

KfK 5076
UBA FB 10402591
August 1992

Prognose der Immissionskonzentration zur Nutzung für ein Frühwarnsystem bei ferntransportiertem Smog

**K.-R. Bräutigam, G. Sardemann,
V. Brandl, Chr. Kupsch, C. Matzerath Boccaccini**
Abteilung für Angewandte Systemanalyse

Kernforschungszentrum Karlsruhe

Kernforschungszentrum Karlsruhe

Abteilung für Angewandte Systemanalyse

KfK 5076

UBA FB 10402591

**Prognose der Immissionskonzentration zur Nutzung
für ein Frühwarnsystem bei ferntransportiertem Smog *)**

K.-R. Bräutigam, G.Sardemann,

V. Brandl, Chr. Kupsch, C. Matzerath Boccaccini

- *) Die Studie wurde mit finanzieller Unterstützung des Umweltbundesamtes (Förderkennzeichen 10402591) durchgeführt.

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

Berichts - Kennblatt

Berichtsnummer 1.UBA-FB 10402591	2.	3.
4. Titel des Berichts Prognose der Immissionskonzentration zur Nutzung für ein Frühwarnsystem bei ferntransportiertem Smog		
5. Autor(en), Name(n), Vorname(n) Bräutigam, K.-R.; Sardemann, G.; Brandl, V.; Kupsch, Chr.; Matzerath Boccaccini, C.	8. Abschlußdatum Oktober 1991	
6. Durchführende Institution (Name, Anschrift) Kernforschungszentrum Karlsruhe Abteilung für Angewandte Systemanalyse Postfach 3640 75 Karlsruhe	9. Veröffentlichungsdatum Juli 1992	
	10. UFOPLAN - Nr. 10402591	
	11. Seitenzahl 156	
	12. Literaturangaben 57	
7. Fördernde Institution (Name, Anschrift) Umweltbundesamt, Bismarckplatz 1, 1000 Berlin 33	13. Tabellen und Diagramme 9	
	14. Abbildungen 50	
	15. Zusätzliche Angaben	
16. Kurzfassung Das zur Vorhersage von SO ₂ -Konzentrationswerten für das Smogfrühwarnsystem des Umweltbundesamtes entwickelte Modell SMOVO wird ausführlich dargestellt. Eingabedaten für das Modell sind die Wetterprognosen des Deutschen Wetterdienstes (BKF/BKN-Modell) sowie Emissionsdaten von SO ₂ für Deutschland, die CSFR, Polen, die Benelux-Staaten, Frankreich und Großbritannien. SMOVO wurde auf den Rechenanlagen des Deutschen Wetterdienstes in einem probeweisen Routinebetrieb eingesetzt. In den Wintermonaten Oktober bis März der Jahre 1989/90 und 1990/91 wurden täglich dreistündliche SO ₂ -Konzentrationen für das Gebiet Deutschlands auf Rasterfeldern der Ausdehnung 1 Längengrad * ½ Breitengrad für einen Zeitraum von 2 Tagen prognostiziert und anschließend mit Meßwerten aus dem Smogfrühwarnsystem verglichen. Ferner wurden Rechnungen für weitere Episoden erhöhter Schadstoffkonzentrationen der Jahre 1985 und 1987 durchgeführt. Beginn, Verlauf und Ende winterlicher Smogepisoden werden i.a. gut prognostiziert. Auch die Höhe der Konzentrationswerte wird vom Modell gut wiedergegeben. Abweichungen gibt es vor allem in der regionalen Verteilung. Mit Hilfe des errechneten SO ₂ -Konzentrationsfeldes, zusätzlichen meteorologischen Informationen und Meßwerten ist eine zufriedenstellende Prognose des zeitlichen Verlaufs und der regionalen Verteilung der Immissionen möglich. Das Programm CYTRA10 zur Berechnung und Darstellung von Rückwärtstrajektorien ist ein weiteres Hilfsmittel zur Beurteilung prognostizierter SO ₂ -Konzentrationsverteilungen.		
17. Schlagwörter Smog, Frühwarnung, Trajektorienmodell, Ferntransport, Emissionsdatenbasis Schwefeldioxid, Vorhersage von SO ₂ -Konzentrationswerten		
18. Preis	19.	20.

1. Report No. UBA-FB 10402591	2.	3.
4. Report Title Prediction of Advected Smog for the SO ₂ -Early-Warning-System of the Federal Environmental Agency of Germany (Umweltbundesamt)		
5. Author(s), Family Name(s), First Name(s) Bräutigam, K.-R.; Sardemann, G.; Brandl, V.; Kupsch, Chr.; Matzerath Boccaccini, C.		8. Report Date October 1991
6. Performing Organisation (Name, Address) Kernforschungszentrum Karlsruhe Abteilung für Angewandte Systemanalyse Postfach 3640 75 Karlsruhe		9. Publication Date July 1992
		10. UFOPLAN - Ref.No. 10402591
7. Sponsoring Agency (Name, Address) Umweltbundesamt, Bismarckplatz 1, D-1000 Berlin 33		11. No. of Pages 156
		12. No. of References 57
		13. No. of Tables, Diag 9
		14. No. of Figures 50
15. Supplementary Notes		
16. Abstract <p>The dispersion model SMOVO developed for use in the smog-early-warning-system of the Umweltbundesamt is described in detail. SMOVO uses weather forecast data of the German Weather Service (BKF-/BKN-model) and a SO₂-emission inventory which covers the area of Germany, CSFR, Poland, BENELUX, France and Great Britain. The model has been run on a preliminary routine base on the computer facilities of the German Weather Service. Each day of the winter months october to march of the years 1989/90 and 1990/91 3-hourly SO₂-concentration values were calculated for a forecast range of 2 days on grid elements of 1° longitude * ½° latitude. The calculated SO₂ concentrations were compared with measured concentration values compiled by the smog-early-warning-system. Additional calculations were made for episodes of high SO₂-concentrations in the years 1985 and 1987. In general, the dispersion model allows quite adequate forecasts of SO₂ concentration levels and the beginning and end of high concentration episodes. Main differences are caused by different regional distributions of calculated and measured SO₂ concentration values. The quality of smog forecast is enhanced by combining the calculated SO₂ concentration fields with additional weather information and measured SO₂-concentrations. An additional program CYTRA10 to calculate backward-trajectories has been developed as an aid to visualize the transport of SO₂.</p>		
17. Keywords Early-warning-system, advected smog, trajectory-model, emission data base for sulfur-dioxide, forecast of SO ₂ -concentration fields		
18. Price	19.	20.

Vorbemerkung

Die vorliegende Studie wurde in der Abteilung für Angewandte Systemanalyse (AFAS) des Kernforschungszentrums Karlsruhe im Auftrag und mit finanzieller Unterstützung des Umweltbundesamtes durchgeführt. Dem ausführlichen Bericht vorangestellt ist eine Kurzfassung der Studie. Das im Rahmen dieses Vorhabens entwickelte Ausbreitungsmodell SMOVO wurde auf den Rechenanlagen des Kernforschungszentrums Karlsruhe und auf den Rechenanlagen des Deutschen Wetterdienstes implementiert und wird dort in den Wintermonaten Oktober bis März im Rahmen des Smogfrühwarnsystems im probeweisen Routinebetrieb eingesetzt. Die berechneten SO₂-Konzentrationen für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland können im Rahmen des Smogfrühwarnsystems vom Umweltbundesamt ausgewertet und den Landesämtern zur Verfügung gestellt werden.

Wir möchten uns beim Deutschen Wetterdienst in Offenbach sehr herzlich für die vielfältigen Anregungen, für die Bereitstellung der erforderlichen Prognose-daten und für die Möglichkeit, die Rechenanlagen des DWD nutzen zu können, bedanken. Unser besonderer Dank gilt dabei Herrn Dr. Frühwald und Herrn Dr. Dietzer. Desweiteren danken wir Herrn Rudolf vom Umweltbundesamt, Pilotstation Frankfurt/Main, der das Projekt betreut hat, Frau Uhse für die Bereitstellung der Meßdaten der Reinluftstationen und Probenahmestellen des Umweltbundesamtes sowie Herrn Strobel vom Umweltbundesamt in Berlin, der uns die Meßdaten aus dem Smogfrühwarnsystem regelmäßig zur Verfügung gestellt hat.

Bei der redaktionellen Arbeit wurden wir von unserer Kollegin Frau Fürniß tatkräftig unterstützt.

Karlsruhe, Juli 1992

K.-R. Bräutigam, G. Sardemann

The first part of the document discusses the importance of maintaining accurate records of all transactions. It emphasizes that every entry should be supported by a valid receipt or invoice. This ensures transparency and allows for easy verification of the data. The text also mentions that regular audits are necessary to identify any discrepancies or errors in the accounting process. It is noted that such audits help in maintaining the integrity of the financial statements and provide a clear picture of the company's financial health.

In addition, the document highlights the role of technology in modern accounting. It suggests that using accounting software can significantly reduce the risk of human error and streamline the data entry process. The text also touches upon the importance of staying updated with the latest tax regulations and accounting standards. It is advised that companies should consult with professional accountants or tax advisors to ensure compliance with all relevant laws and regulations. This proactive approach helps in minimizing legal risks and optimizing the company's financial performance.

Finally, the document concludes by stating that a strong financial foundation is essential for the long-term success of any business. By adhering to the principles of accurate record-keeping, regular audits, and staying compliant with regulations, companies can build a solid financial base that supports their growth and sustainability.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung der Studie	XIII
1. Einleitung	1
2. Physikalische und chemische Prozesse bei winterlichen Smogwetterlagen	3
2.1 Charakterisierung von lokalem und advehiertem Smog	3
2.2 Grundlegende Aspekte der Ausbreitung und Umwandlung von Schadstoffen in der Atmosphäre während Episoden hoher Schadstoffkonzentrationen	5
2.2.1 Transport und vertikaler Austausch	5
2.2.2 Chemie und Ablagerung	7
2.3 Ausbreitungsmodelle	11
3. Das verwendete Modell und die benötigten Eingabedaten	15
3.1 Das Ausbreitungsmodell SMOVO	15
3.1.1 Berechnung des Trajektorienverlaufs	18
3.1.2 Mischungsschicht und vertikale Diffusion	21
3.1.3 Ablagerung und Umwandlung	23
3.1.4 Berechnung von Immissionswerten	24
3.2 Die meteorologische Datenbasis	25
3.3 Emissionsdatenbasis	31
3.3.1 SO ₂ -Emissionen der Bundesrepublik Deutschland für das Bezugsjahr 1982	32
3.3.2 SO ₂ -Emissionen der Bundesrepublik Deutschland unter Berücksichtigung der Regelungen der Großfeuerungsanlagenverordnung	33
3.3.3 SO ₂ -Emissionen für das Gebiet der ehemaligen DDR	34
3.3.4 SO ₂ -Emissionen der CSFR und Polens	35
3.3.5 SO ₂ -Emissionen der Benelux-Staaten, Frankreichs und Großbritanniens	36
3.3.6 Bereitstellung eines komprimierten Emissionsdatensatzes für Rechnungen im Smogfrühwarnsystem	37
3.3.7 Zeitlicher Verlauf der Emissionswerte	45
4. Vergleich von Rechenergebnissen mit Meßwerten und Sensitivitätsstudien mit SMOVO	49
4.1 Darstellung von Rechenergebnissen	49
4.2 Bereitstellung und Aufbereitung von Meßwerten	50
4.3 Quantifizierung der Übereinstimmung von Rasterkarten	56

4.4	Bedeutung physikalisch-chemischer Prozesse	61
4.4.1	Trockene Depositionsprozesse	61
4.4.2	Chemische Umwandlung	63
4.4.3	Nasse Depositionsprozesse	65
4.4.4	Bedeutung der Mischungsschichthöhe	70
4.5	Einfluß der Emissionsdaten	76
4.5.1	Temperatureinfluß	76
4.5.2	Zusammenfassung der Emissionswerte	77
4.5.3	Einfluß von Emissionsszenarien	79
4.6	Einfluß der Güte der Wetterprognosen auf die errechneten SO₂-Konzentrationen	81
4.7	Berücksichtigung der regionalen Verteilung der Temperatur und der Schneebedeckung	86
4.8	Zusammenfassende Bewertung der Sensitivitätsstudien	90
5.	Rechnungen mit SMOVO:	
	Darstellung, Interpretation und Bewertung der Ergebnisse	94
5.1	Während der Untersuchungen eingeführte Modellmodifikationen	95
5.2	Gesamtüberblick über Ergebnisse für das Winterhalbjahr 1989/1990 und das Winterhalbjahr 1990/1991	98
5.3	Detaillierte Darstellung der Ergebnisse ausgewählter Episoden	111
5.3.1	Januar 1985	111
5.3.2	Januar 1987	119
5.3.3	Februar 1987	122
5.3.4	November/Dezember 1989	122
5.3.5	Februar 1991	127
5.3.5.1	Interpretation des zeitlichen Verlaufs der Konzentrationswerte für den Februar 1991	130
5.3.5.2	Zeitlicher Verlauf der Konzentrationswerte in ausgewählten Rasterfeldern	140
5.4	Bewertung der Ergebnisse	146
6.	Die Verwendung von Prognosen des Europamodells für die Smogfrühwarnung	148

Verzeichnis der Abbildungen

Abb. 2.1:	Vergleich der Rechenzeiten von Gitter- und Trajektorienmodellen	14
Abb. 3.1:	Ablaufschema des Ausbreitungsmodells SMOVO zur Berechnung der Konzentrationsverteilung von Schwefeldioxid auf dem Gebiet der Bundesrepublik Deutschland	17
Abb. 3.2:	Vertikalstruktur der Modellatmosphäre	21
Abb. 3.3:	Lage der Gitterpunkte in der MESOS-Datenbasis	26
Abb. 3.4:	Das in SMOVO verwendete IGEL-Gitter	28
Abb. 3.5:	Parametrisierung der Bewölkung mit Hilfe der relativen Feuchte	30
Abb. 3.6:	Pauschaler Tages-, Wochen- und Jahresgang der Emissionen in den Sektoren Kraftwerke/Industrie und Haushalte/Kleinverbraucher	46
Abb. 3.7:	Zeitliches Verhalten der Emissionen (Gangfaktor für den Jahresgang) für unterschiedliche Emissionssektoren für den Zeitraum Februar bis April 1990	48
Abb. 4.1:	Numerierung der Rasterfelder in der Bundesrepublik Deutschland	50
Abb. 4.2a:	Lage der Meßstationen des Bundes und der Länder für die Bundesrepublik Deutschland - alte Bundesländer	51
Abb. 4.2b:	Meßnetz des Umweltbundesamtes	52
Abb. 4.3:	Rasterkarten der Konzentrationswerte von SO ₂ für den 1.12.1989, 18 Uhr ..	54
Abb. 4.4:	Zeitverlauf der Konzentrationswerte im Rasterfeld Gartow für unterschiedliche Stationen, Februar 1991	55
Abb. 4.5:	Vergleich von Messung und Rechnung für den 25.11.1989, 12 Uhr a) Zuordnung der Meßwerte zu den Rechenwerten.	59
	b) zugehörige Rasterkarten von Rechnung und Messung	59
Abb. 4.6:	Vergleich von Messung und Rechnung für den 6.11.1989 um 0 Uhr a) Zuordnung der Meßwerte zu den Rechenwerten.	60
	b) zugehörige Rasterkarten von Rechnung und Messung	60
Abb. 4.7:	Errechnete und gemessene Konzentrationswerte im Rasterfeld Regnitzlosau für den 4.2./5.2. 1991 für unterschiedliche Depositionsgeschwindigkeiten	62
Abb. 4.8:	Tagesgang der Umwandlungsrate für unterschiedliche Termine	64
Abb. 4.9:	Zeitverlauf der Konzentrationswerte für das Rasterfeld Regnitzlosau für den 4.2. bis 5.2.1991 für unterschiedliche Umwandlungsraten und Depositionsgeschwindigkeiten	65
Abb. 4.10:	Washoutraten $k_w = a * R^b$ mit unterschiedlichen Werten für a und b	66
Abb. 4.11:	Monatsmittelwerte der SO ₂ -Konzentration in Waldhof für 1982. Dargestellt sind die Meßwerte sowie Rechnungen mit unterschiedlichen Parameterwerten für die nasse Deposition im Winterhalbjahr.	67
Abb. 4.12:	Vergleich von errechneter und gemessener SO ₂ -Konzentration (Mittelwert über alle Rasterfelder der alten Bundesländer) für unterschiedliche Ansätze der nassen Deposition für den November 1990	69

Abb. 4.13:	Errechnete Konzentrationswerte für das Rasterfeld Regnitzlosau für den 4.2./5.2.1991 mit und ohne Niederschlag sowie für unterschiedliche Depositionsgeschwindigkeiten	69
Abb. 4.14:	Verlauf der Konzentrationswerte für das Rasterfeld Waldhof für unterschiedliche Mischungsschichthöhen für den 7.2. bis 10.2.1991	73
Abb. 4.15:	Verlauf der Konzentrationswerte für das Rasterfeld Berlin für unterschiedliche Mischungsschichthöhen für den 7.2. bis 10.2.1991	73
Abb. 4.16:	Errechnete und gemessene Konzentrationswerte für das Rasterfeld Waldhof für den 7.2. bis 10.2.1991; zusätzlich dargestellt ist der Anteil der Schadstoffmasse, der sich innerhalb der Mischungsschicht befindet	74
Abb. 4.17:	Errechnete Konzentrationswerte für das Rasterfeld Regnitzlosau für den 4.2./5.2. 1991 für unterschiedliche Emissionsdatensätze und Depositionsgeschwindigkeiten	77
Abb. 4.18:	Errechnete Konzentrationswerte für den 4.2./5.2.1991 für das Rasterfeld Regnitzlosau für unterschiedliche Emissionsverteilungen	78
Abb. 4.19:	Errechneter Mittelwert über alle Rasterfelder der alten Bundesländer für unterschiedliche Emissionsszenarien	80
Abb. 4.20:	Errechnete Konzentrationswerte am 4.2./5.2.1991 im Rasterfeld Regnitzlosau für unterschiedliche Emissionsszenarien	81
Abb. 4.21:	Zeitverlauf der Korrelation beider Prognosezeiträume und der Korrelation der 0- bis 24-stündigen bzw. 24- bis 48-stündigen Prognose mit den Meßwerten für den 20. und 21. Oktober 1990	84
Abb. 4.22:	Zeitlicher Verlauf des Mittelwertes der SO ₂ -Konzentrationen in dem Gebiet der alten Bundesländer für den 1.2. - 13.2. 1991; Vergleich von Messung und Rechnung sowie Beiträge einzelner Staaten a) ohne regionale Differenzierung von Temperatur und Schneebedeckung ...	88
	b) mit regionaler Differenzierung von Temperatur und Schneebedeckung	88
Abb. 4.23:	Rasterkarten von Rechnung und Messung für den 4. Februar 1991, 0 Uhr, 9 Uhr und 21 Uhr a) ohne regionale Differenzierung von Temperatur und Schneebedeckung ...	89
	b) mit regionaler Differenzierung von Temperatur und Schneebedeckung	89
	c) Messung	89
Abb. 5.1a:	Konzentrationswerte für das Winterhalbjahr 1989/1990	99
Abb. 5.1b:	Konzentrationswerte für das Winterhalbjahr 1990/1991	99
Abb. 5.2:	Zeitlicher Verlauf der errechneten und gemessenen Konzentrationswerte im Winterhalbjahr 1989/1990 für die Rasterfelder Gartow, Regnitzlosau, Gittrup und Rottenburg	104
Abb. 5.3:	Zeitlicher Verlauf der errechneten und gemessenen Konzentrationswerte im Winterhalbjahr 1990/1991 für die Rasterfelder Gartow, Regnitzlosau, Gittrup und Rottenburg	106
Abb. 5.4:	Abgrenzung von Regionen in den alten und neuen Bundesländern	111
Abb. 5.5:	Luftmassentrajektorien für den Rezeptorpunkt Hamburg in verschiedenen Höhenniveaus; Ankunftszeit 21.1.1985 um 12 Uhr	114
Abb. 5.6:	Luftmassentrajektorien für das 850 hPa - Niveau nach den Prognosedaten (IGEL - Daten) für den Rezeptorpunkt Hamburg; Ankunftszeit 15.1. bis 21.1.1985, jeweils 12 Uhr	114

Abb. 5.7:	Vergleich berechneter und gemessener Konzentrationswerte für den 20.1.1985 und 21.1.1985, jeweils um 12 Uhr	116
Abb. 5.8:	Windrichtung und Windgeschwindigkeit im 850 hPa - Niveau, berechnet aus den IGEL - Daten für den 20.1.1985 und 21.1.1985, jeweils um 12 Uhr	117
Abb. 5.9:	Vergleich der mit dem Trajektorienmodell SMOVO und einem Euler'schen Modell (RIVM - Modell) errechneten Konzentrationswerte für den 20.1. 1985 und den 21.1. 1985	118
Abb. 5.10:	Rasterkarten von Rechnung und Messung für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland für den Zeitraum 18.1. bis 22.1.1987, jeweils 6 Uhr	120
Abb. 5.11:	Rasterkarten von Rechnung und Messung für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland für den 2.2.1987 für die Termine 12 Uhr bis 21 Uhr sowie für den 3.2.1987 für die Termine 0 Uhr bis 9 Uhr	123
Abb. 5.12:	Rasterkarten der Tagesmittelwerte von Rechnung und Messung für das Gebiet der alten Bundesländer für den Zeitraum 29.11.89 bis 4.12.89	125
Abb. 5.13:	Rasterkarten der Tagesmittelwerte von Rechnung und Messung für das Gesamtgebiet der Bundesrepublik Deutschland für den Zeitraum 29.11.89 bis 4.12.89	128
Abb. 5.14:	Zeitlicher Verlauf des Mittelwertes der Konzentrationswerte für das Gebiet der alten Bundesländer für den Februar 1991; Vergleich von Messung und Rechnung sowie Beiträge einzelner Staaten ...	131
Abb. 5.15:	Zeitlicher Verlauf des Mittelwertes der Konzentrationswerte für das Gebiet der neuen Bundesländer für den Februar 1991; errechnete Werte sowie Beiträge einzelner Staaten	132
Abb. 5.16:	Rasterkarten von Rechnung und Messung für den 1. - 14. Februar 1991 jeweils 9 Uhr	135
Abb. 5.17:	Zeitlicher Verlauf der Konzentrationswerte von Rechnung und Messung in ausgewählten Rasterfeldern (Gartow, Regnitzlosau, Gitttrup, Rottenburg, Kassel, Ruhrgebiet, Schwerin, Schleiz und Wiesenburg)	142
Abb. 6.1:	Ausschnittsgebiet des Europamodells zusammen mit der von den IGEL-Daten überdeckten Fläche	150
Abb. 6.2:	Vergleich der vom Europamodell und dem BKN/BKF-Modell benutzten Vertikalkoordinaten	150

1. The first part of the document discusses the importance of maintaining accurate records of all transactions and activities. It emphasizes that proper record-keeping is essential for ensuring transparency and accountability in the organization's operations. This section also outlines the various methods and tools used to collect and store data, highlighting the need for consistency and reliability in the information gathered.

2. The second part of the document focuses on the analysis and interpretation of the collected data. It describes the process of identifying trends, patterns, and anomalies within the data sets. This involves using statistical techniques and data visualization tools to present the information in a clear and understandable manner. The goal is to derive meaningful insights from the data that can inform decision-making and strategic planning.

3. The third part of the document addresses the challenges and limitations of data analysis. It acknowledges that while data provides valuable information, it is not always perfect. Issues such as data quality, incomplete information, and the complexity of large data sets can pose significant challenges. The document offers strategies to mitigate these challenges, such as implementing data quality checks and using advanced analytical tools.

4. The final part of the document discusses the future of data analysis and the role of emerging technologies. It highlights the potential of artificial intelligence, machine learning, and big data analytics to revolutionize the way data is analyzed and interpreted. The document concludes by emphasizing the importance of staying current with technological advancements and continuously improving data analysis practices to maximize the value of the organization's data.

Verzeichnis der Tabellen

Tab. 3.1:	Die in der MESOS-Datenbasis enthaltenen Parameter und daraus berechnete Modellparameter	26
Tab. 3.2:	Klasseneinteilung bei der Zusammenfassung unterschiedlicher Freisetzungshöhen	38
Tab. 3.3a:	Zusammengefaßte SO ₂ -Emissionsverteilung der Bundesrepublik Deutschland für unterschiedliche Freisetzungshöhen im Bezugsjahr 1982 unter Berücksichtigung der Regelungen der Großfeuerungsanlagenverordnung	39
Tab. 3.3b:	Zusammengefaßte SO ₂ -Emissionsverteilung der ehemaligen DDR für unterschiedliche Freisetzungshöhen im Bezugsjahr 1982	40
Tab. 3.3c:	Zusammengefaßte SO ₂ -Emissionsverteilung der CSFR für unterschiedliche Freisetzungshöhen im Bezugsjahr 1982	41
Tab. 3.3d:	Zusammengefaßte SO ₂ -Emissionsverteilung Polens für unterschiedliche Freisetzungshöhen im Bezugsjahr 1982	42
Tab. 3.3e:	Zusammengefaßte SO ₂ -Emissionsverteilung der Benelux-Staaten für unterschiedliche Freisetzungshöhen im Bezugsjahr 1982	43
Tab. 3.3f:	Zusammengefaßte SO ₂ -Emissionsverteilung Großbritanniens für unterschiedliche Freisetzungshöhen im Bezugsjahr 1982	43
Tab. 3.3g:	Zusammengefaßte SO ₂ -Emissionsverteilung Frankreichs für unterschiedliche Freisetzungshöhen im Bezugsjahr 1982	44
Tab. 4.1:	Massen in den unterschiedlichen vom Modell SMOVO berücksichtigten Schichten sowie die Bilanz aus allen Schichten nach jedem Termin für den 7.2. bis 10.2.1991	71
Tab. 4.2:	Zusammenhang zwischen den Korrelationskoeffizienten R_{12} und R_{13}	84
Tab. 4.3:	Meßwerte und Prognosen für die 850 hPa - Temperatur um 0 UTC in Berlin ..	85
Tab. 4.4:	Überblick über die im Modell SMOVO berücksichtigten Eingabedaten und Parameterwerte	93
Tab. 5.1:	Klimamitteltemperatur für Berlin-Dahlem an ausgewählten Terminen	96
Tab. 5.2:	Zusammenstellung der Maximalwerte von SO ₂ , der beaufschlagten Gebiete sowie der Fehlerwerte für Termine, an denen in mindestens einem Rasterfeld der alten Bundesländer die Meß- oder Rechenwerte über 300 µg/m ³ liegen für die Winterhalbjahre 1989/1990 sowie 1990/1991	108

1. The first part of the document discusses the importance of maintaining accurate records of all transactions and activities. It emphasizes that proper record-keeping is essential for transparency and accountability, particularly in financial matters. This section also touches upon the legal implications of failing to maintain such records, which can lead to severe consequences for individuals and organizations alike.

2. The second part of the document delves into the specific requirements for record-keeping, including the types of documents that must be retained and the duration for which they should be kept. It provides a detailed overview of the various categories of records, such as financial statements, contracts, and correspondence, and outlines the best practices for organizing and storing these documents to ensure they are easily accessible and secure.

3. The third part of the document addresses the challenges associated with record-keeping, particularly in the context of digital information. It discusses the risks of data loss, corruption, and unauthorized access, and offers strategies to mitigate these risks. This includes the use of secure storage solutions, regular backups, and access controls to protect sensitive information.

4. The fourth part of the document provides a comprehensive guide to the legal and regulatory requirements governing record-keeping. It covers the various laws and regulations that apply to different types of records and industries, and explains how to ensure compliance with these requirements. This section is particularly useful for organizations that operate in highly regulated sectors, where the consequences of non-compliance can be significant.

5. The fifth part of the document offers practical advice and tips for implementing an effective record-keeping system. It discusses the importance of developing clear policies and procedures, training staff on the correct use of the system, and regularly reviewing and updating the system to reflect changes in requirements and technology. This section provides a wealth of information for anyone looking to improve their record-keeping practices and ensure the long-term success of their organization.

Kurzfassung

I. Einleitung

Zu Beginn der achtziger Jahre wurde deutlich, daß der Ferntransport von Luftschadstoffen zu einer Verschärfung bestehender winterlicher Smoglagen führen kann. Dabei kann es auch außerhalb von Ballungsgebieten zu vergleichsweise hohen Schadstoffkonzentrationen kommen, die durch Freisetzungen in entfernten Emissionsgebieten verursacht werden.

Vor allem die während der Smogepisode des Jahres 1985 gemachten Erfahrungen veranlaßten daher die Teilnehmer der Umweltministerkonferenz 1986 dazu, den Aufbau eines Frühwarnsystems für ferntransportierten Smog zu initiieren. Hauptaufgabe dieses Frühwarnsystems ist die Erfassung von Episoden hoher Schadstoffkonzentrationen in der Bundesrepublik Deutschland mit Hilfe der Meßnetze des Umweltbundesamtes und der Landesämter. Die Meßwerte werden zentral vom Umweltbundesamt gesammelt und ausgewertet und über einen Rechnerverbund an die am Frühwarnsystem beteiligten Stellen weitergegeben.

Aus technischen und organisatorischen Gründen konnten die neuen Bundesländer bisher noch nicht vollständig in das Smogfrühwarnsystem integriert werden. Bei Episoden erhöhter Schadstoffkonzentrationen werden den neuen Bundesländern jedoch Meßdaten aus dem Smogfrühwarnsystem der alten Bundesländer zur Verfügung gestellt und umgekehrt, soweit wie technisch möglich, Meßwerte aus den neuen Bundesländern im Smogfrühwarnsystem mit berücksichtigt.

Anhand der regionalen Verteilung und des zeitlichen Verlaufs der gemessenen Luftschadstoffkonzentrationen sowie der zu erwartenden Entwicklung des Wetterablaufs können erste Aussagen zur weiteren Immissionsentwicklung gemacht werden. Die eigentliche Prognose des Eintretens bzw. weiteren Verlaufs einer Smogepisode wird jedoch mit Hilfe eines Ausbreitungsmodells auf der Grundlage von Wetterprognosen des Deutschen Wetterdienstes (DWD) erstellt.

In der Abteilung für Angewandte Systemanalyse des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KfK/AFAS) wurde hierzu im Auftrag des Umweltbundesamtes und mit Unterstützung des DWD untersucht, inwieweit sich ein bereits existierendes Trajektorienmodell - das am Imperial College in London entwickelte Modell MESOS - in das Smogfrühwarnsystem einbinden läßt.

II. Das Smogvorhersagemodell SMOVO

Das Ausbreitungsmodell MESOS wurde ursprünglich zur Berechnung der Ausbreitung radioaktiver Stoffe entwickelt. Zur Modellierung der Ausbreitung von SO_2 auf dem Gebiet Europas mußte MESOS daher umfangreichen Modifikationen unterzogen werden, wobei jedoch die zugrunde gelegten meteorologischen Annahmen weitgehend beibehalten wurden. Für die **Vorhersage** von SO_2 -Konzentrationen auf dem Gebiet der Bundesrepublik Deutschland entstand auf der Basis von MESOS das Ausbreitungsmodell SMOVO, das die Ergebnisse des feuchtbaroklinen Vorhersagemodells (BKF-Modell bzw. das genestete BKN-Modell) des DWD nutzt.

SMOVO ist wie MESOS ein Vorwärtstrajektorienmodell; allerdings wurde, um die große Anzahl von SO_2 -Emittenten in einer angemessenen Rechenzeit bewältigen zu können, die Berechnung des Trajektorienverlaufs vereinfacht und von der Berechnung des Massenhaushalts (bestimmt durch vertikale Diffusion, Deposition und chemische Umwandlung) entkoppelt. Der Trajektorienverlauf in SMOVO wird mit Hilfe des vom BKF/BKN-Vorhersagemodells gelieferten 850 hPa-Windes berechnet; eine Höhenabhängigkeit des Transportwindes wird nicht berücksichtigt. Falls eine Trajektorie das Beobachtungsgebiet erreicht, wird nachträglich der Massenhaushalt in dem entlang der betreffenden Trajektorie verfolgten Schadstoffpaket bestimmt.

Die vertikale Durchmischung in diesem Schadstoffpaket ist im wesentlichen abhängig von der tages- und jahreszeitlichen Variation der Mischungsschichthöhe. Diese wiederum ergibt sich aus den turbulenten Transporten von Impuls und sensibler Wärme am Boden, die mit Hilfe der Windgeschwindigkeit und des Bedeckungsgrades abgeschätzt werden können. Für die trockene Ablagerung von SO_2 wurde eine Depositionsgeschwindigkeit von 0,8 cm/s angenommen, die allerdings bei schneebedeckter Erdoberfläche auf 0,1 cm/s reduziert wird. Die nasse Deposition ist im wesentlichen abhängig von der Niederschlagsrate. Schneeindex und Niederschlagsrate werden wie auch der Bedeckungsgrad vom BKF/BKN-Modell übernommen. Für die Umwandlung von SO_2 zu SO_4^- wird im Jahresmittel eine Rate von 1% pro Stunde angenommen. Die augenblickliche Umwandlungsrate ist jedoch abhängig von der Tages- und Jahreszeit, mit den höchsten Werten zur Mittagszeit im Sommer.

Als Ergänzung zu SMOVO wurde ein Programm zur Berechnung von Rückwärtstrajektorien entwickelt (CYTRA10). Dieses Programm bestimmt mit Hilfe der Prognosedaten des DWD Rückwärtstrajektorien und Trajektorieneinzugsgebiete

für eine vorgegebene Anzahl von Rezeptorpunkten. Die mit Hilfe von CYTRA10 berechneten und anschließend grafisch dargestellten Rückwärtstrajektorien dienen vor allem als Hilfsmittel zur Beurteilung der prognostizierten SO_2 -Konzentrationsverteilungen.

III. Die meteorologische Datenbasis

SMOVO nutzte zunächst bis zum Ende des Winterhalbjahres 1989/90 die Ergebnisse des feuchtbaroklinen Vorhersagemodells des DWD (BKF-Modell), die für das Gebiet Europas in den sogenannten IGEL-Datensätzen abgespeichert werden. Die IGEL-Daten liegen auf zwei Gitterflächen vor, wobei das zweite Gitter um eine halbe Maschenweite nach Norden und Osten gegenüber dem ersten verschoben ist. Der Abstand zweier Punkte in einem der beiden Gitterpunktsysteme mit je 156 Punkten beträgt 254 km; damit beträgt der kürzeste Abstand von zwei Punkten im Gesamtgitter etwa 180 km. In der Vertikalen liegen die IGEL-Daten auf Flächen gleichen Drucks in 50, 100, 200, 300, 400, 550, 700, 850 und 950 hPa vor. Genutzt wird allerdings nur das Windfeld in 850 hPa und das Temperatur- und Feuchteprofil bis in 300 hPa zur Abschätzung des Bedeckungsgrades, der nicht explizit in den IGEL-Datensätzen enthalten ist.

Seit Oktober 1990 werden die Prognosen für das Smogfrühwarnsystem auf der Basis des genesteten feuchtbaroklinen Prognosemodells des DWD (BKN-Modell) erstellt. Dieses Modell hat eine höhere horizontale Auflösung als das BKF-Modell. Um jedoch die Modelländerungen an SMOVO so gering wie möglich zu halten, werden nur die auf IGEL-Gitterpunkten vorliegenden Parameter genutzt. In den BKN-Datensätzen liegt der Bedeckungsgrad in einer direkt von SMOVO nutzbaren Form vor und braucht deshalb nicht in einem Vorprogramm abgeschätzt zu werden.

IV. Die Emissionsdatenbasis

Um die regionale Verteilung der Konzentrationswerte von SO_2 für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland berechnen zu können, muß neben den meteorologischen Eingabedaten die räumliche und zeitliche Verteilung der Emissionswerte von SO_2 in geeigneter Form vorliegen. Da Episoden mit ferntransportiertem Smog hauptsächlich bei Ostwetterlagen auftreten, sind neben den Emissionen der Bundesrepublik Deutschland insbesondere die der CSFR und Polens von Bedeutung. Die Emissionsdatenbasis enthält für diese Gebiete, aber auch für Frankreich, die Benelux-Staaten und für Großbritannien die regionale Verteilung der Jahresemissionen von SO_2 , aufgeteilt nach den Sektoren Kraftwerke und Indu-

strie sowie Haushalte und Kleinverbraucher. Bezugszeitraum ist das Jahr 1982, da für dieses Jahr für alle für die Immissionsbelastung der Bundesrepublik Deutschland relevanten Staaten die erforderlichen Informationen vorlagen. Eine aktuellere Datenbasis, die, regional differenziert, die bis zum gegenwärtigen Zeitpunkt eingetretenen Veränderungen der Emissionen berücksichtigt, steht nicht zur Verfügung. Allerdings wurden für die Bundesrepublik Deutschland die in den letzten Jahren in Kraft getretenen Verordnungen zur Emissionsreduktion (Regelungen der Großfeuerungsanlagenverordnung) berücksichtigt. Für die CSFR und Polen dürften bis zum gegenwärtigen Zeitpunkt, für die neuen Bundesländer bis Anfang 1991 keine wesentlichen Änderungen gegenüber 1982 eingetreten sein, so daß die Emissionsdatenbasis für die in dieser Studie betrachteten Episoden ferntransportierten Smogs durchaus noch als geeignet angesehen werden kann.

Die Emissionswerte wurden zunächst dem Mittelpunkt von Rasterfeldern der Ausdehnung $\frac{1}{2}$ Längengrad * $\frac{1}{4}$ Breitengrad zugeordnet, und die unterschiedlichen Freisetzungshöhen wurden zu 10 Freisetzungshöhenklassen zusammengefaßt. Damit liegen für die betrachteten Staaten an insgesamt 1097 Standorten Emissionswerte für jeweils bis zu zehn Freisetzungshöhen vor. Sensitivitätsanalysen haben jedoch gezeigt, daß die Emissionen einzelner Rasterfelder unter Beibehaltung der Kaminhöhenklassen weiter zusammengefaßt werden können. Dies führt zu einer erheblichen Reduktion der Rechenzeit, ohne daß sich die Ergebnisse signifikant verändern. Als Ergebnis der Zusammenfassung reduziert sich die Anzahl der zu berücksichtigenden Standorte auf 308.

Die Emissionsdatenbasis enthält nur Jahresmittelwerte und berücksichtigt nicht, daß die Emissionen von der Tageszeit und dem Wochentag abhängen, aber auch, insbesondere im Bereich Haushalte und Kleinverbraucher, von der Temperatur in der Atmosphäre beeinflußt werden. Daher wird zur Berechnung der Temperaturabhängigkeit der Emissionswerte die vom BKF/BKN-Modell bereitgestellte 950 hPa-Temperatur genutzt.

V. Rechnungen mit SMOVO und Vergleich mit Meßwerten

Das Ausbreitungsmodell SMOVO wurde sowohl auf den Rechenanlagen des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KfK-Rechner) als auch auf den Rechenanlagen des Deutschen Wetterdienstes in Offenbach (DWD-Rechner) implementiert und erprobt.

Für den Vergleich der Rechenergebnisse mit Meßwerten stehen Werte aus dem Smogfrühwarnsystem des Umweltbundesamtes zur Verfügung. Analog zu den

vom Modell auf Rasterflächen der Größe 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad prognostizierten 3-Stunden-Werten wird auch bei den Meßwerten über alle in einem Rasterfeld der Ausdehnung 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad liegenden Stationen, für die Meßwerte vorliegen, der 3-Stunden-Mittelwert gebildet.

Der Einsatz des Modells SMOVO auf dem KfK - Rechner diente der nachträglichen Berechnung von Konzentrationswerten, der Erprobung und Verbesserung des Modells, der Interpretation, Auswertung und Bewertung der Ergebnisse sowie der Durchführung von Parameterstudien. Für diese Rechnungen wurden die meteorologischen Datensätze fortlaufend auf dem DWD - Rechner abgespeichert und in regelmäßigen Abständen zum KfK übertragen.

Bei den Parameterstudien ging es insbesondere um

- *die Verbesserung der SO₂-Konzentrationsprognosen durch eine von der Schneedecke abhängige Depositionsgeschwindigkeit und einen von der Temperatur abhängigen Emissionsgang,*
- *den Einfluß der bei der Beschreibung der nassen und trockenen Deposition sowie chemischen Umwandlung gewählten Parameter auf die Rechenergebnisse,*
- *den Einfluß von Mischungsschichthöhe und Windfeld,*
- *die Abhängigkeit der Güte der Smogprognose von der Güte der Wettervorhersage*
- *und den Einfluß der Zusammenfassung der Emittenten auf 308 Standorte.*

Auf dem DWD - Rechner wurden in einem probeweisen Routinebetrieb Prognoserechnungen für die SO₂ - Konzentrationsverteilung auf dem Gebiet der Bundesrepublik Deutschland durchgeführt. Hierzu werden täglich einmal am Morgen Konzentrationswerte als Mittelwert über jeweils 3 Stunden für den jeweils aktuellen und den darauffolgenden Tag errechnet. Die errechneten Konzentrationswerte können anschließend im Rahmen des Smogfrühwarnsystems verwendet und zusammen mit Meßwerten den Bundesländern zur Verfügung gestellt werden.

Der Einsatz des Modells auf dem DWD-Rechner erfolgte mit wenigen Unterbrechungen vom November 1989 bis zum März 1990 sowie vom Oktober 1990 bis zum März 1991. Rechnungen und Auswertungen wurden auf dem KfK-Rechner für den gleichen Zeitraum sowie zusätzlich für weiter zurückliegende Episoden erhöhter SO₂-Konzentrationen - für den 15. bis 21. Januar 1985, den 15. bis 23. Januar 1987, den 2. bis 6. Februar 1987 sowie den 26. und 27. Februar 1987 - durchgeführt.

Da für eine große Anzahl von Terminen und für ein relativ großes Gebiet Konzentrationswerte berechnet wurden, werden im Abschlußbericht nur ausgewählte Ergebnisse in komprimierter Form dargestellt. Ziel dieser Darstellung ist dabei:

- *einen Gesamtüberblick über die Rechenergebnisse und den Vergleich von Messung und Rechnung, z.B. anhand von Fehlerwerten, zu geben;*
- *für ausgewählte Termine bzw. Episoden Detailergebnisse darzustellen;*
- *die Ergebnisse zu interpretieren;*
- *anhand der Interpretation der Ergebnisse Verständnis für die Modellstruktur und die Modellqualität zu wecken;*
- *Darstellungsformen aufzuzeigen, die es ermöglichen, die Ergebnisse im Smogfrühwarnsystem geeignet interpretieren und bewerten zu können;*
- *zu einer umfassenden Bewertung der Qualität der Ergebnisse zu kommen;*
- *Hinweise darauf zu geben, in welcher Weise das Modell weiterentwickelt werden kann bzw. welche Schwerpunkte bei einem neu zu entwickelnden Modell zu setzen sind.*

Im einzelnen wurden folgende Darstellungsformen gewählt:

- *zeitlicher Verlauf des Mittelwertes über alle Rasterfelder der alten Bundesländer (Messung und Rechnung) sowie der neuen Bundesländer (nur Rechnung) für das Winterhalbjahr 1989/1990 sowie das Winterhalbjahr 1990/1991;*
- *Beiträge einzelner Staaten zu dem errechneten Mittelwert;*
- *Rasterkarten von Rechnung und Messung für ausgewählte Termine. Diese Karten enthalten eine Darstellung der regionalen Verteilung der Werte in Rasterfeldern der Ausdehnung 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad für das Gebiet der alten Bundesländer (Messung) bzw. das Gebiet der alten und neuen Bundesländer (Rechnung);*
- *zeitlicher Verlauf der Konzentrationswerte von Messung und Rechnung in ausgewählten Rasterfeldern für ausgewählte Zeiträume.*

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß Beginn, Verlauf und Ende von Episoden erhöhter Konzentrationswerte i.a. gut prognostiziert wurden. Auch die Höhe der Konzentrationswerte, die in den betrachteten Winterhalbjahren im Bereich von deutlich unter $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bis zu $600 \mu\text{g}/\text{m}^3$ lagen, wird vom Modell gut wiedergegeben. Allerdings traten hin und wieder Abweichungen in der regionalen Verteilung der Konzentrationswerte auf. Häufig ist dabei die errechnete Fahne erhöhter Konzentrationswerte gegenüber der entsprechenden gemessenen Fahne im Uhrzeigersinn gedreht, was darauf zurückzuführen sein dürfte, daß zur Modellierung des Transports nur der Wind im 850 hPa-Niveau herangezogen wird und damit ei-

ne Windscherung zum Boden hin nicht berücksichtigt werden kann. Ein abschließlicher Vergleich von Meß- und Rechenwerten in einzelnen Rasterfeldern bzw. an einzelnen Stationen ist daher für eine Bewertung und Interpretation der prognostizierten SO₂-Konzentrationen nur bedingt geeignet. Vielmehr sollten gerade beim Einsatz des Modells im Smogfrühwarnsystem die im ausführlichen Bericht in zahlreichen Abbildungen dargestellten Rasterkarten der regionalen Verteilung der Konzentrationswerte herangezogen werden, um zusammen mit zusätzlichen Informationen, wie z.B. bereits vorliegenden Meßwerten und meteorologischen Informationen, eine Prognose des zeitlichen Verlaufs und der regionalen Verteilung der Konzentrationswerte zu ermöglichen.

VI. Ausblick

Seit Anfang 1991 liefert das Europamodell des Deutschen Wetterdienstes routinemäßig Wettervorhersagedaten. Damit werden die bislang zur Wettervorhersage eingesetzten Modelle, das feuchtbarokline BKF-Modell und das genestete feuchtbarokline BKN-Modell durch ein verbessertes Modell mit wesentlich höherer horizontaler und vertikaler Auflösung ersetzt. In Zukunft müssen daher zur Smogprognose die Daten des Europamodells genutzt werden. Dies bedeutet eine weitgehende Modifizierung des bisher verwendeten Modells SMOVO. Im Winterhalbjahr 1991/1992 wurde das Modell SMOVO jedoch weiterhin im probeweisen Routinebetrieb eingesetzt; für das Winterhalbjahr 1992/1993 ist der Einsatz des neuen Modells SMOROP geplant.

1. Einleitung

Zu Beginn der achtziger Jahre wurde deutlich, daß der Ferntransport von Luftschadstoffen zu einer Verschärfung bestehender winterlicher Smoglagen führen kann. Dabei kann es auch außerhalb von Ballungsgebieten zu vergleichsweise hohen Schadstoffkonzentrationen kommen, die durch Freisetzungen in entfernten Emissionsgebieten verursacht werden.

Vor allem die während der Smogepisode des Jahres 1985 gemachten Erfahrungen veranlaßten die Teilnehmer der Umweltministerkonferenz 1986 dazu, den Aufbau eines Frühwarnsystems für ferntransportierten Smog zu initiieren. Hauptaufgabe dieses Frühwarnsystems ist die Erfassung von Episoden hoher Schadstoffkonzentrationen in der Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) mit Hilfe der Meßnetze des Umweltbundesamtes und der Landesämter. Die Meßwerte werden zentral vom Umweltbundesamt gesammelt und ausgewertet und über einen Rechnerverbund an die am Frühwarnsystem beteiligten Stellen weitergegeben.

Aus technischen und organisatorischen Gründen konnten die neuen Bundesländer bisher noch nicht in das Smogfrühwarnsystem integriert werden. Bei Episoden erhöhter Schadstoffkonzentrationen sollen jedoch Meßdaten aus dem Smogfrühwarnsystem der alten Bundesländer auch den neuen Bundesländern zur Verfügung gestellt werden bzw. umgekehrt, soweit wie technisch möglich, Meßwerte aus den neuen Bundesländern im Smogfrühwarnsystem mitberücksichtigt werden.

Anhand der regionalen Verteilung und des zeitlichen Verlaufs der gemessenen Luftschadstoffkonzentrationen sowie der zu erwartenden Entwicklung des Wetterablaufs können erste Aussagen zur weiteren Immissionsentwicklung gemacht werden. Die eigentliche Prognose des Eintretens bzw. weiteren Verlaufs einer Smogepisode wird jedoch mit Hilfe eines Ausbreitungsmodells auf der Grundlage von Wetterprognosen des Deutschen Wetterdienstes (DWD) erstellt werden.

In der Abteilung für Angewandte Systemanalyse des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KfK/AFAS) wurde hierzu im Auftrag des Umweltbundesamtes und mit Unterstützung des Deutschen Wetterdienstes untersucht, inwieweit sich das bereits existierende und in vielen Fällen für andere Fragestellungen eingesetzte Trajektorienmodell MESOS modifizieren und in das Smogfrühwarnsystem einbinden läßt. MESOS wurde ursprünglich im Imperial College in London entwickelt, um die Ausbreitung radioaktiver Stoffe zu berechnen /1/. Hierbei hat man

es nur mit einem einzigen Freisetzungspunkt zu tun, ganz im Gegensatz zu der großen Anzahl von Emittenten, die zur Schwefeldioxidbelastung beitragen. Darüberhinaus wurde in MESOS auf nachträglich aufbereitete meteorologische Daten der synoptischen Wetterstationen zugegriffen, während zur Prognose von Konzentrationswerten die routinemäßig vom Deutschen Wetterdienst erstellten Wettervorhersagen ausgewertet werden müssen. Zur Modellierung der Ausbreitung von SO₂ auf dem Gebiet Europas mußte MESOS deshalb umfangreichen Modifikationen unterzogen werden, wobei jedoch die zugrunde gelegten meteorologischen Ansätze weitgehend beibehalten wurden.

Im vorliegenden Bericht wird zunächst ein kurzer Überblick über die im Zusammenhang mit winterlichen Smogwetterlagen interessierenden Fragen gegeben. Anschließend wird die für den Einsatz im Smogfrühwarnsystem aus MESOS entwickelte Programmversion SMOVO zur Berechnung von SO₂-Konzentrationen zusammen mit den verwendeten meteorologischen Eingabedaten und der Emissionsdatenbasis beschrieben. Es folgen Untersuchungen zum Einfluß der verschiedenen Modellparameter und der benutzten Eingabedaten auf die Modellergebnisse. Weiterhin werden mit SMOVO berechnete Konzentrationsverteilungen vorgestellt und mit gemessenen SO₂-Konzentrationen verglichen. Den Abschluß bildet eine Bewertung des hier vorgestellten Modells in bezug auf seine Verwendbarkeit in einem Smogfrühwarnsystem. Diese Bewertung wird durch die Tatsache erschwert, daß es in den Jahren 1988 - 1991, in denen das Modell entwickelt und für den Routinebetrieb erprobt wurde, in den alten Bundesländern keine Smogepisoden gab; es traten nur vereinzelt kurzfristig leicht erhöhte SO₂-Konzentrationen auf. Ursache dafür waren zum einen die meteorologischen Bedingungen während der Wintermonate, zum anderen der Rückgang der Emissionen in den alten Bundesländern aufgrund der Bestimmungen der Großfeuerungsanlagenverordnung. Desweiteren werden seit 1990 auch in den neuen Bundesländern, bedingt durch den Produktionsrückgang und die Stilllegung einzelner Anlagen, weniger Schadstoffe freigesetzt.

2. Physikalische und chemische Prozesse bei winterlichen Smogwetterlagen und deren Modellierung

2.1 Charakterisierung von lokalem und advehiertem Smog

Der Begriff Smog wurde zunächst fast ausschließlich mit Episoden extrem hoher Schadstoffkonzentrationen in der Luft in Zusammenhang gebracht, die in Ballungsgebieten während austauscharmer Wetterlagen durch die Ansammlung lokal emittierter Schadstoffe entstehen. Bekannt sind insbesondere die Londoner Smogepisoden, die noch in den fünfziger Jahren zu einer großen Zahl zusätzlicher Sterbefälle führten. Im Ruhrgebiet wurden während einer Smogepisode im Jahr 1962 SO_2 -Konzentrationen bis zu $4000 \mu\text{g}/\text{m}^3$ im Tagesmittel gemessen, und es kam ebenfalls zu einer erheblichen Erhöhung der Mortalität in der Bevölkerung. Daraufhin wurde 1963 die erste Smogverordnung in der Bundesrepublik Deutschland für das Ruhrgebiet erlassen /2/.

Bei diesen Smoglagen handelte es sich im wesentlichen um lokal bzw. regional verursachte Phänomene, die durch stark eingeschränkten vertikalen Luftaustausch infolge einer niedrig liegenden Inversion und zusätzlich durch den verminderten horizontalen Abtransport der Schadstoffe wegen niedriger Windgeschwindigkeiten auftraten. Diese austauscharmen Wetterlagen sind in den Smogverordnungen charakterisiert durch Inversionshöhen unter 700 m und Windgeschwindigkeiten kleiner als 1,5 m/s. Zu lokalen Episoden hoher Schadstoffkonzentrationen kommt es häufig gegen Ende winterlicher Hochdruckwetterlagen nach Ausbildung einer kräftigen Absinkinversion oder wenn am Rande eines nach Osten abziehenden Hochs in der Höhe Warmluft über die bodennahe Kaltluft einfließt. Eine geschlossene Schneedecke am Boden verhindert zunächst eine Erwärmung dieser Kaltluft, und es kommt zu einer mehr oder weniger lang andauernden Inversionslage.

Eine entsprechende Wettersituation führte noch im Januar 1982 zu einer Periode sehr hoher Schadstoffbelastung im Ruhrgebiet, die ebenfalls im wesentlichen auf lokale Emissionen zurückzuführen war. Wegen der sehr niedrigen Inversionshöhe trugen SO_2 -Emissionen aus hohen Kaminen zur Schadstoffbelastung in Bodennähe nicht bei, und es dominierten während dieser Episode CO- und NO_x -Immissionen, die zu einem großen Teil vom Kraftverkehr verursacht wurden. Die CO-Konzentrationen erreichten $21000 \mu\text{g}/\text{m}^3$, die NO_2 -Werte stiegen auf $320 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und die NO-Werte auf $840 \mu\text{g}/\text{m}^3$ im Tagesmittel. Der höchste SO_2 -Tagesmittelwert lag bei $600 \mu\text{g}/\text{m}^3$ /3/. Zu einem im Vergleich zu den anderen Schadstoffen stärkeren Anstieg der SO_2 -Konzentrationen kann es bei Wetterlagen mit größeren In-

versionshöhen kommen, wenn Schadstoffe aus höheren Quellen unterhalb der Inversion freigesetzt werden. Während einer Smoglage im Januar 1979 stiegen dabei die SO₂-Konzentrationen im Ruhrgebiet auf Werte über 800 µg/m³ /4/.

Während es in den alten Bundesländern nach 1982 zu keiner Smogsituation mehr gekommen ist, die überwiegend auf die Emissionen lokaler Quellen zurückzuführen gewesen wäre, ist die Situation in den neuen Bundesländern immer noch vornehmlich durch lokalen Smog geprägt. Die hierbei in den Emissionszentren auftretenden SO₂-Konzentrationswerte liegen weit über den in den letzten Jahren in den "klassischen" Smoggebieten der alten Bundesländer gemessenen Werten. Ende November/Anfang Dezember 1989 wurden beispielsweise in Halle und Erfurt Tagesmittelwerte der SO₂-Konzentrationen über 1000 µg/m³ gemessen und in Leipzig stiegen die Werte sogar über 2000 µg/m³ /5/.

Zu Beginn der achtziger Jahre wurde deutlich, daß der Ferntransport von Luftschadstoffen zu einer Verschärfung bestehender Smoglagen führen kann und daß es auch außerhalb von Ballungsgebieten zu vergleichsweise hohen Schadstoffkonzentrationen kommt, die nur durch Freisetzungen in entfernten Emissionsgebieten verursacht sein können. So werden in /6/ bei einer Analyse Berliner Smogereignisse neben lokal verursachten Episoden auch Fälle herantransportierter "Smogwolken" identifiziert. Im Dezember 1983 kam es im Hamburger Raum zu einer Episode extrem hoher SO₂-Konzentrationen, die ebenfalls auf den Ferntransport von Luftschadstoffen zurückgeführt werden konnte /7/.

Besonders die intensive Untersuchung der Smogepisode im Januar 1985 führte zu weitergehenden Erkenntnissen über den Ablauf und die meteorologischen Ursachen von Smog mit einem großen Anteil von Fremdimmissionen /8-11/. Im Ruhrgebiet wurde Smogalarm bis Stufe 3 ausgelöst; dies bedeutete eine Einschränkung des Kraftfahrzeugverkehrs und Emissionsreduktionen bis hin zur Abschaltung stark emittierender Betriebe. Zur gleichen Zeit herrschte auch in einigen Städten Hessens Smogalarm. Insbesondere die Messungen hessischer Stationen nahe der Grenze zur ehemaligen DDR (beispielsweise der Waldstation Grebenau mit Tagesmittelwerten der SO₂-Konzentration von über 1200 µg/m³) ließen auf einen hohen Anteil ausländischer Emissionen an der Schadstoffbelastung schließen. Abschätzungen für das Ruhrgebiet ergaben einen Fremdanteil an den SO₂-Immissionen von bis zu 60%, wobei auch in dieser Region besonders Ferntransporte aus dem Bereich der ehemaligen DDR, Polens und der CSFR eine große Rolle spielten.

Das Auftreten hoher Schadstoffkonzentrationen auch in ländlichen Gebieten außerhalb der Ballungsräume ist ein wesentliches Merkmal advehierten Smogs. Klassische Smoglagen sind auf die Ballungsgebiete beschränkt; es können bei etwas höheren Windgeschwindigkeiten ($\leq 3\text{m/s}$) und abgehobenen Inversionen jedoch ebenfalls Transporte bis in Entfernungen von etwa 150 km stattfinden. Die meteorologischen Bedingungen während des Auftretens advehierten Smogs sind, wie auch beim klassischen Smog, durch stark eingeschränkten Vertikalaustausch gekennzeichnet. Es handelt sich hier um großräumige Inversionslagen, in denen jedoch die Windgeschwindigkeiten in Bodennähe 5 m/s erreichen können. In der Haupttransporthöhe liegen die Windgeschwindigkeiten teilweise sogar bei 10 m/s und mehr. In der Regel werden die Schadstoffe mit dem Wind 50 m bis 100 m unterhalb der Inversionsobergrenze transportiert, es gibt aber auch Fälle, in denen die Verlagerung der verschmutzten Luftmassen durch den Wind oberhalb der Inversion bestimmt wird. Dies tritt vor allem gegen Ende der austauscharmen Wetterlage beim Herannahen einer Front auf.

Der Ferntransport von Schadstoffen, insbesondere von SO_2 während Advektions-Smoglagen wird außer durch die relativ hohen Windgeschwindigkeiten auch durch geringe trockene Ablagerung der transportierten Stoffe über einer großräumig vorhandenen geschlossenen Schneedecke begünstigt. Die nasse Ablagerung ist ebenfalls nur sehr gering, da es während winterlicher Inversionslagen unter Hochdruckeinfluß kaum zu Niederschlag kommt. Eine ausführliche Beschreibung der Merkmale advehierten Smogs befindet sich in /12/.

2.2 Grundlegende Aspekte der Ausbreitung und Umwandlung von Schadstoffen in der Atmosphäre während Episoden hoher Schadstoffkonzentrationen

2.2.1 Transport und vertikaler Austausch

Die räumliche und zeitliche Struktur des beobachteten SO_2 -Konzentrationsfeldes ist von einer Vielzahl von Faktoren abhängig:

- der räumlichen und zeitlichen Verteilung der Emissionen ("Quellen"),
- der räumlichen und zeitlichen Struktur des Windfeldes ("Transport"),
- der Wirksamkeit vertikaler Austauschvorgänge in der Atmosphäre ("Diffusion") und
- der Wirksamkeit von physikalisch-chemischen Prozessen wie der trockenen und nassen Deposition und der chemischen Umwandlung ("Senken").

Bei vorgegebener Verteilung der Emissionen sind die beobachteten großräumigen Konzentrationsverteilungen in erster Linie von der jeweiligen Windrichtungsverteilung abhängig. Die Windgeschwindigkeit bestimmt darüberhinaus, mit welcher Effizienz die betrachteten Schadstoffe abtransportiert werden. In mittleren Breiten wird das Windfeld oberhalb der atmosphärischen Grenzschicht von der Kräftebalance zwischen der Corioliskraft und der Druckgradientkraft bestimmt, und der Wind weht isobarenparallel. Reibungskräfte am unteren Rand der Atmosphäre führen innerhalb der Grenzschicht zu einer Ablenkung des Windes hin zum tieferen Druck. Orografische Effekte, wie zum Beispiel die Kanalisierung des Windes in Tälern oder die Land-See-Wind-Zirkulation, führen zu teilweise recht komplexen Strömungsmustern in der Grenzschicht. Dies wird im Fall stabiler Grenzschichtverhältnisse, wie sie bei Smoglagen auftreten, noch verstärkt. Wegen des nach unten gerichteten Wärmestroms wird hierbei der vertikale Impulstransport unterdrückt, und die vertikale Kopplung der Strömung ist nur schwach ausgeprägt. Es kommt zu einer starken Windscherung mit meist sehr kleinen Windgeschwindigkeiten in Bodennähe und einem relativ dazu um bis zu 45° gedrehten, kräftigeren Wind in der Höhe. In solchen Situationen gestaltet es sich schwierig, die Herkunft beobachteter Schadstoffe zu bestimmen, solange nicht bekannt ist, in welchem Niveau der Schadstofftransport stattgefunden hat. Das Erkennen und die genaue Analyse von Episoden advehierten Smogs ist deshalb erst nach dem Aufbau eines flächendeckenden Immissionsmeßnetzes in der Bundesrepublik möglich geworden, mit dessen Hilfe Schadstoffwolken auf ihrem Weg verfolgt werden können. Flugzeugmessungen können darüberhinaus Aufschluß über die vertikale Verteilung und des von der Höhe abhängigen Transports der Schadstoffe geben.

Die vertikale Verteilung von Luftbeimengungen ist vor allem von den Schichtungsverhältnissen in der atmosphärischen Grenzschicht abhängig. Smoglagen sind durch das Auftreten kräftiger Inversionen gekennzeichnet, wodurch der vertikale Austausch unterdrückt wird. In bestimmten Höhen emittierte Schadstoffe verbleiben zunächst in diesen Höhenschichten und breiten sich nur wenig vertikal aus. Es kommt dabei zur Ausbildung ausgeprägter Strukturen in den vertikalen Konzentrationsverteilungen. In Bodennähe bildet sich zumeist unter einer abgehobenen Inversionsschicht ein Ausbreitungsraum aus, in dem alle unterhalb der Inversion emittierten Schadstoffe akkumulieren.

2.2.2 Chemie und Ablagerung

In Episoden erhöhter Schadstoffkonzentrationen spielt die Luftchemie von SO_2 eine wesentliche Rolle, denn primär emittierte Schadstoffe sind nicht nur meteorologischen Vorgängen unterworfen, sondern infolge der dabei auftretenden Mischungsvorgänge auch an den mannigfaltigsten chemischen Prozessen beteiligt, wobei neue, sekundäre Schadstoffe entstehen können.

Die bedeutendste Umwandlung des primären Schadstoffes Schwefeldioxid (SO_2) ist die Oxidation zu Schwefelsäure (H_2SO_4). Dies kann sowohl in der Gasphase, d.h. in Luft, als auch in der Flüssigphase, d.h. in Wolken- oder Regentröpfchen, geschehen /13,14/.

Der Hauptoxidant von SO_2 in der Gasphase ist das Hydroxyl-Radikal (OH^\bullet). Einer der wichtigsten Entstehungsprozesse für OH -Radikale ist die Photolyse von Ozon:



Ozon entsteht in der Troposphäre photolytisch aus Stickstoffdioxid (NO_2):



Es wird allerdings sofort wieder verbraucht, indem das in (1a) entstandene Stickstoffmonoxid (NO) zu NO_2 oxidiert wird:



Innerhalb des durch die Reaktionen (2a), (2b) und (3) gebildeten Reaktionszyklus stellt sich ein festes durch die jeweiligen Reaktionskonstanten bestimmtes Verhältnis zwischen den Konzentrationen von O_3 , NO_2 und NO ein (photochemisches Gleichgewicht). Zu den in der Atmosphäre gemessenen Niveaus von einigen zehn bis einigen hundert ppb kann Ozon erst dann akkumulieren, wenn NO in anderen Reaktionen verbraucht wird und damit nicht mehr für die Reaktion (3) zur Verfügung steht. Diese Bedingung ist erfüllt, wenn NO beispielsweise durch Peroxyradikale zu NO_2 oxidiert wird, wobei durch die folgende Reaktion zusätzlich OH -Radikale entstehen:



Die Anwesenheit von Peroxyradikalen wird dabei wesentlich durch das Auftreten von Kohlenwasserstoffen oder Aldehyden in der Atmosphäre bestimmt. Weitere Pfade bei der Produktion von OH-Radikalen sind photolytische Reaktionen mit Formaldehyd und mit salpetriger Säure, die vor allem in den Morgenstunden eine Rolle spielt, wenn sich noch kein Ozon gebildet hat. Wichtige Senken für die OH-Radikale sind die Oxidation von Kohlenwasserstoffen oder Aldehyden sowie die Bildung von Salpetersäure (HNO_3) aus NO_2 .

Die Beteiligung photochemischer Prozesse an der Produktion von OH-Radikalen bedingt, daß die Reaktionsrate für die Oxidation des SO_2 in der Gasphase im wesentlichen proportional zum Strahlungsfluß ist und damit von der Tages- und Jahreszeit und dem Bedeckungsgrad abhängt /15/. Weiterhin ist die Reaktionsrate aufgrund der obengenannten Pfade bei der Entstehung von OH-Radikalen abhängig von der Verschmutzungsstruktur der Atmosphäre, insbesondere vom Verhältnis der Kohlenwasserstoffkonzentration zur Konzentration der Stickstoffoxide. Da hierüber, räumlich und zeitlich differenziert, in der Regel keine Informationen vorliegen, wird in Modellen des Ferntransports von Schwefelverbindungen mit mittleren Werten der Rate für die Gasphasenumwandlung gerechnet. Für mitteleuropäische Verhältnisse kann für die Oxidation des SO_2 in der Gasphase von einem Jahresmittelwert von ca. 1% pro Stunde ausgegangen werden. Berücksichtigt man die Abhängigkeit von der Sonneneinstrahlung, so erhält man Werte zwischen 0,1% pro Stunde und ca. 4% pro Stunde (s. Abschn. 4.4.2).

In der **Flüssigphase** sind die beiden Hauptoxidantien für SO_2 Wasserstoffperoxid (H_2O_2) und Ozon (O_3), die beide in der Gasphase entstehen. Außerdem wird als Möglichkeit auch die Flüssigphasen-Produktion von H_2O_2 in Betracht gezogen, wobei Vorläufer dieser Reaktionen allerdings ebenfalls der Gasphase entstammen. Neben den beiden Oxidantien H_2O_2 und O_3 spielt in der Flüssigphase auch noch die durch $(\text{Fe})^{3+}$ und $(\text{Mn})^{2-}$ katalysierte Oxidation durch Sauerstoff (O_2) eine Rolle. Diese Katalysatoren sind in stark verschmutzten städtischen Luftmassen i.a. in relevanten Konzentrationen vorhanden.

Damit Flüssigphasen-Oxidationen stattfinden können, müssen die Reaktionspartner erst in die Wolken- oder Regentropfen gelangen und dort gelöst werden. Dabei gibt es große Unterschiede in der Löslichkeit der unterschiedlichen Spezies. Die Löslichkeit ist außerdem temperaturabhängig: bei niedrigen Temperaturen werden die Stoffe i.a. besser gelöst, was im Winter Flüssigphasen-Prozessen ein größeres Gewicht verleiht. O_3 ist relativ schlecht, H_2O_2 besser löslich und wird deshalb fast völlig von den Wolkentropfen absorbiert. Die Löslichkeit von SO_2

in Wasser hängt vom pH-Wert der Lösung ab: je saurer sie ist, umso weniger SO_2 wird gelöst. Für Wolkentröpfchen mit einem pH-Wert von 4 befindet sich das meiste SO_2 nicht in den Tröpfchen, sondern in der Luft zwischen den Tröpfchen.

Neben diesen Unterschieden in der Löslichkeit der Reaktionspartner gibt es auch unterschiedliche pH-Abhängigkeiten der Geschwindigkeitskonstanten der einzelnen Oxidationsreaktionen, was u.a. bewirkt, daß die in der Oxidation entstehende Schwefelsäure selbst den Oxidationsvorgang zunehmend hemmen kann. Sie hat auch zur Folge, daß die Oxidation in der Flüssigphase auch durch Säuren oder Basen beeinflusst werden kann, die aus der Gasphase in die Flüssigphase gelangen. Beispiele sind das in Wasser sehr gut lösliche HNO_3 und NH_3 , das in Wasser zu NH_4OH reagiert.

Weil sowohl Ozon als auch das für die Produktion von H_2O_2 wichtige Hydroperoxyradikal (HO_2^*) in photolytischen Prozessen entstehen, ist auch die Verfügbarkeit der wichtigsten Flüssigphasen-Oxidantien vom Strahlungsfluß abhängig. Das resultiert unter Umständen in relativ geringen Reaktionsraten im Winter. Da in Perioden erhöhter Schadstoffniveaus (Mn^{2-} und $(\text{Fe})^{3+}$ ebenfalls in erhöhter Konzentration vorhanden sein können, kann die Flüssigphasen-Oxidation durch O_2 in diesen Perioden - vor allem in städtischen Luftmassen - gegenüber der Oxidation durch O_3 und H_2O_2 stark an Bedeutung gewinnen.

Nebel, der im Winterhalbjahr relativ häufig auftritt, spielt eine besondere Rolle für die Oxidation in der Flüssigphase. Nebeltröpfchen sind verglichen mit Wolkentröpfchen relativ klein, das Oberflächen-zu-Volumen-Verhältnis ist daher relativ groß, was den Transport von Schadstoffen in die Flüssigphase begünstigt und zu hohen Schadstoffkonzentrationen in den Tröpfchen führt. Während ausbreitungsschwacher Wetterlagen werden im Nebel außer hohen Schadstoffkonzentrationen auch hohe Konzentrationen der katalysierenden Metalle (Mn^{2-} und $(\text{Fe})^{3+}$ gefunden /16/. All dies kann hohe Flüssigphasen-Oxidationsraten von einigen zehn Prozent zur Folge haben /17/. In der Regel werden sich solche hohen Umwandlungsraten jedoch nur in ganz bestimmten Fällen, räumlich und zeitlich begrenzt, in der Atmosphäre wiederfinden lassen.

Wie bei der Gasphasenumwandlung liegen auch bei der Flüssigphasenumwandlung für die unterschiedlichen physikalischen und chemischen Prozesse in der Regel keine räumlich und zeitlich differenzierten Daten vor. Daher wird in den Modellen des Ferntransports von Schadstoffen die Flüssigphasenumwandlung von SO_2 zu SO_4^- i.a. nicht explizit berücksichtigt; eine Abreicherung von SO_2 durch diese Prozesse wird erst dann angenommen, wenn es regnet und die entsprechen-

de Rate ist in der Rate für die nasse Ablagerung enthalten. Die nasse Ablagerungsrate von SO_2 ist dabei abhängig von der Niederschlagsintensität und der Jahreszeit und liegt im Bereich von deutlich unter 1% pro Stunde bei geringen bis zu ca. 15 % pro Stunde bei hohen Niederschlagsintensitäten (s. Abschn. 4.4.3).

Neben der chemischen Umwandlung ist eine weitere wichtige Senke des SO_2 die trockene und die nasse Deposition. Trockene Deposition beschreibt die Ablagerung von Gasen und Aerosolen, die durch Luftbewegungen und die Schwerkraft auf die Erdoberfläche gebracht und dort deponiert werden. Nasse Deposition bezieht sich auf die Ablagerung von Schadstoffen, die infolge von Auswaschvorgängen in Wolken- und Regentröpfchen gelangt sind und dann durch Regen auf der Erdoberfläche deponiert werden. Die nasse Deposition von SO_2 spielt während winterlicher Hochdrucklagen, die in der Regel eine Grundbedingung für das Auftreten von Smogereignissen bilden, nur eine untergeordnete Rolle.

Eine charakteristische Größe für die trockene Ablagerung ist die Depositionsgeschwindigkeit, die, mit der Konzentration in Bodennähe multipliziert, die pro Zeit und Flächeneinheit trocken abgelagerte Schadstoffmasse angibt. Die Depositionsgeschwindigkeit nimmt je nach chemischer Spezies, Zustand der Atmosphäre, Beschaffenheit und Bewuchs der Erdoberfläche unterschiedliche Werte an. Im Zusammenhang mit den hier beschriebenen Episoden erhöhter Schadstoffkonzentrationen im Winterhalbjahr ist dabei von Bedeutung, daß die Depositionsgeschwindigkeit des SO_2 über schneebedeckter Oberfläche klein ist. Sie liegt hier bei 0,1 cm/s, während man sonst über Land einen Wert von 0,8 cm/s annimmt /18/. Die Deposition durch Nebel, die als trockener Depositionsprozess beschrieben wird, kann ebenfalls eine bedeutende Rolle spielen. Die Deposition von Flüssigwasser und von H^+ -Ionen durch Nebel läßt sich quantitativ mit der durch Regen vergleichen /19 /, und es wurden Depositionsgeschwindigkeiten von H_2SO_4 zwischen 2 cm/s und 3 cm/s gemessen /20/. Zusammen mit den oben beschriebenen hohen Oxidationsraten von SO_2 zu H_2SO_4 in Nebel bedeutet dies, daß Nebelereignisse Schwefeldioxid sehr wirkungsvoll aus der Atmosphäre entfernen können.

Die niedrigen Depositionsgeschwindigkeiten über Schnee begünstigen im allgemeinen den Ferntransport von SO_2 . Inwieweit nun aber die erhöhte Umwandlungsrate und die erhöhte Deposition im Nebel diesen Effekt aufheben kann, ist schwer abzuschätzen. Wegen der relativ großen Transportgeschwindigkeiten während des Auftretens von advehiertem Smog und der vom Boden abgehobenen Haupttransportschicht dürfte der Einfluß von Nebel auf den Ferntransport jedoch gering sein.

2.3 Ausbreitungsmodelle

Zur Modellierung der Ausbreitung von Luftbeimengungen steht eine große Zahl von Modellen und Modelltypen zur Verfügung:

- statistische Modelle
- Box-Modelle
- Gauß'sche Ausbreitungsmodelle
- Lagrange'sche Teilchensimulationsmodelle
- Trajektorienmodelle
- Euler'sche Gittermodelle

Für die Modellierung großräumiger Schadstoffausbreitung im Zusammenhang mit advehiertem Smog kommen im wesentlichen die beiden letztgenannten Modelltypen in Frage.

In den Euler'schen Gittermodellen wird die Advektions-Diffusionsgleichung

$$\frac{\delta c}{\delta t} = -\nabla \cdot (vc) + \nabla \cdot (K\nabla c) + Q - S$$

mit

- c = Vektor der Konzentrationen der betrachteten Luftverunreinigungen
- v = Windgeschwindigkeitsvektor
- K = turbulenter Diffusionstensor
- Q = Zusammenfassung der Quellterme
- S = Zusammenfassung der Senken

auf einem zwei- bis dreidimensionalen, mit der Erde fest verbundenen Gitter, numerisch gelöst. Die Euler'schen Gittermodelle bieten die Möglichkeit, auch komplexe chemische Reaktionsmechanismen und Ablagerungsprozesse detailliert zu berücksichtigen. Gekoppelt mit meteorologischen Grenzschichtmodellen oder Mesoscale-Modellen kann mit ihrer Hilfe die Schadstoffausbreitung auch unter komplizierten atmosphärischen Bedingungen berechnet werden. Die Tatsache, daß Euler'sche Gittermodelle zur Berechnung der Ausbreitung von Luftbeimengungen relativ einfach mit meteorologischen Gittermodellen (beispielsweise auch Prognosemodellen) zu verknüpfen sind, legt die Folgerung nahe, daß sie sich gut für den Einsatz in einem Smogfrühwarnsystem eignen. Ihrer Verwendung steht jedoch der relativ große numerische Aufwand entgegen, der zu hohen Rechenzeiten auch auf modernen Rechanlagen führt. So wurden beispielsweise mit Hilfe des TADAP/ADOM-Modells, einem der wenigen Euler'schen Modelle, mit dessen

Hilf die Schadstoffausbreitung über Europa simuliert wird, bisher nur Rechnungen für kurze Episoden durchgeführt /21/. Dasselbe gilt für das auf der Basis des amerikanischen Ausbreitungsmodells RADM im Rahmen von EUROTRAC entwickelte Modell EURAD /22/. Die Anwendung in einem Smogfrühwarnsystem verlangt jedoch während der Wintermonate tägliche Rechnungen für einen Prognosezeitraum von bis zu zwei Tagen.

Eine weitere Schwierigkeit beim Einsatz von zur Verfügung stehenden Euler'schen Ausbreitungsmodellen innerhalb eines Smogfrühwarnsystems ergibt sich durch die geringe horizontale und vertikale Gitterauflösung der bis Anfang 1991 ausschließlich vom DWD eingesetzten Prognosemodelle. Erst seit Januar 1991 wird das höher auflösende Europamodell, das auch die meteorologischen Felder für Rechnungen mit TADAP/ADOM lieferte, zur operationellen Wettervorhersage benutzt. Relativ einfache Gittermodelle, die Prognosedaten des Europamodells nutzen, sind zum einen das Episodenmodell THEPI der TH-Darmstadt /23/) und das vom ehemaligen meteorologischen Dienst der DDR entwickelte Ausbreitungsmodell CAPOS /24/.

Die außer den eben genannten Ausbreitungsmodellen vorliegenden Modelle sind meist für den regionalen Scale konzipiert und haben Gitter mit horizontalen Maschenweiten in der Größenordnung von 10 km. Zu nennen wären beispielsweise das THD-Modell der technischen Hochschule Darmstadt /25/, das holländische KNMI-Modell /26/ und das RIV-Gittermodell /27/. Es lassen sich hier jedoch keine Angaben darüber machen, inwieweit diese einfachen (oder aber auch andere hier nicht genannte) Modelle für die Berechnung der Schadstoffausbreitung auf europäischem Scale geeignet sind und darüberhinaus bei entsprechend moderaten Rechenzeiten für die tägliche Smogprognose verwendet werden können.

Bislang wurden für die Berechnung des Ferntransportes von Luftbeimengungen vor allem Lagrange'sche Ausbreitungsmodelle benutzt. Charakteristisch für diese Modelle ist, daß sich das benutzte Bezugssystem mit der atmosphärischen Strömung bewegt und somit in der oben angeführten Advektions-Diffusionsgleichung der Advektionsterm

$$\nabla \cdot (vc)$$

entfällt. Die Gleichungen für den Massenhaushalt von Luftschadstoffen in Lagrange'schen Ausbreitungsmodellen gelten demnach für Luftpakete, die entlang ihrer Trajektorien verfolgt werden. Zur Berechnung des Trajektorienver-

laufs gibt es eine Vielzahl von Verfahren, die sich meist auf die folgenden Ansätze zurückführen lassen:

- Interpolation von Winddaten aufgrund von Bodenwind- oder Radiosondenwindmessungen
- Berechnung des Windfeldes aus Bodenluftdruckdaten (geostrophische Approximation)
- Trajektorienberechnungen in meteorologischen Vorhersagemodellen.

Prinzipiell werden bei den Lagrange'schen Modellen des Ferntransports von Luftschadstoffen quellorientierte und rezeptororientierte Modelle unterschieden /28/. In den rezeptororientierten Modellen werden für vorgegebene Empfängerpunkte Rückwärtstrajektorien berechnet - d.h. Trajektorien, die zu einem vorgegebenen Zeitpunkt den Rezeptor erreichen und die auf ihrem Weg freiwerdenden Emissionen aufsammeln. Unterschiedliche chemische Spezies kommen dabei in einer "Box" zusammen und können miteinander reagieren. Rezeptororientierte Modelle haben gegenüber quellorientierten den Nachteil, daß die Lage einer Schadstoffquelle nicht exakt berücksichtigt werden kann und die Emissionen im allgemeinen über eine ganze Rasterfläche verschmiert werden müssen. Weiterhin ist die Berücksichtigung eines Tagesganges der Mischungsschichthöhe nur in begrenztem Maße möglich.

Das im Rahmen des Smogfrühwarnsystems verwendete Modell gehört zu den quellorientierten Modellen, mit deren Hilfe Schadstoffe auf ihrem Weg zu den Empfängergebieten verfolgt werden. Zu den Nachteilen dieser Modelle gehört, daß der Rechenaufwand bei einer großen Zahl von Quellen stark ansteigt und komplexe (insbesondere nichtlineare) chemische Prozesse nicht berücksichtigt werden können, da Luftkonzentrationen zunächst nicht vorliegen und die von den unterschiedlichen Quellen freigesetzten Schadstoffpakete nicht vermischt werden. Eine Fehlerquelle stellt bei allen Lagrange'schen Modellen der Übergang zum Euler'schen System dar, d.h. wenn Gitterwerte der Konzentrationen und Ablagerungen berechnet werden müssen.

Lagrange'sche Modelle des Ferntransports sind meist recht einfach aufgebaut und benötigen nur relativ geringe Rechnerkapazitäten. In Abbildung 2.1 sind exemplarisch die Rechenzeiten für ein regionales Gitter-Ausbreitungsmodell den Rechenzeiten für ein Trajektorienmodell gegenübergestellt. Es wird deutlich, daß sich erst bei einer großen Anzahl von Quellen Vorteile für das Gittermodell ergeben.

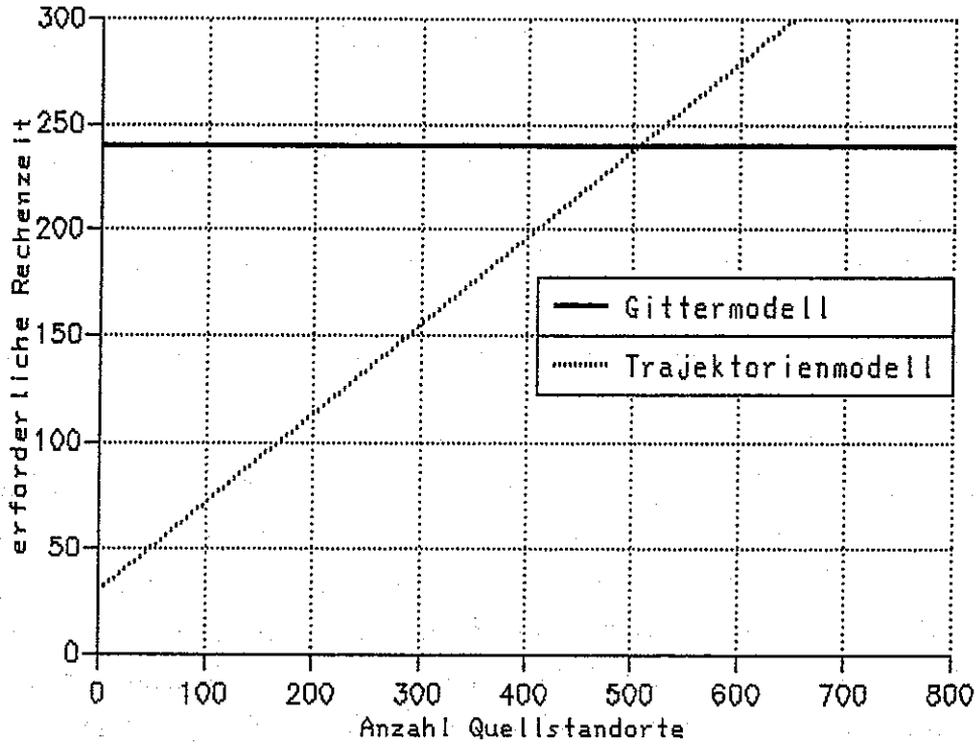


Abb. 2.1: Vergleich der Rechenzeiten von Gitter- und Trajektorienmodellen (nach: /29/)

Ein gewichtiger Grund zur Verwendung eines Trajektorienmodells im Smogfrühwarnsystem war die Tatsache, daß mit MESOS ein lauffähiges Programm zur Verfügung stand. So wurde das für das Smogfrühwarnsystem modifizierte Modell bislang in einer großen Anzahl von Studien angewandt und dabei ausgetestet /30-32/. Als vorteilhaft für die Verwendung eines Lagrange'schen Modells im Zusammenhang mit Prognosedaten des DWD stellte sich zusätzlich der Sachverhalt heraus, daß die Berechnung des Trajektorienverlaufs relativ unabhängig von der Berechnung der Umwandlung, Deposition und vertikalen Diffusion ist. Damit sind bei der Anpassung des Modells an andere meteorologische Eingabedaten nur partielle Änderungen nötig. Die Berechnung des Massenhaushalts in einem Schadstoffpaket kann von diesen Modellmodifikationen weitgehend unberührt bleiben.

3. Das verwendete Modell und die benötigten Eingabedaten

3.1 Das Ausbreitungsmodell SMOVO

Im Verlauf des hier beschriebenen Vorhabens wurden mehrere Modelle verwendet:

- **MESOS** als Einquellen-Trajektorienmodell
- **MULTI** als Vielquellen-Modell für Parameterstudien
- **SMOVO** zur Prognose von Konzentrationswerten von SO_2
- **CYTRA10** zur Berechnung von Rückwärtstrajektorien

Alle Modelle basieren auf dem vom Imperial College in London entwickelten Ausbreitungsmodell MESOS. Es handelt sich hierbei um ein Trajektorienmodell, in dem in einem vorgegebenen Windfeld Schadstoffpakete auf Trajektorien von der Quelle bis hin zu den Rezeptorrasterflächen verfolgt werden. Die horizontale Verteilung der Schadstoffe ist vor allem durch den unterschiedlichen Verlauf aufeinanderfolgender Trajektorien aufgrund der raumzeitlichen Variabilität des Windfeldes bedingt. Zur Behandlung der vertikalen Durchmischung wurde das Konzept einer variablen Mischungsschichthöhe eingeführt. Entlang der Trajektorien wird weiterhin berücksichtigt, wieviel vom emittierten Material durch trockene und nasse Deposition abgelagert bzw. durch chemische Reaktionen in Folgeprodukte umgewandelt wird. Zur Berechnung des Trajektorienverlaufs und anderer Modellparameter steht eine meteorologische Datenbasis zur Verfügung, die das Bodenluftdruckfeld, die Lufttemperatur, den Niederschlagsindex und den Bedeckungsgrad für die Jahre 1982 und 1983 in dreistündiger Auflösung enthält.

MESOS wurde ursprünglich entwickelt, um die Ausbreitung von radioaktiven Stoffen zu berechnen. Dabei hat man es in der Regel mit nur einem Freisetzungspunkt zu tun, ganz im Gegensatz zu der großen Anzahl von Emittenten, die zur Schadstoffbelastung während Smogepisoden beitragen. Zur Modellierung der Ausbreitung von SO_2 auf dem Gebiet Europas mußte MESOS daher umfangreichen Modifikationen unterzogen werden, wobei jedoch die zugrunde gelegten meteorologischen Annahmen weitgehend beibehalten wurden.

Erster Entwicklungsschritt war der Übergang von MESOS zum Vielquellenmodell MULTI, unter Beibehaltung der MESOS-Datenbasis. Auf der Grundlage von MULTI wurde das im Smogfrühwarnsystem eingesetzte Modell SMOVO entwickelt. Der Programmablauf von SMOVO entspricht dem von MULTI. Da jedoch mit Hilfe von SMOVO Immissionsprognosen gemacht werden sollen, muß das

Programm mit aktuellen Wetterdaten rechnen und kann nicht, wie MESOS oder MULTI, auf die Wettermeldungen der synoptischen Stationen zurückgreifen. SMOVO nutzt daher die Ergebnisse des feuchtbaroklinen Vorhersagemodells (BKF- bzw. BKN-Modell) des Deutschen Wetterdienstes, die in Datenbanken des DWD archiviert werden.

Abbildung 3.1 zeigt exemplarisch das Ablaufschema von SMOVO. Für jeden Starttag werden zunächst die meteorologischen Bedingungen festgelegt, die den Verlauf der Trajektorien und den Transport der betrachteten Schadstoffe bestimmen. Dabei werden nicht nur die in der meteorologischen Datenbasis vorliegenden Parameter eingelesen, sondern auch für alle Landrasterflächen die Stabilitätsklasse und Mischungsschichthöhe in stündlichem Abstand berechnet. Im Gegensatz dazu erfolgt die Berechnung der Mischungsschichthöhe in MESOS entlang der jeweiligen Trajektorien, was die Rechenzeit bei einer großen Zahl von Trajektorien stark ansteigen läßt. Über dem Meer wird die Mischungsschichthöhe auch in MULTI entlang von Trajektorien berechnet, da bei ablandigem Wind (d.h. beim Übertritt der Trajektorie vom Land zur See) die Mischungsschichthöhe über dem Meer zunächst von derjenigen über Land abhängig ist.

An jedem Tag eines vorgegebenen Bezugszeitraums werden im Abstand von drei Stunden bei MULTI und einer Stunde bei SMOVO für jeden Quellort Trajektorien gestartet und die sich auf diesen Trajektorien entlangbewegenden Schadstoffpakete in ihrer Entwicklung verfolgt. Nur dann, wenn eine Trajektorie mindestens eine Empfängerrasterfläche berührt, wird der Massenhaushalt der entlang dieser Trajektorie transportierten Schadstoffe berechnet. Hierbei wird ohne wesentliche Änderung wie in MESOS vorgegangen: Nach Austritt aus der Quelle kann sich der betrachtete Schadstoff in der Mischungsschicht nach einem modifizierten Gauss-Ansatz vertikal ausbreiten, bis er die Mischungsschicht in ihrer gesamten Höhe ausfüllt. Danach ist die Höhenentwicklung der Abluftfahne an den Gang der Mischungsschichthöhe gekoppelt, wobei bei einem Absinken der Mischungsschichtobergrenze Schadstoffe in die darüber liegenden "stabilen Schichten" gelangen können. Nur in der Mischungsschicht befindliche Schadstoffe werden trocken abgelagert; die nasse Ablagerung und die Umwandlung erfaßt die Schadstofffahne in ihrer vollen Ausdehnung. Wenn sich an einem Ort mehrere Quellen mit unterschiedlichen Freisetzungshöhen oder unterschiedlichem Jahresgang der Emissionen befinden, wird der Massenhaushalt der auf ein und derselben Trajektorie verfolgten Schadstoffpakete solange getrennt berechnet, bis alle die Höhe zwischen Boden und Mischungsschichtobergrenze ausfüllen. Danach werden die betreffenden Massen in der Mischungsschicht und den darüber befindlichen

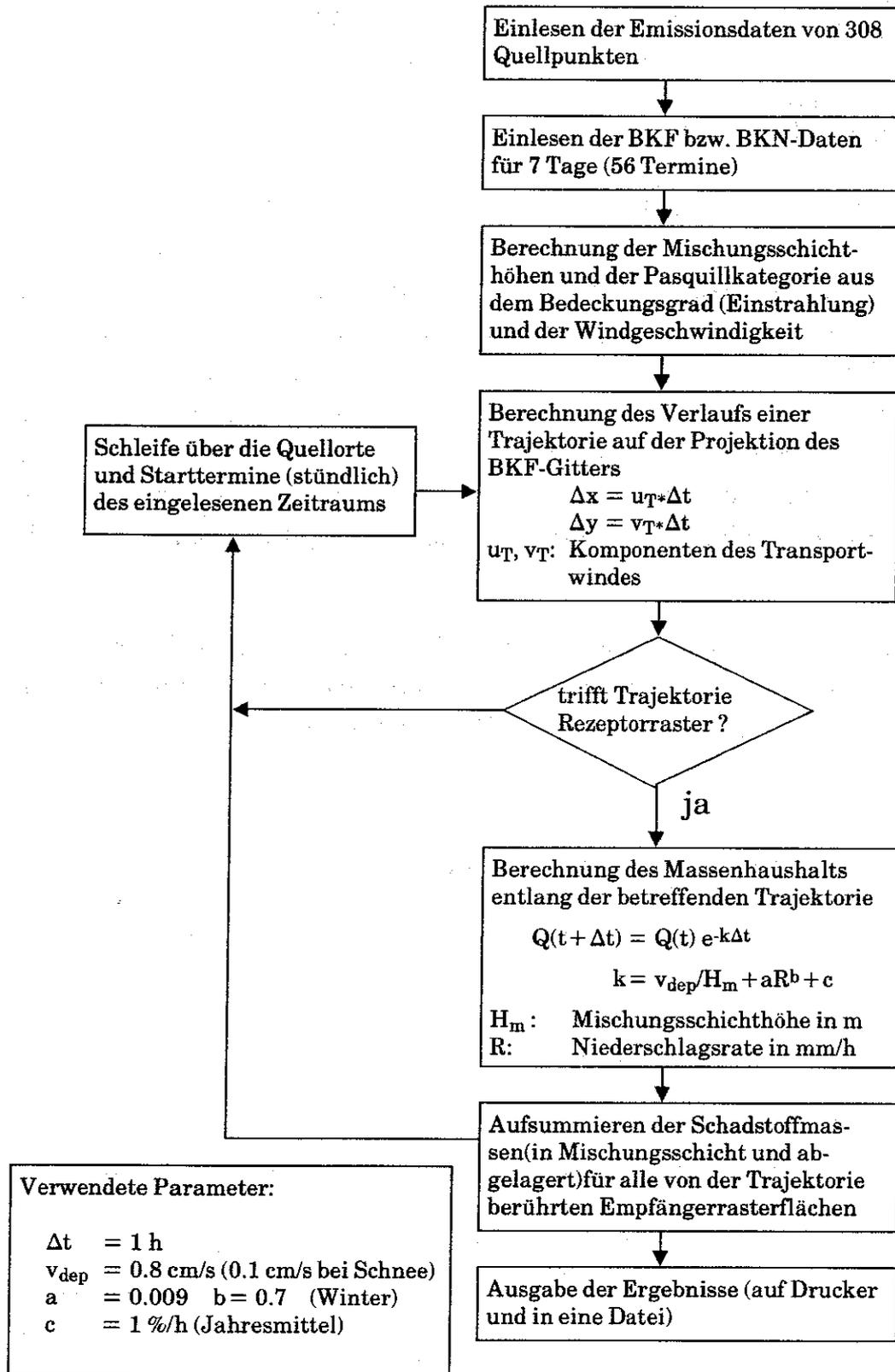


Abb. 3.1: Ablaufschema des Ausbreitungsmodells SMOVO zur Berechnung der Konzentrationsverteilung von Schwefeldioxid auf dem Gebiet der Bundesrepublik Deutschland

stabilen Schichten zusammengefaßt, und es wird im weiteren Verlauf der Rechnungen nicht mehr zwischen den einzelnen Quellen unterschieden.

Als Ergänzung zu den bisher erwähnten Ausbreitungsmodellen wurde ein Programm zur Berechnung von Rückwärtstrajektorien entwickelt (CYTRA10). Dieses Programm bestimmt mit Hilfe der Prognosedaten des DWD Rückwärtstrajektorien und Trajektorieneinzugsgebiete für eine vorgegebene Anzahl von Rezeptorpunkten. Für den probeweisen Routinebetrieb im Smogfrühwarnsystem wurden zunächst die Städte Kiel, Hamburg, Bremen, Hannover, Berlin, Essen, Kassel, Wiesbaden, Karlsruhe und Hof als Rezeptororte ausgewählt. Im Winterhalbjahr 1991/92 kamen noch die Städte Leipzig und Dresden hinzu und der Rezeptorpunkt Kiel wurde durch Rostock ersetzt. Die mit Hilfe von CYTRA10 berechneten und anschließend grafisch dargestellten Rückwärtstrajektorien dienen vor allem als Hilfsmittel zur Beurteilung der prognostizierten SO₂-Konzentrationsverteilungen.

In den folgenden Abschnitten sollen zunächst die wichtigsten Modellkomponenten und -parameter vorgestellt werden. Im Anschluß daran werden die verwendeten meteorologischen Eingabedaten ausführlich beschrieben.

3.1.1 Berechnung des Trajektorienverlaufs

Die Ortsverlagerung Δr eines Schadstoffpakets während eines Zeitschritts Δt wird mit Hilfe der Beziehung

$$\Delta r = v_T \Delta t$$

aus dem Transportvektor v_T berechnet.

In Abhängigkeit von der Datenbasis werden zur Berechnung des Trajektorienverlaufs unterschiedliche Koordinatensysteme benutzt. **MESOS** und **MULTI**, die mit der alten MESOS-Datenbasis rechnen, bestimmen die Ortsverlagerung im geographischen λ/ϕ -Gitter. **SMOVO**, das als meteorologischen Input die Ergebnisse des BKF- bzw. BKN-Modells des DWD nutzt, berechnet Δr auf der Projektionsebene der stereographischen Projektion, die auch dem äquidistanten Gitter des BKN-/BKF-Modells zugrunde liegt (s. Abschn. 3.2).

Die Dauer eines Zeitschritts beträgt während der ersten drei Stunden nach der Freisetzung 10 Minuten, danach eine Stunde. Für den Transportvektor werden je nach Modellversion unterschiedliche Annahmen gemacht:

In **MESOS** steht zur Berechnung des Windvektors in der Datenbasis das Bodenluftdruckfeld zur Verfügung. Daraus kann mit Hilfe folgender Beziehungen der geostrophische Wind berechnet werden:

$$u_g = - \frac{1}{\rho f R} \frac{\Delta p}{\Delta \phi} \qquad v_g = \frac{1}{\rho f R \cos \phi} \frac{\Delta p}{\Delta \lambda}$$

ρ steht hierin für die Luftdichte, p für den Bodenluftdruck, f ist der Coriolisparameter, R der Erdradius und λ und ϕ sind die geographische Länge bzw. Breite. Weiterhin wird in der Mischungsschicht ein von der atmosphärischen Stabilität abhängiges vertikales Windprofil vorgegeben und angenommen, daß oberhalb der Mischungsschicht der Wind dem geostrophischen entspricht. Der Transportvektor ist dann gleich dem mittleren Wind in einer durch die Ober- und Unterkante (H_o bzw H_u) eines Schadstoffpakets festgelegten Transportschicht:

$$\mathbf{v}_T = \frac{1}{H_o - H_u} \int_{H_u}^{H_o} \mathbf{v}(z) dz$$

Vor allem in Quellnähe ist der Transportvektor abhängig von der Freisetzungshöhe. In der Regel füllt jedoch ein Schadstoffpaket wenige Zeitschritte nach der Freisetzung die Mischungsschicht vollständig aus, so daß der weitere Trajektorienverlauf unabhängig von der Freisetzungshöhe ist. Besonders bei einer großen Anzahl von Quellen kann deshalb die Berechnung des Trajektorienverlaufs vereinfacht werden.

Im Vielquellen-Modell **MULTI**, das auf dieselbe Datenbasis zurückgreift wie **MESOS**, wird der Transportvektor direkt aus dem geostrophischen Wind berechnet. Über dem Meer ist der Transportvektor gleich dem geostrophischen Wind, während über Land der Reibungseinfluß durch einen konstanten Ablenkungswinkel des Transportvektors gegenüber dem geostrophischen Wind berücksichtigt wird:

$$\alpha_T = 6.5^\circ$$

Für den Betrag des Transportvektors gilt zusätzlich:

$$V_T = 0.85 V_g$$

Dies ergibt bei einer Mischungsschichthöhe von 1000 m und neutraler Schichtung denselben Trajektorienverlauf wie bei **MESOS**, wenn das entlang der Trajektorie verfolgte Schadstoffpaket die Mischungsschicht ausfüllt.

Im für das Smogfrühwarnsystem eingesetzten Modell **SMOVO** wird der Transportvektor aus dem Wind in 850 hPa berechnet:

$$v_T = v_{850 \text{ hPa}}$$

Die ausschließliche Verwendung des 850 hPa - Windes anstatt des ebenfalls vorliegenden Windes in 950 hPa geschieht aus folgenden Gründen: Zum einen liegt die 950 hPa - Fläche teilweise unterhalb der Geländeoberfläche, so daß hier die Windwerte keinen physikalischen Hintergrund aufweisen. Weiterhin ist auch der Wind in 950 hPa wegen der geringen vertikalen Auflösung des Prognosemodells nicht unbedingt charakteristisch für die Windverhältnisse in der atmosphärischen Grenzschicht. Dies gilt insbesondere für Fälle mit starker vertikaler Windscherung, wie sie häufig bei Smoglagen auftreten.

Die Höhenunabhängigkeit des Transportvektors in **MULTI** und **SMOVO** macht wesentliche Vereinfachungen im Programmablauf möglich. Von jedem Quellort geht nun zu einem vorgegebenen Termin nur eine Trajektorie aus, die unabhängig ist von der jeweiligen vertikalen Schadstoffverteilung. Die Berechnung des Trajektorienverlaufs kann getrennt von der Bestimmung der vertikalen Diffusion, der Deposition und chemischen Umwandlung geschehen. Der Massenhaushalt in einem entlang einer Trajektorie verfolgten Schadstoffpaket wird daher in **MULTI** und **SMOVO** nur dann berechnet, wenn diese Trajektorie das betrachtete Rezeptorgebiet erreicht. Weitere Rechenzeiterparnis ergibt sich durch die Zusammenfassung mehrerer Quellen zu einem Quellort, wobei unterschiedliche Quellhöhen nur bei der Berechnung des Massenhaushaltes getrennt behandelt werden müssen. Sensitivitätsstudien zeigen, daß sich dabei die berechneten Konzentrationsverteilungen nur unwesentlich von denen unterscheiden, die mit dem in **MESOS** verwendeten Ansatz berechnet wurden (s. Abschn. 5.3.1).

Bei der Berechnung von Rückwärtstrajektorien in **CYTRA10** kann eine Höhenabhängigkeit des Transportvektors prinzipiell nicht berücksichtigt werden, da die Freisetzungshöhe der das Rezeptorgebiet erreichenden Schadstoffe nicht im voraus festgelegt werden kann. Je nach zugrunde gelegter Datenbasis wird zur Bestimmung der Ortsverlagerung der auch in **MULTI** bzw. **SMOVO** verwendete Geschwindigkeitsvektor benutzt.

3.1.2 Mischungsschicht und vertikale Diffusion

Der Tagesgang der Mischungsschichthöhe und die vertikale Diffusion in Quellnähe wird in allen Modellversionen auf die gleiche Art und Weise berechnet. In Abbildung 3.2 ist die Vertikalstruktur der Atmosphäre skizziert. Modelliert werden die unteren 3 km der Atmosphäre, wobei sich die Mischungsschicht bis zu einer Höhe H_m erstreckt. In der Mischungsschicht werden Schadstoffe mit großer Effizienz verteilt und die Schadstoffkonzentrationen sind unabhängig von der Höhe. Darüber befinden sich stabile Schichten von je 100 m Dicke, zwischen denen der vertikale Austausch unterbunden ist. Zudem kann aus diesen stabilen Schichten nicht trocken abgelagert werden.

In Quellnähe wird die vertikale Schadstoffverteilung mit Hilfe eines modifizierten Gauß-Ansatzes berechnet. Danach gilt für die vertikale Erstreckung eines Schadstoffpakets in der Mischungsschicht:

$$H_o - H_u = \sigma_z \sqrt{\pi}$$

mit Werten für σ_z nach /33/.

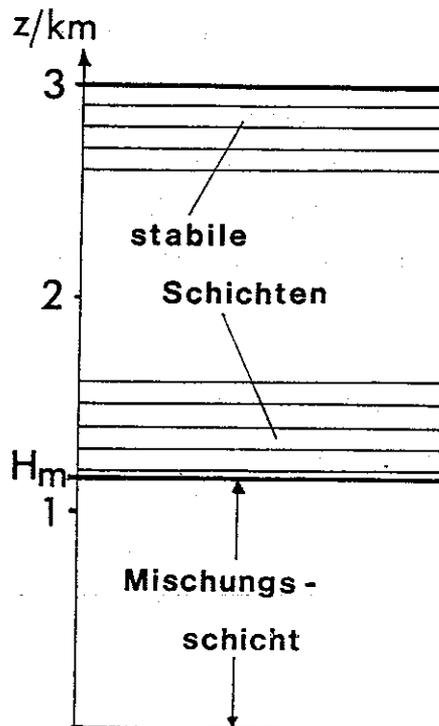


Abb. 3.2: Vertikalstruktur der Modellatmosphäre

Wenn die Oberkante des Schadstoffpakets H_0 die Mischungsschichtobergrenze erreicht hat, wird die vertikale Schadstoffverteilung allein von der Mischungsschichthöhe bestimmt.

Die Höhe der nächtlichen Mischungsschicht ist proportional zur Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe:

$$H_m = m V_{10m}$$

Der Faktor m ist hierbei abhängig von der jeweiligen Stabilitätsklasse und hat im Falle neutraler Schichtung einen Wert von 180 s. Die Bestimmung der Stabilitätsklasse geschieht nach einem in /34/ beschriebenen Verfahren, in das insbesondere die Parameter Bedeckungsgrad und Windgeschwindigkeit eingehen.

Das Wachsen der konvektiven Mischungsschicht am Tage wird mit Hilfe des Jahres- und Tagesganges der solaren Einstrahlung unter Berücksichtigung ihrer Abschwächung durch Bewölkung abgeschätzt. Grundlage ist dabei die folgende Gleichung, welche die Änderung des Wärmeinhalts der Mischungsschicht pro Einheitsfläche beschreibt:

$$\Delta q = \rho c_p \int_0^{H_m(t+\Delta t)} (\theta(z,t) - \theta_m(t+\Delta t)) dz$$

Dabei ist ρ die Luftdichte und c_p die spezifische Wärme der Luft. Mit $\theta(z,t)$ wird das Vertikalprofil der potentiellen Temperatur am Anfang eines Zeitschritts vorgegeben. Unter der Annahme, daß die potentielle Temperatur aufgrund der guten Durchmischung in der Mischungsschicht unabhängig von der Höhe ist (d.h.: $\theta(z) = \theta_m$ für $z=0$ bis H_m), kann die Höhe $H_m(t+\Delta t)$ der Mischungsschicht am Ende eines Zeitschritts aus der Fläche zwischen den Temperaturprofilen am Anfang und Ende eines Zeitschritts abgeleitet werden. Diese Fläche ist proportional zur Wärmezufuhr Δq während eines Zeitschritts. Die Wärmezufuhr setzt sich zusammen aus dem Strom fühlbarer Wärme vom Erdboden und dem Zumischen wärmerer Luft beim Anstieg der Mischungsschichtobergrenze (Entrainment). Die Erwärmung des Erdbodens wird aus der tages- und jahreszeitabhängigen Einstrahlung abgeschätzt, wobei der in der Datenbasis vorliegende Bedeckungsgrad mit berücksichtigt wird. Da zum einen in der MESOS-Datenbasis keine Informationen über die Vertikalstruktur der Atmosphäre vorliegen und zum anderen die für SMOVO verwendeten Prognosedaten des DWD die atmosphärische Grenzschicht nur ungenügend auflösen, muß zur Berechnung des Tagesganges der Mischungsschichthöhe ein vertikales Temperaturprofil vorgegeben werden, das aufgrund der Einstrahlung modifiziert wird.

3.1.3 Ablagerung und Umwandlung

Für den durch trockene und nasse Ablagerung sowie durch Umwandlung von SO_2 zu Sulfat kontrollierten Massenhaushalt der entlang von Trajektorien verfolgten Schadstoffpakete wurde ein einfacher Ansatz gewählt, bei dem die Änderung der Masse Q von Schwefeldioxid allein von der jeweiligen Masse im Schadstoffpaket abhängt und zu dieser proportional ist. Die dazugehörige Differentialgleichung

$$\frac{dQ}{dt} = -k Q$$

hat die Lösung

$$Q(t + \Delta t) = Q(t) e^{-k \Delta t}$$

k setzt sich in der Mischungsschicht aus den Zeitkonstanten für die Abreicherung von SO_2 durch trockene (k_d) und feuchte (k_w) Ablagerung sowie der Umwandlung zu SO_4^- (k_t) zusammen: $k = k_d + k_w + k_t$. Aus den stabilen Schichten, die keinen Kontakt zum Erdboden haben, wird nicht trocken abgelagert: $k = k_w + k_t$.

Charakteristische Größe für die trockene Ablagerung ist die Depositionsgeschwindigkeit, die mit der Konzentration in Bodennähe multipliziert, die pro Zeit- und Flächeneinheit abgelagerte Schadstoffmasse angibt. Mit Hilfe der Depositionsgeschwindigkeit und der Mischungsschichthöhe erhält man die Zeitkonstante der trockenen Ablagerung:

$$k_d = v_{dep} / H_m$$

Dabei wird für die trockene Ablagerung von SO_2 ein Wert von 0,8 cm/s angenommen. Über Schnee wird mit einer geringeren Depositionsgeschwindigkeit (0,1 cm/s) gerechnet.

Die nasse Deposition ist abhängig von der Niederschlagsrate R . Für die Zeitkonstante der nassen Deposition gilt:

$$k_w = aR^b$$

mit von der Jahreszeit abhängigen Werten von a und b (s. Abschn. 4.4.3).

Die Schadstoffumwandlung, d.h. die Produktion von Sulfat, hängt allein von der augenblicklichen SO_2 -Masse im betrachteten Schadstoffpaket ab. Es wird angenommen, daß im Jahresmittel pro Stunde 1% der SO_2 -Masse zu Sulfat umgewandelt wird. Um den Einfluß unterschiedlicher Einstrahlungsverhältnisse auf die Umwandlungsrate berücksichtigen zu können, wurde zusätzlich ein Tages- und Jahresgang eingeführt (s. Abschn. 4.4.2).

3.1.4 Berechnung von Immissionswerten

Das in MESOS verwendete Verfahren zur Berechnung von Immissionswerten aus den zunächst nur entlang von Trajektorien vorliegenden Massenwerten ist sehr aufwendig. An einem Gitterpunkt kann die abgelagerte Masse und Schadstoffkonzentration berechnet werden, wenn er in der Fläche liegt, die von zwei aufeinanderfolgend gestarteten Trajektorien aufgespannt wird. Dabei ist die deponierte Menge bzw. die Höhe der Immission abhängig von der Größe dieser Fläche: Je kleiner die Fläche ist, desto länger befindet sich der Gitterpunkt im Einflußbereich der Trajektorien. Zusätzlich wird für die einzelnen Trajektorien eine Verbreiterung berücksichtigt, die von der Transportzeit abhängt. Das in /35/ ausführlich beschriebene Verfahren ist vor allem deshalb so rechenzeitintensiv, weil die Flächen zwischen zwei Trajektorien recht komplizierte Formen annehmen können.

Wegen der großen Anzahl von Quellen und damit Trajektorien wird in MULTI und SMOVO ein vereinfachtes Verfahren zur Bestimmung von Immissionswerten angewandt. Das Gebiet, für welches Konzentrations- und Ablagerungswerte berechnet werden sollen, wird dazu in Empfängerrasterflächen mit Kantenlängen von 1° geographischer Länge und 0,5° geographischer Breite aufgeteilt. Die entlang von Trajektorien auf diesen Rasterflächen abgelagerten Schadstoffmassen werden entweder zu 3-Stunden-Mittelwerten (bei SMOVO) oder zu Tages-, Monats- bzw. Jahresmittelwerten aufaddiert. Entsprechend wird bei der Berechnung der Luftkonzentrationen verfahren.

Für die auf der Rasterfläche j zur Beobachtungszeit T , d.h. zwischen T und $T + \Delta T$, trocken abgelagerte Masse gilt folgende Beziehung:

$$Q_{d,j}(T) = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{k_d}{k} \Delta Q_{m,i}}{F_j}$$

$\Delta Q_{m,i} = Q_{m,i}(t) - Q_{m,i}(t + \Delta t)$ ist hierbei die gesamte während eines Zeitschritts Δt durch Ablagerung und Umwandlung aus der Mischungsschicht (Index m) entfernte Schadstoffmasse. k_d/k gibt den Anteil an, der trocken abgelagert wird. Die Bedeutung der Zeitkonstanten k_d bzw. k wurde im vorangegangenen Abschnitt ausführlich beschrieben. F_j bezeichnet die Fläche des betreffenden Rasterelements. Summiert wird über alle Zeitschritte i , in denen sich Trajektorien zur Beobachtungszeit über der Rasterfläche befunden haben.

Für die naß abgelagerte Masse gilt:

$$Q_{w,j}(T) = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{k_w}{k} \Delta Q_{m,i} + \frac{k_w}{k - k_d} \Delta Q_{s,i}}{F_j}$$

mit den oben schon eingeführten Abkürzungen. Da die nasse Deposition auch die stabilen Schichten betrifft, wurde zusätzlich die während eines Zeitschritts aus den stabilen Schichten entfernte Schadstoffmasse $\Delta Q_{s,i}$ berücksichtigt.

Konzentrationswerte werden auf folgende Art und Weise berechnet:

$$C_j(T) = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{Q_{m,i}(t)}{H_m(t)}}{F_j \Delta T}$$

Im MKS-System bezeichnet $Q_{m,i}(t)/H_m(t)$ die pro Meter Mischungsschichthöhe enthaltene Schadstoffmasse. Geteilt durch die Fläche des Rasterelements und den Mittelungszeitraum ΔT ergibt sich daraus die gesuchte Schadstoffkonzentration.

3.2 Die meteorologische Datenbasis

Während MESOS vor allem für Parameterstudien und zur Berechnung der Auswirkung unterschiedlicher Emissionsreduktionsszenarien auf die SO_2 -Konzentrationen benutzt wurde und somit auf aktuelle Wetterdaten verzichtet werden konnte, müssen für die mit Hilfe von SMOVO durchgeführten Immissionsprognosen aktuelle bzw. prognostizierte Wetterdaten vorliegen.

Die für MESOS und das daraus direkt abgeleitete MULTI bereitstehende Datenbasis wurde mit Hilfe synoptischer Meldungen der europäischen Wetterstationen erstellt und umfaßt die Jahre 1982 und 1983. Tabelle 3.1 zeigt die in der Datenbasis enthaltenen Parameter und die daraus berechneten Modellgrößen. Bis auf den Bodenluftdruck, der eine doppelt so hohe räumliche Auflösung besitzt, liegen alle Parameter auf Gitterpunkten im Abstand von 1 Breitengrad bzw. 2 Längengraden vor. Abbildung 3.3 zeigt die Lage der Gitterpunkte und den von der MESOS-Datenbasis überdeckten Bereich.

SMOVO nutzte zunächst bis zum Ende des Winterhalbjahres 1989/90 die Ergebnisse des feuchtbaroklinen Vorhersagemodells des DWD (BKF-Modell), die für das Gebiet Europas in den sog. IGEL-Datensätzen abgespeichert werden. Die Da-

MESOS-Datenbasis	Abgeleitete Größen	
Druck	Geostrophischer Wind	Stabilität
Bedeckungsgrad	Einstrahlung	Mischungsschichthöhe
Lufttemperatur	Atmosphärische Schichtung über See	
Niederschlagsintensität	Rate der nassen Ablagerung	

Tab. 3.1: Die in der MESOS-Datenbasis enthaltenen Parameter und daraus berechnete Modellparameter

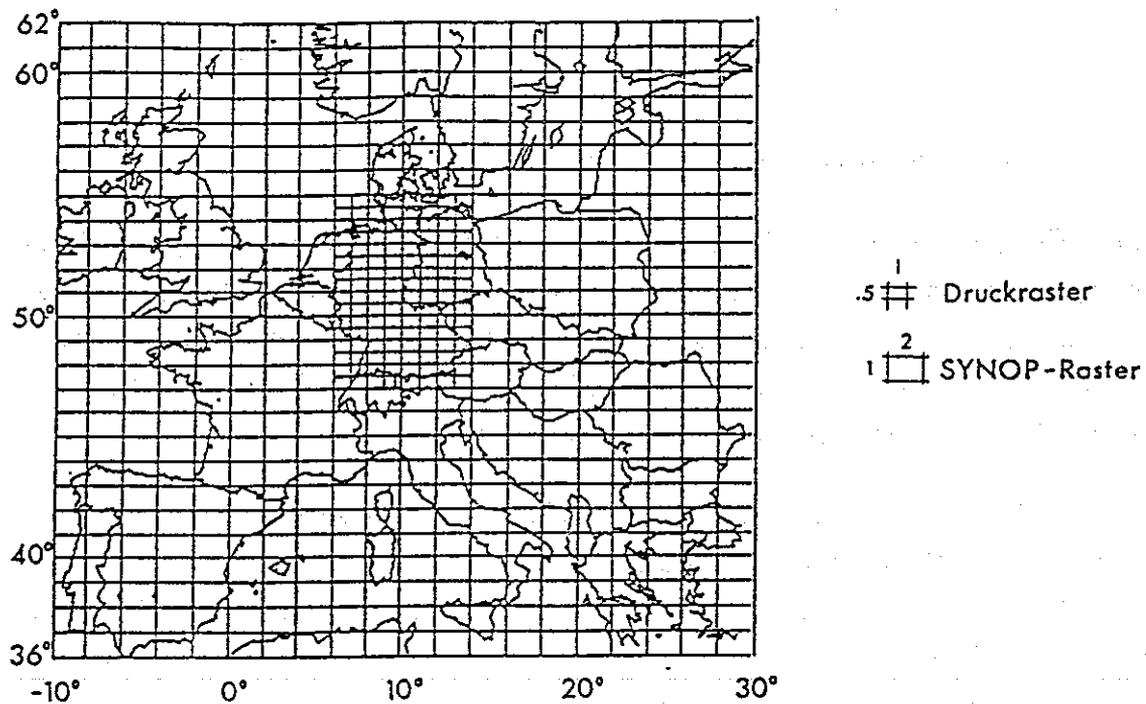


Abb. 3.3: Lage der Gitterpunkte in der MESOS-Datenbasis (Gitterpunkte, an denen Luftdruckwerte vorliegen, wurden nur für einen Ausschnitt dargestellt)

ten werden vom DWD auf Bändern archiviert und können für Vergleichsrechnungen für zurückliegende Zeiträume genutzt werden. Vom Istzustand um 0 UTC und 12 UTC ausgehend berechnet das BKF-Modell Prognosen für einen Zeitraum von bis zu vier Tagen, wobei für die ersten zwei Tage die Prognosen in einem dreistündigen Abstand ausgegeben werden. Danach liegen Prognosen in sechsständigem Abstand vor. Um Schadstoffkonzentrationen für zwei Tage vorhersagen zu können, müssen außer den dazugehörigen 16 Prognoseterminen, die das BKF - Modell um 0 UTC des ersten Prognosetages errechnet, auch noch die Wetterdaten für eine Vorlaufzeit von fünf Tagen eingelesen werden. Da während dieser Vorlaufzeit nur alle 12 Stunden (um 0 UTC und 12 UTC) aktuelle Werte vorliegen, das Modell aber Wetterdaten in dreistündigem Abstand erwartet, werden die fehlenden Termine mit Prognoseterminen (für 3, 6 und 9 UTC bzw. 15, 18 und 21 UTC) aufgefüllt. Entsprechend wird bei der Bereitstellung von Daten für die nachträgliche Berechnung von Konzentrationswerten vergangener Episoden vorgegangen. Die Berücksichtigung einer Vorlaufzeit ist erforderlich, da bei der Berechnung von Immissionswerten zur Initialisierung des Modells nicht von gemessenen Werten ausgegangen werden kann und daher der Herantransport der Beiträge von entfernten Quellen berechnet werden muß. Die Dauer der Vorlaufzeit ergibt sich aus dem Sachverhalt, daß eine Verlängerung über die benutzten fünf Tage hinaus keinen Einfluß auf die berechneten Konzentrationsverteilungen hat, kürzere Vorlaufzeiten jedoch zu einer Unterschätzung der Konzentrationen führen können.

In der Vertikalen liegen die IGEL-Daten auf Flächen gleichen Drucks in 50, 100, 200, 300, 400, 550, 700, 850 und 950 hPa vor. Das verwendete horizontale Gitter mit dem dazugehörigen Koordinatensystem ist in Abbildung 3.4 dargestellt.

Es handelt sich hierbei um ein orthogonales, äquidistantes Gitter in der Projektionsebene einer stereographischen Projektion. Die IGEL-Daten liegen auf zwei Gitterflächen vor, wobei das zweite Gitter (rotes Gitter) um eine halbe Maschenweite nach Norden und Osten gegenüber dem ersten (schwarzes Gitter) verschoben ist. Der Abstand zweier Punkte in einem der beiden Gitterpunktsysteme beträgt 254 km; damit beträgt der kürzeste Abstand von zwei Punkten im Gesamtgitter etwa 180 km. Das IGEL-Gitter besteht aus insgesamt 312 (=2*156) Punkten.

Das benutzte Koordinatensystem wird zwischen den Projektionen des 10. und 100. östlichen Längengrades aufgespannt, mit dem 10. Längengrad als positive x -Achse und dem 100. Längengrad als positive y -Achse. Für die Umrechnung von λ/ϕ -Koordinaten ins IGEL-Koordinatensystem gelten die folgenden Gleichungen:

$$x = \frac{R \cos \phi \cos(\lambda - 10^\circ)(1 + \sin 60^\circ)}{254(1 + \sin \phi)}$$

$$y = x \tan(\lambda - 10^\circ)$$

Folgende meteorologische Größen werden von SMOVO eingelesen:

- Windfeld in 850 hPa
- in drei Stunden gefallene Niederschlagsmenge
- Bedeckungsgrad
- Temperaturdifferenz $T_{\text{Boden}} - T_{950 \text{ hPa}}$

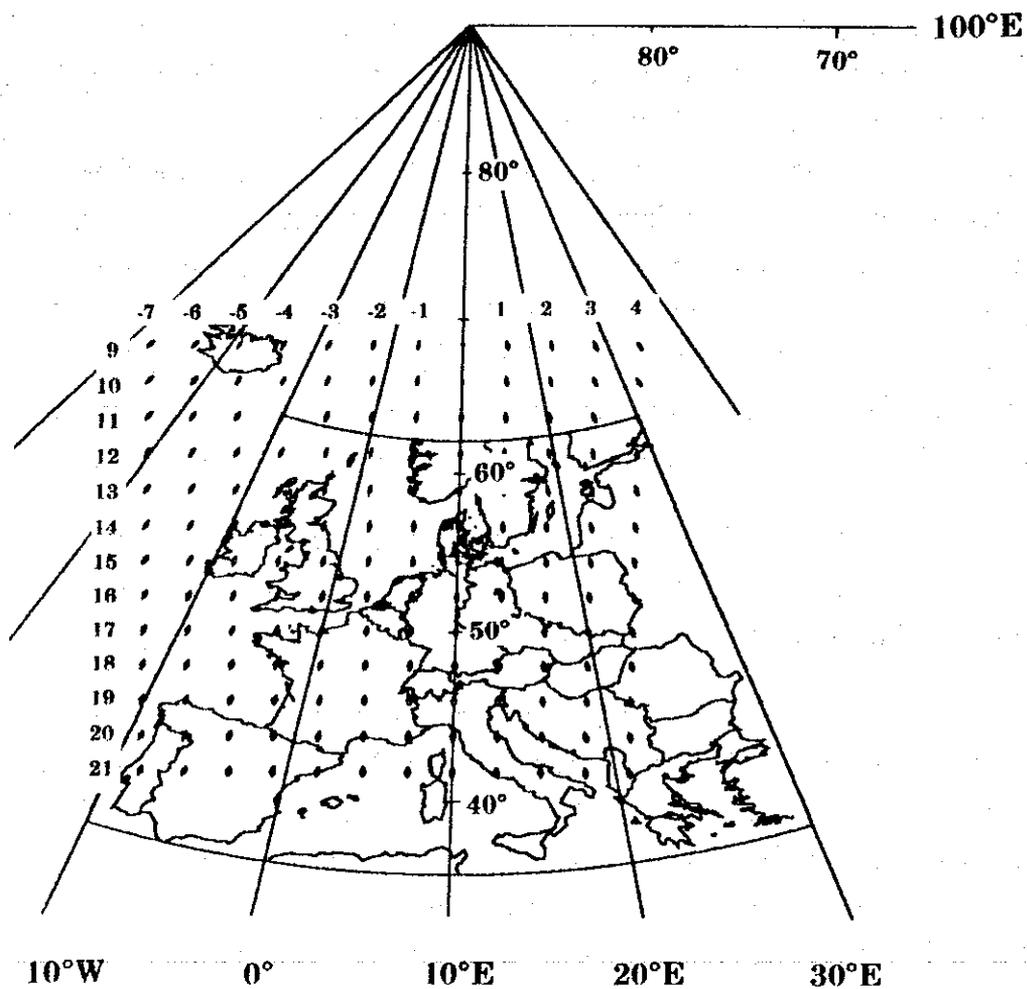


Abb. 3.4: Das in SMOVO verwendete IGEL-Gitter (schwarzes Gitter). Zum Vergleich wurde zusätzlich der von der MESOS-Datenbasis überdeckte Bereich eingezeichnet (s. dazu Abb. 3.3)

Das Windfeld kann direkt dem IGEL-Datensatz des DWD entnommen werden. Der Niederschlag und die Temperaturdifferenz zwischen Boden (bzw. Wasser) und Luft zur Berechnung der Ausbreitungsverhältnisse über See lassen sich auf einfache Weise aus den IGEL-Daten ableiten. Der Bedeckungsgrad liegt nicht explizit vor und wird mit Hilfe des vertikalen Profils der spezifischen Feuchte berechnet. Da ein linearer Zusammenhang zwischen der Bewölkung und der relativen Feuchte angenommen wird, muß aus der spezifischen Feuchte die relative Feuchte berechnet werden. Dies geschieht mit Hilfe folgender Gleichung

$$s = 0,623 \frac{e}{p}$$

s bezeichnet darin die spezifische Feuchte, e den Dampfdruck des Wasserdampfs und p den Druck der feuchten Luft. Mit der Magnus-Formel

$$E = E_0 10^{\frac{7,45t}{235+t}}$$

und der Beziehung

$$r = \frac{e}{E}$$

erhält man daraus für die relative Feuchte r in %:

$$r = \frac{s p}{0,623} 100 \frac{1}{E_0 10^{\frac{7,45t}{235+t}}}$$

Hierbei ist E der Sättigungsdampfdruck, E_0 der Sättigungsdampfdruck bei 0°C und t die Lufttemperatur in °C.

Um für drei Schichten eine mittlere relative Feuchte zu ermitteln, werden aus den IGEL-Daten die spezifische Feuchte und die Temperatur auf den Druckflächen in 300, 400, 500, 700, 850 und 950 hPa benutzt. Mit Hilfe der in Abbildung 3.5 dargestellten Zusammenhänge kann der Bedeckungsgrad ermittelt werden. In diesem Diagramm ist der Bedeckungsgrad als Funktion der relativen Feuchte für hohe, mittelhohe bzw. tiefe Bewölkung (C_H , C_M , C_L) angegeben. Die gestrichelten Kurven werden verwendet, um den Einfluß von Konvektion in 950 hPa bzw. 850 hPa auf den Bedeckungsgrad zu berücksichtigen. Zur Ermittlung des Gesamtbedeckungsgrades NN wird schließlich der folgende einfache Ansatz verwendet:

$$NN = 1 - (1 - NN(1)) * (1 - NN(2)) * (1 - NN(3))$$

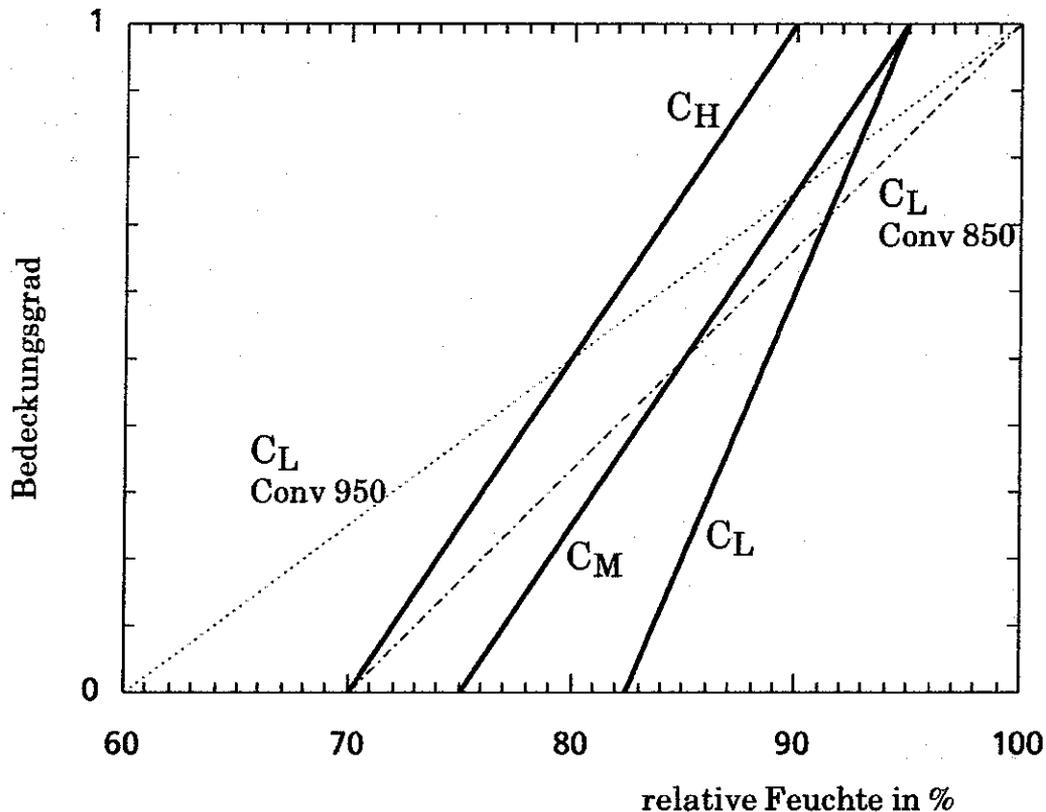


Abb. 3.5: Parametrisierung der Bewölkung mit Hilfe der relativen Feuchte (zur Erklärung der verschiedenen Kurven siehe Text) /36/

Bei dieser der klassischen Wahrscheinlichkeitstheorie entlehnten Gleichung wird angenommen, daß der Bedeckungsgrad in einer Schicht jeweils unabhängig von dem der anderen Schicht ist, was z.B. bei hochreichender sich über alle drei Schichten erstreckende Konvektionsbewölkung zu Fehlern führen kann.

Seit Oktober 1990 werden die Prognosen für das Smogfrühwarnsystem auf der Basis des genesteten feuchtbaroklinen Prognosemodells des DWD (BKN-Modell) erstellt. Dieses Modell hat eine höhere horizontale Auflösung als das BKF-Modell. Um jedoch die Modelländerungen an SMOVO so gering wie möglich zu halten, werden nur die auf IGEL-Gitterpunkten vorliegenden Parameter genutzt. In den BKN-Datensätzen liegt der Bedeckungsgrad explizit vor und braucht deshalb nicht in einem Vorprogramm abgeschätzt zu werden.

Seit 1991 wird anstelle der Temperaturdifferenz $T_{\text{Boden}} - T_{950 \text{ hPa}}$ die Temperatur in 950 hPa genutzt, um einen temperaturabhängigen Tagesgang der Emissionen berücksichtigen zu können. Neu hinzugefügt wurde 1991 der Parameter Schneebedeckung, mit dessen Hilfe die Ablagerungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Ort und der jeweiligen Bodenbeschaffenheit (d.h. schneebedeckt oder schneefrei) berechnet werden kann.

3.3 Emissionsdatenbasis

Um die regionale Verteilung der Konzentrationswerte von SO₂ für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland berechnen zu können, muß neben den meteorologischen Eingabedaten die räumliche und zeitliche Verteilung der Emissionswerte von SO₂ in geeigneter Form vorliegen. Für das Smogfrühwarnsystem sollen Konzentrationswerte für Episoden ferntransportierten Smogs berechnet werden. Da diese Episoden hauptsächlich bei Ostwetterlagen auftreten, sind neben den Emissionen der alten und neuen Bundesländer insbesondere die der CSFR und Polens von Bedeutung. Um jedoch einen ununterbrochenen Einsatz des Modells zu ermöglichen, um beispielsweise auch die Zeiten vor und nach Smogepisoden zu erfassen oder um Vergleiche von Meß- und Rechenwerten über einen längeren zusammenhängenden Zeitraum durchführen zu können, sollten auch die Emissionen weiterer Staaten, die die Konzentrationswerte in Deutschland beeinflussen, berücksichtigt werden. Hierzu gehören Frankreich, die Benelux-Staaten und Großbritannien. Die übrigen europäischen Staaten sind wegen ihrer geringen Emissionen oder aufgrund ihrer großen Entfernung zur Bundesrepublik für die Immissionswerte von geringer Bedeutung und werden daher vernachlässigt.

Um Konzentrationswerte prognostizieren zu können, sollte stets ein möglichst aktueller Emissionsdatensatz zur Verfügung stehen, der die Stilllegung, die Inbetriebnahme sowie die jeweiligen Betriebszustände der einzelnen Anlagen berücksichtigt. Derart detaillierte aktuelle Informationen liegen jedoch für keines der betrachteten Länder vor und werden auch in Zukunft nicht zur Verfügung stehen.

Für die Rechnungen zur Prognose von SO₂-Konzentrationswerten wurde daher die in /35/ ausführlich beschriebene Emissionsdatenbasis herangezogen. Diese Datenbasis enthält für die obengenannten Staaten die regionale Verteilung der Jahresemissionen von SO₂, aufgeteilt nach den Sektoren Kraftwerke, Industrie, Haushalte und Kleinverbraucher sowie Verkehr. Bezugszeitraum ist das Jahr 1982, da für dieses Jahr für alle für die Immissionsbelastung der Bundesrepublik Deutschland relevanten Staaten die erforderlichen Informationen vorlagen. Eine aktuellere Datenbasis, die, regional differenziert, die bis zum gegenwärtigen Zeitpunkt eingetretenen Veränderungen der Emissionen berücksichtigt, steht nicht zur Verfügung. Allerdings wurden für die Bundesrepublik Deutschland die in den letzten Jahren in Kraft getretenen Verordnungen zur Emissionsreduktion (Regelungen der Großfeuerungsanlagenverordnung) berücksichtigt. Für die CSFR und Polen dürften bis zum gegenwärtigen Zeitpunkt, für die neuen Bundesländer bis Anfang 1991 keine wesentlichen Änderungen gegenüber 1982 eingetreten sein, so

daß die Emissionsdatenbasis für die in dieser Studie betrachteten Episoden ferntransportierten Smogs durchaus noch als geeignet angesehen werden kann. Bei Westwetterlagen führen die inzwischen eingetretenen, in der Emissionsdatenbasis jedoch nicht berücksichtigten Emissionsabnahmen der Benelux - Staaten, Frankreichs und Großbritanniens (in Frankreich beispielsweise durch den verstärkten Einsatz der Kernenergie) zu einer möglichen Überschätzung der tatsächlich auftretenden Konzentrationen (s. Abschn. 5.3.5.1). Die wesentlichen Annahmen, die der Emissionsdatenbasis zugrunde liegen, sollen im folgenden kurz skizziert werden.

3.3.1 SO₂-Emissionen der Bundesrepublik Deutschland für das Bezugsjahr 1982

Die SO₂-Emissionen der Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) wurden am detailliertesten erfaßt. Hier wurde auf die Erhebung EMUKAT zurückgegriffen. Dieses Kataster wurde für das Bezugsjahr 1980 im Auftrag des Umweltbundesamtes erstellt /37/. Es ist als Emissions-Ursachen-Kataster aufgebaut, d.h. über die Fixierung der räumlichen Verteilung der Schadstoffquellen hinaus werden die zugehörigen Brennstoffe nach Art und Menge bzw. die Produktmenge (bei prozeßbedingten Emissionen) und deren Einsetzungsbedingungen erfaßt.

Die EMUKAT-Datei enthält als Einzelquellen

- sämtliche Kraftwerke der öffentlichen Versorgung,
- sämtliche Bergbaukraftwerke,
- sämtliche Raffinerien,
- sämtliche Kokereien, Hochöfen und Sinteranlagen,
- eine Vielzahl weiterer Industriebetriebe mit unterschiedlicher Branchenzugehörigkeit.

Der Gesamtausstoß der erfaßten Einzelquellen an SO₂ betrug rund 2,2 Mio Tonnen bei einer Gesamtemission von 2,8 Mio Tonnen SO₂.

Als Flächenquellen sind in EMUKAT aufgeführt:

- Industriebetriebe und Fernheizwerke, soweit sie nicht als Einzelquellen erfaßt sind;
- die Emissionen der Bereiche Haushalte und Kleinverbraucher sowie des Verkehrs.

Die Informationen für die Flächenquellen basieren einerseits auf Energieverbrauchsstatistiken auf der Ebene von Bundesländern, Regierungsbezirken sowie Stadt- und Landkreisen und andererseits auf der Bevölkerungsstatistik. Dies ermöglicht eine Zuordnung der Emissionen zu Rasterflächen.

Die Fortschreibung auf das Jahr 1982 erfolgte in Zusammenarbeit mit DORNIER-SYSTEM /38/ anhand von Energie- und Produktionsstatistiken. Das Emissionskataster EMUKAT umfaßt ca. 1000 Einzelquellen (Kraftwerke und Industriebetriebe) in der Bundesrepublik Deutschland mit den zugehörigen Emissionen und Emissionsbedingungen. Die relativ genaue Erfassung der Emissionen für 1980 ging bei der Fortschreibung auf 1982 teilweise verloren, da bei vielen Emittenten anlagenspezifische Änderungen der Emissionen nicht berücksichtigt werden konnten. Für die wichtigsten SO₂-Emittenten, die Kraftwerke und Raffinerien, wurde jedoch eine Neuerhebung des Energieverbrauchs auf der Basis von allgemein zugänglichen Statistiken durchgeführt. Für Braunkohlenkraftwerke erfolgte zusätzlich eine Erhebung der Emissionsfaktoren /39/, so daß die Erfassung der SO₂-Emissionen für 1982 als zufriedenstellend angesehen werden kann.

3.3.2 SO₂-Emissionen der Bundesrepublik Deutschland unter Berücksichtigung der Regelungen der Großfeuerungsanlagenverordnung

In der Bundesrepublik Deutschland trat im Jahre 1983 die Großfeuerungsanlagenverordnung (GFAVO) in Kraft, die für den größten Teil der Feuerungsanlagen mit einer Feuerungswärmeleistung von über 50 MW_{thermisch} Emissionsreduktionsmaßnahmen vorschreibt.

Die Bestimmungen der GFAVO wurden so genau wie möglich auf die in EMUKAT enthaltenen Anlagen angewandt, jedoch entziehen sich einige Vorgaben, wie z.B. Forderungen nach einer höchstmöglichen Schwefelrückhaltung, einer modellhaften Berücksichtigung. Weiterhin ist zu beachten, daß das Größenklassenspektrum der Anlagen sich ändern kann und auch regional unterschiedliche Entwicklungen nicht auszuschließen sind. Desweiteren wurde bisher die Stilllegung bzw. der Neubau von Anlagen nicht berücksichtigt. Als zusätzliche Einschränkung für die Genauigkeit einer Emissionsprognose ist darauf hinzuweisen, daß die Bestimmungen der GFAVO nur als Mindestanforderung anzusehen sind, so daß zusätzliche Reduktionen durch Auflagen oder Vereinbarungen nicht einbezogen sind.

Die Auswirkungen der GFAVO werden ausgehend von der Energieversorgung im Jahre 1982 ermittelt. Dabei wird errechnet, welche Emissionen im Jahre 1982 zu erwarten gewesen wären, wenn bereits zu diesem Zeitpunkt die GFAVO im vollen Ausmaß Anwendung gefunden hätte.

Da 1989 die in der GFAVO vorgeschriebenen Maßnahmen zur Emissionsminderung nahezu vollständig durchgeführt waren, wurde dieser Datensatz den Berechnungen von SO₂-Konzentrationswerten im Rahmen des Smogfrühwarnsystems zugrunde gelegt. Dies bedeutet eine Verringerung der Gesamtemissionen von 2,8 Mio Tonnen im Jahre 1982 auf 1,2 Mio Tonnen SO₂ pro Jahr.

3.3.3 SO₂-Emissionen für das Gebiet der ehemaligen DDR

Die SO₂-Emissionswerte für das Gebiet der ehemaligen DDR für das Bezugsjahr 1982 wurden einer im Auftrag des Umweltbundesamtes vom Deutschen Institut für Wirtschaftsforschung (DIW) erstellten Studie /40/ entnommen. Sie enthält neben einer ausführlichen Beschreibung der emissionsverursachenden Anlagen auch Tabellen der regionalen Verteilung der Emissionen, dargestellt in Rasterfeldern der Größe $\frac{1}{2}$ Längengrad * $\frac{1}{4}$ Breitengrad für die folgenden Bereiche:

- *Kraftwerke* (Braunkohlenkraftwerke, nicht mit Braunkohle befeuerte Kraftwerke, Heizwerke)
- *Industrie*
- *Haushalte und Kleinverbraucher* (Ofenheizung, Zentralheizung, Warmwasserbereitung für Wohnungen mit Ofenheizung, Warmwasserbereitung für Wohnungen mit Zentralheizung, Kochprozesse, Kleinverbrauch)
- *Verkehr* (Omnibusverkehr, Straßengüterverkehr, Transitverkehr, Schienenverkehr, Binnenschifffahrt, Seeschifffahrt)

Für die Kraftwerke, die einzeln aufgeführt sind, teilweise aber auch für Industrieanlagen, liegen zusätzliche Informationen über den eingesetzten Brennstoff, den Schwefelgehalt des Brennstoffs, die Kapazität und die Auslastung der Anlagen und über die Kaminhöhen vor.

Für die Rechnungen im Rahmen des Smogfrühwarnsystems wurde dieser Emissionsdatensatz, der sich auf das Jahr 1982 bezieht, bis auf kleine Korrekturen, die in /41/ beschrieben sind, beibehalten. Das Kraftwerk Jänschwalde im Raum Cottbus ging mit 2 Blöcken von je 500 MW Ende 1982 in Betrieb und wurde in /40/ mit entsprechend geringen Emissionen (66.000 t/a) berücksichtigt. Inzwischen wurde

es auf insgesamt 3000 MW erweitert. Daher wird für die Rechnungen ab November 1989 ein Jahresemissionswert von 230.650 Tonnen, ab Februar 1990 ein Wert von 346.000 Tonnen angesetzt. Somit werden die Gesamtemissionen der ehemaligen DDR gegenwärtig mit ca. 5 Mio Tonnen SO₂ pro Jahr berücksichtigt.

Aufgrund der politischen Entwicklung und dem damit verbundenen Rückgang der Produktion und der Stilllegung zahlreicher Betriebe ist der Energieverbrauch in den neuen Bundesländern in den Jahren 1990 und 1991 deutlich zurückgegangen. Damit haben auch die SO₂-Emissionen abgenommen. Da bisher jedoch kein Überblick über die in den einzelnen Gebieten stillgelegten Betriebe bzw. über den Rückgang der Energieerzeugung in einzelnen Kraftwerken vorliegt, wurde auch für die Berechnung der Konzentrationswerte für das Winterhalbjahr 1990/1991 noch von dem alten Emissionsdatensatz des Jahres 1982 ausgegangen. Dadurch werden die Konzentrationswerte überschätzt, die Struktur der regionalen Verteilung dürfte aber unverändert geblieben sein, da die Hauptemittenten, die großen Kraftwerke, weiterhin - wenn auch teilweise mit verminderter Leistung - in Betrieb sind und bisher noch keine neuen Anlagen ans Netz gegangen sind.

3.3.4 SO₂-Emissionen der CSFR und Polens

Die regionale Verteilung der SO₂-Emissionen der CSFR ist in einer im Auftrag der KfK/AFAS erstellten Studie des DIW /42/ ausführlich dargestellt. Darin wurden die Emissionswerte bis zum 16. Längengrad Rasterfeldern der Größe $\frac{1}{2}$ Längengrad * $\frac{1}{4}$ Breitengrad, östlich davon Rasterfeldern der Größe 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad zugeordnet. Der Bericht enthält Tabellen und Abbildungen über die Emissionen aus den Bereichen Kraftwerke und Heizwerke (befeuert mit Braunkohle, Steinkohle bzw. Heizöl), Industrie, Haushalte und Kleinverbraucher. Für die Kraftwerke liegen wiederum, wie für die ehemalige DDR, Informationen über die Kapazität, die Auslastung, den Brennstoffverbrauch, die Kaminhöhe und die Emissionsfaktoren vor.

Als Grundlage für die regionale Verteilung der SO₂-Emissionen in Polen dient ein im Auftrag der KfK/AFAS von der Polnischen Akademie der Wissenschaften in Warschau erstellter Bericht /43/.

Die Daten der CSFR und Polens für das Jahr 1982 wurden, bis auf kleine Änderungen in der Zuordnung der Emissionen zu einzelnen Rasterflächen (s. /41/), aus den genannten Studien übernommen.

3.3.5 SO₂-Emissionen der Benelux-Staaten, Frankreichs und Großbritanniens

Die regionale Emissionsverteilung für die Niederlande, Belgien und Luxemburg wurde von KfK/AFAS anhand von Energiestatistiken erstellt. Da für die Standorte von Kraftwerken und Raffinerien recht genaue Angaben vorlagen, konnte für diesen Sektor die kleine Rasterung $\frac{1}{2}$ Längengrad * $\frac{1}{4}$ Breitengrad gewählt werden. Den übrigen Sektoren - Industrie, Haushalte und Kleinverbraucher und Verkehr - wurde ein Raster mit der Maschenweite 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad zugrunde gelegt.

Die Emissionen Frankreichs wurden anhand von Untersuchungen der CITEPA für die Jahre 1981 und 1983 mittels der Energiestatistik für 1982 interpoliert. Die Angaben der CITEPA gelten für die Departements; Kraftwerken und Raffinerien sind daraus Standortkoordinaten zuzuordnen, die eine Erfassung in Rasterfeldern von $\frac{1}{2}$ Längengrad * $\frac{1}{4}$ Breitengrad ermöglichen. Für die übrigen Sektoren werden wieder die Raster der Größe 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad zugrunde gelegt. Zur Umrechnung der Emissionswerte pro Departement auf Werte pro Rasterfläche wurde die Fläche der Departements in Zehntelanteilen den jeweiligen Rasterflächen zugeordnet. Entsprechende Anteile der Departement-Emissionswerte ergeben die SO₂-Emissionen pro Raster, gegebenenfalls als Summe der Anteilswerte mehrerer Departements.

Für die Aufstellung der Emissionen Großbritanniens konnte auf Informationen eines Emissionskatasters zurückgegriffen werden, das im Warren Springs Laboratory erstellt wurde /44/. Für den Kraftwerkssektor wurde eine Datei mit 74 Kraftwerken und 15 Raffinerien geliefert, für die restlichen Emissionen wurden Gesamtflächenwerte für eine Rastereinteilung von 10 km * 10 km angegeben. Entsprechend der Vorgehensweise bei den anderen Staaten erfolgte eine Umrechnung der Emissionen auf Raster der Größe 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad.

Die seit 1982 eingetretenen Emissionsabnahmen Frankreichs, der Benelux - Staaten und Großbritanniens wurden in der Emissionsdatenbasis bisher nicht berücksichtigt. Bei Smogwetterlagen (Ostwetterlagen) haben diese Staaten jedoch keinen oder nur einen äußerst geringen Einfluß auf die Konzentrationswerte in der Bundesrepublik Deutschland. Bei anderen Wetterlagen hingegen führt die Überschätzung der Emissionen zu einer Überschätzung der Konzentrationswerte insbesondere im Westen der Bundesrepublik.

3.3.6 Bereitstellung eines komprimierten Emissionsdatensatzes für Rechnungen im Smogfrühwarnsystem

Für einen großen Teil der Emittenten der Bundesrepublik Deutschland liegen exakte Standortkoordinaten vor; wie aber auch bei den übrigen Staaten wurden die Emissionen dem Mittelpunkt von Rasterfeldern der Ausdehnung $\frac{1}{2}$ Längengrad * $\frac{1}{4}$ Breitengrad zugeordnet. Das aus dem Modell MESOS entwickelte Ausbreitungsmodell SMOVO berechnet aus den zur Verfügung stehenden meteorologischen Eingabedaten, die im Abstand von ca. 180 km und in einer zeitlichen Abfolge von 3 Stunden vorliegen, Konzentrationswerte in einer räumlichen Auflösung von 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad (ca. 50 km * 70 km). Die erwähnte Zuordnung der Emissionswerte zu einzelnen Rasterfeldern ist daher für das Modell vollkommen ausreichend; eine exakte Berücksichtigung der Standorte würde zu keiner Verbesserung der Rechenergebnisse führen.

Auch eine exakte Berücksichtigung *aller* unterschiedlichen Freisetzungshöhen ist wegen der damit verbundenen hohen Rechenzeit nicht sinnvoll. Hinzu kommt, daß häufig keine genauen Angaben über die Kaminhöhen vorliegen. Daher wurden auch die unterschiedlichen Freisetzungshöhen zusammengefaßt. Es ist jedoch wichtig, eine Differenzierung bei der Höhe der Kamine beizubehalten, da dies für die Ausbreitung der Schadstoffe von Bedeutung ist. Emissionen aus niedrigen Kaminen erreichen nämlich i. a. schon in Quellnähe den Erdboden und lagern sich bereits hier teilweise ab. Somit vermindert sich der Anteil der freigesetzten Schadstoffe, der über größere Entfernungen transportiert wird. Emissionen aus hohen Kaminen dagegen werden bei niedrigen Mischungsschichthöhen, wie sie insbesondere bei Smogwetterlagen auftreten können, oberhalb der Mischungsschicht freigesetzt und transportiert. Erst wenn diese Emissionen in die Mischungsschicht gelangen, tragen sie zur bodennahen Konzentration und zur trockenen Ablagerung bei. Dadurch können erhöhte Konzentrationen fernab von Quellen auftreten. Für die Zusammenfassung unterschiedlicher Freisetzungshöhen wurde die in Tabelle 3.2 dargestellte Klasseneinteilung gewählt.

Nach dieser Zuordnung zu Freisetzungshöhenklassen liegen für die betrachteten Staaten an insgesamt 1097 Standorten Emissionswerte für jeweils bis zu zehn Freisetzungshöhen vor. Sensitivitätsanalysen haben jedoch gezeigt, daß die Emissionen einzelner Rasterfelder unter Beibehaltung der Kaminhöhenklassen weiter zusammengefaßt werden können. Dies führt zu einer weiteren erheblichen Reduktion der Rechenzeit, ohne daß sich die Ergebnisse signifikant verändern. Folgende Kriterien wurden dieser Zusammenfassung zugrunde gelegt:

- hohe Emissionswerte verbleiben im entsprechenden Rasterfeld;
- im Vergleich dazu geringe Emissionswerte aus benachbarten Rasterfeldern werden diesen Rasterfeldern zugeschlagen;
- weiter entfernt liegende Rasterfelder werden gröber zusammengefaßt, da mit zunehmender Entfernung von der Bundesrepublik die Bedeutung dieser Emissionen für die Konzentrationswerte in Deutschland abnimmt. Allerdings werden auch hier hohe Emissionswerte in den entsprechenden Rasterfeldern berücksichtigt.

Eine ausführliche Beschreibung der Vorgehensweise bei der Zusammenfassung und eine Gegenüberstellung der unterschiedlichen regionalen Verteilungen der Emissionswerte ist in /41/ gegeben, Sensitivitätsrechnungen hierzu sind in Abschnitt 4.5.2 dargestellt. Als Ergebnis der Zusammenfassung reduziert sich die Anzahl der zu berücksichtigenden Standorte von 1097 auf 308, wobei an jedem Standort bis zu 10 Freisetzungshöhen berücksichtigt werden können. Tabelle 3.3 zeigt die in SMOVO verwendeten Emissionswerte für die einzelnen Staaten.

20 m	<i>für den Bereich HuK und Verkehr</i>
50 m	<i>für den Bereich Industrie, falls keine detaillierte Information vorliegt</i>
85 m mit 35 MW Auftrieb	<i>für die Kaminhöhen von 50 m bis 100 m und einem thermischen Auftrieb über 20 MW</i>
90 m mit 4 MW Auftrieb	<i>für die Kaminhöhen von 50 m bis 140 m und bis zu 10 MW Auftrieb</i>
100 m mit 15 MW Auftrieb	<i>für die Kaminhöhen von 50 m bis 140 m und zwischen 10 und 20 MW Auftrieb</i>
115 m mit 45 MW Auftrieb	<i>für die Kaminhöhen von 100 m bis 140 m und über 20 MW Auftrieb</i>
145 m mit 10 MW Auftrieb	<i>für die Kaminhöhen von 140 m bis 180 m und bis zu 20 MW Auftrieb</i>
155 m mit 55 MW Auftrieb	<i>für die Kaminhöhen von 140 m bis 180 m und über 20 MW Auftrieb oder Kaminhöhen über 180 m und unter 20 MW Auftrieb</i>
220 m mit 65 MW Auftrieb	<i>für die Kaminhöhen von 180 m bis 300 m und über 20 MW Auftrieb</i>
300 m mit 65 MW Auftrieb	<i>für Kaminhöhen ab 300 m</i>

Tab. 3.2: Klasseneinteilung bei der Zusammenfassung unterschiedlicher Freisetzungshöhen

Koordinaten	300/65	220/65	155/55	145/10	115/45	100/15	90/4	85/35	50/0	20/0	Summe
1. 9.25/54.125	0	0	1348	0	0	0	785	0	1646	4553	8332.
2. 10.25/54.375	0	0	0	0	1646	402	337	0	2101	7941	12427.
3. 8.25/53.625	0	5581	0	0	0	0	955	0	2349	4485	13370.
4. 8.75/53.625	0	0	0	0	0	0	3898	0	4483	8236	16617.
5. 9.75/53.625	0	133	4258	0	0	1009	1078	0	5111	8446	20035.
6. 10.75/53.875	0	0	622	0	0	1070	0	0	2122	4061	7875.
7. 10.25/53.625	0	0	0	5136	0	0	0	622	2786	6746	15290.
8. 7.25/53.375	0	0	0	0	0	187	456	655	1210	2286	4794.
9. 8.75/53.125	0	1295	1401	0	589	3586	913	0	7039	6619	21442.
10. 9.75/53.375	0	388	0	0	0	1128	397	1355	1742	3421	8431.
11. 7.25/52.625	0	0	55	0	0	0	25	1141	861	1076	3158.
12. 8.25/52.875	0	0	0	26406	0	0	687	0	330	2667	30090.
13. 8.75/52.625	0	115	205	27628	0	0	1508	0	2267	3452	35175.
14. 13.25/52.625	0	0	0	0	4132	0	41871	0	12878	13196	83582.
15. 7.75/52.375	0	0	808	0	189	866	687	0	3339	3088	8977.
16. 8.75/52.125	0	0	2563	0	246	516	1831	0	9019	9107	23282.
17. 9.75/52.375	0	0	0	0	0	1650	2277	0	3579	5462	12968.
18. 10.25/52.375	0	2028	0	0	7	0	1770	0	2826	2085	8716.
19. 10.75/52.375	0	0	0	0	806	716	1115	0	3064	1998	7699.
20. 10.25/52.125	0	0	0	0	3610	0	2195	0	1693	2948	10446.
21. 10.75/52.125	0	4492	0	0	0	2096	2400	0	280	1302	10570.
22. 13.25/52.375	0	0	2036	0	1139	0	10256	0	7163	7426	42923.
23. 6.75/51.625	0	4343	0	0	2969	3237	7196	915	12126	4222	35008.
24. 7.25/51.625	0	21223	9867	956	11112	10081	4978	0	24115	8299	90631.
25. 7.75/51.625	0	4157	4648	722	36	1273	2067	0	12189	6872	31964.
26. 9.75/51.875	0	0	0	5404	52	0	5091	0	3250	3813	17610.
27. 6.25/51.375	0	1566	0	0	0	0	212	4	5003	4590	11375.
28. 6.75/51.375	0	13993	1531	2337	12400	4489	8085	204	11931	12545	67515.
29. 6.75/51.125	0	0	21163	456	1319	5414	5444	15659	11758	7673	68886.
30. 7.25/51.375	0	0	0	0	1719	2211	566	0	9756	12976	27228.
31. 7.75/51.375	0	1237	0	0	0	0	2920	0	9896	8682	22735.
32. 9.25/51.375	0	0	0	0	586	66	1096	0	2426	3760	7934.
33. 9.25/51.125	0	0	700	0	0	848	493	0	2926	5427	10394.
34. 6.25/50.875	0	8345	0	1427	2415	1106	5830	8257	5617	4062	37059.
35. 6.75/50.875	0	82	9562	0	10383	3583	1840	13551	16863	8206	64070.
36. 7.25/50.875	0	0	0	0	0	1021	1683	0	9117	8339	20160.
37. 8.25/50.125	0	0	0	0	1146	0	2677	1264	5714	9165	19966.
38. 8.75/50.125	0	3713	1076	0	1276	1483	2044	0	7787	11635	29014.
39. 11.75/50.125	0	0	0	0	1424	908	1113	0	5022	4066	12533.
40. 8.25/49.875	0	0	0	0	0	520	411	0	2530	5691	9152.
41. 8.25/49.625	0	0	0	1326	3782	3350	2771	0	3846	3582	18657.
42. 9.25/49.875	0	0	0	2384	1621	538	1575	0	3003	4881	14002.
43. 10.75/49.625	0	2241	0	0	0	0	649	0	4046	5083	12019.
44. 6.75/49.375	0	1299	1823	169	3368	1953	1632	0	3890	4111	18245.
45. 6.75/49.125	0	450	422	302	47212	1099	1777	0	5500	3299	60061.
46. 7.25/49.375	0	2369	1423	0	399	0	1706	0	9233	6686	21816.
47. 8.25/49.375	0	0	168	0	1635	2798	922	0	10710	5952	22185.
48. 8.25/49.125	0	446	3716	3197	1439	149	2702	0	5942	8487	26078.
49. 9.25/49.125	0	0	1185	0	672	941	1450	0	3793	2744	10785.
50. 11.25/49.375	0	0	0	0	29	402	614	0	8615	8010	17670.
51. 12.25/49.375	0	3773	0	608	0	0	1608	0	4418	3594	14001.
52. 8.25/48.625	0	0	0	0	0	0	1384	0	5478	5606	12468.
53. 9.25/48.875	0	236	218	0	0	0	979	0	6523	8476	16432.
54. 9.25/48.625	0	0	13	0	399	306	1092	0	4065	5764	11639.
55. 11.25/48.875	0	0	0	0	0	1426	680	0	2290	2742	7138.
56. 11.75/48.875	0	2786	800	1006	0	0	2168	0	7737	851	15348.
57. 13.25/48.625	0	476	320	0	0	736	220	0	3134	4062	8948.
58. 9.75/48.375	0	0	0	0	0	111	4694	0	3511	4479	12795.
59. 10.75/48.375	0	0	0	0	0	0	1767	0	5895	3631	11293.
60. 11.75/48.375	0	0	535	0	0	369	320	0	5667	2634	9525.
61. 11.75/48.125	0	0	139	0	344	286	581	53	5744	13744	20891.
62. 12.75/48.125	0	0	0	0	597	137	1360	0	8380	3414	13888.
63. 7.75/47.625	0	0	0	0	0	0	1540	0	7874	4084	13498.
64. 9.75/47.875	0	0	0	0	0	0	5361	0	7826	5694	18881.

Tab. 3.3a: Zusammengefaßte SO₂-Emissionsverteilung (t/a) der Bundesrepublik Deutschland für unterschiedliche Freisetzungshöhen (Höhe in m; thermische Emission in MW) im Bezugsjahr 1982 unter Berücksichtigung der Regelungen der Großfeuerungsanlagenverordnung

	Koordinaten	300/65	220/65	155/55	145/10	115/45	100/15	90/4	85/35	50/0	20/0	Summe
65.	14.75/51.875	346000	0	0	0	0	0	4107	0	850	649	351606.
66.	12.25/51.125	105600	48000	0	0	0	33000	16733	0	115786	21236	340355.
67.	12.75/51.125	139200	72000	0	0	0	0	0	0	4086	24652	239938.
68.	14.75/51.375	459200	0	0	0	0	0	2609	0	1972	1531	465312.
69.	11.25/52.125	0	23760	0	0	0	0	180	0	1043	10253	35236.
70.	12.25/51.875	0	69120	0	0	0	12000	15008	0	4911	20290	121329.
71.	12.25/51.625	0	64800	0	53320	0	3750	6820	0	4094	17354	156138.
72.	13.75/51.875	0	175140	0	0	0	0	0	0	1466	10512	187118.
73.	14.25/51.875	0	159999	0	0	0	0	4300	0	1770	1558	167627.
74.	14.25/51.625	0	332640	0	65167	0	0	8277	0	53596	4679	464359.
75.	12.25/51.375	0	182400	0	123266	0	0	47537	0	56948	51394	461545.
76.	13.75/51.125	0	18326	0	40381	0	0	21751	0	44802	29688	154948.
77.	14.75/51.125	0	232539	0	0	0	0	2611	0	2751	3571	241472.
78.	11.75/52.125	0	0	0	22311	0	4416	1728	0	8935	31735	69125.
79.	13.75/52.375	0	0	0	53507	0	4502	22687	0	10317	8179	99192.
80.	14.75/52.125	0	0	0	54439	0	0	11543	0	4548	4188	74718.
81.	12.75/51.875	0	0	0	25200	0	0	5077	0	1496	12694	44467.
82.	11.75/51.375	0	0	0	7088	0	0	31657	0	3092	14840	56677.
83.	12.75/50.875	0	0	0	24767	0	0	7184	0	7263	34269	73483.
84.	13.25/50.875	0	0	0	20000	0	0	7073	0	8238	41137	76448.
85.	11.75/50.375	0	0	0	18850	0	0	0	0	18	2511	21379.
86.	12.25/54.125	0	0	0	0	0	3016	13515	0	7058	21365	44954.
87.	11.25/53.625	0	0	0	0	0	3016	5752	0	3786	17977	30531.
88.	13.25/53.625	0	0	0	0	0	22816	4964	0	5298	32394	65472.
89.	14.25/53.125	0	0	0	0	0	40200	20334	0	4997	3867	69398.
90.	11.25/52.875	0	0	0	0	0	4000	0	0	2180	8885	15065.
91.	10.75/51.375	0	0	0	0	0	3800	2900	0	724	8961	16385.
92.	13.25/51.375	0	0	0	0	0	9750	54951	0	10016	35405	110122.
93.	10.25/50.875	0	0	0	0	0	2300	528	0	1668	13567	18063.
94.	13.75/50.875	0	0	0	0	0	13000	3411	0	8870	14962	40243.
95.	14.75/50.875	0	0	0	0	0	47739	0	0	1192	2137	51068.
96.	13.25/54.125	0	0	0	0	0	0	4815	0	6083	36576	47474.
97.	11.75/53.625	0	0	0	0	0	0	4862	0	3334	19847	28043.
98.	11.75/52.875	0	0	0	0	0	0	678	0	2596	15518	18792.
99.	12.75/52.875	0	0	0	0	0	0	1531	0	3282	27195	32008.
100.	13.75/52.625	0	0	0	0	0	0	11914	0	4987	5186	22087.
101.	12.75/52.375	0	0	0	0	0	0	86156	0	1995	4726	92877.
102.	10.75/51.875	0	0	0	0	0	0	2393	0	6316	7374	16083.
103.	10.75/51.625	0	0	0	0	0	0	2100	0	2075	6549	10724.
104.	11.25/51.875	0	0	0	0	0	0	3486	0	1746	11242	16474.
105.	11.75/51.875	0	0	0	0	0	0	3258	0	1872	12147	17277.
106.	11.25/51.625	0	0	0	0	0	0	8603	0	1496	8725	18824.
107.	11.75/51.625	0	0	0	0	0	0	3960	0	36604	11610	52174.
108.	10.25/51.375	0	0	0	0	0	0	300	0	768	8421	9489.
109.	11.25/51.375	0	0	0	0	0	0	4221	0	1101	9763	15085.
110.	11.25/51.125	0	0	0	0	0	0	5754	0	2185	13257	21196.
111.	11.75/51.125	0	0	0	0	0	0	7200	0	1741	10944	19885.
112.	10.75/50.875	0	0	0	0	0	0	807	0	3210	18680	22697.
113.	10.75/50.625	0	0	0	0	0	0	6721	0	3414	20446	30581.
114.	11.25/50.875	0	0	0	0	0	0	5508	0	4889	21251	31648.
115.	11.75/50.875	0	0	0	0	0	0	6333	0	3702	15543	25578.
116.	11.25/50.625	0	0	0	0	0	0	17403	0	3310	19864	40577.
117.	12.25/50.875	0	0	0	0	0	0	14837	0	5637	24296	44770.
118.	12.75/50.625	0	0	0	0	0	0	3632	0	5789	33769	43190.
119.	12.25/50.375	0	0	0	0	0	0	678	0	3640	24259	28577.
120.	10.25/51.125	0	0	0	0	0	0	0	0	1070	7856	8926.
121.	10.75/51.125	0	0	0	0	0	0	0	0	570	7656	8226.
122.	10.25/50.625	0	0	0	0	0	0	0	0	636	8570	9206.
123.	11.75/50.625	0	0	0	0	0	0	0	0	769	8014	8783.
124.	12.25/50.625	0	0	0	0	0	0	0	0	4362	21858	26220.

Tab. 3.3b: Zusammengefaßte SO₂-Emissionsverteilung (t/a) der ehemaligen DDR für unterschiedliche Freisetzungshöhen (Höhe in m; thermische Emission in MW) im Bezugsjahr 1982

	Koordinaten	300/65	220/65	155/55	145/10	115/45	100/15	90/4	85/35	50/0	20/0	Summe
125.	13.25/50.375	511019	0	0	0	0	8227	0	0	1233	2308	522787.
126.	13.75/50.375	107511	0	0	0	0	0	16708	0	880	3466	128565.
127.	14.75/50.375	261247	56613	0	0	0	0	0	0	2039	6465	326364.
128.	15.25/50.125	175120	0	0	0	0	0	12703	0	3030	7158	198011.
129.	18.50/48.750	90244	0	0	0	0	3237	11215	0	4841	14559	124096.
130.	22.25/48.625	16322	29106	0	0	0	0	0	0	2507	5434	53369.
131.	13.75/50.625	0	157445	0	0	0	118722	33416	0	13663	8483	331729.
132.	12.75/50.125	0	62986	0	0	0	82862	9162	0	32912	8925	196847.
133.	18.25/49.875	0	27379	0	0	0	6739	4068	0	36544	3062	77792.
134.	18.75/49.875	0	18934	0	0	0	10887	0	0	17980	1782	49583.
135.	14.25/50.125	0	0	19572	0	0	0	65413	0	9557	15893	110435.
136.	13.25/49.875	0	0	48845	0	0	0	12870	0	4104	5337	71156.
137.	14.25/50.375	0	0	0	0	0	27400	0	0	13403	4577	45380.
138.	15.75/50.125	0	0	0	0	0	139732	8913	0	5034	10328	164007.
139.	16.50/50.250	0	0	0	0	0	17266	1203	0	5661	28729	52859.
140.	19.50/49.250	0	0	0	0	0	20567	0	0	9568	16976	47111.
141.	14.25/48.875	0	0	0	0	0	6185	1702	0	8334	12078	28299.
142.	17.50/48.750	0	0	0	0	0	36667	0	0	4899	14900	56466.
143.	20.50/48.750	0	0	0	0	0	7241	0	0	32596	32775	72612.
144.	17.50/48.250	0	0	0	0	0	10284	0	0	13800	21140	45224.
145.	14.25/50.875	0	0	0	0	0	0	16708	0	1238	7997	25943.
146.	14.25/50.625	0	0	0	0	0	0	21797	0	11020	9888	42705.
147.	15.75/50.625	0	0	0	0	0	0	6364	0	4924	25992	37280.
148.	14.75/50.125	0	0	0	0	0	0	1115	0	7280	11837	20232.
149.	17.50/50.250	0	0	0	0	0	0	12147	0	5787	8353	26287.
150.	13.75/49.625	0	0	0	0	0	0	10467	0	6276	11353	28096.
151.	18.25/49.625	0	0	0	0	0	0	41748	0	11274	3153	56175.
152.	13.25/49.375	0	0	0	0	0	0	12854	0	3790	3739	20383.
153.	14.75/49.375	0	0	0	0	0	0	13677	0	2457	8937	25071.
154.	16.50/49.250	0	0	0	0	0	0	33928	0	11321	17092	62341.
155.	18.50/49.250	0	0	0	0	0	0	16358	0	11925	24000	52283.
156.	21.50/48.750	0	0	0	0	0	0	32864	0	31304	30834	95002.
157.	14.25/49.625	0	0	0	0	0	0	0	0	9827	9397	19224.
158.	15.75/49.875	0	0	0	0	0	0	0	0	4789	18385	23174.
159.	15.75/49.375	0	0	0	0	0	0	0	0	2813	15517	18330.
160.	17.50/49.250	0	0	0	0	0	0	0	0	9423	20949	30372.
161.	18.50/47.750	0	0	0	0	0	0	0	0	14035	19783	33818.

Tab. 3.3c: Zusammengefaßte SO₂-Emissionsverteilung (t/a) der CSFR für unterschiedliche Freisetzungshöhen (Höhe in m; thermische Emission in MW) im Bezugsjahr 1982

Koordinaten	300/65	220/65	155/55	145/10	115/45	100/15	90/4	85/35	50/0	20/0	Summe
162.	21.50/51.750	39490	79999	0	0	0	0	0	0	5853	125342.
163.	18.75/50.125	72769	128089	0	16740	0	0	0	0	0	217598.
164.	19.25/50.375	14000	42919	0	26179	0	8400	0	0	0	91498.
165.	21.50/50.250	127739	0	0	0	0	0	0	14079	11422	153240.
166.	14.50/53.750	0	18700	0	0	0	0	0	1522	7776	27998.
167.	14.50/53.250	0	89099	0	0	0	0	0	18507	11283	118889.
168.	21.50/52.250	0	15930	0	0	0	31019	0	16198	21872	85019.
169.	16.50/51.750	0	47600	0	0	0	0	0	8657	11254	67511.
170.	19.50/51.750	0	6600	0	0	0	36049	0	19168	19709	81526.
171.	19.50/51.250	0	20589	0	0	0	0	0	27702	43473	91764.
172.	19.25/50.125	0	212850	0	61559	0	43489	0	0	0	317898.
173.	19.75/50.125	0	8900	0	0	0	40999	0	0	0	49899.
174.	18.50/54.250	0	0	0	25869	0	9400	0	17517	30143	82929.
175.	18.50/53.250	0	0	0	12190	0	4900	0	41697	25618	84405.
176.	15.50/52.750	0	0	0	6800	0	0	0	9003	15169	30972.
177.	19.50/52.750	0	0	0	70600	0	0	0	15234	13174	99008.
178.	16.50/52.250	0	0	0	5600	0	0	0	21787	23318	50705.
179.	18.50/52.250	0	0	0	119749	0	45399	0	4001	9102	178251.
180.	20.50/52.250	0	0	0	11900	0	0	0	33337	45602	90839.
181.	21.50/51.250	0	0	0	11200	0	5800	0	40802	43203	101005.
182.	15.50/50.750	0	0	0	157649	0	0	0	9166	4812	171627.
183.	19.50/49.750	0	0	0	11350	0	71659	0	19098	18757	120864.
184.	21.50/53.250	0	0	0	0	0	37399	0	7662	15252	60313.
185.	23.50/53.250	0	0	0	0	0	5000	0	19238	19467	43705.
186.	17.50/51.750	0	0	0	0	0	15400	0	27036	31588	74024.
187.	16.50/51.250	0	0	0	0	0	6900	0	31371	8942	47213.
188.	19.50/50.750	0	0	0	0	0	14200	0	58850	15154	88204.
189.	22.50/50.750	0	0	0	0	0	15500	0	26984	27751	70235.
190.	18.25/50.375	0	0	0	0	0	41299	0	0	0	41299.
191.	18.75/50.375	0	0	0	0	0	50200	0	0	0	50200.
192.	20.50/50.250	0	0	0	0	0	6600	0	13487	23420	43507.
193.	16.50/54.250	0	0	0	0	0	0	0	8106	9732	17838.
194.	17.50/54.250	0	0	0	0	0	0	0	8016	13989	22005.
195.	19.50/54.250	0	0	0	0	0	0	0	15005	17366	32371.
196.	20.50/53.750	0	0	0	0	0	0	0	12378	15952	28330.
197.	16.50/53.250	0	0	0	0	0	0	0	10270	17405	27675.
198.	17.50/52.750	0	0	0	0	0	0	0	18842	31397	50239.
199.	22.50/52.250	0	0	0	0	0	0	0	6328	15593	21921.
200.	15.50/51.750	0	0	0	0	0	0	0	27280	19716	46996.
201.	22.50/51.250	0	0	0	0	0	0	0	40014	24163	64177.
202.	16.50/50.750	0	0	0	0	0	0	0	17474	19813	37287.
203.	17.50/50.750	0	0	0	0	0	0	0	19408	20264	39672.
204.	18.50/50.250	0	0	0	0	0	0	0	73877	64575	138452.
205.	19.50/50.250	0	0	0	0	0	0	0	55862	53204	109066.
206.	21.50/49.750	0	0	0	0	0	0	0	13885	16992	30877.

Tab. 3.3d: Zusammengefaßte SO₂-Emissionsverteilung (t/a) Polens für unterschiedliche Freisetzungshöhen (Höhe in m; thermische Emission in MW) im Bezugsjahr 1982

Koordinaten	300/65	220/65	155/55	145/10	115/45	100/15	90/4	85/35	50/0	20/0	Summe	
207.	4.50/52.250	0	0	0	413	0	38682	0	0	5518	7640	52253.
208.	4.50/51.750	0	0	0	107180	0	41498	0	0	0	0	148678.
209.	3.75/51.375	0	0	0	11285	0	4735	0	0	25140	10445	51605.
210.	3.75/51.125	0	0	0	45044	0	6433	0	0	0	0	51477.
211.	4.25/51.125	0	0	0	72614	0	0	0	0	0	0	72614.
212.	5.75/51.375	0	0	0	11057	0	0	0	0	9468	5343	25868.
213.	3.25/50.625	0	0	0	50468	0	0	0	0	14405	5784	70657.
214.	4.50/50.750	0	0	0	23519	0	0	0	0	0	0	23519.
215.	4.75/50.625	0	0	0	35155	0	8645	0	0	0	0	43800.
216.	5.50/50.750	0	0	0	28926	0	4566	0	0	0	0	33492.
217.	5.75/50.875	0	0	0	6462	0	5974	0	0	22060	9531	44027.
218.	4.50/50.250	0	0	0	6979	0	13326	0	0	11152	4478	35935.
219.	6.75/53.125	0	0	0	0	0	13915	0	0	1853	2566	18334.
220.	5.75/52.625	0	0	0	0	0	17356	0	0	827	1145	19320.
221.	6.25/52.625	0	0	0	0	0	17963	0	0	1497	2073	21533.
222.	5.25/52.125	0	0	0	0	0	22140	0	0	1853	2566	26559.
223.	4.75/51.625	0	0	0	0	0	31595	0	0	3322	4600	39517.
224.	5.50/51.750	0	0	0	0	0	22301	0	0	2595	3593	28489.
225.	5.75/51.125	0	0	0	0	0	33216	0	0	213	296	33725.
226.	4.50/51.250	0	0	0	0	0	0	0	0	26797	10760	37557.
227.	4.25/50.875	0	0	0	0	0	0	0	0	40273	16172	56445.
228.	5.50/49.750	0	0	0	0	0	0	0	0	9605	3116	12721.
229.	6.50/49.750	0	0	0	0	0	0	0	0	11310	2814	14124.

Tab. 3.3e: Zusammengefaßte SO₂-Emissionsverteilung (t/a) der Benelux-Staaten für unterschiedliche Freisetzungshöhen (Höhe in m; thermische Emission in MW) im Bezugsjahr 1982

Koordinaten	300/65	220/65	155/55	145/10	115/45	100/15	90/4	85/35	50/0	20/0	Summe	
279.	-3.50/56.250	0	13700	0	0	0	162930	0	0	10344	5869	192843.
280.	-4.50/55.750	0	5570	0	0	0	740	0	0	31901	18100	56311.
281.	-2.50/55.750	0	49900	0	0	0	0	0	0	5098	2892	57890.
282.	-1.50/54.750	0	59090	0	0	0	48800	0	0	39003	22130	169023.
283.	-1.50/53.750	0	395900	0	0	0	59600	0	0	36657	20799	512956.
284.	-0.50/53.750	0	213900	0	0	0	4000	0	0	8576	4866	231342.
285.	-2.50/53.250	0	170990	0	0	0	20400	0	0	56517	32067	279974.
286.	-0.50/53.250	0	263000	0	58200	0	22700	0	0	7490	4250	355640.
287.	-2.50/52.750	0	83800	0	0	0	9400	0	0	20578	11676	125454.
288.	-1.50/52.750	0	211700	0	0	0	204700	0	0	45475	25802	487677.
289.	-4.50/51.750	0	53550	0	0	0	4700	0	0	4696	2664	65610.
290.	-3.50/51.750	0	8590	0	0	0	3000	0	0	19226	10909	41725.
291.	-1.50/51.750	0	117000	0	0	0	0	0	0	9525	5404	131929.
292.	0.50/51.750	0	21250	0	0	0	6300	0	0	15564	8831	51945.
293.	0.50/51.250	0	106100	0	45200	0	60900	0	0	38629	21918	272747.
294.	1.50/51.250	0	624	0	0	0	7600	0	0	6932	3933	19089.
295.	-1.50/50.750	0	54800	0	0	0	8600	0	0	36138	20505	120043.
296.	-2.50/53.750	0	0	0	0	0	38500	0	0	25293	14351	78144.
297.	-3.50/53.250	0	0	0	0	0	2700	0	0	25280	14344	42324.
298.	-1.50/52.250	0	0	0	0	0	1300	0	0	41315	23442	66057.
299.	-0.50/52.250	0	0	0	0	0	4000	0	0	20398	11573	35971.
300.	0.50/52.250	0	0	0	0	0	1800	0	0	21558	12231	35589.
301.	-3.50/51.250	0	0	0	0	0	83400	0	0	4269	2422	90091.
302.	-2.50/51.250	0	0	0	0	0	8400	0	0	30454	17279	56133.
303.	-0.50/51.250	0	0	0	0	0	1500	0	0	59364	33683	94547.
304.	-2.50/57.250	0	0	0	0	0	0	0	0	4244	2408	6652.
305.	-3.50/55.750	0	0	0	0	0	0	0	0	18403	10442	28845.
306.	-1.50/53.250	0	0	0	0	0	0	0	0	28649	16255	44904.
307.	-0.50/51.750	0	0	0	0	0	0	0	0	52324	29688	82012.
308.	-3.50/50.750	0	0	0	0	0	0	0	0	16230	9208	25438.

Tab. 3.3f: Zusammengefaßte SO₂-Emissionsverteilung (t/a) Großbritanniens für unterschiedliche Freisetzungshöhen (Höhe in m; thermische Emission in MW) im Bezugsjahr 1982

	Koordinaten	300/65	220/65	155/55	145/10	115/45	100/15	90/4	85/35	50/0	20/0	Summe
230.	0.25/49.375	0	54208	0	0	88898	0	0	0	0	0	143106.
231.	2.25/49.125	0	22385	0	0	9800	25228	7312	0	0	0	64725.
232.	1.75/48.875	0	64509	0	0	10512	0	0	0	0	0	75021.
233.	6.25/48.875	0	44860	0	0	0	0	0	0	897	310	46067.
234.	4.75/43.875	0	13251	0	0	7296	0	0	0	18476	3440	42463.
235.	6.25/49.125	0	0	21887	0	16010	0	0	0	2094	724	40715.
236.	2.75/48.875	0	0	21412	0	48533	0	762	0	0	0	70707.
237.	-1.75/47.375	0	0	57353	0	19200	0	0	0	0	0	76553.
238.	4.75/45.375	0	0	19880	0	0	0	0	0	9340	2014	31234.
239.	5.25/43.125	0	0	48823	0	0	0	0	0	0	0	48823.
240.	2.50/50.750	0	0	0	0	38529	2742	5635	0	32680	8445	88031.
241.	2.50/50.250	0	0	0	0	5408	0	0	0	42679	10313	58400.
242.	3.25/50.375	0	0	0	0	59637	22414	0	0	0	0	82051.
243.	3.25/50.125	0	0	0	0	24080	22822	0	0	0	0	46902.
244.	1.50/49.250	0	0	0	0	9947	0	0	0	14712	4724	29383.
245.	7.50/48.750	0	0	0	0	6430	0	0	0	17791	6698	30919.
246.	2.75/48.375	0	0	0	0	16089	0	0	0	12595	11440	40124.
247.	7.75/48.375	0	0	0	0	17414	0	0	0	0	0	17414.
248.	4.25/46.625	0	0	0	0	14909	8500	0	0	8795	5867	38071.
249.	4.50/45.750	0	0	0	0	17198	0	0	0	34819	19571	71588.
250.	-0.25/45.125	0	0	0	0	86524	0	0	0	0	0	86524.
251.	5.50/45.250	0	0	0	0	5744	0	0	0	25209	8988	39941.
252.	-0.50/44.750	0	0	0	0	8399	0	0	0	20165	9723	38287.
253.	2.25/43.625	0	0	0	0	9426	0	0	0	24137	12672	46235.
254.	5.25/43.625	0	0	0	0	118299	0	0	0	8536	2112	128947.
255.	5.25/43.375	0	0	0	0	54601	0	0	0	0	0	54601.
256.	-0.75/44.125	0	0	0	0	0	22492	0	0	3372	2591	28455.
257.	3.50/49.750	0	0	0	0	0	0	12809	0	15555	3570	31934.
258.	-1.50/47.250	0	0	0	0	0	0	22366	0	14201	9055	45622.
259.	3.50/50.250	0	0	0	0	0	0	0	0	51359	13690	65049.
260.	0.50/49.750	0	0	0	0	0	0	0	0	36819	8224	45043.
261.	-0.50/49.250	0	0	0	0	0	0	0	0	12987	6307	19294.
262.	2.50/49.250	0	0	0	0	0	0	0	0	32574	11154	43728.
263.	6.50/49.250	0	0	0	0	0	0	0	0	33366	4023	37389.
264.	1.50/48.750	0	0	0	0	0	0	0	0	24987	11156	36143.
265.	2.50/48.750	0	0	0	0	0	0	0	0	57378	41651	99029.
266.	3.50/48.750	0	0	0	0	0	0	0	0	16069	7353	23422.
267.	6.50/48.750	0	0	0	0	0	0	0	0	63438	5751	69189.
268.	-0.50/48.250	0	0	0	0	0	0	0	0	17721	6354	24075.
269.	4.50/48.250	0	0	0	0	0	0	0	0	10932	6791	17723.
270.	6.50/48.250	0	0	0	0	0	0	0	0	13986	5469	19455.
271.	-2.50/47.750	0	0	0	0	0	0	0	0	10169	10302	20471.
272.	7.50/47.750	0	0	0	0	0	0	0	0	14069	3688	17757.
273.	0.50/46.750	0	0	0	0	0	0	0	0	13819	7707	21526.
274.	0.50/45.750	0	0	0	0	0	0	0	0	14406	5897	20303.
275.	6.50/45.750	0	0	0	0	0	0	0	0	21067	9431	30498.
276.	3.50/43.750	0	0	0	0	0	0	0	0	9051	4773	13824.
277.	7.50/43.750	0	0	0	0	0	0	0	0	10709	5293	16002.
278.	5.50/43.250	0	0	0	0	0	0	0	0	47871	7347	55218.

Tab. 3.3g: Zusammengefaßte SO₂-Emissionsverteilung (t/a) Frankreichs für unterschiedliche Freisetzungshöhen (Höhe in m; thermische Emission in MW) im Bezugsjahr 1982

3.3.7 Zeitlicher Verlauf der Emissionswerte

Recht problematisch ist die Berücksichtigung des zeitlichen Verlaufs der Emissionen. So ist für keinen der betrachteten Staaten bekannt, welche Kraftwerke zu einem bestimmten Zeitpunkt mit welcher Auslastung in Betrieb sind. Bei gleicher Brennstoffqualität können die Emissionen verschiedener Anlagen während bestimmter Episoden zwischen Null (Stillstand) und dem Wert für die maximale Auslastung schwanken. Man muß sich daher mit pauschalen Annahmen über den zeitlichen Verlauf der Emissionen begnügen. Aus empirisch erhobenen Daten wurde ein typischer Tages-, Wochen- und Jahresgang der Emissionen für die Sektoren Kraftwerke/Industrie und Haushalte/Kleinverbraucher festgelegt.

Bezeichnet man mit E_0 die Emissionen ohne Berücksichtigung eines Ganges, so gilt

$$E(\text{hh,dd,mm}) = E_0 * G_T(\text{hh}) * G_W(\text{dd}) * G_J(\text{mm})$$

Die von der Tageszeit (hh), dem jeweiligen Tag (dd) und vom Monat (mm) abhängige SO_2 -Emission ist also gleich der Emission ohne Berücksichtigung eines Ganges, multipliziert mit den Gangfaktoren für den Tagesgang (G_T), den Wochengang (G_W) und den Jahresgang (G_J), wobei die Gangfaktoren einen von den jeweiligen Sektoren abhängigen Zeitverlauf aufweisen.

Die in Abbildung 3.6 dargestellten Verläufe zeigen für die betrachteten Sektoren ausgeprägte Strukturen in den Tages- und Jahresgängen. Im Sektor Haushalte/Kleinverbraucher ist der Jahresgang abhängig von der Außentemperatur, in den hier dargestellten pauschalen Werten von der Summe der Gradtagszahlen GTZ ($\text{GTZ} = 17^\circ \text{ Celsius} - \text{Klimamitteltemperatur des jeweiligen Tages}$) der einzelnen Tage des jeweiligen Monats des Jahres 1982. Für den Sektor Kraftwerke/Industrie ist die Abhängigkeit von der Temperatur wesentlich schwächer ausgeprägt; hier kann man näherungsweise davon ausgehen, daß 80% der Emissionen unabhängig von der Temperatur erfolgen und die restlichen 20% wie die Emissionen aus dem Bereich Haushalte/Kleinverbraucher von der Gradtagszahl abhängig sind.

Für die Rechnungen zum Smogfrühwarnsystem wurde zunächst von dem in Abbildung 3.6 dargestellten pauschalen Jahres-, Wochen- und Tagesgang der Emissionen ausgegangen. Diese pauschalen Annahmen lassen weitgehend unberücksichtigt, daß hohe Konzentrationswerte vor allem bei extrem tiefen Temperaturen und damit verbundenen erhöhten Emissionen auftreten. Deshalb wurde, zunächst

nur bei nachträglichen Rechnungen und Auswertungen, nicht jedoch bei der Prognose von Konzentrationswerten, ein sich an den tatsächlich gemessenen Temperaturwerten orientierender Gangfaktor berücksichtigt. Hierzu wurde aus den in den Berliner Wetterkarten /45/ enthaltenen Werten der Klimamitteltemperatur für Berlin - Dahlem die Gradtagszahl bestimmt und hieraus der Gangfaktor nach folgender Formel berechnet:

$$G_{J,KI} = 0,8 + (0,2 * 365) / 3000 * GTZ$$

$$= 0,8 + 0,0243 * GTZ$$

$$G_{J,HuK} = 365 / 3000 * GTZ$$

$$= 0,122 * GTZ$$

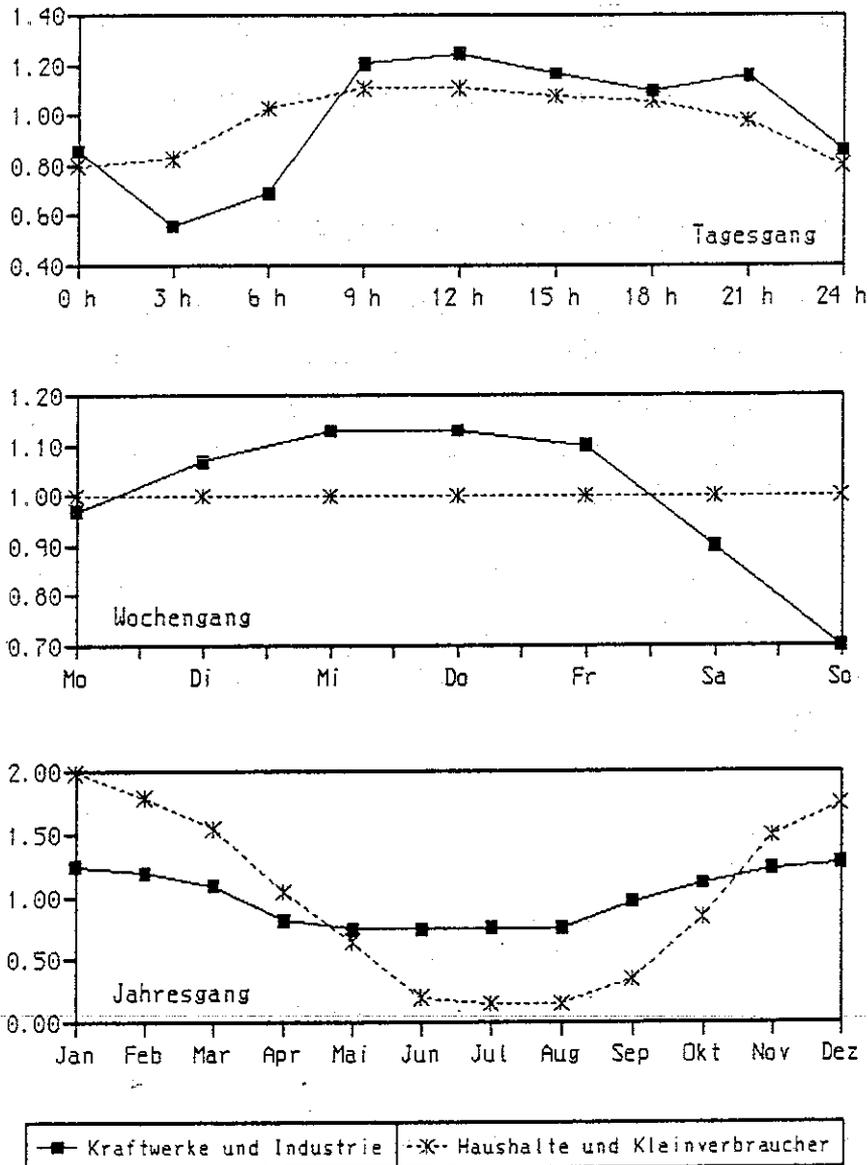
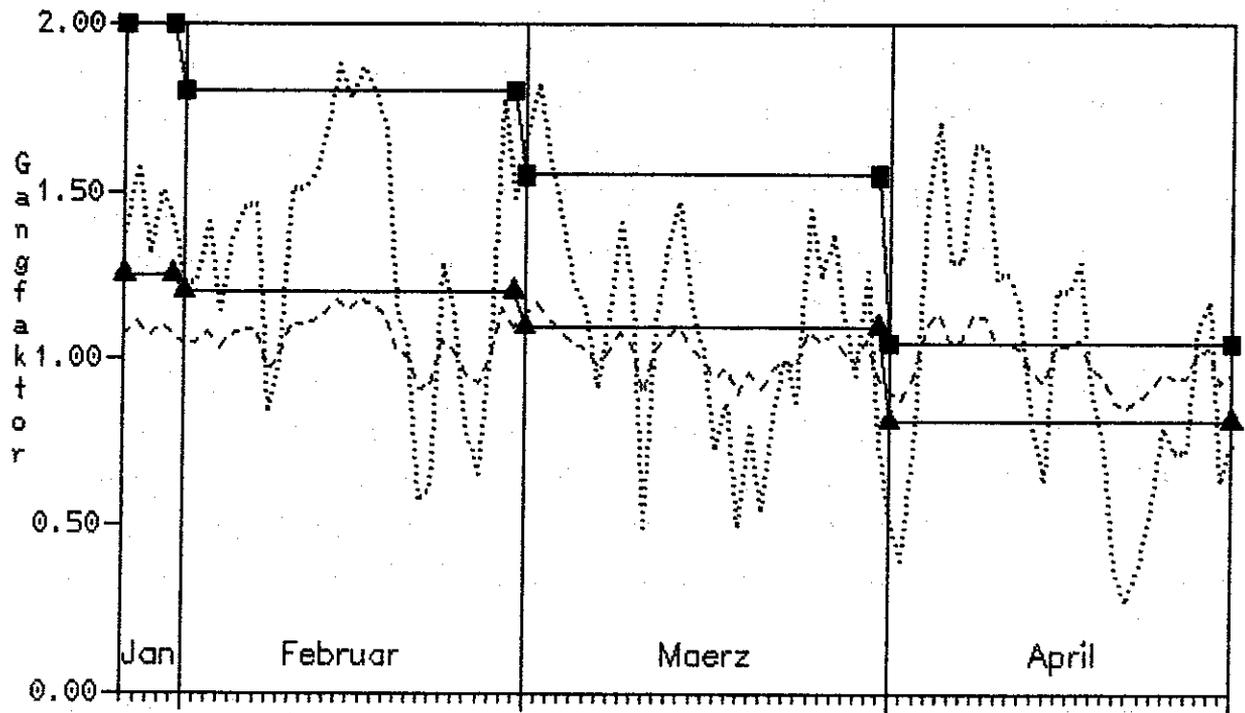


Abb. 3.6: Pauschaler Tages-, Wochen- und Jahresgang der Emissionen in den Sektoren Kraftwerke/Industrie und Haushalte/Kleinverbraucher

Die Zahlenwerte resultieren aus der Annahme, daß für den Bereich Kraftwerke und Industrie 80% der Emissionen unabhängig von der Temperatur sind, für den Bereich Haushalte und Kleinverbraucher hingegen die Emissionen nur von der Temperatur abhängen. Ferner wurde - aus Gründen der Normierung - berücksichtigt, daß für das Jahr 1982, das Bezugsjahr der Emissionsdatenbasis, die Summe der Gradtagszahlen 3000 betrug. Abbildung 3.7 zeigt für den 26.1.-30.4.90 die nach den angegebenen Beziehungen errechneten Gangfaktoren (Jahresgang) im Vergleich zu den mittleren Werten.

Ein großer Nachteil des soeben beschriebenen Verfahrens besteht darin, daß Prognoserechnungen unter Berücksichtigung eines von der tatsächlichen Temperatur abhängigen Zeitverlaufs der Emissionen nicht möglich sind, da die Gradtagszahl aus der Klimamitteltemperatur für Berlin erst im nachhinein bestimmt werden kann. Aus diesem Grund wurde eine weitere Modellmodifikation vorgenommen:

Aus den meteorologischen Eingabedaten (BKN-Daten) wird für jeden Gitterpunkt und für jeden Termin die für das 950hPa-Niveau prognostizierte Temperatur eingelesen. Anschließend wird für jeden Gitterpunkt der Tagesmittelwert der Temperatur gebildet und daraus, wie zuvor aus der Klimamitteltemperatur für Berlin, der Gangfaktor bestimmt. Mit der Bestimmung des Gangfaktors aus den Temperaturwerten, die in den BKN-Daten enthalten sind, ist nun auch die Berücksichtigung von regional unterschiedlichen Faktoren, entsprechend der Auflösung der BKN-Daten, verbunden. Dieser von der regionalen Verteilung der Temperatur abhängige Gangfaktor wird seit Februar 1991 in den Rechnungen für das Smogfrühwarnsystem berücksichtigt.



pauschal: ▲ Kraftwerke/Industrie ■ Haushalte/Kleinverbraucher
temperaturabh.: --- Kraftwerke/Industrie Haushalte/Kleinverbraucher

Abb. 3.7: Zeitliches Verhalten der Emissionen (Gangfaktor für den Jahresgang) für unterschiedliche Emissionssektoren für den Zeitraum Februar bis April 1990. Gegenübergestellt sind der pauschale und der von der Klimamitteltemperatur abhängige Gangfaktor.

4. Vergleich von Rechenergebnissen mit Meßwerten und Sensitivitätsstudien mit SMOVO

Die errechnete Konzentrationsverteilung von SO₂ wird sowohl von den Eingabedaten - meteorologische Größen sowie räumliche und zeitliche Verteilung der Emissionswerte - als auch von der Größe der im letzten Abschnitt erwähnten Parameterwerte für die chemische Umwandlung, die trockene und die nasse Deposition beeinflusst. Bevor ausführlich auf die mit dem Modell SMOVO erzielten Ergebnisse eingegangen wird, soll daher in diesem Kapitel der Einfluß dieser Parameterwerte sowie der Einfluß unterschiedlicher Emissionsverteilungen auf die errechneten Konzentrationswerte aufgezeigt werden. Neben diesen Sensitivitätsuntersuchungen ist dabei auch stets ein Vergleich mit den entsprechenden Meßwerten erforderlich, um Aussagen über die Qualität der Ergebnisse zu erhalten und um beurteilen zu können, wie sich die Ergebnisse bei unterschiedlichen Parameterwerten im Vergleich zu den Meßwerten verändern. Daher wird zunächst auf die Darstellung von Rechenergebnissen und die Auswahl und Aufbereitung von Meßwerten eingegangen und ein Verfahren vorgestellt, das es ermöglicht, die regionale Verteilung von Rechen- und Meßwerten für ein ausgedehntes Gebiet quantitativ miteinander zu vergleichen.

4.1 Darstellung von Rechenergebnissen

Mit dem Modell SMOVO werden Konzentrationswerte von SO₂ für die Bundesrepublik Deutschland (alte und neue Bundesländer) errechnet. Dabei stellen die Werte einzelner Termine Mittelwerte über jeweils 3 Stunden und Mittelwerte über Rasterfelder der Ausdehnung 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad dar. Dabei gilt, daß der Wert für den 3 UTC - Termin den Mittelwert über den Zeitraum 3.00 UTC bis 5.30 UTC, der Wert für den 6 UTC - Termin den Mittelwert über den Zeitraum 6.00 UTC bis 8.30 UTC, usf., darstellt. Abbildung 4.1 zeigt die Einteilung der Bundesrepublik in die erwähnten Rasterfelder. Um bei der Interpretation der Ergebnisse und dem Vergleich mit Meßwerten eine Zuordnung der Werte zu einzelnen Rasterfeldern zu ermöglichen, wurden diese, getrennt nach den alten und den neuen Bundesländern, fortlaufend numeriert. Die regionale Verteilung der Konzentrationswerte zu einem bestimmten Termin kann nun mit Hilfe von Rasterkarten grafisch dargestellt werden. Ebenso ist eine Darstellung des zeitlichen Verlaufs der Werte in ausgewählten Rasterfeldern möglich.

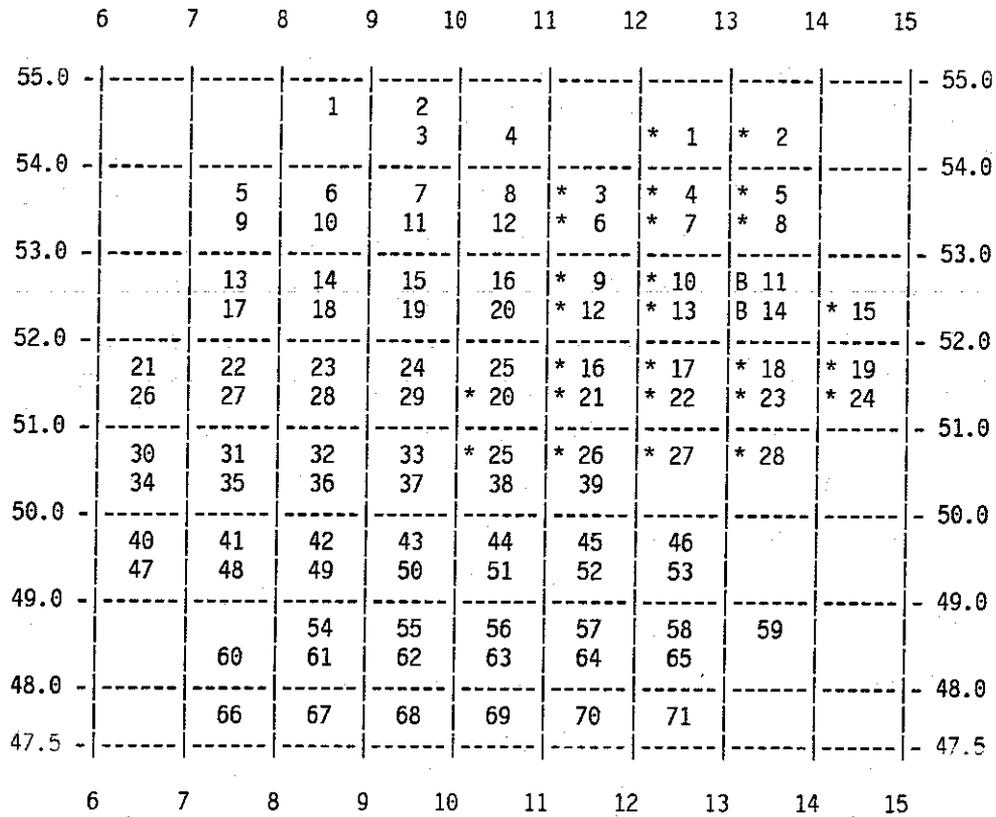


Abb. 4.1: Numerierung der Rasterfelder in der Bundesrepublik Deutschland - alte und neue (*) Bundesländer

4.2 Bereitstellung und Aufbereitung von Meßwerten

Meßwerte werden im Rahmen des Smogfrühwarnsystems von den Meßnetzzentralen der alten Bundesländer dem Umweltbundesamt über einen Rechnerverbund zur Verfügung gestellt und zusammen mit den Meßwerten aus dem Meßnetz des Umweltbundesamtes aufbereitet und grafisch dargestellt. Abbildung 4.2a zeigt für die alten Bundesländer die Lage der Meßstationen des Bundes und der Länder, Abbildung 4.2b das Meßnetz des Umweltbundesamtes für die gesamte Bundesrepublik Deutschland.

In den neuen Bundesländern liegen seit September 1990 für die Stationen Schwerin, Schleiz und Wiesenburg Meßwerte vor, die übrigen 13 Stationen wurden im Laufe des Jahres 1991 in Betrieb genommen. Das Immissionsmeßnetz weist eine unregelmäßige räumliche Verteilung mit einer meist hohen Meßstellendichte in den städtischen Ballungsräumen und weiten Abständen der Stationen in ländlichen Gebieten auf. Die SO₂ - Konzentrationen in den alten Bundesländern werden an ca. 370 Meßstationen regelmäßig erfaßt.

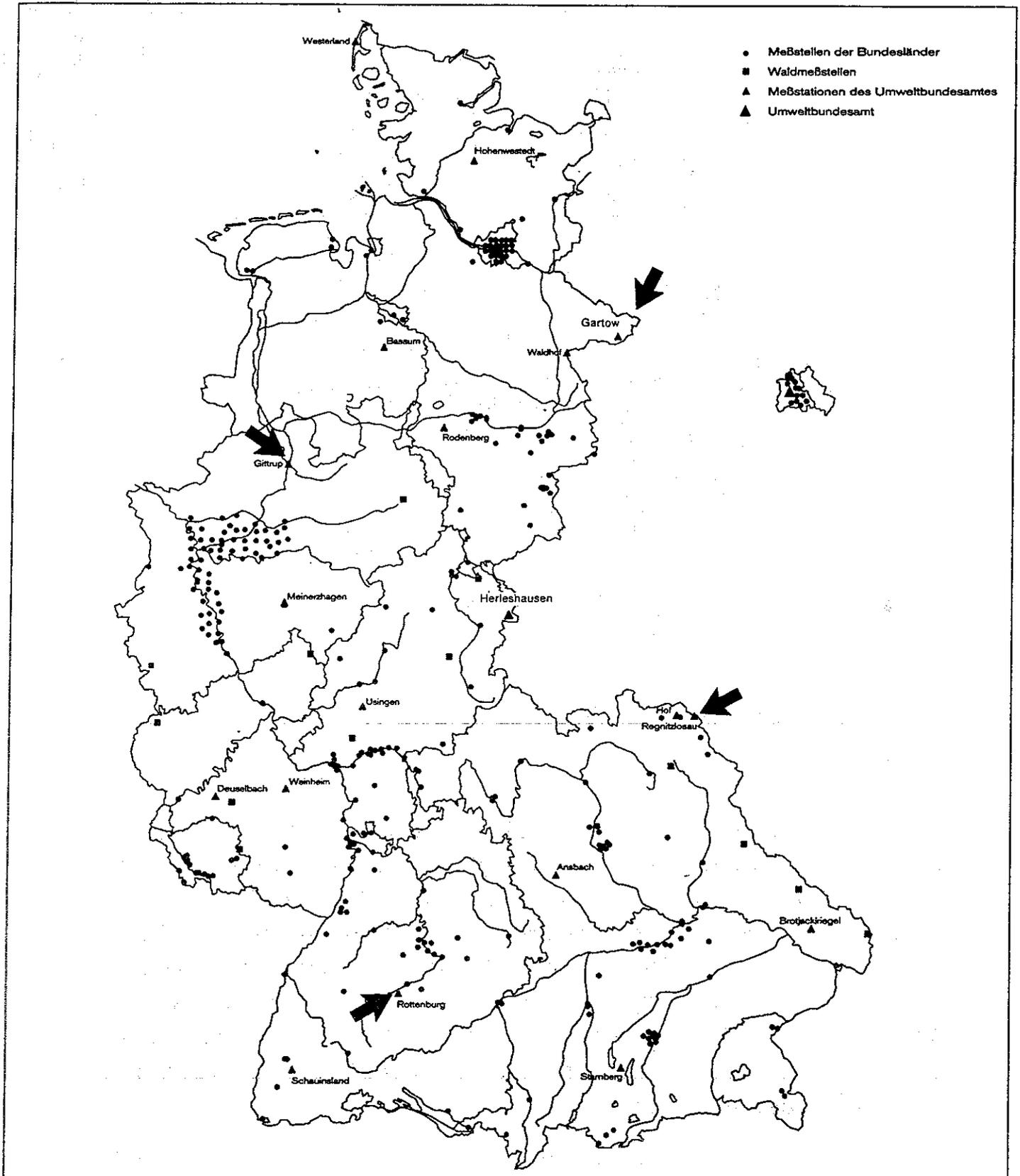


Abb. 4.2a: Lage der Meßstationen des Bundes und der Länder für die Bundesrepublik Deutschland - alte Bundesländer (nach /46/)

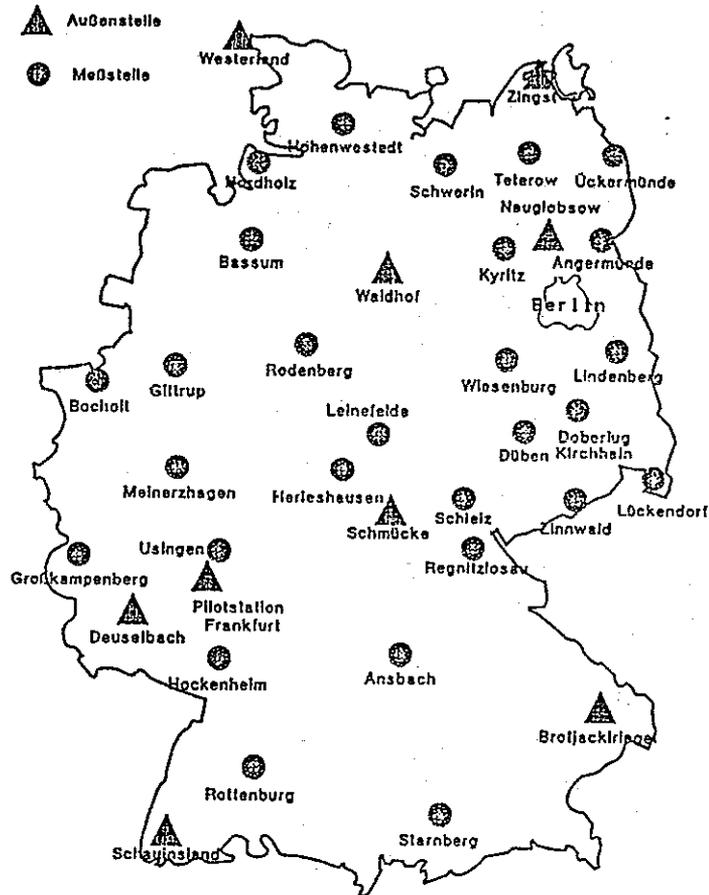


Abb. 4.2b: Meßnetz des Umweltbundesamtes (nach /47/)

Die Übertragung der Daten aus den alten Bundesländern zum Umweltbundesamt erfolgt im Normalbetrieb einmal arbeitstäglich für den vorausgegangenen Arbeitstag bzw. die vorausgegangenen Wochenenden oder Feiertage. Bei drohendem Smog und entsprechender Dienstbereitschaft in der Meßnetzzentrale werden die Daten bis zu achtmal täglich im Dreistunden-Rhythmus übermittelt. Die übermittelten Werte sind $\frac{1}{2}$ - Stunden - Werte ausgewählter Meßstationen bzw. Gruppen von Meßstationen. Eine automatische, routinemäßige Übertragung der Daten aus den neuen Bundesländern zum Umweltbundesamt kann aus technischen Gründen derzeit noch nicht durchgeführt werden.

Vom UBA werden aus den Einzelwerten interpolierte Werte für Rasterfelder der Größe von ca. 25 km * 25 km gebildet und in Rasterkarten grafisch dargestellt. Dazu werden für die Zeiten 2.30 Uhr bis 3 Uhr, 5.30 Uhr bis 6 Uhr, usf., die Halbstunden-Werte der Meßstationen herangezogen und daraus ein interpolierter Wert für das jeweilige Rasterfeld unter Berücksichtigung aller bis zu einer be-

stimmten Entfernung in der Umgebung dieses Rasters liegenden Stationen gebildet. Die Wichtung der einzelnen Stationen erfolgt umgekehrt proportional zu ihrer Entfernung vom jeweiligen Rasterfeld. Die Rasterkarten können über den Rechnerverbund von den Meßnetzcentralen der alten Bundesländer abgerufen werden.

Die vom UBA für die einzelnen Rasterfelder aus den Meßwerten ermittelten Konzentrationswerte stellen, im Gegensatz zu den mit dem Modell errechneten Werten, keinen Mittelwert über das jeweilige Rasterfeld dar. Darüberhinaus bleiben für jedes 3 - Stunden - Intervall von i.a. 6 vorliegenden Werten 5 unberücksichtigt. Für den Vergleich von Messung und Rechnung wird daher nicht von diesen Rasterkarten ausgegangen - die Größe der Rasterfelder ist auch unterschiedlich, und es wäre daher zum Vergleich mit den errechneten Werten eine weitere Interpolation erforderlich - sondern es wird folgendermaßen verfahren:

Vom UBA werden in der Regel einmal monatlich die Originaldaten aus dem Smogfrühwarnsystem - $\frac{1}{2}$ - Stundenwerte der SO_2 - Konzentration - zur Verfügung gestellt. Aus diesen Daten wird über alle in einem Rasterfeld der Größe 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad liegenden Stationen, für die Meßwerte vorliegen, der 3-Stunden - Mittelwert gebildet. Damit liegt im Idealfall, wenn alle eingerichteten Stationen Meßwerte lieferten, für nahezu alle Rasterfelder der alten Bundesländer ein den Rechnungen entsprechender Mittelwert vor.

Abbildung 4.3 zeigt für den 18 Uhr Termin des 1.12.1989 eine Gegenüberstellung der nach den beiden Verfahren erstellten Rasterkarten. Deutlich zu erkennen sind in beiden Abbildungen die Gebiete erhöhter Konzentrationswerte in Ostthessen sowie im Nordosten Bayerns. Wegen der feineren Rasterung und der durchgeführten Interpolation liegen die Werte in den Rasterkarten des UBA dichter und sind gleichmäßiger verteilt. Rasterfelder, in denen keine Meßwerte vorliegen, werden bis zu einer bestimmten Entfernung durch die Interpolation mit Werten beaufschlagt, während die untere Abbildung deutlich die Gebiete fehlender Meßwerte aufzeigt.

Der Vergleich von Meß- und Rechenwerten wird, wie soeben beschrieben, anhand von Mittelwerten einzelner Rasterfelder durchgeführt. Dieser setzt sich je nach Rasterfeld aus bis zu 10 gemessenen Einzelwerten zusammen, die zeitweise stark voneinander abweichen können. Der Mittelwert ist also kein für das jeweilige Rasterfeld repräsentativer Wert, sondern ist abhängig von der Lage und der Anzahl der Stationen, für die Meßwerte vorliegen. In Abbildung 4.4 ist dieser Sachverhalt

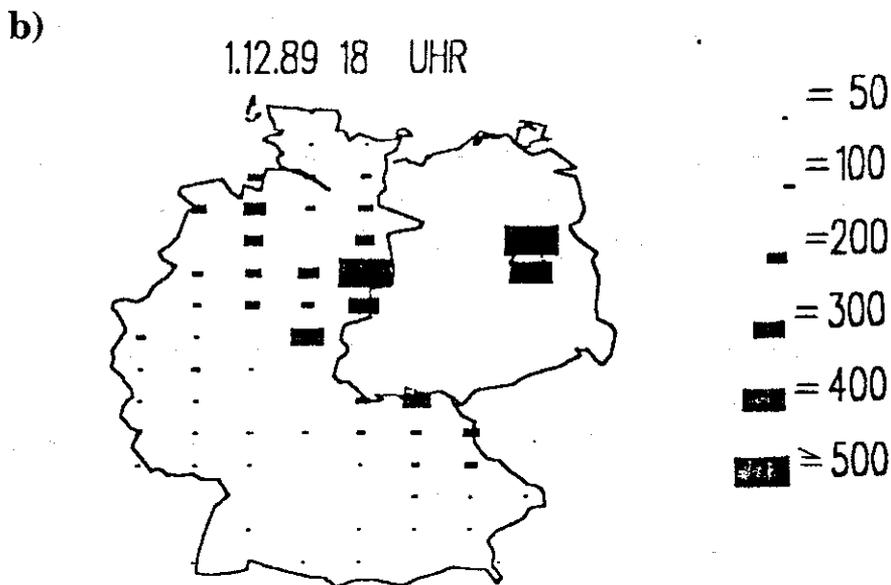
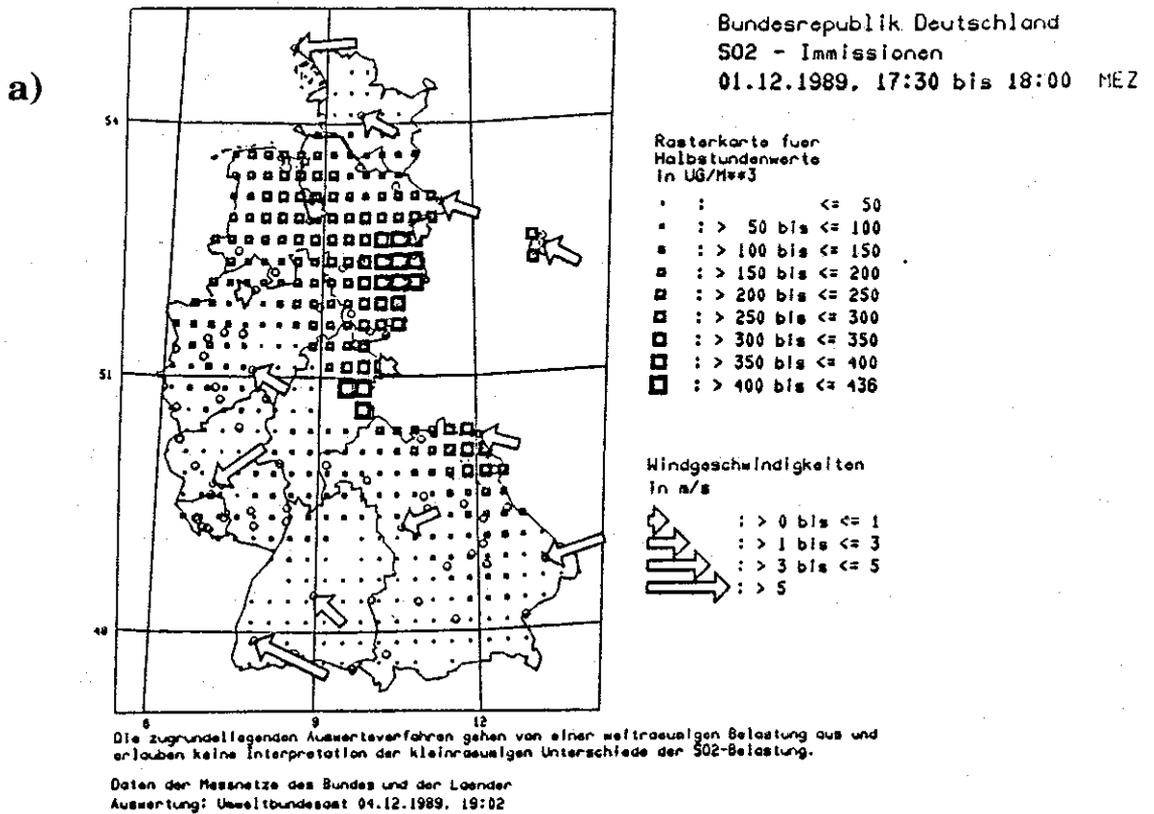


Abb. 4.3: Rasterkarten der Konzentrationswerte von SO₂ (in $\mu\text{g}/\text{m}^3$) fuer den 1.12.1989, 18h

- a) Rasterkarte des UBA, erstellt aus Meßwerten des Smogfrühwarnsystems mittels Interpolation
- b) Rasterkarte fuer den Vergleich von Meß- und Rechenwerten, erstellt aus Meßwerten des Smogfrühwarnsystems durch Mittelbildung ueber alle in einem Rasterfeld liegenden Stationen.

für das Rasterfeld, in dem die Reinluftstation Gartow liegt (Rasterfeld 12 nach Abb. 4.1), für den Februar 1991 dargestellt.

Der Mittelwert in diesem Rasterfeld setzt sich - wenn für alle Stationen Meßwerte vorliegen - zusammen aus den Werten für die Stationen Hamburg-Kirchdorf, Hamburg-Neuland, Hamburg-Tatenberg, Geesthacht, Hamburg-Südost, Lüneburg und Gartow. Im Februar 1991 lagen Meßwerte jedoch nur für Hamburg-Südost, Geesthacht und Gartow vor. Große Unterschiede zwischen einzelnen Stationen (Geesthacht und Gartow in Abbildung 4.4) treten insbesondere am 19. und 20. sowie am 22. Februar auf.

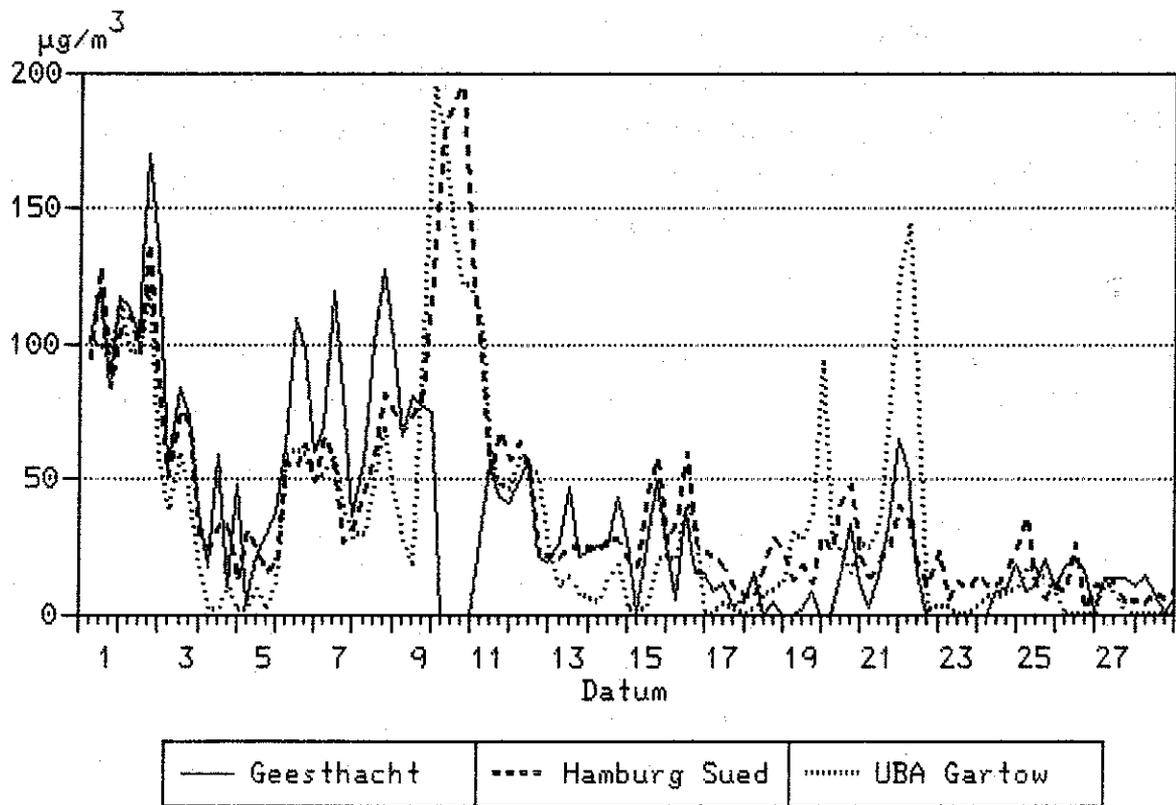


Abb. 4.4: Zeitverlauf der Konzentrationswerte im Rasterfeld Gartow (Rasterfeld 12 nach Abb. 4.1) für unterschiedliche Stationen, Februar 1991

4.3 Quantifizierung der Übereinstimmung von Rasterkarten

Im Zusammenhang mit der Berechnung von Konzentration und Deposition von Luftschadstoffen tritt sowohl für den, der Modelle entwickelt und die Variation von Modellparametern untersucht, als auch für den Benutzer von Modellen die Notwendigkeit auf, Struktur und Qualität der Übereinstimmung von Rechnung und Messung kennzeichnen zu können. Dies kann durch den direkten Vergleich der graphischen Darstellungen von Messung und Rechnung geschehen, wie dies mit Hilfe der in diesem Bericht dargestellten Rasterkarten möglich ist. Weil diesen intuitiv bewertenden Vergleichen eine gewisse subjektive Willkür anhaftet und weil sie im Falle einer Vielzahl von Konzentrationsmustern nur recht mühsam und zeitraubend durchzuführen sind, wurde in dieser Studie versucht, den Vergleich von Rechen- und Meßergebnissen mit Hilfe statistischer Verfahren objektiv zu quantifizieren. Bekannte statistische Methoden, die in /48/ beschrieben und einer kritischen Würdigung unterzogen wurden, sind nicht geeignet, die relative Position eines Gebietes hoher gemessener zu einem Gebiet hoher gerechneter Konzentrationswerte angemessen zu bewerten.

Die im folgenden beschriebene neuentwickelte Methode berechnet daher den 'Fehler' der Rechnung (als Maß für den Grad der Übereinstimmung von Messung und Rechnung) auf folgende Weise:

1. Zunächst wird eine Korrespondenz zwischen einzelnen Rechen- und Meßra-sterfeldern hergestellt. Leitendes Prinzip ist dabei eine Reihung der Größe nach: Einander zugeordnet werden in einem ersten Schritt jene Rasterfelder, die den gleichen Rang in dieser Reihenfolge der Meß- bzw. Rechenra-sterfelder innehaben. In einem zweiten Schritt wird für jedes Meßra-sterfeld untersucht, ob (in dieser Reihe) in der Umgebung des zugeordneten Rechenra-sterfeldes ein Rasterfeld zu finden ist, das einen ähnlich hohen Konzentrationswert aufweist und im Raster näher an der Position des betrachteten Meßra-sterfeldes liegt. Ist dies der Fall, so wird dieses Rechenra-sterfeld dem Meßra-sterfeld zugeordnet, sofern gewisse Plausibilitätsbedingungen erfüllt sind. Dieses Ver-fahren wird iterativ für alle Meßra-sterfelder zweimal durchgeführt.
2. Eingedenk der Tatsache, daß völlige Übereinstimmung von Messung und Rechnung bedeuten würde, daß die unter Punkt 1 bestimmten Distanzen alle Null und Meß- und Rechenwerte in korrespondierenden Rasterfeldern iden-tisch wären, wird der Fehler F , als Maß für die Abweichung von Rechnung und Messung, angesetzt als Summe zweier Terme: Der erste beschreibt die re-lative Abweichung von Meß- und Rechenwerten korrespondierender Raster-

felder, der zweite die Distanzen zwischen korrespondierenden Rasterfeldern. Dementsprechend sieht die Fehlerformel wie folgt aus:

$$F = F1 + F2 = \frac{\overline{|M-R|}}{\overline{M}} + \frac{\overline{D}}{D_H}$$

wobei die Variablen M , R und D Meßwerte, Rechenwerte und Distanzen zwischen korrespondierenden Rasterfeldern und D_H die halbe maximale in den alten Bundesländern mögliche Entfernung zwischen Rasterfeldern bezeichnen. Die Querstriche symbolisieren einen verallgemeinerten Mittelwert, \overline{M} z. B. bedeutet:

$$\overline{M} = \frac{\sum_{i=1}^N M_i \cdot g_i}{\sum_{i=1}^N g_i}$$

mit Gewichtungsfaktoren

$$g_i = \left(\frac{M_i}{M_{max}} \right)^2$$

wobei M_i der Meßwert des i -ten Rasterfeldes, M_{max} der maximale Meßwert im Raster und N die Anzahl der Rasterfelder ist. Diese Wichtung bewirkt, daß bei der Mittelwertbildung Rasterfeldern mit relativ hohen Meßwerten ein größeres Gewicht verliehen wird als Rasterfeldern mit relativ niedrigen Meßwerten. Dies ist deshalb sinnvoll, weil Perioden erhöhter Konzentration beschrieben werden sollen.

Die Übereinstimmung von Meß- und Rechenraster kann dabei wie folgt charakterisiert werden: Werte von $F1$ bzw. $F2$ größer als 0,4 entsprechen einer schlechten Übereinstimmung, Werte zwischen 0,4 und 0,3 einer zufriedenstellenden und Werte kleiner als 0,3 einer guten Übereinstimmung.

Die Abbildungen 4.5a bzw. 4.6a stellen Rasterkarten der alten Bundesländer dar, in denen die unter Punkt 1 beschriebene Zuordnung der Meßwerte (obere Zahl) zu den Rechenwerten (untere Zahl) angezeigt wird. Die Zahlen geben jeweils für Meß- bzw. Rechenwerte die Platzierung in einer Reihung der Größe nach an (1 bezeichnet den größten Wert). Die Abbildungen 4.5b bzw. 4.6b zeigen die zugehörigen Rasterkarten und geben die nach der Fehlerformel berechneten Fehlerwerte

F1 und F2 an. Am 25.11.89 um 12 Uhr ist die Übereinstimmung sowohl bei den Absolutwerten als auch bei der regionalen Verteilung relativ gut; die Fehlerwerte F1 und F2 sind dementsprechend klein. Am 6.11.89 um 0 Uhr stimmen zwar die Absolutwerte gut überein ($F1 = 0,24$), die Gebiete erhöhter Konzentrationswerte liegen aber weit auseinander, F2 hat den relativ hohen Wert von 0,6.

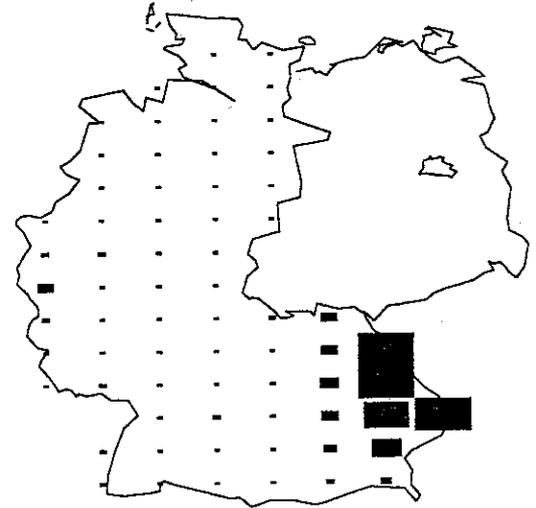
Zusammenfassend kann die neue Formel wie folgt charakterisiert werden:

- Sie setzt Meß- und Rechenwerte auch benachbarter Rasterfelder miteinander in Beziehung, deshalb ist sie auch geeignet, die relative Position eines Gebietes hoher gemessener zu einem Gebiet hoher gerechneter Konzentrationswerte zu bewerten.
- Sie ist gut interpretierbar. Neben dem Wert des Fehlers F werden immer auch die Werte der beiden Summanden F1 und F2 angegeben, um die Übereinstimmung in der Höhe der gemessenen und errechneten Immissionen und der Lage der Konzentrationspeaks getrennt beurteilen zu können.
- Die Methode hat sich in folgender Hinsicht bewährt: In Anwendungen auf konkrete Konzentrationsmuster entsprechen die Werte F1 und F2 i. a. jenem Eindruck, den man durch intuitives Vergleichen der zugehörigen Rasterkarten gewinnt. Die neue Methode stellt somit eine Objektivierung des qualitativen visuellen Vergleiches dar.

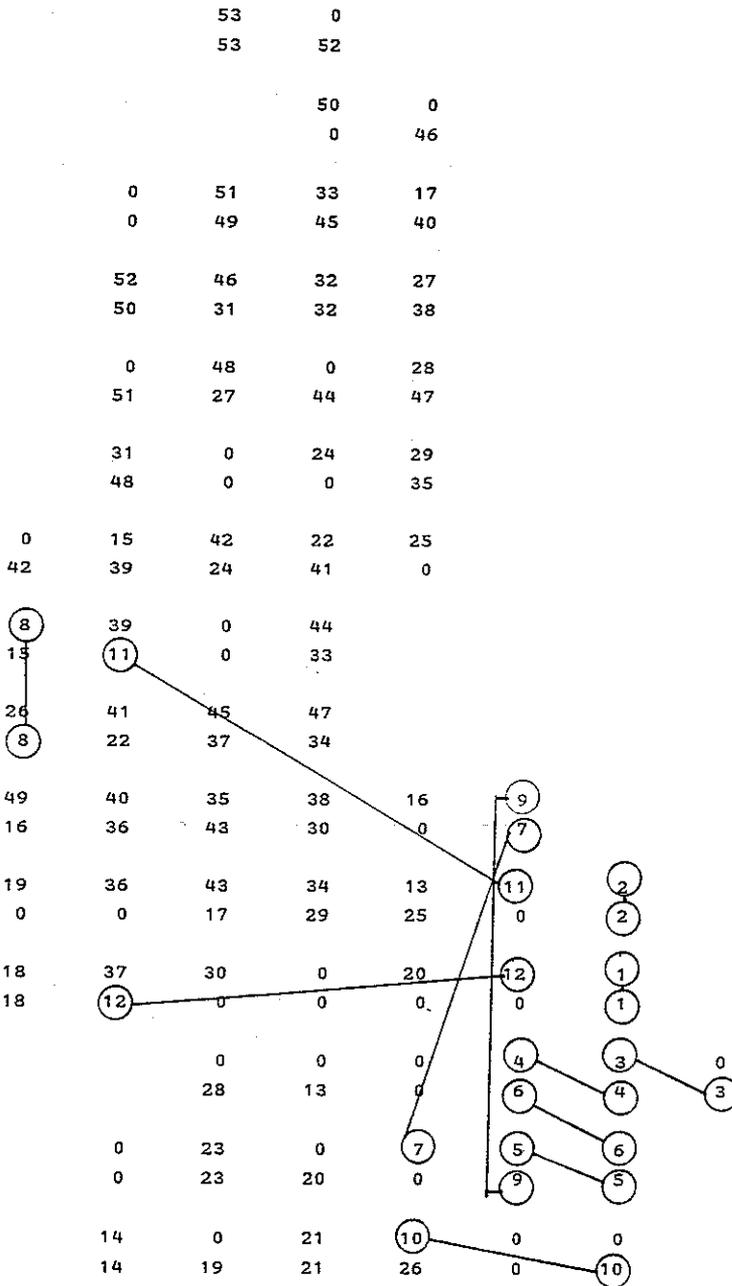
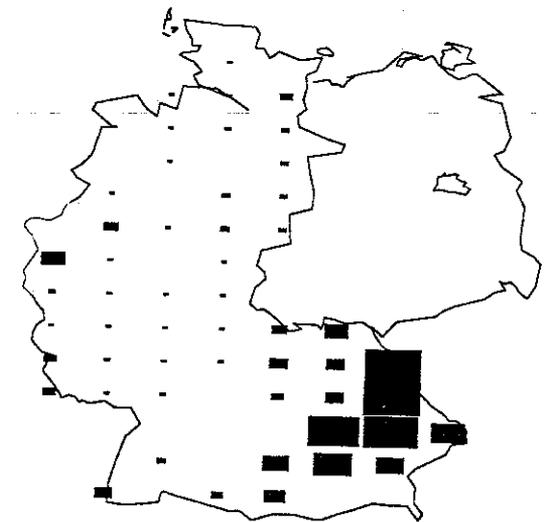
a)

b)

Rechnung (25.11.89-12 Uhr)



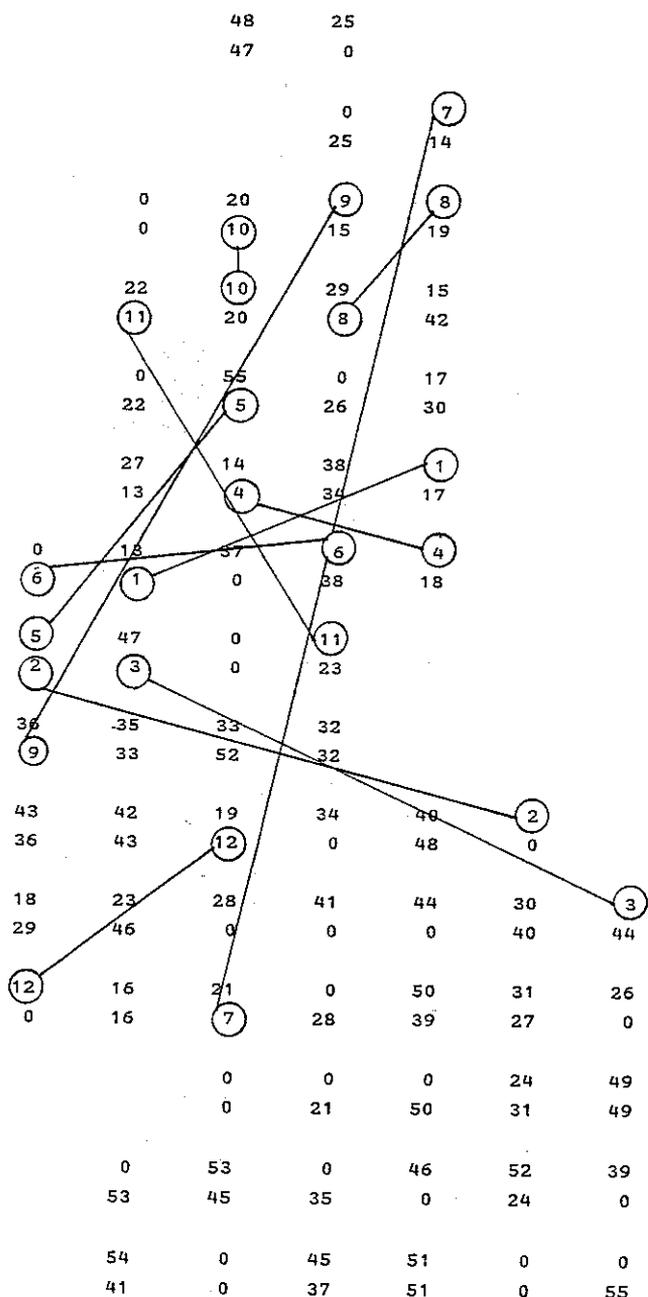
Messung (25.11.89-12 Uhr)



$F = 0.37, F1 = 0.20, F2 = 0.17$

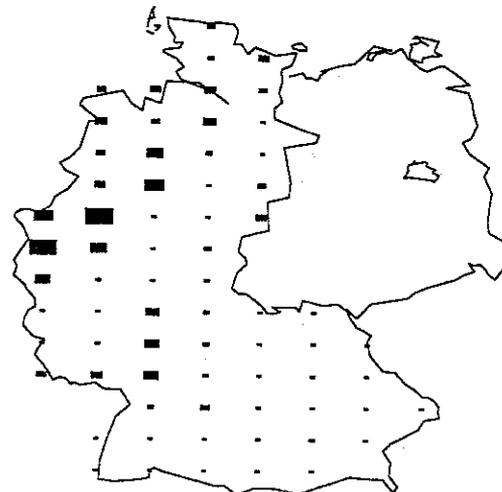
Abb. 4.5: Vergleich von Messung und Rechnung für den 25.11.1989 um 12 Uhr
 a) Zuordnung der Meßwerte (obere Zahl) zu den Rechenwerten (untere Zahl); markiert sind die 12 größten Werte. Die Zahlen geben jeweils für Meß- bzw. Rechenwerte die Platzierung in einer Reihung der Größe nach an.
 b) zugehörige Rasterkarten von Rechnung (oben) und Messung (unten)

a)

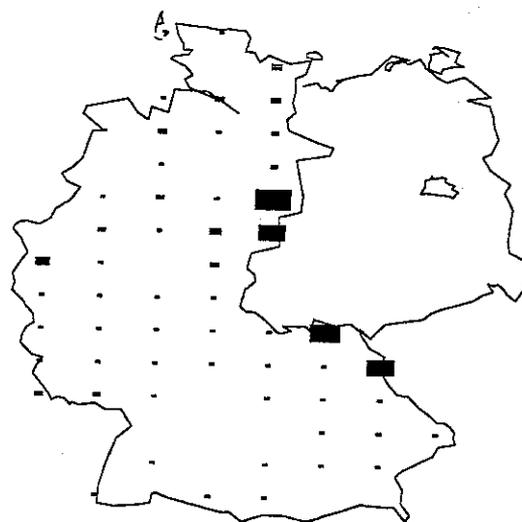


b)

Rechnung (6.11.89 - 0 Uhr)



Messung (6.11.89 - 0 Uhr)



$F = 0.82, F1 = 0.24, F2 = 0.58$

Abb. 4.6: Vergleich von Messung und Rechnung für den 6.11.1989 um 0 Uhr
 a) Zuordnung der Meßwerte (obere Zahl) zu den Rechenwerten (untere Zahl); markiert sind die 12 größten Werte. Die Zahlen geben jeweils für Meß- bzw. Rechenwerte die Plazierung in einer Reihung der Größe nach an.
 b) zugehörige Rasterkarten von Rechnung (oben) und Messung (unten)

4.4 Bedeutung physikalisch-chemischer Prozesse

Die Ausbreitung und Deposition von Schadstoffen werden durch meteorologische Vorgänge und wesentlich auch durch deren chemische Umwandlung auf dem Transportweg beeinflusst. So können erhöhte Schadstoffkonzentrationen unter Umständen die chemische Umwandlung von Schadstoffen in der Flüssig- und Gasphase beeinflussen; bei Nebel kann in verstärktem Ausmaß die besonders wirksame Flüssigphasen-Umwandlung stattfinden und die Deposition von Schadstoffen erhöht werden; Schneebedeckung reduziert die trockene Deposition von SO_2 , und Niederschlag führt zu einem Ausregnen und Auswaschen von Schadstoffen aus der Atmosphäre. Um diese Vorgänge in einem Ausbreitungsmodell berücksichtigen zu können, werden sie durch einfache Parametrisierungen beschrieben. Diese Parametrisierungen, i. a. Funktionen chemischer, physikalischer und meteorologischer Parameter, sind nicht generell gültig. Dies hängt damit zusammen, daß sie nicht aus fundamentalen naturwissenschaftlichen Prinzipien abgeleitet, sondern im wesentlichen phänomenologisch bestimmt werden. Sie gelten deshalb nur für den Anwendungsbereich, für den sie entwickelt und verifiziert wurden. Wendet man Parametrisierungen in Untersuchungen an, die außerhalb dieser Bereiche liegen, so muß erneut die Frage nach ihrer Gültigkeit gestellt werden. Insbesondere ist es nützlich zu überprüfen, ob nicht durch eine geeignetere Wahl der Parameterwerte empirische Ergebnisse besser beschrieben werden können.

4.4.1 Trockene Depositionsprozesse

Schadstoffe werden aus der Atmosphäre u. a. durch die Ablagerung am Boden entfernt. Die Menge des abgelagerten Schadstoffs hängt sowohl von dessen Konzentration am Erdboden als auch von der Beschaffenheit der Erdoberfläche ab. Die trocken abgelagerte Schadstoffmenge kann über die sogenannte Depositionsgeschwindigkeit, deren Wert von den physikalisch-chemischen Prozessen der Wechselwirkung zwischen Schadstoff und Erdbodenoberfläche abhängt, bestimmt werden. Ein Überblick über die Bandbreite der in der Literatur verwendeten Depositionsgeschwindigkeiten ist in /35/ gegeben. Im Modell SMOVO wird bei schneefreier Oberfläche mit einer Depositionsgeschwindigkeit von 0,8 cm/s, bei schneebedeckter mit 0,1 cm/s gerechnet. Bei einer Mischungsschichthöhe von 1000 m führt dies zu einer Ablagerungsrate von ca. 3% pro Stunde bzw. 0,36% pro Stunde.

Um den Einfluß der Höhe der Depositionsgeschwindigkeit auf die errechneten Konzentrationswerte abschätzen zu können, wurden Vergleichsrechnungen mit SMOVO für den 4. und 5. Februar 1991 durchgeführt. In dieser Zeit wird die *regionale Verteilung* der Meßwerte von den Rechnungen relativ gut wiedergegeben (s. Abschn. 4.7 und Abschn. 6.3.5), während die *Absolutwerte* voneinander abweichen. Dies kann u.a. durch die Wahl der Depositionsgeschwindigkeit beeinflusst werden. Es wurden folgende drei Fälle untersucht:

1. Die Depositionsgeschwindigkeit beträgt für das gesamte Gebiet und den gesamten betrachteten Zeitraum einschließlich der 5 Vorlauftage 0,1 cm/s.
2. Die Depositionsgeschwindigkeit beträgt für das gesamte Gebiet und den gesamten betrachteten Zeitraum einschließlich der 5 Vorlauftage 0,8 cm/s.
3. Die Depositionsgeschwindigkeit wird, entsprechend den Angaben über die Schneebedeckung in den BKN-Daten, regional und zeitlich differenziert.

In Abbildung 4.7 ist für das Rasterfeld mit der Reinluftstation Regnitzlosau (Rasterfeld 39 nach Abb. 4.1) der Zeitverlauf von errechneten und gemessenen Konzentrationswerten dargestellt.

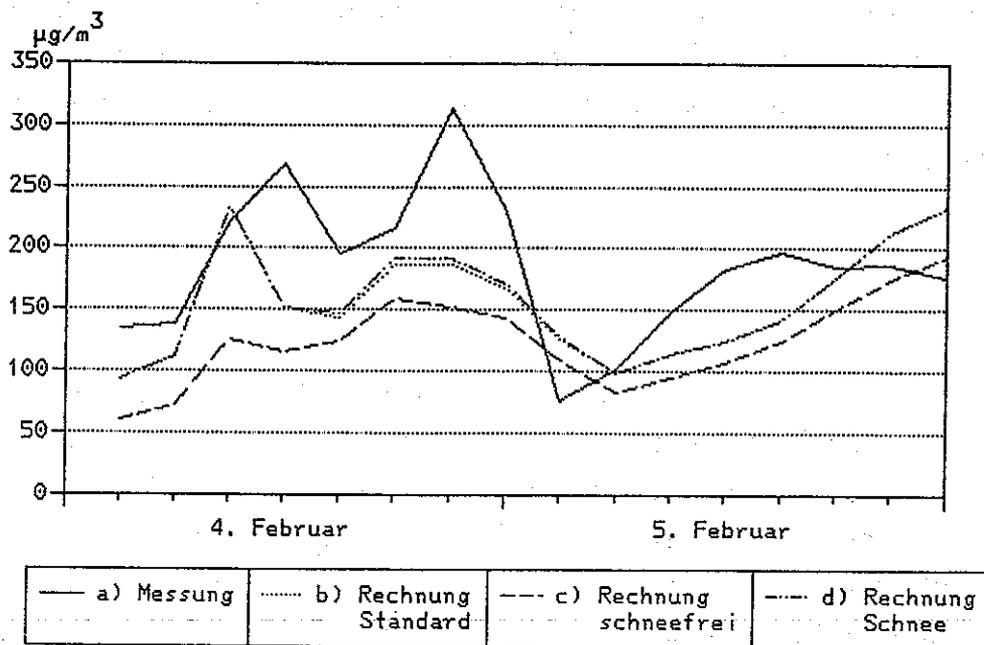


Abb. 4.7: Errechnete und gemessene Konzentrationswerte im Rasterfeld Regnitzlosau (Rasterfeld 39 nach Abb. 4.1) für den 4.2./5.2. 1991 für unterschiedliche Depositionsgeschwindigkeiten

- a) Meßwert
- b) Depositionsgeschwindigkeit regional differenziert (Standard)
- c) $v_d = 0,8$ cm/sec (schneefreie Oberfläche)
- d) $v_d = 0,1$ cm/sec (schneebedeckte Oberfläche)

Zwischen den Ergebnissen für die untersuchten Fälle (1) und (3) treten nur minimale Unterschiede auf, da im betrachteten Zeitraum in nahezu dem gesamten Bezugsgebiet eine geschlossene Schneedecke lag und dies entsprechend den Werten der BKN - Daten berücksichtigt wird. Bei schneebedeckter Oberfläche liegen die errechneten Werte je nach Zeitpunkt um den Faktor 1,2 bis 1,8 über den für eine überall schneefreie Oberfläche berechneten Werten und stimmen besser mit den Meßwerten überein. Ähnliche Ergebnisse erhält man auch für die übrigen Rasterfelder auf dem Gebiet der alten Bundesländer. Ein flächendeckender Vergleich von Messung und Rechnung bei Berücksichtigung unterschiedlicher Depositionsgeschwindigkeiten wird in Abschnitt 4.7 dargestellt.

4.4.2 Chemische Umwandlung

Für die chemische Umwandlung in der Gasphase gilt in SMOVO der in Abschnitt 3.1.3 beschriebene Ansatz. Die zugehörige Geschwindigkeitskonstante wird in Abhängigkeit von der Einstrahlung der Sonne modelliert. Im einzelnen wurde für die Anwendung in SMOVO die tageszeitabhängige Geschwindigkeitskonstante für die geografische Breite 40, 50 und 60 Grad errechnet und derart normiert, daß für die geografische Breite von 50 Grad, gemittelt über das ganze Jahr, ein Wert von 1% pro Stunde resultiert. Abbildung 4.8 zeigt den Tagesgang der Umwandlungsrate für unterschiedliche Termine.

Das Maximum tritt jeweils um 12 Uhr auf und erreicht am 1. Januar ca. 1% pro Stunde, am 1. März 2,5% pro Stunde und am 21. Juni, dem Tag mit dem höchsten Sonnenstand, 3,5% pro Stunde. Da sowohl in der Nacht als auch tagsüber aufgrund des Vorhandenseins anderer Luftbeimengungen eine vom Strahlungsfluß unabhängige Umwandlung erfolgt, wurde zu dem Anteil, der aus der Strahlungsabhängigkeit resultiert, ein Beitrag addiert, der für verschiedene Jahreszeiten unterschiedlich groß angenommen wird.

Wie in Abschnitt 4.4.1 für den Parameter der trockenen Ablagerung wurden auch für die chemische Umwandlung Rechnungen für den 4.2. und 5.2.91 durchgeführt. Dabei wurden folgende Fälle betrachtet:

1. Die Umwandlungsrate ist abhängig von der geografischen Breite sowie von der Tageszeit.
2. Die Umwandlungsrate ist konstant und beträgt 0,5% pro Stunde.
3. Die Umwandlungsrate ist konstant und beträgt 2% pro Stunde.

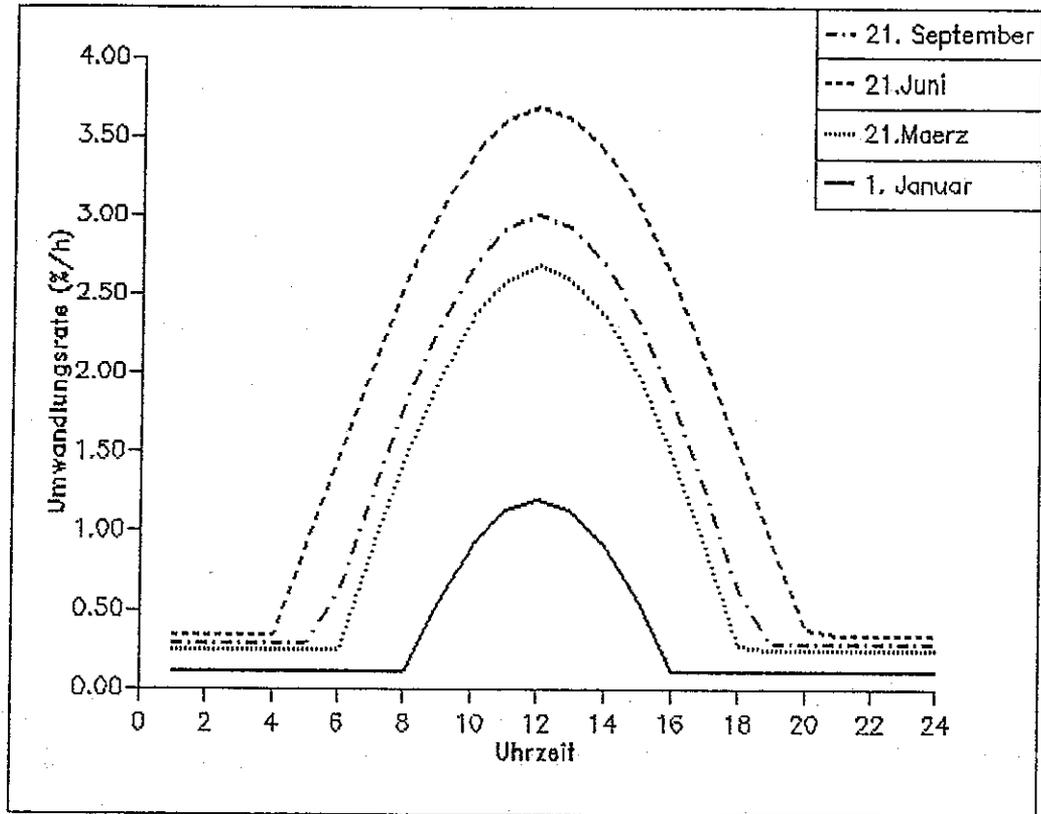


Abb. 4.8: Tagesgang der Umwandlungsrate für unterschiedliche Termine

Abbildung 4.9 zeigt die Ergebnisse, dargestellt am Beispiel des Rasterfeldes Re-
gnitzlosau. Zwischen einer konstanten Umwandlungsrate von 0,5% pro Stunde
und der variablen Rate treten bei den errechneten Konzentrationswerten nur mi-
nimale Unterschiede auf, so daß nur eine dieser Kurven dargestellt wurde. Um
zusätzlich den Einfluß unterschiedlicher Parameter auf die Höhe der errechneten
Konzentrationswerte aufzuzeigen, wurde das Ergebnis eines Rechenlaufs mit ei-
ner Depositionsgeschwindigkeit von 0,8 cm/s - die anderen Rechnungen wurden
mit einer von der Schneebedeckung abhängigen Depositionsgeschwindigkeit
durchgeführt - aufgenommen. In allen 3 Kurven treten Anstieg und Abfall der
Werte zu den gleichen Zeiten auf, die Variation der Depositionsgeschwindigkeit
hat jedoch einen deutlich größeren Einfluß auf das Konzentrationsniveau als die
Variation der Umwandlungsrate. Da darüberhinaus nur unzureichende Informa-
tionen über die Variation der Umwandlungsrate bei winterlichen Smoglagen vor-
liegen, wird zum gegenwärtigen Zeitpunkt auf eine weitere Differenzierung der
Umwandlungsrate verzichtet und in SMOVO mit den in Abbildung 4.8 dargestell-
ten Werten gerechnet.

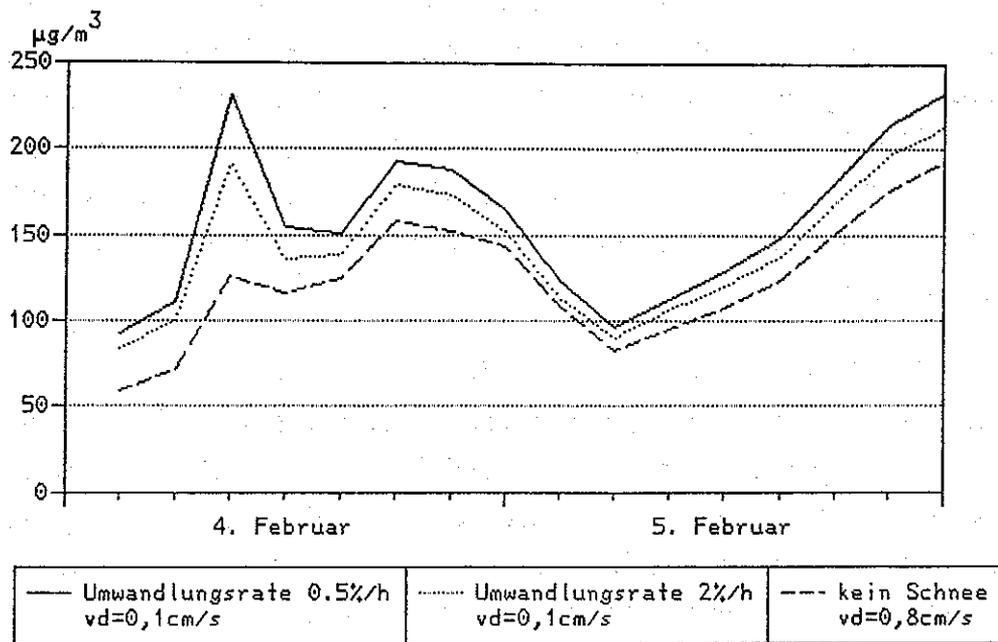


Abb. 4.9: Zeitverlauf der Konzentrationswerte für das Rasterfeld Regnitzlosau (Rasterfeld 39) für den 4.2. bis 5.2.1991 für unterschiedliche Umwandlungsraten und Depositionsgeschwindigkeiten

4.4.3 Nasse Depositionsprozesse

Die nasse Deposition von SO_2 wird in einfachen Ausbreitungsmodellen i.a. durch folgenden Ansatz parametrisiert:

$$k_w = a * R^b.$$

Dabei sind a und b empirisch bestimmte Parameter, R ist die Regenintensität in mm pro Stunde und k_w die Washoutrate in $1/s$. Nach /49/ nehmen die Parameter a und b je nach Jahreszeit unterschiedliche Werte an, da die Wolkenbildungsprozesse und damit die Aufnahme von SO_2 in die Tröpfchen unterschiedlich ablaufen. Für die in /35/ dargestellten Rechnungen mit dem Modell MESOS für das Jahr 1982 haben die Werte von $a=0,14$ und $b=0,12$ für das Sommerhalbjahr und von $a=0,009$ und $b=0,7$ für das Winterhalbjahr zu einer zufriedenstellenden Übereinstimmung von Messung und Rechnung geführt. Daher wurden diese Werte auch den Rechnungen mit SMOVO zugrunde gelegt. Abbildung 4.10 zeigt eine grafische Darstellung der Washoutraten in Abhängigkeit von der Niederschlagsintensität für unterschiedliche Parameterwerte von a und b . Zusätzlich zu den bereits erwähnten Parameterwerten wird auch der in der Deutschen Risikostudie

Kernkraftwerke /50/ verwendete Ansatz mit Werten von $a = 8 \cdot 10^{-5}$ und $b = 0,8$ dargestellt. Bei einer Niederschlagsrate von 1 mm pro Stunde liegt die nasse Depositionsrate zwischen 0,9% und 29% pro Stunde. Dies ist eine sehr große Bandbreite und der obere Wert ist deutlich größer als die Raten für die trockene Deposition und für die chemische Umwandlung. Dabei ist aber zu berücksichtigen, daß nasse Ablagerung nur stattfindet, wenn es auf dem Weg der jeweils betrachteten Trajektorie regnet.

Der in SMOVO verwendete Ansatz mit den Parameterwerten für den Winter führt zu einer deutlich geringeren nassen Ablagerung als die beiden anderen Ansätze. Eine Auswertung der mit SMOVO durchgeführten Rechnungen hat darüberhinaus gezeigt, daß die Schadstoffkonzentrationen häufig überschätzt werden, wenn gleichzeitig im Bezugsgebiet Niederschlag gefallen ist, und daß die Übereinstimmung i.a. besser wird, wenn man auf die obige Differenzierung zwischen Winter- und Sommerhalbjahr verzichtet und für das Winterhalbjahr die gleichen Parameter verwendet wie für das Sommerhalbjahr. Mit dieser Wahl, die bei einer Niederschlagsrate von 1mm pro Stunde zu einer Rate von 14% pro Stunde führt, befindet man sich auch – was den numerischen Wert der Washout-Koeffizienten betrifft – in Einklang mit der Mehrzahl vergleichbarer Ansätze in der Literatur /51/.

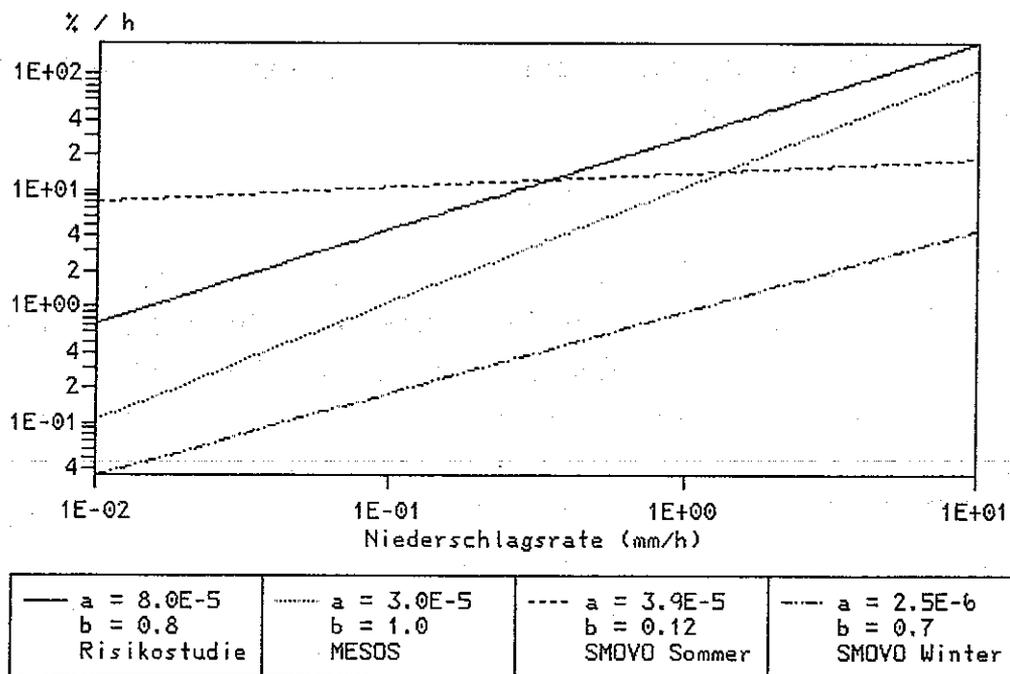


Abb. 4.10: Washoutraten $k_w = a \cdot R^b$ mit unterschiedlichen Werten für a und b

Aus diesem Grund wurden, zunächst mit dem Modell MULTI für das Jahr 1982, Rechnungen mit den beiden unterschiedlichen Ansätzen durchgeführt. Abbildung 4.11 zeigt am Beispiel der Reinluftstation Waldhof (Rasterfeld 16) die errechneten und gemessenen Monatsmittelwerte. Deutlich zu erkennen ist die Abnahme der errechneten Konzentrationswerte in den Monaten Januar bis März bzw. Oktober bis Dezember sowie die i.a. bessere Übereinstimmung der Ergebnisse des modifizierten Ansatzes mit den gemessenen Werten.

Für andere Rasterfelder wurden entsprechende Ergebnisse erzielt. Rechnungen mit dem Modell SMOVO für ausgewählte Episoden, so z.B. für den November 1990, bestätigen diese Ergebnisse (s. Abb. 4.12). Dies kommt besonders deutlich am 23.11. zum Ausdruck. An diesem, aber auch an den vorangehenden Tagen hat es in weiten Teilen des Betrachtungsgebietes geregnet und die damit verbundenen Auswascheffekte dürften mit dem alten Ansatz unterschätzt worden sein.

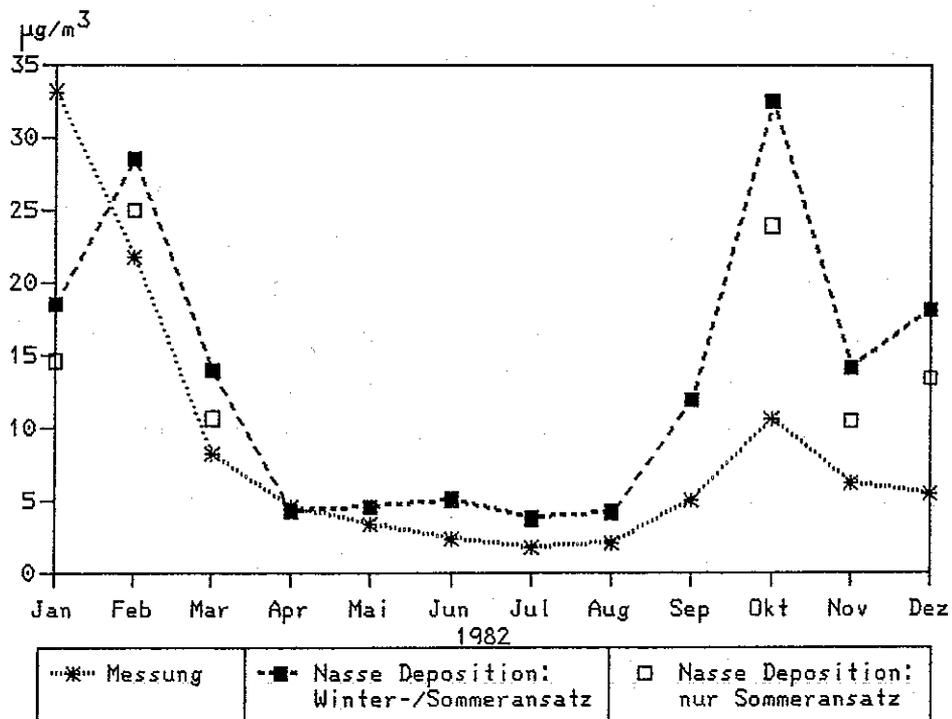


Abb. 4.11: Monatsmittelwerte der SO₂-Konzentration in Waldhof (Rasterfeld 16) für 1982. Dargestellt sind die Meßwerte sowie Rechnungen mit unterschiedlichen Parameterwerten für die nasse Deposition im Winterhalbjahr.

Zusätzlich zu den soeben dargestellten Rechnungen wurden wiederum Untersuchungen für den 4.2. und 5.2. 1991 durchgeführt (s. Abb. 4.13). Dabei wurden folgende Fälle betrachtet:

- a) Während des gesamten Zeitraums einschließlich der 5 Vorlauftage ist kein Niederschlag gefallen, die trockene Depositionsgeschwindigkeit beträgt 0,1 cm/s.
- b) Während des gesamten Zeitraums einschließlich der 5 Vorlauftage hat es im gesamten Betrachtungsgebiet geregnet und die Niederschlagsrate betrug 1 mm pro Stunde; die Depositionsrate wurde mit dem in SMOVO verwendeten Ansatz mit den Parameterwerten für den Winter bestimmt, die trockene Depositionsgeschwindigkeit beträgt 0,1 cm/s.
- c) Während des gesamten Zeitraums einschließlich der 5 Vorlauftage hat es im gesamten Betrachtungsgebiet geregnet und die Niederschlagsrate betrug 1 mm pro Stunde; die nasse Depositionsrate wurde mit dem in SMOVO verwendeten Ansatz mit den Parameterwerten für den Sommer bestimmt, die trockene Depositionsgeschwindigkeit beträgt 0,1 cm/s.
- d) Während des gesamten Zeitraums einschließlich der 5 Vorlauftage ist kein Niederschlag gefallen, die trockene Depositionsgeschwindigkeit beträgt 0,8 cm/s.

Wie Abbildung 4.13 zeigt, führen die Annahmen in b) zu einem geringen Rückgang der Konzentrationswerte, die Annahmen in c) mit der wesentlich höheren nassen Ablagerungsrate jedoch zu einer drastischen Abnahme, die wesentlich stärker ist als der Einfluß der trockenen Depositionsgeschwindigkeit (Punkt d). Dabei ist aber hervorzuheben, daß in den Fällen b) und c) davon ausgegangen wurde, daß es während des gesamten Zeitraums im gesamten Gebiet geregnet hat.

Insgesamt läßt sich feststellen, daß dann, wenn es regnet, die nasse Depositionsrate einen ähnlich großen Einfluß auf die errechneten Konzentrationswerte hat wie die Rate der trockenen Deposition und daß die bisher in SMOVO verwendeten Parameterwerte im Winterhalbjahr i.a. zu einer im Vergleich zu Meßwerten zu geringen Ablagerung führen. In Zukunft sollen daher die für den Sommer gültigen Parameterwerte verwendet werden. Da diese jedoch nur eine geringe Variation mit der Niederschlagsrate aufweisen und insbesondere bei niedrigen Niederschlagsraten die Rate der nassen Deposition im oberen Bereich der in der Literatur diskutierten Werte liegt, sind zur Auswahl eines geeigneteren Ansatzes noch weitere Untersuchungen erforderlich.

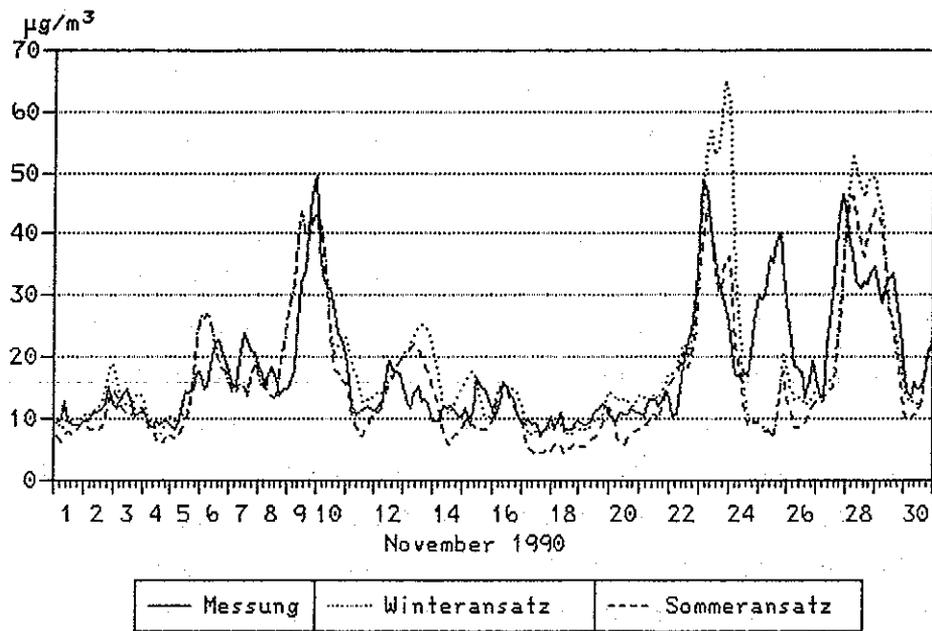


Abb. 4.12: Vergleich von errechneter und gemessener SO_2 -Konzentration (Mittelwert über alle Rasterfelder der alten Bundesländer) für unterschiedliche Ansätze der nassen Deposition für den November 1990

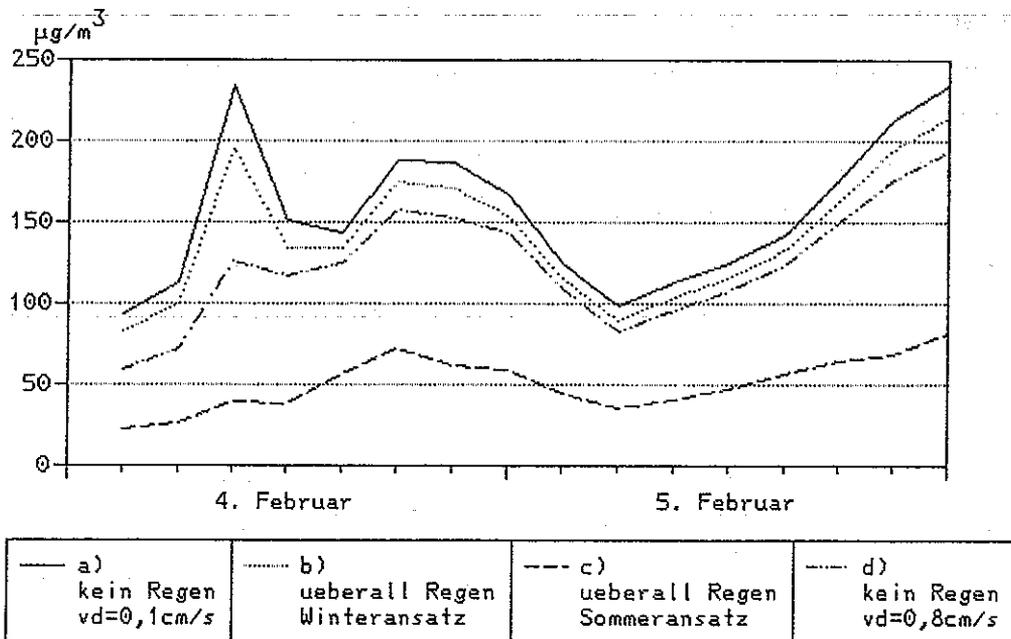


Abb. 4.13: Errechnete Konzentrationswerte für das Rasterfeld Regnitzlosau für den 4.2. und 5.2.1991 mit und ohne Niederschlag sowie für unterschiedlichen Depositionsgeschwindigkeiten (s. Text)

4.4.4 Bedeutung der Mischungsschichthöhe

Wie bereits dargestellt, berücksichtigt das Modell SMOVO bis zu zehn unterschiedliche Freisetzungshöhen. Ein in einer bestimmten Höhe freigesetztes Schadstoffpaket wird mit der vorherrschenden Windrichtung horizontal abtransportiert und breitet sich vertikal entsprechend der vorliegenden Stabilitätsklasse aus. Erst wenn das Schadstoffpaket den Boden erreicht hat, kann es zur bodennahe Konzentration beitragen. Das Modell unterscheidet zwischen Schadstoffmassen, die noch nicht den Erdboden erreicht haben, Massen, die innerhalb der Mischungsschicht gleichmäßig verteilt sind und denen, die sich oberhalb der Mischungsschicht in den stabilen Schichten befinden. Schadstoffe können nur dann in die stabilen Schichten gelangen, wenn sie oberhalb der Mischungsschicht freigesetzt werden oder wenn die Inversionshöhe sinkt. Aus den stabilen Schichten können sie weder trocken deponiert werden noch tragen sie dort zu den Immissionen am Boden bei. Erst bei einem Ansteigen der Inversionshöhe werden die Luftbeimengungen aus den stabilen Schichten wieder in die Mischungsschicht eingebracht.

Im folgenden soll zunächst untersucht werden, welchen Einfluß bestimmte Mischungsschichtniveaus auf die berechneten Konzentrationsverteilungen haben. Zur Abschätzung der Massenanteile, die sich jeweils in der Mischungsschicht bzw. den stabilen Schichten befinden, wurden für die einzelnen Rasterflächen außer den Konzentrationswerten auch die sich in der Mischungsschicht befindlichen Massen an SO_2 (H_{MIX}) zusammen mit der Schadstoffmasse in den stabilen Schichten (H_{STAB}) und der Masse in der Mischungsschicht, die noch nicht den Erdboden erreicht hat (H_{ANF}), bestimmt. In Tabelle 4.1 wird eine entsprechende Zusammenstellung der Verteilung der Schadstoffmassen, die sich vom 7. bis 10. Februar 1991 nach Modellrechnungen mit variabler Mischungsschichthöhe über den Rasterflächen Waldhof (Rasterfeld 16) bzw. Berlin (Rasterfeld B11) befinden, dargestellt.

Mit zunehmender Inversionshöhe steigt der Anteil der Schadstoffe in der Mischungsschicht an und nimmt gleichzeitig in den stabilen Schichten ab. Da sich die Masse innerhalb der Mischungsschicht dann aber über ein größeres Volumen verteilt, werden die berechneten Konzentrationswerte im allgemeinen bei zunehmenden Mischungsschichthöhen kleiner. Zusätzlich nimmt auch die trockene Ablagerung ab, da diese proportional zur Konzentration ist. Der Anteil der naß abgelagerten Schadstoffmassen nimmt jedoch zu, da wegen der geringeren trockenen Ablagerung die noch zur Verfügung stehende Gesamtmasse größer ist.

Datum	Termin	WALDHOF				BERLIN			
		HANF	HMIX	HSTAB	BILANZ	HANF	HMIX	HSTAB	BILANZ
7.2.1991	0	0.0	483.6	4.1	-	3.5	422.7	0.4	-
	3	0.0	439.6	4.6	-43.8	3.5	244.0	0.0	-179.1
	6	0.0	247.8	1.6	-182.8	5.7	233.1	0.0	-8.8
	9	0.0	270.5	0.1	21.2	6.3	250.6	0.0	18.2
	12	0.0	302.9	0.0	32.4	6.0	303.4	0.0	52.5
	15	0.0	290.0	2.9	-10.0	13.1	401.0	41.6	179.6
	18	0.0	519.3	18.6	245.0	25.6	425.9	46.2	41.9
	21	0.0	519.7	14.3	-3.8	27.8	379.5	5.1	-85.2
8.2.1991	0	0.0	521.5	4.5	-8.1	15.7	302.5	1.7	-92.6
	3	0.0	441.3	0.3	-84.4	9.5	267.4	2.4	-40.6
	6	0.0	317.8	0.0	-123.8	22.9	359.5	0.3	103.9
	9	0.0	306.3	0.5	-11.0	5.9	572.8	0.0	195.9
	12	0.0	428.7	8.8	130.7	16.8	617.3	305.7	361.2
	15	0.2	621.6	131.7	316.0	222.4	194.1	424.7	-98.7
	18	0.9	434.7	35.4	-282.5	239.2	284.0	130.6	-187.3
	21	1.0	147.8	47.2	-275.6	91.3	198.8	603.2	906.1
9.2.1991	0	1.0	68.6	177.6	54.5	150.9	208.5	595.7	-604.8
	3	1.5	78.9	207.0	40.3	46.7	261.1	675.6	28.3
	6	7.0	119.2	213.1	48.5	21.1	276.5	862.6	176.7
	9	0.0	176.1	130.1	-29.8	8.2	452.9	418.7	-280.4
	12	0.2	167.0	119.9	-19.1	10.5	965.1	181.8	277.6
	15	3.1	83.2	181.8	-19.3	34.4	251.5	354.3	-183.8
	18	3.6	71.1	88.4	-105.0	89.6	225.2	240.1	-418.7
	21	3.5	82.1	120.4	42.9	75.4	192.0	242.8	-44.7
10.2.1991	0	1.7	54.9	113.0	36.4	37.4	273.2	196.8	-2.8
	3	1.7	61.8	132.1	25.9	21.6	116.2	81.0	-288.5
	6	0.6	86.2	103.7	-5.1	27.2	163.9	47.8	20.1
	9	0.0	91.5	59.5	-39.4	4.1	344.7	56.2	199.4
	12	0.0	69.4	66.7	-14.8	6.1	251.8	130.5	-16.6
	15	0.9	19.7	163.4	47.9	15.2	163.3	295.3	85.3
	18	1.2	51.2	205.1	-73.4	20.7	244.4	187.8	-24.2
	21	2.2	62.1	177.6	-15.6	9.6	524.2	120.1	201.0

Tab. 4.1: Massen in den unterschiedlichen vom Modell SMOVO berücksichtigten Schichten H_{ANF} , H_{MIX} und H_{STAB} sowie die Bilanz aus allen Schichten nach jedem Termin in Tonnen SO_2 für den 7.2. bis 10.2.1991

Desweiteren wurden mit SMOVO Rechnungen für konstante Mischungsschichthöhen von 250 m, 500 m, 1000 m und 1500 m durchgeführt. Die Abbildungen 4.14 und 4.15 zeigen exemplarisch für die bereits erwähnten Rasterfelder von Berlin und Waldhof die errechneten Konzentrationsverläufe im Vergleich zu den Ergebnissen mit variabler Mischungsschichthöhe. Die SO₂-Konzentrationskurven für Waldhof verlaufen im wesentlichen parallel; mit den höchsten Werten im Falle einer konstanten Höhe von 250 m und den niedrigsten bei 1500 m. Die Konzentrationen bei variabler Mischungsschichthöhe entsprechen größenordnungsmäßig denjenigen, die mit Höhen zwischen 1000 m und 1500 m berechnet wurden. Eine Betrachtung der Massenanteile in den verschiedenen Schichten zeigt, daß sich bei konstanten Mischungsschichthöhen über 1000 m keine Schadstoffe mehr in den stabilen Schichten befinden, da die höchsten Freisetzungshöhen bei 300 m liegen und der vom Modell berücksichtigte Auftrieb nicht ausreicht, um diese Höhendifferenz zu überwinden.

In den für Berlin berechneten Konzentrationsverläufen wird insbesondere der Einfluß nahegelegener Quellen deutlich. Teilweise bis zu 50 % der sich in den Rasterfeldern um Berlin befindlichen Schadstoffmassen haben nach den Rechnungen mit SMOVO noch nicht den Erdboden erreicht. Die Konzentrationen sind daher nicht nur vom jeweiligen Mischungsschichtniveau abhängig, sondern wesentlich auch von der Stabilität, die die vertikale Vermischung der Schadstoffe in Quellnähe kontrolliert.

In der Rasterfläche um Waldhof gibt es während des hier betrachteten Zeitraums keine Massenanteile in der Mischungsschicht, die noch nicht den Erdboden erreicht haben. Der größte Teil der Variationen der berechneten Schadstoffkonzentrationen ist daher durch advektive Prozesse bewirkt. Um dies noch etwas genauer herauszuarbeiten und um zu Überprüfen, inwieweit die Aufteilung der Massen auf die einzelnen Schichten des Modells die Güte der Rechenergebnisse beeinflusst, wird in Abbildung 4.16 der Zeitverlauf des sich in der Mischungsschicht befindlichen Massenanteils zusammen mit den für Waldhof berechneten und gemessenen SO₂-Konzentrationen dargestellt. Es handelt sich hierbei um Ergebnisse von Rechnungen mit der in SMOVO standardmäßig verwendeten variablen Mischungsschichthöhe.

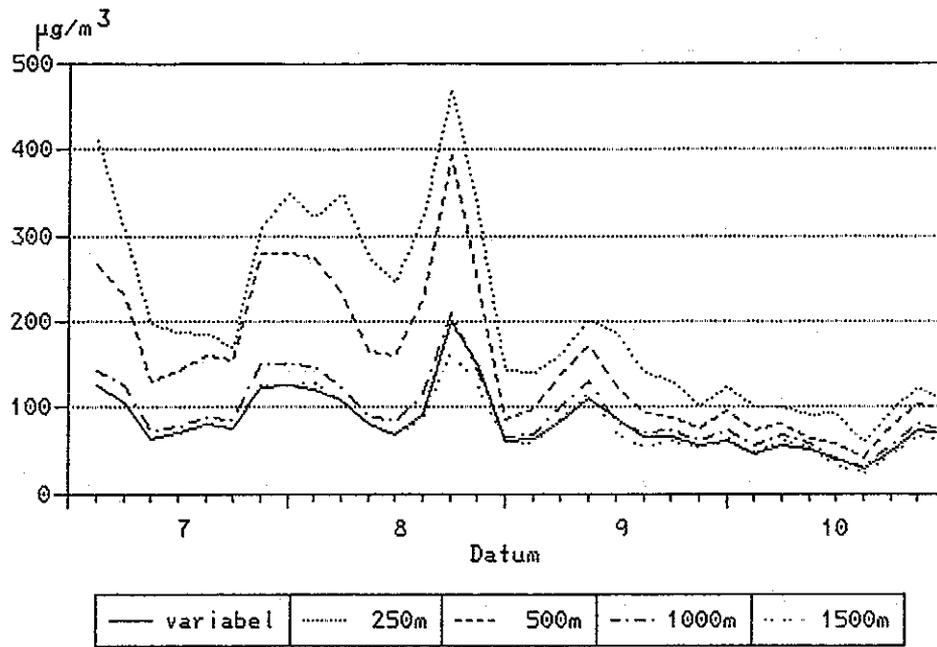


Abb. 4.14: Verlauf der Konzentrationswerte für das Rasterfeld Waldhof (Rasterfeld 16) für unterschiedliche Mischungsschichthöhen für den 7.2. bis 10.2.1991

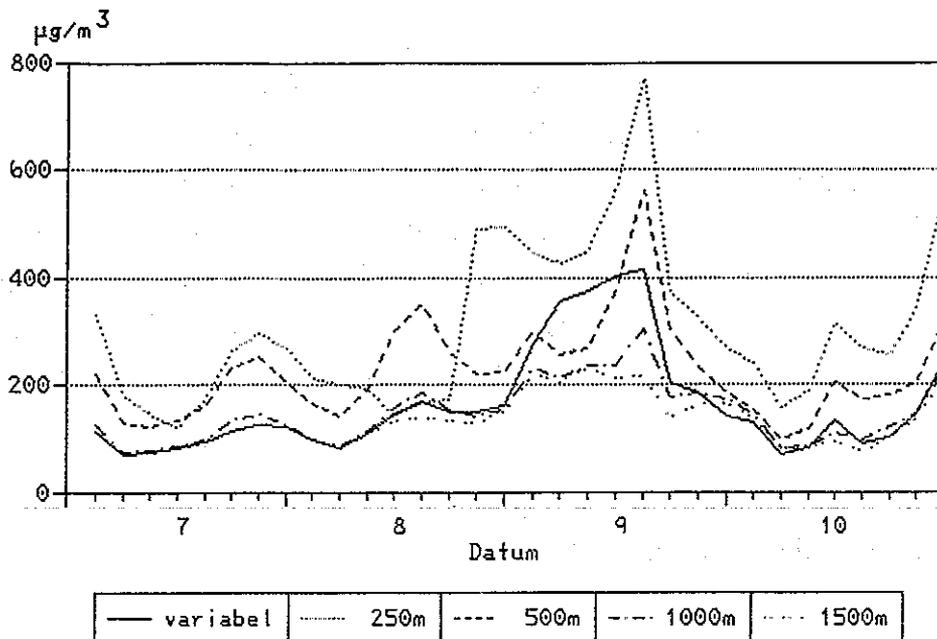


Abb. 4.15: Verlauf der Konzentrationswerte für das Rasterfeld Berlin (Rasterfeld B11) für unterschiedliche Mischungsschichthöhen für den 7.2. bis 10.2.1991

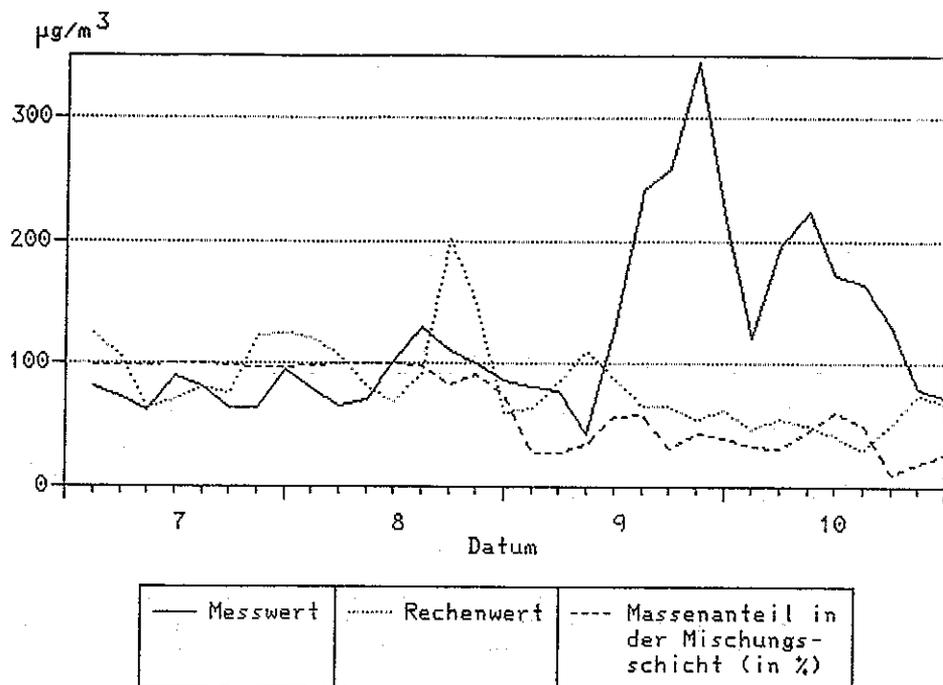


Abb. 4.16: Errechnete und gemessene Konzentrationswerte für das Rasterfeld Waldhof für den 7.2. bis 10.2.1991; zusätzlich dargestellt ist der Anteil der Schadstoffmasse (in%), der sich innerhalb der Mischungsschicht befindet.

Bis zum 8.2. liegen die gemessenen Konzentrationswerte zwischen $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$, die errechneten bei etwa $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und nahezu die gesamte Masse befindet sich innerhalb der Mischungsschicht. Am 8.2. nehmen die gemessenen Konzentrationen nur leicht zu; bei den berechneten Werten dagegen gibt es um 15 Uhr einen Anstieg auf $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$, wobei gleichzeitig der prozentuale Anteil der Masse, der sich in der Mischungsschicht befindet, abnimmt. Die Gesamtmasse nimmt dagegen am 8.2. deutlich durch den Herantransport von Schadstoffen (Advektion) zu.

Am 9.2. und 10.2. nehmen die berechneten Konzentrationen auf Werte unter $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ab, wobei sich nach den Rechnungen deutlich weniger als 100% der Gesamtmasse innerhalb der Mischungsschicht befinden. Die Meßwerte zeigen dagegen am 9.2. ein Konzentrationsmaximum und ein zweites kleineres am 10. Februar. Obwohl sich am 9.2. und 10.2. nach unseren Abschätzungen hohe prozentuale Anteile der Gesamtmasse in den stabilen Schichten befinden und damit nicht zur bodennahen Konzentration beitragen, kann eine andere Verteilung der Massen auf die einzelnen Schichten die Abweichungen zwischen Modell und Messung

nicht verringern. Tabelle 4.1 zeigt eine Abnahme der Gesamtmasse in der betrachteten Rasterfläche, was darauf hindeutet, daß die Zunahme des Anteils der sich in den stabilen Schichten befindlichen Schadstoffmassen allein durch ein Absinken der Mischungsschichthöhe verursacht wurde und nicht durch den Herantransport von Schadstoffen in diesem Niveau. Ein erneutes Ansteigen der Mischungsschichthöhe als einzigem Mechanismus für den Massentransfer aus den stabilen Schichten in die Mischungsschicht würde an den berechneten Konzentrationen daher nur wenig ändern. Die zur Verfügung stehenden Winddaten deuten darauf hin, daß der Transportwind, auf dem die Rechnungen basieren, zu früh über Süd nach Südwest dreht und somit Quellen südöstlich von Waldhof, die möglicherweise das gemessene Maximum am 9.2. und 10.2. hervorgerufen haben, unberücksichtigt läßt.

Das dargestellte Beispiel zeigt, daß in quellfernen Gebieten vor allem ein fehlerhaft berechneter Trajektorienverlauf zu Abweichungen der berechneten von den gemessenen Konzentrationswerten führen kann, weniger jedoch eine falsche Massenaufteilung auf die unterschiedlichen Schichten. Gerade für das Rasterfeld um Waldhof ist zwar ein eindeutiger Einfluß der Mischungsschichthöhe auf die mittlere Höhe der Konzentration, aber nicht auf deren Verlauf, also die Herausbildung von Maxima und Minima, zu erkennen.

Im quellnahen Bereich ist dagegen damit zu rechnen, daß der Zeitverlauf der Mischungsschichthöhe, der die Aufteilung der einzelnen Massen auf die Mischungsschicht und die stabilen Schichten regelt, Einfluß auf den Verlauf der Schadstoffkonzentrationen hat. Je höher die Mischungsschichthöhe ist, desto weiter kann Schadstoff von der Quelle aus transportiert werden, ohne daß er durch vertikale Durchmischung den Erdboden erreicht. Bei sehr niedrigen Mischungsschichthöhen gelangen größere Anteile der Schadstoffmassen in die stabilen Schichten und können somit ebenfalls nicht zur Bodenkonzentration beitragen.

In der Regel überlagern sich die Effekte der Advektion und des Verlaufs der Mischungsschichthöhe, und es ist nicht möglich, allein auf der Basis der berechneten Konzentrationen zu entscheiden, ob Abweichungen von den Meßwerten nur durch einen fehlerhaften Trajektorienverlauf verursacht werden oder durch eine falsche vertikale Aufteilung der Schadstoffmassen. Hier bietet sich die oben anhand eines Beispiels durchgeführte Betrachtung der Massenbilanzen als Interpretationshilfe an.

4.5 Einfluß der Emissionsdaten

4.5.1 Temperatureinfluß

Die freigesetzte Schadstoffmenge wird u.a. durch die Temperatur bestimmt (s. Abschn. 3.3.7). Um den durch diesen Parameter hervorgerufenen Einfluß auf die errechneten Konzentrationswerte abzuschätzen, wurden Rechnungen mit SMOVO für den 4. und 5. Februar 1991 für eine Temperatur von -30°C und für eine Temperatur von $+10^{\circ}\text{C}$ durchgeführt. Da Anfang Februar im Betrachtungsgebiet eine geschlossene Schneedecke lag, diese Annahme bei $+10^{\circ}\text{C}$ jedoch unrealistisch ist, wurde ein weiterer Rechenlauf für eine Temperatur von $+10^{\circ}\text{C}$ und schneefreier Oberfläche durchgeführt.

Bei -30°C sind die Emissionen aus dem Sektor Haushalte und Kleinverbraucher etwa 7 mal so hoch wie bei $+10^{\circ}\text{C}$, die Emissionen aus dem Sektor Kraftwerke/Industrie verdoppeln sich. Je nach Bedeutung der unterschiedlichen Sektoren für das betrachtete Rasterfeld ist damit bei den Konzentrationswerten bei -30°C , bei sonst unveränderten Parameterwerten, mit einem Anstieg auf mindestens das Doppelte, höchstens auf das 7-fache gegenüber einer Temperatur von $+10^{\circ}\text{C}$ zu rechnen.

In Abbildung 4.17 ist der Zeitverlauf der errechneten Konzentrationen für das Rasterfeld Regnitzlosau dargestellt. Anstieg und Abfall der Werte laufen parallel, die Konzentrationswerte bei -30°C sind um den Faktor 2,6 bis 3,8 höher. Bei schneefreier Oberfläche und einer Temperatur von $+10^{\circ}\text{C}$ liegen, bedingt durch die höhere Depositionsgeschwindigkeit, die Werte um 20% bis 50% unter denen, die man für eine schneebedeckte Oberfläche erhält.

Insgesamt hat sich gezeigt, daß die Berücksichtigung des Einflusses der regionalen Verteilung der prognostizierten Temperaturwerte auf die freigesetzte Schadstoffmenge zu einer verbesserten Übereinstimmung von Meß- und Rechenwerten führt. Seit Februar 1991 wird dieser Parameter daher aus den Wetterdaten eingelesen und bei den Rechnungen im Rahmen des Smogfrühwarnsystems berücksichtigt.

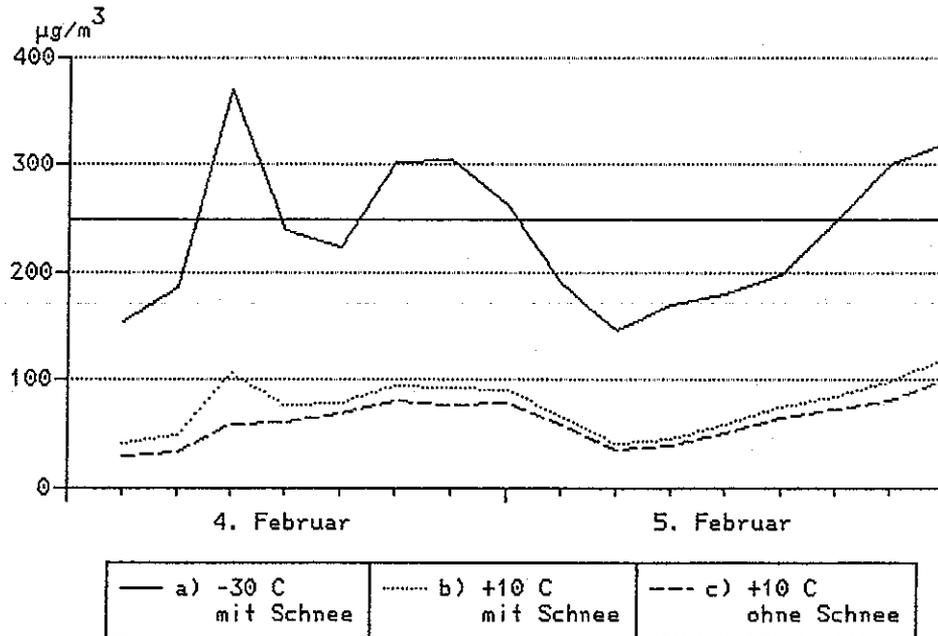


Abb. 4.17: Errechnete Konzentrationswerte für das Rasterfeld Regnitzlosau für den 4.2./5.2. 1991 für unterschiedliche Emissionsdatensätze und Depositionsgeschwindigkeiten

- a) Emissionen bei einer Temperatur von -30°C , Schneebedeckung regional differenziert
- b) Emissionen bei einer Temperatur von $+10^\circ\text{C}$, Schneebedeckung regional differenziert
- c) Emissionen bei einer Temperatur von $+10^\circ\text{C}$, schneefreie Oberfläche

4.5.2 Zusammenfassung der Emissionswerte

Wie in Abschnitt 3.3.6 dargestellt, wurden die Emissionswerte der berücksichtigten Staaten zunächst Rasterfeldern der Ausdehnung $\frac{1}{2}$ Längengrad \times $\frac{1}{4}$ Breitengrad bzw. bei größerer Entfernung von der Bundesrepublik Deutschland Rasterfeldern der Ausdehnung 1 Längengrad \times $\frac{1}{2}$ Breitengrad zugeordnet und anschließend in geeigneter Weise weiter zusammengefaßt. Dadurch reduzierte sich die Anzahl der Quellstandorte von 1072 auf 308. An jedem Standort sind bis zu 10 unterschiedliche Freisetzungshöhen zu berücksichtigen. Zahlreiche Rechnungen hierzu, die in /41/ dargestellt sind, haben gezeigt, daß die Konzentrationswerte, die mit der gewählten Zusammenfassung errechnet worden sind, unwesentlich von denen abweichen, die man bei Berücksichtigung der hohen Anzahl von Stand-

orten erhält. Dies zeigt auch die Abbildung 4.18, in der für den 4.2./5.2. 1991 für das Rasterfeld Regnitzlosau der Zeitverlauf der errechneten Konzentrationswerte dargestellt ist.

Der Verlauf der beiden Kurven ist nahezu identisch, lediglich am Nachmittag des 4.2. treten kleine Unterschiede auf. Die Werte für den Fall "keine Zusammenfassung" liegen erwartungsgemäß, je nach Bedeutung einzelner Quellregionen, zeitweise unter, zeitweise über den Werten für den Fall "Zusammenfassung der Emissionswerte". Da die gewählte Zusammenfassung der Emissionswerte zu einer deutlichen Reduktion der Rechenzeit führt, ohne daß hierdurch die Qualität der Ergebnisse nennenswert beeinflußt wird, wird sie den Rechnungen mit SMOVO zugrunde gelegt. Die entsprechende Verteilung der Emissionswerte wurde in Abschnitt 3.3.6 in Tabelle 3.2 dargestellt.

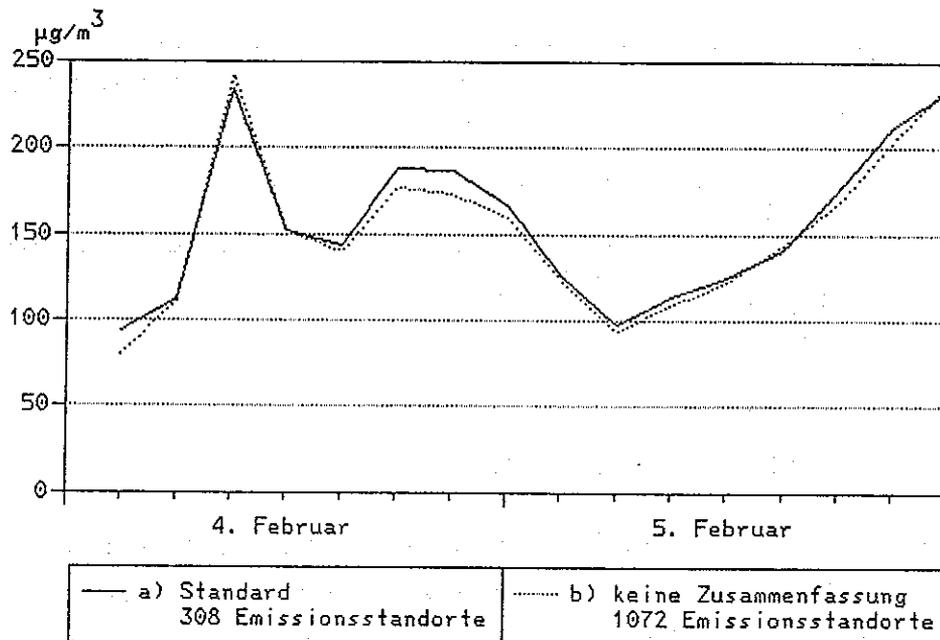


Abb. 4.18: Errechnete Konzentrationswerte für den 4.2./5.2.1991 für das Rasterfeld Regnitzlosau für unterschiedliche Emissionsverteilungen

- a) zusammengefaßte Emissionsverteilung - 308 Standorte
- b) nicht zusammengefaßte Emissionsverteilung - 1072 Standorte

4.5.3 Einfluß von Emissionsszenarien

Zusätzlich zu den soeben beschriebenen Fällen wurden Rechnungen zur Auswirkung von Emissionsänderungen durchgeführt. Dabei wurde einmal davon ausgegangen, daß in den alten Bundesländern die Regelungen der Großfeuerungsanlagenverordnung (GFAVO) nicht gelten (s. Abschn. 3.3.1), zum anderen wurde angenommen, daß sowohl in den alten als auch in den neuen Bundesländern die Regelungen der GFAVO Anwendung finden. Für die neuen Bundesländer wurde in diesem Fall der Emissionsdatensatz folgendermaßen modifiziert:

Für alle größeren Kraftwerke in den neuen Bundesländern liegen Emissionsfaktoren vor. Die Werte liegen dabei je nach Anlage und Qualität der eingesetzten Braunkohle zwischen 1300 kg SO₂/TJ und 2600 kg SO₂/TJ. Berücksichtigt man einen Emissionsfaktor von 140 kg SO₂/TJ, wie er nach der GFAVO für mit Braunkohle befeuerte Kraftwerke mit einer Feuerungswärmeleistung über 300 MW_{thermisch} vorgeschrieben ist, so gehen die Emissionen um etwa 2,5 Mio Tonnen SO₂ pro Jahr zurück, der Gesamtemissionswert reduziert sich entsprechend von ca. 5 Mio Tonnen SO₂ auf ca. 2,5 Mio Tonnen SO₂ pro Jahr.

Zunächst wurde untersucht, wie sich die Regelungen der GFAVO auf den über alle Rasterfelder der alten Bundesländer gemittelten Wert der SO₂-Konzentration auswirken. Abbildung 4.19a zeigt den Beitrag der Emissionen von Quellen in den alten Bundesländern zu diesem Mittelwert für den 4. und 5. Februar vor und nach Anwendung der Regelungen der GFAVO. Wie zu erwarten führen die Emissionsminderungsmaßnahmen zu einem Rückgang der Immissionen. Noch größer ist das Potential der Immissionsminderung bei einer Einführung der Regelungen der GFAVO in den neuen Bundesländern (Abb. 4.19b).

Daß sich die Variationen der Emissionen in Abhängigkeit von der Wetterlage und der Lage des Rasterfeldes unterschiedlich auf die SO₂-Konzentrationen auswirken, zeigt der in Abbildung 4.20 dargestellte Konzentrationsverlauf für die Rasterfläche Regnitzlosau. Die Nichtberücksichtigung der Regelungen der GFAVO hat keinen Einfluß auf die für dieses Rasterfeld errechneten Werte, da an den beiden betrachteten Tagen Ostwind herrschte und das Rasterfeld Regnitzlosau nicht durch Emittenten in den alten Bundesländern beaufschlagt wurde. Eine deutliche Verringerung der Konzentrationswerte bewirkt jedoch die Emissionsabnahme in den neuen Bundesländern. Der geringe Unterschied am Vormittag des 4.2. ist darauf zurückzuführen, daß während dieser Zeit das Konzentrationsniveau nur zum geringen Teil von Quellen in den neuen Bundesländern, überwiegend jedoch von Quellen in der CSFR hervorgerufen wird.

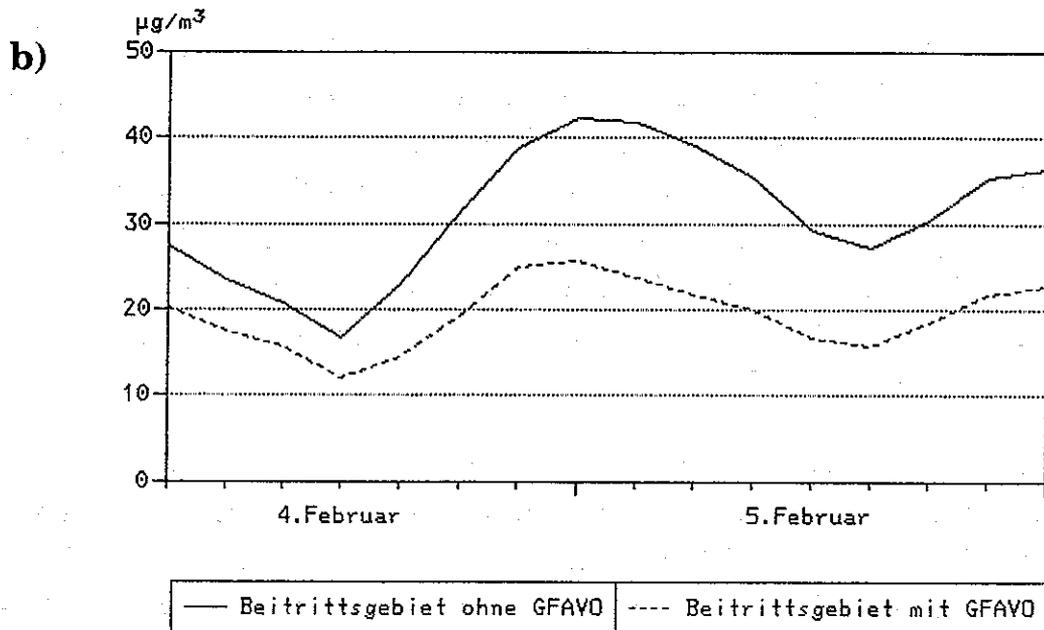
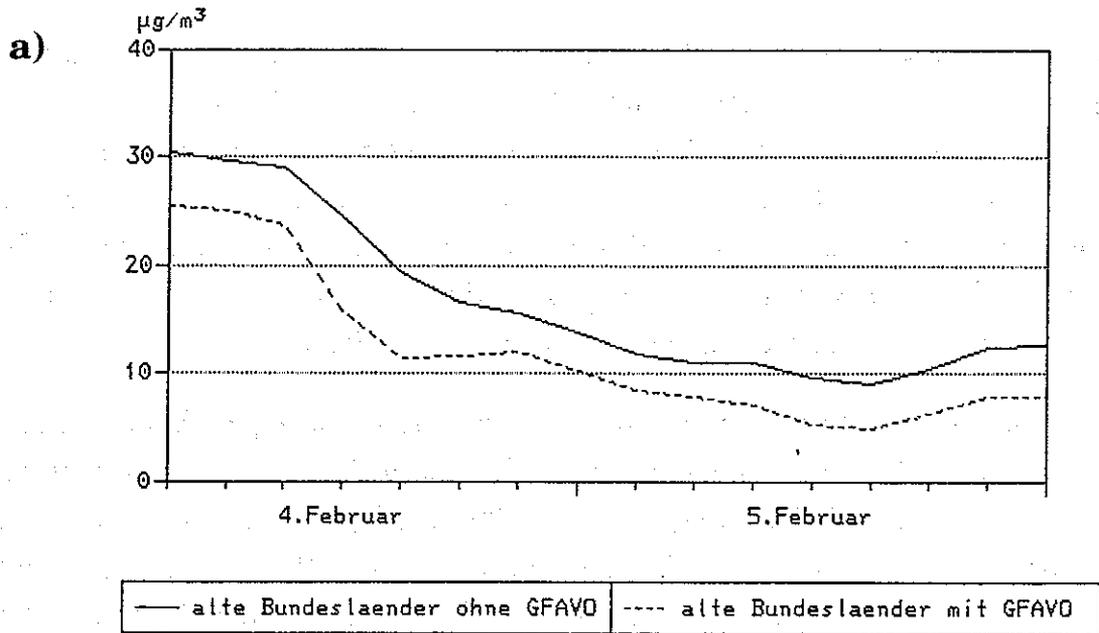


Abb. 4.19: Errechneter Mittelwert über alle Rasterfelder der alten Bundesländer für unterschiedliche Emissionsszenarien

- a) nur Beiträge der alten Bundesländer; Emissionen mit und ohne GFAVO
- b) nur Beiträge der neuen Bundesländer; Emissionen mit und ohne GFAVO

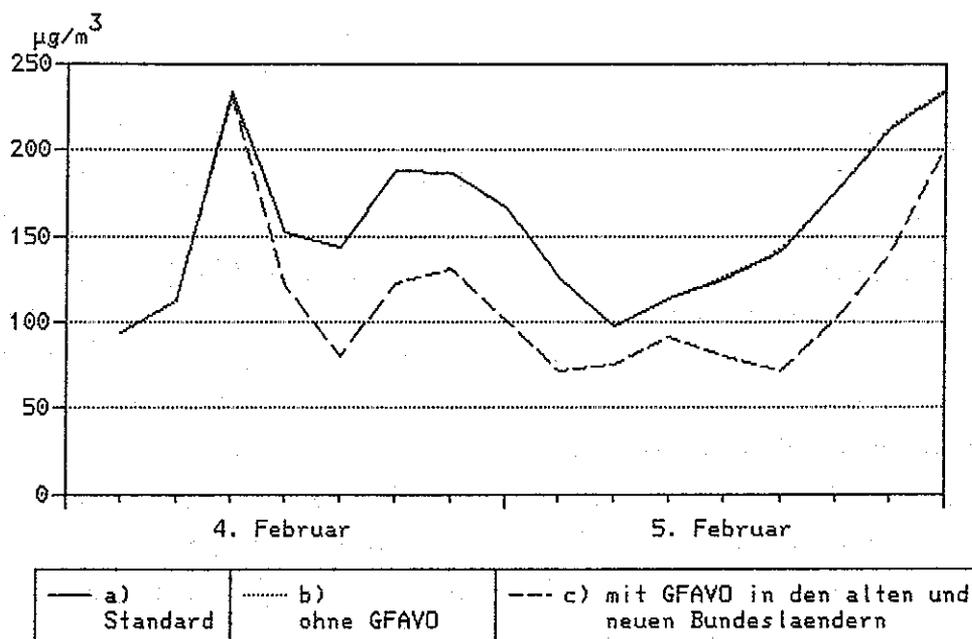


Abb. 4.20: Errechnete Konzentrationswerte am 4.2./5.2.1991 im Rasterfeld Regnitzlosau für unterschiedliche Emissionsszenarien

- a) Standardlauf (Regelungen der GFAVO nur in den alten Bundesländern)
- b) ohne Berücksichtigung der Regelungen der GFAVO
- c) unter Berücksichtigung der Regelungen der GFAVO in den alten und in den neuen Bundesländern.

4.6 Einfluß der Güte der Wetterprognosen auf die errechneten SO_2 -Konzentrationen

Zur Abschätzung des Einflusses der Güte der von SMOVO genutzten Wettervorhersagedaten auf die Güte der berechneten SO_2 -Immissionen wurden die in der Zeit vom 1. Oktober 1990 bis zum 31. März 1991 auf den Rechenanlagen des DWD prognostizierten SO_2 -Konzentrationen ausgewertet. Folgendes Zahlenmaterial stand zur Verfügung:

- Meßwerte auf MESOS-Rasterflächen (zu deren Erstellung s. Abschn. 4.2)
- Rasterwerte der SO_2 -Konzentration für einen Prognosezeitraum von 0 bis 24 Stunden (Wettervorhersage von 0 UTC des betrachteten Tages)
- Rasterwerte der SO_2 -Konzentration für einen Prognosezeitraum von 24 bis 48 Stunden (Wettervorhersage von 0 UTC des jeweiligen Vortages).

Alle Werte liegen in dreistündigem Abstand an 8 Terminen eines Tages vor. Der Vergleich der beiden Prognosezeiträume (0 bis 24 Stunden bzw. 24 bis 48 Stunden) wurde für alle 99 Rasterflächen auf dem Gebiet der alten und neuen Bundesländer durchgeführt. Beim Vergleich der Prognosen mit Meßwerten konnten die neuen Bundesländer nicht berücksichtigt werden. Auf dem Gebiet der alten Bundesländer standen jedoch während eines Großteils des betrachteten Zeitraums zu Vergleichszwecken für mehr als 50 Rasterflächen Meßwerte bereit.

Als wesentliche statistische Kenngröße für den Vergleich der jeweiligen prognostizierten SO₂-Verteilungen untereinander und mit den Meßwerten wurde der Korrelationskoeffizient ausgewählt. Auf die Anwendung des in Abschnitt 4.3 beschriebenen Fehlermaßes wurde verzichtet, da es hier nicht um die Bestimmung eines "absoluten" Maßes für die Güte der Rechnungen geht, sondern um die Abschätzung der *Veränderung* der Prognosegüte bei verschiedenen Prognosezeiträumen. Für den Korrelationskoeffizienten gilt:

$$R_{xy} = \frac{S_{xy}}{S_x S_y}$$

Dabei ist S_{xy} die Kovarianz der vorliegenden N Rasterwerte x_i bzw y_i zu einem vorgegebenen Termin:

$$S_{xy} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

S_x und S_y sind die Standardabweichungen der entsprechenden Rasterwerte. Für jeden Termin, an dem Meßwerte und Prognosen beider Prognosezeiträume vorlagen, konnten drei Korrelationskoeffizienten berechnet werden:

- R als Maß für die Korrelation beider Prognosezeiträume untereinander
- R_{12} als Maß für die Korrelation der "älteren" (d.h. 24- bis 48- stündigen) Prognose mit den Meßwerten und
- R_{13} als Maß für die Korrelation der "aktuelleren" Prognose mit den Meßwerten.

Die Korrelation zwischen beiden Prognosezeiträumen ist im allgemeinen sehr gut. In 77% der Fälle ist R größer als 0,8. Auf die Fälle mit geringerer Übereinstimmung der für beide Prognosezeiträume berechneten SO₂-Konzentrationsver-

teilungen soll später genauer eingegangen werden. Die Werte für R_{12} und R_{13} schwanken in einem sehr großen Bereich zwischen -0,4 und 1. Ein Vergleich beider Korrelationskoeffizienten kann Aufschluß darüber geben, inwieweit die auf der Basis aktuellerer Wetterprognosen berechneten SO_2 -Konzentrationen besser mit Meßwerten übereinstimmen als die aufgrund der 24- bis 48-stündigen Prognose des Vortages. Diese Abschätzung gibt zusätzlich einen Hinweis darauf, inwieweit die Smogprognose durch eine allgemeine Verbesserung der Wettervorhersage sicherer gemacht werden kann - unter Beibehaltung der jetzigen Auswahl der von SMOVO genutzten Parameter und deren jetziger räumlicher und zeitlicher Auflösung.

Tabelle 4.2 zeigt eine kombinierte Häufigkeitsverteilung der in Klassen eingeteilten Korrelationskoeffizienten R_{12} und R_{13} . Es wird deutlich, daß die aktuellere Vorhersage nur in wenig mehr Fällen zu einer Verbesserung der Smogvorhersage mit SMOVO führt: In 58% der Fälle ist zwar R_{13} größer als R_{12} ; in 42% der Fälle jedoch führt die aktuellere Wettervorhersage zu einer geringeren Korrelation zwischen Meß- und Rechenwerten. Der prozentuale Anteil der Fälle, bei denen die aktuellere Wettervorhersage zu besseren Prognosen führt, erhöht sich bei einer Auswahl der Fälle, in denen R unter 0,8 liegt, nur wenig. Niedrige Korrelationswerte beim Vergleich der für unterschiedliche Prognosezeiträume berechneten SO_2 -Konzentrationen lassen darauf schließen, daß sich die aktuellere Wetterprognose deutlich von der des jeweiligen Vortages unterscheidet. Unter der Annahme, daß die aktuelle Wettervorhersage besser ist als die ältere, sollte auch die aktuellere Smogprognose besser sein als die ältere. Dies ist jedoch bei $R < 0,8$ nur in 61% der Fälle so - unabhängig davon, ob die 4 ersten Termine, an denen Einschwingvorgänge des meteorologischen Prognosemodells zu Fehlern bei der aktuelleren Prognose führen können, berücksichtigt werden oder nicht. Es ist daher zu vermuten, daß die Güte der Smogprognose mit Hilfe von SMOVO größtenteils von anderen Faktoren bestimmt wird als von der Güte der zur Zeit mit dem BKN-Modell des DWD prognostizierten atmosphärischen Parameter. Eine große Rolle dürfte dabei die geringe Auflösung der atmosphärischen Grenzschicht durch das BKN-Modell spielen, wodurch in Abhängigkeit von der jeweiligen Wetterlage mehr oder minder große Abweichungen des prognostizierten 850 hPa-Windes vom beobachteten bodennahen Windfeld auftreten können.

R12 \ R13	-0,4	-0,3	-0,2	-0,1	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
-0,4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
-0,3	1	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
-0,2	1	2	5	8	3	1	1	1	0	0	0	0	0	1
-0,1	1	0	11	13	10	5	2	3	0	0	0	0	0	0
0	0	2	5	13	25	14	6	2	1	0	0	0	0	0
0,1	0	0	3	7	21	27	30	7	1	7	2	1	0	0
0,2	0	0	0	3	13	28	50	24	11	2	4	2	0	0
0,3	0	0	0	1	6	15	47	67	28	12	5	2	2	0
0,4	1	0	0	2	2	8	20	44	42	39	14	6	6	1
0,5	0	0	0	0	2	2	9	24	34	57	16	10	4	0
0,6	0	1	2	1	1	1	3	12	14	42	42	15	6	1
0,7	0	1	1	1	1	0	5	3	9	21	23	27	7	1
0,8	0	0	2	0	0	0	0	3	3	5	4	11	9	0
0,9	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	3	3	8

Tab. 4.2: Zusammenhang zwischen den Korrelationskoeffizienten R_{12} und R_{13}

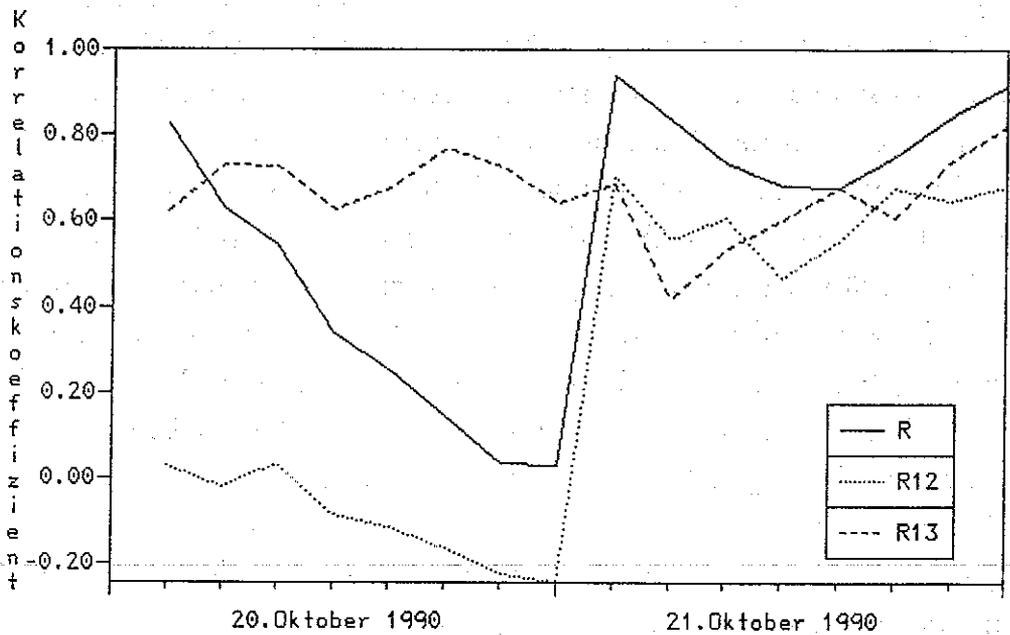


Abb. 4.21: Zeitverlauf der Korrelation beider Prognosezeiträume (R) und der Korrelation der 0 bis 24-stündigen bzw. 24 bis 48-stündigen Prognose mit den Meßwerten (R_{12} , R_{13}) für den 20. und 21. Oktober 1990

Andererseits werden fehlerhafte Wetterprognosen in der Regel zu Fehlprognosen bei der Smogvorhersage führen. Dies zeigt anschaulich die Abbildung 4.21 anhand der Korrelationskoeffizienten R , R_{12} und R_{13} für den 20. und 21. Oktober 1990. R als Maß für die Übereinstimmung der für diesen Zeitraum prognostizierten SO_2 -Werte nimmt am 20. Oktober stetig von Werten über 0,8 auf Werte um 0 ab. Die Korrelation zwischen den am 19. Oktober um 0 UTC für den 20. Oktober prognostizierten SO_2 -Konzentrationen und den Meßwerten ist ebenfalls sehr gering. Dagegen zeigen die hohen Werte für R_{13} am 20. Oktober, daß die auf der Basis der aktuelleren Wettervorhersage berechneten Prognosen gut mit den Meßwerten übereinstimmen. Die am 20. Oktober erstellte Vorhersage für den 21. Oktober stimmt ebenfalls gut mit den Messungen überein und R bzw. R_{12} nehmen am 21. Oktober wieder höhere Werte an.

Ursache der fehlerhaften Smogprognose vom 19. für den 20. Oktober dürfte sein, daß das Vordringen einer Kaltfront über den Nordosten des Bezugsgebietes nicht richtig vorhergesagt wurde. Tabelle 4.3 zeigt eine Übersicht der für Berlin für 0 UTC prognostizierten 850 hPa Temperaturen im Vergleich zu Meßwerten /45/).

Datum	48 - stündige Prognose	24 - stündige Prognose	Meßwert
19. 10.	8	9	8
20. 10.	8	7	5
21. 10.	6	-1	0
22. 10.	0	0	-2

Tab. 4.3: Meßwerte und Prognosen für die 850 hPa - Temperatur um 0 UTC in Berlin

Demnach beträgt die am 19. 10. für den 21. 10. für 0 UTC prognostizierte 850 hPa-Temperatur +6°C. Nach den Messungen befand sich Berlin allerdings schon in der Kaltluft und die Temperatur in 850 hPa betrug 0°C, was am 20. 10. auch richtig für den 21. 10. vorhergesagt wurde. Im 850 hPa-Niveau nahm der Wind nach Durchzug der Kaltfront deutlich zu und drehte auf zunächst nordöstliche und dann südöstliche Richtungen. Die höheren Windgeschwindigkeiten und die Winddrehung nach Frontdurchgang führten dazu, daß nach der Smogprognose vom 20. Oktober vor allem Quellen in der CSFR zu den teilweise über 300 µg/m³ hohen prognostizierten SO_2 -Konzentrationen in der Bundesrepublik beitrugen. Die räumliche Struktur der SO_2 -Konzentrationsverteilung unterscheidet sich stark

von der am 19. 10. prognostizierten. Nach der fehlerhaften Prognose vom 19. Oktober wären zudem vor allem Quellen in den neuen Bundesländern für die hohen SO₂-Konzentrationen verantwortlich gewesen.

Abschließend soll betont werden, daß sich die hier vorgestellten Ergebnisse zur Beurteilung des Einflusses der Güte der Wettervorhersage auf die Güte der Smogprognose nur auf die Rechnungen mit SMOVO auf der Grundlage von Prognosedaten des BKN-Modells beziehen. Da in Zukunft bei der Smogprognose die höhere räumliche und zeitliche Auflösung des Europamodells genutzt werden soll (s. Kap. 6) und zudem die Behandlung der atmosphärischen Grenzschicht ("Mischungsschicht") enger an das meteorologische Prognosemodell gekoppelt sein wird, dürfte auch der Einfluß der Güte der Wettervorhersage auf die Güte der prognostizierten SO₂-Konzentrationen zunehmen. Bisher konnte nur ein beschränkter Zeitraum untersucht werden, in dem keine extremen Smog - Wetterlagen vorkamen. Hier bleibt abzuwarten, wie gut der Verlauf dieser Wetterlagen in Zukunft mit Hilfe des Europamodells vorhergesagt werden kann.

4.7 Berücksichtigung der regionalen Verteilung der Temperatur und der Schneebedeckung

Ab Februar 1991 wurde für die Rechnungen zum Smogfrühwarnsystem die neueste Version des Modells SMOVO eingesetzt. In dieser Version wird der Zeitverlauf der Emissionswerte aus den in den BKN - Daten enthaltenen Temperaturwerten im 950 hPa - Niveau regional differenziert berechnet. Die Depositionsgeschwindigkeit wird den Angaben über die Oberflächenbeschaffenheit entsprechend (schneefrei oder schneebedeckt) ebenfalls regional differenziert.

Für den Zeitraum 1.2. bis 13.2. 1991 wurden Vergleichsrechnungen mit dem alten Modell durchgeführt, das keine regionale Differenzierung der Temperatur und der Schneebedeckung berücksichtigt. Vom 1.-4. Februar lag lediglich in Teilen des Betrachtungsgebietes eine z.T. durchbrochene Schneedecke. Daher wurde für diesen Zeitraum im alten Modell ohne Schnee, d.h. mit einer einheitlichen Depositionsgeschwindigkeit von 0,8 cm/s gerechnet. Ab dem 5.2. lag dann eine nahezu geschlossene Schneedecke, und es wurde eine Depositionsgeschwindigkeit von 0,1 cm/s angenommen. Da im alten Modell nur eine einzige Depositionsgeschwindigkeit vorgegeben werden kann, gilt diese geringe Depositionsgeschwindigkeit nicht nur für den 5.2., sondern auch für die für die Berechnung der Konzentrati-

onswerte benötigte Vorlaufzeit vom 31. Januar bis zum 4. Februar. Ein Vergleich der Ergebnisse zeigt folgendes:

1. Da beide Modelle mit den gleichen Winddaten rechnen und die regionale Verteilung der errechneten Konzentrationswerte hauptsächlich durch das Windfeld bestimmt wird, treten kaum Unterschiede in der Struktur der regionalen Verteilung der Konzentrationswerte auf.
2. Für den Zeitraum 1.2. - 4.2. führen die Rechnungen mit dem neuen Modell zu einer deutlichen Erhöhung der Konzentrationswerte innerhalb der Fahne. Dabei stimmt die Höhe der Werte jetzt besser mit den Meßwerten überein. Dies ist deutlich in den Abbildungen 4.22a und 4.22b zu erkennen, die die gemessenen und die mit dem alten und neuen Modell errechneten Mittelwerte über alle Raster der alten Bundesländer zeigen. Aufgrund der geringeren Depositionsgeschwindigkeit führen insbesondere die Beiträge aus den neuen Bundesländern und aus der CSFR zu der Erhöhung der Konzentrationswerte. Am deutlichsten kommt die Verbesserung der Qualität der Ergebnisse am 4.2. 1991 zum Ausdruck. Abbildung 4.23 zeigt für diesen Tag die regionale Verteilung der Konzentrationswerte von Messung und Rechnung (altes und neues Modell) für die Termine 0 Uhr, 9 Uhr und 21 Uhr. Angegeben sind in der Abbildung auch die jeweiligen Fehlerwerte F1 und F2.
3. Am 5.2. steigen nach den alten Rechnungen die Konzentrationswerte an, da von diesem Tag an, einschließlich der 5 Vorlauftage, eine Schneedecke berücksichtigt wird; nach den neuen Rechnungen und nach den Messungen nehmen die Werte jedoch ab. Anschließend stimmen, bis zum 13.2., alte und neue Rechnungen im wesentlichen überein, da in beiden Fällen für das gesamte Betrachtungsgebiet eine geschlossene Schneedecke berücksichtigt wird. Eine Verbesserung der Qualität der Ergebnisse für den 6.2. - 8.2. erfolgt nicht: die Abweichungen in dieser Zeit sind auf fehlerhafte Winddaten zurückzuführen.

Insgesamt läßt sich feststellen, daß insbesondere zu Terminen, an denen nur Teile des Betrachtungsgebietes von Schnee bedeckt sind und dann, wenn regional sehr unterschiedliche Temperaturen auftreten, das neue Modell zu einer Verbesserung der Qualität der Ergebnisse führt. Der besondere Vorteil des modifizierten Modells liegt jedoch darin, daß eine Berücksichtigung von Schneebedeckung und Temperatureinfluß auf die Emissionswerte jetzt automatisch durch entsprechende Auswertung der BKN-Daten möglich ist.

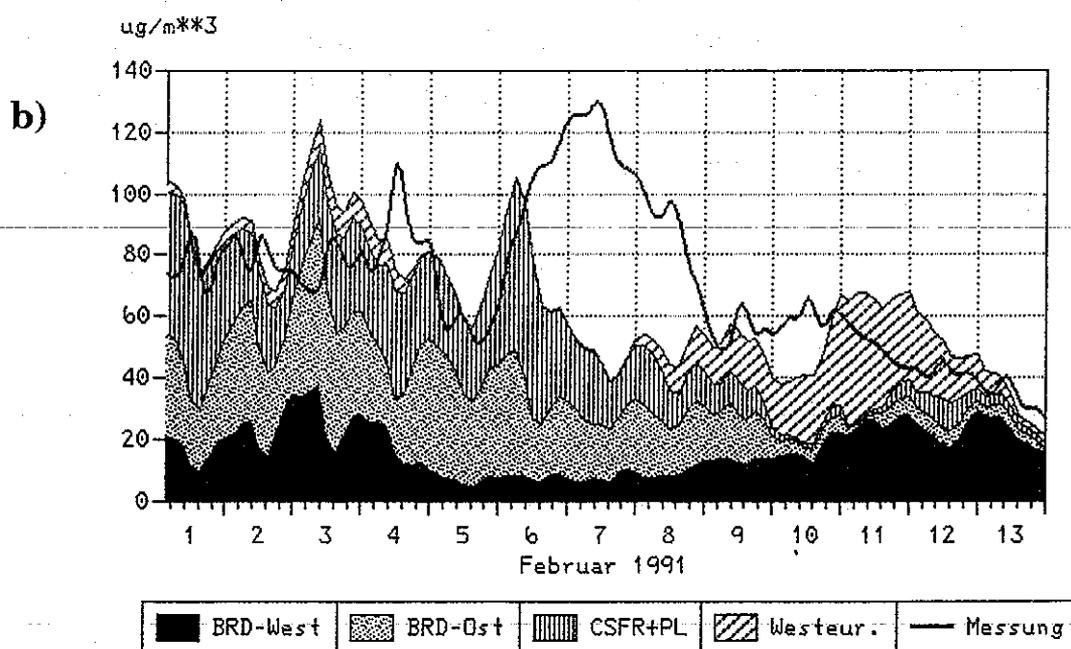
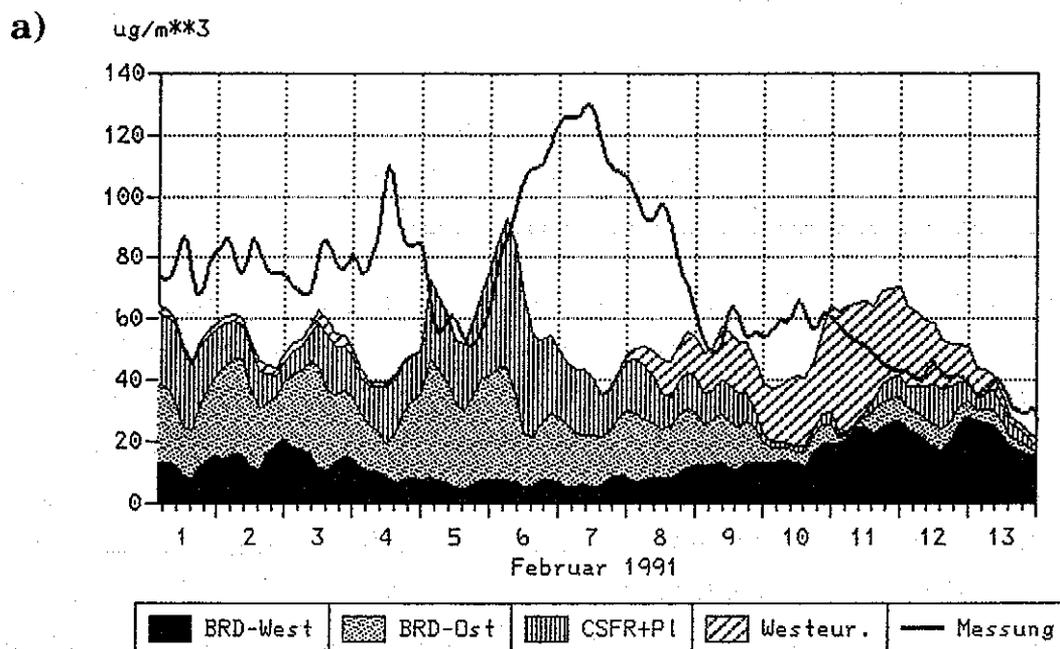
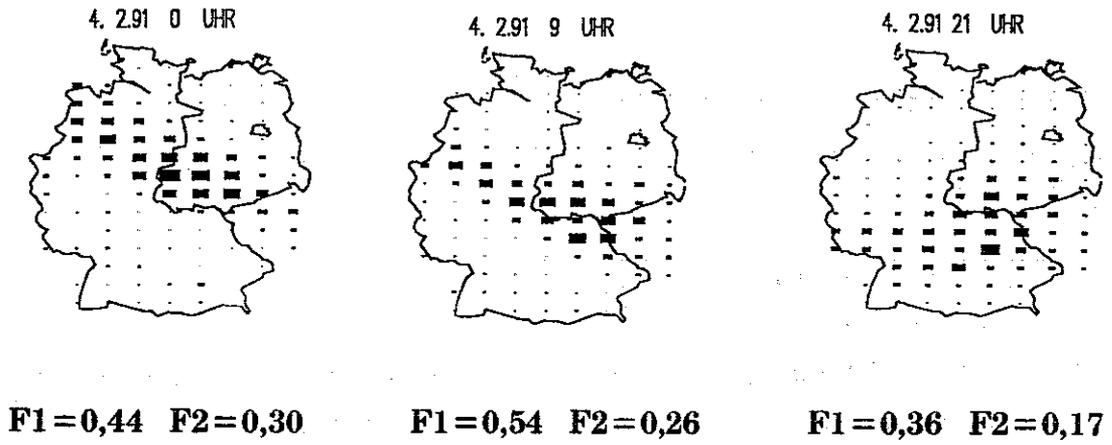


Abb. 4.22: Zeitlicher Verlauf des Mittelwertes der SO₂-Konzentrationen in dem Gebiet der alten Bundesländer für den 1.2. - 13.2. 1991; Vergleich von Messung und Rechnung sowie Beiträge einzelner Staaten

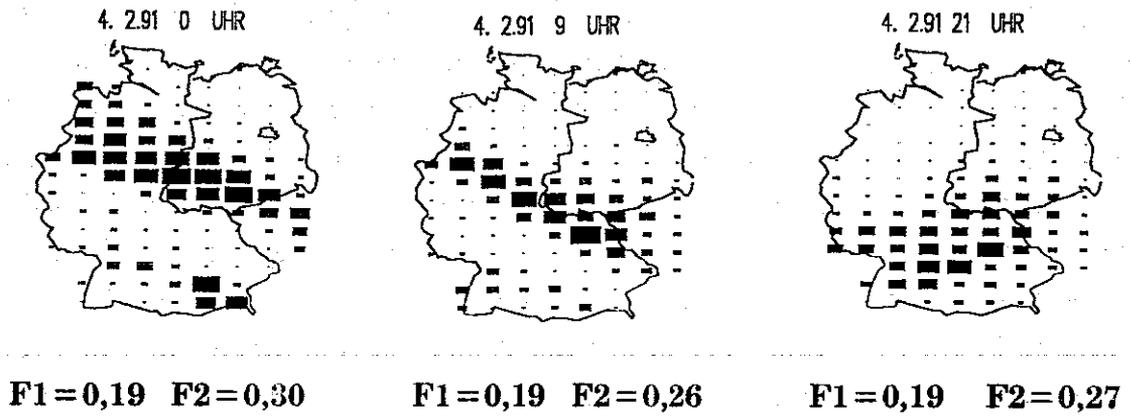
a) ohne regionale Differenzierung von Temperatur und Schneebedeckung

b) mit regionaler Differenzierung von Temperatur und Schneebedeckung

a)



b)



c)

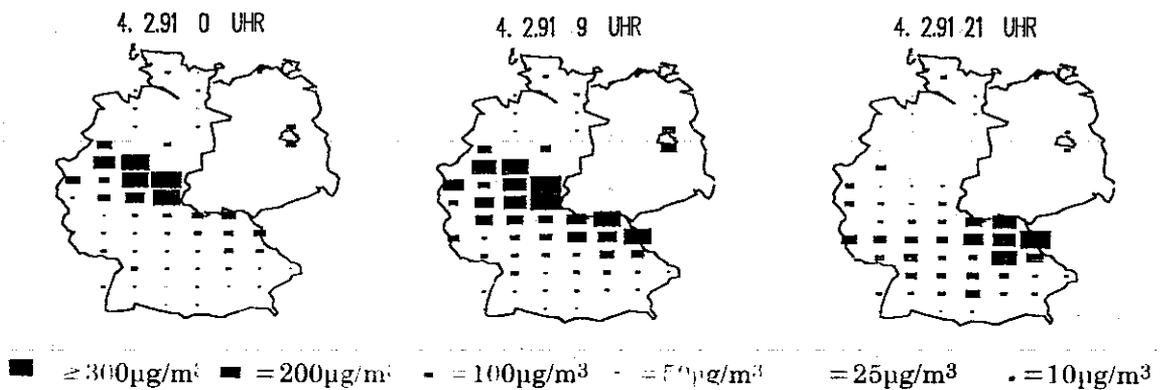


Abb. 4.23: Rasterkarten von Rechnung und Messung für den 4. Februar 1991, 0 Uhr, 9 Uhr und 21 Uhr (Werte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$)

- a) ohne regionale Differenzierung von Temperatur und Schneebedeckung
- b) mit regionaler Differenzierung von Temperatur und Schneebedeckung
- c) Messung

4.8 Zusammenfassende Bewertung der Sensitivitätsstudien

Wie in diesem Kapitel ausführlich beschrieben wurde, hängen die berechneten Konzentrationswerte von zahlreichen Einflußgrößen ab, deren "richtige" Erfassung die Qualität der Übereinstimmung von Meß- und Rechenwerten bestimmt. Hierzu gehören:

- die meteorologischen Eingabedaten
- die Emissionsdatenbasis und
- die Modellstruktur und damit verbunden die Auswahl geeigneter Parameterwerte zur Beschreibung der relevanten physikalischen und chemischen Prozesse in der Atmosphäre.

Bei den **meteorologischen Daten** bestimmt vor allem das Windfeld mit Richtung und Geschwindigkeit des Windvektors die Größe und die regionale Verteilung der Konzentrationswerte. Da mit dem Modell SMOVO der Transport in nur einer Schicht beschrieben werden kann, werden von der Höhe abhängige Windrichtungen und -geschwindigkeiten nicht erfaßt. Generell hat sich gezeigt, daß der Transportwind in 850 hPa i.a. zu einer besseren Übereinstimmung mit Meßwerten führt als der Wind in 950 hPa, dem nächst niedrigeren in den BKN-Daten zur Verfügung stehenden Niveau. Hin und wieder treten jedoch größere Abweichungen in der regionalen Verteilung der Konzentrationswerte auf; die errechnete Fahne ist im Uhrzeigersinn gegenüber der gemessenen Fahne erhöhter Konzentrationswerte gedreht, was auf den Einfluß der nicht im Modell berücksichtigten Winddrehung in der atmosphärischen Grenzschicht schließen läßt. Neben dem Windfeld bestimmt auch die Höhe der Mischungsschicht, die aus Angaben in den BKN-Daten berechnet wird, die errechneten Konzentrationswerte. Ihr Einfluß ist vor allem in größerer Entfernung von den Emittenten gering. Letztendlich hängt die Güte der Smogprognose natürlich auch von der Güte der Wetterprognose ab.

Bei den **Emissionswerten** zeigte sich, daß nicht alle der in der Emissionsdatenbasis vorliegenden 1087 Standorte berücksichtigt werden müssen. Eine Zusammenfassung auf ca. 300 Standorte mit bis zu 10 unterschiedlichen Freisetzungshöhenklassen - die hierfür angewandte Vorgehensweise ist in Abschnitt 3.3.6 beschrieben - führt zu keiner nennenswerten Änderung der Ergebnisse, reduziert die Rechenzeit aber erheblich. Eine von der Temperatur abhängige Variation der Emissionswerte, getrennt nach den Sektoren Kraftwerke und Industrie sowie Haushalte und Kleinverbraucher, führt jedoch zu einer wesentlichen Verbesserung der Ergebnisse. Aus diesem Grunde wird in der aktuellen Version von

SMOVO die Temperatur des 950 hPa-Niveaus aus den BKN-Daten eingelesen, um die vorliegenden Jahresemissionen regional und zeitlich differenzieren zu können.

Bezugsjahr der Emissionsdatenbasis ist das Jahr 1982. Für die Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) wurden während des probeweisen Routinebetriebs die durch die Regelungen der Großfeuerungsanlagenverordnung eingetretenen Emissionsminderungen berücksichtigt. Aufgrund der politischen Entwicklung in den neuen Bundesländern sind auch dort seit 1990 die Emissionen deutlich zurückgegangen, diese Änderungen konnten bisher jedoch noch nicht berücksichtigt werden. Auch die Verminderung der Emissionen in den westeuropäischen Staaten seit 1982 konnten bisher noch nicht berücksichtigt werden. Rechnungen, die einen potentiellen Emissionsrückgang aufgrund der Regelungen der Großfeuerungsanlagenverordnung auch in den neuen Bundesländern annehmen, führen zu einer deutlichen Abnahme der Konzentrationswerte in den alten und den neuen Bundesländern bei Ostwetterlagen. Um die Schwächen der bisher genutzten Emissionsdatenbasis zu beheben, soll sie in einem Nachfolgeprojekt soweit wie möglich aktualisiert werden.

Auf die Auswahl geeigneter Parameterwerte für die chemische Umwandlung von SO_2 zu SO_4^- und für die trockene und nasse Deposition von SO_2 wurde ebenfalls ausführlich eingegangen.

Die **trockene Depositionsgeschwindigkeit** ist abhängig von der Beschaffenheit der Erdoberfläche, mit Werten von ca. 0,1 cm/s bei schneebedeckter Oberfläche und ca. 0,8 cm/s bei schneefreier Oberfläche. Die niedrige Depositionsgeschwindigkeit kann zu Konzentrationswerten führen, die doppelt so hoch sind wie die für die hohe Depositionsgeschwindigkeit berechneten Werte. Die Rechnungen haben darüberhinaus gezeigt, daß eine Differenzierung der Depositionsgeschwindigkeit nach schneefreier und schneebedeckter Oberfläche zu einer deutlich besseren Übereinstimmung von Meß- und Rechenwerten führt; daher wird in SMOVO die Schneebedeckung aus den BKN-Daten eingelesen und die Depositionsgeschwindigkeit entsprechend zeitlich und regional differenziert berücksichtigt.

In SMOVO finden **nasse Abreicherungsprozesse** nur dann statt, wenn es regnet, d.h. die Abreicherung von SO_2 aufgrund von Flüssigphasenprozessen in Nebeltröpfchen sowie in Wolken, die nicht unmittelbar ausregnen, wird nicht berücksichtigt. Das Modell beschreibt jedoch in Regengebieten die Flüssigphasenumwandlung in Wolken- bzw. Regentröpfchen zusammen mit den Auswaschprozessen mit Hilfe der Rate für die nasse Ablagerung. Die Sensitivitätsrechnun-

gen haben gezeigt, daß dann, wenn es regnet, die nasse Depositionsrates einen ähnlich großen Einfluß auf die errechneten Konzentrationswerte hat wie die Rate der trockenen Deposition und daß die bisher in SMOVO verwendeten Parameterwerte im Winterhalbjahr i.a. zu einer im Vergleich zu Meßwerten zu geringen Ablagerung führen. In Zukunft sollen daher die für den Sommer gültigen Parameterwerte verwendet werden. Da diese jedoch nur eine geringe Variation mit der Niederschlagsrate aufweisen und insbesondere bei niedrigen Niederschlagsraten die Rate der nassen Deposition im oberen Bereich der in der Literatur diskutierten Werte liegt, sind zur Auswahl eines geeigneteren Ansatzes noch weitere Untersuchungen erforderlich.

Die **chemische Umwandlung in der Gasphase** wird in Abhängigkeit von der Einstrahlung der Sonne modelliert. Dabei wird die tageszeitabhängige Geschwindigkeitskonstante für die geografische Breite 40, 50 und 60 Grad errechnet und derart normiert, daß für die geografische Breite von 50 Grad, gemittelt über das ganze Jahr, ein Wert von 1% pro Stunde resultiert. Sensitivitätsrechnungen haben hier gezeigt, daß in den Wintermonaten zwischen einer konstanten Umwandlungsrate von 0,5% pro Stunde und der variablen Rate bei den errechneten Konzentrationswerten nur minimale Unterschiede auftreten. Ferner hat die Variation der Depositionsgeschwindigkeit einen deutlich größeren Einfluß auf das Konzentrationsniveau als die Variation der Umwandlungsrate. Aus diesem Grunde wurde auf eine weitere Differenzierung der Umwandlungsrate bei winterlichen Smogwetterlagen verzichtet.

Tabelle 4.4 zeigt abschließend eine Zusammenstellung der im Modell SMOVO verwendeten wesentlichen Eingabedaten und die zu ihrer Bestimmung herangezogenen Größen.

erforderliche Größen	ausgewählte Größen
Windfeld	850 hPa-Wind (BKN-Daten)
Mischungsschichthöhe	variabel berechnet aus Bedeckungsgrad und Windfeld (BKN-Daten)
Emissionen	Emissionsdatensatz zeitlich differenziert entsprechend der Temperatur im 950 hPa - Niveau (BKN-Daten)
trockene Ablagerung	0,8 cm/s bei schneefreier Oberfläche 0,1 cm/s bei schneebedeckter Oberfläche
chemische Umwandlung	abhängig von der Sonneneinstrahlung im Mittel 1% pro Jahr
nasse Deposition	abhängig von der Niederschlagsrate R $k_w = a \cdot R^b$ mit $a = 0,007$, $b = 0,7$; k_w in % pro Stunde
Flüssigphasenumwandlung in Wolken und im Nebel	keine Berücksichtigung

Tab. 4.4: Überblick über die im Modell SMOVO berücksichtigten Eingabedaten und Parameterwerte

5. Rechnungen mit SMOVO: Darstellung, Interpretation und Bewertung der Ergebnisse

Das Ausbreitungsmodell SMOVO wurde sowohl auf den Rechenanlagen des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KfK-Rechner) als auch auf den Rechenanlagen des Deutschen Wetterdienstes in Offenbach (DWD-Rechner) implementiert und erprobt. Auf dem DWD - Rechner werden dabei in einem probeweisen Routinebetrieb Prognoserechnungen für die SO₂ - Konzentrationsverteilung auf dem Gebiet der alten und neuen Bundesländer durchgeführt. Hierzu werden täglich einmal am Morgen Konzentrationswerte als Mittelwert über jeweils 3 Stunden für den jeweils aktuellen und den darauffolgenden Tag errechnet. Dabei wird auf die Prognosedaten der letzten 5 Tage sowie auf die aktuelle 48 - Stunden - Prognose zugegriffen. Die errechneten Konzentrationswerte können anschließend im Rahmen des Smogfrühwarnsystems verwendet und zusammen mit Meßwerten den Bundesländern zur Verfügung gestellt werden (s. Abschn. 4.1 und 4.2).

Der Einsatz des Modells SMOVO auf dem KfK - Rechner dient der nachträglichen Berechnung von Konzentrationswerten, der Erprobung und Verbesserung des Modells, der Interpretation, Auswertung und Bewertung der Ergebnisse sowie der Durchführung von Parameterstudien. Für diese Rechnungen werden die meteorologischen Datensätze fortlaufend auf dem DWD - Rechner abgespeichert und in regelmäßigen Abständen zum KfK übertragen. Dabei wurde auf die Archivierung der für die Smogvorhersage benutzten längerfristigen Prognosedaten (12 bis 48 Stunden) verzichtet. Die meteorologischen Eingabedaten für die nachträglich auf dem KfK - Rechner durchgeführten Rechnungen enthalten außer den zu den Terminen mit aktuellen Wettervorhersagen (0 UTC und 12 UTC) vorliegenden Wetterdaten nur noch die zur Auffüllung zwischen diesen Terminen benötigten 3-, 6- und 9- stündigen Prognosen.

Der Einsatz des Modells auf dem DWD-Rechner erfolgte mit wenigen Unterbrechungen vom November 1989 bis zum März 1990 sowie vom Oktober 1990 bis zum März 1991. Rechnungen und Auswertungen wurden auf dem KfK-Rechner für den gleichen Zeitraum sowie zusätzlich für den 15. bis 21. Januar 1985, den 15. bis 23. Januar 1987, den 2. bis 6. Februar 1987 sowie den 26. und 27. Februar 1987 durchgeführt.

Im Januar 1985 traten Konzentrationswerte bis zu 2000 µg/m³ auf, und es wurde in großen Teilen der alten Bundesländer Smogalarm ausgelöst. Die Smogepisode

vom Januar 1985 war auch Auslöser für den Beschluß der Umweltministerkonferenz vom November 1986, ein Smogfrühwarnsystem einzurichten.

Sowohl im Januar als auch im Februar 1987 wurden regional begrenzt Konzentrationswerte bis $1000 \mu\text{g}/\text{m}^3$ gemessen. Im Januar lagen dabei i.a. geringe Windgeschwindigkeiten vor und die erhöhten Konzentrationswerte waren überwiegend auf lokale Ursachen ("hausgemachter" Smog) zurückzuführen. Im Februar 1987 hingegen wurden Schadstoffe aus der damaligen DDR in die Bundesrepublik Deutschland transportiert und führten dort zu den erhöhten Konzentrationswerten (ferntransportierter Smog). Anfang 1987 befand sich das Smogfrühwarnsystem bereits im Aufbau und so stehen für einige Termine Meßdaten aus dem Smogfrühwarnsystem zur Verfügung. Allerdings liegen die Werte i.a. nicht flächendeckend vor, so daß ein Vergleich von Messung und Rechnung nur eingeschränkt möglich ist.

5.1 Während der Untersuchungen eingeführte Modellmodifikationen

Während das Ausbreitungsmodell SMOVO in den letzten Jahren entwickelt und ausgetestet wurde, wurden, soweit erforderlich, einige Modifikationen am Modell und an der Auswahl der Eingabeparameter, entsprechend der in Kapitel 4 dargestellten Sensitivitätsuntersuchungen, vorgenommen. Im folgenden soll daher aufgeführt werden, mit welcher Modellversion und mit welchen Eingabeparametern die jeweiligen Rechnungen durchgeführt wurden.

Für den **Januar 1985** wurde angenommen, daß die Regelungen der Großfeuerungsanlagenverordnung (GFAVO) noch keinen Rückgang der Emissionen in den alten Bundesländern bewirkt haben und damit der Gesamtemissionswert hier 2,8 Mio. Tonnen SO_2 pro Jahr betrug. Für das Kraftwerk Jänschwalde bei Cottbus wurde eine Jahresemission von 65900 Tonnen angenommen. Ferner wurde davon ausgegangen, daß im gesamten Betrachtungsgebiet eine geschlossene Schneedecke lag. Für SO_2 wurde daher eine Depositionsgeschwindigkeit von $0,1 \text{ cm/s}$ gewählt. Der Gangfaktor für die Emissionen wurde aus der Klimamitteltemperatur für Berlin - Dahlem bestimmt (s. Abschn. 3.3.7 sowie Tab. 5.1). Die für SMOVO benötigten meteorologischen Parameter wurden den auf Bändern archivierten IGEL - Datensätzen entnommen.

Für die Episoden aus dem **Januar und Februar 1987** wurden für die alten Bundesländer die Regelungen der GFAVO berücksichtigt. Die übrigen Annahmen

Datum	Klimamitteltemperatur (°C)	Datum	Klimamitteltemperatur (°C)	Datum	Klimamitteltemperatur (°C)
10. 1. 85	-7,7	13. 1. 87	-17,6	1. 2. 87	-8,0
11. 1. 85	-6,8	14. 1. 87	-16,9	2. 2. 87	-6,5
12. 1. 85	-6,9	15. 1. 87	-12,6	3. 2. 87	-5,8
13. 1. 85	-10,0	16. 1. 87	-10,2	4. 2. 87	-1,2
14. 1. 85	-10,7	17. 1. 87	-11,1	5. 2. 87	+2,2
15. 1. 85	-8,6	18. 1. 87	-9,6	6. 2. 87	+4,1
16. 1. 85	-8,7	19. 1. 87	-9,4		
17. 1. 85	-10,2	20. 1. 87	-11,2	21. 2. 87	-1,3
18. 1. 85	-4,7	21. 1. 87	-7,8	22. 2. 87	-0,4
19. 1. 85	-7,0	22. 1. 87	-1,3	23. 2. 87	-4,5
20. 1. 85	-6,2	23. 1. 87	+1,7	24. 2. 87	-5,2
21. 1. 85	-7,8			25. 2. 87	-2,6
		28. 1. 87	-4,2	26. 2. 87	-1,4
10. 1. 87	-11,8	29. 1. 87	-10,2	27. 2. 87	+0,9
11. 1. 87	-16,2	30. 1. 87	-12,1		
12. 1. 87	-14,0	31. 1. 87	-6,6		

Tab. 5.1: Klimamitteltemperatur für Berlin-Dahlem an ausgewählten Terminen /45/

entsprechen denen vom Januar 1985. Die Klimamitteltemperatur für Berlin - Dahlem ist ebenfalls in Tabelle 5.1 angegeben.

Für den Zeitraum **November 1989 bis Januar 1990** wurde im wesentlichen der in Abschnitt 3.3.6 in Tabelle 3.2 dargestellte Emissionsdatensatz verwendet. Für das Kraftwerk Jänschwalde (Quelle 65 nach Tabelle 3.2) wurde jedoch von einer Jahresemission von 230650 Tonnen SO₂ ausgegangen. Zur Bestimmung des Zeitverlaufs der Emissionswerte wurde der in Abschnitt 3.3.7 in Abbildung 3.6 dargestellte pauschale Gangfaktor herangezogen. Da zu keinem Zeitpunkt im Betrachtungsgebiet eine geschlossene Schneedecke lag, wurde generell mit einer Depositionsgeschwindigkeit von 0,8 cm/s gerechnet.

Ab **Februar 1990** wurde bei den Rechenläufen am KfK-Rechner anstelle des pauschalen Gangfaktors durchgehend mit einem Gangfaktor gerechnet, der aus der

Klimamitteltemperatur für Berlin-Dahlem bestimmt wurde (s. Abb. 3.7 in Abschn. 3.3.7). Für den probeweisen Routinebetrieb am DWD-Rechner wurde weiterhin der alte Ansatz benutzt. Die Emissionen des Kraftwerks Jänschwalde wurden auf 346.000 Tonnen pro Jahr heraufgesetzt. Der ab Februar 1990 eingesetzte Emissionsdatensatz enthält damit die in Tabelle 3.2 im Abschnitt 3.3.6 angegebenen Werte.

Ab **Oktober 1990** wurden an meteorologischen Eingabedaten anstelle der IGEL - Datensätze die BKN - Datensätze verwendet. Alle übrigen Annahmen blieben bis Januar 1991 unverändert. Ab **Februar 1991** wurde sowohl für die Rechnungen in Offenbach als auch die in Karlsruhe der Gangfaktor aus Temperaturangaben in den BKN - Daten bestimmt. Die Depositionsgeschwindigkeit wurde entsprechend der Oberflächenbeschaffenheit (Schnee oder kein Schnee), wie sie in den BKN - Daten vorgegeben ist, gewählt. Damit ist ab Februar 1991 eine regionale Differenzierung des Gangfaktors und der Depositionsgeschwindigkeit entsprechend der Auflösung der BKN - Daten möglich.

Da für eine große Anzahl von Terminen und für ein relativ großes Gebiet Konzentrationswerte berechnet wurden, können im folgenden nur ausgewählte Ergebnisse in komprimierter Form dargestellt werden. Ziel dieser Darstellung ist dabei:

- einen Gesamtüberblick über die Rechenergebnisse und den Vergleich von Messung und Rechnung zu geben;
- für ausgewählte Termine bzw. Episoden Detaillerggebnisse darzustellen,
- die Ergebnisse zu interpretieren;
- anhand der Interpretation der Ergebnisse Verständnis für die Modellstruktur und die Modellqualität zu wecken;
- Darstellungsformen aufzuzeigen, die es ermöglichen, die Ergebnisse im Smogfrühwarnsystem geeignet interpretieren und bewerten zu können;
- zu einer umfassenden Bewertung der Qualität der Ergebnisse zu kommen;
- Hinweise darauf zu geben, in welcher Weise das Modell weiterentwickelt werden kann bzw. welche Schwerpunkte bei einem neu zu entwickelnden Modell zu setzen sind.

5.2 Gesamtüberblick über Ergebnisse für das Winterhalbjahr 1989/1990 und das Winterhalbjahr 1990/1991

Für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland (alte und neue Bundesländer) wurden in einer zeitlichen Auflösung von 3 Stunden und einer räumlichen Auflösung von 1 Längengrad * $\frac{1}{2}$ Breitengrad Konzentrationswerte berechnet. Meßwerte aus dem Smogfrühwarnsystem liegen für das Gebiet der alten Bundesländer vor und wurden, wie in Abschnitt 4.2 beschrieben, in entsprechender räumlicher und zeitlicher Auflösung zusammengefaßt.

Um einen Gesamtüberblick über die erzielten Ergebnisse für die Monate November 1989 bis März 1990 sowie Oktober 1990 bis März 1991 geben zu können, wurden die vorliegenden 3-Stunden-Mittelwerte weiter zu Tagesmittelwerten zusammengefaßt und der Mittelwert über alle Raster der alten Bundesländer (für Messung und Rechnung) sowie der Mittelwert über alle Raster der neuen Bundesländer (nur Rechnung) gebildet. Abbildung 5.1 zeigt den Zeitverlauf der entsprechenden Werte für die beiden Winterhalbjahre.

Die Übereinstimmung von Meß- und Rechenwerten ist in beiden Jahren gut. Erwartungsgemäß liegen, wegen der deutlich höheren Emissionen in den neuen Bundesländern, die errechneten Konzentrationswerte dort auch deutlich über den Werten für die alten Bundesländer. Insbesondere treten Episoden erhöhter Konzentrationswerte in den neuen Bundesländern wesentlich ausgeprägter als in den alten Bundesländern in Erscheinung. Im einzelnen läßt sich folgendes sagen:

Die Witterung des **Winters 1989/90** war durch überdurchschnittlich hohe Temperaturen und das fast völlige Fehlen einer geschlossenen Schneedecke gekennzeichnet. So lag das Klimamittel der Temperatur während der Monate Dezember, Januar und Februar 1989 in Berlin 3.8 K über dem Mittel des Zeitraums 1951 bis 1980 /52/. Die Zahl der Tage mit einer Schneedecke lag beispielsweise mit 9 Tagen in Berlin weit unter dem vieljährigen Durchschnittswert (37.9 Tage). Aufgrund dieser für die Emission und Ausbreitung von Luftschadstoffen günstigen Situation kam es auch bei windschwachen Lagen nicht zu Smogsituationen.

Der **November 1989** begann mit relativ hohen Windgeschwindigkeiten in 850 hPa, die dann mit dem Auftreten antizyklonaler Wetterlagen (Hochdruckbrücke Mitteleuropa und Hoch Mitteleuropa) auf Werte unter 10 m/s abnahmen. Die Hochdrucklagen dauerten bis zum 20. November an. In dieser Zeit traten teilweise auch erhöhte Konzentrationswerte auf, wobei der gemessene Tagesmittelwert (Mittelwert über alle Raster der alten Bundesländer) auf bis zu 60 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ an-

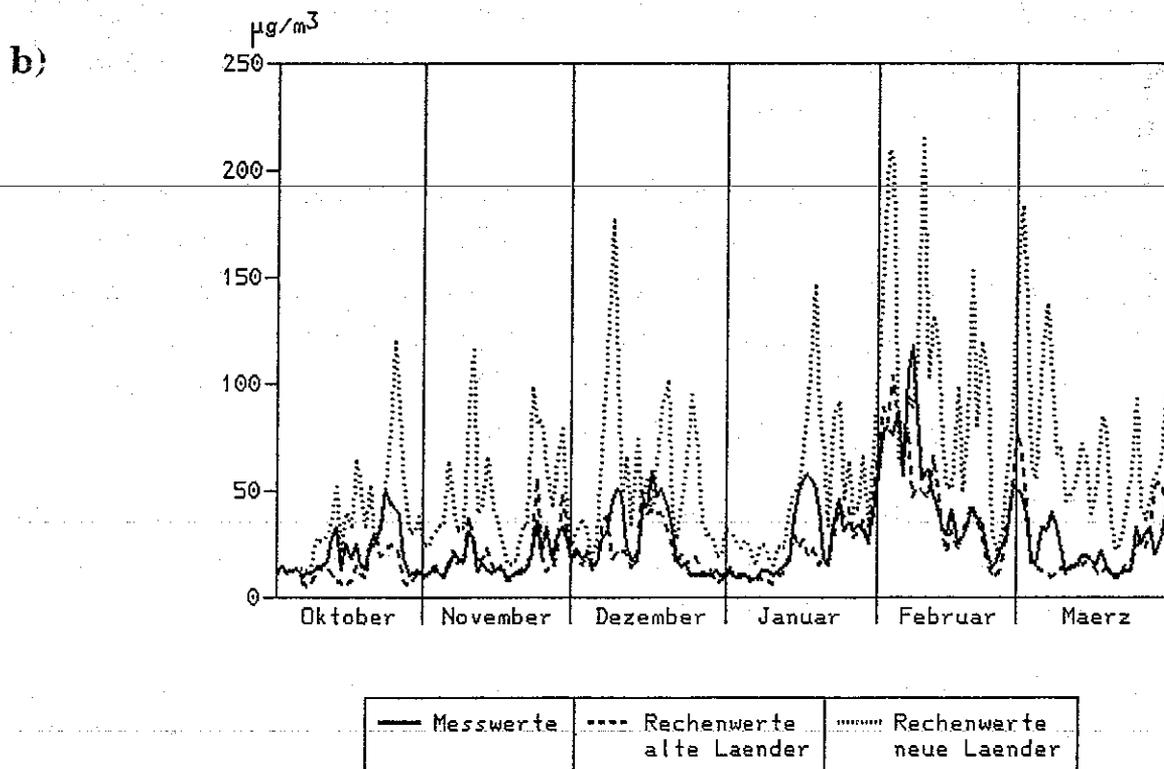
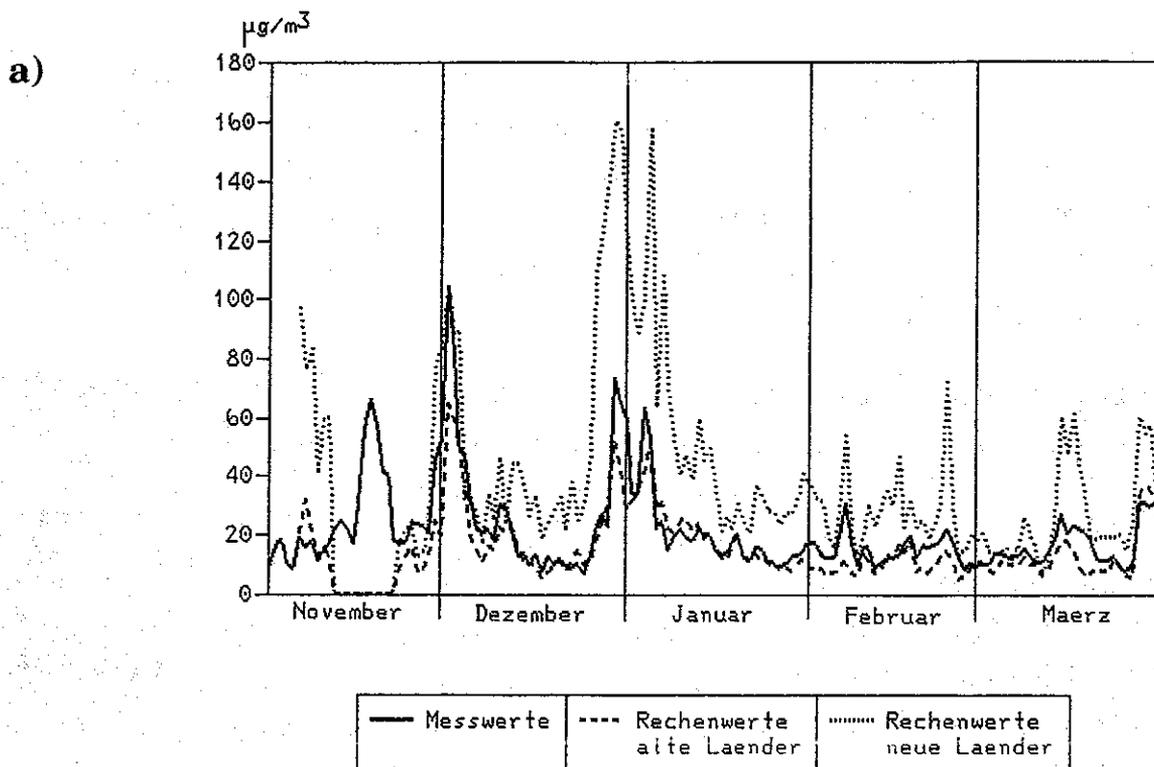


Abb. 5.1: Konzentrationswerte für
a) das Winterhalbjahr 1989/1990
b) das Winterhalbjahr 1990/1991

Dargestellt sind die Mittelwerte der Tagesmittelwerte aller Rasterfelder der alten Bundesländer (Messung und Rechnung) bzw. der neuen Bundesländer (nur Rechnung)

stieg. Danach nahmen die Windgeschwindigkeiten kurzfristig wieder etwas zu und die Konzentrationswerte deutlich ab. Ende des Monats erreichten die Windgeschwindigkeiten erneut ein Minimum, und die Konzentrationswerte nahmen deutlich zu. Wegen eines Rechnerausfalls war es nicht möglich, die Wetterdaten für den gesamten Monat zu archivieren, und daher liegen für den 10.11. bis 22.11. keine errechneten Konzentrationswerte vor.

Anfang **Dezember 1989** setzte sich die Ende November eingeleitete Witterung mit niedrigen Windgeschwindigkeiten fort, und es wurden die höchsten Tagesmittelwerte dieses Winterhalbjahres mit $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bei den Messungen und ca. $70 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bei den Rechnungen (Mittelwert über alle Rasterfelder der alten Bundesländer) erreicht. Die bis zum 11.12. andauernde Hochdruckwetterlage wurde danach von einer zyklonalen Westlage abgelöst, verbunden mit relativ hohen Windgeschwindigkeiten, Niederschlag und geringen Konzentrationswerten. Nach dem 24. Dezember gingen die Windgeschwindigkeiten mit der Entwicklung einer Hochdruckbrücke über Mitteleuropa wieder deutlich zurück, die Konzentrationswerte stiegen an. Gegen Ende des Monats wurden mit ca. $160 \mu\text{g}/\text{m}^3$ die höchsten Werte des Winterhalbjahres für die neuen Bundesländer errechnet. Ein Vergleich mit Meßwerten ist hier bisher nicht möglich.

Der **Januar 1990** war durch zumeist hohe Windgeschwindigkeiten gekennzeichnet. Nur am Anfang des Monats (wie schon Ende Dezember) lagen sie noch im Bereich bzw. unter 20 m/s in 850 hPa und die Konzentrationswerte waren noch leicht erhöht. Danach gab es Perioden mit Windgeschwindigkeiten über 40 m/s ; das Maximum trat am 26. 1. mit ca. 50 m/s auf. Die errechneten und gemessenen Konzentrationswerte lagen auf sehr niedrigem Niveau.

Auch im **Februar 1990** waren die Ausbreitungsbedingungen bei durchweg hohen Windgeschwindigkeiten sehr gut, und es wurden ebenfalls sehr niedrige Konzentrationswerte errechnet und gemessen.

Im **März 1990** setzte sich zunächst die stürmische Witterung des Februars fort. Bis zum 12. 3. schwankten die Windgeschwindigkeiten im 850 hPa -Niveau zwischen 30 m/s und 50 m/s . Nach kurzer Wetterberuhigung und Windgeschwindigkeiten zum Teil unter 10 m/s , verbunden mit einem leichten Anstieg der Konzentrationswerte, gab es wiederum eine Periode mit hohen Windgeschwindigkeiten, die vom 18. bis zum 26. März andauerte. Ende des Monats lagen die Windgeschwindigkeiten wieder etwas niedriger und es setzte über der Bundesrepublik eine Ostströmung ein, was sich auch am Anstieg der gemessenen und berechneten SO_2 -Konzentrationen ablesen läßt.

Der Winter 1990/91 war in den meisten Teilen Deutschlands und dem Nordosten Mitteleuropas durch einen Wärmeüberschuß bei überdurchschnittlicher Sonnenscheindauer gekennzeichnet. Im Gegensatz zum Vorjahr gab es eine größere Zahl von Tagen mit geschlossener Schneedecke (in Berlin: 32 Tage). Es herrschten jedoch in der Regel Wetterlagen vor, die die Ausbreitung von Luftschadstoffen begünstigten, so daß, wie im Vorjahr, die SO₂-Konzentrationen nicht auf extrem hohe Werte ansteigen konnten.

Der Oktober 1990 zeichnete sich durch überdurchschnittliche Temperaturen und Sonnenscheindauer aus. Zu Beginn des Monats lag Mitteleuropa im Bereich der Hauptfrontalzone mit entsprechend guten Ausbreitungsbedingungen. Ab dem 17.10. gab es über Deutschland eine östliche Strömung, die bis zum 26. 10. anhielt. Ursache dafür war ein blockierendes Hoch über Nordeuropa. Die Schadstoffkonzentrationen stiegen in dieser Zeit leicht an und erreichten ihren Monatshöchstwert. Gegen Ende des Monats stellte sich in Mitteleuropa wieder eine Westwindlage ein.

Im November 1990 herrschten im wesentlichen nördliche bis westliche Strömungsverhältnisse mit relativ geringen Schadstoffkonzentrationen vor. Nur zwischen dem 6. und 9. 11., als ein Hoch von den Britischen Inseln über Deutschland hinweg nach Osten wanderte, und zwischen dem 22. und 28. 11., ein Zeitraum, der durch den Einfluß eines quasistationären Troges über Westeuropa bestimmt war, gab es Perioden mit östlichen Windrichtungen. Dies führte allerdings nur zu einer geringen Erhöhung der SO₂-Konzentrationen.

Auch im Dezember 1990 lagen die Schadstoffkonzentrationen auf relativ niedrigem Niveau. Erhöhte SO₂-Konzentrationen gab es zwischen dem 8. und 10. 12. im Einflußbereich einer Hochdruckbrücke über Mitteleuropa. Höhere Konzentrationen in der Zeit vom 15. bis zum 20.12. wurden durch eine östliche Strömung am Rand eines Hochdruckgebietes nördlich Deutschlands verursacht.

In den letzten Tagen des Dezembers und den ersten 12 Tagen des **Januars 1991** lag Mitteleuropa wieder innerhalb der Hauptfrontalzone mit entsprechend guten Ausbreitungsbedingungen. Am 15. Januar bildete sich eine blockierende Antizyklone über der Nordsee, deren Wirksamkeit nur während des Durchzuges von Kurzwellentrögen in der Zeit vom 19. bis zum 21. 1. unterbrochen wurde. Im Einflußbereich des blockierenden Hochs, das sich bis zum Monatsende zum Baltikum verlagerte, herrschten östliche Winde vor, und es kam regional zu Schadstoffkonzentrationen über 200 µg/m³ im Tagesmittel.

Vom 1. bis zum 19. Februar 1991 lagen die Temperaturen auch am Tage überwiegend unter 0°C und vom 6.2. bis zum 22.2. lag in weiten Teilen des Betrachtungsgebietes eine geschlossene Schneedecke. Vom 1.2. bis zum 10.2. kam der Wind an der Südwestseite eines osteuropäischen Hochdruckgebietes überwiegend aus östlichen Richtungen. Dementsprechend lagen in dieser Zeit die gemessenen und errechneten Konzentrationswerte auf recht hohem Niveau und die Tagesmittelwerte über alle Raster der alten Bundesländer erreichten nach den Rechnungen bis zu $100\ \mu\text{g}/\text{m}^3$, nach den Messungen bis zu $120\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ (am 7. Februar). Für die neuen Bundesländer wurden Werte bis zu $200\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ errechnet. Am Monatsende entwickelte sich die gleiche Großwetterlage wie am Anfang des Monats, und es bildete sich eine blockierende Antizyklone über Skandinavien.

Die hierbei kurzfristig erhöhten Schadstoffkonzentrationen verschwanden Anfang März 1991 mit Beendigung der Blockierungslage. Zwischen dem 7. und 10. 3. gab es in der vorherrschend südlichen Strömung über Deutschland eine leichte östliche Komponente, was zu einem leichten Anstieg der Schadstoffkonzentrationen führte. Die Monatsmitteltemperatur lag im März in Mitteleuropa 2 bis 4 K über dem langjährigen Durchschnittswert.

Die in Abbildung 5.1 dargestellten Kurven für den zeitlichen Verlauf der über alle Rasterfelder gemittelten SO_2 - Konzentrationen zeigen zwar deutlich die Episoden erhöhter Konzentrationswerte, geben aber keinen Hinweis darauf, in welchen Gebieten erhöhte Werte auftreten, welche Ausdehnung diese Gebiete haben und wie gut die Übereinstimmung von Messung und Rechnung in der regionalen Verteilung der Werte bzw. in einzelnen Rasterfeldern ist. Aus diesem Grund ist in Abbildung 5.2 für das Winterhalbjahr 1989/1990 und in Abbildung 5.3 für das Winterhalbjahr 1990/1991 der zeitliche Verlauf der Konzentrationswerte (Tagesmittelwerte) für einzelne Rasterfelder dargestellt. Ausgewählt wurden im Osten der alten Bundesländer die Rasterfelder mit den Reinluftstationen Gartow (Rasterfeld 16) und Regnitzlosau (Rasterfeld 39) und im Westen mit den Stationen Gittrup (Rasterfeld 17) und Rottenburg (Rasterfeld 61). (Zur Numerierung der Rasterfelder s. Abb. 4.1 in Abschn. 4.2).

Die Übereinstimmung von Meß- und Rechenwerten ist in diesen Rasterfeldern i.a. recht gut. Deutlich zu erkennen sind in den Feldern mit den Stationen Gartow, Regnitzlosau bzw. Gittrup die bereits beschriebenen Episoden erhöhter Konzentrationen Ende November/Anfang Dezember 1989 (mit gemessenen Werten bis zu $220\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ und errechneten Werten bis zu $160\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ im Rasterfeld Regnitzlosau) sowie Ende Dezember 1989/Anfang Januar 1990. Allerdings werden im Rasterfeld

Gartow Anfang Dezember die gemessenen Werte von $160 \mu\text{g}/\text{m}^3$ stark unterschätzt, da die errechnete Schadstoffahne weiter im Süden verläuft. Ende Dezember 1989/Anfang Januar 1990 werden die gemessenen Werte zeitweise über-, zeitweise aber auch unterschätzt. Im Rasterfeld Rottenburg liegen im gesamten Winterhalbjahr 1989/1990 Meß- und Rechenwerte deutlich unter $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

Im Winterhalbjahr 1990/1991 liegen die höchsten Tagesmittelwerte an den ausgewählten Rasterfeldern leicht über den Werten für das Winterhalbjahr 1989/1990 und es treten wesentlich häufiger Episoden erhöhter Konzentrationswerte auf. Die Übereinstimmung von Messung und Rechnung ist i.a. recht gut, allerdings werden hin und wieder erhöhte Konzentrationswerte errechnet, jedoch nicht gemessen bzw. umgekehrt erhöhte Konzentrationswerte gemessen, jedoch nicht errechnet. In diesen Fällen treten aber meist in benachbarten Rasterfeldern erhöhte Meß- bzw. Rechenwerte auf, der Verlauf der Schadstoffahne wird also nicht in allen Fällen zufriedenstellend beschrieben.

Eine komprimierte Darstellung und Charakterisierung von Episoden erhöhter Schadstoffkonzentrationen aus den beiden Winterhalbjahren enthält Tabelle 5.2. In dieser Tabelle sind für die Termine, zu denen in mindestens einem Rasterfeld der alten Bundesländer der Meß- oder der Rechenwert über $300 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (3 - Stunden - Mittelwert) liegt, folgende Größen angegeben:

- der Termin, zu dem Werte über $300 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auftreten;
- Maximalwert von Messung und Rechnung mit Angabe der entsprechenden Rasterfeldnummer;
- Mittelwert über die 10 höchsten Meß- und Rechenwerte;
- Gebiete, in denen die 10 höchsten Werte auftreten; diese Angaben ermöglichen einen schnellen Überblick über die Gebiete, die bei einzelnen Episoden von erhöhten Werten beaufschlagt werden und zeigen, inwieweit diese Gebiete bei Rechnung und Messung übereinstimmen. Die Abgrenzung dieser Gebiete ist in Abbildung 5.4 dargestellt;
- die Fehlerwerte F1 und F2 zur Bewertung der Qualität der Ergebnisse.

Damit gibt dieser Überblick eine zusammenfassende Darstellung aller Termine, zu denen erhöhte Konzentrationswerte aufgetreten sind und ermöglicht eine Bewertung der Qualität der Ergebnisse dadurch, daß Maximalwerte von Rechnung und Messung sowie beaufschlagte Gebiete einander gegenübergestellt werden. Zusätzlich geben die Fehlerwerte einen Hinweis auf den Grad der Übereinstimmung in den Absolutwerten (F1) und in der regionalen Verteilung (F2).

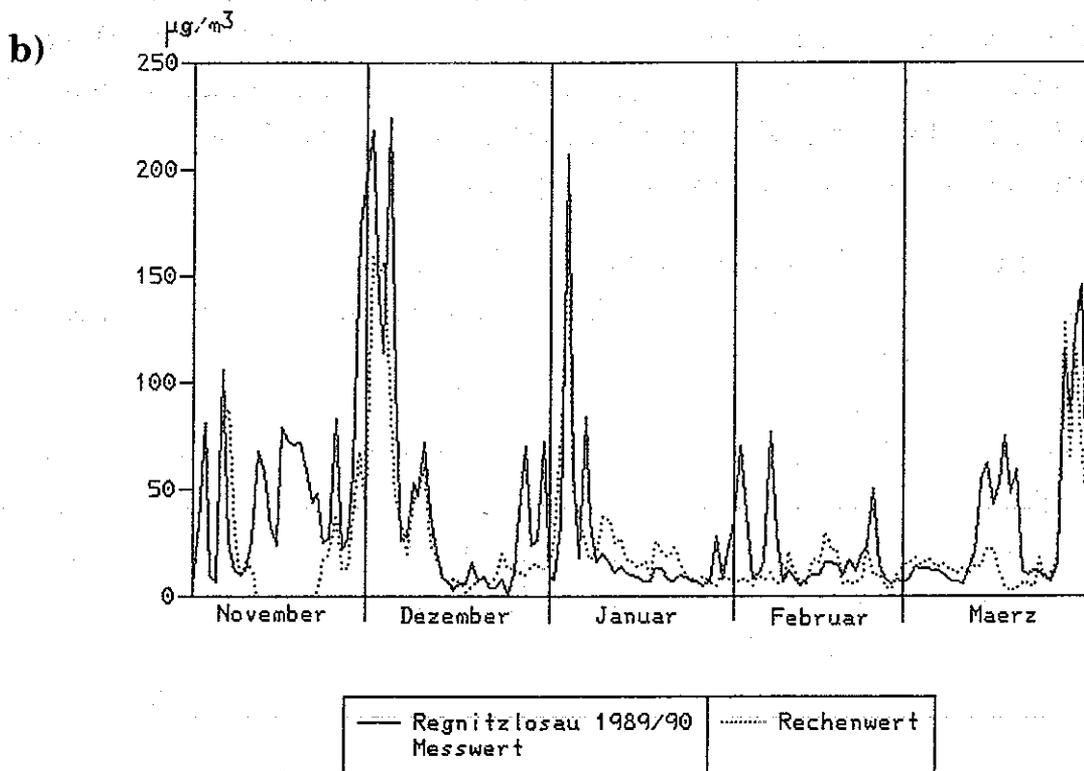
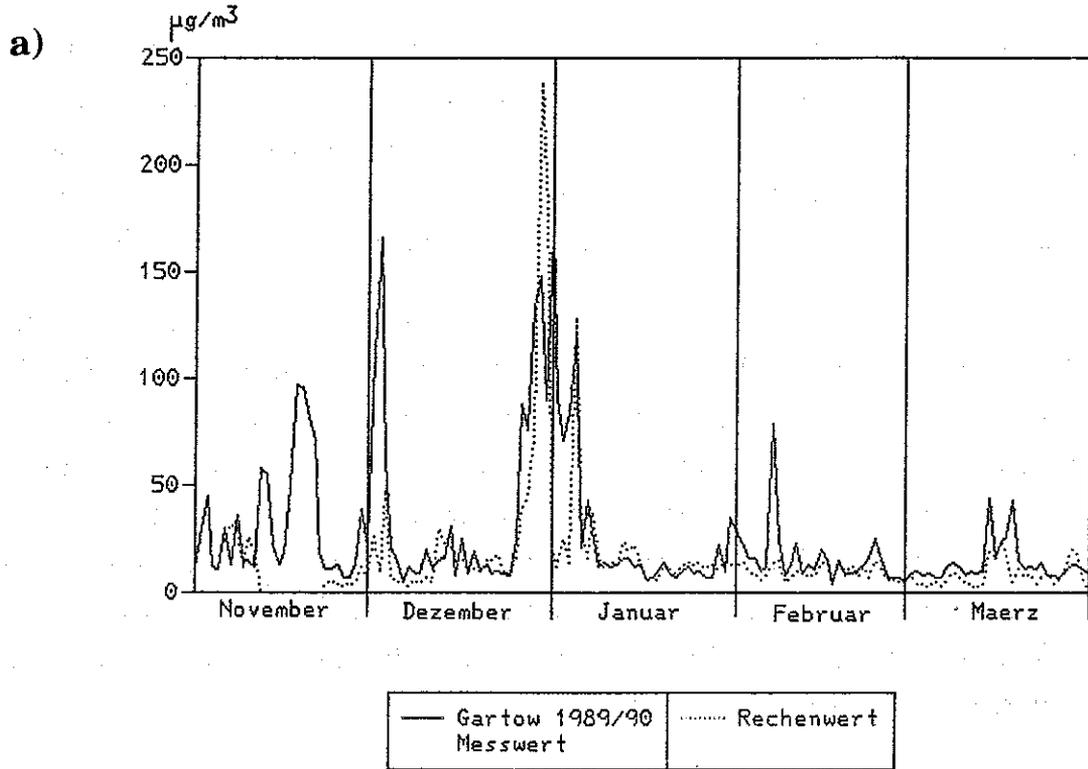


Abb. 5.2: Zeitlicher Verlauf der errechneten und gemessenen Konzentrationswerte im Winterhalbjahr 1989/1990 für die Rasterfelder
a) Gartow (Rasterfeld 16) b) Regnitzlosau (Rasterfeld 39)

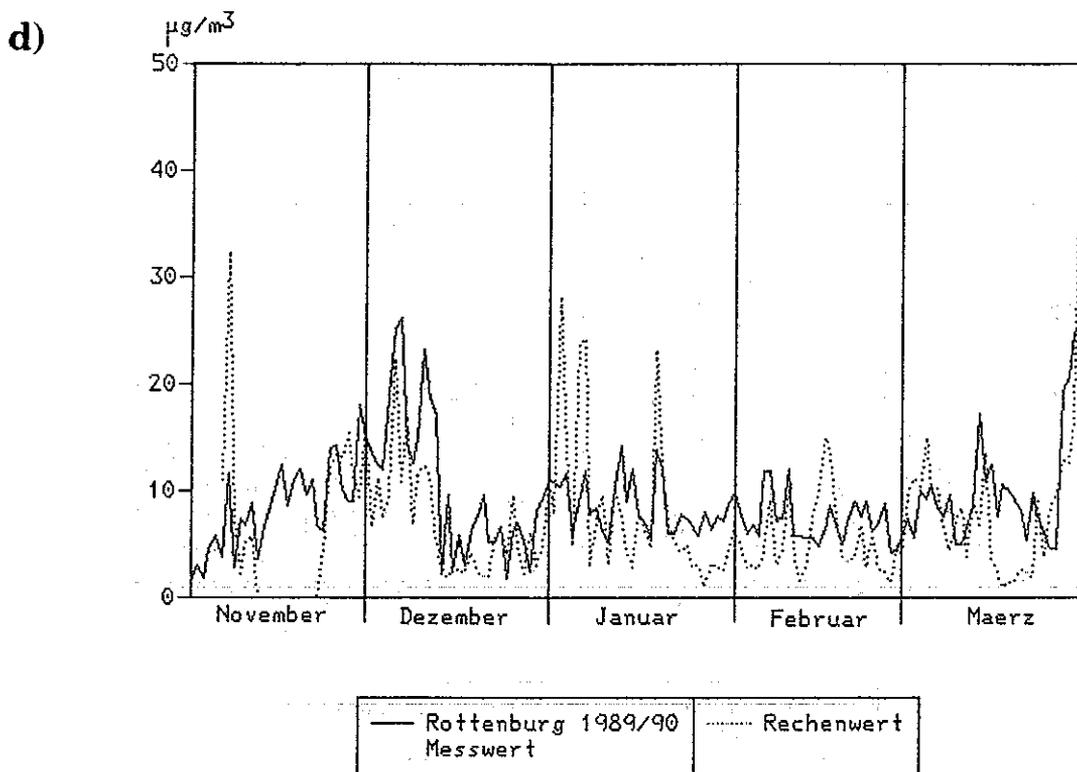
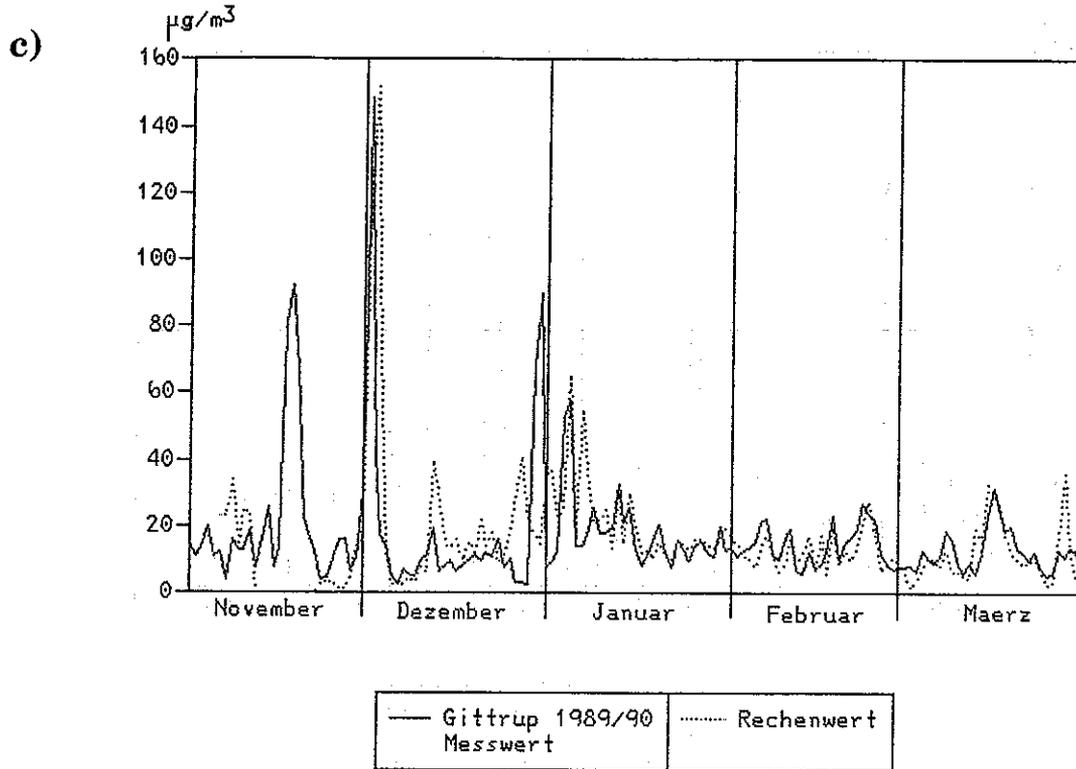


Abb. 5.2: Zeitlicher Verlauf der errechneten und gemessenen Konzentrationswerte im Winterhalbjahr 1989/1990 für die Rasterfelder
c) Gitterup (Rasterfeld 17) d) Rottenburg (Rasterfeld 61)

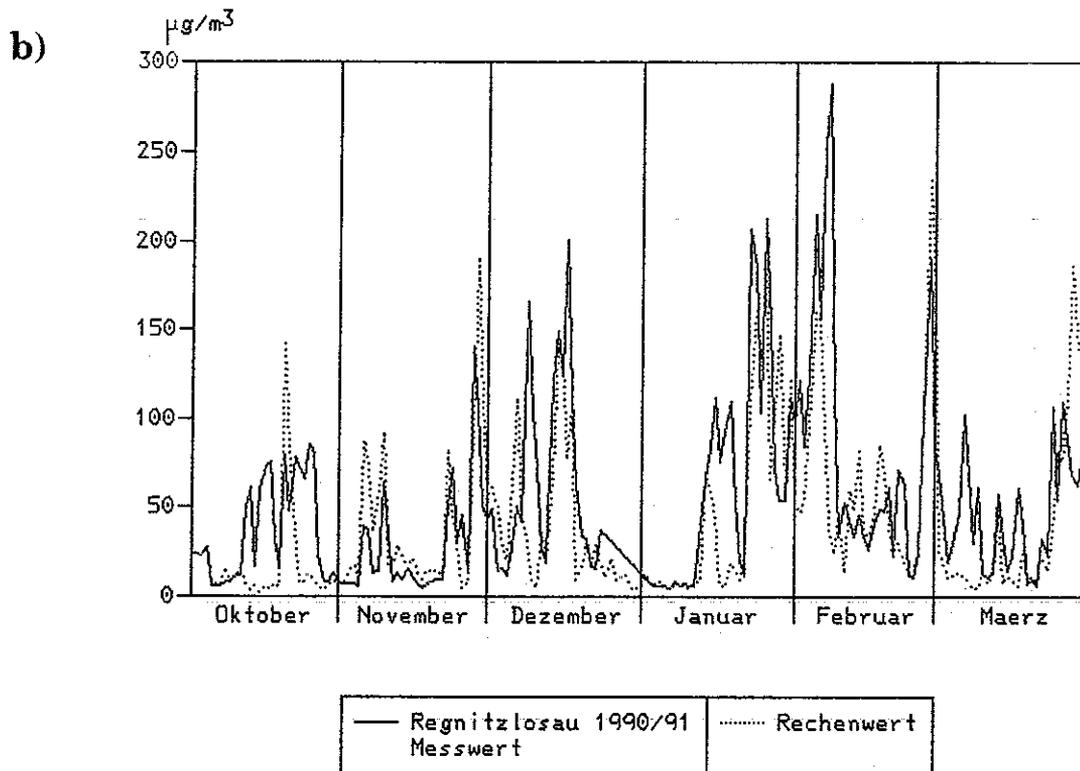
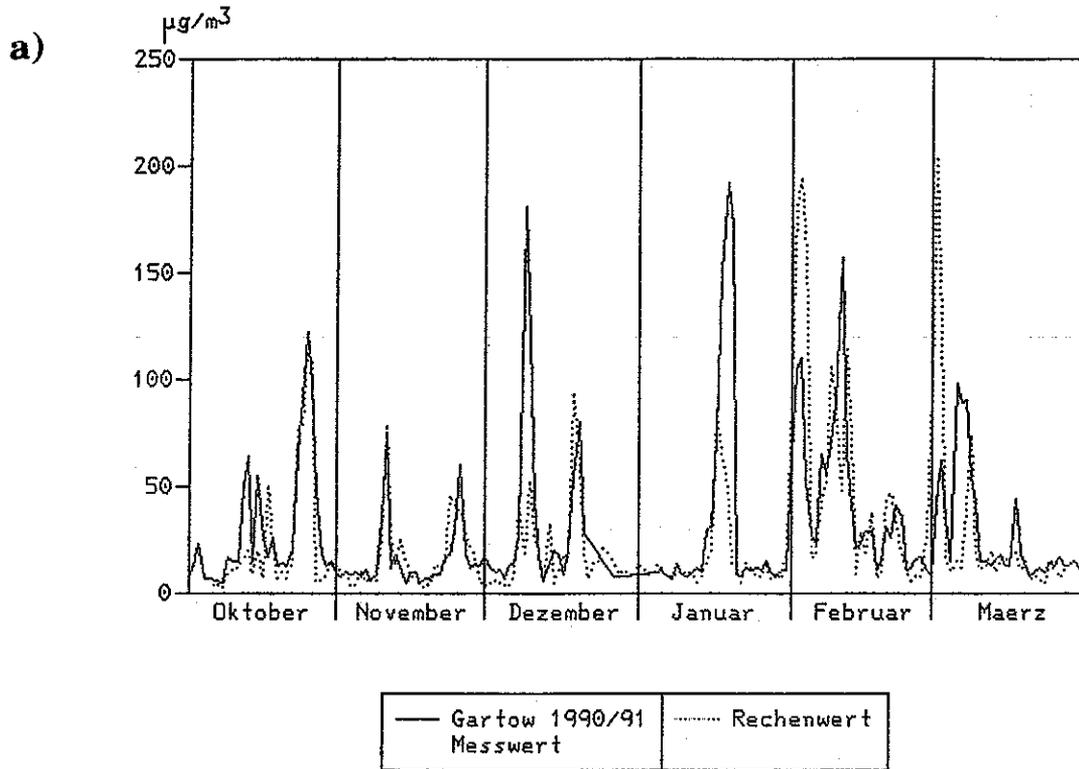


Abb. 5.3: Zeitlicher Verlauf der errechneten und gemessenen Konzentrationswerte im Winterhalbjahr 1990/1991 für die Rasterfelder
a) Gartow b) Regnitzlosau

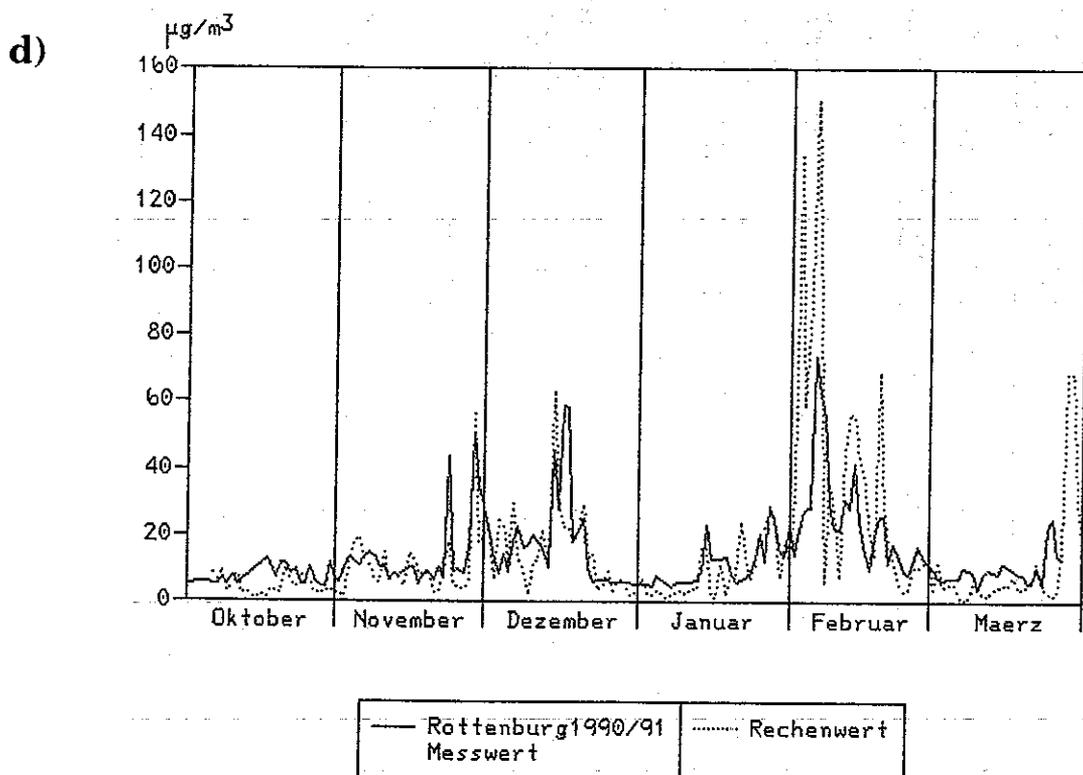
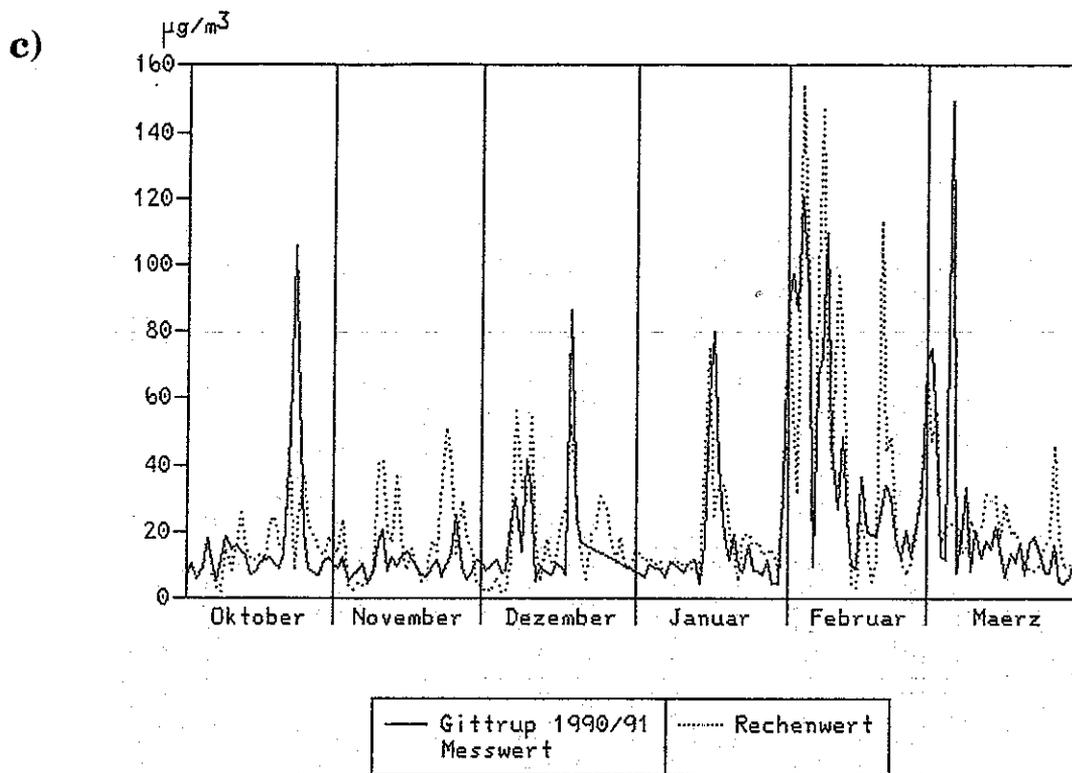


Abb. 5.3: Zeitlicher Verlauf der errechneten und gemessenen Konzentrationswerte im Winterhalbjahr 1990/1991 für die Rasterfelder

c) Gitterup

d) Rottenburg

Termin		Messung			Rechnung			Fehler	
Datum	Uhrzeit	Maximalwert (Raster)	Mittelwert (10)	Gebiet	Maximalwert (Raster)	Mittelwert (10)	Gebiet	F1	F2
29.11.89	21	334 (39)	105	6 4 3 2 5	86 (26)	49	4 5	0.72	0.66
30.11.89	12	322 (20)	168	3 6 4 2 5	105 (66)	65	5 4 6	0.67	0.59
30.11.89	15	352 (20)	179	3 6 2 4	104 (66)	64	5 4 3	0.68	0.72
30.11.89	18	453 (20)	197	3 2 6 4	90 (25)	63	3 4 5	0.74	0.37
30.11.89	21	529 (20)	260	3 2 4 6	203 (25)	79	3 5 4 6 2	0.67	0.33
1.12.89	0	626 (23)	309	4 3 2 6	300 (25)	118	3 2 6 4 5	0.63	0.26
1.12.89	3	628 (23)	339	4 3 2 6	266 (24)	156	2 3 6 4 1	0.55	0.29
1.12.89	6	445 (23)	331	4 3 2 6 1	227 (24)	153	2 3 6 4 1	0.54	0.21
1.12.89	9	496 (25)	334	3 4 6 2 1	481 (25)	301	3 6 2 7	0.16	0.30
1.12.89	12	614 (25)	335	3 4 2 6 1	594 (29)	335	4 3 2 6	0.09	0.26
1.12.89	15	450 (25)	286	3 4 6 1 2	429 (23)	322	4 2 3 6	0.12	0.30
1.12.89	18	471 (20)	247	3 4 6 1 2	360 (22)	279	4 2 3	0.22	0.37
1.12.89	21	530 (20)	227	3 4 1 6 2	318 (17)	224	4 2 3	0.30	0.36
2.12.89	0	493 (20)	211	3 4 1 2 6	265 (25)	188	3 2 4	0.35	0.27
2.12.89	3	380 (20)	203	3 4 1 2	284 (25)	176	3 2 4 6	0.24	0.32
2.12.89	6	351 (20)	199	3 4 1 2 6	164 (29)	139	4 2 3 6	0.40	0.29
2.12.89	9	424 (16)	245	3 4 1 6	327 (29)	214	4 2 3 6	0.21	0.33
2.12.89	12	349 (29)	242	4 3 1 6	351 (25)	262	3 2 4 1	0.12	0.33
2.12.89	18	324 (29)	145	4 3 6 1 2	188 (45)	146	6 4 2	0.29	0.31
2.12.89	21	317 (29)	131	4 3 6 1 2	193 (45)	125	6 4 1 3	0.34	0.26
3.12.89	9	209 (46)	112	6 4 2 3 1	345 (37)	223	4 6 2 1 3	0.78	0.35
4.12.89	12	300 (39)	160	6 4 5 7	234 (51)	178	7 5 6	0.25	0.38
4.12.89	15	384 (39)	165	6 4 5 3 7	154 (57)	125	7 5 6	0.50	0.32
29.12.89	6	333 (20)	160	3 1 2 4	228 (7)	159	1 3 2	0.22	0.20
29.12.89	9	435 (25)	208	3 2 1 4	376 (15)	214	1 3 2	0.19	0.20
29.12.89	12	313 (25)	191	3 2 1	353 (15)	218	1 3 2	0.17	0.25
29.12.89	15	414 (24)	205	2 3 1	350 (12)	237	3 1 2	0.22	0.28
29.12.89	18	559 (25)	207	3 2 1	437 (16)	265	3 1 2	0.23	0.28
29.12.89	21	308 (18)	201	2 3 4 1	394 (16)	263	3 1 2	0.25	0.33
30.12.89	0	366 (19)	191	2 3 4 6 1	332 (11)	227	1 3 2	0.17	0.36
30.12.89	9	187 (20)	135	3 2 1	424 (7)	226	1 3 2	0.76	0.31
30.12.89	12	214 (20)	132	3 2 1	351 (6)	218	1 3 2 4	0.68	0.39
30.12.89	15	228 (20)	135	3 1 2	357 (8)	151	3 1 2 4	0.33	0.43
31.12.89	3	315 (20)	143	3 1 2	142 (4)	79	3 1 4 5	0.53	0.49
31.12.89	6	346 (20)	160	3 2 1	125 (4)	69	3 4 1 5	0.62	0.52
31.12.89	9	367 (20)	164	3 2 1	135 (4)	80	3 4 1 5	0.58	0.60
31.12.89	15	356 (16)	167	3 2 1	147 (27)	99	4 3 1	0.50	0.61
3. 1.90	9	360 (39)	191	6 3 2 4	213 (46)	126	6 7 4 5	0.39	0.45
3. 1.90	12	376 (25)	211	3 2 6 4	264 (45)	176	6 7	0.22	0.52
3. 1.90	15	348 (24)	227	2 3 4 6 1	198 (39)	129	6 7 3	0.44	0.55
3. 1.90	18	324 (25)	247	3 2 1 4	187 (39)	108	6 3 4 7	0.54	0.46
3. 1.90	21	347 (25)	253	3 2 4 1	227 (25)	131	3 4 6 2 7	0.46	0.35
4. 1.90	0	322 (19)	247	2 1 3 4	282 (25)	135	3 2 4 6 7	0.42	0.34
4. 1.90	12	239 (16)	180	3 1	334 (12)	232	3 1 4 2	0.32	0.28

Tab. 5.2a: Zusammenstellung der Maximalwerte von SO₂ (µg/m³), der beaufschlagten Gebiete sowie der Fehlerwerte für Termine, an denen in mindestens einem Rasterfeld der alten Bundesländer die Meß- oder Rechenwerte über 300 µg/m³ liegen (Winterhalbjahr 1989/1990)

Termin		Messung			Rechnung			Fehler	
Datum	Uhrzeit	Maximalwert (Raster)	Mittelwert (10)	Gebiet	Maximalwert (Raster)	Mittelwert (10)	Gebiet	F1	F2
20.10.90	21	109 (46)	65	6 4 5	321 (45)	168	6 7 5	1.58	0.30
22.10.90	21	306 (25)	143	3 2 4	117 (20)	79	3 2 1	0.54	0.31
23.10.90	9	304 (25)	156	3 2 4 6	83 (20)	61	3 1 2	0.69	0.32
23.11.90	3	127 (42)	105	5 4 6	314 (29)	203	4 5	0.85	0.35
23.11.90	6	102 (46)	78	6 5 4	301 (31)	199	4 5 3	1.27	0.49
27.11.90	12	374 (46)	104	6 7 4 5	117 (39)	55	6 4 5 3 2	0.66	0.76
27.11.90	15	345 (46)	141	6 7 5	187 (39)	84	6 4 3 5	0.49	0.30
27.11.90	18	334 (39)	161	6 7 5	216 (45)	122	6 7 4 5	0.32	0.12
8.12.90	3	545 (46)	137	6 3 5 4	66 (25)	45	3 1 6 2	0.87	1.04
8.12.90	6	510 (46)	172	6 3 5 1	47 (16)	39	3 1 6 4	0.88	0.55
8.12.90	9	621 (46)	213	6 3 1 5	46 (22)	36	4 3 1 6 2	0.90	0.70
8.12.90	15	317 (16)	166	3 6 1	38 (22)	31	4 1 7 3 2	0.84	0.43
8.12.90	18	358 (16)	162	3 1 6	39 (6)	31	1 4 7 3	0.85	0.62
13.12.90	18	333 (39)	69	6 4 5 7	346 (46)	135	6 4 1 3 2	0.05	0.26
13.12.90	21	292 (39)	60	6 4 5 7	319 (46)	198	6 7 4 5	0.12	0.24
14.12.90	0	211 (39)	109	6 7 5	432 (52)	224	7 6 5	1.06	0.19
14.12.90	3	234 (39)	109	6 7 5	349 (57)	227	7 6 5	0.82	0.28
16.12.90	15	303 (39)	139	6 5 7	113 (52)	85	7 6 5 4	0.50	0.20
17. 1.91	18	484 (16)	191	3 1 6	77 (22)	59	4 5 3 2	0.79	0.60
17. 1.91	21	408 (16)	197	3 1	84 (22)	62	4 5 2 3	0.74	0.62
18. 1.91	0	313 (16)	165	3 1	78 (47)	58	5 4 2 1 3	0.71	0.78
18. 1.91	18	420 (16)	182	3 6 1 7	116 (12)	68	3 4 5	0.71	0.25
18. 1.91	21	614 (16)	257	3 1 6 2	85 (4)	49	3 4 5	0.84	0.29
19. 1.91	0	634 (16)	277	3 1	39 (22)	33	4 3 2 6	0.92	0.44
19. 1.91	3	420 (16)	256	3 1	28 (22)	24	4 6 3 1 7	0.92	0.71
22. 1.91	9	312 (39)	116	6 3 7 2 4	149 (25)	63	3 2 6 4 7	0.51	0.46
24. 1.91	9	141 (46)	89	6 7 4 5	309 (59)	123	7 6 4 5	0.59	0.35
25. 1.91	15	331 (39)	108	6 5 7	165 (39)	115	6 5 7	0.47	0.26
25. 1.91	18	309 (39)	108	6 7 5	193 (39)	90	6 4 5 7	0.39	0.17
31. 1.91	0	119 (18)	106	2 4 3	306 (20)	196	3 2 4 1	0.75	0.32
31. 1.91	3	154 (25)	103	3 4 2	350 (20)	234	3 2 1 4	1.07	0.26
31. 1.91	6	235 (25)	117	3 2 4 6	356 (14)	264	2 1 3 4	0.83	0.34
31. 1.91	9	310 (25)	139	3 2 4 1 6	228 (18)	196	2 3 1 4	0.33	0.27
31. 1.91	15	348 (25)	143	3 2 4 1 6	220 (25)	166	3 1 2	0.36	0.18
31. 1.91	18	354 (24)	179	2 3 4 6 1	268 (20)	182	3 1 2	0.29	0.28
1. 2.91	0	293 (23)	195	4 3 2 6	444 (16)	273	3 1	0.36	0.45
1. 2.91	3	265 (23)	177	4 3 2 1	378 (16)	289	3 1	0.48	0.42
1. 2.91	6	231 (23)	167	4 3 1 2 6	323 (20)	264	3 1	0.36	0.34
1. 2.91	9	272 (20)	188	3 1 4 6 2	305 (20)	222	3 1	0.15	0.30
1. 2.91	12	258 (20)	168	3 2 1 4	318 (20)	216	3 1 2 5	0.21	0.27
1. 2.91	15	281 (25)	172	3 2 1 4 6	426 (20)	234	3 1 5	0.33	0.36
1. 2.91	18	385 (25)	192	3 2 4 6	410 (20)	251	3 1 2	0.19	0.36
1. 2.91	21	287 (24)	199	2 3 4 1 6	373 (16)	260	3 1 2 5	0.24	0.36
2. 2.91	0	322 (23)	190	4 2 3 1	458 (11)	282	1 3 2	0.41	0.37
2. 2.91	3	277 (23)	163	4 3 2 1	405 (11)	295	1 3	0.60	0.40
2. 2.91	6	201 (23)	144	4 3 2 1	427 (4)	298	3 1 5	0.79	0.42
2. 2.91	9	207 (20)	161	3 4 1 2	354 (6)	263	1 5 3	0.41	0.47
2. 2.91	21	299 (25)	154	3 2 4 1	428 (25)	223	3 5 6 4 7	0.38	0.44

Tab. 5.2b: Zusammenstellung der Maximalwerte von SO₂ (µg/m³), der beaufschlagten Gebiete sowie der Fehlerwerte für Termine, an denen in mindestens einem Rasterfeld der alten Bundesländer die Meß- oder Rechenwerte über 300 µg/m³ liegen (Winterhalbjahr 1990/1991)

Termin		Messung			Rechnung			Fehler	
Datum	Uhrzeit	Maximalwert (Raster)	Mittelwert (10)	Gebiet	Maximalwert (Raster)	Mittelwert (10)	Gebiet	F1	F2
3. 2.91	0	297 (23)	178	4 3 2 6 1	602 (25)	267	3 4 5 7 6	0.52	0.41
3. 2.91	3	472 (23)	180	4 3 2 6 1	560 (25)	285	3 4 1 2 5	0.34	0.33
3. 2.91	6	379 (23)	173	4 3 2 6 1	600 (29)	316	4 3 7 2 1	0.69	0.27
3. 2.91	9	368 (25)	207	3 4 2 6	402 (25)	283	3 2 4 1 7	0.24	0.26
3. 2.91	12	527 (25)	232	3 2 4	431 (25)	276	3 7 2 4 1	0.21	0.19
3. 2.91	15	507 (25)	225	3 2 4	393 (70)	256	7 3 2 4	0.33	0.20
3. 2.91	18	358 (29)	219	4 3 2 6	333 (23)	250	4 7 3 2	0.23	0.32
3. 2.91	21	312 (29)	234	4 3 2 6	255 (25)	233	3 4 7 2	0.18	0.35
4. 2.91	6	352 (23)	226	4 6	303 (29)	223	4 6 7 2 5	0.11	0.26
4. 2.91	9	351 (33)	257	4 6	300 (45)	217	6 4 7	0.19	0.26
4. 2.91	12	310 (46)	215	6 4 7	225 (52)	193	7 6 4	0.13	0.22
4. 2.91	18	314 (39)	195	6 7 5 4	224 (52)	198	7 5 6	0.27	0.21
4. 2.91	21	302 (46)	194	6 7 5	256 (52)	195	7 5 6	0.19	0.27
5. 2.91	6	150 (54)	122	5 6 7	316 (62)	170	5	0.36	0.30
6. 2.91	15	302 (39)	216	6 4 3 5	195 (25)	152	3 4 2 5	0.32	0.34
6. 2.91	18	309 (39)	240	6 4 5	279 (25)	183	3 4 2	0.28	0.47
6. 2.91	21	346 (39)	255	6 5 4	296 (25)	196	3 2 4 1	0.32	0.56
7. 2.91	0	348 (39)	248	6 4 5	284 (18)	182	2 3 4 1	0.37	0.61
7. 2.91	3	312 (39)	239	6 4 5	209 (17)	159	4 2 3 1	0.43	0.56
7. 2.91	15	302 (39)	230	6 4	154 (20)	122	3 2 4 1	0.52	0.48
8. 2.91	18	326 (25)	173	3 2 4	178 (12)	125	3 1 2 4	0.36	0.35
8. 2.91	21	308 (25)	145	3 2 4 1	180 (8)	125	3 1	0.29	0.43
9. 2.91	18	345 (16)	144	3 1 2	240 (2)	133	1 3 4	0.32	0.43
27. 2.91	0	147 (39)	94	6 4 2 7 3	392 (39)	159	6 7 4 5	0.91	0.34
27. 2.91	3	168 (29)	109	4 6 2 3	335 (39)	128	6 7 4	0.34	0.38
27. 2.91	12	330 (39)	155	6 4	373 (46)	151	6 7 4 5	0.17	0.37
27. 2.91	15	209 (38)	142	6 4 5	391 (46)	168	6 7 4	0.32	0.37
27. 2.91	18	177 (29)	126	4 6 5	430 (45)	202	6 4 7 3	0.58	0.41
27. 2.91	21	146 (29)	125	4 6	355 (39)	270	6 4 3 2 7	0.98	0.30
28. 2.91	0	184 (29)	134	4 6 3 7	379 (38)	279	6 2 4 3	0.91	0.30
28. 2.91	3	184 (29)	125	4 3 2 6	333 (18)	251	2 3 6	0.77	0.35
28. 2.91	6	179 (25)	125	3 4 2 6	419 (25)	262	3 4 2 6 7	0.99	0.24
28. 2.91	9	223 (25)	119	3 2 4 6	466 (24)	273	2 3 4 7	1.18	0.20
28. 2.91	12	246 (25)	120	3 2 4 6	337 (14)	253	2 3 1 6	0.66	0.19
28. 2.91	21	234 (23)	132	4 3 2 6	374 (16)	234	3 1 2	0.58	0.36
1. 3.91	0	213 (25)	131	3 4 2 6	387 (16)	237	3 1 2	0.62	0.41
1. 3.91	3	218 (25)	124	3 2 4 6	539 (16)	259	3 1	0.91	0.41
1. 3.91	6	227 (25)	119	3 2 4 6	456 (16)	267	3 1	1.00	0.42
1. 3.91	15	311 (25)	130	3 2 4 1	274 (20)	191	3 1 2	0.25	0.29
1. 3.91	18	290 (25)	146	3 2 4	323 (20)	217	3 1 2	0.22	0.33
1. 3.91	21	253 (23)	154	4 3 2	372 (20)	252	3 1 2	0.55	0.33
2. 3.91	0	282 (23)	151	4 3 2	410 (25)	251	3 1	0.54	0.33
2. 3.91	3	208 (23)	121	4 2 3	391 (20)	243	3 1	0.83	0.42
2. 3.91	6	141 (23)	98	4 2 3 1	404 (16)	225	3 1	1.14	0.37
28. 3.91	6	64 (49)	42	5 4 1	331 (46)	216	6 7 5	3.65	0.68
28. 3.91	9	66 (49)	29	5 4 3 2	348 (46)	215	6 7 5	4.46	0.72

Tab. 5.2c: Zusammenstellung der Maximalwerte von SO₂ (µg/m³), der beaufschlagten Gebiete sowie der Fehlerwerte für Termine, an denen in mindestens einem Rasterfeld der alten Bundesländer die Meß- oder Rechenwerte über 300 µg/m³ liegen (Fortsetzung Winterhalbjahr 1990/1991)

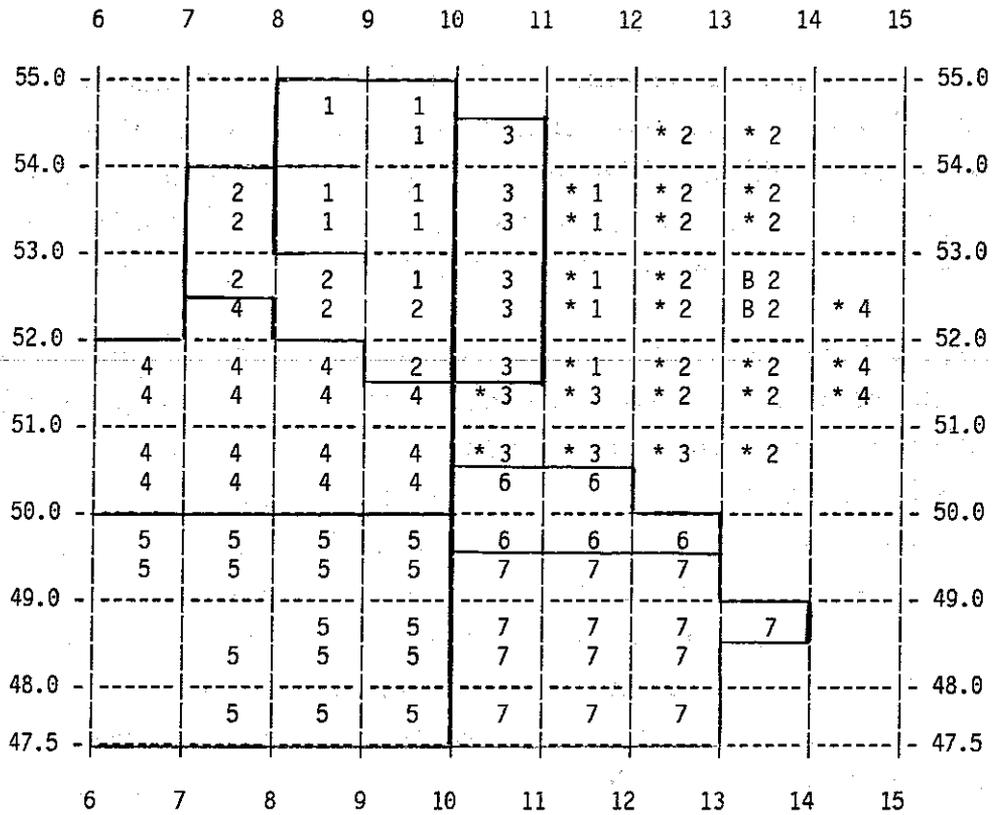


Abb. 5.4: Abgrenzung von Regionen in den alten und in den neuen (*) Bundesländern

5.3 Detaillierte Darstellung der Ergebnisse ausgewählter Episoden

5.3.1 Januar 1985

Die Episode vom Januar 1985 (14.1. - 21.1. 85) ist in /53 / ausführlich beschrieben. Im folgenden sollen daher nur die Merkmale wiedergegeben werden, die zur Interpretation der für diese Episode durchgeführten Rechnungen erforderlich sind:

Auf der Ostseite eines zwischen Südfrankreich und Irland liegenden kalten Höhentiefdruckgebietes drehte am 14.1. nachmittags in Höhen über 1500 m der Wind auf Südost bis Süd, und es wurde Warmluft über die Alpen nach Deutschland transportiert. Am Boden wehte am 13. und 14.1. zwischen einem Hochdruckgebiet über Skandinavien und tiefem Druck über dem Golf von Genua mit östlichem bis nordöstlichem, z.T. sehr lebhaftem Wind, sehr kalte arktische Polarluft von Rußland über Deutschland hinweg bis nach Spanien und Norwestafrika. Die von Süden über die Alpen heranströmende Warmluft legte sich über den Kaltluftstrom und vermischte sich nur langsam mit der Kaltluft, so daß sich über ganz Deutschland eine Temperaturinversion bildete, die eine Mächtigkeit von z. T.

über 1000 m und eine Temperaturzunahme mit der Höhe um ca. 10°C aufwies. Die Inversion war am 16. und 17.1. am stärksten und hielt sich bis zum 21., als ein von Westen heranziehender Tiefdruckwirbel sie beseitigte. Durch Sonneneinstrahlung und Hebungsprozesse in einer leicht zyklonalen Luftströmung über Deutschland hielt sich bis etwa 200 m Höhe über dem Boden eine Austauschschicht.

Mit dem Einsetzen der von Süden kommenden Warmluftströmung bildete sich ab dem 14.1. nördlich der Alpen ein Bereich geringer Luftdruckgegensätze. In seinem nördlichen Bereich, einschließlich des Ruhrgebietes, wurde vom 16.1. bis 20.1. eine östliche Luftströmung beobachtet, die teilweise so schwach war, daß sie durch geländebedingte Zirkulationen überlagert wurde. Südlich der Linie Köln-Kassel wurde häufig schwacher Wind aus wechselnden Richtungen festgestellt. Der im nördlichen Bereich und auch im Gebiet östlich der Elbe beobachtete Wind, der im Laufe der Zeit langsam von Nordost auf Südost drehte, wurde von dem skandinavischen Hochdruckgebiet verursacht, das sich mit seinem Schwerpunkt nach Südosten in Richtung auf das Schwarze Meer verlagerte und sich dabei bis zum 16.1. zunächst verstärkte und dann bis zum 19.1. auflöste.

Die austauscharme Wetterlage wurde durch ein Tiefdruckgebiet beendet, das am 20. und 21.1. von Westen über Deutschland hinwegzog. Vor seiner Warmfront sank die Höhe der Mischungsschicht in der norddeutschen Tiefebene durch beginnende Warmluftadvektion in der Höhe nochmals auf 100 m bis 300 m Höhe ab. Bei auffrischendem Südostwind wurden Schadstoffe in breitem Strom nach Nordwest transportiert; vermutlich wurde dieser Effekt vor dem Frontdurchgang auch durch intensives Herabmischen zum Boden verstärkt. So entstanden, von Süd nach Nord fortschreitend, in der Nordhälfte der Bundesrepublik bis nach Dänemark und im nordöstlichen Teil der Niederlande an allen Meßstellen sehr ähnliche Immissionsverläufe mit sehr hohen Konzentrationen. Schließlich erfaßte der Luftmassenwechsel auch die bodennahen Luftschichten und beendete unter Drehung des Windes über Süd auf Südwest die austauscharme Wetterlage. Der zeitliche Verlauf der Konzentrationswerte läßt sich nach /53/ in 3 Phasen aufteilen:

Am 14./15.1. kam es aufgrund der Inversionswetterlage und der Winddrehung auf östliche Richtungen am Boden in großen Teilen der Bundesrepublik zu einem deutlichen Konzentrationsanstieg für SO₂, der nur den äußersten Norden und Süden aussparte. Während sich in der ersten Phase (bis 16./17.1.) die Belastungsschwerpunkte von Nord - / Mittelhessen über das Rhein - Maingebiet in südwestlicher Richtung bis zum Saarland erstreckten, war in der zweiten Phase (16./17.1. bis 20.1.) in erster Linie die mittlere Bundesrepublik mit den Regionen Nord-Hes-

sen, Rhein-Ruhrgebiet und Teilen Südostniedersachsens betroffen. In der Endphase (20./21.1.) kam es vor dem Frontdurchgang eines Tiefausläufers, der die Smogperiode beendete, in Nordosthessen und im westlichen Ruhrgebiet noch einmal zu einem deutlichen Konzentrationsanstieg, der sich nach Norden fortsetzte und bis zum 21.1. die gesamte norddeutsche Tiefebene erfaßte.

Analysen der Konzentrationsverteilung und des zeitlichen Verlaufs der Konzentrationswerte in Verbindung mit der Wetterlage haben weiterhin gezeigt, daß die SO₂-Konzentrationsverteilung in der Bundesrepublik überwiegend durch Ferntransport aus östlichen Richtungen bestimmt wurde. So ergeben sich Transportanteile von ca. 90% in ländlichen Gebieten nahe der Grenze alte/neue Bundesländer und in Schleswig-Holstein (am 21.1.) bis zu Ferntransportbeiträgen von 30% bis 50% im westlichen Ruhrgebiet. Das höchste SO₂ - Tagesmittel wurde an einer Waldmeßstation in Nordosthessen beobachtet (1275 µg/m³ am 20.1. in Grebenau).

Der Schadstofftransport war während dieser Episode stark von der Transporthöhe abhängig. Dies kam besonders deutlich am 21.1.85, dem Ende der Smogepisode, zum Ausdruck. Wie Abbildung 5.5 zeigt, kam für den Rezeptorpunkt Hamburg der Wind an diesem Tag in Bodennähe aus östlichen bis südöstlichen Richtungen, im 950 hPa - Niveau aus südlichen, im 850 hPa - Niveau (dieses Niveau liegt den Rechnungen mit SMOVO zugrunde) aus südwestlichen und im 700 hPa - Niveau aus westlichen Richtungen. Darüberhinaus war während der gesamten Episode der Wind am Boden deutlich geringer als in der Höhe.

Das Modell SMOVO ist nicht in der Lage, die verschiedenen Transportrichtungen und -geschwindigkeiten in unterschiedlichen Höhen zu berücksichtigen. Selbst ein Mehrschichtenmodell könnte dies nicht in geeigneter Weise leisten, da die meteorologischen Eingabedaten lediglich das Windfeld in 950 hPa und in 850 hPa enthalten, Angaben über den Bodenwind bzw. über dazwischenliegende Niveaus jedoch nicht vorliegen. Aus diesem Grund kann für diese Episode keine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung erwartet werden.

Abbildung 5.6 zeigt mit Hilfe von CYTRA10 aus den IGEL-Daten berechnete Rückwärtstrajektorien für das 850 hPa - Niveau, die den Rezeptorpunkt Hamburg in der Zeit vom 15.1. - 21.1.85 um 12 Uhr erreichten. Danach kamen die Luftmassen bis zum 18.1. überwiegend aus Südost, am 19. und 20.1. aus Nordost und am 21.1. aus Südwest. Nach den Rechnungen mit SMOVO wurde vom 15.1. bis zum 18.1. der Norden der alten Bundesländer mit Tagesmittelwerten bis 320 µg/m³ und 3-Stunden-Mittelwerten bis 450 µg/m³ beaufschlagt. Am 19.1. und 20.1. wurde mit einer Winddrehung auf Ost bis Nordost die Mitte der Bundesrepublik be-

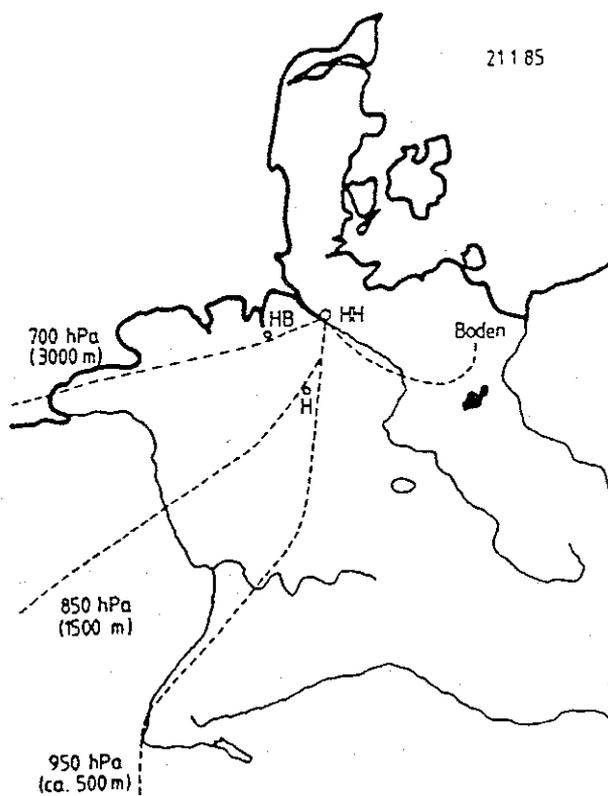


Abb. 5.5: Luftmassentrajektorien für den Rezeptorpunkt Hamburg in verschiedenen Höhenniveaus; Ankunftszeit 21.1.1985 um 12 Uhr (nach /53/)

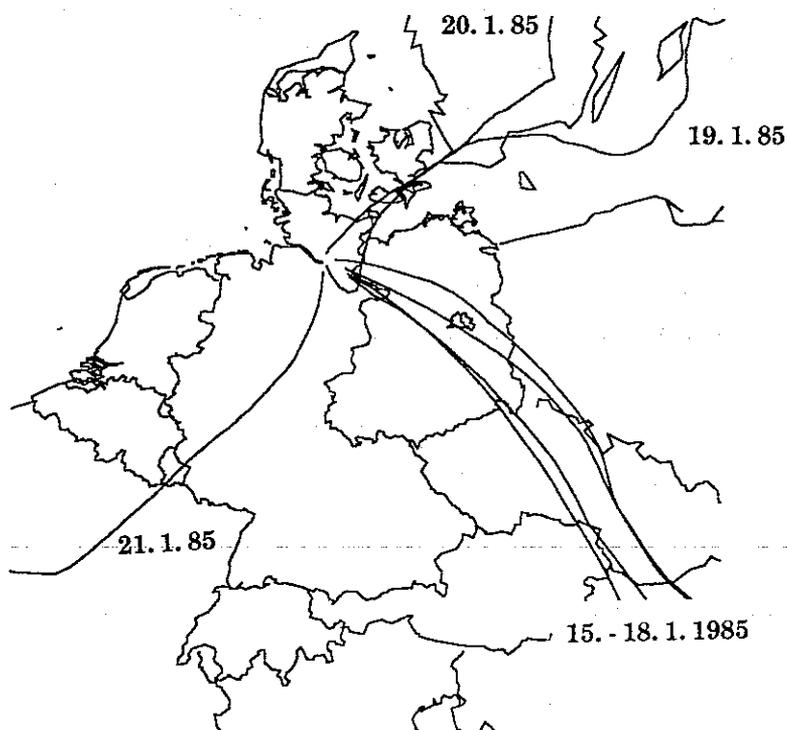


Abb. 5.6: Luftmassentrajektorien für das 850 hPa - Niveau nach den Prognosedaten (IGEL-Daten) für den Rezeptorpunkt Hamburg; Ankunftszeit 15.1. bis 21.1.1985, jeweils 12 Uhr (berechnet mit CYTRA10)

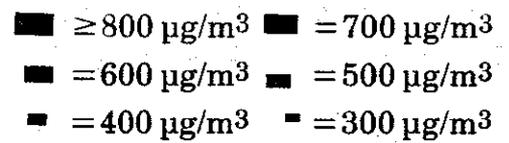
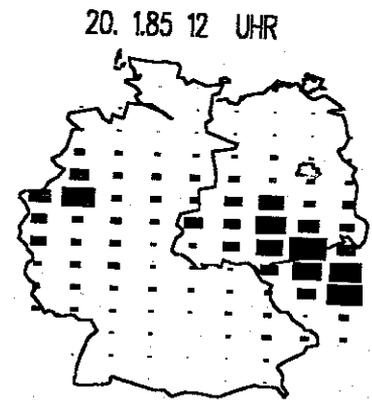
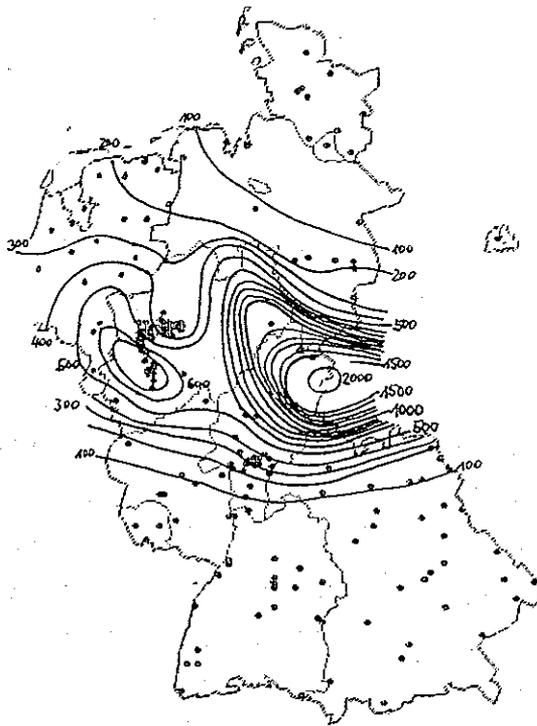
aufschlagt; die höchsten Werte traten im Ruhrgebiet auf. Die höchsten Tagesmittelwerte betragen in dieser Zeit $400 \mu\text{g}/\text{m}^3$, die höchsten 3-Stunden-Mittelwerte $750 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Am 21.1. gehen mit einer Winddrehung auf Südwest die Werte auf unter $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zurück. Für die neuen Bundesländer werden Tagesmittelwerte bis $1000 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und 3-Stunden-Mittelwerte bis $1500 \mu\text{g}/\text{m}^3$ errechnet.

Abbildung 5.7 zeigt für den 12 Uhr Termin des 20. und 21.1. einen Vergleich von errechneten und gemessenen Werten. Deutlich zu erkennen ist am 20.1. das Gebiet erhöhter Konzentrationen im Ruhrgebiet. Der gemessene Belastungsschwerpunkt mit Werten bis zu $2000 \mu\text{g}/\text{m}^3$ in Osthessen wird hingegen durch die Rechnungen nicht wiedergegeben, da im 850 hPa - Niveau der Wind in der ehemaligen DDR überwiegend aus Nord bis Nordwest wehte und die Schadstoffe daher in südöstlicher Richtung in die CSFR transportiert wurden (s. Abb. 5.8). Am 21.1. hat sich das Gebiet erhöhter Konzentrationswerte sowohl nach den Rechnungen als auch nach den Messungen in Richtung Norden verlagert, da sich in der Höhe jedoch schon eine starke südwestliche Strömung durchgesetzt hat, gehen nach den Rechnungen die Werte deutlich auf etwa $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zurück.

Für die Episode vom 16.1. - 21.1. 85 wurden vom "Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiene" in Bilthoven/Niederlande Rechnungen mit einem Euler'schen Modell durchgeführt /54/. Einen Vergleich dieser Rechnungen mit Ergebnissen von SMOVO für den Tagesmittelwert am 20.1. und 21.1. 85 zeigt Abbildung 5.9. Auch das Euler'sche Modell gibt die gemessene Konzentrationsverteilung nicht richtig wieder; die Ergebnisse dieses Modells stimmen aber sehr gut mit denen von SMOVO überein, was sicherlich auf die Verwendung des gleichen Windfeldes zurückzuführen sein dürfte.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß die Konzentrationsverteilung für die betrachtete Episode nicht zufriedenstellend wiedergegeben wird. Dies ist insbesondere darauf zurückzuführen, daß Windrichtung und Windstärke während dieser Episode stark von der Höhe abhängig waren, was von dem einfachen Ausbreitungsmodell SMOVO, das den Transport nur in einer Höhe - dem Niveau in 850 hPa - berücksichtigt, nicht erfaßt werden kann. Auch die Berücksichtigung des Windes im nächst niedrigeren zur Verfügung stehenden Niveau (950 hPa) führt zu keiner wesentlichen Verbesserung der Ergebnisse. Da über einen längeren Zeitraum betrachtet die Übereinstimmung von Messung und Rechnung bei Verwendung der Daten des 850 hPa-Niveaus jedoch besser ist, wird für Rechnungen im Smogfrühwarnsystem generell das Windfeld in diesem Niveau zugrunde gelegt.

a)



b)

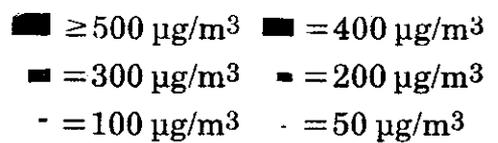
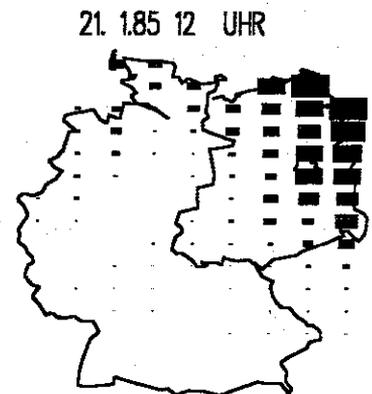
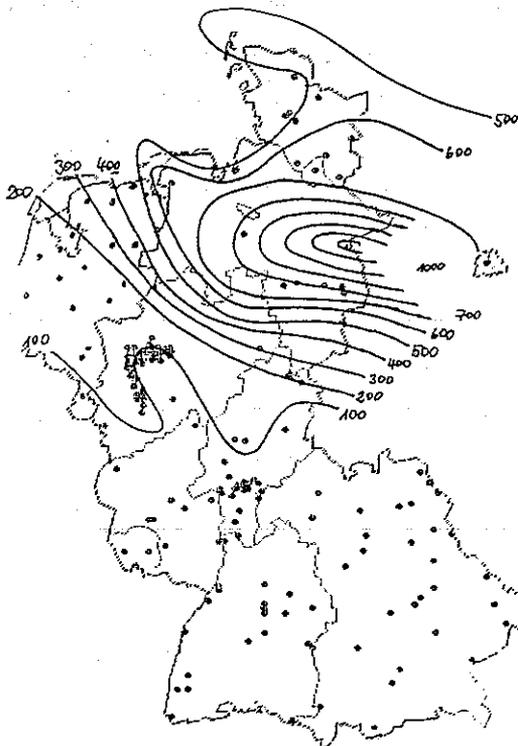
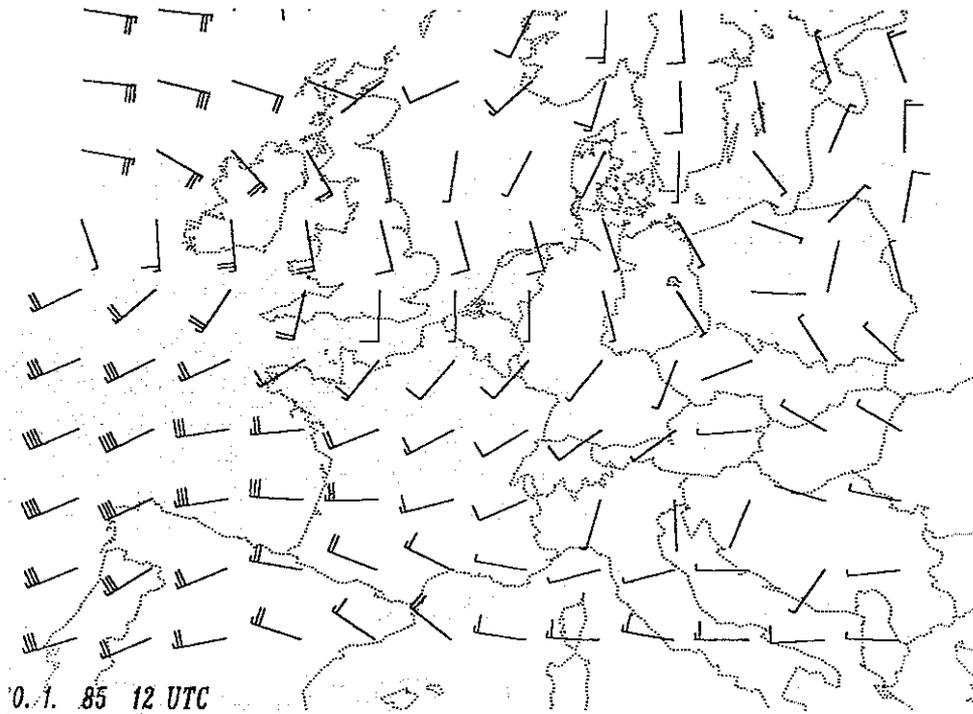


Abb. 5.7: Vergleich gemessener und berechneter Konzentrationswerte ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
a) für den 20.1.1985 um 12 Uhr b) für den 21.1.1985 um 12 Uhr

a)



b)

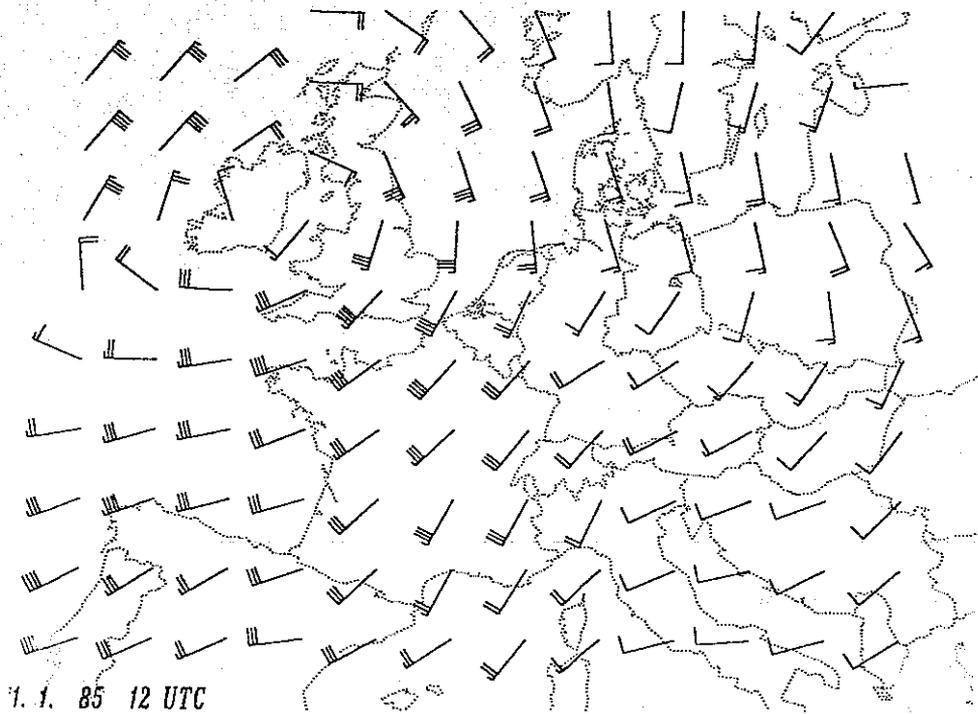


Abb. 5.8: Windrichtung und Windgeschwindigkeit im 850 hPa - Niveau, berechnet aus den IGEL - Daten
a) für den 20.1.1985 um 12 Uhr b) für den 21.1.1985 um 12 Uhr

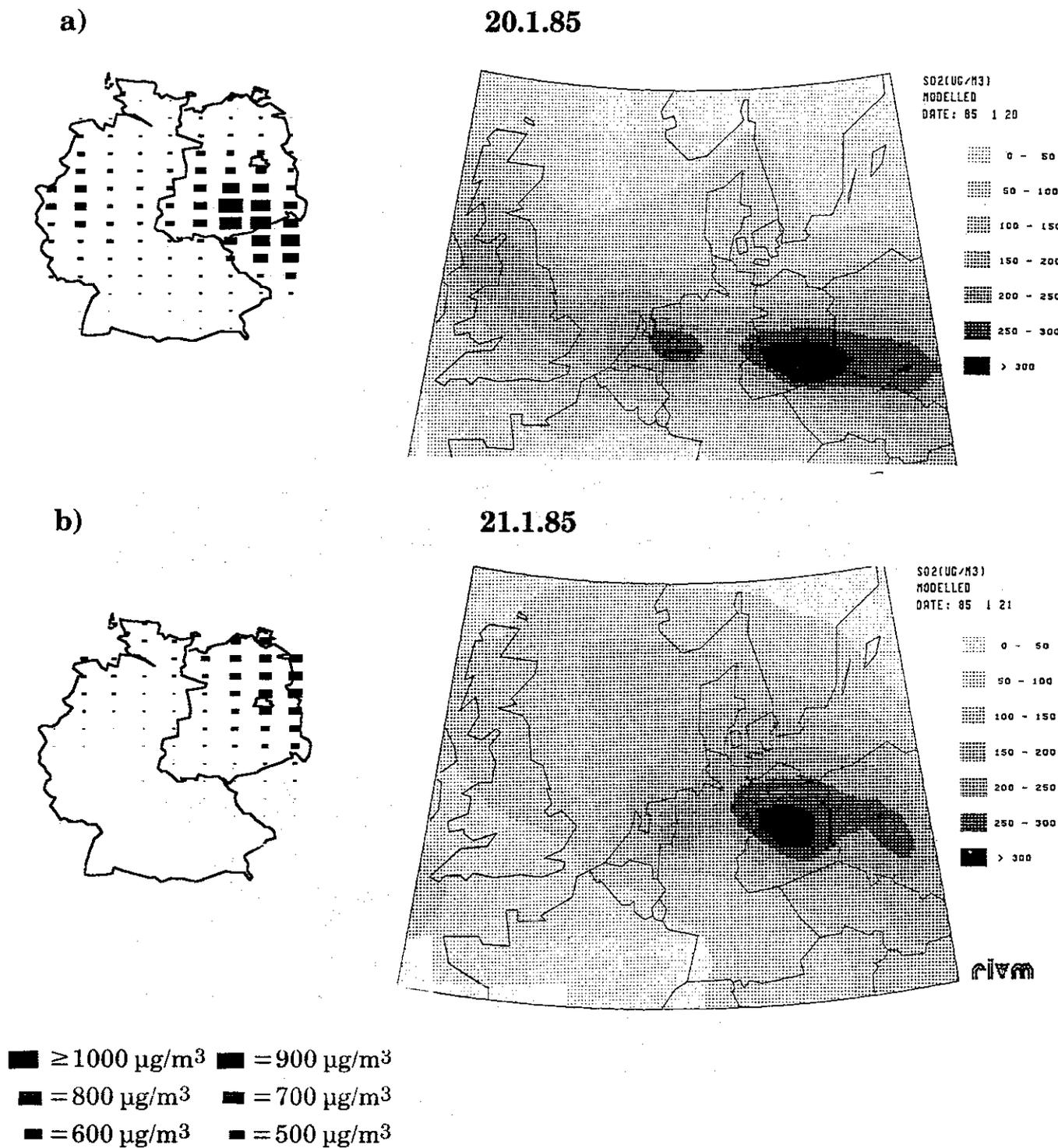


Abb. 5.9: Vergleich der mit dem Trajektorienmodell SMOVO und einem Euler'schen Modell (RIVM-Modell) errechneten Konzentrationswerte (in µg/m³)

- a) für den 20.1.1985 - Tagesmittelwert
- b) für den 21.1.1985 - Tagesmittelwert

5.3.2 Januar 1987

Ein Beispiel für den zu größeren Teilen durch lokale Emissionen "hausgemachten" Smog ist die Episode vom Januar 1987 (14.1. bis 22.1.87). Die Smogsituation entstand durch ein ausgeprägtes Hochdruckgebiet über Osteuropa, mit einer Temperaturinversion in ca. 800 m - 1000 m Höhe. Diese Inversion verhinderte den vertikalen Austausch der Luftmassen. Bei vollständig geschlossener Schneedecke und Temperaturen zwischen -7°C und -20°C waren die Voraussetzungen für hohe Schadstoffkonzentrationen am Boden gegeben. Ein horizontaler Luftmassenaustausch war bei durchschnittlichen Windgeschwindigkeiten um 1m/s bis 2m/s in nur geringem Maße möglich. Diese Smogsituation wurde dadurch aufgelöst, daß mit nordwestlicher Luftströmung geringer belastete Luft herangeführt wurde.

Im Januar 1987 befand sich das Smogfrühwarnsystem erst im Aufbau, so daß für diesen Zeitraum Meßwerte nur für einzelne Termine und nicht flächendeckend erfaßt wurden. Die gemessenen Konzentrationen erreichten Werte bis $900\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Mittelwert über alle in einem Rasterfeld liegenden Stationen), an den Reinluftstationen des Umweltbundesamtes wurden Werte bis $300\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ gemessen. Die errechneten Werte erreichen bis zu $800\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ auf dem Gebiet der alten und bis zu $1000\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ auf dem Gebiet der neuen Bundesländer. Die Abbildungen 5.10a und 5.10b zeigen eine Gegenüberstellung der Rasterkarten von Messung und Rechnung für den 18.1. bis 22.1. 1987, jeweils 6 Uhr. Angegeben sind auch die Maximalwerte von Messung und Rechnung für das Gebiet der alten Bundesländer. Wegen der nicht flächendeckend vorliegenden Meßwerte wurde auf die Berechnung von Fehlerwerten verzichtet. Deutlich zu erkennen ist, daß der Verlauf der Schadstofffahne zeitweise nicht korrekt wiedergegeben wird: die errechnete Fahne ist gegenüber der gemessenen Fahne im Uhrzeigersinn gedreht. Diese Drehung kommt besonders deutlich am 19.1.87 zum Ausdruck. An diesem Tag wehte der Wind am Boden überwiegend aus Ost bis Nordost mit Geschwindigkeiten um 3 m/s, der vom Modell genutzte Wind in 850 hPa kam aus südöstlichen Richtungen mit Geschwindigkeiten bis 15 m/s. Rechnungen mit einem Transportwind in 950 hPa führen nur zu einer geringen Verbesserung in der Übereinstimmung von Messung und Rechnung.

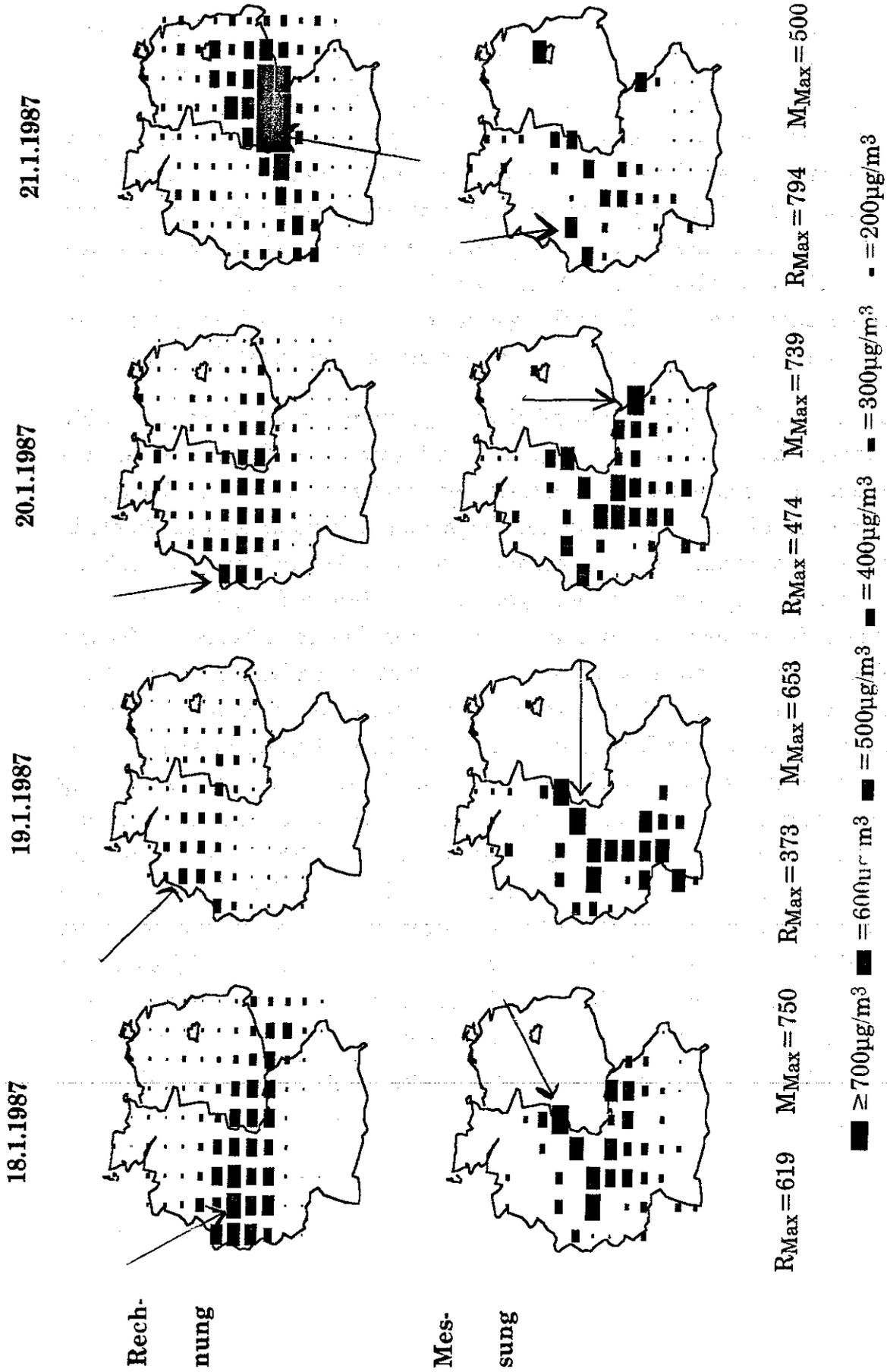
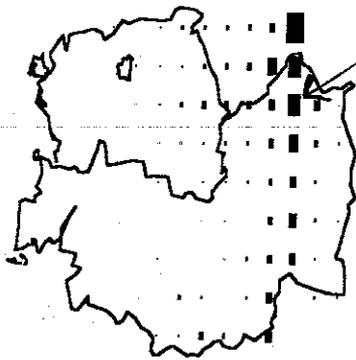


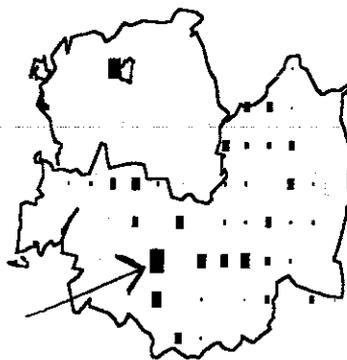
Abb. 5.10a: Rasterkarten von Rechnung und Messung für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland für den Zeitraum 18.1. bis 21.1.1987 jeweils 6 Uhr. Angegeben sind zusätzlich für das Gebiet der alten Bundesländer Lage und Höhe des maximalen Rechenwertes (R_{Max}) und des maximalen Meßwertes (M_{Max}) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

22.1.1987



Rechnung

22.1.87 6 UHR



Messung

$R_{Max} = 414$ $M_{Max} = 430$

■ $\geq 700 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ■ $= 600 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ■ $= 500 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ■ $= 400 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ■ $= 300 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ■ $= 200 \mu\text{g}/\text{m}^3$

Abb. 5.10b: Rasterkarten von Rechnung und Messung für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland für den 22.1.1987 um 6 Uhr. Angegeben sind zusätzlich für das Gebiet der alten Bundesländer Lage und Höhe des maximalen Rechenwertes (R_{Max}) und des maximalen Meßwertes (M_{Max}) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

5.3.3 Februar 1987

Seit dem 30. Januar 1987 bestand ein Hochdruckgebiet mit Zentrum über dem östlichen Mitteleuropa. Extrem kalte Luftmassen über einer geschlossenen Schneedecke führten zu intensivem Brennstoffverbrauch. Am 2. Februar traten im nordöstlichen Bereich der alten Bundesländer Luftströmungen aus südöstlicher bis südlicher Richtung auf und bedingten damit einen Transport von Luftmassen aus der damaligen DDR in die Bundesrepublik Deutschland. Am 2.2.1987 um 15 Uhr lagen die SO_2 - Konzentrationen in nahezu dem gesamten Gebiet der alten Bundesländer unter $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$; lediglich ein kleines Gebiet im Südosten Niedersachsens wurde durch Transportvorgänge von Schadstoffen beeinflusst, wobei im äußersten Osten Werte bis $1000 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zu beobachten waren. Kurze Zeit später hatte sich eine Schadstoffwolke nach Norden hin ausgebreitet und erfaßte bereits um 18 Uhr Teile von Schleswig-Holstein. Die Ausbreitung setzte sich bis Mitternacht fort und griff auf größere Gebiete bis zum äußersten Norden Schleswig-Holsteins mit Werten zwischen $400 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und $600 \mu\text{g}/\text{m}^3$ über. Erst ab 3 Uhr des folgenden Tages wurde ein Rückgang der Konzentrationen erkennbar und damit das Ende dieser Transportepisode ersichtlich /46/.

Rasterkarten von Rechnung und Messung sind für den 2.2.1987, 12 Uhr bis zum 3.2.1987, 9 Uhr in den Abbildungen 5.11a und 5.11b einander gegenübergestellt. Die errechneten Werte stimmen sowohl in der Höhe als auch in der regionalen Verteilung gut mit den gemessenen Werten überein, allerdings wird der äußerste Osten der alten Bundesländer erst ab 18 Uhr von deutlich erhöhten Werten beaufschlagt und die Werte nehmen etwas eher wieder ab. Darüberhinaus ist das beaufschlagte Gebiet etwas kleiner.

5.3.4 November/Dezember 1989

Ende November/Anfang Dezember 1989 traten bei schwachem Wind aus Ost und Temperaturen, die zeitweise unter 0°C lagen, in den alten Bundesländern Konzentrationswerte bis $600 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auf. Abbildung 5.12a zeigt für das Gebiet der alten Bundesländer eine Gegenüberstellung der Rasterkarten von Messung und Rechnung für den 29.11. und 30.11. sowie den 3.12. und 4.12., Abbildung 5.12b für den 1.12. und den 2.12. 1989 (Tagesmittelwerte). Das Gebiet erhöhter Konzentrationswerte wird von den Rechnungen, mit Ausnahme des 30. Novembers, zufriedenstellend wiedergegeben, was auch in den geringen Fehlerwerten F2 für die regionale Verteilung zum Ausdruck kommt. Die Meßwerte liegen jedoch zeitweise

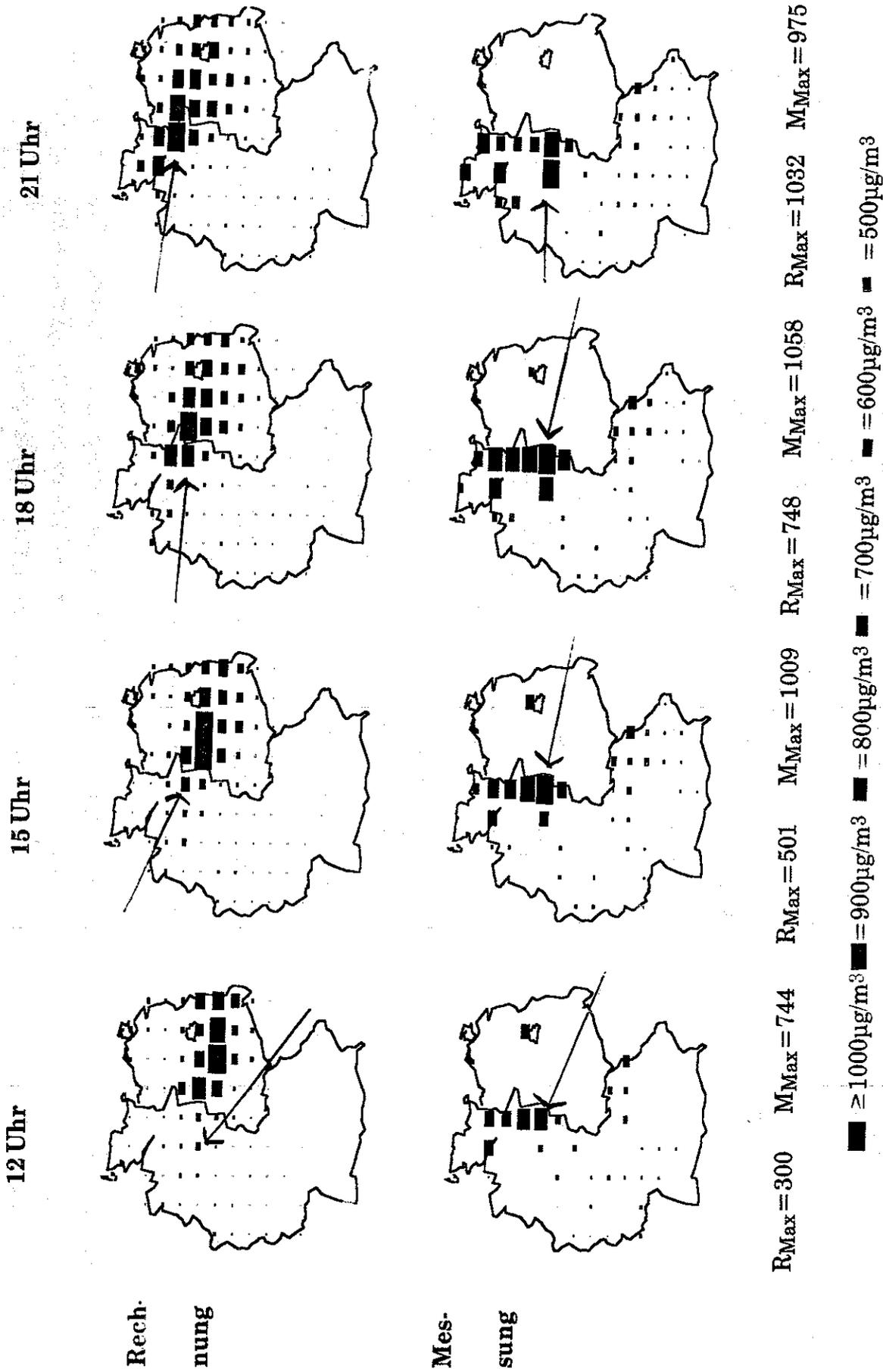


Abb. 5.11a: Rasterkarten von Rechnung und Messung für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland für den 2.2.1987 für die Termine 12 Uhr bis 21 Uhr. Angegeben sind zusätzlich für das Gebiet der alten Bundesländer Lage und Höhe des maximalen Rechenwertes (R_{Max}) und des maximalen Meßwertes (M_{Max}) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

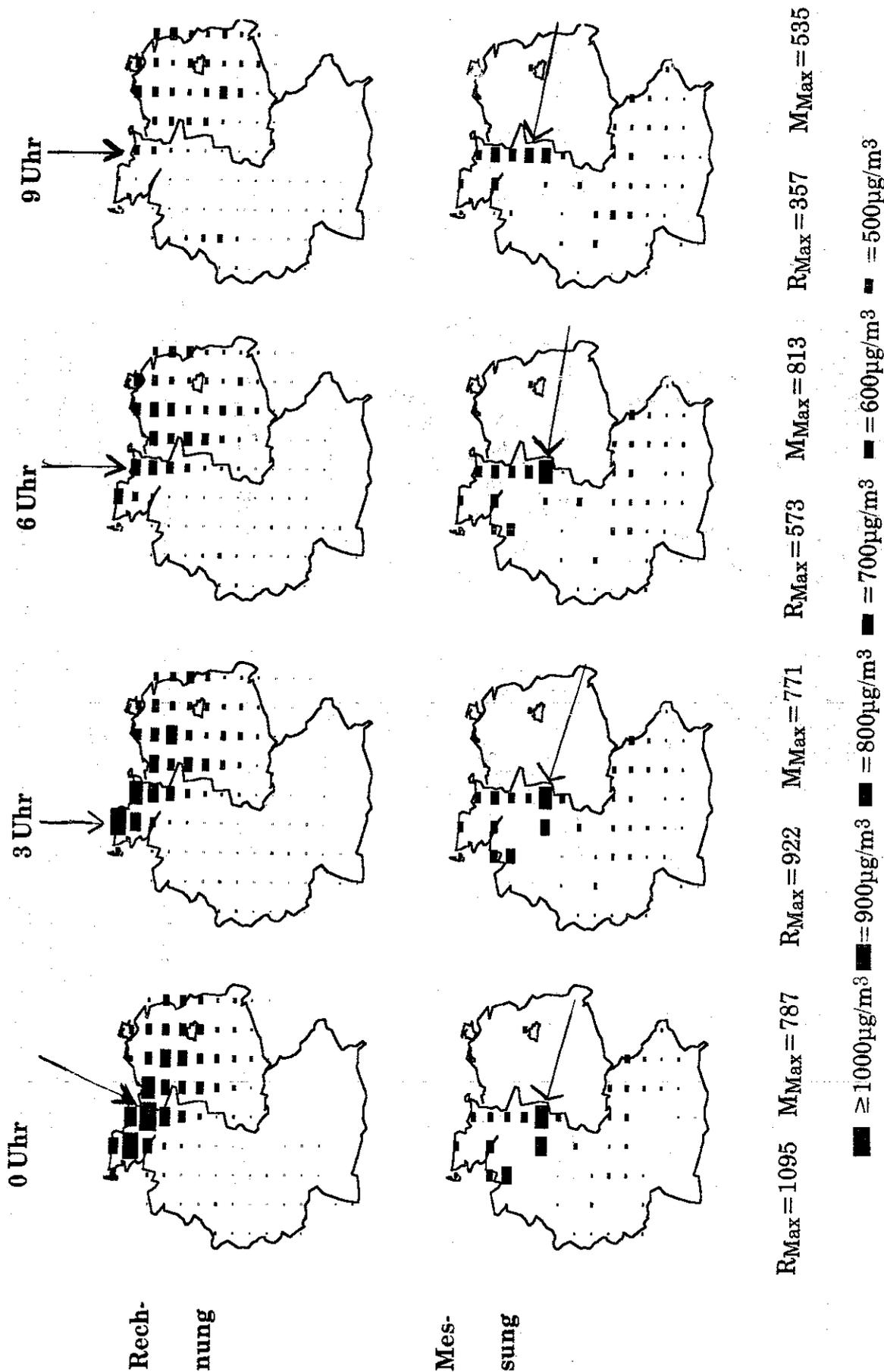
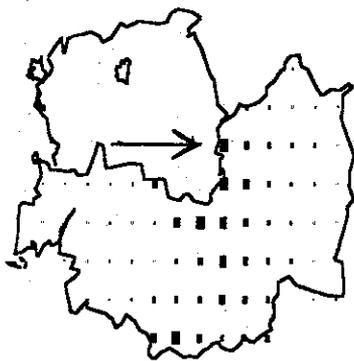


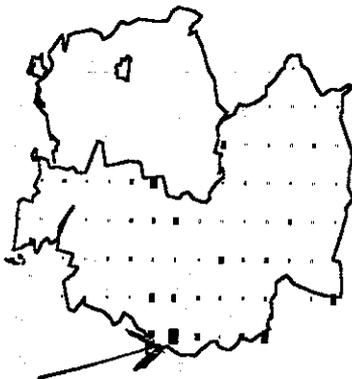
Abb. 5.11b: Rasterkarten von Rechnung und Messung für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland für den 3.2.1987 für die Termine 0 Uhr bis 9 Uhr. Angegeben sind zusätzlich für das Gebiet der alten Bundesländer Lage und Höhe des maximalen Rechenwertes (R_{Max}) und des maximalen Meßwertes (M_{Max}) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

29.11.

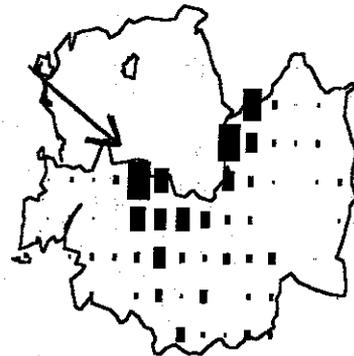


Rech-
nung

30.11.



Mes-
sung



F1=0,46 F2=0,30 M_{Max}=174

F1=0,65 F2=0,51 M_{Max}=241

F1=0,26 F2=0,28 M_{Max}=157

F1=0,34 F2=0,31 M_{Max}=109

■ ≥ 200µg/m³

■ = 100µg/m³

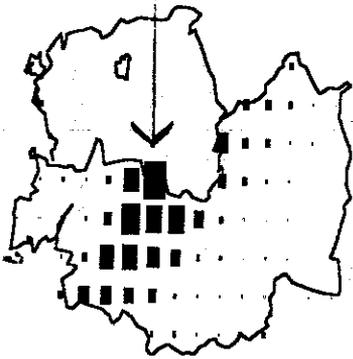
■ = 25µg/m³

■ = 10µg/m³

■ = 5µg/m³

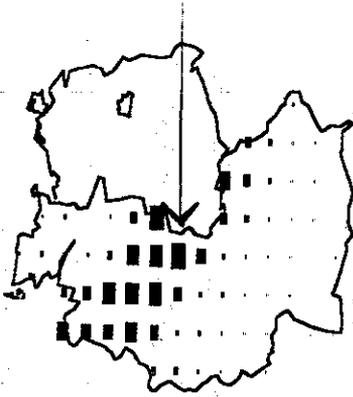
Abb. 5.12a: Rasterkarten der Tagesmittelwerte von Rechnung und Messung für das Gebiet der alten Bundesländer für den Zeitraum 29.11. und 30.11. sowie 3.12. und 4.12.89. Angegeben sind zusätzlich Lage und Höhe des maximalen Rechenwertes (R_{Max}) und des maximalen Meßwertes (M_{Max}) in µg/m³ sowie die Fehlerwerte F1 und F2

1.12.



Rech-
nung

2.12.



Mes-
sung

F1 = 0,33 F2 = 0,21 F1 = 0,22 F2 = 0,33
R_{Max} = 305 M_{Max} = 456 R_{Max} = 200 M_{Max} = 301

■ ≥ 300µg/m³ ■ = 200µg/m³ ■ = 100µg/m³ ■ = 50µg/m³ ■ = 25µg/m³ ■ = 10µg/m³

Abb. 5.12b: Rasterkarten der Tagesmittelwerte von Rechnung und Messung für das Gebiet der alten Bundesländer für den 1.12. und 2.12.89. Angegeben sind zusätzlich Lage und Höhe des maximalen Rechenwertes (R_{Max}) und des maximalen Meßwertes (M_{Max}) in µg/m³ sowie die Fehlerwerte F1 und F2.

deutlich über den errechneten Werten, der Mittelwert über alle Raster der alten Bundesländer erreicht bei den Rechnungen Werte bis zu $65 \mu\text{g}/\text{m}^3$, bei den Messungen Werte bis zu $110 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (s. auch Abb. 5.1a in Abschn. 5.2).

Für den Zeitraum 29.11. bis 4.12. liegen auch Meßwerte von SO_2 für das Gebiet der neuen Bundesländer vor (Tagesmittelwerte für bis zu 98 Stationen, von denen eine große Anzahl in Ballungsgebieten liegt) /55,56/. Die Meßstandorte wurden, entsprechend der Vorgehensweise für die alten Bundesländer, einzelnen Rasterfeldern zugeordnet, und es wurde für die einzelnen Tage der Mittelwert über alle Meßstandorte in einem Rasterfeld gebildet. Die Abbildungen 5.13a und 5.13b zeigen die entsprechenden Rasterkarten für das Gesamtgebiet der Bundesrepublik Deutschland. Auf dem Gebiet der neuen Bundesländer werden die gemessenen Werte durch die Rechnungen stark unterschätzt, das Gebiet erhöhter Konzentrationswerte im Süden der neuen Bundesländer wird jedoch gut wiedergegeben. Es ist zu vermuten, daß die großen Abweichungen u.a. auf lokale Effekte zurückzuführen sind. So können die Auswirkungen des Hausbrands in Ballungsgebieten vom Modell nicht ausreichend räumlich aufgelöst werden.

5.3.5 Februar 1991

Ab Februar 1991 wurde zur Prognose der SO_2 - Immission sowie zur nachträglichen Berechnung von Konzentrationswerten und zur Auswertung der erzielten Ergebnisse die neueste Version von SMOVO eingesetzt. Diese Version berücksichtigt, im Gegensatz zur älteren, zur Bestimmung des Zeitverlaufs der Emissionswerte die regionale Verteilung der Temperatur (950 hPa - Temperatur aus den BKN - Daten) sowie zur Bestimmung der Depositionsgeschwindigkeit die regionale Verteilung der Oberflächenbeschaffenheit (schneefrei bzw. schneebedeckt).

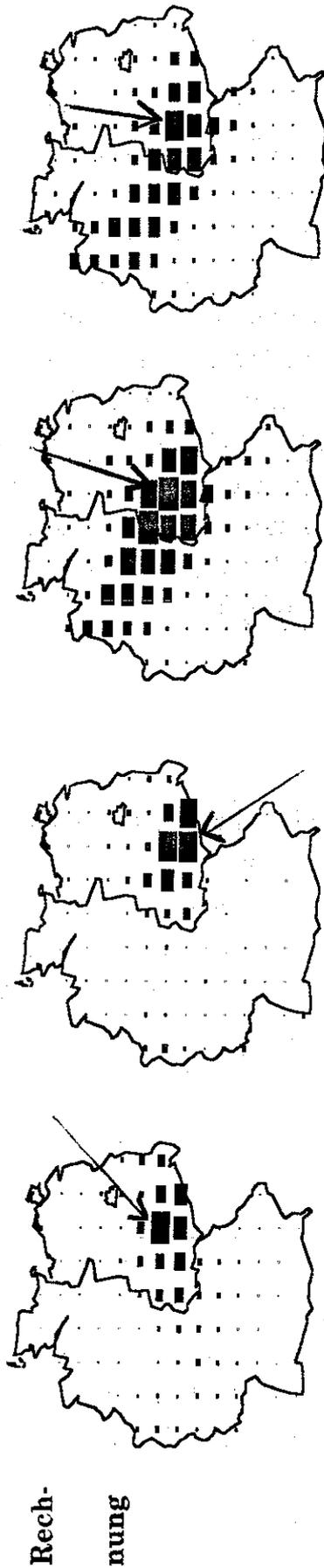
Vom 1. bis zum 19. Februar 1991 lagen die Temperaturen auch am Tage überwiegend unter 0°C und vom 5.2. bis zum 22.2. lag in weiten Teilen des Betrachtungsgebietes eine geschlossene Schneedecke. Da vom 1.2. bis zum 10.2. der Wind überwiegend aus östlichen Richtungen kam, lagen in diesem Zeitraum die gemessenen und errechneten Werte überwiegend auf recht hohem Niveau. Zum Ende des Monats war ein erneuter Anstieg von Meß- und Rechenwerten zu verzeichnen. Im folgenden soll für den gesamten Februar 1991 eine ausführliche Darstellung und Interpretation der erzielten Ergebnisse erfolgen und ein Vergleich mit Meßwerten aus dem Smogfrühwarnsystem durchgeführt werden. Eine entsprechende Darstellung für die übrigen Monate des Winterhalbjahres ist in /48,57/ gegeben.

29.11.

30.11.

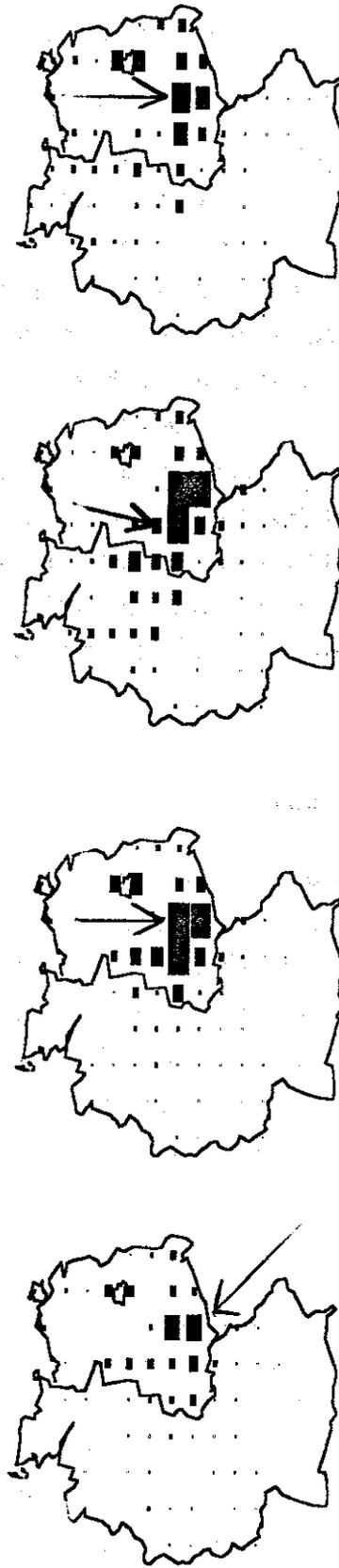
1.12.

2.12.



$\geq 300 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 200 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 100 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 50 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 25 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 10 \mu\text{g}/\text{m}^3$

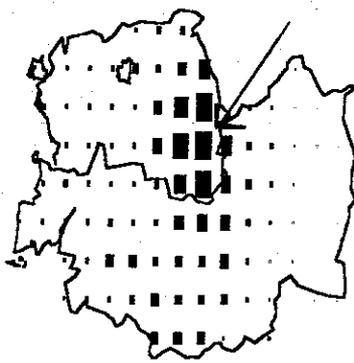
Messung



$R_{\text{Max}} = 288$ $M_{\text{Max}} = 582$ $R_{\text{Max}} = 276$ $M_{\text{Max}} = 919$ $R_{\text{Max}} = 308$ $M_{\text{Max}} = 1283$ $R_{\text{Max}} = 270$ $M_{\text{Max}} = 668$
 $\geq 800 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 700 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 600 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 500 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 400 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 300 \mu\text{g}/\text{m}^3$

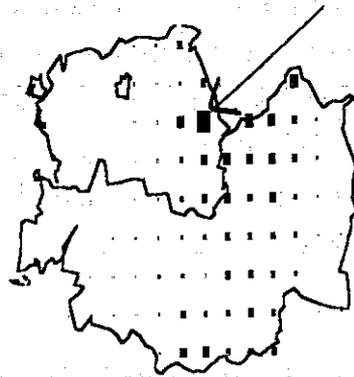
Abb. 5.13a: Rasterkarten der Tagesmittelwerte von Rechnung und Messung für das Gesamtgebiet der Bundesrepublik Deutschland für den Zeitraum 29.11.89 bis 2.12.89. Angegeben sind zusätzlich Lage und Höhe des maximalen Rechenwertes (R_{Max}) und des maximalen Meßwertes (M_{Max}) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

3.12.



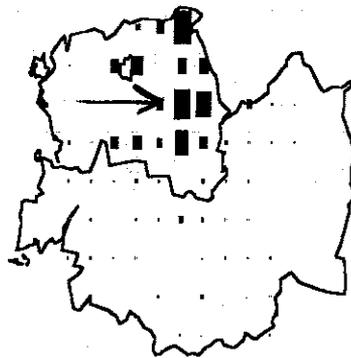
Rechnung

4.12.



$\geq 300 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 200 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 100 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 50 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 25 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 10 \mu\text{g}/\text{m}^3$

Messung



$R_{\text{Max}} = 224$ $M_{\text{Max}} = 640$ $R_{\text{Max}} = 172$ $M_{\text{Max}} = 710$

$\geq 800 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 700 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 600 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 500 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 400 \mu\text{g}/\text{m}^3$
 $= 300 \mu\text{g}/\text{m}^3$

Abb. 5.13b: Rasterkarten der Tagesmittelwerte von Rechnung und Messung für das Gesamtgebiet der Bundesrepublik Deutschland für den Zeitraum 3.12.89 bis 4.12.89. Angegeben sind zusätzlich Lage und Höhe des maximalen Rechenwertes (R_{Max}) und des maximalen Meßwertes (M_{Max}) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

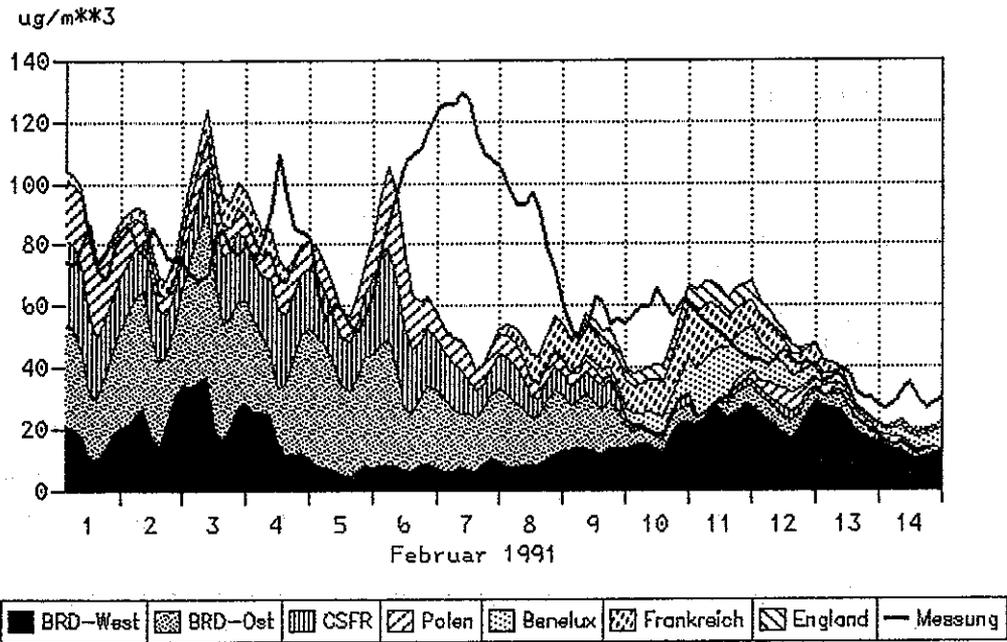
5.3.5.1 Interpretation des zeitlichen Verlaufs der Konzentrationswerte für den Februar 1991

Die Abbildung 5.14 zeigt für den Februar 1991 den zeitlichen Verlauf der Konzentrationswerte von Messung und Rechnung für das Gebiet der alten Bundesländer, Abbildung 5.15 für das Gebiet der neuen Bundesländer (nur Rechnung), jeweils dargestellt als Mittelwert über alle Rasterfelder des Betrachtungsgebietes. Für die errechneten Werte sind zusätzlich die Beiträge der berücksichtigten Staaten angegeben. Fehlerwerte sowie wesentliche Charakteristika für die Termine, zu denen Meß- bzw. Rechenwerte in mindestens einem Raster der alten Bundesländer über $300 \mu\text{g}/\text{m}^3$ liegen, wurden bereits in Tabelle 5.2 zusammengestellt.

Einen Vergleich von Rechnung und Messung anhand von Rasterkarten zeigen die Abbildungen 5.16a bis 5.16e für den Zeitraum 1. bis 14. Februar 1991 für den 9 Uhr Termin (Mittelwert über den Zeitraum 8.30 Uhr bis 10.30 Uhr). Am 1.2. und 2.2. werden in der Mitte und im Norden der alten Bundesländer erhöhte Konzentrationen bis $300 \mu\text{g}/\text{m}^3$ gemessen (Gebiete 4,3,2 und 1 entsprechend der Gebietsaufteilung nach Abb. 5.4), wobei der Schwerpunkt der Fahne am 1.2. in der Mitte der alten Bundesländer liegt und am 2.2. der Grenzbereich zu den neuen Bundesländern (Gebiet 3) betroffen ist. Die Rechenwerte liegen an den beiden Tagen zeitweise über den Meßwerten, und die Schadstofffahne konzentriert sich auf die Gebiete 3 und 1 (Fahndrehung). Am Nachmittag des 2.2. wird, wie bei den Messungen, schwerpunktmäßig der Grenzbereich zum Gebiet der ehemaligen DDR (Gebiet 3) beaufschlagt. Der Mittelwert über alle Raster der alten Bundesländer liegt sowohl nach den Rechnungen als auch nach den Messungen bei $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

Am 3.2. werden Werte bis knapp über $500 \mu\text{g}/\text{m}^3$ gemessen und die Fahne verläuft in Ost-West-Richtung über die Mitte der alten Bundesländer (Gebiete 3 und 4). Die errechnete Fahne mit Werten bis $600 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ist leicht im Uhrzeigersinn gedreht (Gebiet 3). Am 4.2. verläuft auch die gemessene Fahne zunächst in Südost-Nordwest-Richtung, verlagert sich im Laufe des Tages nach Süden und dreht gegen Abend auf Ost-West bis Nordost-Südwest. Die errechnete Fahne folgt dieser Verlagerung: der Fehler für die regionale Verteilung ist an diesen beiden Tagen gering. Der Mittelwert über alle Raster der alten Bundesländer liegt nach den Rechnungen am 3.2. zwischen $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$, nach den Messungen bei $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$, am 4.2. nimmt er nach den Rechnungen auf $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ab, nach den Messungen kurzzeitig auf $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zu (s. Abb. 5.14a).

a)



b)

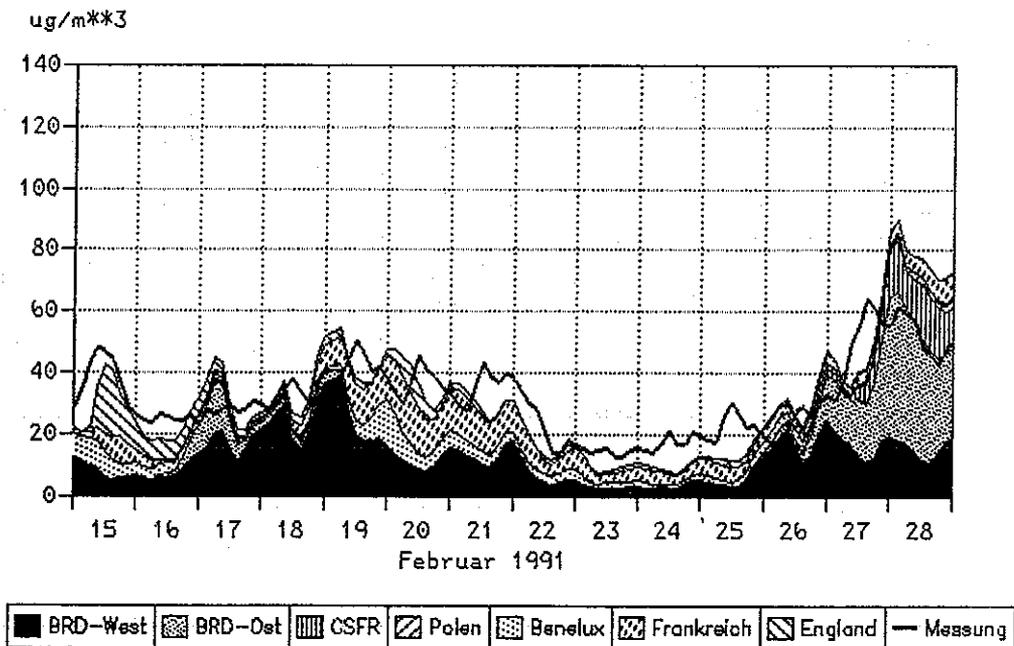
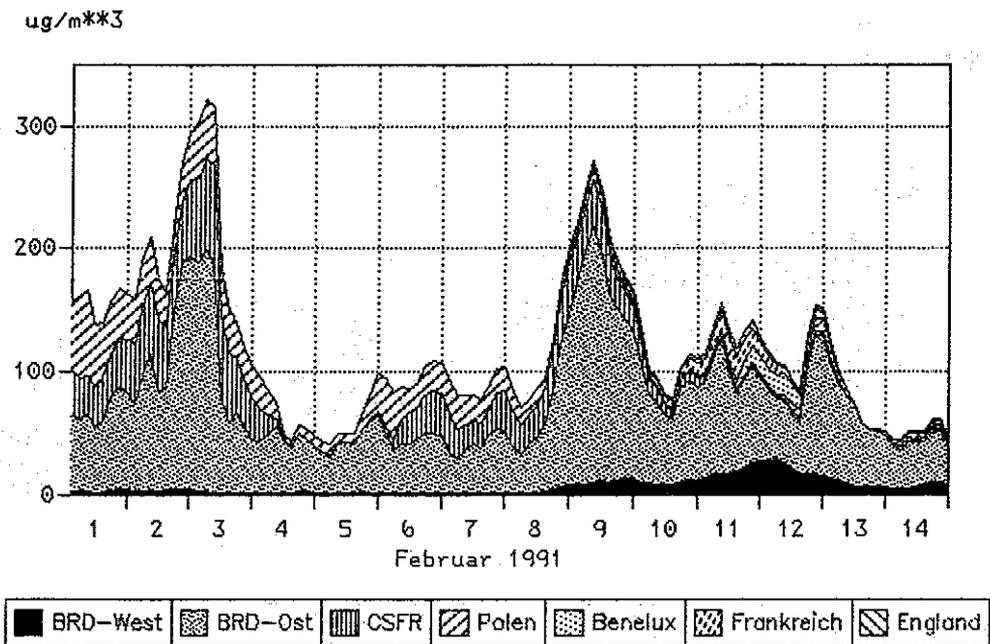


Abb. 5.14: Zeitlicher Verlauf des Mittelwertes der Konzentrationswerte für das Gebiet der alten Bundesländer; Vergleich von Messung und Rechnung sowie Beiträge einzelner Staaten
a) für den 1. bis 14. Februar 1991
b) für den 15. bis 28. Februar 1991

a)



b)

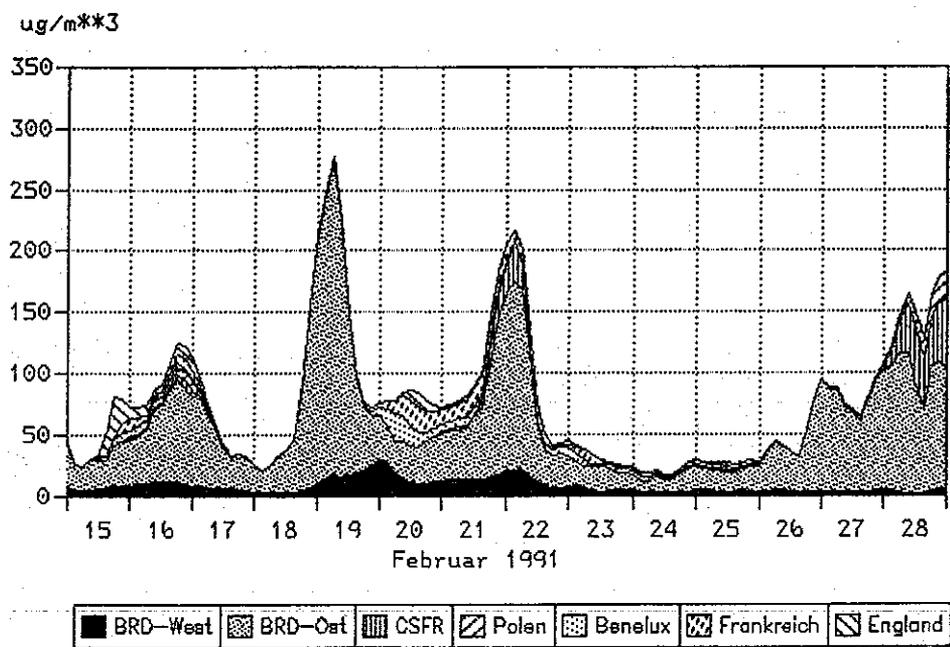


Abb. 5.15: Zeitlicher Verlauf des Mittelwertes der Konzentrationswerte für das Gebiet der neuen Bundesländer; errechnete Werte sowie Beiträge einzelner Staaten

- a) für den 1. bis 14. Februar 1991
- b) für den 15. bis 28. Februar 1991

Am 5.2. treten erhöhte Meß- und Rechenwerte im Süden der Bundesrepublik auf (Gebiete 5 und 6). Am 6.2. dreht die Fahne wieder auf Ost-West, gegen Abend wird nach den Messungen die Mitte (Gebiete 6 und 4), nach den Rechnungen der Norden (Gebiete 2 und 3) beaufschlagt. Die Mittelwerte von Messung und Rechnung stimmen gut überein. Sie gehen am 5.2. von $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auf $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zurück und steigen am 6.2. zunächst auf $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ an, die gemessenen Werte steigen dann weiter auf $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$, die Rechenwerte gehen auf $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zurück. Bis zum 8.2. liegen dann die Mittelwerte nach den Messungen höher als nach den Rechnungen, am Abend des 8.2. sowie am 9.2. stimmen sie mit ca. $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ überein. Die Unterschiede sind darauf zurückzuführen, daß nach den Messungen das Gebiet erhöhter Konzentrationswerte breiter ist und die Werte etwas höher liegen.

Am 7.2. verläuft, wie am 6.2. nachmittags, das Gebiet erhöhter Konzentrationswerte nach den Messungen in der Mitte und im Süden der alten Bundesländer, nach den Rechnungen ist es leicht nach Norden verschoben und im Uhrzeigersinn gedreht. Der Fehler F2 steigt deutlich an. Am 8.2. wird nach den Messungen das Gebiet 4, nach den Rechnungen werden die Gebiete 1, 2 und 3 beaufschlagt. Dabei nehmen nach den Rechnungen die Maximalwerte von etwa $250 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auf unter $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ab, die Meßwerte liegen bei knapp $300 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Nach den Messungen wird ab Mittag das beaufschlagte Gebiet kleiner, gegen Abend treten erhöhte Werte nur noch im Grenzbereich Hessen/Thüringen auf.

Im Verlauf des 9.2. dehnt sich das Gebiet erhöhter gemessener Konzentrationswerte auf den östlichen Teil Niedersachsens aus (Gebiet 3), erhöhte Rechenwerte treten nur im äußersten Norden auf. In den neuen Bundesländern verläuft die Fahne zunächst in Südost - Nordwest - Richtung und dreht im Laufe des Nachmittags auf Süd - Nord. Da sowohl nach den Rechnungen als auch nach den Messungen erhöhte Konzentrationswerte in der gleichen Größenordnung auftreten, geht F1 auf ca. 0,2 zurück. F2 liegt, da die Gebiete nicht gut übereinstimmen, bei 0,5.

Am 10.2. hat der Wind nach den Prognosedaten auf Südwest gedreht, der Mittelwert sinkt auf $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$; am Boden weht der Wind aus wechselnden Richtungen und der Mittelwert der Messungen liegt bei $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Sowohl nach den Rechnungen als auch nach den Messungen treten im Ruhrgebiet Werte bis $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auf. Dabei ist nach den Rechnungen das beaufschlagte Gebiet größer. An diesem und den beiden folgenden Tagen tragen sowohl die Beneluxstaaten als auch Frankreich mit jeweils bis zu $18 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zum Mittelwert über alle Raster der alten Bundesländer bei. Da die Emissionswerte dieser beiden Staaten überschätzt werden, dürfte der tatsächliche Beitrag niedriger liegen. Da am Boden in Osthessen und

Ostniedersachsen eine südöstliche Strömung herrscht, nach den Prognosedaten sich jedoch überall eine südwestliche Strömung durchgesetzt hat, treten dort sowie in Norddeutschland erhöhte Konzentrationswerte auf, es werden jedoch keine erhöhten Werte mehr errechnet.

Vom 11. bis 21.2. werden, bei südwestlichen bis nordwestlichen Winden, häufig in weiten Teilen der alten Bundesländer leicht erhöhte Konzentrationswerte gemessen und errechnet (verringerte Deposition aufgrund einer geschlossenen Schneedecke). Die Übereinstimmung von Messung und Rechnung ist zufriedenstellend.

Am 21.2. dreht im Laufe des Nachmittags der Wind am Boden auf Südost und bis zum 22.2. vormittags werden Werte bis $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$ im Osten Niedersachsens und Hessens sowie im Nordosten Bayerns (Gebiete 6 und 3) gemessen. Da nach den Prognosedaten weiterhin eine südwestliche Strömung vorliegt, werden keine erhöhten Werte errechnet.

Am 22.2. setzt sich auch am Boden wieder eine südwestliche Strömung durch und bei stark auffrischendem Wind, bei Temperaturen um 10°C und einer durchbrochenen Schneedecke gehen die errechneten und gemessenen Werte unter $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ zurück und bleiben bis zum 25.2. auf niedrigem Niveau.

Am 26.2. steigen mit einer Winddrehung auf Nordost bis Ost die Werte im Grenzgebiet zur CSFR auf über $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$ an. Am 27.2. dehnt sich diese Fahne etwas nach Westen (Messungen) bzw. Nordwesten (Rechnungen) aus, wobei teilweise höhere Werte errechnet als gemessen werden. Am 28.2. verlagert sich die errechnete Fahne in Richtung Norden, sodaß gegen Abend der Osten und Norden Niedersachsens beaufschlagt wird, nach den Messungen treten nur in Hessen erhöhte Werte auf.

Für die neuen Bundesländer ist ein Vergleich mit Meßwerten nicht möglich. Der zeitliche Verlauf des errechneten Mittelwertes über alle Rasterfelder ist durch einen großen Schwankungsbereich geprägt (s. Abb. 5.15). Vom 1.2. - 3.2. steigen die Werte auf über $300 \mu\text{g}/\text{m}^3$ an, wobei relativ große Beiträge aus der CSFR und aus Polen errechnet werden. Vom 4.2. - 8.2. liegen die Werte zwischen $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und damit zeitweise unter den Werten für die alten Bundesländer. Werte über $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$, insbesondere der Peak am 18./19.2., werden zum größten Teil durch eigene Quellen hervorgerufen. Beiträge, die zeitweise über $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ liegen, kommen auch aus der CSFR (1.2.-4.2., 7.2.-10.2., 16./21./22. und 28.2.) und aus Polen (1.-9.2., 12./13./16. sowie 28.2.). Auch die Beiträge aus den alten Bundesländern liegen, wegen der verringerten Deposition, zeitweise über $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

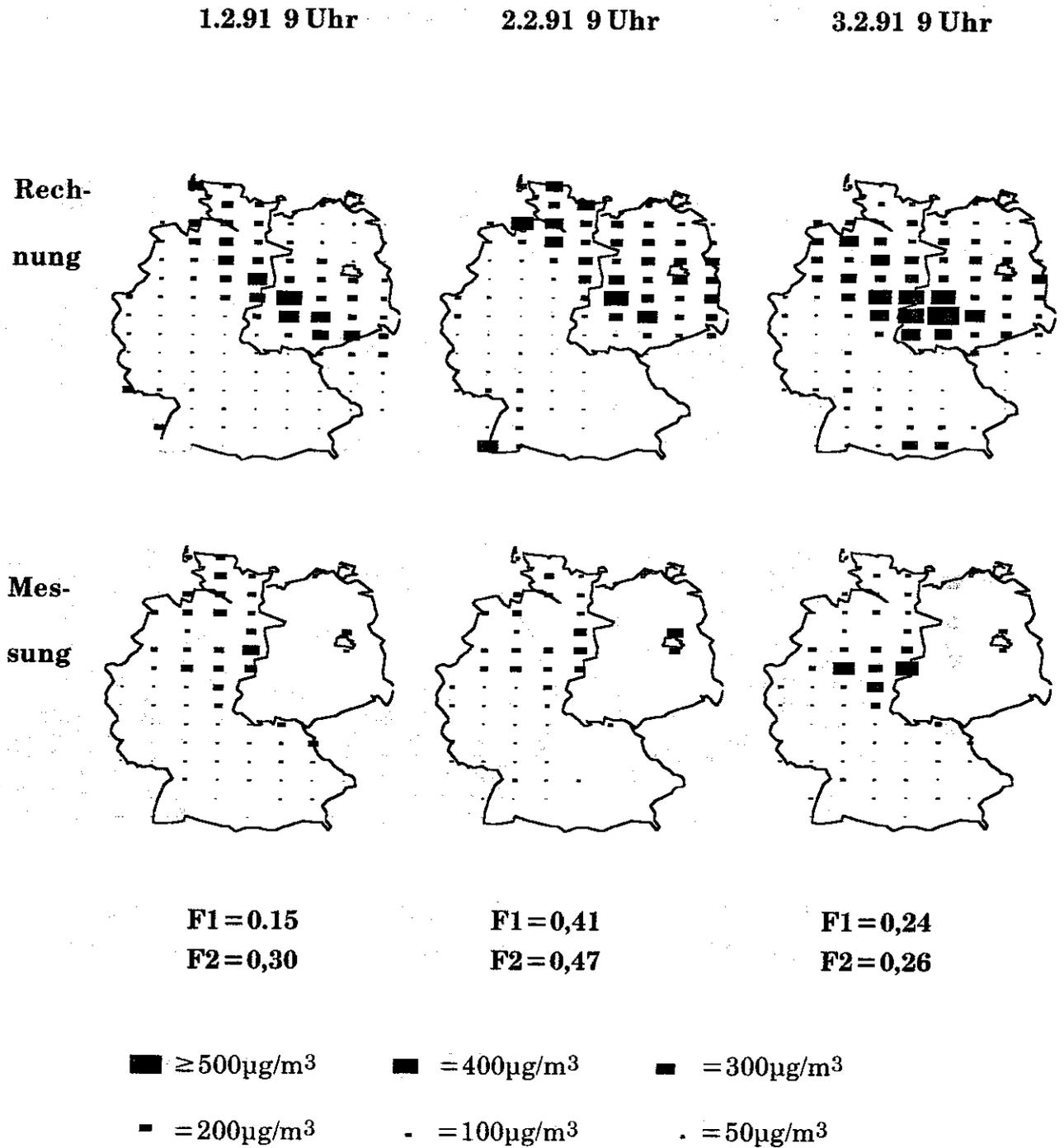


Abb. 5.16a: Rasterkarten von Rechnung und Messung (Werte in µg/m³) für den 1.-3. Februar 1991 jeweils 9 Uhr (die angegebenen Fehlerwerte beziehen sich auf das Gebiet der alten Bundesländer)

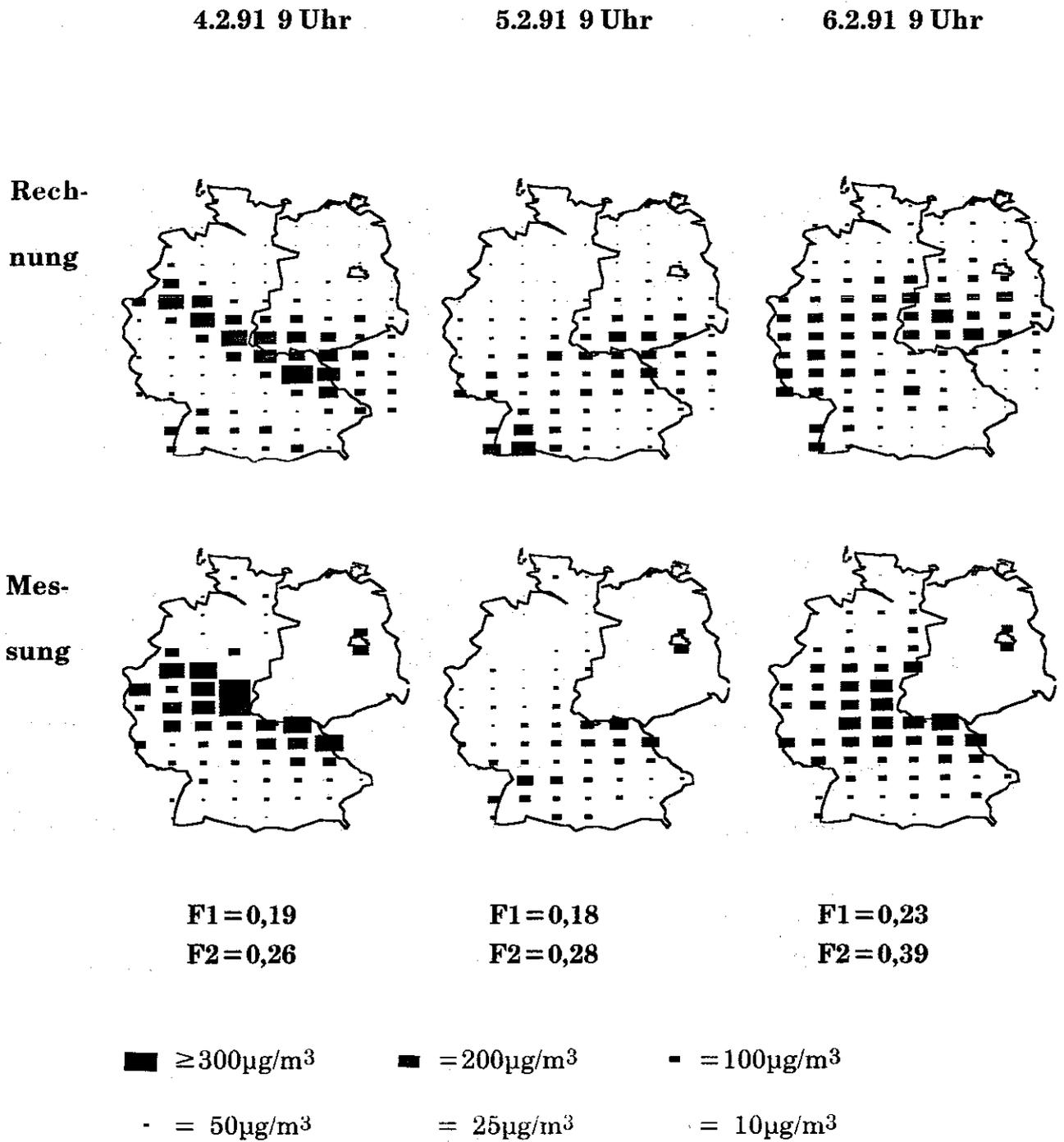


Abb. 5.16b: Rasterkarten von Rechnung und Messung (Werte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$) für den 4.-6. Februar 1991 jeweils 9 Uhr (die angegebenen Fehlerwerte beziehen sich auf das Gebiet der alten Bundesländer)

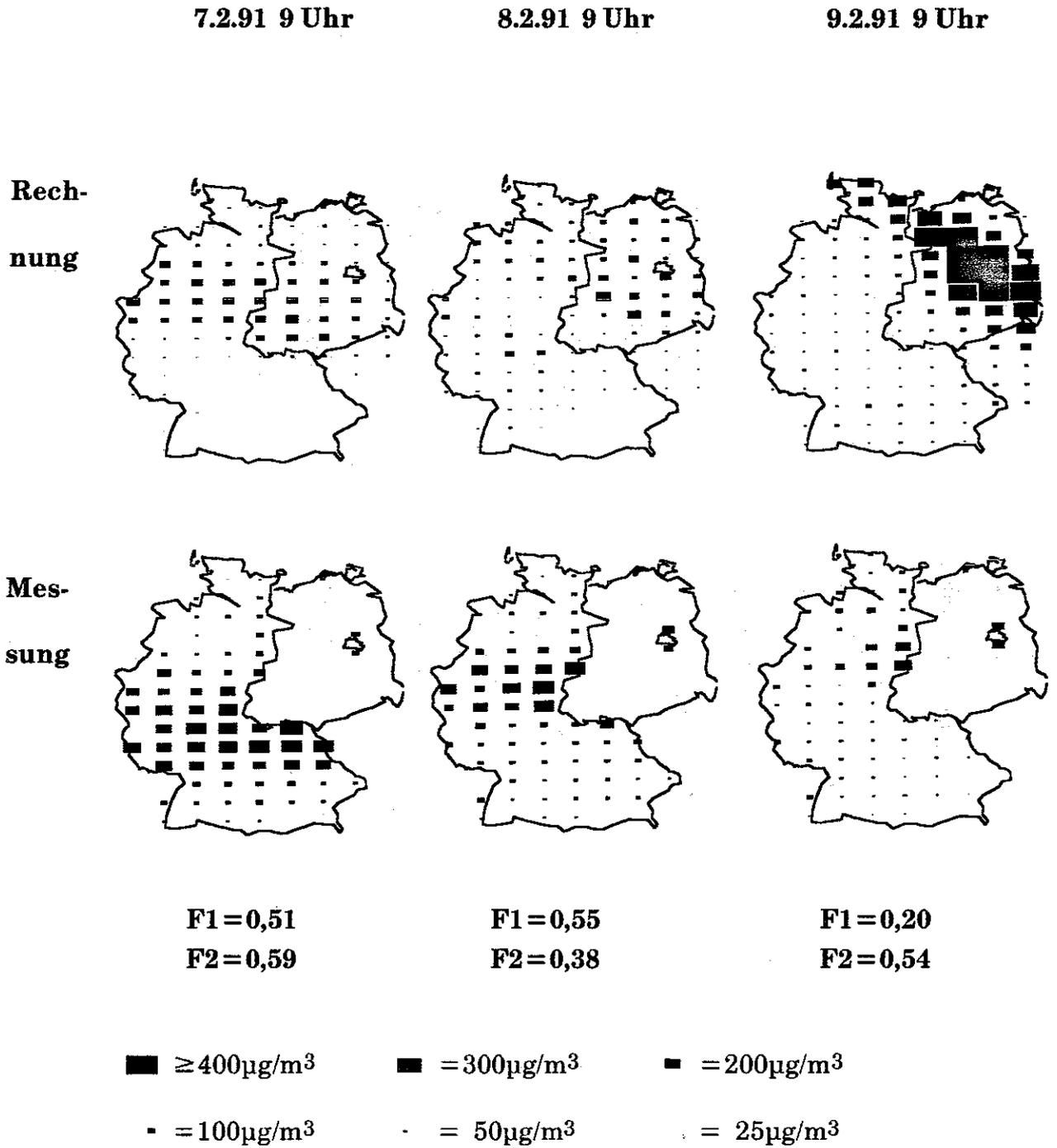


Abb. 5.16c: Rasterkarten von Rechnung und Messung (Werte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$) für den 7.-9. Februar 1991 jeweils 9 Uhr (die angegebenen Fehlerwerte beziehen sich auf das Gebiet der alten Bundesländer)

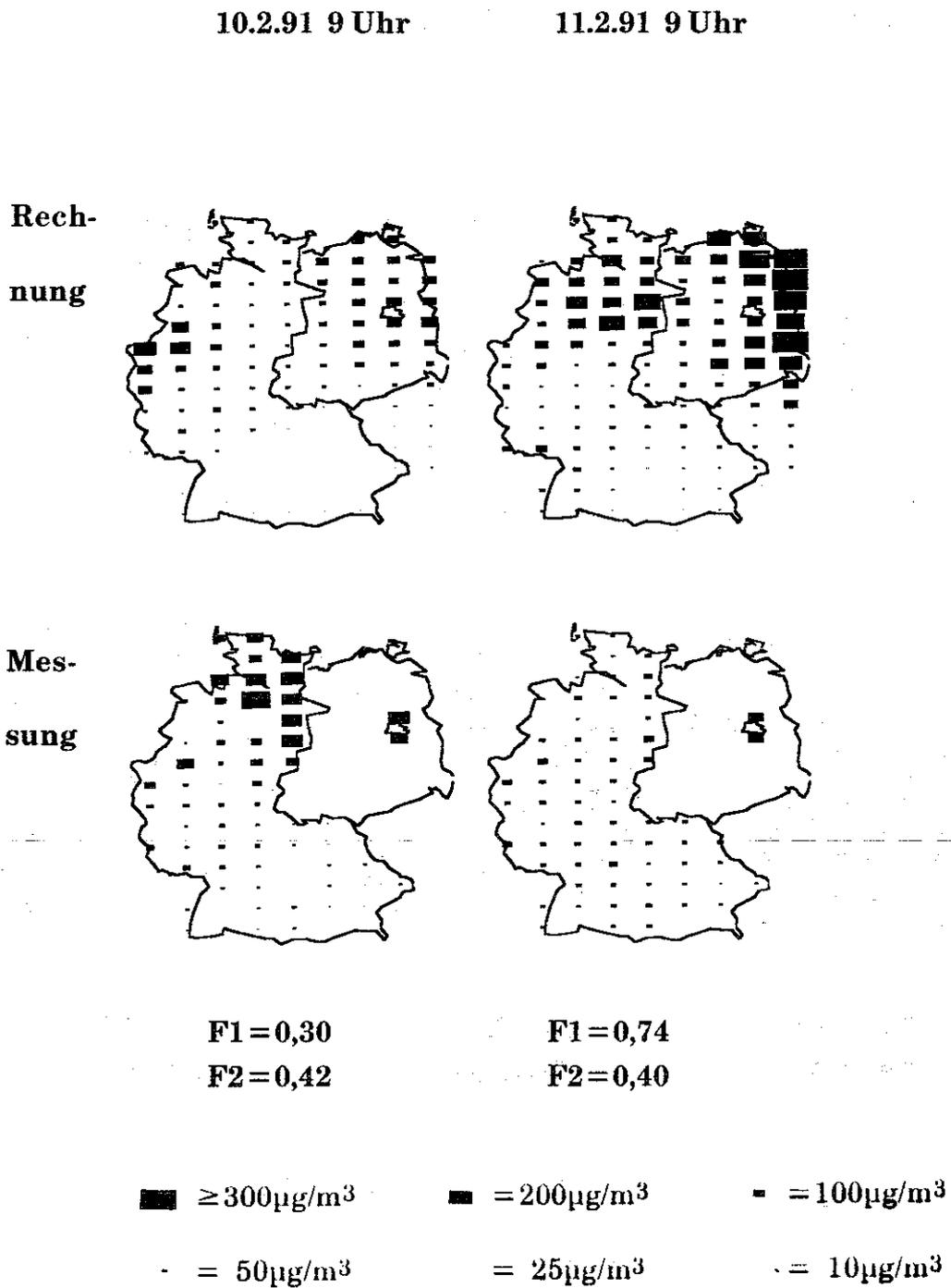


Abb. 5.16d: Rasterkarten von Rechnung und Messung (Werte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$) für den 10.-11. Februar 1991 jeweils 9 Uhr (die angegebenen Fehlerwerte beziehen sich auf das Gebiet der alten Bundesländer)

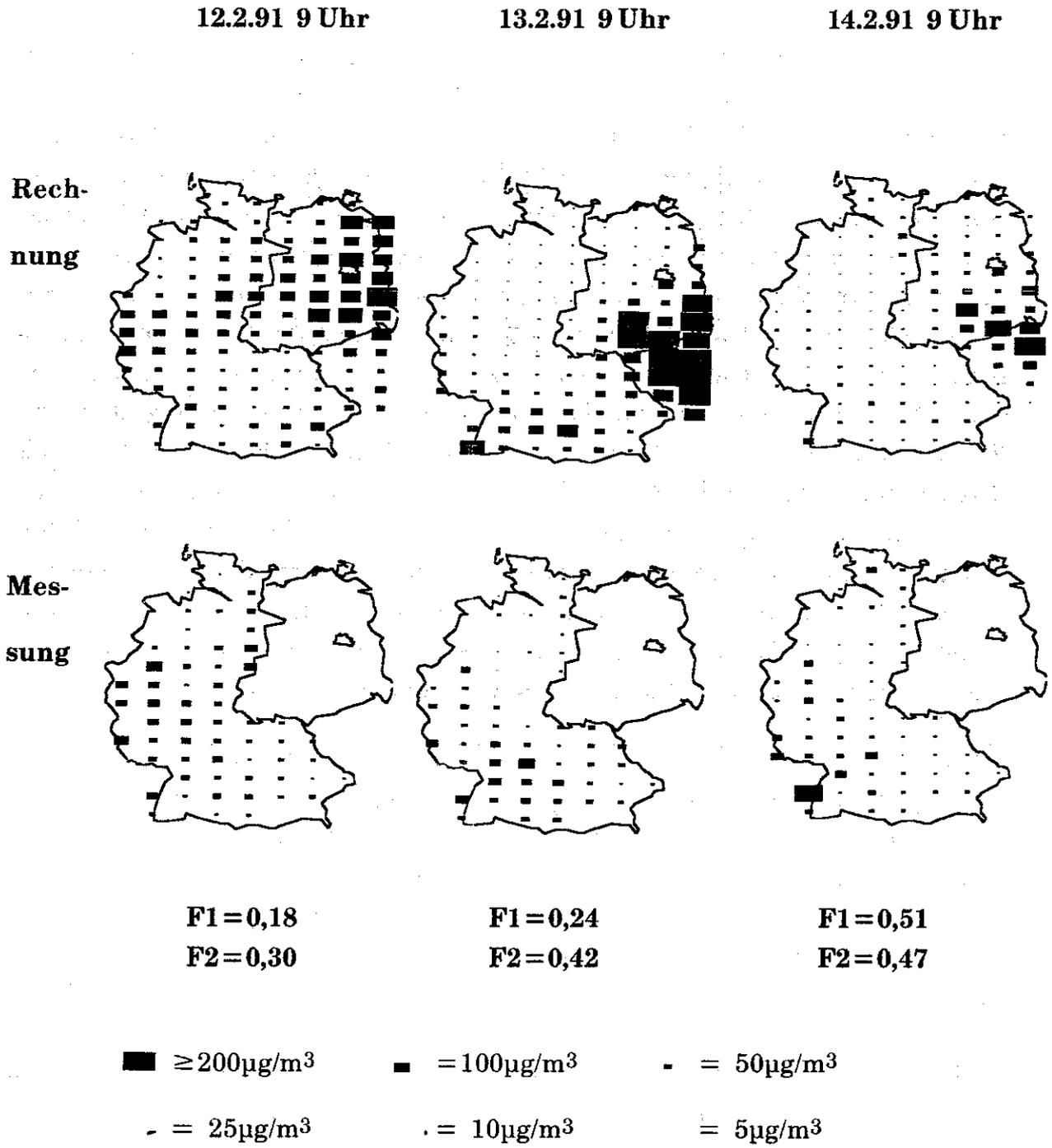


Abb. 5.16e: Rasterkarten von Rechnung und Messung (Werte in µg/m³) für den 12.-14. Februar 1991 jeweils 9 Uhr (die angegebenen Fehlerwerte beziehen sich auf das Gebiet der alten Bundesländer)

5.3.5.2 Zeitlicher Verlauf der Konzentrationswerte in ausgewählten Rasterfeldern

Im letzten Abschnitt wurde für den Februar 1991 ein Überblick über den zeitlichen Verlauf der regionalen Verteilung der Konzentrationswerte von SO₂ gegeben, und für ausgewählte Termine wurden die entsprechenden Rasterkarten dargestellt. Diese Beschreibung wird im folgenden durch eine Darstellung des zeitlichen Verlaufs von Meß- und Rechenwerten an ausgewählten Rasterfeldern ergänzt. Fehler in der Wiedergabe der regionalen Verteilung, wie z.B. falscher Fahnenverlauf oder fehlerhafte Berechnung der Absolutwerte kommen in dieser Darstellungsform deutlich durch Abweichungen im zeitlichen Verlauf der Konzentrationswerte zum Ausdruck. Ausgewählt wurden wiederum zwei Rasterfelder im Osten Niedersachsens sowie im Nordosten Bayerns (Gartow und Regnitzlosau - Rasterfeldnummern 16 und 39) sowie zwei Rasterfelder im Westen Deutschlands (Gittrup und Rottenburg - Rasterfeldnummern 17 und 61), desweiteren ein Rasterfeld im Ruhrgebiet (Rasterfeldnummer 22) sowie das Rasterfeld Kassel (Rasterfeldnummer 29). Dargestellt wird jeweils der 6-Stunden-Mittelwert. Für den Februar 1991 liegen auch Werte aus den neuen Bundesländern vor /47/, und zwar Tagesmittelwerte für die Stationen Schwerin (Rasterfeldnummer *3), Schleiz (Rasterfeldnummer * 26) und Wiesenburg (Rasterfeldnummer *13).

Im Rasterfeld mit der Reinluftstation **Gartow** (Abb. 5.17a) werden vom 1.2.-3.2. die gemessenen Konzentrationswerte z.T. überschätzt, da die errechnete Fahne von Südost nach Nordwest, die gemessene jedoch von Ost nach West verläuft und das Rasterfeld nicht beaufschlagt. Dafür werden weiter südlich im Rasterfeld Kassel (Abb. 5.12e) die gemessenen Werte unterschätzt. Vom 4.2.-7.2. und vom 13.2.-27.2. liegen Meß- und Rechenwerte auf niedrigem Niveau. Im Zeitraum 8.2.-11.2. stellt sich die Wetterlage um, und es treten nur noch leicht erhöhte Meß- und Rechenwerte auf. Der Peak am 10.2. bei den Messungen ist auf eine südöstliche Bodenströmung zurückzuführen, während nach den Prognosedaten Südwestwind herrscht. Am 28.2. verläuft die errechnete Fahne von Südost nach Nordwest, die gemessene von Ost nach West, beaufschlagt also nicht das Rasterfeld Gartow.

In den Rasterfeldern mit den Reinluftstationen **Regnitzlosau** (Abb. 5.17b) bzw. **Gittrup** (Abb. 5.17c) wird der zeitliche Verlauf der Konzentrationswerte zufriedenstellend wiedergegeben. Lediglich am 7.2. werden in Regnitzlosau Werte bis 300 µg/m³ gemessen und nur Werte um 50 µg/m³ errechnet, da an diesem Tag die Fahne etwas weiter im Norden verläuft (siehe Rasterkarte für den 7.2., 9 Uhr in Abb. 5.16c).

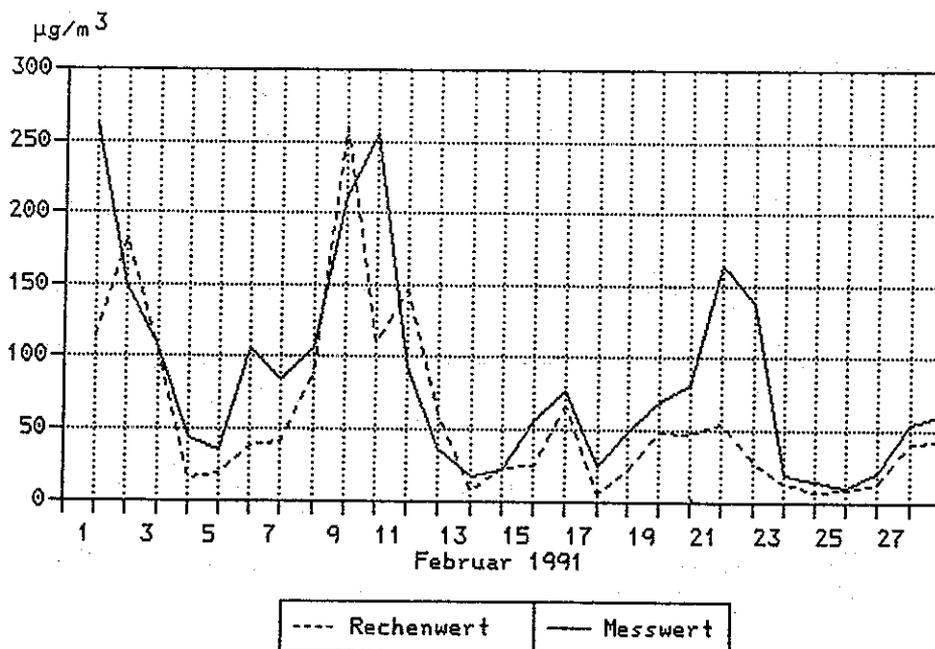
Im Rasterfeld mit der Reinluftstation **Rottenburg** (Abb. 5.17d) liegen im Februar die Meßwerte i.a. unter $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$, nur in der Zeit vom 5.2.-7.2. werden Werte bis $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ erreicht. Bei den Rechnungen treten am 2./3.2 mit $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$, am 4.2. mit $110 \mu\text{g}/\text{m}^3$, am 5./6.2. mit knapp $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$ sowie am 18./19.2. mit $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ kurzfristige Peaks auf. Der Peak am 2.2., der auch in den Rasterkarten in erhöhten Werten in Baden-Württemberg zum Ausdruck kommt, ist auf Trajektorien zurückzuführen, die, von den neuen Bundesländern ausgehend, südlich der Alpen verlaufen und im Westen Deutschlands wieder nordwärts ziehen. Ein derartiger Verlauf dürfte wenig realistisch sein; die erhöhten Werte sind also eindeutig auf Schwächen des Modells zurückzuführen. Am 5.2. und 6.2. zieht eine Fahne in Nordost - Südwest - Richtung über den Süden der alten Bundesländer, der Anstieg der Werte wird durch die Rechnungen jedoch überschätzt. Der Peak am 18./19.2. tritt bei südwestlichem Wind auf, ist also vermutlich eine Folge der überschätzten Emissionswerte in den Benelux-Staaten und in Frankreich.

Im Rasterfeld **Kassel** (Abb. 5.17e) ist die Übereinstimmung von Meß- und Rechenwerten gut. Dieses Rasterfeld wird sowohl von den in Ost-West- (Messung), als auch von den in Südost-Nordwest-Richtung (Rechnung) verlaufenden Fahnen beaufschlagt, und damit hat ein leicht fehlerhaft berechneter Fahnenverlauf wegen der großen räumlichen Auflösung des Modells keine Auswirkungen auf die für dieses Rasterfeld berechneten Konzentrationswerte.

Im **Ruhrgebiet** treten bei west- bis südwestlichen Winden am 10.2. und 11.2., aber auch an den folgenden Tagen, leicht erhöhte Konzentrationswerte auf. Abbildung 5.17f zeigt den zeitlichen Verlauf von Meß- und Rechenwerten für das Rasterfeld 22. Die Übereinstimmung ist ausgesprochen gut. Der Anstieg sowie der anschließende Abfall der Werte am 4.2. wird hervorragend wiedergegeben. Der gemessene Peak am 10./11.2. bei südwestlichen Winden wird etwas überschätzt, am 19.2. ist er schmaler und höher, der Peak am Monatsende tritt etwas verfrüht ein.

An den Stationen **Schwerin** und **Schleiz** (hier beginnt die Meßreihe erst am 9.2.) ist die Übereinstimmung von Messung und Rechnung gut (s. Abb. 5.17 g und h), lediglich in der Zeit vom 19. bis 23.2. werden die Meßwerte deutlich unterschätzt. An der Station **Wiesenburg** (Abb. 5.17j) liegen die Meßwerte zeitweise über den Rechenwerten, so z.B. am 11. und 12.2. sowie in der Zeit vom 19.2. bis 25.2. 91. Im letztgenannten Zeitraum werden jedoch im südlich von Wiesenburg gelegenen Rasterfeld Werte bis $300 \mu\text{g}/\text{m}^3$ errechnet.

g)



h)

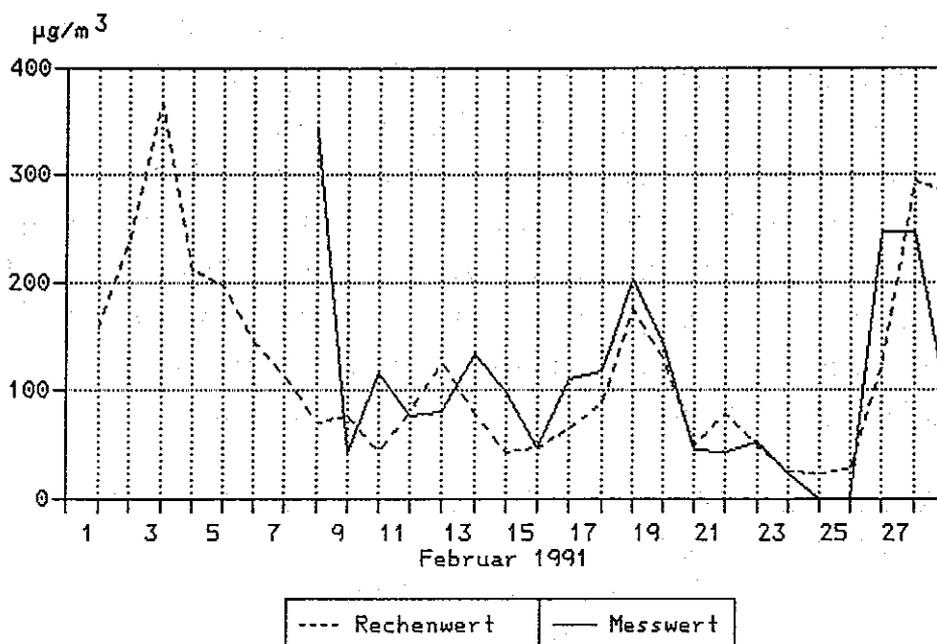


Abb. 5.17: Zeitlicher Verlauf der Konzentrationswerte von Rechnung und Messung in ausgewählten Rasterfeldern
g) Schwerin h) Schleiz

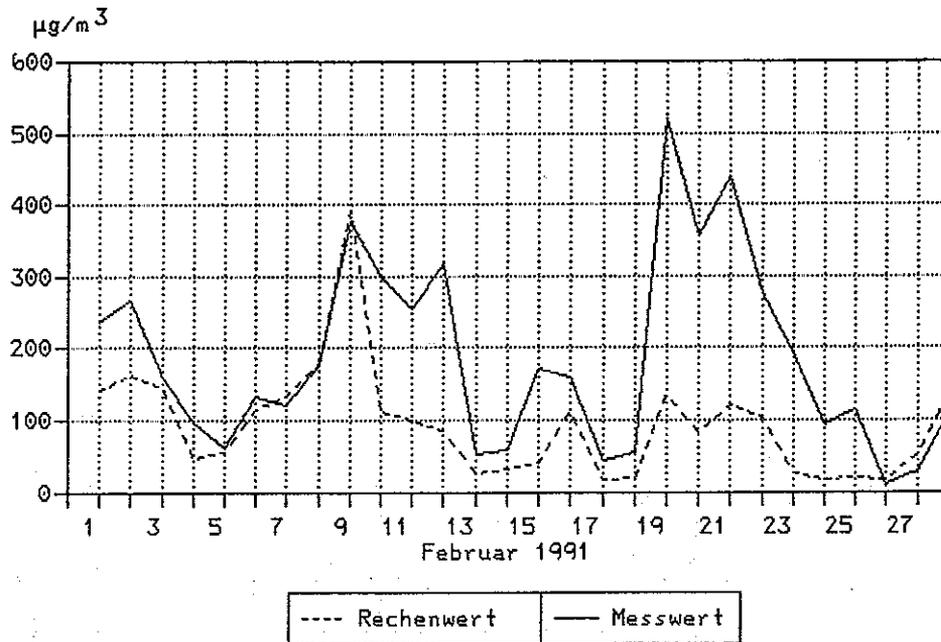


Abb. 5.17i: Zeitlicher Verlauf der Konzentrationswerte von Rechnung und Messung im Rasterfeld Wiesenburg

5.4 Bewertung der Ergebnisse

Das Modell SMOVO wurde im probeweisen Routinebetrieb in der Zeit vom November 1989 bis März 1990 sowie vom Oktober 1990 bis März 1991 eingesetzt. Zusätzlich wurden Rechnungen für Episoden hoher SO_2 -Konzentrationswerte im Januar 1985 sowie im Januar und Februar 1987 durchgeführt. Dabei wurden SO_2 -Konzentrationswerte für die Bundesrepublik Deutschland in einer räumlichen Auflösung von ca. $50 \text{ km} \times 70 \text{ km}$ und in einer zeitlichen Auflösung von 3 Stunden berechnet und mit Meßwerten insbesondere aus dem Smogfrühwarnsystem des Umweltbundesamtes verglichen. In den beiden Winterhalbjahren 1989/1990 und 1990/1991 traten wegen der günstigen Ausbreitungsbedingungen nur kurzzeitig und regional begrenzt leicht erhöhte Konzentrationswerte bis zu $600 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auf. Mit der ausführlichen Darstellung der Ergebnisse in diesem Kapitel

- wurde ein Gesamtüberblick über die Rechenergebnisse und den Vergleich von Messung und Rechnung gegeben;
- wurden für ausgewählte Termine bzw. Episoden Detaillergebnisse dargestellt,
- die Ergebnisse auf der Grundlage unterschiedlicher Darstellungsformen interpretiert und bewertet
- und, zusammen mit den Sensitivitätsanalysen in Kapitel 4, Hinweise darauf gegeben, in welcher Weise das Modell weiterentwickelt werden kann bzw. welche Schwerpunkte bei einem neu zu entwickelnden Modell zu setzen sind.

Beginn, Verlauf und Ende von Episoden erhöhter Konzentrationswerte wurden i.a. gut prognostiziert. Auch die Höhe der Konzentrationswerte, die in den betrachteten Winterhalbjahren im Bereich von deutlich unter $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bis zu $600 \mu\text{g}/\text{m}^3$ lagen, wird vom Modell gut wiedergegeben. Allerdings traten hin und wieder Abweichungen in der regionalen Verteilung der Konzentrationswerte auf. Häufig ist dabei die errechnete Fahne erhöhter Konzentrationswerte gegenüber der entsprechenden gemessenen Fahne im Uhrzeigersinn gedreht, was darauf zurückzuführen sein dürfte, daß zur Modellierung des Transports nur der Wind im 850 hPa-Niveau herangezogen wird und damit eine Windscherung zum Boden hin nicht berücksichtigt werden kann. Ein ausschließlicher Vergleich von Meß- und Rechenwerten in einzelnen Rasterfeldern bzw. an einzelnen Stationen ist daher für eine Bewertung und Interpretation der prognostizierten SO_2 -Konzentrationen nur bedingt geeignet. Vielmehr sollten gerade beim Einsatz des Modells im Smogfrühwarnsystem die in diesem Kapitel in zahlreichen Abbildungen dargestellten Rasterkarten der regionalen Verteilung der Konzentrationswerte herangezogen werden, um zusammen mit zusätzlichen Informationen, wie z.B. bereits vorliegenden Meßwerten und meteorologischen Informationen, eine Prognose des zeitlichen Verlaufs und der regionalen Verteilung der Konzentrationswerte zu ermöglichen.

Neben der eigentlichen Smogprognose bietet die Auswertung der Rechenergebnisse weitere Möglichkeiten. Hierzu gehören:

1. Die Ermittlung der Beiträge einzelner Staaten zur errechneten Konzentrationsverteilung;
2. Die Identifikation von Quellen oder Quellregionen, die während bestimmter Episoden besonders hohe Beiträge liefern;
3. Die Untersuchung der Auswirkungen bestimmter Emissionsszenarien auf die Konzentrationsverteilung;
4. Eine Interpretationshilfe bei einem Vergleich von Meßwerten unterschiedlicher Jahre. Hier kann das Modell Hilfestellung liefern, so z.B. bei der Beantwortung der Frage, ob eine Änderung der Meßwerte von Jahr zu Jahr überwiegend meteorologische Ursachen hat oder aber beispielsweise auf eine Änderung der Emissionswerte in einzelnen Regionen oder Staaten zurückzuführen ist.

6. Die Verwendung von Prognosen des Europamodells für die Smogfrühwarnung

Seit Anfang 1991 liefert das Europamodell des Deutschen Wetterdienstes routinemäßig Wettervorhersagedaten. Damit werden die bislang zur Wettervorhersage eingesetzten Modelle, das feuchtbarokline BKF-Modell und das genestete feuchtbarokline BKN-Modell durch ein verbessertes Modell mit wesentlich höherer horizontaler und vertikaler Auflösung ersetzt. In einer Übergangsphase werden die Daten des BKF/BKN-Modells zwar weiterhin für Vergleichsrechnungen zur Verfügung stehen, jedoch sollen in Zukunft zur Smogprognose die Daten des Europamodells genutzt werden. Dies bedeutet eine weitgehende Modifizierung des bisher verwendeten Modells SMOVO.

Während die bislang zur Smogprognose benutzten IGEL-Daten auf einer polarstereographischen Projektion vorliegen, wird für das Europamodell ein rotiertes geographisches Gitternetz gewählt. Dazu wird der Nordpol des normalen geographischen λ/ϕ Gitternetzes derart in den Pazifik verschoben, daß der Äquator des rotierten Systems durch die Mitte des Modellgebietes verläuft. Der Abstand einzelner Gitterpunkte des Europamodells beträgt jeweils $\frac{1}{2}$ Längengrad bzw. $\frac{1}{2}$ Breitengrad, was im Bereich Mitteleuropas etwa 55 km entspricht. Die Anzahl aller Gitterpunkte des Europamodells beträgt zur Zeit 23349, wovon jedoch nur maximal ein Drittel auf dem Gebiet liegen, das für die Prognose advehierten Smogs relevant ist. Auf einem relativ kleinen Ausschnitt mit 930 Gitterpunkten, der die weitere Umgebung Deutschlands umfaßt, werden alle für die Smogprognose benötigten Parameter in stündlicher Auflösung ausgegeben. Falls sich zukünftige Rechnungen für das Smogfrühwarnsystem auf diesen Ausschnitt beschränken würden, könnten einige englische und französische Quellen im Westen sowie polnische und tschechoslowakische Quellen im Osten nicht mehr berücksichtigt werden. Abbildung 6.1 zeigt das Ausschnittsgebiet des Europamodells im Vergleich zu der von den BKF-Daten überdeckten und von SMOVO genutzten Fläche.

Wesentliche Änderungen gegenüber den zur Zeit noch genutzten BKF-Daten ergeben sich durch die Verwendung eines anderen Vertikalkoordinatensystems. Alle BKF-Daten liegen auf neun Flächen gleichen Drucks in einem p-System vor (Druck als Vertikalkoordinate). Die vertikale Struktur der atmosphärischen Grenzschicht wird durch die BKF-Daten nicht aufgelöst - die untersten Schichten liegen in 950, 850 und 700 hPa. Das Europamodell besitzt dagegen 20 Modellflächen, von denen bei einem Bodendruck von 1000 hPa sieben Schichten unterhalb 850 hPa liegen. Die Auflösung der Grenzschicht ist damit wesentlich besser als

bei den BKF-Daten. Die Daten des Europamodells liegen in Bodennähe auf einem der Orographie folgenden σ -System vor, d.h. an einem Gitterpunkt hängt die "Höhe" einer Modellfläche im p-System vom unreduzierten Bodenluftdruck p_s ab:

$$p_i = a_i + b_i p_s$$

Die Konstanten a_i und b_i sind dabei für die jeweiligen Modellflächen vorgegeben. Abbildung 6.2 zeigt exemplarisch den Verlauf der Modellflächen des Europamodells im Vergleich zu denen des BKF- bzw. BKN-Modells.

Erster Schritt bei der Modifikation des Ausbreitungsmodells SMOVO zur Verwendung der Daten des Europamodells wird zunächst der Übergang auf das Gitternetz des Europamodells sein. Alle weiteren Änderungen können stufenweise eingeführt werden, da die bislang zur Prognose des Schadstofftransports in Europa benutzten und der BKF-Datenbank entnommenen Parameter auch vom Europamodell geliefert werden.

Die unmittelbar zu nutzenden Parameter des Europamodells sind die Komponenten des Windes, der Bedeckungsgrad und die Niederschlagsmenge. Die beiden zuletzt erwähnten Parameter sind unabhängig vom benutzten Vertikalkoordinatensystem. Die Windgeschwindigkeit liegt in einer speziellen Datenbank auch auf Druckflächen interpoliert vor, jedoch sollen bei der Trajektorienberechnung die Vorteile des der Orographie folgenden σ -Koordinatensystems und der hohen vertikalen Auflösung des Europamodells genutzt werden. Wie beim ursprünglichen MESOS-Modell wird der Wind über eine Transportschicht gemittelt, je nach vertikaler Erstreckung des auf der betrachteten Trajektorie transportierten Schadstoffpakets. Dies führt jedoch dazu, daß verschiedene Quellhöhen bei der Trajektorienberechnung wieder getrennt berücksichtigt werden müssen. Weiterhin soll die verbesserte vertikale Auflösung der atmosphärischen Grenzschicht zur Bestimmung der Mischungsschichthöhe und der vertikalen Durchmischung in Quellnähe ausgenutzt werden. Dazu steht neben den Wärme- und Impulsflüssen am Boden das vertikale Temperaturprofil zur Verfügung.

Es besteht die Hoffnung, daß durch die Verwendung der Prognosen des Europamodells und den Einsatz des auf der Basis von SMOVO weiterentwickelten Modells SMOROP mit höherer zeitlicher und räumlicher Auflösung advehierter Smog sicherer vorhergesagt werden kann. Andererseits dürften dann aber auch weitere Verbesserungsmöglichkeiten, die im Rahmen des relativ einfachen Trajektorienmodells MESOS durchführbar waren, ausgeschöpft sein.

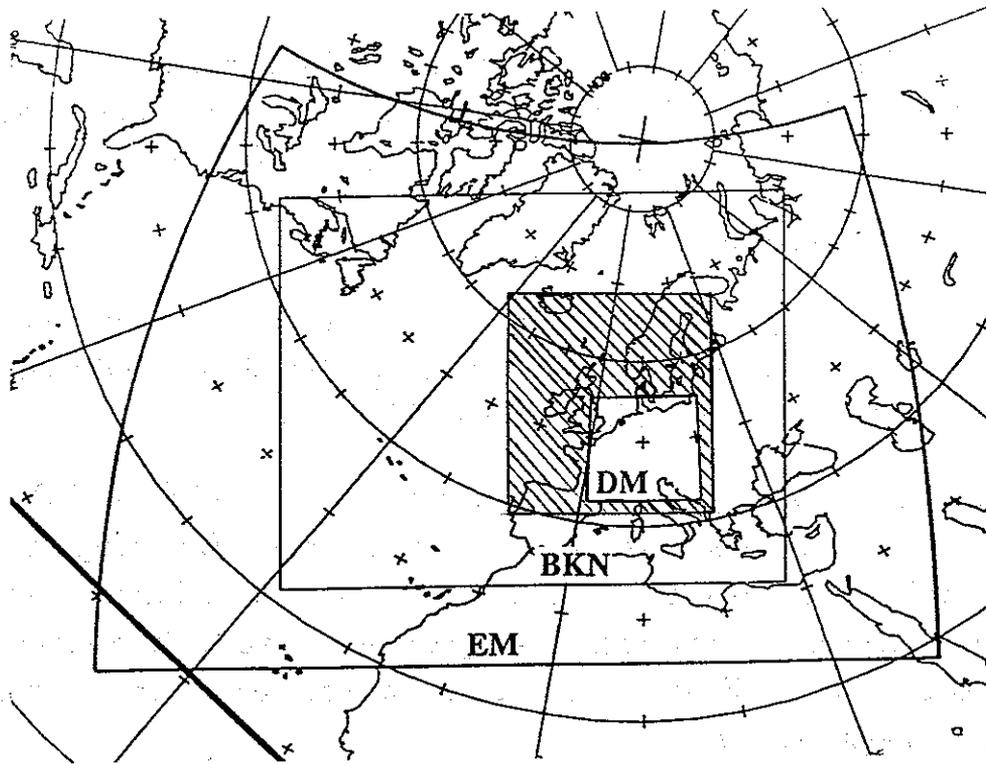


Abb. 6.1: Ausschnittsgebiet des Europamodells (DM) zusammen mit der von den IGEL-Daten überdeckten Fläche (schraffiert)

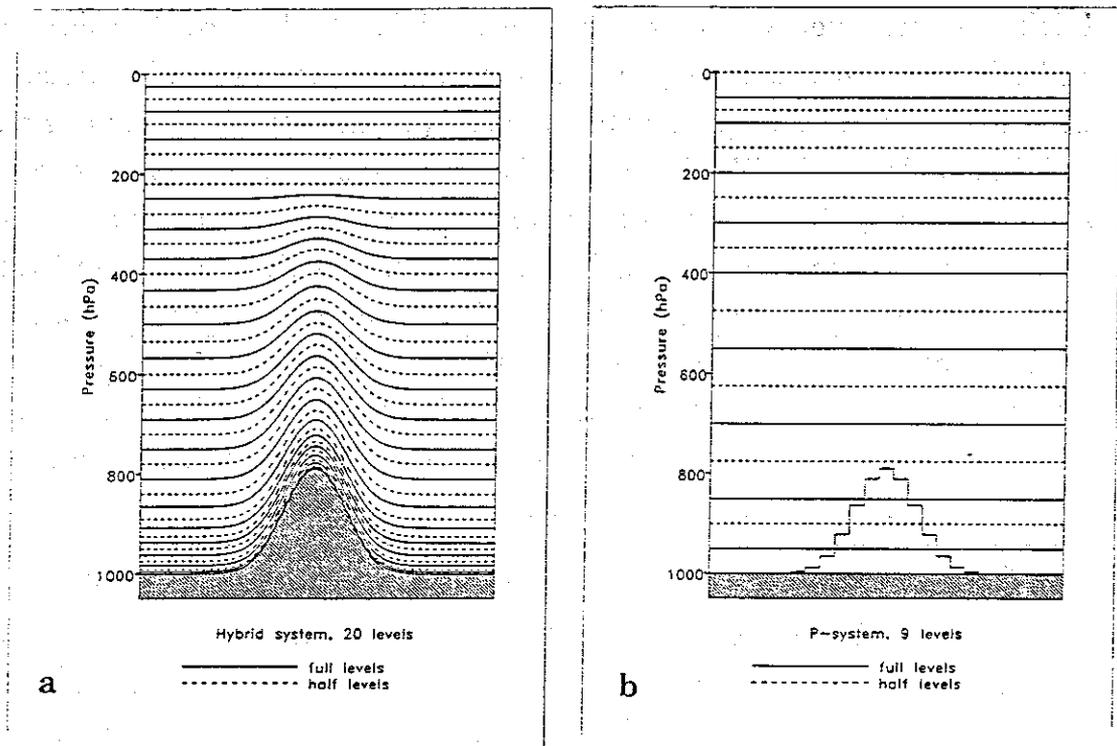


Abb. 6.2: Vergleich der vom Europamodell (a) und dem BKN/BKF-Modell (b) benutzten Vertikalkoordinaten

Literaturverzeichnis

- /1/ ApSimon, H.M.; Goddard, A.J.H. ; Wrigley, J.; 1985:
Long-range atmospheric dispersion of radioisotopes. I. The MESOS model.
Atmospheric Environment, 19, 99-111
- /2/ Külske, S.; 1988:
Entwicklung und Maßnahmen der Smog-Verordnung in Nordrhein-Westfalen. In:
Ahrens, D.; Mayer, H. (Hrsg.): Fachtagung Umweltmeteorologie, München 1988
Wissenschaftliche Mitteilungen des meteorologischen Instituts der Universität
München, 61, 130-137
- /3/ Külske, S.; 1982:
*Analyse der Periode sehr hoher lokaler Schadstoffbelastungen im Ruhrgebiet vom 15. 01.
bis 20. 01. 1982.*
LIS-Berichte Nr. 24
- /4/ Giebel, J. ; Bach, R.-W. ; 1979:
Ursachenanalyse der Immissionsbelastung während der Smogsituation am 17. 1. 1979.
Schriftenreihe der Landesanstalt für Immissionsschutz des Landes Nordrhein-
Westfalen, Nr. 47, 60-73
- /5/ Umweltbundesamt Berlin; 1991:
persönliche Mitteilung
- /6/ Israel, G.W.; Wengenroth K. ; Bauer, H.-W; 1983:
Schadstoffzusammensetzung der Luft während Smogsituationen in Berlin (West).
Bericht des Fachgebietes Luftreinhaltung im Institut für Technischen Umweltschutz,
Techn. Universität Berlin
- /7/ Bruckmann, P.; Reich, T.; Schrader, W.; 1985:
Die Hamburger Smogepisode im Dezember 1983.
Staub-Reinhaltung der Luft, 45, 307-312
- /8/ Perkuhn, J.; Puls, K.E.; Otte, U; 1985:
Die Smog-Wetterlage im Ruhrgebiet im Januar 1985.
Wetteramt Essen
- /9/ Külske, S.; Giebel, J.; Pfeffer, H.-U.; Beier, R.; 1985:
Analyse der Smoglage vom 16. bis 21. Januar 1985 im Rhein-Ruhr-Gebiet
Teil 1: Text und Bildband.
LIS-Berichte Nr. 55
- /10/ Hessischer Minister für Arbeit, Umwelt und Soziales (Hrsg.); 1985:
*Smog-Bericht 85. Erfahrungen und erste Folgerungen aus der Smog-Situation in Hessen
im Januar und Februar 1985.*
- /11/ Bruckmann, P., H.; Borchert, S.; Külske, R.; Lacombe, P.; Lenschow, W.J.; Müller;
Vitze, W.; 1986:
Die Smog-Periode im Januar 1985.
Staub-Reinhaltung der Luft, 46, 334-342
- /12/ Bruckmann, P.; 1988:
Smog-Wetterlagen mit hohem Ferntransportanteil (Advektionssmog)
promet 1/2/3, 85-91

- /13/ Finlayson - Pitts, J.B.; Pitts, J.N. Jr.; 1986:
Atmospheric Chemistry.
J. Wiley & Sons, New York
- /14/ Seinfeld, J.H.; 1986:
Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution.
J. Wiley & Sons, New York
- /15/ Gillani, N.V.; 1985:
Modelling of chemical transformations of SO_x and NO_x in the polluted atmosphere: An overview of approaches and current status. In: De Wispelaere, C. (Hrsg.): *Air Pollution Modelling and its Application IV.*, 163-192
Plenum Press, New York
- /16/ Jacob, D.J.; Hoffmann, M.R.; 1983:
Chemistry of nighttime urban fogs. Precipitation scavenging, dry deposition, and resuspension. In: Pruppacher, H.R.; Semonin, R.G.; Slinn, W.G.N. (Hrsg): *Precipitation scavenging, Vol I*, 149-160
Elsevier Science Publishing Company, Inc., New York
- /17/ Eatough, D.J.; Arthur, R.J.; Eatough, N.L.; Hill, M.W.; Mangelson, N.F.; Richter, B.E.; Hansen, L.D.; 1984:
Rapid conversion of SO₂ to sulfate in a fogbank.
Environ. Sci. Technol., 18, 855-859
- /18/ Cadle, S.H.; Dasch, J.M.; Mulawa, P.A.; 1985:
Atmospheric concentrations and the deposition velocity to snow of nitric acid, sulfur dioxide and various particulate species.
Atmospheric Environment, 19, 1819-1827
- /19/ Barrie, L.A.; Schemenauer, R.S.; 1986:
Pollutant wet deposition mechanisms in precipitation and fog water.
Water, Air, Soil Pollut., 30, 91-104
- /20/ Waldman, J.M.; Jacob, D.J.; Munger, J.W.; Hoffman, M.R.; 1986:
A field study of pollutant deposition in radiation fog.
Am. Chem. Soc., Div. Pet. Chem., Prepr., 31, 499-503
- /21/ Scherer, B.; Stern, R.; 1989:
Simulation of an acid deposition episode over Europe with the TADAP/ADOM Eulerian regional model. In: vanDop, H. (Hrsg.): *Air Pollution Modelling and its Application VIII*, 333-349
Plenum Press, New York
- /22/ Ebel, L.; Neubauer, F.M.; Raschke, E.; Speth P.; (Hrsg.); 1989:
Das EURAD-Modell: Aufbau und erste Ergebnisse.
Mitteilungen aus dem Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität zu Köln,
Nr. 61
- /23/ Thehos, R.; 1991:
Numerische Simulationen zum interregionalen Spurenstofftransport über Europa.
Diss., TH Darmstadt
- /24/ Damrath; 1991:
persönliche Mitteilung

- /25/ van Dop, H.; 1986:
The CCMS air pollution model intercomparison study.
Atmospheric Environment, 20, 1261-1271
- /26/ van Dop, H; de Haan, B.J.; Engeldal, C.; 1982:
The KNMI mesoscale air pollution model.
Scientific Report. W.R. 82-2,
KNMI, De Bilt
- /27/ van Egmond, N.D.; Kesseboom, H.; 1985:
A numerical mesoscale model for long-term average NO_x and NO₂-concentration.
Atmospheric Environment, 19, 587-595
- /28/ Eliassen, A.; 1983:
Aspects of Lagrangian air pollution modelling. In: DeWispelaere, C. (Hrsg.): Air
pollution modelling and its application III, 3-21
Plenum Press, New York
- /29/ van Egmond, N.D.; Kesseboom, H.; 1983:
*Mesoscale air pollution dispersion models. II. Lagrangian puff model and comparison
with Eulerian grid model.*
Atmospheric Environment, 17, 267-274
- /30/ Halbritter, G.; Bräutigam, K.-R.; Kupsch, Ch.; Sardemann, G.; 1985:
*Berechnung der weiträumigen Verteilung von Schwefelemissionen mit Hilfe des
Trajektorien-Puff-Modells MESOS*
Teil I: Staub-Reinhaltung der Luft, 45, 115-120
Teil II: Staub-Reinhaltung der Luft, 45, 204-210
- /31/ Coenen, R. (Hrsg); 1985:
*Steinkohle - Technikfolgenabschätzung ihres verstärkten Einsatzes in der
Bundesrepublik Deutschland.*
Springer Verlag, Berlin
- /32/ Ehrhardt, J.; Burkart, K.; Hasemann, I.; Matzerath, C.; Panitz, H.J.; Steinhauer, C.;
1988:
*Accident consequence assessment modelling in the new program system UFOMOD with
illustrative results.*
Annales de l'Association Belge de Radioprotection, Vol. 13, No. 2, 238-258
Brussels
- /33/ Smith, F.B.; 1973:
*A scheme for estimating the vertical dispersion of a plume from a source near ground
level.*
Proc.3rd meeting of an expert panel on air pollution modelling, Paris, 1972
NATO/CCMS report 14
- /34/ Pasquill, F.; Smith, F. B.; 1983:
Atmospheric Diffusion.
Ellis Horwood, Chichester
- /35/ Bräutigam, K.-R.; Halbritter, G.; Brandl, V.; Findling, B.; Fürniß, B.; Kupsch, Ch.;
Sardemann, G.; Schuler, A.; Schulz, V.; Wiesmann, F.J.; 1989:
*Weiträumige Immissionsanalysen für säurebildende und pflanzentoxische
Luftschadstoffe.*
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK-Bericht 4511

- /36/ Edelmann; 1989:
persönliche Mitteilung
- /37/ Löblich, H.J.; 1985:
EMUKAT - Forschungsvorhaben überregionales fortschreibbares Kataster der Emissionsursachen und Emissionen für SO₂ und NO_x
H.J. Löblich, Beratungsbüro für Umweltfragen, Hamburg
- /38/ DORNIER-System; 1985:
Kernforschungszentrum Karlsruhe, unveröffentlicht
- /39/ Katzer, H.; 1986:
Kernforschungszentrum Karlsruhe, unveröffentlicht
- /40/ DIW (Deutsches Institut für Wirtschaftsforschung); 1988
SO₂- und NO_x-Emissionen in der DDR 1982
Beiträge zur Strukturforchung, Heft 102, Duncker & Humblot, Berlin
- /41/ Bräutigam, K.R.; 1989:
Kernforschungszentrum Karlsruhe, unveröffentlicht
- /42/ DIW (Deutsches Institut für Wirtschaftsforschung); 1988:
SO₂-Emissionen in der CSSR 1982
Beiträge zur Strukturforchung, DIW Bericht, Duncker & Humblot, Berlin
- /43/ Cofala, J.; Bojarski, W.; 1987:
Emissions of sulfur and nitrogen oxides resulting from the energetic utilization of fuels. The situation in Poland
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4257
- /44/ Warren Springs Laboratories; 1987:
persönliche Mitteilung
- /45/ Berliner Wetterkarte
Amtsblatt des Instituts für Meteorologie
Freie Universität Berlin
- /46/ Umweltbundesamt Berlin; 1989:
Daten zur Umwelt 1988/89
Erich Schmidt Verlag GmbH & Co., Berlin
- /47/ Umweltbundesamt Berlin; 1991:
Monatsberichte aus dem Meßnetz, Heft 2/91
- /48/ Bräutigam, K.R.; 1990:
Kernforschungszentrum Karlsruhe, unveröffentlicht
- /49/ SRI (Stanford Research Institute); 1982:
Further studies to develop and apply long- and short-term models to calculate regional patterns and transfrontier exchanges of airborne pollution in Europe
SRI International, Final Report
- /50/ Vogt, S.; Hübschmann, W.; Wittek, P.; 1983:
Niederschlag und Washout im Unfallfolgenmodell der Deutschen Risikostudie Kernkraftwerke
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 3548

- /51/ Ellenton, G.; Misra, P.K.; 1985:
Trajectory puff model of sulphur transport for Eastern North America
Atmos. Environ., 19, 727-737
- /52/ Berliner Wetterkarte, 1990
Beilage Nr. SO 11/90
Amtsblatt des Instituts für Meteorologie
Freie Universität Berlin
- /53/ Minister für Umwelt, Raumordnung und Landwirtschaft des Landes Nordrhein
Westfalen; 1986:
*Die Smogperiode im Januar 1985 - Synoptische Darstellung der Luftbelastung in der
Bundesrepublik Deutschland*
- /54/ de Leeuw, F.A.A.M.; van Egmond, N.D.; 1985:
*Luchtverontreinigingsepisode 16.-21. januari 1985: Meetresultaten, modelberekenin en
informatieverschaffing*
Rijksinstituut voor Volksgezondheit en Milieuhygiene, Bilthoven
- /55/ Umweltbundesamt Berlin; 1991:
persönliche Mitteilung
- /56/ Umweltbundesamt Berlin; 1992:
Daten zur Umwelt 1990/1991
Erich Schmidt Verlag GmbH & Co., Berlin
- /57/ Bräutigam, K.R.; 1991
Kernforschungszentrum Karlsruhe, unveröffentlicht

