



Doctoral Thesis

## Three-dimensional model study of the ozone production in the Po Basin

**Author(s):**

Bärtsch-Ritter, Nathalie Sabrina Paula

**Publication Date:**

2002

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-004485394> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

DISS. ETH NO. 14786

**THREE-DIMENSIONAL MODEL STUDY OF THE  
OZONE PRODUCTION IN THE PO BASIN**

A dissertation submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZURICH

for the degree of  
Doctor of Natural Sciences

presented by

**NATHALIE SABRINA PAULA BÄRTSCH – RITTER**

Dipl. Geogr., University of Basel

born on October 3, 1968

citizen of

Zürich, Mels (SG), Füllinsdorf (BL) and Eptingen (BL)

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Thomas Peter, examiner

Dr. André S.H. Prévôt, co-examiner

Dr. Bernhard Vogel, co-examiner

2002

## Summary

Within the frame of the European project EUROTRAC-2 (Transport and Chemical Transformation of Environmentally Relevant Trace Constituents in the Troposphere over Europe, 1996 – 2002), the subproject LOOP (Limitation of Oxidant Production) was established. The domain of interest is the highly industrialised and populated Milan area in the Po Basin in northern Italy. This region often exhibits ozone levels that are among the highest in Europe with up to 200 ppb. These high ozone levels influence also the adjacent southern part of Switzerland, where the highest ozone concentrations within this country are measured. Prior to the LOOP subproject, three-dimensional model simulations were not possible for the Milan region because of the lack of input data. No conclusions from earlier measurement studies with regard to ozone control strategies could be drawn. A simple approach with a one-dimensional lagrangian model resulted in a first general description of the limitation of photooxidant production and led to a special arrangement of the ground measuring stations up- and downwind of Milan during the LOOP measuring campaign from May to mid June 1998. The main scientific aims of LOOP are to investigate the photooxidant formation in the heavily polluted Milan area, to assess the ozone production regarding NO<sub>x</sub> (NO + NO<sub>2</sub>) or ROG (reactive organic gases) limitation and to evaluate the temporal and spatial behaviour of the photochemical regimes. These issues are investigated in this work.

The model results presented in this work were performed with the three-dimensional photochemical Urban Airshed Model with variable grid (UAM-V), version 1.15. This model package together with the meteorological pre-processor SAIMM is available from Systems Applications International (SAI). First model simulations showed an incorrect definition of the pressure reference height in SAIMM. In addition, it became evident, that transport phenomena in UAM-V such as advection and diffusion did not consider expansions or compressions due to pressure and temperature variations. Corrected versions of the models were used for all simulations.

Investigations in the LOOP modelling domain (141 km x 162 km, 3 km x 3 km grid size resolution) were performed for May 11 – 13, 1998. The results are thoroughly evaluated against ground and airborne measurements for May 13, 1998, when the highest photooxidant production with nearly 200 ppb ozone during the measuring campaign occurred. It turned out, that an observed hydrogen peroxide decrease in the ROG limited Milan ozone plume was not found in the model results. This discrepancy to reality might indicate a bias of the model toward NO<sub>x</sub> sensitivity. It became evident that a discrepancy between the emission inventory and real emission might be the reason for the disagreement of hydrogen peroxide measurements and model results. Hence, we modified the emission inventory. This modified emission inventory did not lead to a remarkable spatial and temporal change for most species in the modelling domain. However, the model represented better the observed hydrogen peroxide feature in the plume. We are more confident in using the modified emission inventory concerning the limitation when comparing the model results to observations. Furthermore, it is a good base for sensitivity analyses.

The modified emission inventory was used for various sensitive simulations with regard to meteorology and spatially coarser emission inventories. The following meteorological quantities were varied: a) mixing height, b) air temperature, c) specific humidity and d) wind speed. Three coarser emission inventories are obtained by resampling the modified emissions. The results show that changes in meteorological input files have the largest effect on peak ozone compared to the spatially coarser emission inventories. The net ozone formation in northern Italy is more

strongly temperature than humidity dependent, while the humidity is very important for the ROG/NO<sub>x</sub> limitation of the ozone production. For each of the meteorological variations (e.g. doubling the mixing height), the modelled ozone plume remains ROG limited on May 13. A strong change towards NO<sub>x</sub> sensitivity in the ROG limited areas was only found if much coarser emission inventories were applied. It is advisable to perform model simulations in the Po Basin with a spatial grid resolution better than 10 x 10 km<sup>2</sup>. Increasing ROG limited areas with increasing wind speed are found, because the ROG limited ozone chemistry induced by point sources is spread over a larger area. Simulations without point sources tend to increase the NO<sub>x</sub> limited areas.

Based on the results of this work, we recommend to reduce ROG emissions in urban areas to decrease the highest ozone concentrations. This recommendation is relatively robust related to different meteorological conditions.

## Zusammenfassung

Im Rahmen des europäischen Projektes EUROTRAC-2 (Transport and Chemical Transformation of Environmentally Relevant Trace Constituents in the Troposphere over Europe – Transport und chemische Umwandlung umweltrelevanter Stoffe in der Troposphäre über Europa) wurde das Unterprojekt LOOP (Limitation of Oxidant Production – Limitierung der Oxidantienbildung) geschaffen. Das angestrebte Untersuchungsgebiet ist die dicht industrialisierte und bevölkerte Region von Mailand in der Po Ebene in Norditalien. Diese Region weist häufig sehr hohe Ozonkonzentrationen auf, welche mit bis zu 200 ppb die höchsten innerhalb von Europas sind. Diese hohen Konzentrationen beeinflussen auch das grenznahe Gebiet im Süden der Schweiz, wo die höchsten Ozonkonzentrationen dieses Landes gemessen werden. Früher waren drei-dimensionale Modellsimulationen im Gebiet von Mailand aus Mangel an Eingabedaten nicht möglich. Aus Messkampagnen konnten keine Schlussfolgerungen bezüglich Kontrollstrategien gezogen werden. Eine einfache Untersuchung mit einem ein-dimensionalen Langrange Modell gab erste generelle Hinweise auf die Limitierung und führte dann zu einer spezifischen Anordnung der Bodenmessstationen im Luv und Lee von Mailand während der LOOP-Messkampagne von Mai bis Mitte Juni 1998. Die wichtigsten wissenschaftlichen Ziele von LOOP sind die Untersuchung der Photooxidantienbildung im stark luftverschmutzten Gebiet von Mailand, die Beurteilung der Ozonproduktion in bezug auf  $\text{NO}_x$  ( $\text{NO} + \text{NO}_2$ ) und ROG (reaktive organische Gase) Limitierung und das zeitliche und räumliche Verhalten der photochemischen Systeme. Diese Ziele werden in dieser Arbeit untersucht.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Modellergebnisse wurden mit dem drei-dimensionalen photochemischen Urban Airshed Model mit variablem Gitter (UAM-V), Version 1.15 simuliert. Dieses chemische Modellpaket ist zusammen mit dem meteorologischen Vorprozessor SAIMM bei System Application International (SAI) erhältlich. Erste Modellergebnisse wiesen auf eine nicht korrekte Definition der Druckreferenzhöhe in SAIMM hin. Zusätzlich wurde deutlich, dass in UAM-V Transportvorgänge wie Advektion und Diffusion keine Expansion oder Kompression durch Druck- und Temperaturänderungen berücksichtigten. Die Modelle wurden korrigiert und für alle nachfolgenden Modellsimulationen verwendet.

Untersuchungen innerhalb des Modellgebietes von LOOP (141 km x 162 km, 3 km x 3 km Gitterauflösung) wurden für den 11. – 13. Mai 1998 durchgeführt. Die Resultate wurden sorgfältig mit Boden- und Flugzeugmessungen für den 13. Mai evaluiert, als die höchste Photooxidantienbildung der gesamten Messkampagne mit nahezu 200 ppb Ozon auftrat. Es zeigte sich, dass eine beobachtete Abnahme des Wasserstoffperoxids in der ROG-limitierten Abluftfahne von Mailand in den Modellergebnissen nicht gefunden wurde. Dieser Unterschied zur Realität konnte darauf hinweisen, dass das Modell zu einer höheren  $\text{NO}_x$  Empfindlichkeit tendierte. Es wurde deutlich, dass Unterschiede zwischen dem Emissionskataster und den wahren Emissionen verantwortlich für das gegenläufige Verhalten des Wasserstoffperoxids in Messungen und im Modell sein könnte. Deshalb veränderten wir das Emissionskataster. Dieses modifizierte Emissionskataster führte bei den meisten Substanzen zu keiner bemerkenswerten räumlichen und zeitlichen Änderung im Modellgebiet. Hingegen konnte nun im Modell das beobachtete Verhalten des Wasserstoffperoxids in der Abluftfahne besser nachvollzogen werden. Wir vertrauen den Resultaten mehr, wenn wir das veränderte Emissionskataster für die Limitierung benutzen und die Modellergebnisse mit Beobachtungen vergleichen. Darüber hinaus bietet es eine solide Basis für Empfindlichkeitsstudien.

Das veränderte Emissionskataster wurde für verschiedene Empfindlichkeitssimulationen bezüglich Meteorologie sowie räumlicher Auflösung des Emissionskatasters verwendet. Folgende meteorologische Grössen wurden verändert: a) Mischungsschichthöhe, b) Lufttemperatur, c) spezifische Feuchte und d) Windgeschwindigkeit. Drei Emissionskataster verschiedener Auflösungen wurden durch ein Zusammenfassen des veränderten Katasters erzeugt. Die Resultate zeigen, dass Veränderungen in den meteorologischen Eingabedaten im Vergleich zur räumlichen Auflösung des Emissionskatasters, den grössten Effekt auf die Abluftfahne haben. Die Temperatur hat eine sehr grosse Auswirkung auf die Ozonproduktion im Modellgebiet. Die Nettoozonproduktion in Norditalien ist stärker temperatur- als feuchteabhängig, während die Feuchtigkeit sehr wichtig für die ROG/NO<sub>x</sub> Limitierung der Ozonproduktion ist. Selbst unter all diesen meteorologischen Veränderungen (z.B. Verdoppelung der Mischungsschichthöhe) bleibt die modellierte Abluftfahne am 13. Mai ROG limitiert. Eine starke Veränderung in Richtung NO<sub>x</sub> Empfindlichkeit im ROG limitierten Gebiet wird nur bei groben Emissionskataster erreicht. Es empfiehlt sich Modellsimulationen in der Po Ebene mit einer räumlichen Gitterauflösung von besser als 10 x 10 km<sup>2</sup> durchzuführen. Mit zunehmender Windgeschwindigkeit vergrössern sich die ROG limitierten Gebiete, weil die durch die Punktquellen verursachte ROG limitierte Ozonchemie sich über ein grösseres Gebiet erstreckt. Simulationen ohne Punktquellen tendieren zu einer Zunahme von NO<sub>x</sub> limitierten Gebieten.

Basierend auf den Resultaten dieser Arbeit empfehlen wir, ROG Emissionen in urbanen Gebieten zu reduzieren um eine Reduktion der höchsten Ozonkonzentrationen zu erreichen. Diese Empfehlung ist recht robust bezüglich verschiedener meteorologischer Bedingungen.