

## PAZI-2 ANNUAL REPORT 2006

This document contains a **summary of the Fourth Workshop** of the DLR/HGF PAZI-2 project held in Oberpfaffenhofen, January 30, 2007. The workshop presentations reviewed the achievements in 2006 and focussed on the work to be carried out during 2007, the final project year. Below, a brief workshop overview and summary of key progress is presented (talk given by the project PI). As appendices, this document also contains the summary **descriptions of work** of each work package (in German). The cumulative **list of publications** (as of January 2007, 65 publications/conference proceedings have either appeared, are in press, or are in preparation) is available as a separate document. Project documents can be downloaded from the website <http://www.pa.op.dlr.de/pazi/>

### Workshop program

09:00 B. Kärcher/U. Schumann Welcome and meeting overview

### New developments in selected work packages

09:10	J.-F. Gayet	The small ice particle issue in contrail and cirrus measurements
09:30	H. Schlager	Status of SO <sub>2</sub> mass spectrometry at IPA and results from CIRRUS-3
09:50	C. Emde	Parameterization of cirrus optical properties in ECHAM
10:10	M. Fiebig	Size distribution of soot particles during contrail ageing
10:30		Coffee (short break)
10:40	S. Unterstraßer	Contrail simulations in the vortex phase
11:00	O. Möhler	Ice nucleation properties of soot – A laboratory perspective
11:20	A. Minikin/B. Mayer	PAZI-2/CIRCLE-2 – Report from planning workshop (Jan 29)
11:40		Lunch
12:30	B. Kärcher	Where do we stand? – A critical review
13:00	U. Schumann	Correlating contrail cirrus cover with air traffic density
13:20	U. Burkhardt	Contrail cirrus in ECHAM – First results
13:40	J. Hendricks	Implementing multi-modal ice microphysics in ECHAM
14:00	K. Gierens	Supersaturation in the ECMWF IFS – Perspectives for contrail prediction
14:20		Tea (short break)
14:30	P. Gerlinger	Soot measurements at the novel PAZI-2 combustor
14:50	M. Plohr	Towards a DLR 4D global aircraft emission inventory – Status of work
15:10	C. Voigt	HGF Junior Research Group AEROTROP – Project overview
15:30	B. Kärcher/All	The way ahead – Discussion
16:30		Adjourn

## Participants

Ottmar Möhler	IMK-FZK
Stefan Benz	IMK-FZK
Claus Wahl	DLR-VT
Peter Gerlinger	DLR-VT
Martin Plohr	DLR-AT
Horst Hüners	DLR, PD-L
Klaus-Dieter Rockwitz	DLR, PD-R
Jean-François Gayet	LaMP
Alfons Schwarzenböck	LaMP
Jacques Pelon	LMD/CNRS
Franz Immler	AWI
Hans Schlager	DLR-IPA
Ulrich Schumann	DLR-IPA
Christiane Voigt	DLR-IPA
Hermann Mannstein	DLR-IPA
Bernhard Mayer	DLR-IPA
Kaspar Graf	DLR-IPA
Luca Bugliaro	DLR-IPA
Claudia Emde	DLR-IPA
Ulrich Hamann	DLR-IPA
Ulrike Burkhardt	DLR-IPA
Johannes Hendricks	DLR-IPA
Michael Ponater	DLR-IPA
Andreas Minikin	DLR-IPA
Markus Fiebig	DLR-IPA
Klaus Gierens	DLR-IPA
Simon Unterstraßer	DLR-IPA
Rüdiger Büll	DLR-IPA
Reinhold Busen	DLR-IPA
Bernd Kärcher	DLR-IPA



### Meeting objectives

- Summarize selected [science news](#).
- Report [progress](#) made towards reaching major project goals.
- Critical issues that lead over to a [new project](#).
- Website <http://www.pa.op.dlr.de/pazi/> for latest developments / documents.

## Overall project goals and main products

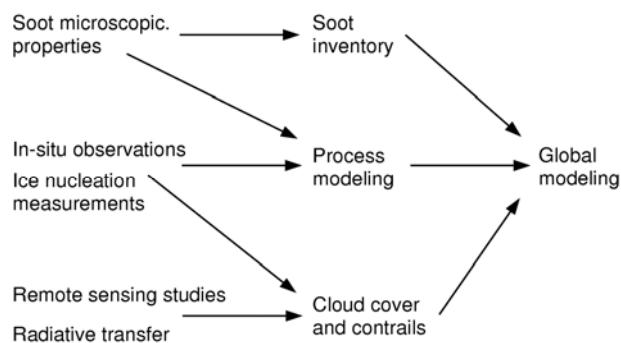
Development and application of simulation techniques for real combustors to predict soot properties at emission.

Experimental determination of ice nucleating ability of aerosols and their impact on cirrus clouds and contrail-cirrus.

Development and application of simulation techniques for the ECHAM4 climate model to predict the anthropogenic impact on cirrus, in particular the aviation impact.

- Numerical soot code optimized for real combustor scenarios
- Aerosol-cloud-radiation module optimized for use in a climate model
- Updated 4D aviation soot emission inventory
- Airborne SO<sub>2</sub> measurement system based on chemical ionization mass spectrometry
- High cloud climatology useful for model validation
- Parameterization schemes for ice formation, contrail-cirrus cover, and radiation
- Experimental clarification of controlling factors of soot formation in jet engines
- Experimental determination of aerosol freezing properties

## Project workflow



Red boxes and arrows on the following pages indicate direct links of and collaboration between work packages during 2006.

Blue highlights issues addressed during this workshop.

## Major milestones 2006

HMS 1	Messungen zur Rußoxidation abgeschlossen und zur Korrektur bestehender Rußmodelle ausgewertet	Dezember 2006 †	← AP 1.1
HMS 2	Vierdimensionales Rußkataster verfügbar	Juni 2007	
HMS 3	Meßkampagnen (am HBK-S und realen Triebwerke) abgeschlossen und neues Rußmodell in 3D-Simulationen validiert	Dezember 2007	
HMS 4	Flugmeßkampagne CIRCLE-1 abgeschlossen und Nukleationseigenschaften relevanter Aerosolpartikel bestimmt	Oktober 2005	
HMS 5	Flugmeßkampagne CIRCLE-2 abgeschlossen, klimarelevante optische Parameter von Zirren bestimmt und Fernerkundung validiert	Oktober 2006 ‡	← AP 2.1, 3.2
HMS 6	Partikelneubildungspotential und indirekter Effekt abgeschätzt	Dezember 2007	
HMS 7	Aerosol-Zirrenmodul in ECHAM implementiert und validiert	Dezember 2005	
HMS 8	Validierte Parameterisierungen für ECHAM verfügbar	Juni 2006	← AP 3.1, 3.4
HMS 9	Luftverkehrs-bedingte Bewölkungs- und Klimaänderung quantifiziert	Dezember 2007	

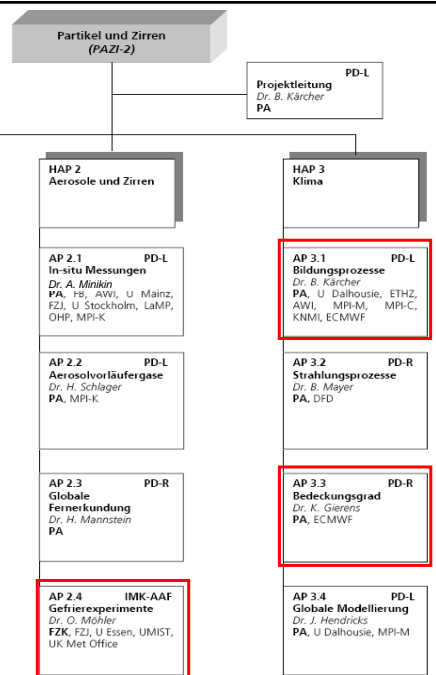
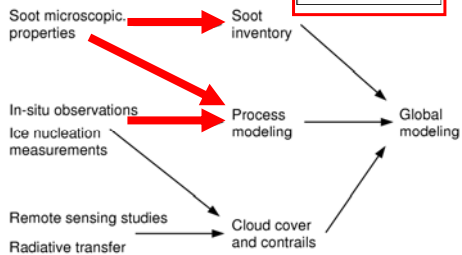
† milestone shifted to 2007 because of unforeseen technical problems that have been solved

‡ milestone shifted to 2007 because CALIPSO launch has been delayed

## Tasks and milestones 2006

- Complete soot oxidation measurements and modeling
- Collect air traffic flow data
- Categorize ice nuclei measurements (esp. soot/sulfur)
- Evaluate potential for indirect soot effect at the cloud scale
- First results: contrail simulations

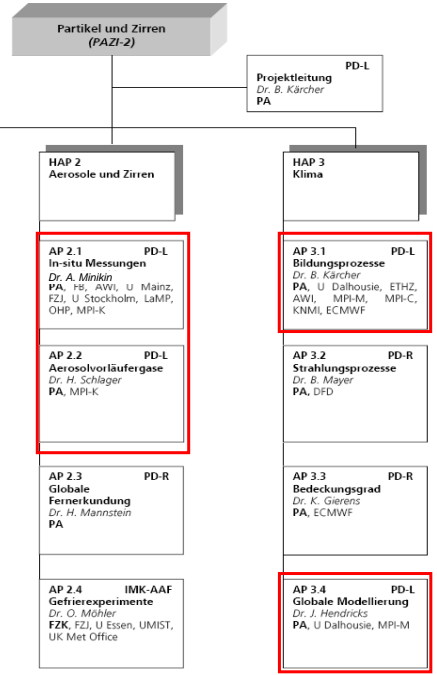
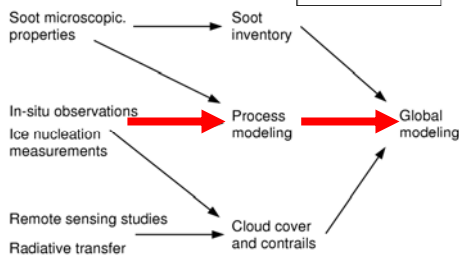
Gerlinger, Plohr, Möhler, Kärcher, Unterstraßer, Gierens et al.



## Tasks and milestones 2006

- Evaluate CIRCLE-1 (= LAUNCH and TROCCINOX) data
- Employ SO<sub>2</sub> instrument in campaigns outside PAZI-2
- SO<sub>2</sub> measurement global model intercomparison and validation
- Planning on CIRCLE-2
- First results: cirrus simulations

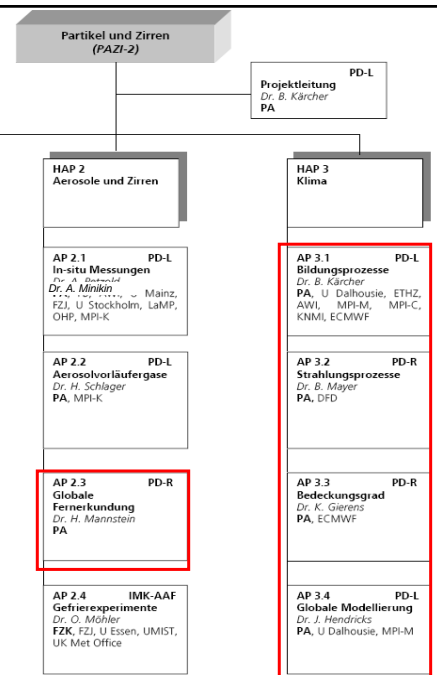
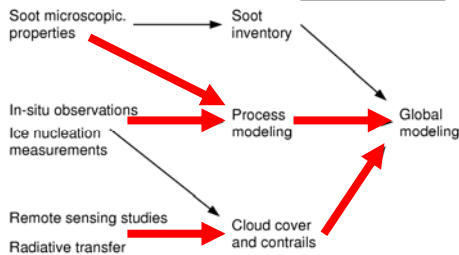
Minikin, Fiebig, Schlager, Voigt, Mayer, Kärcher, Sölch, Hendricks et al.



## Tasks and milestones 2006

- Complete work on MSG analysis, robustness and uncertainties
- Model studies of optically relevant contrail properties
- Start work on radiation parameterization
- Upper tropospheric relative humidity from MOZIC and ECMWF
- First results: global contrail cirrus and indirect effect studies

Krebs, Mannstein, Gierens, Emde, Mayer, Burkhardt, Kärcher, Hendricks et al.



## Workpackage status (details see annual report)

### HAP 1 - Soot Aerosol

#### AP 1.1 - Soot Measurements and Modeling (VT)

- MS: Soot oxidation measurements completed and used to correct soot formation models (12/06)
  - partly shifted

#### AP 1.2 - Emission inventory (AT)

- MS: Global aircraft movement data base available (12/05)
  - partly shifted

## Workpackage status (details see annual report)

### HAP 2 - Aerosols and Cirrus

#### AP 2.1 - In-situ Measurements (PA and partners) - CIRCLE expts

- MS: CIRCLE-1 data bank completed (01/06)
- MS: Planning of CIRCLE-2 field campaign (08/06)
  - partly shifted

#### AP 2.2 - SO<sub>2</sub> Instrument (PA and MPIK)

- MS: Prototype instrument developed and measurements performed (11/06)

#### AP 2.3 - Remote sensing (PA)

- MS: Cloud statistics for Europe/North Atlantic ready (10/06)

#### AP 2.4 - AIDA ice nuclei measurements (FZK IMK-AAF)

- *Extended collaboration now organized within HGF Virtual Institute led by FZK*

## Workpackage status (details see annual report)

### HAP 3 - Climate

#### AP 3.1 - Processes (PA and partners)

- MS: Measurement campaigns (PAZI-1/TROCCINOX) analyzed (12/06)

#### AP 3.2 - Radiation (PA)

- MS: Cirrus retrieval for MSG validated with CIRCLE-2 measurements (12/06)
  - shifted

#### AP 3.3 - Cloud cover (PA and ECMWF)

- MS: Supersaturation in ECMWF-IFS operational (12/06)

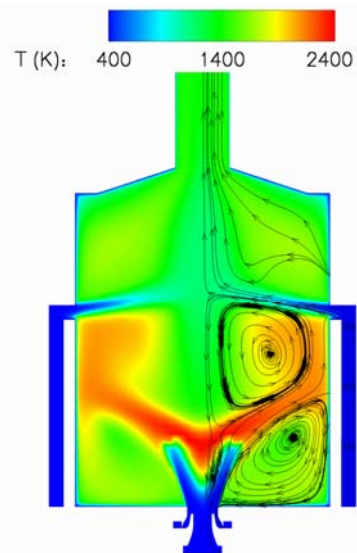
#### AP 3.4 - Global modeling (PA and partners)

- MS: Aerosol module MADE coupled to cloud- and radiation modules (06/06)

## HBK-S facility and THETA code

- Unforeseen technical problems related to unwanted thermo-acoustic oscillations have been solved during 2006.
- Newly developed PAH and soot model has been validated with model flame data and has been fully integrated in the Theta-code.

DLR  
Experiment:  
combustor with  
secondary air  
injection  
turbulent  
ethen/air flame  
 $p = 3 \text{ bar}$ ,  $\Phi = 1,4$



#### THETA Simulation:

311000 volumes, detailed chemistry  
34 species, 164 reactions, 4 classes of PAHs  
multi-variate assumed PDF closure

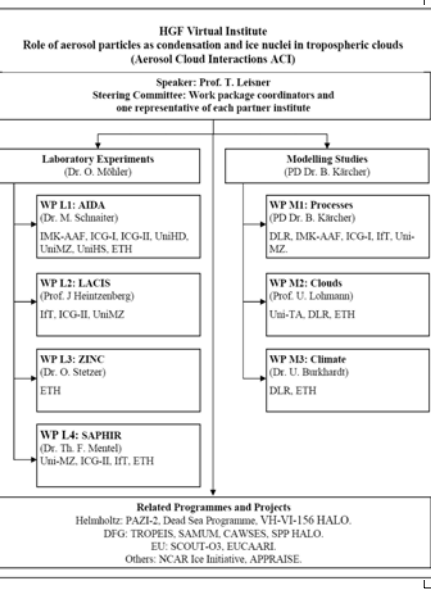
## CIRCLE-2 airborne field campaign

**Goal:** Quantification of optical properties of cirrus particles using airborne, spaceborne and ground-based sensors by performing radiation case studies and validation of satellite retrievals with synergistic instrumentation (active=lidar + lidar/radar and passive=satellite + in-situ).

**Focus:** Extensive characterization of optical and radiative properties of natural and anthropogenically influenced cirrus (with and without lower clouds; preferably over water).

Joint CNES / DLR mission in May 2007.

## HGF-VI ACI



## Role of aerosol particles as condensation and ice nuclei in tropospheric clouds (Aerosol-Cloud Interactions ACI)

within the Helmholtz-Gemeinschaft (HGF).  
(call from April 7, 2006)



Related to Helmholtz Research Field Earth and Environment / Atmosphere and Climate.

### Key topics:

- Role of clouds in climate change and water cycle.
- Impact of aerosols on cloud formation and cloud properties.
- Aerosol related formulation of ice nucleation in cloud and climate models.

### Leading Helmholtz Institute:

FZK	Prof. Dr. T. Leisenr (spokesperson), Dr. O. Möhler Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Institute for Meteorology and Climate Research (IMK-AAF), Postfach 3640, 76021 Karlsruhe Email: Thomas.Leisenr@imk.fzk.de	
-----	--	--

### Helmholtz Partners

DLR-IPA	Prof. Dr. U. Schumann, Priv. Doz. Dr. Bernd Kirchner Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., Institut für Physik der Atmosphäre (IPA), 82230 Weßling Email: Ulrich.Schumann@dlr.de	
FZJ	Prof. Dr. M. Riese, Dr. M. Krämer (ICG-I) Prof. Dr. A. Walmer, Dr. Th. F. Mentel (ICG-II) Forschungszentrum Jülich GmbH, Leo Brandt Str., 52425 Jülich Email: A.Walmer@fz-juelich.de; M.Riese@fz-juelich.de	

### National Partner Institutes and Universities

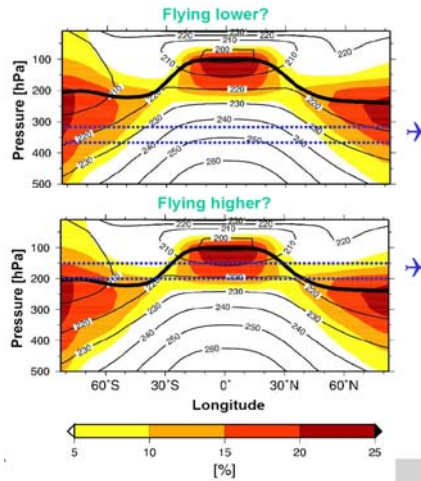
IFT	Prof. Dr. J. Heintzenberg, Dr. F. Stratmann Leibniz-Institut für Troposphärenforschung (IFT), Permoserstr. 15, 04318 Leipzig Email: Joss@tropos.de	
Uni-MZ	Prof. Dr. S. Borrmann, Dr. J. Schneider, Dr. K. Diehl Universität Mainz, Institut für Physik der Atmosphäre Becherweg 21, 55099 Mainz Email: Borrmann@mainz.uni-mainz.de	
Uni-FM	Prof. Dr. Ulrich Schmidt, Dr. H. Bingemer Universität Frankfurt, Institut für Atmosphäre und Umwelt, Georg-Voigt-Straße 14, 60054 Frankfurt Email: U.Schmidt@meteor.uni-frankfurt.de	
Uni-HD	Hochschul. Doz. Dr. V. Ebert Universität Heidelberg, Physikalisch-Chem. Institut, Im Neuenheimer Feld 253, 69120 Heidelberg Email: Volker.Ebert@urz.uni-heidelberg.de	

### International University Partners

ETH	Prof. Dr. U. Lohmann, Dr. O. Stetzer ETH Zürich, Institute for Atmospheric and Climate Science, Universitätsstraße 16, 8092 Zürich Email: Ulrich.Lohmann@env.ethz.ch	
Uni-HS	Prof. P. H. Kaye, Dr. Z. J. Ulanowski University of Hertfordshire, Science and Technology RI, College Lane, Hatfield, Herts AL10 9AB, UK Email: p.h.kaye@herts.ac.uk	
Uni-TA	Prof. Dr. Z. Levin Tel Aviv University, Cloud and Precipitation Physics Laboratory 69978, Tel Aviv, Israel Email: zev@huil.tau.ac.il	

## HGF-NWG AEROTROP

### Frequency of contrail forming air masses



Ozone impact?



Initiating and networking: The President's Fund

A proposal of the  
German Aerospace Center (DLR)  
and the  
Johannes-Gutenberg-University Mainz (Uni-M)  
applying for a  
Helmholtz-Hochschul-Nachwuchsgruppe  
with the title

### Impact of Aircraft Emissions on the heterOgeneous chemistry in the TROPopause region (AEROTROP)

**Keywords:** aviation, aircraft emissions, mitigation,  
heterogeneous chemistry, tropopause region, aerosol, cirrus cloud, contrail

#### Nominee and Host:

Dr. Christiane Voigt  
German Aerospace Center (DLR)  
in the Helmholtz Association  
Institute for Physics of the Atmosphere (PA)  
Oberpfaffenhofen  
82234 Wessling

#### Cooperating University:

Prof. Dr. Stephan Borrmann  
Johannes-Gutenberg-University Mainz  
Institute for Atmospheric Physics  
Johannes-Joachim-Becher-Weg 21  
55099 Mainz

Tel.: (+49)8153/28-2579

Fax: (+49)8153/28-1841

Email: Christiane.Voigt@dlr.de

Tel.: (+49)6131/39-22861

Fax: (+49)6131/39-23532

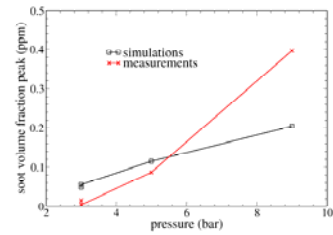
Email: borrmann@uni-mainz.de

## Status summary

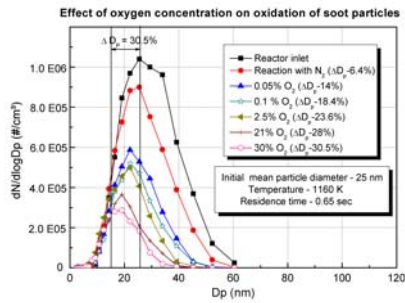
- With additional topics defined and related workplan changes accomodated, the **project proceeds as planned**. Large field campaign in final planning phase.
- The **project finances** (as of 31. Dec. 2006) **are in order**:
  - total volume including investments: € 9.873.916 (100%)
  - available in the **fourth** project year: € 2.446.927 (24.8%)
- ~ 65 publications / conference proceedings appeared / in press / in preparation.

## Soot measurements and modeling

- Measuring soot at HBK-S (in progress)
- Development of a detailed soot model (completed)
- Soot oxidation experiment (completed)
- Real engine measurements (completed)



Calculated and measured maximum soot volume fractions in dependence of pressure (semi-technical scale combustor)

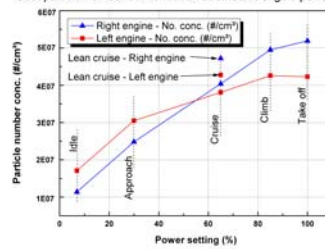


Influence of O<sub>2</sub> concentration on particle number and distribution

Measured soot particle number densities



Soot particle number concentration at different engine power settings



## 4D Aircraft Emission Inventory

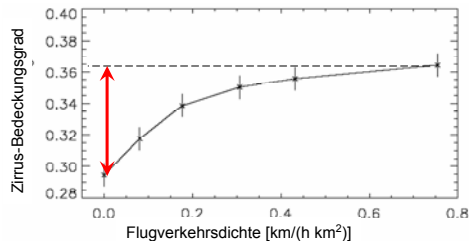
- AT delivers state-of-the-art fuel usage data and emission profiles of various pollutants for representative aircraft/engine combinations, as planned in AP 1.2.
- FW, currently represented by Holger Pabst in PAZI-2, could not be properly integrated in the project while it was initiated.
- Real flight movement inventory (AERO2k) not yet available but required by FW to create an inventory along with fuel / emission data.

## Correlation between cirrus cover and air traffic density

- Analysis was flawed because correlated variables exhibit similar spatial structures and motion of contrail cirrus patterns driven by large-scale wind fields was not considered.
- Strategies to improve the analysis have been devised and first steps have been taken to arrive at a more robust correlation.

### Corrigendum

to MANNSTEIN, H. & SCHUMANN, U., 2005: Aircraft induced contrails over Europe *Meteorol. Z.*, 14, no. 4, p. 549-554.



MSG-analyses over Europe reveals enhanced high cloud cover in heavily traveled aircraft corridors

also tend to fly at least in Europe, the region under consideration, in areas with enhanced cirrus coverage. In particular the conclusion of our paper, 'that the coverage by additional cirrus clouds is in Europe about 10 times higher than by linear contrails' can no longer be supported. Further work is needed to discriminate between contrail cirrus and natural cirrus.

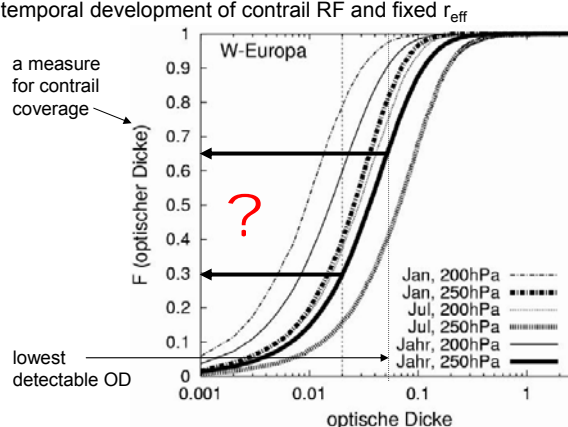
## Towards estimating the climate impact of contrail cirrus

Major areas of progress:

Development, implementation and testing (ongoing) of contrail cirrus scheme including:

- **Mechanistic description of processes affecting contrail cirrus**  
previous work re-initialised line-shaped contrails every 30 min time step
- **No tuning of contrail cover with satellite observations required**  
previous work did not provide independent estimates of coverage outside of Europe
- **Independent microphysical and optical properties of contrail cirrus**  
previous work did not allow for temporal development of contrail RF and fixed  $r_{eff}$

- Strategy in PAZI-2 will be to provide a **range of possible climate impacts** with properly defined sensitivity studies.
- There is a **serious validation problem** when comparing satellite data with the GCM results:



## Multi-modal ice approach realized in ECHAM

**Previous ECHAM version**

single mode



contains all types of ice



**New ECHAM version**

Mode 1



Ice from heterogeneous nucleation on mineral dust

Mode 2



Ice from heterogeneous nucleation on soot

Mode 3



Ice from homogeneous freezing

Mode 4

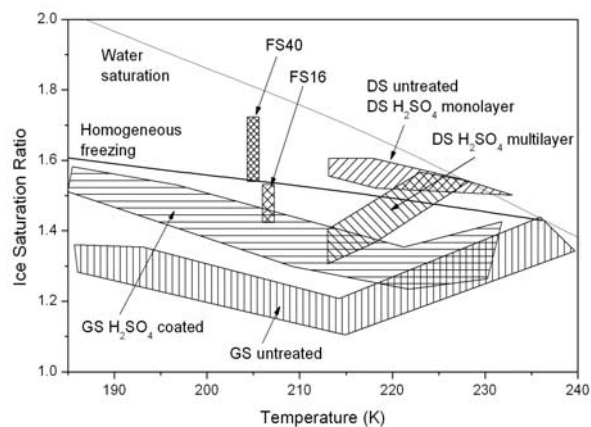


Ice from other freezing pathways

## Cirrus changes caused by aviation soot emission

Major area of progress:

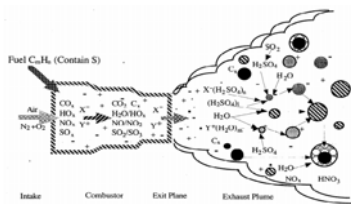
- different types of ice stemming from different freezing aerosol (or from contrail cirrus) can now be represented in a GCM framework
- possible to simulate the competition between different IN in cirrus formation more realistically, avoiding the use of artificial cirrus formation scenarios
- The main goal in PAZI-2 will be to assess potential changes in cirrus properties including soot and dust particles and related RF changes.
- Laboratory data on ice nucleation activity of BC particles have not yet converged to a consistent picture:



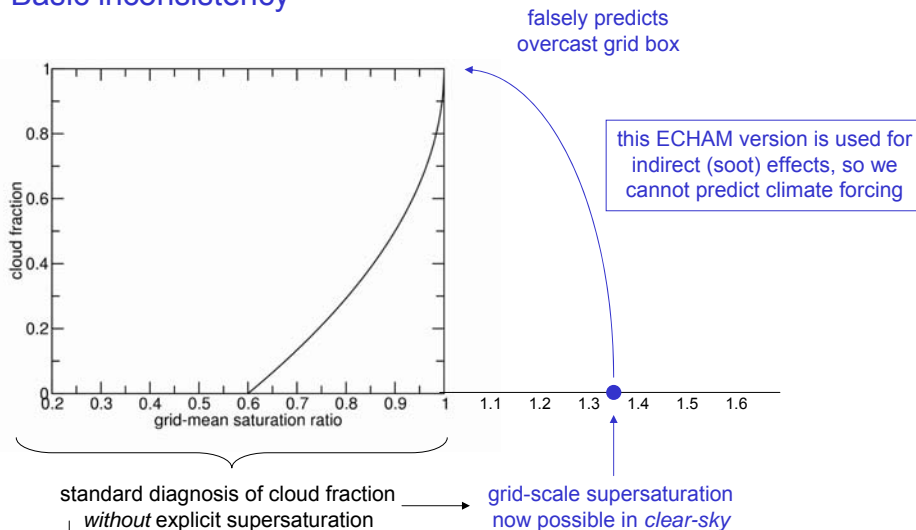
## Goal is to unify direct and indirect effects



... but this is not achievable in PAZI-2



## Basic inconsistency



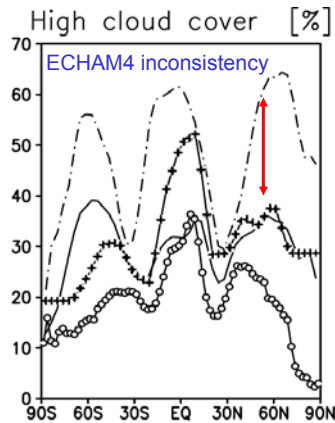
this ECHAM version is used for direct (contrail cirrus) effects, so we have to care about subgrid variability of supersaturation

## Prognostic approach for cirrus coverage in climate model

Major effort at IPA needed to arrive at physically consistent solution:

prognostic cirrus coverage will allow

- consistent treatment of simulated ice supersaturation and indirect effects
- adequate treatment of competition with prognostic contrail cirrus
- reliable climate forcing studies to be performed.



correct treatment of cloud cover and supersaturation in the ECMWF-IFS

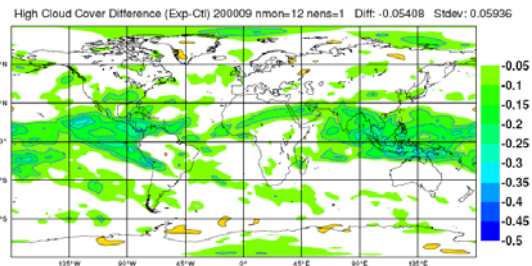
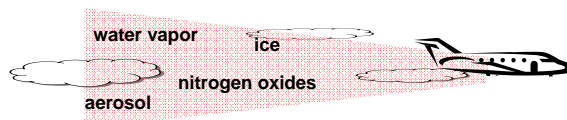
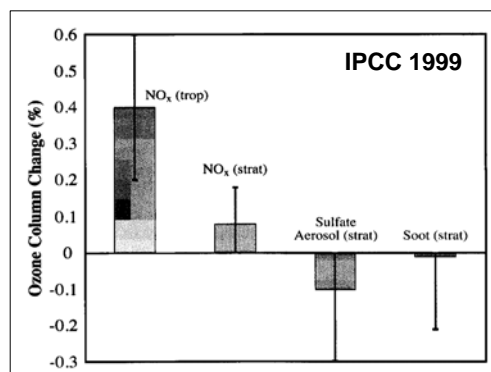


Figure 2: 12 month average difference in high cloud cover ( $p < 450$  hPa approximately) between two experiments using the new nucleation parametrisation and the control, respectively.

## Aircraft $\text{NO}_x$ emissions, halogenes, and ozone changes



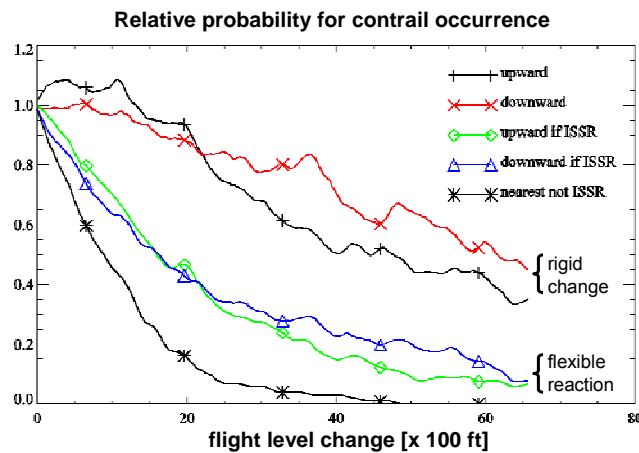
- Time is ripe for new assessment.
- Previous reports are not reflecting state-of-the-art knowledge concerning particles, ice supersaturation,  $\text{NO}_x$  lightning source, among other issues.
- Aircraft-induced ozone changes may become important especially when flight levels shift to higher altitudes.



- Study of chemical changes is main theme of HGF-NWG AEROTROP at IPA.

## Optimization of flight routing to minimize contrail climate impact

- High importance as contrail cirrus are likely to be the main contributor to climate impact of aviation.
- Result is based on a local study, we need **global predictive capability**



- Exploit enhanced capabilities of NWP with explicit supersaturation (IPA-ECMWF collaboration embedded in PAZI-2) to predict contrail persistence and minimize their radiative impact along flight routes to propose flexible response strategies.

## Mitigation

Minimizing the climate impact by optimizing flight routes and flight altitudes:

determine the marginal climate change (RF or  $\Delta T$ ) as function of location ( $\lambda, \varphi$ ), altitude ( $p$ ) and time ( $t$ );

calculate total cost function (normalized climate change, normalized operation costs, etc.):

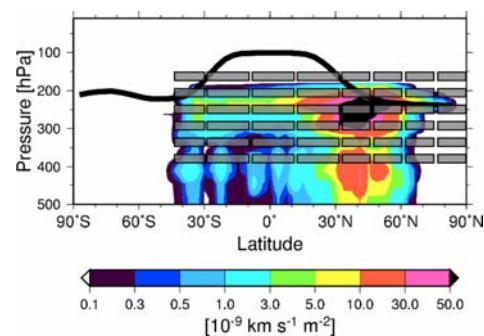
$$f = \sum_{i=1}^N e_i * g_i$$

$e_i$  specific emissions

$g_i$  marginal weights

find optimal route and altitude by minimizing:

$$\int_{paths} f(\vec{s}) ds = \min$$



## Major milestones 2007

HMS 1	Messungen zur Rußoxidation abgeschlossen und zur Korrektur bestehender Rußmodelle ausgewertet	Dezember 2006 †	●
HMS 2	Vierdimensionales Rußkataster verfügbar	Juni 2007	●
HMS 3	Meßkampagnen (am HBK-S und realen Triebwerke) abgeschlossen und neues Rußmodell in 3D-Simulationen validiert	Dezember 2007	●
HMS 4	Flugmeßkampagne CIRCLE-1 abgeschlossen und Nukleationseigenschaften relevanter Aerosolpartikel bestimmt	Oktober 2005	●
HMS 5	Flugmeßkampagne CIRCLE-2 abgeschlossen, klimarelevante optische Parameter von Zirren bestimmt und Fernerkundung validiert	Oktober 2006 ‡	●
HMS 6	Partikelneubildungspotential und indirekter Effekt abgeschätzt	Dezember 2007	●
HMS 7	Aerosol-Zirrenmodul in ECHAM implementiert und validiert	Dezember 2005	●
HMS 8	Validierte Parameterisierungen für ECHAM verfügbar	Juni 2006	●
HMS 9	Luftverkehrs-bedingte Bewölkungs- und Klimaänderung quantifiziert	Dezember 2007	●

† milestone shifted to 2007 because of unforeseen technical problems that have been solved

‡ milestone has been shifted to 2007 because CALIPSO launch has been delayed

Given the detailed reports we heard today, we are confident that the **major project goals will be reached** by the end of 2007.

## But we like to stay competitive

- Aviation impact on climate may be the most serious long-term environmental issue facing aviation industry with a predicted tripling of demand over the next 30-40 years.
- DLR-IPA has an accepted international reputation in the fields of contrails & particles and metrics & climate impact.
- Various groups in the U.S. are strong competitors in key research areas and mitigation.
- £ 5 million research program OMEGA\* has been launched in the U.K.

\* led by Manchester Metropolitan University to assess problems and develop solutions for the global aviation industry

Joint Planning & Development Office  
Environmental Integrated Product Team

Partnership for Air Transportation  
Noise and Emissions Reduction

**A Report of Findings and Recommendations**

Workshop on the Impacts of Aviation on Climate Change  
June 7-9, 2006, Boston, MA

August 31, 2006

"There is no higher priority in this field than research into impact of aviation on atmosphere and climate. Lack of robust understanding of the nature and magnitude of the effects of aircraft emissions impedes aircraft designers and policy makers alike in addressing the question of how best to minimise the future environmental impact of air travel."

Royal Aeronautical Society  
UK, July 2005



**Workpackage summaries 1.1.2006 - 31.12.2006**

<b>HAP 1 / AP 1.1</b>	Rußemissionen / Messung und Modellierung
<b>PI</b>	Gerlinger, VT
<b>Meilenstein(e)</b>	Messungen zur Rußoxidation abgeschlossen und zur Korrektur bestehender Rußmodelle ausgewertet

### Durchgeführte Arbeitsschritte

Untersuchung der PAZI-2 Brennkammer unter atmosphärischen Bedingungen: In den ersten Messkampagnen an der neuen, optisch zugänglichen PAZI-2 Brennkammer sind starke thermoakustische Oszillationen aufgetreten, die sich auch durch mehreren Modifikationen nicht beheben ließen. Daher wurde die Brennkammer im Frühjahr/Sommer 2006 am Hochdruckbrennkammerprüfstand ab- und im Labor aufgebaut und dort unter atmosphärischen Bedingungen betrieben. Die Brennkammerschwingungen traten zunächst auch hier (bei Umgebungsdruck) auf. Der Laboraufbau wurde gewählt, da er einen wesentlich einfacheren Zugang zur Brennkammer (bei Änderungen in der Konfiguration) und deutlich niedrigere Betriebskosten erlaubt. In mehreren ausgedehnten Messkampagnen konnten die Brennkammerschwingungen auf eine Rückkoppelung mit dem Plenum der Luftzufuhr (vor der Eindüsung in die Brennkammer) zurückgeführt werden. Durch Beschleunigung der Luft über ein Lochblech ließen sich die Schwingungen im Labor schließlich beseitigen. Die umgebaute Brennkammer ist momentan wieder am HBK-S aufgebaut und wird im Dezember 2006/Januar 2007 dort untersucht. Durch die Brennkammerschwingungen ist es im Zeitplan zu einer Verschiebung der Messkampagnen (insbesondere mit externen Partnern) gekommen.

Umbau der PAZI-2 Brennkammer: In den ersten Messkampagnen an der optisch zugänglichen PAZI-2 Brennkammer haben sich darüber hinaus Dichtigkeitsprobleme an den Fenstern der Brennkammer gezeigt, die eine hohe Leckageluft verursachten. Um auch dieses Problem zu beseitigen, wurde die Brennkammer umgebaut und ein neues Dichtungskonzept für die Fenster realisiert.

Mehrdimensionale Brennkammersimulationen: Das neu entwickelte PAH- und Rußmodell ist inzwischen vollständig im THETA-Code implementiert und getestet. Es basiert auf detaillierter Chemie für die Gasphase und einer Unterteilung der PAHs in eine beliebige Anzahl von Klassen mit einem vorzugebenden Molekulargewichtsbereich. Damit lassen sich die zahlreichen PAHs durch eine relativ geringe Zahl an PAH-Klassen modellieren, die letztendlich den Ruß hervorrufen. Für jede dieser Klassen wird eine Transportgleichung gelöst, wobei sich prinzipiell alle PAH-Wachstums- und Abbauprozesse berücksichtigen lassen (implementiert ist ein Wachstum der PAHs durch Azethylen-Anlagerung und durch Koagulation von PAHs verschiedener Größenklassen). Die PAH- und Rußoxidation ist durch Reaktionen mit O<sub>2</sub> und OH möglich. Zur Beschreibung des Rußes werden Transportgleichungen für den Rußvolumenbruch und die Anzahl der Rußpartikel pro Volumen gelöst. Um den Einfluß der Turbulenz auf die chemischen Umsatzraten zu berücksichtigen, wird ein multi-variater PDF-Ansatz (vorgegebene PDF) verwendet. Er beruht auf einer Gauß-Verteilung für die Temperatur und einer multi-variater Beta-Verteilung für die Gaskomponenten und die PAHs. Das neue Rußmodell wurde zunächst an sehr einfachen, laminaren Flammen getestet. Auf Grund der Verzögerungen bei den HBK-S Versuchen wurde an Stelle der PAZ-2 Brennkammer eine etwas kleinere, voll turbulente Modellbrennkammer mit Sekundärlufteinblasung simuliert. Diese wird unter etwas niedrigeren Drücken betrieben als die PAZI-2 Brennkammer und besitzt eine um Faktor 2 herabskalierte Düse. Die Simulationen hierfür sind abgeschlossen. Erste Vorausberechnungen der PAZI-2 Brennkammer werden momentan durchgeführt.

Grundlagenexperiment zur Rußoxidation: Nach Inbetriebnahme des Rußoxidationsreaktors (2005) zur isolierten Untersuchung der Oxidation von Rußpartikeln wurden zahlreiche Parameterstudien durchgeführt. Gemessen wurden jeweils die Änderung der Rußgrößenverteilung und der Anzahlkonzentration über der Reaktorlänge. Untersuchte Einflussparameter waren die Temperatur (200–1400 K), die Verweilzeit des Gases (0,4–1,2 s) durch Variation der Geschwindigkeit, die Sauerstoffkonzentration (0–30% Vol.) und der mittlere Start-Partikeldurchmesser (13, 25 und 36 nm). Die Experimente wurden ausgewertet, analysiert und sind abgeschlossen. Wegen der viel versprechenden Resultate werden diese Versuche aus Institutsmitteln fortgeführt. Hierzu wird ein verbesserter Reaktor mit mehreren Entnahmestellen aufgebaut.

Messungen an realen Triebwerken: In Zusammenarbeit mit dem schweizerischen Bundesamt für Zivilluftfahrt und der schwedischen Firma Hjelmcö Oil wurden im Mai 2006 Emissionsmessungen an Kleinflugzeugen durchgeführt. Untersucht wurden Kolbenmotoren der Firmen Lycoming und ROTAX. Der Schwerpunkt dieser Untersuchungen lag in der Bestimmung der Partikelgrößenverteilungen im Abgas mit EEPS sowie der CO<sub>2</sub>, CO, NO<sub>x</sub> Werte. Im Juni 2006 folgten Messungen am Flughafen Bern-Belp zur „Airport Air Quality“. Es wurden online-Messungen von vorbeifliegenden Flugzeugen und vorbeifahrenden LKW durchgeführt. Zusätzlich wurden online Partikelmessungen an zwei PW545A Triebwerken eines Citation Jets der schweizerischen Luftwaffe vorgenommen.

## Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Konstruktion und Aufbau der PAZI-2 Brennkammer: Die verbesserte, optisch zugängliche PAZI-II Brennkammer ist fertig gestellt und am HBK-S installiert. Gleiches gilt für die Mobilmachung der Messtechniken.

Untersuchungen an der PAZI-2 Brennkammer: Bei atmosphärischen Bedingungen konnten die Brennkammerschwingungen beseitigt werden. Sollte sich dieses Verhalten auch am HBK-S unter Druck bestätigen, so werden im Dezember 2006/Januar 2007 LII und LIF Messungen in der PAZI-2 Brennkammer vorgenommen.

Mehrdimensionale Brennkammersimulationen: Das neu implementierte PAH- und Rußmodell ist inzwischen an zahlreichen vorgemischten und nicht-vorgemischten laminaren Modellflammen validiert worden (u.a. auch mit dem Coflame-Experiment aus PAZI-1). Anhand dieser Rechnungen wurden die Modellparameter so optimiert, daß ein möglichst allgemein einsetzbares Russmodell entsteht. Auf dieser Basis ist eine vollturbulente, mit Ethylen betriebene Brennkammer im halbertechnischen Maßstab simuliert worden. Dabei konnte gezeigt werden, dass

- der verwendete PDF-Ansatz zu einer deutlichen Verbesserung der Temperaturverläufe im Vergleich zum Experiment führt;
- die maximalen Rußkonzentrationen in der Brennkammer bei unterschiedlichen Drücken (3,5 und 9 bar) recht gut vorhergesagt werden;
- die Rußverteilungen noch nicht genau genug simuliert werden.

Insgesamt sind sehr gute Resultate erzielt worden, insbesondere wenn man die Komplexität des Strömungsfelds mit starker Rückströmung durch die Sekundärluft berücksichtigt. Momentan wird an einer weiteren Reduktion eines Kerosin-Mechanismus gearbeitet, der für 3D-Brennkammersimulationen geeignet sein soll. Erste Testläufe zum Strömungsfeld der PAZI-2 Brennkammerdüse (inert) haben ebenfalls gute Übereinstimmungen mit experimentellen Resultaten erbracht.

Grundlagenexperiment zur Rußoxidation: Es konnte gezeigt werden, dass das Verhältnis der Temperatur- und Zeitskalen am Oxidationsreaktor den realen Bedingungen entspricht. Ferner erlauben die durchgeführten Experimente eine Quantifizierung der Rußoxidation in Abhängigkeit von der Temperatur. Ein wesentliches Ergebnis war ferner die Beobachtung einer anfänglich sehr schnellen Rußoxidation selbst bei geringen Sauerstoffkonzentrationen. Dagegen hat sich bei hohen Sauerstoffkonzentrationen nahezu kein Einfluss einer Variation der  $O_2$ -Konzentration auf die Rußoxidation gezeigt. Ein Vergleich der erzielten experimentellen Oxidationsraten mit denen des Standard-Rußmodells nach Frenklach ergab eine schlechte Übereinstimmung. Durch zusätzliche Messungen soll nun die Datenbasis erweitert und neue Geschwindigkeitskoeffizienten abgeleitet werden.

Messungen an realen Triebwerken: Im Rahmen von PAZI-2 konnten erstmals online Messungen von Rußgrößenverteilungen auf dem Vorfeld eines Flughafens durchgeführt werden. Kleinere Russpartikel (< 30-40 nm) ließen sich dabei den Triebwerksgasturbinen und größere den Dieselmotoren von LKWs zuordnen. Ferner wurden Rußgrößenverteilungen und -anzahlkonzentrationen für ein PW545A-Triebwerk bei unterschiedlichen Lastpunkten (ICAO und Cruise) quantifiziert. Die Daten wurden an andere Projektpartner weitergegeben.

## Input/Output

Ergebnisse der Messkampagnen an realen Triebwerken wurden an AP 1.2 geliefert. Resultate des Rußoxidationsexperiments gehen in die numerischen Simulationen ein. Die Mitwirkung von AP 2.1 und MPI-K an den HBK-S Messungen ist nun für Frühjahr 2007 vorgesehen.

## Publikationen

Di Domenico, M., P. Gerlinger, and M. Aigner  
Modeling Soot Formation in Methane Diffusion Flames.  
AIAA paper 2006-1163, 2006

Di Domenico, M., P. Gerlinger, and M. Aigner  
Numerical Investigation of Soot Formation in Partially- Premixed Diffusion Flames  
31<sup>st</sup> International Symposium on Combustion, 2006

Di Domenico, M., P. Gerlinger, and M. Aigner  
Numerical Investigation of Soot Formation in Laminar Ethylene-Air Diffusion Flames  
eingereicht als paper für ASME Turbo Expo, 2007

Di Domenico, M., P. Gerlinger, and M. Aigner  
Chemistry and Turbulence Modeling Effects on the Numerical Simulation of Lifted H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Flames in Vitiated Coflow  
eingereicht als paper für 37th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, 2007

- K.P. Geigle, O. Lammel, A. Koch, R. Stirn, W. Meier  
Soot volume fraction study by laser-induced incandescence in a technical scale aero-engine combustor up to 15 bar  
31<sup>st</sup> International Symposium on Combustion, 2006
- Kanjarkar, S., C. Wahl, M. Kapernaum, M., and M. Aigner  
Investigation of Nano-Soot Particle Oxidation in a Flow Reactor Experimental investigation of soot nanoparticle oxidation –Effect of oxygen partial pressure on reaction kinetics  
31<sup>st</sup> International Symposium on Combustion, 2006
- Wahl, C., M. Kapernaum, M., and Th. Rindlisbacher  
Separation of Aircraft and Diesel-Truck Particle-Emissions, a Contribution to Airport Air Quality Measurements  
10<sup>th</sup> ETH-Conference on Combustion Generated Nanoparticles, 2006

<b>HAP 1 / AP 1.2</b>	Rußemissionen / Globaler Rußkataster
<b>PI</b>	Plohr, AT
<b>Meilenstein(e)</b>	Weltweite Luftverkehrsdaten für einen statistisch relevanten Zeitraum verfügbar Rußkorrelation weiterentwickelt und validiert

### **Durchgeführte Arbeitsschritte**

Im Rahmen von AP1.2 geht es um die Entwicklung der Rußemissionen und um die Verfeinerung der wissenschaftlichen Methoden zur besseren Abschätzung des Rußpartikeleintrages aus Flugtriebwerken in die Atmosphäre basierend auf bestehenden Ansätzen. Hierbei wurde eine Erweiterung des Aero2K Katasters auf das Jahr 2006 als sinnvoll erachtet. FW und PA haben Schritte zur Beschaffung der Aero2k Bewegungsdaten unternommen; leider liegen die Basisdaten für das abgeschlossene Aero2K Projekt jedoch noch nicht vor, so dass bisher nur der rein verkehrliche Aspekt betrachtet werden konnte. Das beinhaltet die Aufbereitung von OAG Flugplänen zur Analyse der verkehrlichen Entwicklung im Luftverkehr und der Vergleich von vorhandenen Emissionskatastermodellen im Rahmen einer Diplomarbeit.

Die Korrelationen zur Berechnung der Rußmasse und der Rußeigenschaften sind Voraussetzung für die Modellierung der vom globalen Luftverkehr in die Atmosphäre eingebrachten Rußmenge und ihrer Eigenschaften, da mit ihrer Hilfe die Variabilität der einzelnen Triebwerkstypen sowie globale Verkehrsdaten direkt berücksichtigt werden können. Bisher sind jedoch nur wenige Daten aus Rußmessungen verfügbar. Anhand der in HAP1 und HAP2 durch VT gewonnenen Messdaten sollten daher die Korrelationen überprüft und gegebenenfalls verbessert werden. Leider waren jedoch die in den bisherigen Versuchen durch VT gemessenen Rußmengen so gering, dass eine Bewertung der Korrelationen mit diesen Ergebnissen nicht möglich war.

Es wurden jedoch ersatzweise Messdaten zur Verfügung gestellt, die an den zwei PW545A Strahltriebwerken einer Cessna Citation gewonnen wurden. Eine Modellierung des Triebwerks und seiner Rußemissionen zeigte sehr gute Übereinstimmung mit den gemessenen Daten, insbesondere für das linke Triebwerk. Die gemessenen Werte für das rechte Triebwerk sind etwas höher als die mit der Rußkorrelation modellierten, die Abweichung entspricht aber etwa der Schwankungsbreite zwischen den beiden vermessenen Triebwerken. Diese Ergebnisse zeigen zunächst keinen Bedarf einer weiteren Verbesserung der Korrelationen.

Weitere Messungen an Modellbrennkammern sind im Laufe des Jahres 2007 geplant. In der Hoffnung, dass die dabei gewonnenen Daten weitere Erkenntnisse zur Verbesserung der Rußkorrelationen liefern können, wird der Meilenstein 2-4 offen gehalten und auf einen Zeitpunkt nach Vorliegen der weiteren Messdaten verschoben.

### **Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse**

Erstellung einer Verkehrsdatenbank für eine mögliche Präzisierung für das Jahr 2006 der Aero2K Daten.

Validierung der Rußkorrelationen anhand von Messwerten an 2 PW545A Triebwerken.

### **Input/Output**

I: OAG Daten

O: Aufbereitet und bereinigte Flugplandaten für Januar/Juli 2006.

I: Messergebnisse an 2 PW545A Triebwerken

O: Ergebnisse der Triebwerks- und Rußmodellierung zur Validation der Verfahren

### **Publikationen**

Schaefer, Martin

Methodologies for Aviation Emission Calculation – A comparison of alternative approaches towards 4D global inventories  
Diplomarbeit, Universität Berlin

**HAP 2 / AP 2.1** Aerosole und Zirren / In-situ Messungen  
**PI** Minikin, PA  
**Meilenstein(e)** Datenbank zu CIRCLE-1 fertig  
Messkampagne CIRCLE-2 zur Durchführung vorbereitet

### **Durchgeführte Arbeitsschritte**

Die Analyse von Messdaten der im September 2005 durchgeführten PAZI-LAUNCH Flugzeug-Messkampagne (<http://www.pa.op.dlr.de/pazi-falcon/>) mit der DLR Falcon, die die in situ Beprobung persistenter Kondensstreifen zum Ziel hatte, wurde fortgeführt. Dazu wurde das am IPA von Fiebig et al. entwickelte Softwarepaket zur Invertierung von Aerosol-Größenverteilungsmessungen kombinierter Messinstrumente erweitert und zur Analyse insbesondere des nicht-flüchtigen Aerosolanteils eingesetzt. Die Auswertung gemessener mikrophysikalische Eigenschaften von Eiskristallen wurde in Kooperation mit Gayet et al. (LaMP, Universität Clermond-Ferrant) fortgeführt.

Die intensive Planung und Vorbereitung der für Mai 2007 geplanten CIRCLE-2 Flugzeug-Messkampagne wurde begonnen. Die Messkampagne dient der Bestimmung optischer Zirruseigenschaften durch Lidar und in situ Messungen mit der DLR Falcon und dem Vergleich mit Retrievals aus Satellitenbeobachtungen. Insbesondere soll die Möglichkeit genutzt werden, einen Teil der Messungen mit dem Überflug von Calipso/CloudSat zu koordinieren. Zu diesem Zweck wurde, wie bereits im Projektantrag vorgesehen, eine formlose Kooperation mit französischen Partnern vereinbart, die zeitgleich beabsichtigen, koordinierte Messungen mit einem flugzeuggetragenen Radar/Lidar-System (RALI) durchzuführen.

### **Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse**

Bei PAZI-LAUNCH gelang es insbesondere im Fall einer Verfolgung eines Embraer-170-Flugzeugtyps einen Kondensstreifen bis zu einem Plumealter von etwa 15 min mehrfach zu beproben. Dabei wurde erstmalig die Größenverteilung des interstitiellen, nicht-flüchtigen Aerosols im Kondensstreifen bestimmt. Diese weicht erheblich von der entsprechenden Größenverteilung des Hintergrundaerosols ab. Die mikrophysikalische Messungen im gleichen Fall zeigen von natürlichen Zirren systematisch abweichende Eigenschaften im Contrail (z.B. Verschiebung der Eispartikel-Größenverteilung zu kleineren Durchmessern hin).

Weitere für PAZI relevante Analysen der Messungen von Zirruseigenschaften im Rahmen des INCA-Projekts wurden in Zusammenarbeit mit französischen Partnern fortgeführt und publiziert (Gayet et al., 2006; Shcherbakov et al., 2006).

### **Input/Output**

O: Qualitätsgeprüfte Messdatensätze ausgewählter Sequenzen von Falcon-Messflügen bei der PAZI-LAUNCH Messkampagne verfügbar.

### **Publikationen**

- Gayet, J.-F., Shcherbakov, V., Mannstein, H., Minikin, A., Schumann, U., Ström, J., Petzold, A., Ovarlez, J., and Immler, F. (2006)  
Microphysical and optical properties of midlatitudes cirrus clouds observed in the southern hemisphere during INCA.  
*Q. J. R. Meteor. Soc.* 132, 1-30.
- Shcherbakov, V., Gayet, J.-F., Jourdan, O., Ström, J., and Minikin, A. (2006)  
Light scattering by single ice crystals of cirrus clouds.  
*Geophys. Res. Lett.*, 33, L15809, doi:10.1029/2006GL026055.

**HAP 2 / AP 2.2**            Aerosole und Zirren / Aerosolvorläufergase  
**PI**                            Schlager, PA  
**Meilenstein(e)**            SO<sub>2</sub>-Meßsystem aufgebaut und Flugzeugmessungen durchgeführt

### **Durchgeführte Arbeitsschritte**

Einbau einer Permeationsquelle mit isotopisch markiertem SO<sub>2</sub> in die Massenspektrometer-Einheit für Kalibrierungen im Flug.

Messung der troposphärischen SO<sub>2</sub>-Verteilung in mittleren Breiten bei den Projekten MEGAPLUME, INTEX-B und QUANTIFY, sowie in den Tropen in Westafrika bei AMMA.

Auswertung der SO<sub>2</sub>-Messungen bei SCOUT.

### **Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse**

Der Aufbau des SO<sub>2</sub>-Massenspektrometers wurde planmäßig abgeschlossen. Bei den in 2006 durchgeführten PAZI-Flügen war das SO<sub>2</sub>-Massenspektrometer aus Platzgründen nicht einsetzbar. Daher wurden SO<sub>2</sub>-Messungen im Rahmen anderer Flugprojekte durchgeführt. Bei AMMA wurden neben den SO<sub>2</sub>-Messungen auch Messungen neu gebildeter Partikel durchgeführt, so dass hier Partikelbildung aus SO<sub>2</sub> studiert werden kann.

Der Aufbau und die Funktion des SO<sub>2</sub>-Massenspektrometers wurde mit Messbeispielen in einer Publikation beschrieben (Speidel et al., 2006).

### **Input/Output**

—

### **Publikationen**

- Speidel, M., Nau, R., Arnold, F., Schlager, H., and Stohl, A. (2006)  
Sulfur dioxide measurements in the lower, middle and upper troposphere: Deployment of an aircraft-based chemical ionization mass spectrometer with permanent in-flight calibration  
*Atmos. Environ.*, in press.
- Fiedler, V., H. Aufmhoff, R. Nau, A. Kuhlmann, F. Arnold, H. Schlager, Flugzeugmessungen von atmosphärischem SO<sub>2</sub> während SCOUT, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Heidelberg, 13.-16. März 2006.
- Speidel, M., F. Arnold, R. Nau, T. Schuck, A. Stohl, L. Pirjola, A. Minikin, H. Schlager, Transport von anthropogenem SO<sub>2</sub> aus bodennahen Quellen in die untere Stratosphäre, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Heidelberg, 13.-16. März 2006.
- Fiedler, V., H. Aufmhoff, R. Nau, A. Kuhlmann, F. Arnold, H. Schlager, Sulfur dioxide measurements in the tropical troposphere: Deployment of an aircraft-based CIMS instrument with permanent in-flight calibration during the SCOUT-O3 tropical campaign, EGU, General Assembly, Vienna, Austria, 02-03 April 2006.
- Schuck, T., F. Arnold, R. Nau, V. Fiedler, H. Schlager, A. Stohl, Sulfur dioxide pollution of the upper troposphere over Brazil, EGU, General Assembly, Vienna, Austria, 02-03 April 2006.
- Fiedler, V., H. Schlager, A. Minikin, F. Arnold, M. Lichtenstern, H. Aufmhoff, P. Stock, R. Nau, Tropospheric trace gas and CN distributions from Falcon measurements, ACTIVE / SCOUT-O3 Workshop, British Antarctic Survey (BAS), Cambridge, 6-8 November 2006.

**HAP 2 / AP 2.3**            Aerosole und Zirren / Globale Fernerkundung  
**PI**                            Mannstein, IPA  
Meilenstein(e)            Wolkenstatistik für Europa/Nordatlantik fertig

### **Durchgeführte Arbeitsschritte**

Berechnung der Strahlungsflussdichten aus MSG Daten für das Jahr 2004 (Februar-Dezember), Korrelation mit Flugverkehrsdichte. Vergleich der gefundenen Korrelation mit Klimamodelldaten.

Validierung der aus MSG Daten abgeleiteten Strahlungsflüsse mit GERB und CERES.

Bestimmung des Kondensstreifenbedeckungsgrades aus ATSR und AVHRR Daten für die Jahre 1985, 1990, 1995, 2000 und 2004.

Verbesserung der Wolkenverfolgung und des verwendeten ‚tracking‘ Algorithmus. Die vorgesehene Rückwärtsverfolgung von Zirren wurde aus Zeitmangel noch nicht durchgeführt.

### **Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse**

Für einzelne METEOSAT-8 Szenen wurden die wolkenphysikalischen Parameter optische Dicke und Partikelgröße mit den in AP 3.2 erreichten Methoden bestimmt. Die derzeit verfügbare Rechenkapazität reicht jedoch immer noch nicht aus, um mit dieser Methode alle verfügbaren METEOSAT-8 Daten in vertretbarer Zeit zu bearbeiten.

Beim Vergleich der gefundenen Korrelation von Zirrusbedeckungsgrad und Flugverkehrsdichte mit ECHAM4 Modelldaten der Zirrusbewölkung stellte sich heraus, daß der gefundene Zusammenhang zu einem großen, allerdings nicht genau quantifizierbaren Anteil durch die räumliche Korrelation des Flugverkehrs mit der natürlichen Zirrusbedeckung resultiert. Zur Veröffentlichung Mannstein und Schumann (2005) wurde ein Korrigendum eingereicht.

Die aus Daten verschiedener Satelliten abgeleiteten Kondensstreifenbedeckungsgrade wurden unter Berücksichtigung der Erkennungseigenschaften der Sensoren zusammengeführt. Dabei zeigte sich, daß in Gebieten mit hohem Flugverkehr die Erkennungsrate gegenüber einer früheren Version des Algorithmus nachlässt. Weiteres ‚tuning‘ des Kondensstreifenalgorithmus ist hier möglich und notwendig, um bessere Ergebnisse zu erzielen.

### **Input/Output**

I: Zirrus retrieval (aus AP3.2)

O: Datensätze zu Zirrus-Bedeckung und Strahlungsflussdichten aus METEOSAT-8 Daten für das Jahr 2004, Kondensstreifenbedeckung aus ATSR und AVHRR Daten für die Jahre 1985, 1990, 1995, 2000 und 2004

### **Publikationen**

Mannstein, H., U. Schumann (2005)

Aircraft induced contrail cirrus over Europe.

*Meteorol. Z.*, 14, 549-554; Corrigendum to be published (2007)

Mannstein, H., P. Spichtinger and K. Gierens (2005)

A Note on How to Avoid Contrail Cirrus.

*Transport. Res.*, 10, 421-426

Minnis, P., R. Palikonda; B.J. Walter, J.K. Ayers and H. Mannstein (2005)

Contrail properties over the eastern North Pacific from AVHRR data.

*Meteorol. Z.*, 14, 515-523

Palikonda, R., P. Minnis, D.P. Duda and H. Mannstein (2005)

Contrail coverage derived from 2001 AVHRR data over the continental United States of America and surrounding areas.

*Meteorol. Z.*, 14, 525-536

**HAP 2 / AP 2.4**  
**PI**  
**Meilenstein(e)**

Aerosole und Zirren / Gefrierexperimente  
Möhler, IMK-AAF  
Neue Parametrisierung für die Depositionsnukleation auf Mineralpartikeln

### Durchgeführte Arbeitsschritte

- Auswertung und Publikation der AIDA-Experimente zur Depositionsnukleation auf Mineralpartikeln.
- Teilweise Auswertung der Experimente zum Einfluß von organischen und anorganischen Oberflächenschichten auf die Eisnukleation von Mineralpartikeln.
- Erweiterung eines vorhandenen Prozeßmodells um Formalismen und Parametrisierungen für homogene und heterogene Eisnukleation.
- Erster Vergleich der Modellergebnisse mit AIDA-Messungen.
- Neue AIDA-Experimente zum Einfluss des Gehalts an organischem Kohlenstoff auf die Eisnukleation von Flammenrußpartikeln.

### Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Die AIDA-Experimente zur Depositionsnukleation auf Mineralpartikeln wurden ausgewertet und publiziert (Field et al., 2006; Möhler et al., 2006). Insbesondere bei tiefen Temperaturen ist ein Großteil der Mineralpartikel mit Durchmessern zwischen 0.1 und 1 µm bereits bei geringen Eisübersättigungen von 10 bis 20% als Eiskeim aktiv. Bei Annäherung an die für homogenes Gefrieren von Lösungströpfchen typischen Eissättigungsverhältnisse zeigt sich häufig eine zweite Eisnukleationsmode, insbesondere bei wiederholten Aktivierungen von Mineralpartikeln aus Wüsten.

Die im Jahr 2005 durchgeführten Experimente zum Einfluss von organischen und anorganischen Oberflächenschichten auf die Eisnukleation von Mineralpartikeln wurden teilweise ausgewertet. Dabei hat sich gezeigt, dass dieselben Mineralpartikel, die als äußerst effiziente Depositionseiskeime wirken, nur eine vergleichsweise schwache Wirkung als Immersionsgefrierkeime zeigen. Dies gilt sowohl bei Beschichtung mit Schwefelsäure also auch mit sekundär-organischer Aerosolmasse aus der Ozonolyse von  $\alpha$ -Pinen.

In Zusammenarbeit mit AP 3.1 wurde ein vorhandenes Prozeßmodell um Formalismen und Parametrisierungen für homogene und heterogene Eisnukleation erweitert. Zur Zeit werden die Modellergebnisse zur homogenen und heterogenen Eisnukleation mit entsprechenden AIDA-Ergebnissen verglichen, um die gegebenen Parametrisierungen zu überprüfen.

Neuere AIDA-Ergebnisse zeigen, dass Schwefelsäurepartikel, die bei Bedingungen der oberen Troposphäre mit Ammoniak neutralisiert werden, teilweise kristallisieren können und danach als heterogene Eiskeime aktiv sind. Dieser Prozeß könnte einen merklichen Einfluß auf die Zirrenbildung und damit auf das Klima haben (Abbatt et al., 2006).

### Input/Output

- O: Parametrisierung des Anteils von Mineralpartikeln als aktive Depositionsgefrierkeime.
- O: Datensätze für den gezielten Vergleich mit Prozeßmodellen.

### Publikationen

- Möhler, O., P.R. Field, P. Connolly, S. Benz, H. Saathoff, M. Schnaiter, R. Wagner, R. Cotton, M. Krämer, A. Mangold, and A.J. Heymsfield  
Efficiency of the deposition mode ice nucleation on mineral dust particles.  
*Atmos. Chem. Phys.*, 6, 3007-3021, 2006.
- Field, P.R., O. Möhler, P. Connolly, M. Krämer, R. Cotton, A.J. Heymsfield, H. Saathoff, and M. Schnaiter  
Some ice nucleation characteristics of Asian and Saharan desert dust.  
*Atmos. Chem. Phys.*, 6, 2991-3006, 2006.
- Abbatt, J.P.D., S. Benz, D.J. Cziczo, Z. Kanji, U. Lohmann, and O. Möhler  
Solid ammonium sulfate aerosols as ice nuclei: A pathway for cirrus cloud formation.  
*Science*, 313 (5794), 1770-1773, 2006.

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

### **Durchgeführte Arbeitsschritte**

Modellbildung zum Einfang von Spurengasen in wachsende Eispartikel; Auswertung von Feldmessungen zur HNO<sub>3</sub>-Aufnahme in Zirren und Rußgehalt im troposphärischen Aerosol; Vorbereitung von Parameterisierungen zum Einsatz in ECHAM; Betreuung einer Dissertation zur LES-Modellierung von Zirren; Publikationen.

### **Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse**

Die Arbeiten zur Parameterisierung der homogenen und heterogenen Eisbildung in Zirren (Kärcher et al., 2006), zum ersten Falcon-Einsatz des Aerosolspektrometers der Universität Mainz zur Messung der chemischen Zusammensetzung des freien troposphärischen Aerosols (Schneider et al., 2006) und zu Messungen der Aufnahme von Salpetersäure (HNO<sub>3</sub>) in kalte Zirruswolken (Popp et al., 2006) wurden plangemäß publiziert. Die langjährige Kooperation mit der Gruppe Fahey (NOAA/ESRL, Boulder) wurden über die bisherigen Arbeiten zur HNO<sub>3</sub>-Eis-Wechselwirkung hinaus um Analysen neuester Messungen von schwarzem Kohlenstoff in Einzelaerosolpartikeln erweitert (Schwarz et al., 2006). Dies führte unter anderem zu einem Vergleich mit Ergebnissen des ECHAM Aerosolmoduls (siehe AP 3.4).

Ein neuartiges Modell zur Behandlung der Spurengasaufnahme in Zirren (Trapping) wurde entwickelt (Kärcher and Voigt, 2006). Mit AP 2.1 wurde eine Zusammenschau und Interpretation von Feldmessungen zur HNO<sub>3</sub>-Aufnahme in Zirruswolken auf der Basis des Trapping-Modells publiziert (Voigt et al., 2006). Weiter wurde die Realisierung eines prognostischen Modells für contrail cirrus im Klimamodell ECHAM begleitet (siehe AP 3.4).

Im Rahmen der Dissertation von Herrn Sölch wurde von ihm ein Aerosol-/Eismikrophysikmodul mit Lagrange'scher Partikelverfolgung zur Verwendung im Modell EULAG aufgebaut. Dadurch werden neuartige Grundlagenstudien und die Bewertung strittiger Thesen möglich (z.B. sekundäre Eisnukleation, kubisches Eis, Rolle des Depositionskoeffizienten, Rolle von Aggregation und Eiskernen).

### **Input/Output**

Parameterisierungsschema für Eisbildung in Zirren an AP 3.4.

### **Publikationen**

Kärcher, B., J. Hendricks, and U. Lohmann

Physically-based parameterization of cirrus cloud formation for use in global atmospheric models.  
*J. Geophys. Res.* *111*, D01205, doi:10.1029/2005JD006219, 2006.

Kärcher, B. and C. Voigt

Formation of nitric acid / water ice particles in cirrus clouds.  
*Geophys. Res. Lett.* *33*, L08806, doi:10.1029/2006GL025927, 2006.

Popp, P.J., T.P. Marcy, E.J. Jensen, B. Kärcher, D.W. Fahey, R.S. Gao, T.L. Thompson, K.H. Rosenlof, E.C. Richard, R.L. Herman, E.M. Weinstock, J.B. Smith, R.D. May, H. Vömel, J.C. Wilson, A.J. Heymsfield, M.J. Mahoney, and A.M. Thompson

The observation of nitric acid-containing particles in the tropical lower stratosphere.  
*Atmos. Chem. Phys.* *6*, 601-611, 2006.

Schneider, J., S.S. Hings, B.N. Hock, S. Weimer, S. Borrmann, M. Fiebig, A. Petzold, R. Busen, and B. Kärcher  
Aircraft-based operation of an aerosol mass spectrometer: Measurements of tropospheric aerosol composition.

*J. Aerosol Sci.* *37*, 839-857, 2006.

Schwarz, J.P., R.S. Gao, D.W. Fahey, D.S. Thomson, L.A. Watts, J.C. Wilson, J.M. Reeves, M. Darbeheshti, D.G. Baumgardner, G.L. Kok, S.H. Chung, M. Schulz, J. Hendricks, A. Lauer, B. Kärcher, J.G. Slowik, K.H. Rosenlof, T.L. Thompson, A.O. Langford, M. Loewenstein, and K.C. Aikin

Single particle measurements of mid latitude black carbon and light-scattering aerosols from the boundary layer to the lower stratosphere.

*J. Geophys. Res.* *111*, D16207, doi:10.1029/2006JD007076, 2006.

Voigt, C., H. Schlager, H. Ziereis, B. Kärcher, B.P. Luo, C. Schiller, M. Krämer, P. Popp, H. Irie, and Y. Kondo  
Nitric acid in cirrus clouds.

*Geophys. Res. Lett.* *33*, L05803, doi:10.1029/2005GL025159, 2006.

**HAP 3 / AP 3.2**            Klima / Strahlungsprozesse  
**PI**                            Mayer, PA  
**Meilenstein(e)**            Strahlungsparametrisierung für ECHAM

### **Durchgeführte Arbeitsschritte**

- Evaluation der bestehenden Parametrisierung in ECHAM durch Vergleich mit Simulationen eines detaillierten Strahlungstransfermodells (libRadtran).
- Sensitivitätsstudien zur Abschätzung des Einflusses der Wolkenmikrophysik (insbesondere Größenverteilungen) auf die Strahlungsbilanz.
- Vorarbeiten für die Implementierung einer Strahlungsparametrisierung, bei der die optischen Eigenschaften direkt an die Parametrisierung der Mikrophysik angekoppelt werden.

### **Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse**

Um ECHAM mit dem Strahlungstransportmodell libRadtran vergleichen zu können, waren einige Vorarbeiten erforderlich. Um die Wolken in beiden Modellen überhaupt vergleichen zu können, musste zunächst das "Overlap"-Schema der Wolken in ECHAM ("random overlap") in libRadtran implementiert werden, was für ein 1D-Strahlungstransportmodell eine besondere Herausforderung darstellt, da diese im Allgemeinen mit horizontal homogenen Säulen rechnen. Aus diesem Grund wurde eine Routine in ECHAM implementiert, die eine "effektive optische Dicke" berechnet, welche sowohl die optischen Eigenschaften als auch den Bedeckungsgrad (random overlap) beinhaltet. Diese effektive optische Dicke kann im Strahlungstransportmodell verwendet werden und ermöglicht den globalen Vergleich zwischen ECHAM und dem detaillierten Modell libRadtran. Mit den gleichen Annahmen über die Wolkenmikrophysik stimmen ECHAM und libRadtran Strahlungsflüsse gut überein, nur bei tiefen Sonnenständen gibt es größere Abweichungen (bis zu einem Faktor 2).

Auf der anderen Seite wurde libRadtran so erweitert, dass es die ECHAM-Wolken (Bedeckungsgrad und mikrophysikalische Eigenschaften jeder Schicht) direkt als Input verwenden kann und den random-overlap entsprechend umsetzt. Dadurch wurde eine Verkürzung der Rechenzeit um 2 bis 3 Größenordnungen gegenüber den Rechnungen für Marquart und Mayer (2001) bei gleichzeitiger Erhöhung der Genauigkeit erreicht. Auf diese Weise können verschiedene Wolkenmikrophysikparametrisierungen außerhalb von ECHAM im Rahmen von Sensitivitätsstudien getestet werden, mit dem Ziel, die bestmögliche Parametrisierung zu bestimmen, die längerfristig in ECHAM5 eingebaut werden soll (solch arbeitsintensive Erweiterungen in ECHAM4 erschienen den Entwicklern nicht mehr sinnvoll). Zunächst wurde eine Sensitivitätsstudie für natürliche Zirren durchgeführt, wobei Strahlungsflüsse für einen ECHAM-Datensatz (bestehend aus atmosphärischen Profilen und Strahlungsflüssen für ein Jahr und eine Modellsäule) mit der ECHAM4 Parametrisierung und mit einer neueren, genaueren Parametrisierung (Key et. al., 2002 und Mayer) berechnet wurden. Der Vergleich ergab im Kurzwelligen einen relativen Unterschied von etwa 40% im Jahresmittel für das „radiative forcing“ der Zirren. Die Ergebnisse der Sensitivitätsstudien können auch als Fehlerabschätzung für ECHAM4 dienen.

Zur Parametrisierung von beliebigen Größenverteilungen wurde ein Modul entwickelt, welches aus der Datenbank von Yang et. al. (2000) (Einfachstreuungseigenschaften von Eisparkeln) optische Eigenschaften generiert, die für eine Wolkenparametrisierung in ECHAM genutzt werden können. Dieses Modul kann dazu verwendet werden, die Parametrisierung der Mikrophysik mit der Parametrisierung der optischen Eigenschaften zu koppeln.

### **Input/Output**

—

### **Publikationen**

—

**HAP 3 / AP 3.3**  
**PI**  
**Meilenstein(e)**

**Klima / Bedeckungsgrad**  
Gierens, PA  
Schema für Eisübersättigung in IFS des ECMWF operationell

### **Durchgeführte Arbeitsschritte**

Die neue Wolkenparameterisierung des ECMWF-IFS wurde am 13.09.2006 operationell.

Numerische Simulationen von Kondensstreifen in der Wirbelphase wurden von Simon Unterstraber im Rahmen seiner Dissertation durchgeführt, um herauszufinden, wie die Anzahl und die Masse der Eiskristalle, die am Ende der Wirbelphase noch vorhanden sind, von Umgebungsbedingungen und anderen Parametern abhängen.

Zur Unterstützung von Anstrengungen am ECMWF und bei ECHAM, ein statistisches Wolkenschema zu entwickeln, wurden neun Jahre von MOZAIC-Daten ausgewertet, um instantane Fluktuationen von Temperatur, relativer Feuchte, und Wasserdampfpartialdruck zu bestimmen auf Skalen, die in Klimamodellen üblich sind (etwa T42 mit ~250 km Maschenweite am Äquator). Eine Publikation der Ergebnisse wurde eingereicht.

Es wurde begonnen, in Zusammenarbeit mit AP 2.3, AP 3.1 und AP 3.2 aerodynamisch ausgelöste Kondensstreifen zu untersuchen. Dazu wurde eine einfache Methode entwickelt, mit der man die Umströmung eines idealisierten Flugzeugflügelprofils berechnen kann.

### **Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse**

Die Entwicklung von Kondensstreifen während der Wirbelphase wurde mit Hilfe numerischer Simulationen untersucht. Besonderes Augenmerk wurde auf mikrophysikalische Eigenschaften und die vertikale Verteilung des Eises (Masse and Anzahlkonzentration) am Ende der Wirbelphase gelegt. Mit einem 2D Modell, das mit einem Spezialwerkzeug zum Steuern des Wirbelzerfalls ausgerüstet ist, wurden eine Anzahl von Sensitivitätsstudien für einen festgelegten Flugzeugtyp durchgeführt. Es stellt sich heraus, dass atmosphärische Parameter (Übersättigung, Temperatur, Stabilität und Turbulenzniveau) den größten Einfluss auf Anzahldichte und Massenkonzentration der Eiskristalle haben, die bis zum Wirbelzerfall überleben und die folglich den persistenten Kondensstreifen in übersättigter Luft bilden. Die anfängliche Anzahl der Eiskristalle und deren Verteilung in den Wirbeln sind hingegen von untergeordneter Bedeutung.

Instantane Fluktuationen von Temperatur und relativer Feuchte auf verschiedenen räumlichen Skalen wurden mit Hilfe von MOZAIC Daten (1995-2003) untersucht. Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen wurden bestimmt, deren Momente bis zur vierten Ordnung (d.h. Varianz, Schiefe, und Wölbungsmaß), sowie die Abhängigkeit dieser Größen von der räumlichen Auflösung und der mittleren relativen Feuchte. Saisonale und geographische Unterschiede wurden betrachtet. Bivariate Verteilungen gemeinsamer Fluktuationen von Temperatur und relativer Feuchte wurden abgeleitet. Diese Untersuchung soll die Datengrundlage für Validationszwecke von statistischen Wolkenschemata für großskalige Modelle liefern. Es stellt sich beispielsweise heraus, dass in einem solchen Schema Temperaturfluktuationen nicht vernachlässigt werden können, und dass man die bivariaten Verteilungen gleichzeitiger Fluktuationen von Temperatur und Feuchte verwenden muss.

Fotografien von aerodynamisch induzierten Kondensstreifen zeigen, dass es Bedingungen in der Atmosphäre gibt, bei denen Kondensation direkt über den Tragflächen eines Flugzeugs beginnt. Bei Eisübersättigung verdampfen die einmal gebildeten Partikel nicht wieder und eine besondere Art von Kondensstreifen entsteht, die teilweise eindrucksvolle optische Eigenschaften zeigt (AP 2.3). Eine einfache Abschätzung zeigt, dass solche Art von Kondensation eigentlich recht häufig auftreten muss, denn der Druckabfall oberhalb der Tragflächen bewirkt auch einen Temperaturrückgang von mehr als 10 K, was selbst bei ziemlicher trockener Umgebungsluft noch ausreicht, über dem Flügel Eisübersättigung zu erzeugen. Die Frage ist dann, warum dieses Phänomen so selten auftritt. Wir haben daher die kompressible Umströmung eines idealisierten Tragflächenprofils berechnet, auf den Trajektorien die Nukleation von Eispartikeln auf dem Umgebungsaerosol (AP 3.1), das Wachstum der Eiskristalle, und deren optische Eigenschaften (AP 3.2) berechnet. Es zeigt sich, dass direkt über dem Flügel, im vorderen Teil Übersättigungen von mehreren hundert Prozent erreicht werden. Die Verhältnisse ändern sich aber auf so kurzen Zeitskalen, dass nur sehr kleine (etwa 10 nm) Aerosolteilchen mit der Dampfphase im Gleichgewicht bleiben und gefrieren; die großen Teilchen gefrieren nicht. Dies wird sonst in der Atmosphäre nicht beobachtet. Wegen der hohen Übersättigung wachsen die frischen Eisteilchen rasch an und können so die beobachteten optischen Erscheinungen auslösen.

### **Input/Output**

—

## Publikationen

- Gierens, K., R. Kohlhepp, N. Dotzek, and H.G.J. Smit (2006)  
Instantaneous fluctuations of temperature and moisture in the upper troposphere and tropopause region.  
Part 1: Probability densities and their variability.  
To appear in *Meteorol. Z.*
- Gierens, K., Kärcher, B., H. Mannstein, and B. Mayer (2006)  
Aerodynamically induced formation of contrails.  
Proceedings of the Transport, Atmosphere, and Climate (TAC) Conference, Oxford, 26-29 June 2006.
- Tompkins, A., K. Gierens, and G. Rädcl (2006)  
Ice supersaturation in the ECMWF Integrated Forecast System.  
*Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, in press.
- Unterstrasser, S., K. Gierens, and P. Spichtinger (2006)  
The evolution of contrail microphysics and structure in the vortex phase.  
Submitted to *Meteorol. Z.*

**HAP 3 / AP 3.4** Globale Modellierung  
**PI** Hendricks, PA  
**Meilenstein(e)** MADE an Wolken- und Strahlungsmodul angekoppelt

### Durchgeführte Arbeitsschritte

Kopplung des Aerosolmoduls MADE and das Wolken- und Strahlungsmodul von ECHAM; Weiterentwicklung von ECHAM zur Implementierung einer neuen Parametrisierung der Eiskondensation; Entwicklung einer neuen Parametrisierung von Kondensstreifen-Zirren und Implementierung in ECHAM.

### Erreichte (Zwischen-)Ergebnisse

Die mit dem globalen Aerosol-Klimamodell ECHAM/MADE in 2005 berechneten Aerosolklimatologien sowie Vergleiche der Modellergebnisse mit den Resultaten anderer Modelle wurden publiziert (Lauer und Hendricks, 2006; Kinne et al., 2006; Textor et al., 2006). Ein Vergleich der simulierten Vertikalverteilung von Ruß mit Flugzeugmessungen wurde durchgeführt und veröffentlicht (Schwarz et al., 2006). Gleichzeitig wurde das Aerosolmodul MADE an das Wolken- und das Strahlungsmodul von ECHAM gekoppelt. Mit Hilfe von Beobachtungsdaten wurde gezeigt, daß das gekoppelte Modell in der Lage ist, die wesentlichen Merkmale des globalen Aerosols, einschließlich seiner mikrophysikalischen und optischen Eigenschaften wiederzugeben. Zusätzlich wurden Vergleiche der simulierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen mit Messungen aus AP 2.2 vorbereitet.

Die Aufnahme der in AP 3.1 entwickelten Parametrisierung der Konkurrenz homogener und heterogener Eiskondensation in ECHAM (Kärcher et al., 2006) wurde weiter vorbereitet. Dazu wurde die ECHAM-Version, welche die multimodale mikrophysikalische Beschreibung unterschiedlicher Eismoden erlaubt (bisheriges Modell unimodal), um eine zusätzliche Mode erweitert, was eine detailliertere Beschreibung und Analyse der homogenen und heterogenen Eiskondensation erlaubt. Die technischen Schritte zur Kopplung der von AP3.1 nun übernommenen Parametrisierung mit ECHAM wurden durchgeführt.

Die Parametrisierung von Kondensstreifen-Zirren wurde weiterentwickelt und in ECHAM implementiert. Damit kann die Persistenz, Ausbreitung, Advektion und der Eiswassergehalt der Kondensstreifen global simuliert werden. Die Parametrisierung liefert geometrische Aspekte der Kondensstreifen, wie Länge und Breite, welche von detaillierten Strahlungstransfermodellen für eine genauere Abschätzung der Strahlungswirkung der Kondensstreifen verwendet werden können. Erste Simulationen ergeben, dass der Bedeckungsgrad aufgrund von Kondensstreifen-Zirren um ein vielfaches größer sein kann als der Bedeckungsgrad aufgrund von linearen Kondensstreifen. Dieser Bedeckungsgradanstieg ist regional variabel und ist stärker über Europa als über den USA. Die Parametrisierung wird derzeit noch weiterentwickelt und im Detail evaluiert und eine erste Veröffentlichung vorbereitet.

### Input/Output

I: SO<sub>2</sub>-Daten aus AP 2.2

O: Vollständig gekoppeltes globales Aerosolmodell ECHAM/MADE

### Publikationen

Kärcher, B., J. Hendricks, and U. Lohmann

Physically-based parameterization of cirrus cloud formation for use in global atmospheric models.  
*J. Geophys. Res.* 111, D01205, doi:10.1029/2005JD006219, 2006.

Kinne, S., et al. (einschl. Hendricks, Lauer)

An AeroCom initial assessment - optical properties in aerosol component modules of global models.  
*Atmos. Chem. Phys.* 6, 1815-1834, 2006.

Lauer, A., and J. Hendricks

Simulating aerosol microphysics with the ECHAM4/MADE GCM – Part II: Results from a first multiannual simulation of the submicrometer aerosol.  
*Atmos. Chem. Phys.* 6, 5495-5513, 2006.

Schwarz, J.P., et al. (einschl. Hendricks, Lauer, Kärcher)

Single particle measurements of mid latitude black carbon and light-scattering aerosols from the boundary layer to the lower stratosphere.  
*J. Geophys. Res.* 111, D16207, doi:10.1029/2006JD007076, 2006.

Textor, C., et al. (einschl. Hendricks, Lauer)

Analysis and quantification of the diversities of aerosol life cycles within AeroCom.  
*Atmos. Chem. Phys. Discuss.* 6, 1777-1813, 2006.