

Entwicklung und Anwendung eines online-gekoppelten Chemiemoduls für das mikroskalige Stadtklimamodell PALM-4U

Renate Forkel (1), Basit Khan (1), Matthias Mauder (1), Sabine Banzhaf (2), Emmanuele Russo (2), Farah Kanani-Sühring (3), Björn Maronga (3), Siegfried Raasch (3), Mona Kurppa (4), and Klaus Ketelsen (5)

(1) Karlsruher Institut für Technologie (KIT), IMK-IFU, Garmisch-Partenkirchen, Germany (renate.forkel@kit.edu), (2) Freie Universität Berlin, Institut für Meteorologie, TrUmf, Berlin, (3) Leibniz Universität Hannover, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Hannover, (4) Universität Helsinki, Institute for Atmospheric and Earth System Research, Helsinki, Finland, (5) Unabhängiger Software Consultant, Berlin

Large Eddy Simulation (LES)–Modelle ermöglichen es nicht nur, die wesentlichen Skalen der turbulenten Strömung aufzulösen, sondern sind ebenso in der Lage, Gebäudestrukturen, Oberflächenwärmeflüsse an Gebäudefassaden und Straßenschluchten explizit darzustellen. Obwohl sich diese kleinskaligen Einflüsse stark auf die Ausbreitung, und damit auch auf die chemische Umwandlung und Deposition von Luftschadstoffen in urbanen Systemen auswirken, fanden LES-Modelle bisher für städtische Luftqualitätsstudien wegen des hohen Aufwandes nur geringe Verwendung. Mit PALM-4U steht ein neues mikroskaliges Modell mit online gekoppeltem Chemiemodul für hochaufgelöste Simulationen im urbanen Bereich zur Verfügung, das auf der Basis des seit Jahren bewährten LES-Modells PALM (Maronga et al., 2015, *Geosci. Model Dev.*, 8, doi:10.5194/gmd-8-2515-2015) entwickelt wurde.

Für die numerische Integration der Gasphasenchemie-Reaktionen wurde die aktuelle Version des Kinetic PreProcessor (KPP, Version 2.2.3) verwendet, was eine flexible Anpassung des chemischen Mechanismus an die jeweiligen Anforderungen ermöglicht. Für den LES-Modus von PALM-4U wurden aufgrund des ohnehin sehr großen Rechenaufwands von LES- und Atmosphärenchemie-Modellen stark vereinfachte Gasphasenchemiemechanismen bereitgestellt, die lediglich die im urbanen Kontext bedeutendsten chemischen Spezies berücksichtigen, d.h. O₃, NO, NO₂, CO, und eine kleine Anzahl von VOC und Reaktionsprodukten. Zusätzlich stehen alternativ ein vollständigerer Chemiemechanismus zur Verfügung, sowie ein Mechanismus, der auf das photostationäre Gleichgewicht beschränkt ist. Weiterhin besteht die Möglichkeit, mit Hilfe eines geeignet formulierten Mechanismus die Gasphasenchemie mit dem in PALM-4U implementierten Aerosolmodell SALSA (Kokkola et al. 2008, *Atmos. Chem. Phys.*, 8, doi:10.5194/acp-8-2469-2008) zu koppeln. Aufgrund der Flexibilität durch die Verwendung des KPP-Präprozessors kann das Modellsystem jederzeit um weitere Chemiemechanismen erweitert werden.

Exemplarisch werden Modellergebnisse für ein Gebiet im Zentrum Berlins um den Ernst-Reuter-Platz gezeigt und die Performance unterschiedlicher Chemiemechanismen verglichen sowie der Einfluss verschiedener Ansätze für die lateralen Randbedingungen betrachtet.