

**Abschlußbericht zum Projektteil:
'Mesoskalige Simulation von Dynamik, Transport und Chemie
in der unteren Stratosphäre und oberen Troposphäre
MESSTRO'**

Förderkennzeichen: 01 LO 9516

A. Ebel, J. Kowol-Santen, H.-J. Bock, J. Hendricks, E. Lippert
Universität zu Köln, Institut für Geophysik und Meteorologie

1. Einleitung

1.1 Aufgabenstellung

Mit einem mesoskaligen Modellsystem sollte der Einfluß dynamischer und chemischer Prozesse auf den Spurenstoffhaushalt der Tropopausenregion, d. h. der unteren Stratosphäre und oberen Troposphäre, untersucht werden. Ziel dieser Untersuchungen war die Beurteilung der Rolle dynamischer und chemischer Prozesse insbesondere für den Ozonhaushalt dieser Region sowie die quantitative Bestimmung der Flüsse von Luftmassen und Spurenstoffen durch die Tropopause. Im Zentrum des Interesses standen dabei insbesondere Episoden, die den vertikalen Spurenstofffluß auf der Mesoskala nachhaltig beeinflussen. Zu diesen austauschintensiven dynamischen Phänomenen gehören Tropopausenfaltungen, Kaltlufttropfen und Streamer.

Da sich das in diesem Arbeitspaket verwendete mesoskalige Modellsystem EURAD (Europäisches Ausbreitungs- und Depositionsmodell) sehr gut zur Untersuchung regionaler Effekte mit hoher zeitlicher und räumlicher Auflösung eignet, bildete die Analyse und die Quantifizierung des stratosphärisch-troposphärischen Austauschs für eine Vielzahl dynamisch unterschiedlicher Episoden den Schwerpunkt der Arbeiten in dem Vorhaben 'Mesoskalige Simulation von Dynamik, Transport und Chemie in der unteren Stratosphäre und oberen Troposphäre (MESSTRO)'. Entsprechend dem mesoskaligen Ansatz des Vorhabens, konzentrieren sich die Untersuchungen auf Europa und den Nordatlantik. Darüber hinaus wurden aber auch zwei Lagrangesche Verfahren für die Analyse der Dynamik der Tropopausenregion weiter- bzw. neuentwickelt und ins EURAD-Modellsystem implementiert. Der Konturadvektionsalgorithmus ermöglicht die Untersuchung feinskaliger Strukturen. Das Trajektorienverfahren dient der Beantwortung der Frage nach den physikalischen Prozessen, die für den irreversiblen Austausch von Luftmassen verantwortlich sind.

Diesen Lagrangeschen Verfahren wurden zwei Eulerschen Verfahren (Wei-Formel und Budgetanalysen) gegenübergestellt. Es wurden sowohl unterschiedliche dynamische Phänomene als auch verschiedene Jahreszeiten untersucht, um eine breitere Datenbasis für die Analyse des stratosphärisch-troposphärischen Austausches zu erstellen.

Diese Studien stellen auch einen Beitrag zur Bestimmung geeigneter Parametrisierungen

des stratosphärisch-troposphärischen Austauschs von Spurenstoffen auf der globalen Skala dar.

1.2 Voraussetzungen, wissenschaftlicher und technischer Stand zu Beginn des Vorhabens

Die Grundlage für die angesprochenen Untersuchungen bildete das dreidimensionale mesoskalige EURAD- Modellsystem, welches am Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität zu Köln für troposphärische Bedingungen entwickelt und speziell für die Analyse des Transportes und der Transformation von Flugzeugemissionen modifiziert wurde.

Wesentliche Erweiterungen des ursprünglichen EURAD- Modellsystems beinhalten die Anhebung des oberen Modellrandes von 100 hPa auf 10 hPa, die Einführung dynamischer Anfangs- und Randbedingungen, Erhöhung der vertikalen Auflösung im Tropopausenniveau sowie die Neuentwicklung eines Chemiemechanismus, der sowohl troposphärischen als auch stratosphärischen Bedingungen genügt. Für die Analyse der Tropopausendynamik wurden zwei Lagrangesche Verfahren als Postprozessoren des meteorologischen Modells MM5 ins Modellsystem implementiert: ein 2-D- Konturadvektionsalgorithmus und ein 3-D- Trajektorienalgorithmus. Darüber hinaus wurden Analyse- und Auswerteprogramme entwickelt, die ein besseres Verständnis der simulierten dynamischen und chemischen Prozesse ermöglichen.

Der stratosphärisch-troposphärische Austausch wurde zunächst mit dem MM5 untersucht, das für die im Vorhaben behandelte Fragestellung der Luftmassenflüsse die Formulierung von Wei (1987) beinhaltet. Das Chemie-Transport-Modell beinhaltet ein Modul zur Separation verschiedener chemischer und dynamischer Prozesse, welches es insbesondere ermöglicht, die vertikalen Flüsse von Spurenstoffen zu berechnen.

Die Boxversion des Chemiemoduls, die ursprünglich dazu gedacht war, Änderungen im chemischen Teil des EURAD- Modellsystems separat testen zu können, hat sich als wichtiges Werkzeug für den im Rahmen des Vorhabens durchgeführten Modellvergleich erwiesen.

1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Der Ablauf des Vorhabens erfolgte entsprechend der im Antrag dargestellten Planung. Im einzelnen war vorgesehen und wurde durchgeführt:

1. Übernahme von Modellen und Modulen; Einarbeitung; strukturelle Anpassung der Modelle an das zu behandelnde Problem,
2. Untersuchung geeigneter Rand- und Anfangsbedingungen,
3. Episodensimulationen, besonders für Episoden, während derer Tropopausenfaltungen aufgetreten sind oder für die Messungen vorliegen,
4. Analyse verschiedener Episoden hinsichtlich des Einflusses der Wetterlagen und Hintergrundfelder auf den Ozonhaushalt in der unteren Stratosphäre und oberen Troposphäre,

5. Untersuchung des Vertikaltransportes bei Intrusionen stratosphärischer Luft in die Troposphäre speziell im Hinblick auf das Ozon,
6. Simulation chemischer Umwandlungsprozesse bei austauschintensiven Wetterlagen und damit verbundenen variablen Hintergrundfeldern der Spurengase,
7. Quantifizierung des aufwärts und abwärts gerichteten Spurenstoffflusses bei austauschintensiven Ereignissen.

1.4 Zusammenarbeit

Innerhalb des Verbundprogramms wurden detaillierte Studien zum Vergleich der verschiedenen innerhalb des OFP zum Einsatz kommenden Modelle durchgeführt. Dabei wurde das EURAD- Chemiemodul anderen Chemie- Modellen unter der Koordination des Instituts für stratosphärische Chemie (ICG-1) des Forschungszentrums Jülich gegenübergestellt. Der Modellvergleich zeigte, daß sich die Resultate des Chemiemechanismus des EURAD- Modellsystems nur geringfügig von den Ergebnissen anderer Modelle unterscheiden.

In Kooperation mit der Universität Heidelberg (Zahn et al.) wurden zum einen Meßdaten der Transall zur Modellvalidierung genutzt und zum anderen die Modellergebnisse zur Interpretation der Messungen herangezogen.

Neben der Zusammenarbeit mit Partnern im Verbundprogramm bestand auch eine enge Zusammenarbeit mit anderen Arbeitsgruppen am Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität zu Köln, insbesondere mit dem EURAD- und dem COMMA-Projekt (COMMA: COlogne Model of the Middle Atmosphere).

Im Bereich der Modellierung der Atmosphärenchemie und der mesoskaligen Meteorologie bestand ein reger Austausch mit der EURAD-Gruppe, die darüber hinaus Bodenemissionen und ECMWF Analysen zur Verfügung stellte.

Detaillierte Modellvalidierung wurde ebenfalls in Zusammenarbeit mit dem EC Vorhaben 'TOASTE-C' durchgeführt. Hier bestand auch eine Kooperation bzgl. der Analyse der Luftmassen- und Spurenstoffflüsse durch die Tropopause. In Zusammenarbeit mit dem DFG-Projekt 'Grundlagen und Auswirkung der Luft- und Raumfahrt auf die Atmosphäre' wurde die Wei-Formel (s.u.) in Form eines Moduls ins MM5 implementiert.

Die Universität zu Köln stellte dem Vorhaben Speicherkapazität für die anfallenden großen Datenmengen zur Verfügung. Außerdem half das Universitätsrechenzentrum bei der Visualisierung der Modellergebnisse.

Die Rechnungen mit dem 3-D Modell wurden auf der CRAY Y-MP/864 und auf der CRAY T90 des HLRZ Jülich durchgeführt.

2. Ergebnisse

2.1 Das Modell

Die Modellrechnungen wurden mit einer auf die speziellen Gegebenheiten der Tropopausenregion angepaßten Version des EURAD- Modellsystems (Abb. 1) durchgeführt. Das EURAD- Modellsystem besteht aus zahlreichen Modulen. Die meisten davon dienen als Prä- oder Postprozessoren für eines der drei Hauptmodule: das Emissionsmodell EEM, das meteorologische Modell MM5 oder das Chemie-Transport-Modell CTM.

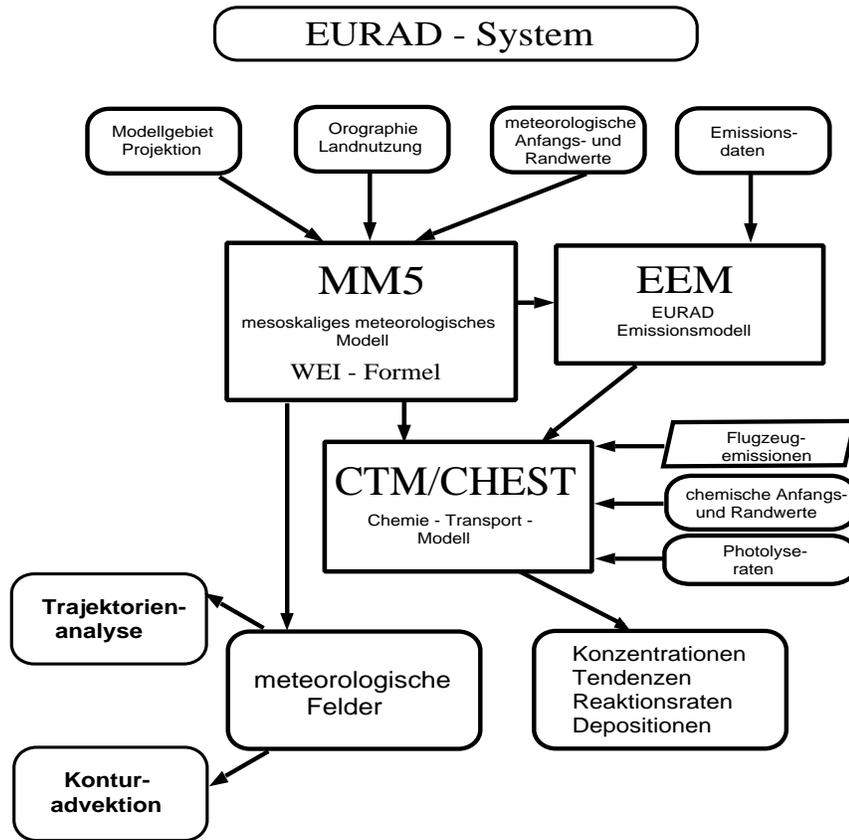


Abbildung 1: Schematische Darstellung des EURAD- Modellsystems

2.1.1 Das mesoskalige meteorologische Modell MM5

Das mesoskalige, meteorologische Modell MM5 (Penn State/NCAR Mesoscale Model/Version 5) ist die fünfte Version des an der Pennsylvania University und am National Center for Atmospheric Research (NCAR) entwickelten meteorologischen Modells (*Anthes et al., 1987, Dudhia, 1993*). Als Rand- und Anfangswerte werden Analysen des European Center for Medium Range Weather Forecast (ECMWF) verwendet. Diese Analysedaten liegen mit einer horizontalen Auflösung von etwa $1.5^\circ \times 1.5^\circ$ am Boden und auf vierzehn Druckniveaus zwischen 1000 und 10 hPa vor.

Das MM5 mit hydrostatischer Option berechnet als prognostische Variablen die horizontalen Windkomponenten, die Temperatur, den Bodendruck, die spezifische Feuchte, den Regenwassergehalt, den Wolkenwassergehalt, den Eisgehalt und Schnee. Für die Behandlung von Wolkenprozessen wird die Kuo-Cumulus-Parametrisierung (Kuo, 1974) verwendet. Bei der Formulierung der planetaren Grenzschicht wird das hochauflösende Blackadar-Modell (Blackadar, 1979) verwendet.

Das MM5 ist horizontal mit einem Arakawa-B Gitter diskretisiert (Abb. 2). Auf den Eckpunkten einer Gitterbox, den sogenannten dot-Punkten, werden die Windfelder, im Inneren der Box, auf den sogenannten cross-Punkten, alle anderen Variablen berechnet. Die vertikale Struktur wird durch Sigmakoordinaten beschrieben, wobei $\sigma = \frac{p-p_t}{p_s-p_t}$, p_t der Druck am Modelloberrand bei 10 hPa, p_s der Druck am Boden und p der Druck in der jeweiligen Modellschicht ist (Abb. 2). Die Windkomponenten werden auf den 30 Sigmaniveaus berechnet. Alle anderen Variablen werden auf dazwischen gemittelten Sigmaniveaus prognostiziert.

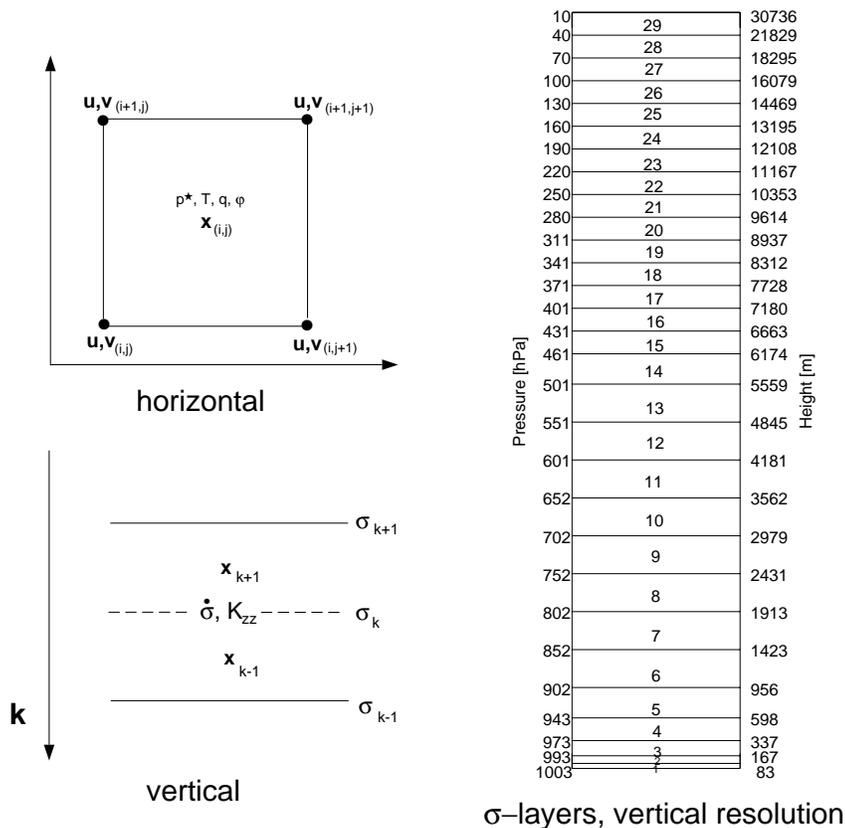


Abbildung 2: Schematische Darstellung der horizontalen und vertikalen Gitterstruktur des MM5.

Die vom MM5 berechneten meteorologischen Parameter dienen als Eingabedaten für das Chemie-Transport-Modell CTM.