



**BOKU-Met**

# **Testbetrieb des Modellsystems zur Prognose von Sommersmog auf Basis operationeller regionaler Wettervorhersage**

im Auftrag von

Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt und Wasserwirtschaft, Abt. I/4 U

Amt der Burgenländischen Landesregierung, Abt. 5/III/2

Magistrat der Stadt Wien, MA 22

Amt der Niederösterreichischen Landesregierung, Abt. Umweltrecht

**Dr. Kathrin Baumann-Stanzer <sup>1</sup>**

**Mag. Marcus Hirtl <sup>1</sup>**

**Dr. Bernd C. Krüger <sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Zentralanstalt für Meteorologie und Geodynamik

<sup>2</sup> Institut für Meteorologie der Universität für Bodenkultur Wien

Wien, November 2005

## Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung.....	2
2. Vorbereitung des kontinuierlichen Testbetriebs im Sommer 2005 .....	2
2.1 Implementierung an der ZAMG .....	2
2.2 Anfangs- und Randwerte.....	2
2.3 Ergebnisaufbereitung .....	3
3. Evaluierung der Modellergebnisse 2005 .....	3
3.1 Ozonepisoden im Sommer 2005.....	3
3.2 Parallelprognose der MA22.....	4
3.3 Vergleich mit Messungen an einzelnen Messstationen.....	6
3.4 Statistische Berechnungen an den Messstationen.....	17
3.5 Vergleich mit Luftgütemessungen (Ozonmaxima).....	18
3.6 Die Alarmschwellenüberschreitung am 15. Juli 2005.....	22
4. Ausblick: Erweiterungen des Modellsystems.....	24
4.1 Einbau neuer Emissionskataster.....	24
4.2 Neuer Ozon – Chemiemechanismus.....	25
4.3 Einbindung der ECMWF Felder für Gesamtozon .....	25
4.4 Schadstoffkonzentrationen am Rand des Modellgebietes.....	26
4.5 Ergebnisaufbereitung .....	27
4.6 Ausfallsicherheit .....	28
5. Referenzen.....	28

## 1. Einleitung

Im Rahmen dieses Projektes wurde im Sommer 2005 ein erster Testbetrieb mit täglicher Ozonprognose an der ZAMG durchgeführt. Gegenstand dieses Zwischenberichts ist ein Erfahrungsbericht dieses ersten operationellen Betriebs des Ozonvorhersagesystems ALADIN/CAMx, der Vergleich der Modellergebnisse mit den Ozonmessdaten der Luftgütestationen in Wien, Niederösterreich und Burgenland und ein Ausblick auf im Winter 2005/2006 geplante Änderungen des Modellsystems.

Für Sommer 2006 ist ein weiterer kontinuierlicher Betrieb der Ozonprognose mit anschließender Evaluierung im Herbst 2006 vorgesehen.

## 2. Vorbereitung des kontinuierlichen Testbetriebs im Sommer 2005

### 2.1 Implementierung an der ZAMG

Das Chemietransportmodell CAMx, das Emissionsmodell und das Schnittstellenprogramm zur Vorbereitung der ALADIN Prognosedaten als Eingangswerte für die Ozonmodellierung, welches im Rahmen des Pilotprojektes (Baumann-Stanzer et al., 2005) entwickelt wurde, wurden an der ZAMG so implementiert, dass der Programmstart und die Übergabe zwischen den Modulen automatisch erfolgt.

Vom 23. Juni 2005 bis 30.9.2005 wurden tägliche 48-stündige Ozonprognosen für den aktuellen Tag und den Folgetag berechnet. Die Modellläufe wurden auf einem LINUX-PC (DUAL-XEN-PC 2,4GHz Taktfrequenz, 4GB Memory, SCSI system) durchgeführt. Die Rechenzeit für 48 Stunden Ozonprognose betrug 8 h. Das graphisch und textlich aufbereitete Modellergebnis war täglich vor 10:00 Lokalzeit verfügbar. Im Testzeitraum ist nur an zwei Tagen eine Störung des Systemablaufs aufgetreten: am 17. September 2005 waren keine ALADIN Prognosen verfügbar. Am 30. September 2005 kam es zu einem vorzeitigen Programmabbruch, da eine Ozonprognose für den Folgetag (1. Oktober) in der Systemsteuerung nicht mehr vorgesehen war.

### 2.2 Anfangs- und Randwerte

Aufgrund des hohen Zeitdrucks bei der Implementierung des Modellsystems im Juni 2005 wurde für die stündlichen chemischen Werte am Rand des Modellgebiets ein sehr einfacher Ansatz gewählt: diese wurden als konstant angenommen, wobei aus Ozonsimulationen der letzten Jahre eine mittel belastete Sommersituation ausgewählt wurde. Wie die Ergebnisse zeigen, hat dieser Zugang von Juni bis August 2005 die Hintergrundbelastung am Rand des Modellgebiets plausibel wiedergegeben, während ab Ende August dieser Ansatz zu systematisch zu hohen Ozonkonzentrationen in der Modellrechnung beigetragen hat.

Als Anfangsfeld der ersten Modellberechnung im Juni 2005 wurden Ergebnisse einer früheren Modellsimulation verwendet. Ab diesem Zeitpunkt wurden jeweils die Ergebnisse des vorangegangenen Modelllaufs der neuen Berechnung als Anfangswerte zugrunde gelegt.

## 2.3 Ergebnisaufbereitung

Es wurde ein Programm entwickelt, um aus den stündlichen Ozonfeldern des Modellergebnisses ausgewählte Graphiken und eine automatische textliche Interpretation des Ergebnisses (Höhe und Eintrittszeit der maximalen Ozonwerte über der Informationsschwelle) zu erzeugen. Folgende Graphiken werden zur Zeit von dem Ausgabeprogramm erstellt:

- die räumliche Ozonverteilung in der untersten Modellschicht zu einem fixen Zeitpunkt (z.B.13 MEZ)
- die maximale Ozonverteilung (Maximalwerte jedes Gitterpunktes am Prognosetag) in der untersten Modellschicht (Beispiel in Abbildung 2.1)
- Zeitreihen der minimalen, mittleren und maximalen Ozonkonzentration in einem ausgewählten Gebiet

Graphiken und Textdateien mit der Mitteilung, ob eine Überschreitung laut der Modellberechnung erwartet wird und den vorhergesagten Maximalwerten, wurden ab 24. Juni 2005 per Hand erstellt und versandt. Ab 8. Juli 2005 erfolgte die Erzeugung der Graphiken automatisch, ab 23. Juli 2005 wurden auch die Textdateien automatisch erzeugt und per email an die Projektmitarbeiter sowie an ausgewählte Adressen der Auftraggeber versandt.

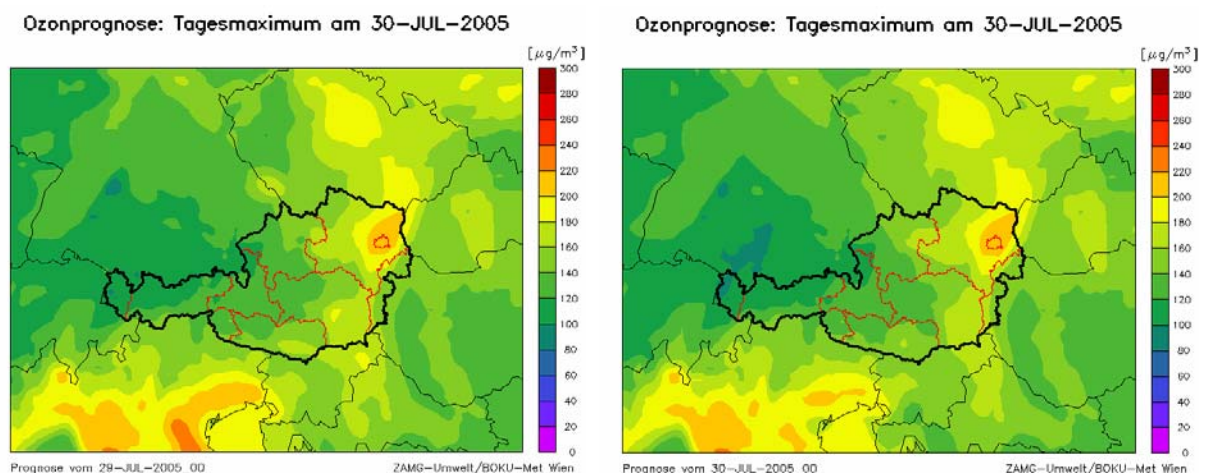


Abbildung 2.1: Maximale Ozonkonzentration im inneren Modellgebiet am 30. Juli 2005 aus der Prognoserechnung vom 29. Juli (links) und vom 30. Juli (rechts).

## 3. Evaluierung der Modellergebnisse 2005

### 3.1 Ozonepisoden im Sommer 2005

**Mai:** Die Informationsschwelle wurde in Wien bereits am 1. bis 3. Mai, am 21. und 29. Mai jeweils an zwei Stationen überschritten. In Niederösterreich waren davon am 1.5. 1 Station, am 2.5. 4, 3.5. 6, 21.5. 5, 27.5. 5, 29.5. 1 und am 30.5. 4 Stationen betroffen. Im Burgenland wurde keine Überschreitung der Informationsschwelle verzeichnet.

**Juni:** Im Juni 2005 wurden keine Überschreitungen der Alarmschwelle in Nordostösterreich festgestellt. Die Informationsschwelle wurde am 3. Juni und am 29. Juni jeweils an einer Station in Niederösterreich überschritten.

**Juli:** Die Alarmschwelle wurde an der Messstelle Schwechat in Niederösterreich am Freitag, den 15. Juli für die Dauer von zwei Stunden überschritten ( $242 \mu\text{g}/\text{m}^3$  um 11 Uhr,  $270 \mu\text{g}/\text{m}^3$  um 12 Uhr MESZ). Die Informationsschwelle wurde in Wien am 15.7. (3 Stationen), 18.7. (2 Stationen) und 28.7. (1 Station), in Niederösterreich am 15.7. (5 Stationen), am 18.7. (4 Stationen), am 27.7. (3 Stationen), 28.7. (5 Stationen), 29.7. (4 Stationen) und am 30.7. an einer Station überschritten.

**August:** Im August 2005 wurden in Nordostösterreich weder die Alarm- noch die Informationsschwelle überschritten.

**September:** Im September 2005 wurden in Nordostösterreich weder die Alarm- noch die Informationsschwelle überschritten.

Für detaillierte Evaluierungen und Testläufe mit veränderten Modellsystembestandteilen zur Vorbereitung des Testbetriebs im Jahre 2006 wird daher die Ozonepisode vom 15. bis 30 Juli 2005 (mit entsprechender Vorlaufzeit) betrachtet werden.

### **3.2 Parallelprognose der MA22**

Von Dipl.-Ing.Günther Schermann (Stadt Wien, MA22) wurden zwischen 29.6.2005 und 4.9.2005 die täglichen subjektiven Prognosen der Mitarbeiter des Luftgütemessnetzes der MA22 aufgezeichnet. Diese Prognosen betreffen nur die Aussage, ob am selben bzw. am Folgetag im Ozonwarnggebiet 1 eine Überschreitung der Informationsschwelle erwartet wird und basieren auf persönlichen Einschätzungen unter Beachtung der Wetterprognose sowie der gemessenen Luftgütewerte.

Die Tabelle 3.1 zeigt eine Gegenüberstellung der subjektiven Prognose und der Überschreitungsprognose durch das Modell. Dargestellt sind nur jene Tage zwischen 29.6.2005 und 4.9.2005, an welchen eine Überschreitung der Informationsschwelle eingetreten ist oder an welchen für den selben oder folgenden Tag eine Überschreitung vorhergesagt wurde.

Tabelle 3.1: Vorhersagen einer Überschreitung der Informationsschwelle im Ozonwarnggebiet 1 am gleichen und am folgenden Tag (JA = Überschreitung; NEIN = keine Überschreitung; durchgestrichen = Prognose ist nicht eingetreten)

Datum (2005)	MA22 Prognose heute	MA22 Prognose morgen	Modellprognose heute	Modellprognose morgen
29.6.	JA	NEIN	JA	NEIN
13.7.	NEIN	NEIN	NEIN	JA
14.7.	NEIN	JA	NEIN	JA
15.7.	JA	NEIN	<del>NEIN</del>	NEIN
17.7.	NEIN	JA	NEIN	JA
18.7.	JA	NEIN	JA	NEIN
26.7.	NEIN	<del>NEIN</del>	NEIN	JA
27.7.	<del>NEIN</del>	JA	JA	JA
28.7.	JA	JA	JA	JA
29.7.	JA	JA	<del>NEIN</del>	JA
30.7.	JA	NEIN	JA	NEIN
29.7.	NEIN	NEIN	NEIN	JA
30.8.	NEIN	<del>JA</del>	<del>JA</del>	NEIN
31.8.	NEIN	<del>JA</del>	NEIN	NEIN
1.9.	NEIN	NEIN	<del>JA</del>	<del>JA</del>
2.9.	NEIN	NEIN	<del>JA</del>	NEIN
Warnung:Überschr.	6 : 7	7:6	8:7	9:6
Anzahl Treffer	15	13	11	13

Ozonüberschreitungen wurden von den Mitarbeitern der MA22 an den folgenden Tagen im Sommer 2005 für den selben Tag richtigerweise vorhergesagt: 29.6., 15.7., 18.7., 28.7., 29.7., 30.7.; nur die Überschreitung am 27.7. wurde von den Mitarbeitern der MA22 nicht prognostiziert.

Für den Folgetag wurden von der MA22 am 14.7., 17.7., 27.7., 28.7., 29.7., 30.8. und 31.8. Überschreitungen der Informationsschwelle erwartet. Diese sind nur am 31.8. und am 1.9. nicht eingetreten, am 26.7. wurde die Überschreitung am Folgetag von der MA22 nicht vorhergesagt.

Die Modellprognose hat im Vergleich zu dieser subjektiven Einschätzung die Überschreitung am 27.7. vorhergesagt, dafür nicht die Überschreitungen am 15. und am 29.7. Am 30.8., 1. und 2.9. wurden vom Modell am Tag, am 13.7., 29.7. und 1.9. für den Folgetag Überschreitungen prognostiziert, welche nicht beobachtet wurden.

In diesem Vergleich wurden die Modellergebnisse danach ausgezählt, ob in den berechneten Ozonkonzentrationsfeldern die Informationsschwelle an einem Gitterpunkt im Ozonwarnggebiet 1 unabhängig von der Lage der Luftgütemessstationen überschritten wurde. Das Modell liefert aber nicht nur diese diskrete Angabe, sondern die Höhe, den zeitlichen Verlauf und die räumliche Verteilung der Ozonwerte.

### 3.3 Vergleich mit Messungen an einzelnen Messstationen

Die berechneten Ozonwerte wurden mit den Messungen an den Messstationen verglichen. Da sich im Ozonüberwachungsgebiet 1 insgesamt 41 Stationen befinden, an denen Ozon gemessen wurde, werden nur einzelne Stationen gezeigt. Für vier Stationen sind jeweils die halbstündigen Messwerte sowie die stündlichen Vorhersagen für den 1. und 2. Prognosetag in den Monaten Juni, Juli, August und September dargestellt. Die Rechnungen wurden am 13. Juni begonnen, der automatische Rechenbetrieb startete am 24. Juni. Die Abbildungen zeigen auch die manuell gestarteten Berechnungen zwischen dem 13. und 30. Juni (Lauf 1).

An der Station Kittsee zeigt sich sowohl in den Zeitverläufen (Abbildung 3.1 bis Abbildung 3.4) als auch im Streudiagramm (Abbildung 3.5), dass der nächtliche Rückgang der Ozonwerte vom Modell häufig nicht ausreichend wiedergegeben wird. Die niedrigen Werte werden durch die Reaktion von Ozon mit NO aus lokalen Quellen bei sehr niedriger Mischungsschichthöhe verursacht. Die vertikale Auflösung des Modellgitters hat zur Folge, dass emittierte NO<sub>x</sub>-Verbindungen zu schnell verdünnt, das heißt über das Volumen der Gitterzelle, in welcher die Freisetzung angesetzt wird, verteilt werden. Diese Abweichungen spielen jedoch für die Tagesmaxima keine Rolle, welche meist sehr gut getroffen wurden.

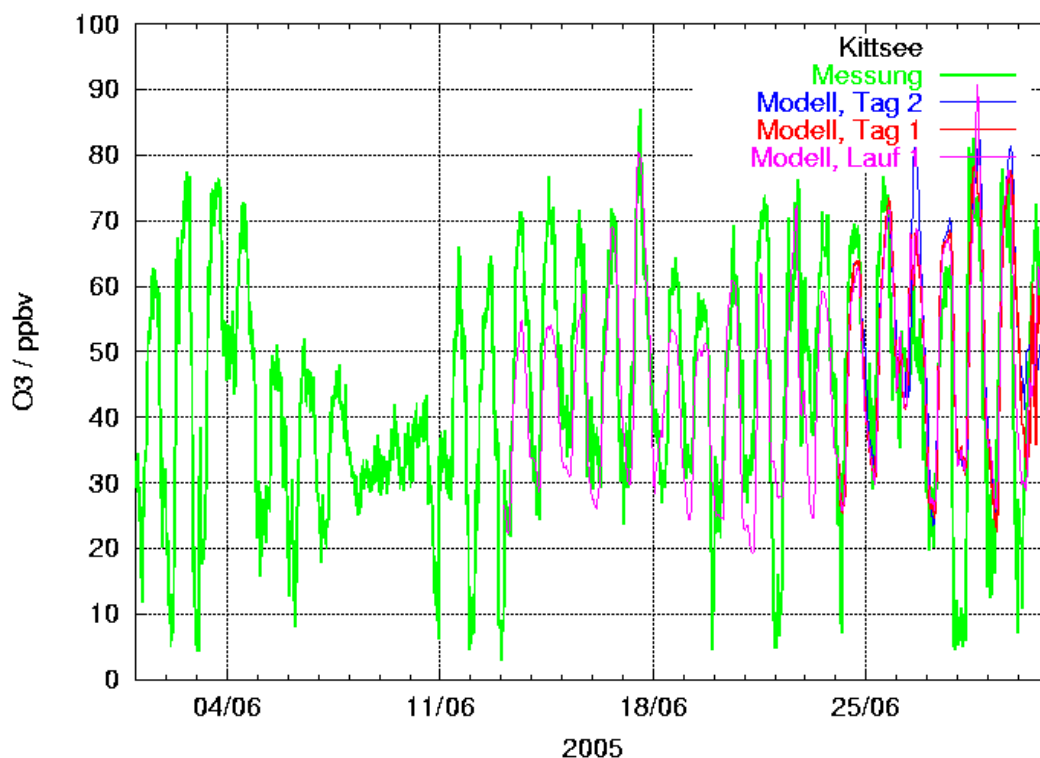


Abbildung 3.1: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Kittsee im Juni 2005.

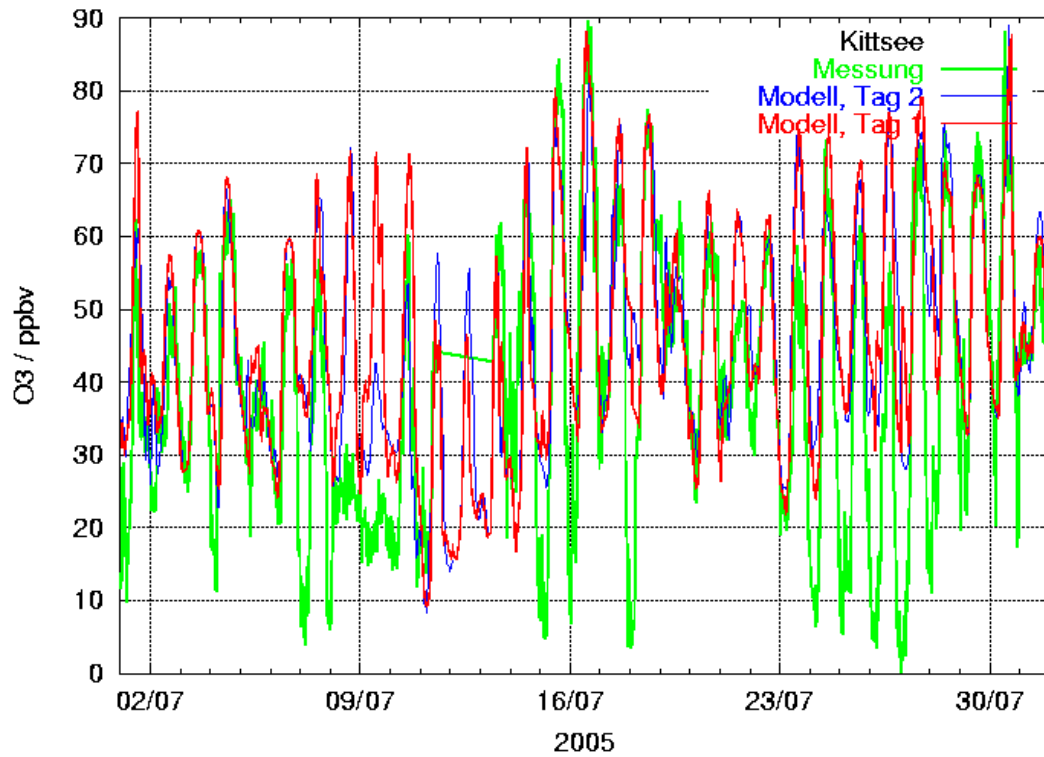


Abbildung 3.2: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Kittsee im Juli 2005.

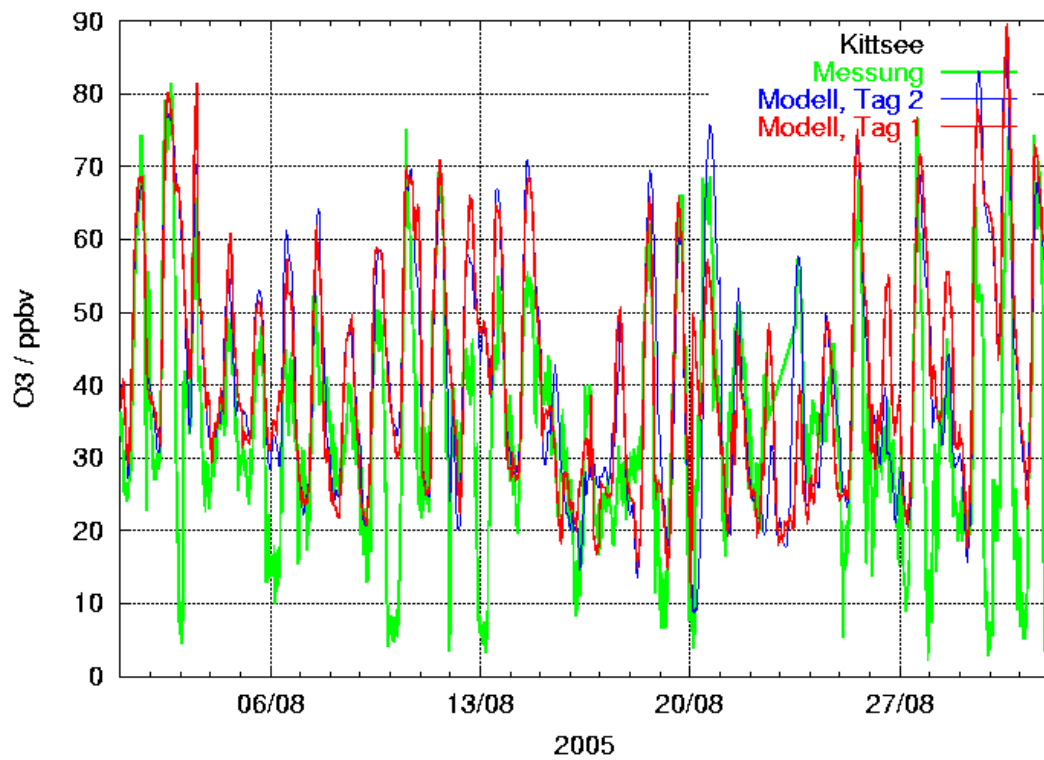


Abbildung 3.3: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Kittsee im August 2005.

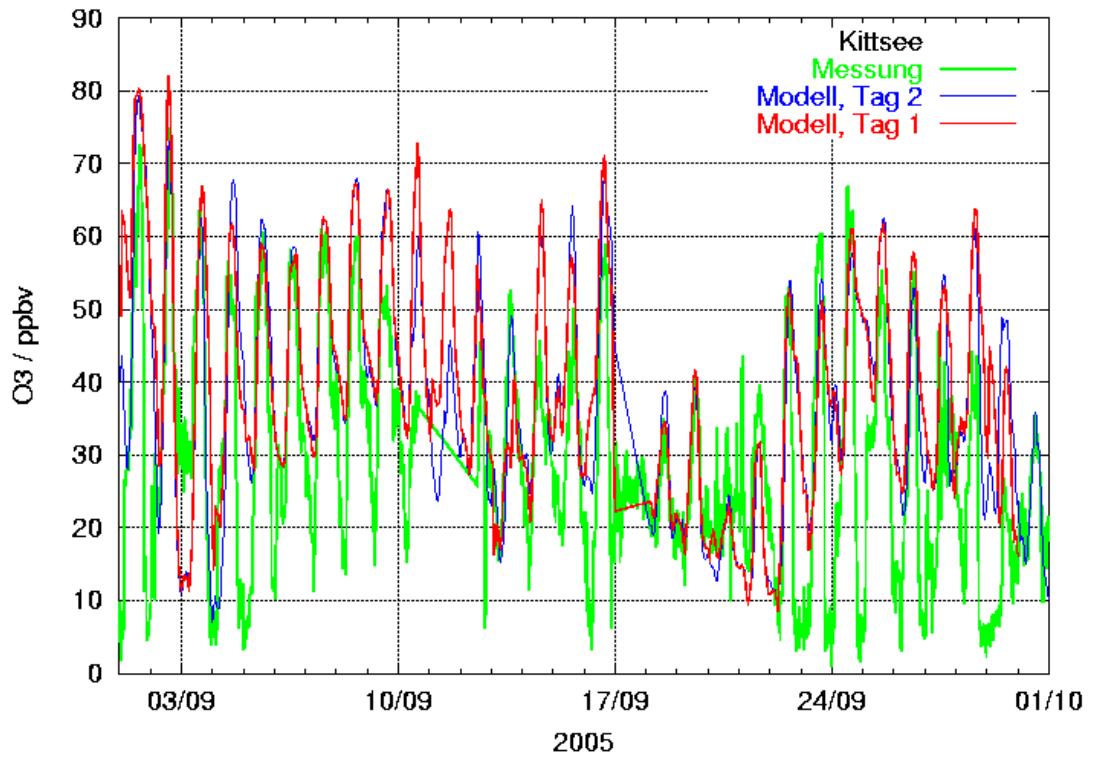


Abbildung 3.4: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Kittsee im September 2005.

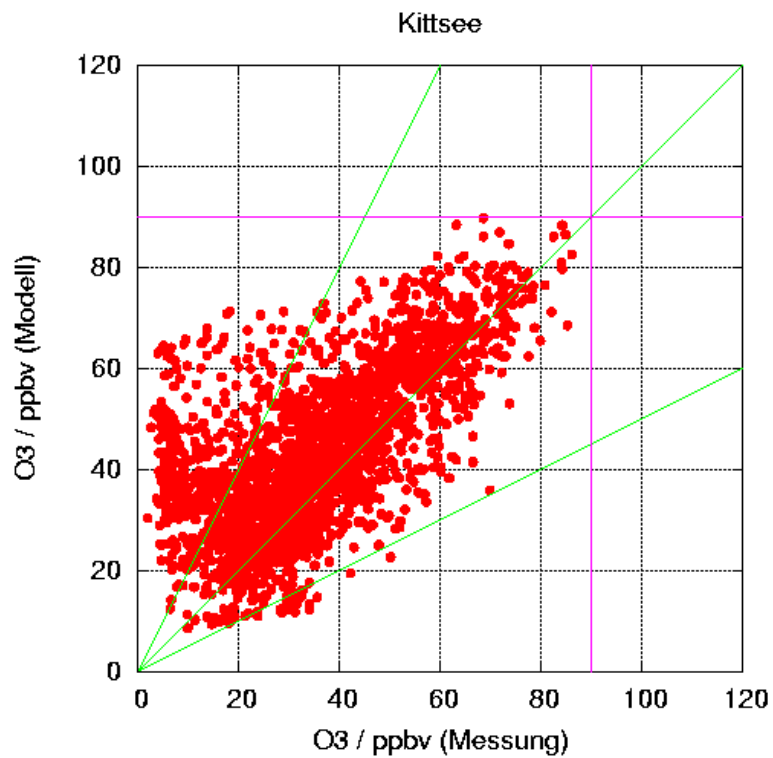


Abbildung 3.5: Streudiagramm der Modellwerte (Tag 1) gegen die Ozonmessungen an der Station Kittsee während der gesamten Vorhersagezeit (jeweils Stundenwerte).

An der Station Lobau im Südosten von Wien ergibt sich ein ähnliches Bild. Diese Station zeigte im Juli zeitweise Überschreitungen der Ozoninformationsschwelle von  $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (entsprechend etwa 90 ppbv), die vom Modell gut wiedergegeben werden. Auf die Überschreitung am 15. Juli 2005 wird in Abschnitt 3.6 näher eingegangen. Durch die Nähe zu Wien mit höheren Emissionen als im Umland ist die Abweichung der nächtlichen Werte an dieser Station nicht so hoch wie in der Nachbarschaft von kleineren Ortschaften.

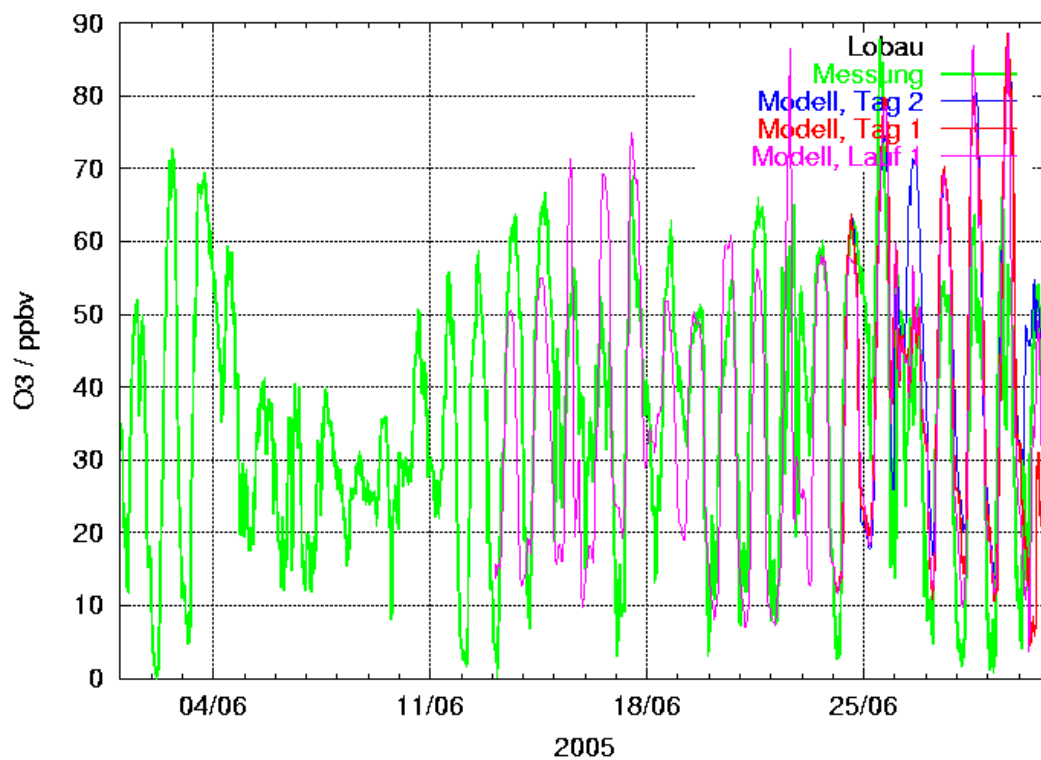


Abbildung 3.6: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Lobau im Juni 2005.

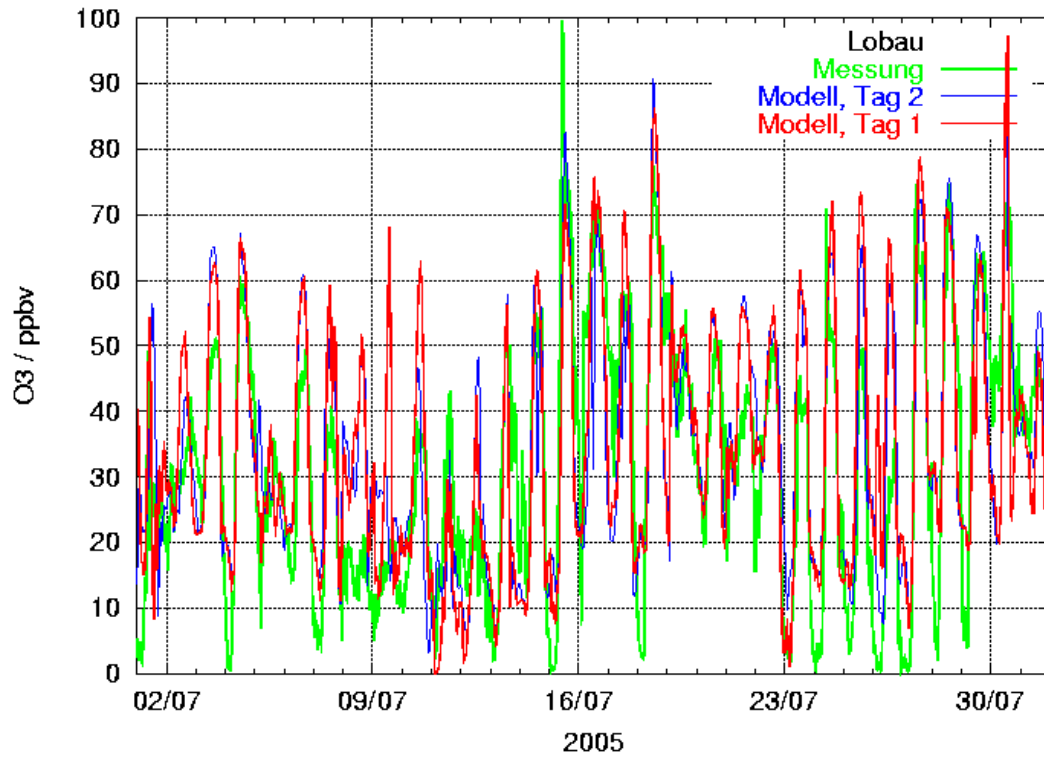


Abbildung 3.7: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Lobau im Juli 2005.

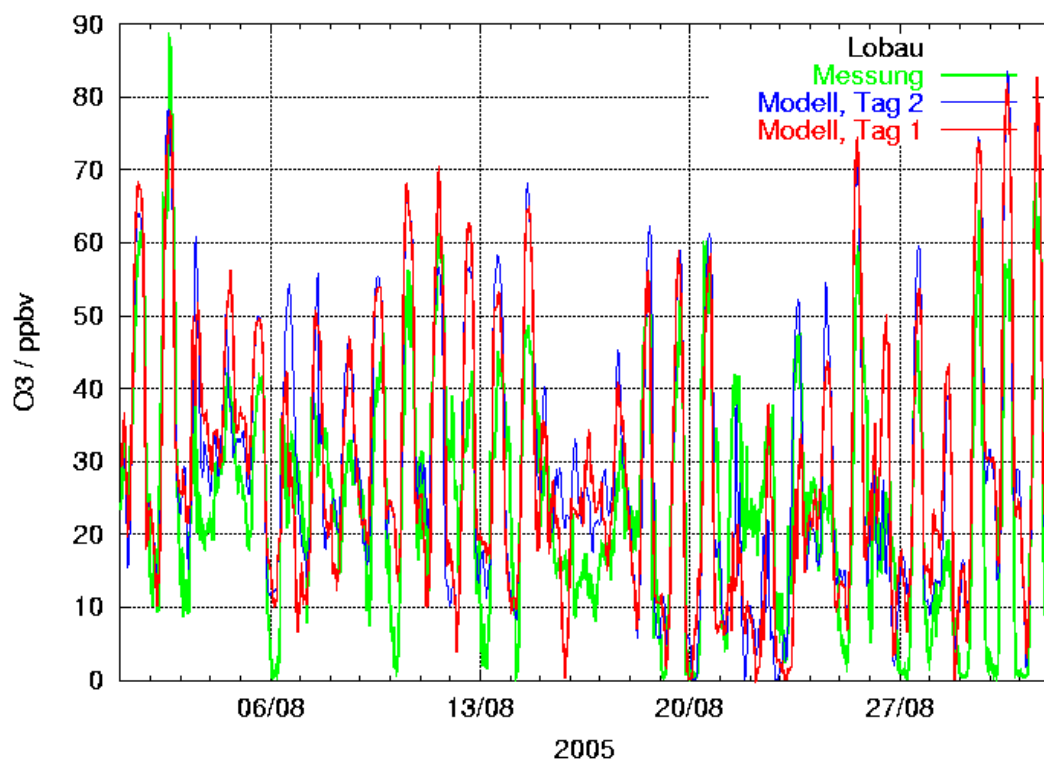


Abbildung 3.8: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Lobau im August 2005.

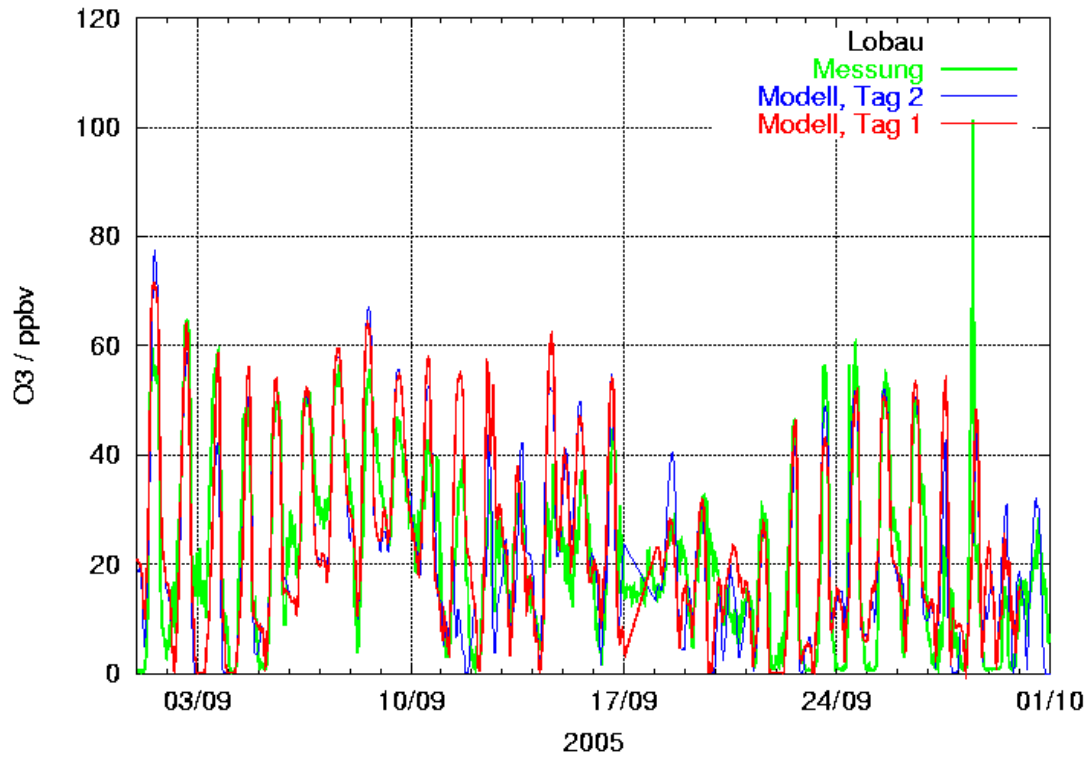


Abbildung 3.9: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Lobau im September 2005.

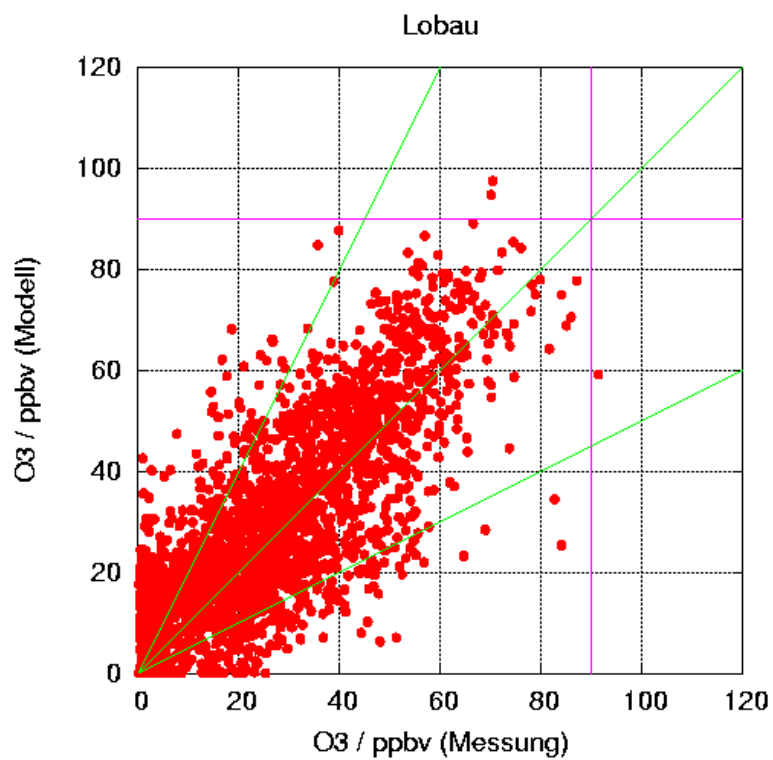


Abbildung 3.10: Streudiagramm der Modellwerte (Tag 1) gegen die Ozonmessungen an der Station Lobau während der gesamten Vorhersagezeit (jeweils Stundenwerte).

An der Station Klosterneuburg am nördlichen Stadtrand von Wien ergeben sich ähnliche Bilder wie in Lobau im Süden.

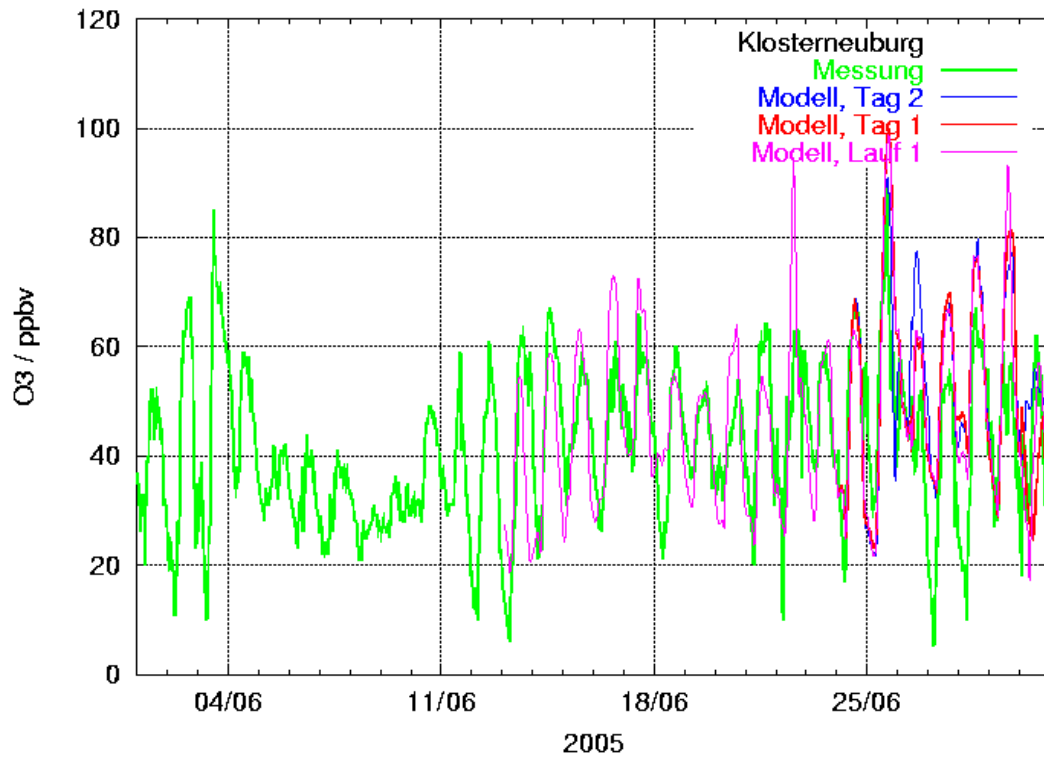


Abbildung 3.11: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Klosterneuburg im Juni 2005.

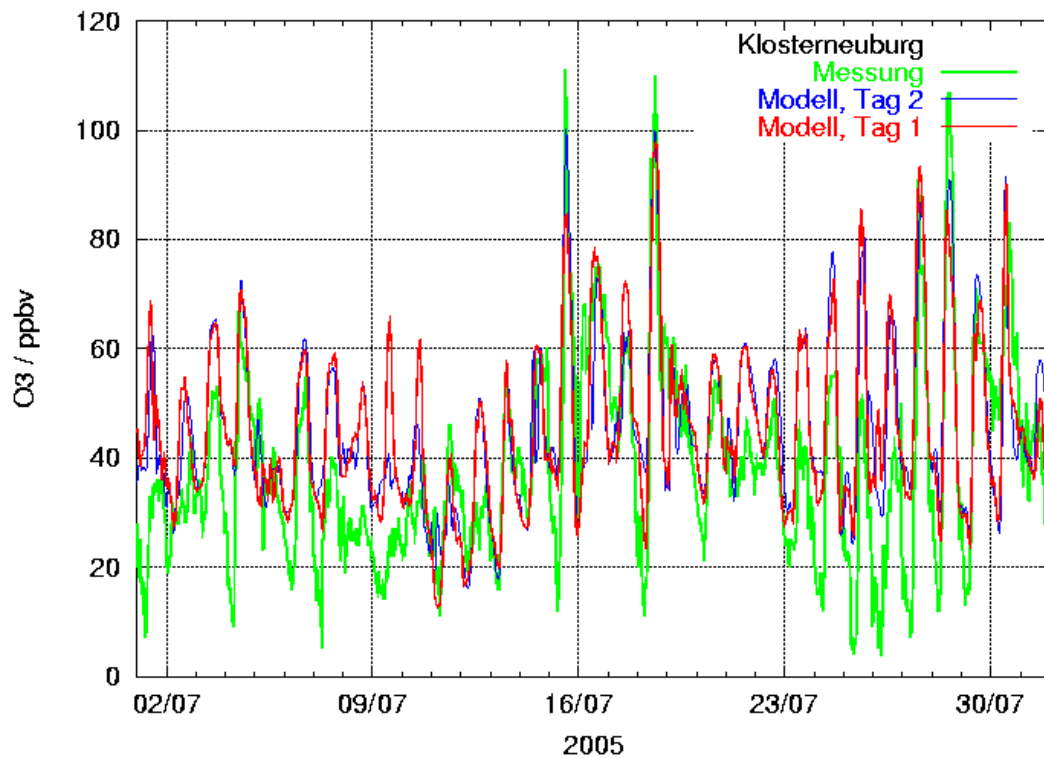


Abbildung 3.12: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Klosterneuburg im Juli 2005.

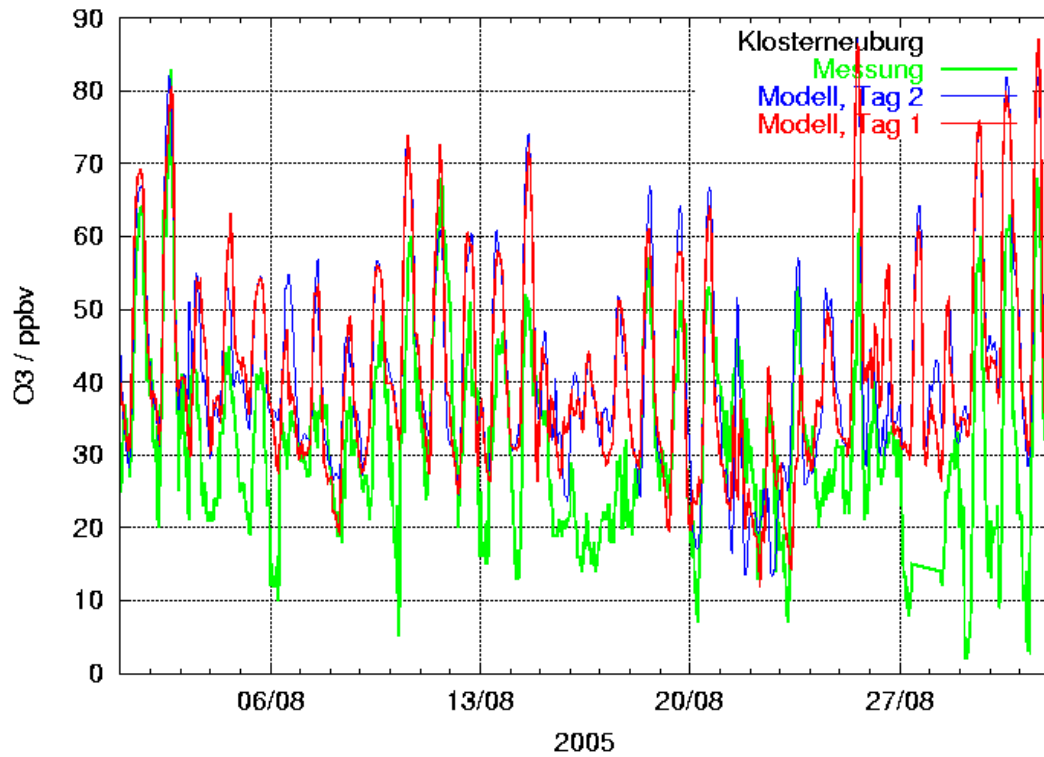


Abbildung 3.13: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Klosterneuburg im August 2005.

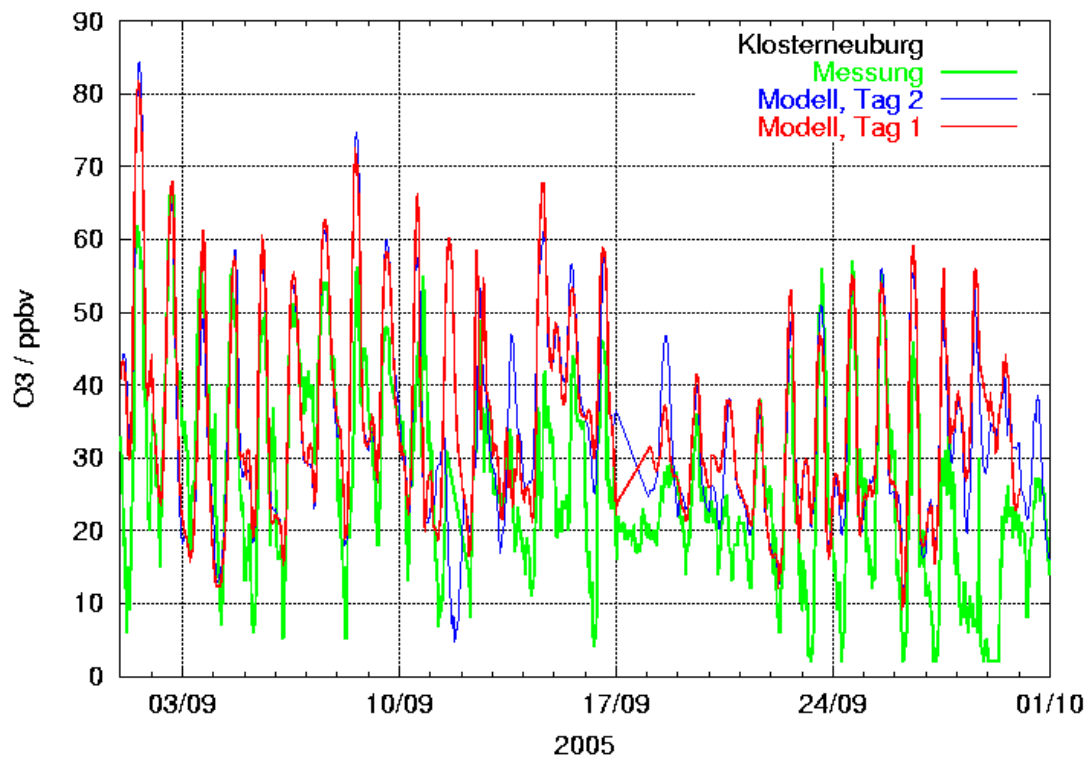


Abbildung 3.14: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Klosterneuburg im September 2005.

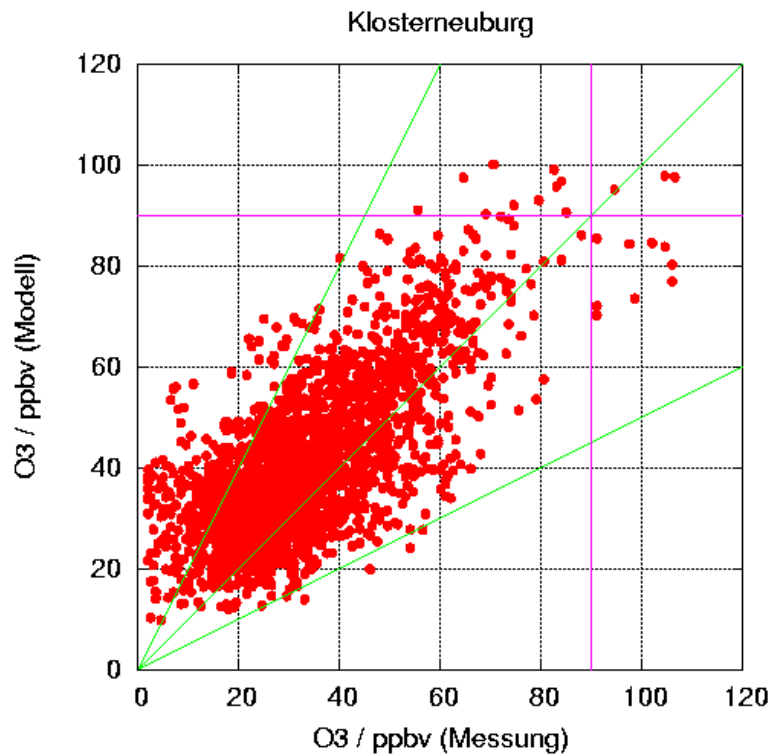


Abbildung 3.15: Streudiagramm der Modellwerte (Tag 1) gegen die Ozonmessungen an der Station Lobau während der gesamten Vorhersagezeit (jeweils Stundenwerte).

Als Beispiel für eine höher gelegene Station werden die Messungen und Rechnungen für die Station Wiesmath gezeigt. Die Station liegt auf einer Seehöhe von 738 m, die Höhe der entsprechenden Gitterzelle im inneren Gitter des Modells beträgt 607 m. Hier ist der Tagesgang der Ozonkonzentration sowohl in der Messung als auch in den Modellergebnissen nicht so ausgeprägt wie an den tiefer gelegenen Stationen nahe starker Emissionsquellen. Es treten fast keine Werte unter 20 ppbv auf. Überschreitungen der Alarmschwelle wurden an dieser Station nicht verzeichnet.

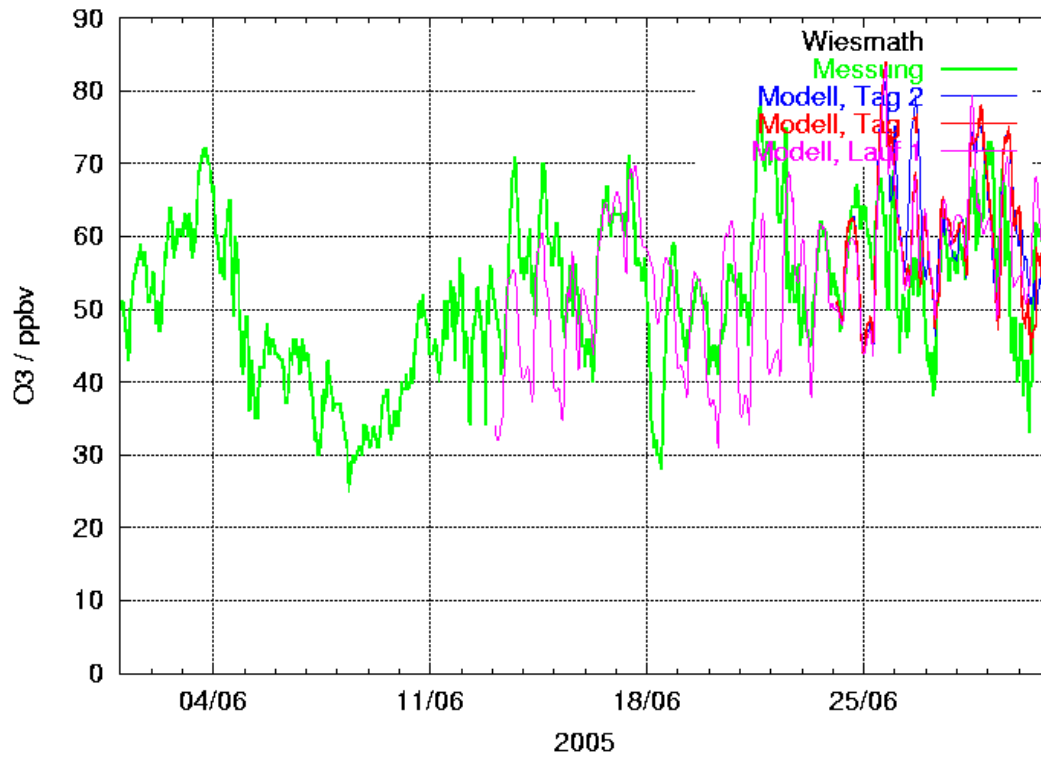


Abbildung 3.16: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Wiesmath im Juni 2005.

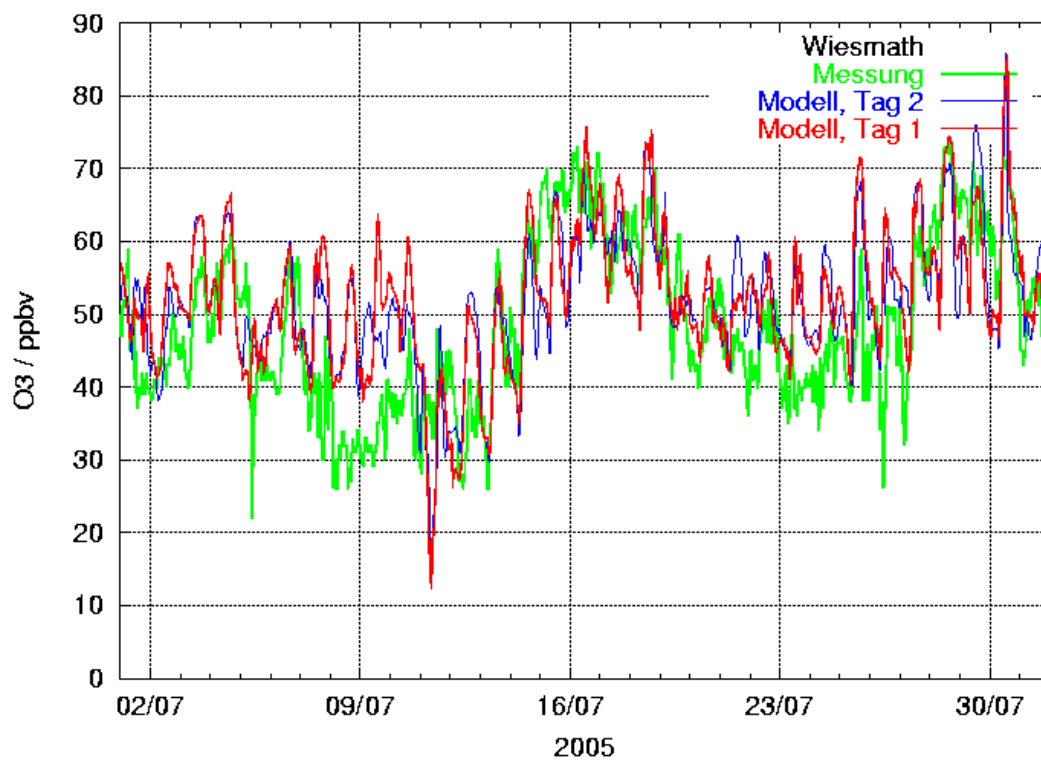


Abbildung 3.17: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Wiesmath im Juli 2005.

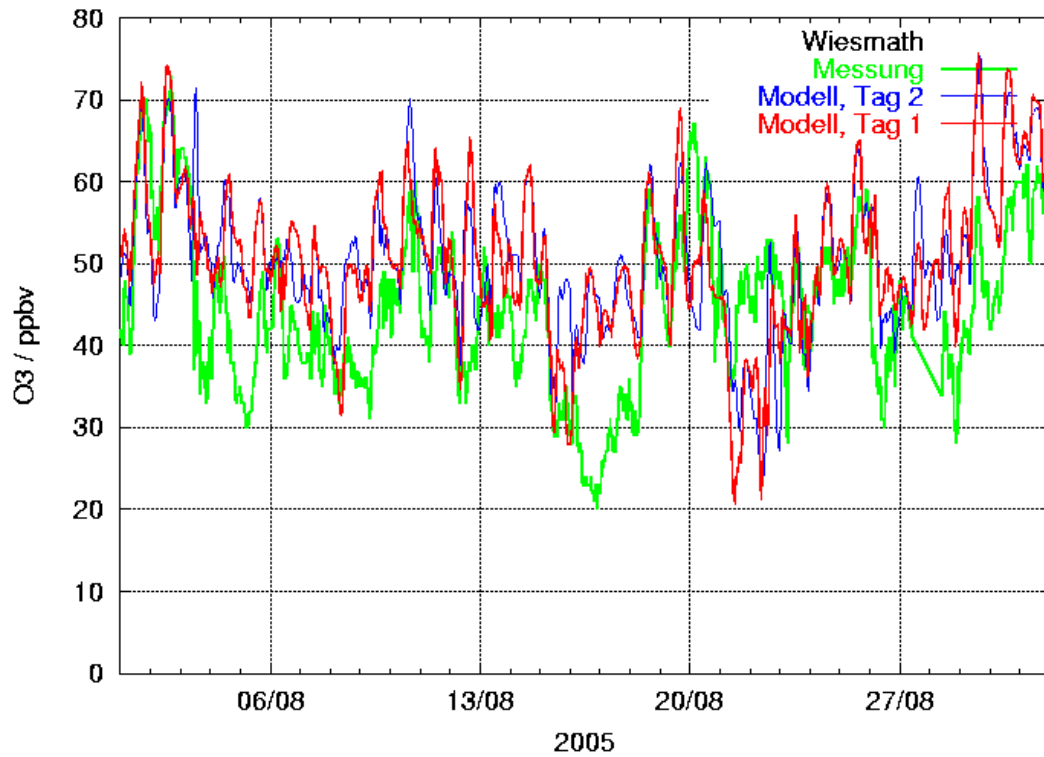


Abbildung 3.18: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Wiesmath im August 2005.

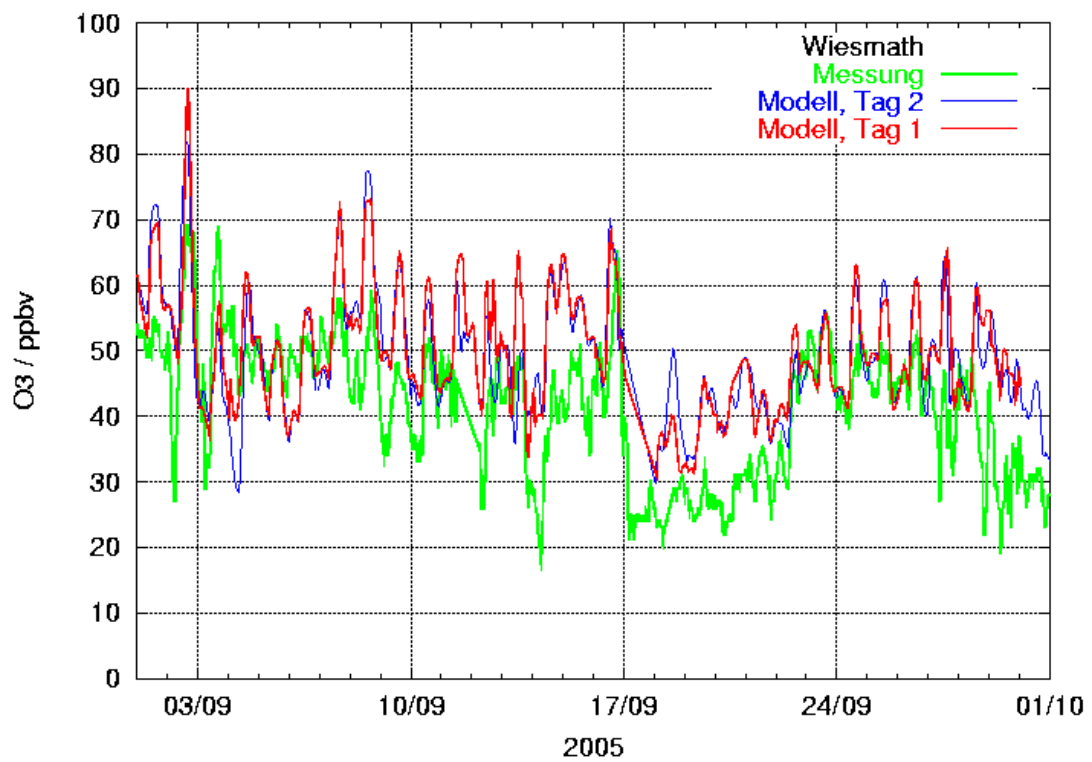


Abbildung 3.19: Vergleich der gemessenen und berechneten Ozonkonzentration an der Station Wiesmath im September 2005.

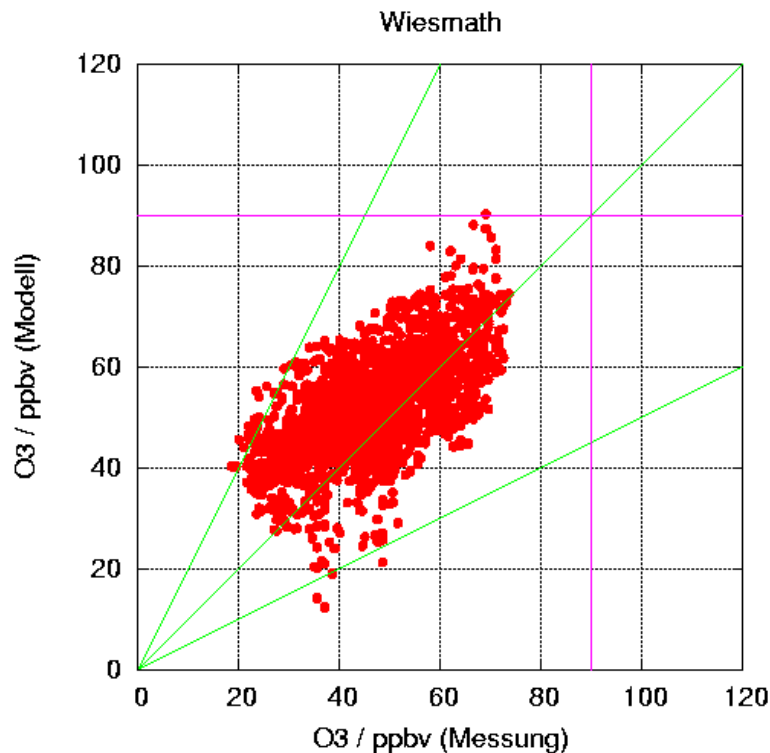


Abbildung 3.20: Streudiagramm der Modellwerte (Tag 1) gegen die Ozonmessungen an der Station Wiesmath während der gesamten Vorhersagezeit (jeweils Stundenwerte).

### 3.4 Statistische Berechnungen an den Messstationen

Zur Beurteilung der Güte der Modellierung im Ozonüberwachungsgebiet 1 werden die Messungen und Modellergebnisse für alle zur Verfügung stehenden Stationen in diesem Gebiet, die auch Ozon gemessen haben, verglichen. In Tabelle 3.2 sind jeweils der Korrelationskoeffizient sowie der Standardfehler der Voraussage  $s_{y,x}$  angeführt. Die Werte wurden sowohl für die Vorhersage des ersten Tages (d1) als auch des zweiten Vorhersagetages (d2) aus allen Stundenmittelwerten berechnet. Für den zweiten Tag zeigt sich ein etwas höherer mittlerer Korrelationskoeffizient und ein etwas geringerer Standardfehler. Noch bessere Werte ergeben sich, wenn nur der Monat Juli betrachtet wird (in Tabelle 3.2 gezeigt für Tag 1).

Da bei vielen Stationen die größten Abweichungen bei den nächtlichen niedrigen Ozonwerten auftraten, die für die Beurteilung der Luftgüte von geringem Interesse sind, wurden die Korrelation und der Standardfehler außerdem nur für die Tageswerte zwischen 9 Uhr und 18 Uhr berechnet. Die so berechneten Werte sind ein besseres Maß für die Güte des Modells, wenn dieses zur Luftgütebeurteilung für Ozon eingesetzt werden soll. Die Übereinstimmung zwischen Messung und Modell ist demnach besonders untertags sehr gut.

Bis auf wenige Ausnahmen liegt der Korrelationskoeffizient bei allen Stationen und für alle Berechnungen zwischen 0.5 und 0.8, der Standardfehler variiert um den Wert 10 ppbv.

Tabelle 3.2: Korrelationskoeffizient und Standardfehler der berechneten Ozonwerte im Vergleich mit den Messwerten (siehe Text).

	alle, 24 h, d1		alle, 24 h, d2		Juli, 24 h, d1		alle, 9-18, d1	
	r	S <sub>y,z</sub>	r	S <sub>y,z</sub>	r	S <sub>y,z</sub>	r	S <sub>y,z</sub>
Amstetten	0.63	11.4	0.66	10.7	0.63	11.2	0.72	10.5
Annaberg	0.33	10.0	0.37	9.1	0.48	8.3	0.57	8.3
Bad Vöslau	0.56	10.3	0.58	9.7	0.64	8.3	0.64	9.9
Dunkelsteiner W.	0.66	9.8	0.68	9.4	0.70	9.8	0.73	9.3
Eisenstadt	0.58	10.6	0.60	10.0	0.60	9.6	0.68	9.5
Forsthof	0.61	9.1	0.62	8.6	0.66	8.0	0.70	8.3
Gänsersdorf	0.71	10.2	0.74	9.8	0.73	9.9	0.76	9.4
Großenzersdorf	0.73	11.3	0.75	11.0	0.76	9.7	0.75	10.7
Hainburg	0.73	10.6	0.76	10.1	0.76	9.3	0.76	9.5
Heidenreichstein	0.64	9.0	0.67	8.3	0.69	8.2	0.72	8.0
Hermannskogel	0.54	13.8	0.56	13.7	0.61	12.3	0.70	12.3
Himberg	0.69	12.1	0.71	11.6	0.74	10.5	0.76	10.5
Hohe Warte	0.69	11.9	0.71	11.7	0.70	11.0	0.74	11.7
Illmitz	0.67	10.3	0.69	9.8	0.71	9.0	0.75	8.7
Stephansplatz	0.62	13.0	0.63	12.9	0.61	12.2	0.70	12.4
Irnfritz	0.70	8.8	0.72	8.6	0.72	8.7	0.74	8.6
Kittsee	0.67	11.8	0.72	11.3	0.73	9.9	0.77	9.5
Klosterneuburg	0.71	10.6	0.74	10.3	0.73	10.3	0.77	9.9
Kollmitzberg	0.70	10.7	0.71	10.2	0.76	9.4	0.73	10.5
Krems	0.63	9.8	0.64	9.6	0.62	9.7	0.66	9.9
Laaer Berg	0.66	12.5	0.68	12.2	0.71	10.7	0.73	11.8
Lobau	0.77	12.0	0.79	11.8	0.77	11.3	0.73	12.3
Mistelbach	0.70	10.0	0.72	9.7	0.70	10.3	0.74	9.3
Mödling	0.61	10.2	0.63	9.6	0.65	8.8	0.73	9.2
Oberwart	0.48	8.7	0.51	8.3	0.61	7.4	0.62	8.2
Pillerdorf	0.72	9.2	0.73	8.8	0.74	8.8	0.75	8.6
Pöchlarn	0.62	10.6	0.65	9.9	0.66	10.5	0.69	10.0
Purkersdorf	0.57	10.7	0.60	10.2	0.64	9.5	0.71	9.5
Payerbach	0.51	7.4	0.49	7.3	0.57	6.6	0.52	7.5
Schwechat	0.74	12.8	0.76	12.3	0.74	12.1	0.74	12.0
Stixneusiedl	0.73	11.1	0.75	10.6	0.76	10.0	0.77	10.1
Stockerau	0.73	10.1	0.75	9.7	0.75	9.9	0.75	10.0
St. Pölten	0.67	10.2	0.71	9.6	0.72	9.8	0.77	9.3
Streithofen	0.63	11.0	0.64	10.8	0.62	11.1	0.71	10.4
St. Valentin	0.66	12.4	0.69	11.7	0.67	12.3	0.71	12.1
Ternitz	0.56	8.2	0.58	7.9	0.64	7.0	0.68	7.8
Tulln	0.61	11.3	0.64	11.0	0.64	11.5	0.64	11.4
Waidhofen / Y.	0.54	10.4	0.58	9.7	0.57	9.5	0.63	10.2
Wiesmath	0.63	7.5	0.60	7.5	0.67	6.7	0.69	7.5
Wiener Neustadt	0.60	9.0	0.62	8.5	0.67	7.7	0.74	7.9
Wolkersdorf	0.71	10.0	0.73	9.7	0.73	9.9	0.75	9.5
Mittelwert	<b>0.64</b>	<b>10.50</b>	<b>0.66</b>	<b>10.07</b>	<b>0.68</b>	<b>9.68</b>	<b>0.71</b>	<b>9.81</b>

### 3.5 Vergleich mit Luftgütemessungen (Ozonmaxima)

Von besonderem Interesse ist die Vorhersage der im Ozonüberwachungsgebiet 1 (Wien, Niederösterreich, nördliches Burgenland) auftretenden täglichen Ozonmaxima, da diese für die Überschreitung der Informations- oder Alarmschwelle relevant sind. In der täglichen Vorhersage im Jahr 2005 wurden die Maximalwerte aus den Prognosefeldern in rechteckigen Teilbereichen des inneren Modellgitters herausgesucht. Zur genaueren Bestimmung der Maximalwerte wurde für die Auswertung in diesem Zwischenbericht ein neues Postprocessing-Programm geschrieben, das die einzelnen Gitterzellen des inneren Gitters vordefinierten Gebieten zuordnet. Die Einteilung der Gebiete ist in Abbildung 3.21 dargestellt. Dieses Programm wird auch bei der täglichen Vorhersage im

Jahre 2006 verwendet werden. Die drei Teile des Ozonüberwachungsgebiets 1 werden hierbei zusammengefasst.

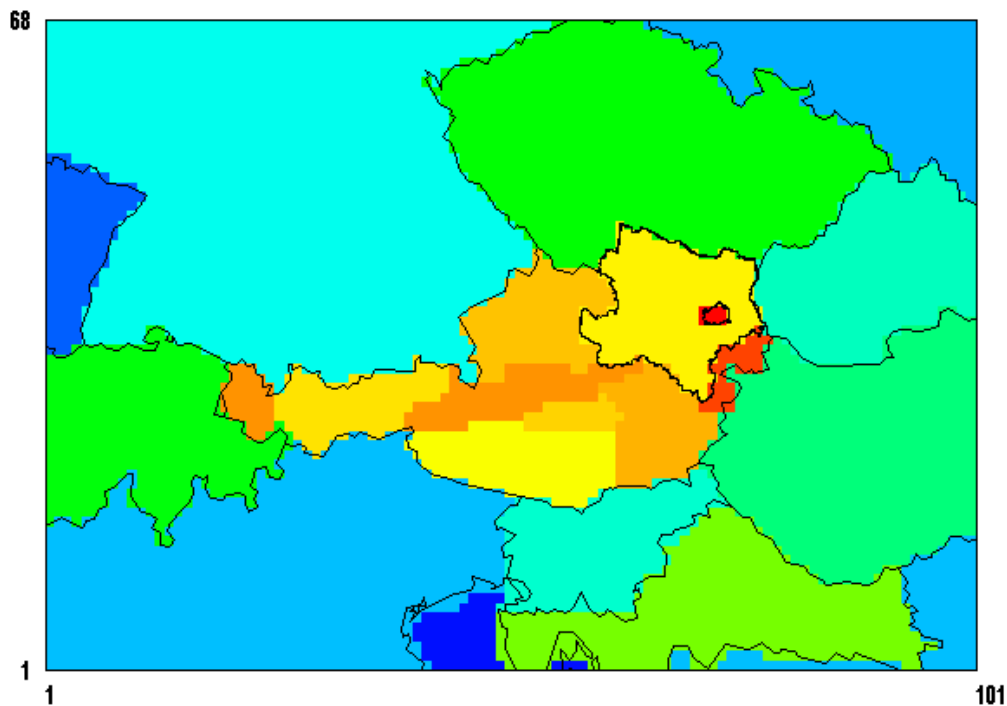


Abbildung 3.21 Einteilung des inneren Modellgitters in Rezeptorgebiete (Achsenbeschriftung entspricht der Anzahl der Gitterpunkte). Österreich ist neben den Teilen des Ozonüberwachungsgebiets 1 (Wien, Niederösterreich, nördliches Burgenland) in die weiteren Ozonüberwachungsgebiete unterteilt.

Mit diesem Programm wurden die täglichen prognostizierten Ozonmaxima im Ozonüberwachungsgebiet 1 ergebn ermittelt und in Abbildung 3.22 als Zeitreihe dargestellt. Die Vorhersagen folgen überwiegend dem Verlauf der maximal gemessenen Werte, doch liegen sie vor allem in der zweiten Hälfte des Untersuchungszeitraums generell etwas zu hoch. Es wird vermutet, dass eine als zu hoch angenommene Konzentration am Rand des äußeren Modellgitters der Grund hierfür ist. Für alle Rechnungen wurden Randwerte aus MM5/CAMx-Rechnungen für den 11. 7. 2003 verwendet. Vereinzelt sind auch Unterschiede zwischen der Vorhersage für Tag 1 und Tag 2 sichtbar. Dies ist durch Änderungen in den Wettervorhersagen des ALADIN-Modells erklärbar.

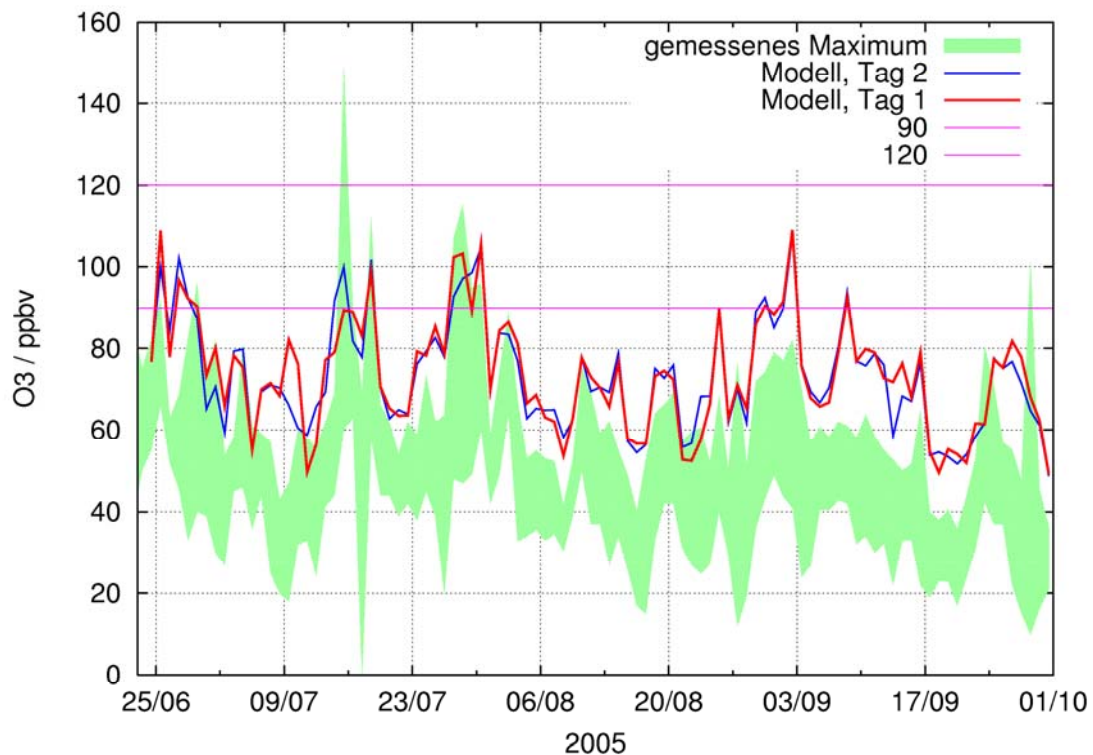


Abbildung 3.22: Täglicher maximaler Ozonwert im Ozonüberwachungsgebiet 1. Der grüne Bereich zeigt die höchsten und niedrigsten maximalen Werte an den im Gebiet vorliegenden Messstationen (Halbstundenwerte). Die rote und blaue Kurve stellt die vorhergesagten Maximalwerte für den Vorhersagetag 1 bzw. 2 dar (Stundenwerte).

Die Überschreitungen der Informationsschwelle in der Mitte und am Ende des Monats Juli wurden gut modelliert. Die Überschreitung der Alarmschwelle an der Station Schwechat am 15. Juli konnte jedoch nicht vorhergesagt werden. Hierauf wird später eingegangen.

Die Güte der Vorhersage lässt sich auch aus Streudiagrammen ersehen. Abbildung 3.23 zeigt den Vergleich der gemessenen maximalen Stundenmittel für Ozon im Ozonüberwachungsgebiet 1 mit den jeweiligen Vorhersagen für die Modelltage 1 und 2. Die Grenzwerte für die Informationsschwelle und die Alarmschwelle sind durch Linien gekennzeichnet.

Es gab kaum Fälle, an denen Überschreitungen gemessen wurden, das Modell aber zu niedrige Werte vorhergesagte. Ausnahmen bilden lediglich die Alarmschwellenüberschreitung an der Station Schwechat am 15. Juli 2005 sowie ein weiterer Fall, an dem 100 ppbv gemessen wurde, das Modell jedoch nur etwa 70 ppbv zeigt. Dieses Maximum trat am 28. September 2005 ebenfalls an der Station Schwechat auf. Häufiger sind Fälle, an denen das Modell eine Überschreitung der Informationsschwelle bis zu 110 ppbv vorher sagt, diese aber in den Messungen nicht eintritt. Diese Fehlprognosen liegen in der zweiten Hälfte der Untersuchungsperiode, in der mit der gegenwärtigen Modellkonfiguration generell zu hohe Ozonwerte berechnet wurden, sowie Ende Juni, als die eingetretene Überschreitung schon zwei Tage zu früh vorhergesagt wurde.

Werden nur die Ergebnisse für den Monat Juli betrachtet, wie in Abbildung 3.24, so sind bis auf die Alarmschwellenüberschreitung fast alle Vorhersagen richtig gewesen.

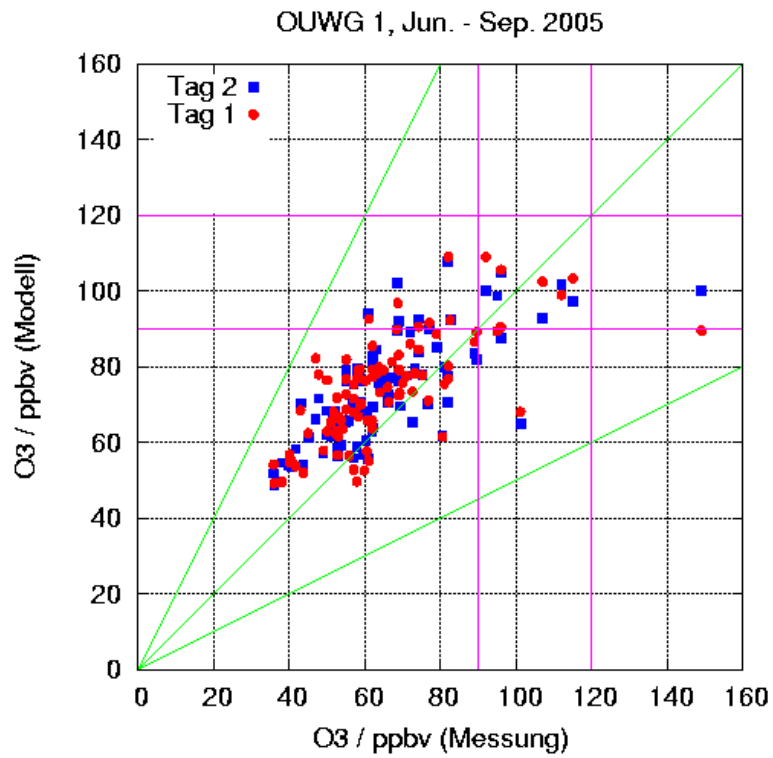


Abbildung 3.23: Streudiagramm der täglichen Ozonmaxima in den Stundenmitteln im Ozonüberwachungsgebiet 1 während der gesamten Vorhersagezeit.

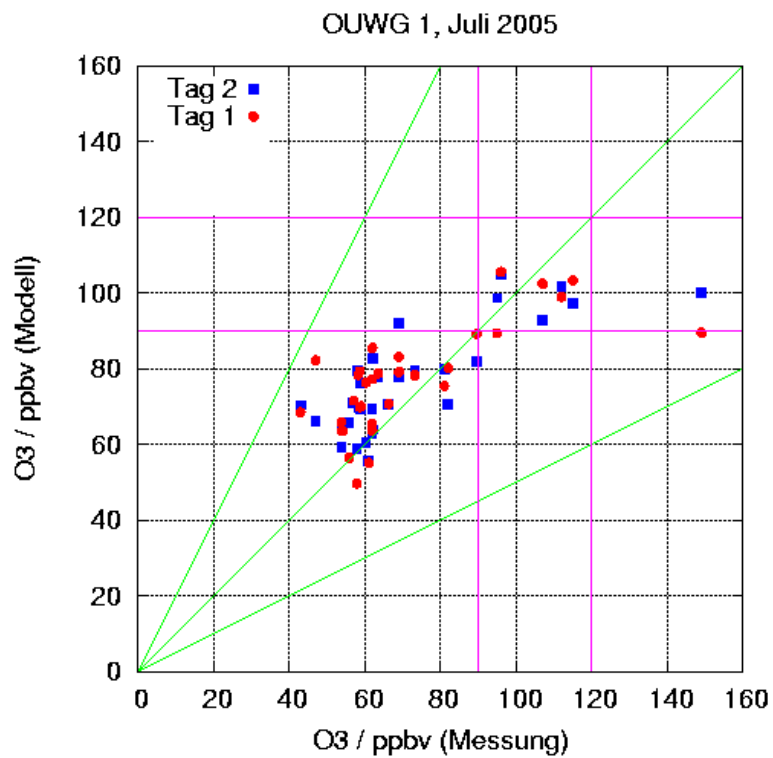


Abbildung 3.24: Streudiagramm der täglichen Ozonmaxima in den Stundenmitteln im Ozonüberwachungsgebiet 1 im Juli 2005.

Tabelle 3.3: Anzahl richtiger (schraffiert) und falscher Vorhersagen von Alarmschwellenüberschreitungen im Untersuchungszeitraum

	Juni	Juli	August	September	gesamt
Tag 1					
Mes < 90 ppbv , Mod < 90 ppbv	3	25	30	26	<b>84</b>
Mes > 90 ppbv, Mod > 90 ppbv	2	4	-	-	<b>6</b>
Mes < 90 ppbv, Mod > 90 ppbv	2	-	1	3	<b>6</b>
Mes > 90 ppbv, Mod < 90 ppbv	-	2	-	1	<b>3</b>
Tag 2					
Mes < 90 ppbv , Mod < 90 ppbv	3	25	30	27	<b>85</b>
Mes > 90 ppbv, Mod > 90 ppbv	1	6	-	-	<b>7</b>
Mes < 90 ppbv, Mod > 90 ppbv	2	-	1	2	<b>5</b>
Mes > 90 ppbv, Mod < 90 ppbv	1	-	-	1	<b>2</b>

Die Vorhersagegüte ist außerdem in Tabelle 3.3 zusammengefasst. Von den 9 aufgetretenen Überschreitungen wurden in der Vorhersage für den aktuellen Tag (Tag 1) 6 Ereignisse vorhergesagt und 6 mal gab es Fehlalarm. In der Vorhersage für den Folgetag (Tag 2) gab es 7 richtige Warnungen und 5 Fehlalarme.

### 3.6 Die Alarmschwellenüberschreitung am 15. Juli 2005

Am 15. Juli 2005 wurde an der Station Schwechat die Alarmschwelle für Ozon von  $240 \mu\text{g}/\text{m}^3$  mit Messwerten von fast  $300 \mu\text{g}/\text{m}^3$  überschritten. Vom Vorhersagemodell wurde diese Überschreitung jedoch nicht vorhergesagt. Abbildung 3.25 zeigt den Verlauf dieses Ozonereignisses an Hand der halbstündigen Messwerte an 9 Stationen. Besonders ist darauf hinzuweisen, dass die höchsten Konzentrationen in Schwechat gegen 10:00 Uhr und 10:30 Uhr gemessen wurden, obwohl Ozonmaxima üblicherweise in den frühen Nachmittagsstunden auftreten. An der benachbarten Station Lobau gab es um 11:00 Uhr den höchsten Messwert des Tages mit 100 ppbv. In der Folge traten an den weiter nördlich gelegenen Stationen Stephansplatz, Hohe Warte, Hermannskogel (diese Station zeigt auf Grund der erhöhten Lage keine nächtliche Absenkung des Ozons), Klosterneuburg und Wolkersdorf geringere Ozonpeaks auf, die auf einen Transport der ozonreichen Luft nach Norden hindeuten. An den im Süden Wiens gelegenen Stationen Laaer Berg und Vösendorf erschien schon um 8:30 Uhr (95 ppbv) bzw. um 9:00 Uhr (67 ppbv) eine kleinere Ozonspitze, während andere Stationen im Süden Wiens wie Stixneusiedl oder Himberg (beide nicht dargestellt) keine derartige Spitze zeigten.

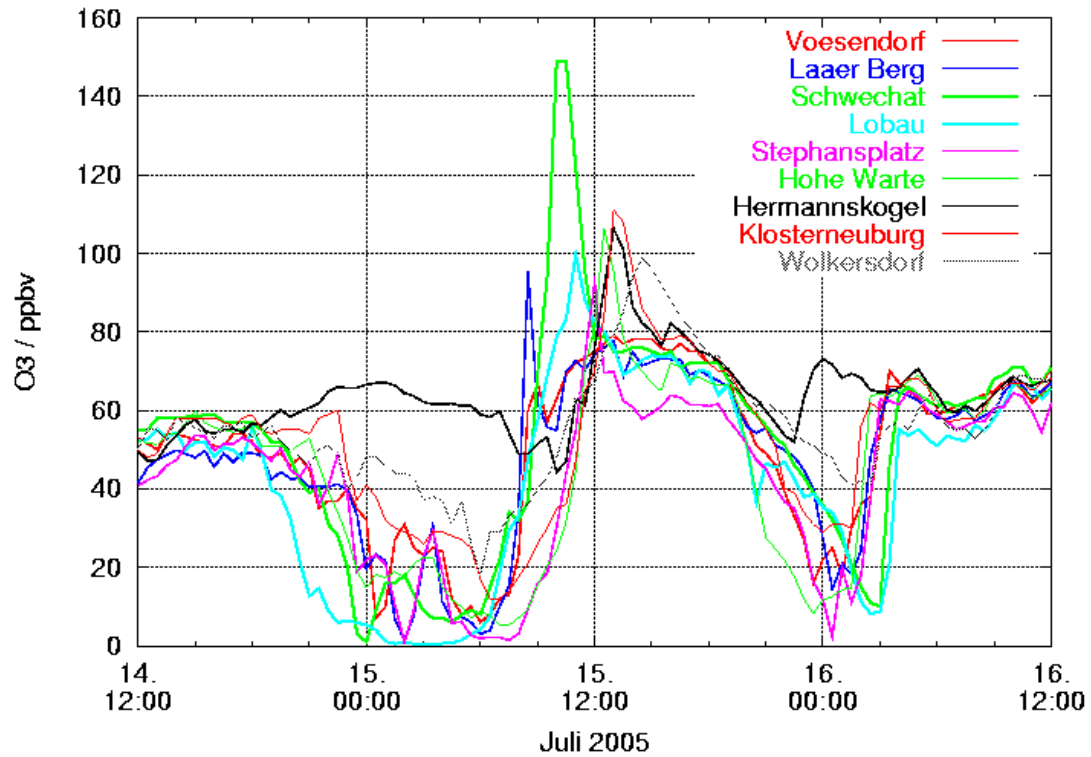


Abbildung 3.25: Gemessene Halbstundenwerte für Ozon in ppbv am 15. Juli 2005 an 9 Stationen.

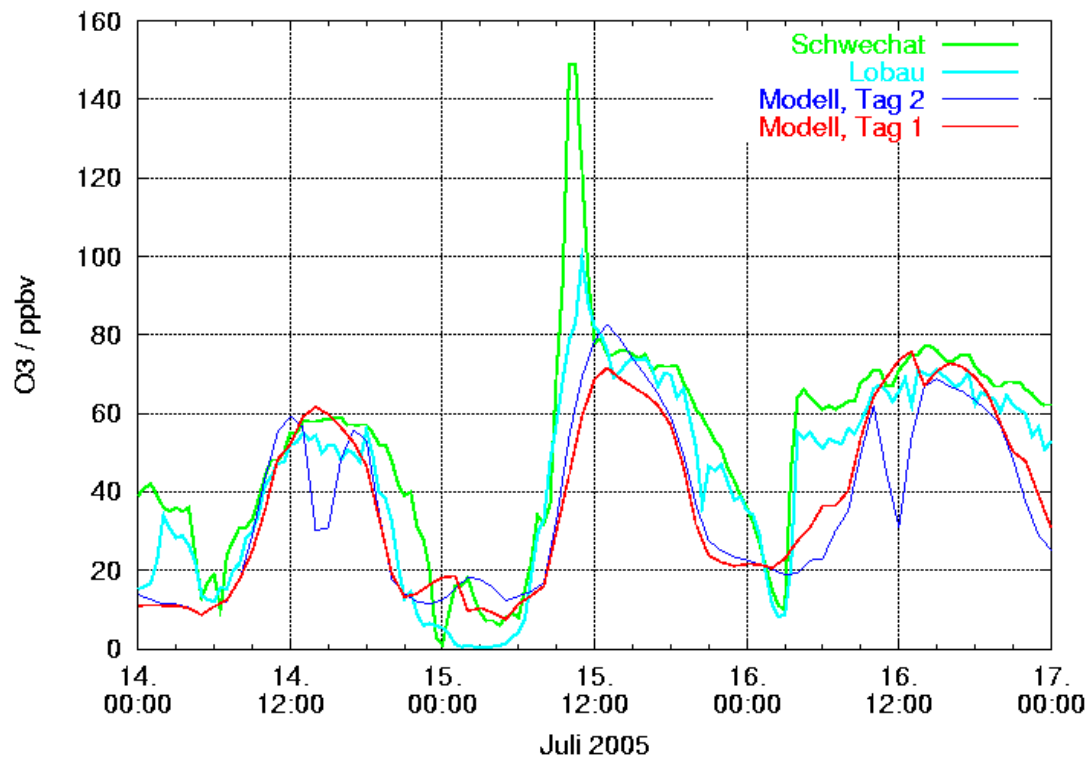


Abbildung 3.26: Gemessenes (Halbstundenwerte) und vorhergesagtes Ozon (Stundenwerte, Tag 1 = Vorhersage für den aktuellen Tag, Tag 2 = Vorhersage für den Folgetag) an den Stationen Schwechat und Lobau vom 14. bis 16. Juli 2005.

Ein möglicher Grund für die Überschreitung könnte eine außergewöhnliche Emission von Ozonvorläufersubstanzen in der Nähe der Station Schwechat sein. Die kleinen früheren Spitzen an den Stationen Laaer Berg und Voesendorf widersprechen allerdings dieser Vermutung. Die Kürze der jeweiligen Spitzen weist jedoch auf sehr lokale Phänomene hin, die mit der räumlichen Auflösung des Vorhersagemodells von 9.67 km nicht erfasst werden. Die stündlichen Emissionswerte welche das Emissionsmodell berechnet, beruhen zudem auf gemittelten Monats- Wochen- und Tagesgängen und enthalten daher keine außergewöhnlichen Emissionsereignisse. Entsprechend wurde die Ozonerhöhung nicht modelliert, wie es in Abbildung 3.26 dargestellt ist.

Die benachbarten Stationen Schwechat und Lobau liegen in der gleichen Gitterzelle des inneren Modellgitters mit 9.67 km Auflösung. An dem Bild mit den unterschiedlichen Messungen wird deutlich, dass das Modell den Mittelwert über die Fläche der Gitterzelle repräsentiert, während Stationsmessungen von lokalen Besonderheiten im Nahbereich beeinflusst sind. Häufig sind dies z. B. Verkehrsemissionen. Im in dieser Arbeit benutzten Modellsystem liegen neben Schwechat und Lobau auch noch die Stationen Stephansplatz und Hohe Warte in einer gemeinsamen Gitterzelle.

Die Abbildung 3.26 zeigt, dass am 15.7. das Modell die Messung in Lobau wesentlich besser repräsentiert als die Werte in Schwechat. Am 16. Juli steigt die Ozonkonzentration an diesen Stationen, wie auch an den meisten anderen Stationen in Abbildung 3.25 bereits gegen 4:00 Uhr an. Dieser ebenfalls ungewöhnliche Anstieg wird im Modell wie die Alarmschwellenüberschreitung nicht dargestellt.

## **4. Ausblick: Erweiterungen des Modellsystems**

Die Testvorhersagen für das Jahr 2005 wurden im wesentlichen mit dem Modellsystem ausgeführt, das schon in der Pilotstudie (Baumann-Stanzer et al., 2005) verwendet wurde. Vor dem Start der weiteren Testphase in der Ozonsaison 2006 wird dieses Modellsystem in verschiedenen Punkten erweitert werden. Einzelne geplante Erweiterungen werden in den folgenden Abschnitten kurz beschrieben. Das neue Programm zur Berechnung der Ozonmaxima im Ozonüberwachungsgebiet 1 ist bereits in Abschnitt 3.5 erläutert worden. In Testläufen für eine mehrtägige Episode aus dem Jahr 2005 wird getestet werden, ob die Erweiterungen zu einer Verbesserung der Modellierung führen. Im Falle einer Verbesserung werden die Erweiterungen für die Rechnungen im Jahr 2006 übernommen.

### **4.1 Einbau neuer Emissionskataster**

Bislang wurden für die Emissionen Daten verwandt, die auf der EMEP Datenbank (<http://www.emep.int>) für das Jahr 2000 beruhen. Für die Länder Österreich, Tschechische Republik, Slowakei und Ungarn wurden diese Daten, die in einem 50 km Raster vorliegen, auf eine räumliche Auflösung von 5 km heruntergerechnet. Seit dem 20. September 2005 liegen die EMEP Daten für das Jahr 2003 vor. Diese werden in die Emissionsdatenbank eingearbeitet.

Außerdem wird der neue Emissionskataster der Stadt Wien in das Emissionsmodell aufgenommen. Dieser liegt mit einer Auflösung von 100 m vor. Vor allem muss ein schneller Algorithmus gefunden werden, mit dem die kleinen Gitterzellen des Katasters in die 9.67 km x 9.67 km großen Gitterzellen

des Modells übertragen werden können. Außerdem sind Anpassungen nötig, da sich die Aufteilung in Emissionssektoren von der bei EMEP-Daten üblichen CORINAIR-Aufteilung unterscheidet.

## 4.2 Neuer Ozon – Chemiemechanismus

Das CAMx-Modell bietet die Verwendung verschiedener Chemiemechanismen an. In der Pilotstudie (Baumann-Stanzer et al., 2005) wurde sowohl der Carbon Bond Version 4 Mechanismus (CBM-IV, Gery et al., 1989) mit einer aktuelleren Isopren-Chemie (Carter, 1996) als auch der SAPRC99-Mechanismus (Carter, 2000; SAPRC = Statewide Air Pollution Research Center) verwendet, und es zeigte sich, dass der SAPRC99 in Österreich generell etwas höhere tägliche Ozonmaxima, die auch besser mit den Messwerten übereinstimmten, berechnete als der CBM-IV Mechanismus. Allerdings benötigt SAPRC99 auf Grund der größeren Anzahl von berechneten Spezies und enthaltener chemischer Reaktionen (Tabelle 4.1) etwa die vierfache Rechenzeit wie CBM-IV.

Im Juni 2005 wurde die neueste Version des CAMx-Modells (Version 4.20) veröffentlicht. Gegenüber der bislang verwendeten Version 4.10s wurde vor allem die Aerosolchemie verbessert. Für reine Gasphasenanwendungen wie die Ozonvorhersage gibt es aber auch die Möglichkeit mit einem erweiterten CBM-IV Mechanismus mit zusätzlichen chemischen Reaktionen zu rechnen. Diese Reaktionen wirken sich einerseits besonders in der oberen Troposphäre und in der Nacht aus. Andererseits sind hierin auch zusätzliche Reaktionen enthalten, die NO<sub>x</sub> aus Reservoirdgasen (PAN, HNO<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, ...) zurückbilden. Dies soll zu etwas höheren Ozonprognosen führen als mit dem konventionellen CBM-IV Mechanismus berechnet (Zaveri und Peters, 1999).

Es sollen Testläufe mit den drei in Tabelle 4.1 aufgeführten Chemiemechanismen ausgeführt werden. Falls die Rechnungen mit dem erweiterten CBM-IV Mechanismus zufrieden stellende Ergebnisse liefern und zusätzlich die Rechenzeit verkürzt wird, kann dieser Mechanismus im Jahre 2006 zur Ozonprognose verwendet werden.

Tabelle 4.1: Vergleich der verschiedenen Chemiemechanismen

Mechanismus	Spezies	Reaktionen
CBM-IV	38	96
SAPRC99	73	211
CBM-IV (erweitert)	38	117

## 4.3 Einbindung der ECMWF Felder für Gesamt ozon

Da Photolysereaktionen hauptsächlich durch UV-Absorption initiiert werden, ist die Gesamt ozonsäule für die Berechnung der Photolysegeschwindigkeiten wichtig. Für die Ozonprognose wurden bis jetzt über das gesamte Rechengebiet sowohl zeitlich als auch räumlich konstante Werte für die gesamte Ozonsäule verwendet da diese nicht in den ALADIN Prognosen enthalten sind. An der ZAMG sind 2 mal täglich operationelle Vorhersagen für diese Größe vom ECMWF (European Centre for Medium Range-Weather Forecasts) verfügbar welche in Zukunft als Input für CAMx verwendet werden sollen.

Die Felder enthalten Prognosen für die nächsten 10 Tage mit einer zeitlichen Auflösung von 3 Stunden. Die horizontale Auflösung beträgt 1°. Es wird eine Schnittstelle entwickelt, welche aus den aktuellsten ECMWF Feldern, sobald diese verfügbar sind, die Ozonwerte extrahiert und auf das CAMx Gitter interpoliert. Wird die Ausbreitungsrechnung mit CAMx gestartet, werden diese Felder als Input verwendet.

Abbildung 4.1 zeigt die Werte der Ozonsäule für den 20. August 2005 um 12 Uhr (0 UTC Lauf vom 20.8.2005).

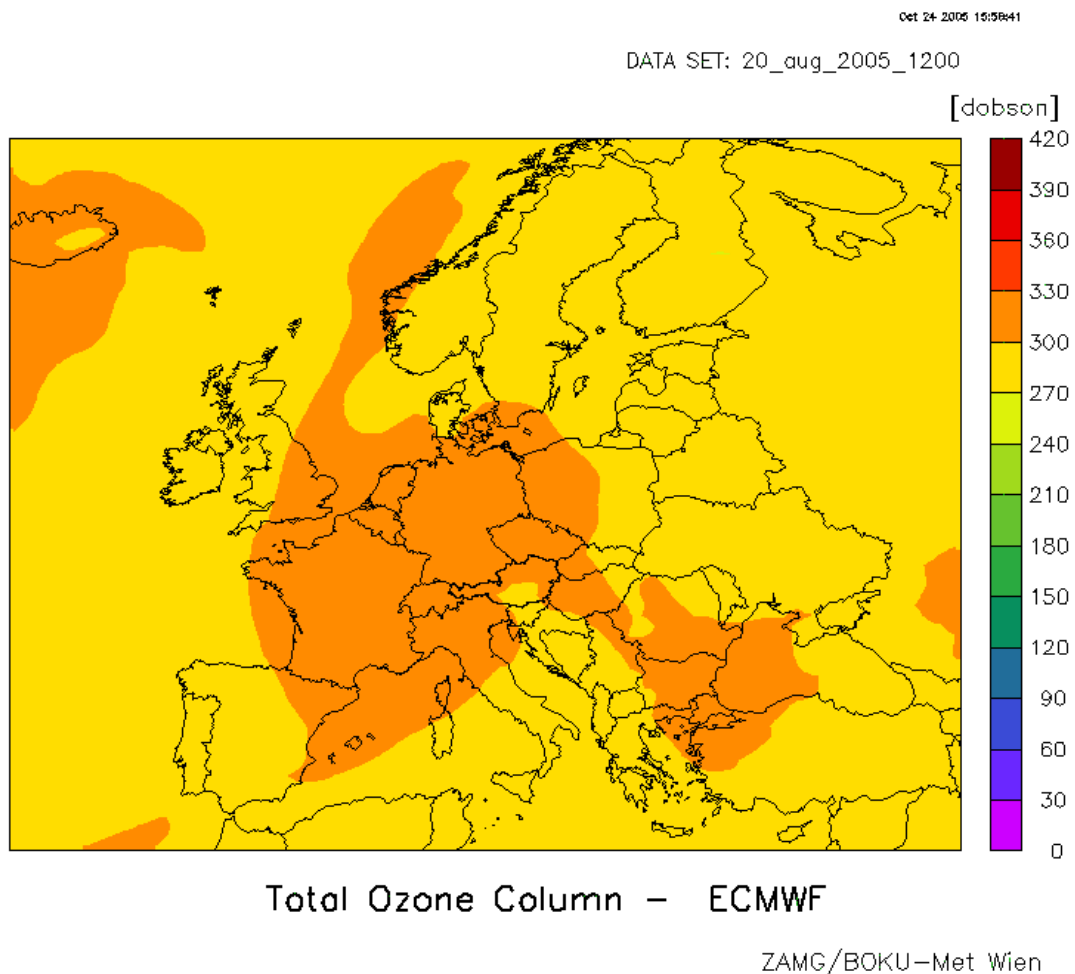


Abbildung 4.1: Beispiel einer ECMWF - Vorhersage der totalen Ozon Säule über Europa.

#### 4.4 Schadstoffkonzentrationen am Rand des Modellgebietes

Anstelle der bisher konstant gehaltenen chemischen Randwerte werden im Winter 2005/2006 zwei alternative Wege zur Randwertbestimmung getestet:

- Die berechneten Konzentrationen am Rande des äußeren Modellgitters der Berechnung für den Vortag werden für den nächsten Tag benutzt.
- Als weitere Möglichkeit wird die Verwendung von Randwerten aus dem globalen Chemiemodell (mit gröberer Auflösung) CHIMERE, welche von einer französischen Gruppe operationell zur Verfügung gestellt werden, getestet.

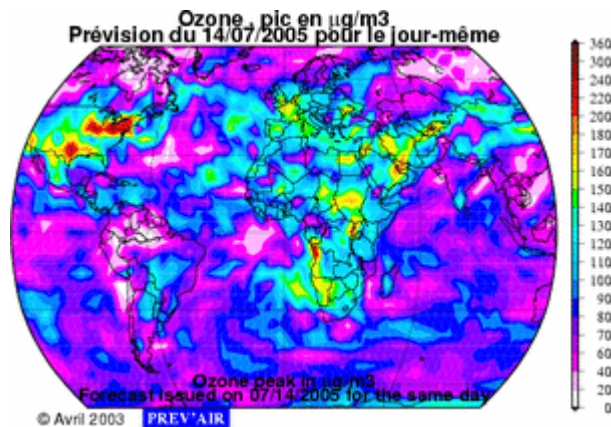


Abbildung 4.2: Maximale Ozonkonzentration prognostiziert mit CHIMERE (auf Basis von ARPEGE) am 14. Juli 2005 aus der Prognoserechnung vom 14. Juli.

Die erste Möglichkeit hat den Nachteil, dass sie Änderungen der Randwerte nur langsam den sich ändernden Bedingungen anpasst. Befindet sich der jeweilige Rand in einer Leelage, so wird er sich voraussichtlich ändern. Bis die Windrichtung umschwenkt, hat dies aber nur geringen Einfluss auf die Modellergebnisse. In einer Luvlage hingegen wird dieses Verfahren die Randwerte kaum ändern sondern die Werte aus der letzten Leelage weiter verwenden. Trotz dieser Einschränkung wird erwartet, dass mit dem Verfahren saisonale Veränderungen sowie Änderungen der Großwetterlage nachvollzogen werden können.

Die erste Möglichkeit hat aber den Vorteil, dass sie nicht von einem anderen Modell abhängig ist. Außerdem kann die tageszeitliche Variation in den Spezieskonzentrationen mitberücksichtigt werden, indem die Konzentrationen des Vortages mit stündlicher Auflösung verwendet werden. Schließlich entstehen keine Interpolationsfehler und Abweichungen durch die Verwendung verschiedener Chemiemechanismen. Die zweite Möglichkeit berücksichtigt hingegen auch die Situation außerhalb des Modellgitters, so dass Vorgänge wie Interkontinentaltransport von Spurengasen in die Rechnung eingehen.

Episoden des Sommers 2005 werden mit diesen neuen Randwertlösungen nachgerechnet und die Prognosegüte bestimmt. Es wird damit möglich sein, unter anderem auf saisonabhängige meteorologische Ereignisse besser einzugehen.

#### 4.5 Ergebnisaufbereitung

Von Seiten der Auftraggeber wurde angeregt, die Prognosen so aufzubereiten, dass die Ergebnisse auf einer Homepage integriert werden können. Dies könnte die Adresse <http://www.reinluft.at> sein. Entsprechend der Vereinbarung vom 16.11.2005 werden die Ergebnisse jedoch 2006 noch nicht operationell der Öffentlichkeit zugänglich gemacht.

#### 4.6 Ausfallsicherheit

In Ergänzung zu der derzeit für die Modellrechnung verwendeten Hardware wurden Testläufe auf einem neuen Großrechner durchgeführt, welcher derzeit an der ZAMG als Testmaschine eingesetzt ist. Die Rechenzeit der Ozonprognose kann auf diesem Rechner um 2/3 verkürzt werden. Für Sommer 2006 ist die Nutzung dieser Testmaschine als Alternativlösung im Fall einer Störung des derzeit verwendeten LINUX - Rechners vorgesehen. Ab Ende 2006 ist diese oder eine ähnliche Maschine für Kurzfristprognose-Produkte der ZAMG (z.B. für eine zukünftig operationelle Ozonprognose) geplant.

#### 5. Referenzen

- Baumann-Stanzer, K., M. Hirtl und B. C. Krüger, 2005: Pilotstudie zur Prognose von Sommersmog auf Basis operationeller regionaler Wettervorhersage in Österreich. Endbericht, Zentralanstalt für Meteorologie und Geodynamik und Institut für Meteorologie der Universität für Bodenkultur Wien.
- Carter, W. P., 1996: Condensed Atmospheric Photooxidation Mechanisms for Isoprene. *Atmos. Environ.* **30**, 4275-4290.
- Carter W. P. L., 2000: Implementation of the SAPRC-99 Chemical Mechanism into the Model-3 Framework. Report to the United States Environmental Protection Agency.
- Gery M.W., G.Z. Whitten, J.P. Killus, and M.C. Dodge, 1989: A Photochemical Kinetics Mechanism for Urban and Regional Scale Computer Modelling. *J. Geophys. Res.* **94**, 12925-12956.
- Zaveri, R. A. und L. K. Peters, 1999: A new lumped structure photochemical mechanism for large-scale applications. *J. Geophys. Res.* **104**, 30387-30415.