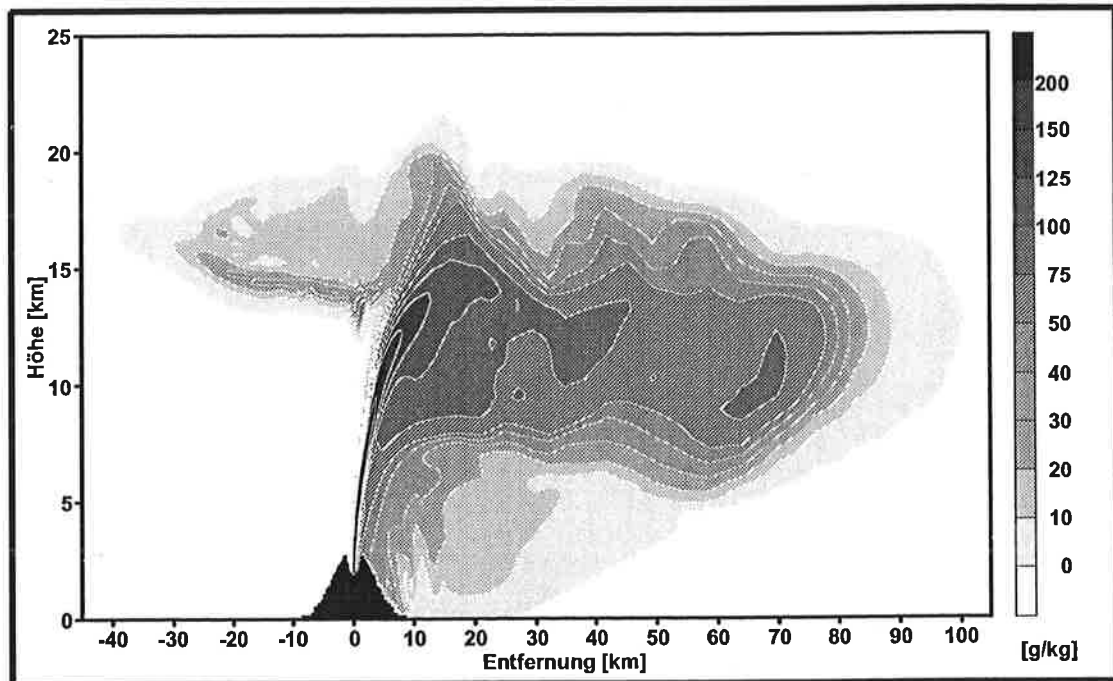




Max-Planck-Institut für Meteorologie

EXAMENSARBEIT Nr. 53



SIMULATION DER DYNAMIK EINES
MULTIKOMPONENTENSYSTEMS AM BEISPIEL
VULKANISCHER ERUPTIONSWOLKEN

VON
Michael Herzog

HAMBURG, Juni 1998

Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades

Autor:

Michael Herzog

Max-Planck-Institut
für Meteorologie

MAX-PLANCK-INSTITUT
FÜR METEOROLOGIE
BUNDESSTRASSE 55
D - 20146 HAMBURG
GERMANY

Tel.: +49-(0)40-4 11 73-0
Telefax: +49-(0)40-4 11 73-298
E-Mail: <name> @ dkrz.de

ISSN 0938-5177

Simulation der Dynamik eines Multikomponentensystems am Beispiel vulkanischer Eruptionswolken

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften
im Fachbereich Geowissenschaften
der Universität Hamburg

vorgelegt von
Michael Herzog
aus Grevenbroich

Hamburg 1998

ISSN 0938 - 5177

Als Dissertation angenommen vom Fachbereich Geowissenschaften
der Universität Hamburg

auf Grund der Gutachten von Prof. Dr. M. Dunst
und Priv. Doz. Dr. H.-F. Graf
und Prof. Dr. K. Hoernle

Hamburg, den 27. Mai 1998

Prof. Dr. G. Miehl

Dekan des Fachbereichs Geowissenschaften

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das **Active Tracer High Resolution Atmospheric Model (ATHAM)** weiterentwickelt und am Beispiel einer plinianischen Vulkaneruption unter verschiedenen Umgebungsbedingungen getestet. Schwerpunkte lagen auf der massen- und impulserhaltenden Formulierung des Modells sowie der Beschreibung turbulenter Austauschprozesse.

ATHAM beschreibt ein Multikomponentensystem aus gasförmigen und inkompressiblen Anteilen unter der Annahme eines dynamischen und thermischen Gleichgewichts des Gemisches. Das Turbulenzschließungsschema unterscheidet zwischen vertikalem und horizontalem Austausch und liefert basierend auf turbulenten Energiegleichungen Austauschkoeffizienten für jede dynamische Größe. Die Mikrophysik verwendet erweiterte Kessler Parametrisierungen unter Berücksichtigung der Eisphase.

ATHAM ist dreidimensional formuliert und verwendet ein implizites Zeitschrittverfahren. Für Sensitivitätsstudien sind zusätzlich Modellversionen in zweidimensionalen kartesischen Koordinaten bzw. Zylinderkoordinaten integriert.

Wie die zweidimensionalen Modellsimulationen zeigen, ist ATHAM in der Lage, ein Multikomponentensystem aus einer Gasphase und einer Vielzahl von aktiven Tracern auch bei extremen Temperatur- und Impulsflüssen numerisch stabil und physikalisch korrekt zu simulieren, wobei der inkompressible Anteil bis zu 99 Gew.% ausmachen kann. Die simulierten vulkanischen Eruptionswolken reichen bis in die Stratosphäre und erreichen horizontale Ausdehnungen von bis zu mehreren hundert Kilometern. Transportprozesse durch Turbulenz sind von gleicher Bedeutung wie Transporte durch Advektion und bestimmen entscheidend das Einmischen von Umgebungsluft in den Plume und das gesamte Aufstiegsverhalten einschließlich der Plumehöhe. Mikrophysikalische Prozesse haben durch die Freisetzung latenter Wärme einen signifikanten Einfluß auf die Plumeentwicklung. Die Wirkung mikrophysikalischer Prozesse auf die Plumedynamik wird bestimmt durch in den Plume eingemischten Wasserdampf. Nicht nur der mittlere meteorologische Zustand der Atmosphäre sondern auch die aktuelle Wettersituation zum Zeitpunkt der Eruption haben einen starken Einfluß auf die Plumehöhe und den stratosphärischen Eintrag von Partikeln und Gasen durch die Eruption.

Abstract

The Active Tracer High Resolution Atmospheric Model (ATHAM) has been improved using a mass and momentum conservative formulation of the model equations and the introduction of a turbulence closure scheme. ATHAM has been tested simulating a typical plinian eruption.

ATHAM describes a multicomponent system consisting of gaseous and incompressible fractions under the assumption of a dynamic and thermal equilibrium. The turbulence closure scheme is based on turbulent energy equations and provides for a turbulent exchange coefficient for each dynamic quantity distinguishing between horizontal and vertical exchange. The microphysics is based on Kessler type parametrizations including the icephase.

ATHAM is fully three dimensionally formulated with an implicit time step scheme. In addition there are two different types of two dimensional versions implemented: One represents two dimensional cartesian coordinates, the other cylindrical coordinates.

The description of a multicomponent system with ATHAM is numerically stable and physically correct, as can be seen from the two dimensional model simulations which includes many active tracers and an incompressible fraction up to 99 weight percentage. The simulated eruption plumes reach into the stratosphere and achieve a horizontal extension in the order of 100 km. Transport processes due to turbulence are as important as those due to advection. Turbulent processes determine the entrainment of ambient air, the plume development and height. The effect of microphysical processes on the plume dynamics is dominated by the amount of entrained water vapour. It is the actual weather conditions at the time of the eruption as well as the mean meteorological state of the atmosphere that have a strong impact on the plume height and the amount of particles and volcanic gases injected into the stratosphere.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Vulkanische Gase	2
1.2	Vulkanismus und Klima	3
1.2.1	Wasserdampf und Kohlendioxid	4
1.2.2	Schwefel	5
1.2.3	Halogene	7
1.3	Plumemodelle als Werkzeug	8
2	Das Plumemodell ATHAM	11
2.1	Das Modellkonzept	12
2.1.1	Dynamisches Gleichgewicht	13
2.1.2	Thermisches Gleichgewicht	18
2.2	Die Dynamik	20
2.2.1	Impulsgleichung	20
2.2.2	Druckgleichung	22
2.2.3	Zustandsgleichung	25
2.2.4	Tracergleichung	26
2.2.5	Thermodynamische Gleichungen	27
2.2.6	Zusammenfassung der Modellgleichungen	30
2.2.7	Numerische Behandlung der dynamischen Gleichungen	31
2.3	Die Mikrophysik	37
2.3.1	Bestimmung der stationären Fallgeschwindigkeiten	39
2.3.2	Kondensation und Evaporation	41
2.3.3	Sublimation und Deposition	44
2.3.4	Autokonversion	46

2.3.5	Akkreszenz	46
2.3.6	Schmelzen und Gefrieren	49
2.3.7	Thermodynamischer Effekt der Phasenübergänge	50
3	Die Modellierung turbulenter Austauschprozesse	51
3.1	Bedeutung von Turbulenz für die Plumeentwicklung	51
3.2	Theorie der universellen Gleichheit der Turbulenz	52
3.3	Turbulenzmittelung und Schließungsproblem	54
3.4	Der Gradientenansatz	56
3.5	Bestimmung der turbulenten Austauschkoefizienten	57
3.5.1	Die turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen	60
3.5.2	Produktionsterme turbulenter Energie	66
3.5.3	Turbulente Längenskala	68
3.5.4	Modellgleichungen zur Beschreibung von Turbulenz	70
3.5.5	Empirische Konstanten	71
3.5.6	Kompressibilitätseffekte	73
3.5.7	Turbulente Austauschkoefizienten	75
3.6	Numerische Behandlung der turbulenten Gleichungen	75
4	Beschreibung und Auswertung der Experimente	77
4.1	Typische Anfangsbedingungen für eine plinianische Eruption	78
4.2	Das Referenzexperiment	82
4.2.1	Das Referenzexperiment als Linienvulkan	83
4.2.2	Das Referenzexperiment in Zylinderkoordinaten	107
4.3	Einfluß der Modellauflösung	112
4.3.1	Auswahl der Experimente	112
4.3.2	Die Anfangsphase der Eruption	114
4.3.3	Die Plumeentwicklung während der Eruptionsphase	118
4.4	Einfluß mikrophysikalischer Prozesse	122
4.5	Einfluß atmosphärischer Bedingungen	126
4.5.1	Einfluß von Temperatur- und Feuchteprofil	127
4.5.2	Einfluß des horizontalen Windprofils	132
5	Zusammenfassung und Ausblick	137

Kapitel 1

Einleitung

Explosive Vulkaneruptionen sind spektakuläre Naturereignisse, die in der näheren Umgebung des Vulkans ein hohes Maß an Zerstörung bewirken können. So wurde beim Ausbruch des Vesuvs 79 n.Chr. mit Pompeji eine ganze Stadt durch einen Ascheregen verschüttet. Glutlawinen hinterlassen eine Spur der Verwüstung. Aus den Ascheablagerungen können sich bei Niederschlägen auch lange Zeit nach der Eruption gefährliche Schlammlawinen, sogenannte Lahare, bilden. Durch eine Vulkaneruption verursachter saurer Regen kann regional die Vegetation und damit Lebensräume vernichten. Die lange Zeit wenig beachteten vulkanischen Gase und ihre Folgeprodukte besitzen Verweildauern in der Atmosphäre von bis zu mehreren Jahren und können auf globalem Maßstab klimawirksam werden.

Betrachtet man die Klimawirksamkeit lithosphärischer Entgasungen durch explosiven Vulkanismus in Abhängigkeit ihrer Quellstärke, so kommt den gleichzeitig mit den vulkanischen Gasen emittierten Silikatpartikeln eine besondere Bedeutung zu: Sie steuern maßgeblich die Gestalt und das zeitliche Verhalten der vulkanischen Eruptionswolke - im folgenden auch Plume genannt - und bestimmen so den Eintrag vulkanischer Gase von der Lithosphäre in die Atmosphäre.

Für das Verständnis von Emissionen vulkanischer Gase in die Atmosphäre ist eine Modellierung des Eruptionsplumes unerlässlich. Dies gilt insbesondere deshalb, weil die meisten Vorgänge im Plume einer direkten Beobachtung nicht zugänglich sind. Eine Plumemodellierung erlaubt darüberhinaus eine Rekonstruktion des abgelagerten Sedimentationsfächers und damit eine Abschätzung der Klimawirksamkeit vergangener Vulkaneruptionen, bei denen der Depositionsfächer die einzig erhaltene Informationsquelle ist.

Im folgenden werden die wichtigsten vulkanischen Gase und ihre Bedeutung für Plumeentwicklung und Klima diskutiert. Aus den dabei auftretenden offenen Fragen, die den Aufstieg vulkanischer Gase im Plume betreffen, werden Möglichkeiten und Anforderungen an die Modellierung vulkanischer Eruptionswolken abgeleitet.

1.1 Vulkanische Gase

Die Zusammensetzung vulkanischer Gase, die aus dem Magma entweichen und in die Atmosphäre emittiert werden, ist stark variabel. Sie hängt nicht nur von der chemischen Zusammensetzung, sondern auch vom thermodynamischen Zustand der Schmelze ab, wie Druck und Temperatur, bei der die Entgasung stattfindet. Der Gehalt einer Schmelze in der Magmakammer an flüchtigen Bestandteilen, der sogenannte Volatilingehalt, kann signifikant durch den Kontakt des Magmas mit dem umgebenden Krustenmaterial geändert werden, etwa durch Aufschmelzen von Nebengestein oder subduzierten Sedimenten, durch Wasserdampfdiffusion entlang eines Konzentrationsgradienten oder durch das Eindringen von Wasser in die Magmakammer unter dem Einfluß der Schwerkraft (Kyser und O'Neil, 1984; Varekamp et al., 1992). Nach Verlassen des Magmas, während des Aufstiegs durch das Nebengestein oder im Schlot werden vulkanische Gase durch Wechselwirkung mit der Umgebung beeinflusst. Wichtig sind hierbei zwei Prozesse: Die Anreicherung mit Wasserdampf durch Kontakt mit Grund- oder Tiefenwasser und chemische Umwandlungen durch Oxidations- bzw. Reduktionsreaktionen.

Die dominanten Bestandteile vulkanischer Gase sind Wasserdampf, Kohlendioxid, Schwefel- und Halogenverbindungen:

- Der H_2O -Gehalt des Magmas ist stark unterschiedlich. Grundsätzlich ist aber H_2O in höher differenzierten Magmen wesentlich besser löslich als in basaltischen Magmen. Höher differenzierte Magmen entstehen aus stagnierenden, abkühlenden, basaltischen Magmen, die zu 45 % bis 54 % aus Silikat bestehen und rund 90 % aller vorkommenden Magmen ausmachen (Schmincke, 1993). Gebildet werden höher differenzierte Magmen bei niedrigen Drücken in oberflächennahen Magmakammern etwa drei bis zehn Kilometer unter der Erdoberfläche, wobei es unter anderem zu einer Anreicherung von Silikat und flüchtiger Bestandteile wie H_2O , SO_2 und Halogeniden wie HCl und HF kommt. Ein signifikanter Anteil des in der Schmelze einer oberflächennahen Magmakammer gelösten H_2O gelangt erst durch Kontakt mit Krustenmaterial in die Schmelze.
- CO_2 ist quantitativ die bedeutendste Volatilenkomponente basaltischer Magmen. Da aber CO_2 insbesondere in höher differenzierten Magmen schlecht löslich ist, kann es schon bei deutlich höheren Drücken eine freie Gasphase bilden als andere Gase, durch das Nebengestein aufsteigen und präeruptiv in die Atmosphäre entweichen. Magmen, die sich in oberflächennahen Kammern sammeln, haben daher meist schon einen Großteil des CO_2 verloren. Da höher differenzierte Magmen aufgrund ihrer hohen Viskosität den größten Teil des explosiven Vulkanismus ausmachen, sind die dabei entweichenden Gase meist H_2O -reich und CO_2 -arm.
- Verglichen mit CO_2 und H_2O kommen Schwefelverbindungen in vulkanischen Gasen in deutlich geringeren Konzentrationen vor. Ihr Anteil liegt typischer-

weise in der Größenordnung von mehreren Gewichtsprozenten. Die dominierenden gasförmigen Schwefelverbindungen sind SO_2 und H_2S (Gerlach und Nordlie, 1975). Die Schwefelgehalte basaltischer bis andesitischer Magmen mit einem Silikatanteil unter 62 % sind grundsätzlich wesentlich höher als die Schwefelgehalte hochdifferenzierter Magmen mit Silikatanteilen von über 62 % (Carroll und Rutherford, 1985; Andres et al., 1992). Das Verhältnis $\text{H}_2\text{S}/\text{SO}_2$ ist abhängig von Druck, Temperatur und der O_2 -Fugazität¹: Je höher der Druck und je niedriger Temperatur und O_2 -Fugazität, desto mehr dominiert H_2S gegenüber SO_2 (Gerlach und Casadevall, 1986). Bei Eruptionen aus tiefer gelegenen Magmakammern ($P > 100$ bar) und andesitisch bis dazitischem Magma mit einem Silikatanteil oberhalb von 54 % ist H_2S die dominante Schwefelspezies, z.B. bei der Eruption des Mount St. Helens im Mai 1980 (Hobbs et al., 1982). H_2S wird in der Atmosphäre innerhalb weniger Tage zu SO_2 oxidiert. Auch bei den letzten Ausbrüchen, die große Mengen Schwefel in die Stratosphäre injizierten, ist H_2S gegenüber SO_2 in bedeutenden Anteilen emittiert worden: Mineralogisch petrologische Befunde deuten darauf hin, daß Schwefel bei der Eruption des El Chichón im April 1982 überwiegend als H_2S emittiert wurde (Luhr et al., 1984). Dies befindet sich in Übereinstimmung mit dem in den ersten Tagen nach der Eruption des Pinatubo im Juni 1991 durch Satellitenfernerkundung beobachteten Anstieg der SO_2 -Konzentration in der stratosphärischen Plume, der durch allmähliche Oxidation von H_2S zu SO_2 erklärt werden kann (Hudson, 1996).

- Eine weitere mengenmäßig bedeutende Komponente vulkanischer Gase sind Halogenverbindungen, deren höchste Gehalte in hochdifferenzierten und alkalischen Magmen zu finden sind (Schmincke, 1993). Die wichtigste Halogenspezies ist Chlor, HCl die mit Abstand wichtigste gasförmige Chlorverbindung (Symonds et al., 1988). Das Schwefel - Chlor Verhältnis ist sehr variabel (Devine et al., 1984). Als grobe Abschätzung kann gelten, daß die emittierte Chlormenge etwa eine halbe Größenordnung geringer ist als die des emittierten Schwefels (Ryan und Mukherjee, 1975). Die Menge der emittierten Brom- und Fluorverbindungen ist nochmals um mehrere Größenordnungen geringer als die der emittierten Chlorverbindungen (Sugiura et al., 1963).

1.2 Vulkanismus und Klima

Silikatpartikel tragen in Gewichtsprozent den Hauptanteil der Emissionen zum explosiven Vulkanismus bei. Kleinere Partikel können bis in die Stratosphäre gelangen, wo sie durch Rückstreuung einfallender Solarstrahlung strahlungs- und somit klimawirksam werden können. Da die Radien vulkanischer Partikel typischerweise deutlich größer als $1 \mu\text{m}$ sind, werden sie durch Sedimentation im Schwerfeld rasch aus der Atmosphäre entfernt. Die maximale Aufenthaltsdauer von Silikatpartikeln im Mikro-

¹Die Fugazität ist ein Maß für den um zwischenmolekulare Kräfte korrigierten Partialdruck.

meterbereich beträgt in der Stratosphäre etwa einen Monat (Pinto et al., 1989), in der Troposphäre bewirken Auswaschprozesse eine weitere Verkürzung der maximalen Aufenthaltszeiten. Der direkte Klimaeinfluß von Silikatpartikeln ist daher vernachlässigbar.

Vulkanische Gase und deren Folgeprodukte besitzen Aufenthaltsdauern in der Atmosphäre von bis zu mehreren Jahren und können innerhalb dieses Zeitraumes einen signifikanten Einfluß auf die Chemie, Mikrophysik und den Strahlungshaushalt der Atmosphäre haben. Vulkanische Gase werden in die Troposphäre sowohl durch sporadische Eruptionen als auch durch ständige Entgasung in vulkanisch aktiven Gebieten emittiert. Große explosive Eruptionen, die etwa einmal pro Dekade auftreten, sind in der Lage, große Mengen vulkanischer Gase bis in die Stratosphäre zu transportieren. Die beiden letzten Großereptionen dieser Art waren der Ausbruch des El Chichón im April 1982 und der des Pinatubo im Juni 1991.

1.2.1 Wasserdampf und Kohlendioxid

Obwohl H_2O und CO_2 quantitativ die wichtigsten vulkanischen Gase und die wichtigsten atmosphärischen Treibhausgase sind, sind die Auswirkungen ihrer vulkanischen Quellen auf die Atmosphäre dennoch gering. Verglichen mit den atmosphärischen Hintergrundkonzentrationen und den Beiträgen aus anderen Quellen sind die H_2O - und CO_2 -Einträge durch vulkanische Aktivität vernachlässigbar. Auf geologischen Zeitskalen ist die vulkanische CO_2 -Quelle zwar dafür verantwortlich, daß das CO_2 -Reservoir des Atmosphäre-Ozeansystems nicht innerhalb von 500 000 Jahren durch Sedimentation von organischem Material, Ablagerung von Carbonaten und Gesteinsverwitterung aufgebraucht wird, allerdings sind die gegenwärtigen anthropogenen CO_2 -Emissionen nahezu um zwei Größenordnungen höher als die vulkanogenen (Schmincke, 1993).

Der vulkanische H_2O -Eintrag in die Troposphäre ist gegenüber den dort vorhandenen Wasserdampfmengen bedeutungslos. Jedoch sind größere Vulkanereptionen in der Lage, große Wasserdampfmengen in die Stratosphäre zu transportieren. Der in der Eruptionwolke enthaltene Wasserdampf wird entweder direkt vom Vulkan emittiert oder gelangt durch Einmischen von Umgebungsluft in den Plume. Auf dem Weg in die Stratosphäre wird H_2O durch Kondensations- und Niederschlagsprozesse zwischen gasförmigen, flüssigen und festen Reservoiren unverteilt und kann so vor Erreichen der Stratosphäre aus der Atmosphäre entfernt werden. Abschätzungen über den durch Vulkane in die Stratosphäre transportierten Wasserdampf sind bislang sehr unsicher, Messungen sind praktisch nicht verfügbar. Grobe Abschätzungen aus eindimensionalen Plumemodellen ergeben für Eruptionen vom Typ des Pinatubo einen Wasserdampfeintrag in die Stratosphäre von etwa 100 Mt (Glaze et al., 1997), was eine signifikante Erhöhung der Wasserdampfkonzentration im Bereich der injizierten Partikel-Gas Wolke über einen längeren Zeitraum bedeuten würde.

Da die stratosphärische Hintergrundkonzentration von Wasserdampf sehr gering ist, sind schon kleine Störungen in der Lage, viele stratosphärische chemische Prozesse

zu destabilisieren (Turco et al., 1983). Der Wasserdampf bildet durch die Reaktion mit photolytisch erzeugten Sauerstoffradikalen Hydroxylradikale und bestimmt somit wichtige chemische Reaktionszyklen in der Stratosphäre, wie den Abbau von Methan und Ozon oder die Oxidation von SO_2 zu Sulfat. Zudem beeinflusst der Wasserdampfgehalt durch die Bildung einer Hydrathülle die Art des sich bildenden Sulfataerosols und dessen optische Eigenschaften, die auch für die dynamischen Effekte des Aerosols durch Änderung der atmosphärischen Zirkulation entscheidend sind. Nach der Eruption des El Chichón im April 1982 wurde in Boulder, Colorado, ein Anstieg der OH-Säulenkonzentration um 30 % gemessen (Burnett und Burnett, 1984), was auf einen Anstieg des Wasserdampfgehalts in der Stratosphäre durch die Eruption schließen läßt.

Darüberhinaus hat Wasserdampf über mikrophysikalische Prozesse einen entscheidenden Einfluß auf die Dynamik der sich bildenden Eruptionswolke und die Verweildauer vulkanischer Gase und Silikatpartikel in der Atmosphäre. Die Freisetzung latenter Wärme durch Kondensationsprozesse beeinflusst die Höhe der Eruptionssäule und damit auch die Höhe, in der klimarelevante vulkanische Gase wie SO_2 injiziert werden. Abschätzungen mit eindimensionalen Plumemodellen ergeben eine Zunahme der Plumehöhe durch latente Wärme im Bereich mehrerer Kilometer (Woods, 1993; Glaze et al., 1997). Aufgrund der Bildung von Ascheclustern durch kondensierenden Wasserdampf oder aufgrund von Auswaschprozessen durch Niederschlag kann die Sedimentation von Aschepartikeln deutlich beschleunigt werden. Dies hat Konsequenzen für die gesamte Entwicklung der Eruptionswolke. Vor allem gut lösliche Gase können durch Einlösen in Flüssigwasser aus der Gasphase entfernt und ausgewaschen, Gasmoleküle an Eisoberflächen adsorbiert werden.

Der Wasserdampfeintrag durch explosive Vulkaneruptionen, die bis in die Stratosphäre reichen, beeinflusst also nicht nur die posteruptive stratosphärische Chemie und Mikrophysik, sondern auch wesentlich die Plumedynamik und die mikrophysikalischen Prozesse während der Eruption und damit die stratosphärische Initialstörung.

1.2.2 Schwefel

Schwefeldioxid wird entweder direkt vulkanisch emittiert oder entsteht durch Oxidation von primär emittiertem H_2S . Vom klimatologischen Standpunkt aus ist SO_2 als Vorläufergas von Sulfataerosol das interessanteste vulkanische Gas. Sulfataerosol ist strahlungsaktiv: Im kurzwelligen Bereich einfallende Solarstrahlung wird in den Weltraum zurückgestreut, was zu einer Erhöhung der planetaren Albedo in diesem Bereich führt. Im nahen Infrarot und langwelligen Bereich wird Strahlung dagegen von Sulfataerosol absorbiert und verstärkt den Treibhauseffekt. Als Folge ergibt sich eine Erwärmung der aerosoltragenden Schichten. In Bodennähe bewirkt Sulfataerosol, mit Ausnahme über Flächen mit hoher Albedo, im Nettoeffekt eine Strahlungsreduktion und damit eine Abkühlung (Lacis et al., 1992).

Obwohl der Anteil vulkanischer Quellen an der Gesamtemission von SO_2 in die

Troposphäre verglichen mit den anthropogenen und biogenen Quellen relativ gering ist, handelt es sich nach neueren Untersuchungen bei den vulkanischen troposphärischen SO₂-Quellen um sehr effektive Quellen, wenn man die Strahlungswirksamkeit des daraus gebildeten Aerosols betrachtet (Graf et al., 1996).

Einmal in der Stratosphäre angelangt, besitzen vulkanische Gase deutlich größere Lebenszeiten als in der Troposphäre: SO₂ wird mit charakteristischen Zeiten im Bereich eines Monats in Sulfat umgewandelt, das als Aerosol in der Lage ist, das globale Klima während mehrerer Jahre zu beeinflussen, bis es durch Sedimentation aus der Atmosphäre entfernt wird. Stratosphärisches Aerosol bewirkt, wie erwähnt, neben der Nettoabkühlung in Bodennähe eine Erwärmung der Stratosphäre durch Strahlungsabsorption. Die dadurch geänderte stratosphärische Zirkulation wirkt sich über die Kopplung der Wellenausbreitung zwischen Strato- und Troposphäre auf die troposphärische Zirkulation aus. Dies bewirkt unter anderem eine Erwärmung über dem eurasischen Kontinent in vulkanisch beeinflussten Wintern trotz einer im hemisphärischen bzw. globalen Mittel gesehenen Nettoabkühlung am Boden (Robock und Mao, 1992; Graf et al., 1993; Lacis et al., 1992). Neben der Beeinflussung des Strahlungshaushalts haben stratosphärische Aerosolpartikel zusätzlich einen Einfluß auf mikrophysikalische Prozesse, da sie als Kondensationskeime dienen können. So wurde nach der Pinatubo Eruption eine verstärkte Cirrenbildung beobachtet (Jensen und Toon, 1992; Sassen et al., 1995). Außerdem wird die Entwicklung Polar Stratosphärischer Wolken - PSC's² - begünstigt (Crutzen und Arnold, 1986), wodurch aufgrund heterogener Reaktionen an den PSC-Teilchen ein verstärkter katalytischer Abbau von Ozon erfolgen kann (Solomon et al., 1986). Heterogene Reaktionen an Sulfataerosol selbst treten auch außerhalb polarer Regionen auf und wirken sich ebenfalls über eine Chloraktivierung ozonzerstörend aus (Brasseur und Granier, 1992).

Bei der Quantifizierung der Schwefelemissionen von Großeruptionen ist man auf satellitengestützte Beobachtungsverfahren angewiesen, die durch Strahlungsmessung in unterschiedlichen Spektralbereichen unter der Annahme vertikaler Profile Säulenbelastungen für einzelne Absorber ableiten. H₂S ist einer Messung durch ein solches Verfahren bislang nicht zugänglich, SO₂ besitzt mit Ozon eine gemeinsame Absorptionsbande. Die SO₂-Bestimmung wird erschwert durch die Anwesenheit von Wolken oder das gleichzeitige Auftreten von vulkanischer Asche oder Sulfataerosol. Die Unsicherheiten dieser Meßmethode und die Nachweisgrenzen sind entsprechend hoch: TOMS³ ermittelte z.B. für die Pinatubo Eruption eine Emission von 14 - 20 Mt SO₂ (Krueger et al., 1995).

Interessiert man sich für das Schicksal der Schwefelgase während des Aufstiegs in die Stratosphäre und für die Chemie der vulkanisch gestörten Stratosphäre, so ist es wichtig zu wissen, ob der Schwefel in reduzierter (H₂S) oder oxidierter (SO₂) Form emittiert wird: So führt die Oxidation von H₂S zu SO₂ zu einer zusätzlichen Verarmung der Atmosphäre an Oxidantien. Bei der Oxidation von H₂S zu SO₂

²PSC: Polar Stratospheric Cloud

³TOMS: total ozone mapping spectrometer

entsteht jeweils ein H_2O -Molekül, so daß der Eintrag von H_2S in die Stratosphäre eine zusätzliche Wasserquelle bedeutet. Darüberhinaus ist H_2S noch schlechter in Wasser löslich als SO_2 .

Während des Aufstiegs im Plume können Schwefelgase nicht nur durch Einlösen in Wasser, sondern auch durch Adsorption an festen Oberflächen aus der Gasphase entfernt werden. Die Menge der adsorbierten SO_2 - bzw. H_2S -Moleküle hängt neben der effektiven Größe der vorhandenen Oberflächen empfindlich von der Art der Oberfläche ab. Da Kondensation von Wasserdampf rasch zu einer Benetzung von Aschepartikeln führt, die beim weiteren Aufstieg im Plume zu Eis gefriert, stehen mit zunehmender Höhe im Plume immer mehr Eis- statt Silikatoberflächen für Adsorptionsprozesse zur Verfügung. Die Effektivität von Adsorptionsprozessen an Eisoberflächen ist abhängig vom Verschmutzungsgrad des gefrierenden Wassers. Varekamp et al. (1984) kommen bei der Analyse von Aschepartikeln der El Chichón Eruption zu dem Ergebnis, daß bis zu 30 % der gasförmigen Schwefelspezies an Aschepartikeln adsorbiert waren. Die genauen Zusammenhänge sind allerdings weder qualitativ noch quantitativ bekannt (Weschler, 1984; Westrich und Gerlach, 1992).

Trotz ihrer relativ geringen Wasserlöslichkeit können daher unter Umständen, die entscheidend von der Plumeentwicklung abhängen, signifikante Mengen von H_2S und SO_2 aus der Gasphase entfernt und damit frühzeitig deponiert werden, bevor sie in der Stratosphäre über die Bildung von Sulfataerosol klimawirksam werden können.

1.2.3 Halogene

Wegen ihrer ozonzerstörenden Wirkung sind Halogene für die stratosphärische Chemie von Bedeutung. Verglichen mit der derzeitigen Chlorbelastung der Stratosphäre von 0,5 Mt werden bei größeren Eruptionen deutlich höhere Mengen an Chlor emittiert. Bei der El Chichón Eruption wurden schätzungsweise 1,8 Mt (Varekamp et al., 1984), bei der Pinatubo Eruption sogar rund 4,5 Mt (Westrich und Gerlach, 1992) HCl emittiert.

Aufgrund ihrer guten Wasserlöslichkeit können Halogenverbindungen effizient durch Wolken- bzw. Niederschlagsbildung aus der Gasphase entfernt werden (Tabazadeh und Turco, 1993). Da Halogene zudem an Tephrapartikeln und Eisoberflächen adsorbiert werden können (Oskarsson, 1980), wird ein direkter Chlor-Eintrag in die Stratosphäre durch Vulkaneruptionen meist vernachlässigt. Gerechtfertigt scheint dieses Vorgehen durch die Auswertung von Eisbohrkernen: Dort findet man erhöhte Sulfatkonzentrationen nach großen Vulkaneruptionen, jedoch selbst bei starker Chloremission der Eruption keine Chloranreicherung (Delmas, 1986; Holdsworth et al., 1986).

Die beobachteten Ozonänderungen werden überwiegend auf den Einfluß des vulkanischen Sulfataerosols zurückgeführt. Nach der El Chichón Eruption wurde eine Ozonabnahme in den Säulenkonzentrationen von etwa 10 % festgestellt (Bais et al., 1985). Der Pinatubo Eruption folgte eine Ozonabnahme in den Tropen und der Nordhemisphäre von 5-9 % (Chandra, 1993). Durch heterogene Reaktionen an

Sulfataerosolen kann bereits in der Stratosphäre vorhandenes Chlor aus relativ inerten Reservoirspezies in reaktivere Substanzen umgewandelt werden und so zu einem verstärkten Ozonabbau führen (Hofmann, 1989; Brasseur und Granier, 1992). Daneben führt der Einfluß des Sulfataerosols auf den Strahlungshaushalt zu einer Änderung der für die Ozonchemie relevanten Photolyseraten, die zusätzlich zu der bereits erwähnten Erwärmung der Stratosphäre eine Ozonreduktion bewirken (Michelangeli et al., 1989). Ein weiterer Beitrag zu den beobachteten Ozonänderungen ergibt sich aus der durch das Sulfataerosol bewirkten Zirkulationsänderung in der Stratosphäre (Brasseur und Granier, 1992).

Einer Vernachlässigung des vulkanischen Chloreintrags in die Stratosphäre widersprechen allerdings Messungen von Mankin und Coffey (1984), die nach der Eruption des El Chichón eine Zunahme stratosphärischen Chlors zwischen 20° und 40° N von 40 % ergaben, was einer Zunahme des globalen stratosphärischen Chlorgehalts um 9 % entspricht. Zudem wurden in der Stratosphäre im Bereich der Eruptionswolke des El Chichón NaCl-Partikel gefunden (Woods et al., 1985), die durch eine Säure-Base Reaktion HCl freisetzen können. Daneben werden von Michelangeli et al. (1991) heterogene Reaktionen an NaCl-Kristallen diskutiert, die zu dem beobachteten Anstieg der HCl-Konzentrationen führen könnten, ohne daß damit eine signifikante Ozonreduktion verbunden wäre. Ungeklärt bleibt dennoch die Frage, wie NaCl-Kristalle, die wie HCl-Gas gut in Wasser löslich sind, in die Stratosphäre gelangen können.

Die Vorgänge, die mit den Halogenen während des Aufstiegs im Plume verbunden sind, sind noch nicht vollständig bekannt bzw. quantifiziert. Für die nähere Umgebung eines Vulkans können die Halogenemissionen von großer Bedeutung sein: Die im Flüssigwasser gelösten Halogenwasserstoffe bewirken einen sehr niedrigen pH-Wert. Der durch Vulkaneruptionen induzierte saure Niederschlag ist in der Lage, die Vegetation in der Umgebung des Vulkans zu zerstören. Vulkanische Halogenemissionen haben daher in erster Linie regionale Auswirkungen.

1.3 Plumemodelle als Werkzeug

Wie in den vorherigen Abschnitten beschrieben, sind die bei einer Vulkaneruption emittierten Gase und Partikel in vielfältiger Weise an Prozessen im Plume beteiligt. Die Wechselwirkungen der vulkanischen Emissionen untereinander und mit der den Plume umgebenden Atmosphäre beeinflussen

- die Dynamik des Plumes und damit seine vertikale und horizontale Ausdehnung,
- das Entfernen vulkanischer Volatile aus der Gasphase durch Kondensation, Einlösen bzw. Adsorption und damit die atmosphärische Initialstörung durch eine Eruption, die globale oder regionale Klimafolgen auslösen kann und
- das Sedimentationsverhalten von Aschepartikeln und damit den posteruptiven Sedimentationsfächer.

Da Prozesse im Plume einer direkten Beobachtung praktisch nicht zugänglich sind, bieten sich Plumemodelle als Werkzeug an,

- um Lücken in der Beobachtung - wie beim Wasserdampftransport in die Stratosphäre - zu schließen,
- um Hypothesen - wie das Auswaschen gasförmiger Chlorspezies - zu überprüfen,
- um Laborexperimente - wie das Adsorptionsverhalten gasförmiger Schwefelspezies - unter realistischen Umgebungsbedingungen im Modell zu testen und
- um systematische Abhängigkeiten - wie den Einfluß von äußeren meteorologischen Bedingungen - zu bestimmen und so zu Verallgemeinerungen zu gelangen, die sonst aus nur aus einer nicht verfügbaren Vielzahl von Einzelereignissen gewonnen werden könnten.

Eindimensionale Plumemodelle in der Art, wie sie von Wilson (1976) bzw. Woods (1988) entwickelt wurden, sind für solche Untersuchungen nicht geeignet: Bei ihnen wird das Partikel-Gas Gemisch wie ein ideales Gas behandelt, Partikel und Gas bewegen sich mit der gleichen Geschwindigkeit. Der Effekt der Sedimentation von Partikeln wird nur dadurch berücksichtigt, daß diese aus dem Plume entfernt werden, sobald die berechnete Vertikalgeschwindigkeit im Plume unter die der stationären Fallgeschwindigkeit der Partikel sinkt. Der Effekt der Wasserdampfkondensation läßt sich zwar erfassen (Woods, 1993; Glaze et al., 1997), aber die Beschreibung von Niederschlagsprozessen und Auswaschvorgängen erfolgt in diesen Modellen aufgrund fehlender Sedimentationsparametrisierung nicht. Das Einmischen von Umgebungsluft in den Plume, das wesentlich ist für die gesamte Plumeentwicklung, wird nur über einen Eintrainmentparameter beschrieben. Eindimensionale Plumemodelle erlauben daher nur grobe qualitative Abschätzungen, detaillierte Prozeßstudien sind mit ihnen nicht möglich.

Die konzeptionell sehr ähnlichen Modelle von Valentine und Wohletz (1989) und Dobran und Neri (1993) beschreiben die Dynamik eines Partikel-Gas Gemisches unter der Annahme eines zylindersymmetrischen Plumes. Beide Modelle prognostizieren explizit die Wechselwirkung zwischen den Komponenten, lösen also für jede Systemkomponente einen vollständigen Satz von Bewegungsgleichungen mit prognostischen Variablen für Impuls-, Masse- und Energieerhaltung. Somit lassen sich Phänomene auch auf sehr kurzen zeitlichen und räumlichen Skalen bis in den Meterbereich realistisch erfassen. Mit den durchgeführten Modellrechnungen wurden die ersten Minuten einer Vulkaneruption auf einem Gebiet, das sowohl horizontal als auch vertikal nur wenige Kilometer umfaßt, für ein Gemisch aus einer Gas- und maximal zwei Partikelkomponenten simuliert (Neri und Macedonio, 1996). Bei einer steigenden Zahl von Komponenten verhindert der mit diesem Modellkonzept verbundene numerische Aufwand schnell eine praktische Anwendbarkeit. Jede neue Komponente muß durch einen zusätzlichen, vollständigen Satz von dynamischen und thermodynamischen Gleichungen behandelt werden, was zu fünf neuen prognostischen Größen im dreidimensionalen Fall führt. Die genannten Modelle eignen sich daher nicht zur

Beschreibung dreidimensionaler, quasistationärer Lösungen auf größeren zeitlichen und räumlichen Skalen, auf denen Vorgänge im Meterbereich vernachlässigt werden können, jedoch eine steigende Zahl von Komponenten berücksichtigt werden muß. Eine Erweiterung um eine Wolkenmikrophysik oder ein Chemiemodul ist praktisch nicht möglich.

Daher soll im folgenden ein auf einem neuen Konzept beruhendes Modell vorgestellt werden, das von einem instantanen Austausch von Impuls und Wärme ausgeht und eine effiziente Behandlung eines Partikel - Gas Gemisches zur Beschreibung des mesoskaligen Plumes einer Vulkaneruption ermöglicht. Für einen mesoskaligen Plume mit horizontalen Ausdehnungen von etwa 100 km und Plumehöhen im Bereich von 25 km sind kleinskalige Prozesse auf räumlichen bzw. zeitlichen Skalen im Meter- bzw. Millisekundenbereich vernachlässigbar. Das neue Modell ATHAM, das die Plumedynamik einschließlich der Wechselwirkungen zwischen Gasen, flüssigen und festen Partikeln simuliert, soll

- räumliche Strukturen im Bereich von 100 m auflösen,
- den Einfluß von Partikeln auf die Plumedynamik berücksichtigen,
- die Sedimentation von Partikeln beschreiben,
- als dreidimensionales Modell verwendet werden, um eine realistische Beschreibung von Transportprozessen einschließlich der Berücksichtigung eines horizontalen Windfeldes zu ermöglichen,
- beliebige Hintergrundprofile für Druck, Temperatur und relative Feuchte verwenden,
- einfach um weitere gasförmige, flüssige oder feste Komponenten erweiterbar sein,
- das Einmischen von Umgebungsluft in den Plume realistisch erfassen,
- die Kondensation von Wasserdampf und die Niederschlagsbildung einschließlich der Eisphase beschreiben,
- die am Boden sedimentierten Partikeln bilanzieren,
- und die Basis bilden für die Berücksichtigung von chemischen Umwandlungen, von Auswaschprozessen von Gasen und Partikeln und der Adsorption von Gasen an festen Oberflächen.

Im nächsten Kapitel wird das Konzept des Plumemodells ATHAM vorgestellt und die Gültigkeit der darin enthaltenen Annahmen diskutiert. Im Anschluß werden die Modellgleichungen erläutert und die Wolkenmikrophysik skizziert. Der Behandlung turbulenter Prozesse ist ein eigenes Kapitel gewidmet. Ergebnisse aus mit ATHAM durchgeführten Simulationen werden in einem weiteren Kapitel analysiert, bevor die Arbeit mit Zusammenfassung und Ausblick schließt.

Kapitel 2

Das Plumemodell ATHAM

Mit der Entwicklung von ATHAM (Active Tracer High Resolution Atmospheric Model) wurde das Ziel verfolgt, die mesoskalige Ausbreitung einer vulkanischen Eruptionswolke in der Atmosphäre zu beschreiben. Nicht aufgelöst werden dabei kleinskalige Prozesse in Kraternähe in der Größenordnung von wenigen Metern und darunter, bei denen die Eigenschaften granularer Strömungen eine wichtige Rolle spielen. Sogenannte base surges, Hochgeschwindigkeitstransportregimes bei Vulkaneruptionen, die durch die Wechselwirkung zwischen den Partikeln dominiert werden und in erster Näherung von der Atmosphäre entkoppelt sind, können daher nicht mit ATHAM beschrieben werden. Pyroklastische Flüsse, Glutlawinen, gebildet von einem turbulenten, heißen Partikel-Gas Gemisch, können von ATHAM aus numerischen Gründen nur erfaßt werden, wenn sie eine gewisse minimale Ausdehnung quer zur Strömungsrichtung aufweisen, die es erlaubt, den Übergangsbereich zwischen Glutlawine und Atmosphäre im Modell aufzulösen. Die Kräfte zwischen den Partikeln müssen gegenüber der Partikel-Gas Wechselwirkung vernachlässigbar sein.

Mit der Entwicklung von ATHAM wurde vor fünf Jahren begonnen. Mit einer ersten Fassung, die von Josef Oberhuber entwickelt wurde, wurden bereits Sensitivitätsstudien im Rahmen einer Diplomarbeit durchgeführt (Schwanke, 1995). Dabei traten aufgrund der gewählten Modellformulierung Probleme im Bereich der Massenerhaltung auf. Das Fehlen einer Turbulenzschließung gestattete lediglich eine qualitative Interpretation der durchgeführten Simulationen. Die Schwerpunkte der im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Modellentwicklung waren die massenerhaltende Formulierung des Modells mit expliziter Berücksichtigung der zeitlichen Kopplung der prognostischen Gleichungen im dynamischen Teil sowie die Einführung eines Turbulenzschließungsschemas zur Beschreibung subskaliger Prozesse.

Außer dem dynamischen Teil von ATHAM zur Behandlung des Partikel-Gas Gemisches existieren drei weitere Module zur Beschreibung der für die mesoskalige Plumentwicklung wichtigen, physikalischen Prozesse: Ein mikrophysikalisches Modul beschreibt Kondensationsprozesse und die Bildung von Niederschlägen in der festen und flüssigen Phase inklusive der mit ihnen verbundenen Energieumsetzungen.

Zur Berücksichtigung nicht aufgelöster, subskaliger Prozesse wird ein Turbulenzschließungsschema verwendet, das auf der Basis turbulenter Energiegleichungen turbulente Austauschkoeffizienten berechnet. Das Bodenmodell bilanziert die sedimentierten Partikel und liefert eine modellkonsistente untere Randbedingung für Temperatur und Feuchte. Module zur Beschreibung der Plume - Chemie und der Wechselwirkung zwischen kondensiertem Wasser und Aschepartikeln sind in Vorbereitung.

Zunächst wird das Modellkonzept von ATHAM und die Gültigkeit der verwendeten Annahmen diskutiert, bevor die einzelnen Module von ATHAM vorgestellt werden. Der Parametrisierung subskaliger Prozesse ist dabei ein eigenes Kapitel gewidmet.

Das Bodenmodell für ATHAM beruht auf einer Vereinfachung des Mehrschichten-Schneedeckenmodells von Loth et al. (1993). Da die Simulationsergebnisse des Bodenmodells im folgenden nicht diskutiert werden, sei an dieser Stelle zur Beschreibung des Bodenmodells lediglich auf die Diplomarbeit von Schwanke (1995) verwiesen, im Rahmen derer das Bodenmodell entstanden ist.

2.1 Das Modellkonzept

Explosive Vulkanausbrüche sind dadurch charakterisiert, daß ein heißes Partikel-Gas Gemisch mit hoher vertikaler Geschwindigkeit in die Atmosphäre injiziert wird. Die Modellierung eines solchen Gemisches erfordert die Beschreibung eines Mehrkomponentensystems. Jede Komponente kann dabei eine aktive Rolle in der Dynamik des Gesamtsystems spielen. Auf diesem Merkmal beruht die Unterscheidung zwischen aktiven und passiven Tracern: Bei passiven Tracern handelt es sich im Gegensatz zu aktiven Tracern um Spurenstoffe, die nur in vernachlässigbaren Konzentrationen auftreten und damit keinen direkten Einfluß auf die Dynamik des Gesamtsystems haben.

Der Aerosoltransport in der Atmosphäre ist ein typisches Beispiel für einen passiven Tracer. Die Aerosolkonzentrationen sind normalerweise so gering, daß sich die physikalischen Eigenschaften des Gas - Aerosol Gemisches, gemessen in Dichte und Wärmekapazität, nicht von denen des Gases unterscheiden. Das Gesamtsystem kann auch weiterhin durch die dynamischen und thermodynamischen Gleichungen der Gasphase beschrieben werden. Die Strömungsgeschwindigkeiten in der Transportgleichung für den passiven Tracer sind externe Parameter. Die Beschreibung von Sedimentation wird durch die Annahme möglich, daß sich die Vertikalgeschwindigkeit der passiven Tracer von der des Gases um eine stationäre, diagnostische Fallgeschwindigkeit unterscheidet. Eine Wechselwirkung zwischen Dynamik und Aerosolpartikeln entsteht lediglich indirekt, etwa durch den Einfluß von Aerosol auf Mikrophysik und Strahlungshaushalt, der als externer Antrieb in die Bewegungsgleichungen des Gases Eingang findet.

Da der Anteil der Aschepartikel bei einem explosiven Vulkanausbruch in Kraternähe mehr als 95 Gewichtsprozent ausmachen kann, müssen diese als aktive Tracer behandelt werden. Aktive Tracer können in beliebigen Konzentrationen auftreten, so

daß ihre räumliche Verteilung maßgeblich die Dichte und Wärmekapazität des Gemisches und damit Druck- und Temperaturverteilung des Systems bestimmt. Ohne zusätzliche Annahmen muß neben der Gasphase jede Komponente des Systems als aktiver Tracer betrachtet werden. Die Beschreibung eines solchen Multikomponenten Systems erfordert einen vollständigen Satz dynamischer und thermodynamischer Gleichungen für jede Komponente. Impuls-, Energie- und Massenerhaltung müssen durch entsprechende prognostische Variablen für jede Komponente berücksichtigt werden. Kopplungsterme beschreiben die Wechselwirkung durch Impuls- und Wärmeaustausch zwischen den einzelnen Komponenten.

Modelle zur Beschreibung eines Zweikomponenten-Systems, die die Wechselwirkung zwischen den Komponenten prognostisch behandeln, finden sich bei Valentine und Wohletz (1989) bzw. Dobran und Neri (1993). Unter der Annahme einer Zylindersymmetrie beschreiben sie die Dynamik je einer Gas- und Partikelphase. Das Modell von Neri und Macedonio (1996) mit zwei Partikelphasen als aktive Tracer stellt eine Weiterentwicklung des Modells von Dobran dar. Aufgrund des mit ihnen verbundenen hohen numerischen Aufwandes eignen sich diese Modelle nicht, wie bereits in Kapitel 1 erwähnt, zur Beschreibung eines Systems mit einer Vielzahl von Komponenten.

Daher soll im folgenden ein Ansatz verwendet werden, der die Beschreibung eines Multikomponentensystems erlaubt, ohne dabei die Wechselwirkungen zwischen den Komponenten prognostisch zu erfassen: Es wird angenommen, daß sich alle Komponenten des Systems in einem dynamischen und thermischen Gleichgewicht befinden. Die Wechselwirkung zwischen den Komponenten erfolgt instantan und läßt sich daher diagnostizieren.

2.1.1 Dynamisches Gleichgewicht

Die Annahme eines dynamischen Gleichgewichts bedeutet, daß sich der Impulsaustausch zwischen den Komponenten des Systems instantan in einem stationären Zustand befindet, in dem sich alle Komponenten des Systems relativ zueinander mit konstanter Geschwindigkeit bewegen. Dies hat zur Folge, daß lediglich der Gesamtimpuls des Systems prognostisch behandelt werden muß. Auch die Zahl der Druckgleichungen reduziert sich zu einer einzigen: Aktive Tracer erfahren im dynamischen Gleichgewicht keine Nettobeschleunigung gegenüber dem Gas, d.h. der Druck, der im Mittel auf die Oberfläche eines Partikels wirkt, ist gleich dem umgebenden Gasdruck. Um den Druckgradienten zu bestimmen, der das Strömungsfeld antreibt, ist es daher ausreichend, eine Gleichung für den Gasdruck zu behandeln.

Jeder aktive Tracer muß lediglich durch eine zusätzliche Transport- bzw. Kontinuitätsgleichung prognostisch behandelt werden: Jede Komponente bewegt sich gegenüber der Gasphase mit einer stationären Fallgeschwindigkeit, die zwar vom Zustand des Systems, wie Gasdruck und aktuelle Teilchengröße, nicht jedoch von seiner Dynamik abhängt. Die Fallgeschwindigkeiten werden entweder aus Annahmen über die Reibung zwischen Partikeln und Gas abgeleitet, z.B. unter der Annahme

Stokescher oder Newtonscher Reibung für sphärische Partikel, oder über Messungen parametrisiert - für Regentropfen siehe z.B. Gunn und Kinzer (1949). Die Geschwindigkeiten der einzelnen Komponenten unterscheiden sich daher nur in der Vertikalen, die Horizontalgeschwindigkeiten sind für alle Komponenten gleich. Aufgrund ihrer Fallgeschwindigkeit gegenüber dem Gas können aktive Tracer sedimentieren. Die Gaskomponente erfährt bei Anwesenheit aktiver Tracer eine zusätzliche Aufwärtsbewegung gegenüber dem Gemisch. Die Geschwindigkeiten, mit der aktive Tracer transportiert werden, sind im Gegensatz zur Behandlung passiver Tracer über den Einfluß des Tracertransportes auf die Dichte mit der Prognose für aktive Tracer gekoppelt.

Bisher unbeantwortet ist die Frage, unter welchen Bedingungen die Annahme eines dynamischen Gleichgewichts eine zulässige Einschränkung darstellt. Anschaulich ist unmittelbar einsichtig, daß ein instantaner Impulsaustausch um so besser gegeben ist, je weniger Impuls zwischen Gas und einem Partikel eines aktiven Tracers ausgetauscht werden muß, d.h., je kleiner die Partikel sind. Die Annahme eines dynamischen Gleichgewichts gilt daher nur im Grenzfall kleiner Teilchen. Ab welcher Größe die Partikel die Bedingung kleiner Teilchen erfüllen, hängt neben der betrachteten Fragestellung von der räumlichen und zeitlichen Auflösung im Modell ab.

Betrachtet man explosive Vulkaneruptionen, handelt es sich bei den aktiven Tracern zunächst um ein Gemisch von Silikatpartikeln unterschiedlicher Größe, das mit Tephra bezeichnet wird. Bei Einbeziehung von Kondensationsprozessen kommen die unterschiedlichen Hydrometeore hinzu. Die Silikatpartikel werden nach ihrem Korndurchmesser grob in drei Klassen unterteilt (Schmincke, 1993): Aschen besitzen Korndurchmesser kleiner 2 mm, Lapilli zwischen 2 mm und 64 mm, größere Partikel werden Bomben genannt, wenn sie aus Magmafetzen gebildet werden, und Blöcke, wenn sie aus dem Nebengestein stammen. Bomben und Blöcke folgen unter dem Einfluß der Schwerkraft ballistischen Flugbahnen und sind nicht mit der Annahme eines dynamischen Gleichgewichts zwischen Partikeln und Gas vereinbar. Da Bomben und Blöcke mit dem sie umgebenden Gas nur in sehr geringem Umfang Impuls und Wärme austauschen, sind sie für die Entwicklung und Energetik eines großskaligen Plumes vernachlässigbar, solange sie nicht die dominante Partikelklasse darstellen. Da im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich die Entwicklung und Dynamik von Plumes hochexplosiver, plinianischer Eruptionen betrachtet werden sollen, bei denen Aschepartikel und Lapilli den bei weitem größten Anteil des eruptierten Materials ausmachen, können Bomben und Blöcke in den folgenden Betrachtungen vernachlässigt werden.

Da die Partikel ihre stationäre Fallgeschwindigkeit relativ zum Gas instantan annehmen sollen, muß die Gültigkeit eines dynamischen Gleichgewichts nicht für einen festen Raumpunkt, sondern für ein festes Luftpaket überprüft werden. Erfährt ein Luftpaket während seiner Bewegung keine nennenswerte Beschleunigung, so bewegen sich auch alle in ihm befindlichen Partikel mit ihrer stationären Fallgeschwindigkeit relativ zum Gas, nachdem sie diese einmal erreicht haben. Erfährt ein Luftpaket aufgrund einer Beschleunigung eine Geschwindigkeitsänderung, so wird die

Geschwindigkeitsänderung der Partikel gegenüber dem Gas aufgrund ihrer größeren Trägheit verzögert erfolgen. Die Bereiche mit maximalen Beschleunigungen, die bei einem physikalischen Problem auftauchen können, müssen daher bei der Beurteilung des dynamischen Gleichgewichts herangezogen werden. Im Falle einer explosiven Vulkaneruption ist dies der kraternahe Bereich.

Bei der Simulation vulkanischer Eruptionswolken wird häufig davon ausgegangen, daß das Partikel-Gas Gemisch bei Eintritt in die Atmosphäre keinen Überdruck besitzt und alle Komponenten mit der gleichen Geschwindigkeit eruptiert werden (Woods, 1988; Valentine und Wohletz, 1989; Dobran und Neri, 1993). Diese Annahmen stellen eine starke Vereinfachung realer Verhältnisse dar: Während des Aufstiegs des Magmas im Schlot findet durch Druckentlastung eine kontinuierliche Entgasung des flüssigen Magmas statt. Der Beginn der Entgasung kann durch das Auftreten von Übersättigungen signifikant verzögert werden (Hurwitz und Navon, 1994). Für explosive Eruptionen ist typisch, daß die entstehenden Gasblasen aufgrund der hohen Viskosität des Magmas eine zu vernachlässigende Relativgeschwindigkeit gegenüber dem Magma besitzen (Wilson et al., 1980). Dies bedeutet insbesondere, daß die Gasblasen sich nicht zu größeren Gasblasen vereinigen und aus dem anfänglich flüssigen Magma eine Art Schaum entsteht. Dieser Schaum wird bei einem Volumenanteil des Gases zwischen 70% und 80% instabil (Woods, 1995): Es kommt zur pyroklastischen Fragmentierung. Aus einem flüssigen Fluid mit Gasblasen wird ein gasförmiges Fluid mit flüssigen bzw. festen Partikeln, die Viskosität nimmt um mehrere Größenordnungen ab. Der Mechanismus der Fragmentierung ist noch nicht vollständig geklärt. Zwei Ansätze werden diskutiert: Entweder verhält sich das Magma wie eine Newtonsche Flüssigkeit, so daß die Trennwände zwischen den Blasen erst zerstört werden, wenn monomolekulare Schichten entstanden sind bzw. wenn in Trennwände eingelagerte Kristalle eine weitere elastische Verdünnung der Trennwände verhindern. Oder das Magma verhält sich wie eine nicht-Newtonsche Flüssigkeit, bei der Schub und Spannung nicht mehr proportional sind, so daß das Magma aufgrund der raschen Druckentlastung spröde reagiert und die Trennwände reißen (Dingwell und Webb, 1989; Dingwell und Webb, 1990).

Durch die fortschreitende Druckentlastung während des Aufstiegs im Schlot erfährt das Partikel-Gas Gemisch eine starke Beschleunigung, so daß nicht von einem dynamischen Gleichgewicht zwischen Gas und Partikeln ausgegangen werden kann. Die Partikel-Gas Kopplung ist allerdings im Schlot verglichen mit den späteren Vorgängen in der Atmosphäre sehr stark. Dies liegt zum einen daran, daß das Gas wegen des hohen Drucks, der häufig über dem lithostatischen Druck liegt, trotz der hohen Temperaturen eine deutlich größere Dichte besitzt. Zum anderen ist die Partikelkonzentration so hoch, daß die Stöße zwischen den Partikeln extreme Geschwindigkeitsunterschiede zwischen den Komponenten des Gemisches verhindern. An der Schlotöffnung besitzt das eruptierte Material bei explosiven Vulkanen einen Überdruck, der individuell sehr unterschiedlich ist. Es bewegt sich mit Schallgeschwindigkeit, die aufgrund des hohen Partikelanteils von über 95 Gewichtsprozent bei etwa 100 m/s bis 150 m/s liegt (Woods und Bower, 1995). Dieser Überdruck bewirkt eine extreme Beschleunigung des Gemisches auf den ersten Metern nach Eintritt

in die Atmosphäre. Die am Ende dieser Dekompressionsphase erreichte Vertikalgeschwindigkeit wird dabei auch von der Form des Kraters beeinflusst. Insbesondere bei kleinen Öffnungswinkeln erfolgt die Beschleunigung durch die Dekompression stärker nach oben gerichtet, so daß das Gemisch Überschallgeschwindigkeiten von über 300 m/s erreichen kann.

Die beiden zuletzt genannten Beschleunigungsphasen des Gemisches während des Aufstiegs im Schlot und der anfänglichen Dekompressionsphase in der Atmosphäre können nicht durch das Modell ATHAM beschrieben werden. Die im Modell verwendete Ausbruchsgeschwindigkeit entspricht der Geschwindigkeit des Gemisches nach der Dekompressionsphase im Krater. Zu diesem Zeitpunkt befinden sich Gas und Partikel noch nicht in dem geforderten dynamischen Gleichgewicht. Erreichen die Partikel innerhalb der räumlichen und zeitlichen Auflösung des Modells ihre stationäre Fallgeschwindigkeit, kann von der Gültigkeit eines dynamischen Gleichgewichts dennoch ausgegangen werden. Da mit ATHAM Strukturen im Bereich von 100 m aufgelöst werden sollen, müssen die Partikel bei Strömungsgeschwindigkeiten von typischerweise 100 m/s innerhalb von einer Sekunde ihre stationäre Fallgeschwindigkeit erreicht haben.

Die Reibungskräfte zwischen Gas und Partikel bestimmen die stationäre Fallgeschwindigkeit eines Partikels und das zeitliche Verhalten, mit der diese angenommen wird. Neben der Größe und der Oberflächenrauigkeit werden diese Reibungskräfte vom Strömungstyp des Gases um das Partikel beeinflusst. In der Atmosphäre ist eine laminare Strömung um das Partikel nur bei sehr kleinen Teilchen mit einem maximalen Radius von etwa $50 \mu\text{m}$ realisiert in Analogie zu Wolken- und Regentropfen (Pruppacher und Klett, 1978). Die Stokesche Reibung ist proportional zur Partikelgeschwindigkeit. Bei größeren Partikeln wird die Strömung des Gases um das Partikel zunehmend durch Turbulenz bestimmt. Es kann in guter Näherung von Newtonscher Reibung ausgegangen werden, bei der die Reibungskraft proportional zum Quadrat der Partikelgeschwindigkeit ist. Die Abweichung zwischen tatsächlicher und Newtonscher Reibung wird durch den sogenannten Drag Coefficient angegeben, der im Falle reiner Newtonscher Reibung konstant ist und im allgemeinen von der Reynolds Zahl abhängig ist (Pruppacher und Klett, 1978). Die stationäre Fallgeschwindigkeit nimmt mit der Wurzel aus dem Partikelradius zu. Das zeitliche Verhalten der Partikelgeschwindigkeit wird durch den Tangens Hyperbolicus beschrieben mit einer Zeitkonstanten τ , die durch die stationäre Fallgeschwindigkeit v_∞ und die Gravitationskonstante g gegeben ist (Greiner, 1984):

$$\tau = v_\infty / g \quad (2.1)$$

Nach einer Zeitspanne, die dreimal der charakteristischen Zeit τ entspricht, unterscheidet sich bei einem aus der Ruhe gestarteten Partikel die tatsächliche von der stationären Fallgeschwindigkeit um weniger als ein Prozent. Selbst ein Partikel, das sich anfänglich mit dem Hundertfachen der stationären Fallgeschwindigkeit vertikal aufwärts bewegt, kommt nach $1,56 \tau$ zur Ruhe; nach 3τ beträgt die Abweichung zwischen tatsächlicher und stationärer Fallgeschwindigkeit nur noch 10%. Partikel mit einer charakteristischen Zeit τ kleiner einer Drittel Sekunde befinden sich daher

im Rahmen der mit ATHAM angestrebten räumlichen Auflösung im dynamischen Gleichgewicht. Wegen Gleichung (2.1) entspricht dies einer maximalen Fallgeschwindigkeit von

$$v_{\infty}^{max} = 3 \text{ m/s.}$$

Bei vernachlässigbarem Blasenanteil und einer Partikeldichte von 2600 kg/m^3 besitzen Aschepartikel mit einem Radius von $200 \mu\text{m}$ bereits eine stationäre Fallgeschwindigkeit von 3 m/s . Die bei explosiven Vulkanausbrüchen eruptierten Partikel besitzen jedoch häufig eine geringere Fallgeschwindigkeit als die gleich großer Regentropfen, weil sie sehr rauhe Oberflächen, einen hohen Gasblasenanteil und damit eine geringe mittlere Dichte aufweisen. Beim Ausbruch des Askja auf Island 1875 betrug die mittlere Dichte der Partikel mit einem Radius von 1 mm weniger als 300 kg/m^3 , beim Fogo A auf den Azoren wurde ein Wert von rund 450 kg/m^3 gemessen (Walker et al., 1971). Bei diesen geringen Partikeldichten, die typisch für explosive Vulkaneruptionen sind, erfüllen auch Partikel mit einem Radius von bis zu 1 mm die oben genannten Kriterien für ein dynamisches Gleichgewicht in Kraternähe. Ihre Dynamik kann nahezu uneingeschränkt mit ATHAM beschrieben werden.

Die Dynamik der Lapilli kann in Kraternähe zumindest näherungsweise unter der Annahme eines dynamischen Gleichgewichts simuliert werden, solange die stationären Fallgeschwindigkeiten der Lapilli klein gegenüber der mittleren Strömungsgeschwindigkeit sind und die charakteristischen Zeiten τ kleiner sind, als dies der angestrebten zeitlichen und räumlichen Auflösung von Strukturen entspricht. Partikel mit $\tau = v_{\infty}/g = 1 \text{ s}$ besitzen stationäre Fallgeschwindigkeiten von 10 m/s , die verglichen mit einer mittleren Strömungsgeschwindigkeit von 100 m/s als klein betrachtet werden können. Lapilli mit hohem Blasenanteil besitzen oft aufgrund ihrer geringen Dichte und rauhen Oberfläche selbst bei Korngrößen im Zentimeterbereich stationäre Fallgeschwindigkeiten von nicht mehr als 10 m/s (Walker et al., 1971). In Kraternähe können somit auch kleine Lapilli unter Annahme eines dynamischen Gleichgewichts beschrieben werden.

Größere Lapilli oder solche mit geringem Blasenanteil sind zu schwach mit der Gasphase gekoppelt, um durch ein dynamisches Gleichgewicht charakterisiert zu sein. Sie können aber dennoch soviel Impuls und Wärme mit dem Gas austauschen, daß sie für die großskalige Plumeentwicklung nicht vernachlässigt werden können. Treten sie bei einer Eruption in bedeutenden Anteilen auf, kann eine solche Eruption nur näherungsweise mit ATHAM simuliert werden.

Vergleicht man dieses Ergebnis mit Messungen anhand von kumulativen Größenverteilungen einiger explosiver Vulkaneruptionen in Abbildung 2.1, so erkennt man, daß zwar plinianische Eruptionen vorkommen, bei denen ein nicht zu vernachlässigender Teil der Partikel in die Klasse der Lapilli fallen (Woods und Bursik, 1991). So waren z.B. beim Askaja D fast fünfzig Gewichtsprozent der Partikel Lapilli, wovon wiederum etwa 25 % einen Durchmesser größer 2 cm besaßen. Mit zunehmender Explosivität jedoch besteht insbesondere bei den phreatomagmatischen Eruptionen, die durch Wasserkontakt verstärkt werden, praktisch das gesamte Eruptionsmaterial

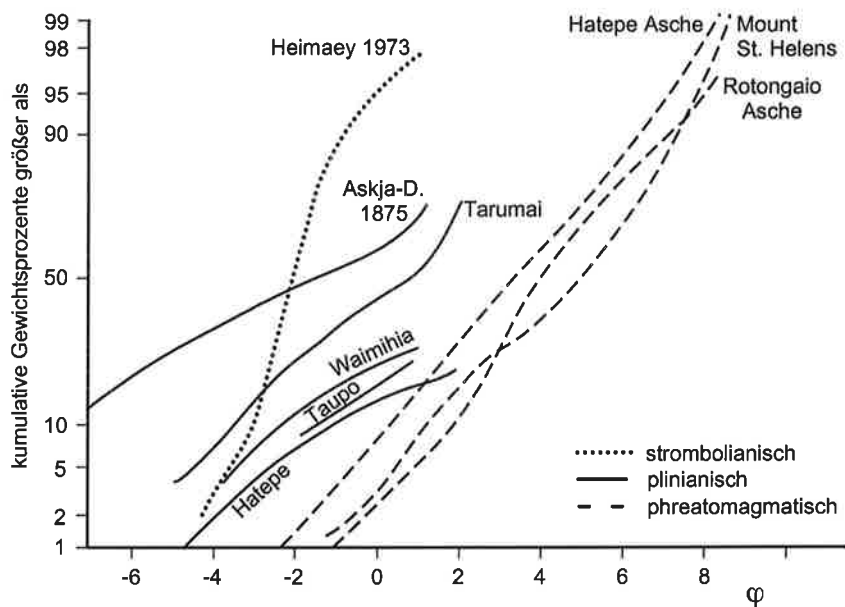


Abbildung 2.1: Kumulative Größenverteilung von Silicatpartikeln verschiedener Eruptionen (Woods und Bursik, 1991). $\varphi = -\log_2 d$ (d: Partikeldurchmesser in Millimeter)

aus Aschepartikeln mit mittleren Partikeldurchmessern in der Größenordnung von $d = 60 \mu\text{m}$ ($\varphi \approx 4$). Bei der Eruption des Mount St. Helens kamen praktisch keine Lapilli vor. Es können also insbesondere solche Vulkaneruptionen mit ATHAM beschrieben werden können, die einen großskaligen Plume entwickeln, der potentiell bis in die Stratosphäre gelangt und somit vom klimatologischen Standpunkt aus von Interesse ist.

2.1.2 Thermisches Gleichgewicht

Als zweite wichtige Vereinfachung bei der Simulation explosiver Vulkaneruptionen wird in ATHAM ein thermisches Gleichgewicht zwischen Partikeln und Gas angenommen. Dies bedeutet, daß Partikel und Gas stets dieselbe in situ Temperatur besitzen. Im Modell muß daher nur eine Temperaturgleichung prognostisch behandelt werden, statt je einer Gleichung pro Komponente des Gemisches. Es ist unmittelbar einsichtig, daß die Annahme eines instantanen Wärmeaustausches umso eher erfüllt ist, je weniger Wärme zwischen Gas und Partikel ausgetauscht werden muß, d.h. je kleiner die Partikel sind.

Nach der Fragmentierung des aufsteigenden Magmas im Schlot ist davon auszugehen, daß sich eine heterogene Temperaturverteilung zwischen Gas und Partikeln ausbildet, da sich das Gemisch aufgrund adiabatischer Expansion und dem Kontakt mit den Schlotwänden nicht gleichmäßig abkühlt. Bei Eintritt in die Atmosphäre wird sich das Partikel - Gas Gemisch daher im allgemeinen nicht im thermischen Gleichgewicht befinden. In erster Näherung kann allerdings von einem solchen Gleichgewicht

des Gemisches im Schlot ausgegangen werden, da aufgrund des geringen Gasanteils im Bereich weniger Gewichtsprozent die Abkühlung durch adiabatische Expansion relativ gering ist (Buresti und Casarosa, 1989). In der Atmosphäre folgt eine Abkühlung zunächst der Gasphase durch adiabatische Expansion während des Aufstiegs bzw. durch Einmischen von kühlerer Umgebungsluft in den Plume. Die Zeitskalen, auf denen Gas und Partikel Wärme austauschen, müssen kleiner sein als die Zeitskalen, auf denen sich die Temperatur der Gasphase ändert.

Im Grenzfall starker konvektiver Abkühlung, wie er beim Aufstieg eines Luftpakets im Plume gegeben ist, wird der Wärmeaustausch zwischen Partikel und Gas beschränkt durch die Wärmeleitung innerhalb des Partikels. Lediglich die Temperatur im Partikelinneren weicht von der des Gases ab. Der Wärmeaustausch zwischen Partikel und Gas erfolgt exponentiell mit einer Zeitkonstanten

$$\tau = \frac{d^2}{4\pi^2\kappa},$$

wobei d den Partikeldurchmesser und κ den Wärmeaustauschkoeffizienten innerhalb des Partikels bezeichnet (Carslaw und Jaeger, 1959). Für vulkanische Silikatpartikel hat der Wärmeaustauschkoeffizient einen Wert von $\kappa \approx 10^{-7} \text{m}^2/\text{s}$ (Woods und Bursik, 1991). Nach der dreifachen charakteristischen Zeit 3τ ist ein Temperaturausgleich nahezu erfolgt. Damit ein existierender Temperaturunterschied zwischen Gas und Partikel bei einer typischen Strömungsgeschwindigkeit von 100 m/s auf einer Skala von 100 m ausgeglichen werden kann, muß der Wärmeaustausch innerhalb einer Sekunde erfolgt sein. Dies führt zu einem maximalen Partikeldurchmesser von

$$d^{max} = 1 \text{ mm.}$$

Wegen des quadratischen Zusammenhangs zwischen Zeitkonstante τ und dem Partikeldurchmesser nimmt die Abweichung vom thermischen Gleichgewicht mit zunehmender Partikelgröße rasch zu.

Während bei Partikeln mit einem Millimeter Durchmesser die Zeitskalen für das Erreichen des thermischen und des dynamischen Gleichgewichts nahezu identisch sind, unterscheiden sie sich für Partikel mit einem Zentimeter Durchmesser bereits um mehr als eine Größenordnung: Die Zeitskala für das Erreichen des dynamischen Gleichgewichts liegt bei einem Zentimeter Partikeldurchmesser noch im Bereich von einer Sekunde, wohingegen sich die Zeitskala für das Erreichen des thermischen Gleichgewichts bereits im Bereich einer halben Minute befindet. Obwohl Lapilli im Zentimeterbereich, wie oben beschrieben, oft im dynamischen Gleichgewicht sind, gilt dies für das thermische Gleichgewicht nicht. Insofern stellt die Annahme eines thermischen Gleichgewichts eine stärkere Einschränkung für die Partikelgröße dar als das dynamische Gleichgewicht. Wie Abbildung 2.1 zu entnehmen ist, ist dies für phreatomagmatische Eruptionen ohne Bedeutung, bei plinianischen Eruptionen hat es häufig zur Folge, daß sie nur näherungsweise mit den in ATHAM verwendeten Ansätzen simuliert werden können.

Eine Erweiterung von ATHAM auf die Behandlung eines thermischen Ungleichgewichts zwischen Gas und Partikeln ist mit relativ geringem Aufwand möglich,

da im einfachsten Fall lediglich eine zusätzliche Temperaturgleichung für die nicht im Gleichgewicht befindlichen Partikel prognostisch behandelt werden muß. Der Wärmeaustausch mit der Gasphase läßt sich durch einem Kopplungsterm beschreiben. Auf die Einbeziehung eines thermischen Ungleichgewichtes kann aber verzichtet werden, da es sich verglichen mit dem Einfluß von Kondensations- und Niederschlagsbildungsprozessen oder dem Einfluß subskaliger turbulenter Prozesse auf die Dynamik des großskaligen Plumes um einen untergeordneten Effekt handelt.

2.2 Die Dynamik

2.2.1 Impulsgleichung

Geht man von dem im vorigen Abschnitt diskutierten dynamischen Gleichgewicht zwischen Gas und Partikeln aus, so lassen sich die Strömungen jeder Komponente des Gas-Partikel Gemisches durch die Kenntnis des Strömungsfeldes für das Volumenmittel beschreiben. Die Wechselwirkungen zwischen den Komponenten können durch die Bestimmung stationärer Fallgeschwindigkeiten diagnostiziert werden, da ihre Änderungsraten klein sind im Vergleich zu den Änderungsraten der Komponenten selbst. Da der Impulsaustausch zwischen den Komponenten nicht explizit aufgelöst wird, gilt die Impulserhaltung nur für das Volumenmittel, nicht aber für jede einzelne Komponente. Die Impulserhaltung für das Volumenmittel wird durch die Navier - Stokes Gleichungen beschrieben. Sie lauten in Komponentenschreibweise, wobei gemäß der Einsteinschen Summenkonvention über doppelt auftretende Indizes summiert wird:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_i u_j && \text{Advektion} \\
 &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho K_j \frac{\partial}{\partial x_j} u_i \right) && \text{turbulente Diffusion} \\
 &- \frac{\partial}{\partial x_i} P && \text{Druckgradientkraft} \\
 &- \rho g \delta_{i3} && \text{Gravitation} \\
 &+ 2 \rho \epsilon_{ijk} \omega_j (u_k - u_k^*) && \text{Corioliskraft} \\
 &+ \rho Q_i && \text{Quellterm}
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

für $i = 1, 2, 3$.

In der hier verwendeten Form beschreiben die Navier - Stokes Gleichungen die zeitliche Änderung jeder Impulskomponente ρu_i für einen festen Raumpunkt. Die verwendeten Größen, die an dieser Stelle für jeden beliebigen Raumpunkt gelten, repräsentieren im Modell Mittelwerte für diskrete Volumina. Dabei bezeichnet u_i die Strömungsgeschwindigkeit des Gemisches in der Raumrichtung i : $i=1$ und $i=2$ bezeichnen die horizontalen Raumrichtungen, $i=3$ die vertikale Raumrichtung. Die

Dichte ρ ist die Dichte des Gemisches, bestehend aus einem Gasanteil und festen oder flüssigen Partikeln (vergleiche auch Gleichung (2.15)).

Die ersten beiden Terme auf der rechten Seite der Gleichung (2.2) beschreiben Transportprozesse durch die mittlere Strömung (Advektion) und durch Turbulenz. Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Diffusionsansatz für turbulente Austauschprozesse verwendet. Die turbulenten Austauschkoeffizienten werden über die turbulente kinetische Energie bestimmt, wie in Kapitel 3 beschrieben wird. Beiträge aus der molekularen Diffusion sind gegenüber denen aus der turbulenten Diffusion vernachlässigbar. Der Druck P ist zunächst der Druck, der auf das Gemisch von Gas und Partikeln wirkt. Da die Partikel aufgrund des angenommenen dynamischen Gleichgewichts keine Nettobeschleunigung erfahren, entspricht dieser dem Gasdruck. Der Druckgradientterm bewirkt eine Strömung, die die Druckunterschiede ausgleicht. Der Gravitationsterm beschreibt den Einfluß der Schwerebeschleunigung g auf die Vertikalkomponente der Strömung ($i=3$).

Der Coriolisterm berücksichtigt lediglich eine Abweichung von einem großskaligen geostrophischen Wind u_i^* . Dies liegt darin begründet, daß das Modell ATHAM nur auf einem räumlich beschränkten Gebiet mit einer horizontalen Ausdehnung von bis zu mehreren hundert Kilometern arbeitet. Das hat zur Folge, daß die zeitliche Entwicklung der großskaligen Druckverteilung, die den geostrophischen Wind bestimmt, nicht im Modell dargestellt werden kann, sondern als äußere Randbedingung über ein geostrophisches Hintergrundwindfeld u_i^* vorgegeben werden muß. Als weitere Folge der beschränkten horizontalen Ausdehnung des Modellgebiets können Effekte der Erdkrümmung unberücksichtigt bleiben. Die Komponenten der Winkelgeschwindigkeit ω_i aufgrund der Erdrotation lauten, wenn die x-Achse ($i=1$) in Ost-West-Richtung weist, die y-Achse in Nord-Süd-Richtung und der Winkel φ die geographische Breite bezeichnet:

$$\vec{\omega} = -\Omega (0, \cos\varphi, \sin\varphi) \quad \text{mit } \Omega = \frac{2\pi}{86164 \text{ s}}. \quad (2.3)$$

Der ϵ -Tensor ϵ_{ijk} in Gleichung 2.2 wird benutzt zur Darstellung des Vektorprodukts in Komponentenschreibweise:

$$\epsilon_{i,j,k} = \begin{cases} 1 & \text{wenn (i,j,k) gerade Permutation von (1, 2, 3)} \\ -1 & \text{wenn (i,j,k) ungerade Permutation von (1, 2, 3)} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Die Quellterme Q_i berücksichtigen externe Antriebe wie z.B. einen Impulseintrag in die Atmosphäre durch eine Vulkaneruption.

Die in (2.2) angegebene Flußform der Navier-Stokes Gleichungen beschreibt die zeitliche Änderung des Impulses bzw. Massenflusses ρu_i . Subtrahiert man von diesen Gleichungen jeweils die Kontinuitätsgleichung für das Gemisch:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i, \quad (2.4)$$

so erhält man die advective Form der Navier - Stokes Gleichungen. Da für den Transport von Tracern die Transportgeschwindigkeit u_i und nicht die Massenflüsse ρu_i benötigt werden, erscheint es auf den ersten Blick günstiger, die Transportgeschwindigkeiten direkt zu modellieren. Da die Modellgleichungen jedoch nur auf diskreten Punkten in Raum und Zeit behandelt werden können und alle räumlichen und zeitlichen Ableitungen linear approximiert werden müssen, führen Diskretisierungsfehler dazu, daß die advective Form der Navier-Stokes Gleichungen nicht a priori impuls-erhaltend ist. Dies gilt insbesondere dann, wenn der räumliche Dichtegradient groß oder das Windfeld nicht divergenzfrei ist (Smolarkiewicz, 1985; Rood, 1987). Gerade solche Bedingungen sind jedoch typisch bei der Plumeentwicklung explosiver Vulkaneruptionen. Die Flußform der Navier-Stokes Gleichungen vermeidet Diskretisierungsfehler dadurch, daß die Massenerhaltung explizit in den diskretisierten Gleichungen enthalten ist und so die Impulserhaltung auch im Modell garantiert ist.

Das Gleichungssystem (2.2) ist nicht vollständig. Um es zu schließen, fehlen Bestimmungs- bzw. Prognosegleichungen für Druck und Dichte. Die turbulenten Austauschkoefizienten K_i werden getrennt in Kapitel 3 behandelt.

2.2.2 Druckgleichung

Der Druck P läßt sich aus einer Gleichung für den Druck des Gasanteils P_g ableiten. Dazu geht man vom totalen Differential des Druckes P_g aus, der eine Funktion der Gasdichte ρ_g und Gastemperatur T_g ist.

$$dP_g = \frac{\partial P_g}{\partial \rho_g} d\rho_g + \frac{\partial P_g}{\partial T_g} dT_g \quad (2.5)$$

Für die weitere Ableitung wird davon ausgegangen, daß sich der Gasanteil durch die Zustandsgleichung des idealen Gases beschreiben läßt:

$$P_g = R_g \rho_g T_g \quad \text{mit } R_g = c_{p,g} - c_{v,g}, \quad (2.6)$$

wobei R_g die spezifische Gaskonstante, $c_{p,g}$ und $c_{v,g}$ die spezifischen Wärmen des Gases bei konstantem Druck bzw. Volumen bezeichnen. Ersetzt man die in situ Temperatur T_g durch die potentielle Temperatur Θ_g :

$$T_g = \Theta_g \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{c_{p,g} - c_{v,g}}{c_{p,g}}}$$

so erhält man für die partielle zeitliche Ableitung des Druckes:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_g = \frac{c_{p,g}}{c_{v,g}} P_g \left(\frac{1}{\rho_g} \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{1}{\Theta_g} \frac{\partial \Theta_g}{\partial t} \right) \quad (2.7)$$

Durch das Ersetzen der in situ durch die potentielle Temperatur wird erreicht, daß im Temperaturterm lediglich nichtadiabatische Zustandsänderungen eingehen. Dieser kann daher als Korrekturterm gegenüber dem ersten Term, der den Einfluß einer

Änderung der Gasdichte auf den Druck beschreibt, aufgefaßt werden. Die Gasdichte, die nicht durch eine Modellgleichung direkt prognostiziert wird, kann über die Massenerhaltung durch die Massenflüsse ersetzt werden, die für das Volumenmittel durch (2.2) prognostiziert werden. Daher ist es wichtig, die Kontinuitätsgleichung für das Gas auf das Gesamtvolumen des Gemisches aus Gas und Partikeln zu beziehen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho q_g = - \frac{\partial}{\partial x_i} \rho q_g u_{i,g} \quad (2.8)$$

q_g bezeichnet die spezifische Konzentration des Gases in Masse des Gases pro Gesamtmasse des Gemisches. Die Transportgeschwindigkeit des Gases $u_{i,g}$ unterscheidet sich wegen der Annahme des dynamischen Gleichgewichts nur in der Vertikalen von der des Gemisches. Da sich die massengewichtete Summe der Relativgeschwindigkeiten $\Delta u_{3,i}$ zwischen vertikaler Geschwindigkeit von Gemisch und Komponenten i zu Null addiert, läßt sich die Differenz zwischen den vertikalen Geschwindigkeiten von Gas und Gemisch $\Delta u_{3,g}$ aus den diagnostisch bestimmten, stationären Fallgeschwindigkeiten $\Delta u'_{3,i}$ der aktiven Tracer berechnen:

$$\Delta u_{3,g} = u_{3,g} - u_3 = - \sum_{i=1}^{N_t} q_i \Delta u'_{3,i} \quad (2.9)$$

N_t bezeichnet die Zahl der aktiven Tracer. Um aus Gleichung (2.8) eine Kontinuitätsgleichung für die Gasdichte zu erhalten, muß beachtet werden, daß das Volumen des Gases V_g bei Anwesenheit aktiver Tracer kleiner ist als das des Gemisches V :

$$\frac{V}{V_g} = \frac{\rho_g}{\rho q_g} \quad (2.10)$$

Setzt man die Gleichungen (2.8) bis (2.10) in die Prognosegleichung (2.7) für den Druck ein und berücksichtigt, daß der Gasdruck aufgrund des dynamischen Gleichgewichts dem auf das Gemisch wirkenden Druck entspricht, so erhält man die im Modell ATHAM verwendete Druckgleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P = \frac{c_{p,g}}{c_{v,g}} P \left[\right. & - \frac{1}{\rho q_g} \frac{\partial}{\partial x_i} (q_g \rho u_i) && \text{Divergenzterm} \\ & - \frac{1}{\rho q_g} \frac{\partial}{\partial z} (q_g \rho \Delta u_{3,g}) && \text{Korrekturterm für} \\ & && \text{Geschwindigkeit} \\ & - \frac{\rho_g}{\rho q_g} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\rho q_g}{\rho_g} && \text{Korrekturterm für} \\ & && \text{Volumen} \\ & + \frac{1}{\Theta_g} \frac{\partial \Theta_g}{\partial t} && \left. \right] \text{Korrekturterm für} \\ & && \text{Temperatur} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Die Gleichung (2.11) beschreibt die zeitliche Änderung des Drucks für einen festen Raumpunkt in Abhängigkeit von räumlichen oder zeitlichen Ableitungen anderer dynamischer Größen. Den Hauptbeitrag in (2.11) liefert der Divergenzterm, der eine

Druckänderung durch die Konvergenz bzw. Divergenz von Masse bewirkt. Die drei weiteren Terme können zwar nicht vernachlässigt werden, liefern aber vergleichsweise kleine Beiträge für eine Druckänderung: Die Korrekturterme für die Abweichung der Gas- von der Gemischgeschwindigkeit und für den Unterschied zwischen Gas- und Gemischvolumen verschwinden im Falle konstanter Gemischzusammensetzung und im Grenzfall geringer Konzentrationen aktiver Tracer. Der Korrekturterm für die Temperatur liefert nur einen Beitrag für nichtadiabatische Prozesse, z.B. bei der Freisetzung latenter Wärme durch Kondensation. Zusätzlich müssen Temperaturänderungen durch Transportprozesse berücksichtigt werden, da die partielle Zeitableitung (Änderung für einen festen Raumpunkt) und nicht die totale Zeitableitung (Änderung für ein festes Luftpaket) in den Korrekturterm eingeht.

Als Modellgleichung ist die Druckgleichung (2.11) allerdings problematisch, da der Divergenzterm von der zeitlichen Entwicklung des Massenflusses ρu_i abhängt, die wiederum aufgrund der Navier-Stokes Gleichungen (2.2) vom Druck bestimmt ist. Jedoch besitzen die Gleichungen dieselbe Struktur, die es ermöglicht, durch Zeitdiskretisierung eine elliptische Gleichung für den Druck abzuleiten. In beiden Gleichungen wird die zeitliche Ableitung der einen Größe mit der räumlichen Ableitung der jeweils anderen Größe verknüpft:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} P &= -c \frac{\partial}{\partial x_i} (q_g \rho u_i) + R_P \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i &= -\frac{\partial}{\partial x_i} P + R_{u_i}\end{aligned}\tag{2.12}$$

$$\begin{aligned}\text{mit } c &= \frac{c_{p,g}}{c_{v,g}} P \frac{1}{\rho q_g} \\ R_P &= \frac{c_{p,g}}{c_{v,g}} P \left(-\frac{1}{\rho q_g} \frac{\partial}{\partial z} (q_g \rho \Delta u_{3,g}) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\rho_g}{\rho q_g} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\rho q_g}{\rho_g} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\Theta_g} \frac{\partial \Theta_g}{\partial t} \right) \\ R_{u_i} &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_i u_j \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho K_j \frac{\partial}{\partial x_j} u_i \right) \\ &\quad - \rho g \delta_{i3} \\ &\quad + 2\rho \epsilon_{ijk} \omega_j (u_k - u_k^*) \\ &\quad + \rho Q_i\end{aligned}$$

Zur numerischen Lösung dieser Gleichung wird aufgrund der im Modell auftretenden Schallwellen und extremen Transportgeschwindigkeiten ein implizites Schema

benötigt (Kwizak und Robert, 1971). Die Zeitdiskretisierung nach einem verallgemeinerten Cranck - Nicolson Verfahren mit einem Zeitgewichtungsfaktor α ergibt mit $n + 1$ als neuem Zeitpunkt und dem Zeitschritt Δt :

$$\begin{aligned} P^{n+1} + \alpha \Delta t c^{n+1} \frac{\partial}{\partial x_i} q_g^{n+1} (\rho u_i)^{n+1} &= P^* \\ (\rho u_i)^{n+1} + \alpha \Delta t \frac{\partial}{\partial x_i} P^{n+1} &= (\rho u_i)^* \end{aligned} \quad (2.13)$$

mit

$$\begin{aligned} P^* &= P^n - (1-\alpha) \Delta t c^n \frac{\partial}{\partial x_i} q_g^n (\rho u_i)^n + \Delta t R_P \\ (\rho u_i)^* &= (\rho u_i)^n - (1-\alpha) \Delta t \frac{\partial}{\partial x_i} P^n + \Delta t R_{u_i} \end{aligned}$$

In den Gleichungen (2.13) hängen die rechten Seiten P^* bzw. $(\rho u_i)^*$ nur vom alten Zeitschritt n ab oder können zunächst, wie R_P und R_{u_i} , als bekannt vorausgesetzt werden. Durch Eliminierung von $(\rho u_i)^{n+1}$ erhält man:

$$P^{n+1} - (\alpha \Delta t)^2 c^{n+1} \frac{\partial}{\partial x_i} q_g^{n+1} \frac{\partial}{\partial x_i} P^{n+1} = P^{**} \quad (2.14)$$

mit

$$P^{**} = P^* - \alpha \Delta t c^{n+1} \frac{\partial}{\partial x_i} q_g^{n+1} (\rho u_i)^*$$

Bei der so gewonnenen Gleichung handelt es sich um eine elliptische Differentialgleichung vom Helmholtztyp. Unter der Annahme, daß die Zeitabhängigkeit der Koeffizienten c und q_g in (2.14) gering ist, hängt die rechte Seite der Gleichung P^{**} nur vom alten Zeitschritt ab und kann daher als bekannt vorausgesetzt werden, so daß (2.14) mit Standardmethoden, die sich in Meteorologie und Ozeanographie bewährt haben, gelöst werden kann.

Die Zeitabhängigkeit der Koeffizienten c und q_g kann durch eine Iteration während des Lösungsverfahrens berücksichtigt werden. Das gleiche gilt für die Advektion und Diffusion von Impuls in R_{u_i} , die wie alle anderen Transportprozesse in ATHAM implizit behandelt werden, sowie für die Korrekturterme aus (2.11) in R_P . Näheres zur numerischen Realisierung findet sich in Kapitel 2.2.7.

Um das Gleichungssystem (2.2) und (2.14) zu schließen, fehlen noch Bestimmungsgleichungen für die Dichte.

2.2.3 Zustandsgleichung

Für die Dichte ρ des Volumenmittels wird in ATHAM keine prognostische Gleichung gelöst, sondern sie wird aus den spezifischen Konzentrationen q_i , die die Masse eines

Tracers bezogen auf die Gesamtmasse angeben, und Dichten ρ_i der N Komponenten des Systems diagnostiziert:

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^N \frac{q_i}{\rho_i} \quad (2.15)$$

Das Gemisch besteht aus einem Gasanteil und flüssigen bzw. festen Partikeln. Für die Partikel gilt die Inkompressibilitätsannahme: Ihre Dichte ist druck- und temperaturunabhängig und für jeden aktiven Tracer konstant. Der Gasanteil kann aus mehreren Komponenten bestehen. Um die Gasdichte ρ_g aus der idealen Gasgleichung 2.6 bestimmen zu können, muß neben dem Druck die in situ Temperatur des Gases bekannt sein, die über eine Transportgleichung für Wärme prognostiziert wird (vergleiche Abschnitt 2.2.5).

Jede Komponente des Systems muß als aktiver Tracer aufgefaßt werden, deren spezifische Konzentrationen durch eine prognostische Transportgleichung bestimmt werden. In der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Version des Modells ATHAM werden sieben aktive Tracer berücksichtigt: Zwei Tracer für die vom Vulkan eruptierten Silikatpartikel - Asche und Lapilli - und fünf Tracer zur Berücksichtigung mikrophysikalischer Prozesse - Wasserdampf, Wolkenwasser, Regenwasser, Eis und Graupel. Der Anteil trockener Luft wird als Residuum aus allen übrigen spezifischen Konzentrationen bestimmt, die sich in der Summe über alle Komponenten per Definition zu eins addieren.

2.2.4 Tracergleichung

Die Prognosegleichung für die spezifische Konzentration eines Tracers q wird abgeleitet aus der Massenerhaltung des Tracers bei Abwesenheit äußerer Quellen und Senken:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho q &= - \frac{\partial}{\partial x_i} \rho q u_{i,q} && \text{Advektion} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_{j,q} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho q \right) && \text{turbulente Diffusion} \\ &+ \rho Q_q && \text{äußere Quellen und Senken} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Prognostiziert wird mit dieser Gleichung nicht direkt eine spezifische Konzentration, sondern die Tracermasse ρq in einem bestimmten Volumenelement des Gemisches. Bei Gleichung (2.16) handelt es sich daher wie bei der Formulierung der Navier-Stokes Gleichungen um die Flußform der Tracergleichung. Die Massenerhaltung steht explizit in der Gleichung und ist daher bei geeigneter Diskretisierung im Modell gewährleistet.

Die zeitliche Änderung der Tracermasse in einem Volumen wird beschrieben durch Transportprozesse aufgrund der mittleren Strömung (Advektion) und aufgrund turbulenter Prozesse. Effekte molekularer Diffusion können vernachlässigt werden. Wie

schon in der Impulsgleichung wird für die turbulenten Prozesse ein Diffusionsansatz verwendet. Die turbulenten Austauschkoefizienten $K_{j,q}$ sind zu denen für Impuls proportional (vergleiche Kapitel 3). Die Transportgeschwindigkeiten $u_{i,q}$ im Advektionsterm entsprechen wegen des angenommenen dynamischen Gleichgewichts in der Horizontalen denen für das Gemisch u_i . In der Vertikalen unterscheiden sich allerdings wegen ihrer stationären Fallgeschwindigkeit $\Delta u'_{3,q}$. Da die stationären Fallgeschwindigkeiten in der verwendeten Modellversion aufgrund einer Gas-Partikel Wechselwirkung parametrisiert werden (vergleiche Kapitel 2.3), sind sie relativ zur vertikalen Geschwindigkeit der Gasphase definiert. Die Vertikalgeschwindigkeit der aktiven Tracer unterscheidet sich daher von der des Gemisches durch die stationäre Fallgeschwindigkeit korrigiert um die Relativgeschwindigkeit $\Delta u_{3,g}$ zwischen Gemisch und Gas:

$$\Delta u_{3,q} = \Delta u'_{3,q} + \Delta u_{3,g} \quad (2.17)$$

wobei $\Delta u_{3,g}$ durch die bereits angegebene Gleichung (2.9) bestimmt ist.

In den äußeren Quellen und Senken Q_q in (2.16) sind neben dem Antrieb durch die Vulkaneruption alle mikrophysikalischen Umwandlungen enthalten. Der Wasserdampf als Komponente des Gases wird ebenfalls nach Gleichung (2.16) prognostiziert, seine vertikale Relativgeschwindigkeit gegenüber dem Gemisch entspricht gerade dem des Gasanteils $\Delta u_{3,g}$.

2.2.5 Thermodynamische Gleichungen

Für die Bestimmung der Gasdichte wird neben der Druckprognose eine Prognose der Temperatur benötigt. Die üblicherweise zu diesem Zweck verwendete potentielle Temperatur des Gasanteils ist bei einem Gemisch mit aktiven Tracern keine Erhaltungsgröße, da dem Gas durch die aktiven Tracer Wärme von außen zugeführt oder entzogen werden kann. Der Wärmehalt der aktiven Tracer muß bei der Temperaturprognose berücksichtigt werden. Die Annahme eines thermischen Gleichgewichts vereinfacht die Behandlung der Thermodynamik des Systems erheblich: Alle Komponenten besitzen die gleiche in situ Temperatur T . Aufgrund der Inkompressibilitätsannahme bei festen und flüssigen Partikeln entspricht deren potentielle Temperatur Θ_i gerade der in situ Temperatur T :

$$\Theta_i = T \quad \text{mit } i = 1, \dots, N_t$$

Die potentielle Temperatur des Gases Θ_g ist wie üblich definiert (Roedel, 1994):

$$\Theta_g = T \left(\frac{P_0}{P} \right)^{\frac{c_{p,g} - c_{v,g}}{c_{v,g}}}$$

$$c_{p,g} = \frac{\sum_{i=1}^{N_g} q_i c_{p,i}}{\sum_{i=1}^{N_g} q_i}$$

$$c_{v,g} = \frac{\sum_{i=1}^{N_g} q_i c_{v,i}}{\sum_{i=1}^{N_g} q_i}$$

N_t bezeichnet die Gesamtzahl der inkompressiblen Tracer, N_g die Gesamtzahl der gasförmigen Komponenten. Diese Eigenschaften ermöglichen es, die Thermodynamik des Gesamtsystems in einer einzigen neuen Erhaltungsgröße auszudrücken: Der potentiellen Temperatur des Gemisches:

$$\Theta = \frac{1}{c_p} \sum_{i=1}^N q_i c_{p,i} \Theta_i$$

$$c_p = \sum_{i=1}^N q_i c_{p,i}$$

$N = N_t + N_g$ bezeichnet die Gesamtzahl aller Komponenten. Da die spezifische Wärmekapazität des Gemisches c_p nicht als räumlich und zeitlich konstant angenommen werden kann, ergibt sich für die Temperaturprognose:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Theta &= -u_{i,\theta} \frac{\partial}{\partial x_i} \Theta && \text{Advektion} \\ &+ \frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho c_p K_{j,\theta} \frac{\partial}{\partial x_j} \Theta \right) && \text{turbulente Diffusion} \\ &+ Q_\theta && \text{äußere Quellen und Senken} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Die Temperaturprognose ist nicht in der sonst im Modell verwendeten Flußform, sondern in der advektiven Form formuliert. Diskretisierungsfehler können daher zu Problemen bei der Energieerhaltung führen.

Wird jedoch auch die Temperatur in Flußform prognostiziert, kommt es aufgrund der gewählten Diskretisierungen auf dem Arakawa C-Gitter (vergleiche Abschnitt 2.2.7) zu einer numerischen Destabilisierung des Modells: In den prognostischen Modellgleichungen tauchen dann lediglich Mittelwerte der Dichte auf. Der in den Advektionstermen auftretende Impulsgradient lautet z.B. in x-Richtung diskretisiert:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \rho u &= \left(u \left(x_0 + \frac{1}{2} \Delta x \right) \frac{1}{2} (\rho(x_0) + \rho(x_0 + \Delta x)) \right. \\ &\quad \left. - u \left(x_0 - \frac{1}{2} \Delta x \right) \frac{1}{2} (\rho(x_0) + \rho(x_0 - \Delta x)) \right) / \Delta x \\ &= \left(u(i+1) \frac{1}{2} (\rho(i) + \rho(i+1)) \right. \\ &\quad \left. - u(i-1) \frac{1}{2} (\rho(i) + \rho(i-1)) \right) / \Delta x \end{aligned}$$

Während die Mittelwerte der Dichte zwar numerisch und physikalisch korrekt simuliert werden können, gilt dies für die ungemittelten Werte der Dichte nicht. Die in der Dichte entstehende $2\Delta x$ -Welle findet sich in den prognostischen Größen wieder, ohne daß das Modell in der Lage wäre, diese numerische Störung auszugleichen.

Die advektive Form der Temperaturgleichung vermeidet dieses Problem. Numerische Störungen in der Dichteverteilung werden durch die Temperaturrückkopplung

wieder gedämpft. Jedoch führt die gewählte Form der Temperaturprognose zu Abstrichen bei der Energieerhaltung. Da das Modell ATHAM kein geschlossenes System beschreibt, erschweren die offenen Ränder einerseits die Überprüfung der Erhaltung potentieller Energie, führen andererseits aber auch dazu, daß die Gesamtenergie des Systems nicht unrealistisch anwachsen kann, solange die Störungen in der Energieerhaltung klein genug sind.

Durch Gleichung (2.18) wird eine Temperaturänderung in Abhängigkeit von Transportprozessen durch Advektion und Turbulenz beschrieben. Wie schon bei Impuls- und Tracergleichung können Effekte molekularer Diffusion vernachlässigt werden. Die turbulenten Austauschkoefizienten $K_{i,\theta}$ werden als proportional zu denen für Impuls angenommen (vergleiche Kapitel 3). Aufgrund des angenommenen dynamischen Gleichgewichts entsprechen die horizontalen Transportgeschwindigkeiten denen für das Gemisch. Die vertikale Geschwindigkeit $u_{3,\theta}$ für Wärme bzw. Temperatur kann aus den spezifischen Wärmekapazitäten und Geschwindigkeiten der einzelnen Komponenten des Gemisches abgeleitet werden. Die Relativgeschwindigkeit zum Gemisch $\Delta u_{3,\theta} = u_3 - u_{3,\theta}$ lautet:

$$\Delta u_{3,\theta} = \frac{\sum_{i=1}^N q_i c_{p,i} \Delta u_{3,i}}{\sum_{i=1}^N q_i c_{p,i}}$$

N bezeichnet die Gesamtzahl der Komponenten im System. Die Relativgeschwindigkeiten der einzelnen Komponenten lassen sich mit den Gleichungen 2.9 und 2.17 diagnostizieren. Die in Gleichung 2.18 auftretenden externen Quellen und Senken Q_θ implizieren den Antrieb durch den Vulkanausbruch und Energieumsetzungen durch Phasenübergänge bei mikrophysikalischen Prozessen, wie z.B. die Freisetzung latenter Wärme durch Kondensation.

2.2.6 Zusammenfassung der Modellgleichungen

Einschließlich der Temperaturgleichung ist nun ein vollständiges Gleichungssystem gegeben, das es erlaubt, unter der Annahme eines dynamischen und thermischen Gleichgewichts die Dynamik eines Gas-Partikel Gemisches mit einer beliebigen Anzahl von Komponenten zu beschreiben. Das Gleichungssystem besteht aus vier prognostischen Grundgleichungen:

- Den Navier-Stokes-Gleichungen (2.2) für den Impuls des Volumenmittels:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_i u_j && \text{Advektion} \\
 &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho K_j \frac{\partial}{\partial x_j} u_i \right) && \text{turbulente Diffusion} \\
 &- \frac{\partial}{\partial x_i} P && \text{Druckgradientkraft} \\
 &- \rho g \delta_{i3} && \text{Gravitation} \\
 &+ 2 \rho \epsilon_{ijk} \omega_j (u_k - u_k^*) && \text{Corioliskraft} \\
 &+ \rho Q_i && \text{Quellterm}
 \end{aligned}$$

für $i = 1, 2, 3$

- der Druckgleichung (2.11) für das Gesamtsystem:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} P &= \frac{c_{p,g}}{c_{v,g}} P \left[- \frac{1}{\rho q_g} \frac{\partial}{\partial x_i} (q_g \rho u_i) && \text{Divergenzterm} \right. \\
 &- \frac{1}{\rho q_g} \frac{\partial}{\partial z} (q_g \rho \Delta u_{3,g}) && \text{Korrekturterm für} \\
 &- \frac{\rho_g}{\rho q_g} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\rho q_g}{\rho_g} && \text{Geschwindigkeit} \\
 &+ \frac{1}{\Theta_g} \frac{\partial \Theta_g}{\partial t} && \text{Korrekturterm für} \\
 & && \text{Volumen} \\
 & && \text{Temperatur}
 \end{aligned}$$

- der Tracergleichung (2.16) für die aktiven Tracer:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho q &= - \frac{\partial}{\partial x_i} \rho q u_{i,q} && \text{Advektion} \\
 &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_{j,q} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho q \right) && \text{turbulente Diffusion} \\
 &+ \rho Q_q && \text{äußere Quellen und Senken}
 \end{aligned}$$

- der Temperaturgleichung (2.18) für die potentielle Temperatur des Gemisches:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Theta &= -u_{i,\theta} \frac{\partial}{\partial x_i} \Theta && \text{Advektion} \\ &+ \frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho c_p K_{j,\theta} \frac{\partial}{\partial x_j} \Theta \right) && \text{turbulente Diffusion} \\ &+ Q_\theta && \text{äußere Quellen und Senken} \end{aligned}$$

Tracer- und Temperaturgleichung werden mit Impuls- und Druckgleichung über die Zustandsgleichungen (2.15) bzw. (2.6) verknüpft. Das Turbulenzschließungsschema in Kapitel 3 zur Bestimmung der turbulenten Austauschkoefizienten ergänzt dieses Gleichungssystem um drei weitere prognostische Gleichungen.

2.2.7 Numerische Behandlung der dynamischen Gleichungen

Die Modellierung der Dynamik eines Fluids auch ohne zusätzliche Komponenten wie aktive Tracer beinhaltet ein grundsätzliches Problem der Kontinuumsmechanik: Die dynamischen Gleichungen sind für ein Kontinuum von Raum-Zeit Punkten zu lösen, ohne daß dabei eine allgemeine analytische Lösung angegeben werden kann. Das Gleichungssystem muß daher unter der Angabe von Randbedingungen mit numerischen Methoden, d.h. diskretisiert in Raum und Zeit, gelöst werden.

In ATHAM wird für alle Größen und Prozesse, die in der Meteorologie und Ozeanographie übliche Eulersche Betrachtungsweise gewählt, die die zeitliche Entwicklung prognostischer Variablen für diskrete, feste Raumpunkte vorhersagt.

Räumliche Diskretisierung

Die räumliche Diskretisierung erfolgt in ATHAM auf dem sogenannten C-Gitter (Mesinger und Arakawa, 1976), bei dem zwischen skalaren Größen wie Druck, Temperatur und Tracerkonzentrationen einerseits und vektoriellen Größen wie Transportgeschwindigkeiten und Austauschkoefizienten andererseits unterschieden wird. Die Vektorpunkte sind dabei jeweils in die zugehörige Koordinatenrichtung um einen halben Gitterpunktastand verschoben. Die in den Modellgleichungen auftretenden räumlichen Ableitungen werden mit Hilfe zentrierter Differenzen diskretisiert.

Um dem Umstand Rechnung zu tragen, daß Prozesse in Kraternähe auf deutlich kleineren Skalen ablaufen als in kraterfernen Bereichen, wird in ATHAM ein Gitter mit variablem Gitterpunktastand verwendet, dessen feinste Auflösung sich am Krater befindet. Der mesoskalige Plume plinianischer Großeruptionen weist vertikale Ausdehnungen von bis zu dreißig Kilometern und horizontale Ausdehnungen am Ende der Eruptionsphase von über hundert Kilometern auf. Bei Simulationen

des großskaligen Plumes mit ATHAM muß das Modellgebiet größer sein als der betrachtete Plume, um den Einfluß der Modellränder auf die Simulationsergebnisse zu reduzieren.

Die Auflösung in Kraternähe kann nicht beliebig klein sein: Zum einen soll die Zahl der Gitterpunkte und damit die Rechenzeit möglichst gering sein, zum anderen muß die relative Änderung des Gitterpunktabstandes klein sein, um numerische Instabilitäten aufgrund des fokussierenden Gitters zu minimieren. Darüberhinaus ist eine beliebige Erhöhung der Modellauflösung auch physikalisch nicht sinnvoll, da aufgrund der Annahmen des dynamischen und thermischen Gleichgewichts ab einer gewissen räumlichen Auflösung keine zusätzlichen Informationen gewonnen werden können. Eine hohe Auflösung in Kraternähe bedeutet daher bei den Simulationen des großskaligen Plumes einen vertikalen und horizontalen Gitterpunktabstand von je einhundert Metern. Verglichen mit in der Natur auftretenden Krateröffnungen mit Durchmessern von typischerweise fünfzig Metern, ist eine Auflösung von 100 m zu grob, um Vorgänge in unmittelbarer Kraternähe zu simulieren. Um die Anfangsphase einer Eruption unter realistischeren Bedingungen untersuchen zu können, werden daher Studien mit höherer Auflösung auf kleinerem Modellgebiet durchgeführt.

Zur Berücksichtigung der Bodentopographie werden in einem kartesischen Koordinatensystem die im Boden befindlichen Gitterpunkte ausgeblendet. Der Vorteil gegenüber einem terrainangepaßten Koordinatensystem liegt darin, daß Gitterpunkte gleicher z -Koordinate auch eine Ebene in der Horizontalen bilden. Räumliche Ableitungen eines gekrümmten Koordinatensystems führen zu zusätzlichen Diskretisierungsfehlern besonders bei hohen Strömungsgeschwindigkeiten.

Modellversionen

ATHAM ist vollständig dreidimensional formuliert, um qualitative Modellaussagen unter realistischen Anfangs- und Umgebungsbedingungen zu ermöglichen. Hoher Speicherplatzbedarf und lange Rechenzeiten verhindern allerdings die generelle Anwendung der dreidimensionalen Version im Rahmen der Modellentwicklung. Daher sind in ATHAM zwei unterschiedliche zweidimensionale Versionen realisiert.

Die eine Version repräsentiert zweidimensionale kartesische Koordinaten und somit einen vertikalen Schnitt durch das dreidimensionale Modellgebiet. In der nicht aufgelösten Raumrichtung werden homogene Verhältnisse angenommen. Das dreidimensionale reale Gegenstück dieser Modellversion ist eine unendlich ausgedehnte Spalteneruption und wird im folgenden mit Linienvulkan bezeichnet. Realistische Anfangsbedingungen sind nur für Gemischzusammensetzung und Eruptionsgeschwindigkeit möglich, nicht aber für die Masseneruptionsrate, die nur als Eruptionsrate pro Längeneinheit des Linienvulkans angegeben werden kann. Der Nachteil dieser Modellversion ist das fehlende Einmischen von Umgebungsluft in den Plume aus der nicht aufgelösten Raumrichtung. Dies hat ein Überschätzen der vulkanischer Signale in der Modellatmosphäre zur Folge. Allerdings lassen sich in dieser Modellversion horizontale Inhomogenitäten bei der großskaligen Plumeentwicklung,

die schon durch ein leichtes horizontales Windfeld ausgelöst werden, zumindest in eine horizontale Raumrichtung studieren.

Eine weitere zweidimensionale Version von ATHAM simuliert Zylinderkoordinaten und wurde erstmalig von Schwanke (1995) eingeführt. Das Einmischen von Umgebungsluft entspricht dem dreidimensionalen Fall, auch die Angabe einer realistischen Masseneruptionsrate ist möglich. Die Zylindergeometrie unterdrückt jedoch horizontale Inhomogenitäten.

Transport - Schema

Zur Vermeidung negativer Konzentrationen bei der Advektion von Tracern, die in der hier gewählten Flußform der Gleichungen durch räumliche Mittelung der Tracerkonzentrationen auftreten können, wird ein Zusatzterm verwendet, der in Analogie zu dem von Smolarkiewicz für ein Upstream - Verfahren entwickelten Korrekturterm für ein auf zentrierten Differenzen beruhendes Transportschema abgeleitet wurde (Smolarkiewicz, 1983; Smolarkiewicz, 1984; Oberhuber, 1996). Dieser Korrekturterm bewirkt in Abhängigkeit der Strömungsgeschwindigkeit und des Konzentrationsgradienten einen diffusionsartigen Beitrag zur Advektion, der das Auftreten negativer Konzentrationen verhindert. Dadurch wird eine zusätzliche numerische Diffusion nur dort verwendet, wo dies zur Vermeidung physikalisch unsinniger Ergebnisse erforderlich ist. Der Tracertransport kann ansonsten völlig diffusionsfrei erfolgen.

Bei der Temperaturprognose, die semi-Lagrange formuliert ist, wird zur Vermeidung numerischer Instabilitäten ein erweitertes Crowley Advektionsschema verwendet (Crowley, 1968; Smolarkiewicz, 1982).

Zeitschrittverfahren

Die zeitliche Diskretisierung der Modellgleichungen in ATHAM ist voll implizit unter Verwendung eines verallgemeinerten Crank - Nicholson Verfahrens mit einem Zeitgewichtungsfaktor von $\alpha = 1/4$)¹ (O'Brien, 1986b). Einzige Ausnahme bildet der Coriolis Term, der aufgrund der betrachteten kurzen Simulationszeiten von etwa einer Stunde und aufgrund eines Zeitschrittes im Sekundenbereich explizit behandelt werden kann.

In der ersten Version von ATHAM war ein Zeitschrittverfahren mit einem Prädiktor- und Korrektorschritt für den Impuls realisiert (Schwanke, 1995). Die linearen Differentialgleichungen für Impuls, Druck, Temperatur und Tracer wurden nacheinander implizit behandelt. Um Fehler durch die zeitliche Diskretisierung zu reduzieren, wurden die wichtigsten Beiträge des Gleichungssystem zuerst behandelt. In ATHAM ist dies die Behandlung der Schallwellen durch die Druckgleichung (2.11) bzw. (2.14). Mit Hilfe eines semiimpliziten Verfahrens wurden in einem Prädiktorschritt zunächst die Prognosegleichungen für Druck und Geschwindigkeitsfeld gelöst gefolgt von einer

¹d.h. $1/4 \Delta t$ forward, $3/4 \Delta t$ backward

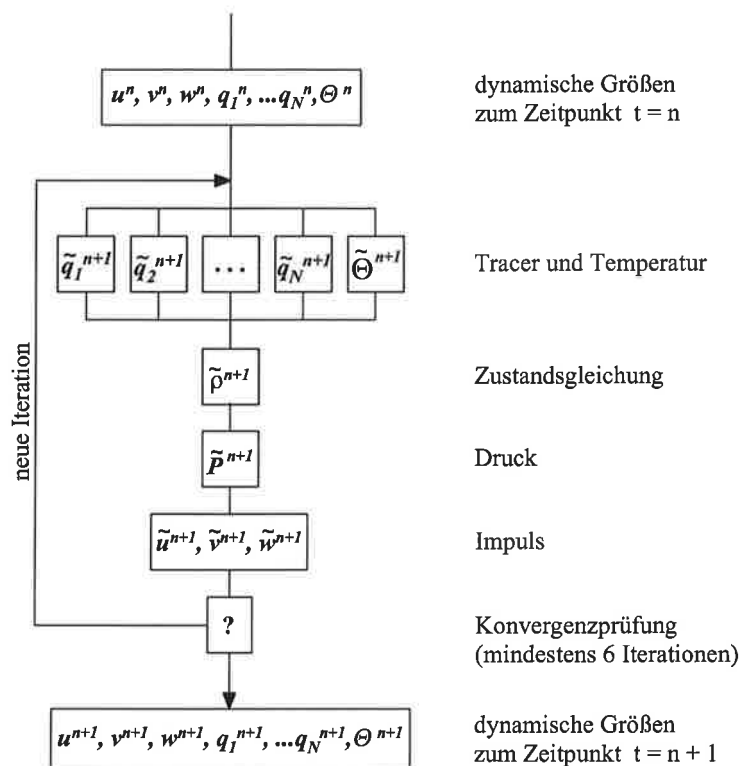


Abbildung 2.2: Skizze des iterativen Zeitschrittverfahrens. Die Iteration im impliziten Zeitschrittverfahren ermöglicht die vollständige Berücksichtigung der zeitlichen Kopplung der dynamischen Gleichungen.

sequentiellen Berechnung der Tracer. Ein Korrekturschritt für den Impuls beendet das Zeitschrittverfahren.

Allerdings wurde bei diesem Verfahren davon ausgegangen, daß eine Änderung der Koeffizienten in den Gleichungen während eines Zeitschrittes - wie z.B. die der Dichte in der Druckgleichung - vernachlässigt werden kann. Eine Massenerhaltung ist damit nicht exakt möglich, da zur Bestimmung der Tracerkonzentrationen die Dichte zum neuen Zeitpunkt benötigt wird. Eine sequentielle Bestimmung der Tracer kann nicht massenerhaltend sein.

Die Lösung dieses Problems besteht darin, die zeitliche Kopplung der Gleichungen für Druck, Impuls, Tracer und Temperatur durch eine parallele Iteration der dynamischen Größen mit jeweils aktualisierter Dichte aufzulösen: Am Ende der ersten Iteration erhält man eine erste Abschätzung für alle dynamischen Größen zum neuen Zeitpunkt, die in den jeweils folgenden Iterationen für eine verbesserte Abschätzung verwendet werden. Eine ausreichende Konvergenz des in Abbildung 2.2 skizzierten Verfahrens läßt sich innerhalb von sechs Iterationen erreichen. Somit ist es möglich, Strömungsprobleme mit nahezu beliebigem Gasanteil und Dichtegradienten auch bei extremen Beschleunigungen, wie sie bei Vulkaneruptionen auftreten, in massenerhaltender Formulierung zu behandeln.

Lösungsmethode

Durch die Diskretisierung der räumlichen Ableitungen ergibt sich im impliziten Teil jeweils eine Matrixgleichung, die für eine einzelne Raumrichtung aus Tridiagonalmatrizen besteht. Diese Matrixgleichung wird nach der Alternating - Direction - Line - Successive - OverRelaxation (ADLSOR) Methode gelöst (O'Brien, 1986a; Luther, 1986). Dabei wird die Lösung in einer ausgezeichneten Raumrichtung für alle Punkte einer Säule mit Hilfe der Tridiagonalmatrizen direkt berechnet, so daß man für diese Raumrichtung die exakte Lösung erhält. Beiträge aus den anderen Raumrichtungen werden iterativ berücksichtigt. Durch Rotation der ausgezeichneten Raumrichtung ist es möglich, daß beliebige Raumpunkte während eines Iterationsschrittes miteinander wechselwirken können. Eine komplette Iteration besteht somit im dreidimensionalen Fall aus drei Schritten, wobei das Gleichungssystem in jede Raumrichtung jeweils einmal direkt gelöst wird.

Im iterativen Teil der ADLSOR - Methode wird abwechselnd auf geraden und ungeraden Gitterpunkten iteriert. Durch diese even - odd Iterationstechnik erhöht sich die Konvergenzgeschwindigkeit des iterativen Teils (Oberhuber, 1990; Oberhuber, 1993). Eine ausreichende Konvergenz kann innerhalb von sechs Iterationen sichergestellt werden. Da bereits die erste Iteration deutlich näher an der endgültigen Lösung liegt als die explizit gewonnene Abschätzung, ist es möglich, die in Abbildung 2.2 skizzierte Iteration aller dynamischen Größen im Zeitschrittverfahren mit der Iteration der Matrixgleichung für eine einzelne Größe zu kombinieren. Zusätzlicher Rechenaufwand ergibt sich lediglich dadurch, daß die Matrixkoeffizienten durch die Iteration im Zeitschrittverfahren jedesmal neu berechnet werden müssen.

Modellzeitschritt

Damit Diskretisierungsfehler des Transportschemas klein bleiben, ist unabhängig von der Stabilität des impliziten Schemas die Einhaltung des Courant - Friedrichs - Lewy (CFL -) Kriteriums für die Transportgeschwindigkeiten notwendig (Mesinger und Arakawa, 1976). Die in Kapitel 4 diskutierten Simulationen wurden mit einer maximalen CFL - Zahl von 0,8 durchgeführt. In ruhigen Phasen der Simulation - z.B. während der Zeiten vor bzw. nach dem Ausbruch - kann ein größerer Zeitschritt verwendet werden, so daß erheblich Rechenzeit eingespart wird.

Randbedingungen

Die Geschwindigkeiten auf den Randpunkten werden nicht fest vorgegeben, sondern sie entsprechen den Geschwindigkeiten auf dem nächsten aktiven Geschwindigkeitspunkt in der Modellatmosphäre. Der Druck wird auf den seitlichen Rändern hydrostatisch berechnet und für den Oberrand des Modellgebietes festgehalten. Für den Transport von Temperatur und Tracern sind die seitlichen und der obere Rand offene Ränder. Die Konzentrationen bzw. Temperaturen im Modellgebiet werden

unter Berücksichtigung der Transportgeschwindigkeiten durch den Rand aus dem Modellgebiet transportiert.

Modellinitialisierung und Vulkanantrieb

ATHAM wird mit Vertikalprofilen für Horizontalwind, Temperatur und Feuchte initialisiert. Die anfängliche Druckverteilung wird unter der Annahme der hydrostatischen Approximation bestimmt. Da so beliebige meteorologische Hintergrundbedingungen für einen Vulkanausbruch verwendet werden können, läßt sich z.B. der Einfluß der Tropopausenhöhe auf das Simulationsergebnis bestimmen.

Der Vulkanausbruch wird durch die Angabe von Eruptionsgeschwindigkeit, Temperatur und Zusammensetzung des eruptierten Materials gesteuert. Die Zusammensetzung des Gemisches wird durch spezifische Konzentrationen für Silikatpartikel und Wasserdampf vorgeschrieben. Bei den durchgeführten Simulationen wurden zwei Klassen von Silikatpartikeln verwendet, die Asche und Lapilli genannt werden. Adieren sich die spezifischen Konzentrationen von Silikatpartikeln und Wasserdampf nicht zu eins, bedeutet dies, daß das Residuum aus trockener Luft besteht. Weiterhin müssen die turbulenten Eigenschaften des eruptierenden Gemisches vorgegeben werden, die in Kapitel 3 eingeführt werden und aus den Komponenten der turbulenten Energie und turbulenter Längenskala bestehen.

2.3 Die Mikrophysik

Der bei explosiven Vulkaneruptionen mit dem Plume vertikal transportierte Wasserdampf wird zum Teil direkt vom Vulkan emittiert - Wasserdampf ist der Hauptbestandteil der vulkanisch emittierten Gase (Coffey, 1996) - oder gelangt durch Einmischen von Umgebungsluft in den Plume (Murcray et al., 1981). Mikrophysikalische Prozesse haben Einfluß auf die Energetik des Plumes, die Sedimentation von Aschepartikeln und die Chemie bzw. den Verbleib anderer vulkanischer Gase, die in bisherigen Untersuchungen zumeist vernachlässigt wurden.

Die bei der Kondensation von Wasserdampf freigesetzte latente Wärme stellt Energie zur Verfügung, die zu einem zusätzlichen Auftrieb des Plumes führt (Woods, 1993; Glaze et al., 1997). Dem Plume kann wiederum Energie entzogen werden durch die Verdunstung der aus dem Wolkenwasser gebildeten Niederschläge in niedrigeren, wärmeren Atmosphärenschichten. Mikrophysikalische Prozesse bewirken daher eine Umverteilung von Energie. Nur wenn die Niederschläge den Boden erreichen, erfährt die Atmosphäre einen Nettogewinn an Energie aufgrund mikrophysikalischer Prozesse.

Durch Wechselwirkung von Aschepartikeln mit festen oder flüssigen Hydrometeoren werden einerseits Auswaschprozesse initiiert, andererseits können benetzte Aschepartikel Cluster - z.B. akkretionäre Lapilli - bilden, die deutlich größere Fallgeschwindigkeiten besitzen als die Ausgangspartikel (Sheridan und Wohletz, 1983; Rose et al., 1995). Mikrophysikalische Prozesse können daher einen wesentlichen Einfluß auf das Sedimentationsverhalten von Aschepartikeln und damit auf die gesamte Plumentwicklung haben. Eine erste qualitative Studie, die im Rahmen einer Diplomarbeit mit ATHAM durchgeführt wurde, bestätigt die potentielle Effektivität von Auswaschprozessen und Clusterbildung (Müller, 1997). Ein detaillierteres Modul zur Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Hydrometeoren und Aschepartikeln ist in Vorbereitung.

Durch das Einlösen von vulkanischen Gasen - interessant sind hierbei Schwefel- und Chlorverbindungen - können diese Gase je nach ihrer Löslichkeit sehr effektiv aus der Gasphase entfernt werden. Ein Vordringen dieser Gase in höhere Atmosphärenschichten wird gehemmt. In diesem Zusammenhang ist von besonderer Bedeutung, ob die gebildeten Hydrometeore in fester oder flüssiger Form vorliegen: Gefrieren flüssige Hydrometeore zu Eis, so sind die bereits eingelösten Gasmoleküle in ihnen zumindest teilweise gefangen, ein weiteres Einlösen ist praktisch nicht mehr möglich. Die Adsorption von Gasmolekülen an Silikat- bzw. Eisoberflächen kann zusätzlich vulkanische Gase aus der Gasphase entfernen.

Um einerseits die Umverteilung von Energie durch mikrophysikalische Prozesse zu erfassen und andererseits eine Basis bereitzustellen für die Modellierung von Auswaschprozessen von Partikeln und Lösungsvorgängen von Gasen, wurde für ATHAM ein mikrophysikalisches Modul entwickelt, das neben Kondensationsprozessen explizit die Niederschlagsbildung von festen bzw. flüssigen Hydrometeoren und deren Wechselwirkung beschreibt.

Dabei werden je zwei Formen fester und flüssiger Hydrometeore unterschieden: Wolkentropfen und Eispartikel sind monodispers, d.h. sie besitzen einen konstanten Radius. Ihre Fallgeschwindigkeiten sind gegenüber dem Gas vernachlässigbar gering. Die aus ihnen gebildeten Regentropfen und Graupel sind größenverteilt, ihre Fallgeschwindigkeiten können nicht vernachlässigt werden. Graupel besteht aus einer Mischung von Schnee und Hagel mit einer angenommenen Dichte von $\rho_h = 700 \text{ kg/m}^3$ (Laube und Höller, 1987). Im einzelnen werden folgende Prozesse durch die Mikrophysik in ATHAM berücksichtigt:

- Kondensation von Wasserdampf zur Neubildung von Wolkenwasser,
- Deposition von Wasserdampf zur Neubildung von Wolkeneis,
- Kondensation an bzw. Evaporation von
 - Wolkentropfen,
 - Regentropfen,
 - schmelzendem Graupel,
- Sublimation von bzw. Deposition an
 - Eiskristallen,
 - Graupel,
- Schmelzen bzw. Gefrieren von
 - Eiskristallen zu Wolkentropfen bzw. umgekehrt,
 - Graupel zu Regentropfen bzw. umgekehrt,
- Autokonversion von
 - Wolkentropfen zu Regentropfen,
 - Eiskristallen zu Graupel,
- Akkreszenz von
 - Wolken- durch Regentropfen,
 - Eiskristallen durch Graupel,
 - Wolkentropfen durch Graupel,
 - Eiskristallen durch Regentropfen,
 - Graupel und Regentropfen.

Die Parametrisierung der genannten Prozesse erfolgt auf der Grundlage der Arbeiten von Lin et al. (1983), Wisner et al. (1972) und Kessler (1969). Die gewählten Ansätze sind sogenannte Bulk Formulierungen: Sämtliche Prozesse werden vollständig durch die in einem Volumen vorhandenen Massen der einzelnen Hydrometeore bestimmt. Die Teilchenzahl oder die Momente der Größenverteilungen von Regen und Graupel - wie Mittelwert und Streuung - werden lediglich massenabhängig formuliert.

Es wird angenommen, daß für Regen und Graupel stationäre Verteilungen existieren, die unabhängig von der Vorgeschichte und den Bildungsprozessen sind. Für Regentropfen stellt dies eine sinnvolle Näherung dar: Aufgrund ihrer internen Dynamik - sie koagulieren, wachsen, werden instabil und zerplatzen wieder zu kleineren Tropfen - stellt sich massenabhängig im Laufe der Zeit ein stationärer Zustand ein. Für Graupelpartikel gilt dies nur eingeschränkt: Zwar können auch sie durch Aggregation wachsen und bei lockerem Zusammenhalt wieder zerfallen, kompakte Graupelpartikel können dagegen nahezu beliebige Größe erreichen, ohne instabil zu werden. Der Einfluß der Entwicklungsgeschichte auf die Größenverteilung von Graupel ist deutlich wichtiger als bei Regen, stationäre Verteilungen können nur eine grobe Näherung realer Verhältnisse sein. Alternative Ansätze, die auch die Eigenschaften von Verteilungen wie die Teilchenzahl prognostizieren, die dann im dynamischen Teil des Modells transportiert werden müssen, existieren zwar - z.B. (Lüpkes, 1991) - , jedoch wurde für ATHAM eine möglichst einfache Formulierung der Mikrophysik gewählt, um das Gesamtsystem aus Dynamik und Mikrophysik überschaubar zu halten.

Zur Berechnung der Wechselwirkungen zwischen den Hydrometeoren müssen unter anderem ihre stationären Fallgeschwindigkeiten bekannt sein. Darüberhinaus werden diese Fallgeschwindigkeiten zur Bestimmung der Geschwindigkeitsanomalien zwischen dem Gemisch und den einzelnen Komponenten des Systems im dynamischen Teil des Modells benötigt, wie in Kapitel 2.2 beschrieben wurde. Daher sollen zunächst die stationären Fallgeschwindigkeiten einschließlich derjenigen für Silikatpartikel angegeben werden, bevor die berücksichtigten mikrophysikalischen Prozesse beschrieben werden.

2.3.1 Bestimmung der stationären Fallgeschwindigkeiten

Da sich Wolkentropfen und Eispartikel dadurch auszeichnen, daß ihre Fallgeschwindigkeiten gegenüber dem Gas vernachlässigt werden können, müssen im Modell lediglich die Fallgeschwindigkeiten für Regentropfen, Hagel und Silikatpartikel berücksichtigt werden.

Für sehr kleine Partikel mit Radien kleiner etwa $50 \mu\text{m}$ läßt sich die Wechselwirkung zwischen Gas und Partikeln in guter Näherung durch die Stokesche Reibung beschreiben, bei der die Reibungskraft proportional zur Partikelgeschwindigkeit ist. Die stationäre Fallgeschwindigkeit w_1 ist dann proportional zum Quadrat des Partikelradius r_p (Rogers und Yau, 1989). Die Zunahme der Fallgeschwindigkeit mit abnehmender Gasdichte läßt sich über die freie Weglänge L nach Cunningham berücksichtigen (Linke und Baur, 1970):

$$w_1 = \frac{2}{9} \frac{\rho_p g}{\eta} r_p^2 \left(1 + \frac{L}{r_p} (0,864 + 0,29 e^{-1,25 \frac{r_p}{L}}) \right) \quad (2.19)$$

ρ_p bezeichnet die Partikeldichte, η die dynamische Viskosität des Gases. Die freie Weglänge L wird durch lineare Interpolation der US-Standard-Atmosphäre bestimmt (Weast et al., 1984).

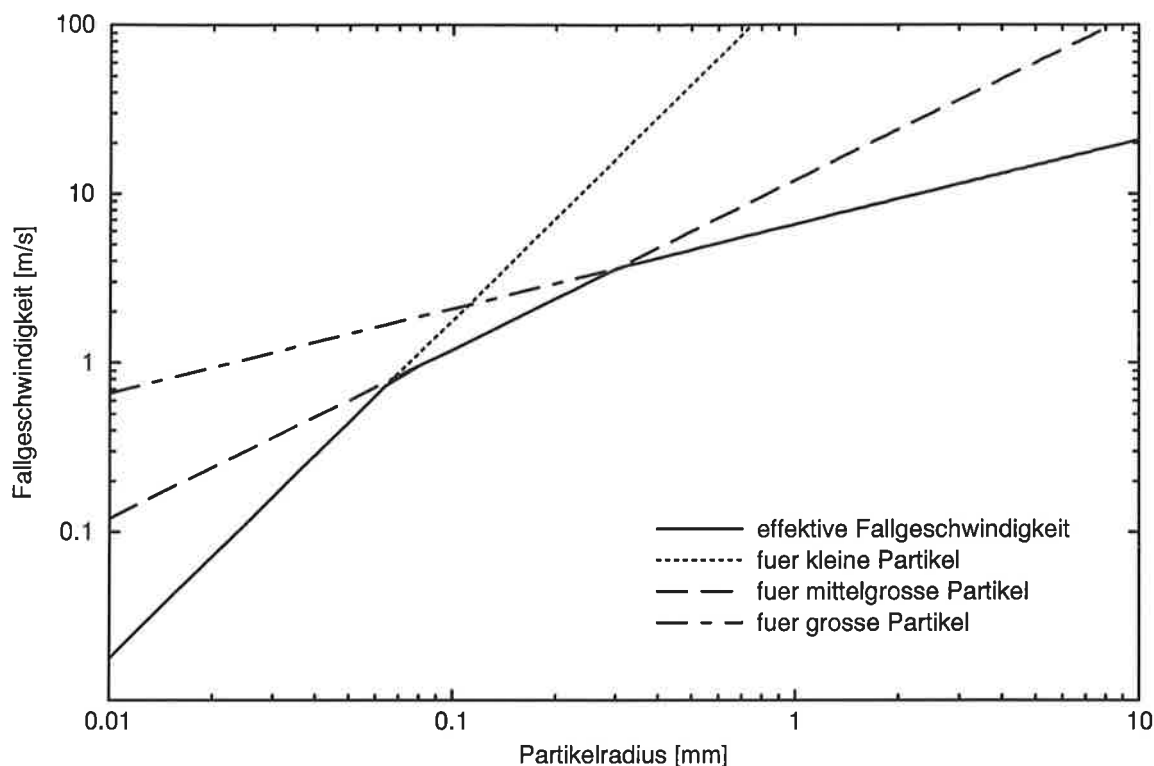


Abbildung 2.3: Stationäre Fallgeschwindigkeit für Silikatpartikel mit einer mittleren Dichte von $\rho_p = 1500 \text{ kg/m}^3$

Bei Partikeln, deren Radien größer etwa $500 \mu\text{m}$ sind, wirkt zwischen Partikel und Gas die Newtonsche Reibung, die proportional zum Quadrat der Partikelgeschwindigkeit ist. Die stationäre Fallgeschwindigkeit ist proportional zur Wurzel aus dem Partikelradius (Rogers und Yau, 1989):

$$w_3 = \sqrt{\frac{8}{3} \frac{\rho_p g}{C_D \rho_g}} \sqrt{r_p} \quad (2.20)$$

ρ_g bezeichnet die Gasdichte. Der sogenannte Drag Coefficient C_D ist in erster Näherung konstant und abhängig von der Rauigkeit der Partikeloberfläche. Für Wassertropfen ergibt sich die beste Übereinstimmung mit den von Gunn und Kinzer (1949) gemessenen Daten für $C_D = 0,54$, für Hagel gilt nach Wisner et al. (1972) $C_D \approx 0,6$. Für Silikatpartikel lassen sich mit $C_D \approx 0,75$ die von Walker et al. (1971) und Wilson und Huang (1979) gemessenen Fallgeschwindigkeiten gut reproduzieren (Carey und Sparks, 1986).

Der Zwischenbereich mit Partikelradien zwischen $50 \mu\text{m}$ und $500 \mu\text{m}$ wird durch einen linearen Ansatz zwischen stationärer Fallgeschwindigkeit und Partikelradius erfaßt (Rogers und Yau, 1989):

$$w_2 = k_2 \rho_p \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_g}} r_p \quad (2.21)$$

$k_2 = 8 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ist eine empirische Konstante, $\rho_0 = 1,12 \text{ kg/m}^3$ bezeichnet die Referenzgasdichte.

Die Unterscheidung, welche der drei Werte für die stationäre Fallgeschwindigkeit genommen werden muß, braucht im Modell nicht in Abhängigkeit der Partikelgröße entschieden zu werden, sondern ergibt sich durch Minimumsbildung, wie Abbildung 2.3 exemplarisch für Silikatpartikel mit $\rho_p = 1500 \text{ kg/m}^3$ verdeutlicht. Für die stationäre Fallgeschwindigkeit w_p eines Partikels in Luft, gilt daher:

$$w_p = \text{Min}(w_1, w_2, w_3)$$

Die stationären Fallgeschwindigkeiten von Regentropfen, Hagel und Silikatpartikeln ergeben sich durch Verwendung der entsprechenden Werte für Partikeldichte, -größe und Drag Coefficient. Bei der Berechnung mikrophysikalischer Umwandlungen, an denen Regentropfen bzw. Hagelkörner beteiligt sind, wird im folgenden lediglich Gleichung (2.20) verwendet, da die Umwandlungsraten von den großen Partikeln der jeweiligen Größenverteilung dominiert werden und die sich ergebenden Änderungen in den Umwandlungsraten gering sind.

2.3.2 Kondensation und Evaporation

Die Massenänderung eines Wassertropfens durch Kondensation oder Evaporation unter Berücksichtigung von Beiträgen durch Wärmeleitung und Wasserdampfdiffusion lautet (Byers, 1965):

$$\frac{\partial}{\partial t} m_w = 4\pi r f_v \frac{S_w - 1}{F_k + F_d} \quad (2.22)$$

m_w bezeichnet die Masse des betrachteten Tropfens mit dem Radius r . f_v ist der Ventilationskoeffizient, der von der Reynolds Zahl abhängt und den Einfluß der Turbulenz durch die Strömung um den fallenden Tropfen beschreibt. S_w ist das Sättigungsmischungsverhältnis über Wasser:

$$S_w = \frac{q_v}{q_{sat}} \quad ,$$

wobei q_v die spezifische Wasserdampfkonzentration und q_{sat} die Wasserdampfkonzentration bei Sättigung bezeichnen. F_k beschreibt den Beitrag durch Wärmeleitung:

$$F_k = \left(\frac{L_v}{R_v T} - 1 \right) \frac{L_v}{K_a T} \quad ,$$

wobei L_v die Verdampfungsenthalpie, R_v die spezifische Gaskonstante für Wasserdampf und K_a die thermische Leitfähigkeit von Luft bezeichnen. F_d beschreibt den Beitrag durch Wasserdampfdiffusion:

$$F_d = \frac{R_v T}{P_s D_v} \quad ,$$

wobei P_s den Sättigungsdampfdruck über Wasser und D_v den Diffusionskoeffizienten für Wasserdampf bezeichnen.

Da Wolkentropfen monodispers sind und der Ventilationskoeffizient für Wolkentropfen aufgrund der vernachlässigbaren Fallgeschwindigkeit eins ist, ergibt sich für die Kondensation an bzw. Evaporation von Wolkentropfen:

$$KonC = 4\pi \frac{q_g}{\rho_g} N_c r_c \frac{S_w - 1}{F_k + F_d} \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_c = +KonC$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_v = -KonC$$

wobei q_c die spezifische Wolkenwasserkonzentration bezeichnet, q_v die Wasserdampfkonzentration, q_g die Gaskonzentration, ρ_g die Gasdichte, N_c die Zahl der Wolkentropfen pro Gasvolumen und r_c den Radius der Wolkentropfen.

Für Regentropfen wird die Marshall - Palmer Verteilung angenommen (Marshall und Palmer, 1948), nach der für die Tropfenzahl pro Gasvolumen $N_r(r)$ in einem Radiusintervall dr gilt:

$$N_r(r) dr = N_{0,r} e^{-2\lambda_r r} dr \quad (2.24)$$

$$\text{mit } \lambda_r = \left(\pi \frac{q_g \rho_w}{\rho_g q_r} N_{0,r} \right)^{1/4} \quad \text{und } N_{0,r} = 10^7 m^{-4}$$

ρ_w bezeichnet die Dichte von Wasser, q_r die spezifische Regenwasserkonzentration. Für den Ventilationskoeffizienten von Regentropfen gilt (Wisner et al., 1972):

$$f_{v,r} = 1 + 0,22 Re_r^{1/2} \quad (2.25)$$

$$\text{mit } Re_r = \frac{2w_r r_r}{\nu} \quad \text{und } w_r = a_r \sqrt{r_r \frac{\rho_0}{\rho_g}} \quad (2.26)$$

Re_r bezeichnet die Reynolds Zahl, r_r den Radius, w_r die Fallgeschwindigkeit der Regentropfen, wobei ρ_0 die Referenzgasdichte, ν die kinematische Viskosität von Luft ist. Nach Gleichung (2.20) ist $a_r = 201\sqrt{m}/s$. Durch Integration über die Größenverteilung der Regentropfen erhält man für die Kondensation an bzw. Evaporation von Regentropfen mit der Gamma - Funktion Γ (Bronstein und Semendjajew, 1989):

$$KonR = 2\pi \frac{q_g}{\rho_g} N_{0,r} \frac{S_w - 1}{F_k + F_d} \left(\lambda_r^{-2} + 0,22 \Gamma(2,75) \sqrt{\frac{a_r}{\nu}} \left(\frac{\rho_0}{\rho_g} \right)^{1/4} \lambda_r^{-2,75} \right) \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_r = +KonR$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_v = -KonR$$

Kondensation und Evaporation finden nicht nur bei Wolken und Regen statt, sondern auch bei schmelzendem Graupel. Im Gegensatz zu Wolkeneis kann Graupel auch für längere Zeit bei Temperaturen oberhalb des Gefrierpunkts existieren. Da Graupel dann von einer dünnen Wasserhaut umgeben ist, findet der Übergang in die Gasphase nicht durch Sublimation, sondern durch Evaporation bzw. Kondensation statt. Für schmelzenden Graupel erhält man einen zu (2.27) analogen Ausdruck, wenn man für die Größenverteilung, den Ventilationskoeffizienten und die Fallgeschwindigkeit die entsprechenden Ausdrücke für Graupel einsetzt. Die von Federer und Waldvogel (1975) aus der Beobachtung von Gewittern für Hagel abgeleitete Größenverteilung wird im folgenden auch für Graupel verwendet:

$$N_h(r) dr = N_{0,h} e^{-2\lambda_h r} dr \quad (2.28)$$

$$\text{mit } \lambda_h = \left(\pi \frac{q_g \rho_h}{\rho_g q_h} N_{0,h} \right)^{1/4} \quad \text{und } N_{0,h} = 1,21 \cdot 10^4 m^{-4}$$

ρ_h bezeichnet die Dichte des Graupels, q_h seine spezifische Konzentration. Der Ventilationskoeffizient für Graupel läßt sich nach Wisner et al. (1972) schreiben als:

$$f_{v,h} = 1,6 + 0,3 Re_h^{1/2} \quad (2.29)$$

$$\text{mit } Re_h = \frac{2w_h r_h}{\nu} \quad \text{und } w_h = a_h \sqrt{r_h \frac{\rho_0}{\rho_g}} \quad (2.30)$$

r_h bezeichnet den Radius, w_h die Fallgeschwindigkeit des Graupel, $a_h = 174,7 \sqrt{m}/s$ nach Gleichung (2.20). Gleichung (2.22) liefert nach Integration über die Größenverteilung für die Kondensation an bzw. Evaporation von schmelzendem Graupel:

$$KonH = 2\pi \frac{q_g}{\rho_g} N_{0,h} \frac{S_w - 1}{F_k + F_d} \quad (2.31)$$

$$(1,6 \lambda_h^{-2} + 0,3 \Gamma(2,75) \sqrt{\frac{a_h}{\nu}} \left(\frac{\rho_0}{\rho_g} \right)^{1/4} \lambda_h^{-2,75})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_h = +KonH$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_v = -KonH$$

Die bisher beschriebenen Kondensationsprozesse finden nur an bereits existierenden Hydrometeoren statt. Die Neubildung von Wolkentropfen durch Kondensation an Aerosolteilchen - meist im Submikrometerbereich - muß als zusätzlicher Prozeß im Modell berücksichtigt werden. Da in der Atmosphäre stets genügend Kondensationskeime vorhanden sind, werden lediglich geringfügige Übersättigungen in wolkenfreien Gebieten beobachtet. In Wolken treten praktisch keine Übersättigungen auf. Die Zahl der Kondensationskeime beeinflusst lediglich die Größe der entstehenden Wolkentropfen. In der verwendeten Mikrophysik wird die Größe der Wolkentropfen

mit $r_c = 10 \mu\text{m}$ fest vorgegeben. Daher kann bei der Kondensation von Wasserdampf zu Wolkentropfen davon ausgegangen werden, daß die gesamte vorhandene Übersättigung innerhalb eines Zeitschritts Δt zur Neubildung von Wolkenwasser führt:

$$KonN = \frac{q_v - q_{sat}}{\Delta t} \quad \text{für } q_v > q_{sat} \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_c = +KonN$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_v = -KonN$$

Bei der modellmäßigen Umsetzung der Kondensationsprozesse ist dafür Sorge zu tragen, daß insgesamt nicht mehr verdunstet bzw. kondensiert als dies der Über- bzw. Untersättigung entspricht. In diese Bilanzierung des Wasserdampfs müssen Sublimations- und Depositionsprozesse auf festen Hydrometeoren einbezogen werden.

2.3.3 Sublimation und Deposition

Der Übergang von Wasser aus der festen Phase in die Gasphase oder umgekehrt ist nur möglich bei Temperaturen unter dem Gefrierpunkt. Oberhalb des Gefrierpunkts existiert kein Wolkeneis und schmelzender Graupel ist von einer Wasserhaut umgeben. Die Massenänderung eines Eisteilchens durch Sublimation bzw. Deposition wird formal durch den gleichen Ausdruck (2.22) beschrieben wie die Kondensation bzw. Evaporation eines Wassertropfens:

$$\frac{\partial}{\partial t} m_s = 4\pi f_v \frac{S_s - 1}{F'_k + F'_d} \quad (2.33)$$

Statt des Mischungsverhältnisses über Wasser S_w muß das über Eis S_s verwendet werden. Die Verdampfungsenthalpie L_v ist durch die Sublimationsenthalpie L_s zu ersetzen, der Sättigungsdampfdruck P_s über Wasser durch den über Eis P'_s :

$$S_s = \frac{q_v}{q'_{sat}}$$

$$F'_k = \left(\frac{L_s}{R_v T} - 1 \right) \frac{L_s}{K_a T}$$

$$F'_d = \frac{R_v T}{P'_s D_v}$$

Für Eiskristalle mit konstantem Radius r_i ergibt sich somit für Sublimation bzw. Deposition:

$$SubI = 1,6 \cdot 4\pi \frac{q_g}{\rho_g} N_i r_i \frac{S_s - 1}{F'_k + F'_d} \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_i = +SubI$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_v = -SubI$$

q_i ist dabei die spezifische Konzentration von Wolkeneis, N_i die Zahl der Eiskristalle pro Gasvolumen. Der Ventilationskoeffizient für Eiskristalle ist wegen (2.29) und der vernachlässigbaren Fallgeschwindigkeit $f_{v,i} = 1,6$. Im Gegensatz zu Wolkentropfen ist der Ventilationskoeffizient für Eiskristalle größer als eins, da die effektive Oberfläche der Eiskristalle aufgrund der Oberflächenstruktur größer als die geometrische Oberfläche einer gleichgroßen Kugel ist.

Mit der für Graupel bereits angegebenen Größenverteilung (2.28) und dem Ventilationskoeffizienten (2.29) erhält man aus (2.33) durch Integration über die Verteilung für die Deposition an bzw. Sublimation von Graupel:

$$SubH = 2\pi \frac{q_g}{\rho_g} N_{0,h} \frac{S_s - 1}{F'_k + F'_d} (1,6 \lambda_h^{-2} + 0,3 \Gamma(2,75)) \sqrt{\frac{a_h}{\nu}} \left(\frac{\rho_0}{\rho_g}\right)^{1/4} \lambda_h^{-2,75} \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_h = +SubH$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_v = -SubH$$

Bei Temperaturen unter dem Gefrierpunkt T_0 können Eiskristalle auch aus der Gasphase neu gebildet werden. Im Gegensatz zur Bildung von Wolkenwasser ist die Entstehung von Eiskristallen aus der Gasphase durch die Zahl der vorhandenen Gefrierkeime limitiert. Die Zahl der effektiv vorhandenen Gefrierkeime N_f ist temperaturabhängig und läßt sich nach Fletcher (1962) unter normalen, d.h. weitgehend unverschmutzten atmosphärischen Bedingungen beschreiben durch

$$N_f = N_{0,f} e^{\beta(T_0 - T)}$$

$$\text{mit } \beta = 0,6 K^{-1} \quad \text{und } N_{0,f} = 10^{-2} m^{-3}$$

Unter der Annahme, daß diese Anzahl von Gefrierkeimen mindestens vorhanden ist und ein Eiskristall die Masse m_i besitzt, ergibt sich für die Neubildung von Eiskristallen durch Sublimation an Gefrierkeimen (Stephens, 1979; Rutledge und Hobbs, 1983):

$$SubN = \frac{q_g}{\rho_g} \frac{m_i N_f}{\Delta t} \quad \text{mit } m_i = 10^{-12} kg$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_i = +SubN$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_v = -SubN$$

Aufgrund der Temperaturabhängigkeit dieses Prozesses findet die Neubildung von Eiskristallen nur bei sehr niedrigen Temperaturen in nennenswertem Umfang statt und verhindert dort, daß große Übersättigung gegenüber Eis entstehen, während die Atmosphäre gegenüber Wasser untersättigt ist.

2.3.4 Autokonversion

Wolkentropfen können durch Koagulation größere Tropfen bilden. Diesen Prozeß bezeichnet man als Autokonversion. Er ist auch möglich für Eiskristalle, die durch Aggregation zu Graupel anwachsen.

Ein einfacher Ansatz zur Parametrisierung der Autokonversion stammt von Kessler (1969), wonach Autokonversion oberhalb einer minimalen Konzentration einsetzt und linear mit dieser Konzentration ansteigt. Für Autokonversion von Wolken- zu Regenwasser erhält man:

$$AutC = k_c \left(q_c - \frac{q_g}{\rho_g} a_c \right) \quad \text{mit} \quad k_c = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

$$a_c = 5 \cdot 10^{-4} \text{ kg/m}^3$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_r = +AutC$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_c = -AutC$$

Die Autokonversion von Wolkeneis zu Graupel ist zusätzlich temperaturabhängig: Sie findet nur bei Temperaturen unterhalb des Gefrierpunkts T_0 statt und wird mit weiter abnehmender Temperatur immer unwahrscheinlicher (Lin et al., 1983):

$$AutI = k_i \left(q_i - \frac{q_g}{\rho_g} a_i \right) \quad \text{mit} \quad k_i = 10^{-3} e^{0,025(T-T_0)} \text{ s}^{-1}$$

$$a_i = 10^{-3} \text{ kg/m}^3$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_h = +AutI$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_i = -AutI$$

2.3.5 Akkreszenz

Regentropfen bzw. Graupelkörner können dadurch wachsen, daß sie aufgrund ihrer Fallgeschwindigkeit andere Hydrometeore aufsammeln. Bei der Akkreszenz von

Wolken durch Regen können Fallgeschwindigkeit und Radius der Wolkentropfen gegenüber den entsprechenden Größen der Regentropfen vernachlässigt werden. Ein Regentropfen ist in der Lage, pro Zeiteinheit alle Wolkentropfen, die sich in dem Zylinder befinden, der durch das Produkt aus Querschnitt und Fallgeschwindigkeit des Regentropfens gegeben ist, mit einer Wahrscheinlichkeit E_{rc} aufzusammeln. Durch Integration über die Größenverteilung der Regentropfen und mit $E_{rc} = 1$ erhält man für die Akkreszenz von Wolkentropfen durch Regentropfen:

$$\begin{aligned}
 AccRC &= \int_0^{\infty} E_{rc} q_c \pi r^2 w_r(r) N_r(r) dr \\
 &= \frac{\pi}{4} N_{0,r} a_r \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_g}} \Gamma(3,5) \lambda_r^{-3,5} q_c \\
 \frac{\partial}{\partial t} q_r &= +AccRC \\
 \frac{\partial}{\partial t} q_c &= -AccRC
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

Die Fallgeschwindigkeit w_r bzw. die Größenverteilung $N_r(r)$ der Regentropfen entsprechen denen aus Gleichung (2.26) bzw. (2.24).

Durch einen analogen Ansatz erhält man die Akkreszenz von Eiskristallen durch Graupel, wobei für die Größenverteilung bzw. die Fallgeschwindigkeit von Graupel die Gleichungen (2.30) bzw. (2.28) verwendet werden. Die Temperaturabhängigkeit der Anhaftwahrscheinlichkeit E_{hi} folgt dem Ansatz von Lin et al. (1983).

$$\begin{aligned}
 AccHI &= \frac{\pi}{4} E_{hi} N_{0,h} a_h \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_g}} \Gamma(3,5) \lambda_h^{-3,5} q_i \\
 \text{mit } E_{hi} &= e^{0,05(T-T_0)} \\
 \frac{\partial}{\partial t} q_h &= +AccHI \\
 \frac{\partial}{\partial t} q_i &= -AccHI
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

Bei der Akkreszenz von Wolkentropfen durch Graupel kommt es bei Temperaturen unter dem Gefrierpunkt zum Gefrieren der Wolkentropfen. Es entsteht zusätzlich Graupel. Bei Temperaturen über dem Gefrierpunkt bewirkt das Zusammentreffen von Wolkentropfen und Graupel eine Erwärmung des Graupels. Der damit verbundene Schmelzprozeß wird im nächsten Abschnitt berücksichtigt. Das akkretionierte Wolkenwasser und der geschmolzene Graupel bilden neues Regenwasser. Durch einen zu Gleichung (2.37) analogen Ansatz erhält man mit einer Anhaftwahrscheinlichkeit von $E_{hc} = 1$ für die Akkreszenz von Wolkenwasser durch Graupel:

$$AccHC = \frac{\pi}{4} N_{0,h} a_h \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_g}} \Gamma(3,5) \lambda_h^{-3,5} q_c \tag{2.38}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_c = -AccHC$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_h = +AccHC \quad \text{für } T < T_0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_r = +AccHC \quad \text{für } T > T_0$$

Ein zusätzliches Problem tritt bei der Akkretion von Eiskristallen durch Regen auf. Da Wolkeneis nur bei Temperaturen unter dem Gefrierpunkt existiert, führt dieser Prozeß zum Gefrieren des unterkühlten Regenwassers. Es wird Graupel gebildet. Akkreszenz von Eiskristallen durch Regen führt zu einer Abnahme sowohl beim Wolkeneis als auch beim Regen. Die Änderung des Wolkeneises kann durch einen zu Gleichungen (2.36) analogen Ausdruck abgeschätzt werden, die Änderung des Regenwassers wird unter der Annahme bestimmt, daß jedes eingefangene Eiskristall maximal einen Regentropfen gefrieren läßt:

$$AccRI_i = \frac{\pi}{4} N_{0,r} a_r \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_g}} \Gamma(3,5) \lambda_r^{-3,5} q_i \quad (2.39)$$

$$AccRI_r = q_r \text{Min} \left(\frac{1}{N_r} \frac{\partial}{\partial t} N_i, 1 \right) = q_r \text{Min} \left(\frac{2 \lambda_r}{N_{0,r}} \frac{3}{4 \pi r_c^3} AccRI_i, 1 \right) \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_h = +AccRI_i + AccRI_r$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_i = -AccRI_i$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_r = -AccRI_r$$

Der letzte mögliche Akkreszenzprozeß entsteht durch unterschiedliche Fallgeschwindigkeiten von Graupel und Regen. Für Temperaturen unter dem Gefrierpunkt bildet der akkretionierte Regen Graupel, während er bei Temperaturen über dem Gefrierpunkt durch die übertragene Wärme zum Schmelzen des Graupel beiträgt und als Regen erhalten bleibt. Da Graupel und Regen ähnliche Größen und Fallgeschwindigkeiten aufweisen, muß bei der Akkreszenz von Regen und Graupel ein Doppelintegral über beide Verteilungen gelöst werden, um den akkretionierten Regen zu erhalten:

$$AccHR = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} E_{rh} \frac{4}{3} \pi^2 r_r^3 \rho_w \frac{q_g}{\rho_g} (r_r + r_h)^2 |w_r(r_r) - w_h(r_h)| N_h(r_h) dr_h N_r(r_r) dr_r$$

Aufgrund des Betrages aus der Differenz der Fallgeschwindigkeiten kann dieses Doppelintegral nicht ohne weiteres analytisch gelöst werden. Das ändert sich, wenn man annimmt, daß die Differenz der Fallgeschwindigkeiten im Mittel durch die Differenz der Fallgeschwindigkeiten gegeben ist, die sich bei Verwendung der massengewichteten Radien für Graupel und Regen ergibt. Die Differenz der Fallgeschwindigkeiten

kann dann vor das Integral gezogen werden, man erhält mit $E_{rh} = 1$:

$$AccHR = \pi^2 \rho_w \frac{q_g}{\rho_g} N_{0,r} N_{0,h} |w_r(\bar{r}_r) - w_h(\bar{r}_h)| \left(\frac{5}{\lambda_r^6 \lambda_h} + \frac{2}{\lambda_r^5 \lambda_h^2} + \frac{0,5}{\lambda_r^4 \lambda_h^3} \right) \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_h = +AccHR \quad \text{für } T < T_0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_r = -AccHR \quad \text{für } T < T_0$$

2.3.6 Schmelzen und Gefrieren

Bei Wolkeneis wird davon ausgegangen, daß es bei Temperaturen oberhalb des Gefrierpunkts instantan innerhalb eines Zeitschritts Δt zu Wolkenwasser schmilzt:

$$MelI = \frac{q_i}{\Delta t} \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_c = +MelI$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_i = -MelI$$

Berücksichtigt man beim Schmelzen von Graupel die zu- bzw. abgeführte Wärme durch Temperatur- und Wasserdampfdiffusion, sowie durch akkretioniertes Wolken- und Regenwasser, so erhält man (Wisner et al., 1972):

$$MelH = \frac{q_g}{\rho_g} N_{0,h} \frac{2\pi}{L_f} (K_a (T - T_0) + L_v D_v (q_v - q_{sat}) q_g) \quad (2.43)$$

$$(1,6 \lambda_h^{-2} + 0,3 \Gamma(2,75) \sqrt{\frac{\alpha_h}{\nu}} \left(\frac{\rho_0}{\rho_g} \right)^{1/4} \lambda_h^{-2,75})$$

$$- \frac{c_{p,w}}{L_f} (T - T_0) (AccHC + AccHR)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_r = +MelH$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_h = -MelH$$

L_f bezeichnet die Schmelzenthalpie, $c_{p,w}$ die spezifische Wärmekapazität von Wasser.

Wolken- bzw. Regenwasser können nicht nur durch Kontakt mit Eiskristallen oder Graupel gefrieren, sondern auch durch temperaturabhängiges statistisches Gefrieren von unterkühltem Wolken- bzw. Regenwasser. Nach Bigg (1953) und Barklie (1959) läßt sich die Wahrscheinlichkeit P des Gefrierens eines unterkühlten Tropfens mit dem Radius r beschreiben durch:

$$\ln(1 - P) = -\frac{4}{3} \pi r^3 B (e^{A(T_0 - T)} - 1)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } A &= 0,66 K^{-1} \\ B &= 100 m^{-3} s^{-1} \end{aligned}$$

Für das statistische Gefrieren von Wolkenwasser erhält man somit (Wisner et al., 1972):

$$FreC = \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)^2 \rho_w N_c \frac{\rho_0}{\rho_g} B' \left(e^{A'(T_0-T)} - 1\right) \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_i = +FreC$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_c = -FreC$$

Für das statistische Gefrieren von Regenwasser liefert die Integration über die Größenverteilung:

$$FreR = 20 \pi^2 \rho_w N_{0,r} \lambda_r^{-7} \frac{\rho_0}{\rho_g} B' \left(e^{A'(T_0-T)} - 1\right) \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_h = +FreR$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q_r = -FreR$$

2.3.7 Thermodynamischer Effekt der Phasenübergänge

Alle mikrophysikalischen Prozesse, bei denen ein Phasentransfer erfolgt, sind mit einer Freisetzung bzw. einem Verbrauch an thermischer Energie verbunden. Für die Änderung der potentiellen Temperatur des Partikel-Gas Gemisches erhält man aufgrund der in den vorherigen Abschnitten diskutierten Prozesse:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Theta &= \frac{L_v}{c_p} (KonN + KonC + KonR) \\ &+ \frac{L_s}{c_p} (SubN + SubI + SubH) \\ &+ \frac{L_f}{c_p} (AccHC + AccRI_r + AccHR(T < T_0) \\ &\quad - MelI - MelH + FreC + FreR) \end{aligned} \quad (2.46)$$

Kapitel 3

Die Modellierung turbulenter Austauschprozesse

In der Atmosphäre werden dynamische Prozesse selbst bei geringen Windgeschwindigkeiten durch Turbulenz beeinflusst. Die viskosen Kräfte sind i.a. nicht in der Lage, die durch Scherkräfte entstehenden turbulenten Anteile in der Bewegung zu dämpfen. Die laminare Strömung als Gegenstück zur turbulenten Bewegung ist in atmosphärischen Problemen die Ausnahme.

Ein Maß für das Auftreten von Turbulenz ist die Reynolds Zahl, der Quotient aus Massenkräften und viskosen Kräften. Oberhalb einer kritischen Reynolds Zahl, die in der Größenordnung von tausend liegt und vom betrachteten Strömungstyp abhängt, setzt Turbulenz ein. Die Wirkung von Turbulenz hat dissipativen Charakter und ist mit der molekularen Diffusion vergleichbar. Jedoch sind die mit dem turbulenten Anteil verbundenen Umwandlungsraten häufig um Größenordnungen höher.

Im folgenden soll ein Turbulenzkonzept vorgestellt werden, das der endlichen räumlichen Auflösung des Plummmodells ATHAM Rechnung trägt. Der Einfluß der nicht aufgelösten Bewegungsanteile - im weiteren mit turbulente Anteile der Bewegung bezeichnet - auf die mittlere, vom Modell simulierte Strömung muß parametrisiert werden.

3.1 Bedeutung von Turbulenz für die Plumeentwicklung

Der Plume einer plinianischen Eruption läßt sich grob in zwei Bereiche unterteilen: Die Schub- bzw. Jetregion direkt über dem Krater ist gekennzeichnet durch den Verbrauch des anfänglichen Impulses und geringen Einfluß von Turbulenz. Die sich anschließende Auftriebsregion ist durch positive Auftriebskräfte und turbulente Anteile in der Bewegung charakterisiert.

Die Dichte des am Krater emittierten heißen Partikel-Gas Gemisches ist größer

als die der umgebenden Atmosphäre. Eine positive Auftriebskraft kann sich daher nicht ohne eine Verdünnung dieses Gemisches entwickeln. Sowohl die Sedimentation von Partikeln als auch das Einmischen von Umgebungsluft können die notwendige Verdünnung bewirken. Bei plinianischen Eruptionen ist die Sedimentation zu Beginn der Eruption kein effektiver Mechanismus zur Verdünnung des Gemisches, da der überwiegende Teil der Partikel Fallgeschwindigkeiten besitzt, die gegenüber der Eruptionsgeschwindigkeit vernachlässigbar sind. Das Einmischen von Umgebungsluft bestimmt daher den Übergang zwischen Schub- und Auftriebsregion und entscheidet darüber, ob der Plume kollabiert, d.h. vollständig oder teilweise zusammenbricht, oder eine großskalige Eruptionswolke entsteht. Da turbulente Prozesse für das Einmischen von Umgebungsluft verantwortlich sind, ist Turbulenz der kritische Parameter, der nicht nur die Höhe des entstehenden Plumes, sondern auch im Falle des Kollabierens das zeitliche Verhalten der entstehenden Glutlawine bestimmt. Aus dieser Glutlawine - auch pyroklastischer Fluß genannt, deren Ablagerungen Ignimbrit bezeichnet werden - kann sich bei ausreichender Verdünnung des Partikel-Gas Gemisches eine coignimbrite Eruption entwickeln. Pyroklastische Flüsse sind bei ihrer Entstehung zunächst relativ stabil, da die bei ihnen vorhandene stabile Schichtung Turbulenz und damit das Einmischen von Umgebungsluft unterdrückt.

Neben der Dynamik werden auch mikrophysikalische Prozesse durch Turbulenz maßgeblich bestimmt. Ein beträchtlicher Teil des im Plume befindlichen Wasserdampfes gelangt durch Einmischen von Umgebungsluft in den Plume. Die Kondensation von Wasserdampf bestimmt eine Vielzahl von Prozessen: Die bei der Kondensation freiwerdende latente Wärme bewirkt einen verstärkten positiven Auftrieb des Plumes. Wolkenwasser und Niederschlag können Auswaschungsprozesse von Aschepartikeln und vulkanischen Gasen in Gang setzen, die ganz wesentlich für deren Aufenthaltsdauer in der Atmosphäre sind.

Die Beschreibung von Turbulenz ist daher zwingend notwendig, um die Dynamik und Mikrophysik einer vulkanischen Eruptionswolke simulieren zu können. Wegen der beschränkten räumlichen Auflösung können turbulente Prozesse im Modell nicht explizit dargestellt werden. Um die Lücke zwischen aufgelösten und subskaligen, turbulenten Prozessen zu schließen, werden Wirkungen subskaliger Prozesse durch Eigenschaften der aufgelösten, mittleren Strömung angenähert. Die so abgeschätzten turbulenten Prozesse wirken dann zurück auf die zeitliche Entwicklung der mittleren Strömung.

3.2 Theorie der universellen Gleichheit der Turbulenz

Je nach ihrer Quelle unterscheidet man zwei Formen von Turbulenz: Scherungsturbulenz entsteht auf Kosten der kinetischen Energie der mittleren Strömung, konvektive Turbulenz auf Kosten thermischer bzw. potentieller Energie. Die dabei in größeren Wirbeln und Turbulenzelementen entstehende turbulente Energie verteilt

sich dabei, einer Energiekaskade folgend, auf immer kleiner werdende Wirbel. Nach der Hypothese der universellen Gleichheit der Turbulenz nach Kolmogorov (1941) wird im Bereich dieser Energiekaskade, dem sogenannten Inertial Subrange, turbulente Energie weder produziert noch dissipiert. Die von Kolmogorov aufgrund von Dimensionsüberlegungen abgeleitete Form des Energiespektrums im Inertial Subrange gilt wegen der postulierten lokalen Isotropie der Turbulenz sowohl für vertikale als auch für horizontale Fluktuationen. Vernichtet wird turbulente Energie durch viskose Reibung auf sehr kleinen Größenskalen.

Obwohl empirische Befunde für eine weitreichende Gültigkeit sprechen, sind die Hypothesen Kolmogorovs und ihre Folgen nicht unumstritten (Lumley, 1964). In Problemstellungen, bei denen Schichtungsstabilität einen wesentlichen Einfluß auf die Entwicklung von Turbulenz hat, ist die vertikale Raumrichtung gegenüber den horizontalen ausgezeichnet. Von einer isotropen Entwicklung turbulenter Größen kann nicht ausgegangen werden. Erst wenn ein Gleichgewicht turbulenter Größen erreicht ist, ist die Annahme lokaler Isotropie eine vernünftige Näherung. Die physikalischen Zeitskalen des betrachteten Problems müssen daher größer sein als die der Turbulenz. Anschaulich bedeutet dies, daß sich die Bedingungen, unter denen sich Turbulenz entwickelt, nicht schneller ändern dürfen, als sich die turbulenten Größen diesen Bedingungen anpassen können.

Eine weitere Eigenschaft des von Kolmogorov postulierten Inertial Subrange ist, daß Energie nur von größeren zu kleineren Skalen transportiert wird. Eine inverse Energiekaskade gibt es unter diesen Annahmen nicht. Theoretische und experimentelle Befunde deuten jedoch darauf hin, daß eine solche Wechselwirkung eine Rolle spielen kann.

So stellt Hasselmann (1976) bei der Untersuchung der Klimavariabilität mit Hilfe stochastischer Modelle fest, daß langsame Klimaänderungen als integrale Reaktion auf eine kontinuierliche Anregung durch zufällige, kurzfristige (Wetter-) Schwankungen erklärt werden können. Die in einfachen linearen Theorien ausgeschlossene Wechselwirkung einer Anregungsfrequenz auf andere Frequenzbereiche führt dazu, daß ein weißes Anregungsspektrum ohne Bevorzugung bestimmter Frequenzen ein rotes Spektrum mit einer Bevorzugung niedriger Frequenzen anregen kann. Ein typisches Beispiel ist die Ozean - Atmosphären Wechselwirkung, bei der kurzperiodische Schwankungen in der Atmosphäre längerperiodische Änderungen in der Ozeanzirkulation induzieren (Frankignoul und Hasselmann, 1977).

Aber auch in räumlich und zeitlich kleineren Bereichen läßt sich der Einfluß kleinerer Skalen auf größere beobachten. Die Isotropieannahme geht in Analogie zur molekularen Diffusion davon aus, daß turbulente Bewegungen ungeordnet erfolgen. Dies führt dazu, daß der Gradientenansatz in Strömungen mit ausgeprägter Ordnungsstruktur keine adäquate Beschreibung erlaubt. Ein Beispiel hierfür sind Strömungen mit Helizität, d.h. einem bevorzugten Schraubensinn, wie bei tropischen Zyklonen. Mit dem Gradientenansatz kann die Erhaltungstendenz derartiger Rotationsstrukturen nicht erklärt werden (Lilly, 1983). Die Existenz turbulenter Helizität ist verbunden mit einer Behinderung des Energietransfers zu kleineren Skalen (Kraichnan, 1973), dabei

kann kinetische Energie auch von kleineren zu größeren Skalen transportiert werden (Andre und Lesieur, 1977; Levich und Tzvetkov, 1985). Es scheint daher naheliegend, die Helizität als weitere, die Turbulenz charakterisierende Größe in die Parametrisierungen einzubeziehen. Ansätze hierfür existieren bereits (Lautenschlager et al., 1988), jedoch fehlt bislang der Nachweis einer praktischen Anwendbarkeit. Insbesondere sind die neu hinzugekommenen Parametrisierungskonstanten und Längenskalierungen experimentell noch nicht hinreichend bekannt, so daß an dieser Stelle auf die Einbeziehung von Helizität in die Turbulenzschließung verzichtet wurde.

In der numerischen Modellierung wird die Wechselwirkung von kleinen auf größere Skalen üblicherweise vernachlässigt. Eine solche Vorgehensweise ist gerechtfertigt, wenn in der nicht aufgelösten Bewegung nur der Inertial Subrange enthalten ist. Dann gilt die Isotropieannahme und damit der Diffusionsansatz mit seiner Gradientenparametrisierung. Dies ist i.a. aber nicht der Fall. Die nicht aufgelöste Bewegung enthält anisotrope bzw. strukturbildende Anteile, die in der Parametrisierung berücksichtigt werden sollten.

3.3 Turbulenzmittelung und Schließungsproblem

Obwohl die turbulente Bewegung den Erhaltungssätzen von Impuls und Energie gehorcht, ist sie doch quasi chaotisch und nicht deterministisch. Um Aussagen über das Verhalten einer Strömung machen zu können, ist eine statistische Behandlung der turbulenten Anteile erforderlich. Ein erster Schritt in diese Richtung stellt die erstmals von Reynolds (1883) vorgeschlagene Mittelung dar. Dazu wird eine physikalischen Größe A in Mittelwert \bar{A} und turbulenten Anteil A' aufgespalten:

$$\begin{aligned} A &= \bar{A} + A' \\ \text{mit } \bar{A'} &= 0 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Die Mittelwertbildung kann durch ein Ensemble-, Zeit- oder Raummittel erfolgen (Panofsky und Dutton, 1984). Für das grundsätzliche Problem der Behandlung turbulenter Anteile ist die spezielle Art der Mittelung unerheblich. An dieser Stelle wird angenommen, daß die Trennung der betrachteten Größen in Mittelwert und turbulenten Anteil möglich und sinnvoll ist. Die mittleren Größen enthalten keine statistischen Anteile mehr.

Die numerische Modellierung auf einem Gitter bewirkt durch räumliche und zeitliche Diskretisierung ebenfalls eine Aufspaltung der physikalischen Größen in einen mittleren vom Modell aufgelösten und einen nichtaufgelösten, subskaligen Anteil. Unter der Annahme, daß das verwendete Modell die physikalisch relevanten Skalen des betrachteten Problems auflöst, kann der subskalige Anteil mit dem turbulenten Anteil aus (3.1) identifiziert werden.

Die turbulenten Anteile, für die ohne zusätzliche Annahmen keine Modellaussage möglich ist, können jedoch nicht bei der Beschreibung der mittleren Größen ver-

nachlässigt werden, da sie in den zu modellierenden, gemittelten Gleichungen auftauchen. Dies soll am Beispiel der Transportgleichung für die Konzentration c eines Tracers erläutert werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} c &= - \frac{\partial}{\partial x_k} u_k c && \text{Advektion} \\ &- \frac{\partial}{\partial x_k} D_c \frac{\partial}{\partial x_k} c && \text{molekulare Diffusion} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Setzt man für die Tracerkonzentration c und die Transportgeschwindigkeiten u_k den Fluktuationsansatz aus Gleichung (3.1) ein, so ergibt sich nach Durchführung der Turbulenzmittelung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{c} &= - \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{c u_k} && \text{Advektion} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{c' u_k'} && \text{turbulenter Transport} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_k} D_c \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{c} && \text{molekulare Diffusion} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Gegenüber Gleichung (3.2) tauchen in Gleichung (3.3) die Korrelationen der fluktuierenden Anteile $\overline{c' u_k'}$ auf, die den Einfluß der Turbulenz auf das mittlere Konzentrationsfeld beschreiben. Um eine Gleichung für diese turbulenten Korrelationen abzuleiten, beschränken wir uns zunächst auf den Fall des Tracertransportes in einer divergenzfreien, zeitlich konstanten Strömung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} u_i &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} u_i &= 0 \quad \text{für } i = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

Für die Tracertransportgleichung läßt sich dann schreiben:

$$\frac{\partial}{\partial t} c = -u_k \frac{\partial}{\partial x_k} c + \frac{\partial}{\partial x_k} D_c \frac{\partial}{\partial x_k} c$$

Einsetzen des Fluktuationsansatzes, Subtrahieren der turbulenzgemittelten Gleichung und Multiplizieren mit u_i' mit anschließender Turbulenzmittelung führt zu der gesuchten Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{c' u_i'} &= -\overline{u_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{c' u_i'} - \overline{u_i' u_k'} \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{c} \\ &- \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{c' u_i' u_k'} + \frac{\partial}{\partial x_k} D_c \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{c' u_i'} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Selbst in dem einfachen Fall einer zeitlich konstanten, divergenzfreien Strömung erscheinen in der Bestimmungsgleichung für die turbulenten Korrelationen sogenannte

Dreifachkorrelationen $\overline{c'u'_k u'_i}$ für $i, k = 1, 2, 3$, die als neue Unbekannte zu behandeln sind.

Bei dem Versuch Bestimmungsgleichungen für die Dreifachkorrelationen aufzustellen, treten wiederum Korrelationen höherer Ordnung als neue Unbekannte auf. Dieses Auftreten von unbekanntem turbulenten Korrelationen höherer Ordnung hat seinen Grund in Produkten turbulenzbehafteter Größen in den Ausgangsgleichungen und ist ein generelles Problem in der Turbulenztheorie. Es wird als Schließungsproblem bezeichnet, da das Gleichungssystem (3.4) nicht ohne zusätzliche Annahmen geschlossen werden kann.

3.4 Der Gradientenansatz

Eine einfache Annahme zur Schließung der Gleichung (3.3) ist der Gradientenansatz, der auf Ideen von Boussinesq (Monin und Yaglom, 1971; Seinfeld, 1986) zurückgeht und in verallgemeinerter Form lautet:

$$\overline{c'u'_i} = -K_{ik} \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{c} \quad (3.5)$$

K_{ik} ist der Tensor der turbulenten Austauschkoefizienten des Tracers q . Dieser Ansatz beruht auf der Analogie von Turbulenz und molekularer Diffusion. Turbulente Austauschprozesse können streng genommen nur dann wie molekulare Diffusion behandelt werden, wenn Probleme betrachtet werden, deren charakteristische Zeiten groß sind gegen die Lagrangesche Skalenzeit. Die Lagrangesche Skalenzeit λ_L ist anschaulich diejenige Zeit, nach der ein Luftpaket seine Erinnerung an seine Vorgeschichte verloren hat. Definiert ist λ_L als Integral über die Lagrangesche Autokorrelationsfunktion $R_L(\tau)$, die ein Maß dafür ist, wie stark die Geschwindigkeit eines Luftpakets zu einem Zeitpunkt t mit der Geschwindigkeit zu einem früheren Zeitpunkt $t - \tau$ oder einem späteren Zeitpunkt $t + \tau$ im Ensemblemittel korreliert ist:

$$\begin{aligned} \lambda_L &= \int_0^\infty R_L(\tau) d\tau \\ &= \int_0^\infty \frac{\langle u'_i(t) u'_i(t \pm \tau) \rangle}{\langle u_i'^2(t) \rangle} d\tau \end{aligned}$$

wobei $\langle \dots \rangle$ das Ensemblemittel bezeichnet.

Für die numerische Modellierung hätte dies zur Folge, daß der Modellzeitschritt größer zu wählen wäre als die Lagrangesche Skalenzeit des betrachteten Problems. Für das Auseinanderdiffundieren z.B. einer Rauchfahne aus einem Kamin bedeutet dies bei mittleren Turbulenzverhältnissen Zeiten im Bereich mehrerer Minuten bis einer Stunde (Roedel, 1994). Betrachtet man kürzere Zeiten als die Lagrange Skalenzeit, wie das in numerischen Simulationen häufig der Fall ist, können die turbulenten Austauschkoefizienten nicht wie bei der molekularen Diffusion als konstant

angesehen werden, sondern müssen den spezifischen Eigenschaften des betrachteten Problems durch eine entsprechende Zeit- und Ortsabhängigkeit Rechnung tragen.

Durch Gleichung (3.5) wird das Problem der Bestimmung von turbulenten Korrelationen $\overline{c'u'_i}$ transformiert in ein Problem der Bestimmung der turbulenten Austauschkoefizienten K_{ik} .

3.5 Bestimmung der turbulenten Austauschkoefizienten

Die turbulenten Austauschkoefizienten sind in der allgemeinen Formulierung von Gleichung (3.5) Elemente eines zweidimensionalen Tensors, der Diagonalgestalt annimmt, wenn die gewählten Koordinatenachsen mit den Hauptachsen des Tensors K_{ik} zusammenfallen. Die Wahl der Hauptachsen muß dabei ortsunabhängig erfolgen, da die Tracergleichung (3.3) in jedem Raumpunkt gelten soll. In atmosphärischen Fragestellungen ist in jedem Raumpunkt die vertikale gegenüber den horizontalen Raumrichtungen aufgrund der nur hier wirkenden Schwerebeschleunigung ausgezeichnet und kann mit einer der Hauptachsen identifiziert werden. Bei den horizontalen Raumrichtungen ist die Hauptwindrichtung zwar gegenüber der zu ihr senkrecht stehenden, horizontalen Raumrichtung ausgezeichnet, jedoch kann die Wahl der Hauptwindrichtung aufgrund von Windscherungen nicht generell ortsunabhängig erfolgen. Eine prinzipielle Unterscheidung zwischen den beiden horizontalen Raumrichtungen ist daher nicht möglich.

Es hat sich dennoch experimentell als ausreichend erwiesen, sich auf die Diagonalelemente von K_{ik} zu beschränken (Seinfeld, 1986; Monin und Yaglom, 1971):

$$K_k = K_{ik}^* \delta_{ik}$$

Damit die Diagonalform unabhängig von der speziellen Wahl des Koordinatensystems ist, müssen die horizontalen Austauschkoefizienten identisch sein. Ist die vertikale Achse mit dem Index $i = 3$ bezeichnet, so ergibt sich:

$$K_1 = K_2 = K_{hor} \quad \text{und} \quad K_3 = K_{ver}$$

In den Impulsgleichungen bzw. der Wärme Gleichung treten turbulente Korrelationen analog zu denen in Gleichung (3.3) auf, die durch Produkte von turbulenzbehafteten Größen entstehen. Wie in den folgenden Kapiteln diskutiert wird, lassen sich auch diese turbulenten Korrelationen $\overline{u'_i u'_j}$ bzw. $\overline{u'_i \theta'}$ auf die Bestimmung eines horizontalen und vertikalen Austauschkoefizienten für Impuls bzw. Wärme zurückführen.

Das generelle Schließungsproblem der Turbulenztheorie ist dadurch auf eine Bestimmung von Austauschkoefizienten K_{hor} und K_{ver} für jede turbulenzbehaftete Größe zurückgeführt .

Die im folgenden für die Bestimmung der turbulenten Austauschkoefizienten verwendeten Ansätze beruhen auf einer Analogie zum Kolmogorov-Prandtl Ansatz

(Kolmogorov, 1942; Prandtl und Wieghardt, 1945) für den Impuls. Kolmogorov und Prandtl hatten Anfang der vierziger Jahre unabhängig voneinander einen Ansatz für einen isotropen, d.h. für alle Raumrichtungen gleichen Austauschkoefizienten unter Verwendung der turbulenten kinetischen Energie postuliert. Die turbulente kinetische Energie ist definiert als Summe über die quadratischen turbulenten Korrelationen des Impulses:

$$B = \overline{u'_i u'_i} = \overline{u'_1 u'_1} + \overline{u'_2 u'_2} + \overline{u'_3 u'_3}$$

Um einen Ausdruck für die turbulente Energie pro Volumenelement zu erhalten, muß der Ausdruck für B noch mit der halben Dichte multipliziert werden. Unter Verwendung einer die Turbulenz charakterisierenden Längenskala Λ und einer empirisch festzulegenden Konstanten c_0 ergibt sich als turbulenter Austauschkoefizient für den Impuls K :

$$K = c_0 \Lambda \sqrt{B} \quad (3.6)$$

Der Ansatz (3.6) beruht auf der Annahme lokaler Isotropie der Turbulenz, die bereits in Abschnitt 3.2 diskutiert wurde. Darüberhinaus wird angenommen, daß der turbulente Austausch maßgeblich durch die turbulente kinetische Energie bestimmt wird. Turbulente Geschwindigkeitskorrelationen der Form $\overline{u'_i u'_j}$ mit $i \neq j$ im Austauschkoefizienten werden vernachlässigt. Die turbulente Längenskala Λ charakterisiert den typischen Größenbereich, in dem die meiste turbulente Energie enthalten ist. Daher ist die turbulente Längenskala abhängig vom Strömungstyp und Entwicklungszustand der Turbulenz.

Wie bereits in Abschnitt 3.5 diskutiert, kann die Vertikale mit einer Hauptachse des Tensors K_{ik} für die turbulenten Austauschkoefizienten identifiziert werden, wohingegen die horizontalen Raumrichtungen nicht weiter unterschieden werden können. Da sich dieser Ansatz bei Simulation von Ausbreitungsexperimenten bewährt hat (Lautenschlager, 1983), soll er auch bei der Bestimmung der Austauschkoefizienten mit Hilfe der turbulenten Energie übernommen werden. Dadurch wird dem Umstand Rechnung getragen, daß im Modell nicht a priori alle subskaligen Anteile der Bewegung im Inertial Subrange liegen. Allerdings wird weiterhin davon ausgegangen, daß subskalige Prozesse nicht strukturbildend wirken. Lediglich das Glätten von Strukturen erfolgt anisotrop.

Die gesamte turbulente Energie wird in einen horizontalen und einen vertikalen Anteil aufgespalten:

$$\begin{aligned} B_{hor} &= \overline{u'_1 u'_1} + \overline{u'_2 u'_2} \\ B_{ver} &= \overline{u'_3 u'_3} \end{aligned}$$

Um daraus einen Ansatz für den vertikalen und horizontalen Austauschkoefizienten abzuleiten, wird davon ausgegangen, daß die turbulente Längenskala Λ als universelle Längenskala zur Charakterisierung von Turbulenz sowohl für den vertikalen als auch für den horizontalen Austausch erhalten bleibt. Die Anisotropie der Turbulenz wird

allein durch die Anisotropie in den Komponenten der turbulenten Energie zum Ausdruck gebracht:

$$\begin{aligned} K_{hor} &= c_0 \Lambda \sqrt{3/2 B_{hor}} \\ K_{ver} &= c_0 \Lambda \sqrt{3 B_{ver}} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Durch den so gewählten Ansatz ist sichergestellt, daß im Falle lokaler Isotropie der Turbulenz der ursprüngliche Ansatz (3.6) erhalten bleibt:

$$\begin{aligned} K_{hor} &= K_{ver} = K = c_0 \Lambda \sqrt{B} \\ \text{mit } \overline{u'_1 u'_1} &= \overline{u'_2 u'_2} = \overline{u'_3 u'_3} = 1/3 B \end{aligned}$$

Durch den erweiterten Kolmogorov-Prandtl Ansatz (3.7) lassen sich aus turbulenter Energie und turbulenter Längenskala Austauschkoefizienten für den Impuls angeben. Für die turbulenten Anteile der Tracergleichung (3.3) ist damit das eingangs gestellte Problem noch nicht gelöst. Es ist allerdings plausibel und experimentell bestätigt, daß der turbulente Transport von Impuls und Tracern nicht unabhängig voneinander erfolgen kann, da er seine Ursache jeweils im turbulenten Anteil der betrachteten Strömung hat. In guter Näherung können daher alle Austauschkoefizienten zueinander proportional gesetzt werden. Sie unterscheiden sich durch tracerspezifische, empirisch zu bestimmende Konstanten α_c , die inverse Prandtl Zahlen genannt werden:

$$\begin{aligned} K_{hor,c} &= \alpha_c K_{hor} \\ K_{ver,c} &= \alpha_c K_{ver} \end{aligned}$$

Die Prandtl-Zahlen α_c können nur von bisher unberücksichtigten Einflußfaktoren abhängen. Bei der turbulenten Bewegung von Partikeln in einer umgebenden Strömung können dies beispielsweise Partikeleigenschaften wie Größe und Oberflächenrauigkeit sein oder beim turbulenten Transport von Wärme die thermische Stabilität des Fluids.

Damit ist das Problem der Bestimmung einer Vielfalt von turbulenten Korrelationen zurückgeführt auf die Bestimmung der turbulenten Energiekomponenten und einer Längenskala unter Berücksichtigung einer Reihe von empirischen Konstanten.

Sind die Austauschkoefizienten einmal bestimmt, lautet die turbulenzgemittelte, zu modellierende Transportgleichung für einen Tracer:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{c u_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} K_{k,c} \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{c}$$

mit $K_{1,c} = K_{2,c} = K_{hor,c}$ und $K_{3,c} = K_{ver,c}$. Ersetzt man die Tracerkonzentration \bar{c} durch das Produkt aus Gesamtdichte und spezifischer Konzentration $\bar{c} = \rho q$ und ergänzt Quellen- und Senkenterme, so erhält man die in Kapitel 2.2.4 bereits angegebene Tracergleichung.

3.5.1 Die turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen

Zur Bestimmung einer Gleichung für die Komponenten der turbulenten Energie wird zunächst eine Gleichung für die turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen hergeleitet. Dazu geht man von der Navier-Stokes Gleichung aus:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i &= - \frac{\partial}{\partial x_k} \rho u_i u_k && \text{Advektion} \\
 &- \frac{\partial}{\partial x_i} P && \text{Druckgradientenkraft} \\
 &- \rho g \delta_{i3} && \text{Gravitation} \\
 &+ \frac{\partial}{\partial x_k} \tau_{ik} && \text{viskose Kraft} \\
 &+ 2 \rho \epsilon_{ijk} \omega_j u_k && \text{Corioliskraft}
 \end{aligned}$$

Da in ATHAM turbulente Bewegungen mit Skalen im Kilometerbereich und darunter betrachtet werden, kann der Coriolis-term bei der Erzeugung turbulenter Energie vernachlässigt werden.

Der Reibungstensor lautet in allgemeiner Form:

$$\tau_{ik} = \mu \left(\frac{\partial}{\partial x_k} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_k - 2/3 \frac{\partial}{\partial x_l} u_l \delta_{ik} \right)$$

μ ist die dynamische Viskosität von Luft. Unter der Inkompressibilitätsannahme vereinfacht sich der Reibungsterm zu einem reinem Diffusionsterm:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \tau_{ik} = \frac{\partial}{\partial x_k} \mu \frac{\partial}{\partial x_k} u_i \quad \text{mit} \quad \frac{\partial}{\partial x_i} u_i = 0$$

In der folgenden Ableitung soll ein räumlicher Dichtegradient, der bei Anwesenheit aktiver Tracer erheblich sein kann, soweit wie möglich mit berücksichtigt werden. Darüberhinaus sollen Kompressibilitätseffekte zunächst unberücksichtigt bleiben. Bei Strömungsgeschwindigkeiten im Bereich der Schallgeschwindigkeit wird Turbulenz generell unterdrückt (Simone et al., 1997). Ein Korrekturterm für diese Unterdrückung von Turbulenz wird in Abschnitt 3.5.6 ergänzt. Unter der Annahme eines divergenzfreien Flusses vereinfacht sich der Reibungsterm in den Navier-Stokes Gleichungen nicht zu einem Diffusionsterm, jedoch sollen die zusätzlich auftretenden Terme als klein gegenüber dem Diffusionsterm vernachlässigt werden. Bei der Ableitung einer Gleichung für die turbulente Energie soll daher von folgenden Gleichungen ausgegangen werden:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i &= - \frac{\partial}{\partial x_k} \rho u_i u_k - \frac{\partial}{\partial x_i} P - \rho g \delta_{i3} + \frac{\partial}{\partial x_k} \mu \frac{\partial}{\partial x_k} u_i \\
 \frac{\partial}{\partial x_k} \rho u_k &= 0
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Um eine Bestimmungsgleichung für die turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen ableiten zu können, wird in die Impulsgleichung (3.8) für Druck, Dichte und die Geschwindigkeitskomponenten der Fluktuationsansatz (3.1) eingesetzt. Als Vereinfachung wird angenommen, daß die Dichtefluktuationen klein gegenüber der mittleren Dichte sind:

$$\rho' \ll \bar{\rho}$$

Die Dichtefluktuationen können dann außer im Auftriebsterm vernachlässigt werden. Diese Annahme entspricht der Boussinesq Approximation mit der Ausnahme, daß bei ihr zusätzlich der räumliche Gradient der mittleren Dichte vernachlässigt wird.

Subtrahiert man nach dem Einsetzen des Fluktuationsansatzes die turbulenzgemittelte Gleichung, so erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} u'_i &= - \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} (u'_i u'_k + u'_i \bar{u}_k + \bar{u}_i u'_k - \overline{u'_i u'_k}) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_i} P' \\ &\quad - \rho' g \delta_{i3} \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x_k} \mu \frac{\partial}{\partial x_k} u'_i \end{aligned} \quad (3.9)$$

Multipliziert man diese Gleichung mit u'_j und addiert die j-te Komponente von (3.9) multipliziert mit u'_i mit anschließender Turbulenzmittelung, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \overline{u'_i u'_j} &= - \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} \bar{u}_k \overline{u'_i u'_j} && \text{Advektion} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} \overline{u'_k u'_i u'_j} && \text{turbulente} \\ &&& \text{Diffusion} \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x_k} \mu \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u'_i u'_j} && \text{molekulare} \\ &&& \text{Diffusion} \\ &\quad - \bar{\rho} \left(\overline{u'_j u'_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{u}_i + \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{u}_j \right) && \text{Produktion} \\ &&& \text{durch Scherung} \quad (3.10) \\ &\quad - g (\overline{u'_i \rho'} \delta_{j3} + \overline{u'_j \rho'} \delta_{i3}) && \text{Produktion} \\ &&& \text{durch Auftrieb} \\ &\quad - \overline{u'_j \frac{\partial}{\partial x_i} P'} - \overline{u'_i \frac{\partial}{\partial x_j} P'} && \text{Umverteilung} \\ &\quad - 2\mu \overline{\left(\frac{\partial}{\partial x_k} u'_i \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_k} u'_j \right)} && \text{Dissipation} \end{aligned}$$

Die Gleichungen (3.10) stellen ein System von sechs gekoppelten partiellen Differentialgleichungen für die turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen dar. Um es zu

schließen werden zusätzliche Bestimmungsgleichungen für die turbulenten Dichtefluktuationen $\overline{u'_i \rho'}$ benötigt. Außerdem treten neue unbekannte turbulente Korrelationen höherer Ordnung auf:

$$D_{ij} = -\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{\rho u'_k u'_i u'_j}$$

$$\pi_{ij} = \overline{u'_j \frac{\partial}{\partial x_i} P'} - \overline{u'_i \frac{\partial}{\partial x_j} P'}$$

$$\varepsilon_{ij} = 2\mu \left(\frac{\partial}{\partial x_k} u'_i \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_k} u'_j \right),$$

für die zusätzliche Annahmen erforderlich sind.

Der Term D_{ij} beschreibt den Transport der betrachteten zweifachen Geschwindigkeitskorrelation $\overline{u'_i u'_j}$ durch die turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen u'_k . Mit Hilfe eines verallgemeinerten Gradientenansatzes läßt sich für die dreifachen Geschwindigkeitskorrelationen schreiben:

$$\overline{u'_k u'_i u'_j} = -K_{ijklmn} \frac{\partial}{\partial x_n} \overline{u'_i u'_m}$$

Bei den Austauschkoefizienten K_{ijklmn} handelt es sich um einen Tensor 6. Stufe, der selbst im isotropen Fall nicht eindeutig bestimmbar ist. Es hat sich jedoch als sinnvoll erwiesen, sich auf wenige Koeffizienten zu beschränken, was einer Beschränkung auf die Hauptdiagonalelemente der Untermatrizen entspricht:

$$K_{ijk}^* = K_{ijklmn} \delta_{il} \delta_{jm} \delta_{kn}.$$

Im isotropen Fall gelangt man zu der von Mellor (1973) vorgeschlagenen Form:

$$\overline{u'_k u'_i u'_j} = -c_1 K \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u'_i u'_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{u'_k u'_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{u'_j u'_k} \right) \quad (3.11)$$

$$\text{mit } K = c_0 \Lambda \sqrt{B}$$

Die Isotropieannahme bedeutet einen von der Raumrichtung unabhängigen Austauschkoefizienten, der entsprechend dem Kolmogorov-Prandtl Ansatz (3.6) gewählt wird. c_1 ist eine empirisch zu bestimmende Konstante. Bei Λ handelt es sich um die bereits in Gleichung (3.6) erwähnte turbulente Längenskala, wenn angenommen wird, daß alle in den Parametrisierungen auftretenden Längenskalierungen zueinander proportional sind. Diese Annahme ist nicht zwingend, folgt aber der in der Literatur üblichen Vorgehensweise.

Betrachtet man die dreifachen Korrelationen $\overline{u'_k u'_i u'_j}$ in Zusammenhang mit dem gesamten Term D_{ij} für die turbulente Diffusion, so lautet der einfachste mögliche

Ansatz für die turbulente Diffusion im isotropen Fall:

$$D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} c_1 K \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u'_i u'_j} \quad (3.12)$$

Dieser Ansatz bedeutet eine Vereinfachung der von Mellor vorgeschlagenen Form in Gleichung (3.11). Er bewahrt die Tensorsymmetrie von D_{ij} , verletzt allerdings die Symmetrie in $\overline{u'_k u'_i u'_j}$. Studien mit einem Schließungsschema von Lewellen (1977), das diesen einfachen Ansatz für die turbulente Diffusion verwendet, haben gezeigt, daß sich die experimentellen Daten für unterschiedliche Strömungsregime im Rahmen der Meßgenauigkeit gut wiedergeben lassen.

Der Ansatz (3.12) soll nun erweitert werden, um der angenommenen Anisotropie zwischen vertikaler und horizontaler Raumrichtung Rechnung zu tragen. Wie schon beim Austauschkoefizienten für Impuls, wird auch an dieser Stelle davon ausgegangen, daß die Anisotropie der Turbulenz nur in den Komponenten der turbulenten Energie berücksichtigt werden muß. Für die turbulente Diffusion in (3.10) ergibt sich somit:

$$D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} c_1 K_k \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u'_i u'_j} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } K_1 = K_2 &= c_0 \Lambda \sqrt{\frac{3}{2} B_{hor}} \\ K_3 &= c_0 \Lambda \sqrt{3 B_{ver}} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Durch diesen Ansatz ist sichergestellt, daß Gleichung 3.13 im Falle isotroper Turbulenz dem von Lewellen (1977) gewählten Ansatz entspricht.

Neben dem von Mellor vorgeschlagenen Ansatz (3.11) für die dreifachen Geschwindigkeitskorrelationen werden auch andere, zum Teil deutlich komplexere Ansätze diskutiert. Einen Zusammenhang zwischen dreifachen und zweifachen Geschwindigkeitskorrelationen erhalten z.B. Hanjalic und Launder (1972) durch Analyse einer exakten Gleichung für $\overline{u'_k u'_i u'_j}$:

$$\overline{u'_k u'_i u'_j} = -c_1 \frac{\Lambda}{\sqrt{B}} \left(\overline{u'_k u'_i} \frac{\partial}{\partial x_l} \overline{u'_l u'_j} + \overline{u'_i u'_l} \frac{\partial}{\partial x_l} \overline{u'_j u'_k} + \overline{u'_j u'_l} \frac{\partial}{\partial x_l} \overline{u'_i u'_k} \right)$$

Dieser Ansatz wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht weiter verfolgt. Er macht lediglich deutlich, daß sehr unterschiedliche Ansätze für die Terme höherer Ordnung möglich sind, ohne daß aufgrund eindeutiger theoretischer oder experimenteller Befunde eine Favorisierung des einen oder anderen Ansatzes erfolgen kann.

Der Term π_{ij} in Gleichung (3.10) beschreibt die Wirkung von Druckfluktuationen auf die turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen. Seine physikalische Bedeutung läßt sich am besten nach einer einfachen Umformung verstehen:

$$\pi_{ij} = \frac{1}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \overline{\bar{\rho} u'_j P'}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\bar{\rho} u'_i P'}}{\partial x_j} - \overline{P' \left(\frac{\partial \bar{\rho} u'_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\rho} u'_i}{\partial x_j} \right)} \right) \quad (3.15)$$

Das Volumenintegral der ersten beiden Terme auf der rechten Seite von (3.15) über ein beschränktes Gebiet, das von einer laminaren Strömung umgeben ist, ergibt Null. Sie bewirken daher eine Umverteilung zwischen den turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen und können wie Diffusionsterme behandelt werden (Mellor und Herring, 1973). Nach Hanjalic und Launder (1972) können turbulente Druckkorrelationen außer in Wandnähe vernachlässigt werden, so daß die ersten beiden Terme auf der rechten Seite von (3.15) einen zu vernachlässigenden Beitrag für die turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen liefern. Die letzten beiden Terme auf der rechten Seite von (3.15) liefern wegen Gleichung (3.8) keinen Beitrag zur gesamten turbulenten Energie, sondern bewirken lediglich eine Umverteilung zwischen den Komponenten der turbulenten Energie.

Der am häufigsten verwendete Ansatz beruht auf Ideen von Rotta (1951), die darauf beruhen, daß der Umverteilungsterm π_{ij} in Richtung einer isotropen Energieverteilung wirkt:

$$\pi_{ij} = c_2 \bar{\rho} \frac{\sqrt{B}}{\Lambda} \left(\overline{u'_i u'_j} - \delta_{ij} \frac{1}{3} B \right) \quad (3.16)$$

c_2 ist eine empirisch zu bestimmende Konstante.

Daneben werden in der Literatur unter anderem Beiträge zum Umverteilungsterm aufgrund von Scherungen in der mittleren Strömung diskutiert (Rotta, 1972; Launder, 1975), die sich im Vergleich mit Messungen nur bedingt bewährt haben (Lewellen, 1977) und daher hier vernachlässigt werden sollen.

Der Term ε_{ij} in Gleichung (3.10) beschreibt den Effekt viskoser Dissipation auf die Geschwindigkeitskorrelationen, d.h. den Übergang turbulenter Energie auf die Molekularbewegung. Bei der Vorstellung des Inertial Subrange geht man zum einen davon aus, daß turbulente Energie nur durch viskose Kräfte dissipiert wird, zum anderen wird turbulente Energie einer Kaskade folgend nur von größeren auf kleinere Skalen übertragen. Da Energie in diesem Bild nicht auf die größeren Skalen zurückfließt, ist der Dissipationsterm ε_{ij} nicht von der Zähigkeit der Fluids, sondern vom Energieübertragungsprozeß abhängig. Im isotropen Fall wird die Dissipation turbulenter Energie daher bestimmt durch das Gesamtbudget turbulenter Energie und eine turbulente Zeitskala τ_0 , die neben der turbulenten Energie nur von der turbulenten Längenskala Λ abhängig ist (Mellor und Herring, 1973):

$$\varepsilon_{ij} = \bar{\rho} \frac{1}{\tau_0} \frac{B}{3} \delta_{ij} \quad \text{mit} \quad \frac{1}{\tau_0} = c_3 \frac{\sqrt{B}}{\Lambda}$$

c_3 ist wiederum eine empirisch zu bestimmende Konstante. Um eine räumliche Anisotropie in den Komponenten der turbulenten Energie zu berücksichtigen, soll dieser Ansatz erweitert werden unter der Annahme, daß nicht nur die turbulente Längenskala Λ , sondern auch die turbulente Zeitskala τ_0 eine isotrope Größe der betrachteten turbulenten Strömung ist:

$$\varepsilon_{ij} = c_3 \bar{\rho} \frac{\sqrt{B}}{\Lambda} \overline{u'_i u'_j} \delta_{ij} \quad (3.17)$$

Vergleichbare Ansätze für einen anisotropen Dissipationsterm finden sich in (Daly und Harlow, 1970; Donaldson, 1972). Der hier diskutierte Ansatz für den Dissipationsterm (3.17) gilt für Strömungen mit großen Reynolds Zahlen, d.h. für stark turbulente Strömungen. Zusätzliche Beiträge zu ε_{ij} aufgrund kleiner Reynolds Zahlen, wie sie in schwach turbulenten Strömungen wichtig sein können, finden sich z.B. bei Lewellen (1977), sollen an dieser Stelle jedoch vernachlässigt werden.

Mit den gegebenen Parametrisierungsansätzen für die turbulenten Korrelationen höherer Ordnung (3.13, 3.16, 3.17) und den Gleichungen (3.10) ist ein System von sechs gekoppelten, linearen Differentialgleichungen für die turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen gegeben. Gelingt es, dieses Gleichungssystem vollständig zu schließen, kann auf den Gradientenansatz in den turbulenzgemittelten Impulsgleichungen prinzipiell verzichtet werden. Ein solches Verfahren, bei dem die zweifachen, turbulenten Korrelationen direkt modelliert werden, wird als Schließungsschema zweiter Ordnung bezeichnet. Werden die turbulenten Korrelationen durch einen Gradientenansatz und turbulente Austauschkoefizienten bestimmt, handelt es sich um ein Schließungsschema erster Ordnung. Eine Zwischenstellung nehmen dabei die Ansätze ein, die den Austauschkoefizienten über eine turbulente Energiegleichung berechnen.

Neben einer Festlegung der empirischen Konstanten c_1 bis c_3 und der turbulenten Längenskala ist eine Bestimmung der turbulenten Dichtekorrelationen $\overline{u'_i \rho'}$ notwendig. Bei einem Schließungsschema zweiter Ordnung werden für diese Dichtekorrelationen eigene Bestimmungsgleichungen abgeleitet. Der Vollständigkeit halber soll das dabei angewandte Verfahren kurz diskutiert, jedoch im weiteren nicht verwendet werden.

Die Dichte ist i.a. ein Funktion von einer oder mehreren skalaren Größen Φ_l

$$\rho = \rho(\Phi_1, \dots, \Phi_N),$$

für die sich Prognosegleichungen angeben lassen. Im einfachsten Fall einer trockenen Atmosphäre ist dies die potentielle Temperatur. Bei Anwesenheit aktiver Tracer werden zusätzlich die Konzentrationen jedes aktiven Tracers benötigt. Aus den Prognosegleichungen jeder skalaren Größe läßt sich analog zu dem bei der Ableitung der Gleichungen (3.10) beschriebenen Verfahren ein Satz von vier Gleichungen für die turbulenten Korrelationen jedes Skalars ableiten:

$$\overline{u'_i \Phi'_l} \quad \text{und} \quad \overline{\Phi'_l \Phi'_l} \quad \text{mit } i = 1, 2, 3 \text{ und } l = 1, \dots, N$$

Im Falle einer trockenen Atmosphäre erhält man zur Bestimmung aller zweifachen turbulenten Korrelationen ein System von 10 gekoppelten, linearen Differentialgleichungen, die numerisch gelöst werden müssen. Bei einem N-Komponentensystem, wie es im Rahmen dieser Arbeit behandelt werden soll, hätte man zusätzlich zu den sechs Gleichungen für die turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen 4N Gleichungen zu berücksichtigen, die alle miteinander gekoppelt sind. Verglichen mit den N+4 Gleichungen aus Kapitel 2.2, die zur Beschreibung der Dynamik der turbulenzgemittelten Größen nötig sind, hätte man zur Behandlung nicht aufgelöster subskaliger Prozesse mit einem Schließungsschema zweiter Ordnung fast die vierfache

Anzahl von Differentialgleichungen numerisch zu lösen. Eine praktische Anwendung eines solchen Modells wäre nahezu ausgeschlossen. Dabei schränken vereinfachende Annahmen bei der Ableitung des Gleichungssystems für die turbulenten Korrelationen die Aussagefähigkeit und Allgemeinheit in der praktischen Anwendung ein: Der Gradientenansatz wird zur Parametrisierung der Dreifachkorrelationen weiterhin verwendet. Ein Einfluß kleiner Skalen auf größere Skalen ist ausgeschlossen. Die Annahme lokaler Isotropie der Turbulenz als Grenzfall bleibt erhalten. Kompressibilitätseffekte werden nicht beschrieben. Aus diesen Gründen soll an dieser Stelle auf die vollständige Ableitung eines Schließungsschemas zweiter Ordnung verzichtet werden.

Im folgenden sollen Gleichungen für die turbulenten Energiekomponenten und für die turbulente Längenskala abgeleitet werden, um über den erweiterten Kolmogorov-Prandtl Ansatz (3.7) turbulente Austauschkoefizienten zu bestimmen. Hierzu beschränkt man sich in Gleichungen (3.10) auf die quadratischen Geschwindigkeitskorrelationen $\overline{u'_i u'_i}$ und ersetzt die in den Produktionstermen auftretenden turbulenten Korrelationen durch einen Gradientenansatz.

3.5.2 Produktionsterme turbulenter Energie

Der Produktionsterm P_i für die turbulenten Energiekomponenten aufgrund von Windscherungen lautet:

$$P_i = -2\bar{\rho} \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_i}$$

Der gebräuchlichste Gradientenansatz für die turbulenten Geschwindigkeitskorrelationen lautet unter der Annahme lokaler Isotropie (Mellor und Yamada, 1974):

$$\overline{u'_i u'_k} = -K \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{u_k} \right) - \frac{1}{3} B \delta_{ik},$$

mit K aus (3.6).

Dieser Ansatz soll analog zu der Parametrisierung der Dreifachkorrelationen im Term D_{ij} für die turbulente Diffusion vereinfacht werden. Da im Produktionsterm P_i über einen Index der zweifachen Geschwindigkeitskorrelation summiert wird, lautet der einfachste Ansatz für den Produktionsterm, der eine Anisotropie zwischen horizontalen und vertikalen Raumrichtungen berücksichtigt:

$$P_i = 2\bar{\rho} K_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_i} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_i} \right), \quad (3.18)$$

mit K_k aus (3.14).

Der Produktionsterm P_ρ aufgrund einer Schichtung des betrachteten Mediums liefert nur einen Beitrag zur vertikalen Komponente der turbulenten Energie:

$$P_\rho = -2g \overline{u'_3 \rho'}$$

In rein atmosphärischen Anwendungen wird die Schichtung der Atmosphäre bestimmt durch die potentielle Temperatur, für die näherungsweise gilt:

$$\frac{\rho'}{\bar{\rho}} \approx -\frac{\Theta'}{\bar{\Theta}}$$

Der üblicherweise verwendete isotrope Gradientenansatz für den Produktionsterm durch Auftrieb lautet daher:

$$P_\rho = P_\Theta = -2g\bar{\rho}K_\theta \frac{1}{\bar{\Theta}} \frac{\partial}{\partial z} \bar{\Theta}$$

$$\text{mit } K_\theta = \alpha_\theta K = \alpha_\theta c_0 \Lambda \sqrt{B}$$

α_θ ist die sogenannte inverse turbulente Prandtl Zahl für Wärme, die empirisch zu bestimmen ist und von der Schichtungsstabilität des Mediums abhängt. Bei stabiler Schichtung $\frac{\partial}{\partial z} \bar{\Theta} > 0$ ist der Produktionsterm durch Auftrieb erwartungsgemäß negativ. Die Stabilität der Schichtung vernichtet turbulente Energie, dämpft also turbulente Prozesse.

Bei einem N-Komponentensystem, wie es im Rahmen dieser Arbeit behandelt werden soll, wird die Stabilität der Schichtung nicht nur durch die potentielle Temperatur des Gases, sondern auch durch die Anwesenheit aktiver Tracer maßgeblich beeinflusst. Die Dichte allein ist keine geeignete Größe für einen Gradientenansatz, da der Dichtegradient bei neutraler Schichtung keine Produktion oder Vernichtung turbulenter Energie auslösen soll. Daher muß ein Dichtemaß gewählt werden, das um Effekte adiabatischer Zustandsänderungen korrigiert ist. Die potentielle Dichte σ bildet ein solches Dichtemaß: Die potentielle Dichte eines Gemischpakets ist diejenige Dichte, die das Gemischpaket besitzt, wenn es adiabatisch auf einen Referenzdruck P_0 gebracht wird:

$$\frac{1}{\sigma} = q_g \frac{R}{P_0} \Theta_g + \sum_{i=1}^{N_t} \frac{q_i}{\rho_i} \quad (3.19)$$

Die Notationen sind entsprechend denen in Kapitel 2.2 gewählt, Θ_g bezeichnet die potentielle Temperatur des Gases, N_t die Zahl der inkompressiblen Tracer. Für ein Gemisch aus Gasanteil und aktiven Tracern lassen die Dichtefluktuationen schreiben als

$$\frac{\rho'}{\bar{\rho}} \approx \frac{\sigma'}{\bar{\sigma}}$$

Durch einen Gradientenansatz erhält man daher für den Produktionsterm durch Auftrieb, wenn man eine räumliche Anisotropie berücksichtigt:

$$P_\rho = 2g\bar{\rho}K_\sigma \frac{1}{\bar{\sigma}} \frac{\partial}{\partial z} \bar{\sigma} \quad (3.20)$$

$$\text{mit } K_\sigma = \alpha_\sigma K_3 = \alpha_\sigma c_0 \Lambda \sqrt{3B_{ver}}$$

$$\alpha_\sigma = \alpha_\theta q_g + \sum_{i=1}^{N_t} \alpha_i q_i \quad (3.21)$$

α_σ ist die inverse Prandtl Zahl des Gemisches, α_θ die für Wärme und α_i diejenigen für die einzelnen aktiven Tracer.

3.5.3 Turbulente Längenskala

Die turbulente Längenskala ist eine charakteristische Längenskala für die betrachtete Strömung. Es ist daher anschaulich einsichtig, daß sie in Wandnähe proportional zur Entfernung zur Wand ist. Auf dieser Überlegung beruht eine häufig verwendete Formulierung in der Grenzschichtmodellierung (Mellor und Yamada, 1974):

$$\Lambda = k z \quad \text{mit} \quad k \approx 0.67$$

z bezeichnet die Höhe über dem Boden. Bei größeren Entfernungen von festen Rändern ist die turbulente Längenskala beschränkt durch einen bestimmten Bruchteil der geometrischen Breite des von Turbulenz erfaßten Bereichs. Bei der Parametrisierung subskaliger Prozesse in einem Gitterpunktsmodell bestimmt der Gitterpunktsabstand die obere Schranke. Bei bekannter Geometrie des betrachteten Problems lassen sich empirische, geometrische Beziehungen für die turbulente Längenskala ableiten. Ein Beispiel hierfür sind axialsymmetrische Jets (Lewellen, 1977). Solche einfachen Ansätze müssen immer dann versagen, wenn die Geometrie des betrachteten Problems zu komplex oder der Entwicklungszustand der Turbulenz weit von einem Gleichgewichtszustand entfernt ist.

Die turbulente Längenskala läßt sich nicht aus lokalen Werten anderer Variablen abschätzen, wenn die Bedingungen, unter denen sich Turbulenz entwickelt, sich auf kürzeren Zeitskalen ändern als die turbulenten Größen. Dies ist aber gerade bei explosiven Vulkaneruptionen zu erwarten. Bei der Bestimmung der turbulenten Längenskala muß daher die zeitliche Entwicklung von Turbulenz mit einbezogen werden. Um diesem integralen Charakter der turbulenten Längenskala Rechnung zu tragen, werden in der Grenzschichtmodellierung unter der Annahme von zumindest näherungsweise horizontal homogenen und zeitlich langsam veränderlichen Bedingungen vertikale Integrale über eine die Turbulenz berücksichtigende Größe verwendet, z.B. (Yu, 1976). Um generell die zeitliche Entwicklung der Turbulenz in die Bestimmung der turbulenten Längenskala einzubeziehen, müssen Transportprozesse berücksichtigt werden. Dies geschieht unter der Annahme, daß die turbulente Längenskala bei Abwesenheit äußerer Quellen und Senken, etwa durch viskose Kräfte, eine Erhaltungsgröße des Luftpakets ist (Daly und Harlow, 1970). Die turbulente Längenskala unterliegt dann ebenso dem Transport durch Advektion und turbulente Diffusion wie die Komponenten der turbulenten Energie.

Ein Beispiel für eine auf diesen Überlegungen beruhende Differentialgleichung zur Bestimmung der turbulenten Längenskala findet sich bei Lewellen (1977). Die neben Advektion und turbulenter Diffusion auftretenden Produktions- und Senkenterme beruhen dabei überwiegend auf Plausibilitätsbetrachtungen und sind mit größerer Unsicherheit behaftet als die in den turbulenten Energiegleichungen. Die zusätzlichen empirischen Konstanten sind nur ungenau aus Messungen bestimmbar.

Aus diesen Gründen soll im Rahmen der vorliegenden Arbeit von einem einfacheren Ansatz ausgegangen werden, der auf Deardorff (1980) zurückgeht. Deardorff verwendet bei der Simulation von Stratocumulus Bewölkung einen Ansatz, der die turbulente Längenskala in Abhängigkeit der turbulenten Energie und der Auftriebsfrequenz beschreibt:

$$\Lambda_0 = \begin{cases} 0,54 \sqrt{\frac{B}{N^2}} & \text{für } N^2 > 0 \text{ und } \Lambda_0 < \Delta s \\ \Delta s & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.22)$$

$$\text{mit } N^2 = \frac{g}{\Theta} \frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial z}$$

$$\Delta s = (\Delta x + \Delta y + \Delta z)/3$$

Δs bezeichnet den mittleren Gitterpunktsabstand im Modell. Da sich diese Formulierung in Strömungen mit Stabilitätseinfluß bewährt hat (Chlond, 1991; Sykes et al., 1988) und eine dynamisch bestimmte Längenskalierung nach Lewellen (1977) im Falle dominanter Windscherungen nahezu identische Strömungen liefert wie bei Verwendung einer konstanten Längenskalierung, wird der Ansatz nach Deardorff (3.22) als stationäre Längenskala im Falle voll entwickelter Turbulenz verwendet. Darüberhinaus werden zur Beschreibung nicht vollentwickelter Turbulenz Transportprozesse durch Advektion und turbulente Diffusion berücksichtigt. Die momentane Längenskala nähert sich der stationären mit der bereits im Umverteilungsterm π_{ij} (3.16) verwendeten charakteristischen Zeitskala. Bei der Bestimmung der Auftriebsfrequenz wird zur Berücksichtigung aktiver Tracer die in (3.19) eingeführte potentielle Dichte σ verwendet.

3.5.4 Modellgleichungen zur Beschreibung von Turbulenz

Für die horizontale und vertikale Komponente der turbulenten kinetischen Energie in advektiver Form erhält man aus Gleichung (3.10) mit den Ausdrücken für die Terme höherer Ordnung (3.13, 3.16, 3.17) und für die Produktionsterme (3.18, 3.20), wobei molekulare Diffusion gegenüber turbulenter Diffusion vernachlässigt wird:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} B_{hor} &= -\overline{u_k} \frac{\partial}{\partial x_k} B_{hor} && \text{Advektion} \\
 &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{\rho} c_1 K_k \frac{\partial}{\partial x_k} B_{hor} && \text{turbulente} \\
 &&& \text{Diffusion} \\
 &+ 2 K_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_1} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_1} \right) && \text{Produktion} \\
 &&& \text{durch Scherung} \\
 &+ 2 K_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_2} \right) \\
 &- c_2 \frac{\sqrt{B}}{\Lambda} \left(B_{hor} - \frac{2}{3} B \right) && \text{Umverteilung} \\
 &- c_3 \frac{\sqrt{B}}{\Lambda} B_{hor} && \text{Dissipation}
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} B_{ver} &= -\overline{u_k} \frac{\partial}{\partial x_k} B_{ver} && \text{Advektion} \\
 &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{\rho} c_1 K_k \frac{\partial}{\partial x_k} B_{ver} && \text{turbulente} \\
 &&& \text{Diffusion} \\
 &+ 2 K_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_3} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_3} \right) && \text{Produktion} \\
 &&& \text{durch Scherung} \\
 &- 2 g \alpha_\sigma K_3 \frac{1}{\overline{\sigma}} \frac{\partial}{\partial z} \overline{\sigma} && \text{Produktion} \\
 &&& \text{durch Auftrieb} \\
 &- c_2 \frac{\sqrt{B}}{\Lambda} \left(B_{ver} - \frac{1}{3} B \right) && \text{Umverteilung} \\
 &- c_3 \frac{\sqrt{B}}{\Lambda} B_{ver} && \text{Dissipation}
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

Als Bestimmungsgleichung für die dynamisch bestimmte turbulente Längenskala ergibt sich aus Abschnitt 3.5.3:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \Lambda &= -\overline{u_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \Lambda && \text{Advektion} \\
 &+ \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} c_1 K_k \frac{\partial}{\partial x_k} \Lambda && \text{turbulente} \\
 & && \text{Diffusion} \\
 &- c_2 \frac{\sqrt{B}}{\Lambda} (\Lambda - \Lambda_0) && \text{Gleichgewichtsterm}
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

$$\text{mit } \Lambda_0 = \begin{cases} 0,54 \sqrt{\frac{B}{N^2}} & \text{für } N^2 > 0 \text{ und } \Lambda_0 < \Delta s \\ \Delta s & \text{sonst} \end{cases}$$

$$N^2 = -\frac{g}{\bar{\sigma}} \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial z}$$

$$\Delta s = (\Delta x + \Delta y + \Delta z)/3$$

Die turbulenten Austauschkoefizienten K_k bzw. K_σ entsprechen denen aus Gleichung (3.14) bzw. (3.21).

Um das Gleichungssystem (3.23, 3.24 und 3.25) zu schließen, müssen die empirischen Konstanten c_0 bis c_3 und α_σ noch festgelegt werden.

3.5.5 Empirische Konstanten

Die empirischen Konstanten sind durch den Vergleich mit unterschiedlichen Messungen bestimmt worden. Ein häufig verwendeter Satz von Konstanten lautet (Zilitinkevich et al., 1967; Mellor und Yamada, 1974; Yu, 1976; Lewellen, 1977):

$$\begin{aligned}
 c_0 &= 0,32 \\
 c_1 &= 0,80 \\
 c_2 &= 0,43 \\
 c_3 &= 0,13
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

Grundsätzlich können alle Konstanten noch von Einflußfaktoren abhängen, die in den Gleichungen für die turbulenten Energiekomponenten und die Längenskala nicht oder nur unvollständig berücksichtigt sind. Hierzu zählt zum Beispiel die Schichtungstabilität. Eine dimensionslose Kennzahl für den Zusammenhang zwischen Turbulenz und Schichtungstabilität ist die Richardson Zahl, die gebildet wird aus dem Quotienten der Produktionsterme für Auftrieb und Windscherung. Durch eine entsprechende Berücksichtigung der Richardson Zahl in der Konstanten für den Impulsaustausch c_0 (Sykes et al., 1988; Chlond, 1991), läßt sich in vielen Fällen eine bessere Übereinstimmung mit den Beobachtungen erzielen.

Da die Richardson Zahl durch lokale Gradienten bestimmt wird, ermöglicht sie keine adäquate Beschreibung turbulenter Strömungen, in denen der Transport turbulenter Eigenschaften eine wesentliche Rolle spielt. Daher soll im folgenden dem Ansatz von Deardorff (1980) der Vorzug gegeben werden, der den Einfluß der Schichtungsstabilität in der Konstanten des Dissipationstermes c_3 statt in c_0 berücksichtigt. Begründet wird dieser Ansatz durch Messungen von Dickey und Mellor (1980), die eine Reduktion der effektiven Dissipation turbulenter Energie bei zunehmender Stabilität festgestellt haben. Als dimensionslose Kennzahl für den Einfluß der Schichtung auf die Turbulenz wird der Quotient aus turbulenter Längenskala und mittlerem Gitterpunktabstand verwendet (Deardorff, 1980):

$$c_3 = 0,067 + 0,18 \frac{\Lambda}{\Delta_s} \quad (3.27)$$

Der oben angegebene Wert für $c_3 = 0,13$ liegt etwa in der Mitte des Wertebereichs von (3.27).

Die inverse Prandtl Zahl α_x einer Größe x ist das Verhältnis der Austauschkoeffizienten für diese Größe und den Impuls. Für den turbulenten Transport von Wärme ist α_θ stabilitätsabhängig. In der Grenzschichtmodellierung wird α_θ gewöhnlich über die Richardson Zahl nach Businger et al. (1971) parametrisiert. Die von Businger gemessenen Beziehungen gelten dabei streng nur für die Prandtl Schicht, die ungefähr die untersten 50 m der Atmosphäre umfaßt. Für die planetare Grenzschicht von etwa 1000 - 2000 m Mächtigkeit wird angenommen, daß die Beziehungen der Prandtl Schicht weiterhin in erster Näherung gültig sind. Ein solcher Ansatz kann hier nicht gewählt werden, da bei den mit ATHAM simulierten Vulkaneruptionen Turbulenz überwiegend in der freien Atmosphäre erzeugt wird, wo die Voraussetzungen der Grenzschichtnäherung nicht gegeben sind. Der Ansatz von Deardorff (1980) bietet die Möglichkeit statt der diagnostischen Richardson Zahl die prognostisch bestimmte turbulente Längenskala zu verwenden:

$$\alpha_\theta = 1 + 2 \frac{\Lambda}{\Delta_s} \quad (3.28)$$

Die inverse Prandtl Zahl für Wärme liegt zwischen $\alpha_\theta = 1$ im Grenzfall extrem stabiler Schichtung und $\alpha_\theta = 3$ für neutrale und instabile Schichtung. Der Ansatz (3.28) reproduziert somit nicht den für die Prandtl Schicht gemessenen Wert von $\alpha_\theta = 1,35$ im Falle neutraler Schichtung. Da er sich in Simulationen mit starkem Stabilitätseinfluß bewährt hat (Deardorff, 1980), soll Ansatz (3.28) im folgenden dennoch verwendet werden.

Für Tracer sind die inversen Prandtl Zahlen abhängig von Partikeleigenschaften wie Größe und Oberflächenrauigkeit. Es ist plausibel, daß Partikel aufgrund ihrer Trägheit einen kleineren Austauschkoeffizienten besitzen als der Impuls, so daß die inversen Prandtl Zahlen für Partikel kleiner eins sind. Da zum einen keine genauen Messungen für die turbulenten Eigenschaften vulkanischer Aschepartikel verfügbar

sind und zum anderen die Partikeleigenschaften bei Vulkanausbrüchen extrem variabel sind, wurde für die folgenden Untersuchungen für alle Partikel der gleiche Wert für die Prandtl Zahl gewählt:

$$\alpha_i = \alpha_q = 0,75 \quad \text{mit } i = 1, \dots, N_t \quad (3.29)$$

Im Zuge einer quantitativen Modellvalidierung an einem Fallbeispiel müssen die inversen Prandtl Zahlen genauer bestimmt werden. Für die hier durchgeführten qualitativen Modellstudien ist eine genauere Kenntnis nicht erforderlich.

3.5.6 Kompressibilitätseffekte

In den bisherigen Ableitungen der turbulenten Energiegleichungen wurden die turbulenten Dichte- und Druckkorrelationen $-\overline{u_i' \rho'}$ und $\overline{u_i' P'}$ vernachlässigt, Dichtefluktuationen lediglich im Auftriebsterm berücksichtigt. Die mit den Dichte- und Druckfluktuationen verbundenen Kompressibilitätseffekte können aber nicht mehr vernachlässigt werden, wenn die Strömungsgeschwindigkeit nicht mehr klein gegenüber der Schallgeschwindigkeit ist oder wenn starke Dichtegradienten in der Strömung auftreten.

Die Scherungsmachzahl der Strömung M_s ist ein Maß für die relative Geschwindigkeitendifferenz verschiedener Teile der Strömung:

$$M_s = \frac{\Delta U}{c_s}$$

c_s ist die lokale mittlere Schallgeschwindigkeit, ΔU die Differenz der Strömungsgeschwindigkeiten von zwei benachbarten Schichten, zwischen denen ein turbulenter Austausch stattfindet. Im Falle eines kompressiblen Jets, wie er bei Vulkaneruptionen in Kraternähe gegeben ist, ist ΔU gerade die Vertikalgeschwindigkeit des Jets. Kompressibilitätseffekte aufgrund der Machzahl sind für $M_s < 1$ vernachlässigbar (Favre, 1964; Bradshaw, 1977). Die für $M_s > 1$ bedeutenden Machzahl Effekte können sich sowohl in einer Stabilisierung als auch in einer Destabilisierung der turbulenten Strömung äußern (Simone et al., 1997). Die üblicherweise beobachtete Wirkung der Kompressibilität des Mediums ist eine Stabilisierung der Strömung und eine damit verbundene Unterdrückung von Turbulenz. Sie tritt immer dann auf, wenn Divergenzen bzw. Konvergenzen im Windfeld auftreten. Diese intrinsische Kompressibilität kann durch die turbulente Machzahl

$$M_t = \frac{\sqrt{B}}{c_s}$$

bestimmt werden. Für $M_s > 3$ ist ein Sättigungseffekt zu beobachten (Zeman, 1992). Eine Destabilisierung der Strömung bzw. Verstärkung von Turbulenz durch Kompressibilitätseffekte kann bei extremen Scherungen in der Strömung auftreten. Ein

Maß für diesen Einfluß ist die sogenannte Distortion Machzahl M_d , die anschaulich ein Maß für die Änderung der Machzahl über die Ausdehnung eines turbulenten Wirbels ist (Durbin und Zeman, 1992):

$$M_d = S \frac{\Lambda}{c_s}$$

mit $S = \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right)^{1/2}$

Eine destabilisierende Wirkung existiert nur für kleine Werte des dimensionslosen Zeitmaßes $S \cdot t$, dem Produkt aus mittlerer Windscherung S und der Zeit t . Der Kompressibilitätseinfluß wirkt sich für $S \cdot t > 4$ wieder stabilisierend auf die Strömung aus (Simone et al., 1997). Da eine Destabilisierung nur auf sehr kleinen räumlichen und zeitlichen Skalen auftritt, die mit ATHAM nicht betrachtet werden sollen, kann die Destabilisierung der Strömung im folgenden vernachlässigt werden.

Im Falle einer Vulkaneruption sind Machzahl Effekte nur in unmittelbarer Kraternähe von Bedeutung: Da dort die Schallgeschwindigkeit wegen der hohen Partikelanteils deutlich reduziert ist, können Machzahlen $M_s > 2$ erreicht werden. Mit zunehmendem Abstand vom Krater sinkt die Strömungsgeschwindigkeit rasch unter die Schallgeschwindigkeit.

Trotz verbesserter Meßmethoden und direkter Modellierung turbulenter Phänomene ist bislang nicht geklärt, ob die beobachteten Machzahl Effekte durch eine reduzierte Produktion von Turbulenz bewirkt werden (Sarkar, 1995; Simone et al., 1997) oder durch eine erhöhte Dissipation turbulenter Energie (Zeman, 1990; Durbin und Zeman, 1992). An dieser Stelle soll der Argumentation von Zeman (1990) gefolgt werden, da sie die Ableitung einer hier anwendbaren Parametrisierung erlaubt. Demnach lassen sich die beobachteten Machzahl Effekte in den unter der Inkompressibilitätsannahme abgeleiteten Gleichungen für die turbulente Energie durch einen Korrekturterm für die Dissipation (3.17) beschreiben. Dieser Korrekturterm wird vollständig durch die turbulente Machzahl M_t bestimmt. Ergänzt man diese Korrektur zu der empirischen Konstante c_3 für den Dissipationsterm, so erhält man:

$$c_3^* = c_3 (1 + c_4 F(M_t)) \tag{3.30}$$

$$\text{mit } F(M_t) = \begin{cases} 1 - \exp\left(-\left[\frac{M_t - 0,1}{0,6}\right]^2\right) & \text{für } M_t > 0,1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$c_4 = 0,75$$

Turbulente Druck- bzw. Dichtekorrelationen können theoretisch auch bei geringen Strömungsgeschwindigkeiten für die Entwicklung von Turbulenz eine Rolle spielen, falls ein Gradient in der mittleren Dichte der turbulenten Strömung vorhanden ist. Allerdings ist dieser Einfluß vernachlässigbar: Brown und Roshko (1974) stellten in Experimenten fest, daß selbst ein Dichteunterschied von $\rho_1/\rho_2 = 7$ zwischen einem kompressiblen Jet und umgebenden Fluid die Verbreiterung des Jets praktisch

nicht veränderte. Die bei Vulkaneruptionen auftretenden Dichteunterschiede zwischen eruptiertem Gemisch und Atmosphäre sind meist deutlich geringer. Die turbulenten Dichtekorrelationen können auch weiterhin vernachlässigt werden, zumindest wenn man unterstellt, daß das Partikel-Gas Gemisch als homogen betrachtet werden kann und granuläre Effekte keinen Einfluß haben. Es ist dann ausreichend, den Einfluß des mittleren Dichtegradients auf die Schichtungsstabilität durch die Verwendung der potentiellen Dichte bei der Entwicklung von Turbulenz zu berücksichtigen.

3.5.7 Turbulente Austauschkoeffizienten

Verwendet man die empirischen Konstanten aus (3.26) bis (3.29), so ist durch (3.23), (3.24) und (3.25) ein vollständiges System von drei gekoppelten linearen Differentialgleichungen zur Bestimmung der turbulenten Energiekomponenten und der turbulenten Längenskala gegeben. Aus diesen Größen lassen sich - wie im Prinzip bereits angegeben - alle turbulenten Austauschkoeffizienten bestimmen. Man erhält als Austauschkoeffizienten

$$\begin{aligned} \text{für Impuls} \quad K_1 = K_2 &= K_{hor} = c_0 \Lambda \sqrt{3/2 B_{hor}} \\ &K_3 = K_{ver} = c_0 \Lambda \sqrt{3 B_{ver}} \\ \\ \text{für Wärme} \quad K_{1,\theta} = K_{2,\theta} &= \alpha_\theta K_{hor} \\ &K_{3,\theta} = \alpha_\theta K_{ver} \\ \\ \text{für Tracer} \quad K_{1,q} = K_{2,q} &= \alpha_q K_{hor} \\ &K_{3,q} = \alpha_q K_{ver} \end{aligned}$$

Diese Koeffizienten werden in den turbulenzgemittelten Gleichungen (siehe Kapitel 2.2) verwendet, um den Einfluß turbulenter, subskaliger Prozesse zu berücksichtigen.

3.6 Numerische Behandlung der turbulenten Gleichungen

Zur Bestimmung der turbulenten Austauschkoeffizienten muß ein System von drei gekoppelten, linearen Differentialgleichungen für die turbulenten Energiekomponenten (3.23), (3.24) und die turbulente Längenskala (3.25) gelöst werden. Die Schwierigkeit bei der Lösung dieses Gleichungssystems besteht darin, daß die einzelnen Gleichungen nicht nur über die Austauschkoeffizienten miteinander gekoppelt sind, sondern daß die turbulenten Größen in Dissipations- und Umverteilungsterm der Gleichungen (3.23) und (3.24) direkte Beiträge liefern. Um diese Kopplung im impliziten Teil der Lösung zu erfassen, wird für das gesamte Gleichungssystem eine gemeinsame Matrixgleichung aufgestellt. Wegen der in den Differentialgleichungen

auftretenden räumlichen Ableitungen sind die Lösungen an einem festen Gitterpunkt mit den Größen der Nachbarpunkte verknüpft. Man erhält Blocktridiagonalmatrizen der Blockgröße drei, wenn man das Gleichungssystem in einer ausgezeichneten Raumrichtung direkt löst. Ist keine Wechselwirkung zwischen den drei Gleichungen des Gleichungssystems vorhanden, sind nur die Hauptdiagonalen der Blockmatrizen belegt. Dissipations- und Umverteilungsterme liefern linearisierte Beträge auf den Nebendiagonalen. Die Blocktridiagonalmatrizen werden wie die Tridiagonalmatrizen der dynamischen Gleichungen mit der in Kapitel 2.2.7 beschriebenen Technik gelöst.

Kapitel 4

Beschreibung und Auswertung der Experimente

Im folgenden Kapitel sollen Experimente vorgestellt und diskutiert werden, die mit dem in den vorangegangenen Kapiteln beschriebenen Plume-Modell ATHAM durchgeführt wurden.

Obwohl ATHAM prinzipiell dreidimensional formuliert ist, beschränken sich die Simulationen auf die in Kapitel 2.2.7 angegebenen zweidimensionalen Modellversionen. Ergebnisse aus einer dreidimensionalen Simulation, die eine ältere Modellversion zugrunde lag, finden sich als Film dargestellt im Internet unter der Adresse: <http://www.dkrz.de/dkrz/visu/video/vulkan2.html>. Mit der aktuellen Fassung von ATHAM in impuls- und massenerhaltender Form unter Berücksichtigung subskaliger Prozesse durch ein Turbulenzschließungsschema konnte eine erneute dreidimensionale Simulation wegen knapper Computerressourcen aus Zeitgründen nicht durchgeführt werden. Aufgrund der gravierenden Modellverbesserungen wird auf eine Diskussion der veralteten dreidimensionalen Simulation an dieser Stelle verzichtet.

Ziel der Experimente ist die Simulation mesoskaliger vulkanischer Eruptionswolken für unterschiedliche Eruptionstypen mit Horizontalausdehnungen bis 200 km und Plumehöhen von etwa 25 km. Daneben soll der Einfluß der umgebenden Atmosphäre und der Mikrophysik auf die Plumeentwicklung diskutiert werden. Um den Einfluß eines Hintergrundwindfeldes und räumliche Asymmetrien in einer horizontalen Raumrichtung zu erfassen, wird bei der Untersuchung der mesoskaligen Plumeentwicklung die zweidimensionale Modellversion ohne Zylinderkoordinaten verwendet (vergleiche hierzu den Abschnitt 'Modellversionen' in Kapitel 2.2.7).

Die zugehörigen Simulationen wurden mit einem Gitterpunktabstand von 100 m in Kraternähe durchgeführt. Die Modellauflösung beträgt bei dem verwendeten nichtäquidistanten Gitter mit 127 Gitterpunkten an den seitlichen Modellrändern etwa 5 km. Es ergibt sich eine Krateröffnung von 300 m, da der Vulkanantrieb auf drei Gitterpunkten definiert ist. Reale Krateröffnungen weisen dagegen häufig Durch-

messer im Bereich von 50 m auf (Schmincke, 1996), so daß der Vulkanantrieb für eine größere Öffnung entsprechend skaliert werden muß. Anfangsbedingungen und Skalierung werden im nächsten Abschnitt am Beispiel einer plinianischen Eruption beschrieben, bevor das Referenzexperiment diskutiert wird. Dieses Referenzexperiment dient als Basis für die folgenden Sensitivitätsexperimente.

4.1 Typische Anfangsbedingungen für eine plinianische Eruption

Bei plinianischen Eruptionen handelt es sich um über mehrere Stunden dauernde, quasikontinuierliche Eruptionen volatilreichen, hochviskosen Magmas. Sie erzeugen konvektive Eruptionssäulen, die bis weit in die Stratosphäre reichen können. Hohe Masseneruptionsraten und eine intensive Fragmentierung des Magmas erzeugen durch Windverdriftung weit verbreitete Ascheablagerungen. Durch teilweisen oder völligen Kollaps der Eruptionssäule können pyroklastische Ströme oder Glutlawinen entstehen, aus denen sich in gewisser Entfernung vom Krater coignimbrite Eruptionssäulen entwickeln können. Phreatoplinianische Eruptionen sind durch zusätzlichen Kontakt mit externem Wasser - etwa Grundwasser - gekennzeichnet.

Das Partikel-Gas Gemisch verläßt den Schlot mit Schallgeschwindigkeit unter hohem Druck, der ein Vielfaches des Atmosphärendrucks betragen kann, bei Temperaturen von typischerweise 1000 K bis 1400 K und einem Gasanteil in der Größenordnung von drei bis fünf Gewichtsprozent (Woods, 1995). Ist der Einfluß der Kratergeometrie auf die Dekompressionsphase des Gemisches vernachlässigbar, d.h. ist der Öffnungswinkel des Kraters groß genug, so erreicht das Gemisch am Ende der Dekompressionsphase eine Geschwindigkeit, die etwa dem Doppelten der Schallgeschwindigkeit entspricht und nahezu unabhängig vom Überdruck im Schlot ist (Woods und Bower, 1995). Die Schallgeschwindigkeit im Partikel-Gas Gemisch ist bei vollständiger Gas-Teilchen Kopplung, wie sie auch in ATHAM durch die Annahme des dynamischen und thermischen Gleichgewichts vorausgesetzt wird, deutlich geringer als in einem reinen Gas. Für einen konstanten Gasanteil läßt sich die Schallgeschwindigkeit sofort aus der Wellengleichung für den Druck (2.14) in Kombination mit den Gleichungen (2.6) und (2.10) ablesen:

$$\begin{aligned} c_s^2 &= \frac{c_{p,g}}{c_{v,g}} \frac{P}{\rho} \\ &= \frac{c_{p,g}}{c_{v,g}} \frac{P}{\rho_g} \frac{\rho_g}{q_g \rho} q_g \\ &= \frac{c_{p,g}}{c_{v,g}} (c_{p,g} - c_{v,g}) T \frac{V}{V_g} q_g \end{aligned}$$

Bei einem Gasanteil $q_g \approx 3\%$ entspricht das Gasvolumen V_g wegen des großen Dichteunterschieds zwischen Gas und Partikeln nahezu dem Gesamtvolumen V , so daß die Schallgeschwindigkeit des Gemisches in guter Näherung unabhängig von den

	Asche	Lapilli
ρ [kg/m ³]	1500	1000
r [mm]	0,06	2,00
Δw^* [m/s] ($P=1$ atm)	0,64	7,62

Tabelle 4.1: Eigenschaften von Aschepartikeln und Lapilli: Neben Dichte ρ und Radius r der in den Simulationen verwendeten Partikel ist ihre stationäre Fallgeschwindigkeit Δw^* gegenüber Luft bei Atmosphärendruck angegeben.

Eigenschaften der Partikelphase ist:

$$c_s \approx \sqrt{\frac{c_{p,g}}{c_{v,g}} (c_{p,g} - c_{v,g}) T q_g}$$

Für ein Gemisch mit einer Temperatur von $T = 1200$ K und einen Gasanteil von $q_g = 3\%$ erhält man somit für die Schallgeschwindigkeit $c_s \approx 140$ m/s, falls der Gasanteil zu 67% aus Wasserdampf besteht und sich die übrigen 33% wie trockene Luft verhalten. Unter Vernachlässigung des Einflusses der Kratergeometrie beträgt die Geschwindigkeit eines solchen Gemisches am Ende der Dekompressionsphase bei einer plinianischen Eruption daher ungefähr 250 m/s.

Die Partikelphase des Gemisches läßt sich grob in zwei Komponenten unterteilen: Die juvenile Komponente entsteht durch Fragmentierung des im Schlot aufsteigenden Magmas, wogegen die lithische Komponente ihre Ursache in der Erosion von Nebengestein in Schlot und Krater hat. Außer in den chemischen Eigenschaften unterscheiden sich die beiden Komponenten in ihren physikalischen Eigenschaften, die für die Plumemodellierung interessant sind: Lithische Partikel besitzen einen vernachlässigbaren Gasblasenanteil und damit unabhängig von ihrer Größe eine mittlere Dichte von 2600 kg/m³. Der Blasenanteil juveniler Partikel führt zu einer deutlich geringeren mittleren Dichte, die um bis zu einer Größenordnung unter der der lithischen Komponente liegen kann (Walker et al., 1971; Macedonio et al., 1988).

Im Mittel nimmt die Dichte juveniler Partikel mit zunehmender Größe wegen eines steigenden Blasenanteils ab. Da juvenile Partikel nicht nur eine deutlich geringere Dichte als lithische Partikel besitzen, sondern im Mittel auch rauhere Oberflächen aufweisen, erreichen juvenile Partikel wesentlich kleinere Fallgeschwindigkeiten als lithische Partikel gleicher Größe. Die Plumeentwicklung wird daher nachhaltiger durch die juvenile Komponente beeinflusst als durch die lithische, die vergleichsweise schnell durch Sedimentation aus dem Plume entfernt wird. Eine Unterscheidung juveniler und lithischer Partikel aufgrund ihrer Größe läßt sich allerdings allgemein nicht treffen, wie Untersuchungen am Sedimentationsfächer der Vesuveruption von 79 n.Chr. zeigen (Macedonio et al., 1988): Der Anteil lithischer Partikel zeigt nur eine

	Realistische Eruption	Referenzexperiment
d_e [m]	60	300
w_e [m/s]	250	131
T_e [K]	1200	727
$q_{g,e}$ [Gew. %]	3,0	49,1
$\frac{q_{v,e}}{q_{g,e}}$ [%]	66,7	2,1
ρ_e [kg/m ³]	5,52	0,80
$\frac{\partial m_e}{\partial t}$ [10 ⁶ kg/s]	3,90	7,42

Tabelle 4.2: Vulkanische Parameter: Den realistischen Anfangsbedingungen sind diejenigen gegenübergestellt, die sich durch Skalierung auf eine Krateröffnung mit 300 m Durchmesser ergeben.

geringe Variation mit der Größe und liegt zwischen 25 und 45 Gewichtsprozent. Um den Einfluß der Partikelphase auf die Plumedynamik modellieren zu können, müssen daher nicht nur Partikel unterschiedlicher Größe, sondern auch unterschiedlicher Dichte bei gleicher Größe berücksichtigt werden.

Im folgenden werden zwei Partikelklassen unterschieden, die mit Asche und Lapilli bezeichnet werden. Es wird angenommen, daß zwei Drittel der Partikel aus Asche, ein Drittel aus Lapilli bestehen. Ihre Größe und Dichte in Tabelle 4.1 wurden so gewählt, daß ihre Größenverteilung repräsentativ für plinianisch bis phreatomagmatische Eruptionen ist (Woods und Bursik, 1991) - vergleiche auch Abbildung 2.1 - und gleichzeitig eine Abnahme der mittleren Dichte mit der Größe berücksichtigt, die trotz der lithischen Partikelkomponente besteht. Die stationären Fallgeschwindigkeiten der Aschepartikel und Lapilli unterscheiden sich bereits in Bodennähe um eine Größenordnung, so daß sich ihr unterschiedlicher Einfluß auf die Plumeentwicklung schon bei relativ kurzen Simulationszeiten bemerkbar macht. Dennoch ist auch die stationäre Fallgeschwindigkeit der Lapilli klein genug, um mit der Annahme des in Kapitel 2.1 diskutierten dynamischen Gleichgewichts verträglich zu sein.

In Tabelle 4.2 sind die Anfangsbedingungen für eine realistische plinianische Eruption und das simulierte Referenzexperiment aufgeführt. Das gesamte Modellgebiet des Referenzexperimentes umfaßt $250 \times 50 \text{ km}^2$ bei einer Auflösung von 100 m horizontal und vertikal in der Nähe des Kraters. Die Krateröffnung besitzt in der Simulation einen Durchmesser von $d_e=300 \text{ m}$, wogegen für die reale Eruption ein Durchmesser von 60 m angenommen wird. Die für das Referenzexperiment gewählte Skalierung des Vulkanantriebes gewährleistet, daß die Massen-, Impuls- und Energieflüsse weitgehend konstant bleiben.

Im Referenzexperiment entsprechen die Massenflüsse von Wasserdampf und Partikelphasen, Asche und Lapilli, denen der realistischen Eruption. Die Eruptionsgeschwindigkeit wird so bestimmt, daß der Impulsfluß der Eruption konstant bleibt. Bei einer Vergrößerung der Querschnittsfläche des Kraters nimmt daher die effektive Eruptionsgeschwindigkeit ab. Damit gleichzeitig die Massenflüsse von Partikeln konstant bleiben, ist eine Erhöhung des Gasanteils $q_{g,e}$ am eruptierten Gemisch unumgänglich. Anschaulich bedeutet dies die Annahme, daß bereits am Krater ein Einmischen von Umgebungsluft, für das Modell präeruptiv, stattgefunden hat. Durch dieses Einmischen von Umgebungsluft wird dem Plume kein Impuls zugeführt, wodurch eine unabhängige Festlegung von Massenflüssen und Impulsfluß möglich wird. Der Fluß an kinetischer Energie ist gegenüber der realistischen Eruption nahezu halbiert. Da jedoch kinetische Energie durch turbulente Diffusion dissipiert, bzw. in thermische Energie umgewandelt wird, während der Impuls erhalten bleibt, ist ein konstanter Impulsfluß einem Fluß konstanter kinetischer Energie bei der Skalierung des Vulkanantriebs vorzuziehen.

Da die umgebende Atmosphäre in Kraternähe eine von Null verschiedene thermische Energie besitzt, erhöht sich durch die Verdünnung des Gemisches der Fluß thermischer Energie durch die Eruption, obwohl die Eruptionstemperatur T_e reduziert wird. Der Wasserdampf der umgebenden Atmosphäre erhöht prinzipiell durch das fiktive präeruptive Entrainment auch den Massenfluß von Wasserdampf. Da jedoch das Einmischen von Wasserdampf während der Eruption proportional zum Umfang des Plumes ist, ist durch die Simulationen in gröberer Auflösung bereits eine Überschätzung des Entrainments von Wasserdampf aus der umgebenden Atmosphäre in den Plume zu erwarten. Diese Überschätzung wird durch eine verringerte Entwicklung von Turbulenz an den Plumerändern nur zum Teil ausgeglichen. Auf eine Erhöhung des Wasserdampfstromes durch die Verdünnung des Gemisches wurde daher verzichtet, da dies eine weitere Überschätzung des vertikalen Wasserdampftransportes im Plume zur Folge hätte.

Durch die bei der Skalierung notwendige Verdünnung des eruptierten Gemisches steigt der Gasanteil von ursprünglich drei auf fast fünfzig Gewichtsprozent an, wodurch die mittlere Dichte des eruptierten Gemisches ρ_e auf einen Wert reduziert wird, der 15 % unterhalb der Dichte der umgebenden Atmosphäre in Höhe des Kraters liegt. Der Wasserdampfanteil der Gasphase $q_{v,e}/q_{g,e}$ reduziert sich durch die Skalierung von ursprünglich 67 % auf etwa 2 % und ist damit in die Größenordnung des Wertes der umgebenden Atmosphäre in Höhe des Kraters abgesunken, der bei knapp 1 % liegt.

Die notwendige Skalierung des Vulkanantriebes für das Referenzexperiment hat eine deutliche Änderung der Anfangsbedingungen zur Folge. Quantitativ richtige Aussagen sind daher aufgrund von skalierten Experimenten nur mit Einschränkung zu erwarten, jedoch ermöglichen sie eine Vielzahl qualitativer Studien des mesoskaligen Plumes bei geringem Bedarf an Computerressourcen.

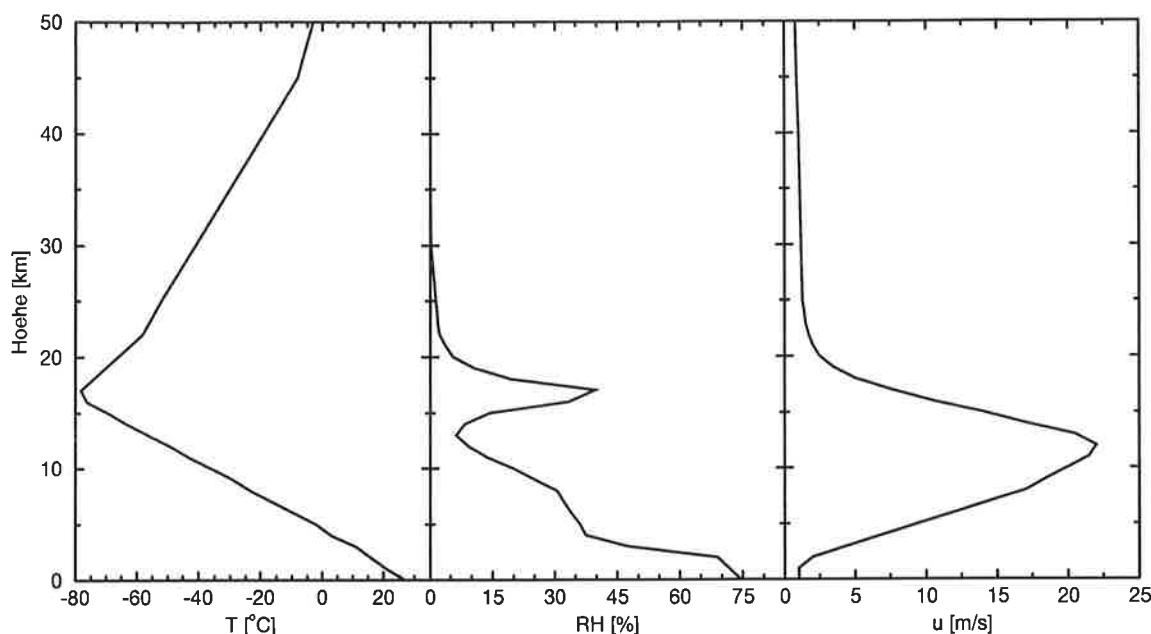


Abbildung 4.1: Meteorologische Randbedingungen für das Referenzexperiment: Die Vertikalprofile von Temperatur (T) und relativer Feuchte (RH) entsprechen tropischen Bedingungen (McClatchey et al., 1972), das Windprofil (u) entstammt ECWMF - Reanalysedaten (Gibson et al., 1997).

4.2 Das Referenzexperiment

Neben den in Tabelle 4.2 spezifizierten vulkanischen Parametern müssen für das Referenzexperiment noch der zeitliche Verlauf der Eruption, die Topographie und die atmosphärischen Bedingungen festgelegt werden. Die für das Referenzexperiment verwendete Topographie und der zeitliche Verlauf der Eruption ist für alle in diesem Kapitel diskutierten Experimente identisch: Die Krateröffnung befindet sich in 2 km Höhe, der Vulkan ist insgesamt 3 km hoch, die Kaldera hat einen Durchmesser von 2,5 km. Innerhalb von zehn Sekunden wird die maximale Eruptionsgeschwindigkeit w_e erreicht, um dann während der folgenden 25 Minuten konstant zu bleiben. In den letzten Minuten der insgesamt dreißig Minuten dauernden Eruptionsphase nimmt die Eruptionsgeschwindigkeit wieder exponentiell ab. Bei Verwendung zweidimensionaler kartesischer Koordinaten mit Windprofil wird vor der Eruption eine 15 minütige Einschwingphase berechnet, damit sich eine der Topographie angepaßte Grenzschicht ausbilden kann.

Die meteorologischen Randbedingungen für Feuchte und Temperatur entsprechen tropischen Bedingungen (McClatchey et al., 1972) und sind in Abbildung 4.1 dargestellt. Die Tropopause befindet sich in 17 km Höhe. Wegen der dort herrschenden niedrigen Temperaturen kommt es zu einem Anstieg der relativen Feuchte im Tropopausenbereich, obwohl die spezifische Feuchte monoton mit der Höhe abnimmt. Bei Verwendung von Zylinderkoordinaten kann anders als beim Linienvulkan ein horizontales Windfeld im Hintergrund ebensowenig berücksichtigt werden, wie der

Einfluß der Corioliskraft. Der Vulkan befindet sich dann gedanklich direkt auf dem Äquator. Das für das Referenzexperiment verwendete Windprofil ist den ECWMF-Reanalysedaten entnommen (Gibson et al., 1997). Im Modellgebiet strömt der Wind von links nach rechts.

Im folgenden wird das Referenzexperiment in der Modellversion des Linienvulkans vorgestellt. Anschließend wird diese Simulation mit der entsprechenden in Zylinderkoordinaten verglichen.

4.2.1 Das Referenzexperiment als Linienvulkan

Um die Funktionsweise des Modells ATHAM zu erläutern und einen Eindruck von der Art der Ergebnisse zu geben, wird zunächst die Druckwelle zu Beginn der Eruption im Referenzexperiment diskutiert, bevor der vollentwickelte Plume nach 25 min kontinuierlicher Eruption durch eine Reihe von Abbildungen vorgestellt wird.

Druckwelle zu Beginn der Eruption

Die Abbildungen 4.2 und 4.3 zeigen die durch die Eruption des Vulkans im Referenzexperiment ausgelöste Druckanomalie nach 20 sec bzw. 30 sec. Das Maximum der führenden Druckwelle entsteht mit dem Ende der 10 sec dauernden Anfangsphase, in der die Eruptionsgeschwindigkeit auf den maximalen Wert ansteigt. Da die Eruptionsgeschwindigkeit durch die Skalierung unterhalb der Schallgeschwindigkeit liegt, wird die Ausbreitung der simulierten Druckwelle nicht durch die Temperatur und den inkompressiblen Anteil des eruptierenden Gemisches beeinflusst. Aus der Entfernung der Maxima zum Krater und dem Abstand der Druckwellen zwischen den beiden gezeigten Zeitpunkten ergibt sich eine Ausbreitungsgeschwindigkeit, die mit der Schallgeschwindigkeit der Atmosphäre bei 20 °C übereinstimmt.

Die Reflektion aufwärts propagierender Energie in der stabil geschichteten Atmosphäre führt zu den Maximalwerten der Druckanomalie in Bodennähe. Wegen der zweidimensionalen kartesischen Koordinaten nimmt die Amplitude der Druckwelle linear mit dem Abstand zum Krater ab. Der Einfluß des mittleren Horizontalwindes bewirkt auf der windzugewandten Seite des Vulkans eine relative Überhöhung der Druckamplitude gegenüber der windabgewandten Seite. Die effektive vertikale Ausbreitungsgeschwindigkeit der Druckwelle ist durch die Eruptionsgeschwindigkeit erhöht: In Abbildung 4.3 ist daher das Maximum der Druckwelle vertikal 2800 m weiter vom Krater entfernt als horizontal.

ATHAM ist also in der Lage, das räumliche und zeitliche Verhalten von Schallwellen physikalisch korrekt wiederzugeben. Beschränkt wird die Darstellung von Schallwellen durch die räumliche Auflösung des Gitters: Die zugehörigen Wellenlängen müssen mindestens den doppelten Gitterpunktabstand besitzen.

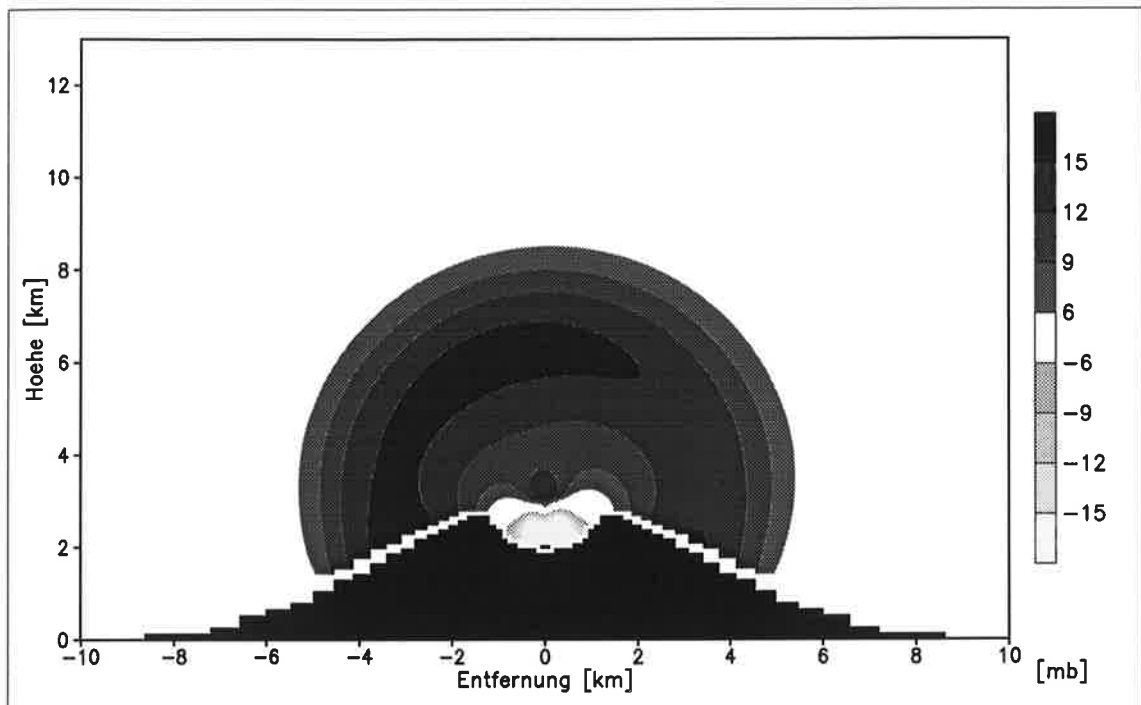


Abbildung 4.2: Druckanomalie 20 sec nach Eruptionsbeginn im Referenzexperiment

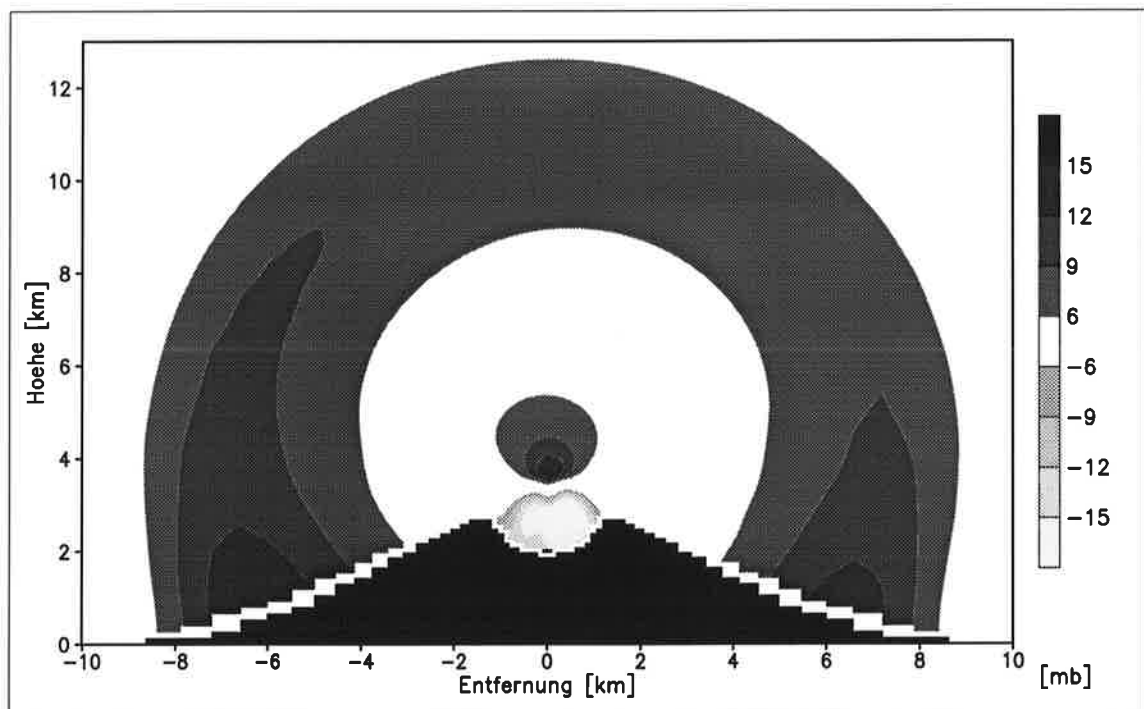


Abbildung 4.3: Druckanomalie 30 sec nach Eruptionsbeginn im Referenzexperiment

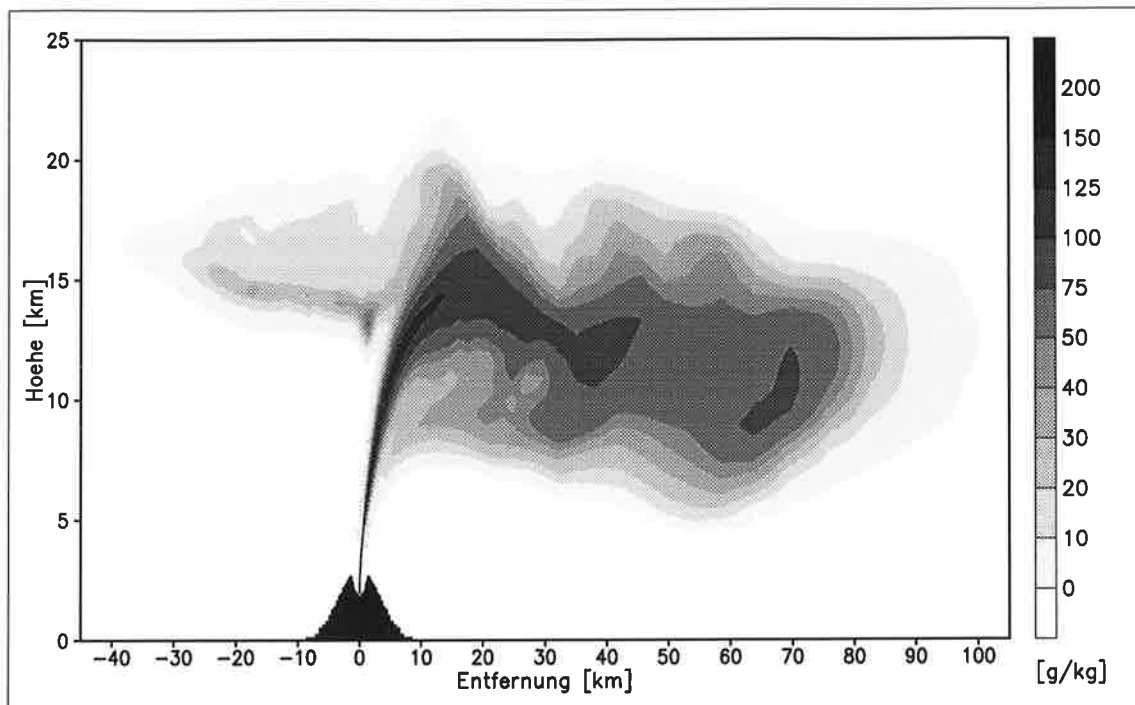


Abbildung 4.4: Ascheplume nach 25 min: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration von Asche für das Referenzexperiment.

Asche und Lapilli

Abbildung 4.4 zeigt den Ascheplume 25 min nach Beginn der Eruption als räumliche Verteilung der spezifischen Konzentrationen, die berechnet werden aus dem Verhältnis der Aschemasse zur Gesamtmasse in einem Volumenelement. Der Modellausschnitt entspricht etwa einem Viertel des insgesamt $250 \times 50 \text{ km}^2$ großen Modellgebietes.

Die geringen horizontalen Windgeschwindigkeiten im unteren Teil der Troposphäre ermöglichen ein nahezu senkrecht Aufsteigen des Plumes bei geringer Auffächerung bis zu einer Höhe von etwa 5 km. Oberhalb dieser Höhe beginnt der Plume sich allmählich nach rechts zur leewärtigen Seite zu neigen und mündet in die Schirmregion. Obwohl sich diese fast 40 km nach links entgegen dem anfänglichen Horizontalwind erstreckt, wird der weitaus größte Teil der Asche mit dem Wind nach rechts bis in eine Entfernung von 100 km vom Krater transportiert. In der linken Plumehälfte sind keine ausgeprägten horizontalen Strukturen erkennbar. Die Aschekonzentrationen sind durch eine vertikalen Schichtung geprägt mit den höchsten spezifischen Konzentrationen von etwa 25 g/kg am unteren Rand der Schirmregion in 14 km bis 15 km Höhe.

In der rechten Plumehälfte ist ein solches horizontales Band maximaler Konzentration nicht erkennbar. Es dominiert eine horizontal wellenartige Struktur, die in der Horizontalverteilung der Asche in Abbildung 4.5 zu Nebenmaxima in größerer Entfernung vom Krater führt. Die Horizontalverteilung wird berechnet aus den in

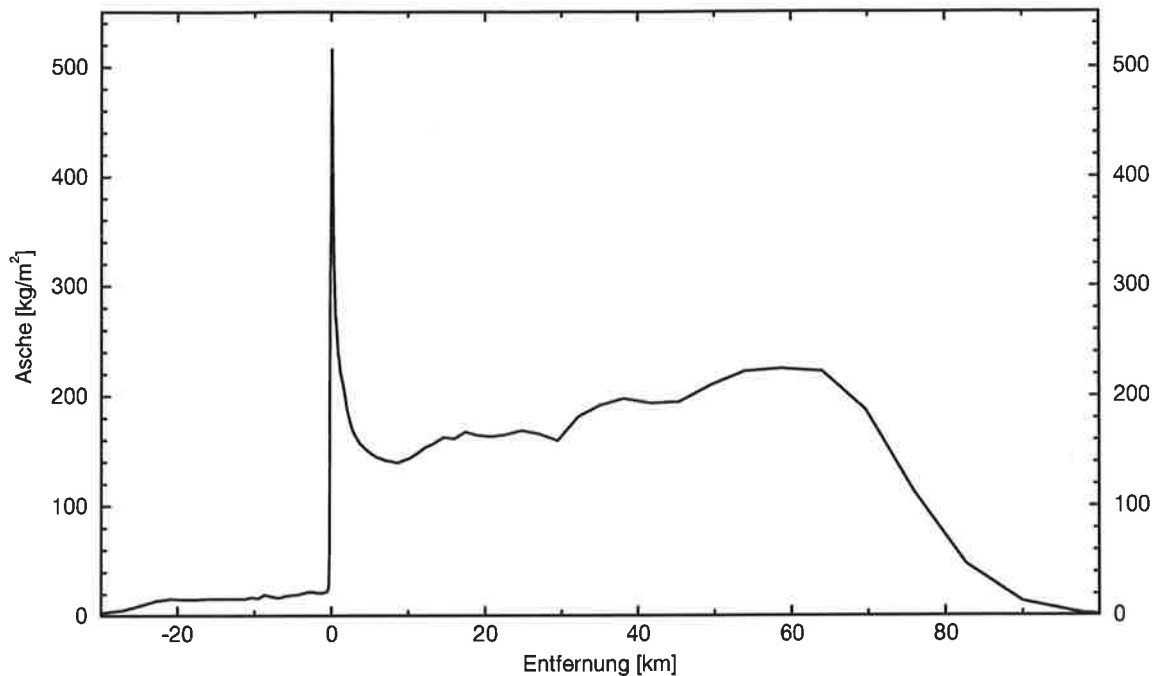


Abbildung 4.5: Horizontalverteilung für Asche nach 25 min: Dargestellt ist die Masse der Asche in einer vertikalen Säule für das Referenzexperiment.

einer vertikalen Säule enthaltenen Aschemassen. Auffallend ist, daß die Säulenkonzentrationen dieser Maxima mit wachsendem Abstand vom Krater zunehmen und nicht, wie vielleicht zunächst erwartet, abnehmen. Die Ursache für dieses Verhalten besteht in einer dynamischen Instabilität des Plumes: Aufgrund eines Impulsüberschusses kann das vom Krater aufsteigende Partikel - Gas Gemisch über seine Gleichgewichtshöhe, in der die potentielle Dichte des Gemisches mit der der umgebenden Atmosphäre übereinstimmt, hinaus aufsteigen. Der Übertrag von vertikalem Impuls durch das kontinuierlich aufsteigende Gemisch läßt den Plume solange aufsteigen, bis sich oberhalb dieser Gleichgewichtshöhe genügend Masse angesammelt hat, die diesen Impulsübertrag kompensiert. Der Plume breitet sich im folgenden verstärkt horizontal aus. Die damit verbundenen horizontalen Beschleunigungen im oberen Plumbereich führen dazu, daß die Höhe des Plumes wieder abnimmt, bis der vertikale Impulsübertrag in der aufsteigenden Säule nicht mehr durch das sich darüber befindliche Partikel - Gas Gemisch ausgeglichen wird. Der Plume kann wieder aufsteigen, ein neuer Zyklus beginnt. Da die Amplitude der Schwingung zu Beginn der Eruption am größten ist, befindet sich nach 25 min Eruption das am stärksten ausgeprägte Nebenmaximum in der Horizontalverteilung am leewärtigen Ende des Plumes.

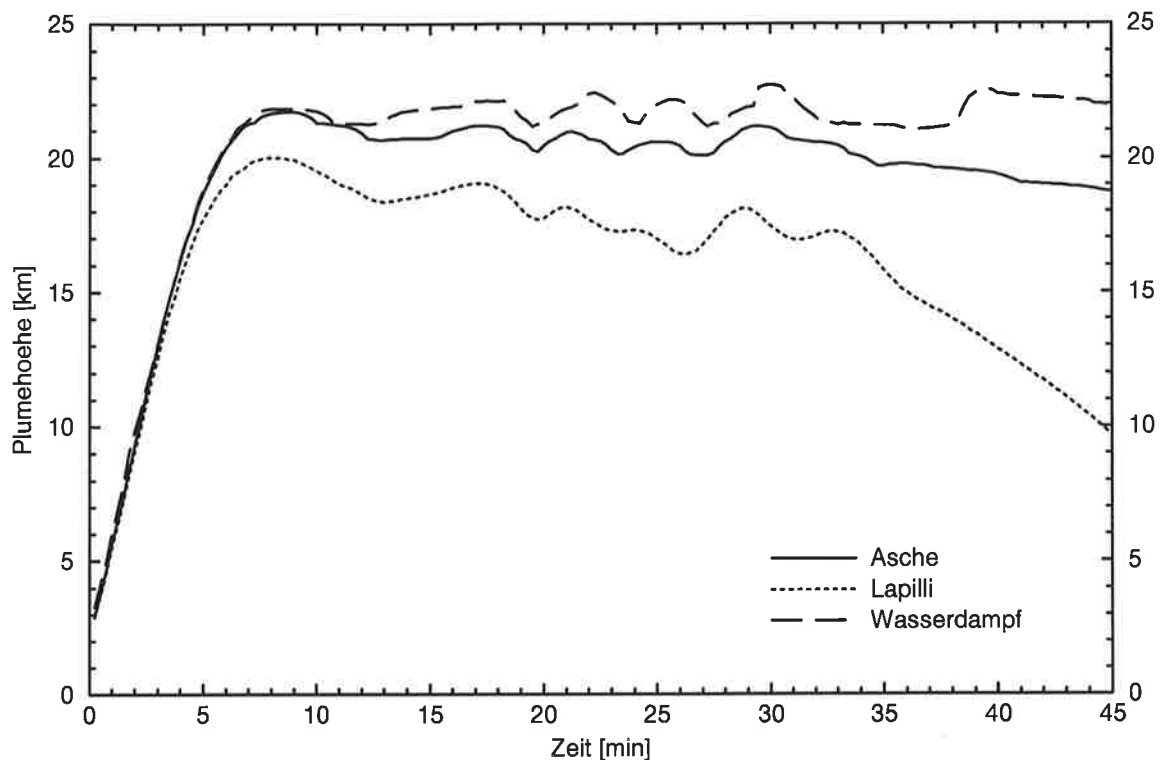


Abbildung 4.6: Plumehöhen: Dargestellt ist der Zeitverlauf der Plumehöhen für Asche, Lapilli und die Wasserdampfanomale für das Referenzexperiment.

Der Zeitverlauf der Plumehöhen für Asche, Lapilli und die Wasserdampfanomale in Abbildung 4.6 verdeutlicht diesen Sachverhalt noch einmal. Die Plumehöhen werden durch das Überschreiten einer minimalen Konzentration in der Vertikalverteilung bestimmt, die proportional zur Gesamtmasse der im Plume enthaltenen Masse der betrachteten Komponente ist. Die Wasserdampfanomale wird relativ zum initialisierten Wasserdampfprofil berechnet. Nach dem anfänglichen Aufsteigen des Plume mit einem deutlichen Überschwingen kommt es während der Phase der kontinuierlichen Eruption zu einer quasiperiodischen Schwingung der Plumehöhen, die mit dem Ende Eruption wieder abklingt. Die Amplitude der Schwingungen während der Eruption beträgt im Mittel 700 m bis 800 m und kann im Extremfall auch deutlich über einem Kilometer betragen.

Obwohl der Plume mit fast 22 km Höhe etwa 5 km in die Stratosphäre eindringt, befindet sich nach 25 min mit 3,5 % nur ein geringer Teil der Masse des Ascheplumes tatsächlich in der Stratosphäre. Der größte Teil der Asche gelangt entweder erst gar nicht dorthin oder sinkt relativ rasch in die Troposphäre zurück. Der maßgebliche Mechanismus für das Zurücksinken liegt nicht in der Sedimentation der Aschepartikel, sondern in dem beschriebenen Überschießen des Plumes. Die Sedimentationsgeschwindigkeit der Aschepartikel ist auch in Tropopausenhöhe mit 2 m/s recht gering, so daß sich 25 min nach Beginn der Eruption noch praktisch die gesamte eruptierte Aschemasse in der Atmosphäre befindet.

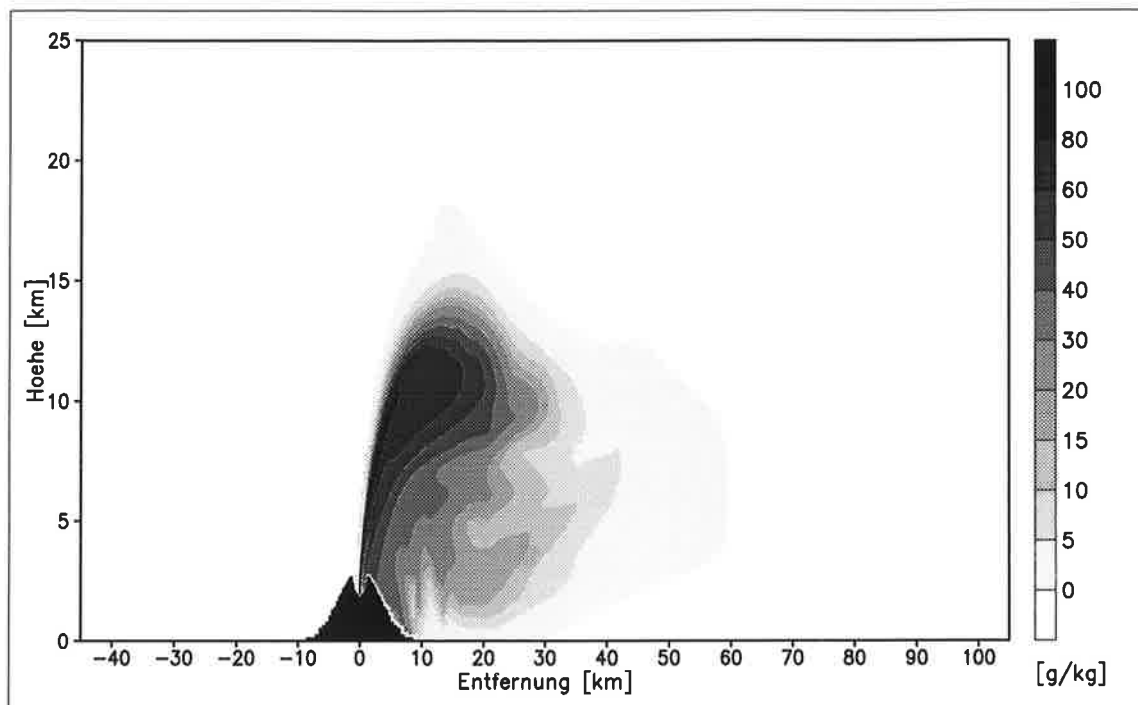


Abbildung 4.7: Lapilliplume nach 25 min: Verteilung der spezifischen Konzentration der Lapilli des Referenzexperimentes.

Die Plumehöhen in Abbildung 4.6 werden außer von der beschriebenen Schwingung von der Trennung von Gas und Partikeln bestimmt. Während die Oberkanten von Asche- und Wasserdampfplume in den ersten 10 min übereinstimmen, ist die maximale Plumehöhe der Lapilli bereits in der Anfangsphase der Eruption fast zwei Kilometer geringer. Mit fortschreitender Eruption nehmen die mittleren Plumehöhen für Asche geringfügig und wesentlich deutlicher für Lapilli ab, wogegen die mittlere Höhe des Wasserdampfplumes nahezu konstant bleibt. Nach dem Ende der Eruption ist das Absinken von Asche- und Lapilliplume beschleunigt, der Wasserdampfplume verändert seine Höhe dagegen kaum.

Lapilli besitzen gegenüber den Aschepartikeln eine um eine Größenordnung größere Fallgeschwindigkeit, die für deren räumliche Verteilung 25 min nach Beginn der Eruption in Abbildung 4.7 von entscheidender Bedeutung ist. Sobald sich der Plume aufgrund des Horizontalwindes in der Atmosphäre gegenüber der Senkrechten neigt, verlassen die Lapilli allmählich durch Sedimentation den Plumbereich hoher Vertikalgeschwindigkeit. Dadurch befinden sich nahezu keine Lapilli in der Stratosphäre. Die zu Beginn durch das Überschießen des Plumes in die Stratosphäre gelangten Lapilli - vergleiche Abbildung 4.6 - sinken rasch in die Troposphäre zurück. Alle Lapilli befinden sich rechts vom Krater, da die Lapilli nicht wie die Aschepartikel in der Lage sind, weit genug aufzusteigen, um mit der Strömung am Oberrand des Plumes gegen den initialisierten Horizontalwind transportiert zu werden.

Dem Strömungsfeld in Abbildung 4.8 ist darüberhinaus zu entnehmen, daß die großflächigen Absinkbewegungen seitlich der Aufstiegszone über dem Krater eine

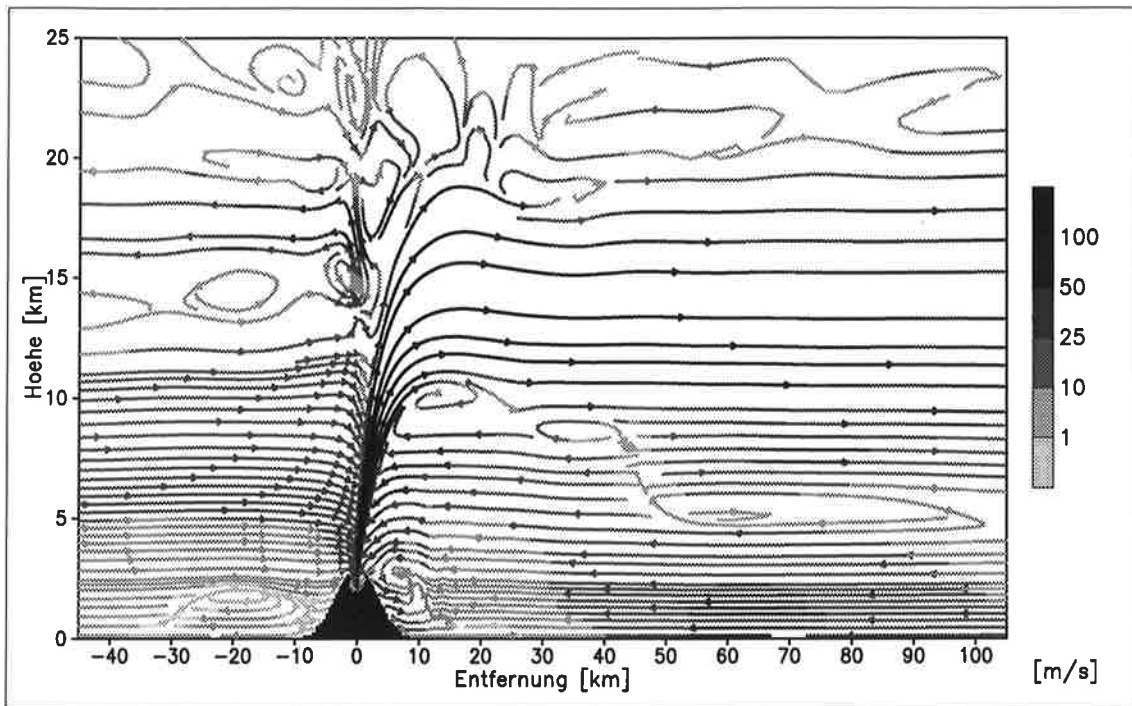


Abbildung 4.8: Strömungsfeld nach 25 min: Dargestellt sind die Stromlinien des Windfeldes für das Referenzexperiment.

Verstärkung der Sedimentationsbewegung bewirken. Ein Teil der Lapilli wird dabei wieder in den Plume eingemischt, der anschließend aufsteigen kann, um in größerer Höhe die Aufstiegszone des Plume erneut zu verlassen.

Dieses Reentrainment ist auch für Aschepartikel in Abbildung 4.4 erkennbar, allerdings wird die Asche bereits in Höhen oberhalb von 5 km wieder vollständig in den Plume eingemischt. Nach 25 min Eruption sind bereits mehr als 10 % der eruptierten Lapilli wieder deponiert. Insgesamt betrachtet erstreckt sich der Sedimentationsfächer der Lapilli auf einen räumlich wesentlich kleineren Bereich als für die Aschepartikel.

Die Größenverteilung der Partikel beeinflusst die Plumeentwicklung auf zweierlei Weise: Verlassen größere Partikel den Plume, wird das verbleibende Partikel-Gas Gemisch verdünnt und kann höher aufsteigen. Ein gegenläufiger Effekt ergibt sich aus der Tatsache, daß die ausfallenden Partikel einen Teil der thermischen Energie mit sich führen. Das unterschiedliche Depositionsverhalten ist insbesondere deshalb von großem Interesse, da der Sedimentationsfächer häufig die einzige Informationsquelle für Eruptionen der Vergangenheit darstellt.

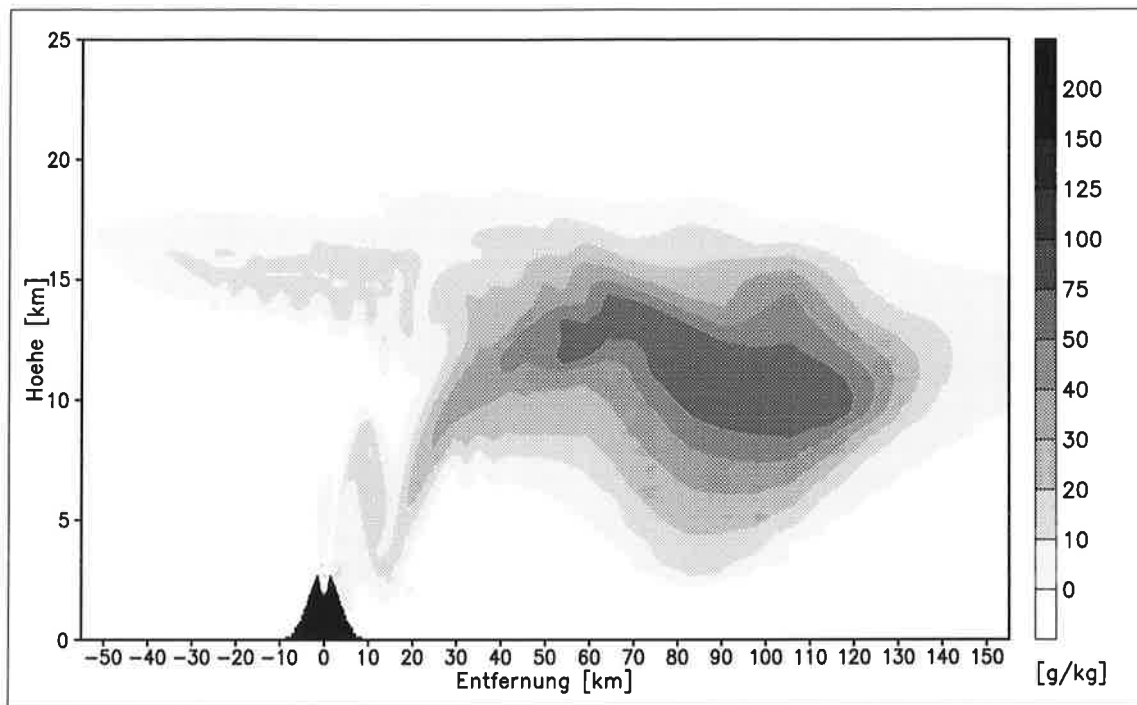


Abbildung 4.9: Aschepume nach der Eruption. Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration der Asche 15 min nach dem Ende der Eruptionphase des Referenzexperimentes.

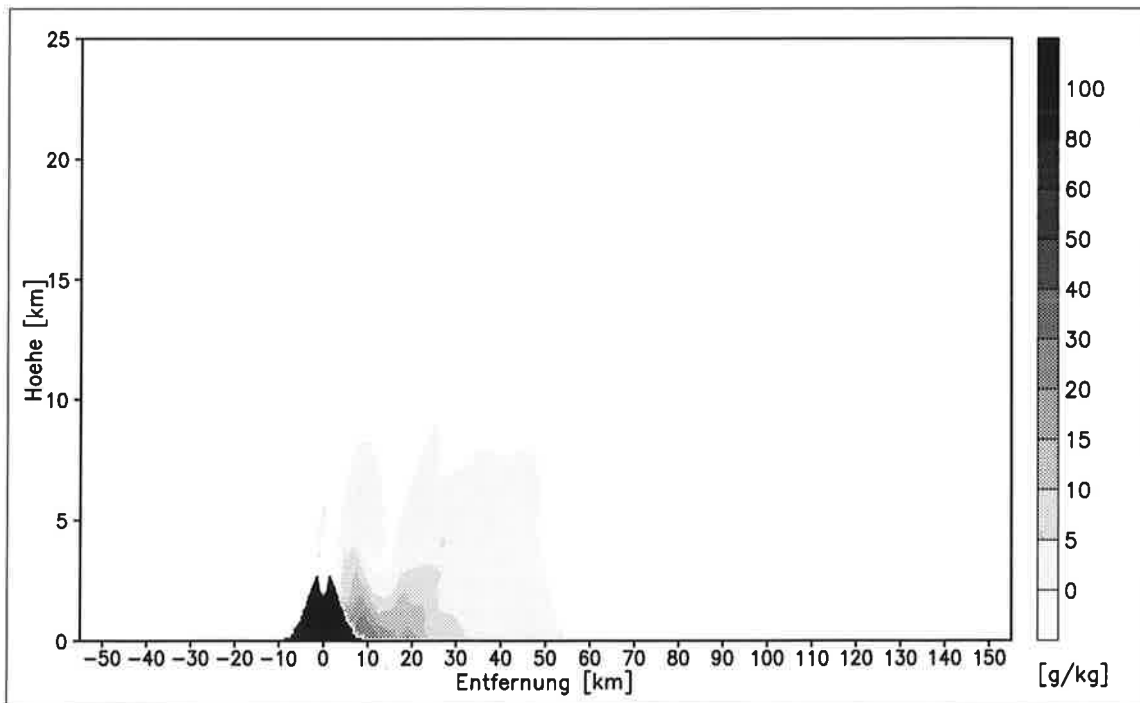


Abbildung 4.10: Lapilliplume nach der Eruption. Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration der Lapilli 15 min nach dem Ende der Eruptionphase des Referenzexperimentes.

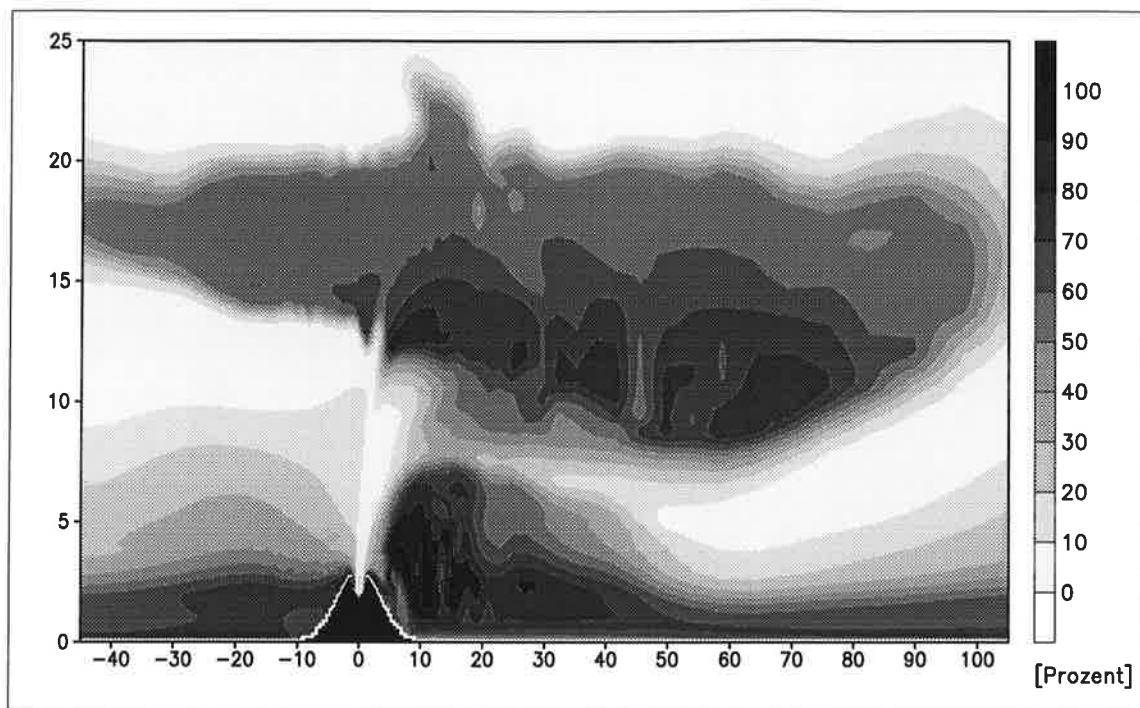


Abbildung 4.11: Relative Feuchte über Wasser nach 25 min für das Referenzexperiment in Prozent.

Die Abbildungen 4.9 und 4.10 zeigen Asche- und Lapilliplume 15 min nach dem Ende der Eruption. Zu diesem Zeitpunkt sind die Lapilli bereits zum größten Teil aus der Atmosphäre durch Deposition entfernt, wogegen der Ascheplume den Boden noch nicht erreicht hat und mit dem Horizontalwind verdriftet wird und beginnt, das eigentliche Modellgebiet zu verlassen. Der effektive stratosphärische Ascheeintrag der Eruption beträgt weniger als 1% der insgesamt eruptierten Asche und damit nur noch ein Viertel des Wertes während der Eruption.

Wasserdampf und Hydrometeore

Die Abbildungen 4.11 und 4.12 zeigen die relativen Feuchten über Wasser und Eis. Die Sättigung über Wasser wird zu diesem Zeitpunkt nur im unteren Teil der Troposphäre rechts vom Plume erreicht. Die Anreicherung der Atmosphäre mit Wasserdampf erfolgt dort durch das Aufsteigen bodennaher relativ wasserdampfreicher Luftmassen. Die dafür verantwortliche bodennahe Luftströmung (vergleiche Abbildung 4.8) entgegen dem initialisierten Windprofil ist eine Folge des Einströmens von Umgebungsluft in den Plume. In der Aufstiegszone des Plumes wird eine Sättigung gegenüber Eis erstmals in 12,5 km Höhe, dem Kondensationsniveau, erreicht. Während auch die Schirmregion gegenüber Wasser ständig untersättigt ist, wird gegenüber Eis die Sättigung fast in der gesamten Schirmregion erreicht bzw. überschritten.

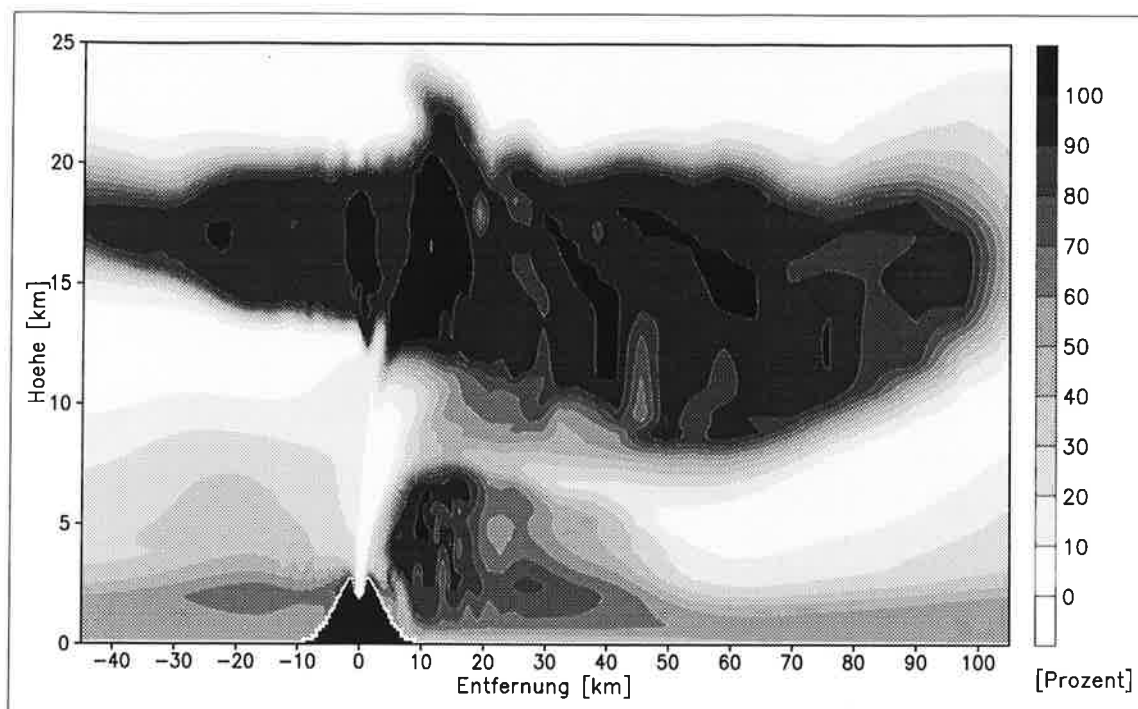


Abbildung 4.12: Relative Feuchte über Eis nach 25 min für das Referenzexperiment in Prozent.

Die Abbildungen 4.13 bis 4.16 zeigen die aufgrund von Übersättigungen gebildeten Hydrometeore.

Das meiste Wolkenwasser entsteht außerhalb des Plumes durch Umlagerung feuchter, bodennaher Luftmassen. Das daraus gebildete Regenwasser erreicht nach 25 min bereits den Boden. Da im oberen Bereich dieser Wolke der Gefrierpunkt teilweise unterschritten wird, bilden sich Wolkeneis und Graupel. Durch schmelzenden Graupel wird die Regenbildung verstärkt.

Innerhalb der Aufstiegszone des Plumes befinden sich im Bereich des Kondensationsniveaus nur sehr geringe Mengen an Wolkenwasser. Da zu diesem Zeitpunkt im Plumbereich - wie erwähnt - keine Sättigung gegenüber Wasser erreicht wird, wurde dieses Wolkenwasser bereits während der früheren Eruptionsphase gebildet. Im Kondensationsniveau herrschen Temperaturen unterhalb des Gefrierpunktes im Bereich von -5°C bis -10°C . Da die Umgebungstemperaturen in dieser Höhe zudem unter -50°C liegen, führen ein extremer Temperaturgradient und Vertikalgeschwindigkeiten von über 70 m/s dazu, daß das gebildete, unterkühlte Wolkenwasser in kürzester Zeit gefriert. Sobald genügend Wolkeneis vorhanden ist, dominiert die Deposition von Wasserdampf an Eiskristallen gegenüber anderen Kondensationsprozessen. Eine Übersättigung gegenüber Wasser wird nicht mehr erreicht und die Bildung von Wolkenwasser verhindert. Innerhalb des Plumes liegt der kondensierte Wasserdampf daher beinahe vollständig als Eis vor.

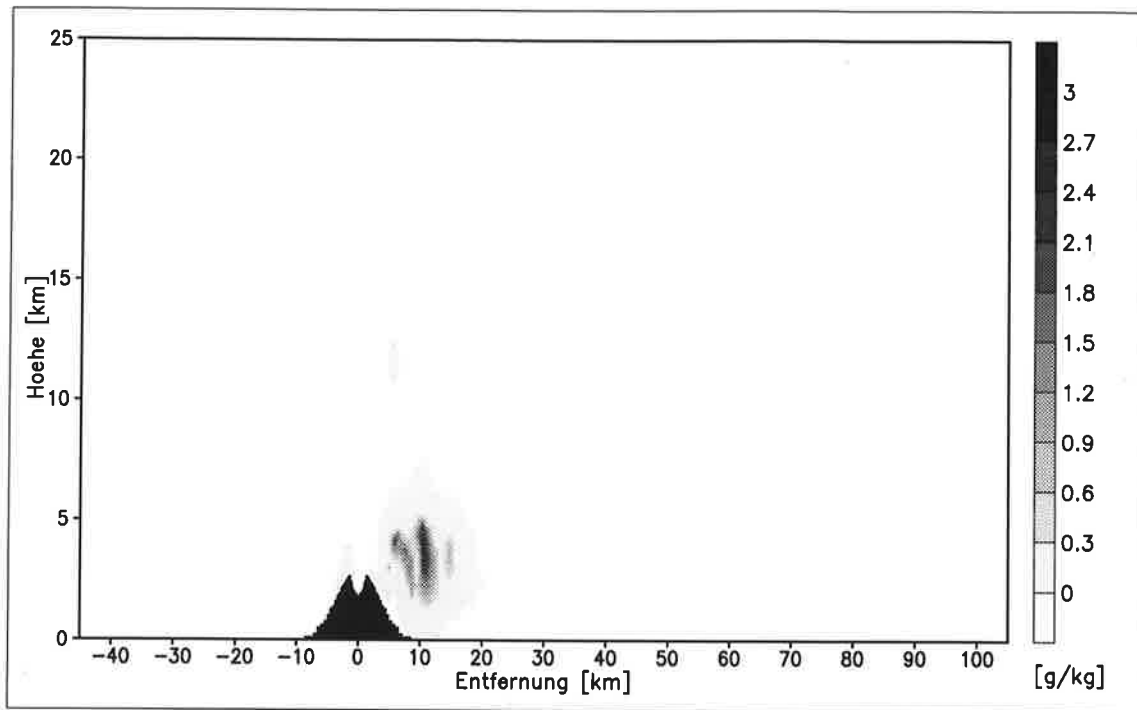


Abbildung 4.13: Wolkenwasser 25 min: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration von Wolkenwasser für das Referenzexperiment.

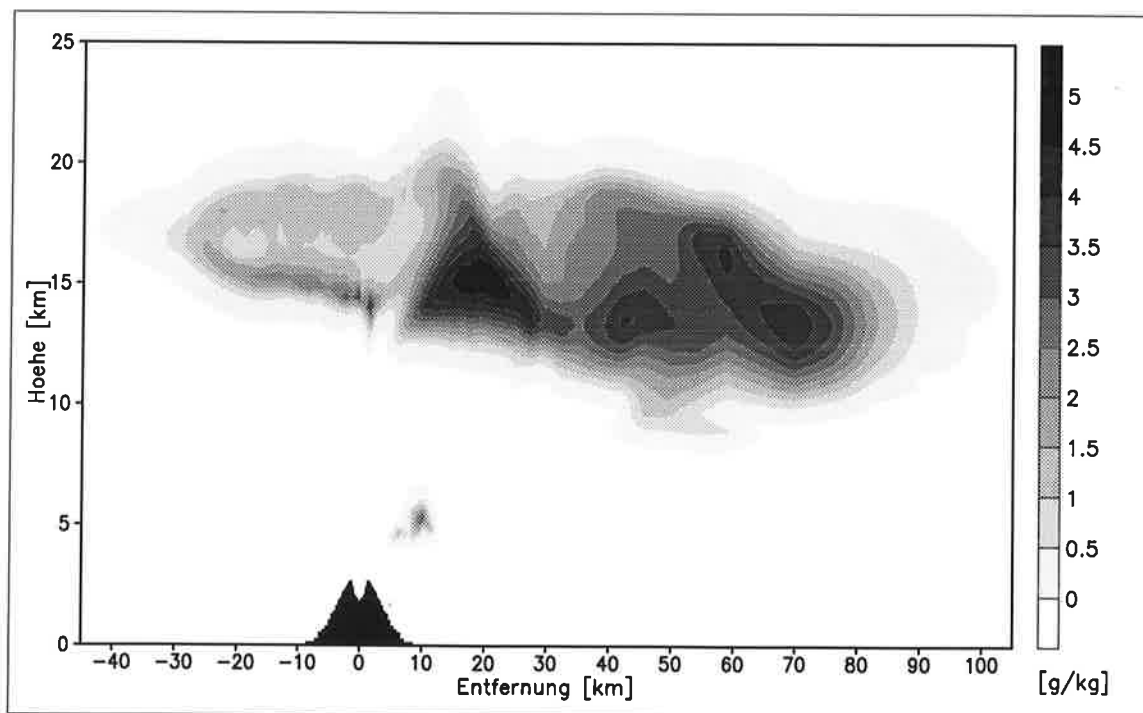


Abbildung 4.14: Eisplume nach 25 min: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration von Wolkeneis für das Referenzexperiment.

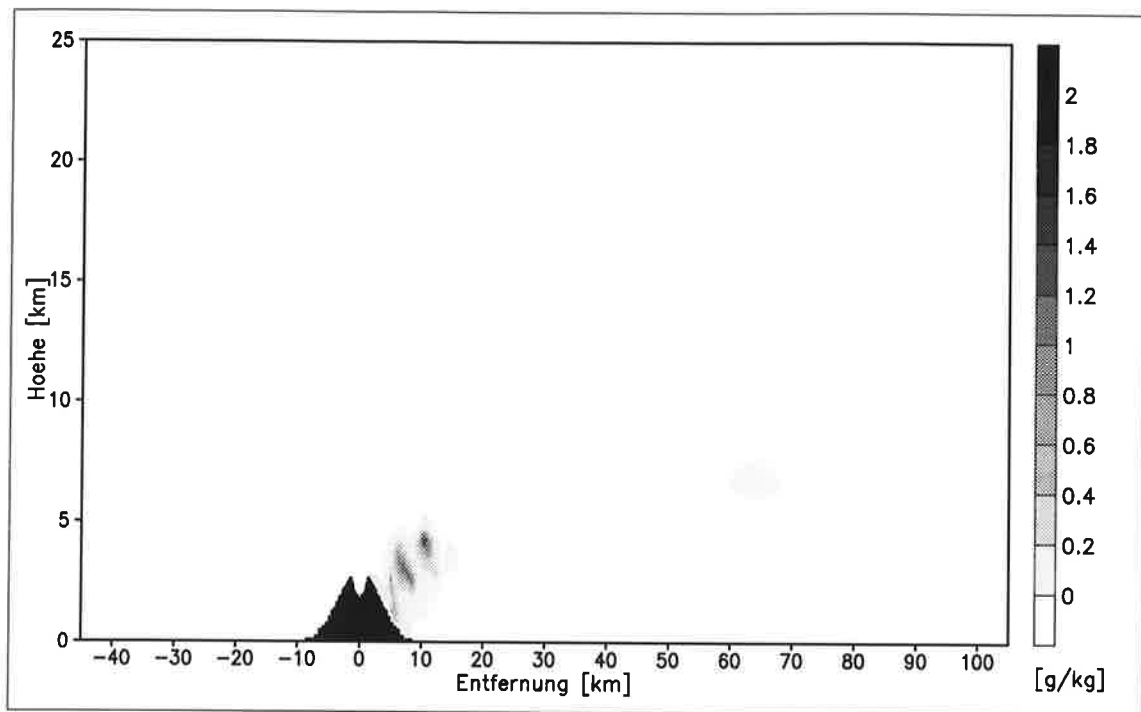


Abbildung 4.15: Regenwasser nach 25 min: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration von Regenwasser für das Referenzexperimentes.

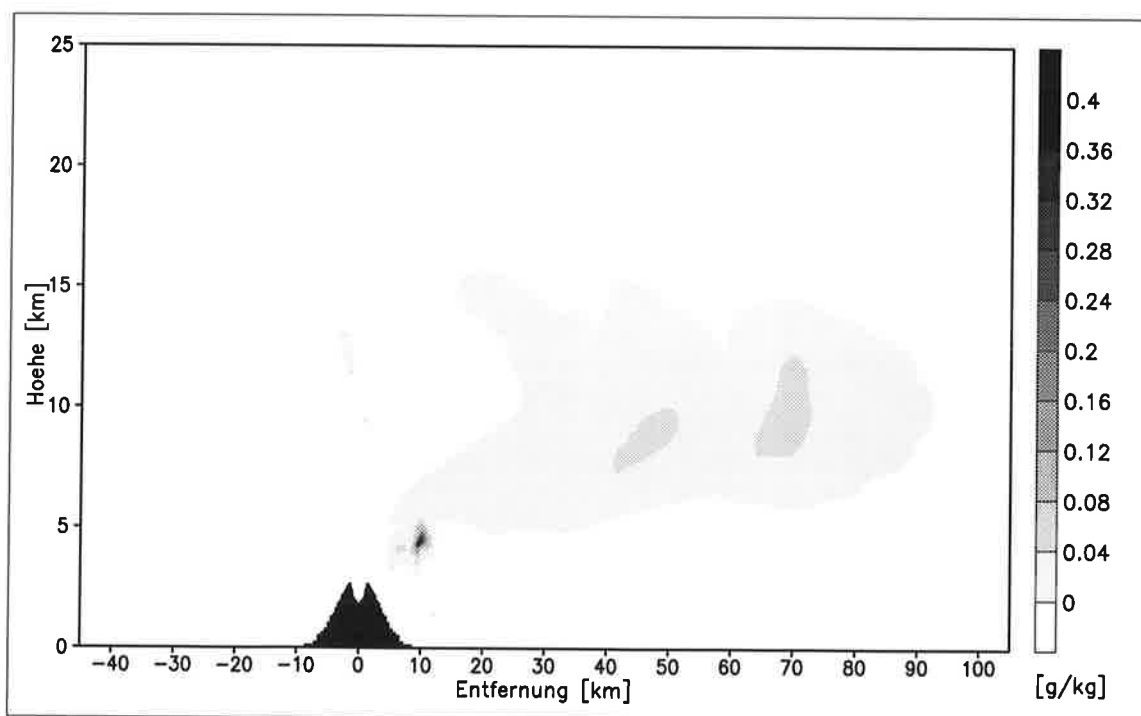


Abbildung 4.16: Graupel nach 25 min: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration von Graupel für das Referenzexperiment.

Eine starke Deposition von Wasserdampf auf Eiskristallen hat deren Wachstum und Sedimentation im Schwerefeld zur Folge, was von der verwendeten Mikrophysik (vergleiche Kapitel 2.3) nicht erfaßt wird. Das Größenwachstum von Eiskristallen ist jedoch verglichen mit der ebenfalls unberücksichtigten Tatsache, daß Silikatpartikel Teil der Mikrophysik sind, von untergeordneter Bedeutung. Wasserdampf kann auf Silikatpartikeln kondensieren bzw. als Eis deponiert werden. Die Wechselwirkung von Hydrometeoren mit Silikatpartikeln führt zu einer Clusterbildung und über erhöhte Fallgeschwindigkeiten zu Auswaschprozessen von Aschepartikeln, die auch zu einem beschleunigten Ausfallen des kondensierten bzw. deponierten Wasserdampfes führen. Die sich durch Einlösen z.B. von vulkanischen Gasen bildenden Lösungen führen zu einer Erniedrigung von Sättigungsdampfdruck und Gefrierpunkt, so daß die Bedeutung der flüssigen Phase gegenüber den anderen Phasen verstärkt wird. Die Bildung von Eiskristallen wird daher in der verwendeten Mikrophysik überschätzt. Für eine vollständigere Betrachtung mikrophysikalischer Prozesse ist die Einbeziehung von Silikatpartikeln und Lösungsprozessen notwendig.

Die starke Temperaturabhängigkeit der Graupelbildung führt dazu, daß lediglich unterhalb einer Höhe von 15 km geringe Mengen Graupel entstehen, die weniger als 1 % des insgesamt im Plume gebildeten Eises ausmachen. In 65 km Entfernung vom Krater beginnt der Graupel zu schmelzen und geringe Mengen Regenwasser zu bilden.

Abbildung 4.17 zeigt die Vertikalverteilungen für die Wasserdampfanomalie, Wolkennasser und Wolkeneis. Auf eine Darstellung von Regen und Graupel wurde verzichtet, da sie zu diesem Zeitpunkt mengenmäßig eine untergeordnete Rolle spielen. Die Vertikalverteilungen werden gewonnen durch horizontale Integration über das Modellgebiet der betrachteten Größe für eine jeweils feste Höhe und sind ein Maß für die Masse dieser Größe pro Höhenmeter und Meter des Linienvulkans. Die Wasserdampfanomalie wird berechnet als Anomalie relativ zum präeruptiven Wasserdampfgehalt der Atmosphäre. Um dabei eine weitgehende Beschränkung auf den Plumbereich zu erzielen, werden bei der Berechnung der Wasserdampfanomalie lediglich die Bereiche betrachtet, in denen sich mindestens $1 \mu\text{g}/\text{kg}$ Asche befindet.

Die negative Wasserdampfanomalie unterhalb einer Höhe von 6,5 km entsteht durch die Absinkbewegung unmittelbar neben dem Plume. Durch sie wird relativ trockene Luft aus größeren Höhen nach unten transportiert. Oberhalb dieser Höhe dominiert der Vertikaltransport von vulkanischem bzw. eingemischtem Wasserdampf im Plume die Wasserdampfanomalie. Das Absinken von Luftmassen in größeren Höhen liefert aufgrund der geringen Wasserdampfkonzentration keine signifikanten Beiträge. Die Wasserdampfanomalie erreicht in 9,5 km Höhe ein Maximum, d.h. bereits im unteren Teil des Ascheplumes, um dann mit zunehmender Höhe wieder abzunehmen. Dies wird verursacht durch die Temperaturabnahme mit der Höhe und das rasche Auskondensieren bzw. Ausgefrieren des Wasserdampfes oberhalb des Kondensationsniveaus.

Die Vertikalverteilung von Wolkeneis wird dominiert durch die Schirmregion des Plumes mit einem Maximum in 14 km Höhe. Ein weiterer Beitrag stammt aus der

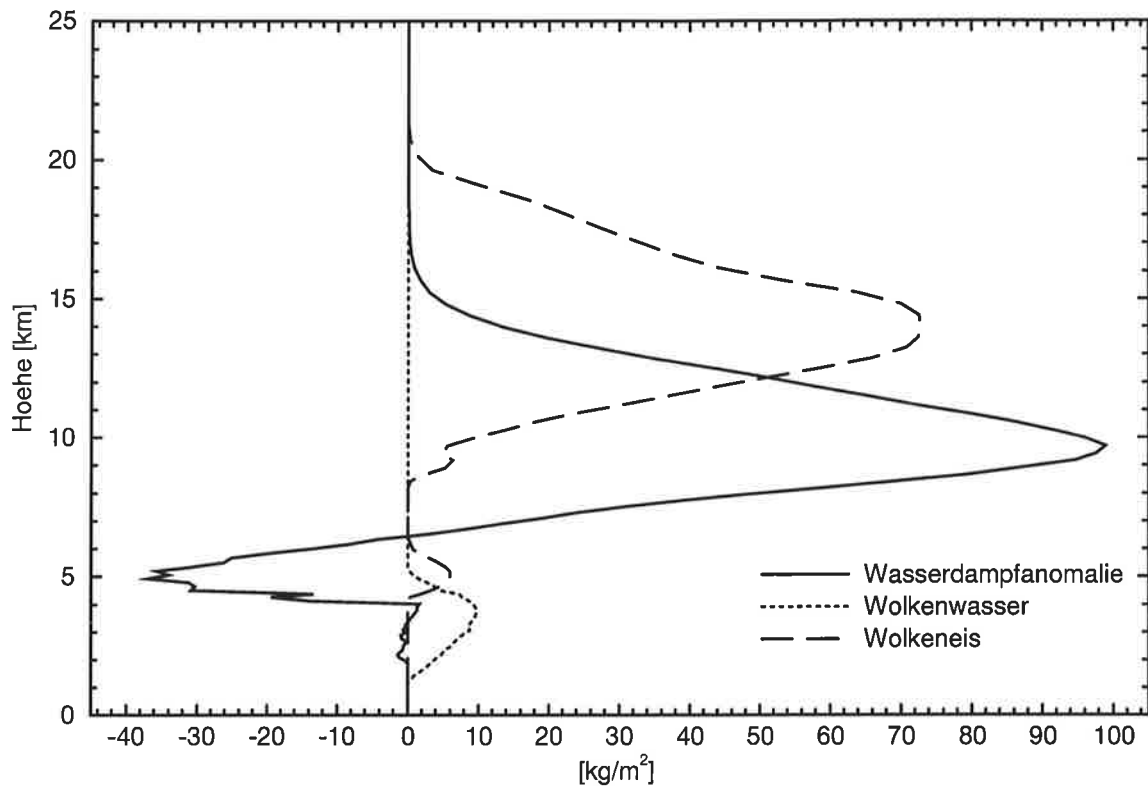


Abbildung 4.17: Vertikalverteilungen für Wasser: Dargestellt ist die Masse der Wasserdampfanomalie und die Masse an Wolkenwasser bzw. -eis pro Höhenmeter und Meter Linienvulkan für das Referenzexperiment, 25 min nach Beginn der Eruption.

Kondensation rechts vom Plume in etwa 5 km Höhe - vergleiche auch Abbildung 4.14. Das Wolkenwasser besitzt ein Maximum in 4 km Höhe, das ebenfalls aufgrund von Kondensationsprozessen außerhalb des Plumes entstanden ist - vergleiche auch Abbildung 4.13.

Vergleicht man die gesamte Wasseranomalie oberhalb von 6,5 km, gebildet aus der Summe von Wasserdampfanomalie und allen Hydrometeoren, mit dem vom Vulkan bis zu diesem Zeitpunkt eruptierten Wasserdampf, so erhält man eine Abschätzung für das Entrainment von Wasserdampf in den Plume. Verbessern läßt sich diese Abschätzung dadurch, daß man den Wasserdampfgehalt des Plumes unterhalb von 6,5 km aus der Verteilung der Asche oberhalb und unterhalb dieser Höhe abschätzt. Eine untere Abschätzung erhält man aus der Annahme, daß nur der vulkanisch emittierte Wasserdampf eine zur Asche proportionale Vertikalverteilung besitzt. Dies bedeutet eine Vernachlässigung des Wasserdampfenrainments unterhalb von 6,5 km. Nimmt man dagegen an, daß die gesamte Wasseranomalie oberhalb von 6,5 km entsprechend dem Verhältnis von Asche ober- und unterhalb von 6,5 km verteilt ist, bedeutet dies eine Überschätzung des Wasserdampfenrainments unterhalb von 6,5 km. Man erhält somit eine obere Abschätzung für das Wasserdampfenrainment in den Plume.

Das Entmischen von Wasserdampf aus dem Plume in die Umgebung kann in diesem Zusammenhang vernachlässigt werden. Wie eine Vergleichssimulation in einer trockenen Atmosphäre ergab, läßt sich mit dem skizzierten Verfahren zur Berechnung der Wasserdampfanomalie praktisch der gesamte eruptierte Wasserdampf erfassen. Detrainment an den Plumerändern und die Partikel-Gas Trennung am Plumeoberrand beeinträchtigen daher die Abschätzung des Wasserdampfdetrainments aus der gesamten Wasserdampfanomalie nicht. Der aus dem Plume ausfallende Niederschlag, der in der Wasseranomalie selbst berücksichtigt wird, kann allerdings zu einer Unterschätzung des Wasserdampfdetrainments führen, wenn er außerhalb des bei der Berechnung der Wasserdampfanomalie berücksichtigten Plumbereiches wieder verdunstet. Im betrachteten Referenzexperiment spielt dieser Effekt 25 min nach Beginn der Eruption allerdings keine Rolle.

So abgeschätzt liegt das Wasserdampfdetrainment für das Referenzexperiment 25 min nach Beginn der Eruption zwischen 82 % und 87 %, d.h. im Plume ist das 1,85 fache des vulkanisch emittierten Wassers enthalten. Die mikrophysikalischen Prozesse werden zu ähnlichen Teilen durch die vulkanische Quelle und durch das Einmischen von Umgebungsluft in den Plume bestimmt. Als Folge von Kondensationsprozessen besteht knapp die Hälfte des insgesamt im Plume enthaltenen Wassers aus Eis, der Rest verbleibt in der Gasphase, die Flüssigphase spielt nur eine ungeordnete Rolle. Durch Freisetzung latenter Wärme wird dem Plume Energie zugeführt, die knapp 4 % dessen ausmacht, was an thermischer Energie durch den Vulkan bis zu diesem Zeitpunkt emittiert wird.

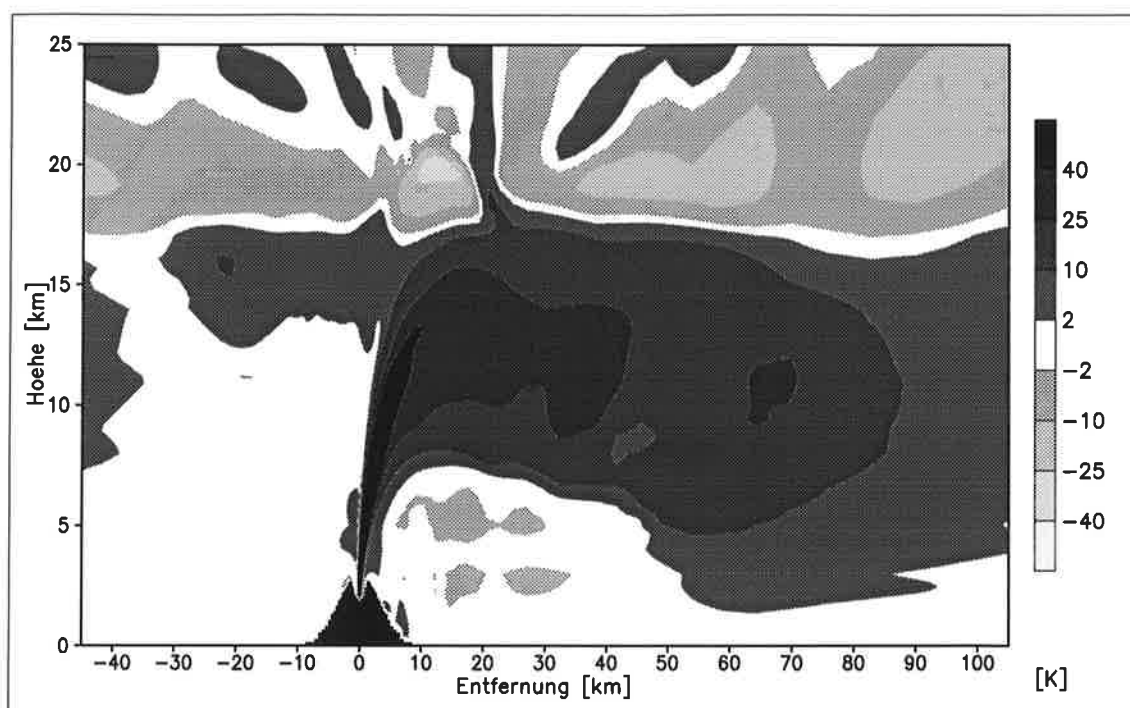


Abbildung 4.18: Temperaturanomalie nach 25 min: Dargestellt ist die Anomalie der in situ Temperatur im Referenzexperiment.

Temperatur

Abbildung 4.18 verdeutlicht, daß Temperaturanomalien über 40 K nur im Zentrum der Aufstiegszone bis zu einer Höhe von 13 km zu finden sind. Die kraternahe Anomalie von mehr als 500 K ist einen Kilometer über dem Krater bereits auf die Hälfte abgesunken. In der Schirmregion werden im Mittel positive Temperaturanomalien im Bereich von 20 K bis 30 K erreicht. Einzige Ausnahme ist das Gebiet negativer Temperaturanomalie von bis zu -30 K in 20 km Höhe über der Aufstiegszone des Plumes. Es entsteht durch passiv gehobene Luftmassen in einer stabil geschichteten Atmosphäre und ist Kennzeichen des Überschießens des Plumes über seine Gleichgewichtshöhe. Es bewirkt ein effektives Abbremsen des vom Krater aufsteigenden Partikel-Gas Gemisches. Dieses Gebiet repräsentiert gleichzeitig den höchsten Bereich des Ascheplumes, was zur Folge hat, daß die Oberkante des Plumes nicht mit der umgebenden Atmosphäre im thermischen Gleichgewicht steht.

Die Messung der Temperatur der Plumeoberkante, die von Satelliten aus für reale Eruptionen möglich ist, erlaubt daher keine direkten Rückschlüsse auf die Plumehöhe. Die aus der Temperatur der Plumeoberkante durch Vergleich mit der Umgebung abgeschätzten Plumehöhen sind für Eruptionswolken, die bis in die Stratosphäre vordringen, systematisch unterschätzt (Woods und Self, 1992). Im Referenzexperiment könnte das Vordringen des Plumes in die Stratosphäre über eine solche Temperaturmessung nicht festgestellt werden, da die Plumeoberkante die Temperatur der ungestörten Tropopause besitzt. Die Plumehöhe würde um 4 km bzw. 20 % unterschätzt.

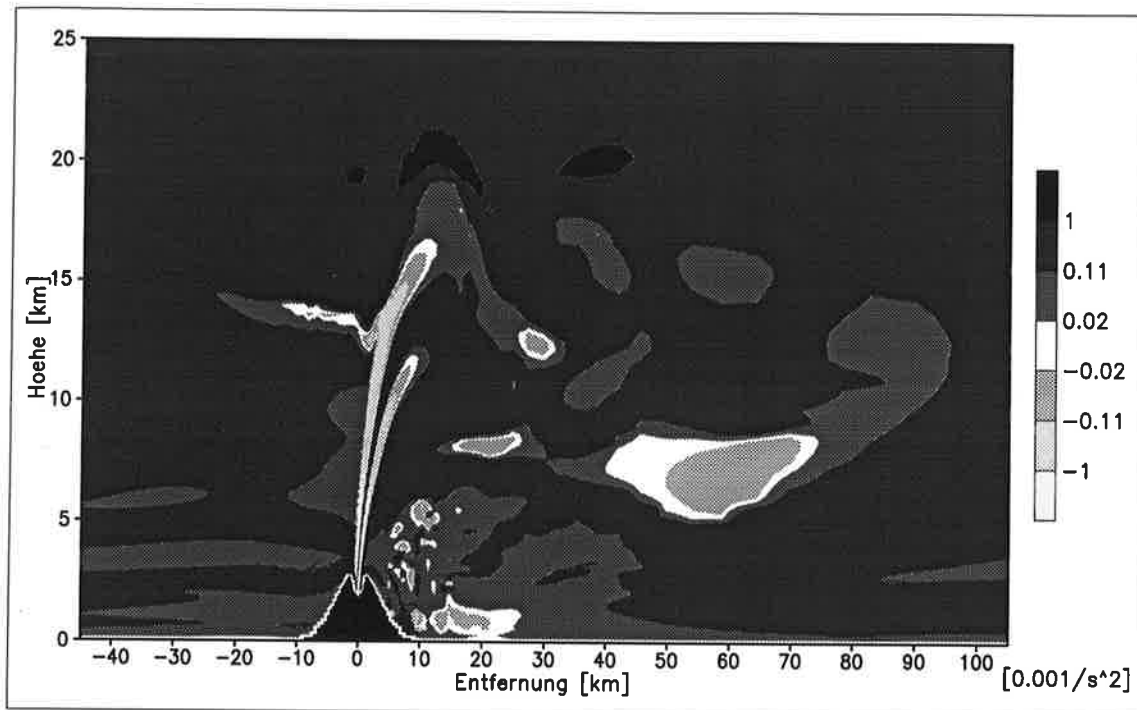


Abbildung 4.19: Schichtungsstabilität nach 25 min: Dargestellt ist das Quadrat der Auftriebsfrequenz im Referenzexperiment.

Turbulente Größen

Turbulente Energie wird außer durch Windscherung wesentlich durch die Stabilität der Schichtung bestimmt, die bei instabiler Schichtung zu einer Produktion und bei stabiler Schichtung zu einer Vernichtung turbulenter Energie führt. Die Schichtungsstabilität im Plume wird neben der Temperatur maßgeblich durch die Anwesenheit von Partikeln beeinflusst, wie in Abbildung 4.19 zu erkennen. Als Maß für die Schichtungsstabilität wird dabei das Quadrat der Auftriebsfrequenz verwendet, wobei die in Kapitel 3.5.2 beschriebene potentielle Dichte statt der potentiellen Temperatur eingeht. Bereiche instabiler Schichtung erscheinen mit negativem Vorzeichen, stabile Schichtung ist durch ein positives Vorzeichen gekennzeichnet.

Der weitaus größte Teil der Modellatmosphäre ist durch eine stabile Schichtung gekennzeichnet, die dem initialisierten Zustand der Atmosphäre ähnlich ist. Die Eruption führt sowohl außerhalb als auch innerhalb des Plumes überwiegend zu einer Labilisierung der Schichtung.

Außerhalb des eigentlichen Plumes findet sich ein teilweise labil geschichteter Bereich in der unteren bis mittleren Troposphäre rechts vom Plume in einem Gebiet, in dem aufgrund vertikaler Aufwärtsbewegungen eine Wolken- und Niederschlagsbildung erfolgt und gleichzeitig signifikante Mengen an Lapilli sedimentieren. Die Anwesenheit dieser Lapilli ist verantwortlich für die simulierte Schichtung der Atmosphäre. Dort, wo die Lapilli den Boden noch nicht erreicht haben, entsteht am Unterrand der sedimentierenden Lapilli durch die mit der Höhe zunehmenden spezifischen Kon-

zentrationen ein Gebiet instabiler Schichtung - vergleiche auch Abbildung 4.7. Das gleiche gilt auch für die Unterkante des Ascheplumes, wo die Zunahme der Partikelkonzentration mit der Höhe zu einer Destabilisierung bis hin zu einer labilen Schichtung führt.

An den Unterkanten von Asche- und Lapilliplume ist der vertikale Austausch daher intensiviert. Aus der potentiellen Temperatur läßt sich dieser Effekt nicht ableiten. Die potentielle Temperatur nimmt an der Unterkante des Plumes mit der Höhe stärker zu als in der Plumeumgebung, wie sich aus Abbildung 4.18 ergibt. Die dadurch verstärkte Stabilisierung der Schichtung würde zu einer Unterdrückung von Turbulenz führen. Damit ergibt sich aus der Betrachtung des Gasanteils bei der Bildung von Turbulenz an den Plumeunterkanten ein gegenüber der Betrachtung des gesamten Partikel - Gas Gemisches gegenteiliges Ergebnis.

Obwohl die größten Temperaturanomalien im Zentrum der Aufstiegszone bei mit der Höhe abnehmenden Werten zu finden sind, ist dort nicht der Bereich instabiler Schichtung. Stattdessen ist dieser Bereich aufgrund der hohen Partikelkonzentrationen im Zentrum der Aufstiegszone stabiler geschichtet als die umgebende Atmosphäre. Der Bereich instabiler Schichtung findet sich an den Rändern der Aufstiegszone mit Extremwerten in der Nähe des Kraters. Dort sind die Partikelkonzentrationen bereits deutlich reduziert, die Temperaturanomalie ist jedoch noch sehr groß, so daß der Temperatureffekt den Partikeleffekt überwiegt. Die Ursache hierfür liegt in der Tatsache, daß die turbulente Diffusion von Wärme effektiver ist als die von Partikeln (vergleiche Kapitel 3.5.5). Die Plumeränder der Aufstiegszone sorgen somit für den Auftrieb, der nötig ist, den Plume bis in die Stratosphäre aufsteigen zu lassen. Das Gebiet negativer Temperaturanomalie über der Aufstiegszone führt zu einer extrem stabilen Schichtung in seinem oberen Teil, die zu einer effektiven Unterdrückung turbulenter Anteile in der Bewegung führt.

Verglichen mit dem Strömungsfeld in Abbildung 4.8 sind die Strukturen der Schichtungsstabilität wesentlich kleinskaliger. Dieser strukturelle Unterschied findet sich auch in der Verteilung der vertikalen und horizontalen Komponenten der turbulenten Energie in Abbildung 4.20 und 4.21 wieder. Die horizontale Komponente der turbulenten Energie ist derjenige Anteil, der für den horizontalen turbulenten Austausch zur Verfügung steht, entsprechendes gilt für die vertikale Komponente. Bei der Darstellung der Komponenten der turbulenten Energie wurden logarithmische Skalen gewählt, deren Einteilungen sich um einen Faktor zwei unterscheiden, da die horizontale turbulente Energie im isotropen Gleichgewicht gerade doppelt so groß ist wie die vertikale turbulente Energie (vergleiche Kapitel 3.5).

Horizontale turbulente Energie wird ausschließlich durch Windscherungen produziert und erhält durch die Umverteilung zwischen horizontaler und vertikaler turbulenter Energie zusätzliche Beiträge. Beides ist in Abbildung 4.20 zu erkennen. Im unteren Bereich der Aufstiegszone und an den Plumerändern dominieren Beiträge aus der vertikalen Komponente der turbulenten Energie, wogegen im oberen Bereich der Aufstiegszone und an den oberen Plumerändern Windscherungen die dominierenden Beiträge liefern.

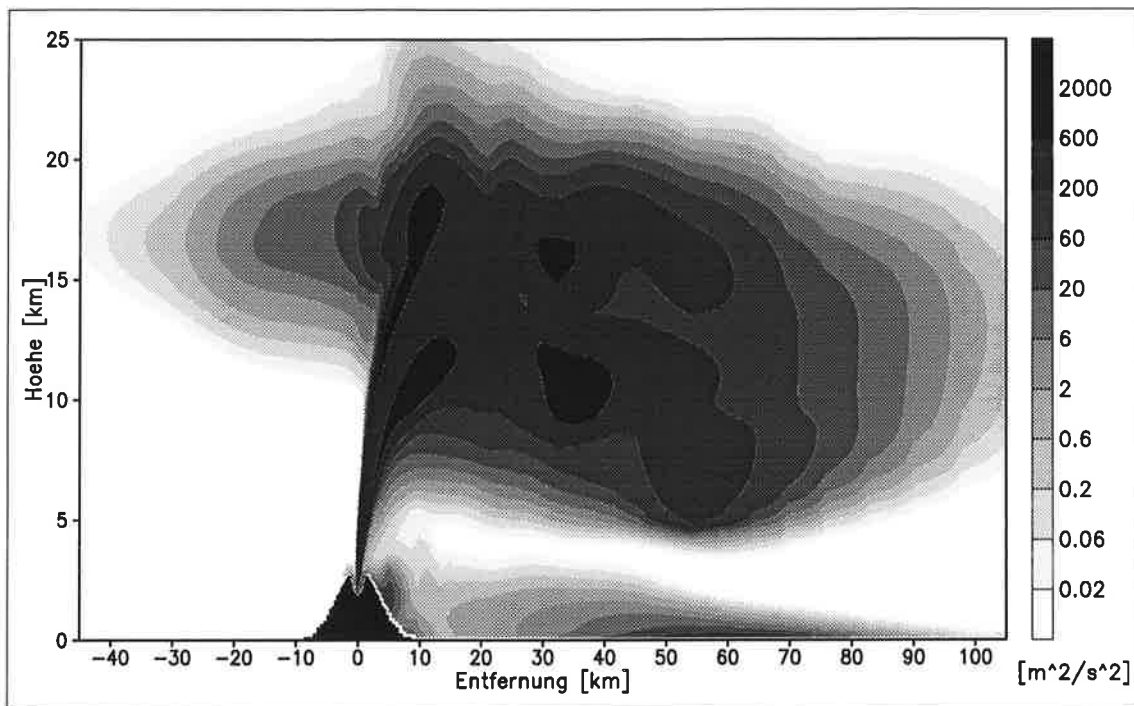


Abbildung 4.20: **Horizontale turbulente Energie nach 25 min:** Dargestellt ist die für den horizontalen Austausch zur Verfügung stehende turbulente Energie im Referenzexperiment.

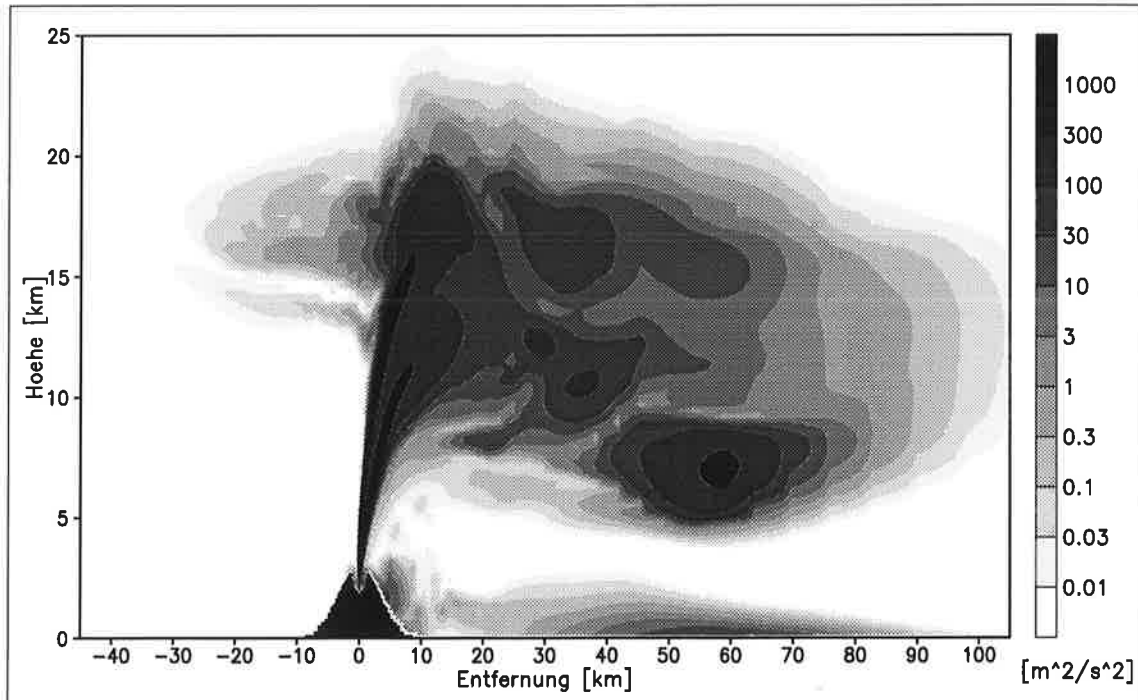


Abbildung 4.21: **Vertikale turbulente Energie nach 25 min:** Dargestellt ist die für den vertikalen Austausch zur Verfügung stehende turbulente Energie, die im isotropen Gleichgewicht halb so groß wie die horizontale turbulente Energie ist.

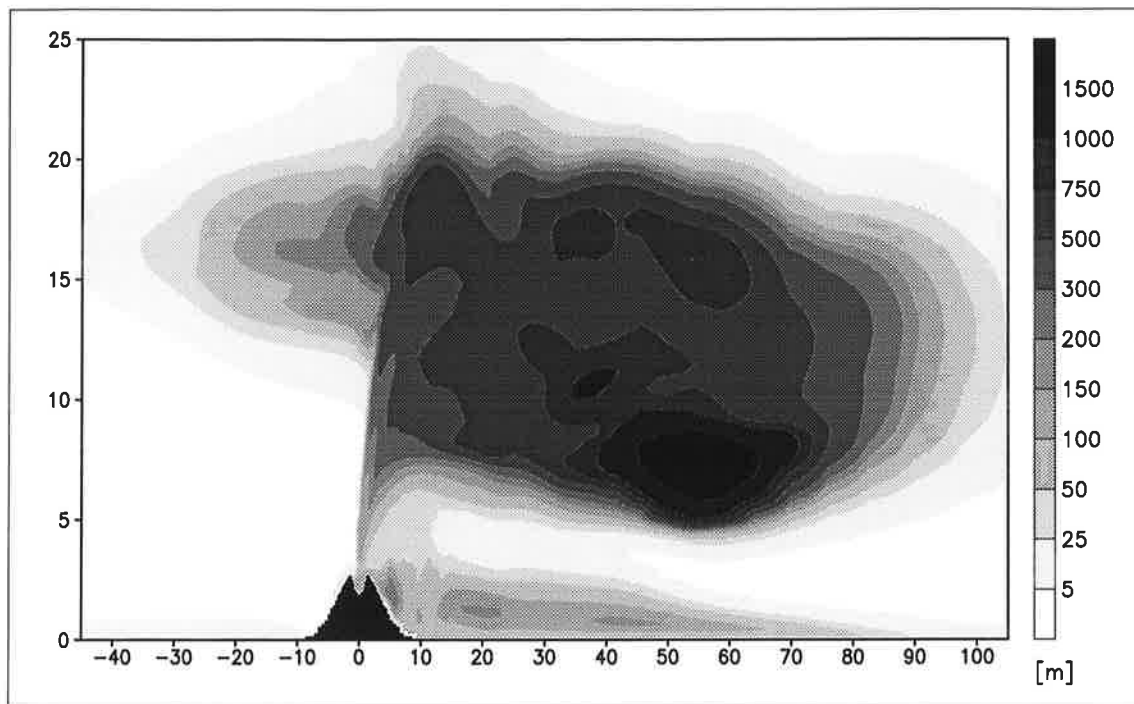


Abbildung 4.22: Turbulente Längenskala nach 25 min im Referenzexperiment.

Der Vergleich der turbulenten Energiekomponenten macht deutlich, daß zwar gemeinsame, vergleichbare großräumige Strukturen vorhanden sind, wie z.B. die hohen Werte im Bereich der Aufstiegszone mit Extrema an den seitlichen Rändern oder die erhöhte turbulente Energie aufgrund der bodennahen Luftströmung mit Maximalwerten 50 km bis 60 km rechts vom Krater, daß aber von einem Gleichgewicht turbulenter Größen im Sinne einer isotropen Energieverteilung nur im Ausnahmefall gesprochen werden kann. Neben den erwähnten strukturellen Unterschieden sind die Absolutwerte der Komponenten der turbulenten Energie in weiten Bereichen des Plumes deutlich vom isotropen Gleichgewicht entfernt.

Bei den absoluten Werten der turbulenten Energie fällt weiterhin auf, daß diese innerhalb des Plumes um fünf Größenordnungen variieren und sich noch einmal deutlich von den Werten der umgebenden Atmosphäre unterscheiden. Lediglich rechts vom Krater kommt es aufgrund der starken bodennahen Strömung und der dort auftretenden Windscherungen zur Entwicklung einer Grenzschicht mit stark entwickelter Turbulenz, deren Extremwerte aber immer noch zwei Größenordnungen unter denen des Plumes liegen.

Die zusammen mit den turbulenten Energiekomponenten prognostizierte turbulente Längenskala ist in Abbildung 4.22 dargestellt. Sie ist anschaulich mit der Größe der turbulenten Wirbel verknüpft, in denen die meiste turbulente Energie enthalten ist. Die Extremwerte treten erwartungsgemäß dort auf, wo Extremwerte der turbulenten Energie mit instabiler Schichtung zusammenfallen.

Da die turbulente Längenskala nach oben durch den mittleren Gitterpunktabstand beschränkt ist, ist die räumliche Verteilung der Längenskala durch das nichtäquidistante Gitter geprägt. So können in Kraternähe maximal 100 m erreicht werden, wogegen wegen der horizontalen Streckung des Gitters in 50 km Entfernung vom Krater turbulente Längenskalen von über 1500 m angenommen werden können. Der Einfluß des nicht aufgelösten turbulenten Anteils auf die Plumeentwicklung ist jedoch in Kraternähe in den instabil geschichteten Ränder der Aufstiegszone am stärksten, so daß hier relativ zu den nichtaufgelösten Skalen die größten Längenskalen für turbulente Wirbel zu erwarten sind. In Bodennähe wiederum ist die Größe turbulenter Wirbel und damit die turbulente Längenskala durch den Abstand zum Boden limitiert, wie im Bereich stark entwickelter Turbulenz in Bodennähe zu erkennen ist.

Trotz des Einflusses der Geometrie des Gitters sind die simulierten turbulenten Längenskalen nicht durch das Gitter allein bestimmt. Deutlich sind die Bereiche entwickelter Turbulenz in Plume und Bodennähe zu erkennen. In der Plume werden die räumlichen Strukturen von der Modellphysik bestimmt: Im Zentrum der Aufstiegszone sind die Längenskalen wegen der stabilen Schichtung gegenüber den Plumerändern reduziert. In der Schirmregion ist der Einfluß sowohl der Schichtung als auch erhöhter turbulenter Energie sichtbar.

Die aus den Komponenten der turbulenten Energie und Längenskala berechneten und in den Modellgleichungen verwendeten turbulenten Austauschkoefizienten sind in den Abbildungen 4.23 und 4.24 dargestellt. Da bei dieser Berechnung nur die Wurzel aus der turbulenten Energie eingeht, variieren die Austauschkoefizienten nicht so stark wie die Komponenten der turbulenten Energie. Innerhalb des Plumes schwanken die Austauschkoefizienten dennoch um vier Größenordnungen und unterscheiden sich von der Umgebung des Plumes um etwa zwei weitere Größenordnungen.

Wie schon bei den turbulenten Energien bestehen zwischen horizontalem und vertikalem Austauschkoefizienten deutliche Unterschiede, die auf eine ausgeprägte richtungsabhängige Komponente der Wirkung von Turbulenz schließen lassen. Die Wirkung der Austauschkoefizienten ist jedoch vom Gitterpunktabstand abhängig. Um bei einem größeren Gitterpunktabstand das gleiche zeitliche Verhalten zu erzielen, ist ein deutlich größerer Austauschkoefizient erforderlich. Um den Einfluß von Turbulenz auf die Dynamik zu untersuchen, ist es daher sinnvoll, die Zeitskala zu betrachten, die mit dem turbulenten Austausch verbunden ist. Diese Zeitskala τ läßt sich mit Hilfe des Austauschkoefizienten K und Gitterpunktabstandes Δx sofort angeben:

$$\tau = \frac{\Delta x^2}{2K}$$

In den Abbildungen 4.25 und 4.26 sind die mit dem horizontalen bzw. vertikalen turbulenten Austausch verbundenen Zeitskalen dargestellt.

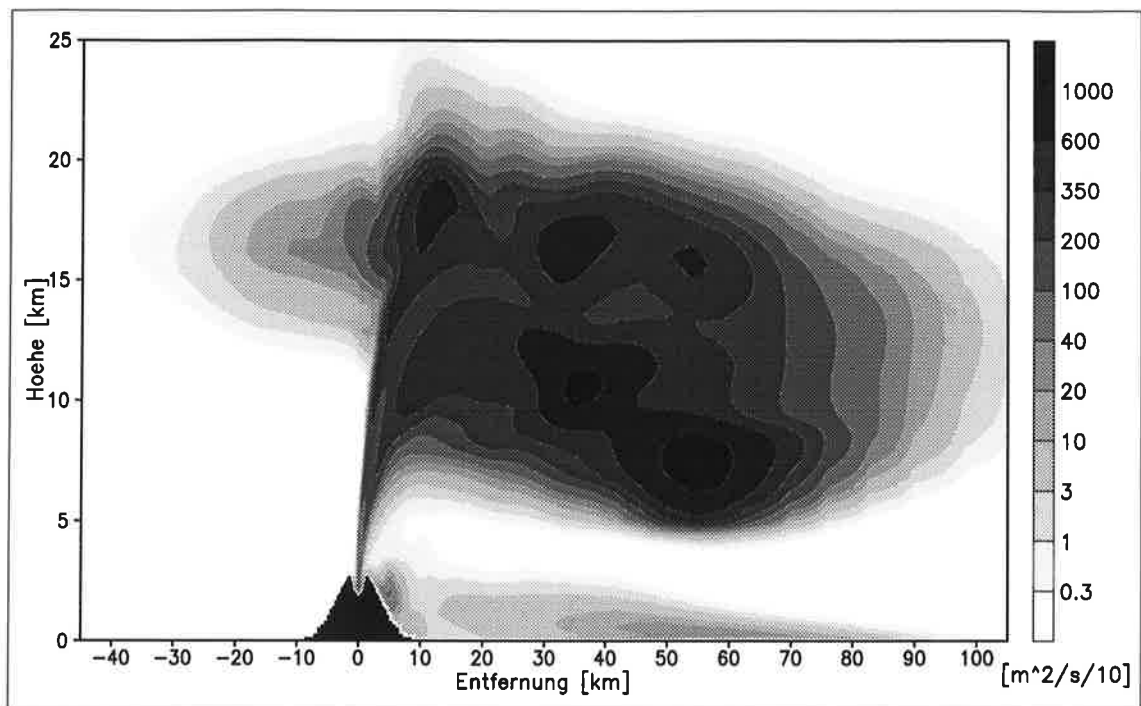


Abbildung 4.23: Horizontaler turbulenter Austauschkoeffizient nach 25 min im Referenzexperiment.

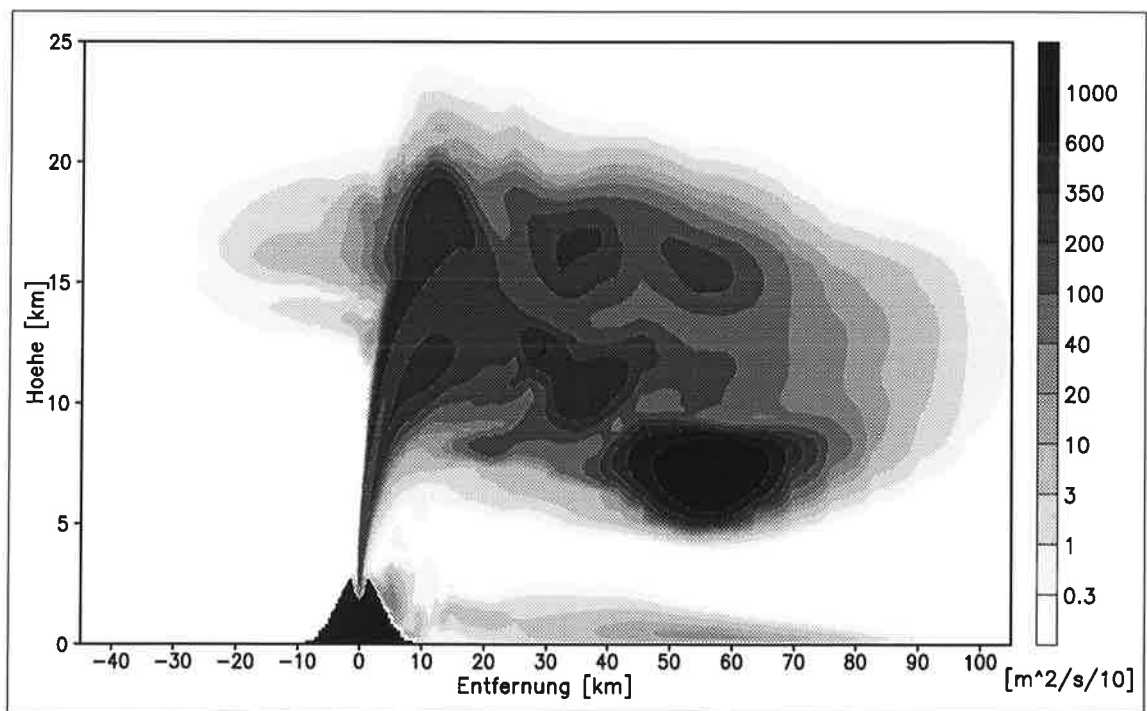


Abbildung 4.24: Vertikaler turbulenter Austauschkoeffizient nach 25 min im Referenzexperiment.

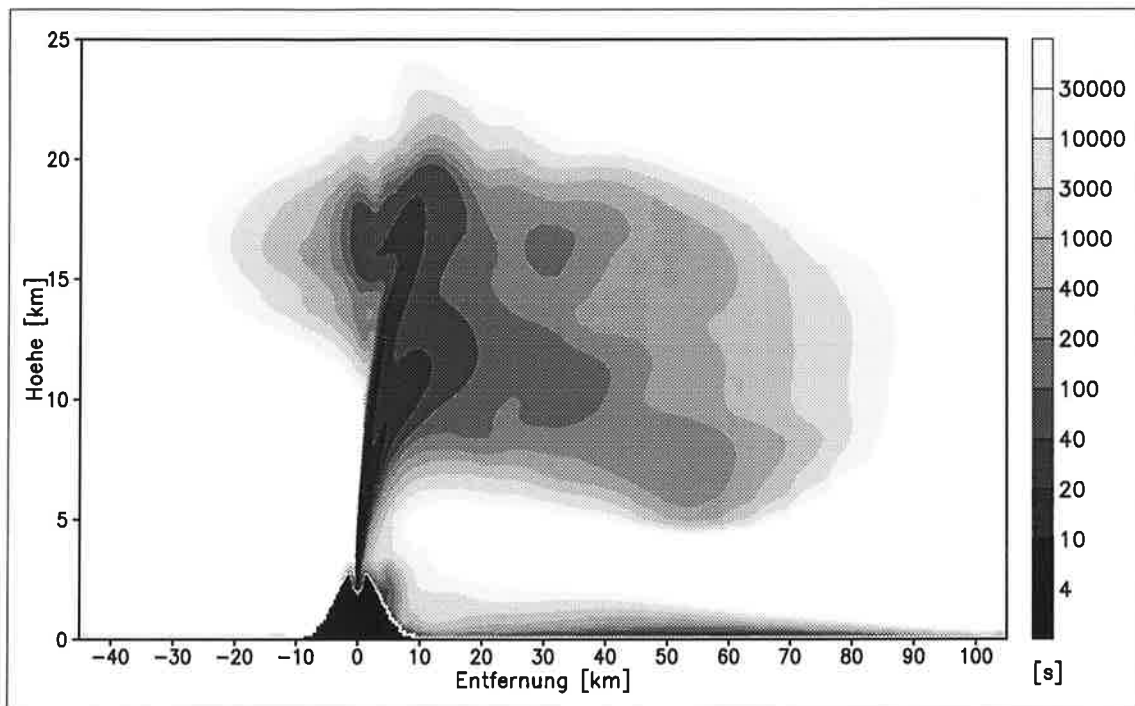


Abbildung 4.25: Horizontale Zeitskala für Turbulenz nach 25 min im Referenzexperiment.

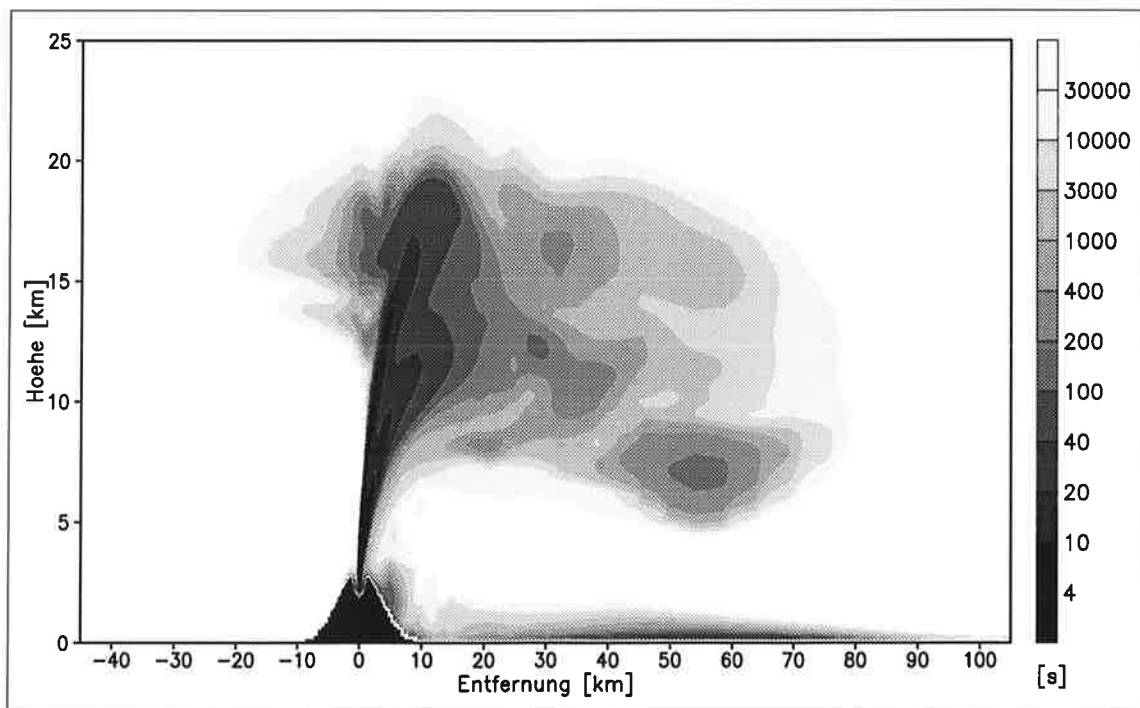


Abbildung 4.26: Vertikale Zeitskala für Turbulenz nach 25 min im Referenzexperiment.

Kürzere turbulente Zeitskalen bedeuten einen stärkeren Einfluß durch Turbulenz. Die turbulenten Zeitskalen überstreichen im Plume einen Bereich von einer Sekunde bis etwa einem halben Tag, variieren also um vier Größenordnungen. Für die Simulation von Bedeutung sind turbulente Prozesse, die auf Zeitskalen ablaufen, die in der Größenordnung der Simulationszeit oder darunter liegen. Den größten Einfluß besitzen turbulente Prozesse auf die Plumedynamik im Bereich der Aufstiegszone. In Kraternähe ist Turbulenz mit Zeitskalen im Bereich von einer Sekunde ebenso wichtig wie die Advektion. Die Berücksichtigung turbulenter Prozesse ist daher für die Beschreibung und das Verständnis der Plumedynamik unabdingbar.

Ebenso wichtig ist die Unterscheidung zwischen horizontalem und vertikalem Austausch. Selbst im Bereich kurzer turbulenter Zeitskalen ergeben sich lokal signifikante Unterschiede zwischen horizontalem und vertikalem Austausch, die trotz der in den Abbildungen 4.25 und 4.26 verwendeten logarithmischen Skalenaufteilung zu erkennen sind. Während in Kraternähe der vertikale Austausch dominiert, ist im oberen Bereich der Aufstiegszone und in den stabil geschichteten Regionen des Plume der horizontale Austausch von größerer Bedeutung.

Das Modell ATHAM ist prinzipiell in der Lage, Vulkaneruptionen zu simulieren. Es ermöglicht die Beschreibung der Dynamik eines Partikel-Gas Gemisches bei extremen Impuls- und Temperaturflüssen einschließlich der Beschreibung der Partikel-Gas Trennung und der Sedimentation von Partikeln.

Kondensationsprozesse treten bereits wenige Minuten nach Beginn der Eruption auf, neben ihrem Einfluß auf die Dynamik durch Freisetzung latenter Wärme sind mikrophysikalische Prozesse sowohl wichtig für die Clusterbildung von Aschepartikeln und deren beschleunigte Sedimentation als auch für das Auswaschen von vulkanischen Chlor- und Schwefelgasen, die Gegenstand zukünftiger Untersuchungen sind.

Turbulenz ist essentiell für die Plumedynamik. Das Einmischen von Umgebungsluft bestimmt die Temperaturverteilung und damit den Auftrieb des Plumes. Wasserdampfentrainment ist im Fall eines Linienvulkans für die Mikrophysik von gleicher Bedeutung wie der vulkanisch emittierte Wasserdampf.

Der Nachteil des hier als Linienvulkan vorgestellten Referenzexperiments ist, daß der Einfluß der nicht aufgelösten dritten Raumrichtung vollständig vernachlässigt wird. Jedoch sind selbst Spalteneruptionen, die sich wie im Falle der Lakieruption im Jahre 1783 bis 1784 über mehrere Kilometer Länge erstrecken können und dem hier simulierten Linienvulkan am ehesten entsprechen, mit zunehmender Entfernung vom Krater wesentlich durch das Entrainment parallel zur Eruptionsspalte beeinflusst, so daß der hier vorgestellte Linienvulkan keine Entsprechung in der Natur besitzt. Eine Validierung von ATHAM in der zweidimensionalen Version des Linienvulkans ist daher nicht möglich. Die Verwendung der Zylinderkoordinaten bietet eine sinnvolle Alternative, da sie dem Entrainment und der horizontalen Plumeverbreiterung in allen Raumrichtungen Rechnung trägt.

4.2.2 Das Referenzexperiment in Zylinderkoordinaten - Vergleich der Modellversionen

Die Änderung des Koordinatensystems in der zweidimensionalen Modellwelt von kartesischen auf Zylinderkoordinaten hat weitreichende Konsequenzen auf das Simulationsergebnis: In Zylinderkoordinaten wird die Wirkung der dritten Raumrichtung unter der Annahme einer Zylindersymmetrie in der Horizontalen einbezogen. Das sich dabei einstellende zusätzliche Entrainment aus der dritten Raumrichtung verstärkt den vertikalen Wasserdampftransport im Plume und die Bedeutung mikrophysikalischer Prozesse für die Plumeentwicklung. Der Wasserdampfgehalt und die Temperatur der umgebenden Atmosphäre haben einen wesentlich größeren Einfluß als in kartesischen Koordinaten. Breiten sich Partikel einer punktförmigen Quelle in Zylinderkoordinaten aus, nehmen die Konzentrationen quadratisch mit dem Abstand von der Quelle ab, wogegen sie beim Linienvulkan nur linear abnehmen.

Der Nachteil der Zylinderkoordinaten gegenüber kartesischen Koordinaten ist die unterstellte extreme Symmetrie in der Horizontalen. So kann kein mittlerer Horizontalwind im Modell betrachtet werden, der durch eine Neigung des Plumes zu einer Verstärkung der Partikel-Gas Trennung führt. Zusätzlich ist der Horizontalwind in der Lage, dynamische Instabilitäten im Plume zu verstärken, die die vertikale Struktur des Plumes beeinflussen. Während in kartesischen Koordinaten also vulkanische Signale über- und der Einfluß der Umgebung unterschätzt werden, bewirkt die Verwendung von Zylinderkoordinaten eine unrealistisch symmetrische horizontale Struktur. Eine wirklich realistische Beschreibung von Vulkaneruptionen ist daher nur in einer dreidimensionalen Modellwelt möglich, zweidimensionale Simulationen können immer nur Näherungen sein, die die Untersuchung einzelner Aspekte und Einflußfaktoren erlauben.

Im folgenden wird das Referenzexperiment in Zylinderkoordinaten exemplarisch vorgestellt und mit dem entsprechenden Experiment als Linienvulkan in zweidimensionalen kartesischen Koordinaten verglichen.

Asche und Lapilli

Die Abbildungen 4.27 und 4.28 zeigen die Ascheplumes in den beiden zweidimensionalen Modellversionen 25 min nach Beginn der Eruption. Die Modellgeometrie sowie der Antrieb des Vulkans sind in beiden Experimenten identisch und entsprechen denen in Tabelle 4.2 angegebenen. Zur besseren Vergleichbarkeit bezüglich der Umgebungsbedingungen erfolgt auch beim Linienvulkan die Eruption in eine ruhende Atmosphäre.

Der Einfluß der Modellversion auf das Simulationsergebnis ist so gravierend, daß die sich entwickelnden Plumes kaum Gemeinsamkeiten aufweisen. Während der in den Abbildungen dargestellte vertikale Modellausschnitt noch identisch gewählt ist, ist dies für den horizontalen Modellausschnitt nicht sinnvoll: Die horizontale Ausdehnung der sich entwickelnden Plumes unterscheidet sich um eine Größenordnung.

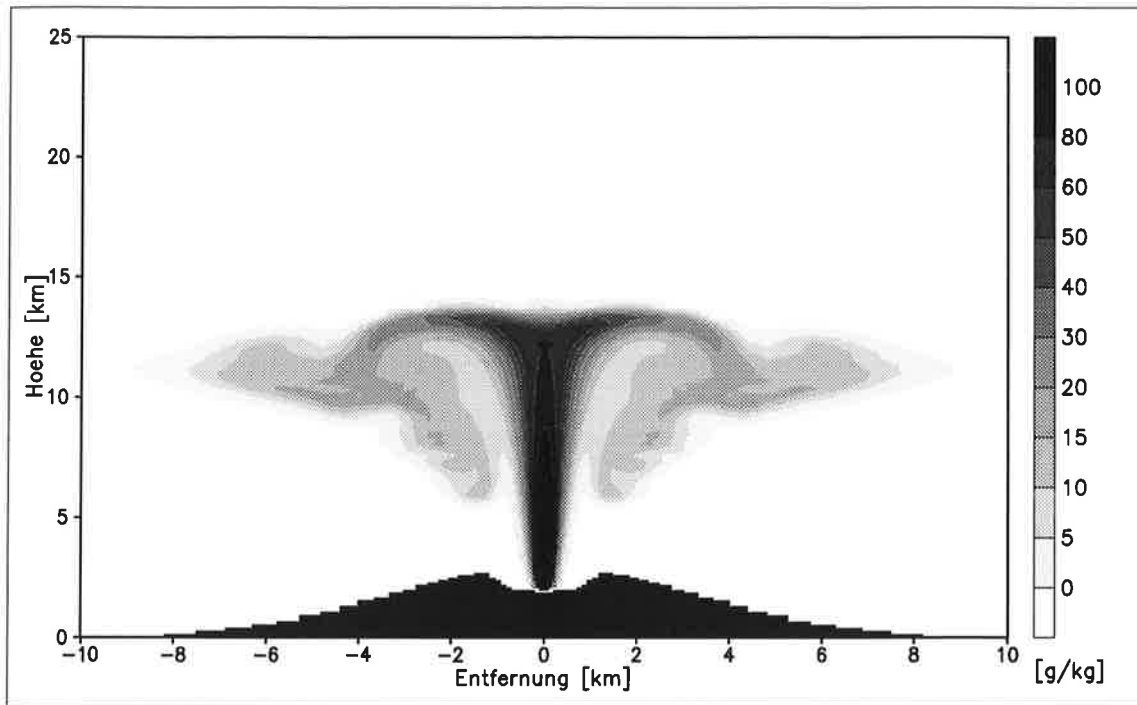


Abbildung 4.27: Ascheplume in Zylinderkoordinaten: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration der Asche des Referenzexperimentes in Zylinderkoordinaten nach 25 min.

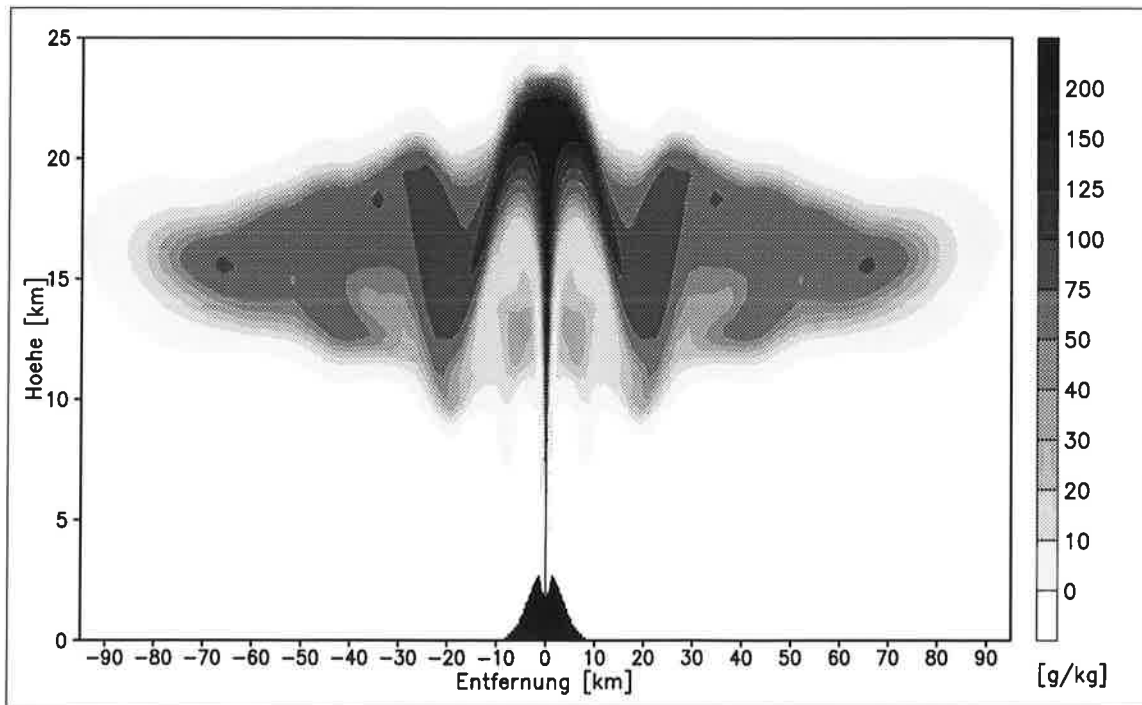


Abbildung 4.28: Ascheplume beim Linienvulkan: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration der Asche des Referenzexperimentes als Linienvulkan ohne Hintergrundwind nach 25 min.

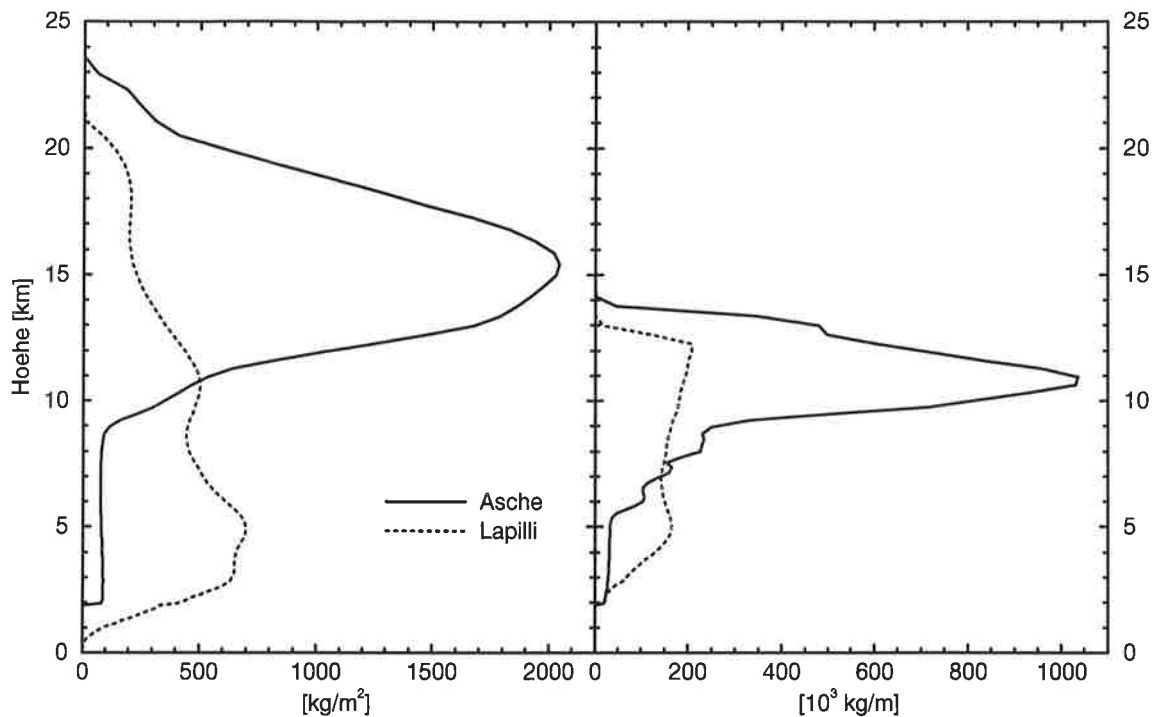


Abbildung 4.29: Vertikalverteilungen für Asche und Lapilli: Links dargestellt für das Referenzexperiment als Linienvulkan, rechts für das Experiment in Zylinderkoordinaten, jeweils 25 min nach Beginn der Eruption. Wegen der verschiedenen Modellversionen sind die Zahlenwerte nicht direkt vergleichbar.

In Zylinderkoordinaten erreicht der Ascheplume in 11 km Höhe seine größte horizontale Ausdehnung, die einen Kreis von 9 km um den Krater umfaßt. Der Ascheplume des Linienvulkans erstreckt sich in 17 km Höhe, dem Tropopausenniveau, bis in über 90 km Entfernung vom Krater.

Während in Zylinderkoordinaten die spezifischen Konzentrationen rasch mit zunehmender Entfernung vom Krater abnehmen und in 6 km Entfernung maximal 20 g/kg erreicht werden, findet man beim Linienvulkan selbst in über 60 km Entfernung vom Krater noch Konzentrationen von über 75 g/kg. Bei einer Plumehöhe von rund 14 km schafft es der Plume in Zylinderkoordinaten nicht, in die Stratosphäre vorzudringen, wogegen der Linienvulkan eine Höhe von über 24 km erreicht. Nach 25 min Eruption befinden sich dort mehr als 30 % der im Plume enthaltenen Asche in der Stratosphäre. An dieser Stelle wird zudem durch Vergleich mit dem Ascheplume in Abbildung 4.4 des vorherigen Abschnitts deutlich, daß das horizontale Windfeld einen wesentlichen Einfluß auf die Plumehöhe und die Vertikalverteilung der Asche hat, der in Abschnitt 4.5.2 diskutiert wird.

Die in Abbildung 4.29 gegenübergestellten Vertikalverteilungen der beiden Plumes besitzen ein stark ausgeprägtes Maximum in der Schirmregion des Plumes. Das Maximum des Linienvulkans befindet sich jedoch in einer um fast 5 km größeren Höhe.

Auffallend ist, daß sich bei Verwendung von Zylinderkoordinaten die Schirmregion auf einen wesentlich schmaleren Höhenbereich konzentriert als bei Verwendung kartesischer Koordinaten. Betrachtet man die vertikale Ausdehnung des Plumes an der Stelle, an der die Konzentrationen in der Vertikalverteilung auf die Hälfte des Maximalwertes abgesunken sind, so ist die Schirmregion des Linienvulkans mit 7 km mehr als doppelt so hoch wie bei Verwendung von Zylinderkoordinaten. Gemeinsam ist den Ascheplumes in beiden Modellversionen, daß die Sedimentation von Aschepartikeln während der Eruptionsphase vernachlässigbar ist.

Die gravierenden Unterschiede zwischen den Modellversionen werden verständlich, wenn man die Plumedynamik in Kraternähe näher analysiert. In den ersten Kilometern über dem Krater ist der Öffnungswinkel des aufsteigenden Ascheplumes in beiden Modellversionen nahezu identisch. Der Durchmesser des aufsteigenden Plumes erhöht sich von 300 m am Krater auf über 1300 m in 3 km Höhe über dem Krater. Im Falle des Linienvulkans verteilt sich der Fluß des eruptierten Gemisches auf über die vierfache Breite, in Zylinderkoordinaten auf die 18 fache Fläche. Als Folge sind nicht nur die spezifischen Konzentrationen im Zentrum der Aufstiegszone in Zylinderkoordinaten deutlich reduziert, sondern der Plume kühlt durch das stärkere Einmischen von Umgebungsluft schneller ab. Da die turbulente Diffusion von Temperatur in den instabil geschichteten Randbereichen der Aufstiegszone viermal so effektiv ist wie die Partikeldiffusion, fällt die effektive Auftriebskraft (vergleiche Kapitel 3.5.5 bzw. 3.5.7), die für den Plumeaufstieg verantwortlich ist, gegenüber dem Linienvulkan mit zunehmender Höhe deutlich geringer aus. In Zylinderkoordinaten erreicht der Plume daher eine geringere Höhe bei reduzierten Partikelkonzentrationen.

Die Vertikalverteilungen der Lapilli in Abbildung 4.29 unterscheiden sich in den beiden Modellversionen noch gravierender als die der Asche. Während sich beim Linienvulkan die meisten Lapilli unterhalb der Schirmregion befinden und die maximalen Konzentrationen in 5 km Höhe auftreten, werden in Zylinderkoordinaten die höchsten Konzentrationen innerhalb der Schirmregion des Plumes erreicht. Trotzdem ist beim Linienvulkan die Deposition der Lapilli mit 3 % der bis zu diesem Zeitpunkt eruptierten Lapilli deutlich geringer als bei Verwendung von Zylinderkoordinaten, wo nach 25 min über 16 % der eruptierten Lapilli den Boden bereits wieder erreicht haben.

Die Ursache hierfür liegt im zeitlichen Verlauf der Eruption bis zu diesem Zeitpunkt: In der ersten Aufstiegsphase gelangen aufgrund des starken Überschießens des Plumes - wie im vorherigen Abschnitt beschrieben - mehr Lapilli in die Schirmregion des Plumes als in den späteren Phasen der Eruption. Diese Lapilli verlassen den Plume relativ rasch durch Sedimentation und führen einige Zeit später zu einer verstärkten Deposition von Lapilli. Im Falle des Linienvulkans steigen die Lapilli höher auf und benötigen länger bis sie deponiert werden. Die erhöhten Lapillikonzentrationen unterhalb von 5 km Höhe stammen gerade aus dem Überschießen während der ersten Eruptionsphase. Bei Verwendung von Zylinderkoordinaten ist diese Phase verstärkter Deposition bereits erfolgt.

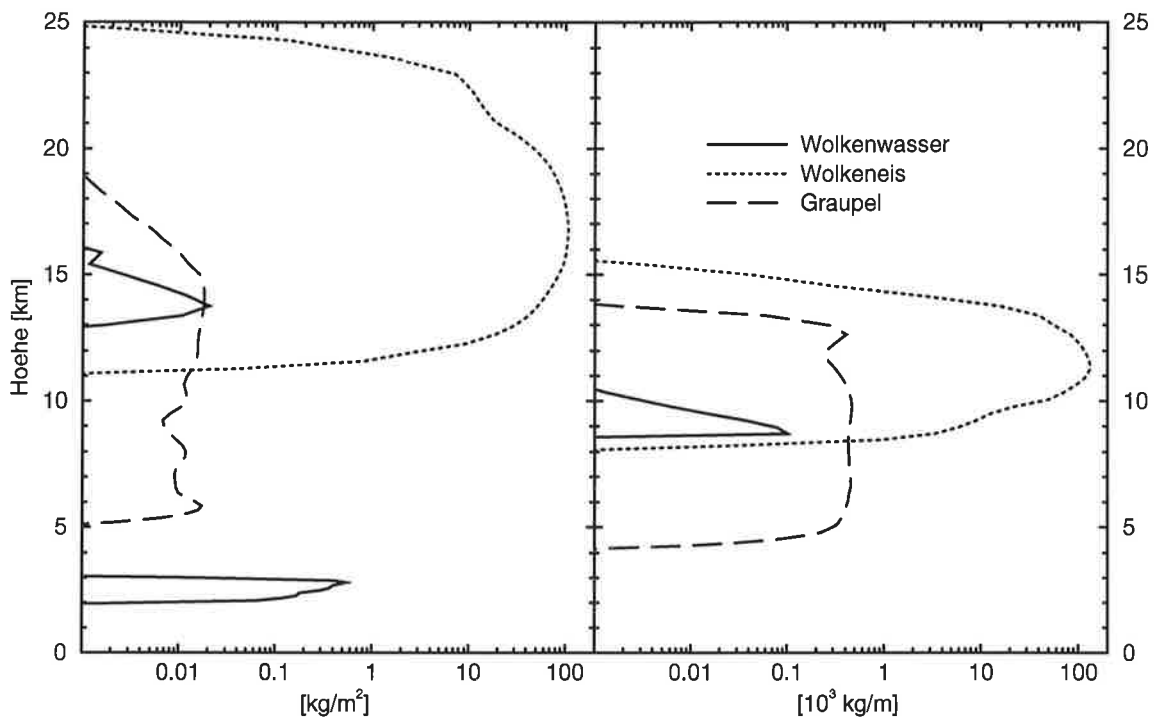


Abbildung 4.30: Vertikalverteilungen für Hydrometeore: Links dargestellt für das Referenzexperiment als Linienvulkan, rechts für das Experiment in Zylinderkoordinaten, jeweils 25 min nach Beginn der Eruption.

Wasserdampf und Hydrometeore

Abbildung 4.30 zeigt die Vertikalverteilungen der Hydrometeore für die beiden Modellversionen 25 min nach Beginn der Eruption. Da sich die Konzentrationen der einzelnen Hydrometeore um Größenordnungen unterscheiden, erfolgt die Darstellung auf einer logarithmischen Skala. Wie schon bei der Verteilung von Asche und Lapilli wird der Wasserhaushalt des Plume beim Linienvulkan durch den Horizontalwind verändert. Auf Unterschiede wird in Abschnitt 4.5.2 eingegangen.

Der Anteil des Wasserdampfes an der gesamten Wasseranomalie macht in beiden Experimenten rund 25 % der gesamten Wasseranomalie aus. Der kondensierte Wasserdampf liegt fast vollständig als Eis vor, Graupel hat daran einen Anteil von 1 % im Falle von Zylinderkoordinaten und von sogar nur 0,1 % beim Linienvulkan. Dieser relative Unterschied beim Graupel ist auf die Temperaturabhängigkeit der Graupelbildung zurückzuführen. Während beim Linienvulkan der Eisplume seine maximalen Konzentrationen in Tropopausenniveau erreicht, treten in Zylinderkoordinaten die maximalen Konzentrationen über 5 km tiefer bzw. bei 40 °C höheren Temperaturen auf.

Wolkenwasser tritt beim Linienvulkan in zwei Höhenbereichen auf: Unterhalb einer Höhe von 3 km stammt es aus einer orographischen Wolke, die sich durch Aufgleiten relativ feuchter Luftmassen an beiden Flanken des Vulkans bildet, oberhalb von

12 km Höhe wird Wolkenwasser durch Kondensation in der Aufstiegszone des Plumes gebildet und kennzeichnet daher das Kondensationsniveau im Plume. In Zylinderkoordinaten entsteht keine orographische Wolke, da die bodennahen Luftströmungen wesentlich geringer ausfallen. Das Kondensationsniveau liegt um 3,5 km unter dem des Linienvulkans.

In beiden Experimenten werden nur sehr geringe Mengen Regenwasser gebildet, die in Abbildung 4.30 nicht dargestellt sind: Beim Linienvulkan bildet es sich im Bereich der orographischen Wolke, also außerhalb des Plumes. In Zylinderkoordinaten setzt die Regenbildung unterhalb einer Höhe von 5 km durch schmelzenden Graupel ein, der innerhalb des Plumes gebildet wurde.

Aus der gesamten Wasseranomalie lassen sich, wie im vorherigen Abschnitt geschildert, die Entrainmentraten für Wasserdampf abschätzen. In Zylinderkoordinaten stammt ein wesentlich größerer Teil des im Plume enthaltenen Wassers aus der umgebenden Atmosphäre. Während beim Linienvulkan nur 75 % Wasserdampf zusätzlich aus der Umgebung in den Plume gelangen, sind dies in Zylinderkoordinaten 310 %. In Zylinderkoordinaten stammt also nur ein Viertel des im Plume für mikrophysikalische Prozesse zur Verfügung stehenden Wasserdampfes aus dem Vulkan selbst, der meiste Wasserdampf gelangt durch Entrainment in den Plume. Dies entspricht der eingangs diskutierten Tatsache, daß in Zylinderkoordinaten die Bedeutung der Umgebung relativ zur vulkanischen Quelle deutlich größer ist als bei Verwendung kartesischer Koordinaten für den Linienvulkan.

Da in der Natur näherungsweise kreisförmige Krateröffnungen die Regel sind und das Entrainment bei endlich ausgedehnten Spalteneruptionen für Entfernungen, die groß sind gegenüber der Länge der Eruptionsspalte, dem einer punktförmigen Quelle entspricht, liefert die Verwendung von Zylinderkoordinaten realistischere Abschätzungen für Sensitivitätsstudien, bei denen Entrainment eine dominante Rolle spielt.

Im folgenden wird der Einfluß der zu Beginn dieses Kapitels beschriebenen Skalierung des Vulkanantriebs auf das Simulationsergebnis in Zylinderkoordinaten untersucht, bevor anschließend die Einflüsse der Mikrophysik und der Umgebung auf die Plumeentwicklung analysiert werden.

4.3 Einfluß der Modellauflösung

4.3.1 Auswahl der Experimente

Der vulkanische Antrieb für das bislang diskutierte Referenzexperiment ist von realistischen Bedingungen abgeleitet. Um den Einfluß der Skalierung auf das Simulationsergebnis und damit dessen Güte abzuschätzen, werden drei Experimente in unterschiedlichen räumlichen Auflösungen mit äquivalentem Antrieb und identischen Umgebungsbedingungen und Topographie miteinander verglichen.

Experiment	ZYL1	ZYL2	ZREF
d_e [m]	60	150	300
F_e [km ²]	7,5×7,5	100×30	200×50
w_e [m/s]	250	205	131
T_e [K]	1200	1011	727
$q_{g,e}$ [Gew. %]	3,0	20,5	49,1
$\frac{q_{v,e}}{q_{g,e}}$ [%]	66,7	8,0	2,1
ρ_e [kg/m ³]	5,52	1,31	0,80
$\frac{\partial m_e}{\partial t}$ [10 ⁶ kg/s]	3,90	4,75	7,42
c_s [m/s]	140	335	440

Tabelle 4.3: Vulkanische Parameter der Experimente zur Abschätzung des Einflusses der Modellauflösung. Die Bedeutung der einzelnen Größen findet sich im Text.

Die Umgebungsbedingungen entsprechen weiterhin den in Abbildung 4.1 dargestellten tropischen Bedingungen. Die vulkanischen Parameter der Experimente sind in Tabelle 4.3 angegeben. Da sich die Experimente vor allem durch die präeruptiv angenommenen bzw. während der Eruption simulierten Entrainmentraten unterscheiden, werden Zylinderkoordinaten verwendet. Das in Tabelle 4.3 beschriebene Experiment ZYL1 besitzt den bereits in Tabelle 4.2 angegebenen unskalierten Antrieb, das Experiment ZREF entspricht dem Referenzexperiment.

Für das Experiment ZYL1 wurde das gesamte Modellgebiet auf $F_e = 7,5 \times 7,5$ km² beschränkt, um eine Krateröffnung von $d_e = 60$ m im Durchmesser verwenden zu können. Dies entspricht einem Gitterpunktabstand von 20 m im Zentrum des Modellgebiets. Das kleine Modellgebiet erlaubt zwar eine realitätsnahe Beschreibung der Anfangsphase der Eruption, eine Simulation des mesoskaligen Plumes ist jedoch nicht möglich. Die hierzu erforderliche deutliche Vergrößerung des Modellgebiets ist ohne eine Vergrößerung des Gitterpunktabstandes im Modellzentrum nicht möglich, ohne gleichzeitig die Zahl der Gitterpunkte zu erhöhen. Die Gesamtsimulationszeit in ZYL1 ist daher auf zwei Minuten beschränkt, der Plume hat den oberen Rand des Modellgebiets erreicht.

Das Experiment ZYL2 wird mit einem Modellgebiet von horizontal 100 km und vertikal 30 km durchgeführt. Bei einem Gitterpunktabstand von 50 m im Zentrum des Modellgebiets bedeutet dies eine Vergrößerung der Querschnittsfläche der Krateröffnung um einen Faktor 6,25. Die weitere Vergrößerung des Modellgebiets auf

$200 \times 50 \text{ km}^2$ im Experiment ZREF bedeutet bei einem Gitterpunktabstand von 100 m im Modellzentrum sogar eine um einen Faktor 25 vergrößerte Querschnittsfläche gegenüber ZYL1.

Die Skalierung des Antriebes bei konstanten Impuls- und Massenflüssen für Partikel und Wasserdampf führt dazu, daß in Experiment ZYL2 die Eruptionsgeschwindigkeit und -temperatur (w_e und T_e) noch annähernd denen in ZYL1 entsprechen, obwohl der Gasanteil $q_{g,e}$ am Gesamtgemisch deutlich erhöht ist. Dieser erhöhte Gasanteil hat trotz der erhöhten gesamten Masseneruptionsrate $\partial m_e / \partial t$ eine Reduktion der Dichte ρ_e und eine Erhöhung der Schallgeschwindigkeit c_s für das Gemisch zur Folge. Während in ZYL1 die Eruptionsgeschwindigkeit deutlich über der Schallgeschwindigkeit im Gemisch liegt, ist dies für ZYL2 gerade umgekehrt.

Das Referenzexperiment ZREF unterscheidet sich bereits in Bezug auf Eruptionsgeschwindigkeit und -temperatur deutlich von den anderen Experimenten. Wie bereits in Abschnitt 4.1 diskutiert, ist der Gasanteil auf fast 50 % Gewichtsprozent angestiegen. Das Gemisch besitzt eine Dichte unter der der Atmosphäre in Kraternähe, der Wasserdampfanteil am Gas $q_{v,e} / q_{g,e}$ ist nur noch doppelt so groß wie in der Umgebung des Kraters, die Schallgeschwindigkeit liegt deutlich über der der Atmosphäre.

Im folgenden wird zunächst die Anfangsphase der Eruption in allen drei Experimenten analysiert, bevor die weitere Plumeentwicklung in den Experimenten ZYL2 und ZREF verglichen wird.

4.3.2 Die Anfangsphase der Eruption

Die Abbildungen 4.31 bis 4.33 zeigen die räumlichen Verteilungen der spezifischen Aschekonzentrationen 110 Sekunden nach Beginn der Eruption. Der in den Abbildungen gezeigte Modellausschnitt entspricht vertikal dem Modellgebiet von ZYL1. Horizontal umfaßt der Modellausschnitt jeweils nur einen kleinen Ausschnitt der verwendeten Modellgebiete. Zu diesem Zeitpunkt hat der Ascheplume des Experiments ZYL1 in Abbildung 4.31 mit nahezu 9 km Höhe den oberen Modellrand fast erreicht.

Man erkennt durch den Vergleich der Abbildungen 4.31 bis 4.33, daß die Vergrößerung der Modellauflösung zu einer Abschwächung von Strukturen im Plume führt: Im zentralen Bereich des Plumes sind die maximalen spezifischen Konzentrationen reduziert. Der Plume ist auch in größeren Höhen über dem Krater deutlich breiter. Die reduzierte Ausbruchsgeschwindigkeit führt zu einer Reduktion der Plumehöhen.

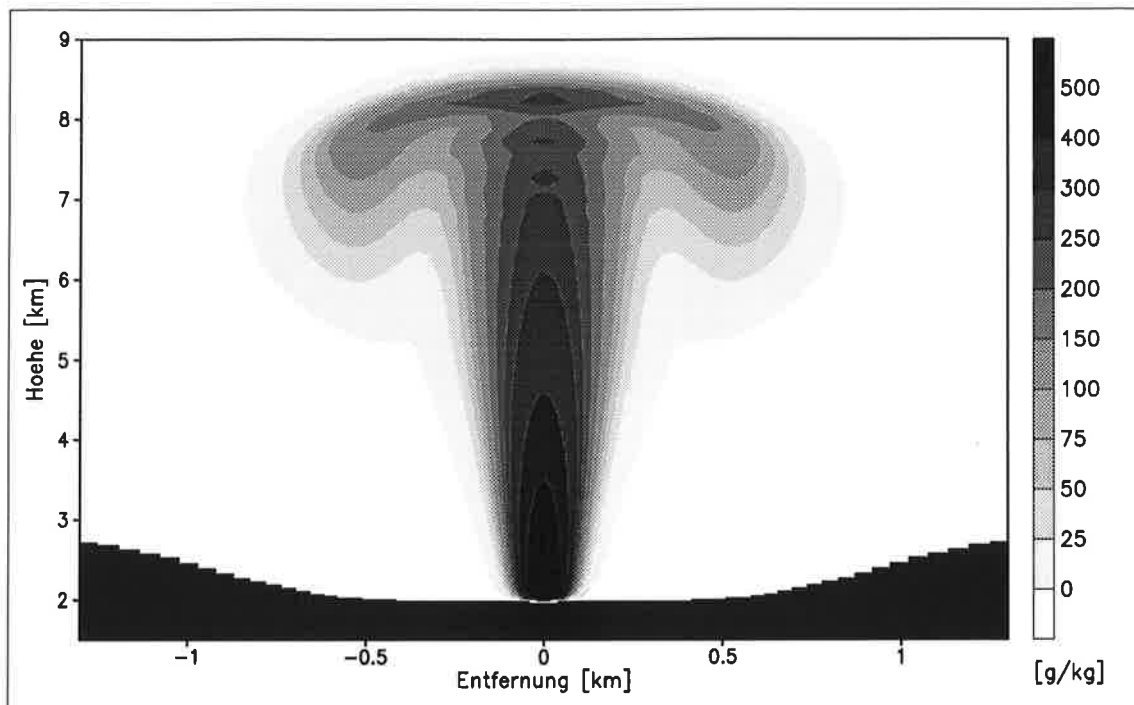


Abbildung 4.31: Ascheplume von ZYL1 nach 110 s: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration der Asche des Experimentes ZYL1. Die Krateröffnung besitzt einen Durchmesser von 60 m.

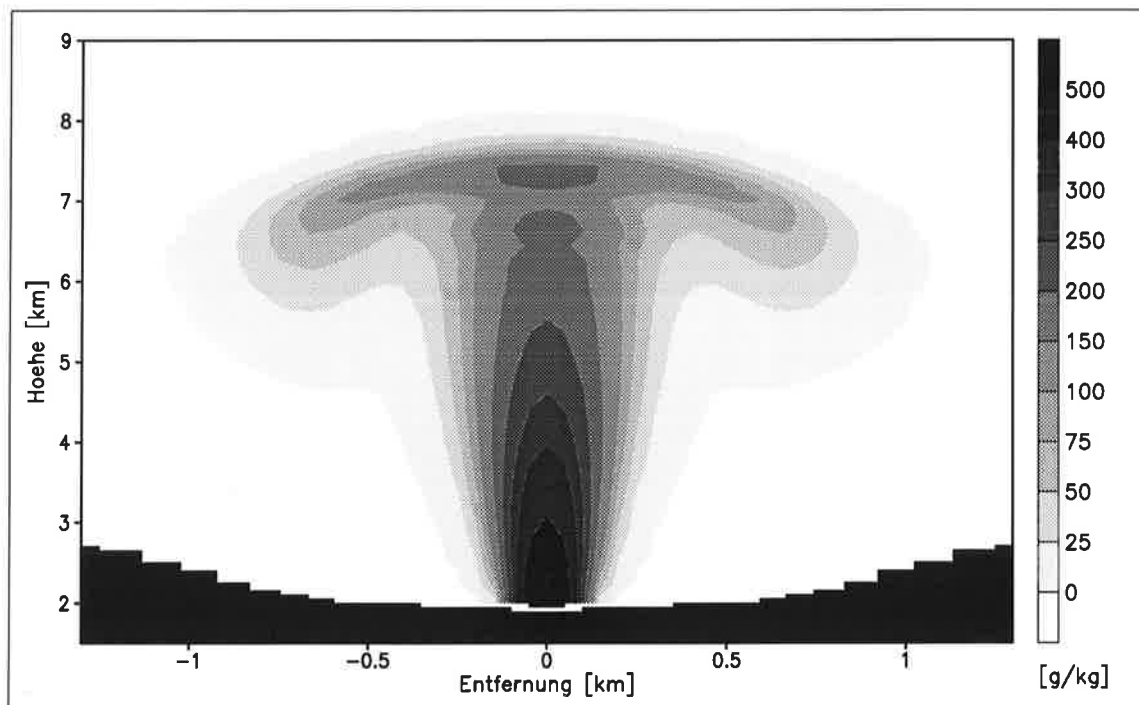


Abbildung 4.32: Ascheplume von ZYL2 nach 110 s: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration der Asche des Experimentes ZYL2. Die Krateröffnung besitzt einen Durchmesser von 150 m.

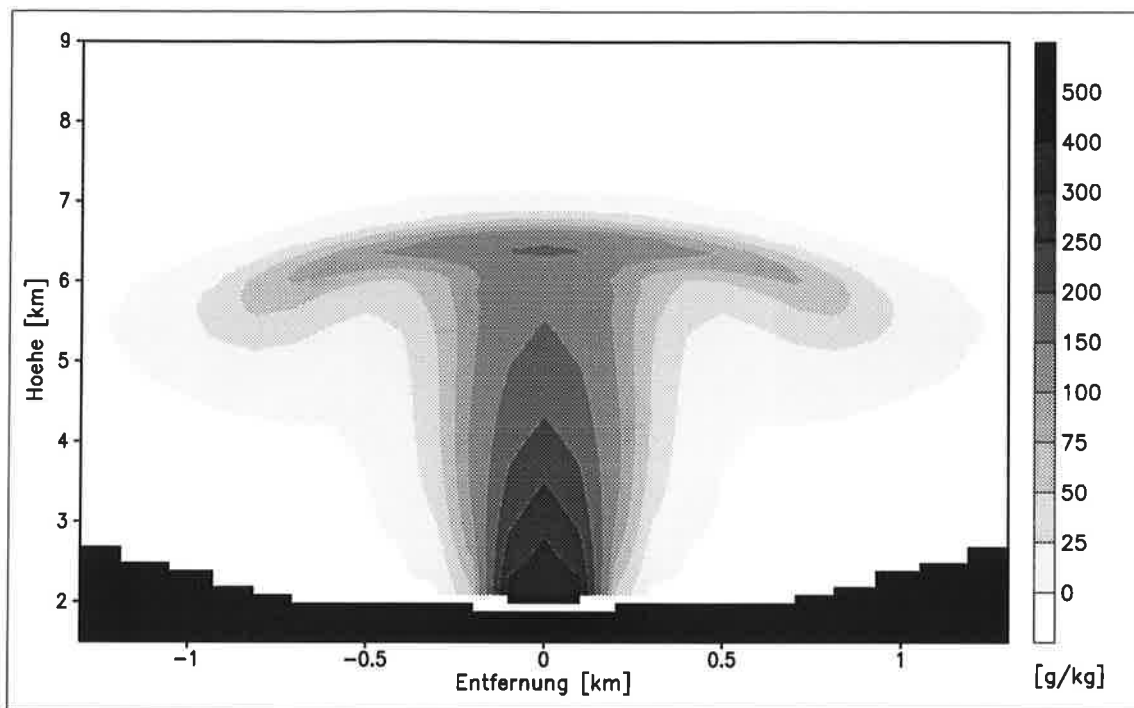


Abbildung 4.33: Ascheplume von ZREF nach 110 s: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration der Asche des Experimentes ZREF. Die Krateröffnung besitzt einen Durchmesser von 300 m.

Die Verteilungen von Asche und Wasserdampf sind in Abbildung 4.34 dargestellt. Da zu diesem frühen Zeitpunkt der Eruption in keinem Experiment eine Kondensation von Wasserdampf erfolgt ist, ist die Wasserdampf-anomalie identisch mit der Gesamtwasserbilanz.

Gegenüber dem realitätsnahen Experiment werden um 800 m bzw. 1700 m geringere Plumehöhen erreicht. Die ballistischen Plumehöhen¹ unterscheiden sich verglichen mit ZYL1 dagegen um 1025 m bzw. 2240 m. Der tatsächlich simulierte Unterschied in den Plumehöhen ist jedoch nur um etwa 25 % geringer, so daß die ersten Minuten der simulierten Eruptionen durch die Jetphase - d.h. den Verbrauch des Anfangsimpulses - dominiert werden. Die durch die Skalierung bewirkte Verdünnung des eruptierten Gemisches führt also nur teilweise zu einem Ausgleich der verringerten Ausbruchsgeschwindigkeiten durch zusätzliche Auftriebskräfte.

Die im Plume enthaltene Aschemasse ist in allen Experimenten identisch und entspricht der bis zu diesem Zeitpunkt eruptierten Asche. Die Höhe der maximalen Aschekonzentration befindet sich in allen Experimenten etwa einen Kilometer unterhalb der maximalen Plumehöhe. Die maximale Aschekonzentration nimmt mit größerer Auflösung zu. Die vertikale Ausdehnung der oberen Plumeregion nimmt dagegen mit größerer Auflösung ab, so daß sich in jedem Experiment etwa die gleiche Masse im oberen, pilzförmigen Plumbereich befindet. Trotz größerer Auflösung sind die vertikalen Strukturen im oberen Plumbereich also kleinskaliger.

¹Gemeint ist die Höhe, die nur durch den Verbrauch des Anfangsimpulses erreicht würde.

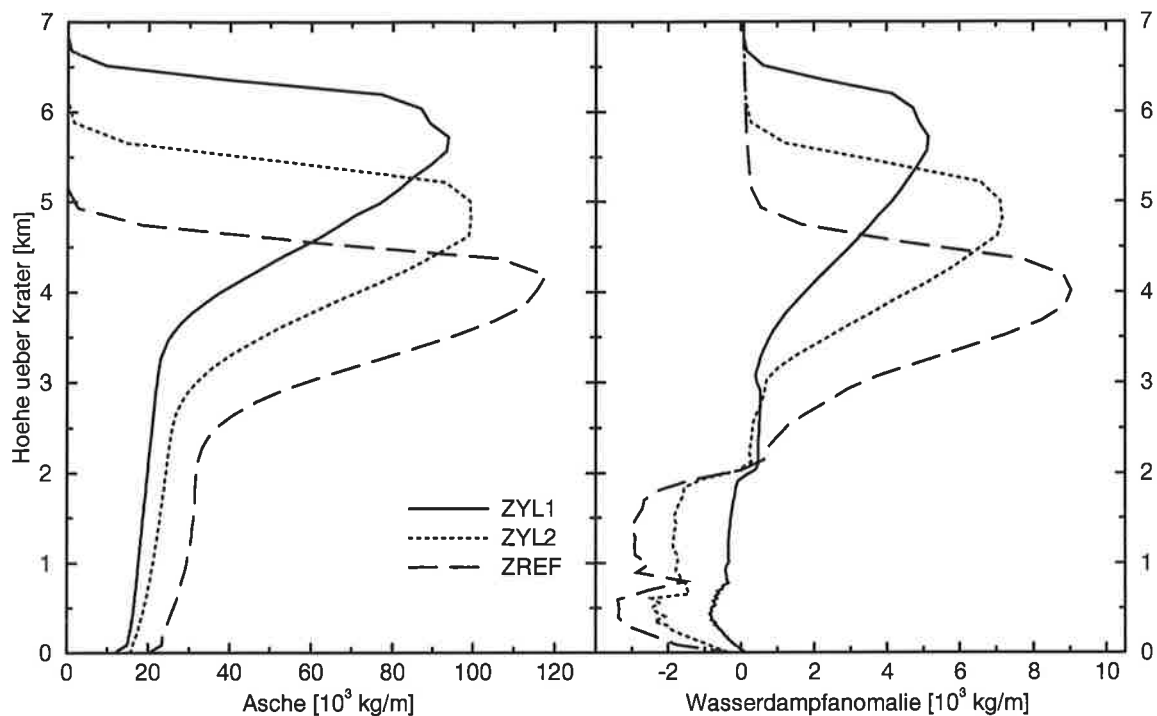


Abbildung 4.34: Vertikalverteilungen für Asche und Wasserdampf nach 110 s: Dargestellt ist die Masse der Asche bzw. des Wasserdampfes pro Höhenmeter in 10^3 kg/m für drei unterschiedliche Modellauflösungen.

Die negative Wasserdampfanomalie im unteren Teil der Plumes in Abbildung 4.34 ist Folge der Abwärtsbewegung relativ trockener Luftmassen aus größerer Höhe im Bereich der Plumeränder. Die Verstärkung dieser negativen Anomalie bei größerer Auflösung spiegelt die Tatsache wider, daß die bei der Skalierung notwendige Verdünnung des Gemisches durch trockenes Gas erfolgte und mehr Umgebungsluft verdrängt wird.

Das Wasserdampfentrainment läßt sich aus der Wasserdampfanomalie, wie im vorigen Abschnitt angegeben wurde, berechnen. Der Wasserdampfplume im unskalierten Experiment enthält demnach nach 110 s Eruption etwa 50 % mehr Wasserdampf durch Entrainment von Umgebungsluft, als vom Vulkan emittiert wurde, wogegen es in ZYL2 bereits über 75 % und in ZREF sogar mehr als 90 % sind. Dies bedeutet, daß das Wasserdampfentrainment bereits in dieser frühen Phase der Eruption in den größer auflösenden Modellsimulationen deutlich überschätzt wird. Dadurch steht im weiteren Verlauf der Simulationen in den Experimenten mit skaliertem Antrieb mehr Wasserdampf für Kondensationsprozesse zur Verfügung als im realitätsnahen Experiment ZYL1.

Die Höhe des Wasserdampfplumes, die Höhe der maximalen Wasserdampfanomalie ebenso wie die vertikale Ausdehnung des oberen Bereichs des Wasserdampfplumes entsprechen in allen Experimenten denen des jeweiligen Ascheplumes. In den ersten Minuten der Eruption ist die Partikel - Gas Trennung daher vernachlässigbar.

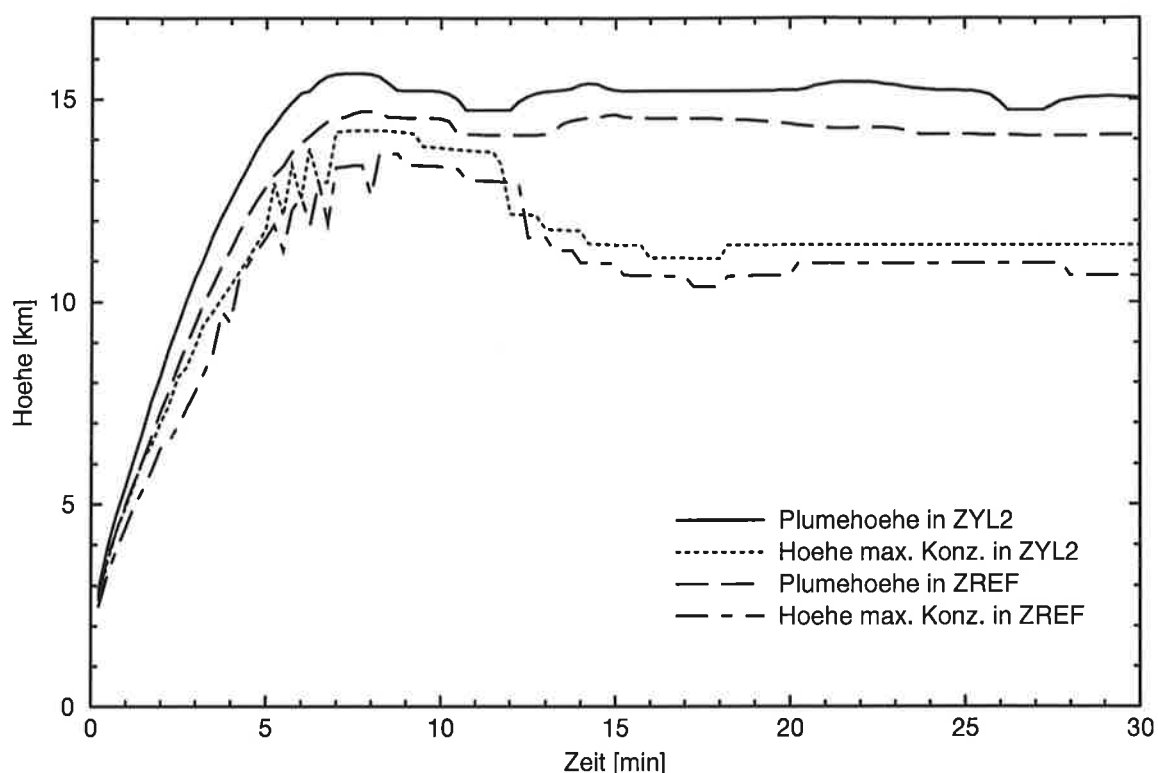


Abbildung 4.35: Vergleich der Plumehöhen: Dargestellt sind neben den Höhen der Ascheplumes für die Experimente ZYL2 und ZREF die Höhen maximaler Aschekonzentration in den zugehörigen Vertikalverteilungen.

4.3.3 Die Plumeentwicklung während der Eruptionsphase

Die Abbildungen 4.36 und 4.37 zeigen die Ascheplumes der Experimente ZYL2 und ZREF 25 min nach Beginn der Eruption. Gegenüber der Anfangsphase der Eruption sind die relativen Unterschiede zwischen den simulierten Plumes deutlich reduziert. Obwohl der Plume im gröber aufgelösten Experiment wie schon in der Anfangsphase insgesamt etwas niedriger ist, zeigen die Schirmregionen in beiden Experimenten eine gute Übereinstimmung: Nicht nur die horizontalen und vertikalen Strukturen entsprechen einander, sondern auch die absoluten Werte der spezifischen Konzentrationen stimmen weitgehend überein. Während die kleinräumigen Strukturen in Kraternähe durch ZREF im Vergleich zu ZYL2 nicht erfaßt werden können, so sind die größeren räumlichen Strukturen in den kraterfernen Gebieten auch durch das gröbere Gitter in ZREF darstellbar. Eine annähernde Übereinstimmung in diesem Gebiet läßt sich durch die verwendete Skalierung des Antriebes erzielen.

Die Plumehöhen während der Eruptionsphase sind in Abbildung 4.35 dargestellt. Der Haupteinfluß der gröberen Modellauflösung in ZREF besteht in einer um gut 5 % reduzierten Plumehöhe gegenüber ZYL2. Absolut gesehen bedeutet dies, daß der Unterschied in den Plumehöhen gegenüber der Anfangsphase im Laufe der Eruption leicht reduziert wird. Neben den Plumehöhen sind die Höhen der maximalen

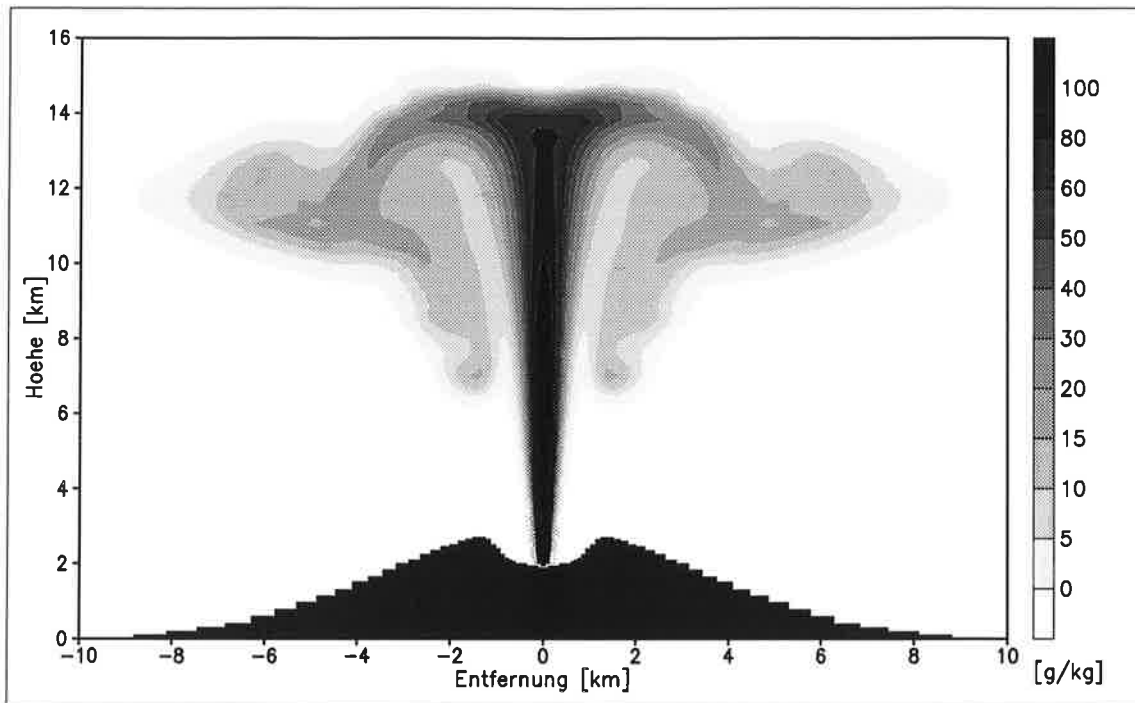


Abbildung 4.36: Ascheplume von ZYL2 nach 25 min. Abgebildet ist die Verteilung der spezifischen Konzentration der Asche.

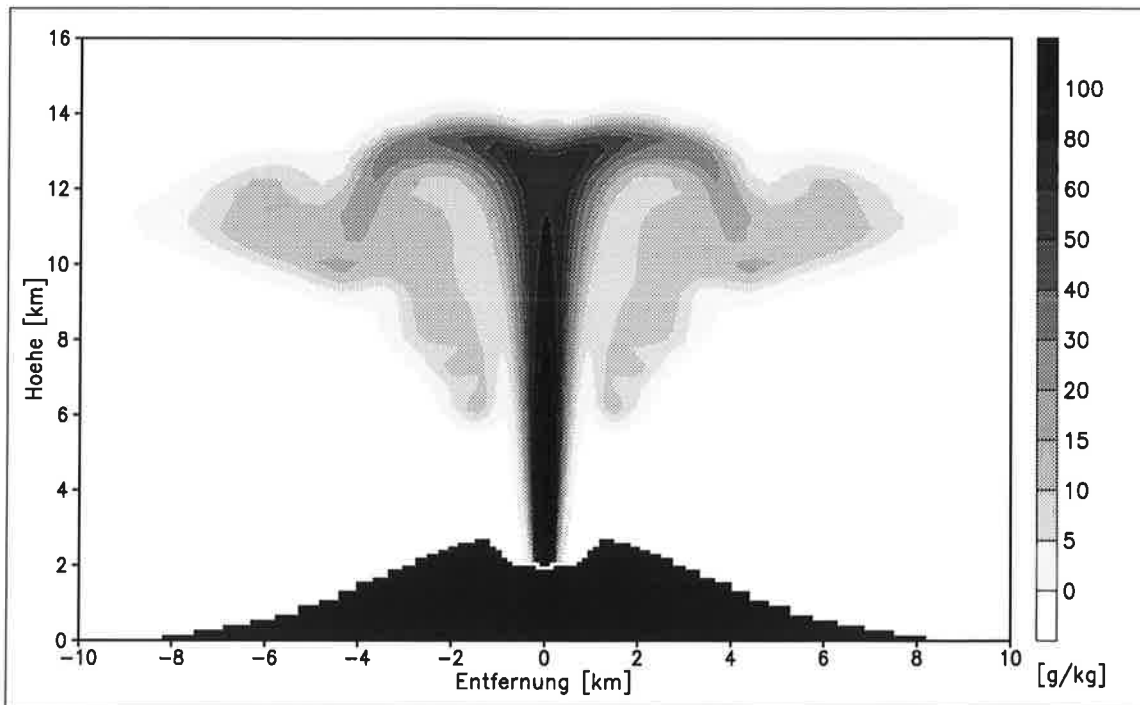


Abbildung 4.37: Ascheplume von ZREF nach 25 min. Abgebildet ist die Verteilung der spezifischen Konzentration der Asche.

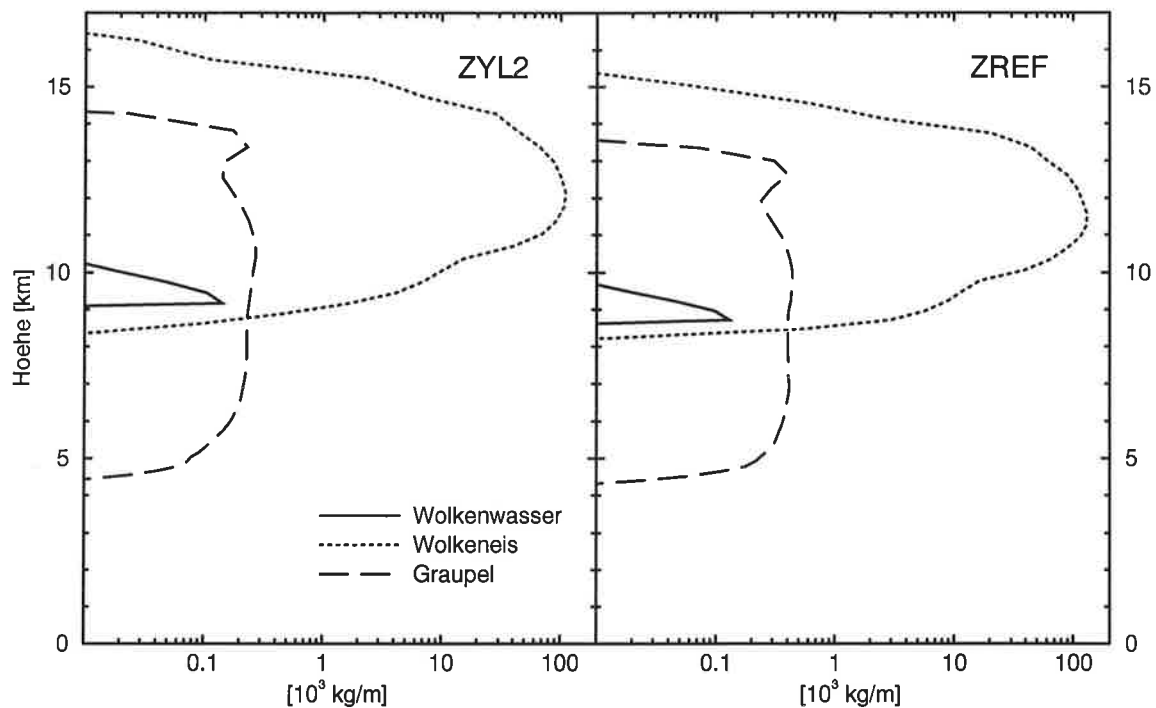


Abbildung 4.38: Vertikalverteilungen für Hydrometeore: Dargestellt ist die Masse der Wasserdampfanomalie pro Höhenmeter 25 min nach Beginn der Eruption: Links für das Experiment ZYL2, rechts für ZREF.

Konzentrationen in den Vertikalverteilungen abgebildet. Bis auf einen nahezu konstanten Höhenunterschied ist der zeitliche Verlauf der Plumehöhen in beiden Experimenten identisch. Die Höhen maximaler Konzentration weisen dabei eine geringere Abweichung voneinander auf als die Plumehöhen. Das Überschießen des Plumes zu Beginn der Eruption ist besonders gut im Höhenverlauf der maximalen Konzentration zu erkennen. Während die Plumehöhe sich geringfügig unterhalb der Maximalhöhe einpendelt, sinkt die Höhe maximaler Konzentration um fast 3 km und damit um über 20 % unter die Maximalhöhe.

Abbildung 4.38 zeigt die Vertikalverteilungen der Hydrometeore in beiden Experimenten 25 min nach Beginn der Eruption. Regenwasser wird durch schmelzenden Graupel zum gewählten Zeitpunkt in so geringen Mengen gebildet, daß er in der Abbildung 4.38 nicht dargestellt ist.

Das gebildete Wolkenwasser markiert die Lage des Kondensationsniveaus innerhalb der Aufstiegszone des Plumes. Seine Höhe liegt im gröber aufgelösten Experiment etwa 500 m niedriger. Die Ursache hierfür liegt nicht im erhöhten Wasserdampfgehalt des Plumes in ZREF, sondern in den niedrigeren Temperaturen der insgesamt breiteren Aufstiegszone, in der eine Sättigung früher erreicht wird als in ZYL2. Denn obwohl in ZREF wie schon in der Anfangsphase der Eruption der Vertikaltransport von Wasserdampf insgesamt überschätzt wird, sind die Wasserdampfkonzentrationen im zentralen Bereich der Aufstiegszone geringer als in ZYL2, wie Abbildung 4.39 zu entnehmen ist.

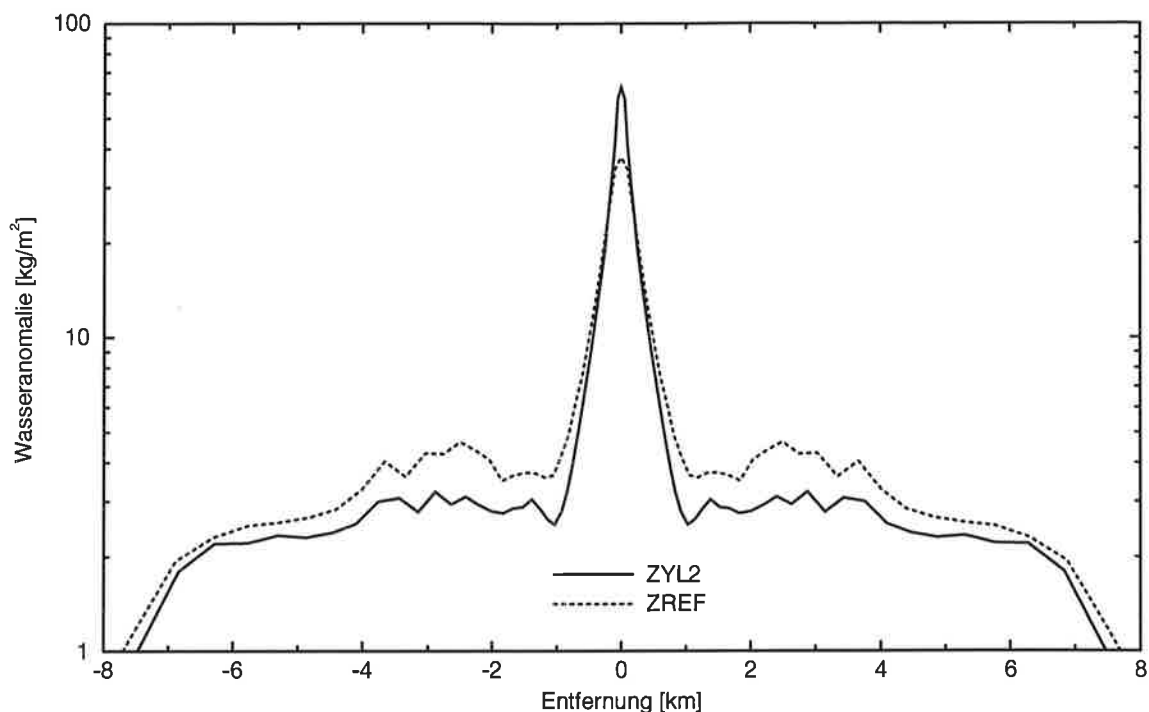


Abbildung 4.39: Horizontalverteilungen der gesamten Wasseranomalie: Dargestellt sind die Masse der Wasseranomalie in einer vertikalen Säule für die Experimente ZYL2 und ZREF, 25 min nach Beginn der Eruption.

Aus der gesamten Wasseranomalie ergibt sich, daß im Plume von ZREF fast 20 % mehr Wasser enthalten ist als in ZYL2. Als Folge sind die mikrophysikalischen Prozesse intensiviert, wie an den höheren Konzentrationen in den Vertikalverteilungen für Eis und Graupel für ZREF in Abbildung 4.38 zu erkennen ist. Die Freisetzung latenter Wärme wird überschätzt und damit der Einfluß der Umgebung auf die Plumeentwicklung. Vergleicht man jedoch die Gesamtbudgets thermischer Energie, gebildet aus der Summe der freigesetzten Wärmen durch die Eruption und mikrophysikalische Umwandlungen, beträgt der Unterschied zwischen den Experimenten lediglich 1,5 %. Dies liegt daran, daß von dem zusätzlich im Plume von ZREF enthaltenen Wasserdampf weniger als zwei Drittel kondensieren und die durch mikrophysikalische Prozesse freigesetzte Wärme lediglich 13 % der durch die Eruption freigesetzten thermischen Energie ausmacht. Die Unterschiede in der Gasdichte aufgrund der unterschiedlichen Wasserdampfgehalte haben wegen der niedrigen Temperaturen in den Schirmregionen der Plumes nur einen sehr geringen Einfluß auf die Plumedynamik.

Die Wirkung dieser zusätzlich in ZREF freigesetzten Wärme auf die Plumeentwicklung wird weiterhin durch die Tatsache abgeschwächt, daß sich dieser Energiegewinn räumlich auf den gesamten Plumbereich außerhalb der eigentlichen Aufstiegszone verteilt, wie aus der Horizontalverteilung der Gesamtwasseranomalien in Abbildung 4.39 zu erkennen. Der absolute Höhenunterschied zwischen den Experimenten aus der Anfangsphase der Eruption wird durch den überschätzten Wasserdampftransport nur geringfügig reduziert.

Die Skalierung des Vulkanantriebes auf eine gröbere Modellauflösung führt also bei der Entwicklung des mesoskaligen Plumes zu leicht reduzierten Plumehöhen. Das Wasserdampfentrainment wird zwar überschätzt, seine zusätzliche Wirkung auf die Plumeentwicklung ist jedoch gering. Tendenziell gewinnt die Umgebung durch eine gröbere Auflösung einen stärkeren Einfluß auf die Plumedynamik. Die für das Referenzexperiment in Abschnitt 4.2 vorgenommene Skalierung des Antriebs ist gerechtfertigt, wenn man an der zeitlichen Entwicklung und den Eigenschaften der Schirmregion bzw. des mesoskaligen Plumes interessiert ist.

Problematisch ist eine solche Skalierung, wenn Prozesse untersucht werden sollen, die stark durch die Dynamik in der Nähe des Kraters oder der Aufstiegszone beeinflusst sind. Dies kann z.B. der Fall sein, wenn chemische Prozesse in der Aufstiegszone untersucht werden sollen. Sie werden nicht durch die mittlere Temperatur sondern durch die Maximalwerte der Temperatur bestimmt, die in unskalierten Simulationen deutlich höher sind als in der skalierten Version. Unrealistische Ergebnisse sind außerdem zu erwarten, wenn das eruptierte Gemisch aufgrund seiner hohen mittleren Dichte keinen aufsteigenden Plume bildet, sondern kollabiert. Das Gemisch ist in solchen Fällen nicht in der Lage, vor dem Kollabieren soviel Umgebungsluft durch Entrainment aufzunehmen, wie es durch die Skalierung angenommen wird.

4.4 Einfluß mikrophysikalischer Prozesse

Die mit mikrophysikalischen Prozessen verbundenen Phasenübergänge führen zu einer Freisetzung oder einem Verbrauch thermischer Energie. Die Kondensation oder Deposition von Wasserdampf führt zu einer lokalen Temperaturerhöhung der Atmosphäre. Einen echten Energiegewinn erfährt die Atmosphäre nur, wenn der kondensierte Wasserdampf die Atmosphäre als Niederschlag verläßt. Jedoch beeinflusst auch der zeitliche Unterschied zwischen Kondensation und Evaporation Umlagerungsprozesse innerhalb der Atmosphäre.

Ziel dieses Abschnitts ist es, den Einfluß der Mikrophysik auf die Plumeentwicklung zu quantifizieren und seine Bedeutung abzuschätzen. Da in diesem Zusammenhang das Entrainment von Wasserdampf eine zentrale Rolle spielt, werden im folgenden vier Experimente in Zylinderkoordinaten mit den atmosphärischen Bedingungen und Antrieb des Referenzexperiments (vergleiche Tabelle 4.2 bzw. 4.3) diskutiert.

Ausgehend vom Referenzexperiment ZREF mit der vollen Mikrophysik wird das gleiche Experiment ohne Berücksichtigung mikrophysikalischer Effekte durchgeführt, bei dem der Wasserdampf in der Gasphase verbleibt. Aus dem Experiment unter Vernachlässigung der Eisphase läßt sich deren Bedeutung für die Mikrophysik und Plumeentwicklung ableiten. Dadurch wird die Abschätzung des maximalen Effekts einer Gefrierpunktserniedrigung z.B. durch Einlösen von vulkanischen Gasen möglich. Um den Einfluß von vulkanischer und atmosphärischer Wasserdampfquelle durch Entrainment voneinander abzugrenzen, wird ein Experiment mit trockener vulkanischer Quelle in die Betrachtung einbezogen.

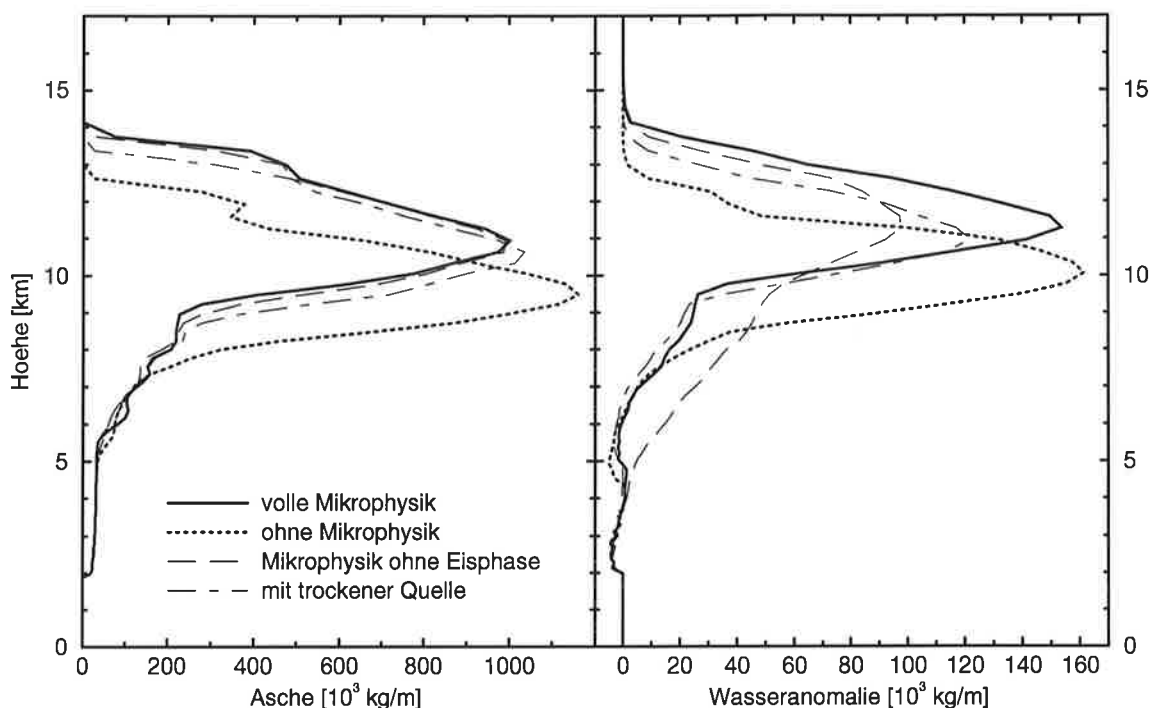


Abbildung 4.40: Vertikalverteilungen zum Einfluß mikrophysikalischer Prozesse: Rechts ist die Masse der Asche pro Höhenmeter 25 min nach Beginn der Eruption dargestellt, links die zugehörigen Wasseranomalien.

Abbildung 4.40 zeigt die Vertikalverteilungen für Asche und Wasseranomalie - die Summe aus Hydrometeoren und Wasserdampfanomalie - in den verschiedenen Experimenten 25 min nach Beginn der Eruption. Durch die Wirkung der Mikrophysik steigen Asche- und Wasserdampfplume im Mittel um 1500 m, bzw. 13 % höher auf. Die maximalen Konzentrationen in den Vertikalverteilungen der Ascheplumes gehen als Folge mikrophysikalischer Prozesse um 15 % zurück. Die Schirmregion des Ascheplumes verteilt sich über einen größeren Höhenbereich, wogegen die Gesamtmasse der insgesamt im Plume enthaltenen Asche konstant bleibt.

Die Horizontalverteilung der Asche wird durch den Einfluß der Mikrophysik kaum verändert, wie Abbildung 4.41 zeigt. In der Aufstiegszone über dem Krater ergeben sich praktisch keine Unterschiede, in der sich horizontal ausbreitenden Schirmregion ergeben sich Abweichungen im Bereich einiger Prozent mit wechselndem Vorzeichen. Die horizontale Gesamtausdehnung des Plumes nimmt durch den Einfluß der Mikrophysik nur geringfügig zu.

Im Gegensatz zu den Ascheplumes nehmen die maximalen Konzentrationen in den Vertikalverteilungen der Wasserplumes durch den Einfluß der Mikrophysik weniger deutlich ab. Das Entrainment von Wasserdampf in den Plume wird durch die Mikrophysik geringfügig verstärkt. Berechnet man die Entrainmentraten für Wasserdampf, wie in den vorherigen Abschnitten beschrieben, so ergibt sich durch den Einfluß der Mikrophysik eine um 5 % höhere Entrainmentrate. Während der aus der Umgebung eingemischte Wasserdampf ohne den Einfluß der Mikrophysik 295 % der vulkani-

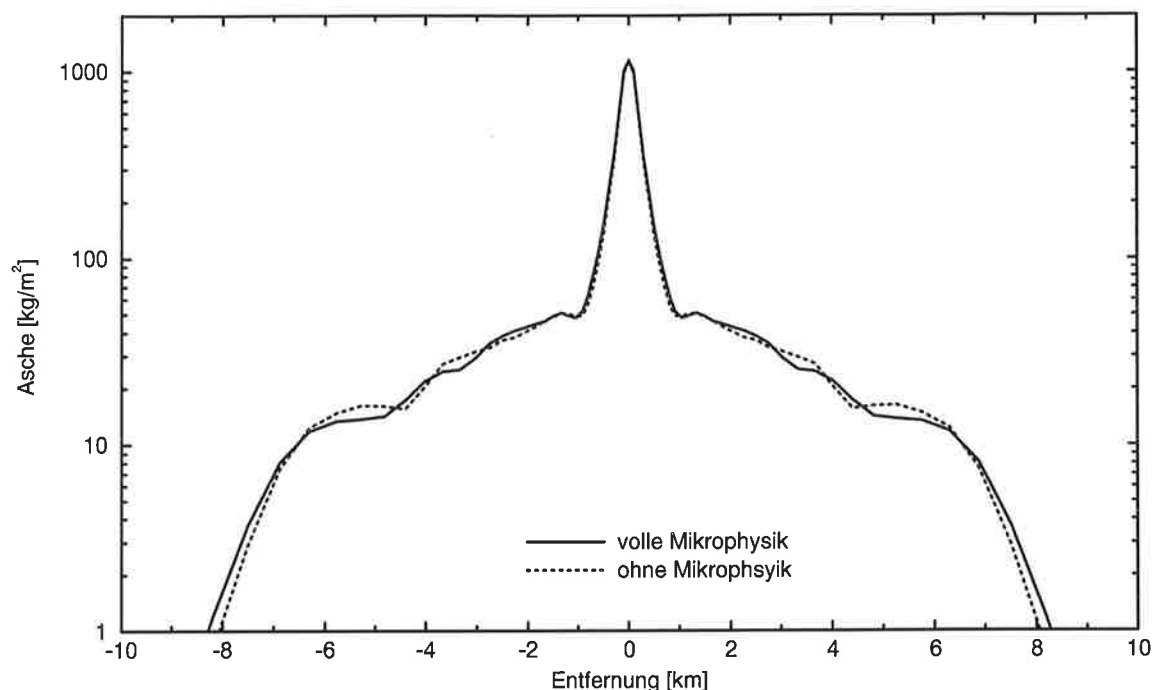


Abbildung 4.41: Horizontalverteilungen für Asche: Dargestellt ist die Masse Asche in einer vertikalen Säule mit und ohne Berücksichtigung mikrophysikalischer Prozesse 25 min nach Beginn der Eruption.

schen Quelle ausmacht, erhöht sich dieser Wert auf 310 %, wenn mikrophysikalische Prozesse wirksam sind.

Bei Vernachlässigung der vulkanischen Wasserdampfquelle ergibt sich ein um 300 m bis 400 m niedrigerer Ascheplume, der sich damit nicht wesentlich vom Ascheplume mit vulkanischer Quelle unterscheidet. Läßt man dagegen den Vulkan in eine trockene Atmosphäre eruptieren (in den Abbildungen nicht dargestellt), so erhält man nahezu den Ascheplume des Experiments ohne Mikrophysik. Bei Vernachlässigung von Wasserdampfentrainment in den Plume haben mikrophysikalische Prozesse daher keinen Einfluß auf die Plumeentwicklung. Der vom Vulkan emittierte Wasserdampf reicht nicht aus, Kondensationsprozesse in nennenswertem Umfang auszulösen. In einer trockenen Umgebung kann der vom Vulkan emittierte Wasserdampf jedoch wichtig sein, um den für die Übersättigung erforderlichen Wasserdampf zur Verfügung zu stellen.

Die Eisphase besitzt keinen signifikanten Einfluß auf die Entwicklung des Ascheplumes. Wie Abbildung 4.40 verdeutlicht, ist bei Vernachlässigung der Eisphase die geringfügig reduzierte Plumehöhe klein im Vergleich zu den sonstigen dynamischen Schwankungen der Plumehöhe während der Eruptionsphase, die bereits in den vorherigen Abschnitten diskutiert wurden. Die durch die Eruption hervorgerufene Wasseranomalie ist über einen größeren Höhenbereich verteilt: Ist die Wasseranomalie bei voller Mikrophysik nach 25 min überwiegend auf die Schirmregion konzentriert, so findet sich dort bei Vernachlässigung der Eisphase wesentlich weniger Wasser.

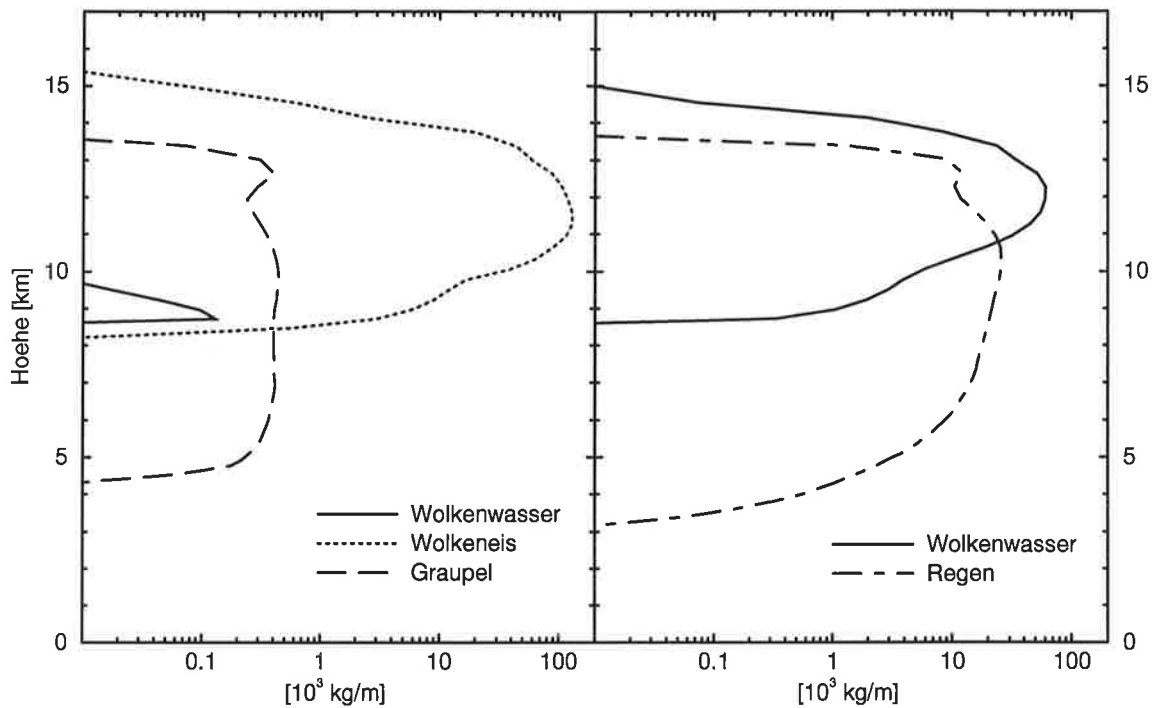


Abbildung 4.42: Vertikalverteilungen für Hydrometeore. Dargestellt ist die Masse an Wolkenwasser, Wolkeneis und Graupel pro Höhenmeter 25 min nach Beginn der Eruption: Links mit, rechts ohne Berücksichtigung von Eisbildungsprozessen.

Die Vertikalverteilungen der Hydrometeore in Abbildung 4.42 verdeutlichen das unterschiedliche Verhalten in beiden Experimenten. Das Kondensationsniveau befindet sich in beiden Experimenten in knapp 9 km Höhe. Hier wird zunächst Wolkenwasser gebildet, das anschließend rasch gefriert. Die Deposition von Wasserdampf auf Eiskristallen verhindert die weitere Bildung von Wolkenwasser. Die Graupelbildung in der Schirmregion des Plumes erfolgt aufgrund von Temperaturen unter -35°C sehr langsam, 99 % des kondensierten Wasserdampfes verbleiben als Eiskristalle im Plume.

Bei Vernachlässigung der Eisphase kommt es zu einer Anreicherung von Wolkenwasser in der Schirmregion, so daß eine effektive Regenbildung den kondensierten Wasserdampf aus der Schirmregion entfernt. Nach 25 min befinden sich nur noch 50 % des kondensierten Wasserdampfes als Wolkenwasser im Plume. Der nach Verlassen der Schirmregion teilweise wieder verdunstende Regen führt zu einer Abkühlung und Wasserdampfanreicherung in tieferliegenden Atmosphärenschichten. Nach 25 min sind bereits 20 % des kondensierten Wasserdampfes wieder verdunstet. In der Gasphase befindet sich daher 50 % mehr Wasserdampf als bei der Einbeziehung der Eisphase. Das Reentrainment dieser abgekühlten, mit Wasserdampf angereicherten Luftmassen hat als Nettoeffekt keinen Einfluß auf die Plumedynamik: Die zuvor erfolgte Abkühlung wird gerade durch die Kondensation des zusätzlichen Wasserdampfes wieder ausgeglichen.

Obwohl die Eisphase also für die Energetik des Plumes unwichtig ist, kann sie dennoch durch die Wechselwirkung von Hydrometeoren und Aschepartikel einen hier nicht berücksichtigten Einfluß auf die Entwicklung des Ascheplumes haben: Wasserdampf kann nicht nur auf Silikatpartikeln kondensieren, sondern auch durch die Bildung eines Wasserfilms die Koagulation und beschleunigte Sedimentation der Partikel bewirken. Gefriert das kondensierte Wasser jedoch, ist diese Koagulation unterdrückt. Da Gefrierpunkterniedrigungen bislang vernachlässigt wurden, die im Extremfall das Auftreten der Eisphase verhindern können (Thibert und Dominé, 1997), ist die Eisphase in der verwendeten Mikrophysik überschätzt. Die tatsächliche Verteilung des kondensierten Wassers wird daher zwischen den in Abbildung 4.42 gezeigten Extremen liegen.

Mikrophysikalische Prozesse haben über die Freisetzung latenter Wärme einen signifikanten Einfluß auf die Plumeentwicklung. Der dadurch hervorgerufene Höhen Gewinn liegt im Referenzexperiment in der gleichen Größenordnung wie das in den vorherigen Abschnitten beschriebene Überschießen zu Beginn der Eruption oder das dynamische Schwingen des Plumes während der Eruption. Die Eisphase ist unbedeutend für die Energetik des Plumes, jedoch ein entscheidender Einflußfaktor bei der Beschreibung der Auswaschprozesse von Silikatpartikeln und vulkanischen Gasen in einer vollständigeren mikrophysikalischen Beschreibung.

Da der entrainete Wasserdampf ausschlaggebend für die Intensität mikrophysikalischer Prozesse ist, hängt die Wirkung der Mikrophysik auf die Plumedynamik entscheidend von den atmosphärischen Bedingungen wie Temperatur, Feuchte und Wind ab, deren Einfluß Gegenstand des nächsten Abschnittes ist.

4.5 Einfluß atmosphärischer Bedingungen

Durch Entrainment werden große Mengen Umgebungsluft in den Plume eingemischt. Die Plumeentwicklung wird dabei nicht nur durch die bei der Kondensation bzw. Deposition von entraintem Wasserdampf freigesetzte latente Wärme beeinflusst, sondern auch durch die thermische Energie der eingemischten Luftmassen. In Abhängigkeit der Temperatur der umgebenden Luft wird dem Plume unterschiedlich viel Energie zugeführt, die zusammen mit der Schichtung der Atmosphäre zu einer unterschiedlichen Plumeentwicklung führt. Ein horizontales Windfeld führt zu einer Plumeineigung mit Auswirkungen auf das Sedimentationsverhalten der Partikel und die Plumedynamik.

Die nachfolgenden Untersuchungen werden mit Ausnahme der Experimente mit mittlerem horizontalem Windfeld in Zylinderkoordinaten durchgeführt. Der vulkanische Antrieb und die Bodentopographie sind in allen Experimenten dieses Abschnittes mit denen des Referenzexperimentes identisch.

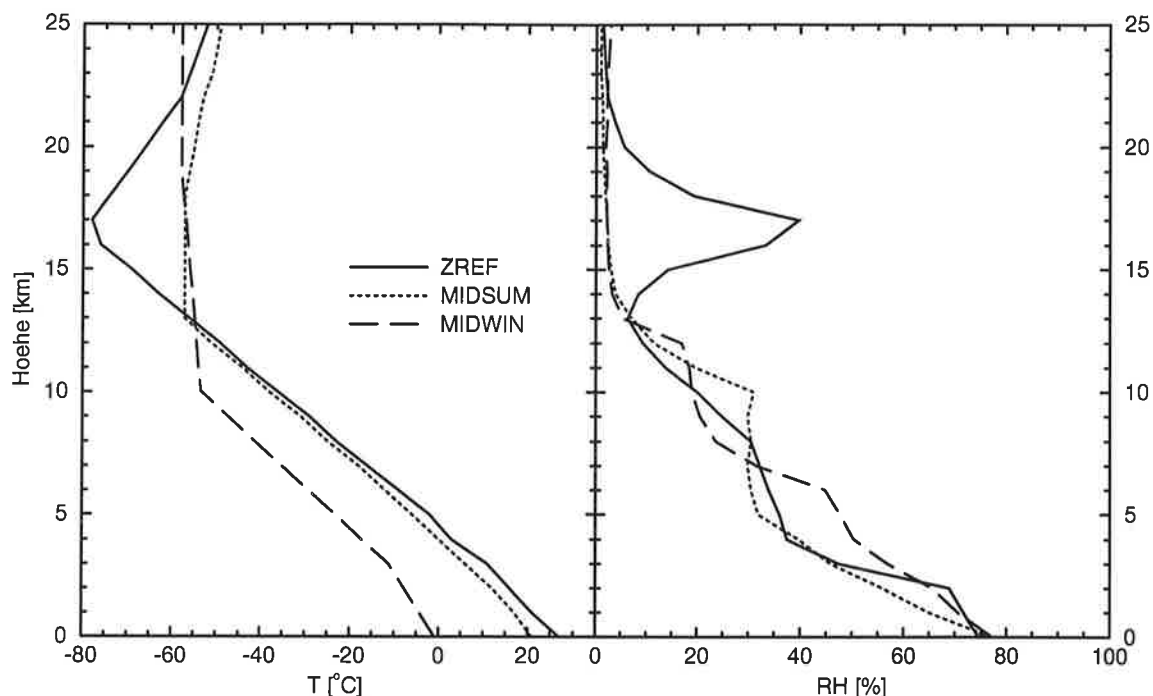


Abbildung 4.43: Meteorologische Randbedingungen für mittlere Breiten: Neben den Vertikalprofilen von Temperatur (T) und relativer Feuchte (RH) für das Referenzexperiment sind Profile, die mittlere Breiten in Sommer und Winter repräsentieren (McClatchey et al., 1972), für die unteren 25 km der insgesamt 50 km hohen Modellatmosphäre gezeigt.

4.5.1 Einfluß von Temperatur- und Feuchteprofil

In diesem Abschnitt werden vier Experimente, die sich durch unterschiedliche Profile für Temperatur und Feuchte voneinander unterscheiden, mit dem Referenzexperiment verglichen. Ziel ist es, den Einfluß mittlerer meteorologischer Bedingungen und der aktuellen Wettersituation auf das Simulationsergebnis abzuschätzen.

Die ersten beiden Experimente beschreiben eine Vulkaneruption in mittleren Breiten. Ihre Temperatur- und Feuchteprofile in Abbildung 4.43 sind wie das tropische Profil des Referenzexperimentes ZREF McClatchey et al. (1972) entnommen und repräsentieren mittlere Breiten im Sommer (MIDSUM) bzw. Winter (MIDWIN). Der Hauptunterschied zwischen den Profilen ZREF und MIDSUM besteht in einer um 4 km niedrigeren Tropopause bei einem vor allem in der Höhe des Kraters reduzierten Feuchtegehalt der Atmosphäre. Gegenüber MIDSUM sind bei MIDWIN die Temperaturen und damit der absolute Feuchtegehalt der Atmosphäre deutlich reduziert bei noch einmal niedrigerer Tropopause.

Zwei weitere Experimente sind Variationen der tropischen Bedingungen des Referenzexperimentes, die durch Unterschiede in der aktuellen Wettersituation hervorgerufen werden können. Ihre Temperatur- und Feuchteprofile sind in Abbildung 4.44 dargestellt. Das Experiment TROPH unterscheidet sich von den Bedingungen ZREF

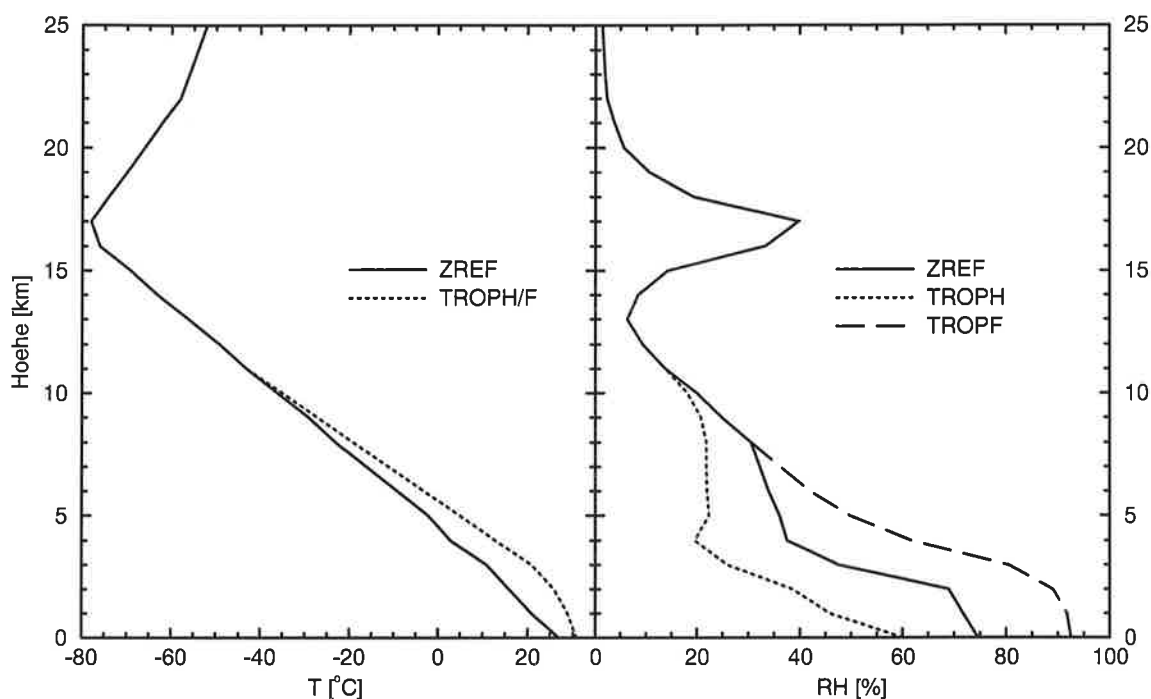


Abbildung 4.44: Meteorologische Randbedingungen für tropische Bedingungen: Neben den Vertikalprofilen von Temperatur (T) und relativer Feuchtigkeit (RH) für das Referenzexperiment sind Profile für eine wärmere und feuchtere tropische Wettersituation gezeigt.

nur durch eine Erwärmung der unteren Troposphäre, die so gewählt ist, daß in Kraternähe eine um 10°C erhöhte Temperatur herrscht. Eine solche Temperaturerhöhung kann bereits durch einen Tagesgang in der Temperatur hervorgerufen werden. Die Temperatur der höheren Luftschichten ist so bestimmt, daß eine stabile Schichtung der Atmosphäre erhalten bleibt. Oberhalb einer Höhe von 11 km stimmen die Temperaturprofile von ZREF und TROPH wieder vollständig überein. Die relative Feuchtigkeit von TROPH ist so reduziert, daß die spezifischen Feuchten in beiden Experimenten identisch sind.

Das Experiment TROPF besitzt das gleiche Temperaturprofil wie TROPH und unterscheidet sich von ihm durch eine deutlich erhöhte relative Feuchtigkeit, die etwas mehr als eine Verdoppelung des Wasserdampfgehalts in Kraternähe bedeutet. Die feucht - warmen Bedingungen von TROPF sind eher typisch für tropische Vulkane in geringer Höhe über dem Meeresspiegel. Aus Gründen der besseren Vergleichbarkeit zwischen den Experimenten wird die Topographie jedoch nicht verändert.

Die Vertikalverteilungen von Asche und Wasseranomalie 25 min nach Beginn der Eruption in Abbildung 4.45 zeigen für die Experimente, deren Umgebungsbedingungen für mittlere Breiten typisch sind, daß der mittlere meteorologische Zustand der Atmosphäre einen signifikanten Einfluß auf die Plumeentwicklung hat. Bereits unter den für mittlere Breiten im Sommer typischen Bedingungen vermag der Plume nur bis zu einer Höhe, die sich gut 1000 m unter der des Referenzexperimentes

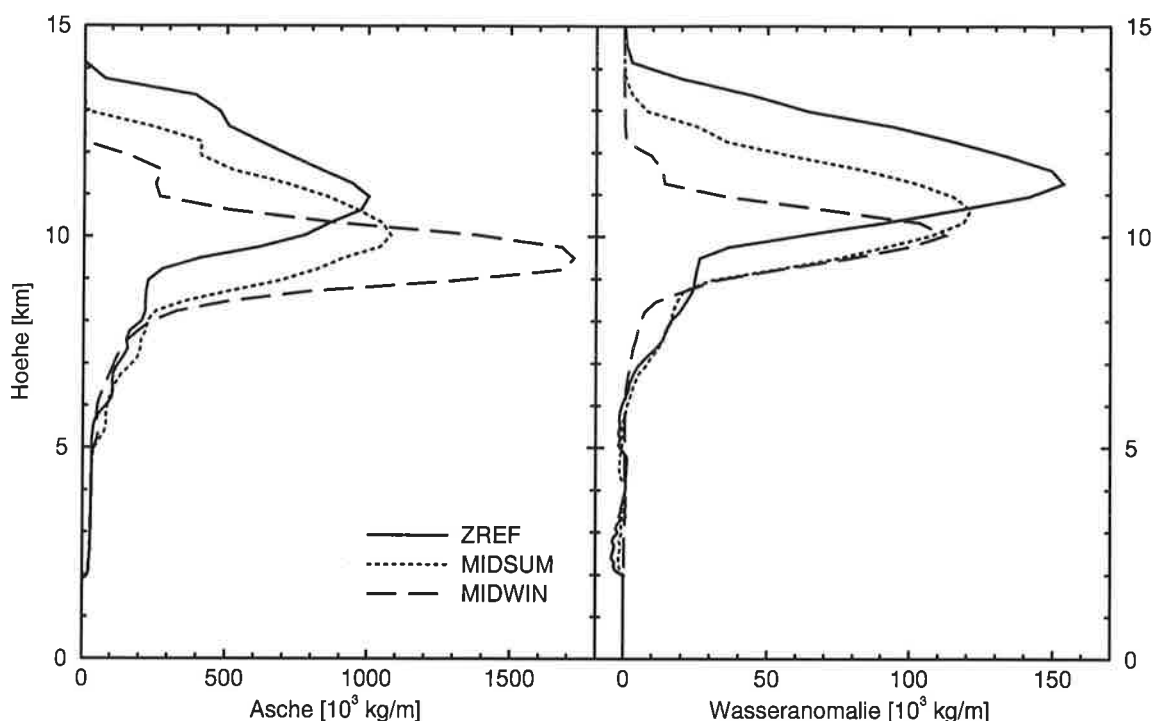


Abbildung 4.45: Vertikalverteilungen in mittleren Breiten: Rechts ist die Masse der Asche pro Höhenmeter 25 min nach Beginn der Eruption dargestellt, links die zugehörigen Wasseranomalien.

befindet aufzusteigen. Der Plume von MIDSUM wird gerade durch die Tropopause in 13 km Höhe gestoppt. Lediglich geringe Mengen Wolkeneis und Wasserdampf erreichen die Stratosphäre, die zusammen etwas über ein Prozent des insgesamt im Plume enthaltenen Wassers ausmachen.

Noch deutlicher ist dieser Effekt für die Winterbedingungen MIDWIN: Zwar ist die Plumehöhe noch einmal um bis zu 1000 m reduziert, dennoch sind nach 25 min Eruption nahezu ein Drittel der eruptierten Aschepartikel bis in die untere Stratosphäre gelangt, die bereits in 10 km Höhe beginnt. Vom im Plume enthaltenen Wasserdampf erreicht sogar mehr als die Hälfte die Stratosphäre. Dieses Wasser besteht zu über 90 % aus Eiskristallen, der Rest befindet sich fast vollständig in der Gasphase.

Wegen des im Mittel geringeren Feuchtegehalts der Atmosphäre in mittleren Breiten ist das Wasserdampfentrainment und damit die Wirkung mikrophysikalischer Prozesse weniger ausgeprägt. Während im Referenzexperiment noch dreimal soviel Wasserdampf aus der Umgebung stammt wie aus der vulkanischen Quelle, so reduziert sich dieser Betrag auf das zweifache in MIDSUM. In MIDWIN wird sogar mehr Wasserdampf vom Vulkan emittiert als durch Einmischen von Umgebungsluft in den Plume gelangt. Im Winter der mittleren Breiten sind daher mikrophysikalische Prozesse für die Plumedynamik von untergeordneter Bedeutung.

Eruptionen, die in den Tropen troposphärische und somit lediglich lokale Auswirkungen haben, können in mittleren Breiten - saisonal unterschiedlich - effektive

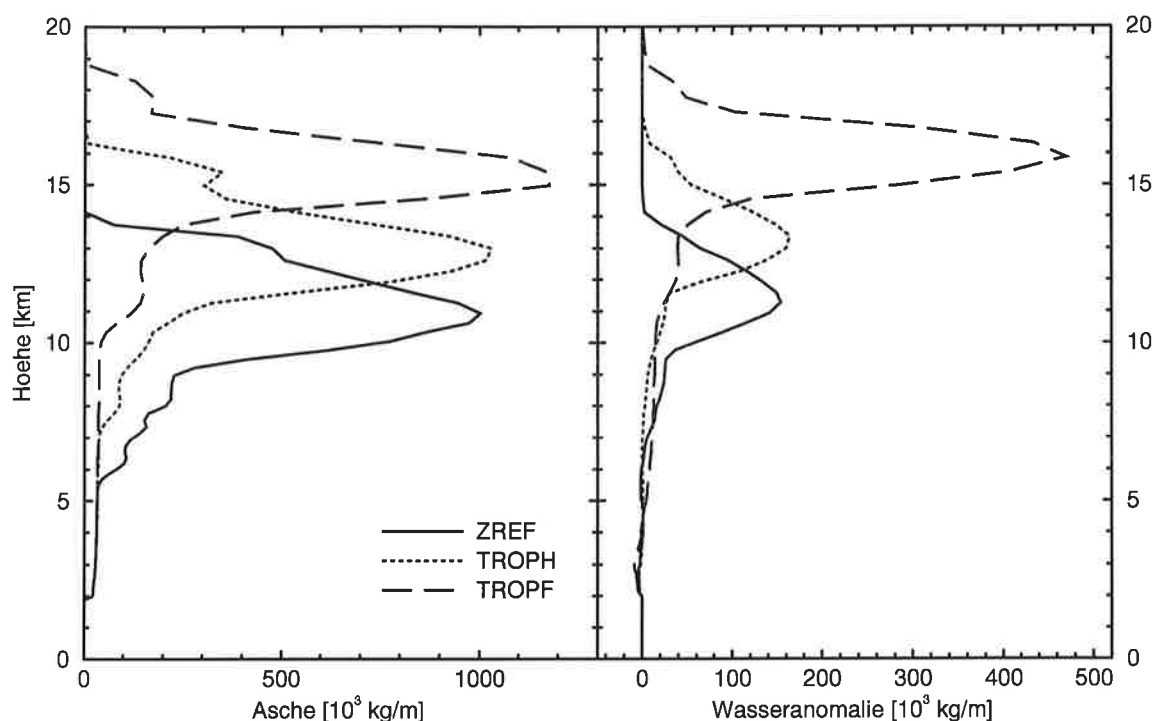


Abbildung 4.46: Vertikalverteilungen zur Variation tropischer Bedingungen: Rechts ist die Masse der Asche pro Höhenmeter 25 min nach Beginn der Eruption dargestellt, links die zugehörigen Wasseranomalien.

stratosphärische Quellen von Wasser und vulkanischen Gasen sein, die globale Klimawirksamkeit entfalten können. Dieses Ergebnis ist allerdings zunächst nur für die mittleren meteorologischen Zustände gültig. Die spezielle Wettersituation zum Zeitpunkt der Eruption hat einen zusätzlichen Einfluß auf die Dynamik. Dieser Effekt wird im folgenden anhand unterschiedlicher tropischer Profile diskutiert.

In Abbildung 4.46 sind die Vertikalverteilungen für Asche und Wasseranomalie der Experimente TROPH und TROPF denen des Referenzexperiments gegenübergestellt. Sowohl die Temperaturerhöhung als auch die Erhöhung des Feuchtegehalts in der unteren bis mittleren Troposphäre haben eine deutliche Erhöhung der entstehenden Plumes zur Folge.

Bereits die erhöhte Temperatur in TROPH führt zu etwa 2300 m höheren Plümehöhen. Damit erreicht der Wasserplume bereits das Tropopausenniveau in 17 km Höhe. Der Ascheplume endet 500 m darunter. Das analog zu den vorherigen Abschnitten berechnete Wasserdampfentrainment liegt in TROPH wegen der größeren Plümehöhen etwa 10 % über dem des Referenzexperiments, obwohl der Feuchtegehalt der Atmosphäre in beiden Experimenten identisch ist. Da die Temperaturen der umgebenden Atmosphäre in Tropopausennähe am niedrigsten sind, kondensiert hier in TROPH zusätzlich ein größerer Teil des ursprünglich im Plume enthaltenen Wasserdampfes als im Referenzexperiment. Während im Referenzexperiment nach 25 min etwa 75 % des im Plume enthaltenen Wassers in kondensierter Form vor-

liegen, sind dies in TROPH fast 90 %. Dadurch ist die Wirkung mikrophysikalischer Prozesse über die Freisetzung latenter Wärme verstärkt.

Verglichen mit der bei der Eruption freigesetzten thermischen Energie ist der Unterschied zwischen den beiden Experimenten jedoch gering: Während im Referenzexperiment der Gehalt an thermischer Energie im Plume nach 25 min durch Freisetzung latenter Wärme um gut 13 % erhöht ist, beträgt diese Erhöhung für TROPH etwa 17 %. Die Plumehöhenzunahme aufgrund mikrophysikalischer Prozesse liegt nur 300 m bzw. 20 % über der im Referenzexperiment (vergleiche Abschnitt 4.4), wie eine entsprechende Simulation von TROPH ohne den Einfluß mikrophysikalischer Prozesse ergibt. Der Unterschied in den Plumehöhen von TROPH und dem Referenzexperiment ist daher nur zu einem geringen Teil auf die Wirkung mikrophysikalischer Prozesse zurückzuführen. Die Temperaturschichtung der Troposphäre hat daher einen wesentlichen Einfluß auf die Plumeentwicklung. Wie das ausgewählte Beispiel zeigt, kann ein Tagesgang in der Temperatur einen größeren Einfluß auf die Plumehöhen haben als mikrophysikalische Prozesse.

Erst die Verdopplung des Wasserdampfgehalts in der unteren Troposphäre von TROPF führt zu einem deutlich erhöhten Einfluß mikrophysikalischer Prozesse auf die Plumeentwicklung. Gegenüber TROPH führt der erhöhte Feuchtegehalt zu einem über 2200 m höheren Plume. Mit dem gleichen vulkanischen Antrieb wie im Referenzexperiment schafft es der Plume in TROPF durch lediglich geänderte atmosphärische Umgebungsbedingungen 4500 m bzw. über 30 % höher und damit bis in die Stratosphäre aufzusteigen. Da sich der Plume in einer Höhe unterhalb des Tropopausenniveaus horizontal ausbreitet, befinden sich jedoch nur knapp 10 % der eruptierten Aschepartikel in der Stratosphäre und 14 % des im Plume befindlichen Wassers, das in der Stratosphäre zu über 99 % aus Eiskristallen besteht.

Der durch Entrainment in den Plume gelangte Wasserdampf liegt nahezu eine Größenordnung über dem vulkanisch emittierten Wasserdampf. Der Anteil der freigesetzten latenten Wärme macht fast 45 % der vom Vulkan freigesetzten thermischen Energie aus. Die Wirkung mikrophysikalischer Prozesse führt daher zu einem um 4000 m höheren Plume. In ZREF beträgt diese Plumerhöhung - wie erwähnt - nur 1500 m.

Wie die Variation der tropischen Bedingungen des Referenzexperimentes verdeutlicht, sind die Umgebungsbedingungen elementar wichtig bei der Simulation einer speziellen Eruption. Nur die Kenntnis der mittleren meteorologischen Bedingungen ist für das Verständnis der Plumedynamik nicht ausreichend. Insbesondere Plumehöhe und stratosphärischer Eintrag können durch die aktuelle Wettersituation oder einen Tagesgang in Feuchte und Temperatur starken Änderungen unterworfen sein.

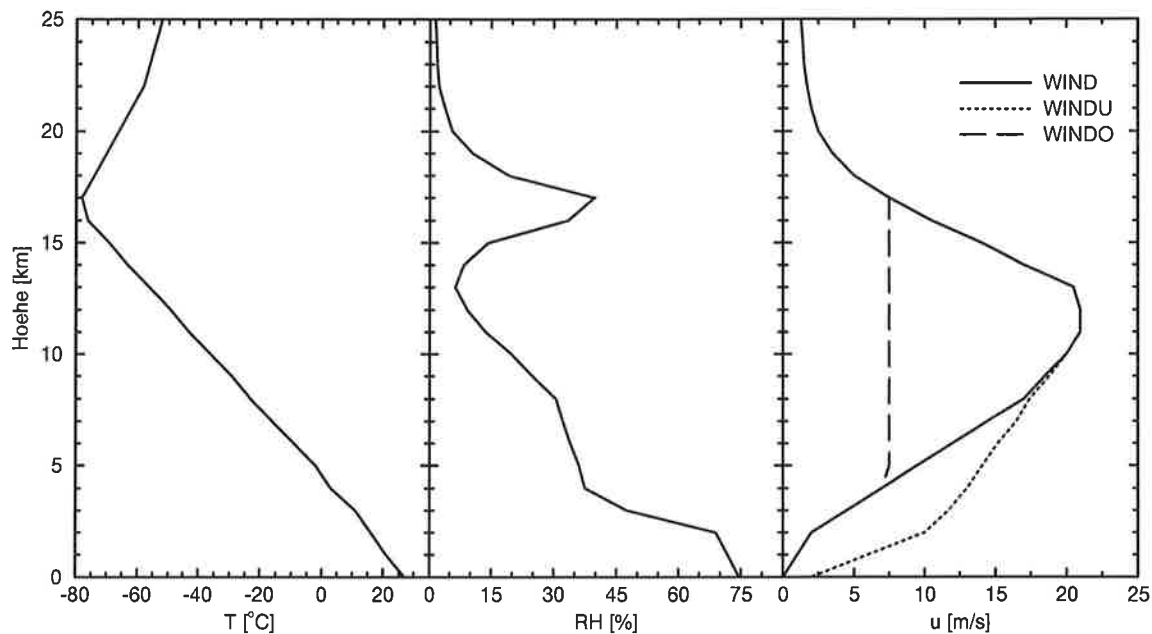


Abbildung 4.47: Meteorologische Randbedingungen für den Einfluß des Horizontalwindes: Neben den Vertikalprofilen von Temperatur (T) und relativer Feuchte (RH) sind drei unterschiedliche Windprofile gezeigt.

4.5.2 Einfluß des horizontalen Windprofils

Die Diskussion des horizontalen Windes in Zusammenhang mit der Plumeentwicklung rundet die Untersuchung des Einflusses atmosphärischer Bedingungen auf die Plumeentwicklung ab. Zur Berücksichtigung eines präeruptiven Horizontalwindes werden Simulationen, die als Linienvulkane in zweidimensionalen kartesischen Koordinaten durchgeführt wurden, miteinander verglichen werden. Neben den beiden Simulationen des Referenzexperimentes als Linienvulkan mit und ohne mittleren Wind aus den Abschnitten 4.2.1 und 4.2.2 werden zwei weitere Experimente mit geänderterem Windprofil betrachtet. Die verwendeten Windprofile sind in Abbildung 4.47 dargestellt. Außer mit dem bereits verwendeten Windprofil WIND wurde das Experiment WINDO mit reduzierter Windgeschwindigkeit in der oberen Troposphäre durchgeführt und ein weiteres Experiment WINDU mit einer in der unteren Troposphäre erhöhten Windgeschwindigkeit.

Abbildung 4.48 zeigt die Vertikalverteilungen von Asche, Lapilli und Wasseranomalie 25 min nach Beginn der Eruption. Zunächst werden die Simulationen des Referenzexperimentes mit und ohne klimatologischen Wind miteinander verglichen, bevor auf die Besonderheiten in den Experimenten WINDO und WINDU eingegangen wird.

Die Berücksichtigung des mittleren Windes WIND im Referenzexperiment führt zu einer deutlichen Reduktion der Plumehöhe. Mit Horizontalwind ist der Plume über 4000 m bzw. fast 20 % niedriger. Der stratosphärische Eintrag an Aschepartikeln re-

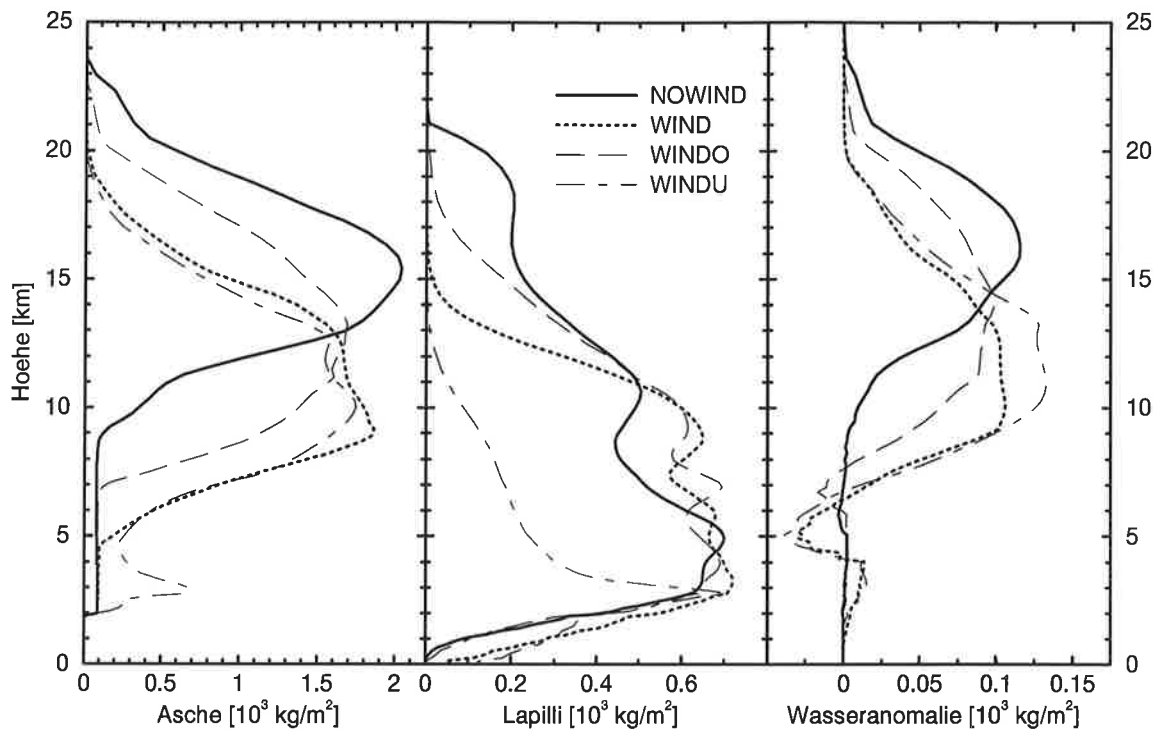


Abbildung 4.48: Vertikalverteilungen für die Horizontalwindexperimente: Dargestellt sind die Vertikalverteilungen für Asche, Lapilli und die Wasseranomalie 25 min nach Beginn der Eruption für unterschiedlichen horizontalen Wind.

duziert sich von über 30 % auf 3 % der bis zu diesem Zeitpunkt eruptierten Asche. Die Lapilli verlassen den durch den Horizontalwind geneigten Plume zum Teil bereits während der Aufstiegsphase durch Sedimentation. Die von den Lapilli erreichte Höhe ist mit Horizontalwind noch stärker reduziert als für die Aschepartikel, ein stratosphärischer Eintrag wird verhindert.

Der Horizontalwind führt zu einer besseren Durchmischung von Plume und Umgebung, was sich in einer um knapp 10 % erhöhten Entrainmentrate für Wasserdampf auswirkt. Die Wirkung der Mikrophysik auf die Plumedynamik wird allerdings trotzdem reduziert. Dies liegt daran, daß aufgrund der höheren Temperaturen im niedrigeren Plume mit Horizontalwind deutlich weniger Wasserdampf kondensiert als ohne Berücksichtigung eines Horizontalwindes. Die Freisetzung latenter Wärme ist um über 35 % reduziert.

Die Existenz eines Horizontalwindes beeinflusst nicht nur die Vertikalverteilungen, sondern führt auch zu ausgeprägten Änderungen in den Horizontalverteilungen, obwohl die durch die Eruption induzierten Horizontalwinde deutlich größer sind als in der präeruptiven Atmosphäre. Der Horizontalwind bewirkt keine einfache laterale Verschiebung, wie Abbildung 4.49 zu entnehmen, sondern hat eine völlig andere Struktur zur Folge. Zur leewärtigen Seite werden nur geringe Aschemengen verfrachtet, die horizontale Gesamtausdehnung ist deutlich reduziert. Der durch die Eruption gebildete Sedimentationsfächer spiegelt den Horizontalwindeneinfluß wieder,

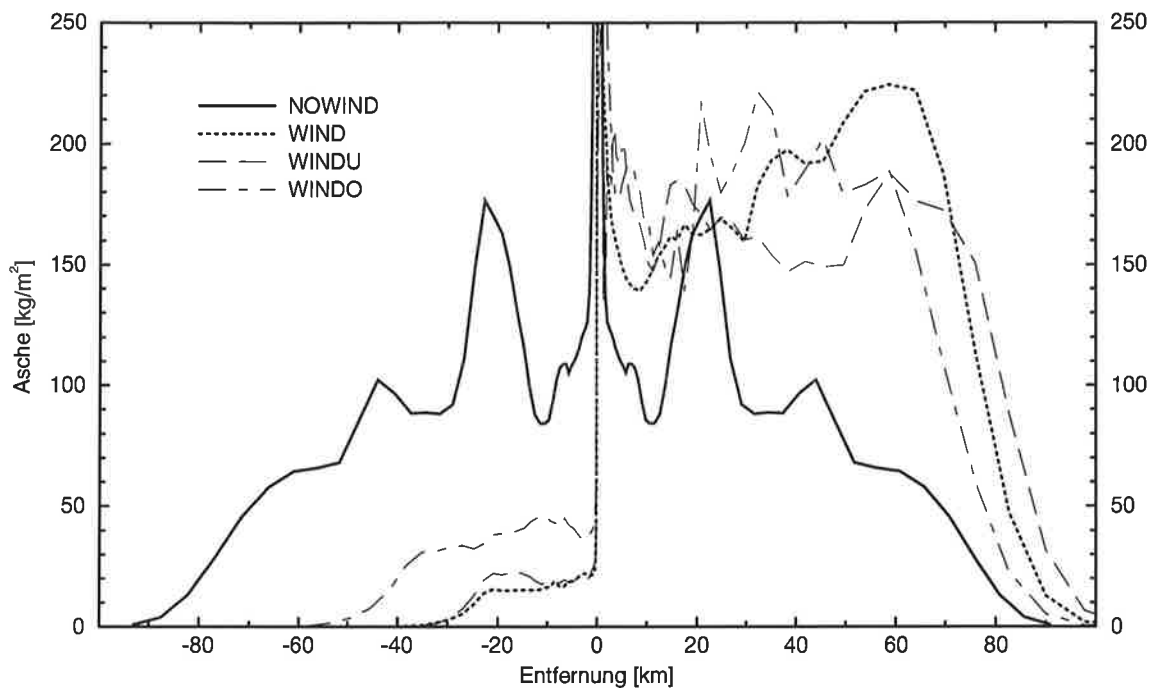


Abbildung 4.49: Horizontalverteilung für Asche nach 25 min: Dargestellt ist die Masse der Asche in einer vertikalen Säule für das Referenzexperiment mit und ohne Horizontalwind.

so daß ein Rückschluß aus der Verteilung der deponierten Aschepartikel auf die Eruption einschließlich Plumehöhe und stratosphärischem Eintrag von Gasen und Partikeln nur unter Berücksichtigung des horizontalen Windfeldes zum Zeitpunkt der Eruption möglich ist.

Die Sensitivität der Plumeentwicklung in Abhängigkeit der Stärke des Horizontalwindes zu untersuchen, ist in zweidimensionalen kartesischen Koordinaten für reale Verhältnisse quantitativ nicht möglich. Wird der Einfluß der Umgebung auf die Plumeentwicklung durch die zu geringen Entrainmentraten unterschätzt, wird im Gegensatz dazu der Einfluß des Horizontalwindes überschätzt, da der Plume horizontal nicht von den Luftmassen umströmt werden kann. Daher führt erst die deutliche Reduzierung der Windgeschwindigkeit in WINDO zu einer Plumehöhe, die in Abbildung 4.48 zwischen den bereits beschriebenen Referenzexperimenten mit und ohne Horizontalwind einfluß liegt. Die horizontale Struktur des Plumes in Abbildung 4.49 ist durch die Reduktion der Windgeschwindigkeit kaum verändert. Der leewärtige Transport von Asche nimmt zwar zu, erreicht aber längst nicht das Ausmaß wie im Experiment ohne Wind.

Einen interessanten Fall bildet das Experiment WINDU, dessen Ascheplume im kraternahen Bereich 25 min nach Beginn der Eruption in Abbildung 4.50 dargestellt ist. Der Plume wird durch den Horizontalwind so stark geneigt, daß er den Rand der Kaldera berührt. Durch die Bodenreibung verliert der Plume kinetische Energie, so daß die Neigung noch verstärkt wird. Dadurch wird die Deposition von Partikeln

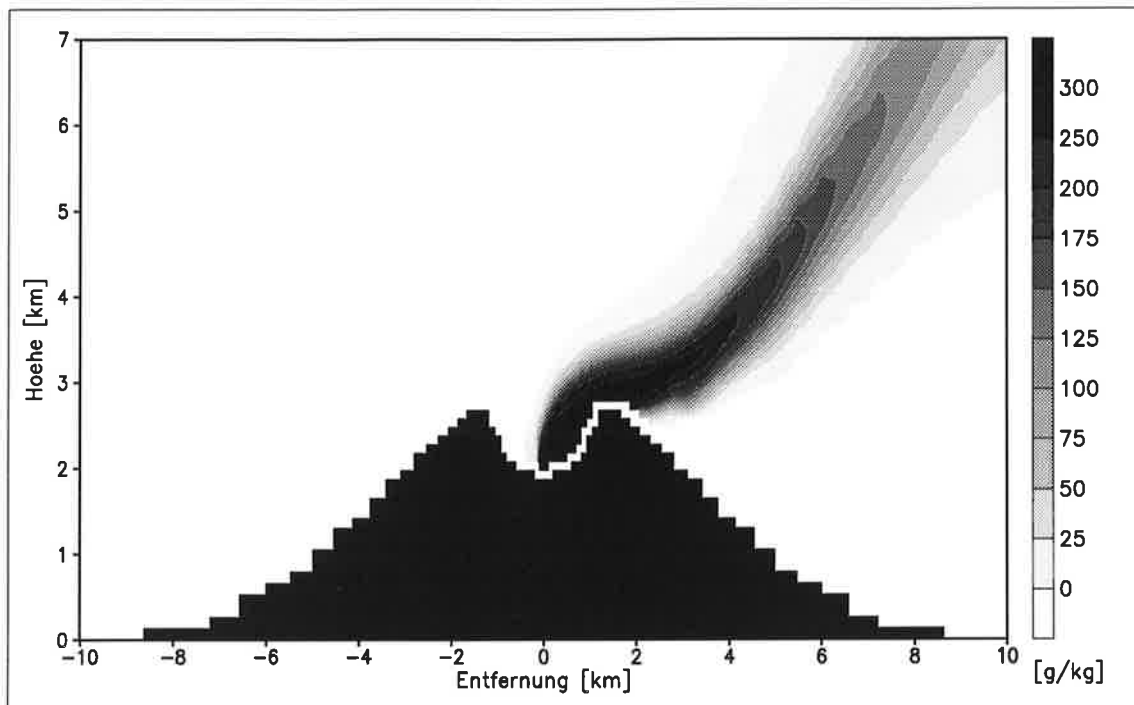


Abbildung 4.50: Ascheplume nach 25 min: Dargestellt ist die Verteilung der spezifischen Konzentration der Asche für das Experiment WINDU.

deutlich erhöht. Während nach 25 min in den anderen Experimenten in Abbildung 4.48 nicht mehr als 10 % der eruptierten Lapilli wieder deponiert sind, ist dieser Wert in WINDU auf über 65 % angestiegen. Die meisten Lapilli werden deponiert bevor sie in die Plume aufsteigen können. Von den eruptierten Aschepartikeln sind nach 25 min etwa 5 % wieder deponiert, wogegen die Deposition von Asche in den anderen Experimenten vernachlässigbar ist.

Die frühe Neigung des Plumes in Kraternähe führt durch das verstärkte Entrainment von bodennaher, feuchter Luft zu einem vermehrten Einmischen von Wasserdampf in die Plume, wie sich aus der Wasseranomalie in Abbildung 4.48 ableiten lässt. Gegenüber der Simulation WIND wird dem Plume dadurch über 60 % mehr latente Wärme durch die Wirkung mikrophysikalischer Prozesse zugeführt.

Obwohl der Plume durch die Wechselwirkung mit dem Boden kinetische Energie durch Reibung und thermische Energie durch die Deposition von Partikeln verliert, erreicht die Ascheplume - wie Abbildung 4.48 zu entnehmen - nahezu die gleiche Höhe wie im Vergleichsexperiment WIND. Die gleichzeitig mit der Deposition erfolgende Reduzierung der mittleren Dichte liefert zusammen mit der erhöhten Freisetzung latenter Wärme einen verstärkten Auftrieb für das verbleibende Gemisch, so daß der Verlust an kinetischer und thermischer Energie in Bodennähe nahezu wieder ausgeglichen wird.

Der Horizontalwind kann also, wie das Experiment WINDU zeigt, möglicherweise zu deutlich erhöhten Depositions- und Entrainmentraten führen. Allerdings bleibt

anzumerken, daß die dafür verantwortlichen kraternahe Effekte sich wegen der relativ groben Modellauflösung in Kraternähe und der damit verbundenen Skalierung des vulkanischen Antriebes mit der gewählten Modellanordnung nicht realistisch simulieren lassen. Dreidimensionale Betrachtungen in adäquater Ortsauflösung sind hierzu erforderlich. Wie das Beispiel der Pinatubo Eruption im Juni 1991 jedoch gezeigt hat, sind Übergänge zwischen einer plinianischen und koignimbriten Eruption, wie dies im Experiment WINDU in Abbildung 4.50 der Fall ist, in der Natur möglich und beobachtet worden (Sparks et al., 1997).

Trotz der Einschränkung bei der Interpretation der in zweidimensionalen kartesischen Koordinaten gewonnenen Ergebnisse wird deutlich, daß der Horizontalwind einen ebenso signifikanten Einfluß auf die Plumeentwicklung besitzt wie die anderen diskutierten Umgebungsbedingungen Feuchte und Temperatur.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das **Active Tracer High Resolution Atmospheric Model (ATHAM)** weiterentwickelt und am Beispiel einer plinianischen Vulkaneruption unter verschiedenen Umgebungsbedingungen getestet. Schwerpunkte lagen auf der massen- und impulserhaltenden Formulierung des Modells sowie der Beschreibung turbulenter Austauschprozesse.

Das Modell ATHAM besteht derzeit aus vier Modulen:

- Der dynamische Teil löst die Navier-Stokes Gleichung für ein Partikel-Gas Gemisch einschließlich des Transports aktiver Tracer.
- Das Turbulenzschließungsschema liefert basierend auf turbulenten Energiegleichungen Austauschkoefizienten für jede dynamische Größe.
- Die Mikrophysik verwendet erweiterte Kessler Parametrisierungen unter Berücksichtigung der Eisphase. Phasenumwandlungen beeinflussen die thermische Energie der Atmosphäre.
- Das Bodenmodell berechnet die Menge deponierter Silikatpartikel bzw. Hydrometeore und liefert eine modellkonsistente untere Randbedingung für Temperatur und Feuchte.

ATHAM ist dreidimensional formuliert. Zusätzlich stehen für Sensitivitätsstudien zwei unterschiedliche, zweidimensionale Modellversionen zur Verfügung:

- In zweidimensionalen kartesischen Koordinaten entspricht die simulierte Vulkaneruption der einer unendlich ausgedehnten Spalteneruption. Aufgrund der unberücksichtigten dritten Raumrichtung werden vulkanische Signale in der Modellatmosphäre überschätzt, wogegen das Einmischen von Umgebungsluft in die Eruptionswolke (Plume) unterschätzt wird.
- Die Verwendung von Zylinderkoordinaten liefert bei der Simulation einer Vulkaneruption ein realistischeres Einmischen von Umgebungsluft. Ein mittlerer Horizontalwind und der Einfluß der Corioliskraft können nicht berücksichtigt werden.

ATHAM beschreibt ein Multikomponentensystem aus gasförmigen und inkompressiblen Anteilen unter der Annahme eines dynamischen und thermischen Gleichgewichts des Gemisches:

- Innerhalb eines Modellzeitschritts findet in jedem Volumenelement ein Temperatur- und Geschwindigkeitsausgleich statt. Die einzelnen Komponenten bewegen sich mit konstanter Relativgeschwindigkeit zueinander und besitzen die gleiche in situ Temperatur.
- Impuls-, Druck-, und Temperaturgleichung müssen nur für das Volumenmittel berechnet werden. Diese Gleichungen sind über die Gesamtdichte mit den Prognosegleichungen für die aktiven Tracer, die in beliebigen Konzentrationen auftreten können, gekoppelt.
- Die Navier - Stokes Gleichung wird in ungefilterter Form mit dem üblichen Diffusionsansatz für die viskosen Kräfte verwendet. Die explizite Berücksichtigung der Schallausbreitung ist notwendig, da bei Vulkaneruptionen Strömungsgeschwindigkeiten im Ultraschallbereich auftreten können.
- Die Modellgleichungen sind bis auf den Wärmetransport vollständig in Flußform formuliert, d.h. die Massen- und Impulserhaltung sind durch die Art der gewählten Diskretisierung gesichert.
- Das Zeitschrittverfahren ist vollständig implizit und trägt der zeitlichen Kopplung der Modellgleichungen über die Zustandsgleichung durch ein iteratives Verfahren Rechnung.

Das Turbulenzschließungsschema verwendet einen erweiterten Kolmogorov - Prandtl Ansatz, der zwischen vertikalem und horizontalem Austausch unterscheidet:

- Bei Vulkaneruptionen kann wegen des starken Einflusses von Auftriebskräften und wegen der kurzen Zeitskalen, auf denen sich Turbulenz entwickelt, nicht von einem lokalen isotropen Gleichgewicht ausgegangen werden. Die vertikale ist gegenüber den horizontalen Raumrichtungen ausgezeichnet, eine Grenzschichtnäherung ist nicht möglich, turbulente Größen können nicht lokal diagnostiziert werden. Die horizontale und vertikale Komponente der turbulenten Energie werden daher zusammen mit der turbulenten Längenskala durch ein System von drei gekoppelten prognostischen Gleichungen simuliert.
- Im Auftriebsterm wird zur Berücksichtigung von aktiven Tracern die potentielle Dichte verwendet. Dadurch kann eine Unterdrückung von Turbulenz bei hohen Tracerkonzentrationen simuliert werden.
- Kompressibilitätseffekten wird durch eine erhöhte Dissipation turbulenter Energie bei Strömungsgeschwindigkeiten im Bereich der Schallgeschwindigkeit Rechnung getragen.

Wie die zweidimensionalen Modellsimulationen zeigen, ist ATHAM in der Lage, ein Multikomponentensystem aus einer Gasphase und einer Vielzahl von aktiven Tracern auch bei extremen Temperatur- und Impulsflüssen numerisch stabil und physikalisch korrekt zu simulieren, wobei der inkompressible Anteil bis zu 99 Gew.%

ausmachen kann. Die betrachteten vulkanischen Eruptionswolken reichen bis in die Stratosphäre und erreichen dabei horizontale Ausdehnungen von bis zu mehreren hundert Kilometern.

Das Referenzexperiment einer plinianischen Eruption zeigt qualitativ das erwartete Verhalten der mesoskaligen Plumeentwicklung. Folgende aus der Beobachtung bekannte Eigenschaften werden simuliert:

- die zu Beginn der Eruption entstehende Druckwelle,
- das dynamische Überschießen des Plumes über seine Gleichgewichtshöhe, das zu einer negativen Temperaturanomale im oberen Teil der Aufstiegszone führt,
- die Sedimentation und Deposition von Partikeln und die Trennung von Partikeln unterschiedlicher Fallgeschwindigkeit,
- die Partikel - Gas Trennung,
- die Kondensation bzw. Deposition von Wasserdampf, die wenige Minuten nach Beginn der Eruption einsetzt und der die Bildung von Niederschlägen folgt.

Die Gebiete stark ausgeprägter Turbulenz sind auf den Plume beschränkt:

- Die mit den turbulenten Austauschkoeffizienten verbundenen Zeitskalen variieren im Plume um mehrere Größenordnungen und unterscheiden sich deutlich von denen in der Umgebung des Plumes.
- Transportprozesse durch Turbulenz sind von gleicher Bedeutung wie der advektive Transport und bestimmen entscheidend das Einmischen von Umgebungsluft in den Plume und das gesamte Aufstiegsverhalten einschließlich der Plumehöhen.
- Die turbulenten Größen sind selbst durch Transportprozesse beeinflusst und weisen deutliche vertikal und horizontal anisotrope Strukturen auf. Die Partikelphase beeinflusst vor allem den vertikalen turbulenten Austausch. Das gewählte Turbulenzschließungsschema erlaubt daher eine adäquate Beschreibung der für die Plumeentwicklung relevanten turbulenten Prozesse.

Mikrophysikalische Prozesse haben durch die Freisetzung latenter Wärme einen signifikanten Einfluß auf die Plumeentwicklung:

- Der Höhengewinn liegt im Referenzexperiment unter mittleren tropischen Bedingungen in der gleichen Größenordnung wie das durch das Überschießen des Plumes hervorgerufene dynamische Schwingen des Plumes.
- Die Eisphase ist die dominante Phase in der Schirmregion des Plumes und führt zur Unterdrückung der Niederschlagsbildung. Für die Energetik des Plumes ist sie jedoch unbedeutend.
- Die Wirkung mikrophysikalischer Prozesse auf die Plumedynamik wird bestimmt durch in den Plume eingemischten Wasserdampf. Der Feuchtegehalt der umgebenden Atmosphäre ist daher wesentlich für die Intensität mikrophysikalischer Prozesse.

Nicht nur der mittlere meteorologische Zustand der Atmosphäre sondern auch die aktuelle Wettersituation zum Zeitpunkt der Eruption haben einen signifikanten Einfluß auf die erreichte Plumehöhe und den stratosphärischen Eintrag:

- Eruptionen, die in den Tropen lediglich troposphärische und somit lokale Auswirkungen haben, können in mittleren Breiten - saisonal unterschiedlich - effektive stratosphärische Quellen von Wasser und vulkanischen Gasen sein, die globale Klimawirksamkeit entfalten können.
- Bereits ein Tagesgang in der Temperatur vermag Änderungen in der Plumehöhe hervorzurufen, die mit dem Einfluß mikrophysikalischer Prozesse vergleichbar ist.
- Unter feuchten Bedingungen kann der Beitrag der freigesetzten latenten Wärme ein Vielfaches dessen unter mittleren Bedingungen ausmachen.
- Ein mittlerer Horizontalwind führt zu reduzierten Plumehöhen bei verstärktem Entrainment von Umgebungsluft in den Plume. Obwohl dadurch mehr Wasserdampf in den Plume gelangt, kann durch eine verringerte Kondensation von Wasserdampf der Einfluß der Mikrophysik auf die Dynamik sinken. Durch die Neigung der Aufstiegszone können Silikatpartikel den Plume früher verlassen. Das verbleibende Gemisch wird verdünnt, verliert aber gleichzeitig thermische Energie für den Aufstieg. Der durch die Eruption gebildete Sedimentationsfächer wird nachhaltig durch den Horizontalwindeinfluß verändert.

Die Ergebnisse dieser Arbeit, die am Beispiel einer typischen plinianischen Eruption gewonnen wurden, erweitern das prinzipielle Verständnis der für die Plumedynamik relevanten Prozesse und erlauben erste qualitative Aussagen.

Es ist geplant, den effektiven Eintrag von vulkanischem Schwefel und Halogenen in Abhängigkeit von Quellstärke und Umgebungsbedingungen für reale Eruptionen abzuleiten. Durch die Rekonstruktion des Sedimentationsfächers historischer Eruptionen kann deren Klimawirksamkeit bestimmt werden. Wie der dominierende Einfluß der Umgebung auf die Plumedynamik in den zweidimensionalen Studien ergibt, können qualitative Abschätzungen nur durch dreidimensionale Simulationen in adäquater räumlicher Auflösung erzielt werden. Nur so können Effekte eines mittleren Horizontalwindes und der Einfluß des Entrainments von Umgebungsluft gleichzeitig realistisch erfaßt werden. Eine erste dreidimensionale Studie des Referenzexperimentes ist für die nächste Zukunft vorgesehen.

Um auch im kraternahen Bereich Entrainmentraten, das Sedimentationsverhalten und Phänomene des Plumekollapses zu erfassen, muß eine der kraternahen Physik angepaßte räumliche Modellauflösung verwendet werden. Die in dieser Arbeit verwendete Skalierung des vulkanischen Antriebes ist dann nicht mehr möglich, sondern muß ersetzt werden durch ein Nesten von Simulationen mit zunehmend gröberer Auflösung. Durch eine solche Technik können sowohl der kraternahe Bereich der Aufstiegszone als auch die mesoskalige Schirmregion des Plumes gleichzeitig erfaßt werden.

Zwingende Voraussetzung für realistischere dreidimensionale Simulationen von Vulkaneruptionen ist eine umfangreiche Modellvalidierung von ATHAM. Diese kann nicht anhand einer realen plinianischen Eruption erfolgen:

- Selbst für Eruptionen der jüngeren Vergangenheit sind die dazu notwendigen Beobachtungsdaten nicht verfügbar, das Wechselspiel der beteiligten Prozesse, die häufig nur unvollständig bekannt sind, zu komplex.
- Informationen über die Zusammensetzung des Gemisches - wie Größenverteilung und Gasanteil -, die Geometrie der Krateröffnung und der zeitlichen Verlauf der Masseneruptionsrate sind mit großen Unsicherheiten behaftet.

Für die Zukunft ist daher ein mehrgleisiges Vorgehen notwendig: Einerseits muß ATHAM an Problemstellungen, die einer Messung leicht zugänglich sind und weniger komplex sind, validiert werden. Andererseits müssen Parametrisierungsansätze für eine vollständigere Beschreibung mikrophysikalischer Prozesse entwickelt werden. Ein Beispiel ist die Clusterbildung von Partikeln durch Benetzung mit Hydrometeoren oder elektrostatische Anziehung.

Neue oder verwandte Anwendungsgebiete außerhalb des Vulkanismus bieten sowohl die Möglichkeit eines Vergleichs mit der Beobachtung als auch mit anderen Modellen:

- Laborexperimente zur Plumeentwicklung bieten die Möglichkeit, die Dynamik in ATHAM unter kontrollierbaren und vereinfachten Bedingungen zu testen und z.B. die empirischen Konstanten der Turbulenzschließung zu überprüfen.
- Da ATHAM ein vollwertiges mesoskaliges Atmosphärenmodell ist, ist ein Vergleich mit anderen mesoskaligen Modellen möglich.
- Zusätzlich kann ATHAM im Bereich atmosphärischer Fragestellungen eingesetzt werden, die einer Modellierung bisher nicht oder nur eingeschränkt zugänglich sind: Dazu zählt der Aerosoleintrag bei der Verbrennung von Biomasse und die Simulation stark konvektiver Ereignisse, etwa in Gewitterwolken.

Mit ATHAM ist also ein geeignetes Werkzeug zur Untersuchung explosiver Vulkaneruptionen entwickelt worden. Aufgrund seines neuartigen Modellkonzeptes erschließt ATHAM, das ohne Einschränkungen der Modellphysik auskommt, völlig neue Anwendungsmöglichkeiten für die Modellierung im Bereich atmosphärischer Fragestellungen, in denen starke Beschleunigungen und Gradienten in Temperatur und Dichte typisch sind. Die modulare Struktur von ATHAM erlaubt es, weitere aktive bzw. passive Tracer und zusätzliche Prozesse - wie Strahlung, Chemie oder eine komplexere Mikrophysik - ohne großen Aufwand zu integrieren.

Literaturverzeichnis

- Andre, J. C. und M. Lesieur (1977), 'Influence of helicity on the evolution of isotropic turbulence at high Reynolds number', *J. Fluid Mech.* **81**, 187–207.
- Andres, R. J., J. Barquero und W. I. Rose (1992), 'New measurements of SO₂ flux at Poas Volcano, Costa Rica', *J. Volcanol. Geotherm. Res.* **49**, 175–177.
- Bais, A. F., C. S. Zerefos, I. C. Ziomas, N. Zoumakis, H. T. Mantis, D. J. Hofmann und G. Fiocco (1985), Decrease in the ozone and the SO₂ columns following the appearance of the El Chichon aerosol cloud at mid-latitude, in 'Atmopheric Ozone, Proceedings of the Quadrennial Ozone Symposium', D. Reidel, Hingham, Mass., Halkidiki, Greece, pp. 353–356.
- Barklie, R. H. D. (1959), 'Nucleation measurements on rain and melted hail', Sci. Rep. MW-30, Stormy Weather Research Group, McGill University.
- Bigg, E. K. (1953), 'The supercooling of water', *Proc. Phys. Soc. London* **B66**, 688–694.
- Bradshaw, P. (1977), 'Compressible turbulent shear layers', *Ann. Rev. Fluid. Mech.* **9**, 33–54.
- Brasseur, G. und C. Granier (1992), 'Mount Pinatubo aerosols, chlorofluorocarbons and ozone depletion', *Science* **257**, 1239–1242.
- Bronstein, I. N. und K. A. Semendjajew (1989), *Taschenbuch der Mathematik*, Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig.
- Brown, G. L. und A. Roshko (1974), 'On density effects and large structure in turbulent mixing layers', *J. Fluid Mech.* **64**, 775–816.
- Buresti, G. und C. Casarosa (1989), 'One dimensional adiabatic flow of equilibrium gas-particle mixtures in long vertical ducts with friction', *J. Fluid Mech.* **203**, 251–272.
- Burnett, C. R. und E. B. Burnett (1984), 'Observational results on the vertical column abundance of atmospheric hydroxyl: Description of its seasonal behavior 1977-1982 and of the 1982 El Chichon perturbation', *J. Geophys. Res.* **89**, 9603–9611.

- Businger, J. A., J. C. Wyngaard, Y. Izumi und E. F. Bradley (1971), 'Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer', *J. Atmos. Sci.* **33**, 181–189.
- Byers, H. R. (1965), *Elements of cloud physics*, The University of Chicago Press.
- Carey, S. und R. S. J. Sparks (1986), 'Quantitative models of the fall out and dispersal of tephra from volcanic eruption columns', *Bulletin of Volcanology* **48**, 109–125.
- Carroll, M. R. und M. J. Rutherford (1985), 'Sulfide and sulfate saturation in hydrous silicate melts', *J. Geophys. Res.* **90**, 601–612.
- Carslaw, H. S. und J. C. Jaeger (1959), *Conduction of heat in solids*, Oxford University Press.
- Chandra, S. (1993), 'Changes in stratospheric ozone and temperature due to the eruptions of Mt. Pinatubo', *Geophys. Res. Lett.* **20**, 33–36.
- Chlond, A. (1991), 'Three-dimensional simulation of cloud street development during a cold air outbreak', *Boundary-Layer Meteorology* **58**, 161–200.
- Coffey, M. T. (1996), 'Observations of the impact of volcanic activity on stratospheric chemistry', *J. Geophys. Res.* **101**, 6767–6780.
- Crowley, W. P. (1968), 'Numerical advection experiments', *Monthly Weather Review* **96**, 1–11.
- Crutzen, P. J. und F. Arnold (1986), 'Nitric acid cloud formation in the cold antarctic stratosphere: a major cause for the springtime 'ozone hole'', *Nature* **324**, 651–655.
- Daly, B. J. und F. H. Harlow (1970), 'Transport equations in turbulence', *Physics of Fluids* **13**, 2634–2649.
- Deardorff, J. W. (1980), 'Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model', *Boundary-Layer Meteorology* **18**, 495–527.
- Delmas, R. J. (1986), Antarctic precipitation chemistry, in W. Jaeschke, ed., 'Chemistry of multiphase atmospheric systems', Vol. G6 of *NATO Adv. Study Inst; Ser.*, Springer-Verlag, New York, pp. 249–266.
- Devine, J. D., H. Sigurdsson, A. N. Davis und S. Self (1984), 'Estimates of sulfur and chlorine yield to the atmosphere from volcanic eruptions: El Chichon, Mystery Volcano, Mt. St. Helens', *J. Geophys. Res.* **89**, 6309–6325.
- Dickey, T. D. und G. L. Mellor (1980), 'Decaying turbulence in neutral and stratified fluids', *J. Fluid Mech.* **99**, 13–31.

- Dingwell, D. B. und S. L. Webb (1989), 'Structural relaxation in silicate melts and non-Newtonian melt reology in igneous processes', *Physics and Chemistry of Minerals* **16**, 508–516.
- Dingwell, D. B. und S. L. Webb (1990), 'Relaxation in silicate melts', *European Journal of Mineralogy* **2**, 427–449.
- Dobran, F. und A. Neri (1993), 'Numerical simulation of collapsing volcanic columns', *J. Geophys. Res.* **98**, 4231–4259.
- Donaldson, C. du P. (1972), 'Calculation of turbulent shear flows for atmospheric and vortex motions', *AIAA Journal* **10**, 4–12.
- Durbin, P. A. und O. Zeman (1992), 'Rapid distortion theory for homogeneous compressed turbulence with application to modelling', *J. Fluid Mech.* **242**, 349–370.
- Favre, A., ed. (1964), *The mechanics of turbulence*, Gordon & Breach, New York.
- Federer, B. und A. Waldvogel (1975), 'Hail and raindrop size distributions from a Swiss multicell storm', *Journal Applied Meteorology* **14**, 91–97.
- Fletcher, N. H. (1962), *The Physics of Rainclouds*, Cambridge University Press.
- Frankignoul, C. und K. Hasselmann (1977), 'Stochastic climate models, part II. application to sea-surface temperature anomalies and thermocline variability', *Tellus* **29**, 289–305.
- Gerlach, T. M. und B. E. Nordlie (1975), 'The C-O-H-S gaseous system, I. Composition limits and trends in basaltic gases', *Am. J. Sci.* **275**, 353–376.
- Gerlach, T. M. und T. Casadevall (1986), 'Fumarole emissions at Mount St. Helens Volcano, June 1980 to October 1981: Degassing of a magma-hydrothermal system', *J. Volcanol. Geotherm. Res.* **28**, 141–160.
- Gibson, J. K., P. Kallberg, S. Uppala, A. Nomura, A. Hernandez und E. Serrano (1997), 'ERA description', ECWMF re-analysis project report series, Report No. 1, ECWMF, UK.
- Glaze, L. S., S. M. Baloga und L. Wilson (1997), 'Transport of atmospheric water vapor by volcanic eruption columns', *J. Geophys. Res.* **102**, 6099–6108.
- Graf, H.-F., B. Langmann und J. Feichter (1996), 'Volcanic sulfur emissions: Estimates of source strength and its contribution to the global sulfate distribution', *accepted at J. Geophys. Res.* .
- Graf, H.-F., I. Kirchner, A. Robock und I. Schult (1993), 'Pinatubo eruption winter climate effects: model versus observations', *Clim. Dyn.* **9**, 81–93.
- Greiner, W. (1984), *Theoretische Physik*, Verlag Harri Deutsch, Frankfurt.

- Gunn, R. und G. D. Kinzer (1949), 'The terminal velocity of fall for water drops in stagnant air', *Journal of Meteorology* **6**, 243–248.
- Hanjalic, K. und B. E. Launder (1972), 'A Reynolds stress model of turbulence and its application to thin flows', *J. Fluid Mech.* **52**, 609–638.
- Hanjalic, K. und B. E. Launder (1972), 'Fully developed asymmetric flow in a plane channel', *J. Fluid Mech.* **51**, 301–335.
- Hasselmann, K. (1976), 'Stochastic climate models. part I', *Tellus* **28**, 473–485.
- Hobbs, P. V., J. P. Tuell, D. A. Hegg, L. F. Radke und M. W. Eltgroth (1982), 'Particles and gases from the 1980-1981 volcanic eruptions of Mount St. Helens', *J. Geophys. Res.* **87**, 11062–11086.
- Hofmann, D. J. (1989), 'Ozone destruction through heterogeneous chemistry following the eruption of El Chichon', *J. Geophys. Res.* **94**, 5029–5041.
- Holdsworth, G., H. R. Krouse und E. Peake (1986), 'Relationship between volcanic emission peaks and the oxygen isotope signature in an ice core from the Yukon territory, Canada (abstract)', *Eos. Trans. AGU* **67**, 883.
- Hudson, R. (1996). Persönliche Mitteilung.
- Hurwitz, S. und O. Navon (1994), 'Bubble nucleation in rhyolitic melts: Experiments at high pressure, temperature and water content', *Earth Planet. Sci. Lett.* **122**, 267–280.
- Jensen, E. J. und O. B. Toon (1992), 'The potential effects of volcanic aerosols on cirrus cloud microphysics', *Geophys. Res. Lett.* **19**, 1759–1762.
- Kessler, E. (1969), 'On the distribution and continuity of water substance in atmospheric circulation', *Met. Monographs* **10**, 84.
- Kolmogorov, A. M. (1942), 'The equations of turbulent motion in an incompressible fluid', *Izv. Acad. Nauk SSSR, Ser Fiz.* **6**, 56–58.
- Kolmogorov, A. N. (1941), 'The local structure of turbulence in incompressible viscous fluids for very large Reynolds numbers', *CR Acad. Sci. U.R.S.S.* **30**, 301–305.
- Kraichnan, R. H. (1973), 'Helical turbulence and absolute equilibrium', *J. Fluid Mech.* **59**, 745–752.
- Krueger, A. J., L. S. Walter, P. K. Bhartia, C. C. schnetzler, N. A. Krotkov, I. Sprod und G. J. S. Bluth (1995), 'Volcanic sulfur dioxide measurements from the total ozone mapping spectrometer instruments', *J. Geophys. Res.* **100**, 14057–14076.
- Kwizak, M. und A. J. Robert (1971), 'A semi-implicit scheme for grid point atmospheric models of the primitive equations', *Monthly Weather Review* **99**, 32–36.

- Kyser, T. K. und J. R. O'Neil (1984), 'Hydrogen isotope systematics of submarine basalts', *Geochim. Cosmochim. Acta* **48**, 2123–2133.
- Lacis, A., J. Hansen und M. Sato (1992), 'Climate forcing by stratospheric aerosols', *Geophys. Res. Lett.* **19**, 1607–1610.
- Laube, M. und H. Höller (1987), Meteorology: Physical and chemical properties of the air: Cloud physics, in G.Fischer, ed., 'Landolt-Börnstein', Vol. 4b, Springer-Verlag, chapter 5.
- Lauder, B. E. (1975), 'On the effect of gravitational field on the turbulent transport of heat and momentum', *J. Fluid Mech.* **67**, 569–581.
- Lautenschlager (1983), Parametrisierung der turbulenten Diffusion in der Atmosphäre unter Benutzung der turbulenten Energiegleichung, Technical Report 83/E/60, GKSS Geesthacht.
- Lautenschlager (1985), Initialization of the euler model MODIS with field data from the 'EPRI plume model validation project', Technical Report 85/E/18, GKSS Geesthacht.
- Lautenschlager, M. (1986), Turbulenzparametrisierung in Strömungen mit Helizität, Technical report, GKSS 86/E/36.
- Lautenschlager, M., D. P. Eppel und W. C. Thacker (1988), 'Subgrid-Parametrization in helical flows', *Contributions to Atmospheric Physics* **61**, 87–97.
- Lewellen, W. S. (1977), Use of invariant modeling, in W.Frost und T. H.Molden, eds, 'Handbook of Turbulence', Plenum Press, pp. 237–290.
- Levich, E. und E. Tzvetkov (1985), 'Helical inverse cascade in three-dimensional turbulence as a fundamental dominant mechanism in mesoscale atmospheric phenomena', *Phys. Rep.* **128**, 1–37.
- Lilly, D. K. (1983), 'Helicity as a stabilizing effect on rotating convective storms', *J. Atmos. Sci.* **40**.
- Lin, Y., R. D. Farley und H. D. Orville (1983), 'Bulk parametrization of the snow field in a cloud model', *Journal of Climate and Applied Meteorology* **22**, 1065–1092.
- Linke, F. und F. Baur, eds (1970), *Meteorologisches Taschenbuch*, Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig KG.
- Loth, B., H.-F. Graf und J.M. Oberhuber (1993), 'Snow cover model for global climate simulations', *J. Geophys. Res.* **98**, 10451–10464.
- Luhr, J. F., I. S. E. Carmichael und J. C. Varekamp (1984), 'The 1982 eruptions of El Chichon volcano, Chiapas, Mexico: Mineralogy and petrology of the anhydrite-bearing pumices', *J. Volcanol. Geotherm. Res.* **23**, 69–108.

- Lumley, J. L. (1964), *The structure of atmospheric turbulence*, Wiley and Sons, New York.
- Lüpkes, Ch. (1991), *Untersuchungen zur Parametrisierung von Koagulationsprozessen von niederschlagsbildender Tropfen*, Verlag Dr. Kovac, Hamburg.
- Luther, M. E. (1986), Advanced methods for steady problems - direct elliptic solvers, in J. J.O'Brien, ed., 'Advanced physical oceanographic numerical modelling', D. Reidel Publishing Company, pp. 73–86.
- Macedonio, G., M. T. Pareschi und R. Santacroce (1988), 'A numerical simulation of the plinian fall phase of 79 a.D. eruption of Vesuvius', *J. Geophys. Res.* **93**, 14817–14827.
- Mankin, W. G. und M. T. Coffey (1984), 'Increased stratospheric hydrogen chloride in the El Chichon cloud', *Science* **226**, 170–172.
- Marshall, J. S. und W. McK. Palmer (1948), 'The distribution of rain drop size', *Journal of Meteorology* **5**, 165–166.
- McClatchey, R. A., R. W. Fenn, J. E. A. Selby, F. E. Volz und J. S. Garing (1972), 'Optical properties of the atmosphere, 3rd ed.', Environmental Research Papers, No. 411.
- Mesinger, F. und A. Arakawa (1976), 'Numerical methods used in atmospheric models', *GARP Publications Series* **17**.
- Mellor, G. L. (1973), 'Analytic precision of the properties of stratified planetary surface layers', *J. Atmos. Sci.* **30**, 1061–1069.
- Mellor, G. L. und H. J. Herring (1973), 'A survey of the mean turbulent field closure models', *AIAA Journal* **11**, 590–599.
- Mellor, G. L. und T. Yamada (1974), 'A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers', *J. Atmos. Sci.* **31**, 1791–1806.
- Michelangeli, D. V., M. Allen und Y. L. Yung (1989), 'El Chichon volcanic aerosol: impact of radiative, thermal and chemical perturbations', *J. Geophys. Res.* **94**, 18429–18443.
- Michelangeli, D. V., M. Allen und Y. L. Yung (1991), 'Heterogeneous reactions with NaCl in the El Chichon volcanic aerosols', *Geophys. Res. Lett.* **18**, 673–676.
- Monin, A. S. und A. M. Yaglom (1971), *Statistical Fluid Mechanics—Mechanics of Turbulence*, Vol. 1+2, MIT Press, Cambridge, Massachusetts.
- Müller, D. (1997), Untersuchung des Einflusses der nassen Deposition auf Vulkan-sedimente, Master's thesis, Universität Hamburg.

- Murcray, D. G., F. J. Murcray und D. B. Barker (1981), 'Changes in stratospheric water vapor associated with the Mount St. Helens eruption', *Science* **211**, 823–824.
- Neri, A. und G. Macedonio (1996), 'Numerical simulation of collapsing volcanic columns with particles of two sizes', *J. Geophys. Res.* **101**, 8153–8174.
- Oberhuber, J. M. (1990), Simulation of the atlantic circulation with a coupled sea ice - mixed layer - isopycnal general circulation model, Technical Report 59, MPI, Hamburg.
- Oberhuber, J. M. (1993), The OPYC ocean general circulation model, Technical Report 7, DKRZ, Hamburg.
- Oberhuber, J. M. (1996). Persönliche Mitteilung.
- O'Brien, J. J. (1986a), The steady problem, in 'Advanced physical oceanographic numerical modelling', D. Reidel Publishing Company, pp. 51–72.
- O'Brien, J. J. (1986b), Time integration schemes, in 'Advanced physical oceanographic numerical modelling', D. Reidel Publishing Company, pp. 155–163.
- Oskarsson, N. (1980), 'The interaction of volcanic gases and thephra: fluorine adhering to tephra of the 1970 Hekla eruption', *J. Volcanol. Geotherm. Res.* **8**, 251–266.
- Panofsky, H. A. und J. A. Dutton (1984), *Atmospheric turbulence*, John Wiley & Sons, New York.
- Pinto, J. P., R. P. Turco und O. B. Toon (1989), 'Self-limiting physical and chemical effects in volcanic eruption clouds', *J. Geophys. Res.* **94**, 11165–11174.
- Prandtl, L. und K. Wieghardt (1945), 'Über ein neues Formelsystem für die ausgebildete Turbulence', *Nach. Akad. Wiss. Göttingen Math. Phys.* **K1**, 6–19.
- Pruppacher, H. R. und J. D. Klett (1978), *Microphysics of clouds and precipitation*, D. Reidel Publishing Company.
- Reynolds, O. (1883), 'On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion', *Phil. Transactions R. Met. soc.* **186**, 123–164.
- Robock, A. und J. Mao (1992), 'Winter warming from large volcanic eruptions', *Geophys. Res. Lett.* **19**, 2405–2408.
- Roedel, W. (1994), *Physik unserer Umwelt*, 2. edn, Springer Verlag.
- Rogers, R. R. und M. K. Yau (1989), *A short course on cloud physics*, 3 edn, Pergamon Press, Oxford.

- Rood, R. B. (1987), 'Numerical advection algorithms and their role in atmospheric transport and chemistry models', *Review of Geophysics* **25**, 71–100.
- Rose, W., D. Delene, D. Schneider, G. Bluth, A. Krueger, I. Sprod, C. McKee, H. Davies und G. Ernst (1995), 'Ice in the 1994 Rabaul eruption cloud: implications for volcano hazard and atmospheric effects', *Nature* **375**, 477–479.
- Rotta, J. C. (1951), 'Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz', *Z. Phys.* **129**, 547–572.
- Rotta, J. C. (1972), *Turbulente Strömungen*, Teubner Press, Stuttgart.
- Rutledge, S. A. und P. V. Hobbs (1983), 'The mesoscale and microscale structure and organization of clouds and precipitation in midlatitude cyclones. VIII: A model for the 'seeder-feeder' process in warm-frontal rainbands', *J. Atmos. Sci.* **40**, 1185–1206.
- Ryan, J. A. und N. R. Mukherjee (1975), 'Sources of stratospheric gaseous chlorine', *Review of Geophysics* **13**, 650–658.
- Sarkar, S. (1995), 'The stabilizing effect of compressibility in turbulent shear flow', *J. Fluid Mech.* **282**, 163–186.
- Sassen, K., D. O. Starr, G. G. Mace, M. R. Poellot, S. H. Melfi, W. L. Eberhard, J. D. Spinhirne, E. W. Eloranta, D. E. Hagen und J. Hallett (1995), 'The 5–6 December 1991 FIRE II jet stream cirrus case study: Possible influences of volcanic aerosols', *J. Atmos. Sci.* **52**, 97–132.
- Schmincke, H.-U. (1993), 'Transfer von festen, flüssigen und gasförmigen Stoffen aus Vulkanen in die Atmosphäre', *UWSF-Z. Umweltchem. Ökotox.* **5**, 27–44.
- Schmincke, H.-U. (1996). Persönliche Mitteilung.
- Schwanke, K. (1995), Sensitivitätsstudie zur Ausbreitung von vulkanischen Emissionen mit Hilfe eines numerischen Modells, Master's thesis, Universität Hamburg.
- Seinfeld, J. H. (1986), *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*, Wiley and Sons, New York.
- Sheridan, M. F. und K. H. Wohletz (1983), Origin of accretionary lapilli from the Pompeii and Avellino deposits, in 'Microbeam Analysis', R. Gooley, pp. 35–38.
- Simone, A., G. N. Coleman und C. Cambon (1997), 'The effect of compressibility on turbulent shear flow: a rapid-distortion-theory and direct-numerical-simulation study', *J. Fluid Mech.* **330**, 307–338.
- Smolarkiewicz, P. K. (1982), 'The multi-dimensional Crowley advection scheme', *Monthly Weather Review* **110**, 1968–1983.

- Smolarkiewicz, P. K. (1983), 'A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion', *Monthly Weather Review* **111**, 479–486.
- Smolarkiewicz, P. K. (1984), 'A fully multidimensional positive definite advection transport algorithm with small implicit diffusion', *J. Comput. Phys.* **54**, 325–362.
- Smolarkiewicz, P. K. (1985), 'On the accuracy of the Crowley advection scheme', *Monthly Weather Review* **113**, 1425–1429.
- Solomon, S., R. R. Garcia, F. S. Rowland und D. J. Wuebbles (1986), 'On the depletion of Antarctic ozone', *Nature* **321**, 755–758.
- Sparks, R. S. J., M. I. Bursik, S. N. Carey, J. S. Gilbert, L.S. Glaze, H. Sigurdsson und A. W. Woods (1997), *Volcanic Plumes*, Wiley and Sons, New York.
- Stephens, M. A. (1979), 'A simple ice phase parametrization', Atmos. Sci. Pap. No. 319. Colorado State University.
- Sugiura, T., Y. Mizutani und S. Oana (1963), 'Fluorine, chlorine and iodine in volcanic gases', *J. Earth Sci.* **11**, 272–278.
- Sykes, R. I., W. S. Lewellen und D. S. Henn (1988), 'A numerical study of the development of cloud-street spacing', *J. Atmos. Sci.* **45**, 2556–2569.
- Symonds, R. B., W. I. Rose und M. H. Reed (1988), 'Contribution of Cl- and F-bearing gases to the atmosphere by volcanoes', *Nature* **334**, 415–418.
- Tabazadeh, A. und R. P. Turco (1993), 'Stratospheric chlorine injection by volcanic eruptions: HCl scavenging and implications for ozone', *Science* **260**, 1082–1086.
- Thibert, E. und F. Dominé (1997), 'Thermodynamics and kinetics of the solid solution of HCl in ice', *Journal of Physical Chemistry* **101**, 3554–3565.
- Turco, R. P., R. C. Whitten, P. Hamill und R. G. Keesee (1983), 'The 1980 eruptions of Mount St. Helens: Physical and chemical processes in the stratospheric clouds', *J. Geophys. Res.* **88**, 5299–5319.
- Valentine, G. A. und K. H. Wohletz (1989), 'Numerical models of plinian columns and pyroclastic flows', *J. Geophys. Res.* **94**, 1867–1887.
- Varekamp, J. C., J. F. Luhr und J. L. Prestegard (1984), 'The 1982 eruptions of El Chichon Volcano (Ciapas Mexico): character of the ash-fall deposits and gas phase', *J. Volcanol. Geotherm. Res.* **23**, 39–68.
- Varekamp, J. C., R. Kreulen und M. J. Bergen R. P. E. Poorter (1992), 'Carbon sources in arc volcanism, with implications for the carbon cycle', *Terra Nova* **4**, 363–373.

- Walker, G. P. L., L. Wilson und E. L. G. Howell (1971), 'Explosive volcanic eruptions - I. The rate of fall of pyroclasts', *Geophys. J. R. astr. Soc.* **22**, 377-383.
- Weast, R. C., M. J. Astle und W. H. Beyer, eds (1984), *Handbook of Chemistry and Physics*, 64 edn, CRC Press, Inc., Boca Raton, Florida.
- Weschler, Ch. J. (1984), 'Sulfur content of Mount St. Helens' ash', *J. Geophys. Res.* **89**, 4891-4894.
- Westrich, H. R. und T. M. Gerlach (1992), 'Magmatic gas source for the stratospheric SO₂ cloud from the June 15, 1991, Pinatubo', *Geology* **20**, 867-870.
- Wilson, L. (1976), 'Explosive volcanic eruptions - III. plinian eruption columns', *Geophys. J. R. astr. Soc.* **45**, 543-556.
- Wilson, L., R. S. J. Sparks und G. P. L. Walker (1980), 'Explosive volcanic eruptions, iv. The control of magma properties and conduit geometry on eruption column behaviour', *Geophys. J. R. astr. Soc.* **63**, 117-148.
- Wilson, L. und T. C. Huang (1979), 'The influence of shape on the atmospheric settling velocity of volcanic ash particles', *Earth Planet. Sci. Lett.* **44**, 311-324.
- Wisner, C., H. D. Orville und C. Myres (1972), 'A numerical model of a hail-bearing cloud', *J. Atmos. Sci.* **29**, 1160-1181.
- Woods, A. W. (1988), 'The fluid dynamics and thermodynamics of eruption columns', *Bulletin of Volcanology* **50**, 169-193.
- Woods, A. W. (1993), 'Moist convection and the injection of volcanic ash into the atmosphere', *J. Geophys. Res.* **98**, 17627-17636.
- Woods, A. W. (1995), 'The dynamics of explosive volcanic eruptions', *Review of Geophysics* **33**, 495-530.
- Woods, A. W. und M. I. Bursik (1991), 'Particle fallout, thermal disequilibrium and volcanic plumes', *Bulletin of Volcanology* **53**, 559-570.
- Woods, A. W. und S. Bower (1995), 'The decompression of volcanic jets in craters', *Earth Planet. Sci. Lett.* **131**, 189-205.
- Woods, A. W. und S. Self (1992), 'Thermal disequilibrium at the top of volcanic clouds and its effect on estimates of the column height', *Nature* **355**, 628-630.
- Woods, D. C., R. L. Chuan und W. I. Rose (1985), 'Halite particles injected into the stratosphere by the 1982 El Chichon eruption', *Science* **230**, 170-172.
- Yu, T. W. (1976), Numerical studies of the atmospheric boundary layer with a turbulent energy closure scheme, in 'AMS Third Symposium on Atmospheric Turbulence, Diffusion and Air Quality', Raleigh, NC.

- Zeman, O. (1990), 'Dilatation dissipation: The concept and application in modeling compressible mixing layers', *Physics of Fluids* **2**, 178–188.
- Zeman, O. (1992), 'Similarity in supersonic mixing layers', *AIAA Journal* **30**, 1277–1283.
- Zilitinkevich, S. S., D. L. Laikhtman und A. S. Monin (1967), 'Dynamics of the atmospheric boundary layer', *Izv. Atmosph. and Oceanic Physics* **3**, 170–191.



Danksagung

Die aufmunternde und tatkräftige Unterstützung vieler hat wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Insbesondere möchte ich mich bedanken bei:

- Dr. Hans-F. Graf für die interessante Aufgabenstellung. Seine zahlreichen Hinweise und Anregungen eröffneten mit stets neue interessante Blickwinkel auf meine Arbeit und halfen mir, diese in einem größeren Zusammenhang zu sehen.
- Herrn Prof. Dr. M. Dunst für die Übernahme der Begutachtung dieser Arbeit.
- Herrn Prof. Dr. K. Hasselman, der mir die Promotion am Max - Planck - Institut für Meteorologie ermöglichte. Die wissenschaftlich anregende und offene Atmosphäre dieses Instituts und seine hervorragende technische Ausstattung haben das Voranschreiten dieser Arbeit wesentlich gefördert.
- Dr. Josef Oberhuber, der mir immer ein kompetenter und unverzichtbarer Ansprechpartner in allen technischen Fragen war. Ohne seine Vorarbeiten und ohne sein Mitwirken wäre diese Arbeit nicht entstanden.
- Dr. Michael Lautenschlager für seinen fachkundigen Rat.
- meinen Kolleginnen und Kollegen am Schlump für all die Kleinigkeiten und die nette Atmosphäre. Mein besonderer Dank gilt dabei Christiane Textor für die kritische Durchsicht des Manuskripts und die vielen hilfreichen, unermüdlichen Diskussionen und Hinweise während der vergangenen Jahre.
- Herrn Prof. Dr. Hans.-U. Schmincke und seiner Arbeitsgruppe vom Geomar Kiel, die mir einen Einblick in die experimentellen Möglichkeiten und geologischen Aspekte meines Themas durch eine Vielzahl von Diskussionen, Workshops und Exkursionen vermittelt haben.
- der Volkswagen Stiftung, die das Projekt EVA (Eintrag von Volatilen in die Atmosphäre), in dessen Rahmen diese Arbeit entstand, finanziell großzügig unterstützt hat.
- Annegret Schulze, die mir durch aufmunternde Worte, ihre Nähe und Möglichkeiten der Zerstreung sehr geholfen hat.