



BOKU-Met

**Änderungen des
Modellsystems zur Prognose von Sommersmog
für Nordost-Österreich im Winter 2005/2006
- 2. Zwischenbericht -**

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. Bernd C. Krüger ¹

Dr. Kathrin Baumann-Stanzer ²

Mag. Marcus Hirtl ²

¹ Institut für Meteorologie der Universität für Bodenkultur Wien

² Zentralanstalt für Meteorologie und Geodynamik

Wien, April 2006

1.	Einleitung	3
2.	Vergleich der Modellversionen	4
2.1.	Erstellung des Referenzlaufs	4
2.2.	Aktualisierung der Emissionen auf EMEP 2003.....	6
2.3.	Einbau des Emissionskatasters emikat für die Stadt Wien	8
2.4.	Einbindung der ECMWF Felder für Gesamtozon.....	12
2.5.	CBM-IV als chemischer Mechanismus.....	13
2.6.	Berechnung der Randwerte für den nächsten Tag	16
	CAMx.f (im Directory CAMx/)	17
	filunit.com (im Directory Inc/).....	17
	openfils.f (im Directory IO_bin)	17
	cncprep.f (im Directory IO_bin/)	17
	wrtbou.f (im Directory IO_bin).....	18
2.7.	Übernahme der Randwerte von einem anderen Modell.....	21
3.	Weitere Diskussion der Ergebnisse.....	21
3.1.	Statistische Berechnungen an den Messstationen	21
3.2.	Rechenzeiten	24
4.	Schlussbemerkungen.....	25
5.	Literatur	26

1. Einleitung

Im Sommer 2005 wurde von der Zentralanstalt für Meteorologie und Geodynamik (ZAMG) gemeinsam mit dem Institut für Meteorologie der Universität für Bodenkultur Wien (BOKU-Met) erstmals eine operationelle Luftgütevorhersage für den Raum Nordost-Österreich auf Basis einer regionalen Wettervorhersage gerechnet. Ein Vergleich der vorhergesagten Ozonbelastung mit den tatsächlich gemessenen Werten ist ausführlich im 1. Zwischenbericht zu diesem Projekt beschrieben worden (Baumann-Stanzer et al., 2005b).

Die Übereinstimmung zwischen Vorhersage und Messung war überwiegend recht gut. Vor allem wurden die meisten Überschreitungen der Ozoninformationsschwelle von $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ im österreichischen Ozonüberwachungsgebiet 1 (Wien, Niederösterreich, nördliches Burgenland) richtig vorhergesagt und es gab wenige Fehlalarme. Trotzdem wurden verschiedene Möglichkeiten zur Verbesserung des verwendeten Modellsystems untersucht:

- Im September 2005 wurden häufig zu hohe Ozonwerte vorhergesagt. Als Grund wurde angenommen, dass mit zeitlich konstanten Randkonzentrationen für das äußere Modellgitter gerechnet wurde, die eine Julisituation repräsentierten, und die im Laufe der Monate nicht verändert wurden. Hier sollen in Zukunft zeitlich veränderliche Randkonzentrationen verwendet werden.
- Das verwendete Emissionsmodell benutzte als Datengrundlage Werte von EMEP für das Jahr 1999. Diese sollen durch neuere Daten ersetzt werden. Außerdem ist in der Zwischenzeit ein neuer hoch aufgelöster Emissionskataster für das Stadtgebiet von Wien erstellt worden, der in das Emissionsmodell integriert werden kann.
- Zur Berechnung der Photolysekonstanten wurde europaweit ein zeitlich nicht veränderbarer mittlerer Wert von 300 DU für die Gesamtozonsäule benutzt. Hier können räumlich aufgelöste Werte aus der täglichen Vorhersage des ECMWF verwandt werden.
- Tests mit anderen Chemiemechanismen als dem verwendeten SAPRC99 können zu einer Beschleunigung der Rechnung führen.

Eine weitere Verbesserung, eine bessere flächendeckende Berechnung der Ozonmaxima im Ozonüberwachungsgebiet 1, wurde bereits im 1. Zwischenbericht (Baumann-Stanzer et al., 2005b) ausführlich beschrieben und wird bei den weiteren operationellen Testläufen während der Ozonsaison 2006 benutzt werden.

Dieser 2. Zwischenbericht beschreibt die Umsetzung der angeführten Modellverbesserungen und deren Erprobung anhand von Testläufen für die dreiwöchige Episode vom 11. bis zum 31. Juli 2005, wobei sukzessive Veränderungen am Modell vorgenommen wurden. Es wurden die Modellergebnisse für jede Modellversion mit den Berechnungen des vorherigen Laufs verglichen, um so festzustellen, ob die Änderungen zu einer Verbesserung der Ergebnisse geführt haben. Da sich die Änderungen in den Ergebnissen an den verschiedenen Stationen im Untersuchungsgebiet meist sehr wenig unterscheiden, wird für die einzelnen Modellläufe das Ergebnis im Vergleich mit den Messungen jeweils nur für eine beispielhafte Station gezeigt.

Auf eine grundsätzliche Beschreibung des Modellsystems wird in diesem Zwischenbericht nicht eingegangen. Das Modellsystem wurde schon ausführlich im 1. Zwischenbericht (Baumann-Stanzer et al., 2005b) sowie im Bericht zur vorher angefertigten Pilotstudie (Baumann-Stanzer et al., 2005a) beschrieben.

2. Vergleich der Modellversionen

2.1. Erstellung des Referenzlaufs

Zum Test der ausgeführten Änderungen des Modells wurden Modellläufe für den Zeitraum vom 11. Juli bis zum 31. Juli 2005 gerechnet und jeweils die Auswirkungen auf die Ergebnisse, vor allem auf die Ozonkonzentration, untersucht. Zunächst wurde ein Referenzlauf erstellt, bei dem noch keine Änderungen der Eingabedaten gegenüber den Prognoserechnungen aus dem Jahre 2005 aufgenommen wurden. Es wurde hierbei jedoch eine neuere Version des Modells CAMx verwendet (Version 4.20, veröffentlicht im Juni 2005), während zur Prognose die damals neuste Version 4.10s benutzt wurde. Im Unterschied zu den Läufen aus der Prognose 2005 wurde außerdem kontinuierlich gerechnet und nicht täglich neu gestartet. Die von der ZAMG gerechneten meteorologische Eingabefelder wurden auch für alle weiteren in diesem Bericht beschriebenen Läufe verwendet.

In Bezug auf die in dieser Studie getesteten Parameter ergaben sich für den Referenzlauf folgende Einstellungen:

- Chemiemechanismus : SAPRC99
- Emissionen: EMEP1999 mit $50 \text{ km} \times 50 \text{ km}$; für die Länder Österreich, Tschechische Republik, Slowakei und Ungarn waren die EMEP - Daten auf eine räumliche Auflösung von $5 \text{ km} \times 5 \text{ km}$ skaliert.
- Als Wert für die Gesamtozonsäule, die für die Berechnung der Photolysegeschwindigkeiten benötigt wird, wurde für alle Zeiten und alle Orte ein einheitlicher Wert von 300 DU benutzt.
- Als Randkonzentrationen für das äußere Modellgitter wurden zeitlich nicht veränderliche Werte aus früheren Rechnungen benutzt (11. Juli 2003).

Die Ergebnisse des Referenzlaufs sollten sich möglichst wenig von der aktuellen Prognose aus dem Jahre 2005 unterscheiden, da in CAMx, v4.20 bei Verwendung des SAPRC99 Mechanismus keine wesentlichen Änderungen vorgenommen wurden. Für die Station Lobau zeigt Abbildung 2-1 den zeitlichen Verlauf des Volumenmischungsverhältnisses von Ozon im betrachteten Zeitraum für die Prognose und den Referenzlauf zusammen mit den Messungen. Die beiden berechneten Kurven unterscheiden sich erwartungsgemäß kaum. Die nächtlichen Minima sind beim Referenzlauf etwas geringer und liegen damit näher an den gemessenen Werten. Die Tageshöchstwerte sind beim Referenzlauf ebenfalls meist etwas geringer als beim Prognoselauf im Sommer 2005.

Für die Vorhersage sind besonders die im Ozonüberwachungsgebiet 1 auftretenden täglichen Ozonmaxima interessant. Die maximalen stündlichen Ozonmittelwerte sind für den betrachteten Zeitraum in Abbildung 2-2 dargestellt. An der Güte der Prognose ändert sich durch Implementierung der CAMx Version 4.20 wenig. An drei Tagen, dem 18. 7., dem 27. 7. und dem 28. 7. trat eine Überschreitung des Informationsschwellwertes auf und wurde richtig vorhergesagt. Auf die Überschreitung am 15. 7. an der Station Schwechat mit einem Einstundenmittelwert von 135.5 ppbv wurde schon ausführlich im letzten Zwischenbericht eingegangen. An diesem Tag lag der prognostizierte Wert leicht unter der Informationsschwelle von 90 ppbv, während der entsprechende Wert des Referenzlaufs mit 91.5 ppbv leicht darüber lag. Eine Überschreitung mit 93 ppbv am 29. 7. wurde in beiden Modellläufen knapp nicht erreicht (Prognose 89.3 ppbv, Referenz 88.7 ppbv) und für den 30. 7. sagten beide Modellläufe einheitlich 105 ppbv voraus, während maximal lediglich 89 ppbv gemessen wurden.

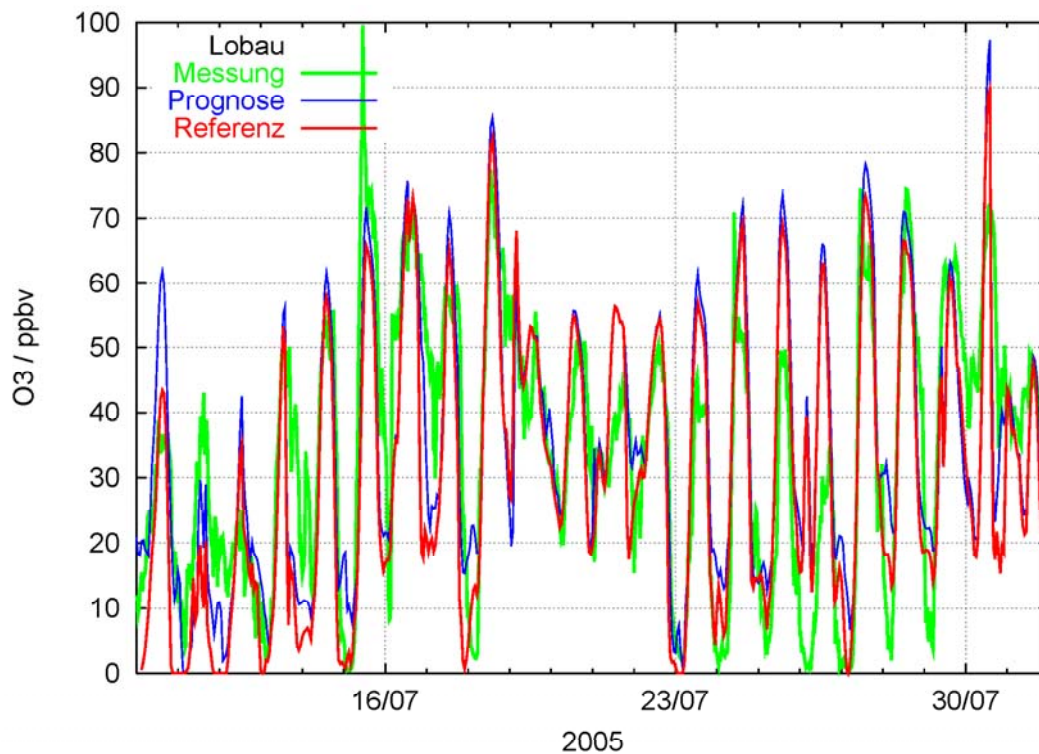


Abbildung 2-1: Zeitlicher Verlauf des Volumenmischungsverhältnisses von Ozon an der Station Lobau vom 10. 7. 2005 bis 31. 7. 2005. Gezeigt ist die Messung (grün), die aktuelle Prognose aus dem Jahr 2005 für den 1. Tag (blau) und der in dieser Studie gerechnete Referenzlauf mit CAMx -v4.20 (rot).

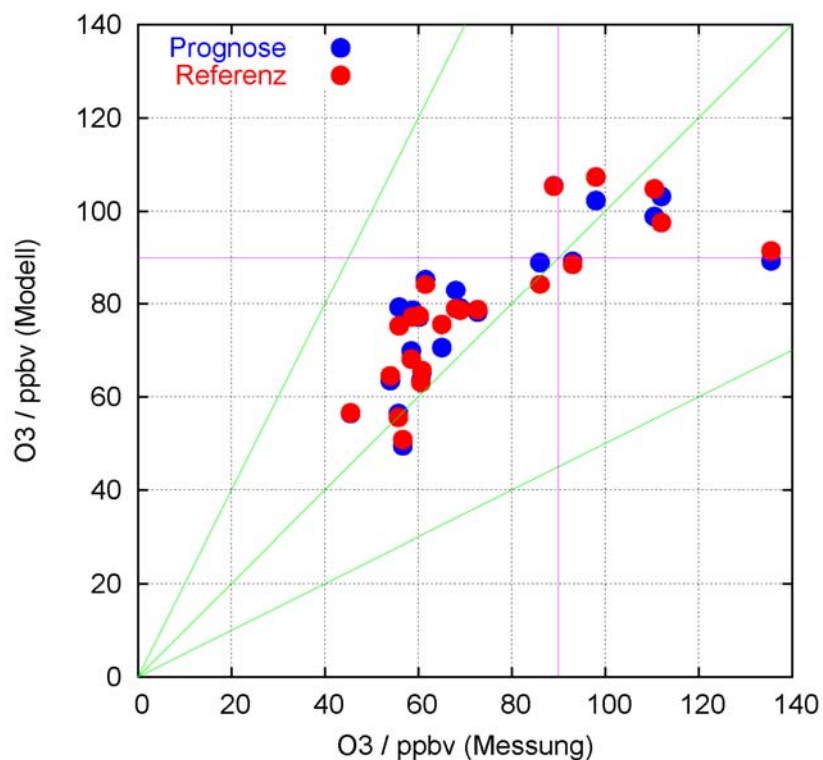


Abbildung 2-2: Streudiagramm zum Vergleich des im Untersuchungszeitraum berechneten maximalen täglichen Volumenmischungsverhältnisses von Ozon im Ozonüberwachungsgebiet 1 mit dem täglichen Maximalwert an allen Stationen. Die Werte der aktuellen Prognose 2005 sind blau, die des Referenzlaufs dieser Studie sind rot dargestellt.

2.2. Aktualisierung der Emissionen auf EMEP 2003

Am 20. 9. 2005 wurde die letzte Aktualisierung der UNECE/EMEP Datenbank (<http://webdab.emep.int/>) für europäische Emissionen („expert emissions“) vorgenommen. Diese Daten (Vestreng et al., 2005) wurden in das Emissionsmodell aufgenommen. Die Daten umfassen die jährlichen Emissionssummen für NO_x , CO, Kohlenwasserstoffe, SO_2 , NH_3 , Feinpartikeln ($<2.5 \mu\text{m}$) und Grobpartikeln ($2.5 \mu\text{m}$ bis $10 \mu\text{m}$) auf einem $50 \text{ km} \times 50 \text{ km}$ Gitter. NH_3 , $\text{PM}_{2.5}$ und $\text{PM}_{2.5-10}$ werden in dieser Studie jedoch nicht berücksichtigt. Für die Herkunft der Emissionen werden 11 Emissionssektoren unterschieden.

Für die Länder Österreich, Tschechische Republik, Slowakei und Ungarn wurden die Daten des Jahres 2003 mit Hilfe des Emissionskatasters aus dem Pannonischen Ozon Projekt (POP) auf eine räumliche Auflösung von $5 \text{ km} \times 5 \text{ km}$ disaggregiert. Hierzu wurde dem von Winiwarter und Zueger (1996) im Jahre 1995 erstellten Emissionskataster die räumliche Verteilung der Emissionen in den einzelnen Sektoren entnommen.

In den Emissionskatastern liegen jährliche Emissionssummen für die einzelnen Gitterflächen vor, die auf stündliche Werte disaggregiert werden müssen. Dies geschieht im Emissionsprogramm über vorgegebene Monatsgänge, Wochengänge und Tagesgänge der Emissionen. Für die Länder Österreich, Tschechische Republik, Slowakei und Ungarn wurden die Werte aus dem POP-Kataster für die jeweiligen Emittentengruppen benutzt. Für alle anderen Länder verwendet das Emissionsprogramm die für Österreich geltenden Angaben. Im Emissionsmodell wurde außerdem die Interpolation von den Gittern der Emissionkataster auf die Gitter des Ausbreitungsmodells verbessert.

Entsprechend den Verursachergruppen müssen die Kohlenwasserstoffe in die einzelnen Komponenten aufgeteilt werden. Dieses Splitting ist für die beiden in dieser Studie verwendeten Chemiemechanismen unterschiedlich. NO_x -Emissionen wurden in 10 % NO_2 - und 90 % NO -Emissionen aufgeteilt.

Die Berechnung der biogenen Emissionen wurde nicht verändert. Die Berechnung von Isoprenen und Terpenen erfolgt mit einem Algorithmus von Guenther et al. (1993). Die biogenen Emissionen von NO und NO_2 werden in Anlehnung an Williams et al. (1987) und Stohl et al. (1996) berechnet. Für die Berechnungen sind die aktuelle Temperatur und die Intensität der Globalstrahlung notwendig, die aus den Modellergebnissen von ALADIN-Austria extrahiert werden. Für die ebenfalls notwendige Landnutzung werden Daten vom USGS mit einer Auflösung von 30 Bodensekunden benutzt.

Als Beispiel für die mit dem Emissionsmodell bearbeiteten Emissionen sind die Werte für NO_2 von Mittwoch, 20. 7. 2005, 16:00 Uhr in Abbildung 2-3 gezeigt. Die europäischen industriellen Ballungszentren sind an den erhöhten Emissionen gut zu erkennen, ebenso wie die Schifffahrtslinien durch den englischen Kanal und entlang der nordafrikanischen Küste.

Gegenüber den zuvor verwendeten Daten für das Basisjahr 1999 haben sich die Emissionen in Österreich und den umliegenden Ländern wenig verändert. Daher sind auch die Auswirkungen der neuen Emissionen auf die berechnete Ozonkonzentration gering. Abbildung 2-4 zeigt den Verlauf des Volumenmischungsverhältnisses von Ozon berechnet mit beiden Datensätzen im Untersuchungszeitraum für die Station St. Pölten im Vergleich mit den Messwerten dieser Station. Häufig verdeckt die mit den 2003'er Werten berechnete Kurve (rot, EMEP 2003) die Kurve, die mit den 1999'er Werten gerechnet wurde (blau, Referenz). Nur an einigen Tagen zeigen sich mit den neuen Emissionen leicht niedrigere Werte in den Tagesspitzen und auch in den nächtlichen Minima. An der Tendenz des Modells, die nächtlichen Minima zu überschätzen, hat sich nichts geändert. Nachts werden zu hohe Ozonwerte berechnet, weil die Durchmischung der nächtlichen Emissionen im Modell zu stark ist.

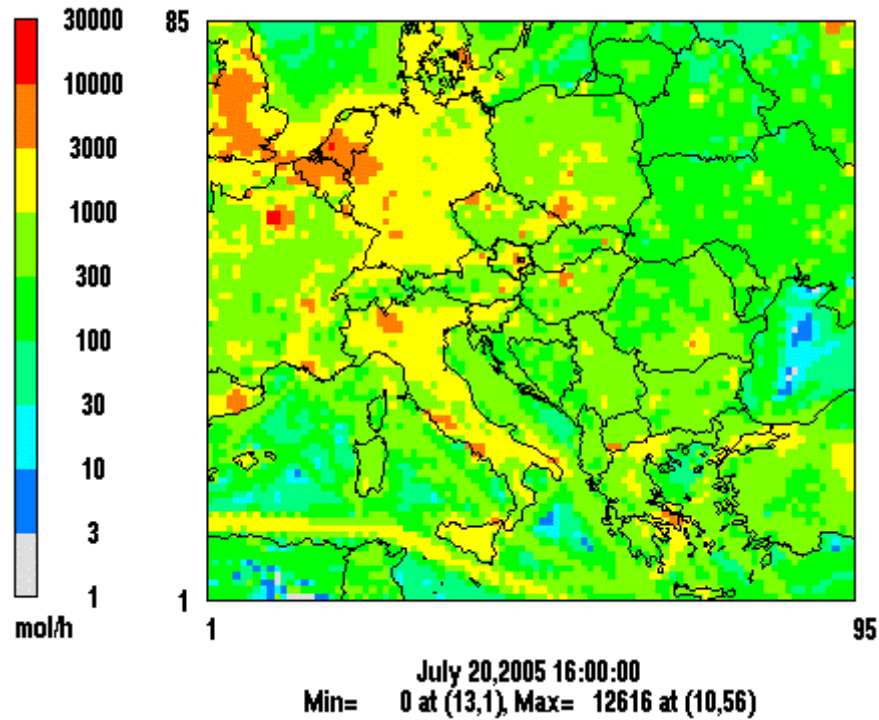


Abbildung 2-3: NO₂ Emissionen für das äußere Gitter mit 27 km räumlicher Auflösung für Mittwoch den 20. Juli 2005, 16:00 Uhr, gerechnet mit den EMEP Emissionen für 2003. Die Einheit ist mol pro Stunde und Gitterzelle.

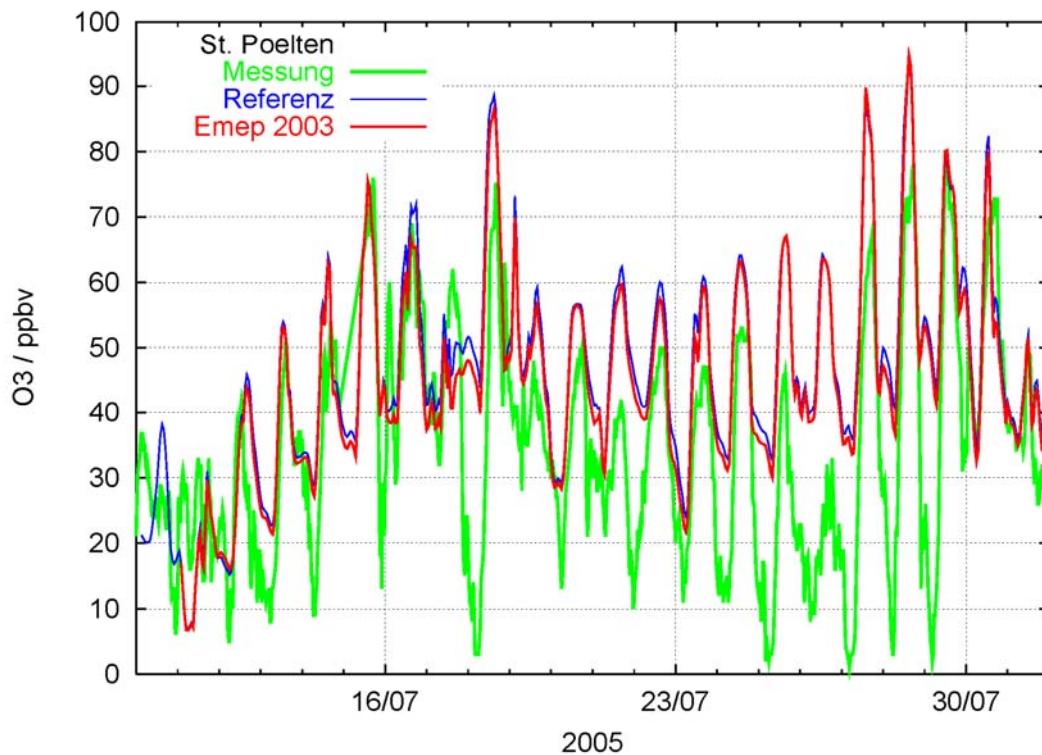


Abbildung 2-4: Zeitverlauf des Ozonvolumenmischungsverhältnisses an der Station St. Pölten im Untersuchungszeitraum. Grün: Messung; blau: Referenz, gerechnet mit EMEP Emissionen für 1999; rot: EMEP 2003, gerechnet mit EMEP Emissionen für 2003.

Die geringen Unterschiede zwischen den beiden Modellläufen sind auch in Abbildung 2-5 zu sehen. In dem Streudiagramm sind die stündlichen Modellergebnisse des Laufs mit den 2003'er Emissionen gegen die entsprechenden Werte des Laufs mit den 1999'er Emissionen aufgetragen. Überwiegend ergeben sich leicht geringere Ozonwerte.

Ein Grund für die geringen Änderungen ist sicherlich, dass sich in der Nähe des Untersuchungsgebietes die Emissionen kaum verändert haben. Im Emissionsdatensatz traten die größten Änderungen in Osteuropa auf. Hier ist entsprechend auch ein stärkerer Einfluss auf die Ozonkonzentration zu erwarten. Andererseits ist üblicherweise der Einfluss kleiner Änderungen in den Emissionen auf die Ozonkonzentration gering. Darauf wird später eingegangen

2.3. Einbau des Emissionskatasters emikat für die Stadt Wien

Im Jahre 2005 wurde der neue Emissionskataster emikat für die Stadt Wien fertig gestellt (Orthofer et al., 2005). Dieser gibt die Emissionen von NO_x , NMVOC, CO, SO_2 und PM als Jahressumme für einzelne Zählsprenkel an. Die Daten lassen sich jedoch auch mit einer Auflösung von 100 m ausgeben. Solche Daten wurden in dieser Studie verwendet. Es waren Anpassungen nötig, da sich die Aufteilung in Emissionssektoren von der bei EMEP - Daten üblichen CORINAIR - Aufteilung unterscheidet. Dies ist in Tabelle 2-1 dargestellt. Für die zeitliche und chemische Disaggregation wurden die Parameter eines ähnlichen EMEP Sektors gewählt.

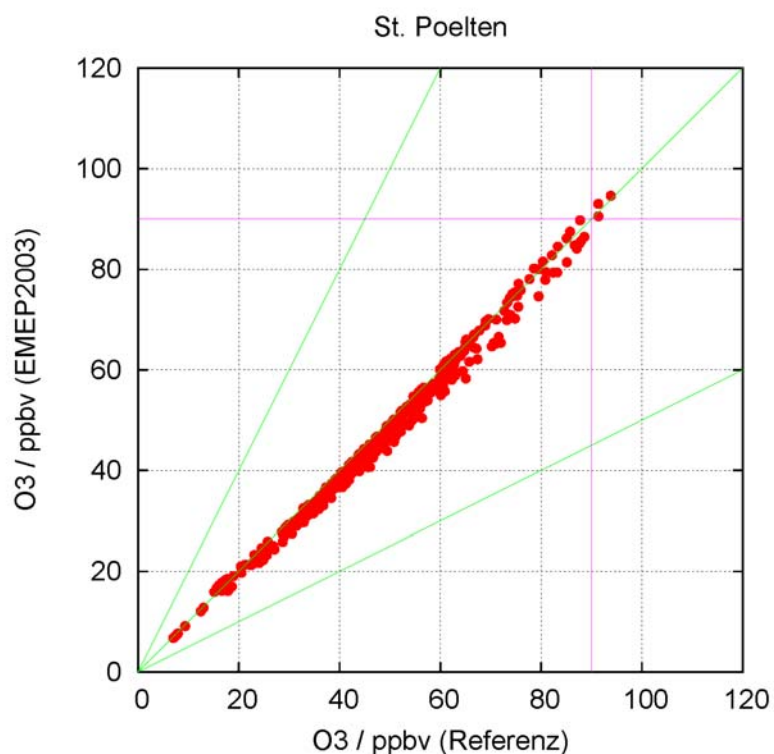


Abbildung 2-5: Streudiagramm der stündlichen Ozonwerte an der Station St. Pölten im Untersuchungszeitraum, berechnet mit den EMEP Emissionen für 2003, gegen die entsprechenden Werte, berechnet mit den EMEP - Werten für 1999 (Referenz).

Tabelle 2-1: Emissionssektoren in den Emissionskatastern EMEP und emikat.at

Nr.	EMEP (SNAP)	Nr.	emikat.at
1	Strom- und Fernwärmekraftwerke	1	Infrastruktur
2	nichtindustrielle Heizungsanlagen	2	Haushalt
3	pyrogene Emissionen der Industrie	3	Industrie
4	Prozess-Emissionen der Industrie		
5	Extraktion und Verteilung von fossilen Brennstoffen	4	Gewerbe, öffentliche Gebäude
6	Lösungsmittlemissionen		
7	Straßenverkehr	5	Straßenverkehr
8	andere mobile Quellen		
9	Abfallbehandlung		
10	Landwirtschaft	6	Natur, Landschaft
11	andere Quellen und Senken	7	Andere

Problematisch ist, dass die neuen Wiener Emissionen keinen Sektor Lösungsmittel enthalten, sondern diese Emissionen den entsprechenden Verbrauchern zugeordnet wurden. Ebenso wurde mit dem Bereich „Extraktion und Verteilung von fossilen Brennstoffen“ verfahren. Hier können Ungenauigkeiten bei der chemischen Disaggregation auftreten, da Lösungsmittel und Brennstoffdämpfe völlig anders zusammengesetzt sind als Verbrennungsabgase.

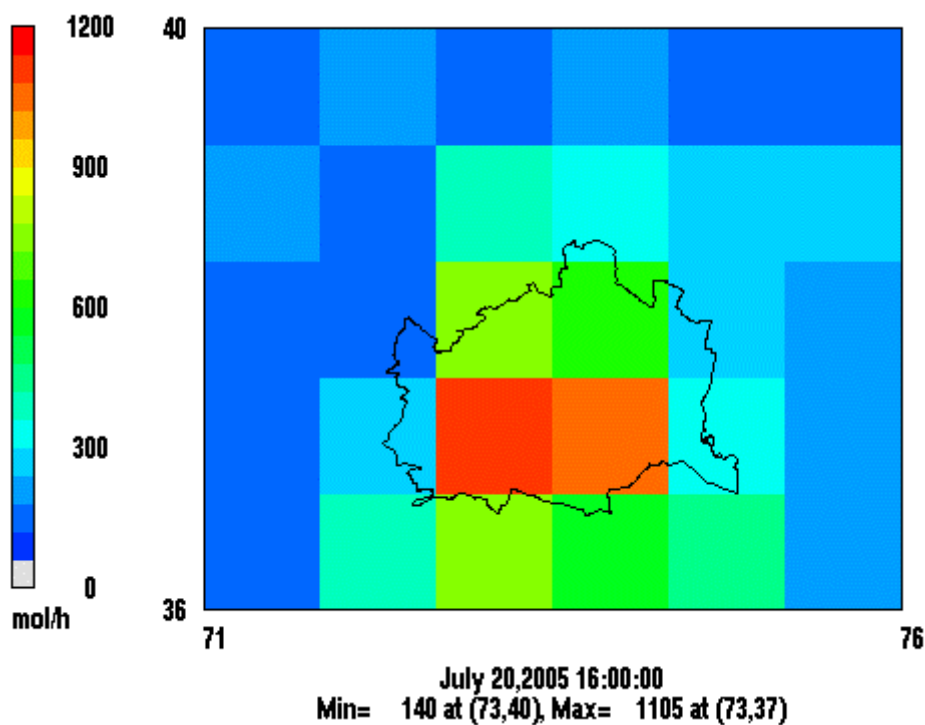


Abbildung 2-6: NO₂-Emissionen in Wien und der näheren Umgebung am Mittwoch dem 20. 7. 2005, 16:00 Uhr in mol/h×Gitterzelle für das innere Gitter (9.67 km × 9.67 km).

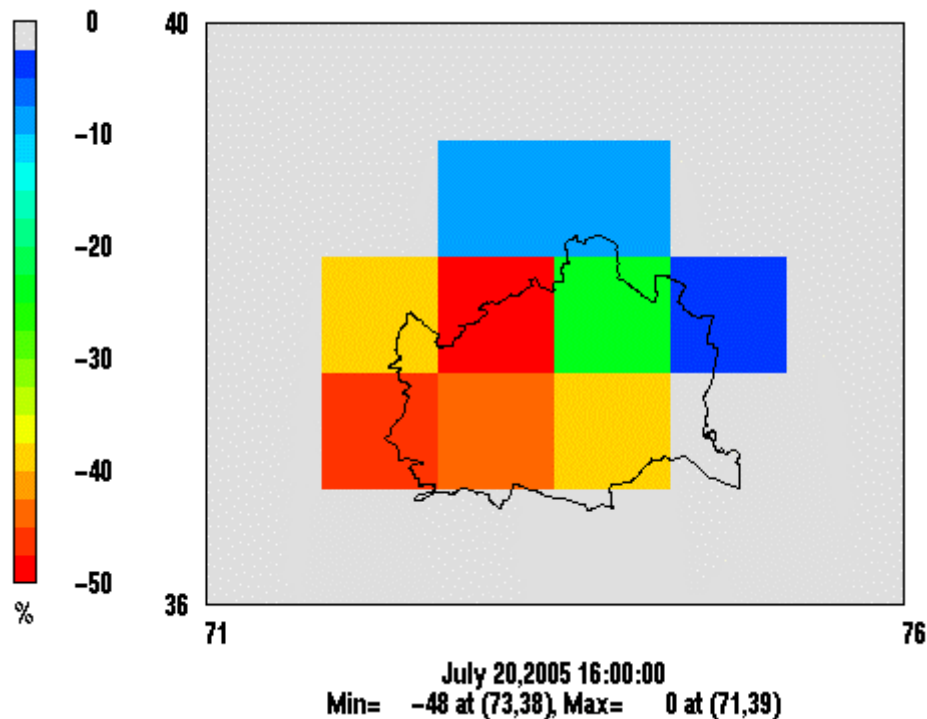


Abbildung 2-7: Prozentualer Unterschied zwischen den Emissionen des neuen Wiener Emissionskatasters emikat.at und den auf 5 km disaggregierten EMEP 2003 Emissionen für die nähere Umgebung von Wien im inneren Modellgitter (9.67 km × 9.67 km).

Die Haushaltsemissionen enthalten neben Emissionen aus der Raumheizung auch Emissionen, die vorwiegend im Sommer auftreten, z. B. von Rasenmähern. Da diese eine andere jahreszeitliche Verteilung als die Heizung haben, kann in diesem Fall die zeitliche Disaggregation ungenau sein.

Für das Emissionsmodell wurde ein schneller Algorithmus gefunden, mit dem die kleinen Gitterzellen des Katasters in die 9.67 km x 9.67 km großen Gitterzellen des Modells übertragen werden können.

Abbildung 2-6 zeigt die stündlichen Emissionen von NO₂ in der näheren Umgebung von Wien am Mittwoch, 20. 7. 2005, 16:00 Uhr, wie sie für das innere 9.67 km Gitter berechnet werden. Für die Flächen außerhalb des Stadtgebiets wurden die auf 5 km Auflösung umgerechneten EMEP 2003 Emissionen benutzt. Die Hauptemissionen treten in der südlichen Hälfte Wiens auf. Im Westen (Wiener Wald) sind sie äußerst gering. Die hohe Auflösung des Emissionskatasters wird jedoch mit der benutzten Modellkonfiguration nicht ausgenutzt, da in jeder Gitterzelle des Modells über 9200 Gitterzellen des Emissionkatasters mit 100 m Auflösung enthalten sind.

Einen Vergleich der Wiener Emissionen mit den Emissionen nach EMEP 2003 zeigt Abbildung 2-7. Die Wiener Emissionen sind generell geringer, im Maximum um 48 %. Im Südwesten Wiens (Lobau) beträgt der Unterschied in der Gitterzelle nur -2%. Der Grund hierfür ist, dass die Wiener Emissionen zum Teil nach der bottom-up Methode erstellt wurden, im Gegensatz zur top-down Methode des EMEP Katasters. So beruhen die Wiener Verkehrsemissionen auf Verkehrszählungen und die EMEP Verkehrsemissionen auf Fahrzeugzulassungen.

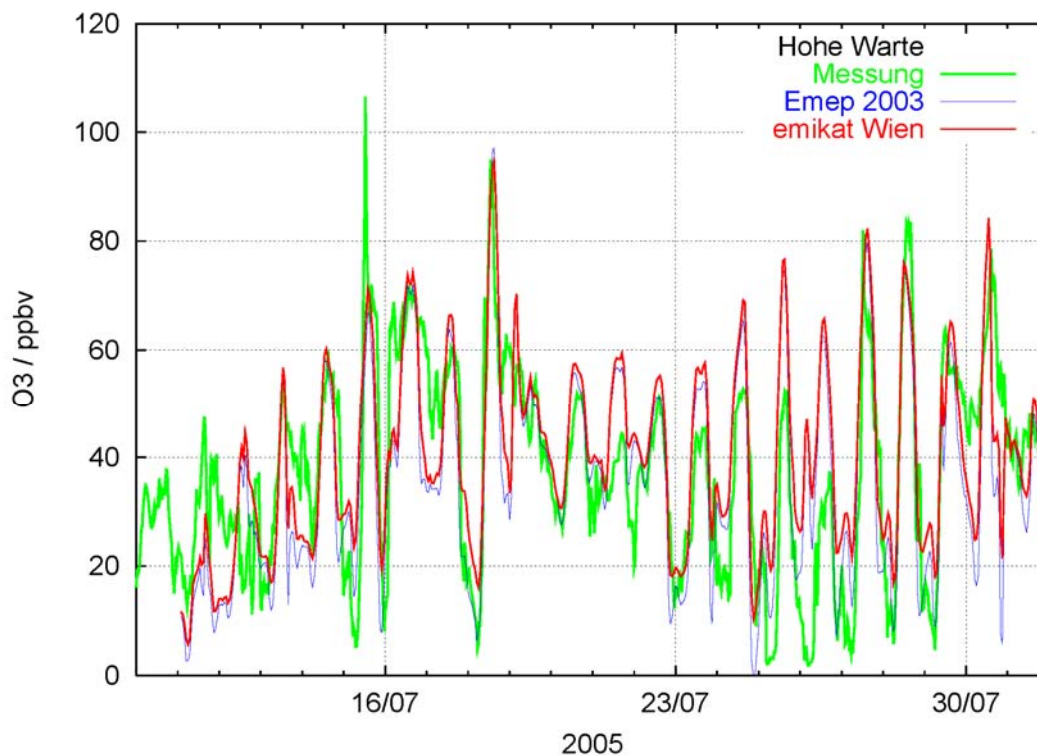


Abbildung 2-8: Zeitverlauf des Ozonvolumenmischungsverhältnisses an der Station Hohe Warte im Untersuchungszeitraum. Grün: Messung; blau: EMEP 2003, gerechnet mit EMEP Emissionen für 2003; rot: emikat Wien, gerechnet mit EMEP Emissionen für 2003, sowie den Emissionen aus emikat.at für das Stadtgebiet von Wien.

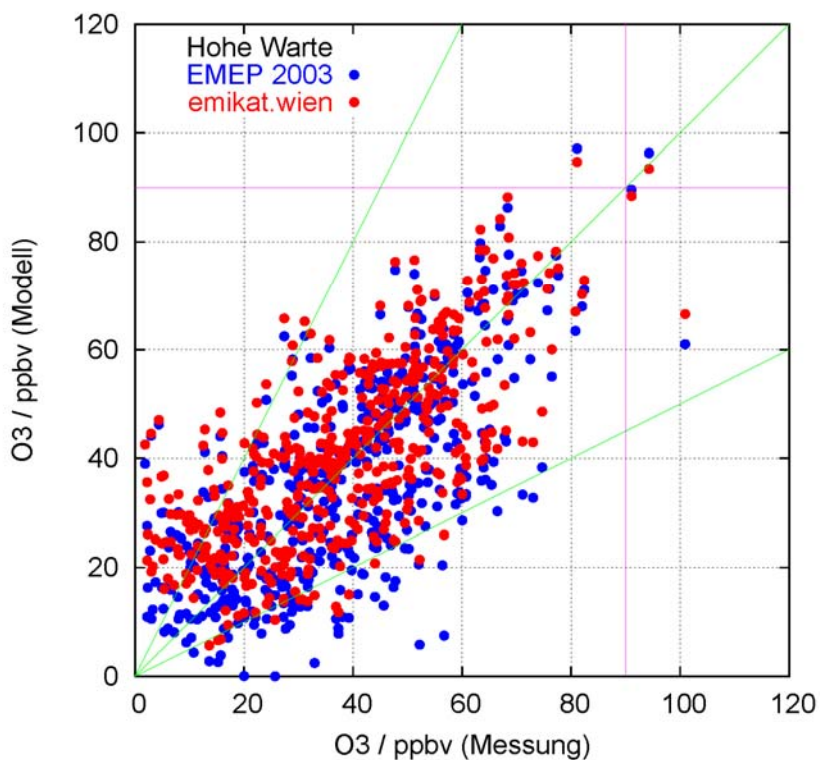


Abbildung 2-9: Streudiagramm der stündlichen Ozonwerte an der Station Hohe Warte im Untersuchungszeitraum gegen die Messwerte. blau: gerechnet mit EMEP Emissionen für 2003; rot: gerechnet mit EMEP Emissionen für 2003, sowie den Emissionen aus emikat.at für das Stadtgebiet von Wien.

Auf die berechneten Ozonkonzentrationen haben die neuen Wiener Emissionen erwartungsgemäß nur in Wien und der nächsten Umgebung einen größeren Einfluss. An entfernter gelegenen Stationen sind die Ozonverläufe, die mit den beiden Emissionskatastern berechnet wurden nahezu deckungsgleich. In Wien führen die geringeren Emissionen sowohl in den nächtlichen Minima wie auch in den Tagesmaxima zu etwas höheren Ozonkonzentrationen. An Stationen außerhalb Wiens treten vereinzelt auch sehr geringe Erhöhungen der Ozonmaxima auf.

Abbildung 2-8 zeigt den Verlauf des berechneten Volumenmischungsverhältnisses von Ozon an der Wiener Station Hohe Warte im Untersuchungszeitraum. Neben den Messwerten (grün) sind Modellergebnisse gezeigt. Beide Modelle verwenden EMEP 2003 Emissionen, für die rote Kurve wurden die neuen Wiener Emissionen im Stadtgebiet von Wien benutzt, für die blaue Kurve nicht. Die geringen Unterschiede sind auch im Streudiagramm in Abbildung 2-9 zu erkennen. Hier wird deutlich, dass die Unterschiede vor allem nachts bei geringen Ozonwerten auftreten. Welcher Emissionsdatensatz bessere Ergebnisse liefert kann nicht entschieden werden.

2.4. Einbindung der ECMWF Felder für Gesamtozon

Da Photolysereaktionen hauptsächlich durch UV-Absorption initiiert werden, ist die Gesamtozonsäule 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 von 300 DU 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 wurde eine Schnittstelle entwickelt, welche aus den aktuellsten ECMWF Feldern, sobald diese verfügbar sind, die Ozonwerte extrahiert und auf das CAMx Gitter interpoliert. Diese Werte wurden in einem weiteren Testlauf des Modells als Input verwendet.

Die vom Chemiemodell CAMx benötigten Photolysegeschwindigkeiten müssen in einer zuvor berechneten Tabelle bereitgestellt werden, in der für jede Photolysereaktion die Werte für verschiedene solare Zenitwinkel, Höhen über Grund, UV-Albedo des Bodens und atmosphärische Trübung neben den Gesamtozonsäulen berechnet wurden. Zur Erstellung dieser Tabelle wird von ENVIRON, die CAMx erstellt haben, ein Programm bereitgestellt, das auf dem Programm TUV aufbaut. TUV (Madronich and Flocke, 1998) ist auch bei den Autoren erhältlich (<http://www.acd.ucar.edu/TUV>). Dieses Programm erstellt wahlweise Daten für den CBM-IV und den SAPRC99 Mechanismus.

Für den Untersuchungszeitraum vom 10. 7. bis 31. 7. 2005 ergaben sich im Gebiet des äußeren Gitters Gesamtozonwerte zwischen 270 DU und 350 DU. Der bislang für die Berechnungen gewählte Mittelwert von 300 DU repräsentierte diesen Bereich somit recht gut. Im Verlauf eines Jahres können allerdings größere Schwankungen der Gesamtozonsäule auftreten, vorwiegend jedoch nicht in den für die Ozonprognose relevanten Sommermonaten. Dies illustriert Abbildung 2-10. Gezeigt sind die monatlichen Minima und Maxima sowie Mittelwerte der Gesamtozonsäulen aus den Messungen des BOKU-Met an der Station Hoher Sonnblick zwischen 1994 und 2003 (Simic et al., 2004) sowie die Monatsmittel an der Schweizerischen Station Arosa zwischen 1928 und 1979 mit Standardabweichung. Vor allem in den Wintermonaten werden Schwankungen der Ozonsäule zwischen 210 DU und 480 DU beobachtet.

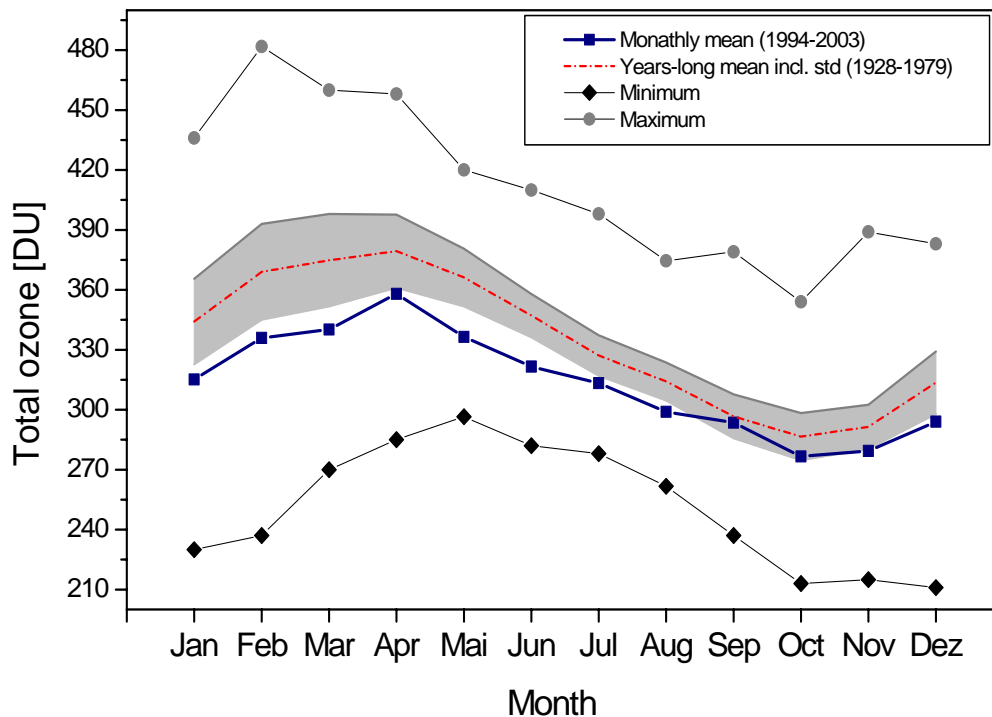


Abbildung 2-10: Monatliche Minima, Maxima und Mittelwerte der Gesamtozonmessungen an der Station Hoher Sonnblick zwischen 1994 und 2003 sowie die Monatsmittel an der Schweizerischen Station Arosa zwischen 1928 und 1979 mit Standardabweichung (aus Simic et al., 2004)

Die Auswirkungen auf das berechnete bodennahe Ozon, die sich aus der Verwendung einer genaueren Ozonsäule ergeben, sind erwartungsgemäß nur gering. Werden die Zeitverläufe des Volumenmischungsverhältnisses an den Stationen des Modelllaufs mit ECMWF - Gesamtozon mit denen des entsprechenden Modelllaufs mit 300 DU gemeinsam gezeichnet, sind die Kurven fast immer überlagert.

2.5. CBM-IV als chemischer Mechanismus

In der Pilotstudie zur Ozonprognose (Baumann-Stanzer et al., 2005a) war für zwei Episoden aus den Jahren 2003 und 2004 getestet worden, wie sich der SAPRC99 Mechanismus (Carter, 2000) und der CBM-IV Mechanismus (Gery et al., 1989) für diesen Zweck eignen. Dabei zeigte sich, dass der CBM-IV Mechanismus grundsätzlich niedrigere Werte für Ozon lieferte und mit dem SAPRC99 Mechanismus eine bessere Übereinstimmung mit den Messungen in Nordost-Österreich erzielt wurde.

Dieses Ergebnis wurde durch einen Testlauf mit dem CBM-IV Mechanismus bestätigt. Es wurde wie in der Pilotstudie die CBM-IV Version mit aktuellerer Isoprenchemie (Carter, 1996) verwandt. Abbildung 2-11 zeigt den Zeitverlauf des Volumenmischungsverhältnisses an der Station Kittsee im Untersuchungszeitraum. Die mit SAPRC99 gerechnete Kurve (blau) weist eine wesentlich bessere Übereinstimmung mit den Messungen (grün) auf als die mit CBM-IV gerechnete Kurve (schwarz). Die CBM-IV Werte sind nicht nur in den Maxima, sondern auch in den nächtlichen Minima niedriger. Die gemessenen Minima werden aber auch mit diesem Mechanismus nicht erreicht. Die Ursache für diese schlechte Übereinstimmung zwischen Messung und Modell ist die Überschätzung der nächtlichen Durchmischung der unteren Grenzschicht der Atmosphäre, da in der Realität mehr Ozon durch NO-Emissionen abgebaut wird als im Modell.

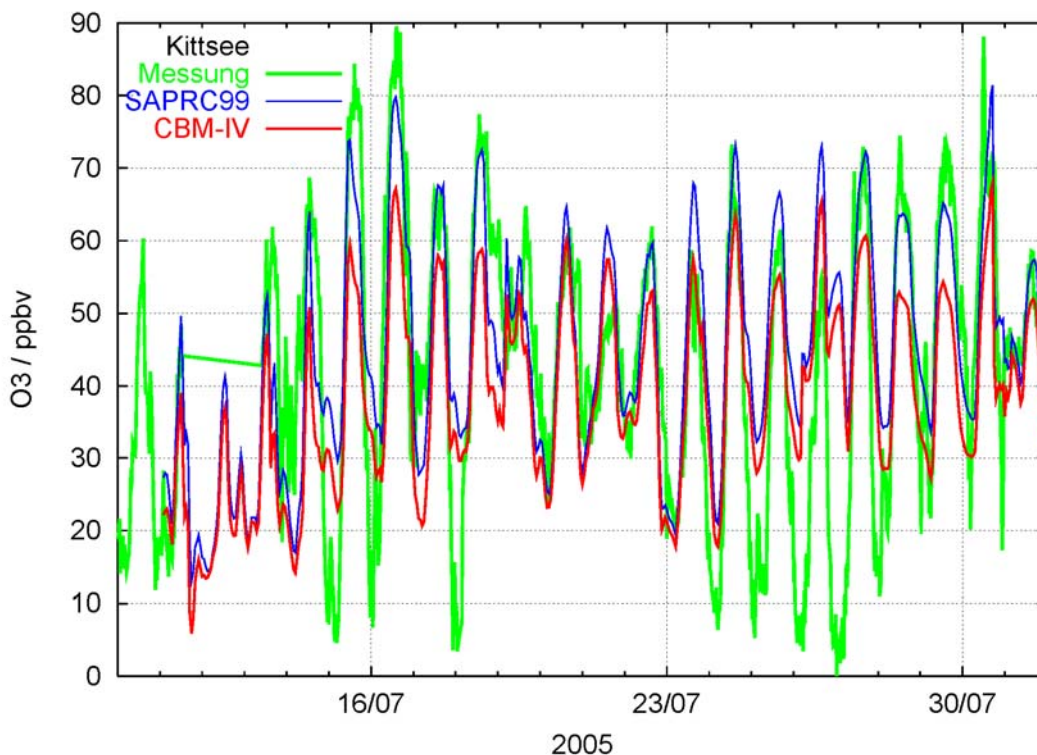


Abbildung 2-11: Zeitverlauf des Ozonvolumenmischungsverhältnisses an der Station Kittsee im Untersuchungszeitraum. Grün: Messung; blau: gerechnet mit SAPRC99; schwarz: gerechnet mit konventionellem CBM-IV; rot: gerechnet mit modifiziertem CBM-IV.

In der im Juni 2005 veröffentlichten neuesten Version des CAMx - Modells (Version 4.20), die in dieser Studie benutzt wurde und die auch für die operationelle Luftschadstoffvorhersage im Jahr 2006 verwendet werden soll, wurde gegenüber der bislang verwendeten Version 4.10s vor allem die Aerosolchemie verbessert. Für reine Gasphasenanwendungen wie die Ozonvorhersage gibt es in der Version aber auch die Möglichkeit, mit einem modifizierten CBM-IV Mechanismus mit zusätzlichen chemischen Reaktionen zu rechnen.

Einige Reaktionen von H_2 und O_x wirken sich besonders in der oberen Troposphäre aus, mehrere Reaktionen von NO_3 mit Auswirkungen auf die Nachtchemie sind ebenfalls eingefügt. Schließlich sind noch zusätzliche Photolysereaktionen enthalten, die NO_x aus Reservoirgasen (PAN , HNO_3 , N_2O_5 , ...) zurückbilden. Dies soll zu etwas höheren Ozonprognosen führen als mit dem konventionellen CBM-IV Mechanismus berechnet (Zaveri und Peters, 1999). Tabelle 2-2 zeigt die Anzahl der in den drei chemischen Mechanismen berücksichtigten chemischen Reaktionen.

Auch mit diesem Mechanismus wurden Rechnungen ausgeführt. Der Zeitverlauf des berechneten Volumenmischungsverhältnisses von Ozon ist ebenfalls in Abbildung 2-11 dargestellt (rote Kurve). Die Ozonkonzentration liegt zwar häufig über den mit dem konventionellen CBM-IV gerechneten Werten. Eine ähnlich gute Übereinstimmung zwischen Messung und Modell wie beim SAPRC99 Mechanismus wird aber nicht erreicht. Dies Ergebnis zeigt auch der Streudiagramm aller stündlichen Werte für die Station Kittsee (Abbildung 2-12).

Tabelle 2-2: Vergleich der verschiedenen Chemiemechanismen.

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

Das gleiche Ergebnis ergibt sich, wenn in Abbildung 2-13 die im Ozonüberwachungsgebiet 1 maximal aufgetretenen Ozonwerte in einem Streudiagramm verglichen werden. Im Untersuchungszeitraum wäre mit beiden CBM-IV Simulationen nie eine Überschreitung der Ozoninformationsschwelle von $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (90 ppbv) prognostiziert worden. Besonders die gemessene Überschreitung mit 135 ppbv am 15. Juli 2005 an der Station Schwechat (auch über der Alarmschwelle von $240 \mu\text{g}/\text{m}^3$) wird schlecht berechnet. An diesem Tag waren auch an anderen Stationen Werte oberhalb der Informationsschwelle gemessen worden.

Diese Ergebnisse zeigen, dass auch weiterhin der SAPRC99 Mechanismus für die Vorhersage der Ozonkonzentration bevorzugt werden sollte.

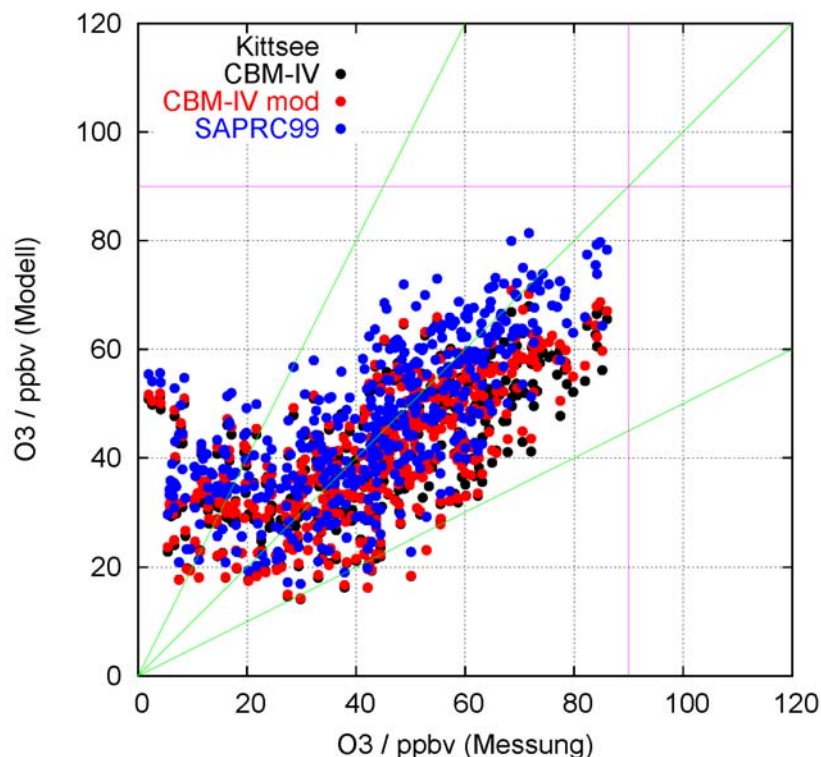


Abbildung 2-12: Streudiagramm der stündlichen Ozonwerte an der Station Kittsee im Untersuchungszeitraum, berechnet mit dem SAPRC99 Mechanismus (blau), dem konventionellen CBM-IV (schwarz) und dem modifizierten CBM-IV (rot) gegen die entsprechenden Messwerte. Alle Modellrechnungen wurden mit EMEP2003 und emikat.wien Emissionen sowie ECMWF Ozonsäule ausgeführt.

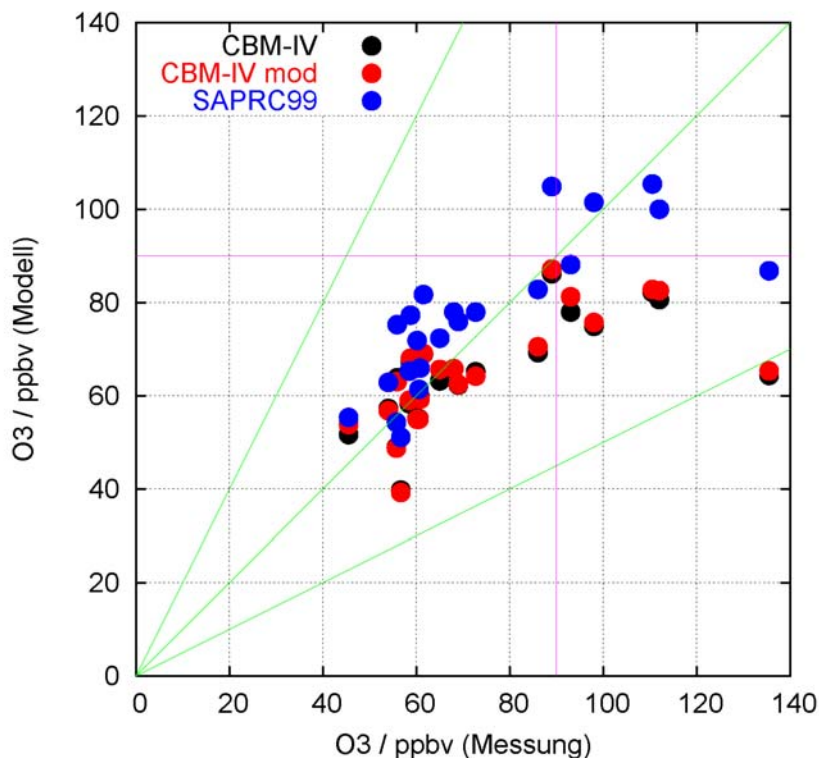


Abbildung 2-13: Streudiagramm zum Vergleich des im Untersuchungszeitraum berechneten maximalen täglichen Volumenmischungsverhältnisses von Ozon im Ozonüberwachungsgebiet 1 mit dem täglichen Maximalwert an allen Stationen. Die Modellläufe entsprechen denjenigen aus Abbildung 2-12.

2.6. Berechnung der Randwerte für den nächsten Tag

Bei der Prognoserechnungen des Jahres 2005 wurde die Ozonkonzentration im September generell überschätzt. Als Ursache wurde angenommen, dass für alle Rechnungen des Jahres einheitliche Randbedingungen für den Rand des äußeren Gitters benutzt wurden, welche den Konzentrationen aus Rechnungen für den 11. Juli 2003 (Krüger, 2004b) entsprachen. Diese frühlommerlichen Konzentrationen waren offensichtlich für Rechnungen im Spätsommer 2005 unpassend.

Daher sollten Methoden erprobt werden, welche die Randkonzentrationen besser an die jeweils aktuelle Situation anpassen. Eine Möglichkeit wäre, Konzentrationen von einem anderen operationellen Modell mit größerem Modellgebiet zu übernehmen (siehe nächster Abschnitt). Ein anderer Weg besteht darin, geeignete Randkonzentrationen aus den Modellergebnissen nahe dem Gebietsrand selbst zu berechnen.

Dieser Zugang hat den Nachteil, dass sich die Randwerte nur langsam den sich ändernden Bedingungen anpassen. 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.

Dieser Weg hat aber andererseits den Vorteil, dass die Methode 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.

Zur Berechnung der Randkonzentrationen des äußeren Gitters wurden verschiedene Änderungen am CAMx - Code vorgenommen. Eine Extraktion aus den üblichen CAMx - Ausgabedateien erschien aus folgenden Gründen nicht sinnvoll:

- Die AVERAGE - Dateien enthalten im normalen Modellbetrieb häufig nur die Werte der untersten Modellschicht, es werden aber alle Modellschichten benötigt.
- Die INSTANT - Dateien liegen nach einem Modelllauf häufig nur für den letzten Zeitschritt vor. Außerdem wäre für die gasförmigen Komponenten eine Umrechnung von Konzentration auf Volumenmischungsverhältnis nötig gewesen.

Im folgenden werden die Änderungen an den einzelnen Programmteilen des CAMx - Modells beschrieben. Es wird jeweils auch das Verzeichnis in der Struktur von CAMx Version 4.20 angegeben. Tabelle 2-3 zeigt die geänderten Programmteile im Überblick.

CAMx.f (im Directory CAMx/)

Im Hauptprogramm wird beim Aufruf des Unterprogramms **wrtcon**, die die stündlich gemittelten Konzentrationen (AVERAGE) des äußeren Gitters ausgibt, ein Aufruf des neuen Unterprogramms **wrtbou** eingefügt.

filunit.com (im Directory Inc/)

Im common-block **funit** wurde die Variable **ibcout** eingefügt, in der die unit-Nummer für die Ausgabedatei mit Randbedingungen steht.

openfils.f (im Directory IO_bin)

Im Unterprogramm **openfils**, das sämtliche Ein- und Ausgabedateien öffnet, wurde eingebaut, dass die Ausgabedatei für die Randbedingungen geöffnet wird. Dies geschah zwischen der Öffnung der Average- und der Deposition-Dateien.

Der Dateiname hat den gleichen Rootnamen wie alle Ausgabedateien des jeweiligen Modelllaufs, enthält also das aktuelle Datum, und endet mit der Endung ".bcout".

cncprep.f (im Directory IO_bin/)

Das Unterprogramm **cncprep**, aufgerufen von **startup**, liest die Kopfzeilen der Eingabe-AIRQUALITY- und -INSTANT-Dateien und schreibt die Kopfzeilen der Ausgabe-AVARAGE-Dateien. Vor der Ausgabe der Kopfzeilen für die Ausgabedatei des äußeren Gitters wurde die Ausgabe der Kopfzeilen für die neue BOUNDARY-Ausgabedatei eingefügt.

Tabelle 2-3: Änderungen am CAMx - Code zur Berechnung von Randkonzentrationen.

Filename	Directory	
CAMx.f	CAMx/	geändert
filunit.com	Inc/	geändert
openfils.f	IO_bin/	geändert
cncprep.f	IO_bin/	geändert
wrtbou.f	IO_bin/	neu

wrtbou.f (im Directory IO_bin)

wrtbou ist ein neues Unterprogramm, welches die Randwerte zur Verwendung am nächsten Modelltag ausgibt. Es wurde in Anlehnung an **wrtcon** geschrieben.

Fest als data-Statement einprogrammiert ist $jboun = 3$. Diese Zahl gibt an, dass die Werte der 3. Spalte bzw. Zeile des Gitters verwendet werden. Die Zahl kann jedoch im Code geändert werden. Ein Wert von 1 ist nicht sinnvoll, da die Randzellen des Gitters vom Modell nicht berechnet werden.

Das Unterprogramm **wrtbou** schreibt als Randwerte für alle Spezies, die auch in den AVERAGE-Dateien ausgegeben werden, und für alle Hörschichten den um $jboun-1$ nach innen verschoben Gitterwert. Als Eckwert wird jeweils der Wert 0 geschrieben und nahe den Ecken, also z. B. zwischen dem Index 1 und dem Index $jboun-1$ an der linken unteren Ecke, der nächste benachbarte Wert, im genannten Fall der Wert mit den Indizes $jboun, jboun$.

Die Werte von Spezies, die nicht in den AVERAGE-Dateien ausgegeben werden, werden nicht berücksichtigt. Dies ist ein Nachteil der aufgeführten Methode. Jedoch lassen sich eventuelle Fehler dadurch verringern, dass alle wesentlichen stabileren Spezies mit höheren Konzentrationen in die Outputliste aufgenommen werden. Dies führt jedoch leider dazu, dass die Ausgabe nicht nur auf jene Spezies beschränkt werden darf, für die unmittelbares Interesse besteht (O_3 , NO, NO_2).

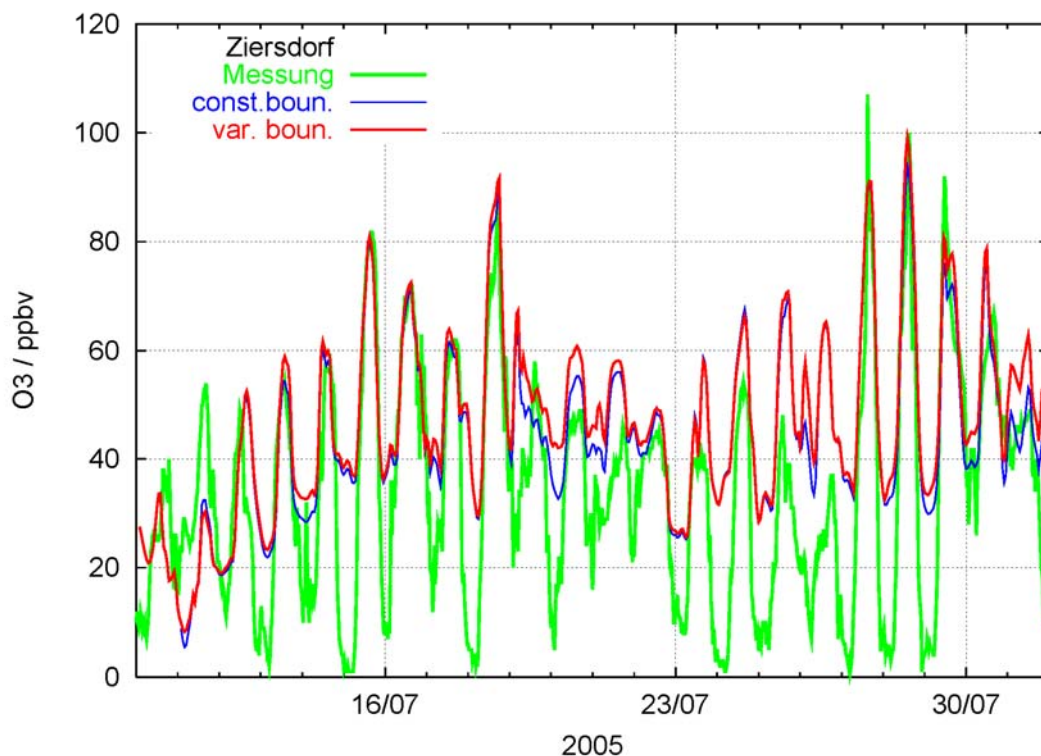


Abbildung 2-14: Zeitverlauf des Ozonvolumenmischungsverhältnisses an der Station Ziersdorf im Untersuchungszeitraum. Grün: Messung; blau: gerechnet mit zeitlich konstanten Randkonzentrationen (SAPRC99, EMEP2003, emikat.wien, ECMWF-Ozonsäule); rot: gerechnet mit zeitlich variablen Rand (sonst wie die blaue Kurve).

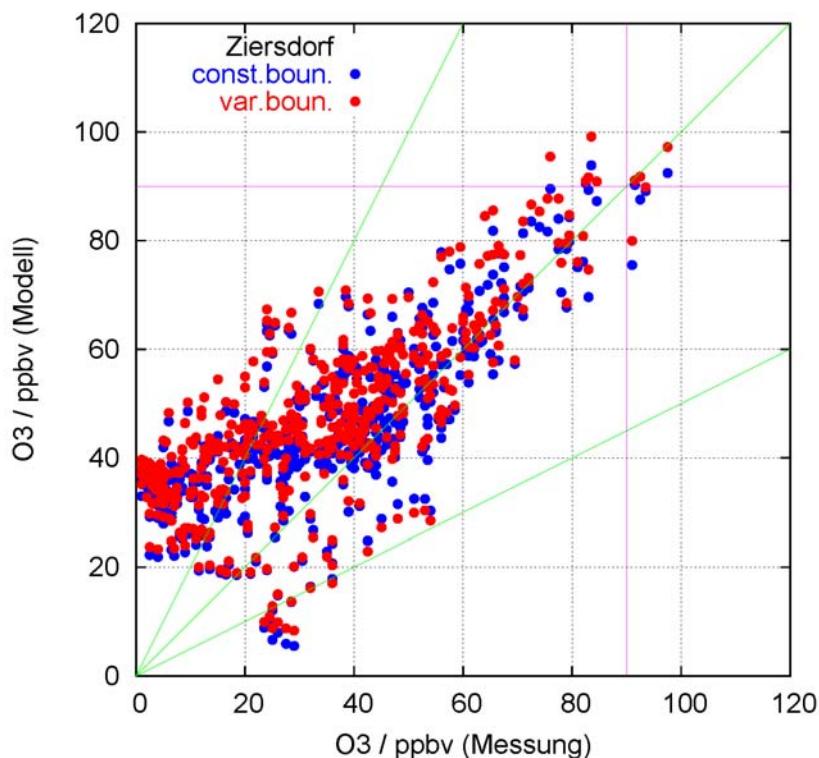


Abbildung 2-15: Streudiagramm der stündlichen Ozonwerte an der Station Kittsee im Untersuchungszeitraum. Blau: gerechnet mit zeitlich konstanten Randkonzentrationen (SAPRC99, EMEP2003, emikat.wien, ECMWF-Ozonsäule); rot: gerechnet mit zeitlich variablen Rand (sonst wie die blaue Punkte).

Die Auswirkungen der variablen Randkonzentrationen sollten vor allem nach einer längeren Laufdauer des Modellsystems sichtbar werden. Für die kurze Zeit des Untersuchungszeitraums dieser Studie von drei Wochen sind sie für die seit August 2004 bestehende Messstation Ziersdorf in Abbildung 2-14 als Zeitverlauf und Abbildung 2-15 als Streudiagramm dargestellt. Häufig liegen die mit variablen Rand gerechneten Konzentrationen etwas höher als in der bisherigen Rechnung. An der betrachteten Station sind die Unterschiede aber, wie im gesamten Hauptinteressengebiet Nordostösterreich, meist kleiner als 10 ppbv, wobei keine tageszeitliche Variation der Änderung auftritt. Die Unterschiede werden vielmehr durch den Transport von Luftmassen mit unterschiedlichem Hintergrund bestimmt.

An den Modellrändern sind die Unterschiede naturgemäß größer als im Hauptuntersuchungsgebiet, das sich in der Modellmitte befindet. Dies zeigt die Darstellung der Differenz des Volumenmischungsverhältnisses zwischen dem Lauf mit zeitlich konstantem Rand (SAPRC99, EMEP2003, emikat.wien, ECMWF-Ozonsäule) und dem mit variablen Rand für den maximalen Tageswert 12 Tage nach Beginn der Berechnung mit variablem Rand am 23. Juli 2005 (Abbildung 2-16). Unterschiede über 10 ppbv treten vor allem über Wasserflächen (Schwarzes Meer, südwestliches Mittelmeer, Ärmelkanal, Ostsee) sowie über den Pyrenäen auf, während in der Modellmitte die Änderungen kleiner sind.

Fünf Tage später, am 28. Juli 2005, sind vor allem die Unterschiede in den höher gelegenen Gitterzellen im Bereich der Alpen auffällig (Abbildung 2-17). Im Hauptuntersuchungsgebiet Nordostösterreich betragen die Unterschiede weniger als 10 ppbv.

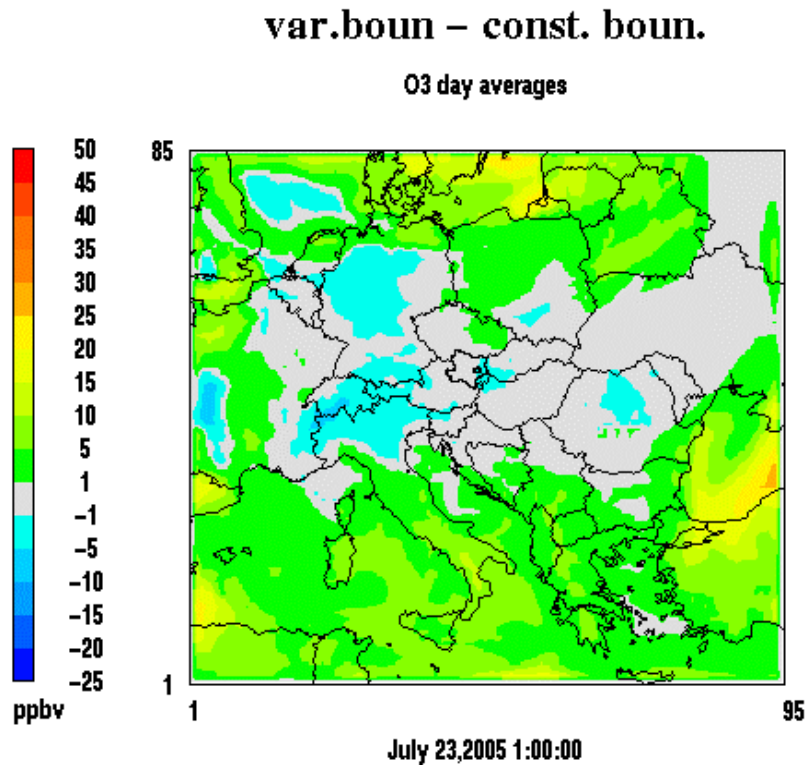


Abbildung 2-16: Differenz der maximalen täglichen Ozonwerte am 23. 7. 2005 im äußeren Modellgitter zwischen der Rechnung mit variablen und mit konstanten Randbedingungen.

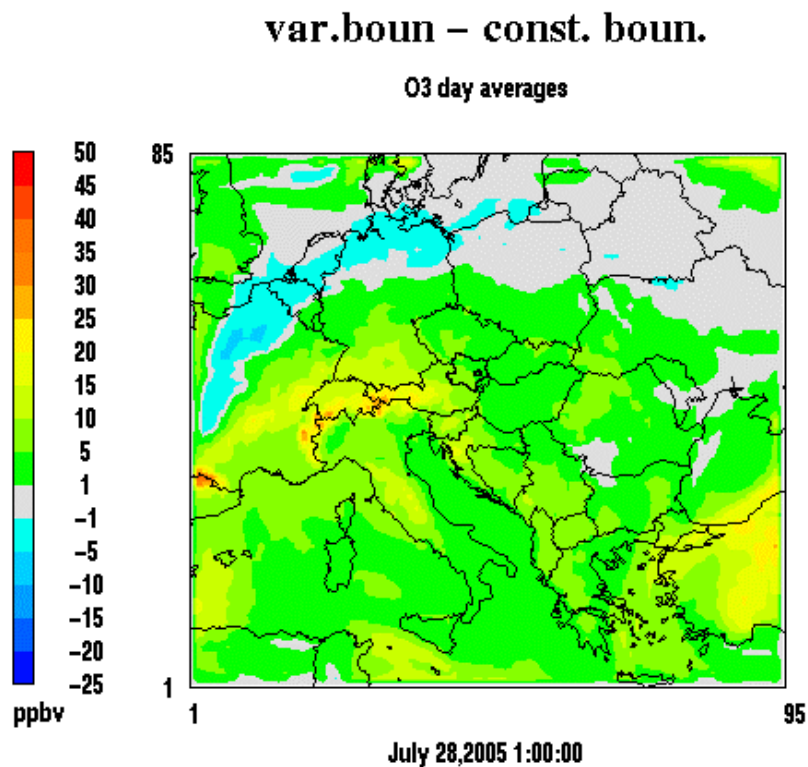


Abbildung 2-17: Differenz der maximalen täglichen Ozonwerte am 28. 7. 2005 im äußeren Modellgitter zwischen der Rechnung mit variablen und mit konstanten Randbedingungen.

2.7. Übernahme der Randwerte von einem anderen Modell

Ursprünglich war geplant, auch zu testen, ob Randwerte von einem anderen prognostischen Photochemiemodell mit einem größeren Modellgebiet übernommen werden könnten. Zunächst war das CHIMERE - Modell vorgesehen, mit dem in Frankreich täglich Luftschadstoffvorhersagen gerechnet werden (http://www.prevair.org/fr/prevision_o3.php). Da die östliche Begrenzung des dort verwendeten Modells jedoch etwa auf einer Linie Lettland – Albanien verläuft, erwies es sich in der gegenwärtigen Konfiguration als ungeeignet.

Aus diesem Grund konnten entsprechende Tests in dieser Studie nicht durchgeführt werden. Der Austausch von Randwerten zwischen verschiedenen Modellen wird jedoch von vielen Arbeitsgruppen in Europa angestrebt. Daher ist zu erwarten, dass sich in näherer Zukunft Möglichkeiten für diese Option ergeben. Einerseits ist für das CHIMERE - Modell geplant, das Modellgebiet zu erweitern, andererseits wird von der Kölner EURAD - Gruppe täglich mit grober Auflösung ein Modelgitter für die Nordhemisphäre gerechnet (<http://www.eurad.uni-koeln.de/>). Schließlich befindet sich auch eine COST-Aktion mit dem Titel “Towards a Multi-Model Network for Chemical Weather Forecasting and Assessment” in Vorbereitung.

3. Weitere Diskussion der Ergebnisse

3.1. Statistische Berechnungen an den Messstationen

Zur Beurteilung der Güte der Modellierung im Ozonüberwachungsgebiet 1 wurde die Standardabweichung zwischen den Messungen und den Modellergebnissen für alle zur Verfügung stehenden Stationen in diesem Gebiet, die auch Ozon gemessen haben, berechnet. Es wurde jeweils der Korrelationskoeffizient (Tabelle 3-1) sowie der Standardfehler der Voraussage $s_{y,x}$ (Tabelle 3-2) bestimmt.

Die Spalte „0, Prognose“ zeigt die Werte für die aktuelle Prognose aus dem Jahr 2005. Diese unterscheiden sich ein wenig von den in Baumann-Stanzer et al. (2005b) für den Monat Juli angegebenen Werten (Mittelwerte: $r = 0.68$, $s_{y,x} = 9.68$), da in dieser Studie nur der Zeitraum zwischen dem 11. und dem 31. Juli 2005 berücksichtigt wurde.

Für alle mit dem SAPRC99-Mechanismus gerechneten neuen Modellläufe (vergleiche Tabelle 3-3) liegen die gemittelten Korrelationskoeffizienten bei 0.67 oder 0.66. Die CBM-IV-Läufe zeigen mit 0.62 und 0.63 eine schlechtere Korrelation. Der Standardfehler liegt bei den SAPRC99-Läufen zwischen 11.0 ppbv und 11.7 ppb. Der Standardfehler der CBM-IV-Läufe ist erstaunlicherweise mit 10.1 ppbv und 10.2 ppbv etwas geringer.

Tabelle 3-1: Korrelationskoeffizient der Modellrechnungen mit den Stationsmessungen.

	0	1	2	3	4	5	6	7
	Prognose	Referenz	EMEP 2003	emikat .w	ges. O3	CBM- IV	Mod CBM	boun
Amstetten	0.61	0.59	0.59	0.59	0.59	0.57	0.56	0.59
Annaberg	0.63	0.59	0.59	0.59	0.59	0.55	0.55	0.54
Bad Vöslau	0.64	0.62	0.64	0.63	0.63	0.57	0.57	0.61
Dunkelsteiner W.	0.72	0.68	0.69	0.69	0.69	0.65	0.65	0.68
Eisenstadt	0.58	0.58	0.59	0.59	0.59	0.56	0.58	0.59
Forsthof	0.65	0.60	0.59	0.59	0.60	0.52	0.52	0.54
Gänserndorf	0.72	0.71	0.71	0.71	0.71	0.65	0.67	0.72
Großenzersdorf	0.77	0.74	0.73	0.76	0.76	0.71	0.72	0.75
Hainburg	0.76	0.76	0.76	0.77	0.77	0.70	0.73	0.76
Heidenreichstein	0.70	0.68	0.69	0.69	0.68	0.63	0.64	0.65
Hermannskogel	0.59	0.54	0.50	0.56	0.57	0.48	0.50	0.54
Himberg	0.74	0.71	0.70	0.74	0.73	0.69	0.70	0.73
Hohe Warte	0.72	0.71	0.70	0.72	0.72	0.66	0.67	0.71
Illmitz		0.70	0.70	0.70	0.70	0.65	0.67	0.69
Stephansplatz	0.64	0.64	0.63	0.65	0.65	0.60	0.62	0.65
Irnfrtz	0.74	0.70	0.71	0.70	0.70	0.62	0.64	0.68
Kittsee	0.72	0.68	0.70	0.70	0.70	0.66	0.67	0.72
Klosterneuburg	0.73	0.72	0.71	0.72	0.72	0.65	0.67	0.71
Kollmitzberg	0.74	0.68	0.67	0.67	0.67	0.63	0.65	0.68
Krems	0.63	0.59	0.60	0.60	0.60	0.56	0.56	0.59
Laaer Berg	0.74	0.72	0.68	0.72	0.72	0.65	0.67	0.71
Lobau	0.78	0.77	0.75	0.78	0.78	0.73	0.74	0.77
Mistelbach	0.71	0.69	0.71	0.70	0.70	0.64	0.66	0.70
Mödling	0.65	0.62	0.63	0.63	0.62	0.56	0.57	0.59
Oberwart	0.59	0.60	0.62	0.62	0.62	0.60	0.60	0.59
Pillerdorf	0.74	0.70	0.70	0.70	0.70	0.62	0.64	0.68
Pöchlarn	0.65	0.62	0.62	0.62	0.62	0.59	0.59	0.61
Purkersdorf	0.64	0.60	0.61	0.61	0.61	0.56	0.56	0.59
Payerbach	0.61	0.58	0.60	0.60	0.60	0.52	0.56	0.59
Schwechat	0.73	0.71	0.68	0.72	0.72	0.66	0.68	0.71
Stixneusiedl	0.75	0.74	0.72	0.74	0.74	0.68	0.70	0.73
Stockerau	0.76	0.76	0.75	0.75	0.75	0.69	0.71	0.75
St. Pölten	0.72	0.69	0.69	0.69	0.69	0.65	0.65	0.68
Streithofen	0.65	0.61	0.62	0.62	0.61	0.57	0.57	0.59
St. Valentin	0.66	0.65	0.65	0.65	0.64	0.61	0.61	0.65
Ternitz	0.61	0.61	0.63	0.63	0.63	0.57	0.58	0.61
Tulln	0.69	0.67	0.67	0.67	0.67	0.62	0.62	0.67
Vösendorf		0.70	0.67	0.71	0.71	0.64	0.66	0.70
Waidhofen / Y.	0.58	0.57	0.56	0.56	0.56	0.53	0.53	0.57
Wiesmath	0.70	0.67	0.68	0.68	0.68	0.58	0.64	0.66
Wiener Neustadt	0.65	0.64	0.66	0.66	0.66	0.60	0.61	0.63
Wolkersdorf	0.73	0.73	0.73	0.73	0.73	0.66	0.69	0.72
Ziersdorf	0.77	0.77	0.78	0.77	0.77	0.73	0.74	0.76
Mittelwert	0.69	0.67	0.67	0.67	0.67	0.62	0.63	0.66

Tabelle 3-2: Standardfehler der Voraussage $s_{y,x}$ zwischen Modellrechnungen und Stationsmessungen.

	0	1	2	3	4	5	6	7
	Prognose	Referenz	EMEP 2003	emikat .w	ges.03	CBM- IV	Mod CBM	boun
Amstetten	12.1	12.7	12.6	12.6	12.7	11.2	11.7	13.5
Annaberg	10.8	13.5	13.1	13.1	13.2	11.8	12.5	16.3
Bad Vöslau	9.8	10.5	10.2	10.2	10.2	9.7	9.9	11.2
Dunkelsteiner W.	9.9	10.8	10.6	10.5	10.5	9.3	9.7	11.0
Eisenstadt	11.5	12.2	12.4	12.0	12.1	11.2	11.3	12.7
Forsthof	9.5	10.9	10.7	10.7	10.7	10.0	10.4	12.2
Gänserndorf	10.8	10.9	10.6	10.5	10.5	9.7	9.6	10.6
Großenzersdorf	10.9	11.1	11.9	10.6	10.6	10.1	10.1	10.9
Hainburg	10.6	10.5	9.8	9.6	9.6	9.2	8.9	10.0
Heidenreichstein	8.7	8.8	8.6	8.5	8.6	7.7	8.1	9.6
Hermannskogel	14.0	15.5	15.9	14.1	14.0	12.8	12.7	14.8
Himberg	11.9	13.1	14.1	12.4	12.4	11.6	11.7	12.8
Hohe Warte	12.1	13.0	13.1	11.8	11.8	10.9	10.9	12.3
Illmitz		10.6	10.7	10.3	10.4	9.8	9.8	10.9
Stephansplatz	13.3	14.2	14.3	13.0	12.9	11.7	11.6	13.3
Irnfrtz	9.1	9.7	9.6	9.4	9.4	8.7	8.8	10.1
Kittsee	11.2	11.0	10.2	10.0	10.0	9.0	9.2	9.9
Klosterneuburg	11.3	12.3	12.1	11.3	11.2	10.3	10.2	11.7
Kollmitzberg	10.4	11.5	11.6	11.6	11.6	10.7	10.9	12.4
Krems	10.1	11.0	10.7	10.5	10.6	9.2	9.6	11.1
Laaer Berg	11.6	12.8	13.7	11.8	11.8	11.3	11.2	12.5
Lobau	12.7	13.5	14.0	12.1	12.0	11.5	11.4	12.5
Mistelbach	10.5	11.0	10.5	10.4	10.5	9.7	9.7	10.7
Mödling	10.2	11.1	10.8	10.6	10.7	9.9	10.1	11.6
Oberwart	8.8	9.3	9.0	8.9	9.0	7.9	8.3	9.9
Pillerdorf	9.5	10.4	10.3	10.0	10.1	9.2	9.3	10.7
Pöchlarn	10.6	11.4	11.3	11.3	11.3	9.8	10.3	12.0
Purkersdorf	10.7	11.7	11.3	11.3	11.3	10.1	10.5	11.9
Payerbach	7.7	8.7	8.2	8.2	8.2	7.5	7.9	9.8
Schwechat	13.7	14.8	15.5	13.3	13.2	12.5	12.5	13.8
Stixneusiedl	11.5	11.8	12.6	11.7	11.7	11.1	11.0	12.1
Stockerau	10.6	11.2	11.1	10.6	10.6	9.8	9.7	10.8
St. Pölten	10.4	11.4	11.3	11.2	11.2	10.2	10.5	11.8
Streithofen	11.8	12.8	12.6	12.5	12.5	11.1	11.5	13.1
St. Valentin	12.9	13.4	13.3	13.3	13.4	12.0	12.4	14.1
Ternitz	8.4	9.0	8.6	8.6	8.6	8.2	8.5	10.0
Tulln	11.5	11.9	11.7	11.4	11.4	9.9	10.1	11.4
Vösendorf		13.4	14.1	12.3	12.3	11.7	11.6	13.0
Waidhofen / Y.	10.7	11.2	11.2	11.2	11.3	10.2	10.6	12.4
Wiesmath	7.5	8.2	8.1	8.1	8.1	8.0	8.0	9.3
Wiener Neustadt	9.2	9.9	9.6	9.6	9.6	9.1	9.4	10.8
Wolkersdorf	10.6	10.8	10.7	10.4	10.4	9.7	9.5	10.7
Ziersdorf	10.0	10.5	10.2	10.0	10.0	9.0	9.1	10.4
Mittelwert	10.7	11.5	11.5	11.0	11.0	10.1	10.2	11.7

3.2. Rechenzeiten

Die Rechnungen wurden am BOKU-Met mit zwei unterschiedlichen Rechnern ausgeführt:

- **imp6:** Dies ist ein Zwei-Prozessor-PC mit 2.4 GHz Opteron Prozessoren. Das Modell wurde mit OpenMP betrieben. Als Compiler wurde pgf90 der Portland Group mit den Optionen „-O2 -pc 64 -Mdalign -Mextend -Mnoframe -byteswapio -Bstatic“ verwendet.
- **imp8:** Dieser PC hat nur einen einzigen Pentium 4 Prozessor mit 3.4 GHz. Compiliert wurde mit dem Intel-Compiler ifort und den Optionen „-O2 -align dcommons -extend_source -convert big_endian -ipo -static“.

Tabelle 3-3 gibt an, wie viel CPU-Zeit durchschnittlich für die Berechnung eines Modelltages gebraucht wurde. Diese Zeiten waren auf der imp6 mit zwei Prozessoren deutlich kürzer als auf der imp8. Für die Modellläufe mit SAPRC99 und unterschiedlichen Emissionen bzw. Ozongesamtsäulen brauchte die imp6 einheitlich etwa 1 h CPU/Modelltag. Ein Vergleich mit Lauf 03 (emikat.wien) auf imp8 zeigt, dass dieser Rechner etwa einen Faktor 3 langsamer ist. Es wurde nicht untersucht, ob mit anderen Compileroptionen die Rechenzeit verkürzt werden konnte.

Lauf 03 lässt sich mit den beiden CBM-IV-Läufen vergleichen. Der einfache konventionelle CBM-IV Mechanismus benötigt etwa einen Faktor 4 weniger Rechenzeit als der SAPRC99 und der modifizierte CBM-IV etwa 15 % mehr als konventionell.

Die Ausgabe der Randkonzentrationen in Lauf 07 erhöht die Rechenzeit etwa um 3 %.

Tabelle 3-3: Modifikationen der einzelnen Testläufe und Rechenzeiten.

	Lauf	Emissionen (allg.)	Emissionen Wien	Ozonsäule	Chemie	äußerer Rand	CPU
01	Referenz	EMEP 1999	EMEP 1999	300 DU	SAPRC99	konstant	1 h 03 m (imp6)
02	EMEP 2003	EMEP 2003	EMEP 2003	300 DU	SAPRC99	konstant	1 h 02 m (imp6)
03	emikat.wien	EMEP 2003	emikat.wien	300 DU	SAPRC99	konstant	3 h 10 m (imp8)
04	Ozonsäule	EMEP 2003	emikat.wien	ECMWF	SAPRC99	konstant	1 h 02 m (imp6)
05	CBM-IV	EMEP 2003	emikat.wien	ECMWF	CBM-IV	konstant	0 h 48 m (imp8)
06	CBM-IV mod.	EMEP 2003	emikat.wien	ECMWF	CBM-IV mod.	konstant	0 h 55 m (imp8)
07	var. boun.	EMEP 2003	emikat.wien	ECMWF	SAPRC99	variabel	3 h 16 m (imp8)

4. Schlussbemerkungen

Änderungen an den Emissionskatastern haben in den vorgestellten Rechnungen einen geringen Einfluss auf die Ozonkonzentration. Indirekt bestätigt dies frühere Ergebnisse zum Einfluss regionaler Emissionen auf das Ozon. In Studien zu einer Ozonepisode im Jahre 2000 (Krüger, 2004a) und zum Ozonsommer 2003 (Krüger, 2004b) war der Einfluss regionaler und europäischer Emissionen und des atmosphärischen Hintergrundes auf die Ozonkonzentration untersucht worden. Regionale Emissionen trugen an vereinzelten Tagen maximal 30 % zu Ozonspitzenwerten im Wiener Raum bei, meistens war ihr Einfluss aber wesentlich geringer. Den größten Einfluss hatte in den Rechnungen der atmosphärische Hintergrund. Anders formuliert heißt das, dass Ozonspitzenwerte mit den in Mitteleuropa üblichen Spurenstoffkonzentrationen mehr durch die aktuelle Wetterlage als durch einzelne Emissionen beeinflusst werden.

Trotzdem sollten bei Prognoserechnungen immer die besten zur Verfügung stehenden Emissionswerte Verwendung finden. Daher werden die in dieser Studie vorgestellten Aktualisierungen auch bei der Prognose der zukünftigen Ozonsaison 2006 benutzt werden und auch in weiterer Zukunft sollten jeweils aktuelle Werte bzw. neuere, höher aufgelöste Kataster (beispielsweise für Niederösterreich) in das Modellsystem integriert werden.

Mit dem vorliegenden Modellsystem mit einer räumlichen Auflösung von 9.6 km konnten auch die Stärken des neuen Wiener 100 m Emissionskatasters nicht ausgenutzt werden. Für andere Studien mit hoch aufgelösten Modellgittern werden sich aber die Vorteile dieses Katasters zeigen lassen.

Bei den geringen Schwankungen der Schichtdicke von Gesamtozon während der untersuchten Episode waren keine großen Unterschiede in den Ergebnissen mit der zeitlich und räumlich aufgelösten Gesamtozonvorhersage des ECMWF zu erwarten gewesen. Die ausgeführten Rechnungen zeigen aber auch, dass mit dieser Methode kein zusätzlicher Fehler im Modell auftrat. Bei einer Verwendung dieser Methode in der Zukunft ist das Modell somit auf eventuell auftretende Extremwerte im Gesamtozon oder auf die größeren Schwankungen zu anderen Jahreszeiten vorbereitet.

Die Tests mit dem CBM-IV Mechanismus bestätigen die Ergebnisse der Pilotstudie (Baumann-Stanzer, 2005a), da sich der SAPRC99 Mechanismus wiederum als geeigneter erwies. Der modifizierte CBM-IV Mechanismus führt zu den erwarteten höheren Ozonkonzentrationen, jedoch nicht in einem zufriedenstellenden Ausmaß.

Ob die neue Methode zur Berechnung der Randwerte geeignet ist, über einen längeren Zeitraum verlässlich Änderungen zu modellieren, muss die Prognose im Sommer 2006 als Langzeittest zeigen. Zu einem späteren Zeitpunkt sollte auch die Verwendung von Randwerten aus anderen Modellen, sobald diese für ein ausreichendes Modellgebiet verfügbar sind, getestet werden.

5. Literatur

- Baumann-Stanzer, K., M. Hirtl und B. C. Krüger, 2005a: 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, Mai 2005.
- Baumann-Stanzer, K., M. Hirtl und B. C. Krüger, 2005b: Testbetrieb des Modellsystems zur Prognose von Sommersmog auf Basis operationeller regionaler Wettervorhersage. Zwischenbericht, Zentralanstalt für Meteorologie und Geodynamik und Institut für Meteorologie der Universität für Bodenkultur Wien, Nov. 2005.
- 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.
- Guenther, A. B., P. C. Zimmermann, R. Harley, R. K. Monson, and R. Fall, 1993: Isoprene and monoterpene emission rate variability: model evaluations and sensitivity analyses. *J. Geophys. Res.*, 98, 12609-12617.
- Krüger, B. C., 2004a: Aktionsplan für Sofortmaßnahmen gemäß § 15 Ozon-Gesetz - Meteorologisch chemische Modellrechnungen - Bericht an den Magistrat der Stadt Wien, MA 22, Wien, an das Amt der niederösterreichischen Landesregierung, Gruppe Raumordnung, Umwelt und Verkehr, Abteilung Umweltrecht, St. Pölten, und an das Amt der burgenländischen Landesregierung Abt. 5 - Anlagenrecht, Umweltschutz und Verkehr, Hauptreferat III - Natur- und Umweltschutz, Eisenstadt.
- Krüger, B. C., 2004b: Photochemische Modellrechnungen zum Ozonsommer 2003 in Nordost-österreich, Institut für Meteorologie, Department Wasser - Atmosphäre - Umwelt, Universität für Bodenkultur Wien, Wien.
- Madronich, S. and S. Flocke, 1998: The role of solar radiation in atmospheric chemistry. in *Handbook of Environmental Chemistry* (P. Boule, ed.), Springer-Verlag, Heidelberg, 1998, pp. 1-26.
- Orthofer, R., H. Humer, W. Winiwarter, P. Kutschera, W. Loibl, T. Strasser, and J. Peters-Anders, 2005: emikat.at – Emissionsdatenmanagement für die Stadt Wien. ARC system research, Bericht ARC-sys-0049, Seibersdorf, Austria, April 2005.
- Simic, S., Weihs, P., Kromp-Kolb, H., Vacek, A., Laube, W., 2004: Investigations of long- and short-term changes in total ozone and UV radiation at the Sonnblick Observatory (3106 m, Austria). In: (Ed.C.Zerefos): *Quadrennial Ozone Symposium 2004*, 1-8.June, Kos; ISBN 960-630-103-6.
- Stohl, A., E. Williams, G. Wotawa und H. Kromp-Kolb, 1996: A European inventory of soil nitric oxide emissions and the effect of these emissions on the photochemical formation of ozone. *Atmospheric Environment* 30, 3741-3755.
- Vestreng, V., K. Breivik, M. Adams, A. Wagener, J. Goodwin, O. Rozovskaya, J. M. Pacyna, 2005: Inventory Review 2005, Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive, Initial review of HMs and POPs, Technical report MSC-W 1/2005, ISSN 0804-2446
- Williams, E. J., D. D. Parrish, and F. C. Fehsenfeld, 1987: Determination of NO_x emissions from soils. *J. Geophys. Res.* 92, 2173-2179.
- Winiwarter, W. and J. Zueger, 1996: Pannonisches Ozonprojekt, Teilprojekt Emissionen. Endbericht. Report OEFZS-A-3817, Austrian Research Center, Seibersdorf.
- Zaveri, R. A. und L. K. Peters, 1999: A new lumped structure photochemical mechanism for large-scale applications. *J. Geophys. Res.* **104**, 30387-30415.