

PAZI-2 ANNUAL REPORT 2004

This document contains the **minutes from the Second Workshop** of the PAZI-2 project held in Oberpfaffenhofen, January 17/18, 2005. The workshop presentations focussed on **three major science issues** covered by PAZI-2, namely Black Carbon (soot) particles, formation of the ice phase, and cirrus cloud cover. Both **project and guest scientists** presented their results and discussed activities planned in 2005. The meeting provided a stimulating environment, fostering scientific collaborations of the various groups. As appendices, this document also contains the **descriptions of work** of each work package (one page summaries, in German). The cumulative **list of publications** is available as a separate document. All documents can be downloaded from the website <http://www.pa.op.dlr.de/pazi/>

Meeting schedule

Monday January 17

1:00p Kärcher/Schumann Welcome and Introduction

Session I – How do atmospheric aerosols freeze and how do ice crystals interact with the gas phase ?

1:20 Kärcher Overview (incl. AP 3.1 results)

1:40 Schurath AIDA results on immersion and deposition freezing

2:00 Minikin CIRCLE-1 campaign preparation

Session II – How do cirrus and contrails interact with radiation and what is their global coverage ?

2:20 Mayer Overview (incl. AP 3.2 results)

2:40 Mannstein New cirrus detection with Meteosat Second Generation

3:00 Gierens Improvements in describing cirrus cloud cover in the ECMWF model

3:20 all Joint discussion of Sessions I and II

Coffee break

4:20 Krämer First results from the CIRRUS II campaign

4:40 Luo Origin of high crystal numbers: Homogeneous vs heterogeneous nucleation

5:00 all Discussion (cont'd)

Tuesday January 18

Session III – How do soot particles form and what is their global distribution and impact on cirrus ?

8:40a Gerlinger Overview (incl. AP 1.1 results)

9:00 Plohr Advances in building a novel aircraft soot inventory

9:20 Hendricks The global BC cycle and the role of aviation in cirrus cloud alteration

9:40 Seisel H₂O-soot interaction – a new DFG project

10:00 all Discussion of Session III

Session IV – Implications for the project and issues in 2005 ?

10:20 all Action items

12:00 Adjourn

Participants

Reinhold Busen	DLR-IPA
Hermann Mannstein	DLR-IPA
Ulrich Schurath	IMK-FZK
Beiping Luo	ETH Zürich
Jacques Pelon	CNRS/IPSL, France
Martina Krämer	FZJ-ICG1
Iulia Gensch	FZJ-ICG1
Hans Schlager	DLR-IPA
Sabine Seisel	U Duisburg-Essen
Claus Wahl	DLR-VT
Peter Gerlinger	DLR-VT
Manfred Aigner	DLR-VT
Johannes Hendricks	DLR-IPA
Bernhard Mayer	DLR-IPA
Horst Hüners	DLR, PD-L
Ulrich Schumann	DLR-IPA
Martin Plohr	DLR-AT
Thomas Gawehn	DLR-AT
Christiane Voigt	DLR-IPA
Waldemar Krebs	DLR-IPA
Luca Bugliaro	DLR-IPA
Tobias Zinner	DLR-IPA
Ralf Meerkötter	DLR-IPA
Peter Wendling	DLR-IPA
Michael Ponater	DLR-IPA
Andreas Minikin	DLR-IPA
Klaus Gierens	DLR-IPA
Peter Spichtinger	DLR-IPA
Reinhard Zellner	U Duisburg-Essen
Bernd Kärcher	DLR-IPA

Minutes

Meeting objectives

- Report progress made in the first project year - Sessions I-III
- Provide forum for guest contributions (FZ Jülich, ETH Zürich, U Essen)
- Inform about workplan changes
- Test if work packages make headway in achieving the main project goals - Session IV
- Emerging new project issues after PAZI-2 ?

- New workpackage lead - Andreas Minikin (AP 2.1)
- Ulrike Lohmann (U Dalhousie, Canada; associated to AP 3.4) accepted a call to ETH Zürich
- 27 publications have either appeared, are in press, or are in preparation 2004/2005

Workplan change

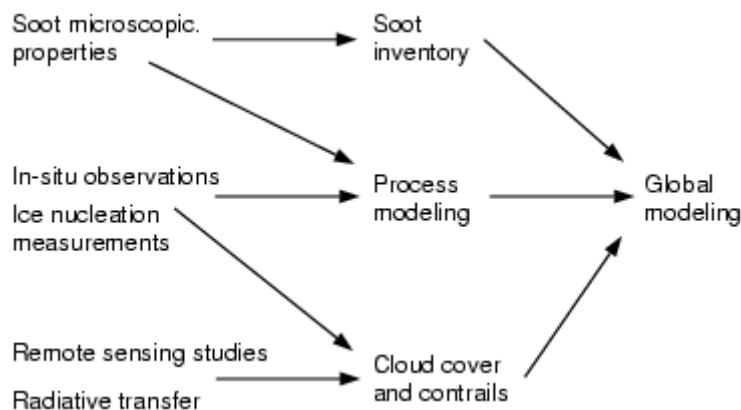
CIRCLE-1 / TROCCINOX-2 campaigns merged, new deployment data 23-JAN to 24-FEB-2005

Science objectives presented at SCOUT-O3 Executive Committee meeting (Erディング, 14/15-DEC-2004) discussed in the Session I part below.

Overall goal and project workflow

Determination of the climate impact of aviation soot-induced cirrus and contrail-cirrus relative to cirrus formed on particles from other anthropogenic or natural sources ...

- to compare climate impact from aviation with climate impact caused by other atmospheric changes
- to develop means to reduce aviation impact through changes in engine technology or air traffic management



Direct effect (contrail-cirrus): linear and spreading contrails, formed from exhaust water vapor and particles, constitute an additional cloud type and enhance cirrus cloud coverage. Initial contrail occurrence relies on well understood thermodynamic principles, initial contrail properties depend on soot and sulfur emissions and near-field exhaust (jet/vortex) dynamics. The spreading process of persistent contrails is controlled by wind shear and relative humidity. The direct effect is unimportant in regions where cirrus already exist or possibly evolve along with spreading contrails.

Indirect effect (soot-induced cirrus): Soot particles associated with aqueous coatings of sulfur and organics are emitted together with SO₂ gas and may perturb cirrus formation processes and cirrus coverage on regional scales. The perturbation depends on the ice-forming ability of coated soot particles that interact with ambient air, on the ability of other atmospheric particles to form ice, and on dynamic processes that set the stage for the generation of cirrus clouds in supersaturated regions. The indirect effect is unimportant in regions where cloud forms on heterogeneous nuclei that are more efficient at nucleating ice than aircraft soot.

Session I – How do atmospheric aerosols freeze and how do ice crystals interact with the gas phase ?

Recent scientific findings related to Session I (as summarized during the SPARC 3rd General Assembly 2004):

- Occurrence of high supersaturations over ice in cirrus conditions (cruising levels of long-range aircraft)
- Predominance of homogeneous freezing processes in cirrus clouds at all latitudes; still heterogeneous ice nuclei (IN) have the potential to significantly modify cloud properties and evolution
- Assessment of impact of IN hampered by paucity of observations and poorly constrained models
- Interaction of trace gases (e.g., HNO₃) with ice surfaces complicated by complex surface kinetic processes and highly dynamical environment in which atmospheric ice crystals evolve

Consequences for PAZI tasks: (i) aircraft soot is unlikely to dominate cirrus formation but cloud modifications (i.e., radiative properties) may still occur and are not well known; (ii) ubiquitousness of homogeneous freezing and associated high supersaturations renders spreading persistent contrail radiative effects relatively more important; (iii) levels of upper tropospheric HNO₃ and related ozone chemistry are perturbed by aircraft NO_x but available HNO₃ may partly be determined by cloud uptake; surface impurities on ice may influence ice growth and evaporation fluxes and water balance.

New tools available for PAZI-2: (i) coupled parameterization scheme of ice formation for use in ECHAM, permits a more realistic treatment of cirrus formation including natural and anthropogenic/aircraft IN after intensive testing in the global model; (ii) one-dimensional cirrus cloud resolving model (particle-in-cell code), permits a realistic description of effects of IN on vertical cloud structure / optical properties and of the vertical redistribution of trace gases and IN. Both tools link to measurements in the freezing chamber AIDA (constrained ice nucleation processes) and in the field (better understanding of atmospheric processes) and to ECHAM global studies (improved assessment).

The AIDA freezing chamber is now operated with separate measurements of gas phase and total water, which allows the amount of H₂O in ice to be inferred; the ice phase is probed separately by particle probes (FSSP) and laser spectroscopy. Soot ice nucleation measurements show deposition freezing in the range 110-130% RHI (over ice); thick sulphuric acid coating increases freezing threshold toward homogeneous limits, perhaps by deactivation of active sites; more soot measurements are needed for a more systematic assessment, these are part of ongoing activities (external mixtures, organic coatings, etc). New data for ammoniated sulfates show freezing at 120-130% RHI, possibly caused by dry areas in hot spots in the AIDA in which non-deliquesced ammonium sulfate could exist and lead to early freezing (deposition mode). Mineral dust data confirm that dust particles are very efficient IN (RHI~100-120%) in mixed phase and cirrus conditions (insoluble uncoated particles); effects of coating remain to be studied. Ice nuclei may exhibit broad spectrum of nucleation supersaturation, as evidenced by AIDA dust and soot data, possibly with implicit size effects (DeMott et al. using monodisperse aerosol).

Consequence for PAZI tasks: The apparent slow nucleation and the broad spectrum of freezing thresholds of some IN complicate the application of the heterogeneous cirrus parameterization developed in PAZI, which is valid for a single ice nucleation threshold value, but contains a free parameter to adjust the nucleation time scale. DLR-IPA and FZK-AAF collaborate to further investigate this issue (Benz et al. and Kärcher et al.). While accurate ice nucleation rates may still be derived, it is possible that the associated cirrus parameterization later to be used in ECHAM can only approximately take such effects into account.

Science issues of the combined CIRCLE-1 / TROCCINOX-2 campaign are as follows:

Measurements of H₂O with emphasis in and near ice supersaturated regions:

- Intercomparison of TDL and hygrometer instruments, including TDL validation
- How is water partitioned between gas phase and ice phase ?
- Can we confirm the relationships between vertical wind, relative humidity, and total ice crystal concentration known from previous measurements ?

Measurements of SO₂ and nucleation mode particles:

- Validation of global model predictions of tropical and subtropical SO₂ and NO_y concentrations
- How is SO₂ transported in convection, in anvil outflow, and above convective cloud tops and can we quantify its abundance ?
- Is new aerosol particle formation in clear air linked to SO₂ and does it also occur within or nearby cirrus clouds ?

Measurements of aerosol and cirrus cloud properties:

- Extend and complement original TROCCINOX goals with respect to subvisible clouds
- How do aerosols grow and freeze in ice supersaturated air and can we establish a quantitative link to ice cloud properties ?
- What are the relationships between ozone, NO_y, lightning, and clouds ?

One experiment is devoted to study the possible indirect effect of aviation soot aerosol on cirrus formation (fly race track pattern in a prefrontal region too warm for contrail formation and detect possible ice cloud features that could be traced back to aircraft emissions). The measurements of supersaturation is still important, because the relative importance of kinetic (associated with ice crystal properties) versus dynamic (cooling and moistening of air) effects responsible for creating persistent supersaturations are unclear.

Consequences for PAZI tasks: Campaign merging requires Falcon payload swapping on-site (lidar out: ~27-JAN, lidar in: ~12-FEB). Some payload planned for October deployment will not be available (AMS, CVI, ice water sampler), but TROCCINOX payload is also valuable for CIRCLE-1 objectives and creates synergistic effects (Geophysica; TDL, aerosol-DMA). Flight strategies have been discussed to meet the science goals, but not all of them could possibly be addressed, mainly depending on the meteorological situation. The possibility of carrying out a dedicated local campaign (in Lindenberg in September 2005 during the LAUNCH campaign or in OP in 2006, depending on financial flexibility) with AMS, CVI, AIS has been considered and should be further discussed.

Session II – How do cirrus and contrails interact with radiation and what is their global coverage ?

Observations suggest a larger radiative impact of spreading contrail-cirrus than of line-shaped contrails due to a greater optically active area. An assessment is difficult because at some point, spreaded (by horizontal wind shear possibly in connection with ice particle sedimentation and uplift creating supersaturation or maintaining saturation) contrails look similar to natural cirrus from a point of view of remote sensing (and sometimes also for eye observers). The single scattering properties of ice crystals determine the cloud radiative response, among other factors. They depend sensitively on shape, and the amount of ice in cloud and its spatial distribution. As a variety of shapes are present in cirrus clouds and the crystal size distributions are different in different regions of the cloud, this further complicates radiative calculations. Most global models treat cirrus analogous to liquid water clouds, and do not allow for ice supersaturation, contrary to recent observational evidence. While attempts are being made to improve the cloud microphysical representation, it must be realized that cirrus cover parameterizations still rely on “historical” approaches and need to be updated and to be made consistent with new findings.

Related work in PAZI-2 aims at developing new remote sensing methods to better quantify cirrus cloud radiative forcing. A far goal is to improve the rather crude radiation parameterization schemes in GCMs currently in use for high cloud. Methods to solve the problems include basic research on interaction of ice clouds with radiation; remote sensing of cirrus cloud properties from space and validation with ground-based (lidar) observations; and transfer of improved knowledge to GCMs, particularly into ECHAM.

Radiative transfer calculations at DLR-IPA are now based on extinction coefficients, single scattering albedos, and scattering phase functions from an extensive data base (Ping Yang, U Texas). The data base (tabulated as a function of wavelength, size, and habit) has been created by performing a larger number of single scattering calculations assuming various common crystal habits and 29 typical ice crystal size distributions. This now takes into account a wide range of size parameters, while work performed in PAZI-1 was based on an exact theory that was only valid for small size parameters (below 20).

Artificial cloud scenes are used for realistic radiative transfer calculations; these are used to average over satellite instrument fields of view, yielding artificial satellite images. At present, studies are confined to spatially limited regions, but the new tool may be used for retrieval validation in the near future. An analysis of high resolution lidar data of cirrus reported by Beiping Luo showed very fine scale cloud structures varying over a scale of only 1 km; this challenges any remote sensing interpretation of cirrus radiative properties. This may require the use of artificial cloud scenes for cirrus.

Plans for the second year include the development of an operational quantitative cirrus retrieval; estimations of cirrus radiative forcing from satellite observations; and the creation of an artificial yet realistic satellite scene for retrieval validation and training.

Spreading persistent contrails enhance the extension of natural cirrus cover in adjacent areas where the supersaturation is too low to form cirrus naturally. This motivates much of the remote sensing work. New algorithms for cloud tracking and classification have been developed, including a novel cirrus mask (based on cloud morphology) for MSG replacing the familiar brightness temperatures to detect cloud in AVHRR images. Tracking requires knowledge of air motion vectors to follow single cloud features and to deduce object growth rates, among other parameters. The new tools have so far been tested for tracks of convective cells, some preliminary contrail detection results have been presented.

The six week study of METEOSAT / air traffic data of filling up of supersaturated fields by persistent contrails reported in PAZI-1 has been expanded using almost one year (2004) of EUROCONTROL data of the actual (not just the scheduled) air traffic movements. This new effort puts the knowledge on contrail-cirrus on a sounder basis.

Consequences for PAZI tasks: Ongoing satellite analysis supports previous conjectures that aircraft affects cirrus cloudiness in dense traffic regions. It is necessary to continue this type of analysis with improved tracking schemes and cloud masks with actual high resolution data from both, aircraft movements and satellites, over statistically significant time periods and different locations with high air traffic density.

In a collaboration with Adrian Tompkins (ECMWF Reading), the stratified cloud cover scheme (originating from Tiedtke and also used in GCMs) has been modified by Klaus Gierens in the ECMWF box model version using a relaxation ansatz for ice formation and dissolution. This permits ice supersaturation to occur and allows ice crystals to exist in subsaturated regions in the model; both is not possible in current operational global weather and climate models.

Tompkins showed that this and related ideas offered by himself and Lohmann and Kärcher creates new or amplifies series numerical problems when used in the three-dimensional forecast system. In an invited talk presented at the COST meeting organized by IPA, he showed test simulations using a simplified version of Gierens' ansatz assuming instantaneous relaxation of in-cloud humidity to ice-saturation. A drawback of this is that this test-version of the forecast system does not allow ice clouds to exist under sub-saturated conditions. The tests showed probability distributions of RHI consistent with corresponding data from MOZAIC. These and further tests are described in a forthcoming ECMWF technical memorandum. Tompkins mentioned that the future of the ECMWF cloud scheme will be a prognostic statistical scheme, developed from the current ECHAM5 cloud scheme. To implement ice-supersaturation in such a scheme will require new thinking. Consequences for PAZI tasks are summarized below (Session IV).

Martina Krämer (FZJ) reported on a cirrus field experiment carried out in November 2004 at 60°N (Northern Europe) in collaboration with MPI/U Mainz and enviscope. Measurements of relative humidity inside and outside clouds using total and gas phase measurements were reported. The probed cirrus at 9-11.5 km were often associated with uplift in warm fronts and showed clear signatures of ice supersaturation. The method of sampling bulk ice and aerosol particles in situ for later chemical analyses of volatile and nonvolatile material in the laboratory (AIS, aerosol and ice sampler) has been described.

It was pointed out that high precision water measurements are still difficult to carry out at low air temperatures and low H₂O partial pressures. A preliminary analysis of AIS data suggests the presence of very few (less than 1/L) insoluble particles in the 1-10 μm size range.

Beiping Luo (ETH Zürich) reported about an extensive measurement analysis of the factors controlling total ice crystal number densities and ice supersturation. Former SUCCESS measurements with data from MASP, PVI, 2DC, and CVI cloud probes were analyzed. It was confirmed that maximum concentrations of IN are probably bound by 10/L or so, but values of 100/L were occasionally observed (continental upper troposphere over the U.S.A.). Observed total ice crystal numbers exceeded 1/cm³. It was convincingly demonstrated that small scale vertical winds that exceed peak ECMWF winds by more than a factor of 10 cause these high values, corroborating the INCA findings. Probability density functions for cooling rates were derived, peaking at several 10 K/hr cooling rates. These cooling rates are determined by the magnitude of the small (meso) scale temperature fluctuations; further, the analysis supported ice mass deposition coefficients between 0.1 and 1.

Session III – How do soot particles form and what is their global distribution and impact on cirrus ?

Although progress has been made in understanding and describing soot formation and oxidation in simple laboratory type experiments, knowledge on the detailed processes controlling the properties of fresh (at emission) soot particles originating from burning kerosene fuel in aircraft combustors in cruising conditions is still at its infancy. Both gas phase chemistry controlling soot precursors and details of the nucleation and surface kinetic processes affecting nascent soot particles are not well known for more complex fuels. There is a strong need for a better data base of soot emissions of real engines in flight conditions. At stepwise approach would first try to better understand soot oxidation for the improvement of kinetic models (laboratory experiments designed to address this issue) and for formation/oxidation in combustors. This serves as a basis for more accurate soot models to be used in complex 3D computational fluid dynamics simulations. Previously used global aircraft soot inventories based on work at DLR and NASA are outdated, calling for an updated and possible more accurate inventory to be used in future assessment. The global distribution of Black Carbon (BC)

and soot particles from the total of natural and anthropogenic sources is highly uncertain. This is caused by often poorly known source strengths (factor 3 uncertainty is not uncommon) and by the poorly known processes that determine the escape rates of soot emitted from ground into the free troposphere and the fate of atmospheric soot aloft. A problem in assessing the impact of aviation soot on cirrus cloudiness without contrail formation is that soot particles from other sources and dust and perhaps crystalline aerosol species might compete with aircraft emissions in the cloud formation process.

The PAZI-2 combustor (semi technical scale for optimal investigation in realistic conditions) has been built up and it has been demonstrated that it is working properly. It will be used in due time to study soot formation and oxidation with high spatial and temporal resolution with laser-spectroscopic methods, as planned.

Soot is formed during combustion in the fuel-rich combustion zone. Most of the fresh soot particles are burned in the lean combustion zones before leaving the combustor. The surfaces of the remaining soot particles are strongly oxidized, possibly explaining that they appear to be hydrophilic as conjectured in an early analysis of the DLR-ATTAS exhaust and contrail characteristics and measured during the PARTEMIS campaign and in the laboratory (Popovitcheva et al.).

Reduction of soot emissions is only possible by modification of the combustion process (i.e., fuel properties and thermodynamic conditions such as: aromatic components, C/H ratio, O₂ mixing ratio; handling of injection, evaporation and mixing, evolution of combustor pressure and temperature). In a detailed yet idealized kinetic model, soot formation is described by finite rate gas phase chemistry (computing the evolution of fuel-specific polyaromatic hydrocarbon (PAH) precursors), followed by PAH growth (chain starts by C₂H₂ addition to C₆H₆, then growth by C₂H₂ addition + PAH recombination). The first soot "particle" forms by nucleation via recombination of PAH molecules followed by soot coagulation and soot surface growth. The nascent soot surfaces are oxidized by OH and O₂.

Tasks include to fully couple the a soot model with finite rate chemistry to the DLR THETHA code; develop a probability density function approach for turbulence chemistry interaction to be used within the THETA code; evaluate the soot coflame experiment (carried out in PAZI-1). The first HBK-S measurement campaign starts in January, a soot oxidation experiment will be carried out within the next 2-3 months. First measurements in real engines (RR staged combustor, Robin and Piper piston engines) in collaboration with industry partners are also planned.

Consequences for PAZI tasks: Despite the possibility for a greater relevance of the spreading contrail issue relative to indirect effect of aircraft soot, the soot issue has still top priority in PAZI-2 because (i) the high soot concentrations measured in flight corridors (~1/cm³ in the northern midlatitudes) could render soot freezing effective in spite of being relatively poor IN; (ii) the soot freezing thresholds vary from 110% RHI to water saturation and do not yet provide a meaningful constraint of models; (iii) the current ECHAM studies suggest that the soot impact on cirrus properties can be substantial and needs more experimental constraints of both abundance and freezing properties (also relative to dust aerosol); (iv) better knowledge of soot properties is required for the novel inventory and for contrail models.

It may also be of importance for DLR to assess the emissions of the novel Airbus A380 airliner.

Many assessments of the atmospheric impact of aviation have been carried out with the DLR 1992 soot inventory or a similar tool developed by NASA. In PAZI-2, a novel inventory is being created based on NO_x emission indices and smoke number, with enhanced resolution using realistic flight levels instead of 1000 m steps and realistic flight trajectories instead of great circles. Soot correlations will be enhanced with latest finding from AP 1.1.

A large number of engine types and aircraft/engine combinations are in service, but traffic data does not contain this type information to select the correct combinations for an inventory. For this reason the concept of representative aircraft/engine types is developed for the new inventory; data sources used include the comprehensive Jane's Aero-engine encyclopaedia, JP airline fleets data base, and the ICAO aircraft engine emissions data base. Selection criteria are based upon similarity of emission characteristics, frequency of occurrence in the global fleet, and date of certification, resulting in 52 representative engine types that will enter the novel inventory.

Next steps includes engine and aircraft models to calculate parameter tables, improvement of soot correlations (2005/6), and processing of air traffic and aircraft/engine data by the project partner DLR-FW (2006/7). There is good hope that by mid-2007, the joint effort in PAZI-2 leads to an aircraft soot inventory that is more accurate than currently available inventories of other BC/soot emissions from natural and anthropogenic sources.

Consequences for PAZI tasks: The exact structure of the data base that will finally be used in ECHAM should be fixed as soon as possible. This will allow the global models to quickly start their final project simulations in the second half of 2007.

Improvements of BC/soot representation (in particular from aviation) in the global model ECHAM have been reported. The global simulations of computed concentrations have been validated by available observations, but an accurate validation is considered problematic because the available in situ data are highly uncertain, and new measurements devices for more accurate soot characterization in the atmosphere have been developed only very recently. The critical mechanisms controlling atmospheric soot concentrations have been isolated (cloud scavenging, soot hydrophobic to hydrophilic transition time). A link to observations could be provided by the CLACE measurements carried out at Jungfraujoch in recent winters; soot water uptake properties could be classified depending on a suitable aging parameter (Petzold et al.).

The ECHAM study underlines that air traffic may perturb global BC (and potential IN) concentrations significantly. An exploratory study of the indirect effect of aircraft soot on cirrus has been carried out. This study raises the possibility of both a significant decrease and an increase in simulated cirrus particle concentrations.

Further improvements of the modal aerosol module MADE used in ECHAM for car traffic studies have been reported. The goal in PAZI-2 is to make the module operational for cirrus studies by mid-2007.

Sabine Seisel presented first results obtained in a new DFG project at U Essen associated with PAZI-2. The key objective is to investigate basic issues of water-soot interactions on a microscopic scale using a Knudsen cell apparatus. Results obtained with kerosene soot from a laboratory burner showed that the uptake coefficient for H₂O molecules on dry surfaces ranges between 0.001 to 0.005 at 200-240 K. Future work will concentrate on variations of the air/fuel ratio and the type of fuel, and the effects of coatings on water adsorption. Laboratory studies on soot water uptake could help improve the representation of soot ageing in global bulk aerosol models. Mineral dust data will also be investigated and are expected to be more hydrophilic than soot. The Essen team so far works with the hypothesis that fresh soot is hydrophobic, which might not be the case regarding the findings of Popovitcheva et al. (see above); Ulrich Schumann suggested to address this issue in future work.

Session IV – Implications for the project and action items in 2005 ?

- Campaign preparation/measurement issues CIRCLE-1 / TROCCINOX-2

The overview provided by Andreas Minikin showed that CIRCLE-1 could well be integrated with TROCCINOX-2 and the team is looking forward for interesting data. This also includes a first deployment of the novel SO₂ instrument.

- Narrowing uncertainties in soot prediction and ice nucleation potential

It was agreed that the main output of AP 1.1 are the total number, the mean size, and the width of a mode of soot particles as input for the inventory developed in AP 1.2. DLR-VT will organize a meeting held in Stuttgart to discuss the workflow between HAP 1 and the global studies carried out in HAP 3, including the expertise of former near-field plume measurements carried out at DLR-IPA. This meeting should also discuss instrument issues including colleagues from Heidelberg, Essen, and Mainz. The ongoing collaboration between DLR-IPA and FZK-AAF will focus on the transfer of soot and dust ice nucleation properties measured in the AIDA into the cirrus parameterization and finally into the global model ECHAM.

- Spreading contrail parameterization and link to QUANTIFY

Having the ability to predict supersaturation in a weather forecast or nudged global model permits the prediction of persistent contrails. Bernd Kärcher proposed to repeat the line-shaped contrail ECHAM study (Ponater, Marquart et al.) using a sub-module describing the spreading process as a first but important step to quantify the impact of contrail cirrus on cloud cover. This module was outlined by Klaus Gierens and could be validated by searching for a suitable MSG observational case study or the Lindenberg LAUNCH data (see above), along with wind information from a weather forecast model. Later refinements concerning the radiative properties of contrail-cirrus versus natural cirrus could be added. Ulrich Schumann pointed out a missing link between small-scale studies linking soot emissions and contrail formation to contrail-cirrus observations. It was agreed that this issue requires further planning to be outlined in a meeting at DLR-IPA involving small scale and global modelers and the remote sensing and lidar groups.

- Improved cirrus microphysics in ECHAM and treatment of indirect effects

As pointed out by Johannes Hendricks, work along these lines proceeds as planned and the PAZI team is likely able to update the results obtained in 2002-2004 (which are unprecedented) in the second half of this project with improved and more realistic models. Without the input of the AIDA measurements these simulations would have to be considered less confident.

- Programmatic issues

Ulrich Schumann addressed the idea that the optimization of air traffic management should take care of contrail formation, if aircraft contrails indeed affect cirrus cloudiness. Therefore, an operational tool to predict persistent contrails as a function of weather prediction and aircraft movements is needed. Another idea has been launched earlier by Andreas Petzold concerning the issues of emissions, transport, noise, safety, and air quality near airports, involving connections to the EU NoE ECATS and to ICAO. As the DLR aviation program will undergo restructuring in 2007, these ideas have to be discussed in depth in the near future.

Summary of workpackage Input / Output (main deliverables taken from the project plan appendix)

AP 1.1 (Soot characterization)	processed soot microphysical data originating from measurements using realistic combustor / engine configurations to AP 1.2
AP 1.2 (Soot inventory)	global 4D inventory to AP 3.4
AP 2.1 (Field campaigns)	data bank CIRCLE 1 / 2 for use in APs 3.1, 3.2, 3.3
AP 2.2 (SO ₂ instrument)	data bank for use (validation of global aerosol module) in AP 3.4
AP 2.3 (Satellite remote sensing)	contrail-cirrus scenes and global cirrus climatology to APs 3.3, 3.4
AP 2.4 (Freezing experiments)	ice nucleation data to APs 3.1, 3.3
AP 3.1 (Ice formation processes)	improved parameterization scheme for use in AP 3.4
AP 3.2 (Radiation processes)	improved cirrus radiation scheme for use in AP 3.4
AP 3.3 (Cloud cover)	improved cloud cover parameterization for use in AP 3.4
AP 3.4 (Climate modeling)	updated assessment of cirrus changes and aviation impact

Key project milestones (HMS)

HMS 1	Soot oxidation measurements completed and evaluated	December 2006
HMS 2	Four-dimensional global aircraft soot inventory available	June 2007
HMS 3	Measurements campaigns (HBK-S and real jet engines) completed; new soot model in 3D CFD simulations validated	December 2007
HMS 4	Aircraft campaign CIRCLE-1 completed; nucleation properties of relevant aerosol particles determined	October 2005
HMS 5	Aircraft campaign CIRCLE-2 completed; optical cirrus parameters determined and remote sensing methods validated	October 2006
HMS 6	Direct and indirect effects estimated	December 2007
HMS 7	Aerosol/cloud module for ECHAM implemented and validated	December 2005
HMS 8	Validated parameterization schemes available for use in ECHAM	June 2006
HMS 9	Quantification of aircraft-induced cloud changes and climate impact	December 2007

HAP 1 / AP 1.1	Rußemissionen / Messung und Modellierung
PI	Gerlinger, VT
Meilenstein(e)	Reaktor zur Rußoxidation aufgebaut (wird FEB-05 abgeschlossen) PAZI-2 Brennkammer aufgebaut und betriebsbereit

Durchgeführte Arbeitsschritte

Konstruktion und Aufbau der PAZI-2 Brennkammer: Zur räumlich aufgelösten laserspektroskopischen Untersuchung der Rußbildung und Rußoxidation unter triebwerkstypischen Bedingungen (am Hochdruckbrennkammerprüfstand Stuttgart, HBK-S) musste eine neue Brennkammer konstruiert und gebaut werden. Durch zwei vollständig in Quarzglas ausgeführte Seitenwände ist bei dieser PAZI-2 Brennkammer ein guter optischer Zugang gegeben. Abmessungen, Aufbau, Verweilzeiten und Sekundärlufteinblasung orientieren sich an realen Flugtriebwerken.

Mobilmachung der Meßtechniken: Die unter Laborbedingungen entwickelten Messtechniken LII (für den Rußvolumenbruch) und SV-CARS (für die Temperaturverteilung) waren so umzubauen, dass sie an Großprüfständen eingesetzt werden können. Das erforderte die Mobilmachung des gesamten Meßtechniksystems und damit beispielsweise die Klimatisierung des Nd:YAG-Lasers.

Mehrdimensionale Brennkammersimulationen: In PAZI-2 ist auch bei den mehrdimensionalen Simulation die Verwendung komplexerer Verbrennungs- und Rußmodelle geplant. Hierzu wurde der DLR THETA-Code dahingehend erweitert, dass eine beliebige Anzahl von Komponententransportgleichungen gelöst und Verbrennung mit einem beliebigen vorgebbaren Reaktionsmechanismus (finite-rate chemistry) simuliert werden kann. Die Modellierung der Rußbildung erfolgt über einen an die Momentenmethode angelehnten, vereinfachten Ansatz, der alle wesentlichen physikalischen Vorgänge der Rußbildungs- und -abbauprozesse berücksichtigt. Basiskomponenten für die Bildung von Rußvorläufern sind Acetylen und Benzol, deren Entstehung durch den Gasphasenmechanismus möglichst genau wiedergegeben werden muss. Die Anzahl an Rußvorläufern ist variabel. Durch die Bildung immer schwererer PAHs kommt es schließlich zur Bildung von Rußpartikeln. Für den Rußvolumenbruch und die Anzahlverteilung der Rußpartikel sind Transportgleichungen zu lösen.

Grundlagenexperiment zur Rußoxidation: Der Rußoxidationsreaktor wurde in einer ersten Ausbaustufe in Betrieb genommen. In Voruntersuchungen wurde der Wärmeübergang vom Rohrofen auf das Testgas und die „Transmission“ der vom Russgenerator erzeugten Nanopartikel durch eine Schicht von Raschigringen analysiert.

Messungen an realen Triebwerken: Im Berichtszeitraum sind Messungen hinter einer gestuften kommerziellen Brennkammer und hinter zwei Robin 400 Kleinflugzeugen vom schweizerischen Luftfahrtbundesamt und einer Piper der Firma Hjelmco Oil vorgenommen worden.

Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Konstruktion und Aufbau der PAZI-2 Brennkammer: Die Fertigung ist voraussichtlich bis Dezember 2004 abgeschlossen, so dass dann erste Probeläufe (Festlegung von Betriebspunkten für die Messung (ca. 10 bar Druck und 600-700K Eintrittstemperatur) am HBK-S beginnen können. Die Mobilmachung der Meßtechniken wird bis März 2005 abgeschlossen sein.

Mehrdimensionale Brennkammersimulationen: Detaillierte Chemie (für beliebige Reaktionsmechanismen) mit Transportgleichungen für jede Gasphasenspezies und ein neues Rußmodell wurden im THETA-Code implementiert. Die Simulation einfacher Testfälle (mit Methan als Brennstoff) hat gute Resultate erbracht.

Grundlagenexperiment zur Rußoxidation: Die Vorversuche am Rußoxidationsreaktor haben gezeigt, dass genügend Rußpartikel die Raschigringe passieren und dass dadurch eine homogene Verteilung über den Querschnitt erreicht werden kann. Darüber hinaus hat sich gezeigt, dass die Partikelgrößenverteilung (bei den erzielbaren Temperaturen und Verweilzeiten im Reaktor) signifikante Änderungen erfährt. Die Partikelgrößenverteilung realer Triebwerke lässt sich am Oxidationsreaktor nachbilden.

Messungen an realen Triebwerken: Die SMPS Messungen hinter einer modernen gestuften Brennkammer haben starke Variationen der Partikelgrößenverteilung und Anzahlkonzentration ergeben, je nachdem wie das Stufungsverhältnis und Betriebspunkt gewählt wird. Bei SMPS-Messungen hinter einmotorigen Kleinflugzeugen (mit Flugbenzin betriebenen) ergaben sich ähnliche Partikelgrößenverteilungen und Anzahlkonzentrationen wie hinter großen (mit JET-A1 betriebenen) Fluggasturbinen.

Input/Output

O: Ergebnisse der „ROBIN-Messungen“ gingen an die ICAO – CAEP/7 Working Group 3.

Publikationen

- Di Domenico, M., P. Gerlinger, and M. Aigner
Detailed Soot Formation Model in Flames.
To appear in the Proceedings of the European Combustion Meeting, 2005
- Wahl, C., M. Kapernaum, H. Zaafar, M. Aigner, Th. Rindlisbacher, W. Bula, and L. Hjelmberg
Nanoparticle Emissions of Flight Engines.
ASME Paper GT2005-68757, 2005
- Wahl, C., M. Kapernaum, Th. Rindlisbacher, and W. Bula
Nanoparticle Emissions of a small Piston- Engine powered Aircraft.
8th International ETH-Conference on Combustion Generated Particles, 16th –18th August 2004 Zürich,
Switzerland
- Wahl, C.
Variabler Nanosootgenerator als stabile und reproduzierbare Verbrennungsrußquelle z.B. zur
Filterprüfung.
Symposium der Palas GmbH, Daimler Chrysler Werk Würth 10. Feb. 2004
- Geigle, K.P., Y. Schneider-Kühnle, M. Tsurikov, R. Hadeff, R. Lückerrath, V. Krüger, W. Stricker, and M. Aigner
Investigation of laminar pressurized flames for soot model validation using SV-CARS and LII.
Proceedings International Symposium on Combustion, erscheint 2005
- Schneider-Kühnle, Y., K.P. Geigle, V. Krüger, R. Lückerrath, M. Tsurikov, W. Stricker, and M. Aigner
Development of a Shifted-Vibrational N2-CARS System and Application to Pressurized Sooting
Flames.
ECONOS 2004, 4.-6.4.2004, Erlangen (Germany)
- Krüger, V., C. Wahl, R. Hadeff, K.P. Geigle, W. Stricker, and M. Aigner
Comparison of laser-induced incandescence method with scanning mobility particle sizer technique: the
influence of probe sampling and laser heating to soot particle size distribution.
in preparation
- Krüger, V., K.P. Geigle, Y. Schneider-Kühnle, R. Hadeff, M. Tsurikov, and M. Aigner
Mesure par LII de la concentration et de la taille de la suie dans une flamme prémélangée laminaire.
12. Congres Francais de Mecanique (CFM), angenommen, 2005

HAP 1 / AP 1.2	Rußemissionen / Globales Rußkataster
PI	Plohr, AT
Meilenstein(e)	Auswahl statistisch relevanter Flugzeug-Triebwerk Kombinationen

Durchgeführte Arbeitsschritte

Untersuchung der in vorhergehenden Katastern verwendeten Methodik zur Auswahl von statistisch relevanten Flugzeug-Triebwerk-Kombinationen.

Bewertung der einzelnen Methoden im Hinblick auf die Eignung in PAZI-2 (Schwerpunkt auf Rußemissionen).

Auswahl und Entwicklung eines geeigneten Verfahrens für PAZI-2 (in Arbeit).

Beschaffung aktueller Flugzeug- und Triebwerksdaten (in Arbeit).

Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Die in vorangegangenen Katasterrechnungen (NASA, ANCAT/EC2, DLR) verwendeten Verfahren zur Gruppierung von Flugzeug- und Triebwerkstypen und zur Auswahl repräsentativer Kombinationen für jede Gruppe wurden verglichen und im Hinblick auf ihre Eignung für PAZI-2 bewertet. Alle Verfahren gruppieren zumindest die strahlgetriebenen Großflugzeuge nach Kapazität, auf der Basis von entweder Passagierzahlen oder maximalem Abhebegewicht (MTOW). Zusätzlich erfolgt eine Einordnung nach Technologie. Dieses Verfahren wird für PAZI-2 übernommen und wird auch für Turboprops und Regional- und Businessjets zur Anwendung kommen.

Die Gruppierung der Triebwerkstypen erfolgte bei allen Katastern auf der Basis von Verbrauchs- und NO_x-Emissionscharakteristik. Die Auswahl der für jede Gruppe repräsentativen Triebwerke erfolgte in aller Regel auf statistischer Basis (das jeweils häufigste Modell wird ausgewählt), oder es wurden generische Triebwerksmodelle verwendet und mit ihrer statistischen Häufigkeit gewichtet. Dieses Verfahren erscheint für PAZI-2 ungeeignet, da sowohl NO_x- als auch Rußemissionscharakteristiken berücksichtigt werden müssen. Es werden daher für PAZI-2 im ersten Schritt alle Triebwerkstypen nach ihren Rußemissionen gruppiert. Diese Gruppen werden anschließend auf der Basis der NO_x-Emissionen weiter unterteilt. Dazu wird ein Verfahren aus dem EU-Projekt AERO2k verwendet, das darin besteht, auf der Basis der individuellen Emissionscharakteristiken und der statistischen Häufigkeit jedes Triebwerkstypen einer Gruppe generische Emissionscharakteristiken zu bilden, die das Emissionsverhalten der Gruppe beschreiben. Als für die Gruppe repräsentatives Triebwerk wird dann dasjenige ausgewählt, dessen Charakteristik der generischen am nächsten kommt.

Die aktuellste Ausgabe der ICAO-Emissionsdatenbank gibt Smoke Number Werte für eine erfreulich große Anzahl von Triebwerken an, so dass eine ausreichende Datenbasis zur Verfügung steht. Ein Schwachpunkt ist nach wie vor die Umrechnung der Smoke Number in Rußkonzentrationen. Weiterhin wird im Laufe der nächsten Jahre die Einführung neuer Flugzeug- und Triebwerkstypen erwartet (z.B. Airbus A380). Es wird daher vorgeschlagen, zum Zeitpunkt des Meilensteins im Dezember 2004 nur eine vorläufige Liste vorzulegen, und diese bis zur eigentlichen Kataster-Berechnung für die Aufnahme neuer Typen offen zu halten.

Input/Output

I: ICAO-Datenbank, Luftflotten-Datenbanken, Publikationen ANCAT/EC2, NASA, DLR.

O: (Vorläufige) Listen repräsentativer Flugzeug/Triebwerk Kombinationen (voraussichtlich 12/04)

HAP 2 / AP 2.1 Aerosole und Zirren / In-situ Messungen
PI Petzold, IPA
Meilenstein(e) Meßapparaturen der neuen Fragestellung angepaßt

Durchgeführte Arbeitsschritte

Anpassung der Aerosol-Messinstrumente an die schnelle und größen aufgelöste Erfassung von festen und flüchtigen Aerosolkomponenten.
Vorbereitung der vorverlegten Messkampagne CIRCLE-1.

Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Das bei IPA existierende Instrumentenpaket zur Messung luftgetragener Partikel wurde für die schnelle Messung von Aerosolgrößenverteilungen erweitert. Dazu wurden mehrere Kondensationskernzähler (Condensation Particle Counter, CPC) zur Bestimmung der Partikelanzahl so modifiziert, dass die Messung von Partikelanzahlkonzentrationen oberhalb definierter Partikeldurchmesser durch Parallelbetrieb mehrerer CPC möglich ist.

Eine Erweiterung des erfassbaren Durchmesserbereichs wurde durch die Kombination von CPC mit so genannten Diffusionsabscheidern erreicht. Diese Diffusionsabscheider bestehen aus feinmaschigen Sieben und entfernen Partikel durch größenabhängige Deposition aus dem Aerosol. Die erfolgreich durchgeführte Kalibrierung des Systems aus CPC und Diffusionsabscheider lieferte die Voraussetzung für den ersten erfolgreichen Einsatz dieser Gerätekombination zur schnellen Messung des Aerosols der Nukleations- und Aitkenmode im Größenbereich $D < 100$ nm während des internationalen Experiments ICARTT-ITOP im Sommer 2004.

Das Feldexperiment CIRCLE-1 wurde auf Grund geänderter äußerer Randbedingungen nach Rücksprache mit den beteiligten Partnern mit dem in Brasilien stattfindenden Experiment TROCCINOX-2 im Januar und Februar 2005 kombiniert. In dem modifizierten Experiment werden überwiegend Fragestellungen aus AP 2.2 bearbeitet. Um nicht-durchführbare Ansätze, die in CIRCLE-1 geplant waren (AMS+CVI Kombination) während PAZI-2 zu verwirklichen, ist geplant, Falcon-Messungen im Raum OP (evtl. in 2006) durchzuführen. Die Vorbereitung der Arbeiten wurde im Dezember 2004 erfolgreich abgeschlossen. Die Messungen werden in Brasilien in der zweiten Januarhälfte 2005 durchgeführt werden.

Input/Output

O: Transferfunktionen für CPC-Diffusionsabscheider-Kombinationen für die schnelle Messung der Nukleations- und Aitkenmode auf der Falcon; modifizierte Experimentplanung für das Feldexperiment in Brasilien im Januar 2005.

Publikationen

- Schneider, J., N. Hock, S. Hings, S. Weimer, S. Borrmann, M. Fiebig, A. Petzold, R. Busen, and B. Kärcher
Aircraft-based mass spectrometric aerosol measurements: Chemical composition of tropospheric background aerosol and aircraft exhaust particles
J. Geophys. Res., in review, 2005.
- Fiebig, M., C. Stein, F. Schröder, P. Feldpausch, and A. Petzold
Inversion of data containing information on the aerosol particle size distribution using multiple instruments
J. Aerosol Sci., in review, 2005.
- Feldpausch, Ph., M. Fiebig, L. Fritzsche, and A. Petzold
Measurement of ultrafine aerosol size distributions by a diffusion separator-CPC combination
J. Aerosol Sci., in preparation, 2005.
- Feldpausch, Ph., A. Petzold, L. Fritzsche, and A. Minikin
Measurement of ultrafine aerosol size distributions by a multi-channel diffusion separator – CPC system
J. Aerosol Sci., Abstracts of the European Aerosol Conference, S757 – S758, 2004.

HAP 2 / AP 2.2 Aerosole und Zirren / Aerosolvorläufergase
PI Schlager, IPA; Arnold, MPI-K
Meilenstein(e) Messtechnik ausgewählt

Durchgeführte Arbeitsschritte

Laboruntersuchungen zum SO₂-Nachweis mittels gepulster Fluoreszenz und Chemischer Ionisationsmassenspektrometrie (CIMS).

Aufbau einer Erprobungsversion eines IT(Ion Trap)CIMS-Instruments.

Einsatz des ITCIMS-Instrumentes an Bord der Falcon im Juli 2004 für erste atmosphärische SO₂-Messungen.

Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Als SO₂-Nachweismethode wurde die CIMS-Technik ausgewählt. Sie ermöglicht eine Nachweisgrenze bei Flugzeugmessungen von 0,1 nmol/mol bei einer Zeitauflösung von 1 Sekunde. Im Vergleich dazu können mit der Fluoreszenztechnik nur 30 nmol/mol bei 10 Sekunden Auflösung erreicht werden. Dies ist für Messungen in der freien Troposphäre nicht ausreichend.

Eine erste ITCIMS (Ion Trap Chemi-Ionisation Mass Spectrometer)-Messanordnung für den Einsatz in der Falcon wurde aufgebaut und luftfahrttechnisch zugelassen. Sie besteht aus drei Hauptkomponenten: a) Strömungsreaktor, b) Ionenquelle, c) Ionenfallen-Massenspektrometer. Primäre Ionen (CO₃⁺H₂O) werden in den Strömungsreaktor injiziert und reagieren dort mit den SO₂-Molekülen in der Probenluft. Dabei werden SO₅⁻-Produktionen gebildet. Das Verhältnis von Ausgangs- und Produktionen wird mit dem Massenspektrometer gemessen und daraus die SO₂-Konzentration bestimmt.

Der erste Einsatz des ITCIMS-Instruments (Prototyp) an Bord der Falcon verlief erfolgreich. Es wurden SO₂-Profile von der planetaren Grenzschicht bis in die untere Stratosphäre in unterschiedlich belasteten Gebieten in Europa (Südbayern, Poebene, Nordfrankreich, Ostatlantik) gemessen.

Geplante Arbeiten 2005

Auswertung der SO₂-Messungen bei den Falcon-Flügen im Juli 2004.

Einsatz des ITCIMS-Instruments bei der CIRCLE-1 Kampagne im Januar/Februar 2005.

Weitere Miniaturisierung des ITCIMS-Aufbaus.

HAP 2 / AP 2.3 Aerosole und Zirren / Fernerkundung
PI Mannstein, IPA
Meilenstein(e) Algorithmen zur Wolkenverfolgung und -klassifizierung

Durchgeführte Arbeitsschritte

Aufbau des METEOSAT-8 (MSG) Datenempfangs und der Archivierung in Zusammenarbeit mit dem DFD.
Entwicklung von schnellen Prozessierungsketten zur Analyse der METEOSAT 8 Daten, die eine Echtzeit-Verarbeitung ermöglichen.
Erste Anwendung des Cloud-Tracking Verfahrens auf METEOSAT-8 Daten für Zirren.
Entwicklung einer sensitiven Zirrenmaske aus Infrarot (IR)- und Wasserdampf (WV)-Kanal Daten, die tageszeitunabhängig auch dünne Zirren erkennt.
Entwicklung von schnellen und flexiblen ‚mapping‘-Routinen, die Satellitendaten in unterschiedlicher Aufnahmegeometrie auf die METEOSAT-Geometrie abbilden.
Anwendung des DLR Kondensstreifenerkennungs-Algorithmus auf METEOSAT-8 SEVIRI Daten.

Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Die für das Berichtsjahr gesetzten Ziele wurden erreicht. Sowohl die Klassifizierung von Zirren aus METEOSAT-8 SEVIRI Daten als auch die Verfahren zur Verfolgung von Zirren über längere Perioden wurden erfolgreich angewandt.

Die neu konzipierte Zirrusmaske kombiniert verschiedene Tests, die aus Vorwärts-Strahlungstransferberechnungen in AP 3.2 entwickelt wurden. Zur Validierung der Zirrenmaske wurde sie mit den Ergebnissen aus den räumlich und spektral wesentlich höher aufgelösten MODIS Daten verglichen und dabei eine hervorragende Übereinstimmung gefunden.

Parallel zu diesen Arbeiten wurden auch die technischen Probleme, die bei der Einführung eines neuen Satellitentyps zwangsläufig entstehen, gelöst. Die Prozesskette vom Datenempfang über die Dekodierung, Kalibrierung, Interpretation bis hin zur Archivierung ist aktiv. Zur besseren Datenverfügbarkeit wird der Datenempfang seit November 2004 redundant betrieben.

Input/Output

I: Simulation der Beobachtungen von Meteosat Second Generation (MSG), als Basis zur Entwicklung der Zirrusmaske (AP 3.2); O: Algorithmus zur Erkennung von Zirren aus METEOSAT-8 SEVIRI IR und WV Daten (Zirrenmaske); Algorithmus zur Verfolgen von Zirren in METEOSAT-8 Zeitserien

HAP 2 / AP 2.4 Aerosole und Zirren / Gefrierexperimente
PI Möhler, FZK-AAF
Meilenstein(e) Aerosolerzeugung und AIDA-Instrumentierung einsatzbereit

Durchgeführte Arbeitsschritte

Aufbau und erfolgreicher Einsatz des CAST-Brenners und der neuen TDL-Apparatur für Wassermessungen.
Experimente zum Einfluss von organischem Kohlenstoff auf die Eisnukleation von Russpartikeln.
Weitere Experimente zur heterogenen Eisnukleation von Mineralpartikeln.
Erste Simulationsexperimente zum Wettbewerb zwischen heterogener und homogener Eisnukleation.
Erste Experimente (AIDA-1) zur Simulation von Eisübersättigungen in Zirren bei Temperaturen der tropischen Tropopause.

Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Die Instrumentierung der AIDA-Aerosol- und Wolkenkammer, die bereits während der ersten Projektphase für Eisnukleationsexperimente bei Zirrenbedingungen eingesetzt wurde, konnte im ersten Projektjahr PAZI-2 weiter verbessert werden. Ein neues TDL-System für die empfindliche Messung von niedrigen Wasserdampfkonzentrationen in Tieftemperaturexperimenten wurde aufgebaut und bereits erfolgreich eingesetzt. Derzeit laufen Experimente zur genauen Charakterisierung der verwendeten Absorptionslinien von Wassermolekülen um die Genauigkeit des Systems noch zu steigern. Eine neue Apparatur für die Messung der Intensität und Depolarisation von an Eispartikeln gestreutem Laserlicht soll demnächst getestet werden.

Ein Laborbrenner (CAST) für die Erzeugung von Verbrennungsruß mit unterschiedlichem Gehalt an organischem Kohlenstoff (OC) wurde aufgebaut und bei Eisexperimenten als Aerosolquelle eingesetzt. Eine erste Fallstudie hat gezeigt, dass zunehmender OC-Gehalt die Eisbildung deutlich unterdrückt. Weitere Experimente sind für die nächste AIDA-Messkampagne geplant.

Bei einer umfangreichen Messkampagne im Oktober und November 2004 wurde neue Datensätze zur heterogenen Eisnukleation auf Mineralpartikeln sowie zum Wettbewerb zwischen heterogener und homogener Eisnukleation erzeugt. Die Ergebnisse sollen demnächst mit Ergebnissen von Prozessmodellen verglichen werden, um neue Parametrisierungen heterogener Eisnukleation zu überprüfen. Diese Arbeiten erfolgen in Zusammenarbeit mit AP3.2.

Input/Output

I: Schema für die Modellierung heterogener Eisnukleation (von AP 3.2). O: Neue Datensätze für den Vergleich mit Prozessmodellen in HAP 3.

Publikationen

- Mangold, A., R. Wagner, H. Saathoff, U. Schurath, C. Giesemann, V. Ebert, M. Krämer, and O. Möhler
Experimental investigation of ice nucleation by different types of aerosols in the aerosol chamber
AIDA: implications to microphysics of cirrus clouds.
Meteorol. Z., in press, 2004.
- Möhler, O., C. Linke, H. Saathoff, M. Schnaiter, R. Wagner, A. Mangold, M. Krämer, and U. Schurath
Ice nucleation on flame soot aerosol of different organic carbon content.
Meteorol. Z., in press, 2004.
- Möhler, O., S. Büttner, C. Linke, M. Schnaiter, H. Saathoff, O. Stetzer, R. Wagner, M. Krämer, A. Mangold, V. Ebert, and U. Schurath
Effect of sulphuric acid coating on heterogeneous ice nucleation by soot aerosol particles.
J. Geophys. Res., submitted, 2004.

HAP 3 / AP 3.1 Klima / Bildungsprozesse
PI Kärcher, IPA
Meilenstein(e) Parameterisierungsschema für Eisbildung fertig

Durchgeführte Arbeitsschritte

Erweiterung der Parameterisierungen zur Eisbildung zum Gebrauch in globalen Modellen.

Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Die in PAZI-1 entwickelten Parameterisierungen zur homogenen und heterogenen Eisbildung wurden gekoppelt, um Konkurrenz zwischen verschiedenen Gefriermoden subskalig zu beschreiben. Evidenz für diese Konkurrenz verschiedener Aerosoltypen beim Gefrierprozeß liefern Analysen von flugzeug-getragenen Messungen. Das Verhalten des heterogenen Schemas wurde in ECHAM eingehend untersucht (Lohmann et al., 2004).

Strategie: Die Sättigungsgleichung wird numerisch vorwärts integriert. Eiskristallzahl und -größe werden nach Erreichen der Gefrierbedingungen parametrisch berechnet. Die (prä-)existierenden Eispartikel werden zwecks Bestimmung der Wasseraufnahme durch Depositionswachstum als monodispers angenommen.

Für den späteren Einsatz im Klimamodell wird das neue Schema zur Zeit getestet und mit detaillierten numerischen Simulationen validiert. Diese Arbeiten werden Anfang 2005 abgeschlossen. Eine Publikation ist in Vorbereitung (Kärcher et al., 2005). In Zusammenarbeit mit FZK (Möhler, Benz) und UK MetOffice / NCAR (Cotton, Field) ist geplant, die Parameterisierung für heterogene Eisnukleation am Beispiel von Mineralstaub (AIDA Messungen liegen vor) experimentell zu untermauern. Ziel ist außerdem die Ableitung heterogener Nukleationsraten für Staub- und Rußpartikel zum Gebrauch in Prozeßmodellen.

Weitere Arbeiten im Rahmen der Drittmittelprojekte PARTS und SCOUT-O3: Abschluß der Dissertation W. Haag (Haag und Kärcher, 2004). Neuer Ansatz zur Beschreibung der Spurengasaufnahme in wachsenden Eiskristallen (Kärcher und Basko, 2004) mit Bezug zum Beitrag des AWI-Bremerhaven in PAZI-2 AP 3.1. Studie zur globalen Rußverteilung mit Schwerpunkt Luftverkehrseintrag (Hendricks et al., 2004) mit AP 3.4. Studie zu heterogenen chemischen Prozessen in Kondensstreifen (Meilinger et al., 2005).

Input/Output

I: Resultate (u.a. Eiskristallzahl, Gefrierfeuchten) aus AIDA, die in AP 2.4 gewonnen wurden. O: Validiertes Parameterisierungsschema für ECHAM. Heterogene Eisnukleationsratenkoeffizienten für AP 2.4. Wissenschaftliche Beiträge für den 4. IPCC Assessment Report (Kapitel 7, Contributing Author) und das SPARC Stratospheric Aerosol Assessment (Kapitel 1, Lead Author).

Publikationen

- Haag, W. and B. Kärcher
The impact of aerosols and gravity waves on cirrus clouds at midlatitudes.
J. Geophys. Res. 109, D12202, doi:10.1029/2004JD004579, 2004.
- Lohmann, U., B. Kärcher, and J. Hendricks
Sensitivity studies of cirrus clouds formed by heterogeneous freezing in the ECHAM GCM.
J. Geophys. Res. 109, D16204, doi:10.1029/2003JD004443, 2004.
- Kärcher, B. and M.M. Basko
Trapping of trace gases in growing ice crystals.
J. Geophys. Res. 109, D22204, doi:10.1029/2004JD005254, 2004.
- Hendricks, J., B. Kärcher, A. Döpelheuer, J. Feichter, U. Lohmann, and D. Baumgardner
Simulating the global atmospheric black carbon cycle: A revisit to the contribution of aircraft emissions.
Atmos. Chem. Phys. 4, 2521-2541, 2004.
- Meilinger, S.K., B. Kärcher, and Th. Peter
Microphysics and heterogeneous chemistry in aircraft plumes - High sensitivity on local meteorology and atmospheric composition.
Atmos. Chem. Phys. 5, in press, 2005.
- Kärcher, B., J. Hendricks, and U. Lohmann
Physically-based parameterization of cirrus cloud formation for use in global atmospheric models.
J. Geophys. Res., in preparation, 2005.

HAP 3 / AP 3.1 Klima / Strahlungsprozesse
PI Mayer, IPA
Meilenstein(e) Kein Meilenstein im Berichtszeitraum

Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Die Arbeiten zur Entwicklung des Mikrophysik-Retrievals für MSG/SEVIRI laufen nach Plan. Das Strahlungstransportmodell libRadtran wurde weiter ausgebaut. Insbesondere wurde eine Parametrisierung der optischen Eigenschaften von Eispartikeln entwickelt.

Während im solaren Spektralbereich als Ergebnis der Arbeiten in PAZI bereits eine gute Parametrisierung zur Verfügung stand, waren im thermischen Bereich keine zufriedenstellenden Daten verfügbar. In Zusammenarbeit mit Dr. Ping Yang, Texas A&M University, wurde ein völlig neuer Datensatz entwickelt und an libRadtran angepasst, der nun die genaue Berücksichtigung von Eispartikeln in unterschiedlichen Kristallformen erlaubt. Somit ist nun eine konsistente Vorwärtsberchnung der Strahlungseigenschaften von Zirren im gesamten Spektralbereich von Meteosat Second Generation (MSG) möglich.

Ein weiterer Punkt ist die Parametrisierung der molekularen Absorption in libRadtran: Sowohl bei der Validierung der bestehenden Lowtran-Parametrisierung als auch bei der Entwicklung neuer k-Verteilungen wurden wichtige Fortschritte gemacht. Eine umfangreiche Publikation über das Modellpaket libRadtran (Mayer und Kylling, 2004) wird demnächst eingereicht.

Auf der Basis dieser neuen Möglichkeiten wurde mit der Entwicklung einer neuen Zirrenerkennung für Meteosat Second Generation begonnen (Arbeitspaket 2.3). Die nächsten Schritte sind die Weiterentwicklung der Parametrisierung der molekularen Absorption sowie die Anwendung dieser Methoden zur Ableitung der Mikrophysik (optische Dicke, effektive Grösse von Eispartikeln) aus MSG-Beobachtungen.

Input/Output

O: Simulation der Beobachtungen von MSG als Basis der Zirrenerkennung in AP 2.3

Publikationen

Mayer, B. and A. Kylling

The libRadtran software package for radiative transfer calculations: Description and examples of use. Atmos. Chem. Phys., to be submitted, 2004.

Mayer, B., M. Schröder, R. Preusker, and L. Schüller

Remote sensing of water cloud droplet size distributions using the backscatter glory: a case study. Atmos. Chem. Phys. 4, 1255-1263, 2004.

HAP 3 / AP 3.3 Klima / Bedeckungsgrad
PI Gierens, IPA
Meilenstein(e) NASA Ames Mikrophysik Modul in MESOSCOP integriert

Durchgeführte Arbeitsschritte

Neues Schema für stratiforme Wolkenbildung im ECMWF Modell entwickelt.
Eiswolkenphysik in EuLag (anstatt MESOSCOP) integriert.

Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Das im Wettervorhersagemodell des ECMWF zur Prognose von Bedeckungsgrad und Wolkenwassergehalt verwendete Tiedtke-Schema wurde erweitert, um für den Bereich der oberen Troposphäre Eisübersättigung zuzulassen. Die Erweiterungen wurden mit Hilfe einer single-column-Version des Modells getestet und dann an Adrian Tompkins vom ECMWF weitergegeben, der entsprechende 3-dim. Testläufe durchgeführt hat.

Das Modell EuLag (von Piotr Smolarkiewicz, NCAR, entwickelt) wurde mit einer Eiswolkenmikrophysik versehen, die auch schon in MESOSCOP verwendet wurde. Das alte Modell MESOSCOP wird nicht weiterverwendet. Daher wurde der Meilenstein 2004 entsprechend uminterpretiert. Es sind insbesondere zwei Neuerungen erwähnenswert, die jetzt zum ersten Mal zum Einsatz kommen. Schon während PAZI-1 wurden zwei Eispopulationen definiert, homogen und heterogen gebildetes Eis. Damit kann verfolgt werden, wie sich diese Populationen in Wolken verhalten, wenn beide Nukleationsmechanismen in Konkurrenz zueinander am gleichen Ort und ungefähr zu gleicher Zeit stattfinden. Diese Neuerung wurde jetzt auch in EuLag übernommen, und damit werden gegenwärtig Simulationen für das DFG-Projekt Dünner Zirrus durchgeführt. Die zweite Neuerung betrifft die Sedimentation: Wir verwenden jetzt unterschiedliche Fallgeschwindigkeiten für Eiskristallanzahldichte und Eismasse. Die entsprechenden Formulierungen ergeben sich aus einem Flusssdichtekonzept. Das „neue“ Verfahren (schon 1978 von Srivastava zur Simulation von Regen angewandt) führt zu realistischeren vertikalen Wolkenstrukturen als das alte Verfahren mit nur einer Fallgeschwindigkeit, da es erlaubt, dass die großen Kristalle schneller fallen als die kleinen. Dies hat auch Einfluss auf die optischen Eigenschaften der simulierten Wolken und auf ihre Lebensdauer.

Das Modell EuLag mit unserer Eisphysik wird im Rahmen des special project SPDEISSR in der Parallelversion an Rechnern des ECMWF betrieben.

Input/Output

O: Erweitertes Tiedtke-Schema für ECMWF.

Publikationen

Gierens, K., and P. Spichtinger
On the formulation of sedimentation in two-moment bulk ice microphysics schemes.
J. Comput. Phys., in preparation.
Tompkins, A.M., and K. Gierens
Ice supersaturation in the IFS.
ECMWF Technical Memorandum, in preparation.

HAP 3 / AP 3.4 Klima / Globale Modellierung
PI Hendricks, IPA
Meilenstein(e) Ergebnisse aus PAZI-1 vollständig ausgewertet

Durchgeführte Arbeitsschritte

Vervollständigung der Auswertung globaler Simulationen aus PAZI-1.
Implementierung neuer Parametrisierungen.
Aufbau eines Aerosol/Wolkenmoduls.

Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Die Auswertung der noch in PAZI-1 durchgeführten globalen Simulationen mit ECHAM wurde vervollständigt. Dieser Arbeitsschritt bestätigte, dass der Luftverkehr zu einer signifikanten Zunahme der Anzahlkonzentration von Rußpartikeln in der nordhemisphärischen Tropopausenregion sowie zu einer damit verbundenen Veränderung der mikrophysikalischen Eigenschaften der Zirrusbewölkung führen kann (Hendricks et al., 2004, 2005). Es gelang, diesen Effekt einzugrenzen. Eine detaillierte Quantifizierung ist weiterer Gegenstand von PAZI-2.

Unter Einschluss der in PAZI-1 entwickelten Nukleationsparametrisierungen wurden mit ECHAM Simulationen durchgeführt, um die potentiellen Effekte heterogener Nukleation weiter einzugrenzen (Lohmann et al., 2004). Dabei wurde eine hohe Sensitivität der mikrophysikalischen Eigenschaften der globalen Zirrusbewölkung sowie des Strahlungsflusses bezüglich des angenommenen Nukleationsmechanismus festgestellt. Dies zeigt, dass die geplante Weiterentwicklung des Nukleationsschemas in ECHAM sinnvoll ist. Die in diesem Arbeitspaket noch durchzuführenden Arbeitsschritte sind damit gerechtfertigt. Daher wurde das Modell im Rahmen eines Forschungsaufenthaltes an der Dalhousie University, Kanada (DLR-Forschungssemester) auf die Aufnahme der in AP 3.1 entstehenden Parametrisierung der Konkurrenz von homogener und heterogener Nukleation (Kärcher et al., 2005) vorbereitet. Es liegt nun ein Wolkenmodul vor, welches mit zusätzlichen prognostischen Gleichungen zur Beschreibung konkurrierender homogen oder heterogen gebildeter Eismoden ausgestattet ist.

Um die Genauigkeit der Beschreibung eisbildender Aerosole zu erhöhen, wurde die Grundversion des Aerosolmikrophysikmoduls MADE in ECHAM integriert (Lauer et al., 2005). Hiermit liegt nun eine Version des globalen Modells vor, welche die Simulation von Aerosolen einschließlich ihrer Größenverteilung und Zusammensetzung erlaubt. Die Grundversion von MADE ist für die Bedingungen der unteren und mittleren Troposphäre ausgelegt. Eine Anpassung des Moduls zur Anwendung auf die Tropopausenregion wird im kommenden Berichtsjahr erfolgen.

Input/Output

I: Validiertes Parameterisierungsschema für ECHAM (aus AP 3.1). O: Publikationen der Ergebnisse aus PAZI-1.

Publikationen

- Hendricks, J., B. Kärcher, A. Döpelheuer, J. Feichter, U. Lohmann, and D. Baumgardner
Simulating the global atmospheric black carbon cycle: A revisit to the contribution of aircraft emissions.
Atmos. Chem. Phys. 4, 2521-2541, 2004.
- Hendricks, J., B. Kärcher, M. Ponater, and U. Lohmann
Do aircraft black carbon emissions affect cirrus clouds on a global scale ?
Geophys. Res. Lett., submitted, 2005.
- Kärcher, B., J. Hendricks, and U. Lohmann
Physically-based parameterization of cirrus cloud formation for use in global atmospheric models.
J. Geophys. Res., in preparation, 2005.
- Lauer, A., J. Hendricks, J. Feichter, I. Ackermann, B. Schell, H. Hass, and S. Metzger
Simulating aerosol microphysics with the ECHAM GCM – model description and comparison with observations.
J. Geophys. Res., in preparation, 2005.
- Lohmann, U., B. Kärcher, and J. Hendricks
Sensitivity studies of cirrus clouds formed by heterogeneous freezing in the ECHAM GCM.
J. Geophys. Res. 109, D16204, doi:10.1029/2003JD004443, 2004.