

Analytische und numerische Untersuchung eines Wolkenmodells

Dissertation

zur Erlangung des Grades
„Doktor der Naturwissenschaften“
am Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik
der Johannes Gutenberg-Universität
in Mainz



JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ

Nikolas Porz
geboren in Koblenz

Frankenthal, 2. März 2021

Datum der mündlichen Prüfung: 26.02.2021

Publikationen

Während der Zeit meines Promotionsprojektes wurden bereits einige Teile und Resultate dieser Dissertation publiziert. Es folgt die Liste der Publikationen mit einer kurzen Beschreibung meines Beitrags. Diese Publikationen haben den Peer-Review-Prozess durchlaufen und wurden für diese Arbeit verwendet.

- Das Wolkenmodell aus Kapitel 2 wurde in Porz et al. [39] veröffentlicht. Mein Beitrag zu dieser Publikation bestand in der Entwicklung des halb-impliziten Euler-Verfahrens zur numerischen Lösung des Modells, in der Durchführung der numerischen Simulationen, sowie in der Darstellung der Ergebnisse.
- Die Ergebnisse aus Kapitel 3 sind in Hanke und Porz [22] dargelegt. Allerdings wurden manche der Resultate mit anderen Methoden gezeigt. Mein Beitrag zu dieser Publikation bestand darin, die Beweisstrategie der in Theorem 3.10 zusammengefassten Theoreme zu entwickeln und den Beweis im Detail auszuführen.

Zusammenfassung

Die korrekte Repräsentation von Wolkenprozessen in Wetter- und Klimamodellen ist entscheidend aufgrund ihrer Rückkopplung mit den atmosphärischen Strömungen. Da es keine allgemeine makroskopische Wolkentheorie gibt, ist die Parametrisierung von Wolken in entsprechender Vorhersage-Software empfindlich abhängig von den zugrunde liegenden Modellannahmen. Wir präsentieren daher ein aus physikalischen Prinzipien abgeleitetes neuartiges Modell von mittlerer Komplexität, ein Eineinhalb-Momente-Schema, für warme Wolken.

Ein besonderes Feature der differential-algebraischen Modellgleichungen ist die automatisierte Nukleation von Wolkentropfen, wenn feuchte Luft übersättigt. Dies wird durch eine nicht Lipschitz-stetige rechte Seite der gewöhnlichen Differentialgleichung ermöglicht, da diese nicht-triviale glatte Lösungen besitzt. Unter milden Anforderungen an den externen Antrieb des Systems zeigen wir rigoros, dass dieses System eine eindeutige physikalisch konsistente Lösung besitzt, das heißt, eine Lösung mit positiver Tropfenpopulation in einem thermodynamisch übersättigten Regime. Diesen Beweis führen wir mit Hilfe einer als Fuchs'sche Reduktion bezeichneten Methode und der bekannten Picard-Lindelöf-Theorie.

Für die numerische Lösung des Modells schlagen wir ein semi-implizites Integrationschema mit effizienter Lösung der impliziten Anteile und einem Upwind-Schema für den Sedimentationsfluss vor. Mit Hilfe eines „rain-shaft“-Experiments wird das Schema getestet und eine Niederschlagsrate erzeugt.

Als zweiten Aspekt dieser Arbeit untersuchen wir Methoden, um die diversen Parameter des Modells anhand gegebener Niederschlagsraten zu rekonstruieren beziehungsweise zu optimieren. Für die Optimierung wird neben dem Vorwärtslöser auch der negative Gradient der Modellvorhersagen zur Verfügung gestellt. Dieser Gradient wird zunächst analytisch bestimmt und in der numerischen Simulation zugleich mit der Niederschlagsrate ausgewertet. Allerdings haben die Gradienten an isolierten Punkten Singularitäten, welche die Optimierung behindern. Dieser Einfluss wird anhand ausgewählter Beispiele herausgearbeitet.

Abstract

The representation of cloud processes in weather and climate models is crucial for their feedback on atmospheric flows. Since there is no general macroscopic theory of clouds, the parametrization of clouds in corresponding simulation software depends significantly on the underlying modeling assumptions. Hence we present a new model of intermediate complexity, a one-and-a-half moment scheme for warm clouds, which is derived from physical principles.

A unique feature of these differential-algebraic model equations is the automatic onset of cloud droplet nucleation when moist air becomes supersaturated. This is made possible by a non-Lipschitz continuous right-hand side of the differential equation, which allows for nontrivial smooth solutions. Under mild assumptions on the external forcing we prove that this system has a unique physically consistent solution, i.e., a solution with a positive drop population in the supersaturated regime. This proof is achieved with a technique known as Fuchsian reduction and the well-known Picard-Lindelöf theory.

For the numerical solution of this model we advocate a semi-implicit integration scheme with efficient solvers for the implicit parts and an upwind scheme for the sedimentation flux. We test the model in a so-called rain-shaft experiment and generate a precipitation rate.

As a second aspect to this treatise we investigate methods to restore and optimize diverse model parameters on the basis of precipitation rate measurements. In addition to the forward-in-time solution, the corresponding negative gradient of the model forecast is passed to the optimization algorithm. This gradient is obtained analytically initially, while in subsequent numerical simulations the gradient and the precipitation rate are computed simultaneously. However, at isolated points the gradients exhibit singularities which are a hindrance to a proper optimization. This influence is investigated using selected examples.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell	5
2.1. Wolkenprozesse	7
2.2. Thermodynamische Größen	16
2.3. Wolkenmodell	18
2.4. Wolkenmodell in der Luftsäule	19
3. Lösungen des Modells	20
3.1. Koeffizienten und Schranken	20
3.2. Kritische Anfangswerte	26
3.3. Lösungen der Säule	48
4. Numerisches Verfahren und Experimente	52
4.1. Numerische Zeitintegration	52
4.2. Simulation von Niederschlag	59
5. Parameteridentifikation	65
5.1. Ableitungen der Prozesse und Funktionen	67
5.2. Partielle Ableitungen der Quellen und Senken f	82
5.3. Konventionelle Optimierungsmethoden	84
6. Ausblick/Fazit	95
A. Anhang	97

1. Einleitung

Es ist allgemein bekannt, dass die Vorhersagbarkeit des Wetters trotz aller verfügbaren Mittel und Messwerte limitiert ist. Die aktuelle Forschung in der Physik der Atmosphäre unternimmt daher mit dem überregionalen Sonderforschungsbereich SFB/TRR 165, genannt „Waves to Weather“ [1], große Anstrengungen um Grenzen der Vorhersagbarkeit zu identifizieren, die Anwendung neuer Analysemethoden zu erdenken und die Integration von Messwerten in der Modellbildung zu testen.

Ein großer Unsicherheitsfaktor für die Vorhersehbarkeit des Wetters beruht auf dem sich fortlaufend ändernden und verhältnismäßig kleinen Wassermassenanteil der Luft. Wasser kommt in der Troposphäre, dem unteren Teil der Atmosphäre, in drei Aggregatzuständen vor, zum einen als Gas, zum anderen als suspensierte kleine Partikel aus flüssigem Wasser oder Eis. In diesen Formen hat der Wassergehalt unter anderem Einfluss auf den Wasserkreislauf, auf den Energiehaushalt der Erde (z.B. via Strahlungseffekten oder Phasenübergängen) und auf andere schwebende Teilchen, genannt Aerosole. Das Forschungsgebiet, welches sich mit dem Umsatz von Wasser in der Atmosphäre beschäftigt, nennt sich Wolkenphysik. Dabei stellt die sogenannte Mikrophysik die Untersuchung der Wolkenprozesse auf Partikelbasis dar. Die Forschung orientiert sich dabei an den verwendeten Größen und Skalen der aktuellen Simulationssoftware der Wettervorhersage, zum Beispiel an den Modellen COSMO-DE [2] und ICON [3] des deutschen Wetterdienstes DWD. Es ist bekannt, dass diese großen Modelle aus mathematischer Sicht „chaotisch“ sind, was bedeutet, kleine Fehler können immense Folgen haben. Bereits kleinere Teilmodelle, wie in diesem Fall das Mikrophysikmodell, zeigen eigene Charakteristik. Bemühungen, die Struktur der Lösung und ihre qualitativen Phänomene an reduzierten Modellen zu untersuchen, findet man beispielsweise in [42].

Im Gegensatz zu weiteren Teilmodellen, beispielsweise Turbulenz und Strahlungen, gibt es für die Mikrophysik keine vollständige zugrundeliegende Gleichung oder Benchmark-Modelle, wie die Navier-Stokes-Gleichung oder line-by-line-Modelle. Zusätzlich macht die schierere Anzahl der Partikel, die in einer recht kleinen 1 km^3 einnehmenden Wolke 10^{17} übersteigen kann, eine direkte Simulation der Partikel für die Wettervorhersage unmöglich, vergleiche [33]. Erschwerend kommt hinzu, dass auf der Skala einzelner Partikel viele Prozesse bisher noch nicht vollständig erforscht sind. Das Vorantreiben der Inkorporation von Messwerten in Modelle der Mikrophysik wird daher als wesentliche Aufgabe der aktuellen Forschung erachtet,

1. Einleitung

vergleiche beispielsweise [34] und [48]. Ein ausführlicherer Überblick über diese speziellen Herausforderungen in der Modellierung der Mikrophysik wird in [33] gegeben.

Zur Unterstützung dieses Forschungsansatzes formulieren und untersuchen wir im Weiteren ein neuartiges Wolkenmodell für warme Wolken von intermediärer Komplexität. Für das Modell werden eine mathematische Analyse der Lösungseigenschaften diskutiert, ein adäquates numerisches Schema zur Lösung des Modells entwickelt, sowie einige numerische Beispiele des häufiger verwendeten „rain-shaft“-Experiments (eine Säule/ein Kamin auf- und absteigender Luft) durchgeführt.

Die Modellgleichungen unseres im Folgenden vorgestellten Wolkenmodells sind aus der Sicht einer Modellierung mit Differentialgleichungen eine Kontinuitätsgleichung der Form

$$\frac{\partial y}{\partial t} + v \nabla y = f(y, t), \quad (1.1)$$

für die Systemgrößen y , mit dem Geschwindigkeitsvektor v und mit den, in der Funktion f zusammengefassten, Quellen und Senken der Systemgrößen abhängig von der Zeit t .

Die Komplexität dieser partiellen Differentialgleichung lässt sich reduzieren, wenn man sich die konkreten Anwendungsszenarien vor Augen führt. Der Fokus dieser Arbeit liegt auf dem „rain-shaft“-Experiment, dabei handelt es sich in einem typischen Experimentaufbau um eine Luftsäule, in der eine Wolke mit einsetzendem Niederschlag erzeugt wird. Die Säule ähnelt einem schmalen vertikal ausgedehnten Ausschnitt der Atmosphäre. Regentropfen fallen in ihr von oben nach unten, bis sie die Säule am unteren Rand verlassen. Die Fallgeschwindigkeit der Tropfen ist der einzige von null verschiedene Eintrag in v . Der Gradient $v \nabla y$ ist daher eindimensional und wir nehmen uns die Freiheit, ihn in diskreter Form in eine einfallende Regenquelle und eine ausfallende Regensenke aufzuteilen und so in f zu integrieren. Daher kann das Modell für einen Punkt oder passender ein Box-förmiges Luftvolumen als gewöhnliche Differentialgleichung aufgefasst werden.

Zunächst leiten wir die Systemgleichungen her. Dies geschieht mittels einer Betrachtung der involvierten mikrophysikalischen Prozesse und deren Einfluss auf einen kugelförmigen Tropfen mittlerer Größe. Anschließend werden die so gefundenen Formulierungen mit der Anzahl vorhandener Tropfen skaliert, um Beschreibungen der Prozesse auf Ebene der Systemgrößen zu erlangen. Für die Herleitung notwendige Konstanten, Zusammenhänge und Größen werden eingeführt, sobald sie benötigt werden.

Bevor wir mit numerischen Experimenten beginnen, wird das Modell einer mathematischen Analyse unterzogen. Wir sind vorrangig an der Eindeutigkeit und den Regularitätseigenschaften der Lösung interessiert, da die Existenz von Lösungen sofort aus der Peano-Theorie [47] folgt. Ein wesentliches Merkmal dieses Modells sind Prozesse in f , die nicht Lipschitz-stetig in den Systemgrößen y sind.

1. Einleitung

Insbesondere nutzen wir diesen Typ Gleichung für eine neuartige Behandlung der Nukleation kleiner Tropfen, genannt Wolkentropfen, an Aerosolen, genannt CCN (englisch „cloud condensation nuclei“). Um bereits vorweg einen kleinen Eindruck dieses entscheidenden Bestandteils zu bekommen, skizzieren wir an dieser Stelle die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \dot{y} &= c(t)y^\delta, \\ y(0) &= y_0, \end{aligned} \tag{1.2}$$

mit einem Parameter $0 < \delta < 1$. Wie üblich bezeichnet \dot{y} die Ableitung von y in Richtung der Zeit t . Das Anfangswertproblem (1.2) mit $y_0 = 0$ ist ein populäres Lehrbuchbeispiel für eine Differentialgleichung mit nicht Lipschitz-stetiger rechter Seite und mehreren Lösungen, siehe beispielsweise Walter [50].

Als Einstieg stellen wir uns unter (1.2) ein vereinfachtes Modell für die Zeitentwicklung der Masse schwebender Tropfen vor. Die Funktion $c(t)$ verkörpert den thermodynamischen Zustand der Atmosphäre. Das heißt, sie entscheidet, ob sich neue Masse durch Kondensation an den Tropfen anlagert, $c(t) > 0$, oder ob die Tropfen verdunsten, $c(t) < 0$.

Ist $y_0 = 0$, so ist zum Zeitpunkt $t = 0$ noch keine Wolke vorhanden. In diesem Fall ist $y = 0$ eine triviale Lösung von (1.2). Die Uneindeutigkeit der Lösung macht es möglich, in glatter Weise von der trivialen Lösung in $t = 0$ zu einer weiteren für $t > 0$ positiven Lösung zu wechseln, wenn der Faktor $c(t)$ in diesem Punkt positiv wird, nachdem er zuvor nicht positiv war.

Eine solche Situation ist in der Atmosphäre recht häufig zu beobachten, zum Beispiel, wenn Luft durch Erwärmung oder durch die Beschaffenheit der Erdoberfläche zum Aufsteigen veranlasst wird. Die aufsteigende Luft kühlt ab und kann den transportierten Wasserdampf zuweilen nicht mehr ausreichend speichern, da sich der thermodynamische Zustand jenseits des Gleichgewichts befindet. Es kommt zur Wolkenbildung.

Wir werden zeigen, dass unter Zuhilfenahme einer mathematischen Entropiebedingung eine eindeutige Lösung für das gesamte Wolkenmodell existiert.

Konsequenterweise muss eine Simulationssoftware für dieses Modell ebenfalls Wolken bilden, wenn sich der thermodynamische Zustand jenseits des Gleichgewichts befindet. Es empfiehlt sich, ein semi-implizites Verfahren zu verwenden, wobei sich die impliziten Anteile auf die nicht Lipschitz-stetigen Prozesse beschränken und stets niedrigdimensional bleiben. Wir präsentieren daher ein adäquates Euler-Verfahren, welches die Senken vor den Quellen berücksichtigt und lediglich eine Komponente mithilfe eines quadratisch konvergierenden Newton-Verfahrens löst. Es hat außerdem den Nebeneffekt, dass auch numerisch alle Systemgrößen stets nicht negativ sind.

Im Anschluss an einen Simulationstest mit dem Modell wenden wir uns der Identifikation von Systemparametern zu. Es handelt sich dabei um im Modell

1. Einleitung

verwendete Konstanten, die entweder physikalisch nicht bestimmt sind oder nur teilweise definiert werden können. Man stelle sich darunter beispielsweise eine Rate vor, die im Fall einer Kollision von Tropfen beschreibt, wie häufig sich diese zu einem größeren Tropfen zusammenschließen anstatt in kleinere zu zerplatzen. Diese Parameter sollen ausschließlich über den Vergleich von zur Verfügung gestellten Niederschlagsmesswerten \bar{P} mit der Niederschlagsvorhersage unseres Modells P bestimmt werden. Die Strategie besteht darin, solche Parameter q der Funktion f zu finden, die das Minimum

$$\min_q \|\bar{P} - P(q)\| \quad (1.3)$$

ergeben. Hierfür kommt der Optimierungsalgorithmus *lsqnonlin* der Programmiersprache MATLAB zum Einsatz. Dem Algorithmus wird neben den Messwerten und der Vorhersage auch der negative analytisch bestimmte Gradient der Modellvorhersage zur Verfügung gestellt. Einige Faktoren in der Berechnung dieses Gradienten enthalten an isolierten Punkten Singularitäten, welche die Optimierung behindern. Ein erster Eindruck über diesen Einfluss und über das Leistungsvermögen der Optimierung im Bezug auf das neue Modell wird anhand von ausgewählten Simulationsexperimenten gewonnen.

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

Ein Modell mit Lösungseigenschaften wie jene, aus unserem Einstiegsbeispiel (1.2), benötigt eine solide physikalische Motivation. Daher beginnen wir mit der Modellentwicklung, siehe [39], des im Weiteren analysierten simplen Wolkenmodells. Zusätzlich zeigen wir Herleitungen für die initialen Werte der Parameter in den Anhängen A.1, A.2 und A.3. Diese Parameter werden im Anschluss an die Analyse einigen numerischen Identifikationsexperimenten unterzogen.

Im Folgenden werden wir die Argumente der Funktionen zum Zweck besserer Lesbarkeit meist weglassen und sie lediglich zur besonderen Betonung von Abhängigkeiten oder Werten einfügen. Der Leser sei deshalb zum Nachvollziehen der Abhängigkeiten auf die Definitionen der Funktionen und Operatoren verwiesen.

In der Wolkenphysik werden standardmäßig Anzahl und Masse der physikalischen Größen (Index x) als Konzentrationen n_x respektive q_x pro Masse trockene Luft modelliert, das heißt, sie haben die Einheiten $[n_x] = \text{kg}^{-1}$ und $[q_x] = \text{kg kg}^{-1}$. Denn durch die Massenerhaltung der Luft sind q_x Erhaltungsgrößen innerhalb der Erdatmosphäre im Gegensatz zu ihren entsprechenden Dichten ρ_x .

Die Masse m eines Tropfen ist näherungsweise das Produkt

$$m = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho_l \quad (2.1)$$

eines Kugelvolumens abhängig vom Radius r mit der, als konstant angenommenen, volumetrischen Dichte von flüssigem Wasser ρ_l .

In warmen Wolken tritt Wasser in zwei Phasen auf, zum einen als Wasserdampf und zum anderen als flüssige Wassertropfen bis zu einer Größe von circa 8 mm Durchmesser [46]. Diese Tropfen interagieren miteinander und mit dem in ihrer Umgebung vorhandenen Wasserdampf, angetrieben durch die thermodynamischen Eigenschaften der Luft. Tropfen werden traditionell in zwei Spezies unterteilt, siehe [24]. Dies beruht auf Rechnungen [9], die zeigen, dass es eine Separation des Tropfenspektrums in zwei Modi gibt. Wir bezeichnen sie im Folgenden als Wolkentropfen (Index c) und Regentropfen (Index r).

In guter Näherung sind Luft (Index a) und Wasserdampf (Index v) ideale Gase. Ergo erfüllen sie die Zustandsgleichung idealer Gase

$$p_x V = M_x R_x T \iff p_x = \rho_x R_x T$$

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

mit dem Partialdruck p_x , dem Volumen V , der Temperatur T , der Masse M_x , der Dichte ρ_x , der spezifischen Gaskonstante $R_x = R^*/M_{\text{mol},x}$, der universellen Gaskonstante R^* und der molaren Masse $M_{\text{mol},x}$.

Des Weiteren wenden wir das Dalton-Gesetz für ideale Gase an. Es besagt, der gesamte Druck des Systems erfüllt die Identität

$$p = p_a + p_v.$$

Messungen des Wasserdampfanteils in der einschlägigen Literatur zeigen die Verhältnisse

$$p_v \ll p_a \quad \text{sowie} \quad \rho_v = q_v \rho_a \ll \rho_a.$$

Es werden daher die Approximationen $p \approx p_a$ und $\rho = \rho_v + \rho_a \approx \rho_a$ verwendet. Diese geben uns die Näherung der Dichte

$$\rho = \frac{p}{R_a T}, \quad R_a = 287.05 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}, \quad (2.2)$$

durch die thermische Zustandsgleichung idealer Gase im Fall von trockener Luft.

Wir setzen für die latente Wärme des Phasenübergangs zwischen Wasserdampf und flüssigem Wasser in unseren Experimenten der Kapitel 4 und 5 den konstanten Wert $L = 2.53 \cdot 10^6 \text{ J kg}^{-1}$ an. Diese Vereinfachung beruht auf den verhältnismäßig geringen Abweichungen der Werte für L in der Tabelle Table 2.1 aus [53]. Würde man jedoch einen größeren Temperaturbereich untersuchen oder die Eisphase involvieren, bräuchte man eine empirische Formulierung der latenten Wärme $L(T)$ in Abhängigkeit der Temperatur T .

Es werden die folgenden Modellannahmen gemacht:

1. Wir unterscheiden die zwei Wassertropfen-Spezies anhand ihrer Größe: Wolkenröpfchen haben einen Durchmesser kleiner als $50 \mu\text{m}$, während Regentropfen sehr viel größere Durchmesser besitzen.
2. Die zuerst von [24] benutzte Differenzierung unterscheidet zwischen den Wolkenröpfchen, deren Fallgeschwindigkeit aufgrund von Reibungseffekten mit der Luft vernachlässigbar klein ist, und Regentropfen, die mit einer Endgeschwindigkeit v_t abhängig von ihrer Größe fallen. Diese wiederum kann aus Messwerten abgeleitet werden, vergleiche [40].
3. Nur Wolkenröpfchen können aus Wasserdampf entstehen, im Speziellen wachsen sie an aktivierten Aerosolen, wie es durch die Köhler-Theorie [7, 28] beschrieben wird.
4. Die Tropfen können durch Diffusion verdunsten und wachsen, wobei wir das Diffusionswachstum der Regentropfen vernachlässigen, da es verhältnismäßig langsam vonstattengeht [14].
5. Regentropfen formieren sich durch Kollisionen und Vereinigungen von und mit Wolkenröpfchen. Dies ist der dominante Prozess, der größere Wassertropfen entstehen lässt [25].

2.1. Wolkenprozesse

2.1.1. Sättigungsdampfdruck und Sättigung

Das thermodynamische Gleichgewicht zwischen Wasserdampf und flüssigem Wasser wird beschrieben durch die Clausius-Clapeyron-Gleichung [40]. Sie besitzt die Näherung für ideale Gase

$$p'_s(T) = \frac{L(T)}{R_v T^2} p_s(T), \quad p_s(T_0) = p_{s,0}. \quad (2.3)$$

Diese Näherung ist ein Anfangswertproblem mit dem Anfangswert $p_{s,0}$, dabei handelt es sich um den Tripel-Punkt von Wasser ($p_{s,0}, T_0$) für $T_0 = 273.16$ K. Gleichung (2.3) beschreibt den Sättigungsdampfdruck p_s von reinem Wasser an einer unendlich ausgedehnten ungekrümmten Oberfläche. Abseits der Herleitungen verwenden wir die von der Temperatur T abhängige empirische Formel

$$\begin{aligned} p_s(T) = & \exp(54.842763 - 6763.22/T - 4.210 \log(T) + 0.000367T \\ & + \tanh(0.0415(T - 218.8)) \\ & \cdot (53.878 - 1331.22/T - 9.44523 \log(T) + 0.014025T)) \end{aligned} \quad (2.4)$$

von Murphy und Koop [36], um den Sättigungsdampfdruck zu bestimmen.

Wassertropfen haben jedoch in der Regel eine gekrümmte Oberfläche und sind von Natur aus unrein, das heißt, andere Substanzen sind darin gelöst. Daher entspricht (2.4) im Allgemeinen nicht dem Sättigungsdampfdruck an der Tropfen-Oberfläche. Trotzdem verwenden wir diese Formulierung, da sie für unseren Modelltyp sehr viel einfacher zu handhaben ist, wie wir nachfolgend in Abschnitt 2.1.2 diskutieren werden.

Häufig wird in diesem Zusammenhang die Größe der Sättigung $\frac{p_v}{p_s} = \frac{q_v}{q_{vs}}$ betrachtet, mit der Näherung der Wasserdampfkonzentration auf Sättigung

$$q_{vs} = \varepsilon \frac{p_s}{p_a}$$

und dem Quotienten $\varepsilon = \frac{M_{\text{mol},v}}{M_{\text{mol},a}} \approx 0.622$ der molaren Massen von Wasser $M_{\text{mol},v}$ und trockener Luft $M_{\text{mol},a}$. Bezüglich dieses Modells verwenden wir die Bezeichnungen der Sättigungsverhältnisse aus Definition 3.2 und in Kapitel 3 die Größe der Sättigungskonzentration

$$q_s = q_v - q_{vs}. \quad (2.5)$$

2.1.2. Das Entstehen von Partikeln

In der Atmosphäre sind viele verschiedene Aerosol-Partikel vorhanden. Manche können abhängig von ihren chemischen Eigenschaften, beispielsweise Hygroskopie,

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

und dem Sättigungsdampfdruck p_s an ihrer Oberfläche mit Wasserdampf interagieren. Sobald Wasserdampf vorhanden ist, wachsen manche Partikel durch Diffusion, das heißt, Wassermoleküle setzen an der Partikeloberfläche an und verändern Größe und Mischungsverhältnisse der Partikel. Der den Gleichgewichtszustand bestimmende Sättigungsdampfdruck dieses Effekts wird durch die Köhler-Theorie beschrieben. Sie modelliert den Sättigungsdampfdruck des Wasserdampfes an der Tropfenoberfläche. Dieser hängt, wie zuvor angesprochen, von der Krümmung der Oberfläche und daher vom Radius des Tropfens, sowie den chemischen Eigenschaften, zum Beispiel der Oberflächenspannung, ab. Da wir im Folgenden keine einzelnen Tropfen oder deren chemische Eigenschaften sondern Durchschnittsgrößen modellieren, werden wir lediglich einige Phänomene emulieren.

Das Entstehen der Wassertropfen hat daher in unserer limitierten Betrachtung zwei Protagonisten, die vorhandenen schwebenden befeuchteten Partikel und das an ihnen angelagerte Wasser. Wir erkennen ein solches Partikel als Wolkentröpfchen, wenn es eine Mindestgröße erreicht. Außerdem machen wir die folgenden Modellannahmen:

- Neue Wolkentröpfchen entstehen nur bei Übersättigung, d.h. $q_v > q_{vs}$.
- Wenige Partikel sind bei Wassersättigung, $q_v = q_{vs}$, bereits groß genug, um als Wolkentröpfchen zu gelten.
- Durchschnittlich kleinere Tröpfchen entstehen vorrangig bei höheren Übersättigungen als größere Tröpfchen.
- Die Anzahl an Partikeln, die zu Wolkentropfen wachsen können, ist limitiert.
- Entweder die Anzahl oder die Größe der Tröpfchen ist konstant.
- Tropfen können durch Verdunstung verschwinden.

Im Folgenden verwenden wir die glatte Formulierung der Wolkentröpfchen-Anzahl

$$n_c(q_c) = \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{q_c}{m_0} \coth \frac{q_c}{N_0 m_0} \quad (2.6)$$

in Abhängigkeit der Wolkentropfen-Masse q_c , welche sich als nützlich erwiesen hat, vergleiche Abbildung 2.1. Diese Formulierung ist angelehnt an die Gleichung (22) aus [39] mit den selben Parametern m_0 , N_0 und N_∞ .

Bemerkung 2.1. Die algebraische Gleichung der Wolkentröpfchenanzahl n_c ist als Produkt differenzierbarer Funktionen ebenfalls differenzierbar in q_c mit der Ableitung (5.33) und es gilt

$$\left. \frac{\partial n_c}{\partial q_c} \right|_{q_c=0} = 0.$$

Letzteres wird intuitiv klar, wenn man n_c in das Produkt

$$n_c = \varphi \psi$$

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

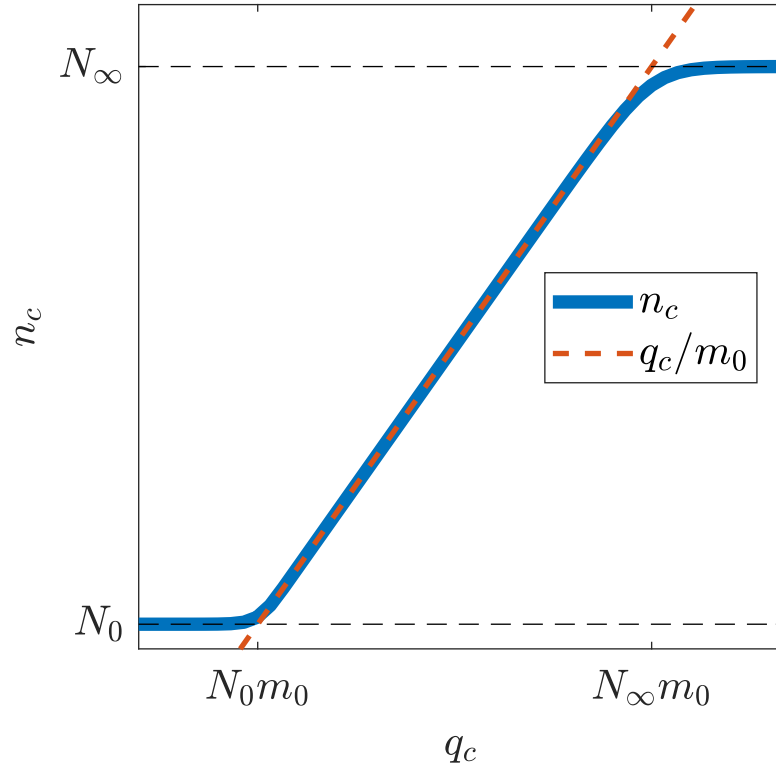


Abbildung 2.1.: Anzahlkonzentration n_c der Wolkentropfen nach Gleichung (2.6) in Abhängigkeit von der Massenkonzentration q_c .

mit

$$\varphi = \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{N_0 m_0}{m_0} \quad (2.7)$$

und

$$\psi = x \coth(x), \quad x = \frac{q_c}{N_0 m_0}, \quad (2.8)$$

aufteilt. Wir setzen ψ in $x = 0$ auf natürliche Weise durch den Grenzwert $\psi \rightarrow 1$ für $x \rightarrow 0$ fort. Für die Ableitungen von (2.7) und (2.8) gilt unabhängig voneinander

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial q_c} \right|_{q_c=0} = \left. \frac{\partial \psi}{\partial q_c} \right|_{q_c=0} = 0$$

und mit der Produktregel folgt die Aussage, da sowohl (2.7) als auch (2.8) in der Nähe von $q_c = 0$ beschränkt sind.

2.1.3. Endgeschwindigkeit von Wasserpartikeln

Kugelförmige Wassertropfen in der Atmosphäre werden durch Gravitation Richtung Erdoberfläche beschleunigt, während Reibung mit der Luft der

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

Beschleunigung entgegenwirkt, bis die Tropfen im Kräftegleichgewicht eine konstante Endgeschwindigkeit erreichen. In Anhang A.2 leiten wir für Regentropfen die Beziehung

$$v_t = \alpha \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2} \left(\frac{m m_t}{m + m_t} \right)^\beta \quad (2.9)$$

der Fallgeschwindigkeit mit den Parametern

$$\alpha = 190.3 \text{ m s}^{-1} \text{ kg}^{-\beta}, \quad \beta = 4/15 \quad \text{und} \quad m_t = 1.21 \cdot 10^{-5} \text{ kg}$$

her. Ein wichtiges Merkmal besteht darin, dass die Fallgeschwindigkeit nicht unbeschränkt mit der Tropfengröße wächst, sondern ab einem gewissen Punkt einen konstanten Wert anstrebt, wie es in Abbildung A.1 demonstriert wird.

2.1.4. Kondensation/Evaporation an der Oberfläche einzelner Tropfen

Kondensation und Verdunstung beschreiben den Prozess von sich anlagernden und sich lösenden Wassermolekülen an einer Oberfläche. Dominieren die sich lösenden Moleküle, spricht man für gewöhnlich von Verdunstung. Überwiegen dagegen die sich anlagernden Moleküle, spricht man von Kondensation. In unserem Zusammenhang handelt es sich um Oberflächen von Tropfen oder Kondensationskeimen, sogenannten CCN (englisch: „cloud condensation nuclei“). Welcher der beiden Prozesse überwiegt, hängt maßgeblich vom Dampfdruck des in der Luft enthaltenen Wasserdampfs in der Nähe der Oberfläche ab. Ist dieser größer als der Sättigungsdampfdruck (2.3), kondensiert der Wasserdampf, ist er kleiner, so verdunstet das flüssige Wasser. Das Diffusionswachstum ist ein häufig beschriebenes Phänomen in einführenden Büchern und Texten der Wolkenphysik und die Herleitung der folgenden Prozessbeschreibungen kann dort nachvollzogen werden. Der Ansatz ist, wie zum Beispiel in [17] beschrieben, die radialsymmetrische Lösung der Diffusionsgleichung integriert über die Oberfläche eines kugelförmigen Tropfens zu betrachten. Man erhält die Wachstumsgleichung

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -4\pi D r \rho (q_{vs} - q_v) G f_v, \quad (2.10)$$

mit den folgenden involvierten Termen beziehungsweise physikalischen Konstanten:

- Die Diffusionskonstante [40] für Wasserdampf

$$D = D_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1.94} \frac{p_*}{p} \quad (2.11)$$

abhängig von Druck und Temperatur mit $D_0 = 2.11 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $T_0 = 273.15 \text{ K}$ und $p_* = 101325 \text{ Pa}$.

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

- Der Einfluss

$$G = \left[\left(\frac{L}{R_v T} - 1 \right) \frac{L p_s}{R_v T^2} \frac{D}{K} + 1 \right]^{-1} \quad (2.12)$$

des Stroms latenter Wärme am Tropfen auf die Diffusion von Wasserdampf an der Tropfen-Oberfläche mit einer Korrektur für sehr kleine Tropfen, wobei die Wärmeleitfähigkeit K feuchter Luft gegeben ist durch

$$K = \frac{a_K T^{3/2}}{T + b_K 10^{c_K/T}} \quad (2.13)$$

mit $a_K = 0.002\,646 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-3/2}$, $b_K = 245.4 \text{ K}$ und $c_K = -12 \text{ K}$, vergleiche [15].

- Durch das Fallen des Tropfens ausgelöste Turbulenz und Wirbel haben einen verstärkenden Ventilationseffekt auf die Diffusion des Wasserdampfs [41]. Berücksichtigt wird dies, gemäß [43], durch den empirischen Koeffizienten

$$f_v = a_v + b_v N_{\text{Sc}}^{1/3} N_{\text{Re}}^{1/2}$$

in Gleichung (2.10) mit $a_v = 0.78$ und $b_v = 0.308$. In dieser Definition werden sowohl die Schmidt-Zahl

$$N_{\text{Sc}} = \frac{\mu}{\rho D}$$

als auch die Reynolds-Zahl

$$N_{\text{Re}} = \frac{2\rho}{\mu} v_t r = \frac{2\rho}{\mu} v_t \left(\frac{3\rho_l}{4\pi} \right)^{1/3} m^{1/3}$$

in Abhängigkeit von der dynamischen Viskosität der Luft

$$\mu = \frac{\mu_0 T^{3/2}}{T + T_\mu} \quad (2.14)$$

mit

$$\mu_0 = 1.458 \cdot 10^{-6} \text{ s Pa K}^{-1/2} \quad \text{und} \quad T_\mu = 110.4 \text{ K}$$

als Funktion der Temperatur verwendet, siehe beispielsweise [15].

Da Wolkentröpfchen nicht fallen und sehr klein sind, entfällt der entsprechende Ventilationseffekt für sie, das heißt,

$$\frac{dm_c}{dt} = d\rho(q_v - q_{vs})m_c^{1/3} \quad (2.15)$$

mit

$$d = \left(\frac{48\pi^2}{\rho_l} \right)^{1/3} DG. \quad (2.16)$$

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

Für Regentropfen dagegen vernachlässigen wir die Kondensation, da bei großen Tropfen das Diffusionswachstum sehr langsam ist. Die Verdampfung der Regentropfen muss jedoch berücksichtigt werden, daher gilt für sie

$$\frac{dm_r}{dt} = d\rho(q_v - q_{vs})_- \left[a_E m_r^{1/3} + b_E v_t^{1/2} m_r^{1/2} \right] \quad (2.17)$$

mit

$$a_E = a_v = 0.78, \quad b_E = b_v \left(\frac{6\rho}{\rho_l D^2} \right)^{1/6} \quad (2.18)$$

und mit der Notation

$$(q_{vs} - q_v)_- = \begin{cases} q_v - q_{vs}, & q_v \leq q_{vs}, \\ 0, & q_v > q_{vs}. \end{cases}$$

2.1.5. Kollisionen und Vereinigungen von Tropfen

An dieser Stelle ist es sinnvoll, eine Vorstellung davon zu haben, wie Tropfen miteinander interagieren. Für das erforderliche Verständnis von Kollisionen ist es notwendig, mehr als nur einen durchschnittlichen Tropfen zu betrachten und ein Gefühl für die räumliche Verteilung zu bekommen, obwohl dies ein wenig kontraintuitiv zu unserer bisher verfolgten Betrachtungsweise der Systemgrößen als Konzentrationen pro Masse trockener Luft ist.

Wie bereits zu Beginn angesprochen, bestehen Wolken aus vielen sehr unterschiedlich schweren Tropfen. Von den großen Regentropfen, die wir als Niederschlag beobachten, über die kleinen Wolkentropfen, welche so leicht sind, dass ihre Reibung mit der Luft uns veranlasst ihre Fallgeschwindigkeit zu vernachlässigen, bis hin zu Lösungströpfchen, die in unserem Modell lediglich als initiale Kerne für die Kondensation berücksichtigt werden. Ungeachtet dessen haben alle Tropfen zumindest eine kleine Fallgeschwindigkeit. Die Fallgeschwindigkeit ist größenabhängig und deshalb haben alle Tropfen, wenn auch geringe, Differenzgeschwindigkeiten zueinander. In der Fallbewegung kommt es daher ständig zu Kollisionen. Es gibt weitere Effekte, die zu Kollisionen von Tropfen führen können, beispielsweise lokale Turbulenzen. Diese Vorstellung soll uns an dieser Stelle bereits genügen, um die Kollision und damit verbundene Koaleszenz unserer Tropfenspezies Wolkentropfen und Regentropfen zu modellieren.

Anstatt uns auf die Modellierung der vielen Wolkentröpfchen und ihrer kleinen Differenzgeschwindigkeiten einzulassen, verwenden wir Wahrscheinlichkeiten und modellieren die Koaleszenz-Rate der Kollisionstypen anhand des Volumenanteils der Wolkentröpfchen $\rho q_c / \rho_l$. Das Modell beschränkt sich auf zwei Typen der Kollision, zum einen das Vereinen von Wolkentropfen zu einem Regentropfen und zum anderen das Mitreißen von Wolkentropfen durch einen Regentropfen, da diese die einzigen Möglichkeiten eines unmittelbaren Transfers zwischen den Spezies darstellen.

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

- Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Wolkentropfen einen anderen Wolkentropfen trifft und mit ihm zusammen einen Regentropfen bildet, ist proportional zum Volumenanteil. Daher ist die erwartete Zunahme der Regentropfen-Masse

$$\frac{dm_r}{dt} = 2k_1 \frac{\rho q_c}{\rho_l} m_c \quad (2.19)$$

mit der Proportionalitätskonstanten k_1 , wobei $[k_1] = \text{s}^{-1}$.

- Ein fallender Regentropfen wird von einem Fluss aus Luft beziehungsweise aus einem Fluss von in der Luft enthaltenen Wolkentröpfchen

$$\frac{dm_r}{dt} = k_2 v_t \rho \pi r^2 q_c, \quad (2.20)$$

angeströmt, wobei $k_2 = 0.7 > 0$ den Proportionalitätsparameter¹, $v_t \rho$ den Massefluss der Luft relativ zum Tropfen, πr^2 die Tropfenquerschnittsfläche und q_c den Wolkentröpfchenanteil der Luft beschreiben.

Der Ursprung der Proportionalitätskonstanten k_1 und k_2 unterscheidet sich wesentlich. Für k_2 schätzen wir anhand von [51], dass die Fläche eines Regentropfens zu 70% effektiv ist, um Wolkentropfen einzufangen. Das heißt, circa 30% der herangetragenen Wolkentropfen entgehen der Kollision und werden durch die Luftströmung um den Tropfen herum geleitet. Den Wert des Parameters k_1 leiten wir im Anhang A.1 explizit her.

2.1.6. Formulieren von Massenkonzentrationsraten

Verdunstung und Kondensation beeinflussen Wolken- und Regentropfen. Kleine Tropfen können gänzlich verschwinden, daher ändern diese Prozesse neben der Masse auch die Anzahl der Tropfen. Die geläufigen Begriffe Kondensation und Verdunstung werden wir in Bezug auf dieses Modell so definieren, dass wir den diffusiven Übergang zwischen Wasserdampf q_v und Wolkentröpfchen q_c als Kondensation (C) und den diffusiven Übergang der Regentropfengrößen q_r und n_r zu Wasserdampf q_v als Verdunstung/Evaporation (E, E') bezeichnen. Das heißt, wir verwenden

$$C = n_c \frac{dm_c}{dt}$$

und

$$E = n_r \frac{dm_r}{dt}.$$

Wenn wir schließlich (2.15) und (2.17) einsetzen und annehmen, dass die mittlere Masse eines Tropfen

$$m_x = \frac{q_x}{n_x} \quad (2.21)$$

¹Man bemerke den abweichenden Wert in [39].

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

ist, erhalten wir die Prozessbeschreibungen

$$C = d\rho(q_v - q_{vs})n_c^{2/3}q_c^{1/3} \quad (2.22)$$

und

$$E = d\rho(q_{vs} - q_v) - \left(a_E q_r^{1/3} n_r^{2/3} + b_E v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2} \right). \quad (2.23)$$

Für die Kollisionsprozesse gehen wir analog vor. Den Prozess der Formation von Regentropfen q_r und n_r durch Kollisionen kleiner Wolkentropfen q_c nennen wir Autokonversion

$$A_1 = \frac{n_c}{2} \frac{dm_r}{dt}.$$

Der Faktor $1/2$ verhindert, dass wir Kollisionen zweier Teilchen doppelt zählen. Die Zunahme der Regentropfenmasse q_r durch die Anströmung von Wolkentröpfchen q_c an die Oberfläche von Regentropfen nennen wir für die Bulk-Größe q_r Akkreszenz

$$A_2 = n_r \frac{dm_r}{dt}.$$

Setzen wir die Raten (2.19) und (2.20) ein, erhalten wir die Prozessgleichungen

$$A_1 = \frac{k_1}{\rho_l} \rho q_c^2 \quad (2.24)$$

und

$$A_2 = k_2 \left(\frac{3}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{\rho_l} \right)^{2/3} v_t \rho q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3}. \quad (2.25)$$

2.1.7. Formulieren von Anzahlkonzentrationsraten

Die Anzahlkonzentration der Regentropfen n_r haben wir mehrfach zur Herleitung der Prozesse A_2 und E verwendet, jedoch auf sie wirkende Prozesse bisher noch nicht im Detail diskutiert. Konträr zur Anzahlkonzentration der Wolkentropfen n_c mit ihrer Modellierung über die effiziente algebraische Kopplung (2.6) an die Masse q_c leiten wir für n_r eine eigene Differentialgleichung her, welche das Entstehen und Vernichten der Regentropfen modelliert. Dabei orientieren wir uns an der Modellierung der Masse q_r . Daher sind nur die Prozesse Autokonversion, Verdunstung und die im Anschluss präsentierte Sedimentation von Bedeutung, da der Prozess der Akkreszenz die Anzahl der Regentropfen nicht verändert.

Infolgedessen berücksichtigen wir die durch Autokonversion

$$A'_1 = n_c \frac{k_1}{2} \frac{\rho q_c}{\rho_l} \quad (2.26)$$

neu erschaffenen Regentropfen entsprechend der Anzahl zur Verfügung stehender Wolkentröpfchen und ihrer Kollisionsrate $\frac{k_1 \rho q_c}{2 \rho_l}$, wobei jede Kollision zweier Wolkentropfen nur einmal berücksichtigt wird.

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

Im Gegensatz dazu kann Verdunstung Regentropfen vernichten. Entsprechend nehmen wir für die Anzahl

$$E' = \frac{1}{m_r} E \quad (2.27)$$

an, dass sie sich proportional zur Masse verhält, mit der Inversen der mittleren Regentropfenmasse als Proportionalitätsfaktor.

2.1.8. Sedimentation, der vertikale Gradient

An dieser Stelle müssen wir den vertikalen Gradienten der Kontinuitätsgleichung (1.1) diskutieren. Denn wie bereits mehrfach erwähnt, sedimentieren Regentropfen im Gegensatz zu den Wolkentropfen in der Lagrangeschen Betrachtungsweise des Bezugssystems, vergleiche [6]. Sie beschleunigen, angetrieben von Gravitation, bis zur Endgeschwindigkeit (2.9) und verlassen zu einem gegebenen Zeitpunkt das untersuchte Luftvolumen. Zusätzlich nehmen wir an, dass die Sedimentationsrichtung ausschließlich vertikal orientiert ist. Dies nehmen wir zum Anlass, den Gradienten auf eine vertikale Sedimentation der Masse q_r und der Anzahl n_r zu reduzieren.

Inspiziert von numerischer Diskretisierung werden wir die Sedimentation als Vorwärtsdifferenzenquotienten

$$S = S_{\text{out}} - S_{\text{in}}, \quad (2.28)$$

$$S' = S'_{\text{out}} - S'_{\text{in}}, \quad (2.29)$$

modellieren, mit der Aufteilung in ausfallenden Regen

$$S_{\text{out}} = \frac{1}{h} v_q q_r \quad (2.30)$$

und

$$S'_{\text{out}} = \frac{1}{h} v_n n_r \quad (2.31)$$

als Senken, sowie einfallendem Regen S_{in} und S'_{in} als Quellen für q_r und n_r . Unter der Höhendifferenz h können wir uns die Höhe einer numerischen Diskretisierung oder die vertikale Ausdehnung eines beobachteten Kontrollvolumens vorstellen. Eine numerische Diskretisierung der Vertikalen wird in der Meteorologie traditionell von oben nach unten nummeriert, daher wäre $h = z_k - z_{k+1}$ für zwei aufeinanderfolgende Höhenwerte $z_k > z_{k+1}$ einer Diskretisierung.

Die Fallgeschwindigkeiten von q_r und n_r unterscheiden sich ein wenig von der Endgeschwindigkeit einzelner Regentropfen. Da die Fallgeschwindigkeit sehr großer Tropfen signifikant größer ist [49], fällt die Masse q_r schneller als die Anzahl n_r . Diesen Effekt modellieren wir mit den zur Endgeschwindigkeit v_t proportionalen Fallgeschwindigkeiten

$$v_q = c_q v_t \quad (2.32)$$

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

und

$$v_n = c_n v_t, \quad (2.33)$$

mit den Konstanten $c_q > c_n > 0$. Wir definieren daher die Parameter $\alpha_q = c_q \alpha$ und $\alpha_n = c_n \alpha$. Die Herleitung für ihre initialen Werte befindet sich im Anhang A.3.

Einfallender Regen S_{in} und S'_{in} hängt nicht von lokalen Größen und Bedingungen ab. Er muss daher als Sedimentation anderer, darüber liegender Luft entweder als Reihe von Messwerten gegeben sein oder berechnet werden. Im einfachsten Fall übersättigt die Luftschicht oberhalb nicht, so dass es nicht zu einfallendem Regen kommt. In unserem Säulenmodell (siehe 2.4) berechnen wir S_{in} und S'_{in} aus S_{out} , S'_{out} und der Luftdichteänderung im Vergleich zur Luft darüber.

2.2. Thermodynamische Größen

Luft in der Atmosphäre wird durch verschiedenste Mechanismen in Bewegung versetzt (z.B. durch die Coriolis-Kraft und durch Dichteunterschiede, ausgelöst durch die Einstrahlung der Sonne). Der daraus resultierende Wind ist nicht direkt sichtbar, kann jedoch durch seinen Einfluss auf die Umwelt beobachtet werden. Im Besonderen sind Wolken ein Indikator für Winde, die eine vertikale Geschwindigkeitskomponente w besitzen. Im Speziellen kann man einige Strukturen der Wolken auf Muster im vertikalen Geschwindigkeitsfeld zurückführen (vergleiche [42] und [45]).

Vertikaler Wind hat einen Einfluss auf die Dichte und, für dieses Modell entscheidend, auf die Temperatur, denn diese bestimmt vorrangig die Sättigung und daher die Kondensation beziehungsweise Wolkenbildung.

Luftdruck und Lufttemperatur lassen sich näherungsweise und für dieses Modell ausreichend genau über Differenzialgleichungen bestimmen.

2.2.1. Luftdruck

Die Barometrische Höhenformel im hydrostatischen Gleichgewicht

$$\frac{dp}{dh} = -\rho g$$

zusammen mit der vertikalen Geschwindigkeit w als Höhenänderung

$$\frac{dh}{dt} = w$$

und dem Startwert p_0 gibt uns eine Differentialgleichung mit Anfangswert,

$$\frac{dp}{dt} = -g \rho w, \quad p(0) = p_0, \quad (2.34)$$

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

für den Luftdruck p . Die Konstante g bezeichnet die Fallbeschleunigung² durch Gravitation.

2.2.2. Lufttemperatur und latente Wärme

Die Lufttemperatur ändert sich zum einen anhand des trockenadiabatischen Temperaturgradienten

$$\gamma = -\frac{g}{c_p} \quad (2.35)$$

mit der Fallbeschleunigung g und der spezifischen Wärmekapazität trockener Luft c_p . Zum anderen kühlen oder erwärmen die diffusiven Prozesse Kondensation und Evaporation die Luft durch den Verbrauch beziehungsweise die Freisetzung latenter Wärme

$$\frac{dT}{dt} = -\gamma w + \frac{L}{c_p} C + \frac{L}{c_p} E$$

mit der spezifischen latenten Wärme der Verdampfung L .

²Man bemerke den entsprechenden Tippfehler in [39].

2.3. Wolkenmodell

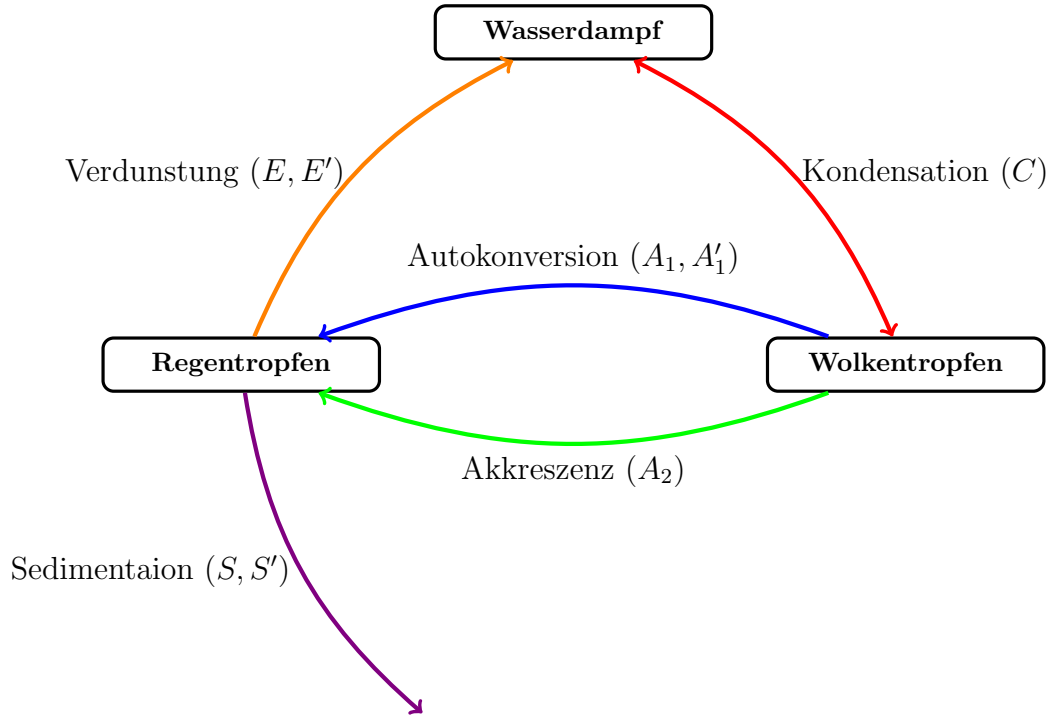


Abbildung 2.2.: Schematische Darstellung der Wolkenprozesse zwischen Wasserdampf und den Tropfenspezies.

Damit sind die physikalischen Prozesse insgesamt hergeleitet und wir fügen sie zu einem sechsdimensionalen gewöhnlichen Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned}
 \dot{q}_v &= -C && - E \\
 \dot{q}_c &= C && -A_1 && -A_2 \\
 \dot{q}_r &= && A_1 && +A_2 && + E && -S \\
 \dot{n}_r &= && A'_1 && && + E' && -S' \\
 \dot{p} &= && && && && -g\rho w \\
 \dot{T} &= \frac{L}{c_p}C && && + E \frac{L}{c_p} && && -\gamma w,
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

mit algebraischen Nebenbedingungen

$$n_c = \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{q_c}{m_0} \coth \frac{q_c}{N_0 m_0}, \tag{2.37}$$

$$\rho = \frac{p}{RT}, \tag{2.38}$$

$$v_t = \alpha \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2} \left(\frac{q_r m_t}{q_r + n_r m_t} \right)^\beta \tag{2.39}$$

2. Mikrophysikalisches Wolkenmodell

für ein konkretes Luftvolumen zusammen.

In den Nebenbedingungen vernachlässigen wir zum einen die physikalischen Konstanten für Verdunstung und Kondensation, denn obwohl sie von Druck und Temperatur abhängen, tragen sie als Konstanten wenig zur Komplexität des Systems bei. Zum anderen berücksichtigen wir ausschließlich eine der Fallgeschwindigkeiten. Sie steht stellvertretend für alle drei, da diese sich lediglich um einen Parameter unterscheiden. Die Sedimentation ist an dieser Stelle reduziert auf ausfallenden Regen. Den Fall, dass einfallender Regen als stetige Funktion der Zeit gegeben ist, möchten wir der Einfachheit halber zunächst außer Acht lassen.

Ein besonderes Augenmerk haben wir auf den Ursprung der Parameter k_1 , k_2 , N_∞ , α , α_q , α_n , m_t und β gelegt. Ihre angegebenen Werte werden uns später in Kapitel 5 als Anhaltspunkte zur Identifikation dienen. Die dem Modell entsprechende Simulationssoftware werden wir detailliert in 4.1 diskutieren.

2.4. Wolkenmodell in der Luftsäule

Wie bereits in unserer Diskussion der Sedimentation in Abschnitt 2.1.8 angedeutet, lässt sich das Modell von einem Punkt oder recht kleinen Volumen, einer Box, zu einer vertikal ausgedehnten Säule erweitern. So können nicht-triviale vertikale Feuchteverteilungen aufgelöst und modelliert werden. Wir nehmen an, dass alle Elemente der vertikalen Diskretisierung der Säule, im folgenden Boxen genannt, dieselbe horizontale Querschnittsfläche A besitzen. Die Säule soll in jedem Element ihre Luftmasse

$$m_a = \rho A h \tag{2.40}$$

über die Zeit erhalten, daher adaptieren wir die Höhe $h = h(t, z)$ aus (2.30) und (2.31) für alle Boxen. Sie ist für jede Box individuell und daher abhängig von der vertikalen Ortsvariablen z , außerdem passen wir sie den sich ständig ändernden Dichteverhältnissen an. Die Ortsvariable hat ihren Ursprung $z = 0$ am unteren Rand der Säule und nimmt mit der Höhe der Säule zu, bleibt jedoch stets beschränkt (siehe (3.7) und (3.8)). Im Gegensatz dazu beginnt die Indizierung der vertikalen Diskretisierung traditionell reziprok am oberen Rand der Säule mit $k = 0$ und steigt bis zur untersten Box an. So wird, wie wir später in Abschnitt 4.1.2 sehen werden, nicht nur die Masse der Luft, sondern auch die Masse des Wassers in der Säule erhalten, wenn man das sedimentierte Wasser weiterhin berücksichtigt.

3. Lösungen des Modells

Es folgt eine mathematische Analyse der Lösungseigenschaften, denn streng genommen ist das Säulenmodell das Anfangswertproblem eines differential-algebraischen Systems. Wir beobachten eine Luftsäule mit internem Eulerschen [6] Sedimentationsfluss aus der Lagrange-Perspektive [6]. Insbesondere zeigen die Untersuchungen die Konsistenz des Modells zu den modellierten physikalischen Gegebenheiten in den Punkten:

- q_r und n_r sind gleichzeitig null oder ungleich null,
- q_c ist positiv, wenn die Luft übersättigt.

Wir beschränken uns für die Analyse zunächst auf eine einzelne Box, bevor wir uns einer Modifikation der Resultate für den Fall einer kompletten Säule zuwenden.

3.1. Koeffizienten und Schranken

Neben einer konsistenten Repräsentation der physikalischen Prozesse sind wir vorrangig an der Lösung des Modells durch eine adäquate Simulationssoftware interessiert. Eine vollständige Analyse des differential-algebraischen Gleichungssystems (2.36) mit den Nebenbedingungen (2.37), (2.38) und (2.39) wird uns den notwendigen Überblick über die Komplexität der Lösung verschaffen. Insbesondere werden die Existenz und Eindeutigkeit, sowie die physikalische Konsistenz der Lösung untersucht. Wir schreiben verkürzend

$$\begin{aligned} \dot{y} &= f(y, t), \\ y(0) &= y_0, \end{aligned} \tag{3.1}$$

für das Anfangswertproblem der Differentialgleichung (2.36) mit der Schreibweise $y = (q_v \ q_c \ q_r \ n_r \ p \ T)^T$ und mit den Anfangswerten $y_0 = (q_{v,0} \ q_{c,0} \ q_{r,0} \ n_{r,0} \ p_0 \ T_0)^T$. Die rechte Seite der Gleichung bezeichnen wir komponentenweise mit $f = (f_v \ f_c \ f_q \ f_n \ f_p \ f_T)^T$, wobei diese die Komponenten der ursprünglichen

3. Lösungen des Modells

physikalischen Gleichung (2.36) beschreiben. Das heißt,

$$f_v = -C \quad - \quad E, \quad (3.2a)$$

$$f_c = C - A_1 - A_2, \quad (3.2b)$$

$$f_q = A_1 + A_2 + E - S, \quad (3.2c)$$

$$f_n = A'_1 + E' - S', \quad (3.2d)$$

$$f_p = -g\rho w, \quad (3.2e)$$

$$f_T = \frac{L}{c_p} C, \quad + \frac{L}{c_p} E \quad - \gamma w. \quad (3.2f)$$

Im weiteren Verlauf werden wir auch dann diese Komponenten der rechten Seite f referenzieren, wenn die jeweilige Komponente der Differentialgleichung (3.1) gemeint ist.

Die algebraischen Nebenbedingungen des Differentialgleichungssystems bezeichnen wir, wie in der Analysis üblich, als Nullstelle

$$0 = \varphi(y, t) = \begin{bmatrix} n_c - \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{q_c}{m_0} \coth \frac{q_c}{N_0 m_0} \\ \rho - \frac{p}{RT} \\ v_t - \alpha \left(\frac{\rho^*}{\rho} \right)^{1/2} \left(\frac{q_r m_t}{q_r + n_r m_t} \right)^\beta \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Für die weitere Untersuchung des differential-algebraischen Systems bietet es sich an eine Schreibweise mit den Koeffizienten

$$a_1 = \frac{k_1}{\rho_l} \rho, \quad (3.4a)$$

$$a'_1 = \frac{k_1}{2\rho_l} \rho, \quad (3.4b)$$

$$a_2 = k_2 \pi \left(\frac{3}{4\pi \rho_l} \right)^{2/3} \rho, \quad (3.4c)$$

$$c = d\rho, \quad (3.4d)$$

$$e_1 = d\rho a_E, \quad (3.4e)$$

$$e_2 = d\rho b_E, \quad (3.4f)$$

in den Prozessbeschreibungen einzuführen. Diese Koeffizienten hängen ausschließlich von den thermodynamischen Größen Luftdruck p und Lufttemperatur T ab. Sie enthalten einige physikalische Konstanten, die durch empirische Approximationen berechnet werden. Daher setzen wir lediglich voraus, dass sie für relevante Werte Lipschitz-stetig in den Systemvariablen sind. Für die verwendeten Näherungen lässt sich dies nachrechnen.

3. Lösungen des Modells

Bemerkung 3.1. Die Koeffizienten (3.4a)-(3.4f) sind Lipschitz-stetig für strikt positive und in der Erdatmosphäre relevante Werte des Druck p und der Temperatur T .

Beweis. In den Gleichungen (5.8) - (5.20) zeigen wir, dass zum einen die von uns vorgeschlagenen empirischen Funktionen für den Wasserdampf-Sättigungsdampfdruck p_s , die Wärmeleitfähigkeit K , die dynamische Viskosität μ und zum anderen der Einfluss latenter Wärme G , die Diffusionskonstante D , die Diffusivität d und Gleichung (2.2) der Dichte ρ partiell differenzierbar in p und T sind. Da sich die Koeffizienten aus Produkten dieser stets positiven Funktionen zusammensetzen, sind sie ebenfalls partiell differenzierbar. Die Lipschitz-Konstanten lassen sich daher mit Hilfe des Mittelwertsatzes der Differentialrechnung [19] bestimmen. □

Die Beschreibung der Wolkenprozesse

$$C = cq_s n_c^{2/3} q_c^{1/3}, \quad (3.5a)$$

$$E = (q_{vs} - q_v)_- \left(e_1 q_r^{1/3} n_r^{2/3} + e_2 v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2} \right), \quad (3.5b)$$

$$E' = (q_{vs} - q_v)_- \left(e_1 q_r^{-2/3} n_r^{5/3} + e_2 v_t^{1/2} q_r^{-1/2} n_r^{3/2} \right), \quad (3.5c)$$

$$A_1 = a_1 q_c^2, \quad (3.5d)$$

$$A'_1 = a'_1 n_c q_c, \quad (3.5e)$$

$$A_2 = a_2 v_t q_c q_r^{2/3} n_r^{1/3}, \quad (3.5f)$$

$$S = S_{\text{out}} = h^{-1} v_q q_r, \quad (3.5g)$$

$$S' = S'_{\text{out}} = h^{-1} v_n n_r, \quad (3.5h)$$

wird folglich etwas übersichtlicher mit den klar zu erkennenden Abhängigkeiten von den Systemgrößen q_v , q_c , q_r und n_r , sowie den algebraischen Nebenbedingungen der Wolkentropfenanzahl n_c und den Fallgeschwindigkeiten v_t , v_q und v_n .

Diese Fallgeschwindigkeiten sind ebenfalls empirische Näherungen an Messungen, vergleiche Anhang A.2, weshalb wir für sie lediglich obere und untere Schranken fordern, die entweder konstant oder Vielfache von Systemvariablen sind. Im Besonderen lassen sich die verwendeten Beschreibungen der Fallgeschwindigkeit von Regentropfen durch

$$c_v \min\{1, (q_r/n_r)^\beta\} \leq v_n \leq v_t \leq v_q \leq C_v \min\{1, (q_r/n_r)^\beta\} \quad (3.6)$$

für zwei entsprechende Konstanten c_v und C_v abschätzen.

Hinsichtlich der Bezifferung und Abschätzung relevanter Werte des Luftdrucks und der Lufttemperatur nehmen wir zunächst an, dass dieses Modell hauptsächlich in der Troposphäre der Erdatmosphäre zum Einsatz kommt. Daher können wir uns

3. Lösungen des Modells

an extremen gemessenen Werten des Drucks, der Temperatur und der vertikalen Struktur der Atmosphäre orientieren. Flüssiges Wasser ist nur oberhalb des Schmelzpunktes $T_m = 273.15$ K stabil, es kann jedoch im unterkühlten beziehungsweise metastabilen Zustand für $T < T_m$ existieren. Eine wichtige Marke der Temperatur ist daher 235 K, siehe [36], da gemeinhin angenommen wird, dass unterhalb dieses Wertes kein flüssiges Wasser in der Atmosphäre vorhanden ist. Es gefriert ab dieser Temperatur homogen, das heißt, es sind keine Nukleationskerne, genannt IN (englisch „ice nuclei“), notwendig um den Gefrierprozess einzuleiten.

Bezüglich der vertikalen Geschwindigkeit, die das Anfangswertproblem (3.1) antreibt, nehmen wir an, dass sie stetig in der Zeit ist und die Luft durch annehmbare Höhen

$$z(t) = z_0 + \int_0^t w(\tau) d\tau, \quad t > 0,$$

fährt. Außerdem kann die totale Masse des offenen Systems nicht steigen und ist durch die Summe $q_{v,0} + q_{c,0} + q_{r,0}$ der Anfangswerte nach oben beschränkt, denn die Summe der ersten Ableitungen der Massenkonzentrationen

$$\dot{q}_v + \dot{q}_c + \dot{q}_r = -S$$

ist nicht positiv zu allen Zeiten für zulässige Lösungen der Differentialgleichung (3.1). Das gilt insbesondere auch für die vollständige Luftsäule unter der Annahme, dass kein Regen einfällt. Daher stellen wir für die Lösung der Temperaturgleichung

$$T(t) = T_0 - \gamma \int_0^t w(\tau) d\tau + \int_0^t \frac{L(\tau)}{c_p} (C(\tau) + E(\tau)) d\tau$$

fest, dass sie ebenfalls beschränkt ist, denn nach (3.2a) ist

$$T(t) = T_0 - \gamma \int_0^t w(\tau) d\tau - \int_0^t \frac{L(\tau)}{c_p} \dot{q}_v(\tau) d\tau.$$

Wenden wir den Mittelwertsatz der Integralrechnung [19] an, so gilt

$$T(t) = T_0 - \gamma(z(t) - z_0) - \frac{\tilde{L}}{c_p} (q_v(t) - q_{v,0}) \quad (3.7)$$

mit dem Wert der latenten Wärme $\tilde{L} = L(\tilde{T})$ für einen mittleren Wert der Temperatur. Bezüglich des Luftdrucks erhalten wir die Lösung

$$p(t) = p_0 \exp\left(-\frac{g}{R} \int_0^t \frac{w(\tau)}{T(\tau)} d\tau\right)$$

via Trennung der Variablen in der Druckgleichung (2.36) und mit dem Mittelwertsatz der Differentialrechnung, sowie mit der intermediären vertikalen Geschwindigkeit \tilde{w} erhalten wir

$$p(t) = p_0 \left(\frac{T_0}{T(t)}\right)^{g\tilde{w}/R}. \quad (3.8)$$

3. Lösungen des Modells

Ist w mit den zuvor besprochenen Annahmen gegeben, so folgt aus (3.7) und (3.8) die gleichförmige Beschränktheit von oben, von unten und weg von der Null der zulässigen Lösungen der Druck- und Temperaturgleichungen. Folglich sind die Lipschitz-stetigen Koeffizienten (3.4a) bis (3.4f) ebenfalls beschränkt. Schließlich können wir

$$\dot{n}_r \leq a'_1 n_c q_c \quad (3.9)$$

abschätzen und daher zeigen, dass n_r ebenfalls für endliche Zeitintervalle nach oben beschränkt ist.

Die Beschränktheit von Druck und Temperatur impliziert insbesondere auch die Beschränktheit der Dichte ρ nach oben und unten. Dies garantiert die Invertierbarkeit der Jacobi-Matrix

$$J_\varphi = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{\alpha}{2} \left(\frac{\rho_*}{\rho^3} \right)^{1/2} \left(\frac{q_r m_t}{q_r + n_r m_t} \right)^\beta & 1 \end{bmatrix}.$$

Dies bedeutet, aus den algebraischen Nebenbedingungen lässt sich die Differentialgleichung

$$\begin{bmatrix} \dot{n}_c \\ \dot{\rho} \\ \dot{v}_t \end{bmatrix} = -J_\varphi^{-1} \varphi$$

herleiten. Das differential-algebraische System (3.1) mit den Nebenbedingungen (3.3) hat demzufolge Index eins. Infolgedessen ist speziell das implizite Euler-Verfahren tauglich als numerischer Löser für dieses System, siehe Kapitel 4.

Für die Bildung und Auflösung von Wolken- und Regentropfen ist die Differenz q_s aus Gleichung (2.5) entscheidend, daher benennen wir die folgenden Regime der Differenz.

Definition 3.2. Das Modell (3.1) heißt

1. *gesättigt* beziehungsweise *auf Sättigung*, wenn

$$q_v = q_{vs},$$

2. *untersättigt*, wenn

$$q_v < q_{vs},$$

3. *übersättigt*, wenn

$$q_v > q_{vs}.$$

Wird $q_v - q_{vs}$ positiv und das Modell übersättigt, erwarten wir eine positive Wolkentröpfchenmasse.

3. Lösungen des Modells

Definition 3.3. Eine Lösung von (3.1) heißt *physikalisch konsistent*, wenn

$$q_c > 0 \quad \text{falls} \quad q_s > 0.$$

Wie bereits in der Einleitung angedeutet, ist die Lösung des Modells im Allgemeinen nicht eindeutig. Denn als eine zulässige Lösung $y(t)$, $t \in [0, t_0]$, des Modells verstehen wir nicht-negative Funktionen q_v , q_c , q_r und n_r , sowie strikt positive Funktionen p und T . Eine physikalisch konsistente Lösung hat indes stets zusätzlich eine positive Komponente q_c , wann immer die Sättigungskonzentration q_s aus Gleichung (2.5) positiv ist. Für die weitere Untersuchung verwenden wir die Übersättigung als eine Art mathematische Entropie-Bedingung, zumal wir vornehmlich an physikalisch konsistenten Lösungen interessiert sind. Es ist daher essenziell, die zeitliche Entwicklung von q_s zu betrachten, da diese Größe die Wolkenbildung mittels Kondensation C initiiert:

$$\begin{aligned} \dot{q}_s &= \dot{q}_v - \dot{q}_{vs} \\ &= \dot{q}_v - \varepsilon \frac{p'_s(T)}{p} \dot{T} + \varepsilon \frac{p_s(T)}{p^2} \dot{p} \\ &= -d_1 C - d_1 E + d_2 w. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Für diese Umrechnung verwenden wir die Identität der Clausius-Clapeyron Differentialgleichung (2.3) und erhalten die zusätzlichen Koeffizienten

$$d_1 = 1 + \frac{\varepsilon L p'_s}{c_p p} = 1 + \varepsilon \frac{L^2}{c_p R_v T^2} \frac{p_s}{p}, \quad (3.11a)$$

$$d_2 = \varepsilon \left(\gamma \frac{p'_s}{p} - \frac{g}{RT} \frac{p_s}{p} \right) = \varepsilon \frac{p_s}{p} \left(\frac{\gamma L}{R_v T^2} - \frac{g}{RT} \right). \quad (3.11b)$$

Bemerkung 3.4. Die Koeffizienten d_1 und d_2 sind ebenfalls Lipschitz-stetige und nach oben beschränkte positive Funktionen in den Systemvariablen Druck und Temperatur. Die Positivität von d_2 diskutieren wir ausführlich im Anhang A.7. Da sowohl Druck als auch Temperatur von oben, von unten und von der Null weg beschränkt sind, ist d_1 ebenfalls beschränkt und überdies sind d_1 und d_2 partiell differenzierbar in p und T . Die Lipschitz-Konstanten können daher mit Hilfe des Mittelwertsatzes der Differentialrechnung bestimmt werden.

Tatsächlich ist das Differentialgleichungssystem, in welchem wir die Komponente \dot{q}_v durch \dot{q}_s ersetzen,

$$\begin{aligned} \dot{q}_s &= -d_1 C && -d_1 E && +d_2 w, \\ \dot{q}_c &= C && -A_1 && -A_2, \\ \dot{q}_r &= && A_1 && +A_2 && + E && -S, \\ \dot{n}_r &= && A'_1 && && + E' && -S', \\ \dot{p} &= && && && && -g\rho w, \\ \dot{T} &= \frac{L}{c_p} C && && + \frac{L}{c_p} E && && -\gamma w, \end{aligned} \quad (3.12)$$

3. Lösungen des Modells

äquivalent zum ursprünglichen Modell (3.1). Denn jede physikalisch konsistente Lösung des Anfangswertproblems (3.1) erzeugt eine physikalisch konsistente Lösung des Anfangswertproblems (3.12) mit $q_{s,0} \geq -q_{vs,0} = q_{vs}(p_0, T_0)$ und umgekehrt. Dies lässt sich nachvollziehen, indem man

$$q_v = q_s + q_{vs}$$

aus der Komponente q_s der Lösung von (3.12) zusammen mit q_{vs} bestimmt. Es folgt, dass q_v die ursprüngliche Gleichung (3.1) erfüllt mit Anfangswerten $q_v(0) \geq 0$. Daher bleibt q_v positiv, weil die rechte Seite von (3.1) positiv ist, sofern $q_v < q_{vs}$.

Zwangsläufig machen wir bezüglich der Anfangswerte des Modells (3.1) beziehungsweise des äquivalenten Systems (3.12) entsprechend unseren Ansprüchen an die Lösung Annahmen. Im Detail heißt das, zum Zeitpunkt $t = 0$ sind $q_{v,0} \geq 0$, $q_{c,0} \geq 0$, $q_{r,0} \geq 0$ und $n_{r,0} \geq 0$. Außerdem sind $q_{r,0}$ und $n_{r,0}$ konsistent beide größer null oder beide gleich null. Des Weiteren sind $p_0 > 0$ und $T_0 > 0$. Den Zeitpunkt $t = 0$ können wir an dieser Stelle ohne Einschränkungen als Beginn der Lösung wählen, da eine einfache Substitution der Zeitvariablen genügt, um das System in diesen Punkt zu verschieben.

3.2. Kritische Anfangswerte

Wie wir im vorangegangenen Abschnitt diskutiert haben, sind die Lösungskomponenten des Anfangswertproblems (3.1) und des äquivalenten Problems (3.12) für endliche Zeitintervalle beschränkt. In den Bemerkungen 3.1 und 3.4 haben wir gezeigt, dass die Koeffizienten (3.4a) bis (3.4f), sowie die Koeffizienten (3.11a) und (3.11b), die nur von den Systemgrößen Druck und Temperatur direkt abhängen, in diesen beiden Variablen Lipschitz-stetig sind.

Bemerkung 3.5. Sei x einer der Koeffizienten (3.4a) bis (3.4f), (3.11a) oder (3.11b). Außerdem sei $\gamma > 0$ und es seien ϑ_p und ϑ_T geeignete Funktionen, mit denen Druck und Temperatur durch

$$\begin{aligned} p &= p_0 + t^\gamma \vartheta_p, \\ T &= T_0 + t^\gamma \vartheta_T, \end{aligned}$$

mit $1 > t \geq 0$, dargestellt werden können. Dann gilt

$$|x(p_0 + t^\gamma \vartheta_p, T_0 + t^\gamma \vartheta_T) - x_0| \leq t^\gamma L(|\vartheta_p| + |\vartheta_T|)$$

aufgrund der Lipschitz-Stetigkeit von x , wobei wir $x_0 = x(p_0, T_0)$ bezeichnen. Das bedeutet, die führende Ordnung der Zeit von $x(p, T) - x_0$ ist größer oder gleich γ , sofern die Differenz ungleich null ist.

3. Lösungen des Modells

Des Weiteren sind die Fallgeschwindigkeiten durch (3.6) beschränkt und für positive Werte von q_r , n_r , p und T differenzierbar mit den Ableitungen (5.21) bis (5.24), (5.25) bis (5.28) und (5.29) bis (5.32). Insbesondere sind die Fallgeschwindigkeiten daher für diese Werte Lipschitz-stetig in den Systemvariablen. Ferner bemerken wir, dass für die algebraische Funktion der Wolkentropfen n_c gilt:

Bemerkung 3.6. Ist $q_c \geq 0$, dann gilt mit Hilfe des Mittelwertsatzes der Differentialrechnung [19]

$$\begin{aligned} n_c(q_c) &= n_c(0) + n_c(q_c) - n_c(0) \\ &= n_c(0) + \left. \frac{\partial n_c}{\partial q_c} \right|_{q_c=\xi} q_c, \end{aligned}$$

für ein entsprechendes $\xi \in (0, q_c)$, da n_c differenzierbar ist und die Ableitung (5.33) besitzt.

Anhand der Prozessbeschreibungen (3.5a) bis (3.5h) lässt sich erkennen, dass die rechte Seite des Anfangswertproblems (3.1) für ein komponentenweise strikt positives Tupel von Anfangswerten $y_0 = (q_{v,0} \ q_{c,0} \ q_{r,0} \ n_{r,0} \ p_0 \ T_0)^T$ Lipschitz-stetig in den Systemvariablen y ist.

Daher existiert in diesem Fall laut dem Picard-Lindelöf-Theorem, siehe beispielsweise [47], eine eindeutige Lösung von (3.1) und sie ist als solche offensichtlich lokal zulässig. Ist jedoch einer oder sind mehrere der Anfangswerte $q_{c,0}$, $q_{r,0}$ oder $n_{r,0}$ gleich null, dann ist die rechte Seite (3.2a) bis (3.2f) nicht Lipschitz-stetig in der Nähe der Anfangswerte und das korrespondierende Anfangswertproblem (3.1) muss keine eindeutige Lösung besitzen. Ergo bezeichnen wir diese Anfangswerte als *kritisch*.

Definition 3.7. Sei $q_{c,0} = 0$, $q_{r,0} = 0$ oder $n_{r,0} = 0$, so nennen wir

$$y_0 = (q_{v,0} \ q_{c,0} \ q_{r,0} \ n_{r,0} \ p_0 \ T_0)$$

kritische Anfangswerte des Anfangswertproblems (3.1).

Wie beispielhaft im sehr reduzierten Beispiel (1.2) der Einleitung angedeutet, sind die konstanten Funktionen q_v , q_c , q_r und n_r triviale Lösungen von (3.1) für die Anfangswerte $q_{c,0} = q_{r,0} = n_{r,0} = 0$. Diese Lösungen sind physikalisch konsistent, solange die Luft nicht übersättigt. Eine solche Lösung ist jedoch nicht physikalisch, sobald die Luft Sättigung übersteigt und übersättigt. Denn, wenn $q_s > 0$ wird, erwarten wir eine positive Lösung der Wolkentropfenmasse q_c .

Darüber hinaus fordern wir aus physikalischen Gründen eine *Selbstkonsistenz* hinsichtlich der beiden Größen q_r und n_r , welche die Regentropfenpopulation beschreiben, das heißt, sie sind entweder zugleich null oder zugleich positiv.

3. Lösungen des Modells

Im Folgenden untersuchen wir das äquivalente Anfangswertproblem (3.12) auf diese Eigenschaften und betrachten zunächst kritische Anfangswerte in den Fällen untersättigter bis gesättigter Luft.

Theorem 3.8. *Seien die Koeffizienten (3.4a)-(3.4f) und (3.11a)-(3.11b) Lipschitz-stetig in den Systemvariablen p und T . Seien weiterhin die Anfangswerte p_0 und T_0 positiv, $-q_{vs}(p_0, T_0) \leq q_{s,0} < 0$ oder $q_{s,0} = 0$ und der äußere Antrieb, die vertikale Geschwindigkeit, $w \leq 0$ in einem offenen Zeitintervall $(0, t_0)$. Dann hat das System (3.12) mit den Anfangswerten*

$$q_{c,0} = 0, \quad q_{r,0} \geq 0, \quad n_{r,0} \geq 0,$$

sowie p_0, T_0 und $q_{s,0}$ wie angenommen, eine eindeutige physikalisch konsistente Lösung in einem offenen Zeitintervall $(0, t'_0)$, vorausgesetzt, dass $q_{r,0}$ und $n_{r,0}$ entweder beide null oder beide nicht null sind. Die Komponente q_c dieser Lösung ist identisch null und falls die Anfangswerte $q_{r,0} = n_{r,0} = 0$ sind, dann sind die Lösungskomponenten q_r und n_r ebenfalls null in $(0, t'_0)$.

Beweis. Sei zunächst $q_{s,0} < 0$. Das bedeutet, das System ist untersättigt. So ist q_s negativ für positive Zeiten t in der Nähe von $t = 0$ für jede zulässige Lösung von (3.12) aufgrund von (3.10) und den Voraussetzungen dieses Theorems.

Andererseits ist (3.2b) auch nicht positiv, solange q_s nicht positiv ist. Das bedeutet, dass q_c in einem Zeitintervall $(0, t'_0)$ nicht auftaucht. Deshalb lösen die übrigen Komponenten das reduzierte System

$$\begin{aligned} \dot{q}_s &= & -d_1 E & +d_2 w \\ \dot{q}_r &= & E & -S \\ \dot{n}_r &= & E' & -S' \\ \dot{p} &= & & -g\rho w \\ \dot{T} &= & d_3 E & -\gamma w. \end{aligned} \tag{3.13}$$

Sind $q_{r,0}$ und $n_{r,0}$ beide größer null, können wir das Picard-Lindelöf-Theorem [47] anwenden, um eine eindeutige Lösung des reduzierten Systems (3.13) zu finden. Zusammen mit $q_c = 0$ ist dies eine physikalisch konsistente Lösung von (3.12), welche die gegebenen Anfangsdaten erfüllt.

Es seien nun $q_{r,0} = n_{r,0} = 0$. Da die rechten Seiten von

$$\begin{aligned} \dot{q}_r &= & E & -S, \\ \dot{n}_r &= & E' & -S', \end{aligned}$$

beide nicht negativ sind in $(0, t'_0)$, sind die Komponenten q_r und n_r jeder zulässigen Lösung von (3.12) null im selben Intervall. Tatsächlich bilden diese Nulllösungen vervollständigt durch $q_c = 0$ und durch die Lösung des Systems

$$\begin{aligned} \dot{q}_s &= & d_2 w \\ \dot{p} &= & -g\rho w \\ \dot{T} &= & -\gamma w \end{aligned}$$

3. Lösungen des Modells

eine physikalisch konsistente Lösung des Systems (3.12) in $[0, t'_0)$. Außerdem ist dies die einzige Lösung für die gegebenen Anfangswerte. □

Als nächstes wenden wir uns dem etwas aufwändigeren Fall übersättigter Luft, beziehungsweise solcher Luft, die gerade im Begriff ist, Sättigung zu überschreiten, zu. Zuvor bemerken wir noch eine Abschätzung, welche im anschließenden Beweis häufiger Anwendung findet.

Bemerkung 3.9. Sei $u_0 \in \mathbb{R}_{>0}$ und sei $\nu \in C([0, t_0], \mathbb{R})$ sowie $0 < \alpha < 1$ und $\gamma > 0$. Dann lässt sich mit Hilfe der binomischen Reihe, vergleiche [19], für kleine $t \in [0, t_0)$, mit t_0 so klein, dass $t^\gamma \frac{\nu}{u_0} < 1$ gilt, zeigen,

$$(u_0 + t^\gamma \nu)^\alpha = u_0^\alpha \left(1 + t^\gamma \alpha \frac{\nu}{u_0} - t^{2\gamma} \binom{\alpha}{2} \left(\frac{\nu}{u_0} \right)^2 + O(t^{3\gamma}) \right).$$

Wir untersuchen die Lösungseigenschaften unter der Entropie-Bedingung, dass betrachtete Lösungen physikalisch konsistent sind.

Theorem 3.10. *Sei entweder der Anfangswert $q_{s,0} > 0$ oder es sei $q_{s,0} = 0$ und die vertikale Geschwindigkeit w sei analytisch in der Nähe von $t = 0$ mit $w(t) > 0$ in einem offenen Zeitintervall $(0, t_0)$. Dann hat das System (3.12) mit den Anfangswerten*

$$q_{c,0} \geq 0, \quad q_{r,0} \geq 0, \quad n_{r,0} \geq 0,$$

sowie $p_0 > 0$ und $T_0 > 0$ eine eindeutige physikalisch konsistente Lösung in einem offenen Zeitintervall $(0, t'_0)$, gegeben dass entweder $q_{r,0}$ und $n_{r,0}$ beide größer null oder beide gleich null sind. Jedenfalls kann t'_0 so klein sein, dass q_c , q_r und n_r alle positiv sind für $t \in (0, (t'_0)^{1/3})$.

Beweis. Wie gefordert, hat die vertikale Geschwindigkeit w im Fall $q_{s,0} = 0$ eine Taylor-Reihenentwicklung

$$w(t) = u_w t^{n-1} + O(t^n) \tag{3.14}$$

für ein $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$ und den führenden Koeffizienten $u_w > 0$. Außerdem verwenden wir im Folgenden die zusätzliche Schreibweise $n = 0$ für den Fall, dass $q_{s,0} > 0$. Positive Anfangswerte von q_c lassen wir bis zum Ende des Beweises ganz außer Acht, sie sind weniger schwierig und für unsere Experimente von geringerer Bedeutung, das heißt, bis dahin nehmen wir $q_{c,0} = 0$ an.

Diskutieren wir zunächst die Lösungseigenschaften der beiden thermodynamischen Größen Luftdruck p und Lufttemperatur T . Da wir $p_0 > 0$ und $T_0 > 0$ voraussetzen, sind die Komponenten (3.2e) und (3.2f) Lipschitz-stetig in p und T unter der Verwendung der Bemerkung 3.1 für den Koeffizienten c . Das bedeutet,

3. Lösungen des Modells

sind die Lösungen der übrigen Komponenten gegeben, können wir die Integralgleichungen

$$p(t) - p_0 = t \int_0^1 f_p(st) ds = t^{2/3} \vartheta_p = t^{1/3} \nu_p, \quad (3.15)$$

$$T(t) - T_0 = t \int_0^1 f_T(st) ds = t^{2/3} \vartheta_T = t^{1/3} \nu_T. \quad (3.16)$$

im Sinne des Satzes von Picard-Lindelöf, siehe [47], mit Hilfe einer Substitution der Integrationsvariablen, $\tau = st$, formulieren. Die Existenz dieser Integrale haben wir bereits in (3.7) und (3.8) besprochen. Die Wahl des Exponenten $1/3$ des Faktors $t^{1/3}$ hat in diesem Beweis nur ästhetische Gründe, andere Exponenten aus dem offenen Intervall $(0, 0.5)$ wären denkbar. Wichtig ist, dass wir uns daher die Ergebnisse aus Bemerkung 3.5 im Folgenden zunutze machen können.

Der Hauptteil des Beweises für $q_{c,0} = 0$ lässt sich in vier Schritte einteilen:

- (i) $q_c > 0$ in der Nähe von $t > 0$ für jede zulässige physikalisch konsistente Lösung des Anfangswertproblems 3.12 mit den im Theorem spezifizierten Anfangswerten. Weiterhin lassen sich q_s und q_c schreiben als

$$q_s = t^n u_s, \quad q_c = t^{(3n+3)/2} u_c^{3/2}, \quad (3.17)$$

während

$$q_r = t^{3n+4} u_q, \quad n_r = t^{(3n+5)/2} u_n, \quad (3.18)$$

wenn $q_{r,0} = n_{n,0} = 0$. Für $t \in [0, t_1]$, mit einem $t_1 > 0$, sind $u_s, u_c, u_q, u_n \in C^1(0, t_1) \cap C([0, t_1])$ mit strikt positiven Werten für $t = 0$. Sind dagegen $q_{r,0} > 0$ und $n_{n,0} > 0$, gilt bereits

$$q_r = u_q, \quad n_r = u_n,$$

ebenso wie für $n = 0$ gilt

$$q_s = u_s.$$

- (ii) Die so definierten Funktionen und Faktoren der Lösung $u = [u_s \ u_c \ u_q \ u_n]^T$ haben komponentenweise die Struktur

$$u = u_0 + t^{1/3} \nu_1 \quad (3.19)$$

mit $u_0 = u(0)$ für geeignete Funktionen $\nu_1 = [\nu_s \ \nu_c \ \nu_q \ \nu_n]^T$ mit $\nu_s, \nu_c, \nu_q, \nu_n \in C^1(0, t'_0) \cap C([0, t'_0])$ für ein kleines $t'_0 > 0$ und mit $\nu(0) = 0$.

- (iii) Für $\nu = (\nu_1, \nu_p, \nu_T)^T$, mit ν_p aus (3.15) und ν_T aus (3.16) gilt die Gleichung vom Fuchs-Typ, vergleiche [26],

$$t\dot{\nu} + A\nu = tF(\nu, t) \quad (3.20)$$

für ein $t \in (0, t'_0)^{1/3}$, eine untere Dreiecksmatrix A und eine in ν Lipschitz-stetige Funktion F .

3. Lösungen des Modells

- (iv) Das System (3.20) hat eine eindeutige Lösung mit den Anfangswerten $\nu(0) = 0$.

Beginnen wir mit dem ersten Schritt des Beweises. Die rechte Seite (3.10) der Sättigungskomponente ist Lipschitz-stetig bezüglich q_s . Sind die Lösungen der Komponenten q_c, q_r, n_r, p und T gegeben, so hat diese Differentialgleichung eine eindeutige Lösung mit $q_s(0) = q_{s,0}$. In der Nähe von $t = 0$ ist diese Lösung durch

$$q_s(t) = f(t) \left(q_{s,0} + \int_0^t \frac{d_2(\tau)w(\tau)}{f(\tau)} d\tau \right)$$

mit

$$f(t) = \exp \left(- \int_0^t d_1(s)c(s)n_c^{2/3}(s)q_c^{1/3}(s) ds \right)$$

gegeben, da q_s erkennbar positiv ist für kleine $t > 0$ unter den Voraussetzungen an $q_{s,0}$ und w . Es folgt, dass

$$f(t) = 1 + O(t) \quad \text{für } t \rightarrow 0$$

und

$$q_s(t) = q_{s,0} + O(t) \quad \text{für } t \rightarrow 0, \quad \text{falls } q_{s,0} > 0.$$

Ist dagegen $q_{s,0} = 0$, zeigt eine Taylor-Reihenentwicklung basierend auf (3.14), dass

$$\begin{aligned} q_s(t) &= (1 + O(t)) \int_0^t \frac{d_{2,0}u_w\tau^{n-1} + O(\tau)}{1 + O(\tau)} d\tau \\ &= \frac{d_{2,0}u_w}{n} t^n + O(t^{n+1}), \quad t \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Somit haben wir die erste Gleichung in (3.17), für einen Exponenten $n \in \mathbb{N}_0$ aus (3.14) und eine auf $(0, t_1)$ differenzierbare Funktion u_s , gezeigt. Die Funktion u_s ist differenzierbar, da q_s bereits differenzierbar ist und sie lässt sich durch

$$u_s(0) = u_{s,0} = \begin{cases} q_{s,0} & , \text{ falls } q_{s,0} > 0, \\ d_{2,0}u_w/n & , \text{ falls } q_{s,0} = 0, \end{cases} \quad (3.21)$$

stetig bis $t = 0$ fortsetzen. Daraus und aus (3.3) folgern wir, dass $q_c > 0$ für $t \in (0, t'_0)$.

Als Nächstes beobachten wir, dass für jede Lösung von (3.12) mit $q_c > 0$ die Funktion

$$x_c = q_c^{2/3} \quad (3.22)$$

die Differentialgleichung

$$\dot{x}_c = \frac{2}{3}cn_c^{2/3}q_s - \frac{2}{3}a_1x_c^{5/2} - \frac{2}{3}a_2v_tq_r^{2/3}n_r^{1/3}x_c, \quad (3.23)$$

3. Lösungen des Modells

abgeleitet von (3.2b), löst. Verwenden wir die bereits gezeigte Repräsentation (3.17) von q_s , lässt sich aus (3.23) folgern, dass

$$x_c(t) \leq \frac{2}{3} \int_0^t c(\tau) n_c^{2/3}(\tau) q_s(\tau) d\tau = \frac{2u_{s,0}c_0n_{c,0}^{2/3}}{3(n+1)} t^{n+1} + O(t^{n+2}), \quad t \rightarrow 0.$$

Fügt man diese Abschätzung wieder in (3.23) ein, erhält man die untere Schranke

$$\begin{aligned} x_c(t) &\geq \frac{2}{3} \int_0^t c(\tau) n_c^{2/3}(\tau) q_s(\tau) d\tau - \int_0^t \left(C_1 \tau^{(5n+5)/2} + C_2 \tau^{n+1} \right) d\tau \\ &= \frac{2u_{s,0}c_0n_{c,0}^{2/3}}{3(n+1)} t^{n+1} - O(t^{n+2}), \quad t \rightarrow 0, \end{aligned}$$

wobei C_1 und C_2 zwei zweckmäßige Konstanten auf der Basis von (3.6) und der Beschränktheit aller involvierten Funktionen sind. Damit und mit der Monotonie von $(\cdot)^{3/2}$ ist die entsprechende Gleichung in (3.17) für q_c gezeigt mit

$$u_c(0) = u_{c,0} = \frac{2c_0n_{c,0}^{2/3}u_{s,0}}{3(n+1)}. \quad (3.24)$$

Im Weiteren nehmen wir $q_{r,0} = n_{r,0} = 0$ an. n_r erfüllt die Differentialgleichung

$$\dot{n}_r = a'_1 n_c q_c - h^{-1} v_n n_r,$$

da $q_s > 0$ für $t \in (0, t_1)$. Aufgrund dessen ist

$$n_r(t) = f(t) \int_0^t \frac{a'_1(\tau) n_c(\tau) q_c(\tau)}{f(\tau)} d\tau, \quad (3.25)$$

während

$$f(t) = \exp\left(-\int_0^t h^{-1}(s) v_n(s) ds\right) \quad (3.26)$$

ist. Somit erhalten wir die zweite Gleichung aus (3.18) durch eine Taylor-Reihenentwicklung unter Verwendung von (3.6) und der Anfangswert ist

$$u_n(0) = u_{n,0} = \frac{2a'_{1,0}n_{c,0}u_{c,0}^{3/2}}{3n+5}. \quad (3.27)$$

Hinsichtlich q_r summieren wir die Systemkomponenten (3.2b) und (3.2c) zu

$$\dot{q}_r + \dot{q}_c = cn_c^{2/3} q_s q_c^{1/3} - h^{-1} v_q q_r, \quad (3.28)$$

denn die Verdunstung E entfällt, da $q_s > 0$ für $t \in (0, t_1)$. Es folgt, dass

$$\begin{aligned} q_r(t) &= -q_c(t) + \int_0^t \left(c(\tau) n_c^{2/3}(\tau) q_s(\tau) q_c^{1/3}(\tau) - h^{-1}(\tau) v_q(\tau) q_r(\tau) \right) d\tau \\ &\leq \int_0^t c(\tau) n_c^{2/3}(\tau) q_s(\tau) q_c^{1/3}(\tau) d\tau, \end{aligned} \quad (3.29)$$

3. Lösungen des Modells

wobei wir davon ausgehen, dass q_r und q_c beide nicht negativ sind. Wir können daher vorläufig

$$q_r(t) = O(t^{(3n+3)/2}), \quad \text{für } t \rightarrow 0, \quad (3.30)$$

folgern. Ferner gilt die Abschätzung

$$q_r(t) \leq \int_0^t \left(a_1(\tau)q_c^2(\tau) + a_2(\tau)v_t(\tau)q_c(\tau)q_r^{2/3}(\tau)n_r^{1/3} \right) d\tau.$$

Zusammen mit den zuvor gezeigten Asymptoten und mit der vorläufigen Asymptote (3.30) impliziert dies

$$q_r(t) \leq \frac{a_{1,0}u_{c,0}^3}{3n+4} t^{3n+4} + O(t^{3n+13/3}), \quad t \rightarrow 0.$$

Setzen wir dies zurück in (3.2c) ein und benutzen $q_{s-} = 0$, so erhalten wir die untere Schranke

$$q_r(t) \geq \int_0^t \left(a_1(\tau)q_c^2(\tau) - h^{-1}v_q(\tau)q_r(\tau) \right) d\tau \geq \frac{a_{1,0}u_{c,0}^3}{3n+4} t^{3n+4} - O(t^{3n+5}), \quad t \rightarrow 0,$$

und somit die erste Gleichung aus (3.18) mit

$$u_q(0) = u_{q,0} = \frac{a_{1,0}u_{c,0}^3}{3n+4}. \quad (3.31)$$

Im zweiten Schritt des Beweises beschränken wir uns zunächst auf den Fall $q_{s,0} = 0$. Das heißt, n ist positiv und wir nehmen an, dass $q_{r,0} = n_{r,0} = 0$. Die weiteren Fälle diskutieren wir nach Abschluss des Beweises dieses Falls, denn sie sind leichter und können in ähnlicher Weise behandelt werden. Wir betrachten ein entsprechend kleines Zeitintervall $[0, t_1]$ für ein genügend kleines $t_1 > 0$ und einen kompakten Quader $\Omega_1 \subset \mathbb{R}_{>0}^6$ für die Werte von $(u, p, T)^T$, wobei wir annehmen, dass die Anfangswerte $(u_{s,0} \ u_{c,0} \ u_{q,0} \ u_{n,0} \ p_0 \ T_0)^T$ im Inneren von Ω_1 liegen, da $u_w > 0$. Es folgt die komponentenweise Aufteilung von u . Dazu verwenden wir die bereits gezeigten führenden Zeitordnungen der Systemgrößen aus den Gleichungen (3.17) und (3.18).

Wir betrachten zunächst die erste Komponente des Systems (3.12) und integrieren ihre rechte Seite (3.10) mit der Substitution $\tau = st$. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} q_s(t) &= \int_0^t \left[-\tau^{(3n+1)/2} d_1(\tau)c(\tau)n_c^{2/3}(\tau)u_s(\tau)u_c^{1/2}(\tau) + d_2(\tau)w(\tau) \right] d\tau \\ &= t^n \left(\int_0^1 d_{2,0}u_w s^{n-1} ds \right. \\ &\quad \left. + t^{1/3} \int_0^1 \left[s^{(3n+1)/2} t^{(n+1)/2} d_1(st)c(st)n_c^{2/3}(st)q_s(st)q_c^{1/3}(st) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + t^{-1/3}(d_2(st) - d_{2,0})u_w s^{n-1} + t^{2/3-n}d_2(st)(w(st) - u_w s^{n-1}t^{n-1}) \right] ds \right) \\ &= t^n \left(u_{s,0} + t^{1/3}\nu_s \right), \end{aligned}$$

3. Lösungen des Modells

da die Koeffizienten (3.4a) bis (3.4f), (3.11a) und (3.11b), sowie die Systemgrößen q_s und q_c , wie zuvor diskutiert, im Intervall $t \in (0, t_1)$ beschränkt sind. Die Notation der Koeffizienten, wie beispielsweise $d_{2,0}$, ist analog zu jener in Bemerkung 3.5 zu verstehen.

Der Term $t^{-1/3}(d_2(t) - d_{2,0}) = O(t^{1/3})$ aufgrund der Lösungseigenschaften von p und T in den Gleichungen (3.15) und (3.16) sowie der Bemerkung 3.5. Außerdem ist der Term $w(t) - u_w t^{n-1} = O(t^n)$ nach unserer Definition 3.14. Die Terme sind daher wohldefiniert und es folgt zusätzlich

$$\nu_s(t)|_{t=0} = 0. \quad (3.32)$$

Für die zweite Komponente wenden wir uns erneut zur alternativen Differentialgleichung (3.23) und integrieren diese:

$$\begin{aligned} x_c(t) &= \int_0^t \frac{2}{3} \left[\tau^n c(\tau) n_c^{2/3}(\tau) u_s(\tau) - \tau^{(5n+5)/2} a_1(\tau) u_c^{5/2}(\tau) \right. \\ &\quad \left. - \tau^{(7n+9)/3} a_2(\tau) v_t(\tau) u_q^{2/3}(\tau) u_n^{1/3}(\tau) u_c(\tau) \right] d\tau \\ &= t^{n+1} \frac{2}{3} \left(\int_0^1 s^n c_0 n_{c,0}^{2/3} u_{s,0} ds \right. \\ &\quad \left. + t^{1/3} \left(\int_0^1 s^{n+1/3} c_0 n_{c,0}^{2/3} \nu_s(st) ds \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \int_0^1 \left[s^n t^{-1/3} c_0 \left(n_c^{2/3}(st) - n_{c,0}^{2/3} \right) \left(u_{s,0} + t^{1/3} \nu_s(st) \right) \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + s^n t^{-1/3} (c(st) - c_0) n_c^{2/3}(st) \left(u_{s,0} + t^{1/3} \nu_s(st) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - t^{(9n+13)/6} s^{(5n+5)/2} a_1(st) u_c^{5/2}(st) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - t^{(4n+8)/3} s^{(7n+9)/3} a_2(st) v_t(st) u_c(st) u_q^{2/3}(st) u_n^{1/3}(st) \right] ds \right) \left. \right) \\ &= t^{n+1} (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c). \end{aligned}$$

Wie zuvor für die erste Komponente wenden wir erneut die Substitution $\tau = st$ an und setzen die soeben gezeigte Darstellung der ersten Komponente ein. Der Term $t^{-1/3}(c(t) - c_0) = O(t^{1/3})$ aufgrund der Bemerkung 3.5 und den Gleichungen (3.15) und (3.16). Des Weiteren ist der Term $n_c^{2/3}(t) - n_{c,0}^{2/3} = O(t^{(3n+3)/2})$. Dies lässt sich mit den Bemerkungen 3.6 und 3.9 nachvollziehen und wir können daher den Anfangswert

$$\nu_c(t)|_{t=0} = 0 \quad (3.33)$$

bestimmen. Weiterhin integrieren wir die dritte Komponente (3.2c) unter Anwendung der bereits gezeigten Resultate bezüglich der ersten beiden

3. Lösungen des Modells

Komponenten. Es ist

$$\begin{aligned}
 q_r(t) &= \int_0^t \left[\tau^{3n+3} a_1(\tau) u_c^3(\tau) \right. \\
 &\quad \left. + \tau^{4n+5} a_2(\tau) v_t(\tau) u_c^{3/2}(\tau) u_q^{2/3}(\tau) u_n^{1/3}(\tau) + \tau^{3n+4} h^{-1}(\tau) v_q(\tau) u_q(\tau) \right] d\tau \\
 &= t^{3n+4} \left(\int_0^1 s^{3n+3} a_{1,0} u_{c,0}^3 ds \right. \\
 &\quad \left. + t^{1/3} \left(\int_0^1 s^{3n+3} s^{1/3} \mathfrak{A} a_{1,0} u_{c,0}^2 \nu_c(st) ds \right. \right. \\
 &\quad \left. + \int_0^1 \left[s^{3n+3} \left(s^{2/3} t^{1/3} \mathfrak{A} a_{1,0} u_{c,0} \nu_c^2(st) + st^{2/3} a_{1,0} \nu_c^3(st) \right) \right. \right. \\
 &\quad \left. + s^{3n+3} t^{-1/3} (a_1(st) - a_{1,0}) \left(u_{c,0} + (st)^{1/3} \nu_c(st) \right) \right. \\
 &\quad \left. + t^{(3n+2)/3} s^{4n+5} a_2(st) v_t(st) u_c^{3/2}(st) u_q^{2/3}(st) u_n^{1/3}(st) \right. \\
 &\quad \left. \left. + t^{2/3} s^{3n+4} h^{-1}(st) v_q(st) u_q(st) \right] ds \right) \\
 &= t^{3n+4} \left(u_{q,0} + t^{1/3} \nu_q \right).
 \end{aligned}$$

Der Koeffizient a_1 lässt sich aufgrund der Lösungseigenschaften von p und T in den Gleichungen (3.15) und (3.16) mit Bemerkung 3.5 zu $t^{-1/3}(a_1(t) - a_{1,0}) = O(t^{1/3})$ abschätzen. Dies resultiert im Anfangswert

$$\nu_q(t)|_{t=0} = 0. \tag{3.34}$$

Zuletzt folgt mit Integration der rechten Seite (3.2d) und mit den Abschätzungen

3. Lösungen des Modells

der Koeffizienten und Systemgrößen wie zuvor die Darstellung

$$\begin{aligned}
n_r(t) &= \int_0^t \left[\tau^{(3n+3)/2} a'_1(\tau) n_c(\tau) u_c^{3/2}(\tau) - \tau^{(3n+5)/2} h^{-1}(\tau) v_n(\tau) u_n(\tau) \right] d\tau \\
&= t^{(3n+5)/2} \left(\int_0^1 s^{(3n+3)/2} a'_{1,0} n_{c,0} u_{c,0}^{3/2} ds \right. \\
&\quad + t^{1/3} \left(\int_0^1 s^{(3n+3)/2} s^{1/3} a'_{1,0} n_{c,0} u_{c,0}^{1/2} \left(1 + \frac{1}{2} u_{c,0}^{-1} \right) \nu_c(st) ds \right. \\
&\quad + \int_0^1 \left[s^{(3n+3)/2} t^{-1/3} (a'_1(st) - a'_{1,0}) n_c(st) \left(u_{c,0} + (st)^{1/3} \nu_c(st) \right)^{3/2} \right. \\
&\quad + s^{(3n+3)/2} t^{-1/3} a'_{1,0} (n_c(st) - n_{c,0}) \left(u_{c,0} + (st)^{1/3} \nu_c(st) \right)^{3/2} \\
&\quad + s^{(3n+3)/2} s^{1/3} a'_{1,0} n_{c,0} \nu_c(st) \left(\left(u_{c,0} + (st)^{1/3} \nu_c(st) \right)^{1/2} - u_{c,0}^{1/2} \right) \\
&\quad + s^{(3n+3)/2} t^{-1/3} a'_{1,0} n_{c,0} u_{c,0} \left(\left(u_{c,0} + (st)^{1/3} \nu_c(st) \right)^{1/2} \right. \\
&\quad \left. \left. - u_{c,0}^{1/2} - (st)^{1/3} \frac{1}{2} \frac{\nu_c(st)}{u_{c,0}^{1/2}} \right) \right. \\
&\quad \left. \left. - t^{2/3} s^{(3n+5)/2} h^{-1}(st) v_n(st) u_n(st) \right] ds \right) \\
&= t^{(3n+5)/2} \left(u_{n,0} + t^{1/3} \nu_n \right).
\end{aligned}$$

Die Abschätzung des Koeffizienten a'_1 mit Bemerkung 3.5 aufgrund der Lösungseigenschaften in den Gleichungen (3.15) und (3.16) resultiert in $t^{-1/3}(a'_1(t) - a'_{1,0}) = O(t^{1/3})$. Des Weiteren sind

$$\begin{aligned}
n_c - n_{c,0} &= O(t^{(3n+3)/2}), \\
\left(u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c \right)^{1/2} - u_{c,0}^{1/2} &= O(t^{1/3}), \\
\left(u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c \right)^{1/2} - u_{c,0}^{1/2} - t^{1/3} \frac{1}{2} \nu_c u_{c,0}^{-1/2} &= O(t^{2/3})
\end{aligned}$$

mit Hilfe der Bemerkungen 3.6 respektive 3.9. Somit folgt der Anfangswert

$$\nu_n(t)|_{t=0} = 0. \tag{3.35}$$

Da $u_w > 0$, sind auch $u_{s,0} > 0$, $u_{c,0} > 0$, $u_{q,0} > 0$ und $u_{n,0} > 0$. Deshalb können wir t'_0 stets so klein wählen, dass die Werte von ν auf dem Zeitintervall $[0, t'_0]$ im \mathbb{R}^4 liegen und $u = u_0 + t^{1/3} \nu$ komponentenweise stets nicht negativ ist. Denn u und ν sind stetige Funktionen der Zeit, da bereits die Lösungen q_r , q_c , q_r und n_r stetige Funktionen sind.

Damit ist die Darstellung (3.19) gezeigt und wir wenden uns zu Schritt (iii). Die Substitutionen (3.17) und (3.18), die wir in Schritt (i) des Beweises gezeigt haben,

3. Lösungen des Modells

transformieren das System der Differentialgleichungen für q_s , q_c , q_r und n_r in ein Anfangswertproblem

$$t\dot{u} + A_1 u = F_1(u, t), \quad u(0) = u_0, \quad (3.36)$$

mit der Diagonalmatrix

$$A_1 = \begin{bmatrix} n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n+1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3n+4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (3n+5)/2 \end{bmatrix}$$

und den Komponenten

$$\begin{aligned} F_{1,s} &= -t^{(n+3)/2} d_1 c n_c^{2/3} u_s u_c^{1/2} + d_2 u_w, \\ F_{1,c} &= \frac{2}{3} \left(c n_c^{2/3} u_s - t^{(3n+5)/2} a_1 u_c^{5/2} - t^{(5n+9)/2} a_2 v_t u_c u_q^{2/3} u_n^{1/3} \right), \\ F_{1,q} &= a_1 u_c^3 + t^{n+2} a_2 v_t u_c^{3/2} u_q^{2/3} u_n^{1/3} - t h^{-1} v_q u_q, \\ F_{1,n} &= a'_1 n_c u_c^{3/2} - t h^{-1} v_n u_n \end{aligned}$$

der rechten Seite F_1 sowie mit den in (3.21), (3.24), (3.31) und (3.27) spezifizierten Anfangswerten u_0 .

An dieser Stelle ergänzen wir das System um die Komponenten des Drucks (3.15) und der Temperatur (3.16). Zusammen mit der komponentenweisen Substitution (3.19) transformiert dies das System der Differentialgleichung (3.36) für u weiter in ein Anfangswertproblem

$$t\dot{\nu} + A_2 \nu = t^{1/3} F_2(\nu, t), \quad \nu(0) = 0,$$

für $\nu = (\nu_s \nu_c \nu_q \nu_n \nu_p \nu_T)^T$ und für die untere Dreiecksmatrix

$$A_2 = \begin{bmatrix} n+1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2/3 c_0 n_{c,0}^{2/3} & n+4/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3u_{c,0}^2 a_{1,0} & 3n+13/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -a'_{1,0} n_{c,0} u_{c,0}^{1/2} \left(1 + \frac{1}{2} u_{c,0}^{-1} \right) & 0 & 3/2 n + 17/6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 \end{bmatrix}$$

mit nicht negativen Eigenwerten auf der Diagonalen und für eine entsprechende

3. Lösungen des Modells

Funktion F_2 mit den Komponenten

$$t^{2/3} F_{2,s} = -t^{(n+3)/2} d_1 c n_c^{2/3} (u_{s,0} + t^{1/3} \nu_s) (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c)^{1/2} + \frac{1}{t^{n-1}} (d_2 w - t^{n-1} d_{2,0} u_w), \quad (3.37)$$

$$t^{2/3} F_{2,c} = \frac{2}{3} (c n_c^{2/3} (u_{s,0} + t^{1/3} \nu_s) - c_0 u_{s,0} n_{c,0}^{2/3} - t^{1/3} c_0 n_{c,0}^{2/3} \nu_s) - \frac{2}{3} t^{(3n+5)/2} (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c)^{5/2} - \frac{2}{3} t^{(5n+9)/2} a_2 v_t (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c) \quad (3.38)$$

$$\cdot (u_{q,0} + t^{1/3} \nu_q)^{2/3} (u_{n,0} + t^{1/3} \nu_n)^{1/3}, \quad (3.39)$$

$$t^{2/3} F_{2,q} = (a_1 (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c) - a_{1,0} u_{c,0}^3 - t^{1/3} 3a_{1,0} u_{c,0}^2) + t^{n+2} a_2 v_t (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c)^{3/2} (u_{q,0} + t^{1/3} \nu_q)^{2/3} (u_{n,0} + t^{1/3} \nu_n)^{1/3} - t h^{-1} v_q (u_{q,0} + t^{1/3} \nu_q), \quad (3.40)$$

$$t^{2/3} F_{2,n} = (a'_1 n_c (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c)^{3/2} - a'_{1,0} n_{c,0} u_{c,0}^{3/2}) \quad (3.41)$$

$$- t^{1/3} a'_{1,0} n_{c,0} u_{c,0}^{1/2} \left(1 + \frac{1}{2} u_{c,0}^{-1}\right) - t h^{-1} v_n (u_{n,0} + t^{1/3} \nu_n), \quad (3.42)$$

$$F_{2,p} = t^{1/3} f_p, \quad (3.43)$$

$$F_{2,T} = t^{1/3} f_T, \quad (3.44)$$

wobei f_p und f_T aus den Gleichungen (3.2e) und (3.2f) gemeint sind. Die rechte Seite $F_2(\nu, t)$ ist Lipschitz-stetig in ν , da komponentenweise $u(0) > 0$ gilt. An dieser Stelle substituieren wir $t = s^3$ und erhalten so die Identität (3.20) mit

$$A = 3 A_2, \quad F = 3 F_2(\nu, s^3).$$

Die ausführliche Rechnung zur zweiten Komponente von Gleichung (3.20) findet sich im Anhang A.6.

Es bleibt die Existenz einer eindeutig bestimmten Lösung des Anfangswertproblems (3.20) zu zeigen. Dazu definieren wir den Integraloperator

$$H[x] = \int_0^1 s^{A-I} x(st) ds, \quad (3.45)$$

den wir komponentenweise verstehen wollen, wobei I die Einheitsmatrix im Raum der 6×6 -Matrizen bezeichnet. Die Funktion $\nu = H[x]$ ist die Lösung der linken

3. Lösungen des Modells

Seite

$$\left(t \frac{d}{dt} + A\right) \nu = x \quad (3.46)$$

von (3.20) mit $x(0) = 0$, vorausgesetzt, dass $x = O(t)$ in der Nähe von $t = 0$ gilt. Eine Rechnung dazu findet sich im Anhang A.5. Definieren wir des Weiteren den Operator

$$x \mapsto G_1[x] := tF(H[x]), \quad (3.47)$$

so stellen wir fest, dass x genau dann ein Fixpunkt von G_1 ist, wenn $\nu = H[x]$ das Anfangswertproblem (3.20) löst. Denn sei x einerseits ein Fixpunkt von G_1 , so ist

$$\left(t \frac{d}{dt} + A\right) H[x] = x = tF(H[x]).$$

Umgekehrt sei ν eine Lösung von (3.20), so ist

$$x = \left(t \frac{d}{dt} + A\right) \nu = tF(\nu) = tF(H[x]).$$

Daher bleibt lediglich zu zeigen, dass G eine Kontraktion auf

$$\mathcal{X} = \{(\nu, p, T) \in C([0, (t_0')^{1/3}], \mathbb{R}^6) : p(0) = p_0, T(0) = T_0, \nu(0) = 0\}$$

bezüglich der natürlichen Metrik gegeben durch die Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{X}}$ ist. Man kann sich leicht überzeugen, dass $H[x]$ komponentenweise Lipschitz-stetig in x ist bezüglich der Supremumsnorm $\|\cdot\|$ auf dem Zeitintervall $[0, (t_0')^{1/3}]$. Wir können daher immer ein $L_H > 0$ so groß wählen, dass

$$\|H[x_1] - H[x_2]\|_{\mathcal{X}} \leq L_H \|x_1 - x_2\|_{\mathcal{X}}$$

für $x_1, x_2 \in \mathcal{X}$. Die obere Intervallgrenze $t_0 > 0$ wurde so klein gewählt, dass auch $F(\nu)$ komponentenweise Lipschitz-stetig ist bezüglich $\|\cdot\|_{\mathcal{X}}$. Deshalb können wir immer ein $L_F > 0$ so groß wählen, dass

$$\|F(\nu_1) - F(\nu_2)\|_{\mathcal{X}} \leq L_F \|\nu_1 - \nu_2\|_{\mathcal{X}}$$

für $\nu_1, \nu_2 \in \mathcal{X}$. Insgesamt folgt

$$\begin{aligned} \|G[x_1] - G[x_2]\| &= t_0 \|F(H[x_1]) - F(H[x_2])\| \\ &\leq t_0 L_F \|H[x_1] - H[x_2]\| \\ &\leq t_0 L_F L_H \|x_1 - x_2\|. \end{aligned}$$

Somit haben wir gezeigt: G ist eine Kontraktion für eine genügend kleine Wahl von $t_0 < \frac{1}{L_F L_H}$. Man kann daher den Fixpunktsatz von Banach anwenden um zu überprüfen, dass G einen eindeutigen Fixpunkt besitzt. Mit anderen Worten, das Anfangswertproblem (3.12) hat in diesem Fall eine eindeutige Lösung zusammengesetzt aus den Bestandteilen (3.17), (3.18) und (3.19).

3. Lösungen des Modells

Es bleiben noch die nominell leichteren Fälle zu zeigen. Die Strategie ändert sich dabei nicht, lediglich die führenden Ordnungen der Zeit und die weiteren Aufteilungen der Lösungen haben eine etwas andere Gestalt. Sie können jedoch immer auf ein System im Sinne von Schritt (iii) zurückgeführt werden, dessen Lösung wir soeben gezeigt haben.

Den Fall $q_{s,0} > 0$ haben wir bereits mit der Diskussion des Wertes $u_{s,0}$ in Gleichung (3.21) für den Fall $n = 0$ angeschnitten. Daher ist in unserer bisherigen Notation $q_s = u_s$, das heißt, es gibt keine echte führende Ordnung der Zeit und wir können den Schritt (i) überspringen. Eine Aufteilung im Sinne von Schritt (ii) findet sich durch

$$\begin{aligned} q_s &= q_{s,0} + t^{1/3} \nu_s, \\ \nu_s &= t^{2/3} \int_0^1 f_s(st) ds. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Auch die Anfangsbedingung $\nu_s(0) = 0$ ist gegeben. Die erste Komponente des Systems in Schritt (iii) ist dann

$$t\dot{\nu}_s + \frac{1}{3}\nu = t^{2/3} f_s(t).$$

Der Fall $q_{r,0} > 0$ und $n_{r,0} > 0$ beeinflusst die führenden Zeitordnungen von q_s und q_c nicht, wie sich leicht nachvollziehen lässt, da wir ihre führenden Ordnungen für diese Berechnung nicht verwendet haben. Schritt (ii) gestaltet sich wie folgt:

$$\begin{aligned} q_r &= q_{r,0} + t^{1/3} \nu_q, & \nu_q &= t^{2/3} \int_0^1 f_q(st) ds, \\ n_r &= q_{r,0} + t^{1/3} \nu_n, & \nu_n &= t^{2/3} \int_0^1 f_n(st) ds. \end{aligned}$$

Daraus lassen sich die Anfangswerte $\nu_q(0) = \nu_n(0) = 0$ erschließen. Eine kurze Rechnung ergibt, dass in diesem Fall

$$\begin{aligned} t^{2/3} F_{2,c} &= \frac{2}{3} \left(cn_c^{2/3} \left(u_{s,0} + t^{1/3} \nu_s \right) - c_0 u_{s,0} N_0^{2/3} - t^{1/3} c_0 N_0^{2/3} \nu_s \right) \\ &\quad - \frac{2}{3} t^{(3n+5)/2} \left(u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c \right)^{5/2} \\ &\quad - \frac{2}{3} t^{(3n+3)/2} a_2 v_t \left(u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c \right) \left(u_{q,0} + t^{1/3} \nu_q \right)^{2/3} \left(u_{n,0} + t^{1/3} \nu_n \right)^{1/3}. \end{aligned}$$

Die Schritte (iii) und (iv) sind anschließend analog zu dem von uns zuerst behandelten Fall mit zu ersetzenden Einträgen der Matrix A_2 und der rechten Seite F_2 entsprechend dem erneut diskutierten Schritt (ii). Wir finden dementsprechend für die gegebenen Anfangswerte eine physikalisch konsistente Lösung von (3.1). Darüber hinaus ist y komponentenweise positiv in $(0, (t'_0)^{1/3})$.

3. Lösungen des Modells

Wenden wir uns den außer Acht gelassenen Fällen mit einem Anfangswert $q_{c,0} > 0$ zu. Die Komponente q_s kann für $q_{s,0} > 0$ wie in Gleichung (3.48) behandelt werden. Ist $q_{s,0} = 0$, ergibt sich in Schritt (i) dieselbe führende Ordnung der Zeit wie in Gleichung (3.17). Eine kurze Rechnung zeigt, dass sich auch eine Zerlegung für Schritt (ii) findet ohne echte führende Ordnung der Zeit für q_c . Eine Zerlegung für die q_c Komponente selbst findet sich via

$$\begin{aligned} q_c &= q_{c,0} + t^{1/3} \nu_c, \\ \nu_c &= t^{2/3} \int_0^1 f_c(st) ds, \end{aligned}$$

denn die rechte Seite f_c aus Gleichung (3.2b) ist Lipschitz-stetig in q_c auf dem Zeitintervall $[0, t_1)$, da $q_{c,0} > 0$ ist, und wir finden diese Integraldarstellung im Sinne des Picard-Lindelöf-Theorems.

Unsere frühere Einteilung in kritische und unkritische Anfangswerte ergibt, dass die Anfangswerte $q_{r,0} > 0$ und $n_{r,0} > 0$ in diesem Fall unkritisch sind. Die Eindeutigkeit der Lösung folgt geradewegs mit Anwendung des Picard-Lindelöf-Theorems. Diskutieren wir daher die kritischen Anfangswerte $q_{r,0} = n_{r,0} = 0$. In der Nähe von $t = 0$ finden wir die Lösung wie in den Gleichungen (3.25) und (3.26) mit Variation der Konstanten. In diesem Fall hat q_c eine andere Ordnung, deshalb folgt mit Taylor-Reihenentwicklungen der involvierten Exponentialfunktionen und mit der Abschätzung (3.6), dass

$$n_r = t u_n, \quad u_{n,0} = a'_{1,0} n_{c,0} q_{c,0}.$$

Hinsichtlich q_r summieren wir erneut die Systemkomponenten (3.2b) und (3.2c) zu Gleichung (3.28). Mit der daraus folgenden Gleichung (3.29) halten wir vorläufig fest, dass

$$q_r(t) = O(t^{n+1}) \quad \text{für} \quad t \rightarrow 0 \quad (3.49)$$

folgt. Weiterhin ist

$$q_r(t) \leq \int_0^t \left(a_1(\tau) q_c^2(\tau) + a_2(\tau) v_t(\tau) q_c(\tau) q_r^{2/3}(\tau) n_r^{1/3}(\tau) \right) d\tau.$$

Zusammen mit den zuvor gezeigten Asymptoten und mit der vorläufigen Asymptote (3.49) impliziert dies

$$q_r(t) \leq a_{1,0} q_{c,0}^2 t + O(t^2), \quad t \rightarrow 0.$$

Setzen wir dies zurück in (3.2c) ein und benutzen $q_{s-} = 0$, so erhalten wir die untere Schranke

$$q_r(t) \geq \int_0^t \left(a_1(\tau) q_c^2(\tau) - h^{-1}(\tau) v_q(\tau) q_r(\tau) \right) d\tau \geq a_{1,0} q_{c,0}^2 t - O(t^2), \quad t \rightarrow 0,$$

3. Lösungen des Modells

und somit die Aufteilung von q_r in die führende Ordnung der Zeit und eine geeignete Funktion $u_q \in C([0, t_1], \mathbb{R}_+)$ mit

$$q_r = tu_q, \quad u_{q,0} = a_{1,0}q_{c,0}^2.$$

Es finden sich dementsprechend andere führende Ordnungen der Zeit für q_r und n_r als wir sie in Schritt (i) in Gleichung (3.18) für den Anfangswert $q_{c,0} = 0$ gesehen haben.

Die Zerlegung für Schritt (ii) können wir mit den bekannten Mitteln zur Abschätzung der Koeffizienten a_1 , a'_1 und von n_c aus den Bemerkungen 3.5 und 3.6 nachrechnen, es ist

$$\begin{aligned} q_r(t) &= \int_0^t \left[a_1(\tau)u_c^3(\tau) \right. \\ &\quad \left. + \tau a_2(\tau)v_t(\tau)u_c^{3/2}(\tau)u_q^{2/3}(\tau)u_n^{1/3}(\tau) + \tau h^{-1}(\tau)v_q(\tau)u_q(\tau) \right] d\tau \\ &= t \left(\int_0^1 a_{1,0}u_{c,0}^3 ds + t^{1/3} \left(\int_0^1 s^{1/3} 3 a_{1,0}u_{c,0}^2 \nu_c(st) ds \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \int_0^1 \left[\left(s^{2/3}t^{1/3} 3 a_{1,0}u_{c,0} \nu_c^2(st) + st^{2/3} a_{1,0} \nu_c^3(st) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + t^{-1/3} (a_1(st) - a_{1,0}) \left(u_{c,0} + (st)^{1/3} \nu_c(st) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + t^{2/3} s a_2(st) v_t(st) u_c^{3/2}(st) u_q^{2/3}(st) u_n^{1/3}(st) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + t^{2/3} s h^{-1}(st) v_q(st) u_q(st) \right] ds \right) \right) \\ &= t \left(u_{q,0} + t^{1/3} \nu_q \right) \end{aligned}$$

3. Lösungen des Modells

und

$$\begin{aligned}
n_r(t) &= \int_0^t [a'_1(\tau)n_c(\tau)u_c(\tau) - \tau h^{-1}(\tau)v_n(\tau)u_n(\tau)] d\tau \\
&= t \left(\int_0^1 a'_{1,0}n_{c,0}u_{c,0}^{3/2} ds + t^{1/3} \left(\int_0^1 s^{1/3}a_{1,0}n_{c,0}u_{c,0}^{1/2}\nu_c(st) ds \right. \right. \\
&\quad + \int_0^1 \left[t^{-1/3}(a'_1(st) - a'_{1,0})n_c(st) \left(u_{c,0} + (st)^{1/3}\nu_c(st) \right)^{3/2} \right. \\
&\quad + t^{-1/3}a'_{1,0}(n_c(st) - n_{c,0}) \left(u_{c,0} + (st)^{1/3}\nu_c(st) \right)^{3/2} \\
&\quad + s^{1/3}a'_{1,0}n_{c,0}\nu_c(st) \left(\left(u_{c,0} + (st)^{1/3}\nu_c(st) \right)^{1/2} - u_{c,0}^{1/2} \right) \\
&\quad + t^{-1/3}a'_{1,0}n_{c,0}u_{c,0} \left(\left(u_{c,0} + (st)^{1/3}\nu_c(st) \right)^{1/2} - u_{c,0}^{1/2} - (st)^{1/3} \frac{1}{2} \frac{\nu_c(st)}{u_{c,0}^{1/2}} \right) \\
&\quad \left. \left. - t^{2/3}sh^{-1}(st)v_n(st)u_n(st) \right] ds \right) \\
&= t \left(u_{n,0} + t^{1/3}\nu_n \right),
\end{aligned}$$

denn mit Bemerkung 3.9 zeigt sich

$$\begin{aligned}
\left(u_{c,0} + t^{1/3}\nu_c \right)^{1/2} - u_{c,0}^{1/2} &= O(t^{1/3}), \\
\left(u_{c,0} + t^{1/3}\nu_c \right)^{1/2} - u_{c,0}^{1/2} - t^{1/3} \frac{1}{2} \nu_c u_{c,0}^{-1/2} &= O(t^{2/3}).
\end{aligned}$$

Nun kann man leicht das System so zusammenstellen, dass man eine Darstellung im Sinne der Gleichung (3.20) bekommt. Mit Schritt (iv) folgt die Behauptung auch für diesen Fall. \square

In [22] findet man Theorem 3.10 anhand der Fallunterscheidung $q_{c,0} = 0$ und $q_{c,0} > 0$ aufgeteilt in zwei Theoreme. Der Beweis des aufwändigeren Falls $q_{c,0} = 0$ weicht von unserer Strategie ab.

Bemerkung 3.11. Der Unterschied in der Beweisstrategie zwischen unserem Beweis von Theorem 3.10 und Theorem 3.2 aus [22] beginnt nach der Bestimmung führender Ordnungen der Zeit, wie sie in den Gleichungen (3.17) und (3.18) des Schritt (i) zu sehen ist. Denn in [22] wird anschließend ein System aus den so gefundenen Größen u_s , u_c , u_q und u_n zusammen mit den thermodynamischen Größen p und T in einem genügend kleinen Zeitintervall $[0, t_0]$ für ein $t_0 > 0$ und in einem genügend schmalen abgeschlossenen Quader $\Omega \subset \mathbb{R}_+^6$, welcher die Anfangswerte $u_0 = (u_{s,0} \ u_{c,0} \ u_{q,0} \ u_{n,0} \ p_0 \ T_0)^T$ enthält, untersucht. Es kann ein äquivalentes System aus Integralgleichungen

$$u = \Phi(u)$$

3. Lösungen des Modells

aufgestellt werden, mit $u = (u_s \ u_c \ u_q \ u_n \ p \ T)^T$. Diese Integralgleichung bildet den Raum

$$\mathcal{X}_0 = \left\{ u \in C([0, t_0], \Omega) : u(0) = u_0 \right\}$$

in sich selbst ab, sofern $t_0 > 0$ klein genug und der Quader Ω schmal genug sind. Des Weiteren gilt die komponentenweise Ungleichung

$$\begin{bmatrix} \|\Phi_s(\tilde{u}) - \Phi(u)\| \\ \|\Phi_c(\tilde{u}) - \Phi(u)\| \\ \|\Phi_q(\tilde{u}) - \Phi(u)\| \\ \|\Phi_n(\tilde{u}) - \Phi(u)\| \\ \|\Phi_p(\tilde{u}) - \Phi(u)\| \\ \|\Phi_T(\tilde{u}) - \Phi(u)\| \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} L & L & Lt_0 & Lt_0 & 0 & 0 \\ L & L & L & Lt_0 & Lt_0 & Lt_0 \\ L & L & 0 & L & Lt_0 & Lt_0 \\ L & L & 0 & L & Lt_0 & Lt_0 \\ Lt_0 & Lt_0 & 0 & Lt_0 & 0 & 0 \\ Lt_0 & Lt_0 & Lt_0 & Lt_0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|\tilde{u}_s - u_s\| \\ \|\tilde{u}_c - u_c\| \\ \|\tilde{u}_q - u_q\| \\ \|\tilde{u}_n - u_n\| \\ \|\tilde{p} - p\| \\ \|\tilde{T} - T\| \end{bmatrix}.$$

Wir nennen die Matrix der rechten Seite kurz A_{t_0} . Der Beweis wird vervollständigt, indem ein eindeutiger Fixpunkt im vollständigen metrischen Raum \mathcal{X}_0 , ausgestattet mit der natürlichen Metrik gegeben durch die Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{X}}$ auf dem Raum $\mathcal{X} = C([0, t_0], \mathbb{R})$, gefunden wird. Φ ist Lipschitz-stetig, jedoch im Allgemeinen keine Kontraktion. Für die mehrfache Anwendung Φ^4 der Integralgleichung gilt andererseits

$$\|\Phi^4(\tilde{u}) - \Phi^4(u)\|_{\mathcal{X}} \leq \|A_{t_0}^4\|_{\infty} \|\tilde{u} - u\|_{\mathcal{X}}$$

mit der Zeilensummennorm $\|\cdot\|_{\infty}$. Der Wert $\|A_{t_0}^4\|_{\infty}$ wird kleiner als eins, wenn man t_0 klein genug wählt. Deshalb kann der Fixpunktsatz von Weissinger, vergleiche [52], angewendet werden um zu zeigen, dass Φ einen eindeutigen Fixpunkt in \mathcal{X}_0 besitzt.

Die nun bewiesenermaßen eindeutige physikalische Lösung von (3.12) für gegebene Anfangswerte können wir mit klassischer Picard-Lindelöf-Theorie, siehe [47], bis zu dem Punkt fortsetzen, an dem die Trajektorie der Lösung den Rand des entsprechenden Gebiets, in welchem die rechte Seite von (3.1) wohldefiniert und Lipschitz-stetig ist, kreuzt. Diese Lösung endet erst an jenem Punkt, an dem eine der Komponenten q_v , q_c , q_r oder n_r null wird, falls sie überhaupt endet, da alle Komponenten der Lösung beschränkt sind. Wie bereits erwähnt, kann die Komponente q_v nicht null werden, weil q_{vs} stets positiv ist und da $\dot{q}_v > 0$ wann immer $q_{vs} > q_v > 0$, siehe Gleichung (3.2a). An einer Nullstelle von q_c können wir die Lösung mit dem vorangegangenen Theorem 3.10 eindeutig auf physikalisch konsistente Weise fortsetzen. Es bleiben daher die Fälle zu betrachten, in denen die Komponenten q_r oder n_r eine Nullstelle haben. Denn existieren nur gemeinsame Nullstellen von q_r und n_r , können wir ebenfalls mit Theorem 3.10 die Lösung fortsetzen.

Satz 3.12. *Sei y eine zulässige Lösung des Anfangswertproblems (3.1) in einem offenen Zeitintervall $\mathcal{I} = (t'_0, t_0) \subset \mathbb{R}_{>0}$. Falls die Komponente $q_r(t) > 0$ für $t \in \mathcal{I}$*

3. Lösungen des Modells

und $q_r(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow 0$, oder falls $n_r(t) > 0$ für $t \in \mathcal{I}$ und $n_r(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow 0$, lässt sich die Lösung stetig nach $t = t_0$ fortsetzen, mit

$$q_r(t_0) = n_r(t_0) = q_c(t_0) = 0 \quad \text{und} \quad y(t_0) \leq 0.$$

Zusätzlich ist $q_c(t) > 0$ in der Nähe von t_0 mit $t < t_0$.

Beweis. Wie zuvor in Abschnitt 3.1 gesehen, sind alle Komponenten der zulässigen Lösung nach oben beschränkt in (t'_0, t_0) . Die rechte Seite (3.2a) bis (3.2f) mit der möglichen Ausnahme (3.2d) ist daher ebenfalls beschränkt. Es folgt, dass q_s , q_c , q_r , p und T Lipschitz-stetige Funktionen in (t'_0, t_0) sind und sich deshalb bis $t = t_0$ stetig fortsetzen lassen.

Betrachten wir zunächst den Fall, dass $n_r > 0$ und $n_r(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow t_0$. Angenommen $q_r \neq 0$, dann existiert ein $\delta > 0$ und ein Teilintervall $[t''_0, t_0) \subset \mathcal{I}$ so, dass $q_r \geq \delta$. Die rechte Seite (3.2d) gibt uns die Ungleichung

$$E \leq \frac{\dot{n}_r}{n_r} q_r + h^{-1} v_n q_r.$$

Fügen wir dies in (3.2c) ein, schließen wir, dass

$$\frac{\dot{q}_r}{q_r} \leq \frac{\dot{n}_r}{n_r} + \frac{\alpha_n - \alpha_q}{\alpha} v_t + a_1 \frac{q_c^2}{q_r} + a_2 v_t q_c \left(\frac{n_r}{q_r} \right)^{1/3}$$

in $[t''_0, t_0)$. Es impliziert, dass

$$\log \frac{n_r(t)}{n_r(t''_0)} \geq \log \frac{q_r(t)}{q_r(t''_0)} - \int_{t''_0}^t \left(\frac{\alpha_n - \alpha_q}{\alpha} v_t + a_1 \frac{q_c^2}{q_r} + a_2 v_t q_c \left(\frac{n_r}{q_r} \right)^{1/3} \right) d\tau$$

für alle $t \in (t''_0, t_0)$. Da q_r nach unten beschränkt ist durch δ , bleibt die rechte Seite beschränkt, wenn $t \rightarrow t_0$, wohingegen die linke Seite dieser Ungleichung gegen $-\infty$ strebt. Dieser Widerspruch zeigt $q_r(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow t_0$.

Als Nächstes betrachten wir den Fall, dass $q_r(t) > 0$ in \mathcal{I} ist, mit $q_r(t) \rightarrow 0$ während $t \rightarrow t_0$. Sei $n_r(t) \geq \delta$ für ein $\delta > 0$ und für alle $t \in [t''_0, t_0)$, wobei $t'_0 \leq t''_0 < t_0$. Wenn wir (3.2c) durch

$$E \leq \dot{q}_r + h^{-1} v_q q_r$$

abschätzen und in (3.2d) einsetzen, erhalten wir die Ungleichung

$$\frac{\dot{n}_r}{n_r} \leq \frac{\dot{q}_r}{q_r} + \frac{\alpha_q - \alpha_n}{\alpha} v_t + a'_1 n_c \frac{q_c}{n_r}.$$

Integrieren wir diese von t''_0 nach $t \in (t''_0, t_0)$, dann schließen wir, dass

$$\log \frac{q_r(t)}{q_r(t''_0)} \geq \log \frac{n_r(t)}{n_r(t''_0)} - \int_{t''_0}^t \left(\frac{\alpha_q - \alpha_n}{\alpha} v_t + a'_1 n_c \frac{q_c}{n_r} \right) d\tau.$$

3. Lösungen des Modells

Die rechte Seite dieser Ungleichung bleibt beschränkt, während die linke Seite gegen $-\infty$ strebt, wenn $t \rightarrow t_0$. Dies ist ein Widerspruch zu unseren Annahmen, was bedeutet, es existiert eine Folge $(t_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset (t'_0, t_0)$ mit $t_k \rightarrow t_0$ und $n_r(t_k) \rightarrow 0$. Daher folgt aus (3.9), dass

$$n_r(t) \leq n_r(t_k) + \int_{t_k}^t a'_1 n_c q_c d\tau, \quad t_k \leq t < t_0.$$

Da der Integrand beschränkt ist,

$$\limsup_{t \rightarrow t_0} n_r(t) \leq 0$$

und da n_r nicht negativ ist, folgt, dass $n_r(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow t_0$.

Abschließend betrachten wir q_c und nehmen zunächst an, der Limes $q_c(t_0)$ wäre positiv. Dann ist $\dot{q}_r > 0$ in der Nähe von $t = t_0$, das heißt, q_r ist streng monoton steigend im Widerspruch zum bereits Gezeigten. Daher ist $q_c(t_0) = 0$. Als Nächstes nehmen wir an, dass $q_c(t) = 0$ für alle $t \in [t''_0, t_0]$ mit $t''_0 \in (t'_0, t_0)$. Die rechten Seiten der Differentialgleichungen von q_r und n_r vereinfachen sich dann zu

$$\begin{aligned} f_q &= E - S, \\ f_n &= E' - S' \end{aligned} \tag{3.50}$$

in $[t''_0, t_0)$. Der Wert t''_0 kann so nahe an t_0 gewählt werden, dass weder q_r noch n_r eine Nullstelle im Intervall besitzen. Wir folgern daher aus (3.50), dass

$$\frac{\dot{n}_r}{n_r} = \frac{\dot{q}_r}{q_r} + \frac{\alpha_q - \alpha_n}{\alpha} v_t$$

und in integrierter Form

$$\log \frac{n_r(t)}{n_r(t''_0)} = \log \frac{q_r(t)}{q_r(t''_0)} + \int_{t''_0}^t \frac{\alpha_q - \alpha_n}{\alpha} v_t d\tau, \quad t''_0 < t < t_0.$$

Der Integrand ist beschränkt, daher existiert eine Konstante $C > 0$ und wir können

$$n_r(t) \leq C q_r(t)$$

mit $t''_0 \leq t < t_0$ abschätzen. Anhand von Gleichung (2.23) bedeutet das auch

$$d\rho \left(a_E q_r^{1/3} n_r^{2/3} + b_E v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2} \right) \leq C' q_r$$

für eine weitere Konstante $C' > 0$, und es folgt

$$\dot{q}_r \geq -(C' |q_{s,-}| + h^{-1} v_q) q_r$$

in $[t''_0, t_0)$, woraus wir wiederum

$$\log \frac{q_r(t)}{q_r(t''_0)} \geq - \int_{t''_0}^t (C' |q_{s,-}| + h^{-1} v_q) d\tau$$

3. Lösungen des Modells

folgern. Das resultiert im angestrebten Widerspruch für $t \rightarrow 0$, denn das Integral auf der rechten Seite ist beschränkt. Dies zeigt, $q_c(t)$ ist positiv für t in der Nähe von t_0 mit $t < t_0$.

Da $q_c \rightarrow 0$ für $t \rightarrow t_0$, ist notwendigerweise $q_s(t_0) \leq 0$, da sonst der dominante Term der rechten Seite von (3.2b) durch $cq_s n_c q_c^{1/3} > 0$ für t nahe genug an t_0 gegeben wäre. Dies würde bedeuten, q_c ist streng monoton steigend in der Nähe von $t = t_0$. □

Infolgedessen stellen wir fest, dass das Anfangswertproblem (3.1) zu allen Zeiten eine eindeutige physikalisch konsistente Lösung besitzt. Der Beweis von Theorem 3.10 hat uns zusätzlich einige Eigenschaften der physikalisch konsistenten Lösung im Fall einer entstehenden Wolke gezeigt. Zum einen kennen wir daher die führenden Ordnungen der Zeit derjenigen Lösungskomponenten mit kritischen Anfangswerten. Der Zusammenhang der Zeitordnungen k_x , $x \in \{s, c, q, n\}$, ist dabei für eine analytische Vertikalgeschwindigkeit w mit führender Ordnung k_w wie folgt:

$$k_s = k_w + 1, \tag{3.51}$$

$$k_c = \frac{3k_s + 3}{2} = \frac{3}{2}(k_w + 2), \tag{3.52}$$

$$k_q = 2k_c + 1 = 3k_s + 4, \tag{3.53}$$

$$k_n = k_c + 1 = \frac{3k_s + 5}{2}. \tag{3.54}$$

Dabei bezeichnet k_s die führende Ordnung von q_s , k_c die Ordnung von q_c , k_q diejenige von q_r und k_n die führende Ordnung von n_r . Ein entsprechendes Verhalten werden wir in unseren numerischen Experimenten im Falle von entstehenden Wolken wiederfinden. Für verschwindende Wolken lässt der Beweis leider keine konstruktive Aussage über solche Ordnungen zu.

Zum anderen wechseln wir für die Untersuchung der Wolkentropfenmasse q_c im Laufe des Beweises häufiger zur in Gleichung (3.22) neu eingeführten Größe x_c .

Bemerkung 3.13. Die Größe x_c entspricht der Oberfläche mittlerer Wolkentropfen, denn die Masse der Tropfen ist über die Gleichung (2.1) direkt vom Radius r abhängig. Da in unserem Modell die mittlere Masse eines Wolkentropfens durch den Zusammenhang (2.21) zwischen der Masse q_c und Anzahl n_c errechnet werden kann, gilt die Identität

$$r = \tilde{K} q_c^{1/3}, \quad \tilde{K} = \left(\frac{3}{4\pi\rho_l n_c} \right)^{1/3}.$$

In der anfänglichen Herleitung der Wolkenprozesse haben wir bereits häufiger implizit angenommen, dass die Anzahl der Wolkentropfen n_c meist konstant ist. Dies trifft für unsere algebraische Bedingung (2.37) insbesondere für kleine und große Werte von q_c zu. Machen wir an dieser Stelle ebenfalls diese Annahme,

3. Lösungen des Modells

entspricht $q_c^{1/3}$ dem Radius r eines mittleren Wolkentropfens bis auf eine Konstante \tilde{K} . Das bedeutet für die Hilfsgröße x_c aus Gleichung (3.22), dass sie sich von der Oberfläche O eines mittleren Wolkentropfens mit

$$O = K x_c, \quad K = 4\pi \tilde{K}^2,$$

lediglich um die Konstante K unterscheidet.

Ist die Sättigung konstant, wächst die Tropfenoberfläche nahezu linear, denn betrachtet man nur den Prozess mit führender Ordnung der Zeit, nämlich die Kondensation, in der Differentialgleichung (3.23), dann ist die Ableitung von x_c konstant. Trotz dieser Bedeutung von x_c ist ein vollständiger Wechsel zu dieser Größe nicht für alle Fälle sinnvoll. Man beachte die folgende Bemerkung.

Bemerkung 3.14. Im Fall von verschwindenden Wolken sind die Lösungen von (3.23) und (3.2b) im Allgemeinen nicht mehr äquivalent.

Beweis. Angenommen $q_s < 0$, das heißt, die Luft ist untersättigt und Wolken verschwinden. Außerdem sind $q_r \geq 0$ und $n_r \geq 0$. Sind nun $q_c = x_c = 0$, so ist einerseits $\dot{x}_c = \frac{2}{3} c n_c^{2/3} q_s < 0$, wogegen andererseits $\dot{q}_c = 0$ gilt. □

Da es somit zu allen Zeiten eine eindeutige physikalisch konsistente Lösung des Modells gibt, entwickeln wir im Folgenden ein adäquates numerisches Schema, welches die Entropie-Bedingung (3.3) erfüllt und auf dessen Grundlage wir anschließend eine entsprechende Simulationssoftware erstellen können.

3.3. Lösungen der Säule

Das Modell in den unteren Boxen der Säule unterscheidet sich von dem der obersten Box oder einer einzelnen Box hinsichtlich des einfallenden Regens. Daher diskutieren wir an dieser Stelle die Lösungseigenschaften des Anfangswertproblems (3.1), wenn die Komponenten (3.2c) und (3.2d) die zusätzlichen Quellen S_{in} und S'_{in} einfallenden Regens besitzen. Diese sind durch den ausfallenden Regen der Box darüber geben, wie in Abschnitt 2.1.8 angesprochen. Wir betrachten folglich anstatt (3.2c) und (3.2d) die Komponenten

$$f_q = A_1 + A_2 + E - S_{\text{out}} + S_{\text{in}}, \quad (3.55)$$

$$f_n = A'_1 + E' - S'_{\text{out}} + S'_{\text{in}}. \quad (3.56)$$

Für nicht kritische Anfangswerte lassen sich Existenz und Eindeutigkeit der Lösung einer unteren Box in einer Säule nach wie vor mit der Picard-Lindelöf-Theorie [47] beweisen. Sind die Anfangswerte des äquivalenten Anfangswertproblems (3.12) mit den Komponenten (3.10), (3.2b), (3.55), (3.56), (3.2e) und (3.2f) nach Definition 3.7 kritisch, lässt sich mit Hilfe der vorangegangenen Theoreme 3.8 und 3.10 das folgende Theorem formulieren.

3. Lösungen des Modells

Theorem 3.15. *Die Quellen S_{in} und S'_{in} seien im Zeitintervall $[0, t_0]$ als ausfallender Regen der darüber liegenden Box gegeben. Außerdem sei $w(t)$ analytisch für $t \in [0, t_0]$. Dann hat das Anfangswertproblem (3.12) mit den Komponenten (3.10), (3.2b), (3.55), (3.56), (3.2e), sowie (3.2f) für kritische Anfangswerte in dieser Box genau eine physikalisch konsistente Lösung $y(t)$, $t \in [0, t_1]$.*

Beweis. Da S_{in} und S'_{in} aus der Box darüber stammen, können wir annehmen, dass sie konsistent entweder beide positiv sind oder gerade mit einer entsprechenden führenden Ordnung der Zeit aus der Null starten. Sind sie beide gleich null, ist die Aussage bereits durch die Theoreme 3.8 und 3.10 gezeigt.

Wir beschränken uns in diesem Beweis zunächst auf den Fall mit den Anfangswerten

$$q_{s,0} \leq 0, \quad q_{c,0} = 0, \quad q_{r,0} = n_{r,0} = 0,$$

mit $p_0 > 0$ und $T_0 > 0$ wie zu Beginn dieses Kapitels besprochen. Da $w \leq 0$, wird q_s nicht positiv in $(0, t_0)$. Das bedeutet, q_c taucht im Intervall $(0, t_0)$ nicht auf. Die übrigen Komponenten lösen daher das reduzierte System (3.13) mit

$$S = S_{\text{out}} - S_{\text{in}}, \quad S' = S'_{\text{out}} - S'_{\text{in}}.$$

Es lassen sich zwei Fälle für den einfallenden Regen unterscheiden:

- (a) Entweder sind S_{in} und S'_{in} bereits positiv.
- (b) oder sie werden gerade positiv mit führender Ordnung der Zeit

$$\begin{aligned} S_{\text{in}} &= t^m t^{3n+4} u_{\text{in}}, \\ S'_{\text{in}} &= t^m t^{(3n+5)/2} u'_{\text{in}}, \end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned} S_{\text{in}} &= t^m u_{\text{in}}, \\ S'_{\text{in}} &= t^m u'_{\text{in}}, \end{aligned}$$

für ein $m \in \mathbb{N}$ und mit der führenden Ordnung $n - 1$ der Vertikalgeschwindigkeit w aus Gleichung (3.14).

In beiden Fällen lässt sich die Vier-Schritte-Strategie aus dem Beweis von Theorem 3.10 durchführen. Wir zeigen an dieser Stelle jedoch nur den Fall (a), da beide Fälle analog zu zeigen sind mit jeweils entsprechenden führenden Ordnungen der Zeit. Wie im Beweis von Theorem 3.10 sind die folgenden vier Schritte zu zeigen:

- (i) q_s , q_r und n_r lassen sich schreiben als

$$q_s = t^n u_s, \quad q_r = t u_q, \quad q_r = t u_n. \quad (3.57)$$

Für $t \in [0, t_1)$ mit einem $t_1 > 0$ sind u_s , u_q , $u_n \in C^1(0, t_1) \cap C([0, t_1))$ mit strikt positiven Werten für $t = 0$.

3. Lösungen des Modells

- (ii) Die so definierten Funktionen und Faktoren der Lösung $u = (u_s \ u_q \ u_n)^T$ haben komponentenweise die Struktur

$$u = u_0 + t^{1/3}\nu_1$$

mit $u_0 = u(0)$ für geeignete Funktionen $\nu_1 = (\nu_s \ \nu_q \ \nu_n)^T$ mit $\nu_s, \nu_q, \nu_n \in C^1(0, t_2) \cap C([0, t'_0])$ für ein kleines $t_2 > 0$ und mit $\nu_1(0) = 0$.

- (iii) Für $\nu = (\nu_1, \nu_p, \nu_T)^T$ mit ν_p aus (3.15) und ν_T aus (3.16) gilt die Gleichung vom Fuchs-Typ (siehe [26])

$$t\dot{\nu} + A\nu = tF(\nu, t) \tag{3.58}$$

für ein $t \in (0, t_2^{1/3})$, eine untere Dreiecksmatrix A und eine in ν Lipschitz-stetige Funktion F .

- (iv) Das System (3.58) hat eine eindeutige Lösung mit den Anfangswerten $\nu(0) = 0$.

Beginnen wir mit Schritt (i). Die rechte Seite der Sättigungskomponente ist Lipschitz-stetig bezüglich q_s . Sind die Lösungen der anderen Komponenten gegeben, hat diese Komponente eine eindeutige Lösung mit $q_s(0) = q_{s,0}$. Mit Hilfe von Trennung der Variablen und einer Taylor-Reihenentwicklung lässt sich daher die Zerlegung

$$q_s = t^n u_s$$

mit $u_s(0)$ wie in Gleichung (3.21) finden.

Hinsichtlich q_r entfallen Autokonversion und Akkreszenz, da q_c nicht auftaucht. Es folgt, dass

$$q_r(t) \leq \int_0^t S_{\text{in}} \, d\tau,$$

wobei wir davon ausgehen, dass die Verdunstung E und die Sedimentation S_{out} negative Vorzeichen haben. Dies impliziert

$$q_r(t) \leq tS_{\text{in},0} + O(t^2), \quad t \rightarrow 0.$$

Bezüglich n_r entfällt die Autokonversion A'_1 , da q_c nicht auftaucht. Wir können daher

$$n_r(t) \leq \int_0^t S'_{\text{in}} \, d\tau$$

abschätzen, denn E' und S'_{out} haben negative Vorzeichen. Daraus folgt

$$n_r(t) \leq tS'_{\text{in},0} + O(t^2), \quad t \rightarrow 0.$$

Setzen wir diese Asymptoten in die q_r -Komponente von (3.13) ein, erhalten wir

$$q_r \geq \int_0^t (E(\tau) - S_{\text{out}}(\tau) + S_{\text{in}}(\tau)) \, d\tau \geq tS_{\text{in},0} - O(t^2)$$

3. Lösungen des Modells

und somit die zweite Gleichung aus (3.57) mit

$$u_q(0) = u_{q,0} = S_{\text{in},0}.$$

Ebenso setzen wir die Asymptoten in die n_r -Komponente von (3.13) ein und erhalten mit

$$n_r \geq \int_0^t (E'(\tau) - S'_{\text{out}}(\tau) + S'_{\text{in}}(\tau)) d\tau \geq tS'_{\text{in},0} - O(t^2)$$

die dritte Gleichung aus (3.57) mit

$$u_n(0) = u_{n,0} = S'_{\text{in},0}.$$

Im Schritt (ii) betrachtet man ein entsprechend kleines Zeitintervall $[0, t_1]$ und einen kompakten Quader $\Omega_1 \subset \mathbb{R}_{<0} \times \mathbb{R}_{>0}^4$ für die Werte von (u_s, u_q, u_n, p, T) . Dies ist analog zu Ω_1 im Beweis von Theorem 3.10. Nachrechnen ergibt an dieser Stelle die verlangte Aufteilung der Systemvariablen.

Die Schritte (iii) und (iv) lassen sich damit ebenfalls analog zum Beweis von Theorem 3.10 durchführen. Ergänzt um die konstante Lösung $q_c = 0$ hat das Anfangswertproblem 3.12 daher in diesem Fall eine eindeutige physikalisch konsistente Lösung.

Alle Fälle weiterer Konstellationen von Anfangswerten lassen sich mit analogen Methoden zum Beweis des gezeigten Falls oder zu den Beweisen der Theoreme 3.8 und 3.10 zeigen. \square

Eine Induktion über alle Boxen der Säule von oben nach unten ergibt, mit den Theoremen 3.8 und 3.10 als Induktionsanfang und mit Theorem 3.15 als Induktionsschritt, die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung y des Anfangswertproblems 3.1 in jeder der Boxen.

4. Numerisches Verfahren und Experimente

In der Meteorologie ist Modellentwicklung in der Regel auch damit verbunden eine Vorhersage machen zu können. Wetterprognosen stützen sich seit der Einführung der numerischen Wettervorhersage fast immer auf Ergebnisse einer Simulationssoftware. Daher werden wir nachstehend für unser Modell adäquate Verfahren von theoretischer Seite diskutieren.

4.1. Numerische Zeitintegration

Haben wir physikalisch konsistente Anfangswerte für die Variablen des Modells (3.1) zum Zeitpunkt $t = 0$, kann eine komplette Wolkenmodell-Säule, wie in Abschnitt 2.4 beschrieben, mit einer gegebenen vertikalen Geschwindigkeit $w > 0$ durch explizites Vorwärtsschreiten in der Zeit t gelöst werden, da es sich, wie zuvor diskutiert, um ein differential-algebraisches System mit Index eins handelt.

Die zeitliche Diskretisierung für die numerische Integration der Zeit unseres Modells orientiert sich an der Zeitskala der Diffusionsprozesse Kondensation (C) und Verdunstung (E, E'), da es ein erklärtes Ziel dieses Modells ist diese numerisch aufzulösen. Im Besonderen gilt es daher, das steile Verhalten (siehe Abbildung 2.1), der Wolkentropfenanzahl n_c zu erfassen. In den folgenden Experimenten wählen wir eine konstante Zeitschrittweite τ im Bereich $0.5 \text{ s} - 1 \text{ s}$. Deshalb können wir an dieser Stelle auch für feine vertikale Diskretisierungen der Säule eine Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) Bedingung [23] einhalten, denn diese bedeutet eine obere Schranke für die Zeitschrittweite $\tau > 0$. Im Kontext dieses Modells soll eine solche Bedingung verhindern, dass die Sedimentation Abschnitte der vertikalen Diskretisierung überspringt. Konkret bedeutet dies, einfallender Regen in eine der vertikal angeordneten Boxen darf diese nicht innerhalb eines Zeitschritts durchqueren, sodass schlussendlich die Flüsse zwischen den Boxen in jedem Fall innerhalb eines Zeitschritts unabhängig von einander bleiben. Da wir in Abschnitt 2.1.8 angenommen haben, dass $v_q > v_t > v_n$, genügt diese obere Schranke der Ungleichung

$$\tau < \min_k \{h/v_q\},$$

mit dem Index k für die, beginnend von oben nach unten nummerierten, vertikal angeordneten Boxen der Säule.

4. Numerisches Verfahren und Experimente

In der vorangegangenen Analyse haben wir nur nicht-negative Lösungen für die Systemgrößen unseres Modells zugelassen. Deshalb haben wir ein Augenmerk darauf, ebenfalls nicht-negative numerische Lösungen zu erhalten. Diese Eigenschaft des numerischen Lösers ist mithin wichtig, um reelle numerische Lösungen garantieren zu können, da die Tropfenvariablen q_c , q_r und n_r in einigen Wolkenprozessen und in unseren Formulierungen der Fallgeschwindigkeiten mit Exponenten zwischen null und eins auftreten. Unser Ansatz wird sein, Quellen und Senken dieser Größen zu trennen und die Senken innerhalb eines Zeitschritts stets vor den Quellen zu berechnen. Außerdem muss die Entropie-Bedingung (3.3) für die Lösung der Komponente q_c im Falle einer sich bildenden Wolke berücksichtigt werden. Es bietet sich an, das Anfangswertproblem (3.1) mit einem semi-impliziten Verfahren zu lösen, welches die Komponente q_c und die Senken der Komponenten q_r und n_r sedimentierender Regentropfen implizit berechnet, während der Rest explizit gelöst wird. Ein solches Verfahren werden wir im folgenden entwickeln und die effektive Lösung der impliziten Gleichungen diskutieren.

4.1.1. Semi-implizites Euler-Schema

Wir lösen die Differentialgleichung (2.36) mit einem Euler-Schema, da es der Lösung im Allgemeinen an Regularität mangelt. Dazu teilen wir die rechte Seite der Differentialgleichung auf, einen Teil lösen wir implizit, während der andere Teil explizit gelöst wird. Der implizite Teil besteht aus der Wolkentropfen-Masse und aus den Senken für Regentropfen-Masse und -Anzahl. Diese Aufteilung gewährleistet

- eine adäquate Aktivierung der Wolkentropfen sobald das System übersättigt und, dass
- alle Wasserkonzentrationen stets nicht negativ sind.

Im Speziellen starten wir von den aktuellen Werten $(q_{v,i} \ q_{c,i} \ q_{r,i} \ n_{r,i} \ p_i \ T_i)^T$ der Näherungslösung des Gleichungssystems (2.36) bis (2.38) in einer gegebenen Box der Luftsäule zu einem Zeitpunkt $t_i = i\tau$. Das heißt, wir lösen

$$q_{r,i+1/2} = q_{r,i} + \tau(E(q_{r,i+1/2}, n_{r,i+1/2}) - S_{\text{out}}(q_{r,i+1/2})), \quad (4.1)$$

$$n_{r,i+1/2} = n_{r,i} + \tau(E'(q_{r,i+1/2}, n_{r,i+1/2}) - S'_{\text{out}}(n_{r,i+1/2})), \quad (4.2)$$

für $q_{r,i+1/2}$ und $n_{r,i+1/2}$, um damit $q_{c,i+1}$ aus

$$q_{c,i+1} = q_{c,i} + \tau(C(q_{c,i+1}) - A_1(q_{c,i+1}) - A_2(q_{c,i+1}, q_{r,i+1/2}, n_{r,i+1/2})) \quad (4.3)$$

zu bestimmen. Abschließend aktualisieren wir die neuen Werte von q_r und n_r mit

$$q_{r,i+1} = q_{r,i+1/2} + \tau(A_1(q_{c,i+1}) + A_2(q_{c,i+1}, q_{r,i+1/2}, n_{r,i+1/2}) + S_{\text{in}}), \quad (4.4)$$

$$n_{r,i+1} = n_{r,i+1/2} + \tau(A'_1(q_{c,i+1}) + S'_{\text{in}}). \quad (4.5)$$

4. Numerisches Verfahren und Experimente

Für die Auswertung der rechten Seiten der jeweiligen Gleichungen (4.1) bis (4.5) verwenden wir außerdem die alten Werte $q_{v,i}$, $n_{r,i}$, ρ_i , p_i , T_i . In (4.4) und (4.5) ist der einfallende Regen der Box mit Index k in Masse

$$S_{k,\text{in}} = \frac{\rho_{k-1}}{\rho_k} S_{k-1,\text{out}} \quad (4.6)$$

und in Anzahl

$$S'_{\text{in}} = \frac{\rho_{k-1}}{\rho_k} S'_{k-1,\text{out}}. \quad (4.7)$$

Dieser einfallende Regen ist durch den ausfallenden Regen der Box darüber mit Index $k - 1$ gegeben. Da wir mit den Änderungsraten S und S' der Konzentrationen q_r und n_r arbeiten, benötigen wir den Faktor $\frac{\rho_{k-1}}{\rho_k}$ um die Sedimentation an die Masse trockene Luft der Box k anzupassen. Bei dieser Methode zur Behandlung des vertikalen Gradienten beziehungsweise der Sedimentation handelt es sich um ein sogenanntes Upwind-Schema, vergleiche [23].

In der numerischen Wettervorhersage werden Höhenlevel traditionell von oben nach unten aufsteigend nummeriert. Die Implementierung des Säulenmodells sollte die Aktualisierungen (4.1) bis (4.5) für alle Boxen gleichzeitig durchführen, sodass für jede individuelle Box die Einflüsse bereitstehen, wenn sie anschließend für die explizite Berechnung der Quellen gebraucht werden. Zusätzlich erlaubt dies eine direkte SIMD-Parallelisierung (englisch: „single instruction, multiple data“) des Säulenmodells.

Sind q_c , q_r und n_r auf dem neuesten Stand, werden der Druck p , die Temperatur T und der Wasserdampf q_v mit einem expliziten Euler-Schritt aktualisiert. Dazu verwenden wir die Größen

$$E = E(q_{r,i+1/2}, n_{r,i+1/2}) \text{ und } C = C(q_{c,i+1}),$$

die in (4.1) respektive (4.3) berechnet wurden. Schließlich werden die algebraischen Bedingungen ρ und n_c aktualisiert und die Höhen der Boxen werden neu aus der Identität

$$h_{k,i+1} = \frac{m_{a,k}}{\rho_{k,i+1} A} \quad (4.8)$$

bestimmt, wobei die Masse m_a der Luft einer Box und die Grundfläche A über alle Zeiten konstant bleiben. Dies gewährleistet den Erhalt der Struktur und Luftmasse innerhalb der Säule. Das heißt, die Sedimentation der Regentropfen kann die Säule als vertikaler Fluss nur am unteren Ende der untersten Box verlassen.

Bemerkung 4.1. Die Veränderung der Boxhöhen hat Auswirkungen auf den Druck und die Temperatur höher gelegener Boxen, denn die Expansionen und Kontraktionen der unteren Boxen bedeuten einen zusätzlichen Antrieb. Alle bis auf die unterste Box erfahren daher eine zusätzliche vertikale Bewegung

$$\Delta w = \frac{h_{k,i+1} - h_{k,i}}{\tau} \quad (4.9)$$

4. Numerisches Verfahren und Experimente

und das bedeutet entsprechende Änderungen des Drucks und der Temperatur anhand der barometrischen Höhenformel (2.34) respektive anhand des trockenadiabatischen Temperaturgradienten (2.35) um

$$\Delta p = -g\rho\Delta w, \quad \Delta T = -\gamma\Delta w.$$

Dieses Update wird als letztes durchgeführt, bevor wir zu einem weiteren Schritt mit Schrittweite τ vorwärts in der Zeit ansetzen, vergleiche Abbildung A.3.

4.1.2. Massenerhaltung des Wassers

Vorausgesetzt, es gibt keinen Einfluss in die Säule (Box) beispielsweise durch einfallenden Regen von oben, dann folgt aus (2.36) und (2.40), dass die totale Wassermasse durch

$$\sum_k m_a(q_v + q_c + q_r) = M_a - R,$$

gegeben ist, wobei M_a die globale Masse des Wassers in der Säule zum Zeitpunkt $t = 0$ darstellt und R die gesamte durch Regen aus der Säule ausgefallene Masse seit dem Beginn, $t = 0$, der Simulation zusammenfasst. Da das semi-implizite Euler-Schema in jeder individuellen Box dieselben Werte der Prozesse A_1 , A_2 , C und E in den verschiedenen Gleichungen benutzt und denselben Ein- und Ausfluss der benachbarten Boxen verwendet, bleibt diese Identität auch in der diskreten Zeitevolution erhalten. In diesem Fall ist R die akkumulierte Summe von $\tau m_a S_{\text{out}}$ der untersten Box der Säule.

4.1.3. Numerische Lösung der gekoppelten Gleichungen (4.1) und (4.2)

Löst man die Gleichung (4.1) nach \bar{E} auf und setzt den resultierenden Ausdruck in (2.27) ein, so folgt aus (4.2), dass

$$\begin{aligned} n_{r,i+1/2} &= n_{r,i} - \frac{1}{m_r} (q_{r,i} - q_{r,i+1/2} - \tau S_{\text{out}}(q_{r,i+1/2})) - \tau S'_{\text{out}}(n_{r,i+1/2}) \\ &= n_{r,i} - \frac{1}{m_r} (q_{r,i} - q_{r,i+1/2} - \tau s q_{r,i+1/2}) - \tau s' n_{r,i+1/2} \end{aligned}$$

mit

$$s = \frac{v_q}{h_i}, \quad s' = \frac{v_n}{h_i},$$

beruhend auf (2.30) und (2.31). Setzen wir für die mittlere Masse der Regentropfen

$$m_r = \frac{q_{r,i}}{n_{r,i}} \tag{4.10}$$

an, dann sind $q_{r,i+1/2}$ und $n_{r,i+1/2}$ durch

$$q_{r,i+1/2} = \frac{q_{r,i}}{n_{r,i}} \frac{1 + \tau s'}{1 + \tau s} n_{r,i+1/2} \tag{4.11}$$

4. Numerisches Verfahren und Experimente

linear gekoppelt. Fügen wir diese Identität wieder in die Gleichung (2.27) ein, bekommen wir

$$E'(n_{r,i+1/2}) = \lambda n_{r,i+1/2},$$

$$\lambda = (q_{vs} - q_v)_- \left(e_1 \left(\frac{n_{r,i}}{q_{r,i}} \right)^{2/3} \left(\frac{1 + \tau s'}{1 + \tau s} \right)^{1/3} + e_2 v_t^{1/2} \left(\frac{n_{r,i}}{q_{r,i}} \right)^{1/2} \left(\frac{1 + \tau s'}{1 + \tau s} \right)^{1/2} \right),$$

mit $\lambda < 0$. Es folgt daher aus (4.2), dass

$$n_{r,i+1/2} = \frac{1}{1 - \tau\lambda + \tau s'} n_{r,i}. \quad (4.12)$$

Das bedeutet, wenn wir (4.12) in (4.11) einsetzen, erhalten wir außerdem

$$q_{r,i+1/2} = \frac{1 + \tau s'}{1 + \tau s} \frac{1}{1 - \tau\lambda + \tau s'} q_{r,i}. \quad (4.13)$$

Die Lösungen von (4.12) und (4.13) sind jeweils die expliziten Lösungen von (4.1) und (4.2). Man bemerke, dass sowohl $q_{r,i+1/2}$ als auch $n_{r,i+1/2}$ positiv bleiben, wenn $q_{r,i}$ und $n_{r,i}$ bereits positiv waren.

4.1.4. Numerische Lösung der Gleichung (4.3)

Sind $q_{r,i+1/2}$ und $n_{r,i+1/2}$ gegeben, so lässt sich die nichtlineare Gleichung (4.3) wie folgt schreiben:

$$q_{c,i+1} = q_{c,i} + \tau \left(\tilde{c} q_{c,i+1}^{1/3} - a_1 q_{c,i+1}^2 - \tilde{a}_2 q_{c,i+1} \right)$$

mit den Koeffizienten

$$\tilde{c} = d\rho(q_v - q_{vs})n_c^{2/3}, \quad a_1 = k_1 \frac{\rho}{\rho_l}, \quad \tilde{a}_2 = k_2 \pi \left(\frac{3}{4\pi\rho_l} \right)^{2/3} \rho v_t q_{r,i+1/2}^{2/3} n_{r,i+1/2}^{1/3}.$$

Man bemerke, dass diese Koeffizienten \tilde{a}_2 und \tilde{c} sich von denen aus (3.4c) und (3.4d) durch zusätzliche Faktoren unterscheiden, sie werden lediglich für die numerische Lösung der Gleichung (4.3) benötigt.

Die Koeffizienten a_1 und \tilde{a}_2 sind stets nicht negativ, das Vorzeichen von \tilde{c} hängt dagegen vom Sättigungsverhältnis (2.5) ab. \tilde{c} ist positiv im übersättigten Regime und nicht positiv im übrigen.

Der gesuchte nicht-negative Wert von $x = q_{c,i+1}^{1/3}$ ist die Nullstelle des Polynoms sechsten Grades

$$p(x) = \tau a_1 x^6 + (1 + \tau \tilde{a}_2) x^3 - \tau \tilde{c} x - q_{c,i}. \quad (4.14)$$

Die ersten beiden Ableitungen des Polynoms p sind

$$p'(x) = 6\tau a_1 x^5 + 3(1 + \tau \tilde{a}_2) x^2 - \tau \tilde{c},$$

$$p''(x) = 30\tau a_1 x^4 + 6(1 + \tau \tilde{a}_2) x,$$

4. Numerisches Verfahren und Experimente

und die zweite Ableitung $p''(x) > 0$ für $x > 0$. Daher ist der Graph von p strikt konvex für $x \geq 0$. Außerdem ist $p(0) \leq 0$ und $p \rightarrow \infty$, wenn $x \rightarrow \infty$. Dies impliziert bereits, dass p höchstens eine positive Nullstelle besitzt. Wir unterscheiden deshalb die folgenden Fälle (siehe Abbildung 4.1):

- (a) Im übersättigten Regime ist $p'(0) < 0$ und p hat daher eine eindeutige positive Nullstelle. Im Besonderen ist die Nullstelle positiv, selbst wenn $q_{c,i} = 0$, sodass in dieser Situation Wachstum der Wolkentröpfchen ausgelöst wird.
- (b) In einem nicht übersättigten Regime ist c nicht positiv, somit ist p streng monoton wachsend für $x \geq 0$. Entsprechend hat p eine eindeutige nicht-negative Nullstelle.
 - (b1) Ist $q_{c,i} = 0$, so ist auch $q_{c,i+1} = 0$. Es entstehen keine Tropfen in diesem Fall.
 - (b2) Ist dagegen bereits $q_{c,i} > 0$, dann ist $p(0) < 0$ und daher ist $q_{c,i+1}$ strikt positiv. Zusätzlich ist $q_{c,i+1} < q_{c,i}$, da $p(q_{c,i}^{1/3}) > 0$.

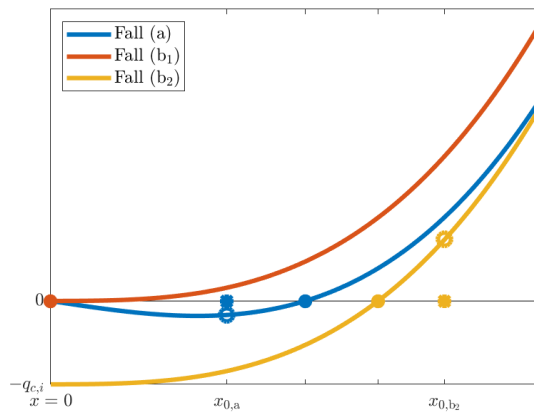


Abbildung 4.1.: Illustration des Graphen von p für das Newton-Verfahren.

Das Newtonverfahren

$$x_{k+1} = x_k - \frac{p(x_k)}{p'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

bietet sich in den vorangegangenen Fällen (a) und (b2) als Iterationsverfahren zur effektiven Berechnung der positiven Nullstelle von (4.14) an.

- (a) Für übersättigte Luft ist

$$x_0 = x_{0,a} = \max \left\{ \left(\frac{\tau \tilde{c}}{3} \right)^{1/2}, \left(\frac{\tilde{c}}{6a_1} \right)^{1/5} \right\} \quad (4.15)$$

4. Numerisches Verfahren und Experimente

naheliegend, da $p'(x_0) \geq 0$ für diesen Startwert gilt, was lokal quadratische Konvergenz der Newton-Iteration garantiert.

(b2) Im nicht-übersättigten Regime schlagen wir

$$x_0 = x_{0,b2} = \left(\frac{q_{c,i}}{\tau \tilde{a}_2 + 1} \right)^{1/3} \quad (4.16)$$

vor, denn $p(x_0) > 0$ für diese Wahl des Startwerts, was erneut die quadratische Konvergenz der Newton-Iteration garantiert.

Bemerkung 4.2. Mit diesem numerischen Schema ist daher die mathematische Entropie-Bedingung 3.3 stets erfüllt und unsere theoretischen Resultate aus Kapitel 3 gelten auch im Diskreten. Das heißt, die diskrete numerische Approximation ist ebenfalls physikalisch konsistent.

Bemerkung 4.3. Wir bemerken an dieser Stelle, dass wir mit unserem Vorschlag in Gleichung (4.15) vom Startwertvorschlag in [39] insofern abweichen, als wir das Maximum statt des Minimums der beiden Werte wählen. In der Theorie sind beide Werte stets geeignet, denn für sie ist die Ableitung $p'(x_0) > 0$ und man befindet sich daher bereits im wachsenden Bereich des für positive Werte konvexen Polynoms p .

Es ergeben sich jedoch erhebliche Unterschiede für die Implementierung, denn für das Minimum der beiden vorgeschlagenen Werte $(\frac{\tau \tilde{c}}{3})^{1/2}$ und $(\frac{\tilde{c}}{6a_1})^{1/5}$ konvergiert die Newton-Iteration nur sehr langsam in einer Situation, die bei jedem Auflösungsvorgang einer bestehenden Wolke aufgrund von Austrocknung vorkommt. Denn der Koeffizient c , welcher die Sättigung als Faktor enthält, wird sehr klein im Verhältnis zu den anderen Größen. Das bedeutet, die Steigung des Polynoms ist an diesem Startwert sehr klein und die erste Iterierte liegt mitunter einige Größenordnungen entfernt von der gesuchten Nullstelle. Die Werte

$$a_1 = 3, \quad \tilde{a}_2 = 0.1, \quad \tilde{c} = 1 \cdot 10^{-12}, \quad \tau = 1, \quad q_{c,i} = 1 \cdot 10^{-5}$$

entsprechen einer solchen Situation.

Denn dies bedeutet

$$p' \left(\min \left\{ \left(\frac{\tau \tilde{c}}{3} \right)^{1/2}, \left(\frac{\tilde{c}}{6a_1} \right)^{1/5} \right\} \right) \approx 1 \cdot 10^{-13}$$

und

$$p' \left(\max \left\{ \left(\frac{\tau \tilde{c}}{3} \right)^{1/2}, \left(\frac{\tilde{c}}{6a_1} \right)^{1/5} \right\} \right) \approx 1.6 \cdot 10^{-5}.$$

Die Iterationen sind daher unterschiedlich schnell, was durchaus von Bedeutung ist, da wir in der Implementierung eine Obergrenze für die Anzahl der Iterationsschritte vorgeben möchten.

4.2. Simulation von Niederschlag

In der Analyse der Modelllösungen haben wir bereits gesehen, dass die Modellgrößen der Tropfen für manche Anfangswerte mit bestimmten Zeitabhängigkeiten entstehen. Für die nunmehr zur Verfügung stehende und in Abschnitt 4.1 vorgestellte Implementierung des Modells können wir uns dies für das feste Beispielprofil der vertikalen Windgeschwindigkeit in Abbildung 4.2, dem Antrieb des Modells, anschauen. Gleichzeitig ermöglicht es uns, das Modell ein wenig aus meteorologischer Sicht zu validieren.

Eine wichtige und alltägliche Messgröße für Regen ist der resultierende Niederschlag (englisch „precipitation“) auf der Erdoberfläche. Dieser wird für gewöhnlich in den Einheiten L m^{-2} oder mm gemessen. Im Zusammenhang mit unserem Modell, einer Luftsäule aus der Lagrange-Perspektive mit einer Eulerschen Betrachtungsweise der Sedimentation (siehe [6]), bietet es sich an, eine Niederschlagsrate P zu betrachten, da wir im Allgemeinen keinen direkten Zusammenhang zur Erdoberfläche untersuchen. Denn zum einen ist die Querschnittsfläche A der Säule oder Box nur als festes Verhältnis zur Masse der Luft m_a gegeben und zum anderen bleibt der Verbleib des Regens nach dem Verlassen der untersten Box unseres Modells auf dem Weg zur Erdoberfläche ungeklärt. Die Niederschlagsrate berechnet sich über

$$P = \frac{\rho}{\rho_l} S_{\text{out}} h \cdot 1000 \text{ mm m}^{-1} \quad (4.17)$$

anhand der ausfallenden Sedimentation S_{out} der untersten Box und hat die Einheit $[P] = \text{mm s}^{-1}$. Sie beschreibt, wie viel Niederschlag die Säule pro Sekunde produziert, wenn dieser direkt auf den Boden treffen würde. Ist zusätzlich ein Zusammenhang des Modells zur Erdoberfläche gegeben, kann man mit Hilfe von Integration der Zeit den Niederschlag aus der Niederschlagsrate P errechnen.

Die Anfangswerte für den Druck bestimmen wir anhand der barometrischen Höhenformel (2.34) und die Temperatur anhand des trockenadiabatischen Temperaturgradienten (2.35). Zunächst simulieren wir eine einzelne Box auf Bodenhöhe mit einer vertikalen Ausdehnung von 2000 m. Des Weiteren nehmen wir an, dass die Luft bereits zu 98% gesättigt ist und, dass zum Startzeitpunkt noch keine Wolken präsent sind. Das heißt konkret:

$$y(0) = [0.98 q_{vs} \ 0 \ 0 \ 0 \ p_* \ T_0]^T. \quad (4.18)$$

Die Box steigt nach kurzer Zeit auf, angetrieben von der vertikalen Geschwindigkeit w , sie erreicht Sättigung und übersättigt sofort, die Wolkenprozesse beginnen mit der Wolkenbildung. Es entsteht eine Kumuluswolke [51]. Der darauffolgende Abstieg, induziert durch negative vertikale Geschwindigkeiten, trocknet die Luft aus, sie wird aufgrund des verlorenen Niederschlags wärmer als vor dem Aufstieg, obwohl der Höhenunterschied übereinstimmt, da weniger latente Wärme zur Verdampfung benötigt wird.

4. Numerisches Verfahren und Experimente

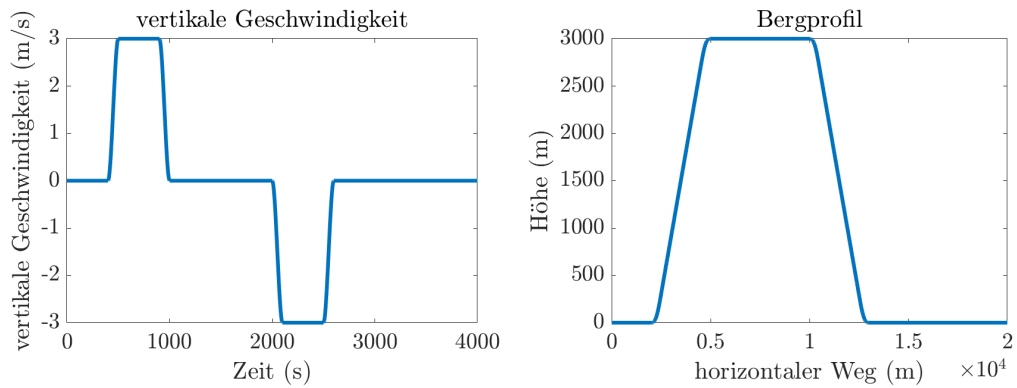


Abbildung 4.2.: Das Beispielpprofil der vertikalen Windgeschwindigkeit w (links). Es ist größtenteils konstant mit kurzen Beschleunigungsphasen und setzt sich aus einer Auf- und einer später folgenden Abstiegsphase zusammen. Als Verbindung zu einer realen Anwendung kann man sich die Überströmung eines Bergprofils (rechts) vorstellen, mit einer konstanten 5 m s^{-1} schnellen Anströmung des Berges von links und einem orographisch erzwungenen Auf- und Abstieg der Luft.

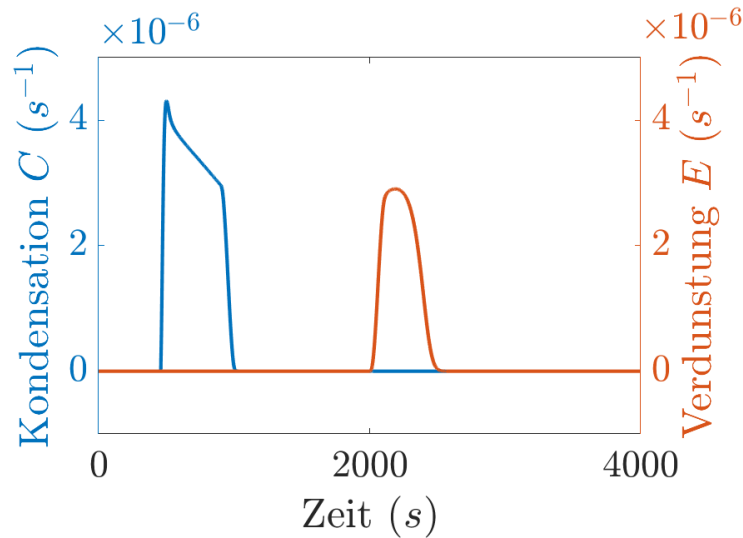


Abbildung 4.3.: Die Wolkenprozesse der Kondensation C und Verdunstung E ausgewertet für das Profil in Abbildung 4.2.

Die Kondensation des Modells wurde bereits in [39] mit einer Untersuchung der Übersättigung, einem Vergleich zur sogenannten Sättigungsadjustierung und mit zwei Aufstiegsszenarien ausführlich untersucht. Deshalb betrachten wir sie an dieser Stelle im direkten Vergleich zur Verdunstung. In Abbildung 4.3 ist zu erkennen, dass die Kondensation während des Aufstiegs etwas abnimmt und im Falle des Abstiegs so gut wie kein q_c abbaut, da, wie man in Abbildung 4.6

4. Numerisches Verfahren und Experimente

erkennt, zu diesem Zeitpunkt nur noch wenig q_c vorhanden ist. Die Verdunstung hat dagegen per Design nur eine Richtung und ist beim Abstieg der Luft aktiv, sie verwandelt Regen q_r zu Wasserdampf q_v .

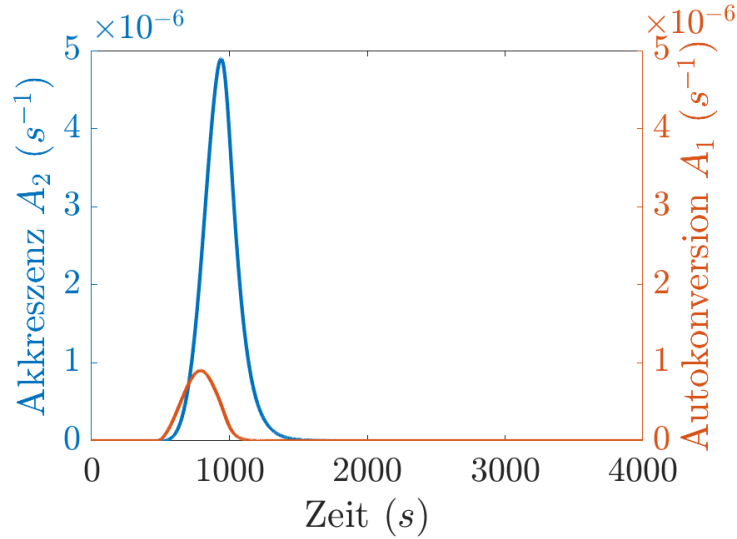


Abbildung 4.4.: Tropfenkollisionen von Wolkentropfen mit Wolkentropfen A_1 und Regentropfen mit Wolkentropfen A_2 , ausgewertet für das Profil in Abbildung 4.2.

Wie in Abbildung 4.4 gut zu erkennen ist, lässt sich die Regentropfenbildung des Modells gut in zwei Phasen aufteilen. Zum einen entstehen zunächst einige Tropfen durch Autokonversion A_1 und zum anderen dominiert ab einer gewissen Mindestpopulation der Prozess der Akkreszenz, welcher die vorhandenen Wolkentropfen q_c ausräumt und zu sedimentierenden Regentropfen werden lässt. Dieses Verhalten wird von Berry in seinen Arbeiten [10] und [11] beschrieben und ist die Motivation für diese Methode der Wolkenmodellierung.

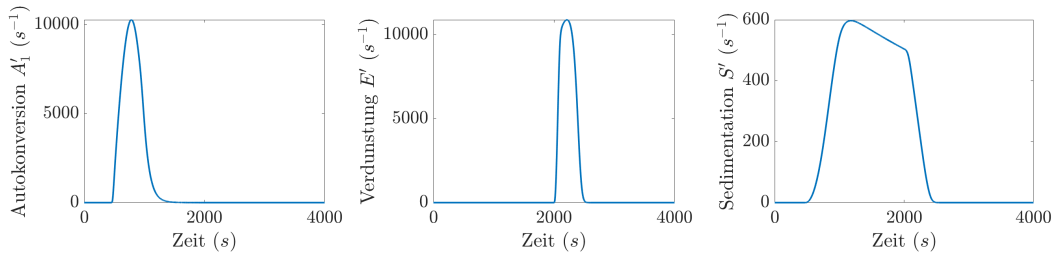


Abbildung 4.5.: Prozesse Autokonversion A'_1 , Verdunstung E' und Sedimentation S' der Regentropfenanzahl n_r . Sie zeigen ein ähnliches Verhalten im Bezug auf den Aktivitätszeitraum und die Ausprägung wie die Prozesse der Regentropfenmasse q_r .

4. Numerisches Verfahren und Experimente

Die Systemgrößen in Abbildung 4.6 zeigen ein Bild, wie wir es aufgrund der Prozesse in den Abbildungen 4.3, 4.4, 4.5 und 4.9 erwarten. Der Wasserdampf q_v wird zunächst zu Gunsten von q_c verbraucht. Anschließend wachsen die Wolkentropfen q_c zu Regentropfen q_r , bevor beim Abstieg aus Regentropfen Wasserdampf q_v zurückgewonnen wird. Die Luft erwärmt sich als Resultat des Auf- und Abstiegs und aufgrund des verlorenen Niederschlags. Außerdem können wir klar erkennen, dass q_r schneller sedimentiert als n_r . Dieser Effekt ist beabsichtigt und auf unsere Wahl von v_q und v_n aus den Gleichungen (2.32) und (2.33) zurückzuführen.

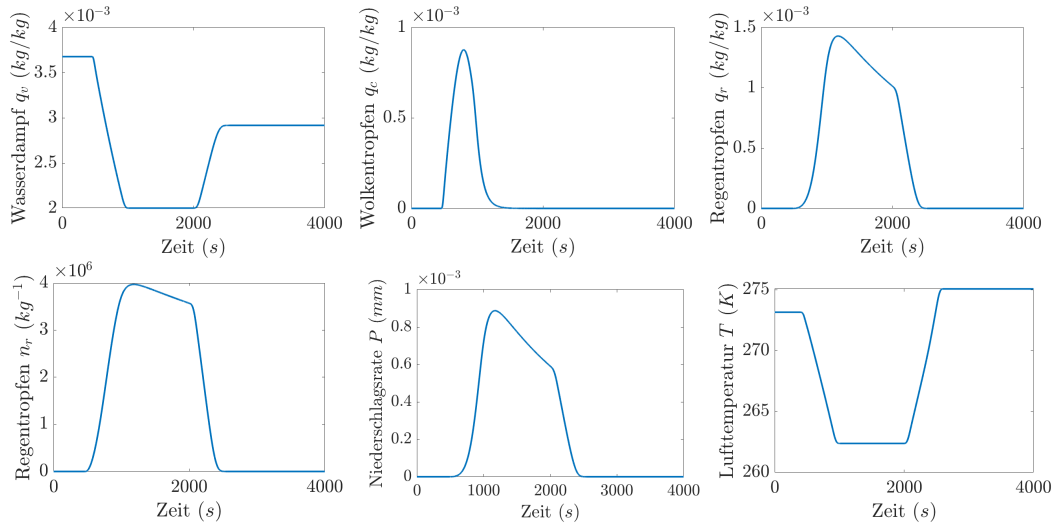


Abbildung 4.6.: Die zentralen Größen q_v , q_c , q_r , n_r , p und T unseres Systems im Überblick mit ihrem Verhalten für das vertikale Windprofil aus Abbildung 4.2.

Die Anzahl der Wolkentropfen n_c explodiert förmlich zu Beginn des Anstiegs und im Moment der Übersättigung, wie in Abbildung 4.7 zu beobachten. Der Anstieg ist offenbar so steil, dass n_c innerhalb von fünf Sekunden komplett aktiviert ist. Beim Abstieg ist das Verschwinden von n_c dagegen etwas langsamer und man erkennt die Form unserer algebraischen Bedingung (2.37) deutlich. Der entsprechende mittlere Radius der Wolkentropfen ist in Abbildung 4.8 zu sehen, dieser verschwindet zum selben Zeitpunkt wie n_c .

An der Fallgeschwindigkeit v_t in Abbildung 4.7 erkennen wir, dass weder q_r noch n_r im Laufe der Simulation vollständig verschwinden, da v_t erkennbar positiv bleibt, auch wenn sie nach dem Abstieg streng monoton abfällt. Das heißt, die mittlere Masse und der korrespondierende mittlere Radius der Regentropfen bleiben ebenfalls erkennbar positiv, obwohl sowohl q_r als auch n_r sehr klein werden. Dieses Verhalten ist in Abbildung 4.8 ebenfalls deutlich zu erkennen.

An Stelle der Dichte ρ als dritte algebraische Nebenbedingung ist in Abbildung 4.7 die Boxhöhe h dargestellt, denn diese wird angepasst, um die Masse der Luft

4. Numerisches Verfahren und Experimente

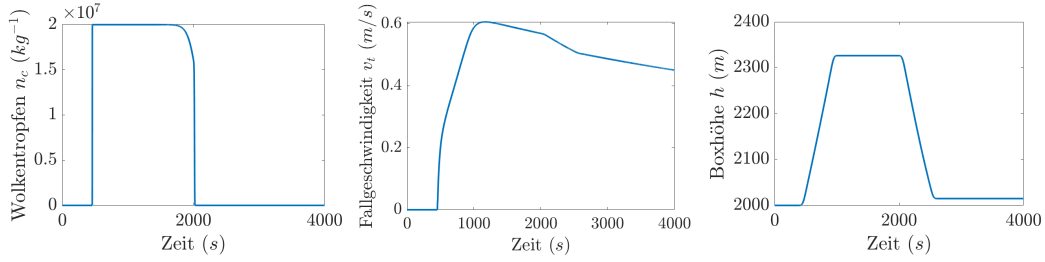


Abbildung 4.7.: Die algebraischen Nebenbedingungen (2.37), (2.39) und (2.40), wobei h an dieser Stelle ρ aus (2.38) vertritt.

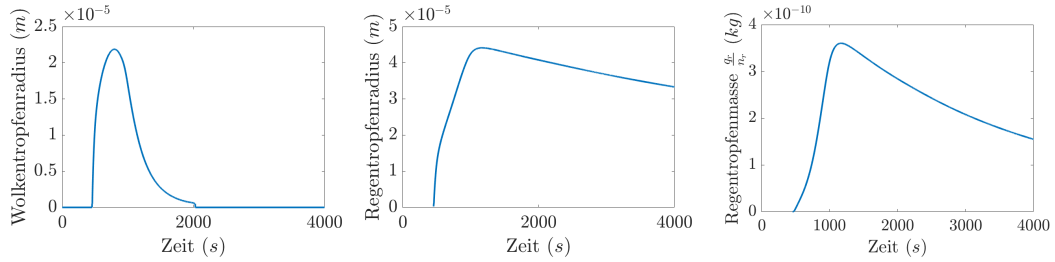


Abbildung 4.8.: Die mittlere Masse der Regentropfen q_r/n_r und die mittleren Radien der Wolken- und Regentropfen, die über Gleichung (2.1) direkt mit der jeweiligen mittleren Masse zusammenhängen.

innerhalb der Säule zu erhalten. Außerdem sind ρ und h über die Gleichung (2.40) direkt austauschbar. Wie zu erwarten, dehnt sich die Luft mit dem Aufstieg erheblich aus. Zusätzlich sorgt der verlorene Niederschlag durch die Erwärmung der Luft über latente Wärme für ein um circa 2% gesteigertes Volumen der Box am Ende der Simulation gegenüber des Volumens zu Beginn.

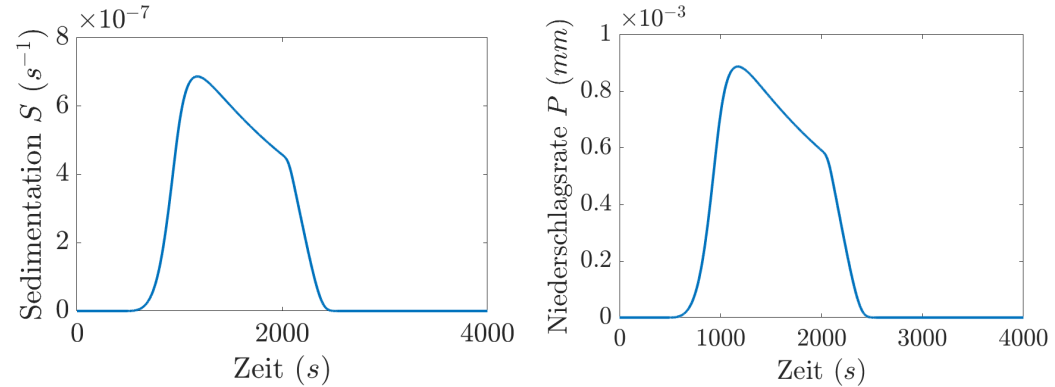


Abbildung 4.9.: Sedimentation (2.28) und Niederschlagsrate (4.17) unterscheiden sich im Verhalten kaum.

Der Graph der Sedimentation einer einzelnen Box unterscheidet sich in seiner

4. Numerisches Verfahren und Experimente

Gestalt naturgemäß wenig von der resultierenden Niederschlagsrate. Beide Graphen sind in Abbildung 4.9 zu sehen. Da es sich um eine Säule mit nicht näher spezifizierter Grundfläche A handelt, müsste man für eine lokale Vorhersage des Niederschlags noch über die Zeit integrieren. Gehen wir daher davon aus, dass das gesamte vertikale Windprofil aus Abbildung 4.2 im Gegensatz zur vorgestellten Bergüberströmung in Abbildung 4.2 am selben Ort durchlaufen wird, ist der resultierende Niederschlag an diesem Ort das Integral der in Abbildung 4.9 vorgestellten Niederschlagsrate.

Schauen wir uns im Vergleich den Niederschlag einer Säule an. Die Höhe der Säule stimmt mit der zuvor gezeigten Box mit 2000 m überein. Sie ist in zehn zu Beginn gleich große gestapelte Boxen unterteilt und jede dieser Boxen hat dieselben Anfangswerte 4.18 wie die zuvor gezeigte einzelne Box. Diese in der Atmosphäre eher ungewöhnliche Schichtung soll an dieser Stelle einen direkten Vergleich ermöglichen. Man erkennt sofort ein anderes Verhalten des Niederschlags in Abbildung 4.10 im Vergleich mit Abbildung 4.9, wobei man davon ausgehen kann, dass die Sedimentation der obersten Box der Säule dasselbe Verhalten zeigt wie die Sedimentation in Abbildung 4.9.

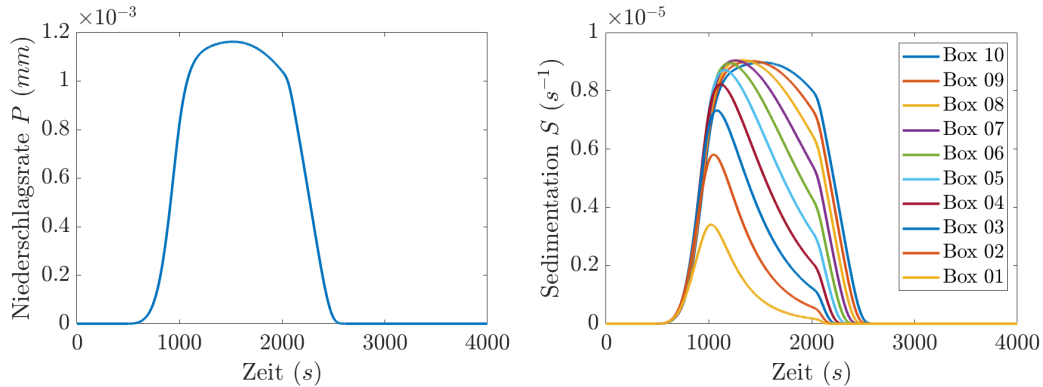


Abbildung 4.10.: Niederschlagsrate P und Sedimentation S_{out} einer Säule mit zehn Boxen à 200 m mit äquivalenten Anfangswerten zur Box-Simulation.

Damit haben wir die wesentlichen Aspekte des Modells in Simulationen gezeigt. Dieses Modell wird uns im Folgenden als Vorwärtsmodell für die Vorhersagen von Niederschlagsmessungen (4.17) dienen, um daraus Rückschlüsse auf die verwendeten Parameter q zu ermöglichen.

5. Parameteridentifikation

Untersuchungen von Unsicherheiten in den mikrophysikalischen Teilmodellen globaler und lokaler Wettervorhersagemodelle sind Gegenstand aktueller Forschung in der Meteorologie. Der Sonderforschungsbereich (TRR) 165 "Waves to Weather" [1] widmet sich beispielsweise in einem seiner drei Forschungsschwerpunkte dieser Aufgabe. Unser Modell eignet sich für eine Implementierung als mikrophysikalisches Teilmodell, wenn die numerisch aufgelösten Größenskalen entsprechend klein genug sind. Wie wir in der Herleitung unseres Modells gesehen haben, sind Prozesse des Wolkenmodells nicht auf der Skala einzelner Partikel realisierbar und stehen daher in der Regel für Modelle dieser Art lediglich als künstliche Prozessfunktionen für Durchschnittswerte zur Verfügung. Zusätzlich sorgen unter anderem der Radius-Masse-Zusammenhang (2.1) und das exponentielle Verhalten der Endgeschwindigkeit für nicht-lineare Abhängigkeiten. Es wird daher auf Parameter zurückgegriffen, die nicht beachtete Zusammenhänge und schwer messbare physikalische Konstanten in wenigen Zahlen vereinen. Werte dieser Parameter sind häufig indirekt aus Beobachtungsdaten oder aus älteren Modellen in der Literatur anhand einzelner Szenarien abgeleitet, siehe beispielsweise Abschnitt A.1, A.2 und A.3.

Eine Idee zur Verbesserung ist der Ansatz, diejenigen Parameter zu finden, welche Messdaten am besten erklären. Dieser Idee werden wir mit Hilfe Inverser Methoden nachgehen, insbesondere testen wir ihre Eignung für unser spezielles Modell. Das bedeutet, wir vergleichen die durch Gleichung (4.17) berechnete Vorhersage der Regenwerte P mit Messdaten \bar{P} desselben Szenarios. Das heißt, die Anfangswerte y_0 und die vertikale Geschwindigkeit w wurden ebenfalls gemessen. Sie stehen daher für unsere Modellläufe zur Verfügung und müssen nicht zusätzlich bestimmt werden. Der Fehler

$$\varepsilon_P = \|\bar{P} - P\|_2^2 \quad (5.1)$$

dient zur Ermittlung der Präzision der Vorhersage im Vergleich zur Messung. Diese natürliche Metrik ist gegeben durch die Norm $\|\cdot\|_2$ auf dem Raum der Messwerte \mathbb{R}^m , wobei m die Anzahl der Messpunkte beziffert. Das Ziel lässt sich insofern genauer spezifizieren, als dass wir nun diejenigen Parameter q suchen, die den Fehler ε_P minimieren. In unserem Modell fassen wir die Konstanten

- N_0 , m_0 und N_∞ der algebraischen Funktion (2.37) für die Wolkentropfenanzahl n_c ,
- α , α_q , α_n , m_t und β in unseren Beschreibungen (2.39), (2.32) und (2.33) der

5. Parameteridentifikation

Endgeschwindigkeiten v_t , v_q sowie v_n ,

- k_1 und k_2 in den Gleichungen (2.24), (2.26) und (2.25) der Kollisionen A_1 , A'_1 und A_2 ,

als Parameter auf. Eine Auswahl der genannten Konstanten bildet komponentenweise den gesuchten Parametersatz q . Auf der Suche nach dem Minimum folgt man iterativ dem negativen Gradienten

$$-\frac{d\varepsilon_P}{dq} = \langle 2 \frac{dP}{dq}, \bar{P} - P \rangle \quad (5.2)$$

als Abstiegsrichtung auf dem Weg zum Minimum

$$\min_q \varepsilon_P. \quad (5.3)$$

Mit $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ist das norminduzierende euklidische Skalarprodukt auf dem Raum der Messwerte gemeint. Man erkennt bereits an der Funktion (4.17) des Niederschlags P , dass zur Berechnung von

$$\frac{dP}{dq} = \frac{\partial P}{\partial y} \frac{dy}{dq} + \frac{\partial P}{\partial q} \quad (5.4)$$

mit Hilfe der Kettenregel die Ableitung $\frac{dy}{dq}$ der Lösung y unseres Anfangswertproblem (3.1) in Richtung der Parameter q benötigt wird. Da wir die Lösung y im Allgemeinen nicht kennen, sondern lediglich die Kontinuitätsgleichung (1.1), welche wir auf das Anfangswertproblem (3.1) reduziert haben, stellen wir eine weitere entsprechend höherdimensionale Differentialgleichung für Berechnung von $\frac{dy}{dq}$ auf.

Vorausgesetzt, die Lösung y ist zweimal stetig differenzierbar in den Variablen Zeit t und Parameter q , so gilt der Satz von Schwarz [18]. Das heißt, wir können die Reihenfolge der Differentiation dieser beiden Variablen vertauschen. Konkret können wir daher die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{dy}{dq} = \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dq} + \frac{\partial f}{\partial q} \quad (5.5)$$

für die unbekannte Ableitung $\frac{dy}{dq}$ aufstellen. Die Anfangswerte

$$\left. \frac{dy}{dq} \right|_{t=0} = 0 \quad (5.6)$$

machen daraus ein numerisch lösbares Anfangswertproblem, welches wir im folgenden diskutieren werden.

Bemerkung 5.1. Die in Gleichung (5.5) auftretende partielle Ableitung $\frac{\partial f}{\partial y}$ erschwert das numerische Lösen des Anfangswertproblems, bestehend aus (5.5)

5. Parameteridentifikation

und (5.6). Denn einerseits ist die rechte Seite f aus Gleichung (3.1) nicht Lipschitz-stetig in der Nähe der Null für die Variablen q_c , q_r und n_r . Insbesondere hat f an solchen Stellen, an denen eine oder mehrere der drei Variablen von null ins Positive oder umgekehrt vom Positiven zu null wechseln, daher keine stetige Ableitung in diesen Variablen. Andererseits kann das Produkt

$$\frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dq}$$

trotzdem stetig oder sogar glatt sein. Dies lässt sich für die aus dem Beweis von Theorem 3.10 bekannten Zerlegungen der Größen q_c , q_r und n_r mit den führenden Ordnungen der Zeit (3.52)-(3.54) und für die Näherung

$$\frac{dy}{dq} \approx \frac{\partial f}{\partial q}$$

überprüfen. Eine solche Zerlegung steht uns jedoch nicht für alle auftretenden Fälle zur Verfügung, deshalb nehmen wir die numerisch schwierigen Unstetigkeiten, die extreme Sprünge mit sich bringen, während der Lösung des Anfangswertproblem (5.5), (5.6) in Kauf.

5.1. Ableitungen der Prozesse und Funktionen

Es folgen die partiellen Ableitungen in Richtung der Systemvariablen und Parameter, sofern die einzelnen Funktionen von ihnen abhängen. Sie sind sortiert nach Prozessen und physikalischen Konstanten. Anschließend werden wir diese partiellen Ableitungen zu partiellen Ableitungen der Quellen und Senken f zusammensetzen.

5.1.1. Partielle Ableitungen der Kondensation (C) aus (2.22)

Die Funktion der Kondensation enthält Potenzen von q_c und n_c mit Exponenten zwischen null und eins. Ableitungen in Richtung q_c haben daher eine Singularität für $q_c \rightarrow 0$, die Kondensation selbst ist dagegen

$$C|_{q_c=0} \equiv 0,$$

weshalb die Ableitungen für $q_c = 0$ ebenfalls gleich null sind. Für andere Werte von q_c gelten entsprechend die im Folgenden gelisteten Ableitungen.

Da n_c für alle Werte von q_c positiv ist, brauchen Ableitungen in dieser Richtung faktisch keine Fallunterscheidung. Andererseits haben wir uns entschlossen, insbesondere in der Implementierung, $n_c = 0$ zu setzen, wenn die Luft untersättigt

5. Parameteridentifikation

und kein q_c vorhanden ist. Die partiellen Ableitungen lauten wie folgt:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial q_v} C &= d\rho n_c^{2/3} q_c^{1/3}, \\
 \frac{\partial}{\partial q_c} C &= \frac{1}{3} d\rho (q_v - q_{vs}) n_c^{2/3} q_c^{-2/3} + \frac{2}{3} d\rho (q_v - q_{vs}) n_c^{-1/3} q_c^{1/3} \frac{\partial n_c}{\partial q_c}, \\
 \frac{\partial}{\partial p} C &= \frac{\partial d}{\partial p} \rho (q_v - q_{vs}) n_c^{2/3} q_c^{1/3} + d \frac{\partial \rho}{\partial p} n_c^{2/3} q_c^{1/3} - d\rho \frac{\partial q_{vs}}{\partial p} n_c^{2/3} q_c^{1/3}, \\
 \frac{\partial}{\partial T} C &= \frac{\partial d}{\partial T} \rho (q_v - q_{vs}) n_c^{2/3} q_c^{1/3} + d \frac{\partial \rho}{\partial T} n_c^{2/3} q_c^{1/3} - d\rho \frac{\partial q_{vs}}{\partial T} n_c^{2/3} q_c^{1/3}, \\
 \frac{\partial}{\partial N_0} C &= \frac{2}{3} d\rho (q_v - q_{vs}) n_c^{-1/3} q_c^{1/3} \frac{\partial n_c}{\partial N_0}, \\
 \frac{\partial}{\partial m_0} C &= \frac{2}{3} d\rho (q_v - q_{vs}) n_c^{-1/3} q_c^{1/3} \frac{\partial n_c}{\partial m_0}, \\
 \frac{\partial}{\partial N_\infty} C &= \frac{2}{3} d\rho (q_v - q_{vs}) n_c^{-1/3} q_c^{1/3} \frac{\partial n_c}{\partial N_\infty}.
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

5.1.2. Ableitungen der Autokonversion (A_1 , A'_1) aus (2.24) und (2.26)

Die Autokonversion der Masse A_1 hat nur wenige Faktoren und hängt direkt nur vom Parameter k_1 ab:

$$\frac{\partial}{\partial q_c} A_1 = 2 \frac{k_1}{\rho_l} \rho q_c,$$

$$\frac{\partial}{\partial p} A_1 = \frac{k_1}{\rho_l} \frac{\partial \rho}{\partial p} q_c^2,$$

$$\frac{\partial}{\partial T} A_1 = \frac{k_1}{\rho_l} \frac{\partial \rho}{\partial T} q_c^2,$$

$$\frac{\partial}{\partial k_1} A_1 = \frac{1}{\rho_l} \rho q_c^2.$$

Die Funktion der anzahlbezogenen Autokonversion A'_1 hängt zusätzlich von den Parametern unserer algebraischen Funktion für n_c ab, daher ergeben sich drei zusätzliche partielle Ableitungen:

$$\frac{\partial}{\partial q_c} A'_1 = \frac{k_1}{2\rho_l} \rho n_c + \frac{k_1}{2\rho_l} \rho \frac{\partial n_c}{\partial q_c} q_c,$$

$$\frac{\partial}{\partial p} A'_1 = \frac{k_1}{2\rho_l} \frac{\partial \rho}{\partial p} n_c q_c,$$

$$\frac{\partial}{\partial T} A'_1 = \frac{k_1}{2\rho_l} \frac{\partial \rho}{\partial T} n_c q_c,$$

$$\frac{\partial}{\partial k_1} A'_1 = \frac{1}{2\rho_l} \rho n_c q_c,$$

$$\frac{\partial}{\partial N_0} A'_1 = \frac{k_1}{2\rho_l} \rho \frac{\partial n_c}{\partial N_0} q_c,$$

$$\frac{\partial}{\partial m_0} A'_1 = \frac{k_1}{2\rho_l} \rho \frac{\partial n_c}{\partial m_0} q_c,$$

$$\frac{\partial}{\partial N_\infty} A'_1 = \frac{k_1}{2\rho_l} \rho \frac{\partial n_c}{\partial N_\infty} q_c.$$

5.1.3. Partielle Ableitungen der Akkreszenz (A_2) aus (2.25)

Die Funktion der Akkreszenz enthält die Faktoren $n_r^{1/3}$ und $q_r^{2/3}$, das bedeutet, die partiellen Ableitungen in Richtung q_r und n_r haben eine Singularität für $q_r \rightarrow 0$ beziehungsweise für $n_r \rightarrow 0$. Andererseits ist A_2 für $n_r = 0$ oder $q_r = 0$ identisch null und daher sind die Ableitungen für diese Werte von n_r und q_r ebenfalls null. Für andere Werte von n_r und q_r gelten die folgenden Ableitungen:

$$\frac{\partial}{\partial q_c} A_2 = k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} v_t \rho n_r^{1/3} q_r^{2/3},$$

$$\frac{\partial}{\partial q_r} A_2 = \frac{2}{3} k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} v_t \rho q_c n_r^{1/3} q_r^{-1/3} + k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} \frac{\partial v_t}{\partial q_r} \rho q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3},$$

$$\frac{\partial}{\partial n_r} A_2 = \frac{1}{3} k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} v_t \rho q_c n_r^{-2/3} q_r^{2/3} + k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} \frac{\partial v_t}{\partial n_r} \rho q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3},$$

$$\frac{\partial}{\partial p} A_2 = k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} \frac{\partial v_t}{\partial p} \rho q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3} + k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} v_t \frac{\partial \rho}{\partial p} q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3},$$

$$\frac{\partial}{\partial T} A_2 = k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} \frac{\partial v_t}{\partial T} \rho q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3} + k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} v_t \frac{\partial \rho}{\partial T} q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3},$$

$$\frac{\partial}{\partial k_2} A_2 = \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} v_t \rho q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3},$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} A_2 = k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} \frac{\partial v_t}{\partial \alpha} \rho q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3},$$

$$\frac{\partial}{\partial m_t} A_2 = k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} \frac{\partial v_t}{\partial m_t} \rho q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3},$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} A_2 = k_2 \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4\rho_l} \right)^{2/3} \frac{\partial v_t}{\partial \beta} \rho q_c n_r^{1/3} q_r^{2/3}.$$

5.1.4. Partielle Ableitung der Verdunstung (E , E') aus (2.23) und (2.27)

Zum Einen enthält die Funktion der Verdunstung E wie zuvor A_2 ebenfalls Potenzen von q_r und n_r mit Exponenten zwischen null und eins. Sie ist gleichermaßen identisch null für $q_r = 0$ oder $n_r = 0$, weshalb die Ableitungen in diesen Fällen ebenso null sind.

Zum anderen lässt der Faktor $(q_v - q_{vs})_-$ nur nicht-positive Werte der Differenz $q_v - q_{vs}$ zu, weshalb die partiellen Ableitungen für $q_{vs} \leq q_v$ verschwinden.

In den übrigen Fällen gelten die folgenden Ableitungen:

$$\frac{\partial}{\partial q_v} E = d\rho \left(a_E q_r^{1/3} n_r^{2/3} + b_E v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2} \right),$$

$$\frac{\partial}{\partial q_r} E = d\rho (q_v - q_{vs})_- \left(\frac{1}{3} a_E q_r^{-2/3} n_r^{2/3} + \frac{1}{2} b_E v_t^{-1/2} \frac{\partial v_t}{\partial q_r} q_r^{1/2} n_r^{1/2} + \frac{1}{2} b_E v_t^{1/2} q_r^{-1/2} n_r^{1/2} \right),$$

$$\frac{\partial}{\partial n_r} E = d\rho (q_v - q_{vs})_- \left(\frac{2}{3} a_E q_r^{1/3} n_r^{-1/3} + \frac{1}{2} b_E v_t^{-1/2} \frac{\partial v_t}{\partial n_r} q_r^{1/2} n_r^{1/2} + \frac{1}{2} b_E v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{-1/2} \right),$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p} E &= \frac{\partial d}{\partial p} \rho (q_v - q_{vs})_- \left(a_E q_r^{1/3} n_r^{2/3} + b_E v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2} \right) \\ &\quad + d \frac{\partial \rho}{\partial p} \left(a_E q_r^{1/3} n_r^{2/3} + b_E v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2} \right) \\ &\quad - d\rho \frac{\partial q_{vs}}{\partial p} \left(a_E q_r^{1/3} n_r^{2/3} + b_E v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2} \right) \\ &\quad + d\rho (q_v - q_{vs})_- \frac{\partial b_E}{\partial p} v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} E &= \frac{\partial d}{\partial T} \left(a_E q_r^{1/3} n_r^{2/3} + b_E v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2} \right) \\ &\quad + d \frac{\partial \rho}{\partial T} (q_v - q_{vs})_- \left(a_E q_r^{1/3} n_r^{2/3} + b_E v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2} \right) \\ &\quad - d\rho \frac{\partial q_{vs}}{\partial T} \left(a_E q_r^{1/3} n_r^{2/3} + b_E v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2} \right) \\ &\quad + d\rho (q_v - q_{vs})_- \frac{\partial b_E}{\partial T} v_t^{1/2} q_r^{1/2} n_r^{1/2}, \end{aligned}$$

5. Parameteridentifikation

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} E = d\rho(q_v - q_{vs}) - \frac{1}{2} b_E v_t^{-1/2} \frac{\partial v_t}{\partial \alpha} q_r^{1/2} n_r^{1/2},$$

$$\frac{\partial}{\partial m_t} E = d\rho(q_v - q_{vs}) - \frac{1}{2} b_E v_t^{-1/2} \frac{\partial v_t}{\partial m_t} q_r^{1/2} n_r^{1/2},$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} E = d\rho(q_v - q_{vs}) - \frac{1}{2} b_E v_t^{-1/2} \frac{\partial v_t}{\partial \beta} q_r^{1/2} n_r^{1/2}.$$

Da sich die Verdunstung der Anzahl E' nur um den Faktor $\frac{1}{\bar{m}_r} = \frac{n_r}{q_r}$ von der Funktion E unterscheidet, lassen sich ihre partiellen Ableitungen mit Hilfe der Produktregel [19] leicht berechnen:

$$\frac{\partial}{\partial q_v} E' = \frac{1}{\bar{m}_r} \frac{\partial E}{\partial q_v},$$

$$\frac{\partial}{\partial q_r} E' = \begin{cases} \frac{1}{\bar{m}_r} \frac{\partial E}{\partial q_r} - \frac{n_r}{q_r^2} E & , q_r > 0, \\ 0 & , q_r = 0, \end{cases}$$

$$\frac{\partial}{\partial n_r} E' = \begin{cases} \frac{1}{\bar{m}_r} \frac{\partial E}{\partial n_r} + \frac{1}{q_r} E & , q_r > 0, \\ 0 & , q_r = 0, \end{cases}$$

$$\frac{\partial}{\partial p} E' = \frac{1}{\bar{m}_r} \frac{\partial E}{\partial p},$$

$$\frac{\partial}{\partial T} E' = \frac{1}{\bar{m}_r} \frac{\partial E}{\partial T},$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} E' = \frac{1}{\bar{m}_r} \frac{\partial E}{\partial \alpha},$$

$$\frac{\partial}{\partial m_t} E' = \frac{1}{\bar{m}_r} \frac{\partial E}{\partial m_t},$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} E' = \frac{1}{\bar{m}_r} \frac{\partial E}{\partial \beta}.$$

5.1.5. Partielle Ableitungen der Sedimentation (S , S') aus (2.28), (2.29)

Die Diskretisierung (2.28) und (2.29) der Komponenten des vertikalen Gradienten der Sedimentation für eine Box der Säule ist aufgeteilt in die Summanden S_{in} und S_{out} beziehungsweise S'_{in} und S'_{out} . Da S_{in} die ausfallende Sedimentation der darüber liegenden Box ist, werden S_{in} und S_{out} im Wesentlichen mit derselben Formel

$$S_{\text{out}} = \frac{1}{h} v_q q_r$$

berechnet. In Gleichung (4.6) haben wir bereits gesehen, dass S_{out} noch auf die neue Konzentration der Box darunter angeglichen wird, wenn der ausfallende Regen S_{out} zu einfallendem Regen S_{in} in der Box darunter wird. Des Weiteren ist die Sedimentation S_{in} für die Werte der Systemgrößen der Box darüber ausgewertet worden. Dasselbe ist natürlich auch für Ableitungen der Sedimentation zu beachten. Diese lauten:

$$\frac{\partial}{\partial q_r} S_{\text{out}} = \frac{1}{h} v_q + \frac{1}{h} \frac{\partial v_q}{\partial q_r} q_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial n_r} S_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_q}{\partial n_r} q_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial p} S_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_q}{\partial p} q_r - \frac{1}{h^2} \frac{\partial h}{\partial p} v_q q_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial T} S_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_q}{\partial T} q_r - \frac{1}{h^2} \frac{\partial h}{\partial T} v_q q_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_q} S_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_q}{\partial \alpha_q} q_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial m_t} S_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_q}{\partial m_t} q_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} S_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_q}{\partial \beta} q_r.$$

5. Parameteridentifikation

Gleiches gilt für S'_{in} und S'_{out} . Sie werden beide im Wesentlichen mit der Formel

$$S'_{\text{out}} = \frac{1}{h} v_n n_r$$

berechnet und wir zeigen daher lediglich die partiellen Ableitungen der Gleichung (2.31). Gleichwohl wird auch S'_{out} , wie in Gleichung (4.7) gesehen, für die Berechnung von S'_{in} auf die neue Konzentration im Verhältnis zur Masse der Luft angeglichen:

$$\frac{\partial}{\partial q_r} S'_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_n}{\partial q_r} n_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial n_r} S'_{\text{out}} = \frac{1}{h} v_n + \frac{1}{h} \frac{\partial v_n}{\partial n_r} n_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial p} S'_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_n}{\partial p} n_r - \frac{1}{h^2} \frac{\partial h}{\partial p} v_n n_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial T} S'_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_n}{\partial T} n_r - \frac{1}{h^2} \frac{\partial h}{\partial T} v_n n_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_n} S'_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_n}{\partial \alpha_n} n_r,$$

$$\frac{\partial}{\partial m_t} S'_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_n}{\partial m_t} n_r$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} S'_{\text{out}} = \frac{1}{h} \frac{\partial v_n}{\partial \beta} n_r.$$

5.1.6. Partielle Ableitungen der physikalischen Konstanten

Die physikalischen Konstanten hängen ausschließlich von den thermodynamischen Größen Druck und Temperatur ab. Das bedeutet, sie sind insbesondere nicht direkt von unserer Auswahl an Parametern abhängig.

Die Ableitung des Wasserdampf-Sättigungsdampfdrucks aus Gleichung (2.4) lautet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} p_s = & \left(-6763.22/T - 4.210/T + 0.000367 \right. \\ & + 0.0415 \operatorname{sech}^2(0.0415(T - 218.8)) \\ & \cdot (53.878 - 1331.22/T - 9.44523 \log(T) + 0.014025) \\ & + \tanh(0.0415(T - 218.8)) \\ & \left. \cdot (1331.22/T^2 - 9.44523/T + 0.014025) \right) \cdot p_s. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Die Ableitungen der Diffusivität aus Gleichung (2.16) lauten:

$$\frac{\partial}{\partial p} d = 4\pi \left(\frac{3}{4\pi\rho_l} \right)^{1/3} \frac{\partial D}{\partial p} G + 4\pi \left(\frac{3}{4\pi\rho_l} \right)^{1/3} D \frac{\partial G}{\partial p}, \quad (5.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} d = 4\pi \left(\frac{3}{4\pi\rho_l} \right)^{1/3} \frac{\partial D}{\partial T} G + 4\pi \left(\frac{3}{4\pi\rho_l} \right)^{1/3} D \frac{\partial G}{\partial T}. \quad (5.10)$$

Die Ableitungen der Diffusionskonstanten aus Gleichung (2.11) sind:

$$\frac{\partial}{\partial p} D = -D_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1.94} \frac{p_*}{p^2}, \quad (5.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} D = 1.94 D_0 T^{0.94} \left(\frac{1}{T_0} \right)^{1.94} \frac{p_*}{p}. \quad (5.12)$$

Die Ableitung der Wärmeleitfähigkeit aus Gleichung (2.13) ist:

$$\frac{\partial}{\partial T} K = \frac{3}{2} \frac{a_K T^{1/2}}{T + b_K 10^{c_K/T}} - \frac{a_K T^{3/2} (1 - b_K \log(10) \frac{c_K}{T^2} 10^{c_K/T})}{(T + b_K 10^{c_K/T})^2} \quad (5.13)$$

5. Parameteridentifikation

Die Ableitungen des Einflusses latenter Wärme aus Gleichung (2.12) lauten:

$$\frac{\partial}{\partial p} G = - \left[\left(\frac{L}{R_v T} - 1 \right) \frac{L p_s}{R_v T^2} \frac{D}{K} + 1 \right]^{-2} \left(\frac{L}{R_v T} - 1 \right) \frac{L p_s}{R_v T^2} \frac{1}{K} \frac{\partial D}{\partial p}, \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} G = & - \left[\left(\frac{L}{R_v T} - 1 \right) \frac{L p_s}{R_v T^2} \frac{D}{K} + 1 \right]^{-2} \left[- \frac{L}{R_v T^2} \frac{L p_s}{R_v T^2} \frac{D}{K} \right. \\ & + \left(\frac{L}{R_v T} - 1 \right) \frac{\partial p_s}{\partial T} \frac{L}{R_v T^2} \frac{D}{K} - 2 \left(\frac{L}{R_v T} - 1 \right) \frac{L p_s}{R_v T^3} \frac{D}{K} \\ & \left. + \left(\frac{L}{R_v T} - 1 \right) \frac{L p_s}{R_v T^2} \frac{1}{K} \frac{\partial D}{\partial T} - \left(\frac{L}{R_v T} - 1 \right) \frac{L p_s}{R_v T^2} \frac{D}{K^2} \frac{\partial K}{\partial T} \right]. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Die Ableitung des dynamischen Viskosität der Luft aus Gleichung (2.14) lautet:

$$\frac{\partial}{\partial T} \mu = \frac{3}{2} \frac{\mu_0 T^{1/2}}{T + T_\mu} - \frac{\mu_0 T^{3/2}}{(T + T_\mu)^2}. \quad (5.16)$$

Die Ableitungen der Konstante der Verdunstung aus Gleichung (2.18) sind:

$$\frac{\partial}{\partial p} b_E = b_v \frac{1}{6} \left(\frac{6\rho}{\mu D^2 \pi \rho_l} \right)^{-5/6} \left(\frac{6}{\mu D^2 \pi \rho_l} \frac{\partial \rho}{\partial p} - \frac{12\rho \mu D \frac{\partial D}{\partial p} \pi \rho_l}{(\mu D^2 \pi \rho_l)^2} \right), \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} b_E = & b_v \frac{1}{6} \left(\frac{6\rho}{\mu D^2 \pi \rho_l} \right)^{-5/6} \left(\frac{6}{\mu D^2 \pi \rho_l} \frac{\partial \rho}{\partial T} \right. \\ & \left. - \frac{6\rho}{(\mu D^2 \pi \rho_l)^2} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} D^2 \pi \rho_l + 2\mu D \frac{\partial D}{\partial T} \pi \rho_l \right) \right). \end{aligned} \quad (5.18)$$

5.1.7. Ableitungen der algebraischen Bedingungen aus (2.37) bis (2.39)

Die Ableitungen der Dichte der Luft und der idealen Gasgleichung aus Gleichung (2.38) lauten:

$$\frac{\partial}{\partial p}\rho = \frac{1}{RT}, \quad (5.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial T}\rho = -\frac{p}{RT^2}. \quad (5.20)$$

Die Ableitungen der Endgeschwindigkeit eines durchschnittlichen Regentropfens aus Gleichung (2.39) sind:

$$\frac{\partial}{\partial q_r}v_t = \alpha\beta\left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r}\right)^{\beta-1}\left(\frac{m_t}{q_r + m_t n_r} - \frac{m_t q_r}{(q_r + m_t n_r)^2}\right)\left(\frac{\rho_*}{\rho}\right)^{1/2}, \quad (5.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial n_r}v_t = -\alpha\beta\left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r}\right)^{\beta-1}\frac{m_t^2 q_r}{(q_r + m_t n_r)^2}\left(\frac{\rho_*}{\rho}\right)^{1/2}, \quad (5.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial p}v_t = -\alpha\frac{1}{2}\left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r}\right)^\beta\left(\frac{\rho_*}{\rho^3}\right)^{1/2}\frac{\partial\rho}{\partial p}, \quad (5.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial T}v_t = -\alpha\frac{1}{2}\left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r}\right)^\beta\left(\frac{\rho_*}{\rho^3}\right)^{1/2}\frac{\partial\rho}{\partial T}, \quad (5.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha}v_t = \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r}\right)^\beta\left(\frac{\rho_*}{\rho}\right)^{1/2},$$

$$\frac{\partial}{\partial m_t}v_t = \alpha\beta\left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r}\right)^{\beta-1}\left(\frac{m_t}{q_r + m_t n_r} - \frac{m_t n_r q_r}{(q_r + m_t n_r)^2}\right)\left(\frac{\rho_*}{\rho}\right)^{1/2},$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta}v_t = \alpha\left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r}\right)^\beta\left(\frac{\rho_*}{\rho}\right)^{1/2}\log\left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r}\right).$$

Die Fallgeschwindigkeit v_q der Masse q_r unterscheidet sich lediglich um den Parameter α_q von der Endgeschwindigkeit v_t . Trotzdem zeigen wir alle partiellen

5. Parameteridentifikation

Ableitungen von v_q aus Gleichung (2.32):

$$\frac{\partial}{\partial q_r} v_q = \alpha_q \beta \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta-1} \left(\frac{m_t}{q_r + m_t n_r} - \frac{m_t q_r}{(q_r + m_t n_r)^2} \right) \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2} \quad (5.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial n_r} v_q = -\alpha_q \beta \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta-1} \frac{m_t^2 q_r}{(q_r + m_t n_r)^2} \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2} \quad (5.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial p} v_q = -\alpha_q \frac{1}{2} \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta} \left(\frac{\rho_*}{\rho^3} \right)^{1/2} \frac{\partial \rho}{\partial p} \quad (5.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} v_q = -\alpha_q \frac{1}{2} \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta} \left(\frac{\rho_*}{\rho^3} \right)^{1/2} \frac{\partial \rho}{\partial T} \quad (5.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_q} v_q = \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta} \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2}$$

$$\frac{\partial}{\partial m_t} v_q = \alpha_q \beta \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta-1} \left(\frac{m_t}{q_r + m_t n_r} - \frac{m_t n_r q_r}{(q_r + m_t n_r)^2} \right) \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2}$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} v_q = \alpha_q \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta} \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2} \log \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)$$

5. Parameteridentifikation

Die Fallgeschwindigkeit v_n der Anzahl n_r aus Gleichung (2.33) unterscheidet sich ebenfalls nur um den Parameter α_n von der Endgeschwindigkeit v_t . Analog listen wir ebenfalls alle partiellen Ableitungen dieser algebraischen Bedingung auf:

$$\frac{\partial}{\partial q_r} v_n = \alpha_n \beta \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta-1} \left(\frac{m_t}{q_r + m_t n_r} - \frac{m_t q_r}{(q_r + m_t n_r)^2} \right) \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2}, \quad (5.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial n_r} v_n = -\alpha_n \beta \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta-1} \frac{m_t^2 q_r}{(q_r + m_t n_r)^2} \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2}, \quad (5.30)$$

$$\frac{\partial}{\partial p} v_n = -\alpha_n \frac{1}{2} \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta} \left(\frac{\rho_*}{\rho^3} \right)^{1/2} \frac{\partial \rho}{\partial p}, \quad (5.31)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} v_n = -\alpha_n \frac{1}{2} \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta} \left(\frac{\rho_*}{\rho^3} \right)^{1/2} \frac{\partial \rho}{\partial T}, \quad (5.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_n} v_n = \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta} \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2},$$

$$\frac{\partial}{\partial m_t} v_n = \alpha_n \beta \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta-1} \left(\frac{m_t}{q_r + m_t n_r} - \frac{m_t n_r q_r}{(q_r + m_t n_r)^2} \right) \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2},$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} v_n = \alpha_n \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right)^{\beta} \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2} \log \left(\frac{m_t q_r}{q_r + m_t n_r} \right).$$

5. Parameteridentifikation

Die partiellen Ableitungen der Wolkentropfen-Anzahlkonzentration n_c aus Gleichung (2.37) lauten:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial q_c} n_c &= \frac{\frac{1}{N_\infty m_0}}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{q_c}{m_0} \coth\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right) \\
 &\quad - \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{\left(1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}\right)^2} \left(\frac{1}{N_\infty m_0} + \frac{2q_c}{N_\infty^2 m_0^2}\right) \frac{q_c}{m_0} \coth\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right) \\
 &\quad + \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{1}{m_0} \coth\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right) \\
 &\quad - \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{q_c}{m_0} \frac{1}{N_0 m_0} \operatorname{csch}^2\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right), \tag{5.33}
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial N_0} n_c = \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{q_c^2}{N_0^2 m_0^2} \operatorname{csch}^2\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right),$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial N_\infty} n_c &= - \frac{1}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2} \coth\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right) \\
 &\quad + \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{\left(1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}\right)^2} \left(\frac{q_c m_0}{N_\infty^2 m_0^2} + 2 \frac{q_c^2}{N_\infty^3 m_0^2}\right) \frac{q_c}{m_0} \coth\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial m_0} n_c &= - \frac{q_c N_\infty}{N_\infty^2 m_0^2} \frac{1}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{q_c}{m_0} \coth\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right) \\
 &\quad + \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{\left(1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}\right)^2} \left(\frac{q_c N_\infty}{N_\infty^2 m_0^2} + 4 \frac{q_c^2 N_\infty}{N_\infty^2 m_0^2}\right) \frac{q_c}{m_0} \coth\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right) \\
 &\quad - \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{q_c}{m_0^2} \coth\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right) \\
 &\quad + \frac{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0}}{1 + \frac{q_c}{N_\infty m_0} + \frac{q_c^2}{N_\infty^2 m_0^2}} \frac{q_c}{m_0} \frac{q_c N_0}{N_0^2 m_0^2} \operatorname{csch}^2\left(\frac{q_c}{N_0 m_0}\right).
 \end{aligned}$$

5.1.8. Partielle Ableitungen der Niederschlagsrate P aus (4.17)

Die Funktion P berechnet aus den Systemgrößen y die resultierende Niederschlagsrate. Das heißt, sie bildet die Lösung des Anfangswertproblems in den Raum unserer Messgröße ab. Daher benötigen wir ihre partiellen Ableitungen in Richtung der Systemgrößen sowie in Richtung solcher Parameter, von denen P unmittelbar abhängt:

$$\frac{\partial P}{\partial q_r} = 1000 \frac{\rho}{\rho_l} \frac{\partial v_q}{\partial q_r} q_r + 1000 \frac{\rho}{\rho_l} v_q,$$

$$\frac{\partial P}{\partial n_r} = 1000 \frac{\rho}{\rho_l} \frac{\partial v_q}{\partial n_r} q_r,$$

$$\frac{\partial P}{\partial p} = 1000 \frac{1}{\rho_l} \frac{\partial \rho}{\partial p} v_q q_r + 1000 \frac{\rho}{\rho_l} \frac{\partial v_q}{\partial p} q_r,$$

$$\frac{\partial P}{\partial T} = 1000 \frac{1}{\rho_l} \frac{\partial \rho}{\partial T} v_q q_r + 1000 \frac{\rho}{\rho_l} \frac{\partial v_q}{\partial T} q_r,$$

$$\frac{\partial P}{\partial \alpha_q} = 1000 \frac{\rho}{\rho_l} \frac{\partial v_q}{\partial \alpha_q} q_r,$$

$$\frac{\partial P}{\partial m_t} = 1000 \frac{\rho}{\rho_l} \frac{\partial v_q}{\partial m_t} q_r,$$

$$\frac{\partial P}{\partial \beta} = 1000 \frac{\rho}{\rho_l} \frac{\partial v_q}{\partial \beta} q_r.$$

Die Ableitungen in Richtung der Systemgrößen $y = (q_v \ q_c \ q_r \ n_r \ p \ T)^T$ fassen wir in der Jacobi-Matrix

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{\partial P}{\partial q_r} & \frac{\partial P}{\partial n_r} & \frac{\partial P}{\partial p} & \frac{\partial P}{\partial T} \end{bmatrix}$$

zusammen. Die Jacobi-Matrix in Richtung der Parameter hat die Form

$$\frac{\partial P}{\partial q} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial P}{\partial \alpha_q} & 0 & \frac{\partial P}{\partial m_t} & \frac{\partial P}{\partial \beta} \end{bmatrix}.$$

Die verwendete Reihenfolge der Systemparameter ist hierbei $q = (k_1 \ k_2 \ N_0 \ m_0 \ N_\infty \ \alpha \ \alpha_q \ \alpha_n \ m_t \ \beta)^T$.

5.2. Partielle Ableitungen der Quellen und Senken f

Es folgen die partiellen Ableitungen der Quellen und Senken f aus (3.2a) bis (3.2f) komponentenweise:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f_v}{\partial y} &= \begin{bmatrix} -\frac{\partial C}{\partial q_v} - \frac{\partial E}{\partial q_v} \\ -\frac{\partial C}{\partial q_c} \\ -\frac{\partial E}{\partial q_r} \\ -\frac{\partial E}{\partial n_r} \\ -\frac{\partial C}{\partial p} - \frac{\partial E}{\partial p} \\ -\frac{\partial C}{\partial T} - \frac{\partial E}{\partial T} \end{bmatrix}^T, & \frac{\partial f_c}{\partial y} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial C}{\partial q_c} - \frac{\partial A_1}{\partial q_c} - \frac{\partial A_2}{\partial q_c} \\ -\frac{\partial A_2}{\partial q_r} \\ -\frac{\partial A_2}{\partial n_r} \\ \frac{\partial C}{\partial p} - \frac{\partial A_1}{\partial p} - \frac{\partial A_2}{\partial p} \\ \frac{\partial C}{\partial T} - \frac{\partial A_1}{\partial T} - \frac{\partial A_2}{\partial T} \end{bmatrix}^T, \\
 \frac{\partial f_q}{\partial y} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial q_v} \\ \frac{\partial A_1}{\partial q_c} + \frac{\partial A_2}{\partial q_c} \\ \frac{\partial A_2}{\partial q_r} + \frac{\partial E}{\partial q_r} - \frac{\partial S}{\partial q_r} \\ \frac{\partial A_2}{\partial n_r} + \frac{\partial E}{\partial n_r} - \frac{\partial S}{\partial n_r} \\ \frac{\partial A_1}{\partial p} + \frac{\partial A_2}{\partial p} + \frac{\partial E}{\partial p} - \frac{\partial S}{\partial p} \\ \frac{\partial A_1}{\partial T} + \frac{\partial A_2}{\partial T} + \frac{\partial E}{\partial T} - \frac{\partial S}{\partial T} \end{bmatrix}^T, & \frac{\partial f_n}{\partial y} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial E'}{\partial q_v} \\ \frac{\partial A_1'}{\partial q_c} \\ \frac{\partial E'}{\partial q_r} - \frac{\partial S'}{\partial q_r} \\ \frac{\partial E'}{\partial n_r} - \frac{\partial S'}{\partial n_r} \\ \frac{\partial A_1'}{\partial p} + \frac{\partial E'}{\partial p} - \frac{\partial S'}{\partial p} \\ \frac{\partial A_1'}{\partial T} + \frac{\partial E'}{\partial T} - \frac{\partial S'}{\partial T} \end{bmatrix}^T, \\
 \frac{\partial f_p}{\partial y} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -g \frac{\partial \rho}{\partial p} w \\ -g \frac{\partial \rho}{\partial T} w \end{bmatrix}^T, & \frac{\partial f_p}{\partial y} &= \begin{bmatrix} \frac{L}{c_p} \frac{\partial C}{\partial q_v} + \frac{L}{c_p} \frac{\partial E}{\partial q_v} \\ \frac{L}{c_p} \frac{\partial C}{\partial q_c} \\ \frac{L}{c_p} \frac{\partial E}{\partial q_r} \\ \frac{L}{c_p} \frac{\partial E}{\partial n_r} \\ \frac{L}{c_p} \frac{\partial C}{\partial p} + \frac{L}{c_p} \frac{\partial E}{\partial p} \\ \frac{L}{c_p} \frac{\partial C}{\partial T} + \frac{L}{c_p} \frac{\partial E}{\partial T} \end{bmatrix}^T.
 \end{aligned}$$

Zusammenfassend ergibt sich daraus die Matrix

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_v}{\partial y} & \frac{\partial f_c}{\partial y} & \frac{\partial f_q}{\partial y} & \frac{\partial f_n}{\partial y} & \frac{\partial f_p}{\partial y} & \frac{\partial f_T}{\partial y} \end{bmatrix}^T \quad (5.34)$$

5. Parameteridentifikation

als Ableitung in Richtung der Systemgrößen y . Bezüglich der Parameter q gilt

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f}{\partial k_1} &= \left[0 \quad -\frac{\partial A_1}{\partial k_1} \quad \frac{\partial A_1}{\partial k_1} \quad \frac{\partial A'_1}{\partial k_1} \quad 0 \quad 0 \right]^T, \\
 \frac{\partial f}{\partial k_2} &= \left[0 \quad -\frac{\partial A_2}{\partial k_2} \quad \frac{\partial A_2}{\partial k_2} \quad 0 \quad 0 \quad 0 \right]^T, \\
 \frac{\partial f}{\partial N_0} &= \left[-\frac{\partial C}{\partial N_0} \quad \frac{\partial C}{\partial N_0} \quad 0 \quad \frac{\partial A'_1}{\partial N_0} \quad 0 \quad \frac{L}{c_p} \frac{\partial C}{\partial N_0} \right]^T, \\
 \frac{\partial f}{\partial m_0} &= \left[-\frac{\partial C}{\partial m_0} \quad \frac{\partial C}{\partial m_0} \quad 0 \quad \frac{\partial A'_1}{\partial m_0} \quad 0 \quad \frac{L}{c_p} \frac{\partial C}{\partial m_0} \right]^T, \\
 \frac{\partial f}{\partial N_\infty} &= \left[-\frac{\partial C}{\partial N_\infty} \quad \frac{\partial C}{\partial N_\infty} \quad 0 \quad \frac{\partial A'_1}{\partial N_\infty} \quad 0 \quad \frac{L}{c_p} \frac{\partial C}{\partial N_\infty} \right]^T, \\
 \frac{\partial f}{\partial \alpha} &= \left[-\frac{\partial E}{\partial \alpha} \quad -\frac{\partial A_2}{\partial \alpha} \quad \frac{\partial A_2}{\partial \alpha} + \frac{\partial E}{\partial \alpha} \quad \frac{\partial E'}{\partial \alpha} \quad 0 \quad \frac{L}{c_p} \frac{\partial E}{\partial \alpha} \right]^T, \\
 \frac{\partial f}{\partial \alpha_q} &= \left[0 \quad 0 \quad \frac{\partial S}{\partial \alpha_q} \quad 0 \quad 0 \quad 0 \right]^T, \\
 \frac{\partial f}{\partial \alpha_n} &= \left[0 \quad 0 \quad 0 \quad \frac{\partial S'}{\partial \alpha_n} \quad 0 \quad 0 \right]^T, \\
 \frac{\partial f}{\partial m_t} &= \left[-\frac{\partial E}{\partial m_t} \quad -\frac{\partial A_2}{\partial m_t} \quad \frac{\partial A_2}{\partial m_t} + \frac{\partial E}{\partial m_t} - \frac{\partial S}{\partial m_t} \quad \frac{\partial E'}{\partial m_t} - \frac{\partial S'}{\partial m_t} \quad 0 \quad \frac{L}{c_p} \frac{\partial E}{\partial m_t} \right]^T, \\
 \frac{\partial f}{\partial \beta} &= \left[-\frac{\partial E}{\partial \beta} \quad -\frac{\partial A_2}{\partial \beta} \quad \frac{\partial A_2}{\partial \beta} + \frac{\partial E}{\partial \beta} - \frac{\partial S}{\partial \beta} \quad \frac{\partial E'}{\partial \beta} - \frac{\partial S'}{\partial \beta} \quad 0 \quad \frac{L}{c_p} \frac{\partial E}{\partial \beta} \right]^T,
 \end{aligned}$$

welche sich zur Matrix

$$\frac{\partial f}{\partial q} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial k_1} & \frac{\partial f}{\partial k_2} & \frac{\partial f}{\partial N_0} & \frac{\partial f}{\partial m_0} & \frac{\partial f}{\partial N_\infty} & \frac{\partial f}{\partial \alpha} & \frac{\partial f}{\partial \alpha_q} & \frac{\partial f}{\partial \alpha_n} & \frac{\partial f}{\partial m_t} & \frac{\partial f}{\partial \beta} \end{bmatrix}$$

zusammensetzen lassen. Somit stehen alle Komponenten der Gleichung (5.5) zur numerischen Berechnung zur Verfügung.

Bemerkung 5.2. Im Produkt der Ableitungen des einfallenden Regens S_{in} und S'_{in} in Richtung der Systemvariablen y mit den Ableitungen der Systemvariablen in Richtung der Parameter $\frac{dy}{dq}$ ist zu beachten, dass diese im Gegensatz zu den übrigen Termen in (5.5) von den Werten der Box darüber abhängen. Das bedeutet konkret, in unserer Notation des numerischen Schemas ist

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial S_{\text{in}}}{\partial y} \frac{dy}{dq} &= \frac{1}{\rho_k} \frac{\partial}{\partial y} (\rho_{k-1} S_{k-1,\text{out}}) \frac{dy}{dq} \Big|_{k-1} - \frac{\rho_{k-1}}{\rho_k^2} S_{k-1,\text{out}} \frac{\partial \rho_k}{\partial y} \frac{dy}{dq} \Big|_k, \\
 \frac{\partial S'_{\text{in}}}{\partial y} \frac{dy}{dq} &= \frac{1}{\rho_k} \frac{\partial}{\partial y} (\rho_{k-1} S'_{k-1,\text{out}}) \frac{dy}{dq} \Big|_{k-1} - \frac{\rho_{k-1}}{\rho_k^2} S'_{k-1,\text{out}} \frac{\partial \rho_k}{\partial y} \frac{dy}{dq} \Big|_k,
 \end{aligned}$$

für eine Box k mit einfallendem Regen aus der darüber liegenden Box $k-1$.

Bemerkung 5.3. In Simulationen einer Luftsäule ändern wir die Höhen der einzelnen Boxen, um die Masse der Luft im Inneren der Säule so zu erhalten, wie

5. Parameteridentifikation

wir es von theoretischer Seite in Gleichung (2.40) und von numerischer Seite in Gleichung (4.8) festgehalten haben. Resultat dieser Höhenänderung ist eine Modifizierung der vertikalen Geschwindigkeit aller Boxen mit Ausnahme der untersten Box. Das bedeutet, die jeweiligen vertikalen Geschwindigkeiten sind ebenfalls von den Systemgrößen abhängig und müssen daher für den Gradienten (5.2) gleichermaßen abgeleitet werden. Konkret gibt es somit für die sich in Höhe k befindende Box die Matrix

$$W_k = \left[0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad -g\rho \frac{\partial w_k}{\partial q} \quad -\gamma \frac{\partial w_k}{\partial q} \right]^T$$

als zusätzlichen Summanden in der rechten Seite der Differentialgleichung (5.5), sodass dort

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{dy_k}{dq} = \left(\frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dq} + \frac{\partial f}{\partial q} \right) \Big|_k + W_k \quad (5.35)$$

gilt, mit den Ableitungen

$$\begin{aligned} \frac{dw_k}{dq} \Big|_{t=t_i} &= \frac{1}{\tau} \sum_{l=k+1}^{\text{Boden}} \frac{m_{a,l}}{A} \left(\frac{1}{\rho_{l,i}^2} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_{l,t=t_i} - \frac{1}{\rho_{l,i+1}^2} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_{l,t=t_{i+1}} \right) \frac{dp}{dq} \Big|_{l,t=t_i} \\ &+ \frac{1}{\tau} \sum_{l=k+1}^{\text{Boden}} \frac{m_{a,l}}{A} \left(\frac{1}{\rho_{l,i}^2} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_{l,t=t_i} - \frac{1}{\rho_{l,i+1}^2} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_{l,t=t_{i+1}} \right) \frac{dT}{dq} \Big|_{l,t=t_i}, \end{aligned}$$

wobei $m_{a,k}$ die Masse Luft der Box k bezeichnet. Da wir die Boxen von oben nach unten nummerieren, beginnt die Summe mit $k+1$ und geht bis zum Boden der Säule.

5.3. Konventionelle Optimierungsmethoden

Tatsächlich kommt die Software vieler Algorithmen zur Minimierung des Fehlers (5.1) ohne die explizite Bereitstellung einer Ableitung aus. Die Abstiegsrichtung (5.2) wird dann mit Hilfe von Differenzenquotienten in Bezug auf Rechenzeit sehr viel aufwändiger approximiert. Uns steht jedoch die gesamte Ableitung (5.4), berechnet über die numerische Lösung der Differentialgleichung (5.5), zur Verfügung. Das bedeutet, wir können unsere Ableitung im Test gegen die Approximation der Software erproben. Da es sich bei unserem Anfangswertproblem (3.1) keinesfalls um ein lineares Problem handelt und wir zudem nur nicht-negative Parameter suchen, ist der Algorithmus unserer Wahl *lsqnonlin* aus der „Optimization ToolboxTM“ von MATLAB, siehe Webseite [4] mit Instruktionen zur Verwendung des Algorithmus. Eine Dokumentation des Algorithmus findet sich in groben Zügen auf der Homepage des Entwicklers MathWorks[®], siehe [5].

5.3.1. Optimierung mit Trust-Region-Verfahren

Die Strategie des *lsqnonlin*-Algorithmus beruht auf einem Trust-Region-Algorithmus, siehe [35], welcher um Box-förmige Bedingungen

$$l \leq x \leq u \quad (5.36)$$

mit der unteren Schranke l und oberen Schranke u an die gesuchten Werte x erweitert wurde. Gelöst wird die Minimierungsaufgabe (5.3) für eine quadratische Näherung an ε_P aus Gleichung (5.1), dabei handelt es sich um die ersten beiden Terme der Taylor-Entwicklung. Gesucht wird in einem zweidimensionalen Unterraum aufgespannt vom Gradienten und einem zweiten Vektor, welcher mit Hilfe eines präkonditionierten Verfahrens der konjugierten Gradienten (PCG-Verfahren, vergleiche [23]) gesucht wird. Anschließend wird in diesem Unterraum mit einem anhand der Karush-Kuhn-Tucker-Bedingung (Box-förmige Bedingungen, siehe [20]) skaliertem Newton-Verfahren minimiert.

Die Schranken l und u sind vor allem erforderlich, um nicht-negative Parameter zu gewährleisten, denn ein negativer Parameter würde unter Umständen bedeuten, dass die Richtung eines Wolkenprozesses gänzlich umgekehrt wird. Weiterhin kann die Kenntnis über obere und untere Schranken dabei helfen, die Konvergenzgeschwindigkeit zu verbessern oder im schlechtesten Fall die Konvergenz zu ermöglichen.

5.3.2. Bereitstellung einer Ableitung

Nachdem uns alle notwendigen partiellen Ableitungen als Formel zur Verfügung stehen, können wir die Ableitung $\frac{dP}{dq}$ in Richtung der Parameter über Gleichung (5.4) berechnen. Denn den Faktor $\frac{dy}{dq}$ können wir mit einem expliziten Euler-Verfahren über die numerische Lösung der Differentialgleichung (5.5) für die unterste Box und über die numerische Lösung der Differentialgleichung (5.35) für alle höheren Boxen berechnen. Für eine einzelne Box der Höhe 2000 m mit den Anfangswerten (4.18), die das vertikale Geschwindigkeitsprofil aus Abbildung 4.2 durchläuft, ergeben sich die partiellen Ableitungen in Abbildung 5.1.

Grundsätzlich ist zu erkennen, dass diese Ableitungen den Anschein von glatten Funktionen erwecken und eine sehr ausgeprägte Richtung im Bereich des dazu passenden Niederschlags aus Abbildung 4.9 aufweisen. Dennoch zeigen die meisten Ableitungen im Bereich des Verschwindens des Niederschlags, das heißt, im Bereich der negativen vertikalen Geschwindigkeit und im Bereich des Verschwindens des bereits stark reduzierten q_c , einen Ausschlag gegensätzlich zu ihrer hauptsächlich ausgeprägten Richtung.

In den Bereichen des Entstehens und des Verschwindens des Niederschlags P zeigen einige der involvierten partiellen Ableitungen, die an der Berechnung von $\frac{dP}{dq}$ beteiligt sind, ein singuläres Verhalten, wie bereits in Abschnitt 5.1.1 und in

5. Parameteridentifikation

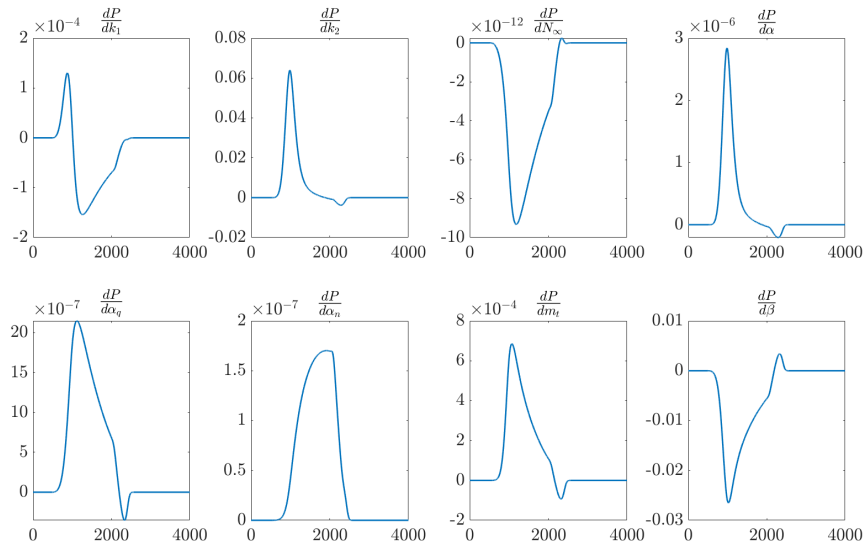


Abbildung 5.1.: Ableitungen des Niederschlags P in Richtung der Parameter (Ordinate) als Funktionen der Zeit (Abszisse in der Einheit s) im Intervall der Simulation aus Abschnitt 4.2, berechnet mit Hilfe der Gleichung (5.4) und der Differentialgleichung (5.5) für die von uns hergeleiteten Werte der Parameter q .

Gleichung (5.7) angesprochen. Von diesen Singularitäten ist in Abbildung 5.1 nichts mehr zu erkennen, dennoch ist die Berechnung dieser wesentlich für die richtige Approximation der Ableitungen. Insbesondere muss unsere numerische Berechnung das steile Verhalten auflösen. Abbildung 5.2 wirft einen Blick auf das Verhalten unserer numerischen Lösung für $\frac{\partial C}{\partial q_c}$ in der Simulation aus Abschnitt 4.2.

Es kommt zu einem rapiden Wechsel von circa 16 Größenordnungen nach einem vorangegangenen Vorzeichenwechsel bei circa 2000 s. Dieses extreme Verhalten sorgt für Fehler in der Approximation der Ableitung $\frac{\partial f}{\partial y}$ aus Gleichung (5.34) als Teil der Differentialgleichung (5.5). Diese Fehler können sich unter Umständen durch den restlichen Verlauf einer konkreten Simulation fortpflanzen und so auch die übrigen Ableitungen im weiteren Verlauf verfälschen.

Wir mussten feststellen, dass für unsere Implementierung des Modells diese durch die Singularitäten verursachten Fehler aufgrund der Maschinengenauigkeit

$$\text{eps} \approx 10^{-16} \quad (5.37)$$

eine geeignete Approximation der Ableitung nicht für alle Szenarien zulassen. Insbesondere kleinere vertikale Auflösungen der Säule/Box, kleinere Werte der Luftmasse m_a oder, besonders gravierend, veränderte Werte der Parameter haben regelmäßig zu inadäquat approximierten Ableitungen $\frac{dP}{dq}$ geführt.

Da wir im Besonderen die Werte der Parameter innerhalb der Minimierung nicht

5. Parameteridentifikation

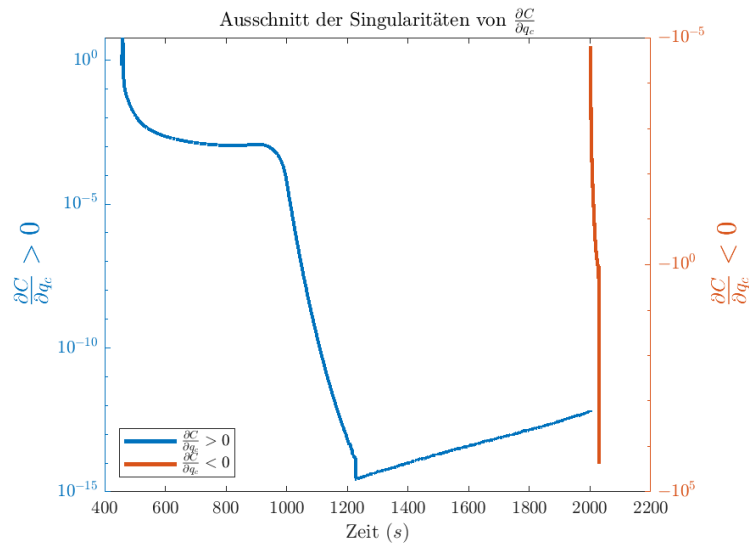


Abbildung 5.2.: Das Verhalten von $\frac{\partial C}{\partial q_c}$ im Bereich positiver Werte von q_c für die Simulation einer Box aus Abschnitt 4.2. Gezeigt wird der Betrag von $\frac{\partial C}{\partial q_c}$, obwohl es sich ab circa 2000s um negative Werte handelt, um eine logarithmische Skala auf der y-Achse zeigen zu können.

weiter kontrollieren möchten und uns für realistischere Anwendungen auch für kleinere Boxen in der Säule interessieren, bringt uns dieses Problem in die Situation, Messwerte im Bereich der Singularitäten umgehen zu wollen. Dagegen spricht jedoch, dass die Abhängigkeit der Systemvariablen und damit die Abhängigkeit der Messwerte von den Parametern gerade in den Bereichen der Singularitäten besonders intensiv ist und daher eine Rekonstruktion der Parameter durch Messwerte in der Nähe der Singularität erst vielversprechend wird. Deshalb haben wir uns entschlossen im Folgenden hauptsächlich ein Szenario zu betrachten, das nur eine Singularität besitzt. Diese tritt erst zu einem fortgeschrittenen Zeitpunkt des Szenarios auf um Fehlerfortpflanzungen der Fehler, die in der Nähe der Singularität entstehen, in der numerischen Lösung kleinzuhalten. Trotzdem werfen wir einen kurzen Blick auf die Optimierung im bereits in Abschnitt 4.2 untersuchten Szenario mit den zwei Singularitäten aus Abbildung 5.2. Während der Experimente vergleichen wir die Ergebnisse unserer bereitgestellten Ableitung von $\frac{dP}{dq}$ mit denen, die der Algorithmus mit der vom Hersteller mitgelieferten Approximation der Ableitung durch Differenzenquotienten erzielt. Bei dieser Approximation der Ableitung durch Differenzenquotienten müssen zu keiner Zeit Singularitäten wie in Abbildung 5.2 bestimmt werden. Dafür ist die Rechenzeit mit dieser Methode etwas intensiver.

Bemerkung 5.4. Es hat sich als nützlich erwiesen, die rechte Seite der Differentialgleichung 5.5 zur approximativen Lösung der Ableitung $\frac{dy}{dq}$ durch ein

5. Parameteridentifikation

explizites Euler-Verfahren mit der Mittelpunkformel, vergleiche [23], an den komponentenweisen Mittelwerten

$$y_{i+1/2} = \frac{y_i + y_{i+1}}{2}$$

des aktuellen und des letzten Zeitschrittes t_{i+1} und t_i auszuwerten.

5.3.3. Erstes Experiment (Box)

Als ersten Test der Methodik inszenieren wir ein sogenanntes „inverse crime“ [13]. Das heißt konkret, wir verwenden unser Modell um mit den präsentierten Werten der Parameter q eine Niederschlagsvorhersage \bar{P} zu erstellen. Anschließend stören wir die Werte der Parameter zufällig um ε_q . Diese Störung wählen wir zunächst uniform zwischen null und einem Prozent nach oben oder nach unten um den originalen Wert. Der Algorithmus wird mit diesen komponentenweise gestörten Werten

$$q_{0,j} = \varepsilon_{q,j} q_j, \tag{5.38}$$

siehe Tabelle 5.1, in der Hoffnung gestartet, dass die originalen ungestörten Werte bis auf Maschinengenauigkeit wiedergefunden werden.

Parameter q	Wert	ε_q
k_1	1003	0.994439863421795
k_2	0.8	1.007414646123548
N_∞	$2 \cdot 10^7$	1.008372218158758
α	190.3	1.002234877258053
α_q	350.15	1.005318157129606
α_n	110.37	1.000368359757459
m_t	$1.21 \cdot 10^{-5}$	0.995936010031524
β	4/15	0.993754424573225

Tabelle 5.1.: Die ursprünglichen Werte der Parameter und der Störfaktor für die Anfangswerte der Optimierung im ersten Experiment.

Wir verwenden weiterhin das Beispielprofil der vertikalen Geschwindigkeit w aus Abbildung 4.2 und zur Vermeidung der Singularität im Moment der ersten Übersättigung, starten wir die Simulation diesmal mit den Anfangswerten

$$y_0 = [q_{vs} \quad 10^{-4} \quad 10^{-4} \quad 10^6 \quad p_* \quad T_0]^T. \tag{5.39}$$

Anderweitig bleibt der Experimentaufbau im Vergleich zu Abschnitt 4.2 unverändert.

Die Ableitung (5.4) gibt uns durch Multiplikation mit dem Fehler $\bar{P} - P$ zwischen den Messwerten \bar{P} und der Vorhersage P die Abstiegsrichtung (5.2). Um nicht nur

5. Parameteridentifikation

einen Überblick über den Fehler im Raum der Messwerte zu bekommen, definieren wir zusätzlich noch die gewichtete Metrik

$$\delta_q = \sum_j \left(1 - q_j^{-1} \bar{q}_j\right)^2 \quad (5.40)$$

zwischen den eigentlichen Parameterwerten q und einer Näherung \bar{q} . Der verwendete MATLAB-Algorithmus *lsqnonlin* ermöglicht es, eine der Boxschränken offen zu lassen, indem man den symbolischen Wert ∞ übergibt. In dieser Schreibweise wählen wir daher komponentenweise die Schranken

$$l = 0 \quad \text{und} \quad u = \infty \quad (5.41)$$

für unsere Experimente, da wir lediglich nicht-negative Parameterwerte garantieren wollen.

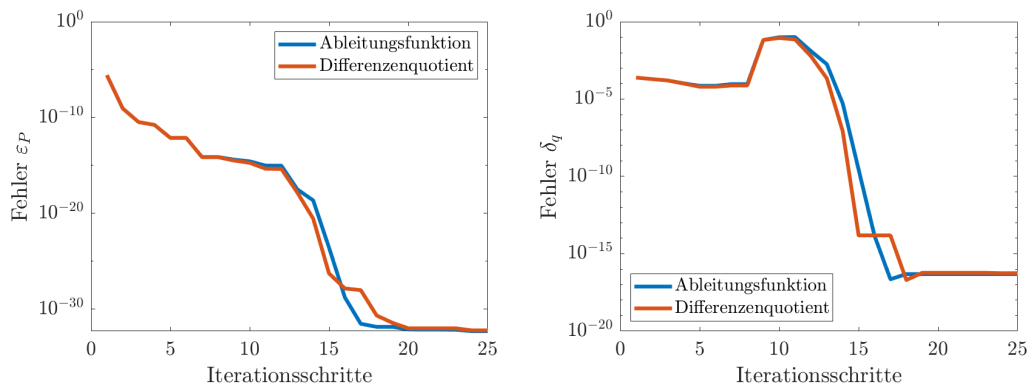


Abbildung 5.3.: Das Verhalten des quadratischen Fehlers ε_P aus Gleichung (5.1) im Messraum und des quadratischen Fehlers δ_q aus Gleichung (5.40) im Parameterraum während der Iteration des ersten Experiments. Zu sehen sind die Kurven für bereitgestellte Ableitungen (blau) versus vom Algorithmus per Differenzenquotient bestimmte Ableitungen (rot).

Im Raum der Messwerte des Niederschlags in Abbildung 5.3 können wir im Laufe der Iterationen der Optimierung durch *lsqnonlin* einen monoton fallenden Fehler ε_P beobachten. Dieser fällt für das Verfahren ohne bereitgestellte Ableitung bereits nach circa 20 Iterationen auf eine Größenordnung von 10^{-33} , das entspricht in etwa dem Quadrat der Maschinengenauigkeit (5.37). Im Fall des Verfahrens mit bereitgestellter Ableitung fällt er in circa 18 Iterationen auf die Größenordnung von 10^{-33} und erreicht damit nur ein wenig schneller diese Marke.

Der Fehler δ_q im Raum der Parameter ist dagegen für keines der Verfahren monoton, wie in Abbildung 5.3 zu beobachten. Selbiges können wir ebenfalls für die schrittweise Rekonstruktion der Parameter in den Graphen der Abbildung 5.4 erkennen. Der Wert eins entspricht in dieser Abbildung dem gesuchten

5. Parameteridentifikation

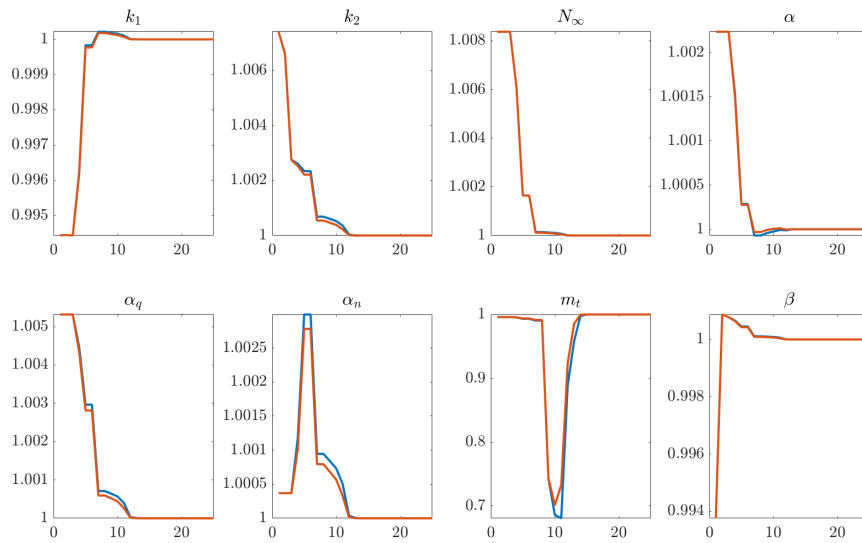


Abbildung 5.4.: Die Näherung der normierten Parameterwerte (Ordinate) nach jedem Iterationsschritt (Abszisse) der Optimierung durch den Algorithmus `lsqnonlin`. Die Werte sind durch die Parameter q , die zur Datenerstellung verwendet wurden, normiert. Die blauen Kurven entsprechen dem Algorithmus mit bereitgestellter Ableitung und die roten dem mit durch Differenzenquotienten bestimmten Ableitungen.

ursprünglichen Wert des jeweiligen Parameters. Nach einer anfänglichen Periode scheinen jedoch alle Graphen ein monotonen Verhalten und eine Konvergenz gegen eins zu entwickeln.

5.3.4. Zweites Experiment (Box)

Wenden wir die Methodik aus Abschnitt 5.3.3 im Szenario aus Abschnitt 4.2 mit den Anfangswerten aus Gleichung (4.18) an, gibt es zwei Zeitpunkte der Simulation, in denen in der Berechnung der Ableitung $\frac{dy}{dq}$ Singularitäten auftreten. Das ist zum einen der Zeitpunkt der initialen Wolkenbildung im Moment der ersten Übersättigung und zum anderen ist es der Zeitpunkt der Wolkenauflösung. Daher stören wir die Parameter in diesem Experiment etwas weniger, das heißt, sie werden zufällig um bis zu ein Promille nach oben oder nach unten gestört, siehe Tabelle 5.2. Die Schranken l und u wählen wir wie zuvor in Gleichung (5.41).

Parameter q	Wert	ε_q
k_1	1003	0.999443986342179
k_2	0.8	1.000741464612355
N_∞	$2 \cdot 10^7$	1.000837221815876
α	190.3	1.000223487725805
α_q	350.15	1.000531815712961
α_n	110.37	1.000036835975746
m_t	$1.21 \cdot 10^{-5}$	0.999593601003152
β	4/15	0.999375442457322

Tabelle 5.2.: Von uns hergeleitete Werte der Parameter und der Störfaktor für die Anfangswerte der Optimierung im zweiten Experiment.

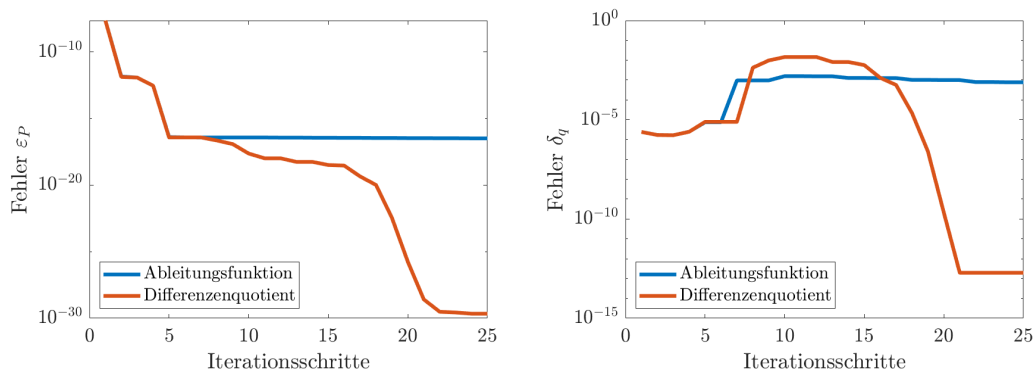


Abbildung 5.5.: Graphen der Fehler ε_P und δ_q im Experiment mit un-
tersättigten Anfangswerten der Simulation. Der Fehler ε_P des Verfahrens mit Ab-
leitungen, die durch numerische Differenzenquotienten bestimmt wurden, senkt
sich nach circa 25 Iterationsschritten auf ein Niveau im Bereich der Maschinenge-
nauigkeit. Im Gegensatz dazu fällt der Fehler des Verfahrens mit den bereitgestellten
Ableitungen nach circa 5 Iterationsschritten nur noch unmerklich.

In Abbildung 5.5 ist zu erkennen, dass das Verfahren mit durch numerische
Differenzenquotienten approximierten Ableitungen die Parameter bereits nach

5. Parameteridentifikation

circa 21 Iterationsschritten recht genau identifiziert hat. Das Verfahren mit unserer bereitgestellten Ableitung zeigt jedoch nach circa 5 Iterationsschritten kaum Veränderungen im Fehler ε_P . Dies ist auf eine unzureichende Approximation der Ableitungen durch unsere Implementierung der bereitgestellten Ableitung zurückzuführen.

5.3.5. Drittes Experiment (Säule)

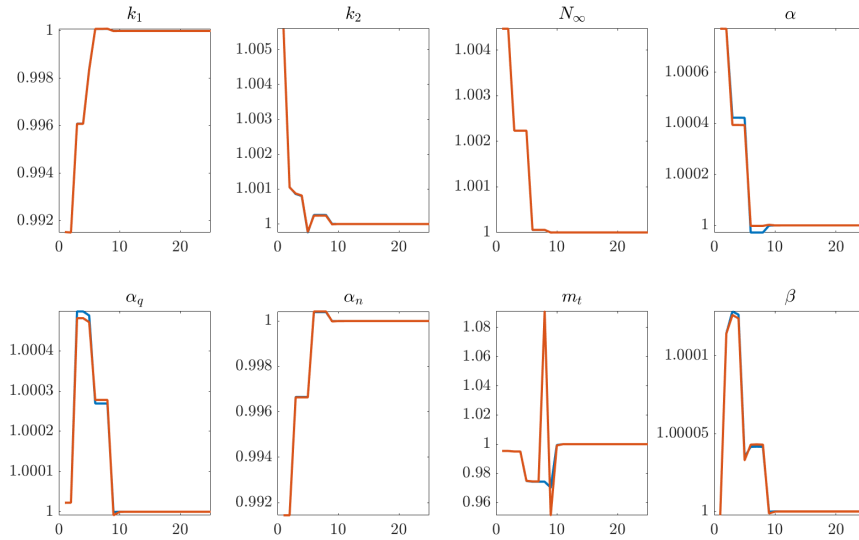


Abbildung 5.6.: Die Näherung der normierten Parameterwerte (Ordinate) nach jedem Iterationsschritt (Abszisse) der Optimierung durch den Algorithmus *lsqnonlin*. Die Werte sind durch die Parameter q , die zur Datenerstellung verwendet wurden, normiert. Die blauen Kurven entsprechen dem Algorithmus mit bereitgestellter Ableitung und die roten dem mit durch Differenzenquotienten bestimmten Ableitungen.

Als Letztes schauen wir uns die Parameteridentifikation an einer Säule an, da diese insbesondere auch für realistische Experimente in durch die Mikrophysik dominierten Situationen der Natur verwendet werden kann. Um Probleme bei der Approximation der Ableitungen zu vermeiden, teilen wir die zu Beginn insgesamt 2000 m hohe Säule in zwei gleich große Boxen à 1000 m Höhe und starten die

5. Parameteridentifikation

Simulationen wieder mit den Anfangswerten

$$y_0 = \begin{bmatrix} q_{vs}(89199.46, 263.16) & q_{vs}(p_*, T_0) \\ 10^{-4} & 10^{-4} \\ 10^{-4} & 10^{-4} \\ 10^6 & 10^6 \\ 89199.46 & p_* \\ 263.16 & T_0 \end{bmatrix}, \quad (5.42)$$

die eine bereits vorhandene Wolke simulieren. Die Startwerte der Parameter für die Iteration der Optimierung durch *lsqnonlin* sind, wie in Gleichung (5.38) beschrieben, durch die Werte in Tabelle 5.3 gestört und die Schranken l und u wählen wir wie in Gleichung (5.41) gezeigt.

Parameter q	Wert	ε_q
k_1	1003	0.991526165787479
k_2	0.8	1.005598375844802
N_∞	$2 \cdot 10^7$	1.004469303556619
α	190.3	1.000769917408209
α_q	350.15	1.000022409273199
α_n	110.37	0.991441022667195
m_t	$1.21 \cdot 10^{-5}$	0.995368779602037
β	4/15	0.999997650016511

Tabelle 5.3.: Von uns hergeleitete Werte der Parameter und der Störfaktor für die Anfangswerte der Optimierung im dritten Experiment.

In diesem Experiment zeigt sich die Methode mit bereitgestellter Ableitung als die bessere Wahl, da sie, wie in Abbildung 5.7 zu erkennen ist, die Parameter etwas genauer bestimmt. Dennoch schafft es auch die Methode mit über Differenzenquotienten bestimmten Ableitungen die Parameter näherungsweise wiederzufinden. Abbildung 5.6 lässt vermuten, dass dieser Unterschied vor allem durch die abweichende Approximation der Ableitung in Richtung des Parameters m_t zustande kommt.

5.3.6. Diskussion der Ergebnisse

Der Aufbau der Experimente 5.3.3, 5.3.4 und 5.3.5 ist so gewählt, dass die grundsätzliche Funktionsweise der Methode zur Rekonstruktion der Parameter gut zu erkennen ist und sich gleichzeitig ihre Problematiken in den Ergebnissen andeuten. Deshalb ist beispielsweise die Boxhöhe noch sehr groß im Verhältnis zu aktuellen vertikalen Auflösungen von Wettervorhersagemodellen. Gerade für die Säule sind feinere Boxhöhen potentiell schwieriger, da Informationen im System über mehr Stationen fehlerfrei transportiert werden müssen um die Ableitungen zu

5. Parameteridentifikation

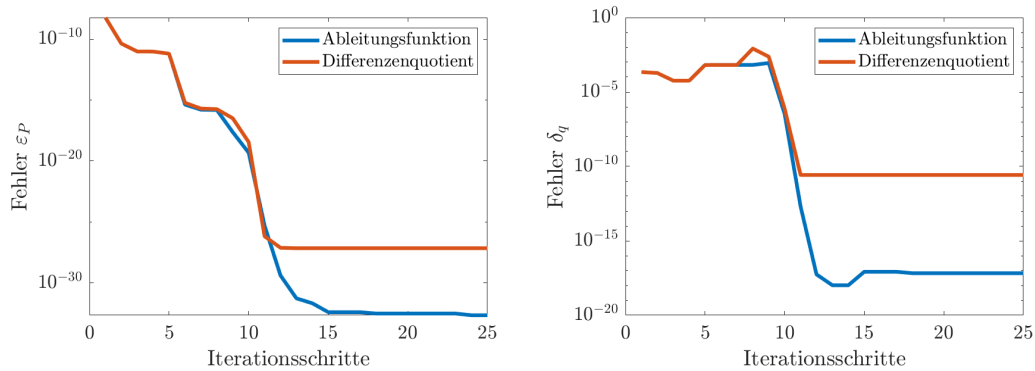


Abbildung 5.7.: Graphen der Fehler ε_P und δ_q im Experiment einer Säule bestehend aus zwei gestapelten Boxen mit den übersättigten Anfangswerten (5.42) der Simulation. Der Fehler ε_P des Verfahrens mit den bereitgestellten Ableitungen senkt sich nach circa 15 Iterationsschritten auf ein Niveau im Bereich der Maschinengenauigkeit. Im Gegensatz dazu fällt der Fehler des Verfahrens mit Ableitungen, die durch numerische Differenzenquotienten bestimmt wurden, nach circa 12 Iterationsschritten nur noch unmerklich.

approximieren. Für die Anwendung dieser Methode in der Wolkenphysik wäre eine sehr viel stärkere Störung der Parameter über mehrere Größenordnungen wünschenswert, da die Parameterwerte nur über Umwege oder gar nicht gemessen werden können, auch die Zeitpunkte der Wolkenentstehung und -auflösung sind sehr wichtig und enthalten viel Information der Parameter. Um diesen Anforderungen gerecht zu werden, wären neue Ideen erforderlich um die Rekonstruktion zu verbessern. Aufgrund des zu erwartenden Umfangs einer solchen Entwicklungsarbeit muss diese einer separaten Eruiierung überlassen werden.

6. Ausblick/Fazit

Zu Beginn dieser Arbeit entwickeln und testen wir ein gewöhnliches Differentialgleichungsmodell für warme Wolken, vergleiche [39], welches über eine automatische Aktivierung der Tropfen und eine meteorologisch explizit berechnete Kondensation verfügt und so auf die veraltete, als Sättigungsadjustierung [27] bekannte, Technik verzichten kann. Dazu verwenden wir prozessweise Herleitungen der Gleichungen. Die Herleitung beruht dabei auf den physikalischen Erkenntnissen über einzelne Partikel, welche entsprechend skaliert sind. Ein solches Modell kann vielseitig eingesetzt werden, zum Beispiel als Modul in komplexen Vorhersagemodellen. In dieser Arbeit fokussieren wir konkret die Anwendung in einem Säulenmodell („rain-shaft“-Experiment), um so mit geringem Rechenaufwand durch Wolkenphysik dominierte Szenarien untersuchen zu können.

Anschließend analysieren wir die Lösungseigenschaften des Modells, eines differential-algebraischen Anfangswertproblems einer gewöhnlichen Differentialgleichung, im Detail und können mit einer mathematischen Entropiebedingung, der Picard-Lindelöf-Theorie und der als Fuchs'sche Reduktion [26] bekannten Technik Existenz- und Eindeutigkeitsresultate erzielen. Des Weiteren zeigen wir, dass sich die Momente der Masse und Anzahl der Regentropfen zu allen Zeiten konsistent verhalten.

Auf der Basis der Entropiebedingung entwickeln wir ein effizientes halb-implizites Euler-Verfahren zur numerischen Lösung des Modells und präsentieren dessen Eigenschaften sowie numerische Simulationen des Modells. Die analytisch gezeigten Resultate zur physikalisch konsistenten Lösung gelten daher auch für die diskrete numerische Approximation.

Abschließend untersuchen wir die Parameter des Modells mit dem Ziel, Unsicherheiten abschätzen zu können. Wir stellen fest, dass die Implementierung einer bereitgestellten Ableitung, die typischerweise für Optimierungsalgorithmen für schlecht gestellte (englisch „ill-posed“, vergleiche [21]) nicht-lineare inverse Probleme hilfreich ist, in der Nähe von Singularitäten einer der partiellen Ableitungen bei der Entstehung und Vernichtung von Wolken Fehler aufweist, die sich fortpflanzen. In den ausgewählten Experimenten reduzieren wir zur Demonstration der Methode daher die Anzahl dieser Singularitäten und vergleichen unsere Ergebnisse mit einer Methode, die auf Approximationen der Ableitung durch Differenzenquotienten zurückgreift. Auf eine Regularisierung [16] des Fehlerfunktions der Optimierung verzichten wir bisher.

6. Ausblick/Fazit

Das Modell ist in seiner Anwendung noch recht limitiert, da viele Niederschlagsereignisse in der Atmosphäre zumindest in der Entstehung eine signifikante Beteiligung der Eisphase haben. Insbesondere Niederschläge, die zu einer Umweltgefahr werden können, besitzen einen großen Anteil an Tropfen, die auf ihrem Weg zur Erdoberfläche zu einem Zeitpunkt entweder Eis waren oder Kontakt mit Eiskristallen hatten. Eine Studie mit einem Ansatz zur Quantifizierung des Eisanteils in der Wolkenbildung findet sich in [37]. Abgesehen davon bestehen einige Wolken nur aus Eispartikeln, sogenannte Zirren. Eine übergreifende Studie zu diesen Eiswolken mit dem Fokus auf zwei konkurrierenden Entstehungsprozessen der Eispartikel findet sich in [29] und [30]. Eine Erweiterung um die Eisphase ist daher ein logischer nächster Schritt.

Die Entwicklung einer grundsätzlichen Verfahrensweise im Umgang mit den von uns beobachteten Singularitäten einiger Gradienten in der Optimierung zeichnet sich als ambitioniertes Ziel ab. Daher wäre im Rahmen der Erweiterung des Modells um die Eisphase eine Regularisierung des Modells bezüglich der Parameter als ad-hoc Lösung zur Vermeidung der Singularitäten in den Gradienten denkbar.

Ob sich dagegen die Strategie des Beweises zur Existenz einer eindeutigen physikalisch konsistenten Modelllösung auf Erweiterungen des Modells übertragen lässt, kann a priori nicht pauschal beantwortet werden.

Zum Forschungsansatz, Messwerte in mikrophysikalische Modelle einzubinden, tragen wir mit einer Modellierung des Kondensationsprozesses, mit dem Nachweis wichtiger Lösungseigenschaften und mit der Identifikation von konkreten Schwierigkeiten in der Parameterrekonstruktion bei.

Abschließend lässt sich das Folgende festhalten: Für die Untersuchung der Lösungseigenschaften von Mikrophysikmodellen erweist sich die Fuchs'sche Reduktion oder von ihr inspirierte Methoden in dieser Arbeit und in [22] als vielversprechend. Die Identifikation der Modellparameter steht dagegen momentan noch vor dem Dilemma, dass gerade die Momente des Auftretens und Verschwindens von Wolken einen wichtigen Informationsbeitrag zur Optimierung leisten, obwohl diese Zeitpunkte die Berechnung der Abstiegsrichtung deutlich erschweren.

A. Anhang

A.1. Herleitung des Parameters k_1

Um einen initialen Wert für den Parameter k_1 des Autokonversionsprozesses zu erhalten, orientieren wir uns an Arbeiten von Edwin Berry zu Modifikationen von warmen Regenprozessen, siehe [10] und [11]. Der Ansatz zur Beschreibung dieses Wolkenprozesses besteht in der Isolation jener Tropfenbildungsphase, die von der Autokonversion dominiert wird.

Die Rate der Autokonversion

$$\frac{L_c}{\Delta\tau} = \frac{1}{2 + 0.0266 \frac{N_0}{D_0} \frac{1}{L_c}} L_c^2$$

aus [10] ergibt sich dann als Division der entstandenen Wolkentropfenmasse L_c , mit der Einheit $[L_c] = \text{g m}^{-3}$, durch die benötigte Zeit $\Delta\tau$, mit der Einheit $[\tau] = \text{min}$. Nach Umrechnung in die Größen q_c und t , mit der Einheit $[t] = \text{s}$, ergibt sich die Gleichung

$$\frac{\rho q_c}{\Delta t} = 1/(6 \cdot 10^4) \text{ kg min g}^{-1} \text{ s}^{-1} \frac{1}{2 + 0.0266 \frac{N_0}{D_0} \frac{1}{L_c}} L_c^2. \quad (\text{A.1})$$

Es folgt ein Vergleich mit unserer Formulierung für die festen Werte

- $L_c = 1$,
- $D_0 \in \{0.128, 0.199, 0.364, 0.488\}$,
- $N_0 = 200$,
- $\rho = 1$.

Bei N_0 handelt es sich um die Anzahl der Tropfen ($[N_0] = \text{cm}^{-3}$) und D_0 entspricht einem Tropfenradiusverhältnis. Die differierenden Werte resultieren in unterschiedlich ausgedehnten Phasen der Autokonversion. Sie sind der Grafik Figure 1 in [10] entnommen, welche die verstrichene Zeit der anfänglichen Tropfenwachstumsphase als Funktion der Tropfenanzahlkonzentration N für die genannten Werte des Parameters D_0 zeigt. Die Werte von D_0 sind zusätzlich in Tabelle A.1 aufgeführt.

Wir nehmen an, dass

$$\frac{\rho q_c}{\Delta t} = \rho A_1 \quad (\text{A.2})$$

A. Anhang

für unsere Beschreibung der Autokonversion (2.24) und für $\frac{\rho q_c}{\Delta t}$ aus Gleichung (A.1) gilt. Daher ist

$$k_1 = \frac{\rho l}{\rho} 1/(6 \cdot 10^4) \text{ kg min g}^{-1} \text{ s}^{-1} \frac{1}{2 + 0.0266 \frac{N_0}{D_0} \frac{1}{L_c}} \frac{L_c^2}{q_c^2}. \quad (\text{A.3})$$

Die Schätzungen der Tabelle A.1 des Parameters k_1 resultieren aus der Auswertung von Gleichung (A.3) für die vier Werte des Parameters D_0 und für

$$1 \text{ g cm}^{-3} = L_c = \rho q_c = 1 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}.$$

Während der Experimente mit unserem Modell in den Kapiteln 4 und 5 verwenden wir den konkreten Wert¹ $k_1 = 1003 \text{ s}^{-1}$.

k_1 in s^{-1}	D_0	Zeit bis $N_0 = 200$
1292	0.488	13 min
1003	0.364	17 min
580	0.199	30 min
383	0.128	45 min

Tabelle A.1.: Aus der Identität (A.3) berechnete Werte von k_1 mit den Werten von D_0 aus [10]. Die Zeiten in der rechten Spalte entsprechen laut der Grafik Figure 1 aus [10] ungefähr der Zeit, die für die initiale Tropfenbildung abhängig von D_0 benötigt wird, um eine Population von N_0 Wolkentropfen zu erreichen.

¹Man bemerke den entsprechend anderen Wert in [39].

A.2. Herleitung der Parameter α , β und m_t

Traditionell wurde die Endgeschwindigkeit von Regentropfen in Parametrisierungen mittlerer mikrophysikalischer Größen (englisch „bulk schemes“) mit einem Exponentialansatz modelliert. Große Regentropfen weichen jedoch von der sphärischen Form (2.1) ab. Sie werden flacher, das heißt, ihre Querschnittsfläche vergrößert sich im Verhältnis zur Masse und damit erhöht sich auch ihr Luftwiderstand, bis sie schließlich bei einem maximalen Durchmesser von circa 8 mm instabil werden und zerplatzen, siehe [46]. Die Endgeschwindigkeit von Regentropfen nähert sich daher bei wachsender Regentropfenmasse einem konstanten Wert an. In [44] wird die Formulierung

$$v_t(r) = \alpha_r - \beta_r \exp(-\gamma_r 2r)$$

der Fallgeschwindigkeit mit den Konstanten

$$\alpha_r = 9.292 \text{ m s}^{-1}, \quad \beta_r = 9.623 \text{ m s}^{-1} \quad \text{und} \quad \gamma_r = 6.222 \cdot 10^2 \text{ m}^{-1}$$

vorgestellt. Sie beinhaltet den Verformungseffekt und eignet sich für große Tropfen mit Radius $r > 50 \mu\text{m}$.

Wir verwenden dagegen die Modifikation (2.39) des Exponentialansatzes

$$v_t = \alpha' m^\beta \quad \text{mit} \quad \alpha' = 159 \text{ m s}^{-1} \text{ kg}^{-\beta} \quad \text{und} \quad \beta = \frac{4}{15}$$

aus [43] abhängig von der Tropfenmasse m . Dieser Ansatz wurde ursprünglich von [31] formuliert, wir übernehmen davon jedoch lediglich den Parameter β unverändert. Beide Approximationen von v_t geben Referenzwerte der Fallgeschwindigkeit für die Dichte der Luft

$$\rho = \rho_* = 1.225 \text{ kg m}^{-3}$$

bei Normaldruck $p_* = 101\,325 \text{ Pa}$ und Lufttemperatur $T_* = 288 \text{ K}$. Für andere Dichten müssen sie adaptiert werden. Dazu verwenden wir den Faktor

$$(\rho_*/\rho)^{1/2},$$

welcher im Anhang von [38] diskutiert wird.

Wir nutzen daher die funktionelle Beziehung

$$v_t = \alpha \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2} \left(\frac{m m_t}{m + m_t} \right)^\beta,$$

wobei es sich als nützlich erwiesen hat, die Werte der beiden übrigen Parameter als

$$\alpha = 190.3 \text{ m s}^{-1} \text{ kg}^{-\beta} \tag{A.4}$$

und

$$m_t = 1.21 \cdot 10^{-5} \text{ kg} \tag{A.5}$$

zu wählen. Sie wurden über den Fit an die Formulierung aus [44] in Abbildung A.1 bestimmt. Der Parameter m_t entspricht dabei der mittleren Masse eines Regentropfens und einem durchschnittlichen Tropfenradius von circa 1.42 mm.

A. Anhang

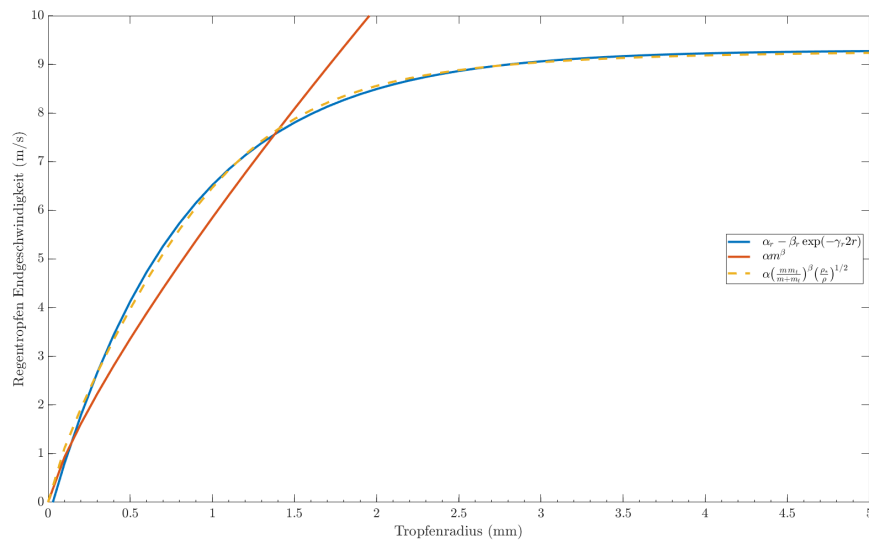


Abbildung A.1.: Die Näherungen der Fallgeschwindigkeit im Stil von [43] an die Formulierung aus [44] als Funktionen des Tropfenradius r . Man bemerke, dass Masse und Radius über Gleichung (2.1) gekoppelt sind. Die Graphen wurden für die Dichte $\rho = \rho_*$ berechnet.

A.3. Herleitung der Parameter α_q und α_n

Die initialen Werte für die Parameter α_q und α_n entspringen einer Modellierung der Systemgrößen q_r und n_r als Momente einer Größenverteilung der Regentropfen. Dies ist eine in der Meteorologie häufig gewählte Variante, die Größen der Wolkenphysik zu motivieren, siehe beispielsweise [43] oder [45]. Die Regentropfengröße wird dabei durch den Radius festgelegt und wir nehmen an, dass sie, exponentiell verteilt ist:

$$f(r) = B_r \exp(-\lambda r), \quad (\text{A.6})$$

wobei $[B_r] = \text{m}^{-4}$ und $[\lambda] = \text{m}^{-1}$, siehe [32]. Die zugehörigen Momente haben die Gestalt

$$\mu_k[r] = \int_0^\infty r^k f(r) dr = B_r \frac{\Gamma(k+1)}{\lambda^{k+1}} \quad (\text{A.7})$$

mit der Gamma-Funktion $\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} \exp(-t) dt$. Somit ergeben sich das nullte

$$\rho n_r = \mu_0[r] = \frac{B_r}{\lambda}$$

und das dritte

$$\rho q_r = \frac{4}{3} \pi \rho_l \mu_3[r] = \frac{4}{3} \pi \rho_l \frac{6 B_r}{\lambda^4}$$

Moment der Dichtefunktion $f(r)$ der Regentropfen-Größenverteilung. Dies bedeutet für die Masse eines mittleren Regentropfens

$$m = \frac{q_r}{n_r} = \frac{4}{3} \pi \rho_l \frac{6}{\lambda^3}.$$

Die Fallgeschwindigkeit der Regentropfenanzahl folgt aus

$$v_n = \frac{1}{\rho n_r} \int_0^\infty f(r) v_t(m) dr = \frac{\Gamma(3\beta+1)}{6^\beta} \alpha m^\beta \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2}$$

für ein vereinfachtes $v_t(m) = \alpha m^\beta \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2}$ und wir definieren

$$\alpha_n = \frac{\Gamma(3\beta+1)}{6^\beta} \alpha \approx 110.37 \text{ m s}^{-1} \text{ kg}^{-\beta}.$$

Analog gilt für die Fallgeschwindigkeit der Regentropfenmasse

$$v_q = \frac{1}{\rho q_r} \int_0^\infty f(r) m v_t(m) dr = \frac{\Gamma(3\beta+4)}{6^{\beta+1}} \alpha m^\beta \left(\frac{\rho_*}{\rho} \right)^{1/2}$$

und wir definieren daher

$$\alpha_q = \frac{\Gamma(3\beta+4)}{6^{\beta+1}} \alpha \approx 350.15 \text{ m s}^{-1} \text{ kg}^{-\beta}.$$

A.4. Schließung für Ein-Moment-Schema

Für manche Anwendungen ist die Gleichungskomponente (3.2d) unerwünscht. In solchen Fällen kann eine Schließung zum Ein-Moment-Schema für dieses Modell verwendet werden. Der Vollständigkeit halber präsentieren wir eine Schließung hier. Sie ist dem Anhang von [12] entnommen.

Eine übliche Annahme ist, dass Regentropfen nach einer festen Größenverteilung verteilt sind. Häufig wird eine exponentielle Verteilung (A.6) mit konstantem Parameter $B_r = 2 \cdot 10^7 \text{ m}^{-4}$, der Regentropfengröße in Abhängigkeit vom Tropfenradius r , angenommen, siehe [32]. Unter der Verwendung der Momente (A.7) dieser Verteilung ergibt sich

$$\rho n_r = \mu_0[r] = \frac{B_r}{\lambda} \quad \text{und} \quad \rho q_r = \frac{4}{3} \pi \rho_l \frac{\Gamma(4)}{\lambda^4} B_r.$$

Aus diesen Gleichungen lässt sich λ eliminieren und die Funktion

$$n_r = c_r \rho^{-3/4} q_r^{1/4}$$

der Anzahlkonzentration, mit $c_r = B_r^{3/4} (8\pi\rho_l)^{-1/4}$, formulieren.

A.5. Rechnung zum Operator H

Im Beweis von Theorem 3.10 definieren wir den Operator

$$H[x] = \int_0^1 s^{A-I} x(st) \, ds \quad (\text{A.8})$$

und behaupten, dass $\nu = H[x]$ die Lösung der linken Seite

$$\left(t \frac{d}{dt} + A \right) \nu = x \quad (\text{A.9})$$

des Anfangswertproblems (3.20) sei, unter der Voraussetzung, dass $x(0) = 0$ und $x = O(t)$ in der Nähe von $t = 0$ gilt. Die folgende Rechnung soll diesen Zusammenhang nachvollziehen.

Wir definieren

$$s^A := \exp(\log(s)A)$$

für die quadratische Matrix A und einen Skalar $s > 0$ über das Matrixexponential

$$e^X := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{X^k}{k!}$$

für quadratische Matrizen X . Diese Notation wird ergänzt durch den Grenzwert $s^A \rightarrow 0$ für $s \rightarrow 0$. Außerdem ist dann

$$s^A \cdot s^{-1} = s^A \cdot (s^{-1})^I = e^{\log(s)A} \cdot e^{\log(s^{-1})I} = e^{\log(s)A - \log(s)I} = s^{A-I}$$

für die quadratische Einheitsmatrix I und $s > 0$. Um die Behauptung

$$\begin{aligned} \left(t \frac{d}{dt} + A \right) H[x](t) &= t \int_0^1 s^{A-I} \frac{d}{dt} x(st) \, ds + A \int_0^1 s^{A-I} x(st) \, ds \\ &= t \int_0^1 s^A x'(st) \, ds + A \int_0^1 s^{A-I} x(st) \, ds \\ &= \frac{t}{t} I x(t) - \frac{t}{t} A \int_0^1 s^{A-I} x(st) \, ds + A \int_0^1 s^{A-I} x(st) \, ds \\ &= x(t) \end{aligned}$$

zu zeigen, setzen wir (A.8) in (A.9) ein und verwenden für die Umformungen der Reihe nach den Satz von der majorisierten Konvergenz, die Kettenregel, partielle Integration und $1^A = I$. Die Schreibweise x' bezeichnet die erste Ableitung in Richtung der einzigen Variablen.

A.6. Rechnung zur zweiten Komponente von (3.20)

Die zweite Komponente der Gleichung (3.20) errechnet sich aus der zweiten Komponente

$$\dot{q}_c = f_c \quad (\text{A.10})$$

des Anfangswertproblems (3.1) mit

$$\begin{aligned} f_c &= C - A_1 - A_2 \\ &= cq_s n_c^{2/3} q_c^{1/3} - a_1 q_c^2 - a_2 v_t q_c q_r^{2/3} n_r^{1/3} \end{aligned}$$

aus (3.2b) und den Koeffizienten (3.4a), (3.4c) und (3.4d). Für die physikalisch konsistenten Lösungen der Komponenten von (3.1) haben wir bereits die Zerlegungen

$$\begin{aligned} q_s &= t^n (u_{s,0} + t^{1/3} \nu_s), & q_c &= t^{(3n+3)/2} (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c)^{3/2}, \\ q_r &= t^{3n+4} (u_{q,0} + t^{1/3} \nu_q), & n_r &= t^{(3n+5)/2} (u_{n,0} + t^{1/3} \nu_n), \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} u_{s,0} &= \frac{d_{2,0} u_w}{n}, & u_{c,0} &= \frac{2}{3} \frac{c_0 n_{c,0}^{2/3} u_{s,0}}{n+1}, \\ u_{q,0} &= \frac{a_{1,0} u_{c,0}^3}{3n+4}, & u_{n,0} &= \frac{2a'_{1,0} n_{c,0} u_{c,0}^{3/2}}{3n+5}, \end{aligned}$$

im Fall der Anfangswerte $q_{s,0} = q_{c,0} = q_{r,0} = n_{r,0} = 0$ gezeigt. Setzen wir die Zerlegung von q_c und den Anfangswert $u_{c,0}$ in die linke Seite der Gleichung (A.10) ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} \dot{q}_c &= \frac{3}{2} t^{(3n+1)/2} (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c)^{1/2} \left(t^{4/3} \dot{\nu}_c + (n+1) u_{c,0} + t^{1/3} (n + \frac{4}{3}) \nu_c \right) \\ &= \frac{3}{2} t^{(3n+1)/2} (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c)^{1/2} \left(t^{4/3} \dot{\nu}_c + \frac{2}{3} c_0 n_{c,0}^{2/3} u_{s,0} + t^{1/3} (n + \frac{4}{3}) \nu_c \right). \end{aligned}$$

Andererseits können wir diese Zerlegungen von q_s , q_c , q_r und n_r auch in die rechte Seite von (A.10) einsetzen und man erhält mit Hilfe zweier Nulladditionen

$$\begin{aligned} f_c &= t^{(3n+1)/2} (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c)^{1/2} \left[c_0 n_{c,0}^{2/3} u_{s,0} + t^{1/3} c_0 n_{c,0}^{2/3} \nu_s \right. \\ &\quad + c_0 (n_c^{2/3} - n_{c,0}) (u_{s,0} + t^{1/3} \nu_s) + (c - c_0) n_c^{2/3} (u_{s,0} + t^{1/3} \nu_s) \\ &\quad - t^{(3n+5)/2} a_1 (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c)^{5/2} \\ &\quad \left. - t^{(5n+9)/2} a_2 v_t (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c) (u_{q,0} + t^{1/3} \nu_q)^{2/3} (u_{n,0} + t^{1/3} \nu_n)^{1/3} \right]. \end{aligned}$$

Kürzt man nun die rechte und linke Seite von (A.10) um den Faktor $t^{(3n+1)/2} (u_{c,0} + t^{1/3} \nu_c)^{1/2}$ und zieht von beiden Seiten den Summanden $c_0 n_{c,0}^{2/3}$ ab,

A. Anhang

erhält man nach einer erneuten Kürzung um den Faktor $t^{1/3}$, weiterem Umsortieren der übrigen Summanden und einer Substitution $t = s^3$ die zweite Komponente von (3.20).

A.7. Positivität des Koeffizienten d_2

Der Koeffizient d_2 aus Gleichung (3.11b) besteht im Kern aus der Summe eines strikt positiven und eines strikt negativen Summanden, da die Temperatur von der Null weg beschränkt ist. Eine weitere Umformung des Koeffizienten ergibt

$$\begin{aligned} d_2 &= \varepsilon \frac{p_s}{p} \left(\frac{\gamma L}{R_v T^2} - \frac{g}{RT} \right) \\ &= \varepsilon \frac{p_s}{p} \cdot \frac{g}{T} \left(\frac{1}{T} \cdot \frac{L}{c_p} \cdot \frac{1}{R_v} - \frac{1}{R} \right) \end{aligned}$$

mit dem lediglich von der Temperatur abhängigen Summanden $\frac{L}{c_p R_v T}$ und dem konstanten Summanden $\frac{1}{R}$.

Betrachten wir die Graphen in Abbildung A.2 der beiden Summanden mit den von uns verwendeten Werten für L , γ und R_v , erkennt man leicht, dass der Koeffizient d_2 für den Temperaturbereich $250 \text{ K} \leq T \leq 300 \text{ K}$ warmer Wasserwolken strikt positiv ist. Dies ist vor allem auf den außergewöhnlich großen Quotienten $\frac{L}{c_p}$ zurückzuführen, da R_v und R eine ähnliche Größenordnung haben und der Faktor $\frac{1}{T}$ den ersten Summanden lediglich verkleinert. Dieser große Quotient wiederum entsteht durch die außergewöhnlich intensive latente Wärme-Freisetzung [8] der Verdunstung von Wasser im Vergleich zu beispielsweise Kohlenstoffdioxid.

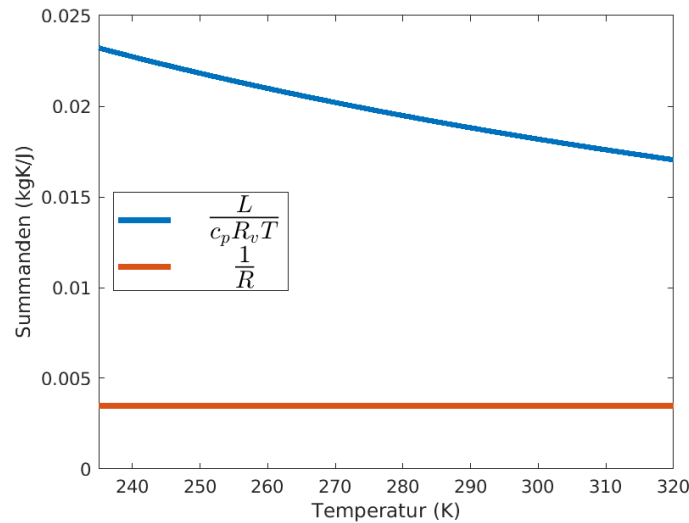


Abbildung A.2.: Die absoluten Werte der Summanden des Koeffizienten d_2 im relevanten Temperaturregime.

A.8. Konstanten und Parameterwerte

Konstante	Bedeutung
$p_* = 101\,325\text{ Pa}$	Referenzluftdruck
$T_* = 288\text{ K}$	Referenzlufttemperatur
$T_0 = 273.15\text{ K}$	Schmelztemperatur von Wasser
$\rho_* = 1.225\text{ kg m}^{-3}$	Referenzdichte der Luft
$\gamma = \frac{g}{c_p} = 0.009\,76\text{ K m}^{-1}$	trockenadiabatischer Temperaturgradient
$\rho_l = 1000\text{ kg m}^{-3}$	Dichte von flüssigem Wasser
$R_a = 287.05\text{ J kg}^{-1}\text{ K}^{-1}$	spezifische Gaskonstante trockener Luft
$R_v = 461.52\text{ J kg}^{-1}\text{ K}^{-1}$	spezifische Gaskonstante des Wasserdampfs
$c_p = 1005\text{ J kg}^{-1}\text{ K}^{-1}$	spezifische Wärmekapazität trockener Luft
$g = 9.81\text{ m s}^{-2}$	Beschleunigung durch Gravitation
$L = 2.53 \cdot 10^6\text{ J kg}^{-1}$	latente Wärme der Verdunstung
$D_0 = 2.11 \cdot 10^{-5}\text{ m}^2\text{ s}^{-1}$	Diffusionskonstante
$\varepsilon = \frac{M_{\text{mol},v}}{M_{\text{mol},a}} = 0.622$	Quotient der molaren Massen von Wasserdampf und trockener Luft

Tabelle A.2.: *Physikalische Konstanten und Referenzgrößen.*

A. Anhang

Parameter	Bedeutung
$\alpha = 190.3 \text{ m s}^{-1} \text{ kg}^{-\beta}$	Parameter der Endgeschwindigkeit von Regentropfen
$\beta = \frac{4}{15}$	Parameter der Endgeschwindigkeit von Regentropfen
$m_t = 1.21 \cdot 10^{-5} \text{ kg}$	Parameter der Endgeschwindigkeit von Regentropfen
$k_1 = 1003 \text{ kg s}^{-1}$	Parameter der Autokonversion
$k_2 = 0.7 \text{ kg}$	Parameter der Akkreszenz
$N_0 = 1000 \text{ kg}^{-1}$	Parameter der Tropfenaktivierung
$N_\infty = 2 \cdot 10^7 \text{ kg}^{-1}$	Parameter der Tropfenaktivierung
$m_0 = \frac{4}{3}\pi\rho_l(0.5 \mu\text{m})^3$	Parameter der Tropfenaktivierung
$a_E = 0.78$	Parameter der Verdunstung
$a_v = 0.78$	Parameter der Ventilation
$b_v = 0.308$	Parameter der Ventilation
$c_q = 1.84$	Parameter der effektiven Fallgeschwindigkeit
$c_n = 0.58$	Parameter der effektiven Fallgeschwindigkeit
h	Höhe einer Box

Tabelle A.3.: *Modellparameter.*

A.9. Ein Zeitschritt des Modells mit Ableitung

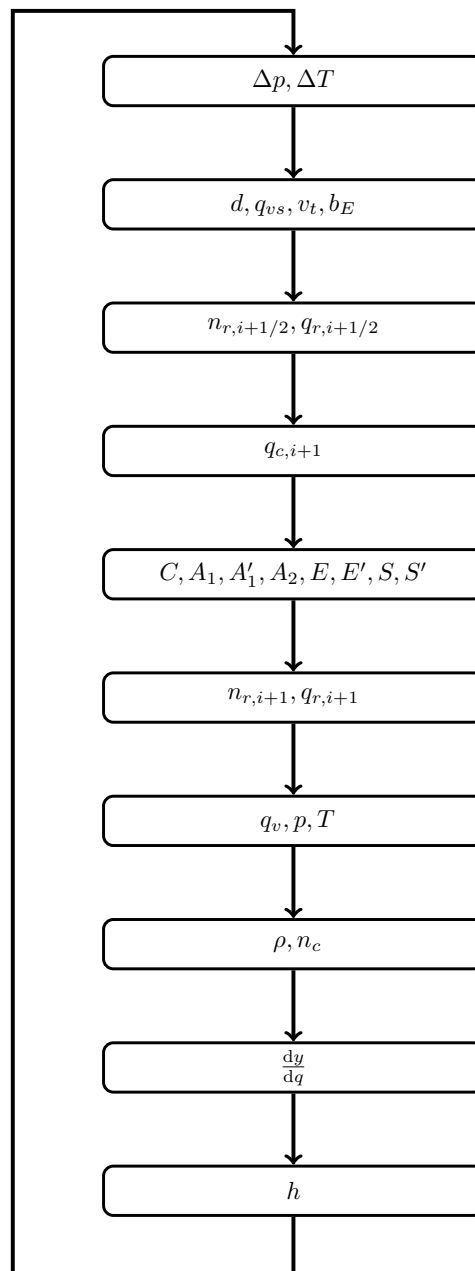


Abbildung A.3.: Berechnung eines Zeitschritts des Modells angelehnt an die Grafik aus [39] und erweitert um den Moment der Berechnung eines Zeitschritts der Ableitung der Systemvariablen in Richtung der Parameter.

Abbildungsverzeichnis

2.1.	Anzahlkonzentration n_c der Wolkentropfen nach Gleichung (2.6) in Abhängigkeit von der Massenkonzentration q_c	9
2.2.	Schematische Darstellung der Wolkenprozesse zwischen Wasserdampf und den Tropfenspezies.	18
4.1.	Illustration des Graphen von p für das Newton-Verfahren.	57
4.2.	Das Beispielpprofil der vertikalen Windgeschwindigkeit w (links). Es ist größtenteils konstant mit kurzen Beschleunigungsphasen und setzt sich aus einer Auf- und einer später folgenden Abstiegsphase zusammen. Als Verbindung zu einer realen Anwendung kann man sich die Überströmung eines Bergprofils (rechts) vorstellen, mit einer konstanten 5 m s^{-1} schnellen Anströmung des Berges von links und einem orographisch erzwungenen Auf- und Abstieg der Luft.	60
4.3.	Die Wolkenprozesse der Kondensation C und Verdunstung E ausgewertet für das Profil in Abbildung 4.2.	60
4.4.	Tropfenkollisionen von Wolkentropfen mit Wolkentropfen A_1 und Regentropfen mit Wolkentropfen A_2 , ausgewertet für das Profil in Abbildung 4.2.	61
4.5.	Prozesse Autokonversion A'_1 , Verdunstung E' und Sedimentation S' der Regentropfenanzahl n_r . Sie zeigen ein ähnliches Verhalten im Bezug auf den Aktivitätszeitraum und die Ausprägung wie die Prozesse der Regentropfenmasse q_r	61
4.6.	Die zentralen Größen q_v , q_c , q_r , n_r , p und T unseres Systems im Überblick mit ihrem Verhalten für das vertikale Windprofil aus Abbildung 4.2.	62
4.7.	Die algebraischen Nebenbedingungen (2.37), (2.39) und (2.40), wobei h an dieser Stelle ρ aus (2.38) vertritt.	63
4.8.	Die mittlere Masse der Regentropfen q_r/n_r und die mittleren Radien der Wolken- und Regentropfen, die über Gleichung (2.1) direkt mit der jeweiligen mittleren Masse zusammenhängen.	63
4.9.	Sedimentation (2.28) und Niederschlagsrate (4.17) unterscheiden sich im Verhalten kaum.	63
4.10.	Niederschlagsrate P und Sedimentation S_{out} einer Säule mit zehn Boxen à 200 m mit äquivalenten Anfangswerten zur Box-Simulation.	64

Abbildungsverzeichnis

5.1. Ableitungen des Niederschlags P in Richtung der Parameter (Ordinate) als Funktionen der Zeit (Abszisse in der Einheit s) im Intervall der Simulation aus Abschnitt 4.2, berechnet mit Hilfe der Gleichung (5.4) und der Differentialgleichung (5.5) für die von uns hergeleiteten Werte der Parameter q	86
5.2. Das Verhalten von $\frac{\partial C}{\partial q_c}$ im Bereich positiver Werte von q_c für die Simulation einer Box aus Abschnitt 4.2. Gezeigt wird der Betrag von $\frac{\partial C}{\partial q_c}$, obwohl es sich ab circa 2000 s um negative Werte handelt, um eine logarithmische Skala auf der y-Achse zeigen zu können.	87
5.3. Das Verhalten des quadratischen Fehlers ε_P aus Gleichung (5.1) im Messraum und des quadratischen Fehlers δ_q aus Gleichung (5.40) im Parameterraum während der Iteration des ersten Experiments. Zu sehen sind die Kurven für bereitgestellte Ableitungen (blau) versus vom Algorithmus per Differenzenquotienten bestimmte Ableitungen (rot).	89
5.4. Die Näherung der normierten Parameterwerte (Ordinate) nach jedem Iterationsschritt (Abszisse) der Optimierung durch den Algorithmus lsqnonlin. Die Werte sind durch die Parameter q , die zur Datenerstellung verwendet wurden, normiert. Die blauen Kurven entsprechen dem Algorithmus mit bereitgestellter Ableitung und die roten dem mit durch Differenzenquotienten bestimmten Ableitungen.	90
5.5. Graphen der Fehler ε_P und δ_q im Experiment mit untersättigten Anfangswerten der Simulation. Der Fehler ε_P des Verfahrens mit Ableitungen, die durch numerische Differenzenquotienten bestimmt wurden, senkt sich nach circa 25 Iterationsschritten auf ein Niveau im Bereich der Maschinengenauigkeit. Im Gegensatz dazu fällt der Fehler des Verfahrens mit den bereitgestellten Ableitungen nach circa 5 Iterationsschritten nur noch unmerklich.	91
5.6. Die Näherung der normierten Parameterwerte (Ordinate) nach jedem Iterationsschritt (Abszisse) der Optimierung durch den Algorithmus lsqnonlin. Die Werte sind durch die Parameter q , die zur Datenerstellung verwendet wurden, normiert. Die blauen Kurven entsprechen dem Algorithmus mit bereitgestellter Ableitung und die roten dem mit durch Differenzenquotienten bestimmten Ableitungen.	92
5.7. Graphen der Fehler ε_P und δ_q im Experiment einer Säule bestehend aus zwei gestapelten Boxen mit den übersättigten Anfangswerten (5.42) der Simulation. Der Fehler ε_P des Verfahrens mit den bereitgestellten Ableitungen senkt sich nach circa 15 Iterationsschritten auf ein Niveau im Bereich der Maschinengenauigkeit. Im Gegensatz dazu fällt der Fehler des Verfahrens mit Ableitungen, die durch numerische Differenzenquotienten bestimmt wurden, nach circa 12 Iterationsschritten nur noch unmerklich.	94

Abbildungsverzeichnis

A.1. Die Näherungen der Fallgeschwindigkeit im Stil von [43] an die Formulierung aus [44] als Funktionen des Tropfenradius r . Man bemerke, dass Masse und Radius über Gleichung (2.1) gekoppelt sind. Die Graphen wurden für die Dichte $\rho = \rho_*$ berechnet.	100
A.2. Die absoluten Werte der Summanden des Koeffizienten d_2 im relevanten Temperaturregime.	106
A.3. Berechnung eines Zeitschritts des Modells angelehnt an die Grafik aus [39] und erweitert um den Moment der Berechnung eines Zeitschritts der Ableitung der Systemvariablen in Richtung der Parameter. . . .	109

Tabellenverzeichnis

5.1. Die ursprünglichen Werte der Parameter und der Störfaktor für die Anfangswerte der Optimierung im ersten Experiment.	88
5.2. Von uns hergeleitete Werte der Parameter und der Störfaktor für die Anfangswerte der Optimierung im zweiten Experiment.	91
5.3. Von uns hergeleitete Werte der Parameter und der Störfaktor für die Anfangswerte der Optimierung im dritten Experiment.	93
A.1. Aus der Identität (A.3) berechnete Werte von k_1 mit den Werten von D_0 aus [10]. Die Zeiten in der rechten Spalte entsprechen laut der Grafik Figure 1 aus [10] ungefähr der Zeit, die für die initiale Tropfenbildung abhängig von D_0 benötigt wird, um eine Population von N_0 Wolkentropfen zu erreichen.	98
A.2. Physikalische Konstanten und Referenzgrößen.	107
A.3. Modellparameter.	108

Literaturverzeichnis

- [1] <https://www.wavestoweather.de>, 26.08.2020.
- [2] https://www.dwd.de/DE/forschung/wettervorhersage/num_modellierung/01_num_vorhersagemodelle/regionalmodell_cosmo_de.html, 26.08.2020.
- [3] https://www.dwd.de/DE/forschung/wettervorhersage/num_modellierung/01_num_vorhersagemodelle/icon_beschreibung.html, 26.08.2020.
- [4] <https://de.mathworks.com/help/optim/ug/lsqlnonlin.html>, 26.08.2020.
- [5] <https://de.mathworks.com/help/optim/ug/constrained-nonlinear-optimization-algorithms.html>, 26.08.2020.
- [6] H. Altenbach. *Kontinuumsmechanik: Einführung in die materialunabhängigen und materialabhängigen Gleichungen*. Springer Berlin Heidelberg, 2015.
- [7] S. Arabas and S.-I. Shima. On the ccn (de) activation nonlinearities. *Nonlinear processes in geophysics*, 24(3):535–542, 2017.
- [8] P. W. Atkins and J. De Paula. *Physikalische Chemie*. Wiley-VCH, 2013.
- [9] K. D. Beheng. The Evolution of Raindrop Spectra: A Review of Microphysical Essentials. In F. Y. Testik and M. Gebremichael, editors, *Rainfall: State of the Science*, Geophysical Monograph Series, pages 29–48, 2010.
- [10] E. X. Berry. Modification of the warm rain process. In *Proceedings of the First National Conference on Weather Modification, Albany, New York*, pages 81–88. American Meteorological Society, Washington D.C., 1968.
- [11] E. X. Berry. A parameterisation of the collection of cloud drops. In *Proceedings of the International Conference on Cloud Physics, Canada*, pages 111–114. University of Toronto, Toronto, 1968.
- [12] A. Chertock, A. Kurganov, M. Lukáčová-Medvid'ová, P. Spichtinger, and B. Wiebe. Stochastic galerkin method for cloud simulation. *Mathematics of Climate and Weather Forecasting*, 5(1):65 – 106, 2019.
- [13] D. Colton and R. Kress. *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*. Applied Mathematical Sciences. Springer New York, 2012.
- [14] B. J. Devenish, P. Bartello, J.-L. Brenguier, L. R. Collins, W. W. Grabowski, R. H. A. IJzermans, S. P. Malinowski, M. W. Reeks, J. C. Vassilicos, L.-P. Wang, and Z. Warhaft. Droplet growth in warm turbulent clouds. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 138(667):1401–1429, 2012.

- [15] J. Dixon. *The Shock Absorber Handbook*. Wiley, 2007.
- [16] H. W. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer. *Regularization of Inverse Problems. Mathematics and Its Applications*. Springer Netherlands, 1996.
- [17] D. Etling. *Theoretische Meteorologie: Eine Einführung*. Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [18] O. Forster. *Analysis 2: Differentialrechnung im \mathbb{R}^n , gewöhnliche Differentialgleichungen*. Analysis / Otto Forster. Vieweg+Teubner Verlag, 2008.
- [19] O. Forster. *Analysis 1: Differential- und Integralrechnung einer Veränderlichen*. Grundkurs Mathematik. Vieweg+Teubner Verlag, 2012.
- [20] C. Geiger and C. Kanzow. *Theorie und Numerik restringierter Optimierungsaufgaben*. Springer-Lehrbuch Masterclass. Springer Berlin Heidelberg, 2002.
- [21] M. Hanke. *A Taste of Inverse Problems: Basic Theory and Examples*. Other Titles in Applied Mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2017.
- [22] M. Hanke and N. Porz. Unique solvability of a system of ordinary differential equations modeling a warm cloud parcel. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 80(2):706–724, 2020.
- [23] M. Hanke-Bourgeois. *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*. Vieweg+Teubner Verlag, 2008.
- [24] E. Kessler. *On the distribution and continuity of water substance in atmospheric circulations.*, volume 32 of *Meteorological Monographs*. American Meteorological Society, Boston, 1969.
- [25] A. P. Khain, M. Ovtchinnikov, M. Pinsky, A. Pokrovsky, and H. Krugliak. Notes on the state-of-the-art numerical modeling of cloud microphysics. *Atmospheric Research*, 55(3-4):159 – 224, 2000.
- [26] S. Kichenassamy. *Fuchsian Reduction: Applications to Geometry, Cosmology and Mathematical Physics*. Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications. Birkhäuser Boston, 2007.
- [27] Y. L. Kogan and W. J. Martin. Parameterization of Bulk Condensation in Numerical Cloud Models. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 51(12):1728–1739, 06 1994.
- [28] H. Köhler. The nucleus in and the growth of hygroscopic droplets. *Transactions of the Faraday Society*, 32(2):1152–1161, 1936.
- [29] M. Krämer, C. Rolf, A. Luebke, A. Afchine, N. Spelten, A. Costa, J. Meyer, M. Zöger, J. Smith, R. L. Herman, B. Buchholz, V. Ebert, D. Baumgardner, S. Borrmann, M. Klingebiel, and L. Avallone. A microphysics guide to cirrus

- clouds – part 1: Cirrus types. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16(5):3463–3483, 2016.
- [30] M. Krämer, C. Rolf, N. Spelten, A. Afchine, D. Fahey, E. Jensen, S. Khaykin, T. Kuhn, P. Lawson, A. Lykov, L. L. Pan, M. Riese, A. Rollins, F. Stroh, T. Thornberry, V. Wolf, S. Woods, P. Spichtinger, J. Quaas, and O. Sourdeval. A microphysics guide to cirrus – part ii: Climatologies of clouds and humidity from observations. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 2020:1–63, 2020.
- [31] J. Y. Liu and H. D. Orville. Numerical modeling of precipitation and cloud shadow effects on mountain-induced cumuli. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 26(6):1283–1298, 1969.
- [32] J. S. Marshall and W. Mc K. Palmer. The distributions of raindrops with size. *Journal of Meteorology*, 5(4):165–166, 08 1948.
- [33] H. Morrison, M. van Lier-Walqui, A. M. Fridlind, W. W. Grabowski, J. Y. Harrington, C. Hoose, A. Korolev, M. R. Kumjian, J. A. Milbrandt, H. Pawlowska, D. J. Posselt, O. P. Prat, K. J. Reimel, S.-I. Shima, B. van Diedenhoven, and L. Xue. Confronting the challenge of modeling cloud and precipitation microphysics. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 12(8):e2019MS001689, 2020. e2019MS001689 2019MS001689.
- [34] H. Morrison, M. van Lier-Walqui, M. R. Kumjian, and O. P. Prat. A Bayesian Approach for Statistical–Physical Bulk Parameterization of Rain Microphysics. Part I: Scheme Description. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 77(3):1019–1041, 03 2020.
- [35] J. J. Moré and D. C. Sorensen. Computing a trust region step. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 4(3):553–572, 1983.
- [36] D. M. Murphy and T. Koop. Review of the vapour pressures of ice and supercooled water for atmospheric applications. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 131(608, B):1539–1565, 2005.
- [37] J. Mülmenstädt, O. Sourdeval, J. Delanoë, and J. Quaas. Frequency of occurrence of rain from liquid-, mixed-, and ice-phase clouds derived from a-train satellite retrievals. *Geophysical Research Letters*, 42(15):6502–6509, 2015.
- [38] A. K. Naumann and A. Seifert. A lagrangian drop model to study warm rain microphysical processes in shallow cumulus. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 7(3):1136–1154, 2015.
- [39] N. Porz, M. Hanke, M. Baumgartner, and P. Spichtinger. A model for warm clouds with implicit droplet activation, avoiding saturation adjustment. *Mathematics of Climate and Weather Forecasting*, 4:50–78, 2018.
- [40] H. R. Pruppacher and J. D. Klett. *Microphysics of Clouds and Precipitation*.

Springer, 2010.

- [41] H. R. Pruppacher and R. Rasmussen. Wind-tunnel investigation of the rate of evaporation of large water drops falling at terminal velocity in air. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 36(7):1255–1260, 1979.
- [42] J. Rosemeier, M. Baumgartner, and P. Spichtinger. Intercomparison of warm-rain bulk microphysics schemes using asymptotics. *Mathematics of Climate and Weather Forecasting*, 4(1):104 – 124, 2018.
- [43] A. Seifert and K. D. Beheng. A two-moment cloud microphysics parameterization for mixed-phase clouds. Part I: Model description. . *Meteorology and Atmospheric Physics*, 92:45–66, 2006.
- [44] A. Seifert, U. Blahak, and R. Buhr. On the analytic approximation of bulk collision rates of non-spherical hydrometeors. *Geoscientific Model Development*, 7(2):463–478, 2014.
- [45] E. Spreitzer, M. Marschallik, and P. Spichtinger. Subvisible cirrus clouds – a dynamical system approach. *Nonlinear Processes in Geophysics Discussions*, pages 1–31, 01 2016.
- [46] M. Szakáll, S. Mitra, K. Diehl, and S. Borrmann. Shapes and oscillations of falling raindrops — a review. *Atmospheric Research*, 97:416–425, 2010.
- [47] G. Teschl. *Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems*. Graduate studies in mathematics. American Mathematical Soc.
- [48] M. van Lier-Walqui, H. Morrison, M. R. Kumjian, K. J. Reimel, O. P. Prat, S. Lunderman, and M. Morzfeld. A Bayesian Approach for Statistical–Physical Bulk Parameterization of Rain Microphysics. Part II: Idealized Markov Chain Monte Carlo Experiments. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 77(3):1043–1064, 03 2020.
- [49] U. Wacker and A. Seifert. Evolution of rain water profiles resulting from pure sedimentation: Spectral vs. parameterized description. *Atmospheric Research*, 58(1):19–39, 2001.
- [50] W. Walter. *Ordinary Differential Equations*. Springer New York, 1998.
- [51] P. K. Wang. *Physics and Dynamics of Clouds and Precipitation*. Cambridge University Press, 2013.
- [52] J. Weissinger. Zur theorie und anwendung des iterationsverfahrens. *Mathematische Nachrichten*, 8(1):193–212, 1952.
- [53] M. K. Yau and R. R. Rogers. *A Short Course in Cloud Physics*. Elsevier Science, 1996.