## Heike Kunz: Der Einfluß von Fronten auf das Ozonbudget der mittleren und unteren Troposphäre. 2001

In der vorliegenden Arbeit wird die Bilanzierung von Ozon in einem Frontgebiet mit Hilfe eines mesoskaligen Chemie-Transport-Modells durchgeführt. Weiterhin werden für die planetare Grenzschicht (PBL) und die freie Troposphäre (FT) getrennte Bilanzen berechnet, und es wird der Austausch zwischen den beiden Atmosphärenschichten bestimmt.

Zur Identifizierung von Frontgebieten wird ein objektives Frontenanalyseverfahren dahingehend weiterentwickelt, daß Frontlinien und Frontgebiete vollautomatisch erkannt werden. Dieses Verfahren wird auf eine Kaltfront, die im Anschluß an eine Sommersmogepisode Zentraleuropa überquert, angewandt. Die gesamte Episode umfaßt acht Tage. Es ist eine spezielle Anpassung auf diese Episode nötig, um eine gute Übereinstimmung von berechneten Frontgebieten mit den aus Wetterkarten und Satellitenbildern analysierten Fronten zu erreichen. Die Anwendung des Verfahrens ermöglicht es, Fronten stündlich objektiv zu identifizieren.

Die Ozonmassenbilanz des Frontgebietes zeigt sich im Vergleich zu dem restlichen Gebiet, in dem ein Hochdruckgebiet die Wetterlage bestimmt, deutlich verändert. Im Frontbereich ergibt sich ein hoher Massenverlust, der betragsmäßig die Zunahme von Ozon im restlichen Gebiet, die vor allem durch Subsidenz und photochemische Produktion verursacht ist, noch um ein Viertel übertrifft und dies, obwohl das Frontgebiet nur etwa 7% der betrachteten Fläche ausmacht. Der wichtigste Verlustprozeß ist die vertikale Advektion, durch die Ozon bis in die obere Troposphäre transportiert wird. Der Ozonmassenverlust durch horizontale Advektion macht etwa ein Drittel des gesamten Verlustes aus. Wolkeneffekte führen zu einer nicht zu vernachlässigenden Zunahme von Ozon über Gebieten, für die vor der Front die Ozonkonzentrationen nicht erhöht waren, so vor allem über Skandinavien. Weiterhin kann eine im Vergleich zu dem restlichen Gebiet erhöhte Produktion von Ozon in den oberen Modellschichten des Frontgebietes beobachtet werden, die auf den vertikalen Transport von Vorläufersubstanzen wie Stickoxide und PAN und eine erhöhte Photolyserate zurückzuführen ist. Betrachtet man statt des Massenflußes die mittlere Konzentrationsänderung, so ergibt sich für das Frontgebiet eine Abnahme um -0.29 ppb h<sub>-1</sub>, bzw. -0.02 ppb h<sub>-1</sub> hochgerechnet auf das gesamte Gebiet. Die negative Tendenz ist in der PBL mit -1.56 ppb h<sub>-1</sub> (bzw. -0.11 ppb h<sub>-1</sub> für das gesamte Gebiet) noch deutlicher.

Der für den Austausch von Ozon zwischen PBL und FT wichtigste Prozeß ist die vertikale Advektion. Das gilt sowohl für das Frontgebiet, wo durch aufsteigende Luftmassen Ozon aus der PBL in die FT transportiert wird, als auch für das restliche Gebiet, wo durch Subsidenz Ozon aus der FT in die PBL gelangt. Einen umgekehrten Massenfluß verursacht das Entrainment. Das bedeutet, daß durch die konvektiv bedingte Zu- und Abnahme der PBL-Höhe im Frontgebiet Ozon aus der FT wieder in die PBL zurückgemischt wird. Für das restliche Gebiet ergibt sich durch das Entrainment ein Nettotransport aus der PBL heraus. Das Entrainment wirkt somit der vertikalen Advektion entgegen. Die vertikale Diffusion ist zu vernachlässigen.

This paper presents the budget of ozone for a frontal area calculated with the help of a mesoscale chemistry transport model. Additionally, separate budgets are calculated for the planetary boundary layer (PBL) and the free troposphere (FT) as well as the exchange between these two atmospheric layers.

To identify frontal areas an objective procedure to analyse fronts is developed in a way that frontlines and frontal areas are detected automatically. This procedure is applied to a coldfront, which crosses central Europe after a summersmog episode. A special adjustment is necessary to achieve a good correspondence of the calculated fronts with those analysed from weathercharts and satellite images. The application of this procedure makes it possible to objectively identify fronts every hour over a period of 8 days.

In comparison to the rest of the area, where the meteorological situation is determined by a high

pressure system, the mass budget of the frontal areas presents itself as definitely changed. Within the area of the front a high loss of mass can be identified, which surpasses by a quarter the increase of ozone in the remaining area, which is caused by subsidence and photochemical production, though the frontal area comprises only 7% of the whole analysed area. The most important loss-causing process is the vertical advection, by which ozone is transported up to the higher troposphere. The loss of ozone by horizontal advection is approximately one third of the whole loss. Cloud effects can not be neglected any more. They lead to an increase of ozone in areas in which concentrations of ozone were not increased before, mainly in Scandinavia. In addition, compared to the remaining area an increased production of ozone at higher levels of the frontal areas can be observed. This can be attributed to the vertical transport of precursors as NOx and PAN and a higher photolysis rate. If the change of ozone concentrations is considered instead of ozone mass fluxes there is to be seen a decrease of -0.29 ppb h<sub>-1</sub>, respectively -0.02 ppb h<sub>-1</sub> calculated for the whole area. Within the PBL the negative tendency of -1.56 ppb h<sub>-1</sub> (respectively - 0.11 ppb h<sub>-1</sub> for the whole area) is even clearer.

The most important process for the exchange of ozone between PBL and FT is vertical advection. This is valid for the frontal areas, where ozone is transported from the PBL into the FT by rising air masses, as well as for the remaining area, where ozone from the FT gets into the PBL by subsidence. A reverse mass flow is caused by entrainment. This means that due to the in- and decrease of the PBL-height, which is based on convection, in the frontal areas ozone is mixed back from the FT into the PBL. For the remaining area the entrainment results in a net transport from the PBL. Consequently the entrainment counteracts the vertical advection whereas the vertical diffusion can be neglected.