

DOKUMENTATIONEN

02/2020

# Ozonsituation in Deutschland

Wissensstand, Forschungsbedarf und Empfehlungen



## **Ozonsituation in Deutschland**

Wissensstand, Forschungsbedarf und Empfehlungen

Dokumentation des Workshops „Was sind Gründe für die Ozonbelastung in Deutschland?“,

19. – 20. November 2019, Umweltbundesamt Dessau

Veranstaltet von

Institute for Advanced Sustainability Studies und  
Umweltbundesamt

Konzeption und Durchführung sowie Dokumentation des  
Workshops:

Tim Butler

Institute for Advanced Sustainability Studies und Freie  
Universität Berlin

Ute Dauert, Andrea Mues, Marion Wichmann-Fiebig  
Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau

Workshop-Teilnehmende:

Manuela Baumgarten, Technische Universität München

Tim Butler, Institute for Advanced Sustainability Studies  
und Freie Universität Berlin

Lilian Busse, Ute Dauert, Bryan Hellack, Andrea Minkos,  
Andrea Mues, Stephan Nordmann, Gudrun Schütze,  
Michael Strogies, Marion Wichmann-Fiebig,  
Umweltbundesamt

Renate Forkel, Rüdiger Grote, Rainer Steinbrecher,  
Karlsruher Institut für Technologie

Dieter Klemp, Martin Schultz, Robert Wegener,  
Forschungszentrum Jülich

Dagmar Kubistin, Deutscher Wetterdienst

Jeroen Kuenen, TNO

Mark Lawrence, Erika von Schneidmesser, Institute for  
Advanced Sustainability Studies

Andreas Richter, Universität Bremen


Martijn Schaap, TNO und Freie Universität Berlin


Thomas Weber, Bundesministerium für Umwelt,  
Naturschutz und nukleare Sicherheit

## Impressum

### Herausgeber

Umweltbundesamt  
Wörlitzer Platz 1  
06844 Dessau-Roßlau  
Tel: +49 340-2103-0  
Fax: +49 340-2103-2285  
[buergerservice@uba.de](mailto:buergerservice@uba.de)  
Internet: [www.umweltbundesamt.de](http://www.umweltbundesamt.de)

 [/umweltbundesamt.de](https://www.facebook.com/umweltbundesamt.de)

 [/umweltbundesamt](https://twitter.com/umweltbundesamt)

### Konzeption und Durchführung der Veranstaltung:

Institute for Advanced Sustainability Studies  
Berliner Straße 130  
14467 Potsdam  
Internet: [www.iass-potsdam.de/de](http://www.iass-potsdam.de/de)

Umweltbundesamt  
Wörlitzer Platz 1  
06844 Dessau-Roßlau

### Abschlussdatum:

April 2020

### Redaktion:

Fachgebiet II 4.2 Beurteilung der Luftqualität  
Andrea Mues

Publikationen als pdf:

<http://www.umweltbundesamt.de/publikationen>

ISSN 2199-6571

Dessau-Roßlau, Juni 2020

Die Veröffentlichung dokumentiert die Beiträge, Diskussionen und Meinungsäußerungen der Personen, die am Workshop teilgenommen haben. Keineswegs besteht zu allen Aussagen Konsens unter allen Teilnehmenden. Gleichzeitig geben die Texte nicht die Ansicht des Umweltbundesamtes oder des Institute for Advanced Sustainability Studies wieder, die den Gesprächsrahmen zur Verfügung stellten.

**Kurzbeschreibung: Ozonsituation in Deutschland**

Die Gefährdung der menschlichen Gesundheit und der Vegetation durch Ozon ist nach wie vor ein wichtiges Thema in Deutschland. Ein vom Umweltbundesamt (UBA) und dem Potsdamer Institut für transformative Nachhaltigkeitsforschung (IASS Potsdam) organisierter Workshop widmete sich diesem Thema. Expertinnen und Experten diskutierten den derzeitigen Wissensstand zu ozonrelevanten Prozessen, den Verbesserungsbedarf bei Modellierung und Messungen, die Aussagekraft der vorliegenden Emissionsinventare und den Beitrag der regionalen Ozonbildung an der Gesamtbelastung. Es wurden außerdem allgemeine Empfehlungen zu Emissionsminderungen der Ozonvorläuferstoffe in Deutschland erarbeitet und Wissenslücken sowie weiterer Forschungsbedarf identifiziert. Beispielhaft für die Ergebnisse der Diskussion sind folgende Empfehlungen des Workshops zu nennen:

- ▶ weitere Minderung der anthropogenen NO<sub>x</sub>-Emissionen,
- ▶ Verbesserung des Detailgrads der NMVOC-Spezifikation in den anthropogenen Emissionskatastern,
- ▶ Aktualisierung der biogenen VOC-Emissionen für Chemie-Transport-Modelle,
- ▶ regelmäßige Überwachung von Isopren-Konzentrationen und kampagnenbasierte Messungen der Isopren-Emissionen aus der Vegetation unter deutschen Bedingungen,
- ▶ parallele Messungen von NO, NO<sub>2</sub> und Ozon an städtischen und verkehrsnahen Stationen sowie am Stadtrand,
- ▶ Durchführung von Modellvergleichsstudien auf verschiedenen räumlichen Ebenen

**Abstract: Ozone situation in Germany**

Ozone is still a threat to human health and vegetation and therefore an important topic in Germany. A workshop, organized by the German Environment Agency (Umweltbundesamt) and the Institute for Advanced Sustainability Studies (IASS Potsdam), addressed this issue. Experts discussed the current state of knowledge on processes relevant for ozone, the need for improvement concerning models and measurements, the quality of the current emission inventories, and the contribution of the regional ozone production to the overall pollution. Also, general recommendations for emission reduction of ozone precursors in Germany were discussed and knowledge gaps as well as further research needs identified. Examples for results of the discussions are the following recommendations:

- ▶ further reduction of anthropogenic NO<sub>x</sub>-emissions,
- ▶ improvement of the level of detail of NMVOC-speciation in anthropogenic emission inventories,
- ▶ update biogenic VOC-emissions for chemistry transport models,
- ▶ add regular isoprene monitoring and further campaign-based measurements of isoprene emissions from vegetation under German conditions,
- ▶ establish model intercomparison studies with a focus on ozone at different scales

## Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis.....	8
1 Einleitung.....	9
2 Empfehlungen .....	10
2.1 Emissionsminderung.....	10
2.1.1 Anthropogene Stickstoffoxide (NO <sub>x</sub> ).....	10
2.1.2 Anthropogene flüchtige organische Verbindungen ohne Methan (NMVOC) .....	10
2.1.3 Methan (CH <sub>4</sub> ) und Kohlenstoffmonoxid (CO) .....	10
2.1.4 Biogene flüchtige organische Verbindungen (BVOC) .....	11
2.2 Schließen von Wissenslücken .....	11
2.2.1 Biogene flüchtige organische Verbindungen (BVOC) .....	11
2.2.2 Urbane Luftqualität.....	11
2.2.3 Numerische Modelle.....	12
3 Stand des Wissens zur Ozonbelastung in Deutschland.....	13
3.1 Hintergrund.....	13
3.2 Ozonbildung, Ozontransport und ihre Modellierung .....	14
3.2.1 Zeitliche und räumliche Skalen der Ozonproduktion und des Ozontransports.....	14
3.2.2 Numerische Modelle.....	14
3.2.3 Meteorologie .....	15
3.2.4 Chemie .....	15
3.2.5 Trockene Deposition.....	15
3.2.6 Wissenslücken und Empfehlungen .....	16
3.3 Emissionen von Ozonvorläuferstoffen.....	16
3.3.1 Anthropogene Vorläuferstoffe .....	16
3.3.1.1 Anthropogene Stickstoffoxide (NO <sub>x</sub> ) .....	17
3.3.1.2 Anthropogene flüchtige organische Verbindungen ohne Methan (NMVOC) .....	17
3.3.1.3 Kohlenstoffmonoxid (CO) und Methan (CH <sub>4</sub> ) .....	17
3.3.1.4 Wissenslücken und Empfehlungen.....	17
3.3.2 Biogene Vorläuferstoffe.....	18
3.3.2.1 Wissenslücken und Empfehlungen.....	18
3.4 Messungen von Ozon und Vorläuferstoffen.....	19
3.4.1 In-situ-Messungen von vor allem flüchtigen organischen Verbindungen (VOC) und Stickoxiden (NO <sub>x</sub> ) .....	19

3.4.2	Nutzung von Satellitenmessungen von flüchtigen organischen Verbindungen (VOC), Stickoxiden (NO <sub>x</sub> ) und Ozon (O <sub>3</sub> ) .....	19
3.4.3	Wissenslücken und Empfehlungen .....	20

## Abkürzungsverzeichnis

<b>AOT40</b>	Accumulated dose Over a Threshold of 40 ppb
<b>BVOC</b>	Biogenic Volatile Organic Compounds – biogene flüchtige organische Verbindungen
<b>CEIP EEA</b>	Centre on Emission Inventories and Projections (CEIP) der European Environmental Agency (EEA)
<b>CH<sub>4</sub></b>	Methan
<b>CO</b>	Kohlenstoffmonoxid
<b>CO<sub>2</sub></b>	Kohlenstoffdioxid
<b>DOAS</b>	Differenzielle Optische Absorptionsspektroskopie
<b>EU-NEC-Richtlinie</b>	Richtlinie der Europäischen Union über nationale Emissionshöchstmengen für bestimmte Luftschadstoffe, engl. National Emission Ceilings Directive, kurz NEC-Richtlinie
<b>HCHO</b>	Formaldehyd
<b>LRTAP</b>	Convention on Long-range Transboundary Air Pollution
<b>NH<sub>3</sub></b>	Ammoniak
<b>NO</b>	Stickstoffmonoxid
<b>NO<sub>2</sub></b>	Stickstoffdioxid
<b>NO<sub>x</sub></b>	Stickstoffoxide – Zusammenfassung von Stickstoffdioxid (NO <sub>2</sub> ) und Stickstoffmonoxid (NO)
<b>NMVOC</b>	Non-Methane Volatile Organic Compounds – flüchtige organische Verbindungen ohne Methan
<b>OH</b>	Hydroxyl-Radikal
<b>O<sub>3</sub></b>	Ozon
<b>O<sub>x</sub></b>	O <sub>x</sub> = NO <sub>2</sub> + O <sub>3</sub>
<b>OVOC</b>	Oxygenated Volatile Organic Compounds – Sauerstoffhaltige flüchtige organische Verbindungen
<b>PAN</b>	Peroxyacetylnitrat
<b>PM<sub>2.5</sub></b>	PM <sub>2.5</sub> (PM, particulate matter) Feinstaub mit einem maximalen Durchmesser von 2.5 Mikrometer
<b>SO<sub>2</sub></b>	Schwefeldioxid
<b>VOC</b>	Volatile Organic Compounds – Flüchtige organische Verbindungen



## 1 Einleitung

Die gemessenen Spitzenwerte von bodennahem Ozon in Deutschland sind seit den 1990er Jahren erheblich zurückgegangen. Selbst unter extremen Bedingungen, wie den heißen Sommern der beiden vergangenen Jahre, treten Konzentrationen oberhalb der Alarmstufe nur noch sehr selten auf. Die öffentliche Diskussion zu Luftschadstoffen befasste sich stattdessen mit Feinstaub und Stickstoffdioxid. Dennoch stellt Ozon nach wie vor eine Gefährdung für die menschliche Gesundheit und die Vegetation dar. Es gibt zwar weniger akute Erkrankungen und Pflanzenschäden, aber durch den fortwährenden Anstieg der mittleren Ozonbelastung nehmen die Langzeitauswirkungen weiter zu. Die gesundheitlichen Wirkungen von Ozon bestehen in einer verminderten Lungenfunktion, entzündlichen Reaktionen in den Atemwegen und Atemwegsbeschwerden. Bei körperlicher Anstrengung, also bei erhöhtem Atemvolumen, können sich diese Auswirkungen verstärken. Ozon wird von Pflanzen durch die Spaltöffnungen der Blattoorgane aufgenommen. Dadurch können bei Pflanzen Schäden an Blattoorganen auftreten. Länger anhaltende Belastungen stellen ein Risiko für das Pflanzenwachstum, Ernteerträge und die Qualität landwirtschaftlicher Produkte dar.

Was aber führt zu dieser Ozonbelastung? Diese Frage wurde im Rahmen eines Workshops, organisiert von Umweltbundesamt (UBA) und dem Institute for Advanced Sustainability Studies (IASS Potsdam), diskutiert. Die Ergebnisse des Workshops sind in diesem Bericht zusammengefasst.

Im Gespräch mit Expertinnen und Experten wurden folgende Themen bzw. Fragestellungen diskutiert:

- ▶ Was ist der derzeitige Wissensstand zu ozonrelevanten Prozessen bzw. Einflüssen (Ozonbildung, Transport, Emission, Meteorologie, Hintergrundbelastung)?
- ▶ Wo gibt es Verbesserungsbedarf bei Modellierung und Messung?
- ▶ Wie aussagekräftig sind die vorliegenden Emissionsinventare?
- ▶ Welchen Beitrag hat die regionale Ozonbildung an der Gesamtbelastung?

Im Rahmen des Workshops wurden außerdem allgemeine Empfehlungen zu Emissionsminderungen der Ozonvorläuferstoffe in Deutschland diskutiert und Wissenslücken sowie weiterer Forschungsbedarf identifiziert. Die wesentlichsten Empfehlungen zur Emissionsminderung und zur Schließung der größten Wissenslücken werden im ersten Teil des Berichtes vorgestellt. Im zweiten Teil wird der aktuelle Stand des Wissens zu den oben genannten Themen zusammengefasst.

## 2 Empfehlungen

### 2.1 Emissionsminderung

#### 2.1.1 Anthropogene Stickstoffoxide (NO<sub>x</sub>)

Die Minderung der anthropogenen NO<sub>x</sub>-Emissionen (NO<sub>x</sub> = Zusammenfassung von Stickstoffdioxid (NO<sub>2</sub>) und Stickstoffmonoxid (NO)) führt in städtischen Gebieten im Mittel zu einer höheren Ozonkonzentration. Dies ist auf den Titrationseffekt (siehe Kapitel 3.1) zurückzuführen. Weitere Minderungen der anthropogenen NO<sub>x</sub>-Emissionen sind dennoch zu empfehlen, da NO<sub>x</sub>-Emissionen weiterhin zu Spitzenkonzentrationen von Ozon sowie erhöhten Stickstoffdioxidkonzentrationen beitragen. Es ist zu empfehlen:

- ▶ die anthropogenen NO<sub>x</sub>-Emissionen weiterhin zu mindern.

#### 2.1.2 Anthropogene flüchtige organische Verbindungen ohne Methan (NMVOC)

Ob die Minderung der anthropogenen NMVOC-Emissionen in Deutschland eine vorrangige Maßnahme zur Minderung von Ozon sein sollte, ist unklar. Um dies besser beurteilen zu können, sollten zunächst die grundlegenden Kenntnisse zu anthropogenen NMVOC-Emissionen und ihrer Reaktivität verbessert werden. Es ist zu empfehlen:

- ▶ den Detailgrad der NMVOC-Spezifikation in den anthropogenen Emissionskatastern zu verbessern.

Dazu sollten:

- ▶ so viele Primärdaten wie möglich erhoben werden (obwohl für die Emissionsberichterstattung nur Gesamt-NMVOC erforderlich ist),
- ▶ Informationen aus der Lösemittelindustrie eingeholt werden und Möglichkeiten zur freiwilligen Berichterstattung der NMVOC-Spezifikation diskutiert werden. Jede weitere Detaillierung der Information kann bereits helfen, die Spezifikation zu verbessern.

#### 2.1.3 Methan (CH<sub>4</sub>) und Kohlenstoffmonoxid (CO)

Methan- und Kohlenstoffmonoxid-Emissionen tragen beide erheblich zur Hintergrundkonzentration von Ozon auf der hemisphärischen Skala bei, da diese Stoffe eine lange Verweildauer in der Atmosphäre haben. Der deutsche Anteil an den Emissionen dieser Stoffe ist dabei vergleichsweise niedrig. Daher hätte die Minderung der deutschen Emissionen allein keinen wesentlichen Anteil an der Ozonbelastung in Deutschland. Die Kontrolle der Emissionen von Methan und Kohlenstoffmonoxid zur Minderung des Hintergrundozons erfordert daher eine internationale Koordinierung. Es ist zu empfehlen:

- ▶ Internationale Gremien wie das LRTAP<sup>1</sup>-Übereinkommen zu nutzen, um sich für eine Minderung dieser Emissionen auf der hemisphärischen Skala einzusetzen,
- ▶ künftige Bemühungen zur Reduktion von Methanemissionen in Deutschland zu verstärken, da diese als Vorbildfunktion für andere Länder dienen können.

---

<sup>1</sup> Convention on Long-range Transboundary Air Pollution

### 2.1.4 Biogene flüchtige organische Verbindungen (BVOC)

Die biogenen VOC-Emissionen in Deutschland tragen stark zur Ozonbildung in Deutschland bei, insbesondere zu Spitzenwerten bei hohen Temperaturen. Die für die Ozonchemie relevantesten BVOC-Emissionen sind die Isopren-Emissionen einzelner Baumarten. Deutschland ist derzeit dabei, die Baumartenzusammensetzung in den Wäldern und Städten zu ändern, um sie widerstandsfähiger gegen den Klimawandel zu machen. Einige der neuen Baumarten sind Emittenten mit hohem Isopren-Anteil. Es ist zu empfehlen:

- ▶ beim aktiven Waldumbau und anderen Begrünungsmaßnahmen auch die BVOC-Emissionen der Baumarten, insbesondere von Isopren, zu beachten. Die Interessen der Ozonminderung sollten jedoch mit dem Ziel abgewogen werden, in Deutschland wo immer möglich klimaresiliente, möglichst naturnahe Laubmischwälder zu etablieren.
- ▶ eine Aktualisierung der BVOC-Emissionen für Chemie-Transport-Modelle anzustreben.

## 2.2 Schließen von Wissenslücken

Es gibt erhebliche Wissenslücken, die geschlossen werden müssen, um zielgerichtete Maßnahmen zur Ozonminderung in Deutschland beurteilen zu können.

### 2.2.1 Biogene flüchtige organische Verbindungen (BVOC)

Messungen der Isopren-Emissionen und -konzentration sind in Deutschland äußerst selten. Modelle zur Abschätzung der Isopren-Emissionen basieren auf einer sehr kleinen Anzahl von Beobachtungen in verschiedenen Regionen der Welt. Angesichts der Bedeutung von Isopren für die Ozonbildung sollte eine verbesserte Überwachung von Isopren eine hohe Priorität haben. Es ist zu empfehlen:

- ▶ eine regelmäßige Überwachung von Isopren (als für die Ozonbildung wichtiges und relativ leicht zu erfassendes BVOC) an ländlichen (auch durch das UBA-Messnetz) und städtischen (Länder-)Messstationen vorzunehmen,
- ▶ weitere kampagnenbasierte Messungen der Isopren-Emissionen aus der Vegetation unter deutschen Bedingungen durchzuführen. Dies unterstützt die Verbesserung der Emissionsmodelle für Deutschland.

### 2.2.2 Urbane Luftqualität

Die Überwachung der Luftqualität in deutschen Stadtgebieten ist derzeit nicht detailliert genug, um den VOC-Mix in der Umgebungsluft und weitere für die Ozonproduktion relevante atmosphärische Zusammensetzungen charakterisieren zu können. Des Weiteren fehlen Informationen zur Dynamik, wie zum Beispiel die vertikale Durchmischung von emittierten Schadstoffen. Es ist zu empfehlen:

- ▶ parallele Messungen von NO, NO<sub>2</sub> und Ozon an städtischen Hintergrundstationen und am Stadtrand (zur Überwachung des gesamten Budgets von NO<sub>x</sub> und O<sub>x</sub> (O<sub>x</sub> = NO<sub>2</sub> + O<sub>3</sub>)) und
- ▶ parallele Messungen von NO, NO<sub>2</sub> und Ozon an ausgewählten verkehrsnahen Stationen (gegebenenfalls Informationen über die primären NO<sub>2</sub>-Emissionen) durchzuführen.

- ▶ eine kleine Anzahl von „Supersites“ in ausgewählten Städten einzurichten, an denen umfassende Messungen auch von einzelnen VOC-Spezifikationen (biogene, anthropogene VOC u.a. Formaldehyd) und der gesamten OH-Reaktivität (OH – Hydroxyl-Radikal) erfolgen.
- ▶ die Langzeitmessungen durch kampagnenbasierte Messungen der Umgebungskonzentration von spezifiziertem VOC, der gesamten OH-Reaktivität und von NO<sub>x</sub>-Vertikalprofilen in städtischen Gebieten zu ergänzen.

### 2.2.3 Numerische Modelle

Die simulierte Hintergrundkonzentration von Ozon unterscheidet sich aus bisher unbekanntem Gründen derzeit sehr stark zwischen verschiedenen globalen Modellen. Regionale Modelle, die ihre Randbedingungen oft aus den globalen Modellen übernehmen, weisen ebenfalls erhebliche Unsicherheiten in der stundenbezogenen Evaluation mit Messdaten und in der ozonrelevanten Prozessbeschreibung auf. Von BVOC-Emissionen ist bekannt, dass diese Eingangsdaten in allen aktuellen Modellen schlecht erfasst sind. Es wird empfohlen:

- ▶ Landnutzungskarten mit detaillierteren Angaben zu Baumarten zu verwenden,
- ▶ Isopren-Emissionsmodelle zu verbessern,
- ▶ vermehrt bereits verfügbare, jedoch kaum verwendete, detailliertere Methoden zur Modellbewertung (z. B. dynamische Evaluierung) zu verwenden,
- ▶ Modellvergleichsstudien (Schwerpunkt Ozon) auf globaler, europäischer, nationaler und städtischer Ebene in Kombination mit entsprechenden Messkampagnen durchzuführen. Diese können dazu beitragen, Modellunsicherheiten zu verstehen und zu verringern.
- ▶ verstärkt direkte Messungen des Ozonflusses zur Vegetation zur Modellbewertung durchzuführen.

## 3 Stand des Wissens zur Ozonbelastung in Deutschland

### 3.1 Hintergrund

Die Einführung der EU-Richtlinie über die Luftverschmutzung durch Ozon im Jahr 1992 und ihre Verschärfung im Jahr 2003 führte zu einer höheren Dichte an Messstationen für bodennahes Ozon in Deutschland. Derzeit wird die Ozonkonzentration in den Messnetzen der Bundesländer und des Umweltbundesamtes an ca. 260 Stationen gemessen. Seit 1992 haben fast 100 % der städtischen Stationen in Deutschland mindestens einmal pro Jahr das Langfristziel zum Schutz der menschlichen Gesundheit von  $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$  überschritten, und fast 100 % der ländlichen Stationen haben jedes Jahr den langfristigen Zielwert zum Schutz der Vegetation (Accumulated dose Over a Threshold of 40 ppb (AOT40)) von  $6000 \mu\text{g}/\text{m}^3 \text{ h}$  überschritten. Im Unterschied zu anderen Schadstoffen (z. B.  $\text{NO}_2$ ) sind die Konzentrations- und Expositionsschwellenwerte für Ozon keine rechtsverbindlichen Grenzwerte, sondern Zielwerte, Langzeitzielwerte, Informationsschwellen oder Alarmschwellen.

Ab etwa 1995 ist die Häufigkeit der Überschreitung der europäischen Alarm- und Informationsschwelle ( $240$  und  $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) zurückgegangen. Gleichzeitig treten sehr niedrige stündliche Ozonkonzentrationen (zwischen  $0$  und  $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) seltener auf, insbesondere an städtischen Stationen und zu allen Jahreszeiten. Diese Beobachtungen sind konsistent mit dem Auftreten niedrigerer  $\text{NO}_x$ -Emissionen in diesem Zeitraum. Dies führt zu einer Abschwächung des Titrationseffektes während Perioden mit schwacher Photochemie (nachts und während allen Jahreszeiten außer im Sommer) und einer langsameren lokalen photochemischen Produktion während Perioden mit starker Photochemie (tagsüber im Sommer).

Der Titrationseffekt beschreibt den schnellen Abbau von Ozon durch  $\text{NO}$  (bei gleichzeitiger Bildung von  $\text{NO}_2$ ). In Regionen mit hohen  $\text{NO}$ -Emissionen (z. B. Stadtzentren/urbanen Gebieten) kann dies zur vollständigen Entfernung des gesamten Ozons in der Luft führen. Durch die Titration abgebautes Ozon geht jedoch nicht dauerhaft verloren, da  $\text{NO}_2$  durch UV-Strahlung schnell photolysiert wird und so gleich wieder Ozon entsteht. Die Summe aus Ozon und  $\text{NO}_2$  wird oft als „ $\text{O}_x$ “ bezeichnet. Diese Summenkonzentration bleibt während der Ozontitration erhalten, was sie zu einem nützlichen Indikator für die lokale photochemische Ozonproduktion und den lokalen Ozonverlust macht.

Insgesamt steigt die mittlere Ozonkonzentration vor allem in städtischen Gebieten und zu allen Jahreszeiten (1991 – 2018) an. Am stärksten war der Anstieg allerdings in den 1990er Jahren. Dieser Anstieg ist vor allem auf einen zunehmenden Trend des Auftretens von Konzentrationen im mittleren Wertebereich der Konzentrationsverteilung ( $40$  bis  $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) zurückzuführen.

Da die gemessenen  $\text{O}_x$ -Werte in Städten ähnlich wie in nahegelegenen ländlichen Gebieten sind, lässt sich der Anstieg in den städtischen Ozonwerten auf eine verringerte Titration durch eine Abnahme der  $\text{NO}_x$ -Emissionen zurückführen und nicht auf eine erhöhte städtische Ozonproduktion. Aufgrund der relativ geringen Anzahl von Stationen, die sowohl Ozon als auch  $\text{NO}_2$  messen, ist es jedoch schwierig, hier eindeutige Schlussfolgerungen zu ziehen.

Seit 1971 werden in Deutschland am Observatorium Hohenpeißenberg Langzeitmessungen von Ozon durchgeführt. Je nach Ursprung der herantransportierten Luftmassen sind die Messungen repräsentativ für die Hintergrundatmosphäre in Zentraleuropa („sauberer“ Sektor) oder für nahegelegene Regionen einschließlich urbaner Gebiete („verschmutzter“ Sektor). Die Langzeitmessungen zeigen von 1971 bis Mitte der 2000er Jahre einen Anstieg des Ozonjahresmittels um etwa  $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (von etwa  $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$  auf etwa  $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) und seitdem einen leicht rückläufigen Trend.

## 3.2 Ozonbildung, Ozontransport und ihre Modellierung

### 3.2.1 Zeitliche und räumliche Skalen der Ozonproduktion und des Ozontransports

Ozon ist ein sekundärer Schadstoff, der nicht unmittelbar emittiert wird, sondern erst in der Troposphäre durch photochemische Reaktionen aus Vorläuferstoffen ( $\text{NO}_x$  und VOC) in Gegenwart von Sonnenstrahlung entsteht. Aufgrund seiner langen Lebensdauer (bis zu mehreren Wochen) kann es sowohl über interkontinentale Strecken (Ferntransport) als auch aus der Stratosphäre in die Troposphäre transportiert werden. Die Zeitskalen für die Produktion und den Transport von troposphärischem Ozon werden von seiner chemischen Lebensdauer und der Lebensdauer seiner  $\text{NO}_x$ - und VOC-Vorläufer bestimmt. Diese reichen von Stunden ( $\text{NO}_x$  und die sehr reaktiven VOC wie Isopren) bis zu einem Jahrzehnt (Methan). Entsprechende räumliche Skalen reichen von der gesamten Erdkugel bis hin zur urbanen Skala.

Die höchsten Ozonkonzentrationen treten im Sommer auf, wenn die lokale photochemische Produktion von Ozon gegenüber dem Anteil durch den Ferntransport von Ozon aus dem Hintergrund überwiegt. Diese lokale photochemische Produktion erfolgt über kurze Zeiträume (Tage bis Stunden) und auf kleinen räumlichen Skalen. Die lokale photochemische Ozonproduktion ist in Regionen mit hohen Konzentrationen von anthropogenem  $\text{NO}_x$  hochempfindlich gegenüber biogenen VOC-Emissionen (insbesondere Isopren). Titrationseffekte sind auch auf noch kleineren Skalen wichtig, z.B. in der Nähe starker  $\text{NO}_x$ -Quellen (z. B. einzelne Fahnen und Straßenschluchten).

### 3.2.2 Numerische Modelle

Numerische Modelle werden häufig verwendet, um die für Ozon relevanten Prozesse zu verstehen und vorherzusagen. Diese Prozesse reichen von den Emissionen der Vorläuferstoffe bis zur chemischen Bildung von Ozon und schließen Ferntransport- und Abbauprozesse ein. Um alle für die Entstehung, den Transport und den Abbau von Ozon wichtigen Prozesse erfassen zu können, müssen Modelle alle relevanten zeitlichen und räumlichen Skalen abbilden. Dies kann kein einzelnes Modell in einer einzelnen Simulation leisten. Stattdessen werden Hierarchien von Modellen mit unterschiedlichen Skalen verwendet. Die Auswahl der Modelle hängt demnach auch von der zu betrachtenden Skala ab.

Der simulierte Anteil des Hintergrundozons in globalen Modellen basiert auf folgenden Prozessen: Ozontransport aus der Stratosphäre, Oxidation langlebiger VOC-Vorläuferstoffe wie Methan und Kohlenstoffmonoxid in der Anwesenheit von Stickstoffoxiden, Abbau durch Photolyse und hemisphärischer Transport. Globale Modelle haben eine sehr breite Streuung der simulierten Ozonkonzentration zwischen verschiedenen Modellen und überschätzen im Durchschnitt die gemessenen Ozonwerte, wohingegen Spitzenkonzentrationen oftmals unterschätzt werden. Studien zur Quellzuordnung mit Modellen zeigen, dass die Ozonkonzentration im hemisphärischen Hintergrund in Globalmodellen im Jahresdurchschnitt in hohem Maße von den relativ langlebigen organischen Vorläuferstoffen Methan und Kohlenstoffmonoxid beeinflusst wird. Verschiedene Faktoren können dafür verantwortlich sein: unterschiedliche Lebensdauer von Methan, vertikale Mischung und die in den Modellen verwendeten Chemie-Mechanismen. Aufgrund ihrer groben Auflösung (ca. 100 km) neigen globale Modelle dazu, die  $\text{NO}_x$ -Emissionen zu schnell zu verdünnen, insbesondere aus isolierten Punktquellen wie einzelnen Städten und der internationalen Schifffahrt. Diese künstliche Verdünnung der  $\text{NO}_x$ -Emissionen, insbesondere aus der internationalen Schifffahrt, könnte zur Überschätzung der Ozonbelastung in vielen globalen Modellen beitragen.



Regionale Modelle können Ozon über Gebiete von der Größe Europas und mit einer hohen räumlichen Auflösung bis zum städtischen Hintergrund simulieren. Jedes Modell muss Kompromisse in Bezug auf den dargestellten Detaillierungsgrad und den erforderlichen Rechenaufwand eingehen. Regionale Modelle stützen sich entweder auf globale Modelle oder auf Beobachtungen der Hintergrundkonzentration hinsichtlich ihrer lateralen Randbedingungen und damit ihrer Darstellung des Ozontransports über große Entfernungen.

### **3.2.3 Meteorologie**

Die Ozonkonzentration ist stark temperaturabhängig. Obwohl in den Modellen die Temperaturabhängigkeit vieler Prozesse berücksichtigt wird, werden die Spitzenkonzentrationen von Ozon bei hohen Temperaturen häufig nicht erfasst. Ein möglicher Grund hierfür könnten Mängel bei der zeitabhängigen Quantifizierung der BVOC-Emissionen in den Modellen sein. Diese hängen stark von der Temperatur und anderen Modellparametern wie der Landnutzung (Baumarten) und der Wahl des BVOC-Emissionsalgorithmus ab.

Die vertikale Auflösung von Modellen in der Grenzschicht scheint ein weiterer wichtiger Faktor für eine gute Simulation von Ozon zu sein. Eine detaillierte Darstellung ist wichtig, damit das Einmischen von Ozon aus den höheren Schichten in die Mischungsschicht am Morgen sowie die vertikale Durchmischung der Emissionen der Vorläuferstoffe am Tag im Modell berücksichtigt wird.

### **3.2.4 Chemie**

Aktuelle Modelle zeigen, dass anthropogene NMVOC weder wesentlich zum Jahresmittel der Hintergrundkonzentration von Ozon noch zu den Spitzenkonzentrationen beitragen. Ihr wichtigster Beitrag scheint in der Bildung hemisphärischen Hintergrundozons im Frühling zu bestehen. Eine wichtige Einschränkung dieser Ergebnisse ist, dass alle Modelle derzeit stark vereinfachte Darstellungen der NMVOC-Chemie verwenden. Dies hat mehrere Gründe: Unvollständigkeit der Emissionsinventare; Mangel an verfügbaren detaillierten Messungen, mit denen Modelle bewertet werden können; und die Notwendigkeit zur Recheneffizienz.

Viele Modelle verwenden chemische Mechanismen, die in den 1980er Jahren entwickelt wurden. Trotzdem simulieren sie vergleichbare Ozonmengen wie Modelle mit deutlich neueren chemischen Mechanismen. Die von Modellen simulierte Ozonproduktionsrate hängt von der Gesamtreaktivität des simulierten VOC-Gemisches und nicht von den spezifischen Identitäten des simulierten VOC ab. Systematische Unterschiede in den chemischen Mechanismen für die Oxidation von NMVOC könnten einige der Unterschiede im simulierten globalen Hintergrund zwischen globalen Modellen erklären. Auf regionaler Ebene sind BVOC jedoch wichtiger als anthropogene NMVOC. Mängel in der NMVOC-Modellchemie dürften daher nur bei fehlenden hochreaktiven NMVOC von Bedeutung sein, für die es in Deutschland allerdings keine eindeutigen Beobachtungsnachweise gibt.

### **3.2.5 Trockene Deposition**

Ein Hauptabbauprozess für bodennahes Ozon ist die trockene Deposition durch die Vegetation. Diese Ablagerung erfolgt durch Aufnahme von Ozon über offene Stomata, ist also eng mit der Physiologie der Vegetation verknüpft. Hohe Temperaturen können zu einer geringeren Ozondeposition (und damit zu einer höheren Ozonkonzentration) führen, da Pflanzen bei hohen Temperaturen ihre Stomata schließen, um Wasser zu sparen. Längere Trockenperioden können außerdem zum Verlust von Blättern führen, was ebenfalls zu einer geringeren Deposition von Ozon führt. Dies kann jedoch auch die Emissionen von BVOC verringern, wodurch die photochemische Produktion von Ozon abnimmt. Aktuelle Modelle erfassen die beobachtete

Beziehung zwischen Trockenheit und erhöhtem Ozon nicht. Direkte Messungen des Ozonflusses zur Vegetation wären für die Modellbewertung sehr nützlich, aber diese Messungen sind selten.

### 3.2.6 Wissenslücken und Empfehlungen

Die Spanne der simulierten Ozonkonzentrationen in Modellensembles (sowohl auf globaler als auch auf regionaler Ebene) ist häufig groß. Gründe für diese großen Unterschiede sind bisher nicht gut erklärbar. Daher sollten Methoden zur Bewertung und zum Vergleich von Modellen mit Beobachtungen weiterentwickelt werden. Dynamische Evaluierungen der Modelle hinsichtlich ihrer Sensitivität gegenüber der Variabilität in der Meteorologie (z. B. Temperatur), verbesserte Diagnoseinformationen von Modellen (z. B. Ozonbudgets) und verbesserte statistische Evaluierungsmethoden können dazu beitragen, die Unterschiede zwischen den Modellen zu verstehen und ihre Übereinstimmung mit den Beobachtungen zu verbessern. In der Klimamodellierung gibt es bereits weitaus besser entwickelte Methoden zur statistischen Evaluierung von Modellen, die auch als Vorbild für die Atmosphärenchemiemodellierung dienen könnten.

## 3.3 Emissionen von Ozonvorläuferstoffen

### 3.3.1 Anthropogene Vorläuferstoffe

Deutschland berichtet seine anthropogenen Emissionen von Luftschadstoffen und Vorläuferstoffen mit dem primären Ziel, seine Verpflichtungen aus dem LRTAP-Übereinkommen und der EU-NEC-Richtlinie<sup>2</sup> zu erfüllen. Die Verwendung dieser berichteten Emissionsdaten für die numerische Modellierung der Luftverschmutzung ist ein sekundäres Ziel. Die Berichterstattungsrichtlinien des Centre on Emission Inventories and Projections (CEIP) der European Environmental Agency (EEA) legen die Schadstoffe und Sektoren fest, für die Emissionen gemeldet werden müssen. Diese Richtlinien wurden kürzlich dahingehend aktualisiert, dass Emissionen räumlich verteilt auf einem Gitter berichtet werden müssen. Die Richtlinien verlangen außerdem, dass die berichteten Emissionen vollständig und von hoher Qualität sind. Jährliche Durchschnittsemissionen werden jedes Jahr für alle Jahre ab 1990 berichtet. Die meisten westeuropäischen Länder, einschließlich Deutschland, weisen seit 1990 einen Rückgang der NO<sub>x</sub>-, NMVOC- und CO-Emissionen aus. Änderungen in der Berichtsmethode oder die Verfügbarkeit neuer Informationen führen dazu, dass die Emissionen für frühere Jahre regelmäßig überarbeitet werden.

Um Ozon und andere Luftschadstoffe zu simulieren, benötigen numerische Modellierer zusätzliche Informationen zu den Emissionen. Dies sind zum Beispiel Zeitprofile der Emissionen (wann wird wieviel von der Gesamtmasse emittiert; saisonal, wöchentlich, stündlich), den NO/NO<sub>2</sub>-Split und die Spezifikation von NMVOC. Modellierer müssen diese Informationen entweder selbst hinzufügen oder Produkte verwenden, die auf den gemeldeten Daten basieren und von Dritten erstellt wurden. Für diese Produkte werden außerdem Konsistenzprüfungen für gemeldete Emissionen durchgeführt, um Abweichungen zwischen den Ländern bei den gemeldeten Emissionen zu korrigieren. Einige Emissionssektoren profitieren von einem bezüglich der Zeitprofile dynamischen Modellierungsansatz. Beispielsweise hängt die Stärke des Hausbrands stark von der Umgebungstemperatur ab. Die Modellergebnisse werden verbessert, wenn die Temperaturabhängigkeit der Heizemissionen berücksichtigt wird.

---

<sup>2</sup> Richtlinie der Europäischen Union über nationale Emissionshöchstmengen für bestimmte Luftschadstoffe, engl. National Emission Ceilings Directive, kurz NEC-Richtlinie



### 3.3.1.1 Anthropogene Stickstoffoxide (NO<sub>x</sub>)

Der Sektor mit der höchsten Reduzierung der NO<sub>x</sub>-Emissionen seit 1990 ist der Verkehr. Dieser Sektor macht jedoch nach wie vor zusammen mit dem Energiesektor mehr als 80 % der gesamten NO<sub>x</sub>-Emissionen in Deutschland aus. Weitere NO<sub>x</sub>-Quellen sind Industrieprozesse, das verarbeitende Gewerbe, die Landwirtschaft und private Haushalte.

### 3.3.1.2 Anthropogene flüchtige organische Verbindungen ohne Methan (NMVOC)

Für anthropogene NMVOC sind Industrieprozesse und hier vor allem die Anwendung von Lösemitteln die aktuell relevanteste Quelle. Der höchste Anteil der gemeldeten NMVOC-Emissionsminderungen seit 1990 stammt aus den Bereichen Verkehr und der Lösemittelanwendung. Jedoch bleibt die Lösemittelanwendung nach wie vor der wichtigste Sektor für die nationalen NMVOC-Emissionen in Deutschland. Die Emissionen des Lösemittelsektors sind sowohl in Bezug auf die Gesamtmenge der NMVOC-Emissionen als auch auf die Art der Emissionen mit großen Unsicherheiten behaftet. Die Spezifikation der NMVOC-Emissionen ist aufgrund der Art der Berichterstattung unbekannt. Es ist lediglich vorgegeben, dass die gesamten NMVOC-Emissionen berichtet werden müssen, sodass überhaupt keine Informationen über die Spezifikation gesammelt werden. Die Spezifikation der NMVOC-Emissionen muss durch Modellierungsgruppen oder durch Dritte erfolgen, die Emissionsinventare erstellen. Die Spezifikation von NMVOC, wie sie tatsächlich in Modellsimulationen verwendet wird, hängt auch stark von der Anzahl und dem Typ der NMVOC ab, die in dem verwendeten Chemie-Mechanismus berücksichtigt werden.

Angesichts der Tatsache, dass anthropogene NMVOC keine wichtigen Ozonvorläufer zu sein scheinen, ist nicht klar, wie wichtig eine detaillierte NMVOC-Spezifikation für die Modellierung von bodennahem Ozon tatsächlich ist. Dies könnte jedoch von Bedeutung sein, wenn sich zeigen würde, dass die anthropogenen NMVOC viel reaktiver sind als derzeit in den Emissionskatastern und Modellspezifikation angenommen wird. Es ist durchaus möglich, dass die Emissionen moderner Lösemittel reaktiver sind als in den aktuellen, bereits vor einiger Zeit entwickelten, Spezifikationen angenommen wird. Um dies genauer zu untersuchen, wären Modellsensitivitätsstudien hilfreich. Eine Verbesserung der Spezifikation von NMVOC-Emissionen würde eine Änderung der Berichterstattung der Lösemittelindustrie erforderlich machen. Eine Bereitstellung der entsprechenden Informationen auf freiwilliger Basis seitens der Lösemittelindustrie wäre hilfreich und wünschenswert. Eine detaillierte Spezifikation eines Produzenten ist für die Modellierung zunächst nicht nötig. Allgemeine Informationen, welche Arten von Molekülen und deren Reaktivitäten moderne Emissionen aus dem Lösemittelsektor beinhalten, würden zunächst ausreichen.

### 3.3.1.3 Kohlenstoffmonoxid (CO) und Methan (CH<sub>4</sub>)

Kohlenstoffmonoxid und Methan sind im hemisphärischen Hintergrund aufgrund ihrer langen Lebensdauer in der Troposphäre wichtige Vorläuferstoffe von Ozon. Deutsche Methan- und Kohlenstoffmonoxid-Emissionen beeinflussen die lokale Ozonproduktion in Deutschland nicht wesentlich, sondern tragen eher zur Ozonproduktion im hemisphärischen Hintergrund bei.

### 3.3.1.4 Wissenslücken und Empfehlungen

Unsicherheiten werden in den Emissionsinventaren zunächst nicht angegeben; nur für das Gesamtinventar gibt es Unsicherheitsberechnungen. Das UBA berichtet diese für die Komponenten NO<sub>x</sub>, Schwefeldioxid (SO<sub>2</sub>), NMVOC, Ammoniak (NH<sub>3</sub>) und Feinstaub (PM<sub>2.5</sub>) für Deutschland. Neue Erkenntnisse in den Emissionsinventaren kommen mit nur großer Verzögerung (oft Jahre) bei den Modellierern an. Um Verbesserungen in der Ozonmodellierung

in Bezug auf die Emissionen zu erzielen, sollte die Zusammenarbeit zwischen Emissionsexperten und Modellierern weitergeführt und gestärkt werden.

### 3.3.2 Biogene Vorläuferstoffe

Eine Vielzahl von BVOC werden von der Vegetation emittiert, darunter Isopren, andere Terpene und sauerstoffhaltige VOC (OVOC). Von diesen verschiedenen Verbindungen sind Isopren-Emissionen für die Ozonproduktion am wichtigsten. Terpene reagieren im Allgemeinen schneller direkt mit Ozon, als dass sie Ozon produzieren. Außerdem haben ihre Oxidationsprodukte meist einen niedrigen Dampfdruck, so dass sie leicht in die Aerosolphase kondensieren und daher für die nachfolgende Ozonproduktion nicht mehr zur Verfügung stehen. OVOC sind im Allgemeinen weniger reaktiv als Isopren und werden in geringeren Mengen emittiert. Modellstudien zeigen daher, dass insbesondere Isopren wichtig für Episoden mit hohem Ozongehalt im Sommer ist.

Die BVOC-Emissionen sind abhängig von den Eigenschaften der Vegetation sowie den meteorologischen Umgebungsbedingungen und saisonalen Faktoren. Die Isopren-Emissionen stammen überwiegend von Bäumen und sind in hohem Maße artenabhängig, werden aber auch von der individuellen Situation jedes Baumes bestimmt. Umweltbedingungen, die die Isopren-Emissionen beeinflussen, sind Temperatur, Sonneneinstrahlung, CO<sub>2</sub>-Konzentration und Bodenfeuchtigkeit sowie Stressfaktoren wie Parasiten und erhöhte Ozonkonzentrationen.

Hitzewellen führen direkt und indirekt zu erhöhten Emissionen – außer bei zu hoher Trockenheit. Dies zeigt sich beispielsweise bei dem Vergleich der beiden Sommer 2015 und 2018, in denen hohe Temperaturen gemessen wurden. Im Gegensatz zu 2015 war 2018 aber auch durch extreme Trockenheit geprägt, was mit hoher Wahrscheinlichkeit zu niedrigeren Emissionen von BVOC führte. Die Ozon-Spitzenwerte in 2018 waren niedriger als in 2015. Allerdings gibt es wenig bis keine belastbaren BVOC-Messungen, die diesen Zusammenhang belegen können.

#### 3.3.2.1 Wissenslücken und Empfehlungen

Modelle der BVOC-Emissionen sind derzeit stark vereinfacht. Sie berechnen die Gesamtemissionen ausschließlich als lineare Kombination einer Teilmenge der Faktoren (z.B. Vegetationstyp, Temperatur und Einstrahlung), von denen bekannt ist, dass sie zu den Emissionen beitragen. Nichtlineare Wechselwirkungen zwischen diesen Faktoren werden vernachlässigt. Diese Modelle unterscheiden im Allgemeinen auch nicht zwischen einzelnen Baumarten, sondern fassen diese in Vegetationstypen mit gleichen Emissionseigenschaften zusammen. Diese Kategorien können aber je nach Artenzusammensetzung tatsächlich sehr unterschiedliche Emissionsmuster aufweisen. Weiterhin werden Einflüsse wie das Entwicklungsstadium der Bäume, Parasitenbefall oder die lokale Ozonbelastung nicht berücksichtigt. Viele Vereinfachungen in den Modellen resultieren aus fehlenden Messungen, zum Beispiel von den Emissionsmustern einzelner Arten. Andere sind dem fehlenden Wissen über die Auswirkungen von Umwelteinflüssen geschuldet. Messungen von BVOC-Flüssen aus einer Vielzahl von Ökosystemtypen bei gleichzeitiger Erfassung von verschiedenen Umgebungsfaktoren in städtischen und ländlichen Gebieten würden bei der Entwicklung und Bewertung von Modellen helfen. Messungen von Formaldehyd (HCHO) wären ebenfalls nützlich, da dies ein Hauptoxidationsprodukt aller VOC, einschließlich BVOC, ist.

Vegetationskataster sind eine wichtige Grundlage und sollten aktuell gehalten werden. Durch die ständigen Veränderungen in der Vegetationszusammensetzung (z.B. durch den Waldumbau, Landwirtschaft, Stadtbegrünung) sind die Kataster zum Teil zeitlich sehr variabel. Der Waldumbau führt auch in deutschen Wäldern zu raschen Veränderungen der Zusammensetzung

der Baumarten. Dies führt auch zur Veränderung der Emission von Isopren und anderen BVOC. Damit BVOC-Emissionsmodelle detaillierte Vegetationskataster nutzen können, müssen die Algorithmen aktualisiert werden, um eine detailliertere Unterscheidung zwischen verschiedenen Baumarten zu ermöglichen.

### **3.4 Messungen von Ozon und Vorläuferstoffen**

Zusätzlich zu den oben beschriebenen Messungen, die nach dem LRTAP-Übereinkommen und der EU-Gesetzgebung erforderlich sind, werden weitere langfristige oder kampagnenbasierte Messungen von Vorläuferstoffen durchgeführt. Langzeitmessungen sind besonders nützlich für die Ermittlung von Trends, während kampagnenbasierte Messungen ein detailliertes Prozessverständnis liefern können. Zu unterscheiden sind zudem In-situ-Messungen und Fernerkundung.

#### **3.4.1 In-situ-Messungen von vor allem flüchtigen organischen Verbindungen (VOC) und Stickoxiden (NO<sub>x</sub>)**

Neben den oben beschriebenen Langzeitmessungen von Ozon am Hohenpeißenberg existieren auch Langzeitmessungen für Ozonvorläuferstoffe an diesem Standort. Messungen von NO<sub>x</sub> werden seit 1996 an diesem Standort durchgeführt. Diese Messdaten zeigen keinen Trend im Zeitraum bis heute, weder für Luftmassen, die dem „sauberen“ Sektor zugeordnet werden können und damit repräsentativ für die Hintergrundatmosphäre in Zentraleuropa sind, noch für Luftmassen, die aus dem „verschmutzten Sektor“ herantransportiert werden. Das Fehlen eines Rückgangs der NO<sub>x</sub>-Konzentrationen steht im Widerspruch zum Rückgang der gemeldeten NO<sub>x</sub>-Emissionen. Anthropogene NMVOC weisen in diesem Zeitraum einen geringfügig abnehmenden Trend auf, während BVOC einen zunehmenden Trend aufweisen. Dieser Anstieg ist am deutlichsten bei Isopren zu verzeichnen.

Die Messung der gesamten OH-Reaktivität einer Luftmasse ist im Vergleich zur Messung der Konzentration einzelner VOC ein nützlicheres Maß für den Beitrag der VOC zur Geschwindigkeit der Ozonproduktion. Die OH-Reaktivität ist außerdem eine nützliche Metrik für die Bewertung von Modellen, da diese die VOC-Chemie stark vereinfacht darstellen. Messkampagnen in städtischen Gebieten Deutschlands zeigen abnehmende Trends für die NO<sub>x</sub>-Konzentration, stärker ausgeprägt jedoch für die OH-Reaktivität der VOC. Eine Messkampagne in Berlin 2016 hat gezeigt, dass die OH-Reaktivität von VOC im „urbanen Hintergrund“ von BVOC dominiert wird. VOC-Messungen in der „Innenstadt“ weisen jedoch eine ähnliche Reaktivitätszusammensetzung zu Verkehrsemissionen auf. In dieser Kampagne wurden keine Hinweise auf hochreaktive Emissionen aus dem Lösemittelsektor gefunden.

#### **3.4.2 Nutzung von Satellitenmessungen von flüchtigen organischen Verbindungen (VOC), Stickoxiden (NO<sub>x</sub>) und Ozon (O<sub>3</sub>)**

Instrumente an Bord von Satelliten können verschiedene für das troposphärische Ozon relevante chemische Spezies messen. Sie können neben Ozon Informationen über NO<sub>2</sub>, CO und Formaldehyd (HCHO) liefern. Kohlenstoffmonoxid kann in Deutschland via Satellit nur gemessen werden, wenn die lokalen Quellen sehr stark sind (z.B. Brände). Formaldehyd kann aus Satellitenmessungen über Deutschland im Winter nicht nachgewiesen werden und im Sommer nur mit relativ hohen Fehlern. Es lassen sich jedoch auf monatlichen Satellitenkarten durchaus erhöhte HCHO-Werte über einigen Gebieten in Europa wie der Po-Ebene, über bestimmten Waldgebieten und über Bränden nachweisen. Einzelmessungen außerhalb von Bränden liegen unterhalb der Nachweisgrenze, es können daher aus ihnen keine Informationen zu VOC hergeleitet werden. Ozonmessungen sind in Deutschland aufgrund des geringen

thermischen Kontrasts zwischen dem Boden und der darüberliegenden Atmosphäre schwierig. Derzeit sind in Deutschland regelmäßig nur NO<sub>2</sub>-Messungen durch Satelliten möglich.

Seit 2018 misst das TROPOMI-Instrument an Bord des Satelliten Sentinel 5P die Gesamtsäule NO<sub>2</sub> einmal täglich zur Überflugzeit von 13:30 mit einer Auflösung von 3,5 x 5,5 km<sup>2</sup> unter wolkenfreien Bedingungen auf 30 % Genauigkeit. Die räumliche Abdeckung und die Messgenauigkeit können verbessert werden, indem Daten aus mehreren Überflügen gemittelt werden. Diese räumliche Auflösung ermöglicht einen direkten Vergleich mit regionalen numerischen Modellen. TROPOMI-Daten werden bereits für die Modellbewertung verwendet. TROPOMI-NO<sub>2</sub>-Messungen können auch direkt zur Lokalisierung von NO<sub>2</sub>-Quellen und zur Bestimmung ihrer Stärke verwendet werden. Dies ermöglicht eine direkte Evaluierung der Emissionsinventare.

Eine Hauptunsicherheitsquelle bei Satelliten-NO<sub>2</sub>-Messungen ist die vertikale Verteilung von NO<sub>2</sub>. Der „Retrieval Algorithm“ muss eine a-priori-Vertikalverteilung annehmen, die üblicherweise Modellsimulationen entnommen wird. Die Vertikalverteilung von NO<sub>2</sub> in Modellen ist jedoch selbst unsicher. Zur Verbesserung der Verwendbarkeit von NO<sub>2</sub>-Satellitendaten in Modellen sind daher unabhängige Messungen der vertikalen NO<sub>2</sub>-Verteilung durch Sonden erforderlich.

Aufgrund des relativ aktuellen Starts von Sentinel 5P sind nur erste Ergebnisse zu verzeichnen. Zukünftige Generationen von geostationären Satelliten werden in der Lage sein, den Tageszyklus der atmosphärischen Zusammensetzung zu messen und so weitere Möglichkeiten zur Bewertung von Inventaren und Modellen zu schaffen.

### 3.4.3 Wissenslücken und Empfehlungen

Es sind nicht genügend Messungen von Ozonvorläuferstoffen für die Bewertung von Modellen verfügbar. Zum Verständnis des Ozontransports über große Entfernungen, der Hintergrundbedingungen und der urbanen Photochemie sind verschiedene Messungen erforderlich. Die Messungen müssen für Modellierer leicht zugänglich sein, und die Modellierer sollten die verfügbaren Daten auch besser nutzen. Das Programm ACTRIS (Aerosols, Clouds and Trace gases Research Infrastructure) bietet beispielsweise ein freizugängliches Datenportal an (ACTRIS Data portal), das Messungen von deutschen und weiteren europäischen Standorten umfasst.

Zusätzlich zu den regelmäßigen Ozonmessungen in der freien Troposphäre wären PAN-Messungen (Peroxyacetylnitrat) hilfreich, um die Rolle des Ferntransports zu verstehen. Zusätzliche VOC-Messungen wären sowohl im ländlichen als auch im städtischen Hintergrund nützlich. Angesichts des hohen Anteils von Isopren an der Ozonbildung und der hohen Unsicherheit hinsichtlich des Verständnisses der Isopren-Emissionen wären regelmäßige Langzeitmessungen von Isopren sowohl in städtischen als auch in ländlichen Gebieten sehr nützlich. Dies würde helfen, das Verständnis der Isopren-relevanten Prozesse zu verbessern und damit auch die entsprechenden Prozesse in den Modellen besser abbilden zu können.

Zur Verbesserung des Verständnisses der Spezifikation anthropogener NMVOC-Emissionen in aktuellen Inventaren würden detaillierte, fortlaufende, hochspezifizierte Messungen von NMVOC in städtischen Gebieten helfen. Diese Messungen würden dazu beitragen, diese Spezifikation und ihre OH-Reaktivität einzuschätzen. Messungen der gesamten OH-Reaktivität in städtischen Gebieten wären auch sehr nützlich, um die Vollständigkeit spezifizierter NMVOC-Messungen sowie das Ozonproduktionspotential städtischer Luftmassen zu überprüfen. Formaldehyd sollte als übliches Oxidationsprodukt jeder VOC-Spezies in solche Messungen einbezogen werden.

Für das Verständnis der  $\text{NO}_x$ -Ozon-Chemie ist es außerdem wichtig, dass  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  und Ozon parallel an ausgewählten Messstationen gemessen werden.  $\text{NO}$  und  $\text{NO}_2$  sollten parallel gemessen werden, um Informationen über die gesamten  $\text{NO}_x$ -Emissionen zu erhalten. Die Summe von  $\text{NO}_2$  und  $\text{O}_3$  („ $\text{O}_x$ “) gibt unabhängig vom Titrationseffekt Auskunft über die Ozonbildung und -zerstörung. Die Messungen aller drei Stoffe am Straßenrand und an nahegelegenen Stationen im städtischen Hintergrund liefern Informationen über die primären  $\text{NO}_2$ -Emissionen aus dem Verkehr. In den Messnetzen der Länder erfolgt diese Parallelmessung an Verkehrsstationen vielfach nicht (da die Messprogramme auf die Anforderungen der EU-Richtlinien ausgerichtet sind).

Derzeit werden Routinemessungen von  $\text{NO}_x$  nur an den bodennahen Messstationen durchgeführt. Kenntnisse über das vertikale Profil von  $\text{NO}_x$  in der Grenzschicht fehlen. Messungen des vertikalen  $\text{NO}_x$ -Profils würden dazu beitragen, die simulierte vertikale Vermischung in Modellen zu evaluieren und a-priori-Informationen für Satellitenmessungen bereitzustellen.

Eine kleine Anzahl von „Supersites“ in ausgewählten deutschen Großstädten würde dazu beitragen, viele der derzeitigen Wissenslücken in unserem Verständnis der Emissionen und der Chemie von BVOC, anthropogenen NMVOC,  $\text{NO}_x$  und Ozon zu schließen. Langzeitmessungen an solchen Supersites könnten durch gelegentliche Messkampagnen ergänzt werden. Die Kombination aus langen Zeitreihen an festen, repräsentativen Standorten und detaillierten Kampagnendaten über kürzere Zeiträume wäre ideal für die Modellbewertung und Verbesserung des Prozessverständnisses.

Des Weiteren werden mehr Informationen zur vertikalen Verteilung von  $\text{NO}_x$  benötigt. Diese sind wichtig, um Modelle auch in der Vertikalen zu evaluieren und um die Genauigkeit der Satellitenmessungen zu verbessern. Hier würden sich beispielsweise Ballonmessungen mit Sonden und DOAS (Differenzielle Optische Absorptionsspektroskopie)-Messungen anbieten.