - uncertainties in global modelling. *Atmos. Chem. Phys.* 7, 4553–4568.
- Vignati, E., J. Wilson und P. Stier (2004). M7: An efficient size-resolved aerosol microphysics module for large-scale aerosol transport models. *J. Geophys. Res.* 109, D22202, doi:10.1029/2003JD004485.
- Wang, P. (2003). Moisture plumes above thunderstorm anvils and their contributions to cross-tropopause transport of water vapor in midlatitudes. *J. Geophys. Res.* 108, 4194, doi:10.1029/2002JD002581.
- Wei, M. (1987). A new formulation of the exchange of mass and trace constituents between the stratosphere and troposphere. *J. Atmos. Sci.* 44, 3079–3086.
- Wernli, H. und M. Bourqui (2002). A Lagrangian “1-year climatology” of (deep) cross-tropopause exchange in the extratropical Northern Hemisphere. *J. Geophys. Res.* 107, 4021, doi:10.1029/2001JD000812.
- Wernli, H. und H. C. Davies (1997). A Lagrangian-based analysis of extratropical cyclones. I: The method and some applications. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 123, 467–489.
- Wernli, H. und C. Schwierz (2006). Surface cyclones in the ERA-40 dataset (1958–2001). Part I: Novel identification method and global climatology. *J. Atmos. Sci.* 63, 2486–2507.
- Wild, O. (2007). Modelling the global tropospheric ozone budget: exploring the variability in current models. *Atmos. Chem. Phys.* 7, 2643–2660.
- Wirth, V. (1995). Diabatic heating in an axisymmetrical cutoff cyclone and related stratosphere troposphere exchange. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 121, 127–147.
- Wirth, V. und J. Egger (1999). Diagnosing extratropical synoptic-scale stratosphere-troposphere exchange: A case study. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 125, 635–655.
- World Meteorological Organization (1957). Meteorology – A three dimensional science. *WMO Bull.* 6, 134–138.
- Young, P. J., A. T. Archibald, K. W. Bowman, J. F. Lamarque, V. Naik, D. S. Stevenson, S. Tilmes, A. Voulgarakis, O. Wild, D. Bergmann, P. Cameron-Smith, I. Cionni, W. J. Collins, S. B. Dalsoren, R. M. Doherty, V. Eyring, G. Faluvegi, L. W. Horowitz, B. Josse, Y. H. Lee, I. A. MacKenzie, T. Nagashima, D. A. Plummer, M. Righi, S. T. Rumbold, R. B. Skeie, D. T. Shindell, S. A. Strode, K. Sudo, S. Szopa und

- G. Zeng (2013). Pre-industrial to end 21st century projections of tropospheric ozone from the Atmospheric Chemistry and Climate Model Intercomparison Project (ACCMIP). *Atmos. Chem. Phys.* *13*, 2063–2090.
- Zahn, A., C. Brenninkmeijer, W. Asman, P. Crutzen, G. Heinrich, H. Fischer, J. Cuijpers und P. van Velthoven (2002). Budgets of O<sub>3</sub> and CO in the upper troposphere: CARIBIC passenger aircraft results 1997-2001. *J. Geophys. Res.* *107*, 4337, doi:10.1029/2001JD001529.
- Zanis, P., P. Hadjinicolaou, A. Pozzer, E. Tyrlis, S. Dafka, N. Mihalopoulos und J. Lelieveld (2014). Summertime free-tropospheric ozone pool over the eastern Mediterranean/Middle East. *Atmos. Chem. Phys.* *14*, 115–132.
- Zhang, L., D. J. Jacob, N. V. Downey, D. A. Wood, D. Blewitt, C. C. Carouge, A. van Donkelaar, D. B. A. Jones, L. T. Murray und Y. Wang (2011). Improved estimate of the policy-relevant background ozone in the United States using the GEOS-Chem global model with 1/2 degrees x 2/3 degrees horizontal resolution over North America. *Atmos. Environ.* *45*, 6769–6776.
- Zhang, Y., W. Rossow, A. Lacis, V. Oinas und M. Mishchenko (2004). Calculation of radiative fluxes from the surface to top of atmosphere based on ISCCP and other global data sets: Refinements of the radiative transfer model and the input data. *J. Geophys. Res.* *109*, D19105, doi:10.1029/2003JD004457.
- Zierl, B. und V. Wirth (1997). The influence of radiation on tropopause behavior and stratosphere-troposphere exchange in an upper tropospheric anticyclone. *J. Geophys. Res.* *102*, 23883–23894.

## **Danksagung**

Ich danke allen Menschen, die mich in der Zeit meiner Promotion in jeglicher Art und Weise unterstützt haben!

Aus datenschutzrechtlichen Gründen muss auf die namentliche Nennung dieser Personen hier verzichtet werden.

Allen Personen, die sich angesprochen fühlen, sage ich daher auf diesem Weg nochmals:  
Vielen Dank!