

KfK 5380  
November 1994

# **Prognose ferntransportierten Smogs mit Hilfe der Prognosedaten des Europa-Modells des Deutschen Wetterdienstes**

**G. Sardemann, K.-R. Bräutigam,  
C. Matzerath Boccaccini, B. Fürniß  
Abteilung für Angewandte Systemanalyse**

**Kernforschungszentrum Karlsruhe**



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Abteilung für Angewandte Systemanalyse

KfK 5380

**Prognose ferntransportierten Smogs mit Hilfe  
der Prognosedaten des Europa-Modells des  
Deutschen Wetterdienstes\***

*G. Sardemann, K.-R. Bräutigam  
C. Matzerath Boccaccini und B. Fürniß*

\*) Die Studie wurde mit finanzieller Unterstützung des Umweltbundesamtes  
(Förderkennzeichen 30202003) durchgeführt

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

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

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH  
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

ISSN 0303-4003

## **Zusammenfassung**

### **Prognose ferntransportierten Smogs mit Hilfe der Prognosedaten des Europa-Modells des Deutschen Wetterdienstes**

Das Ausbreitungsmodell SMOROP ersetzt das bislang zur Vorhersage von SO<sub>2</sub>-Konzentrationen für das Smogfrühwarnsystem des Umweltbundesamtes verwendete Modell SMOVO. Es waren erhebliche Änderungen am Ausbreitungsmodell nötig, um als meteorologische Eingabedaten die Wetterprognosen des Europa-Modells des Deutschen Wetterdienstes (DWD) verwenden zu können. Zusätzlich wurden die zur Verfügung stehenden Emissionsdaten aktualisiert. SMOROP wurde im probeweisen Routinebetrieb auf den Rechenanlagen des DWD in den Wintermonaten der Jahre 1992/93 und 1993/94 ausführlich getestet und lieferte dabei ohne größere programmbedingte Unterbrechungen tägliche SO<sub>2</sub>-Prognosen für das Smogfrühwarnsystem. Der Vergleich der prognostizierten Konzentrationswerte mit Meßwerten der Stationen des Smogfrühwarnsystems zeigt eine befriedigende Übereinstimmung. Beginn, Verlauf und Ende winterlicher Episoden mit überhöhten Schadstoffkonzentrationen werden i. a. gut prognostiziert, allerdings wird die Höhe der Konzentrationswerte vor allem in Westdeutschland häufig überschätzt. Die regionale Verteilung der SO<sub>2</sub>-Konzentrationswerte wird durch SMOROP meist besser wiedergegeben als durch SMOVO. Insgesamt gesehen sind jedoch die Unterschiede zwischen den von beiden Ausbreitungsmodellen prognostizierten Werten relativ gering.

## Summary

### **Prediction of Advected Smog Using Weather Forecast Data of the Europa-Modell of the Deutscher Wetterdienst**

The dispersion model SMOROP replaces the former model SMOVO to be used for the forecast of SO<sub>2</sub>-concentrations in the smog-early-warning-system of the Umweltbundesamt. The model had to be modified for the input of weather forecast data provided by the "Europa-Modell" of the Deutscher Wetterdienst (DWD). In addition the emission data base has been brought up to date. SMOROP was thoroughly tested while running on a preliminary routine base on the computer facilities of the DWD in the winter months of the years 1992/93 and 1993/94. During this period daily SO<sub>2</sub>-forecasts were provided for the smog-early-warning-system of the Umweltbundesamt without severe interruptions. The correspondence between forecasted SO<sub>2</sub>-concentrations and the measurements at stations of the smog-early-warning-system is quite satisfactory with adequate forecasts of the beginning, development and end of high concentration episodes. In the western part of Germany SO<sub>2</sub>-concentration values can sometimes be overestimated. The quality of the forecasted regional distribution of SO<sub>2</sub>-concentrations by SMOROP is slightly better than that by SMOVO but on the whole the differences between the two models are relatively small.

## Vorbemerkung

Die vorliegende Studie wurde in der Abteilung für Angewandte Systemanalyse (AFAS) des Kernforschungszentrums Karlsruhe mit finanzieller Unterstützung des Umweltbundesamtes durchgeführt.

Für das im Rahmen dieses Vorhabens entwickelte Ausbreitungsmodell SMOROP liegt eine technische Programmbeschreibung vor, die bei der Abteilung für Angewandte Systemanalyse angefordert werden kann.

Unser Dank gilt dem Deutschen Wetterdienst in Offenbach, der freundlicherweise die Daten des Europa-Modells zur Verfügung stellte und auf seinen Rechenanlagen den probeweisen Routinebetrieb des Modells SMOROP ermöglichte. Desweiteren möchten wir Herrn Jäschke vom Umweltbundesamt, Pilotstation Frankfurt/Main, für die Betreuung des Projekts danken und Frau Uhse für die Bereitstellung von Meßdaten aus dem UBA-Meßnetz.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1.</b>	<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
<b>2.</b>	<b>Modellbeschreibung</b> .....	<b>6</b>
<b>2.1</b>	<b>Das Europa-Modell des Deutschen Wetterdienstes</b> .....	<b>6</b>
2.1.1	Vertikalkoordinatensystem .....	6
2.1.2	Horizontalkoordinatensystem .....	9
2.1.3	Datenbanken mit Produkten des Europa-Modells .....	11
<b>2.2</b>	<b>Das Ausbreitungsmodell SMOROP</b> .....	<b>14</b>
2.2.1	Berechnung des Trajektorienverlaufs .....	16
2.2.2	Berechnung des Massenhaushalts in SMOROP .....	17
2.2.3	Berechnung der Mischungsschichthöhe .....	19
2.2.4	Berechnung von Immissionswerten .....	19
<b>3.</b>	<b>Die vom Modell SMOROP genutzte Emissionsdatenbasis und deren Aktualisierung</b> .....	<b>21</b>
<b>3.1</b>	<b>Beschreibung der vom Modell SMOROP genutzten Emissionsdaten- basis für Schwefeldioxid</b> .....	<b>21</b>
<b>3.2</b>	<b>Aktualisierung der Emissionsdatenbasis für Schwefeldioxid</b> .....	<b>24</b>
3.2.1	SO <sub>2</sub> -Emissionen der Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) ..	24
3.2.2	SO <sub>2</sub> -Emissionen für das Gebiet der neuen Bundesländer .....	26
3.2.3	SO <sub>2</sub> -Emissionen Polens, der Tschechischen und der Slowakischen Republik, Ungarns und Österreichs .....	28
3.2.4	SO <sub>2</sub> -Emissionen Frankreichs .....	30
3.2.5	SO <sub>2</sub> -Emissionen der Benelux-Staaten und Großbritanniens .....	32
<b>3.3</b>	<b>Gesamtüberblick über die aktualisierten Emissionen von SO<sub>2</sub></b> .....	<b>32</b>
<b>3.4</b>	<b>Freisetzungshöhen</b> .....	<b>34</b>
<b>3.5</b>	<b>Zusammenfassung der Emissionswerte</b> .....	<b>34</b>

<b>4.</b>	<b>Auswertung der Rechnungen mit SMOROP für das Smogfrühwarnsystem im Winter 1992/93</b> .....	<b>39</b>
4.1	Vergleich der Prognosen mit Meßwerten an UBA-Stationen .....	41
4.1.1	Dezember 1992 .....	43
4.1.2	Januar 1993 .....	48
4.1.3	Februar 1993 .....	52
4.1.4	März 1993 .....	57
4.2	Die regionale Verteilung gemessener und prognostizierter SO <sub>2</sub> - Konzentrationen (Tagesmittel) .....	61
4.2.1	Die Episode zwischen dem 20. und dem 27. Dezember 1992 .....	61
4.2.2	Die Episode zwischen dem 28. Januar und dem 5. Februar 1993 .....	66
4.3	Verursacheranalyse für ausgewählte Fälle .....	70
4.4.	Prüfung der Prognosegüte .....	76
4.4.1	Vergleich von Meß- und Rechenwerten anhand von Punktwolken .....	76
4.4.2	Korrelationskoeffizienten .....	79
4.4.3	Kontingenztafeln .....	80
<b>5.</b>	<b>Sensitivitätsstudien</b> .....	<b>86</b>
5.1	Vergleich der Modelle SMOVO und SMOROP .....	86
5.1.1	Vergleich der durch das BKN - bzw. Europamodell des DWD zur Verfügung gestellten meteorologischen Parameter .....	87
5.1.1.1	Windfeld .....	88
5.1.1.2	Mischungsschichthöhe und Stabilitätsklasse .....	92
5.1.2	Vergleich der auf der Basis des Europamodells sowie des BKN - Modells berechneten Trajektorien .....	94
5.1.3	Vergleich der von SMOVO und SMOROP berechneten SO <sub>2</sub> - Konzentrationen .....	100
5.1.3.1	Der Konzentrationsverlauf in der zweiten Hälfte des Januar 1992 .....	101
5.1.3.2	Rechnungen mit SMOVO und SMOROP für den Dezember 1992 auf der Basis von EM - Daten .....	109
5.1.3.3	Bewertung des Modellvergleichs .....	110

<b>5.2</b>	<b>Vergleich verschiedener Ansätze zur Berechnung der Mischungsschichthöhe in SMOROP</b> .....	113
5.2.1	Verfahren zur Berechnung der Mischungsschichthöhe nach Ossing .....	113
5.2.2	Verfahren zur Bestimmung der Mischungsschichthöhe nach Verver und Scheele .....	117
5.2.3	Rechnungen mit den unterschiedlichen Ansätzen zur Berechnung der Mischungsschichthöhe .....	120
5.2.3.1	Vergleich der Mischungsschichthöhen .....	120
5.2.3.2	Vergleich der SO <sub>2</sub> -Konzentrationen .....	123
5.2.4	Bewertung .....	127
<b>5.3</b>	<b>Der Einfluß aktualisierter Emissionsdaten auf die Güte der Smogprognose</b> ..	129
5.3.1	Unterschiede bei der regionalen Verteilung der Emissionen in den jeweiligen Emissionsdatenbasen .....	129
5.3.2	Vergleich der mit den jeweiligen Emissionsdatenbasen berechneten Konzentrationswerte .....	131
<b>6.</b>	<b>Zusammenfassung</b> .....	137
	<b>Literaturverzeichnis</b> .....	140

## Verzeichnis der Abbildungen

<b>Abb. 2.1:</b>	Modellschichten des Europamodells und des BKN-/BKF-Modells .....	8
<b>Abb. 2.2:</b>	Orografie des Europa-Modells .....	8
<b>Abb. 2.3:</b>	Modellgebiet des Europa-Modells und Ausschnittsgebiet des Deutschland-Modells .....	10
<b>Abb. 2.4:</b>	Schematische Darstellung des Verlaufs der Unter- und Oberkante eines Schadstoffpakets zusammen mit dem Gang der Mischungsschichthöhe und der Schadstoffmasse pro Meter Mischungsschichthöhe .....	15
<b>Abb. 2.5:</b>	Ober- und Untergrenzen der untersten 5 Schichten des Europa-Modells zusam- men mit der Ober- und Unterkante eines Schadstoffpakets in SMOROP .....	17
<b>Abb. 2.6:</b>	Mögliche Werte der Zeitkonstanten der trockenen und nassen Ablagerung und der Umwandlung .....	18
<b>Abb. 2.7:</b>	Die Empfängerrasterflächen in SMOROP im Vergleich zu den Empfängerrasterflächen von SMOVO .....	20
<b>Abb. 3.1a:</b>	Regionale Verteilung der vom Modell SMOVO genutzten Emissionsdaten für England, Frankreich und die Benelux-Staaten .....	36
<b>Abb. 3.1b:</b>	Regionale Verteilung der vom Modell SMOVO genutzten Emissionsdaten für Polen, Ungarn, die Tschechische und die Slowakische Republik und für Österreich .....	37
<b>Abb. 3.1c:</b>	Regionale Verteilung der vom Modell SMOVO genutzten Emissionsdaten für die Bundesrepublik Deutschland .....	38
<b>Abb. 4.1:</b>	Lage der Meßstationen des Smogfrühwarnsystems .....	40
<b>Abb. 4.2:</b>	Darstellung des Verlaufs von Temperatur, Windgeschwindigkeit und Windrichtung für Dresden, Essen und Berlin im Dezember 1992 .....	46
<b>Abb. 4.3:</b>	Zeitreihen berechneter und gemessener SO <sub>2</sub> - Konzentrationen für den Dezember 1992 an den UBA-Stationen Schleiz, Doberlug-Kirchhain, Wiesenburg und Regnitzlosau .....	47
<b>Abb. 4.4:</b>	Darstellung des Verlaufs von Temperatur, Windgeschwindigkeit und Windrichtung im Januar 1993 .....	50
<b>Abb. 4.5:</b>	Zeitreihen berechneter und gemessener SO <sub>2</sub> -Konzentrationen für den Januar 1993 an den UBA-Stationen Schleiz, Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain und Herleshausen .....	51
<b>Abb. 4.6:</b>	Darstellung des Verlaufs von Temperatur, Windgeschwindigkeit und Windrichtung im Februar 1993 .....	55

<b>Abb. 4.7:</b>	Zeitreihen berechneter und gemessener SO <sub>2</sub> -Konzentrationen für den Februar 1993 an den UBA-Stationen Schleiz, Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain und Waldhof .....	56
<b>Abb. 4.8:</b>	Darstellung des Verlaufs von Temperatur, Windgeschwindigkeit und Windrichtung im März 1993 .....	59
<b>Abb. 4.9:</b>	Zeitreihen berechneter und gemessener SO <sub>2</sub> -Konzentrationen für den März 1993 an den UBA-Stationen Schleiz, Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain und Herleshausen .....	60
<b>Abb. 4.10:</b>	Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten SO <sub>2</sub> - Konzentrationen für die Episode zwischen dem 20. und 27. Dezember 1992 .....	63
<b>Abb. 4.11:</b>	Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten SO <sub>2</sub> -Konzentrationen für die Episode zwischen dem 27. Januar und 6. Februar 1993 ..	67
<b>Abb. 4.12:</b>	Zeitverlauf des Anteils der auf den Rasterflächen Schleiz und Doberlug-Kirchhain liegenden Quellen an den berechneten SO <sub>2</sub> - Konzentrationen (Emissions-Eigenanteil) .....	71
<b>Abb. 4.13:</b>	Punkt看ke der prognostizierten bzw. gemessenen 3-Stundenmittelwerte an der UBA-Station Schleiz .....	77
<b>Abb. 4.14:</b>	Punkt看ke der prognostizierten bzw. gemessenen 3-Stundenmittelwerte an der UBA-Station Schleiz (logarithmiert) .....	77
<b>Abb. 4.15:</b>	Punkt看ke der prognostizierten bzw. gemessenen 3-Stundenmittelwerte an der UBA-Station Doberlug-Kirchhain .....	78
<b>Abb. 4.16:</b>	Punkt看ke der prognostizierten bzw. gemessenen 3-Stundenmittelwerte an der UBA-Station Rottenburg .....	78
<b>Abb. 5.1:</b>	Vergleich des vom BKN- und Europa-Modell für den 12 UTC-Termin prognostizierten Verlaufs von Windgeschwindigkeit und Windrichtung am Rasterpunkt Hannover .....	89
<b>Abb. 5.2:</b>	Punkt看ke der gegeneinander aufgetragenen Windgeschwindigkeiten in 10 m Höhe aus SMOVO und SMOROP für den 15. bis 31. Januar 1993 am Rasterpunkt Berlin .....	90
<b>Abb. 5.3:</b>	Vom Europa-Modell und BKN-Modell prognostizierte Windfelder für den 19. und 20. Januar 1992 .....	91
<b>Abb. 5.4:</b>	Verlauf der von SMOVO und SMOROP berechneten Mischungsschichthöhen	93
<b>Abb. 5.5:</b>	Von SMOVO und SMOROP berechnete Stabilitätsklassen (Pasquillkategorie)	93
<b>Abb. 5.6:</b>	Anteile unterschiedlicher Abstände von korrespondierenden, jeweils von CYTRA10 (SMOVO) und SMOROP berechneten, Trajektorienstützpunkten, in Abhängigkeit von der Verfolgungszeit der jeweiligen Trajektorien .....	95
<b>Abb. 5.7:</b>	Zeitverlauf des Anteils korrespondierender, jeweils von CYTRA10 (SMOVO) und SMOROP berechneter, Trajektorienstützpunkte, die einen Abstand von weniger als 100 km haben .....	96

<b>Abb. 5.8:</b>	Trajektorien, die am 21. Januar 1992 Hannover erreichten .....	98
<b>Abb. 5.9:</b>	Windfeld für den 21. Januar 1992 .....	98
<b>Abb. 5.10:</b>	Vertikale berechnete Windprofile am 27. Januar 1992, 12 UTC .....	99
<b>Abb. 5.11:</b>	Trajektorienverlauf am 28. Januar 1992, 12 UTC, für den Zielpunkt Kassel .	99
<b>Abb. 5.12:</b>	Verlauf der SO <sub>2</sub> -Tagesmittel an den UBA-Stationen Schleiz und Herleshausen zwischen dem 15. und 31. Januar 1992 im Vergleich zu Rechenwerten von SMOROP und SMOVO .....	102
<b>Abb. 5.13:</b>	Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten SO <sub>2</sub> - Konzentrationen für die Episode zwischen dem 20. und 31. Januar 1992 .....	104
<b>Abb. 5.14:</b>	Korrelationskoeffizienten für den Zusammenhang zwischen den gemessenen und mit Hilfe von SMOROP bzw. SMOVO berechneten Konzentrationsverteilungen für den 15. bis 31. Januar 1992 .....	108
<b>Abb. 5.15:</b>	Rasterkarten der gemessenen und von SMOVO und SMOROP auf der Basis von Wetterdaten des Europa-Modells berechneten SO <sub>2</sub> - Konzentrationen am 9. und 10. Dezember 1992 .....	111
<b>Abb. 5.16:</b>	Rasterkarten der gemessenen und von SMOVO und SMOROP auf der Basis von Wetterdaten des Europa-Modells berechneten SO <sub>2</sub> - Konzentrationen am 22., 23. und 24. Dezember 1992 .....	111
<b>Abb. 5.17:</b>	Berechnung der Schubspannungsgeschwindigkeit und des Wärmeflusses in Abhängigkeit von der Stabilität zur Bestimmung der Mischungsschichthöhe nach Ossing .....	115
<b>Abb. 5.18:</b>	Berechnung der Monin-Obukhov-Länge und der Schubspannungsgeschwindigkeit mit Hilfe der integrierten Fluß-Profil-Funktionen $\Psi_m$ und $\Psi_h$ als Grundlage zur Bestimmung der Mischungsschichthöhe nach Verver und Scheele .	119
<b>Abb. 5.19:</b>	Vergleich der Mischungsschichthöhen nach dem alten in SMOROP verwendeten Ansatz mit den neuen Ansätzen von Ossing bzw. Verver und Scheele für 15 SMOROP-Rasterflächen und alle Termine im Dezember 1992	121
<b>Abb. 5.20:</b>	Zeitlicher Verlauf der Mischungsschichthöhen nach altem Ansatz und den Ansätzen von Ossing bzw. Verver und Scheele für die Station Schleiz zwischen dem 5. und 13. bzw. 21. und 31. Dezember 1992 .....	122
<b>Abb. 5.21:</b>	Zeitlicher Verlauf der SO <sub>2</sub> -Konzentrationen für die drei unterschiedlichen Mischungsschichthöhenansätze zusammen mit den Meßwerten an den Stationen Schleiz und Wiesenburg für den 5. bis 13. Dezember 1992 .....	125
<b>Abb. 5.22:</b>	Zeitlicher Verlauf der SO <sub>2</sub> -Konzentrationen für die drei unterschiedlichen Mischungsschichthöhenansätze zusammen mit den Meßwerten an den Stationen Schleiz und Wiesenburg für den 21. bis 31. Dezember 1992 .....	126
<b>Abb. 5.23:</b>	Räumliche Korrelation der mit den drei Ansätzen zur Berechnung der Mischungsschichthöhe berechneten SO <sub>2</sub> -Rasterwerte mit den Meßwerten .	128
<b>Abb. 5.24:</b>	Änderungen der Gesamtemissionen auf den einzelnen Rasterflächen Deutschlands und der näheren Umgebung .....	130

<b>Abb. 5.25:</b>	Verlauf der Tagesmittel der mit den unterschiedlichen Emissionsdatenbasen errechneten SO <sub>2</sub> -Konzentrationen für die Stationen Schleiz, Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain und Herleshausen .....	133
<b>Abb. 5.26:</b>	Summe der Abweichungen bei den Tagesmitteln der für die einzelnen Rasterflächen auf der Basis unterschiedlicher Emissionsdaten prognostizierten SO <sub>2</sub> -Konzentrationen .....	135
<b>Abb. 5.27:</b>	Korrelationskoeffizienten für den Zusammenhang zwischen den gemessenen und mit Hilfe von SMOROP mit Hilfe unterschiedlicher Emissionsdaten berechneten Konzentrationsverteilungen für den Dezember 1992 .....	136

## Verzeichnis der Tabellen

<b>Tab. 2.1:</b>	Koeffizienten zur Berechnung der Vertikalkoordinaten des Europa-Modells aus dem Bodenluftdruck .....	7
<b>Tab. 2.2:</b>	Konstante in den GRIB-Datenbanken für das Europa-Modell EM3MO und EM3DA enthaltene Parameter (Orografie) .....	12
<b>Tab. 2.3:</b>	Vorhergesagte in den GRIB-Datenbanken für das Europa-Modell EM3DA und EM3MO enthaltene Parameter (Auswahl) .....	13
<b>Tab. 3.1:</b>	Emissionsfaktoren für Kraftwerke in den alten Bundesländern .....	25
<b>Tab. 3.2:</b>	Emissionen von Schwefeldioxid für die im Rechenmodell berücksichtigten Staaten .....	33
<b>Tab. 4.1:</b>	Auf der Basis von 3-Stunden-Mittelwerten berechnete Monatsmittel, Standardabweichungen und 95%-Perzentilwerte für gemessene und prognostizierte SO <sub>2</sub> -Konzentrationen an ausgewählten UBA-Stationen .....	42
<b>Tab. 4.2:</b>	SMOROP-Rasterflächen im Bereich der UBA-Stationen Schleiz und Doberlug Kirchhain .....	72
<b>Tab. 4.3:</b>	Der Beitrag verschiedener Quellen zu den berechneten Immissionen am 26. Dezember 1992 in Schleiz .....	74
<b>Tab. 4.4:</b>	Korrelationskoeffizienten für den Zusammenhang zwischen Meßwerten an den UBA-Stationen und den entsprechenden SMOROP-Prognosen .....	79
<b>Tab. 4.5:</b>	Kontingenztafeln für die Übereinstimmung der von SMOROP prognostizierten Tagesmittelwerte mit den entsprechenden Rasterwerten der gemessenen SO <sub>2</sub> -Konzentrationen .....	81
<b>Tab. 4.6:</b>	Kontingenztafeln für die Übereinstimmung der von SMOROP prognostizierten 3-Stunden-Werte mit den entsprechenden an den UBA-Stationen Schleiz und Wiesenburg gemessenen SO <sub>2</sub> -Konzentrationen .....	83
<b>Tab. 4.7:</b>	Kontingenztafeln für die Übereinstimmung der von SMOROP prognostizierten 3-Stunden-Werte mit den entsprechenden an den UBA-Stationen Doberlug-Kirchhain und Herleshausen gemessenen SO <sub>2</sub> -Konzentrationen .....	84
<b>Tab. 4.8:</b>	Kontingenztafeln für die Übereinstimmung der von SMOROP prognostizierten 3-Stunden-Werte mit den entsprechenden an den UBA-Stationen gemessenen SO <sub>2</sub> -Konzentrationen .....	85
<b>Tab. 5.1:</b>	Veränderung der Emissionswerte in den Rasterflächen Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain, Schleiz und Herleshausen durch den Übergang zur neuen Emissionsdatenbasis .....	132

## 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 rechtzeitige Erfassung und Prognose von Episoden hoher Schadstoffkonzentrationen in der Bundesrepublik Deutschland mit Hilfe der Meßnetze des Umweltbundesamtes (UBA) und der Landesämter. Die Meßwerte werden zentral vom Umweltbundesamt gesammelt und ausgewertet und über einen Rechnerverbund an die am Frühwarnsystem beteiligten Stellen weitergegeben.

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 in den Jahren 1990 bis 1992 im Auftrag des Umweltbundesamtes und mit Unterstützung des Deutschen Wetterdienstes das Ausbreitungsmodell SMOVO entwickelt (F + E-Vorhaben des Umweltbundesamtes, Förderkennzeichen 10402591; s. /1/). Dieses Modell wurde sowohl auf den Rechenanlagen des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KfK-Rechner) als auch auf den Rechenanlagen des Deutschen Wetterdienstes in Offenbach (DWD-Rechner) implementiert, erprobt und auf den Rechenanlagen des DWD im probeweisen Routinebetrieb eingesetzt. Mit dem Modell wurden Prognoserechnungen für die Konzentrationsverteilung von Schwefeldioxid (SO<sub>2</sub>) auf dem Gebiet der Bundesrepublik Deutschland durchgeführt. Hierzu wurden täglich einmal Konzentrationswerte als Mittelwert über jeweils 3 Stunden für den jeweils aktuellen und den darauffolgenden Tag errechnet und dem Smogfrühwarnsystem zur Verfügung gestellt.

Der Einsatz des Modells auf dem DWD-Rechner erfolgte mit wenigen Unterbrechungen in der Zeit vom November 1989 bis zum März 1990 sowie vom Oktober 1990 bis zum März 1991. Zusätzlich wurden auf dem KfK-Rechner mit Hilfe archivierter Wetterdaten Rechnungen für weiter zurückliegende Episoden erhöhter SO<sub>2</sub>-Konzentrationen durchgeführt. Die Auswertung der Rechenergebnisse und ein Vergleich mit Meßwerten aus dem Smogfrühwarnsystem - eine ausführliche Darstellung dieser Vergleiche ist in /1/ enthalten - hat gezeigt, 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 µg/m<sup>3</sup> bis zu 600 µg/m<sup>3</sup> lagen, wird vom Modell gut wiedergegeben. Allerdings traten hin und wieder Abweichungen in der regionalen Verteilung der Konzentrationswerte auf. Häufig war 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 und damit eine Windscherung zum Boden hin nicht berücksichtigt werden konnte.

Seit Anfang 1991 liefert das Europa-Modell des Deutschen Wetterdienstes routinemäßig Wettervorhersagedaten. Damit wurden 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.

Um weiterhin eine Prognose von SO<sub>2</sub>-Konzentrationswerten zu ermöglichen, mußte das Modell SMOVO modifiziert werden, da einerseits die verbesserte horizontale und vertikale Auflösung des Europa-Modells genutzt werden sollte, andererseits aber auch die Wetterdaten des Europa-Modells in ganz anderer Form als beim BKN/BKF-Modell vorliegen.

Inzwischen ist das neu entwickelte Ausbreitungsmodell SMOROP auf den Rechenanlagen des DWD implementiert und umfangreich erprobt worden. In einem probeweisen Routinebetrieb wurden Prognoserechnungen für die Monate November 1992 bis März 1993 sowie die Monate November 1993 bis Januar 1994 durchgeführt. Für die Wintermonate 1992/1993 erfolgte ein ausführlicher Vergleich mit Meßwerten aus dem Smogfrühwarnsystem. Für einen ausgewählten Zeitraum, in dem sowohl Daten des Europa-Modells als auch Daten des BKN/BKF-Modells vorlagen, wurden zusätzlich Vergleichsrechnungen mit SMOVO und SMOROP durchgeführt. Ein weiterer Vergleich beider Modelle erfolgte auf der

Basis der Daten des Europa-Modells, die für die Verwendung in SMOVO entsprechend aufbereitet wurden. Sinn dieses Vergleichs war es, unabhängig von unterschiedlichen Wetterprognosedaten aufzuzeigen, welche Änderungen in den berechneten Konzentrationswerten auftreten und wie sich die Prognosegüte im Vergleich zu Meßwerten ändert, wenn die verbesserte horizontale und vertikale Auflösung des Europa-Modells genutzt wird.

Parallel zur Entwicklung des Modells SMOROP wurde die Emissionsdatenbasis für SO<sub>2</sub> soweit wie möglich aktualisiert.

1. Für die Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) wurden vom "Institut für Kraftwerkstechnik der Universität Essen" Daten für die öffentlichen Kraftwerke und die Industriekraftwerke für das Jahr 1991 zur Verfügung gestellt.
2. Für die Bundesrepublik Deutschland (neue Bundesländer) wurden vom "Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung (IER) der Universität Stuttgart" regionalisierte Emissionsdaten für die Jahre 1989 und 1990 sowie von der "Vereinigten Energiewerke AG (VEAG)" in Berlin Daten für die öffentlichen Kraftwerke für die Jahre 1991 und 1992 übernommen.
3. Für Frankreich wurden vom "Centre Interprofessionnel Technique d' Etudes de la Pollution Atmosphérique (CITEPA)" in Paris regionalisierte Daten für 1985 sowie Gesamtemissionswerte für 1990 und 1991 bereitgestellt.
4. Für Polen, Ungarn, die Tschechische und Slowakische Republik und Österreich konnten die vom "International Institute for Applied Systems Analysis (IIASA)" in Laxenburg bei Wien im Rahmen der "Central European Initiative (CEI)" für das Jahr 1988 erhobenen Daten ausgewertet werden.

Die erwähnten Daten wurden so aufbereitet, daß sie in Zukunft für Rechnungen im Smogfrühwarnsystem genutzt werden können. Darüber hinaus wurden mit der bisher genutzten Datenbasis und der neuen Datenbasis Vergleichsrechnungen mit dem Modell SMOROP für den Dezember 1992 durchgeführt.

Der vorliegende Bericht ist wie folgt gegliedert:

In Kapitel 2 wird zunächst das Europa-Modell des Deutschen Wetterdienstes beschrieben. Dabei wird insbesondere auf die für die Entwicklung des Ausbreitungsmodells SMOROP relevanten Punkte eingegangen. Weiterhin werden die Datenbanken beschrieben, die die Ergebnisse des Europa-Modells enthalten und aus de-

nen die Eingabedaten für SMOROP entnommen wurden. Abschließend folgt eine Beschreibung des Ausbreitungsmodells SMOROP und der in dem Modell enthaltenen Annahmen. Eine ausführliche Programmdokumentation ist in einem gesonderten Bericht enthalten.

In Kapitel 3 wird die vom Modell SMOROP verwendete Emissionsdatenbasis sowie deren Aktualisierung beschrieben. Die bis zum Ende des Winterhalbjahres 1993/1994 genutzte Emissionsdatenbasis für SO<sub>2</sub> entspricht im wesentlichen der schon von SMOVO genutzten Datenbasis, die in /1/ ausführlich beschrieben wurde. Lediglich für die neuen Bundesländer wurden einige Modifikationen durchgeführt. Die aktualisierte Emissionsdatenbasis - mit Ausnahme der Benelux-Staaten und Großbritanniens wurden die Emissionen aller für die Prognose der Konzentrationswerte in der Bundesrepublik Deutschland relevanter Staaten aktualisiert - kann in Zukunft für Rechnungen im Rahmen des Smogfrühwarnsystems herangezogen werden. Die neue Datenbasis enthält über die Emissionswerte hinaus eine Vielzahl weiterer Informationen, so daß jederzeit beim Vorliegen neuerer Informationen eine Modifikation möglich ist. Vom Modell SMOROP wird nicht die umfangreiche Ausgangsdatenbasis genutzt, da sonst mit unverträglich hohen Rechenzeiten zu rechnen wäre, ohne daß dadurch die Qualität der Rechenergebnisse wesentlich verbessert werden würde. Aus diesem Grunde wurden die in der Ausgangsdatenbasis enthaltenen Werte zusammengefaßt, indem die Emissionen einzelnen Rasterflächen und die unterschiedlichen Freisetzungshöhen einzelnen Freisetzungshöhenklassen zugeordnet wurden.

Im Kapitel 4 werden die mit SMOROP in den Wintermonaten 1992/1993 durchgeführten Prognoserechnungen vorgestellt und die erzielten Ergebnisse mit Meßwerten aus dem Smogfrühwarnsystem verglichen. Dabei erfolgt zunächst ein Vergleich mit Meßwerten an einzelnen Stationen des Umweltbundesamtes, anschließend ein Vergleich der regionalen Verteilung gemessener und prognostizierter Werte für das Gesamtgebiet Deutschlands für zwei Episoden erhöhter Konzentrationswerte, die Episode vom 20. bis 27. Dezember 1992 sowie die Episode zwischen dem 28. Januar und 5. Februar 1993. Zur Interpretation und Bewertung der Ergebnisse wurden zusätzlich Verursacheranalysen sowie eine Prüfung der Prognosegüte durchgeführt.

In Kapitel 5 werden einige Sensitivitätsstudien, die mit dem Modell SMOROP durchgeführt wurden, vorgestellt. Hierzu gehört ein Vergleich der Modelle SMOVO und SMOROP anhand der von den jeweiligen Modellen benutzten meteorologischen Eingabedaten sowie anhand der erzielten Ergebnisse. Ausführlich

wird in einem Unterabschnitt auf die Berechnung der Mischungsschichthöhe eingegangen. Dabei werden unterschiedliche Ansätze vorgestellt und Rechnungen mit diesen Ansätzen durchgeführt.

In Zukunft soll für die Smogprognose mit SMOROP der aktualisierte Emissionsdatensatz verwendet werden. Im letzten Abschnitt des fünften Kapitels wird dieser Datensatz mit dem bisher genutzten Datensatz verglichen, Unterschiede werden herausgestellt und interpretiert, und es werden Vergleichsrechnungen mit SMOROP unter Verwendung der beiden Datensätze durchgeführt.

Im abschließenden Kapitel 6 werden die erzielten Ergebnisse zusammengefaßt und Empfehlungen für den Einsatz von SMOROP im Smogfrühwarnsystem des Umweltbundesamtes gegeben.

## 2. Modellbeschreibung

### 2.1 Das Europa-Modell des Deutschen Wetterdienstes

Das Europa-Modell (EM) ist wesentlicher Teil des neuen operationellen Wettervorhersagesystems des Deutschen Wetterdienstes. Dieses besteht zur Zeit aus dem Europa-Modell und dem Globalen Modell (GM), das unter anderem die Randwerte für das Europa-Modell liefert. Im Jahr 1993 hat zusätzlich das hochauflösende Deutschland-Modell seinen Routinebetrieb aufgenommen. Das Europa-Modell weist gegenüber dem bislang zur operationellen Wettervorhersage eingesetzten feuchtbaroklinen Vorhersagemodell (BKF-Modell bzw. das genestete BKN-Modell) Verbesserungen vor allem durch die detailliertere Vorhersage bodennaher Parameter auf.

Eine Kurzbeschreibung des Europa-Modells, des verwendeten numerischen Schemas und der Parametrisierungsansätze, insbesondere für die Behandlung der Bewölkung und des Niederschlags, findet sich in /2/. Die Parametrisierung der turbulenten Flüsse in der atmosphärischen Grenzschicht wird ausführlich in /3/ beschrieben. Im Europa-Modell gibt es prognostische Gleichungen für folgende Variablen:

- Bodenluftdruck  $p_0$
- Horizontalkomponenten des Windes  $u$  und  $v$
- totaler Wärmeinhalt  $h = c_p T + Lq_v$
- Gesamtwassergehalt  $q_w = q_v + q_c$

Der Wärmeinhalt setzt sich dabei zusammen aus der Enthalpie  $c_p T$  und der latenten Kondensationswärme  $Lq_v$ . Der Gesamtwassergehalt ist definiert als die Summe aus dem spezifischen Wasserdampfgehalt  $q_v$  und dem Gehalt an Wolkenwasser  $q_c$ . Aus dem totalen Wärmeinhalt und dem Gesamtwassergehalt können mittels diagnostischer Beziehungen die Temperatur  $T$  und die die Luftfeuchtigkeit und den Bedeckungsgrad bestimmenden Größen Wasserdampfgehalt bzw. Wolkenwassergehalt bestimmt werden.

#### 2.1.1 Vertikalkoordinatensystem

Das im Europa-Modell verwendete Vertikalkoordinatensystem entspricht in Bodennähe einem der Orografie folgenden  $\sigma$ -System, während in der Stratosphäre auf reinen Druckflächen gerechnet wird. Im  $\sigma$ -System hängen die Vertikalkoordi-

naten an einem vorgegebenen Ort vom jeweiligen Bodenluftdruck  $p_0$  ab, und für den Druck an der Obergrenze der  $k$ -ten Modellschicht gilt:

$$p_k = a_k + b_k p_0$$

mit fest vorgegebenen Koeffizienten  $a_k$  und  $b_k$  (siehe dazu Tab. 2.1). Das Europa-Modell hat zur Zeit eine vertikale Auflösung von 20 Modellschichten. Ein Großteil der vom Europa-Modell gelieferten Produkte (beispielsweise das Windfeld, die Temperatur und die spezifische Feuchte) liegt auf der Höhe der Schichtmitten vor, während das Geopotential an den 21 Schichtgrenzen definiert ist. Abbildung 2.1 zeigt das Vertikalkoordinatensystem des Europa-Modells im Vergleich zu dem im BKF- bzw. BKN-Modell verwendeten. Bei letzteren ist der Druck die Vertikalkoordinate, d.h. alle Parameter sind auf Druckflächen definiert. Die untersten Flächen befinden sich dabei in 950 bzw. 850 hPa. Damit wird die atmosphärische Grenzschicht, in der ein Großteil der vom Menschen verursachten Luftschadstoffe transportiert und durch chemische Umwandlung und Deposition wieder aus der Atmosphäre entfernt wird, von diesen Modellen nur ungenügend aufgelöst. Dagegen befinden sich beim Europa-Modell in der Regel 5 bis 6 Modellflächen innerhalb der atmosphärischen Grenzschicht.

$k$	$a_k$ (Pa)	$b_k$	$p_k$ (hPa)
1	0.0	0.000	0
2	5000.0	0.000	50
3	10000.0	0.000	100
4	16000.0	0.000	160
5	22000.0	0.000	220
6	20307.7	0.077	280
7	18615.4	0.154	340
8	16923.1	0.231	400
9	15089.7	0.314	465
10	13115.4	0.404	535
11	11282.1	0.487	600
12	9589.7	0.564	660
13	7897.4	0.641	720
14	6205.1	0.718	780
15	4512.8	0.795	840
16	3102.6	0.859	890
17	2115.4	0.904	925
18	1410.3	0.936	950
19	705.1	0.968	975
20	225.6	0.990	992

**Tab. 2.1:** Koeffizienten zur Berechnung der Vertikalkoordinaten des Europa-Modells aus dem Bodenluftdruck. Zur Veranschaulichung sind Werte von  $p_k$  bei einem Bodenluftdruck von 1000 hPa mit angegeben.

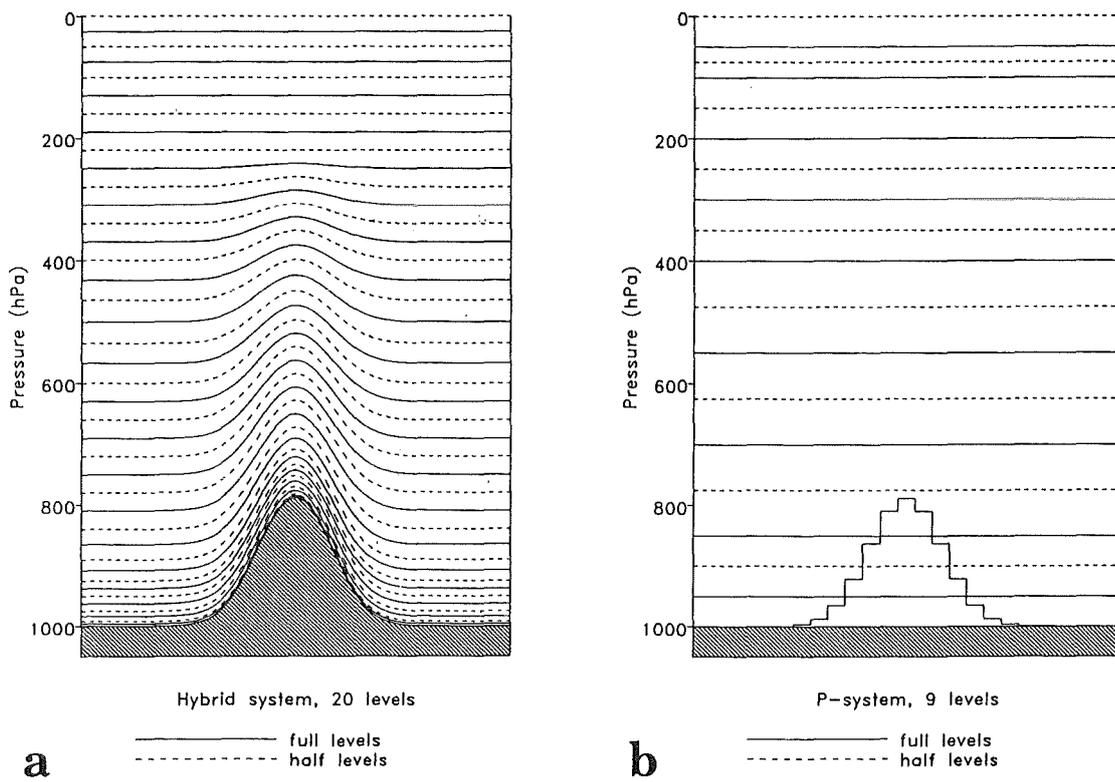


Abb. 2.1: Modellschichten des Europamodells (a) und des BKN-/BKF-Modells (b)

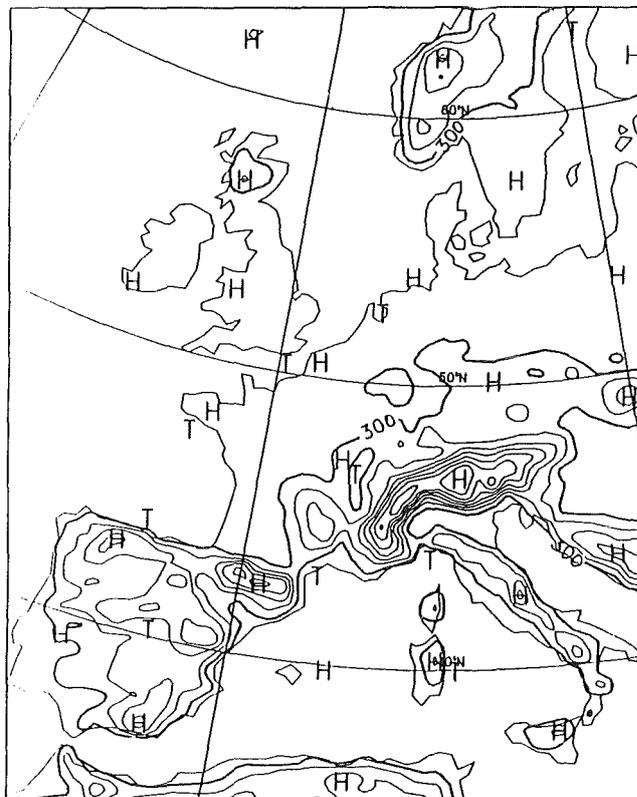


Abb. 2.2: Orografie des Europa-Modells

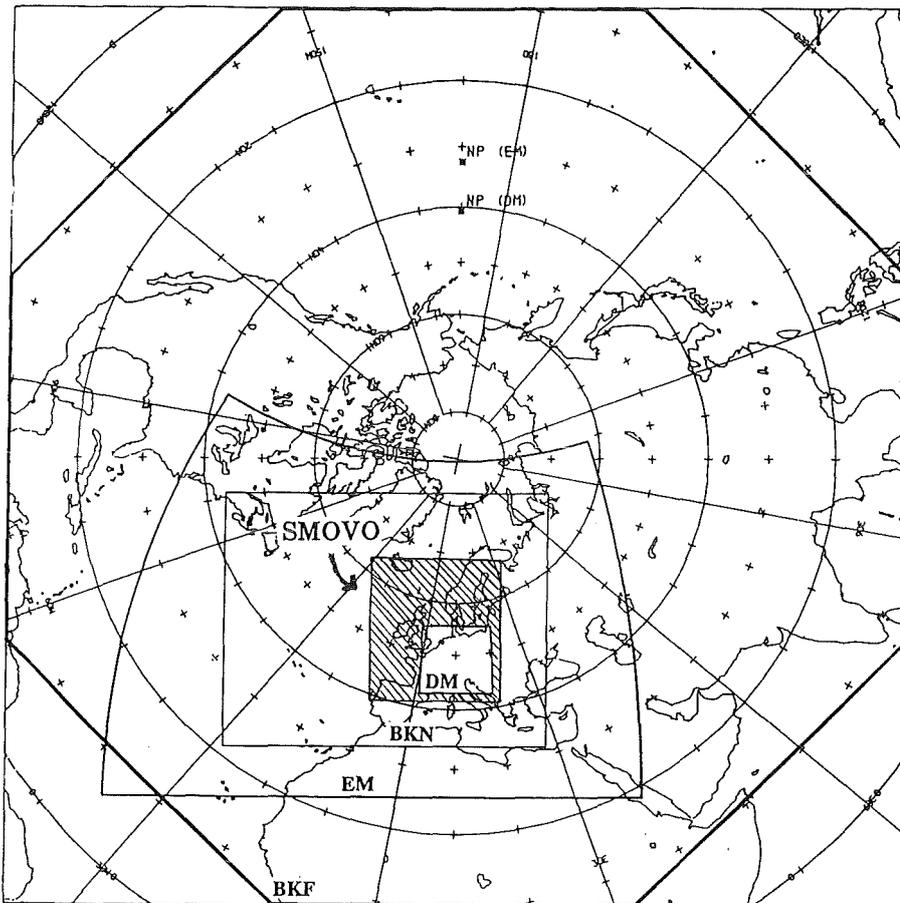
Die dem Modellgebiet des Europa-Modells unterlegte Orografie (das Geopotential der untersten Schichtgrenze) beruht auf Höhenmittelwerten über eine Fläche von  $\frac{1}{2}$  Längengrad \*  $\frac{1}{2}$  Breitengrad (Abb. 2.2) und weist gegenüber der des BKN-/BKF-Modells eine wesentlich feinere Auflösung auf. Trotzdem sind auch hier nur großräumige Strukturen wie die Alpen oder das Rhonetal deutlich zu erkennen. Die deutschen Mittelgebirge werden nicht aufgelöst, so daß Leiteffekte beim Schadstofftransport durch Täler oder am Rand von Mittelgebirgen wie dem Thüringer Wald auch bei Rechnungen mit SMOROP auf der Basis des Europa-Modells nicht modelliert werden können.

### 2.1.2 Horizontalkoordinatensystem

Während die bislang zur Smogprognose benutzten BKF/BKN-Daten auf einer stereografischen Projektion vorlagen, wurde für das Europa-Modell ein rotiertes geografisches Koordinatensystem gewählt. Bei diesem ist der Nordpol des geografischen  $\lambda/\phi$ -Koordinatensystems derart in den Pazifik verschoben, daß der Äquator des rotierten Systems in der Mitte des Modellgebiets liegt. Der Abstand einzelner Gitterpunkte des Europa-Modells beträgt im rotierten System  $\frac{1}{2}$  Längengrad bzw.  $\frac{1}{2}$  Breitengrad. Aufgrund der Nähe Mitteleuropas zum Äquator des rotierten Koordinatensystems, der durch Nord- und Ostsee verläuft, sind dort die zwischen den einzelnen Gitterpunkten aufgespannten Rasterflächen in ihrer Ausdehnung nur wenig von der geografischen Breite (im rotierten System!) abhängig.

Abbildung 2.3 zeigt das Modellgebiet des Europa-Modells. Zusätzlich wurde der Ausschnitt dargestellt, auf dem die Rechnungen mit SMOROP durchgeführt werden. Dieser Ausschnitt, der im rotierten System zwischen  $15.5^\circ$  südlicher Breite und  $7.5^\circ$  westlicher Länge (linke untere Ecke) und  $1^\circ$  südlicher Breite und  $7.5^\circ$  östlicher Länge (rechte obere Ecke) aufgespannt wird, enthält 930 (= 30 Punkte in nord-südlicher mal 31 Punkte in ost-westlicher Richtung) von den 23349 Gitterpunkten des gesamten EM-Gebietes. In "normalen" geografischen Koordinaten liegt dieses Ausschnittsgebiet, auf dem auch die Rechnungen mit dem hochauflösenden Deutschland-Modell des DWD durchgeführt werden (DM-Ausschnitt), zwischen dem 40. und 56. Breitengrad und zwischen  $3^\circ$  westlicher und  $23^\circ$  östlicher Länge an der nördlichen Begrenzung des Ausschnittsgebietes bzw. zwischen  $0^\circ$  und  $20^\circ$  östlicher Länge an dessen südlicher Begrenzung.

Bei dem im Europa-Modell zur numerischen Lösung der hydrodynamischen Grundgleichungen benutzten Rechengitter handelt es sich um das Arakawa-C-



**Abb. 2.3:** Modellgebiet des Europa-Modells und Ausschnittsgebiet des Deutschland-Modells

Gitter. In diesem sind die Gitterpunkte mit der u-Komponente des Windes um den halben Gitterpunkt Abstand in östlicher Richtung und die Gitterpunkte mit der v-Komponente des Windes um einen halben Gitterpunkt Abstand in nördlicher Richtung gegenüber dem Gitter mit den anderen Modellparametern verschoben. Für die Transformation zwischen dem rotierten ( $\lambda'$ ,  $\phi'$ ) und dem geografischen ( $\lambda$ ,  $\phi$ ) Koordinatensystem gibt es die folgenden Beziehungen:

a) Berechnung rotierter aus geografischen Koordinaten:

$$\lambda' = \arctan \frac{-\cos\phi \sin(\lambda - \lambda_N)}{-\sin\phi_N \cos\phi \cos(\lambda - \lambda_N) + \cos\phi_N \sin\phi}$$

$$\phi' = \arcsin (\cos\phi_N \cos\phi \cos(\lambda - \lambda_N) + \sin\phi_N \sin\phi)$$

b) Berechnung geografischer aus rotierten Koordinaten:

$$\lambda = \arctan \frac{\sin \lambda_N (\cos \phi_N \sin \phi' - \sin \phi_N \cos \lambda' \cos \phi') - \cos \lambda_N \sin \lambda' \cos \phi'}{\cos \lambda_N (\cos \phi_N \sin \phi' - \sin \phi_N \cos \lambda' \cos \phi') + \sin \lambda_N \sin \lambda' \cos \phi'}$$

$$\phi = \arcsin (\cos \phi_N \cos \lambda' \cos \phi' + \sin \phi_N \sin \phi')$$

Mit  $\lambda_N$  und  $\phi_N$  werden in diesen Transformationsbeziehungen die geografischen Koordinaten des Nordpols des rotierten Koordinatensystems bezeichnet, und es gilt

$$\begin{aligned} \lambda_N &= -170^\circ \\ \phi_N &= 32,5^\circ \end{aligned}$$

Negativ gezählt werden hierbei südliche Breitengrade und westliche Längen, d.h.  $\lambda_N = -170^\circ$  entspricht  $\lambda_N = 170^\circ$  W.

Die Verwendung eines rotierten Koordinatensystems hat zur Folge, daß die darin angegebenen Komponenten  $u'$  und  $v'$  des Windvektors bei Bedarf in zonale bzw. meridionale Komponenten (bezogen auf das geografische Koordinatensystem) umgerechnet werden müssen. Die Drehung des Windes geschieht mittels folgender Gleichungen:

$$\begin{aligned} u' &= u \cos \beta + v \sin \beta \\ v' &= -u \sin \beta + v \cos \beta \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u &= u' \cos \beta - v' \sin \beta \\ v &= u' \sin \beta + v' \cos \beta \end{aligned}$$

mit

$$\beta = \arccos (-\sin \phi_N \sin \lambda' \sin (\lambda - \lambda_N) - \cos \lambda' \cos (\lambda - \lambda_N))$$

### 2.1.3 Datenbanken mit Produkten des Europa-Modells

Auf den Rechenanlagen des DWD liegt eine größere Anzahl von Datenbanken vor, die Produkte des Europa-Modells enthalten. Diese Datenbanken enthalten Datenfelder, die im GRIB-Code abgespeichert wurden. Der Aufbau von GRIB- (*gridded binary*) Datensätzen wird von der WMO (World Meteorological Organization) vorgeschrieben. Für den Umgang mit den in den Datenbanken enthaltenen Daten

werden spezielle Lese- und Entpackprogramme bereitgestellt. Zum einen handelt es sich dabei um eigenständige Programme, die interaktiv am Terminal genutzt werden können, zum anderen um FORTRAN-Unterprogramme, die aus Programmen wie SMOROP aufgerufen werden können.

Von den Datenbanken, die Produkte von Prognoseläufen des Europa-Modells enthalten, sind die folgenden erwähnenswert:

- Die Vorhersage-Datenbank **EM3MO** enthält Felder der 78h-Prognosen für die Vorhersagezeiten 00 UTC + 0, 6, 12, 18, ..., 78h und 12 UTC + 0, 6, 12, 18, ..., 78h, also im 6-stündigen Abstand, für das gesamte EM-Gebiet.
- Stündliche Vorhersagen für den DM-Ausschnitt (s. Abschn. 2.2) befinden sich in der Bank **EM3DA** für die Vorhersagezeiten 00 UTC + 0, 1, 2, 3, ..., 78h und 12 UTC + 0, 1, 2, 3, ..., 78h.

Eine weitere Datenbank, die das Gesamtgebiet des Europa-Modells umfaßt, enthält die Felder des Bodenluftdrucks und der horizontalen Windkomponenten und den Wind in 10 m Höhe in zweistündigem Abstand, ebenfalls für einen Prognosezeitraum von 78 Stunden.

Die in den beiden Datenbanken **EM3MO** und **EM3DA** auf Modellflächen enthaltenen Elemente sind in den Tabellen 2.2 und 2.3 zusammengefaßt. Tabelle 2.2 enthält hierbei alle Parameter, die die Orografie und Bodenbeschaffenheit des jeweiligen Modellgebiets betreffen.

Element	Symbol	GRIB-Nr.	Einheit	Level
Geopotential an der Erdoberfläche	FIB	102	gpm	Boden
Landanteil	BLA	555		Boden
Bodentyp	BTY	560		Boden
Pflanzenbedeckungsgrad	BPF	564		Boden
Blattflächenindex	BFI	565		Boden
Wurzeltiefe	BWT	566	m	Boden

**Tab. 2.2:** Konstante in den GRIB-Datenbanken für das Europa-Modell **EM3MO** und **EM3DA** enthaltene Parameter (Orografie)

Tabelle 2.3 zeigt eine Auswahl prognostizierter Parameter. Bei den meisten dieser Parameter handelt es sich um Momentanwerte für den jeweiligen Prognosezeitpunkt; einige sind jedoch Summen- oder Mittelwerte über den Prognosezeitraum.

Element	Symbol	GRIB-Nr.	Einheit	Level
Luftdruck an der Erdoberfläche	PS	1	hPa	Boden
Geopotential	FI	102	gpm	Schichtgrenzen
zonaler Wind (rotiertes System)	U'	23	m/s	Schichtmitten
10 m Wind	U10M	23	m/s	10 m Höhe
meridionaler Wind (rotiertes System)	V'	24	m/s	Schichtmitten
10 m Wind	V10M	24	m/s	10 m Höhe
Vertikalbewegung	OMEGA	140	hPa/s	Schichtmitten
Temperatur	T	4	°C	Schichtmitten
2 m Temperatur	T2M	4	°C	2 m Höhe
Minimum der 2 m Temperatur	TMIN2M	6	°C	2 m Höhe
Maximum der 2 m Temperatur	TMAX2M	5	°C	2 m Höhe
Temperatur der Schneedecke	TS	514	K	Boden
Temperatur an der Grenzfläche Boden/Atmosphäre bzw. Boden/Schnee	TB	500	K	Boden
spezifische Feuchte	QD	112	kg/kg	Schichtmitten
turbulenter Transferkoeffizient (Impuls)	TCM	461		Boden
turbulenter Transferkoeffizient (Wärme)	TCH	462		Boden
Strahlungsbilanz (kurzwellig)	SOSB	255	W/m <sup>2</sup>	Boden
Strahlungsbilanz (langwellig)	THSB	256	W/m <sup>2</sup>	Boden
Albedo für kurzwellige Strahlung	ALB	558		Boden
Regen (skalig)	RRSN	402	kg/m <sup>2</sup>	Boden
Schnee (skalig)	RSSN	403	kg/m <sup>2</sup>	Boden
Regen (konvektiv)	RRKN	414	kg/m <sup>2</sup>	Boden
Schnee (konvektiv)	RSKN	415	kg/m <sup>2</sup>	Boden
Gesamtbedeckungsgrad	CLCT	305		
Bedeckungsgrad (hohe Wolken)	CLCH	311		
Bedeckungsgrad (mittlere Wolken)	CLCM	312		
Bedeckungsgrad (niedrige Wolken)	CLCL	313		
Impulsfluß (u)	BFLU	454	kg/ms <sup>2</sup>	Boden
Impulsfluß (v)	BFLV	455	kg/ms <sup>2</sup>	Boden
sensibler Wärmefluß	BFLH	456	W/m <sup>2</sup>	Boden
latenter Wärmefluß	BFLQD	457	W/m <sup>2</sup>	Boden

**Tab. 2.3:** Vorhergesagte in den GRIB-Datenbanken für das Europa-Modell EM3DA und EM3MO enthaltene Parameter (Auswahl)

Die Niederschlagswerte (RRSN, RSSN, RRKN und RSKN) stellen hierbei die Summe des gefallenen Niederschlags seit Prognosebeginn dar. Die Strahlungsbilanzgrößen und Flüsse von Impuls und Wärme sind Mittelwerte über den jeweiligen Vorhersagezeitraum. Der mittlere Betrag dieser Größen zwischen zwei vorgegebenen Vorhersagezeitpunkten  $t_1$  und  $t_2$  ergibt sich daraus folgendermaßen:

$$\overline{A(t_2) - A(t_1)} = \frac{\overline{t_2 A(t_2) - t_1 A(t_1)}}{t_2 - t_1}$$

Mit A wurden hierin die betreffenden Parameter SOSB, THSB, BFLU, BFLV und BFLH bezeichnet.

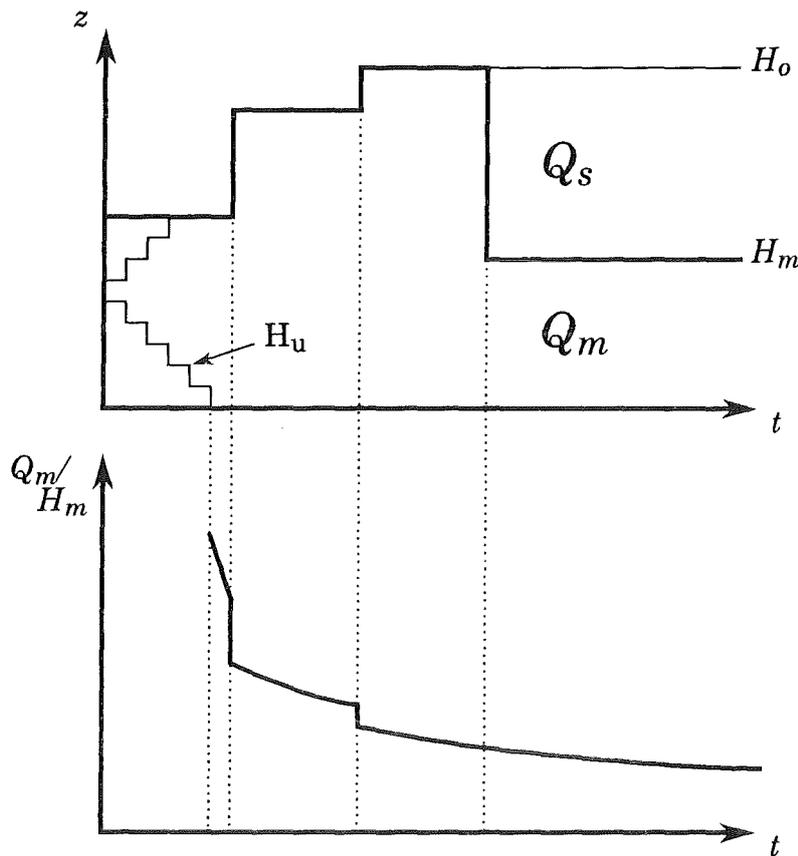
## 2.2 Das Ausbreitungsmodell SMOROP

Grundsätzlich entsprechen die in SMOROP verwendeten physikalischen Annahmen denjenigen, die auch schon in SMOVO Anwendung fanden. Die Ausbreitung von Luftschadstoffen in diesen Modellen wird simuliert, indem in festgelegten Zeitabständen Schadstoffpakete an vorgegebenen Quellpunkten freigesetzt und auf ihrem Weg entlang von Trajektorien verfolgt werden. Diese Schadstoffpakete enthalten zunächst die zwischen zwei Startzeiten von den jeweiligen Quellen emittierten Schadstoffmengen. Entlang einer Trajektorie findet dann Schadstoffumwandlung und trockene und nasse Ablagerung statt, was zu einer Abreicherung der im betrachteten Schadstoffpaket enthaltenen Masse führt.

Die weitere Verdünnung der emittierten Schadstoffe geschieht durch horizontale und vertikale Diffusion. Die horizontale Durchmischung wird im wesentlichen durch das Auseinanderstreben aufeinanderfolgender Trajektorien im sich räumlich und zeitlich ändernden Windfeld simuliert. Vor allem im Nahbereich kommt darüber hinaus zum Tragen, daß die emittierten Schadstoffe bei der Berechnung von Konzentrationen auf ganze Rasterflächen verteilt werden.

Die vertikale Diffusion wird durch die Zunahme der vertikalen Ausdehnung eines Schadstoffpakets modelliert. Diese ist vor allem von der Variation der Mischungsschichthöhe abhängig. Im Nahbereich einer Quelle wird allerdings die vertikale Ausdehnung eines Schadstoffpakets noch so lange nach einem modifizierten Gauß-Ansatz berechnet, bis das betrachtete Schadstoffpaket die Mischungsschicht ganz ausfüllt. Danach wird die Oberkante eines Schadstoffpakets durch das Ansteigen der Mischungsschichthöhe angehoben. Bei einer Abnahme der Mischungsschichthöhe wird die oberhalb der Mischungsschicht verbliebene Schad-

stoffmasse vom Boden abgekoppelt und kann nicht trocken abgelagert werden. An der pro Meter Mischungsschichthöhe in dem betreffenden Schadstoffpaket enthaltenen Schadstoffmasse, die zur Berechnung von Konzentrationswerten herangezogen wird, ändert sich allerdings bei einem Absinken der Mischungsschichthöhe nichts (Abb. 2.4).



**Abb. 2.4:** Schematische Darstellung des Verlaufs der Unter- und Oberkante eines Schadstoffpakets ( $H_u$  und  $H_o$ ) zusammen mit dem Gang der Mischungsschichthöhe ( $H_m$ ) und der Schadstoffmasse pro Meter Mischungsschichthöhe ( $Q_m/H_m$ ). Mit  $Q_m$  und  $Q_s$  wurden die jeweils sich in der Mischungsschicht bzw. in den stabilen Schichten befindenden Massen bezeichnet.

Die Berechnung der Schadstoffkonzentrationen aus den zunächst nur entlang von Trajektorien vorliegenden Schadstoffmassen geschieht in SMOVO und SMOROP nach einem recht einfachen Verfahren: Alle sich während eines vorgegebenen Mittelungszeitraums über einer Rasterfläche befindenden Schadstoffpakete tragen zur Konzentration an dieser Rasterfläche bei. Die in den jeweiligen Schad-

stoffpaketen in der Mischungsschicht enthaltenen Massen werden aufaddiert und durch die Fläche des Rasterfeldes und den Mittelungszeitraum geteilt.

Im folgenden soll nun auf die einzelnen in SMOROP enthaltenen physikalischen Annahmen eingegangen werden.

### 2.2.1 Berechnung des Trajektorienverlaufs

Bei der Berechnung des Trajektorienverlaufs wird in SMOROP der besseren vertikalen Auflösung der EM-Daten im Bereich der atmosphärischen Grenzschicht Rechnung getragen. Während bei SMOVO allein der Wind im 850-hPa-Niveau zur Berechnung des Trajektorienverlaufes herangezogen wurde, entspricht nun der Transportvektor  $v_T$  dem über die vertikale Ausdehnung des Schadstoffpakets gemittelten Windvektor:

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

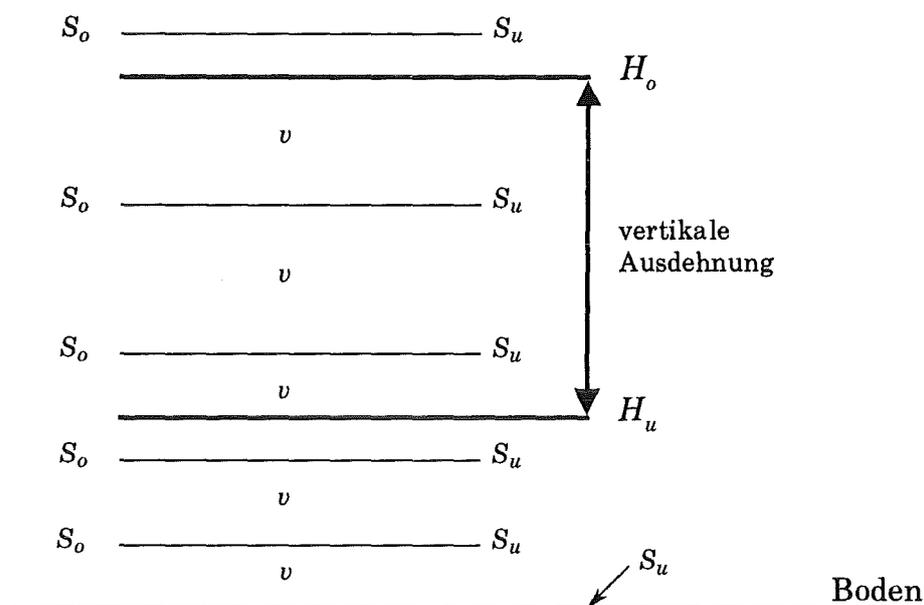
$H_u$  und  $H_o$  sind hierbei Unter- und Oberkante des betrachteten Schadstoffpakets. Für die Berechnung des Transportvektors aus den auf Schichtmitten vorliegenden Winddaten des Europa-Modells gilt in SMOROP:

$$v_T = \frac{1}{H_o - H_u} \sum_i v_i (H_{o_i} - H_{u_i})$$

Summiert wird dabei über alle Schichten des Europa-Modells, die im Bereich der vertikalen Ausdehnung des Schadstoffpaketes liegen. Für  $H_{u_i}$  und  $H_{o_i}$  gilt jeweils

$$H_{u_i} = \max(H_u, S_{u_i})$$
$$H_{o_i} = \min(H_o, S_{o_i})$$

wobei die  $S_{u_i}$  und  $S_{o_i}$  die Unter- bzw. Oberkanten der betreffenden Schichten des Europa-Modells bezeichnen (Abb. 2.5).



**Abb. 2.5:** Ober- und Untergrenzen  $S_{oi}$  und  $S_{ui}$  der untersten 5 Schichten des Europa-Modells zusammen mit der Ober- und Unterkante ( $H_o$  bzw.  $H_u$ ) eines Schadstoffpakets in SMOROP

### 2.2.2 Berechnung des Massenhaushalts in SMOROP

Der Massenhaushalt in einem Schadstoffpaket wird in SMOROP auf dieselbe Art und Weise behandelt wie in SMOVO. Die Berechnung der trockenen und nassen Ablagerung sowie Umwandlung von  $SO_2$  zu Sulfat geschieht mittels folgender Gleichung:

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

$k$  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:  $k = k_w + k_t$ .

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<sub>2</sub> 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  $b$ .

Die Schadstoffumwandlung, d.h. die Produktion von Sulfat, hängt allein von der augenblicklichen SO<sub>2</sub>-Masse im betrachteten Schadstoffpaket ab. Es wird angenommen, daß im Jahresmittel pro Stunde 1% der SO<sub>2</sub>-Masse zu Sulfat umgewandelt wird. Um den Einfluß unterschiedlicher Einstrahlungsverhältnisse auf die Umwandlungsrate berücksichtigen zu können, wurde zusätzlich ein Tages- und Jahresgang eingeführt. Abbildung 2.6 veranschaulicht die Bandbreite der möglichen Werte von  $k$ .

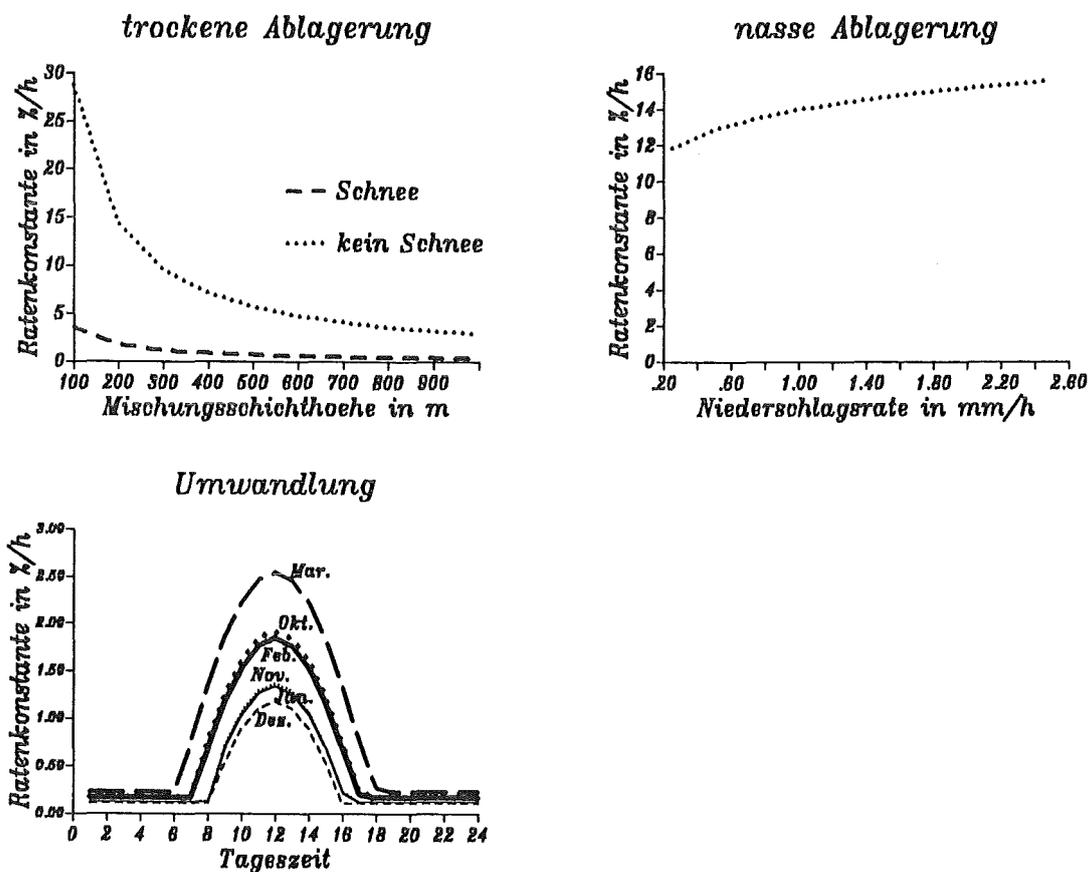


Abb. 2.6: Mögliche Werte der Zeitkonstanten der trockenen und nassen Ablagerung und der Umwandlung in % pro Stunde

### 2.2.3 Berechnung der Mischungsschichthöhe

Um die Mischungsschichthöhe aus Daten des Europa-Modells berechnen zu können, wurden unterschiedliche in der Literatur beschriebene Ansätze untersucht und auf ihre Eignung überprüft. Eine ausführliche Beschreibung dieser Ansätze und der damit erzielten Ergebnisse ist in Abschnitt 5.2 gegeben. Insgesamt hat sich jedoch gezeigt, daß der bisher im Modell SMOVO verwendete und in /1/ ausführlich beschriebene Ansatz beibehalten werden sollte.

In diesem Ansatz ist die Höhe der nächtlichen Mischungsschicht proportional zur Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe. Das Wachsen der konvektiven Mischungsschicht am Tage wird mit Hilfe des Jahres- und Tagesganges der solaren Einstrahlung unter Berücksichtigung ihrer Abschwächung durch Bewölkung abgeschätzt. Zusätzlich wird das vertikale Temperaturprofil benötigt. Obwohl die Einstrahlung (bzw. der eigentlich benötigte sensible Wärmefluß am Boden) und das Temperaturprofil in der von SMOROP verwendeten EM-Datenbank vorliegen, wurden aus Konsistenzgründen die im vorliegenden Berechnungsschema vorgegebenen Werte benutzt.

### 2.2.4 Berechnung von Immissionswerten

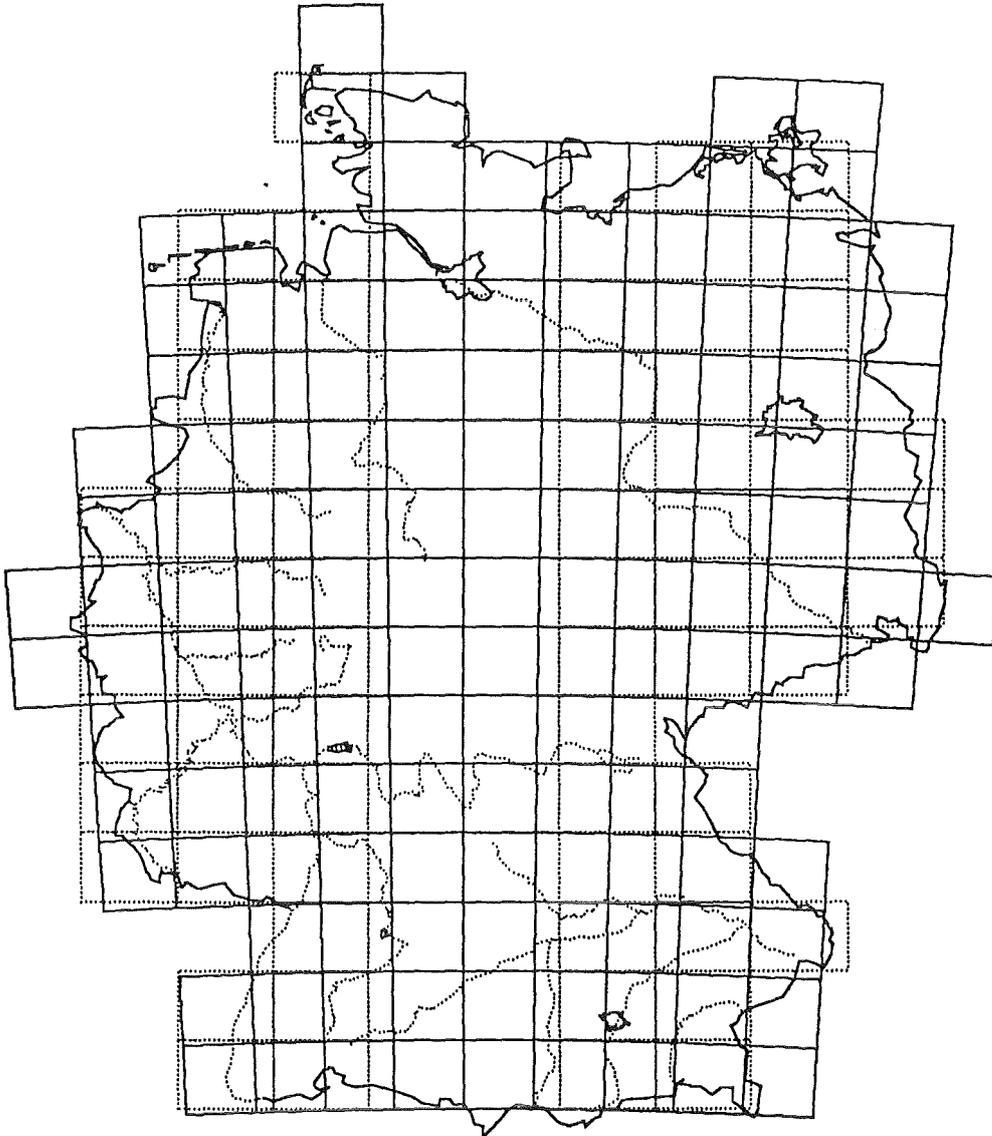
Wie in SMOVO wird auch in SMOROP ein vereinfachtes Verfahren zur Bestimmung von Immissionswerten angewandt. Das Gebiet, für welches Konzentrations- und Ablagerungswerte berechnet werden sollen, wird dazu in Empfängerrasterflächen mit Kantenlängen von 1° Länge und 0,5° Breite aufgeteilt. Im Gegensatz zu den dabei in SMOVO verwendeten geografischen Koordinaten werden jedoch in SMOROP die Empfängerrasterflächen auf das gedrehte Koordinatensystem des Europa-Modells bezogen (Abb. 2.7).

Für die SO<sub>2</sub>-Konzentration an der Rasterfläche  $j$  zur Beobachtungszeit  $T$ , d.h. zwischen  $T$  und  $T + \Delta T$ , gilt folgende Beziehung:

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

Im MKS-System bezeichnet  $Q_{m,i}(t)/H_m(t)$  die pro Meter Mischungsschichthöhe enthaltene Schadstoffmasse. Aufsummiert über alle Zeitschritte  $i$ , in denen sich Tra-

vektoren zur Beobachtungszeit über der Rasterfläche befunden haben und geteilt durch die Fläche  $F_j$  des Rasterelements und den Mittelungszeitraum  $\Delta T$  ergibt sich daraus die gesuchte Schadstoffkonzentration.



**Abb. 2.7:** Die Empfängerrasterflächen in SMOROP im Vergleich zu den Empfängerrasterflächen von SMOVO (gepunktet)

### **3. Die vom Modell SMOROP genutzte Emissionsdatenbasis und deren Aktualisierung**

#### **3.1 Beschreibung der vom Modell SMOROP genutzten Emissionsdatenbasis für Schwefeldioxid**

Um die regionale Verteilung der Konzentrationswerte von Schwefeldioxid (SO<sub>2</sub>) für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland berechnen zu können, muß neben den meteorologischen Eingabedaten die räumliche und zeitliche Verteilung der Emissionswerte von SO<sub>2</sub> 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 auch die Emissionen der Tschechischen und der Slowakischen Republik, Polens sowie Österreichs und Ungarns von Bedeutung. Um 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 SO<sub>2</sub>-Konzentrationswerten mit dem in den vorangegangenen Jahren genutzten Modell SMOVO wurde die in /1/ ausführlich beschriebene Emissionsdatenbasis herangezogen. Diese Datenbasis enthält für die obengenannten Staaten, mit Ausnahme Österreichs und Ungarns, die regionale Verteilung der Jahresemissionen von SO<sub>2</sub> für das Jahr 1982. Für die Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) wurden darüber hinaus die Regelungen der Großfeuerungsanlagen-Verordnung berücksichtigt, indem davon ausgegangen wurde, daß alle von diesen Regelungen betroffenen Anlagen aus dem Anlagenbestand des Jahres 1982 die entsprechenden Auflagen erfüllen. Dadurch

gingen die Gesamtemissionen von ca. 2,8 Mio. Tonnen Schwefeldioxid im Jahre 1982 auf ca. 1,3 Mio. Tonnen zurück.

Inzwischen wurde das Prognosemodell SMOVO durch das Modell SMOROP abgelöst, das auf die meteorologischen Daten des Europa-Modells des Deutschen Wetterdienstes zugreift. Für die in diesem Bericht dargestellten Rechnungen für das Winterhalbjahr 1992/1993 sowie für den probeweisen Routinebetrieb im Winterhalbjahr 1993/1994 wurde dabei im wesentlichen die bereits von SMOVO genutzte Emissionsdatenbasis herangezogen. Lediglich für die neuen Bundesländer wurden einige Modifikationen vorgenommen, die zu einer Verringerung der Emissionswerte um ca. 970.000 Tonnen Schwefeldioxid führten. Diese Modifikationen sollen im folgenden kurz beschrieben werden:

Für die neuen Bundesländer wurden vom Umweltbundesamt Emissionsdaten von SO<sub>2</sub> für das Jahr 1989 für die Sektoren "Betriebe mit luftverunreinigenden Anlagen" sowie "Haushalte und Kleinverbraucher" auf Bezirksebene zur Verfügung gestellt /4/. Diese Daten enthalten keine Aufschlüsselung nach einzelnen Anlagen, und es sind keine Informationen über Kaminhöhen enthalten. Ein Vergleich mit der für das Jahr 1982 vorliegenden Datenbasis, in der für einen Großteil der Anlagen diese Informationen enthalten sind, zeigte, daß für den Sektor "Betriebe mit luftverunreinigenden Anlagen" keine wesentlichen Unterschiede in den Gesamtemissionswerten sowie ihrer regionalen Verteilung vorhanden sind. Daher wurden - mit Ausnahme der öffentlichen Kraftwerke - die bisher genutzten Daten für diesen Sektor weiterhin den Rechnungen zugrundegelegt.

Für den Sektor Haushalte und Kleinverbraucher sind in den vom Umweltbundesamt zur Verfügung gestellten Daten für 1989 Emissionswerte in Höhe von 440.000 Tonnen Schwefeldioxid, gegenüber 970.000 Tonnen im bisher genutzten Datensatz, angegeben. Wegen dieser deutlichen Unterschiede wurden daher die neuen Daten für die Rechnungen mit SMOROP übernommen.

Für die öffentlichen Kraftwerke wurden von der "Vereinigten Energiewerke AG (VEAG)" in Berlin für das Jahr 1991 folgende Informationen zur Verfügung gestellt /5/:

- Kraftwerksname
- installierte Leistung (MW<sub>el</sub>)
- Bruttoerzeugung
- Emissionsfaktor

Aus diesen Daten wurden die Emissionswerte für 1991 errechnet, und die in der Datenbasis für 1982 für die öffentlichen Kraftwerke enthaltenen Werte wurden durch die Werte für 1991 ersetzt. Die Emissionen der öffentlichen Kraftwerke gingen dadurch um ca. 440.000 Tonnen auf ca. 1,4 Mio. Tonnen zurück.

Im vom alten Modell SMOVO genutzten Emissionsdatensatz wurden die Emissionswerte den Mittelpunkten von Rasterfeldern der Ausdehnung  $\frac{1}{2}$  Längengrad \*  $\frac{1}{4}$  Breitengrad bzw. 1 Längengrad \*  $\frac{1}{2}$  Breitengrad zugeordnet /1/. Dieses Raster entspricht dem in SMOVO zur Berechnung der SO<sub>2</sub>-Konzentrationen verwendeten. In SMOROP wurde aufgrund der Vorgaben durch das Europa-Modell von einem geografischen  $\lambda/\Phi$ -Gitter ausgegangen. Konzentrationswerte werden hier auf Rasterflächen berechnet, die im gedrehten Koordinatensystem des Europa-Modells definiert sind (s. dazu Abb. 2.7 in Abschn. 2.2.4). Zur Vermeidung von Inkonsistenzen sollten zumindest die Emissionen Deutschlands und der angrenzenden Gebiete auf diesem SMOROP-Raster definiert sein. Auf eine Neu-Rasterung der alten schon für Rechnungen mit SMOVO verwendeten Emissionsdaten wurde allerdings verzichtet. Nur die neuen in die Emissionsdatenbasis aufgenommenen Emissionen des Sektors Haushalte und Kleinverbraucher für die neuen Bundesländer wurden den Mittelpunkten von SMOROP-Rasterflächen zugeordnet. Die in die Emissionsdatenbasis aufgenommenen Koordinaten für die öffentlichen Kraftwerke der neuen Bundesländer entsprechen dagegen den jeweiligen Standorten der Anlagen.

Während der Laufzeit des Vorhabens konnten weitere neuere Informationen zu den Schwefeldioxidemissionen der für das Modell SMOROP relevanten Staaten zusammengetragen und zur Erstellung einer aktualisierten Datenbasis genutzt werden. Diese Datenbasis soll in den folgenden Abschnitten näher beschrieben werden. Rechnungen mit der neuen Datenbasis sind in Abschnitt 5.3 dargestellt. Für den probeweisen Routinebetrieb auf den Rechenanlagen des Deutschen Wetterdienstes in Offenbach im Winterhalbjahr 1993/1994 wurde diese Datenbasis jedoch noch nicht genutzt, da zu Beginn des probeweisen Routinebetriebs im November 1993 noch nicht alle vorliegenden Informationen ausgewertet waren und im Verlauf des Routinebetriebs keine Änderungen der Eingabedaten erfolgen sollte. Dies hätte zu einer Erschwerung der fortlaufenden Interpretation und Auswertung der Prognoserechnungen geführt. Die neue Emissionsdatenbasis steht jedoch für Prognoserechnungen im Rahmen des Smogfrühwarnsystems zur Verfügung.

## **3.2 Aktualisierung der Emissionsdatenbasis für Schwefeldioxid**

### **3.2.1 SO<sub>2</sub>-Emissionen der Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer)**

Die SO<sub>2</sub>-Emissionen der Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) wurden am detailliertesten erfaßt. Grundlage der bisher vom alten Modell SMOVO genutzten Emissionsdatenbasis waren das vom Umweltbundesamt erstellte Emissionsursachenkataster EMUKAT (Bezugsjahr 1980 und 1982) /6/ sowie die Regelungen der Großfeuerungsanlagen-Verordnung.

Die EMUKAT-Datei enthält als Einzelquellen

- sämtliche Kraftwerke der öffentlichen Versorgung und Bergbaukraftwerke,
- sämtliche Raffinerien,
- sämtliche Kokereien, Hochöfen und Sinteranlagen,
- eine Vielzahl von Industriebetrieben unterschiedlicher Branchenzugehörigkeit

sowie die nicht als Einzelquellen erfaßten Emissionen der Industrie und der Sektoren Haushalte und Kleinverbraucher und Verkehr als Flächenquellen.

Zur Aktualisierung der Datenbasis für die Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) im Rahmen der Arbeiten zum Smogfrühwarnsystem wurde für die Kraftwerke der alten Bundesländer (öffentliche Kraftwerke, Heizkraftwerke, Industriekraftwerke) im Rahmen eines Unterauftrags vom "Institut für Kraftwerkstechnik der Universität Essen" eine Datenbasis zur Verfügung gestellt, die u.a. folgende Informationen enthält /7/:

- Name und Betreiber des Kraftwerks,
- Baujahr und gegebenenfalls das Stilllegungsjahr des Kraftwerks,
- die Art des Kraftwerks (Heizkraftwerk, Industriekraftwerk, öffentliches Kraftwerk),
- die Art des eingesetzten Brennstoffs,
- die Feuerungswärmeleistung sowie die elektrische Leistung,
- die Feuerungsart,
- die Standortkoordinaten (nur für einige Anlagen),
- Informationen über durchgeführte Entschwefelungs- und Entstickungsmaßnahmen,
- Vollastbenutzungsstunden für das Jahr 1991 (nur für die öffentlichen Kraftwerke).

Nicht enthalten in der Kraftwerksdatenbank sind die Emissionswerte der einzelnen Anlagen. Diese lassen sich jedoch aus den vorhandenen Angaben mit Hilfe von Emissionsfaktoren nach folgender Formel berechnen:

$$E = \text{FWL} * \text{VBH} * E_{\text{fakt}} * 3,6 * 10^{-6}$$

mit

- E = Emission in Tonnen SO<sub>2</sub> pro Jahr
- FWL = Feuerungswärmeleistung der Anlage in MW
- VBH = Vollastbenutzungsstunden in Stunden
- E<sub>fakt</sub> = Emissionsfaktor in kg SO<sub>2</sub> pro Terajoule

In Tabelle 3.1 sind die Emissionsfaktoren angegeben, die zur Berechnung der Emissionswerte herangezogen wurden. Die Werte orientieren sich an den Regelungen der Großfeuerungsanlagen-Verordnung. Auf eine Verwendung unterschiedlicher Emissionsfaktoren für verschiedene Kohlesorten (Steinkohle, Braunkohle) wurde allerdings verzichtet. In den Fällen, in denen weitere Informationen vorlagen, wie z.B. Werte über den Schwefelgehalt im Rauchgas, wurden die Emissionsfaktoren entsprechend modifiziert. Fehlende Angaben über die Vollastbenutzungsstunden wurden durch eigene Annahmen ergänzt. Fehlende Standortkoordinaten wurden der EMUKAT-Datei entnommen; dies war ohne Schwierigkeiten möglich, da über den Namen der Anlage eine eindeutige Zuordnung möglich war und neu errichtete Anlagen i.a. an schon genutzten Standorten errichtet wurden.

Brennstoff	Feuerungswärmeleistung in MW	Emissionsfaktor in kg SO <sub>2</sub> /TJ
Kohle	50 - 100	650
	100 - 300	260
	> 300	100
leichtes Heizöl		87
schweres Heizöl		120
Erdgas		1

**Tab. 3.1:** Emissionsfaktoren für Kraftwerke in den alten Bundesländern

Alle zur Berechnung der Emissionen erforderlichen Informationen sind in einem Datensatz enthalten, so daß eine Modifikation der Emissionswerte durch Abänderung einzelner Werte, z.B. der Emissionsfaktoren oder der Vollastbenutzungsstunden, jederzeit möglich ist. Allerdings kann dieser Datensatz nicht direkt zur Eingabe in SMOROP verwendet werden, da eine Zuordnung zu Rasterflächen fehlt. Diese Zuordnung ist in Abschnitt 3.5 beschrieben.

Ein Vergleich des aktualisierten Datensatzes für die Kraftwerke mit dem bisher für die alten Bundesländer verwendeten Datensatz zeigt, daß die seit 1982 stillgelegten Kraftwerke eine thermische Leistung von insgesamt ca. 40 GW hatten und neue Kraftwerke mit etwa der gleichen thermischen Leistung in Betrieb gingen. Da schon im alten Datensatz die Regelungen der Großfeuerungsanlagen-Verordnung berücksichtigt worden waren und die neuen Anlagen i.a. an alten Standorten errichtet wurden, sind bei den Emissionswerten und ihrer regionalen Verteilung gegenüber dem alten Datensatz nur geringe Veränderungen aufgetreten. Die Emissionen aus Kraftwerken der öffentlichen Versorgung betragen nach den neuen Abschätzungen 190.000 Tonnen im Jahre 1991; dieser Wert stimmt gut mit dem von der "Vereinigung Deutscher Elektrizitätswerke (VDEW)" veröffentlichten Wert von ca. 200.000 Tonnen im Jahre 1990 überein /8/. Auch für die Emissionen der Industriekraftwerke ist die Übereinstimmung gut.

Sämtliche in der EMUKAT-Datei als Einzelquellen enthaltenen Kraftwerke wurden durch die soeben beschriebene Datenbasis ersetzt. Für die übrigen Einzelquellen sowie die Flächenquellen (nicht als Einzelquellen erfaßte Industriebetriebe, Haushalte und Kleinverbraucher, Verkehr) der EMUKAT-Datei lagen keine neuen Informationen vor; diese Werte wurden daher übernommen. Allerdings wurden auch hier die Regelungen der Großfeuerungsanlagen-Verordnung sowie die durch die "Novellierung der Technischen Anleitung zur Reinhaltung der Luft von 1986" vorgeschriebenen Grenzwerte auf den Anlagenbestand abgebildet und die dadurch hervorgerufenen Emissionsminderungen berücksichtigt /9,10/.

Die Gesamtemissionswerte für die alten Bundesländer betragen jetzt ca. 950.000 Tonnen SO<sub>2</sub> pro Jahr gegenüber 1,2 Mio. Tonnen im bisher genutzten Datensatz.

### **3.2.2 SO<sub>2</sub>-Emissionen für das Gebiet der neuen Bundesländer**

Die im alten Modell SMOVO verwendeten SO<sub>2</sub>-Emissionswerte für das Gebiet der neuen Bundesländer bezogen sich auf das Jahr 1982 und wurden einer im Auftrag

des Umweltbundesamtes vom Deutschen Institut für Wirtschaftsforschung (DIW) erstellten Studie entnommen /11/. Inzwischen liegt für die neuen Bundesländer ein Emissionsdatensatz für die Jahre 1989 und 1990 vor. Dieser Datensatz wurde der Abteilung für Angewandte Systemanalyse des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KfK/AFAS) vom "Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung (IER) der Universität Stuttgart" für die Nutzung im Smogfrühwarnsystem zur Verfügung gestellt /12/. Er enthält für Rasterflächen der Größe 10 km \* 10 km die Emissionswerte für SO<sub>2</sub> für folgende Sektoren:

- Punktquellen,
- Haushalte,
- Kleinverbraucher,
- Industrieunternehmen, die nicht als Punktquellen erfaßt sind,
- regionale Energieversorgungsunternehmen,
- Verkehr.

Für die Punktquellen liegen zusätzlich Angaben zur Kaminhöhe vor. Nicht enthalten in der Datenbasis sind Angaben zur Art der Anlage, zur Feuerungswärmeleistung und zur Art der eingesetzten Brennstoffe. Damit ist eine Identifizierung einzelner Anlagen und eine Berechnung der Emissionswerte aus anlagenspezifischen Daten nicht möglich. Durch einen Vergleich der neuen Datenbasis mit den bisher genutzten Daten konnten jedoch die öffentlichen Kraftwerke identifiziert werden. Für diese Kraftwerke wurden, wie schon für das Jahr 1991, von der "Verinigten Energiewerke AG (VEAG)" in Berlin auch für das Jahr 1992 die zur Berechnung der Emissionen relevanten Daten zur Verfügung gestellt /13/. Dadurch konnten die in der IER-Datenbasis enthaltenen Werte für das Jahr 1990 durch neue Werte ersetzt werden. Die Emissionen der öffentlichen Kraftwerke gingen um ca. 260.000 Tonnen von ca. 1,55 Mio. Tonnen im Jahre 1990 auf ca. 1,3 Mio. Tonnen im Jahre 1992 zurück. Dieser Rückgang ist u.a. auf die Stilllegung der Kraftwerke Hirschfelde, Lauta, Zschornowitz und Lübbenau III sowie auf die geringere Auslastung der übrigen Kraftwerke zurückzuführen.

Die Gesamtemissionswerte für die neuen Bundesländer betragen - auf der Grundlage des IER-Datensatzes für 1990 sowie der VEAG-Informationen für die Emissionen der öffentlichen Kraftwerke für 1992 - 3,8 Mio. Tonnen SO<sub>2</sub> gegenüber ca. 5 Mio. Tonnen nach dem alten Datensatz.

Aufgrund der wirtschaftlichen Entwicklung in den neuen Bundesländern sind die Emissionen seit 1989 bis zum heutigen Zeitpunkt durch die Stilllegung und die geringere Auslastung zahlreicher Anlagen weiter zurückgegangen. Da hierüber je-

doch bisher keine detaillierten Informationen vorliegen, konnten diese Änderungen nicht berücksichtigt werden. Ein weiterer deutlicher Rückgang der Emissionen ist in den nächsten Jahren zu erwarten, wenn die Regelungen der Großfeuerungsanlagen-Verordnung auch in den neuen Bundesländern umgesetzt sein werden. Die Kraftwerksemissionen dürften dann von 1,3 Mio. Tonnen SO<sub>2</sub> im Jahre 1992 auf ca. 0,2 Mio. Tonnen zurückgehen /14/.

### **3.2.3 SO<sub>2</sub>-Emissionen Polens, der Tschechischen und der Slowakischen Republik, Ungarns und Österreichs**

Für die Rechnungen mit dem Modell SMOVO wurde die regionale Verteilung der SO<sub>2</sub>-Emissionen der ehemaligen CSFR der im Auftrag der Abteilung für Angewandte Systemanalyse des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KfK/AFAS) erstellten Studie des Deutschen Instituts für Wirtschaftsforschung (DIW) in Berlin /15/ entnommen. Als Grundlage für die regionale Verteilung der SO<sub>2</sub>-Emissionen in Polen diente eine ebenfalls im Auftrag der KfK/AFAS von der Polnischen Akademie der Wissenschaften in Warschau erstellte Studie /16/. In beiden Fällen bezogen sich die Emissionen auf das Jahr 1982. Die Emissionen Ungarns und Österreichs wurden bisher nicht berücksichtigt. Inzwischen liegen neuere Informationen für die genannten Staaten für das Bezugsjahr 1988 vor. Unter der Verantwortlichkeit des "International Institute for Applied Systems Analysis (IIASA)" in Laxenburg bei Wien wurde von der "Central European Initiative (CEI)" die regionale Verteilung der Emissionen von SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, Staub und CO<sub>2</sub> für die Tschechische und Slowakische Republik, für Polen, Österreich, Kroatien, Ungarn und Italien erstellt /17/. Diese Daten dienten als Grundlage zur Aktualisierung der vom Modell SMOROP bisher genutzten Emissionsdatenbasis für SO<sub>2</sub>.

Die Daten des IIASA enthalten für die genannten Staaten die Emissionswerte für eine Vielzahl von Punktquellen sowie für Flächenquellen. Für die Punktquellen sind zusätzlich die Standortkoordinaten sowie Art und Name der Anlage angegeben, nicht jedoch weitere anlagenspezifische Daten wie Feuerungswärmeleistung, eingesetzter Brennstoff oder Auslastung der Anlage.

Die Flächenquellen beinhalten die Summe der Emissionen aus den Sektoren Industrie und Kraftwerke, die nicht als Punktquellen erfaßt sind, und den Sektoren Haushalte und Kleinverbraucher sowie Verkehr. Die räumliche Zuordnung der Emissionen aus den Flächenquellen erfolgte nach Verwaltungsbezirken. Zusätz-

lich angegeben sind in dem Bericht des IIASA für die einzelnen Staaten die Gesamtemissionen der Sektoren:

- öffentliche Kraftwerke und Heiz(kraft)werke,
- Industrie,
- Verkehr,
- Haushalte und Kleinverbraucher.

Damit enthalten diese Daten für die einzelnen Staaten die Gesamtemissionen für den Sektor Haushalte und Kleinverbraucher, nicht jedoch die regionale Verteilung der Emissionen aus diesem Sektor, da in der regionalen Verteilung der Flächenquellen auch noch Anteile aus dem Sektor Industrie enthalten sind. Für Rechnungen mit dem Modell SMOROP sollte der Sektor Haushalte und Kleinverbraucher jedoch gesondert berücksichtigt werden, da für diesen Sektor ein gesonderter Jahresgang der Emissionen angenommen wird.

Bei den Ländern, deren Emissionen schon in der bisherigen Emissionsdatenbasis vorliegen (Tschechische und Slowakische Republik, Polen) wurden die bisherigen Werte für den Sektor Haushalte und Kleinverbraucher übernommen. Um diese Emissionswerte auf Rasterflächen der Ausdehnung 1 Längengrad \*  $\frac{1}{2}$  Breitengrad mit den Informationen des IIASA verknüpfen zu können, wurden sie den im IIASA-Datensatz verwendeten Verwaltungsbezirken zugeordnet. Die Emissionen des Sektors Industrie ergeben sich als Restglied aus der Differenz zwischen den auf die eben beschriebene Weise gewonnenen HuK-Emissionen der einzelnen Verwaltungsbezirke und den Emissionen der im IIASA-Datensatz aufgeführten Flächenquellen.

Nach /18/ wurden in den letzten Jahren im Nordböhmischen Becken einige Kraftwerksblöcke stillgelegt. Berücksichtigt man diesen Tatbestand, so reduzieren sich für die Tschechische Republik die Emissionen aus Punktquellen gegenüber den Daten, die vom IIASA zur Verfügung gestellt wurden, um ca. 326.000 Tonnen Schwefeldioxid pro Jahr.

Für das Kraftwerk Turow in Polen lagen ebenfalls neuere Informationen über die Emissionen von SO<sub>2</sub> vor /18/. Dadurch verringern sich die Emissionen der Punktquellen geringfügig um ca. 50.000 Tonnen pro Jahr.

Die Emissionen Österreichs und Ungarns wurden bisher nicht berücksichtigt. Hier wurden die Daten des IIASA übernommen. Da auch für diese Staaten keine Informationen über die regionale Verteilung der Emissionen aus dem Sektor

Haushalte und Kleinverbraucher vorlagen und eine Übernahme bisher genutzter Daten nicht möglich war, wurden die in der IIASA-Studie angegebenen Gesamtemissionswerte für diesen Sektor entsprechend der Einwohnerzahl auf die einzelnen Verwaltungsbezirke verteilt und die Werte für die Flächenquellen wurden entsprechend modifiziert.

### 3.2.4 SO<sub>2</sub>-Emissionen Frankreichs

Die bisher genutzten Emissionen Frankreichs wurden auf der Grundlage von Untersuchungen des "Centre Interprofessionnel Technique d' Etudes de la Pollution Atmosphérique (CITEPA)" in Paris /19,20/ für die Jahre 1981 und 1983 zusammengestellt und mittels der Energiestatistik für 1982 interpoliert. Inzwischen wurden weitere Werte von der CITEPA /21/ zur Verfügung gestellt, die für die Sektoren "Verbrennung mit Ausnahme der Industrie", "Industrie" und "Verkehr" die SO<sub>2</sub>-Emissionswerte pro Departement für das Jahr 1985 enthalten. Der Sektor Verbrennung enthält dabei die zusammengefaßten Werte für Kraftwerke, Fernwärme sowie Haushalte und Kleinverbraucher. Darüber hinaus stehen Gesamtemissionswerte für Frankreich für das Jahr 1992 für folgende Sektoren zur Verfügung:

- Haushalte und Kleinverbraucher,
- Fernwärme,
- Industrie und Landwirtschaft,
- öffentliche Kraftwerke,
- Energieumwandlung,
- Prozesse der Industrie,
- Transport.

Zur Bestimmung der regionalen Verteilung der Emissionswerte für 1992 wurde folgendermaßen vorgegangen:

1. Ausgegangen wurde zunächst von der regionalen Verteilung der Emissionswerte für den Sektor Industrie für das Jahr 1985. Die Gesamtemissionswerte dieses Sektors betragen 772.530 Tonnen SO<sub>2</sub> im Jahre 1985.
2. Für das Jahr 1992 werden für diesen Sektor, der sich aus den Teilbereichen Landwirtschaft und Industrie, Energieumwandlung und Prozesse der Indu-

strie zusammensetzt, insgesamt 549.000 Tonnen angegeben; das entspricht ca. 71% des Wertes von 1985.

3. Für jedes Departement wurden daher die Emissionswerte von 1985 mit dem Faktor 0,71 multipliziert.
4. Für den Sektor Transport liegt ebenfalls die regionale Verteilung der Emissionswerte für 1985 vor, die Gesamtemissionen betragen in diesem Jahr 99.292 Tonnen. Für 1992 wird ein Wert von 155.000 Tonnen angegeben. Für jedes Departement wurden daher die Emissionswerte mit dem daraus resultierenden Umrechnungsfaktor von 1,56 multipliziert.
5. Für den Sektor Haushalte und Kleinverbraucher liegt die regionale Verteilung der Emissionswerte für das Jahr 1983 vor. Die Gesamtemissionen für dieses Jahr betragen 236.495 Tonnen, für 1992 wird ein Wert von 174.000 Tonnen angegeben. Durch Multiplikation der Werte der einzelnen Departements mit dem Faktor 0,74 erhält man die regionale Verteilung für 1992.
6. Für die Gesamtemissionen aus dem Sektor öffentliche Kraftwerke wird für das Jahr 1992 ein Wert von 274.000 Tonnen angegeben. Bekannt ist weiterhin für das Jahr 1985 die regionale Verteilung der Emissionen aus dem Sektor Verbrennung, der die Emissionen der öffentlichen Kraftwerke sowie des Sektors Haushalte und Kleinverbraucher (HuK) enthält. Diese Werte werden um die entsprechenden HuK-Emissionen des jeweiligen Departements für das Jahr 1985 reduziert. Dabei war teilweise eine Umverteilung auf benachbarte Departements erforderlich, um negative Werte zu vermeiden. Anschließend wurden die Werte von 1985 für die einzelnen Departements (Gesamtemission von 355.338 Tonnen) mit dem Faktor 0,77 multipliziert, um die Werte von 1992 (274.000 Tonnen) zu erhalten.

Die beschriebene Vorgehensweise ist insgesamt zwar unbefriedigend, bietet aber derzeit die einzige Möglichkeit, zu einer einigermaßen realistischen regionalen Verteilung der Emissionen zu kommen, da bisher keine detaillierteren Informationen vorliegen. Unsicherheiten dürften insbesondere dadurch auftreten, daß für die einzelnen Departements eine proportionale Umrechnung der Emissionen des Jahres 1985 auf das Jahr 1992 erfolgte, ohne daß die Emissionsänderungen konkreter Anlagen (z.B. die Stilllegung einzelner Kraftwerke) berücksichtigt werden konnten. Sobald neuere Daten vorliegen - beispielsweise aus dem Projekt "CORINAIR 1990" /22/ - sollten diese berücksichtigt werden.

### **3.2.5 SO<sub>2</sub>-Emissionen der Benelux-Staaten und Großbritanniens**

Für die Benelux-Staaten und Großbritannien standen keine neuen Informationen über die regionale Verteilung der Emissionswerte zur Verfügung. Daher konnte für diese Staaten auch keine Aktualisierung der Datenbasis vorgenommen werden. Die Werte der Benelux-Staaten werden daher überschätzt. So werden von der "ECE-Co-Operative Programme for Monitoring and Evaluation of the Long-Range Transmission of Air Pollutants in Europe (EMEP)" für 1990 Werte von 680.000 Tonnen angegeben, gegenüber 962.000 Tonnen im vom Modell genutzten Datensatz. In Großbritannien betragen die Gesamtemissionswerte weiterhin etwa 4 Mio. Tonnen SO<sub>2</sub> pro Jahr /23/.

### **3.3 Gesamtüberblick über die aktualisierten Emissionen von SO<sub>2</sub>**

Mit Ausnahme von Großbritannien und den Benelux-Staaten wurden die Emissionsdaten aller für die Smogprognose relevanter Staaten aktualisiert. Hierzu gehören die Bundesrepublik Deutschland (alte und neue Bundesländer), die Tschechische und die Slowakische Republik, Polen, Ungarn, Österreich und Frankreich. Wie bei den bisher durchgeführten Rechnungen sollen auch in Zukunft die Emissionen Italiens nicht berücksichtigt werden, da davon ausgegangen werden kann, daß die Alpen eine wirksame Barriere für den Schadstofftransport darstellen. Andererseits wäre das Ausbreitungsmodell SMOROP auch nicht in der Lage, derartige Transporte mit der erforderlichen Genauigkeit zu simulieren.

Die Datensätze für die einzelnen Staaten sind unterschiedlich aufgebaut; die detailliertesten Informationen liegen für die Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) vor. Auch die Bezugsjahre sind unterschiedlich. Sobald neuere Emissionsdaten für ein einheitliches Bezugsjahr, so z.B. aus dem CORINAIR-Projekt für das Jahr 1990 (s. /22/) zur Verfügung stehen, sollte geprüft werden, ob diese Daten übernommen werden können.

Tabelle 3.2 zeigt eine Zusammenstellung der in der Emissionsdatenbasis enthaltenen Werte, aufgeteilt nach einzelnen Emissionssektoren, sowie einen Vergleich der Gesamtemissionswerte der einzelnen Staaten mit den Werten der alten Datenbasis. Dabei ist festzustellen, daß für alle Staaten mit Ausnahme Frankreichs keine großen Änderungen in den Gesamtwerten aufgetreten sind. Diese Aussage gilt auch für die regionale Verteilung der Werte. Die relativ geringe Veränderung

	Punkt- quellen	Industrie Flächen- quellen	HuK	Verkehr	Summe neu	Summe alt
England	2699	740	360	60	3859	3859
BRD-Ost	2323	795	668	25	3811	4252
Polen	2237	703	730	114	3783	3624
CSFR	1457	392	472	–	2320	3319
Ungarn	474	354	326	17	1171	–
Frankreich	274	549	174	155	1152	2385
Benelux	681	188	63	30	962	962
BRD-West	498	192	202	53	945	1258
Österreich	30	60	19	7	116	–
Summe					18120	19660

**Tab: 3.2:** Emissionen von Schwefeldioxid ( $10^3$  Tonnen pro Jahr) für die im Rechenmodell berücksichtigten Staaten

der Emissionswerte im Vergleich zu den bisher genutzten Daten ist u.a. darauf zurückzuführen, daß

- für die Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) durch die schon erfolgte Berücksichtigung der Regelungen der Großfeuerungsanlagen-Verordnung die wesentlichen Änderungen bereits erfaßt waren; die Stilllegung einer Vielzahl von älteren Anlagen seit 1982 wurde durch die Inbetriebnahme neuer Anlagen an den gleichen Standorten im allgemeinen wieder ausgeglichen;
- der Emissionsdatensatz für die neuen Bundesländer sich im wesentlichen auf das Jahr 1990 bezieht (die Emissionen der öffentlichen Kraftwerke beziehen sich auf das Jahr 1992) und die größten Änderungen erst nach 1990 aufgetreten sein dürften; darüber hinaus sind auch im alten Datensatz teilweise schon Emissionsänderungen für die neuen Bundesländer berücksichtigt worden (s. Abschn. 3.1);
- die neuesten Daten für Polen sich nur wenig von den Daten für 1982 unterscheiden.

### 3.4 Freisetzungshöhen

Die Verteilung der Schadstoffe in der Atmosphäre nach der Freisetzung hängt u.a. von der Freisetzungshöhe ab. Daher sollten in den Emissionsdaten auch Angaben darüber sowie über den thermischen Auftrieb enthalten sein. Für die Bundesrepublik Deutschland (alte Bundesländer) wurden die Informationen über die Freisetzungshöhe und den thermischen Auftrieb aus der bisher genutzten Datenbasis übernommen; fehlende Angaben bei den neu errichteten Anlagen wurden durch eigene Annahmen ergänzt. Für die neuen Bundesländer sind für die Punktquellen die Angaben zur Kaminhöhe in dem Emissionsdatensatz enthalten. Der thermische Auftrieb wurde wiederum aufgrund eigener Annahmen abgeschätzt. Für alle anderen Staaten lagen i.a. keine Informationen vor, so daß die Angaben dem bisher genutzten Datensatz entnommen und durch eigene Annahmen vervollständigt wurden. Alle verwendeten Werte für die Kaminhöhen und den thermischen Auftrieb sind in der Datenbasis enthalten und können jederzeit überprüft und gegebenenfalls abgeändert werden.

Für die Flächenquellen aus dem Bereich Industrie wurde generell von einer Freisetzungshöhe von 50 m ohne thermischen Auftrieb, bei den Emissionen aus dem Sektor Haushalte und Kleinverbraucher wurde von einer Freisetzungshöhe von 20 m ausgegangen.

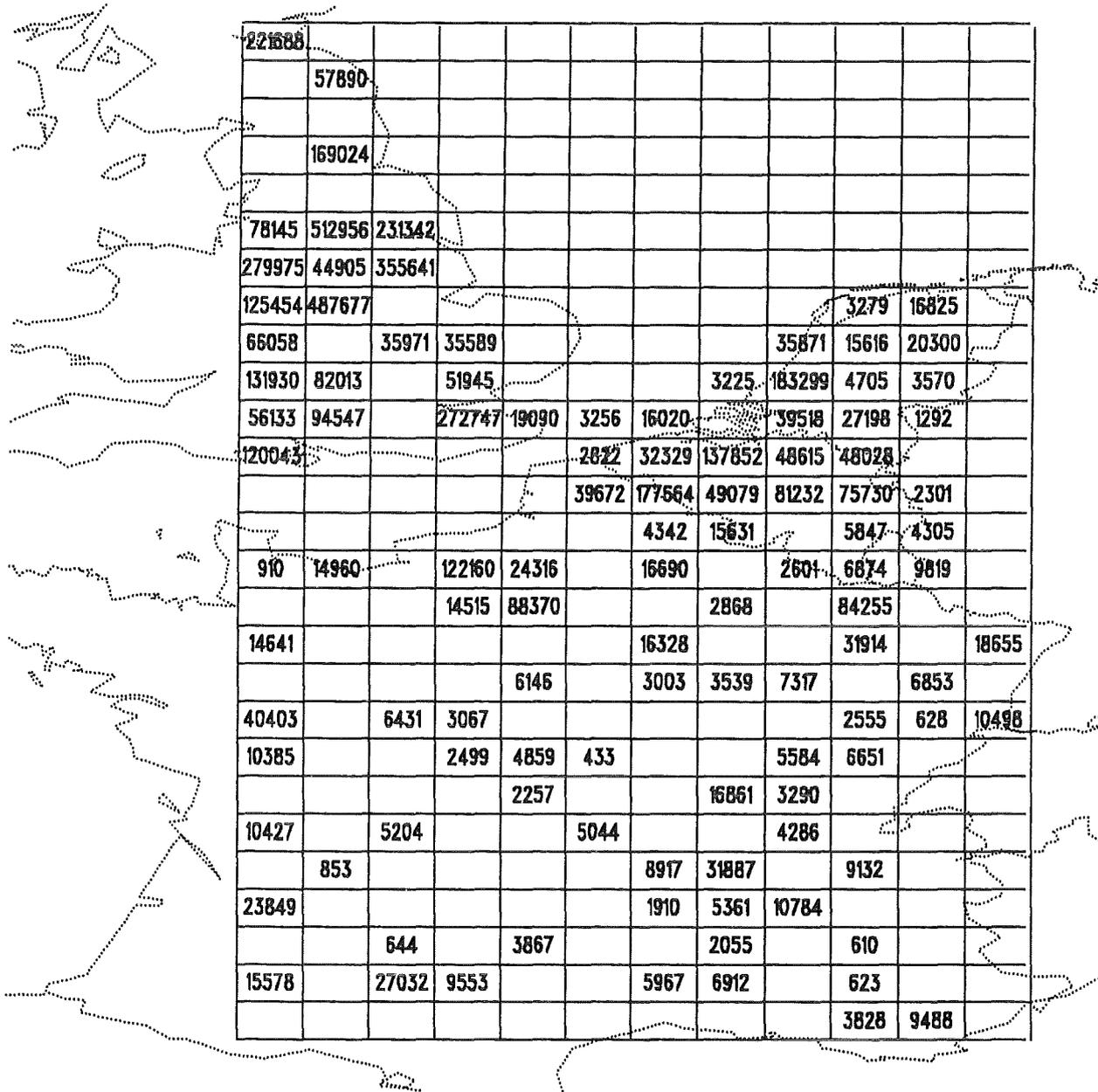
### 3.5 Zusammenfassung der Emissionswerte

Die neu erstellte Emissionsdatenbasis enthält ca. 1800 Einzelquellen mit den zugehörigen Standortkoordinaten sowie ca. 5400 Flächenquellen für die Sektoren Industrie, Haushalte und Kleinverbraucher sowie Verkehr. Für Rechnungen mit SMOROP müssen diese detaillierten, in einer gesonderten Datei vorliegenden Emissionsdaten, weiter aufbereitet werden. Dies geschieht im wesentlichen durch eine Rasterung der Emissionsverteilung, mit Ausnahme der Quellen, deren Emissionen über 100.000 Tonnen SO<sub>2</sub> pro Jahr liegen. Je nach Standort werden alle Quellen mit Emissionen unter 100.000 Tonnen SO<sub>2</sub> pro Jahr den Mittelpunkten von SMOROP-Rasterflächen zugeordnet. Dies gilt auch für Emittenten außerhalb Deutschlands, wo das Gitter des Europa-Modells Grundlage der Rasterung ist. Die Emissionsrasterflächen für Emittenten in Deutschland und der näheren Umgebung haben eine Ausdehnung von  $\frac{1}{2}$  Längengrad \*  $\frac{1}{2}$  Breitengrad im gedrehten Koordinatensystem des Europa-Modells (entsprechend einer Fläche von 50 \* 50 km<sup>2</sup>). In größerer Entfernung von Deutschland (mehr als 9 Rasterflächen vom

Mittelpunkt Deutschlands entfernt) werden die Emissionen in Rasterflächen von  $1\frac{1}{2}^\circ * 1\frac{1}{2}^\circ$  Ausdehnung entsprechend  $3 * 3$  SMOROP-Rasterflächen zusammengefaßt. Bei dieser weiten Zusammenfassung werden alle Emissionen dem Mittelpunkt derjenigen der 9 SMOROP-Rasterflächen zugeordnet, in der von vornherein die Quellen mit den höchsten Emissionen lagen.

Nach dieser Zusammenfassung auf Rasterflächen kann noch eine Zusammenfassung nach Kaminhöhenklassen erfolgen, ohne daß die Qualität der Rechenergebnisse dadurch verschlechtert wird (die Angaben zur Freisetzungshöhe sind ohnehin mit relativ großen Unsicherheiten behaftet). Die Zusammenfassung der Freisetzungshöhen zu zehn unterschiedlichen Höhenklassen ist in /1/ ausführlich beschrieben, so daß an dieser Stelle nicht näher darauf eingegangen wird. Die gewählte Zuordnung zu den einzelnen Höhenklassen ist ebenfalls in der Datenbasis enthalten.

Abbildung 3.1 zeigt einen Überblick über die Emissionen in den einzelnen Rasterfeldern der berücksichtigten europäischen Staaten.



**Abb: 3.1a:** Regionale Verteilung der vom Modell SMOVO genutzten Emissionsdaten für England, Frankreich und die Benelux-Staaten (Emission in Tonnen SO<sub>2</sub> pro Jahr, Rastergröße  $\frac{1}{2}$  Längengrad \*  $\frac{1}{2}$  Breitengrad im gedrehten Koordinatensystem des Europa-Modells)



				4761				772					
			1512	4047	4688	175	15700	14765	2170				
		8944	5926	13883	12766	21246	14449	15032	11996				
	416	1731	16313	3170	6765	7772	9471	14632	39164	643			
	2704	4292	5768	2874	3148	23781	19527	27929	33363	2246			
	4655	4104	16927	15449	21366	57114	24292	29301	75576	60638			
37669	90065	15303	6935	5339	25893	53609	145090	19774	272017	518867			
110162	47164	3926	3716	9487	62282	51027	944423	42530	69598	329552	169959		
48975	18885		6282	21963	84326	95097	120635	163895	34416	11081	966		
807	6128	8775	28781	2703	15191	25773	48214	7345					
2356	2958	12521	19348	5494	4922	5583	1246	1161					
16735	20479	12550	27620	4211	2609	11237	2770	4409	139				
		10028	5802	15815	3625	2918	13264	3448	2464				
	2016	3686		5299	5635	2186	14302	8017					
	6145	3540		5130	5161		4536	2856	134				

**Abb. 3.1c:** Regionale Verteilung der vom Modell SMOVO genutzten Emissionsdaten für die Bundesrepublik Deutschland (Emission in Tonnen SO<sub>2</sub> pro Jahr, Rastergröße  $\frac{1}{2}$  Längengrad \*  $\frac{1}{2}$  Breitengrad im gedrehten Koordinatensystem des Europa-Modells)

#### **4. Auswertung der Rechnungen mit SMOROP für das Smogfrühwarnsystem im Winter 1992/93**

Vom 7. Oktober 1992 bis zum 31. März 1993 lief SMOROP im probeweisen Routinebetrieb auf den Rechnern des DWD und produzierte Prognosen der SO<sub>2</sub>-Konzentrationsverteilungen für das Smogfrühwarnsystem des UBA. Zur späteren Auswertung wurden die Ergebnisse der Rechnungen von SMOROP archiviert. Dabei handelte es sich um die folgenden Daten:

- meteorologische Parameter an ausgewählten Orten im Gitter des Europa-Modells,
- Konzentrationsverteilungen für alle prognostizierten Termine (Rasterkarten),
- Matrix der für die Konzentrationen an den jeweiligen Rasterflächen verantwortlichen Verursacher.

Für den Vergleich der mit Hilfe von SMOROP prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen mit Meßwerten standen einerseits die Messungen an den Stationen des UBA zur Verfügung und andererseits alle Meldungen, die von den zuständigen Behörden der Bundesländer ans Smogfrühwarnsystem abgegeben wurden. Letztere dienten insbesondere dazu, die regionale Verteilung der SO<sub>2</sub>-Konzentrationen im Tagesmittel einzuschätzen. Allerdings ist zu beachten, daß es sich bei den von den Ländern gelieferten Meßwerten größtenteils um ungeprüfte Daten handelt. Die Lage der UBA- bzw. Länder-Stationen, deren Meßwerte für die folgenden Untersuchungen vorlagen, ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Es ist offensichtlich, daß sich nicht in allen SMOROP-Rasterflächen Meßstationen befinden. Um Rasterkarten mit Meßwerten besser mit den Prognosekarten vergleichen zu können, wurden deshalb fehlende Rasterwerte mit räumlich und zeitlich interpolierten Werten aufgefüllt (s. Abschn. 4.2). Außerdem wurden aus den Meßwerten, die größtenteils in halbstündiger Auflösung vorlagen, 3-Stunden-Mittel und Tagesmittelwerte berechnet. Diese konnten anschließend mit den von SMOROP für das Smogfrühwarnsystem prognostizierten Werten verglichen werden. Der in den folgenden Abschnitten durchgeführte Vergleich beschränkt sich auf den Zeitraum Dezember 1992 bis März 1993, in dem das Ausbreitungsmodell ohne Änderungen an den physikalischen Annahmen und der zugrundegelegten Emissionsdatenbasis und bis auf eine Ausnahme ohne Unterbrechungen Prognosen für das Smogfrühwarnsystem produzierte.

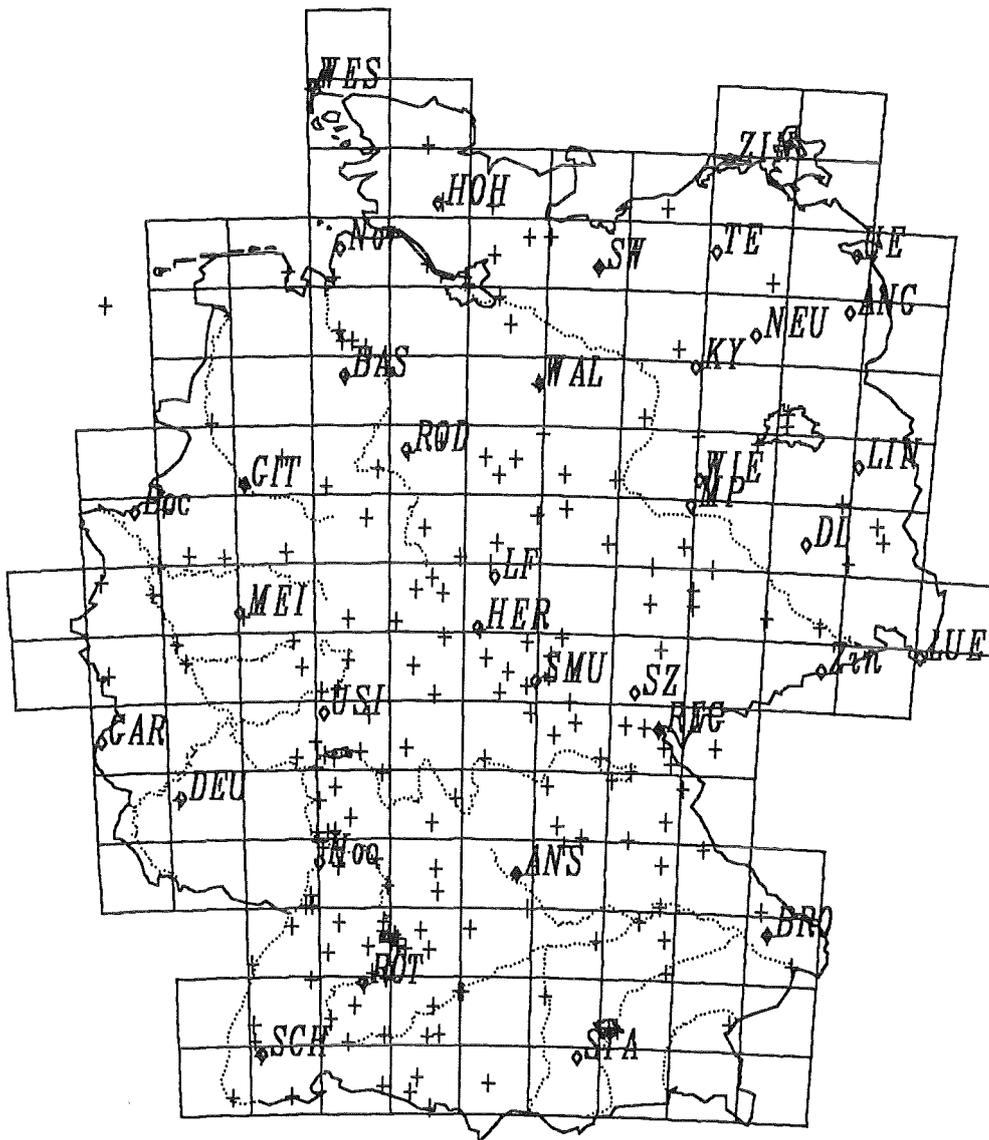


Abb. 4.1: Lage der Meßstationen des Smogfrühwarnsystems

Kreuze: Länderstationen

Rauten: UBA-Stationen

WES	Westerland	HOH	Hohenwestedt	ZIN	Zingst
No	Nordholz	SW	Schwerin	TE	Teterow
UE	Ueckermünde	ANG	Angermünde	NEU	Neuglobsow
KY	Kyritz	WAL	Waldhof	BAS	Bassum
Boc	Bocholt	GIT	Gittrup	ROD	Rodenberg
WIE	Wiesenburg	MP	Melpitz	LIN	Lindenberg
DL	Doberlug-Kirchh.	LUE	Lückendorf	Zin	Zinnwald
SZ	Schleiz	SMU	Schmücke	HER	Herleshausen
MEI	Meinerzhagen	GAR	Großkampenberg	USI	Usingen
REG	Regnitzlosau	DEU	Deuselbach	Hoc	Hockenheim
ANS	Ansbach	BRO	Brotjacklriegel	ROT	Rottenburg
SCH	Schauinsland	STA	Starnberg		

#### 4.1 Vergleich der Prognosen mit Meßwerten an UBA-Stationen

Die Betrachtung der Meßwerte an den UBA-Stationen und deren zeitlicher Entwicklung zusammen mit den während des probeweisen Routinebetriebs von SMOROP in Offenbach prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen dient vor allem als Grundlage zur allgemeinen Einschätzung der Immissionssituation im Winter 1992/1993. Für den Vergleich zwischen Meßwerten und Prognosen wurden aus den archivierten Konzentrationsverteilungen diejenigen Rasterflächen ausgewählt, in denen die betreffenden UBA-Stationen liegen, und die für diese Rasterflächen prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen wurden den dazugehörigen Meßwerten gegenübergestellt.

Einen ersten Überblick über die Konzentrationsverhältnisse an den UBA-Stationen gibt Tabelle 4.1. Hierin sind die Monatsmittelwerte, Standardabweichungen und 95%-Perzentilwerte der über drei Stunden gemittelten Meßwerte an ausgewählten UBA-Stationen zusammen mit den entsprechenden Angaben für die mit Hilfe von SMOROP berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen dargestellt.

Die Stationen mit den höchsten Konzentrationen liegen erwartungsgemäß in den neuen Bundesländern. Es handelt sich hierbei um die Stationen Lindenberg, Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain, Schleiz und Lückendorf. In den alten Bundesländern weisen die in unmittelbarer Nachbarschaft zur ehemaligen DDR gelegenen UBA-Stationen Waldhof, Herleshausen bzw. die zusätzlich noch an der Grenze zur Tschechischen Republik gelegene Station Regnitzlosau die höchsten über den Monat gemittelten Konzentrationswerte auf. An der Station Brotjacklriegel, in 1016 m Höhe im Bayerischen Wald gelegen, wurden in dieser Auswahl die niedrigsten Konzentrationen gemessen. In den neuen Bundesländern hat die Station Teterow die niedrigsten Monatsmittelwerte der betrachteten Stationen.

Die Konzentrationen an Stationen mit niedrigen bzw. mittleren Konzentrationsniveaus werden von SMOROP in der Regel überschätzt. Dies gilt in besonderem Maße für die Station Brotjacklriegel (aber auch für die Station Schauinsland, die allerdings in der hier gezeigten Auswahl nicht enthalten ist) und hat seine Ursache hauptsächlich in der Höhenlage der Station. Trotz der gegenüber SMOVO wesentlich verbesserten horizontalen und vertikalen Auflösung, insbesondere der topografischen Unterlage des Europa-Modells, ist es auch mit SMOROP nicht möglich, SO<sub>2</sub>-Konzentrationen in Höhenlagen oberhalb von Inversionen in den umgebenden Tallagen korrekt zu modellieren. Unter diesen Inversionen kann es zu einer Ansammlung von Schadstoffen kommen, die von den höhergelegenen Luftschichten abgekoppelt ist. In SMOROP liegt dagegen jeder Punkt auf der Erdober-

	Dezember 1992			Januar 1993			Februar 1993			März 1993			
	Mittel	Std. Abw	95% Perz.	Mittel	Std. Abw	95% Perz.	Mittel	Std. Abw	95% Perz.	Mittel	Std. Abw	95% Perz.	
Brotjacklriegel	M	3,7	4,3	14,8	2,8	3,1	10,0	5,5	6,7	18,6	8,4	11,9	31,3
	R	15,8	19,0	49,7	7,9	12,0	30,1	20,3	24,6	58,4	15,4	15,2	47,3
Rottenburg	M	8,5	7,1	21,9	7,5	5,4	19,1	8,2	3,6	18,1	16,1	14,9	54,9
	R	10,3	16,4	34,6	4,8	5,7	18,7	7,9	7,8	26,1	7,3	5,9	19,2
Ansbach	M	11,8	13,9	35,3	7,1	6,6	19,8	9,8	7,3	25,1	12,7	11,9	35,8
	R	17,2	28,4	88,0	7,2	10,2	29,9	11,8	12,3	39,9	9,2	12,2	34,2
Meinerzhagen	M	9,4	8,1	28,2	11,3	13,9	36,5	18,4	16,1	45,8	21,1	19,6	64,0
	R	16,8	18,8	67,8	19,3	23,9	67,5	25,3	22,6	77,0	16,2	12,0	43,2
Gittrup	M	14,7	13,4	39,0	15,7	23,2	69,5	11,0	12,5	35,6	15,1	14,5	42,7
	R	37,5	77,7	116,0	24,7	34,1	112,0	25,8	37,1	110,75	15,9	17,9	54,7
Teterow	M	18,4	21,2	59,6	12,4	18,7	57,6	11,3	19,8	46,0	7,7	10,6	32,2
	R	38,1	71,6	206,0	17,7	28,2	76,0	17,4	30,4	78,0	13,7	20,9	50,0
Waldhof	M	22,7	29,7	85,2	19,4	33,2	98,9	20,4	34,6	112,0			
	R	44,8	86,3	228,8	33,8	92,4	145,0	24,3	48,5	114,0			
Herleshausen	M	33,8	38,4	121,9	34,3	54,4	163,3	50,4	66,6	234,0	24,4	31,9	105,51
	R	66,5	95,2	226,0	36,6	65,1	198,0	46,2	62,3	184,0	26,6	39,6	110,0
Lindenberg	M	39,8	31,1	95,6	32,9	32,5	101,5	50,3	65,0	228,0	31,4	32,0	95,2
	R	33,2	51,8	233,0	23,6	38,8	100,0	23,3	45,6	112,5	17,2	24,2	70,8
Regnitzlosau	M	51,8	61,6	188,0	16,4	32,7	68,0	60,7	75,5	231,0	27,4	34,4	98,4
	R	36,7	39,1	118,0	15,6	33,4	146,7	35,0	28,3	91,0	28,5	32,2	110,0
Wiesenburg	M	58,9	51,4	166,1	44,1	58,0	167,2	61,6	82,7	278,8	33,0	38,0	118,0
	R	91,2	92,9	259,0	56,8	69,6	210,0	64,5	80,2	238,0	41,4	51,9	116,0
Doberlug-Kirchhain	M	67,3	50,6	168,0	52,6	48,0	151,5	94,9	102,5	347,5	42,0	46,9	118,7
	R	113,1	103,7	326,9	63,0	59,9	186,7	85,6	99,8	316,0	55,1	61,1	195,0
Schleiz	M	75,6	111,8	333,0	44,8	82,6	249,8	103,9	128,1	369,2	61,7	80,2	244,0
	R	99,9	133,0	296,0	43,7	65,9	218,0	74,4	63,6	212,0	51,4	48,6	160,0
Lückendorf	M	75,5	71,2	234,8	51,8	37,8	128,0	120,7	129,2	493,3	64,0	48,1	159,0
	R	107,1	91,0	340,7	69,1	53,3	190,0	127,0	105,8	342,0	75,1	57,1	200,0

Tab. 4.1: Auf der Basis von 3-Stunden-Mittelwerten berechnete Monatsmittel, Standardabweichungen und 95%-Perzentilwerte für gemessene (M) und prognostizierte (R) SO<sub>2</sub>-Konzentrationen an ausgewählten UBA-Stationen

fläche innerhalb der Mischungsschicht (bzw. unterhalb einer eventuellen Inversion) und damit auch die Rasterfläche, die den Vergleichswert für die Station Brotjacklriegel liefert.

Die Abweichungen zwischen prognostizierten und gemessenen  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen werden am Ende dieses Kapitels in Abschnitt 4.4 eingehend untersucht. Besonders für die Stationen in den alten Bundesländern gilt, daß die Konzentrationen von SMOROP systematisch überschätzt werden. Ausnahmen von dieser Regel stellen die Stationen Rottenburg und Regnitzlosau dar. Ebenfalls zu einer Unterschätzung der gemessenen Konzentrationen durch SMOROP kommt es vor allem an den UBA-Stationen in den neuen Bundesländern.

Zur weiteren Untersuchung der gemessenen bzw. prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen wird in den folgenden Abschnitten zusammen mit dem Zeitverlauf der Konzentrationswerte an den Meßstationen des UBA auch der Verlauf ausgewählter meteorologischer Parameter dargestellt. Es handelt sich hierbei um die vom Europa-Modell prognostizierten Werte, die von SMOROP für ausgewählte Orte ausgegeben und archiviert wurden. Bei der allgemeinen Beschreibung der jeweiligen Wetterlagen wurden die Angaben in der Berliner Wetterkarte und ihren monatlichen Klimaübersichten herangezogen /24/.

#### 4.1.1 Dezember 1992

Bis zum 5. Dezember lag Deutschland im Bereich der Nordatlantischen Frontalzone mit guten Ausbreitungsbedingungen bei hohen Windgeschwindigkeiten und dem steten Durchzug von Fronten. Danach setzte sich über Deutschland bei meist niedrigen Windgeschwindigkeiten höherer Luftdruck durch. Am 6. Dezember kam der Wind vornehmlich aus südlichen Richtungen, drehte dann aber über Südost und Ost nach Nordost. Die Temperaturen lagen in Gefrierpunktnähe. Zwischen dem 11. und 15. Dezember lag Deutschland am Nordrand einer sich von den Azoren bis nach Osteuropa erstreckenden Hochdruckzone in einer teilweise recht kräftigen Westströmung vor allem in Norddeutschland. Danach verstärkte sich jedoch das Hochdruckgebiet über Osteuropa, und Deutschland kam in eine südliche bis östliche Strömung mit geringen Windgeschwindigkeiten. Verbreitet gab es Frost und Nebel. Am 19. und 20. überquerte ein Frontensystem Deutschland. Gleichzeitig wanderte ein kräftiges Hoch von den Britischen Inseln über Südschweden nach Osteuropa. Dabei lag Deutschland in einer meist östlichen Strö-

mung bei Temperaturen um den Gefrierpunkt. Zum Monatsende stellte sich eine hochwinterliche Wetterlage ein mit Temperaturen unter  $-10^{\circ}\text{C}$ .

Die Abbildungen 4.2a-c zeigen einen Überblick über den Zeitverlauf der vom Europa-Modell für die unterste Modellschicht prognostizierten Temperatur, Windgeschwindigkeit und Windrichtung für 12 UTC für die Orte Dresden, Essen und Berlin. Der eben beschriebene Witterungsablauf spiegelt sich darin deutlich wider. Besonders auffällig ist die Periode zwischen dem 6. und 11. Dezember mit niedrigen Temperaturen und Windrichtungen um Nordost. Während dieser Zeit steigen die Schadstoffkonzentrationen in Deutschland auf etwas höhere Werte an. Ebenfalls mit einem Anstieg der Schadstoffkonzentrationen verbunden ist die Winddrehung auf nordöstliche Richtungen am 20. Dezember bei nachfolgend stetig sinkenden Temperaturen.

Die UBA-Stationen mit den höchsten über den Monat gemittelten Konzentrationen im Dezember sind Schleiz, Lückendorf, Doberlug-Kirchhain, Wiesenburg und Regnitzlosau. Wegen der langen Ausfallszeiten der Station Lückendorf im Dezember soll hier auf eine Betrachtung der Zeitreihe dieser Station verzichtet werden. Den Zeitverlauf der 3-Stunden-Mittelwerte der restlichen vier Stationen zeigt die Abbildung 4.3 zusammen mit den von SMOROP für einen Prognosezeitraum von 0 bis 24 Stunden berechneten Konzentrationswerten.

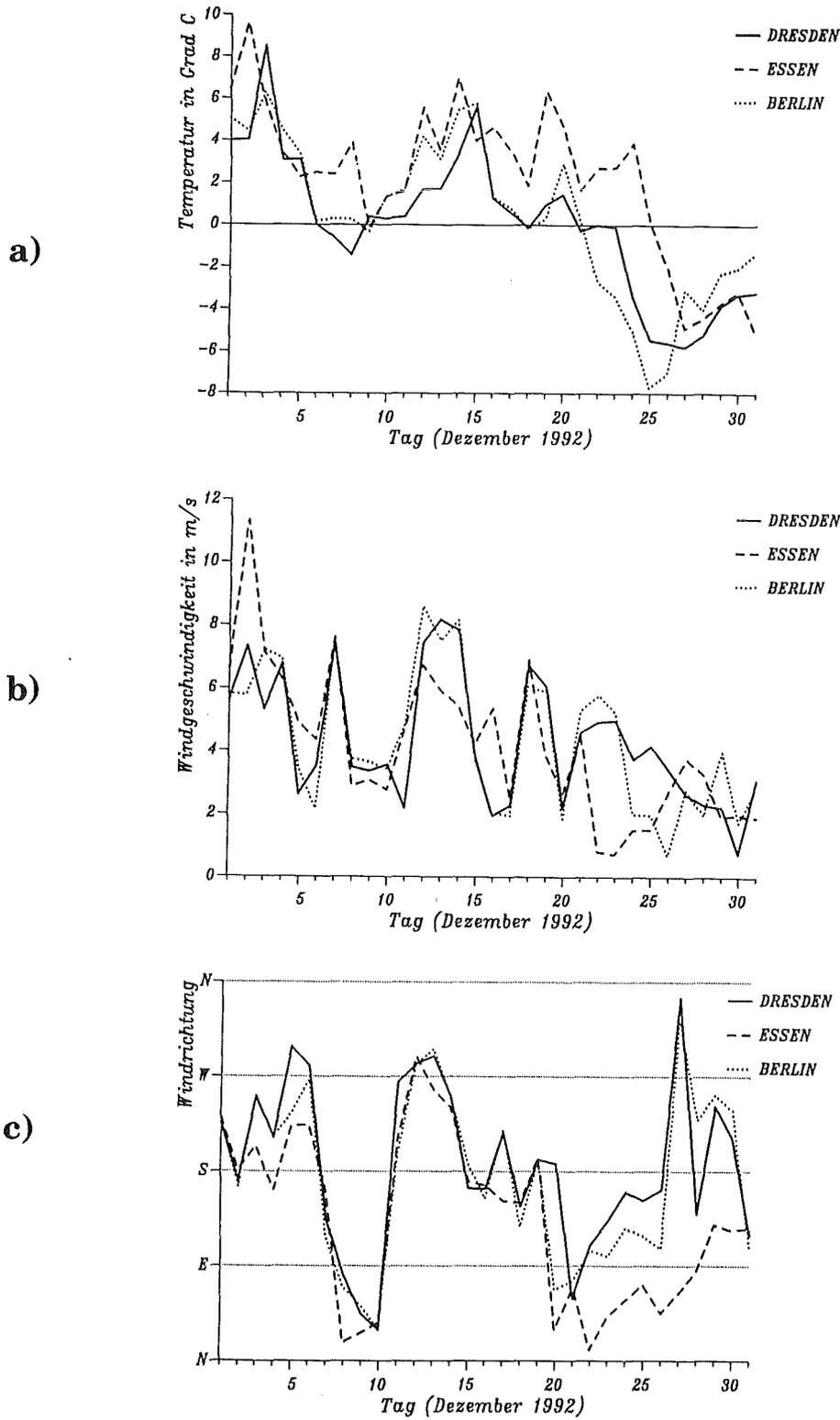
Die höchsten gemessenen und prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen finden sich im Dezember an der Station **Schleiz**. Nach sehr niedrigen Konzentrationswerten zu Monatsbeginn gibt es am 7. Dezember einen Anstieg der Konzentrationen auf Werte um  $200 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  bei Messung und Prognose. Bis zum Absinken der Konzentrationen am 11. Dezember wird der Verlauf der gemessenen  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen von SMOROP gut prognostiziert. Dies gilt auch für die Phase der niedrigen Konzentrationen danach und das erneute Ansteigen der Konzentrationen am 20. Dezember. Der höchste über drei Stunden gemittelte Meßwert tritt nach dem 25. Dezember als ausgeprägter Spitzenwert auf. Ein solcher Spitzenwert wird auch von SMOROP prognostiziert, allerdings erst drei Stunden später mit einer Konzentration von  $1305 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  anstatt der gemessenen  $712 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ . Nach dem 26. Dezember schwanken Messung und Prognose recht kräftig um Werte von  $200 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ , wobei die gemessenen erhöhten Werte vom Modell mal unter- und mal überschätzt werden.

An der Station **Doberlug-Kirchhain** kommt es im Dezember zu einer sehr starken Überschätzung der tatsächlich gemessenen Werte durch die Prognosen. Auffällig sind die im Vergleich zu den Meßwerten sehr starken Schwankungen der

prognostizierten Konzentrationen. Allerdings kommt es in den anderen betrachteten Monaten des Winters 1992/93 bei den Meßwerten an der Station Doberlug-Kirchhain zu ähnlich starken Ausschlägen wie hier bei den prognostizierten Werten (siehe dazu die folgenden Abschnitte dieses Kapitels). Ein Versuch, die großen Diskrepanzen zwischen den Meßwerten und den Prognosen von SMOROP für das betreffende Raster zu erklären, wird in Abschnitt 4.3 anhand einer detaillierten Verursacheranalyse gemacht.

Auf den ersten Blick ist die Übereinstimmung des Verlaufs der gemessenen und prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen an der Station **Wiesenburg** besser als an der Station Doberlug-Kirchhain. Allerdings wird auch hier das Bild durch eine große Anzahl extremer Ausschläge im Verlauf der prognostizierten Konzentrationen getrübt. Der in Schleiz beobachtete Anstieg der Konzentrationen zwischen dem 7. und 11. Dezember tritt in der Meßreihe von Wiesenburg (wie auch in der Meßreihe von Doberlug-Kirchhain) nicht auf, wird aber vom Modell, wenn auch nicht so stark wie für die Rasterfläche um Schleiz, vorhergesagt. Zwischen dem 12. und 16. Dezember ist die Übereinstimmung zwischen Meß- und Rechenwerten sehr gut. Für das Modell spricht, daß dabei auch der Anstieg der Konzentrationen am 14. Dezember korrekt vorhergesagt wird. Größere Abweichungen gibt es in der zweiten Monatshälfte, insbesondere am 17. Dezember, an dem eine Konzentration von  $650 \mu\text{g m}^{-3}$  vorhergesagt wird, die Meßwerte aber unter  $200 \mu\text{g m}^{-3}$  liegen, und nach dem 24. Dezember.

Die Station **Regnitzlosau** liegt als einzige der betrachteten Stationen in den alten Bundesländern. Die gemessenen Konzentrationen haben im Dezember die gleiche Größenordnung wie die in Doberlug-Kirchhain und Wiesenburg. Interessant ist, daß im Gegensatz zu den Verhältnissen an diesen beiden Stationen, die während der zweiten Monatshälfte in Regnitzlosau gemessenen Konzentrationen von SMOROP durchgängig unterschätzt werden. Bis zum 14. Dezember ist die Übereinstimmung zwischen Prognose und Messung sehr gut, danach sind in der Meßreihe eine große Anzahl von kurzzeitigen Spitzenwerten zu finden, die von den Rechnungen nicht in derselben Größenordnung reproduziert werden.



**Abb. 4.2:** Darstellung des Verlaufs von (a) Temperatur, (b) Windgeschwindigkeit und (c) Windrichtung für Dresden, Essen und Berlin im Dezember 1992. Diese Werte wurden vom Europa-Modell für den 12 UTC-Termin jeden Tages prognostiziert und während des probeweisen Routinebetriebs von SMOROP archiviert.

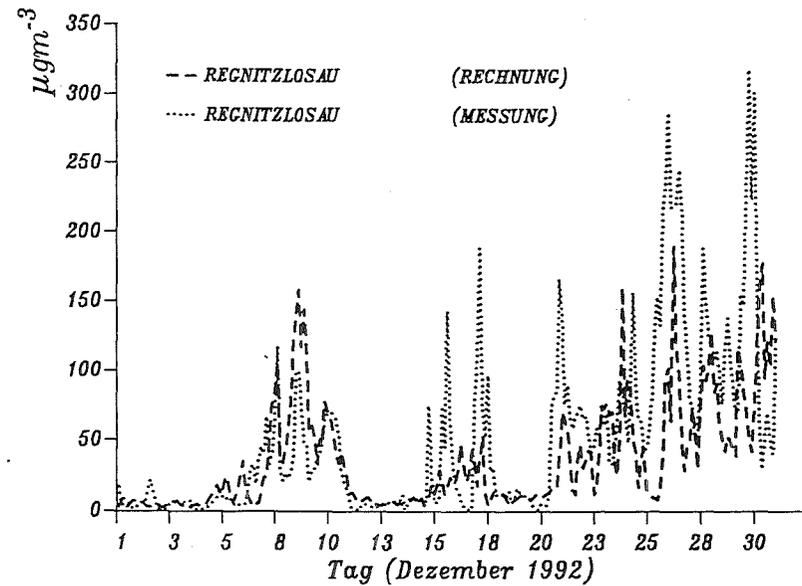
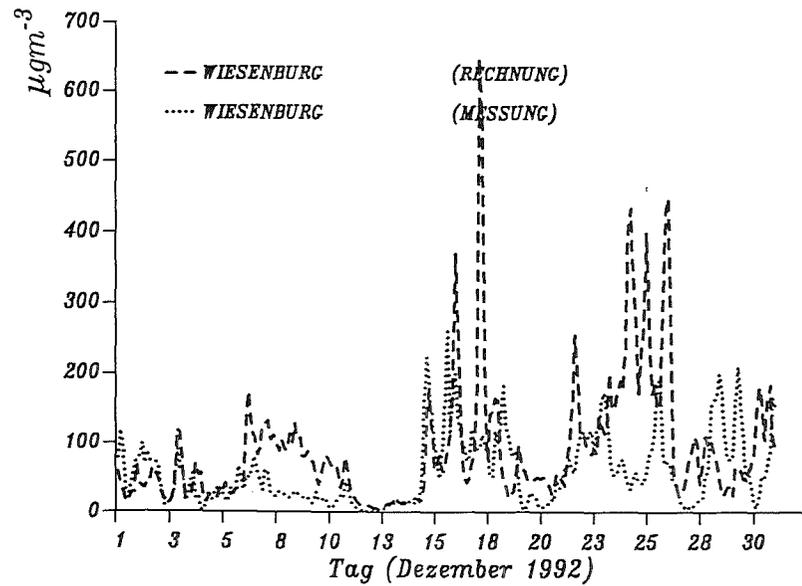
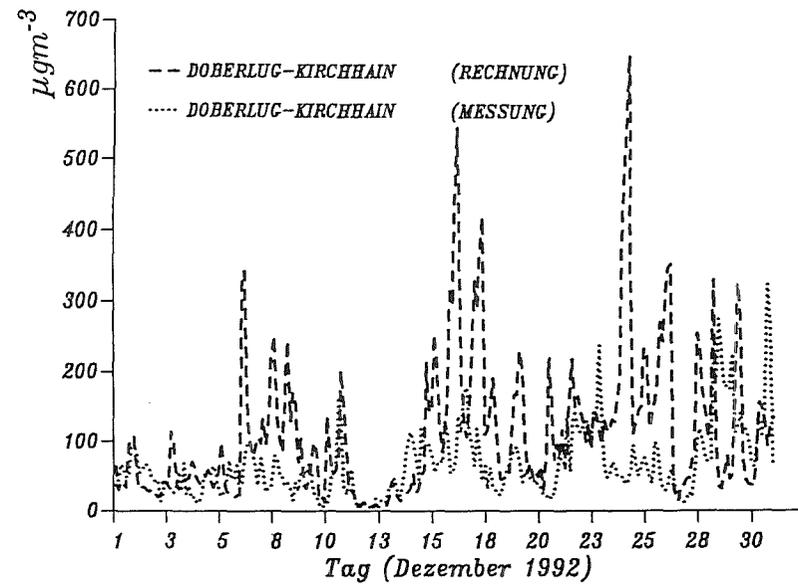
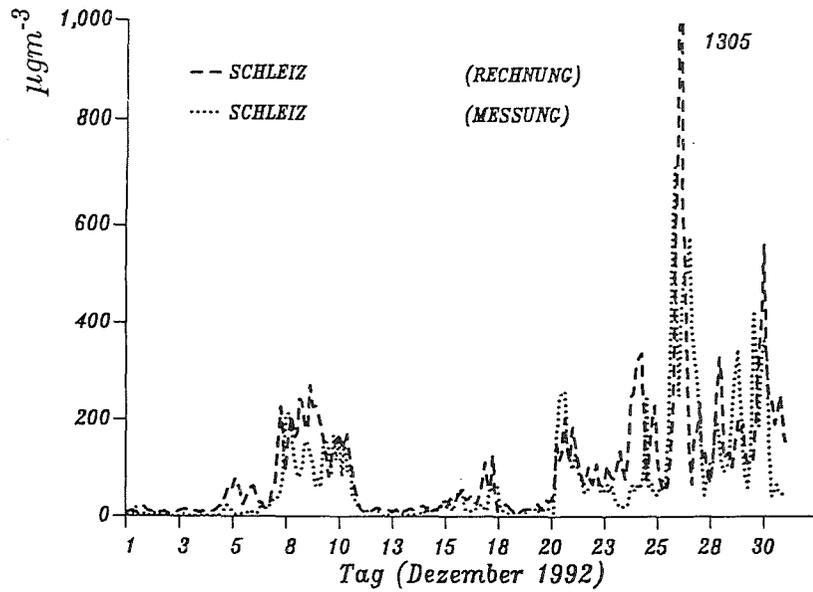


Abb. 4.3: Zeitreihen berechneter und gemessener  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für den Dezember 1992 an den UBA-Stationen Schleiz, Doberlug-Kirchhain, Wiesenburg und Regnitzlosau

#### 4.1.2 Januar 1993

Die Witterung dieses Monats war bis auf kurze Ausnahmen zu Beginn und Ende des Monats durch sehr gute Ausbreitungsbedingungen für luftgetragene Schadstoffe gekennzeichnet. Gegenüber den langjährigen Mittelwerten war der Januar 1993 in Mitteleuropa bis 4,5 K zu warm. Zudem gab es immer wieder Tage mit sehr hohen Windgeschwindigkeiten und Starkniederschlägen. Zu Beginn des Monats setzte sich allerdings die im Dezember begonnene hochwinterliche Phase fort und dauerte bis zum 5. Januar an. Deutschland befand sich dabei am Rande eines kräftigen Hochs, das sich von der Ukraine langsam südwestwärts verlagerte. Durch vor allem in der Höhe recht kräftige Ostwinde wurde kalte Festlandsluft herantransportiert, so daß die Temperaturen nachts vielerorts bis unter  $-15^{\circ}\text{C}$  absanken. Im Raum Thüringen und Sachsen stiegen am 3. Januar auch tagsüber die Temperaturen nicht über  $-10^{\circ}\text{C}$  an. Während es Anfang Januar nur im brandenburgischen Raum eine dünne, vielfach durchbrochene Schneedecke gab, die zudem nach dem 5. Januar völlig verschwunden war, kam es in der Nacht vom 26. auf den 27. Januar während des Durchgangs einer Okklusion vor allem im Osten Deutschlands verbreitet zu Schneefällen. Bis zum Monatsende bildete sich quer über Deutschland ein ca. 100 km breiter Streifen mit 10 bis 40 cm Gesamtschneehöhe. Der Wind drehte nach dem 26. Januar auf östliche Richtungen und die Temperaturen sanken bis Monatsende auf Minimalwerte bis teilweise unter  $-10^{\circ}\text{C}$  ab. Auch tagsüber lagen die Temperaturen verbreitet unter dem Gefrierpunkt.

Im vom Europa-Modell berechneten Zeitverlauf von Temperatur, Windgeschwindigkeit und Windrichtung (Abb. 4.4) spiegelt sich der eben beschriebene Witterungsverlauf deutlich wider. Dasselbe gilt für die Konzentrationsverläufe an den Stationen des Umweltbundesamtes und der mit Hilfe von SMOROP berechneten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen: An allen Stationen werden zu Monatsbeginn hohe Konzentrationen gemessen (und von SMOROP prognostiziert), nach dem 4. Januar folgt eine Periode mit sehr niedrigen Konzentrationswerten bis zum 27. Januar. Danach steigen die Konzentrationen wieder auf Werte an, die mit denen zu Monatsbeginn vergleichbar sind (Abb. 4.5).

Die an der Station **Schleiz** gemessenen  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen schwanken zu Monatsbeginn über einen großen Bereich zwischen 100 und  $400 \mu\text{g m}^{-3}$ . Die Ausschläge bei den berechneten Werten sind dagegen nicht ganz so groß. Zwischen dem 4. und 28. Januar liegen die gemessenen und berechneten Konzentrationen durchweg auf sehr niedrigem Niveau. Die Abweichungen zwischen Meß- und Rechen-

werten sind nur gering. Auch der Verlauf der in Schleiz zum Monatsende gemessenen höheren Konzentrationen wird von SMOROP sehr gut wiedergegeben.

An der Station **Wiesenburg** werden zu Monatsbeginn weit niedrigere  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen gemessen als in Schleiz. Die gemessenen 3-Stunden-Mittelwerte überschreiten nicht  $200 \mu\text{g m}^{-3}$ , die von SMOROP prognostizierten Konzentrationen erreichen dagegen noch Werte um  $300 \mu\text{g m}^{-3}$ . Das Absinken der Konzentrationen auf Werte unter  $50 \mu\text{g m}^{-3}$  geschieht in Wiesenburg später als in Schleiz, zudem sind in den sonst auf ähnlich niedrigem Niveau wie in Schleiz liegenden Konzentrationen zwischen dem 5. und 28. Januar zahlreiche erhöhte Werte zu finden, die bei den Messungen bis zu  $200 \mu\text{g m}^{-3}$  erreichen. Erhöhte Werte werden bis auf zwei Ausnahmen auch von SMOROP berechnet, in ihrer Größenordnung aber unterschätzt. Zum Monatsende steigen die gemessenen Konzentrationen im Vergleich zu den prognostizierten nur sehr langsam an, erreichen dann aber am 30. Januar gleichzeitig mit den Rechenwerten ihren Monatshöchststand.

Der Konzentrationsverlauf an der Station **Doberlug-Kirchhain** ist nicht ganz so eindeutig in die drei Phasen hohe Konzentrationen zu Monatsbeginn, sehr niedrige Konzentrationen in der Monatsmitte und Wiederanstieg der Konzentrationen am Monatsende einzuteilen. Zwar liegen auch hier die Maximalwerte der 3-Stunden-Mittel der Messungen am Monatsanfang und -ende, die Konzentrationen schwanken jedoch auch in der Monatsmitte recht stark und erreichen immer wieder Werte um  $100 \mu\text{g m}^{-3}$ . Die Übereinstimmung zwischen den gemessenen und berechneten Werten ist wesentlich schlechter als an den Stationen Schleiz und Wiesenburg.

Im Gegensatz zu Doberlug-Kirchhain ist der Konzentrationsverlauf an der Station **Herleshausen** wieder wesentlich klarer gegliedert. Die Konzentrationen in der Monatsmitte liegen bei Rechnung und Messung auf sehr niedrigem Niveau und überschreiten nur selten  $20 \mu\text{g m}^{-3}$ . Zu Monatsbeginn und -ende werden wie bei den anderen Stationen auch erhöhte Konzentrationen gemessen und berechnet. Auffällig ist, daß im Gegensatz zu den Stationen in den neuen Bundesländern die "Hintergrundkonzentrationen" eher vom Modell unterschätzt werden (oder zumindest in der gleichen Größenordnung liegen), während die Spitzenwerte überschätzt werden.

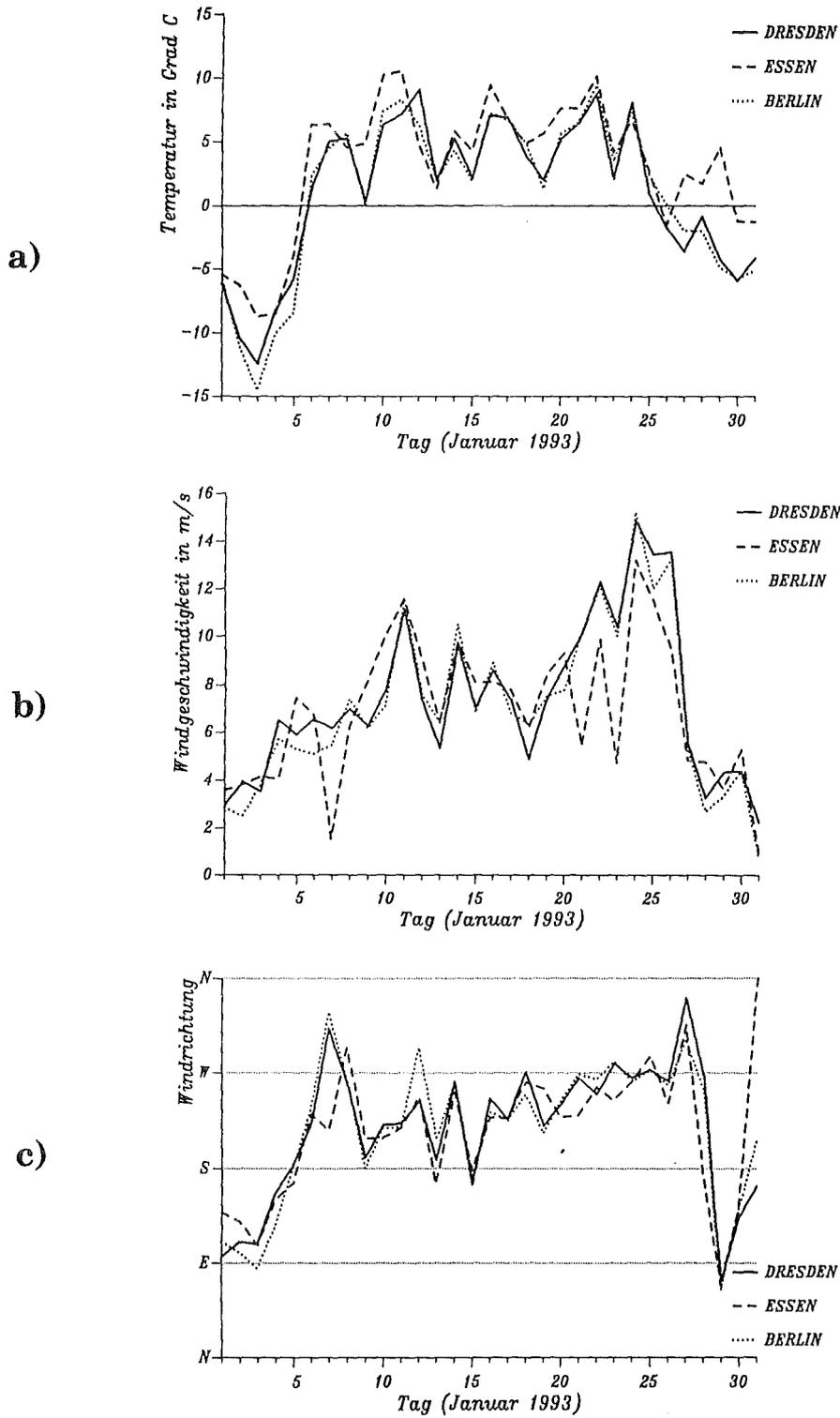


Abb. 4.4: Darstellung des Verlaufs von (a) Temperatur, (b) Windgeschwindigkeit und (c) Windrichtung im Januar 1993 (s. auch Abb. 4.2)

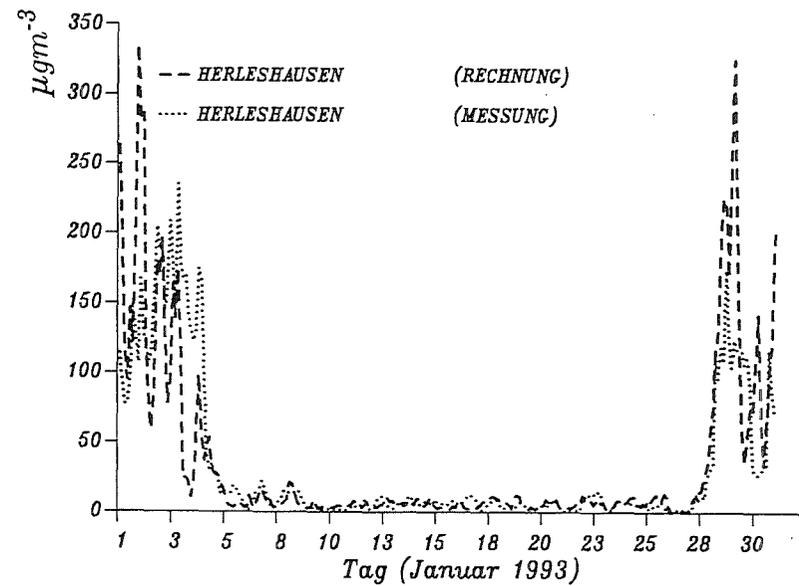
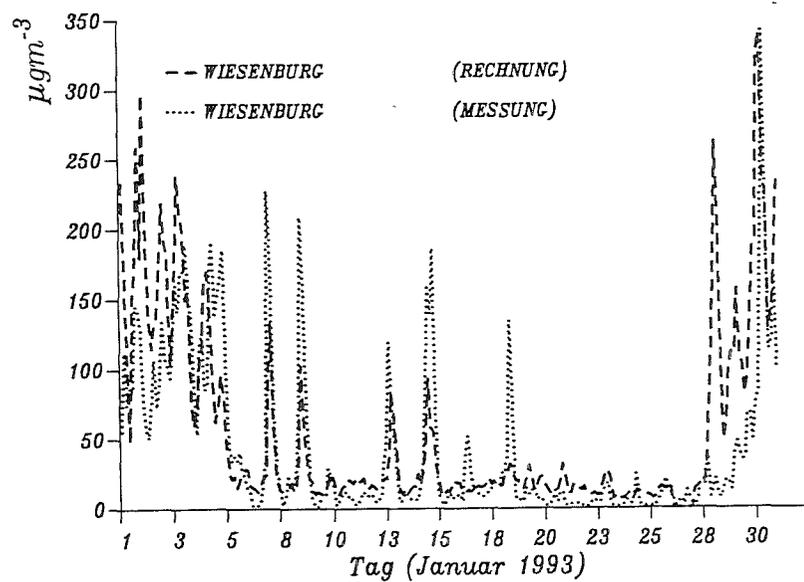
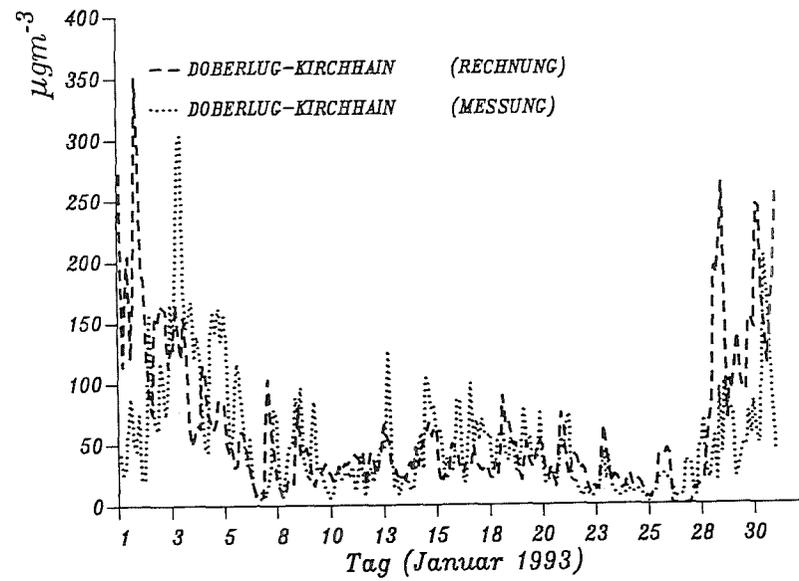
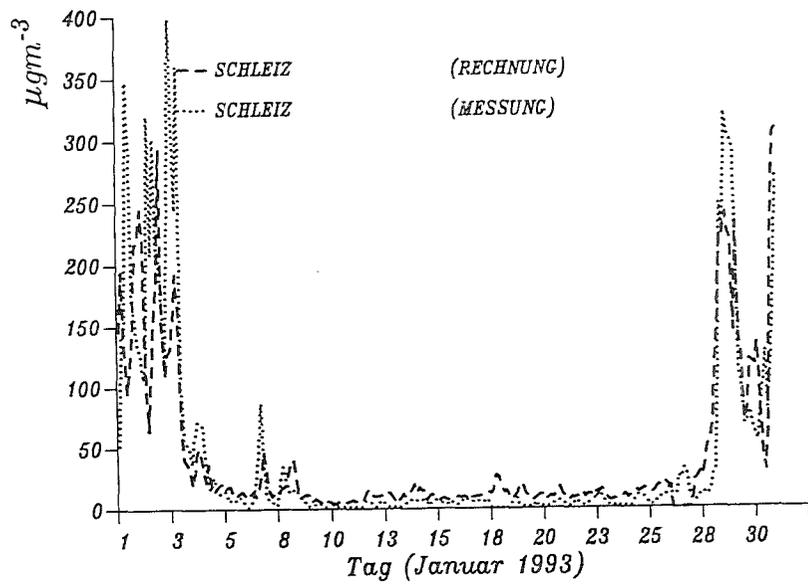


Abb. 4.5: Zeitreihen berechneter und gemessener  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für den Januar 1993 an den UBA-Stationen Schleiz, Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain und Herleshausen

### 4.1.3 Februar 1993

Der Februar des Jahres 1993 war durch antizyklonale Wetterlagen geprägt. Die nächtlichen Temperaturen lagen am Monatsanfang vor allem im thüringischen Raum unter  $-10^{\circ}\text{C}$ , die Tagesmaxima schwankten um den Gefrierpunkt. In den Höhenlagen setzte sich Warmluft durch, so daß in den Mittelgebirgen verbreitet Tagesmaxima bis über  $5^{\circ}\text{C}$  registriert wurden. Bis zum 6. Februar schwächte sich das bis dahin über Deutschland gelegene Hochdruckgebiet immer weiter ab, so daß zwischen dem 6. und 9. Februar immer wieder die Fronten von im Norden Deutschlands vorbeiziehenden Tiefdruckgebieten das Wetter in Deutschland beeinflussen konnten. Zwischen dem 10. und 15. Februar setzte sich wiederum ein von den Britischen Inseln herangezogenes Hochdruckgebiet über Deutschland durch. Es war dabei jedoch nicht ganz so kalt wie zu Monatsbeginn. Die Ausbreitungsbedingungen bis Monatsmitte waren geprägt durch bodennahe Kaltluft, über der fast durchweg wärmere Luft in der Höhe lag, was sich auch deutlich in der Verteilung der Monatsmittel zeigte; mit unterdurchschnittlichen Temperaturen in den Niederungen und höheren Temperaturen und überdurchschnittlichen Sonnenscheindauern in den Mittelgebirgen. Nach dem 15. Februar wanderten immer wieder mit einer nordwestlichen Strömung Kurzwellentröge aus dem grönländischen Raum nach Mittel- und Südeuropa, so daß dort eine hochwinterliche Witterungsperiode begann, die bis zum 10. März anhielt. Eine geschlossene Schneedecke über großen Teilen Deutschlands (mit Ausnahme Nordwestniedersachsens) bildete sich jedoch erst nach dem 20. Februar aus.

Die Zweiteilung des Witterungsablaufes im Februar 1993 zeigt sich bei den Darstellungen der vom Europa-Modell prognostizierten Parameter besonders gut beim Zeitverlauf der Windgeschwindigkeiten (Abb. 4.6b) in der untersten Modellschicht. Bis Monatsmitte herrschten demnach an allen betrachteten Orten niedrige Windgeschwindigkeiten vor. Nach Umstellung der Wetterlage am 15. Februar nehmen die Windgeschwindigkeiten kräftig zu und drehen zunächst auf westliche und dann auf nördliche Richtungen. Nach dem 20. Februar befindet sich Deutschland innerhalb eines ausgedehnten Höhentrogs und bei abnehmenden Windgeschwindigkeiten setzt sich, wie die Darstellung des Temperaturverlaufs zeigt, sehr kalte Luft durch (Abb. 4.6a).

Die UBA-Stationen mit den höchsten über 3 Stunden gemittelten Meßwerten liegen wie auch schon in den Vormonaten in den neuen Bundesländern. An der Station Schleiz werden zu Monatsbeginn  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen über  $700 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  gemessen, in Wiesenburg steigen die Werte kurzfristig bis  $550 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  an, und in

Doberlug-Kirchhain treten des öfteren Konzentrationen um  $400 \mu\text{g m}^{-3}$  auf. Die Station mit den höchsten Konzentrationen in den alten Bundesländern ist Waldhof, wo 3-Stunden-Mittelwerte von  $200 \mu\text{g m}^{-3}$  beobachtet werden. Die höchsten Konzentrationen werden an allen Stationen in der ersten Monatshälfte erreicht, allerdings steigen die gemessenen und von SMOROP prognostizierten Werte nach dem 20. Februar während der oben beschriebenen Troglage wieder leicht an, allerdings nicht auf ganz so hohe Werte wie zu Monatsbeginn. Im einzelnen kann der Verlauf der gemessenen bzw. berechneten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen an den Stationen des UBA folgendermaßen charakterisiert werden (s. Abb. 4.7):

Die höchsten Konzentrationen an der Station **Schleiz** treten bis zum 4. Februar in Form von zwei kurzfristigen Spitzenwerten zwischen  $700$  und  $800 \mu\text{g m}^{-3}$  auf. Die prognostizierten Konzentrationen liegen dagegen weit niedriger und steigen im ersten Fall auf etwa  $250 \mu\text{g m}^{-3}$  an, im zweiten Fall bleiben sie unter  $100 \mu\text{g m}^{-3}$  im 3-Stunden-Mittel. Zwischen dem 5. und 8. Februar steigen die Konzentrationen stetig an, was vom Modell wieder sehr gut nachvollzogen wird. Die in Schleiz zwischen dem 9. und 12. Februar gemessenen hohen Konzentrationen (bis  $500 \mu\text{g m}^{-3}$ ) konnten wegen Rechnerausfalls am 9. Februar und der nachfolgenden Anlaufzeit des Modells nicht korrekt berechnet werden. Nach dem 12. Februar folgen die prognostizierten Konzentrationen wieder im wesentlichen dem Verlauf der gemessenen Werte.

Die bei der Station Schleiz beschriebenen zwei Spitzenwerte zu Monatsbeginn sind auch in den Meßwerten der UBA-Station **Wiesenburg** enthalten. Diese werden jedoch von SMOROP recht gut wiedergegeben. Auch sonst wird der Verlauf der beobachteten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen weit besser modelliert als für den oben beschriebenen Fall der Station Schleiz. Die Lage und Größenordnung von kurzzeitig erhöhten Werten wird bis auf kleine Phasenverschiebungen meist gut getroffen; dies gilt auch für den Verlauf der Konzentrationen auf sehr niedrigem Niveau nach dem 15. Februar und das Wiederansteigen am 25. Februar.

Letzteres gilt auch für die Verhältnisse an der Station **Doberlug-Kirchhain**. Hier gibt es allerdings in der ersten Monatshälfte wieder größere Diskrepanzen zwischen den gemessenen und berechneten Konzentrationswerten. Beide schwanken kräftig zwischen Werten um  $50$  und  $400 \mu\text{g m}^{-3}$  hin und her, die Konzentrationsverläufe sind aber nur selten in Phase. Interessant ist, daß im Falle der Stationen Wiesenburg und Doberlug-Kirchhain die Konzentrationen nach dem Rechnerausfall am 9. Februar im Gegensatz zu den Verhältnissen an der Station Schleiz schnell wieder ansteigen, was auf eine starke Beeinflussung des Verlaufs

der berechneten Konzentrationen durch nahegelegene Verursacher schließen läßt.

Der Konzentrationsverlauf an der Station **Waldhof** ist durch in der Regel unterhalb von  $50 \mu\text{g m}^{-3}$  liegende Werte gekennzeichnet. Dazwischen gibt es kurze Episoden, in denen die berechneten und gemessenen  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen bis über  $200 \mu\text{g m}^{-3}$  ansteigen. Der zeitliche Ablauf dieser Episoden wird von SMOROP gut getroffen, auch wenn die einzelnen Spitzenwerte meist überschätzt werden. Dies entspricht den oben schon für den Januar 1993 beschriebenen Verhältnissen an der Station Herleshausen.

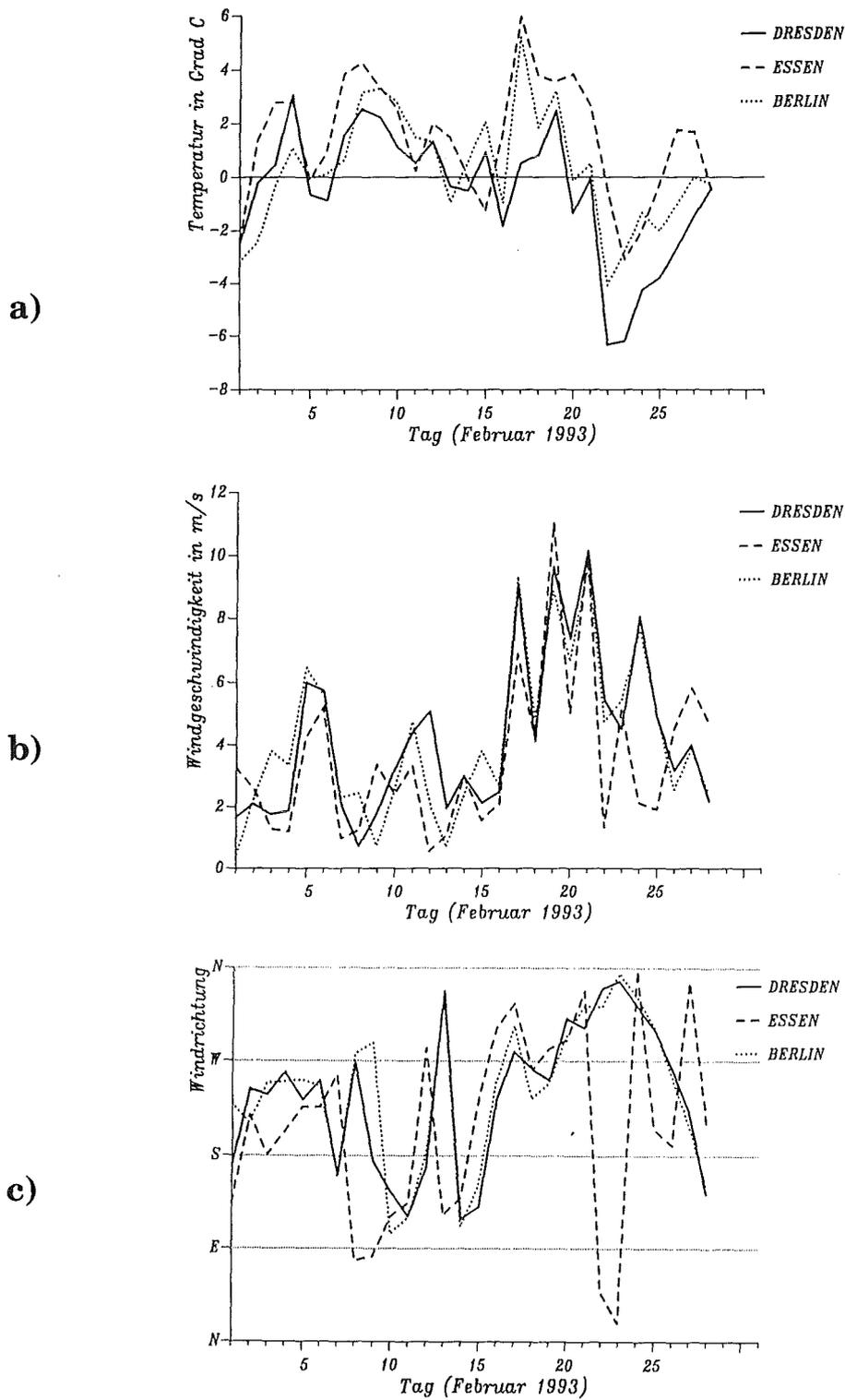


Abb. 4.6: Darstellung des Verlaufs von (a) Temperatur, (b) Windgeschwindigkeit und (c) Windrichtung im Februar 1993 (s. auch Abb. 4.2)

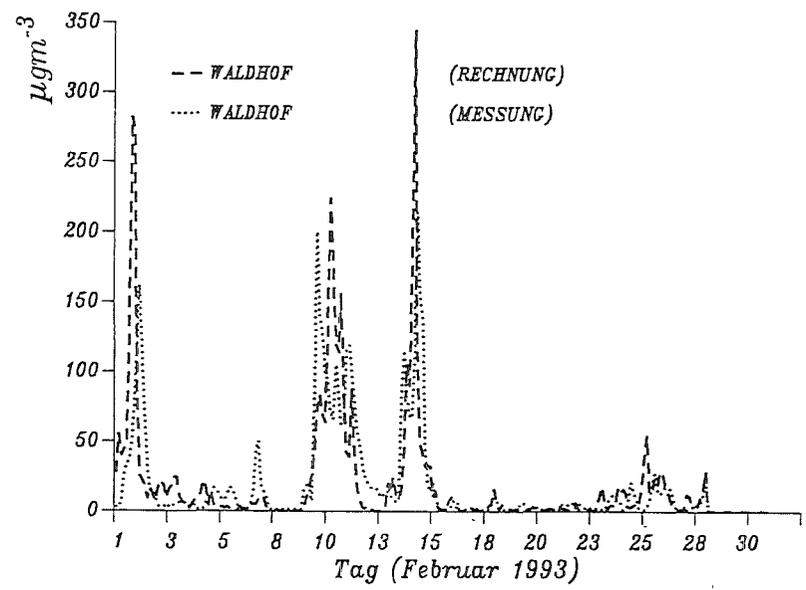
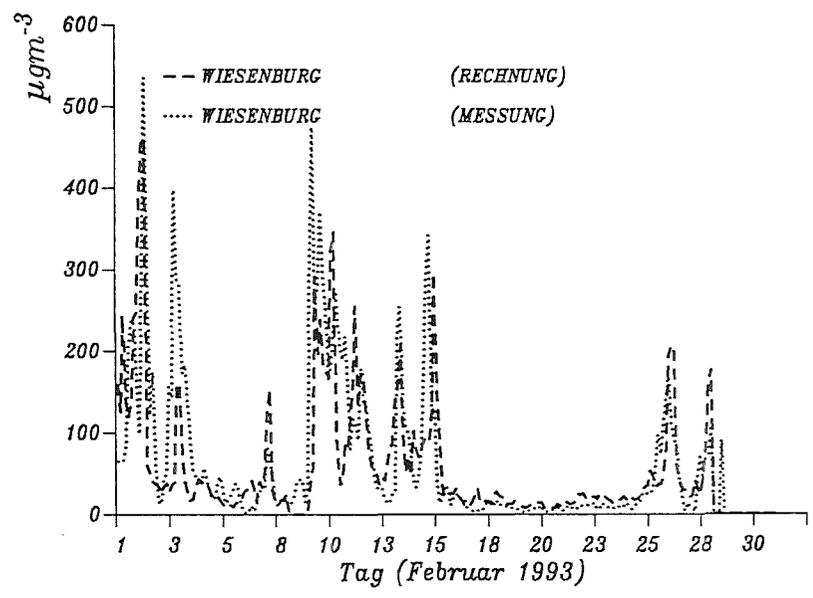
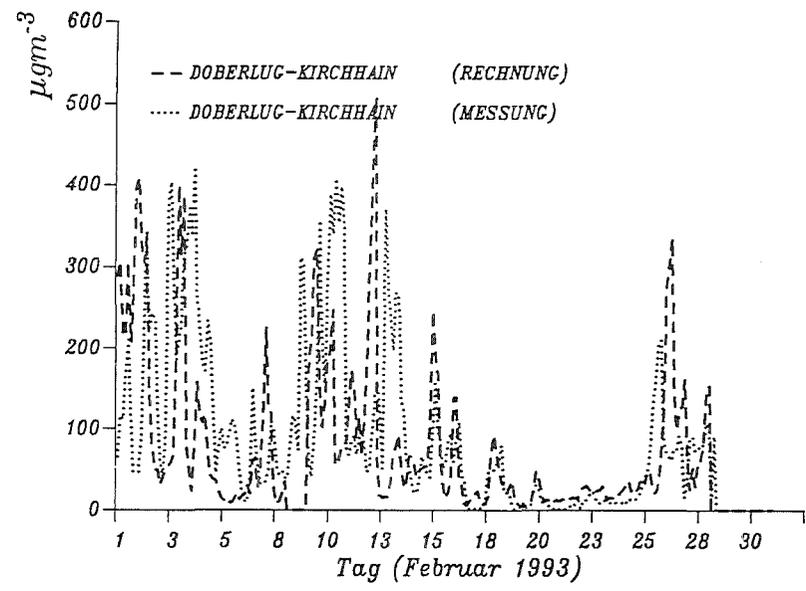
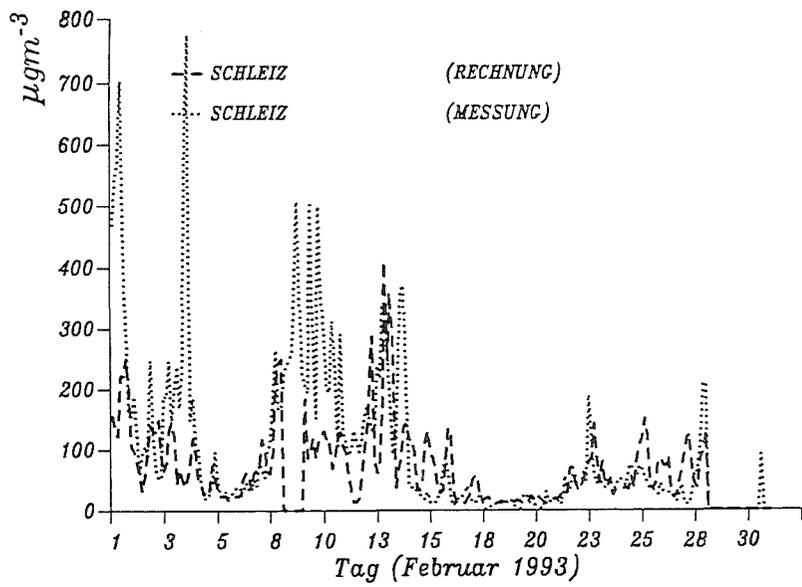


Abb. 4.7: Zeitreihen berechneter und gemessener SO<sub>2</sub>-Konzentrationen für den Februar 1993 an den UBA-Stationen Schleiz, Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain und Waldhof

#### 4.1.4 März 1993

Die im Vormonat eingeleitete hochwinterliche Witterungsphase dauerte bis zum 10. März 1993 an. Neue Schneefälle gab es in Deutschland zwischen dem 5. und 7. März beim Durchzug von Tiefdruckgebieten und ihren Fronten. Danach bildete sich über Westeuropa ein ausgeprägter Hochkeil, der bis zum 15. März zunehmend wärmere Luft nach Deutschland führte. Vor allem im Osten Deutschlands konnte sich die wärmere Luft zunächst nicht bis zum Boden durchsetzen. Allerdings führte die Sonneneinstrahlung bei sich auflösender Schneedecke bald dazu, daß sich die Inversion über der bodennahen Kaltluft abschwächte. Nach dem 15. März war das Wetter beim raschen Durchzug von Kurzwellentrögen wechselhaft, und die unteren Luftschichten waren im Gegensatz zu den Verhältnissen am Monatsanfang gut durchmischt. Nach dem 25. März kam Deutschland während einer Troglage in den Einflußbereich arktischer Kaltluft. Die nächtlichen Temperaturen sanken dabei zum Teil wieder unter  $-5^{\circ}\text{C}$  ab, und im Osten Deutschlands bildete sich eine dünne Schneedecke.

Auch der vom Europa-Modell für SMOROP ausgegebene und in Abbildung 4.8a dargestellte Temperaturverlauf zeigt eine kalte Phase zu Monatsbeginn, stetiges Ansteigen der Temperaturen ab dem 10. und eine erneute Abkühlung nach dem 21. März. Zwischen dem 10. und 23. März weht der Wind der untersten Modellschicht des Europa-Modells an allen drei betrachteten Orten aus westlichen bis südwestlichen Richtungen mit entsprechend positiven Auswirkungen auf die Immissionssituation in Deutschland, sonst aus östlichen bis nördlichen Richtungen (Abb. 4.8b-c). Den Witterungsverhältnissen entsprechend liegen die Konzentrationen bei allen UBA-Stationen vor allem am Monatsbeginn und zum Monatsende auf einem hohen Niveau. Zwischen dem 10. und 21. März werden allgemein niedrigere Konzentrationen beobachtet und berechnet, allerdings sinken die Konzentrationen erst ab dem 15. März auf Minimalwerte ab, da zuvor vielerorts die über der bodennahen Kaltluft liegende Warmluft einen intensiven Austausch und Abtransport der Schadstoffe verhindert.

Die Abbildung 4.9 zeigt wiederum die Zeitreihen der gemessenen und berechneten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen an ausgewählten UBA-Stationen. An der Station **Schleiz** schwanken die gemessenen  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen vom 1. bis zum 3. März um Werte von  $300 \mu\text{g m}^{-3}$ . Bei den Rechnungen dagegen liegen die Konzentrationen zu Monatsbeginn unter  $100 \mu\text{g m}^{-3}$  und steigen erst nach dem 2. März langsam an. Zum 5. März hin fallen dann Rechen- und Meßwerte gleichzeitig für kurze Zeit auf ein niedriges Niveau, steigen dann aber nach dem 6. März wieder an. Gemes-

sene leicht erhöhte Werte werden vom Modell nicht reproduziert, jedoch wird der allgemeine Verlauf gut wiedergegeben. Dies gilt auch für die relativ niedrigen Konzentrationen nach dem 10. März. Nach dem 23. März steigen die Konzentrationen an der Station Schleiz wieder an, was jedoch vom Modell in der Geschwindigkeit des Anstiegs und im Betrag überschätzt wird.

Die an der Station **Wiesenburg** gemessenen Konzentrationen liegen deutlich unter denen in Schleiz und erreichen am 9. bzw. 11. März ihr Maximum von  $200 \mu\text{g m}^{-3}$  im 3-Stunden-Mittel. Diese beiden Werte treten in dem in der Abbildung 4.9 dargestellten Zeitverlauf sehr deutlich bei den Rechenwerten hervor. Prognostiziert wird für den 9. März ein Spitzenwert von  $500 \mu\text{g m}^{-3}$  und für den 11. März von ca.  $350 \mu\text{g m}^{-3}$ .

Der Zeitverlauf an der Station **Doberlug-Kirchhain** ist wie in den Vormonaten durch starke Schwankungen sowohl in den gemessenen als auch in den berechneten Konzentrationen gekennzeichnet. Die Übereinstimmung zwischen den gemessenen und berechneten Werten ist vor allem zu Monatsbeginn recht gut, allerdings hat das Modell Schwierigkeiten, den Zeitpunkt des Eintreffens einzelner Spitzenwerte korrekt zu prognostizieren. Zwischen dem 11. und 14. März werden die in Doberlug-Kirchhain gemessenen Konzentrationen von SMOROP deutlich überschätzt. So steigen die berechneten Konzentrationen bis über  $300 \mu\text{g m}^{-3}$  an, während die Meßwerte unter  $150 \mu\text{g m}^{-3}$  bleiben. Sehr große Abweichungen gibt es auch am 20. März durch ein berechnetes (aber nicht beobachtetes) relatives Maximum von über  $250 \mu\text{g m}^{-3}$ .

Als Vergleichsstation in den alten Bundesländern soll hier wieder **Herleshausen** herangezogen werden, wo im März Konzentrationen knapp unter  $250 \mu\text{g m}^{-3}$  gemessen wurden. Die Konzentrationen in Herleshausen fallen vom 1. bis zum 6. März stetig von einem Wert von  $150 \mu\text{g m}^{-3}$  auf Konzentrationen unter  $20 \mu\text{g m}^{-3}$  ab, was von SMOROP bis auf die extremen Schwankungen in den Rechenwerten zu Monatsbeginn gut wiedergegeben wird. Der Anstieg der Konzentrationen zum 8. März hin wird von SMOROP sehr genau vorhergesagt, allerdings wird das erste Maximum deutlich überschätzt, während die Übereinstimmung zwischen Meß- und Rechenwert beim zweiten Maximum am 9. März wieder sehr gut ist. Ab dem 10. März liegen die gemessenen und - bis auf eine Ausnahme am Anfang des Zeitraums - auch die berechneten Konzentrationswerte unter  $50 \mu\text{g m}^{-3}$ .

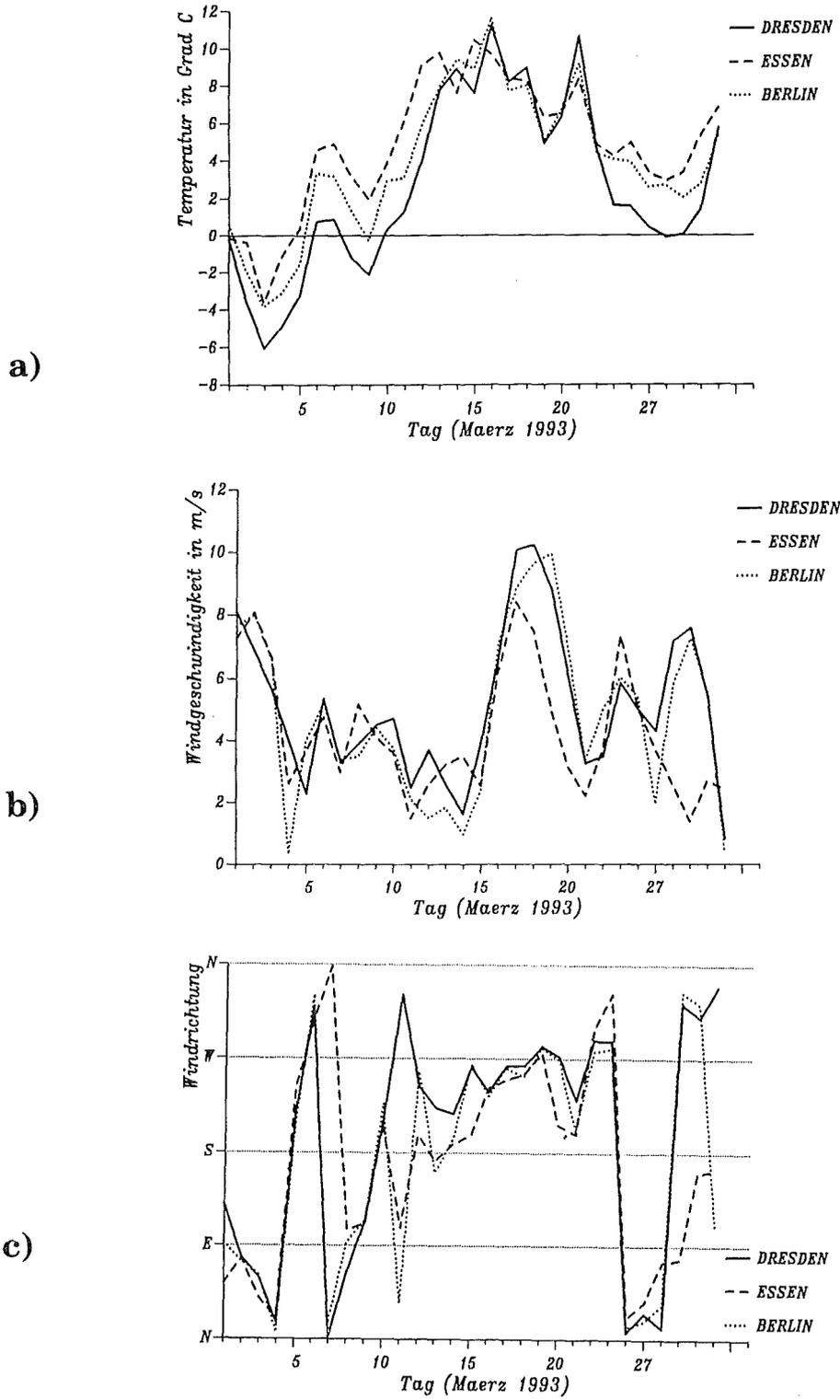


Abb. 4.8: Darstellung des Verlaufs von (a) Temperatur, (b) Windgeschwindigkeit und (c) Windrichtung im März 1993 (s. auch Abb. 4.2)

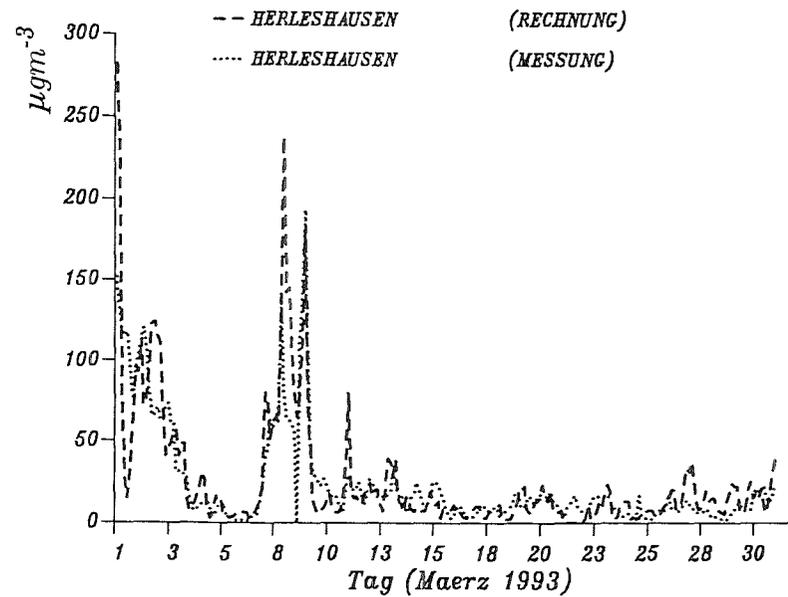
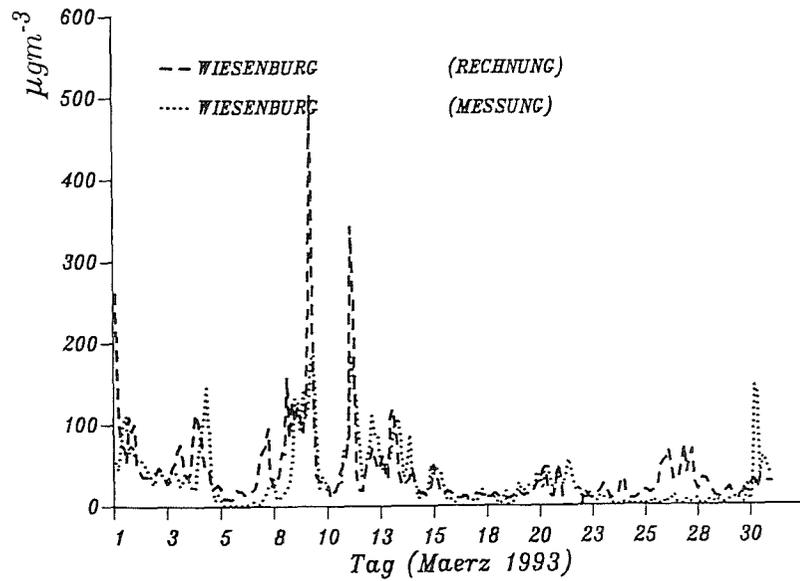
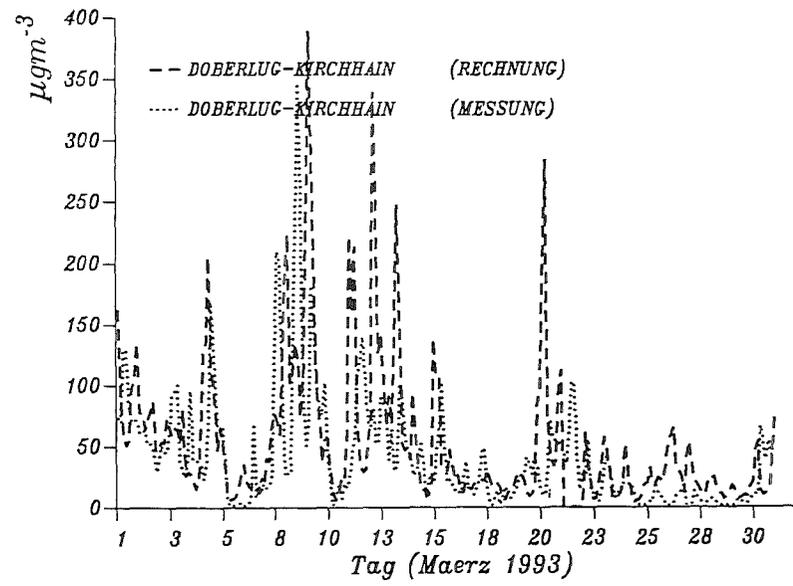
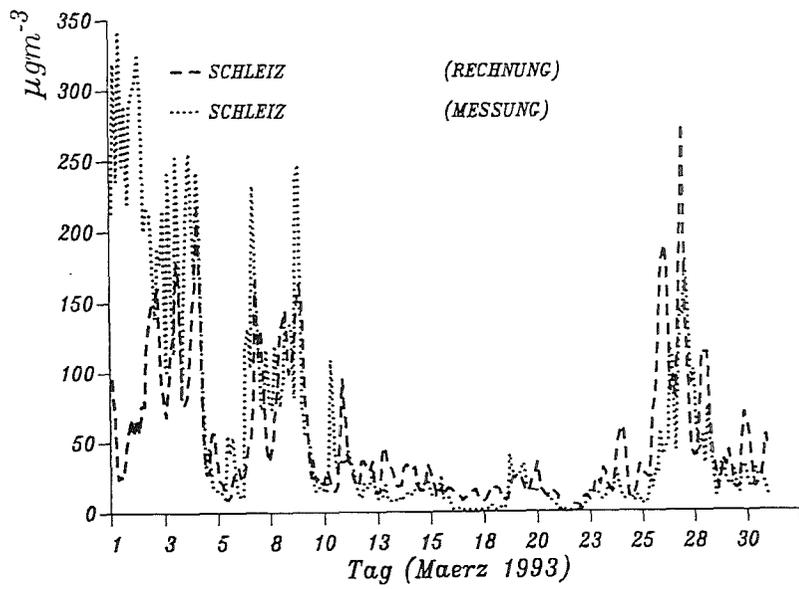


Abb. 4.9: Zeitreihen berechneter und gemessener  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für den März 1993 an den UBA-Stationen Schleiz, Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain und Herleshausen

## **4.2 Die regionale Verteilung gemessener und prognostizierter SO<sub>2</sub>-Konzentrationen (Tagesmittel)**

Die regionale Verteilung der SO<sub>2</sub>-Konzentrationen soll nun für zwei ausgewählte Episoden im Dezember 1992 bzw. im Januar/Februar 1993 anhand von Rasterkartendarstellungen beschrieben werden. Während dieser Episoden kam es nach den im vorangegangenen Abschnitt betrachteten Zeitreihen an den UBA-Stationen zu einem signifikanten Anstieg der gemessenen bzw. prognostizierten Konzentrationen.

Die Rasterkarten der prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen wurden während des probeweisen Routinebetriebes mit SMOROP erzeugt und archiviert. Für den Vergleich mit Meßwerten wurden aus den archivierten 3-Stunden-Mittelwerten Rasterkarten mit Tagesmittelwerten erstellt. Um höhere Konzentrationen besser hervortreten zu lassen und damit die Struktur der Immissionsverteilungen zu betonen, wurden in den Rasterkarten mit den Prognosen alle Konzentrationswerte unterdrückt, die unter 100 µg·m<sup>-3</sup> liegen.

Die Meßwerte wurden für die Darstellung in Rasterkarten folgendermaßen aufbereitet: Zunächst wurden die Stationen des UBA und der Länder SMOROP-Rasterflächen zugeordnet und Tages- und Rastermittelwerte berechnet (letzteres natürlich nur, wenn sich auf einer Rasterfläche mehrere Stationen befinden). Konzentrationswerte für Rasterflächen, auf denen keine Station liegt, wurden durch ein gewichtetes Mittel aus den umliegenden Rasterflächen interpoliert. Wenn vorhanden, wurden für diese Interpolation auch die Konzentrationswerte des vorangegangenen bzw. folgenden Tages herangezogen und mit einem entsprechenden Wichtungsfaktor versehen. Um auch für Raster, in deren Umgebung keine weitere mit einem Wert belegte Rasterfläche lag, Konzentrationswerte berechnen zu können, wurde iterativ vorgegangen.

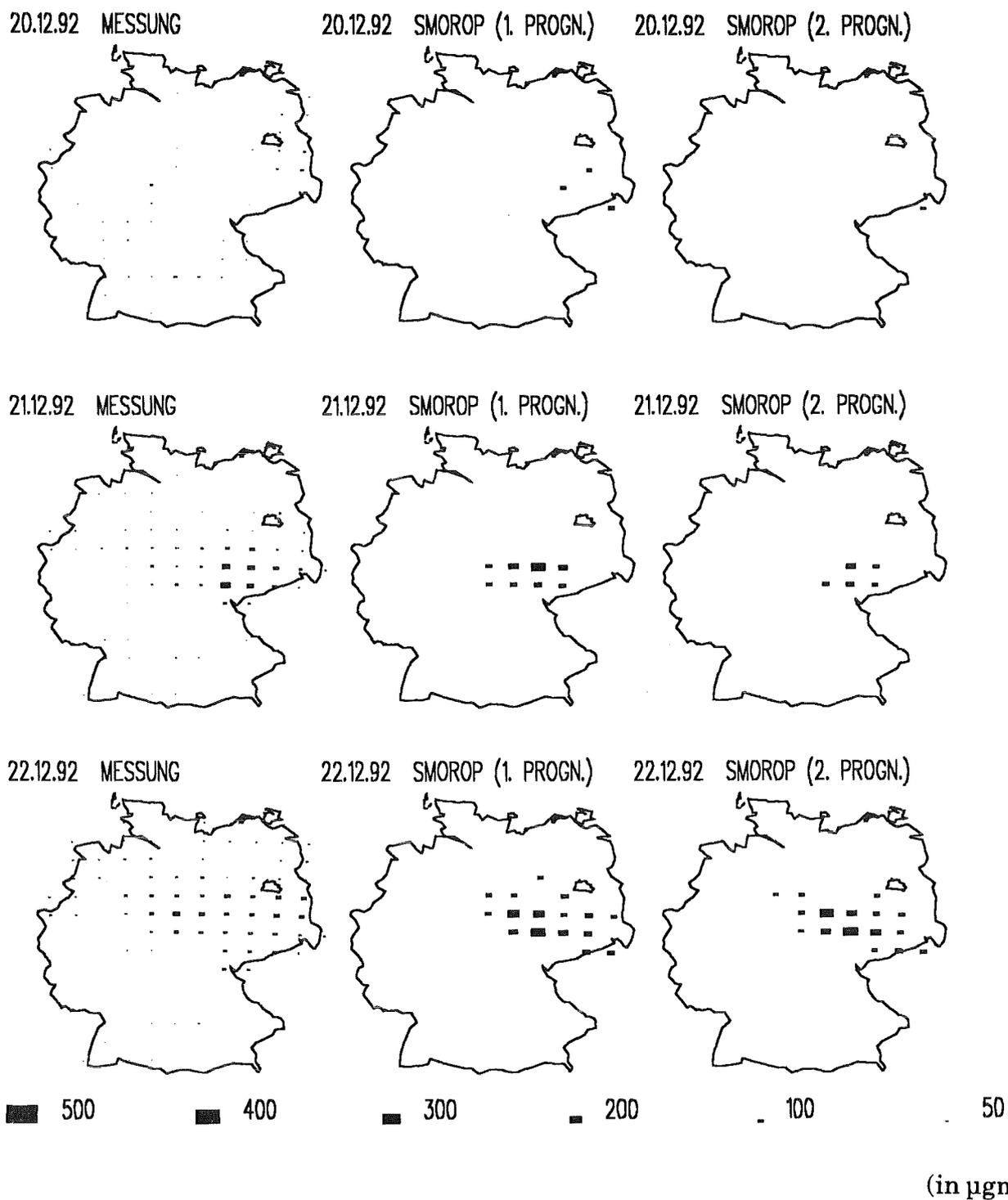
### **4.2.1 Die Episode zwischen dem 20. und dem 27. Dezember 1992**

Die in Abschnitt 4.1.1 beschriebenen Zeitreihen der SO<sub>2</sub>-Konzentrationen an den UBA-Stationen zeigen übereinstimmend einen Anstieg der Werte nach dem 20. Dezember 1992. Davor lagen die Konzentrationen auf einem recht niedrigen Niveau. Die höchsten Konzentrationen werden in den Zeitreihen am 26. Dezember erreicht (z.B. der prognostizierte 3-Stunden-Mittelwert von 1305 µg·m<sup>-3</sup> in Schleiz). Danach sinken die Konzentrationen rasch wieder ab und bleiben kurzfri-

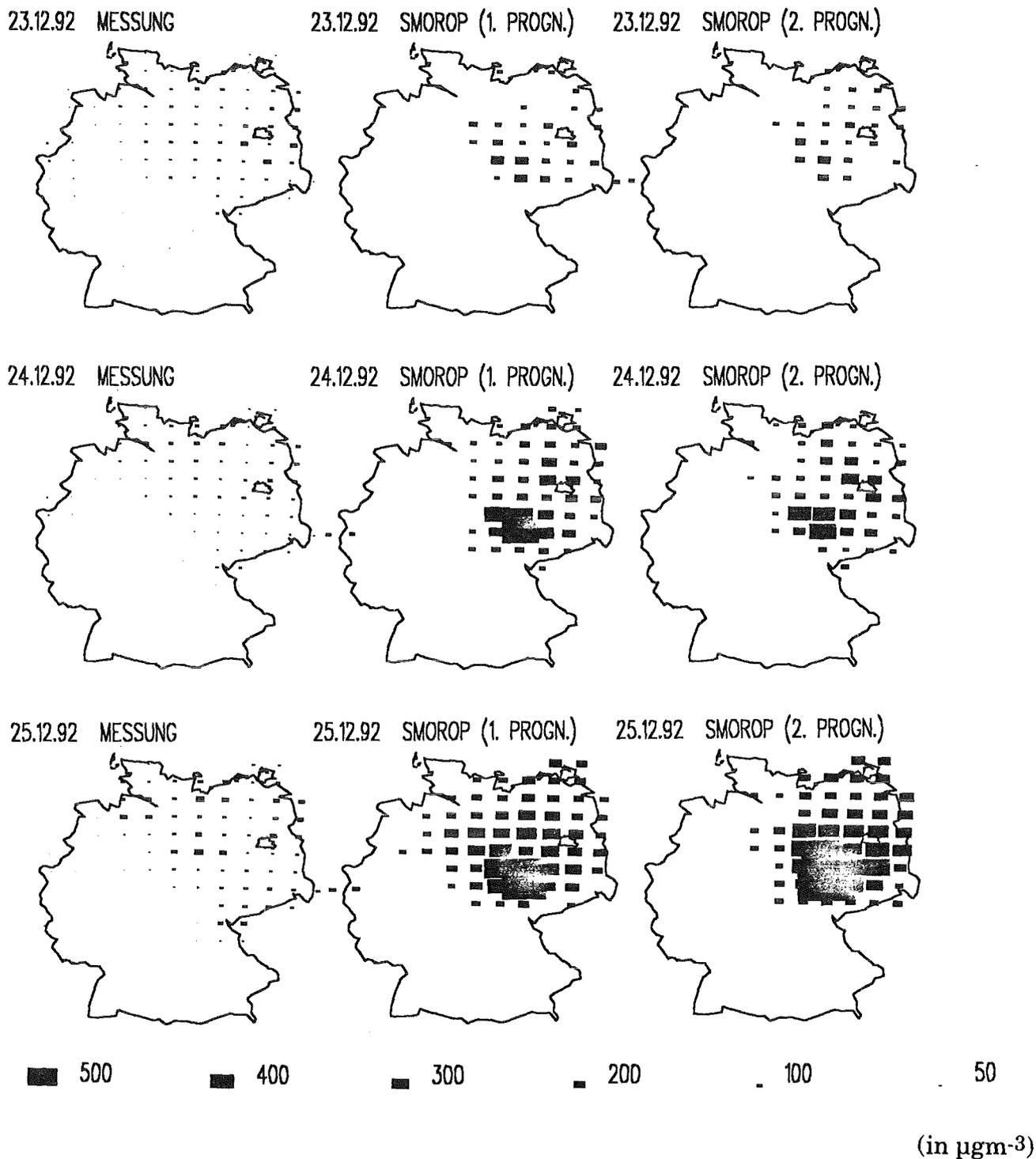
stig bei niedrigen Werten. In Abbildung 4.10 wird die Entwicklung der großräumigen Immissionssituation anhand einer Abfolge von Rasterkarten der für den Zeitraum zwischen dem 20. und 27. Dezember 1992 gemessenen und prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen dargestellt. Neben der Rasterkarte der gemessenen Konzentrationsverteilung werden in dieser Abbildung Rasterkarten der 0...24-stündigen und der 24...48-stündigen Prognosen von SMOROP gezeigt, um einen direkten Vergleich zu ermöglichen.

Die Rasterkarten zeigen für den 20. Dezember noch allgemein niedrige Konzentrationen. Die Tagesmittel der Meßwerte liegen alle unter  $100 \mu\text{g m}^{-3}$ , größtenteils sogar unter  $50 \mu\text{g m}^{-3}$ , bei den Prognosen gibt es vereinzelt Werte zwischen 100 und  $200 \mu\text{g m}^{-3}$ . Dies gilt insbesondere für das Raster der Station Doberlug-Kirchhain, für das als Ausnahme bei den in Abschnitt 4.1.1 dargestellten Zeitreihen auch für die Zeit vor dem 20. Dezember höhere Konzentrationen prognostiziert wurden. Nach dem 20. Dezember steigen die gemessenen und prognostizierten Konzentrationen großräumig an. Die Übereinstimmung der Konzentrationsverteilungen ist recht gut, die Höhe der Werte wird von SMOROP jedoch leicht überschätzt. Während sich die Tagesmittel der Meßwerte zwischen dem 21. und 25. Dezember kaum ändern, wird von SMOROP für den 24. Dezember ein kräftiger Anstieg der Schadstoffkonzentrationen vorhergesagt. In Ostdeutschland sollen danach die  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen auf Werte über  $500 \mu\text{g m}^{-3}$  im Tagesmittel ansteigen, gemessen wurden allerdings nur Konzentrationen unter  $100 \mu\text{g m}^{-3}$ . Die prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen steigen auch nach dem 24. Dezember noch an, während es bei den gemessenen Konzentrationen nur geringfügige Änderungen gibt.

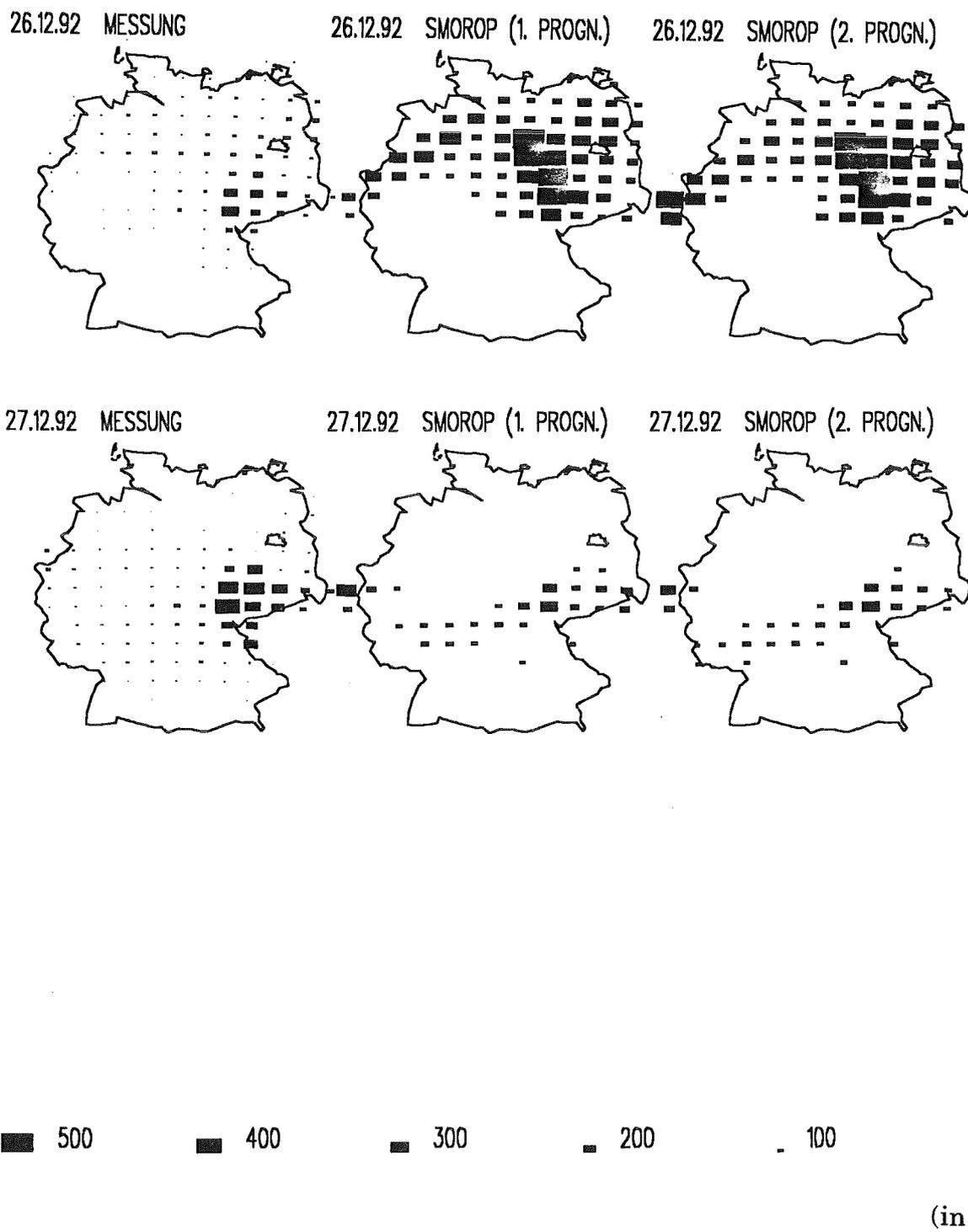
Für den 27. Dezember wird eine starke Abnahme der Konzentrationen von Werten um  $500 \mu\text{g m}^{-3}$  auf Werte meist unter  $300 \mu\text{g m}^{-3}$  prognostiziert. Die gemessenen Konzentrationen steigen dagegen in Ostdeutschland von 100 bis  $200 \mu\text{g m}^{-3}$  am 25. Dezember auf knapp  $500 \mu\text{g m}^{-3}$  am 27. Dezember an. Ein ähnliches Verhalten zeigen auch die folgenden (hier nicht gezeigten) Rasterkarten. Nach einem weiträumigen Absinken der Konzentrationen nach dem 27. Dezember folgt zunächst ein gut prognostizierter Anstieg und anschließend eine Überschätzung der gemessenen Werte. Für den 4. Januar wird das Ende der Episode mit überhöhten Schadstoffwerten prognostiziert, während die gemessenen Konzentrationen noch einmal kräftig ansteigen, um danach wie die prognostizierten Werte auf ein niedrigeres Niveau abzusinken.



**Abb. 4.10:** Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für die Episode zwischen dem 20. und 27. Dezember 1992



**Abb. 4.10:** Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für die Episode zwischen dem 20. und 27. Dezember 1992 (Fortsetzung)



**Abb. 4.10:** Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen für die Episode zwischen dem 20. und 27. Dezember 1992 (Fortsetzung)

#### 4.2.2 Die Episode zwischen dem 28. Januar und dem 5. Februar 1993

Die regionale Verteilung der SO<sub>2</sub>-Konzentrationen während dieses Zeitraums wird in Abbildung 4.11 dargestellt. Der Anstieg der Konzentrationen am 28. Januar beginnt nach einer langen Periode sehr niedriger Konzentrationswerte (s. Abschn. 4.5). Die Rasterkarten für den 27. Januar sind charakteristisch für diese Verhältnisse: Die Tagesmittel der Messungen und Prognosen liegen für alle Rasterflächen unter 100 µgm<sup>-3</sup> und werden im Fall der Prognosekarten nicht dargestellt. Am 28. Januar gibt es im Osten Deutschlands einen leichten Anstieg der Meßwerte auf über 100 µgm<sup>-3</sup> im Tagesmittel, was vom Modell in der Prognose vom gleichen Tag (1. Prognose) korrekt vorhergesagt wird, nicht aber in der Prognose des Vortages. Dagegen ist die Prognose am 28. Januar für den 29. Januar durchaus zutreffend: Die gemessenen Konzentrationen steigen weiter an, und das Gebiet mit den leicht erhöhten Konzentrationen hat sich ausgedehnt. Allerdings werden die gemessenen Konzentrationen vom Modell überschätzt. Die größten Tagesmittel der Meßwerte liegen zwischen 200 und 300 µgm<sup>-3</sup>, während die größten prognostizierten Werte zwischen 300 und 400 µgm<sup>-3</sup> liegen. Diese Situation ändert sich bis zum 31. Januar nur wenig. Am 1. Februar aber beginnen die gemessenen Werte kräftig zu steigen, was von den jeweiligen Prognosen sehr gut erfaßt wird. Zum 2. Februar hin schwenkt die Achse mit den höchsten gemessenen Konzentrationen nach Norden. Diese Drehung macht auch die in den Prognosekarten ausgebildete Schadstofffahne mit, wobei aber gegenüber den Verhältnissen am Vortag abnehmende Konzentrationen prognostiziert werden. Die gemessenen Konzentrationen steigen jedoch im Osten Deutschlands weiter an, wobei sich bis zum 4. Februar das Zentrum mit den höchsten Konzentrationen in die Region um Dresden verschiebt. Zwar werden auch für dieses Gebiet die höchsten Konzentrationen prognostiziert, aber die prognostizierten Werte sind sehr viel kleiner als die tatsächlich beobachteten. Am 5. Februar sinken die im Osten Deutschlands gemessenen hohen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen wieder ab, und am 6. Februar liegen die höchsten über den Tag gemittelten Rasterwerte bei 100 µgm<sup>-3</sup>. Die Rasterkarten mit den Prognosen weisen keine Rasterflächen mit Konzentrationen über 100 µgm<sup>-3</sup> mehr auf.

27. 1.93 MESSUNG



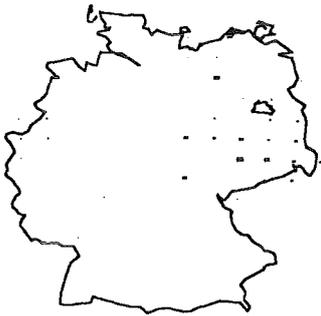
27. 1.93 SMOROP (1. PROGN.)



27. 1.93 SMOROP (2. PROGN.)



28. 1.93 MESSUNG



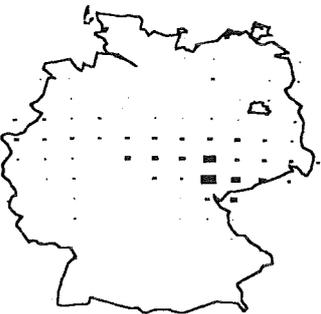
28. 1.93 SMOROP (1. PROGN.)



28. 1.93 SMOROP (2. PROGN.)



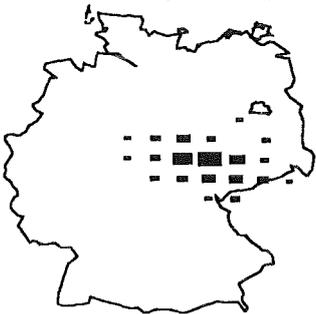
29. 1.93 MESSUNG



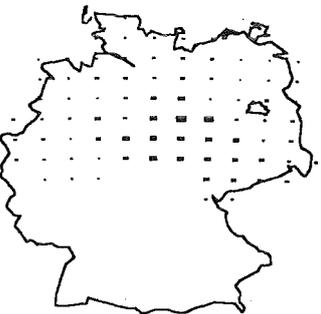
29. 1.93 SMOROP (1. PROGN.)



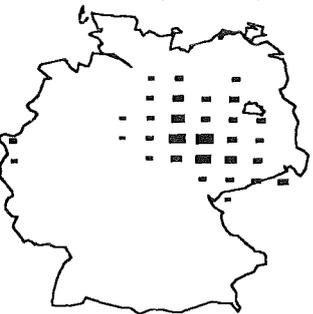
29. 1.93 SMOROP (2. PROGN.)



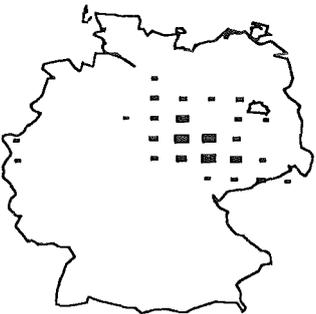
30. 1.93 MESSUNG



30. 1.93 SMOROP (1. PROGN.)



30. 1.93 SMOROP (2. PROGN.)



■ 500

■ 400

■ 300

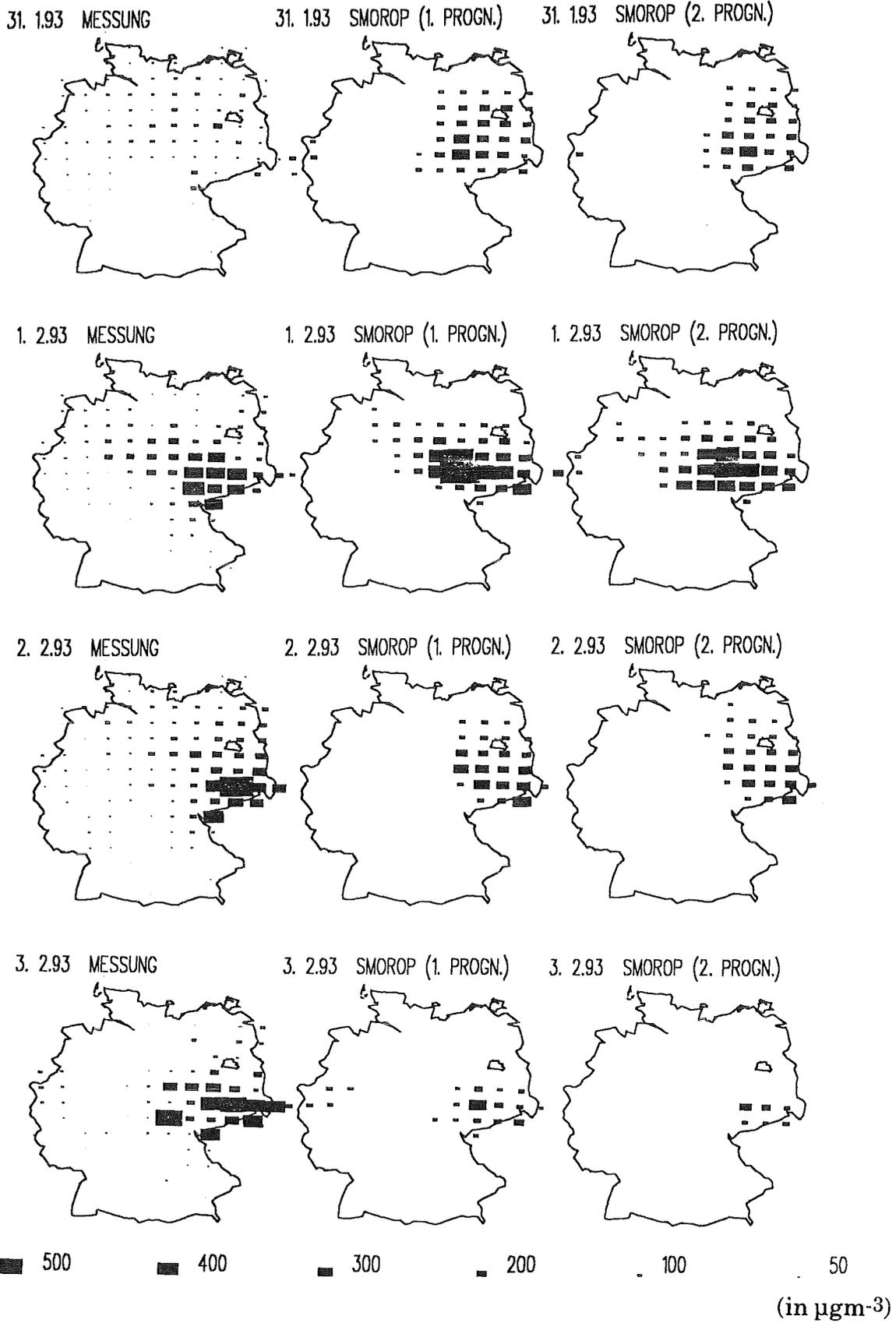
■ 200

■ 100

■ 50

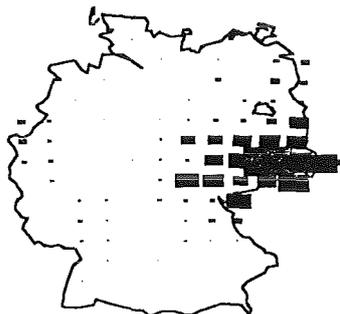
(in  $\mu\text{g m}^{-3}$ )

**Abb. 4.11:** Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für die Episode zwischen dem 27. Januar und 6. Februar 1993

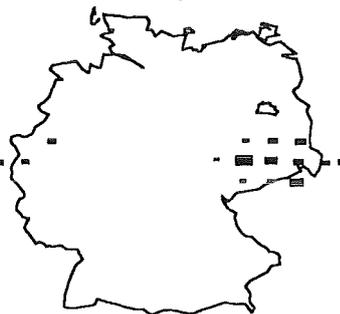


**Abb. 4.11:** Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für die Episode zwischen dem 27. Januar und 6. Februar 1993 (Fortsetzung)

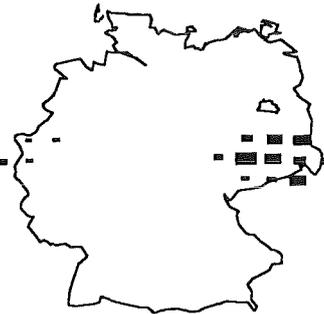
4. 2.93 MESSUNG



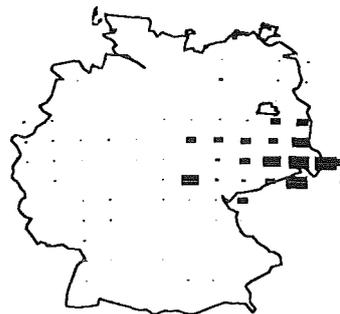
4. 2.93 SMOROP (1. PROGN.)



4. 2.93 SMOROP (2. PROGN.)



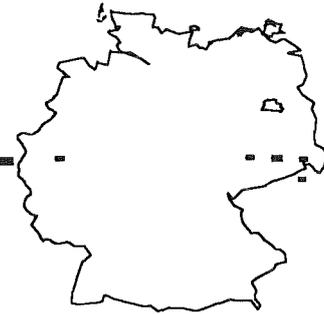
5. 2.93 MESSUNG



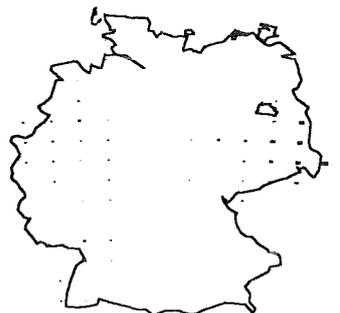
5. 2.93 SMOROP (1. PROGN.)



5. 2.93 SMOROP (2. PROGN.)



6. 2.93 MESSUNG



6. 2.93 SMOROP (1. PROGN.)



6. 2.93 SMOROP (2. PROGN.)



■ 500

■ 400

■ 300

■ 200

■ 100

■ 50

(in  $\mu\text{g m}^{-3}$ )

Abb. 4.11: Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für die Episode zwischen dem 27. Januar und 6. Februar 1993 (Fortsetzung)

### 4.3 Verursacheranalyse für ausgewählte Fälle

Die im folgenden durchgeführte Verursacheranalyse soll insbesondere ein Gefühl dafür geben, wie die von SMOROP prognostizierten und in den vorangegangenen Abschnitten beschriebenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen zustandekommen und welche Fehlerquellen es gibt. Für diese Verursacheranalyse wurden die Zeitreihen an den UBA-Stationen Schleiz und Doberlug-Kirchhain und den dazugehörigen SMOROP-Rasterflächen im Dezember 1992 ausgewählt. Während die Übereinstimmung zwischen den Prognosen und den Meßwerten an der Station Schleiz im Dezember relativ gut ist, gibt es an der Station Doberlug-Kirchhain größere Abweichungen, die durch im Vergleich zu den Meßwerten extrem starke Ausschläge im Verlauf der prognostizierten Konzentrationen verursacht werden.

Die SO<sub>2</sub>-Konzentrationen in einer Rasterfläche setzen sich zusammen aus dem Anteil, der von Quellen in dieser Rasterfläche stammt (Emissions-Eigenanteil), und dem Anteil aus allen anderen Rasterflächen. Der zeitliche Verlauf des Emissions-Eigenanteils, dargestellt in den Abbildungen 4.12a und 4.12b, liefert erste Hinweise auf Unterschiede beim Zustandekommen der für Schleiz und Doberlug-Kirchhain berechneten Konzentrationswerte. Es wird deutlich, daß sich der Emissions-Eigenanteil an den für die Station Schleiz prognostizierten Konzentrationen auf einem wesentlich höheren Niveau befindet als dies bei der Station Doberlug-Kirchhain der Fall ist. Für Schleiz schwankt er, mit wenigen Ausnahmen, die nachfolgend eingehender beschrieben werden sollen, um Werte von 60%. Zu diesem hohen Eigenanteil trägt fast ausschließlich der Sektor Haushalte und Kleinverbraucher (HuK) bei. Auffällig sind die Einbrüche beim Verlauf des Emissions-Eigenanteils während der leicht angehobenen Konzentrationen zwischen dem 8. und 11. Dezember und die kräftigeren Schwankungen nach dem 20. Dezember. Unter 10% sinkt jedoch der Emissions-Eigenanteil an der Station Schleiz nicht ab, ganz im Gegenteil zu den für Doberlug-Kirchhain berechneten Werten. Diese liegen über weite Strecken hinweg unter 10% und erreichen nur während kurzfristiger Spitzenwerte Anteile zwischen 30% und 60%.

Trotz des hohen Eigenanteils in der Rasterfläche Schleiz wird dort weniger emittiert als auf der Rasterfläche Doberlug-Kirchhain. Die Quellen auf letzterer tragen zu 4,5% zu den Emissionen in den neuen Bundesländern bei, während die Quellen auf der Rasterfläche Schleiz nur einen Beitrag von 1,5% liefern. Allerdings gibt es Rasterflächen in unmittelbarer Nähe, wie die der Region zwischen Halle und Leipzig, die mehr als 15% der Emissionen in den neuen Bundesländern enthalten. Tabelle 4.2 zeigt einen Überblick über die Nachbarrasterflächen von

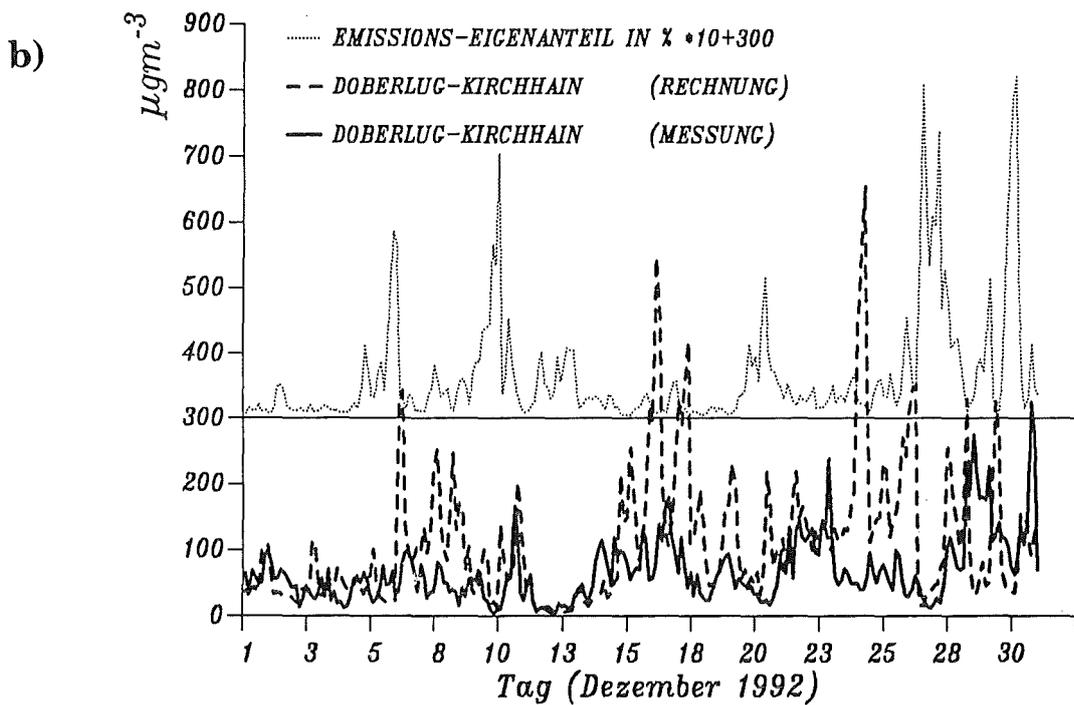
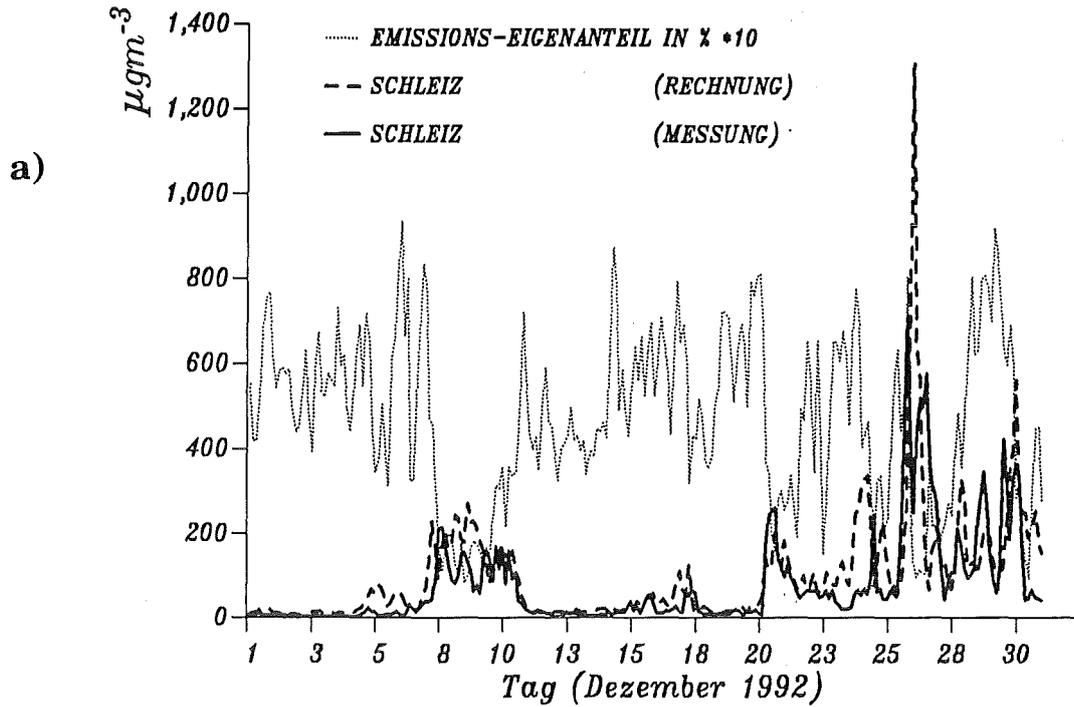


Abb. 4.12: Zeitverlauf des Anteils der auf den Rasterflächen (a) Schleiz und (b) Doberlug-Kirchhain liegenden Quellen an den berechneten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen (Emissions-Eigenanteil). Zur Orientierung wurde zusätzlich die Zeitreihe der berechneten und prognostizierten Konzentrationswerte für beide Stationen eingezeichnet.

		<b>63 (DL)</b>		
			3,5%	
			4,5%	
<b>73</b>	<b>74</b>	<b>75</b>		
16,3%	10,0%	4,5%		
15,1%	11,5%	3,9%		
<b>86 (SZ)</b>	<b>87</b>	<b>88</b>	<b>89</b>	
1,5%	2,1%	9,4%	1,6%	
0,6%	1,2%	10,7%	1,2%	
<b>97</b>	<b>98</b>			
0,9%	4,7%			
0,7%	4,7%			

**Tab. 4.2:** SMOROP-Rasterflächen im Bereich der UBA-Stationen Schleiz (SZ) und Doberlug-Kirchhain (DL). Die Zahlen in den Kästchen bedeuten:

obere Zahl: Raster-Nummer  
 mittlere Zahl: Anteil an den Gesamtemissionen der neuen Bundesländer  
 untere Zahl: Anteil an den Emissionen aus Quellen mit Kaminhöhen kleiner als 100 m (ebenfalls bezogen auf die neuen Bundesländer)

Schleiz und Doberlug-Kirchhain, die in der folgenden weitergehenden Verursacheranalyse erwähnt werden. Außer den Raster-Nummern sind in dieser Tabelle auch die Anteile der auf den jeweiligen Rasterflächen liegenden Quellen an den Gesamtemissionen der neuen Bundesländer angegeben und zusätzlich die Anteile von Quellen mit Kaminhöhen unter 100 m an den Gesamtemissionen der entsprechenden Emittentenklassen. Den größten Anteil an den Emissionen in dieser Aufstellung liefern die Rasterflächen 73 und 74 mit über 36% der Gesamtemissionen in den neuen Bundesländern. In diesen Rasterflächen, genau zwischen den Stationen Schleiz und Doberlug-Kirchhain gelegen, sind alle Emissionen in der Region südwestlich von Halle und um Leipzig zusammengefaßt. Knapp 15% tragen zusätzlich die Rasterflächen 75 und 88 bei. Verantwortlich für diesen ebenfalls recht hohen Anteil sind Emittenten im Großraum Dresden.

Der Anteil der eben beschriebenen Emittenten an den für die beiden betrachteten Stationen berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen soll nun zunächst für die Station *Schleiz* untersucht werden. Ausgesucht wurde dazu die Episode zwischen dem 8. und 11. Dezember und der Zeitraum mit einer Spitzenkonzentration von 1306 µg·m<sup>-3</sup> am 26. Dezember zwischen 21 und 24 UTC.

Der erste Anstieg der berechneten Konzentrationen während der ersten Episode erfolgt um 0 UTC des 8. Dezember, wozu die Quellen auf der Rasterfläche *Schleiz* selbst noch zu über 40% beitragen. Weitere Quellen sind in der Rasterfläche 98 südöstlich von *Schleiz* zu finden. Danach sinkt der Eigenanteil schnell auf Werte unter 20% ab, und *Schleiz* wird nach den Rechnungen vor allem durch östlich gelegene Quellen beeinflusst (Rasterflächen 87 und 88). Die HuK-Emissionen aus Rasterfläche 87 tragen zu über 30 % zu den Immissionen in *Schleiz* bei. Die Beeinflussung durch die Rasterflächen 87 und 88 dauert von 6 UTC bis 24 UTC des 8. Dezember an. Bis zum 11. Dezember wird *Schleiz* dann vor allem durch Emissionen in den Rasterflächen 73, 74 und 64 beeinflusst. Diese Rasterflächen liegen nördlich bis nordöstlich von *Schleiz* und enthalten alle Emittenten der Region *Halle/Leipzig*. Wie schon am 8. Dezember sind es vor allem die Emissionen aus Kaminhöhen unter 100 m (einschließlich des Sektors HuK), die die Immissionssituation während dieser Zeit in *Schleiz* prägen.

Der extreme Anstieg am 26. Dezember, dem ein, wenn auch weniger ausgeprägter, Anstieg in den Messungen entspricht, wird hauptsächlich (zu 45%) durch Emissionen der Rasterfläche 73 verursacht. Wie die Tabelle 4.3, in der alle Quellen mit Anteilen über 1% an den Immissionen am 26. Dezember in *Schleiz* zusammengefaßt sind, zeigt, liegen nahezu alle Kaminhöhen unter 100 m. Sehr stark vertreten ist dabei der Sektor HuK. Bezeichnenderweise liegen die beiden Quellen mit Kaminhöhen über 100 m in größerer Entfernung von *Schleiz*.

Stellvertretend für die große Anzahl von kurzzeitig stark erhöhten Werten, die den Verlauf der prognostizierten Konzentrationen an der Station *Doberlug-Kirchhain* charakterisieren, sollen hier nur alle diejenigen näher untersucht werden, deren Wert über 300 µg·m<sup>-3</sup> lag. Zum erstenmal der Fall ist dies in der Nacht zum 7. Dezember 1992. Der 3-Stunden-Mittelwert der Prognose steigt hier bis auf 342 µg·m<sup>-3</sup> an. 70% der berechneten Immissionen werden durch Quellen in den Rasterflächen 73 und 74 verursacht, die südwestlich von *Doberlug-Kirchhain* liegen. In diesen Rasterflächen sind alle Emissionen in der Region südwestlich von *Halle* und um *Leipzig* zusammengefaßt. Allein die HuK-Emissionen *Leipzigs* und anderer Städte in Rasterfläche 74 tragen 28% zu den berechneten Immissionen bei.

Rasterfläche	Anteil an den Immissionen in Schleiz	Emittentenklasse	Kaminhöhe in m
73	8%	6	90
73	8%	8	50
73	27%	8	50
73	2%	9 (HuK)	20
74	8%	9 (HuK)	20
86	10%	9 (HuK)	20
87	15%	9 (HuK)	20
*	5%	0	300
*	1%	2	155

Tab. 4.3: Der Beitrag verschiedener Quellen zu den berechneten Immissionen am 26. Dezember 1992 in Schleiz

\* Lage außerhalb des in Abbildung 2.7 dargestellten Empfängerrasters

Ähnliches gilt für den Anstieg in der Nacht vom 16. auf den 17. Dezember auf Konzentrationen über  $500 \mu\text{g m}^{-3}$ . Hier werden bis zu 13% durch die HuK-Emissionen der Region Leipzig verursacht und zusätzlich bis zu 12% durch HuK-Emissionen aus dem Bereich Chemnitz/Zwickau (Rasterfläche 87). Der Anstieg der berechneten Konzentrationen auf Werte über  $300 \mu\text{g m}^{-3}$ , der um 18 UTC des 16. Dezember stattfindet, wird allerdings durch Quellen verursacht, die mehr im Süden von Doberlug-Kirchhain liegen und nicht dem Sektor HuK entstammen. Allerdings handelt es sich auch hier um Quellen mit geringen Kaminhöhen. Der erneute Anstieg der berechneten Konzentrationen in der folgenden Nacht auf Werte über  $400 \mu\text{g m}^{-3}$  wird zu etwa 50% durch Quellen in der südlich von Doberlug-Kirchhain gelegenen Rasterfläche 75 verursacht, in der sich Leipzig befindet. Zwei Drittel dieser Quellen haben Kaminhöhen von 50 m und darunter.

Für die Nacht vom 24. auf den 25. Dezember werden von SMOROP für Doberlug-Kirchhain Konzentrationen über  $650 \mu\text{g m}^{-3}$  prognostiziert. Wie in den zuvor be-

schriebenen Fällen wird auch dieser Wert durch Quellen mit niedrigen Kaminhöhen (unter 100 m) verursacht. Knapp 15% der berechneten Immissionen sind auf HuK-Emissionen zurückzuführen. Ein Hauptteil der Quellen liegt diesmal im Gebiet südöstlich von Doberlug-Kirchhain zwischen Dresden und Zittau.

Alle hier beschriebenen Fälle haben folgende Gemeinsamkeiten, die besonders im Fall der Station Doberlug-Kirchhain auf Schwierigkeiten von SMOROP bei der Modellierung der Schadstoffausbreitung im Nahbereich hindeuten:

- Die Quellen liegen in unmittelbar benachbarten Rasterflächen (nicht aber in der zur Station gehörenden Rasterfläche!),
- die Spitzenwerte treten in der Nacht auf,
- die Kaminhöhen sind klein.

Das Auftreten von Spitzenwerten in der Nacht bei kleinen Kaminhöhen läßt auf den starken Einfluß der nächtlichen Mischungsschichthöhe schließen. Diese kann in SMOROP in der Nacht bei stabiler Schichtung auf 100 m absinken. Daß dies jedoch im Falle der Station Doberlug-Kirchhain zu einer kräftigen Überschätzung der Meßwerte durch die Prognosen führt und im Fall der Station Schleiz nicht, dürfte vor allem an der geografischen Lage der jeweiligen Station relativ zu den umgebenden Quellen liegen. Hier gibt es außer den Unsicherheiten bei der Modellierung des Transportwindes mehrere Fehlerquellen, die zum einen den Ort der Station selber betreffen (Lage, Einfluß lokaler Windsysteme, etc.) und zum anderen die genaue Lage der Quellen und deren Repräsentation im Modell (Rasterung!).

#### 4.4 Prüfung der Prognosegüte

In den vorangegangenen Abschnitten wurde gezeigt, daß trotz der meist befriedigenden Vorhersage der großräumigen SO<sub>2</sub>-Konzentrationsverteilungen lokal durchaus erhebliche Abweichungen zwischen den prognostizierten Konzentrationen und den Meßwerten auftreten können. Durch die Verursacheranalyse konnten qualitativ einige der Ursachen für diese Abweichungen geklärt werden. Im folgenden soll nun versucht werden, die Güte der Smogprognose quantitativ abzuschätzen.

##### 4.4.1 Vergleich von Meß- und Rechenwerten anhand von Punktwolken

Relativ gute Übereinstimmung zwischen den mit Hilfe von SMOROP prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen und Meßwerten gibt es nach den vorangegangenen Ausführungen an der UBA-Station Schleiz. Abbildung 4.13 zeigt die Punktwolke, die sich ergibt, wenn die 3-Stunden-Mittel der Meßwerte der Station Schleiz gegen die entsprechenden Prognosewerte aufgetragen werden. In dieser Punktwolke sind alle für den Zeitraum Dezember 1992 bis März 1993 berechneten bzw. gemessenen Werte zusammengefaßt. Es wird deutlich, daß sich die Punkte dieser Punktwolke im Bereich niedriger Konzentrationen stark häufen. Höhere Konzentrationen kommen dagegen bei Rechnung und Messung relativ selten vor. Um systematische Abweichungen auch im Bereich niedriger Konzentrationen etwas besser hervortreten zu lassen, wurden zusätzlich die logarithmierten Werte von Rechnung und Messung gegeneinander aufgetragen. Die in Abbildung 4.14 dargestellte Punktwolke zeigt, daß im Fall der Station Schleiz vor allem die niedrigen Konzentrationen durch SMOROP überschätzt werden, während hohe Konzentrationen teilweise unterschätzt werden.

Im Gegensatz zu Schleiz weist die Punktwolke der Station Doberlug-Kirchhain eine wesentlich höhere Streuung der Punkte auf (Abb. 4.15). Es gibt eine sehr große Anzahl von Fällen, bei denen die Meßwerte durch die Prognosen stark überschätzt werden, aber auch Fälle, bei denen es zu einer Unterschätzung der Meßwerte kommt, sind nicht selten.

Abbildung 4.16 zeigt für die Station Rottenburg die Schwierigkeiten bei der Bewertung der Prognose von SO<sub>2</sub>-Konzentrationen, die sich über den ganzen Zeitraum hinweg auf einem niedrigem Niveau befinden: Hier häufen sich die gemessenen und prognostizierten Konzentrationswerte in einem Bereich unterhalb von 30 µg·m<sup>-3</sup> und streuen dabei sehr stark.

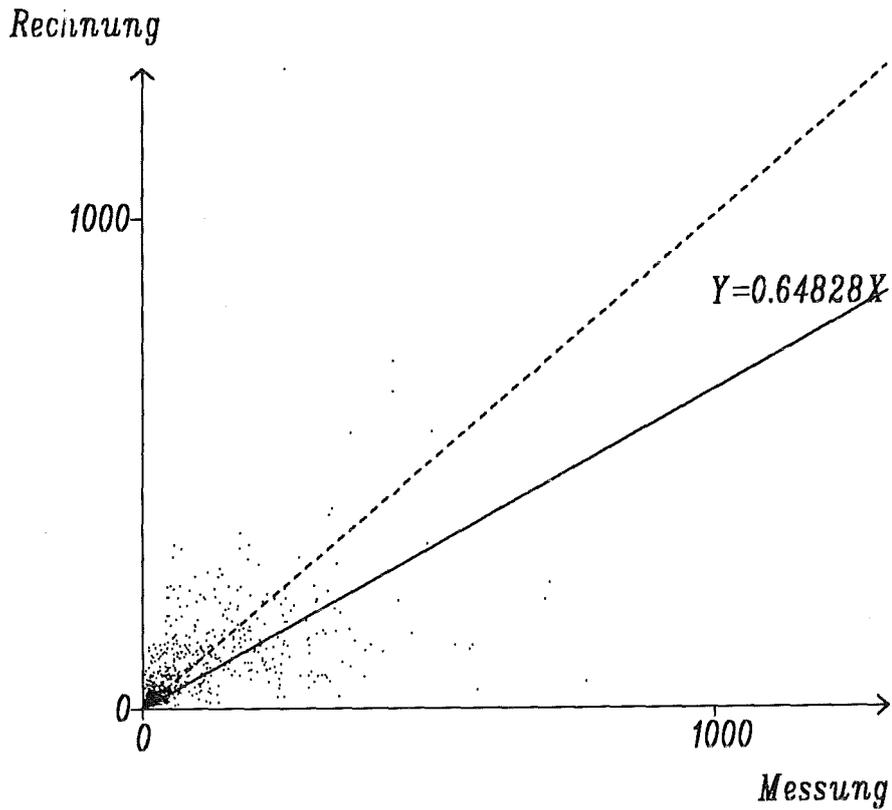


Abb. 4.13: Punktwolke der prognostizierten bzw. gemessenen 3-Stundenmittelwerte an der UBA-Station Schleiz

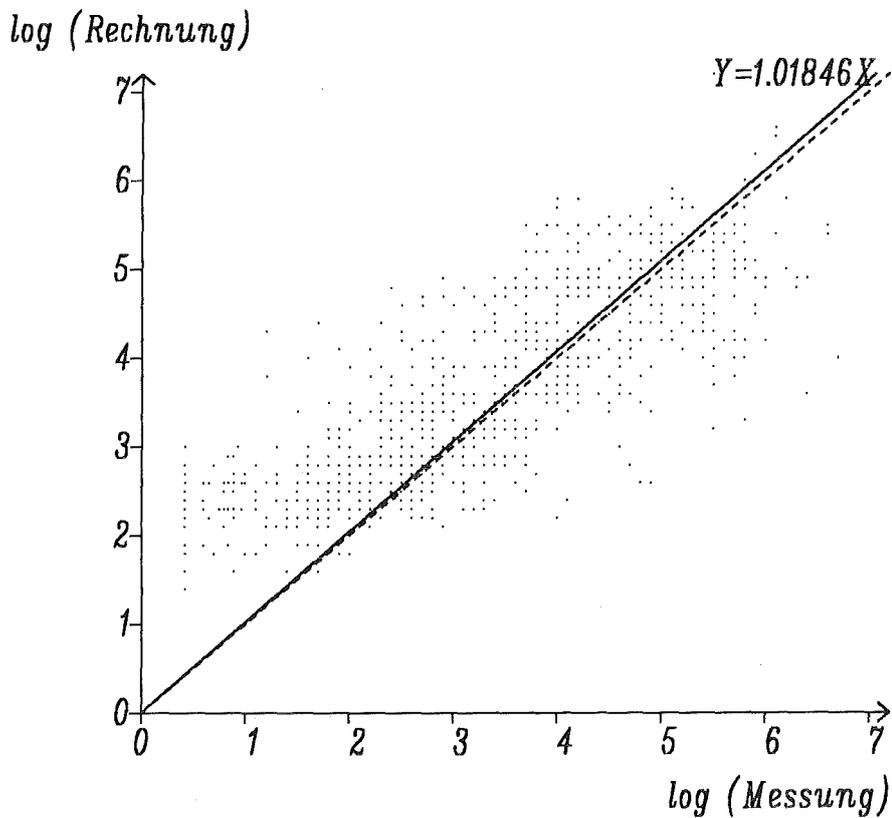


Abb. 4.14: Punktwolke der prognostizierten bzw. gemessenen 3-Stundenmittelwerte an der UBA-Station Schleiz (logarithmiert)

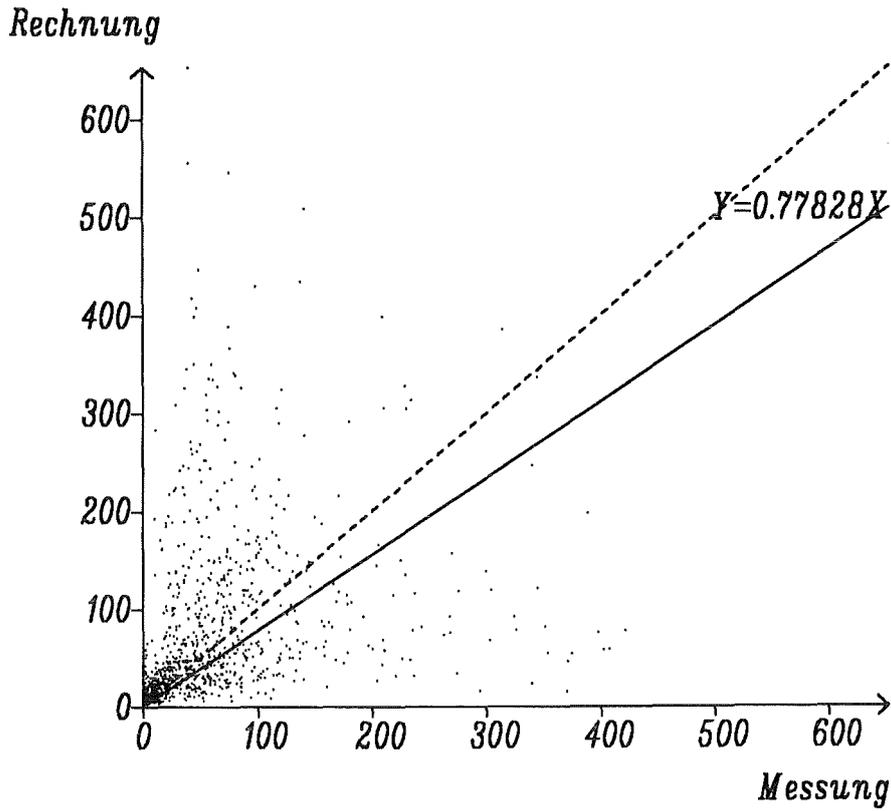


Abb. 4.15: Punktwolke der prognostizierten bzw. gemessenen 3-Stunden-Mittelwerte an der UBA-Station Doberlug-Kirchhain

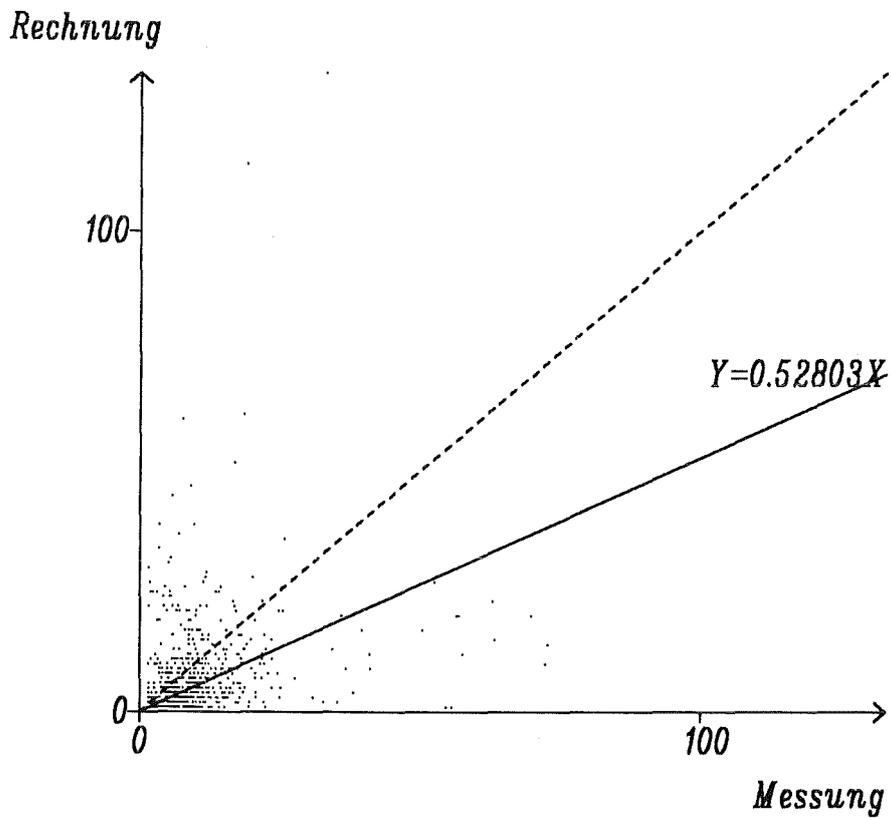


Abb. 4.16: Punktwolke der prognostizierten bzw. gemessenen 3-Stunden-Mittelwerte an der UBA-Station Rottenburg

#### 4.4.2 Korrelationskoeffizienten

Tabelle 4.4 zeigt eine Übersicht über die Korrelationskoeffizienten, die zur Abschätzung der Korrelation zwischen den Zeitreihen der prognostizierten und gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen an den UBA-Stationen berechnet wurden. Grundlage sind die 3-Stunden-Mittel des Zeitraums Dezember 1992 bis März 1993. Die Form der im vorangegangenen Abschnitt für die UBA-Stationen vorgestellten Punktwolken legt nahe, daß wir es nicht mit zweidimensionalen Normalverteilungen zu tun haben. Stattdessen wird angenommen, daß log-normale Verteilungen vorliegen, und der Korrelationskoeffizient wird daher mit Hilfe des natürlichen Logarithmus der Konzentrationswerte berechnet.

	Korrelationskoeffizient	
	1. Prognose	2. Prognose
Brotjacklriegel	0,42	0,42
Rottenburg	0,23	0,18
Ansbach	0,46	0,44
Meinerzhagen	0,45	0,43
Gittrup	0,46	0,46
Teterow	0,74	0,70
Herleshausen	0,78	0,79
Lindenberg	0,57	0,56
Regnitzlosau	0,71	0,73
Wiesenburg	0,70	0,67
Doberlug- Kirchhain	0,59	0,58
Schleiz	0,86	0,86
Lückendorf	0,56	0,53

**Tab. 4.4:** Korrelationskoeffizienten für den Zusammenhang zwischen Meßwerten an den UBA-Stationen und den entsprechenden SMOROP-Prognosen (berechnet aus dem natürlichen Logarithmus der Konzentrationswerte)

Die beste Korrelation zwischen Meß- und Rechenwerten für den betrachteten Zeitraum weist die Station Schleiz auf. Der Korrelationskoeffizient für die 0- bis 24-stündige Prognose beträgt hier 0,86. Dagegen hat die Station Rottenburg mit 0,23

den niedrigsten Korrelationskoeffizienten. Auch andere Stationen in Westdeutschland weisen relativ kleine Korrelationskoeffizienten auf, wogegen die Korrelation zwischen prognostizierten und gemessenen Konzentrationen für die meisten UBA-Stationen Ostdeutschlands sehr gut ist. Sehr gute Korrelationskoeffizienten weisen zudem die Stationen Herleshausen und Regnitzlosau in den alten Bundesländern auf.

Die geringe Korrelation zwischen Prognose- und Meßwerten im Westen Deutschlands weist auf Schwierigkeiten des Modells SMOROP hin, auch Schwankungen von  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen auf sehr niedrigem Niveau korrekt vorherzusagen. Alle Stationen mit Korrelationskoeffizienten unter 0,5 haben nach Tabelle 4.1 in Abschnitt 4.1 sehr kleine 95%-Perzentilwerte (zum Teil weit unter  $50 \mu\text{g m}^{-3}$ ). Interessant allerdings ist der gute Korrelationskoeffizient für die Station Teterow bei ebenfalls relativ niedrigem Konzentrationsniveau. Diese Tatsache und die gute Korrelation zwischen Prognose und Meßwerten bei den Stationen Regnitzlosau und Herleshausen, die ebenso wie Teterow abseits naher Quellen, aber im Einflußbereich der Emissionszentren in Ostdeutschland liegen, deutet auf eine brauchbare Prognose des Ferntransports von  $\text{SO}_2$  durch SMOROP hin.

#### 4.4.3 Kontingenztafeln

Die zusammenfassende Prüfung der Güte von  $\text{SO}_2$ -Prognosen soll hier anhand von Kontingenztafeln erfolgen. Dies kann für alle Rasterflächen anhand von Tagesmittelwerten geschehen und für ausgewählte Rasterflächen im Vergleich mit den Meßwerten der UBA-Stationen anhand der ursprünglichen 3-Stunden-Mittelwerte.

Die Kontingenztafeln für die Tagesmittelwerte des gesamten hier betrachteten Zeitraums (Dezember 1992 bis März 1993) sind in Tabelle 4.5 zusammengefaßt. Die Spalten in diesen Kontingenztafeln enthalten alle Fälle, bei denen die prognostizierten Tagesmittel aller Rasterflächen eine ganz bestimmte Konzentration unter- bzw. überschritten haben. In den Zeilen stehen alle Fälle, in denen die Tagesmittel der Messungen die entsprechenden Konzentrationen unter- bzw. überschritten haben. Untersucht wurde für jeden Tag eines Monats, ob in allen Rasterflächen die  $\text{SO}_2$ -Tagesmittel unter 50, 100 bzw.  $200 \mu\text{g m}^{-3}$  lagen oder ob es mindestens eine Rasterfläche gab, in der ein Wert von 200 bzw.  $500 \mu\text{g m}^{-3}$  überschritten wurde. Die Güte der Prognosen ist um so besser, je mehr Fälle auf der Diagonalen der Kontingenztafeln zu finden sind. Häufen sich die Fälle im Dreieck oberhalb

Dezember 1992 bis Maerz 1993

Prognosenpruefung fuer die erste Prognose:

Messung   V	Prognose ----->					Summe
	alle <50	alle <100	alle <200	ein Wert >200	ein Wert >500	
alle <50	5	3	2	0	0	10
alle <100	3	23	7	1	0	34
alle <200	2	10	19	16	3	50
ein Wert >200	0	1	7	6	3	17
ein Wert >500	0	0	0	7	0	7
Summe	10	37	35	30	6	

Prognosenpruefung fuer die zweite Prognose:

Messung   V	Prognose ----->					Summe
	alle <50	alle <100	alle <200	ein Wert >200	ein Wert >500	
alle <50	6	3	1	0	0	10
alle <100	4	23	6	1	0	34
alle <200	2	14	21	10	3	50
ein Wert >200	0	1	7	8	1	17
ein Wert >500	0	0	1	6	0	7
Summe	12	41	36	25	4	

**Tab. 4.5:** Kontingenztafeln für die Übereinstimmung der von SMOROP prognostizierten Tagesmittelwerte mit den entsprechenden Rasterwerten der gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen

der Diagonalen, so werden die tatsächlich eingetretenen Konzentrationsverhältnisse von der Prognose überschätzt, während eine Häufung im unteren Dreieck auf eine systematische Unterschätzung der gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen durch die Prognosen hinweist. Für die Fälle des Auftretens von Konzentrationen oberhalb der Schwellenwerte von 200 und 500 µg·m<sup>-3</sup> enthalten die Kontingenztafeln keine Aussagen über eine Übereinstimmung des Ortes der maximalen Konzentrationen. Es läßt sich aber zeigen, daß diese Maxima bei Rechnung und Messung in der Regel im Bereich Thüringen, Sachsen-Anhalt und Sachsen liegen.

Eine Betrachtung der Kontingenztafeln in Tabelle 4.5 zeigt, daß grobe Fehlprognosen der großräumigen Immissionsverhältnisse relativ selten sind. Dies gilt für die erste (0- bis 24-stündige) und zweite (24- bis 48-stündige) Prognose. An den meisten der betrachteten 118 Tage liegen die Tagesmittel von Prognose und Messung unterhalb 200 µg·m<sup>-3</sup>. Bei der ersten Prognose sind es 74 Tage (62,7%), bei der zweiten 80 Tage (67,8%). An 24 Tagen finden sich bei den Tagesmitteln der gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen Rasterflächen, bei denen der hier gewählte

Schwellenwert von  $200 \mu\text{g m}^{-3}$  überschritten wird. Für 16 Tage bei der ersten Prognose und 15 Tage bei der zweiten Prognose trifft dies auch für die entsprechenden Prognose-Rasterkarten zu. In den restlichen 8 bzw. 9 Fällen liegen jedoch alle prognostizierten Werte unterhalb des Schwellenwerts. Wie schon in den vorangegangenen Abschnitten bei der Beschreibung der Rasterkarten und des Zeitverlaufs der  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen an den UBA-Stationen angemerkt, werden die gemessenen Konzentrationswerte durch die Prognosen weit häufiger überschätzt als unterschätzt. In den Kontingenztafeln ist dies an der relativ hohen Anzahl von Tagen zu erkennen, für die mindestens ein Rasterwert über  $200 \mu\text{g m}^{-3}$  prognostiziert wurde, alle gemessenen Tagesmittel jedoch unterhalb dieses Wertes blieben. Auffällig ist, daß durch die erste Prognose die tatsächlich eingetretene Immissionssituation häufiger überschätzt wird als durch die zweite Prognose.

In den Tabellen 4.6 und 4.7 sind die Kontingenztafeln für das Eintreffen prognostizierter  $\text{SO}_2$ -Konzentrationswerte an den UBA-Stationen Schleiz, Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain und Herleshausen dargestellt. Anders als bei den gerasternten Tagesmittelwerten wird hier für eine ganz bestimmte Rasterfläche untersucht, ob alle acht 3-Stunden-Mittelwerte eines Tages unterhalb bestimmter Schwellenwerte ( $100, 200$  bzw.  $400 \mu\text{g m}^{-3}$ ) liegen oder ob die Konzentrationen bei Messung oder Rechnung mindestens einmal am Tag  $400, 600$  bzw.  $800 \mu\text{g m}^{-3}$  überschreiten.

Die Güte der Prognosen für die Station Schleiz ist im Vergleich zu den anderen UBA-Stationen sehr hoch: 72% der betrachteten 121 Tage liegen auf der Diagonalen der Kontingenztafel für die erste Prognose. Bei der zweiten Prognose sind es 70%. Sonst wird die eingetretene Situation eher leicht unter- als überschätzt. An drei Tagen bei der ersten und an vier Tagen bei der zweiten Prognose liegen alle prognostizierten Werte unterhalb des Schwellenwertes von  $400 \mu\text{g m}^{-3}$ , während die tatsächlich beobachteten Konzentrationen teilweise über  $600 \mu\text{g m}^{-3}$  liegen.

An der Station Wiesenburg treffen die Prognosen ebenfalls in einer recht großen Anzahl von Fällen ein. Hier liegen im Falle der ersten Prognose 66% aller Tage auf der Diagonalen der Kontingenztafel, bei der zweiten Prognose 67%. Größere Unterschätzungen der 3-Stunden-Mittelwerte der Messungen kommen aber seltener vor als bei der Station Schleiz.

Bei der Station Doberlug-Kirchhain deutet eine Häufung der Fälle oberhalb der Diagonalen in der Kontingenztafel darauf hin, daß die gemessenen  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen häufiger durch die Prognosen überschätzt werden. 57% aller Fälle liegen bei der ersten Prognose auf der Diagonalen, 58% bei der zweiten Prognose.

Station: SCHLEIZ  
alle Monate

Prognosenpruefung fuer die erste Prognose:

Messung		Prognose ----->					Summe	
V		alle<100	alle<200	alle<400	ein Wert>400	ein Wert>600		ein Wert>800
	alle<100	66	9	1	0	0	0	76
	alle<200	1	7	2	0	0	0	10
	alle<400	1	11	13	1	0	0	26
ein Wert>400		0	1	0	1	1	0	3
ein Wert>600		0	1	1	0	0	1	3
ein Wert>800		0	0	0	0	0	0	3
Summe		68	29	17	2	1	1	

Prognosenpruefung fuer die zweite Prognose:

Messung		Prognose ----->					Summe	
V		alle<100	alle<200	alle<400	ein Wert>400	ein Wert>600		ein Wert>800
	alle<100	68	7	1	0	0	0	76
	alle<200	2	6	2	0	0	0	10
	alle<400	2	13	9	2	0	0	26
ein Wert>400		0	1	1	0	0	1	3
ein Wert>600		0	1	0	0	1	1	3
ein Wert>800		0	1	0	0	1	1	3
Summe		72	28	13	2	1	2	

Station: WIESENBURG  
alle Monate

Prognosenpruefung fuer die erste Prognose:

Messung		Prognose ----->					Summe	
V		alle<100	alle<200	alle<400	ein Wert>400	ein Wert>600		ein Wert>800
	alle<100	60	9	2	1	0	0	72
	alle<200	9	11	10	2	1	0	33
	alle<400	2	3	6	0	0	0	11
ein Wert>400		0	0	1	1	0	0	2
ein Wert>600		0	0	0	0	0	0	0
ein Wert>800		0	0	0	0	0	0	0
Summe		71	23	19	4	1	0	

Prognosenpruefung fuer die zweite Prognose:

Messung		Prognose ----->					Summe	
V		alle<100	alle<200	alle<400	ein Wert>400	ein Wert>600		ein Wert>800
	alle<100	62	8	1	1	1	0	73
	alle<200	12	12	7	1	1	0	33
	alle<400	5	2	4	0	0	0	11
ein Wert>400		0	0	0	1	0	0	1
ein Wert>600		0	0	0	0	0	0	0
ein Wert>800		0	0	0	0	0	0	0
Summe		79	22	12	3	2	0	

Tab. 4.6: Kontingenztafeln für die Übereinstimmung der von SMOROP prognostizierten 3-Stunden-Werte mit den entsprechenden an den UBA-Stationen Schleiz (oben) und Wiesenburg (unten) gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen

Station: DOBERLUG-KIRCHHAIN  
alle Monate

Prognosenpruefung fuer die erste Prognose:

Messung		Prognose ----->					Summe	
V		alle<100	alle<200	alle<400	ein Wert>400	ein Wert>600		ein Wert>800
	alle<100	51	6	15	1	1	0	74
	alle<200	5	9	10	2	0	0	26
	alle<400	1	5	7	2	0	0	15
ein Wert>400		0	0	3	0	0	0	3
ein Wert>600		0	0	0	0	0	0	0
ein Wert>800		0	0	0	0	0	0	0
Summe		57	20	35	5	1	0	

Prognosenpruefung fuer die zweite Prognose:

Messung		Prognose ----->					Summe	
V		alle<100	alle<200	alle<400	ein Wert>400	ein Wert>600		ein Wert>800
	alle<100	50	14	7	1	0	1	73
	alle<200	7	14	5	1	0	0	27
	alle<400	5	4	4	1	1	0	15
ein Wert>400		0	1	1	1	0	0	3
ein Wert>600		0	0	0	0	0	0	0
ein Wert>800		0	0	0	0	0	0	0
Summe		62	33	17	4	1	1	

Station: HERLESHAUSEN  
alle Monate

Prognosenpruefung fuer die erste Prognose:

Messung		Prognose ----->					Summe	
V		alle<100	alle<200	alle<400	ein Wert>400	ein Wert>600		ein Wert>800
	alle<100	80	7	3	1	0	0	91
	alle<200	5	9	6	0	1	0	21
	alle<400	0	2	3	0	0	0	5
ein Wert>400		0	0	1	0	0	0	1
ein Wert>600		0	0	0	0	0	0	0
ein Wert>800		0	0	0	0	0	0	0
Summe		85	18	13	1	1	0	

Prognosenpruefung fuer die zweite Prognose:

Messung		Prognose ----->					Summe	
V		alle<100	alle<200	alle<400	ein Wert>400	ein Wert>600		ein Wert>800
	alle<100	83	5	3	0	0	0	91
	alle<200	9	6	5	0	1	0	21
	alle<400	1	0	5	0	0	0	6
ein Wert>400		0	0	0	0	0	0	0
ein Wert>600		0	0	0	0	0	0	0
ein Wert>800		0	0	0	0	0	0	0
Summe		93	11	13	0	1	0	

**Tab. 4.7:** Kontingenztafeln für die Übereinstimmung der von SMOROP prognostizierten 3-Stunden-Werte mit den entsprechenden an den UBA-Stationen Doberlug-Kirchhain (oben) und Herleshausen (unten) gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen

Bei der Kontingenztabelle der Station Herleshausen zeigen sich wieder deutlich die Schwierigkeiten bei der Prüfung von Smogprognosen, wenn während des betrachteten Zeitraums kaum Fälle mit hohen Konzentrationen beobachtet wurden. An 80 (bzw. 83) von 118 Tagen liegen die gemessenen und prognostizierten Konzentrationen im 3-Stunden-Mittel unterhalb 100 µgm<sup>-3</sup>, nur an einem Tag wurden Konzentrationen über 400 µgm<sup>-3</sup> gemessen. Die prognostizierten Konzentrationen für diesen Tag liegen zwischen 200 und 400 µgm<sup>-3</sup>. Ansonsten werden auch für Herleshausen die Konzentrationen durch die Prognosen eher überschätzt.

Die zusammenfassende Kontingenztabelle für 13 ausgewählte Stationen aus dem UBA-Meßnetz (Tab. 4.8) zeigt wiederum eine hohe Anzahl niedriger Konzentrationen und nur wenige Konzentrationswerte, die bei Messung oder Prognose über dem Schwellenwert von 400 µgm<sup>-3</sup> liegen. Diese höheren Konzentrationen traten in der Regel zudem nur an den oben betrachteten Stationen auf, die bis auf Waldhof oder Herleshausen in den neuen Bundesländern liegen.

Alle Stationen alle Monate							
Prognosenprüfung fuer die erste Prognose:							
Messung   V	Prognose ----->						Summe
	alle<100	alle<200	alle<400	ein Wert>400	ein Wert>600	ein Wert>800	
alle<100	1077	92	34	8	1	0	1212
alle<200	50	63	46	5	2	0	166
alle<400	9	34	39	5	0	0	87
ein Wert>400	2	2	7	4	1	0	16
ein Wert>600	0	1	1	0	0	1	3
ein Wert>800	0	0	0	0	0	0	3
Summe	1138	192	127	22	4	1	
Prognosenprüfung fuer die zweite Prognose:							
Messung   V	Prognose ----->						Summe
	alle<100	alle<200	alle<400	ein Wert>400	ein Wert>600	ein Wert>800	
alle<100	1083	91	30	3	1	1	1209
alle<200	66	62	34	2	2	0	166
alle<400	25	29	30	4	1	0	89
ein Wert>400	1	4	6	2	0	1	14
ein Wert>600	0	1	0	0	1	1	3
ein Wert>800	0	1	0	0	1	1	3
Summe	1175	187	100	11	5	3	

**Tab. 4.8:** Kontingenztabelle für die Übereinstimmung der von SMOROP prognostizierten 3-Stunden-Werte mit den entsprechenden an den UBA-Stationen gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen

## 5. Sensitivitätsstudien

Die in diesem Kapitel vorgestellten Sensitivitätsstudien dienen insbesondere dazu, abzuschätzen, welchen Einfluß die folgenden im Zuge der Programmentwicklung von SMOROP durchgeführten Modifikationen auf die Qualität der Smogprognose haben:

- Übergang von den Wetterprognosen des BKN-Modells des DWD zu denen des Europa-Modells;
- Anpassung der "Modellphilosophie" von SMOROP an die Vorgaben des Europa-Modells;
- Aktualisierung der Emissionsdatenbasis.

Bei der Anpassung von SMOROP an die gegenüber den BKN-Daten wesentlich verfeinerten Wetterdaten des Europa-Modells stellte sich die Frage nach einer Verbesserung des Ansatzes zur Berechnung der Mischungsschichthöhe in SMOROP. Abschnitt 5.2 befaßt sich daher mit dem Vergleich unterschiedlicher Ansätze zur Berechnung der Mischungsschichthöhe und deren Auswirkungen auf den Verlauf der Mischungsschichthöhe in SMOROP und auf die berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen. Es zeigte sich jedoch, daß keiner der untersuchten Ansätze zu einer wesentlichen Verbesserung der Modellergebnisse führt.

### 5.1 Vergleich der Modelle SMOVO und SMOROP

Die Entwicklung eines neuen Ausbreitungsprogramms für das Smogfrühwarnsystem war notwendig geworden, nachdem beim DWD die bislang von SMOVO genutzten BKF/BKN-Daten nicht mehr zur Verfügung standen. Vor allem die bessere Auflösung der atmosphärischen Grenzschicht durch das Europa-Modell gab Anlaß zu einer Reihe grundlegender Änderungen in SMOVO und führte zur Entwicklung des Ausbreitungsmodells SMOROP. Inwieweit diese Änderungen zu besseren und sichereren Prognosen der SO<sub>2</sub>-Konzentrationen führten, soll nun anhand eines Vergleichs der von SMOVO und SMOROP berechneten Konzentrationsverteilungen und der jeweils zugrundegelegten Meteorologie überprüft werden. Weiterhin wird untersucht, wie Prognosen von SMOVO zu bewerten sind, die mit einem reduzierten Satz von EM-Daten (entsprechend den zuvor verwendeten BKF/BKN-Daten) erzeugt wurden.

Zu diesem Zweck wurde eine Episode im Januar 1992 ausgesucht, in der das Europa-Modell die routinemäßigen Wettervorhersagen lieferte und für die darüber

hinaus noch BKF/BKN-Daten vorlagen. Außerdem wurden Vergleichsrechnungen für den Dezember 1992 durchgeführt, wobei jedoch nur Wetterdaten des Europa-Modells zur Verfügung standen, die für das Programm SMOVO entsprechend aufbereitet wurden.

### **5.1.1 Vergleich der durch das BKN- bzw. Europa-Modell des DWD zur Verfügung gestellten meteorologischen Parameter**

SMOVO nutzte die vom feuchtbaroklinen, genesteten BKN-Modell des DWD berechneten Prognosedaten. Diese wurden in der Datenbank BKNMO mit einer zeitlichen Auflösung von 3 Stunden archiviert. Die räumliche Auflösung war durch die Lage der Gitterpunkte der den Rechnungen mit SMOVO zugrundeliegenden IGEL-Gitters bestimmt und lag bei etwa 180 km. Folgende meteorologische Parameter wurden von SMOVO eingelesen:

- der Wind in 850 hPa,
- die Niederschlagsrate,
- der Bedeckungsgrad,
- die Temperatur in 950 hPa
- und der Schneeindex.

Die von SMOROP eingelesenen Prognosedaten haben dagegen eine zeitliche Auflösung von einer Stunde und liegen auf Gitterpunkten im Abstand von etwa 50 km vor. Zur Berechnung des Schadstofftransports wird die höhere vertikale Auflösung des Europa-Modells ausgenutzt und das Windfeld auf sieben zum größten Teil innerhalb der atmosphärischen Grenzschicht liegenden Modellschichten eingelesen. Die darüber hinaus verwendeten Parameter entsprechen denen von SMOVO.

Bei beiden Modellen wird aus den eingelesenen Parametern zusätzlich die Stabilitätsklasse und die Mischungsschichthöhe abgeleitet, wobei für den hier durchgeführten Vergleich ein identisches Berechnungsschema benutzt wurde. Die Auswirkungen *unterschiedlicher* Ansätze zur Berechnung der Mischungsschichthöhe auf die Ergebnisse von SMOROP werden in Abschnitt 5.2 untersucht.

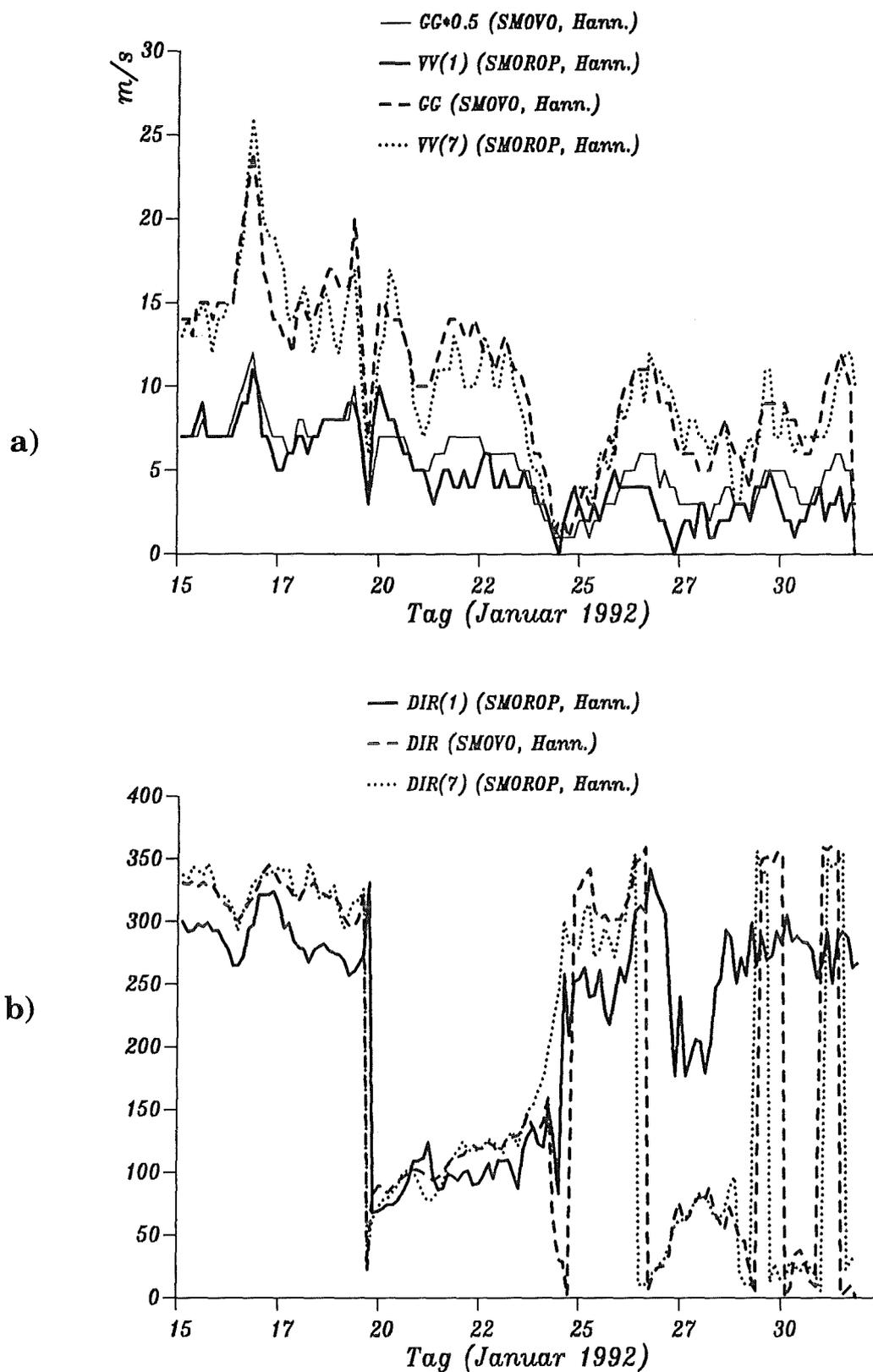
Für den Vergleich der Prognosen von BKN-Modell und Europa-Modell wurde der Zeitraum zwischen dem 15. und 31. Januar 1992 ausgewählt, wobei die in dieser Zeit vorherrschende Immissionssituation den Ausschlag gab. Der im folgenden durchgeführte Vergleich der Größenordnung der meteorologischen Parameter in

beiden betrachteten Modellen kann daher nur exemplarischer Art sein und dient vor allem als Grundlage zur Einschätzung von Abweichungen zwischen den von SMOVO und SMOROP berechneten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen. Die Wetterlage während des betrachteten Zeitraums war stark antizyklonal geprägt. Bis zum 19. Januar lag Deutschland am Rand eines Hochs über den Britischen Inseln in einer nordwestlichen Strömung. Die Temperaturmaxima erreichten in dieser Zeit im Norden Deutschlands Werte um  $7^\circ\text{C}$ , während im Süden die Tagesminima im Bereich des Gefrierpunktes lagen. Zwischen dem 20. und 25. Januar lag Deutschland an der südlichen bzw. westlichen Flanke eines von Skandinavien über die Ostsee nach Südosten wandernden Hochdruckgebietes. Der Wind wehte am Boden schwach aus östlichen Richtungen. Die Temperaturen sanken rasch ab und lagen auch tagsüber unterhalb des Gefrierpunktes. Die nächtlichen Minima lagen örtlich bei  $-10^\circ\text{C}$ . Am 26. Januar zog eine Warmfront über Deutschland hinweg und führte kurzfristig zu höheren Temperaturen, die allerdings in Bodennähe bei geringen Windgeschwindigkeiten und geringer Bewölkung im Bereich eines Hochs über der Nordsee schnell wieder absanken. Weitverbreitet gab es Nebel.

#### 5.1.1.1 Windfeld

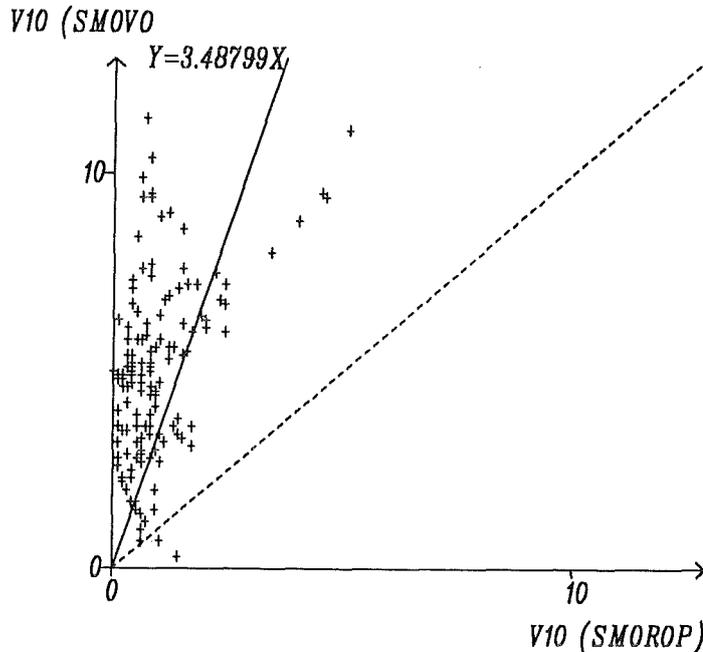
Der zeitliche Verlauf des Betrages des Windvektors und der Windrichtung für den Gitterpunkt Hannover wird in den Abbildungen 5.1a und 5.1b veranschaulicht. Der Wind in der 7. Modellschicht des Europa-Modells (VV(7) bzw. DIR(7) in den Abbildungen) entspricht im wesentlichen dem 850-hPa-Wind des BKN-Modells (GG bzw. DIR). Der Betrag des Windes in beiden Modellen liegt in der gleichen Größenordnung, und die Windrichtung stimmt bis auf wenige Ausnahmen (z.B. in der Zeit um den 25. Januar) recht gut überein. Zum Vergleich wurde in die Abbildungen noch der Wind in der ersten Modellschicht des Europa-Modells hineingenommen (VV(1) bzw. DIR(1)). Dieser entspricht größenordnungsmäßig dem 10 m-Wind in SMOVO, der dort aus dem Wind in 850 hPa berechnet wird ( $\text{GG} * 0,5$  in Abbildung 5.1a). Gegenüber dem Wind in der 7. Modellschicht (DIR(7)) weist der Wind in der 1. Modellschicht (DIR(1)) meist eine mehr oder weniger ausgeprägte Linksdrehung (Reibungsablenkung) auf. Auffällig sind allerdings die großen Abweichungen am 27. bzw. 28. Januar.

Aufschlußreich ist die Betrachtung des in den EM-Daten direkt enthaltenen 10 m-Windes. Sein Betrag ist wesentlich kleiner als der des Windes in der 1. Modellschicht des Europa-Modells, die in etwa 30 m Höhe liegt und auch wesentlich kleiner als der 10 m-Wind von SMOVO. Dies ist deutlich in der Punktwolke in Abbil-



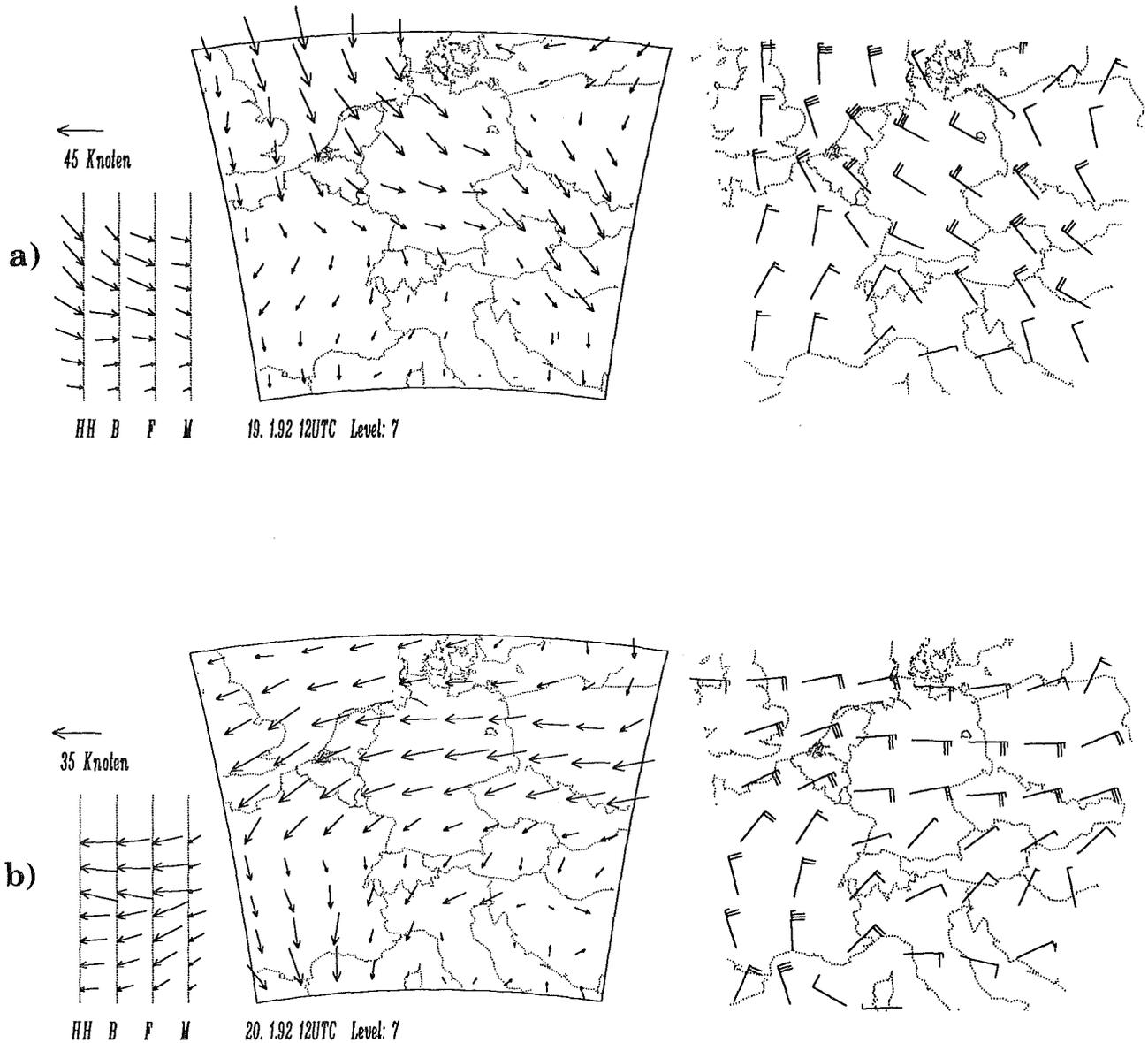
**Abb. 5.1:** Vergleich des vom BKN- und Europa-Modell für den 12 UTC-Termin prognostizierten Verlaufs von (a) Windgeschwindigkeit und (b) Windrichtung am Rasterpunkt Hannover

dung 5.2 zu erkennen, in der der 10 m Wind von SMOROP (auf der Basis des Europa-Modells) und der von SMOVO gegeneinander aufgetragen sind. Der Unterschied wirkt sich merklich bei der Berechnung der Mischungsschichthöhe und Stabilitätsklasse in SMOROP aus (s. Abschn. 5.1.1.2).



**Abb. 5.2:** Punktwolke der gegeneinander aufgetragenen Windgeschwindigkeiten in 10 m Höhe aus SMOVO und SMOROP für den 15. bis 31. Januar 1993 am Rasterpunkt Berlin

Abbildung 5.3 zeigt für zwei charakteristische Tage die von SMOVO und SMOROP verwendeten Windfelder für den 12 UTC-Termin auf der gesamten von der jeweiligen meteorologischen Datenbasis überstrichenen Fläche. Im Falle des Windfeldes von SMOVO werden dabei Windfahnen für jeden zweiten der sonst für die Konzentrationsberechnung verwendeten Punkte dargestellt. Ein kurzes Häkchen an der Windfahne bedeutet eine Windgeschwindigkeit von 5 Knoten (kn), ein langes Häkchen 10 kn und ein ausgefülltes Dreieck 50 kn. Die von SMOROP verwendete Anzahl von Winddaten (hier der 7. Modellschicht des Europa-Modells) wurde auf ein Sechstel der ursprünglichen Werte ausgedünnt, um sie besser darstellen zu können. Die Länge des Windpfeiles ist proportional zum Betrag des Windes. Zusätzlich wird für ausgewählte Orte (Hamburg, Berlin, Frankfurt und München) das vertikale Windprofil gezeigt. Die Windfelder beider Modelle zeigen sehr schön die Witterungsumstellung zwischen dem 19. und 20. Januar mit einer Umkehrung der Strömungsverhältnisse über Deutschland von westlichen auf östliche Richtungen.



**Abb. 5.3:** Vom Europa-Modell (links, 7. Modellschicht) und BKN-Modell (rechts, 850-hPa-Niveau) prognostizierte Windfelder. Für das Europa-Modell sind zusätzlich vertikale Windprofile für Hamburg (HH), Berlin (B), Frankfurt (F) und München (M) dargestellt.

a) 19. Januar 1992

b) 20. Januar 1992

Auch sonst ist die großräumige Übereinstimmung zwischen beiden Windfeldern sehr gut und zwar für den gesamten Zeitraum zwischen dem 15. und 31. Januar 1992. Betrachtet man allerdings das Windfeld (beispielsweise über Deutschland) etwas genauer, so kommen doch Abweichungen zum Vorschein, die erhebliche Auswirkungen auf den Schadstofftransport über die für das Smogfrühwarnsystem relevanten Entfernungen haben können. Wie groß diese Auswirkungen allerdings wirklich sind, kann nur die Analyse von Trajektorien zeigen, deren Verlauf nicht nur von der räumlichen Struktur des Windfeldes, sondern auch von dessen zeitlicher Entwicklung abhängig ist (s. dazu Abschn. 5.1.2).

#### 5.1.1.2 Mischungsschichthöhe und Stabilitätsklasse

Die Mischungsschichthöhe und Stabilitätsklasse (Pasquillkategorie) wird in der im Winter 1992/93 verwendeten Version von SMOROP mit Hilfe des schon in SMOVO angewandten Verfahrens berechnet (s. dazu /1/). Dieses Verfahren benötigt als meteorologische Eingabegrößen

- den geostrophischen Wind  $V_g$ ,
- den Wind in 10 m Höhe  $V_{10}$
- und den Bedeckungsgrad NN in Achteln.

In SMOVO wurde der geostrophische Wind durch die Windgeschwindigkeit im 850-hPa-Niveau angenähert und der Wind in 10 m Höhe durch die Beziehung:

$$V_{10} = \frac{1}{2} V_g.$$

Für SMOROP steht in der EM3DA-Datenbank der Wind in 10 m Höhe direkt zur Verfügung. Der geostrophische Wind wird in SMOROP durch den Wind der 7. Modellschicht des Europa-Modells repräsentiert.

Abbildung 5.4 zeigt den von beiden Modellen berechneten Verlauf der Mischungsschichthöhe für Hannover. Es wird deutlich, daß die mit Hilfe von SMOROP berechneten Mischungsschichthöhen einen wesentlich stärkeren Tagesgang aufweisen. Sehr markant sind die Unterschiede in der Zeit vom 20. bis 24. Januar. Auch die Pasquillkategorie schwankt im Gegensatz zu den Rechnungen mit SMOVO bei den mit Hilfe von SMOROP berechneten Werten viel stärker um den neutralen Fall ( $P=4$ ) mit stabilen Stabilitätsklassen in der Nacht und labilen am Tage (Abb. 5.5). Da sich der in beiden Modellen benutzte Bedeckungsgrad zwischen dem 20. und 24. Januar nicht wesentlich unterscheidet und auch der jeweils be-

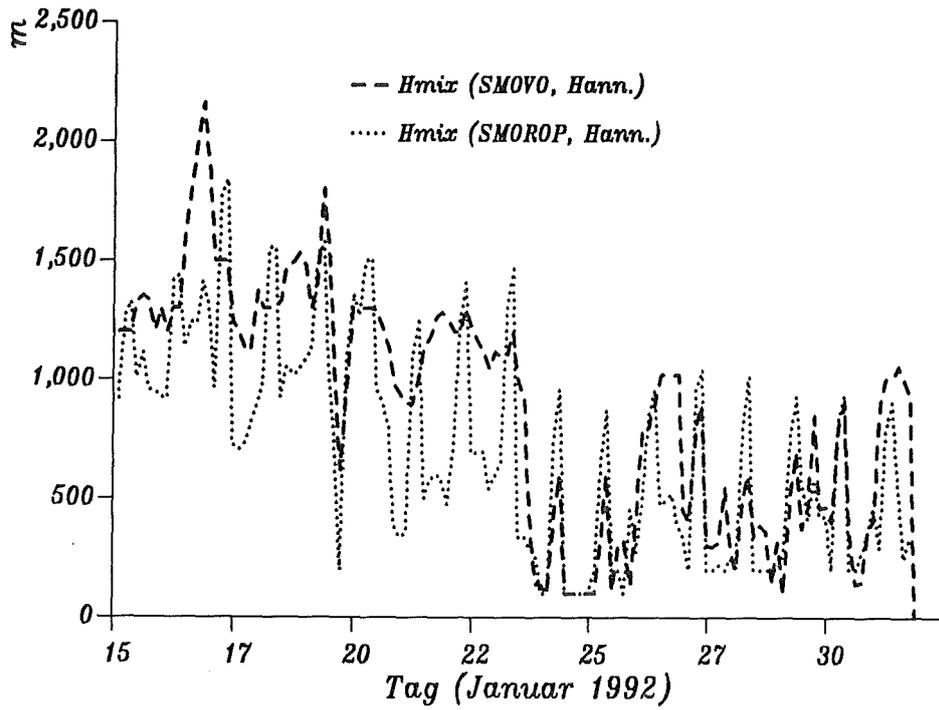


Abb. 5.4: Verlauf der von SMOVO und SMOROP berechneten Mischungsschichthöhen

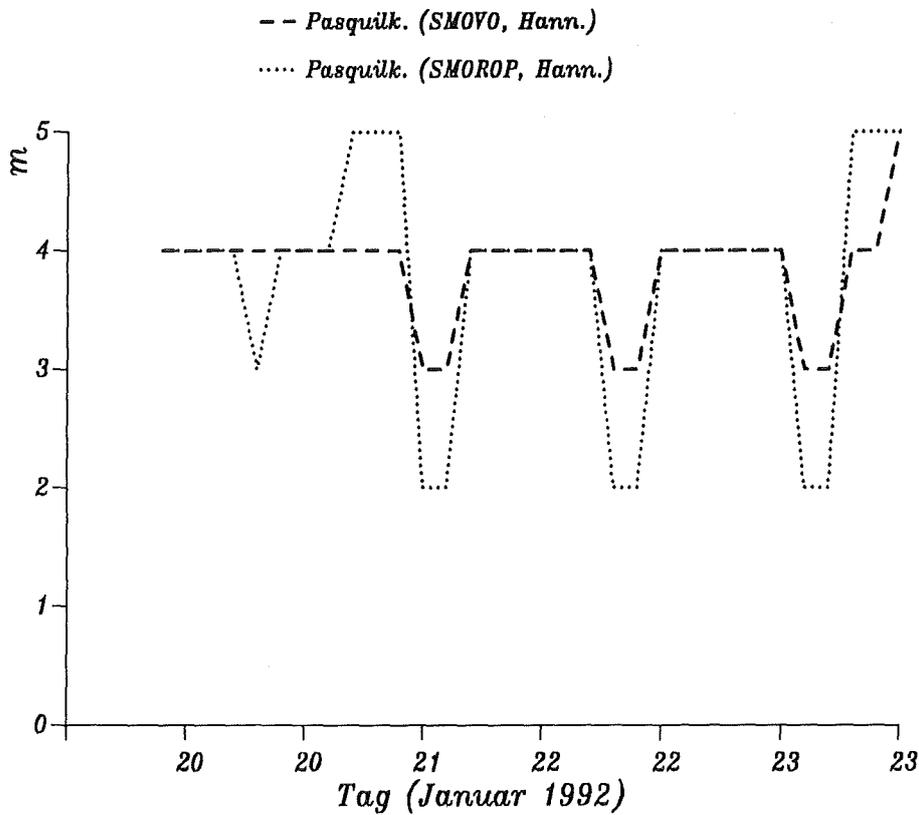


Abb. 5.5: Von SMOVO und SMOROP berechnete Stabilitätsklassen (Pasquillkategorie)

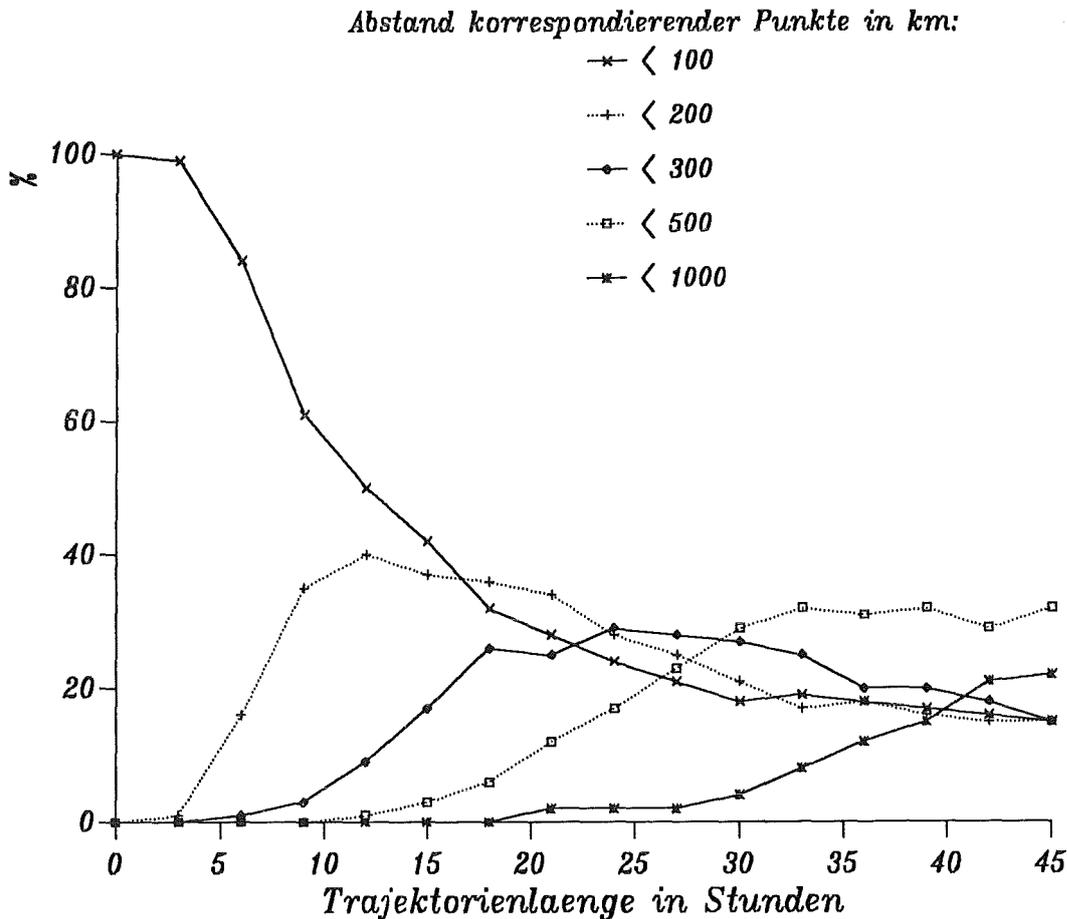
nutzte "geostrophische Wind" keine wesentlichen Unterschiede aufweist, sind die Unterschiede zwischen den von SMOVO und SMOROP berechneten Stabilitätsklassen und Mischungsschichthöhen vor allem durch die Unterschiede beim Wind in 10 m Höhe zu erklären. Dies zeigen insbesondere Rechnungen, bei denen in SMOROP der 10 m-Wind des Europa-Modells durch den Wind der untersten Modellfläche oder durch den halbierten Wert des geostrophischen Windes ersetzt wurde.

### 5.1.2 Vergleich der auf der Basis des Europa-Modells sowie des BKN-Modells berechneten Trajektorien

Mit Hilfe des Programms CYTRA10 wurden auf der Basis des vom BKN-Modell gelieferten 850-hPa-Windes für 10 ausgewählte Standorte und jeweils 8 Termine pro Tag Rückwärtstrajektorien berechnet. Diese sollen hier mit den von SMOROP auf der Grundlage von EM-Daten berechneten Vorwärtstrajektorien verglichen werden, die zu den gleichen Terminen Rasterflächen erreichen, in denen die für die Rückwärtstrajektorien ausgewählten Rezeptororte liegen. Die Vorwärtstrajektorien von SMOROP unterscheiden sich vor allem dadurch von den von CYTRA10 auf der 850-hPa-Fläche berechneten Rückwärtstrajektorien, daß deren Verlauf von der jeweiligen Quellhöhe und der Entwicklung der Mischungsschichthöhe bzw. Vertikalentwicklung des auf dieser Trajektorie transportierten Schadstoffpakets abhängig ist. Je nach Vertikalentwicklung des Schadstoffpakets ist der Trajektorienverlauf mehr oder weniger stark vom jeweiligen Wind in den einzelnen Schichten des Europa-Modells abhängig. Allerdings kann davon ausgegangen werden, daß nach einem vollständigen Tageszyklus der Mischungsschichthöhe die Schadstoffe sich über eine Höhe von mindestens 1000 m verteilt haben, was bedeutet, daß der Transport vor allem durch den Wind in den oberen der in SMOROP berücksichtigten sieben EM-Modellschichten dominiert wird. Verursacht wird dieser Effekt durch die nach oben hin zunehmende Mächtigkeit der Modellschichten.

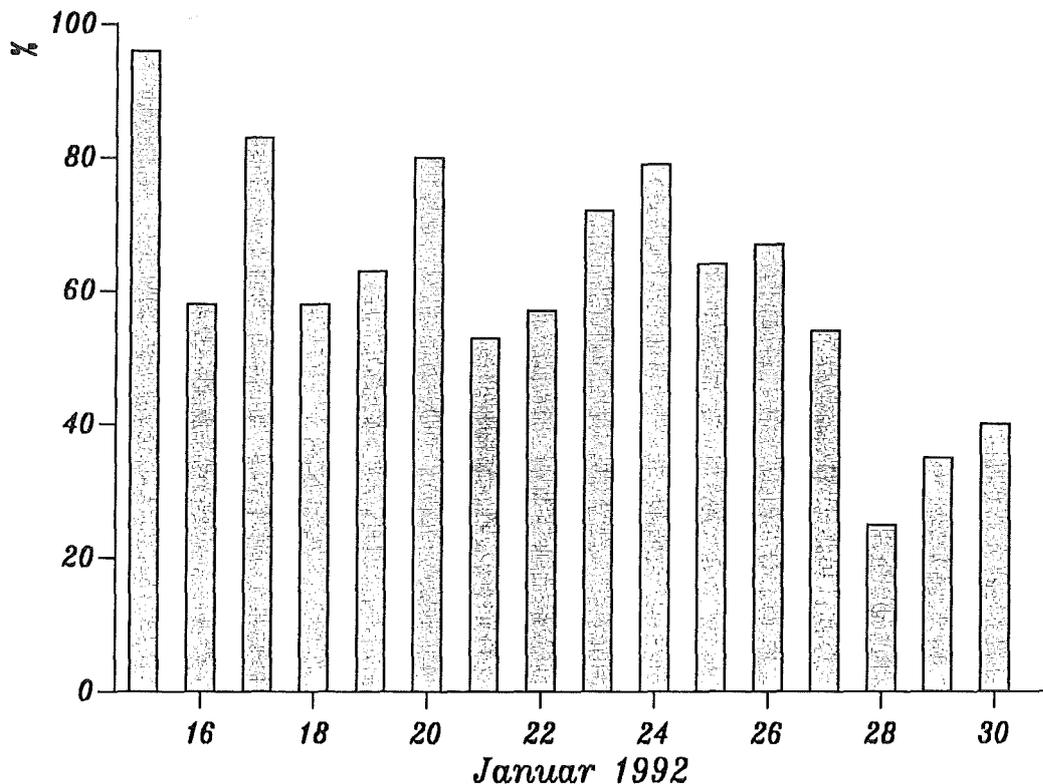
Der hier durchgeführte Vergleich basiert auf 1360 pro Modell berechneten Trajektorien mit jeweils maximal 16 ausgegebenen Trajektorienstützpunkten in 3-stündigem Abstand. Die Ankunftszeiten der betrachteten Trajektorien sind 0 UTC, 3 UTC bis 21 UTC des jeweiligen Tages und als Rezeptororte wurden die Orte (bzw. Rasterflächen) *Hamburg, Rostock, Hannover, Berlin, Essen, Kassel, Leipzig, Wiesbaden, Hof* und *Dresden* ausgewählt. Untersucht wurde zunächst der Abstand korrespondierender Trajektorienstützpunkte von SMOROP und CYTRA10.

Abbildung 5.6 zeigt, daß während der ersten drei Stunden ihres Verlaufs noch fast alle Trajektorienpaare einen gegenseitigen Abstand von weniger als 100 km haben. Der Abstand nimmt dann aber in der Regel rasch zu, und nach 12 Stunden haben nur noch 50 % aller betrachteten Trajektorien einen Abstand von weniger als 100 km. Allerdings wächst hier der Abstand nur bei wenigen Trajektorien auf Werte über 200 km an. Nach 24 Stunden liegen noch etwas mehr als 20 % der Trajektorien in einem Abstand von weniger als 100 km voneinander, ebenso viele haben einen Abstand von 100 bis 200 km. Trajektorien, deren Abstand auf Werte bis 500 km angestiegen ist, haben allerdings auch schon einen Anteil von knapp unter 20 %. Nach etwa zwei Tagen haben 30% aller Trajektorien einen Abstand von mehr als 500 km, ebenso viele sind aber auch weniger als 200 km voneinander entfernt.



**Abb. 5.6:** Anteile unterschiedlicher Abstände von korrespondierenden, jeweils von CYTRA10 (SMOVO) und SMOROP berechneten, Trajektorienstützpunkten, in Abhängigkeit von der Verfolgungszeit der jeweiligen Trajektorien

Inwieweit der Trajektorienverlauf bei den betrachteten Modellen übereinstimmt, ist nicht unerheblich vom Wetterablauf abhängig. Abbildung 5.7 zeigt den Anteil von Stützpunkten, die bei allen Trajektorien einzelner Tage weniger als 100 km auseinander liegen. Der hohe Anteil nahe beieinander liegender Trajektorien am 15. Januar hat seine Ursache in der noch nicht vorhandenen Vorlaufzeit zur Berechnung der Trajektorien in CYTRA10 und SMOROP. Die Trajektorien sind in diesem Fall nur zwischen 3 und 21 Stunden "alt". An zwei Tagen der vorliegenden Episode im Januar streben die Trajektorien besonders stark auseinander. Der erste dieser beiden Tage ist der 21. Januar, dem nach den Ausführungen in Abschnitt 5.1 eine Umstellung der Wetterlage am 20. Januar vorausgegangen ist. Im Zuge dieser Umstellung drehte der Wind in der Nacht vom 19. auf den 20. Januar von Nord-Nord-West nach Ost, wobei Deutschland zunächst nach den in Abschnitt 5.1.1 gezeigten Windfeldern in eine kräftige Ostströmung mit sehr hohen Windgeschwindigkeiten geriet.



**Abb. 5.7:** Zeitverlauf des Anteils korrespondierender, jeweils von CYTRA10 (SMOVO) und SMOROP berechneter, Trajektorienstützpunkte, die einen Abstand von weniger als 100 km haben

Die Betrachtung des Trajektorienverlaufs in Abbildung 5.8 zeigt jedoch, daß der unterschiedliche Trajektorienverlauf nicht durch die Witterungsumstellung verursacht wird, deren Ablauf von den Prognosemodellen meist unterschiedlich vorhergesagt wird, sondern durch die großen Windgeschwindigkeiten am 20. und 21. Januar und den damit verbundenen starken Horizontalgradienten. Die Trajektorien, die zu den ersten Terminen des 21. Januar in Hannover ankommen, haben zunächst noch einen sehr gut übereinstimmenden Verlauf in westliche Richtungen. Erst am Nachmittag werden die Unterschiede größer, wobei die von SMOROP berechneten Trajektorien über Polen durch ein Gebiet mit schwachen Strömungsgeschwindigkeiten kommen (s. Abb. 5.9), während die von CYTRA10 berechneten Trajektorien dieses Gebiet nur am Südrand streifen. Nach dem 21. Januar nimmt der Anteil übereinstimmend verlaufender Trajektorien stetig zu, bis am 25. Januar das Ende der Ostlage erreicht wird. Der geringe Abstand der Trajektorien vor allem am Ende dieser Ostlage ist allerdings zum Teil durch die sehr geringen Windgeschwindigkeiten bedingt, die von vornherein verhindern, daß sich die Trajektorien allzuweit voneinander weg bewegen. Das kann auch der Grund dafür sein, daß die Wetterumstellung am 20. Januar nicht zu extrem großen Abweichungen im Trajektorienverlauf geführt hat. Während dieser Umstellung waren die Windgeschwindigkeiten ebenfalls sehr klein.

Nach dem 25. Januar nimmt durch die Zunahme der Windgeschwindigkeit und eine Drehung des Windes der Anteil gleich verlaufender Trajektorien wieder leicht ab und erreicht am 28. sein zweites (für den betrachteten Zeitraum absolutes) Minimum. Hier dürfte außer der für den 27. Januar vom Europa- und BKN-Modell prognostizierten leichten Winddrehung auch die sehr starke vertikale Windscherung im Europa-Modell eine Rolle gespielt haben. Die Windrichtung in der 7. Modellschicht des Europa-Modells stimmt zwar sehr gut mit derjenigen im 850-hPa-Niveau des BKN-Modells überein (s. dazu den Windrichtungsverlauf am Rasterpunkt Hannover in Abb. 5.1b), in der Nordhälfte Deutschlands dreht der Wind nach den EM-Daten jedoch von West bis Südwest am Boden über Nordwest in der 3. Modellschicht, Nord in der 5. Modellschicht nach Nordost in der 7. Modellschicht des Europa-Modells (Abb. 5.10). Die Trajektorien von SMOROP, die am 28. Januar die Rasterfläche Kassel erreichen, nehmen dementsprechend zunächst in Quellnähe (beeinflusst durch den Wind in den unteren Modellschichten des Europa-Modells) einen Verlauf in südliche Richtungen. Danach folgt ein Umschwenken in einen nach Westen gerichteten Verlauf (Abb. 5.11). Die von CYTRA10 berechneten Trajektorien folgen dagegen in einem großen Bogen von südwestlichen nach westlichen Richtungen der Strömung in 850-hPa.

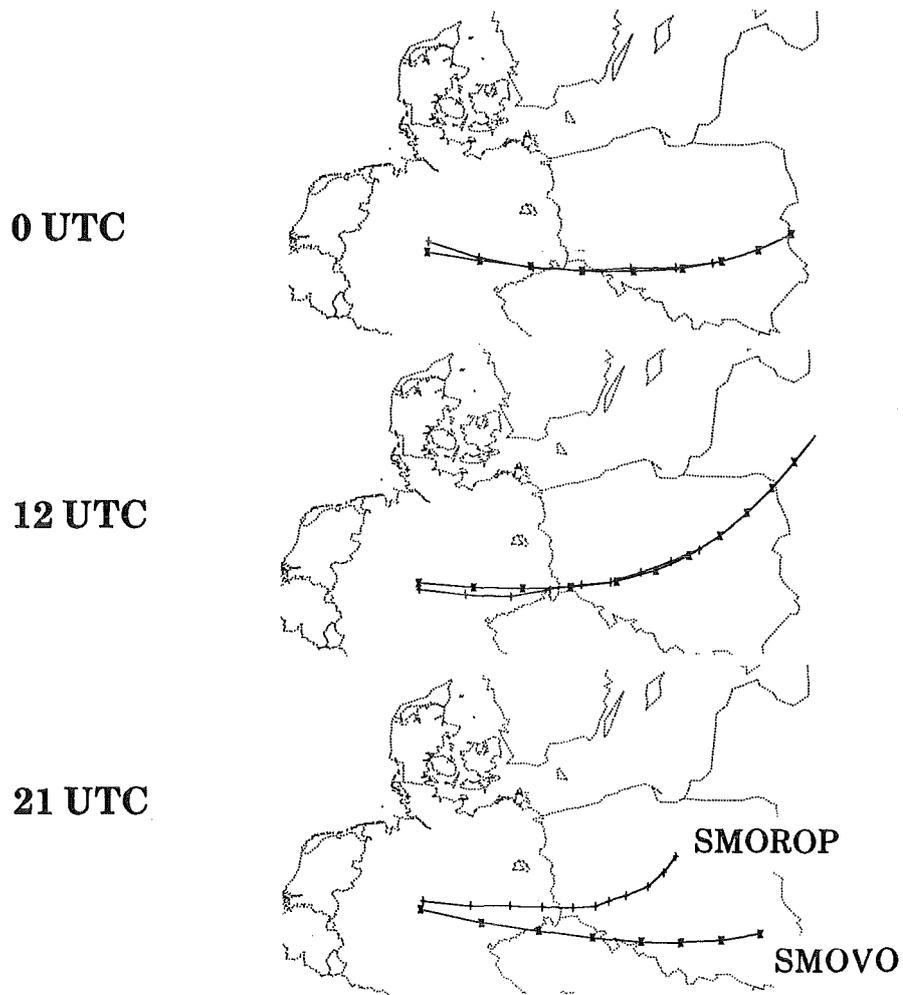


Abb. 5.8: Trajektorien, die am 21. Januar 1992 Hannover erreichten

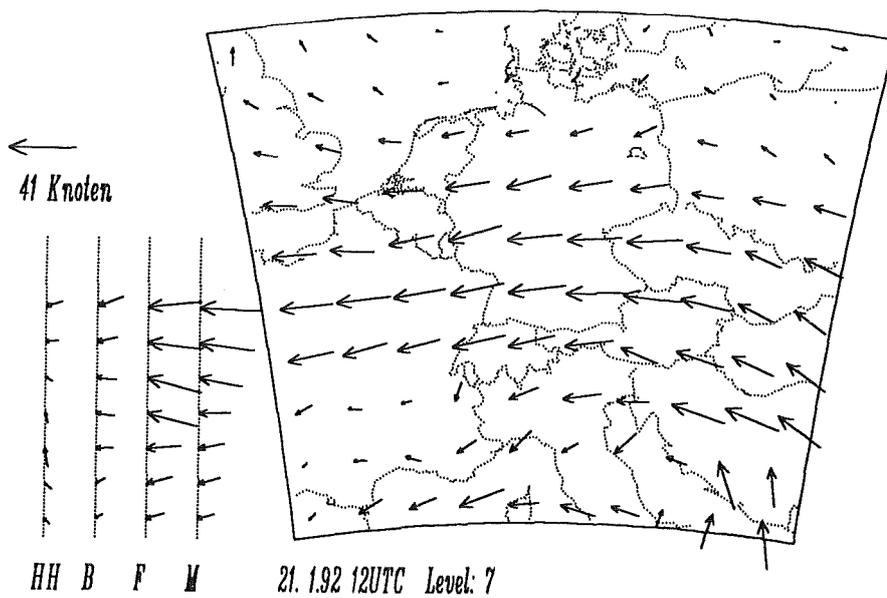


Abb. 5.9: Windfeld für den 21. Januar 1992 (7. Modellschicht des Europa-Modells)

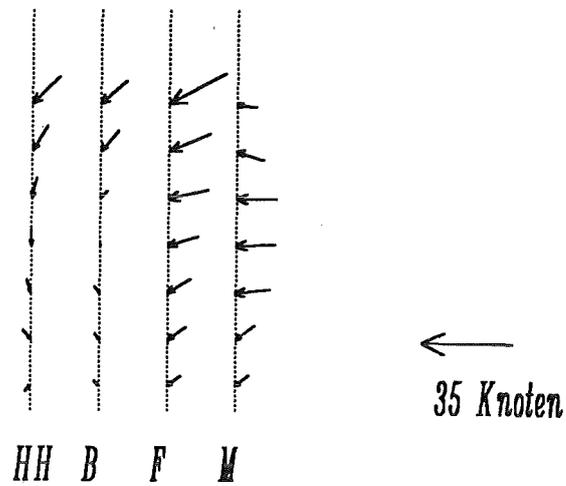


Abb. 5.10: Vertikale berechnete Windprofile am 27. Januar 1992, 12 UTC.  
(s. auch Abb. 5.3)

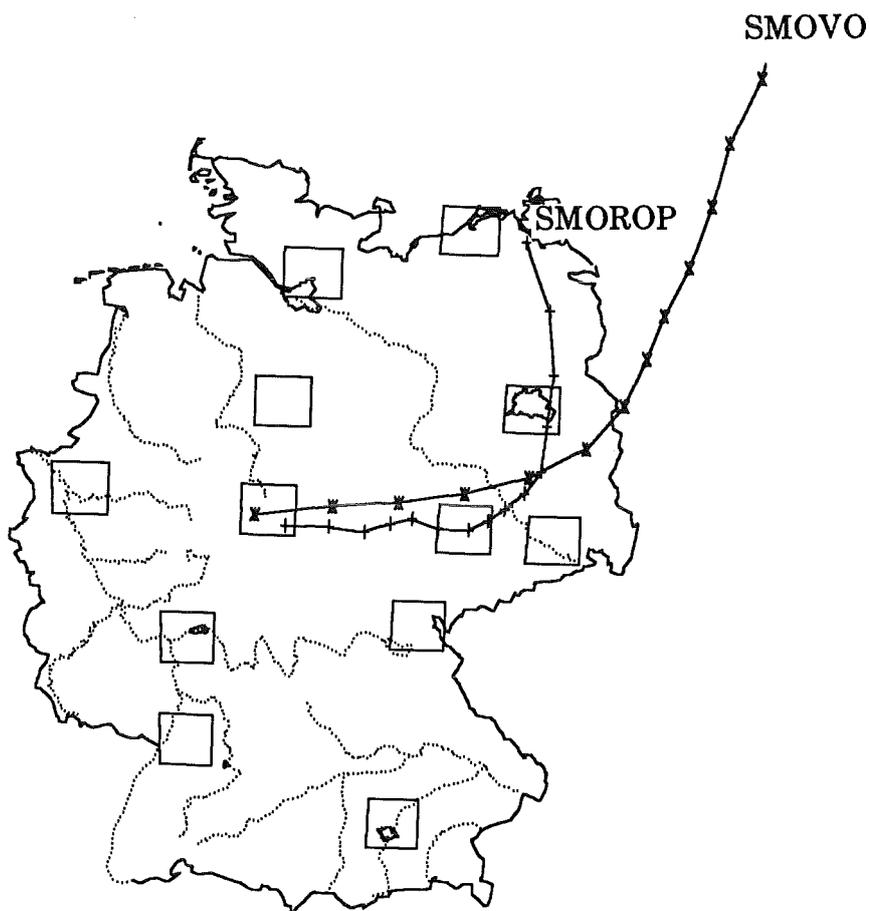


Abb. 5.11: Trajektorienverlauf am 28. Januar 1992, 12 UTC, für den Zielpunkt Kassel

Eine Bewertung der unterschiedlichen Trajektorienverläufe auf der Basis von EM-Daten bzw. von BKN-Daten fällt schwer - vor allem vor dem Hintergrund einer Fehlerabschätzung des Verlaufs berechneter Trajektorien im Vergleich zu den Transportvorgängen in der Natur. Am schwerwiegendsten dürfte hier sein, daß diese Transportvorgänge generell von einem einfachen Trajektorienmodell, wie es auch SMOROP in seiner Grundkonzeption noch darstellt, nur unvollständig erfaßt werden können. Besondere Unsicherheit herrscht darüber, in welchem Niveau der Schadstofftransport stattfindet. In Fällen mit großer vertikaler Windscherung (wie beispielsweise am oben beschriebenen 27. Januar) *kann* diese Unsicherheit zu völlig falschen Trajektorienverläufen führen, unabhängig von der zur Verfügung stehenden vertikalen Auflösung des Windfeldes.

Eine Abschätzung des *numerischen* Fehlers bei der Berechnung des Trajektorienverlaufs findet sich bei Sykes and Hatton /25/. Der Fehler

$$e = r_{\text{berechnet}} - r_{\text{exakt}}$$

des augenblicklichen Ortsvektors  $r$  eines Trajektorienstützpunktes wächst demnach folgendermaßen an:

$$d e / d t = \Delta v + (v(r_{\text{berechnet}}) - v(r_{\text{exakt}}))$$

Allein aufgrund des statistischen Fehlers der Windgeschwindigkeit  $\Delta v$ , der auf etwa 2 m/s geschätzt wird, beträgt der Fehler im Verlauf einer Trajektorie nach drei Tagen etwa 50 km. Bei größeren örtlichen Änderungen im Windfeld kann es jedoch wegen des zweiten Terms in obiger Gleichung zu einem exponentiellen Anwachsen von  $e$  kommen. Sykes and Hutton /25/ geben Fehler im Trajektorienverlauf zwischen 100 und 250 km nach 30 Stunden und bis zu 1250 km nach 45 Stunden an. Im Vergleich dazu sind die Abweichungen zwischen dem Trajektorienverlauf der beiden verglichenen Modellansätze durchaus in der Größenordnung des zu erwartenden numerischen Fehlers.

### 5.1.3 Vergleich der von SMOVO und SMOROP berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen

Die mit Hilfe von SMOVO und SMOROP berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen sollen hier miteinander und mit den Meßwerten des Smogfrühwarnsystems verglichen werden. Die dazu mit SMOROP für die Zeit zwischen dem 15. und 31. Januar 1992 berechneten Konzentrationsverteilungen basieren auf Emissionsdaten, die

auch bei den Rechnungen für das Smogfrühwarnsystem im Winter 1992/93 eingesetzt wurden (siehe dazu Kapitel 3). Mit SMOVO wurden für denselben Zeitraum die folgenden Rechenläufe durchgeführt, und zwar

- auf der Grundlage von Wetterdaten des BKN-Modells und den alten schon von SMOVO im Winterhalbjahr 1991/92 genutzten Emissionsdaten,
- mit denselben Wetterdaten, aber den neuen auch von SMOROP verwendeten Emissionsdaten,
- mit Wetterdaten des Europa-Modells und dem von SMOROP verwendeten Emissionsdatensatz.

Um die von SMOVO berechneten Konzentrationsverteilungen mit denen von SMOROP vergleichen zu können, wurden die Ergebnisse von SMOVO anstatt auf dem darin normalerweise verwendeten  $\lambda/\phi$ -Gitter auf Gitterflächen im rotierten Koordinatensystem des Europa-Modells berechnet und ausgegeben (SMOROP-Raster).

Die Daten des Europa-Modells wurden für Rechnungen mit SMOVO auf folgende Weise modifiziert: Aus den stündlich vorliegenden EM-Daten wurden alle von SMOVO benötigten Parameter in dreistündigem Abstand (0 UTC, 3 UTC bis 21 UTC) ausgewählt. Der normalerweise von SMOVO genutzte 850-hPa-Wind wurde durch den Wind in der 7. Modellschicht des Europa-Modells ersetzt; alle anderen Parameter entsprechen sich weitgehend. Rechnungen mit SMOVO auf der Basis von EM-Daten wurden einerseits für die oben schon beschriebene Episode im Januar 1992 durchgeführt und zusätzlich noch für den Dezember 1992.

#### **5.1.3.1 Der Konzentrationsverlauf in der zweiten Hälfte des Januar 1992**

In den Abbildungen 5.12a und 5.12b wird der Zeitverlauf der berechneten und gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen in Form von Tagesmittelwerten für die Rasterflächen Herleshausen und Schleiz dargestellt. Die berechneten Konzentrationen stammen einerseits von Rechnungen mit SMOROP und andererseits von Rechnungen mit SMOVO und den oben beschriebenen unterschiedlichen Eingabedatensätzen.

Charakteristisch für die Konzentrationsverläufe an beiden Stationen ist der starke Konzentrationsanstieg am 20. Januar nach einer Phase mit sehr niedrigen Konzentrationen. Die gemessenen Tagesmittelkonzentrationen steigen bei Herleshausen auf Werte zwischen 200 und 250  $\mu\text{g m}^{-3}$ , während in Schleiz 400  $\mu\text{g m}^{-3}$

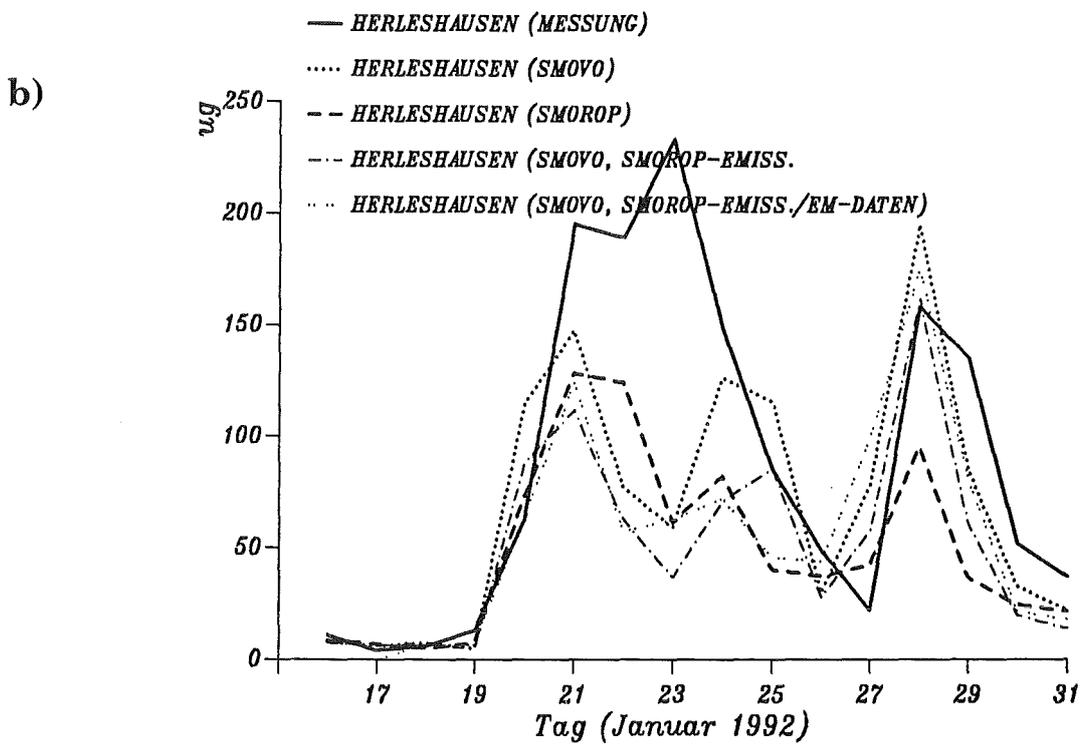
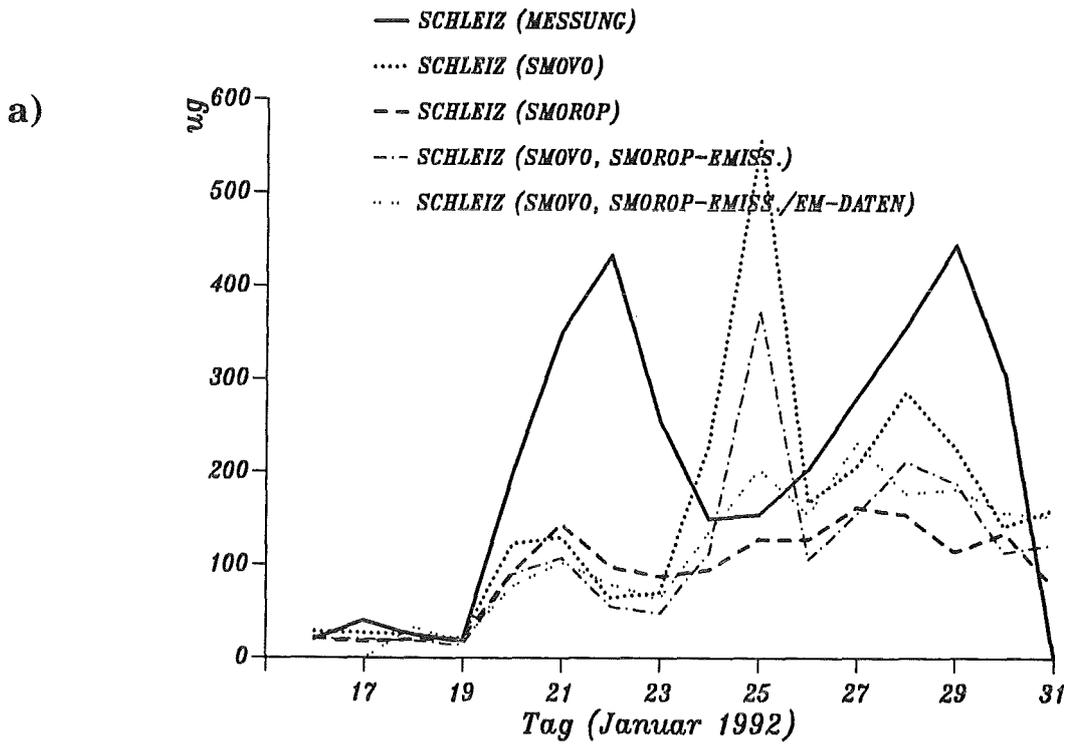


Abb. 5.12: Verlauf der SO<sub>2</sub>-Tagesmittel an den UBA-Stationen (a) Schleiz und (b) Herleshausen zwischen dem 15. und 31. Januar 1992 im Vergleich zu Rechenwerten von SMOROP und SMOVO

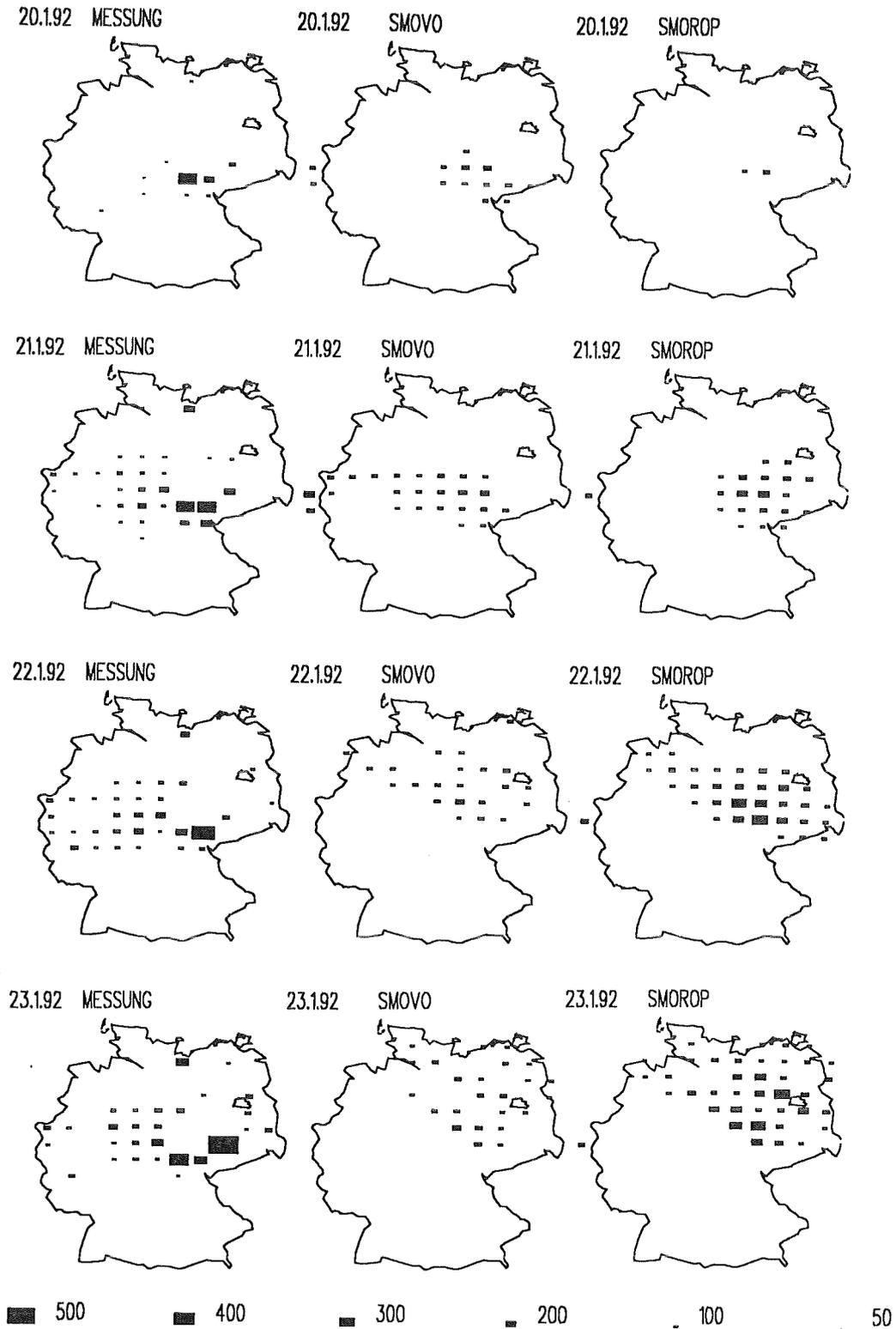
überschritten werden. Nach dem 21. Januar bei Schleiz und dem 23. bei Herleshausen sinken die Konzentrationen zunächst wieder ab, um nach drei bzw. vier Tagen wieder anzusteigen. Am 28. Januar erreichen die SO<sub>2</sub>-Konzentrationen an beiden Stationen erneut ein recht hohes Niveau, sinken aber zum Monatsende wieder ab. Der Beginn des Anstieges der Konzentrationen am 20. Januar wird von allen Modellversionen korrekt vorhergesagt, im weiteren Verlauf gibt es aber einige Abweichungen zwischen den Rechenwerten und Messungen einerseits und zwischen den von den unterschiedlichen Programmversionen berechneten Konzentrationen andererseits.

Am eindeutigsten zu identifizieren und zu erklären sind die Unterschiede zwischen den beiden Versionen von SMOVO auf der Basis von BKN-Daten, aber unterschiedlichen Emissionsdaten. Die von diesen beiden Modellversionen stammenden Konzentrationsverläufe nehmen einen ähnlichen Verlauf, wobei aber die auf der Basis der aktuelleren, auch von SMOROP im Winterhalbjahr 1992/93 benutzten, Emissionsdaten berechneten Werte immer kleiner sind als die auf der Basis der ehemaligen SMOVO-Emissionsdatenbasis berechneten. Dies ist eine Folge der im Osten Deutschlands weiträumig gesunkenen SO<sub>2</sub>-Emissionen.

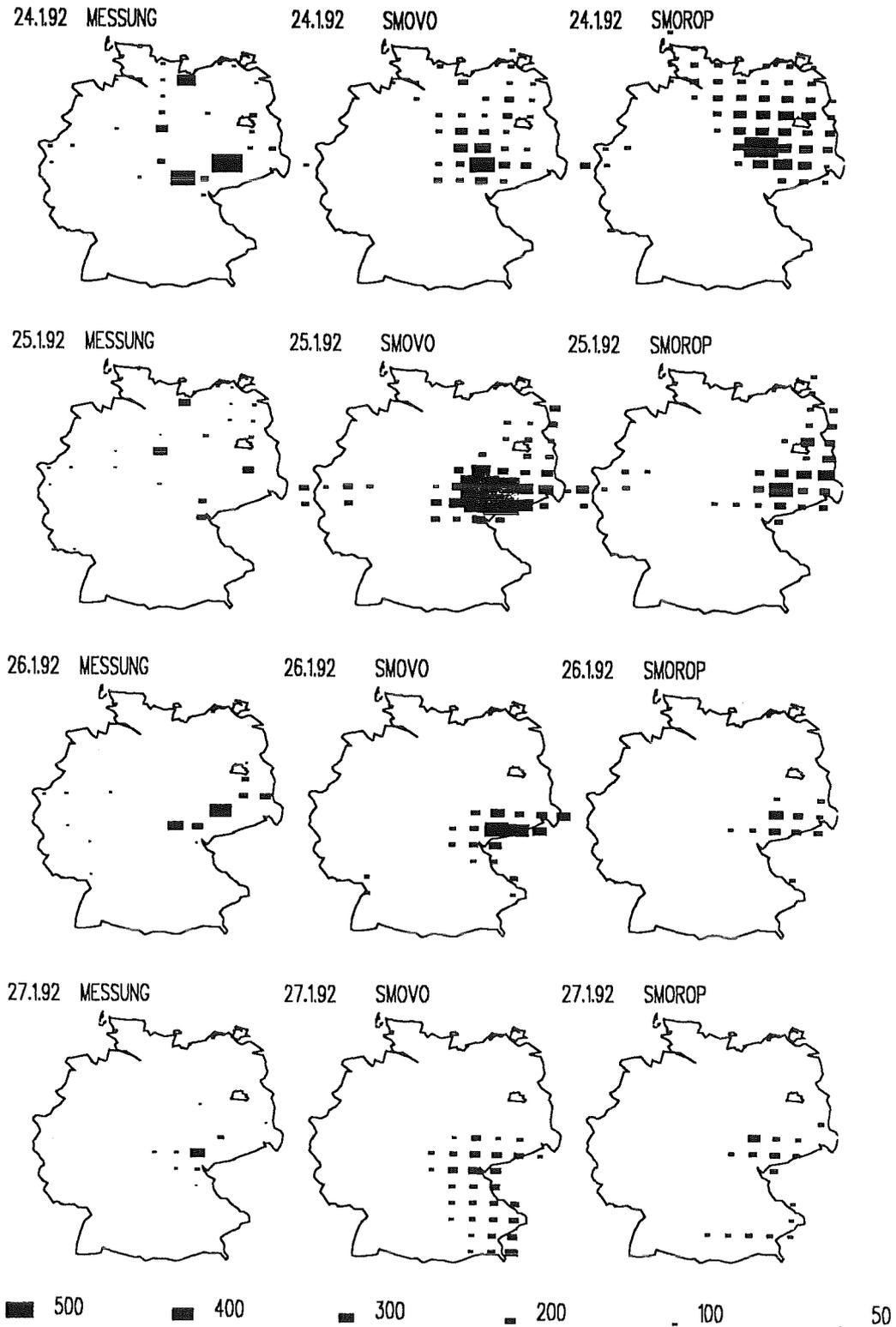
Der Einfluß unterschiedlicher Wetterdaten zeigt sich sehr deutlich an den Unterschieden bei den für den 25. Januar für Schleiz berechneten Konzentrationen. Beide Versionen von SMOVO auf der Basis von BKN-Daten überschätzen hier kräftig die gemessenen Konzentrationen, während SMOROP bzw. die auf der Basis von EM-Daten rechnende Version von SMOVO in der Größenordnung der gemessenen Konzentrationen bleiben.

Die in Abbildung 5.12 dargestellten Konzentrationsverläufe lassen ohne weitere Analysen keine Aussage zu, inwieweit SMOROP bessere SO<sub>2</sub>-Prognosen liefert als SMOVO. Bei einem Vergleich zwischen Rechenwerten und den Meßwerten an einzelnen Stationen kommt erschwerend hinzu, daß die gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen nicht unbedingt repräsentativ für die dazugehörigen Rasterflächen sind, auch wenn, wie hier, Tagesmittelwerte miteinander verglichen werden. Daher soll zusätzlich untersucht werden, wie die großräumige Immissionsituation von SMOROP und SMOVO prognostiziert wird.

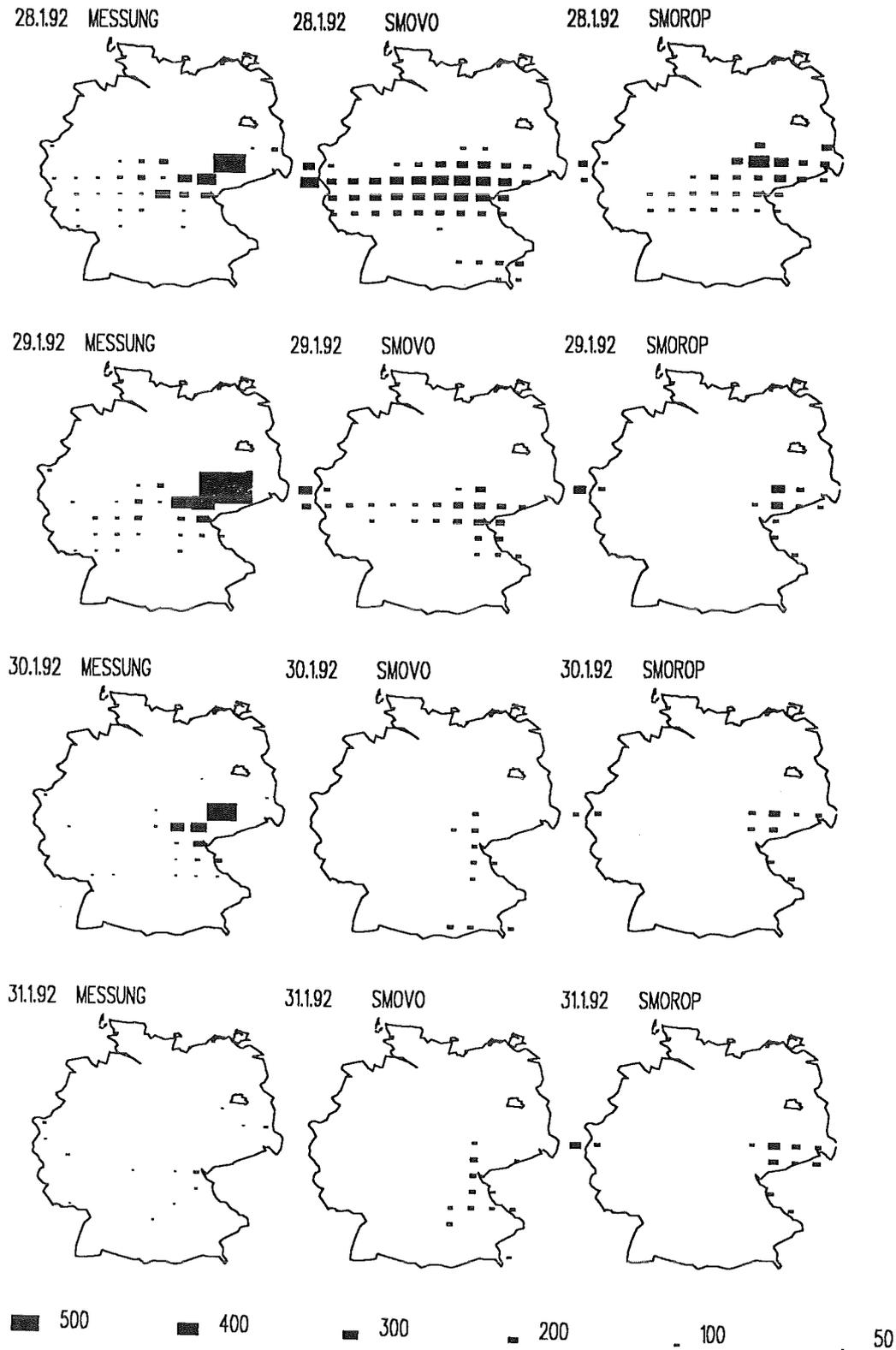
Abbildung 5.13 zeigt für den 20. bis 31. Januar die von beiden Modellen berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationsverteilungen (Tagesmittel) im Vergleich zu den Meßwerten. Um die Lage der höchsten Konzentrationswerte besser zu veranschaulichen, wurden nur die Konzentrationen dargestellt, die über dem Flächenmittel (Mittelwert über alle Rasterflächen), mindestens aber über 50 µg<sup>m</sup>-<sup>3</sup> bei den Messungen bzw. 100 µg<sup>m</sup>-<sup>3</sup> bei den berechneten Werten liegen.



**Abb. 5.13:** Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen (in µg<sub>m</sub><sup>-3</sup>) für die Episode zwischen dem 20. und 31. Januar 1992



**Abb. 5.13:** Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen (in µg·m<sup>-3</sup>) für die Episode zwischen dem 20. und 31. Januar 1992 (Fortsetzung)



**Abb. 5.13:** Abfolge von Rasterkarten der gemessenen und prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen (in µg<sub>m</sub><sup>-3</sup>) für die Episode zwischen dem 20. und 31. Januar 1992 (Fortsetzung)

Der Anstieg der Meßwerte am 20. Januar auf Werte über  $300 \mu\text{g m}^{-3}$  im thüringischen Raum wird vor allem von SMOVO gut erfaßt, während SMOROP nur einen relativ geringen Konzentrationsanstieg berechnet. Am 21. und 22. Januar bleibt das gemessene Konzentrationsmaximum weiterhin im Raum Thüringen, die Konzentrationen steigen nun aber auch im Westen Deutschlands auf Werte über  $100 \mu\text{g m}^{-3}$ . Diese Entwicklung wird zunächst von SMOVO besser erfaßt; allerdings werden die Konzentrationsspitzen besser von SMOROP beschrieben. Am 22. fällt auf, daß die von SMOVO und SMOROP berechneten Schadstofffahnen im Uhrzeigersinn gegenüber der gemessenen Schadstoffverteilung gedreht sind. Überraschend ist, daß die Größenordnung dieser Drehung bei SMOROP die gleiche ist wie bei SMOVO, trotz der besseren vertikalen Auflösung der EM-Daten und der damit möglichen Berücksichtigung der Winddrehung zum Boden hin (in der Regel durch den Reibungseinfluß *gegen* den Uhrzeigersinn). Hier scheint der Transport in SMOROP vor allem durch den Wind in der 7. Modellschicht des Europa-Modells beeinflußt zu sein, der in Richtung und Betrag vergleichbar dem 850-hPa-Wind des BKN-Modells ist. Vom 23. auf den 24. Januar schwenkt die achsiale Ausrichtung der gemessenen Schadstoffverteilung von westlichen nach nördlichen Richtungen. Die maximalen Konzentrationen der Größenordnung von  $500 \mu\text{g m}^{-3}$  im Tagesmittel finden sich nun im Bereich zwischen Thüringen und Sachsen, aber auch in Norddeutschland (Rostock) werden relativ hohe  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen gemessen. Eine Drehung der Fahne findet sich auch in den berechneten Werten beider Modelle, allerdings schwenkt die von SMOVO berechnete Schadstofffahne zu weit nach rechts. Die Größenordnung der Konzentrationsmaxima wird wie schon an den vorangegangenen Tagen von SMOROP besser als von SMOVO erfaßt.

Die Meßwerte für den 25. Januar sind leider unvollständig, insbesondere fehlen diejenigen der ostdeutschen Stationen, die die Maximalwerte der letzten Tage übermittelt hatten. Am 26. liegt der Tagesmittelwert der  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen im Bereich Halle/Leipzig bei  $400 \mu\text{g m}^{-3}$ , was von SMOVO in der Größenordnung besser berechnet wird als von SMOROP, bei dem die berechneten Maximalwerte des Tagesmittels nur bei etwa  $230 \mu\text{g m}^{-3}$  liegen. Die Lage der größten Konzentrationen wird von beiden Modellen in etwa gleich gut wiedergegeben. Am 27. Januar gehen die gemessenen  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen allgemein auf niedrige Werte zurück, um dann aber im Dreieck Jena/Halle/Leipzig wieder kräftig anzusteigen. Die höchsten gemeldeten Konzentrationswerte des betrachteten Zeitraums liegen dort am 29. Januar bei  $1000 \mu\text{g m}^{-3}$ . Weder SMOVO noch SMOROP können diese hohen gemessenen Konzentrationen reproduzieren, jedoch wird auch hier die Lage der Maximalkonzentrationen von beiden Modellen recht gut dargestellt. Am

30. Januar gehen die gemessenen Konzentrationen im oben genannten Gebiet auf Werte um  $500 \mu\text{g m}^{-3}$  zurück. Diesen Rückgang kann man auch bei den berechneten Werten beobachten, wobei allerdings die Konzentrationen bei SMOVO und SMOROP kleiner sind als die beobachteten.

Bei diesem beschreibenden, subjektiven Vergleich der Modellergebnisse von SMOVO und SMOROP ist zunächst kein herausragender Vorteil des einen Modells vor dem anderen zu erkennen. Die Lage der Konzentrationsmaxima wird von beiden Modellen gut wiedergegeben; beide Modelle haben aber auch Schwächen bei der Darstellung der achsialen Ausrichtung von Schadstoffahnen. Die Verbesserung, die in SMOROP aufgrund der besseren Auflösung der EM-Daten erwartet wurde, ist bei den betrachteten Fällen relativ gering. Es soll hier jedoch noch der Versuch gemacht werden, den Vergleich zu objektivieren. Dazu wurden die Verteilungen der gemessenen Tagesmittelwerte mit den jeweils von den Modellen berechneten Konzentrationsverteilungen korreliert und für jeden Tag des betrachteten Zeitraums Korrelationskoeffizienten berechnet. Dabei wurden nur diejenigen Raster berücksichtigt, für die Messungen vorlagen. Die hierbei gewonnenen Korrelationskoeffizienten sind in Abbildung 5.14 dargestellt.

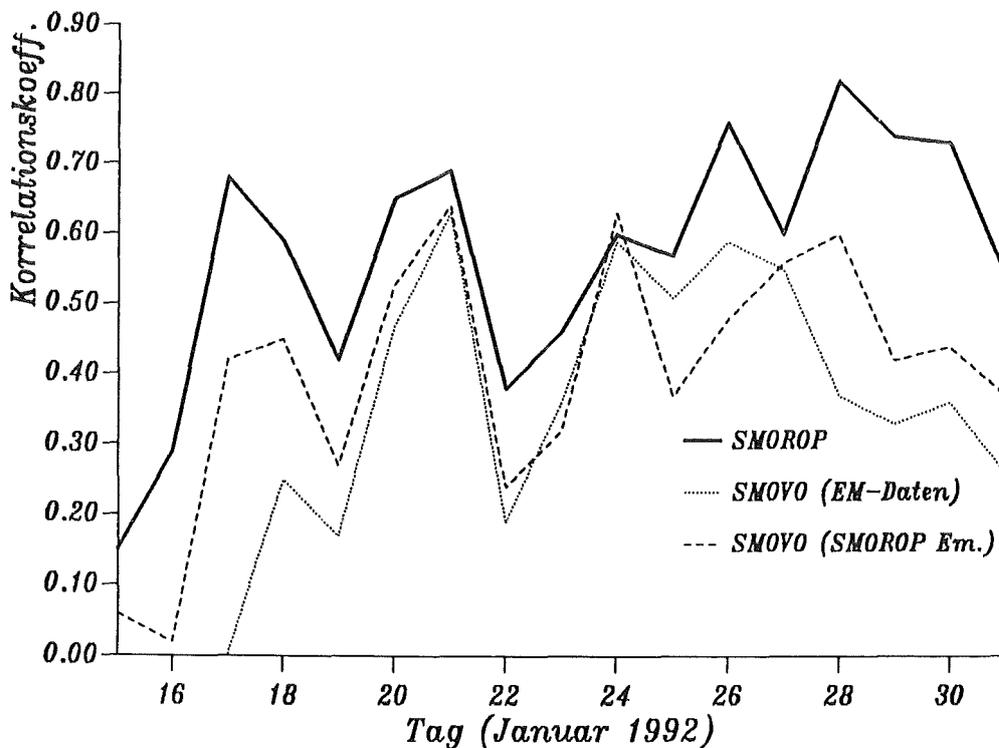


Abb. 5.14: Korrelationskoeffizienten für den Zusammenhang zwischen den gemessenen und mit Hilfe von SMOROP bzw. SMOVO berechneten Konzentrationsverteilungen für den 15. bis 31. Januar 1992

Es wird deutlich, daß bis auf eine Ausnahme (am 24. Januar) das mit Hilfe von SMOROP berechnete Konzentrationsfeld besser mit den Meßwerten korreliert ist als das von SMOVO berechnete. SMOROP erreicht Korrelationskoeffizienten von bis zu 0,8, während SMOVO unter einem Wert von 0,7 bleibt. Gegen Monatsende sind die Unterschiede zwischen SMOVO und SMOROP relativ groß, was unter anderem auf die große Anzahl divergierender Trajektorien zurückzuführen sein dürfte (s. dazu Abschn. 5.1.3.1). Ein Vergleich des zeitlichen Verlaufs des Korrelationskoeffizienten mit der Häufigkeit übereinstimmenden Trajektorienverlaufs von SMOVO und SMOROP zeigt weiterhin, daß an Tagen, an denen die Trajektorien weniger gut in ihrem Verlauf übereinstimmen, auch die Korrelation zwischen Meßwerten und Modellergebnissen relativ schlecht ist.

#### **5.1.3.2 Rechnungen mit SMOVO und SMOROP für den Dezember 1992 auf der Basis von EM-Daten**

Zusätzlich zu den eben beschriebenen Rechnungen wurden weitere Vergleichsrechnungen für den Dezember 1992 durchgeführt. Allerdings standen für diesen Monat keine BKN-Daten zur Verfügung, so daß sich die Untersuchung auf den Vergleich der Modellergebnisse von SMOROP mit denen von SMOVO auf der Basis von EM-Daten beschränkte. Die Emissionsdaten sind bei beiden Modellen gleich. Der hier durchgeführte Vergleich soll unabhängig von Unterschieden bei den prognostizierten Wetterdaten aufzeigen, inwieweit bei Rechnungen mit SMOROP verlässlichere Prognosen der  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen zu erwarten sind als bei Rechnungen mit SMOVO. Dabei geht es insbesondere darum, abzuschätzen, welchen Einfluß die in SMOROP gegenüber SMOVO eingeführten Verbesserungen, wie beispielsweise die höhere Auflösung des Windes in der atmosphärischen Grenzschicht, auf die Modellergebnisse haben. Im folgenden werden daher diejenigen Fälle genauer untersucht, bei denen die Modelle Schwierigkeiten haben könnten, die achsiale Ausrichtung von Schadstofffahnen korrekt zu beschreiben. Bei der Auswertung von Rechnungen mit SMOVO für das Smogfrühwarnsystem in den vorangegangenen Jahren war aufgefallen, daß die Ausrichtung prognostizierter Schadstofffahnen häufig im Uhrzeigersinn gegenüber den gemessenen Fahnen gedreht war /1/.

In den Konzentrationsverteilungen des 9. und 10. Dezember (Abb. 5.15) ist deutlich die fahnenartige Struktur der Immissionsverteilungen bei den Rechnungen, aber auch den Messungen, zu erkennen. Sehr deutlich tritt dabei auch die Drehung der achsialen Ausrichtung der von SMOVO berechneten Schadstoffvertei-

lung gegenüber der von SMOROP berechneten und auch der gemessenen Verteilung zu Tage. Hier dürfte sich die Ausnutzung der besseren Auflösung der Windverhältnisse in der atmosphärischen Grenzschicht durch das Europa-Modell in SMOROP positiv gegenüber den Vereinfachungen in SMOVO bemerkbar machen.

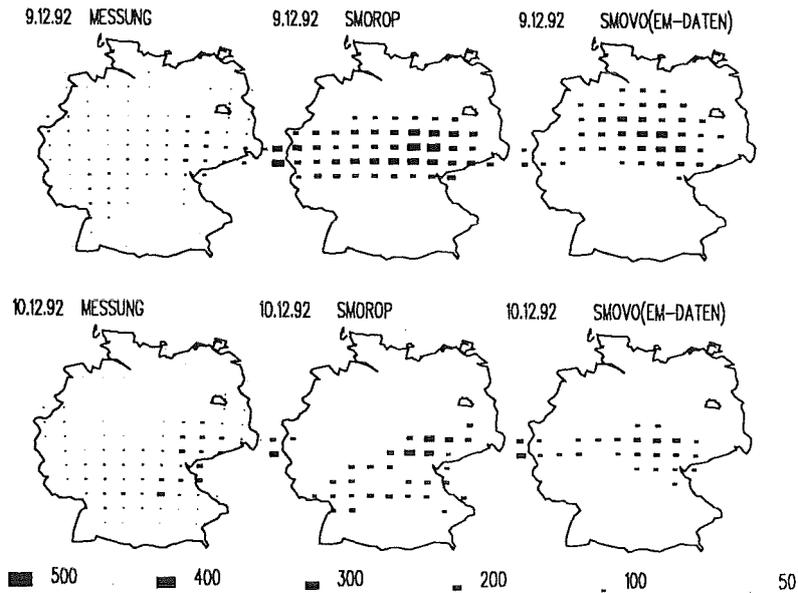
Eine ähnliche Situation ist bei den Immissionsverteilungen des 22., 23. und 24. Dezember zu beobachten (Abb. 5.16). Auch hier ist die achsiale Ausrichtung der mit SMOVO berechneten Fahne deutlich gegenüber der von SMOROP gedreht. Abgesehen von der deutlichen Überschätzung durch beide Modelle stimmt die räumliche Verteilung der gemessenen Konzentrationswerte besser mit der von SMOROP überein als mit der von SMOVO.

Die Betrachtung der Korrelation zwischen der gemessenen und der berechneten Konzentrationsverteilung (Tagesmittelwerte) zeigt, wie auch schon beim Vergleich der Januarwerte, höhere Korrelationen bei SMOROP. Der Korrelationskoeffizient von SMOVO liegt bis auf einen einzigen Fall unter dem von SMOROP. Bei beiden Modellen ist der Korrelationskoeffizient starken Schwankungen unterworfen, wobei die bei SMOROP auftretenden Minima mit geringen Korrelationswerten bei SMOVO einhergehen.

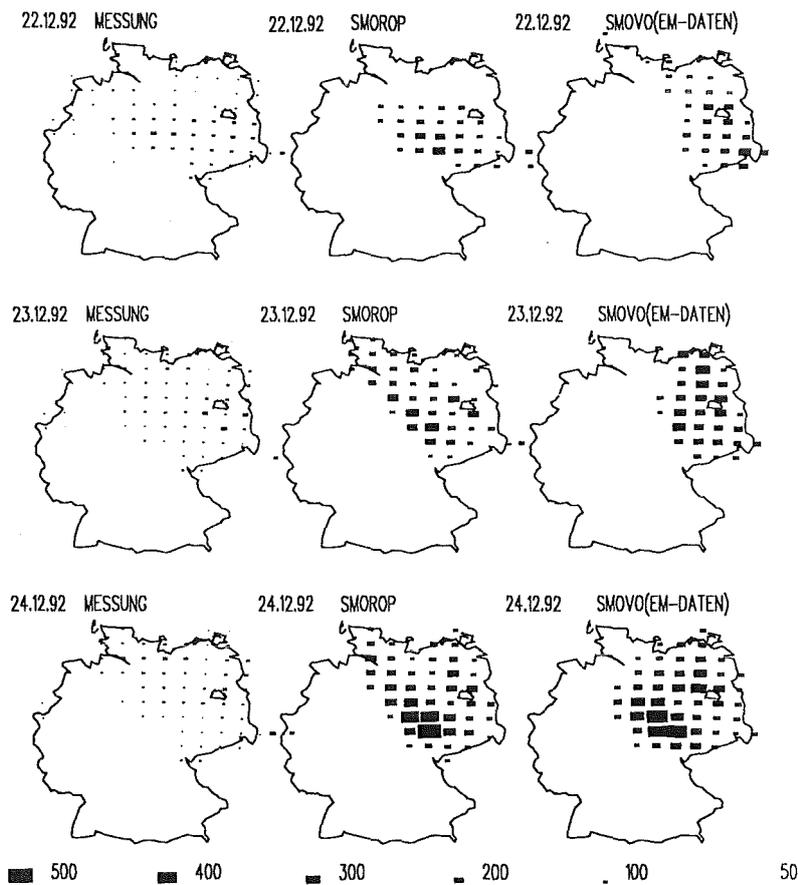
### 5.1.3.3 Bewertung des Modellvergleichs

Grundsätzlich kann gesagt werden, daß die Verbesserungen bei der Prognose der SO<sub>2</sub>-Konzentrationen durch SMOROP auf der Basis von EM-Daten nicht proportional dem erhöhten Aufwand gegenüber den Rechnungen mit SMOVO auf der Basis von BKN-Daten (oder auch reduzierten EM-Daten) folgen. Die weit bessere zeitliche und räumliche Auflösung der vom Europa-Modell gelieferten Wetterdaten hätte eigentlich eine weitgehendere Verbesserung der Güte der berechneten Konzentrationen erwarten lassen. Hier macht sich negativ bemerkbar, daß aufgrund der vielen vereinfachenden Annahmen weder SMOVO noch SMOROP die physikalischen und chemischen Prozesse beim Transport von SO<sub>2</sub> korrekt modellieren können.

Allerdings sind Verbesserungen bei SMOROP gegenüber SMOVO durchaus zu erkennen. Vor allem macht sich der Einfluß der höheren vertikalen Auflösung des Windfeldes, wie er vom Europa-Modell geliefert wird, positiv bemerkbar. Beim Vergleich der in den letzten Jahren im probeweisen Routinebetrieb für das Smog-



**Abb. 5.15:** Rasterkarten der gemessenen und von SMOVO und SMOROP auf der Basis von Wetterdaten des Europa-Modells berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen (in  $\mu\text{g m}^{-3}$ ) am 9. und 10. Dezember 1992



**Abb. 5.16:** Rasterkarten der gemessenen und von SMOVO und SMOROP auf der Basis von Wetterdaten des Europa-Modells berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen (in  $\mu\text{g m}^{-3}$ ) am 22., 23. und 24. Dezember 1992

frühwarnsystem prognostizierten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationsverteilungen mit Meßwerten /1/ war immer wieder aufgefallen, daß die Ausrichtung der berechneten Fahne gegenüber der beobachteten im Uhrzeigersinn gedreht war. Dies wurde vor allem auf die nicht berücksichtigte Windscherung des Windes in Bodennähe im Vergleich zu dem zur Trajektorienberechnung benutzten Wind im 850-hPa-Niveau zurückgeführt. Bei den hier durchgeführten Vergleichsrechnungen zeigte sich in vielen Fällen, daß die achsiale Ausrichtung der Schadstoffverteilung bei SMOROP wesentlich besser mit der beobachteten übereinstimmt als bei SMOVO. In den meisten Fällen allerdings geht bei beiden Modellen die Fahne in die gleiche Richtung, entsprechend der weitgehenden Übereinstimmung des Trajektorienverlaufs (s. Abschn. 5.1.2). Dies hat seinen Grund vor allem darin, daß die maximalen Änderungen in Windrichtung und -geschwindigkeit in Bodennähe stattfinden, darüber aber über größere Höhen hinweg vertikal homogene Verhältnisse herrschen. Wenn sich ein Schadstoffpaket in einiger Entfernung von der Quelle über die gesamte Mischungsschichthöhe verteilt hat, wird demnach sein Transport vor allem durch den Wind in den oberen Luftschichten kontrolliert. Diese Erkenntnis führte im übrigen auch zu den in SMOVO eingeführten Vereinfachungen bei der Berechnung des Schadstofftransports.

Die von beiden Modellen berechneten Schadstoffkonzentrationen sind im Vergleich zu den gemessenen in der Regel zu hoch. Allerdings wird umgekehrt das Auftreten extrem hoher gemessener Schadstoffkonzentrationen meist unterschätzt. Hier dürften vor allem die besonderen lokalen Verhältnisse am Standort des Meßcontainers eine Rolle spielen. Die Lage der höchsten Schadstoffkonzentrationen wird von beiden Modellen gut wiedergegeben, mit den eben beschriebenen Vorteilen von SMOROP bei der Beschreibung der achsialen Ausrichtung von Schadstofffahnen.

Insgesamt sind die mit SMOROP berechneten Konzentrationsverteilungen besser mit den Meßwerten korreliert als die mit SMOVO berechneten. Das heißt, daß von einem mit SMOROP prognostizierten Anstieg der Konzentrationen mit größerer Sicherheit auf einen zu erwartenden Anstieg der beobachteten Konzentrationen geschlossen werden kann als bei SMOVO. Über die Größenordnung des Anstiegs sind sich jedoch beide Modelle gleich unsicher, und es bleibt Aufgabe des auswertenden Meteorologen, den zu erwartenden Anstieg der Konzentrationen aufgrund seiner Erfahrungen im Routinebetrieb mit SMOROP (wie auch schon bei SMOVO) einzuschätzen.

## 5.2 Vergleich verschiedener Ansätze zur Berechnung der Mischungsschichthöhe in SMOROP

Seit Anfang 1991 stehen routinemäßig Vorhersagedaten aus dem Europa-Modell des Deutschen Wetterdienstes zur Verfügung. Unter Berücksichtigung der von diesem Modell in wesentlich höherer horizontaler und vertikaler Auflösung gelieferten meteorologischen Informationen wurde das Modell SMOROP entwickelt. Für die Berechnung der Mischungsschichthöhe bedeutete dies, die Frage zu klären, ob es einen anderen als den bisher gewählten Ansatz gibt, der die bessere vertikale Auflösung der Wind- und Temperaturdaten nutzen kann. Ebenfalls zu untersuchen war, ob dadurch signifikante Änderungen der berechneten Konzentrationen und der Übereinstimmung dieser Werte mit gemessenen Werten auftreten.

Aus der Literatur wurden zwei Verfahren ausgewählt, die jeweils das alte Berechnungsschema in SMOROP ersetzen. Da keine weiteren Änderungen im Programm vorgenommen wurden, zeigen die Modellergebnisse nur die Auswirkungen einer veränderten Berechnung der Mischungsschichthöhe.

Da der ursprünglich in SMOVO und in SMOROP verwendete Ansatz schon an anderer Stelle ausführlich beschrieben wurde /1/, werden im folgenden nur die zwei neuen Verfahren zur Berechnung der Mischungsschichthöhe kurz dargestellt. Im Anschluß daran werden verschiedene Ergebnisse der drei Berechnungsformen einander gegenübergestellt und interpretiert.

### 5.2.1 Verfahren zur Berechnung der Mischungsschichthöhe nach Ossing

Das Verfahren nach Ossing wird detailliert in /26/ beschrieben und entspricht einem Vorschlag von Heimann /27/, wobei für die labile Schichtung der Ansatz von Deardorff /28/ und für die stabile und neutrale Schichtung ein Ansatz von Smeda /29/ benutzt wird. Unter Vernachlässigung von thermischem Auftrieb und Wärmefluß gilt bei neutraler oder stabiler Schichtung für die Änderung der Mischungsschichthöhe  $dh/dt$  von einer Ausgangshöhe  $z$  aus:

$$\frac{dh}{dt} = c_1 \frac{u_*^2}{zf} \left[ 1 - \left( \frac{c_2 zf}{u_*} \right) a \right] \quad (1)$$

mit der Schubspannungsgeschwindigkeit  $u_*$  und  $a=3$ ,  $c_1=0,06$ ,  $c_2=3,3$  und  $f=0,000115$ . Die Wahl der Konstanten  $a$  und  $c_1$  beeinflusst die Reduktionszeit und

die Endhöhe der Mischungsschicht und soll Schwingungen der Richardsonzahl verhindern.

Für die labile Schichtung wird der folgende Ansatz vorgeschlagen. Dabei wird ein linearer Wärme flu ß  $F_h$  in der instabilen Schicht angenommen und die Turbulenz in der stabilen Schicht oberhalb der Grenzschicht vernachlässigt:

$$\frac{dh}{dt} = 1,8 F_h \left( z \gamma + \frac{9 w_*^2 \Theta}{gz} \right)^{-1} + w \quad (2)$$

$w_*$  ist die konvektive Skalengeschwindigkeit mit

$$w_* = \left[ \frac{g}{\Theta} F_h z \right]^{-1/3} \quad (3)$$

und  $\gamma = \partial\Theta/\partial z$  der Gradient der potentiellen Temperatur oberhalb der durchmischten Schicht. Mit  $\Theta$  wird die mittlere potentielle Temperatur innerhalb der durchmischten Schicht bezeichnet und  $g$  steht für die Erdbeschleunigung.

Im Modell wird zur Vereinfachung von der Annahme  $w = 0$  ausgegangen, außerdem wird bei labiler Schichtung das Anwachsen der Grenzschicht hauptsächlich auf konvektive Turbulenz zurückgeführt, d.h.:  $w_* > u_*$ .

Die Gleichungen (1) und (2) zur Berechnung der Mischungsschichthöhe können in Abhängigkeit von der Stabilität der Atmosphäre gelöst werden, wenn die Schubspannungsgeschwindigkeit  $u_*$  und der Wärme flu ß  $F_h$  bekannt sind. Das zur Berechnung dieser Größen verwendete Verfahren wird in Abbildung 5.17 dargestellt.

Die Entscheidung über die atmosphärische Stabilität wird über die Bulk-Richardsonzahl getroffen:

$$Ri_b = - \frac{gz}{\Theta} \cdot \frac{(\Theta_s - \Theta)}{u^2} \quad (4)$$

wobei für  $Ri_b < 0$  labile und für  $Ri_b \geq 0$  stabile bis neutrale Verhältnisse angenommen werden.  $\Theta_s$  bezeichnet in dieser Gleichung die Temperatur am Erdboden und  $u$  die mittlere Windgeschwindigkeit in der atmosphärischen Grenzschicht.

	Impuls:	Wärme:
	$u_* = C_{ux} u$	$F_h = -C_{tx} u_* (\Theta - \Theta_s)$
neutral	$C_{un} = \left[ \frac{1}{\kappa} \ln \left( \frac{0,025 z}{z_o} \right) + 8,4 \right]^{-1}$	$C_{tn} = \left[ \frac{1}{\kappa} R \ln \left( \frac{0,025 z}{z_o} \right) + 7,3 \right]^{-1}$
stark stabil	$C_{us} = C_{un} \left( 1 - \frac{Ri}{Ri_c} \right)$	$C_{ts} = C_{tn} \left( 1 - \frac{Ri}{Ri_c} \right)$
labil	$C_{ul} = \left[ C_{un}^{-1} - 25 \exp \left( 0,26 \zeta - 0,03 \zeta^2 \right) \right]^{-1}$	$C_{tl} = \left[ C_{tn}^{-1} + C_{us}^{-1} - C_{un}^{-1} \right]^{-1}$

mit:

$R = 0,74$

$Ri_c = 3,05$  (kritische Richardsonzahl mit  $Ri \leq 0,9 Ri_c$ )

$\zeta = \log(-Ri_*) - 3,5$  und  $Ri_* = \max(Ri, Ri_{con})$

$Ri_{con} = -10^v$  (Untergrenze der Richardsonzahl, unterhalb derer freie Konvektion herrscht)

mit:

$$v = 4,25 \log \left[ \log \left( \frac{z}{z_o} \right) \right] - 0,78$$

$u_*$  Schubspannungsgeschwindigkeit  
 $F_h$  gemittelter Wärmefluß  
 $C_{ux}$  Widerstandskoeffizient für den Impuls  
 $C_{tx}$  Wärmeübergangskoeffizient (x='n' für neutrale Fälle,  
x='s' für stabile Fälle,  
x='l' für labile Fälle)

$z$  Höhe (entspricht augenblicklicher Mischungsschichthöhe)  
 $z_o$  Rauigkeitsparameter  
 $\kappa$  vonKarman-Konstante

Literatur: /27/, /30/

Abb. 5.17: Berechnung der Schubspannungsgeschwindigkeit und des Wärmeflusses in Abhängigkeit von der Stabilität zur Bestimmung der Mischungsschichthöhe nach Ossing

Das Verfahren von Ossing wird in SMOROP für alle Landrasterpunkte angewendet. Über dem Meer werden in Abhängigkeit von der Pasquillkategorie konstante Mischungsschichthöhen verwendet, und zwar 1500 m bei instabilen, 1000 m bei neutralen und 500 m bei stabilen Verhältnissen. Zur Berechnung der Mischungsschichthöhe über Land gehen aus dem Europa-Modell folgende Daten in die Berechnung ein:

- Der Luftdruck und die Temperatur sowie die Windgeschwindigkeit in den untersten 7 Modellschichten des Europa-Modells (einschließlich der Temperatur in 2 m Höhe und der Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe) zusammen mit der Höhe der Schichtmitten zur Berechnung des vertikalen Temperaturprofils bzw. der mittleren Temperatur und Windgeschwindigkeit in der Mischungsschicht,
- die Oberflächentemperatur zur Berechnung von  $\Theta_s$
- und der turbulente Wärmestrom am Erdboden zur Berechnung von  $F_h$ .

Der verwendete Ansatz nach Ossing ist stark von der Mischungsschichthöhe im vorherigen Zeitschritt abhängig. Für den ersten Zeitschritt beim Modellstart wird, abhängig von der Pasquillkategorie, eine Mischungsschichthöhe von 1700 m für instabile, von 1100 m für neutrale und von 600 m für stabile Bedingungen verwendet /31/.

$\Theta$  und  $u$  werden als Mittelwerte über die vorherige Mischungsschichthöhe bzw. einer Höhe von maximal 7 Modellschichten ermittelt. Die Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe ist nach unten auf 1 m/sec begrenzt, die Richardsonzahl wird bei  $|Ri| \leq 0.02$  als neutral angesehen. Die Mischungsschichthöhen sind auf mindestens 100 m und höchstens 3000 m begrenzt.

Die numerische Integration erfolgt nach dem Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung /32/. Der Zeitschritt von 90 Sekunden wurde für ausreichend genau befunden und ergab eine angemessene Rechenzeiterparnis.

### 5.2.2 Verfahren zur Bestimmung der Mischungsschichthöhe nach Verver und Scheele

Das Verfahren nach Verver und Scheele /33/ beruht im wesentlichen auf Arbeiten, die in /34, 35 und 36/ ausführlich beschrieben werden. Bei labiler Schichtung wird folgende Gleichung zugrunde gelegt:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\left( \overline{\Theta w} \right)_0}{\gamma h \left( 1 - \left( \frac{\kappa C_2}{C_1} \right) \frac{L}{h} \right)} \left[ 1 + 2 C_1 + 2 \kappa^2 \frac{C_2^2}{C_1} \left( \frac{L}{h} \right)^2 \right] \quad (5)$$

mit der sogenannten Monin-Obukhov-Länge  $L$ , einem Maß für die statische Stabilität innerhalb der Oberflächenschicht, der von Karman-Konstante  $\kappa$ , dem sensiblen Wärmefluß an der Oberfläche  $(\overline{\Theta w})_0$ , der Mischungsschichthöhe  $h$  und den Konstanten  $C_1 = 0,2$ , und  $C_2 = 5,0$ .

Eine stabile Schichtung erscheint allgemein während der Nacht, wenn die Bodenoberfläche durch Ausstrahlung abkühlt. Die Reibung erzeugt nur eine kleine turbulente Schicht. Niewstadt /37/ leitete folgenden Ausdruck unter Verwendung von Gleichungen nach Brost und Wyngaard /38/ ab:

$$h = \frac{0,2 \frac{u_*}{f}}{1 + 1,9 \frac{h}{L}} \quad (6)$$

mit  $u_*$  als Reibungsgeschwindigkeit. Im neutralen Fall reduziert sich diese Gleichung unter der Bedingung  $L \rightarrow \infty$  zu

$$h = 0,2 \frac{u_*}{f} \quad (7)$$

Um die Gleichungen lösen zu können, müssen die Größen  $L$  und  $u_*$  bestimmt werden. Dazu werden in Abhängigkeit von der Stabilität die in Abbildung 5.18 zusammengefaßten integrierten Fluß-Profil-Funktionen benutzt. Während im neutralen Fall Gleichung (7) sofort mit Hilfe des in Abbildung 5.18 angegebenen  $u_*$  gelöst werden kann, wird im labilen bzw. stabilen Fall die Monin-Obukhov-Länge

$L$  iterativ ermittelt. Im labilen Fall startet die Iteration mit dem Wert  $L = -36$ . Die Iteration wird fortgesetzt, bis sich die Werte nur noch um 5% unterscheiden. Im stabilen Fall wird die Schubspannungsgeschwindigkeit  $u_*$  des neutralen Falls zur Bestimmung eines Startwerts für  $L$  benutzt und dabei  $\Theta_*$  durch folgende Beziehung angenähert:

$$\Theta_* = \frac{\kappa \Delta\Theta}{\ln\left(\frac{z_2}{z_1}\right)} \quad (8)$$

Folgende Daten des Europamodells werden benötigt:

- Der Luftdruck und die Temperatur in den untersten 7 Modellschichten des Europa-Modells einschließlich der Temperatur in 2 m Höhe zusammen mit der Höhe der Schichtmitten zur Berechnung des vertikalen Temperaturprofils in der Mischungsschicht,
- die Temperatur in 2 m Höhe und an der Bodenoberfläche zur Berechnung von  $\Delta\Theta$ ,
- die Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe zur Berechnung von  $u_*$  und
- die Rauigkeitslänge  $z_0$ .

Die Anfangswerte der Mischungsschichthöhen und die Mischungsschichthöhen über dem Meer entsprechen denjenigen, die auch beim Verfahren nach Ossing (Abschn. 5.2.1) verwendet werden. Dasselbe gilt für die Begrenzung der berechneten Mischungsschichthöhen auf einen Bereich zwischen 100 und 3000 m. Unterer Grenzwert für die Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe ist 1,0 m/sec und  $u_*$  ist durch einen Wert von 0,001 nach unten begrenzt. Die Stabilitätsentscheidung beim Ansatz nach Verver und Scheele wird auf der Basis des Temperaturgradienten getroffen, da die eigentlich dafür vorgeschlagene Richardson-Zahl auf der Basis von EM-Daten durchweg zu klein ausfiel und fast nur neutrale Fälle ergab. Bei einer Temperaturdifferenz zwischen  $-0,01$  und  $0,01$  K wird die Atmosphäre als neutral geschichtet angesehen, bei Werten unter  $-0,1$  K ist die Schichtung labil und über  $0,01$  K stabil.

Bei dem Gleichungssystem nach Verver und Scheele muß nur Gleichung (5) numerisch integriert werden, was wiederum mit dem Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung mit einem Zeitschritt von  $t = 60$  s durchgeführt wird.

$$L = \frac{T u_*^2}{\kappa g \Theta_*} \quad \text{mit:} \quad u_* = \kappa u_z \left[ \ln \frac{z}{z_0} - \Psi_m \left( \frac{z}{L} \right) + \Psi_m \left( \frac{z_0}{L} \right) \right]^{-1} \quad \Theta_* = \kappa \Delta \Theta \left[ \ln \frac{z_2}{z_1} - \Psi_h \left( \frac{z_2}{L} \right) + \Psi_h \left( \frac{z_1}{L} \right) \right]^{-1} \quad \Psi_m \left( \frac{z}{L} \right) = \int_0^{z/L} \frac{1 - \Phi_m(\xi)}{\xi} d\xi$$

neutraler Fall ( $L \rightarrow \infty$ ):  $u_* = \kappa u_z \cdot \ln \left( \frac{z}{z_0} \right)$

$\Psi_h$  dto.

sonst:

instabiler Fall ( $-2 \leq z/L \leq 0$ ):

$$\Phi_m = \frac{1}{x} \quad \Phi_h = \Phi_m^2$$

$$\Psi_m = 2 \ln \left( \frac{1+x}{2} \right) + \ln \left( \frac{1+x^2}{2} \right) - 2 \tan^{-1}(x) + \frac{\pi}{2}$$

$$\Psi_h = 2 \ln \left( \frac{1+x^2}{2} \right) \quad \text{mit } x = (1-16z/L)^{0,25}$$

mäßig stabiler Fall ( $0 \leq z/L \leq 0,5$ ):

$$\Phi_m = 1 + a \left( \frac{z}{L} \right) \quad \Phi_h = \Phi_m$$

$$\Psi_m = -a \left( \frac{z}{L} \right) \quad \Psi_h = \Psi_m$$

mit  $a=5$

stark stabiler Fall ( $0,5 \leq z/L \leq 10$ ):

$$\Phi_m = 8 - \frac{4,25}{\left( \frac{z}{L} \right)} + \frac{1}{\left( \frac{z}{L} \right)^2} \quad \Phi_h = 2 \Phi_m$$

$$\Psi_m = -7 \ln \frac{z}{L} - \frac{4,25}{\left( \frac{z}{L} \right)} + \frac{0,5}{\left( \frac{z}{L} \right)^2} \quad \Psi_h = 2 \Psi_m$$

$L$  Monin-Obukhov-Länge

$\kappa$  vonKarman-Konstante

$T$  Lufttemperatur

$u_*$  Schubspannungsgeschwindigkeit

$z_0$  Rauigkeitsparameter

$g$  Erdbeschleunigung

$\Theta_*$  charakteristisches Temperaturmaß

$z$  Höhe

$u_z$  Wind in 10 m Höhe

Literatur: /39 - 42/

Abb. 5.18: Berechnung der Monin-Obukhov-Länge und der Schubspannungsgeschwindigkeit mit Hilfe der integrierten Fluß-Profil-Funktionen  $\Psi_m$  und  $\Psi_h$  als Grundlage zur Bestimmung der Mischungsschichthöhe nach Verver und Scheele

### **5.2.3 Rechnungen mit den unterschiedlichen Ansätzen zur Berechnung der Mischungsschichthöhe**

Die beiden dargestellten Ansätze zur Berechnung der Mischungsschichthöhe nach Ossing bzw. Verver und Scheele wurden jeweils als eigenständige Unterprogramme in SMOROP eingebaut und in der Folge drei getrennte SMOROP-Läufe gerechnet, jeweils mit dem alten aus SMOVO übernommenen Ansatz sowie mit den beiden neuen Ansätzen.

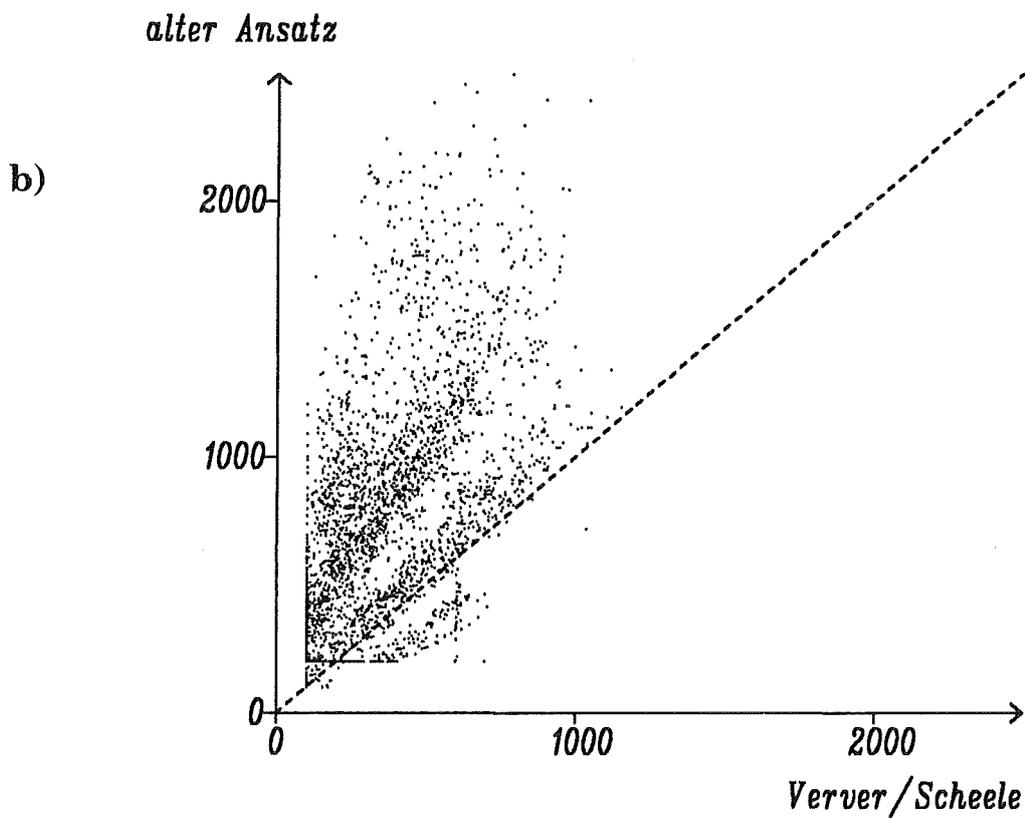
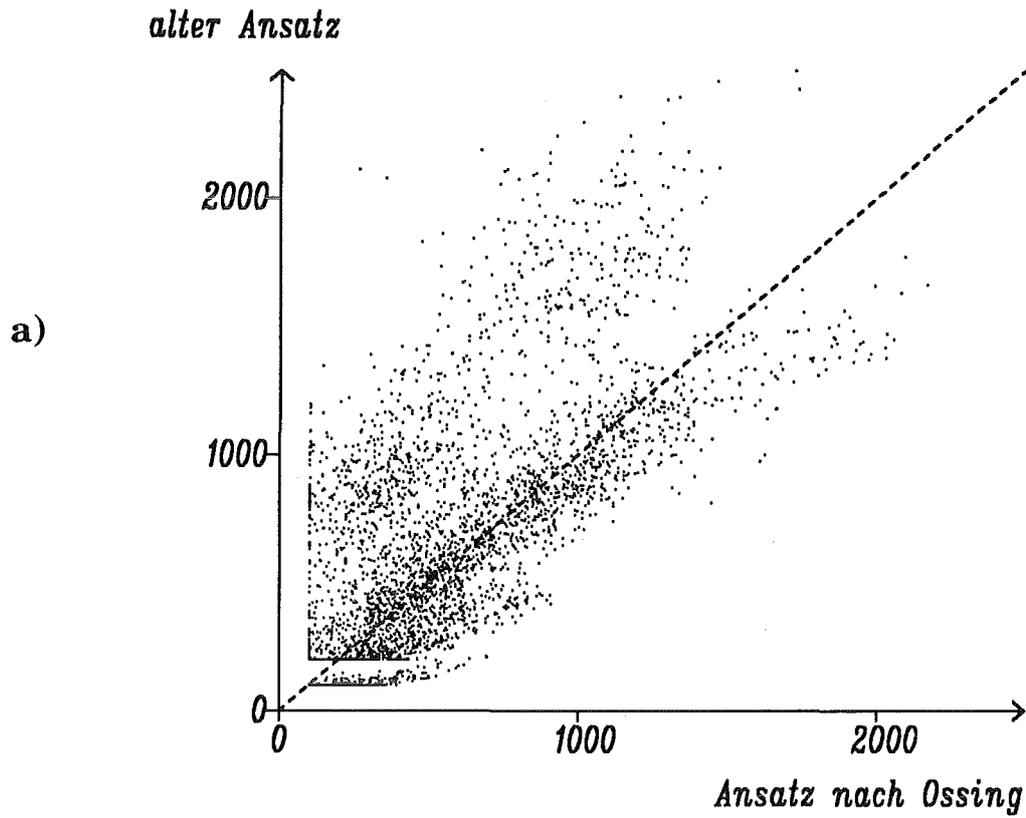
Für die Rechnungen wurde der Dezember 1992 ausgewählt und der Vergleich der berechneten Konzentrationen untereinander und mit Meßwerten für 15 ausgewählte Rasterflächen vollzogen. Auf diesen Rasterflächen liegen die für die Untersuchungen in Abschnitt 4.1 ausgewählten und in Tabelle 4.1 angeführten UBA-Stationen.

#### **5.2.3.1 Vergleich der Mischungsschichthöhen**

Die Abbildungen 5.19 a und b stellen den Vergleich der Mischungsschichthöhen der Modelle als Punktwolken für alle 15 Rasterflächen und den gesamten betrachteten Zeitraum dar. Im Vergleich zwischen dem alten Ansatz und dem Ansatz nach Ossing (s. Abb. 5.19 a) ist deutlich eine Zweiteilung der Punktwolke zu erkennen. Eine Unterscheidung nach Stabilitätsklassen ergibt, daß der obere Zweig durch die labilen Fälle mit einer Pasquillkategorie  $< 4$  gebildet wird. Bei diesen nur am Tag vorkommenden Fällen liegt demnach die Mischungsschichthöhe nach Ossing deutlich unter der nach dem alten Ansatz berechneten. Der Zweig, der eine bessere Übereinstimmung der Modelle untereinander zum Ausdruck bringt, beinhaltet im wesentlichen die neutralen Fälle.

Die Mischungsschichthöhen nach dem Ansatz von Verver und Scheele bleiben noch deutlicher unter den nach dem alten Ansatz berechneten Höhen. Auch hier sieht man eine starke Strukturierung der Punktwolke. Die Äste ergeben sich nach der gleichen Differenzierung wie im vorigen Fall. Der dritte hier erkennbare Ast stellt die nach der Pasquillkategorie stabilen Fälle dar, bei denen die nach dem Ansatz von Verver und Scheele berechneten Mischungsschichthöhen allgemein größer sind als die nach dem alten Ansatz berechneten.

In den Abbildungen 5.20 a und b ist exemplarisch der zeitliche Verlauf der Mischungsschichthöhen zwischen dem 5. und 13. bzw. 21. und 31. Dezember 1992 für alle drei betrachteten Ansätze im Raster der Station Schleiz dargestellt. Es fällt



**Abb. 5.19:** Vergleich der Mischungsschichthöhen nach dem alten in SMOROP verwendeten Ansatz mit den neuen Ansätzen von Ossing (a) bzw. Verver und Scheele (b) für 15 SMOROP-Rasterflächen und alle Termine im Dezember 1992

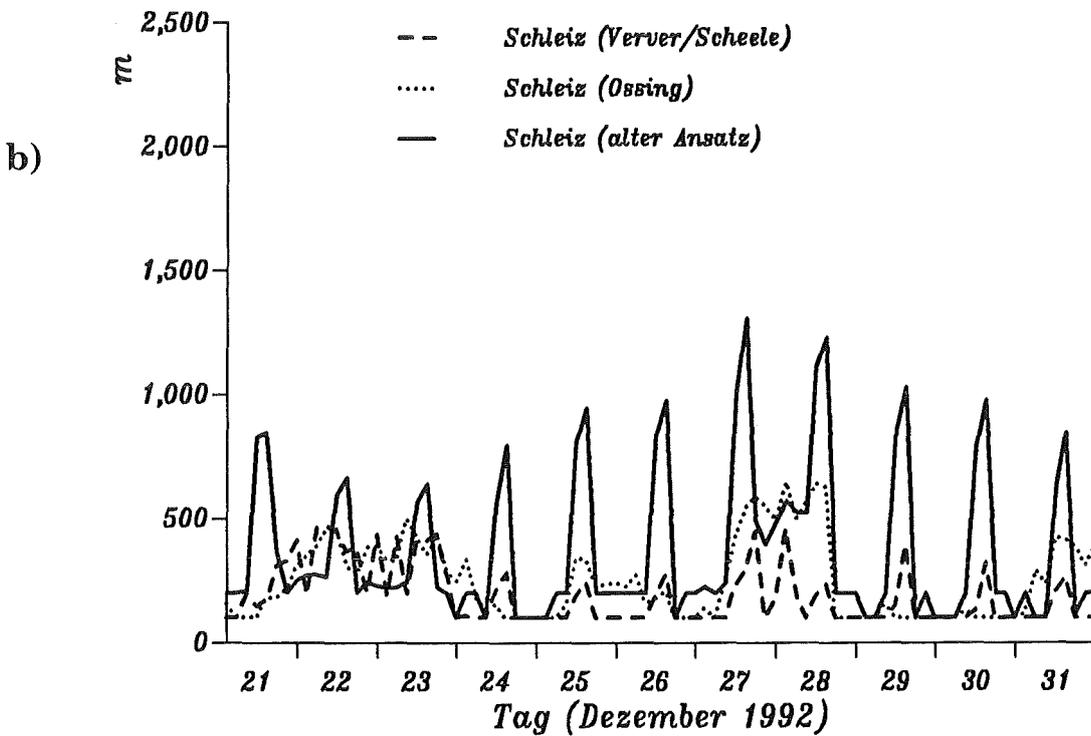
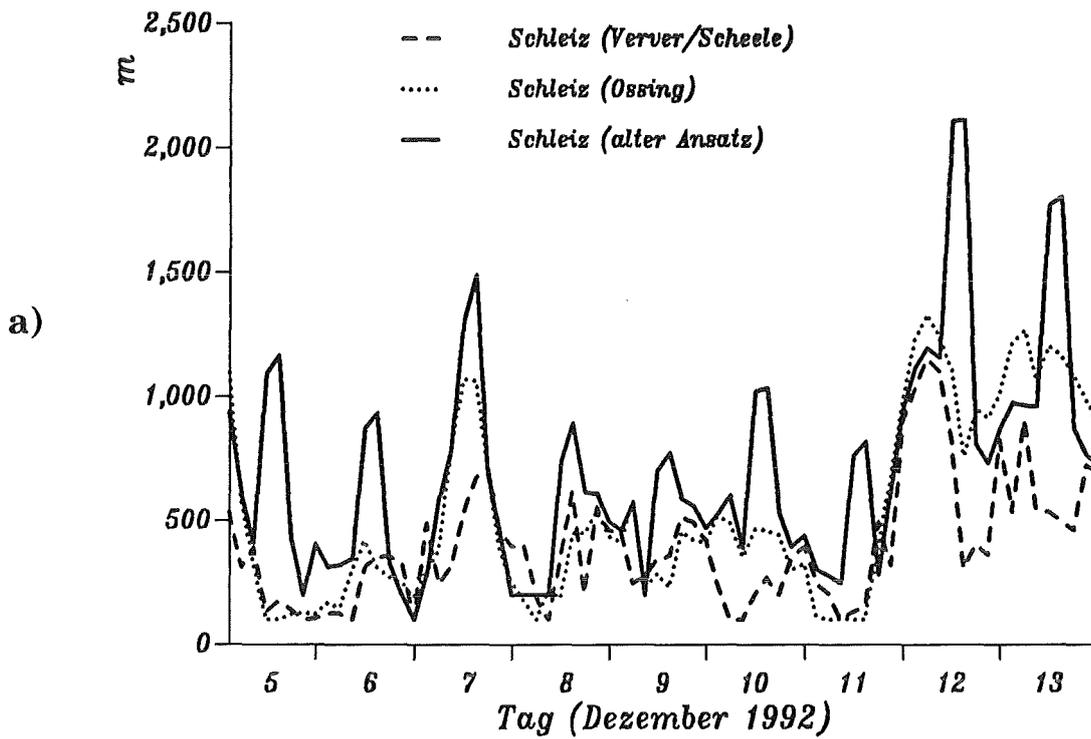


Abb. 5.20: Zeitlicher Verlauf der Mischungsschichthöhen nach altem Ansatz und den Ansätzen von Ossing bzw. Verver und Scheele für die Station Schleiz zwischen dem 5. und 13. (a) bzw. 21. und 31. Dezember 1992 (b)

sofort ins Auge, daß die nach dem alten Ansatz berechnete Mischungsschichthöhe den am stärksten ausgeprägten Tagesgang aufweist und die Tagesmaxima in der Regel über den nach dem Ansatz von Ossing bzw. Verver und Scheele berechneten Werten liegen. Auf der anderen Seite sind die nach dem alten Ansatz berechneten nächtlichen Mischungsschichthöhen häufig kleiner als die nach den neuen Ansätzen berechneten.

Außer von der Art der jeweiligen Ansätze sind die Unterschiede im Verlauf der Mischungsschichthöhe auch vom jeweils benutzten Verfahren zur Unterscheidung der atmosphärischen Stabilität abhängig. Im Gegensatz zur Klassifizierung nach Pasquill, in die abgesehen vom Bedeckungsgrad allein bodennahe Größen eingehen, wird die Unterscheidung der Stabilität in den beiden neuen Ansätzen zur Berechnung der Mischungsschichthöhe von den Verhältnissen in den unteren Atmosphärenschichten bestimmt.

Der ausgeprägte Gang der Mischungsschichthöhe nach dem alten Ansatz geht mit entsprechenden Schwankungen der Pasquill-Kategorie zwischen stabilen Fällen in der Nacht und labilen Fällen am Tage einher. Diese relativ großen Schwankungen werden zum Teil durch die Verwendung des 10 m-Windes des Europa-Modells zur Bestimmung der Pasquill-Kategorie verursacht (s. dazu Abschn. 5.1.1.2).

Ein ähnlicher Zusammenhang zwischen dem Verlauf der Mischungsschichthöhe und der Stabilität besteht beim Ansatz von Verver und Scheele. Jedoch ist die Abhängigkeit von der hier zur Bestimmung der Stabilität benutzten Richardson-Zahl nicht ganz so eindeutig wie beim alten Ansatz die Abhängigkeit von der Pasquill-Kategorie. Die beim Ansatz von Ossing verwendete Bulk-Richardson-Zahl liegt während des hier betrachteten Zeitraums fast ausschließlich im stabilen Bereich, so daß der Tagesgang vor allem von anderen im Ansatz benutzten Parametern abhängt.

### **5.2.3.2 Vergleich der SO<sub>2</sub>-Konzentrationen**

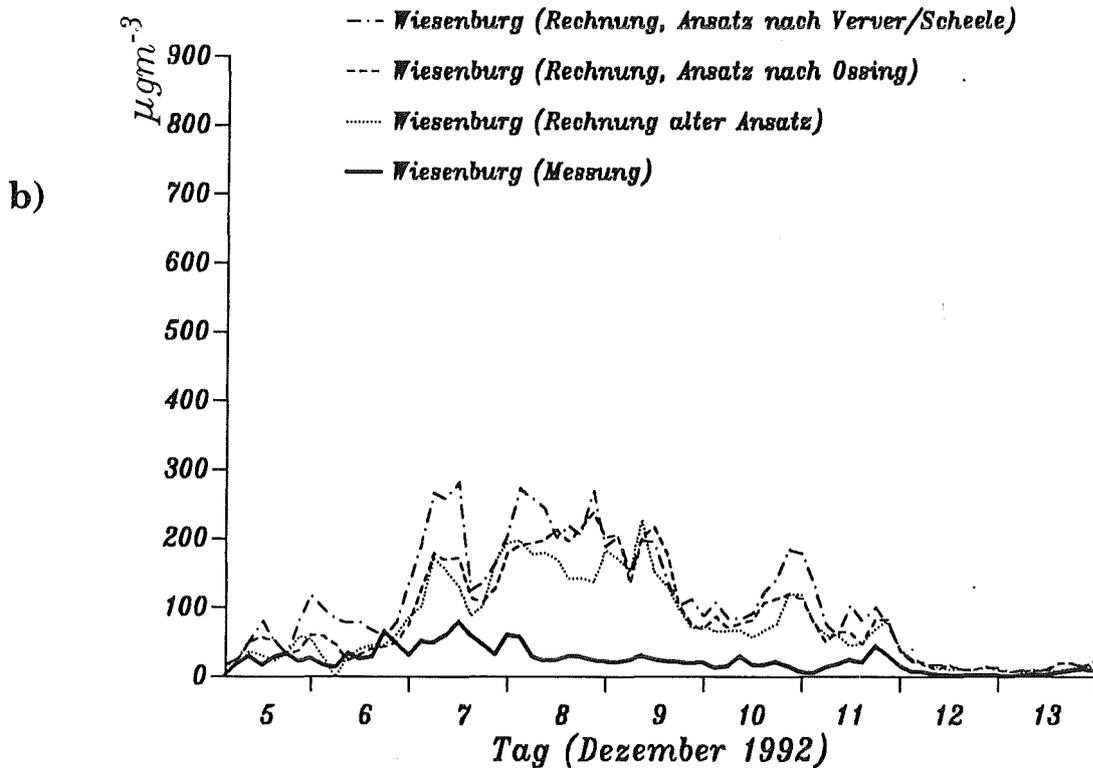
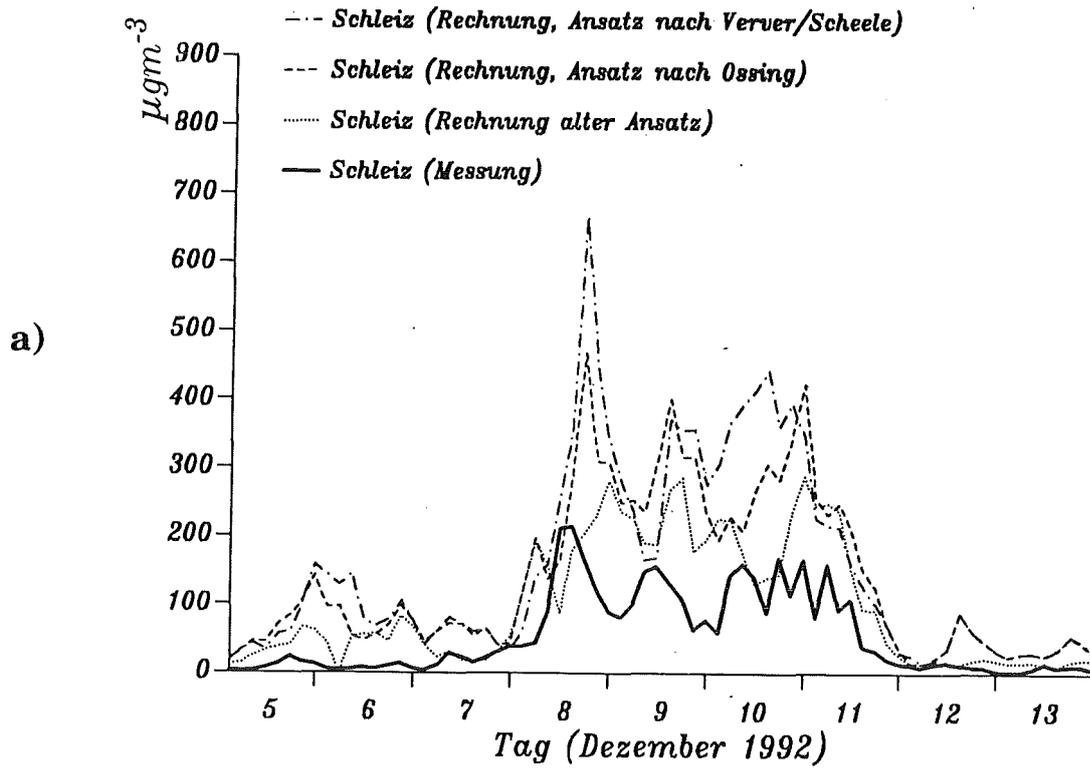
Für den Vergleich der mit Hilfe der unterschiedlichen Ansätze zur Mischungsschichthöhenbestimmung berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen wurden die Zeitreihen an den Rasterflächen zweier UBA-Stationen herangezogen, die schon in Abschnitt 4.1 ausführlich behandelt wurden. Es handelt sich um die Station Wiesenburg mit relativ großen Abweichungen zwischen Meß- und Rechenwerten und die Station Schleiz, bei der die Übereinstimmung zwischen den gemessenen und mit

dem alten Mischungsschichthöhenansatz berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen vergleichsweise gut ist.

Die Zeitreihen für die Rasterflächen der Stationen Wiesenburg und Schleiz für den Zeitraum zwischen dem 5. und 13. bzw. 21. und 31. Dezember 1992 sind in Abbildung 5.21 und 5.22 für alle drei Ansätze zur Berechnung der Mischungsschichthöhe zusammen mit den Meßwerten dargestellt. Dabei ist anzumerken, daß der Verlauf der auf der Basis des alten Mischungsschichthöhenansatzes berechneten Konzentrationen von dem in Abschnitt 4.1 gezeigten Verlauf abweichen kann, da sich die verwendeten Wetterdaten leicht unterscheiden. Im Gegensatz zu den dort verwendeten Prognosedaten (bis 0 UTC + 48 h) werden im Zusammenhang mit dem Vergleich der einzelnen Ansätze zur Berechnung der Mischungsschichthöhe Wetterdaten verwendet, die alle 12 Stunden aktualisiert wurden (0 UTC bis 0 UTC + 12 h, 12 UTC bis 12 UTC + 12 h, etc.).

Bei den gezeigten Zeitverläufen fällt sofort auf, daß die mit den neuen Ansätzen zur Berechnung der Mischungsschichthöhe berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen meist höher sind als die mit dem alten Ansatz berechneten. Besonders für den Zeitraum zwischen dem 5. und 13. Dezember bedeutet dies eine noch größere Überschätzung der Meßwerte als schon durch die mit dem alten Ansatz berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen. In der Zeit zwischen dem 8. und 11. Dezember mit leicht erhöhten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen in der Rasterfläche der Station Schleiz werden die gemessenen Werte besonders stark überschätzt. Die höchsten Konzentrationen werden dabei mit dem Ansatz nach Verver und Scheele berechnet. Auch für die Station Wiesenburg, wenn auch nicht so deutlich wie bei der Station Schleiz, liefert der Ansatz nach Verver und Scheele in der Regel höhere Konzentrationen als alle anderen untersuchten Ansätze.

Zwischen dem 21. und 31. Dezember sind wesentlich größere Schwankungen bei den gemessenen und berechneten Konzentrationen zu verzeichnen. In diesem Zeitraum gibt es zudem Fälle, bei denen die gemessenen Konzentrationen größer sind als die berechneten. Auffällig ist, daß gerade in diesen Fällen die Unterschiede zwischen den jeweils mit den unterschiedlichen Ansätzen für die Mischungsschichthöhe berechneten Konzentrationen wesentlich geringer sind als in den Fällen, bei denen es zu einer Überschätzung der Meßwerte durch die berechneten Konzentrationen kommt. Deshalb werden die durch den alten Ansatz unterschätzten Meßwerte durch die beiden neuen Ansätze nur unwesentlich besser wiedergegeben, während bei den berechneten Spitzenwerten die Abweichungen von den Meßwerten bei den neuen Ansätzen im Vergleich zum alten Ansatz sehr groß



**Abb. 5.21:** Zeitlicher Verlauf der  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für die drei unterschiedlichen Mischungsschichthöhenansätze zusammen mit den Meßwerten an den Stationen Schleiz (a) und Wiesenburg (b) für den 5. bis 13. Dezember 1992

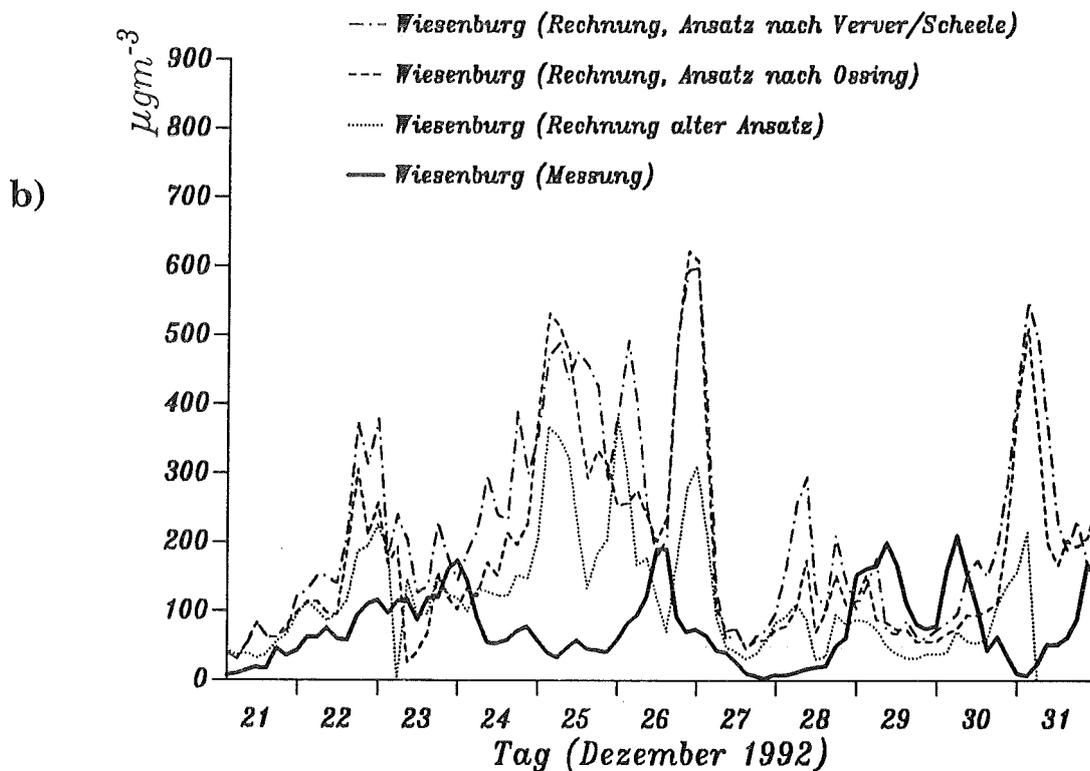
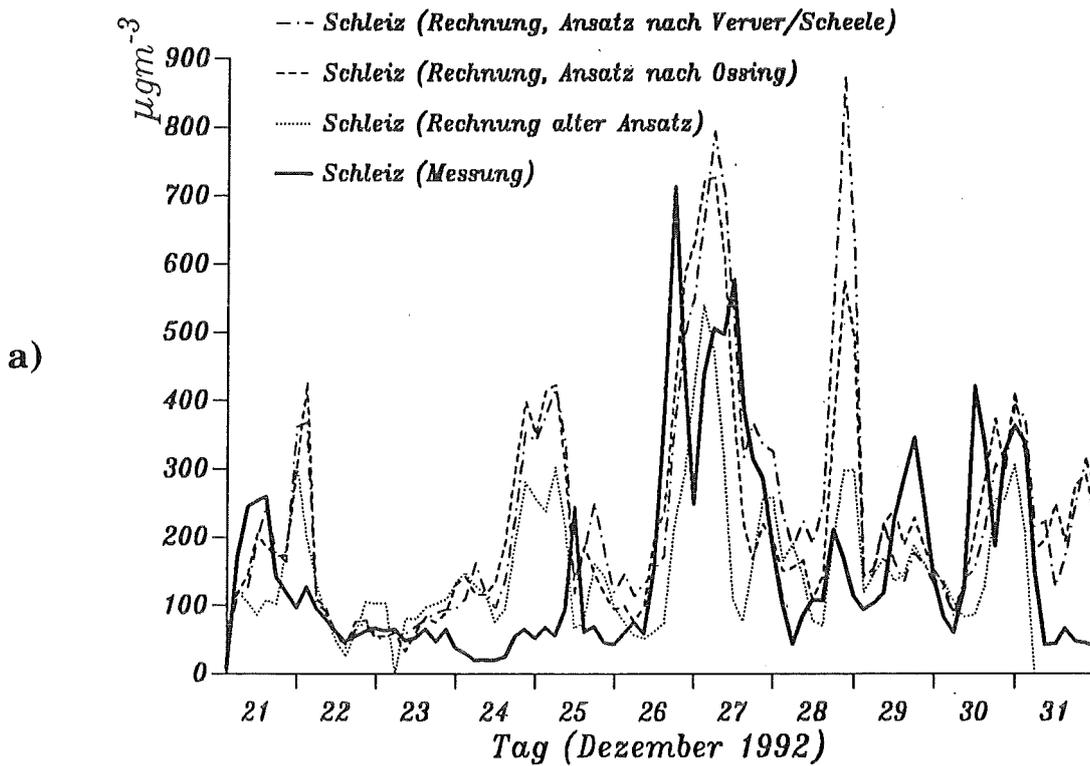


Abb. 5.22: Zeitlicher Verlauf der  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für die drei unterschiedlichen Mischungsschicht Höhenansätze zusammen mit den Meßwerten an den Stationen Schleiz (a) und Wiesenburg (b) für den 21. bis 31. Dezember 1992

sind. Auch hier liefert der Ansatz nach Verver und Scheele die höchsten Konzentrationen, während die mit Hilfe des Ansatzes nach Ossing berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen meist zwischen denjenigen liegen, die mit dem alten Ansatz und dem Ansatz nach Verver und Scheele berechnet wurden.

#### 5.2.4 Bewertung

Die nach den hier untersuchten neuen Ansätzen nach Ossing bzw. Verver und Scheele berechneten Mischungsschichthöhen weisen einen wesentlich geringeren Tagesgang auf als die nach dem alten Ansatz berechneten Mischungsschichthöhen. Vor allem beim Ansatz nach Verver und Scheele liegen die erreichten Tagesmaxima der Mischungsschichthöhe weit unter den nach dem alten Ansatz berechneten. Der verminderte Tagesgang der Mischungsschichthöhe und die damit verminderte vertikale Durchmischung führt im allgemeinen zu einer Überschätzung der berechneten Werte vor allem dort, wo die Immissionen durch nahegelegene Quellen bestimmt sind. Bei neutraler Schichtung der Atmosphäre sind die Unterschiede zwischen den jeweiligen Ansätzen eher gering. In größerer Entfernung von den Quellen ist der Einfluß des Tagesganges der Mischungsschichthöhe auf die berechneten Konzentrationen relativ klein, da hier der Trajektorienverlauf der bestimmende Faktor ist.

Einen zusammenfassenden Überblick über die Unterschiede bei den auf der Basis der unterschiedlichen Mischungsschichthöhenansätzen berechneten Konzentrationswerten gibt die Darstellung des Zeitverlaufs der Korrelation zwischen den gemessenen und jeweils berechneten Rasterwerten in Abbildung 5.23 (analog zur Darstellung in Abschnitt 5.1.3.1). Es wird deutlich, daß die Unterschiede zwischen den einzelnen Ansätzen, betrachtet man das gesamte Vorhersagegebiet, relativ gering sind. Die Korrelation zwischen den mit neuen Ansätzen berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen und den gemessenen Werten ist während des betrachteten Zeitraums meist etwas geringer als im Falle des alten Ansatzes, aber es gibt auch Tage, an denen die neuen Ansätze bessere Prognosen liefern.

Angesichts dieser relativ geringen Unterschiede bei der Prognose der SO<sub>2</sub>-Konzentrationen für das gesamte Vorhersagegebiet und der Schwierigkeiten der neuen Ansätze mit dem Nahbereich kann geschlossen werden, daß die Berechnung der Mischungsschichthöhe vor allem im Hinblick auf die Rechenzeitersparnis beibehalten werden sollte. Dafür spricht auch, daß mit diesem Ansatz bislang gute Erfahrungen bei der Smogprognose gesammelt wurden. Als Möglichkeit für

die Zukunft könnte ins Auge gefaßt werden, die Mischungsschichthöhe innerhalb des Europa-Modells (mit den dort verwendeten Grenzschichtparametrisierungen) zu berechnen und in einer dem Ausbreitungsmodell SMOROP zugänglichen Datenbank abzulegen.

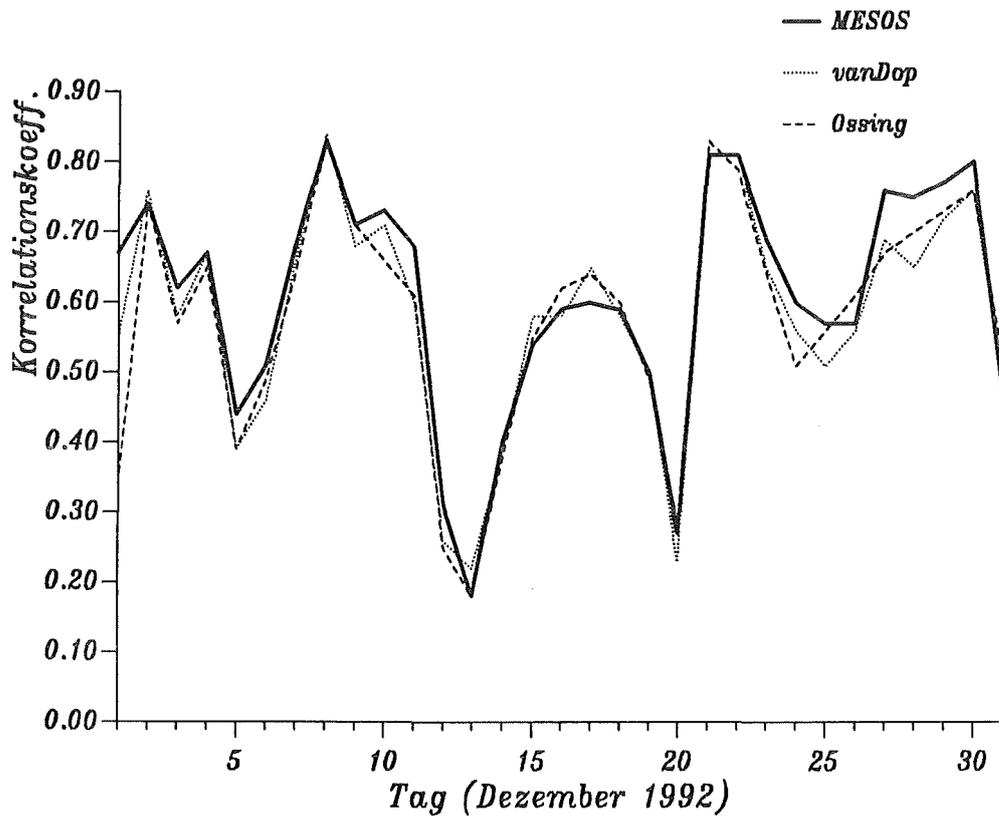


Abb. 5.23: Räumliche Korrelation der mit den drei Ansätzen zur Berechnung der Mischungsschichthöhe berechneten SO<sub>2</sub>-Rasterwerte mit den Meßwerten.

### **5.3 Der Einfluß aktualisierter Emissionsdaten auf die Güte der Smogprognose**

Nach den Ausführungen in Kapitel 3 sind grundsätzlich folgende Varianten der für die Smogprognose verwendeten Emissionsdatenbasis zu unterscheiden:

- Die alte für Rechnungen mit SMOVO benutzte Emissionsdatenbasis,
- die teilweise aktualisierte Emissionsdatenbasis von SMOROP, die in den Winterhalbjahren 1992/93 und 1993/94 benutzt wurde,
- die neue und bei zukünftigen Rechnungen mit SMOROP zu verwendende Emissionsdatenbasis.

Die Auswirkungen des Übergangs von der alten SMOVO-Emissionsdatenbasis zur aktuelleren, schon von SMOROP im probeweisen Routinedienst für das Smogfrühwarnsystem genutzten Datenbasis sind in Abschnitt 5.1.3 beim Vergleich der Modelle SMOVO und SMOROP diskutiert worden. Dabei zeigte sich eine leichte Reduktion der prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen durch die Einführung aktuellerer Emissionsdaten für die neuen Bundesländer mit verminderten Emissionen vor allem des Sektors Haushalte und Kleinverbraucher.

Im folgenden soll nun der Einfluß der weiter aktualisierten und neu gerasterten Emissionsdatenbasis, die in Zukunft Grundlage der Prognose ferntransportierten Smogs für das Smogfrühwarnsystem sein soll, anhand von Rechnungen mit SMOROP für den Dezember 1992 untersucht werden. Bevor jedoch auf die Unterschiede bei den von SMOROP auf der Basis der verschiedenen Emissionsdaten berechneten Konzentrationsverteilungen eingegangen wird, sollen zunächst die Unterschiede zwischen den Emissionsdaten selbst näher untersucht werden.

#### **5.3.1 Unterschiede bei der regionalen Verteilung der Emissionen in den jeweiligen Emissionsdatenbasen**

Werte für die Änderungen bei den Gesamtemissionen der in der bisherigen bzw. zukünftigen SMOROP-Emissionsdatenbasis berücksichtigten Staaten wurden schon in Kapitel 3 angegeben. Den größten Einfluß auf die jeweils berechneten Emissionsverteilungen haben jedoch die regionalen Änderungen der Emissionen im Bezugsgebiet selbst. Abbildung 5.24 zeigt die Änderungen der Gesamtemissionen (summiert über alle Emissionssektoren) auf den Rasterflächen Deutschlands und der unmittelbar angrenzenden Gebiete beim Übergang von der bislang von SMOROP verwendeten Emissionsdatenbasis zur neuen Emissionsdatenbasis. Es

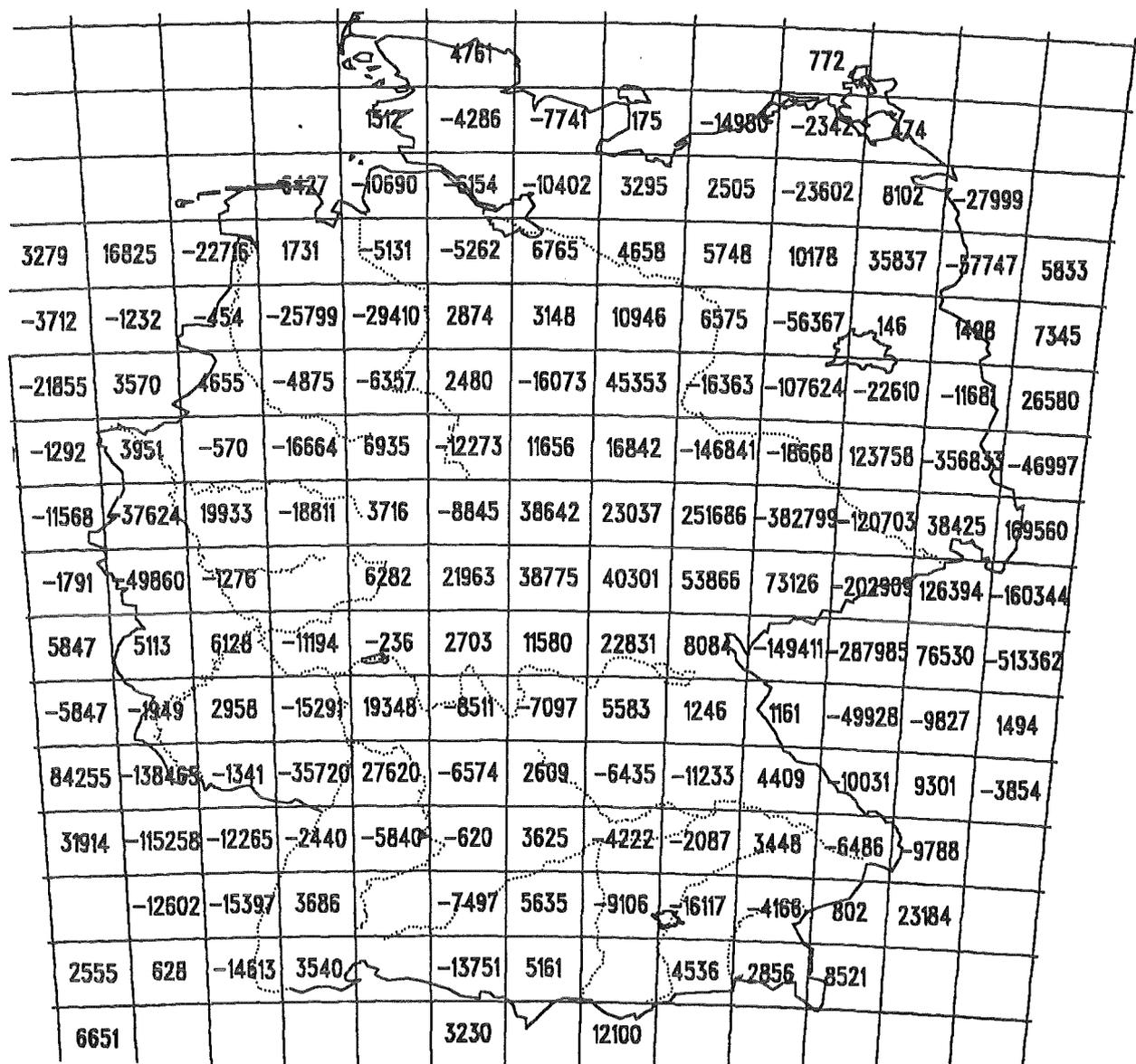


Abb. 5.24: Änderungen der Gesamtemissionen auf den einzelnen Rasterflächen Deutschlands und der näheren Umgebung (in t/a)

wird deutlich, daß es in einigen Rasterflächen eine erhebliche Abnahme der Emissionen gibt, während andere Rasterflächen in der neuen Emissionsdatenbasis höhere Werte aufweisen als zuvor. Dies ist zu einem großen Teil durch die neue Rasterung der Emissionen bedingt. Auffällig aber ist, daß in der Mitte Deutschlands (u.a. in Thüringen) die neuen Emissionswerte großräumig angestiegen sind, während sonst eher eine Abnahme zu verzeichnen ist. Die größten Abnahmen auf einzelnen Rasterflächen gibt es in den neuen Bundesländern (Brandenburg, Sachsen-

Anhalt, Sachsen), während die Werte in den alten Bundesländern nur relativ wenig abgenommen haben.

Tabelle 5.1 zeigt eine Übersicht über die Veränderung der Emissionswerte in den Rasterflächen der UBA-Stationen Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain, Schleiz und Herleshausen in Abhängigkeit von den Kaminhöhenklassen E1 bis E9. Bis auf die Werte im Raster Wiesenburg haben die Emissionen in den betrachteten Rasterflächen beim Übergang zur neuen Datenbasis zugenommen, in benachbarten Rasterflächen teilweise jedoch stark abgenommen. Daß auch die Emissionswerte für den Sektor HuK zugenommen haben, liegt daran, daß in der von SMOROP bislang benutzten Emissionsdatenbasis bereits aktualisierte Werte für diesen Bereich verwendet wurden, und die neuen, vom "Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung (IER) der Universität Stuttgart" gelieferten Werte, leicht davon abweichen.

Erwähnenswert sind auch die Abweichungen der Emissionswerte in den Rasterflächen der Nachbarländer. Vor allem in der tschechischen Republik gibt es eine sehr markante Abnahme der Emissionen in einigen Rasterflächen. Ebenfalls abgenommen haben die Emissionswerte im Elsaß. Die Zunahme der Emissionswerte in einigen Rasterflächen südöstlich Bayerns ist darauf zurückzuführen, daß in die neue Emissionsdatenbasis nun auch die Emissionen Österreichs aufgenommen wurden.

### **5.3.2 Vergleich der mit den jeweiligen Emissionsdatenbasen berechneten Konzentrationswerte**

Abbildung 5.25 zeigt den Zeitverlauf der Tagesmittel der SO<sub>2</sub>-Konzentrationen an den UBA-Stationen Schleiz, Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain und Herleshausen für den Dezember 1992, wie sie mit SMOROP mit Hilfe der alten und neuen Emissionsdatenbasis berechnet wurden, im Vergleich zu den Meßwerten. Die in Tabelle 5.1 für die Rasterflächen der genannten Stationen dargestellten Änderungen der Emissionswerte sind bei den berechneten Konzentrationswerten wiederzuerkennen. So sind die für Wiesenburg auf der Basis der neuen Emissionsdaten berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen meist geringer als die mit der alten SMOROP-Emissionsdatenbasis berechneten. Dies gilt auch für die Station Doberlug-Kirchhain, trotz der in dieser Rasterfläche angestiegenen Emissionswerte. Damit bestätigt sich jedoch die schon durch die Verursacheranalyse in Abschnitt 4.3 festgestellte Beeinflussung der Rasterfläche Doberlug-Kirchhain durch Nachbarra-

		Wiesenburg	Doberlug-Kirchhain	Schleiz	Herleshausen
E1	alt	0	1433	0	0
	neu	0	0	0	0
	Differenz	0	-1433	0	0
E2	alt	20	0	0	0
	neu	0	2309	0	0
	Differenz	-20	2309	0	0
E3	alt	0	0	0	0
	neu	0	281	64	0
	Differenz	0	281	64	0
E4	alt	11	0	0	0
	neu	0	0	0	0
	Differenz	-11	0	0	0
E5	alt	0	0	0	38
	neu	16	0	23	0
	Differenz	16	0	23	-38
E6	alt	968	0	211	32
	neu	0	0	171	30
	Differenz	-968	0	-40	-2
E8	alt	156	14	144	31
	neu	124	66	472	351
	Differenz	-32	52	328	320
E9	alt	212	33	311	135
	neu	151	63	474	240
	Differenz	-61	30	163	105
Summe	alt	1367	1480	666	236
	neu	291	2719	1204	621
	Differenz	-107	1239	538	385

**Tab. 5.1:** Veränderung der Emissionswerte in den Rasterflächen Wiesenburg, Doberlug-Kirchhain, Schleiz und Herleshausen durch den Übergang zur neuen Emissionsdatenbasis (in 100t/a) - E1 bis E9 kennzeichnen die einzelnen Kaminhöhenklassen

sterflächen. Die für Schleiz und Herleshausen auf der Basis der neuen Emissionsdaten berechneten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen liegen meist über den mit Hilfe der bisherigen Emissionsdatenbasis berechneten Werten. Besonders eindeutig ist dies im Fall der Station Herleshausen. Dies führt dort im Dezember 1992 zu einer weiteren Überschätzung der gemessenen Konzentrationen.

Ein Vergleich der mit Hilfe beider Emissionsdatenbasen erstellten Rasterkarten der SO<sub>2</sub>-Konzentrationsverteilungen zeigt deutlich eine Zunahme der Konzentrationen in der Mitte Deutschlands, entsprechend der dort zu verzeichnenden Zunahme der Emissionswerte nach Einführung der neuen Emissionsdatenbasis. Die

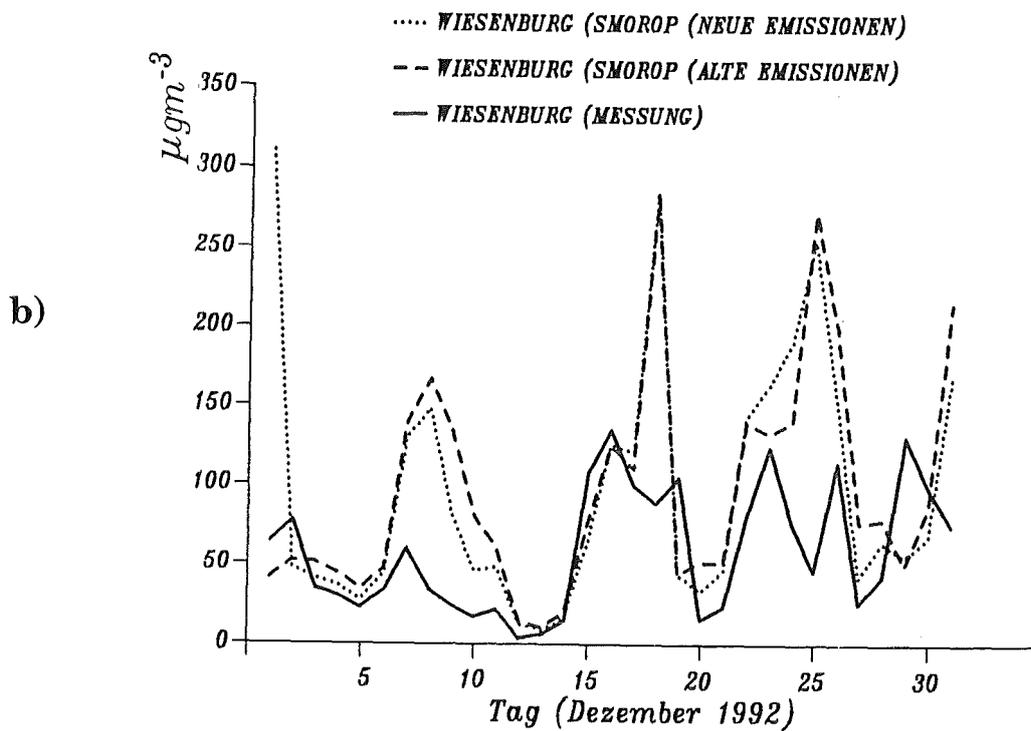
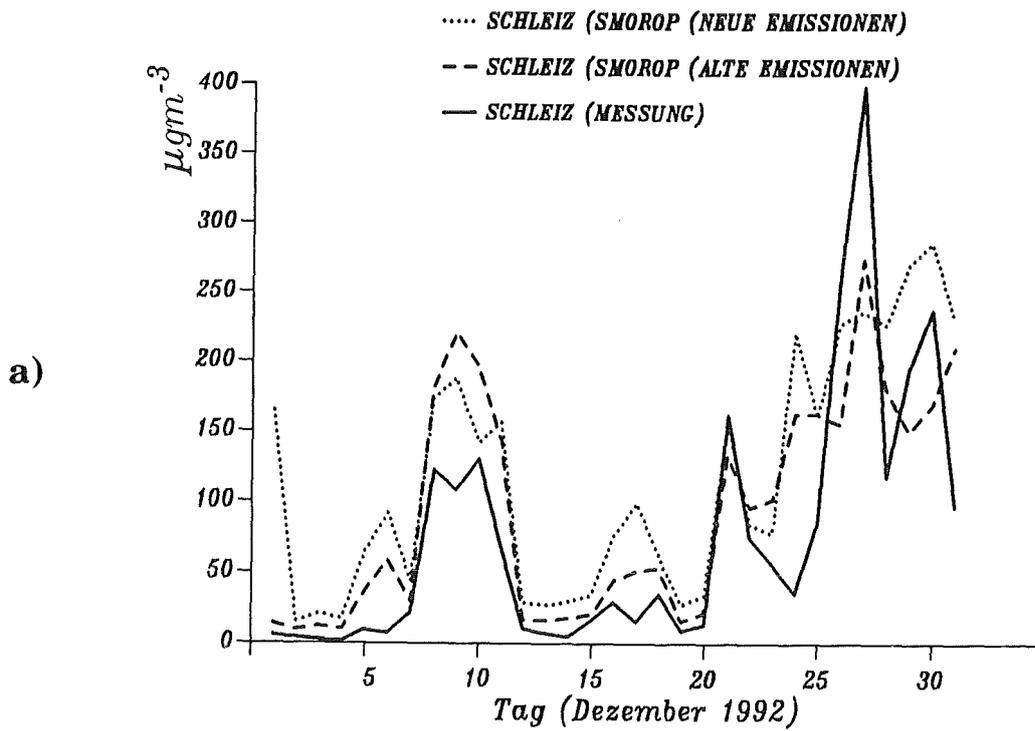


Abb. 5.25: Verlauf der Tagesmittel der mit den unterschiedlichen Emissionsdatenbasen errechneten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für die Stationen (a) Schleiz, (b) Wiesenburg, (c) Doberlug-Kirchhain und (d) Herleshausen

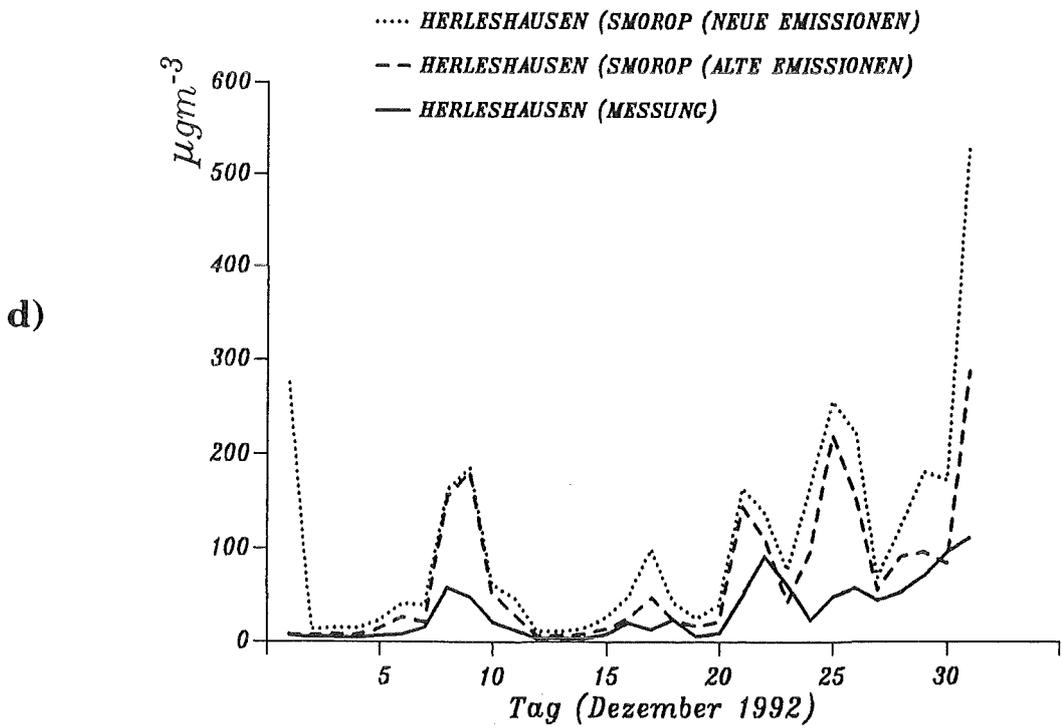
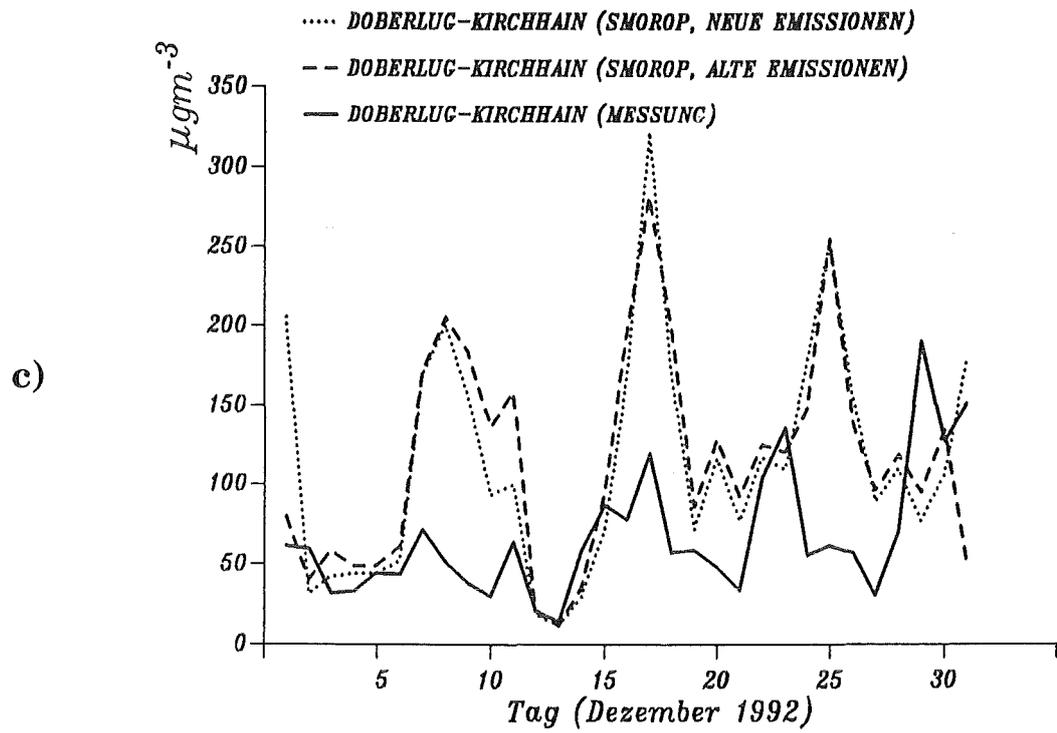


Abb. 5.25: Verlauf der Tagesmittel der mit den unterschiedlichen Emissionsdatenbasen errechneten  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen für die Stationen (a) Schleiz, (b) Wiesenburg, (c) Doberlug-Kirchhain und (d) Herleshausen (Fortsetzung)

Zunahme der mit Hilfe der aktualisierten Emissionsdatenbasis berechneten Immissionswerte in diesem Gebiet zeigt sich in nahezu allen Rasterkarten mit den Tagesmittelwerten des Dezember 1992. Für die Darstellung in Abbildung 5.26

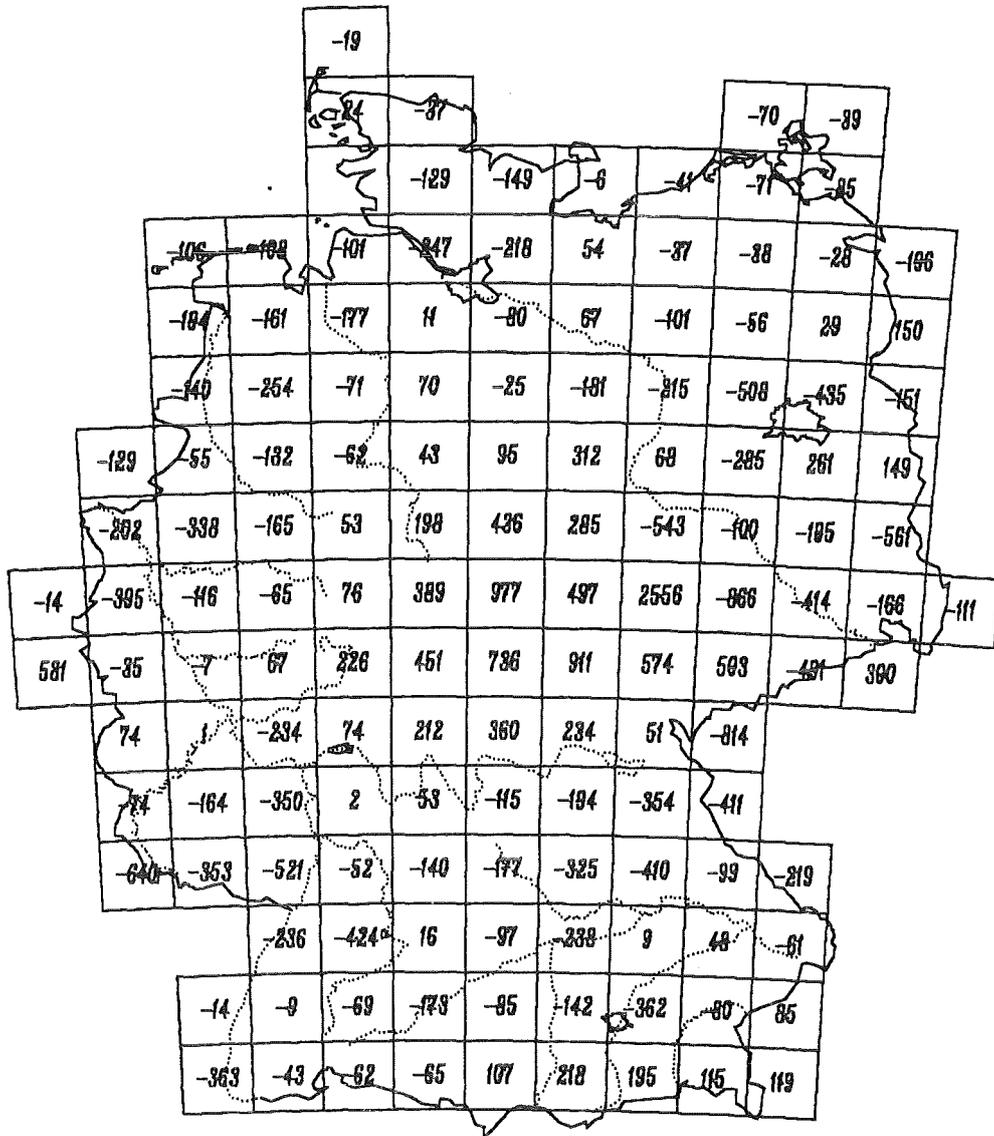
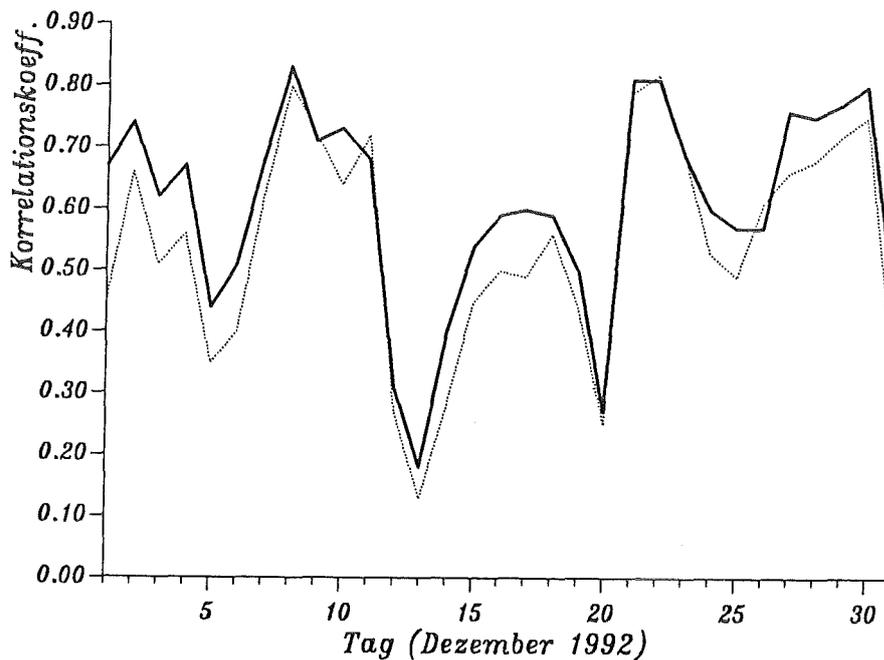


Abb. 5.26: Summe der Abweichungen bei den Tagesmitteln der für die einzelnen Rasterflächen auf der Basis unterschiedlicher Emissionsdaten prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen

wurden die Abweichungen zwischen den jeweiligen Prognosen rasterweise für den ganzen Dezember 1992 aufsummiert. Es zeigt sich, daß großräumig mit einer leichten Abnahme der berechneten Konzentrationen nach Einführung der neuen Datenbasis zu rechnen ist. Ausnahme ist, wie oben schon angedeutet, die Mitte

Deutschlands, aber auch der Süden, wo sich die neu hinzugekommenen Emissionen Österreichs bemerkbar machen.

Bemerkenswerterweise wird die Korrelation zwischen den Tagesmittelwerten der berechneten und gemessenen Rasterwerte (s. Abschn. 5.1.3) im Dezember 1992 durch Einführung der neuen Emissionsdatenbasis etwas schlechter, wie Abbildung 5.27 zeigt. Daran wird deutlich, wie schwierig es ist, die mit Hilfe von



**Abb. 5.27:** Korrelationskoeffizienten für den Zusammenhang zwischen den gemessenen und mit Hilfe von SMOROP mit Hilfe unterschiedlicher Emissionsdaten berechneten Konzentrationsverteilungen für den Dezember 1992

SMOROP erstellte Smogprognose weiter zu verbessern. Aufgrund der vielen vereinfachenden Annahmen in SMOROP, Unzulänglichkeiten bei den zugrundeliegenden Wetterdaten und anderen Einflußfaktoren, kommt es häufig zu sich kompensierenden Fehlern bei der Berechnung der  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen, die es schwer machen, den Einfluß von Änderungen am Modell bzw. der verwendeten Datenbasis aufgrund von Rechnungen für einen relativ begrenzten Zeitraum abzuschätzen.

## 6. Zusammenfassung

In den letzten Jahren wurde vom Umweltbundesamt ein Frühwarnsystem für ferntransportierten Smog aufgebaut. Hauptaufgabe dieses Frühwarnsystems ist die rechtzeitige Erfassung und Prognose von Episoden hoher Schadstoffkonzentrationen in der Bundesrepublik Deutschland mit Hilfe der Meßnetze des Umweltbundesamtes und der Landesämter. Die eigentliche Prognose des Eintretens bzw. weiteren Verlaufs einer Smogepisode wird jedoch mit Hilfe eines Ausbreitungsmodells auf der Grundlage von Wetterprognosen des Deutschen Wetterdienstes erstellt. Hierzu dient das Modell SMOROP, das auf die Prognosedaten des Europa-Modells des Deutschen Wetterdienstes zugreift und mit Hilfe einer Datenbasis mit den Schwefeldioxidemissionen aller emissionsrelevanten europäischen Staaten SO<sub>2</sub>-Konzentrationswerte für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland prognostiziert.

Das Modell SMOROP wurde in den Wintermonaten 1992/1993 und 1993/1994 im Smogfrühwarnsystem des Umweltbundesamtes im probeweisen Routinebetrieb eingesetzt. Dabei zeigte sich, daß das Modell zu einer sinnvollen Prognose der SO<sub>2</sub>-Konzentrationsverteilung über Deutschland herangezogen werden kann. Während der Wintermonate wurden zuverlässig und ohne programmbedingte Ausfälle täglich einmal die SO<sub>2</sub>-Konzentrationsverteilungen für einen Zeitraum von 48 Stunden prognostiziert.

Aufgrund der im probeweisen Routinebetrieb von SMOROP gewonnenen Erfahrungen und der im vorliegenden Bericht vorgestellten Untersuchungen ausgewählter Episoden kann die Qualität der prognostizierten Konzentrationen folgendermaßen bewertet werden:

Der zeitliche Verlauf von gemessenen und prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen (deutlicher Anstieg bzw. deutliche Abnahme der Werte) stimmt in der Regel gut überein. Die Lage der Gebiete mit den höchsten Konzentrationen wird meist gut getroffen. Die absolute Höhe der prognostizierten Werte wird allerdings im Vergleich zu den gemessenen häufig überschätzt. Dies gilt vor allem für die SO<sub>2</sub>-Konzentrationen im Westen Deutschlands (alte Bundesländer). Im Osten Deutschlands, vor allem in der Nähe von Emissionszentren, gibt es dagegen häufig Zeiten, in denen die gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen von den Prognosen unterschätzt werden. Ausführliche Verursacheranalysen zeigen in diesen Fällen, daß hohe SO<sub>2</sub>-Konzentrationen in den neuen Bundesländern vor allem durch Emissionen

aus dem Bereich Haushalte und Kleinverbraucher sowie von Quellen mit niedrigen Kaminen verursacht werden.

Die Korrelation zwischen den prognostizierten und gemessenen SO<sub>2</sub>-Konzentrationen ist am besten bei den Stationen, die nicht im Einflußbereich naher Quellen liegen, aber häufig von Schadstoffahnen beeinflusst werden, die von entfernt gelegenen Emissionszentren herrühren. Dies läßt auf eine gute Modellierung des Ferntransportes schließen. Allgemein ist in den alten Bundesländern die Korrelation schlechter als in den neuen Bundesländern. Dort werden zudem meist höhere "Hintergrundkonzentrationen" auch während Lagen mit guten Ausbreitungsbedingungen angetroffen, während die Konzentrationen im Westen Deutschlands durchweg sehr niedrig sind.

Vergleichsrechnungen mit dem Vorgängermodell SMOVO zeigen eine Verbesserung der Qualität der Ergebnisse. Diese fällt jedoch gering aus, sodaß auf weitere Modifikationen des Modells SMOROP verzichtet werden sollte. Insbesondere gilt dies für die zukünftige Verwendung von Prognosedaten des Deutschlandmodells des DWD, obwohl mit deren Hilfe möglicherweise die Ausbreitung innerhalb von orografisch beeinflussten Windsystemen besser berücksichtigt werden könnte.

Nicht befriedigend gelöst wurde bislang das Problem der Berechnung der Mischungsschichthöhe in SMOROP. Aus praktischen Gründen und vor allem wegen der geringen Änderungen, die der Einsatz alternativer Ansätze zur Berechnung der Mischungsschichthöhe mit sich brachte, wurde in SMOROP der alte auch schon in den Vorgängermodellen angewandte Ansatz beibehalten. Hier sollte untersucht werden, ob nicht die Möglichkeit besteht, die Mischungsschichthöhe extern mit Hilfe von DWD-Routinen auf der Basis von nicht in den Routinedatenbanken abgelegten Grenzschichtparametern des Europa-Modells zu berechnen.

Für die Rechnungen mit SMOROP im probeweisen Routinebetrieb wurde im wesentlichen die bereits von SMOVO genutzte Emissionsdatenbasis herangezogen. Lediglich für die neuen Bundesländer wurden einige Modifikationen vorgenommen, die zu einer Verringerung der Emissionen um ca. 1 Mio Tonnen Schwefeldioxid führten. Entsprechend zeigte sich auch eine leichte Reduktion der prognostizierten SO<sub>2</sub>-Konzentrationen.

Während der Laufzeit des Vorhabens wurden weitere aktuellere Informationen zu den SO<sub>2</sub>-Emissionen der für das Modell SMOROP relevanten Staaten zusammengetragen, und es wurde eine neue Emissionsdatenbasis erstellt. Diese Datenbasis enthält detaillierte Informationen über die Emissionswerte für die Sektoren

Haushalte und Kleinverbraucher, Industrie und Kraftwerke für die Bundesrepublik Deutschland (alte und neue Bundesländer), Polen, die Tschechische und die Slowakische Republik, Österreich, Ungarn, Frankreich, die Benelux-Staaten und Großbritannien. Im Vergleich zur bisher von SMOROP genutzten Datenbasis wurden die Emissionen Österreichs und Ungarns neu aufgenommen. Für die meisten Kraftwerke sowie für eine Vielzahl von Industriebetrieben sind die Standortkoordinaten in der Datenbasis enthalten, die übrigen Emittenten wurden einzelnen Rasterflächen zugeordnet. Der Aufbau der Datenbasis wurde so gestaltet, daß eine Aktualisierung ohne großen Arbeitsaufwand jederzeit möglich ist.

Die neu erstellte Datenbasis weist insgesamt niedrigere Emissionswerte auf, in einigen Gebieten, so z.B. in der Mitte Deutschlands (u.a. in Thüringen) sind die Emissionen jedoch großräumig angestiegen. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die vom "Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung (IER)" der Universität Stuttgart für die neuen Bundesländer zur Verfügung gestellte Datenbasis mit dem Bezugsjahr 1991 für den Bereich Haushalte und Kleinverbraucher insgesamt höhere Emissionswerte aufweist, als die bisher von SMOROP genutzte Datenbasis. Da in den neuen Bundesländern seit 1991 bis heute jedoch weitere deutliche Emissionsabnahmen aufgetreten sind, sollten die Emissionswerte für die neuen Bundesländer sobald wie möglich aktualisiert werden.

Vergleichsrechnungen mit der im probeweisen Routinebetrieb von SMOROP genutzten Emissionsdatenbasis zeigen, daß großräumig mit einer leichten Abnahme der berechneten Konzentrationen nach Einführung der neuen Datenbasis zu rechnen ist, in der Mitte Deutschlands, aber auch im Süden, wo sich die neu hinzugekommenen Emissionen Österreichs bemerkbar machen, die Konzentrationen leicht zunehmen. Die Korrelationen zwischen den Tagesmittelwerten der berechneten und gemessenen Rasterwerte werden in dem betrachteten Vergleichsbeispiel (Dezember 1992) durch Einführung der neuen Emissionsdatenbasis etwas schlechter. Daran wird deutlich, wie schwierig es ist, die mit Hilfe von SMOROP erstellte Smogprognose weiter zu verbessern. Aufgrund der vielen vereinfachenden Annahmen in SMOROP, Unzulänglichkeiten bei den zugrundeliegenden Wetterdaten und anderen Einflußfaktoren, kommt es häufig zu sich kompensierenden Fehlern bei der Berechnung der  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen, die es schwer machen, den Einfluß von Änderungen am Modell bzw. der verwendeten Datenbasis aufgrund von Rechnungen für einen relativ begrenzten Zeitraum abzuschätzen.

## Literatur

- /1/ Bräutigam, K.-R.; Sardemann, G.; Brandl, V.; Kupsch, C.; Matzerath Boccaccini, C.; 1992:  
Prognose der Immissionskonzentration zur Nutzung für ein Frühwarnsystem bei ferntransportiertem Smog; Kernforschungszentrum Karlsruhe. KfK-Bericht 5076
- /2/ Majewski, D.; 1991:  
Short Description of the Europa-Modell (EM) of the Deutscher Wetterdienst (DWD) as at Oktober 1991.  
DWD Offenbach, unveröffentlicht
- /3/ Müller, E.; 1981:  
Turbulent flux parameterization in a regional-scale model.  
Aus: ECMWF Workshop on planetary boundary layer parameterization
- /4/ UBA (Umweltbundesamt); 1993:  
persönliche Mitteilung
- /5/ VEAG (Vereinigte Energiewerke AG); 1992:  
persönliche Mitteilung
- /6/ Löblich, H.J.; 1985:  
EMUKAT-Forschungsvorhaben überregionales fortschreibbares Kataster der Emissionsursachen und Emissionen für SO<sub>2</sub> und NO<sub>x</sub>.  
H.J. Löblich, Beratungsbüro für Umweltfragen, Hamburg
- /7/ Institut für Kraftwerkstechnik der Universität Essen; 1993:  
persönliche Mitteilung
- /8/ VDEW (Vereinigung Deutscher Elektrizitätswerke e.V.); 1992:  
VDEW-Pressekonferenz Frankfurt am Main, 31. August 1992
- /9/ BMI (Bundesministerium des Innern); 1986:  
Erste Allgemeine Verwaltungsvorschrift zum Bundesimmissionsschutzgesetz. Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft (TA Luft) vom 27. Februar 1986
- /10/ Bräutigam, K.-R.; Halbritter, G.; Brandl, V.; Findling, B.; Fürniß, B.; Kupsch, C.; Sardemann, G.; Schuler, A.; Schulz, V.; Wiesmann, F. J.; 1989:  
Weiträumige Immissionsanalysen für säurebildende und pflanzentoxische Luftschadstoffe. Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK-Bericht 4511
- /11/ DIW (Deutsches Institut für Wirtschaftsforschung); 1988:  
SO<sub>2</sub>-und NO<sub>x</sub>-Emissionen in der DDR 1982; Beiträge zur Strukturforchung, Heft 102, Duncker & Humblot, Berlin
- /12/ IER (Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung der Universität Stuttgart); 1993:  
persönliche Mitteilung
- /13/ VEAG (Vereinigte Energiewerke AG); 1993:  
persönliche Mitteilung

- /14/ UBA (Umweltbundesamt); 1992:  
Jahresbericht 1992.  
Umweltbundesamt, Berlin
- /15/ DIW (Deutsches Institut für Wirtschaftsforschung); 1986:  
SO<sub>2</sub>-Emissionskataster für die CSSR 1982;  
Bericht im Auftrag des Kernforschungszentrums Karlsruhe
- /16/ 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-Bericht 4257
- /17/ Klimont, Z.; Amann, M.; Cofala, J.; Gyarfas, F.; Klaassen, G.; Schöpp, W.; 1993:  
Emissions of Air Pollutants in the Region of the Central European Initiative-1988.  
IIASA (International Institute for Applied Systems Analysis), Laxenburg, Austria, 1993
- /18/ UBA (Umweltbundesamt), 1993:  
persönliche Mitteilung
- /19/ CITEPA (Centre Interprofessionnel Technique d' Etudes de la Pollution Atmosphérique); 1983:  
persönliche Mitteilung
- /20/ CITEPA; 1986:  
persönliche Mitteilung
- /21/ CITEPA; 1993:  
persönliche Mitteilung
- /22/ CORINAIR; 1993:  
Inventaire des Emissions de Pollutants dans l'Atmosphère dans la Communauté Européenne en 1985.  
Projet de Rapport Final
- /23/ Halvorsen, N.E.; 1990:  
Status of the EMEP/MSC-W Emission Inventory.  
In: Proceedings of the Workshop on International Emission Inventories, Regensburg, Federal Republic of Germany, 3-6 July, 1990; EMEP/CCC-Report 7/90
- /24/ Berliner Wetterkarte; 1992 und 1993:  
Amtsblatt des Inst. für Meteorologie der FU, Berlin
- /25/ Sykes, R.I.; Hatton, L.; 1976:  
Computation of horizontal trajectories based on the surface geostrophic wind.  
Atmos. Environ., 10, 925-934
- /26/ Ossing, F.J.; 1987:  
Ein Ansatz zur Berechnung der Mischungsschichthöhe.  
Beilage zur Berliner Wetterkarte 33/87, SO 7/87 vom 17.3.1987
- /27/ Heimann, D.; 1985:  
Ein Dreischichten-Modell zur Berechnung mesoskaliger Wind- und Immissionsfelder über komplexem Gelände.  
Dissertation Universität München

- /28/ Deardorff, J.; 1974:  
Three-Dimensional Numerical Study of the Height and Mean Structure of a Heated Planetary Boundary Layer.  
Bound. Layer. Meteor. 7, 81-106
- /29/ Smeda, M.; 1979:  
Incorporation of the Planetary Boundary Layer Processes into Numerical Boundary Layer Models.  
Bound. Layer. Meteor. 16, 115-129
- /30/ Deardorff, J.; 1972:  
Parametrization of the Planetary Boundary Layer for Use in General Circulation Models.  
Monthly Weather Review 100, 93-106
- /31/ Renner, E.; Ratzlaff, U.; Rolle, W.; 1985:  
A Lagrangian multi-level model of transport, transformation and deposition of atmospheric sulfur dioxide and sulfate.  
Atmos. Environ. 19, 1351-1359
- /32/ MacCormick, J.M.; Salvadori, M.G.; 1964:  
Numerical Methods in FORTRAN.  
Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J.
- /33/ Verver, G.H.L.; Scheele, M.P.; 1989:  
Influence of non-uniform mixing heights on dispersion simulations following the chernobyl accident.  
In: Air pollution Modeling and its Application 7, edited by H. van Dop; Plenum Press, New York
- /34/ Tennekes, H.; 1973:  
A model for the dynamics of the inversion above a convective boundary layer.  
J. Atmos. Sci. 30, p. 558-567
- /35/ Driedonks, A.G.M.; 1981:  
Dynamics of the well-mixed atmospheric boundary layer.  
Thesis, Royal Netherlands Meteorological Institute, 3730 AE De Bilt, pp.189
- /36/ Dop, H. van; de Haan, B.J.; Engeldal, C.; 1982:  
The KNMI mesoscale air pollution model.  
Scientific Report, W.R. 82-2, KNMI, De Bilt
- /37/ Niewstadt, F.T.M.; 1981:  
The steady-state and resistance laws of the nocturnal boundary layer, theory compared with observations.  
Bound. Lay. Meteor. 20, 3-17
- /38/ Brost, R.A.; Wyngaard, J.C.; 1978:  
A model study of the stably stratified planetary boundary layer.  
J. Atmos. Sci. 35, 1427-1440
- /39/ Dyer, A.J.; 1974:  
A Review of Flux-Profile Relationships.  
Bound. Lay. Meteor. 7, 363-372

- /40/ Paulson, C.A.; 1970:  
The Mathematical Representation of Wind Speed and Temperature Profiles in the Unstable  
Atmospheric Surface Layer.  
J. Appl. Meteor. 9, 856-861
- /41/ Holtslag, A.A.M.; 1984:  
Estimates of Diabatic Wind Speed Profiles from near-surface weather observations.  
Bound. Lay. Meteor. 29, 225-250
- /42/ Webb, E.K.; 1970:  
Profile Relationships: The Log-Linear Range and Extensions to Strong Stability.  
Quart. J. Roy. Met. Soc. 96, 67-90