



Modellierung von B(a)P Konzentrationen und Depositionen mit CMAQ: Abhängigkeit von der Parameterisierung physikalischer Prozesse im angekoppelten mesoskaligen Modell MM5

V. Matthias, M. Quante and A. Aulinger

GKSS Forschungszentrum, Institut für Küstenforschung, Max-Planck-Straße 1, 21502
Geesthacht (volker.matthias@gkss.de, Tel. 04152-872346, Fax 04152-872332)

Dreidimensionale Eulersche Chemietransportmodelle (CTM) wie das Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Model (Byun und Ching, 1999) benötigen hochaufgelöste meteorologische Felder als Eingangsdaten. Die Qualität dieser Felder hat entscheidenden Einfluss auf die Transportvorgänge und chemischen Umsetzungen im CTM. Daher ist es von herausragender Bedeutung zunächst die Güte der meteorologischen Felder zu untersuchen bevor Aussagen über die Ergebnisse des CTM gemacht werden können.

Am GKSS Forschungszentrum wird das von der US EPA entwickelte Chemietransportmodell CMAQ betrieben. Die Modellregion umfasst Europa mit einer Gitterweite von $54 \times 54 \text{ km}^2$ sowie die Nordsee mit einer Gitterweite von $18 \times 18 \text{ km}^2$. Dreißig Schichten in der Vertikalen sorgen für eine gute Auflösung von Grenzschichtprozessen. CMAQ kann mit unterschiedlichen Algorithmen für die photochemischen Prozesse (RADM (Stockwell et al., 1990) und CB IV (Gery et al., 1989)) betrieben werden. Außerdem enthält es einen hochentwickelten Aerosolalgorithmus (Binkowski und Roselle, 2003), der drei unterschiedliche Größenklassen und 13 chem. Komponenten unterscheidet. Am GKSS Forschungszentrum wurde CMAQ erweitert, so dass auch polyaromatische Kohlenwasserstoffe (PAKs) und hier insbesondere das kanzerogene Benzo(a)Pyren (B(a)P) modelliert werden können (Aulinger et al., 2007). CMAQ kann bequem mit dem mesoskaligen meteorologischen Modell MM5 (Grell et al., 1995) verbunden werden, da eine Schnittstelle für die meteorologischen Ein-

gangsdaten von MM5 bereits entwickelt wurde (Otte, 1999). Beide Modelle lassen sich zudem frei über das Internet herunterladen und werden weltweit an vielen wissenschaftlichen Instituten betrieben. MM5 kann mit unterschiedlichen Kombinationen von physikalischen Parameterisierungen betrieben werden, die je nach Aufgabenstellung ausgewählt werden müssen. Dies beinhaltet die Möglichkeit den Einfluss der Parameterisierung auf die berechneten meteorologische Felder genauer zu untersuchen. Allerdings sollte bei der Vielzahl möglicher Kombinationen zunächst eine sinnvolle Fragestellung entwickelt werden. Außerdem müssen sich die Ergebnisse so testen lassen, dass eine Entscheidung für die günstigsten Modelloptionen getroffen werden kann.

Bei der Modellierung von persistenten, in der Atmosphäre nur gering konzentrierten Schadstoffen wie den PAKs geht es vor allem darum, lange Zeiträume bis zu mehreren Jahren sowie den großräumigen Transport modellieren zu können. Bei den durchgeführten Tests lag das Augenmerk daher darauf, dass die meteorologischen Felder keine systematischen räumlichen und zeitlichen Abweichungen von langfristigen Beobachtungsdaten aufweisen. Da der Ferntransport von Schadstoffen entscheidend davon abhängt wie der Vertikaltransport repräsentiert wird, wurden Vergleichsdaten gewählt, die auch Vertikalinformationen enthalten.

In der hier vorgestellten Untersuchung wurden die modellierten Felder zunächst exemplarisch für den Monat April des Jahres 2000 mit einem Satz von über 80 Radiosondendaten aus ganz Europa verglichen. Als Anfangs- und Randbedingungen wurden ERA40 Daten verwendet. Durch Verwendung verschiedener Nudging-Optionen wurden die modellierten Felder mehr oder weniger stark an die Reanalysen gebunden. Variiert wurden zudem das Bodenmodul und die Repräsentation der Wasseroberflächentemperatur (SST). Die Parameterisierungen der Wolkenmikrophysik, der Grenzschichtprozesse und der subskaligen Bewölkung wurden hingegen nicht verändert. Untersucht wurde dann der Einfluss der variierten Größen auf die Vertikalprofile von Wind, Temperatur, relativer und absoluter Feuchte. Zudem wurden Niederschlagsdaten an verschiedenen EMEP Stationen, an denen auch Depositionsdaten für einige Schadstoffe gemessen werden, als Qualitätsmaße miteinbezogen.

Die Ergebnisse belegen den hohen Einfluss des Nudging auf die konstante Güte der berechneten meteorologischen Größen. Die modellierten Feuchtefelder hängen auch stark von der Wahl des Bodenmoduls ab. Sie beeinflussen wiederum den Niederschlag und somit die Deposition von Schadstoffen, hier insbesondere des B(a)P. Nachdem eine Auswahl der günstigsten Modelloptionen getroffen werden konnte, wurden die meteorologischen Felder für einen kompletten Jahreslauf mit den Radiosondendaten verglichen. Der Einfluss der Felder auf Verteilung und Deposition von B(a)P konnte quantifiziert werden.

Zitate:

Aulinger, A., Matthias, V., Quante, M., 2007. Introducing a partitioning mechanism for PAHs into the Community Multiscale Air Quality modelling system and its application to simulating the transport of benzo(a)pyrene over Europe. *Journal of Applied Meteorology*, zur Veröffentlichung angenommen.

Binkowski, F.S., Roselle, S.J., 2003. Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model aerosol component. 1. Model description. *J. Geophys. Res.* 108, D6, 4183, doi: 10.1029/2001JD001409.

Byun, D.W., Ching, J.K.S., 1999. Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality Modeling System. EPA/600/R-99/030, US Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Washington DC.

Gery, M.W., Whitten, G.Z., Killus, J.P., Dodge, M.C., 1989. A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling. *J. Geophys. Res.* 94, 12925 - 12956.

Grell, G., Dudhia, J., and Stauffer, D.R., 1995. A Description of the Fifth-Generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5). NCAR Technical Note 398, NCAR, Boulder, Colorado, USA.

Otte, T.L., 1999. Developing meteorological fields, in Byun, D.W. and Ching, J.K.S., 1999. Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality Modeling System, EPA/600/R-99/030, US Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Washington DC.

Stockwell, W.R., Middleton, P. Chang, J.S., 1990. The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling. *J. Geophys. Res.* 95, D10, 16343-16367.