



JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ

Strukturbildung in Wolken

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

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

Juliane Rosemeier
geboren in Schönebeck (Elbe)

Mainz, 12.07.2020

Berichterstatter: u. a. Prof. Peter Spichtinger
verteidigt am 07.09.2020

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen Menschen meinen großen Dank aussprechen, die mich bei der Anfertigung meiner Doktorarbeit unterstützt haben.

Nicht zuletzt möchte ich den Personen danken, die mich in Rahmen meiner wissenschaftlichen Ausbildung an der FU Berlin, UC Santa Barbara, am Konrad-Zuse-Zentrum Berlin und der JGU Mainz mit Rat, Anregungen und produktiven Gesprächen begleitet haben.

Meiner Familie danke ich für ihre Geduld, Ermutigungen und Zusprüche während des Studiums und der Anfertigung der Dissertation.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Vor- und Zuname: Juliane Rosemeier
geboren am: 24. Juni 1987 in Schönebeck (Elbe)
Staatsangehörigkeit: deutsch
Familienstand ledig

Schulbildung

1993-1997 Grundschule Sachsendorf
1997-1999 Sekundarschule Groß Rosenberg
1999-2006 Friedrich-Schiller-Gymnasium Calbe (Saale), Abitur

Hochschulausbildung

2006-2010 Studium der Mathematik an der Freien Universität Berlin, Vordiplom
2010/2011 Studienaufenthalt an der University of California, Santa Barbara
2011-2015 Fortsetzung des Studiums der Mathematik an der Freien Universität Berlin,
Anfertigung der Diplomarbeit, Thema: "Adaptive Ordnungs- und Iterationssteuerung bei spektralen Defektkorrekturmethode"

2012-2014 studentische Hilfskraft am Konrad-Zuse-Zentrum Berlin
seit 2016 Promotion an der Johannes Gutenberg-Universität Mainz in angewandter Mathematik am Institut für Physik der Atmosphäre

Zusammenfassung

Die Arbeit vereint Elemente aus der Mathematik und Wolkenphysik. Insbesondere widmet sie sich der Untersuchung von Wolkenstrukturen. Es werden Modelle, die warme Wolken und Eiswolken beschreiben, betrachtet. Die Wolkenmodelle werden als Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen formuliert.

In der vorliegenden Arbeit wird ein generisches Wolkenchema für warme Wolken formuliert. Die operationellen Modelle, die in IFS und COSMO verwendet werden sowie das Wacker-Schema sind Spezialfälle des generischen Modells und ergeben sich durch eine passende Parameterwahl aus dem generischen Modell. Für die Spezialfälle werden eine Gleichgewichtsanalyse und asymptotische Untersuchungen durchgeführt. Außerdem werden die ODE-Systeme mithilfe von Runge-Kutta Verfahren numerisch berechnet. Diese Untersuchungen geben Aufschluss über die zeitlichen Strukturen der Wolkenmodelle. Zusätzlich werden die Zeitskalen der mikrophysikalischen Wolkenprozesse identifiziert. Durch Ankoppelung von Diffusionstermen an das generische Wolkenmodell gelangt man zu Reaktions-Diffusions-Systemen. Für verschiedene Parameterwahlen im generischen Wolkenchema werden die Reaktions-Diffusions-Systeme auf räumliche Strukturbildung hin untersucht und mit einem Pseudospektralverfahren numerisch gelöst.

Außerdem wird ein Eiswolkenmodell beschrieben und untersucht. Um den Einfluss hochfrequenter Forcing-Terme numerisch effizient behandeln zu können, werden heterogene Mehrskalungsverfahren verwendet, die im Vorfeld beschrieben werden. Die numerischen Untersuchungen gewähren einen Einblick in die zeitlichen Strukturen der Eiswolken.

Abstract

The thesis combines elements of cloud physics and mathematics. Especially it is devoted to the investigation of cloud structures. Cloud schemes that describe warm clouds and ice clouds are considered. The cloud schemes are formulated as ordinary differential equations.

A generic cloud scheme for warm clouds is formulated. The operational schemes which are incorporated in IFS and COSMO as well as the Wacker scheme are special cases of the generic scheme and can be obtained by an appropriate choice of the parameters in the generic cloud scheme. An analysis of the fixed points and asymptotic investigations are done for the special cases. Additionally the ODE systems are solved numerically with Runge-Kutta methods. These investigations shed light on the temporal structures of the cloud schemes. Additionally the time scales of the micro physical cloud processes are identified. Coupling diffusion terms to the generic cloud scheme leads to reaction-diffusion systems. For special choices of the parameters of the generic cloud scheme the reaction-diffusion systems are investigated for spatial pattern formation and solved numerically with a pseudo-spectral method.

Furthermore an ice cloud scheme is described and examined. To treat the impact of highly oscillatory forcing terms efficiently heterogeneous multiscale methods, which are described previously, are applied. The numerical investigations provide insight into the temporal structures of ice clouds.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Mathematische Methoden zur Untersuchung gewöhnlicher Differentialgleichungen	3
2.1	Mathematische Grundlagen zur Gleichgewichtsanalyse	3
2.2	Runge-Kutta-Verfahren	7
2.3	A-Stabilität	10
2.4	Der Begriff der Steifheit	12
3	Untersuchungen zu Modellen von warmen Wolken	17
3.1	Massenkonzentrationen	18
3.2	Mikrophysikalische Wolkenprozesse	19
3.2.1	Kondensation	20
3.2.2	Evaporation	20
3.2.3	Kollisionsprozesse	21
3.2.4	Sedimentation	21
3.3	Generisches Wolkenmodell	22
3.4	Entdimensionalisierung	23
3.5	Die speziellen Wolkenmodelle	24
3.6	Numerische Lösungen der speziellen Wolkenmodelle	25
3.7	Qualitative Analyse	27
3.7.1	Bemerkung zum thermodynamischen Gleichgewicht und zur Gleichgewichtsanalyse im Sinn der dynamischen Systeme	27
3.7.2	Anwendung der Gleichgewichtsanalyse auf die Wolken schemata	29
3.7.3	Der triviale Fixpunkt	30
3.7.4	Nullstellenverhalten des trivialen Fixpunktes bei Berücksichtigung der Evaporation	32
3.7.5	Ein nicht-trivialer Fixpunkt	33
3.7.6	Bemerkung zur Eindeutigkeit der Nullstellen des nicht-trivialen Fixpunktes	36
3.8	Asymptotische Untersuchungen	37
3.8.1	Herleitung der reduzierten Gleichungen	40
3.8.2	Zusammenfassende Bemerkungen zur Fixpunkt- und asymptotischen Analyse	46
3.9	Ausblick und thematisch verwandte Literatur	47
4	Räumliche Strukturbildung in warmen Wolken	51
4.1	Lineare Stabilitätsanalyse bei Turing-Systemen	51
4.2	Lineare Stabilitätsanalyse für die Wacker-, COSMO- und IFS-Schemata	55

4.3	Ein Beispiel für Strukturbildung	57
4.4	Ein numerisches Verfahren zum Lösen von Reaktions-Diffusions-Gleichungen	61
4.4.1	Pseudospektral-Verfahren	61
4.4.2	Exponentielle Integratoren	62
4.5	Ausblick und mögliche Weiterentwicklungen	63
5	Beschreibung eines Eiswolkenmodells	75
5.1	Thermodynamische Änderungen	76
5.1.1	Druck	76
5.1.2	Temperatur	76
5.1.3	Änderung der Übersättigung	77
5.2	Mikrophysikalische Prozesse zur Änderung von Massen- und Anzahldichte	79
5.2.1	Wachstum	80
5.2.2	Sedimentation	94
5.2.3	Nukleation	95
5.3	Das Eiswolkenchema	96
6	Heterogene Mehrskalungsverfahren	97
6.1	Periodische Mittelung	97
6.2	Beispiel: Invertiertes Pendel	99
6.3	Heterogene Mehrskalungsverfahren (HMM)	100
6.4	Eine erste Idee zur Realisierung von HMM	102
6.5	HMM mit Integrationskernen	106
6.6	Das invertierte Pendel und HMM mit Integrationskernen	115
6.7	Abschließende Bemerkungen zu HMM	119
7	Numerische Behandlung des Eiswolkenmodells	121
7.1	Konstantes Forcing	121
7.2	Mit periodischem Forcing	122
7.2.1	Harmonischer Oszillator als Forcing-Term	125
7.2.2	Das van der Pol-System als Forcing-Term	127
7.3	Numerische Simulationen mit HMM	127
7.3.1	Harmonischer Oszillator	129
7.3.2	Van der Pol-System	129
7.3.3	Vergleich des Modells mit verschiedenen Forcing-Termen	131
7.3.4	Fehler	133
7.4	Spektrales Defektkorrektur-Verfahren (SDC) als Makro-Löser	133
7.4.1	Beschreibung des Verfahrens	137
7.4.2	Testläufe	139
7.5	Ausblick	140
8	Abschließende Bemerkungen	143
A	Ergänzendes zu Kapitel 3	145
A.1	Herleitung der Kondensationsrate von warmen Wolken	145
A.2	Bemerkungen zum Wolkenmodell aus Porz u. a., 2018	146

B	Ergänzungen zu Kapitel 4	147
	B.1 Einige Bemerkungen über Reaktions-Diffusions-Gleichungen	147
	B.2 Untersuchungen zum trivialen Gleichgewicht	148
C	Ergänzungen zu Kapitel 5	149
D	Zusätzliche Bemerkungen zu Kapitel 6	153
	D.1 Ein Lemma von Besjes	153
	D.2 Gronwall-Lemma	154
	D.3 Sobolev-Normen	154
	D.4 Hölder-Ungleichung	154
	D.5 Fehleranalyse bei SAM	155
	D.6 Fehler HMM mit Kernfunktionen	157
E	Ergänzungen zu Kapitel 7	159
	E.1 Ein symplektisches Runge-Kutta Verfahren der Ordnung 4	159
	E.2 Stabilität von Gleichgewichten im Eiswolkenchema	159
	Symbolverzeichnis	163
	Literatur	167

Abbildungsverzeichnis

1.1	Interdisziplinärer Ansatz	2
2.1	Allgemeine Form eines Butcher-Schemas	8
2.2	Butcher-Schemata verschiedener Runge-Kutta-Verfahren	9
2.3	Stabilitätsgebiete verschiedener Runge-Kutta-Verfahren	13
2.4	Veranschaulichung $A(\alpha)$ -Stabilität	14
2.5	Numerische Lösungen der Prothero-Robinson Gleichung	16
3.1	Fallender Wassertropfen mit wirkenden Kräften	18
3.2	Größenspektrum der Tropfen	18
3.3	Veranschaulichung Akkreszenz, Autokonversion, Sedimentation	22
3.4	Wechselwirkung zwischen Wolkentröpfchen und Regentropfen	23
3.5	Entdimensionalisierte Kondensationsrate	25
3.6	Entdimensionalisierte, umgebungsabhängige Vorfaktoren des COSMO-Schemas	26
3.7	Entdimensionalisierte, umgebungsabhängige Vorfaktoren des IFS-Schemas	26
3.8	Numerische Lösungen der speziellen Wolkenmodelle und Realteile der Eigenwerte der Jacobi-Matrizen	28
3.9	Eigenwerte für COSMO, IFS und Wacker bei Auswertung der Jacobi-Matrizen an numerischen Lösungspunkten	29
3.10	Lösungstrajektorien der drei Wolkenschemata im (q_c, q_r) -Phasenraum . .	36
3.11	Vergleich der reduzierten Modelle mit den Ausgangsmodellen	42
3.12	Simulation und Berechnung der Realteile der Eigenwerte reduzierter Wolkenmodelle	45
3.13	Zeitskalen der Wolkenprozesse	47
3.14	Bifurkation bei warmen Wolken	49
4.1	Stabilität von Turing-Modellen	56
4.2	Zulässige Parameter für Musterbildung	60
4.3	Musterbildung bei warmen Wolken für q_c mit einer Raumdimension . . .	65
4.4	Musterbildung bei warmen Wolken für q_r mit einer Raumdimension . . .	66
4.5	Musterbildung bei warmen Wolken in einer Raumdimension	67
4.6	Musterbildung bei warmen Wolken in zwei Raumdimensionen - q_c	68
4.7	Musterbildung bei warmen Wolken in zwei Raumdimensionen - q_r	69
4.8	Veranschaulichung von q_c bei der Simulation der Navier-Stoke-Gleichungen, gekoppelt an ein Wolkenschema	70
4.9	Veranschaulichung von q_r bei der Simulation der Navier-Stoke-Gleichungen, gekoppelt an ein Wolkenschema	71
4.10	Brüsselator als System gewöhnlicher Differentialgleichungen	72
4.11	Brüsselator als Reaktions-Diffusions-Gleichung	73

5.1	Vergleich der Übersättigungsterme	78
5.2	Eiskristallformen	80
5.3	Wasserdampftransport zum Eiskristall	81
5.4	Eiskristall in Form eines verlängerten Rotationsellipsoiden	85
5.5	Wachstumsprozesse am Eiskristall	87
5.6	Logarithmische Normalverteilung	92
5.7	Sedimentation bei Eiswolken	94
6.1	Veranschaulichung des invertierten Pendels	100
6.2	Numerische Berechnung des invertierten Pendels	101
6.3	Invertiertes Pendel mit SAM	105
6.4	Pseudocode SAM	106
6.5	Numerische Fehler von SAM beim invertierten Pendel	107
6.6	Gitter bei HMM	109
6.7	Beispiel für Integrationskerne	109
6.8	Grundgerüst eines HMM-Verfahrens	110
6.9	Minimierung der Fehlerfunktion	115
6.10	Rekonstruktion des Startwerts	117
6.11	Approximation des gemittelten Flusses des invertierten Pendels mit drei verschiedenen heterogenen Mehrskalen-Verfahren	118
6.12	Approximation des gemittelten Flusses des invertierten Pendels mit zwei verschiedenen heterogenen Mehrskalen-Verfahren	118
6.13	Fehler beim des invertierten Pendels mit HMM	119
7.1	Eiswolkenmodell mit konstanten Forcing $w = 0.01 \text{ m s}^{-1}$	122
7.2	Eiswolkenmodell mit konstanten Forcing $w = 0.1 \text{ m s}^{-1}$	123
7.3	Eiswolkenmodell mit konstanten Forcing $w = 0.5 \text{ m s}^{-1}$	124
7.4	Eiswolkenmodell mit van der Pol-Oszillator als Forcing-Term	126
7.5	Eiswolkenmodell mit van der Pol-Oszillator als Forcing-Term	128
7.6	Eiswolkenmodell mit harmonischen Oszillator als Forcing-Term	130
7.7	Eiswolkenmodell mit van der Pol-Oszillator als Forcing-Term	132
7.8	Vergleich des Eiswolkenmodells mit verschiedenen hochfrequenten Forcing- Termen	134
7.9	Vergleich des Eiswolkenmodells mit verschiedenen Forcing-Termen einer langsameren Frequenz	135
7.10	Vergleich des Eiswolkenmodells mit verschiedenen Forcing-Termen einer langsame Frequenz	136
7.11	Fehler unterschiedlicher HMM bei Verwendung verschiedener Runge-Kutta- Verfahren als Makro-Löser	137
7.12	Das grobe und die feinen SDC-Gitter	138
7.13	Fehler des heterogenen Mehrskalen-Verfahrens mit dem spektralen Defektkorrektur- Verfahren als Makro-Löser	140
7.14	Periodische angeregtes Eiswolkenchema ohne Skalenseparation	141
8.1	Großskalige Wolkenstrukturen	144
E.1	Gauss-Verfahren 4. Ordnung	159

E.2 Stabile und instabile Gleichgewichte beim Eiswolkenchema 160

Tabellenverzeichnis

2.1	Stabilitätsfunktionen verschiedener Runge-Kutta-Verfahren	12
2.2	Prothero-Robinson Gleichung mit explizitem und implizitem Löser	15
3.1	Konstante und variable Koeffizienten der COSMO-, IFS- und Wacker-Schemata	25
3.2	entdimensionalisierten Fixpunkte	32
3.3	Eigenwert λ_1 für das nicht-triviale Gleichgewicht, Relaxations- und Oszillationszeitskalen	35
3.4	Konstante Vorfaktoren und Exponenten der speziellen Wolkschemata	38
3.5	Distinguished Limit	38

Kapitel 1

Einleitung

”Pour soulever un poids si lourd,
Sisyphé, il faudrait ton courage! ... ”

Charles Baudelaire, in ”Le Guignon” aus
”Les Fleurs du Mal”

Wolken stellen eine große Unsicherheit in Wetter- und Klimamodellen dar. Dies liefert die Motivation, sich näher mit der Wolkenmodellierung zu beschäftigen. Insbesondere sollen Wolkenstrukturen, die sowohl zeitlich als auch räumlich sein können, untersucht werden. Wolken sind an Atmosphärenflüsse gekoppelt und beeinflussen diese. Die Untersuchung von Wolkenstrukturen soll ein Schritt dahingehend sein, die Wechselwirkung zwischen Wolken und großskaligen Flüssen besser zu verstehen.

Im Folgenden liegt eine interdisziplinäre Arbeit vor, die sowohl Ideen aus der Mathematik als auch der Wolkenphysik vereint. Ein weiteres Ziel besteht darin, eine Brücke zwischen beiden Disziplinen zu schlagen. Dazu werden verschiedene mathematische Methoden auf wolkenphysikalische Probleme angewendet. Eine Übersicht stellt die Abbildung 1.1 dar.

Wir beginnen in Kapitel 2 mit grundlegenden Bemerkungen zu Runge-Kutta Verfahren. Diese numerische Zeitschrittverfahren werden dann in den folgenden Kapiteln immer wieder angewendet. Außerdem werden einige analytische Resultate, die zur Untersuchung gewöhnlicher Differentialgleichungen nützlich sind, gezeigt.

In Kapitel 3 finden wir das erste Mal den Bezug zur Wolkenphysik. Dort wird die allgemeine Form eines Einmomentenschemas, das warme Wolken beschreibt, gezeigt. Es werden dann drei spezielle Wolkenschemata, die diese allgemeine Form annehmen untersucht. Zwei von ihnen werden oder wurden in operationellen Wettermodellen verwendet. Unter der Annahme von idealisierten Situationen bezüglich der Umgebungsbedingungen werden auf die speziellen Wolkenschemata die Methoden aus Kapitel 2 angewendet. Außerdem werden die Gleichungen zusätzlich durch asymptotische Untersuchungen analysiert.

Es schließt sich das Kapitel 4 an, in dem an das Wolkenmodell aus Kapitel 3 Laplace-Terme angekoppelt werden. Dadurch gelangt man zu einer partiellen Differentialgleichung, im Speziellen zu einem Turing-Modell. Es wird dann für verschiedene spezielle Wolkenmodelle eine lineare Stabilitätsanalyse durchgeführt. Dies ist eine neue Herangehensweise, Wolkenmodelle zu untersuchen. Dadurch ergeben sich interessante Einsichten.

Ab Kapitel 5 wenden wir uns Eiswolken zu. Kapitel 5 enthält zunächst eine Beschreibung eines Eiswolkenschemas. Es handelt sich um ein Zweimomentenschema. An dieses Modell können dann Forcing-Terme angekoppelt werden, die das Heben und Senken eines Luftpakets simulieren und zu weiteren Untersuchungen führen.

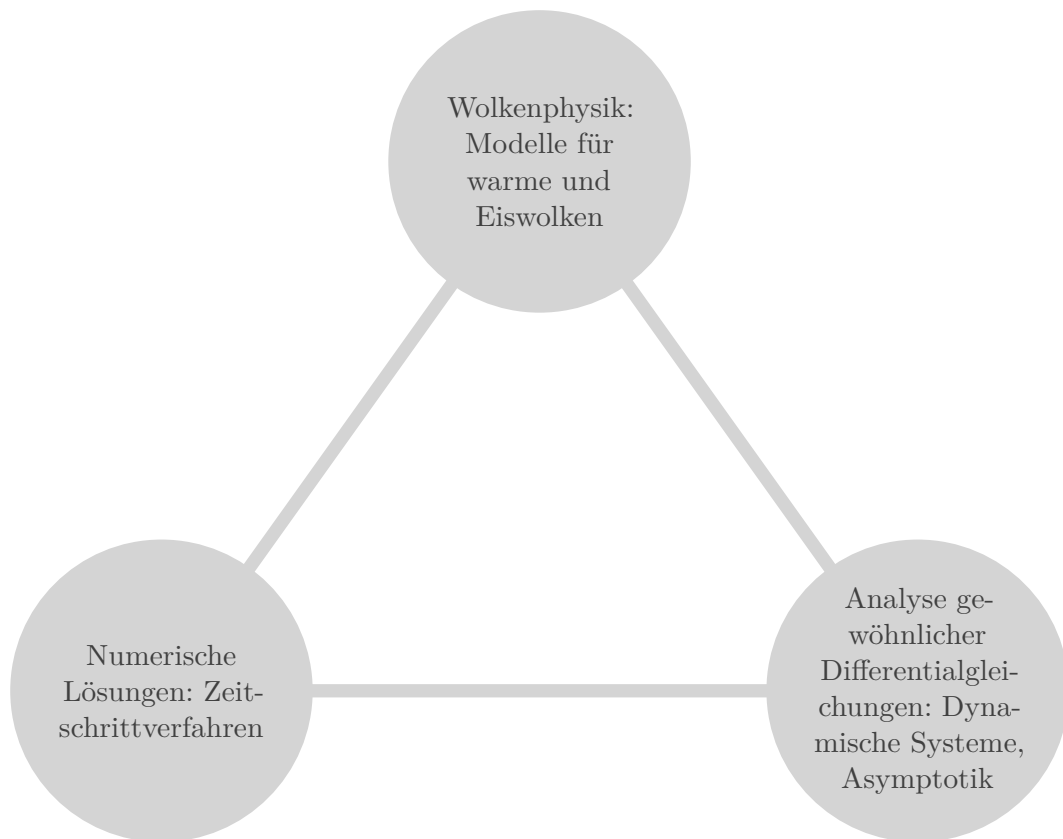


Abbildung 1.1: Interdisziplinärer Ansatz

In Kapitel 6 werden heterogene Mehrskalungsverfahren vorgestellt. Diese werden zunächst am invertierten Pendel getestet. Dabei handelt es sich um ein Modell mit einem Zweiskalenverhalten, das häufig zum Test heterogener Mehrskalungsverfahren herangezogen wird. Später sollen die Verfahren dem Zweck dienen, mit hochfrequenten Forcing-Termen, die an das Eiswolkenchema aus Kapitel 5 angekoppelt werden, numerisch effizient umzugehen.

In Kapitel 7 wird das Eiswolkenchema aus 5 numerisch gelöst. Dazu werden wieder idealisierte Situationen hinsichtlich der Umgebungsbedingungen betrachtet. In einfachen Fällen können Runge-Kutta Verfahren angewendet werden, bei Ankoppelung hochfrequenter Terme werden heterogene Mehrskalungsverfahren benutzt. In diesem Kapitel werden auch spektrale Defektkorrekturverfahren als Makro-Löser der heterogenen Mehrskalungsverfahren vorgeschlagen und getestet.

Abschließende Bemerkungen zu dieser Arbeit findet man in Kapitel 8.

Kapitel 2

Mathematische Methoden zur Untersuchung gewöhnlicher Differentialgleichungen

In diesem Kapitel sollen mathematische Grundlagen erklärt werden, von denen in den nachfolgenden Kapiteln häufig Gebrauch gemacht wird. Diese umfassen sowohl analytische Werkzeuge in Abschnitt 2.1 als auch numerische Verfahren in Abschnitt 2.2.

2.1 Mathematische Grundlagen zur Gleichgewichtsanalyse

Neben der klassischen Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen existiert die Theorie der dynamischen Systeme. Wir werden uns Resultate beider Theorien zu Nutze machen. In der klassischen Theorie geht es vorrangig darum, Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen zu klären und zu gegebenen Differentialgleichungen explizite Lösungen zu berechnen. Hingegen steht in der Theorie der dynamischen Systeme das qualitative Verhalten von Lösungstrajektorien im Vordergrund. Differentialgleichungen oder Differentialgleichungssysteme werden auch dynamische Systeme genannt. In diesem Abschnitt werden neben dem Satz von Picard-Lindelöf die mathematischen Grundlagen der Gleichgewichtsanalyse, die später auf die speziellen Wolkenschemata aus Kapitel 3 angewendet werden sollen, aufgezeigt. Zu dieser Thematik existiert eine reichhaltige Literatur. Einige Beispiele sind Verhulst, 1996, Arnold, 2001, Hirsch u. a., 2004 oder Argyris u. a., 2010.

Zunächst betrachten wir ein Anfangswertproblem der Form

$$\dot{x}(t) = f(x(t)), \quad t \in [0, T] \quad (2.1a)$$

$$x(0) = x_0 \quad (2.1b)$$

Da wir in Zukunft immer annehmen, dass x von t abhängig ist, schreiben wir bei Differentialgleichungen im Folgenden x anstatt $x(t)$. Es sei angemerkt, dass x auch vektorwertig sein kann, wir es daher in diesem Fall mit einem Differentialgleichungssystem zu tun haben. Gleichung (2.1) stellt den Fall eines autonomen Differentialgleichungssystems dar, da keine explizite Zeitabhängigkeit bei der rechten Seite f vorliegt. Dies bedeutet jedoch keinen Verlust von Allgemeinheit, da ein nicht-autonomes Gleichungssystem autonomisiert werden kann. Man betrachte dazu das System

$$\dot{x} = F(x, t), \quad t \in [0, T] \quad (2.2a)$$

$$x(0) = x_0 \quad (2.2b)$$

Durch Übergang zu

$$\dot{x} = F(x, \theta), \quad t \in [0, T] \quad (2.3a)$$

$$\dot{\theta} = 1 \tag{2.3b}$$

$$x(0) = x_0 \tag{2.3c}$$

$$\theta(0) = 0 \tag{2.3d}$$

erhält man ein System, das die gleichen Lösungen zulässt, wie (2.2). Die Dimension des Systems erhöht sich durch die Autonomisierung um eins.

Wenn man Anfangswertprobleme der Form (2.1) oder (2.2) betrachtet, möchte man wissen, wie es um die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen steht. Eine Aussage über Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen von Differentialgleichungen trifft der Satz von Picard-Lindelöf.

Satz 2.1.1. *Wir betrachten das Anfangswertproblem (2.2). Sei $G = \mathbb{R}^d \times I$ mit einem kompakten Intervall I . Die rechte Seite F sei stetig und erfülle bezüglich x eine Lipschitzbedingung in G . Dann besitzt das Anfangswertproblem (2.2) für jedes $(x_0, t_0) \in G$ eine eindeutige Lösung.*

Den Beweis für dieses Resultat kann man beispielsweise in Werner, 2009 oder Behrends, 2004 finden. Dieser Satz lässt sich im Besonderen auf autonome Probleme der Form (2.1) anwenden. In diesem Fall gilt $F(x, t) = f(x)$.

In den Wolkenmodellen, die in Kapitel 3 behandelt werden, ist die Bedingung der Lipschitz-Stetigkeit oft nicht erfüllt. Man kann somit unter Umständen keine Eindeutigkeit der Lösungen garantieren. Beispielsweise wird in Porz u. a., 2018 ein Wolkenchema für warme Wolken hergeleitet und anschließend auf diese Problematik hingewiesen. Man führt die Bedingung ein, dass sie Lösung bei Übersättigung positiv werden muss und passt den numerischen Löser dementsprechend an. Weitergehende Untersuchungen zur Eindeutigkeit finden sich in Hanke und Porz, 2020.

An dieser Stelle sei noch die Schreibweise der Flussnotation eingeführt. Damit wird später schlüssig, was mit einem diskreten Fluss numerischer Verfahren gemeint ist. Diese Begriffsbildung wird in Abschnitt 2.2 häufig verwendet.

Definition 2.1.2. *Das Problem (2.1) habe eine eindeutig bestimmte Lösung. Dann liegt der Anfangswert x_0 im Definitionsbereich des Flussoperators ϕ^t und für alle $t \in [0, T]$ kann der Fluss $\phi^t x_0$ definiert werden durch*

$$\phi^t x_0 = x(t). \tag{2.4}$$

In der Theorie der dynamischen Systeme wird der Fluss zunächst als eine Abbildung mit den Eigenschaften $\phi^0 x_0 = x_0$ und $\phi^s \circ \phi^t = \phi^{s+t}$ definiert und anschließend gezeigt, dass der Fluss äquivalent zur Lösung eines Anfangswertproblems ist, das die rechte Seite $f(x) = \frac{d(\phi^t x_0)}{dt} \Big|_{t=0}$ besitzt (Siehe Hirsch u. a., 2004).

Wir sind an ganz speziellen Lösungen von (2.1) interessiert, und zwar an Lösungen, die zeitlich konstant sind.

Definition 2.1.3. *Eine konstantes $x^* \in \mathbb{R}^d$ heißt Fixpunkt von (2.1), falls die zugehörige Lösungstrajektorie $x(t) \equiv x^*$ das Problem (2.1) mit dem Anfangswert $x(0) = x^*$ löst. Die Begriffe Fixpunkt, Gleichgewicht und kritischer Punkt werden synonym verwendet.*

Falls x^* ein Fixpunkt von (2.1) ist, erfüllt $x(t) \equiv x^*$ die Bedingung $f(x^*) = 0$ und umgekehrt. Im Folgenden nehmen wir an, dass ein Fixpunkt x^* von (2.1) existiert und $x^* = 0$ gilt. Falls $x^* \neq 0$, kann man $x^* = 0$ durch eine einfache Koordinatentransformation des Systems erreichen. Wir sind daran interessiert zu untersuchen, wie sich Lösungen von Differentialgleichungen in der Nähe von Fixpunkten verhalten. Damit befasst sich der Rest des Abschnitts 2.1. Zunächst definieren wir den Begriff der Stabilität einer Lösung:

Definition 2.1.4. *Man betrachte die Anfangswertprobleme*

$$\dot{x} = f(x) \quad x(0) = x_0 \quad (2.5)$$

$$\dot{\tilde{x}} = f(\tilde{x}) \quad \tilde{x}(0) = x_0 + \delta_0 \quad (2.6)$$

Sei $x(t)$ die Lösung von (2.5) und $\tilde{x}(t)$ die Lösung von (2.6). $x(t)$ heißt stabil, wenn für alle $\varepsilon > 0$ ein $\delta > 0$ existiert, so dass die Bedingung $\|\delta_0\| < \delta$ die Existenz einer Lösung $\tilde{x}(t)$ zu Problem (2.6) und $\|x(t) - \tilde{x}(t)\| < \varepsilon$ für alle $t \in [0, \infty)$ impliziert. Die Lösung $x(t)$ nennt man asymptotisch stabil, wenn $x(t)$ stabil ist und ein $\hat{\delta}_0$ existiert, sodass aus $\|\delta_0\| < \hat{\delta}_0$ folgt, dass $\lim_{t \rightarrow \infty} \|x(t) - \tilde{x}(t)\| = 0$

Man möchte nun die Stabilität eines gegebenen Fixpunktes bestimmen können. Wir nennen einen Fixpunkt x^* stabil bzw. asymptotisch stabil, wenn die zugehörige Lösung $x(t) \equiv x^*$ stabil bzw. asymptotisch stabil ist. Anstatt des allgemeinen Problems betrachten wir zuerst das lineare Problem

$$\dot{x} = Ax, \quad t \in [0, T] \quad (2.7a)$$

$$x(0) = x_0 \quad (2.7b)$$

Später versuchen wir die Resultate, die für das lineare Problem gewonnen werden, auf nicht-lineare Probleme zu verallgemeinern. Dies ist teilweise möglich. Zur Bestimmung der Stabilitätseigenschaften ist der weiter unten angegebene Satz 2.1.7 nützlich. Zunächst definieren wir das Spektrum einer Matrix.

Definition 2.1.5. *Die Menge aller Eigenwerte einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$ wird als Spektrum $\sigma(A)$ bezeichnet. In Zeichen:*

$$\sigma(A) =: \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda \text{ ist Eigenwert von } A\} \quad (2.8)$$

Es bietet sich an dieser Stelle an, die Spektralabzisse einer Matrix A zu definieren

Definition 2.1.6. *Man nennt den maximalen Realteil der Eigenwerte der Matrix A Spektralabzisse $\nu(A)$ der Matrix A .*

$$\nu(A) =: \max_{\lambda \in \sigma(A)} \operatorname{Re}(\lambda) \quad (2.9)$$

Satz 2.1.7. *Wir betrachten das System (2.7). Der Fixpunkt $x^* = 0$ ist stabil im Sinn der oben angegebenen Definition 2.1.4, g.d.w. für alle $\lambda \in \sigma(A)$ gilt $\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0$ und für die Eigenwerte mit $\operatorname{Re}(\lambda) = 0$ die algebraische gleich der geometrischen Vielfachheit ist. Der Fixpunkt ist asymptotisch stabil, g.d.w. $\nu(A) < 0$ gilt.*

Den Beweis findet man zum Beispiel in Deuffhard und Bornemann, 2008. Satz 2.1.7 zeigt, dass es möglich ist, mithilfe der Eigenwerte von A das Stabilitätsverhalten des Gleichgewichtspunktes $x^* \equiv 0$ der linearen Differentialgleichung (2.7) zu bestimmen. Für das nicht-lineare Problem (2.1) strebt man ebenfalls solche Aussagen über Fixpunkte an. Zu diesem Zweck erscheint es naheliegend, das System

$$\dot{x} = Df(x^*)x \tag{2.10}$$

zu untersuchen. Dabei ist x^* der Fixpunkt, dessen Stabilitätsverhalten bestimmt werden soll und $Df(x^*)$ ist die Jacobi-Matrix der rechten Seite $f(x)$ aus (2.1), ausgewertet an x^* . Die Eigenschaft, ein stabiler Fixpunkt zu sein, überträgt sich im Allgemeinen nicht vom linearisierten Problem (2.10) auf das nicht-lineare Ausgangssystem, da Terme höherer Ordnung im nicht-linearen Problem dominieren könnten. Die Situation ist anders, wenn wir asymptotische Stabilität betrachten.

Satz 2.1.8. *Sei x^* ein Fixpunkt des Systems (2.1). Sei weiterhin f stetig differenzierbar. Falls dann $\nu(Df(x^*)) < 0$ gilt, ist x^* asymptotisch stabiler Fixpunkt von (2.1).*

Die Eigenschaft der asymptotischen Stabilität überträgt sich also vom linearisierten Problem auf das nicht-lineare Ausgangssystem. Das Ergebnis wird zum Beispiel in Deuffhard und Bornemann, 2008 gezeigt.

Dynamische Systeme in \mathbb{R}^2 stellen einen Sonderfall dar, da man das Grenzverhalten von beschränkten Lösungen von (2.1) sehr gut mithilfe des Satzes von Poincaré-Bendixson charakterisieren kann. In höheren Dimensionen ist eine derart einfache Charakterisierung nicht mehr möglich, insbesondere kann dann bei dynamischen Systemen chaotisches Verhalten auftreten. Für eine exakte Formulierung des Satzes von Poincaré-Bendixson ist es von Vorteil, die Begriffe ω - und α -Limesmenge zu definieren. ω - und α -Limesmengen kann man sich als Mengen von Häufungspunkten von Trajektorien vorstellen. Die zu den Häufungspunkten gehörigen Trajektorien sind die Lösungen des gegebenen Differentialgleichungssystems. Es folgt eine exakte Definition der Begriffe ω - und α -Limesmenge.

Definition 2.1.9. *Sei $x(t)$ eine Lösung von (2.1). Der Punkt $p \in \mathbb{R}^d$ ist ein ω -Limespunkt g.d.w. eine Folge $t_n \rightarrow +\infty$ existiert mit $x(t_n) \rightarrow p$. Die Menge aller ω -Limespunkte von x wird als ω -Limesmenge von x bezeichnet (in Zeichen: ω_x). α -Limesmengen werden analog mit Folgen $t_n \rightarrow -\infty$ definiert.*

Mit dieser Begriffsbildung kann jetzt der Satz von Poincaré-Bendixson formuliert werden, den wir später auf das System (3.14) anwenden können.

Satz 2.1.10. *Wir betrachten eine Differentialgleichung in \mathbb{R}^2 . Eine nicht-leere, kompakte ω - oder α -Limesmenge, die keinen Fixpunkt enthält, ist ein geschlossener Orbit.*

Der Satz von Poincaré-Bendixson ist ein grundlegendes Resultat aus der Theorie der dynamischen Systeme. Einen Beweis findet man beispielsweise in Hirsch u. a., 2004.

Bendixson's Kriterium trifft zudem eine Aussage darüber, unter welcher Bedingung man die Existenz von periodischen Lösungen bei einem zweidimensionalen Differentialgleichungssystem ausschließen kann.

Satz 2.1.11. *Sei $D \subseteq \mathbb{R}^2$ einfach zusammenhängend und f aus (2.1) stetig differenzierbar. Das System (2.1) kann nur dann eine periodische Lösung in D besitzen, wenn $\nabla \cdot f$ das Vorzeichen in D wechselt oder $\nabla \cdot f = 0$ in D .*

Dieses Ergebnis wird in Verhulst, 1996 gezeigt.

Zur Charakterisierung von Lösungen von Differentialgleichungssystemen der Form (2.1) kann es hilfreich sein, ein erstes Integral von (2.1) zu finden. Eine Definition dieses Begriffes wird in Verhulst, 1996 angegeben.

Definition 2.1.12. *Wir betrachten das System (2.1) mit $x(t) \in D \subseteq \mathbb{R}^d$ für alle $t \in \text{mathbb{R}}$. Die Funktion $I(x)$ wird erstes Integral von (2.1) in D genannt, wenn*

$$0 = \frac{\partial I}{\partial x_1} \dot{x}_1 + \cdots + \frac{\partial I}{\partial x_n} \dot{x}_d \quad (2.11)$$

gilt.

Damit ist ein erstes Integral I eines Systems (2.1) konstant entlang der Lösungstrajektorien von (2.1). Man kann auch sagen, dass die Lösungen von (2.1) auf den Niveau-Linien von I liegen. Der Begriff des ersten Integrals wird uns in Abschnitt 3.8.1 wieder begegnen.

2.2 Runge-Kutta-Verfahren

Runge-Kutta-Verfahren sind weit verbreitete numerische Verfahren zur approximativen Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen. Sie werden beispielsweise in Hairer und Wanner, 1991, Hairer und Wanner, 1993 Deuffhard und Bornemann, 2008 Hanke-Bourgeois, 2009 oder Strehmel u. a., 2012 beschrieben. Es handelt sich hierbei um Standardverfahren, die zu den Einschritt-Verfahren gezählt werden.

Die Aufgabe besteht darin für ein gegebenes Anfangswertproblem

$$\dot{x}(t) = F(x, t), \quad x(0) = x_0, \quad t \in [0, T] \quad (2.12)$$

eine numerische Approximation zu berechnen. Dabei gilt $x_0 \in \mathbb{R}^d$ und $f : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$. Auf dem Intervall $[0, T]$ sei ein Gitter $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_n = T$ gegeben. Die Gitterweite wird durch $\tau_k := t_{k+1} - t_k$ definiert. Bei Vorliegen eines äquidistanten Gitters kann der Index weggelassen werden und man schreibt nur τ . Wir werden im Folgenden, soweit nicht ausdrücklich erwähnt, davon ausgehen, dass wir mit einem äquidistanten Gitter arbeiten. An den entsprechenden Knoten t_0, \dots, t_n sollen Approximationen x_0, \dots, x_n von (2.12) berechnet werden.

Wie weiter oben erwähnt sind Runge-Kutta-Verfahren Einschrittverfahren, d. h. zur Berechnung von x_{k+1} benötigt man nur x_k . Es bietet sich an, die Notation für den diskreten Fluss zu verwenden: $x_{k+1} = \Psi^\tau x_k$. Diese Schreibweise kann wie folgt interpretiert werden: man wendet das Runge-Kutta-Verfahren Ψ^τ mit vorgegebener Schrittweite τ auf x_k an, um den Wert von x_{k+1} zu berechnen. Außerdem wird sich die Schreibweise mit einer Inkrementfunktion ψ als nützlich erweisen: $\Psi^\tau x_k = x_k + \tau\psi(t_k, x_k, \tau)$.

Demgegenüber stehen die Mehrschrittverfahren. Diese verwenden nicht nur den letzten Gitterpunkt zur Berechnung der Approximation. k -Schrittverfahren benutzen die Information der letzten k Knoten.

An dieser Stelle soll definiert werden, was wir unter einem Runge-Kutta-Verfahren verstehen.

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & A \\ \hline & \mathbf{b} \end{array}$$

Abbildung 2.1: Allgemeine Form eines Butcher-Schemas

Definition 2.2.1. *Man nennt einen diskreten Flussoperator der Form*

$$\psi^\tau x = x + \tau \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad (2.13)$$

mit

$$k_i = f \left(x + \tau \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j, t + c_i \tau \right) \quad (2.14)$$

Runge-Kutta-Verfahren der Stufe s .

Ein Runge-Kutta-Verfahren kann durch ein Butcher-Schema charakterisiert werden. Abbildung 2.1 zeigt die allgemeine Form eines Butcher-Schemas. Dabei gilt für ein Verfahren der Stufe s : $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_s)$, $\mathbf{b} = (b_1, \dots, b_s)$ und für die Matrix $A = (a_{ij})_{i,j=1}^s$. Die Abbildungen 2.2a, 2.2b, 2.2c, 2.2d, 2.2e und 2.2f zeigen die Butcher-Schemata konkreter Runge-Kutta-Verfahren. Dabei sind nur die Runge-Kutta-Verfahren, die zu den Abbildungen 2.2b und 2.2d gehören, also das implizite Euler-Verfahren und das Trapez-Verfahren, implizite Runge-Kutta-Verfahren, alle anderen aufgeführten Runge-Kutta-Verfahren sind explizit. Bei expliziten Runge-Kutta-Verfahren ist die Matrix A immer eine untere Dreiecksmatrix mit Nullen in der Hauptdiagonalen. Implizite Verfahren können günstige Stabilitätseigenschaften besitzen, die explizite Verfahren nicht haben können (siehe dazu Abschnitt 2.3). Die Berechnung der s Stufen führt bei impliziten Verfahren auf ein Gleichungssystem. Bei expliziten Verfahren hingegen kann man die Stufen rekursiv auswerten.

Wie weiter oben gezeigt, kann man das Problem (2.12) autonomisieren. Es ist wünschenswert, dass die Anwendung eines Runge-Kutta-Verfahrens ψ^τ auf das nicht-autonome Problem (2.12) äquivalent zur Anwendung auf das autonomisierte Problem (2.3) ist. Dazu müssen folgende Bedingungen erfüllt sein:

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}. \quad (2.15)$$

und

$$1 = \sum_{i=1}^s b_i. \quad (2.16)$$

Wir nehmen an, dass im Folgenden diese Bedingungen immer erfüllt sind. Bedingung (2.16) werden wir im Satz 2.2.5 weiter unten, der Aussagen über die Fehlerordnungen von Runge-Kutta-Verfahren trifft, noch einmal begeben.

An dieser Stelle wenden wir uns der Analyse des Approximationsfehlers von Runge-Kutta-Verfahren zu.

Definition 2.2.2. *Man nennt das Verfahren Ψ^τ konsistent mit Konsistenzordnung p , wenn es für jede kompakte Menge $K \subset \mathbb{R}^n$ eine Konstante $\tilde{C}(K, f)$ und ein τ^* gibt mit*

$$\|\phi^\tau x - \Psi^\tau x\| \leq \tilde{C}(K, f) \tau^{p+1} \quad (2.17)$$

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array}$$

(a) expliziter Euler

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array}$$

(b) impliziter Euler

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

(c) Heun-Verfahren 2. Ordnung

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

(d) Trapez-Verfahren

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ \hline & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4} \end{array}$$

(e) Heun-Verfahren 3. Ordnung

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

(f) klassisches Runge-Kutta-Verfahren

Abbildung 2.2: Butcher-Schemata verschiedener Runge-Kutta-Verfahren

Explizites und implizites Euler-Verfahren besitzen die Konsistenzordnung 1, das Trapez-Verfahren hat die Konsistenzordnung 2, das klassische Runge-Kutta-Verfahren besitzt die Konsistenzordnung 4, die beiden Heun-Verfahren haben, wie ihr Name besagt, die Konsistenzordnungen 2 und 3.

Wir bezeichnen mit x_Δ eine Funktion, die auf den Knoten t_0, \dots, t_n definiert ist. Dabei gilt für die sogenannte Gitterfunktion $x_\Delta(t_k) = x_k$. Die Werte x_k erhält man beispielsweise durch Anwendung eines Runge-Kutta-Verfahrens auf das Problem (2.12).

Definition 2.2.3. *Der Diskretisierungsfehler wird wie folgt definiert*

$$\|x - x_\Delta\|_\infty := \max_{k=0, \dots, n} \|x(t_k) - x_k\| \tag{2.18}$$

Man nennt das Verfahren Ψ^τ konvergent mit Konvergenzordnung p , wenn es $C > 0$ und τ^* gibt mit

$$\|x - x_\Delta\|_\infty \leq C\tau^p \tag{2.19}$$

für alle $\tau < \tau^*$

Die Konstante darf vom Intervall $[0, T]$ und der rechten Seite f abhängen.

Satz 2.2.4. *Sei Ψ ein Runge-Kutta-Verfahren mit Inkrementfunktion ψ . Die Inkrementfunktion ψ sei Lipschitz-stetig in der Zustandsvariablen. Für den Konsistenzfehler gelte*

$$x(t + \tau) - \Psi^\tau x(t) = \mathcal{O}(\tau^{p+1}) \tag{2.20}$$

entlang einer Trajektorie $x \in C([0, T], \mathbb{R}^d)$. Dann definiert für eine genügend kleine Gitterweite ψ eine Gitterfunktion. Die Familie der Gitterfunktionen konvergiert mit Ordnung p gegen $x(t)$.

Dieses Resultat, sowie dessen Beweis findet man in Deuffhard und Bornemann, 2008. Wenn ein Runge-Kutta-Verfahren gegeben ist, möchte man wissen, welche Konvergenzordnung man bei Anwendung des Verfahrens erwarten kann. Dabei hilft das folgende Ergebnis weiter. Durch die Beziehung (2.15) sind die c_i gegeben.

Satz 2.2.5. *Ein Runge-Kutta-Verfahren der Stufe s besitzt für alle rechten Seiten $f \in C^p(\mathbb{R}^d)$ die Konsistenzordnung $p = 1$, wenn für die Einträge von \mathbf{b} und A gilt*

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1, \quad (2.21)$$

die Konsistenzordnung $p = 2$, wenn zusätzlich für die Einträge von \mathbf{b} und A gilt

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i = \frac{1}{2}, \quad (2.22)$$

die Konsistenzordnung $p = 3$, wenn zusätzlich für die Einträge von \mathbf{b} und A gilt

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \quad (2.23a)$$

$$\sum_{i,j=1}^s b_i a_{i,j} c_j = \frac{1}{6}, \quad (2.23b)$$

die Konsistenzordnung $p = 4$, wenn zusätzlich für die Einträge von \mathbf{b} und A gilt

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^3 = \frac{1}{4}, \quad (2.24a)$$

$$\sum_{i,j=1}^s b_i c_i a_{i,j} c_j = \frac{1}{8}, \quad (2.24b)$$

$$\sum_{i=1}^s b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}, \quad (2.24c)$$

$$\sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{i,j} a_{j,k} c_k = \frac{1}{24}, \quad (2.24d)$$

Mit diesem Satz ist es jetzt möglich, die Ordnungen der in Abbildung 2.2 aufgeführten Runge-Kutta-Verfahren zu bestimmen.

2.3 A-Stabilität

Es soll die Frage beantwortet werden, ob sich asymptotische Stabilität vom kontinuierlichen Problem auf die Diskretisierung überträgt. Aus den Sätzen 2.1.7 und 2.1.8 geht hervor, dass

Stabilität mit den Eigenwerten von A bzw. $Df(x^*)$ in Verbindung steht. Dies motiviert die Betrachtung der Dahlquist'schen Testgleichung

$$\dot{x} = \lambda x \tag{2.25}$$

Satz 2.3.1. *Wir betrachten ein Runge-Kutta-Verfahren ψ^τ , also ein Verfahren der Form*

$$\psi^\tau x = x + \tau \sum_{i=1}^s b_i k_i \tag{2.26}$$

$$k_i = f \left(x + \tau \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j, t + c_i \tau \right) \tag{2.27}$$

Es existiert ein $\tau^* > 0$, sodass die Anwendung von ψ^τ auf (2.25) eine Vorschrift der Form

$$x_{k+1} = R(\lambda\tau)x_k \tag{2.28}$$

ergibt für alle $\tau < \tau^*$, wobei $R(z)$ dargestellt werden kann als

$$R(z) = \frac{P(z)}{Q(z)} \tag{2.29}$$

mit eindeutig bestimmten teilerfremden Polynomen P und Q , für die $\deg(P) \leq s$ und $\deg(Q) \leq s$ gilt und die durch $P(0) = 1 = Q(0)$ normalisiert sind. Man nennt $R(z)$ Stabilitätsfunktion des Runge-Kutta-Verfahrens ψ^τ .

In Tabelle 2.1 sind die Stabilitätsfunktionen verschiedener Runge-Kutta-Verfahren aufgeführt. Man kann zeigen, dass Runge-Kutta-Verfahren mit Konsistenzordnung p Stabilitätsfunktionen $R(z)$ besitzen, die die Bedingung $R(z) = \exp(z) + \mathcal{O}(z^{p+1})$ für $z \rightarrow 0$ erfüllen. Daher ist es nicht überraschend, dass die Stabilitätsfunktionen der expliziten Verfahren mit den ersten Gliedern der Taylorreihenentwicklung der Exponentialfunktion übereinstimmen..

Wenn in Gleichung (2.25) die Bedingung $\operatorname{Re}(\lambda) < 0$ erfüllt ist, konvergiert das zugehörige Anfangswertproblem für $t \rightarrow \infty$ gegen 0. Damit ist 0 ein asymptotisch stabiler Fixpunkt. Man möchte, dass numerische Löser dieses Verhalten wiedergeben. Der folgende Satz charakterisiert, bei welchen Verfahren man sicher sein kann, dass sich die Eigenschaft, gegen 0 zu konvergieren, von der kontinuierlichen Lösung auf die numerische Approximation überträgt. Mit \mathbb{C}_- bezeichnen wir die linke Halbebene der komplexen Zahlenebene.

Satz 2.3.2. *Sei $R(z)$ die Stabilitätsfunktion des Runge-Kutta-Verfahrens Ψ^τ . Wir betrachten die folgende Bedingung an das Verfahren Ψ^τ*

$$\mathbb{C}_- \subset S = \{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| < 1\} \tag{2.30}$$

Die Bedingung (2.30) ist äquivalent zu der Aussage, dass aus der Stabilität von $\dot{x} = \lambda x$ die Stabilität von $x_{k+1} = \Psi^\tau x_k$ für alle $\lambda \in \mathbb{C}$ folgt.

Die Bedingung (2.30) spielt eine wichtige Rolle, bei der numerischen Lösung von Differentialgleichungen. Sie liefert die Motivation für folgende Begriffsbildung.

Verfahren	Stabilitätsfunktion
explizites Euler-Verfahren	$R(z) = 1 + z$
implizites Euler-Verfahren	$R(z) = \frac{1}{1-z}$
Heun2, Runge-Kutta2	$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2}$
Mittelpunktregel	$R(z) = \frac{1+\frac{1}{2}z}{1-\frac{1}{2}z}$
Heun3	$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{6}$
klassisches Runge-Kutta-Verfahren	$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{6} + \frac{z^4}{24}$

Tabelle 2.1: Stabilitätsfunktionen verschiedener Runge-Kutta-Verfahren

Definition 2.3.3. Sei $R(z)$ die Stabilitätsfunktion des Runge-Kutta-Verfahrens Ψ^τ . Die Menge

$$S = \{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| < 1\} \tag{2.31}$$

heißt Stabilitätsgebiet von Ψ^τ . Ψ^τ heißt A-stabil, wenn $\mathbb{C}_- \subset S$ gilt.

Wenn ein Verfahren A-stabil ist, wird die Stabilität von der Dahlquist'schen Testgleichung, einem kontinuierlichen Problem, auf das entsprechende Verfahren vererbt. Da Stabilitätsfunktionen von expliziten Runge-Kutta-Verfahren polynomiell sind, können explizite Runge-Kutta-Verfahren nicht A-stabil sein. Wenn ein Runge-Kutta-Verfahren A-stabil ist, muss es also implizit sein. Es wurden bisher zwei implizite Runge-Kutta-Verfahren erwähnt, das implizite Euler Verfahren und das Trapez-Verfahren. Beide sind A-stabil, da das Stabilitätsgebiet \mathbb{C}_- beinhaltet. Dies wird in Abbildung 2.3 verdeutlicht.

Natürlich möchte man kompliziertere Probleme als die Dahlquist'sche Testgleichung numerisch lösen. Der folgende Satz besagt, dass A-stabile Verfahren ihr gutartiges Verhalten bei asymptotisch stabilen Fixpunkten behalten.

Satz 2.3.4. Sei x^* ein asymptotisch stabiler Fixpunkt des Systems $\dot{x} = f(x)$, wobei f zwei mal stetig differenzierbar sein soll. Sei Ψ^τ ein A-stabiles Runge-Kutta-Verfahren. Dann ist x^* ein asymptotisch stabiler Fixpunkt von Ψ^τ .

Einen Beweis findet man beispielsweise in Deuffhard und Bornemann, 2008. Manchmal umfasst das Stabilitätsgebiet eines Runge-Kutta-Verfahrens Ψ^τ nicht die gesamte linke komplexe Halbebene, aber dennoch große Teile von \mathbb{C}_- . Um solche Verfahren charakterisieren zu können, geben wir noch die folgende Definition an.

Definition 2.3.5. Ein Runge-Kutta-Verfahren heißt $A(\alpha)$ -stabil, wenn

$$\mathbb{C}(\alpha) := \{z = re^{i\Phi} : r \geq 0, |\pi - \Phi| \leq \alpha\} \subset S \tag{2.32}$$

Abbildung 2.4 veranschaulicht, was man unter $A(\alpha)$ -Stabilität versteht. Dabei ist es wünschenswert, dass bei einem numerischen Verfahren der Winkel α möglichst groß ist.

2.4 Der Begriff der Steifheit

Der Begriff der Steifheit einer Differentialgleichung wird beispielsweise in Strehmel u. a., 2012 diskutiert. Es ist schwierig, eine genaue Definition dieses Begriffes anzugeben. Man

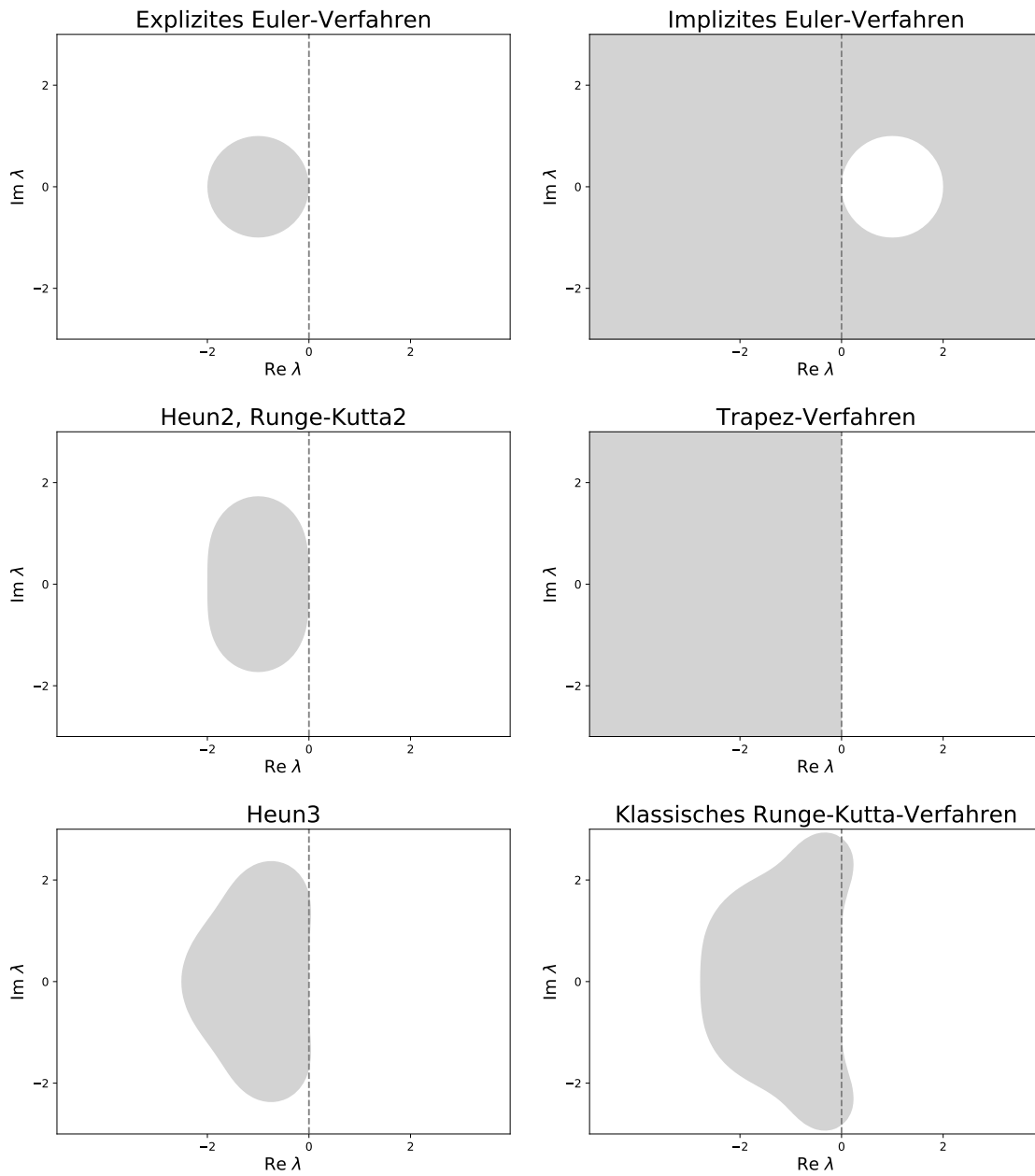


Abbildung 2.3: Stabilitätsgebiete verschiedener Runge-Kutta-Verfahren

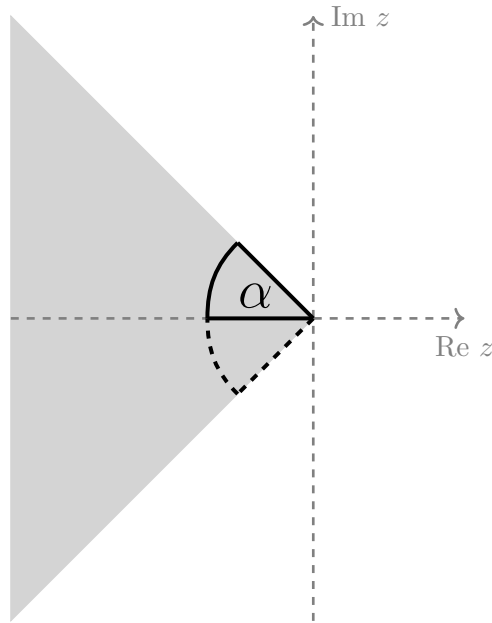


Abbildung 2.4: Veranschaulichung $A(\alpha)$ -Stabilität. Wenn die grau eingefärbte Menge in der linken Halbebene Teilmenge des Stabilitätsgebiets eines Runge-Kutta-Verfahrens ist, nennt man dieses Runge-Kutta-Verfahren $A(\alpha)$ -stabil.

nennt ein Problem steif, wenn es nicht effizient mit expliziten Verfahren gelöst werden kann.

Zur Illustration betrachten wir noch einmal die Dahlquist'sche Testgleichung. Bei der Verwendung von expliziten Runge-Kutta-Verfahren, von denen einige in Abschnitt 2.2 zu finden sind, sollte der Faktor $\lambda\tau$ für $\lambda < 0$ im Stabilitätsgebiet des Runge-Kutta-Verfahrens liegen. Wenn man mit einem expliziten Runge-Kutta-Verfahren arbeitet und $|\lambda| \gg 0$ gilt, bedeutet diese Forderung eine starke Reduzierung der Schrittweite τ . Dies macht das explizite Verfahren ineffizient.

Ein anderes, prominentes Beispiel, das zur Untersuchung von numerischen Verfahren und deren Lösungsverhalten bei steifen Problemen verwendet wird, ist die Prothero-Robinson-Gleichung. Sie ist gegeben durch

$$\dot{x} = \lambda(x - g(t)) + \dot{g}(t). \quad (2.33)$$

Die Lösung hat die allgemeine Form

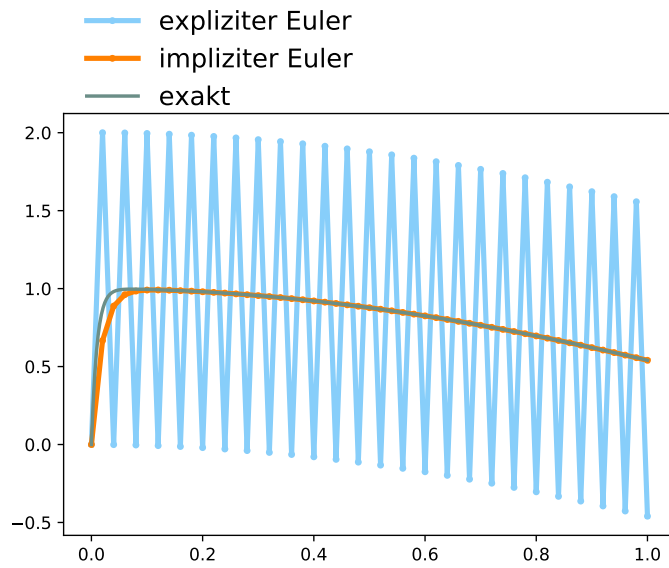
$$x(t) = c \exp(\lambda t) + g(t). \quad (2.34)$$

Je nachdem wie man λ wählt, ist das Problem (2.33) steif oder nicht-steif. Wir betrachten den Fall $g(t) = \cos(t)$ mit dem Startwert $x_0 = 0$ auf dem Integrationsintervall $[0, 1]$. Abbildung 2.5 zeigt numerische Lösungen von (2.33) mit dem expliziten und dem impliziten Euler-Verfahren. Das implizite Euler-Verfahren liefert als A-stabiles Verfahren stabile Lösungen. Das explizite Euler-Verfahren hingegen liefert nur für sehr reduzierte Schrittweiten zufriedenstellende Lösungen. Dies wird auch in Tabelle 2.2 veranschaulicht.

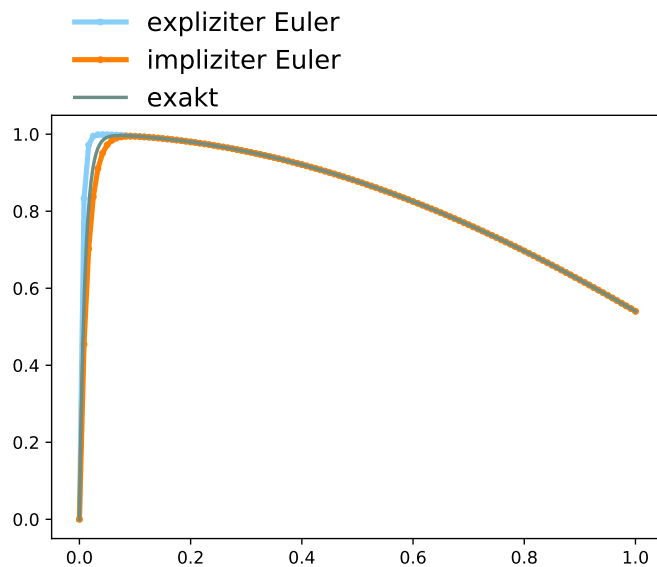
N	$\lambda = -1$		$\lambda = -100$		$\lambda = -1000$	
	explizit	implizit	explizit	implizit	explizit	implizit
10	$4.6 \cdot 10^{-2}$	$4.2 \cdot 10^{-2}$	$\gg 1.0 \cdot 10^5$	$2.9 \cdot 10^{-4}$	$\gg 1.0 \cdot 10^5$	$2.8 \cdot 10^{-5}$
100	$4.4 \cdot 10^{-3}$	$4.4 \cdot 10^{-3}$	$2.7 \cdot 10^{-5}$	$2.7 \cdot 10^{-5}$	$\gg 1.0 \cdot 10^5$	$2.7 \cdot 10^{-6}$
1000	$4.4 \cdot 10^{-4}$	$4.4 \cdot 10^{-4}$	$2.7 \cdot 10^{-6}$	$2.7 \cdot 10^{-6}$	$2.7 \cdot 10^{-7}$	$2.7 \cdot 10^{-7}$

Tabelle 2.2: Prothero-Robinson Gleichung mit explizitem und implizitem Löser. Gezeigt wird der Fehler am Gitterpunkt $x_n = 1$ bei Verwendung des expliziten und impliziten Euler-Verfahrens. Es wird mit einer Gitterweite von $\tau = \frac{1}{N}$ auf dem Intervall $[0, 1]$ gerechnet.

Je größer $|\lambda|$ ist, umso steifer ist das Problem und umso stärker muss die Schrittweite bei expliziten Verfahren reduziert werden, um gute Approximationen zu erhalten.



(a) $\tau = \frac{1}{50}$



(b) $\tau = \frac{1}{120}$

Abbildung 2.5: Numerische Lösungen der Prothero-Robinson Gleichung mit dem expliziten und dem impliziten Euler-Verfahren zu verschiedenen Schrittweiten τ . Der Parameter λ wurde als $\lambda = -100$ gewählt.

Kapitel 3

Untersuchungen zu Modellen von warmen Wolken

”... Steht Wolke hoch, zum herrlichsten geballt,...”

J. W. Goethe, in ”Howards Ehrengedächtnis”

Die Ergebnisse aus diesem Kapitel wurden in Rosemeier u. a. (2018) veröffentlicht. Es existiert eine Vielzahl von verschiedenen Wolkenmodellen, insbesondere auch für warme Wolken. Unter warmen Wolken verstehen wir Wolken in denen Wasser nur in flüssiger und nicht in fester Form vorkommt. In Kapitel 5 wird ein Wolkenschema für Eiswolken hergeleitet. In diesem Kapitel werden nur warme Wolken behandelt. Man verwendet bei unterschiedlichen Wettervorhersagemodellen nicht durchgehend das gleiche Modell für warme Wolken, deshalb stellt sich die Frage, inwieweit diese Modelle vergleichbare Ergebnisse liefern. Wir konstruieren in diesem Kapitel einen idealisierten Fall hinsichtlich der Umgebungsbedingungen, der dennoch eine gewisse physikalische Relevanz besitzt und testen die Vergleichbarkeit der Modelle mithilfe der Theorie der dynamischen Systeme und der asymptotischen Störungsrechnung. Wir führen also einen Konsistenztest der verschiedenen Modelle unter ganz bestimmten Umgebungsbedingungen durch.

Bei der verwendeten Notation orientieren wir uns an Rosemeier u. a., 2018, in dem ein Großteil des in diesem Kapitel gezeigten Inhalts zu finden ist.

Es werden im Folgenden Wolkenmodelle der Form

$$\frac{dq_c}{dt} = C - A_1 - A_2, \quad (3.1a)$$

$$\frac{dq_r}{dt} = A_1 + A_2 - E + B - D. \quad (3.1b)$$

untersucht. Dies ist eine allgemeine Form eines Ein-Momenten-Schemas für warme Wolken. Die Größen q_c und q_r sind die Massenkonzentrationen von Wolkentröpfchen und Regentropfen. Außerdem werden in diesem Modell die mikrophysikalischen Prozesse Kondensation (C), Autokonversion (A_1), Akkreszenz (A_2), Evaporation (E), Sedimentation aus dem betrachteten Luftpaket (D), sowie Regen, der von oben in das Luftpaket hinein fällt, (B) berücksichtigt. Sowohl die Definition der Massenkonzentrationen, als auch die mikrophysikalischen Wolkenprozesse werden in den nächsten Abschnitten ausführlich erklärt. An dieser Stelle erwähnen wir nur, dass diese Prozesse in Abhängigkeit von q_c und q_r formuliert werden. Außerdem wird im Verlauf dieses Kapitels darauf eingegangen, warum die Terme B und D getrennt auftreten, obwohl beide mit dem Sedimentationsprozess in

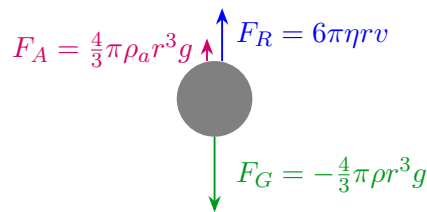


Abbildung 3.1: Modell eines fallenden Wassertropfens, einschließlich der Reibungs- (F_R), Auftriebs- (F_A) und Gravitationskraft (F_G), die an diesem Tropfen wirken.

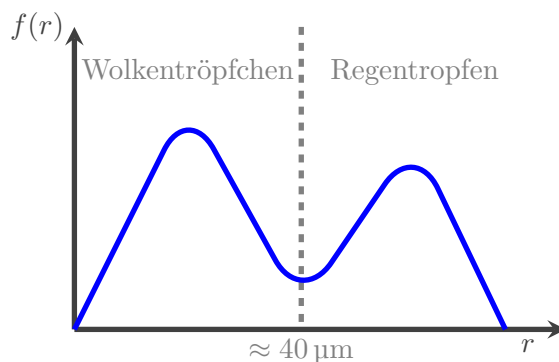


Abbildung 3.2: Größenspektrum der Tropfen. Die Funktion $f(r)$ gibt die Anzahl der Tropfen mit Radius r an.

Verbindung stehen. Ferner werden übliche Parameterisierungen der Wolkenprozesse gezeigt. Es sind eben diese Parameterisierungen, durch die sich Wolkenmodelle unterscheiden.

3.1 Massenkonzentrationen

Wie bereits erwähnt, werden in diesem Kapitel warme Wolken behandelt. Dementsprechend treten als Hydrometeore nur Wolkentropfchen und Regentropfen auf. Die Unterscheidung zwischen Wolkentropfchen und Regentropfen ist künstlich und geht auf E. Kessler zurück (siehe Kessler, 1969, Kessler, 1995). Dahinter steckt folgende Annahme: Bei großen Tropfen setzt sich der Einfluss der Erdanziehungskraft durch und sie fallen nach unten. In diesem Fall spricht man von Regentropfen. Kleine Tropfen verbleiben in der Wolke. Diese Tropfen nennt man Wolkentropfchen. Wenn man annimmt, dass die Tropfen eine kugelförmige Geometrie besitzen, liegt der kritische Radius zur Unterscheidung der beiden Hydrometeore bei etwa $40 \mu\text{m}$, siehe beispielsweise Beheng, 2010. Die charakteristische Größe von Wolkentropfchen beträgt ca. $10 \mu\text{m}$. Bei Regentropfen nimmt sie ungefähr einen Wert von 1 mm an (siehe Wang, 2013). Wenn man das Größenspektrum der Wolkentropfchen betrachtet, findet man ein Minimum zwischen zwei Peaks, das bei ungefähr $40 \mu\text{m}$ liegt und die Trennung zwischen Wolken- und Regentropfen kennzeichnet. Dies wird in Abbildung 3.2 veranschaulicht.

Die Annahme, dass kleine Tröpfchen in der Wolke verbleiben, während große Tropfen aufgrund der Gravitation aus der Wolke herausfallen wird plausibel, wenn man das Stokes'sche Gesetz betrachtet. Es liegt eine Kugel vor, die von Luft umgeben ist. Sie hat

ein Anfangsgeschwindigkeit von $v = 0$ und wird fallen gelassen. Die Kugel wird durch Gravitation nach unten beschleunigt. Die Beschleunigung nimmt mit der Zeit ab. Grund dafür ist, dass mit der Geschwindigkeit auch die Reibungskraft zunimmt. Wir nehmen an, dass sich die Kugel nach genügend langer Zeit nur noch mit konstanter Geschwindigkeit fortbewegt, und damit nicht mehr beschleunigt wird. In diesem Fall müssen sich die auf die Kugel wirkenden Kräfte Gravitationskraft F_G , Auftriebskraft F_A und Reibungskraft F_R aufheben. Es gilt also

$$0 = F_G + F_A + F_R \quad (3.2)$$

Das Stokes'sche Gesetz besagt

$$F_R = 6\pi\eta r v. \quad (3.3)$$

Dabei ist r der Kugelradius und η die dynamische Viskosität. Das Stokes'sche Gesetz ist bei geringen Fallgeschwindigkeiten gültig. Die Strömung der Luft ist dann laminar.¹ Außerdem gilt

$$F_G + F_A = \frac{4}{3}\pi(\rho - \rho_a)r^3g. \quad (3.4)$$

Man kann die Beziehungen (3.3) und (3.4) in Gleichung (3.2) einsetzen und nach v umstellen. Dadurch gelangt man schließlich zu

$$v = \frac{2g}{9\eta}(\rho - \rho_a)r^2 \quad (3.5)$$

(siehe Pruppacher und Klett, 2004). Die Fallgeschwindigkeit hängt damit quadratisch vom Tropfenradius ab. Sehr kleine Tropfen fallen damit sehr langsam. Große Tropfen fallen schnell und verlassen somit auch schnell das betrachtete Luftpaket. Diese Beobachtung macht die Annahme aus Kessler, 1969 und Kessler, 1995, dass kleine Tröpfchen in der Wolke verbleiben und große Tropfen als Regen herausfallen, plausibel. Eine Veranschaulichung der auf den Tropfen wirkenden Kräfte findet man in Abbildung 3.1.

Nachdem geklärt ist, warum man zwischen Wolken- und Regentropfen unterscheidet, werden an dieser Stelle die Massenkonzentrationen der beiden Hydrometeore definiert:

$$q_x = \frac{\text{Masse von Hydrometeor } x}{\text{Masse von trockener Luft}} \quad x \in \{c, r\} \quad (3.6)$$

Dabei steht c für Wolkentröpfchen und r für Regentropfen,

3.2 Mikrophysikalische Wolkenprozesse

Wir müssen jetzt die mikrophysikalischen Wolkenprozesse aus Gleichung (3.1) modellieren. Dabei wird die Übersättigung gegenüber Flüssigwasser als

$$S = \frac{p_v}{p_{\text{sat}}} - 1 \quad (3.7)$$

definiert, wobei p_v den Partialdruck von Wasserdampf und p_{sat} den Sättigungsdampfdruck über Wasser bezeichnet.

¹ Für Tropfen mit geringer Größe und einer Fallgeschwindigkeit von einigen Zentimetern pro Sekunde erhält man eine Reynolds-Zahl von ≈ 0.1 . In diesem Fall stimmt die Annahme, dass die Strömung laminar ist. Für größere Tropfen und Fallgeschwindigkeiten kann die Reynolds-Zahl auch eine Größenordnung von 1000 annehmen. Man findet diese Abschätzungen in Wang, 2013.

3.2.1 Kondensation

Wir beschränken uns hier auf eine kurze Beschreibung der Parameterisierung des Kondensationsprozesses. Eine Herleitung des Kondensationsprozesses in warmen Wolken findet man in Anhang A.1.

Kondensation bezeichnet den Wachstumsprozess von Wolkentröpfchen durch Diffusion von Wasserdampf. Die Kondensationsrate wird durch einen Term der Form

$$C := cSq_c \tag{3.8}$$

modelliert. Dabei muss c geeignet gewählt werden. Eine solche Parameterisierung der Kondensationsrate wurde bereits in Wacker (1992), sowie dadurch motiviert in Rosemeier u. a. (2018) verwendet. Eine ähnliche lineare Beziehung wird in Klein und Majda (2006) benutzt.

In den operationellen Modellen vermeidet man die Verwendung einer expliziten Parameterisierung der Kondensation, da Kondensation ein Prozess ist, der sehr schnell abläuft. Eine explizite Parameterisierung hätte eine starke Schrittweitenreduzierung zur Folge, was sich wiederum negativ auf den Rechenaufwand der Wettervorhersagemodelle auswirken würde.

In der vorliegenden Analyse wird der Term (3.8) benutzt, um Techniken zur Realisierung der Sättigungsadjustierung², die in operationellen Wettervorhersagemodellen angewendet werden, zu ersetzen. Damit erreichen wir, dass ein Wolkenchema als geschlossenes Differentialgleichungssystem dargestellt werden kann. Die vorliegende Analyse behandelt den Fall von Übersättigung. Übersättigung in Wolken kann durch permanentes Kühlen, also beispielsweise durch vertikalen Auftrieb, erreicht werden, wobei das Diffusionswachstum nicht instantan den Wasserdampfüberschuss ausgleicht. Geringe Auftriebsgeschwindigkeiten, die zum Beispiel entlang von Warmfronten auftreten, können kleine Übersättigungen erzeugen. Höhere Übersättigungen treten hingegen bei größeren Auftriebsgeschwindigkeiten auf, die unter anderem bei Warm Conveyor Belts oder konvektiven Systemen zu beobachten sind. Die Übersättigung kann über einen bestimmten Zeitraum beinahe konstant bleiben, was durch Korolev und Mazin (2003) oder Boxmodellsimulationen (persönliche Mitteilung, K. Diehl, April 2019) bestätigt wurde. Allerdings hängt die Zeitskala, wie lange die fastkonstante Übersättigung aufrechterhalten werden kann, stark von der Auftriebsgeschwindigkeit ab. Dennoch rechtfertigt dies, dass für die vorliegende Analyse konstante Übersättigungen angenommen werden.

3.2.2 Evaporation

Mit Evaporation bezeichnen wir in dieser Arbeit die Wechselwirkung zwischen Regentropfen und Wasserdampf. Das beinhaltet sowohl das Anwachsen von Regentropfen im übersättigten Fall, als auch deren Verkleinerung bei Untersättigung. Für den Prozess der Evaporation findet man in den operationellen Modellen, anders als bei der Kondensation, explizite Parameterisierungen. Diese besitzen die folgende allgemeine Gestalt

²Bei einer Sättigungsadjustierung werden Übersättigungen nicht aufgelöst. Bei Auftreten einer Übersättigung wird der überschüssige Wasserdampf sofort in Wasser umgewandelt. Dies geschieht in jedem Zeitschritt.

$$E: = -\left(e_1 q_r^{\delta_1} + e_2 q_r^{\delta_2}\right) S. \quad (3.9)$$

Dabei sind e_1 und e_2 Vorfaktoren, die von den Umgebungsbedingungen abhängen dürfen und δ_1 und δ_2 sind konstante Exponenten. Bei Betrachtung der Gleichung (3.9) fällt auf, dass der Evaporationsprozess als Summe zweier Terme formuliert wurde. Man versucht damit den Einfluss von Ventilation zu berücksichtigen. Bei der Beschreibung von Diffusionswachstum nimmt man üblicherweise eine ruhende Umgebung um den Tropfen an. Diese Annahme wird abgeschwächt, indem man einen Ventilationskoeffizienten der Form $f_v = a_v + b_v(N_{Sc}, N_{Re})$ einführt. Man modelliert die Strömung um einen fallenden Tropfen. Da der Ventilationskoeffizient an die Wachstumsgleichung multipliziert wird, erhält man eine Summe, bestehend aus zwei Summanden. Näheres dazu findet man in Seifert und Beheng, 2006, Pruppacher und Klett, 2004 und Pruppacher und Rasmussen, 1979. Außerdem wird in Kapitel 5 Ventilation in Eiswolken behandelt.

3.2.3 Kollisionsprozesse

Zu den Kollisionsprozessen zählen sowohl Autokonversion als auch Akkreszenz. Eine Veranschaulichung der beiden Prozesse findet man in den Abbildungen 3.3b und 3.3a.

Der Prozess der Autokonversion hängt lediglich von den Wolkentröpfchen ab. Dieser Prozess kann folgendermaßen beschrieben werden: Zwei Wolkentröpfchen kollidieren und formen dabei einen größeren Tropfen. Dieser größere Tropfen ist dann bereits so groß, dass auf ihn wirkende Gravitationskräfte nicht vernachlässigbar sind und er als Regentropfen betrachtet werden muss. In den betrachteten Ein-Momenten-Schemata wird die Autokonversion durch Terme der Form

$$A_1: = a_1 q_c^\gamma \quad (3.10)$$

parameterisiert. Der Exponent γ ist wieder konstant, der Vorfaktor a_1 darf von den Umgebungsbedingungen abhängen. Die Autokonversion ist ein wichtiger Prozess, um Regenbildung zu initiieren. Wenn noch keine Regentropfen vorhanden sind, können sich diese durch Autokonversion aus Wolkentröpfchen bilden.

Hingegen beschreibt der Prozess der Akkreszenz das Einfangen von Wolkentröpfchen durch Regentropfen. Da beide Hydrometeore an diesem Prozess beteiligt sind, schlägt sich dies auch in den Parameterisierungen nieder, die die allgemeine Form

$$A_2: = a_2 q_c^{\beta_c} q_r^{\beta_r} \quad (3.11)$$

besitzen. Der Vorfaktor a_2 ist im Allgemeinen von den Umgebungsbedingungen abhängig, β_c und β_r werden üblicherweise als konstant angesetzt.

3.2.4 Sedimentation

In diesem Abschnitt wird die Modellierung der Sedimentation erläutert. Der Regenrate D , die den Regen, der aus dem betrachteten Luftpaket herausfällt, beschreibt, wird durch

$$D: = dq_r^\zeta, \quad (3.12)$$

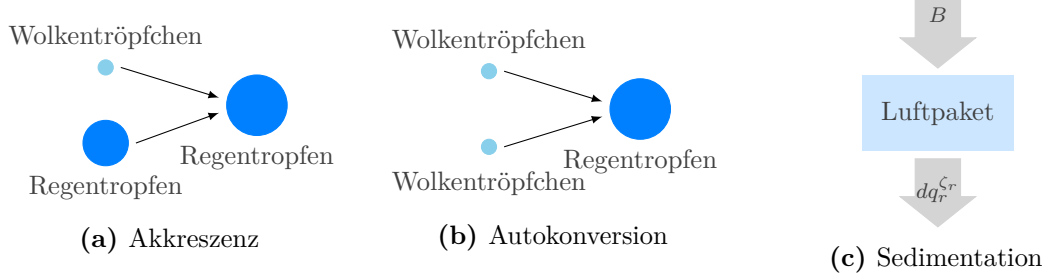


Abbildung 3.3: Veranschaulichung mikrophysikalischer Wolkenprozesse in warmen Wolken

beschrieben, wobei der Vorfaktor d wieder von den Umgebungsbedingungen abhängen darf und der Exponent ζ als konstant angenommen wird. Der Koeffizient d ist durch

$$d = \frac{v}{h} \quad (3.13)$$

gegeben. Dabei ist $vq_r^{\zeta-1}$ die modellabhängig parameterisierte Fallgeschwindigkeit der Regentropfen und h die Höhe des betrachteten Luftpaketes, welche in den hier durchgeführten Berechnungen zur Analyse von warmen Wolken 1000 m beträgt.

Außerdem führen wir den Term B ein, der als konstant angenommen werden soll. Er beschreibt den Regen, der von oben in das betrachtete Luftpaket hineinfällt. Es gilt $B \neq 0$, wenn über dem betrachteten Kontrollvolumen Luftpakete liegen, aus denen Regen sedimentiert. Eine Veranschaulichung, wie der Sedimentationsprozess modelliert wird, ist in der Abbildung 3.3c zu finden.

Es soll an dieser Stelle noch einmal betont werden, dass D und B separat auftauchen. Wir schreiben B vor, was letztendlich eine ad-hoc Annahme ist. Diese ist jedoch notwendig, da wir ein zeitabhängiges System gewöhnlicher Differentialgleichungen betrachten wollen und B den Einfluss von höher liegenden Luftpaketen beschreibt. Wenn man also B durch dynamische Variablen beschreiben wollte, müsste man benachbarte Luftpakete miteinander koppeln. Man bekäme damit letztendlich eine partielle Differentialgleichung mit hyperbolischen Termen. Wir wollen aber an dieser Stelle nur die lokale Evolution des Systems untersuchen, deshalb wird B , also der Einfluss höher liegender Luftpakete, als externes Forcing betrachtet. Der Term D hingegen hängt nur von den lokalen Bedingungen im betrachteten Kontrollvolumen ab. Darin liegt letztendlich auch der Grund, warum B und D im Wolkenschema (3.1) getrennt auftreten.

3.3 Generisches Wolkenmodell

Man kann nun (3.8), (3.9), (3.11), (3.10) und (3.12) in das Gleichungssystem (3.1) einsetzen. Als Resultat erhält man ein generisches Modell für warme Wolken, das wie folgt angegeben werden kann:

$$\frac{dq_c}{dt} = cq_c - a_1q_c^\gamma - a_2q_c^{\beta_c}q_r^{\beta_r}, \quad (3.14a)$$

$$\frac{dq_r}{dt} = a_1q_c^\gamma + a_2q_c^{\beta_c}q_r^{\beta_r} + (e_1q_r^{\delta_1} + e_2q_r^{\delta_2})S + B - dq_r^\zeta. \quad (3.14b)$$

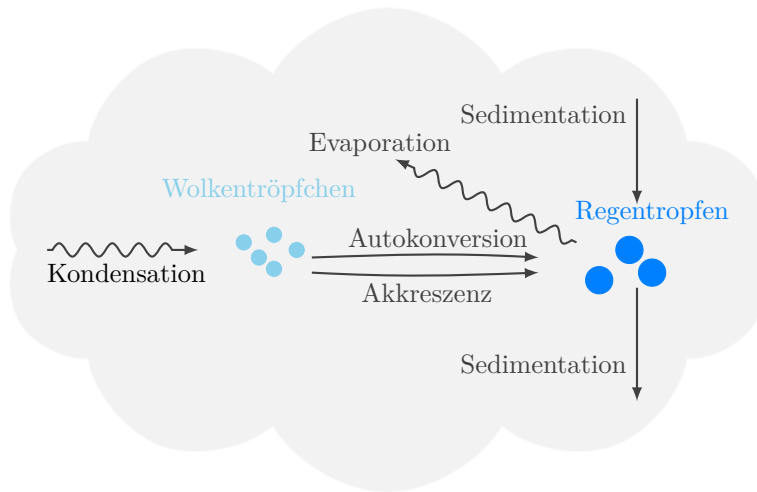


Abbildung 3.4: Veranschaulichung der Wechselwirkung zwischen Wolkentropfen und Regentropfen durch die mikrophysikalischen Wolkenprozesse

Alle in der Folge untersuchten Schemata für warme Wolken besitzen diese Form, einschließlich derer, die in den operationellen Modellen COSMO und IFS eingebaut sind, mit der Einschränkung, dass die Sättigungsadjustierung, die in den operationellen Modellen verwendet wird, durch eine explizite Parameterisierung der Kondensation ersetzt wurde. An dieser Stelle wird noch einmal zusammenfassend bemerkt, dass die Vorfaktoren c , a_1 , a_2 , e_1 , e_2 und d von den Umgebungsbedingungen abhängen dürfen, hingegen werden die Exponenten γ , β_c , β_r , δ_1 , δ_2 und ζ , sowie die Regenrate B als konstant angenommen. In Abbildung 3.4 wird die Wechselwirkung der Hydrometeore durch der mikrophysikalischen Prozesse, die in dem zu untersuchenden Wolken schemata modelliert werden, veranschaulicht.

In Wacker, 1992 wird darauf hingewiesen, dass man bei der Modellierung chemischer Reaktionen zu ähnlichen Differentialgleichungssystemen wie bei der Modellierung warmer Wolken gelangt. Außerdem wird in Wacker, 1995 eine Analogie zu den hier formulierten Parameterisierungen und Räuber-Beute-Systemen, die aus der Populationsdynamik bekannt sind (siehe beispielsweise Murray, 2002), angesprochen.

3.4 Entdimensionalisierung

Zur mathematischen Analyse der Gleichungen (3.14) bietet sich eine Entdimensionalisierung des Systems an. In allgemeinen Fällen kann damit sichergestellt werden, dass alle betrachteten Variablen auf einen Wert um eins normalisiert werden. In diesem Abschnitt wird die Entdimensionalisierung verwendet, um die Mischungsverhältnisse q_c und q_r auf einen Wert um eins zu skalieren. Außerdem ermöglicht eine Entdimensionalisierung der Gleichungen (3.14) die Identifizierung der mikrophysikalischen Prozesse, die die Dynamik des Systems antreiben.

Zur Entdimensionalisierung des generischen Wolkenmodells (3.14) wird der Referenzwert $t_{\text{ref}} = 1 \text{ s}$ für die Zeit und $q_{\text{ref}} = 10^{-4} \text{ kg kg}^{-1}$ für die beiden Mischungsverhältnisse verwendet. Für den Rest dieses Abschnitts werden Größen mit ' gekennzeichnet, wenn sie unskaliert sind. Wenn also Ψ' eine unskalierte Größe bezeichnet, so wird die zugehörige

skalierte oder auch entdimensionalisierte Größe durch $\Psi = \frac{\Psi'}{\Psi_{\text{ref}}}$ definiert. Die einzigen Ausnahmen stellen die Referenzgrößen t_{ref} und q_{ref} dar. Durch Anwendung der Kettenregel gelangt man zu der Beziehung $\frac{dq_c}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{q'_c(t \cdot t_{\text{ref}})}{q_{\text{ref}}} \right) = \frac{t_{\text{ref}}}{q_{\text{ref}}} \frac{dq'_c}{dt'}(t')$ für das Mischungsverhältnis von Wolkentröpfchen. Analog kann man eine Gleichung für das Mischungsverhältnis von Regentropfen q_r herleiten. Letztendlich erhält man das gleiche System wie (3.14), aber mit veränderten, entdimensionalisierten Vorfaktoren

$$\begin{aligned} c &= t_{\text{ref}} c', & a_1 &= t_{\text{ref}} q_{\text{ref}}^{\gamma-1} a'_1, & a_2 &= t_{\text{ref}} q_{\text{ref}}^{\beta_c + \beta_r - 1} a'_2, \\ e_1 &= t_{\text{ref}} q_{\text{ref}}^{\delta_1 - 1} e'_1, & e_2 &= t_{\text{ref}} q_{\text{ref}}^{\delta_2 - 1} e'_2, & d &= t_{\text{ref}} q_{\text{ref}}^{\zeta - 1} d' \end{aligned} \quad (3.15)$$

und $B = \frac{t_{\text{ref}}}{q_{\text{ref}}} B'$. Diese Normalisierung führt zu Variablen q_c, q_r , die Werte der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ annehmen.

3.5 Die speziellen Wolkenmodelle

Wie bereits in Abschnitt 3.3 erwähnt, ergibt eine Wahl der Parameter des Systems (3.14), also der Vorfaktoren und Exponenten, ein spezielles Wolkenchema. Im Folgenden beschäftigen wir uns mit den Wolkenchemata, die in den operationellen Modellen von COSMO und IFS verwendet werden bzw. wurden und dem Schema aus Wacker (1992). Die Exponenten und Vorfaktoren für die Schemata aus COSMO und IFS findet man in Doms u. a., 2011 und ECMWF, 2017. Die entdimensionalisierten Werte der Exponenten und konstanten Vorfaktoren sind in Tabelle 3.4 aufgelistet. Außerdem zeigen die Abbildungen 3.5, 3.6 und 3.7 die Vorfaktoren, die von den Umgebungsbedingungen abhängen. Tabelle 3.1 fasst zusammen, welche Vorfaktoren bei den drei betrachteten Wolkenchemata konstant oder von den Umgebungsbedingungen abhängig sind.

Die Schemata aus COSMO und IFS, sowie das Modell aus Wacker (1992) sind Spezialfälle des generischen Modells (3.14). Es wird an dieser Stelle betont, dass in der vorliegenden Analyse für alle Wolkenchemata der gleiche Kondensationsterm C verwendet wird. In operationellen Modellen wird gegenwärtig Kondensation nicht explizit parameterisiert, sondern man bedient sich einer Sättigungsadjustierung. Bei der Sättigungsadjustierung werden Übersättigungen nicht aufgelöst, sondern man geht davon aus, dass sich das Luftpaket in gesättigtem Zustand befindet und der überschüssige Wasserdampf den Wolkentröpfchen zugeschlagen wird. Durch Anwendung von Erhaltungsgleichungen schließt man darauf, wie Phasenumwandlungsprozesse das System beeinflussen. Im Verlauf des Kapitels werden die Zeitskalen der Kondensation in Abhängigkeit von der Übersättigung untersucht. Dabei zeigt sich, dass bei hohen Übersättigungen die Kondensation sehr schnell abläuft. Wenn man solche Übersättigungen auflösen möchte, muss man dementsprechend den Zeitschritt in den numerischen Berechnungen verringern. Um größere Zeitschritte wählen zu können, vermeidet man bei den operationellen Modellen die Auflösung von Übersättigungen. In dem Modell aus Wacker (1992), welches ein Modell ist, das zu Forschungszwecken entwickelt wurde, wählt man zur Parameterisierung des Kondensationsprozesses einen ähnlichen Ansatz wie den Unseren. Allerdings ist bei diesem Modell der Vorfaktor c konstant und hängt nicht von den Umgebungsbedingungen ab.³ Außerdem findet man in Porz u. a., 2018 ein Forschungsmodell, dass eine Sättigungsadjustierung vermeidet.

³In Wacker (1992) gilt $c = 0.445$.

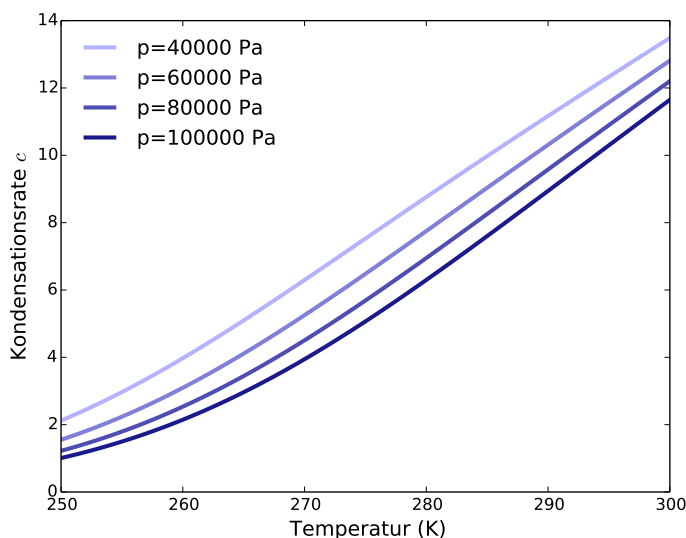


Abbildung 3.5: Entdimensionalisierte Kondensationsrate c als Funktion in Abhängigkeit von Temperatur für verschieden Werte des Druckes p .

Schema	Variabel	Konstant
Wacker	c	a_1, a_2, e_1, e_2, d
Cosmo	c, a_2, e_1, e_2, d	a_1
IFS	c, e_1, e_2	a_1, a_2, d

Tabelle 3.1: Zusammenfassung der konstanten und variablen Koeffizienten der drei Wolkenschemata. Ein Koeffizient wird als variabel bezeichnet, wenn er von den Umgebungsbedingungen Druck oder Temperatur abhängt.

Abbildung 3.5 veranschaulicht die Abhängigkeit der von uns konsistent für alle untersuchten Wolkenschemata verwendeten Kondensationsrate c von Umgebungsdruck und -temperatur. Anmerkungen zur Herleitung von c findet man in Anhang A.1. Es sticht die starke Abhängigkeit der Kondensationsrate von der Temperatur ins Auge. Diese Beobachtung regt die Betrachtung verschiedener Regime an (siehe Abschnitt 3.8). Abgesehen von der Kondensationsrate liegt nur eine schwache Abhängigkeit der Vorfaktoren von den Umgebungsbedingungen vor (siehe dazu die Abbildungen 3.6 und 3.7). Außerdem sei angemerkt, dass das Wackerschema den Verdunstungsprozess nicht berücksichtigt. Aus mathematischer Sicht liegt damit also insbesondere die Parameterwahl $e_1 = 0 = e_2$ vor.

3.6 Numerische Lösungen der speziellen Wolkenmodelle

Die speziellen Wolkenmodelle sind zweidimensionale Systeme nicht-linearer gewöhnliche Differentialgleichungen. In der Regel ist es schwierig, in einem solchen Fall explizite Lösungen anzugeben. Um einen ersten Eindruck über das Verhalten der Lösungstrajektorien zu gewinnen, kann man numerische Approximationen berechnen. In Abschnitt 2.2 wurden zu diesem Zweck Runge-Kutta-Verfahren eingeführt. Die Abbildungen 3.8a, 3.8c und 3.8e

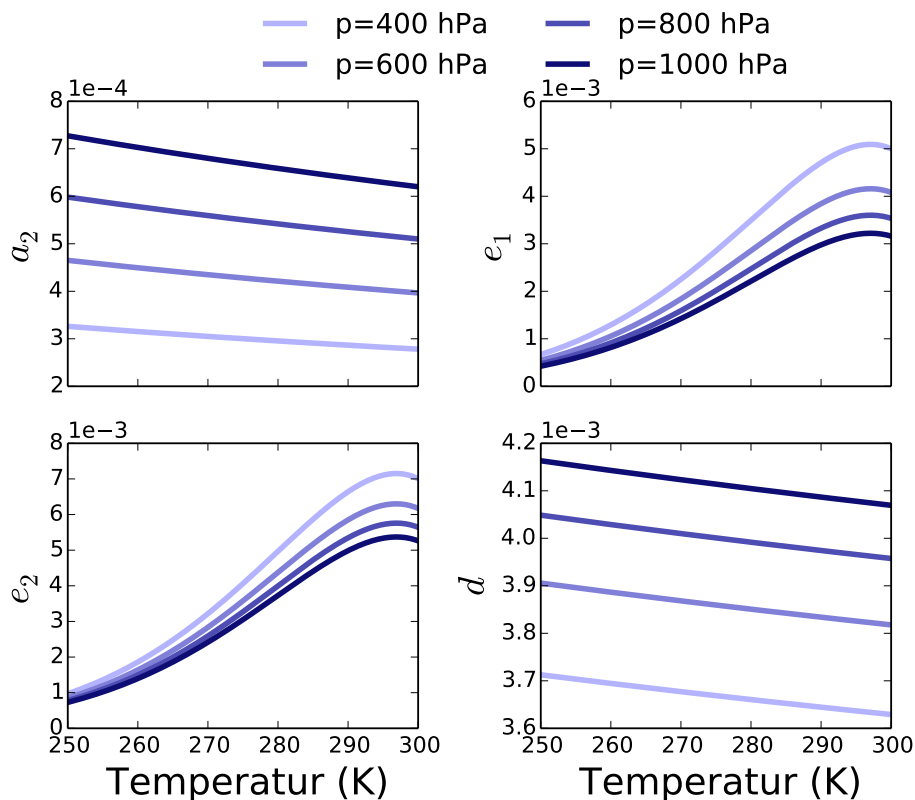


Abbildung 3.6: Die entdimensionalisierten Vorfaktoren a_2 , e_1 , e_2 , d des COSMO-Schemas als Funktion in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Werte des Drucks.

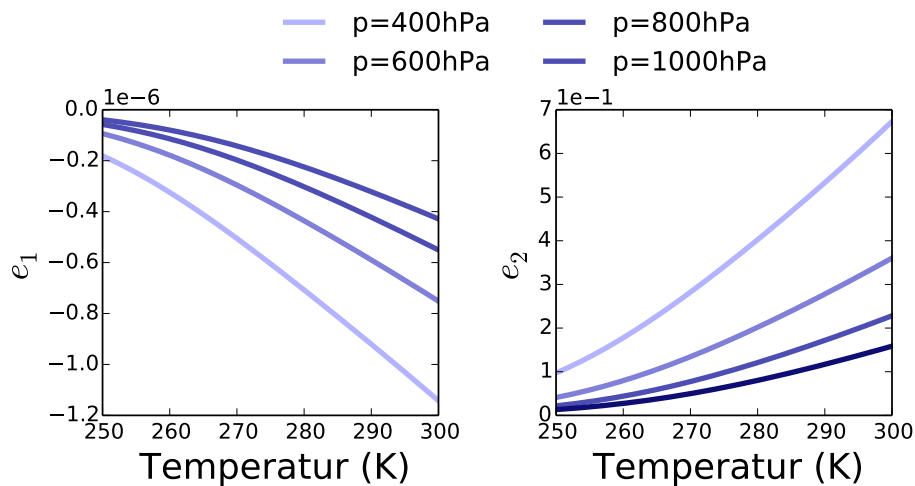


Abbildung 3.7: Die entdimensionalisierten Vorfaktoren e_1 , e_2 des IFS-Schemas als Funktion in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Werte des Drucks.

zeigen numerische Lösungen der Wacker-, COSMO- und IFS-Modelle im Phasenraum. Es wurde das klassische Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung verwendet. Die numerischen Approximationen legen die Vermutung nahe, dass die Trajektorien gegen asymptotisch stabile Fixpunkte konvergieren. Dies wird in Abschnitt 3.7 durch analytische Überlegungen bestätigt.

Wir gehen davon aus, dass eine Differentialgleichung mit einer genügend glatten rechten Seite vorliegt und die Linearisierung der Differentialgleichung um einen Punkt x eine gute Approximation des Ausgangssystems liefert. In Kapitel 2 haben wir gesehen, dass zur Gewährleistung der Stabilität der numerischen Lösungen von linearen Problemen, die Schrittweite so klein gewählt werden sollte, dass $\tau\lambda_i \in S$ gilt für alle λ_i mit $Re(\lambda_i) < 0$. Dabei bezeichnen τ die Schrittweite, λ_i die Eigenwerte der Jacobi-Matrix und S das Stabilitätsgebiet des Lösers. Diese Idee wenden wir auch für die nicht-linearen Systeme an.⁴ Dabei werden zwar die nicht-linearen Anteile der rechten Seite vernachlässigt, aber man stellt sicher, dass die linearen Anteile stabil behandelt werden. Wir beziehen uns hier auf die Überlegungen aus Abschnitt 2.3. Um die Dämpfung der steifen Komponenten zu garantieren, hätte man auch A-stabile Verfahren verwenden können.

Ein Blick auf die Abbildungen 3.8b, 3.8d und 3.8f zeigt, dass wir es mit einem Problem zu tun haben, bei den Eigenwerte λ_i mit $Re(\lambda_i) < 0$ existieren. Die Abbildungen 3.9a, 3.9b und 3.9c veranschaulichen jedoch, dass die Eigenwerte nahe bei null liegen. Die letztgenannten Abbildungen zeigen die Mengen, die aus den Eigenwerten der Jacobi-Matrizen bestehen, wobei die Jacobi-Matrizen an den Punkten der numerischen Lösungen ausgewertet wurden. Es stellt sich heraus, dass man die drei Wolkenmodelle mit geringem Aufwand mit einem expliziten Verfahren, bei dem auf eine angemessene Schrittweitenreduzierung geachtet wurde, stabil lösen kann.

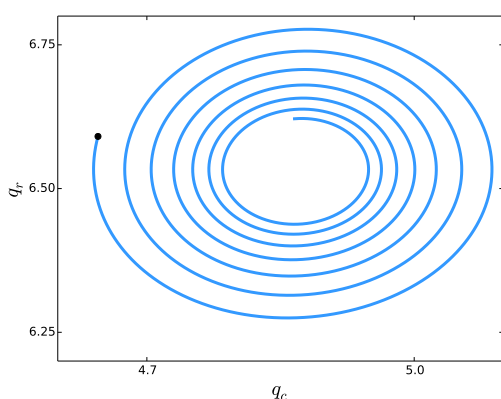
3.7 Qualitative Analyse

Da die hier behandelten Wolkenschemata Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen sind, kann aus mathematischer Sicht eine qualitative Analyse mit der Theorie der dynamischen Systeme durchgeführt werden. Die dazu benötigten Grundlagen wurden bereits in Abschnitt 2.1 aufgezeigt.

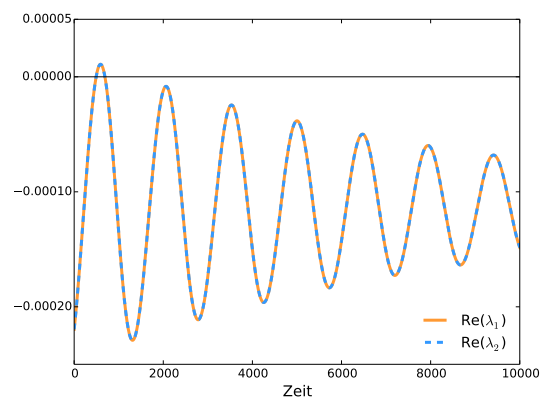
3.7.1 Bemerkung zum thermodynamischen Gleichgewicht und zur Gleichgewichtsanalyse im Sinn der dynamischen Systeme

Eine Wolke befindet sich im thermodynamischen Gleichgewicht, wenn $S = 0$ gilt (siehe Kondepudi und Prigogine, 2015). Betrachtet man jedoch ein externes Forcing, das auf die Wolke wirkt und eine Über- oder Untersättigung erzeugt, können sich Quellen und Senken ausgleichen, ohne dass $S = 0$ gilt. Ein externes Forcing kann eine Aufwärtsbewegung der Wolke sein, die eine Übersättigung verursacht. Damit kann also bei unserem Szenario

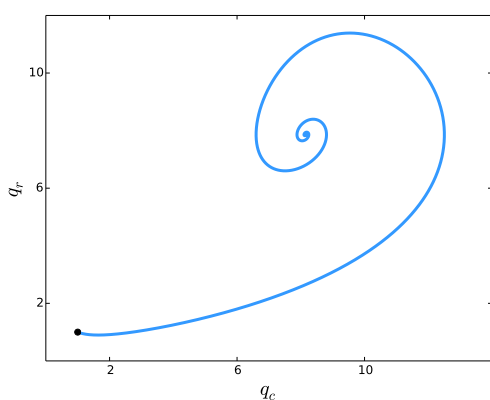
⁴Die Linearisierung um x_0 ist gegeben durch $\dot{x} = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) = c + \lambda x$. Für die analytische Lösung gilt $x(t) = \exp(\lambda t)c_0 - \frac{c}{\lambda} \rightarrow -\frac{c}{\lambda}$ für $\lambda < 0$. Anwendung eines Runge-Kutta-Verfahrens mit Stabilitätsfunktion R ergibt $x_1 = R(z)\left(x_0 + \frac{c}{\lambda}\right) - \frac{c}{\lambda}$ oder $x_n = R(z)^n x_0 + R(z)^n \frac{c}{\lambda} - \frac{c}{\lambda} \rightarrow -\frac{c}{\lambda}$, falls $z = \tau\lambda$ im Stabilitätsgebiet liegen, und damit Konvergenz gegen die analytische Lösung. A-Stabilität liefert für jede Schrittweite τ Konvergenz. Insbesondere werden steife Komponenten gedämpft.



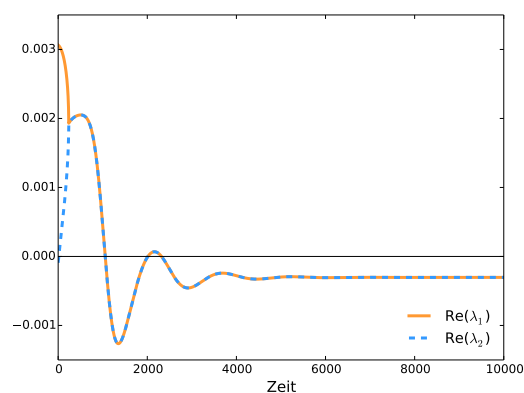
(a) Simulation des Wacker-Modells



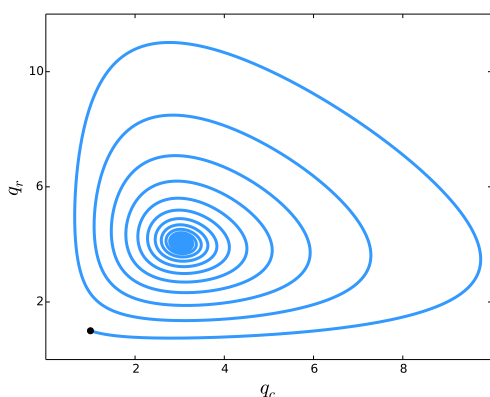
(b) Realteil der Eigenwerte der Jacobimatrix des Wacker-Modells



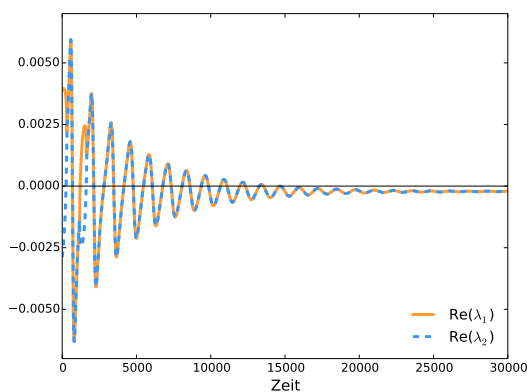
(c) Simulation des Schemas in COSMO



(d) Realteil der Eigenwerte der Jacobimatrix des Schemas in COSMO



(e) Simulation des Schemas in IFS



(f) Realteil der Eigenwerte der Jacobimatrix des Schemas in IFS

Abbildung 3.8: Berechnung numerischer Lösungen der Wolkenmodelle von Wacker, COSMO und IFS. Außerdem wurde die Jacobi-Matrix der Wolkenmodelle an den numerischen Lösungspunkten ausgewertet. Zu sehen sind die Realteile dieser Jacobi-Matrizen. Umgebungsbedingungen: Druck 100000Pa, Temperatur 280K.

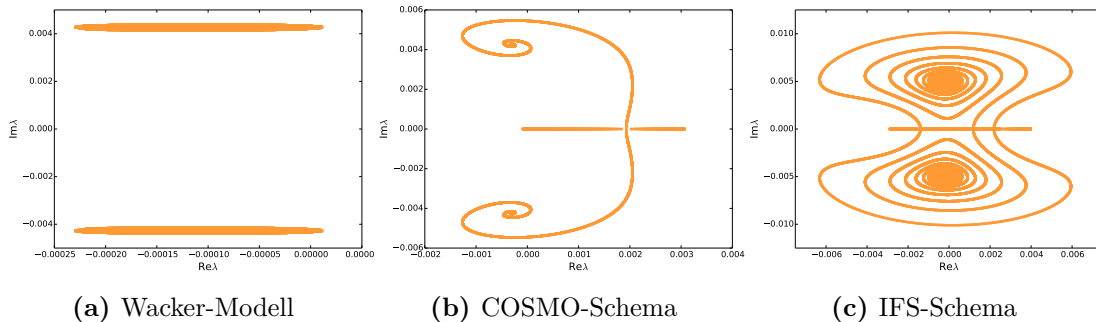


Abbildung 3.9: Menge der Eigenwerte bei Auswertung der Jacobi-Matrizen an numerischen Lösungspunkten. Es wurde die numerische Lösung aus Abbildung 3.8 verwendet.

das betrachtete Luftpaket nicht im thermodynamischen Gleichgewicht liegen (siehe Abschnitt 3.2.1). Bei der folgenden Analyse zeigt sich, dass das System bei einer konstanten Übersättigung einen Gleichgewichtszustand im Sinn der dynamischen Systeme annehmen kann (siehe Kapitel 2). Dieser Gleichgewichtszustand unterscheidet sich aufgrund der angenommenen Übersättigung vom thermodynamischen Gleichgewicht.

3.7.2 Anwendung der Gleichgewichtsanalyse auf die Wolkenschemata

Zunächst nehmen wir an, dass sich ein Luftpaket in einer Wolke in einem Zustand befindet, der sehr nahe bei einem Gleichgewicht ist, das heißt sich also zeitlich kaum ändert. Setzt man nun die Gültigkeit der Gleichungen (3.14) voraus, bedeutet dies, dass die rechte Seite verschwinden muss, wir also einen Fixpunkt im Sinne der dynamischen Systeme bestimmen müssen.

Es soll also die mathematische Gleichgewichtsanalyse aus Abschnitt 2.1 auf die speziellen Wolkenschemata angewendet werden. Damit fällt die rechte Seite aus (2.1) mit der rechten Seite des generischen Wolkenmodells (3.14) zusammen.

Es ist nicht von vornherein klar, ob die Lösungen einer Differentialgleichung, deren Anfangsbedingungen in der Nähe eines Fixpunktes liegen, auch tatsächlich gegen diesen Fixpunkt konvergieren. Aus Abschnitt 2.1 wissen wir, dass dies bei asymptotisch stabilen Fixpunkten der Fall ist. Es wird also die in dem genannten Abschnitt erwähnte Stabilitätsanalyse angewendet. Dazu bedarf es der Jacobi-Matrix des Systems (3.14), die wie folgt angegeben werden kann

$$\begin{pmatrix} Sc - a_1 \gamma q_c^{\gamma-1} - a_2 \beta_c q_c^{\beta_c-1} q_r^{\beta_r} & -a_2 \beta_r q_c^{\beta_c} q_r^{\beta_r-1} \\ a_1 \gamma q_c^{\gamma-1} + a_2 \beta_c q_c^{\beta_c-1} q_r^{\beta_r} & a_2 \beta_r q_c^{\beta_c} q_r^{\beta_r-1} + H(q_r) - d \zeta q_r^{\zeta-1} \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Dabei ist die Funktion $H(q_r)$ durch

$$H(q_r) := \left(e_1 \delta_1 q_r^{\delta_1-1} + e_2 \delta_2 q_r^{\delta_2-1} \right) S. \quad (3.17)$$

definiert. Im vorangegangenen Abschnitt 3.7.1 wurde argumentiert, dass die betrachteten Differentialgleichungssysteme zur Beschreibung von Wolken einen Gleichgewichtszustand

haben können. Es sollen nun die Existenz und die Stabilitätseigenschaften der Gleichgewichte geklärt werden. Insbesondere sind wir daran interessiert, ob die Fixpunkte asymptotisch stabil, und damit Attraktoren für benachbarte Trajektorien sind. Die Aussage des Satzes von Poincaré-Bendixson beinhaltet aber auch die mögliche Konvergenz einer beschränkten Trajektorie gegen einen Limit-Cycle. In diesem Fall würden sich die Massenkonzentrationen q_c und q_r zeitlich periodisch ändern. Es bleibt zu klären, wie wünschenswert ein Modell, das ein solches Verhalten zeigt, aus physikalischen Gesichtspunkten ist.

3.7.3 Der triviale Fixpunkt

Wir widmen uns jetzt der Bestimmung von Fixpunkten $(q_{c,e}, q_{r,e})$. Bei Betrachtung des Systems (3.14) fällt auf, dass die rechte Seite von Gleichung (3.14a) immer 0 ist, wenn $q_{c,e} = 0$ gilt. Wenn ein Fixpunkt diese Bedingung erfüllt, nennen wir ihn trivial. Da $q_{c,e}$ die Massenkonzentration der Wolkenröpfchen repräsentiert, kann man diesen Fall physikalisch so interpretieren, dass keine Wolke vorhanden ist. Aus Gleichung (3.14b) folgt, dass $q_{r,e}$

$$0 = \left(e_1 q_{r,e}^{\delta_1} + e_2 q_{r,e}^{\delta_2} \right) S + B - d q_{r,e}^{\zeta}. \quad (3.18)$$

erfüllen muss. Dies ist eine nicht-lineare Gleichung. In der folgenden Diskussion lassen wir den Evaporationsterm weg, insbesondere nehmen wir also $e_1 = 0 = e_2$, und damit $H(q_r) \equiv 0$ an (siehe Gleichung (3.17)). Im nächsten Abschnitt 3.7.5 wird klar, dass diese Vereinfachung gerechtfertigt ist, da die Evaporation auf das Verhalten des Systems einen eher geringfügigen Einfluss hat. Für $S > 0$ kann dieses Vorgehen auch physikalisch gerechtfertigt werden, da keine Verdampfung stattfindet und das Diffusionswachstum der Regentropfen sehr langsam abläuft.

Durch Weglassen des Evaporationsprozesses gelangt man zu

$$q_{r,e} = \left(\frac{B}{d} \right)^{\frac{1}{\zeta}}. \quad (3.19)$$

Dieser Fixpunkt besitzt eine anschauliche physikalische Interpretation. Wir betrachten ein Luftpaket, in das von oben Regen hinein fällt. Der einfallende Regen kann nicht mit Wolkenröpfchen wechselwirken, da keine Wolkenröpfchen vorhanden sind ($q_{c,e} = 0$), und fällt wieder aus dem Luftpaket heraus.

In Tabelle 3.4 wird ersichtlich, dass die Exponenten β_c und γ in allen speziellen Wolkenmodellen die Ungleichungen $1 \leq \beta_c$ und $1 \leq \gamma$ erfüllen. Deshalb nehmen wir dies auch in der folgenden Analyse an. Es wird aber an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass beispielsweise das COSMO-Schema $\beta_r < 1$ erfüllt und es grundsätzlich keine vorgeschriebenen Regeln für die Wahl der Exponenten gibt. Zur Parameterisierung der Kondensation hätte man auch einen Term der Form $c S q_c^{\frac{1}{3}}$ ansetzen können. Diese Darstellung wurde jedoch in Anhang A.1 durch die Annahme, dass m_c in erster Näherung konstant ist, vermieden. Bei Exponenten < 1 geht in den Gleichungen (3.14) die Lipschitz-Stetigkeit verloren. Damit ist der Satz von Picard-Lindelöf nicht mehr anwendbar, der Existenz und Eindeutigkeit von gewöhnlichen Differentialgleichungen garantiert. Somit werden auch mehrere Lösungen des Differentialgleichungssystems möglich. In Hanke und Porz, 2020 konnte die Eindeutigkeit der Lösungen für das Wolkenmodell aus Porz u. a., 2018 gezeigt werden, wenn man verlangt, dass q_c positiv bei übersättigter Luft ist.

Wir nehmen jetzt $1 > \beta_c$ und $1 > \gamma$ an und betrachten die Jacobi-Matrix des trivialen Fixpunktes. Da die Evaporation vernachlässigt werden soll, wird der Term $H(q_r)$ in der Jacobi-Matrix weggelassen. Außerdem setzen wir $q_{c,e} = 0$. Damit erhält man für die Jacobi-Matrix (3.16)

$$(DF)_{(0, q_r, e)} = \begin{pmatrix} cS & 0 \\ 0 & -d\zeta q_r^{\zeta-1} \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Ein Eigenwert ist cS . Dieser ist bei Übersättigung immer positiv, und somit ist der triviale Fixpunkt immer instabil. Hingegen kann dieser Fixpunkt bei Untersättigung stabil sein. Das bedeutet, dass die Wolken in sich zusammenfällt. Diese Beobachtung trifft insbesondere für das IFS-Schema zu (siehe Tabelle 3.4).

Als nächstes betrachten wir den Fall, dass $\beta_c = 1$ oder $\gamma = 1$ gilt. Damit lässt sich die folgende Analyse auf die Wacker und COSMO-Schemata anwenden. Die Jacobi-Matrix ist durch

$$(DF)_{(0, q_r, e)} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ \tilde{\eta} & -d\zeta q_r^{\zeta-1} \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

gegeben, wobei

- $\lambda_1 = Sc - a_1$ und $\tilde{\eta} = a_1$ im Fall $\gamma = 1$, $\beta_c > 1$,
- $\lambda_1 = Sc - a_2 q_r^{\beta_r}$ und $\tilde{\eta} = a_2 q_r^{\beta_r}$ im Fall $\gamma > 1$, $\beta_c = 1$,
- $\lambda_1 = Sc - a_1 - a_2 q_r^{\beta_r}$ und $\tilde{\eta} = a_1 + a_2 q_r^{\beta_r}$ im Fall $\gamma = \beta_c = 1$.

gilt. Der Eigenwert $-d\zeta q_r^{\zeta-1}$ ist in jedem Fall negativ (wir nehmen $\zeta > 0$ an), wohingegen der Eigenwert λ_1 sowohl positiv als auch negativ sein kann. Das Vorzeichen von λ_1 hängt davon ab, wie groß die Übersättigung S verglichen mit $a_2 q_r^{\beta_r}$ oder a_1 ist. Wenn die Übersättigung klein genug ist und $\gamma = 1$ oder $\beta_c = 1$ gilt, ist der triviale Fixpunkt stabil. Wir haben vorher gesehen, dass sich das Stabilitätsverhalten im übrigen Fall $\beta_1 > 1$ und $\gamma > 1$ davon unterscheidet. Insbesondere ist für eine solche Wahl der Exponenten der Fixpunkt immer instabil. Bezieht man diese Analyse auf die drei speziellen Wolkenschemata, so stellt sich heraus, dass der triviale Fixpunkt für das IFS-Schema immer instabil ist. Im Unterschied dazu kann der triviale Fixpunkt bei den Wacker- und COSMO-Schemata stabil sein, vorausgesetzt, die Übersättigung ist klein genug.

Man findet in Tabelle 3.2 in der Spalte "Trivial" ein Beispiel, bei dem die trivialen Fixpunkte berechnet wurden. Dabei wurde ein Druck von 1000 hPa, eine Umgebungstemperatur von 273 K, eine Übersättigung von 0.1 % und eine Regenrate $B = 10^{-3}$ angenommen. Bei den COSMO- und IFS-Schemata wurden zwei Fälle unterschieden. Zum einen haben wir den trivialen Fixpunkt unter Berücksichtigung der Evaporation, zum anderen bei deren Vernachlässigung berechnet. Die Ergebnisse bestätigen, dass der Prozess der Evaporation nur einen untergeordneten Einfluss hat. Beim Wacker-Schema wurde auf eine Parameterisierung der Evaporation von vornherein verzichtet. Die trivialen Fixpunkte der unterschiedlichen Wolkenschemata liegen sehr nahe zusammen. Die unskalierten Werte der Gleichgewichte ergeben sich durch Multiplikation der entdimensionalisierten Werte mit dem Faktor $10^{-4} \text{ kg kg}^{-1}$.

Schema	Trivial		Nicht Trivial	
	$q_{c,e}$	$q_{r,e}$	$q_{c,e}$	$q_{r,e}$
Wacker	0	0.258	4.870	6.533
COSMO (Ohne Evaporation)	0	0.284	7.939	7.662
COSMO	0	0.285	7.943	7.662
IFS (Ohne Evaporation)	0	0.250	3.045	4.056
IFS	0	0.259	3.045	4.056

Tabelle 3.2: Zusammenfassung der entdimensionalisierten Fixpunkte, berechnet für einen Umgebungsdruck von 1000 hPa, einer Temperatur von 273 K und eine Übersättigung von 0.1 %. Für die Berechnungen wurde $B = 10^{-3}$ angenommen. Die Werte wurden auf drei Stellen gerundet. Die dimensionsbehafteten Werte können durch Multiplikation mit dem Faktor $10^{-4} \text{ kg kg}^{-1}$ erhalten werden.

3.7.4 Nullstellenverhalten des trivialen Fixpunktes bei Berücksichtigung der Evaporation

Wir haben bei Vernachlässigung der Evaporation durch die Beziehung (3.19) eine Nullstelle gefunden. Das Weglassen des Evaporationsterms wird damit gerechtfertigt, dass er nur einen geringen Einfluss auf das physikalische Verhalten des Gesamtsystems hat (siehe Abschnitt 3.8). Auch wenn das der Fall ist, könnte es möglich sein, dass die nicht-linearen Terme der Evaporation das Nullstellenverhalten eines Systems verändern. Wir gehen deshalb jetzt der Frage nach, welchen Einfluss der Evaporationsterm auf die Nullstellen des Systems hat.

Zuerst soll geklärt werden, ob der Evaporationsterm zusätzliche Nullstellen erzeugen kann. Zur Beantwortung dieser Frage definieren wir, ausgehend von der Beziehung (3.18), die Funktion

$$g(q) := e_1 S q^{\delta_1} + e_2 S q^{\delta_2} + B - d q^\zeta \quad (3.22)$$

Es werden also Lösungen, für die $g(q) = 0$ gilt, gesucht. Wenn es mehr als eine Nullstelle gibt, muss die Ableitung von (3.22), gegeben durch

$$g'(q) = e_1 S \delta_1 q^{\delta_1-1} + e_2 S \delta_2 q^{\delta_2-1} - d \zeta q^{\zeta-1} \quad (3.23)$$

an mindestens einem Punkt Null werden. Diese Aussage folgt aus dem Mittelwertsatz. Wenn wir ausschließen können, dass die Ableitung im physikalisch relevanten Bereich eine Nullstelle besitzt, kann (3.22) dort nur maximal eine Nullstelle besitzen.

Es sollen die üblichen Umgebungsbedingungen 100000Pa, 273K und eine Übersättigung von 0.1%, sowie $B = 10^{-3}$ gelten. Für $q \in [0, 0.1]$ hat sowohl für das COSMO- als auch das IFS-Schema die Abschätzung

$$0 < B - (|e_1 S q^{\delta_1}| + |e_2 S q^{\delta_2}| + |d q^\zeta|) \quad (3.24)$$

Gültigkeit. In diesem Intervall braucht man also nicht nach Nullstellen von (3.22) zu suchen. Wir untersuchen noch das Verhalten auf dem als physikalisch relevant betrachteten Intervall $[0.1, 10]$. Angenommen in diesem Intervall gäbe es zwei Nullstellen. Dann müsste

(3.23) an mindestens einem Punkt verschwinden. Man kann aber für das IFS- und das COSMO Schema die Abschätzung

$$dq^{\zeta-1} > |e_1 S \delta_1 q^{\delta_1-1}| + |e_2 S \delta_2 q^{\delta_2-1}| \quad (3.25)$$

oder äquivalent

$$0 > |e_1 S \delta_1 q^{\delta_1}| + |e_2 S \delta_2 q^{\delta_2-1}| - dq^{\zeta-1} \quad (3.26)$$

im genannten Intervall zeigen. Der Sedimentationsterm dominiert also die Evaporation. Damit wurde gezeigt, dass Gleichung (3.18) ,mit den Parametern aus den COSMO- und IFS-Schemata im Intervall $[0, 10]$, das hier als der physikalisch relevante Bereich betrachtet wird, nicht mehr als eine Nullstelle haben kann.

Andererseits muss in dem Intervall $[0.1, 10]$ bei Wahl der Parameter, die zu den COSMO- und IFS-Schemata gehören, eine Nullstelle existieren. Dies zeigt eine einfache Anwendung des Zwischenwertsatzes, da Gleichung (3.22) mit den entsprechenden Parametern stetig ist und an den Intervallenden entgegengesetzte Vorzeichen besitzt.

Ein Standardverfahren zur Berechnung von Nullstellen ist das Newton-Verfahren. Angenommen man möchte eine Nullstelle einer Funktion $h(x)$ berechnen. Dann betrachtet man das Taylor-Polynom ersten Grades

$$p_1(x) = h(x_0) + (x - x_0)h'(x_0) \quad (3.27)$$

und berechnet dessen Nullstelle

$$x_1 = x_0 - \frac{h(x_0)}{h'(x_0)}. \quad (3.28)$$

Man kann diesen Prozess iterieren. So erhält man das Newton-Verfahren. Für Konvergenz braucht man im Allgemeinen einen guten Startwert, da das Newton-Verfahren im Allgemeinen nicht global konvergent ist. Es ist dann quadratisch konvergent. Außerdem sollte, um die Anwendbarkeit zu garantieren, $g'(x)$ invertierbar sein. Man kann das Newton-Verfahren anwenden, um die Nullstellen von (3.18) für die COSMO- und das IFS-Schemata zu bestimmen. Für die Newton-Iteration ist 0.1 für beide Schemata ein guter Startwert. Die Ergebnisse findet man in Tabelle 3.2. Dort zeigt sich auch, dass die Evaporation nur einen geringen Einfluss auf das Ergebnis hat.

3.7.5 Ein nicht-trivialer Fixpunkt

Das generische Wolkenmodell (3.14) kann für eine beliebige Wahl von Exponenten starken nicht-linearen Charakter bekommen. Es werden in der Literatur keine Einschränkungen gemacht, wie die Exponenten zu wählen sind. Ein Grund dafür ist, dass die Wolkenmodelle nicht aus einer allgemeinen Theorie abgeleitet werden. In einem nicht-linearen Fall ist es im Allgemeinen schwierig, Fixpunkte im physikalisch relevanten Bereich $0 \leq q_c, 0 \leq q_r$ analytisch zu berechnen. Wir beschränken uns deshalb in der folgenden Untersuchung auf die drei speziellen Wolkenschemata, die in Abschnitt 3.5 vorgestellt wurden. Bei der Bestimmung von Fixpunkten kommen hier auch numerische Methoden, wie das Newton-Verfahren, zum Einsatz. Es wurde im vorangegangenen Abschnitt 3.7.4 bereits erklärt. Bei den COSMO- und IFS-Schemata vernachlässigen wir wieder den Evaporationsprozess.

Außerdem nehmen wir im Folgenden immer $q_{c,e} \neq 0$ an, da sich andernfalls wieder der triviale Fixpunkt ergibt.

Für das Wacker-Schema hat die Gleichung $f(q_{c,e}, q_{r,e}) = 0$ nur eine Lösung, für die $q_{c,e} \neq 0$ gilt, und zwar ist sie durch

$$q_{c,e} = \frac{d}{a_2} - \frac{1}{cS} \left[\frac{da_1}{a_2} + B \right] \quad \text{und} \quad q_{r,e} = \frac{cS - a_1}{a_2}. \quad (3.29)$$

gegeben. Für die hier betrachteten Parameter ist der Fixpunkt stabil (siehe Tabelle 3.3). Eine ausführliche Diskussion über das Stabilitätsverhalten des Wacker-Schemas findet man in Wacker (1992). Allerdings wurde in Wacker (1992) eine konstante Kondensationsrate, die nicht von den Umgebungsbedingungen abhängt, verwendet.

Wenn man die rechte Seite von Gleichung (3.14a) gleich Null setzt und die Exponenten des COSMO-Modells verwendet, gelangt man zur Gleichgewichtslösung

$$q_{r,e}^{\frac{7}{8}} = \frac{cS - a_1}{a_2} \quad (3.30)$$

für die Massenkonzentration von Regentropfen. Für den Akkreszenzparameter a_2 gilt $a_2 > 0$. Damit erhält man eine physikalisch sinnvolle Lösung für $q_{r,e}$, wenn $cS - a_1 \geq 0$ gilt, also insbesondere solange die Übersättigung groß genug ist. Diese nicht-triviale Lösung ist für das COSMO-Modell eindeutig. Wir nehmen jetzt an, dass die Bedingung einer genügend großen Übersättigung erfüllt ist und setzen die rechte Seite von Gleichung (3.14b) Null. Es wird wieder der Evaporationsterm vernachlässigt. Wenn man die resultierende Gleichung zu (3.14a) addiert und nach der Massenkonzentration für Wolkenwasser auflöst, erhält man die Gleichung

$$q_{c,e} = \frac{dq_{r,e}^{\frac{9}{8}} - B}{cS}. \quad (3.31)$$

Wir widmen uns noch dem IFS-Schema mit seinen Exponenten. Die rechten Seiten der Gleichungen (3.14a) und (3.14b) werden Null gesetzt. Anschließend werden beide Gleichungen addiert. Daraus ergibt sich

$$q_{c,e} = \frac{dq_{r,e} - B}{cS}. \quad (3.32)$$

Dieses Ergebnis kann man jetzt in Gleichung (3.14a) einsetzen. Man gelangt so zu der nicht-linearen Gleichung

$$0 = cS - a_1 \left(\frac{dq_{r,e} - B}{cS} \right)^{1.47} - a_2 \left(\frac{dq_{r,e} - B}{cS} \right)^{0.15} q_{r,e}^{1.15}, \quad (3.33)$$

deren Lösung das Gleichgewicht für $q_{r,e}$ ist. Bemerkungen zur Eindeutigkeit folgen in Abschnitt 3.7.6.

Nachdem die Berechnung der Gleichgewichtslösungen beschrieben wurde, kann nun auch deren Stabilitätsverhalten analysiert werden. Dazu bedienen wir uns numerischer Berechnungen. Zunächst listet Tabelle 3.2 die entdimensionalisierten Koordinaten der nicht-trivialen Gleichgewichte in der Spalte "Nicht-Trivial" bei den angegebenen Umgebungsbedingungen auf. Abbildung 3.10 zeigt Lösungstrajektorien für die drei Wolkenschemata

Schema	λ_1	τ_{relax}	τ_{osc}
Wacker	$-1.138 \cdot 10^{-4} + 4.272 \cdot 10^{-3}i$	8787.346	1470.821
COSMO	$-1.173 \cdot 10^{-3} + 4.094 \cdot 10^{-3}i$	852.56	1534.583
IFS	$-2.132 \cdot 10^{-4} + 4.953 \cdot 10^{-3}i$	4690.822	1268.59

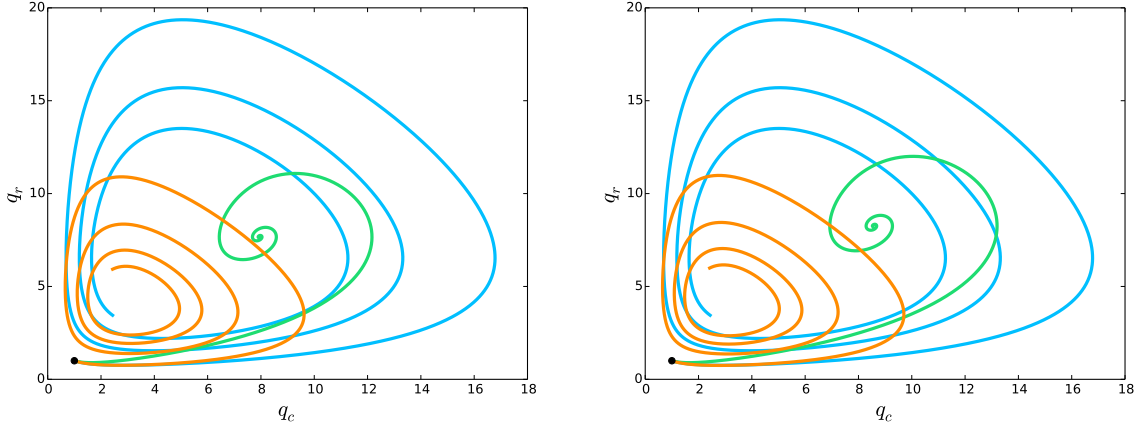
Tabelle 3.3: Eigenwert λ_1 für das nicht-triviale Gleichgewicht für die drei speziellen Wolkenschemata. Außerdem die entdimensionalisierten Relaxations- und Oszillationszeitskalen, die durch die Gleichungen (3.34) definiert werden. Es gelten die gleichen Umgebungsbedingungen wie in Tabelle 3.2. Es wurde auf drei Nachkommastellen gerundet. Quelle: Rosemeier u. a., 2018

für verschiedene Umgebungsbedingungen. Die Trajektorien aller drei Wolkenschemata bewegen sich spiralförmig auf den zum jeweiligen Wolkenschema gehörigen nicht-trivialen Fixpunkt zu. Das ist ein erstes Anzeichen dafür, dass die nicht-trivialen Gleichgewichte stabil sind und deren Eigenwerte einen von Null verschiedenen Imaginärteil besitzen. Abbildung 3.10 ermöglicht es außerdem, die Lösungstrajektorien zu den verschiedenen Wolkenschemata zu vergleichen. Es zeigt sich, dass die Gleichgewichtslösungen zu den unterschiedlichen Wolkenschemata nicht identisch sind. Dies sollte als eine wesentliche Beobachtung hervorgehoben werden, bedeutet es doch, dass die Simulation einer warmen Wolke mit dem COSMO- oder IFS-Schema zu unterschiedlichen Zusammensetzungen der Massenkonzentrationen von Wolken- und Regenwasser führt, da Wolken als Systeme nahe dem Gleichgewicht angesehen werden. Wenn man an ein Wettervorhersage- oder Klimamodell denkt, werden also je nachdem welches Wolkenschema verwendet wird, unterschiedliche Werte an die angekoppelten Parameterisierungen zurückgegeben. Dies kann das Verhalten des gesamten Modells beeinflussen.

Ein Blick auf das Abbildung 3.10 zeigt, dass sowohl die Konvergenzgeschwindigkeit gegen den Fixpunkt als auch die Windungsrates der verschiedenen Wolkenmodelle unterschiedlich sind. Diese Beobachtung wird durch die Berechnung der Eigenwerte λ_1, λ_2 der Jacobi-Matrix $(DF)_{(q_c, e, q_r, e)}$ mit den zugehörigen Relaxations- und Oszillationszeitskalen, die durch

$$\tau_{\text{relax}} = \frac{1}{|\text{Re}(\lambda_1)|} \quad \text{and} \quad \tau_{\text{osc}} = \frac{2\pi}{|\text{Im}(\lambda_1)|}. \quad (3.34)$$

definiert sind, bestätigt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 3.3 zusammengefasst. Dabei fällt auf, dass die Relaxationszeitskala τ_{relax} des COSMO-Schemas deutlich kleiner ist als die der anderen beiden Wolkenschemata. Das bedeutet, dass die Trajektorie des COSMO-Schemas schneller gegen den Gleichgewichtspunkt konvergiert (grüne Kurve). Dieses mathematische Verhalten kann man physikalisch wie folgt interpretieren: Eine warme Wolke, die unter den angegebenen Bedingungen mit dem COSMO-Schema modelliert wird, befindet sich deutlich schneller nahe des Gleichgewichts, als es bei Simulationen mit den anderen beiden Schemata der Fall ist. Außerdem zeigen die Rechnungen, dass die Oszillationszeitkala des COSMO-Schemas geringfügig größer ist als die der anderen beiden Schemata (siehe Tabelle 3.3). In Abbildung 3.10 sind jedoch mit bloßem Auge viele Windungen der grünen Kurve nicht sichtbar, da sich die Trajektorie sehr schnell sehr nahe am Gleichgewichtspunkt befindet.



Gewählte Umgebungsbedingungen: Temperatur 273 K, Druck 1000 hPa

Gewählte Umgebungsbedingungen: Temperatur 250 K, Druck 800 hPa

Abbildung 3.10: Lösungstrajektorien der drei Wolkenschemata im (q_c, q_r) -Phasenraum mit den Anfangsbedingungen $q_c(0) = 1$ und $q_r(0) = 1$. Sie erreichen die nicht-trivialen Gleichgewichte bei zwei verschiedenen Wahlen der Umgebungsbedingungen. Es wurde $B = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ gewählt. Wacker-Schema: blaue Linie; COSMO-Schema: grüne Linie; IFS-Schema: orange Linie. Quelle: Rosemeier u. a., 2018

3.7.6 Bemerkung zur Eindeutigkeit der Nullstellen des nicht-trivialen Fixpunktes

Wir betrachten das Intervall $q_c \in (0, 10]$. Zunächst soll die Evaporation vernachlässigt werden. Es werden also die Zeitableitungen in Gleichung (3.14a) Null gesetzt. Anschließend kann man Gleichung (3.14a) nach q_r auflösen. Für die Wacker- und COSMO-Schemata erhält man lineare Gleichungen in q_c . Daraus folgt die Eindeutigkeit. Für das IFS-Schema ist q_r eine Funktion in q_c

$$q_r = \left(\frac{1}{a_2}\right)^{\frac{20}{23}} \left(cS q_c^{-0.15} - a_1 q_c^{1.32}\right)^{\frac{20}{23}} := q_r(q_c) \quad (3.35)$$

An dieser Stelle wird die Ableitung von (3.35) berechnet, die in diesem Abschnitt noch gebraucht wird.

$$q_r'(q_c) = \frac{20}{23} \left(\frac{1}{a_2}\right)^{\frac{20}{23}} \left(cS q_c^{-0.15} - a_1 q_c^{1.32}\right)^{-\frac{3}{23}} \left(-0.15cS q_c^{-1.15} - 1.32a_1 q_c^{0.32}\right) \quad (3.36)$$

Durch Addition von (3.14a) und (3.14b) erhält man für das IFS-Schema

$$0 = cS q_c + B - dq_r(q_c) =: f(q_c). \quad (3.37)$$

Hätte Gleichung (3.37) mindestens zwei Nullstellen $q_{c,e}^1, q_{c,e}^2$ im relevanten Bereich mit $q_{c,e}^1 < q_{c,e}^2$, würde die Ableitung an mindestens einem Punkt $q_c \in [q_{c,e}^1, q_{c,e}^2]$ Null werden. Es soll gezeigt werden, dass dies nicht der Fall ist. Wir berechnen also die Ableitung von

(3.37) und machen die folgende Abschätzung

$$f'(q_c) = cS + d \frac{20}{23} \left(\frac{1}{a_2} \right)^{\frac{20}{23}} \left(cS q_c^{-0.15} - a_1 q_c^{1.32} \right)^{-\frac{3}{23}} \left(0.15cS q_c^{-1.15} + 1.32a_1 q_c^{0.32} \right) > 0 \quad (3.38)$$

auf $(0, 10]$. In den hier betrachteten Fällen gilt

$$cS q_c^{-0.15} - a_1 q_c^{1.32} > 0 \quad (3.39)$$

auf $(0, 10]$. Es wird auch hier $S = 0.001$ angenommen. Damit ist auch die Eindeutigkeit beim IFS-Schema gezeigt.

Es soll jetzt der Fall mit Evaporation untersucht werden. Es werden also das COSMO- und das IFS-Schema betrachtet. Zuerst wenden wir uns dem COSMO-Schema zu. Der Wert von q_r ist hier allein durch Gleichung (3.14a) bestimmt und nimmt den Wert $q_r = \left(\frac{c-a_1}{a_2} \right)^{\frac{7}{8}}$ an. Gleichung (3.14b) ist damit linear in q_c , woraus die Eindeutigkeit folgt. Beim IFS-Schema werden ähnliche Argumente wie zu Beginn dieses Abschnitts angewendet. Es gilt immer noch die Beziehung (3.35) für q_r . Gleichung (3.37) nimmt die veränderte Gestalt

$$0 = cS q_c + B + e_1 S q_r(q_c)^{\delta_1} + e_2 S q_r(q_c)^{\delta_2} - dq_r(q_c) =: f(q_c) \quad (3.40)$$

an. Es wird wieder die Ableitung berechnet, dieses Mal von Gleichung (3.40). Außerdem können einige Abschätzungen gemacht werden.

$$f'(q_c) = \underbrace{cS}_{>0} + \underbrace{e_1 S \delta_1 q_r'(q_c) (q_r(q_c))^{\delta_1-1}}_{>0} + \underbrace{e_2 S \delta_2 q_r'(q_c) (q_r(q_c))^{\delta_2-1}}_{<0} - \underbrace{dq_r'(q_c)}_{>0, \text{ da } q_r'(q_c) < 0} \quad (3.41)$$

Es gilt

$$d > |e_2 S \delta_2 (q_r(q_c))^{\delta_2-1}| \quad (3.42)$$

für $q_c \in (0, 10]$. Damit kann in dem betrachteten Intervall nicht mehr als eine Nullstelle existieren.

3.8 Asymptotische Untersuchungen

In Abschnitt 3.7 wurde durch die Gleichgewichtsbestimmung und die Stabilitätsanalyse das Verhalten, das die Lösungstrajektorien der Wolkenschemata bei einem Startwert in der Nähe des Gleichgewichts haben, untersucht. Es wurde bereits erwähnt, dass das qualitative Verhalten eng mit dem Langzeitverhalten der Lösungen für $t \rightarrow \infty$ verbunden ist. Diese Beobachtung gibt Anstoß zu der Frage über das Verhalten der Wolkenschemata auf kürzeren Zeitskalen. Dieses Problem ist aus physikalischen Gesichtspunkten relevant, da Wolken im Allgemeinen nicht beliebig oder gar unendlich lang den gleichen Umgebungsbedingungen ausgesetzt sind. Die Annahme einer konstanten Übersättigung kann mit einem konstanten Auftrieb gerechtfertigt werden, was für unendlich lange Zeiten schlichtweg nicht haltbar ist. Damit ist die Bestimmung der Gleichgewichte eine erste Annäherung an das Problem, jedoch ergibt die Untersuchung der Wolkenschemata auf bestimmten Zeitskalen, und zwar solchen, die vom Auftrieb bestimmt werden, aussagekräftigere Resultate. Deshalb werden im folgenden Abschnitt die Wolkenschemata auf verschiedenen Zeitskalen untersucht. Dabei bedienen wir uns Techniken der asymptotischen Störungsrechnung.

Vorfaktor	a_1	a_2	e_1	e_2	d	
Wacker	10^{-4}	$7.5 \cdot 10^{-4}$	0	0	$3.88 \cdot 10^{-3}$	
COSMO	10^{-3}	X	X	X	X	
IFS	$9.83 \cdot 10^{-8}$	$8.45 \cdot 10^{-4}$	X	X	$4 \cdot 10^{-3}$	
Exponent	γ	β_c	β_r	δ_1	δ_2	ζ
Wacker	1	1	1	1	1	1
COSMO	1	1	$\frac{7}{8}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{11}{16}$	$\frac{9}{8}$
IFS	2.47	1.15	1.15	$\frac{10}{9}$	$\frac{127}{360}$	1

Tabelle 3.4: Werte der konstanten Vorfaktoren und Exponenten der drei Wolkschemata. Variable Vorfaktoren werden durch ein X gekennzeichnet.

Scheme	a_1	a_2	e_1	e_2	d
Wacker	$a_1^* \epsilon^4$	$a_2^* \epsilon^3$	–	–	$d^* \epsilon^3$
COSMO	$a_1^* \epsilon^3$	$a_2^* \epsilon^3$	$e_1^* \epsilon^3$	$e_2^* \epsilon^3$	$d^* \epsilon^3$
IFS	$a_1^* \epsilon^7$	$a_2^* \epsilon^3$	$e_1^* \epsilon^7$	$e_2^* \epsilon^2$	$d^* \epsilon^3$

Tabelle 3.5: Wahl des Distinguished Limit für die Koeffizienten der Wolkschemata mit a_1^* , a_2^* , e_1^* , e_2^* , $d^* = \mathcal{O}(1)$ für $\epsilon \rightarrow 0$. Eine Parameterisierung der Evaporation ist beim Wacker-Schema nicht vorhanden.

Es wurde bereits weiter oben gezeigt, dass die Entdimensionalisierung der Wolkschemata zu bestimmten Vorfaktoren in den Gleichungen führt. Die relative Größe der Vorfaktoren zueinander spielte eine wichtige Rolle für das Verhalten der Lösungstrajektorien. Wenn nur ein kleiner oder großer Parameter in den Gleichungen auftreten würde, könnte man diesen Parameter gleich ϵ oder ϵ^{-1} setzen und das Verhalten der Lösungstrajektorien für den Limes $\epsilon \rightarrow 0$ untersuchen. In unseren Gleichungen finden wir jedoch mehrere Vorfaktoren, darum wählen wir für diese einen sogenannten Distinguished Limit, der die Vorfaktoren der verschiedenen Wolkschemata an einen kleinen Parameter ϵ bindet (siehe Klein u. a., 2010). Für die hier gezeigte Wahl des Distinguished Limit werden die Werte der entdimensionalisierten Koeffizienten (3.15) verwendet. Die konstanten Werte werden in Tabelle 3.4 und die Vorfaktoren, die von den Umgebungsbedingungen abhängen, in den Abbildungen 3.5, 3.6 und 3.7 gezeigt. Die physikalisch sinnvollen Werte für die Kondensationsrate erstrecken sich grob über eine Größenordnung (siehe Abbildung 3.5), deshalb kann man

$$c = \epsilon^\mu c^* \quad (3.43)$$

ansetzen, wobei $\mu \in \{-1, 0\}$ und $c^* = \mathcal{O}(1)$ für $\epsilon \rightarrow 0$. Diese Wahl ist kompatibel mit $\epsilon \sim \frac{1}{10}$ wie in Hittmeir und Klein, 2017. In der Folge betrachten wir den Fall $\mu = 0$. Um verschiedene konstante Übersättigungen modellieren zu können, setzen wir

$$S = \epsilon^\alpha \quad (3.44)$$

mit $\alpha > 0$. Eine Änderung von α bewirkt somit eine Änderung der Übersättigung. Wir betrachten nachfolgend immer Werte für $\alpha > 1$, wenn es nicht anders angezeigt wird.

Dies stellt sicher, dass die Übersättigungen kleiner als 10% sind. Die Wahl der übrigen Koeffizienten ist in Tabelle 3.5 zusammengestellt. Um die Zeitskala des Systems (3.14) zu ändern, wird eine Zeittransformation durchgeführt

$$\tau = \epsilon^\omega t. \quad (3.45)$$

Die Anwendung dieser Zeittransformation auf q_c ergibt $\frac{dq_c}{d\tau} = \epsilon^{-\omega} \frac{dq_c}{dt}$. Ein analoges Resultat erhält man für q_r . Wenn man nun noch den Distinguished Limit einsetzt, gelangt man für das Wacker-Schema zu

$$\frac{dq_c}{d\tau} = \epsilon^{\mu+\alpha-\omega} c^* q_c - \epsilon^{4-\omega} a_1^* q_c - \epsilon^{3-\omega} a_2^* q_c q_r, \quad (3.46a)$$

$$\frac{dq_r}{d\tau} = \epsilon^{4-\omega} a_1^* q_c + \epsilon^{3-\omega} a_2^* q_c q_r - \epsilon^{3-\omega} d^* q_r + \epsilon^{-\omega} B, \quad (3.46b)$$

für das COSMO-Schema zu

$$\frac{dq_c}{d\tau} = \epsilon^{\mu+\alpha-\omega} c^* q_c - \epsilon^{3-\omega} a_1^* q_c - \epsilon^{3-\omega} a_2^* q_c q_r^{\frac{7}{8}}, \quad (3.47a)$$

$$\frac{dq_r}{d\tau} = \epsilon^{3-\omega} a_1^* q_c + \epsilon^{3-\omega} a_2^* q_c q_r^{\frac{7}{8}} + \epsilon^{3+\alpha-\omega} \left(e_1^* q_r^{\frac{1}{2}} + e_2^* q_r^{\frac{11}{16}} \right) - \epsilon^{3-\omega} d^* q_r^{\frac{9}{8}} + \epsilon^{-\omega} B, \quad (3.47b)$$

und für das IFS-Schema zu den Gleichungen

$$\frac{dq_c}{d\tau} = \epsilon^{\mu+\alpha-\omega} c^* q_c - \epsilon^{7-\omega} a_1^* q_c^{2.47} - \epsilon^{3-\omega} a_2^* q_c^{1.15} q_r^{1.15}, \quad (3.48a)$$

$$\begin{aligned} \frac{dq_r}{d\tau} = & \epsilon^{7-\omega} a_1^* q_c^{2.47} + \epsilon^{3-\omega} a_2^* q_c^{1.15} q_r^{1.15} + \epsilon^{7+\alpha-\omega} e_1^* q_r^{\frac{10}{9}} + \epsilon^{2+\alpha-\omega} e_2^* q_r^{\frac{127}{360}} \\ & - \epsilon^{3-\omega} d^* q_r + \epsilon^{-\omega} B. \end{aligned} \quad (3.48b)$$

Wie bereits weiter oben angedeutet, können wir jetzt verschiedene Regime betrachten, indem wir den Exponenten der Zeittransformation ω und der Übersättigung α entsprechend wählen. Nach der Festlegung der einzelnen Exponenten wird für die Massenkonzentrationen die folgende Entwicklung angesetzt

$$q_c(\tau) = q_c^{(0)}(\tau) + \epsilon q_c^{(1)}(\tau) + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (3.49a)$$

$$q_r(\tau) = q_r^{(0)}(\tau) + \epsilon q_r^{(1)}(\tau) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (3.49b)$$

Diese wird in die reskalierten Gleichungen (3.46), (3.47) und (3.48) eingesetzt. Anschließend erhält man die reduzierten Gleichungen durch das Ordnen der Terme nach ϵ -Exponenten. Dabei Bedarf der Term B , der den von oben in das betrachtete Luftpaket einfallenden Regen beschreibt, einer besonderen Behandlung. Dieser Term hängt von den umgebenden Bedingungen außerhalb des betrachteten Luftpakets ab und unterliegt keinen Einschränkungen. Er könnte also in jeder Ordnung der asymptotischen Entwicklung auftreten. Wir haben deshalb B oben noch nicht bei der Wahl des Distinguished Limit eingeschlossen. Das holen wir jetzt nach und wählen als Entwicklung für B

$$B = \epsilon^3 \left(B^{(0)} + \epsilon B^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right). \quad (3.50)$$

Diese Wahl stellt sicher, dass B und D von der gleichen asymptotischen Größenordnung sind und sich ausbalancieren. Dabei beschreibt der Term D den aus dem Luftpaket ausfallenden Regen. Mit Gleichung (3.50) treffen wir eine Annahme an die Größenordnung von B . Man kann auch größere Werte für B ansetzen. In diesem Fall könnte man beispielsweise eine asymptotische Entwicklung der Form $B = \epsilon^3 (\epsilon^{-1} B^{(-1)} + B^{(0)} + \epsilon B^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2))$ wählen. Wenn jedoch $B \gg D$ gilt, ist die Menge des in das Luftpaket hereinfallenden Regens viel größer als die Menge, die herausfällt, somit gäbe es eine starke Ansammlung von Wasser im Luftpaket. Dies erscheint unrealistisch, da der Regen durch das Luftpaket hindurchfallen sollte, dementsprechend sollte D auch groß sein, wenn B groß ist. Gilt auf der anderen Seite $B \ll D$, ist die Menge des aus dem Luftpaket herausfallenden Wassers beträchtlich größer als die Menge des von oben hereinfallenden Wassers und das Luftpaket würde letztendlich austrocknen. Die Betrachtung dieses Falls ist nur dann sinnvoll, wenn sich das Luftpaket am oberen Rand der Wolkensäule befindet

Im folgenden Abschnitt 3.8.1 wird das Verhalten der Wolkenschemata für verschiedene Regime beschrieben. Dafür werden die zugehörigen Gleichungen führender Ordnung hergeleitet und untersucht.

3.8.1 Herleitung der reduzierten Gleichungen

Nachdem die entdimensionalisierten Gleichungen (3.46), (3.47) und (3.48) der unterschiedlichen Wolkenschemata hergeleitet und ein Distinguished Limit festgelegt wurde, können wir uns jetzt den reduzierten Gleichungen für verschiedene Regime zuwenden. Wir untersuchen das Verhalten der Wolkenschemata auf verschiedenen Zeitskalen:

- $\omega = 4$, zur Untersuchung des Verhaltens auf einer Zeitskala 10 000 s, dazu beachtet man $t' = t_{\text{ref}} t = \epsilon^{-\omega} t_{\text{ref}} \tau = \epsilon^{-4} t_{\text{ref}} \sim 10\,000\text{ s}$ für $\tau = 1$,
- $\omega = 3$, zur Untersuchung des Verhaltens auf einer Zeitskala 1000 s,
- $\omega = 2$, zur Untersuchung des Verhaltens auf einer Zeitskala 100 s und
- $\omega = 1$, zur Untersuchung des Verhaltens auf einer Zeitskala 10 s.

Die lange Zeitskala von 1000 s, die anschließend als die lange Zeitskala bezeichnet wird, ist mit dem Zeitschritt in einem Klimamodell oder der Lebensdauer einer typischen Cumulus Wolke vergleichbar (siehe Rogers und Yau, 1989). Deshalb gibt eine Analyse auf dieser Zeitskala Einblick in das Verhalten der Wolkenschemata für einen Klimazeitschritt und die simulierte Wolkendynamik während eines Cumuluslebenszyklus. Dabei wird immer eine konstante Übersättigung angenommen. Beispiele für atmosphärische Phänomene, die zwar geringe, aber nahezu konstante Übersättigungen hervorrufen können, sind Warm Conveyor Belts und Vertikalbewegungen entlang Fronten großskaliger Drucksysteme.

Die mittlere Zeitskala von 100 s ist mit dem Zeitschritt innerhalb eines numerischen Wettervorhersagemodells vergleichbar. Auf dieser Zeitskala kann man auch nur geringe Übersättigungen erwarten, die durch anhaltende Vertikalbewegung aufrechterhalten werden.

Die kurze Zeitskala von 10 s wird bei der Betrachtung von Large Eddy Simulationen oder wolkenauflösenden Modellen interessant. Auf dieser Zeitskala können Übersättigungen auch höhere Werte erreichen, beispielsweise durch einen Auftrieb innerhalb einer Wolke.

Sehr lange Zeitskala 10 000 s

Wir betrachten die sehr lange Zeitskala von 10 000 s, indem wir in den entdimensionalisierten Schemata (3.46), (3.47) und (3.48) für den Exponenten der Zeittransformation (3.45) $\omega = 4$ wählen. Dies führt in führender Ordnung zu algebraischen Gleichungen. Dabei nehmen wir für diese Zeitskala geringe Übersättigungen, für die $\alpha > 3$ gilt, an. Durch Anwendung der asymptotischen Entwicklungen (3.49) für q_c und q_r gelangt man zu folgenden Gleichungen führender Ordnung: für das Wacker-Schema

$$0 = -a_2^* q_c^{(0)} q_r^{(0)}, \quad (3.51a)$$

$$0 = a_2^* q_c^{(0)} q_r^{(0)} - d^* q_r^{(0)} + B^{(0)} \quad (3.51b)$$

für das COSMO-Schema

$$0 = -a_1^* q_c^{(0)} - a_2^* q_c^{(0)} \left(q_r^{(0)} \right)^{\frac{7}{8}}, \quad (3.52a)$$

$$0 = a_1^* q_c^{(0)} + a_2^* q_c^{(0)} \left(q_r^{(0)} \right)^{\frac{7}{8}} - d^* \left(q_r^{(0)} \right)^{\frac{9}{8}} + B^{(0)} \quad (3.52b)$$

und für das IFS-Schema

$$0 = -a_2^* \left(q_c^{(0)} q_r^{(0)} \right)^{1.15}, \quad (3.53a)$$

$$0 = a_2^* \left(q_c^{(0)} q_r^{(0)} \right)^{1.15} - d^* q_r^{(0)} + B^{(0)}. \quad (3.53b)$$

Für alle drei Wolkschemata ist die Lösung durch $q_c^{(0)} = 0$ und Gleichung (3.19) gegeben, insbesondere fällt auf einer Zeitskala von 10 000 s die asymptotische Lösung mit dem trivialen Gleichgewicht zusammen. Da $q_c^{(0)} = 0$ gilt, liegt hier ein wolkenfreier Fall vor, bei dem lediglich Regen von oben in das Luftpaket hinein- und unten wieder herausfällt. Für noch längere Zeitskalen und geringe Übersättigungen ($\alpha > 3$), gelangt man in führender Ordnung zu den selben Gleichungen. Die Zeitskala von 10 000 s ist bei der Betrachtung von Warm Conveyor Belts von Interesse.

Lange Zeitskala 1000 s

Die Wahl der Zeitskala von 1000 s wird durch die Wahl $\omega = 3$ festgelegt. Wir schauen uns zuerst eine Übersättigung von $S \sim 0.1\%$ an und wählen dazu $\alpha = 3$. Dadurch ergeben sich die folgenden Gleichungen führender Ordnung: für das Wacker-Schema

$$\frac{dq_c^{(0)}}{d\tau} = c^* q_c^{(0)} - a_2^* q_c^{(0)} q_r^{(0)}, \quad (3.54a)$$

$$\frac{dq_r^{(0)}}{d\tau} = a_2^* q_c^{(0)} q_r^{(0)} - d^* q_r^{(0)} + B^{(0)}, \quad (3.54b)$$

für das COSMO-Schema

$$\frac{dq_c^{(0)}}{d\tau} = c^* q_c^{(0)} - a_1^* q_c^{(0)} - a_2^* q_c^{(0)} \left(q_r^{(0)} \right)^{\frac{7}{8}}, \quad (3.55a)$$

$$\frac{dq_r^{(0)}}{d\tau} = a_1^* q_c^{(0)} + a_2^* q_c^{(0)} \left(q_r^{(0)} \right)^{\frac{7}{8}} - d^* \left(q_r^{(0)} \right)^{\frac{9}{8}} + B^{(0)}, \quad (3.55b)$$

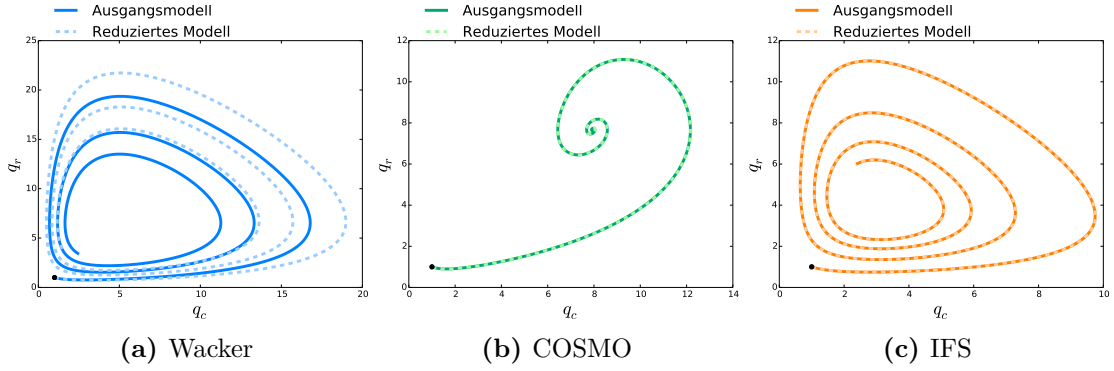


Abbildung 3.11: Vergleich der reduzierten Modelle mit den Ausgangsmodellen. Bei allen Modellen wurde der Startwert $q_c(0) = 1, q_r(0) = 1$ gewählt. Anschließend wurde das Verhalten der Systeme über einen Zeitraum von 5000 s berechnet.

und für das IFS-Schema

$$\frac{dq_c^{(0)}}{d\tau} = c^* q_c^{(0)} - a_2^* (q_c^{(0)} q_r^{(0)})^{1.15}, \quad (3.56a)$$

$$\frac{dq_r^{(0)}}{d\tau} = a_2^* (q_c^{(0)} q_r^{(0)})^{1.15} - d^* q_r^{(0)} + B^{(0)}. \quad (3.56b)$$

Das Wacker- und das IFS-Schema liefern dabei sehr ähnlicher Resultate, da der Exponent 1.15 im IFS-Schema sehr nahe bei 1 liegt. Was die Parameterisierung der Akkreszenz betrifft, liegt auch das COSMO-Schema sehr nahe bei den anderen Schemata, denn es gilt auch $\frac{7}{8} \approx 1$. Beim COSMO-Schema taucht jedoch der Autokonversionsterm in führender Ordnung auf. Auf dieser Zeitskala und für diese Übersättigung zeigen alle Wolkenschemata eine verallgemeinerte Räuber-Beute-Dynamik. Die Gleichungen besitzen also eine Struktur, die dem Lotka-Volterra-System sehr ähnliche ist (siehe dazu Murray, 2002 oder Verhulst, 1996). Setzt man bei den reduzierten Gleichungen (3.54) $B^{(0)} = 0$, kann man für das System ein erstes Integral mit der Invarianten

$$I(q_c^{(0)}, q_r^{(0)}) = a_2^* (q_c^{(0)} + q_r^{(0)}) - c^* \log(q_r^{(0)}) - d^* \log(q_c^{(0)}), \quad (3.57)$$

finden. Die Niveau-Mengen von I (engl. level sets) enthalten die Lösungen des beschriebenen Systems (siehe beispielsweise Verhulst, 1996; Murray, 2002). Wenn $B^{(0)} = 0$ gilt, kann man die Existenz von periodischen Trajektorien zeigen.

Abbildung 3.11 zeigt sowohl Simulationen der vollen Wolkenschemata als auch der reduzierten Gleichungen führender Ordnung mit $B^{(0)} = 1$ und $B^{(n)} = 0$ für $n \neq 0$. Die Abbildung zeigt, dass die Trajektorien der reduzierten Gleichungen gut mit denen der vollen Schemata übereinstimmen, und somit die Dynamik auf dieser Zeitskala wiedergeben. Insbesondere bei den Abbildungen 3.11b und 3.11c erkennt man kaum einen Unterschied zwischen den vollen und reduzierten Gleichungen.

Betrachtet man eine höhere Übersättigung, also $\alpha < 3$, ergeben sich die Gleichungen

$$q_c^{(0)} = 0 \quad \text{and} \quad \frac{dq_r^{(0)}}{d\tau} = -d^* (q_r^{(0)})^\zeta + B^{(0)}. \quad (3.58)$$

Man erhält also eine algebraische und eine Differentialgleichung. Für den Fall $\zeta = 1$ gilt

$$q_r = \frac{B^{(0)}}{d^*} + c_1 \exp(-d^* t) \quad (3.59)$$

mit einer Integrationskonstanten c_1 . Außerdem lässt sich nachrechnen, dass $q_c^{(n)} = 0$ für alle Ordnungen n gilt. Das bedeutet, dass die Massenkonzentration der Wolkentröpfchen Null ist. Wäre der Term $B^{(0)}$ in Gleichung (3.58) gleich Null, würden sich die Lösungen des Systems (3.58) dem Punkt $(0, 0)$ annähern. Die Konvergenz gegen $(0, 0)$ findet nur dann nicht statt, wenn der Term $B^{(0)} \neq 0$ gewählt wird. Physikalisch würde man ein anderes Verhalten erwarten, nämlich dass die hohe Übersättigung zur Entwicklung einer neuen Wolke führt. Die Wahl $\alpha < 3$ bedeutet jedoch, dass man eine Übersättigung von mindestens 1 % aufrechterhalten muss, was für die hier betrachtete Zeitskala unrealistisch erscheint.

Andererseits kann man die Gleichungen für eine geringere Übersättigung, also $\alpha \geq 4$, herleiten. Im Folgenden sind die reduzierten Gleichungen für diesen Fall aufgelistet. Man erhält für das Wacker-Schema

$$\frac{dq_c^{(0)}}{d\tau} = -a_2^* q_c^{(0)} q_r^{(0)}, \quad (3.60a)$$

$$\frac{dq_r^{(0)}}{d\tau} = a_2^* q_c^{(0)} q_r^{(0)} - d^* q_r^{(0)} + B^{(0)}, \quad (3.60b)$$

für das COSMO-Schema

$$\frac{dq_c^{(0)}}{d\tau} = -a_1^* q_c^{(0)} - a_2^* q_c^{(0)} \left(q_r^{(0)} \right)^{\frac{7}{8}}, \quad (3.61a)$$

$$\frac{dq_r^{(0)}}{d\tau} = a_1^* q_c^{(0)} + a_2^* q_c^{(0)} \left(q_r^{(0)} \right)^{\frac{7}{8}} - d^* \left(q_r^{(0)} \right)^{\frac{9}{8}} + B^{(0)}, \quad (3.61b)$$

und für das IFS-Schema

$$\frac{dq_c^{(0)}}{d\tau} = -a_2^* \left(q_c^{(0)} q_r^{(0)} \right)^{1.15}, \quad (3.62a)$$

$$\frac{dq_r^{(0)}}{d\tau} = a_2^* \left(q_c^{(0)} q_r^{(0)} \right)^{1.15} - d^* q_r^{(0)} + B^{(0)}. \quad (3.62b)$$

Der Kondensationsterm erscheint also in keinem Wolkenschema in führender Ordnung mehr. Eine derartig kleine Übersättigung reicht nicht aus, damit in führender Ordnung das Wasser der Wolkentröpfchen durch Diffusion anwächst. Damit ist $q_c^{(0)}$ eine monoton fallende Funktion und man kann bei entsprechender Wahl der Anfangsbedingungen und Parameter erwarten, dass die Wolke verschwindet.

Dieses Verhalten wird in Abbildung 3.12 veranschaulicht. Außerdem werden in den Abbildungen 3.12b, 3.12d und 3.12f die Eigenwerte der Jacobi-Matrizen gezeigt. Dafür wurden die Jacobi-Matrizen an den entsprechenden numerischen Lösungen ausgewertet. Die Ergebnisse lassen vermuten, dass es sich mit den gewählten Anfangswerten und auf dem festgelegten Lösungsintervall $[0, 50000]$ um ein nicht-steifes Problem handelt. Die numerischen Lösungen in den Abbildungen 3.12a, 3.12c und 3.12e wurden mit einem expliziten Verfahren, dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung, erstellt.

In dem hier beschriebenen Fall verschwindet die Wolke nicht durch den Evaporationsprozess - es wird immer noch eine konstante Übersättigung produziert -, sondern weil durch die Kollisionsprozesse Wolkenwasser in Regenwasser umgewandelt wird und das Regenwasser schließlich aus dem Luftpaket sedimentiert. Die Exponenten, die in den Gleichungen führender Ordnung auftreten, sind bei den drei Schemata ähnlich.

Mittlere Zeitskala 100 s

Durch die Wahl von $\omega = 2$ transformieren wir das System auf die mittlere Zeitskala, die relevant für numerische Wettervorhersagemodelle ist. Es ist möglich, die reduzierten Gleichungen für verschiedene Übersättigungen, also insbesondere für verschiedene α , herzuleiten. Man erhält dann für $\alpha < 2$

$$q_c^{(0)} = 0 \quad \text{and} \quad \frac{dq_r^{(0)}}{d\tau} = 0, \quad (3.63)$$

Für $\alpha = 2$ gelangt man zu

$$\frac{dq_c^{(0)}}{d\tau} = c^* q_c^{(0)} \quad \text{and} \quad \frac{dq_r^{(0)}}{d\tau} = 0, \quad (3.64)$$

da außer der Kondensation alle Prozesse von mindestens Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon)$ sind. In dem hier betrachteten Fall ist der Kondensationsprozess stark genug, um sehr viel Wolkenwasser zu produzieren, wohingegen der Autokonversionsprozess zu langsam ist, um das Wolkenwasser in führender Ordnung in Regen umzuwandeln. Die Gleichung für die Massenkonzentration von Wolkentröpfchen besitzt eine unbeschränkte Lösung. Damit treten sekulare Terme auf. Die asymptotische Entwicklung bricht für Zeiten größer als τ zusammen. Um eine Lösung zu erhalten, die auf allen betrachteten Zeitskalen gültig ist, kann man asymptotische Lösungen aufeinanderfolgender Regime, die sich aus den Zeitskalen ergeben, betrachten (siehe Holmes, 2013).

Wenn man die Übersättigung weiter verringert ($2 < \alpha$), gelangt man zu den Gleichungen

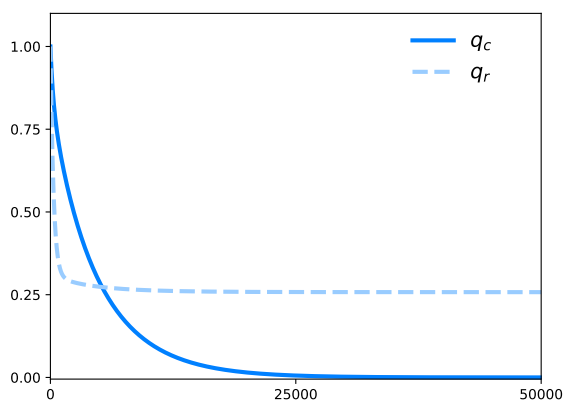
$$\frac{dq_c^{(0)}}{d\tau} = 0 \quad \text{and} \quad \frac{dq_r^{(0)}}{d\tau} = 0. \quad (3.65)$$

Die Lösungen sind zeitlich konstant, man erhält also den Anfangswert. Wenn man die Korrekturen höherer Ordnung berechnet, ergeben sich Polynome in τ und damit wieder sekulare Terme. Um zu Lösungen zu gelangen, die auch auf längeren Zeitskalen ihre Gültigkeit behalten, muss man wieder die Lösungen der verschiedenen Regime betrachten.

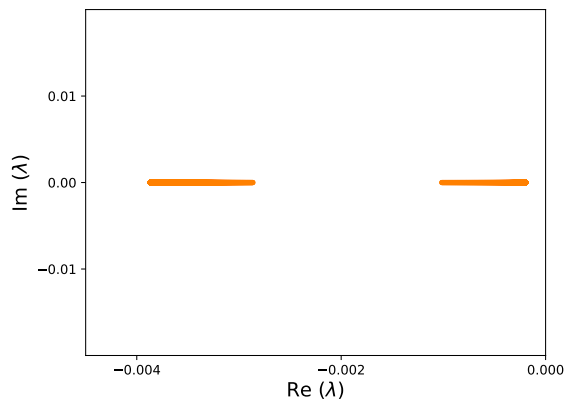
Kurze Zeitskala 10 s

Durch die Wahl von $\omega = 1$ bewegt man sich auf der Zeitskala, die typisch für Large Eddy Simulationen oder wolkenauflösende Modelle ist. Bei der Wahl von $\alpha = 1$ erhält man die Gleichungen (3.64), allerdings bedeutet $\alpha = 1$ eine Größenordnung von 10 % Übersättigung, was als sehr groß angesehen werden kann.

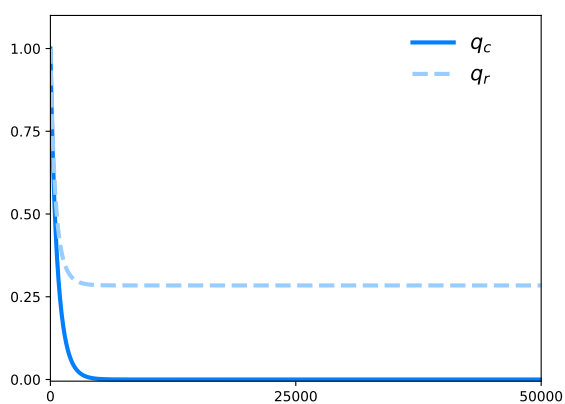
Wenn man geringere Übersättigungen ansetzt, gelangt man zu den Gleichungen (3.65), sodass also das System führender Ordnung die Anfangsbedingungen wiedergibt. Falls man eine Übersättigung von 1 % annimmt, ist die Kondensation der dominante Prozess und $q_c^{(1)}$



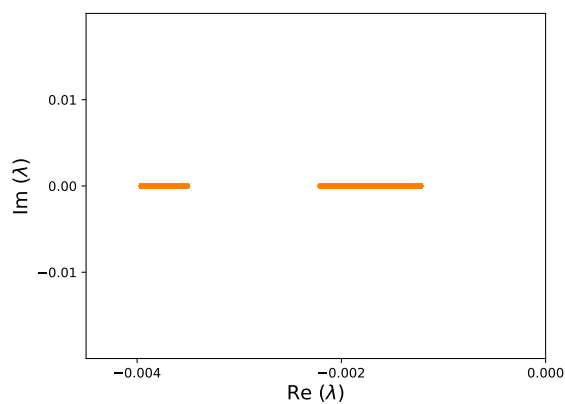
(a) zeitliche Entwicklung von q_c und q_r beim reduzierten Wacker-Schema



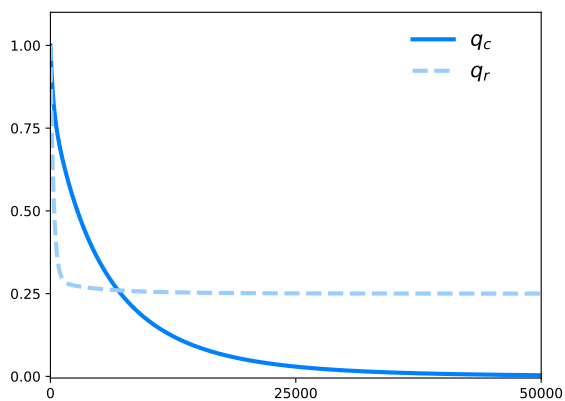
(b) Eigenwerte der Jacobimatrix beim reduzierten Wacker-Schema



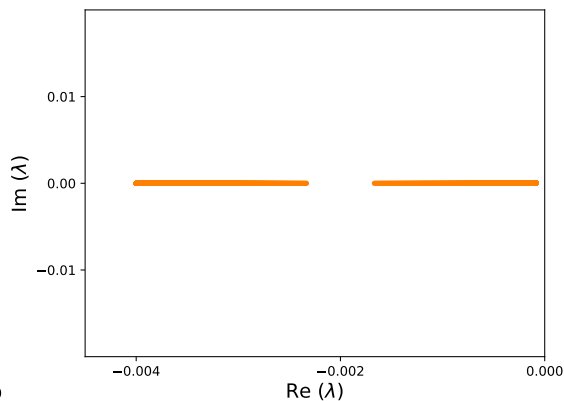
(c) zeitliche Entwicklung von q_c und q_r beim reduzierten COSMO-Schema



(d) Eigenwerte der Jacobimatrix beim reduzierten COSMO-Schema



(e) zeitliche Entwicklung von q_c und q_r beim reduzierten IFS-Schema



(f) Eigenwerte der Jacobimatrix beim reduzierten IFS-Schema

Abbildung 3.12: Numerische Lösung und Berechnung der Eigenwerte der reduzierten Wolkenmodelle (3.60), (3.61) und (3.62).

wächst unbeschränkt. Für geringere Übersättigungen findet die Dynamik in der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ statt. Auch ergeben sich wieder sekulare Terme, die die Gültigkeit der asymptotischen Approximation auf ein relativ kurzes (reskaliertes) Zeitintervall beschränken. Man kann diesem Problem begegnen, indem man asymptotische Lösungen, die auf den verschiedenen Zeitskalen gültig sind, betrachtet.

3.8.2 Zusammenfassende Bemerkungen zur Fixpunkt- und asymptotischen Analyse

In Abschnitt 3.7.3 wurde der triviale Gleichgewichtspunkt der speziellen Wolkschemata analytisch berechnet. Dabei wurde der Evaporationsprozess, der zusätzliche nicht-lineare Terme in die Gleichung gebracht hätte, aber asymptotisch vernachlässigbar ist, zunächst nicht berücksichtigt. Bei späteren Überlegungen zur Eindeutigkeit des Fixpunktes wurden diese nicht-linearen Terme einbezogen. Bereits dort wurde ausgenutzt, dass diese Terme im Vergleich zu den Parameterisierungen anderer Prozesse klein sind. Die Gleichungen (3.47) und (3.48) haben gezeigt, dass die Evaporationsterme nur Beiträge höherer Ordnung liefern und nicht in den Gleichungen führender Ordnung auftauchen.

Bei Betrachtung der Gleichungen (3.46), (3.47) und (3.48) stellt man fest, dass sich die Autokonversionsparameterisierungen in den verschiedenen Wolkschemata stark unterscheiden. Einzig beim COSMO-Schema erscheint der Autokonversionsprozess in der gleichen Ordnung wie die Akkreszenz und Sedimentation. Dies kann, insbesondere bei zunächst regenfreien Anfangsbedingungen dazu führen, dass beim COSMO-Schema schneller Regen entsteht als bei den anderen Schemata. An dieser Stelle sei noch angemerkt, dass einige Klimamodelle die gleiche Autokonversionsrate verwenden wie das IFS-Schema, die Khairoutdinov und Kogan (2000) entnommen ist. Sie wird aber bei den Klimamodellen durch Multiplikation mit einem konstanten Faktor geändert, um die richtige Strahlungsbilanz herzustellen (siehe Lohmann und Ferrachat, 2010). Vom asymptotischen Standpunkt aus betrachtet entspricht diese Multiplikation mit einem konstanten Faktor einer Änderung der Ordnung des Autokonversionsprozesses. In Khairoutdinov und Kogan (2000) wird allerdings darauf hingewiesen, dass man die Parameterisierung nur auf der LES-Skala verwenden sollte.

Abbildung 3.13 fasst die Zeitskalen der unterschiedlichen mikrophysikalischen Wolkenprozesse in Abhängigkeit von der Übersättigung zusammen. Die Parameterisierungen des Kondensationsprozesses und der Evaporation hängen von der Übersättigung ab, deshalb ändert sich auch die Zeitskala der Prozesse mit der Übersättigung, insbesondere laufen diese Prozesse mit zunehmender Übersättigung schneller ab. Abbildung 3.13 zeigt auch, dass die Kondensation grundsätzlich schneller abläuft als der Evaporationsprozess. Die anderen Prozesse sind von der Übersättigung unabhängig. Wie bereits erwähnt, hängt der Einfluss des Autokonversionsprozesses stark von dem betrachteten Wolkschema ab, darum wird ihm auch auf der Abbildung keine Zeitskala zugeordnet. Abbildung 3.13b zeigt, wie sich die Zeitskalen der Kondensation verändern, wenn man $\mu = -1$ wählt (siehe dazu Gleichung (3.43) und Abbildung 3.5).

Es wurde bereits darauf hingewiesen, dass die gewählten Zeitskalen typischen Zeitschritten von atmosphärischen Modellen entsprechen. So werden beispielsweise bei Large Eddy Simulationen Zeitschritte der Größenordnung von 1 s bis 10 s, bei Wettervorhersagemodellen Zeitschrittweiten um die 100 s und bei Klimamodellen Zeitschritte von 1000 s und größer

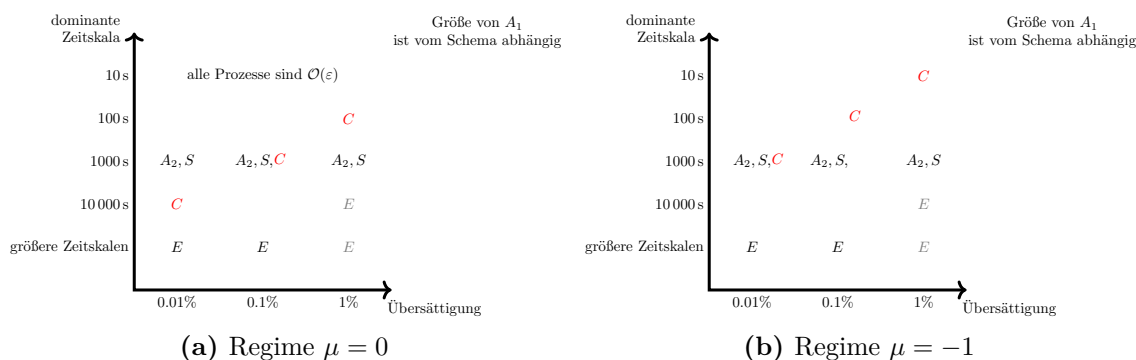


Abbildung 3.13: Zusammenfassung der Zeitskalen der Wolkenprozesse für eine gegebene Übersättigung für beide möglichen Regime $\mu = 0$ (links) und $\mu = -1$ (rechts) des Kondensationsprozesses. Kondensation und Evaporation hängen von der Übersättigung ab.

angewendet. Durch die Herleitung der reduzierten Gleichungen der Wolken schemata haben wir deren inherentes Verhalten auf den entsprechenden Zeitskalen analysieren können. Dies kann einen Beitrag für die Interpretation der Wechselwirkung der Wolken schemata mit den anderen Parameterisierungen des numerischen Modells liefern. Wenn zum Beispiel ein numerisches Modell einen Zeitschritt von 10 s verwendet, weiß man aus Abschnitt 3.8.1, dass das Wolken schema im Wesentlichen den Anfangswert wiedergibt. Somit erhalten die an das Wolken schema gekoppelten Parameterisierungen des numerischen Modells den fast unveränderten Anfangswert des Wolken schemas, unter der Voraussetzung, dass das Wolken schema nicht selbst an ein schnelleres Schema gekoppelt ist. Ein solches Beispiel wird in Kapitel 7 behandelt. Dort wird an ein Eiswolken schema ein sehr schnell oszillierender Forcing-Term gekoppelt. Wenn im Gegensatz dazu das numerische Modell größere Zeitschritte verwendet und die Wolkenmodelle dynamisches Verhalten auf der Zeitskala der Zeitschrittweite zeigen, wird eine genaue Approximation der Wolken schemata benötigt. Die untersuchten Modelle zeigen auf einer Zeitskala von 1000 s dynamisches Verhalten. Man kann auch diskutieren, ob bei sehr großen Schrittweiten des atmosphärischen Modells eine Berechnung des Fixpunktes des Wolken schemas sinnvoll ist. Diese Sichtweise könnte auch bei der Implementierung von atmosphärischen Modellen nützlich sein, da man das Wissen über das Verhalten der Wolken schemata auf bestimmten Zeitskalen berücksichtigen kann.

3.9 Ausblick und thematisch verwandte Literatur

Im Wesentlichen wurde in diesem Abschnitt eine Idee vorgestellt, wie man verschiedene Wolken schemata vergleichen kann. Dazu wurde zum einen eine Fixpunktanalyse durchgeführt, zum anderen wurden mit asymptotischen Techniken reduzierte Gleichungen hergeleitet, die möglicherweise selbst als Parameterisierungen verwendet werden können. Außerdem wurden die Zeitskalen der unterschiedlichen mikrophysikalischen Wolkenprozesse bestimmt. Auch andere Wolken schemata eignen sich für dieser Untersuchungen. In Anhang A.2 findet

man einige Anmerkungen, die Aufschluss darüber geben, wie die Wolkenprozesse in einem weiteren Wolkenchema parameterisiert sind.

Eine andere Möglichkeit, Wolken schemata zu vergleichen, ist es, in einem atmosphärischem Modell Simulationen unter den gleichen Bedingungen durchzuführen, bei denen lediglich die Mikrophysik schemata ausgetauscht werden, um die Modellausgaben zu vergleichen. So wurde in Joos und Forbes, 2016 die Wichtigkeit einer möglichst genauen Repräsentation der Mikrophysik gezeigt. Hier wurden Modellausgaben von Simulationen des IFS-Modells mit verschiedenen Mikrophysik schemata verglichen. Dieser Idee nahestehend ist das "piggybacking", das in Grabowski, 2014 erläutert wird. Man arbeitet mit zwei Wolken schemata. Das erste Wolken schema wird, wie es üblich ist, an die Dynamik gekoppelt. Die Besonderheit beim "piggybacking" liegt darin, dass das zweite Wolken schema bei der ersten Simulation ebenfalls verwendet wird, und zwar für diagnostische Berechnungen. Anschließend erfolgt eine zweite Simulation, bei der die Wolken schemata ihre Rollen tauschen. Durch die zusätzlichen Berechnungen möchte man einen besseren Einblick bekommen, welchen Einfluss die Wolkenmikrophysik auf die Simulationen und insbesondere auf bestimmte Modellausgaben hat.

In Lukáčová-Medvid'ová u. a. (2017) wurde ein numerisches Verfahren für ein System vorgestellt, das aus einem Wolkenmodell und den Navier-Stokes-Gleichungen besteht. Damit können Studien durchgeführt werden, bei denen die Parameter des Wolkenmodells variiert werden.

In den drei spezifischen Wolken schemata sind die Trajektorien gegen stabile Gleichgewichtspunkte konvergiert. Abbildung 3.14 zeigt, dass man bei entsprechender Parameterwahl bei dem generischen Wolken schema (3.14) neben stabilen Fixpunkten auch die Konvergenz gegen Grenzzyklen erhalten kann. Durch Änderung eines Parameters wird ein stabiler Fixpunkt instabil und ein Limitcycle, gegen den benachbarte Trajektorien konvergieren können, entsteht. Dies wird in Abbildung 3.14 verdeutlicht. Dort betrachtet man das System

$$\dot{q}_c = c^* S q_c - a_1^* q_c - a_2^* q_c q_r^2 \quad (3.66a)$$

$$\dot{q}_r = a_1^* q_c + a_2^* q_c q_r^2 - d^* q_r + B. \quad (3.66b)$$

Die nicht-trivialen Gleichgewichte sind durch

$$q_{r,e} = \left(\frac{c^* S - a_1^*}{a_2^*} \right)^{\frac{1}{2}} \quad q_{c,e} = \frac{d^* q_{r,e} - B}{c^*} \quad (3.67)$$

gegeben. Mithilfe der Jacobi-Matrix kann man das Stabilitätsverhalten der Gleichgewichte untersuchen. Auf Abbildung 3.14 erkennt man, dass das Gleichgewicht für bestimmte Parameterbereiche von a_1 und B asymptotisch stabil, für Andere instabil ist. Im instabilen Bereich konnte die Konvergenz einer Trajektorie gegen einen Grenzzyklus beobachtet werden. Vor diesem Hintergrund liegt es nahe, das System (3.14) in einer zukünftigen Arbeit auf Hopf-Bifurkationen zu untersuchen. Wenn ein Wolken schema einen Grenzzyklus besitzt, gegen den benachbarte Trajektorien konvergieren, ändern sich die Massenkonzentrationen von Wolkenröpfchen und Regenwasser periodisch. Bereits in Wacker, 1992 wurde Grenzzyklusverhalten bei Wolken schemata entdeckt.

Es ist nicht überraschend, wenn sich das Stabilitätsverhalten eines Wolken schemas durch Ankoppeln anderer Gleichungen ändert. Im nächsten Abschnitt zeigen wir, dass

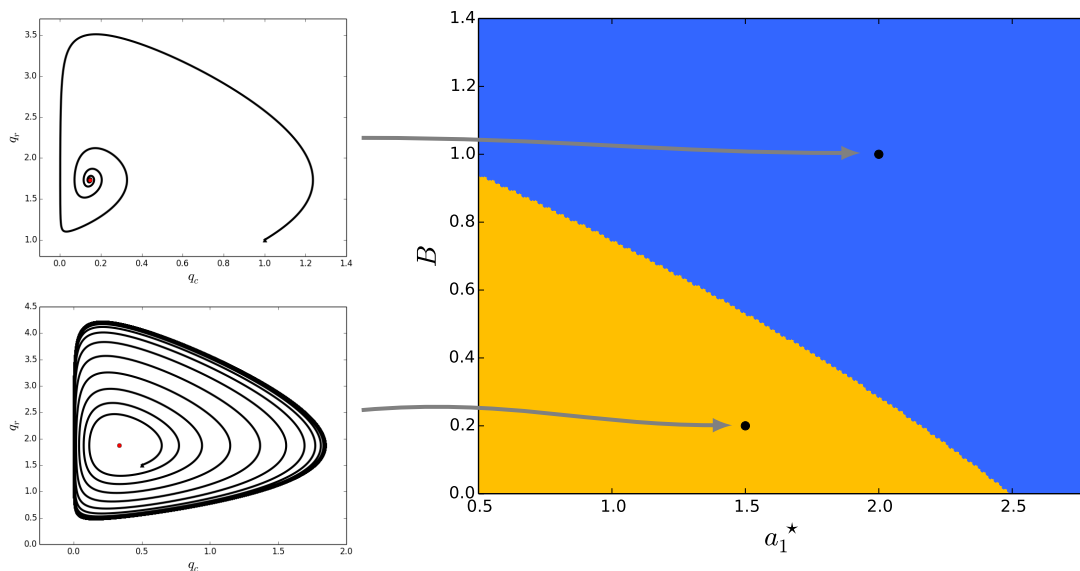


Abbildung 3.14: Durch Änderung der Parameter a_1^* oder B kann aus einem stabilen Fixpunkt (blauer Bereich rechts im Bild) ein instabiler Fixpunkt (gelber Bereich) werden. Es wurden die folgenden Parameter fest gewählt $c^*S = 5$, $a_2^* = 1$, $d^* = 1$.

dazu bereits Laplace-Terme genügen. Asymptotisch stabile Gleichgewichte eines Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen können durch Hinzufügen von Diffusionstermen destabilisiert werden. Durch die Diffusionsterme treten Ortsableitungen in den Gleichungen auf, man erhält also eine partielle Differentialgleichung. Die Destabilisierung kann dann zur Entstehung von räumlichen Mustern führen. Aus meteorologischer Sicht wäre natürlich das Verhalten bei Ankoppelung von Gleichungen, die die Atmosphäre beschreiben, von Interesse.

Kapitel 4

Räumliche Strukturbildung in warmen Wolken

Als nächstes werden an das Differentialgleichungssystem (3.14), das die zeitliche Entwicklung eines Luftpakets in warmen Wolken beschreibt, Diffusionsterme, im Folgenden auch Laplace-Terme genannt, angekoppelt. Dadurch erhält man das folgende Differentialgleichungssystem

$$\dot{q}_c = cq_c - a_1 q_c^\gamma - a_2 q_c^{\beta_c} q_r^{\beta_r} + D_1 \nabla^2 q_c \quad (4.1a)$$

$$\dot{q}_r = a_1 q_c^\gamma + a_2 q_c^{\beta_c} q_r^{\beta_r} - dq_r^\zeta + B + D_2 \nabla^2 q_r. \quad (4.1b)$$

Physikalisch beschreiben die Laplace-Terme im System (4.1) Diffusion und werden mit Diffusionskonstanten D_1 und D_2 multipliziert. Diese Faktoren steuern die Stärke der Diffusion. In System (4.1) wird nicht molekulare Diffusion modelliert, sondern die Laplace-Terme beschreiben einen Durchmischungsprozess der Luft, wie zum Beispiel eine turbulente Durchmischung oder eine eher organisierte Durchmischung in Form von Eddies, die hier grob genähert werden.

Mit diesem System liegen zwei gekoppelte partielle Differentialgleichungen oder genauer ein Reaktions-Diffusions-System vor. Im Folgenden sprechen wir auch von einem Turing-System. In Anhang B.1 wurden einige Bemerkungen zu Reaktions-Diffusions-Systemen zusammengetragen. Die Parameterisierungen der mikrophysikalischen Prozesse sind der Reaktionsterm. Sie bedingen auch die Kopplung der beiden Gleichungen. Die Analyse von Turing-Systemen ist Teil der Theorie über Musterbildung (siehe dazu Cross und Greenside, 2009 oder Hoyle, 2007). Bei Erfüllung bestimmter Bedingungen kann man bei Turing-Systemen die Bildung von Strukturen beobachten. Sowohl auf die zugrundeliegende Theorie der Strukturbildung bei Turing-Systemen als auch auf deren konkrete Anwendung auf das Gleichungssystem (4.1) wird in diesem Kapitel eingegangen.

Da an ein Mikrophysikmodell Terme angekoppelt werden, die die räumliche Durchmischung von Luft beschreiben sollen, kann dieses Kapitel als ein Versuch angesehen werden, Strukturen innerhalb von Wolken zu beschreiben. Im Verlauf des Kapitels werden die Ergebnisse, die auf der Analyse von Turing-Systemen basieren mit Modellsimulationen verglichen.

4.1 Lineare Stabilitätsanalyse bei Turing-Systemen

Die Idee zur linearen Stabilitätsanalyse wurde bereits in Turing, 1952 vorgestellt. Die Ausführungen in diesem Abschnitt findet man in Cross und Greenside, 2009. Es soll das

Prinzip der linearen Stabilitätsanalyse erklärt werden, das eine Aussage darüber trifft, ob es bei einem Turing-System möglicherweise zu Musterbildung kommt. Dieses Prinzip führt zu mehreren wichtigen Einsichten:

- Diffusion kann einen destabilisierenden Einfluss auf das System haben.
- Die Instabilität durch Diffusion kann für das Wachstum von Strukturen bestimmter Wellenlängen verantwortlich sein.
- Zur Entstehung von Strukturen benötigt man zwei verschiedene Diffusionskoeffizienten.

Besonders der erste Punkt ist kontraintuitiv, da die bloße Diffusion räumliche Variationen glättet und man deshalb erwarten könnte, dass Diffusionsterme eher das Entstehen von Strukturen unterdrücken (siehe Griffiths, 1999). Aufgrund der unterschiedlichen Diffusionskonstanten läuft die Diffusion der verschiedenen Variablen unterschiedlich schnell ab. Dies in Verbindung mit den nicht-linearen Reaktionstermen kann eine Instabilität triggern. An dieser Stelle sei noch einmal erwähnt, dass man bei der linearen Stabilitätsanalyse von periodischen Randbedingungen ausgeht.

Es wird jetzt das Vorgehen bei der linearen Stabilitätsanalyse beschrieben. Ein allgemeines Turing-Modell ist gegeben durch die Gleichungen

$$\dot{u}_1 = f_1(u_1, u_2) + D_1 \nabla^2 u_1 \quad (4.2a)$$

$$\dot{u}_2 = f_2(u_1, u_2) + D_2 \nabla^2 u_2. \quad (4.2b)$$

Damit liegt ein System von Reaktions-Diffusions-Gleichungen vor. Die Namensgebung erscheint natürlich, wenn man die Gleichungen im Hinblick auf ihre Anwendung bei chemischen Reaktionen interpretiert. Zwei chemische Stoffe reagieren miteinander, zusätzlich diffundieren sie im Reaktionsbehälter. Eine analoge Interpretation ist auch auf das Wolkenchema (4.1) anwendbar. Hier wechselwirken die Hydrometeore miteinander.

Im Folgenden wird eine lineare Stabilitätsanalyse des Reaktions-Diffusions-Systems (4.2) durchgeführt. Ziel ist es, mathematische Bedingungen für das mögliche Auftreten von Strukturbildung herzuleiten. Dabei wird zuerst System(4.2) ohne die Diffusionsterme betrachtet

$$\dot{u}_1 = f_1(u_1, u_2) \quad (4.3a)$$

$$\dot{u}_2 = f_2(u_1, u_2). \quad (4.3b)$$

Man erhält ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen, das Gleichgewichtslösungen besitzen kann. Falls Gleichgewichte existieren, erfüllen diese das Gleichungssystem

$$0 = f_1(u_1, u_2) \quad (4.4a)$$

$$0 = f_2(u_1, u_2). \quad (4.4b)$$

Dies wurde in Abschnitt 2.1 erläutert. Man erhält also zwei nicht-lineare Gleichungen mit zwei Unbekannten. Im Allgemeinen steht kein systematischer Weg zur Verfügung, dieses Gleichungssystem zu lösen. Auch muss die Lösbarkeit nicht immer gegeben sein. In Kapitel 3 wurden die Gleichgewichtspunkte spezieller Wolkenchemata ausführlich diskutiert.

Wir sind im Folgenden an asymptotisch stabilen Gleichgewichtslösungen des Systems (4.3) interessiert. Die Gleichgewichte sind (asymptotisch) stabil, wenn die Realteile der Eigenwerte der Jacobimatrix am Gleichgewichtspunkt $(u_{1,e}, u_{2,e})$ echt kleiner als Null sind (siehe dazu Abschnitt 2.1). Angenommen wir haben eine asymptotische stabile Gleichgewichtslage $(u_{1,e}, u_{2,e})$ gefunden und die Jacobi-Matrix Df sei an diesem Gleichgewicht durch

$$Df|_{(u_{1,e}, u_{2,e})} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

gegeben. Es gilt also

$$a_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial u_j} \quad (4.6)$$

Die Bedingung der asymptotischen Stabilität für das System (4.3) ist dann äquivalent zu

$$\operatorname{tr}(Df) := a_{11} + a_{22} < 0 \quad (4.7a)$$

$$\det(Df) := a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} > 0. \quad (4.7b)$$

Dabei bezeichnen $\operatorname{tr}(Df)$ die Spur der Matrix Df und $\det(Df)$ die Determinante der Matrix Df .

Das Bemerkenswerte ist nun, dass bei Ankoppelung von Diffusionstermen und Störung dieses stabilen Gleichgewichtszustandes Strukturbildung auftreten kann. Dies soll jetzt genauer erklärt werden. Wir betrachten die linearisierte Variante von (4.2)

$$\dot{u}_1 = a_{11}u_{p1} + a_{12}u_{p2} + D_1 \nabla^2 u_{p1} \quad (4.8a)$$

$$\dot{u}_2 = a_{21}u_{p1} + a_{22}u_{p2} + D_2 \nabla^2 u_{p2}. \quad (4.8b)$$

Dabei wurde der Reaktionsterm $(f_1(u_1, u_2), f_2(u_1, u_2))$ durch die Linearisierung am Gleichgewichtspunkt ersetzt. Der Laplace-Operator ist linear. Somit erhalten wir eine lineare partielle Differentialgleichung, für deren Lösung analytische Methoden angewendet werden können. Dafür wählen wir den folgenden Separationsansatz

$$u_p = \begin{pmatrix} u_{1q} \\ u_{2q} \end{pmatrix} \exp(\sigma_q t) \exp(iqx). \quad (4.9)$$

Die Berechnungen werden hier für den Fall einer Raumdimension durchgeführt. Man kann aber analog den mehrdimensionalen Fall behandeln. Dazu verwendet man im Separationsansatz $\exp(i(q_1 x_1 + \dots + q_n x_n))$ anstatt $\exp(iqx)$. Da wir außerdem periodische Randbedingungen annehmen, gilt $q = \frac{2\pi}{L}m$, wobei L die Länge des betrachteten Gebiets und $m \in \mathbb{Z}$ ist. Der Ansatz (4.9) verwendet eine Fourier-Zerlegung im Ort. Da wir periodische Randbedingungen annehmen, ist dies ein naheliegender Ansatz. Wir werden sehen, dass er zu mindestens einer Lösung des Problems führt. Da in (4.9) ein exponentieller Ansatz in der Zeit gewählt wurde, erhält man das Eigenwertproblem

$$A_q u_q = \sigma_q u_q \quad (4.10)$$

mit der Matrix

$$A_q = \begin{pmatrix} a_{11} - D_1 q^2 & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - D_2 q^2 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Damit bilden die Wachstumsrate σ_q und der Vektor u_q ein Eigenwert-Eigenvektor-Paar für die Matrix A_q . Dies gilt für jedes q . Wir finden zwei linear unabhängige Lösungen.¹ Eine Linearkombination dieser Lösungen ergibt

$$\phi_q = (c_{1q} u_{1q} \exp(\sigma_{1q} t) + c_{2q} u_{2q} \exp(\sigma_{2q} t)) \exp(iq x) \quad (4.12)$$

Die Konstanten c_{1q} und c_{2q} hängen von der Anfangsbedingung ab. Die Lösung wird zeitlich exponentiell gedämpft, wenn die Bedingungen $\operatorname{Re}(\sigma_{1q}) < 0$ und $\operatorname{Re}(\sigma_{2q}) < 0$ gelten. Eine allgemeine Lösung erhält man aus den möglichen Superpositionen der ϕ_q aus (4.12) über alle q .

Das charakteristische Polynom des Eigenwertproblems (4.10) ist gegeben durch

$$0 = \det(A_q - \sigma_q I) = \sigma_q^2 - (\operatorname{tr}(A_q))\sigma_q + \det(A_q) \quad (4.13)$$

Die Eigenwerte sind damit gegeben durch

$$\sigma_q = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(A_q) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\operatorname{tr}(A_q))^2 - 4 \det(A_q)} \quad (4.14)$$

Damit asymptotische Stabilität vorliegt, müssen beide Eigenwerte einen negativen Realteil besitzen. Das bedeutet insbesondere, dass für diesen Fall die Spur negativ und die Determinante positiv ist. Man hat dann also

$$\operatorname{tr}(A_q) = a_{11} + a_{22} - (D_1 + D_2)q^2 < 0 \quad (4.15a)$$

$$(a_{11} - D_1 q^2)(a_{22} - D_2 q^2) - a_{12} a_{21} > 0 \quad (4.15b)$$

Wenn also die beiden Bedingungen (4.15) erfüllt sind, ist der räumlich konstante Gleichgewichtszustand von (4.3) stabil gegenüber räumlichen Störungen. Im Umkehrschluss kann eine zu q gehörige Mode instabil werden, wenn eine der Bedingungen nicht erfüllt ist.

Zur Interpretation: Angenommen wir haben ein System, bei dem die Diffusion ausgeschaltet werden kann. Dann gibt das System gewöhnlicher Differentialgleichungen (4.3) das Verhalten des Systems wieder. Wir haben dann folgende Bedingung für einen stabilen Gleichgewichtszustand

$$a_{11} + a_{22} < 0 \quad (4.16a)$$

$$a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21} > 0. \quad (4.16b)$$

¹ Wir betrachten den Fall, dass A die Jordan-Normalform $J = \begin{pmatrix} \sigma_q & 1 \\ 0 & \sigma_q \end{pmatrix}$ besitzt. Man findet mit Ansatz (4.9) nur eine Lösung. Wir betrachten dann das allgemeinere Problem $\dot{u}_q = A_q u_q$ und machen keine Annahme an die Fourier-Koeffizienten. Es gelte $J = T^{-1} A T$. Dann hat das transformierte System die Gestalt $\dot{v}_q = J v_q$ mit $v_q = T^{-1} u_q$. Außerdem kann man die Lösungen durch $v_q = \alpha_q \exp(\sigma_q t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta_q \exp(\sigma_q t) \begin{pmatrix} t \\ 1 \end{pmatrix}$ und $u_q = T v_q$ angeben.

In diesem Fall sind die Realteile der Eigenwerte negativ. Wir machen jetzt die Annahme, dass die Diffusion im System eingeschaltet werden kann. Damit beschreiben die Gleichungen (4.2) das Verhalten. Es stellt sich nun die Frage, ob die Diffusionsterme, die intuitiv eine glättende Wirkung auf das System haben, zu Instabilität einzelner Moden, und damit zu räumlicher Musterbildung führen können. Für Bedingung (4.15a) gilt unter der Annahme, dass wir von einem stabilen Gleichgewicht des ODE-System ausgehen

$$\operatorname{tr}(A_q) = a_{11} + a_{22} - (D_1 + D_2)q^2 < a_{11} + a_{22} < 0 \quad (4.17)$$

Das heißt also, dass diese Bedingung nicht verletzt werden kann. Um aus einem stabilen Gleichgewicht durch Diffusion räumliche Muster zu gewinnen, darf demzufolge die Determinantenbedingung (4.15b) nicht gelten. Würde man diese Gleichung Null setzen, erhielte man eine Parabel in q^2 , die bei $q^2 = 0$ positiv ist und sich nach oben hin öffnet. Dies wird in Abbildung 4.1 dargestellt. Als Bedingung für lineare Instabilität erhalten wir, dass das Minimum der Parabel negativ sein muss. Dies ist auch eine Bedingung an die Diffusionskonstanten. Durch Ableiten der Parabelgleichung und anschließendes Nullsetzen, findet man das Minimum bei

$$q_m^2 = \frac{D_1 a_{22} + D_2 a_{11}}{2D_1 D_2}. \quad (4.18)$$

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die in Frage kommenden q eine diskrete Menge bilden. Wenn man den Wert aus (4.18) für q in die Determinantenbeziehung einsetzt, erhält man

$$\det(A_{q_m}) = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} - \frac{(D_1 a_{22} + D_2 a_{11})^2}{4D_1 D_2} \quad (4.19)$$

Dieser Ausdruck wird negativ, wenn die Ungleichung

$$D_1 a_{22} + D_2 a_{11} > 2\sqrt{D_1 D_2 (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})} \quad (4.20)$$

erfüllt ist. In diesem Fall können Ortsmoden destabilisiert werden und Strukturbildung kann auftreten. Zur Erfüllung der Ungleichung (4.20) benötigt man unterschiedliche Diffusionskonstanten D_1 und D_2 , da man diese andernfalls aus der Ungleichung herauskürzen könnte. Der Ausdruck (4.20) würde dann im Widerspruch zu den Bedingungen (4.16) stehen.

4.2 Lineare Stabilitätsanalyse für die Wacker-, COSMO- und IFS-Schemata

Wir betrachten hier die in Tabelle 3.2 in Spalte "Nicht Trivial" aufgeführten Gleichgewichtspunkte. Es wurde bereits in Kapitel 3 festgestellt, dass diese asymptotisch stabil sind (siehe Tabelle 3.3). Es bleibt zu prüfen, ob bei Ankoppelung von Diffusionstermen die Bildung von Strukturen zu erwarten ist. Die ist der Fall, wenn Ungleichung (4.20) erfüllt wird, was in der Folge dieses Abschnitts geprüft werden soll. Es werden die Wolkenschemata ohne Evaporation betrachtet. Diese Approximation ist vertretbar, da die Evaporation die Gleichgewichte kaum ändert.

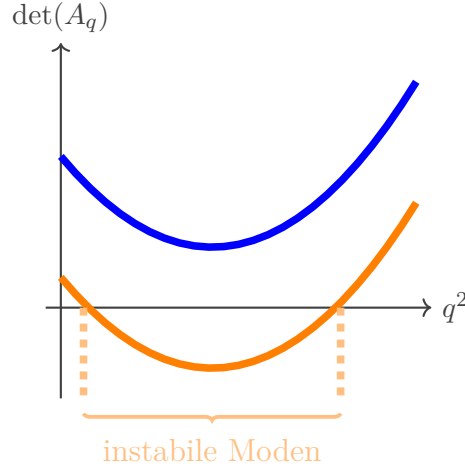


Abbildung 4.1: Stabilität von Turing-Modellen. Die blaue Parabel erfüllt Stabilitätsbedingung (4.15b). Hier wird keine Musterbildung erwartet. Bei der orangenen Parabel kann Musterbildung auftreten.

Zunächst wenden wir uns den Wacker- und COSMO-Schemata zu, für die $\gamma = 1$ und $\beta_c = 1$ gilt. Dadurch können einige analytische Resultate gezeigt werden.

Die Gleichgewichte sind durch die Beziehungen

$$q_{c,e} = \frac{d}{cS} \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\zeta}{\beta_r}} - \frac{B}{cS} \quad q_{r,e} = \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{1}{\beta_r}} \quad (4.21)$$

gegeben. Für die Jacobi-Matrix gilt

$$Df|_{(u_{1,e}, u_{2,e})} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

mit

$$a_{11} = cS - a_1 - a_2 q_{r,e}^{\beta_r} = 0, \quad (4.23a)$$

$$\begin{aligned} a_{12} &= -a_2 \beta_r q_{c,e} q_{r,e}^{\beta_r - 1} \\ &= -\frac{a_2 \beta_r}{cS} \left(d \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\zeta}{\beta_r}} - B \right) \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\beta_r - 1}{\beta_r}}, \end{aligned} \quad (4.23b)$$

$$a_{21} = a_1 + a_2 q_{r,e}^{\beta_r} = cS \quad (4.23c)$$

$$\begin{aligned} a_{22} &= a_2 \beta_r q_{c,e} q_{r,e}^{\beta_r - 1} - d \zeta q_{r,e}^{\zeta - 1} \\ &= a_2 \beta_r \left(\frac{d}{cS} \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\zeta}{\beta_r}} - \frac{B}{cS} \right) \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\beta_r - 1}{\beta_r}} - d \zeta \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\zeta - 1}{\beta_r}} \end{aligned} \quad (4.23d)$$

Damit reduziert sich Bedingung (4.20) zu

$$D_1 a_{22} > 2 \sqrt{D_1 D_2 (-1) a_{12} a_{21}} \quad (4.24)$$

Es genügt, dass $a_{22} > 0$ ist, denn dann kann man D_1 und D_2 so anpassen, dass Ungleichung (4.24) erfüllt ist. Wenn andererseits $a_{22} < 0$ ist, kann diese Bedingung nicht erfüllt werden. Deshalb schauen wir uns a_{22} näher an:

$$\begin{aligned} a_{22} &= \frac{a_2 \beta_r d}{cS} \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\beta_r + \zeta - 1}{\beta_r}} - d\zeta \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\zeta - 1}{\beta_r}} - \frac{a_2 \beta_r}{cS} B \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\beta_r - 1}{\beta_r}} \\ &= \left(\frac{\beta_r d}{cS} (cS - a_1) \right) - d\zeta \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\zeta - 1}{\beta_r}} - \underbrace{\frac{a_2 \beta_r}{cS} B \left(\frac{cS - a_1}{a_2} \right)^{\frac{\beta_r - 1}{\beta_r}}}_{<0} \end{aligned} \quad (4.25a)$$

Zum Schluss betrachten wir noch den Term

$$\frac{\beta_r d}{cS} (cS - a_1) - d\zeta = d \left(\beta_r - \frac{a_1 \beta_r}{cS} - \zeta \right). \quad (4.26)$$

Damit gilt $a_{22} < 0$, falls $\beta_r \leq \zeta$. Die ist für die Wacker- und COSMO-Schemata der Fall. Es sei noch angemerkt, dass im Fall $\gamma = 1$ und $\beta_c = 1$ der Eintrag $a_{22} < 0$ gelten muss, damit ein asymptotisch stabiles Gleichgewicht des gewöhnlichen Differentialgleichungssystems vorliegt, da in diesem Fall $a_{11} = 0$ gilt, siehe (4.23a).

Folgerung 1. *Seien $\beta_c = 1 = \gamma$ und $cS > a_1$. Dann ist durch Gleichung (4.21) ein Gleichgewicht $(q_{c,e}, q_{r,e})$ gegeben. Falls $\beta_r \leq \zeta$ gilt, kann Bedingung (4.20) nicht erfüllt sein.*

Es wurde angenommen, dass alle Exponenten und Vorfaktoren positiv sind. Für die Parameterwahl der Wacker- und COSMO-Schemata bekommt man also kein stabiles Gleichgewicht, das man in der in Abschnitt 4.1 beschriebenen Weise destabilisieren kann.

Wir betrachten noch der IFS-Schema. In Tabelle 3.2 wurde ein asymptotisch stabiler Fixpunkt angegeben. Man kann für diesen die Jacobi-Matrix berechnen und stellt fest, dass die Einträge der Hauptdiagonalen negativ sind. Die lineare Stabilitätsanalyse lässt auch hier keine Bildung von Mustern erwarten, da dies der Bedingung (4.20) widerspricht.

4.3 Ein Beispiel für Strukturbildung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde gezeigt, dass die in lineare Stabilitätsanalyse keine Destabilisierung von Moden durch Laplace-Terme bei der in Kapitel 3 berechneten stabilen Gleichgewichte erwarten lässt. Es soll gezeigt werden, dass durchaus Wolkenmodelle existieren, bei denen Musterbildung beobachtet werden kann. Wir betrachten den folgenden Spezialfall des generischen Wolkenmodells (3.14):

$$\dot{q}_c = cq_c - a_1 q_c - a_2 q_c^2 q_r^2 \quad (4.27a)$$

$$\dot{q}_r = a_1 q_c + a_2 q_c^2 q_r^2 - dq_r. \quad (4.27b)$$

Zur Vereinfachung der Notation schreiben wir nur c und nehmen an, dass die Übersättigung bereits in diesem Vorfaktor enthalten ist. Außerdem wählen wir ganzzahlige

Exponenten. Die gesamte lineare Stabilitätsanalyse des Systems kommt dann mit analytische Berechnungen aus. Das zugehörige Reaktions-Diffusions-System ist also gegeben durch

$$\dot{q}_c = cq_c - a_1q_c - a_2q_c^2q_r^2 + D_1\nabla^2q_c \quad (4.28a)$$

$$\dot{q}_r = a_1q_c + a_2q_c^2q_r^2 - dq_r + D_2\nabla^2q_r. \quad (4.28b)$$

Bei diesen Systemen wurden die Exponenten durch die Werte $\beta_c = 2, \beta_r = 2, \gamma = 1, \zeta = 1$ festgelegt. Die Wahl von ganzzahligen Exponenten wird im Folgenden analytische Berechnungen erleichtern. Außerdem werden die Evaporation und der von oben einfallende Regen vernachlässigt. Für die Wahl der Vorfaktoren bedeutet das $e_1 = 0, e_2 = 0$ und $B = 0$. Durch geeignete Wahl an a_1, a_2, c und d kann man erreichen, dass das System die Bedingungen (4.7) und (4.20) erfüllt und die Bildung von Strukturen beobachten.

Wir beginnen mit den Rechnungen und gehen dabei wie in Abschnitt 4.1 beschrieben vor. Zunächst wird ein nicht-triviales Gleichgewicht von (4.27) durch Nullsetzen der rechten Seite bestimmt. Man muss also das Gleichungssystem

$$0 = cq_c - a_1q_c - a_2q_c^2q_r^2 \quad (4.29a)$$

$$0 = a_1q_c + a_2q_c^2q_r^2 - dq_r \quad (4.29b)$$

lösen. Da wir von einem nicht-trivialen Gleichgewicht ausgehen, können wir $q_c \neq 0$ annehmen. Aus Gleichung (4.29a) gelangt man dann zu der Beziehung

$$q_c = \frac{c - a_1}{a_2q_r^2}. \quad (4.30)$$

Wäre $q_r = 0$, würde nach (4.29b) $q_c = 0$ gelten. Dies stände im Widerspruch dazu, dass ein nicht-triviales Gleichgewicht vorliegt. Durch Addition der Gleichungen (4.29a) und (4.29b) und anschließendes Einsetzen der Beziehung (4.30) kann man q_r berechnen

$$0 = cq_c - dq_r = c \frac{c - a_1}{a_2q_r^2} - dq_r \quad (4.31)$$

Beziehung (4.31) kann nach q_r umgestellt werden. Nutzt man die Gleichungen (4.30) und (4.31), kann man den folgenden Gleichgewichtspunkt bestimmen

$$q_{c,e} = \left(\frac{c - a_1}{a_2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{d}{c} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (4.32a)$$

$$q_{r,e} = \left(\frac{c}{a_2d} \right)^{\frac{1}{3}} (c - a_1)^{\frac{1}{3}}. \quad (4.32b)$$

Um zu positiven und damit physikalisch sinnvollen Massendichten zu gelangen, muss insbesondere

$$c > a_1 \quad (4.33)$$

gelten. Das ist die erste Einschränkung an die Vorfaktoren. Damit wird gefordert, dass die Kondensation stärker ist als die Autokonversion. Die Bedingungen (4.7) und (4.20) führen zu Weiteren, die im Anschluss berechnet werden. Diese Einschränkungen werden in Abbildung 4.2 veranschaulicht.

Die Stabilitätseigenschaften des Systems werden durch die Jacobi-Matrix bestimmt. Im hier vorliegenden Fall hat sie die Gestalt

$$J = \begin{pmatrix} c - a_1 - 2a_2q_cq_r^2 & -2a_2q_c^2q_r \\ a_1 + 2a_2q_cq_r^2 & 2a_2q_c^2q_r - d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}(q_c, q_r) & a_{12}(q_c, q_r) \\ a_{21}(q_c, q_r) & a_{22}(q_c, q_r) \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

Jetzt sollen die einzelnen Komponenten der Jacobi-Matrix an dem berechneten Gleichgewichtspunkt (4.32) näher betrachtet werden. Mit Bedingung (4.33) erhalten wir

$$a_{11}(q_{c,e}, q_{r,e}) = a_1 - c < 0 \quad (4.35a)$$

$$a_{12}(q_{c,e}, q_{r,e}) = -2\frac{d}{c}(c - a_1) < 0 \quad (4.35b)$$

$$a_{21}(q_{c,e}, q_{r,e}) = 2c - a_1 > 0, \quad (4.35c)$$

$$a_{22}(q_{c,e}, q_{r,e}) = d\left(1 - \frac{2a_1}{c}\right). \quad (4.35d)$$

Dabei wurde verwendet, dass alle Vorfaktoren positiv sind, sowie Bedingung (4.33). Es wird sich herausstellen, dass es für unsere Zwecke günstig ist

$$c > 2a_1 \quad (4.36)$$

zu wählen. Dadurch gilt $a_{22}(q_{c,e}, q_{r,e}) > 0$. Bedingung (4.36) impliziert Bedingung (4.33). Da wir nach einem stabilen Gleichgewicht suchen, das durch Diffusionsterme destabilisiert werden soll, müssen wir zunächst die Spur- und Determinantenbedingungen (4.7) prüfen.

$$a_{11}(q_{c,e}, q_{r,e}) + a_{22}(q_{c,e}, q_{r,e}) = \underbrace{a_1 - c}_{<0} + d\underbrace{\left(1 - \frac{2a_1}{c}\right)}_{>0} \quad (4.37)$$

Bei den Abschätzungen kommt Bedingung (4.36) zum Tragen. Durch eine geeignete Wahl von d kann man erreichen, dass der Ausdruck (4.37) < 0 ist. Dies führt zu der Bedingung

$$d < c\frac{c - a_1}{c - 2a_1} \quad (4.38)$$

Bedingung (4.36) stellt insbesondere sicher, dass man d positiv wählen kann und damit physikalisch sinnvolle Werte annimmt. Zur Veranschaulichung der Bedingungen (4.33), (4.36) und (4.38) findet man Abbildung 4.2. Für die Determinante gilt

$$a_{11}(q_{c,e}, q_{r,e})a_{22}(q_{c,e}, q_{r,e}) - a_{12}(q_{c,e}, q_{r,e})a_{21}(q_{c,e}, q_{r,e}) = 3d(c - a_1) > 0 \quad (4.39)$$

Wenn man also d möglichst klein wählt, und damit der Regen sehr langsam aus dem Luftpaket fällt, sind die Bedingungen (4.7) erfüllt. Um ein stabiles Gleichgewicht zu destabilisieren, muss zusätzlich Bedingung (4.20) gelten. Hier hilft die Beobachtung weiter, dass $a_{11}(q_{c,e}, q_{r,e})$ und $a_{22}(q_{c,e}, q_{r,e})$ entgegengesetzte Vorzeichen haben. Dies bedeutet, dass man die Diffusionskonstanten D_1 und D_2 so anpassen kann, dass Bedingung (4.20) erfüllt ist. Man braucht dazu nur D_1 groß genug und D_2 klein genug zu wählen. Die Annahme, dass die Diffusionskonstante D_1 groß und die Diffusionskonstante D_2 klein ist, passt auch

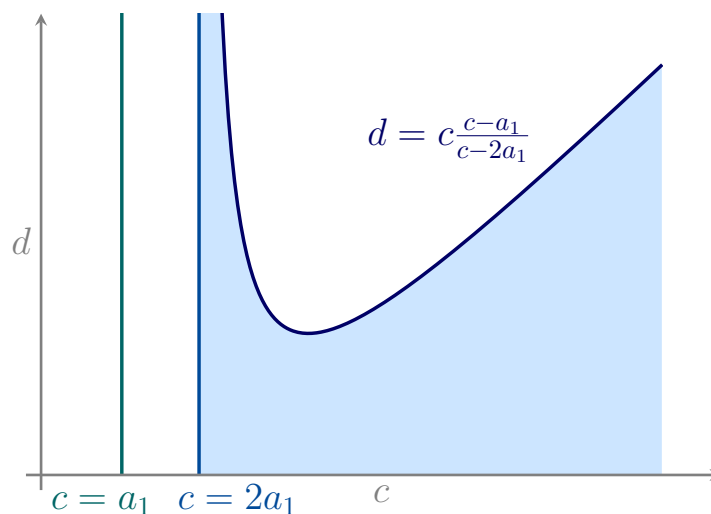


Abbildung 4.2: Zulässige Parameter für Musterbildung. Der Parameter a_1 wird als gegeben angenommen. Der hellblaue Bereich ist der zulässige Bereich der Parameter c und d , wenn Musterbildung nach den Ergebnissen der linearen Stabilitätsanalyse auftreten soll. Dabei wurden die Beziehungen (4.33), (4.36) und (4.38) berücksichtigt.

zur physikalischen Intuition, da D_1 die Durchmischung der leichteren Wolkenröpfchen und D_2 die Durchmischung der schweren Regentropfen beschreiben soll.

Die Beschreibung der numerischen Behandlung des Systems (4.28) findet man in Abschnitt 4.4. Die Ausgabe einer Simulation für eine Raumdimension findet man auf den Abbildungen 4.3, 4.4 und 4.5.² Diese deuten an, dass das System in ein zeitliches Gleichgewicht läuft, das räumlich inhomogen ist. Das Ergebnis einer Simulation in zwei Raumdimensionen zeigen die Abbildungen 4.6 und 4.7. Auch hier erkennt man Musterbildung.

Es stellt sich die Frage, ob die Simulationen des Systems (4.28) für die Wolkenvariablen ähnliche Resultate liefern wie komplexere Modelle, die man zur Beschreibung der Dynamik in warmen Wolken verwendet. Die Abbildungen 4.8 und 4.9 sind aus Chertock u. a., 2019 entnommen. Hier erkennt man die dreidimensionale räumliche Verteilung von q_c und q_r für ein Wolkenschema für warme Wolken, das an die Navier-Stokes-Gleichungen gekoppelt wurde. In der horizontalen Ebene scheinen sich die Massenkonzentrationen q_c und q_r zu Clustern zusammenzuziehen. Damit entstehen Strukturen, die denen in den Abbildungen 4.6 und 4.7 ähnlich sind. Auch in einer Raumdimension erkennt man, dass q_c und q_r an manchen Stellen große Werte annehmen, wohingegen die Massenkonzentrationen im restlichen Gebiet deutlich geringer sind. Dieses Verhalten ist in den Abbildungen 4.3, 4.4 und 4.5 illustriert.

Ein genauerer Blick zeigt, dass sowohl bei den Simulationen von System (4.28) als auch bei der Simulation der Navier-Stokes-Gleichungen, gekoppelt an ein Wolkenmodell, dort hohe Konzentrationen von q_c zu finden sind, wo die Konzentration von q_r gering ist

²Für größere Ortsausdehnungen sieht man beispielsweise in Abbildung 4.5 mehr Streifen.

und umgekehrt. Dies legt folgende physikalische Interpretation nahe: Dort, wo sich viel q_r befindet, wurden die Wolkentröpfchen zu Regen umgesetzt, sodass nur noch wenige von ihnen vorhanden sind. Falls neue Wolkentropfen auftauchen, werden diese durch den Regen aufgrund von Akkreszenz entfernt. An den anderen Stellen mit wenig q_r liegt das Flüssigwasser vorrangig in Form von Wolkentröpfchen vor.

4.4 Ein numerisches Verfahren zum Lösen von Reaktions-Diffusions-Gleichungen

In diesem Abschnitt soll beschrieben werden, wie man das System (4.44) numerisch approximieren kann. Dabei wird angenommen, dass zum Zeitpunkt $t = 0$ Anfangsdaten gegeben sind. Außerdem betrachten wir periodische Randbedingungen. Das beschriebene Verfahren verwendet eine Fourier-Zerlegung im Raum, die auf ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen führt. Dieses wird anschließend mit exponentiellen Integratoren gelöst.

4.4.1 Pseudospektral-Verfahren

Es wird erklärt, wie das Pseudospektral-Verfahren mit einer Fourier-Diskretisierung im Ort auf Reaktions-Diffusions-Gleichungen der Form (4.1) angewendet werden kann. In Boyd (2000) wird darauf hingewiesen, dass ein Pseudospektral-Verfahren mit einer Fourier-Zerlegung im Ort geeignet ist, um Anfangsrandwertprobleme mit periodischen Anfangsbedingungen numerisch zu lösen.

Wir gehen zunächst allgemein von einem Problem mit einem linearen und einem nicht-linearen Anteil

$$\dot{x} = L(x) + R(x) \tag{4.40}$$

aus. Da wir Gleichung (4.1) lösen wollen, gilt in unserem Fall $x = (q_c, q_r)$, sowie

$$L(q_c, q_r) = \begin{pmatrix} (c + D_1 \nabla^2) q_c \\ D_2 \nabla^2 q_r \end{pmatrix} \tag{4.41}$$

und

$$R(q_c, q_r) = \begin{pmatrix} -a_1 q_c^\gamma - a_2 q_c^{\beta_c} q_r^{\beta_r} \\ a_1 q_c^\gamma + a_2 q_c^{\beta_c} q_r^{\beta_r} - d q_r^\zeta + B \end{pmatrix}. \tag{4.42}$$

Der Term $R(q_c, q_r)$ ist also der nicht-lineare Anteil des Reaktionsterms. Daher rührt die Notation. Wir nehmen periodische Randbedingungen auf $[0, L]$ an. Die Lösung x wird in eine Fourier-Reihe entwickelt. Wir erhalten folgende Darstellung

$$y = \sum \varphi(t) \exp(ik_n x) \tag{4.43}$$

mit $k_n = \frac{2\pi n}{L}$ für $n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}$. Dabei soll N eine gerade Zahl sein. Für numerische Berechnungen wird die Reihe nach $N+1$ Termen abgebrochen. In unserem Fall ist $\varphi_n(t)$ eine Vektor mit zwei Einträgen. Die Vektoren $\varphi_n(t)$ für $n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}$ kennzeichnen die Lösung im Fourier-Raum. Die $\exp(ik_n x)$ bilden ein Orthonormalsystem. Das soll im anschließenden Schritt ausgenutzt werden. Zuerst wird Gleichung (4.43) in die Differentialgleichung

(4.40) eingesetzt. An dieser Stelle kann der Laplace-Operator ausgewertet werden. Die resultierende Gleichung wird mit den Basisfunktionen $\exp(ik_n x)$ multipliziert, und zwar für alle $n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}$. Danach integriert man diese Gleichungen auf dem Gebiet $[0, L]$. Es ergibt sich ein Gleichungssystem, das folgende Gestalt besitzt

$$\dot{\varphi}_n(t) = l_n \varphi_n(t) + R_n(t), \quad n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} \quad (4.44)$$

Dabei bezeichnet l_n eine Matrix.

$$l_n = \begin{pmatrix} c - D_1 k_n^2 & 0 \\ 0 & -D_2 k_n^2 \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

In Gleichung (4.44) tritt der Term R_n in Erscheinung, der hier erläutert werden soll. Man approximiert die Nicht-Linearität $R(x)$ durch eine Fourier-Reihe

$$R(q_c(t), q_r(t)) \approx \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} R_n(t) \exp(ik_n x) \quad (4.46)$$

Nachfolgend wird eine Möglichkeit zur Berechnung von R_n beschrieben, die man bei expliziten Verfahren, bei denen es möglich ist, die einzelnen Stufen rekursiv auszuwerten, verwenden kann. Man kennt $N(q_c(t), q_r(t))$ zu einem bestimmten Zeitpunkt t_m , beispielsweise zum Startzeitpunkt, für den die Anfangsdaten gegeben sind. Deshalb kann man, wie oben beschrieben, die Fourier-Koeffizienten R_n zu diesem Zeitpunkt berechnen. Damit kann Gleichung (4.44) zunächst für einen Zeitschritt oder eine Stufe gelöst werden. Wir verwenden dazu die exponentiellen Integratoren ETD1 und ETD2 aus Abschnitt 4.4.2 und folgen damit einem Vorschlag aus Cox und Matthews, 2002. Dadurch erhält man die Lösung für einen neuen Zeitschritt oder eine neue Stufe zum Zeitpunkt t_{m+1} . Allerdings sind dafür die R_n nicht bekannt. Man muss die neue Lösung zum Zeitpunkt t_{m+1} vom Fourier-Raum in Ausgangsraum transformieren und dort die Nicht-Linearität berechnen. Anschließend wird diese in den Fourier-Raum zurücktransformiert. Dann kann ein neuer Zeitschritt oder eine neue Stufe des expliziten Verfahrens berechnet werden. Zur Transformation kann man die FFT verwenden, die einen Aufwand der Ordnung $n \log(n)$ besitzt. Eine Realisierung des Pseudospektral-Verfahrens in Matlab wird in Trefethen, 2000 beschrieben.

4.4.2 Exponentielle Integratoren

Einen Überblick zu exponentiellen Integratoren findet man in Hochbruck und Ostermann, 2010. Zur Lösung von Systemen der Form (4.44) bieten sich diese exponentiellen Integratoren an. Darauf wird in Cox und Matthews, 2002 hingewiesen. Außerdem verweisen die Autoren auf gute Genauigkeitseigenschaften bei steifen Problemen. Exponentielle Integratoren sind in der Literatur häufig zu finden, wenn Probleme der Form (4.40) mit einem linearen Anteil $L(x)$ und einem nicht-linearen Anteil $R(x)$ gelöst werden sollen, siehe beispielsweise Peddle (2018) oder Haut und Wingate (2014).

Bei der Herleitung von exponentiellen Integratoren, geht man davon aus, dass ein Problem in der folgenden Form vorliegt

$$\dot{u} = ku + N(u, t) \quad (4.47)$$

mit einer Konstanten k und einem nicht-linearen Term $N(u, t)$. Gleichung (4.47) wird mit dem integrierenden Faktor $\exp(-kt)$ multipliziert und anschließend integriert. Dadurch gelangt man zu

$$\int_{t_m}^{t_m+\tau} \dot{u} \exp(-kt) - ku \exp(-kt) dt = \int_{t_m}^{t_m+\tau} \exp(-kt) N(u, t) dt. \quad (4.48)$$

Gleichung (4.48) kann umformuliert werden zu

$$u(t_m + \tau) \exp(-k(t_m + \tau)) = u(t_m) \exp(-kt_m) + \int_{t_m}^{t_m+\tau} \exp(-kt) N(u, t) dt \quad (4.49)$$

oder äquivalent

$$u(t_m + \tau) = u(t_m) \exp(k\tau) + \exp(k\tau) \int_0^\tau \exp(-kt) N(u(t + t_m), t + t_m) dt. \quad (4.50)$$

Die verschiedenen exponentiellen Integratoren unterscheiden sich in der Approximation des Integrals in Gleichung (4.50). Man kann beispielsweise annehmen, dass $N(u, t)$ in grober Näherung konstant auf dem Intervall $[t_m, t_m + \tau]$ ist. Man hat also $N = N_m + \mathcal{O}(\tau)$, wobei $N_m = N(u_m, t_m)$ gilt. Mit dieser Näherung erhält man das exponentielle Zeitintegrationsschema der Ordnung 1 (ETD1)

$$u_{m+1} = u_m \exp(k\tau) + N_m \frac{\exp(k\tau) - 1}{k}. \quad (4.51)$$

Man kann N auch approximieren durch $N = N_m + t \frac{N_m - N_{m-1}}{\tau} + \mathcal{O}(\tau^2)$. Damit ergibt sich als Approximationsformel das exponentielle Zeitintegrationsschema der Ordnung 2 (ETD2)

$$u_{m+1} = u_m \exp(k\tau) + N_m \frac{(1 + \tau k) \exp(k\tau) - 1 - 2\tau k}{\tau k^2} + N_{m-1} \frac{1 + \tau k - \exp(k\tau)}{\tau k^2} \quad (4.52)$$

Man erhält also ein Zwei-Schritt-Verfahren.

Es können exponentielle Integratoren beliebiger Ordnung hergeleitet werden, siehe dazu Cox und Matthews, 2002.

4.5 Ausblick und mögliche Weiterentwicklungen

Wir haben gesehen, dass bei den speziellen Wolkenschemata aus Kapitel 3 durch Ankoppelung von Diffusionstermen die lineare Stabilitätsanalyse nicht die Destabilisierung einzelner Moden ergibt, und damit keine Entstehung von Mustern vorhersagt. In Abschnitt 4.3 wurde jedoch ein Wolkenschema vorgestellt, bei dem einzelne Moden destabilisiert werden können und es wurde auch die Entstehung von Strukturen beobachtet. Es stellt sich nun die Frage, wie gut damit die Realität abgebildet werden kann. Der Vergleich mit den Simulationen aus Chertock u. a., 2019, deutet an, dass das Wolkenmodell, das an Diffusionsterme gekoppelt wurde, qualitativ ähnliche Resultate ergibt wie die Simulationen, bei denen ein Wolkenmodell an die Navier-Stokes-Gleichungen gekoppelt wurden. Dabei beschränken wir uns bei dieser Beobachtung auf Strukturen in der horizontalen Ebene.

Zum einen bleibt zu klären, ob das Reaktions-Diffusions-Modell durch Ankoppelung von Auftriebstermen auf ein dreidimensionales Modell erweitert werden kann. Zum anderen stellt sich die Frage, inwieweit die Parameter angepasst werden können, um reale physikalische Prozesse möglichst genau abzubilden. Ein interessanter Aspekt wäre auch zu klären, was realistische Werte für die Diffusionskonstanten D_1 und D_2 sind.

Ähnliche Untersuchungen mit der linearen Stabilitätsanalyse, wie sie in diesem Kapitel zu System (3.14) durchgeführt wurden, gibt es zum Brusselator. Der Brusselator, benannt nach seinem Herkunftsort, ist ein Modell, das die Entwicklung von chemischen Konzentrationen beschreibt. Ausführlicheres dazu findet man in Kondepudi und Prigogine, 2015. Als System gewöhnlicher Differentialgleichungen ist der Brusselator durch

$$\dot{u}_1 = \Omega - (\Psi + 1)u_1 + u_1^2 u_2 \quad (4.53a)$$

$$\dot{u}_2 = \Psi u_1 - u_1^2 u_2. \quad (4.53b)$$

gegeben und passt damit nicht ganz zu (3.14). Allerdings kann auch er durch Ankoppelung von Laplace-Termen zu dem folgenden Reaktions-Diffusions-System erweitert werden

$$\dot{u}_1 = \Omega - (\Psi + 1)u_1 + u_1^2 u_2 + D_1 \nabla^2 u_1 \quad (4.54a)$$

$$\dot{u}_2 = \Psi u_1 - u_1^2 u_2 + D_2 \nabla^2 u_2. \quad (4.54b)$$

Man kann ein Gleichgewicht von (4.53)

$$u_{1,e} = \Omega \quad (4.55a)$$

$$u_{2,e} = \frac{\Psi}{\Omega} \quad (4.55b)$$

finden, das sowohl stabil, als auch instabil sein kann. Abbildung 4.10 zeigt eine Simulation für ein instabiles Gleichgewicht. Das System wurde mit dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung vier gelöst. Die Eigenwerte der Jacobi-Matrix deuten an, dass das System effizient mit einem expliziten Löser behandelt werden kann. Bei einer geeigneten Parameterwahl im System (4.54) kann man auch wieder ein stabiles Gleichgewicht durch Laplace-Terme destabilisieren. Dies wird in Abbildung 4.11 veranschaulicht. Das Beispiel der linearen Stabilitätsanalyse zeigt, dass Ideen, die in anderen Disziplinen bereits erfolgreich angewendet wurden, das Potenzial haben, in der Wolkenphysik neue Einsichten zu liefern.

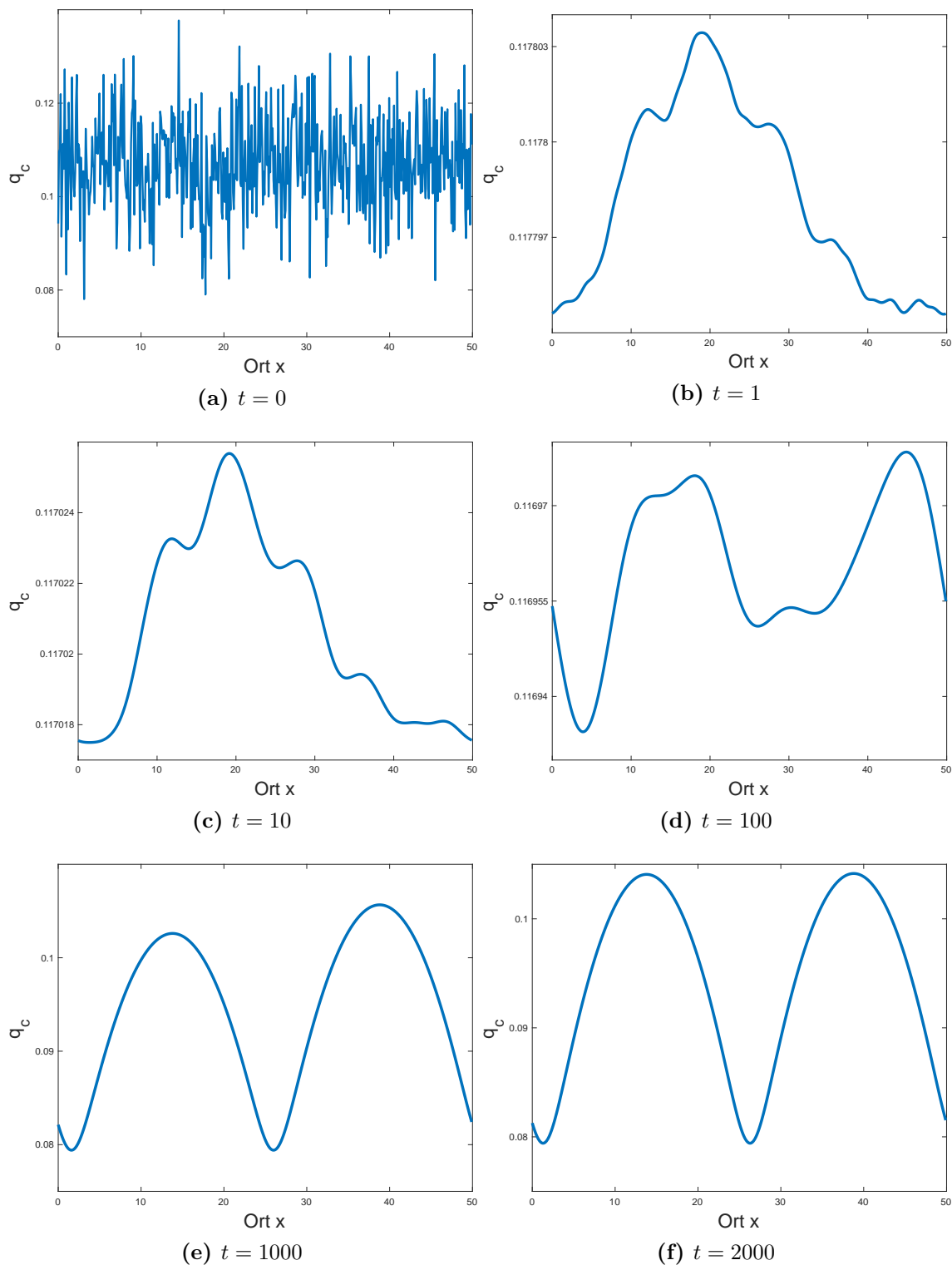


Abbildung 4.3: Musterbildung bei warmen Wolken. Zu sehen ist die Massenkonzentration von Wolkentröpfchen q_c zu verschiedenen Zeitpunkten bei Simulation des Systems (4.28). Es wurde mit einer Raumdimension gerechnet

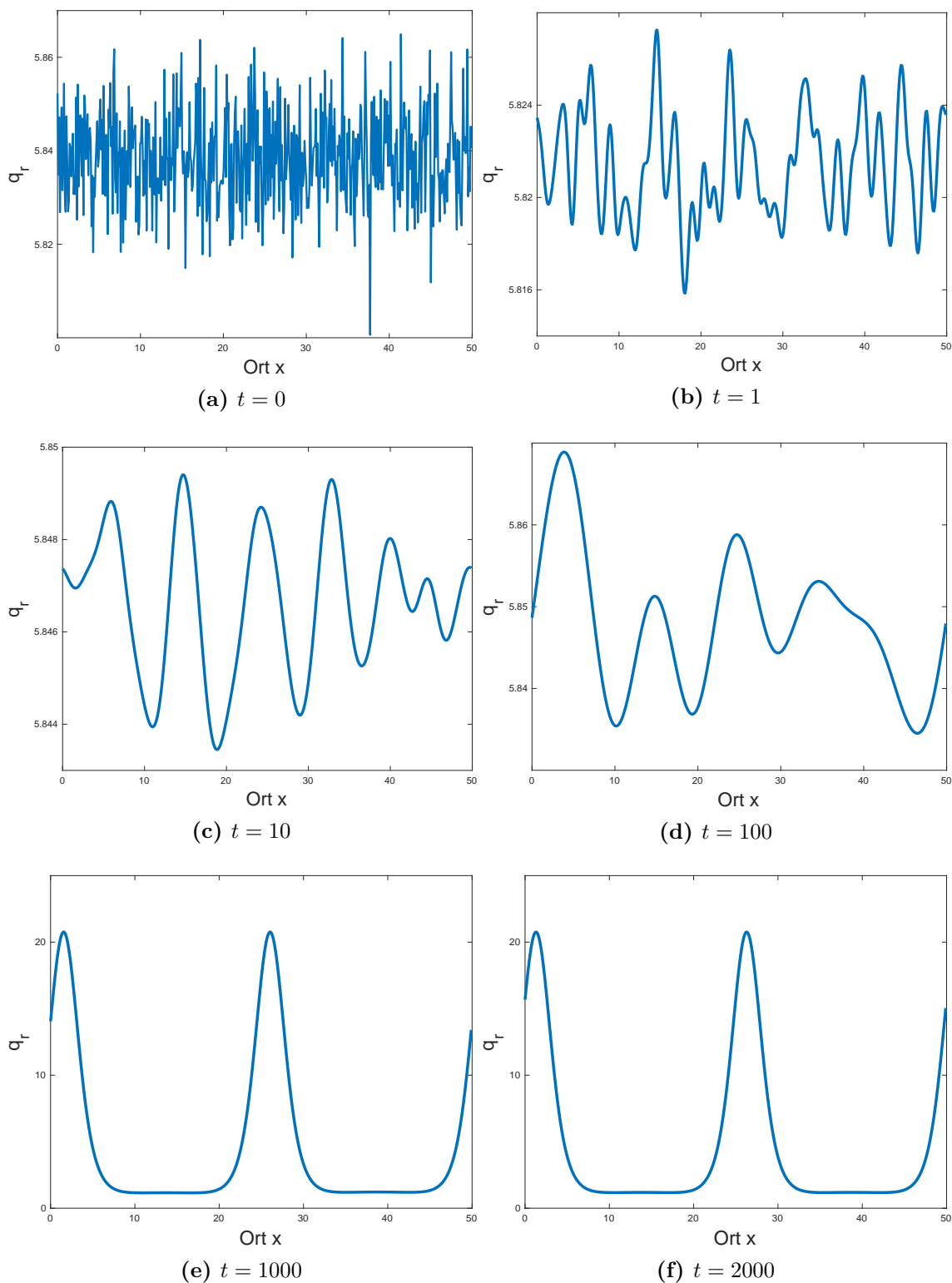
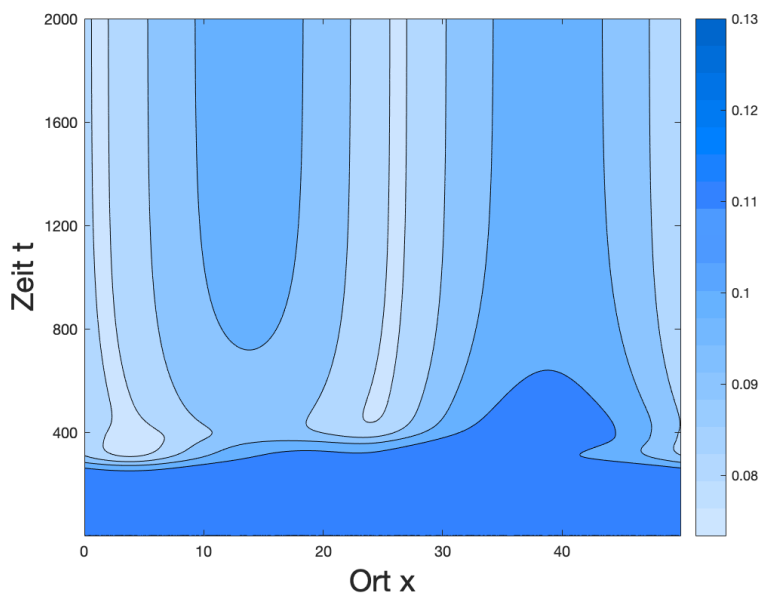
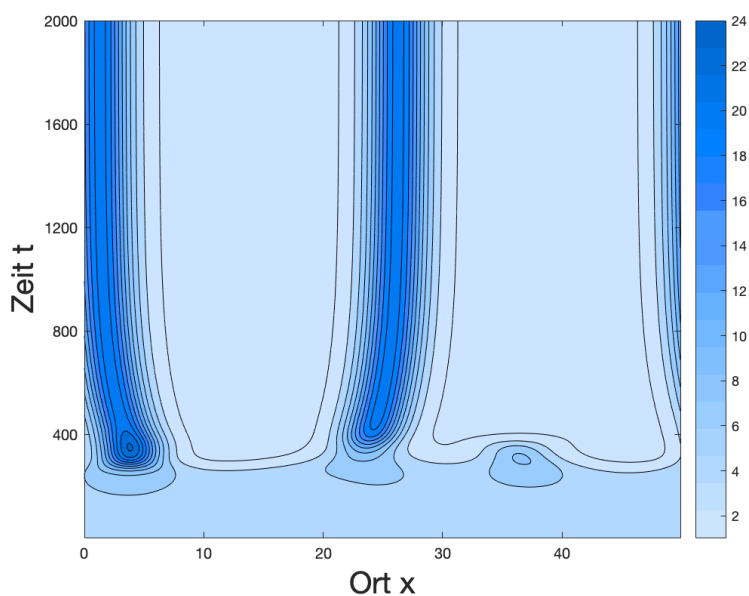


Abbildung 4.4: Musterbildung bei warmen Wolken. Zu sehen ist die Massenkonzentration von Regentropfen q_r zu verschiedenen Zeitpunkten bei Simulation des Systems (4.28). Es wurde mit einer Raumdimension gerechnet



(a) Massenkonzentration von Wolkentröpfchen q_c



(b) Massenkonzentration von Regentropfen q_r

Abbildung 4.5: Simulation des Systems (4.28) in einer Raumdime-
 sion mit der Parameterwahl $a_1 = 1, a_2 = 1, c = 5, d = 0.1, D_c = 10^3, D_r = 10^{-1}$

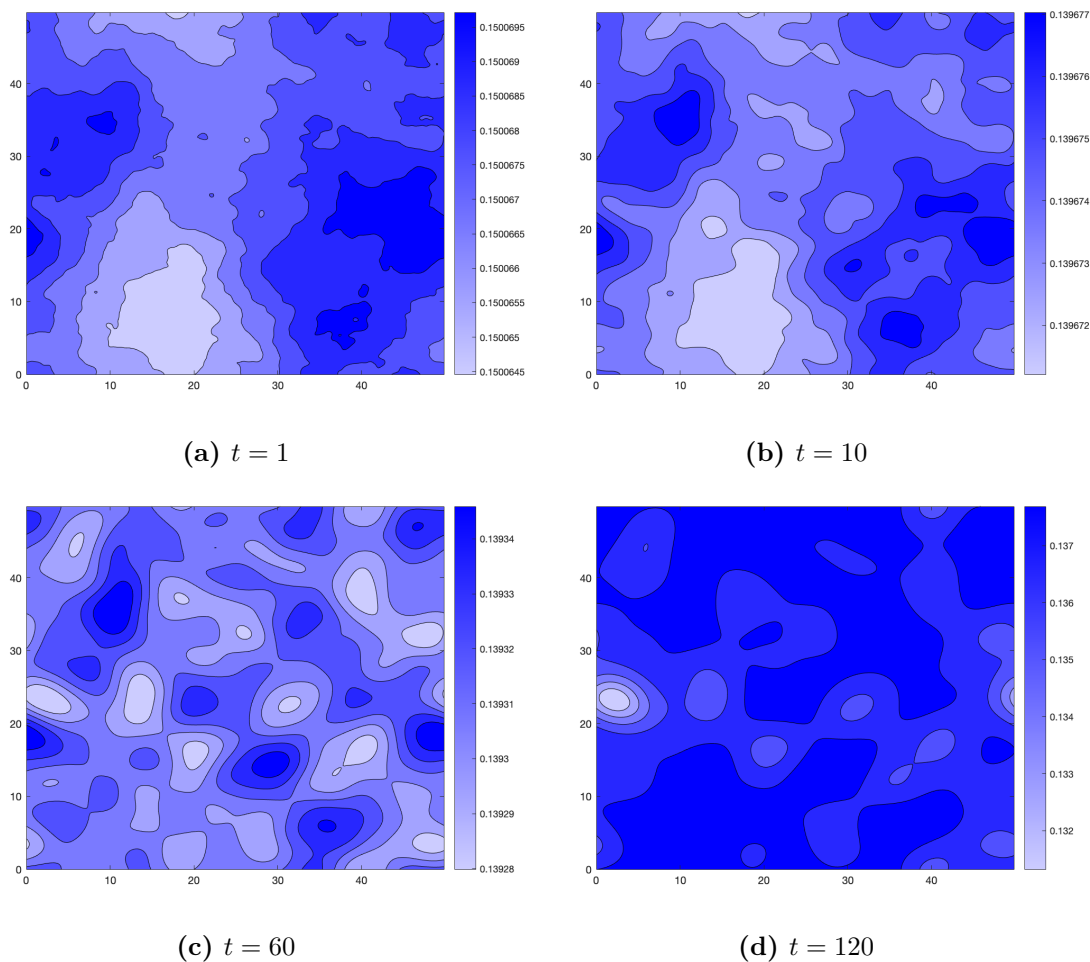


Abbildung 4.6: Simulation des Systems (4.28). Zeitliche Entwicklung von q_c in zwei Raumdimensionen. Gezeigt wird die räumlicher Verteilung von q_c zu verschiedenen Zeitpunkten. Parameter: $a_1 = 1, a_2 = 1, c = 5, d = 0.13, D_1 = 10^2, D_2 = 2.5 \cdot 10^{-2}$

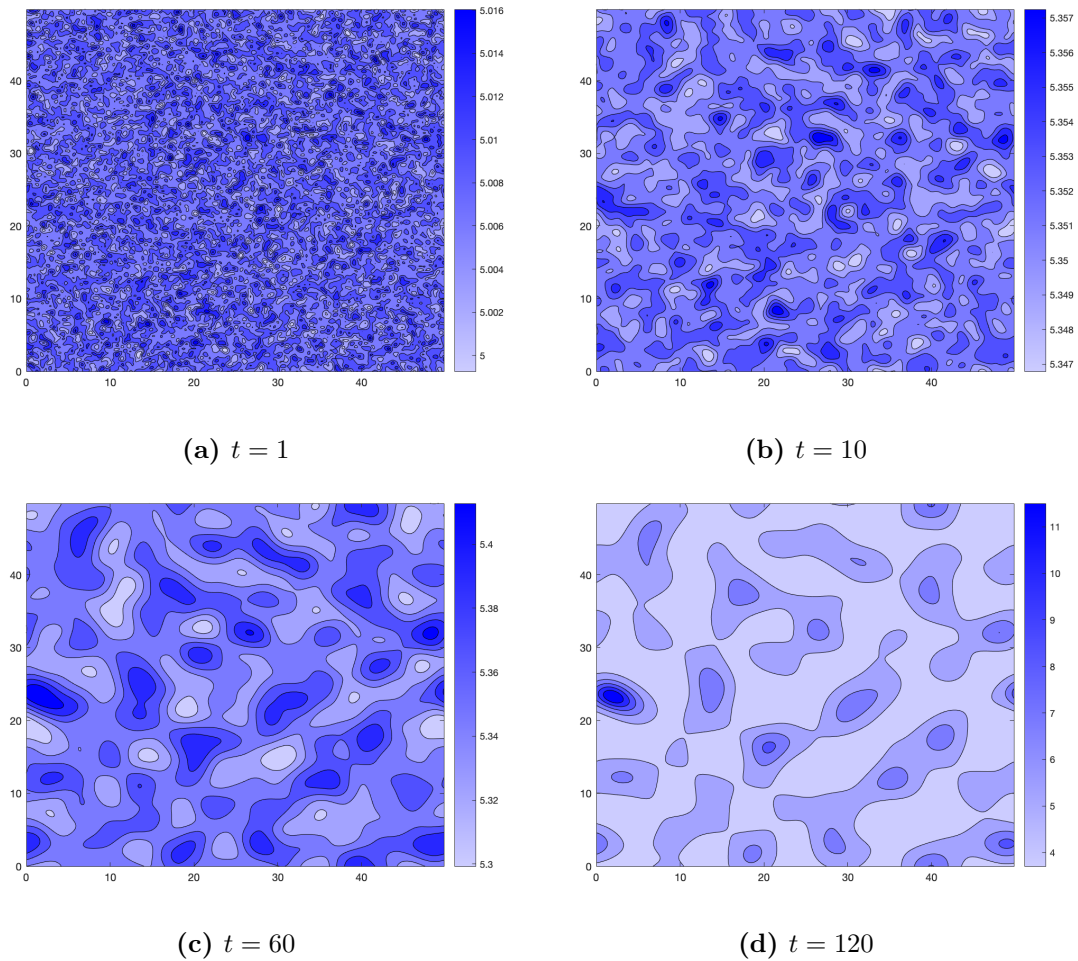


Abbildung 4.7: Simulation des Systems (4.28). Zeitliche Entwicklung von q_r in zwei Raumdimensionen. Gezeigt wird die räumliche Verteilung von q_r zu verschiedenen Zeitpunkten. Parameter: $a_1 = 1, a_2 = 1, c = 5, d = 0.13, D_1 = 10^2, D_2 = 2.5 \cdot 10^{-2}$

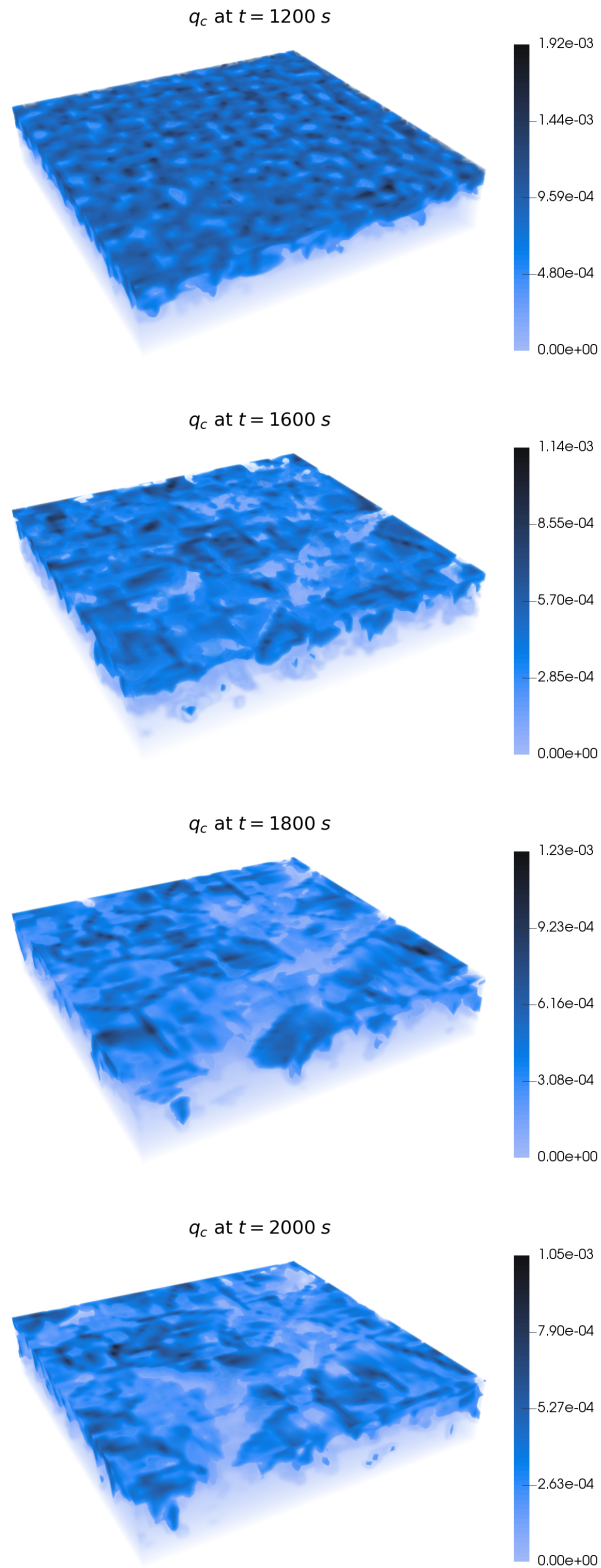


Abbildung 4.8: Veranschaulichung von q_c bei der Simulation der Navier-Stoke-Gleichungen, gekoppelt an ein Wolkenschema, das warme Wolken modelliert. Quelle: Chertock u. a., 2019

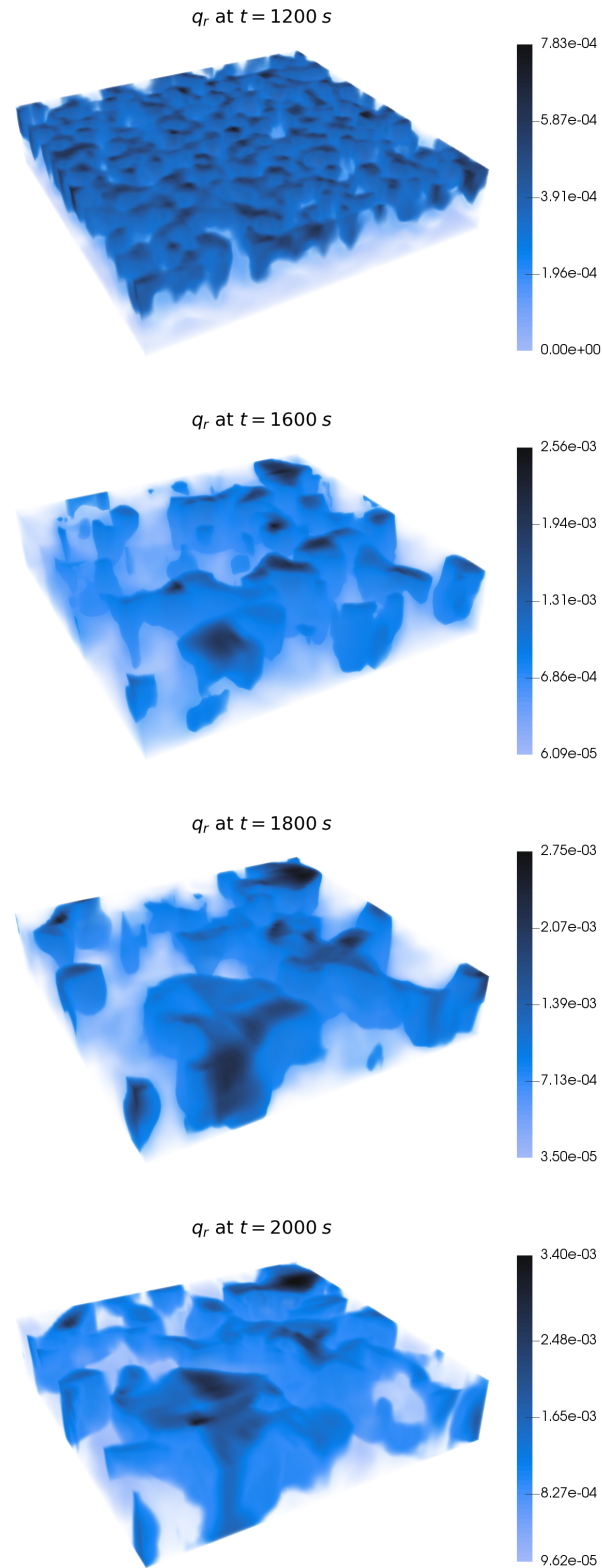
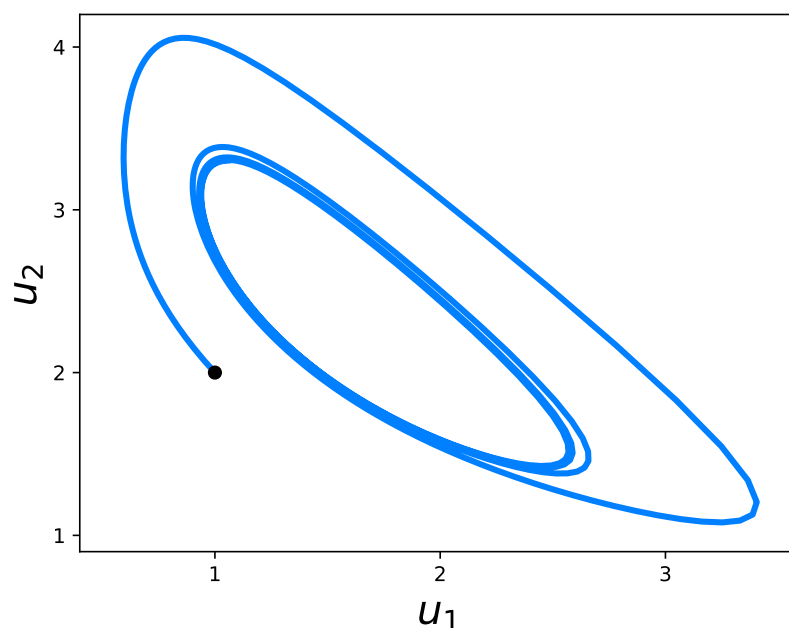
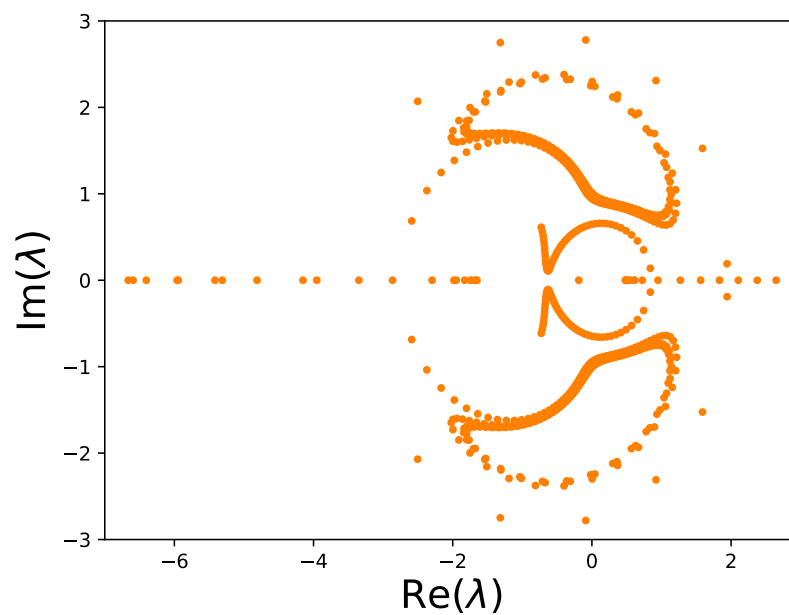


Abbildung 4.9: Veranschaulichung von q_r bei der Simulation der Navier-Stoke-Gleichungen, gekoppelt an ein Wolkenschema, das warme Wolken modelliert. Quelle: Chertock u. a., 2019

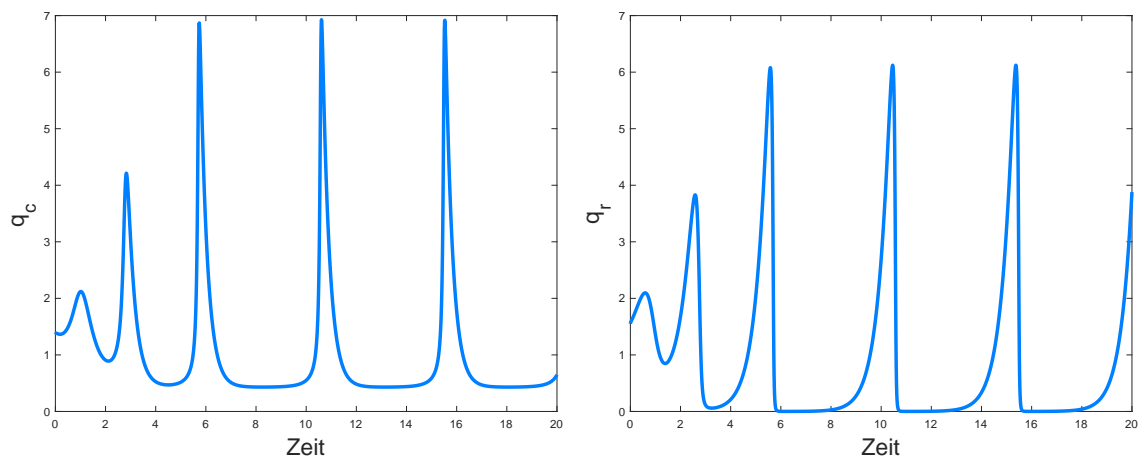


(a) u_1 - u_2 -Phasendiagramm. Schwarzer Punkt kennzeichnet Startwert.

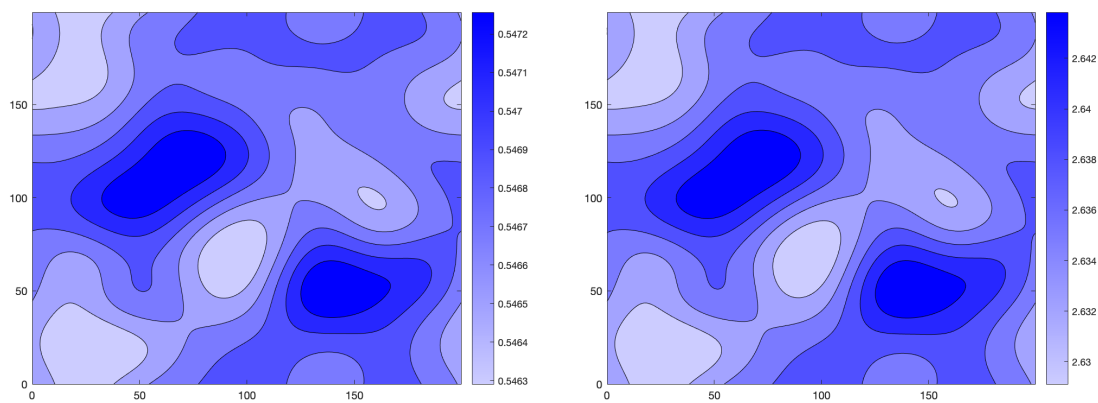


(b) Eigenwerte der Jacobimatrix

Abbildung 4.10: Brüsselator als System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Dabei wurden folgende Parameter gewählt: $\Omega = 1.5$, $\Psi = 3.5$. Das Gleichgewicht (4.55) ist instabil. Es entsteht ein Grenzzyklus, gegen den benachbarte Trajektorien konvergieren.



(a) Zeitliche Entwicklung von q_c am Gitterpunkt $(0, 0)$ (b) Zeitliche Entwicklung von q_r am Gitterpunkt $(0, 0)$



(c) Räumliche Verteilung von q_c zum Zeitpunkt $t = 1000$ (d) Räumliche Verteilung von q_r zum Zeitpunkt $t = 1000$

Abbildung 4.11: Brusselator als Reaktions-Diffusions-Gleichung. Parameter: $\Omega = 1.5, \Psi = 2.5, D_1 = 2.8, D_2 = 22.4$

Kapitel 5

Beschreibung eines Eiswolkenmodells

Das im folgenden behandelte Eiswolkenmodell ist als ein Zwei-Momenten-Schema formuliert. Dementsprechend werden die Variablen Massenkonzentration q_i und Anzahlkonzentration n_i modelliert. Diese beiden Größen werden analog zu den Massenkonzentrationen von Wasserdampf und Flüssigwasser (siehe (3.6)), definiert.

$$q_i = \frac{\text{Masse der Eiskristalle}}{\text{Masse trockener Luft}} \quad (5.1)$$

$$n_i = \frac{\text{Anzahl der Eiskristalle}}{\text{Masse trockener Luft}} \quad (5.2)$$

Man kann q_i und n_i auch relativ zur Gesamtmasse der Luft definieren. Dies würde nur einen sehr geringen Unterschied ausmachen. Zusätzlich beinhaltet das Modell eine Gleichung für die Übersättigung über Eis S_i , definiert als das Verhältnis des vorherrschenden Wasserdampfdruckes zum Wasserdampfdruck im Gleichgewicht über Eis

$$S_i = \frac{p_v}{p_{\text{si}}(T)}. \quad (5.3)$$

Äquivalent kann auch eine Gleichung für Massenkonzentration von Wasserdampf q_v formuliert werden. Man kann dann auf eine Gleichung für S_i verzichten. Die Übersättigung unterliegt bei Eiswolken im Vergleich zu warmen Wolken großen Schwankungen. Allgemein können in Eiswolken sehr hohe Übersättigungen auftreten. Dies bestätigen sowohl Messungen (Siehe dazu Krämer u. a., 2009), als auch Modellsimulationen (Siehe Spichtinger und Gierens, 2009a, Spichtinger und Gierens, 2009b, Spichtinger und Gierens, 2009c, Spichtinger und Cziczo, 2010, Spreitzer u. a., 2017). Außerdem wird das Auftreten von hohen Übersättigungen in Eiswolken in Kapitel 7 bestätigt. Zum vollständigen Schema zählen des Weiteren prognostische Gleichungen für die Temperatur T und den Druck p . Das Eiswolkenchema hat die folgende Gestalt

$$\dot{n}_i = \text{Nuc}_n + \text{Evap}_n + \text{Sed}_n, \quad (5.4a)$$

$$\dot{q}_i = \text{Nuc}_q + \text{Dep}_q + \text{Sed}_q, \quad (5.4b)$$

$$\dot{S}_i = \text{Cool}_w + \text{Dep}_S, \quad (5.4c)$$

$$\dot{T} = \left. \frac{dT}{dt} \right|_{\text{adiabatisch}} + \left. \frac{dT}{dt} \right|_{\text{Diffusion}}, \quad (5.4d)$$

$$\dot{p} = \left. \frac{dp}{dt} \right|_{\text{adiabatisch}}. \quad (5.4e)$$

Bei dieser Formulierung werden Wachstumsprozesse ($\text{Evap}_n, \text{Dep}_q, \text{Dep}_s$), Nukleation ($\text{Nuc}_n, \text{Nuc}_q$) und Sedimentation ($\text{Sed}_n, \text{Sed}_q$), sowie thermodynamische Effekte berücksichtigt. Bei der Herleitung des Eiswolkenchemas werden folgende Annahmen getroffen

- Luft und Wasserdampf sind ideale Gase. Es gilt also die Gleichung für ideale Gase

$$p = \rho R_a T \quad (5.5)$$

für Luft und

$$p_v = \rho_v R_v T \quad (5.6)$$

für Wasserdampf.

- Die Gleichung für das hydrostatische Gleichgewicht

$$\frac{dp}{dz} = -\rho g \quad (5.7)$$

ist gültig.

- Es gilt die Clausius-Clapeyron-Gleichung

$$\frac{dp_{si}(T)}{dT} = \frac{L_S p_{si}(T)}{R_v T^2}, \quad (5.8)$$

die den Sättigungsdampfdruck über Eis beschreibt.

Im Folgenden sollen Parameterisierungen für die mikrophysikalischen Prozesse, also Wachstum, Nukleation und Sedimentation, angegeben werden. Außerdem wird beschrieben, wie die geltende Thermodynamik berücksichtigt wird.

5.1 Thermodynamische Änderungen

5.1.1 Druck

Die zeitliche Änderung des Drucks entsteht durch die Höhenverschiebung des Luftpakets. Damit gilt also

$$\left. \frac{dp}{dt} \right|_{\text{adiabatisch}} = \frac{dp}{dz} \frac{dz}{dt} = -g \rho w(t). \quad (5.9)$$

Hier wurde ausgenutzt, dass wir das hydrostatische Gleichgewicht annehmen. Außerdem beschreibt $w(t)$ die Höhenverschiebung des Luftpaketes explizit in der Zeit.

5.1.2 Temperatur

Die Temperatur des betrachteten Luftpakets ändert sich zum einen durch Hebung und Senkung, zum anderen durch Phasenumwandlungen. Durch die Phasenumwandlungen wird Wärme in die Umgebung freigesetzt bzw. der Umgebung entzogen.

Wir betrachten zunächst die Temperaturänderung aufgrund einer adiabatischen Höhenverschiebung des Luftpaketes.

$$\left. \frac{dT}{dt} \right|_{\text{adiabatisch}} = \frac{dT}{dz} \frac{dz}{dt} = -\frac{g}{c_p} w(t) \quad (5.10)$$

Die folgenden Rechnungen findet man in Etling, 2008. Die potentielle Temperatur ist definiert als

$$\theta = T \left(\frac{p_0}{p} \right)^\kappa \quad (5.11)$$

Hier ist p_0 ein konstanter Referenzdruck und $\kappa = \frac{R_a}{c_p}$. Für die Ableitung nach z gilt

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \left(\frac{\partial T}{\partial z} + \frac{g}{c_p} \right) \frac{\theta}{T} \quad (5.12)$$

Wir treffen jetzt die Annahme, dass die Atmosphäre adiabatisch geschichtet ist, also

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = 0 \quad (5.13)$$

gilt. Damit ergibt sich

$$\frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{g}{c_p} \quad (5.14)$$

Daher rührt der Faktor $-\frac{g}{c_p}$ in Gleichung (5.10) Man nennt ihn auch den adiabatischen Temperaturgradienten. Der Term $w(t)$ beschreibt die Höhenverschiebung des Luftpaketes explizit in der Zeit und entspricht damit dem Term $\frac{dz}{dt}$.

Des Weiteren beeinflusst die latente Wärmefreisetzung die Temperatur im Luftpaket. Zur Berechnung dieses Beitrags muss man den Betrag des Wasserdampfes, der in Eis umgesetzt wird, berücksichtigen. Dazu ist zum einen der Nukleationsprozess, zum anderen das Depositionswachstum von Bedeutung. Dementsprechend sollten sich diese beiden Prozesse in der folgenden Parameterisierung wiederfinden.

$$\left. \frac{dT}{dt} \right|_{\text{Diffusion}} = \frac{L_s}{c_p} (\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q) \quad (5.15)$$

Dabei ist $(\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q)$ die Masse an Wasserdampf pro Kilogramm trockener Luft, die pro Zeiteinheit sublimiert. Durch Multiplikation dieses Wertes mit der latenten Sublimationswärme L_s berechnet man den Betrag der Wärme, der durch die Phasenumwandlung pro Masseneinheit Luft und pro Zeiteinheit an die Umgebung abgegeben wird. Wird dieser Wert durch die spezifische Wärmekapazität c_p geteilt, erhält man schließlich die Temperaturänderung durch Sublimation. Man geht davon aus, dass die freiwerdende Sublimationswärme nur zu einer Temperaturänderung im Luftpaket und nicht zu einer Druckänderung führt.

5.1.3 Änderung der Übersättigung

Das Sättigungsverhältnis wird durch (5.3) definiert. Wie bereits am Anfang des Kapitels erwähnt, kann man das Sättigungsverhältnis S_i und die Massendichte für Wasserdampf q_v äquivalent ineinander umformulieren. Die Massendichte für Wasserdampf q_v ist wie folgt definiert

$$q_v = \frac{\text{Masse Wasserdampf}}{\text{Masse trockener Luft}} = \frac{M_w}{M} \quad (5.16)$$

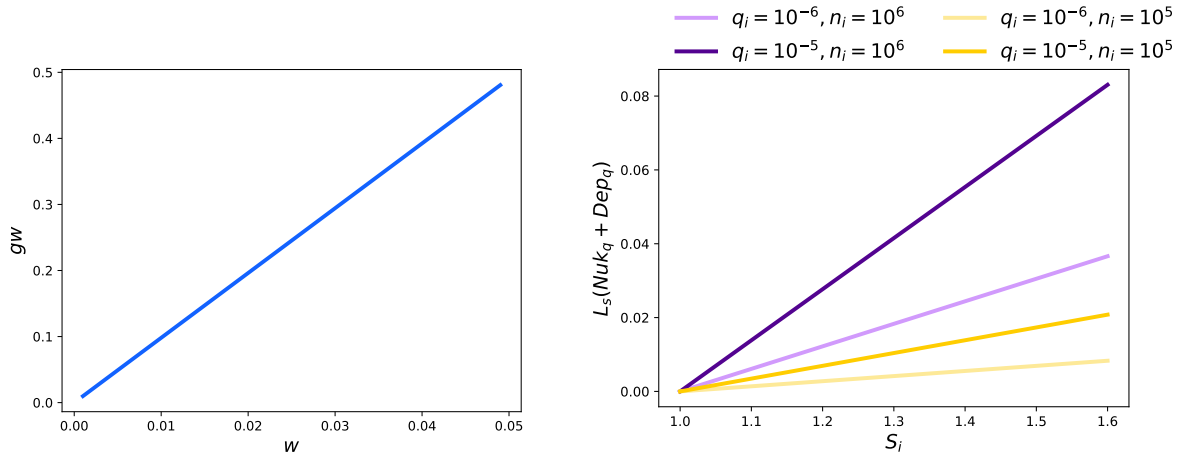


Abbildung 5.1: Vergleich der Übersättigungsterme

Durch Anwendung der idealen Gasgleichung gelangt man zu

$$q_v = \frac{p_v V}{R_v T} \frac{R_a T}{V p} = \epsilon \frac{p_v}{p} \quad (5.17)$$

Unter Verwendung von (5.3) und (5.17) erhalten wir

$$S_i = \frac{p q_v}{\epsilon p_{si}(T)}. \quad (5.18)$$

Dabei ist ϵ als das Verhältnis der Gaskonstanten von trockener Luft und Wasserdampf definiert, also $\epsilon = \frac{R_a}{R_v} = \frac{M_w}{M} \approx 0.622$.

Durch Anwendung der Kettenregel erhält man folgende Beziehung für die zeitliche Änderung des Sättigungsverhältnisses

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{dS_i}{dT} \frac{dT}{dt} + \frac{dS_i}{dp} \frac{dp}{dt} + \frac{dS_i}{dq_v} \frac{dq_v}{dt}. \quad (5.19)$$

Bei der Berechnung der partiellen Ableitungen stellt sich die Beziehung (5.18) als sehr nützlich heraus. Für die Änderung von S_i bezüglich der Temperatur erhält man

$$\frac{dS_i}{dT} = -\frac{p q_v}{\epsilon p_{si}(T)^2} \frac{\partial p_{si}(T)}{\partial T} = -\frac{p q_v}{\epsilon p_{si}(T)^2} \frac{L_S p_{si}(T)}{R_v T^2} = -\frac{L_S}{R_v T^2} S_i \quad (5.20)$$

Bei dieser Herleitung wurde die Clausius-Clapeyron-Gleichung (5.8) angewendet. Die Änderung hinsichtlich p ergibt

$$\frac{dS_i}{dp} = \frac{q_v}{\epsilon p_{si}(T)} = \frac{S_i}{p} \quad (5.21)$$

Bei Betrachtung der Änderung bezüglich q_v gelangt man zu

$$\frac{dS_i}{dq_v} = \frac{p}{\epsilon p_{si}(T)} = \frac{S_i}{q_v} \quad (5.22)$$

Wir untersuchen jetzt die einzelnen Summanden aus Gleichung (5.19). Mit (5.10) und (5.20) aus Abschnitt 5.1.2, sowie (5.15) gelangt man zu der Beziehung

$$\frac{dS_i}{dT} \frac{dT}{dt} = -\frac{L_S}{R_v T^2} S_i \left(-\frac{g}{c_p} w(t) + \frac{L_S}{c_p} (\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q) \right). \quad (5.23)$$

Wenn der Auftriebsterm $w(t)$ groß genug ist, kann zur vereinfachenden Darstellung der Term $\frac{L_S}{c_p} (\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q)$ weggelassen werden, da dann bei kalten Temperaturen $T < 235 \text{ K}$ die latente Wärme nur einen geringen Einfluss auf die Temperatur hat. Dies wird in Abbildung 5.1 veranschaulicht. Wir nehmen an dieser Stelle

$$\frac{dS_i}{dT} \frac{dT}{dt} = \frac{L_S g}{c_p R_v T^2} S_i w(t) \quad (5.24)$$

an. Für den zweiten Summanden in Gleichung (5.19) findet man mit (5.21) und (5.9)

$$\frac{dS_i}{dp} \frac{dp}{dt} = -\frac{S_i}{p} g \rho w(t) = -S_i \frac{g}{R_a T} w(t) \quad (5.25)$$

Hier wurde die ideale Gasgleichung (5.5) angewendet. Schließlich kann man den dritten Summanden als

$$\frac{dS_i}{dq_v} \frac{dq_v}{dt} = \frac{p}{\epsilon p_{si}(T)} \left(-(\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q) \right) \quad (5.26)$$

Dabei wurde die Gleichung (5.22) angewendet. Außerdem beschreibt $\frac{dq_v}{dt}$ den Anteil der Massenkonzentration des Wasserdampfes, der in Eis umgewandelt wird. Der Abbau der Massenkonzentration von Wasserdampf geschieht durch die Prozesse Nukleation und Wachstum, bei denen Phasenumwandlungen eine Rolle spielen. In der Formulierung mit Massendichten haben wir deshalb $\frac{dq_v}{dt} = -(\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q)$. Insgesamt erhält man also bei Berücksichtigung von (5.24), (5.25) und (5.26)

$$\frac{dS_i}{dt} = \underbrace{\left(\frac{L_S g}{c_p R_v T^2} - \frac{g}{R_a T} \right) S_i w(t)}_{\text{Cool}_w} - \underbrace{\frac{p}{\epsilon p_{si}(T)} (\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q)}_{\text{Dep}_S} \quad (5.27)$$

Der Term Cool_w beschreibt die Änderung des Sättigungsverhältnisses S_i aufgrund von Heben und Senken des Luftpakets. Außerdem gibt Dep_S den Einfluss der Wachstumsprozesse und der Nukleation auf die Zeitevolution des Sättigungsverhältnisses an. Die beiden zuletzt genannten Prozesse sind verantwortlich für die Phasenumwandlung von Wasserdampf zu Eis. Damit ist klar, dass sie einen Einfluss auf das Sättigungsverhältnis S_i haben müssen.

5.2 Mikrophysikalische Prozesse zur Änderung von Massen- und Anzahldichte

In diesem Abschnitt wird die mathematische Modellierung des Wachstums, der Sedimentation und der Nukleation von Eiskristallen ausgeführt.

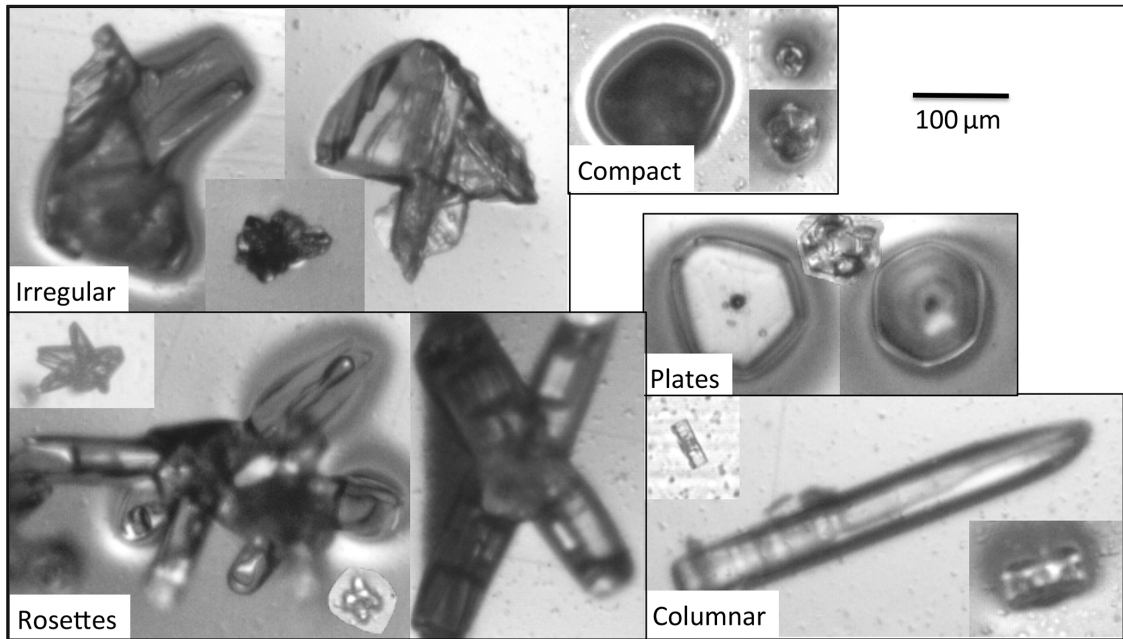


Abbildung 5.2: Mögliche Formen von Eiskristallen. Quelle: Wolf u. a., 2018

5.2.1 Wachstum

Man findet in diesem Teilabschnitt eine Beschreibung des Wachstums von Eiskristallen. Dabei folgen wir dem Buch Lamb und Verlinde, 2011. Für die Massenänderung eines Eiskristalls gilt die Gleichung

$$\frac{dm}{dt} = 4\pi C D_v G_v (S_i - 1) f_v. \quad (5.28)$$

Dabei bezeichnet C in diesem Abschnitt die Kapazität und kodiert damit die verallgemeinerte Gestalt des Eiskristalls. Mögliche Formen von Eiskristallen findet man in Wolf u. a., 2018 (siehe Abbildung 5.2). Die Diffusionskonstante wird mit D_v bezeichnet. Man kann stattdessen auch die Diffusionskonstante mit kinetischer Korrektur D_v^* betrachten. Mehr dazu findet man weiter unten in diesem Abschnitt. Mit G_v bezeichnen wir den Howellfaktor. Er ergibt sich bei der Herleitung der Wachstumsgleichung und bezeichnet die Korrektur durch die freiwerdende latente Wärme. Schließlich ist f_v die Ventilationskorrektur. In dem hier hergeleiteten Modell wird die Ventilationskorrektur für Stäbchen verwendet, von der angenommen wird, dass sie der Ventilationskorrektur von Ellipsoiden sehr ähnlich ist, da im Verlauf dieses Kapitel ellipsoidförmige Eiskristalle betrachtet werden.

Herleitung der Wachstumsgleichung

Wir betrachten einen Eiskristall der Oberfläche A . Die Massenzunahme des Eiskristalls bei Wasserdampfübersättigung über Eis lässt sich durch die Gleichung

$$\frac{dm}{dt} = -M_w \int \Phi_v \cdot dA \quad (5.29)$$

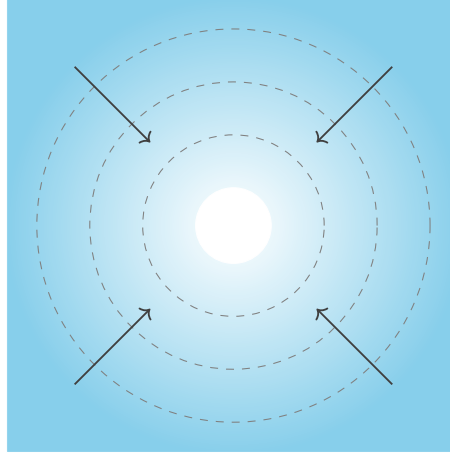


Abbildung 5.3: Die weiße Kugel veranschaulicht einen sphärischen Eiskristall. Das blaue Gebiet um die Kugel illustriert die molare Konzentration von Wasserdampf. Die heller werdende Farbe bedeutet eine Abnahme der Konzentration. Die gestrichelten Linien deuten gedachte Kugeln um den Eiskristall an. Die Pfeile veranschaulichen die Flussrichtung des Wasserdampfes.

beschreiben. Dabei ist Φ_v das Feld, das den Fluss der molaren Volumenkonzentration des Wasserdampfes n , die durch $n = \frac{p_v}{RT}$ gegeben ist, beschreibt. Die Konstante M_w ist die molare Masse von Wasser. Multiplikation mit diesem Faktor erlaubt es, auf eine Massenänderung bei gegebener molaren Wasserdampfkonzentration zu schließen.

Wir wenden uns dem Massentransport aufgrund des Flusses im Wasserdampfgebiet Φ_v zu. Zunächst wird von einem sphärischen Eiskristall mit Radius r_d und einem auf der Eiskristalloberfläche uniform verteilten Fluss, d. h. $\Phi_v \equiv const.$, ausgegangen. Später wird dieses Ergebnis für ellipsoidförmige Eiskristalle modifiziert. Es ergibt sich gemäß (5.29) die Massenrate durch

$$\frac{dm}{dt} = -4\pi M_w r_d^2 \Phi_v. \quad (5.30)$$

Der Fluss im Wasserdampfgebiet kann nach dem ersten Fick'schen Gesetz formuliert werden. Demnach ist der Fluss proportional zum Gradienten der Konzentration und entgegengesetzt gerichtet. Am Eiskristallrand erhält man dadurch

$$\Phi_v \Big|_{r_d} = -D_v \frac{dn}{dr} \Big|_{r_d}. \quad (5.31)$$

Dabei bezeichnet D_v die Diffusionskonstante. Entsprechend ergibt sich aus (5.30) und (5.31)

$$\frac{dm}{dt} = 4\pi M_w D_v r_d^2 \frac{dn}{dr} \Big|_{r_d}. \quad (5.32)$$

Durch Anwendung der Kontinuitätsgleichung $\frac{dn}{dt} = \nabla \cdot \Phi$ gelangt man mit dem ersten Fick'schen Gesetz zu

$$\frac{dn}{dt} = D_v \nabla^2 n. \quad (5.33)$$

Diese Gleichung bezeichnet man als das zweite Fick'sche Gesetz. Da das Wasserdampfgebiet als stationär angenommen wird, erhält man letztendlich das Problem

$$\nabla^2 n = 0 \quad \text{auf } \mathbb{R}^3 \setminus B(r_d) \quad (5.34a)$$

$$n(r_d) = n_p \quad (5.34b)$$

$$n(r) = n_\infty \quad r \rightarrow \infty. \quad (5.34c)$$

Als Randbedingungen legen wir einen Wert n_p für den Eiskristallrand fest. Außerdem soll der Wert auf einer Kugel, deren Oberfläche sich unendlich weit von dem Eiskristall entfernt und deren Mittelpunkt der Mittelpunkt des Eiskristalls ist, gegen n_∞ konvergieren. Wir wollen ein radialsymmetrisches System betrachten. Damit liegt eine Laplace-Gleichung mit Dirichlet-Randbedingungen auf einem unbeschränkten Gebiet vor. Das betrachtete physikalische System ist radialsymmetrisch aufgebaut, deshalb suchen wir zur Beschreibung der physikalischen Vorgänge nach radialsymmetrischen Lösungen. Das motiviert die Anwendung von Kugelkoordinaten. Der Laplaceoperator ist in Kugelkoordinaten gegeben durch

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\tilde{\theta})} \frac{\partial}{\partial \tilde{\theta}} \left(\sin(\tilde{\theta}) \frac{\partial f}{\partial \tilde{\theta}} \right) + \frac{1}{r^2 (\sin(\tilde{\theta}))^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \quad (5.35)$$

Da wir ein radialsymmetrisches System ohne Variation in $\tilde{\theta}$ und φ betrachten, gilt $\frac{\partial f}{\partial \tilde{\theta}} = 0 = \frac{\partial f}{\partial \varphi}$ und Gleichung (5.35) vereinfacht sich zu

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) \quad (5.36)$$

Damit wird (5.34) zu

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial n}{\partial r} \right) = 0 \quad r \in [r_d, \infty) \quad (5.37a)$$

$$n(r_d) = n_p \quad (5.37b)$$

$$n(r) = n_\infty \quad r \rightarrow \infty. \quad (5.37c)$$

Das vorliegende Problem wurde damit auf eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung mit zwei Randwerten zurückgeführt. Man kann (5.37a) auch schreiben als

$$\frac{\partial^2 n}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial n}{\partial r} = 0 \quad (5.38)$$

Führt man jetzt $\tilde{n} = \frac{\partial n}{\partial r}$ ein, erhält man

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial r} + \frac{2}{r} \tilde{n} = 0 \quad (5.39)$$

Da man $r \leq r_d$ betrachtet, gilt die Lipschitz-Stetigkeit und der Satz von Picard-Lindelöf garantiert die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen. Durch einen Ansatz der Form $\tilde{n} = \tilde{a}r^{-\tilde{\alpha}}$ kann man diese Differentialgleichung lösen. Durch anschließende Integration gelangt man zu einer Lösungsdarstellung der Form $n = \tilde{a}r^{-1} + \tilde{b}$. Durch Einsetzen der

Randbedingungen kann man \tilde{a} und \tilde{b} eindeutig bestimmen¹ und man erhält die Lösung von (5.37) durch

$$n(r) = n_\infty - (n_\infty - n_p) \frac{r_d}{r} \quad (5.40)$$

Man kann jetzt Gleichung (5.40) ableiten und gelangt damit zu der folgenden Gleichung, die an der Oberfläche des Eiskristalls gilt

$$\left. \frac{dn}{dr} \right|_{r_d} = \frac{n_\infty - n_p}{r_d}. \quad (5.41)$$

Die Beziehung (5.41) kann in Gleichung (5.32) eingesetzt werden und es ergibt sich

$$\frac{dm}{dt} = 4\pi M_w r_d D_v (n_\infty - n_p). \quad (5.42)$$

Wir nehmen an, dass wir den äußeren Sättigungsquotienten $S_i = \frac{p_v(T_\infty)}{p_{si}(T_\infty)}$ kennen. Dann bekommt man für die äußere Randbedingung mit der Gasgleichung

$$n_\infty = \frac{p(T_\infty)}{RT_\infty} = n_s(T_\infty) S_i, \quad (5.43)$$

wobei $n_s(T_\infty) = \frac{p_{si}(T_\infty)}{RT_\infty}$ gilt und R die universelle Gaskonstante ist.

Als nächstes werden die Oberflächenprozesse auf dem Eiskristall betrachtet. An der Oberfläche des Eiskristalls herrscht eine Übersättigung, die deutlich geringer ist als die Übersättigung in der entfernten Umgebung. Darum betrachten wir als Näherung zunächst folgende Beziehung

$$\frac{p_{p,si}(T_p)}{RT_p} \approx \frac{p_{p,v}(T_p)}{RT_p} = n(T_p). \quad (5.44)$$

Der Index p zeigt an, dass wir die Bedingungen auf der Oberfläche des Eispartikels betrachten.

Man kann jetzt die Gleichungen (5.44) und (5.43) in (5.42) einsetzen und erhält

$$\frac{dm}{dt} = 4\pi M_w r_d D_v n_s(T_\infty) \left(S_i - \frac{n_s(T_p)}{n_s(T_\infty)} \right). \quad (5.45)$$

Wir betrachten jetzt den Quotienten $\frac{n_s(T_p)}{n_s(T_\infty)}$ näher. Bei kleinen Temperaturgradienten kann man als Approximation folgendes Taylorpolynom ersten Grades um T_∞ ansetzen.

$$\begin{aligned} n_s(T_p) &\approx n_s(T_\infty) + (T_p - T_\infty) \frac{dn_s(T_\infty)}{dT} \\ &= n_s(T_\infty) + (T_p - T_\infty) \left(\frac{L_s p_{si}(T_\infty)}{R R_v T_\infty^3} - \frac{p_{si}(T_\infty)}{R T_\infty^2} \right). \end{aligned} \quad (5.46)$$

Dabei wurde die Clausius-Clapeyron-Gleichung (5.8) angewendet. Division durch $n_s(T_\infty)$ unter der Berücksichtigung der Identität $n_s(T) = \frac{p_{si}(T)}{RT}$ ergibt

$$\frac{n_s(T_p)}{n_s(T_\infty)} \approx 1 + \left(\frac{L_s}{R_v T_\infty} - 1 \right) \left(\frac{T_p - T_\infty}{T_\infty} \right) \quad (5.47)$$

¹I. A. sind Existenz und Eindeutigkeit von Zweipunktrandwertproblemen nicht garantiert. Siehe dazu Baily u. a., 1968

Einsetzen von (5.47) in (5.45) ergibt

$$\frac{dm}{dt} = 4\pi M_w r_d D_v n_s(T_\infty) \left(S_i - 1 - \left(\frac{L_s}{R_v T_\infty} - 1 \right) \left(\frac{T_p - T_\infty}{T_\infty} \right) \right) \quad (5.48)$$

An dieser Stelle soll der Energietransport des betrachteten radialsymmetrischen Systems untersucht werden. Wie beim Wasserdampf gehen wir von einem zeitlich stationären Temperaturprofil aus. Damit ergibt sich analog zu oben

$$T(r) = T_\infty - (T_\infty - T_p) \frac{r_d}{r}. \quad (5.49)$$

Durch Ableiten erhält man

$$\left. \frac{dT}{dr} \right|_{r_d} = \frac{T_\infty - T_p}{r_d}. \quad (5.50)$$

Man findet (5.49) und (5.50) in Lamb und Verlinde, 2011. Das Fourier'sche Gesetz besagt, dass der Wärmetransport proportional zum negativen Temperaturgradienten ist. Angewandt auf den hier betrachteten Fall, also einem radialsymmetrischen System, bedeutet dies

$$\Phi_q = -k_T \frac{dT}{dr}. \quad (5.51)$$

Mit k_T wird die Wärmeleitung von Luft bezeichnet. Bei Wachstum des Eiskristalls wird durch Phasenumwandlung an der Eiskristalloberfläche ständig latente Wärme freigesetzt. Unter stationären Bedingungen kann es zu keiner Erwärmung oder Abkühlung an der Eiskristalloberfläche kommen, also müssen sich Freisetzung von latenter Wärme und Abfluss von Wärme die Waage halten. Demnach gilt $l_S I_v + I_q = 0$. Dabei bezeichnet l_S die latente Sublimationswärme bezogen auf die Stoffmenge, I_v den molaren Fluss von Wasserdampf hin zum Eiskristall und I_q den Wärmefluss. Der Fluss von Wasserdampf zum Eiskristall steht mit dem Eiskristallwachstum in folgender Beziehung $I_v = -\frac{1}{M_w} \frac{dm}{dt}$. Da Sublimationswärme freigesetzt wird, gilt $T_p > T_\infty$. Nach dem Fourier'schen Gesetz fließt also Wärme vom Eiskristall weg. Unter Verwendung von (5.51) und (5.50) ergibt sich

$$I_q = A_p \Phi_q \Big|_{r_d} = 4\pi r_d k_T (T_p - T_\infty) \quad (5.52)$$

Mit der Energiebilanz gelangt man zu $I_q = -l_S I_v = \frac{l_S}{M_w} \frac{dm}{dt} = 4\pi r_d k_T (T_p - T_\infty)$, und durch Umstellen zu

$$T_p - T_\infty = \frac{l_S}{4\pi r_d k_T M_w} \frac{dm}{dt} = \frac{L_S}{4\pi r_d k_T} \frac{dm}{dt}. \quad (5.53)$$

Durch Kombination von (5.53) und (5.48) gelangt man schließlich zu der Wachstumsgleichung

$$\frac{dm}{dt} = \frac{4\pi r_d M_w D_v n_s(T_\infty) (S_i - 1)}{1 + D_v n_s(T_\infty) \left(\frac{L_S}{R_v T_\infty} - 1 \right) \frac{L_S M_w}{k_T T_\infty}}. \quad (5.54)$$

Im Folgenden sollen Anmerkungen zu Korrekturen und Verallgemeinerungen der Wachstumsgleichung (5.54) gemacht werden.

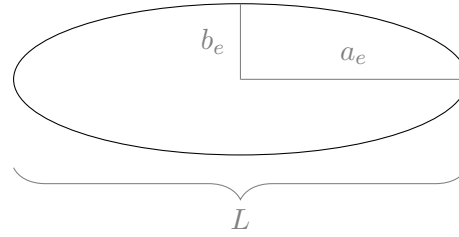


Abbildung 5.4: Eiskristall in Form eines verlängerten Rotationsellipsoids. Zu sehen ist ein Querschnitt entlang der längeren Achse. Der ellipsoidförmige Eiskristall hat die Länge $L = 2a_e$ und Höhe $2b_e$. Die Halbachsen haben damit die Längen a_e und b_e .

Kapazität

Die Wachstumsgleichung für Eispartikel wurde für sphärische Geometrien hergeleitet. Damit diese Gleichung auch für andere Geometrien Gültigkeit besitzt, führt man die sogenannte Kapazität (engl. capacitance) ein, also einen Korrekturfaktor, der die Wachstumsgleichung auf beliebige Geometrien anwendbar macht, wobei jeder Geometrie ein individueller Wert ihrer Kapazität zugewiesen wird. In der Wachstumsgleichung findet man dann nicht mehr den Radius r_d , sondern stattdessen die Kapazität C . Wir nehmen die Form eines Rotationsellipsoids für die betrachteten Eiskristalle an. Dann kann man die Kapazität C durch den Ausdruck

$$C = \frac{L\epsilon}{\log\left(\frac{1+\epsilon}{1-\epsilon}\right)} \quad (5.55)$$

angeben (Siehe McDonald, 1963). In (5.55) bezeichnet L die Länge des Eiskristalls. Zur Berechnung der Kapazität benötigt man zusätzlich die numerische Exzentrizität ϵ , die durch die Beziehung $\epsilon = \sqrt{1 - \left(\frac{b_e}{a_e}\right)^2}$ gegeben ist mit den Halbachsen a_e und b_e . Man findet eine Veranschaulichung in Abbildung 5.4. Damit hat man eine Beschreibung für einen einzelnen Eiskristall. In Eiswolken tritt das Problem auf, dass viele Eiskristalle vorhanden sind, die nicht einzeln beschrieben werden. Man führt dann eine Funktion zur Beschreibung der Anzahlkonzentration ein, über die integriert wird. Um das Integral auszuwerten, ist es von Vorteil, C durch ein Potenzgesetz (engl. power law) zu beschreiben. Dies wird weiter unten ausführlich erklärt.

Howellfaktor

Man kann die Wachstumsgleichung in vereinfachter Notation folgendermaßen formulieren

$$\frac{dm}{dt} = 4\pi D_v G_v C (S_i - 1) \quad (5.56)$$

In dieser Gleichung wurden mehrere Terme durch den Howell-Faktor gemäß

$$G_v = \left(\frac{1}{M_w n_S(T_\infty)} + \left(\frac{L_S}{R_v T_\infty} - 1 \right) \frac{L_S D_v}{k_T T_\infty} \right)^{-1} \quad (5.57)$$

zusammengefasst. Man kann die molare Konzentration des Wasserdampfes als $n_S(T_\infty) = \frac{p_{si}(T_\infty)}{RT_\infty}$ schreiben. Außerdem gilt $R_v = \frac{R}{M_w}$. Damit ergibt sich aus (5.57)

$$G_v = \left(\left(\frac{L_S}{R_v T_\infty} - 1 \right) \frac{L_S D_v}{T_\infty k_T} + \frac{R_v T_\infty}{p_{si}(T_\infty)} \right) \quad (5.58)$$

Betrachtet man noch die korrigierten Werte für Diffusion und Wärmeleitung, nimmt der Howellfaktor die Form

$$G_v^* = \left(\left(\frac{L_S}{R_v T_\infty} - 1 \right) \frac{L_S D_v^*}{T_\infty k_T^*} + \frac{R_v T_\infty}{p_{si}(T_\infty)} \right) \quad (5.59)$$

an. Weiter unten wird noch näher auf D_v^* und k_T^* eingegangen. Die Sublimationswärme $L_S = L_S(T)$ kann wie in Murphy und Koop, 2005 parameterisiert werden.

$$L_S(T) = \frac{1}{M_w} \left(46782.5 + 35.8925T - 0.07414T^2 + 541.5 \exp \left(- \left(\frac{T}{123.75} \right)^2 \right) \right) \quad (5.60)$$

Diese Parameterisierung ist für $T > 30K$ gültig. Die Wärmeleitfähigkeit der Luft k_T ist durch die Gleichung

$$k_T = \frac{a_k T^{b_k}}{T + T_k \cdot 10^{\frac{c_k}{T}}} \quad (5.61)$$

gegeben. Wir orientieren uns dabei an der Parameterisierung aus Dixon, 2007 und verwenden deren korrigierte Version aus Porz u. a., 2018. Die Wärmeleitung der Luft mit kinetischer Korrektur wird mit k_T^* bezeichnet. Man erhält diese, indem man die Wärmeleitung der Luft mit einem Korrekturfaktor multipliziert

$$k_T^* = k_T f_k(r, a, b_k) \quad (5.62)$$

Die Größen a_k, b_k, c_k und T_k sind Konstanten. Auf die Korrektur der Wärmeleitung wird weiter unten eingegangen.

Diffusionskonstante

Durch Anwendung des ersten Fick'schen Gesetzes, das den Transport von Wasserdampf hin zum Eiskristall beschreibt, tritt die Diffusionskonstante D_v in der Wachstumsgleichung auf. Siehe dazu (5.31). Die Diffusionskonstante D_v kann durch die Beziehung

$$D_v = D_{v0} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{d_T} \frac{p_0}{p} \quad (5.63)$$

beschrieben werden. Diese Parameterisierung ist in Hall und Pruppacher, 1976 und Pruppacher und Klett, 2004 gegeben. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass in Hall und Pruppacher, 1976 ein gültiger Temperaturbereich von -80°C bis $+40^\circ\text{C}$ und bei Pruppacher und Klett, 2004 von -40°C bis $+40^\circ\text{C}$ angegeben ist.

Am Eiskristallrand herrscht keine exakte Sättigung, sondern immer noch eine kleine Übersättigung vor. Man kann diesen Effekt berücksichtigen, indem man eine modifizierte Diffusionskonstante einführt. Die Herleitung dieser Diffusionskonstante wird im Folgenden erläutert.

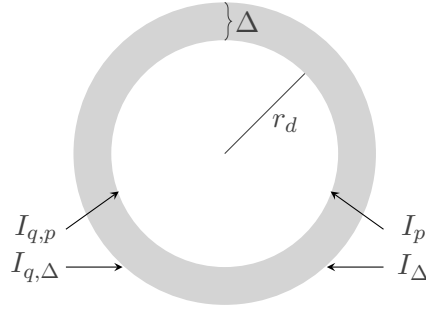


Abbildung 5.5: Wachstumsprozesse am Eiskristall. Sphärischer Eiskristall mit Radius r_d . Es werden die Flussdichten direkt am Eiskristall und im Abstand Δ vom Eiskristall gezeigt.

Mit Φ_{eq} bezeichnen wir den Fluss, der vorherrscht, wenn der Eiskristall weder wächst noch schrumpft. Er befindet sich dann im Gleichgewicht. Außerdem gehen wir davon aus, dass der Fluss Φ_p , der auf den Eiskristall trifft, überwiegt, da für das Wachstum eine Wasserdampfübersättigung angenommen wird. Es soll der Anteil des Flusses definiert werden, der tatsächlich zum Eiskristallwachstum beiträgt.

$$\Phi_{\text{net}} = \alpha_m(\Phi_p - \Phi_{\text{eq}}) = \frac{\alpha_m}{4} \bar{c}_v \delta n_\Delta \quad (5.64)$$

Der Massenakkommodationskoeffizient α_m kann als Maß für die Effizienz betrachtet werden, mit der Moleküle des Wasserdampfes vom Eiskristall eingefangen werden. Der Faktor $\frac{1}{4}$ ist die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Partikel, das sich nahe der Eiskristalloberfläche befindet, auf diese Oberfläche stößt. Mit \bar{c}_v bezeichnen wir die mittlere Geschwindigkeit der Wassermoleküle. Sie ist durch die Gleichung

$$\bar{c}_v = \sqrt{\frac{8R_v T}{\pi}} \quad (5.65)$$

gegeben. (siehe z. B. Pruppacher und Klett, 2004). Damit beschreibt $\frac{1}{4} \bar{c}_v \delta n_\Delta$ die Flussdichte, die auf die Eiskristalloberfläche trifft und zum Wachstum des Eiskristalls beiträgt.

Damit erhält man eine modifizierte Version von (5.42), die das Eiskristallwachstum beschreibt und die geringe Übersättigung am Eiskristallrand berücksichtigt.

$$\frac{dm}{dt} = M_w \Phi_{\text{net}} A_p = \pi \alpha_m M_w \bar{c}_v r_d^2 \delta n_\Delta \quad (5.66)$$

Dabei gilt $\delta n_\Delta = n_\Delta - n_{\text{eq}}$. Das wirft die Frage auf, wie man δn_Δ bestimmen kann.

Man betrachtet zwei Flüsse. Sie werden in Abbildung 5.5 veranschaulicht. Der Fluss direkt am Eiskristallrand beträgt

$$I_p = A_p \Phi_{\text{net}} = 4\pi r_d^2 \Phi_{\text{net}}. \quad (5.67)$$

Der Fluss, der sich aus der entfernten Umgebung in Richtung Eiskristall bewegt, ist durch die Beziehung

$$I_\Delta = A_i \Phi_\Delta = 4\pi(r_d + \Delta)^2 \Phi_\Delta \quad (5.68)$$

gegeben. Für die Größe Δ wird die folgende Gleichung

$$\Delta = c_{\text{cunn}} \tilde{\lambda} \quad (5.69)$$

mit dem Cunningham-Faktor c_{cunn} und der mittleren freien Weglänge für Wassermoleküle $\tilde{\lambda}$ angegeben. Damit besitzt Δ die gleiche Größenordnung wie die mittlere freie Weglänge. Der Cunningham-Faktor c_{cunn} ist eine Konstante, für die mittlere freie Weglänge $\tilde{\lambda}$ gilt nach Pruppacher und Klett, 2004

$$\tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}_0 \left(\frac{T}{T_{\tilde{\lambda}}} \right) \left(\frac{p_{\tilde{\lambda}}}{p} \right). \quad (5.70)$$

mit Konstanten $\tilde{\lambda}_0$, $T_{\tilde{\lambda}}$ und $p_{\tilde{\lambda}}$.

Die Flussdichte, die sich durch den Fluss aus der entfernten Umgebung des Eiskristalls ergibt, kennen wir bereits

$$\Phi_{\Delta} = -D_v \frac{dn}{dr} \Big|_{r_d+\Delta} = -D_v \frac{n_{\infty} - n_{\Delta}}{r_d + \Delta}. \quad (5.71)$$

Durch Gleichsetzen der beiden Flüsse gelangt man zu dem Ausdruck

$$n_{\Delta} - n_{\text{eq}} = \frac{1}{1 + \frac{r_d \alpha_m \bar{c}_v}{4D_v} \frac{r_d}{r_d + \Delta}} (n_{\infty} - n_{\text{eq}}). \quad (5.72)$$

Dieser kann in die Wachstumsgleichung (5.66) eingesetzt werden. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{dm}{dt} &= \pi \alpha_m M_w \bar{c}_v r_d^2 \frac{1}{1 + \frac{r_d \alpha_m \bar{c}_v}{4D_v} \frac{r_d}{r_d + \Delta}} (n_{\infty} - n_{\text{eq}}) \\ &= 4\pi M_w r_d \frac{D_v}{\frac{4D_v}{r_d \alpha_m \bar{c}_v} + \frac{r_d}{r_d + \Delta}} (n_{\infty} - n_{\text{eq}}) \\ &= 4\pi M_w r_d D_v^* (n_{\infty} - n_{\text{eq}}) \end{aligned} \quad (5.73)$$

mit der modifizierten Formel für die Diffusivität D_v^*

$$D_v^* = \frac{D_v}{\frac{4D_v}{r_d \alpha_m \bar{c}_v} + \frac{r_d}{r_d + \Delta}} = \frac{D_v}{\frac{r_d}{r_d + \Delta} + \frac{b_{\text{Diff}}}{r_d}} = D_v f(r_d, \Delta, b_{\text{Diff}}). \quad (5.74)$$

Da am Eiskristallrand eine geringe Übersättigung erhalten bleibt, ändert sich der Betrag der freigesetzten latenten Wärme. Man versucht diesen Effekt zu berücksichtigen, indem man den Faktor, der die Wärmeleitfähigkeit beschreibt, modifiziert.

Man betrachtet wieder zwei Flüsse. Für Flussdichte direkt am Eiskristallrand erhält man eine ähnliche Beschreibung wie oben

$$\Phi_{q,p} = \frac{1}{4} \bar{c}_{\text{Luft}} n_{\text{Luft}} c_p \alpha_T (T_p - T_{\Delta}). \quad (5.75)$$

Hier ist $\frac{1}{4} \bar{c}_{\text{Luft}} n_{\text{Luft}}$ die Anzahl der Luftmoleküle, die gegen die Eiskristalloberfläche stoßen. Mit c_p wird die molare Wärmekapazität von Luft und mit α_T der thermale Akkomodationskoeffizient, ein Maß für die Effektivität mit der die gasförmigen Moleküle thermische

Energie aufnehmen. Der Temperaturgradient zwischen der Eiskristalloberfläche und der Luft im Abstand Δ zum Eiskristall ist durch $(T_p - T_\Delta)$ gegeben. Dabei ist T_p die Temperatur auf der Eiskristalloberfläche und T_Δ die Lufttemperatur am Rand im Abstand Δ . Damit beschreibt $c_p \alpha_T (T_p - T_\Delta)$ die Energie die von den Molekülen transportiert wird. Dadurch ergibt sich der folgende Fluss

$$I_{q,p} = A_p \Phi_{q,p} = \pi r_d^2 \bar{c}_{\text{Luft}} n_{\text{Luft}} c_p \alpha_T (T_p - T_\Delta) \quad (5.76)$$

Der Fluss, der aufgrund des Temperaturgradienten mit der entfernten Umgebung herrscht, ist bereits bekannt.

$$I_{q,\Delta} = 4\pi (r_d + \Delta)^2 k_T \frac{T_\Delta - T_\infty}{r_d + \Delta} \quad (5.77)$$

Durch Gleichsetzen der Flüsse gelangt man zu der Beziehung

$$T_p - T_\Delta = \frac{4k_T}{\alpha_T \bar{c}_{\text{Luft}} n_{\text{Luft}} c_p} \frac{r_d + \Delta}{r_d^2} (T_\Delta - T_\infty). \quad (5.78)$$

Wir definieren $b_W = \frac{4k_T}{\alpha_T \bar{c}_{\text{Luft}} n_{\text{Luft}} c_p}$. Es gilt dann

$$T_p - T_\infty = \left(\frac{(r_d + \Delta)b_W}{r_d^2} + 1 \right) (T_\Delta - T_\infty) \quad (5.79)$$

Dazu hat man die Identität $T_p - T_\infty = T_p - T_\Delta + T_\Delta - T_\infty$ verwendet. Man betrachtet eine modifizierte Version von (5.53). Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{l_S}{M_w} \frac{dm}{dt} &= 4\pi (r_d + \Delta) k_T (T_\Delta - T_\infty) \\ &= 4\pi r_d \frac{k_T}{\frac{r_d}{r_d + \Delta} + \frac{b_W}{r_d}} (T_p - T_\infty) \\ &= 4\pi r_d k_T^* (T_p - T_\infty). \end{aligned} \quad (5.80)$$

Man gelangt zu einer ähnlichen Gleichung wie weiter oben, allerdings mit einem angepassten Wärmeleitkoeffizienten, der wie folgt definiert ist

$$k_T^* = \frac{k_T}{\frac{r_d}{r_d + \Delta} + \frac{b_W}{r_d}} = k_T f_W(r_d, \Delta, b_W) \quad (5.81)$$

Wenn man Berechnungen durchführt, bei denen viele Eiskristalle modelliert werden, kann ein gemittelter Radius $r = \left(\frac{3m}{4\pi\rho_b} \right)^{\frac{1}{3}}$ mit der Eisdichte ρ_b verwendet werden.

Ventilationskoeffizient

Der Ventilationskoeffizient f_v ist ein Korrekturfaktor für Diffusivität. Man kann einen Fit von f_v angeben, der durch die Schmidt-Zahl und die Reynolds-Zahl bestimmt wird.

$$f_v = 1 + c_\chi \chi^2 = 1 + c_\chi N_{Sc}^{\frac{2}{3}} N_{Re} \quad (5.82)$$

Man findet diesen Ausdruck in Pruppacher und Klett, 2004. Mit der Schmidt- und der Reynoldszahl kann man dann die Korrekturgröße

$$\chi = N_{Sc}^{\frac{1}{3}} N_{Re}^{\frac{1}{2}} \quad (5.83)$$

eingeführen. Für säulenförmige Kristalle ist also der Korrekturfaktor f_v ein Polynom zweiten Grades in χ . Es steht kein Korrekturfaktor f_v für ellipsoidförmige Kristalle zur Verfügung, deshalb verwenden wir den Korrekturfaktor für säulenförmige Kristalle.

Im Folgenden wird gezeigt, wie man die Schmidt- und Reynolds-Zahlen berechnen kann. Die Schmidt-Zahl ist durch

$$N_{Sc} = \frac{\mu}{\rho D_v} \quad (5.84)$$

gegeben. Hier bezeichnet μ die dynamische Viskosität der Luft, für die nach Dixon, 2007

$$\mu = \frac{a_\mu T^{b_\mu}}{T + T_\mu} \quad (5.85)$$

gilt. Die Größen a_μ , b_μ und T_μ sind konstant.

Gemäß Pruppacher und Klett, 2004 gilt für die Reynolds-Zahl

$$N_{Re} = \frac{\rho}{\mu} (v_t L) \quad (5.86)$$

mit der Fallgeschwindigkeit v_t und der Länge L des Eiskristalls. In Spichtinger und Gierens, 2009a wurde v_t wie folgt parameterisiert

$$v_t = v_{t0} c(p, T). \quad (5.87)$$

Der Faktor v_{t0} hängt von der Eiskristallmasse m ab. Man erhält durch folgende Beziehung einen guten Fit (Spichtinger, o.D.)

$$v_{t0} \approx v_{t0, \text{fit}}(m, m_0, a_v, b_v, c_v) = a_v m^{b_v} \left(\frac{m_0^{b_v c_v}}{m_0^{b_v c_v} + m^{b_v c_v}} \right)^{\frac{1}{c_v}}. \quad (5.88)$$

Damit wird eine stückweise Darstellung, die beispielsweise in Spichtinger und Gierens, 2009a zu finden ist, vermieden. Außerdem ist diese Darstellung stetig. Durch die Größe $c(p, T)$ werden Temperatur- und Druckabhängigkeit der Fallgeschwindigkeit berücksichtigt. Sie ist durch

$$c(p, T) = \left(\frac{p}{p_c} \right)^{a_c} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{b_c} \quad (5.89)$$

gegeben. Die Größen p_c , a_c , T_c und b_c sind konstant mit konstanten Werten für a_v , b_v , c_v und m_0 .

Zur Approximation der Reynolds-Zahl bietet es sich an, die folgende Beziehung zu verwenden

$$L v_{t0} \approx a_v m^{b_v + c_v} \left(\frac{m_0^{c_v}}{m_0^{c_v} + m^{c_v}} \right) \quad (5.90)$$

Überführung der Parameterisierung der Wachstumsrate in Momentenschreibweise

Wir haben die Wachstumsgleichung für einen Eiskristall hergeleitet. Zur Bestimmung der Rate der Massenkonzentration q_i muss man alle vorhandenen Eiskristalle im betrachteten Luftpaket berücksichtigen. Dafür steht folgende Gleichung zur Verfügung

$$\frac{dq_i}{dt} = \int_0^\infty f(m)4\pi CD_v G_v (S_i - 1) f_v dm = 4\pi G_v D_v (S_i - 1) \int_0^\infty f(m) C f_v dm. \quad (5.91)$$

oder mit der modifizierten Diffusionskonstante D_v^*

$$\frac{dq_i}{dt} = \int_0^\infty f(m)4\pi CD_v^* G_v (S_i - 1) f_v dm = 4\pi G_v (S_i - 1) \int_0^\infty f(m) C D_v^* f_v dm. \quad (5.92)$$

Die Funktion $f(m)$ ist die Verteilungsfunktion, die angibt, wieviele Eiskristalle einer bestimmten Größe m existieren.

An dieser Stelle verwendet man eine Kontinuumshypothese. Kontinuumshypothesen sind in den Naturwissenschaften verbreitet. Sie werden beispielsweise auch in der Biologie zur Beschreibung der Populationsdynamik verschiedener Spezies verwendet, siehe dazu Murray, 2002. Eigentlich müsste man den Beitrag von jedem einzelnen Eiskristall aufsummieren. Stattdessen nehmen wir in (5.91) und (5.92) eine kontinuierliche Verteilung der Eiskristalle an. Damit ergibt sich das Integral. Die Kontinuumshypothese ist gerechtfertigt, wenn sehr viele Eiskristalle vorliegen. Allerdings müssen diese für die Gültigkeit der Wachstumsgleichung auch weit genug auseinander liegen, damit die Randbedingungen an die molare Wasserdampfkonzentration und die Temperatur erfüllt werden. Man arbeitet hier mit idealisierten Annahmen, deren Gültigkeit zu überprüfen bleibt. Ziel ist es jetzt, die Integrale in den Gleichungen (5.91) und (5.92) auszuwerten.

Man erhält eine gute Approximation, wenn man für m in $C(m)$, $D_v^*(m)$ und $f_v(m)$ Vielfache der mittleren Massen einsetzt, wobei die mittlere Masse durch

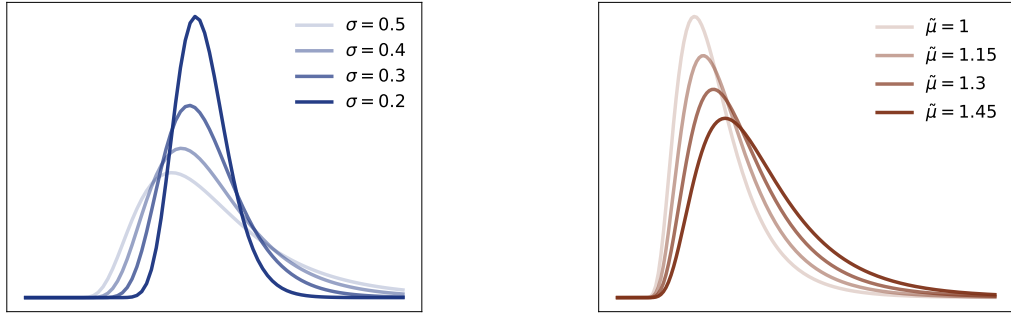
$$\bar{m} = \frac{q_i}{n_i} \quad (5.93)$$

gegeben ist (Spichtinger, o.D.). Diese Beobachtung wird bei der Auswertung der Integrale in (5.91) und (5.92) helfen.

Für die Eiskristalle nehmen wir eine Massenverteilung, die durch eine logarithmische Normalverteilung beschrieben werden kann, an. In der Wolkenphysik werden auch andere Verteilungen verwendet. Die Arbeit Jawitz, 2004 beschreibt verwendete Verteilungsfunktionen. Abbildung 5.6 zeigt die Dichtefunktionen einer logarithmischen Normalverteilung bei Variation der Parameter σ und $\tilde{\mu}$. Es gilt damit

$$\begin{aligned} f(m) &= \frac{n_i}{\sqrt{2\pi}\sigma m} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\log(m) - \tilde{\mu}}{\sigma}\right)^2\right) \\ &= \frac{n_i}{\sqrt{2\pi} \log(\sigma_m) m} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\log\left(\frac{m}{m_m}\right)}{\log(\sigma_m)}\right)^2\right). \end{aligned} \quad (5.94)$$

Diese Darstellungen sind in Spichtinger und Gierens, 2009a und Jawitz, 2004 zu finden. Die logarithmische Normalverteilung hängt also von zwei Parametern $\tilde{\mu} = \log(m_m)$ und



(a) Der Parameter σ wird variiert, $\tilde{\mu}$ wird konstant gehalten.

(b) Der Parameter $\tilde{\mu}$ wird variiert, σ wird konstant gehalten.

Abbildung 5.6: Dichtefunktionen einer logarithmischen Normalverteilung

$\sigma = \log(\sigma_m)$ ab. Der Median ist durch $\exp(\tilde{\mu}) = m_m$ gegeben. Man nennt die Größe m_m auch die Modalmasse und σ_m ist die geometrische Breite. Außerdem ist n_i die Teilchenanzahl der Ausgangsverteilung. An dieser Stelle soll noch die Größe

$$r_0 = \exp\left((\log(\sigma_m))^2\right), \quad (5.95)$$

definiert werden. Diese Notation erweist sich bei der Auswertung der Momente als günstig. Sie sind durch folgende Gleichung gegeben

$$\int_0^\infty f(m)m^k dm = \exp\left(k\tilde{\mu} + \frac{(k\tilde{\mu})^2}{2}\right) = \tilde{\mu}_k[m] = n_i \bar{m}^k r_0^{\frac{k(k-1)}{2}}. \quad (5.96)$$

Damit gilt

$$\int_0^\infty f(m)a_i m^{b_i} dm = n_i a_i \bar{m}^{b_i} r_0^{\frac{b_i(b_i-1)}{2}} = n_i A_i \bar{m}^{b_i} \quad (5.97)$$

mit $A_i = a_i r_0^{\frac{b_i(b_i-1)}{2}}$. Siehe dazu Jawitz, 2004 und Spichtinger und Gierens, 2009a. Um (5.97) anzuwenden, muss man $CD_v f_V$ in die Form $\sum a_i m^{\alpha_i}$ umschreiben. Dazu machen wir die folgenden Überlegungen:

Die Kapazität wurde weiter oben in Abhängigkeit von der Länge L und der Exzentrizität ϵ ausgedrückt. Wir benötigen einen Ausdruck, der von der Masse m abhängt. Einerseits hat man damit nur noch einen Freiheitsgrad zur Verfügung, andererseits sind L und ϵ Größen, die das Volumen kennzeichnen. Man kann einen Freiheitsgrad eliminieren, indem man einen funktionalen Zusammenhang der beiden Halbachsen für Eiskristalle annimmt. Außerdem wird die Dichte als konstant angenommen. Damit ist es möglich, Volumina in Massen umzurechnen. Die Kapazität $C(m)$ kann durch die folgende stetige Funktion approximiert werden

$$C(m) \approx a_1 m^{b_1} + a_2 m^{b_2} \quad (5.98)$$

mit Konstanten a_1, a_2, b_1, b_2 (P. Spichtinger, persönliche Mitteilung, 22.11.2019). Alternativ ist es möglich, die Kapazität durch eine stückweise definierte Funktion der Form

$$C(m) \approx a_i m^{b_i}, \quad (5.99)$$

zu beschreiben. Dabei sind a_i und b_i für verschiedene Größenbereiche stückweise konstant, siehe Spichtinger und Gierens, 2009a. Wir werden mit (5.98) arbeiten.

Man kann bei der logarithmischen Normalverteilung eine Breite von $r_0 = 3$ wählen. Für die kinetische Korrektur erhält man dann eine gute Näherung, wenn man eine skalierte mittlere Masse der Form

$$m_1 = c_1 \bar{m}. \quad (5.100)$$

benutzt (P. Spichtinger, persönliche Mitteilung 21.11.2019). Dann haben wir

$$r_1 = \left(\frac{3}{4\pi\rho_b} c_1 m \right)^{\frac{1}{3}} = c_m \bar{m}^{\frac{1}{3}}. \quad (5.101)$$

Damit und mit Gleichung (5.74) erhalten wir

$$D_v^* \approx D_v(r_1) =: \tilde{D}_v^*. \quad (5.102)$$

Man verwendet in Gleichung (5.101) einen Kugelradius, da man annimmt, dass die kinetische Korrektur vor allem auf kleine Eiskristalle einen Einfluss hat. Diese werden als nahezu kugelförmig angenommen. Indem man die skalierte Masse aus (5.100) benutzt, kann man die Abhängigkeit vom Radius r und damit auch von der Masse m aus f_v eliminieren.

Zur Berechnung der Ventilationskorrektur benötigt man die Reynoldszahl, die von der Masse des Eiskristalls abhängt. Man kann stattdessen ebenfalls eine skalierten Masse

$$m_2 = c_2 \bar{m}, \quad (5.103)$$

verwenden, wobei c_2 eine Konstante ist (P. Spichtinger, persönliche Mitteilung 21.11.2019). Damit entfällt die Abhängigkeit von der Eiskristallmasse und es gilt

$$f_v \approx 1 + c_\chi N_{Sc}^{\frac{2}{3}} c(p, T) \frac{\rho}{\mu} v_{L, \text{fit}}(m_2, m_0) =: \tilde{f}_v. \quad (5.104)$$

Für das Depositionswachstum gilt dann

$$\text{Dep}_q = 4\pi G_v (S_i - 1) D_v \tilde{f}_v n_i \left(a_1 \bar{m}^{b_1} r_0^{\frac{(b_1-1)b_1}{2}} + a_2 \bar{m}^{b_2} r_0^{\frac{(b_2-1)b_2}{2}} \right) \quad (5.105)$$

oder

$$\text{Dep}_q = 4\pi G_v (S_i - 1) \tilde{D}_v^* \tilde{f}_v n_i \left(a_1 \bar{m}^{b_1} r_0^{\frac{(b_1-1)b_1}{2}} + a_2 \bar{m}^{b_2} r_0^{\frac{(b_2-1)b_2}{2}} \right). \quad (5.106)$$

Für die Verdampfung von Eiskristallen wählt man

$$\text{Evap}_n = \frac{n_i}{q_i} \text{Dep}_q H(1 - S_i) \quad (5.107)$$

mit der Heaviside-Funktion

$$H(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.108)$$

Die Heaviside-Funktion sorgt dafür, dass Verdampfung nur bei Untersättigung stattfindet. Gleichung (5.107) besagt, dass die zeitliche Änderung der Anzahlkonzentration der Eiskristalle, multipliziert mit der mittleren Masse der Eiskristalle, gleich der zeitlichen Änderung der Massenkonzentration durch Verdampfen ist.

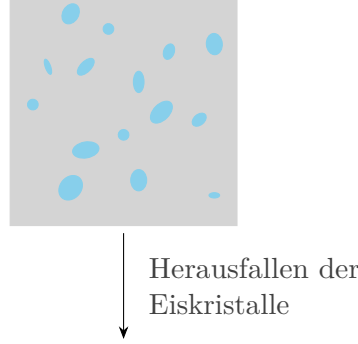


Abbildung 5.7: Veranschaulichung des Sedimentationsprozesses: Ellipsoidförmige Eiskristalle fallen infolge der Gravitationskraft aus dem Luftpaket. Wir nehmen an, dass keine Kristalle von oben in das Luftpaket fallen.

5.2.2 Sedimentation

Die Sedimentation beschreibt die Veränderung der Massen- und Anzahlkonzentration von Eiskristallen durch Herausfallen infolge der Gravitationskraft. Wir nehmen an, dass nur Eiskristalle durch die untere Wand des Luftpakets herausfallen. An allen anderen Wänden des Luftpakets findet kein Massenaustausch mit der Umgebung statt. Diese Annahmen werden in Abbildung 5.7 veranschaulicht. Ausgangspunkt unserer Betrachtungen ist die Kontinuitätsgleichung

$$\left. \frac{d\rho q_i}{dt} \right|_{\text{Sedimentation}} = - \frac{d\rho q_i v_q}{dz}. \quad (5.109)$$

Mit ρ wird die Dichte von Luft bezogen auf eine Einheitsvolumen bezeichnet. Außerdem gilt $q_i v_q = \int_0^\infty m f(m) v dm$, wobei mit v die Geschwindigkeit der Eiskristalle bezeichnet wird. Gleichung (5.109) beschreibt die Änderung der Eiskristallmasse bezogen auf ein Einheitsvolumen. Wenn wir annehmen, dass ρ zeitlich konstant ist, kann der Einfluss des Sedimentationsprozesses auf die Massendichte durch die Beziehung

$$\text{Sed}_q = \left. \frac{dq_i}{dt} \right|_{\text{Sedimentation}} = - \frac{1}{\rho} \frac{d\rho q_i v_q}{dz}. \quad (5.110)$$

beschrieben werden. Für die Anzahlkonzentration steht folgende analoge Beziehung zur Verfügung

$$\text{Sed}_n = \left. \frac{dn_i}{dt} \right|_{\text{Sedimentation}} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho n_i v_n}{\partial z}. \quad (5.111)$$

mit $n_i v_q = \int_0^\infty f(m) v dm$.

$$v_q = c_q v_{t0,\text{fit}}(\bar{m}, m_{q0}) c(p, T), \quad (5.112a)$$

$$v_n = c_n v_{t0,\text{fit}}(\bar{m}, m_{n0}) c(p, T). \quad (5.112b)$$

Durch die Gleichung (5.88) ist $v_{t0,\text{fit}}$ gegeben. Mit (5.89) erhalten wir $c(p, T)$. Außerdem gilt $c_q = r_0^{\frac{b_s(b_s+1)}{2}}$ und $c_n = r_0^{\frac{b_s(b_s-1)}{2}}$ mit einer Konstanten b_s .

Als Approximation, die die vertikale Ortsableitung vermeidet, können die Beziehungen

$$\text{Sed}_q = - \frac{1}{\Delta z} v_q q_i \quad (5.113)$$

$$\text{Sed}_n = -\frac{1}{\Delta z} v_n n_i \quad (5.114)$$

verwendet werden (siehe Spichtinger, o.D.).

5.2.3 Nukleation

In unserem Modell soll homogene Nukleation betrachtet werden. Es wird also davon ausgegangen, dass wässrige Schwefelsäuretröpfchen als Aerosole vorliegen. Diese gefrieren und werden damit in Eiskristalle umgewandelt. Wir beschreiben die Parameterisierung aus Marschalik und Spichtinger, o.D. . Eine weitere Parameterisierung des Nukleationsprozesses findet sich in Koop u. a., 2000. Auf diese wird in Marschalik und Spichtinger, o.D. Bezug genommen. Für die Parameterisierung der Nukleation nimmt man an, dass diese proportional zum Gesamtvolumen des vorhandenen Volumens der Lösungströpfchen ist. Es kann also folgender Ansatz gewählt werden

$$\text{Nuc}_n = J V_{\text{sol}} n_a \quad (5.115)$$

mit der Nukleationsrate $J(S_i, T)$, der Gesamtanzahlkonzentration der Lösungströpfchen n_a und dem mittleren Volumen eines Lösungströpfchens V_{sol} . Für V_{sol} kann man die Beziehung

$$V_{\text{sol}} = \frac{3}{4} \pi r_{\text{sol}}^3 c_{\text{sol}} \quad (5.116)$$

angeben. Dabei ist r_{sol} der Modalradius und c_{sol} ein Korrekturfaktor, der aus der Annahme einer logarithmischen Normalverteilung resultiert. Dieser kann angegeben werden als

$$c_{\text{sol}} = \exp\left(\frac{9}{2} \log(\sigma_r)^2\right) \quad (5.117)$$

Für die Anzahl der Lösungstropfen pro Kilogramm Luft n_a hat folgende Beziehung Gültigkeit

$$n_a = \frac{N_a}{\rho} \quad (5.118)$$

Dabei kann N_a als konstant angenommen werden und beschreibt die Anzahl der Lösungströpfchen pro Volumeneinheit Luft. Gleichung (5.118) dient also dazu, die Anzahl der Lösungströpfchen pro Volumeneinheit in die Anzahl der Lösungströpfchen pro Masseneinheit umzurechnen. Für die Nukleationsrate $J(S_i, T)$ steht die Parameterisierung

$$J(S_i, T) = 10^{A(T)(S_i - S_{i_0}(T)) + 16} \quad (5.119)$$

zur Verfügung. Für $A(T)$ kann man einen linearen Fit in T ansetzen

$$A(T) = a_1^{\text{nuk}} \left(a_{w1}^{\text{nuk}} T + a_{w0}^{\text{nuk}} \right) \quad (5.120)$$

Außerdem kann S_{i_0} durch ein quadratisches Polynom in T approximiert werden

$$S_{i_0} = a_{s2}^{\text{nuk}} T^2 + a_{s1}^{\text{nuk}} T + a_{s0}^{\text{nuk}} \quad (5.121)$$

Die Nukleationsrate für die Massendichte der Eiskristalle kann mithilfe der Beziehung

$$\text{Nuc}_q = m_{\text{nuk}} \text{Nuc}_n \quad (5.122)$$

berechnet werden. Dabei ist m_{nuk} eine typische Masse der nukleierten Aerosoltröpfchen. Abschließend sei noch bemerkt, dass man in das Modell eine Gleichung für n_a einbauen könnte. Es wird darauf verzichtet, da die Anzahl der Aerosole in der Regel um ein bis zwei Ordnungen größer ist, als die Anzahl der Eiskristalle. Es ist also ein genügend großer Vorrat an Aerosolen vorhanden, damit ständig Nukleation stattfinden kann (P. Spichtinger, persönliche Mitteilung 21.11.2019).

5.3 Das Eiswolkenchema

Mit den vorangegangenen Herleitungen kann das Eiswolkenchema wie folgt angegeben werden

$$\dot{n}_i = \text{Nuc}_n + \text{Evap}_n + \text{Sed}_n, \quad (5.123a)$$

$$\dot{q}_i = \text{Nuc}_q + \text{Dep}_q + \text{Sed}_q, \quad (5.123b)$$

$$\dot{S}_i = \left(\frac{Lg}{c_p R_v T^2} - \frac{g}{R_a T} \right) S_i w(t) - \epsilon \frac{p}{p_{si}(T)} (\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q), \quad (5.123c)$$

$$\dot{T} = -\frac{g}{c_p} w(t) + \frac{L_s}{c_p} (\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q), \quad (5.123d)$$

$$\dot{p} = -g\rho w(t). \quad (5.123e)$$

Dabei sind Nuc_n durch (5.115), Nuc_q durch (5.122), Sed_n durch (5.114), Sed_q durch (5.113), Evap_n durch (5.107) und Dep_q durch (5.105) oder (5.106) gegeben. Die Konstanten, die für die Parameterisierungen der mikrophysikalischen Wolkenprozesse benötigt werden, sind in Anhang C zusammengetragen.

Dieses System gewöhnlicher Differentialgleichungen stellt in Kapitel 7 die Grundlage für numerische Untersuchungen dar. Dort verwendete numerische Verfahren werden zunächst in Kapitel 6 beschrieben. Bei den numerischen Berechnungen des Eiswolkenmodells wird besonderes Augenmerk auf $w(t)$ gelegt. Dieser Term ist ein externes Forcing und beschreibt das Heben und Senken des betrachteten Luftpakets. Für die spätere Analyse ist es von Vorteil, idealisierte Bedingungen hinsichtlich Temperatur und Druck anzunehmen, die es ermöglichen, das Differentialgleichungssystem zu reduzieren.

Es sei noch einmal angemerkt, dass für die Herleitung des Eiswolkenmodells eine Kontinuumshypothese verwendet wurde, die es ermöglicht, die zeitliche Entwicklung eines Luftpakets in einer Eiswolke als gewöhnliche Differentialgleichung zu formulieren. Diese Annahme ist im Speziellen für Eiswolken ein Diskussionsgegenstand, da hier eher geringe Anzahlkonzentrationen für Eiskristalle auftreten. Für anwendungsorientierte Simulationen kann deshalb auch über die Verwendung und Entwicklung von Eiswolkenchemata, die auf die Kontinuumshypothese verzichten, nachgedacht werden.

Kapitel 6

Heterogene Mehrskalenverfahren

” This principle is not a theorem, but a physical proposition, that is, a vaguely stated and, strictly speaking, false assertion. Such assertions often happen to be fruitful sources for mathematical theorems.”

Arnold u. a., 2006

Heterogene Mehrskalenverfahren (engl. heterogeneous multiscale methods, HMM) sind Verfahren, die auf Probleme mit verschiedenen Zeitskalen angewendet werden können, siehe beispielsweise E, 2011. Sie stellen kein spezielles Verfahren dar, sondern bilden den Rahmen zum Design verschiedenartiger Verfahren. In den Naturwissenschaften treten sehr viele Probleme mit mehreren Zeitskalen auf. In E, 2011 wird zum Beispiel gezeigt, wie man heterogene Mehrskalenverfahren auf Problemstellungen aus der chemischen Reaktionskinetik anwenden kann. In diesem Kapitel werden mit der HMM-Strategie Verfahren hergeleitet, die im nächsten Kapitel auf das Eiswolkenmodell, das periodisch gestört wird, angewendet werden sollen.

Es kann numerisch sehr aufwendig sein, Probleme mit verschiedenen Zeitskalen mit einfachen Verfahren, wie Runge-Kutta-Verfahren, zu lösen, da dann die schnelle Zeitskala den Zeitschritt des Verfahrens bestimmen kann. Mit der Anwendung von heterogenen Mehrskalenverfahren erwartet man einen Effizienzgewinn. Anstatt die schnelle Zeitskala aufzulösen berechnet man eine gemittelte Lösung. Wir nehmen in diesem Kapitel an, dass die schnelle Zeitskala von einem Parameter der Form $\frac{1}{\varepsilon}$ mit $0 < \varepsilon \ll 1$ bestimmt wird und die langsame Zeitskala von der Ordnung $\mathcal{O}(1)$ ist. Ein effizientes Verfahren, das eine gemittelte Lösung berechnet, sollte dann einen Aufwand besitzen, der unabhängig von ε ist, da nur die schnelle Zeitskala von ε abhängt.

6.1 Periodische Mittelung

Eine ausführliche Behandlung zu analytischen Verfahren der Mittelung (engl.: averaging) angewendet auf Differentialgleichungen findet sich in Sanders u. a., 2007. Die folgende Passage folgt den Erläuterungen in diesem Buch. Später beziehen wir uns auch auf Arnold u. a., 2006.

Wir sind, motiviert durch das Eiswolkenmodell, an periodischen Mittelungsverfahren interessiert. Zunächst gehen wir von einer Differentialgleichung der folgenden Form aus

$$\dot{y} = f^1\left(y, \frac{t'}{\varepsilon}\right) + \varepsilon f^2\left(y, \frac{t'}{\varepsilon}, \varepsilon\right) \quad (6.1)$$

Durch die Transformation $t = \frac{t'}{\varepsilon}$ kann (6.1) in die folgende Form gebracht werden, mit der wir in diesem Abschnitt arbeiten,

$$\dot{x} = \varepsilon f^1(x, t) + \varepsilon^2 f^2(x, t, \varepsilon). \quad (6.2)$$

Dabei sollen $f^1(x, t)$ und $f^2(x, t, \varepsilon)$ T -periodisch in der zweiten Variablen sein. Im Folgenden werden wir uns für sehr kurze Periodendauern der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ interessieren, deshalb nennen wir t die schnelle Variable. Anstatt Gleichung (6.2) zu lösen, kann man versuchen sich auf das System

$$\dot{z} = \varepsilon \bar{f}^1(z) \quad (6.3)$$

zurückzuziehen Die Funktion $\bar{f}^1(x)$ wird durch

$$\bar{f}^1(z) = \frac{1}{T} \int_0^T f^1(z, s) ds \quad (6.4)$$

definiert. Man löst also die autonome Gleichung (6.3) anstatt des Systems (6.2). Das System kann durch die Transformation $\tau = \varepsilon t$ in das System

$$\frac{dw}{d\tau} = \bar{f}^1(w) \quad (6.5)$$

überführt werden. Dann gilt $z(t, \varepsilon) = w(\varepsilon t)$. In den sich anschließenden Abschnitten werden numerische Verfahren zur Lösung von gemittelten Flüssen beschrieben. Am Ende dieses Abschnitts wird ein Satz aus Sanders u. a., 2007 zitiert, der die Frage klärt, inwieweit die Ersetzung von (6.2) durch einen gemittelten Fluss gerechtfertigt ist.

Wir setzen voraus, dass eine zusammenhängende, offene, beschränkte Menge D , die den Anfangswert enthält, eine Konstante $L_I > 0$ und eine Konstante $\varepsilon_0 > 0$ so gewählt werden können, dass die Lösungen $x(t, \varepsilon)$ und $z(t, \varepsilon)$ auf einem Intervall $0 \leq t \leq \frac{L_I}{\varepsilon}$ für $0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0$ in D verbleiben. In Sanders u. a. (2007) wird beschrieben, wie man versuchen kann, eine solche Menge zu konstruieren.

Satz 6.1.1. *Wir nehmen an, dass f^1 Lipschitz-stetig und f^2 stetig sind. Außerdem werden ε_0 , D , und L_I so wie oben beschrieben gewählt. Dann gibt es eine Konstante $c > 0$, so dass*

$$\|x(t, \varepsilon) - z(t, \varepsilon)\| < c\varepsilon \text{ für } 0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0 \text{ und } 0 \leq t \leq \frac{L_I}{\varepsilon}. \quad (6.6)$$

gilt.

Beweis. Wir definieren zuerst den Fehler.

$$E = x(t, \varepsilon) - z(t, \varepsilon) = x(t, \varepsilon) - w(t\varepsilon)$$

Der Fehler kann auch mithilfe von Integralen formuliert werden.

$$E = \varepsilon \int_0^t \underbrace{f^1(x(s, \varepsilon), s) - \varepsilon f^2(x(s, \varepsilon), s, \varepsilon) - \bar{f}^1(z(s, \varepsilon))}_{=f^1(x(s,\varepsilon),s)-f^1(w(\varepsilon s),s)-\varepsilon f^2(x(s,\varepsilon),s,\varepsilon)+f^1(w(\varepsilon s),s)-\bar{f}^1(w(\varepsilon s)))} ds \quad (6.7)$$

Unter Verwendung der Lipschitz-Stetigkeit kann man die folgende Abschätzung für den Fehler vornehmen.

$$\begin{aligned} \|E\| &\leq \varepsilon \int_0^t \|f^1(x, s) - f^1(w, s)\| \, ds + \varepsilon^2 \left\| \int_0^t f^2(x, s, \varepsilon) \, ds \right\| + \varepsilon \left\| \int_0^t f^1(w, s) - \bar{f}(w) \, ds \right\| \\ &\leq \varepsilon L_{f^1} \int_0^t \|x - w\| \, ds + \varepsilon^2 c_0 + \varepsilon c_1 \end{aligned}$$

Es wurden außerdem das Lemma von Besjes aus Anhang D.1 und die Beschränktheit von f^2 angewendet. Damit gilt

$$\|E\| \leq \varepsilon L_{f^1} \int_0^t \|E\| \, ds + \varepsilon^2 c_0 + \varepsilon c_1$$

Anwendung des Gronwall-Lemmas aus Anhang D.2 ergibt

$$\|E\| \leq \varepsilon (c_0 L_{f^1} + c_1) \exp(L_{f^1} \varepsilon t).$$

□

Man kann außerdem nicht-autonome Probleme der folgenden Form betrachten

$$\dot{x} = f(x, \varepsilon t, t). \tag{6.9}$$

Diese Mal soll $f(x, \varepsilon t, t)$ in der dritten Variablen T -periodisch sein. Die dritte Komponente ist in diesem Fall auch die schnelle Variable, über die man mitteln möchte. Demzufolge soll eine Differentialgleichung gelöst werden, die nur von den langsamen Variablen abhängt

$$\dot{y} = \bar{f}(y, t). \tag{6.10}$$

Man mittelt über die dritte Variable, während man εt und x festhält, wie folgt

$$\bar{f}(y, \varepsilon t) = \frac{1}{T} \int_0^T f(y, \varepsilon t, s) \, ds. \tag{6.11}$$

6.2 Beispiel: Invertiertes Pendel

Das invertierte Pendel dient häufig als Testproblem für heterogene Mehrskalungsverfahren. Als Beispiele seien die Veröffentlichungen Sharp u. a., 2005, Calvo u. a., 2011a oder Calvo u. a., 2011b genannt. Man betrachtet ein auf dem Kopf stehendes Pendel, das einen instabilen Fixpunkt bei dem verschwindenden Öffnungswinkel $\theta = 0$ besitzt. Dieser instabile Fixpunkt kann durch sehr schnelle Oszillationen des Aufhängepunktes stabilisiert werden. In Abbildung 6.1 wird das invertierte Pendel veranschaulicht. Das Pendel zeigt dann ein Zweiskalenverhalten. Zum einen hat man auf der schnellen Zeitskala die stabilisierenden Oszillationen des Aufhängepunktes, zum anderen möchte man die gemittelten Schwingungen des Pendels verfolgen, die man mit heterogenen Mehrskalungsverfahren numerisch berechnen kann. Zur Verdeutlichung sei auf Abbildung 6.2 hingewiesen.

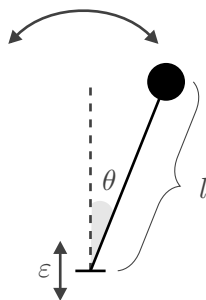


Abbildung 6.1: Veranschaulichung des invertierten Pendels. Sehr schnelle Schwingungen des Aufhängepunkts stabilisieren den Gleichgewichtspunkt bei $\theta = 0$, der ohne diese Schwingungen instabil ist.

Das invertierte Pendel wird durch das Differentialgleichungssystem

$$\dot{\theta}_1 = \theta_2 \tag{6.12a}$$

$$\dot{\theta}_2 = \frac{1}{l} \left(g + \frac{1}{\varepsilon} \sin\left(\frac{2\pi t}{\varepsilon}\right) \right) \sin(\theta_1) \tag{6.12b}$$

beschrieben. Außerdem ist es möglich, eine Differentialgleichung für den gemittelten Fluss anzugeben durch

$$\dot{\Theta}_1 = \Theta_2 \tag{6.13a}$$

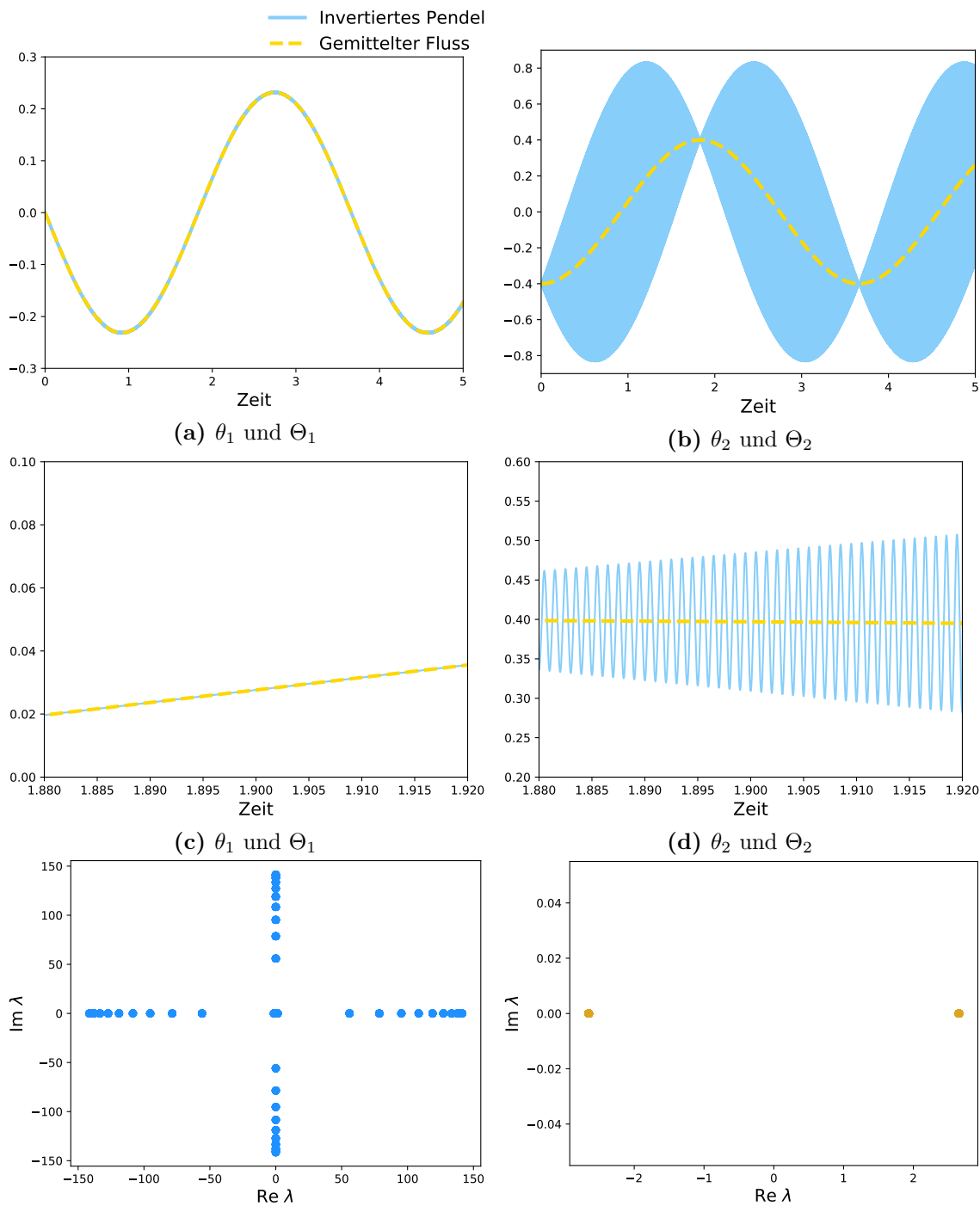
$$\dot{\Theta}_2 = \frac{g}{l} \sin(\Theta_1) - \frac{1}{8\pi^2 l^2} \sin(\Theta_1) \cos(\Theta_1). \tag{6.13b}$$

Gleichung (6.13) findet man beispielsweise in Sharp u. a., 2005. Dieses System wird in Abschnitt 6.5 für den Vergleich zwischen heterogenen Mehrskalenverfahren und dem gemittelten Fluss benötigt.

Die Abbildungen 6.2 zeigen eine numerische Lösung des invertierten Pendels (6.12) und des gemittelten Flusses (6.13). Das System (6.12) besitzt zwei inhärente Zeitskalen. Die Abbildungen 6.2a und 6.2b zeigen das Verhalten auf einer langen Zeitskala. Zu erkennen ist, dass der gemittelte Fluss (6.13) das Verhalten auf der langen Zeitskala gut wiedergibt. Die Abbildungen 6.2c und 6.2d zeigen hingegen das Verhalten auf einer kurzen Zeitskala. Auf dieser Zeitskala verhält sich der gemittelte Fluss (6.13) nahezu konstant. Außerdem wurden noch die Eigenwerte der Jacobi-Matrizen an den Knoten des Lösungsgitters berechnet. Sie werden in den Abbildungen 6.2f und 6.2e gezeigt. Die Eigenwerte deuten an, dass es sich bei dem gemittelten Fluss (6.13) um ein nicht-steifes System handelt, und es damit explizit gelöst werden kann. Die Absolutbeträge der Eigenwerte des invertierten Pendels (6.12) sind um mehrere Ordnungen größer. Damit zeichnet sich ab, dass man für verlässliche numerische Lösungen von (6.12) keine einfachen expliziten Verfahren benutzen sollte.

6.3 Heterogene Mehrskalenverfahren (HMM)

Die heterogenen Mehrskalenverfahren liefern ein allgemeines Gerüst zum Design numerischer Löser von Mehrskalenproblemen. Problemstellungen, die zu Mehrskalenproblemen



(e) Eigenwerte der Jacobi-Matrizen des invertierten Pendels (6.12) an den Gitterknoten

(f) Eigenwerte der Jacobi-Matrizen des gemittelten Flusses (6.13) an den Gitterknoten

Abbildung 6.2: Numerische Berechnung des invertierten Pendels. Blau ist das invertierte Pendel (6.12), orange der gemittelte Fluss (6.13). Es wurden folgende Parameter gewählt: $l = 0.1, g = 0.05, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-3}$

führen, stammen häufig aus den Naturwissenschaften, auch der Wolkenphysik. In diesem Kapitel betrachten wir das invertierte Pendel als Testbeispiel. Außerdem wird in Kapitel 7 das Eiswolkenchema mit periodischem Forcing-Term mit heterogenen Mehrskalungsverfahren gelöst.

Einen Überblick zu heterogenen Mehrskalungsverfahren gibt E u. a., 2007. HMM ist kein spezielles Verfahren, sondern vielmehr ein Gerüst, das sich als effektiv erwiesen hat, Verfahren, die für die Lösung bestimmter Problemklassen geeignet sind, zu konstruieren. Die Modelle, die mit solchen Verfahren gelöst werden, können sich auf verschiedenen Skalen sehr unterschiedlich verhalten. Daher rührt das Wort heterogen im Namen "Heterogene Mehrskalungsverfahren". Bei den in dieser Arbeit aufgeführten Beispielen beschränken wir uns auf zwei Skalen. Zum einen wird das in Kapitel 5 beschriebene Eiswolkenmodell mit einem periodischen Forcing-Term, zum anderen das periodisch angeregte invertierte Pendel untersucht. Die periodischen Anregungen der beiden Systeme können als sehr idealisiert angesehen werden. Gerade im Hinblick auf Anwendungen wäre es auch interessant, andere Anregungen zu betrachten.

In E u. a., 2007 wird die Idee von HMM wie folgt beschrieben: Angenommen wir sind an der Lösung eines großskaligen, gemittelten Flusses interessiert, haben aber nur ein sehr detailliertes Modell mit kleinskaligen Einflüssen zur Verfügung, das zudem numerisch aufwendig zu lösen ist. Bei den HMM tut man so, als kenne man den großskaligen Fluss. Dort, wo Information zur Lösung des großskaligen Flusses fehlt, löst man das detaillierte Modell und überträgt diese Information auf den Makro-Fluss. Die Lösung des feinen Modells findet nur lokal statt. Diese Idee wird in Abschnitt 6.5 weiter formalisiert. Zunächst behandeln wir ein Verfahren, das als Beispiel eines heterogenen Mehrskalungsverfahrens angesehen werden kann, die stroboscopic averaging method (SAM).

6.4 Eine erste Idee zur Realisierung von HMM

Es soll anhand der stroboscopic averaging method (SAM) die Grundidee von HMM gezeigt werden. Dieses Verfahren ist übersichtlich und verdeutlicht gut zugänglich das Prinzip von HMM. In Abschnitt 6.5 wenden wir uns Verfahren zu, die numerisch Integrale der Form (6.4) approximieren. Das ist bei SAM nicht notwendig. SAM wird in Calvo u. a. (2011a) beschrieben. Außerdem wird dieses Verfahren weiter in Calvo u. a. (2011b) untersucht. Es kann als ein heterogenes Mehrskalungsverfahren für eine spezielle Klasse von Problemen betrachtet werden, und zwar ist dieses Verfahren für Probleme mit einem sehr schnell oszillierendem Forcing mit einer einzelnen Frequenz geeignet, dessen Periode bekannt ist. In der Anwendung stellt dies eine große Einschränkung dar.

Analytisch betrachten wir die folgende Problemstellung

$$\frac{dy}{dt} = f\left(y, \frac{t}{\varepsilon}; \varepsilon\right) \tag{6.14a}$$

$$y(t_0) = y_0, \tag{6.14b}$$

wobei die Funktion $f(y, s; \varepsilon)$ in der zweiten Variablen $2\pi\varepsilon$ periodisch ist. Die Aufgabe besteht darin Lösungen für das System (6.14) zu finden.

Man geht davon aus, dass das Problem, das durch die gewöhnliche Differentialgleichung (6.14) beschrieben wird, steile Gradienten durch die $\frac{t}{\varepsilon}$ -Abhängigkeit der Zeitkoordinate

besitzt und eine genaue numerische Lösung viel Rechenaufwand bedeutet. Die Idee, wie man das Problem des großen Rechenaufwands umgehen kann, besteht darin, anstatt (6.14), ein einfacheres System zu integrieren, von dem man annimmt, dass es nicht-steif ist. Jedoch ist die rechte Seite des einfacheren Systems in der Regel nicht bekannt, deshalb wird die benötigte Information darüber durch lokale numerische Integration des Systems (6.14) gewonnen. Bei SAM will man eine Lösung konstruieren, die die exakte Lösung von (6.14) an bestimmten Knoten, die wir im Folgenden stroboskopische Knoten nennen, interpoliert. Angenommen der Startwert y_0 ist zum Zeitpunkt t_0 gegeben und das System (6.14) verhält sich $2\pi\varepsilon$ -periodisch in der zweiten Komponente. Dann sind die stroboskopischen Knoten t_n durch die Beziehung $t_n = t_0 + 2\pi\varepsilon n$ für $n \in \mathbb{Z}$ gegeben. Die Abbildung $t_n \rightarrow y(t_n)$ bezeichnen wir als Poincaré-Abbildung.

Wir stellen die Lösung von (6.14) in Flussnotation dar (siehe Abschnitt 2.1)

$$y(t) = \varphi_{t,t_0;\varepsilon}(y_0), \tag{6.15}$$

mit $y(t_0) = y_0$. Außerdem wird die Shift-Abbildung um $2\pi\varepsilon$ in der Zeitkoordinate definiert

$$\Psi_{t_0,\varepsilon} = \varphi_{t_0,t_0+2\pi\varepsilon;\varepsilon}. \tag{6.16}$$

Abbildung (6.16) ist $2\pi\varepsilon$ -periodisch in t_0 . Das sieht man folgendermaßen ein. Sowohl $\varphi_{t,t_0;\varepsilon}(y_0)$ als auch $\varphi_{t_0+2\pi\varepsilon,t+2\pi\varepsilon;\varepsilon}(y_0)$ erfüllen das Anfangswertproblem

$$\frac{dy}{dt} = f\left(y(t), \frac{t}{\varepsilon}; \varepsilon\right) \quad y(t_0) = y_0 \tag{6.17}$$

Bei entsprechenden Regularitätsvoraussetzungen folgt aus dem Satz von Picard-Lindelöf, dass die Lösungen übereinstimmen. Mehr dazu findet man in Abschnitt 2.1. Damit ist $\Psi_{t_0,\varepsilon} = \Psi_{t_0+2\pi\varepsilon,\varepsilon}$. Außerdem gilt

$$y(t_n) = \varphi_{t_0,t_n;\varepsilon}(y_0) = (\varphi_{t_{n-1},t_n;\varepsilon} \circ \dots \circ \varphi_{t_0,t_1;\varepsilon})(y_0). \tag{6.18}$$

Induktiv kann man daraus folgern, dass

$$y(t_n) = \Psi_{t_0;\varepsilon}^n(y_0). \tag{6.19}$$

gilt. Insbesondere interessieren wir uns für den Fall, dass $\Psi_{t_0;\varepsilon}(y_0)$ in der folgenden Form dargestellt werden kann

$$\Psi_{t_0;\varepsilon}(y_0) = y_0 + \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon^j M_j(y_0), \tag{6.20}$$

als sogenannte near-identity-map. Dies ist für das invertierte Pendel der Fall (siehe Calvo u. a. (2011a) oder Calvo u. a. (2011b)). Es wäre günstig, einen Fluss der Form

$$\frac{dY}{dt} = F_0(Y) + \varepsilon F_1(Y) + \dots \tag{6.21}$$

zu konstruieren, für den

$$Y(t_n) = \Psi_{t_0;\varepsilon}^n(y_0) \tag{6.22}$$

gilt. Gleichung (6.21) stellt im Wesentlichen eine asymptotische Entwicklung dar. Im Allgemeinen konvergiert die Reihe in (6.21) nicht. Deshalb schneidet man sie ab und erhält

$$\frac{dY}{dt} = F_0(Y) + \dots + \varepsilon^{J-1} F_{J-1}(Y). \quad (6.23)$$

Für die Lösungen von (6.23) gilt dann $|Y(t_n) - y(t_n)| = \mathcal{O}(\varepsilon^J)$, siehe Calvo u. a. (2011a) oder Calvo u. a. (2011b).

Ziel von SAM ist es, einen Fluss der Form (6.23) zu integrieren. Das Verfahren besteht aus drei Komponenten, die gemeinsam das numerische Verfahren ausmachen:

1. Makro-Löser für die Integration des gemittelten Flusses
2. Mikro-Löser für die lokalen Integrationen des Systems (6.14)
3. Finite Differenzen-Schema für die Übertragung der Information zwischen dem gemittelten Fluss und (6.14)

Mikro- und Makro-Löser können unterschiedliche numerische Verfahren sein. Wir nehmen an, dass der Makro-Löser ein numerisches Verfahren ist, das den Anfangswert y_0 und Auswertungen des gemittelten Flusses verwendet. Der Makro-Löser könnte zum Beispiel ein Runge-Kutta-Verfahren oder ein eingebettetes Runge-Kutta-Verfahren mit adaptiver Schrittweitensteuerung sein. Im Allgemeinen kennen wir keinen analytischen Ausdruck für den gemittelten Fluss $F(y)$. Um eine Approximation des gemittelten Flusses $F(Y(t_0))$ zu erhalten, wird der Mikro-Löser verwendet. Man kann beispielsweise für die Berechnungen des gemittelten Flusses das Ausgangssystem eine Periode vorwärts und eine Periode rückwärts in der Zeit mit einer Schrittweite h integrieren, wobei man $y_0 = Y(t_0)$ als Startwert zur Anfangszeit t_0 verwendet. Dadurch erhalten wir $y(t_0 - 2\pi\varepsilon)$ und $y(t_0 + 2\pi\varepsilon)$. An den stroboskopischen Zeitpunkten sollten (6.14) und der gemittelte Fluss eine gute Übereinstimmung aufweisen, also nehmen wir an, dass $Y(t_0 - 2\pi\varepsilon) = y(t_0 - 2\pi\varepsilon)$ und $Y(t_0 + 2\pi\varepsilon) = y(t_0 + 2\pi\varepsilon)$ gilt. Mit dieser Beobachtung kann man ein finites Differenzen-Schema zweiter Ordnung anwenden, um die rechte Seite des gemittelten Flusses zu approximieren.

$$F(y_0) \approx \frac{1}{4\pi\varepsilon} (Y(t_0 + 2\pi\varepsilon) - Y(t_0 - 2\pi\varepsilon)) \quad (6.24)$$

Mit dieser Information könnte man beispielsweise das explizite Euler-Verfahren mit einer Schrittweite H , die deutlich größer sein sollte als die Schrittweite h der Mikro-Integrationen, als Makro-Löser anwenden. Wir nennen dann H die Makro-Schrittweite und h die Mikro-Schrittweite. Die Wahl der Schrittweiten h und H resultiert aus dem steifen Charakter von (6.14) und dem nicht-steifen Verhalten des gemittelten Flusses. Durch Iteration dieser Schritte erhält man eine Approximation eines gemittelten Flusses auf einem groben Zeitgitter. In Abbildung 6.4 wird eine mögliche Realisierung von SAM gezeigt.

Es folgt noch eine Anmerkung zum Aufwand der Mikro-Integrationen. Um die Oszillationen aufzulösen benötigt man eine Schrittweite h der Größenordnung $2\pi\varepsilon$. Da wir über zwei Perioden integrieren ist die Intervalllänge auch von der Größenordnung $2\pi\varepsilon$. Damit ergibt sich pro Mikro-Integration ein Aufwand von $\mathcal{O}(1)$ unabhängig von ε .

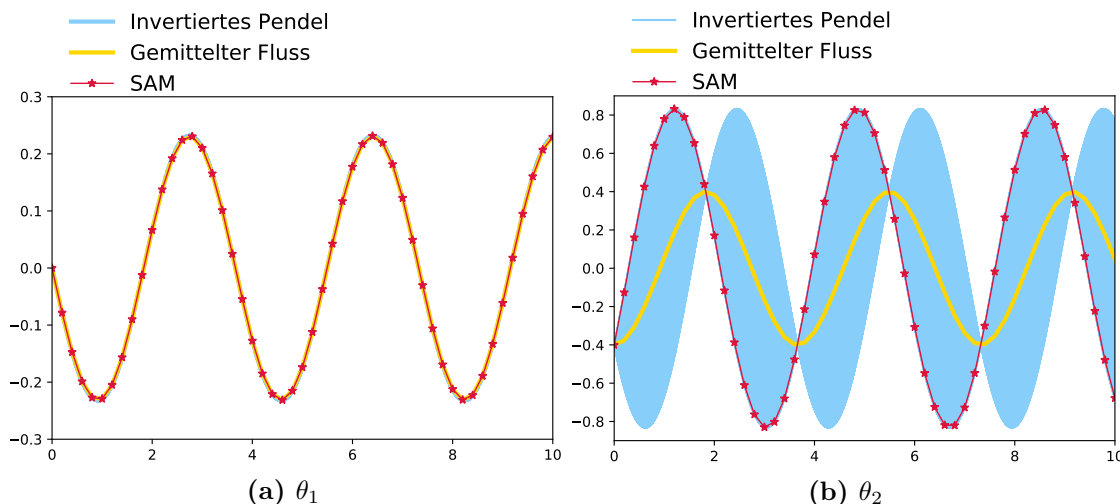


Abbildung 6.3: Numerische Berechnung des invertierten Pendels. Zusehen sind numerische Lösungen des invertierte Pendels (6.12) als Zwei-Skalen-Modell, eine Berechnung mit SAM und eine Berechnung des gemittelten Flusses (6.13).

Es ist auch möglich finite Differenzen-Schemata höherer Ordnung als 2 anzuwenden. Ein Schema der Ordnung 4 ist beispielsweise durch

$$F(y_0) \approx \frac{1}{24\pi\varepsilon} (-Y(t_0 + 4\pi\varepsilon) + Y(t_0 + 2\pi\varepsilon) - Y(t_0 - 2\pi\varepsilon) + Y(t_0 - 4\pi\varepsilon)) \quad (6.25)$$

gegeben. Im Allgemeinen benötigt man für höhere Ordnungen zusätzliche Auswertungen mit dem Mikro-Löser. Dies erhöht den Aufwand.

Wir wenden uns jetzt der Fehleranalyse von SAM zu. Diese folgt den Ausführungen in Calvo u. a., 2011b. Angenommen wir können einen Makro-Fluss, der die Bedingung (6.22) erfüllt, finden. Dann existieren drei Fehlerquellen:

1. die Approximation der rechten Seite des gemittelten Flusses durch das finite Differenzen-Schema
2. die Ersetzung der Werte, den die Poincaré-Abbildung liefert, durch die Mikro-Integrationen
3. der Fehler durch den Makro-Löser

Damit gelangt man zu einem numerischen Fehler der Ordnung

$$\mathcal{O}\left(\varepsilon^\delta + H^N + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^n\right) \quad (6.26)$$

siehe Calvo u. a., 2011b oder Anhang D.5. Im Fall eines finite Differenzen-Schemas zweiter Ordnung ist $\delta = 2$. Außerdem bezeichnen wir mit H die Makro-Schrittweite und N die Ordnung des Makro-Lösers. Analog ist h die Mikro-Schrittweite und n die Ordnung des Mikro-Lösers.

procedure SAM

Gegeben: y_0, t_0

s-stufiges Runge-Kutta Verfahren als Makro-Löser

for i=1:s **do**

$$y_{0i} = y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j, t_{0i} = t_0 + c_i H$$

Mikro-Integration: Startwerte y_{0i} **zum Startzeitpunkt** t_{0i} ,

Integration eine Periode vorwärts in der Zeit y_{0i}^+ **und rückwärts** y_{0i}^-

$$z_a = y_{0i}$$

for $t = t_{0i} : t_{0i} + 2\pi\varepsilon$ **do**

$$\text{for } m=1:s' \text{ do } \tilde{k}_m = f\left(z_a + h \sum_{n=1}^{m-1} \tilde{a}_{mn} \tilde{k}_n, t + h\tilde{c}_m\right)$$

$$z_n = z_a + h \sum_{m=1}^{s'} \tilde{b}_m \tilde{k}_m, z_a = z_n$$

$$y_{0i}^+ = z_n$$

$$z_a = y_{0i}$$

for $t = t_{0i} : t_{0i} - 2\pi\varepsilon$ **do**

$$\text{for } m=1:s' \text{ do } \tilde{k}_m = f\left(z_a - h \sum_{n=1}^{m-1} \tilde{a}_{mn} \tilde{k}_n, t + h\tilde{c}_m\right)$$

$$z_n = z_a - h \sum_{m=1}^{s'} \tilde{b}_m \tilde{k}_m, z_a = z_n$$

$$y_{0i}^- = z_n$$

$$\text{Datentransfer: } k_i = \frac{1}{4\pi\varepsilon} (y_{0i}^+ - y_{0i}^-)$$

Makro-Löser: $y_1 = y_0 + H \sum_{i=1}^s b_i k_i, t_1 = t_0 + H$

Neuer Makro-Schritt

Abbildung 6.4: Pseudocode für eine Realisierung von SAM

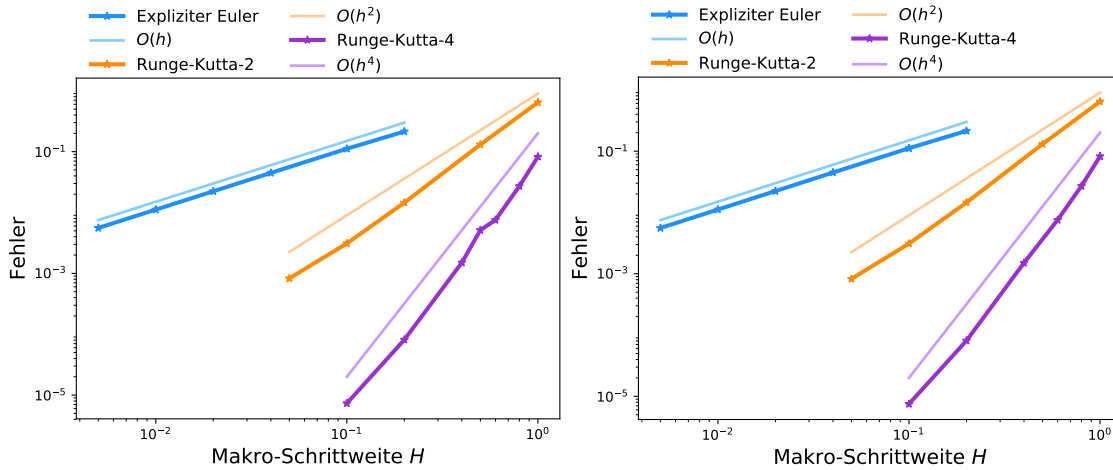
Abbildung 6.3 zeigt eine numerische Lösung des Systems (6.12), die mit SAM berechnet wurde. Außerdem erkennt man eine Darstellung der Lösung von (6.12) als Zweiskalen-Modell. SAM interpoliert lokale Extremwerte der Trajektorie, die durch 6.3 beschrieben wird. Die Anfangsbedingungen und stroboskopischen Knoten wurden dementsprechend gewählt.

Abbildung 6.5 zeigt die numerischen Fehler bei SAM. Für den Mikro-Löser wurde das klassische Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung mit einer Mikro-Schrittweite h von $5.0 \cdot 10^{-5}$, um Stabilität und Genauigkeit zu gewährleisten, verwendet. In Abbildung 6.5a wurde das Finite-Differenzen-Schema (6.24) der Ordnung zwei benutzt. Außerdem zeigt Abbildung 6.5b die numerischen Fehler bei Verwendung des Finite-Differenzen-Schemas (6.25) vierter Ordnung. Als Makro-Löser wurden Runge-Kutta-Verfahren der Ordnungen eins, zwei und vier betrachtet. Man erkennt in beiden Abbildungen, dass der Fehler des Makro-Lösers dominant ist.

6.5 HMM mit Integrationskernen

Im Folgenden wird gezeigt, wie man heterogene Mehrskalenverfahren durch die Approximation von Integralen der Form (6.4) konstruieren kann. Wir wollen die folgende steife Differentialgleichung

$$\frac{dy}{dt} = f_\varepsilon(y, t) \tag{6.27}$$



(a) Finite-Differenzen-Schema der Ordnung zwei (b) Finite-Differenzen-Schema der Ordnung vier

Abbildung 6.5: Numerische Fehler von SAM bei der Berechnung des invertierten Pendels. Als Makro-Löser wurden das explizite Euler-Verfahren, sowie die Runge-Kutta-Verfahren der Ordnungen zwei und vier angewendet. Die Parameter wurden wie folgt gewählt: $\varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-3}$, $l = 0.05$, $g = 0.1$. In den Abbildungen ist der numerische Fehler der zweiten Komponente des invertierten Pendels zum Zeitpunkt $T = 1$ zu sehen.

lösen, die kleinskalige Störungen besitzt. Heterogene Mehrskalen-Verfahren lösen dann ein sogenanntes effektives System

$$\frac{dY}{dt} = \bar{F}(Y) \tag{6.28}$$

In Abschnitt 6.1 wurden Überlegungen zu einem gemittelten Fluss gemacht. In diesem Abschnitt ist der Fall $f^2(y, t, \varepsilon) = 0$ von Interesse. Ein heterogenes Mehrskalenverfahren besteht aus folgenden Komponenten:

1. ein Verfahren, um den großskaligen bzw. gemittelten Fluss (6.3) zu integrieren
2. ein Verfahren zur Integration des vollen Modells einschließlich der kleinskaligen Störungen
3. einer Methode, die Information zwischen gemitteltem Fluss und dem vollen Modell austauscht.

Bei SAM aus Abschnitt 6.4 waren dies der Makro- und der Mikro-Löser, sowie die Finite-Differenzen-Schemata. Die Bezeichnung Makro- und Mikro-Löser werden beibehalten.

Die explizite Form des gemittelten Flusses $\bar{F}(Y)$ wird bei den vorgeschlagenen Verfahren nicht verwendet. Der kleinskalige Fluss wird integriert, um $\bar{F}(Y)$ an verschiedenen Knoten auszuwerten. Die Berechnung von $\bar{F}(Y)$ an den für den großskaligen Fluss benötigten Integrationspunkten geschieht mithilfe eines Integrationskerns. Dann kann die Zeitevolution des großskaligen Flusses erfolgen. Bemerkenswert ist, dass der Aufwand eines solchen Verfahrens nicht von ε abhängt. Der kleinskalige Fluss wird mit einem Aufwand der Ordnung $\mathcal{O}(1)$ gelöst, da das Zeitfenster des Mikro-Lösers dementsprechend klein ist. Der großskalige Fluss ist unabhängig von ε . Das Grundgerüst eines heterogenen Mehrskalenverfahrens

wird in Abbildung 6.8 zusammengefasst. Außerdem veranschaulicht Abbildung 6.6 den Datentransfer zwischen Mikro- und Makro-Löser.

Der Darstellung in Engquist und Tsai, 2005 folgend bezeichnen wir mit $\mathbb{K}^{p,q}$ den Raum möglicher Integrationskerne. Dabei gilt für eine Kernfunktion $K \in \mathbb{K}^{p,q}(I)$, falls $K \in C_c^q(\mathbb{R})$ mit $\text{supp}(K) = I$ und

$$\int_{\mathbb{R}} K(t)t^r = \begin{cases} 1 & r = 0 \\ 0 & 1 \leq r \leq p \end{cases} \quad (6.29)$$

Mit K_η soll ein skalierter Integrationskern der Form

$$K_\eta = \frac{1}{\eta} K\left(\frac{t}{\eta}\right) \quad (6.30)$$

bezeichnet werden.

Zur Berechnung der rechten Seite des effektiven Systems wurden verschiedene Integrationskerne vorgeschlagen. In Sharp u. a., 2005 findet man beispielsweise die exponentielle Kernfunktion

$$K(t) = 422.11 \exp\left(\frac{5}{4t^2 - 1}\right) \quad (6.31)$$

mit der Eigenschaft $K \in \mathbb{K}^{1,\infty}([-1, 1])$. Außerdem wird in Engquist und Tsai, 2005 der Kosinus-Kern

$$K(t) = \frac{1}{2} \chi_{[-1,1]}(t)(1 + \cos(\pi t)). \quad (6.32)$$

vorgeschlagen. Abbildung 6.7 veranschaulicht die beiden Integrationskerne für verschiedene Werte von η .

Die genannten Kernfunktionen erfüllen die Symmetriebedingung $K(t) = K(-t)$. In Engquist und Tsai, 2005 findet man auch asymmetrische Kerne. Diese werden beispielsweise dann verwendet, wenn das Zeitfenster der Mikro-Löser nicht symmetrisch um die Knoten, die für den Makro-Löser verwendet werden, angeordnet sind. In den folgenden numerischen Berechnungen wurde der exponentielle Kern verwendet.

Wir gehen der Frage nach, wie gut man mit Kernfunktionen Integrale der Form (6.4) approximieren kann und folgen dabei wieder Engquist und Tsai, 2005. Für eine Fehlerabschätzung sind einige Resultate über die verwendeten Kernfunktionen nützlich. Mit $f^{[s]}$ bezeichnen wir eine Stammfunktion von f der Ordnung s , also

$$f^{[s]} = \int_0^t f^{[s-1]}(t') dt' + C_s. \quad (6.33)$$

und definieren $f^{[0]} := f$. Mit $f^{(s)}$ bezeichnen wir die Ableitung $\frac{d^s f}{dt^s}$ der Ordnung s .

In Anhang D.3 werden Sobolev-Normen definiert. Sie werden für die Formulierung der nachstehenden Resultate benötigt. Außerdem wird in den Beweisen die Hölder-Ungleichung verwendet, siehe dazu Anhang D.4.

Hilfssatz 6.5.1. (a) Für $f \in C^p, K \in K^{s,q}$ gilt

$$\|(K_\eta * f)(t) - f(t)\| \leq C_f \eta^{\max(p,s+1)}$$

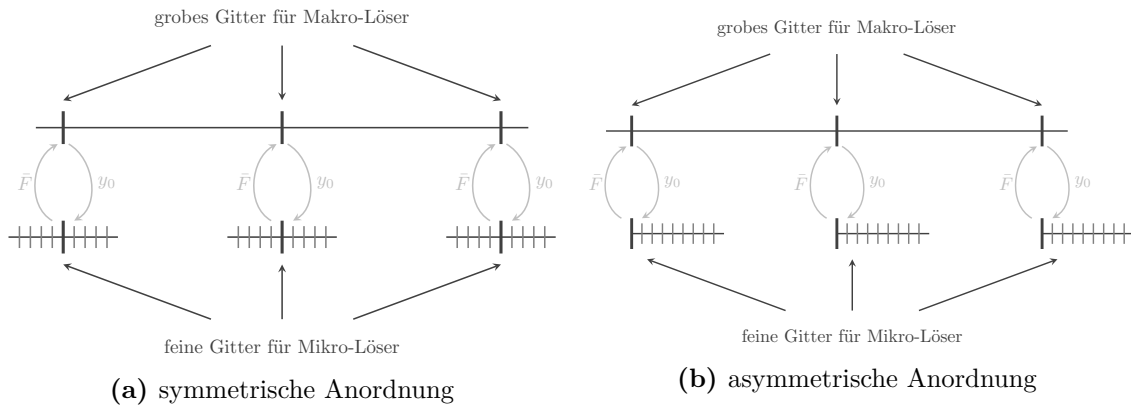


Abbildung 6.6: Gitter bei HMM. Der grobe Zeitschritt liefert den Startwert für den Mikro-Löser. Mithilfe der Mikro-Integrationen berechnet man den gemittelten Fluss \bar{F} . Dabei kann man vorwärts und rückwärts in der Zeit integrieren (Abbildung 6.6a) oder auch nur vorwärts (Abbildung 6.6b). Abhängig davon werden die Gitterknoten für die Mikro-Integration gewählt.

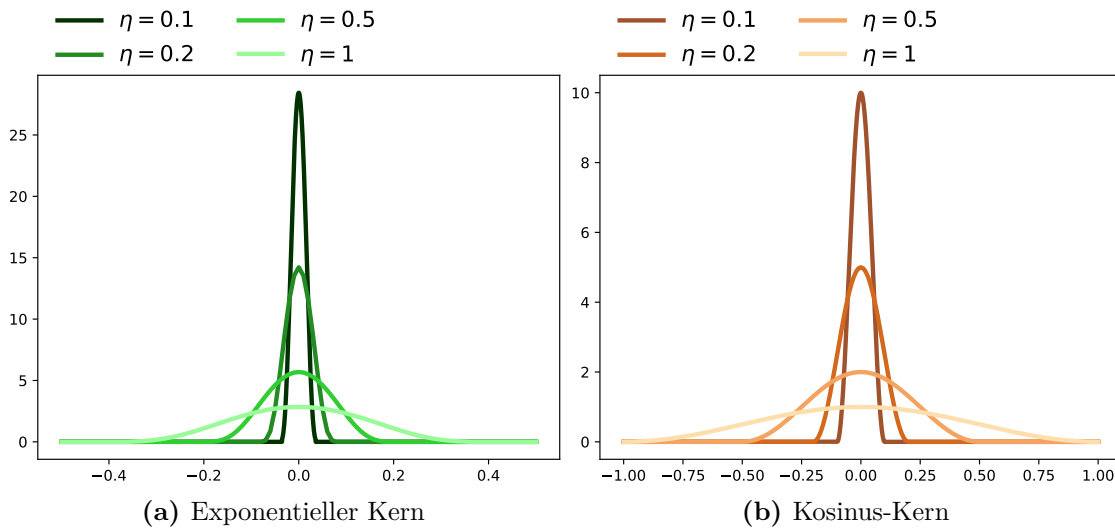


Abbildung 6.7: Beispiel für Integrationskerne mit verschiedenen Skalierungsparametern η .

procedure HMM

s-stufiges Runge-Kutta-Verfahren als Makro-Löser

for i=1:s **do**

Berechnung des gemittelten Flusses

(a) Rekonstruktion des Starwerts zum Zeitpunkt $t_n + c_i H$:

$$y_0^i = R(Y^n + H \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j)$$

(b) Löse $\frac{dy}{dt} = f_\varepsilon(y, t)$, $y(t_n + c_i H) = y_0^i$ auf $t \in [(t_n + c_i H) - \eta, (t_n + c_i H) + \eta]$
 $\rightarrow y^{\text{mikro}}$

(c) Approximation des gemittelten Flusses: $k_i = K_\eta^\Delta * f_\varepsilon(y^{\text{mikro}})$

Löse das effektive System:

Berechne Y^{n+1} zum Zeitpunkt $t_{n+1} = t_n + H$: $Y^{n+1} = Y^n + H \sum_{i=1}^s b_i k_i$

Nächster Zeitschritt auf dem groben Gitter: $Y^n = Y^{n+1}$, $t_n = t_{n+1}$

Abbildung 6.8: Aufbau eines HMM-Verfahrens mit einem Runge-Kutta Verfahren als Makro-Löser. Der Rekonstruktionsoperator R wird häufig als $R = Id$ gewählt. Im folgenden Abschnitt wird ein anderer Rekonstruktionsoperator gezeigt.

(b) Sei $g \in C(\mathbb{R})$ Für $K \in \mathbb{K}^{p,q}$, $\varepsilon > 0$ gilt

$$\left\| K_\eta * g\left(\frac{\cdot}{\varepsilon}\right) \right\| \leq \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^q \|g^{[q]}\|_\infty \|K\|_{W^{1,q}}$$

(c) Sei $g \in C(\mathbb{R})$ mit $g(t + \alpha) = g(t)$, $\int_0^\alpha g(t) dt = 0$ für ein $\alpha > 0$ und $\|g(t)\| < C$ für alle $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$, dann gilt für $K \in \mathbb{K}^{p,q}$ und $\varepsilon > 0$

$$\left\| K_\eta * g\left(\frac{\cdot}{\varepsilon}\right)(t) \right\| \leq \hat{C} \alpha^q \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^q \|K\|_{W^{1,q}}$$

Beweis. (a) Es gilt

$$\begin{aligned} K_\eta * f(t) - f(t) &= \int_{\mathbb{R}} K_\eta(t-s) f(s) ds - \int_{\mathbb{R}} K_\eta(t-s) f(t) ds \\ &= \int_{\mathbb{R}} K_\eta(t-s) (f(s) - f(t)) ds \end{aligned} \tag{6.34a}$$

Jetzt wird $f(s)$ in eine Taylorreihe um t entwickelt:

$$f(s) = f(t) + (s-t)f^{(1)}(t) + \dots + \frac{f^{(r)}(\xi)}{r!} (s-t)^r \tag{6.35}$$

Dabei ist $r = \min(s+1, p)$. Wir verwenden (6.34a) und (6.35), sowie (6.29) für die folgende Abschätzung:

$$|K_\eta * f(t) - f(t)| = \left| \int_{\mathbb{R}} K_\eta(t-s) \left(f(t) + (s-t)f^{(1)}(t) + \dots + \frac{f^{(r)}(\xi)}{r!} (s-t)^r - f(t) \right) ds \right|$$

$$\begin{aligned}
 &= \left| \int_{\mathbb{R}} K_{\eta}(t-s) \left((s-t)f^{(1)}(t) + \dots + \frac{f^{(r)}(\xi)}{r!} (s-t)^r \right) ds \right| \\
 &= \left| \int_{\mathbb{R}} K_{\eta}(t-s) \frac{f^{(r)}(\xi)}{r!} (s-t)^r ds \right| \\
 &\leq C\eta^r
 \end{aligned}$$

(b) Der Beweis erfolgt durch mehrfache Anwendung partieller Integration: Definiere zunächst $g_{\varepsilon}(t) =: g\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)$

$$\begin{aligned}
 (K_{\eta} * g_{\varepsilon})(t) &= \int_{\mathbb{R}} K_{\eta}(t-s) g\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) ds \\
 &= \underbrace{\left[K_{\eta}(t-s) g^{[1]}\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) \right]_{s=-\infty}^{\infty}}_{=0} - \frac{\varepsilon}{\eta} \int_{\mathbb{R}} K_{\eta}^{(1)}(s-t) g^{[1]}\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) ds \\
 &= \dots \\
 &= \left(-\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^q \int_{\mathbb{R}} K_{\eta}^{(q)}(t-s) g^{[q]}\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) ds
 \end{aligned}$$

Wenn man nacheinander die Kommutativität der Faltung, die Hölder'sche Ungleichung und eine einfache Substitution anwendet, gelangt man zu

$$\left| K_{\eta} * g\left(\frac{\cdot}{\varepsilon}\right)(t) \right| \leq \left(-\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^q \|g^{[q]}\|_{\infty} \|K\|_{W^{1,q}}$$

(c) Eine Stammfunktion von g ist durch

$$g^{[1]}(t) = \int_{t_0}^t g(s) ds + C$$

gegeben. Wenn man die Integrationkonstante $C = -\alpha^{-1} \int_0^{\alpha} \int_{t_0}^s g(t) dt ds$ wählt, erreicht man

$$\int_0^{\alpha} g^{[1]}(s) ds = 0.$$

Außerdem gilt $g^{[1]}(t) = g^{[1]}(t + \alpha)$. Dies soll gezeigt werden. Sei dazu $n\alpha \leq t < (n+1)\alpha$. Dann gilt

$$g^{[1]}(t) = \int_0^t g(s) ds = \int_{n\alpha}^t g(s) ds + \underbrace{\int_0^{n\alpha} g(s) ds}_{=0} = \int_{(n+1)\alpha}^{t+\alpha} g(s) ds + \underbrace{\int_0^{(n+1)\alpha} g(s) ds}_{=0} = g^{[1]}(t + \alpha)$$

An dieser Stelle wurde die α -Periodizität von g ausgenutzt.

Eine Stammfunktion der Ordnung j kann folgendermaßen definiert werden

$$g^{[j]} = \int_{t_0}^t g^{[j-1]}(s) ds - \alpha^{-1} \int_0^{\alpha} \int_{t_0}^s g^{[j-1]}(t) dt ds$$

Damit erhält man die Eigenschaft der Periodizität und $\int_0^{\alpha} g^{[j]}(s) ds = 0$.

Mit diesen Vorbereitungen kann jetzt eine Abschätzung vorgenommen werden, die die Behauptung zeigt. Seien ohne Einschränkung $t, \tilde{t} \in [0, \alpha]$

$$\begin{aligned}
 |g^{[1]}(t)| &= \left| \alpha^{-1} \int_0^\alpha \int_{t_0}^t g(s) \, ds \, d\tilde{t} - \alpha^{-1} \int_0^\alpha \int_{t_0}^{\tilde{t}} g(s) \, ds \, d\tilde{t} \right| \\
 &= \left| \alpha^{-1} \int_0^\alpha \left[\int_{t_0}^t g(s) \, ds - \int_{t_0}^{\tilde{t}} g(s) \, ds \right] d\tilde{t} \right| \\
 &= \left| \alpha^{-1} \int_0^\alpha \int_{\tilde{t}}^t g(s) \, ds \, d\tilde{t} \right| \\
 &\leq \left| \alpha^{-1} C \int_0^\alpha \underbrace{|t - \tilde{t}|}_{\leq \alpha} d\tilde{t} \right| \\
 &\leq \alpha^{-1} C \alpha^2 \\
 &\leq \alpha C
 \end{aligned}$$

Damit gilt $\|g^{[1]}\|_\infty \leq C\alpha$. Induktiv folgt $\|g^{[j]}\|_\infty \leq C\alpha^j$. Durch Anwendung von Teil (b) ergibt sich mit diesem Resultat die Behauptung. \square

Wir interessieren uns für den oszillatorischen Fall.

Hilfssatz 6.5.2. Sei $g(t, s) = a(t)b(s)$ mit $b(s + \alpha) = b(s)$, $\int_s^{s+\alpha} b(\tau) d\tau = 0$ für $\alpha > 0$ und $a \in C^q(\mathbb{R})$ mit $\|a\| < M$, dann gilt für jedes $K \in \mathbb{K}^{p,q}$

$$\left\| K_\eta * g\left(\cdot, \frac{\cdot}{\varepsilon}\right)(t) \right\| \leq C\alpha^q \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^q \max_{0 \leq r \leq q} \|a^{(r)}\|_\infty \|K\|_{W^{1,q}}$$

Beweis. Definiere $\tilde{K}_\eta(t, s) = \frac{1}{\eta} K\left(\frac{t-s}{\eta}\right)a(s)$. Damit ist $\tilde{K}_\eta(\cdot, s) \in C_c^q(\mathbb{R})$ und $\text{supp}(\tilde{K}_\eta(\cdot, s)) \subseteq \text{supp}(K_\eta(\cdot, s))$. Es wird partielle Integration angewendet. Wir betrachten also

$$\begin{aligned}
 |K_\eta * g\left(\cdot, \frac{\cdot}{\varepsilon}\right)| &= \left| \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\eta} K\left(\frac{t-s}{\eta}\right) a(s) b\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) \, ds \right| \\
 &= \left| \int_{\mathbb{R}} \tilde{K}_\eta(t, s) b\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) \, ds \right| \\
 &\leq \varepsilon^q \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{d^q \tilde{K}_\eta(t, s)}{ds^q} b^{[q]}\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) \right| \, ds \\
 &\leq \varepsilon^q \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{d^q \tilde{K}_\eta(t, s)}{ds^q} \right| \, ds \|b^{[q]}\|_\infty
 \end{aligned}$$

Dabei sollen die Stammfunktionen $b^{[q]}$ so konstruiert sein wie die Stammfunktionen $g^{[q]}$ in Lemma 6.5.1 (c). Damit gilt, wie im Beweis zu Lemma 6.5.1 gezeigt, die Abschätzung

$$\|b^{[q]}\|_\infty \leq \hat{C}_1 \alpha^q \tag{6.40}$$

Mit $\eta < 1$ erhält man die folgende Abschätzung

$$\int_{\mathbb{R}} \left| \frac{d^q \tilde{K}_\eta(t, s)}{ds^q} \right| \, ds = \int_{\mathbb{R}} \left| \sum_{r=0}^q \binom{q}{r} \left(\frac{-1}{\eta}\right)^r \frac{1}{\eta} K_\eta^{(r)}\left(\frac{t-s}{\eta}\right) a^{(q-r)}(s) \right| \, ds$$

$$\leq \hat{C}_2 \|a\|_{W^{\infty,q}} \|K\|_{W^{1,q}} \frac{1}{\eta^q}$$

An dieser Stelle wurden die Produktregel und die Hölder'sche Ungleichung angewendet. Zusammen mit (6.40) folgt die Behauptung. \square

Wir nennen eine Funktion $f(t)$ α -periodisch, wenn $f(t + \alpha) = f(t)$ für $t \in \mathbb{R}$ gilt.

Die rechte Seite der Differentialgleichung (6.28) $f_\varepsilon(y(t), t)$ kann bei bekanntem $y(t)$ auch vereinfachend als $f_\varepsilon(t)$ geschrieben werden. Wir betrachten den Spezialfall, bei dem $f_\varepsilon(t)$ auch als $f(t, \frac{t}{\varepsilon})$ formuliert werden kann.

Satz 6.5.3. Sei $f(t, s)$ 1-periodisch in der zweiten Variablen, $\frac{\partial^r}{\partial t^r} f(t, s)$ stetig und durch eine Konstante C_f beschränkt für $r = 0, \dots, \sigma + 1$, $\sigma > 0$. Bezeichne $f_\varepsilon(t) = f(t, \frac{t}{\varepsilon})$ und definiere

$$\bar{f}(t) = \int_0^1 f(t, s) ds \quad (6.42)$$

und

$$g\left(t, \frac{t}{\varepsilon}\right) = f_\varepsilon(t) - \bar{f}(t) \quad (6.43)$$

Dann gilt für $K \in \mathbb{K}^{p,q}$

$$|K_\eta * (f_\varepsilon - \bar{f})(t)| \leq \tilde{C}_1 \|K\|_{W^{1,q}} \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^q + \tilde{C}_2 \eta^{\sigma+1} \quad (6.44)$$

Beweis. Es gilt

$$\int_0^1 g(t, s) ds = \int_0^1 f(t, s) - \bar{f}(t) ds = \int_0^1 f(t, s) ds - \bar{f}(t) = 0$$

Da $f(t, s)$ 1-periodisch in der zweiten Komponente ist, gilt die folgende Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial^k}{\partial t^k} g(t, s+1) &= \frac{\partial^k}{\partial t^k} f(t, s+1) - \frac{\partial^k}{\partial t^k} \int_0^1 f(t, s) ds \\ &= \frac{\partial^k}{\partial t^k} f(t, s) - \frac{\partial^k}{\partial t^k} \int_0^1 f(t, s) ds \\ &= \frac{\partial^k}{\partial t^k} g(t, s) \end{aligned}$$

Damit ist also auch $\frac{\partial^k}{\partial t^k} g(t, s)$ in der zweiten Variablen 1-periodisch. Wir definieren jetzt die Stammfunktion der Ordnungen $j = 0, 1, \dots$ von $\frac{\partial^k}{\partial t^k} g(t, s)$ bezüglich der zweiten Variablen für $k = 0, \dots, \sigma$.

$$\frac{\partial^k}{\partial t^k} g^{[j]} = \int_0^s \frac{\partial^k}{\partial t^k} g^{[j-1]}(t, \tilde{s}) d\tilde{s} - \int_0^1 \int_0^\tau \frac{\partial^k}{\partial t^k} g^{[j-1]}(t, s) ds d\tau$$

Damit gilt die Abschätzung

$$\left| \frac{\partial^k}{\partial t^k} g^{[1]}(t, s) \right| = \left| \int_0^1 \int_\tau^s \frac{\partial^k}{\partial t^k} g(t, s) d\tilde{s} d\tau \right| \quad (6.46a)$$

$$\leq C_f \tag{6.46b}$$

Induktiv kann man zeigen, dass für die Ableitungen $k \leq \sigma + 1$ die gleiche Abschätzung gilt.

Wir wollen jetzt $K_\eta * g(\cdot, \frac{\cdot}{\varepsilon})(t)$ betrachten. Dazu entwickeln wir $g(s, \frac{s}{\varepsilon})$ in der ersten Variable in eine Taylorreihe um t .

$$g\left(s, \frac{s}{\varepsilon}\right) = g\left(t, \frac{s}{\varepsilon}\right) + (s-t) \frac{\partial}{\partial t} g\left(t, \frac{s}{\varepsilon}\right) + \dots + \frac{(s-t)^\sigma}{\sigma!} \frac{\partial^\sigma}{\partial t^\sigma} g\left(t, \frac{s}{\varepsilon}\right) + \frac{1}{\sigma!} \int_s^t \frac{\partial^{\sigma+1}}{\partial t^{\sigma+1}} g\left(\xi, \frac{s}{\varepsilon}\right) (t-\xi)^\sigma d\xi \tag{6.47}$$

Dabei wurde die Integralform der Restgliedformel angewendet. Der Ausdruck $K_\eta * g(\cdot, \frac{\cdot}{\varepsilon})$ lässt sich damit als Summe zweier Terme I_1 und I_2 schreiben.

$$I_1 = \sum_{k=0}^{\sigma} \frac{1}{\eta} \int_{t-\eta}^{t+\eta} K\left(\frac{s-t}{\eta}\right) \left(\frac{s-t}{k!}\right)^k \frac{\partial^k}{\partial t^k} g\left(t, \frac{s}{\varepsilon}\right) ds$$

$$I_2 = \frac{1}{\eta} \int_{t-\eta}^{t+\eta} \int_s^t \frac{1}{\sigma!} \frac{\partial^{\sigma+1}}{\partial t^{\sigma+1}} g\left(\xi, \frac{s}{\varepsilon}\right) (t-\xi)^\sigma K\left(\frac{s-t}{\eta}\right) d\xi ds$$

Mit Hilfssatz 6.5.2 gilt

$$\begin{aligned} |I_1| &\leq \sum_{k=0}^{\sigma} \left| \int_{t-\eta}^{t+\eta} K\left(\frac{s-t}{\eta}\right) \frac{(s-t)^k}{k!} \frac{\partial^k}{\partial t^k} g\left(t, \frac{s}{\varepsilon}\right) ds \right| \\ &\leq \sum_{k=0}^{\sigma} \left(\frac{\eta^k}{k!}\right) \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^q \sup_s \sup_t \left| \frac{\partial^k}{\partial t^k} g^{[q]}(t, s) \right| \|K\|_{W^{1,q}} \\ &\leq C \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^q \max_{0 \leq k \leq \sigma} \sup_s \sup_t \left| \frac{\partial^k}{\partial t^k} g^{[q]}(t, s) \right| \|K\|_{W^{1,q}} \sum_{k=0}^{\sigma} \left(\frac{\eta^k}{k!}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |I_2| &\leq \left| \frac{1}{\eta} \int_{t-\eta}^{t+\eta} K\left(\frac{s-t}{\eta}\right) \int_s^t \frac{1}{\sigma!} \frac{\partial^{\sigma+1}}{\partial t^{\sigma+1}} g\left(\xi, \frac{s}{\varepsilon}\right) (t-\xi)^\sigma d\xi ds \right| \\ &\leq \sup_t \sup_s \left| \frac{\partial^{\sigma+1}}{\partial t^{\sigma+1}} g(t, s) \right| \frac{1}{\eta} \int_{t-\eta}^{t+\eta} K\left(\frac{s-t}{\eta}\right) \underbrace{\int_s^t \frac{1}{\sigma!} (t-\xi)^\sigma d\xi}_{=\frac{(t-s)^{\sigma+1}}{(\sigma+1)!}} ds \\ &\leq \sup_t \sup_s \left| \frac{\partial^{\sigma+1}}{\partial t^{\sigma+1}} g(t, s) \right| \frac{\eta^{\sigma+1}}{(\sigma+1)!} \left| \frac{1}{\eta} \int_{t-\eta}^{t+\eta} K\left(\frac{s-t}{\eta}\right) ds \right| \\ &\leq \bar{C} \sup_t \sup_s \left| \frac{\partial^{\sigma+1}}{\partial t^{\sigma+1}} g(t, s) \right| \|K\|_{L^1} \frac{\eta^{\sigma+1}}{(\sigma+1)!} \end{aligned}$$

□

Satz 6.5.4. Sei $f(t, s)$ 1-periodische in der zweiten Variablen, $\frac{\partial^r}{\partial t^r} f(t, s)$ stetig und durch eine Konstante C_f beschränkt für $r = 0, \dots, p$. Bezeichne $f_\varepsilon = f(t, \frac{t}{\varepsilon})$ und definiere

$$\bar{f}(t) = \int_0^1 f(t, s) ds. \tag{6.50}$$

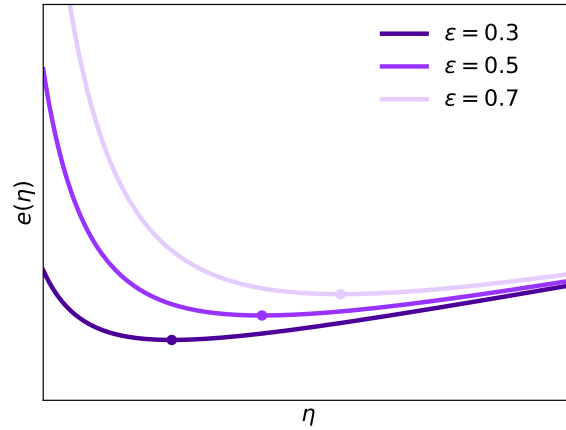


Abbildung 6.9: Minimierung der Fehlerfunktion (6.52) die eine obere Schranke ist. Man erkennt eine Darstellung der Funktion (6.52) für verschiedene Parameter. Die Punkte zeigen das Minimum von (6.52).

Dann gilt für $K \in \mathbb{K}^{p,q}$

$$|K_\eta * f_\varepsilon - \bar{f}(t)| \leq C_1 \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^q + C_2 \eta^p \quad (6.51)$$

Beweis. Dieses Resultat ergibt sich durch eine Kombination aus Satz 6.5.3 und Hilfssatz 6.5.1 (a) und Anwendung der Dreiecksungleichung

$$|K_\eta * f_\varepsilon - \bar{f}(t)| \leq |K_\eta * (f_\varepsilon - \bar{f})(t)| + |K_\eta * \bar{f}(t) - \bar{f}(t)|.$$

□

Die Fehlerabschätzung auf der rechten Seite von Satz 6.5.4 wird minimiert, wenn η mit $(\varepsilon)^{\frac{q}{p+q}}$ skaliert. Das sieht man folgendermaßen ein: Man definiert eine Funktion

$$e(\eta) = C_1 \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^q + C_2 \eta^p \quad (6.52)$$

Durch Nullsetzen von $e'(\eta)$ kann man einen Extremalwert bestimmen. Man kann prüfen, dass dieser ein Minimum ist. Das Minimum hängt jedoch von den unbekanntenen Konstanten C_1 und C_2 ab. Abbildung 6.9 zeigt (6.52) für verschiedene ε .

6.6 Das invertierte Pendel und HMM mit Integrationskernen

In Engquist und Tsai, 2005 wird ausführlich dargelegt, wie man das invertierte Pendel mit den Verfahren, die in Abschnitt 6.5 beschrieben wurden, behandelt werden kann. Dieser Abschnitt bezieht sich auf diese Arbeit.

Wir haben in früheren Simulationen gesehen, dass θ_2 starke Oszillationen auf der kurzen Zeitskala zeigt. Der gemittelte Fluss interpoliert die Lösung des invertierten Pendels zu

bestimmten Zeitpunkten s_0, s_1, \dots . Die Knoten des groben Zeitgitters t_0, t_1, \dots müssen nicht mit diesen Zeitpunkten übereinstimmen. Man möchte für die Mikro-Integrationen um den Knoten t_n mit den exakten Werten der Lösung des invertierten Pendels zum Zeitpunkt t_n als Startwert rechnen, um keine zusätzlichen Fehler durch einen schlechten Startwert zu erzeugen. Eine Veranschaulichung findet man in Abbildung 6.10. Zu diesem Zweck wird in Engquist und Tsai, 2005 ein Rekonstruktionsoperator vorgeschlagen. Wenn der mittlere Fluss zum Zeitpunkt t_n bekannt ist, kann daraus die Lösung des invertierten Pendels zum Zeitpunkt t_n rekonstruiert werden. Der Rekonstruktionsoperator kann wie folgt angegeben werden

$$\begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Theta_1 \\ \Theta_2 - \sin(\Theta_1) \frac{\cos(2\pi \frac{t_n}{\varepsilon})}{2\pi l} \end{pmatrix}. \quad (6.53)$$

Es kann gezeigt werden, dass $|\theta_1(t) - \Theta_1(t)| = \mathcal{O}(\varepsilon)$. Außerdem gilt

$$\Theta_2(t_n) = \frac{1}{2\varepsilon} \int_{t_n-\varepsilon}^{t_n+\varepsilon} \theta_2(t) dt \quad (6.54a)$$

$$= \frac{1}{2\varepsilon} \int_{t_n-\varepsilon}^{t_n+\varepsilon} \theta_2(t_n) + \int_{t_n}^t a\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) \sin(\theta_1(s)) ds dt \quad (6.54b)$$

$$= \theta_2(t_n) + \frac{1}{2\varepsilon} \int_{t_n-\varepsilon}^{t_n+\varepsilon} \int_{t_n}^t a\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) \sin(\theta_1(s)) ds dt \quad (6.54c)$$

Umstellen ergibt

$$\theta_2(t_n) = \Theta_2(t_n) - \frac{1}{2\varepsilon} \int_{t_n-\varepsilon}^{t_n+\varepsilon} \int_{t_n}^t a\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) \sin(\theta_1(s)) ds dt \quad (6.55a)$$

$$\approx \Theta_2(t_n) - \sin(\Theta_1(t_n)) \frac{\cos(2\pi \frac{t_n}{\varepsilon})}{2\pi l} \quad (6.55b)$$

Wir verwenden, dass $\sin(\theta_1)$ nur langsam variiert. Außerdem gilt $a\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) = \frac{1}{\varepsilon l}(\varepsilon g + \sin(2\pi \frac{t_n}{\varepsilon}))$. Damit erhält man eine Approximation des exakten Werts von $\theta_2(t_n)$.

Als Makro-Löser wurden in Engquist und Tsai, 2005 das explizite Euler-Verfahren, ein semi-implizites Verfahren erster Ordnung und das Verlet Verfahren, das die Ordnung zwei besitzt, vorgeschlagen. Das explizite Euler-Verfahren ist bereits aus Kapitel 2 bekannt.

An dieser Stelle wird das semi-implizite Verfahren, das wir verwenden, formuliert.

$$\begin{aligned} \Theta_{2,n+1} &= \Theta_{2,n} + H\bar{F}(\theta_{1,n}) \\ \Theta_{1,n+1} &= \Theta_{1,n} + H(\Theta_{2,n+1}) \end{aligned} \quad (6.56)$$

Es besteht aus einem expliziten und einem impliziten Euler-Schritt.

Das letzte Verfahren ist das Verlet Verfahren. Es kann in unserem Fall wie folgt angegeben werden.

$$\begin{aligned} \Theta_{2,n+\frac{1}{2}} &= \Theta_{2,n} + \frac{H}{2}\bar{F}(\theta_{1,n}) \\ \Theta_{1,n+1} &= \Theta_{1,n} + H\Theta_{2,n+\frac{1}{2}} \\ \Theta_{2,n+1} &= \Theta_{2,n+\frac{1}{2}} + \frac{H}{2}\bar{F}(\theta_{1,n+1}) \end{aligned} \quad (6.57)$$

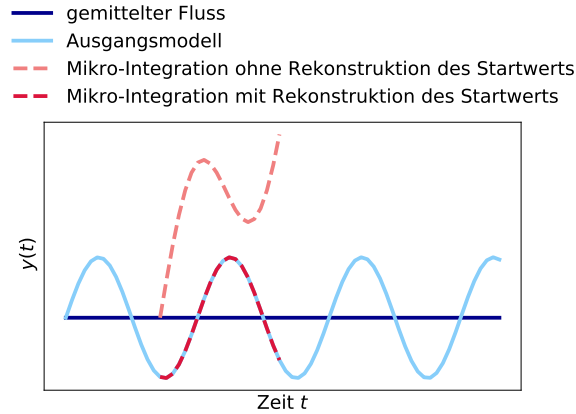


Abbildung 6.10: Rekonstruktion des Startwerts. Die Skizze veranschaulicht, dass die Vernachlässigung der Rekonstruktion des Startwerts der Mikro-Integration zu Fehlern führen kann. Die dunkelblaue Linie gibt den gemittelten Fluss und die hellblaue Linie die Lösung des Ausgangsmodells an. Angenommen der Startwert für den nächsten Zeitschritt ist kein Schnittpunkt des gemittelten und exakten Flusses, sondern liegt nur auf der dunkelblauen Linie. Dann unterscheidet sich die Trajektorie der Mikro-Integration (hellrote Linie) möglicherweise stark von dem exakten Fluss (hellblaue Linie). Bei Anwendung eines Rekonstruktionsoperators liefert das mehrskalige Ausgangsmodell den Startwert für die Mikro-Integrationen (dunkelrote Linie).

Zur Berechnung von $F(\theta_{1,n+1})$ wird die Beziehung $\theta_{1,n+1} = \Theta_{1,n+1}$ verwendet.

In den Abbildungen 6.11 und 6.12 sind numerische Approximationen des invertierten Pendels zu sehen, die mit den in diesem Abschnitt und Abschnitt 6.5 beschriebenen heterogenen Mehrskalungsverfahren berechnet wurden. Für die Berechnungen wurde der Parameter $\varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-3}$ gewählt. Außerdem wurden die Mikro-Integrationen mit dem klassischen Runge-Kutta Verfahren vierter Ordnung durchgeführt.

Abbildung 6.11 zeigt, dass bei Verwendung des expliziten Euler Verfahrens als Makro-Löser die Amplitude der numerischen Lösung wächst. Dies deutet auf ein instabiles Verhalten hin. Bei Verwendung des semi-expliziten Verfahrens und des Verlet Verfahrens hingegen bleibt die Amplitude stabil. Dass dieses stabile Verhalten auch über längere Zeiträume anhält, zeigt Abbildung 6.12.

In Abbildung 6.13 wird der numerische Fehler veranschaulicht. Als Referenz wurde eine numerische Lösung mit geringer Schrittweite des gemittelten Flusses des invertierten Pendels (6.13) verwendet. Man erkennt, dass bei Verringerung der Makro-Schrittweite der Fehler des heterogenen Mehrskalungsverfahrens entsprechend der Ordnung des Makro-Lösers kleiner wird. Dies deutet darauf hin, dass bei den in Abbildung 6.13 gewählten Schrittweiten der Fehler des Makro-Lösers den dominanten Fehleranteil ausmacht.

Im Anhang in Abschnitt D.6 findet man weitere Bemerkungen zum Fehler von heterogenen Mehrskalungsverfahren.

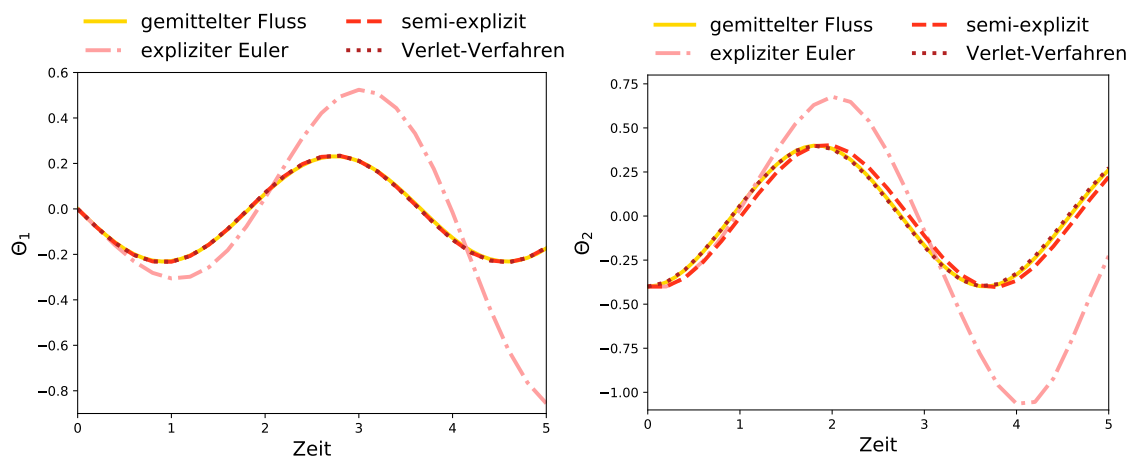


Abbildung 6.11: Approximation des gemittelten Flusses des invertierten Pendels mit drei verschiedenen heterogenen Mehrskalenverfahren. Es wurden das explizite Euler-Verfahren, ein semi-explizites Verfahren und das Verlet-Verfahren als Makro-Löser verwendet.

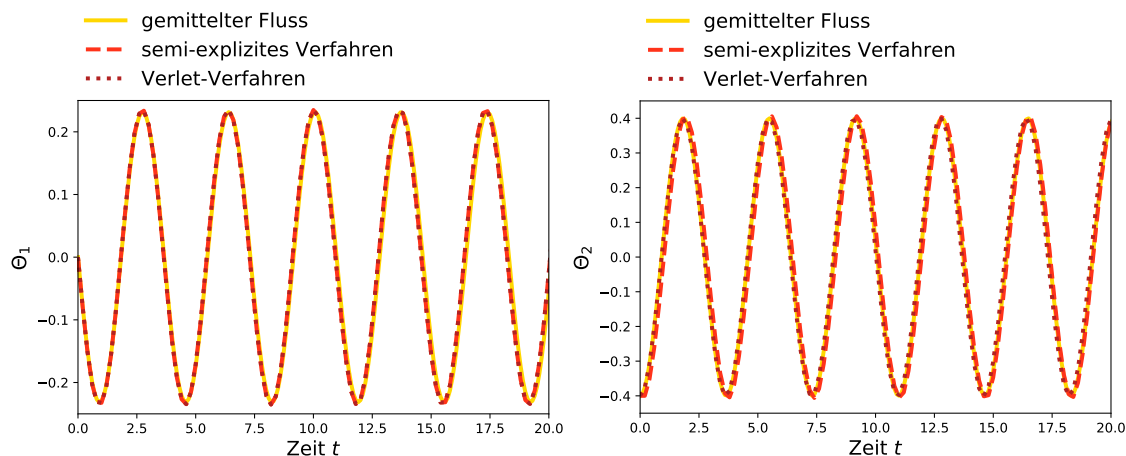


Abbildung 6.12: Approximation des gemittelten Flusses des invertierten Pendels mit zwei verschiedenen heterogenen Mehrskalen-Verfahren. Zum einen wurde ein semi-explizites Verfahren, zum anderen das Verlet-Verfahren als Makro-Löser verwendet. Man erkennt, dass die Lösungen stabil sind

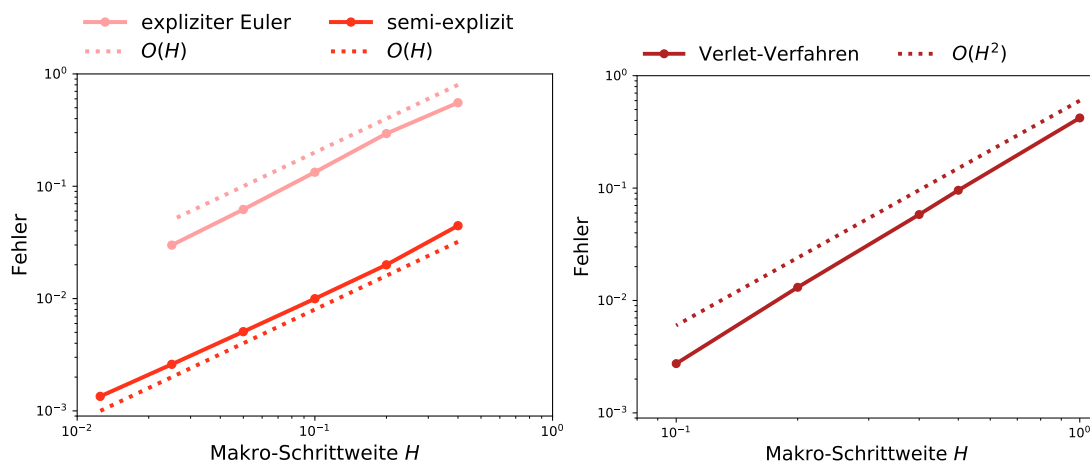


Abbildung 6.13: Fehler beim Lösen des invertierten Pendels mit HMM. Dabei wird der Fehler der zweiten Komponente veranschaulicht. Beim expliziten Euler und semi-expliziten Verfahren wurde der Zeitpunkt $T_{max} = 2$ und beim Verlet Verfahren $T_{max} = 6$ gewählt.

6.7 Abschließende Bemerkungen zu HMM

In diesem Kapitel wurden heterogene Mehrskalungsverfahren beschrieben und auf das invertierte Pendel angewendet. Diese Verfahren eignen sich für die numerische Lösung von Problemen mit mehreren Skalen. Das invertierte Pendel enthält einen Parameter ε , der die Skalenseparation bestimmt. Durch die Anwendung heterogener Mehrskalungsverfahren konnte dieses Problem mit einem Aufwand gelöst werden, der nicht von ε abhängt. Würde man stattdessen das System direkt mit einem Runge-Kutta Verfahren approximieren, müsste man für verlässliche Resultate die feine Zeitskala auf dem gesamten Integrationsintervall auflösen. Damit würde der Aufwand von ε abhängen, da der Zeitschritt entsprechend klein gewählt werden muss.

Mit dem Gerüst, das die heterogenen Mehrskalungsverfahren liefern, hat man es also geschafft, Verfahren zu konstruieren, für deren Aufwand ε keine Rolle spielt. Allerdings vernachlässigt man damit auch die mikroskopischen Mechanismen, d. h. wenn man Simulationen benötigt, bei denen die mikroskopischen Mechanismen aufgelöst werden sollen, sollten heterogene Mehrskalungsverfahren nicht angewendet werden.

Wenn man die Abschätzung 6.51 betrachtet, erkennt man, dass die Genauigkeit vom Quotienten $\frac{\varepsilon}{\eta}$ abhängt. Der Parameter η , der das Zeitfenster bestimmt, sollte nicht beliebig groß gewählt werden, da zum einen ein Term der Ordnung η^p in der Fehlerabschätzung auftritt, zum anderen große η ein großes Zeitfenster für die Makro-Integrationen, und damit einen großen Aufwand bedeuten. Wenn also ε nicht sehr klein, und somit die Skalenseparation im Problem nicht sehr ausgeprägt ist, leidet die Genauigkeit der heterogenen Mehrskalungsverfahren darunter.

Grob formuliert besagt das Mittelungsprinzip, dass die hochfrequenten Terme Oszillationen verursachen, die den Fluss, der durch das gemittelte System beschrieben wird, überlagern. In E, 2011 oder auch Arnold u. a., 2006 wird darauf hingewiesen, dass es Fälle komplizierterer Probleme gibt, bei deren Lösung man Sorgfalt walten lassen sollte.

Insbesondere dann, wenn in einem Problem mehrere Frequenzen auftreten, die resonant sind, kann die Vernachlässigung dieser Resonanzen zu fehlerhaften Ergebnissen führen.

Heterogene Mehrskalen-Verfahren finden auch Anwendung in jüngeren Arbeiten. In Haut und Wingate, 2014 werden sie beispielsweise zur numerischen Lösung der Flachwassergleichungen verwendet. Dort wird auch auf Resonanzen eingegangen. Allgemein gilt, dass das Anwendungsfeld von heterogenen Mehrskalenverfahren nicht auf gewöhnliche Differentialgleichungen beschränkt ist. Einen Überblick über diese Verfahren einschließlich vieler verschiedenartiger Probleme, auf die diese angewendet werden können, findet man in E u. a., 2007.

Kapitel 7

Numerische Behandlung des Eiswolkenmodells

Ziel dieses Kapitels ist es, das Eiswolken-Schema (5.123) aus Kapitel 5 mit unterschiedlichen Auftriebstermen w numerisch zu untersuchen. Die Auftriebsterme w sind externe Forcing-Terme, die auf das System wirken. Für die numerischen Berechnungen in diesem Kapitel werden die Temperatur T und der Druck p als konstant angenommen. Damit entfallen die Differentialgleichungen, die die zeitliche Entwicklung von T und p beschreiben und (5.123) reduziert sich auf ein dreidimensionales System. Die Temperatur T und der Druck p treten in diesem reduzierten System als Systemparameter auf. Die Annahme, dass Druck und Temperatur konstant sind, sind Vereinfachungen, die in der Realität nur über kurze Zeiträume aufrechterhalten werden können.

7.1 Konstantes Forcing

Wir untersuchen in diesem Abschnitt das Eiswolken-Schema (5.123) mit einem konstanten Forcing. Das konstante Forcing wird durch einen konstanten Auftriebsterm w hervorgerufen. Später werden auch nicht-konstante Auftriebsterme w , und damit nicht-konstante Forcing-Terme betrachtet.

Die Abbildungen 7.1, 7.2 und 7.3 stellen numerische Simulationen des Eiswolken-Schemas (5.123) mit konstanten Auftriebstermen $w = 0.01, 0.1$ und 0.5 dar und geben einen ersten Eindruck über das Lösungsverhalten des Systems. Die Berechnungen wurden bei einem konstanten Druck von $30\,000$ Pa und einer konstanten Temperatur von 210 K durchgeführt. Die zeitlichen Entwicklungen der Massenkonzentration q_i , der Anzahlkonzentration n_i und Übersättigung S_i werden durch die Abbildungen 7.1a, 7.2a und 7.3a illustriert. Eine Veranschaulichung im Phasenraum zeigen die Abbildungen 7.1b, 7.2b und 7.3b.

Die Abbildungen 7.1 und 7.3 deuten an, dass die Trajektorien gegen ein stabiles Gleichgewicht konvergieren. Die numerische Lösung aus Abbildung 7.2 scheint gegen einen Grenzzyklus zu konvergieren. (Siehe dazu auch Abbildung E.2 in Anhang E.2.) In Spreitzer u. a., 2017 wurden ähnliche Beobachtungen für ein anderes Eiswolken-Schema gemacht. Für kleine Auftriebsterme w konvergieren die Lösungen gegen ein stabiles Gleichgewicht. Bei Vergrößerung von w durchläuft das System eine Hopf-Bifurkation und es zeigt sich die Konvergenz gegen einen Grenzzyklus. Eine weitere Erhöhung des Auftriebsterms führt zu einer erneuten Hopf-Bifurkation und die Trajektorien konvergieren wieder gegen ein stabiles Gleichgewicht.

Die Abbildungen 7.1c, 7.2c und 7.3c zeigen die Eigenwerte der Jacobi-Matrix an den numerischen Lösungen. Die Ergebnisse deuten an, dass es sich hier um nicht-steife Probleme

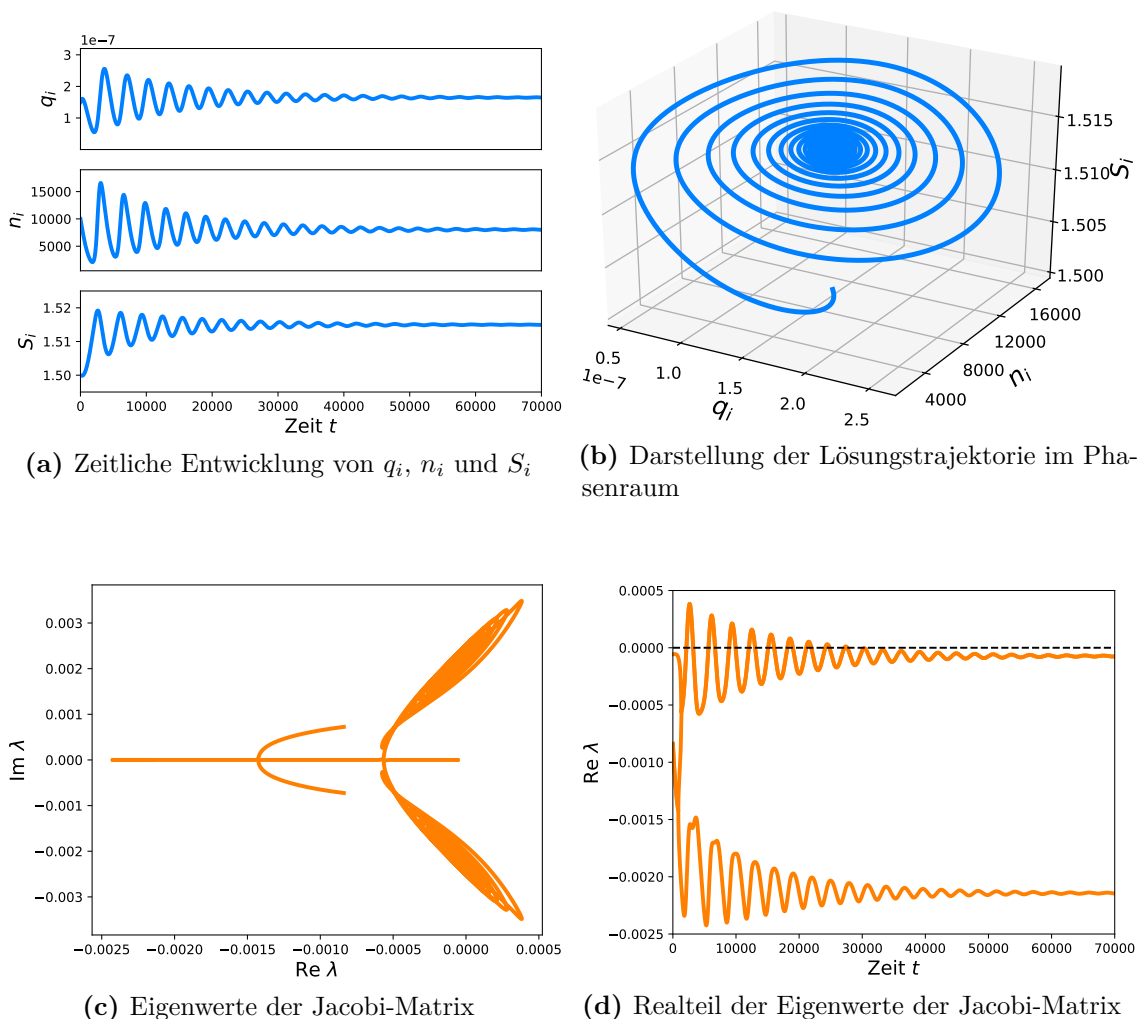
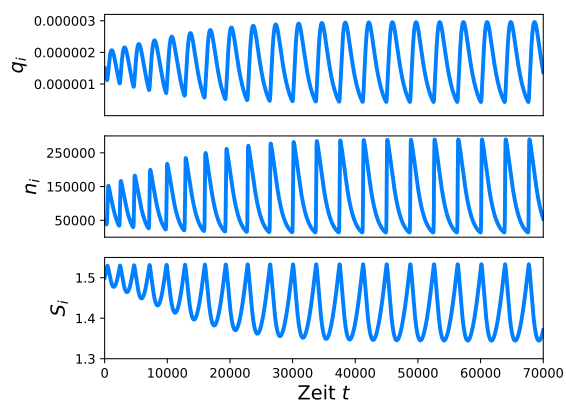
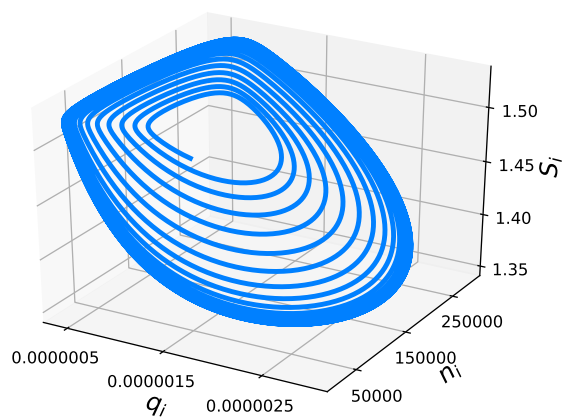


Abbildung 7.1: Numerische Lösung des Eiswolkenmodells. Für die Simulationen wurden eine Temperatur $T = 210$ K, ein Druck 30 000 Pa und ein Auftrieb $w = 0.01$ m s⁻¹ gewählt.

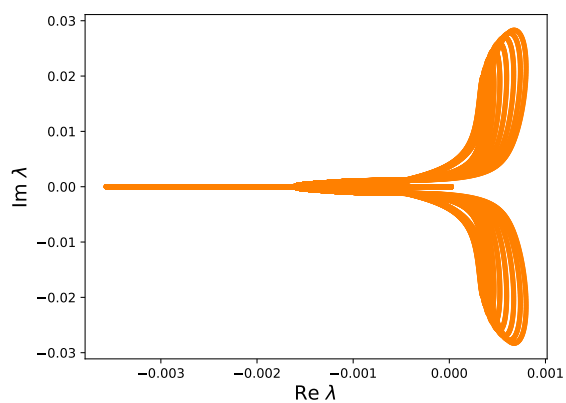
handelt und diese somit mit einem expliziten Runge-Kutta-Löser stabil berechnet werden können. Außerdem werden in den Abbildungen 7.1d, 7.2d und 7.3d die Realteile der Eigenwerte der Jacobi-Matrix an den numerischen Lösungen gezeigt. Die Abbildungen 7.1d und 7.3d deuten eine Konvergenz der Realteile der Eigenwerte gegen negative Werte an. Diese Beobachtung passt mit der Vermutung zusammen, dass die Trajektorien gegen ein stabiles Gleichgewicht konvergieren.

7.2 Mit periodischem Forcing

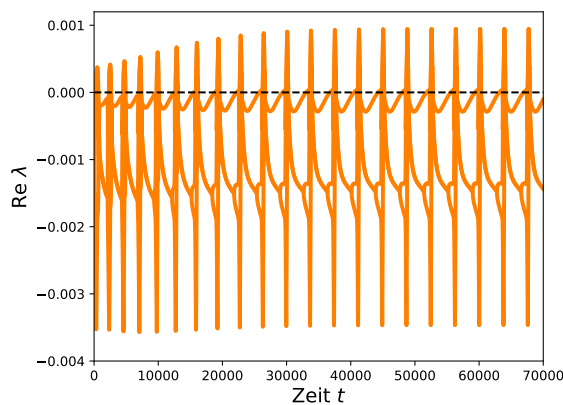
In diesem Abschnitt wird das gleiche System wie im vorangegangenen Abschnitt betrachtet, allerdings mit dem Unterschied, dass der Auftriebsterm w nicht mehr konstant, sondern aus einer Konstanten und einer periodischen Bewegung zusammengesetzt ist.

(a) Zeitliche Entwicklung von q_i , n_i und S_i 

(b) Darstellung der Lösungstrajektorie im Phasenraum

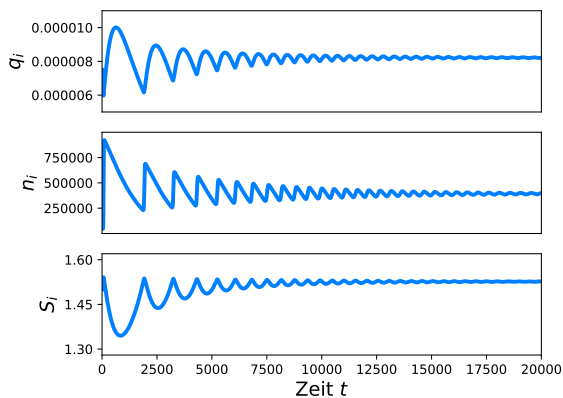


(c) Eigenwerte der Jacobi-Matrix

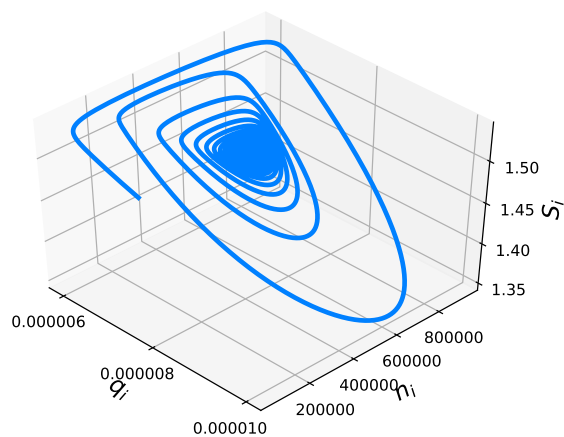


(d) Realteil der Eigenwerte der Jacobi-Matrix

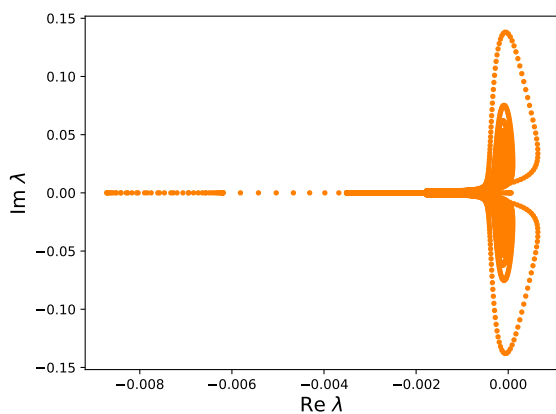
Abbildung 7.2: Numerische Lösung des Eiswolkenmodells. Für die Simulationen wurden eine Temperatur $T = 210 \text{ K}$, ein Druck $30\,000 \text{ Pa}$ und ein Auftrieb $w = 0.1 \text{ m s}^{-1}$ gewählt.



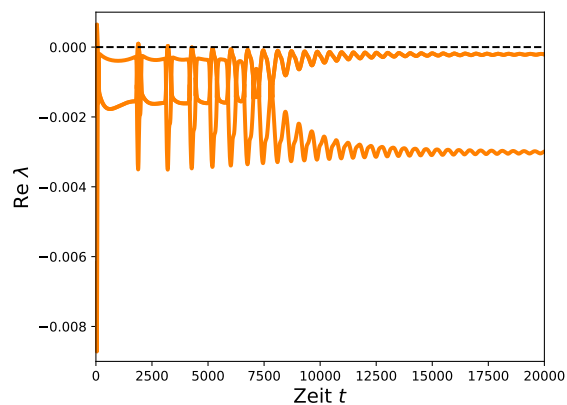
(a) Zeitliche Entwicklung von q_i , n_i und S_i



(b) Darstellung der Lösungstrajektorie im Phasenraum



(c) Eigenwerte der Jacobi-Matrix



(d) Realteil der Eigenwerte der Jacobi-Matrix

Abbildung 7.3: Numerische Lösung des Eiswolkenmodells. Für die Simulationen wurden eine Temperatur $T = 210$ K, ein Druck $30\,000$ Pa und ein Auftrieb $w = 0.5$ m s⁻¹ gewählt.

7.2.1 Harmonischer Oszillator als Forcing-Term

Wir untersuchen in diesem Abschnitt einen veränderten Forcing-Term der Form

$$w(t) = a_1 + a_2 \cos\left(\frac{2\pi}{\varepsilon}t\right). \quad (7.1)$$

Es werden also ein konstanter Auftrieb und eine Schwingung überlagert. Die Schwingung soll durch den harmonischen Oszillators als linearen Oszillator beschrieben werden. Mit $0 < \varepsilon \ll 1$ sind die Oszillationen sehr schnell. Man kann deshalb erwarten, dass die Schwingungen zu einem Mehrskalensystem führen. Das zu untersuchende Eiswolkenmodell wird damit wie folgt formuliert werden

$$\dot{n}_i = \text{Nuc}_n + \text{Evap}_n + \text{Sed}_n, \quad (7.2a)$$

$$\dot{q}_i = \text{Nuc}_q + \text{Dep}_q + \text{Sed}_q, \quad (7.2b)$$

$$\dot{S}_i = \left(\frac{L_S g}{c_p R_v T^2} - \frac{g}{R_a T} \right) S_i \left(a_1 + a_2 \cos\left(\frac{2\pi}{\varepsilon}t\right) \right) - \frac{p}{\varepsilon p_{si}(T)} (\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q). \quad (7.2c)$$

Man kann es mit der in Kapitel 2 beschriebenen Methode autonomisieren. Alternativ ist es auch möglich, die folgende Formulierung zu verwenden

$$\dot{n}_i = \text{Nuc}_n + \text{Evap}_n + \text{Sed}_n, \quad (7.3a)$$

$$\dot{q}_i = \text{Nuc}_q + \text{Dep}_q + \text{Sed}_q, \quad (7.3b)$$

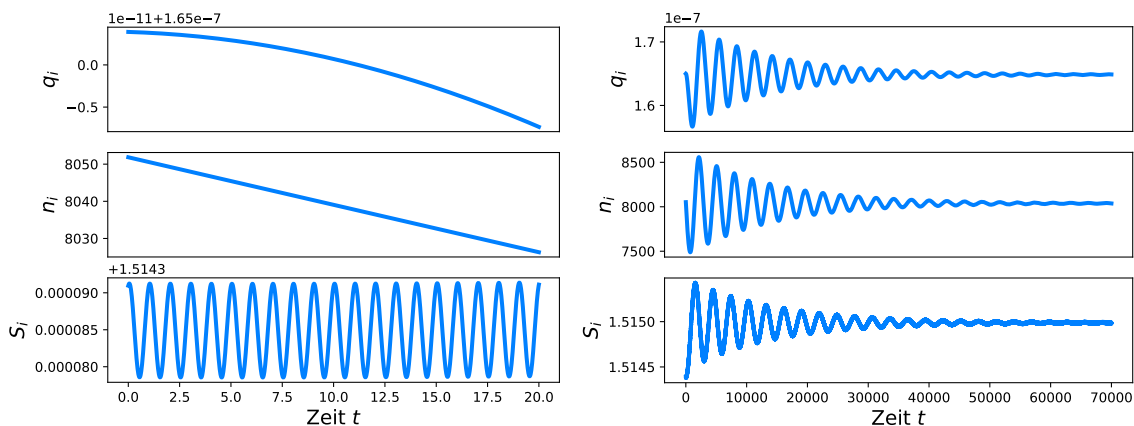
$$\dot{S}_i = \left(\frac{L_S g}{c_p R_v T^2} - \frac{g}{R_a T} \right) S_i (a_1 + a_2 x_1) - \frac{p}{\varepsilon p_{si}(T)} (\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q) \quad (7.3c)$$

$$\dot{x}_1 = x_2 \quad (7.3d)$$

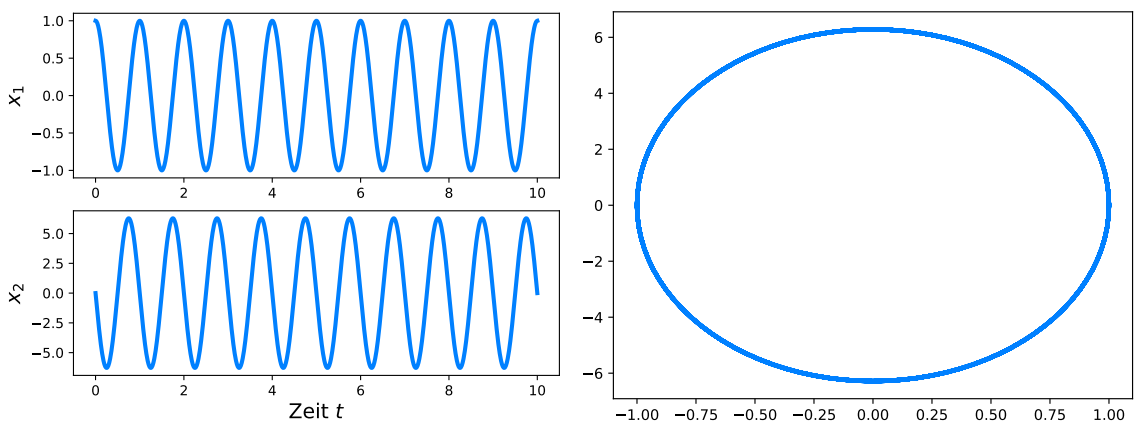
$$\dot{x}_2 = -\frac{4\pi^2}{\varepsilon^2} x_1. \quad (7.3e)$$

Man gelangt dann zu einem Auftriebsterm wie in (7.2c), indem man die zusätzlichen Anfangsbedingungen $x_1(0) = 1$ und $x_2(0) = 0$ festlegt. Auf diese Weise können auch andere Oszillatoren, die beispielsweise nicht-linear sind, angekoppelt werden. Mehr dazu findet man in Abschnitt 7.2.2.

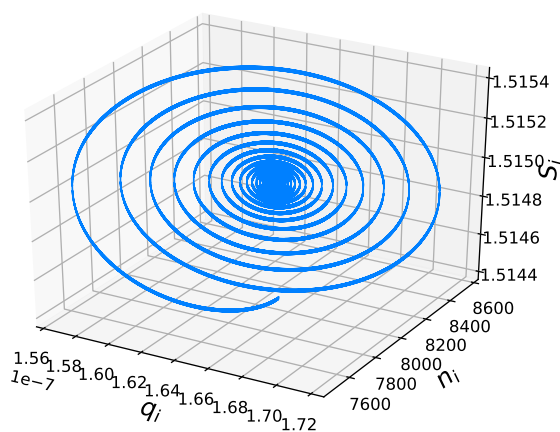
Abbildung 7.4 zeigt eine numerische Berechnung des Systems (7.3). Die Abbildungen 7.4a, 7.4b und 7.4e zeigen das Verhalten des Systems auf einer kurzen und einer langen Zeitskala. Auf der kurzen Zeitskala erkennt man die Oszillationen, die S_i aufgrund des harmonischen Oszillators als Forcing-Term durchführt. Mit den Abbildungen 7.4c und 7.4d werden die numerischen Lösungen des Teilsystems (7.3d) und (7.3e) veranschaulicht. Da es sich hier um den harmonischen Oszillator handelt, bietet sich ein symplektisches Verfahren als numerischer Löser an. Es wurde mit dem impliziten Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung vier gelöst, das in E.1 zu finden ist. Das Teilsystem (7.3a), (7.3b) und (7.3c) wurde mit dem klassischen Runge-Kutta Verfahren vierter Ordnung berechnet. Durch den oszillatorischen Forcing-Term gewinnt das Problem (7.3) an Steifheit. Dies zeigt ein Vergleich von Abbildung 7.4f mit den Abbildungen 7.1c, 7.2c und 7.3c. Abbildung 7.4f deutet darauf hin, dass man die Schrittweite des Löser entsprechend des Systems (7.3d) und (7.3e) anpassen sollte. Wir sprechen in diesem Fall von oszillatorischer Steifheit, da die betragsmäßig großen Imaginärteile der Eigenwerte Ursache für das steife Verhalten der Differentialgleichungen sind.



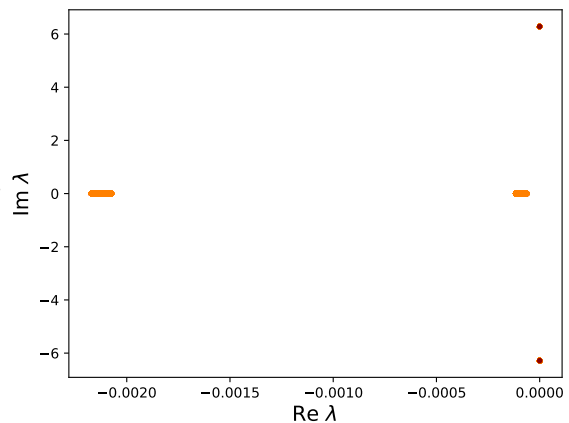
(a) Zeitliche Entwicklung von q_i , n_i und S_i auf einer kurzen Zeitskala (b) Zeitliche Entwicklung von q_i , n_i und S_i auf einer langen Zeitskala



(c) harmonischer Oszillator als Forcing-Term (d) harmonischer Oszillator im Phasenraum



(e) q_i , n_i und S_i im Phasenraum



(f) Eigenwerte der Jacobi-Matrix. Die dunklen Punkte zeigen die Eigenwerte des harmonischer Oszillators.

Abbildung 7.4: Numerische Lösung des Eiswolkenmodells mit dem harmonischer Oszillator als Forcing-Term. Für die Simulationen wurden eine Temperatur $T = 210$ K, ein Druck 30 000 Pa, sowie folgende Parameter für den Auftrieb gewählt $a_1 = 0.01$ m s⁻¹, $a_2 = 1$ m s⁻¹. $\varepsilon = 1$.

7.2.2 Das van der Pol-System als Forcing-Term

In Abschnitt 7.2.1 wurde der harmonische Oszillator als Forcing-Term betrachtet. Bereits dort wurde darauf hingewiesen, dass man auch andere Systeme als Forcing ankoppeln kann. In diesem Abschnitt betrachten wir das van der Pol-System als nicht-linearen Oszillator. Dieses System ist ein Standardbeispiel, das häufig in der nicht-linearen Dynamik untersucht wird (siehe Guckenheimer und Holmes, 2002). Andere Beispiele für nicht-lineare Oszillatoren sind bereits in Kapitel 3 bei der Untersuchung von Modellen, die warme Wolken beschreiben, aufgetaucht. Man kann zeigen, dass das van der Pol-System einen eindeutigen Grenzyklus besitzt und jede Trajektorie gegen diesen für $t \rightarrow \infty$ gegen diesen konvergiert (siehe Teschl, 2012). Bei Verwendung des van der Pol-Systems als Forcing-Term erhalten wir folgende Formulierung für das Eiswolkenmodell

$$\dot{n}_i = \text{Nuc}_n + \text{Evap}_n + \text{Sed}_n, \quad (7.4a)$$

$$\dot{q}_i = \text{Nuc}_q + \text{Dep}_q + \text{Sed}_q, \quad (7.4b)$$

$$\dot{S}_i = \left(\frac{L_S g}{c_p R_v T^2} - \frac{g}{R_a T} \right) S_i (a_1 + a_2 x_1) - \frac{p}{\epsilon p_{s_i}(T)} (\text{Nuc}_q + \text{Dep}_q) \quad (7.4c)$$

$$\dot{x}_1 = x_2 \quad (7.4d)$$

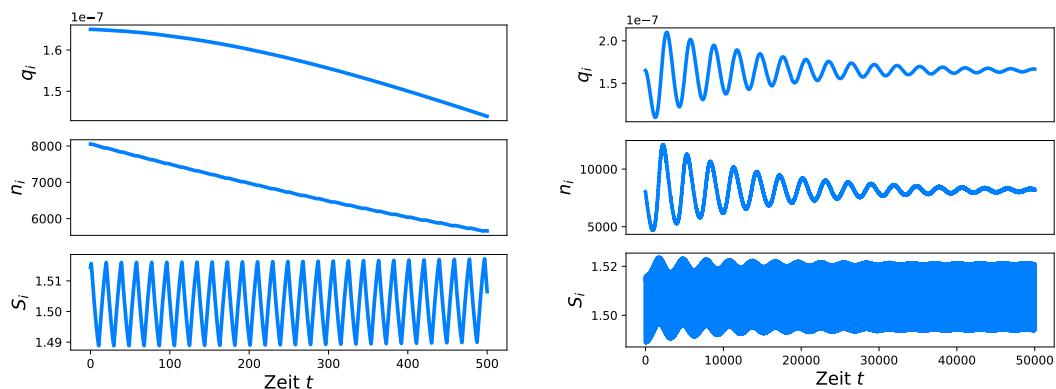
$$\dot{x}_2 = \alpha (1 - x_1^2) x_2 - x_1. \quad (7.4e)$$

Abbildung 7.5 zeigt eine numerische Berechnung des Modells (7.4). Durch die Abbildungen 7.5a und 7.5b wird das Verhalten von q_i , n_i und S_i auf einer langen und einer kurzen Zeitskala veranschaulicht. Man erkennt auf der kurzen Zeitskala deutlich den Einfluss der Oszillationen auf S_i . Das van der Pol-System, das als Forcing die Oszillationen hervorruft, ist durch (7.4d) und (7.4e) gegeben. Die Abbildungen 7.5c und 7.5d zeigen eine numerische Lösung dieses Systems. Man erkennt auf Abbildung 7.5d, dass die berechnete Lösung gegen einen Grenzyklus konvergiert. Außerdem werden mit Abbildung 7.5e die Eigenwerte des Systems (7.4) veranschaulicht. Daraus ergibt sich, dass die Eigenwerte des Systems (7.4) mit dem Parameter $\alpha = 10$ größer sind als die Eigenwerte, die man mit einem konstanten Forcing-Term wie in Abschnitt 7.1 erhält. Man sollte die Schrittweite des numerischen Lösers dementsprechend anpassen. Man erkennt auf Abbildung 7.5c, dass die Frequenz des hier verwendeten Oszillators deutlich geringer ist, als die des harmonischen Oszillators im vorherigen Abschnitt. Dies führt zu einer Vergrößerung der Amplitude von S_i .

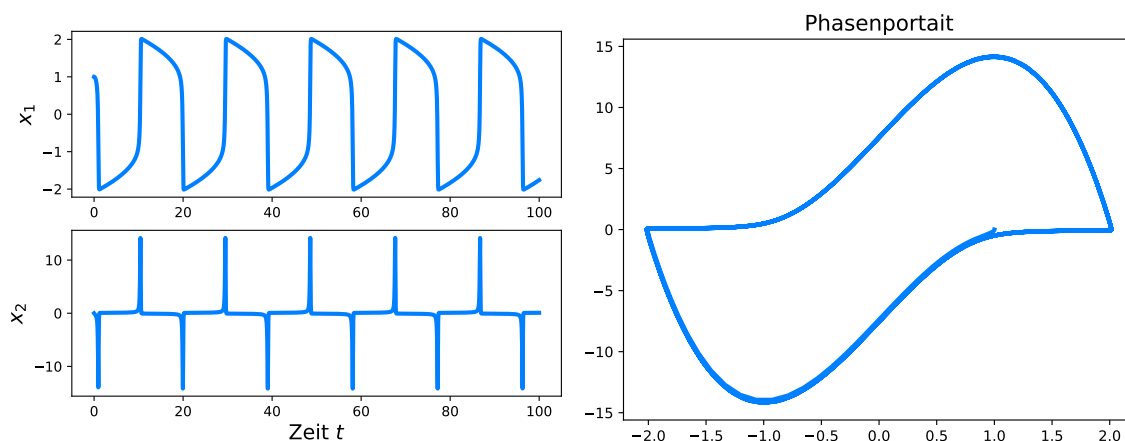
7.3 Numerische Simulationen mit HMM

In Kapitel 6 wurden heterogene Mehrskalungsverfahren beschrieben. Sie sollen in diesem Abschnitt auf das Eiswolken-Schema, auf das ein periodisches Forcing wirkt, angewendet werden.

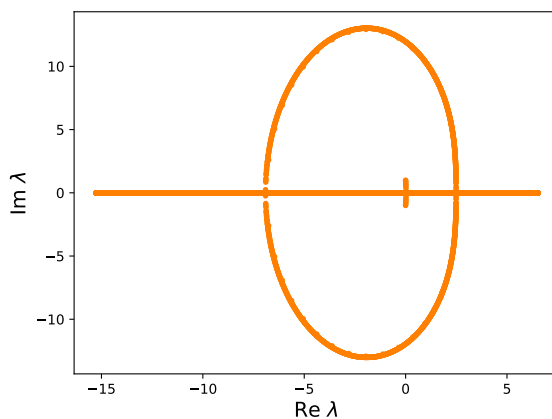
Die Fehlerabschätzung (6.51) hängt sowohl von η als auch vom Quotient $\frac{\epsilon}{\eta}$ ab. Mit η wird die Größe des Integrationszeitfensters der Mikro-Integrationen festgelegt. Der Parameter ϵ führt bei entsprechender Wahl dazu, dass das System zwei Zeitskalen besitzt. Um zu gewährleisten, dass die Fehlerabschätzung (6.51) klein bleibt, sollten η und $\frac{\epsilon}{\eta}$ klein sein. Dies kann erreicht werden, wenn ϵ klein ist.



(a) Zeitliche Entwicklung von q_i , n_i und S_i auf einer kurzen Zeitskala (b) Zeitliche Entwicklung von q_i , n_i und S_i auf einer langen Zeitskala



(c) van der Pol-Oszillator als Forcing-Term (d) van der Pol-Oszillator im Phasenraum



(e) Eigenwerte der Jacobi-Matrix

Abbildung 7.5: Numerische Lösung des Eiswolkenmodells mit dem van der Pol-Oszillator als Forcing-Term. Für die Simulationen wurden eine Temperatur $T = 210$ K, ein Druck $30\,000$ Pa, sowie folgende Parameter für den Auftrieb gewählt $a_1 = 0.01 \text{ m s}^{-1}$, $a_2 = 1 \text{ m s}^{-1}$. $\alpha = 10$

Wenn der Parameter ε klein ist, oszilliert der periodische Anteil des Forcing-Terms sehr schnell um Null. Um die Übersättigung S_i zu berechnen, muss man über den Forcing-Term integrieren. Je schneller die Oszillationen sind, umso kleinere Werte liefert die Integration über den periodischen Anteil. Deshalb wird durch den periodischen Anteil des Forcing-Terms die Übersättigung S_i bei hohen Frequenzen kaum beeinflusst, selbst wenn man unrealistisch große Amplituden annimmt. Dies werden die Berechnungen in diesem Abschnitt zeigen.

7.3.1 Harmonischer Oszillator

Abbildung 7.6 zeigt numerische Berechnungen des Eiswolken-Modells, die mit dem harmonischen Oszillator als Forcing-Term durchgeführt wurden. Bei den Abbildungen 7.6a und 7.6b nehmen die Parameter a_1, a_2 und ε die Werte $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}, a_2 = 20 \text{ m s}^{-1}, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-2}$ an. Zur Erstellung der Abbildungen 7.6c und 7.6d wurden $\varepsilon = 1.e - 2$ gewählt. Die Amplitude des Forcing-Terms beträgt $a_2 = 0.5 \text{ m s}^{-1}$. Die periodischen Schwingungen wurden mit einem konstanten Auftrieb $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}$ überlagert.

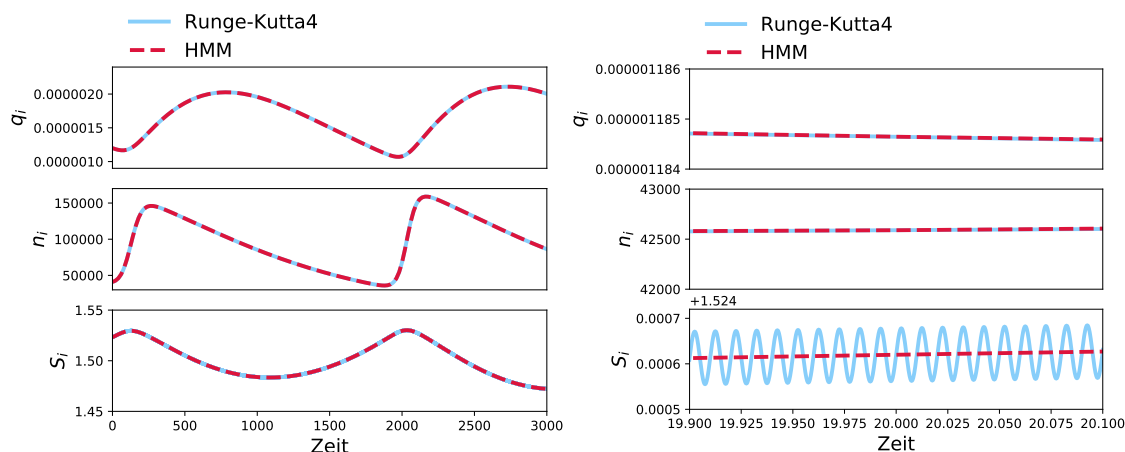
Es wurde eine Referenzlösung mit dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung erstellt. Außerdem wurde das Eiswolkenmodell mit einem heterogenen Mehrskalungsverfahren berechnet, das das Heun Verfahren zweiter Ordnung als Makro-Löser verwendet. Als Mikro-Löser wurden für den harmonischen Oszillator das symplektische Runge-Kutta Verfahren vierter Ordnung aus Abschnitt E.1 im Anhang benutzt, für das Eiswolkenmodell wurde wieder das klassische Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung verwendet. Außerdem wurde für das Zeitfenster der Mikro-Integration $\eta = 0.1$ für die Abbildungen 7.6a und 7.6b $\eta = 1$ und für die Abbildungen 7.6c und 7.6c gewählt. Abbildung 7.6 zeigt, dass mit dem verwendeten heterogenen Mehrskalen-Verfahren die Referenzlösung interpoliert werden kann.

Verwendet man anstatt (7.2) die Darstellung (7.3) stellt sich die Frage, wie man für das Teilsystem (7.3d), (7.3e) die Startwerte für die Mikro-Integrationen wählen soll. Sofern die Frequenz des Forcings nicht bekannt ist, geht durch die Makroschritte die Information über die Phase verloren. Für die Mikro-Integrationen können dann beispielsweise immer die gleichen Anfangsdaten $x_1(t_0) = 1$ und $x_2(t_0) = 0$ verwendet werden. Bei dieser Vorgehensweise braucht die numerische Lösung des periodischen Forcings, die für die Mikro-Integrationen benötigt wird, nur einmal berechnet werden. Dieses Ergebnis kann man dann für jede Mikro-Integration wiederverwenden.

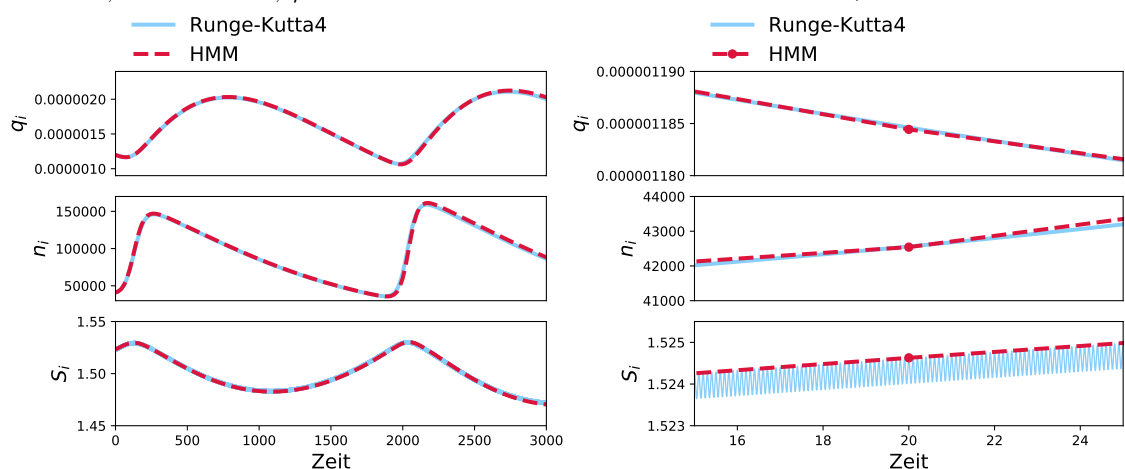
7.3.2 Van der Pol-System

Beim van der Pol-System taucht noch kein Parameter ε auf. Er wird durch eine Zeittransformation eingeführt. Es soll gelten $x(t) = \tilde{x}(\varepsilon t)$. Dabei ist $x(t)$ die Lösung des Ausgangssystems und $\tilde{x}(t')$ die Lösung des transformierten Systems. Der Parameter ε soll die Frequenz des Forcing-Terms steuern. Unter Berücksichtigung dieser Frequenz kann man η , und damit die Größe des Zeitfensters der Mikro-Integrationen wählen. In Hinblick auf die Abschätzung (6.51) ist es günstig, ε so zu wählen, dass die Frequenz des Forcing-Terms groß ist.

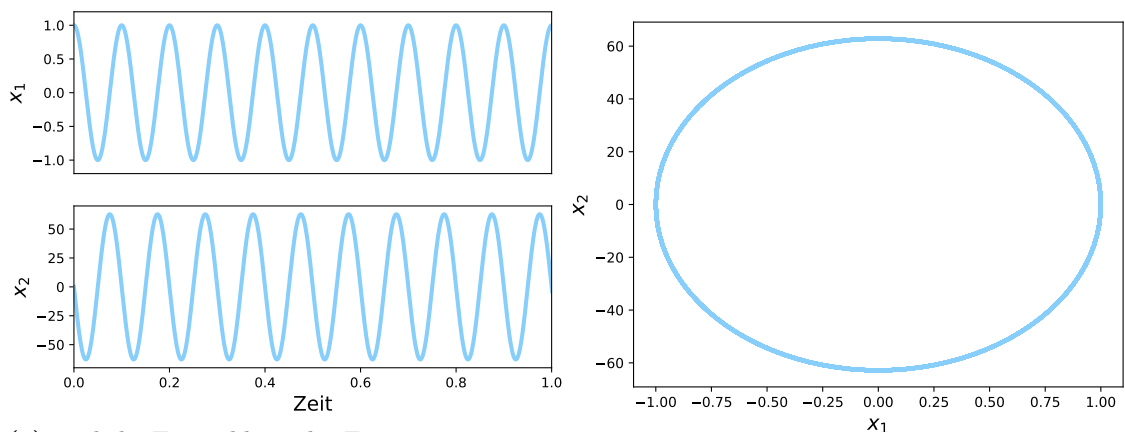
Durch die Zeittransformation nimmt der van der Pol-Oszillator folgende Gestalt an



(a) längere Zeitskala, $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}, a_2 = 20 \text{ m s}^{-1}, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-2}, \eta = 0.125$ (b) kurze Zeitskala, $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}, a_2 = 20 \text{ m s}^{-1}, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-2}, \eta = 0.125$



(c) längere Zeitskala, $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}, a_2 = 0.5 \text{ m s}^{-1}, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-1}, \eta = 1$ (d) kurze Zeitskala, $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}, a_2 = 0.5 \text{ m s}^{-1}, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-1}, \eta = 1$



(e) zeitliche Entwicklung des Forcing-Terms, $\varepsilon = 1 \cdot 10^{-1}$ (f) Forcing-Term im Phasenportrait

Abbildung 7.6: Numerische Lösungen des Eiswolkenmodells mit dem harmonischen Oszillator als Forcing-Term. Zu sehen sind zwei Simulationen bei Verwendung unterschiedlicher Parameter. Die Lösungen wurden mit einem heterogenen Mehrskalungsverfahren berechnet.

$$\dot{\tilde{x}}_1 = \tilde{x}_2 \quad (7.5a)$$

$$\dot{\tilde{x}}_2 = \frac{\alpha}{\varepsilon} \left(1 - \tilde{x}_1^2\right) \tilde{x}_2 - \frac{1}{\varepsilon^2} \tilde{x}_1. \quad (7.5b)$$

Abbildung 7.7 zeigt numerische Berechnungen des Eiswolken-Schemas mit dem van der Pol-System als Forcing-Term. Für die Referenzlösung wurde das System mit dem klassische Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung gelöst. Außerdem wurde das System mit einem heterogenen Mehrskalungsverfahren gelöst. Dabei wurde als Makro-Löser das Heun-Verfahren zweiter Ordnung und als Mikro-Löser das klassische Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung vier verwendet.

Zu sehen sind zwei Simulationen mit jeweils unterschiedlichen Parametern. Zur Erstellung der Abbildungen 7.7a und 7.7b wurden die Parameter $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}$, $a_2 = 10 \text{ m s}^{-1}$, $\alpha = 3$, $\varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-2}$ verwendet. Eine andere Wahl von a_2 eröffnet die Möglichkeit die Amplitude des Forcing-Terms zu modifizieren. Es wurde ein Zeitfenster $\eta = 1$ gewählt. Abbildung 7.7e zeigt die verkürzte Periodendauer des van der Pol-Systems. Dies wurde durch Einführung des Parameters ε erreicht.

Für den zweiten Testlauf wurden die Parameter durch $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}$, $a_2 = 0.25 \text{ m s}^{-1}$, $\alpha = 5$, $\varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-3}$ festgelegt. Das Zeitfenster beträgt $\eta = 0.1$. Die Resultate werden durch die Abbildungen 7.7c und 7.7d veranschaulicht. Außerdem zeigt Abbildung 7.7f das Phasenportrait des Oszillators.

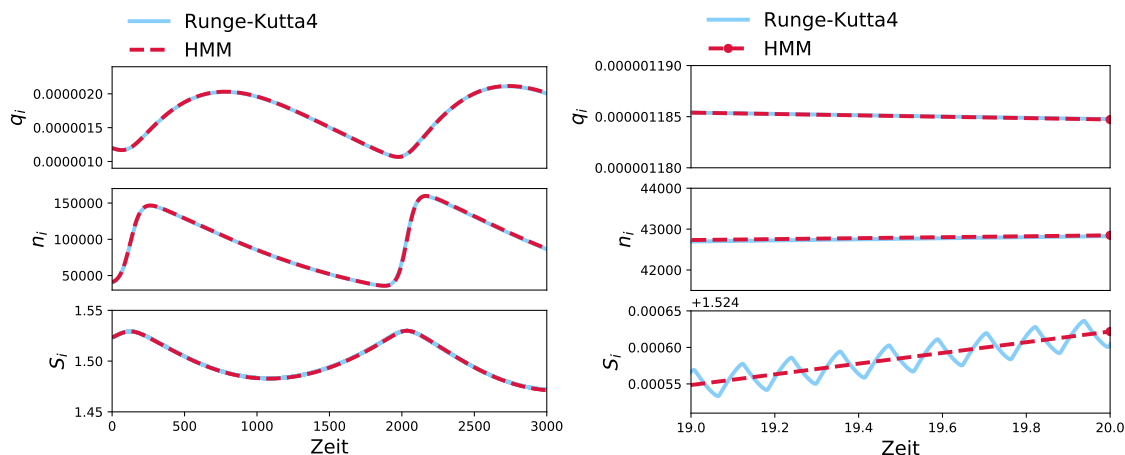
Zur Approximation dieses Systems wurde, mangels Information über die Phase, für jede Mikro-Integration der gleiche Startwert verwendet. Es bietet sich an, die numerische Lösung, die den periodischen Anteil des Forcings beschreibt, als Teil der Mikro-Integration nur einmal zu berechnen und für jede Mikro-Integration wiederzuverwenden.

Die Periodendauer kann numerisch berechnet werden. Alternativ kann man auch versuchen, Abschätzungen zu deren Bestimmung zu verwenden. Hier zeigt sich der Vorteil von heterogenen Mehrskalungsverfahren mit Kernfunktionen gegenüber SAM (siehe Abschnitt 6.4), da für die erstgenannte Verfahrensklasse die Periodendauer nicht exakt bekannt zu sein braucht.

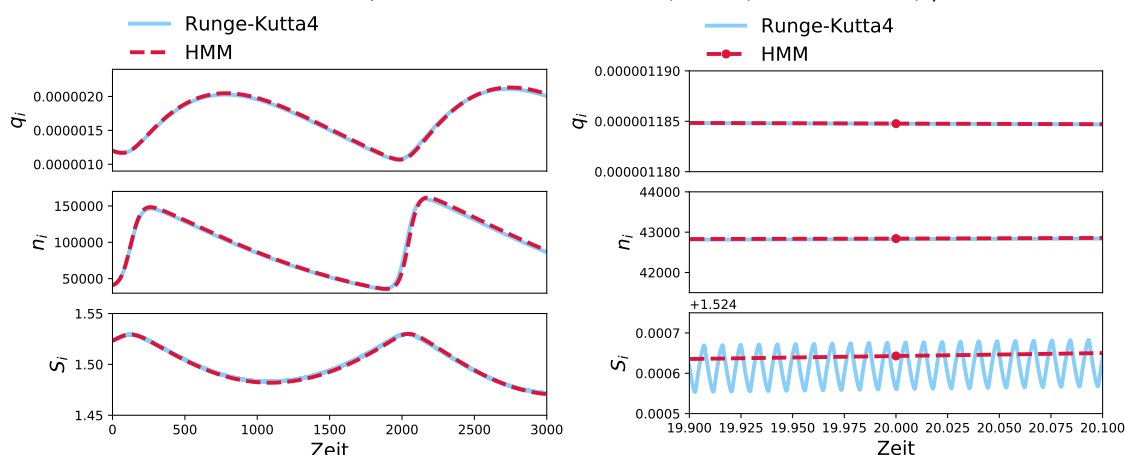
7.3.3 Vergleich des Modells mit verschiedenen Forcing-Termen

In Abbildung 7.8 werden numerische Lösungen des Eiswolkenmodells verglichen, die mit unterschiedlichen Forcing-Termen berechnet wurden. Insbesondere unterscheiden sich die periodischen Anteile der Forcing-Terme. Der periodische Anteil wird zum einen durch den harmonischen und zum anderen durch den van der Pol-Oszillator beschrieben. Abbildung 7.8d veranschaulicht, dass die beiden Forcing-Terme vergleichbare Frequenzen besitzen. Für den harmonischen Oszillator wurde dazu die Wahl $\varepsilon = 0.1$ und für den van der Pol-Oszillator $\varepsilon = 1 \cdot 10^{-2}$, $\alpha = 3$ getroffen. Die Amplitude wurde durch den Faktor a_2 modifiziert. Im Fall des harmonischen Oszillators wurde $a_2 = 0.5 \text{ m s}^{-1}$ und für den van der Pol-Oszillator $a_2 = 0.25 \text{ m s}^{-1}$ gewählt. Damit gehen die Forcing-Terme mit sehr ähnlichen Amplituden in das System ein.

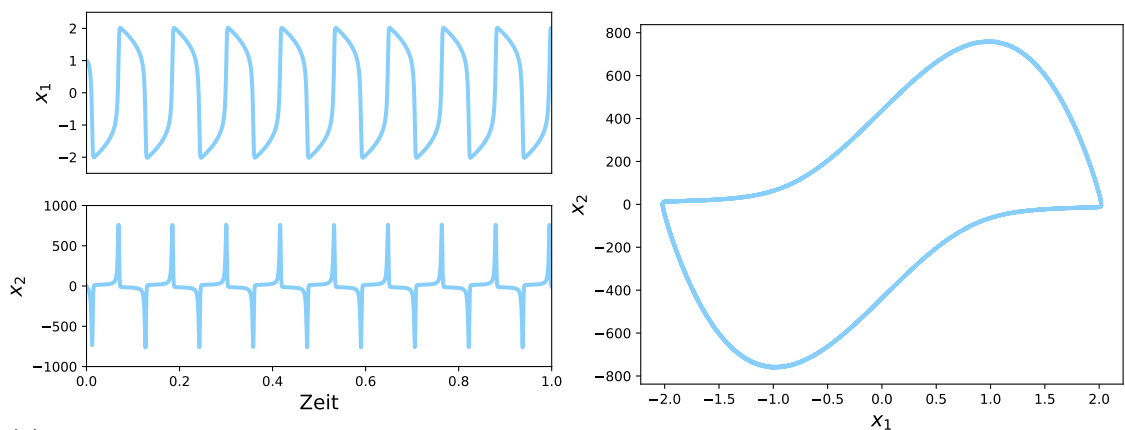
Auf den Abbildungen ist zu sehen, dass die gemittelten Flüsse sehr ähnlich sind und ein Verhalten zeigen, dass vergleichbar ist mit dem der Flüsse ohne periodisches Forcing



(a) längere Zeitskala, $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}, a_2 = 10 \text{ m s}^{-1}, \alpha = 3, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-2}, \eta = 1$. (b) kurze Zeitskala, $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}, a_2 = 10 \text{ m s}^{-1}, \alpha = 3, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-2}, \eta = 1$.



(c) längere Zeitskala, $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}, a_2 = 0.25 \text{ m s}^{-1}, \alpha = 5, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-3}, \eta = 0.1$. (d) kurze Zeitskala, $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}, a_2 = 0.25 \text{ m s}^{-1}, \alpha = 5, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-3}, \eta = 0.1$.



(e) zeitliche Entwicklung des Forcing-Terms bei der Parameterwahl $\alpha = 3, \varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-2}$. (f) Forcing-Term im Phasenportrait

Abbildung 7.7: Numerische Lösung des Eiswolkenmodells mit dem van der Pol-Oszillator als Forcing-Term. Es wurden das Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung und ein HMM-Verfahren als numerische Löser verwendet. Dabei wurden eine Temperatur $T = 210 \text{ K}$, ein Druck $30\,000 \text{ Pa}$ gewählt.

(siehe Abbildungen 7.1, 7.2, 7.3). In diesen hochfrequenten Fällen scheint der konstante Auftriebsterm das qualitative Verhalten des gemittelten Flusses wesentlich zu bestimmen.

Zum weiteren Vergleich wurden in Abbildung 7.9 die Simulationen mit einer langsameren Frequenz durchgeführt, siehe dazu Abbildung 7.9d. Durch die verschiedenen Forcing-Terme ändert sich das Einschwingverhalten bei den Berechnungen mit $a_1 = 0.01 \text{ m s}^{-1}$ und $a_1 = 0.5 \text{ m s}^{-1}$. Als numerischer Löser wurde das klassische Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung mit Schrittweite von 0.01 verwendet. Bei der Erstellung der Abbildung 7.10 wurde die Frequenz weiter verlangsamt, siehe Abbildung 7.10d. Für die Fälle $a_1 = 0.01 \text{ m s}^{-1}$ und $a_1 = 0.5 \text{ m s}^{-1}$ erhält man nach einer Einschwingphase ähnliche Resultate mit dem harmonischen und van der Pol-Oszillator. Wenn $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}$ beträgt, sind die numerischen Lösungen verschieden. Man erkennt dies in den Abbildungen 7.10a, 7.10b und 7.10c. Die numerischen Lösungen wurden mit dem klassische Runge-Kutta Verfahren der Ordnung vier berechnet. Es wurde eine Schrittweite von 0.001 verwendet.

7.3.4 Fehler

Bei der Fehleranalyse wird das System mit harmonischen Oszillator als Forcing-Term betrachtet. Der Parameter ε , der die Skalenseparation bestimmt, wurde als $\varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-2}$ gewählt. Außerdem verwenden wir für die Parameter a_1 und a_2 die Wahl $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}$ und $a_2 = 20 \text{ m s}^{-1}$.

Es wurden Runge-Kutta-Verfahren verschiedener Ordnung als Makro-Löser verwendet, insbesondere dienen das explizite Euler Verfahren und das Heun-Verfahren der Ordnung zwei als Makro-Löser. Für die Mikro-Integrationen wurde das klassische Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung vier mit einer Mikro-Schrittweite $h = 0.0005$ angewendet.

Abbildung 7.11 zeigt den numerischen Fehler des Verfahrens zu einem festgelegten Zeitpunkt T_{\max} bei Verwendung verschiedener Makro-Schrittweiten. Für den numerische Fehler wurden zunächst die relativen Fehler

$$x_{\text{rel}} = \left| \frac{x(T_{\max}) - x_{\text{ref}}(T_{\max})}{x_{\text{ref}}(T_{\max})} \right| \quad x \in \{q_i, n_i, S_i\} \quad (7.6)$$

berechnet und anschließend addiert. Die Bezeichnung x_{ref} steht dabei für die Referenzlösung, die mit dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren bei geringer Schrittweite berechnet wurde.

In Abbildung 7.11 erkennt man im Wesentlichen die Ordnungen der Makro-Löser wieder. Für die Erstellung von Abbildung 7.11a wurde das explizite Euler-Verfahren als Makro-Löser angewendet. Man erkennt, dass das Verfahren Ordnung eins in der Makro-Schrittweite besitzt. Die Kurve beginnt bei $H \approx 0.25$ abzufallen. An dieser Stelle werden andere Fehlerterme dominant. Abbildung 7.11b zeigt die Fehlerentwicklung bei Anwendung des Heun-Verfahrens als Makro-Löser. Bis zu einer Makro-Schrittweite von $H \approx 4$ erkennt man die Ordnung zwei in H . Wählt man die Schrittweiten kleiner, flacht die Fehlerkurve ab.

7.4 Spektrales Defektkorrektur-Verfahren (SDC) als Makro-Löser

In diesem Abschnitt soll das spektrale Defektkorrektur-Verfahren (SDC) vorgestellt werden. Es handelt sich hierbei um ein iteratives Verfahren zur numerischen Lösung gewöhnlicher

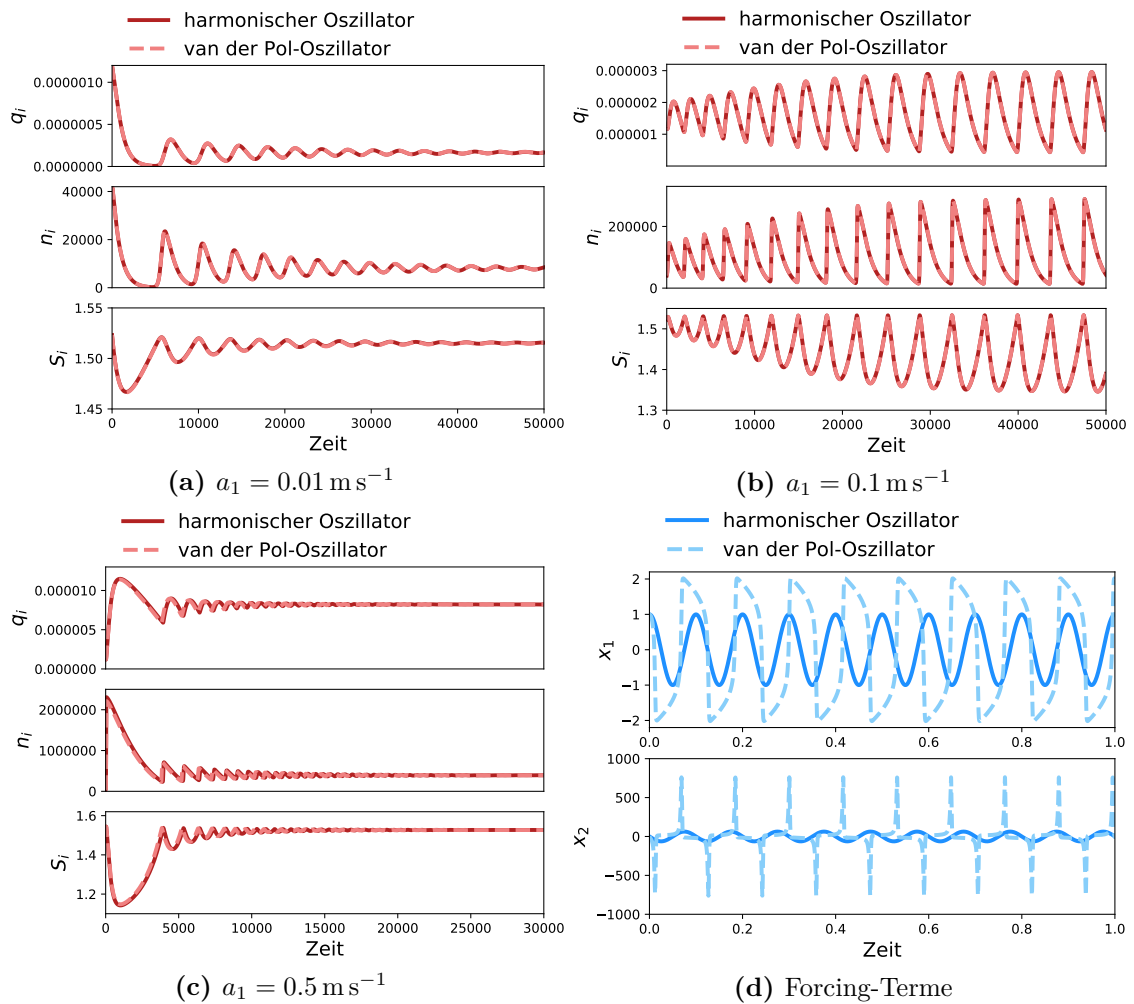


Abbildung 7.8: Vergleich des Eiswolkenmodells mit verschiedenen hochfrequenten Forcing-Termen. Parameter harmonischer Oszillator: $\varepsilon = 0.1$, $a_2 = 0.5 \text{ m s}^{-1}$, Parameter van der Pol: $\varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-2}$, $\alpha = 3$, $a_2 = 0.25 \text{ m s}^{-1}$

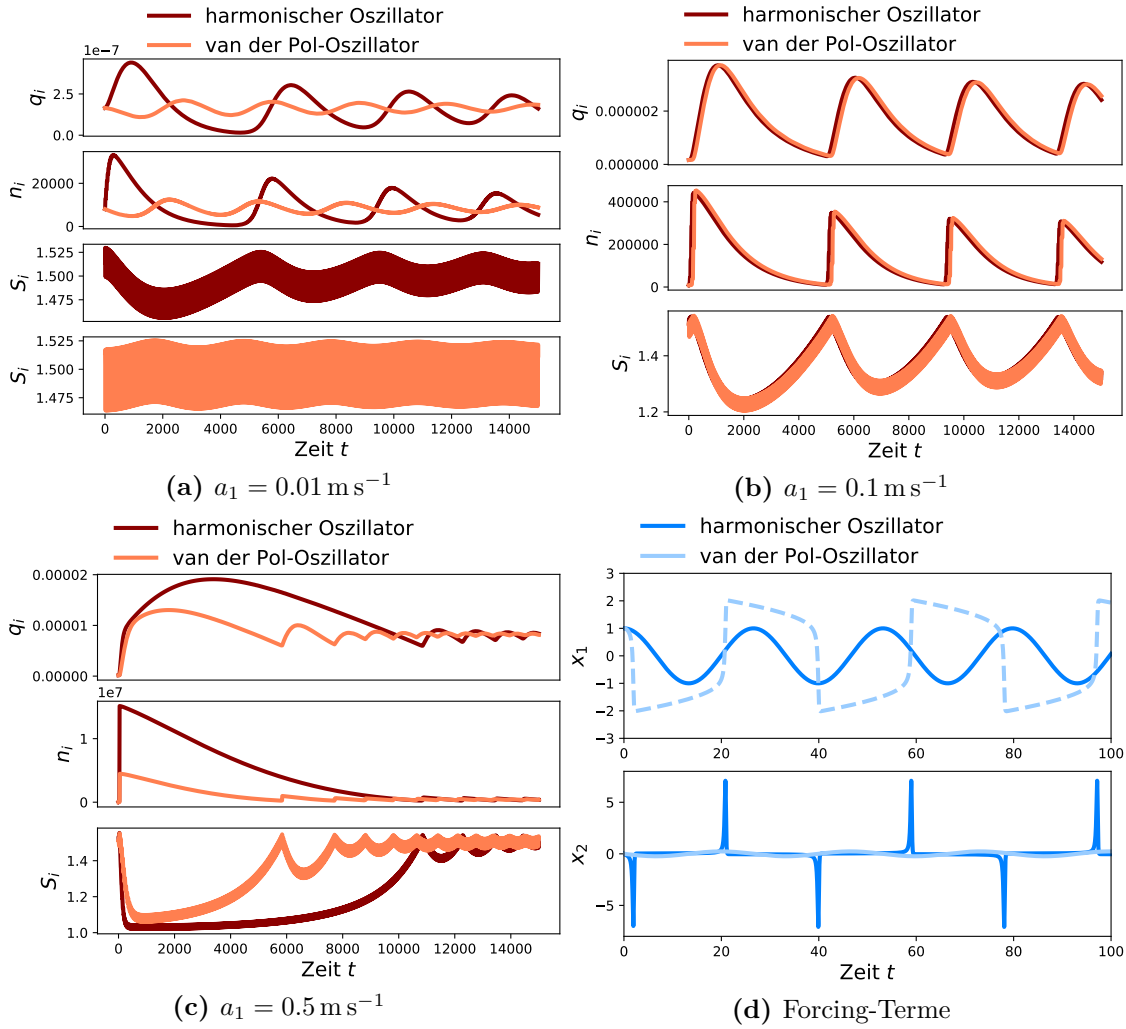


Abbildung 7.9: Vergleich des Eiswolkenmodells mit verschiedenen Forcing-Termen einer langsameren Frequenz. Parameter harmonischer Oszillator: $\varepsilon = 15\pi^{\frac{1}{2}}$, $a_2 = 2 \text{ m s}^{-1}$, Parameter van der Pol: $\varepsilon = 2$, $\alpha = 10$, $a_2 = 1 \text{ m s}^{-1}$

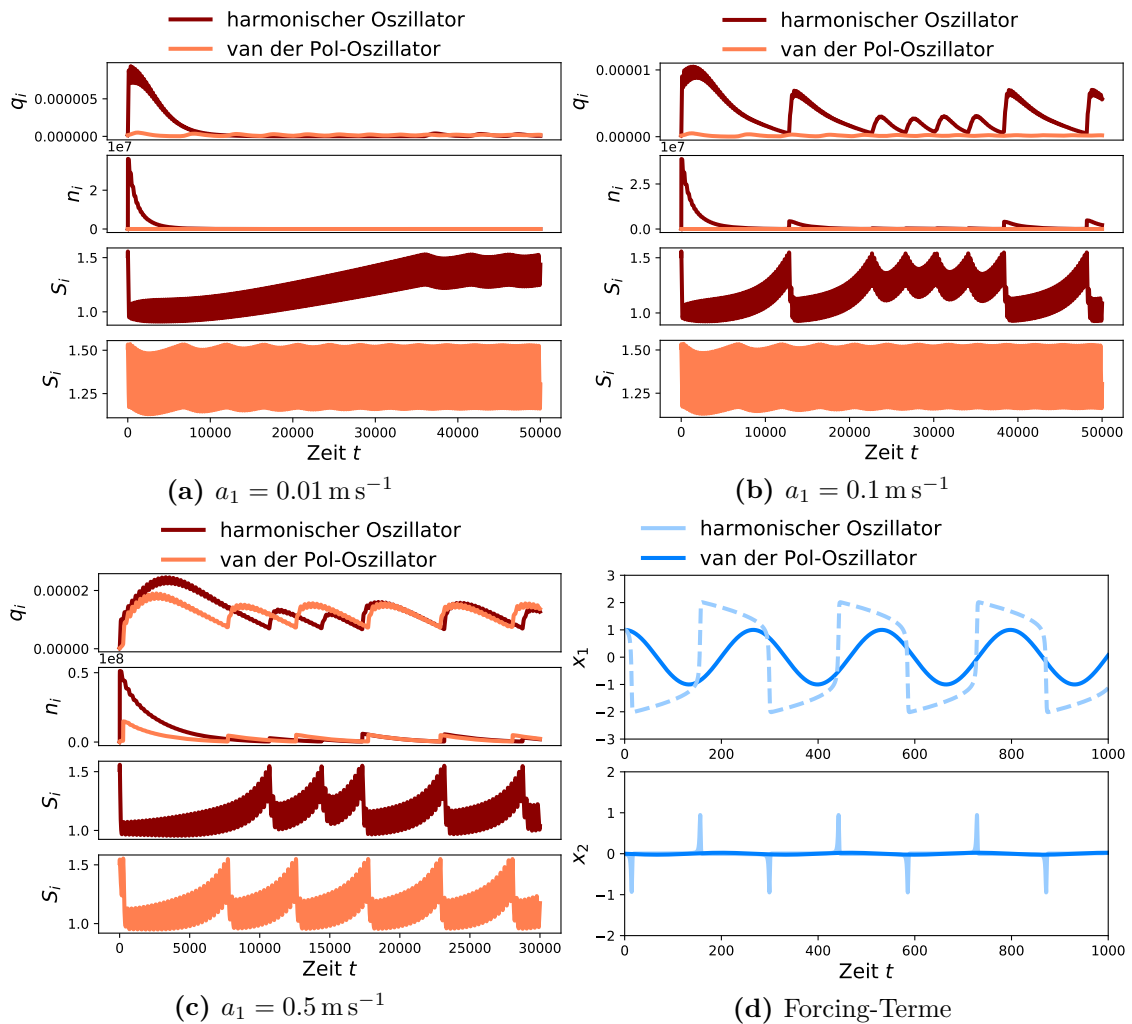
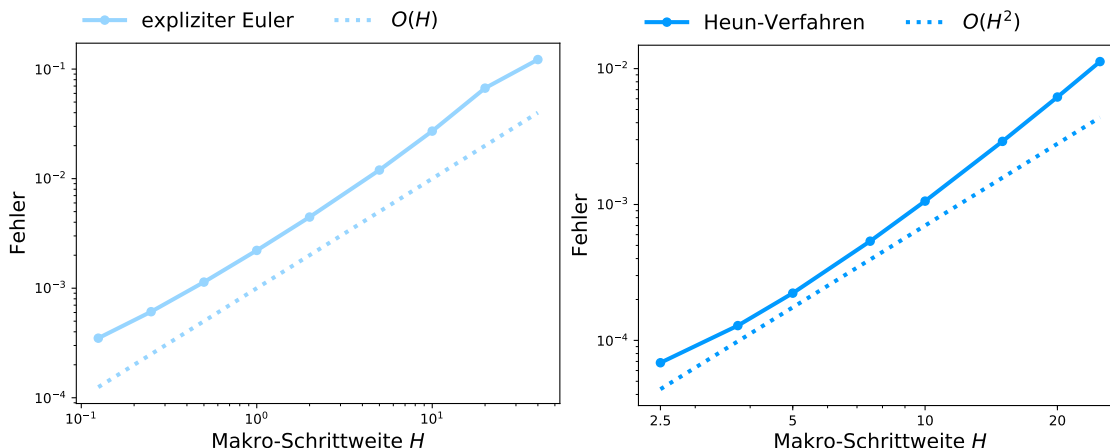


Abbildung 7.10: Vergleich des Eiswolkenmodells mit verschiedenen Forcing-Termen einer langsamen Frequenz. Parameter harmonischer Oszillator: $\varepsilon = 150\pi^{\frac{1}{2}}$, $a_2 = 2 \text{ m s}^{-1}$, Parameter van der Pol: $\varepsilon = 15$, $\alpha = 10$, $a_2 = 1 \text{ m s}^{-1}$



(a) Explizites Euler-Verfahren als Makro-Löser, $T_{\max} = 100$
 (b) Heun-Verfahren der Ordnung zwei als Makro-Löser, $T_{\max} = 600$

Abbildung 7.11: Fehler unterschiedlicher HMM bei Verwendung verschiedener Runge-Kutta-Verfahren als Makro-Löser

Differentialgleichungen. Dabei erhöht jede Iteration die Fehlerordnung bis zu einer maximal erreichbaren Ordnung. Dieses Verfahren soll später als Makro-Löser für heterogene Mehrskalenverfahren dienen.

7.4.1 Beschreibung des Verfahrens

Eine Beschreibung des spektralen Defektkorrektur-Verfahrens findet man in Dutt u. a. (2000). Den Ausgangspunkt für die nachfolgenden Untersuchungen stellt die folgende gewöhnliche Differentialgleichung dar

$$y'(t) = G(t, y(t)) \quad t \in [t^0, t^M] \quad (7.7a)$$

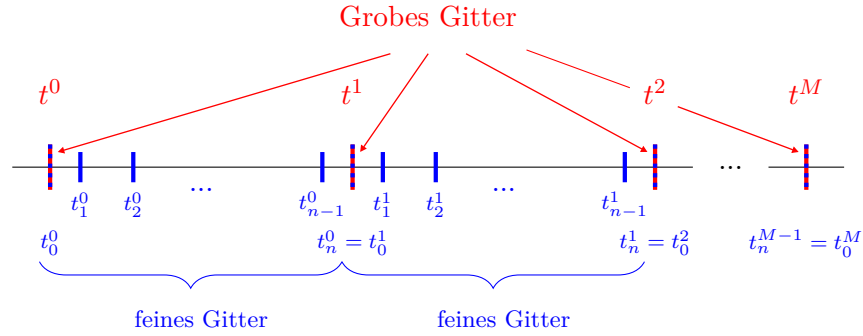
$$y(t^0) = y_0. \quad (7.7b)$$

Das Intervall $[t^0, t^M]$ wird durch ein grobes Zeitgitter t^0, t^1, \dots, t^M unterteilt. Wenn in diesem Abschnitt von groben und feinen Zeitgittern die Rede ist, beziehen wir uns damit nicht auf die Mikro- und Makro-Zeitschritte, die bei heterogenen Mehrskalenverfahren durchgeführt werden. Die Mikro- und Makro-Zeitschritte der heterogenen Mehrskalenverfahren sind davon unabhängig zu betrachten.

Zwei benachbarte Knoten des groben Zeitgitters bilden ein neues, kleineres Intervall. Auf dem Intervall $[t^0, t^1]$ kann ein feines Zeitgitter $t_0^0, t_1^0, \dots, t_n^0$ eingeführt werden. Bei dem sich anschließenden kleinen Intervall $[t^1, t^2]$ wird das feine Zeitgitter mit $t_0^1, t_1^1, \dots, t_n^1$ bezeichnet und so weiter. Abbildung 7.12 zeigt eine Veranschaulichung der betrachteten Gitter.

In der Folge beschränken wir unsere Betrachtungen auf das Intervall $[t^0, t^1]$ und das zu diesem Intervall gehörige feine Zeitgitter. Aus Gründen der Übersichtlichkeit schreiben wir t_0 anstatt t_0^0 , t_1 anstatt t_1^0 und so weiter. Damit betrachten wir von jetzt an das Problem

$$y'(t) = G(t, y(t)) \quad t \in [t_0, t_n] \quad (7.8a)$$


Abbildung 7.12: Das grobe und die feinen SDC-Gitter

$$y(t^0) = y_0. \quad (7.8b)$$

Die Lösung des Problems (7.8) kann als Picard-Integral formuliert werden

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t G(\tau, y(\tau)) d\tau. \quad (7.9)$$

Wir nehmen an, dass wir durch irgendein Verfahren eine Approximation $y^{[0]}$ des Problems (7.8) erhalten haben. Dann können wir die Defektgleichung wie folgt formulieren

$$\delta(t) = y(t) - y^{[0]}(t). \quad (7.10)$$

Die Approximation $y^{[0]}$ kann eine konstante Funktion sein, die den Startwert y_0 im gesamten Intervall $[t_0, t_n]$ annimmt. Mit den Gleichungen (7.9) und (7.10) kann die Lösung von (7.8) umformuliert werden und man gelangt zu

$$\begin{aligned} y(t_i) &= y(t_{i-1}) + \underbrace{\int_{t_{i-1}}^{t_i} (G(\tau, y^{[0]}(\tau) + \delta(\tau)) - G(\tau, y^{[0]}(\tau))) d\tau}_{I_1} \\ &\quad + \underbrace{\int_{t_{i-1}}^{t_i} G(\tau, y^{[0]}(\tau)) d\tau}_{I_2}. \end{aligned}$$

Wir haben Gleichung (7.10) verwendet, um $y(t)$ umzuschreiben. Außerdem wurde die Beziehung $-G(\tau, y^{[0]}(\tau) + \delta(\tau)) + G(\tau, y^{[0]}(\tau)) = 0$ benutzt.

An dieser Stelle sollen die Integrale I_1 und I_2 approximiert werden. Das Verfahren, das für die Approximation von I_1 verwendet wird, ist das Basisverfahren des spektralen Defektkorrektur-Verfahrens. Verschiedenste Verfahren für die numerische Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen stellen eine mögliche Wahl für das Basisverfahren dar. Hier wird das spektrale Defektkorrektur-Verfahren mit dem expliziten Euler-Verfahren als Basisverfahren beschrieben. Insbesondere wird bei dieser Wahl I_1 durch

$$I_1 \approx (t_i - t_{i-1})(G(t_{i-1}, y^{[0]}(t_{i-1}) + \delta(t_{i-1})) - G(t_{i-1}, y^{[0]}(t_{i-1}))). \quad (7.11)$$

diskretisiert. Für die Approximation von I_2 benutzen wir das eindeutige Polynom minimalen Grades p_n , das die Bedingungen

$$p_n(t_j) = G(t_j, y^{[0]}(t_j)) \quad (7.12)$$

erfüllt. Das Integral I_2 kann dann durch

$$I_2(y^{[0]})_i = \int_{t_{i-1}}^{t_i} p_n(\tau) d\tau \quad (7.13)$$

approximiert werden. Die Berechnung dieses Integrals kann als eine Matrix-Vektor-Multiplikation implementiert werden. Die Matrix muss insgesamt nur einmal berechnet werden.

Letztendlich erhalten wir die Vorschrift

$$y^{[1]}(t_i) = y^{[1]}(t_{i-1}) + (t_i - t_{i-1})(G(t_{i-1}, y^{[1]}(t_{i-1})) - G(t_{i-1}, y^{[0]}(t_{i-1}))) + I_2(y^{[0]})_i. \quad (7.14)$$

Der exakte Wert von $\delta(t_i)$ ist im Allgemeinen nicht bekannt, deshalb approximieren wir $y^{[0]}(t_{i-1}) + \delta(t_{i-1})$ durch $y^{[1]}(t_{i-1})$.

Es wurde also die Approximation $y^{[1]}$ unter Verwendung von $y^{[0]}$ berechnet. Dieser Prozess kann iteriert werden und man erhält Approximationen $y^{[2]}$, $y^{[3]}$ und so weiter.

Es soll ein spektrales Defektkorrektur-Verfahren als Makro-Löser verwendet werden. Da der Makro-Fluss als nicht-steif vorausgesetzt wird, wird ein explizites Verfahren angewendet, dem der explizite Euler als Basisverfahren zugrunde liegt. Es ist auch möglich implizite spektrale Defektkorrektur-Verfahren zu konstruieren. Beispielsweise kann das implizite Euler-Verfahren als Basisverfahren dienen. Einige dieser Verfahren wurden in Dutt u. a. (2000) untersucht und haben sich als $A(\alpha)$ -stabil herausgestellt. Des Weiteren wurden semi-implizite Varianten und deren Stabilitätsverhalten in Minion (2003) betrachtet.

Man kann zeigen, dass die Iterationen die Ordnung des Verfahrens bis zu einer maximal erreichbaren Ordnung erhöhen. Bei Verwendung des expliziten Euler-Verfahrens als Basisverfahren erhöht jede Iteration die Ordnung um eins (siehe Causley und Seal, 2017). Ein Ergebnis über die Konvergenz von linearen Problemen findet man auch in Huang u. a. (2006). Die maximal erreichbare Ordnung wird durch die Anzahl der Quadraturknoten bestimmt. Wenn man Quadraturknoten mit superkonvergenten Eigenschaften wählt, kann die Ordnung verbessert werden. Darauf wird in Causley und Seal (siehe 2017) hingewiesen.

7.4.2 Testläufe

Es wurde das Eiswolkenchema (7.3) mit einem heterogenen Mehrskalen-Verfahren, bei dem eine spektrale Defektkorrektur-Verfahren als Makro-Löser und das klassische Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung vier als Mikro-Löser verwendet wurden, numerisch gelöst. Das verwendete spektrale Defektkorrektur-Verfahren ist ein explizites Verfahren, bei dem der explizite Euler als Basisverfahren benutzt wird. Als Quadraturknoten wählen wir drei Radu-IIa-Knoten. Außerdem wurde als Startlösung immer eine konstante Funktion verwendet. Die Wahl wurde in Abschnitt 7.4.1 beschrieben. Für die Berechnungen wurden die Parameter $\varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-2}$, $a_1 = 0.1 \text{ m s}^{-1}$ und $a_2 = 20 \text{ m s}^{-1}$ gewählt. Die Mikro-Schrittweite beträgt $5.0 \cdot 10^{-4}$. Dies ist ausreichend, wenn man den harmonischen Oszillator vor der Integration

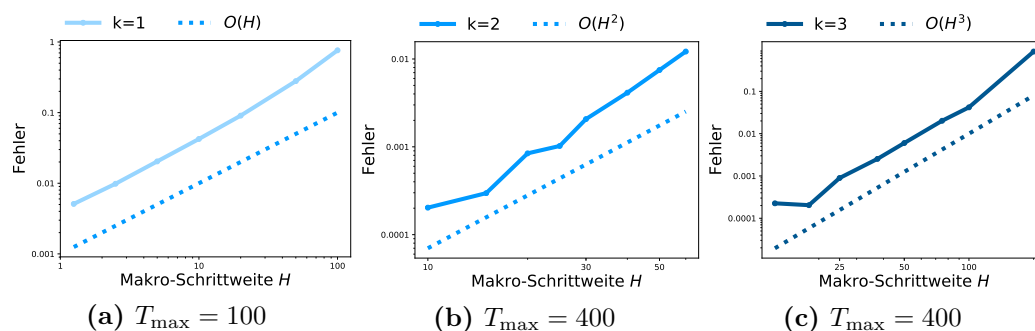


Abbildung 7.13: Fehler des heterogenen Mehrskalen-Verfahrens mit dem spektralen Defektkorrektur-Verfahren als Makro-Löser. Es wurden $k = 1, 2, 3$ Iterationen durchgeführt.

mit einer genügenden Genauigkeit gelöst hat oder die exakte Lösungsdarstellung für den harmonische Oszillator wählt.

Abbildung 7.13 zeigt den numerischen Fehler des heterogenen Mehrskalen-Verfahrens. Dabei wurden die Lösungen, die mit dem HMM erhalten wurden gegen eine Lösung, die mit dem klassischen Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung vier mit geringer Schrittweite ermittelt wurde, verglichen. Der Fehler wurde wie in Abschnitt 7.3.4 berechnet.

In den verschiedenen Testläufen wurden $k = 1, 2, 3$ Iterationen durchgeführt. Bei einer Iteration erkennt man auf Abbildung 7.13a die lineare Konvergenzordnung des Löser. Für $k = 1$ ist das spektrale Defektkorrektur-Verfahren äquivalent zum expliziten Euler-Verfahren. Führt man zwei Iterationen durch, erhält man die Konvergenzordnung zwei. Dies zeigt Abbildung 7.13b. Bei einer Makro-Schrittweite von $H \approx 15$ beginnt das Abflachen der Fehlerkurve und Fehlerterme, die nicht vom Makro-Löser herrühren, setzen sich zunehmend durch. Für $k = 3$ Iterationen ergibt sich die Konvergenzordnung drei, was die Abbildung 7.13c veranschaulicht. Hier flacht die Fehlerkurve bei einer Makro-Schrittweite von $H \approx 20$ ab.

7.5 Ausblick

Das Eiswolkenchema wurde mit verschiedenen numerischen Verfahren gelöst. Es wurden dabei mit unterschiedlichen Auftriebstermen betrachtet. Diese Auftriebsterme stellen ein externes Forcing dar. Man kann die numerischen Tests ausweiten. Eine Möglichkeit wäre es, das Lösungsverhalten von heterogenen Mehrskalen-Verfahren bei Verwendung verschiedener Mikro-Löser zu testen. Als Mikro-Löser wurde in den vorliegenden Testläufen das klassische Runge-Kutta Verfahren vierter Ordnung mit konstanter Schrittweite verwendet. Man kann Löser mit adaptiver Schrittweite benutzen. Dies ist insbesondere dann sinnvoll, wenn man Systeme wie den van der Pol-Oszillator als Forcing-Term ankoppelt. In Hinblick auf den Makro-Löser kann man testen, wie klein der Parameter ε tatsächlich sein muss, damit die numerischen Lösungen der heterogenen Mehrskalen-Verfahren noch verlässliche Resultate liefern. Die Abschätzung in Kapitel 6 zeigt, dass die HMM nur gute Resultate bei einer deutlichen Skalenseparation erwarten lassen.

Die Untersuchung des Verhaltens des Eiswolkenchemas bei Ankoppelung verschiedener Forcing-Terme ist in diesem Kapitel nicht ausschöpfend behandelt. Die Formulierung der

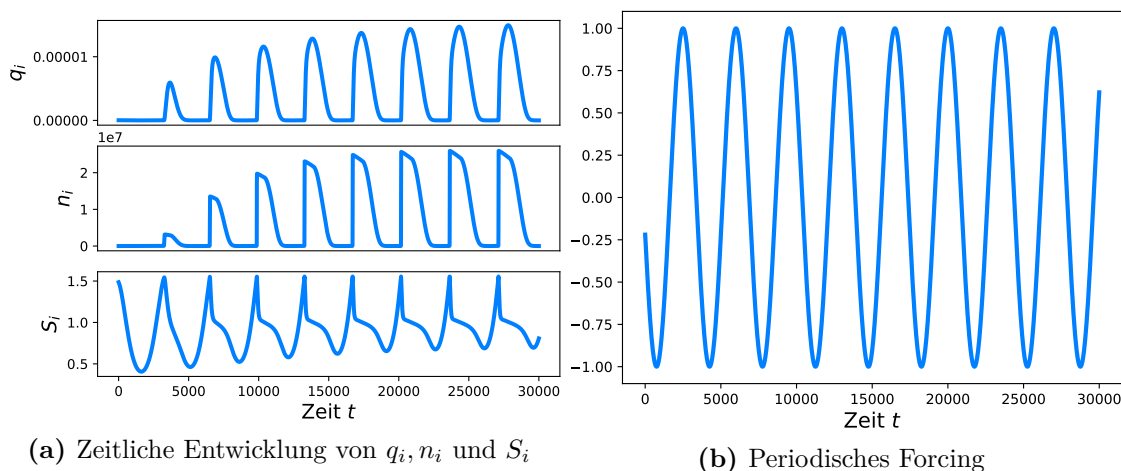


Abbildung 7.14: Numerische Berechnung des Eiswolkenchemas mit einem periodischen Forcing-Term. Für den periodischen Forcing-Term wurde der harmonische Oszillator verwendet. Die Frequenz des Forcing-Terms entspricht ungefähr der Oszillationsfrequenz des Systems ohne Forcing. Der konstante Auftrieb beträgt $a_1 = 0.01 \text{ m s}^{-1}$.

Form (7.3) erlaubt es, neben dem harmonischen Oszillator auch andere Differentialgleichungssysteme an das Modell zu koppeln. Beispielhaft wurde in Abschnitt 7.2.2 der van der Pol-Oszillator als periodisches Forcing verwendet.

Mithilfe eines verlässlichen numerischen Löser kann man das Verhalten der Lösungstrajektorien untersuchen. Die Resultate deuten an, dass ohne periodisches Forcing ein stabiler Fixpunkt und periodische Orbits möglich sind. Die berechneten gemittelten Flüsse scheinen sich ähnlich zu verhalten, wenn der periodische Anteil des Forcing-Terms sehr schnelle Oszillationen beinhaltet. In diesem Zusammenhang ist ein Ergebnis aus Arnold u. a., 2006 interessant, das Folgendes besagt: Wenn das gemittelte System einen asymptotisch stabilen Fixpunkt besitzt, hat das exakte System einen Grenzzyklus. Es erscheint weithin von Interesse, das Verhalten des Systems zu untersuchen, wenn die Skalenseparation nicht so deutlich ist, wie an den hier berechneten Beispielen. Dann kann man den oszillatorischen Forcing-Term durch idealisierte Schwerewellen motivieren (siehe Spreitzer, 2016). Abbildung 7.14 zeigt eine numerische Lösung, bei der die Anregungsfrequenz vergleichbar mit der Oszillationszeitskala des System ohne periodisches Forcing ist. Der konstante Auftriebsterm wurde als $a_1 = 0.01 \text{ m s}^{-1}$ gewählt. Ohne das langsame periodische Forcing erhält man das System aus Abbildung 7.1, das sich qualitativ vom Verhalten aus Abbildung 7.14 unterscheidet. In Abbildung 7.14 reicht ein Amplitudenparameter von $a_2 = 1 \text{ m s}^{-1}$ aus, um große Schwankungen bei S_i hervorzurufen. Das motiviert systematische Untersuchungen, bei denen die Auswirkung der Parameterwahl auf das qualitative Verhalten des Eiswolkenystems betrachtet wird. Neben den Parametern, die im Forcing-Term w auftreten, kann auch der Einfluss von Druck und Temperatur betrachtet werden. Es wäre dann auch wünschenswert, die numerischen Beobachtungen durch analytische Untersuchungen zu bestätigen. Erste Ergebnisse sind in Anhang E.2 zu finden.

Kapitel 8

Abschließende Bemerkungen

Die vorliegende Arbeit befindet sich an der Schnittstelle zwischen Wolkenmodellierung, Numerik und der analytischen Behandlung von Differentialgleichungen. Es wurden Untersuchungen zu Modellen von warmen Wolken und Eiswolken durchgeführt. Dabei wurden Resultate über das zeitliche Verhalten gewonnen. Im Fall von warmen Wolken konnten die dominanten mikrophysikalischen Prozesse, die die Dynamik der Wolken bestimmen ausgemacht werden. Außerdem ermöglichten es diese Untersuchungen, reduzierte Gleichungen für die Wolken schemata herzuleiten. Diese Ergebnisse können einen unmittelbaren Nutzen für die Anwendungen haben. Außerdem wurde gezeigt, dass es möglich ist, mit Wolkenmodellen als Reaktionsterm in Reaktions-Diffusions Gleichungen räumliche Muster zu erzeugen. Dies könnte ein Ausgangspunkt zur Entwicklung neuer Parameterisierungen, die effizient numerisch gelöst werden können, sein.

Bei der Untersuchung der Eiswolken lag der Fokus auf der Numerik. Hier hat die Wolkenphysik Beispiele zum Testen neuer numerischer Verfahren geliefert. Als konkretes Beispiel ist ein heterogenes Mehrskalungsverfahren zu nennen, bei dem ein spektrales Defektkorrekturverfahren als Makro-Löser verwendet wurde.

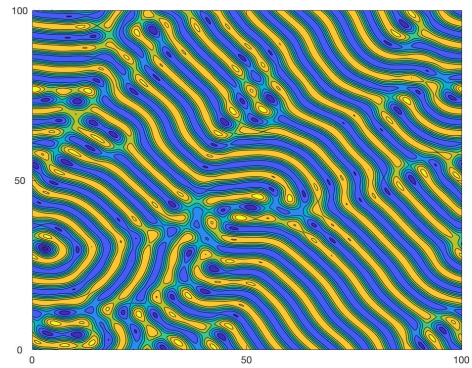
Die angewendeten mathematischen Methoden tragen zu einem besseren Verständnis der Wolkenmodelle bei. Insbesondere für die Anwendungen kann dies dann unmittelbar von Nutzen sein, wenn Wolkenmodelle, die untersucht werden, Bestandteil von Wettermodellen sind. Aus diesem Grund wird hier noch einmal hervorgehoben, dass zwei Wolkenmodelle, die in IFS und COSMO verwendet werden, analysiert wurden.

Vorrangig behandelt diese Arbeit zeitliche Strukturen von warmen Wolken und Eiswolken. In Kapitel 4 wurde auch ein erster Schritt in Richtung räumliche Strukturbildung gemacht. Mithilfe einer linearen Stabilitätsanalyse konnten Muster gefunden werden, die möglicherweise den Blick in eine Wolke hinein ermöglichen. Wolken können auch von außen betrachtet Muster bilden. Abbildung 8.1 zeigt, wie man versuchen kann, diese großskalige Wolkenstrukturen zu modellieren. Mit der Swift-Hohenberg Gleichung ist es möglich, ähnliche Strukturen zu erzeugen, wie sie von Eiswolken angenommen werden. Diese Gleichung ist eine Beispielgleichung, die häufig in der Theorie der Strukturbildung untersucht wird.

Die Swift-Hohenberg ist eine Gleichung, mit der universelle Phänomene beschrieben werden können. Es besteht ebenfalls die Möglichkeit, sich dem Problem der Strukturbildung in Wolken zunächst durch komplexere Modelle, in dem möglichst viele physikalische Prozesse parameterisiert werden, anzunähern. So wird beispielsweise in Jakub und Mayer (2017) verfahren. Dort wird besonderes Augenmerk darauf gelegt, welchen Einfluss Strahlungsparameterisierungen auf die Strukturbildung von Wolken besitzen.



(a) Eiswolken



(b) numerische Lösung der Swift-Hohenberg Gleichung

Abbildung 8.1: Großskalige Wolkenstrukturen

Da in dieser Arbeit sehr viel über Wolkenmodellierung gesagt wurde, sollen zum Abschluss noch einige Worte über die Grenzen der Modellierung formuliert werden. Modelle können die Realität nicht vollständig beschreiben, sondern nur einzelne Aspekte aus ihr wiedergeben. Deshalb sind alle Modelle fehlerbehaftet. Bei ihrer Entwicklung gehen Zusatzhypothesen ein, wie zum Beispiel die Wahl eines Parameters mit Unsicherheiten. Letztendlich können Modelle nur bestimmte Konsistenzen aufweisen, beispielsweise konsistent mit Daten sein oder bestimmte Beobachtungen wiedergeben. Eine weiterführende Diskussion zu diesem Thema findet man in Oreskes u. a. (1994).

Anhang A

Ergänzendes zu Kapitel 3

A.1 Herleitung der Kondensationsrate von warmen Wolken

Nach Rogers und Yau (1989) ist die Gleichung, die die Massenzunahme eines einzelnen Wolkentröpfchens der Masse m' durch Kondensation beschreibt, durch

$$C_p = \frac{4\pi r' S}{\left(\frac{L'}{R'_v T'} - 1\right) \frac{L'}{k' T'} + \frac{R'_v T'}{\alpha_d D' p_{\text{sat}}(T')}} =: A' m'^{\frac{1}{3}} S \quad (\text{A.1})$$

gegeben, wobei r' den Radius des Wolkentröpfchens, L' die latente Verdampfungswärme, R'_v die Gaskonstante von Wasserdampf, T' die Umgebungstemperatur, k' die Wärmeleitfähigkeit von trockener Luft, D' die Diffusivität von trockener Luft, α_d den Massenakkommodationkoeffizienten und p'_{sat} den Sättigungsdampfdruck von flüssigem Wasser bezeichnen. Man kann Gleichung (A.1) auch in Abhängigkeit von m' formulieren, indem man die Beziehung $r' = \left(\frac{3}{4\pi} m'\right)^{\frac{1}{3}}$ ausnutzt.

Ein Ensemble von Wassertropfen wird durch die Verteilungsfunktion $f'(m')$ beschrieben. Diese Verteilungsfunktion ist durch n'_c , die Anzahlkonzentration, die durch das nullte Moment der Verteilungsfunktion gegeben ist, normalisiert. Die Massenkonzentration ist durch das erste Moment der Verteilungsfunktion gegeben, insbesondere gilt also $q'_c = \int_{\mathbb{R}} m' f'(t', m') dm'$. Die Zuwachsrate von q'_c aufgrund von Kondensation ist durch

$$\left. \frac{dq'_c}{dt'}(t') \right|_{\text{Diffusion}} = A' S \int_0^{\infty} (m')^{\frac{1}{3}} f'(t', m') dm' \quad (\text{A.2})$$

gegeben. In Spichtinger und Gierens (2009a) arbeitet man mit einem ähnlichen Ausdruck.

Für die Verteilungsfunktionen, die typischerweise in der Wolkenphysik verwendet werden, kann man die Momente analytisch berechnen. Es gilt

$$\int_0^{\infty} f'(t', m') (m')^r dm' = n'_c m_c'^r \cdot c(f), \quad r \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.3})$$

Dabei bezeichnen $m'_c = \frac{q'_c}{n'_c}$ die mittlere Masse und $c(f)$ ist ein Korrekturfaktor, der vom Typ der Verteilung abhängt. Man gelangt damit für die Kondensationsrate zu folgendem Ausdruck

$$\left. \frac{dq'_c}{dt'}(t') \right|_{\text{Diffusion}} = A' S n'_c m_c'^{\frac{1}{3}} \cdot c(f). \quad (\text{A.4})$$

Der Korrekturfaktor $c(f)$ ist von der Größenordnung $O(1)$, wir setzen jetzt $c(f) \approx 1$. Dadurch erhält man

$$\frac{dq'_c}{dt'}(t') = A' S n'_c m'_c{}^{\frac{1}{3}}. \quad (\text{A.5})$$

Wir nehmen wie in Wacker (1992) an, dass sich während der Kondensation die mittlere Masse der Tropfen nicht stark ändert und betrachten als erste Näherung m'_c als konstant. Ein ähnliches Vorgehen findet man auch in Porz u. a., 2018 und Chertock u. a., 2019. Durch Anwenden der Beziehung $q'_c = n'_c m'_c$ gelangen wir zu

$$\frac{dq'_c}{dt'}(t') = A' S \cdot \frac{q'_c}{m'_c} m'_c{}^{\frac{1}{3}} = \underbrace{A' m'_c{}^{-\frac{2}{3}}}_{=:c} S q'_c. \quad (\text{A.6})$$

Eine ähnliche Beziehung wurde in Klein und Majda (2006) zur Untersuchung konvektiver Wolken mit asymptotischen Methoden angewendet.

A.2 Bemerkungen zum Wolkenmodell aus Porz u. a., 2018

Es werden noch einige Bemerkungen zum Wolkenschema aus Porz u. a., 2018, das in Chertock u. a., 2019 als Einmomentenschema verwendet wurde, gemacht. Es geht um den Vergleich der mikrophysikalischen Prozesse.

Zunächst wird wieder eine Entdimensionalisierung mit den Referenzwerten $q_{\text{ref}} = 1.0 \cdot 10^{-4} \text{ kg kg}^{-1}$ und $t_{\text{ref}} = 1 \text{ s}$ durchgeführt. Die Parameterisierungen der Wolkenprozesse besitzen die folgende Form

$$C = c S q_c \quad E = e S q_r^{\frac{1}{2}} \quad A_1 = a_1 q_c^2 \quad A_2 = a_2 q_c q_r^{\frac{19}{20}} \quad D = d q_r^{\frac{6}{5}} \quad (\text{A.7})$$

mit den entdimensionalisierten Vorfaktoren

$$\begin{aligned} c &= 1.95 \cdot 10^{-1} & e &= 4.93 \cdot 10^{-5} \\ a_1 &= 2.03 \cdot 10^{-4} & a_2 &= 2.96 \cdot 10^{-4} & d &= 1.78 \cdot 10^{-3}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Es wurde die Parameterisierung der Kondensation aus Porz u. a., 2018 verwendet mit einer konstanten Teilchenanzahl von 10^9 . Für die Vorfaktoren kann folgender Distinguished Limit

$$\begin{aligned} c &= c^* \epsilon & e &= e^* \epsilon^5 \\ a_1 &= a_1^* \epsilon^4 & a_2 &= a_2^* \epsilon^4 & d &= d^* \epsilon^3 \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

mit $c^*, e^*, a_1^*, a_2^*, d^* \in \mathcal{O}(1)$ gewählt werden. Damit ist die Evaporation von höherer Ordnung. Sedimentation und Kondensation sind bei einer Übersättigung von $S = 0.01$ vergleichbar, da man für diesen Fall $S \in \mathcal{O}(\epsilon^2)$ annehmen kann. Die Kollisionsprozesse Autokonversion und Akkreszenz sind von der gleichen Größenordnung und etwas langsamer als die Sedimentation.

Anhang B

Ergänzungen zu Kapitel 4

B.1 Einige Bemerkungen über Reaktions-Diffusions-Gleichungen

Es werden einige analytische Resultate über Reaktions-Diffusionsgleichungen zusammengetragen. In Schweizer, o.D. ist angemerkt, dass jede Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung $\dot{u} = f(u, t)$ auch eine Lösung der partiellen Differentialgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + f(u, t) \quad (\text{B.1a})$$

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 \quad (\text{B.1b})$$

ist.

In Schweizer, 2018 liefert Theorem 16.14 eine Existenzaussage über Lösungen von Reaktions-Diffusionsgleichungen bei homogene Dirichlet-Randbedingungen. Dieser Satz soll hier zitiert werden.

Satz B.1.1. *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein beschränktes Gebiet, $(0, T) \subset \mathbb{R}$ ein Intervall, $u_0 \in L^2(\Omega, \mathbb{R}^n)$ und $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ global Lipschitz-stetig. Dann hat das System*

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + f(u) \quad \text{in } \Omega \times (0, T) \quad (\text{B.2a})$$

$$u(\cdot, 0) = u_0 \quad \text{in } \Omega \quad (\text{B.2b})$$

mit homogenen Dirichlet-Randwerten eine eindeutige Lösung

$$u \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) \cap H^1(0, T; H^{-1}(\Omega))$$

Die folgenden Definitionen sind Schweizer, 2018 entnommen.

- $H^k(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) \mid D^\alpha u \in L^2(\Omega) \text{ für alle } \alpha \in \mathbb{N}^n \text{ mit } |\alpha| \leq k\}$
- $H_0^k = \{f \in H^k \mid \exists f_j \in C_c^\infty(\Omega), \|f - f_j\|_{H^k} \rightarrow 0\}$. Zu C_c^∞ gehören die beliebig oft stetig differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger. Außerdem gilt $\|\cdot\|_{H^k} = \|\cdot\|_{W^{k,2}}$, siehe D.3.
- Der Dualraum von H_0^1 wird mit $H^{-1}(\Omega) = \{\mu : H_0^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R} \text{ linear und stetig}\}$ bezeichnet.

- Zum Bochner-Raum $L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ gehören alle stark messbaren Funktionen $u : [0, T] \rightarrow H_0^1(\Omega)$ mit $\left(\int_0^T \|u(t)\|_{H^1}^2 dt\right)^{\frac{1}{2}} < \infty$
- Eine Funktion $u \in L^2(0, T, H^{-1})$ ist im Raum $H^1(0, T, H^{-1})$, falls ein $v \in L^2(0, T, H^{-1})$ existiert, für das $\partial_t u = v$ gilt.

B.2 Untersuchungen zum trivialen Gleichgewicht

Wir betrachten das System aus Abschnitt 4.2, bei dem $\gamma = 1$ und $\beta_c = 1$ gewählt wurden. Es liegt also das folgende Differentialgleichungssystem vor

$$\dot{q}_c = cq_c - a_1q_c - a_2q_cq_r^{\beta_r} \quad (\text{B.3a})$$

$$\dot{q}_r = a_1q_c + a_2q_cq_r^{\beta_r} + B - dq_r^\zeta. \quad (\text{B.3b})$$

Das triviale Gleichgewicht ist durch

$$q_c = 0, \quad q_r = \left(\frac{B}{d}\right)^{\frac{1}{\zeta}} \quad (\text{B.4})$$

gegeben. Es ist bei den COSMO- und Wacker-Schemata instabil.

Die Jacobi-Matrix ist durch

$$Df|_{(u_{1,e}, u_{2,e})} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.5})$$

gegeben mit

$$a_{11} = c - a_1 - a_2 \left(\frac{B}{d}\right)^{\frac{\beta_r}{\zeta}} \quad (\text{B.6a})$$

$$a_{12} = 0 \quad (\text{B.6b})$$

$$a_{21} = a_1 + a_2 \left(\frac{B}{d}\right)^{\frac{\beta_r}{\zeta}} \quad (\text{B.6c})$$

$$a_{22} = -d\zeta \left(\frac{B}{d}\right)^{\frac{\zeta-1}{\zeta}}. \quad (\text{B.6d})$$

Für die asymptotische Stabilität muss $\det\left(Df|_{(u_{1,e}, u_{2,e})}\right) > 0$, und damit $a_{11} < 0$ gelten. Damit gilt aber auch insbesondere $D_1a_{11} + D_2a_{11} < 0$. Das Gleichgewicht kann folglich nicht durch Diffusion destabilisiert werden.

Anhang C

Ergänzungen zu Kapitel 5

Im Folgenden werden die Konstanten des Eiswolkenmodells aufgelistet.

Konstanten, die für verschiedene mikrophysikalische Prozesse benötigt werden:

Symbol	Bezeichnung
a_c	-0.178
b_c	-0.397
c_p	$1.0047 \cdot 10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
g	9.81 ms^{-1}
p_c	30 000 Pa
r_0	3
R_v	$461.52 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
T_c	233 K
ρ_b	0.81 kg m^{-3}

Konstanten für das Diffusionswachstum

- Diffusion

Symbol	Bezeichnung
c_1	$8.198\,37 \cdot 10^{-1}$
c_{cunn}	0.7
d_T	1.94
D_{v0}	$2.11 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-2}$
p_0	101 325 Pa
$p_{\bar{\lambda}}$	101 325 Pa
T_0	273.15 K
$T_{\bar{\lambda}}$	293.15 K
α_m	0.5
$\tilde{\lambda}_0$	$6.6 \cdot 10^{-8} \text{ m}$

- Howelfaktor

Symbol	Bezeichnung
a_k	$2.646 \cdot 10^{-3} \text{ kgm}^3/\text{s}^3\text{K}^{\frac{3}{2}}$
b_k	1.5
c_k	-12 K
M_w	$18.01528 \cdot 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}$
T_k	245 K

- Ventilationskoeffizient

Symbol	Bezeichnung
a_v	$1.1 \cdot 10^6 \text{ m}^2\text{s}^{-1}\text{kg}^{-(b_v + c_v)}$
a_μ	$1.458 \cdot 10^{-6} \text{ kgm}^{-1}\text{s}^{-1}\text{K}^{1 - b_\mu}$
b_v	0.51
b_μ	1.5
c_2	1.5
c_v	0.57
c_χ	0.14856
m_0	$4.4 \cdot 10^{-9} \text{ kg}$
T_μ	110.4 K

- Kapazität

Symbol	Bezeichnung
a_1	0.015755
a_2	0.33565
b_1	0.3
b_2	0.43

Sedimentation

Symbol	Bezeichnung
a_v	$63\,292.37 \text{ m/skg}^{-b}$
b_v	0.5727273
b_s	0.5727273
c_v	1.4
m_{n0}	$2.35 \cdot 10^{-8} \text{ kg}$
m_{q0}	8.0 kg
Δz	50 m

Nukleation

Symbol	Bezeichnung
a_1^{nuk}	$2.547\,749 \cdot 10^2$
a_{w0}^{nuk}	$-1.978\,55 \cdot 10^{-1}$
a_{w1}^{nuk}	$3.677 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$
a_{s0}^{nuk}	1.67469
a_{s1}^{nuk}	$2.28 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$
a_{s2}^{nuk}	$-1.369\,89 \cdot 10^{-5}$
m_{nuk}	$1.0 \cdot 10^{-16} \text{ kg}$
N_a	$1.0 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-3}$
r_{sol}	$75.0 \cdot 10^{-9} \text{ m}$
σ_r	1.5

Anhang D

Zusätzliche Bemerkungen zu Kapitel 6

D.1 Ein Lemma von Besjes

Notation und Beweisidee sind Sanders u. a., 2007 entnommen.

Hilfssatz D.1.1. Sei $\varphi(x, s)$ periodisch mit Periode T und Mittelwert Null in s für festes x . Außerdem sei $\varphi(x, s)$ für alle s und $x \in D$ beschränkt und habe Lipschitzkonstante L_{Lip} in x für $x \in D$. Wir nehmen weiterhin an, dass $x(t, \varepsilon) \in D$ für $0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0$ und $0 \leq t \leq \frac{L}{\varepsilon}$ und $\dot{x} = \mathcal{O}(\varepsilon)$. Dann existiert eine Konstante c_1 derart, dass

$$\left\| \int_0^t \varphi(x(s, \varepsilon), s) ds \right\| \leq c_1 \quad (\text{D.1})$$

für $0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0$ und $0 \leq t \leq \frac{L}{\varepsilon}$

Beweis. Das Resultat ist offensichtlich, wenn x konstant ist. In diesem Fall ist das Integral periodisch und kann mithilfe der Amplitude Periodendauer beschränkt werden.

Im Allgemeinen variiert x langsam. Wir unterteilen das Intervall in Teilintervalle, die die Länge der Periode haben, $[0, T], [T, 2T], \dots, [(m-1)T, mT]$. Das letzte Intervall hat die Form $[mT, t]$, wobei $0 \leq t - mT < T$ gilt. Man kann das Integral (D.1) folgendermaßen zerlegen

$$\left\| \int_0^t \varphi(x(s, \varepsilon), s) ds \right\| \leq \sum_{i=1}^m \left\| \int_{(i-1)T}^{iT} \varphi(x(s, \varepsilon), s) ds \right\| + \left\| \int_{mT}^t \varphi(x(s, \varepsilon), s) ds \right\| \quad (\text{D.2})$$

Im Folgenden werden die einzelnen Integrale abgeschätzt.

$$\left\| \int_{(i-1)T}^{iT} \varphi(x(s, \varepsilon), s) ds \right\| = \left\| \int_{(i-1)T}^{iT} \varphi(x(s, \varepsilon), s) - \varphi(x((i-1)T, \varepsilon), s) ds \right\| \quad (\text{D.3a})$$

$$\leq L_{\text{Lip}} \int_{(i-1)T}^{iT} \|x(s, \varepsilon) - x((i-1)T, \varepsilon)\| ds \quad (\text{D.3b})$$

$$\leq L_{\text{Lip}} \int_{(i-1)T}^{iT} \varepsilon c_2 ds \quad (\text{D.3c})$$

$$\leq L_{\text{Lip}} \varepsilon c_2 T \quad (\text{D.3d})$$

Wir nehmen dabei an, dass $\|x(s, \varepsilon) - x((i-1)T, \varepsilon)\| \leq \varepsilon c_2$ gilt, da sich $x(s, \varepsilon)$ langsam ändert. Außerdem ist die erste Gleichung erfüllt, da $\varphi(x((i-1)T, \varepsilon), s)$ in s T -periodisch ist.

Es fehlt noch die Abschätzung des letzten Integrals.

$$\left\| \int_{mT}^t \varphi(x(s, \varepsilon), s) \, ds \right\| \leq T \|\varphi\|_\infty =: c_3 \quad (\text{D.4})$$

Damit haben wir die Abschätzung

$$\left\| \int_0^t \varphi(x(s, \varepsilon), s) \, ds \right\| \leq mL_{\text{Lip}} \varepsilon c_2 T + c_3 \quad (\text{D.5})$$

Wir haben angenommen, dass $mT \leq t \leq \frac{t}{\varepsilon}$. Damit erhalten wir die Abschätzung

$$\left\| \int_0^t \varphi(x(s, \varepsilon), s) \, ds \right\| \leq LL_{\text{Lip}} c_2 + c_3 =: c_1. \quad (\text{D.6})$$

□

D.2 Gronwall-Lemma

Das Gronwall-Lemma wird hier in Integralform formuliert.

Hilfssatz D.2.1. *Seien $\varphi, \alpha \in C([t_0, t_1])$ nicht-negative Funktionen und $\beta \geq 0$ integrierbar. Weiterhin sollen die Funktionen die Ungleichung*

$$\varphi \leq \alpha(t) + \int_{t_0}^t \beta(s) \varphi(s) \, ds \quad \text{für } t \in [t_0, t_1] \quad (\text{D.7})$$

erfüllen. Dann gilt die Abschätzung

$$\varphi \leq \alpha(t) + \int_{t_0}^t \alpha(s) \beta(s) \exp\left(\int_s^t \beta(\tilde{s}) \, d\tilde{s}\right) \, ds \quad (\text{D.8})$$

D.3 Sobolev-Normen

Definition D.3.1.

$$\|f\|_{W^{k,p}} = \begin{cases} \left(\sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha f\|_{L^p}^p \right)^{\frac{1}{p}} & p < \infty \\ \max_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha f\|_{L^\infty} & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{D.9})$$

Die Ableitungen werden als schwache Ableitungen interpretiert.

D.4 Hölder-Ungleichung

Satz D.4.1. *Es gelte $1 \leq p \leq \infty$ und $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ mit der Konvention $\frac{1}{\infty} = 0$. Außerdem seien (Ω, Σ, μ) ein Maßraum, $f \in L^p(\mu)$ und $g \in L^q(\mu)$. Dann gilt $fg \in L^1(\mu)$ und*

$$\|fg\|_{L^1} \leq \|f\|_{L^p} \|g\|_{L^q}. \quad (\text{D.10})$$

Siehe Werner, 2009. Für unsere Zwecke ist der Fall interessant, wenn $\Omega = \mathbb{R}^d$ oder $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, Σ die borelsche σ -Algebra und μ das Lebesgue-Maß bezeichnen.

D.5 Fehleranalyse bei SAM

Zuerst betrachten wir den Mikro-Löser und gehen davon aus, dass man für diesen ein Runge-Kutta Verfahren wählt. Gegeben ist ein Problem der Art

$$\dot{x} = f\left(x, \frac{t}{\varepsilon}; \varepsilon\right). \quad (\text{D.11})$$

Es kann durch eine Transformation in die Form

$$\dot{y}(t') = \varepsilon f(y, t'; \varepsilon) \quad (\text{D.12})$$

gebracht werden. Bei der Fehleranalyse von Runge-Kutta Verfahren tritt eine Fehlerkonstante auf. Der Fehler kann umso kleiner geschätzt werden, je kleiner diese Fehlerkonstante ist. Sie hängt allerdings bei Runge-Kutta Verfahren von der Lipschitzkonstante der rechten Seite des Systems ab. Die Lipschitzkonstante kann in System (D.11) für $\varepsilon \rightarrow 0$ zunehmend große Werte annehmen. Um eine solche in der Fehlerkonstante versteckte ε -Abhängigkeit zu vermeiden betrachten wir das System (D.5). (Wir nehmen an, dass die rechte Seite von 2π -periodisch in der zweiten Variablen ist.) Bei einer Schrittweite von τ lösen wir mit einem Runge-Kutta Verfahren der Ordnung n das System (D.5) eine Periode vorwärts und eine Periode rückwärts in der Zeit und erhalten

$$y^+ = y(t_n + 2\pi) + e^+ \quad (\text{D.13a})$$

$$y^- = y(t_n - 2\pi) + e^- \quad (\text{D.13b})$$

mit $e^+, e^- \in \mathcal{O}(\tau^n) = \mathcal{O}\left(\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^n\right)$.

Als Nächstes betrachten wir die Approximation des gemittelten Flusses durch ein Finites-Differenzen-Schema. Dabei machen wir folgende Analyse

$$F(y) = \frac{y(t_n + 2\pi\varepsilon) - y(t_n - 2\pi\varepsilon)}{4\pi\varepsilon} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (\text{D.14a})$$

$$= \frac{y^+ - y^-}{4\pi\varepsilon} + \frac{e^+ - e^-}{4\pi\varepsilon} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (\text{D.14b})$$

$$= \frac{y^+ - y^-}{4\pi\varepsilon} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^n\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (\text{D.14c})$$

Im ersten Schritt (D.14a) wurde ein Finite-Differenzen-Schema zweiter Ordnung angewendet. Im zweiten Schritt (D.14b) setzt man die Approximationen aus (D.13) ein, die man für $y(t_n + 2\pi\varepsilon)$ und $y(t_n - 2\pi\varepsilon)$ durch den Mikro-Löser erhalten hat. Der letzte Schritt ergibt sich aus der Fehleranalyse des Mikro-Lösers.

Es fehlt noch die Analyse des Makro-Lösers. Auch für diesen nehmen wir ein explizites Runge-Kutta Verfahren an. Die einzelnen Stufen sind wie folgt definiert

$$k_i = F\left(x + H \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j\right). \quad (\text{D.15})$$

Wir haben aber keine exakte Definition von F zur Hand, deshalb berechnen wir eine gestörte Stufe, die man folgendermaßen darstellen kann

$$\tilde{k}_i = F\left(x + H \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \tilde{k}_j\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^n\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (\text{D.16})$$

Wir nehmen an, dass der Makro-Fluss Lipschitz-stetig mit Lipschitz-Konstante L ist. Dann kann man zeigen, dass

$$\tilde{k}_i = k_i + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^n\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (\text{D.17})$$

gilt. Anwendung eines Runge-Kutta Verfahrens als Makro-Lösers ergibt

$$y_{k+1} = y_k + H \sum b_i k_i + H\mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^n\right) + H\mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (\text{D.18})$$

Bei einem Runge-Kutta Verfahren der Ordnung N erhält man damit einen Fehler der Ordnung

$$\mathcal{O}(H^N) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^n\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (\text{D.19})$$

Dies kann man folgendermaßen einsehen. Mit y_k^{SAM} bezeichnen wir die numerische Lösung, die wir durch Anwendung von SAM erhalten. Außerdem wird mit y_k^{RK} die numerische Lösung bezeichnet, die wir mit dem Makro-Löser bei Kenntnis der exakten rechten Seite F erhalten würden. Durch Anwendung der Dreiecksungleichung kann man den numerischen Fehler aufteilen

$$|y(t_k) - y_k^{SAM}| \leq |y(t_k) - y_k^{RK}| + |y_k^{RK} - y_k^{SAM}| \quad (\text{D.20})$$

$$\leq \mathcal{O}(H^N) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^n\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (\text{D.21})$$

Bei der Abschätzung $|y_k^{RK} - y_k^{SAM}|$ hilft der folgende Satz weiter :

Satz D.5.1. *Wir betrachten ein diskretes Einschritt-Verfahren, das der Stabilitätsbedingung*

$$|\psi^\tau x - \psi^\tau y| \leq \exp(\tau\gamma L)|x - y| \quad (\text{D.22})$$

genügt. Außerdem betrachten wir die gestörte Gitterfunktion

$$y_{k+1}^* = \psi^\tau y_k^* + \epsilon_k \quad (\text{D.23})$$

Dann gilt die Abschätzung

$$|y_k^* - y_k| \leq \exp(t_k\gamma L) \sum_{i=0}^{k-1} |\epsilon_i| \quad (\text{D.24})$$

Siehe Kornhuber und Schütte (2006). Die Konstante γ hängt vom Verfahren ab, L ist die Lipschitzkonstante der rechten Seite des gemittelten Flusses. Mit diesem Satz und (D.18) gilt

$$|y_k^{RK} - y_k^{SAM}| \leq \exp(t_k\gamma L) \sum_{i=0}^{k-1} H \left(\mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^n\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right) \quad (\text{D.25a})$$

$$= \exp(t_k\gamma L) T \left(\mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^n\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right) \quad (\text{D.25b})$$

D.6 Fehler HMM mit Kernfunktionen

Zuerst wird der Fehler durch die Approximation des gemittelten Flusses \bar{F} betrachtet. Wir bezeichnen mit f^{micro} die rechte Seite f , die an den feinen Gitterknoten t_n^m um t_n definiert ist und es gilt $f^{\text{micro}}(t_n^m) = f(y^{\text{micro}}(t_n^m))$, wobei man die Gitterfunktion y^{micro} durch die Mikro-Integration erhält.

$$\begin{aligned} \left\| \bar{F}(t_n) - K_\eta^\Delta * f^{\text{micro}}(t_n) \right\| &\leq \underbrace{\left\| \bar{F}(t_n) - K_\eta * f(t_n) \right\|}_{\text{Fehler durch Verwendung der Kernfunktion}} + \underbrace{\left\| K_\eta * f(t_n) - K_\eta^\Delta * f(t_n) \right\|}_{\text{Quadraturfehler}} \\ &\quad + \underbrace{\left\| K_\eta^\Delta * f(t_n) - K_\eta^\Delta * f^{\text{micro}}(t_n) \right\|}_{\substack{y(t_n^m) \\ \text{mit Mikro-Löser approximiert}}} \end{aligned} \quad (\text{D.26})$$

Für Runge-Kutta-Löser als Makro-Löser kann dann Satz D.5.1 angewendet werden. Für die anderen Verfahren muss die Stabilitätsbedingung (D.22) geprüft werden.

Die Rechnung wird exemplarisch für das semi-implizite Verfahren gezeigt:

$$|\Theta_{1,n+1} - \tilde{\Theta}_{1,n+1}| \leq |\Theta_{1,n} - \tilde{\Theta}_{1,n}| + H |\bar{F}(\Theta_{1,n+1}) - \bar{F}(\tilde{\Theta}_{1,n+1})| \quad (\text{D.27a})$$

$$\leq |\Theta_{1,n} - \tilde{\Theta}_{1,n}| + LH |\Theta_{1,n} - \tilde{\Theta}_{1,n}| \quad (\text{D.27b})$$

$$|\Theta_{2,n+1} - \tilde{\Theta}_{2,n+1}| \leq |\Theta_{2,n} - \tilde{\Theta}_{2,n}| + H |\Theta_{1,n+1} - \tilde{\Theta}_{1,n+1}| \quad (\text{D.28a})$$

$$\leq |\Theta_{2,n} - \tilde{\Theta}_{2,n}| + (H + LH^2) |\Theta_{1,n} - \tilde{\Theta}_{1,n}| \quad (\text{D.28b})$$

$$\begin{aligned} &|\Theta_{1,n+1} - \tilde{\Theta}_{1,n+1}| + |\Theta_{2,n+1} - \tilde{\Theta}_{2,n+1}| \\ &\leq |\Theta_{1,n} - \tilde{\Theta}_{1,n}| + |\Theta_{2,n} - \tilde{\Theta}_{2,n}| + H(L+1) (|\Theta_{1,n} - \tilde{\Theta}_{1,n}| + |\Theta_{2,n} - \tilde{\Theta}_{2,n}|) \end{aligned} \quad (\text{D.29a})$$

$$+ H^2 L (|\Theta_{1,n} - \tilde{\Theta}_{1,n}| + |\Theta_{2,n} - \tilde{\Theta}_{2,n}|)$$

$$\leq \left(1 + H\sqrt{2}(L+1) + \frac{H^2}{2} 2(L+1)^2 \right) (|\Theta_{1,n} - \tilde{\Theta}_{1,n}| + |\Theta_{2,n} - \tilde{\Theta}_{2,n}|) \quad (\text{D.29b})$$

$$\leq \exp(H\sqrt{2}(L+1)) (|\Theta_{1,n} - \tilde{\Theta}_{1,n}| + |\Theta_{2,n} - \tilde{\Theta}_{2,n}|) \quad (\text{D.29c})$$

Anhang E

Ergänzungen zu Kapitel 7

E.1 Ein symplektisches Runge-Kutta Verfahren der Ordnung 4

Abbildung E.1 zeigt das Butcher-Tableau eines symplektischen Runge-Kutta Verfahrens der Ordnung vier.

E.2 Stabilität von Gleichgewichten im Eiswolkenchema

Für das Eiswolkenchema wurden Gleichgewichte berechnet. Die Parameter w und T waren während jedes Modellaufs konstant. Sie unterschieden aber bei unterschiedlichen Modellläufen. Im weißen Bereich auf Abbildung E.2 wurde ein asymptotisch stabiles Gleichgewicht gefunden. Im grauen Bereich wurde auch ein Gleichgewicht gefunden. Dieses erfüllte aber nicht mehr die Voraussetzungen der asymptotischen Stabilität. In diesen Parameterbereich fallen auch die Ergebnisse aus Abbildung 7.2. Für die numerischen Berechnungen wurde ein gedämpftes Newton-Verfahren verwendet.

$$\begin{array}{c|cc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

Abbildung E.1: Gauss-Verfahren 4. Ordnung

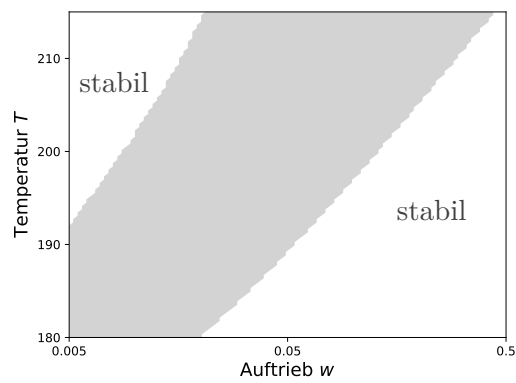


Abbildung E.2: Stabile und instabile Gleichgewichte beim Eiswolkenchema. Im weißen Gebiet wurde ein asymptotisch stabiles Gleichgewicht gefunden, im grauen Gebiet wurde ein Gleichgewicht gefunden, das nicht asymptotisch stabil ist. Der Druck beträgt $p = 30\,000$ Pa.

Symbolverzeichnis

Es werden Symbole aufgelistet, die in dieser Arbeit verwendet werden und eine Bezeichnung besitzen.

Symbol	Bezeichnung
c_{cunn}	Cunningham-Faktor
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
\bar{c}_v	mittlere Geschwindigkeit von Wassermolekülen
D_v	Diffusionskonstante
D_v^*	Diffusionskonstante mit kinetische Korrektur
f_v	Ventilationskoeffizient
g	Beschleunigung aufgrund der Erdanziehungskraft
G_v	Howellfaktor
I	Fluss
J	Nukleationsrate
k_T	Wärmeleitfähigkeit von Luft
k_T^*	Wärmeleitfähigkeit von Luft mit kinetische Korrektur
l_s	latente Sublimationwärme auf Stoffmenge bezogen
L_s	latente Sublimationwärme auf Masse bezogen
m	Masse
\bar{m}	mittlere Masse
m_m	Modalmasse
M	molare Masse von trockener Luft
M_w	molare Masse von Wasser
n	molare Konzentration
n_a	Anzahlkonzentration von Lösungströpfchen
n_i	Anzahlkonzentration von Eis
N_a	Anzahl von Lösungströpfchen pro Volumeneinheit Luft
N_{Re}	Reynolds-Zahl
N_{Sc}	Schmidt-Zahl
p	Druck
p_{sat}	Wasserdampfdruck über Wasser
p_{si}	Wasserdampfdruck bei Eissättigung
p_v	Partialdruck von Wasserdampf
q_c	Massenkonzentration von flüssigem Wolkenwasser
q_i	Massenkonzentration von Eis
q_r	Massenkonzentration von Regentropfen
q_v	Massenkonzentration von Wasserdampf
r	Radius
R_a	Gaskonstante von Luft
R_v	Gaskonstante von Wasserdampf
S	Übersättigung gegenüber Flüssigwasser
S_i	Übersättigung über Eis
T	Temperatur

v	Geschwindigkeit
v_t	Fallgeschwindigkeit von Eismolekülen
V	Volumen
V_{sol}	Volumen von Lösungströpfchen
$w(t)$	zeitabhängige Höhenverschiebung eines Luftpakets
α_m	Massenakkommodationskoeffizient
α_T	thermaler Akkommodationskoeffizient
ϵ	Verhältnis der Gaskonstanten von trockener Luft und Wasserdampf
η	dynamische Viskosität
θ	potentielle Temperatur
κ	Poisson Konstante
$\tilde{\lambda}$	mittlere freie Weglänge von Wassermolekülen
μ	dynamische Viskosität
ρ	Dichte
ρ_a	Dichte von Luft
ρ_b	Eisdichte
ρ_v	Partialdichte von Wasserdampf
Φ	Flussdichte

Literatur

- ARGYRIS, J., FAUST, G., HAASE, M. und FRIEDRICH, R. (2010). *Die Erforschung des Chaos - Eine Einführung in die Theorie nichtlinearer Systeme*. Springer.
- ARNOLD, V. I. (2001). *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. Springer.
- ARNOLD, V. I., KOZLOV, V. V. und NEISHTADT, A. I. (2006). *Mathematical Aspects of Classical and Celestial Mechanics*. Springer.
- BAILY, P. B., SHAMPINE, F. S. und WALTMAN, P. E. (1968). *Nonlinear Two Point Boundary Value Problems*. Academic Press.
- BEHENG, K. (2010). “The Evolution of Raindrop Spectra: A Review of Microphysical Essentials”. In: *Washington DC American Geophysical Union Geophysical Monograph Series* 191, S. 29–48.
- BEHREND, E. (2004). *Analysis - Band 2*. Springer.
- BOYD, J. P. (2000). *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. DOVER Publications, Inc.
- CALVO, M. P., CHARTIER, P., MURUA, A. und SANZ-SERNA, M. (2011a). “A stroboscopic numerical method for highly oscillatory problems”. In: *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.* 82, S. 73–87.
- CALVO, M. P., CHARTIER, P., MURUA, A. und SANZ-SERNA, M. (2011b). “Numerical stroboscopic averaging for ODEs and DAEs”. In: *Applied Numerical Mathematics* 61, S. 1077–1095.
- CAUSLEY, M. und SEAL, D. (2017). “On the convergence of spectral deferred correction methods”. In: *Communications in Applied Mathematics and Computational Science* 14.
- CHERTOCK, A., KURGANOV, A., LUKÁČOVÁ-MEDVID'OVÁ, M., SPICHTINGER, P. und WIEBE, B. (2019). “Stochastic Galerkin method for cloud simulation”. In: *Mathematics of Climate and Weather Forecasting* 5.1, S. 65–106.
- COX, S. M. und MATTHEWS, P. C. (2002). “Exponential Time differencing for Stiff Systems”. In: *Journal of Computational Physics* 176, S. 430–455.
- CROSS, M. und GREENSIDE, H. (2009). *Pattern Formation and Dynamics in Nonequilibrium Systems*. Cambridge University Press.
- DEUFLHARD, P. und BORNEMANN, F. (2008). *Numerische Mathematik 2 - Gewöhnliche Differentialgleichungen*. de Gruyter.
- DIXON, J. C. (2007). *The Shock Absorber Handbook*. John Wiley und Sons.
- DOMS, G., FÖRSTNER, J., HEISE, E., HERZOG, H.-J., MIRONOW, D., RASCHENDORFER, M., REINHARDT, T., RITTER, B., SCHRODIN, R., SCHULZ, J.-P. und VOGEL, G. (2011). *A Description of the Nonhydrostatic Regional COSMO Model. Part II: Physical Parameterization*.
- DUTT, A., GREENGARD, L. und ROKHLIN, V. (2000). “spectral deferred correction methods for ordinary differential equations”. In: *BIT* 40.2, S. 241–266.
- E, W. (2011). *Principles of Multiscale Modeling*. Cambridge University Press.

- E, W., ENGQUIST, B., LI, X., REN, W. und VANDEN-EIJNDEN, E. (2007). “Heterogeneous Multiscale Methods: A Review”. In: *communications in computational physics*, S. 241–261.
- ECMWF (2017). *IFS DOCUMENTATION – Cy43r3. Part IV: Physical Processes*.
- ENGQUIST, B. und TSAI, Y.-H. (2005). “Heterogeneous multiscale methods for stiff ordinary differential equations”. In: *mathematics of computation* 74, S. 1707–1742.
- ETLING, D. (2008). *Theoretische Meteorologie*. Springer.
- GRABOWSKI, W. W. (2014). “Extracting Microphysical Impacts in Large-Eddy Simulations of Shallow Convection”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences*, S. 4493–4499.
- GRIFFITHS, D. J. (1999). *Introduction to Electrodynamics*. Prentice Hall.
- GUCKENHEIMER, J. und HOLMES, P. (2002). *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*. Springer.
- HAIRER, E. und WANNER, G. (1991). *Solving Ordinary Differential Equations II - Stiff and Differential Algebraic Problems*. Springer.
- HAIRER, E. und WANNER, G. (1993). *Solving Ordinary Differential Equations I - Nonstiff Problems*. Springer.
- HALL, W. D. und PRUPPACHER, H. R. (1976). “The survival of Ice Particles Falling from Cirrus Clouds in Subsaturated Air”. In: *journal of the atmospheric sciences* 13, S. 1995–2006.
- HANKE, M. und PORZ, N. (2020). “Unique solvability of a system of ordinary differential equations modeling a warm cloud parcel”. In: *SIAM Journal on Applied Mathematics* 80.2, S. 706–724.
- HANKE-BOURGEOIS, M. (2009). *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*. Vieweg + Teubner.
- HAUT, T. und WINGATE, B. (2014). “An asymptotic parallel-in-time method for highly oscillatory PDEs”. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 36, A693–A713.
- HIRSCH, M. W., SMALE, S. und DEVANEY, R. L. (2004). *Differential equations, dynamical systems, and an introduction to chaos*. Elsevier.
- HITTMEIR, S. und KLEIN, R. (2017). “Asymptotics for moist deep convection I: refined scalings and self-sustaining updrafts”. In: *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*.
- HOCHBRUCK, M. und OSTERMANN, A. (2010). “Exponential integrators”. In: *Acta Numerica* 19, S. 209–286.
- HOLMES, M. H. (2013). *Introduction to Perturbation Methods*. Second Edition. Bd. 20. Texts in Applied Mathematics. New York: Springer-Verlag.
- HOYLE, R. (2007). *Pattern Formation - An introduction to methods*. Cambridge University Press.
- HUANG, J., JIA, J. und MINION, M. (2006). “Accelerating the convergence of spectral deferred correction methods”. In: *Journal of Computational Physics* 214, S. 633–656.
- JAKUB, F. und MAYER, B. (2017). “The role of 1-D and 3-D radiative heating in the organization of shallow cumulus convection and the formation of cloud streets”. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 17, S. 13317–13327.
- JAWITZ, J. W. (2004). “Moments of truncated continuous univariate distributions”. In: *Advances in Water Resources* 27, S. 269–281.

- JOOS, H. und FORBES, R. M. (2016). “Impact of different IFS microphysics on a warm conveyor belt and the downstream flow evolution”. In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*.
- KESSLER, E. (1969). “On the Distribution and Continuity of Water Substance in Atmospheric Circulations”. In: *Meteorological Monographs* 10.
- KESSLER, E. (1995). “On the continuity and distribution of water substance in atmospheric circulations”. In: *Atmospheric Research*.
- KHAIROUTDINOV, M. und KOGAN, Y. (2000). “A New Cloud Physics Parameterization in a Large-Eddy Simulation Model of Marine Stratocumulus”. In: *Monthly Weather Review* 128.1, S. 229–243.
- KLEIN, R. und MAJDA, A. J. (2006). “Systematic Multiscale Models for Deep Convection on Mesoscales”. In: *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*.
- KLEIN, R., VATER, S., PAESCHKE, E. und RUPRECHT, D. (2010). “Multiple Scales Methods in Meteorology”. In: *Asymptotic Methods in Fluid Mechanics: Survey and Recent Advances*. Hrsg. von H. STEINRÜCK. Springer-Verlag.
- KONDEPUDI, D. und PRIGOGINE, I. (2015). *Modern Thermodynamics*. Wiley.
- KOOP, T., LUO, B., TSIAS, A. und PETER, T. (2000). “Water activity as the determinant for homogeneous ice nucleation in aqueous solutions”. In: *Nature* 406, S. 611–614.
- KORNHUBER, R. und SCHÜTTE, C. (2006). *Einführung in die Numerische Mathematik*. Vorlesungsskript.
- KOROLEV, A. V. und MAZIN, I. P. (2003). “Supersaturation of Water Vapor in Clouds”. In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 60, S. 2957–2974.
- KRÄMER, M., SCHILLER, C., AFCHINE, A., BAUER, R., GENSCHE, I., MANGOLD, A., SCHLICHT, S., SPELTEN, N., SITNIKOV, N., BORRMANN, S., REUS, M. DE und SPICHTINGER, P. (2009). “Ice supersaturations and cirrus cloud crystal numbers”. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 9, S. 3505–3522.
- LAMB, D. und VERLINDE, J. (2011). *Physics and Chemistry of Clouds*. Cambridge University Press.
- LOHMANN, U. und FERRACHAT, S. (2010). “Impact of parametric uncertainties on the present-day climate and on the anthropogenic aerosol effect”. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 610, S. 11373–11383.
- LUKÁČOVÁ-MEDVID’OVÁ, M., ROSEMEIER, J., SPICHTINGER, P. und WIEBE, B. (2017). “IMEX Finite Volume Methods for Cloud Simulation”. In: *Finite Volumes for Complex Applications VIII - Hyperbolic, Elliptic and Parabolic Problems*. Hrsg. von C. CANCE`S und P. OMNES. Cham: Springer International Publishing, S. 179–187.
- MARSCHALIK, P. und SPICHTINGER, P. *Approximations for nucleation rates of supercooled droplets*. in preparation.
- MCDONALD, J. E. (1963). “Use of the Electrostatic Analogy in Studies of Ice Crystal Growth”. In: *ZAMP* 14, S. 610–620.
- MINION, M. L. (2003). “Semi-implicit spectral deferred correction methods for ordinary differential equations”. In: *Communications in Mathematical Sciences* 1.3, S. 471–500.
- MURPHY, D. M. und KOOP, T. (2005). “Review of the vapour pressures of ice and supercooled water for atmospheric applications”. In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 131, S. 1539–1565.
- MURRAY, J. D. (2002). *Mathematical Biology I. An Introduction*. Springer-Verlag.

- ORESQUES, N., SHRADER-FRECHETTE, K. und BELITZ, K. (1994). "Verification, Validation, and Confirmation of Numerical Models in the Earth Sciences". In: *Science (New York, N. Y.)* 263, S. 641–6.
- PEDDLE, A. (2018). "Components of Nonlinear Oscillation and Optimal Averaging for Stiff PDEs". Diss. University of Exeter.
- PORZ, N., HANKE, M., BAUMGARTNER, M. und SPICHTINGER, P. (2018). "A model for warm clouds with implicit droplet activation, avoiding saturation adjustment". In: *Mathematics of Climate and Weather Forecasting* 4, S. 50–78.
- PRUPPACHER, H. R. und KLETT, J. D. (2004). *Microphysics of clouds and precipitation*. kluwer academic publishers.
- PRUPPACHER, H. R. und RASMUSSEN, R. (1979). "A Wind Tunnel Investigation of the Rate of Evaporation of Large Water Drops Falling at Terminal Velocity in Air". In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 36, S. 1255–1260.
- ROGERS, R. und YAU, M. (1989). *A Short Course in Cloud Physics*. Third Edition. International Series in Natural Philosophy. Butterworth-Heinemann.
- ROSEMEIER, J., BAUMGARTNER, M. und SPICHTINGER, P. (2018). "Intercomparison of Cloud Models using Aymptotics". In: *Mathematics in Climate and Weather Forecasting*.
- SANDERS, J. A., VERHULST, F. und MURDOCK, J. (2007). *Averaging ;ethods in Nonlinear Dynamical Systems*. Springer.
- SCHMEISER, C. *Reaktions-Diffusionsgleichungen*. Skriptum zur Vorlesung.
- SCHWEIZER, B. (2018). *Partielle Differentialgleichungen*. Springer.
- SEIFERT, A. und BEHENG, K. (2006). "A two-moment cloud microphysics parameterization for mixed-phase clouds. Part 1: Model description". In: *Meteorology and Atmospheric Physics*.
- SHARP, R., TSAI, Y.-H. und ENGQUIST, B. (2005). "Multiple Time Scale Numerical Method for the Inverted Pendulum Problem". In: *Engquist, B., Lo`tsedt, P., Runborg, O. (eds) Multiscale Methods in Science and Engineering, Lect. Notes Comput. Sci. Eng. 44* 44, S. 241–264.
- SPICHTINGER, P. "Dokumentation Eismodell". unveröffentlicht.
- SPICHTINGER, P. und CZICZO, D. J. (2010). "Impact of heterogeneous ice nuclei on freezing events in cirrus clouds". In: *Journal of geophysical research* 115.
- SPICHTINGER, P. und GIERENS, G. M. (2009a). "Modelling of cirrus clouds – Part 1a: Model description and validation". In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 9, S. 685–706.
- SPICHTINGER, P. und GIERENS, G. M. (2009b). "Modelling of cirrus clouds – Part 1b: Structuring cirrus clouds by dynamics". In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 9, S. 707–719.
- SPICHTINGER, P. und GIERENS, G. M. (2009c). "Modelling of cirrus clouds – Part 2: Competition of different nucleation mechanisms". In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 9, S. 2319–2334.
- SPREITZER, E. J. (2016). "The title of the work". Magisterarb. JGU.
- SPREITZER, E. J., MARSCHALIK, P. M. und SPICHTINGER, P. (2017). "Subvisible cirrus clouds - a dynamical system approach". In: *Nonlinear Processes in Geophysics* 24, S. 307–326.
- STREHMEL, K., WEINER, R. und PODHAISKY, H. (2012). *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Vieweg+Teubner Verlag.

- TESCHL, G. (2012). *Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems*. American Mathematical Society.
- TREFETHEN, L. N. (2000). *Spectral Methods in Matlab*. Society for Industrial und Applied Mathematics.
- TURING, A. (1952). “The Chemical Basis of Morphogenesis”. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 52.237, S. 37–72.
- VERHULST, F. (1996). *Nonlinear Differential Equations and Dynamical Systems*. Second Edition. Universitext. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- WACKER, U. (1992). “Structural Stability in Cloud Physics Using Parameterized Microphysics”. In: *Beiträge zur Physik der Atmosphäre* 65.3, S. 231–242.
- WACKER, U. (1995). “Competition of Precipitation Particles in a Model with Parameterized Cloud Microphysics”. In: *journal of the atmospheric sciences* 52.14, S. 2577–2589.
- WANG, P. K. (2013). *Physics and Dynamics of Clouds and Precipitation*. Cambridge University Press.
- WERNER, D. (2009). *Einführung in die höhere Analysis*. Springer.
- WOLF, V., KUHN, T., MILZ, M., VOELGER, P., KRÄMER, M. und ROLF, C. (2018). “Arctic ice clouds over northern Sweden: microphysical properties studied with the Balloon-borne Ice Cloud particle Imager B-ICI”. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 18, S. 17371–17386.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Vor- und Zuname: Juliane Rosemeier
geboren am: 24. Juni 1987 in Schönebeck (Elbe)
Staatsangehörigkeit: deutsch
Familienstand ledig

Schulbildung

1993-1997 Grundschule Sachsendorf
1997-1999 Sekundarschule Groß Rosenberg
1999-2006 Friedrich-Schiller-Gymnasium Calbe (Saale), Abitur

Hochschulausbildung

2006-2010 Studium der Mathematik an der Freien Universität Berlin,
Vordiplom
2010/2011 Studienaufenthalt an der University of California, Santa
Barbara
2011-2015 Fortsetzung des Studiums der Mathematik an der Freien
Universität Berlin,
Anfertigung der Diplomarbeit, Thema: "Adaptive Ordnungs-
und Iterationssteuerung bei spektralen Defektkorrekturme-
thoden"
2012-2014 studentische Hilfskraft am Konrad-Zuse-Zentrum Berlin
seit 2016 Promotion an der Johannes Gutenberg-Universität Mainz in
angewandter Mathematik am Institut für Physik der
Atmosphäre