

TEXTE

88/2023

Zeitliche Verteilung nationaler Emissionsdaten für Ausbreitungsrechnungen mit Chemie- Transportmodellen

Abschlussbericht

TEXTE 88/2023

Ressortforschungsplan des Bundesministerium für
Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit

Forschungskennzahl 3718 52 208 0
UBA-FB001121

Zeitliche Verteilung nationaler Emissionsdaten für Ausbreitungsrechnungen mit Chemie-Transportmodellen

Abschlussbericht


von
Nicola Toenges-Schuller
Erric Gallus
Michael Pelzer
Christiane Schneider


Im Auftrag des Umweltbundesamtes

Impressum

Herausgeber

Umweltbundesamt
Wörlitzer Platz 1
06844 Dessau-Roßlau
Tel: +49 340-2103-0
Fax: +49 340-2103-2285
buergerservice@uba.de
Internet: www.umweltbundesamt.de

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

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

Durchführung der Studie:

AVISO GmbH
Am Hasselholz 15
52074 Aachen

Abschlussdatum:

Februar 2023

Redaktion:

Fachgebiet II 4.2 Beurteilung der Luftqualität
Stefan Feigenspan

Publikationen als pdf:

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

ISSN xxxxxxxxx

Dessau-Roßlau, Juni 2023

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen und Autoren.

Kurzbeschreibung: Zeitliche Verteilung nationaler Emissionsdaten für Ausbreitungsrechnungen mit Chemie-Transportmodellen

Im Rahmen dieses Projekts wurde das Tool TeResE (Temporal Resolution of Emission data) zur zeitlichen Verteilung von Emissionen entwickelt. Für räumlich verteilte Emissionen leitet das Tool regionalisierte Splitting-Faktoren ab, die für jede Gitterbox und jede Quellgruppe pro Stunde den Anteil der jeweiligen Emission enthalten. Diese Splitting-Faktoren hängen dynamisch von den jeweiligen räumlichen oder zeitlichen Bedingungen ab, z.B. unterscheiden sich verschiedene Jahre hinsichtlich der Meteorologie: Art, Ausprägung und Zeitpunkte der auftretenden Wetterlagen variieren sowohl räumlich wie auch von Jahr zu Jahr. Dies beeinflusst unmittelbar die zeitlichen Emissionsprofile der Quellgruppen wie z.B. der Landwirtschaft oder der Kleinf Feuerungsanlagen. Andere wichtige Eingangsdaten sind z.B. stündliche Daten der Verkehrsstärken des Straßenverkehrs oder der aktuellen Energieabgabe von Kraftwerken.

Die aktuell vorliegende Version des Tools erzeugt Splitting-Faktoren für Stickstoffoxide, Feinstaub, Ammoniak, nicht-Methan Kohlenwasserstoffe, Schwefeldioxid und Kohlenmonoxid und das Nest-2 Gitter (ca. 2 km x 2 km Auflösung über Deutschland) des derzeit im Umweltbundesamt betriebenen Chemie-Transport-Modells REM-CALGRID. Mit diesem Modell wurde für das Jahr 2016 eine Evaluierung der Splitting-Faktoren durchgeführt. Dazu wurden die Schnittstellen des Modells REM-CALGRID entsprechend angepasst.

Abstract: Temporal distribution of national emission data for dispersion calculations with chemical transport models

Within this project, the tool TeResE (Temporal Resolution of Emission data) for the temporal distribution of emissions was developed. Splitting factors are generated for spatially distributed emissions as annual totals per grid cell, which contain the share of the respective emission for each grid cell and each source group per hour. These splitting factors depend dynamically on the respective spatial or temporal conditions, e.g., different years differ in terms of meteorology: the type, characteristics and times of the weather conditions that occur vary both spatially and from year to year. This directly influences the temporal emission profiles of source groups such as agriculture or small combustion plants. Other important input data are, for example, hourly data on road traffic volumes or the current energy output of power plants.

The current version of the tool generates splitting factors nitrogen oxides, particulate matter, ammonia, non-methane hydrocarbons sulphur dioxide and carbon monoxide for the nest-2 grid (approx. 2 km x 2 km resolution over Germany) of the REM-CALGRID chemical transport model currently operated by the German environmental agency. This model was used to evaluate the splitting factors for 2016. For this purpose, the interfaces of REM-CALGRID were adjusted accordingly.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----|
| Abbildungsverzeichnis..... | 9 |
| Tabellenverzeichnis | 20 |
| Abkürzungsverzeichnis | 26 |
| Zusammenfassung..... | 29 |
| Summary | 39 |
| 1 Hintergrund und Ziele | 49 |
| 2 Literatur- und Datenrecherche zu meteorologischen und anderen Abhängigkeiten sektoraler Emissionen | 51 |
| 2.1 Befragungen..... | 51 |
| 2.1.1 CAMS..... | 51 |
| 2.1.2 LOTOS-EUROS | 53 |
| 2.1.3 EURAD (-IM) | 54 |
| 2.1.4 CHIMERE | 54 |
| 2.1.5 CMAQ..... | 55 |
| 2.2 Vergleich der statischen Zeitprofile aus CAMS 50 mit in RCG für Deutschland aktuell verwendeten Profilen | 55 |
| 2.3 Quellgruppenspezifische Auswertung der Literaturrecherche..... | 59 |
| 2.3.1 Landwirtschaft | 60 |
| 2.3.2 Straßenverkehr | 66 |
| 2.3.3 Kraftwerke | 74 |
| 2.3.4 Kleinf Feuerungsanlagen | 77 |
| 3 COSMO-DE Meteorologie und Klimaregionen | 79 |
| 4 Untersuchung der sektoralen Emissionen hinsichtlich meteorologischer und anderer Abhängigkeiten..... | 84 |
| 4.1 Kraftwerke..... | 92 |
| 4.2 Kleinf Feuerungsanlagen | 101 |
| 4.3 Industrie, Gewerbe, Energie ohne Kraftwerke | 103 |
| 4.4 Straßenverkehr | 110 |
| 4.5 Sonstiger Verkehr..... | 133 |
| 4.6 Landwirtschaft | 136 |
| 4.7 Sonstige Produktanwendungen | 146 |
| 4.8 Zusammenfassung Splitting-Faktoren | 148 |
| 5 TeResE (Temporal Resolution of Emission data)..... | 149 |

| | | |
|-------|--|-----|
| 5.1 | Zeitzone für die Splitting-Faktoren | 149 |
| 5.2 | Zusammenfassung der Splitting-Faktoren auf NFR-Ebene zu Faktoren auf SNAP-Ebene .. | 149 |
| 5.2.1 | SNAP 1..... | 150 |
| 5.2.2 | SNAP 2..... | 151 |
| 5.2.3 | SNAP 3, 4, 5, 6..... | 152 |
| 5.2.4 | SNAP 7 (RCG: 7 bis 12) | 152 |
| 5.2.5 | SNAP 8 (RCG: SNAP 13)..... | 153 |
| 5.2.6 | SNAP 9 (RCG: SNAP 14)..... | 154 |
| 5.2.7 | SNAP 10 (RCG: SNAP 15)..... | 154 |
| 5.2.8 | Anzahl Splitting-Faktoren auf SNAP Ebene..... | 156 |
| 5.3 | Ablaufdiagramme..... | 157 |
| 6 | Schnittstellenanpassung REM-CALGRID..... | 159 |
| 6.1 | Kurzbeschreibung REM-CALGRID..... | 159 |
| 6.2 | Basisläufe mit statischen Zeitprofilen..... | 161 |
| 6.3 | Modifikationen zur Schnittstellenanpassung und durchgeführte Tests..... | 162 |
| 7 | Evaluierung anhand ausgewählter Stationen | 164 |
| 7.1 | Auswahl des für die Evaluierung verwendeten Referenzjahres | 164 |
| 7.2 | Anpassung Landwirtschaft..... | 165 |
| 7.2.1 | Mittelungsgebiete und -zeiträume | 166 |
| 7.2.2 | Parameter Bodenbearbeitung | 169 |
| 7.3 | Auswahl geeigneter Messstationen für die Evaluierung | 175 |
| 7.4 | Kartendarstellungen Jahresmittelwerte 2016 | 176 |
| 7.5 | Kartendarstellungen Monatsmittelwerte 2016 | 187 |
| 7.6 | Zeitreihen 2016 | 200 |
| 7.7 | Statistische Kenngrößen 2016 | 202 |
| 7.8 | Evaluierung SF Landwirtschaft..... | 212 |
| 7.8.1 | Evaluierung Landwirtschaft NH ₃ 2016 | 212 |
| 7.8.2 | Evaluierung Landwirtschaft NH ₃ 2017 | 216 |
| 7.9 | Auswertungen zur Feinstaub-Episode Anfang 2017 | 219 |
| 7.10 | Fazit Evaluierung anhand ausgewählter Stationen..... | 225 |
| 8 | Evaluierung mit dem Delta-Tool..... | 227 |
| 8.1 | Evaluierung NO ₂ | 227 |
| 8.2 | Evaluierung PM ₁₀ | 234 |
| 8.3 | Evaluierung O ₃ | 242 |

| | | |
|-------|---|-----|
| 8.4 | Fazit Evaluierung Delta-Tool | 244 |
| 9 | Ausblick: Vorschläge für Weiterentwicklungen von TeResE | 246 |
| 10 | Quellenverzeichnis | 249 |
| A | Übersicht NFR-Sektoren, GNFR-Sektoren, SNAP-level 1 Sektoren | 252 |
| B | Übersicht NFR-Sektoren und Splitting-Faktoren | 260 |
| C | TeResE (Temporal Resolution of Emission data)..... | 273 |
| C.1 | Ablaufdiagramme..... | 273 |
| C.2 | TeResE Eingabedateien | 282 |
| C.2.1 | Konfigurationsdateien | 282 |
| C.2.2 | Eingangsdaten..... | 285 |
| C.2.3 | Erforderliche Änderungen bei Änderung des Rechenjahres | 286 |
| C.3 | TeResE Ausgabedateien..... | 287 |
| C.3.1 | Ausgabe NFR-Ebene..... | 287 |
| C.3.2 | Ausgabe SNAP-Ebene..... | 288 |
| D | Durchgeführte Modifikationen am Quellcode von RCG | 289 |
| D.1 | Routinen und Datenstrukturen zur Verwendung statischer Zeitprofile in RCG | 289 |
| D.2 | Durchgeführte Modifikationen am RCG Quellcode | 290 |
| E | Evaluierung, Karten absolute Differenzen Monatsmittelwerte 2016..... | 293 |
| F | Evaluierung: Plots Zeitreihen 2016 | 297 |
| F.1 | Zeitreihen NO ₂ | 297 |
| F.2 | Zeitreihen NO _x | 305 |
| F.3 | Zeitreihen O ₃ | 313 |
| F.4 | Zeitreihen PM10..... | 321 |
| G | Korrelationen 2016, Plots..... | 329 |
| H | Evaluierung: Statistische Kenngrößen, Zahlenwerte 2016 | 333 |
| H.1 | Korrelationen | 333 |
| H.2 | Bias | 338 |
| H.3 | Root Mean Square Error | 343 |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|---------------|--|----|
| Abbildung 1: | 2016 NO ₂ : Jahresmittelwert RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default); die weißen Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren der Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen Jahresmittelwert..... | 34 |
| Abbildung 2: | Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R ² (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Berlin-Neukölln 2016 | 36 |
| Abbildung 3: | Zeitprofile anthropogener Emissionen bei CAMS 50, Quelle: TNO (2011) | 52 |
| Abbildung 4: | Vergleich der Jahresgänge anthropogener Emissionen bei CAMS 50 (oben), Quelle: TNO (2011), s. Abbildung 3, mit den aktuell in RCG für Deutschland verwendeten Jahresgängen (unten) | 56 |
| Abbildung 5: | Jahresgang der Quellgruppe „Landwirtschaft“ in RCG für unterschiedliche Luftschadstoffe | 57 |
| Abbildung 6: | Vergleich der Wochengänge anthropogener Emissionen bei CAMS 50 (oben), Quelle: TNO (2011), s. Abbildung 3, mit den aktuell in RCG für Deutschland verwendeten Wochengängen (unten) | 58 |
| Abbildung 7: | Vergleich der Tagesgänge anthropogener Emissionen bei CAMS 50 (oben), Quelle: TNO (2011), s. Abbildung 3, mit den aktuell in RCG für Deutschland verwendeten Tagesgängen (unten) ... | 59 |
| Abbildung 8: | Jahresgang der Emissionen für die Jahre 1999 bis 2001 für die Gitterzellen, die die Stationen Tange (a), Lindet (b), Frederiksborg (c) und Kelsnor (d) enthalten, Quelle: Skjoth et al. (2004)..... | 61 |
| Abbildung 9: | Jahresgang der unterschiedlichen NH ₃ emittierenden Prozesse an der Station Tange, Quelle: Geels et al. (2012)..... | 61 |
| Abbildung 10: | Normierte NH ₃ -Konzentrationen (Messung und Modellrechnung) und Emissionen: Tagesgänge nach Jahreszeiten für die Gitterzelle, in der die Messstation Harvell liegt, Quelle: Werner et al. (2015)..... | 62 |
| Abbildung 11: | Jahresgang der täglichen NH ₃ - Emissionen: Statisches (STP) und dynamisches (DTP) Zeitprofil (Mittelwert über alle Gitterzellen) im Vergleich, Quelle: Backes et al. (2016) | 63 |
| Abbildung 12: | Jahresgang der NH ₃ -Emissionen in verschiedenen Ländern Europas: Vergleich der a priori-Emissionen, der assimilierten Emissionen (optimized) sowie der Subsektoren nach MASAGE; Quelle: Paulot et al. (2014)..... | 64 |

| | | |
|---------------|---|----|
| Abbildung 13: | Tägliche Gülletransportdaten 2008 für die Provinzen West-Flandern (WVL), Ost-Flandern (OVL), Antwerpen (ANTW), Limburg (LIMB) und Flämisch Brabant (VLBRA), Quelle: Hendriks et al. (2016) | 65 |
| Abbildung 14: | Wochengang (stündliche Werte) der Emissionen für Leicht- und Schwerverkehr auf BAB und innerstädtischen Bundesstraßen, Mittelung des Zeitverlaufs gewichtet mit NO _x -Emissionsfaktoren, zum Vergleich: rote Kurve: Mittelung des Zeitverlaufs nach Fahrleistung, blaue Kurve: Default-Profil; Quelle: Mues et al. (2014) | 66 |
| Abbildung 15: | Ganglinien des Straßenverkehrs für Paris, London, Barcelona und Mailand, abgeleitet aus verkehrsnahen NO ₂ -Messstationen, Quelle: Menut et al. (2012) | 68 |
| Abbildung 16: | Mit CHIMERE modellierte Tagesgänge für O ₃ , NO ₂ und PM ₁₀ (Mittelung 29. Juni bis 1. September 2007) für Paris, Barcelona, London, Warschau, Neapel, jeweils Vergleich der Modellrechnung mit dem Default-Zeitprofil und dem optimierten Zeitprofil für den Straßenverkehr, Quelle: Menut et al. (2012)..... | 69 |
| Abbildung 17: | Normierter Wochengang zeitgleicher NO ₂ -Messungen mittels eines Molybdän- und eines photolytischen Konverters, gemittelt über die Jahre 2006 bis 2009 in Payerne (Schweiz), Quelle: Mues et al. (2014) | 71 |
| Abbildung 18: | Kampagnengemittelter Tagesgang von NO ₂ , optisch gemessen mittels DOAS und photokatalytisch gemessen mittels Molybdän Konverter, bei einer Messkampagne in Santiago de Chile 2005, Quelle: Villena et al. (2012) | 72 |
| Abbildung 19: | Wochengänge aus Dauerzählstellen der BASt 2016 für Kfz und SV: oben: Gundersheim Nord, KW 1 und KW 38; unten: Murnau; Datenquelle: BASt (2022) | 73 |
| Abbildung 20: | ENTSO-E: Hourly Load Values für Deutschland 2018, Datenquelle: https://www.entsoe.eu/data/power-stats/hourly_load/ , Zugriff: 25.04.2022 | 74 |
| Abbildung 21: | Stromproduktion in Deutschland (alle Quellen), beispielhaft für KW 16 im Jahr 2019, Quelle: Screenshot aus www.energy-charts.de , ISE, Zugriff: 22.04.2019..... | 75 |
| Abbildung 22 | Stromproduktion in Deutschland (Braunkohle, kraftwerksscharf), beispielhaft für KW 16 im Jahr 2019, Quelle: screenshot aus www.energy-charts.de , ISE, Zugriff: 22.04.2019 | 76 |
| Abbildung 23: | Zusammenhang zwischen Außentemperatur (2-Tage-Mittelwerte) und Fernwärmebedarf in Hamburg für die Jahre 2005 und 2006, Quelle: Aulinger et al. (2011) | 77 |

| | |
|--|-----|
| Abbildung 24: Klimaregionen in Deutschland (DWD, 2017) | 80 |
| Abbildung 25: Tagesmittelwerte pro Klimaregion der Temperatur in 2 m Höhe über Grund aus der COSMO-DE Meteorologie 2016 | 81 |
| Abbildung 26: Tagesmittelwerte pro Klimaregion der mittleren Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe über Grund aus der COSMO-DE Meteorologie 2016..... | 81 |
| Abbildung 27: Tagesmittelwerte pro Klimaregion des Gesamtniederschlags aus der COSMO-DE Meteorologie 2016..... | 82 |
| Abbildung 28: Tagesmittelwerte der Temperatur in 2 m Höhe über Grund 2016: Vergleich Mittelwert COSMO-DE Region „Südwestdeutsche Mittelgebirge“, COSMO-DE Rasterzellen um Stuttgart und Messwerte Stuttgart Echterdingen | 83 |
| Abbildung 29: Tagesmittelwerte der Temperatur in 2 m Höhe über Grund 2016: Vergleich Mittelwert COSMO-DE Region „Alpen“ und Messwerte Oberstdorf | 83 |
| Abbildung 30: PRTR-Betriebe des Sektors Stromerzeugung und ENTSOE- Kraftwerksdaten pro Übertragungsnetzbetreiber für Deutschland 2017..... | 96 |
| Abbildung 31: Stündliche Stromerzeugung 2016 für vier Kraftwerke nach ENTSO-E | 97 |
| Abbildung 32: Splitting-Faktoren 2016 für vier Kraftwerke nach ENTSO-E | 98 |
| Abbildung 33: Splitting-Faktoren 2016 im Vergleich mit 2017 für vier Kraftwerke nach ENTSO-E | 99 |
| Abbildung 34: Tagesbezogene Splitting-Faktoren 2016 (oben) und 2017 (unten) für die vier Übertragungsnetzbetreiber in Deutschland nach ENTSO-E | 100 |
| Abbildung 35: Jahresgang zur zeitlichen Verteilung von Emissionen aus Kleinf Feuerungsanlagen für die Klimaregion „Zentrale Mittelgebirge und Harz“ 2016 für verschiedene Werte für Heizgrenze und Anteil Warmwasser/Prozesswärme im Vergleich mit dem entsprechenden statischen Zeitprofil aus RCG | 102 |
| Abbildung 36: Tagesgänge zur Verteilung der Emissionen auf Kleinf Feuerungsanlagen | 103 |
| Abbildung 37: Produktionsindizes (Monatswerte deutschlandweit, normiert) 2016 der hier benötigten Wirtschaftszweige (WZ08, Datenquelle: Destatis) (fett gedruckte Linien) und Sommerferien (SF) nach Bundesländern (feiner gedruckte Linien)..... | 108 |
| Abbildung 38: Produktionsindizes (Monatswerte deutschlandweit, normiert) 2017 der hier benötigten Wirtschaftszweige (WZ08, Datenquelle: Destatis) (fett gedruckte Linien) und Sommerferien (SF) nach Bundesländern (feiner gedruckte Linien)..... | 109 |

| | |
|---|-----|
| Abbildung 39: Regionen für die Hochrechnung bei der SVZ 2020 | 112 |
| Abbildung 40: Stündliche Kfz-Werte (LV, SV) 2018 für zwei automatische Dauerzählstellen der BAST | 113 |
| Abbildung 41: Stündliche Kfz-Werte (LV, SV) 2018 (erste vier Wochen) für zwei automatische Dauerzählstellen der BAST | 114 |
| Abbildung 42: Splitting-Faktoren für Leichtverkehr (LV, oben) und Schwerverkehr (SV, unten) auf BAB für die SVZ-Regionen 603 und 904 | 115 |
| Abbildung 43: Stündliche Kfz-Werte (LV, SV) für die ersten zwei Wochen 2016, 2017 und 2018 für eine automatische Dauerzählstelle der BAST | 116 |
| Abbildung 44: Lage der BAST Dauerzählstellen an innerörtlichen Bundesstraßen | 117 |
| Abbildung 45: Stündliche Verkehrswerte 2016 (normiert) an zwei innerstädtischen Dauerzählstellen der BAST und drei Zählstellen der LUBW an innerstädtischen Spotmessstellen..... | 119 |
| Abbildung 46: Stündliche Verkehrswerte 2016 (normiert) an zwei innerstädtischen Dauerzählstellen der BAST und drei Zählstellen der LUBW an innerstädtischen Spotmessstellen, eine Normalwoche | 119 |
| Abbildung 47: Innerörtliche Splitting-Faktoren (SF) 2016 für den Leichtverkehr (LV, oben) und den Schwerverkehr (SV, unten) für Bayern und Sachsen auf Basis der bundesweit gemittelten innerstädtischen Dauerzählstellen der BAST unter Berücksichtigung der jeweiligen Termine für die Sommerferien | 120 |
| Abbildung 48: NO _x -Korrekturfunktionen für Diesel Pkw nach HBEFA4.1; Bildquelle: TU Graz (2019)..... | 123 |
| Abbildung 49 NO _x -Korrekturfunktionen für Diesel INfz nach HBEFA4.1; Bildquelle: TU Graz (2019)..... | 123 |
| Abbildung 50: Flottenzusammensetzung für Pkw und leichte Nutzfahrzeuge (Mittelwert Deutschland); Datenquelle: HBEFA4.1..... | 124 |
| Abbildung 51: Temperaturabhängige Korrekturfaktoren für die NO _x -Emissionen der Pkw und INfz (normiert, Mittelwert = 1) für die bundesmittlere Flotte der Pkw und INfz (2016, 2020, 2025 und 2030) und den Temperaturverlauf der Klimaregion „Südwestdeutsche Mittelgebirge“ | 125 |
| Abbildung 52: Tägliche Temperaturdifferenzen (Mittelwerte pro Klimaregion und für Deutschland gesamt) aus der COSMO-DE Meteorologie für 2016 | 126 |
| Abbildung 53: SF 2016 für die Emissionen des Leichtverkehrs (LV), exemplarisch für Sachsen (SN), für Schadstoffe ohne Temperaturabhängigkeit, für NO _x und für NMVOC aus Sektor 1A3bv | 128 |

| | |
|---|-----|
| Abbildung 54: Mittlerer Wochengang der Verkehrsstärken der Fahrzeugarten Pkw, leichte und schwere Nutzfahrzeuge sowie der Stickstoffdioxidkonzentrationen an der Verkehrszählstelle Stuttgart Am Neckartor; Basis: Halbstundenwerte; 01.01.2014 bis 31.12.2014; Quelle: LUBW (2016) | 129 |
| Abbildung 55: Stündliche Messwerte 2016 der Verkehrsstärke sowie der Konzentrationen der Luftschadstoffe NO, NO ₂ und NO _x an der Messtation Pfinztal, Karlsruher Str..... | 130 |
| Abbildung 56: Stündliche Messwerte vom 24.01.2016 bis zum 31.01.2016 der Verkehrsstärke sowie der Konzentrationen der Luftschadstoffe NO, NO ₂ und NO _x an der Messtation Stuttgart Am Neckartor | 131 |
| Abbildung 57: Tagesganglinientypen des Kfz-Verkehrs Dienstag bis Donnerstag, Quelle: BASt (2014) | 133 |
| Abbildung 58: Monatliche Beförderungsleistung des Schienengüterverkehrs und der Binnenschifffahrt 2016, 2017 und 2018; Datenquelle: Statistisches Bundesamt (Destatis), 2020 | 134 |
| Abbildung 59: Anzahl der Starts und Landungen auf den 25 größten Flughäfen Deutschlands für 2016 und 2017; Datenquelle: Statistisches Bundesamt (Destatis), 2020 | 135 |
| Abbildung 60: Normierter Jahresgang für die Emissionen aus der Tierhaltung in der Klimaregion „Nordwestdeutsches Tiefland“ 2016 mit den Parametern nach Backes (2014)..... | 139 |
| Abbildung 61: Normierter Jahresgang für die Emissionen aus der Bodenbearbeitung in der Klimaregion „Nordwestdeutsches Tiefland“ 2016 mit den Parametern nach Backes (2014)..... | 141 |
| Abbildung 62: GRETA Output der NH ₃ -Emissionen der Landwirtschaft 2015 für Gebiet der Größe 20 km × 20 km um die ländlichen Messstationen Bösel und Melpitz, differenziert nach den wichtigsten Subsektoren | 144 |
| Abbildung 63: Jahresgang der NH ₃ -Emissionen der Landwirtschaft in Bösel (Klimaregion Nordwestdeutsches Tiefland) und Melpitz (Klimaregion Südostdeutsche Becken und Hügel) mit den Parametern nach Backes (2014) im Vergleich mit dem statischen Jahresgang nach CAMS 50 und den statischen Jahresgängen aus RCG für NH ₃ , NMVOC und PM2.5 | 145 |
| Abbildung 64: Zeitprofil der Emissionen aus dem Grillen von Holzkohle | 148 |
| Abbildung 65: Splitting-Faktoren Mittelwerte pro Übertragungsnetzbetreiber 2016 für den NFR-Sektor 1A1a | 151 |
| Abbildung 66: Klimaregionen in Deutschland nach DWD (2017) mit überlagertem 2x2km ² (hellgrau, fein) und 50x50km ² (schwarz, fett) Raster..... | 156 |

| | |
|---|-----|
| Abbildung 67: Zeitreihen der stündlichen NH ₃ -Messungen an drei ländlichen Hintergrundstationen in Hessen 2016 (oben) und 2017 (unten) | 168 |
| Abbildung 68: Raster für die Evaluierung der SF für die Landwirtschaft: Grüne Kreise: Landwirtschaftliche Messstationen der Bundesländer, blaue Kreise: UBA-Hintergrundstationen; rot oder blau umrandete Raster: Enthalten mindestens fünf Messstationen; rot umrandete Raster: Enthalten Stationen mit besonders hohen NH ₃ -Konzentrationen; zusätzlich dargestellt: Klimaregionen in Deutschland | 169 |
| Abbildung 69: Monatsmittelwerte 2016 gemessener NH ₃ -Konzentrationen an den Messstationen in Raster 21 sowie Mittelwerte (MW) für Raster 21 | 171 |
| Abbildung 70: Monatsmittelwerte 2016 gemessener NH ₃ -Konzentrationen an den Messstationen in Raster 26 sowie Mittelwerte (MW) für Raster 26 | 171 |
| Abbildung 71: Monatsmittelwerte 2017 gemessener NH ₃ -Konzentrationen an den Messstationen in Raster 21 sowie Mittelwerte (MW) für Raster 21 | 172 |
| Abbildung 72: Monatsmittelwerte 2017 gemessener NH ₃ -Konzentrationen an den Messstationen in Raster 26 sowie Mittelwerte (MW) für Raster 26 | 172 |
| Abbildung 73: Monatsmittelwerte 2016 der gemessenen NH ₃ -Konzentrationen für Raster 21 und 26 im Vergleich mit den monatlichen SF für die Landwirtschaft nach Backes 2014 für diese Raster sowie dem entsprechenden Default SF aus RCG | 173 |
| Abbildung 74: Monatsmittelwerte 2017 der gemessenen NH ₃ -Konzentrationen für Raster 21 und 26 im Vergleich mit den monatlichen SF für die Landwirtschaft nach Backes 2014 für diese Raster sowie dem entsprechenden Default SF aus RCG | 173 |
| Abbildung 75: 2016 NO ₂ : JMW-RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default); die weißen Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren der Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen JMW | 179 |
| Abbildung 76: 2016 NO ₂ : Relative Differenz der Jahresmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF | 180 |
| Abbildung 77: 2016 O ₃ : JMW-RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default); die weißen Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren der Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen JMW | 181 |

| | |
|--|-----|
| Abbildung 78 2016 O ₃ : Relative Differenz der Jahresmittelwerte der RCG- Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF | 182 |
| Abbildung 79: 2016 PM ₁₀ : JMW-RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default); die weißen Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren der Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen JMW..... | 183 |
| Abbildung 80: 2016 PM ₁₀ : Relative Differenz der Jahresmittelwerte der RCG- Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF | 184 |
| Abbildung 81: 2016 NH ₃ : JMW-RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default); die weißen Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren der Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen JMW..... | 185 |
| Abbildung 82 2016 NH ₃ : Relative Differenz der Jahresmittelwerte der RCG- Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF | 186 |
| Abbildung 83: 2016 NO ₂ : Monatsmittelwerte RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default) | 188 |
| Abbildung 84: 2016 NO ₂ : Relative Differenz der Monatsmittelwerte der RCG- Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF | 189 |
| Abbildung 85: 2016 O ₃ : Monatsmittelwerte RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default) | 191 |
| Abbildung 86: 2016 O ₃ : Relative Differenz der Monatsmittelwerte der RCG- Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF | 192 |
| Abbildung 87: 2016 PM ₁₀ : Monatsmittelwerte RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default) | 194 |
| Abbildung 88: 2016 PM ₁₀ : Relative Differenz der Monatsmittelwerte der RCG- Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF | 195 |
| Abbildung 89: Jahresgang 2016 der Emissionen aus Kleinfeuerungsanlagen auf Basis der dynamischen SF für die Klimaregionen im Vergleich mit dem Default-Jahresgang aus RCG | 196 |
| Abbildung 90: 2016 NH ₃ : Monatsmittelwerte RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default) | 197 |
| Abbildung 91: 2016 NH ₃ : Relative Differenz der Monatsmittelwerte der RCG- Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF | 198 |
| Abbildung 92: Dynamische SF für NH ₃ in den für die Landwirtschaft definierten Rastern 57 und 145 im Vergleich mit dem statischen Default Profil aus RCG | 199 |

| | |
|--|-----|
| Abbildung 93: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Berlin-Neukölln 2016... | 204 |
| Abbildung 94: Jahresgang (Monatsmittelwerte) 2016 an der Station Berlin-Neukölln für die Messung und die Modellrechnungen mit statischen und dynamischen SF für NO_2 (oben), NO_x (Mitte) und Ozon (unten) | 205 |
| Abbildung 95: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Freiburg 2016..... | 206 |
| Abbildung 96: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Augsburg LfU 2016..... | 207 |
| Abbildung 97: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Emsland 2016 | 208 |
| Abbildung 98: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Mülheim Styrum 2016. | 208 |
| Abbildung 99: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Schauinsland 2016..... | 209 |
| Abbildung 100: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Waldhof 2016 | 210 |
| Abbildung 101: Beiträge zu den NO_x -Emissionen in der RCG-Nest 2-Gitterbox, in der die Messstation Waldhof liegt | 211 |
| Abbildung 102: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Schmücke 2016..... | 211 |

| | |
|---|-----|
| Abbildung 103: Zeitreihen der NH ₃ -Monatsmittelwerte 2016 der für die Evaluierung gewählten Landwirtschafts-Raster 15, 17, 21, 22 und 26 (s. Abbildung 68) sowie der Hintergrund-Stationen Schmücke und Waldhof, jeweils Modellrechnung mit statischen und mit dynamischen SF sowie Messwerte; zur Orientierung ist Abbildung 68 unten links als kleine Karte eingefügt..... | 214 |
| Abbildung 104: Evaluierung Landwirtschaft NH ₃ 2016: Statistische Kenngrößen R (Pearson-Korrelation, oben), Bias (Mitte) und RMSE (unten) jeweils für die modellierten Zeitreihen der Monatsmittelwerte (RCG-Modellrechnung unter Verwendung statischer bzw. dynamischer SF) und die entsprechenden Messwerte aus Abbildung 103..... | 215 |
| Abbildung 105: Zeitreihen der NH ₃ -Monatsmittelwerte 2017 der für die Evaluierung gewählten Landwirtschafts-Raster 15, 17, 21, 22 und 26 (s. Abbildung 68) sowie der Hintergrund-Stationen Schmücke und Waldhof, jeweils Modellrechnung mit statischen und mit dynamischen SF sowie Messwerte; zur Orientierung ist Abbildung 68 unten links als kleine Karte eingefügt..... | 217 |
| Abbildung 106: Evaluierung Landwirtschaft NH ₃ 2017: Statistische Kenngrößen R (Pearson-Korrelation, oben), Bias (Mitte) und RMSE (unten) jeweils für die modellierten Zeitreihen der Monatsmittelwerte (RCG-Modellrechnung unter Verwendung statischer bzw. dynamischer SF) und die entsprechenden Messwerte aus Abbildung 105..... | 218 |
| Abbildung 107: Feinstaub-Episode vom 18. bis zum 26.01.2017 über Deutschland: PM ₁₀ -Tagesmittelwerte (gemessen, Interpolation); Bildquelle: UBA..... | 220 |
| Abbildung 108: Default-Modellrechnung 2017: PM ₁₀ -Tagesmittelwerte während der Feinstaub-Episode vom 18. bis zum 26.01.2017; Standorte der für die Evaluierung gewählten Stationen: 1: Berlin- Neukölln, 2: Freiburg, 3: Augsburg LfU, 4: Emsland, 5: Mülheim Styrum, 6: Schauinsland, 7: Waldhof, 8: Schmücke | 221 |
| Abbildung 109: Relative Differenz der PM ₁₀ -Tagesmittelwerte der RCG- Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF während der Feinstaub-Episode vom 18. bis zum 26.01.2017; Standorte der für die Evaluierung gewählten Stationen: 1: Berlin-Neukölln, 2: Freiburg, 3: Augsburg LfU, 4: Emsland, 5: Mülheim Styrum, 6: Schauinsland, 7: Waldhof, 8: Schmücke..... | 222 |

| | |
|--|-----|
| Abbildung 110: Zeitreihen der stündlichen PM ₁₀ -Konzentrationen während der Feinstaub-Episode vom 18. bis zum 26.01.2017 in den Gitterzellen mit den für die Evaluierung gewählten Stationen, jeweils Modellrechnung mit statischen und mit dynamischen SF sowie Messwerte | 224 |
| Abbildung 111: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool für NO ₂ : Vergleich anhand der Kenngröße NMB (normalized mean bias) jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb) | 228 |
| Abbildung 112: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool für NO ₂ : Vergleich anhand der Kenngröße R jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb) | 229 |
| Abbildung 113: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm NO ₂ für die RCG-Modellrechnung auf Basis statischer SF..... | 231 |
| Abbildung 114: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm NO ₂ für die RCG-Modellrechnung auf Basis dynamischer SF..... | 231 |
| Abbildung 115: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm NO ₂ für die RCG-Modellrechnung auf Basis statischer SF, Auswahl Stationen aus Kapitel 7 | 233 |
| Abbildung 116: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm NO ₂ für die RCG-Modellrechnung auf Basis dynamischer SF, Auswahl Stationen aus Kapitel 7.. | 233 |
| Abbildung 117: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool für PM ₁₀ : Vergleich anhand der Kenngröße NMB (normalized mean bias) jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb) | 234 |
| Abbildung 118: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung Winter 2016 mit dem Delta-Tool für PM ₁₀ : Vergleich anhand der Kenngröße NMB (normalized mean bias) jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb)..... | 235 |

| | |
|--|-----|
| Abbildung 119: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung Winter 2016 mit dem Delta-Tool für PM ₁₀ : Vergleich anhand der Kenngröße R (Pearson'scher Korrelationskoeffizient) jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb) | 236 |
| Abbildung 120: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool für PM ₁₀ : Vergleich anhand der Überschreitungstage jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb) | 237 |
| Abbildung 121: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm PM ₁₀ für die RCG-Modellrechnung auf Basis statischer SF..... | 238 |
| Abbildung 122: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm PM ₁₀ für die RCG-Modellrechnung auf Basis dynamischer SF..... | 238 |
| Abbildung 123: Zeitreihen der PM ₁₀ -Stundenmittelwerte (schwarz: Messwerte, rot: RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF, grün: RCG Modellrechnung mit statischen SF) 2016 bis 2018 für die drei schlechtesten Punkte aus dem Delta-Tool Zieldiagramm in Abbildung 122..... | 240 |
| Abbildung 124: Zeitreihen der gemessenen PM ₁₀ -Tagesmittelwerte 2016 bis 2020 für die beiden ländlichen Hintergrundstationen (DEHE024 und DESN079) aus Abbildung 123; Bildquelle: UBA..... | 241 |
| Abbildung 125 Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm O ₃ für die RCG-Modellrechnung auf Basis statischer SF..... | 243 |
| Abbildung 126: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm O ₃ für die RCG-Modellrechnung auf Basis dynamischer SF..... | 243 |
| Abbildung 127: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool für Ozon: Vergleich anhand der Überschreitungstage jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb) | 244 |

Tabellenverzeichnis

| | |
|--|-----|
| Tabelle 1: Anzahl der Gitterzellen aus dem COSMO-DE Raster in der Auflösung 0,03125° (LON) x 0,015625° (LAT) pro Klimaregion | 80 |
| Tabelle 2: Anteile der NFR-Sektoren an den übergeordneten SNAP-Sektoren | 84 |
| Tabelle 3: Anteile der NFR-Sektoren an den nationalen Gesamtemissionen | 88 |
| Tabelle 4: Anteile der zu Hauptgruppe A zusammengefassten NFR-Sektoren an den Gesamtemissionen dieser Hauptgruppe für Deutschland 2016 | 93 |
| Tabelle 5: Liste der zeitlich über Produktionsindizes verteilten NFR-Sektoren: Jeweils Angabe der zur räumlichen (d_param_name, Stand: Erstellung des Berichts) und zur zeitlichen Verteilung herangezogenen Branchen nach Wirtschaftszweigschlüssel. | 104 |
| Tabelle 6: Bestimmtheitsmaße (R^2) zwischen den stündlichen Verkehrsstärken für 2016 an drei LUBW Stationen („Stuttgart Am Neckartor“, Stuttgart Hohenheimer Str.“, „Pfinztal Karlsruher Str.“) und zwei innerstädtischen BASt Dauerzählstellen (Koblenz, Wittenberg) | 118 |
| Tabelle 7: Bestimmtheitsmaße (R^2) zwischen den stündlichen Verkehrsstärken für 2017 an drei LUBW Stationen („Stuttgart Am Neckartor“, Stuttgart Hohenheimer Str.“, „Pfinztal Karlsruher Str.“) und zwei innerstädtischen BASt Dauerzählstellen (Koblenz, Wittenberg) | 118 |
| Tabelle 8: Datenquellen für die verkehrsstärkenabhängige zeitliche Verteilung der Straßenverkehrsemissionen pro NFR-Sektor nach Ortslage .. | 121 |
| Tabelle 9: Korrelation (Quadrat des Pearson-Korrelationskoeffizienten, R^2) zwischen den täglichen Temperaturwerten in 2 m Höhe gemittelt über die Klimaregionen jeweils mit den für Deutschland gesamt gemittelten Werten für die Jahre 2016 und 2017; Datenquelle: COSMO-DE | 126 |
| Tabelle 10: Bestimmtheitsmaß (R^2) zwischen den stündlichen Luftschadstoffmessungen (NO_2 bzw. NO_x) und den stündlichen Verkehrsstärken für 2016 und 2017 an den drei Stationen „Stuttgart Am Neckartor“, Stuttgart Hohenheimer Str.“ und „Pfinztal Karlsruher Str.“ | 132 |
| Tabelle 11: Verwendete Daten für das Zeitverhalten der Emissionen der NFR- Sektoren aus SNAP 8 | 136 |
| Tabelle 12: Scheitelpunkte (Tage, an dem die kumulierten Tagestemperaturen die entsprechenden Werte für μ erreichen) und Halbwertsbreiten σ der Zeitfunktionen für die Emissionen aus Pflanzen und NH_3 behandeltem Stroh, sowie Anteile dieser Teilquellen; Quelle: Backes (2014) | 140 |

| | |
|--|-----|
| Tabelle 13: Scheitelpunkte (Tage, an dem die kumulierten Tagestemperaturen die entsprechenden Werte für μ erreichen) und Halbwertsbreiten σ der Zeitfunktionen für die Emissionen aus der Gülle- und Mineraldüngerausbringung und grasendem Vieh, sowie Anteile dieser Teilquellen; Quelle: Backes (2014) | 140 |
| Tabelle 14: Zuordnung der NFR-Sektoren der Landwirtschaft zu den Zeitfunktionen | 142 |
| Tabelle 15: NFR-Sektor 2G: Anteile der Emissionen der Subsektoren nach Schadstoff 2016 | 147 |
| Tabelle 16: NFR-Sektor 2G: Anteile der Emissionen der Subsektoren nach Schadstoff 2017 | 147 |
| Tabelle 17: Anzahl Splitting-Faktoren pro SNAP-Sektor (bei einer Rastergröße von 50x50km ² für die Landwirtschaft)..... | 156 |
| Tabelle 18: Optimale Tage für Düngung mit Gülle und Mineraldünger gemäß Temperaturabhängigkeit nach Backes (2014) für die Raster 21 und 26 und die Jahre 2016 und 2017 | 170 |
| Tabelle 19: Anpassung der Aufteilung der Emissionen aus der Düngung mit Gülle auf die vier Termine nach Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005)..... | 174 |
| Tabelle 20: Gemeinsame Varianz (Quadrat des Pearsonschen Korrelationskoeffizienten) jeweils der monatlichen SF nach Backes (2014), der angepassten SF und der RCG Default SF für die Landwirtschaft mit den Monatsmittelwerten der gemessenen NH ₃ -Konzentrationen in Raster 21 und 26 | 174 |
| Tabelle 21: Übersicht über die Zeitreihen, für die statische Kenngrößen dargestellt werden..... | 203 |
| Tabelle 22: Statistische Kenngrößen R ² (Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten), Bias und RMSE (root mean square error) jeweils zwischen den Zeitreihen der stündlichen PM ₁₀ -Messwerte an den ausgewählten Stationen während der Episode vom 18. bis zum 26. 01.2017 und den entsprechenden Modellwerten unter Verwendung statischer (stat.) bzw. dynamischer (dyn.) SF sowie für alle Größen jeweils das Verhältnis dynamisch zu statisch | 225 |
| Tabelle 23: Zuordnung NFR-Sektoren, GNFR-Sektoren, SNAP-Sektoren (level 1) | 252 |
| Tabelle 24: Für alle NFR-Sektoren: Übersicht über die zur Konstruktion der Splitting-Faktoren verwendeten Daten zur Zeitabhängigkeit und die dabei berücksichtigte räumliche Differenzierung | 260 |
| Tabelle 25: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R ²): Jahresgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R ² dynamisch zu statisch | 333 |

| | |
|---|-----|
| Tabelle 26: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresgang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch | 333 |
| Tabelle 27: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresgang Monatsmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch | 334 |
| Tabelle 28: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresmittlerer Wochengang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch | 334 |
| Tabelle 29: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresmittlerer Tagesgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch | 335 |
| Tabelle 30: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresmittlerer Tagesgang Werktag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch | 335 |
| Tabelle 31: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresmittlerer Tagesgang Samstag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch | 335 |
| Tabelle 32: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresmittlerer Tagesgang Sonn- und Feiertag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch..... | 336 |
| Tabelle 33: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Mittlerer Tagesgang Frühling Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch | 336 |
| Tabelle 34: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Mittlerer Tagesgang Sommer Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch | 337 |
| Tabelle 35: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Mittlerer Tagesgang Herbst Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch | 337 |

| | |
|--|-----|
| Tabelle 36: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Mittlerer Tagesgang Winter Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch | 337 |
| Tabelle 37: Bias: Jahresgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung..... | 338 |
| Tabelle 38: Bias: Jahresgang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 338 |
| Tabelle 39: Bias: Jahresgang Monatsmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 339 |
| Tabelle 40: Bias: Jahresmittlerer Wochengang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch | 339 |
| Tabelle 41: Bias: Jahresmittlerer Tagesgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch | 340 |
| Tabelle 42: Bias: Jahresmittlerer Tagesgang Werktag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch | 340 |
| Tabelle 43: Bias: Jahresmittlerer Tagesgang Samstag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch | 340 |
| Tabelle 44: Bias: Jahresmittlerer Tagesgang Sonn- und Feiertag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 341 |
| Tabelle 45: Bias: Mittlerer Tagesgang Frühling Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch | 341 |
| Tabelle 46: Bias: Mittlerer Tagesgang Sommer Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch | 342 |

| | |
|---|-----|
| Tabelle 47: Bias: Mittlerer Tagesgang Herbst Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch | 342 |
| Tabelle 48: Bias: Mittlerer Tagesgang Winter Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch | 342 |
| Tabelle 49: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch | 343 |
| Tabelle 50: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresgang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch | 343 |
| Tabelle 51: Root Mean Square Error (RMSE) Jahresgang Monatsmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 344 |
| Tabelle 52: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresmittlerer Wochengang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 344 |
| Tabelle 53: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresmittlerer Tagesgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 345 |
| Tabelle 54: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresmittlerer Tagesgang Werktag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 345 |
| Tabelle 55: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresmittlerer Tagesgang Samstag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 345 |
| Tabelle 56: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresmittlerer Tagesgang Sonn- und Feiertag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 346 |

| | |
|---|-----|
| Tabelle 57: Root Mean Square Error (RMSE): Mittlerer Tagesgang Frühling Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 346 |
| Tabelle 58: Root Mean Square Error (RMSE): Mittlerer Tagesgang Sommer Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 347 |
| Tabelle 59: Root Mean Square Error (RMSE): Mittlerer Tagesgang Herbst Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 347 |
| Tabelle 60: Root Mean Square Error (RMSE): Mittlerer Tagesgang Winter Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch..... | 347 |

Abkürzungsverzeichnis

| | |
|-----------|---|
| ACDEP | Atmospheric Chemistry and Deposition model (an der Universität von Aarhus entwickeltes CTM) |
| AIS | Automatisiertes Identifikationssystem |
| AS | Anschlussstelle |
| AO | Außerortsstraßen |
| ArcGIS | Oberbegriff für verschiedene Geoinformationssystem-Softwareprodukte |
| BAB | Bundesautobahnen |
| BAST | Bundesanstalt für Straßenwesen |
| BC | black carbon |
| BL | Bundesländer |
| CAMS | Copernicus Atmosphere Monitoring Service |
| CHIMERE | CTM der Ecole Polytechnique Palaiseau |
| DEHM | Danish Eulerian Hemispheric Model (an der Universität von Aarhus entwickeltes CTM) |
| CLINSH | Clean INland SHipping |
| CLRTAP | Convention on long-range transboundary air pollution |
| CMAQ | Community Multiscale Air Quality, CTM des HZ Geesthacht |
| CO | Kohlen(stoff)monoxid |
| COSMO | COnsortium for Small-Scale Modelling |
| CTM | Chemie-Transportmodell |
| DLR | Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt |
| DOAS | Differential Optical Absorbtion Spectroscopy |
| DWD | Deutscher Wetterdienst |
| EC | Elemental Carbon |
| EDGAR | Emissions Database for Global Atmospheric Research |
| EIC | Energy Identification Codes |
| EMEP | European Monitoring and Evaluation Programme |
| EMPA | Eidgenössische Materialprüfungs- und Forschungsanstalt |
| ENTSO-E | European Network of Transmission System Operators for Electricity |
| EURAD | EURocean Air pollution Dispersion (CTM, Forschungszentrum Jülich) |
| EURAD-IM | EURAD Modell mit inverser Modellierung |
| FAIRMODE | Forum for air quality modelling in Europe |
| ISE | Fraunhofer-Institut für Solare Energiesysteme |
| GEOS-Chem | Goddard Earth Observing System atmospheric chemistry model |
| GHD | Gewerbe, Handel, Dienstleistungen |
| GNFR | Gridded Nomenclature For Reporting |
| GRETA | Gridding Emission Tool for ArcGIS |
| GTZ | Gradtagzahl |
| GV | Güterverkehr |
| HBEFA | HandBuch für EmissionsFAktoren des Straßenverkehrs |

| | |
|-------------------|---|
| HCB | Hexachlorbenzol |
| HDV | Heavy-duty Vehicles |
| HZ | Helmholtz-Zentrum |
| IO | Innerortsstraßen |
| JMW | Jahresmittelwert |
| Kfz | Kraftfahrzeuge = Summe der Fahrzeugarten des LV und SV |
| KW | Kalenderwoche |
| LAT | Latitude |
| LDV | Light-duty Vehicles |
| Infz | Leichte Nutzfahrzeuge |
| LON | Longitude |
| LOTOS-EUROS | CTM des TNO |
| LUBW | Landesanstalt für Umwelt Baden-Württemberg |
| LV | Fahrzeuge des motorisierten Leichtverkehrs |
| MACC | Monitoring Atmospheric Composition and Climate |
| MASAGE | Magnitude And Seasonality of Agricultural Emissions model |
| MEZ | Mitteleuropäische Zeit |
| MQI | Model Quality Indicator |
| MV | Mecklenburg-Vorpommern |
| MW | Megawatt |
| NACE | Nomenclature statistique des activités économiques dans la Communauté européenne |
| MADE/SORGAM | Modal Aerosol Dynamics Model for Europe/ Secondary Organic Aerosol Model |
| NCAR | National Center for Atmospheric Research |
| NEC | National Emission Ceiling |
| netCDF | Network Common Data Format |
| NFR | Nomenclature For Reporting |
| Nfz | Nutzfahrzeuge |
| NH ₃ | Ammoniak |
| NI | Niedersachsen |
| NMB | Normalized Mean Bias |
| NMVOC | Non-Methane Volatile Organic Compounds |
| NO | Stickstoffmonoxid |
| NO ₂ | Stickstoffdioxid |
| NO _x | Stickstoffoxide |
| O ₃ | Ozon |
| OC | Organic Carbon |
| OML-DEP | lokales Gaußsches Ausbreitungs- und Depositionsmodell, an der Universität von Aarhus entwickelt |
| Pkw | Personenkraftwagen |
| PM ₁₀ | Particulate Matter, Feinstaub, aerodynamischer Durchmesser < 10 µm |
| PM _{2,5} | Particulate Matter, Feinstaub, aerodynamischer Durchmesser < 2,5 µm |

| | |
|-----------------|--|
| POPs | Persistent Organic Pollutant Emissions |
| PRTR | Pollutant Release and Transfer Register |
| R | Pearson'scher Korrelationskoeffizient |
| RADM2 | Second Generation Regional Acid Deposition Model |
| RCG | REM-CALGRID (vom UBA betriebenes CTM) |
| REMix | Renewable Energy Mix, am DLR entwickeltes Modell zur Analyse von Energieszenarien |
| RIU | Rheinisches Institut für Umweltforschung |
| RMSE | Root Mean Square Error |
| SO ₂ | Schwefeldioxid |
| SCR | Selective Catalytic Reduction (Nachbehandlungssystem zur Reduktion von Stickoxiden in Abgasen von Dieselmotoren) |
| SF | Splitting-Faktor |
| SNAP | Selected Nomenclature for Air Pollution |
| SV | Fahrzeuge des Schwerverkehrs |
| SVZ | Sonderverkehrszählung |
| TeResE | Temporal Resolution of Emission data |
| TNO | Nederlandse Organisatie voor toegepast-natuurwetenschappelijk onderzoek (Niederländische Organisation für Angewandte Naturwissenschaftliche Forschung) |
| TREMOD | Transport Emission Model |
| TSP | Total Suspended Particles (Gesamtstaub) |
| UTC | Universal Time Coordinate |
| VDI | Verein Deutscher Ingenieure |
| VOC | Volatile Organic Compounds |
| WRF-Chem | Weather Research and Forecasting-Chemistry, am NCAR entwickeltes CTM |
| ZSE | Zentrales System Emissionen |

Zusammenfassung

Das Umweltbundesamt (UBA) berichtet die jährlichen Emissionsmengen auf der Grundlage nationaler, europäischer und internationaler Vereinbarungen (Göteborg-Protokoll der Genfer Luftreinhaltekonvention (CLRTAP)). Die berichteten Emissionsdaten sind zudem wesentliche Eingangsdaten für Chemie-Transportmodelle (CTM), mit denen einerseits jährlich die flächendeckende Luftschadstoffkonzentration in Deutschland ermittelt wird und andererseits Szenarien für Strategien und Maßnahmen zur Minderung der Schadstoffbelastung gerechnet werden. Letztere werden benötigt, um den Beitrag einzelner Maßnahmen zur Einhaltung von Immissionsgrenzwerten beurteilen zu können. Sie sind außerdem eine Grundlage für die Erstellung des nationalen Luftreinhalteprogramms, wie es die neue NEC-Richtlinie 2016/2284/EU vorsieht.

Für Ausbreitungsrechnungen mit Chemie-Transportmodellen werden räumlich und zeitlich verteilte Emissionsdaten benötigt. Das derzeit im UBA betriebene CTM REM-CALGRID (RCG, Stern, 2009), aber auch andere CTM, arbeiten mit statischen Zeitprofilen (Jahres-, Wochen- und Tagesgänge) für Emissionen auf SNAP Level 1 (Selected Nomenclature for Air Pollution) Kategorie Ebene.

Die als jährliche nationale Summen erhobenen Emissionen müssen für die Verwendung in CTM räumlich auf das entsprechende Modellgitter und zeitlich auf alle Stundenwerte des Jahres verteilt werden. Die Qualität der Modellergebnisse, insbesondere für Szenarienrechnungen, wird maßgeblich von der Qualität der eingehenden Emissionsdaten – Menge, räumliche und zeitliche Verteilung – bestimmt.

Zur räumlichen Verteilung von Emissionsdaten wurde das „Gridding Emission Tool for ArcGIS“ (GRETA) entwickelt (Schneider et al., 2016). Die sektoralen Emissionen des Zentralen Systems Emissionen (ZSE) werden hierbei über Verteilparameter räumlich verteilt. Mit GRETA ist es möglich, die Beiträge einzelner Sektoren zur Luftbelastung regional zu quantifizieren.

Aktuell werden zur zeitlichen Verteilung im RCG und auch bei den meisten anderen in Europa etablierten CTMs statische Zeitprofile verwendet. Das sind pro Quellgruppe (meist: SNAP Level 1 Ebene) feste Tages-, Wochen- und Jahresgänge, die keinerlei räumliche oder zeitliche Varianz aufweisen. Zum Beispiel unterscheiden sich die Jahresgänge für die Emissionen aus Kleinf Feuerungsanlagen in der Alpenregion aktuell nicht von denen im Rheintal, auch wenn in den Alpen länger geheizt werden muss. Die statischen Zeitprofile sind auch für alle Jahre identisch: Besondere Ereignisse, wie z.B. die Corona-bedingten Lockdowns im Jahr 2020 oder die Flutkatastrophe im Jahr 2021, während derer z.B. die Fahrleistungen beim Straßenverkehr deutlich zurückgingen, können daher nicht berücksichtigt werden.

Ziel dieses Forschungsvorhabens war es, ein Tool zur dynamischen zeitlichen Verteilung der Emissionen zu entwickeln, bei dem räumliche und/oder zeitliche Abhängigkeiten der Zeitprofile mittels lokaler und jahresspezifischer Eingangsdaten berücksichtigt werden.

Das Tool TeResE (Temporal Resolution of Emission data) erzeugt für räumlich verteilte, als Jahressummen pro Gitterbox vorliegende Emissionen von Stickstoffoxiden (NO_x), Feinstaub (PM₁₀, PM_{2.5}), Ammoniak (NH₃), NMVOC, Schwefeldioxid (SO₂) und Kohlenmonoxid (CO) dynamische Zeitprofile, Splitting-Faktoren genannt, die für jede Gitterbox und jede Quellgruppe pro Stunde den Anteil der jeweiligen Emission enthalten. Die Splitting-Faktoren hängen dynamisch von den jeweiligen räumlichen und/oder zeitlichen Bedingungen ab, z.B. unterscheiden sich verschiedene Jahre hinsichtlich der Meteorologie: Art, Ausprägung und Zeitpunkte der auftretenden Wetterlagen variieren sowohl räumlich wie auch von Jahr zu Jahr. Dies beeinflusst unmittelbar die zeitlichen Emissionsprofile von Quellgruppen wie z.B. der

Landwirtschaft oder der Kleinf Feuerungsanlagen. Beim Straßenverkehr können lokale Gegebenheiten und zeitlich besondere Situationen durch die Verwendung stündlicher Daten für die Verkehrsstärke aus den automatischen Dauerzählstellen der BASt (Bundesanstalt für Straßenwesen) berücksichtigt werden.

Die Splitting-Faktoren werden zunächst pro NFR-Sektor erzeugt. Dazu werden repräsentative Zeitprofile für Jahres-, Wochen- und Tagesgänge der Emissionen, möglichst ausgehend von einer stündlichen Auflösung, abgeleitet. Hierbei werden regionale Aspekte berücksichtigt, d.h. die Splitting-Faktoren werden regionalisiert nach Regionen oder Gitterzellen bereitgestellt. TeResE ist in der Lage, die regionalisierte zeitliche Verteilung der Emissionen sowohl auf NFR- als auch auf SNAP-Ebene auszugeben. Eine Übersicht über die Aggregation von Emissionen NFR- bzw. SNAP-Sektoren und die jeweilige Zuordnung findet sich in Anhang A.

Im Rahmen des Forschungsvorhabens zur Entwicklung des Tools wurden die folgenden Arbeiten durchgeführt.

Literatur- und Datenrecherche

Es wurden sektorspezifische Zeitprofile (Jahres-, Wochen- und Tagesgänge) für Emissionen der betrachteten Schadstoffe recherchiert und dabei insbesondere die Abhängigkeit von meteorologischen Bedingungen berücksichtigt. Dies beinhaltete eine Befragung der Betreiber gängiger europäischer CTMs bezüglich der dort verwendeten Zeitprofile und der Pläne zur Weiterentwicklung. Die verwendeten Zeitprofile wurden mit den aktuell im CTM REM-CALGRID (RCG, im UBA betrieben) verwendeten statischen Profilen verglichen. Weiterhin wurde eine Literaturrecherche im Bereich wissenschaftlicher Veröffentlichungen sowie Veröffentlichungen von Umweltbehörden und in dem Forschungsfeld tätigen Instituten und Forschungszentren durchgeführt. Zusätzlich wurden regional verfügbare Datenquellen zu Zeitverläufen recherchiert.

Für die einzelnen NFR-Sektoren hängt das durch dynamische Zeitprofile erreichbare Verbesserungspotenzial von verschiedenen Aspekten ab:

1. Anteil an den nationalen Gesamtemissionen: Je höher der Beitrag eines Sektors ist, desto wichtiger ist es, dessen Zeitprofil möglichst korrekt abzubilden. Dieser Anteil kann je nach Luftschadstoff unterschiedlich hoch sein.
2. Ausprägung: Je ausgeprägter die Zeitprofile sind und je schärfer die Maxima lokalisiert sind, desto wichtiger ist es, diese auch richtig abzubilden.
3. Räumliche und zeitliche Variabilität: Je stärker die Zeitprofile räumlich und zeitlich variieren, desto wichtiger ist es, lokale, regionale Gegebenheiten bei den Eingangsdaten zu berücksichtigen.
4. Datenverfügbarkeit: Es können nur Datenquellen betrachtet werden, die deutschlandweit einheitlich in ausreichender Qualität vorliegen. Zudem müssen die Daten regelmäßig fortgeschrieben werden.

Als Ergebnis dieses Arbeitspakets wurden diese Aspekte in verschiedenen Tabellen zusammengefasst: Die Beiträge aller NFR-Sektoren zum jeweils übergeordneten SNAP-Sektor sowie zu den nationalen Gesamtemissionen sind in Kapitel 4 in Tabelle 2 bzw. Tabelle 3 ausgewiesen. Die meteorologischen und weiteren regionalen Anhängigkeiten der Zeitprofile sowie die dafür verfügbaren Datenquellen sind in Anhang B in Tabelle 24 aufgelistet.

Als besonders relevante Quellgruppen bezüglich der Zeitabhängigkeit der Emissionen wurden die Landwirtschaft, der Straßenverkehr, Großfeuerungsanlagen im Energiesektor sowie Kleinf Feuerungsanlagen zur Gebäudeheizung identifiziert.

Ableitung der Splitting-Faktoren

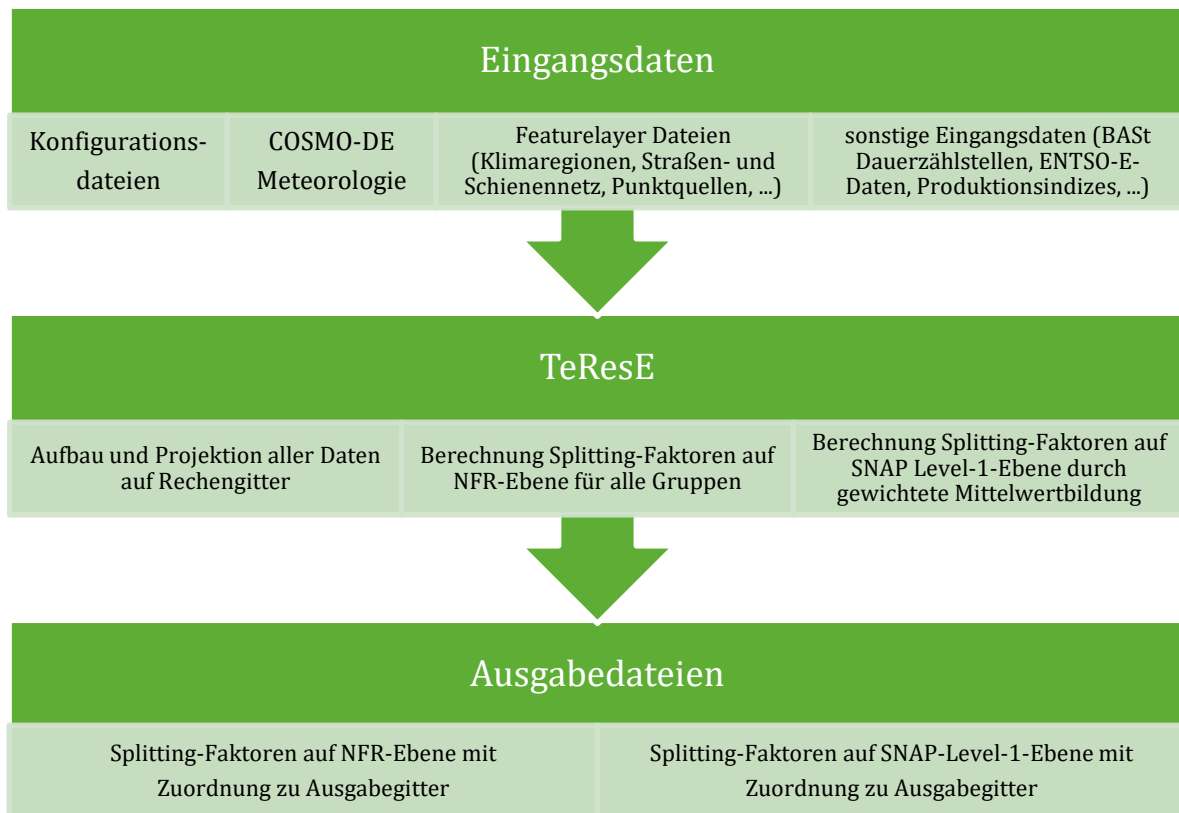
Für alle NFR-Sektoren wurden die für die Splitting-Faktoren zu berücksichtigenden meteorologischen und weiteren Abhängigkeiten sowie die zu verwendenden Datenquellen zusammengestellt. Die wichtigsten sind:

- ▶ Kraftwerke: Großkraftwerke gehen bei der räumlichen Verteilung der Emissionen durch GRETA (Schneider et al., 2016) als Punktquellen ein. Für die Blöcke großer Kraftwerke liegen bei ENTSO-E (European Network of Transmission System Operators for Electricity) Zeitreihen stündlicher Energieabgaben vor. Für die im PRTR (Pollutant Release and Transfer Register) vorliegenden Punktquellen, die bei der räumlichen Verteilung durch GRETA berücksichtigt werden und bei ENTSO-E zugeordnet werden können, werden die entsprechenden Zeitprofile direkt verwendet. Für alle nicht zugeordneten Punktquellen sowie für die als Flächenquellen vorliegenden Kraftwerksemissionen kommen Mittelwerte der Übertragungsnetzbetreiber zu Anwendung.
- ▶ Kleinf Feuerungsanlagen: Für die Zeitprofile der Gebäudeheizung werden Gradtagzahlen verwendet. Gradtagzahlen entsprechen an Heiztagen, d.h. an Tagen, an denen die Außentemperatur einen bestimmten Wert unterschreitet, jeweils der Differenz aus gewünschter Innentemperatur und Außentemperatur. Die Außentemperaturen werden auf Basis der COSMO-DE-Meteorologie für verschiedene Klimaregionen berechnet, die auch als Modellantrieb für das RCG dient.
- ▶ NFR-Sektoren der Quellgruppen aus Industrie, Gewerbe, Energie ohne Kraftwerke sowie aus dem Verkehr ohne Straßenverkehr: Für den Jahresgang auf Monatsebene werden Daten des statistischen Bundesamts verwendet (Produktionsindizes, Beförderungsleistungen, Anzahl Starts und Landungen der Großflughäfen etc.). Wochengang und Tagesgang werden jeweils aus den statischen Default-Zeitprofilen des RCG übernommen.
- ▶ Straßenverkehr: Das Zeitverhalten der Emissionen des Straßenverkehrs ist wesentlich durch die Zeitprofile der Verkehrsstärke gegeben. Als Datenquelle werden die automatischen Dauerzählstellen der BASt verwendet. Dabei wird differenziert zwischen Leicht- und Schwerverkehr sowie zwischen Autobahnen, Bundesstraßen und Innerortsstraßen. Die Zeitprofile der Autobahnen und Bundesstraßen werden räumlich über die für die Straßenverkehrszählung definierten Regionen gemittelt. Die Zeitprofile für den Straßenverkehr auf Innerortsstraßen werden bundesweit gemittelt. Zusätzlich wird für die Verdunstungsemissionen sowie für die Stickstoffoxidemissionen des Leichtverkehrs eine Abhängigkeit von der Temperatur berücksichtigt.
- ▶ Landwirtschaft: Hier werden Funktionen zur zeitlichen Verteilung der NH_3 -Emissionen nach Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005) verwendet. Diese wurden ursprünglich für Dänemark abgeleitet, die Parameter können jedoch angepasst werden. Für Emissionen aus NFR-Sektoren der Landwirtschaft, die nicht auf NH_3 bezogen werden können, werden die statischen Default-Profile des RCG verwendet.
- ▶ Sonstige Produktanwendungen: Dieser Sektor ist insbesondere deshalb relevant, weil er u.a. das Feuerwerk enthält. Es wurden für die relevanten Subsektoren eigene Zeitprofile erstellt,

zum Beispiel wurden die Feinstaub-Emissionen des Silvester-Feuerwerks in die erste Stunde des Jahres gelegt.

Entwicklung des Tools

Es wurde das Tool TeResE (Temporal Resolution of Emission data) entwickelt, das räumlich verteilte Emissionen zeitlich gemäß den abgeleiteten Zeitprofilen und den verfügbaren Eingangsdaten verteilt und somit für Modellrechnungen mit CTMs verfügbar macht. Der Rechenablauf ist im folgenden Diagramm dargestellt.



Als Eingangsdaten werden benötigt:

- ▶ Konfigurationsdateien, welche Informationen und Daten bzw. Randbedingungen zur Berechnung enthalten.
- ▶ Daten zur Meteorologie des Modelljahres (verwendet werden aktuell: Temperatur in 2 m Höhe über Grund und Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe über Grund), konkret in Form der COSMO-DE-Meteorologie, die auch in der RCG-Modellrechnung zur Evaluierung verwendet wird. Im Rahmen dieses Projekts wurden die Jahre 2016 und 2017 ausgewertet; solange die Struktur der Daten unverändert bleibt, können beliebige Jahre verarbeitet werden.
- ▶ Eingangsdaten zur räumlichen Lage der Klimaregionen, zum Straßen- und Schienennetz, den Wasserwegen, den Punktquellen etc. müssen als Featurelayer-Dateien vorliegen.
- ▶ Weitere wichtige jahresspezifische Eingangsdaten sind die Zählraten aus den BAST-Dauerzählstellen, ENTSO-E-Daten, Produktionsindizes etc.

Beim Rechenablauf werden zunächst die Rechengitter aufgebaut, dann alle Geometriedaten auf diese Gitter projiziert sowie die aus den Meteorologie-Daten abgeleiteten Größen berechnet.

Anschließend werden für alle Gruppen die Splitting-Faktoren berechnet und auf NFR- sowie auch auf SNAP-Level-1-Ebene ausgegeben.

Die aktuell vorliegende Version von TeResE erzeugt Splitting-Faktoren für das Nest-2 Gitter (ca. 2 km x 2 km Auflösung über Deutschland) des derzeit im UBA betriebenen Chemie-Transport-Modells REM-CALGRID (RCG).

Evaluierung

Die Evaluierung der Splitting-Faktoren erfolgte durch Modellrechnungen mit dem RCG für das Jahr 2016 („Normaljahr“ ohne besondere meteorologische Ereignisse und Schadstoffepisoden).

Um die erzeugten Splitting-Faktoren im RCG einlesen und verwenden zu können, wurde eine entsprechende Schnittstelle zu RCG implementiert.

Die Evaluierung erfolgte durch Vergleich einer RCG-Modellrechnung unter Verwendung der statischen Default-Zeitprofile bzw. einer RCG-Modellrechnung unter Verwendung der im Projekt entwickelten dynamischen Splitting-Faktoren jeweils mit Messdaten. Für diesen Vergleich wurden acht Luftqualitätsmessstationen ausgewählt, fünf aus dem städtischen Hintergrund und drei aus dem unbelasteten ländlichen Hintergrund. Betrachtet wurden die Luftschadstoffe NO₂, NO_x, O₃ und PM₁₀.

Die Temperaturabhängigkeit der Landwirtschaftsemissionen (in Abhängigkeit von der kumulierten Außentemperatur gibt es jeweils optimale Termine für verschiedene Düngungen) wird in den dynamischen Zeitprofilen berücksichtigt. Es kommen jedoch weitere Einflüsse hinzu, zu denen keine Daten verfügbar sind (Art der tatsächlich lokal angepflanzten Feldfrüchte, Terminkalender der Bauern, ...). Dies führt zu starken räumlichen und zeitlichen Variationen bei den NH₃-Messungen, die so im Modell nicht abgebildet werden können. Für die Evaluierung der landwirtschaftlichen Zeitprofile anhand von NH₃-Messungen wurde daher räumlich über größere Raster und zeitlich über größere Zeiträume (Monate) gemittelt.

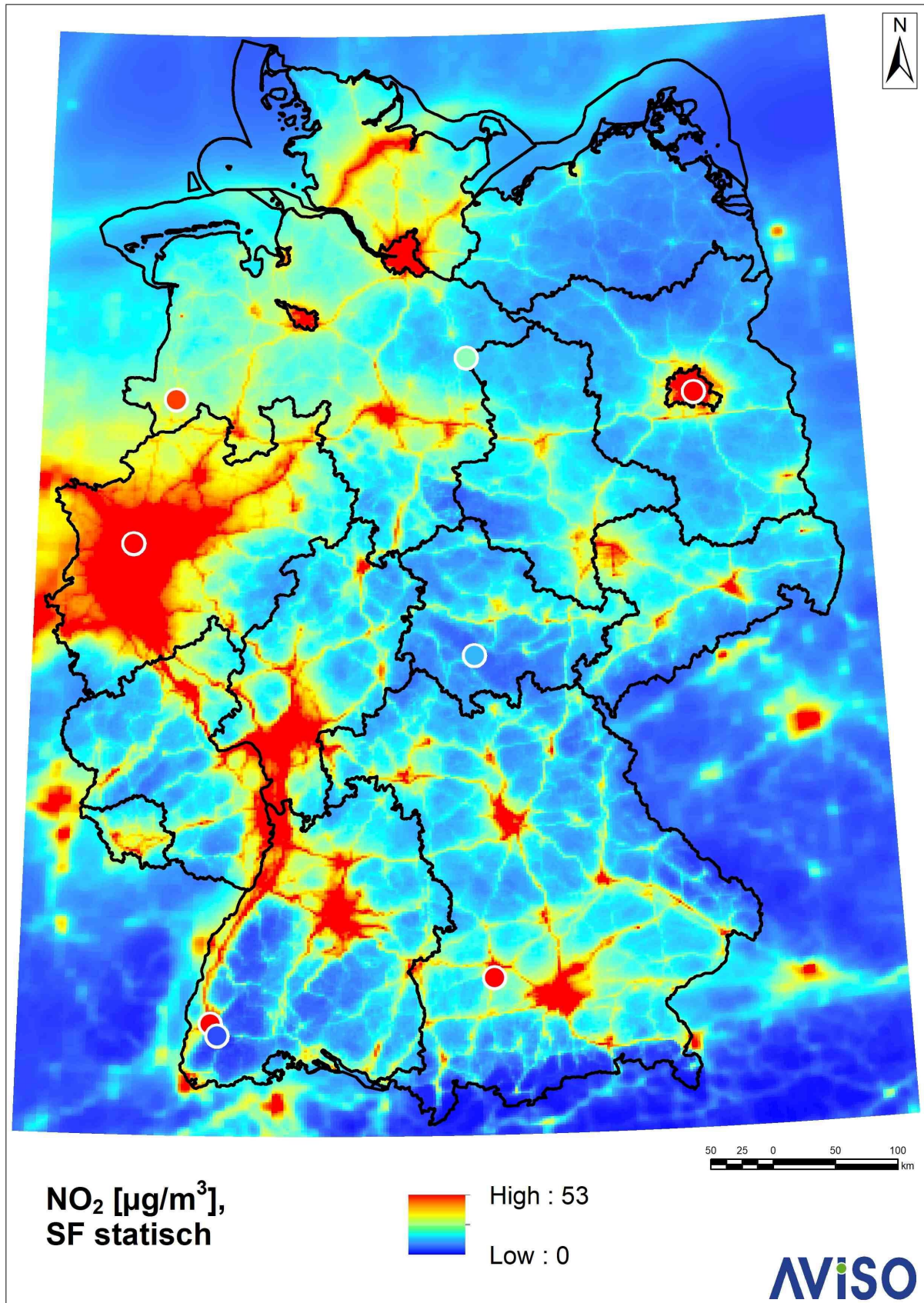
Zusätzlich zur Evaluierung an ausgewählten Messstationen wurde für NO₂, PM₁₀ und O₃ eine Evaluierung mit dem FAIRMODE Delta-Tool (Thunis et Cuvelier, 2022) durchgeführt.

Die Modellrechnung auf Basis der statischen Default-Zeitprofile und die Modellrechnung auf Basis der von TeResE erzeugten dynamischen Zeitprofile wurden zunächst qualitativ anhand von Kartendarstellungen für jahresmittlere und monatsmittlere Konzentrationen verglichen.

Abbildung 1 zeigt die modellierte jahresmittlere NO₂-Konzentration der RCG-Modellrechnung bei Verwendung der statischen Default-Splitting-Faktoren. Weiße Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren dieser Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen Jahresmittelwert. Die in der Karte sichtbare räumliche Verteilung der NO₂-Konzentrationen entspricht der Erwartung: Sie ist in Ballungsräumen, Großstädten und entlang von Verkehrsachsen wie dem Nord-Ostseekanal, dem Rhein und den Autobahnen erhöht, insbesondere das Rhein-/Ruhrgebiet tritt deutlich hervor

Für die meisten der betrachteten Messstationen zeigt der Vergleich der gemessenen jahresmittleren Konzentration mit der RCG-Modellrechnung eine gute Übereinstimmung. Im Rahmen der Auflösung der Farbskala sichtbare Abweichungen gibt es für NO₂ nur an einer Station im Emsland (auf der Karte: rot gefüllter weißer Kreis im Nordwesten), hier unterschätzt das Modell die Messung (Umgebung des Kreises: gelb gefärbt). Eine mögliche Erklärung für den höheren NO₂-Messwert an der Station Emsland (städtischer Hintergrund) ist, dass dieser Wert von den Emissionen der Ortsumgehung oder der naheliegenden A31 teilweise beeinflusst ist. Die Autobahn ist in der Karte als dünne Linie mit erhöhten NO₂-Konzentrationen erkennbar, in der Auflösung 2 km x 2 km tritt sie jedoch nur schwach gegenüber dem Hintergrund hervor.

Abbildung 1: 2016 NO₂: Jahresmittelwert RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default); die weißen Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren der Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen Jahresmittelwert



Für die Gitterzellen, in denen die acht für die Evaluierung ausgewählten Messstationen liegen, wurden weiterhin Zeitreihen gemittelter Konzentrationswerte betrachtet. Ziel ist die bestmögliche Übereinstimmung zwischen Modellrechnung und Messung für den gesamten betrachteten Zeitraum (Jahr) und das kleinste vorliegende Mittelungsintervall (Stunde). Diese Zeitreihe des Jahresgangs aus Stundenmittelwerten enthält alle zeitlichen Einflüsse (Tagesgänge, Wochengänge, Jahresgang). Mögliche Ursachen für Abweichungen zwischen Modellrechnung und Messung können anhand dieser Zeitreihe jedoch nur schwer isoliert werden. Es wurden daher zusätzlich zum Jahresgang der Stundenmittelwerte weitere Zeitreihen betrachtet, um Tagesgänge, Wochengänge und saisonales Verhalten getrennt betrachten zu können. Dies ermöglicht auch Rückschlüsse auf Quellgruppen, deren Emissionen auf den entsprechenden Zeitskalen besonders stark variieren. Für die Konzentrationen der betrachteten Luftschadstoffe wurden daher verschiedene Zeitreihen grafisch dargestellt:

- ▶ Jahresgang aus Stundenmittelwerten, Tagesmittelwerten und Monatsmittelwerten,
- ▶ Wochengang aus Tagesmittelwerten,
- ▶ verschiedene Tagesgänge (alle Tage, Sonn- und Feiertage) aus Stundenmittelwerten

Diese Zeitreihen wurden auch quantitativ analysiert anhand der statistischen Kenngrößen R^2 (Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten), Bias und RMSE (Root Mean Square Error), die jeweils zwischen den Mess- und Modellwerten auf Basis statischer Zeitprofile und zwischen den Mess- und Modellwerten auf Basis dynamischer Zeitprofile berechnet wurden.

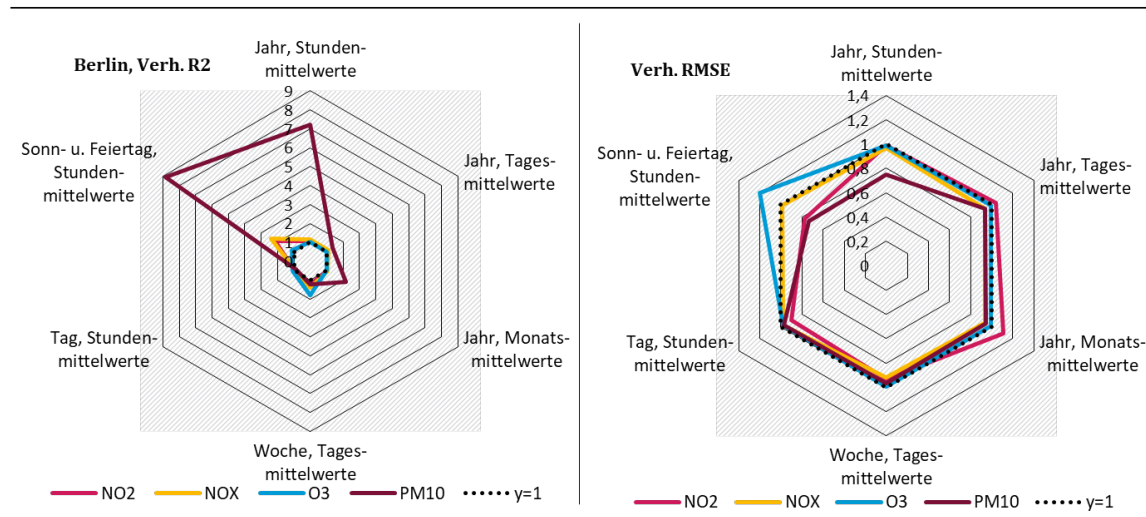
R ist ein Maß für den Grad eines linearen Zusammenhangs zwischen zwei Größen, R^2 kann interpretiert werden als Anteil der Varianz einer Größe, der durch die andere Größe erklärt werden kann. Für die Evaluierung zeitlicher Zusammenhänge ist R^2 die wichtigste Kenngröße. Als Bias wird der systematische Modellfehler bezeichnet, bei einem positiven Bias überschätzt das Modell die Messwerte systematisch, bei einem negativen unterschätzt das Modell die Messwerte systematisch. Bei kleinem Bias ist der RMSE ein Maß für den zufälligen Modellfehler.

Für die nicht-vorzeichenbehafteten Größen R^2 und RMSE wurden Verhältnisse der jeweiligen Kenngröße für den RCG-Lauf mit dynamischen Zeitprofilen zu der entsprechenden Kenngröße für den RCG-Lauf mit statischen Zeitprofilen gebildet. Auf eine Verbesserung der Modellrechnung durch Verwendung dynamischer Zeitprofile weisen folgende Werte hin:

- ▶ $R^2_{\text{dynamisch}} / R^2_{\text{statisch}} > 1$
- ▶ $\text{RMSE}_{\text{dynamisch}} / \text{RMSE}_{\text{statisch}} < 1$

Diese Verhältnisse sind beispielhaft für die Station Berlin-Neukölln in der folgenden Grafik in Form zweier sechseckiger Netzdiagramme dargestellt. Das Netzdiagramm auf der linken Seite zeigt für die betrachteten Zeitreihen jeweils die Verhältnisse R^2 dynamisch zu R^2 statisch, das Diagramm auf der rechten Seite die entsprechenden Verhältnisse für den RMSE.

Abbildung 2: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Berlin-Neukölln 2016



In beiden Diagrammen sind in Richtung der oberen Ecke die Verhältnisse der Kennwerte für die Zeitreihen des Jahresgangs aus Stundenmittelwerten abgetragen. Die weiteren fünf Ecken entsprechen, im Uhrzeigersinn, den folgenden Zeitreihen: Jahresgang aus Tagesmittelwerten, Jahresgang aus Monatsmittelwerten, Wochengang aus Tagesmittelwerten, Tagesgang aus Stundenmittelwerten und Tagesgang an Sonn- und Feiertagen aus Stundenmittelwerten.

Die für diese Zeitreihen dargestellten Verhältnisse der statistischen Kenngrößen entsprechen jeweils den durch die Verwendung der dynamischen Zeitprofile bewirkten Änderungen. Das schwarz gepunktete Sechseck entspricht der Linie „ $y=1$ “: Für die quadrierten Korrelationskoeffizienten (links) bedeuten Werte außerhalb dieses Sechsecks eine Verbesserung der Modellrechnung durch die Verwendung dynamischer Zeitprofile, für die RMSE (rechts) bedeuten Werte innerhalb dieses Sechsecks eine Verbesserung.

An der Station Berlin-Neukölln treten die größten Verbesserungen bei den Korrelationen bei PM_{10} auf. Hier erhöht sich R^2 durch die dynamischen Zeitprofile für die Zeitreihen „Jahr, Stundenmittelwerte“ und „Sonn- und Feiertag, Stundenmittelwerte“ im Vergleich zu der RCG-Modellrechnung mit statischen Zeitprofilen um einen Faktor von ca. 7 bzw. ca. 9. Diese Verbesserung liegt im Wesentlichen an zwei Dingen: An der Berücksichtigung des **Silvester-Feuerwerks**, das an dieser Station in der Feinstaub-Messung besonders ausgeprägt ist, und am **Wegfall der Morgenspitze der Verkehrsganglinie an Sonn- und Feiertagen**. Die statischen Default-Tagesgänge des Straßenverkehrs weisen für alle Tagestypen identisch eine Morgen- und Abendspitze auf; Samstage und Sonntage unterscheiden sich von Werktagen nur durch den Wochengang, der das Gesamt-Niveau an Wochenenden absenkt. Die auf Basis von Verkehrsdaten hier abgeleiteten dynamischen Zeitprofile weisen an Sonn- und Feiertagen zwar eine Abend-, jedoch keine Morgenspitze auf.

Das Silvester-Feuerwerk ist auch im Monatsmittelwert für den Januar noch erkennbar, der Wert für R^2 verbessert sich daher auch im Jahresgang der Monatsmittelwerte bei PM_{10} durch die dynamischen Zeitprofile noch um mehr als einen Faktor 2. Das geänderte Zeitprofil des Straßenverkehrs am Wochenende führt auch bei NO_2 und NO_x zu Erhöhungen von R^2 beim Sonn- und Feiertag um mehr als einen Faktor 2. Beim Ozon zeigt sich dieser Effekt am Wochengang, auch hier erhöht sich R^2 um einen Faktor 2.

Leichte Verschlechterungen bei R^2 an der Station Berlin-Neukölln treten beim Tagesgang der Stundenmittelwerte bei NO_x und PM_{10} auf, der Wert wird hier durch Einführung der dynamischen Zeitprofile um einen Faktor 0,96 bzw. 0,90 (d.h. um 4% bzw. 10%) gemindert. Grund dafür ist, dass die Morgenspitze im Straßenverkehr an der Station Berlin-Neukölln etwas später auftritt als in den aus bundesweiter Mittelung über die innerörtlichen Zählstellen des Straßenverkehrs abgeleiteten dynamischen Zeitprofile. Für Berlin passen diese hier an Werktagen etwas schlechter als die Default-Profile. Bei der Zeitreihe der Stundenmittelwerte überwiegt dennoch deutlich die Verbesserung durch das neue Sonntagsprofil.

Auch beim RMSE kommt es an der Station Berlin-Neukölln durch die dynamischen SF für die meisten Schadstoffe und Zeitreihen zu Verbesserungen (im rechten Diagramm sind die meisten dargestellten Verhältnisse kleiner als eins). Für Ozon am Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) sowie für NO_2 beim Jahresgang der Monatsmittelwertewerte kommt es hingegen zu Verschlechterungen.

Die Erhöhung des RMSE beim Ozon an Sonn- und Feiertagen um 20% ist keine Folge des zeitlichen Verlaufs, sondern des hier nicht dargestellten positiven Bias: Das Modell überschätzt hier die Messwerte. Durch Wegfall der sonntäglichen Morgenspitze der NO_x -Emissionen des Verkehrs entfällt im Modell auch ein Morgenminimum für O_3 (ein Maximum bei den Stickstoffoxiden führt zu einem Minimum bei Ozon), das zwar im Zeitverlauf der Messung nicht auftritt, das aber insgesamt die Modellwerte verkleinert und deshalb in Summe über den Tag Bias und RMSE verkleinert.

Eine mögliche Erklärung für die Vergrößerung des RMSE für NO_2 beim Jahresgang der Monatsmittelwerte ist eine hier nicht berücksichtigte Temperaturabhängigkeit des NO_2/NO_x -Verhältnisses der Emissionen des Straßenverkehrs. Die Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der NO_x -Emissionen (höhere Emissionen im Winter bei kalten Temperaturen aufgrund der Thermofenster bestimmter Nachbehandlungssysteme) verringert den RMSE beim Jahresgang aus Monatsmittelwerten für NO_x leicht, das winterliche NO_2 wird dadurch jedoch überschätzt.

Insgesamt stimmen die unter Verwendung dynamischer Zeitprofile modellierten Konzentrationen für die meisten Stationen, Schadstoffe und Zeitskalen besser mit den gemessenen Konzentrationen überein als unter Verwendung statischer Zeitprofile.

Auch die wie oben beschrieben separat durchgeführte Evaluierung für die Quellgruppe Landwirtschaft zeigt für die meisten betrachteten Gitterzellen Verbesserungen bei Verwendung dynamischer Zeitprofile. An einigen Stellen weisen Verschlechterungen bei den zeitlichen Zusammenhängen auf Verbesserungspotenziale bei der räumlichen Verteilung der Emissionen hin.

Zusätzlich zur Evaluierung anhand ausgewählter Messstationen wurde eine Evaluierung mit den Delta-Tool (Thunis et Cuvelier, 2022) durchgeführt. Dieses Tool wurde im Rahmen von FAIRMODE¹ (Forum for Air Quality Modeling in Europe) entwickelt mit dem Ziel, Luftqualitätsmodelle für regulatorische Zwecke zu bewerten.

Als Messwerte verwendet wurden die Daten aller Messstationen im ländlichen, vorstädtischen und städtischen Hintergrund in Deutschland, an denen die entsprechenden Größen 2016 ohne zu große Datenlücken vorliegen bzw. berechnet werden können. Für NO_2 ergaben sich dafür 243 gültige Stationen, für PM_{10} 212 und für Ozon 241. Dies stellt eine gute Ergänzung zur Evaluierung an ausgewählten Stationen dar: Während bei dieser wenige einzelne Stationen im

¹ <https://fairmode.jrc.ec.europa.eu/>

Detail betrachtet wurden, liegt beim Delta-Tool der Fokus auf der großen Anzahl berücksichtigter Stationen.

Die Evaluierung der RCG-Modellrechnungen unter Verwendung statischer und dynamischer Zeitprofile mit dem Delta-Tool lässt sich wie folgt zusammenfassen:

- ▶ Die dynamischen SF führen insgesamt zu einer leichten Verbesserung für den Korrelationskoeffizienten für PM_{10} und NO_2 an urbanen Hintergrundstationen.
- ▶ Auch die PM_{10} -Überschreitungstage werden etwas besser getroffen,
- ▶ die O_3 -Überschreitungstage hingegen etwas schlechter.

Dies entspricht den Ergebnissen der Evaluierung der acht ausgewählten Einzelstationen, wo auch insgesamt leichte Verbesserungen der Modellrechnung gefunden wurden. Eine Evaluierung nur dieser acht Stationen mit dem Delta-Tool zeigte zudem, dass die Modellperformanz dieser acht Stationen als repräsentativ für die Performanz des Gesamtkollektivs aller gültigen Stationen angesehen werden kann.

Fazit

Insgesamt lässt sich festhalten, dass die unter Verwendung dynamischer Zeitprofile modellierten Konzentrationen für die meisten Stationen, Schadstoffe und Zeitskalen besser zu den gemessenen Konzentrationen passen als die unter Verwendung statischer Zeitprofile modellierten Konzentrationen.

Im Rahmen der Modellierung gefundene Abweichungen zwischen Modellrechnung und Messung weisen auf Verbesserungspotenziale des hier als Prototyp entwickelten Tools TeResE hin. Dabei stehen insbesondere die Quellgruppen Landwirtschaft und Straßenverkehr im Fokus: Sie liefern hohe Beiträge zu den Gesamtemissionen, weisen räumlich eine scharfe Emissionsverteilung auf und zeitlich ausgeprägte Emissionsspitzen. Datenquellen zum Beispiel zu tatsächlich lokal angebauten Feldfrüchten/Fruchtfolgen oder zu innerörtlichen Verkehrsstärken hätten das Potenzial, die Übereinstimmung zwischen Modellrechnung und Messung weiter zu verbessern, liegen aktuell jedoch nicht vor.

Weitere Verbesserungspotenziale gibt es z.B. für die Großflughäfen: Zur zeitlichen Emissionsverteilung werden aktuell die lokalen monatlichen Starts und Landungen verwendet. Auf Anfrage bei den Flughäfen könnten stündliche Daten zu Starts und Landungen bezogen werden.

Außerdem lieferte die Evaluierung Hinweise auf Verbesserungsmöglichkeiten der räumlichen Emissionsverteilung. Neben der Landwirtschaft betrifft das z.B. die Quellgruppen „sonstige Produktanwendungen“ und den Holzeinsatz zur Wohngebäudeheizung: Hier bietet es sich an zu prüfen, ob als räumlicher Verteilparameter zusätzlich zur dort unter anderem eingehenden Einwohnerzahl die Anzahl der Betten im Touristiksektor herangezogen werden sollte.

Summary

The German environment agency (UBA) reports annual emissions based on national, European and international agreements (Gothenburg Protocol of the Geneva Air Pollution Control Convention (CLRTAP)). The reported emissions are also essential input data for chemical transport models (CTM), which, on the one hand, are used to model air pollutant concentrations over Germany, and, on the other hand, are used to model scenarios for strategies and measures to reduce pollution. The latter are required to be able to assess the potential of individual measures to achieve compliance with air quality limit values. They are also a basis for the national clean air program within the framework of the new NEC Directive 2016/2284/EU.

Spatially and temporally distributed emission data are required for dispersion calculations with chemical transport models. The CTM REM-CALGRID (RCG) currently operated at UBA, but also other CTMs, work with static time profiles (annual, weekly, and daily cycles) for emissions at SNAP Level 1 (Selected Nomenclature for Air Pollution) category level.

For use in CTM, the emissions recorded as annual national totals must be distributed spatially to the corresponding model grid and temporally to all hourly values of the year. The quality of the model results, especially for scenario calculations, is largely determined by the quality of the incoming emission data - quantity, spatial and temporal distribution.

The "Gridding Emission Tool for ArcGIS" (GRETA) was developed for the spatial distribution of emission data (Schneider et al., 2016). The sectoral emissions of the Central Emissions System (ZSE) are spatially distributed using distribution parameters. With GRETA it is possible to regionally quantify the contributions of individual sectors to air pollution.

Currently, static time profiles are used for the temporal distribution in RCG, and in many other CTMs established in Europe. These are fixed daily, weekly, and annual profiles for each source group (usually: SNAP Level 1 level) that do not show any spatial or temporal variance. For example, the annual profiles for emissions from small combustion plants in the Alpine region currently do not differ from those in the Rhine Valley, even if heating is required in the Alps for longer. The static time profiles are also identical for all years: Special events, such as the corona-related lockdowns in 2020 or the flood disaster in 2021, during which, for example, road traffic volume fell significantly, cannot be considered.

The aim of this research project was to develop a tool for the dynamic temporal distribution of emissions, in which spatial and/or temporal dependencies of the time profiles are considered using local and year-specific input data.

The tool TeResE (Temporal Resolution of Emission data) generates dynamic time profiles for the emissions of nitrogen oxides (NO_x), particulate matter (PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$), ammonia (NH_3), NMVOC, sulfur dioxide (SO_2) and carbon monoxide (CO), called splitting factors. These splitting factors contain the share of the respective emission for each grid box and each source category per hour. The splitting factors depend dynamically on the respective spatial and/or temporal conditions, e.g., different years differ in terms of meteorology: the type, characteristics and times of the weather conditions that occur vary both spatially and from year to year. This directly influences the temporal emission profiles of source groups such as agriculture or small combustion plants. In the case of road traffic, local conditions and special temporal situations can be considered by using hourly data for the traffic volume from the automatic continuous counting stations of the BAST (Federal Highway Research Institute).

The splitting factors are initially generated for each NFR sector. For this purpose, representative time profiles for annual, weekly, and diurnal emissions are derived, based on an hourly resolution if possible. Regional aspects are considered, i.e., the splitting factors are provided

regionalized according to regions or grid cells. TeResE can output the regionalized temporal distribution of emissions at both NFR and SNAP level. An overview of the aggregation of emissions from NFR and SNAP sectors and the respective allocation can be found in Appendix A.

The following work was carried out as part of the research project to develop the tool.

Literature and Data Survey

Sector-specific time profiles (annual, weekly, and diurnal cycles) were surveyed for emissions of the pollutants under consideration, taking into account in particular the dependence on meteorological conditions. This included a survey of the operators of common European CTMs regarding the time profiles used there and the plans for further development. The time profiles found in the survey were compared with the static profiles currently used in the CTM REM-CALGRID (RCG, operated by the UBA). Furthermore, a literature search was done among scientific publications as well as publications by environmental authorities and institutes and research centers active in the research field. In addition, regionally available data sources on time courses were surveyed.

For the individual NFR sectors, the improvement potential that can be achieved by using dynamic time profiles depends on various aspects:

1. Percentage of total national emissions: The higher the contribution of a sector, the more important it is to depict its time profile as correctly as possible. This contribution can vary depending on air pollutant.
2. Characteristics: The more pronounced the time profiles are and the sharper the localization of the maxima, the more important it is to depict them correctly.
3. Spatial and temporal variability: The more the time profiles vary spatially and temporally, the more important it is to take local, regional conditions into account in the input data.
4. Data availability: Only data sources that are uniformly available throughout Germany and are of sufficient quality can be considered. In addition, the data must be updated regularly.

As a result of this work package, these aspects were summarized in various tables: The contributions of all NFR sectors to the respective superordinate SNAP sector and to the total national emissions are shown in Chapter 4 in Tabelle 2 and Tabelle 3. The meteorological and other regional dependencies of the time profiles and the data sources available for them are listed in Appendix B in Tabelle 24.

Agriculture, road traffic, large combustion plants in the energy sector and small combustion plants for heating buildings were identified as particularly relevant source groups regarding the time dependence of emissions.

Derivation of the splitting factors

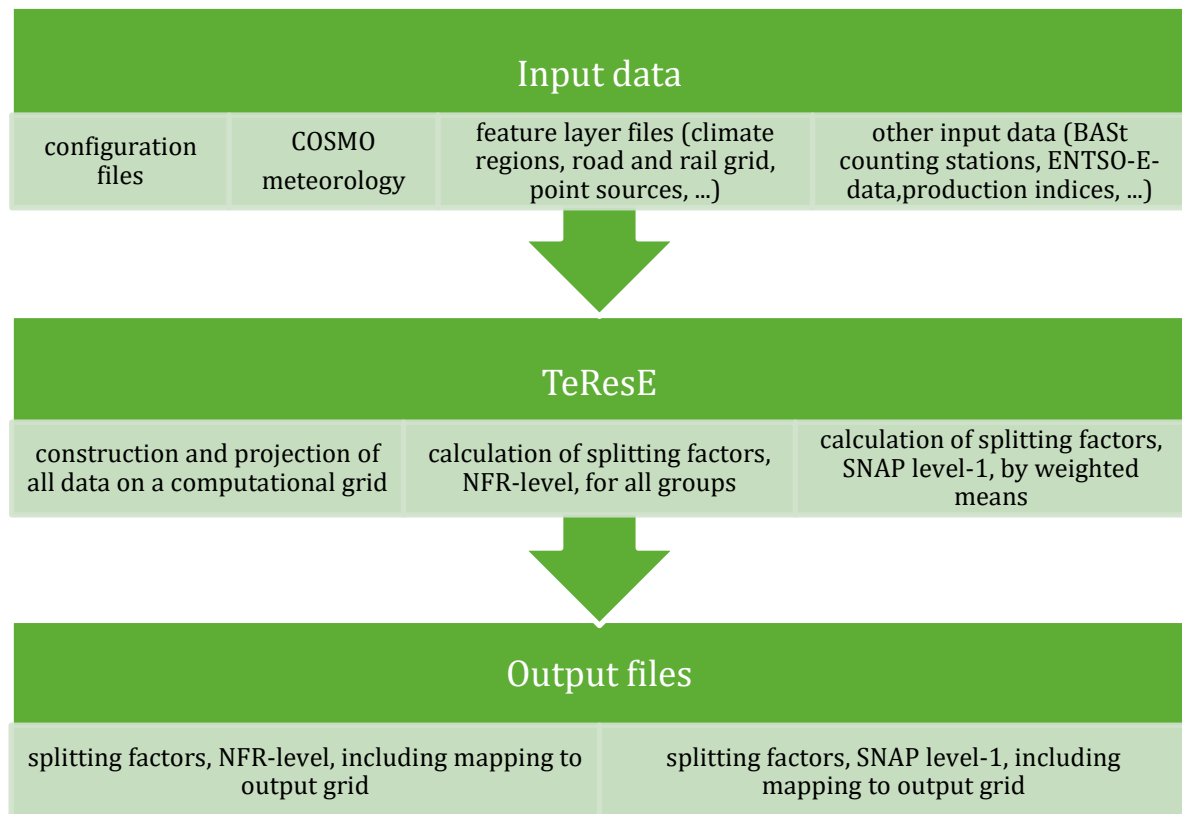
The meteorological and other dependencies to be considered for the splitting factors and the data sources to be used were compiled for all NFR sectors. The most important are:

- **Power plants:** Large power plants are included in the spatial distribution of emissions by GRETA (Schneider et al., 2016) as point sources. Time series of hourly energy deliveries are available from ENTSO-E (European Network of Transmission System Operators for Electricity) for blocks of large power plants. The corresponding time profiles are used directly for the point sources in the PRTR (Pollutant Release and Transfer Register), which are used in the spatial distribution by GRETA and can be assigned in ENTSO-E. Mean values from the transmission system operators are used for all unassigned point sources and for the power plant emissions available as area sources.

- ▶ Small furnaces: Degree Day figures are used for the time profiles of building heating. On heating days, i.e., on days when the outside temperature falls below a certain value, degree day figures correspond to the difference between the desired inside temperature and the outside temperature. The outside temperatures are calculated based on the COSMO-DE meteorology for different climate regions, which also serves as a model driver for the RCG.
- ▶ NFR sectors of the source groups industry, commerce, energy excluding power plants and traffic excluding road traffic: Data from the Federal Statistical Office is used for the annual variation at monthly level (production indices, transport services, number of take-offs and landings at major airports, etc.). Weekly and daily cycles are each taken from the static default time profiles of RCG.
- ▶ Road traffic: The time behaviour of the emissions from road traffic is essentially given by the time profile of the traffic volume. The BAST's automatic continuous counting stations are used as the data source. A distinction is made between light and heavy traffic as well as between motorways, federal roads, and inner-city roads. The time profiles of the motorways and federal roads are spatially averaged over the regions defined for the road traffic census. The time profiles for road traffic on urban roads are averaged nationwide. In addition, a dependency on the temperature is considered for the evaporative emissions and for the nitrogen oxide emissions from light traffic.
- ▶ Agriculture: Functions for the temporal distribution of NH_3 emissions according to Skjoth et al. (2004) and Gyldenkerne et al. (2005) used. These were originally derived for Denmark, but the parameters can be adjusted. The static default profiles of the RCG are used for emissions from those NFR sectors of agriculture that cannot be related to NH_3 .
- ▶ Other product applications: This sector is particularly relevant because it includes fireworks, among other things. Separate time profiles were created for the relevant sub-sectors, for example the fine dust emissions from the New Year's Eve fireworks were placed in the first hour of the year.

Tool development

The tool TeResE (Temporal Resolution of Emission data) was developed, which temporally distributes spatially distributed emissions according to the derived time profiles and the available input data and thus makes them available for model calculations with CTMs. The calculation process is shown in the following diagram.



The following input data is required:

- ▶ Configuration files that contain information and data or boundary conditions for the calculation.
- ▶ Data on the meteorology of the model year (currently used: temperature at 2 m above ground level and wind speed at 10 m above ground level), specifically in the form of the COSMO-DE meteorology, which is also used in the RCG model calculation for evaluation. As part of this project, the years 2016 and 2017 were evaluated; as long as the structure of the data remains unchanged, any year can be processed.
- ▶ Input data on the spatial location of the climatic regions, the road and rail network, the waterways, the point sources, etc. must be available as feature layer files.
- ▶ Other important year-specific input data are the counting data from the BAST permanent counting stations, ENTSO-E data, production indices, etc.

During the calculation process, first, the calculation grids are set up, then all geometric data are projected onto these grids and the quantities derived from the meteorological data are calculated. The splitting factors are then calculated for all groups, and finally, output files are written at NFR and SNAP Level 1 level.

The currently available version of TeResE generates splitting factors for the Nest-2 grid (approx. 2 km x 2 km resolution over Germany) of the chemical transport model REM-CALGRID (RCG) currently operated at the UBA.

Evaluation

The splitting factors were evaluated using model calculations with RCG for the year 2016 ("normal year" without special meteorological events and pollutant episodes).

To be able to read in and use the generated splitting factors in RCG, a corresponding interface to RCG was implemented.

The evaluation was carried out by comparing both an RCG model calculation using the static default time profiles and an RCG model calculation using the dynamic splitting factors developed in the project with measurement data. Eight air quality monitoring stations were selected for this comparison, five from the urban background and three from the unpolluted rural background. The air pollutants NO_2 , NO_x , O_3 and PM_{10} were considered.

For the agricultural emissions, the temperature dependency (depending on cumulative ambient temperature, there are optimal dates for different fertilizer applications) is considered in the dynamic time profiles. However, there are other influences for which no data is available (type of crops actually planted locally, farmers' schedules, ...). This leads to strong spatial and temporal variations in the NH_3 measurements that cannot be represented in the model. Therefore, for the evaluation of the agricultural time profiles based on NH_3 measurements, spatial averages were used over coarser grids and over longer time periods (months).

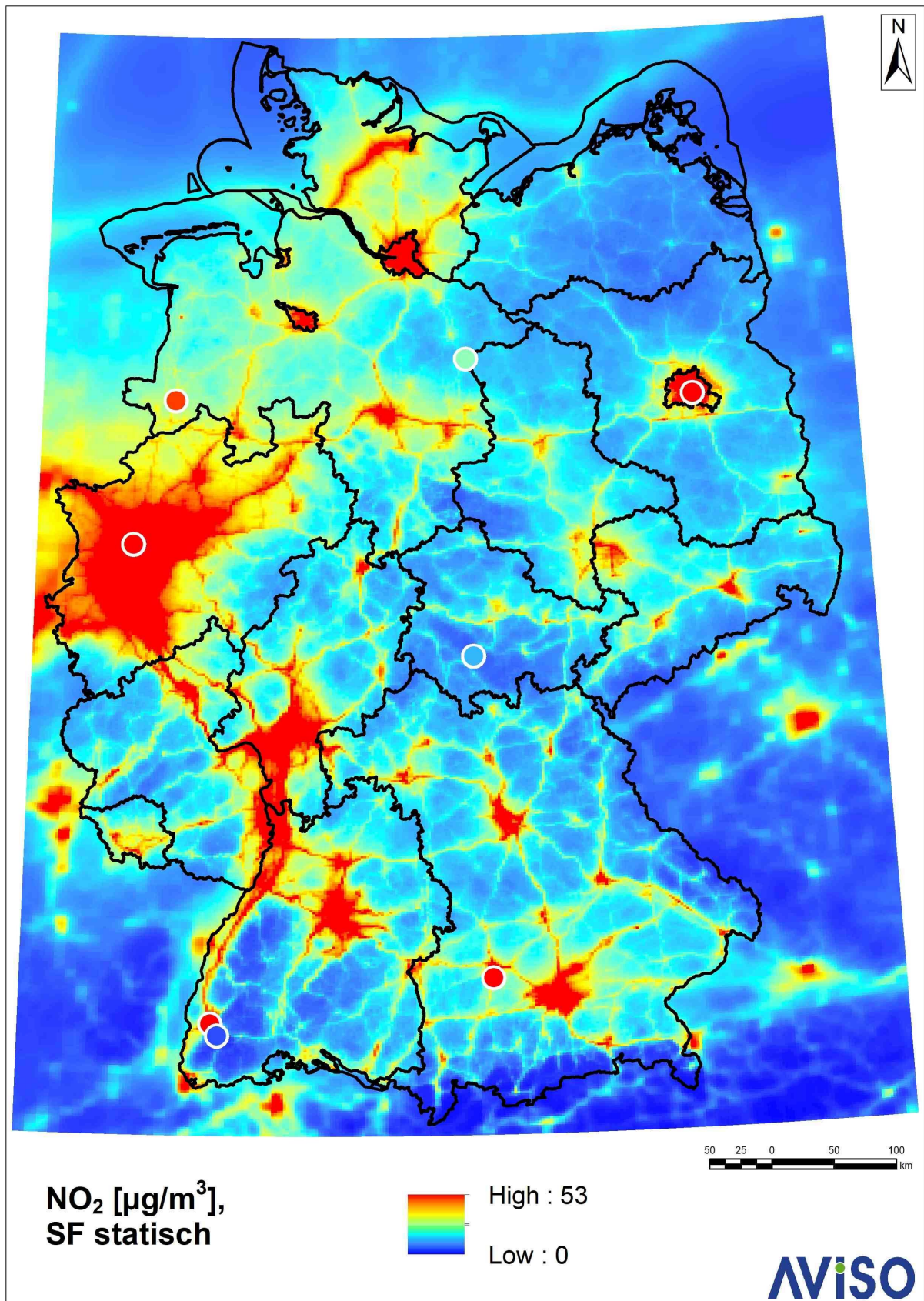
In addition to the evaluation at selected measuring stations, an evaluation with the FAIRMODE Delta tool (Thunis et Cuvelier, 2022) was carried out for NO_2 , PM_{10} and O_3 .

The model calculation based on the static default time profiles and the model calculation based on the dynamic time profiles generated by TeResE were first compared qualitatively using maps for annual mean and monthly mean concentrations.

Figure 1 shows the modelled annual mean NO_2 concentration of the RCG model calculation using the static default splitting factors. White circles mark the locations of the measuring stations considered, the colour value inside these circles corresponds to the annual mean concentration measured there. The spatial distribution of the NO_2 concentrations visible on the map corresponds to the expectation: it is increased in conurbations, large cities and along traffic axes such as the Kiel Canal, the Rhine and the motorways, particularly, the Rhine/Ruhr area clearly evident.

For most of the monitoring stations considered, the comparison of the measured annual mean concentration with the RCG model calculation shows good agreement. Within the resolution of the colour scale, there are visible deviations for NO_2 at only one station in Emsland (on the map: red-filled white circle in the north-west), here the model underestimates the measurement (surroundings of the circle: coloured yellow). A possible explanation for the higher NO_2 measurement at the Emsland station (urban background) is, that this value is partly influenced by emissions from the bypass or the nearby A31. The motorway can be seen on the map as a thin line with increased NO_2 concentrations, but at the 2 km x 2 km resolution it only stands out faintly against the background.

Figure 1: Annual mean modelled NO₂ concentration 2016 (RCG model run using static splitting factors (default); the white circles mark the positions of the measurement stations considered, the colour values inside correspond to the measured annual mean concentrations there.



For the grid cells in which the eight measuring stations selected for the evaluation are located, time series of averaged concentration values were also considered. The goal is the best possible match between model calculation and measurement for the entire period under consideration (year) and the smallest available averaging interval (hour). This time series of annual changes from hourly mean values contains all temporal influences (diurnal changes, weekly changes, annual changes). However, it is difficult to isolate possible causes for discrepancies between model calculation and measurement using this time series. Therefore, in addition to the annual course of the hourly mean values, further time series were considered to be able to consider diurnal courses, weekly courses and seasonal behaviour separately. This also allows conclusions to be drawn about source groups whose emissions vary particularly strongly on the relevant time scales. Various time series were therefore graphically displayed for the concentrations of the air pollutants under consideration:

- Annual cycle from hourly averages, daily averages, and monthly averages,
- Weekly cycle from daily mean values,
- Different diurnal cycles (every day, Sundays, and public holidays) from hourly averages

These time series were also analysed quantitatively using the statistical parameters R^2 (square of Pearson's correlation coefficient), bias and RMSE (root mean square error). These quantities were calculated both between the measured and modelled values based on static time profiles and between the measured and modelled values based on dynamic time profiles.

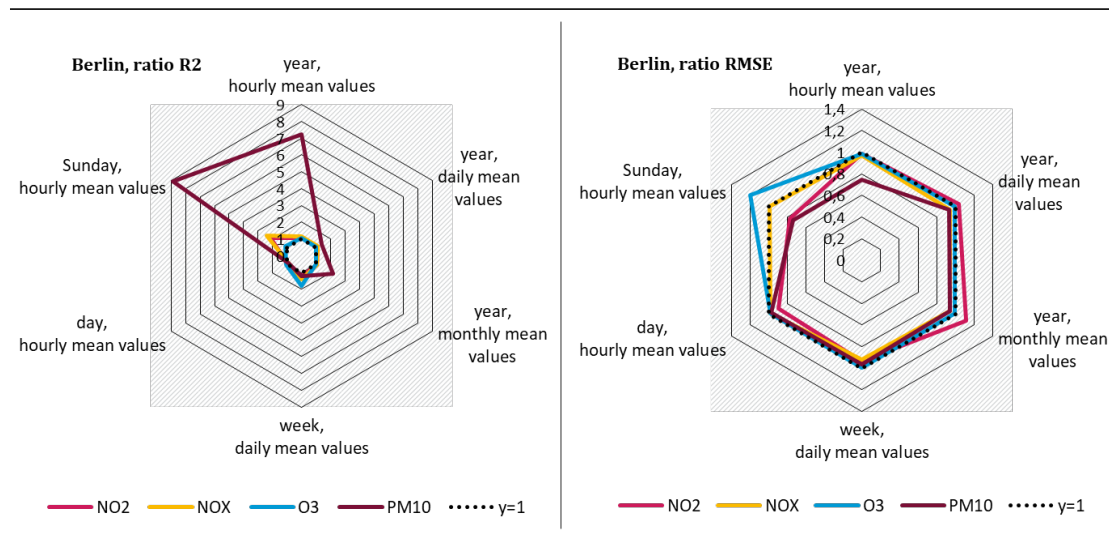
R shows how strong two variables are linearly related, R^2 can be interpreted as the proportion of the variance in one variable that can be explained by the other variable. R^2 is the most important parameter for evaluating temporal relationships. The systematic model error is referred to as bias; with a positive bias, the model systematically overestimates the measured values, with a negative bias, the model systematically underestimates the measured values. With a small bias, the RMSE is a measure of the random model error.

For the unsigned quantities R^2 and RMSE, ratios of the respective quantity for the RCG run with dynamic time profiles to the corresponding quantity for the RCG run with static time profiles were formed. An improvement of the model calculation through the use of dynamic time profiles is indicated by the following ratios:

- $R^2_{\text{dynamic}}/R^2_{\text{static}} > 1$
- $\text{RMSE}_{\text{dynamic}}/\text{RMSE}_{\text{static}} < 1$

These ratios are shown as an example for the Berlin-Neukölln station in the following graphic in the form of two hexagonal network diagrams. The network diagram on the left shows the ratios R^2 dynamic to R^2 static for the time series considered, the diagram on the right the corresponding ratios for the RMSE.

Figure 2: Dynamic to static ratio for the statistical parameters R^2 (left, here ratios > 1 mean an improvement) and RMSE (right, here ratios < 1 mean an improvement) at the Berlin-Neukölln station in 2016.



In both diagrams, the ratios of the characteristic values for the time series of the annual variation from hourly mean values are plotted in the direction of the upper corner. The other five corners correspond, clockwise, to the following time series: annual variation from daily mean values, annual variation from monthly mean values, weekly variation from daily mean values, diurnal variation from hourly mean values and diurnal variation on Sundays and public holidays from hourly mean values.

The ratios of the statistical parameters shown for these time series each correspond to the changes caused by using the dynamic time profiles. The black dotted hexagon corresponds to the "y=1" line: For the squared correlation coefficients (left), values outside this hexagon mean an improvement in the model calculation through the use of dynamic time profiles, for the RMSE (right), values inside this hexagon mean an improvement.

At the Berlin-Neukölln station, the largest improvements occur for PM_{10} correlations. Here, R^2 increases by a factor of approx. 7 or approx. 9 due to the dynamic time profiles for the time series "year, hourly mean values" and "Sundays and public holidays, hourly mean values" compared to the RCG model calculation with static time profiles. This improvement is essentially due to two things: the consideration of the New Year's Eve fireworks, which is particularly pronounced at this station in the fine dust measurements, and the omission of the morning peak of the traffic diurnal profile on Sundays and public holidays. The static default daily courses of road traffic show morning and evening peaks identical for all types of day; Saturdays and Sundays differ from working days only in the weekly cycle, which lowers the overall level at weekends. The dynamic time profiles derived here based on traffic data show an evening peak on Sundays and public holidays, but no morning peak.

The New Year's Eve fireworks are visible even in the monthly mean value for January, so the value for R^2 also improves in the annual course of the monthly mean values for PM_{10} by more than a factor of 2 by using the dynamic time profiles. Also for NO_2 and NO_x , the changes of the time profiles of road traffic at weekends lead to increases R^2 on Sundays and public holidays by more than a factor of 2. With ozone, this effect is reflected in the weekly cycle, where R^2 also increases by a factor of 2.

Slight deteriorations in R^2 at the Berlin-Neukölln station occur in the daily course of the hourly mean values for NO_x and PM_{10} ; the value is decreased here by a factor of 0.96 or 0.90 (i.e. by 4% or 10%) through the introduction of the dynamic time profiles. The reason for this is that the morning peak in road traffic at the Berlin-Neukölln station occurs somewhat later than in the dynamic time profiles derived from nationwide averaging via the inner-city road traffic counting stations. For Berlin on working days, these work not as well as the default profiles. In the time series of the hourly mean values, however, the improvement due to the new Sunday profile clearly dominates.

The RMSE also improves at the Berlin-Neukölln station due to the dynamic SF for most pollutants and time series (most of the ratios shown in the right-hand diagram are less than one). For ozone on Sundays and public holidays (hourly mean values) as well as for NO_2 in the annual course of the monthly mean values, there is a deterioration.

The increase in the RMSE for ozone by 20% on Sundays and public holidays is not a consequence of the time profile, but of the positive bias (not shown here): the model overestimates the measured values here. Due to the omission of the Sunday morning peak of NO_x emissions from traffic, there is also no morning minimum for O_3 in the model (a maximum for nitrogen oxides leads to a minimum for ozone), which does not occur over the time profile of the measurement, however, which reduces the model values overall and therefore, in total over the day, decreased bias and RMSE.

A possible explanation for the increase in the RMSE for NO_2 in the annual variation of the monthly mean values is a temperature dependence of the NO_2/NO_x ratio of road traffic emissions, which is not considered here. Considering the temperature dependency of the NO_x emissions (higher emissions in winter at cold temperatures due to the thermal windows of certain aftertreatment systems) slightly reduces the RMSE for the annual variation from monthly mean values for NO_x , but the NO_2 in winter is overestimated as a result.

Overall, the concentrations modelled using dynamic time profiles agree better with the measured concentrations for most stations, pollutants and time scales than using static time profiles.

The evaluation for the agriculture source category, which was carried out separately as described above, also shows improvements when using dynamic time profiles for most of the grid cells considered. In some places, deteriorations in the temporal relationships indicate potential for improvement in the spatial distribution of emissions.

In addition to the evaluation based on selected measuring stations, an evaluation was carried out using the Delta tool (Thunis et Cuvelier, 2022). This tool was developed as part of FAIRMODE (Forum for Air Quality Modeling in Europe) with the aim of evaluating air quality models for regulatory purposes.

The data from all measuring stations in the rural, suburban, and urban background in Germany, where the corresponding values for 2016 are available or can be calculated without too large data gaps, were used as measured values. There were 243 valid stations for NO_2 , 212 for PM_{10} and 241 for ozone. This is a good complementation to the evaluation of selected stations: While this evaluation looked at a few individual stations in detail, the Delta tool focuses on the large number of considered stations.

The evaluation of the RCG model calculations using static and dynamic time profiles using the Delta tool can be summarized as follows:

- Overall, the dynamic splitting factors lead to a slight improvement in the correlation coefficient for PM₁₀ and NO₂ at urban background stations.
- The PM₁₀ exceedance days are also matched a little better,
- the O₃ exceedance days, on the other hand, slightly worse.

This agrees with the results of the evaluation of the eight selected individual stations. A Delta tool evaluation restricted to these eight stations also showed that the model performance of these eight stations can be regarded as representative of the performance of the entire collective of all valid stations.

Conclusion

Overall, it can be concluded that the concentrations modelled using dynamic time profiles match the measured concentrations better than the concentrations modelled using static time profiles for most stations, pollutants and time scales.

Deviations between model calculations and measurements indicate potential for improvement of the tool TeResE, which was developed here as a prototype. The focus is particularly on the source groups agriculture and road traffic: They contribute highly to the total emissions, have a sharp distribution of emissions spatially, and show pronounced emission peaks over time. Data sources, for example on field crops/crop rotations actually grown locally, or on inner-city traffic volumes, would have the potential to further improve the agreement between model calculations and measurements, but are currently not available.

There is further potential for improvement, e.g., for the major airports: Currently, local monthly take-offs and landings are used to distribute emissions over time. Hourly take-off and landing data could be obtained upon request from airports.

The evaluation also provided indications of potential improvements in the spatial distribution of emissions. In addition to agriculture, this applies, for example, to the source category "other product applications" and the use of wood for heating residential buildings: Here it makes sense to check whether the number of beds in the tourism sector should be used as a spatial distribution parameter in addition to the number of inhabitants, which, among others, is currently used.

1 Hintergrund und Ziele

Das Umweltbundesamt (UBA) berichtet die jährlichen Emissionsmengen auf der Grundlage nationaler, europäischer und internationaler Vereinbarungen (Göteborg-Protokoll der Genfer Luftreinhaltekonvention (CLRTAP)). Die berichteten Emissionsdaten sind zudem wesentliche Eingangsdaten für Chemie-Transportmodelle (CTM), mit denen einerseits jährlich die flächendeckende Luftschadstoffkonzentration in Deutschland ermittelt wird und andererseits Szenarien für Strategien und Maßnahmen zur Minderung der Schadstoffbelastung gerechnet werden. Letztere werden benötigt, um den Beitrag einzelner Maßnahmen zur Einhaltung von Immissionsgrenzwerten beurteilen zu können. Sie sind außerdem eine Grundlage für die Erstellung des nationalen Luftreinhalteprogramms, wie es die neue NEC-Richtlinie 2016/2284/EU vorsieht.

Für Ausbreitungsrechnungen mit Chemie-Transportmodellen werden räumlich und zeitlich verteilte Emissionsdaten benötigt. Das derzeit im UBA betriebene CTM REM-CALGRID (RCG), aber auch andere CTM, arbeiten mit statischen Zeitprofilen (Monats-, Wochen- und Tagesgänge) für Emissionen auf SNAP Level 1 (Selected Nomenclature for Air Pollution, siehe Anhang A) Kategorie Ebene.

Die Qualität der Modellergebnisse, insbesondere für Szenarienrechnungen, wird maßgeblich von der Qualität der eingehenden Emissionsdaten – Menge, räumliche und zeitliche Verteilung – bestimmt.

Zur räumlichen Verteilung von Emissionsdaten wurde das „Gridding Emission Tool for ArcGIS“ (GRETA) (Schneider et al., 2016) entwickelt. Die sektoralen Emissionen des Zentralen Systems Emissionen (ZSE) werden hierbei über Verteilparameter räumlich verteilt. Mit GRETA ist es möglich, die Beiträge einzelner Sektoren zur Luftbelastung regional zu quantifizieren.

Ziel des Forschungsvorhabens war es, ein zusätzliches Tool zur zeitlichen Verteilung der Emissionen zu entwickeln. Dieses Tool mit Namen TeResE (Temporal Resolution of Emission data) liegt nun vor.

Je nach SNAP-Kategorie werden mehrere NFR (Nomenclature For Reporting) - Sektoren, die nicht zwangsläufig die gleiche zeitliche Verteilung aufweisen, zusammengefasst (Anhang A). Da Modelle wie das RCG auf SNAP Level 1-Kategorie Ebene mit identischen Zeitprofilen arbeiten, können Sektoren mit unterschiedlichen Zeitprofilen nicht differenziert im Modell berücksichtigt werden. Ein Beispiel hierfür ist das Silvesterfeuerwerk, das nach einem für die gesamte SNAP-Kategorie angewandten Zeitprofil über das gesamte Jahr verteilt wird.

In TeResE werden daher repräsentative Zeitprofile für Jahres-, Monats- und Tagesgänge der Emissionen pro NFR-Sektor, möglichst ausgehend von einer stündlichen Auflösung, abgeleitet. Hierbei werden regionale Aspekte berücksichtigt, d.h. die Splitting-Faktoren werden regionalisiert nach Regionen oder Gitterzellen bereitgestellt. TeResE ist in der Lage, die regionalisierte zeitliche Verteilung der Emissionen sowohl auf NFR- als auch auf SNAP-Ebene auszugeben.

Im Rahmen des Forschungsvorhabens wurden die folgenden Arbeiten durchgeführt:

- Zunächst wurden sektorspezifische Zeitprofile (Monats-, Wochen- und Tagesgänge) für Emissionen von Stickstoffoxiden (NO_x), Feinstaub (PM₁₀, PM_{2.5}), Ammoniak (NH₃), NMVOC, Schwefeldioxid (SO₂) und Kohlenmonoxid (CO) recherchiert und dabei insbesondere die Abhängigkeit von meteorologischen Bedingungen berücksichtigt.

- ▶ Es wurden weitere regionalisierte Eingangsdaten untersucht, die mit der zeitlichen Variabilität der Emissionen im Zusammenhang stehen.
- ▶ Es wurde das Tool TeResE entwickelt, das die mit GRETA erzeugten Daten zeitlich in Abhängigkeit dieser Eingangsdaten und den recherchierten Zeitprofilen verteilt und somit für Modellrechnungen mit CTM verfügbar macht.
- ▶ Hierzu wurde zusätzlich eine Schnittstelle zu RCG entwickelt.

Abschließend erfolgte eine Evaluierung des Tools durch Modellrechnungen mit RCG für die Jahre 2016 (Normaljahr, keine ausgeprägten Episoden) und 2017 (Feinstaub - Episode im Januar).

2 Literatur- und Datenrecherche zu meteorologischen und anderen Abhängigkeiten sektoraler Emissionen

In diesem Kapitel wird der zum Zeitpunkt der Durchführung des Projekts aktuelle wissenschaftliche Stand der zeitlichen Verteilung von Emissionen zusammengefasst. Der Fokus lag auf der Abhängigkeit der zeitlichen Verteilung der Emissionen von meteorologischen Parametern sowie auf Standardzeitprofilen.

Die dazu durchgeführte Recherche bestand einerseits aus Befragungen der EntwicklerInnen bzw. AnwenderInnen insbesondere im europäischen Kontext etablierter Chemie-Transport-Modelle (CTMs). Weiterhin wurden Publikationen in wissenschaftlichen Fachzeitschriften ausgewertet und weitere verfügbare Daten recherchiert.

2.1 Befragungen

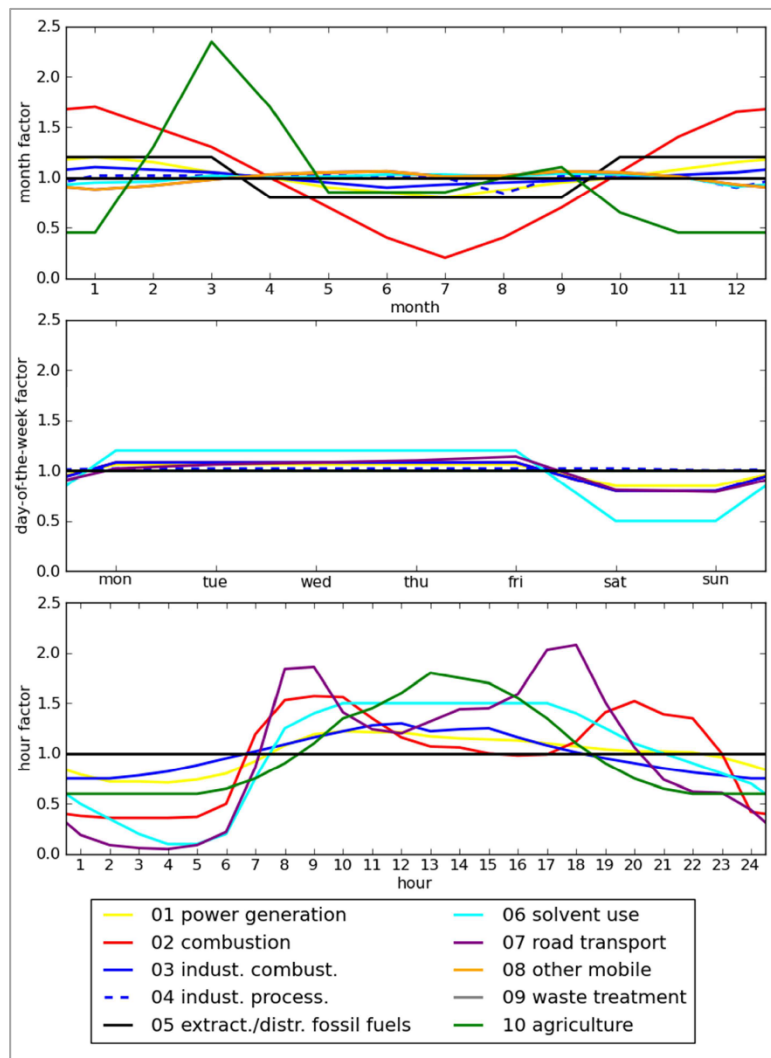
Um zu ermitteln, welche Zeitprofile aktuell in gängigen CTMs zur Anwendung kommen, wurde eine Befragung unter EntwicklerInnen bzw. AnwenderInnen folgender aktuell vor allem im europäischen Kontext eingesetzter CTMs durchgeführt: LOTOS-EUROS, EURAD, EURAD-IM, CHIMERE, CMAQ. Die befragten Personen sind unter anderem auch an Projekten wie CAMS81, FAIRMODE, EMEP und CLINSH beteiligt. Die Ergebnisse werden im Folgenden dargestellt.

2.1.1 CAMS

Der Copernicus Atmosphere Monitoring Service (CAMS) der EU dient der Atmosphären- und Klimaüberwachung. Auf Basis von Messdaten zur atmosphärischen Zusammensetzung (Satelliten, In-situ-Messsysteme am Boden und in geringer Höhe) wurden verschiedene Produkte entwickelt, z.B. für europaweite Luftqualitäts-Vorhersagen in Europa für die nächsten 96 Stunden.

Im Rahmen von CAMS 50, der regionalen Luftqualitätskomponente von CAMS, wurden statische Emissionsprofile definiert (TNT, 2011). Die entsprechenden Tages-, Wochen- und Jahresgänge sind auf SNAP-Ebene aggregiert (s. Anhang A) und in Abbildung 3 dargestellt und werden von einigen der im Rahmen der Recherche untersuchten Modelle verwendet.

Abbildung 3: Zeitprofile anthropogener Emissionen bei CAMS 50, Quelle: TNO (2011)



Im Rahmen von CAMS 81 (Globale und Regionale Emissionen) werden diese Profile weiterentwickelt und auf der Ebene GNFR (s. Anhang A) aggregiert betrachtet (A bis L), die Gruppe F (Straßenverkehr) wird weiter differenziert nach Otto, Diesel, Gas und nicht-Abgas. Für folgende Quellgruppen werden neue Zeitprofile entwickelt (Jahresgänge, Wochengänge, Tagesgänge):

- A (PublicPower): Basis pro Land sind die ENTSO-E hourly energy production-Daten. Messungen realer Emissionen am Schornstein zeigen hohe Korrelationen mit diesen Daten. Pro Land wird daraus ein Schadstoff-spezifisches Zeitprofil abgeleitet. Die Gewichtung der Brennstoffe wird für jedes Land über alle Gitterzellen als konstant angesetzt. Durch die Reduktion auf Jahresgänge, Wochengänge und Tagesgänge kann nicht berücksichtigt werden, dass der Tagesgang im Sommer ein anderer ist als im Winter.
- B (industry): In dieser Aggregationsstufe werden alle Industrie-Sektoren (außer PublicPower) gemeinsam betrachtet. Pro Land wird ein Satz Zeitprofile aus einer Mittelung über die vorliegenden Industrieproduktionsindizes gebildet. Der Jahresgang weist

typischerweise ein Minimum im Sommer auf (Sommerferien), dessen Lage und Ausprägung landesspezifisch ist (z.B. in Italien stärker ausgeprägt als in Großbritannien).

- C (other stationary combustion, nicht genehmigungsbedürftige Kleinf Feuerungsanlagen in Haushalten und im Sektor GHD): Es wird ein Anteil von 20% für Warmwasserbereitung und Prozesswärme angesetzt. Der Rest wird mittels Gradtagzahlen verteilt (Definition: s. Abschnitt 2.3.4). Der Tagesgang für den Holzeinsatz (ein Maximum abends) weicht von dem von Gas und Öl (zwei Maxima, morgens und abends) ab. Schadstoffe bekommen den Tagesgang ihres dominierenden Brennstoffs zugewiesen (z.B. NO_x: zwei Maxima, PM₁₀: ein Maximum). Für ein Musterhaus in Kanada, bei dem über Jahre der stündliche Energieeinsatz protokolliert wird, gibt es eine hohe Korrelation zwischen den mittels Gradtagzahlen zeitlich verteilten Emissionen und dem protokollierten Energieeinsatz.
- F (road transport): Die zeitliche Variabilität wird aus Zählungen abgeleitet (Aktivitätsrate). Temperatureffekte werden bei den NMVOCs aus non-combustion berücksichtigt, diese haben andere Zeitverläufe und ein Maximum bei hohen Temperaturen. Pro Land werden Tages-, Wochen- und Jahresgänge gebildet, jeweils für ländliche und städtische Gebiete. Der Tagesgang ist z.B. in Berlin deutlich stärker ausgeprägt als in Barcelona.
- K (AgriLivestock): Die Emissionen aus der Viehhaltung werden bereits fertig gegridet und mit Zeitprofilen pro Gitterbox aus dem MASAGE NH₃ emission inventory (Paulot et al., 2014) übernommen.
- L (AgriOthers): Die Emissionen aus dem Anbau von Pflanzen werden nach Skjoth et al. (2004) bestimmt. Die Emissionen aus der Verbrennung landwirtschaftlicher Abfälle werden von Klimont et al. (2016) nach ECLIPSE v5 übernommen.

2.1.2 LOTOS-EUROS

Dieses Modell wird bei der TNO (Toegepast Natuurwetenschappelijk Onderzoek, die niederländische Organisation für angewandte naturwissenschaftliche Forschung) entwickelt. Die Emissionen gehen wahlweise auf SNAP-Ebene oder auf GNFR-Ebene ins Modell ein. Eine Übersicht über die verschiedenen Arten, Emissionen zu aggregieren (SNAP, GNFR, NFR), und die jeweiligen Zuordnungen, befindet sich in Anhang A.

Der Kraftstofftyp ist in LOTOS-EUROS weiter differenziert als nach SNAP (Diesel/Benzin beim Straßenverkehr, Biomasseanteil bei allen Kraftstoffen). Als Default werden statische Zeitprofile nach CAMS 50 verwendet, siehe Abschnitt 2.1.1.

Diese Zeitprofile sind für alle Länder gleich, auch wenn sie zum Teil nur für ein Land abgeleitet wurden (z.B. Verkehrszählungen aus den Niederlanden als Basis für Tages- und Wochengänge des Straßenverkehrs). Weiterhin ist bekannt, dass die Zeitprofile, z.B. für die Energieversorgung und den Hausbrand (Brennstoffverfeuerung in Privathaushalten), in unterschiedlichen Ländern deutlich voneinander abweichen.

Die statischen Zeitprofile werden sukzessive durch dynamische Zeitprofile ersetzt:

- Kleinf Feuerungsanlagen: Es wird ein Anteil von 15% für Warmwasserbereitung und Prozesswärme angesetzt. Der Rest wird mittels Gradtagzahlen (Definition: s. Abschnitt 2.3.4)

verteilt, für den Tagesgang wird auf das CAMS 50-Profil zurückgegriffen.

Brennstoffspezifische Tagesgänge (z.B. nur eine Abendspitze für Holz statt einer Morgen- und einer Abendspitze bei Gas und Öl, höherer Holzeinsatz an Wochenenden etc.) werden diskutiert, sind aber noch nicht umgesetzt.

- ▶ Feuerungsanlagen der Energiewirtschaft: Es werden ENTSO-E hourly energy production-Daten verwendet.
- ▶ Landwirtschaft: Hendriks et al. (2016) leiteten aus Gülletransportdaten Zeitprofile für Landwirtschaftsemissionen in Flandern ab (s. Abschnitt 2.3). Auf Basis dieser Daten wird eine Parametrisierung für Vorhersagen mit LOTOS-EUROS abgeleitet.
- ▶ Feuerwerk: Für Modellrechnungen auf europäischer Ebene wird das Feuerwerk nicht explizit berücksichtigt. Modellrechnung für das Gebiet der Niederlande berücksichtigen das Silvesterfeuerwerk als eigene Quellkategorie. Die Zeitverteilung beschränkt sich auf einen Zeitraum fünf Tage vor bis fünf Tage nach dem ersten Januar, das Maximum liegt am 01.01. um 0:00 Uhr. Es gibt Planungen, auch andere feststehende Termine für Feuerwerk zu berücksichtigen.
- ▶ Zur expliziten Berücksichtigung von Emissionen aus Osterfeuern (Zeitraum: um Ostern) und zu Emissionen aus dem Grillen (eher im Sommer) gab es TNO-interne Diskussionen, es ist aber noch nichts implementiert.
- ▶ Für den NO₂-Anteil an den NO_x-Emissionen wird in LOTOS-EUROS pauschal ein Wert von 3 % angesetzt. Für den Straßenverkehr wird NO₂ aufgrund des höheren NO₂-Anteils bei Dieselfahrzeugen explizit berücksichtigt, der sich für den Straßenverkehr ergebende NO₂-Anteil liegt aktuell bei 15 %.

2.1.3 EURAD (-IM)

Die Modelle EURAD und EURAD-IM (mit inverser Modellierung) werden vom Forschungszentrum Jülich betrieben. Die Quellgruppen gehen wahlweise auf SNAP oder GNFR Ebene ein (siehe Anhang A). Es werden, wie beim Default für LOTOS-EUROS, die statischen Zeitprofile aus dem CAMS 50 Projekt verwendet, siehe Abschnitt 2.1.1. Es gibt Ansätze für dynamische Profile (Gradtagzahlen für die Kleinf Feuerungsanlagen, Landwirtschaft nach Skjoth et al. (2004), siehe unten), aber diese sind zum Zeitpunkt der Befragung nicht umgesetzt.

2.1.4 CHIMERE

Im Modell CHIMERE (National Research Center) werden anthropogene Emissionen traditionell auf SNAP-Ebene eingelesen, aktuell wird dies umgestellt auf GNFR-Ebene.

Es werden überwiegend statische Zeitprofile (Jahresgänge, Wochengänge, Tagesgänge) verwendet, diese hängen ab von der jeweiligen Quellgruppe, vom jeweiligen Schadstoff und von der jeweiligen Region (69 Regionen in Europa). Lokale Feiertage werden nicht berücksichtigt. Im Rahmen der Umstellung auf GNFR werden auch neue, zum Teil dynamische, Zeitprofile implementiert. Für folgende Quellgruppen werden bereits dynamische Zeitprofile verwendet bzw. getestet:

- ▶ Hausbrand-Emissionen werden auf Basis von Gradtagzahlen dynamisch verteilt.

- ▶ Aktuell werden dynamische Ansätze für die Emissionen aus der Landwirtschaft implementiert.
- ▶ Für die Emissionen aus dem Straßenverkehr werden zeitliche Verteilungen auf Basis von stündlichen NO₂-Messungen an verkehrsbeeinflussten Luftqualitätsmessstationen abgeleitet (Menut et al., 2012). Diese sind europaweit für eine Vielzahl von Stationen bei der European Environment Agency (EEA)-Airbase verfügbar.

2.1.5 CMAQ

Das CTM CMAQ (Community Multiscale Air Quality) wird am HZ Geesthacht betrieben. Aktuell wird dafür ein neues Emissionsmodell erarbeitet, bei dem je nach Quellgruppe top-down oder bottom-up Ansätze zur Anwendung kommen. Aktuell werden für die meisten Quellgruppen statische Zeitprofile nach LOTOS-EUROS verwendet, es werden jedoch sukzessive dynamische Ansätze implementiert.

- ▶ Umgesetzt ist dies bereits für die Landwirtschaft (Backes et al., 2016) und die
- ▶ Hausbrandemissionen (Aulinger et al., 2011), diese Ansätze sind in Abschnitt 2.3.4 beschrieben.
- ▶ Für die internationale Seeschifffahrt wurde ein Emissionsmodell auf der Basis von AIS-Daten (Automatisiertes Identifikationssystem) erarbeitet, die Daten erhält das HZG im Rahmen eines Kooperationsvertrags vom BSH (Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie). Ein entsprechendes Modell für die Binnenschifffahrt ist in der Entwicklung.
- ▶ Für die Emissionen des Straßenverkehrs und des Schienenverkehrs gibt es eine Zusammenarbeit mit der DLR (Berlin Adlershof).

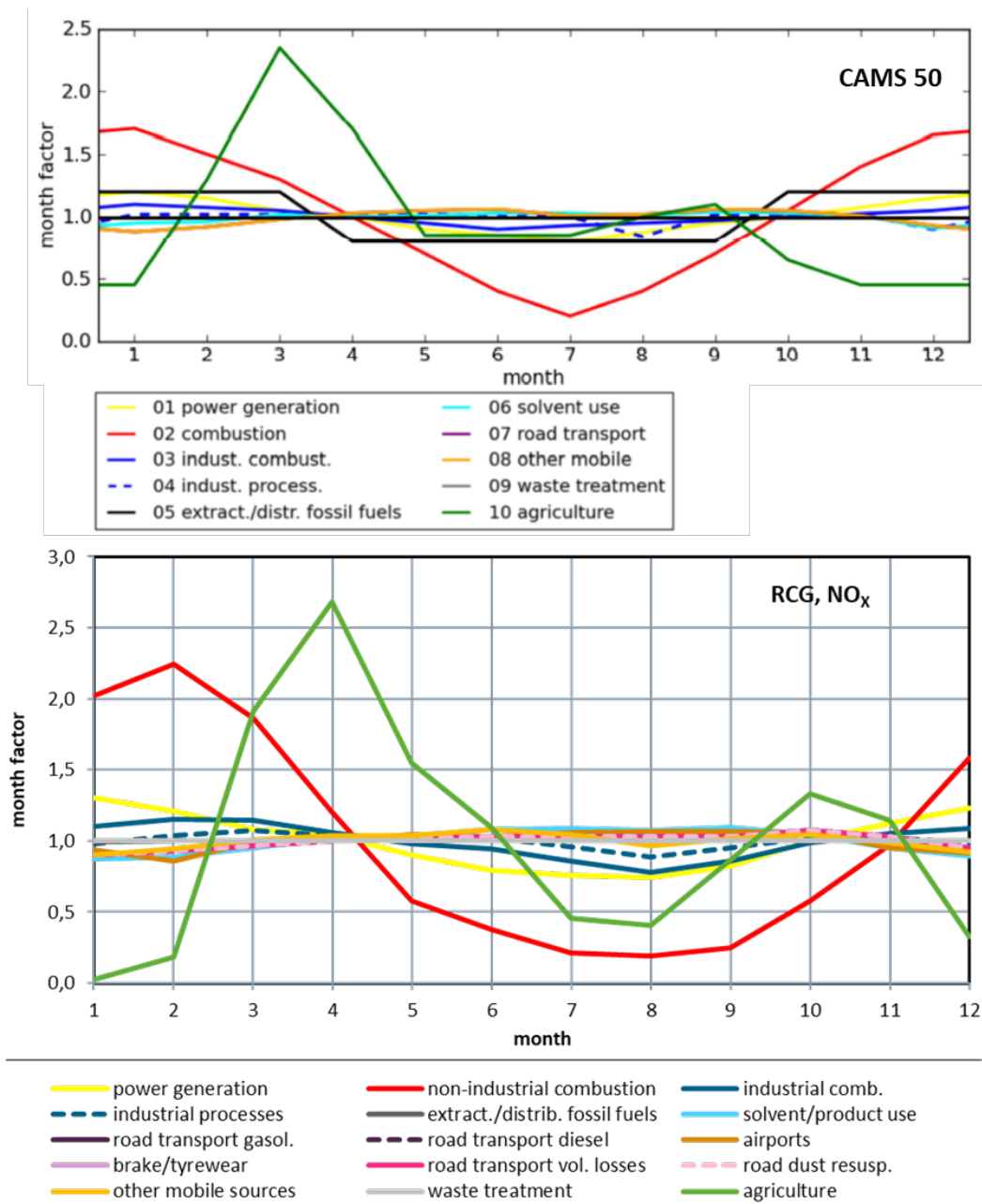
Prinzipiell ist geplant, dass das Emissionsmodell dynamisch in Abhängigkeit der Meteorologie für jeden Luftschadstoff, jede Quellgruppe (aktuell: SNAP, soll verfeinert werden) und jede Gitterzelle eigene Zeitreihen berechnet.

2.2 Vergleich der statischen Zeitprofile aus CAMS 50 mit in RCG für Deutschland aktuell verwendeten Profilen

Ein Ergebnis der Expertenbefragung (s. vorheriger Abschnitt) ist, dass im Fall der Verwendung statischer Zeitprofile auf SNAP-Ebene häufig die für CAMS 50 festgelegten und bereits in Abbildung 3 dargestellten Tages-, Wochen- und Jahresgänge eingesetzt werden. Diese Profile werden daher im folgenden Abschnitt den aktuell in RCG für Deutschland verwendeten Profilen gegenübergestellt.

In Abbildung 4 werden die jeweiligen Jahresgänge verglichen. In RCG sind die Zeitverläufe schadstoffspezifisch, für den Vergleich wurde NO_x gewählt. Bei den Jahresgängen gibt es jedoch nur für die Quellgruppe „Landwirtschaft“ eine deutliche Abhängigkeit vom Schadstoff.

Abbildung 4: Vergleich der Jahresgänge anthropogener Emissionen bei CAMS 50 (oben), Quelle: TNO (2011), s. Abbildung 3, mit den aktuell in RCG für Deutschland verwendeten Jahresgängen (unten)

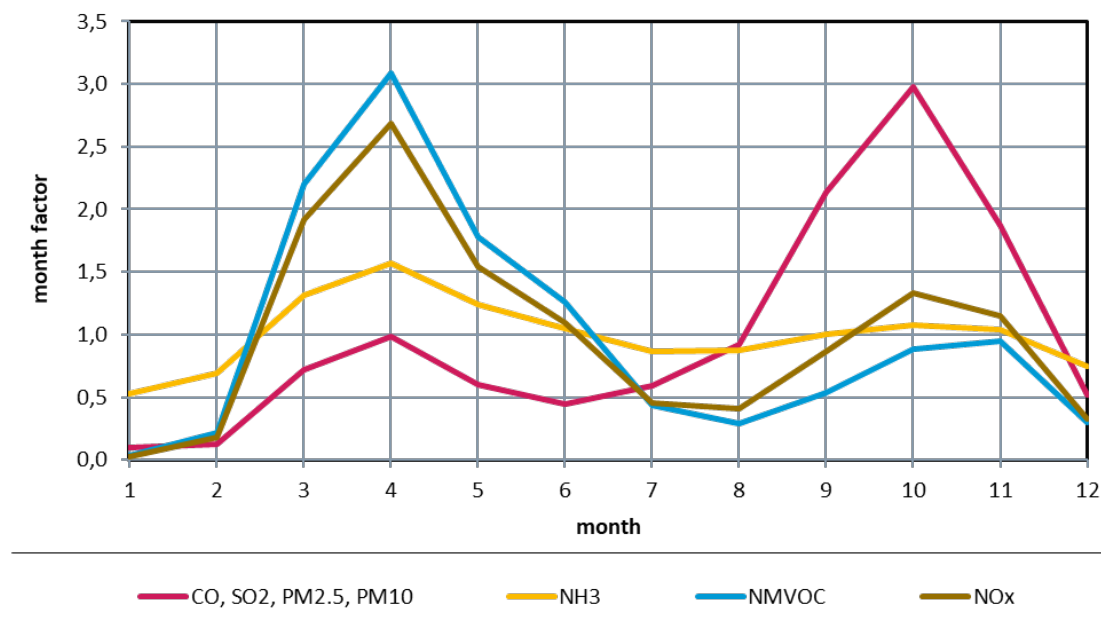


Da Anzahl und Differenzierung der betrachteten SNAP-Sektoren unterschiedlich sind, muss der Vergleich über die Namen der Sektoren durchgeführt werden, es wurden für die Abbildung jeweils ähnliche Farben gewählt.

Der Vergleich zeigt, dass sowohl bei CAMS 50 wie auch in RCG die Quellgruppen „combustion“ (Hausbrand und Verbrennungsprozesse in der Industrie) sowie „Landwirtschaft“ die größte Variabilität im Jahresgang aufweisen. Es sind jedoch auch Unterschiede zu erkennen. In RCG ist die Variabilität bei diesen Quellgruppen noch höher. Außerdem liegt das Maximum der Landwirtschaftsemissionen für NO_x bei CAMS 50 im März, in RCG einen Monat später im April.

Wie bereits erwähnt, sind die Zeitprofile in RCG grundsätzlich schadstoffspezifisch, auch wenn häufig pro Quellgruppe für alle Substanzen die gleichen Profile hinterlegt sind. Für die Landwirtschaft liegen vier unabhängige Profile für den Jahresgang vor, diese sind in Abbildung 5 dargestellt. Die Emissionen von CO, SO₂ und PM_{2.5} (die Profile sind identisch, in der Abbildung ist nur PM_{2.5} sichtbar) aus der Landwirtschaft weisen ein Nebenmaximum im April und ein deutlich stärkeres Hauptmaximum im Oktober auf. Bei den NMVOC- und NO_x-Emissionen liegt das Hauptmaximum im April und ein schwächeres Nebenmaximum im Oktober bzw. im November. Gleiches gilt für die NH₃-Emissionen, bei denen jedoch der Unterschied zwischen Haupt- und Nebenmaximum schwächer ausgeprägt ist als bei NMVOC und NO_x. Mit nur einem Zeitprofil pro Quellgruppe könnte eine solche Variabilität zwischen den Schadstoffen nicht abgedeckt werden.

Abbildung 5: Jahresgang der Quellgruppe „Landwirtschaft“ in RCG für unterschiedliche Luftschadstoffe



Analog zu Abbildung 4 werden in Abbildung 6 die für CAMS 50 festgelegten Wochengänge und in Abbildung 7 die für CAMS 50 festgelegten Tagesgänge mit den entsprechenden Profilen aus RCG (Beispiel: NO_x) verglichen. Die Verläufe sind sich jeweils sehr ähnlich.

Abbildung 6: Vergleich der Wochengänge anthropogener Emissionen bei CAMS 50 (oben), Quelle: TNO (2011), s. Abbildung 3, mit den aktuell in RCG für Deutschland verwendeten Wochengängen (unten)

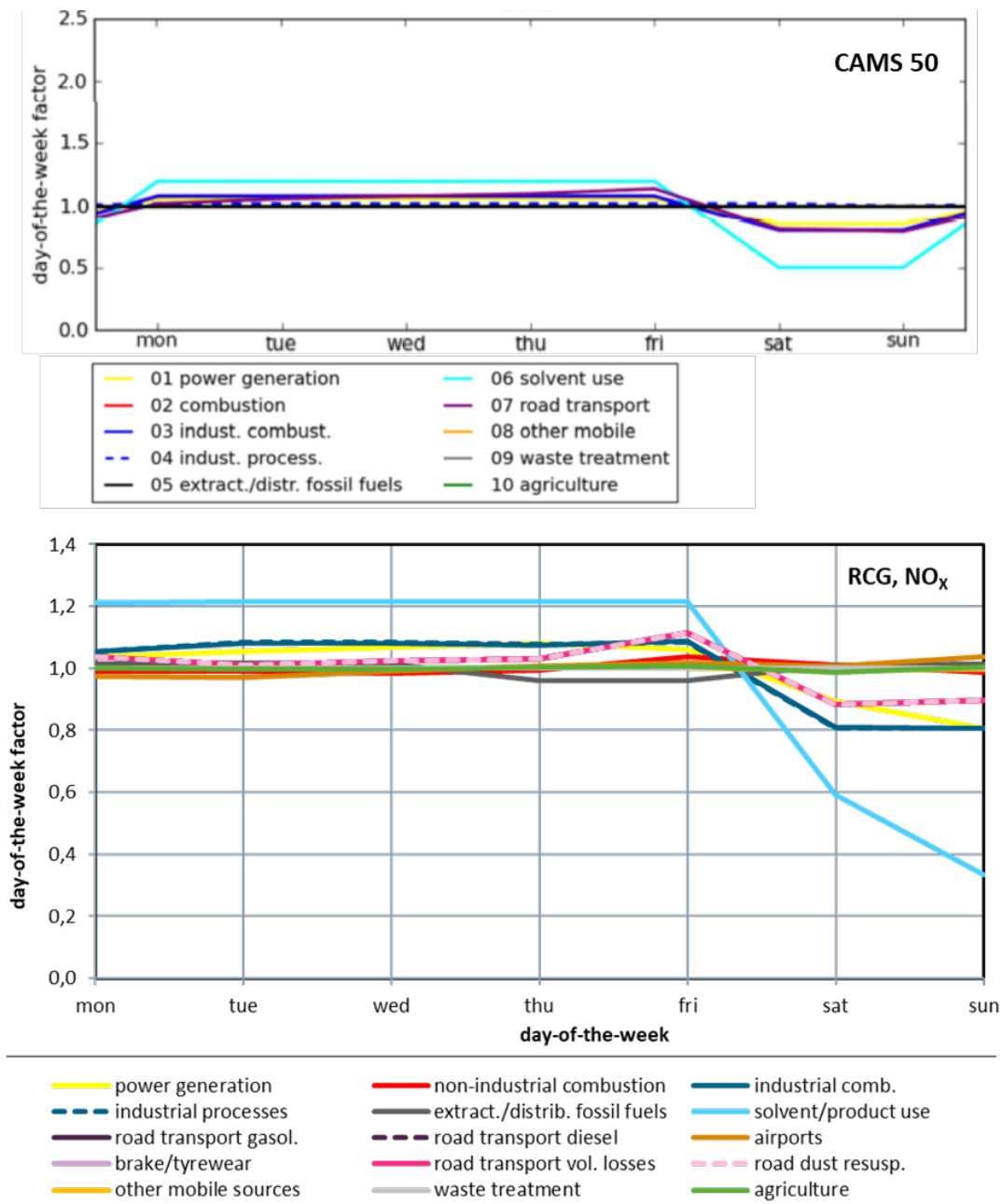
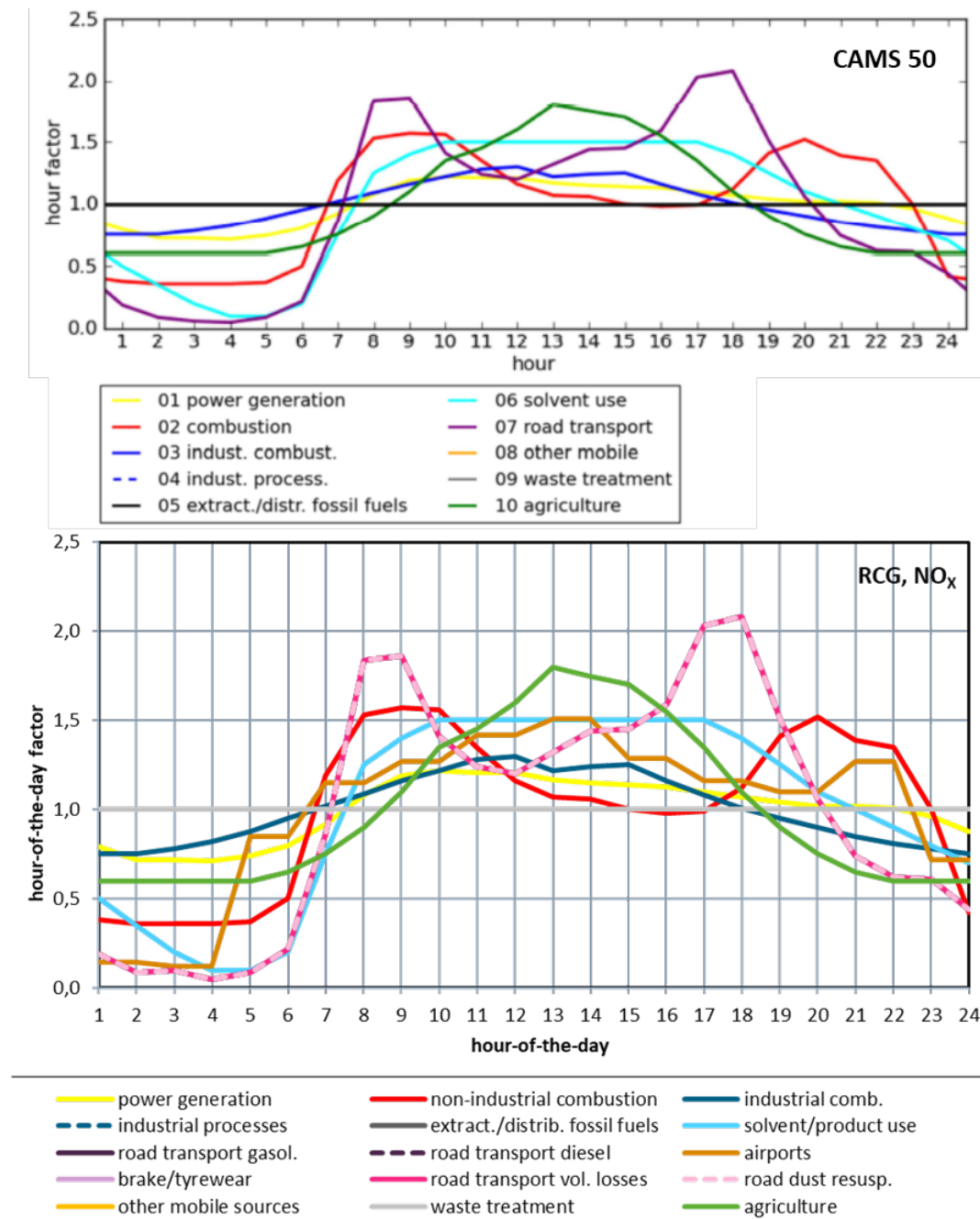


Abbildung 7: Vergleich der Tagesgänge anthropogener Emissionen bei CAMS 50 (oben), Quelle: TNO (2011), s. Abbildung 3, mit den aktuell in RCG für Deutschland verwendeten Tagesgängen (unten)



2.3 Quellgruppenspezifische Auswertung der Literaturrecherche

Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse der Recherche zur Zeitabhängigkeit von Emissionen aufgrund meteorologischer oder weiterer Einflüsse sowie zu dazu verfügbaren Datenquellen für einzelne Quellgruppen dargestellt.

2.3.1 Landwirtschaft

Zu dieser Quellgruppe liegt eine Vielzahl von Publikationen vor. Ein Großteil davon bezieht sich auf Arbeiten am National Environmental Research Institute in Roskilde, Dänemark. Die Grundlagen sind in einer Doppelpublikation von Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005) beschrieben und werden im Folgenden zusammengefasst.

Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005) definieren 16 Funktionen zur zeitlichen Verteilung von NH_3 Emissionen, 15 davon beziehen sich auf die Landwirtschaft, die 16. beschreibt die NH_3 -Emissionen des Straßenverkehrs.

Bei den Landwirtschaftsemissionen werden folgende Prozesse betrachtet:

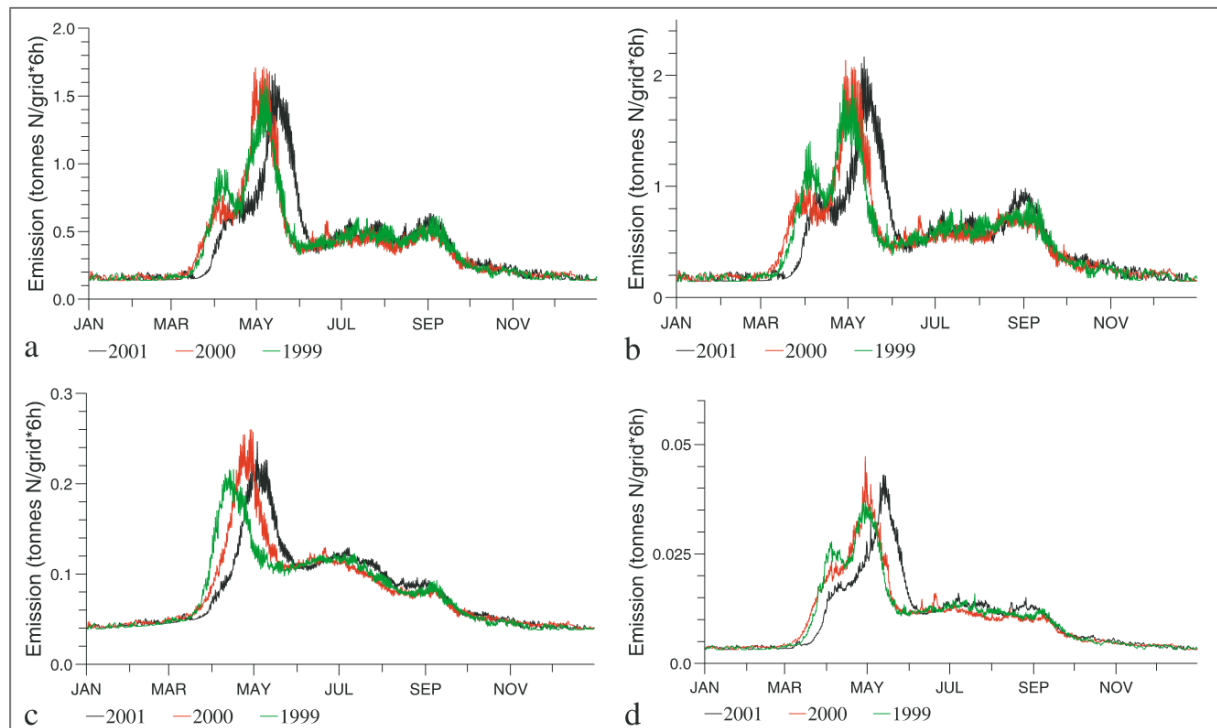
5. Ställe mit Belüftung
6. offene Ställe
7. Lagerung von Gülle
8. Winterfrüchte
9. Frühlingsfrüchte
10. späte Frühlingsfrüchte
11. Gras
12. Gülleausbringung im Frühling auf unbepflanztem Boden
13. Gülleausbringung im Frühling auf bepflanztem Boden
14. Gülleausbringung im Sommer
15. Gülleausbringung im Herbst
16. Düngermanagement im Frühling (90% des Düngers)
17. Düngermanagement im Sommer (10% des Düngers)
18. weidendes Vieh
19. mit Ammoniak behandeltes Heu (Futter)

Für alle Prozesse werden temperaturabhängige Funktionen definiert, zum Teil haben sie die Form von Gaußkurven: Die Düngermanagements z.B. erfolgen jeweils zu bestimmten Zeitpunkten im Jahr, die von den bis zu diesen Zeitpunkten kumulierten Temperaturen abhängen (Maximum der Kurve). Weil die lokalen Temperaturen streuen und außerdem die individuellen Planungen der einzelnen Bauern dazu kommen, ergeben sich Streuungen um das Maximum, was zur Form der Glockenkurve führt. Für jeden Prozess werden die Kurven mit der Gesamtmenge an Emissionen pro Jahr dieses Prozesses normiert. Die Parameter für die Funktionen stammen aus einem Pflanzen-Wachstums-Modell (crop growth model) für Dänemark.

Mit diesen Funktionen wurden von Skjoth et al. (2004) Modellrechnungen mit dem Modell ACDEP (Atmospheric Chemistry and Deposition model) durchgeführt, für die NH_3 -Konzentrationen wurden im Vergleich mit Messungen signifikante Verbesserungen gegenüber den Default-Funktionen gefunden. Für vier Stationen in Dänemark und drei Jahre sind die resultierenden Zeitprofile der NH_3 Emissionen in Abbildung 8 dargestellt.

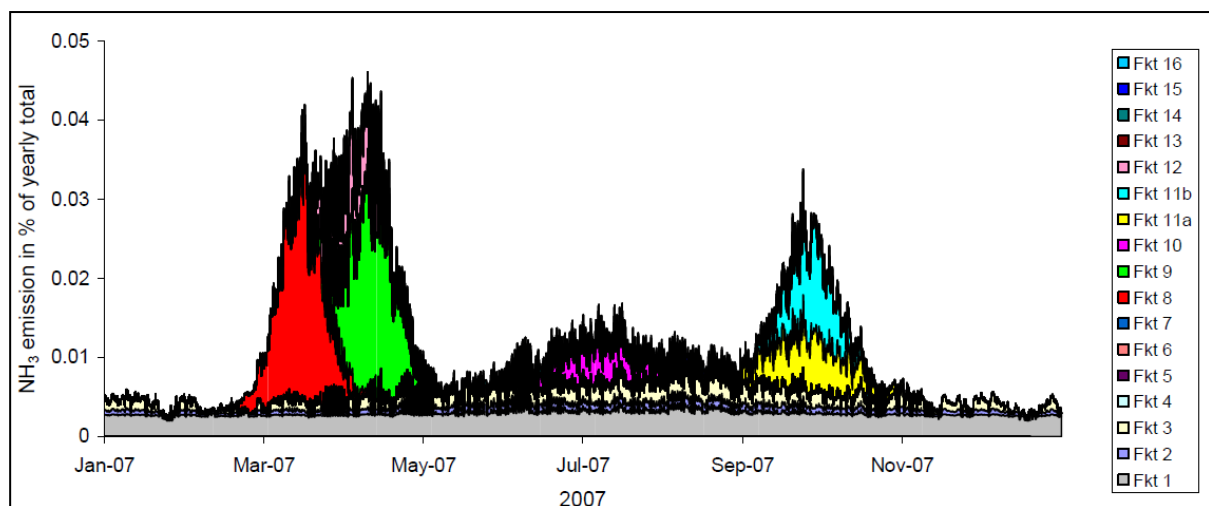
Auch wenn die Funktionen ursprünglich für Dänemark abgeleitet wurden, wurden sie in der Folge auch für andere Länder Europas übernommen (Skjoth et al., 2011). Insbesondere durch die Veränderungen der zeitlichen Verteilung der Landwirtschaftsemissionen in Deutschland konnte die Übereinstimmung von Modellrechnungen mit Messungen in Dänemark weiter verbessert werden.

Abbildung 8: Jahresgang der Emissionen für die Jahre 1999 bis 2001 für die Gitterzellen, die die Stationen Tange (a), Lindet (b), Frederiksborg (c) und Kelsnor (d) enthalten, Quelle: Skjoth et al. (2004)



Geels et al. (2012) konnten die Modellierung von Ammoniak in Dänemark weiter verbessern, indem sie das regionale CTM DEHM (Auslösung: 6 km x 6 km über Dänemark) mit einem lokalen Gaußschen Ausbreitungs- und Depositionsmodell (OML-DEP) koppelten. Emissionsseitige Basis bildete das nationale NH_3 -Inventar für Dänemark, das auf Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005) zurückgeht und seitdem stetig verbessert wird. Die entsprechenden Zeitprofile für den Jahresgang an der Station Tange sind in Abbildung 9 dargestellt.

Abbildung 9: Jahresgang der unterschiedlichen NH_3 emittierenden Prozesse an der Station Tange, Quelle: Geels et al. (2012)

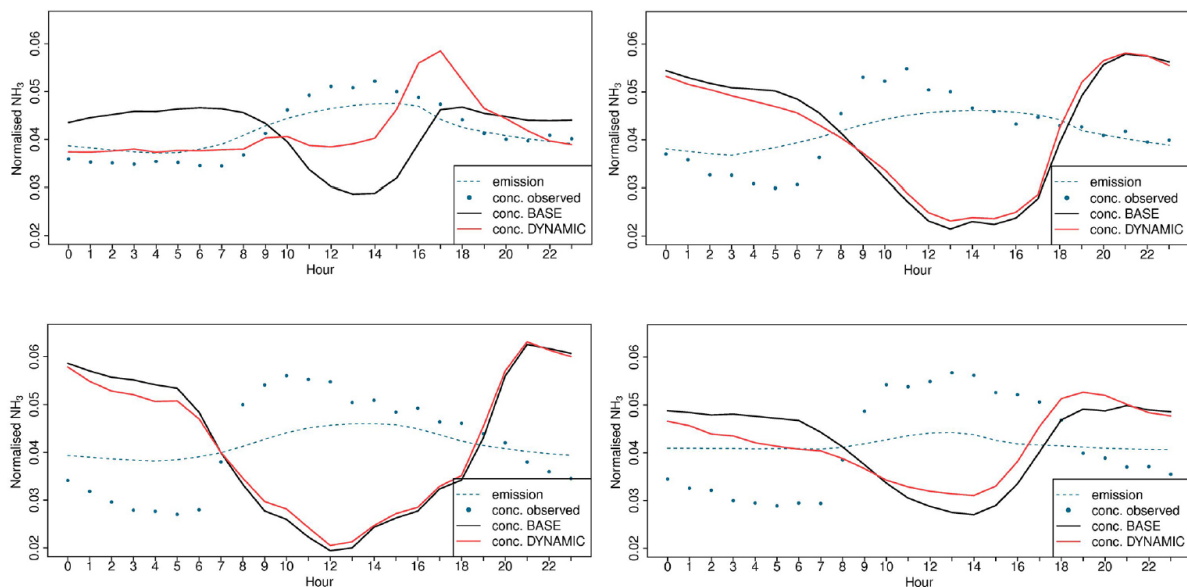


Durch die Kopplung der Modelle können große Ställe oder Güllelager als Punktquellen modelliert werden, Flächenquellen werden mit einer Auflösung von 100m x 100m berücksichtigt. Die Ergebnisse von Geels et al. (2012) zeigen, dass die Verteilung der

landwirtschaftlichen Emissionen auf große Gitterzellen zu Überschätzung der NH_3 -Konzentrationen führen kann. Eine höhere Modellauflösung kann dies verhindern, erfordert aber entsprechende Genauigkeit bei den Eingangsdaten.

Werner et al. (2015, 2017) führten Modellrechnungen für Europa mit dem Modell WRF (Weather Research and Forecasting)-Chem (ausführliche Gasphasenchemie: RADM2 (Second Generation Regional Acid Deposition Model) Mechanismus, Aerosoldynamik: MADE/SORGAM (Modal Aerosol Dynamics Model for Europe/Secondary Organic Aerosol Model)) durch, und verglichen dabei statische und dynamische Zeitprofile für die NH_3 -Emissionen. Im Basisfall (statische Zeitprofile) wurden die TNO MACC II Emissionen verwendet, im Vergleichsfall die (dynamische Zeitprofile) die NH_3 -Emissionen nach Geels et al. (2012). Verglichen wurden die Modellergebnisse mit gemessenen NH_3 -Stundenmittelwerten aus Harvell (Großbritannien) sowie mit NH_3 -Tagesmittelwerten verschiedener landwirtschaftlich beeinflusster Messstationen in Polen und Dänemark. Die NH_3 -Tagesgänge werden vom Modell in beiden Fällen nicht richtig wiedergegeben: Die Messungen zeigen für NH_3 -Maxima tagsüber je nach Jahreszeit zwischen 09:00 Uhr und 15:00 Uhr, während die Modellrechnungen in diesem Zeitraum eher Minima aufweisen (s. Abbildung 10). Hier scheinen unabhängig vom verwendeten Zeitprofil für die Emissionen bei der Modellierung für NH_3 -relevante Prozesse im Modell nicht vollständig berücksichtigt zu sein.

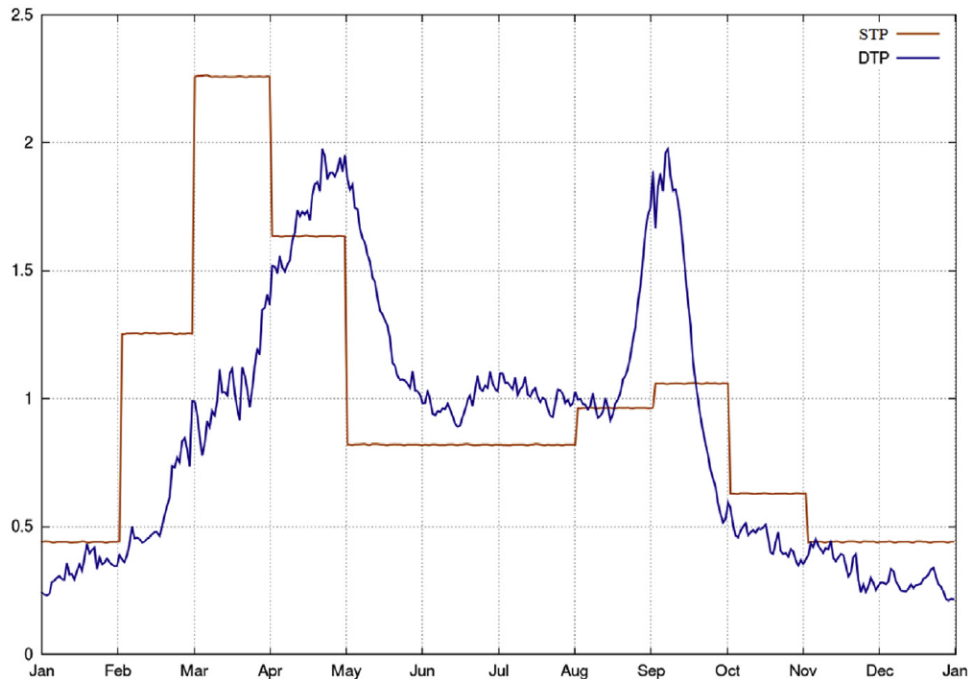
Abbildung 10: Normierte NH_3 -Konzentrationen (Messung und Modellrechnung) und Emissionen: Tagesgänge nach Jahreszeiten für die Gitterzelle, in der die Messstation Harvell liegt, Quelle: Werner et al. (2015)



Auch Backes et al. (2016) führten Modellrechnungen mit den dynamischen Zeitprofilen für die NH_3 -Emissionen nach Skjoth (2004) durch im Vergleich mit statischen Zeitprofilen. Sie verwendeten das Modell CMAQ mit einer Gitterauflösung von 24 km x 24 km für das nördliche Europa. Verglichen wurden die Modellergebnisse mit Messungen an 16 EMEP-Messstationen, dabei wurden neben gemessenen NH_3 -Konzentrationen auch Messungen von $\text{PM}_{2.5}$ und verschiedener anorganischer Salze, zu deren Bildung NH_3 als Aerosolbildner beiträgt (NH_4^+ , SO_4^{2-} , NO_3^- , HNO_3 , N) betrachtet. Da diese zum Teil langlebiger sind als NH_3 , spielt hier der Transport eine wichtigere Rolle. Basis für die Emissionen war die EDGAR-Datenbank und die dort verwendeten Quellgruppen. Pro Land wurden die Emissionen jedoch mit den Gesamtsummen nach EMEP skaliert. Gegenüber dem statischen Zeitprofil (Default aus dem

LOTOS-EUROS-Modell, ein Maximum im März, ein kleineres Maximum im September) war das Frühjahrsmaximum beim dynamischen Zeitprofil um ca. einen Monat verschoben (April), und das zweite Maximum im Herbst deutlich stärker ausgeprägt. Beide Profile sind in Abbildung 11 dargestellt.

Abbildung 11: Jahresgang der täglichen NH_3 -Emissionen: Statisches (STP) und dynamisches (DTP) Zeitprofil (Mittelwert über alle Gitterzellen) im Vergleich, Quelle: Backes et al. (2016)

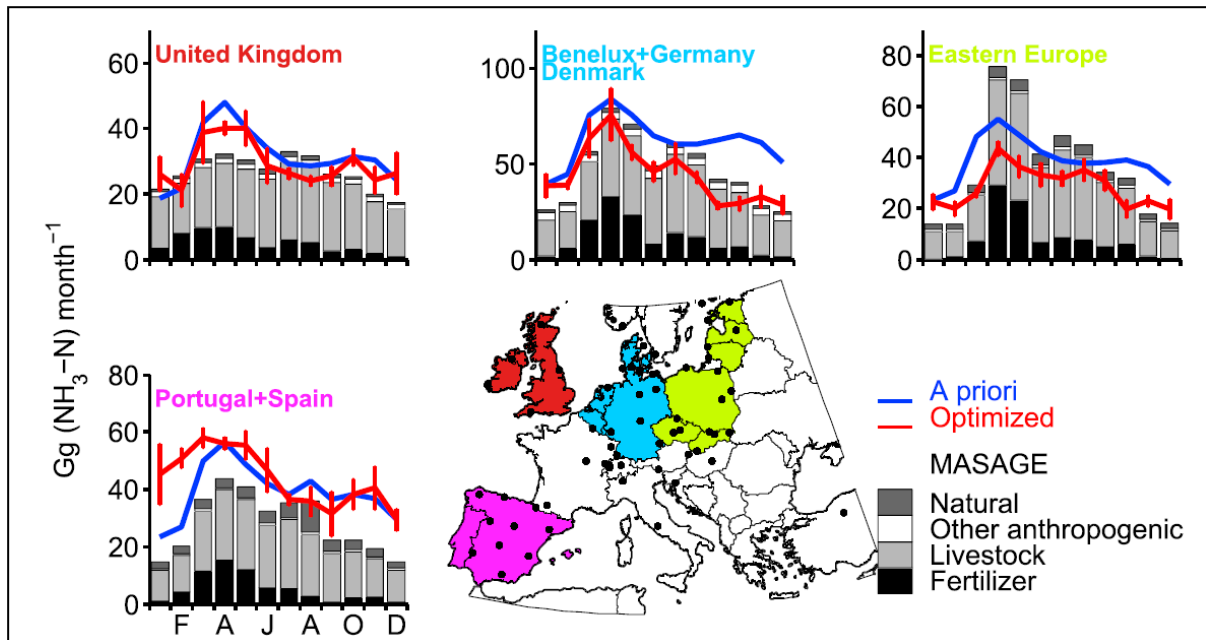


Der Vergleich mit den Messungen zeigt, dass sich für NH_3 die Korrelationen der Zeitreihen durch das dynamische Zeitprofil für 12 von 16 EMEP-Messstationen deutlich verbessern. Eine jahreszeitliche Betrachtung ergibt, dass durch die dynamischen Zeitprofile die Konzentrationen im Winter erniedrigt und im Sommer erhöht werden. Im Winter scheinen die Emissionen durch die neuen Profile unterschätzt, Backes et al. (2016) vermuten, dass die Emissionen aus der Lagerung von Gülle in der EDGAR-Datenbank möglicherweise unterschätzt sind. Der Vergleich mit den Aerosolmessungen zeigt keine Verbesserung der Korrelationen durch die dynamischen Zeitprofile. Durch die längere Lebensdauer ist hier der Transport wichtiger, die räumlichen Muster von Emissionen und Konzentrationen weichen stärker voneinander ab. Andere statistische Kenngrößen, wie z.B. NME (normalized mean error) zeigen jedoch Verbesserungen für die Modellrechnung auf Basis der dynamischen Zeitprofile.

Paulot et al. (2014) verwenden Datenassimilation (Modell: GEOS-Chem (Goddard Earth Observing System atmospheric chemistry model)), um mittels gemessener Flüsse der feuchten Deposition von NH_4^+ die NH_3 -Emissionen der Vereinigten Staaten, der EU sowie Chinas zu verbessern (top-down). Um die Ergebnisse der Assimilation besser interpretieren zu können, entwickeln Paulot et al. (2014) zusätzlich ein bottom-up-Emissionsinventar für NH_3 (MASAGE_ NH_3 , Magnitude And Seasonality of Agricultural Emissions model for NH_3). Ein Vergleich beider Ansätze zeigt, welche Subsektoren aus dem bottom-up-Inventar besonders relevant sind. Die Temperaturabhängigkeiten für die Emissionen aus der Dünger- und Gülleausbringung für MASAGE_ NH_3 stammen aus Skjoth et al. (2004). Für die NH_3 -Emissionen der EU sind sowohl die assimilierten top-down-Emissionen wie auch die bottom-up-Emissionen nach MASAGE_ NH_3 im Rahmen der Unsicherheiten mit EMEP konsistent. Die Assimilation zeigt

Minderungen der NH_3 -Emissionen gegenüber dem a priori z.B. für die Benelux-Staaten, für Dänemark und Deutschland, nicht aber für Spanien (s. Abbildung 12). Paulot et al. (2014) erklären das mit einem Erfolg des Göteborg-Protokolls, in dem sich die Benelux-Staaten, Dänemark und Deutschland zu Minderungen verpflichteten, nicht aber Spanien.

Abbildung 12: Jahresgang der NH_3 -Emissionen in verschiedenen Ländern Europas: Vergleich der a priori-Emissionen, der assimilierten Emissionen (optimized) sowie der Subsektoren nach MASAGE; Quelle: Paulot et al. (2014)

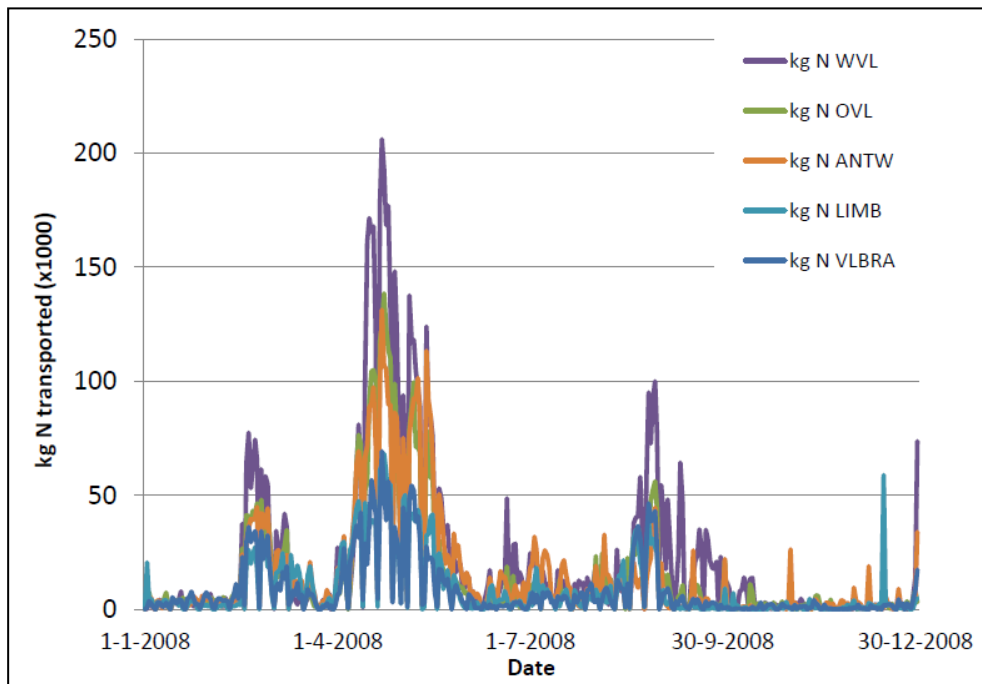


Alle bisher betrachteten Publikationen verwenden zumindest teilweise Temperaturabhängigkeiten der verschiedenen NH_3 -emissionsrelevanten Prozesse der Landwirtschaft nach Skjoth et al. (2004).

Auch Hendriks et al. (2016) vergleichen Modellrechnungen (LOTOS-EUROS) auf Basis statischer und dynamischer Zeitprofile. Für die Emissionen der Viehzucht und der Anwendung von Dünger verwenden sie ebenfalls die Ansätze von Skjoth et al. (2004), für die Emissionen durch Gülle Ausbringung jedoch eine andere Parametrisierung: Gülletransporte, die eine Provinzgrenze überschreiten, müssen in Flandern der flämischen Landmaatschappij gemeldet werden. Diese Daten (Quell- und Zielprovinz sowie Güllemenge inklusive Stickstoffgehalt) wurden für den Zeitraum von 2007 bis 2011 für die Untersuchung von Hendriks et al. (2016) zur Verfügung gestellt. Bei Transporten über mehrere Provinzgrenzen liegen die Daten auf täglicher Basis vor (Darstellung für 2008 in Abbildung 13), andernfalls über längere Zeiträume summiert. Diese Daten beziehen sich auf ca. 1/3 der insgesamt ausgebrachten Gülle, die restlichen 2/3 werden in den Provinzen, in denen sie anfallen, ausgebracht. Für die NH_3 -Emissionen wird angenommen, dass

- ▶ die Gülle am Tag ihres Transports ausgebracht wird,
- ▶ an diesem Tag auch die Emissionen freigesetzt werden,
- ▶ das Zeitprofil für die Ausbringung der Gülle, die in ihrer Quellprovinz ausgebracht wird, ebenfalls dem Zeitprofil der Gülletransporte entspricht.

Abbildung 13: Tägliche Gülletransportdaten 2008 für die Provinzen West-Flandern (WVL), Ost-Flandern (OVL), Antwerpen (ANTW), Limburg (LIMB) und Flämisch Brabant (VLBRA), Quelle: Hendriks et al. (2016)



Die Düngeverordnung formuliert Regeln für „gute fachliche Praxis der Düngung“. Zum Beispiel beinhaltet sie Aufbringungsbeschränkungen für stickstoff- und phosphathaltige Düngemittel in Abhängigkeit von Standort und Bodenzustand und regelt Sperrzeiten. Die Düngeverordnung wurde, auch in Folge eines Vertragsverletzungsverfahrens durch die EU, novelliert. Seit dem 2. Juni 2017 ist die neue Düngeverordnung in Kraft. Durch die Novellierung verlängern sich die Zeiträume, in denen keine Düngemittel ausgebracht werden dürfen, grundsätzlich, die zuständigen Behörden können Beginn/Ende jedoch jeweils um bis zu vier Wochen verschieben:

- Ackerland: nach der Ernte der Hauptfrucht bis 31.01.
- Grünland: 01.11. – 31.01.
- Einführung einer Sperrzeit für die Aufbringung von Festmist und Kompost: 15.12. – 15.01.

Weiterhin darf keine Stickstoff- oder Phosphat- Düngung ausgebracht werden, wenn der Boden überschwemmt, wassergesättigt, gefroren oder schneebedeckt ist. Für gefrorenen Boden werden Ausnahmen genannt: Es dürfen maximal 60 kg Stickstoff (gesamt) pro Hektar aufgebracht werden, wenn

- durch Auftauen tagsüber die Aufnahmefähigkeit gegeben ist,
- keine Gefahr des Abschwemmens in Gewässer bzw. auf benachbarte Flächen besteht,
- eine Pflanzendecke (= Winterung, Zwischenfrucht, Grünland) vorliegt,
- andernfalls Verdichtung/Strukturschäden entstünden.

Mögliche Auswirkungen der Novellierung betreffen die zukünftige Entwicklung und können in den oben beschriebenen Publikationen, die vor in Kraft treten der Novellierung erstellt wurden, nicht enthalten sein.

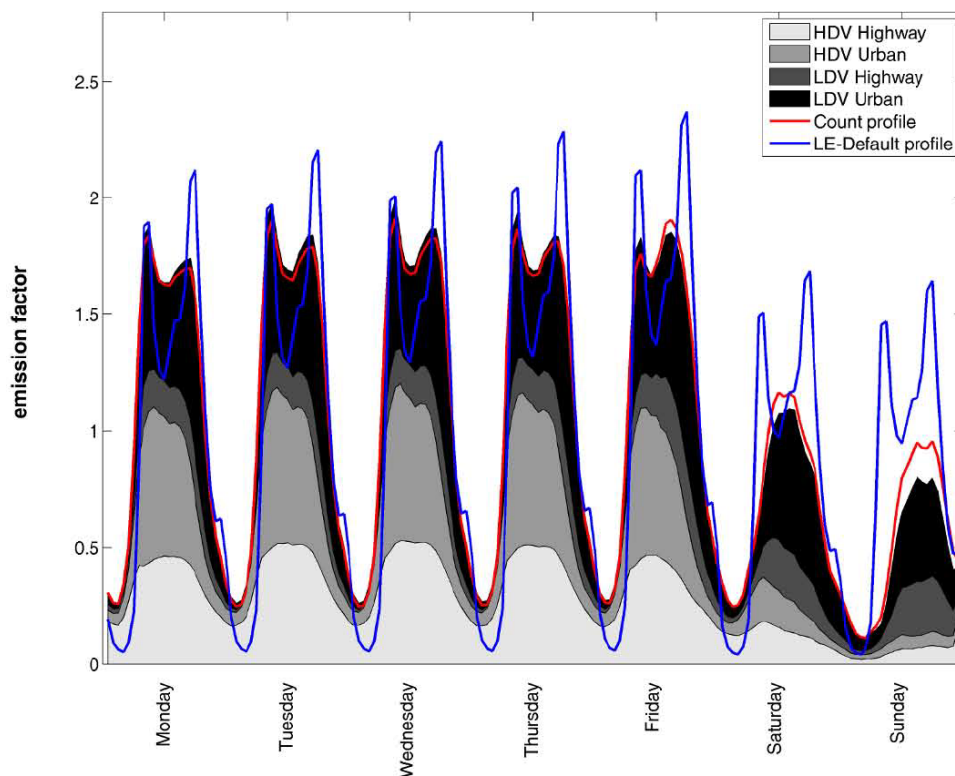
2.3.2 Straßenverkehr

Mues et al. (2014) werteten für den Zeitverlauf dieser Quellgruppe zwölf automatische Dauerzählstellen auf BAB und sechs automatische Dauerzählstellen auf innerstädtischen Bundesstraßen für die Jahre 2006 bis 2010 aus, betrachtet wurde die Differenzierung nach Leichtverkehr und Schwerverkehr. Es wurden Unterschiede zwischen einzelnen Regionen betont (z.B. andere Zeitprofile in Ferienregionen), die im Rahmen der Publikation jedoch nicht berücksichtigt werden konnten. Für die Quellgruppe Straßenverkehr wurden daher gemittelte Zeitprofile für die Emissionen in der Differenzierung „innerorts“ und „außerorts“ erstellt.

Es wurde eine gemeinsame Zeitreihe für Leicht- und Schwerverkehr erstellt, aufgrund der unterschiedlichen Emissionsfaktoren (Emissionen pro Fahrzeug-km) wurde dafür eine mit den NO_x -Emissionsfaktoren gewichtete Mittelung durchgeführt. NO_x wurde für diese Mittelung gewählt, weil der Straßenverkehr für die NO_x -Emissionen eine besonders relevante Quellgruppe dargestellt.

Die Abbildung 14 zeigt die so abgeleiteten Wochengänge für Leichtverkehr (LDV) und Schwerverkehr (HDV) innerorts (urban) und außerorts (highway), zum Vergleich sind die entsprechenden fahrleistungsgewichteten Profile (ohne Berücksichtigung der unterschiedlichen Emissionsfaktoren) sowie das Default-Profil dargestellt.

Abbildung 14: Wochengang (stündliche Werte) der Emissionen für Leicht- und Schwerverkehr auf BAB und innerstädtischen Bundesstraßen, Mittelung des Zeitverlaufs gewichtet mit NO_x -Emissionsfaktoren, zum Vergleich: rote Kurve: Mittelung des Zeitverlaufs nach Fahrleistung, blaue Kurve: Default-Profil; Quelle: Mues et al. (2014)



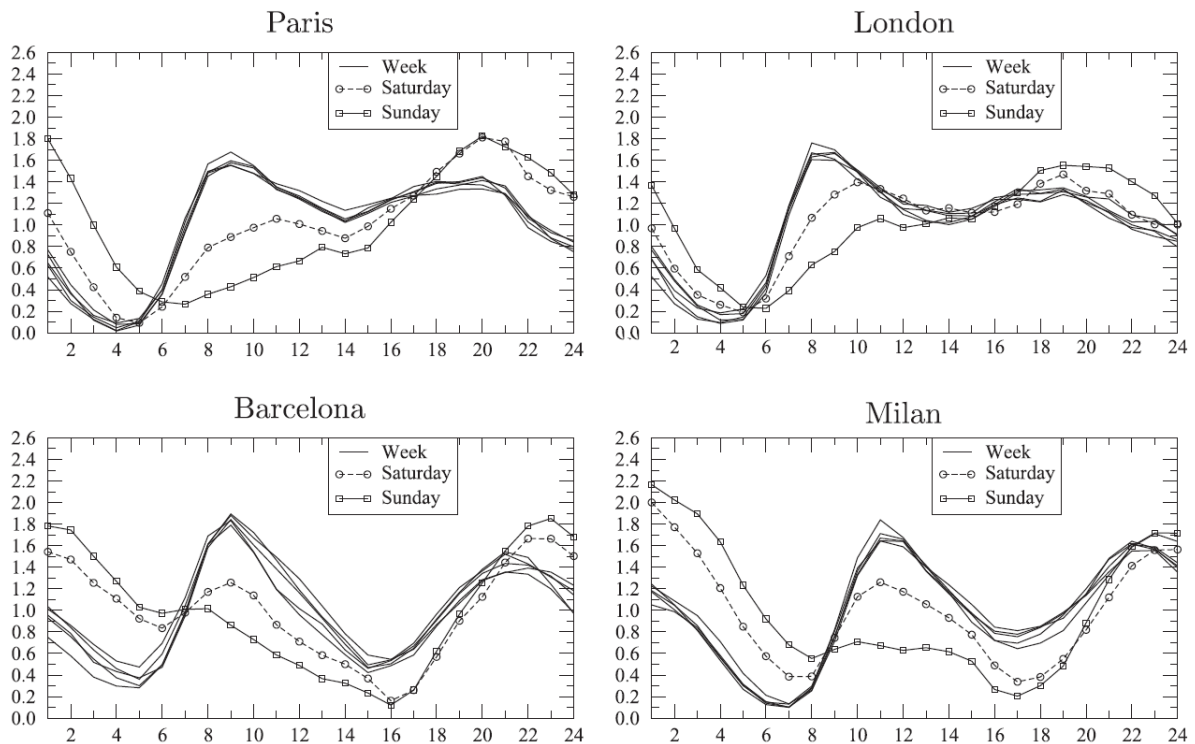
In der Kombination aus Wochen- und Tagesgang ist zu erkennen, dass sich im Default-Profil der Tagesgang am Samstag und Sonntag nicht von dem an Werktagen unterscheidet. Die Morgen- und Abendspitze haben die gleiche Form wie an Werktagen, die Werte sind aufgrund des Wochengangs nur etwas niedriger. Im von Mues et al. (2014) abgeleiteten Profil sind die Morgen- und Abendspitzen nicht so stark ausgeprägt wie im Default-Profil, Samstag und Sonntag weisen nur eine Spitze auf.

Auch Menut et al. (2012) leiteten für Modellrechnungen mit CHIMERE neue Zeitprofile für die Quellgruppe Straßenverkehr ab. Als Modellgebiet betrachteten sie Mitteleuropa im Bereich etwa von Irland bis Polen. Die Emissionen einschließlich der räumlichen Verteilung stammen aus EMEP, mittels Landnutzungsdaten wurde die räumliche Auflösung verfeinert.

Menut et al. (2012) sehen die NO₂-Messungen straßennaher Luftqualitätsstationen als den repräsentativsten verfügbaren Proxy für die NO_x-Emissionen des Straßenverkehrs an. Aus den stündlichen NO₂-Messwerten an verkehrsbeeinflussten Messstationen der EEA-AirBase (The European air quality database der European Environment Agency) für 2007 leiteten sie wie folgt Zeitprofile für die Emissionen des Straßenverkehrs ab.

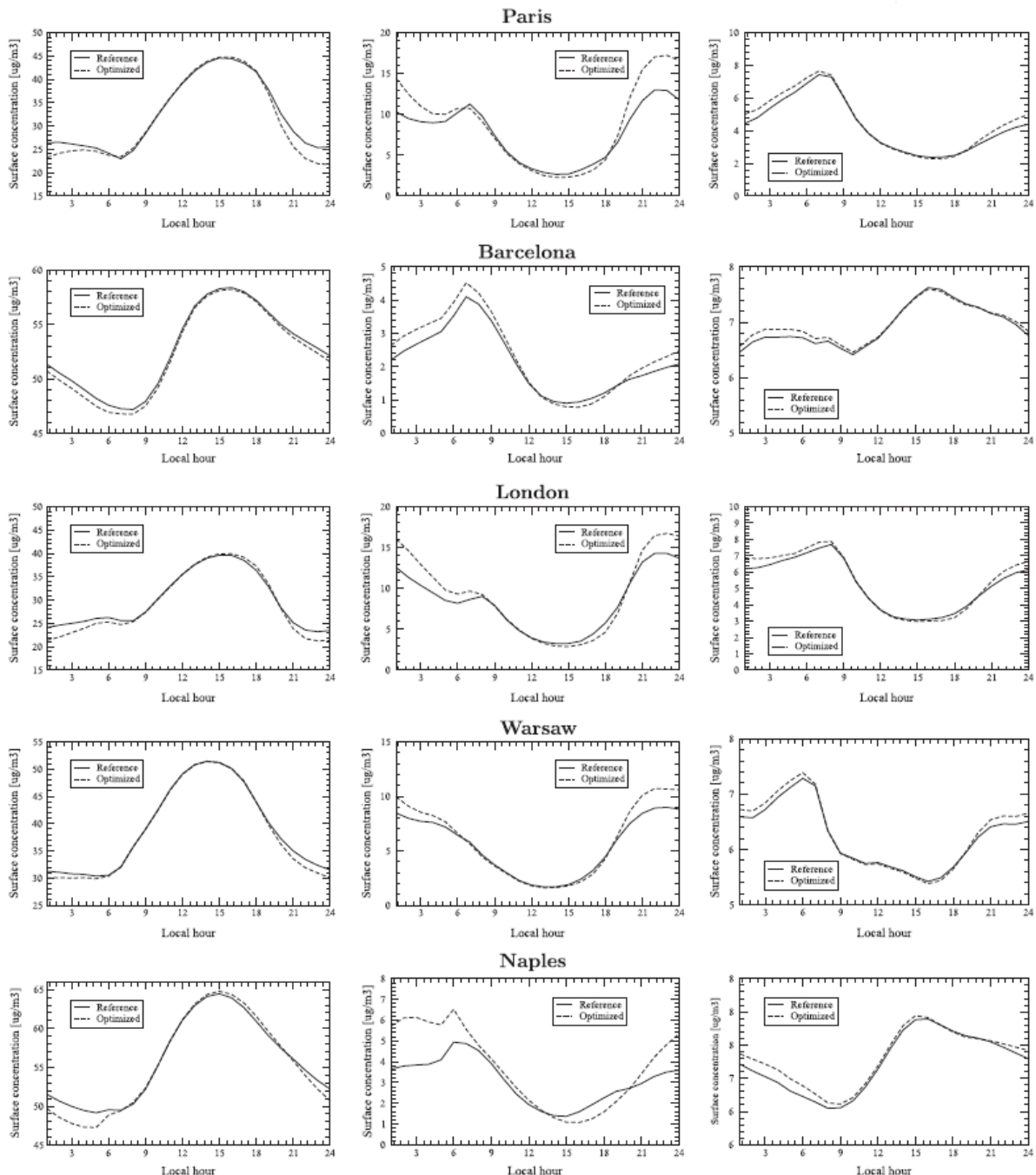
- ▶ Zunächst wurden alle europäischen Großstädte ausgewählt, für die eine hinreichend große Zahl an verkehrsnahen Luftmessstationen in einem Gebiet von 0,8° × 0,6° um das Stadtzentrum mit Messwerten vorliegt (wenigstens 20 vollständige Tage für jeden Wochentag).
- ▶ Zur Berücksichtigung des Hintergrunds wurde ein einfacher Ansatz gewählt: Es wurde für jeden Tag jeweils der minimale Messwert als (konstanter) Hintergrund angesehen und subtrahiert.
- ▶ Für jede Stadt und jeden Wochentag wurde ein gemittelter Tagesgang gebildet, für Paris, London, Barcelona und Mailand sind diese Profile für Werktage, Samstage und Sonntage in Abbildung 15 dargestellt.
- ▶ Für jedes Land wurde die Stadt ausgewählt, für die die meisten Messwerte vorliegen. Dies sind z.B. Madrid für Spanien, Paris für Frankreich, Mailand für Italien und München für Deutschland.

Abbildung 15: Ganglinien des Straßenverkehrs für Paris, London, Barcelona und Mailand, abgeleitet aus verkehrsnahen NO₂-Messstationen, Quelle: Menut et al. (2012)



Es wurden Modellrechnungen mit CHIMERE jeweils mit den Default- und den optimierten Zeitprofilen für den Straßenverkehr durchgeführt. In Abbildung 16 sind Tagesgänge beider Modellrechnungen für O₃, NO₂ und PM₁₀ gemittelt über den Zeitraum vom 29. Juni bis 1. September 2007 in Paris, Barcelona, London, Warschau, Neapel dargestellt. Aufgrund der Gittergröße von 0,5° × 0,5° (grob: 50 km x 50 km) entspricht das Modellergebn städtischen Hintergrundkonzentrationen.

Abbildung 16: Mit CHIMERE modellierte Tagesgänge für O₃, NO₂ und PM₁₀ (Mittelung 29. Juni bis 1. September 2007) für Paris, Barcelona, London, Warschau, Neapel, jeweils Vergleich der Modellrechnung mit dem Default-Zeitprofil und dem optimierten Zeitprofil für den Straßenverkehr, Quelle: Menut et al. (2012)



Die größten Abweichungen treten für NO₂ in der Nacht auf. Durch die neuen Zeitprofile werden gegenüber den Default-Profilen die NO₂ Konzentration nachts zum Teil deutlich erhöht, tags etwas reduziert.

Zum Vergleich mit Messungen (Messwerte städtischer und ländlicher Hintergrundstationen) betrachteten Menut et al. (2012) den *bias* für Ozon und Feinstaub, und zwar jeweils zu den für diese Luftschadstoffe als repräsentativ angesehenen Zeiten 05:00 Uhr und 15:00 Uhr. Durch die geänderten Zeitprofile für den Straßenverkehr wird der *bias* bei Ozon und Feinstaub systematisch um bis zu 10% verkleinert, der Modellfehler bleibt jedoch überall deutlich höher

als die erreichte Verbesserung. Die Autoren schließen daraus, dass ihre Methodik in die richtige Richtung geht, dass der Modellfehler jedoch neben der räumlichen Varianz der Zeitprofile des Straßenverkehrs von weiteren Ursachen dominiert wird. Für NO_2 wurde kein *bias* angegeben.

Bei diesem Ergebnis stellt sich die Frage, ob es sich bei den hohen nächtlichen Verkehrswerten (Abbildung 15) möglicherweise um ein Artefakt handelt, bedingt durch die Verwendung der NO_2 -Messwerte an Verkehrsmessstationen als Proxy für die NO_x -Emissionen des Straßenverkehrs. Im Straßenraum stellt sich ein quasistationärer Zustand zwischen NO und NO_2 ein, der im Wesentlichen bestimmt ist durch

- ▶ die Photolyse von NO_2 (NO_2 wird durch Sonnenlicht in NO und O aufgespalten, letzteres reagiert sofort mit O_2 aus der Umgebungsluft zu Ozon),
- ▶ die Ozon-Konzentration (von dieser hängt die Geschwindigkeit der Rückreaktion ab, NO reagiert mit Ozon zu NO_2 und O_2) sowie
- ▶ das NO_2/NO_x -Verhältnis der lokalen Emissionen.

Nachts findet keine Photolyse statt, so dass das Gleichgewicht gegenüber dem Tagzeitbereich deutlich in Richtung NO_2 verschoben wird. NO_2 ist daher als Proxy für die NO_x -Emissionen weniger gut geeignet als NO_x ($\text{NO} + \text{NO}_2$). Es ist zu erwarten, dass die Zeitprofile aus Abbildung 15 bei Verwendung gemessener NO_x - statt NO_2 -Profile stärker ausgeprägte Tagesspitzen und weniger Emissionen im Nachtzeitbereich enthalten würden.

Auch bei der Verwendung von gemessenen NO_x -Konzentrationen als Proxy für die NO_x -Emissionen muss näherungsweise angenommen werden, dass

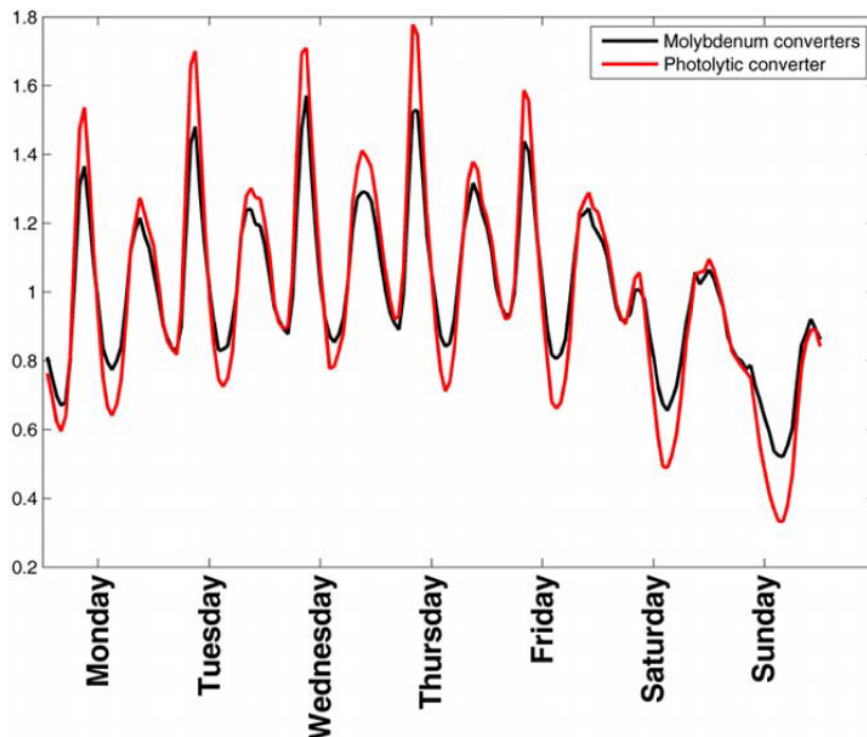
- ▶ der zeitliche Verlauf der Hintergrundkonzentration vernachlässigt werden kann,
- ▶ die Variation der Höhe der Mischungsschicht (nachts weniger hoch als tagsüber) vernachlässigt werden kann
- ▶ sonstige meteorologische Einflüsse (z.B. Windgeschwindigkeit und -richtung) im Mittel keinen Tagesgang aufweisen.

Zusätzlich gibt es einen messtechnischen Effekt, der bei der Verwendung von gemessenen NO_x -Konzentrationen als Proxy für die NO_x -Emissionen zu Verzerrungen des Zeitverlaufs führen kann und auch beim Vergleich von Messungen mit Modellergebnissen bei der Validierung relevant ist, wie auch von Mues et al. (2014) thematisiert wird.

NO_x wird in Deutschland typischerweise gemessen, indem zunächst mittels Chemilumineszenz NO gemessen wird. Dann wird NO_2 mit Hilfe eines Molybdän-Konverters in NO umgewandelt und nochmals NO gemessen. Die Differenz beider Werte ergibt NO_2 . Bei der Umwandlung werden neben NO_2 jedoch auch andere Substanzen der unter NO_y zusammengefassten Stickstoffverbindungen (z.B. Salpetersäure, Nitrate, PAN, Ammoniak, HONO) teilweise in NO umgewandelt, so dass NO_x (wie auch NO_2) bei Messungen mit Molybdänkonvertern etwas überschätzt werden. Messungen der EMPA (Eidgenössische Materialprüfungs- und Forschungsanstalt, Schwarzenbach, B., Hüglin, C., 2011) haben ergeben, dass dies bei Jahresmittelwerten an vergleichsweise hoch belasteten Verkehrsstandorten weniger als 10% ausmacht (weil dort NO_y von NO_x dominiert wird), an niedrig belasteten Standorten jedoch mehr, an der erhöht gelegenen Messstation Rigi-Seebodenalp z.B. 45%.

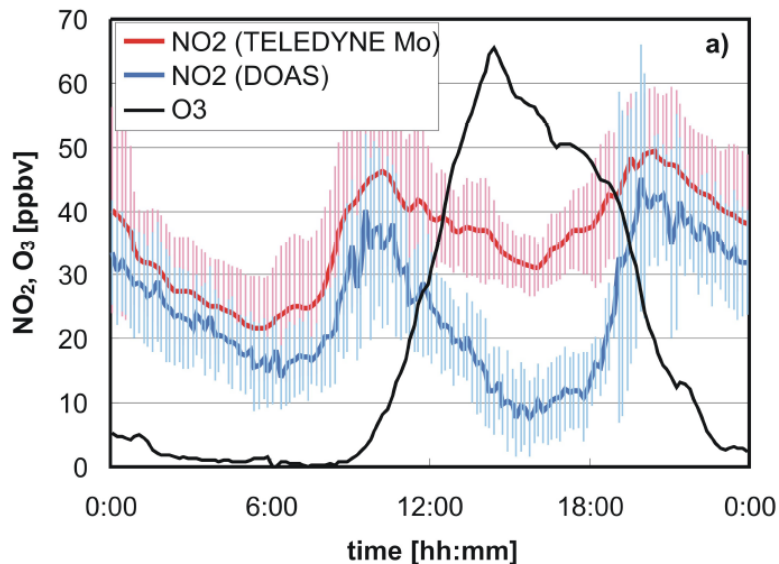
Bei einem mittels Molybdänkonverter an einem Belastungsschwerpunkt gemessenen NO_x -Tagesgang wird der Zeitverlauf durch den Tagesgang der nicht im NO_x enthaltenen NO_y -Komponenten überlagert. Mues et al. (2014), hier dargestellt in Abbildung 17, zeigen normierte Tagesgänge auf Basis von Messwerten unterschiedlicher Instrumente aus der Schweiz. Danach ist der normierte Tagesgang auf Basis von Messungen mittels Molybdänkonverter gegenüber der Vergleichsmessung mittels photolytischem Konverter schwächer ausgeprägt.

Abbildung 17: Normierter Wochengang zeitgleicher NO_2 -Messungen mittels eines Molybdän- und eines photolytischen Konverters, gemittelt über die Jahre 2006 bis 2009 in Payerne (Schweiz), Quelle: Mues et al. (2014)



Villena et al. (2012) führten im Rahmen einer Messkampagne in Santiago de Chile Vergleichsmessungen von NO_2 mittels DOAS (differential optical absorption spectroscopy, optisch) und photokatalytisch mittels Molybdänkonverter durch, ein gemittelter Tagesgang ist in Abbildung 18 dargestellt. Anders als Schwarzenbach und Hüglin (2011) finden sie hohe Abweichungen am Nachmittag, die zum Zeitpunkt hoher photolytischer Aktivität (Proxy dafür: Ozonmessung) auftreten. Möglicherweise herrscht in Santiago de Chile ein anderes chemisches Regime.

Abbildung 18: Kampagnengemittelter Tagesgang von NO₂, optisch gemessen mittels DOAS und photokatalytisch gemessen mittels Molybdän Konverter, bei einer Messkampagne in Santiago de Chile 2005, Quelle: Villena et al. (2012)



Bei der BAST (Bundesanstalt für Straßenwesen) können für alle Jahre von 2003 bis aktuell 2020 stündliche Verkehrswerte der von ihr betriebenen automatischen Dauerschälstellen auf Autobahnen und Bundesstraßen abgerufen werden (BAST, 2022). Diese sind zumindest nach Leichtverkehr und Schwerverkehr differenziert, häufig auch in der sogenannten 8+1 Klassifizierung (Pkw mit und ohne Anhänger, Motoräder, Lieferwagen, Busse, Lkw mit und ohne Anhänger, Sattelzüge, nicht klassifizierte Fahrzeuge).

Die Zählstellen sind jeweils repräsentativ für einen bestimmten Streckenabschnitt, bei Bildung von Mittelwerten müssen mit der Länge gewichtete Mittelwerte gebildet werden.

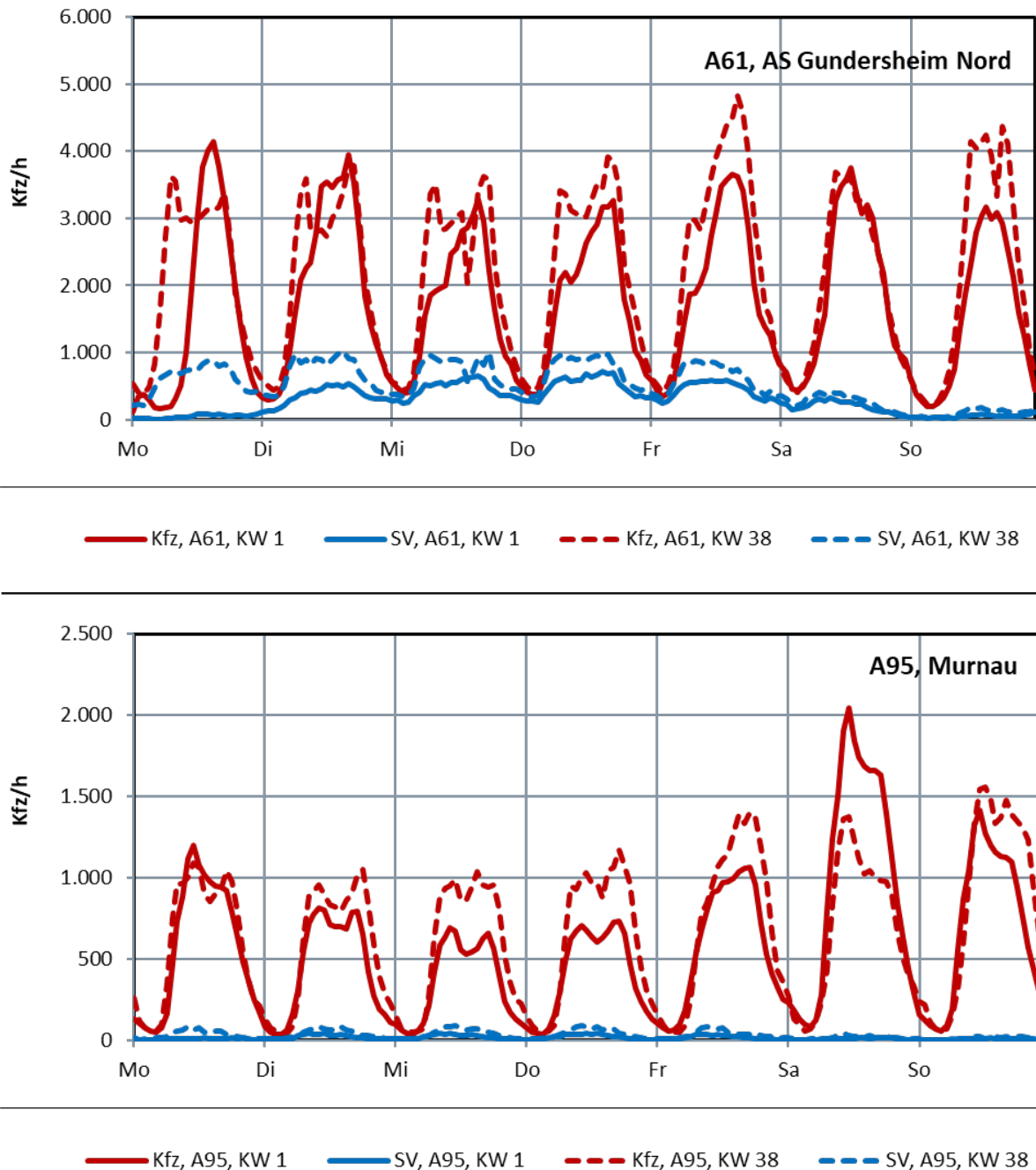
Für alle Zählstellen sind weiterhin folgende Faktoren angegeben:

- ▶ Ferienfaktor: Verhältnis des Verkehrs an mittleren Werktagen innerhalb der Schulferien zum Verkehr an mittleren Werktagen insgesamt
- ▶ Sonntagsfaktor: Verhältnis des Sonntagsverkehrs zum Verkehr der mittleren Werktage Dienstag bis Donnerstag
- ▶ Freitagsfaktor: Verhältnis des Freitagsverkehrs zum Verkehr der mittleren Werktage Dienstag bis Donnerstag

Bundesfernstraßen, die zu beliebten Ferienregionen führen, weisen hohe Ferienfaktoren auf, hier ist der Pkw-Verkehr in den Ferien höher als zu anderen Zeiten. Entsprechend sind in Gebieten, die für Wochenenderholung/Wochenendausflüge attraktiv sind, die Sonntags- bzw. Freitagsfaktoren erhöht.

In Abbildung 19 (oben) sind exemplarisch für die Dauerschälstelle auf der A61 an der Anschlussstelle (AS) Gundersheim die stündlichen Verkehrsmengen für Kfz und Schwerverkehr (SV) für die Kalenderwochen (KW) 1 und 38 (keine Ferien, keine Feiertage) dargestellt.

Abbildung 19: Wochengänge aus Dauerzählstellen der BAST 2016 für Kfz und SV: oben: Gundersheim Nord, KW 1 und KW 38; unten: Murnau; Datenquelle: BAST (2022)



Der Schwerverkehr (SV) ist am Feiertag (1. Januar) und am Wochenende deutlich reduziert. Weiterhin ist für die Kfz (dominiert durch Pkw) an Normalwerktagen (keine Ferien- oder Feiertage) ein typischer Verlauf mit Morgen- und Nachmittagsspitze zu erkennen. Der erste Januar (im Jahr 2018 ein Montag) weist bei den Pkw eine Nachmittagsspitze auf (Rückreiseverkehr).

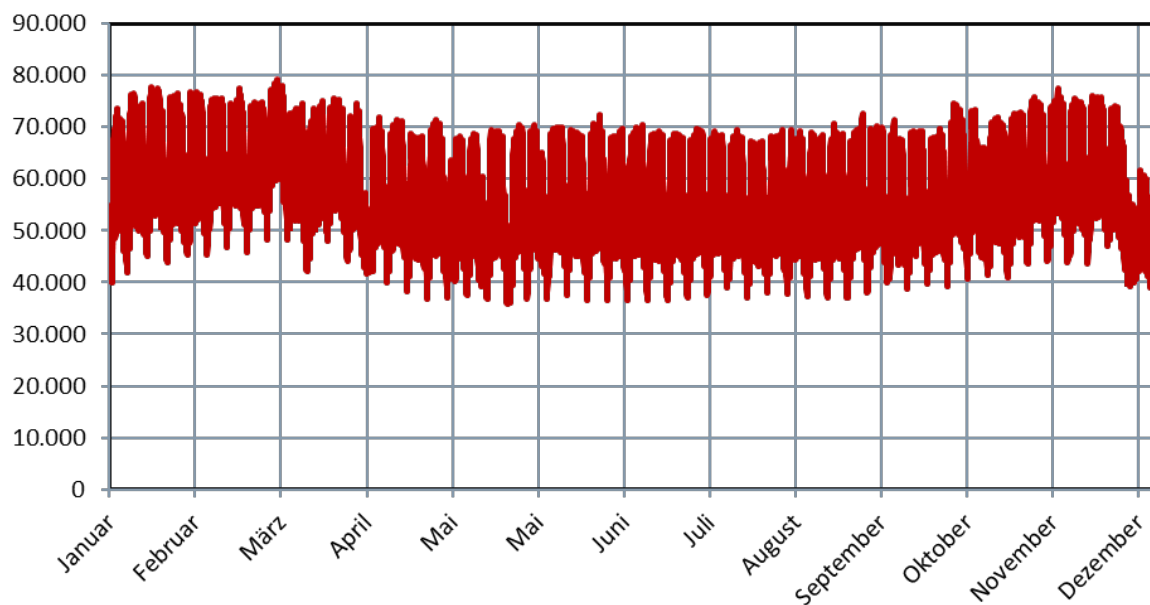
In Abbildung 19 (unten) sind jeweils analog stündliche Verkehrsmengen für die Dauerzählstelle auf der A95 bei Murnau dargestellt. Hier handelt es sich um ein typisches Feriengebiet (Oberbayern). Es sind regionale Unterschiede zu erkennen: Auf der A95 sind die Verkehrswerte

insgesamt niedriger, gleiches gilt für den SV-Anteil. Außerdem liegt am Samstag von KW 1 (Ende der Weihnachtsferien) ein Verkehrsmaximum.

2.3.3 Kraftwerke

Mues et al. (2014) verwendeten, wie auch Marc Guevara für CAMS81 (s. Abschnitt 2.1, Telefoninterview), für den zeitlichen Verlauf der Emissionen aus SNAP1 (combustion in energy and transformation industries) die ENTSO-E Daten (European Network of Transmission System Operators for Electricity) für das Jahr 2006. Unter https://www.entsoe.eu/data/power-stats/hourly_load/ können für jedes Land der EU gemittelt stündliche Werte des Energieverbrauchs abgerufen werden, die Werte für Deutschland 2018 sind in Abbildung 20 dargestellt.

Abbildung 20: ENTSO-E: Hourly Load Values für Deutschland 2018, Datenquelle: https://www.entsoe.eu/data/power-stats/hourly_load/, Zugriff: 25.04.2022



Es sind auch kraftwerksspezifische Werte verfügbar, diese müssen jedoch noch räumlich zugeordnet werden. Die Zuordnung kann z.B. mittels der Kraftwerksliste (open power system data, 2018) durchgeführt werden, diese enthält EICodes (Energy Identification Codes, 16stellige Identifikationsnummern, entsprechen einem von ENTSO-E entwickelten europäischen Standard) und GPS-Koordinaten.

Hendriks et al. (2015) verwendeten für SNAP 1 die statischen Default-Zeitprofile und untersuchten in verschiedenen Szenarien, welche Auswirkungen ein steigender Anteil regenerativer Energien am Strommix insbesondere auch auf kurzlebige Luftschadstoffe hat.

Dabei wurden folgende Fälle untersucht:

- ▶ Die Gesamtemissionen wurden um den entsprechenden Anteil regenerativ erzeugten Stroms gemindert, das Zeitprofil für SNAP 1 wurde beibehalten.
- ▶ Es wurden mit dem Modell REMix Zeitprofile für die Erzeugung von Photovoltaik und Windenergie erstellt, deren jeweilige Anteile in verschiedenen Szenarien variiert wurden.

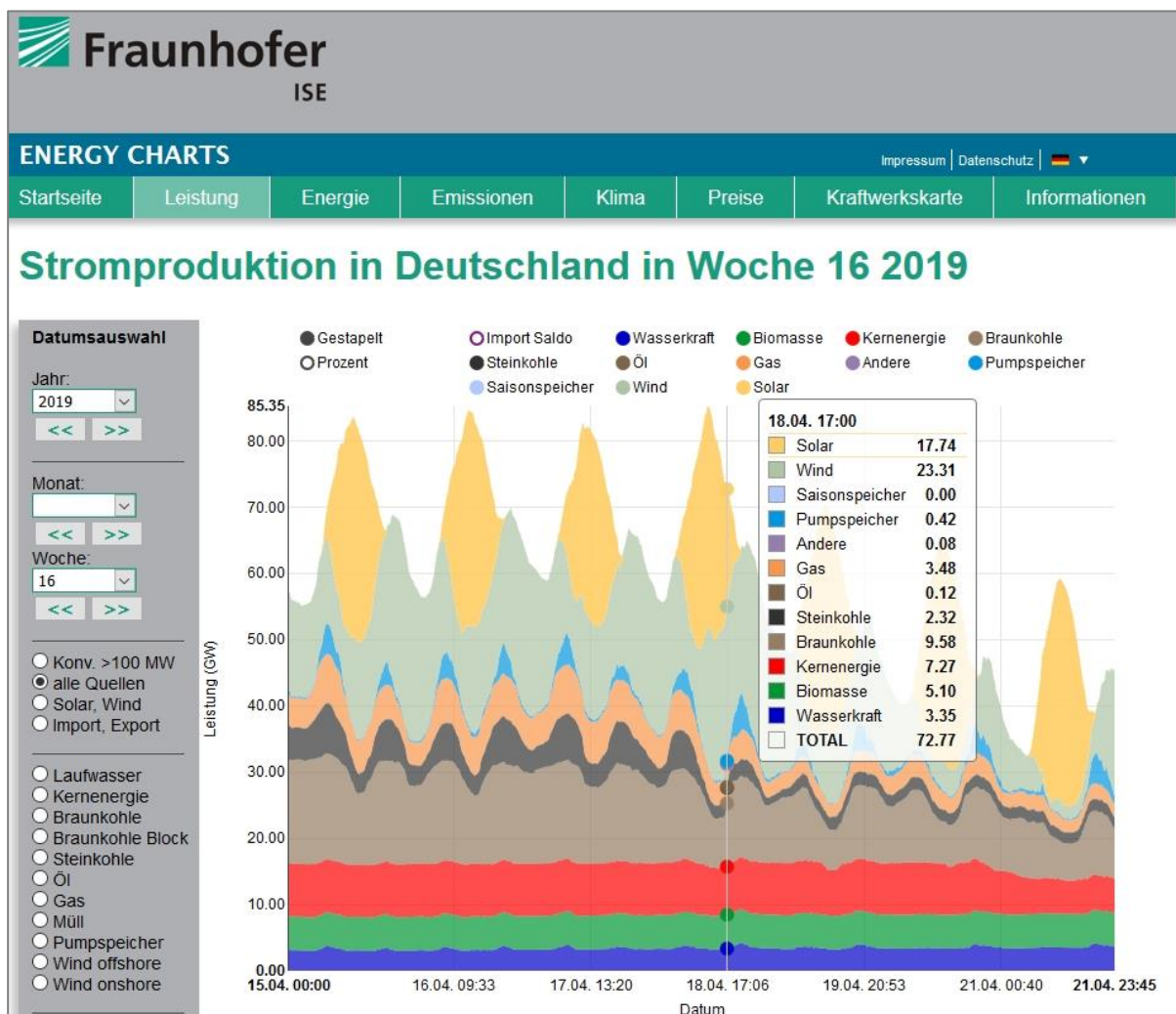
Bei konstant gehaltener Nachfrage wurde jeweils der „Rest“ durch den herkömmlichen Strommix abgedeckt.

Weil sich das chemische Regime im Tagesverlauf ändert, fanden die Autoren bei den modellierten Konzentrationen kurzlebiger Luftschadstoffe deutliche Auswirkungen der Zeitverläufe, zu denen fossile Energien ersetzt wurden, auch wenn der Anteil für das Jahr insgesamt jeweils gleich war. Aufgrund europaweit unterschiedlicher Bedingungen (Strommix und Nachfragekurven) variieren die Auswirkungen in unterschiedlichen europäischen Ländern.

Für Deutschland liegt mit den vom Fraunhofer-Institut für Solare Energiesysteme (ISE) auf der Webseite www.energy-charts.de als Grafik veröffentlichten Daten eine weitere Basis zur Ableitung zeitlicher Verläufe vor. Für diese wurde die Zuordnung und Aggregation der Zeitreihen einzelner Kraftwerksblöcke mittels EIC bereits durchgeführt.

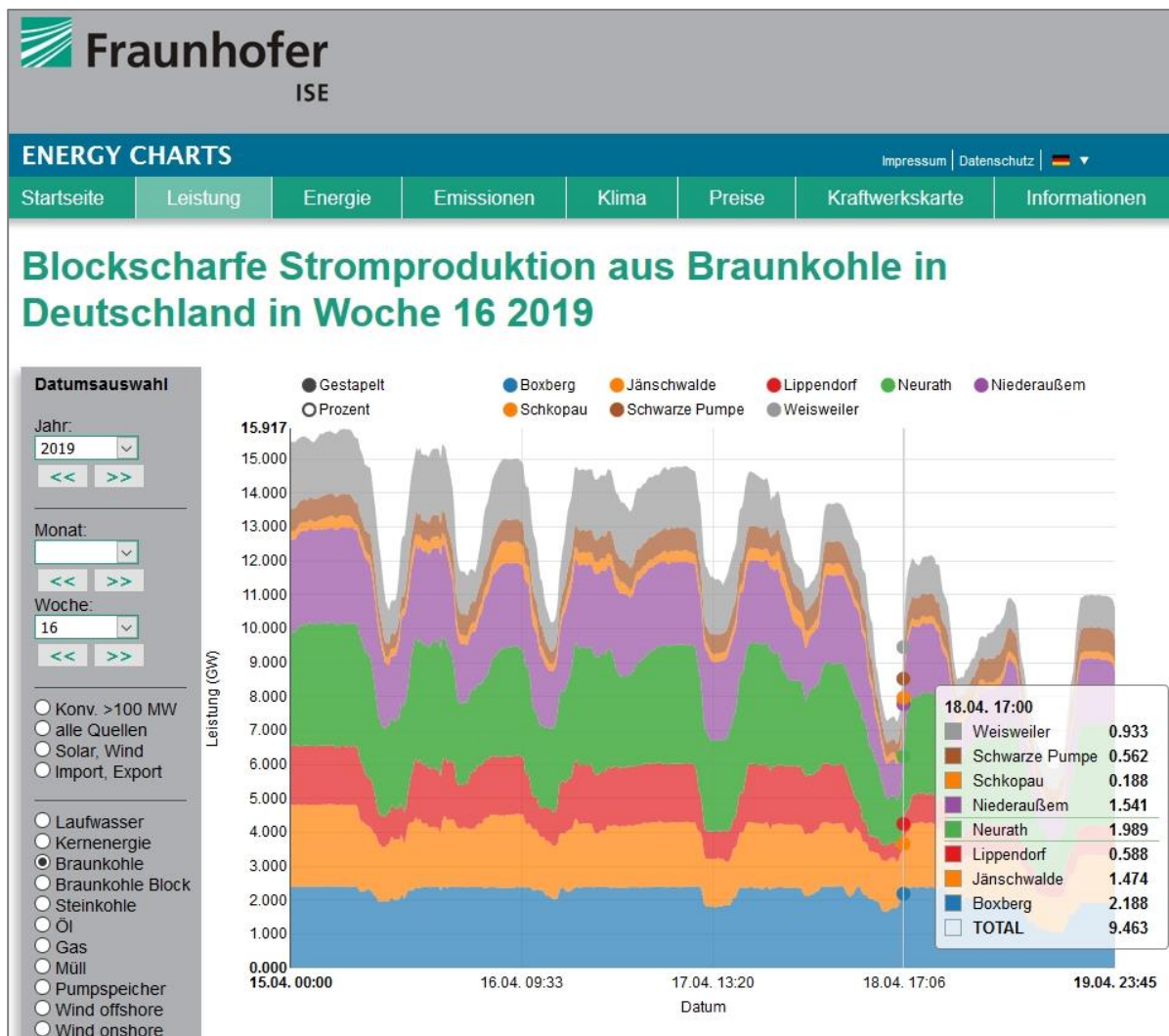
Für alle Jahre seit 2010 können auf www.energy-charts.de Grafiken zur Stromproduktion in Deutschland erzeugt werden, und zwar auf Basis stündlicher Werte (seit 2019 sind viertelstündliche Werte vorhanden). Die Zahlenwerte für bestimmte Zeitpunkte sind auf der Webseite durch Anklicken ablesbar. In Abbildung 21 ist beispielhaft für KW 12 aus dem Jahr 2019 ein Screenshot dieser Seite für die Auswahl „alle Quellen“ gezeigt, die numerischen Werte sind für den 18.04.2019, 17:00 Uhr, dargestellt.

Abbildung 21: Stromproduktion in Deutschland (alle Quellen), beispielhaft für KW 16 im Jahr 2019, Quelle: Screenshot aus www.energy-charts.de, ISE, Zugriff: 22.04.2019



In der Grafik „alle Quellen“ wird eine Zeitreihe der Stromproduktion aller Kraftwerke in Deutschland gezeigt. Es können auch einzelne Quellen ausgewählt werden, für Kraftwerke ab einer installierten Leistung von 100 MW werden dort die Beiträge der einzelnen Kraftwerke zu dieser Stromquelle angegeben. In Abbildung 22 wurde für KW 19, Jahr 2019 (analog zu Abbildung 21 für alle Quellen) die Quelle „Braunkohle“ gewählt, dargestellt ist die Stromproduktion in acht Braunkohlekraftwerken. Am 18.04., 17:00 Uhr, lag die momentane Gesamtleistung dieser Kraftwerke bei 9,46 GW. Nach Abbildung 21 lag zu diesem Zeitpunkt die Gesamtleistung aller Braunkohlekraftwerke in Deutschland bei 9,58 GW. Die (geringe) Differenz wird durch Braunkohlekraftwerke mit weniger als 100 MW installierter Leistung erbracht.

Abbildung 22 Stromproduktion in Deutschland (Braunkohle, kraftwerksscharf), beispielhaft für KW 16 im Jahr 2019, Quelle: screenshot aus www.energy-charts.de, ISE, Zugriff: 22.04.2019



Insgesamt sind kraftwerksscharf folgende Zeitreihen vorhanden:

- Braunkohle: 8 Kraftwerke
- Steinkohle: 44 Kraftwerke
- Öl: 5 Kraftwerke

- Gas: 50 Kraftwerke
- Müll: 1 Kraftwerk

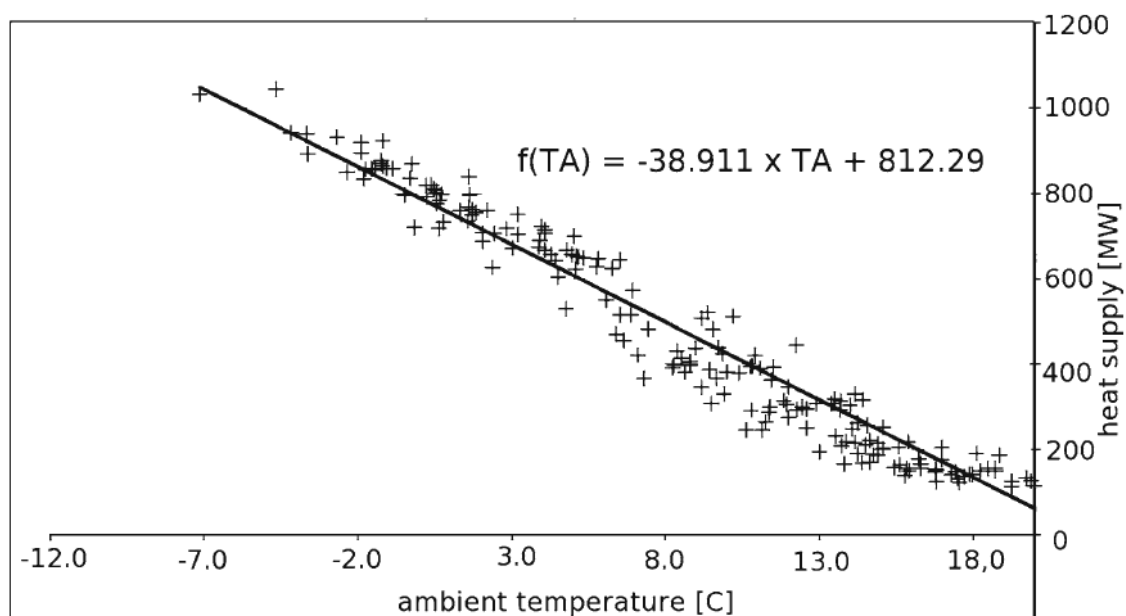
Auf der Webseite www.energy-charts.de werden nur Grafiken angezeigt, die dahinter liegenden Daten können beim ISE käuflich erworben werden.

2.3.4 Kleinf Feuerungsanlagen

Für diese Quellgruppe werden regionalisierte Zeitprofile in Abhängigkeit von der lokalen Außentemperatur bereits häufig angewandt, dabei werden Gradtagzahlen (GTZ) oder daran angelehnte Konzepte verwendet. Die Berechnung der GTZ aus den tagesmittleren Temperaturen ist in der VDI Richtlinie 2067 festgelegt: Es wird für alle Heiztage jeweils die Differenz aus gewünschter Innentemperatur und Außentemperatur summiert. Für die gewünschte Innentemperatur wird ein Wert von 20°C angesetzt. Als Heiztage gelten alle Tage in der Heizperiode zwischen dem 01.10. und dem 30.04., an denen die Außentemperatur unter 15°C (Heizgrenztemperatur) liegt. GTZ werden z.B. zur Witterungsbereinigung verwendet oder auch zur Aufteilung der Nebenkosten bei Mieterwechseln.

Am HZ Geesthacht wird das regionale CTM CMAQ betrieben. Aulinger et al. (2011) simulierten mit diesem Modell für das Jahr 2000 europaweit Benzo(a)pyren (B(a)P). Die NO_x-, SO₂-, CO- und NH₃-Emissionen, sowie 35 Komponenten der NMVOC kamen dabei vom IER auf Basis der EMEP Emissionssummen. B(a)P-Emissionen kamen von TNO aus einem europäischen Emissionsinventar für POPs (persistent organic pollutant emissions, Denier van der Gon et al., 2005). Weil nach diesem Inventar mehr als 80% der B(a)P-Emissionen aus Kleinf Feuerungsanlagen in Privathaushalten stammen, wurde für die zeitliche Verteilung auf Daten zum Fernwärmebedarf zurückgegriffen. Die Fernwärmedaten stammten von Vattenfall aus den Jahren 2005 und 2006, es besteht ein linearer Zusammenhang mit der Außentemperatur (s. Abbildung 23).

Abbildung 23: Zusammenhang zwischen Außentemperatur (2-Tage-Mittelwerte) und Fernwärmebedarf in Hamburg für die Jahre 2005 und 2006, Quelle: Aulinger et al. (2011)



Oberhalb von 18°C wird der Wärmeeinsatz als konstant angesehen (nur noch Deckung des Warmwasserwärmebedarfs). Eine entsprechende Skalierung der Jahresemissionen entspricht dem Gradtagzahlansatz, anders als nach VDI 2067 sind die Heiztage nicht auf die Heizperiode beschränkt und die Heizgrenztemperatur liegt bei 18°C (statt 15°C nach VDI 2067). Für den Tagesgang der B(a)P-Emissionen wird auf Default-Zeitprofile zurückgegriffen.

Simpson et al. (2012) verwendeten für die Quellgruppe SNAP 2 (non-industrial combustion), die von den Hausbrandemissionen dominiert ist, im EMEP MSC-W CTM ebenfalls Gradtagzahlen zur zeitlichen Verteilung auf Tagesebene. Anders als nach VDI 2067 beschränkten die Autoren die Verteilung nicht auf die Heizperiode, sonst entspricht der Ansatz dem nach VDI 2067, wenn gewünschte Innentemperatur und Heizgrenztemperatur auf 18°C gesetzt werden.

Auch Mues et al. (2014) verwendeten Gradtagzahlen zur zeitlichen Verteilung der Emissionen der Quellgruppe SNAP 2. Wie Aulinger et al. (2011) setzten sie als Heizgrenztemperatur einen Wert von 18°C an. Für die Deckung des Warmwasserwärmebedarfs setzten sie 20% der Hausbrand Emissionen an; dieser Anteil wird nicht in Abhängigkeit der Außentemperatur verteilt.

AVISO et al. (2017 und 2019) verwendeten Gradtagzahlen nach VDI 2067 zur zeitlichen Verteilung und zur Witterungsbereinigung von Hausbrandemissionen. AVISO et al. (2017) untersuchten die Wirkung eines temporären Betriebsverbots für Komfortkamine in Stuttgart an Feinstaubalarmtagen und glichen dafür eine Zeitreihe der Gradtagzahlen in Stuttgart mit Feinstaubalarmtagen des gleichen Jahres ab. AVISO et al. (2019) ermittelten im Auftrag der Landesanstalt für Umwelt und Messungen Baden-Württemberg (LUBW) den Endenergiebedarf kleiner und mittlerer Feuerungsanlagen in Baden-Württemberg (BW). Unter Verwendung des Energieatlasses BW und der Gebäudevolumina aus Laserbefliegungsdaten schätzten sie die Anteile der Privathaushalte (Heizwärme 56% und Warmwasser 6%) sowie des Sektors GHD (Heizwärme 34% und Prozesswärme 4%) in Baden-Württemberg am Wärmebedarf ab. Warmwasser-Wärmebedarf der Privathaushalte wurde nach DIN4107-10 pauschal aus der Wohnfläche bestimmt mit 12,5 kWh/(m²·a). Der Anteil der Quellgruppe zur Deckung des Wärmebedarfs nach AVISO 2019 für BW ist damit nur halb so hoch wie nach Mues et al. (2019).

3 COSMO-DE Meteorologie und Klimaregionen

Wie die im vorherigen Kapitel zusammengefasste Literaturrecherche zeigt, resultiert die Zeitabhängigkeit von Emissionen für viele Quellgruppen und Luftschadstoffe aus der zeitlichen Änderung meteorologischer Größen wie z.B. der Temperatur. Die in diesem Projekt abgeleiteten dynamischen Zeitprofile für die Emissionen (Splitting-Faktoren, SF) werden mittels Modellrechnungen mit RCG evaluiert, daher erschien es sinnvoll, zur Ableitung der SF dieselben meteorologischen Daten zu verwenden wie für den Antrieb von RCG.

Der meteorologische Antrieb des Modells RCG erfolgt mittels der COSMO-DE Meteorologie. Der Ursprung dieses Modells ist das Lokal-Modell Kurzzeitfrist, das vom Deutschen Wetterdienst (DWD) für die numerische Wettervorhersage und auch für verschiedenste wissenschaftliche Anwendungen entwickelt wurde, mittlerweile sind am COSMO-Konsortium (Consortium for Small-Scale Modelling) eine Reihe weiterer Wetterdienste beteiligt. COSMO-DE-Daten werden vom DWD auf seinen Datenservern zur Verfügung gestellt. Für RCG aufbereitete Daten für die Jahre 2016 und 2017 wurden in diesem Projekt vom UBA zur Verfügung gestellt. Die Auflösung beträgt $0,03125^\circ$ (LON) \times $0,015625^\circ$ (LAT) mit 13 Höhenleveln, dies entspricht an einem mittleren Breitengrad von 50° einer horizontalen Auflösung von ca. 2 km \times 2 km. Die Höhenlevel folgen der Orographie.

Folgende meteorologische Daten liegen pro Gitterbox für jedes Höhenlevel vor: Windgeschwindigkeit in x- und y-Richtung, Temperatur, relative Feuchte, Dichte sowie Wolkenwassergehalt; folgende Daten sind nicht höhenabhängig: Gesamtniederschlag, horizontale Windgeschwindigkeit in 10 m über Grund, Temperatur und Feuchte in 2 m über Grund, fühlbarer bzw. latenter Wärmefluss, kurzweilige Strahlungsbilanz und Albedo des Bodens, Bodenwassergehalt sowie Temperatur der Erd- bzw. Wasseroberfläche.

In der von RCG in Nest 2 für Deutschland verwendeten räumlichen Auflösung von 2 km \times 2 km gibt es $310 \times 520 = 161.200$ Gitterzellen in der horizontalen Ebene. Da grundsätzlich jeder NFR-Sektor und jeder Luftschadstoff eigene meteorologische Abhängigkeiten aufweisen können, müssen die Gitterzellen geeignet zu Gruppen zusammengefasst werden, um die Datenmenge der auf dieser Basis berechneten SF handhabbar zu halten. Diese Gruppen wurden entsprechend den Klimaregionen des DWD gewählt.

Der DWD unterscheidet in seinem nationalen Klimareport (DWD, 2017) zwölf Klimaregionen, die sowohl den Übergang vom maritimen zum kontinentalen Einfluss als auch die durch das Relief vorhandenen Strukturen berücksichtigen sollen. Sie sind in Abbildung 24 dargestellt.

In Tabelle 1 ist pro Klimaregion die Anzahl der RCG-Rasterelemente, die dieser Region zugeordnet werden und über die die meteorologischen Variablen gemittelt werden, angegeben. Die Klimaregion, in die die geringste Anzahl Rasterelemente fällt, sind mit 1.285 Gitterzellen die Alpen. Damit enthalten alle Klimaregionen eine hinreichend große Anzahl an Rasterelementen, um als repräsentativ angesehen werden zu können.

Die wichtigste Größe zur Ableitung der dynamischen Zeitprofile ist die Temperatur in 2 m Höhe über Grund. Landwirtschaftsemissionen sind teilweise zusätzlich von der Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe über Grund abhängig, die Emissionen weiterer Quellgruppen ggf. vom Gesamtniederschlag (z.B. kann der Einsatz mobiler Maschinen zur Garten- und Landschaftspflege auf Zeiten ohne Niederschlag beschränkt werden). Für diese drei Größen sind in Abbildung 25 bis Abbildung 27 Tagesmittelwerte pro Klimaregion aus der COSMO-DE Meteorologie 2016 dargestellt.

Abbildung 24: Klimaregionen in Deutschland (DWD, 2017)

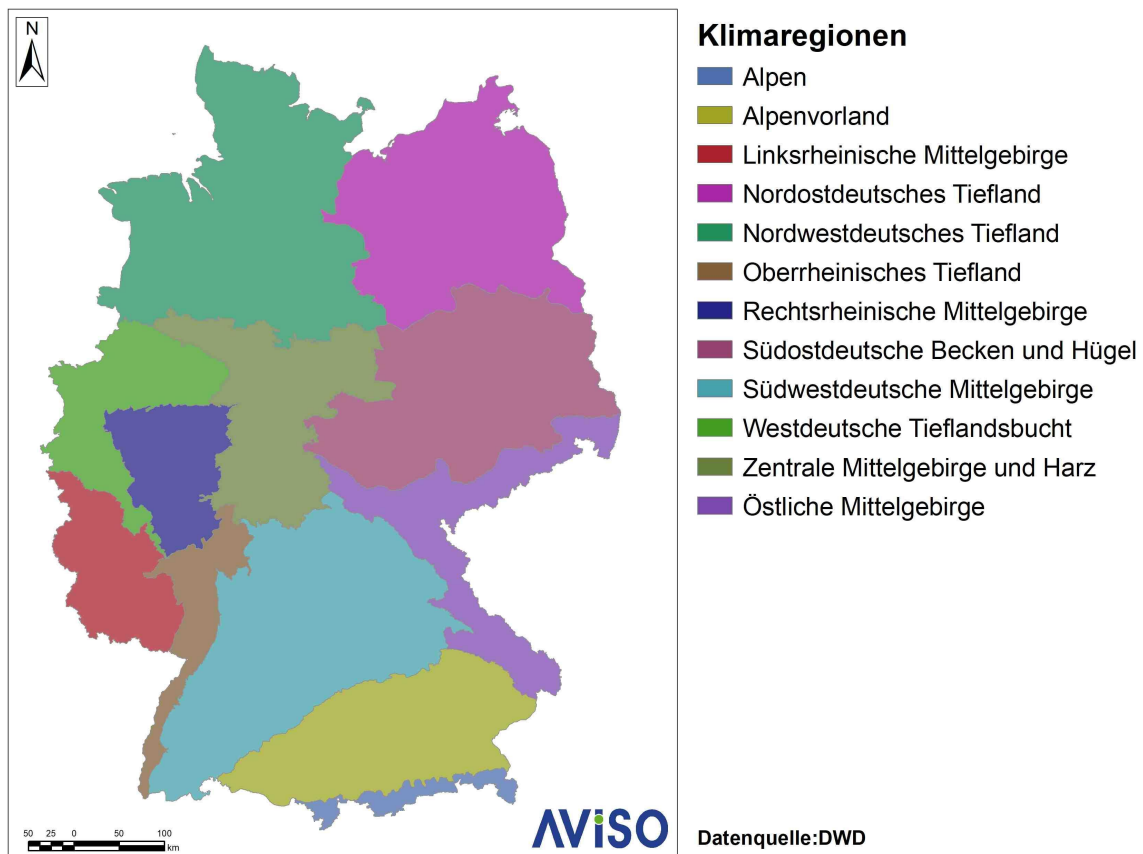
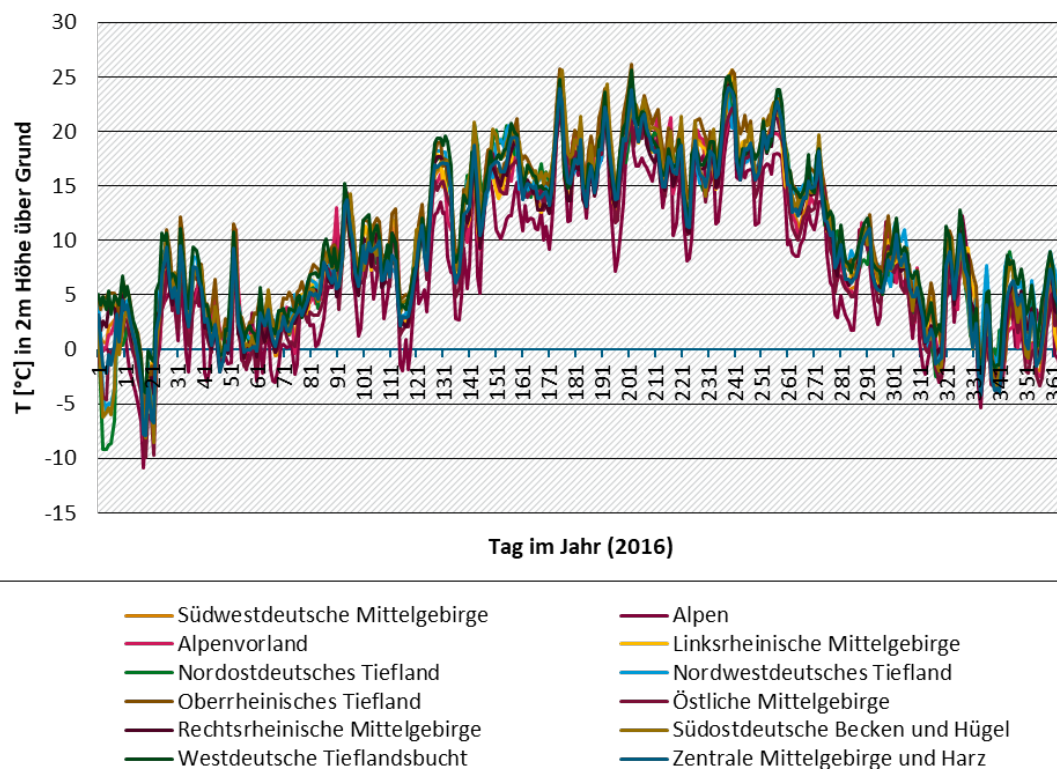


Tabelle 1: Anzahl der Gitterzellen aus dem COSMO-DE Raster in der Auflösung 0,03125° (LON) x 0,015625° (LAT) pro Klimaregion

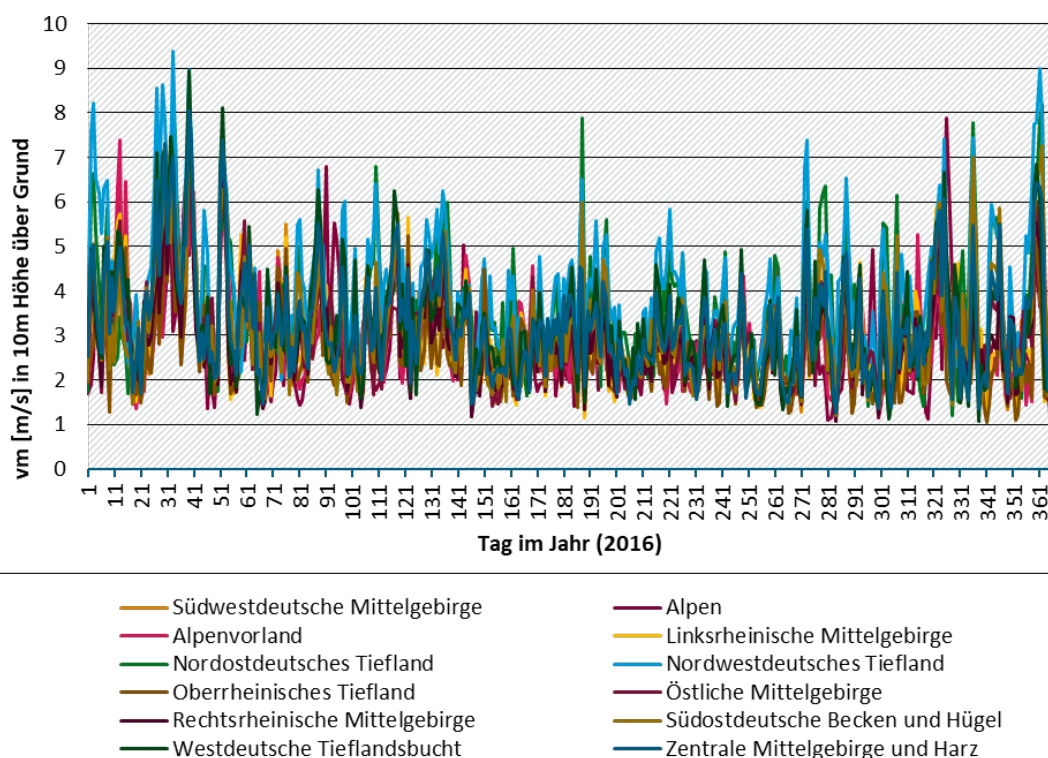
| Klimaregion | Anzahl Gitterzellen COSMO-DE |
|---------------------------------|------------------------------|
| Südwestdeutsche Mittelgebirge | 14.923 |
| Alpen | 1.285 |
| Alpenvorland | 8.171 |
| Linksrheinische Mittelgebirge | 4.617 |
| Nordostdeutsches Tiefland | 13.359 |
| Nordwestdeutsches Tiefland | 17.212 |
| Ober rheinisches Tiefland | 2.627 |
| Östliche Mittelgebirge | 6.147 |
| Rechtsrheinische Mittelgebirge | 4.251 |
| Südostdeutsche Becken und Hügel | 12.384 |
| Westdeutsche Tieflandsbucht | 5.189 |
| Zentrale Mittelgebirge und Harz | 7.475 |

Abbildung 25: Tagesmittelwerte pro Klimaregion der Temperatur in 2 m Höhe über Grund aus der COSMO-DE Meteorologie 2016



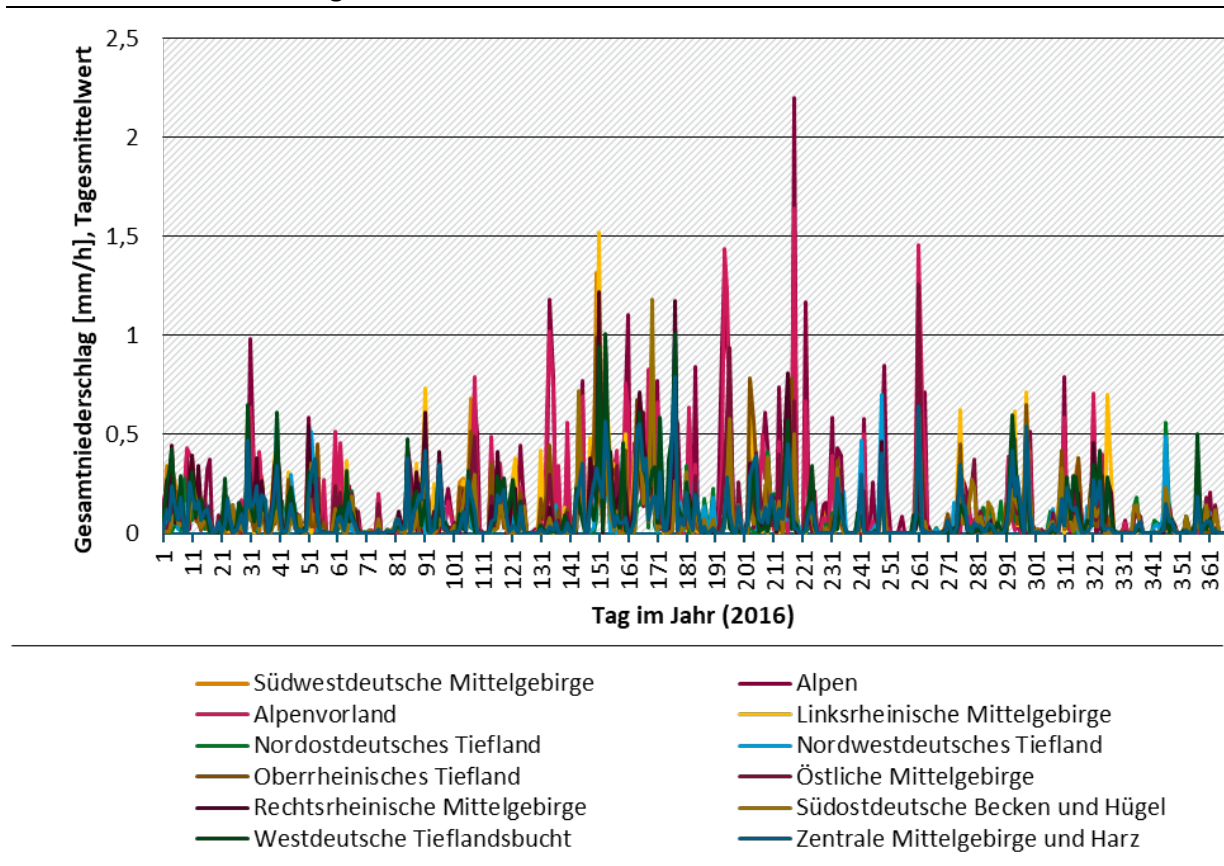
Datenquelle: COSMO-DE

Abbildung 26: Tagesmittelwerte pro Klimaregion der mittleren Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe über Grund aus der COSMO-DE Meteorologie 2016



Datenquelle: COSMO-DE

Abbildung 27: Tagesmittelwerte pro Klimaregion des Gesamtniederschlags aus der COSMO-DE Meteorologie 2016



Datenquelle: COSMO-DE

In Abbildung 28 sind die Tagesmittelwerte der Temperatur in 2 m Höhe über Grund 2016 aus der COSMO-DE Meteorologie für die Region „Südwestdeutsche Mittelgebirge“ im Vergleich mit den Tagesmittelwerten der Rasterzellen um Stuttgart für 2016 und den Messwerten der DWD-Station Stuttgart Echterdingen dargestellt.

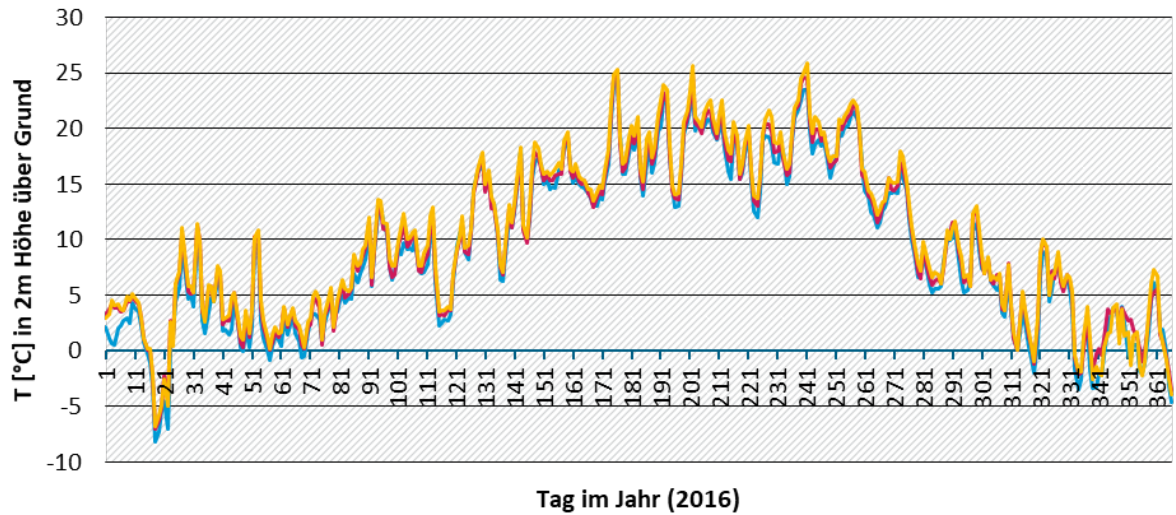
Die Zeitreihe aus der COSMO-DE Meteorologie für Stuttgart stimmt sehr gut mit den Messungen aus Echterdingen überein. Die Zeitreihe für die Region „Südwestdeutsche Mittelgebirge“, die fast 15.000 Rasterzellen umfasst, weicht nur an einigen Tagen sichtbar von den anderen ab. Für dieses Beispiel spiegeln die mittleren meteorologischen Bedingungen der Klimazone die meteorologische Situation in darin liegenden Gitterzellen gut wider. Es erscheint daher ausreichend, für die meteorologischen Abhängigkeiten der Emissionen klimazonengemittelte Werte zu verwenden.

In Abbildung 29 ist ein entsprechender Vergleich der Temperatur-Zeitreihe für die Alpenregion mit den Messwerten der DWD-Station Oberstdorf dargestellt.

Die Alpenregion ist die Klimaregion in Deutschland mit den extremsten Verläufen, und sie enthält mit 1.285 Gitterzellen weniger als ein Zehntel der Gitterzellen der Region „Südwestdeutsche Mittelgebirge“ (s. Tabelle 1). Wie erwartet, ist die Übereinstimmung zwischen den Temperatur-Messwerten der DWD-Station Oberstdorf und den COSMO-Mittelwerten für die Alpenregion nicht ganz so gut wie für Stuttgart und die Region „Südwestdeutsche Mittelgebirge“, die Zeitreihen sind aber immer noch sehr ähnlich.

Selbst für die „extreme“ Alpenregion spricht also nichts dagegen, klimazonengemittelte Werte für die Temperaturabhängigkeit der Emissionen zu verwenden.

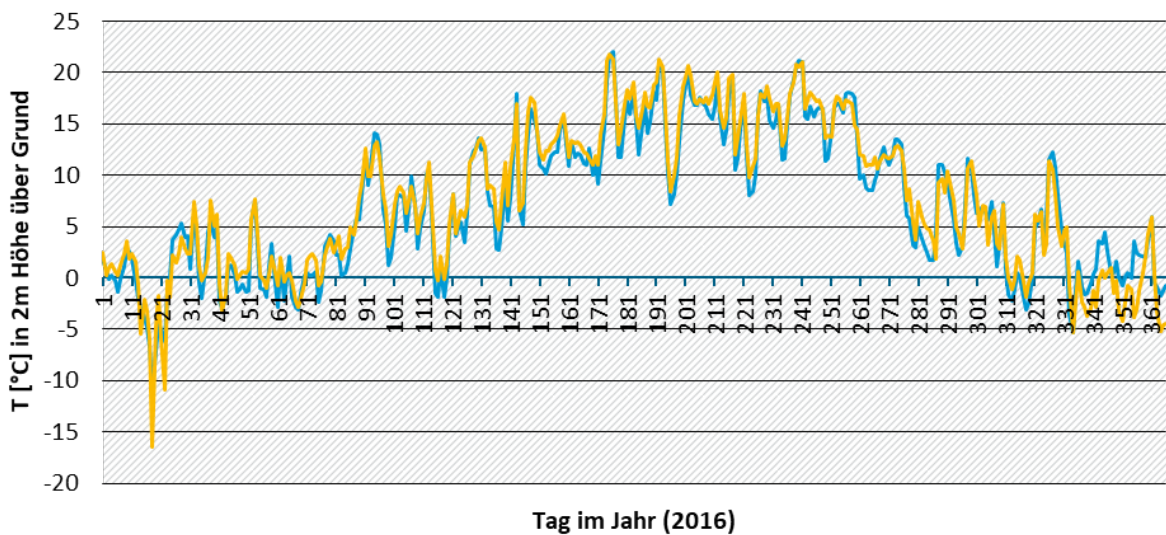
Abbildung 28: Tagesmittelwerte der Temperatur in 2 m Höhe über Grund 2016: Vergleich Mittelwert COSMO-DE Region „Südwestdeutsche Mittelgebirge“, COSMO-DE Rasterzellen um Stuttgart und Messwerte Stuttgart Echterdingen



— Südwestdeutsche Mittelgebirge — COSMO-DE Stuttgart — Messwerte Stuttgart Echterdingen

Datenquellen: COSMO-DE, DWD

Abbildung 29: Tagesmittelwerte der Temperatur in 2 m Höhe über Grund 2016: Vergleich Mittelwert COSMO-DE Region „Alpen“ und Messwerte Oberstdorf



— Alpen — Messwerte Oberstdorf

Datenquellen: COSMO-DE, DWD

4 Untersuchung der sektoralen Emissionen hinsichtlich meteorologischer und anderer Abhängigkeiten

Nachdem in Kapitel 2 allgemein der Stand des Wissens zur Zeitabhängigkeit von Emissionen und dessen Umsetzung in CTMs sowie die verfügbaren Datenquellen dargestellt wurden, werden in diesem Kapitel für jeden NFR-Sektor die Zeitabhängigkeiten, die in TeResE (Temporal Resolution of Emission data) konkret implementiert sind, beschrieben.

Die in der Submission 2018 enthaltenen 127 NFR-Sektoren werden in Unterabschnitten abgehandelt, in denen Gruppen mit ähnlichem Zeitverhalten, für die auf ähnliche Datenquellen zurückgegriffen werden kann, gemeinsam beschrieben werden. Diese entsprechen zum Teil den übergeordneten SNAP-Sektoren:

- ▶ Kraftwerke
- ▶ Kleinf Feuerungsanlagen
- ▶ Industrie, Gewerbe, Energie ohne Kraftwerke
- ▶ Straßenverkehr
- ▶ Sonstiger Verkehr
- ▶ Abfallbehandlung / Entsorgung
- ▶ Landwirtschaft
- ▶ Sonstige Produktanwendungen (NFR 2g)

In Tabelle 2 sind für die betrachteten Luftschadstoffe NO_x , PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$, NH_3 , NMVOC, SO_x und CO die Anteile der Emissionen der jeweiligen NFR-Sektoren an den Emissionen der übergeordneten SNAP-Sektoren ausgewiesen, und in Tabelle 3 die entsprechenden Anteile an den nationalen Gesamtemissionen, jeweils für die Submission 2018 für das Jahr 2016 der nationalen Emissionsberichtserstattung.

Die Beiträge der Sektoren aus Abfallbehandlung/Entsorgung zu den nationalen Gesamtemissionen sind für alle Schadstoffe gering, daher werden hier zunächst die statischen Zeitprofile beibehalten. Für alle anderen Sektoren wird das Vorgehen zur Umsetzung der meteorologischen und sonstigen zeitlichen Abhängigkeiten der Emissionen in Splitting-Faktoren im Folgenden beschrieben.

Tabelle 2: Anteile der NFR-Sektoren an den übergeordneten SNAP-Sektoren

| SNAP | NFR | NO_x | PM_{10} | $\text{PM}_{2.5}$ | NH_3 | NMVOC | SO_x | CO |
|------|------|---------------|------------------|-------------------|---------------|-------|---------------|-----|
| 1 | 1A1a | 90% | 89% | 89% | 74% | 89% | 80% | 90% |
| 1 | 1A1b | 5% | 7% | 7% | 24% | 8% | 16% | 1% |
| 1 | 1A1c | 4% | 4% | 4% | 2% | 3% | 4% | 8% |
| 3 | 1A2a | 7% | 4% | 1% | 13% | 4% | 8% | 14% |
| 3 | 1A2b | 1% | 0% | 0% | 1% | 1% | 1% | 0% |

| SNAP | NFR | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} | NH ₃ | NMVOC | SO _x | CO |
|------|-----------|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|-------|-----------------|-----|
| 3 | 1A2c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 3 | 1A2d | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 3 | 1A2e | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 2% | 0% |
| 3 | 1A2f | 0% | 0% | 0% | 3% | 0% | 0% | 76% |
| 8 | 1A2gvii | 12% | 7% | 9% | 3% | 13% | 1% | 42% |
| 3 | 1A2gviii | 91% | 96% | 99% | 82% | 94% | 90% | 10% |
| 8 | 1A3ai(i) | 9% | 0% | 1% | 56% | 2% | 13% | 2% |
| 8 | 1A3aii(i) | 3% | 0% | 0% | 16% | 1% | 4% | 2% |
| 7 | 1A3bi | 58% | 13% | 20% | 97% | 60% | 63% | 73% |
| 7 | 1A3bii | 8% | 4% | 6% | 1% | 1% | 5% | 2% |
| 7 | 1A3biii | 33% | 8% | 12% | 2% | 5% | 32% | 7% |
| 7 | 1A3biv | 1% | 2% | 3% | 0% | 20% | 1% | 18% |
| 7 | 1A3bv | 0% | 0% | 0% | 0% | 13% | 0% | 0% |
| 7 | 1A3bvi | 0% | 47% | 38% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 7 | 1A3bvii | 0% | 26% | 21% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 8 | 1A3c | 9% | 54% | 38% | 3% | 2% | 18% | 0% |
| 8 | 1A3di(ii) | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 8 | 1A3dii | 26% | 8% | 10% | 3% | 4% | 55% | 1% |
| 1 | 1A3ei | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% |
| 8 | 1A3eii | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 2 | 1A4ai | 22% | 5% | 5% | 25% | 5% | 9% | 6% |
| 8 | 1A4aii | 9% | 2% | 2% | 1% | 4% | 0% | 1% |
| 2 | 1A4bi | 67% | 90% | 90% | 72% | 91% | 72% | 89% |
| 8 | 1A4bii | 0% | 1% | 1% | 0% | 37% | 0% | 32% |
| 2 | 1A4ci | 11% | 5% | 5% | 3% | 4% | 19% | 5% |
| 8 | 1A4cii | 26% | 27% | 37% | 4% | 33% | 2% | 15% |
| 8 | 1A4ciii | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% | 4% | 0% |
| 2 | 1A5a | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 8 | 1A5b | 4% | 1% | 1% | 13% | 5% | 3% | 4% |
| 5 | 1B1a | 0% | 100% | 100% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 1B1b | 1% | 1% | 3% | 0% | 4% | 1% | 1% |
| 5 | 1B1c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |

| SNAP | NFR | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} | NH ₃ | NMVOC | SO _x | CO |
|------|--------|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|-------|-----------------|------|
| 5 | 1B2ai | 0% | 0% | 0% | 0% | 23% | 0% | 0% |
| 4 | 1B2aiv | 0% | 0% | 0% | 0% | 51% | 0% | 0% |
| 5 | 1B2av | 0% | 0% | 0% | 0% | 63% | 0% | 0% |
| 5 | 1B2b | 100% | 0% | 0% | 0% | 14% | 100% | 100% |
| 9 | 1B2c | 39% | 0% | 0% | 0% | 74% | 97% | 82% |
| 5 | 1B2d | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2A1 | 17% | 5% | 15% | 12% | 1% | 8% | 0% |
| 4 | 2A2 | 5% | 1% | 2% | 0% | 0% | 1% | 0% |
| 4 | 2A3 | 13% | 1% | 1% | 6% | 1% | 13% | 0% |
| 4 | 2A5a | 0% | 36% | 13% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2A5b | 0% | 30% | 10% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2A5c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2A6 | 3% | 4% | 8% | 1% | 0% | 2% | 0% |
| 4 | 2B1 | 3% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B2 | 29% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B3 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B5 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B6 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B7 | 0% | 0% | 0% | 10% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B10a | 0% | 1% | 3% | 70% | 6% | 25% | 0% |
| 4 | 2B10b | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C1 | 24% | 14% | 27% | 1% | 6% | 37% | 87% |
| 4 | 2C2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C3 | 0% | 1% | 4% | 0% | 0% | 6% | 12% |
| 4 | 2C4 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C5 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% |
| 4 | 2C6 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C7a | 0% | 0% | 1% | 0% | 0% | 3% | 0% |
| 4 | 2C7b | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C7c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C7d | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3a | 0% | 0% | 0% | 0% | 17% | 0% | 0% |

| SNAP | NFR | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} | NH ₃ | NMVOC | SO _x | CO |
|------|---------|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|-------|-----------------|------|
| 4 | 2D3b | 1% | 1% | 1% | 0% | 2% | 2% | 0% |
| 4 | 2D3c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3d | 0% | 0% | 0% | 0% | 37% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3e | 0% | 0% | 0% | 0% | 7% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3f | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3g | 0% | 0% | 0% | 0% | 8% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3h | 0% | 0% | 0% | 0% | 12% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3i | 0% | 0% | 0% | 0% | 19% | 0% | 0% |
| 6 | 2G | 100% | 18% | 44% | 100% | 0% | 100% | 100% |
| 4 | 2H1 | 3% | 0% | 0% | 0% | 5% | 1% | 0% |
| 4 | 2H2 | 0% | 1% | 2% | 0% | 18% | 0% | 0% |
| 4 | 2H3 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2I | 0% | 4% | 8% | 0% | 5% | 0% | 0% |
| 4 | 2J | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 6 | 2K | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 6 | 2L | 0% | 82% | 56% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B1a | 1% | 9% | 41% | 10% | 37% | 0% | 0% |
| 10 | 3B1b | 1% | 6% | 26% | 11% | 36% | 0% | 0% |
| 10 | 3B2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B3 | 0% | 9% | 3% | 15% | 7% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4a | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4d | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4e | 0% | 0% | 1% | 1% | 1% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4f | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4gi | 0% | 7% | 3% | 1% | 4% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4gii | 0% | 6% | 4% | 1% | 5% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4giii | 0% | 4% | 5% | 2% | 3% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4giv | 0% | 2% | 2% | 0% | 1% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4h | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Da1 | 53% | 0% | 0% | 16% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Da2a | 31% | 0% | 0% | 31% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Da2b | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |

| SNAP | NFR | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} | NH ₃ | NMVOC | SO _x | CO |
|------|---------|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|-------|-----------------|------|
| 10 | 3Da2c | 9% | 0% | 0% | 9% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Da3 | 4% | 0% | 0% | 1% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Da4 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Db | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Dc | 0% | 56% | 15% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Dd | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3De | 0,0% | 0,0% | 0,0% | 0,0% | 4,7% | 0,0% | 0,0% |
| 10 | 3Df | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3F | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3I | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5A | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5B1 | 0% | 0% | 0% | 57% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5B2 | 0% | 0% | 0% | 43% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1a | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1bi | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1bii | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1biii | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1biv | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1bv | 61% | 0% | 0% | 0% | 1% | 3% | 18% |
| 9 | 5C1bvi | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5D1 | 0% | 0% | 0% | 0% | 25% | 0% | 0% |
| 9 | 5D2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5D3 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5E | 0% | 99% | 100% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 5 | 6A | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |

Tabelle 3: Anteile der NFR-Sektoren an den nationalen Gesamtemissionen

| SNAP | NFR | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} | NH ₃ | NMVOC | SO _x | CO |
|------|------|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|-------|-----------------|----|
| 1 | 1A1a | 22% | 4% | 8% | 0% | 1% | 48% | 5% |
| 1 | 1A1b | 1% | 0% | 1% | 0% | 0% | 9% | 0% |
| 1 | 1A1c | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% | 2% | 0% |
| 3 | 1A2a | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% | 1% |

| SNAP | NFR | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} | NH ₃ | NMVOC | SO _x | CO |
|------|-----------|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|-------|-----------------|-----|
| 3 | 1A2b | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 3 | 1A2c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 3 | 1A2d | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 3 | 1A2e | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 3 | 1A2f | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 6% |
| 8 | 1A2gvii | 1% | 1% | 1% | 0% | 0% | 0% | 5% |
| 3 | 1A2gviii | 6% | 1% | 2% | 0% | 1% | 10% | 1% |
| 8 | 1A3ai(i) | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 8 | 1A3aii(i) | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 7 | 1A3bi | 21% | 2% | 4% | 2% | 5% | 0% | 18% |
| 7 | 1A3bii | 3% | 1% | 1% | 0% | 0% | 0% | 1% |
| 7 | 1A3biii | 12% | 1% | 2% | 0% | 0% | 0% | 2% |
| 7 | 1A3biv | 0% | 0% | 1% | 0% | 2% | 0% | 5% |
| 7 | 1A3bv | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% | 0% |
| 7 | 1A3bvi | 0% | 7% | 7% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 7 | 1A3bvii | 0% | 4% | 4% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 8 | 1A3c | 1% | 4% | 4% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 8 | 1A3di(ii) | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 8 | 1A3dii | 2% | 1% | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 1 | 1A3ei | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 8 | 1A3eii | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 2 | 1A4ai | 2% | 1% | 1% | 0% | 0% | 1% | 1% |
| 8 | 1A4aii | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 2 | 1A4bi | 5% | 10% | 20% | 0% | 3% | 4% | 18% |
| 8 | 1A4bii | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% | 4% |
| 2 | 1A4ci | 1% | 1% | 1% | 0% | 0% | 1% | 1% |
| 8 | 1A4cii | 3% | 2% | 4% | 0% | 1% | 0% | 2% |
| 8 | 1A4ciii | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 2 | 1A5a | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 8 | 1A5b | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% |
| 5 | 1B1a | 0% | 2% | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 1B1b | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |

| SNAP | NFR | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} | NH ₃ | NMVOC | SO _x | CO |
|------|--------|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|-------|-----------------|-----|
| 5 | 1B1c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 5 | 1B2ai | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% | 0% |
| 4 | 1B2aiv | 0% | 0% | 0% | 0% | 4% | 0% | 0% |
| 5 | 1B2av | 0% | 0% | 0% | 0% | 2% | 0% | 0% |
| 5 | 1B2b | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 1B2c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% |
| 5 | 1B2d | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2A1 | 1% | 1% | 1% | 0% | 0% | 2% | 0% |
| 4 | 2A2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2A3 | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% | 3% | 0% |
| 4 | 2A5a | 0% | 5% | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2A5b | 0% | 4% | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2A5c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2A6 | 0% | 1% | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B1 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B2 | 2% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B3 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B5 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B6 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B7 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2B10a | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% | 6% | 0% |
| 4 | 2B10b | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C1 | 2% | 2% | 2% | 0% | 0% | 8% | 24% |
| 4 | 2C2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C3 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% | 3% |
| 4 | 2C4 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C5 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C6 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C7a | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% |
| 4 | 2C7b | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C7c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2C7d | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |

| SNAP | NFR | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} | NH ₃ | NMVOC | SO _x | CO |
|------|---------|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|-------|-----------------|----|
| 6 | 2D3a | 0% | 0% | 0% | 0% | 9% | 0% | 0% |
| 4 | 2D3b | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2D3c | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3d | 0% | 0% | 0% | 0% | 20% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3e | 0% | 0% | 0% | 0% | 4% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3f | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3g | 0% | 0% | 0% | 0% | 4% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3h | 0% | 0% | 0% | 0% | 6% | 0% | 0% |
| 6 | 2D3i | 0% | 0% | 0% | 0% | 10% | 0% | 0% |
| 6 | 2G | 0% | 5% | 7% | 0% | 0% | 0% | 1% |
| 4 | 2H1 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2H2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% | 0% |
| 4 | 2H3 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2I | 0% | 1% | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 4 | 2J | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 6 | 2K | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 6 | 2L | 0% | 21% | 9% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B1a | 0% | 1% | 2% | 10% | 7% | 0% | 0% |
| 10 | 3B1b | 0% | 1% | 1% | 10% | 7% | 0% | 0% |
| 10 | 3B2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B3 | 0% | 1% | 0% | 14% | 1% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4a | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4d | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4e | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4f | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4gi | 0% | 1% | 0% | 1% | 1% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4gii | 0% | 1% | 0% | 1% | 1% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4giii | 0% | 1% | 0% | 2% | 1% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4giv | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3B4h | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Da1 | 6% | 0% | 0% | 15% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Da2a | 3% | 0% | 0% | 29% | 0% | 0% | 0% |

| SNAP | NFR | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} | NH ₃ | NMVOC | SO _x | CO |
|------|---------|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|-------|-----------------|----|
| 10 | 3Da2b | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Da2c | 1% | 0% | 0% | 9% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Da3 | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Da4 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Db | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Dc | 0% | 9% | 1% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3Dd | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3De | 0% | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% | 0% |
| 10 | 3Df | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3F | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 10 | 3I | 0% | 0% | 0% | 1% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5A | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5B1 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5B2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1a | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1bi | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1bii | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1biii | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1biv | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1bv | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C1bvi | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5C2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5D1 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5D2 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5D3 | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 9 | 5E | 0% | 3% | 6% | 0% | 0% | 0% | 0% |
| 5 | 6A | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% | 0% |

4.1 Kraftwerke

Die durch den Betrieb von Kraftwerken verursachten Emissionen (direkt am Schornstein und indirekt durch Erzeugung und Verteilung von Brennstoffen) sind in verschiedenen NFR-Sektoren enthalten und können unterschiedlich zusammengefasst werden. Relevant sind hier die oberste Ebene der SNAP-Sektoren (in dieser Aggregationsstufe gehen die Emissionen in das Modell RCG ein) sowie das Gridding-Tool GRETA, für das die Hauptgruppe A definiert ist.

Der SNAP-Sektor 1 (Verbrennung in der Energie- und Transformationsindustrie) umfasst die NFR-Sektoren 1A1a (Public electricity and heat production), 1A1b (Petroleum refining), 1A1c (Manufacture of solid fuels and other energy industries) und 1A3ei (Pipeline transport).

In der in GRETA definierten Hauptgruppe A (Schneider et al., 2016) sind folgende NFR-Sektoren enthalten: 1A1a (Public electricity and heat production), 1A1b (Petroleum refining), 1A1c (Manufacture of solid fuels and other energy industries), 1A3ei (Pipeline transport), 1B1b (Fugitive emission from solid fuels: Solid fuel transformation), 1B2ai (Fugitive emissions oil: Exploration, production, transport), 1B2aiv (Fugitive emissions oil: Refining / storage), 1B2av (Distribution of oil products), 1B2b (Fugitive emissions from natural gas (exploration, production, processing, transmission, storage, distribution and other)), also zusätzlich zu SNAP 1 auch einige NFR-Sektoren aus SNAP 4 (Produktionsprozesse) und SNAP 5 (Gewinnung und Verteilung von fossilen Brennstoffen).

In Tabelle 4 sind für die hier betrachteten Luftschadstoffe die Anteile der zu Hauptgruppe A zusammengefassten NFR-Sektoren an den Gesamtemissionen dieser Hauptgruppe für Deutschland 2016 in Summe ausgewiesen. Für die meisten Schadstoffe werden die Emissionen aus Hauptgruppe A durch den NFR-Sektor 1A1a (public electricity and heat production) dominiert. Für die NMVOC und teilweise für NH₃ und SO_x sind auch NFR-Sektoren zur Raffinierung, Verteilung und Lagerung von Erdölprodukten (1A1b, 1B2ai, 1B2aiv, 1B2av) relevant.

Tabelle 4: Anteile der zu Hauptgruppe A zusammengefassten NFR-Sektoren an den Gesamtemissionen dieser Hauptgruppe für Deutschland 2016

| NFR-Sektor | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} | NH ₃ | NMVOC | SO _x | CO |
|--|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|-------|-----------------|-------|
| 1A1a Public electricity and heat production | 89,8% | 85,6% | 86,6% | 73,9% | 11,5% | 80,0% | 87,0% |
| 1A1b Petroleum refining | 5,2% | 6,5% | 6,4% | 23,6% | 1,0% | 15,5% | 1,0% |
| 1A1c Manufacture of solid fuels and other energy industries | 4,3% | 3,8% | 3,9% | 2,3% | 0,4% | 4,0% | 8,1% |
| 1A3ei Pipeline transport | 0,5% | 0,1% | 0,1% | 0,1% | 0,0% | 0,0% | 0,6% |
| 1B1b Fugitive emission from solid fuels: Solid fuel transformation | 0,2% | 4,0% | 3,0% | 0,1% | 4,2% | 0,5% | 3,1% |
| 1B2ai Fugitive emissions oil: Exploration, production, transport | 0,0% | 0,0% | 0,0% | 0,0% | 7,5% | 0,0% | 0,0% |
| 1B2aiv Fugitive emissions oil: Refining / storage | 0,0% | 0,0% | 0,0% | 0,0% | 50,2% | 0,0% | 0,0% |
| 1B2av Distribution of oil products | 0,0% | 0,0% | 0,0% | 0,0% | 20,7% | 0,0% | 0,0% |
| 1B2b Fugitive emissions from natural gas | 0,0% | 0,0% | 0,0% | 0,0% | 4,4% | 0,0% | 0,1% |

Input für RCG ist die oberste SNAP-Ebene. Prinzipiell können die NFR-Sektoren in jeder Gitterbox unterschiedlich zu den übergeordneten SNAP-Sektoren (oberste Ebene) beitragen, was bei unterschiedlichem Zeitverhalten durch unterschiedliche Mittelungen zu einer großen Zahl nur minimal verschiedener SF führen würde. Um dies zu vermeiden, wurde entschieden, z.B. Emissionen aus NFR-Sektor 1B2b, die sich auf feste Brennstoffe beziehen, aber SNAP 4

zugeordnet sind, zeitlich anhand geeigneter Wirtschaftszweig-Daten zu verteilen, siehe Abschnitt 4.3. Tabelle 4 zeigt, dass der Anteil dieses NFR-Sektors für alle Schadstoffe unter 5% der Emissionen aus Hauptgruppe A beträgt. Außerdem werden diese Emissionen räumlich flächig verteilt, so dass auch sichergestellt ist, dass sie nicht an einzelnen Gitterboxen dominieren.

Bei NFR-Sektor 1A1b sieht dies anders aus: Die großen Raffinerien sind als Punktquellen in GRETA enthalten. Selbst bei größeren Gitterboxen ist davon auszugehen, dass die Raffinerien das Emissionsverhalten der Boxen, in denen sie liegen, dominieren. Den als Punktquellen zugeordneten Raffinerien werden daher eigene SF zugeordnet mit einem flachen zeitlichen Verlauf (Raffinerien laufen außerhalb ihrer Wartungsphasen durch).

Bei der zeitlichen Verteilung der Emissionen wird daher im Folgenden unterschieden:

- Die NFR-Sektoren 1A1a, 1A1c und 1A3ei werden zeitlich verteilt wie die Kraftwerksemissionen, dies wird in diesem Abschnitt beschrieben.
- Die NFR-Sektoren 1B1b, 1B2ai, 1B2aiv, 1B2av, 1B2b werden zeitlich verteilt wie in Abschnitt 4.3 beschrieben (Monatswerte aus Daten zu Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel, Wochen- und Tagesgang aus RCG-Default). NFR-Sektor 1A1b (Raffinerien) bekommt einen flachen Tagesgang.

In GRETA werden Emissionen der Hauptgruppe A räumlich zum Teil auf Punktquellen, zum Teil auf Flächenquellen verteilt.

Da sich im Vergleich zur Menge der emittierten Schadstoffe die Anzahl und räumliche Lage der Punktquellen nur langsam ändert, werden letztere in GRETA standardmäßig in 5-Jahresschritten aktualisiert. Für das Jahr 2015, das den hier betrachteten Jahren 2016 und 2017 am nächsten liegt, sind in GRETA 185 Punktquellen enthalten, Grundlage ist das PRTR Register (alle Anlagen mit NACE (Nomenclature statistique des activités économiques dans la Communauté européenne) Code 3511 (Energiesektor)).

Die nach PRTR für diese Punktquellen berichteten Emissionen werden räumlich direkt den entsprechenden Gitterzellen zugeordnet. Die Differenz dieser Summe zu den nationalen Gesamtemissionen des NFR-Sektors 1A1a sowie die Summe der NFR-Sektoren 1A1c und 1A3ei wird anhand entsprechender Verteilparameter flächig verteilt.

ENTSO-E-Daten

Zur zeitlichen Verteilung der Kraftwerksemissionen werden die bereits in Abschnitt 2.3.3 vorgestellten Daten verwendet, die auf der Website von ENTSO-E (European Network of Transmission System Operators for Electricity, europäischer Verband der Übertragungsnetzbetreiber) zur Verfügung gestellt werden. Es wird nicht auf die dort auf Länderebene bereits aggregierten Daten zurückgegriffen, sondern auf die Daten für die einzelnen Kraftwerksblöcke.

Für die meisten europäischen Länder sind ab dem Jahr 2015 auf Ebene der Kraftwerksblöcke (> 1.000 MW elektrische Leistung) stündliche Werte für die Stromerzeugung (Einheit: MWh) verfügbar, ältere Daten befinden sich, zum Teil unvollständig und weniger detailliert, in einem Archiv. Die Kraftwerksblöcke können zu Kraftwerken zusammengefasst werden (nach EIC-Kraftwerkscode). Für den Zugang zu den Daten ist eine Registrierung erforderlich, unter https://transparency.entsoe.eu/content/static_content/Static%20content/knowledge%20base/SFTP-Transparency_Docs.html sind das Vorgehen und der Zugang zu den Daten beschrieben.

Die Kraftwerksliste (open power system data, 2018) enthält EIC codes und gps Koordinaten. Diese wurden innerhalb eines Fangradius von 1 km den GPS Koordinaten der PRTR-Punktquellen zugeordnet.

Neben den Daten auf Ebene der Kraftwerksblöcke sind viertelstündliche Daten differenziert nach Brennstoff vorhanden. Diese gibt es auf den Aggregationsebenen

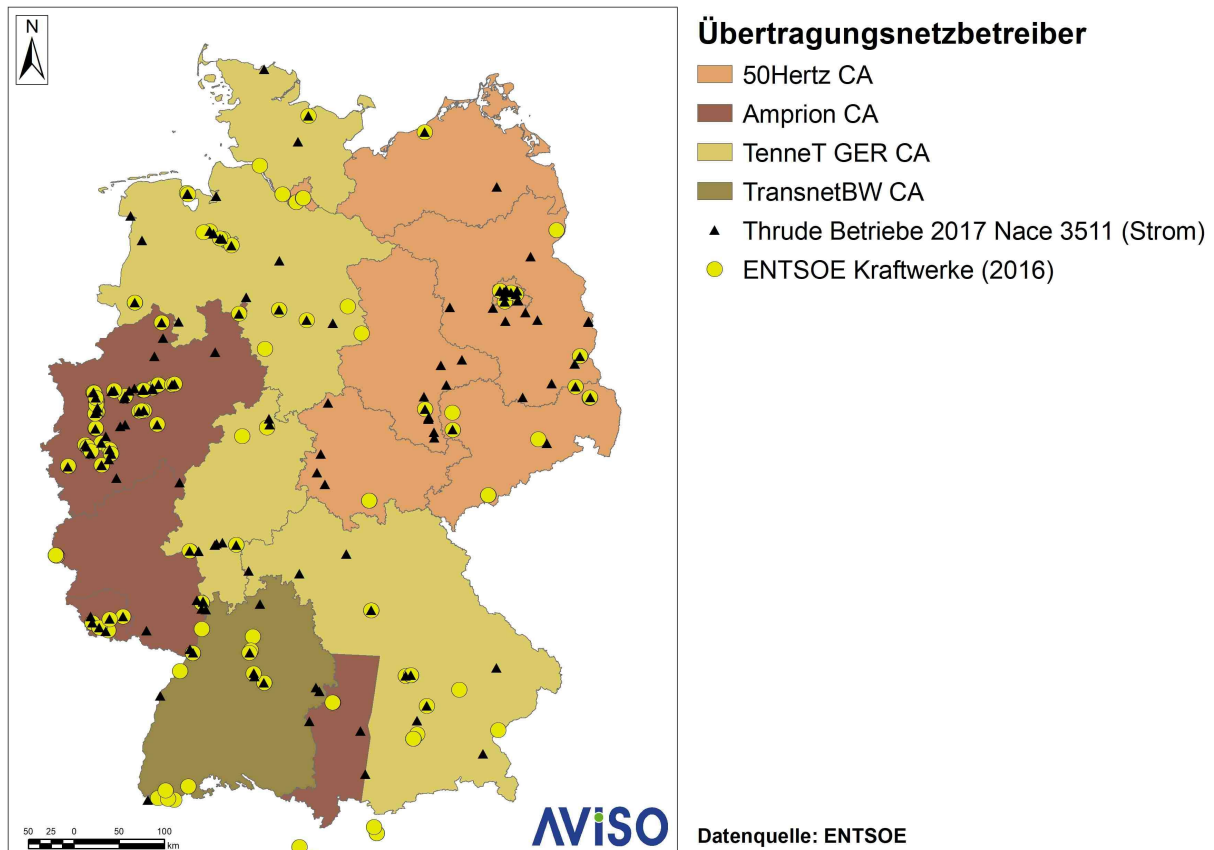
- ▶ „Control Area“ (für Deutschland die Übertragungsnetzbetreiber 50Hertz, Amprion, TenneT und TransnetBW)
- ▶ „Country“ (hier: Deutschland gesamt)
- ▶ „Bidding zone“ (verschiedene Länder zu Bieterzonen zusammengefasst, z.B. Deutschland, Luxemburg, Österreich)

Für das Jahr 2015 wurden von 185 Punktquellen in GRETA aus Hauptgruppe A innerhalb eines Fangradius von einem Kilometer für 70 Punktquellen eine Zuordnung zu einem oder mehreren ENTSO-E Kraftwerksblöcken gefunden. Für das Jahr 2017 wurden von 155 Punktquellen aus dem Energiesektor von PRTR für 63 eine entsprechende Zuordnung gefunden. Das entspricht jeweils etwa einem Anteil von 40%.

In Abbildung 30 sind für das Jahr 2017 die PRTR-Betriebe aus dem Sektor Stromerzeugung und die zu mittels EIC Kraftwerkscode zusammengefassten Blöcke nach ENTSOE für Deutschland in einer Karte dargestellt. Es ist zu erkennen, dass es sowohl ENTSO-E Kraftwerksdaten gibt, zu denen keine PRTR-Punktquellen gefunden werden konnten, wie auch PRTR-Punktquellen, zu denen keine ENTSO-E Daten gefunden werden konnten.

Außerdem dargestellt sind in Abbildung 30 die Gebiete der vier Übertragungsnetzbetreiber in Deutschland (50Hertz, Amprion, TenneT und TransnetBW), für die wie oben beschrieben aggregierte Zeitreihen vorliegen.

Abbildung 30: PRTR-Betriebe des Sektors Stromerzeugung und ENTSOE-Kraftwerksdaten pro Übertragungsnetzbetreiber für Deutschland 2017



Zeitliche Verteilung für die Punktquellen

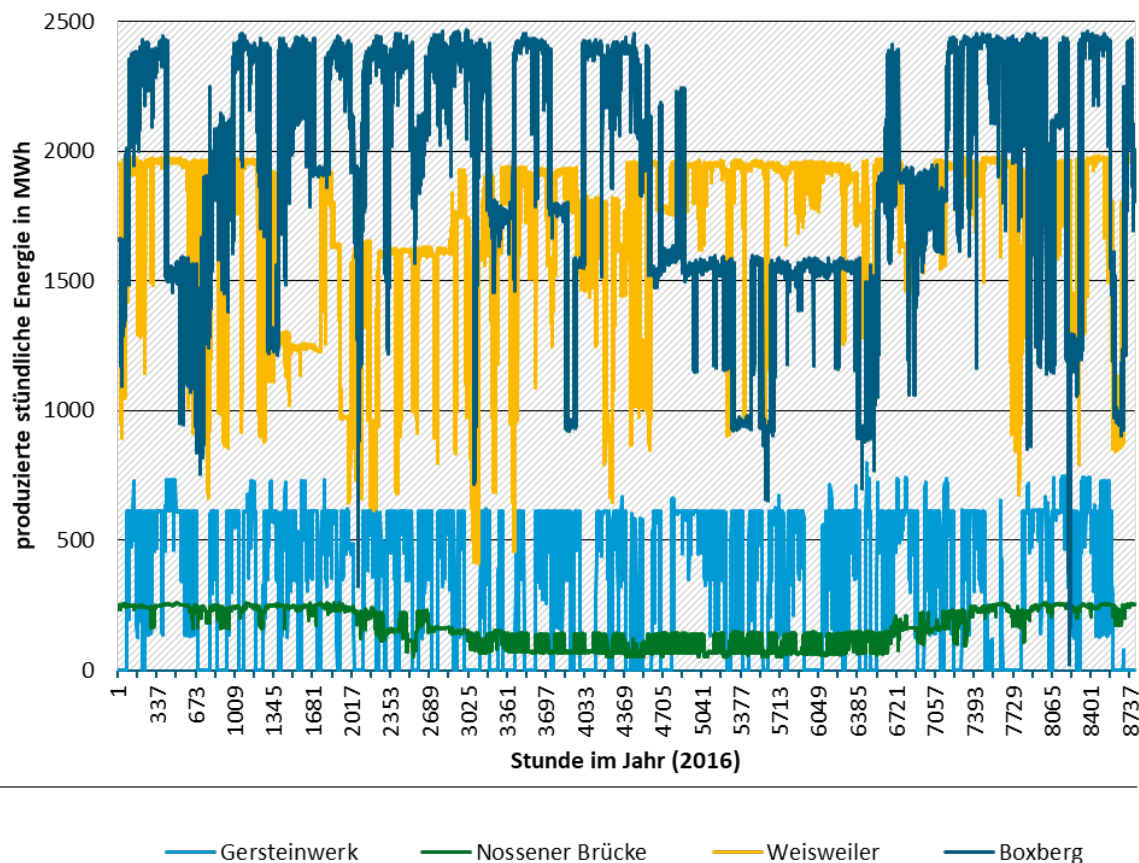
Für die Punktquellen in GRETA, denen ein oder mehrere Kraftwerksblöcke aus den ENTSO-E-Daten zugeordnet werden können, ergeben sich die Splitting-Faktoren direkt aus den ENTSO-E-Daten: Die stündliche Stromerzeugung aller zu einer Punktquelle gehörenden Blöcke wird summiert und dann normiert.

Im Folgenden werden die stündliche Stromerzeugung und die daraus resultierenden Splitting-Faktoren für vier Kraftwerke beispielhaft gezeigt:

- ▶ Boxberg: Braunkohlekraftwerk aus dem Lausitzer Revier, Nettoleistung: 2.575 MW
- ▶ Weisweiler: Braunkohlekraftwerk aus dem Rheinischen Revier, Nettoleistung: 2.457 MW
- ▶ Gersteinwerk: Erdgaskraftwerk bei Hamm (Westfalen), Nettoleistung: 1.397 MW
- ▶ Nossener Brücke: Heizkraftwerk, Erdgas (ersatzweise Öl) in Dresden, elektrische Leistung: 260 MWel

In Abbildung 31 ist die stündliche Stromerzeugung 2016 für die vier Kraftwerke (jeweils Summe über alle Blöcke) als Zeitreihe dargestellt.

Abbildung 31: Stündliche Stromerzeugung 2016 für vier Kraftwerke nach ENTSO-E



Datenquelle: <https://www.entsoe.eu/>

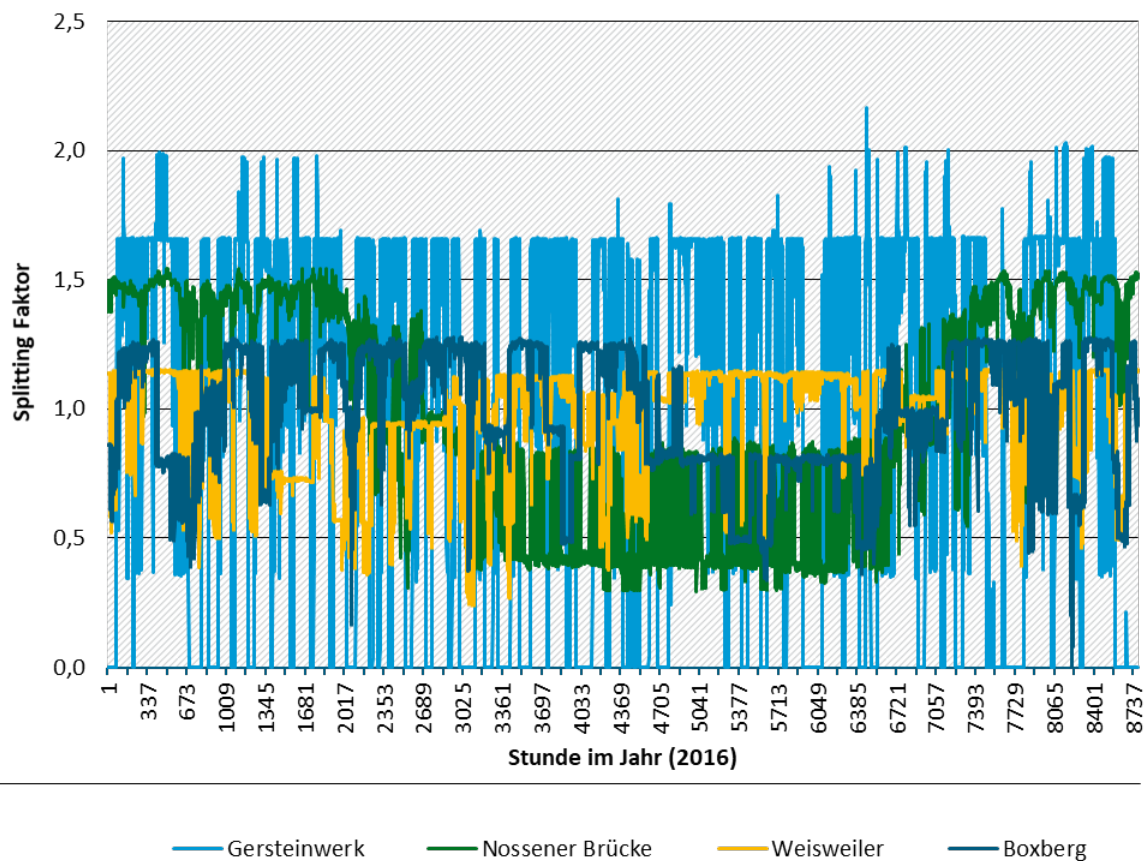
Bei Boxberg und Weisweiler handelt es sich um zwei große Braunkohlekraftwerke im Osten bzw. Westen Deutschlands, in beiden Kraftwerken sind aktuell vier Blöcke in Betrieb. Sie liefern im Wesentlichen Grundlast, in der Abbildung ist zu erkennen, wann einzelne Blöcke zu- bzw. abgeschaltet werden.

Das Gersteinwerk besteht aktuell aus 6 erdgasbetriebenen Blöcken (zwei davon dauerkonserviert), ein weiterer Block ist geplant. Von diesen Blöcken dienen einige der Kapazitätsreserve, d.h. sie nehmen nicht am Strommarkt teil. Das Gersteinwerk liefert Mittel- und Spitzenlast.

Beim Kraftwerk „Nossener Brücke“ handelt es sich um ein gasbetriebenes Heizkraftwerk, das ersatzweise auch mit Öl betrieben werden kann. Zusätzlich zur dargestellten Stromabgabe wird Fernwärme bereitgestellt. In Abbildung 31 ist ein deutlicher Jahresgang zu erkennen.

In Abbildung 32 sind die Splitting-Faktoren dargestellt, die sich durch Normierung aus den Zeitreihen für die stündliche produzierte Energie (Abbildung 31) ergeben.

Abbildung 32: Splitting-Faktoren 2016 für vier Kraftwerke nach ENTSO-E



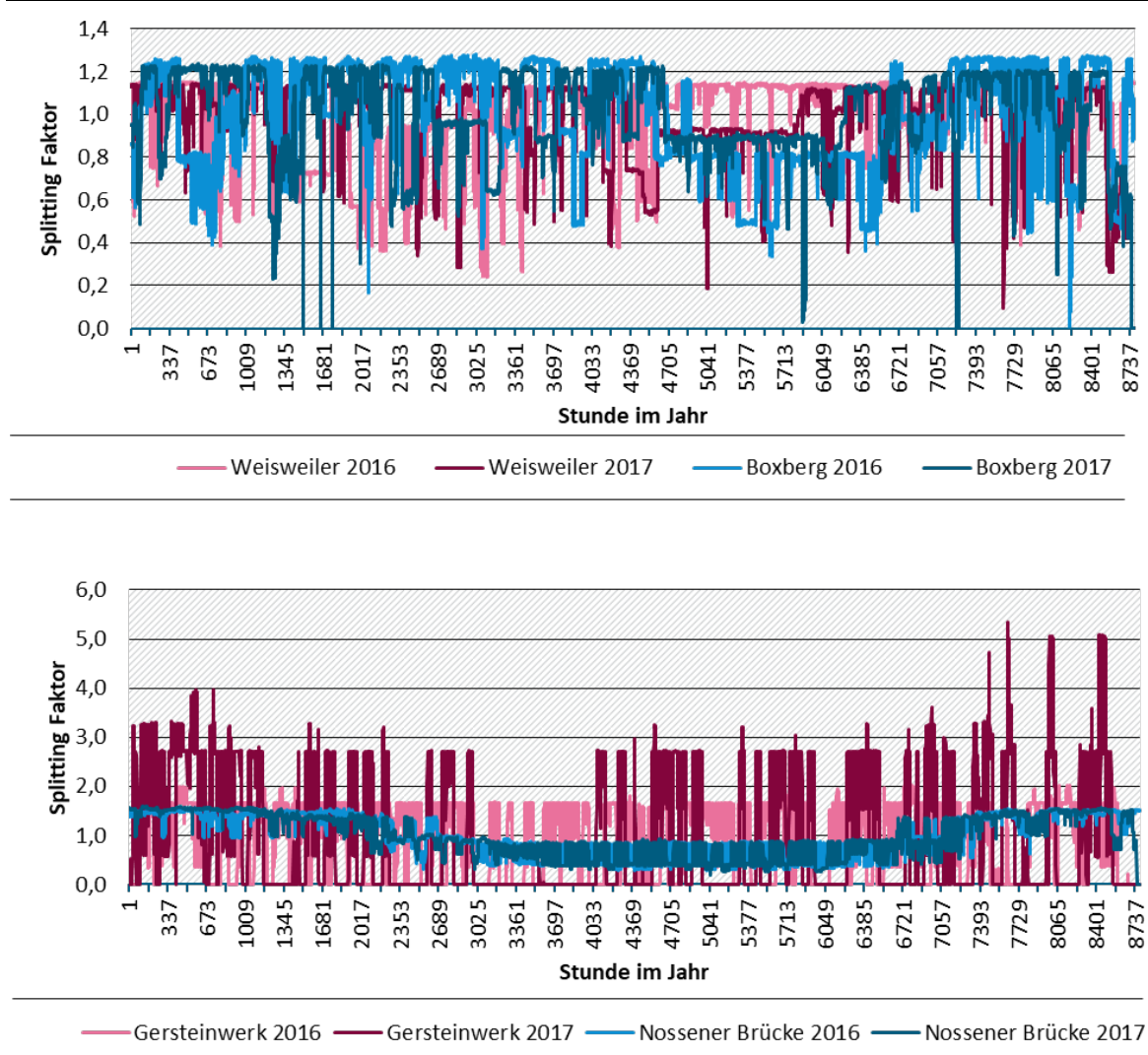
Datenquelle: <https://www.entsoe.eu/>

In dieser Darstellung ist gut zu erkennen, dass die Variabilität für das Gersteinwerk (Mittel- und Spitzenlast) am höchsten ist und für die beiden Braunkohlekraftwerke (Grundlast) am geringsten. Der Jahresgang für das Heizkraftwerk ist ebenfalls deutlich zu erkennen.

In Abbildung 33 sind die Splitting-Faktoren für die vier Kraftwerke für die Jahre 2016 und 2017 im Vergleich dargestellt, der Übersicht halber oben für Boxberg und Weisweiler und unten für Gersteinwerk und Nossener Brücke.

Die Splitting-Faktoren variieren von Jahr zu Jahr, am deutlichsten ist dies für das Mittel- und Spitzenlastkraftwerk „Gersteinwerk“ zu sehen. Aber auch die beiden Grundlastkraftwerke und das Heizkraftwerk zeigen Unterschiede im Jahresgang für 2016 und 2017.

Abbildung 33: Splitting-Faktoren 2016 im Vergleich mit 2017 für vier Kraftwerke nach ENTSO-E



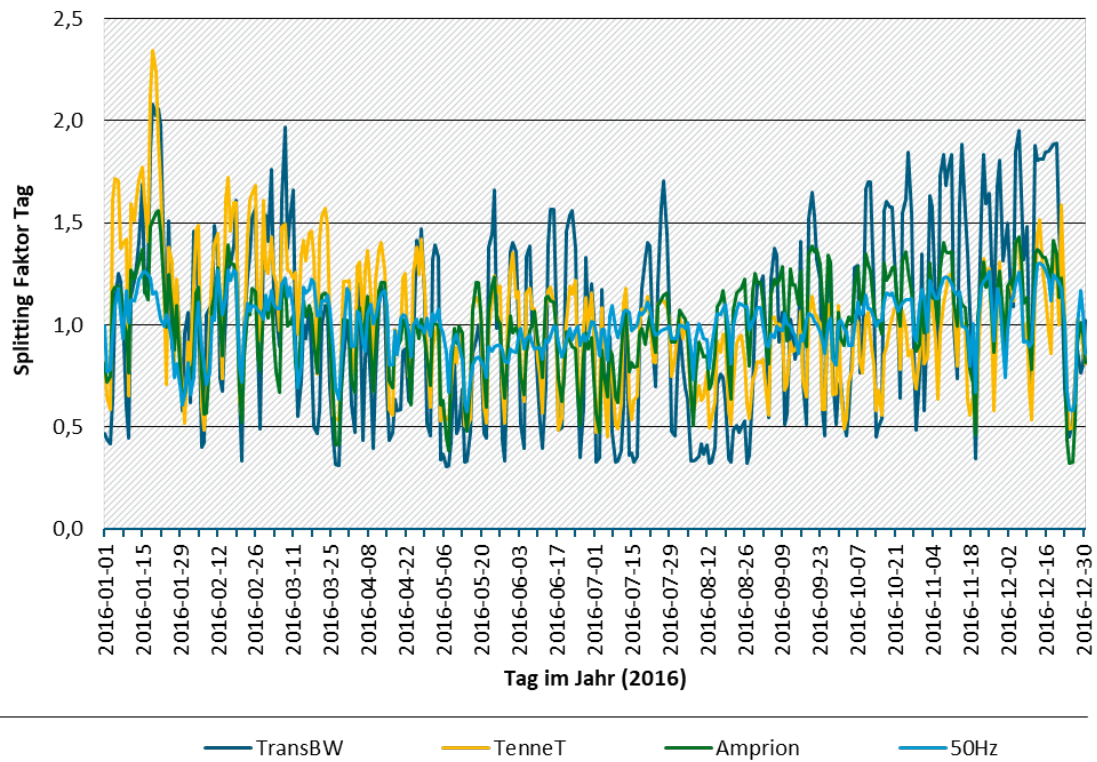
Datenquelle: <https://www.entsoe.eu/>

Zeitliche Verteilung für die Flächenquellen

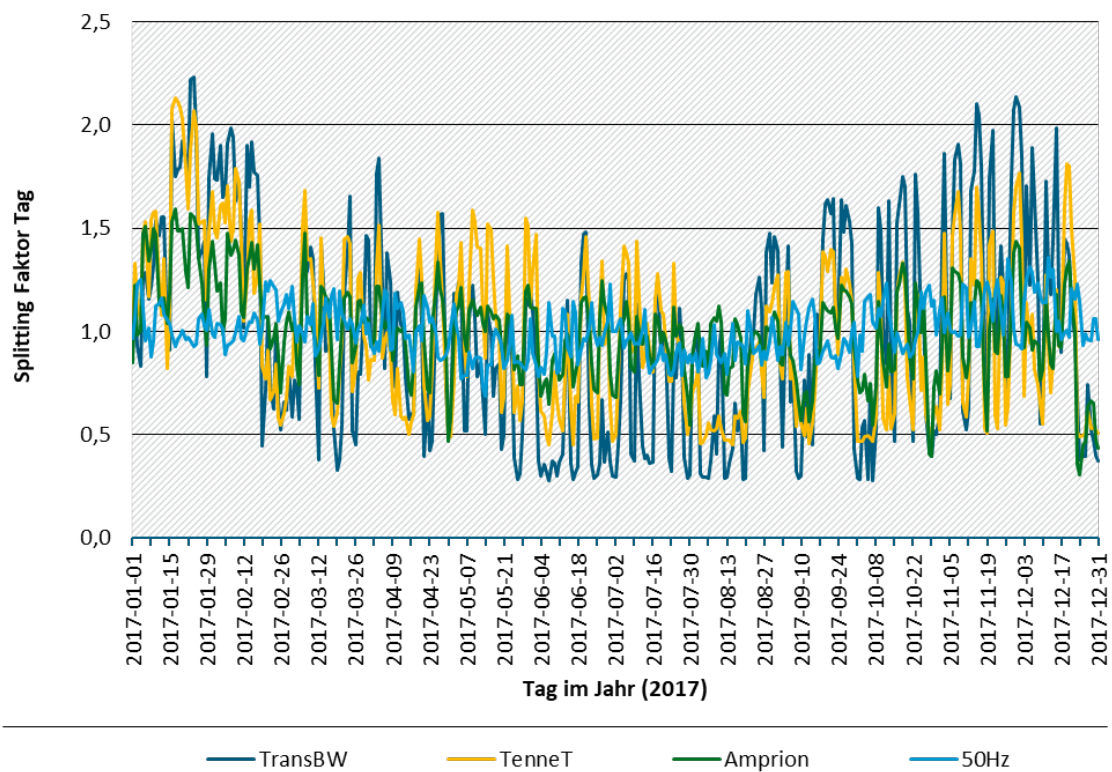
Die Punktquellen aus PRTR für den Sektor Stromerzeugung, denen keine Zeitreihe nach ENTSO-E zugeordnet werden kann, und alle auf Flächenquellen verteilten Emissionen der NFR-Sektoren 1A1c und 1A3ei, werden zeitlich wie folgt verteilt: Für die Gebiete der Übertragungsnetzbetreiber 50Hertz, Amprion, TenneT und TransnetBW (siehe Abbildung 30) werden jeweils mittlere Splitting-Faktoren aus den pro Gebiet summierten Zeitreihen des durch Verbrennung von Kohle, Gas, Öl, Biomasse oder Müll produzierten Stroms gebildet. Die Gitterboxen, die Emissionen aus nicht zugeordneten Punktquellen oder Flächenquellen der entsprechenden NFR-Sektoren enthalten, erhalten die mittleren Splitting-Faktoren der Übertragungsnetzbetreiber, in deren Gebieten sie liegen.

In Abbildung 34 sind die mittleren tagesbezogenen Splitting-Faktoren für die vier Gebiete für 2016 (oben) und 2017 (unten) dargestellt. In beiden Jahren ist in allen vier Gebieten ein Jahresgang (höhere Stromerzeugung im Winter) zu erkennen. Dieser ist jedoch unterschiedlich stark ausgeprägt, und auch die Streuung um den Jahresgang (Wochengang, sonstige Fluktuationen aufgrund von Wetter etc.) variiert zwischen den Gebieten und den Jahren.

Abbildung 34: Tagesbezogene Splitting-Faktoren 2016 (oben) und 2017 (unten) für die vier Übertragungsnetzbetreiber in Deutschland nach ENTSO-E



Datenquelle: <https://www.entsoe.eu/>



Datenquelle: <https://www.entsoe.eu/>

4.2 Kleinf Feuerungsanlagen

In diesem Abschnitt wird das Zeitverhalten der Emissionen aus Kleinf Feuerungsanlagen beschrieben. Diese werden in vier NFR-Sektoren berichtet: 1A4ai (Commercial/institutional), 1A4bi (Residential), 1A4ci (Agriculture/Forestry/Fishing) und 1A5a (Other stationary including military), die alle SNAP 2 zugeordnet sind.

Das Zeitverhalten hier setzt sich zusammen aus einem Jahresgang (Tag pro Jahr), der von den Außentemperaturen bestimmt wird, und überlagert einen Wochen- und einen Tagesgang, die vom Nutzerverhalten bestimmt werden.

Jahresgang

Emissionen, die bei der Bereitstellung von Warmwasser bzw. Prozesswärme entstehen, fallen gleichmäßig über das ganze Jahr an. Typische Werte für diesen Anteil liegen zwischen 10% und 20%. Emissionen, die bei der Deckung des Heizwärmebedarfs entstehen, hängen von der Außentemperatur ab. Zur zeitlichen Verteilung dieser Emissionen kann ein Ansatz analog zu den Gradtagzahlen verwendet werden. Gradtagzahlen werden zur Berechnung der Kosten von Wärmeversorgungsanlagen für die Raumheizung in einem Zeitraum Z verwendet und sind nach VDI Richtlinie 2067/DIN 4108 T6 wie folgt definiert:

$$G_{t20/15} = \sum_{z=1}^Z (20^{\circ}\text{C} - t_a)$$

Darin ist t_a die Außentemperatur, für die hier die Temperatur in 2 m Höhe über Grund aus der COSMO-DE Meteorologie gemittelt pro Klimaregion angesetzt wird. Als Heiztage gelten die Tage innerhalb der Heizperiode, an denen die Außentemperatur t_a unter der Heizgrenze liegt. Nach der deutschen Richtlinie gilt als Heizgrenze 15°C , in Österreich und der Schweiz gilt 12°C .

Hier ist nicht die Summe relevant, sondern die Zeitreihe der Differenzen der Außentemperatur an Heiztagen zu 20°C . Eine starr festgelegte Heizperiode soll nicht berücksichtigt werden.

Einen ähnlichen Ansatz verwendeten Aulinger et al. (2011) und Mues et al. (2014), sie setzten als Heizgrenze einen Wert von 18°C an.

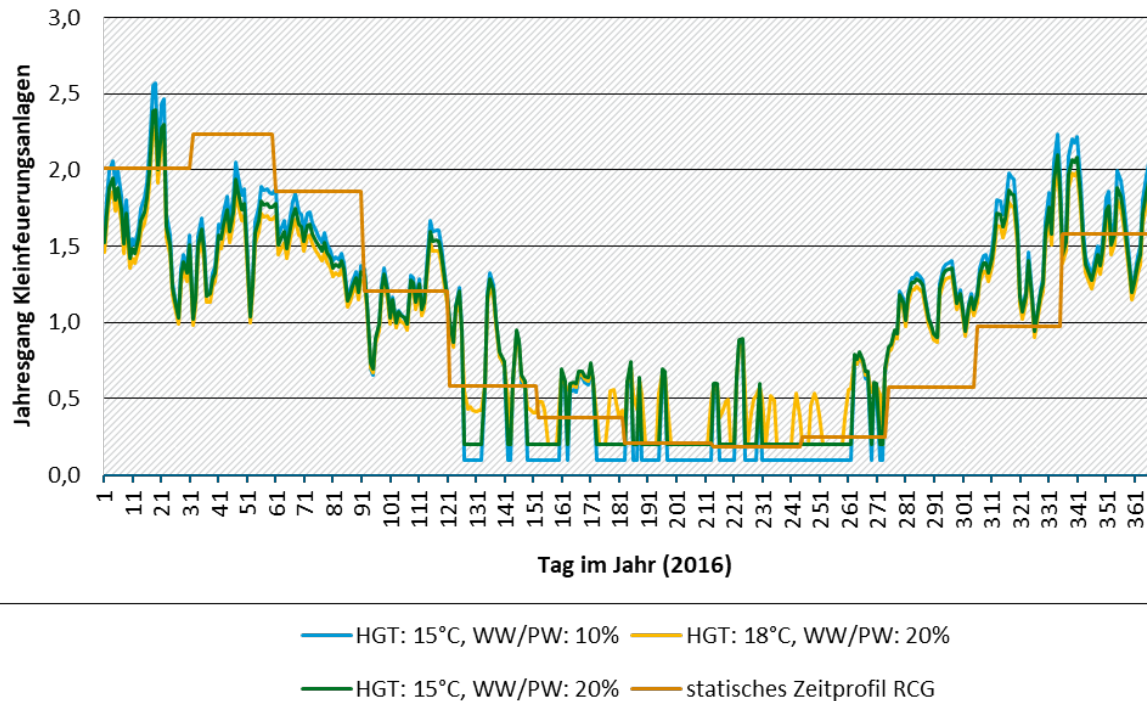
Der Jahresgang zur Verteilung der Emissionen aus Kleinf Feuerungsanlagen hängt damit ab vom Anteil Wärme für Warmwasser und Prozesswärme sowie von der Wahl der Heizgrenze. Die konkret für die zeitliche Verteilung verwendeten Werte können in TeResE mittels Steuerdatei gesetzt werden. In Abbildung 35 sind für verschiedene Werte die resultierenden Jahresgänge für eine ausgewählte Klimaregion im Vergleich mit dem aktuell in RCG verwendeten statischen Profil dargestellt. Für die Parameter sind folgende Einflüsse erkennbar:

- Je niedriger der Anteil für Warmwasser/Prozesswärme angesetzt ist, desto niedriger ist der „Offset“ der Kurve im Sommer, wenn nicht geheizt wird. Entsprechend werden mehr Emissionen auf die Wintertage verteilt.
- Je höher die Heizgrenze gewählt wird, desto häufiger werden auch Heizungsemissionen auf kühlere Sommertage verteilt. Entsprechend weniger Emissionen werden auf die Wintertage verteilt.

Die dynamischen Jahresgänge weisen deutlich mehr zeitliche Variabilität auf als der aktuell in RCG verwendete statische Jahresgang. Die grundsätzliche Verteilung auf die Jahreszeiten ist ähnlich.

Es wird für alle vier NFR-Sektoren (1A4ai, 1A4bi, 1A4ci, 1A5a) der gleiche Jahresgang verwendet.

Abbildung 35: Jahresgang zur zeitlichen Verteilung von Emissionen aus Kleinfeuerungsanlagen für die Klimaregion „Zentrale Mittelgebirge und Harz“ 2016 für verschiedene Werte für Heizgrenze und Anteil Warmwasser/Prozesswärme im Vergleich mit dem entsprechenden statischen Zeitprofil aus RCG



Datenquelle: COSMO-DE

Wochen- und Tagesgang

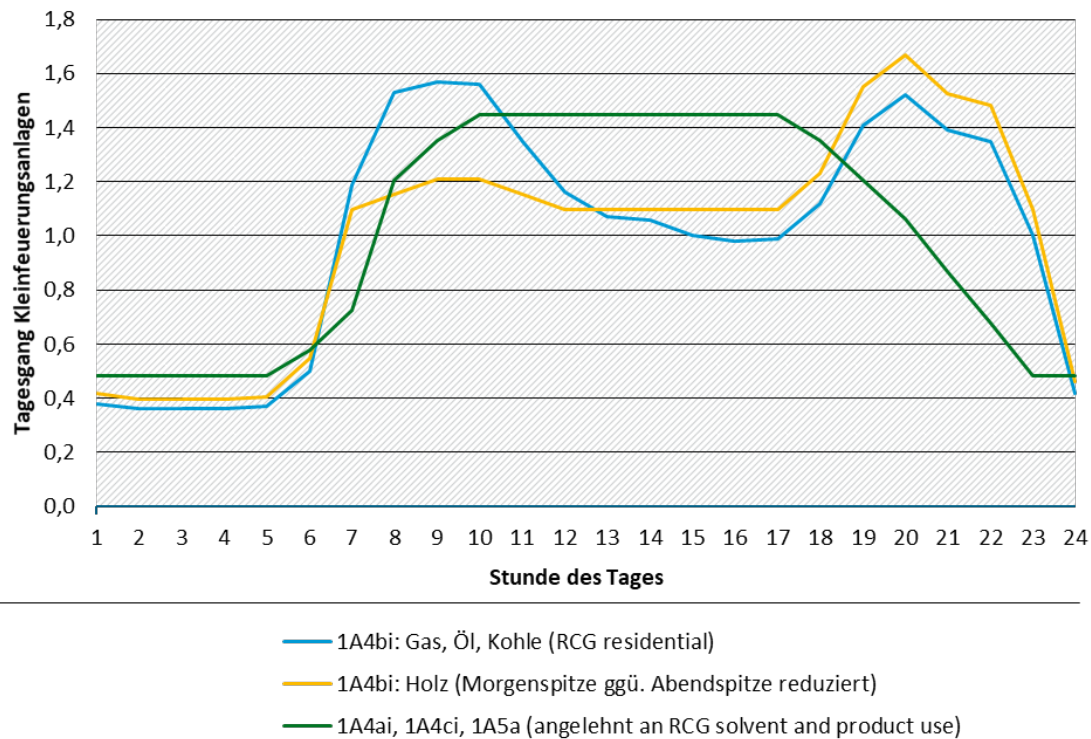
Zum Wochen- und zum Tagesgang der Emissionen aus Kleinfeuerungsanlagen wurden keine neuen Datenquellen für dynamische Zeitprofile gefunden. Es werden daher dem Jahresgang statische Zeitprofile pro Woche und Tag überlagert. Diese entsprechen, zum Teil leicht modifiziert, den aktuell in RCG verwendeten Profilen:

- Die Emissionen zur Wohngebäudeheizung (NFR 1A4bi) haben in RCG keinen Wochengang, die Emissionen aus kommerziellen Quellgruppen (1A4ai, 1A4ci, 1A5a) sind an Samstagen etwas und an Sonntagen stärker reduziert. Diese Annahmen werden übernommen.
- Für die Emissionen aus der Gas-, Öl- und Kohleverbrennung zur Heizung von Wohngebäuden (NFR 1A4bi) wird der Tagesgang aus RCG für den Sektor „residential“ verwendet. Der Verlauf hat eine Morgen- und Abendspitze, niedrigere Werte während des Tages, wenn viele Leute arbeiten und nicht zu Hause sind, und noch niedrigere Werte nachts, wenn die Temperatur zum Schlafen abgesenkt wird.
- Für die Emissionen aus der Holzverbrennung zur Heizung von Wohngebäuden (NFR 1A4bi) wird beim Tagesgang die Morgenspitze ggü. der Abendspitze etwas abgesenkt. Holzverbrennung findet vielfach in Komfortkaminen statt, die erst abends befeuert werden.

- Für die Emissionen aus Kleinfeuerungsanlagen im kommerziellen Bereich (1A4ai, 1A4ci, 1A5a) wird ein Tagesgang verwendet, der morgens ansteigt, tagsüber konstant bleibt, abends etwas flacher abfällt und nachts auf niedrigem Niveau konstant bleibt. Er ist angelehnt an das RCG-Profil „product and solvent use“.

Diese Tagesgänge sind in Abbildung 36 dargestellt.

Abbildung 36: Tagesgänge zur Verteilung der Emissionen auf Kleinfeuerungsanlagen



Datenquelle: RCG

Die verwendeten Tages- und Wochengänge werden in einer Steuerdatei des Tools TeResE hinterlegt und können geändert werden. Wenn z.B. Ätholometermessungen neue Erkenntnisse zum Tagesgang aus Holzfeuerungsanlagen liefern, könnten diese übernommen werden.

4.3 Industrie, Gewerbe, Energie ohne Kraftwerke

In dieser Gruppe werden alle die NFR-Sektoren betrachtet, deren Zeitabhängigkeit durch Produktionsprozesse gegeben ist. Sie sind nicht von der Meteorologie abhängig. Als Datenquelle dienen Produktionsindizes des statistischen Bundesamtes (DeStatis), diese liegen differenziert nach Wirtschaftszweigschlüssel als Monatswerte vor. Da zu Wochen- oder Tagesgängen keine Daten vorliegen, werden die Monatsgänge zur Konstruktion stündlicher Splitting-Faktoren mit den statischen Wochen- und Tagesgängen aus RCG kombiniert.

Aus SNAP-Sektor 1 (Verbrennung in der Energie- und Transformationsindustrie) betrifft dies den NFR-Sektor 1A1b (Petroleum refining). Weiterhin werden hier NFR-Sektoren aus den SNAP-Sektoren 3 (Verbrennung in der verarbeitenden Industrie), 4 (Produktionsprozesse), 5 (Gewinnung und Verteilung von fossilen Brennstoffen) und 6 (Lösungsmittel und andere Gebrauchsgegenstände) betrachtet, sofern ihr Zeitverhalten durch Produktionsindizes beschreibbar ist. Insgesamt betrifft dies 58 NFR-Sektoren.

Die Emissionen der meisten dieser NFR-Sektoren wurden bereits räumlich auf Kreisebene über Wirtschaftsdaten verteilt, häufig über die Beschäftigten der entsprechenden Wirtschaftszweige. Zeitlich liegen beim Statistischen Bundesamt auf Wirtschaftszweigebene monatliche Produktionsindizes vor, jedoch nur für Deutschland in Summe. Soweit möglich, werden die Produktionsindizes der bereits zur räumlichen Verteilung herangezogenen Wirtschaftszweige für die entsprechenden NFR-Sektoren zur zeitlichen Verteilung verwendet. In Tabelle 5 sind die Sektoren mit den entsprechenden Wirtschaftszweigschlüsseln aufgelistet, die Spalte „d_param_name“ enthält die zur räumlichen Verteilung, die letzte Spalte die zur zeitlichen Verteilung herangezogenen Schlüssel.

Tabelle 5: Liste der zeitlich über Produktionsindizes verteilten NFR-Sektoren: Jeweils Angabe der zur räumlichen (d_param_name, Stand: Erstellung des Berichts) und zur zeitlichen Verteilung herangezogenen Branchen nach Wirtschaftszweigschlüssel

| SNAP | NFR_CODE | NFR_longname | d_param_name | zeitlich |
|------|----------|---|--------------|-------------------------|
| 3 | 1A2a | 1A2a Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Iron and steel | P_WZ08_24 | P_WZ08_241 |
| 3 | 1A2b | 1A2b Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Non-ferrous metals | P_WZ08_24 | P_WZ08_24 |
| 3 | 1A2c | 1A2c Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Chemicals | P_WZ08_20 | P_WZ08_20 |
| 3 | 1A2d | 1A2d Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Pulp, Paper and Print | P_WZ08_17 | P_WZ08_17 |
| 3 | 1A2e | 1A2e Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Food processing, beverages and tobacco | P_WZ08_10 | P_WZ08_10 |
| 3 | 1A2f | 1A2f Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Non-metallic minerals | P_WZ08_23 | P_WZ08_23 |
| 3 | 1A2gviii | 1A2gviii Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Other (please specify in the IIR) | P_WZ08_C | Produzieren-des Gewerbe |
| 4 | 1B1b | 1B1b Fugitive emission from solid fuels: Solid fuel transformation | P_WZ08_19 | P_WZ08_19 |
| 4 | 1B2aiv | 1B2aiv Fugitive emissions oil: Refining / storage | P_WZ08_19 | P_WZ08_19 |
| 4 | 2A1 | 2A1 Cement production | P_WZ08_23 | P_WZ08_23 |
| 4 | 2A2 | 2A2 Lime production | P_WZ08_23 | P_WZ08_23 |
| 4 | 2A3 | 2A3 Glass production | P_WZ08_23 | P_WZ08_23 |

| SNAP | NFR_CODE | NFR_longname | d_param_name | zeitlich |
|------|----------|--|----------------|------------|
| 4 | 2A5a | 2A5a Quarrying and mining of minerals other than coal | P_WZ08_0609 | P_WZ08_08 |
| 4 | 2A5b | 2A5b Construction and demolition | P_WZ08_F | Baugewerbe |
| 4 | 2A5c | 2A5c Storage, handling and transport of mineral products | P_EW_DISTRICT | P_WZ08_23 |
| 4 | 2A6 | 2A6 Other mineral products (please specify in the IIR) | P_WZ08_23 | P_WZ08_23 |
| 4 | 2B1 | 2B1 Ammonia production | P_WZ08_20 | P_WZ08_20 |
| 4 | 2B2 | 2B2 Nitric acid production | P_WZ08_20 | P_WZ08_20 |
| 4 | 2B3 | 2B3 Adipic acid production | P_WZ08_20 | P_WZ08_20 |
| 4 | 2B5 | 2B5 Carbide production | P_WZ08_20 | P_WZ08_20 |
| 4 | 2B6 | 2B6 Titanium dioxide production | P_WZ08_20 | P_WZ08_20 |
| 4 | 2B7 | 2B7 Soda ash production | P_WZ08_20 | P_WZ08_20 |
| 4 | 2B10a | 2B10a Chemical industry: Other (please specify in the IIR) | P_WZ08_20 | P_WZ08_20 |
| 4 | 2B10b | 2B10b Storage, handling and transport of chemical products (please specify in the IIR) | P_EW_DISTRICT | P_WZ08_20 |
| 4 | 2C1 | 2C1 Iron and steel production | P_WZ08_24 | P_WZ08_241 |
| 4 | 2C2 | 2C2 Ferroalloys production | P_WZ08_24 | P_WZ08_24 |
| 4 | 2C3 | 2C3 Aluminium production | P_WZ08_24 | P_WZ08_24 |
| 4 | 2C4 | 2C4 Magnesium production | P_WZ08_24 | P_WZ08_24 |
| 4 | 2C5 | 2C5 Lead production | P_WZ08_24 | P_WZ08_24 |
| 4 | 2C6 | 2C6 Zinc production | P_WZ08_24 | P_WZ08_24 |
| 4 | 2C7a | 2C7a Copper production | P_WZ08_24 | P_WZ08_24 |
| 4 | 2C7b | 2C7b Nickel production | P_WZ08_24 | P_WZ08_24 |
| 4 | 2C7c | 2C7c Other metal production (please specify in the IIR) | P_WZ08_24 | P_WZ08_24 |
| 4 | 2C7d | 2C7d Storage, handling and transport of metal products (please specify in the IIR)" | P_EW_DISTRICT | P_WZ08_24 |
| 4 | 2D3b | 2D3b Road paving with asphalt | P_Kreisflaeche | Baugewerbe |
| 4 | 2D3c | 2D3c Asphalt roofing | P_EW_DISTRICT | Baugewerbe |
| 4 | 2H1 | 2H1 Pulp and paper industry | P_WZ08_17 | P_WZ08_17 |
| 4 | 2H2 | 2H2 Food and beverages industry | P_WZ08_11 | P_WZ08_11 |

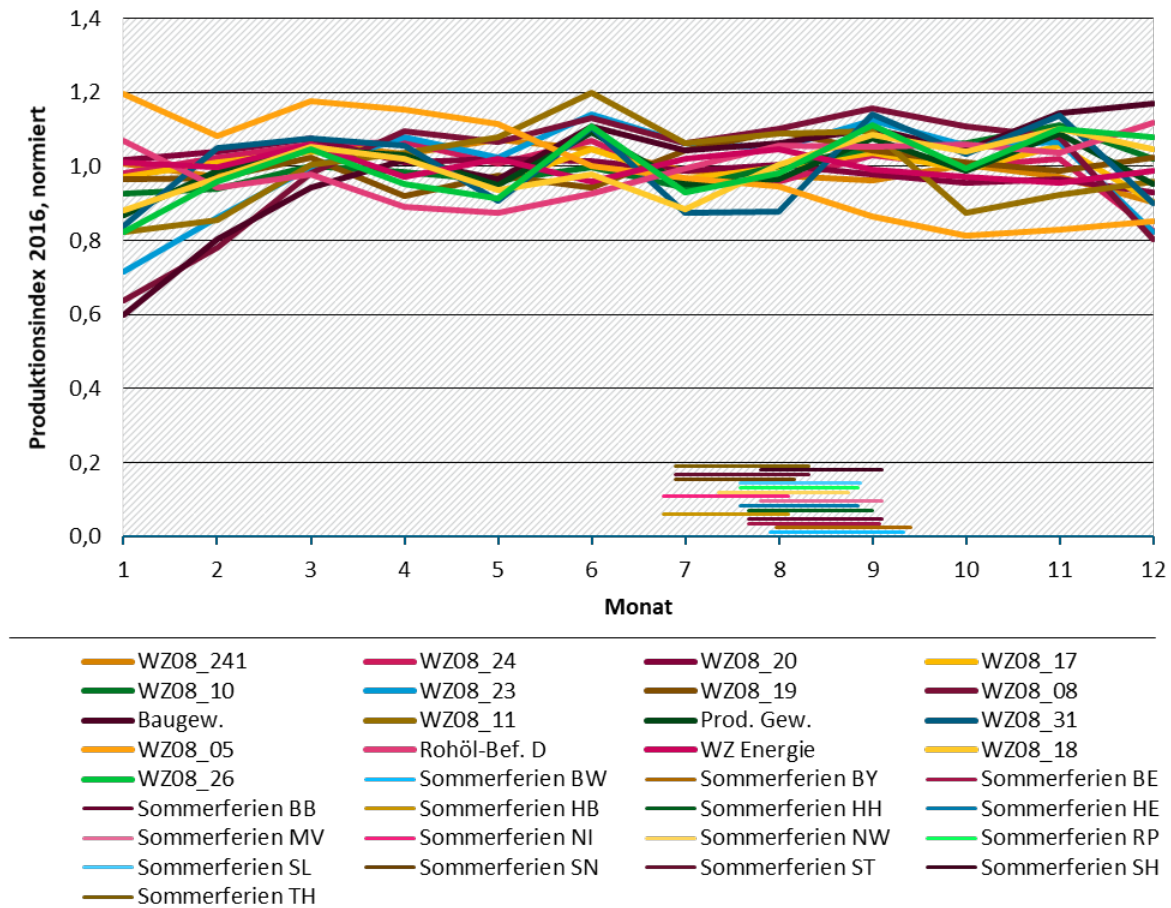
| SNAP | NFR_CODE | NFR_longname | d_param_name | zeitlich |
|------|----------|---|-----------------------|------------------------|
| 4 | 2H2 | 2H2 Food and beverages industry | P_WZ08_10 | P_WZ08_10 |
| 4 | 2H3 | 2H3 Other industrial processes (please specify in the IIR) | P_EW_DISTRICT | Produzierendes Gewerbe |
| 4 | 2I | 2I Wood processing | P_WZ08_31 | P_WZ08_31 |
| 4 | 2J | 2J Production of POPs | P_EW_DISTRICT | P_WZ08_20 |
| 5 | 1B1a | 1B1a Fugitive emission from solid fuels: Coal mining and handling | P_WZ08_05 | P_WZ08_05 |
| 5 | 1B1c | 1B1c Other fugitive emissions from solid fuels | P_EW_DISTRICT | P_WZ08_05 |
| 5 | 1B2ai | 1B2ai Fugitive emissions oil: Exploration, production, transport | P_WZ08_19 | P_WZ08_19 |
| 5 | 1B2av | 1B2av Distribution of oil products | P_EW_DISTRICT | Rohöl-Bef. D |
| 5 | 1B2av | 1B2av Distribution of oil products | P_Autobahntankstellen | wie Verkehr BAB |
| 5 | 1B2b | 1B2b Fugitive emissions from natural gas (exploration, production, processing, transmission, storage, distribution and other) | P_WZ08_19 | P_WZ08_19 |
| 5 | 1B2d | 1B2d Other fugitive emissions from energy production | P_EW_DISTRICT | WZ Energie |
| 5 | 6A | 6A Other (included in national total for entire territory) (please specify in IIR) | P_EW_DISTRICT | nicht reportet |
| 6 | 2D3d | 2D3d Coating applications | P_WZ08_C | Produzierendes Gewerbe |
| 6 | 2D3d | 2D3d Coating applications | P_WZ08_1332 | Produzierendes Gewerbe |
| 6 | 2D3e | 2D3e Degreasing | P_WZ08_G_U | Produzierendes Gewerbe |
| 6 | 2D3e | 2D3e Degreasing | P_EW_DISTRICT | Produzierendes Gewerbe |
| 6 | 2D3g | 2D3g Chemical products | P_WZ08_G_U | P_WZ08_20 |
| 6 | 2D3g | 2D3g Chemical products | P_EW_DISTRICT | P_WZ08_20 |
| 6 | 2D3h | 2D3h Printing | P_WZ08_G_U | P_WZ08_18 |
| 6 | 2D3h | 2D3h Printing | P_EW_DISTRICT | P_WZ08_18 |
| 6 | 2D3i | 2D3i Other solvent use (please specify in the IIR) | P_Kreisflaeche | Produzierendes Gewerbe |

| SNAP | NFR_CODE | NFR_longname | d_param_name | zeitlich |
|------|----------|--|---------------|------------------------|
| 6 | 2K | 2K Consumption of POPs and heavy metals (e.g. electrical and scientific equipment) | P_EW_DISTRICT | P_WZ08_26 |
| 6 | 2L | 2L Other production, consumption, storage, transportation or handling of bulk products (please specify in the IIR) | P_WZ08_C | Produzierendes Gewerbe |

Wenn für die räumlichen Verteilparameter kein Zeitverhalten vorliegt (Verteilung über Einwohner („P_EW_DISTRICT“), Kreisfläche etc.), wird zur zeitlichen Verteilung allgemein das produzierende Gewerbe angesetzt. In der Regel reicht die Ebene der 2-Steller bei den Wirtschaftszweigschlüsseln aus, für die Eisen- und Stahlerzeugung, die die Emissionen der Metallerzeugung dominiert, wird eine zusätzliche Ziffer berücksichtigt (WZ08_241).

In Abbildung 37 (für 2016) und Abbildung 38 (für 2017) sind die zur Verteilung der in Tabelle 5 aufgelisteten NFR-Sektoren benötigten monatlichen Produktionsindizes (normiert) nach Wirtschaftszweigen (Datenquelle: Destatis) dargestellt. Es sind durchaus Unterschiede zwischen den Jahren 2016 und 2017 zu erkennen, z.B. gab es im Juni 2017 einen Rückgang der Rohölbeförderung in Deutschland, der 2016 so nicht erkennbar ist.

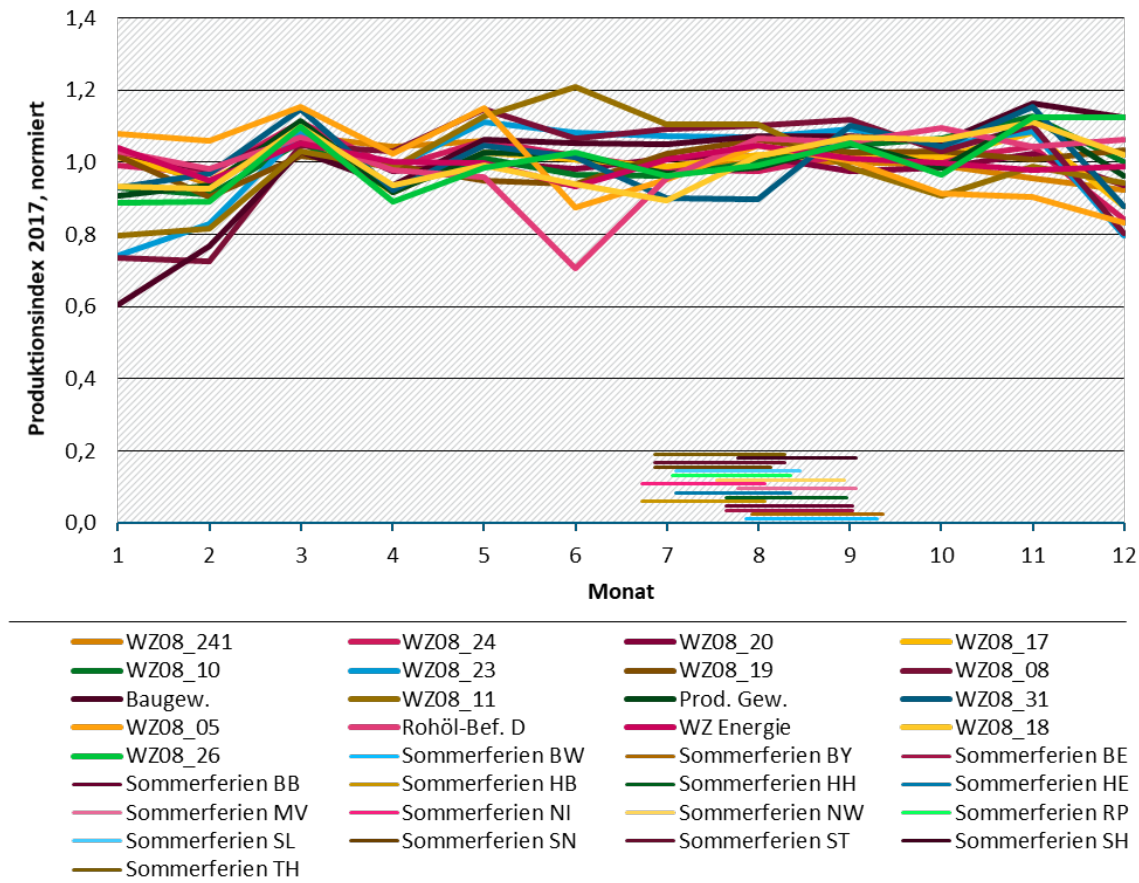
Abbildung 37: Produktionsindizes (Monatswerte deutschlandweit, normiert) 2016 der hier benötigten Wirtschaftszweige (WZ08, Datenquelle: Destatis) (fett gedruckte Linien) und Sommerferien (SF) nach Bundesländern (feiner gedruckte Linien)



Datenquelle: destatis

In Abbildung 37 bzw. Abbildung 38 sind mit etwas feineren Linien auch die Sommerferientermine für 2016 bzw. für 2017 dargestellt. Auf der hier vorliegenden bundesweiten monatlichen Ebene sind keine signifikanten Einbrüche der Produktionsindizes während der Ferien erkennbar. Es wurde daher in Absprache mit dem Auftraggeber entschieden, keine zeitliche Abhängigkeit von den Ferienterminen anzusetzen.

Abbildung 38: Produktionsindizes (Monatswerte deutschlandweit, normiert) 2017 der hier benötigten Wirtschaftszweige (WZ08, Datenquelle: Destatis) (fett gedruckte Linien) und Sommerferien (SF) nach Bundesländern (feiner gedruckte Linien)



Datenquelle: destatis

Bei einigen NFR-Sektoren wird die räumliche Verteilung in GRETA über zwei verschiedene Parameter durchgeführt:

- 2H2: Food and beverages industry:
Die Emissionen werden räumlich zur Hälfte wie die Beschäftigten in der Nahrungs- und Futtermittelerzeugung und zur Hälfte wie die Beschäftigten der Getränkeindustrie verteilt. Die Produktionsindizes der Getränkeindustrie (WZ08_11) weisen ggü. denen der Nahrungs- und Futtermittelerzeugung (WZ08_10) zeitlich ein ausgeprägtes Sommermaximum auf.
- 1B2av: Distribution of oil products:
Diese Emissionen werden räumlich zum Teil über die Einwohner und zum Teil über BAB-Tankstellen verteilt.
- 2D3d (coating applications), 2D3e (degreasing), 2D3g (chemical products) 2D3h (printing):
Die Emissionen dieser NFR-Sektoren werden räumlich jeweils teilweise über die Beschäftigten im verarbeitenden Gewerbe und teilweise über die Einwohner verteilt.

Pro Gitterzelle variieren die Beiträge der nach den unterschiedlichen räumlichen Parametern verteilten Emissionen pro NFR-Sektor. Nach dem GRETA-Export ist diese Information jedoch nicht mehr verfügbar. Eine zukünftige Möglichkeit wäre, NFR-Sektoren, die räumlich anhand verschiedener Parameter mit unterschiedlichem Zeitverhalten verteilt werden, in GRETA in

Subsektoren aufzuteilen. Nach dem GRETA-Export könnten den Emissionen pro Gitterzelle der Subsektoren jeweils eigene Splitting-Faktoren zugewiesen werden.

Weil

- ▶ der Ansatz für das Zeitverhalten auf Basis der bundesweiten monatlichen Produktionsindizes grob ist (z.B. im Vergleich mit stündlich vorliegenden Zeitreihen für die Kraftwerksemissionen),
- ▶ die Aufteilung der Emissionen dieser NFR-Sektoren auf verschiedene räumliche Verteilparameter (z.B. die nachträgliche Aufteilung von food and beverages in Emissionen aus der Nahrungsmittel- und der Getränkeproduktion) mit Unsicherheiten behaftet ist,
- ▶ keine neue Datenquelle für die häusliche Anwendung von „coating applications“, „degreasing“, „chemical products“ oder „printing“ vorliegt (es müsste auf die statischen Zeitreihen aus RCG zurückgegriffen werden),

wird den NFR-Sektoren 2H2, 2D3d, 2D3e, 2D3g und 2D3h in der ersten Version von TeResE jeweils nur ein Splitting-Faktor zugewiesen. In einer weiteren Version kann das Vorgehen mittels der Einführung von Subsektoren verfeinert werden.

Eine Ausnahme stellt der NFR-Sektor 1B2av (Distribution of oil products) dar, dessen Emissionen räumlich zum Teil über die Einwohner und zum Teil über BAB-Tankstellen verteilt werden. Weil der GRETA Export ohnehin um Punktquellen erweitert werden muss (Kraftwerke, Flughäfen) können optional auch die als Punktquellen vorliegenden Autobahntankstellen einzeln behandelt werden. Diese bekommen die Splitting-Faktoren des Verkehrs auf den Autobahnen, an denen sie liegen, s. Abschnitt 4.4. Die übrigen Emissionen des NFR-Sektors 1B2av werden zeitlich verteilt wie der Rohöltransport in Deutschland.

4.4 Straßenverkehr

Der SNAP-Sektor 7 (Straßentransport) enthält die NFR-Sektoren 1A3bi (Road transport: Passenger cars), 1A3bii (Road transport: Light duty vehicles), 1A3biii (Road transport: Heavy duty vehicles and buses), 1A3biv (Road transport: Mopeds & motorcycles), 1A3bv (Road transport: Gasoline evaporation), 1A3bvi (Road transport: Automobile tyre and brake wear) und 1A3bvii (Road transport: Automobile road abrasion). RCG weicht hier vom internationalen Standard ab: In RCG ist dieser SNAP-Sektor bereits unterteilt in die Sektoren 7: Straßentransport Benzin, 8: Straßentransport Diesel, 9: Straßentransport LPG, 10: Brems- und Reifenabrieb, 11: Straßentransport Verdunstung und 12: Straßentransport Aufwirbelung.

Die hier betrachteten NFR-Sektoren tragen insbesondere bei den Stickoxiden deutlich zu den nationalen Gesamtemissionen bei, für die Pkw beträgt der Anteil an den deutschlandweiten NO_x-Emissionen im Jahr 2016 ca. 21% (nach den Kraftwerken mit ca. 22% der höchste Einzelbeitrag eines NFR-Sektors), für die schweren Nutzfahrzeuge ca. 12% und für die leichten Nutzfahrzeuge ca. 3%, siehe Tabelle 2.

Für das Zeitverhalten der Emissionen des Straßenverkehrs werden zwei Einflüsse berücksichtigt. Primärer Einfluss ist das Zeitverhalten des Straßenverkehrs selbst (Zeitreihen der stündlichen Anzahl Fahrzeuge). Für die Stickoxidemissionen der Diesel-Pkw sowie für die NMVOC-Emissionen aus der Tankatmung wird zusätzlich eine Temperaturabhängigkeit berücksichtigt: Tankatmungsemissionen entstehen bei ansteigenden Temperaturen und den

dadurch bedingten Anstieg des Druckes im Tank, und für die NO_x-Emissionen werden die Korrekturfaktoren für die Temperatur nach HBEFA4.1 herangezogen.

Zeitverhalten des Verkehrs auf Autobahnen und sonstigen Außerortsstraßen

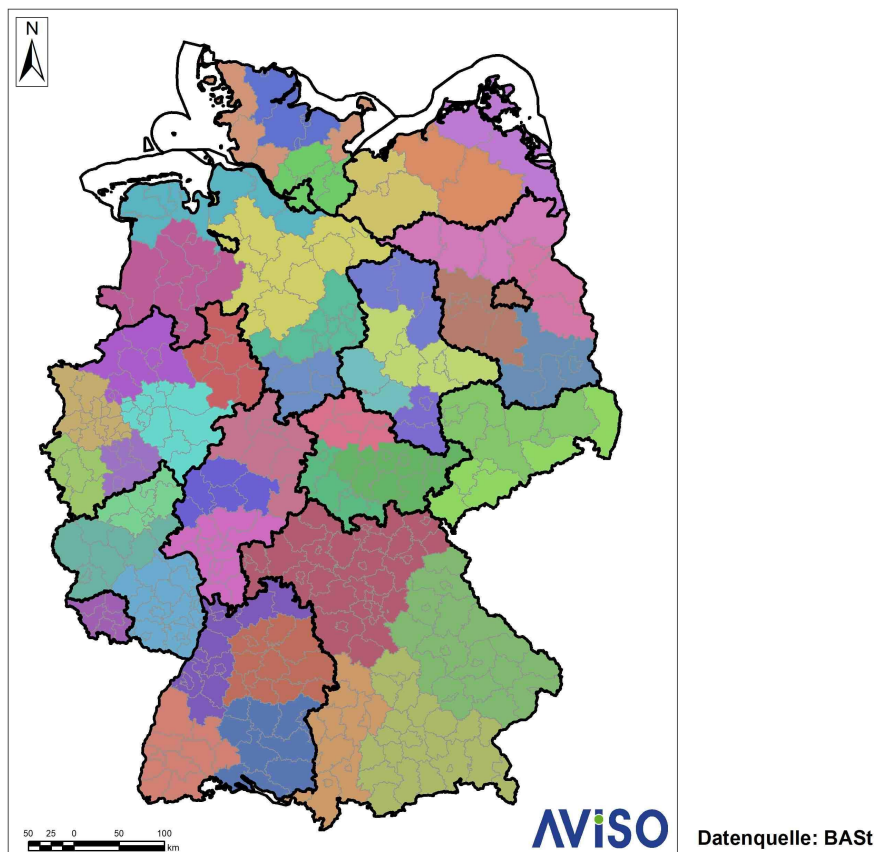
Für das zeitliche Verhalten des Straßenverkehrs wird unterschieden zwischen BAB (Bundesautobahnen), sonstigen Außerortsstraßen (AO) und sonstigen Innerortsstraßen (IO). Die wichtigste Datenquelle für BAB und AO sind die Dauerzählstellen der BAST, die sich fest installiert an Bundesfernstraßen (BAB und Bundesstraßen) befinden. Das zeitliche Verhalten auf Bundesstraßen wird generell für AO angesetzt, also auch für Landes- und Kreisstraßen sowie sonstige Außerortsstraßen.

Die Dauerzählstellen der BAST liefern stündliche Werte pro Richtung, differenziert nach Fahrzeugarten. Viele Dauerzählstellen können Fahrzeuge nach der Art „8+1“ erfassen, d.h. differenziert nach Pkw ohne Anhänger, Pkw mit Anhänger, Motorräder, leichte Nutzfahrzeuge, Lkw ohne Anhänger, Lkw mit Anhänger, Sattelzüge, Busse, nicht identifizierte Fahrzeuge/Sonderfahrzeuge. Zumindest wird zwischen Leichtverkehr (LV) und Schwerverkehr (SV) differenziert. Die Splitting-Faktoren werden nach Leicht- und Schwerverkehr differenziert, daher können alle Dauerzählstellen in die Auswertung eingehen.

Bei den regelmäßig alle 5 Jahre durchgeführten Straßenverkehrszählungen (SVZ) werden zusätzlich zu den Dauerzählstellen temporäre und manuelle Zählungen durchgeführt. Diese werden mit Hilfe von Parametern, die aus den Dauerzählstellen gewonnen werden, auf ganze Jahre hochgerechnet. Für die Bestimmung der Parameter für die Hochrechnung werden die Dauerzählstellen in Regionen aufgeteilt, i. d. Regel Zusammenfassungen benachbarter Kreise, die möglichst homogen sind hinsichtlich der Zusammensetzung des Verkehrs und des Einflusses von Sonn- und Feiertagen sowie der Ferien.

Das Zeitverhalten für LV und für SV wird jeweils durch Mittelung über alle Dauerzählstellen in den für die SVZ 2020 gebildeten Regionen berechnet. Sie sind in Abbildung 39 dargestellt.

Abbildung 39: Regionen für die Hochrechnung bei der SVZ 2020



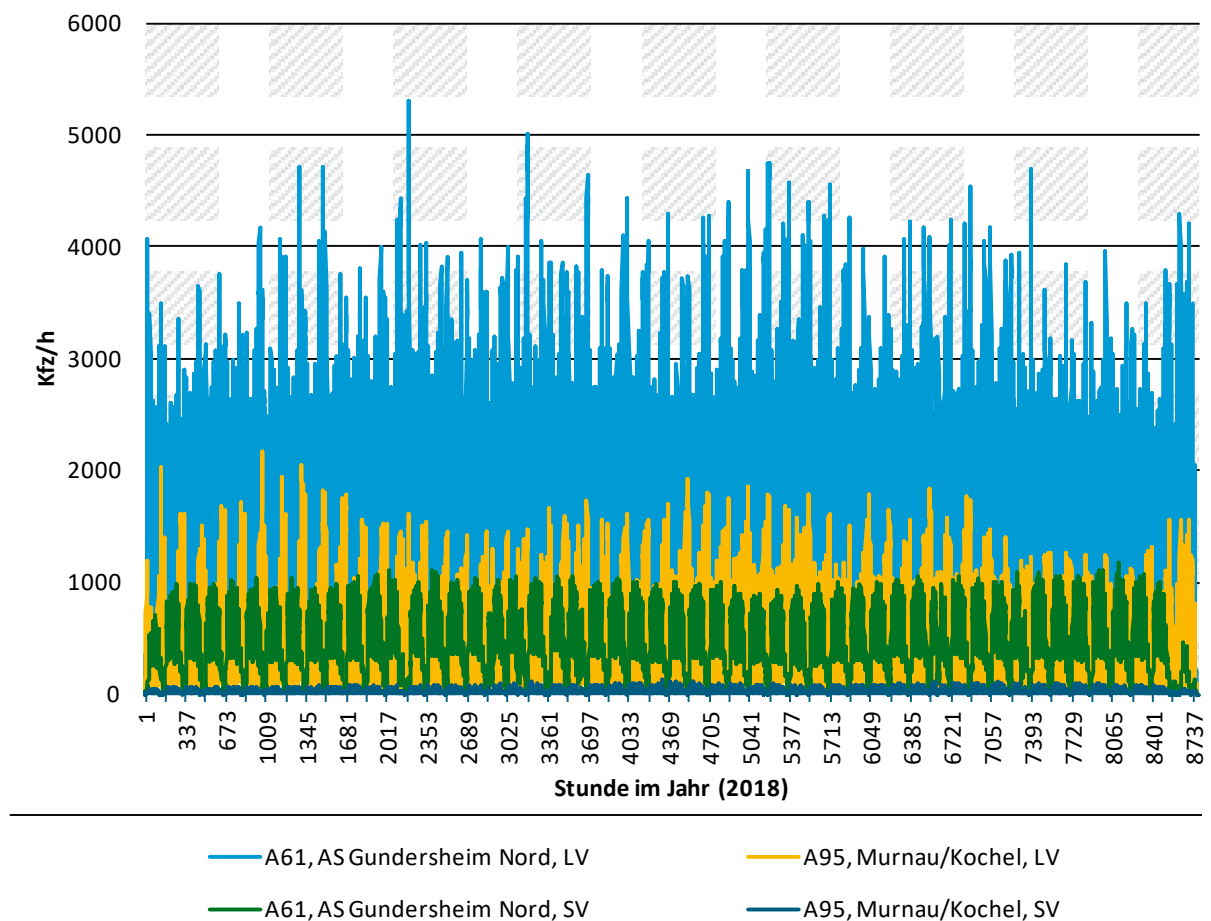
Je nach den Beiträgen von Ferien- und Wochenendverkehr sowie von Tages- und Wochenendpendlern wirken sich Wochenenden, Feiertage und Ferienzeiten für die Regionen unterschiedlich auf die Zeitreihen aus.

Im Folgenden wird dies exemplarisch für die beiden bereits in Abbildung 19 vorgestellten automatischen Dauerzählstellen (BAB) der BAST dargestellt:

- Die A61 an der Anschlussstelle (AS) Gundersheim Nord zwischen den Ballungsräumen Mainz und Mannheim weist einen hohen SV-Anteil (>22%) auf.
- Die Zählstelle bei Murnau/Kochel an der A95 liegt zwischen München und Garmisch-Partenkirchen. Hier findet Ferienverkehr in die Alpen statt, der SV-Anteil ist mit ca. 4% gering.

In Abbildung 40 sind die stündlichen Verkehrswerte für LV und SV 2018 für beide Dauerzählstellen dargestellt. Sowohl für LV wie auch für SV sind die Verkehrswerte auf der A61 deutlich höher als auf der A95. Weiterhin ist zu erkennen, dass der SV auf der A61 nachts zwar niedriger ist als tagsüber, die nächtlichen SV-Werte aber nur am Wochenende auf null zurückgehen.

Abbildung 40: Stündliche Kfz-Werte (LV, SV) 2018 für zwei automatische Dauerzählstellen der BAST



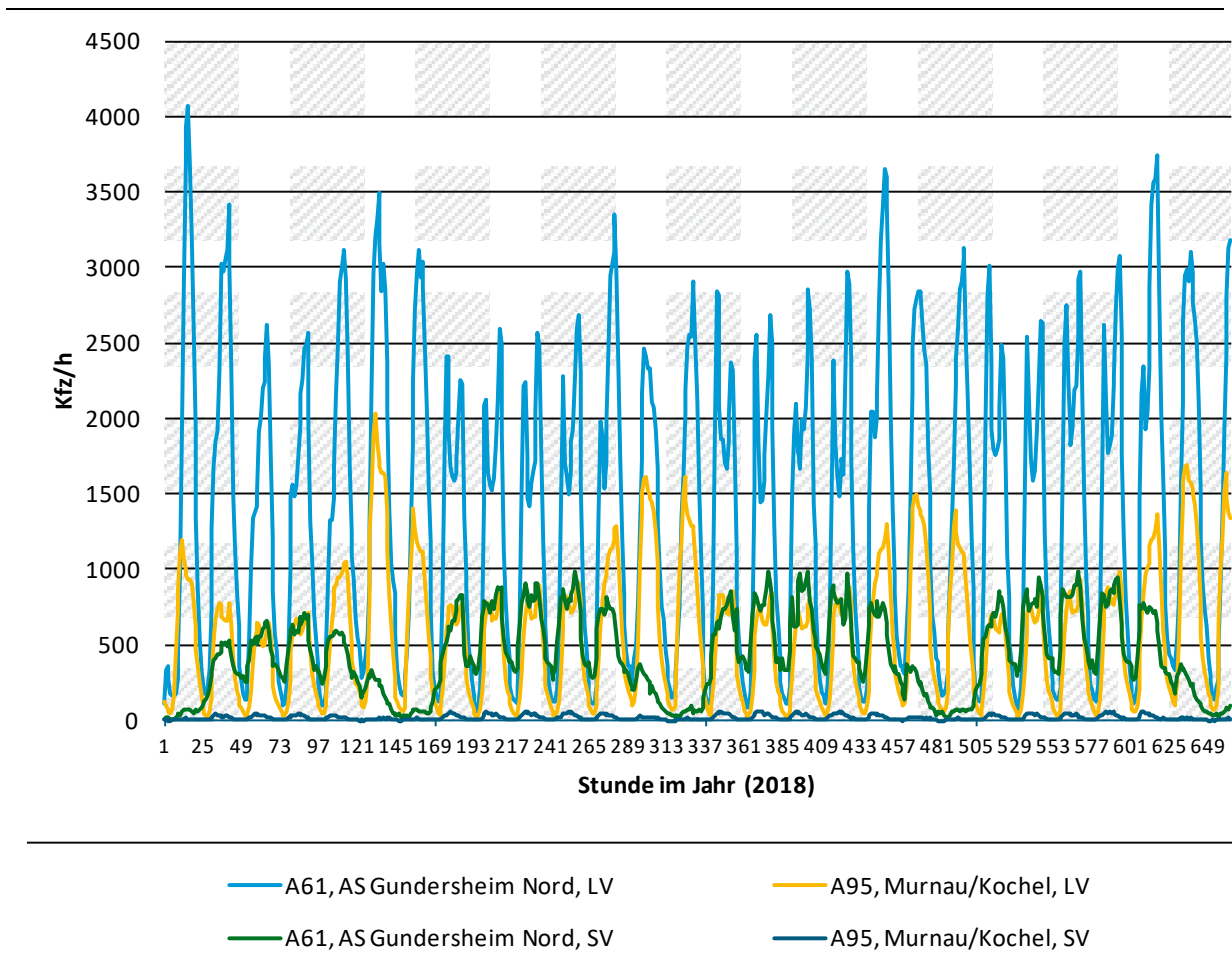
Datenquelle: <https://www.bast.de>

Abbildung 41 zeigt einen Ausschnitt der ersten vier Wochen aus Abbildung 40. Dieser beginnt mit einem Feiertag (Neujahr), gefolgt von einer Ferienwoche (zweite Hälfte Weihnachtsferien) und drei Normalwochen.

Für die A61 ist zu erkennen, dass der Schwerverkehr samstags und noch deutlicher sonntags zurückgeht. In den Ferien ist er etwas geringer als in den Normalwochen. Der Tagesgang des Leichtverkehrs hat an Normalwerktagen zwei Spitzen, die Abendspitze ist etwas stärker ausgeprägt. Außerhalb der Ferien treten die höchsten LV-Werte am Freitagnachmittag auf, was auf Wochenendpendler hindeutet.

Auf der A95 findet insgesamt weniger Verkehr statt, für den SV gilt dies besonders. Auch hier weist der SV einen typischen Wochengang mit reduzierten Samstags- und noch stärker reduzierten Sonntagswerten auf, nachts gehen die SV-Werte hier auch an Werktagen fast ganz zurück. Die LV-Werte sind auf der A95 in Normalwochen freitags höher als an den anderen Werktagen, noch höher sind sie hier jedoch an den Wochenenden. Dies deutet auf eine Ferienregion hin.

Abbildung 41: Stündliche Kfz-Werte (LV, SV) 2018 (erste vier Wochen) für zwei automatische Dauerzählstellen der BAST



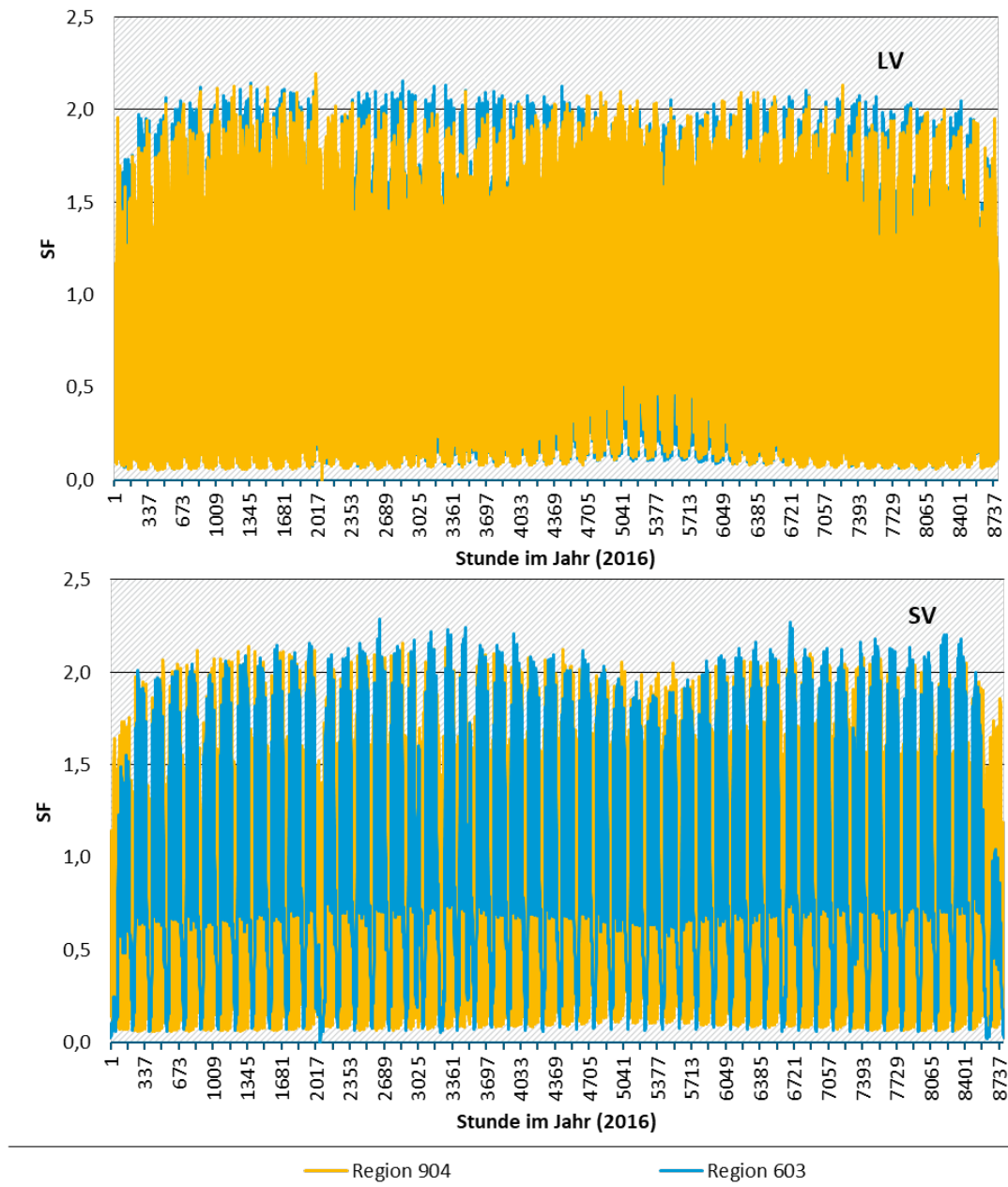
Datenquelle: <https://www.bast.de>

Das Zeitverhalten für LV und für SV auf Bundesautobahnen (BAB) und Außerortsstraßen pro SVZ-Region wird jeweils durch Mittelung über alle entsprechenden Dauerzählstellen in den für die SVZ 2020 gebildeten Regionen (Abbildung 39) berechnet. Pro Region und Jahr ergibt dies vier Zeitreihen (je eine für LV und SV auf BAB sowie auf Außerortsstraßen).

In Abbildung 42 sind die so berechneten Splitting-Faktoren (SF) für Leichtverkehr (LV) und Schwerverkehr (SV) für die SVZ-Regionen 603 und 904 auf BAB vergleichend dargestellt. Die Region 603 enthält verschiedene Kreise in Hessen, die oben beispielhaft betrachtete Zählstelle auf der A61 an der Anschlussstelle Gundersheim fällt in diese Region. Die Region 904 enthält verschiedene Kreise in Bayern, die oben beispielhaft betrachtete Zählstelle auf der A95 fällt in diese Region.

Die SF sind normiert auf die Anzahl Stunden des Jahres, die jeweilige Höhe der Emissionen ergibt sich als Produkt der Stundenwerte mit den Jahresemissionen der jeweiligen Gitterzelle. Anders als die in Abbildung 40 dargestellten Verkehrswerte unterscheiden sich die SF für die Regionen daher nicht hinsichtlich des Gesamtniveaus, sondern nur im Zeitverhalten.

Abbildung 42: Splitting-Faktoren für Leichtverkehr (LV, oben) und Schwerverkehr (SV, unten) auf BAB für die SVZ-Regionen 603 und 904



Datenquelle: <https://www.bast.de>

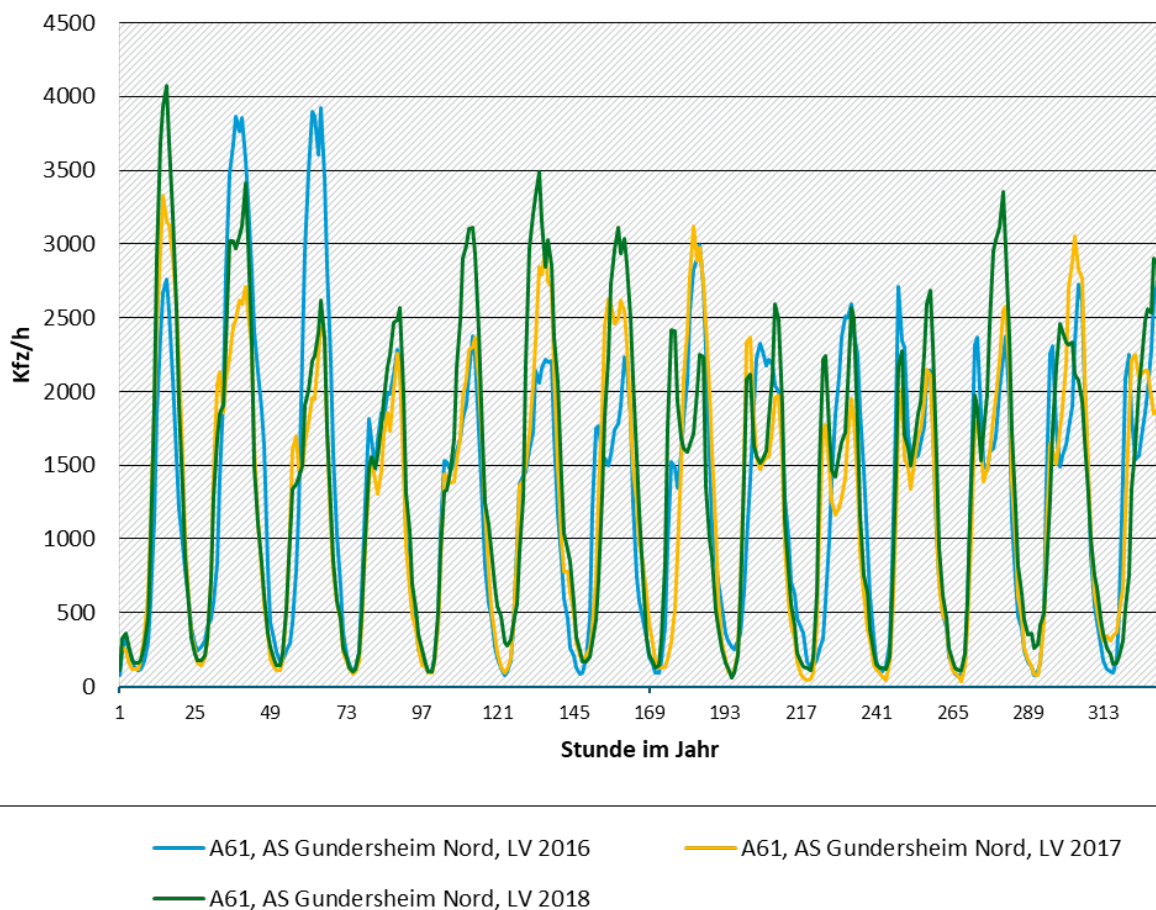
Beim SF für den LV in Region 904 fällt auf, dass an Wochenenden in den Sommerferien nachts die Werte nicht so stark zurückgehen wie zu anderen Zeiten. Offensichtlich fahren Urlauber Richtung Süden und zurück teilweise auch über Nacht, so dass hier der Nachtverkehr erhöht ist. In Region 603 tritt dieser Effekt nicht auf.

Beim SV in Region 603 wird deutlich, dass die Werte nachts nur an Wochenenden ganz zurück gehen, während der Woche jedoch nur auf ca. 1/3 des Tagesniveaus. Dies zeigte sich auch schon an den Kfz-Werten der beispielhaft betrachteten Zählstelle an der A61 in Abbildung 40. Einen so hohen Anteil nächtlichen Schwerverkehrs gibt es in Region 904 nicht.

Beim aktuell implementierten Verfahren werden die SF auf BAB und Außerortsstraßen für jedes Jahr und jede Region aus den jeweiligen Zählwerten der Dauerzählstellen neu berechnet. Der Vorteil dieser Vorgehensweise ist, dass Trends und interannuelle Schwankungen direkt für die Regionen übernommen werden, die Auswirkungen von Corona z.B. sind damit für alle Regionen berücksichtigt. Der Nachteil ist, dass die stündlichen Jahresgänge der Dauerzählstellen für jedes zu modellierende Jahr neu aufbereitet werden müssen: Weil die Wochenenden in jedem Jahr auf ein anderes Datum fallen, unterscheiden sich die Zeitreihen auch ohne sonstige Einflüsse von Jahr zu Jahr. Dies ist für die ersten beiden Wochen der Jahre 2016, 2017 und 2018 exemplarisch für die A61 (AS Gundersheim Nord) in Abbildung 43 dargestellt.

Es wird daher optional ein zweites Verfahren vorgeschlagen. Dabei werden pro Region bzw. Bundesland aus den Stundengängen der Dauerzählstellen eines Jahres mittlere Tagesgänge für Normalwerktag, Ferienwerktag, Samstage sowie Sonn- und Feiertage gebildet und aus diesen Jahresgänge (LV bzw. SV, jeweils BAB und sonstige Außerortsstraßen) konstruiert. Diese können an weitere Jahre angepasst werden, indem Wochentage, Feiertage und Ferientermine angepasst werden. Es müssen also nicht jährlich neue Daten beschafft und aufbereitet werden, dafür werden interannuelle Schwankungen und Trends nicht berücksichtigt. Für dieses Verfahren wird als Input eine Tabelle mit Ferien- und Feiertagen pro Bundesland benötigt. Über eine Steuerdatei kann das gewünschte Verfahren ausgewählt werden.

Abbildung 43: Stündliche Kfz-Werte (LV, SV) für die ersten zwei Wochen 2016, 2017 und 2018 für eine automatische Dauerzählstelle der BAST



Datenquelle: <https://www.bast.de>

Zeitverhalten des Verkehrs auf Innerortsstraßen

Die automatischen Dauerzählstellen der BASt befinden sich an Autobahnen und Bundesstraßen, deren Bau und Betrieb zu den Hoheitsaufgaben des Bundes zählt. Die BASt betreibt auch 54 Dauerzählstellen an innerörtlichen Bundesstraßen (zum geringen Teil auch an Landesstraßen und in Ausnahmefällen an Kreis- oder Gemeindestraßen), ihre Lage ist in Abbildung 44 dargestellt. Sie liegen jedoch teilweise an Grenzübergängen (dort ist das Zeitverhalten nicht typisch), und es liegen auch nicht überall für jedes Jahr Daten vor.

Für eine Bildung gemittelter Zeitverläufe auf Ebene von Regionen oder Bundesländern reicht die Anzahl der innerörtlichen Dauerzählstellen ohne Grenzübergänge nicht aus.

In Tabelle 6 bzw. Tabelle 7 sind exemplarisch die Bestimmtheitsmaße (R^2) zwischen den stündlichen Verkehrsstärken für 2016 an drei LUBW-Stationen („Stuttgart Am Neckartor“, Stuttgart Hohenheimer Str.“, „Pfinztal Karlsruher Str.“, Messstellen des Landesamts für Umwelt und Messungen Baden-Württemberg) und zwei innerstädtischen BASt Dauerzählstellen (Koblenz, Wittenberg) ausgewiesen. Halbstündliche Kfz-Werte für die Jahre 2016 und 2017 für die Verkehrszählstationen „Stuttgart Am Neckartor“, „Stuttgart Hohenheimer Straße“ und „Pfinztal Karlsruher Straße“ wurden dazu von der LUBW zur Verfügung gestellt (LUBW, 2020).

R ist ein Maß für den Grad eines linearen Zusammenhangs zweier Größen, R^2 kann interpretiert werden als Anteil der Varianz einer Größe, der durch die andere Größe erklärt werden kann.

Abbildung 44: Lage der BASt Dauerzählstellen an innerörtlichen Bundesstraßen

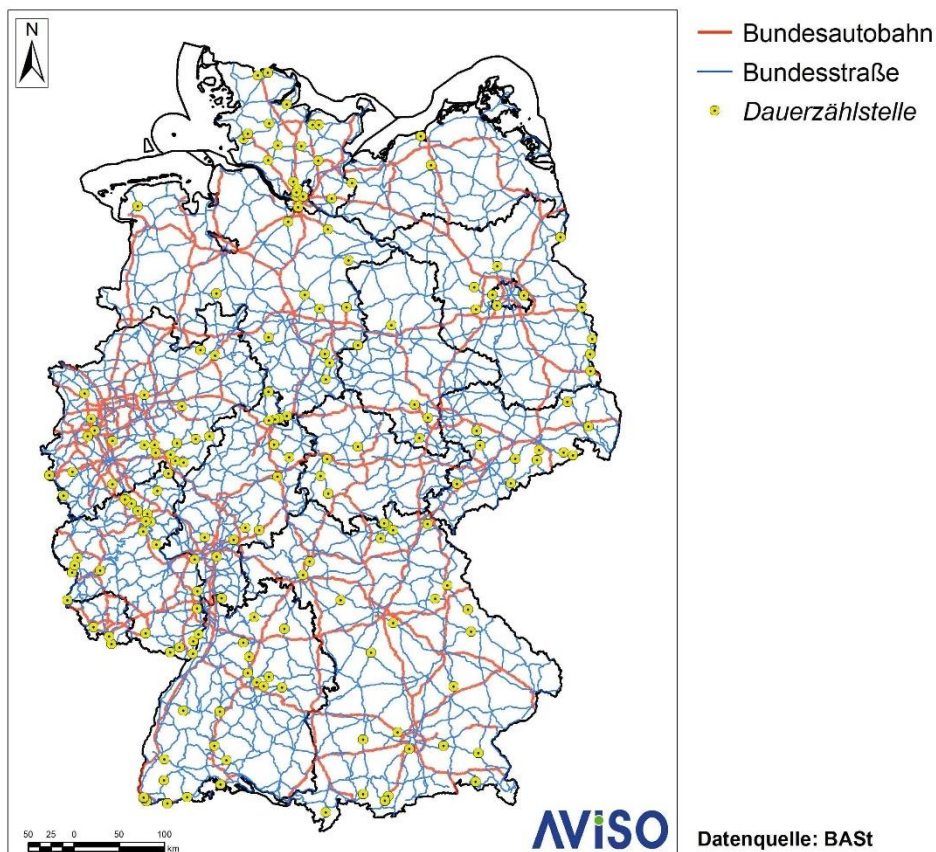


Tabelle 6: Bestimmtheitsmaße (R^2) zwischen den stündlichen Verkehrsstärken für 2016 an drei LUBW Stationen („Stuttgart Am Neckartor“, Stuttgart Hohenheimer Str.“, „Pfinztal Karlsruher Str.“) und zwei innerstädtischen BASt Dauerzählstellen (Koblenz, Wittenberg)

| | Stuttgart Am Neckartor | Pfinztal Karlsruher Str. | Stuttgart Hohenheimer Str. | Koblenz | Wittenberg |
|----------------------------|------------------------|--------------------------|----------------------------|---------|------------|
| Stuttgart Am Neckartor | 100% | 91% | 97% | 84% | 81% |
| Pfinztal Karlsruher Str. | | 100% | 92% | 88% | 89% |
| Stuttgart Hohenheimer Str. | | | 100% | 83% | 81% |
| Koblenz | | | | 100% | 88% |
| Wittenberg | | | | | 100% |

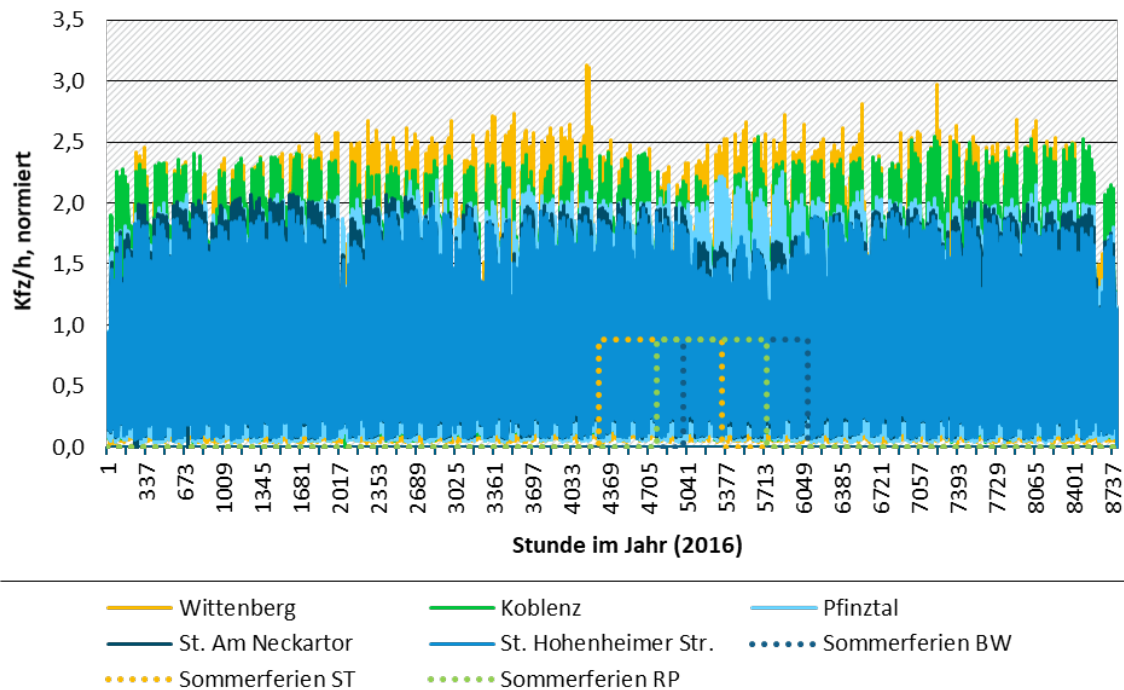
Tabelle 7: Bestimmtheitsmaße (R^2) zwischen den stündlichen Verkehrsstärken für 2017 an drei LUBW Stationen („Stuttgart Am Neckartor“, Stuttgart Hohenheimer Str.“, „Pfinztal Karlsruher Str.“) und zwei innerstädtischen BASt Dauerzählstellen (Koblenz, Wittenberg)

| | Stuttgart Am Neckartor | Pfinztal Karlsruher Str. | Stuttgart Hohenheimer Str. | Koblenz | Wittenberg |
|----------------------------|------------------------|--------------------------|----------------------------|---------|------------|
| Stuttgart Am Neckartor | 100% | 93% | 96% | 81% | 65% |
| Pfinztal Karlsruher Str. | | 100% | 91% | 87% | 73% |
| Stuttgart Hohenheimer Str. | | | 100% | 78% | 62% |
| Koblenz | | | | 100% | 87% |
| Wittenberg | | | | | 100% |

Die Korrelationen zwischen den Verkehrsstärken der exemplarisch betrachteten Zählstellen sind tendenziell im Jahr 2016 etwas höher als im Jahr 2017, selbst der kleinste Wert für R^2 (2017 Stuttgart Hohenheimer Str. – Wittenberg) liegt mit 62% deutlich über 50%. Zumindest für die hier exemplarisch betrachteten fünf Zählstellen sind die Korrelationen zwischen den Verkehrsstärken gut, obwohl hier nicht die zwischen den Bundesländern unterschiedlichen Ferientermine und Feiertage berücksichtigt sind.

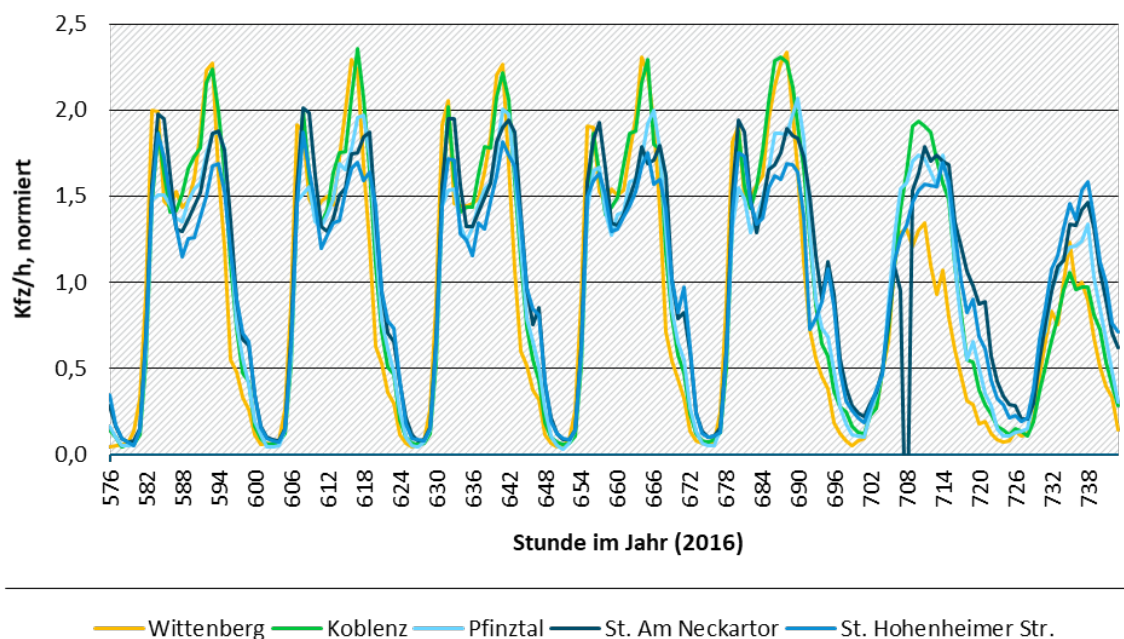
In Abbildung 45 sind stündliche Verkehrswerte 2016 (normiert) an zwei innerstädtischen Dauerzählstellen der BASt und drei Zählstellen der LUBW an innerstädtischen Spotmessstellen dargestellt, Abbildung 46 zeigt einen Ausschnitt daraus für eine Normalwoche (ohne Ferien und Feiertage). Wochengang und Tagesgang stimmen für die unterschiedlichen Stationen gut überein, das Verhältnis von Morgen- zu Nachmittagsspitze ist teilweise unterschiedlich, jedoch nicht bundeslandspezifisch.

Abbildung 45: Stündliche Verkehrswerte 2016 (normiert) an zwei innerstädtischen Dauerzählstellen der BASt und drei Zählstellen der LUBW an innerstädtischen Spotmessstellen



Datenquellen: LUBW, BASt

Abbildung 46: Stündliche Verkehrswerte 2016 (normiert) an zwei innerstädtischen Dauerzählstellen der BASt und drei Zählstellen der LUBW an innerstädtischen Spotmessstellen, eine Normalwoche

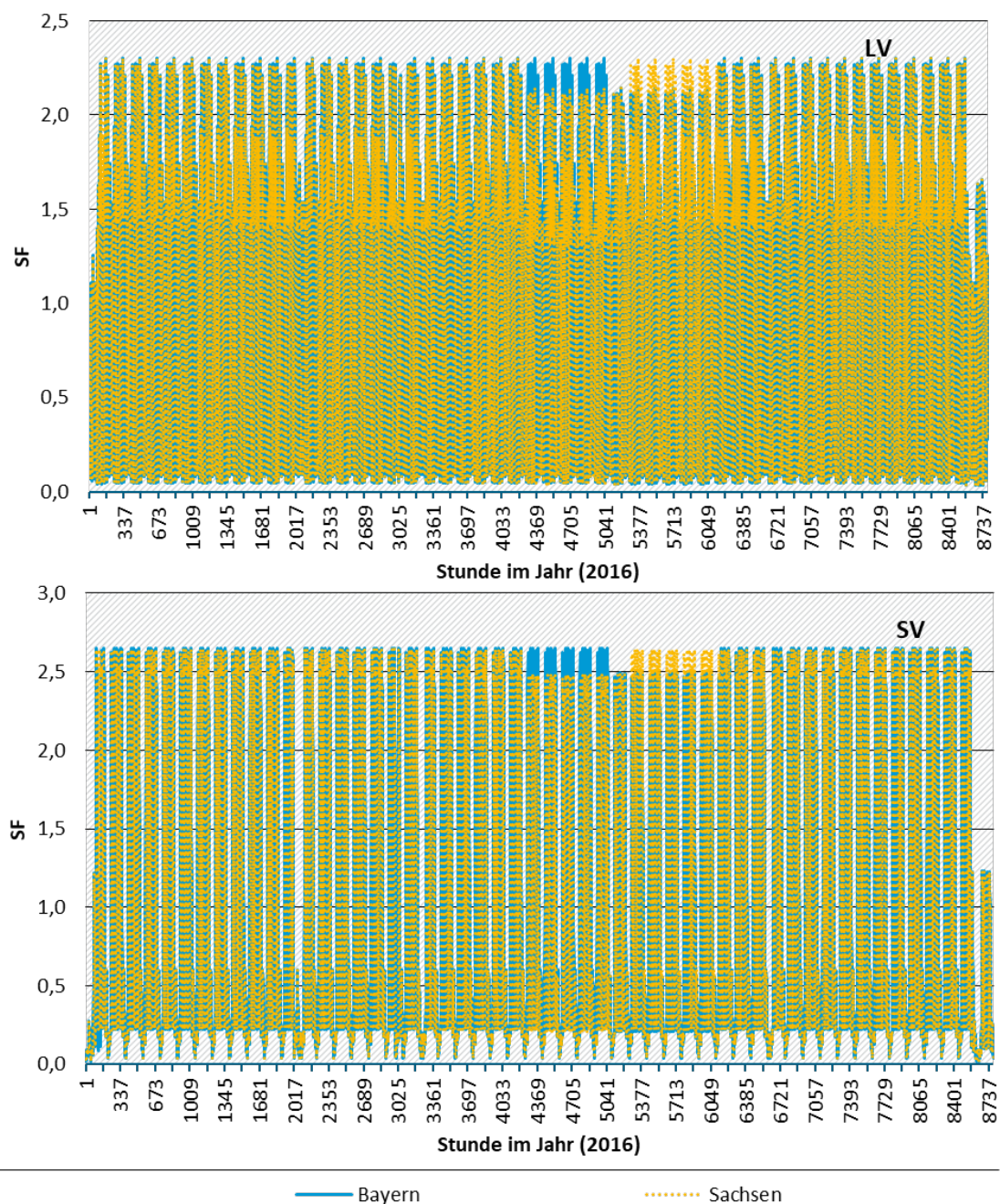


Datenquellen: LUBW, BASt

Zur zeitlichen Verteilung der innerstädtischen Emissionen des Straßenverkehrs sind innerstädtische Verkehrszählstellen gut geeignet, auch wenn sie aufgrund der geringen Anzahl nur bundesweit ausgewertet werden können. Es werden daher mittlere Wochengänge gebildet. Pro Bundesland werden daraus synthetische Zeitprofile konstruiert, so dass die unterschiedlichen Feiertage und Termine für die Sommerferien berücksichtigt werden.

Für die Bundesländer Bayern (Sommerferien 2016 spät) und Sachsen (Sommerferien 2016 früh) sind die resultierenden innerörtlichen SF beispielhaft in Abbildung 47 dargestellt.

Abbildung 47: Innerörtliche Splitting-Faktoren (SF) 2016 für den Leichtverkehr (LV, oben) und den Schwerverkehr (SV, unten) für Bayern und Sachsen auf Basis der bundesweit gemittelten innerstädtischen Dauerzählstellen der BAST unter Berücksichtigung der jeweiligen Termine für die Sommerferien



Datenquelle: <https://www.bast.de>

Übersicht über die für TeResE verwendeten Datenquellen zur Verkehrsstärke

In Tabelle 8 sind für die NFR-Sektoren des Straßenverkehrs und die Ortslagen BAB, sonstige AO und IO die Datenquellen aufgelistet, die zur verkehrsstärkenabhängigen zeitlichen Verteilung der Straßenverkehrsemissionen verwendet werden.

Die Temperaturabhängigkeit führt zu einer zusätzlichen Zeitabhängigkeit, die im folgenden Abschnitt beschrieben wird.

Tabelle 8: Datenquellen für die verkehrsstärkenabhängige zeitliche Verteilung der Straßenverkehrsemissionen pro NFR-Sektor nach Ortslage

| NFR-Sektor | BAB | sonst. AO | IO |
|---|---|---|--|
| 1A3bi (Road transport: Passenger cars) | Dauerzählstellen der BAST auf BAB pro SVZ-Region; Auswertung LV | Dauerzählstellen der BAST auf Bundesstraßen pro SVZ-Region; Auswertung LV | Dauerzählstellen der BAST auf innerörtlichen Bundesstraßen ohne Grenzstationen bundesweit; Berücksichtigung von Feiertagen und Ferienterminen pro Bundesland; Auswertung LV; |
| 1A3bii (Road transport: Light duty vehicles) | analog 1A3bi | analog 1A3bi | analog 1A3bi |
| 1A3biii (Road transport: Heavy duty vehicles and buses) | Dauerzählstellen der BAST auf BAB pro Bundesland; Auswertung SV | Dauerzählstellen der BAST auf Bundesstraßen pro Bundesland; Auswertung SV | analog 1A3bi, Auswertung SV |
| 1A3biv (Road transport: Mopeds & motorcycles) | analog 1A3bi | analog 1A3bi | analog 1A3bi |
| 1A3bv (Road transport: Gasoline evaporation) | analog 1A3bi | analog 1A3bi | analog 1A3bi |
| 1A3bvi (Road transport: Automobile tyre and brake wear) | Zeitverhalten wie LV (trägt stärker zu den Abrieben bei als SV) | analog BAB | analog BAB |
| 1A3bvii (Road transport: Automobile road abrasion) | analog 1A3bvi | analog 1A3bvi | analog 1A3bvi |

Temperaturabhängigkeit

Neben der Abhängigkeit zeitlichen Verteilung der Straßenverkehrsemissionen von der Variabilität der Verkehrsstärke sind die Stickoxid- und die NMVOC-Emissionen des Straßenverkehrs auch vom Jahresgang der Temperatur abhängig.

Abweichungen zwischen am Prüfstand für vorgegebene Fahrzyklen ermittelten Emissionsfaktoren und im realen Straßenverkehr gemessenen Emissionsfaktoren gab es schon immer, diese wurden durch das Konzept der Verkehrssituationen, die das reale Fahrverhalten besser abbilden sollen, im HBEFA berücksichtigt. Ab Mitte der Zehner-Jahre nahmen solche Abweichungen insbesondere für die **Stickoxide** zu, die Diskrepanzen traten insbesondere bei niedrigen Temperaturen auf, wie z.B. remote-sensing Messungen in Zürich zeigten. Als Ursache dafür wurde ermittelt, dass bei Diesel-Fahrzeugen mit SCR-Nachbehandlungssystem bei niedrigen Temperaturen und/oder in bestimmten Fahrsituationen die Nachbehandlungssysteme aus Motorschutzgründen abgeschaltet wurden (Thermofenster). Im HBEFA4.1 sind daher NO_x-Korrekturfaktoren in Abhängigkeit von der Außentemperatur und vom Fahrzeugalter angegeben.

Die Temperaturabhängigkeit ist relevant, um die auf jahresmittleren Randbedingungen basierenden nationalen Emissionen in Abhängigkeit von der Außentemperatur geeignet zeitlich zu verteilen. Die entsprechenden NO_x-Korrekturfaktoren für Pkw bzw. für Lfz nach HBEFA4.1 sind in Abbildung 48 bzw. Abbildung 49 dargestellt.

Da die Korrekturfaktoren von der Euronormstufe abhängen (sie sind maximal für Diesel-Pkw der Euronormstufen 6a/b), hängt ein Gesamt-Korrekturfaktor für den Leichtverkehr von der Flottenzusammensetzung ab. Abbildung 50 zeigt oben die deutschlandweite Flottenverteilung für Pkw und Lfz und unten die entsprechenden Anteile an den NO_x-Emissionen. Für NO_x ist der Anteil der Otto-Fahrzeuge an den Emissionen deutlich geringer als an der Fahrleistung.

Damit ergeben sich, exemplarisch für die mittlere Tagestemperatur in 2 m Höhe der Klimaregion „Südwestdeutsche Mittelgebirge“ für Pkw und Lfz die in Abbildung 51 dargestellten Korrekturfaktoren der NO_x-Emissionen für die Temperatur (normiert, Mittelwert = 1).

In Abbildung 51 ist Folgendes zu erkennen:

- Die NO_x-Emissionen weisen einen deutlichen Jahresgang auf, sie sind für die Pkw-Flotte 2016 im Winter um fast 20% höher und im Sommer um ca. 20% niedriger als im Jahresmittel („Thermofenster“).
- Die Temperaturkorrekturen für die Flotte 2016 sind bei den Lfz minimal höher als bei den Pkw.
- Bis 2030 ändern sich die Temperaturkorrekturen bei den Pkw kaum, bei den Lfz wird die Temperaturkorrektur über den betrachteten Zeitraum abgeschwächt. Grund dafür ist, dass die Korrekturfaktoren bei den Pkw bis Euronorm 6a,b auf über 1,9 ansteigen, während sie bei den Lfz für die Euronorm 6a,b mit einem Wert von 1,4 bereits kleiner sind als für Euronorm 4 und 5.

Langfristig ist zu erwarten, dass durch die fortschreitende Flottenentwicklung die Anteile der Euro 6d Fahrzeuge nicht nur an der Fahrleistung, sondern auch an den NO_x-Emissionen zunehmen, und damit die Korrekturfaktoren sich Werten von eins annähern.

Abbildung 48: NO_x-Korrekturfunktionen für Diesel Pkw nach HBEFA4.1; Bildquelle: TU Graz (2019)

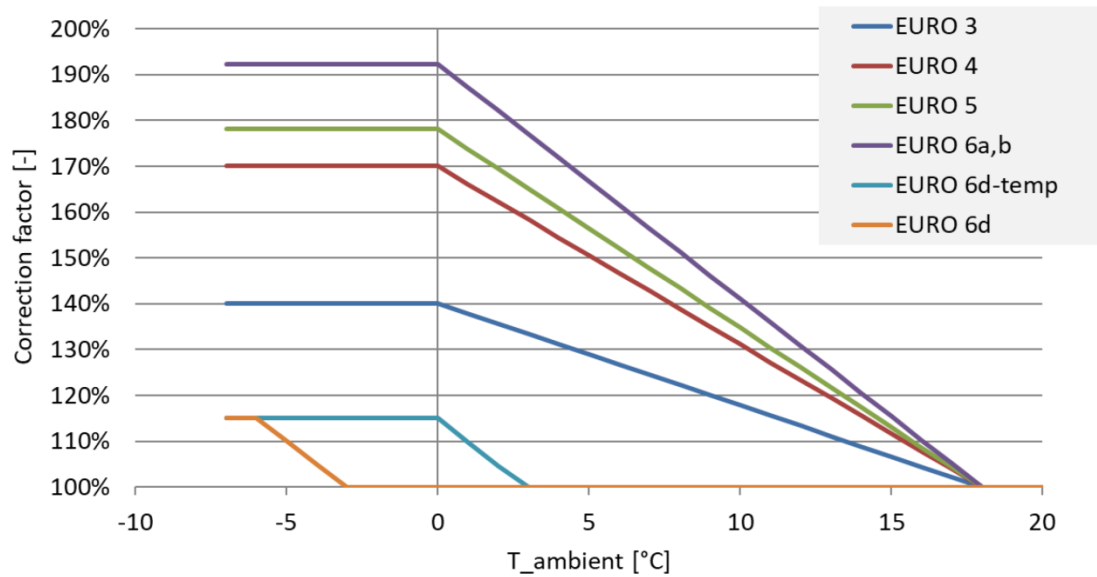


Abbildung 49 NO_x-Korrekturfunktionen für Diesel INFz nach HBEFA4.1; Bildquelle: TU Graz (2019)

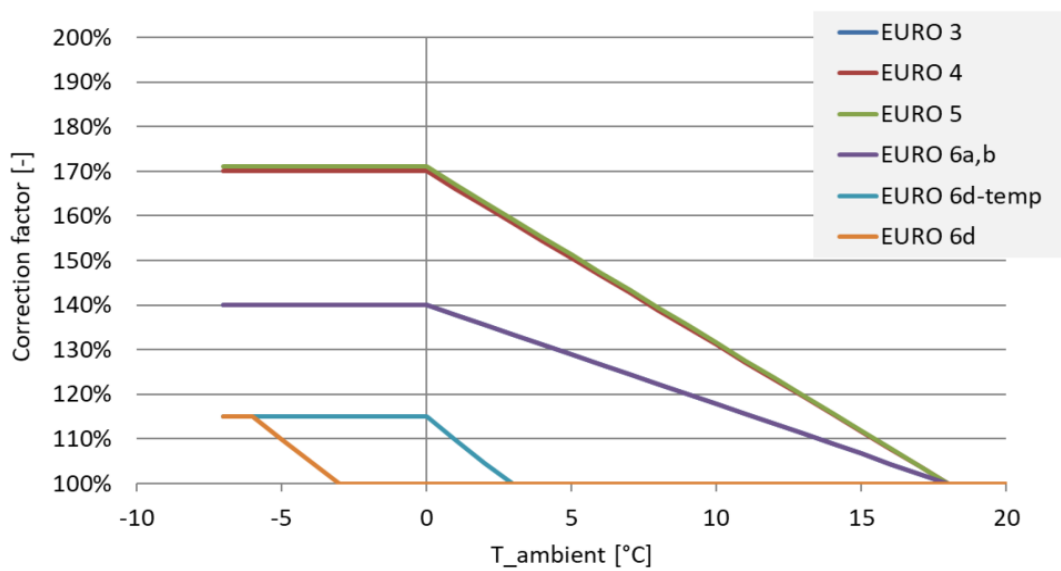
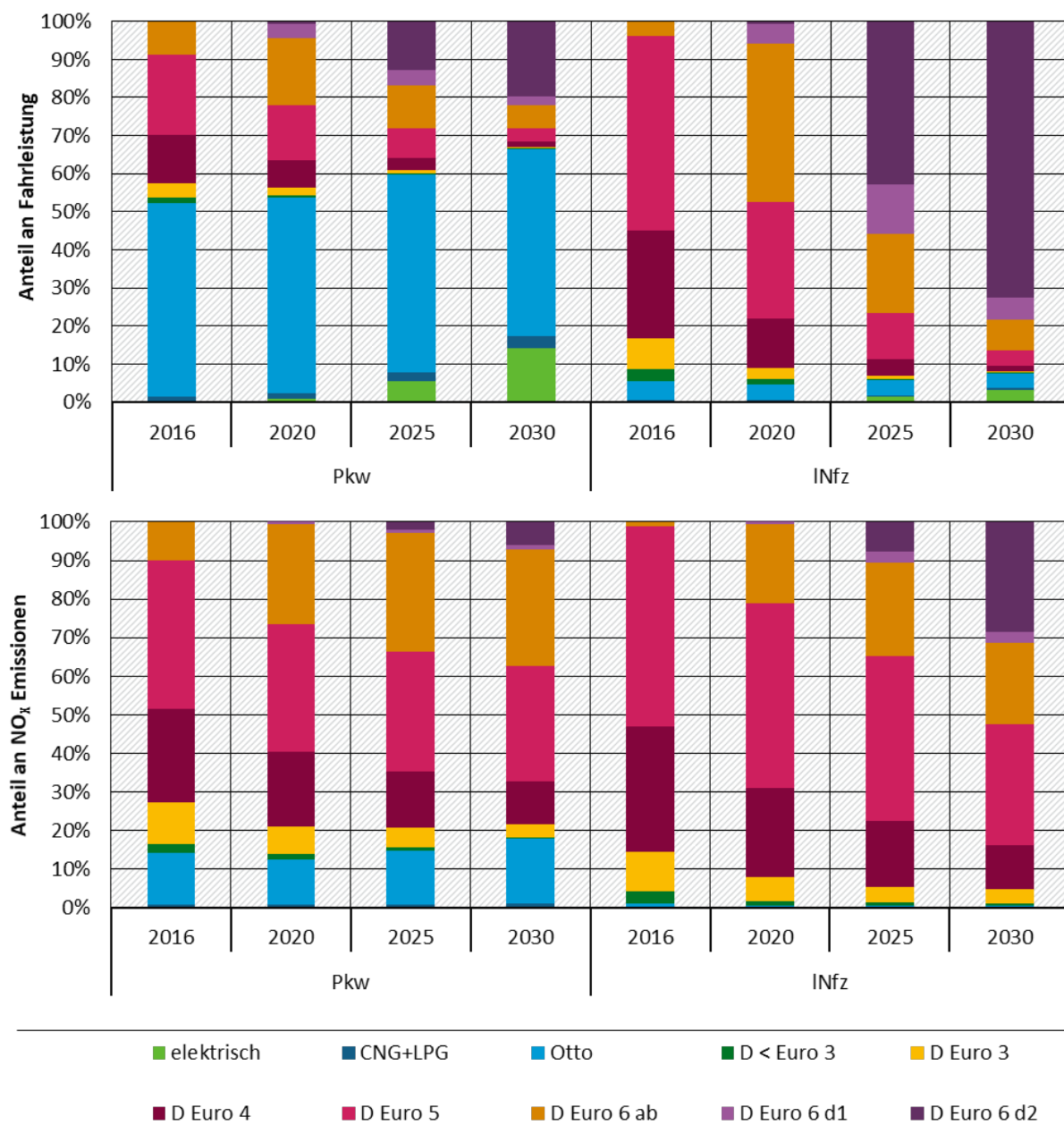
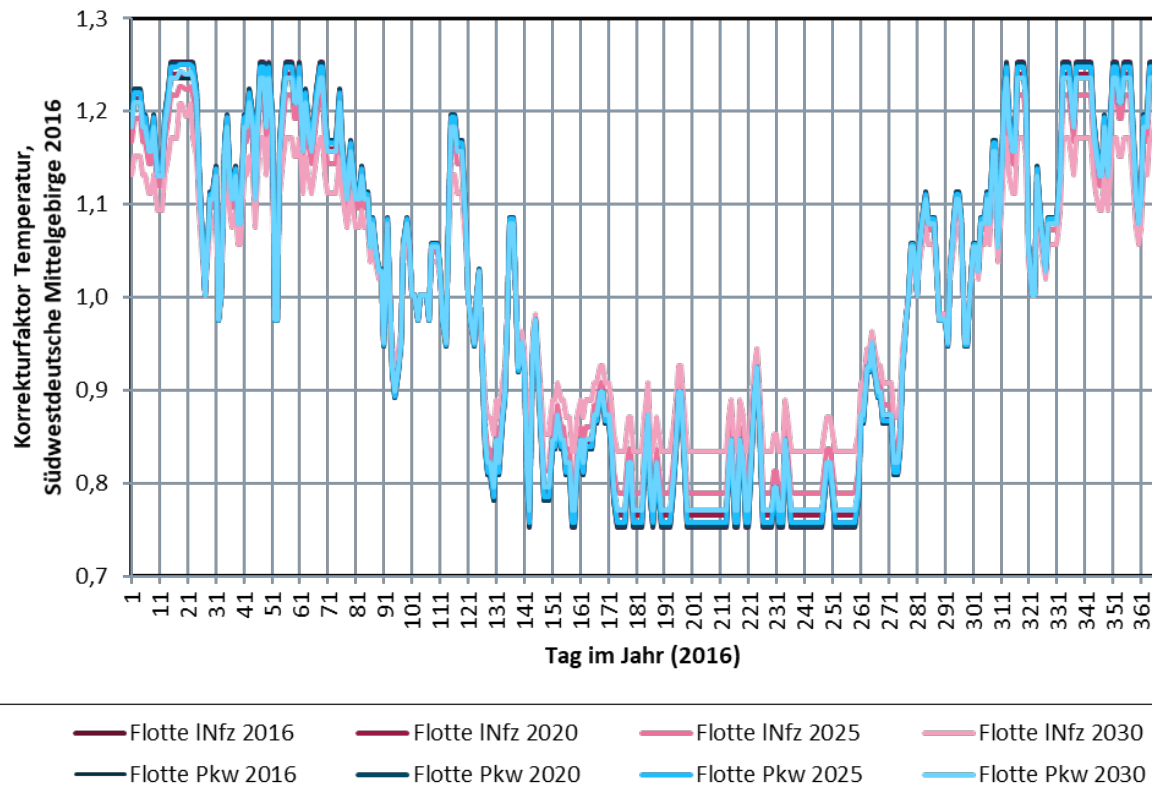


Abbildung 50: Flottenzusammensetzung für Pkw und leichte Nutzfahrzeuge (Mittelwert Deutschland); Datenquelle: HBEFA4.1



Datenquelle: HBEFA4.1

Abbildung 51: Temperaturabhängige Korrekturfaktoren für die NO_x-Emissionen der Pkw und INfz (normiert, Mittelwert = 1) für die bundesmittlere Flotte der Pkw und INfz (2016, 2020, 2025 und 2030) und den Temperaturverlauf der Klimaregion „Südwestdeutsche Mittelgebirge“



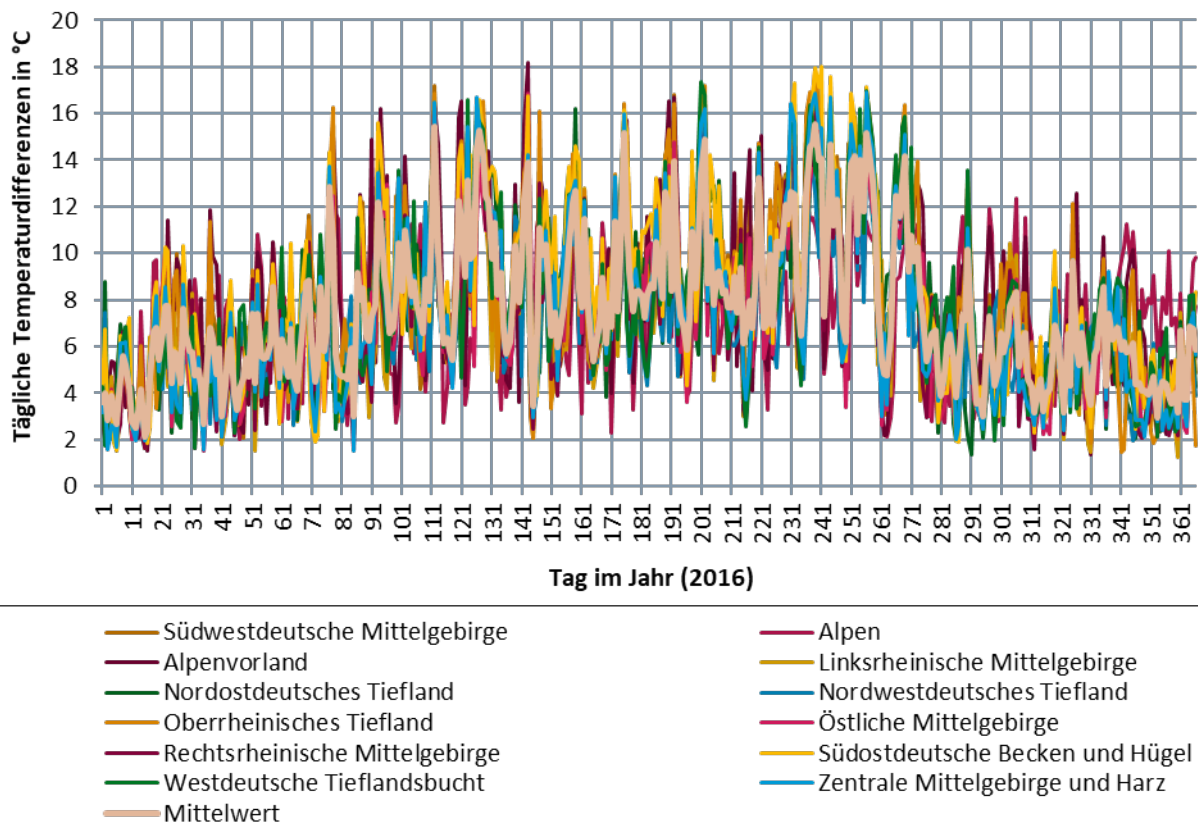
Datenquellen: COSMO-DE, HBEFA4.1

NMVOC entstehen einerseits bei der unvollständigen Verbrennung von (Otto-) Kraftstoff, insbesondere beim Kaltstart, wenn die Katalysatoren noch nicht optimal funktionieren. Diese Emissionen sind zum Großteil in den NFR-Sektoren 1A3bi (Road transport: Passenger cars) und 1A3biv (Road transport: Mopeds & motorcycles) enthalten. Wegen des geringeren Anteils an Otto-Motoren bei den Nutzfahrzeugen sind die NMVOC-Emissionen in den Sektoren 1A3bii (Road transport: Light duty vehicles) und 1A3biii (Road transport: Heavy duty vehicles and buses) geringer. Es gibt eine schwache Abhängigkeit der Kaltstart-NMVOC-Emissionen von der Umgebungstemperatur, sie wird hier jedoch nicht berücksichtigt.

Eine weitere Quelle für NMVOC-Emissionen ist die Verdampfung/Verdunstung von Otto-Kraftstoff, sie ist im Sektor 1A3bv (Road transport: Gasoline evaporation) enthalten. Sie setzen sich in Summe für Deutschland nach ifeu (2020) zusammen aus Emissionen infolge der Tankatmung (ca. 80%), aus „running losses“ während der Fahrt (ca. 8%) und aus Emissionen nach dem Motorabstellen (ca. 12%). Insbesondere die Tankatmung ist abhängig von der Umgebungstemperatur: Bei steigenden Temperaturen verdunstet Kraftstoff und die Luft im Tank dehnt sich aus. Daher können die mittleren Tagestemperatur-Differenzen zur zeitlichen Verteilung dieser Emissionen verwendet werden (TREMOT, 2016).

In Abbildung 52 sind die mittleren täglichen Temperaturdifferenzen 2016 in 2 m Höhe über Grund pro Klimaregion dargestellt.

Abbildung 52: Tägliche Temperaturdifferenzen (Mittelwerte pro Klimaregion und für Deutschland gesamt) aus der COSMO-DE Meteorologie für 2016



Datenquelle: COSMO-DE

Gesamt Splitting-Faktoren

Primär sind die Emissionen des Straßenverkehrs von der Verkehrsstärke abhängig, dies führt zu Teil-Splitting-Faktoren für LV und SV pro SVZ-Region bzw. Bundesland, differenziert nach Ortslage (BAB, AO, IO). Die NO_x - und NMVOC-Emissionen weisen eine zusätzliche Temperaturabhängigkeit auf. Weil SVZ-Regionen und die in Abschnitt 3 beschriebenen Klimaregionen nicht deckungsgleich sind, würde eine Verschneidung der SVZ-Regionen und der Klimaregionen zu einer Vielzahl von Teilregionen mit jeweils eigenen Abhängigkeiten führen. Die zeitlichen Verläufe der Temperaturen unterscheiden sich zwischen den Klimaregionen in Deutschland jedoch nicht stark, in Tabelle 9 sind für die Jahre 2016 und 2017 die quadrierten Pearson-Korrelationskoeffizienten R^2 der mittleren Tagestemperaturen in 2 m Höhe pro Klimaregion jeweils mit den entsprechenden mittleren Werten für Deutschland gesamt ausgewiesen.

Tabelle 9: Korrelation (Quadrat des Pearson-Korrelationskoeffizienten, R^2) zwischen den täglichen Temperaturwerten in 2 m Höhe gemittelt über die Klimaregionen jeweils mit den für Deutschland gesamt gemittelten Werten für die Jahre 2016 und 2017;
Datenquelle: COSMO-DE

| Klimaregion | Name Region | R^2 2017 | R^2 2016 |
|-------------|-------------------------------|------------|------------|
| 1 | Südwestdeutsche Mittelgebirge | 0,99 | 0,98 |
| 2 | Alpen | 0,95 | 0,93 |
| 3 | Alpenvorland | 0,97 | 0,97 |

| Klimaregion | Name Region | R ² 2017 | R ² 2016 |
|-------------|---------------------------------|---------------------|---------------------|
| 4 | Linksrheinische Mittelgebirge | 0,98 | 0,98 |
| 5 | Nordostdeutsches Tiefland | 0,95 | 0,95 |
| 6 | Nordwestdeutsches Tiefland | 0,96 | 0,96 |
| 7 | Oberrheinisches Tiefland | 0,99 | 0,98 |
| 8 | Östliche Mittelgebirge | 0,99 | 0,99 |
| 9 | Rechtsrheinische Mittelgebirge | 0,99 | 0,98 |
| 10 | Südostdeutsche Becken und Hügel | 0,98 | 0,98 |
| 11 | Westdeutsche Tieflandbucht | 0,98 | 0,97 |
| 12 | Zentrale Mittelgebirge und Harz | 0,99 | 0,99 |

R² ist ein Maß für die gemeinsame Varianz dieser Zeitreihen, die Werte sind alle höher als 93%, die niedrigsten Korrelationen treten auf zwischen der Alpenregion und Deutschland gesamt (93%, 2016) bzw. zwischen der Nordostdeutschen und der Nordwestdeutschen Tieflandbucht und Deutschland gesamt (Werte zwischen 95% und 96% für 2016 und 2017).

Da selbst die an den Rändern im Norden und Süden gelegenen Regionen zeitlich so gut mit den Mittelwerten für Deutschland gesamt übereinstimmen, werden nur die deutschlandweit gemittelten Temperaturabhängigkeit für die Straßenverkehrsemissionen angesetzt.

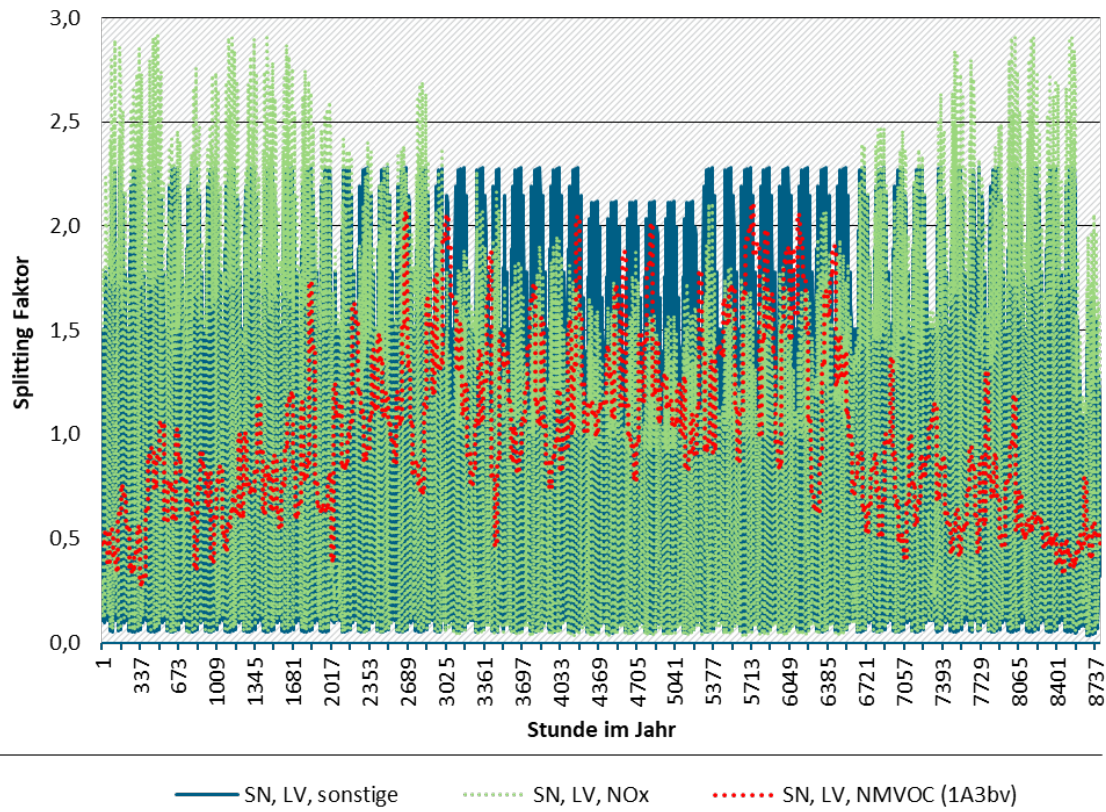
Der Gesamt-Splitting-Faktor ergibt sich wie folgt:

NO_x: Der Teilfaktor für die Verkehrsstärke (Summe = 1) verteilt die Emissionen entsprechend den Verkehrsstärken, ein sekundärer Teilfaktor (Mittelwert = 1) für die Temperatur wird damit multipliziert. Damit die Gesamtemissionen erhalten bleiben, wird anschließend noch einmal normiert.

NM VOC: 20% der Emissionen aus NFR-Sektor 1A3bv werden zeitlich wie die Verkehrsstärken verteilt, 80% (Anteil Tankatmung nach TREMOD (2016), s.o.) wie die Temperaturdifferenzen (Abbildung 52).

In Abbildung 53 ist die zeitliche Verteilung für die Emissionen des Leichtverkehrs exemplarisch für Sachsen jeweils für die nicht-temperaturabhängigen Emissionen (bereits dargestellt in Abbildung 47), für NO_x und für die NM VOC-Emissionen aus NFR-Sektor 1A3bv dargestellt (deutschlandweit gemittelte Temperaturabhängigkeit).

Abbildung 53: SF 2016 für die Emissionen des Leichtverkehrs (LV), exemplarisch für Sachsen (SN), für Schadstoffe ohne Temperaturabhängigkeit, für NO_x und für NMVOC aus Sektor 1A3bv



Datenquellen: BAST, COSMO-DE

Die nicht temperaturabhängigen Emissionen des LV (blaue Linie) zeigen den typischen Wochengang, auch ein Einbruch während der Sommerferien ist zu erkennen. Die NO_x-Emissionen (grüne Linie) zeigen durch die Korrekturfaktoren höhere Werte im Winter und niedrigere Werte im Sommer. Die NMVOC-Verdampfungsemissionen zeigen dagegen höhere Werte im Sommer und niedrigere Werte im Winter.

Nicht verwendete Datenquellen

Zusätzlich zu den BAST-Dauerzählstellen an innerörtlichen Bundesstraßen wurden weitere Datenquellen hinsichtlich ihrer Eignung zur zeitlichen Verteilung der innerstädtischen Straßenverkehrsemissionen untersucht. Sie werden hier vorgestellt, auch wenn sie aus den folgenden Gründen nicht weiterverfolgt werden.

Im Modell CHIMERE werden als Proxy für den Tagesgang des innerstädtischen Verkehrs stündliche NO₂-Messungen an innerstädtischen Verkehrsmessstellen herangezogen (Menut et al., 2012). Auch Untersuchungen der LUBW an mit Verkehrszählstellen kombinierten innerstädtischen verkehrsbeeinflussten Luftqualitätsmessstationen (LUBW, 2016) zeigen für eine mittlere Woche 2014 gute Übereinstimmung der Zeitverläufe von Verkehrsstärke und NO₂. In Abbildung 54 ist dies exemplarisch für die Messstelle Stuttgart Am Neckartor dargestellt. Gezeigt wird ein mittlerer Wochengang, d.h. es wurde für jeden Wochentag über alle gleichen Wochentage des Jahres gemittelt. Fluktuationen z.B. aufgrund des Wetters werden dadurch ausgeblendet.

Abbildung 54: Mittlerer Wochengang der Verkehrsstärken der Fahrzeugarten Pkw, leichte und schwere Nutzfahrzeuge sowie der Stickstoffdioxidkonzentrationen an der Verkehrszählstelle Stuttgart Am Neckartor; Basis: Halbstundenwerte; 01.01.2014 bis 31.12.2014; Quelle: LUBW (2016)

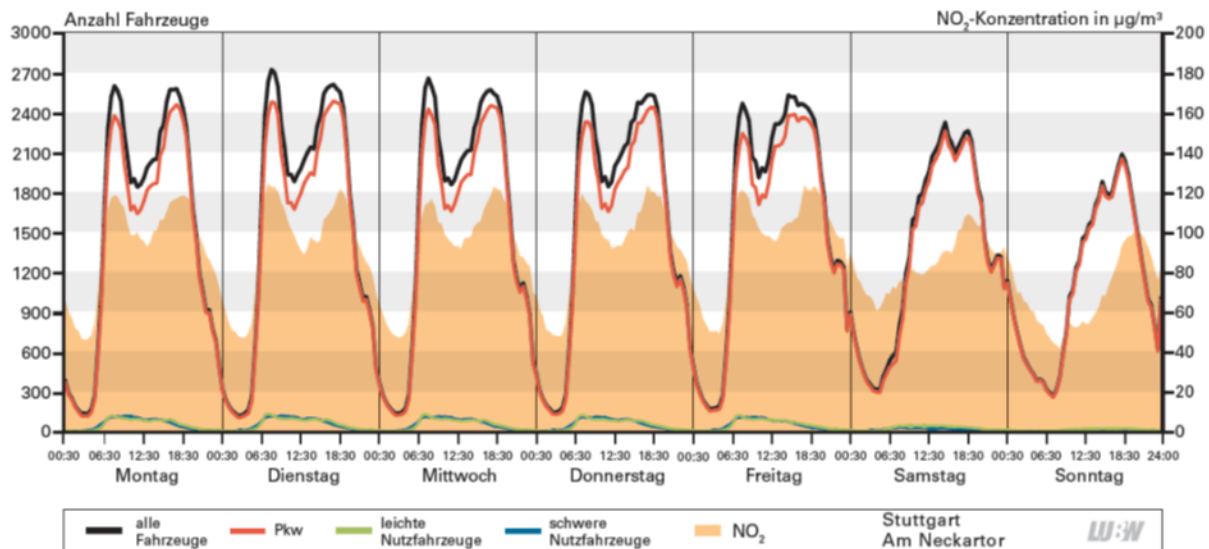
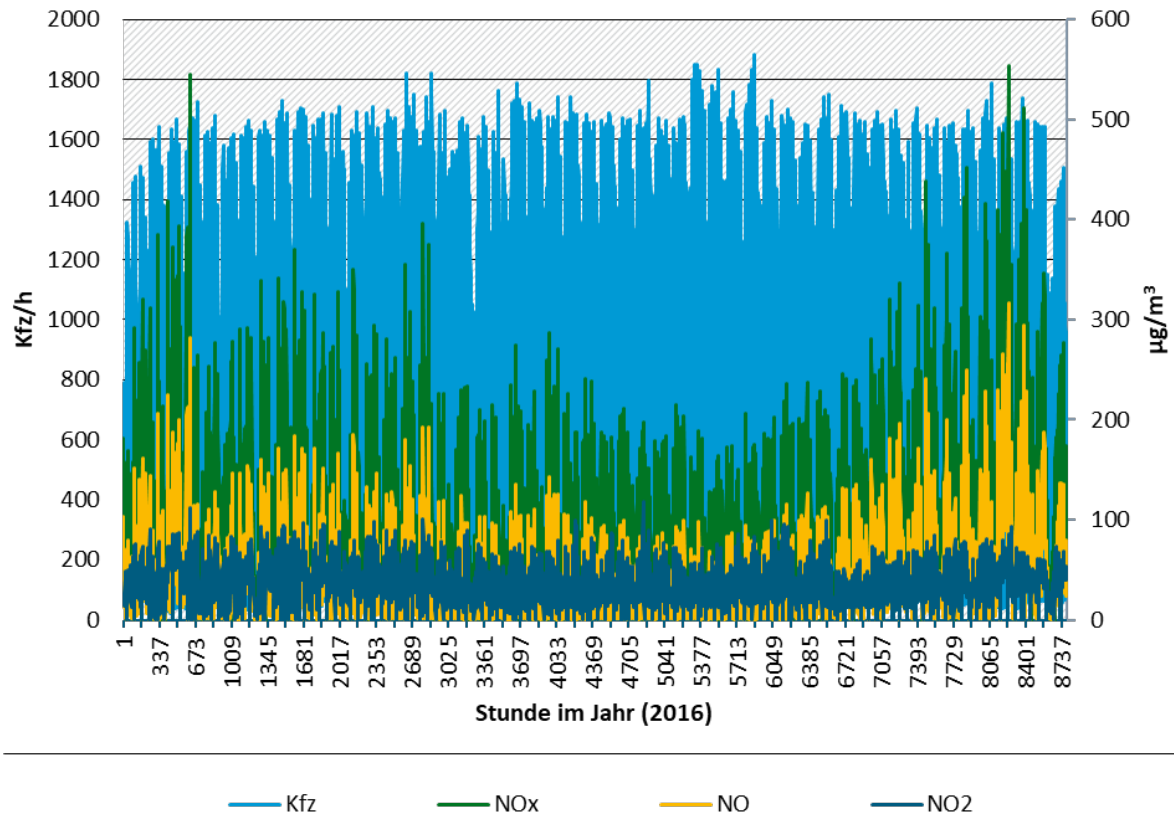


Abbildung 54 zeigt, dass der mittlere Wochengang von Verkehrsstärke und NO_2 qualitativ gut übereinstimmen. Nachts gehen die NO_2 -Werte jedoch weniger stark zurück als die Verkehrswerte. Dazu trägt, neben weiteren NO_x -Quellen zusätzlich zum Straßenverkehr, insbesondere die Chemie bei: Nachts findet keine NO_2 -Photolyse statt, d.h. das Gleichgewicht zwischen NO und NO_2 wird in Richtung NO_2 verschoben. Bei Verwendung von NO_2 -Konzentrationswerten als Proxy für die NO_x -Emissionen würden also zu viele Emissionen auf die Nachtstunden verteilt werden.

Es wurde daher untersucht, ob NO_x -Messungen, die weniger von der Photolyse betroffen sind als NO_2 , an innerstädtischen Spotmessstellen besser als Proxy für die NO_x -Emissionen geeignet sind. Dazu wurden die bereits oben ausgewerteten, von der LUBW für die Jahre 2016 und 2017 zur Verfügung gestellten Kfz-Werte für die Verkehrszählstationen Stuttgart Am Neckartor, Stuttgart Hohenheimer Straße und Pfinztal Karlsruher Straße (LUBW, 2020) betrachtet, an denen sich auch NO_x - und NO_2 -Messstationen befinden. Die zeitlich zugehörigen Messwerte dieser Konzentrationen können unter <https://udo.lubw.baden-wuerttemberg.de/public/> heruntergeladen werden.

In Abbildung 55 sind für Pfinztal, Karlsruher Str. 2016, stündliche Werte für Kfz, NO_x , NO_2 und NO vergleichend dargestellt. Es ist zu erkennen, dass NO , und damit auch NO_x , anders als NO_2 einen Jahresgang mit höheren Werten im Winter aufweist. Mögliche Gründe für den von NO_2 abweichenden Jahresgang sind eine im Winter niedrigere Mischungsschichthöhe, die Temperaturabhängigkeit der NO_x -Emissionen des Straßenverkehrs (führt beides zu höheren NO_x -Konzentrationen im Winter), eine jahreszeitabhängige Lage des Gleichgewichts zwischen NO und NO_2 (im Winter weniger Photolyse, aber auch deutlich weniger Ozon) sowie ein jahreszeitlich veränderliches NO_2/NO_x -Verhältnis der Emissionen (mögliche Temperaturabhängigkeit des NO_2/NO_x -Verhältnisses der Emissionen des Straßenverkehrs, im Winter höhere Beiträge der Emissionen aus Kleinf Feuerungsanlagen).

Abbildung 55: Stündliche Messwerte 2016 der Verkehrsstärke sowie der Konzentrationen der Luftschadstoffe NO, NO₂ und NO_x an der Messtation Pfinztal, Karlsruher Str.

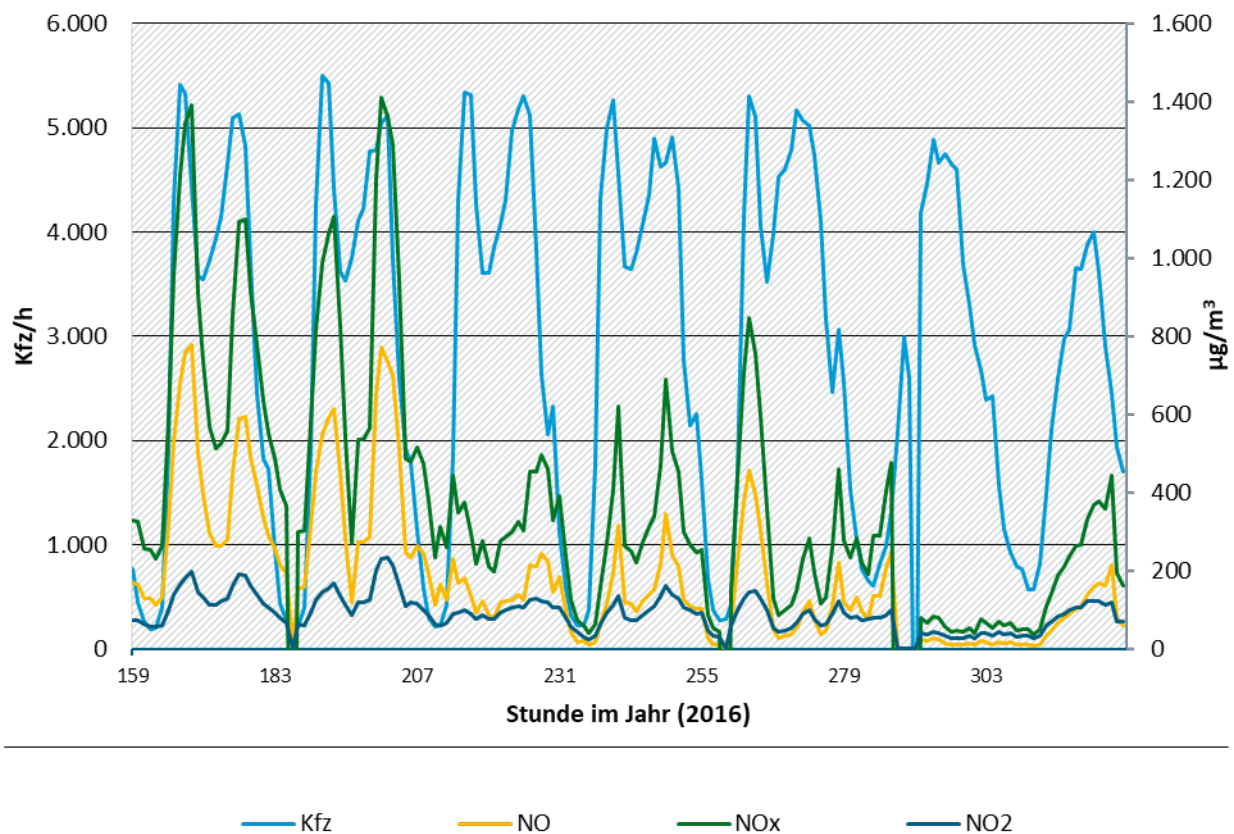


Datenquelle: LUBW

Während bei den NO₂-Messungen der Tagesgang (zu hohe Werte bei Nacht im Vergleich zum Tag) gegen eine Verwendung als Proxy für die Emissionen spricht, ist es bei den NO_x-Messungen der Jahresgang (zu hohe Werte im Winter im Vergleich zum Sommer).

Aber auch innerhalb einer Jahreszeit sind Konzentrationsmessungen nicht gut als Proxy für Emissionen geeignet, dafür sind die Konzentrationen (sowohl für NO_x wie auch für NO₂) zu sehr vom Wetter abhängig. In Abbildung 56 sind zur Veranschaulichung Messreihen einer Woche dargestellt, und zwar die stündlichen Messwerte vom 24.01.2016 bis zum 31.01.2016 (Normalwoche, beginnend mit einem Montag), diesmal für die Station Stuttgart Am Neckartor. Es ist gut zu erkennen, dass die Verkehrswerte an den ersten vier Werktagen einen sehr ähnlichen Tagesgang aufweisen, jeweils mit Morgen- und Nachmittagsspitze. Die Schadstoffkonzentrationen sind am dritten Tag jedoch deutlich niedriger. Dies ist wahrscheinlich auf für die Luftqualität günstigeres Wetter zurückzuführen: Die beim Deutschen Wetterdienst (DWD, 2020) erhältlichen meteorologischen Messdaten der Station Stuttgart Echterdingen zeigen, dass an den ersten beiden dargestellten Tagen sehr niedrige mittlere Windgeschwindigkeiten (1 m/s) vorlagen, und ab dem dritten Tag der dargestellten Woche deutlich höhere mittlere Windgeschwindigkeiten (2 bis 5 m/s).

Abbildung 56: Stündliche Messwerte vom 24.01.2016 bis zum 31.01.2016 der Verkehrsstärke sowie der Konzentrationen der Luftschadstoffe NO, NO₂ und NO_x an der Messtation Stuttgart Am Neckartor



Datenquelle: LUBW

In Tabelle 10 ist das Bestimmtheitsmaß (Quadrat des Pearson-Korrelationskoeffizienten, R^2) zwischen den stündlichen Luftschadstoffmessungen (NO₂ bzw. NO_x) und den stündlichen Verkehrsstärken für 2016 und 2017 an den drei Stationen „Stuttgart Am Neckartor“, Stuttgart Hohenheimer Str.“ und „Pfinztal Karlsruher Str.“ ausgewiesen.

Für alle Stationen sind die Korrelationen zwischen NO₂ und Verkehrsstärken höher als die zwischen NO_x und Verkehrsstärken. Alle Werte für R^2 liegen unter 50% und auch unter den Werten zwischen Verkehrsstärken an innerstädtischen Dauerzählstellen verschiedener Bundesländer (s. Tabelle 6 und Tabelle 7).

Tabelle 10: Bestimmtheitsmaß (R^2) zwischen den stündlichen Luftschadstoffmessungen (NO_2 bzw. NO_x) und den stündlichen Verkehrsstärken für 2016 und 2017 an den drei Stationen „Stuttgart Am Neckartor“, Stuttgart Hohenheimer Str.“ und „Pfinztal Karlsruher Str.“

| | Stuttgart Am Neckartor | Stuttgart Hohenheimer Str. | Pfinztal Karlsruher Str. |
|--------------------|------------------------|----------------------------|--------------------------|
| 2016 NO_2 | 25% | 34% | 48% |
| 2016 NO_x | 21% | 28% | 36% |
| 2017 NO_2 | 20% | 30% | 44% |
| 2017 NO_x | 18% | 29% | 39% |

Bei Verwendung von Konzentrationsmessdaten (unerheblich, ob NO_2 oder NO_x) als Proxy für Emissionen würden auf austauscharme Tage zu hohe Emissionen und auf die anderen Tage zu niedrige Emissionen verteilt werden. Da ein Ausbreitungsmodell die Meteorologie enthält, verstärkt es diesen Effekt: Zu hohe Emissionen an austauscharmen Modelltagen führen zu wiederum erhöhten Modellkonzentrationen.

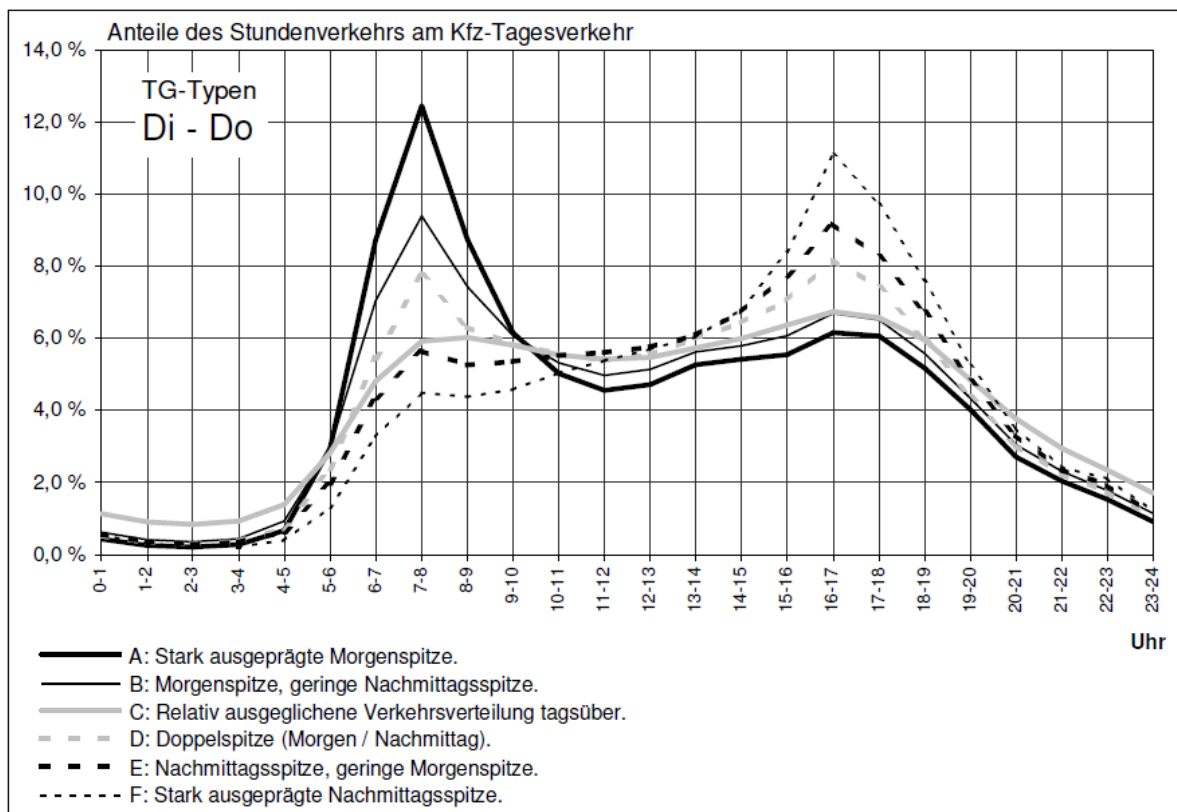
Im vorliegenden Projekt werden Konzentrationsmessungen daher nicht als Proxy für Emissionen verwendet.

Eine weitere Möglichkeit zur zeitlichen Verteilung der innerstädtischen Straßenverkehrsemissionen ist die Verwendung synthetischer Zeitprofile auf Basis von Tagesganglinientypen. Typische Ganglinientypen sind in Abbildung 57 beispielhaft für die Tage Dienstag bis Donnerstag dargestellt. Sie unterscheiden sich hinsichtlich der Lage ihrer Spitzen (Morgenspitze, Nachmittagsspitze, Doppelspitze) und deren Ausprägtheit.

Es können jedoch auch innerhalb einer Stadt sehr unterschiedliche Ganglinientypen auftreten, wenn Pendler z.B. morgens und abends häufig unterschiedliche Wege nehmen.

Die Ganglinien dienen z.B. der Hochrechnung von Verkehrszählungen an konkreten Strecken, für die der Ganglinientyp bekannt ist, für die Ermittlung eines mittleren innerstädtischen Zeitverhaltens helfen sie nicht weiter.

Abbildung 57: Tagesganglinientypen des Kfz-Verkehrs Dienstag bis Donnerstag, Quelle: BASt (2014)



Zur Ermittlung von Splitting-Faktoren für die Emissionen des innerstädtischen Straßenverkehrs werden daher die bereits oben beschriebenen Dauerzählstellen der BASt an innerstädtischen Bundesstraßen (ohne Grenzstationen) herangezogen.

4.5 Sonstiger Verkehr

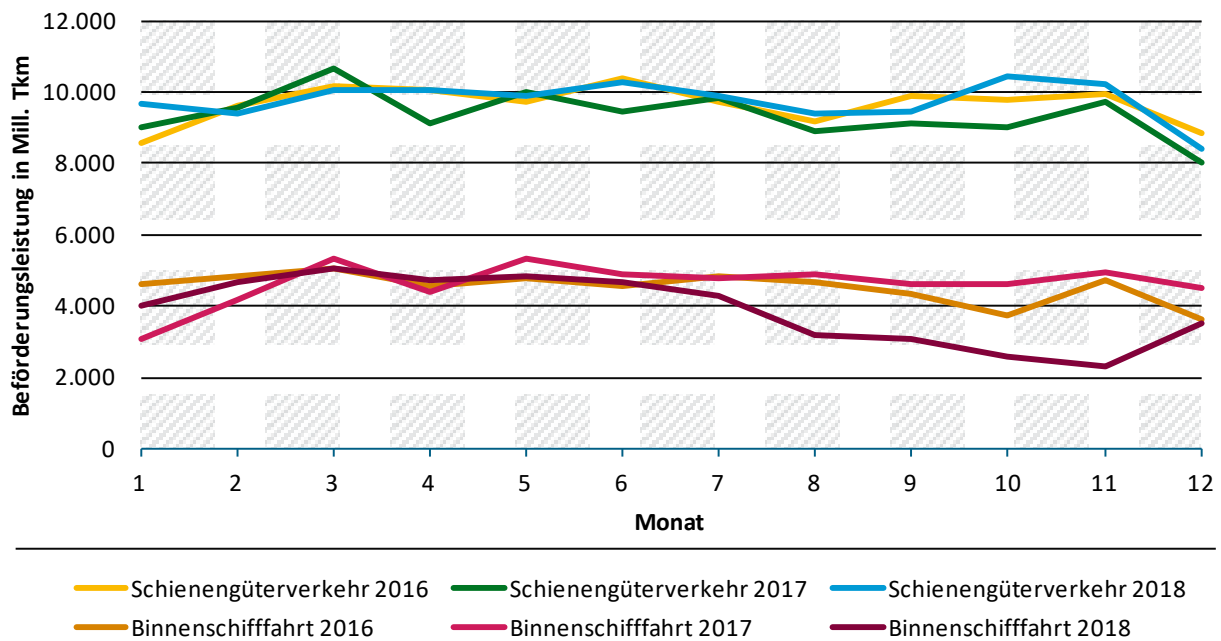
Der SNAP-Sektor 8 (andere mobile Quellen und Maschinen) fasst die Emissionen aus allen mobilen Maschinen zusammen, die nicht zum Straßenverkehr gehören. Das beinhaltet die Schifffahrt, den Schienenverkehr, den Flugverkehr, die Baumaschinen sowie den Einsatz mobiler Maschinen in Industrie, in Haushalten, in der Garten- und Landschaftspflege, der Landwirtschaft, Forstwirtschaft und Fischerei, beim Militär und der Freizeitgestaltung.

Analog zur Gruppe „Industrie, Gewerbe, Energie ohne Kraftwerke“ (s. Abschnitt 4.3) wird auch hier auf Monatswerte zurückgegriffen, die mit Default-Wochen- und -Tagesgängen (statische Zeitprofile aus RCG) kombiniert werden.

Für Schifffahrt und Schienenverkehr werden monatliche Beförderungsleistungen des Güterverkehrs angesetzt. Diese Werte liegen beim Statistischen Bundesamt deutschlandweit vor und sind für die Jahre 2016, 2017 und 2018 in Abbildung 58 dargestellt.

Das Jahr 2018 wurde zusätzlich zu den hier untersuchten Jahren (2016 und 2017) aufgenommen, da hier zu erkennen ist, wie sich die besondere Trockenheit 2018 und die damit zusammenhängenden niedrigen Pegelstände der Flüsse auf die Binnenschifffahrt auswirken: Verglichen mit den Jahren 2016 und 2017 ist die Beförderungsleistung der Binnenschifffahrt zwischen August und November 2018 deutlich reduziert.

Abbildung 58: Monatliche Beförderungsleistung des Schienengüterverkehrs und der Binnenschifffahrt 2016, 2017 und 2018; Datenquelle: Statistisches Bundesamt (Destatis), 2020



Datenquelle: destatis

Für den Flugverkehr werden für die 25 größten Flughäfen Deutschlands die monatlichen Anzahlen der Starts und Landungen verwendet. Auch diese liegen beim Statistischen Bundesamt vor und sind für 2016 und 2017 in Abbildung 59 dargestellt.

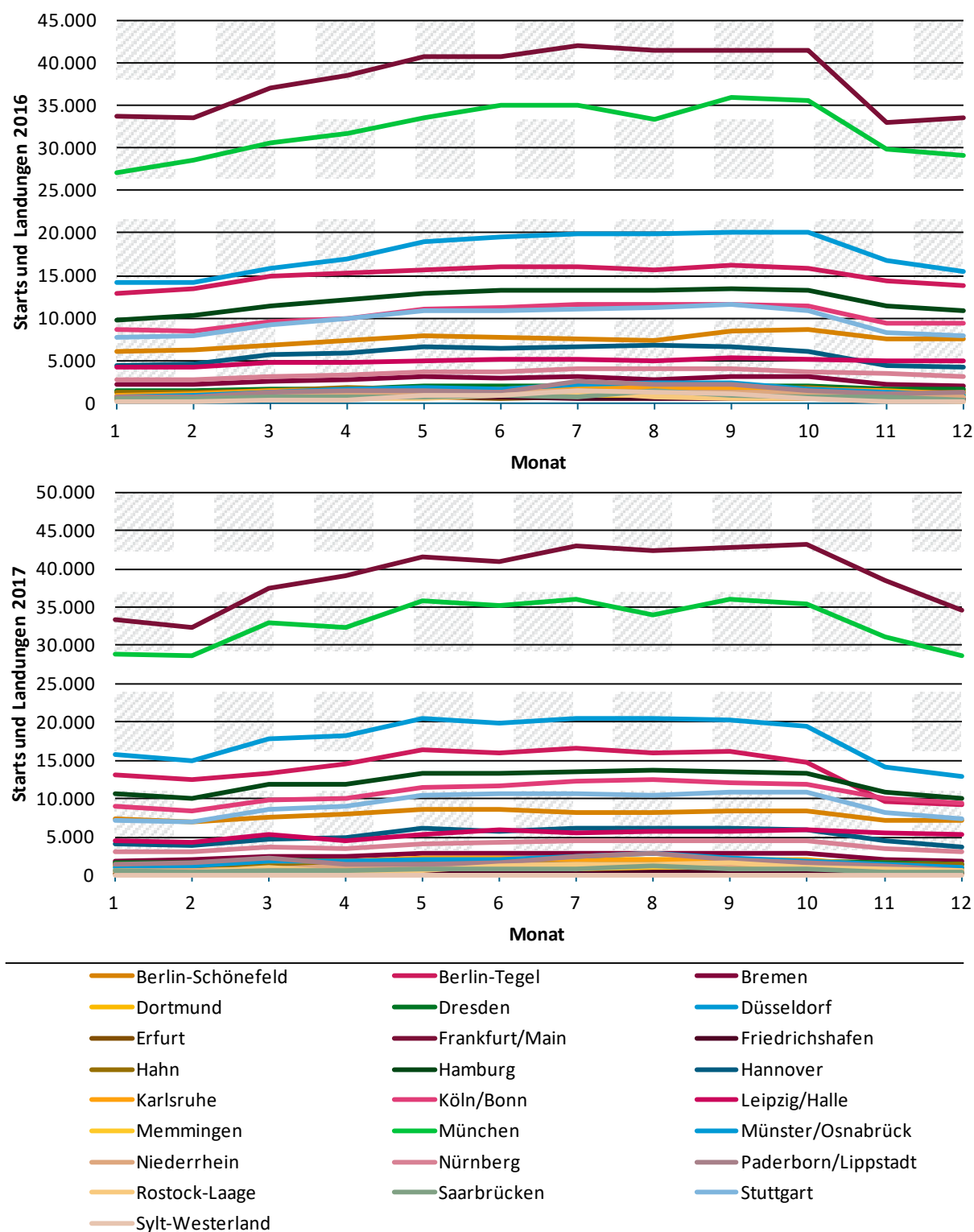
Die Großflughäfen sind in GRETA als Punktquellen enthalten (Flughafen-Layer), denen die Monatsprofile direkt zugeordnet werden. Die übrigen Gitterzellen werden mit mittleren Verteilungen versorgt.

Für die Baumaschinen werden die monatlichen Produktionsindizes des Baugewerbes, für die mobilen Maschinen der Industrie die Produktionsindizes des produzierenden Gewerbes (s. Abbildung 37 und Abbildung 38) angesetzt. Der NFR-Sektor „Agriculture/Forestry/Fishing“ wird durch die Landwirtschaft dominiert, hier werden die Zeitfunktionen der Landwirtschaft angesetzt (s. Abschnitt 4.6).

Für die übrigen NFR-Sektoren aus SNAP 8 (1A4bii Residential: Household and gardening (mobile), 1A4ciii Agriculture/Forestry/Fishing: National fishing, 1A5b Other, Mobile (including military, land based and recreational boats)) werden synthetische Default-Profile angesetzt, für den Einsatz von mobilen Maschinen im Gartenbereich kann dabei eine Meteorologieabhängigkeit angesetzt werden (Rasenmähen während der Wachstumsperiode und nicht bei Regen). Mit Ausnahme von 1A4bii (Residential: Household and gardening, mobile)) liegen die Beiträge dieser Sektoren zu den nationalen Gesamtemissionen unter einem Prozent, der Beitrag von NFR 1A4bii ist für CO maximal und liegt dort bei ca. 4%.

Da es sich bei diesen übrigen NFR-Sektoren um Flächenquellen handelt, deren Zeitverhalten keine scharfen Peaks aufweist, werden auch nicht die Emissionen in einzelnen Gitterzellen oder zu bestimmten Zeitpunkten von diesen Quellgruppen dominiert. Eine Näherung an dieser Stelle ist daher legitim.

Abbildung 59: Anzahl der Starts und Landungen auf den 25 größten Flughäfen Deutschlands für 2016 und 2017; Datenquelle: Statistisches Bundesamt (Destatis), 2020



Datenquelle: destatis

Die verwendeten Daten für die zeitliche Verteilung der Emissionen der NFR-Sektoren aus SNAP 8 sind in Tabelle 11 aufgelistet.

Tabelle 11: Verwendete Daten für das Zeitverhalten der Emissionen der NFR-Sektoren aus SNAP 8

| NFR-Sektor | Zeitverhalten |
|--|-------------------------|
| 1A2gvii Mobile Combustion in manufacturing industries and construction | Baugewerbe |
| 1A3ai(i) International aviation LTO (civil) | Starts+Landungen |
| 1A3aii(i) Domestic aviation LTO (civil) | Starts+Landungen |
| 1A3c Railways | Beförderungsleistung GV |
| 1A3di(ii) International inland waterways | Beförderungsleistung GV |
| 1A3dii National navigation (shipping) | Beförderungsleistung GV |
| 1A3eii Other (please specify in the IIR) | nicht berichtet |
| 1A4aii Commercial/institutional: Mobile | produzierendes Gewerbe |
| 1A4bii Residential: Household and gardening (mobile) | Jahreszeit |
| 1A4cii Agriculture/Forestry/Fishing: Off-road vehicles and other machinery | Landwirtschaft |
| 1A4ciii Agriculture/Forestry/Fishing: National fishing | synthetisch erzeugen |
| 1A5b Other, Mobile (including military, land based and recreational boats) | synthetisch erzeugen |

4.6 Landwirtschaft

Die Emissionen der Landwirtschaft (26 NFR-Sektoren) werden im SNAP-Sektor 10 zusammengefasst. Die Landwirtschaft dominiert vielerorts die NH_3 -Emissionen (Beitrag zu den Gesamtemissionen in Deutschland 2016: ca. 95%), zu den NH_3 -Emissionen der Landwirtschaft gibt es daher bereits zahlreiche Untersuchungen und Modellrechnungen.

Bereits in vielen Modellen implementiert und zum Teil weiterentwickelt sind Ansätze für dynamische Zeitprofile nach Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005). Dort werden 15 Funktionen zur zeitlichen Verteilung von NH_3 -Emissionen der Landwirtschaft (und eine des Straßenverkehrs) definiert. Hier werden diese Funktionen ebenfalls verwendet, die Parameter werden zunächst übernommen nach Backes (2014), in Abschnitt 7.2.2 findet eine geringfügige Anpassung statt.

Bei den Zeitfunktionen für die Landwirtschaft gibt es zwei Gruppen mit jeweils ähnlichem Verhalten:

- Die Emissionen aus der Tierhaltung folgen im Wesentlichen etwas gedämpft dem Jahresgang der Temperatur, eine zusätzliche Abhängigkeit besteht von der mittleren Windgeschwindigkeit.
- Die Emissionen aus der Bodenbearbeitung haben im Wesentlichen die Form von Glockenkurven, deren Maxima bei den jeweils optimalen Düngeterminen liegen und deren Breiten sich durch Streuung um diese Termine ergeben. Je nach Art der Kultur (Winterfrüchte, Frühlingsfrüchte, ...) und Anzahl Düngergaben ergeben sich die Zeiten für die Maxima, wenn die kumulierten Tagestemperaturen bestimmte Werte überschreiten. Teilweise sind sie zusätzlich von der mittleren Windgeschwindigkeit abhängig, was zu Modulationen der Glockenkurven führt.

Tierhaltung

Unter diesem Punkt werden die in Ställen und bei der Lagerung von Gülle entstehenden Emissionen betrachtet; die bei Weidehaltung durch grasendes Vieh entstehenden Emissionen werden zusammen mit den Emissionen durch Bodenbearbeitung betrachtet. Ställe werden unterteilt in offene Ställe und in geschlossene Ställe mit Belüftung, es wird angesetzt, dass Rinder und Milchvieh in offenen Ställen gehalten werden und Schweine und Geflügel in geschlossenen Ställen.

Basierend auf Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005) lässt sich die Zeitabhängigkeit der Emissionen $E(t)$ aus Ställen nach Backes (2014) wie folgt parametrisieren:

$$E(t) = E_a \frac{T^{0,89}(t) \cdot v_m^{0,26}(t)}{\sum_{s=1}^n T^{0,89}(s) \cdot v_m^{0,26}(s)}$$

Darin bedeuten

- t: Index für den Tag im Jahr
- E_a : jährliche Gesamtemission pro Gitterpunkt,
- $T(t)$: Temperatur im Stall, abhängig von der Außentemperatur in 2 m Höhe über Grund, s. unten
- $v_m(t)$: bei offenen Ställen: mittlere Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe über Grund,
bei geschlossenen Ställen: Ventilationsgeschwindigkeit, s. unten

Der Exponent bei der Temperaturabhängigkeit (0,89) ist etwas kleiner als eins, die Emissionen sind also nicht direkt proportional zur Temperatur, sondern etwas gedämpft. Der Exponent bei der Windabhängigkeit (0,26) ist deutlich kleiner, die Emissionen steigen also mit steigender Windgeschwindigkeit/Ventilationsgeschwindigkeit, aber deutlich schwächer als mit steigender Temperatur. Die Summe im Nenner dient der Normierung.

Die Parameter für die Abhängigkeit der Stalltemperatur T und für die Ventilationsgeschwindigkeit v_m von der Außentemperatur T_{out} wurden von Backes (2014) übernommen, sie sind im Folgenden dargestellt.

Schweinehaltung (geschlossene Ställe):

$$T = \begin{cases} 20^\circ\text{C} + 0,5 \cdot T_{out} & \text{wenn } T_{out} < 0^\circ\text{C} \\ 20^\circ\text{C} & \text{wenn } 0^\circ\text{C} \leq T_{out} < 12,5^\circ\text{C} \\ 7,5^\circ\text{C} + T_{out} & \text{wenn } 12,5^\circ\text{C} \leq T_{out} \end{cases}$$

$$v_m = \begin{cases} 0,2 \frac{\text{m}}{\text{s}} & \text{wenn } T_{out} < 0^\circ\text{C} \\ 0,2 \frac{\text{m}}{\text{s}} + 0,18 \frac{\text{m}}{\text{s}} \frac{T_{out}}{12,5^\circ\text{C}} & \text{wenn } 0^\circ\text{C} \leq T_{out} < 12,5^\circ\text{C} \\ 0,38 \frac{\text{m}}{\text{s}} & \text{wenn } 12,5^\circ\text{C} \leq T_{out} \end{cases}$$

Geflügel (geschlossene Ställe):

$$T = \begin{cases} 22^\circ\text{C} + 0,5 \cdot T_{out} & \text{wenn } T_{out} < 0^\circ\text{C} \\ 22^\circ\text{C} & \text{wenn } 0^\circ\text{C} \leq T_{out} < 12,5^\circ\text{C} \\ 9,5^\circ\text{C} + T_{out} & \text{wenn } 12,5^\circ\text{C} \leq T_{out} \end{cases}$$

$$v_m = \begin{cases} 0,2 \frac{\text{m}}{\text{s}} & \text{wenn } T_{out} < 0^\circ\text{C} \\ 0,2 \frac{\text{m}}{\text{s}} + 0,23 \frac{\text{m}}{\text{s}} \frac{T_{out}}{12,5^\circ\text{C}} & \text{wenn } 0^\circ\text{C} \leq T_{out} < 12,5^\circ\text{C} \\ 0,43 \frac{\text{m}}{\text{s}} & \text{wenn } 12,5^\circ\text{C} \leq T_{out} \end{cases}$$

Geflügel ist etwas empfindlicher als Schweine, daher sind die Stalltemperaturen dort im Winter etwas höher.

Rinder (offene Ställe):

$$T = \begin{cases} 4^\circ\text{C} + T_{out} & \text{wenn } -1^\circ\text{C} \leq T_{out} \\ 3^\circ\text{C} & \text{wenn } -1^\circ\text{C} > T_{out} \end{cases}$$

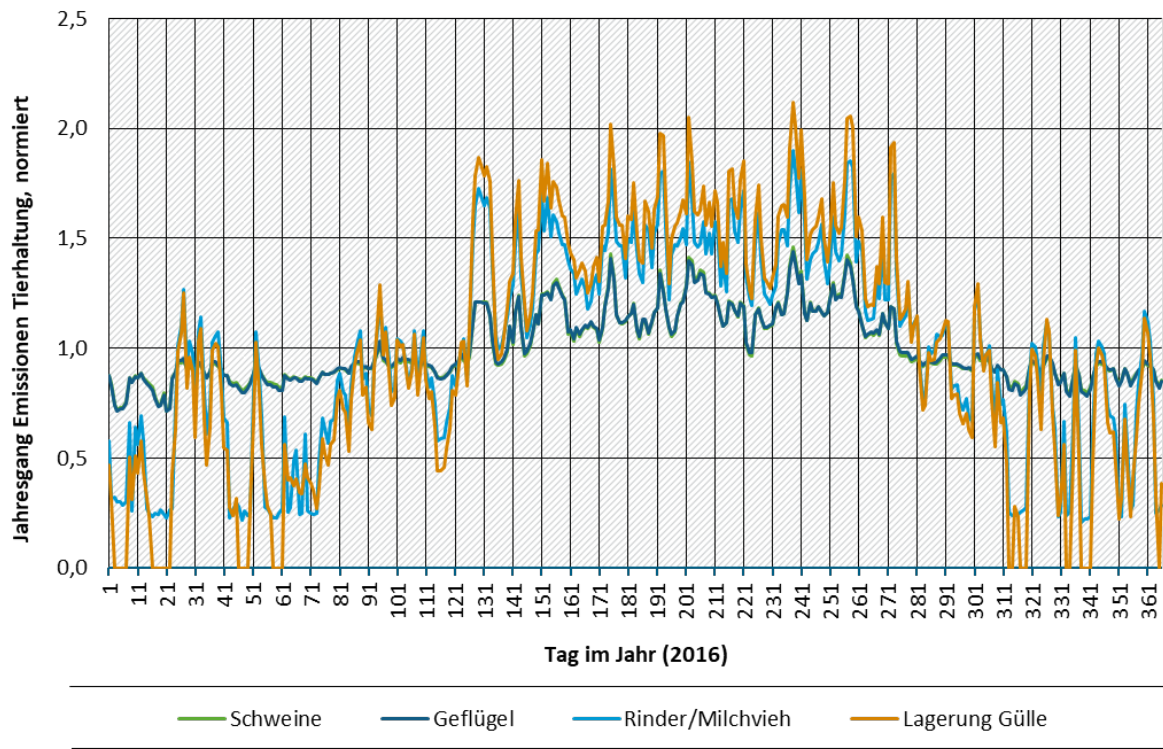
Lagerung von Gülle:

$$T = \begin{cases} T_{out} & \text{wenn } 1^\circ\text{C} \leq T_{out} \\ \text{keine Emissionen} & \text{wenn } 1^\circ\text{C} > T_{out} \end{cases}$$

Die damit berechneten normierten Jahresgänge für die Emissionen aus der Tierhaltung mit den Werten für Temperatur in 2 m Höhe über Grund und mittlere Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe über Grund in der Klimaregion „Nordwestdeutsches Tiefland“ für 2016 sind in Abbildung 60 dargestellt. Weil sich, wie in Abschnitt 3 gezeigt, die meteorologischen Variablen für die zwölf Klimaregionen nicht sehr unterscheiden, sind die Jahresgänge der Emissionen in anderen Klimaregionen sehr ähnlich.

Durch die Heizung in geschlossenen Ställen sind die Unterschiede zwischen Sommer- und Wintertemperaturen geringer und entsprechend ist der Jahresgang bei Schweinen und Geflügel weniger stark ausgeprägt als bei in offenen Ställen gehaltenen Rindern oder bei der Lagerung von Gülle.

Abbildung 60: Normierter Jahresgang für die Emissionen aus der Tierhaltung in der Klimaregion „Nordwestdeutsches Tiefland“ 2016 mit den Parametern nach Backes (2014)



Datenquelle: COSMO-DE

Bodenbearbeitung

Emissionen im Zusammenhang mit der Bodenbearbeitung entstehen einerseits durch Emissionen der Pflanzen selbst über deren Blätter und andererseits bei der Ausbringung von Dünger. Die Pflanzen emittieren während der Zeit ihres stärksten Wachstums am meisten. Da die Düngungen ebenfalls in diese Zeiten fallen, sind die Zeitfunktionen teilweise ähnlich.

Die zeitlichen Verteilungen der Emissionen der Pflanzen über ihre Blätter entsprechen Glockenkurven:

$$E(t) = E_a \cdot \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Die Scheitelpunkte μ sind bestimmt als die Tage, an denen die kumulierten Tagestemperaturen in 2 m Höhe die in Tabelle 12 angegebenen Werte erreichen oder überschreiten. Die entsprechenden Halbwertsbreiten σ sind ebenfalls in Tabelle 12 ausgewiesen, ebenso die Aufteilung der Pflanzenemissionen auf die Subsektoren Winterfrüchte, Frühjahrsfrüchte, späte Frühjahrsfrüchte und Grasland. Die Emissionen von mit NH_3 behandeltem Stroh haben ebenfalls die Form von Glockenkurven.

Den Emissionen der Pflanzen über ihre Blätter entspricht der NFR-Sektor 3De (Cultivated crops). NH_3 -Emissionen werden für Deutschland in diesem Sektor nicht berichtet, berichtet werden jedoch NMVOC-Emissionen aus Pflanzen, die mittels dieser Jahresgänge zeitlich verteilt werden können.

Tabelle 12: Scheitelpunkte (Tage, an dem die kumulierten Tagestemperaturen die entsprechenden Werte für μ erreichen) und Halbwertsbreiten σ der Zeitfunktionen für die Emissionen aus Pflanzen und NH_3 behandeltem Stroh, sowie Anteile dieser Teilquellen; Quelle: Backes (2014)

| Teilquelle | μ | σ | Anteil |
|-----------------------------|-------|----------|--------|
| winter crops | 860 | 39 | 10,1% |
| spring crops | 1100 | 25 | 9,2% |
| late spring crops | 2190 | 45 | 2,3% |
| grassland | 1550 | 60 | 4,3% |
| NH_3 treated straw | 1865 | 9 | 4,5% |

Tabelle 13: Scheitelpunkte (Tage, an dem die kumulierten Tagestemperaturen die entsprechenden Werte für μ erreichen) und Halbwertsbreiten σ der Zeitfunktionen für die Emissionen aus der Gülle- und Mineraldüngerausbringung und grasendem Vieh, sowie Anteile dieser Teilquellen; Quelle: Backes (2014)

| Teilquelle | μ | σ | Anteil |
|----------------------|-------------------|----------|--------|
| manure application 1 | 250 | 9 | 12% |
| manure application 2 | 512 | 9 | 30% |
| manure application 3 | 1550 | 16 | 2,8% |
| manure application 4 | 250 (day of year) | 9 | 7,5% |
| mineral fertilizer 1 | 350 | 9 | 11,1% |
| mineral fertilizer 2 | 1550 | 16 | 1,3% |
| grassing | 1550 | 60 | 4,9% |

Die bei der Ausbringung von Dünger entstehenden Emissionen haben ebenfalls die Form von Glockenkurven, sie weisen jedoch zusätzliche Abhängigkeiten von der jeweiligen Temperatur in 2 m Höhe T in $^{\circ}\text{C}$ und der jeweiligen mittleren Windgeschwindigkeit in 10 m Höhe v_m in m/s auf, wodurch die Glockenkurven etwas moduliert werden:

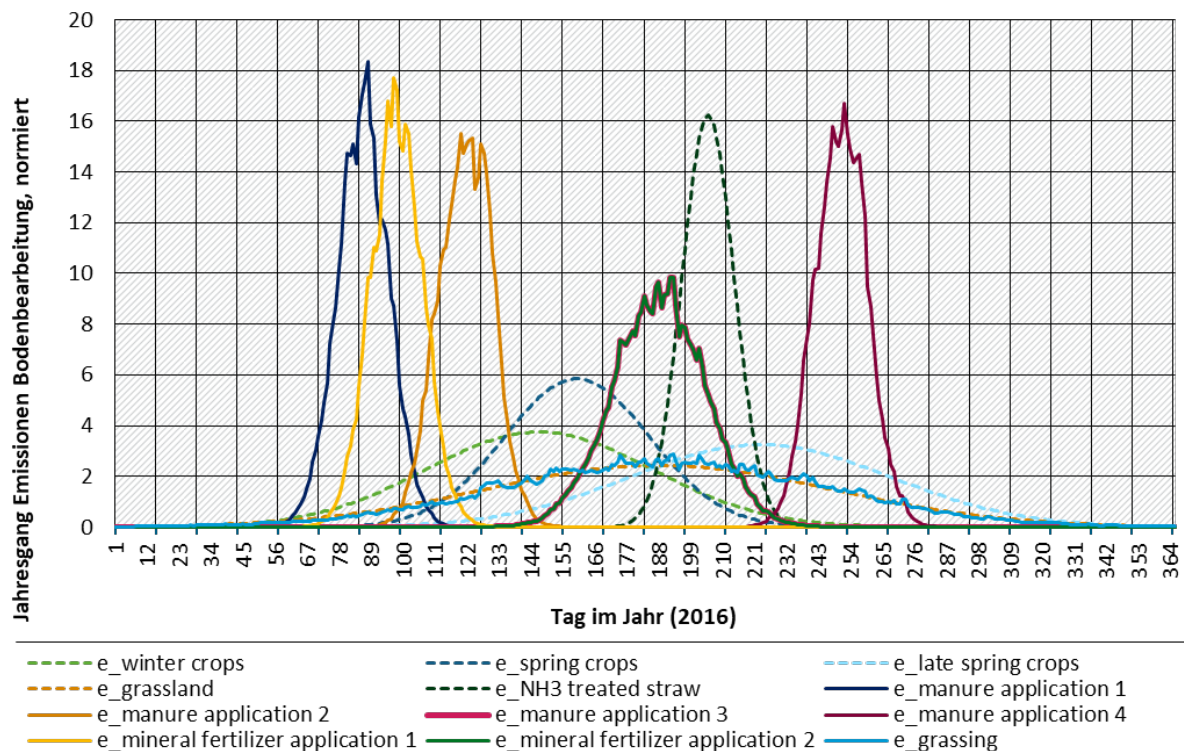
$$E(t) = E_a \cdot e^{0,0223T} \cdot e^{0,0419v_m} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Die Werte für die Scheitelpunkte und die Halbwertsbreiten σ dieser Kurven sind in Tabelle 13 ausgewiesen. Die Werte für die Emissionen aus Düngung durch grasende Tiere sind identisch mit denen für Emissionen aus Grasland. Die Emissionen aufgrund der verschiedenen Düngergaben sind schärfer gebündelt, die entsprechenden Werte für die Halbwertsbreiten σ sind deutlich kleiner als bei den Emissionen aus den Pflanzen.

In Abbildung 61 sind die entsprechenden Jahresgänge für die Klimaregion „Nordwestdeutsches Tiefland“ 2016 grafisch dargestellt, die Kurven für die Emissionen aus Blättern (Glockenkurven) gestrichelt, die Kurven für die Emissionen aufgrund von Düngergaben (Glockenkurven,

moduliert durch Abhängigkeit von Temperatur und Windgeschwindigkeit) als durchgezogene Linien.

Abbildung 61: Normierter Jahresgang für die Emissionen aus der Bodenbearbeitung in der Klimaregion „Nordwestdeutsches Tiefland“ 2016 mit den Parametern nach Backes (2014)



Datenquelle: COSMO-DE

Sperrzeiten gemäß der Düngeverordnung

Nach der seit Juni 2017 geltenden Düngeverordnung gibt es verschiedene Zeiträume, in denen keine Düngemittel ausgebracht werden dürfen: Ackerland darf nach der Ernte der Hauptfrucht bis zum 31.01. nicht gedüngt werden. Grünland darf zwischen dem 01.11. und dem 31.01. nicht gedüngt werden. Weiterhin gibt es eine Sperrzeit für die Aufbringung von Festmist und Kompost zwischen dem 15.12. und dem 15.01. Die zuständigen Behörden können Beginn und Ende dieser Fristen jeweils um bis zu vier Wochen verschieben.

Die Anteile der Emissionen, die nach den Jahresgängen aus Abbildung 61 in die genannten Sperrzeiten fallen, sind sehr gering, eine explizite Berücksichtigung der Sperrzeiten würde die zeitliche Verteilung nur minimal ändern. Die Sperrzeiten werden daher zur zeitlichen Verteilung hier nicht berücksichtigt.

Nach der Düngeverordnung darf weiterhin keine Stickstoff- oder Phosphat-Düngung ausgebracht werden, wenn der Boden überschwemmt, wassergesättigt, gefroren oder schneebedeckt ist, dabei gibt es folgende Ausnahmen: Es dürfen maximal 60 kg Stickstoff (gesamt) pro Hektar ausgebracht werden, wenn durch Auftauen des Bodens tagsüber eine Aufnahmefähigkeit gegeben ist, keine Gefahr des Abschwemmens in Gewässer bzw. auf benachbarte Flächen besteht, eine Pflanzendecke (Winterung, Zwischenfrucht, Grünland) vorliegt oder andernfalls Verdichtung/Strukturschäden entstünden.

Auch diese Einschränkung durch die Düngeverordnung wird hier bei der zeitlichen Verteilung nicht berücksichtigt: In den Winter (gefrorene oder schneebedeckte Böden) fallen nach

Abbildung 61 nahezu keine Emissionen. Ein Maß für Überschwemmung oder Wassergesättigung der Böden kann aus den vorliegenden meteorologischen Variablen nicht abgeleitet werden, zumal ohnehin die oben genannten Ausnahmen möglich sind.

Zuordnung NFR-Sektoren zu Zeitfunktionen

In Tabelle 14 werden die NFR-Sektoren der Landwirtschaft den Zeitfunktionen nach Gyldenkærne et al. (2005) und Backes (2014) zugeordnet.

Tabelle 14: Zuordnung der NFR-Sektoren der Landwirtschaft zu den Zeitfunktionen

| Zeitfunktionen Backes (2014) nach Gyldenkærne et al. (2005) | NFR-Sektoren Landwirtschaft |
|--|--|
| open barns (cattle) | 3B1a (dairy cattle), 3B1b (non-dairy cattle) 3B4a (buffalo) (für Deutschland nicht berichtet) |
| Grassing | 3B2 (sheep), 3B4d (goats), 3B4e (horses), 3B4f (mules and asses) 3Da3 (urine and dung deposited by grassing animals) |
| Pigs | 3B3 (swine) |
| Poultry | 3B4gi (laying hens), 3B4gii (broilers), 3B4giii (turkeys), 3B4giv (other poultry) |
| Crops | 3De (cultivated crops) nur Emissionen für NMVOC |
| mineral fertilizer 1, 2 | 3Da1 (inorganic N-fertilizers) Anteile für 1 und 2 nach Backes (2014) |
| manure applications 1, 2, 3, 4 | 3Da2a (animal manure applied to soils) 3Da2b (sewage sludge) 3Da2c (other organic fertilizers including compost) 3Da4 (crop residues) 3Db (indirect emissions from managed soils) 3Df (use of pesticides) Anteile für 1 bis 4 nach Backes (2014) |

Es wird näherungsweise angesetzt, dass Schafe, Ziegen, Pferde, Maultiere und Esel im Wesentlichen auf der Weide gehalten werden. Die Emissionen dieser Subsektoren sind gering. Weiterhin wird angesetzt, dass sich alle organischen Düngergaben (Gülle, Klärschlamm, Kompost, Gärreste, indirekte Emissionen aus Böden) zeitlich wie die Gülleausbringung verhalten. Auch Emissionen aus dem Einsatz von Pestiziden werden zeitlich wie die Güllegaben verteilt. Der Grund dafür ist, dass der Pestizideinsatz in ähnlicher Weise vom Pflanzenwachstum bestimmt ist wie die Düngung.

Die Aufteilung auf die verschiedenen Düngezeiträume wird nach Backes (2014) vorgenommen, siehe Tabelle 13.

Wie bereits erwähnt, sind die Jahresgänge der Temperatur der verschiedenen Klimaregionen in Deutschland sehr ähnlich. Entsprechend ähnlich sind die daraus resultierenden Jahresgänge für die Emissionen der einzelnen NFR-Sektoren der Landwirtschaft, dargestellt für die Klimaregion

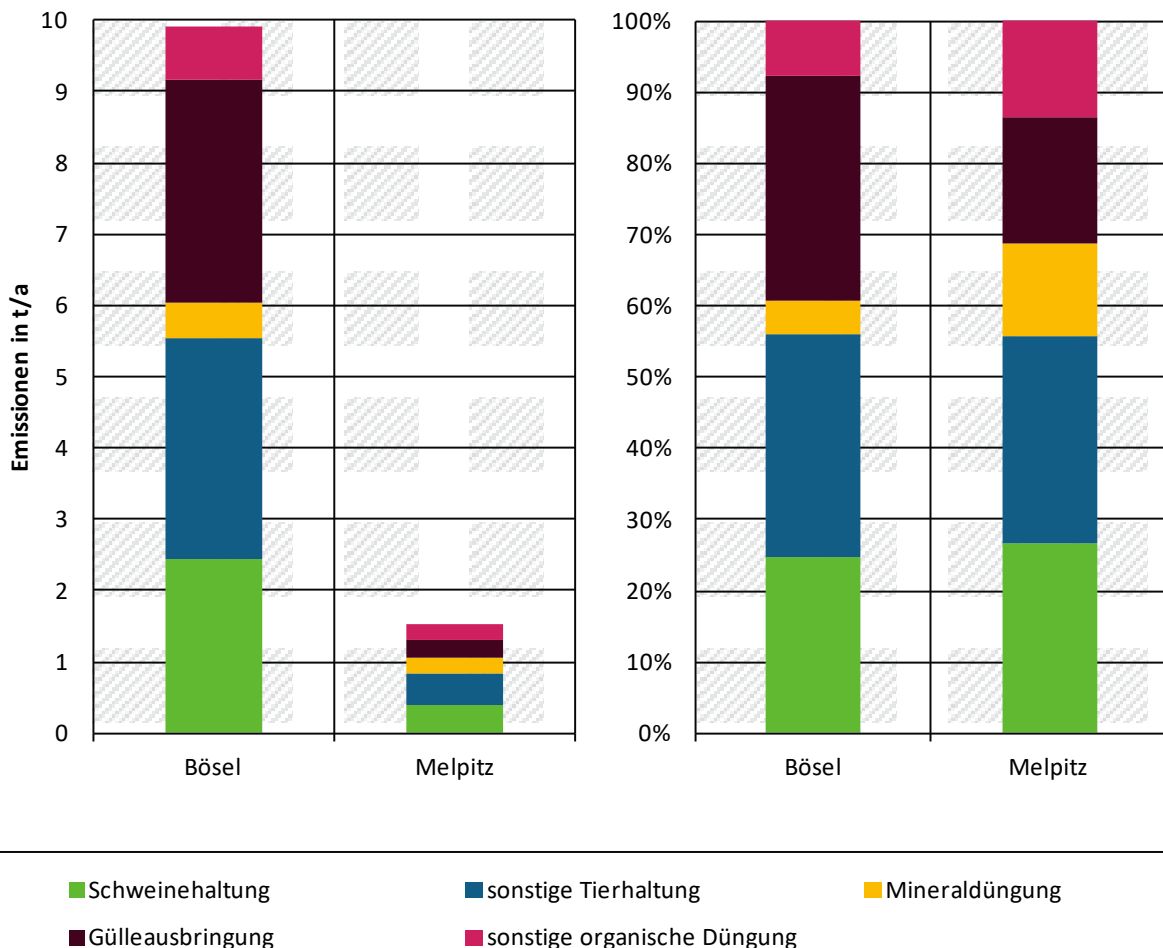
„Nordwestdeutsches Tiefland“ 2016 in Abbildung 60 (Viehhaltung) Abbildung 61 (Bodenbearbeitung). Es kann für die Landwirtschaft insgesamt (SNAP level 1) jedoch trotzdem zu regional unterschiedlichem Zeitverhalten kommen, wenn sich die Anteile der NFR-Sektoren unterscheiden und die entsprechenden Zeitverläufe räumlich unterschiedlich gewichtet werden.

Ein Vergleich der Beiträge der landwirtschaftlichen NFR-Sektoren wurde beispielhaft für die Umgebung der ländlichen Hintergrundstationen Bösel und Melpitz durchgeführt. Bösel ist eine Gemeinde in Niedersachsen südwestlich von Oldenburg und stark von der Landwirtschaft geprägt, insbesondere die Schweinezucht ist dort relevant. Melpitz ist ein Ortsteil der Stadt Torgau in Sachsen, dort befindet sich eine regionale Hintergrundmessstation, die vom TROPOS-Institut in Leipzig betrieben wird.

Mit dem Tool GRETA wurden für einen Bereich der Größe 20 km x 20 km um die Messstationen die NH₃-Emissionen der landwirtschaftlichen NFR-Sektoren für das Jahr 2015 ausgegeben, in Abbildung 62 sind diese Emissionen dargestellt, differenziert nach Schweinehaltung (3B3), sonstiger Tierhaltung (Summe aus 3B1a, 3B1b, 3B2, 3B4a, 3B4d, 3B4e, 3B4f, 3B4gi, 3B4gii, 3B4giii, 3B4giv, 3B4h), Mineraldüngung (3Da1), Gülleausbringung (3Da2a) und sonstiger organischer Düngung (Summe aus 3Da2b, 3Da2c, 3Da3, 3Da4). Dargestellt sind links die absoluten Beiträge und rechts die relativen Anteile.

In Abbildung 62 ist zu erkennen, dass die landwirtschaftlichen Emissionen in der Umgebung der Station Bösel mehr als sechsmal so hoch sind wie in der Umgebung der Station Melpitz. Der Anteil der Emissionen aus der Tierhaltung ist in beiden Regionen vergleichbar und liegt bei ca. 55%, etwa die Hälfte davon kommt aus der Schweinehaltung. Unterschiede gibt es für die Emissionen aus der Bodenbearbeitung bei den Anteilen von Mineraldüngung und Gülle: In Bösel trägt die Mineraldüngung zu den landwirtschaftlichen NH₃-Emissionen 5% und die Gülleausbringung 32% bei, in Melpitz liegen diese Werte bei 13% bzw. 18%. Weil sich die Funktionen zur zeitlichen Verteilung von Emissionen aus Mineraldüngung und aus Gülleausbringung unterscheiden, führt dies zu einem unterschiedlichen Zeitverhalten der Landwirtschaftsemissionen in Bösel und Melpitz.

Abbildung 62: GRETA Output der NH₃-Emissionen der Landwirtschaft 2015 für Gebiet der Größe 20 km × 20 km um die ländlichen Messstationen Bösel und Melpitz, differenziert nach den wichtigsten Subsektoren



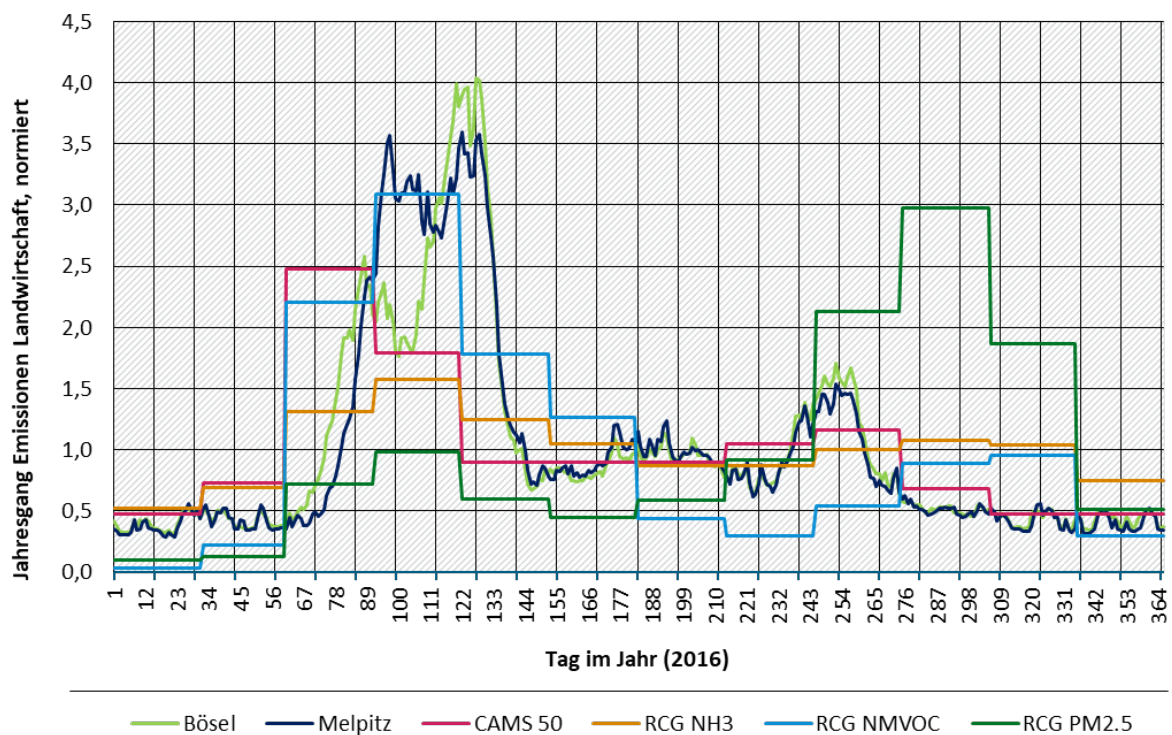
Datenquelle: GRETA

In Abbildung 63 ist dargestellt, welche Jahresgänge sich für die NH₃-Emissionen aus der Landwirtschaft in Bösel und Melpitz mit den Parametern nach Backes (2014) ergeben, wenn die Zeitfunktionen für die einzelnen NFR-Sektoren der Landwirtschaft nach entsprechend ihrer Anteile gewichtet gemittelt werden. Die Zeitverläufe sind ähnlich, es gibt jedoch Unterschiede aufgrund der unterschiedlichen Temperaturverläufe und der Anteile von Gülle und Mineraldünger:

- Im Frühjahr beginnt der Anstieg der NH₃-Emissionen der Landwirtschaft in Bösel (Klimaregion Nordwestdeutsches Tiefland) etwas früher als in Melpitz (Klimaregion Südostdeutsche Becken und Hügel). Der Grund dafür ist, dass es im Jahr 2016 in der Klimaregion Südostdeutsche Becken und Hügel im Winter mehr kalte Tage gibt als in der Klimaregion Nordwestdeutsches Tiefland, so dass die kumulierten Temperaturen den Wert für den Scheitelpunkt der ersten Gülleausbringung (250°C) in Melpitz 6 Tage später erreichen als in Bösel.
- Im Sommer ist die Klimaregion Südostdeutsche Becken dagegen etwas wärmer als das Nordwestdeutsche Tiefland, so dass sich im weiteren Jahresverlauf die Unterschiede zwischen den kumulierten Temperaturen beider Regionen nivellieren.

- In Melpitz ist der Anteil des Mineraldüngers an den Düngemitteln höher. Die erste Mineraldüngung liegt zeitlich kurz nach der ersten Gülleausbringung, die Maxima beider Düngungen überlagern sich dadurch in Melpitz, so dass der in den Zeitraum zwischen ca. Tag 90 und Tag 110 fallende Anteil der NH_3 -Landwirtschaftsemissionen in Melpitz höher ist als in Bösel.
- In Bösel sind stattdessen das zweite Frühjahrsmaximum (ca. Tag 110 bis Tag 130, zweite Gülleausbringung) und das Herbstmaximum (ca. Tag 240 bis Tag 260, vierte Gülleausbringung) stärker ausgeprägt.

Abbildung 63: Jahresgang der NH_3 -Emissionen der Landwirtschaft in Bösel (Klimaregion Nordwestdeutsches Tiefland) und Melpitz (Klimaregion Südostdeutsche Becken und Hügel) mit den Parametern nach Backes (2014) im Vergleich mit dem statischen Jahresgang nach CAMS 50 und den statischen Jahresgängen aus RCG für NH_3 , NMVOC und $\text{PM}_{2.5}$



Datenquelle: COSMO-DE

Die statischen Jahresgänge der Landwirtschaftsemissionen nach CAMS 50 (gleich für alle Luftschadstoffemissionen der Landwirtschaft) und aus RCG (für NH_3 , NMVOC und $\text{PM}_{2.5}$ unterschiedlich) sind zum Vergleich ebenfalls in Abbildung 63 mit dargestellt. Hier zeigen sich deutliche Unterschiede: Im Vergleich mit den auf Basis der COSMO-Meteorologie und den Parametern nach Backes (2014) für Bösel und Melpitz berechneten Zeitverläufen

- beginnt das Frühjahrsmaximum nach CAMS 50 ca. einen Monat früher,
- sind Frühjahrs- und Herbstmaximum im statischen Zeitprofil für NH_3 in RCG schwächer ausgeprägt,
- liegt das Herbstmaximum des Jahresgangs für NH_3 in RCG später,

- fehlt das (schwach ausgeprägte, aber vorhandene) Sommermaximum in allen statischen Profilen.

Weitere Luftschadstoffemissionen der Landwirtschaft

Die Zeitfunktionen nach Gyldenkerne et al. (2005) und Backes (2014) beziehen sich auf NH_3 . Zusätzlich werden für die Landwirtschaft Emissionen der Luftschadstoffe NO_x , NMVOC, $\text{PM}_{2.5}$, PM_{10} , TSP sowie C_6Cl_6 (Hexachlorbenzol, HCB) berichtet. Wie Abbildung 63 zeigt, unterscheiden sich die statischen Zeitprofile in RCG für die verschiedenen Schadstoffe.

Die landwirtschaftlichen Emissionen von NO_x und NMVOC werden für dieselben NFR-Sektoren berichtet wie NH_3 , die wichtigsten Quellen nach dem IIR Deutschland sind bei NO_x die Anwendung von Mineraldüngern (52,7%) und Gülle (32,5%) und bei NMVOC die Tierhaltung. (Fein-) Staubemissionen werden zusätzlich zu den Sektoren der Tierhaltung im NFR-Sektor 3Dc (Farm-level agricultural operations including storage, handling and transport of agricultural products) berichtet. HCB wird beim Einsatz von Pestiziden freigesetzt. Es wird für die zeitliche Verteilung zunächst nicht berücksichtigt, weil es in CTMs nicht als Einzelsubstanz eingeht.

In TeResE werden pro NFR-Sektor alle Luftschadstoffe zeitlich genauso verteilt wie die NH_3 -Emissionen dieses NFR-Sektors, das heißt z.B. die NO_x -Emissionen aus der Mineraldüngung zeitgleich mit den NH_3 -Emissionen aus der Mineraldüngung. Für die (Fein-) Staubemissionen aus dem NFR-Sektor 3Dc (Farm-level agricultural operations including storage, handling and transport of agricultural products) gibt es keine Zeitfunktion nach Gyldenkerne et al. (2005) und Backes (2014). Hier weist das statische Zeitprofil aus RCG ein deutliches Herbstmaximum auf (s. Abbildung 63), was auf Emissionen im Rahmen der Erntearbeiten hindeutet. Für diesen NFR-Sektor wird dieses statische Zeitprofil beibehalten.

Die motorbedingten Emissionen der landwirtschaftlichen Maschinen werden im NFR-Sektor 1A4cii (Agriculture/Forestry/Fishing: Off-road vehicles, other machinery, s.o.) berichtet, dieser Sektor wird durch die Emissionen der mobilen Maschinen in der Landwirtschaft dominiert und leistet insbesondere zu den deutschen BC-Emissionen (hier nicht betrachtet) einen relevanten Beitrag. Diese Emissionen fallen bei allen Einsätzen mobiler Maschinen in der Landwirtschaft an, es ist kein so klares Herbstmaximum zu erwarten wie in Sektor 3Dc, jedoch auch keine so klaren Glockenkurven wie für die NH_3 -Emissionen aus der Bodenbearbeitung. Für den NFR-Sektor 1A4cii wird daher das statische Zeitprofil aus RCG für die NO_x -Emissionen der Landwirtschaft angesetzt.

4.7 Sonstige Produktanwendungen

Der NFR-Sektor 2G (other product use) enthält in Submission 2020 folgende Subsektoren: Feuerwerk (2G4a), Tabak (2G4b) und Grillen (2G4c). In den vorherigen Submissionen war zusätzlich der mobile Einsatz von Schmiermitteln (2G4d) enthalten. Diese werden vornehmlich in Kfz eingesetzt, die zeitliche Verteilung entspricht damit der des Straßenverkehrs. Da für die Entwicklung von TeResE die Submission 2020 maßgeblich ist, sind diese Emissionen nicht mehr im NFR-Sektor 2G enthalten.

Die Feuerwerksemissionen werden im Wesentlichen innerhalb einer Stunde des Jahres (Neujahr, 0:00 – 1:00 Uhr) freigesetzt. Der Geschäftsführer von Weco, dem Marktführer in Deutschland für Feuerwerkskörper, sagte in einem Interview mit dem Deutschlandfunk (DLF, 2019), dass Weco 95% seines Umsatzes in den letzten drei Tagen des Jahres mache. Großfeuerwerke bei Veranstaltungen seien mehr fürs Renommee, nicht so sehr für den Umsatz.

In der hier realisierten ersten Version von TeResE werden die Emissionen des Feuerwerks zu 100% in die erste Stunde des Jahres gelegt. In späteren Erweiterungen kann z.B. ein kleiner Teil

auf die Stunden davor verlegt werden (ungeduldige Kinder) oder auf die Folgenacht verschoben werden (Verbrauch übrig gebliebener Böller), es liegen dazu jedoch keine Daten vor. Die Verteilung der Emissionen bei Feuerwerken von Großveranstaltungen (z.B. „Rhein in Flammen“) kann z.B. mittels Fanpages im Internet (https://www.feuerwerk-fanpage.de/feuerwerk_kalender/) durchgeführt werden, dort werden pro Jahr Orte und Termine genannt. Es handelt sich dabei jedoch um private Seiten, so dass Vollständigkeit und Fortschreibbarkeit nicht garantiert sind.

Die Emissionen aus dem Konsum von Tabak werden zeitlich konstant verteilt.

Für die Emissionen aus dem Grillen mit Holzkohle wird ein synthetisches Zeitprofil konstruiert:

- ▶ Für den Jahresgang werden die Produktionsindizes der Getränkeindustrie herangezogen, um den Unterschied zwischen Sommer und Winter zu verstärken, wird das Profil etwas überhöht.
- ▶ Für den Wochengang werden die Emissionen an Feiertagen und Wochenenden ggü. den Werktagen erhöht, als default werden für das Verhältnis Werktag : Samstag : Feiertag die Faktoren 1 : 3 : 6 angesetzt.
- ▶ Für den Tagesgang wird eine Überlagerung zweier Glockenkurven (Nebenmaximum mittags: $\mu=13:00$, $\sigma=1,5$, etwas breiteres Hauptmaximum abends: $\mu=18:00$, $\sigma=2,5$) angesetzt, die im Verhältnis 1:4 gewichtet werden.

Das resultierende Profil ist in Abbildung 64 dargestellt. Die erforderlichen Parameter sind in einer Steuerdatei hinterlegt und können geändert werden.

Räumlich werden die drei Subsektoren 2G4a, 2G4b und 2G4c in GRETA über die Einwohner auf Kreise verteilt. Die Anteile der Subsektoren an den Emissionen des Sektors 2G sind also für alle Gitterzellen gleich den Anteilen für die nationalen Gesamtemissionen, sie sind für 2016 in Tabelle 15 und für 2017 in Tabelle 16 ausgewiesen.

Tabelle 15: NFR-Sektor 2G: Anteile der Emissionen der Subsektoren nach Schadstoff 2016

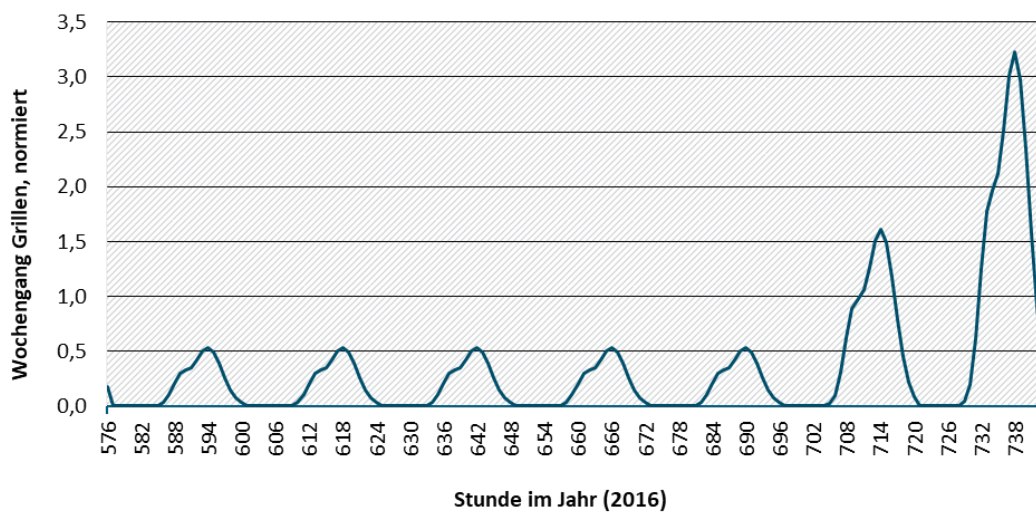
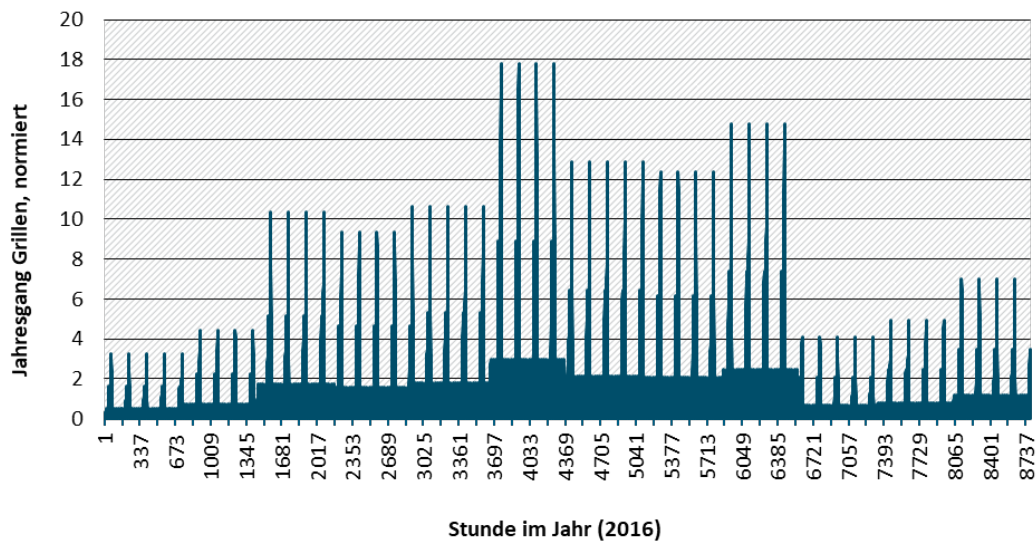
| | BC | CO | NH ₃ | NMVOC | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} |
|-----------------------|--------|-------|-----------------|--------|-----------------|------------------|-------------------|
| Feuerwerk | | 1,2% | | | 2,8% | 48,4% | 32,8% |
| Grillen mit Holzkohle | | | | | | 5,6% | 7,3% |
| Tabakkonsum | 100,0% | 98,8% | 100,0% | 100,0% | 97,2% | 46,0% | 59,9% |

Tabelle 16: NFR-Sektor 2G: Anteile der Emissionen der Subsektoren nach Schadstoff 2017

| | BC | CO | NH ₃ | NMVOC | NO _x | PM ₁₀ | PM _{2.5} |
|-----------------------|--------|-------|-----------------|--------|-----------------|------------------|-------------------|
| Feuerwerk | | 1,1% | | | 2,5% | 45,7% | 30,4% |
| Grillen mit Holzkohle | | | | | | 5,9% | 7,6% |
| Tabakkonsum | 100,0% | 98,9% | 100,0% | 100,0% | 97,5% | 48,4% | 62,0% |

Weil diese Anteile pro Schadstoff für alle Gitterzellen gleich sind, braucht der NFR-Sektor 2G auch pro Schadstoff nur über einen Splitting-Faktor zeitlich verteilt zu werden. Dieser ergibt sich als gewichteter Mittelwert der Zeitverläufe der Subsektoren.

Abbildung 64: Zeitprofil der Emissionen aus dem Grillen von Holzkohle



4.8 Zusammenfassung Splitting-Faktoren

In Anhang A in Tabelle 24 sind für alle NFR-Sektoren die zur Konstruktion der Splitting-Faktoren verwendeten Daten zu den Zeitabhängigkeiten und die berücksichtigten räumlichen Differenzierungen aufgelistet.

5 TeResE (Temporal Resolution of Emission data)

Die Berechnung der in Kapitel 4 auf NFR-Ebene beschriebenen Splitting-Faktoren (SF) wurde im Tool TeResE implementiert. Die Zusammenhänge zwischen den unterschiedlichen Eingangsdaten und den SF sind abhängig von der Zeitzone, in der die Daten vorliegen. Um einen konsistenten Satz SF zu erzeugen, müssen Eingangsdaten in jeweils der gleichen Zeitzone vorliegen. Dies ist in Abschnitt 5.1 beschrieben.

RCG (und weitere CTMs) benötigen als Input Splitting-Faktoren auf SNAP-Ebene, einige CTMs auf GNFR-Ebene. In diesem Kapitel wird daher zunächst die Aggregation der Splitting-Faktoren von NFR zu SNAP beschrieben (Abschnitt 5.2). Abschnitt 5.3 verweist auf Ablaufdiagramme für die Berechnung der Splitting-Faktoren in TeResE. Die Diagramme selbst befinden sich im Anhang. In Abschnitt C.2 sind die für das Tool benötigten Eingabedateien und in Abschnitt C.3 die Ausgabedateien des Tools beschrieben.

5.1 Zeitzone für die Splitting-Faktoren

Das Modell RCG erstreckt sich in Europa über mehrere Zeitzonen und verwendet bei der Berechnung wie auch bei der Ausgabe der Ergebnisse UTC. Weil die SF als Eingabe für RCG verwendet werden, werden auch sie in UTC konstruiert. Für die Eingangsdaten bedeutet dies:

- ▶ Die COSMO-Meteorologie liegt ohnehin in UTC vor. Die daraus abgeleiteten Tagesgänge entsprechend auch.
- ▶ Gleiches gilt für die ENTSO-E-Daten.
- ▶ Die Daten der BAST-Dauerzählstellen liegen in jeweiliger Lokalzeit vor, d.h. in MEZ (mitteleuropäische Zeit, UTC+1) oder MESZ (mitteleuropäische Sommerzeit, UTC+2). Zur Ableitung der SF werden sie entsprechend verschoben.
- ▶ Gleiches gilt für die RCG-Tagesgänge: Die Default-Tagesgänge liegen jeweils als Lokalzeit vor und werden im RCG an die jeweilige Zeitzone angepasst. Zur Ableitung der SF werden die RCG-Default-Tagesgänge daher auf UTC verschoben. Bei Auswahl dynamischer SF im RCG entfällt die Anpassung an UTC (siehe Schnittstellenanpassung RCG in Kapitel 6).
- ▶ Die Feuerwerksemissionen werden zeitlich in die erste Stunde des Jahres verteilt, also in den Zeitraum zwischen 0:00 und 1:00 MEZ. Dies entspricht dem Zeitraum 23:00 bis 24:00 UTC des Vorjahres. Konsistent müssten die Feuerwerksemissionen daher in die letzte Stunde des Jahres (UTC) verteilt werden, bzw. in die letzte Stunde der als Anfangsbedingung des Modells verwendeten letzten Tage des jeweiligen Vorjahres-Laufes. Aus Praktikabilitätsgründen wurde entschieden, die Feuerwerksemissionen in die erste Stunde des Jahres (UTC) zu legen (ein Teil des Feuerwerks findet ohnehin nach 1:00 MEZ statt). Im Rahmen der Evaluierung werden beim Vergleich mit Messdaten die betroffenen Stunden gemittelt.

5.2 Zusammenfassung der Splitting-Faktoren auf NFR-Ebene zu Faktoren auf SNAP-Ebene

Gegenstand von Kapitel 4 war die Ableitung von Splitting-Faktoren auf Ebene der NFR-Sektoren. Je nach verfügbaren Daten und Relevanz der Quellgruppe ist die Komplexität bei der

Berechnung und auch die Güte dieser Splitting-Faktoren unterschiedlich: So werden z.B. für den Straßenverkehr Splitting-Faktoren auf Basis stündlicher Zählwerte von Dauerzählstellen gemittelt über SVZ-Regionen erstellt. Für verschiedene NFR-Sektoren aus dem Bereich der Industrie liegen andererseits nur bundesweit einheitliche Produktionsindizes auf Monatsebene vor, Tages- und Wochengänge müssen aus Default-Zeitreihen ergänzt werden.

Splitting-Faktoren auf SNAP-Ebene ergeben sich grundsätzlich durch gewichtete Mittelung der Splitting-Faktoren auf NFR-Ebene pro Gitterbox. Die Mischung der Beiträge unterschiedlicher NFR-Sektoren pro SNAP Sektor kann jedoch von Gitterbox zu Gitterbox variieren, dadurch ergeben sich grundsätzlich pro Gitterbox, SNAP-Sektor und Schadstoff eigene Splitting-Faktoren. Im „worst case“ sind dies für Nest 2 des RCG-Rechengitters (310 x 520 Gitterpunkte in der Ebene, 14 SNAP-Sektoren (ohne internationale Seeschifffahrt und Abfallbehandlung) und 8 Schadstoffe) 18 Mio. Splitting-Faktoren jeweils der Länge 8.784 (Anzahl Stunden im Schaltjahr) vom Typ Real. Das ist vom Speicherbedarf bei einem 32-Bit-Programm wie RCG in der momentanen Umsetzung nicht ohne einschneidende Eingriffe am RCG-Kernprogramm realisierbar. Durch Mittelungen über Gebiete mit ähnlichem Zeitverhalten kann die Anzahl unabhängiger Splitting-Faktoren jedoch deutlich reduziert werden. Das Vorgehen für die einzelnen SNAP-Sektoren wird im Folgenden beschrieben.

5.2.1 SNAP 1

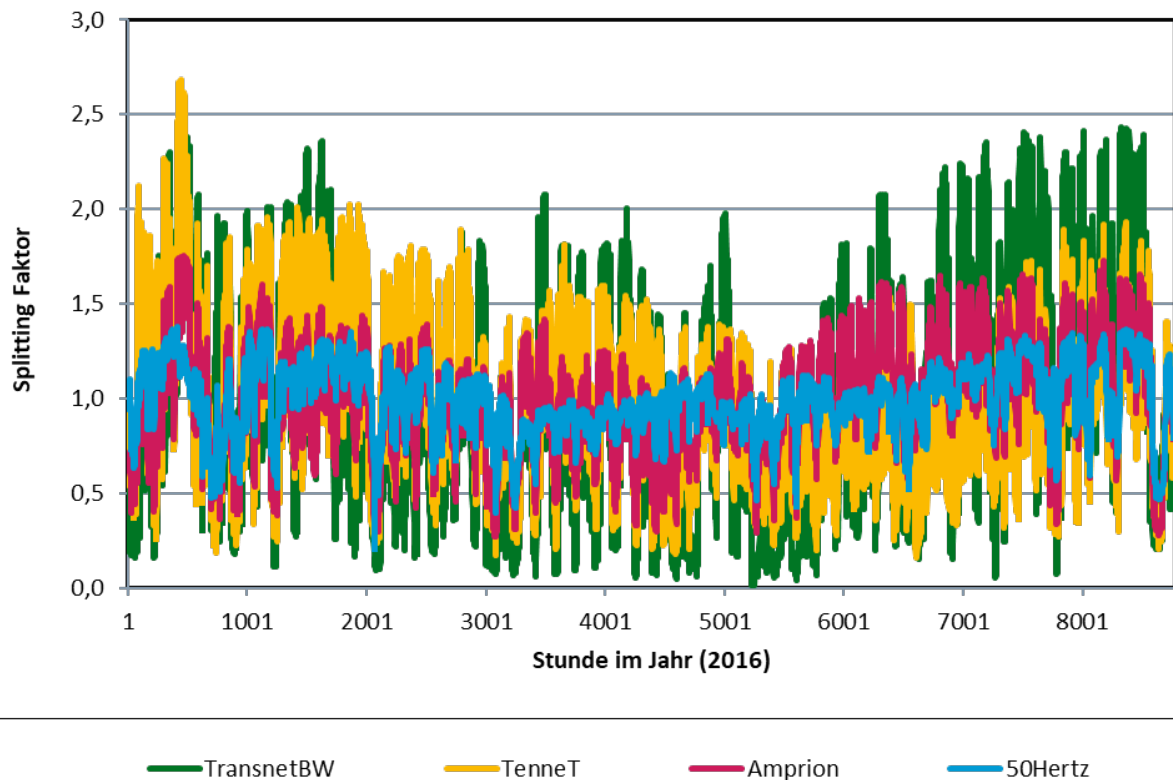
Der SNAP-Sektor 1 (Verbrennung in der Energie- und Transformationsindustrie) umfasst die NFR-Sektoren 1A1a (Public electricity and heat production), 1A1b (Petroleum refining), 1A1c (Manufacture of solid fuels and other energy industries) und 1A3ei (Pipeline transport). Dominiert wird dieser Sektor durch den NFR-Sektor 1A1a.

Wie in Kapitel 4 beschrieben, konnten von den 185 Punktquellen in GRETA vorhandenen Punktquellen 70 mit einem Fangradius von 1 km einem ENTSO-E Kraftwerk zugeordnet werden. Den nicht zugeordneten Punktquellen und den Flächenquellen aus dem NFR-Sektor 1A1a werden Splitting-Faktoren aus den Mittelwerten für die vier Übertragungsnetzbetreiber zugeordnet. Diese sind für 2016 in Abbildung 65 dargestellt. Das ergibt 74 Splitting-Faktoren für diesen NFR-Sektor.

Die übrigen NFR-Sektoren aus SNAP 1 werden analog zu den Flächenquellen aus dem NFR-Sektor 1A1a verteilt. Eine Ausnahme stellen die Raffinerien (1A1b) dar, die, abgesehen von Wartungsintervallen, zeitlich konstant ausgelastet werden. Die in GRETA als Punktquellen bekannten Raffinerien bekommen einen eigenen Splitting-Faktor (Default: konstantes Zeitprofil, individuell veränderbar).

SNAP 1 enthält damit 75 unabhängige Splitting-Faktoren (74 für NFR 1A1a und ein Profil (konstant) für die zugeordneten Raffinerien).

Abbildung 65: Splitting-Faktoren Mittelwerte pro Übertragungsnetzbetreiber 2016 für den NFR-Sektor 1A1a



Datenquellen: ENTSO-E

5.2.2 SNAP 2

Der SNAP-Sektor 2 (nicht-industrielle Verbrennungsanlagen) umfasst die NFR-Sektoren 1A4ai (Commercial/institutional), 1A4bi (Residential), 1A4ci (Agriculture/Forestry/Fishing) und 1A5a (Other stationary including military). Wie in Kapitel 4 beschrieben, ergibt sich der Jahresgang für alle diese NFR-Sektoren im Wesentlichen aus den pro Klimaregion gemittelten Gradtagzahlen. Es gibt jedoch auch innerhalb der Klimaregionen (kleine) Unterschiede:

- ▶ Der Warmwasserwärmebedarf von Wohngebäuden und der Prozesswärmebedarf bei den kommerziell genutzten Gebäuden weisen keinen Jahresgang auf. Die Anteile ohne Jahresgang sind für die betrachteten NFR-Sektoren zwar typischerweise ähnlich (sie können in TeResE parametrisiert werden), aber nicht notwendigerweise identisch.
- ▶ Der Sektor 1A4bi (Wohngebäudeheizung) weist keinen Wochengang auf, die kommerziellen Sektoren enthalten jedoch den RCG-Default-Wochengang mit reduzierten Emissionen am Wochenende.
- ▶ Auch die Tagesgänge unterscheiden sich: NFR-Sektor 1A4bi weist eine Morgen- und eine Abendspitze auf, die anderen sind während der Arbeitszeiten erhöht.

Prinzipiell ergeben sich durch pro Gitterbox unterschiedliche Mischungen der in SNAP 2 enthaltenen NFR-Sektoren unterschiedliche Splitting-Faktoren. Näherungsweise wird daher pro Klimaregion über die SF der eingehenden NFR-Sektoren gewichtet gemittelt. Damit ergeben sich

für SNAP 2 24 Splitting-Faktoren (12 Klimaregionen, zwei Schadstoffgruppen (PM_{2.5} und PM₁₀: Tagesgang wie Holzverbrennung; sonstige Schadstoffe: Tagesgang wie Öl/Gas).

5.2.3 SNAP 3, 4, 5, 6

Diese Sektoren enthalten Emissionen aus der Verbrennung in der verarbeitenden Industrie, aus Produktionsprozessen, der Gewinnung und Verteilung von fossilen Brennstoffen sowie aus dem Einsatz von Lösungsmitteln und anderen Gebrauchsgegenständen. Insgesamt tragen 53 NFR-Sektoren zu diesem SNAP-Sektor bei.

Bundesweit einheitliche Zeitprofile für den jeweiligen Jahresgang der Monatswerte werden aus Produktionsindizes des Statistischen Bundesamts abgeleitet, kombiniert werden diese mit Default-Tages- und Wochengängen aus RCG. Grundsätzlich können auch hier pro Gitterbox unterschiedliche Mischungen der Zeitprofile auftreten. Da die Güte dieser Datenquelle als Proxy für die jeweiligen Emissionen im Vergleich zu anderen SNAP-Sektoren nicht besonders hoch ist, werden hier Mittelwerte pro Bundesland angesetzt.

Der NFR-Sektor 2G (other product use) enthält Emissionen aus dem Feuerwerk (verteilt auf die erste Stunde des Jahres), aus dem Konsum von Tabak (zeitlich konstant) und aus dem Grillen (statisches Profil, in TeResE parametrisierbar). Die entsprechenden Zeitprofile sind deutschlandweit gleich, pro Bundesland werden für die Gewichtung mittlere Anteile für Feuerwerk, Tabakkonsum und Grillen angesetzt.

Damit ergeben sich für SNAP 3, 4 und 5 jeweils 16 unabhängige Splitting-Faktoren (pro Bundesland) und für SNAP 6 32 Splitting-Faktoren (enthält NFR-Sektor 2G, daher eigene Splitting-Faktoren für PM_{2.5} und PM₁₀).

5.2.4 SNAP 7 (RCG: 7 bis 12)

In RCG werden die Emissionen des Straßentransports auf 6 SNAP-Sektoren aufgeteilt: 7: Benzin, 8: Diesel, 9: LPG, 10: Brems- und Reifenabrieb, 11: Verdunstung und 12: Aufwirbelung. In dieser Differenzierung liegen Emissionen jedoch i.d.R. nicht vor, Basis für die Emissionsberichterstattung sind die internationalen SNAP-Sektoren (Sektor 7: Straßenverkehr) oder die NFR-Sektoren 1A3bi (Passenger cars), 1A3bii (Light duty vehicles), 1A3biii (Heavy duty vehicles and buses), 1A3biv (Mopeds & motorcycles), 1A3bv (Gasoline evaporation), 1A3bvi (Automobile tyre and brake wear) und 1A3bvii (Automobile road abrasion).

In den Präprozessoren für RCG zur Aufbereitung der GRETA-Emissionen werden sämtliche Straßenverkehrsemissionen in SNAP 7 summiert, SNAP 8 bis 12 bleiben leer. Weil für die SNAP-Sektoren 7 bis 12 in RCG die jeweils gleichen statischen Zeitprofile verwendet werden, ist die Aufteilung der Emissionen auf diese Sektoren auch nicht relevant.

Es wurde entschieden, dass in TeResE als Ausgabemöglichkeit „RCG SNAPS“ ausgewählt werden können. Diese entsprechen der Nomenklatur in RCG, den Sektoren SNAP 7 bis 12 werden jeweils die gleichen Splitting-Faktoren zugeordnet.

Wie in Kapitel 4 beschrieben, wird das zeitliche Verhalten primär durch die Verkehrsstärke bestimmt. Als sekundärer Einfluss kommt bei NO_x und den NMVOC eine Temperaturabhängigkeit dazu.

Das zeitliche Verhalten der Verkehrsstärke wird auf Basis der kontinuierlichen Dauerzählstellen der BASt ermittelt, und zwar getrennt für LV (Leichtverkehr) und SV (Schwerverkehr) und für die Ortslagen BAB (Bundesautobahnen), sonstige Außerortsstraßen (AO) und Innerortsstraßen (IO).

Auf BAB und AO werden dabei als Gebiete für die räumliche Mittelung 42 SVZ (Straßenverkehrszählungs)-Regionen betrachtet. Diese wurden im Rahmen der SVZ als Gebiete ermittelt, die einheitlich sind im Hinblick auf die Auswirkungen von Feiertagen und Ferientagen auf den Verkehr.

Im Innerortsbereich gibt es zu wenig Zählstellen für eine räumliche Differenzierung, daher werden über bundesweite Auswertungen mittlere Profile für Werktage, Ferientage und Feiertage ermittelt. Für die einzelnen Bundesländer (BL) werden daraus, entsprechend der jeweiligen Lage der Feiertage und der Ferien, individuelle Profile zusammengesetzt.

Dieses Vorgehen kann, als Alternative zur Verwendung der Zählstellen des jeweiligen Jahres, auch für BAB und AO gewählt werden. Durch die Anpassung der Lage der Wochentage, der Feiertage und der Ferien an das jeweilige Kalenderjahr können so die Zählzeiten eines Jahres auf ein anderes Jahr übertragen werden.

Das durch die Verkehrsstärke bestimmte primäre Zeitverhalten wird durch die Temperatur korrigiert. Durch Verschneidung der SVZ-Regionen mit den Klimazonen würde eine Vielzahl kleiner Gebiete und damit eine Vielzahl von Splitting-Faktoren entstehen. Da der Einfluss der Temperatur hier nur sekundär ist und die Temperaturgänge innerhalb Deutschlands im Wesentlichen ähnlich verlaufen, wird hier ein mittlerer Temperaturgang für Deutschland angesetzt.

Damit ergeben sich für den Straßenverkehr pro NFR-Sektor folgende Anzahlen für die Splitting-Faktoren:

- ▶ NFR-Sektoren 1A3bi, 1A3bii, 1A3biv:
 $\{42 \text{ (SVZ-Reg.)} * 2 \text{ (BAB+AO)} + 16 \text{ (BL, IO)}\} * 2 \text{ (LV Otto + Diesel T-Abh. NOx)}$ 200
- ▶ NFR-Sektor 1A3biii:
 $\{42 \text{ (SVZ-Reg.)} * 2 \text{ (BAB+AO)} + 16 \text{ (BL, IO)}\} \text{ (SV)}$ 100
- ▶ NFR-Sektor 1A3bv:
 analog 1A3bi, T-Abh. NMVOC 100
- ▶ NFR-Sektoren 1A3bvi, 1A3bvii:
 bei pro SVZ-Region räumlich konstanten Anteilen LV, SV: 100

Damit ergeben sich für SNAP 7 (RCG: die SNAP Sektoren 7 bis 12) in Summe 500 unabhängige Splitting-Faktoren.

Je nach Größe der Gitterboxen (diese ergibt sich aus dem gewählten Rechengitter) kann eine Box gleichzeitig Streckenabschnitte von Innerortsstraßen, Bundesautobahnen und sonstigen Außerortsstraßen enthalten. Durch unterschiedliche Mittelungen können sich so beliebig viele minimal unterschiedliche Zeitprofile ergeben. Um dies zu vermeiden, wird für jede Gitterbox und jeden Schadstoff der Splitting-Faktor ausgewählt, der dem Prozess mit den höchsten Emissionen für diesen Schadstoff in dieser Gitterzelle (gegeben durch NFR-Sektor, Ortslage und Kraftstoff) zugeordnet ist.

5.2.5 SNAP 8 (RCG: SNAP 13)

Dieser Sektor beinhaltet die Emissionen aus mobilen Maschinen und umfasst die NFR-Sektoren 1A2gvii (Mobile Comb. in manufacturing industries and construction), 1A3ai(i) (International aviation LTO (civil)), 1A3aii(i) (Domestic aviation LTO (civil)), 1A3c (Railways), 1A3di(ii) (International inland waterways), 1A3dii (National navigation (shipping)), 1A3eii Other (please

specify in the IIR), 1A4aii (Commercial/institutional: Mobile), 1A4bii (Residential: Household and gardening (mobile)), 1A4cii (Agriculture/Forestry/Fishing: Off-road vehicles, other machinery), 1A4ciii (Agriculture/Forestry/Fishing: National fishing), 1A5b (Other, Mobile (incl. military, land based, recreational boats)).

Wie in Kapitel 4 beschrieben, liegen analog zu den Sektoren 3 bis 6 auch hier nur bundesweite Monatswerte (Beförderungsleistungen, Flugzahlen, Wirtschaftszweigindex Bauindustrie, ...) des Statistischen Bundesamts vor, Wochen- und Tagesgang muss aus statischen Default-Profilen überlagert werden. Diese sind zwar bundesweit einheitlich, durch unterschiedliche Mischung ergeben sich Unterschiede im Zeitverhalten. Analog zu den Sektoren 3 bis 6 wird daher auch hier über Bundesländer gemittelt.

Eine Ausnahme stellen die 25 größten Flughäfen dar, deren Flugzahlen einzeln vorliegen, und die als Punktquellen betrachtet werden.

Damit ergeben sich für diesen Sektor 41 unabhängige Splitting-Faktoren (16 Bundesländer, 25 Flughäfen).

5.2.6 SNAP 9 (RCG: SNAP 14)

Für den Sektor Abfallbehandlung und Entsorgung werden keine dynamischen Splitting-Faktoren erstellt.

5.2.7 SNAP 10 (RCG: SNAP 15)

Dieser SNAP Sektor enthält die Emissionen aus der Landwirtschaft und umfasst 26 NFR-Sektoren mit dynamischen Zeitprofilen nach Backes et al. (2014). Wie in Kapitel 4 beschrieben sind dies Jahresgänge auf Basis von Tageswerten für Temperatur und Windgeschwindigkeit. Tagesgänge auf Stundenbasis müssen aus Default-Profilen überlagert werden.

Die Landwirtschaft ist einer von drei Sektoren, bei denen die Zeitabhängigkeit der Emissionen stark von der Temperatur bestimmt wird. Die anderen beiden Sektoren, deren Splitting-Faktoren explizit temperaturabhängig sind, wurden oben bereits beschrieben (Straßenverkehr, Abschnitt 5.2.4 und nicht-industrielle Verbrennungsanlagen, Abschnitt 5.2.2).

Die zeitliche Varianz der Straßenverkehrsemissionen wird primär von der Verkehrsstärke bestimmt, die Temperatur wirkt lediglich als sekundärer Einfluss auf NO_x und die VOC, es ist ausreichend, dass sie deutschlandweit gemittelt eingeht.

Für die nicht-industriellen Verbrennungsanlagen ist die Temperatur der primäre Einfluss, Varianz entsteht durch unterschiedliche Abhängigkeiten bei Wohngebäuden und kommerziell genutzten Gebäuden. Da einerseits diese Unterschiede nicht sehr groß sind und andererseits innerhalb der Klimaregionen das Verhältnis „Wohngebäude zu kommerziell genutzten Gebäuden“ nicht stark variiert, kann bei diesem Sektor über Klimaregionen gemittelt werden. Diese Klimaregionen sind in Abbildung 66 noch einmal dargestellt.

Die Landwirtschaft gehört zu den sehr relevanten Quellgruppen, im Jahr 2016 trug sie 95% zu den NH₃-Emissionen in Deutschland bei. Insbesondere die Emissionen aus der Bodenbearbeitung weisen scharfe Maxima zu den Zeitpunkten für die Düngung auf, die stark temperaturabhängig sind. Diese Zeitpunkte unterscheiden sich z.B. für die Ausbringung von Mineraldünger und von Gülle (siehe Kapitel 4 und Kapitel 7.2). Das Verhältnis von Gülle zu Mineraldünger bei der Düngung hängt unter anderem davon ab, wieviel Viehzucht in einer Region stattfindet.

Abbildung 66 zeigt, dass z.B. die Klimaregion „Nordwestdeutsches Tiefland“ sich über weite Teile von Niedersachsen und Schleswig-Holstein erstreckt. In diesem Bereich unterscheiden sich die Beiträge der 26 NFR-Sektoren zum Teil deutlich: z.B. werden in Gegenden, die von der Schweinezucht dominiert sind, die NH_3 -Emissionen aus der Bodenbearbeitung stark von Gülle dominiert, in anderen Gegenden wird mehr Mineraldünger eingesetzt.

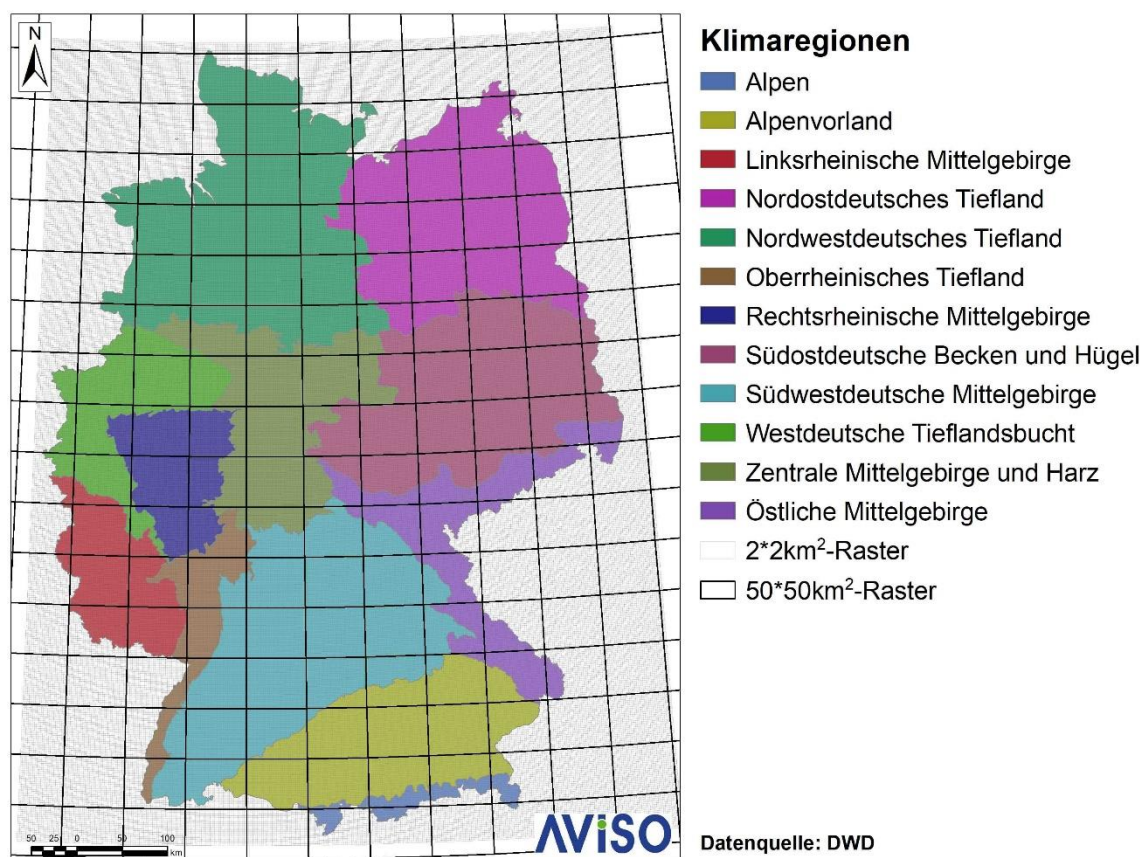
Für die Landwirtschaft werden die Splitting-Faktoren auf SNAP-Ebene daher nicht über Klimaregionen gemittelt, sondern über Raster, deren Größe parametrisierbar ist, und deren maximale Anzahl sich aus der dafür erforderlichen Speichergröße und Rechenzeit ergibt.

In Abbildung 66 sind zusätzlich zu den Klimaregionen Gitterlinien eingetragen: Fein in grau für das $2 \times 2 \text{ km}^2$ Raster von Nest 2 des RCG-Rechengitters, fett in schwarz für ein $50 \times 50 \text{ km}^2$ -Raster, dessen Linien jeweils auf Linien des Nest 2 Rasters fallen.

Insgesamt liegen 234 Gitterzellen des groben und fast 140.000 Gitterzellen des feinen Rasters ganz oder teilweise im Gebiet von Deutschland, müssten also mit Splitting-Faktoren versorgt werden. 140.000 Splitting-Faktoren für die Landwirtschaft sind nicht ohne einschneidende Programmänderungen realisierbar, 234 Splitting-Faktoren voraussichtlich problemlos umsetzbar; die Zahl ist vergleichbar mit der Anzahl beim Straßenverkehr (500 Splitting-Faktoren), einem weiteren Sektor mit hohen Emissionen und starker zeitlicher Variabilität.

Die Zeitprofile nach Backes et al. (2014) (leichte Anpassung der Parameter: s. Kapitel 7.2) wurden ursprünglich für NH_3 abgeleitet, sie werden hier auch für die anderen Schadstoffe der jeweiligen NFR-Sektoren angesetzt. Eine Ausnahme bilden die Staubemissionen, die nicht nur bei der Düngung, sondern auch bei der Ernte anfallen. Für diese werden deutschlandweit einheitlich Default-Profile angesetzt. Damit ergeben sich für SNAP 10 (RCG: SNAP 15) bei einer Rastergröße von $50 \times 50 \text{ km}^2$ insgesamt 235 unabhängige Splitting-Faktoren.

Abbildung 66: Klimaregionen in Deutschland nach DWD (2017) mit überlagertem 2x2km² (hellgrau, fein) und 50x50km² (schwarz, fett) Raster



5.2.8 Anzahl Splitting-Faktoren auf SNAP Ebene

In Tabelle 17 ist für alle SNAP-Sektoren (international übliche Nummerierung von 1 bis 10; Landwirtschaft: gewählte Rastergröße: 50x50km²) die aus den oben beschriebenen Annahmen resultierende Anzahl Splitting-Faktoren aufgelistet.

Tabelle 17: Anzahl Splitting-Faktoren pro SNAP-Sektor (bei einer Rastergröße von 50x50km² für die Landwirtschaft)

| SNAP Nr. | SNAP Name | Anzahl unabhängige Schadstoffe | Anzahl Splitting-Faktoren |
|----------|--|--------------------------------|---------------------------|
| 1 | Verbrennung in der Energie- und Transformationsindustrie | 1 | 75 |
| 2 | Nicht-industrielle Verbrennungsanlagen | 2 | 24 |
| 3 | Verbrennung in der verarbeitenden Industrie | 1 | 16 |
| 4 | Produktionsprozesse | 1 | 16 |
| 5 | Gewinnung und Verteilung von fossilen Brennstoffen | 1 | 16 |
| 6 | Lösungsmittel und andere Gebrauchsgegenstände | 2 | 32 |
| 7 | Straßentransport | 4 | 500 |

| SNAP Nr. | SNAP Name | Anzahl unabhängige Schadstoffe | Anzahl Splitting-Faktoren |
|----------|-------------------------------------|--------------------------------|---------------------------|
| 8 | Andere mobile Quellen und Maschinen | | 41 |
| 9 | Abfallbehandlung und Entsorgung | | |
| 10 | Landwirtschaft | 2 | 235 |
| | Summe | | 955 |

5.3 Ablaufdiagramme

Als Grundlage der Codierung wurden für TeResE Programmablaufpläne erstellt. Diese beschreiben den Datenfluss und die dem Tool zugrunde liegende Logik und dienen einerseits als Leitfaden für die programmtechnische Umsetzung von TeResE und andererseits als Dokumentation der Algorithmen und Struktur des Tools.

Die Ablaufdiagramme liegen für sieben hinsichtlich der Ableitung von Splitting-Faktoren inhaltlich vergleichbare Gruppen von NFR-Sektoren vor. Zusätzlich existiert eine Übersicht zum grundsätzlichen Bearbeitungsablauf in TeResE.

Folgende Gruppen wurden gebildet:

- ▶ Gruppe 1: Kraftwerke und Raffinerien (SNAP 1)
- ▶ Gruppe 2/4: Industrie/Gewerbe, Energie ohne Kraftwerke (SNAP 3 bis 6, NFR 2G: Gruppe 8)
- ▶ Gruppe 3: Kleinfeuerungsanlagen (SNAP 2)
- ▶ Gruppe 5: Straßenverkehr-/transport (SNAP 7, RCG: SNAP 7 bis 12)
- ▶ Gruppe 6: sonstiger Verkehr (SNAP 13, RCG: SNAP 8)
- ▶ Gruppe 7: Landwirtschaft (SNAP 15, RCG: SNAP 10)
- ▶ Gruppe 8: sonstige Produktanwendung (NFR2G)

Die 8 Ablaufdiagramme sind im Anhang C in Abschnitt C.1 dokumentiert.

Das erste Diagramm zeigt die Übersicht des TeResE-Berechnungsablaufs, der die folgenden Teilschritte enthält:

- ▶ Config-Datei einlesen, die die benötigten Informationen und Daten bzw. die Randbedingungen des Berechnungslaufs enthält.
- ▶ Rechengitter aufbauen
- ▶ Meteorologiedaten einlesen
- ▶ Sonstige regionale Datensätze einlesen
- ▶ Alle Geometriedaten auf Rechengitter projizieren, aus den Meteorologiedaten abgeleitete Größen berechnen

- ▶ Pro Gruppe: Berechnung der Splitting-Faktoren auf NFR-Ebene pro Gitterbox und pro Schadstoff
- ▶ Zusammenfassung der Splitting-Faktoren auf SNAP-Ebene
- ▶ Export für RCG (Es kann ausgewählt werden, ob Splitting-Faktoren für NFR-Sektoren, für SNAP-Sektoren nach der internationalen Nomenklatur (von 1 bis 10) oder für SNAP-Sektoren nach der in RCG verwendeten Nomenklatur (von 1 bis 16) ausgegeben werden.)

Die übrigen Ablaufdiagramme in Anhang C zeigen dann im Detail pro Gruppe den Ablauf der Ermittlung der Splitting-Faktoren. In Abschnitt C.2 und C.3 sind auch die Ein- und Ausgabedateien für TeResE beschrieben.

6 Schnittstellenanpassung REM-CALGRID

Zur Evaluierung der mit TeResE generierten dynamischen SF wurden jeweils Modellrechnungen unter Verwendung statischer SF (Default) und dynamischer SF (neu generiert) mit dem Modell REM-CALGRID (RCG) durchgeführt und mit Messungen verglichen. In diesem Kapitel werden die Anpassungen beschrieben, die am RCG durchgeführt wurden, um die von TeResE ausgegebenen dynamischen Splitting-Faktoren einzulesen und zu verwenden.

In Abschnitt 6.1 wird das Modell RCG kurz beschrieben, in Abschnitt 6.2 folgt eine Beschreibung von Testläufen, die mit der Ursprungsversion durchgeführt wurden, um die technischen Randbedingungen zu Rechenzeit und Speicherbedarf zu ermitteln. In Abschnitt 6.3 werden die am Quelltext von RCG durchgeführten Modifikationen sowie damit durchgeführte Tests beschrieben.

6.1 Kurzbeschreibung REM-CALGRID

Das REM-CALGRID-Modell (RCG) ist ein dreidimensionales Chemie-Transportmodell (CTM), das im Rahmen verschiedener vom UBA geförderter F&E-Vorhaben durch Verschmelzung des ursprünglich für die großräumige Skala entwickelten Modells REM3 und des für die urbane Skala entwickelten CALGRID-Modells entwickelt wurde. Die wissenschaftlichen Module wurden immer wieder überarbeitet, ergänzt und auf den Stand des Wissens gebracht, darauf aufbauend wurde das Modell laufend fortgeschrieben. Eine aktuelle Beschreibung findet sich z.B. in Stern (2009). Neben dem Transport werden folgende Prozesse berücksichtigt:

- ▶ Zur Berechnung der *Gasphasenchemie* wird im RCG der Carbon Bond-IV-Mechanismus (CBM-IV) verwendet. Dies ist ein so genannter "lumped-structure"-Mechanismus, bei dem die Kohlenwasserstoffe in symbolische Gruppen entsprechend den Bindungseigenschaften der C-Atome aufgeteilt werden. Der CBM-IV-Mechanismus im RCG-Modell entspricht der im CMAQ-Modellsystem der US EPA verwendeten Form.
- ▶ Die *Aerosolbehandlung* im RCG wird relativ einfach gehandhabt: Das Modell unterscheidet im Größenbereich kleiner 10 µm jeweils organische und anorganische primär emittierte anthropogene und natürliche Partikel sowie über chemisch/physikalische Prozesse aus anthropogenen und natürlichen Vorläufersubstanzen sekundär gebildete organische und anorganische Partikel.
- ▶ Als Emissionen werden sowohl *anthropogene* wie auch *natürliche Quellen* berücksichtigt.
- ▶ Die Entfernung von Schadstoffen aus der Atmosphäre wird im RCG-Modell über die Prozesse der *trockenen und nassen Deposition* behandelt. Betrachtet wird das Auswaschen mit dem Regenniederschlag (nasse Deposition) und die trockene Ablagerung von Partikeln und Gasen auf Pflanzen und anderen Oberflächen (trockene Deposition).

Das RCG-Modell kann zur Bestimmung der Luftqualität und des Eintrags von Schadstoffen in den Boden in der europaweiten und der nationalen Raumskala (Auflösungen von ca. 30x30 km² bis circa 2x2 km²) verwendet werden, in Ballungsgebieten bis zu einer Auflösung von ca. 1x1 km² und höher. Dabei dienen die aus höherskaligen Modellanwendungen abgeleiteten Hintergrundbelastungen als Randbedingung für die niedrigerskaligen Berechnungen („one-way-nesting“).

Für Modellrechnungen auf der nationalen Skala für Deutschland werden aktuell drei Nester berechnet: Nest 0 (Auflösung: $0,5^\circ$ Länge x $0,25^\circ$ Breite, Europa) und Nest 1 (Auflösung: $0,125^\circ$ Länge x $0,0625^\circ$ Breite, Deutschland) als Randbedingung sowie Nest 2 (Auflösung: $0,03125^\circ$ Länge x $0,015625^\circ$ Breite, Deutschland) als Ergebnislauf.

Die internen Zeitschritte im RCG werden entsprechend den numerischen Erfordernissen in Abhängigkeit von Gitterauflösung, Windgeschwindigkeit und chemischem Umsatz gewählt, die Ausgabe der Ergebnisse erfolgt auf Stundenbasis für das ganze Jahr. Durch anschließende Mittelung können auf verschiedenen Zeitskalen Modellberechnungen mit Messergebnissen verglichen werden. Betrachtet werden alle relevanten Spurenstoffe in der Gasphase und deren chemische Reaktionen sowie die Feinstaubproblematik. Bei den Partikeln können neben der Gesamtsumme der Partikel $< 10 \mu\text{m}$ (PM_{10}) auch die Größenfraktionen $\text{PM}_{10}\text{-PM}_{2.5}$ und $\text{PM}_{2.5}$ sowie die Komponenten EC (elemental carbon), OC (organic carbon), die anorganischen Sekundäraerosole SO_4 , NH_4 und NO_3 sowie einige organische Aerosole getrennt ausgewiesen werden.

Die Parametrisierungen der physikalisch/chemischen Prozesse erfolgen mit Modellierungsansätzen mittlerer Komplexität, um die auf Langfristberechnungen abzielende Anwendung des Modells auch ohne Großrechner gewährleisten zu können. In der praktischen Anwendung bedeutet dies, dass die physikalisch-chemischen Parametrisierungen so gewählt sind, dass einerseits eine dem Problem angemessene Darstellung der relevanten Prozesse gewährleistet ist und andererseits der Rechenzeitbedarf des Modells eine Erstellung von Jahresläufen auf einem modernen PC gestattet.

Als Eingangsdaten benötigt RCG:

- ▶ Anthropogene Emissionen der Stoffgruppen SO_x , NO_x , CO, NH_3 , Benzol, PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$ und NMVOC jeweils als Punkt- oder Flächenquellen und unterteilt nach 16 SNAP-Sektoren (der Straßenverkehr ist ggü. international weiter aufgeteilt in 6 Sektoren, siehe Abschnitt 5.2.4). Aktuell sind pro Stoffgruppe und SNAP-Sektor statische Tages-, Wochen- und Jahresgänge hinterlegt; im Rahmen dieses Projekts wird die Möglichkeit implementiert, diese durch dynamische SF zu ersetzen.
- ▶ Meteorologische Daten (dreidimensionale Felder für Windkomponenten u und v, für Temperatur, Feuchte und Dichte sowie zweidimensionale Felder für Bodentemperatur, Bodenwindgeschwindigkeit, Monin-Obukhov-Länge, Schubspannungsgeschwindigkeit, Mischungsschichthöhe, Niederschlag und Schneebedeckung alle auf stündlicher Basis) werden für das aktuelle Projekt aus dem COSMO-Modell des DWD übernommen.
- ▶ Landnutzungsdaten: Pro Gitterzelle werden die Anteile benötigt für Stadtgebiete, Landwirtschaft, Grasland, Laub-, Nadel- und Mischwald, Wasser, Sumpfland sowie Sand und Felsen. In Kombination mit den meteorologischen Daten werden damit z.B. die biogenen Emissionen berechnet.
- ▶ Anfangs- und Randbedingungen werden entweder extern vorgegeben oder es werden Defaults angesetzt. Bei genesteten Anwendungen können die Randbedingungen direkt aus den Berechnungen für die übergeordnete Skala übernommen werden.

6.2 Basisläufe mit statischen Zeitprofilen

Für die Jahre 2016 und 2017 wurden jeweils RCG-Basisläufe unter Verwendung statischer Zeitprofile durchgeführt, die bei der Evaluierung (Kapitel 7) als Vergleichsversion für Modellrechnungen unter Verwendung der dynamischen Zeitprofile dienen. In diesem Abschnitt werden für alle drei Nester die benötigten Ressourcen (Speicherbedarf und Rechenzeit) beschrieben.

1. Nest 0: Europa
 Auflösung: 0.5° Länge x 0.25° Breite ($\sim 28 \times 32 \text{ km}^2$), das Modellgebiet umfasst in der Horizontalen 82×120 Gitterzellen;
 Es wurden sieben Höhenlevel gerechnet, seitliche und obere Randbedingungen entsprechen den klimatologischen Hintergrundkonzentrationen, die Anfangsbedingungen stammen für den Basislauf 2016 aus den letzten fünf Tagen eines Rechenlaufes für 2015, für den Basislauf 2017 aus dem für 2016.
2. Nest 1: Deutschland
 Auflösung: 0.125° Länge x 0.0625° Breite ($\sim 7 \times 8 \text{ km}^2$), das Modellgebiet umfasst in der Horizontalen 82×134 Gitterzellen;
 Es wurden sechs Höhenlevel gerechnet, seitliche und obere Randbedingungen entsprechen dem Lauf für Nest 0 (obere Randbedingung: Höhenlevel 7 aus Nest 0), die Anfangsbedingungen stammen für den Basislauf 2016 aus den letzten fünf Tagen eines Rechenlaufes für 2015, für den Basislauf 2017 aus dem für 2016.
3. Nest 2: Deutschland
 Auflösung: 0.03125° Länge x 0.015625° Breite ($\sim 2 \times 2 \text{ km}^2$), das Modellgebiet umfasst in der Horizontalen 310×510 Gitterzellen;
 Es wurden sechs Höhenlevel gerechnet, seitliche und obere Randbedingungen entsprechen dem Lauf für Nest 1 (obere Randbedingung: Höhenlevel 6 aus Nest 6), die Anfangsbedingungen stammen für den Basislauf 2016 aus den letzten fünf Tagen eines Rechenlaufes für 2015, für den Basislauf 2017 aus dem für 2016.

Alle Modellrechnungen wurden auf einem AMD Ryzen 9 3900X mit 12 Kernen und 24 Threads @ 4,3 Gigahertz durchgeführt. Der Arbeitsspeicher liegt bei 32 Gigabyte, als Betriebssystem läuft Windows 10. Als Entwicklungsumgebung wurde das Fortran Visual Studio verwendet.

Rechenzeiten

Die folgenden Rechenzeiten beziehen sich auf den Release-Modus, bei dem das Programm ohne Debug-Informationen läuft. Produktionsläufe werden aus Rechenzeitgründen im Release-Modus durchgeführt, es ist nicht nötig, ein vollständiges Modelljahr im Debugger laufen zu lassen. Für die Jahresläufe ergaben sich folgende Rechenzeiten:

- Nest 0, ohne Aufteilung: fast 2 Tage Rechenzeit
- Nest 1, ohne Aufteilung: etwas mehr als 2 Tage Rechenzeit
- Nest 2, Aufteilung auf 12 Kerne, pro Kern jeweils 1 Monat mit 5 Tagen Überlappung: je nach Monat 8 – 9 Tage (Wintermonate aufgrund höherer Windgeschwindigkeiten und dadurch einer höheren erforderlichen Anzahl Zeitschritte dauern tendenziell etwas länger) Rechenzeit

Speicherbedarf

Da die Programmentwicklung im Debugger durchgeführt wird, das Programm also grundsätzlich im Debug-Modus lauffähig sein soll, beziehen sich die folgenden Angaben für den Speicherbedarf auf den Debug-Modus.

Für eine Maximalbetrachtung wird im Folgenden die Konfiguration für Nest 2 betrachtet, bei der trotz der geringeren Anzahl Höhenlevel durch die größte Anzahl horizontaler Gitterpunkte die größten Arrays für Emissionen, Konzentrationen, meteorologische Variablen etc. erforderlich sind.

Für Nest 2 benötigt das RCG im Debug-Modus ca. 2 GB Arbeitsspeicher.

Größtes Einzelarray ist aktuell das Master Array, in dem hintereinander verschiedene Variablen für das Rechengitter gespeichert werden: Konzentrationen und ihre Mittelwerte, meteorologische Größen, geophysikalische Größen, Emissionen (biogen und Punktquellen), Deposition und Fluss zur oberen Randbedingung, temporäre Felder für die Advektion, etc.

Die Größe des Master Arrays wird durch die Konstante *mxmain* festgesetzt und liegt für die Auflösung von Nest 2 bei ca. 500 MB.

Von den anthropogenen Emissionen werden nur die Punktquellen im Master Array gespeichert. Das Master Array braucht zur Schnittstellenanpassung nicht erweitert werden.

RCG wurde für ein 32-Bit-System entwickelt und kann daher auf maximal 4 GB Arbeitsspeicher zugreifen. Für Nest 2 wird aktuell ca. die Hälfte davon benötigt.

6.3 Modifikationen zur Schnittstellenanpassung und durchgeführte Tests

Bisher ist im RCG eine statische Zeitabhängigkeit der Emissionen implementiert. Um die SF aus TeResE in das RCG einlesen und verwenden zu können, wurden Modifikationen am Quellcode des RCG durchgeführt. Diese sind im Einzelnen in Anhang C.2 beschrieben.

Es wurden verschiedene Tests sowohl mit dem ursprünglichen RCG wie auch nach den Modifikationen durchgeführt. Diese werden im Folgenden beschrieben.

Auswirkungen Restart File

Mit dem ursprünglichen RCG wurde getestet, welchen Einfluss die Aufteilung des Jahreslaufs auf zwölf parallel gerechnete Monate hat. Dafür wurden Läufe mit und ohne Restart-File verglichen: Bereits nach 48 Stunden Modellzeit waren die Abweichungen zwischen diesen Läufen gering, nach 72 Stunden vernachlässigbar. Es verbleiben daher nur marginale Unterschiede zwischen einem Jahreslauf aus zwölf parallel gerechneten Monaten mit fünf Tagen Überlappung und einem nicht parallelisierten Jahreslauf.

Speicherbedarf

Zum Testen des für die Splitting-Faktoren benötigten Speicherbedarfs wurden im Modul *emissions_mod.for* die Arrays *split_fac_pointers* und *splitting_factors* zunächst nicht aus den entsprechenden Dateien eingelesen, sondern es wurde Speicher allokiert und mit dummy-Werten belegt.

In der Modellkonfiguration für Nest 2 (310 x 510 Gitterpunkte in der Ebene, 8 zeitlich unabhängige Schadstoffe, 16 Quellgruppen und 2 Bytes pro Integer) ergibt sich als Größe des Pointer-Arrays ca. 42 MB.

Die Länge der Splitting-Faktoren ist fest (8.784, Anzahl Stunden im Schaltjahr), die Anzahl der Splitting-Faktoren wurde zu Testzwecken variiert. Bei 1.000 Splitting-Faktoren (zu erwartende

Größenordnung, siehe Tabelle 17) ergibt sich für den Datentyp Real mit 4 Bytes eine Array Größe von ca. 35 MB. Testweise wurde die Anzahl Splitting-Faktoren bis zum Programmabsturz erhöht. Dieser fand, wie für ein 32 Bit Programm zu erwarten, bei einer Speicherbelegung von ca. 4 GB und ca. 50.000 Splitting-Faktoren (Größe des Arrays *splitting_factors*: ca. 1,8 GB) statt.

Bei einer Anzahl von ca. 1.000 SF sind für RCG als 32- Bit-Programm daher keine Probleme zu erwarten.

Dynamische SF auf Basis der Default RCG Zeitprofile

Zum Testen der neuen Routinen wurden synthetische SF erzeugt, deren Form der TeResE-Ausgabe entspricht, die jedoch aus den RCG-Default-Zeitprofilen konstruiert sind. Für den Modelltag 15.06.2016 (Normalwerktag, d.h. keine Schulferien, kein Feiertag) wurden jeweils eine Modellrechnung mit dem ursprünglichen RCG (Verwendung dynamischer SF mittels globalem Flag ausgeschaltet) und eine Modellrechnung mit den neu implementierten Routinen (Verwendung dynamischer SF mittels globalem Flag eingeschaltet) und den synthetisch erzeugten SF auf Basis der Default-Profile durchgeführt und verglichen. Geringfügige Abweichungen sind dabei zu erwarten, weil 2016 ein Schaltjahr ist und sich die Jahressumme der Emissionen um ein $1/365 \approx 0,3\%$ unterscheidet.

Verglichen wurden einerseits stündliche Karten für die Schadstoffe NO₂, NO_x, PM_{2.5}, O₃, SO₂ und NH₃ sowie die im Modell ankommenden und zur Berechnung verwendeten stündlichen Emissionssummen, die in der Log-Datei *LIST_DE_2x2.ASC* für alle Spezies ausgegeben werden.

Die gefundenen Abweichungen waren jeweils kleiner oder gleich den erwarteten 0,3%.

7 Evaluierung anhand ausgewählter Stationen

Gegenstand dieses Kapitels ist die Evaluierung der dynamischen Splitting-Faktoren (SF) mittels RCG anhand ausgewählter Luftqualitäts-Messstationen aus dem städtischen und ländlichen Hintergrund. RCG-Modellrechnungen (unter Verwendung der statischen Default-Zeitprofile sowie der dynamischen Splitting-Faktoren) für die Gitterboxen, in denen sich diese Stationen befinden, wurden mit den entsprechenden Messwerten verglichen. Als Vergleichsjahr wurde das Jahr 2016 gewählt (siehe Abschnitt 7.1).

Die Evaluierung wurde für die Luftschadstoffe NO₂, O₃ und PM_{2.5} bzw. PM₁₀ durchgeführt, da zu diesen Stoffen viele Messstationen mit zeitaufgelösten Messwerten vorhanden sind. Im landwirtschaftlich geprägten ländlichen Hintergrund wurde weiterhin NH₃ betrachtet.

Bereits vor der eigentlichen Evaluierung und den damit verbundenen umfangreichen Modellrechnungen wurden die Zeitfunktionen der Landwirtschaft einer Plausibilitätsprüfung durch Vergleich mit Messdaten unterzogen. Die verwendeten Parameter wurden in der Folge leicht angepasst (Abschnitt 7.2). In diesem Zusammenhang zeigte sich auch, dass bei der Evaluierung der Zeitfunktionen der Landwirtschaft räumlich über größere Gebiete und zeitlich über längere Messintervalle gemittelt werden muss als bei den übrigen Sektoren.

In Abschnitt 7.3 werden die Messstationen beschrieben, die für die Evaluierung der SF ausgewählt wurden.

Für die Evaluierung mittels Modellrechnungen wurden RCG-Modellläufe für das Jahr 2016 mit statischer und mit dynamischer zeitlicher Verteilung der Emissionen durchgeführt. In den Abschnitten 7.4 und 7.5 werden Kartendarstellungen dieser RCG-Modellrechnungen mit statischen und mit dynamischen SF gezeigt, in Abschnitt 7.4 für Jahresmittelwerte und in Abschnitt 7.5 für Monatsmittelwerte.

Für beide Läufe wird das modellierte Zeitverhalten der Konzentrationen auf verschiedenen zeitlichen Skalen (saisonal, Wochen- und Tagesgänge) zur Evaluierung betrachteter Luftschadstoffe in ausgewählten Gitterzellen mit dem Zeitverhalten gemessener Konzentrationen an Hintergrundstationen in diesen Gitterzellen verglichen. Als statistische Kenngrößen werden dafür jeweils Korrelationskoeffizient, Bias und RMSE (root mean square error) zwischen Modellrechnung und Messung bestimmt. In Abschnitt 7.6 werden die auszuwertenden Zeitreihen qualitativ beschrieben, in Abschnitt 7.7 werden die auf Basis dieser Zeitreihen berechneten Kenngrößen dargestellt und interpretiert.

Abschnitt 7.8 enthält die separat durchgeführte Evaluierung für die Landwirtschaft. Wie oben beschrieben, wurde dafür räumlich über größere Gebiete und zeitlich über längere Messintervalle gemittelt.

Zusätzlich zur Evaluierung anhand des meteorologisch „unauffälligen“ Jahres 2016 wurde eine Episode im Januar des Jahres 2017 betrachtet, während der die Feinstaub-Konzentration in Deutschland großflächig über mehrere Tage deutlich erhöht war (Abschnitt 7.9).

7.1 Auswahl des für die Evaluierung verwendeten Referenzjahres

Für die Evaluierung wurde mit 2016 ein Jahr ausgewählt, das bereits in dem UBA-Projekt „Immissionsseitige Bewertung der Luftschadstoff-Emissionen einzelner Quellen und Anpassung der nationalen Emissionsdaten zur Beurteilung der Luftqualität“ (FKZ 3717512520) als meteorologisch „unauffällig“ identifiziert wurde. Im Rahmen dieses Projekts wurde ein Jahr gesucht,

- ▶ das zeitlich nicht zu lange zurück liegt,
- ▶ das möglichst geringe Temperatur- und Niederschlagsanomalien aufweist,
- ▶ für das möglichst viele Messungen vorliegen (wenig Datenlücken an kontinuierlichen Messstationen, zusätzliche Messungen aus Kampagnen etc.,
- ▶ das keine besonders langen oder besonders stark ausgeprägten Ozon- oder Feinstaub-Episoden enthält,
- ▶ das möglichst wenig beeinflusst ist von Sonderereignissen (z.B. Ferntransporten in Folge von Waldbränden oder vulkanischen Aktivitäten).

Eine im Projekt FKZ 3717512520 durchgeführte Analyse der Jahre 2010 bis 2017 führte zur Wahl des Jahres 2016 als Referenzjahr:

Das Jahr 2016 war zwar im Mittel zu warm (+0,6°C im Vergleich zum Zeitraum 1981-2010) und zu trocken, allerdings nicht so extrem wie z.B. 2014 oder 2015. Die moderaten Abweichungen 2016 liegen im Trend der letzten zwei Jahrzehnte, in denen die Anzahl der Jahre überwiegt, die zu den wärmsten jemals gemessenen Jahren zählen. Das Jahr 2016 zeichnet sich weiterhin durch eine zeitlich und räumlich homogene Verteilung der Temperatur- und Niederschlagsanomalien aus.

Im Jahr 2016 gab es nur kurze PM₁₀- und O₃-Episoden. Die mittlere PM₁₀-Konzentration fiel im Vergleich zum Mittel über alle betrachteten Jahre eher niedrig aus. Der Sahara-Staub-Index, der u.a. das Vorhandensein, die Konzentration und Eindeutigkeit von Saharastaub in der Atmosphäre berücksichtigt, ist für 2016 gering. In das 2016 fallen weiterhin keine Vulkanausbrüche (wie z.B. 2010 der Eyjafjallajökull oder 2011 der Grimsvötn auf Island), die 2016 bei Waldbränden verbrannte Fläche in Südeuropa ist nicht außergewöhnlich hoch.

7.2 Anpassung Landwirtschaft

In Kapitel 4 wurden für jeden NFR-Sektor die in TeResE zur Berechnung der SF verwendeten Daten, Funktionen und Parameter beschrieben, die auf Basis der Literaturrecherche als optimal identifiziert wurden. Häufig handelt es sich dabei um bereits als Zeitreihe vorliegende Messdaten oder Proxy-Daten (Temperatur, Verkehrswerte, Produktionsindizes, ...). Für viele Quellgruppen sind die Zeitreihen für die Emissionen (also die SF) entweder direkt proportional zu den verwendeten Zeitreihen der Proxy-Daten, oder sie ergeben sich durch Kombination und Korrekturen. In den meisten Fällen ist die Korrelation zwischen dem SF und der Zeitreihe der wichtigsten Einflussgröße hoch.

Bei der Landwirtschaft, speziell bei den Emissionen aus der Bodenbearbeitung, sieht das anders aus. Das Zeitverhalten dieser Emissionen hängt ab von der Temperatur. Diese ist räumlich hoch aufgelöst und mit vergleichsweise geringen Unsicherheiten behaftet aus der COSMO-Meteorologie verfügbar. Die zeitlichen Verläufe der daraus abgeleiteten Emissionsfunktionen haben jedoch keine Ähnlichkeit mit den Temperaturverläufen, sondern sind Überlagerungen verschiedener Glockenkurven (s. Abbildung 61), deren Scheitelpunkte an Tagen liegen, an denen die kumulierten Temperaturen bestimmte Werte überschreiten. Die Werte für diese Scheitelpunkte, die entsprechenden Halbwertsbreiten sowie die Verteilung der Emissionen auf die verschiedenen Kurven gehen als Parameter ein und wurden von Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005) für Dänemark bestimmt und von Backes (2014) an Deutschland und das Referenzjahr 2008 angepasst.

Weil die auf dieser Basis berechneten SF für die Emissionen aus der Bodenbearbeitung kritisch von diesen Parametern abhängen, wurde geprüft, ob die Parameter ggf. an die hier betrachteten Jahre 2016 und 2017 angepasst werden müssen. Dazu wurden die nach Abschnitt 4.6 berechneten SF einem Vergleich mit Zeitreihen gemessener NH_3 -Konzentrationen unterzogen und in der Folge leicht modifiziert. Auch wenn sich generell die Zeitreihen von Emissionen und Immissionen aufgrund von Transport, variabler Mischungsschichthöhe oder chemischen Umwandlungen deutlich unterscheiden können, liefert ein Vergleich der Lage der Maxima im Zeitverlauf von Emissionen und Immissionen schon Hinweise, die vor der Durchführung aufwändiger Modellrechnungen berücksichtigt werden können.

Bei dem Vergleich zeigte sich auch, dass speziell bei der Landwirtschaft ein Vergleich zwischen Modellrechnungen und Messungen nur für Mittelungen über größere Gebiete und längere Messintervalle sinnvoll ist, was bei der Evaluierung der SF (s. Abschnitt 7.8) berücksichtigt wird.

In diesem Kapitel werden zunächst sinnvolle Mittelungsgebiete und -zeiträume für den Vergleich zwischen Mess- und Modelldaten im Sektor Landwirtschaft abgeleitet (Abschnitt 7.2.1). Auf dieser Basis werden dann Vergleiche gemessener Zeitreihen mit den Zeitprofilen der Emissionen aus der Bodenbearbeitung durchgeführt und die entsprechenden Parameter angepasst (Abschnitt 7.2.2).

7.2.1 Mittelungsgebiete und -zeiträume

Die Landwirtschaftsemissionen aus der Bodenbearbeitung sind dominiert durch die Emissionen bei der Ausbringung von Gülle und sonstigen organischen Düngemitteln (vier Düngegaben pro Jahr) sowie von Mineraldünger (zwei Düngegaben pro Jahr). Die in Abschnitt 4.6 beschriebenen Funktionen zur zeitlichen Verteilung dafür sind Gaußsche Glockenkurven (Normalverteilungen).

Die Begründung für den Ansatz von Normalverteilungen ist, dass sich die Emissionen aus der Düngeerausbringung in Summe aus einer großen Anzahl unabhängiger Einzeldüngungen zusammensetzen, die zeitlich jeweils um die optimalen Düngetermine streuen. Nach dem zentralen Grenzwertsatz sind Verteilungen, die durch additive Überlagerung einer großen Zahl von unabhängigen Einflüssen entstehen, annähernd normalverteilt.

NH_3 wird in Deutschland an einigen Messstationen im unbelasteten ländlichen Hintergrund (z.B. des UBA) gemessen, im Wesentlichen jedoch an Messstationen im landwirtschaftlich geprägten ländlichen Hintergrund und auch an einigen Verkehrsmessstationen (an denen sich das Zeitverhalten der NH_3 -Emissionen des Straßenverkehrs aufgrund von Ammoniak-Schlupf zeigt, die also für die Prüfung der Parameter für die Landwirtschaftsemissionen nicht relevant sind).

Für die Messstationen im unbelasteten ländlichen Hintergrund, an denen Luftpakete aus unterschiedlichen Windrichtungen ankommen, die auf ihren Trajektorien eine Vielzahl von Feldern passiert haben, ist je nach Mittelungszeitraum die Voraussetzung für die Normalverteilung (große Zahl von Einzeldüngungen tragen zum Messwert bei) möglicherweise erfüllt. Messungen in landwirtschaftlich geprägten Gebieten, auch wenn sie an Hintergrundstationen durchgeführt werden, die repräsentativ für ein größeres Gebiet sind, sind jedoch von einzelnen Düngevorgängen geprägt: Typischerweise werden Felder um Umkreis von einigen km in zeitlicher Nähe zueinander gedüngt, können also nicht als unabhängige Ereignisse angesehen werden.

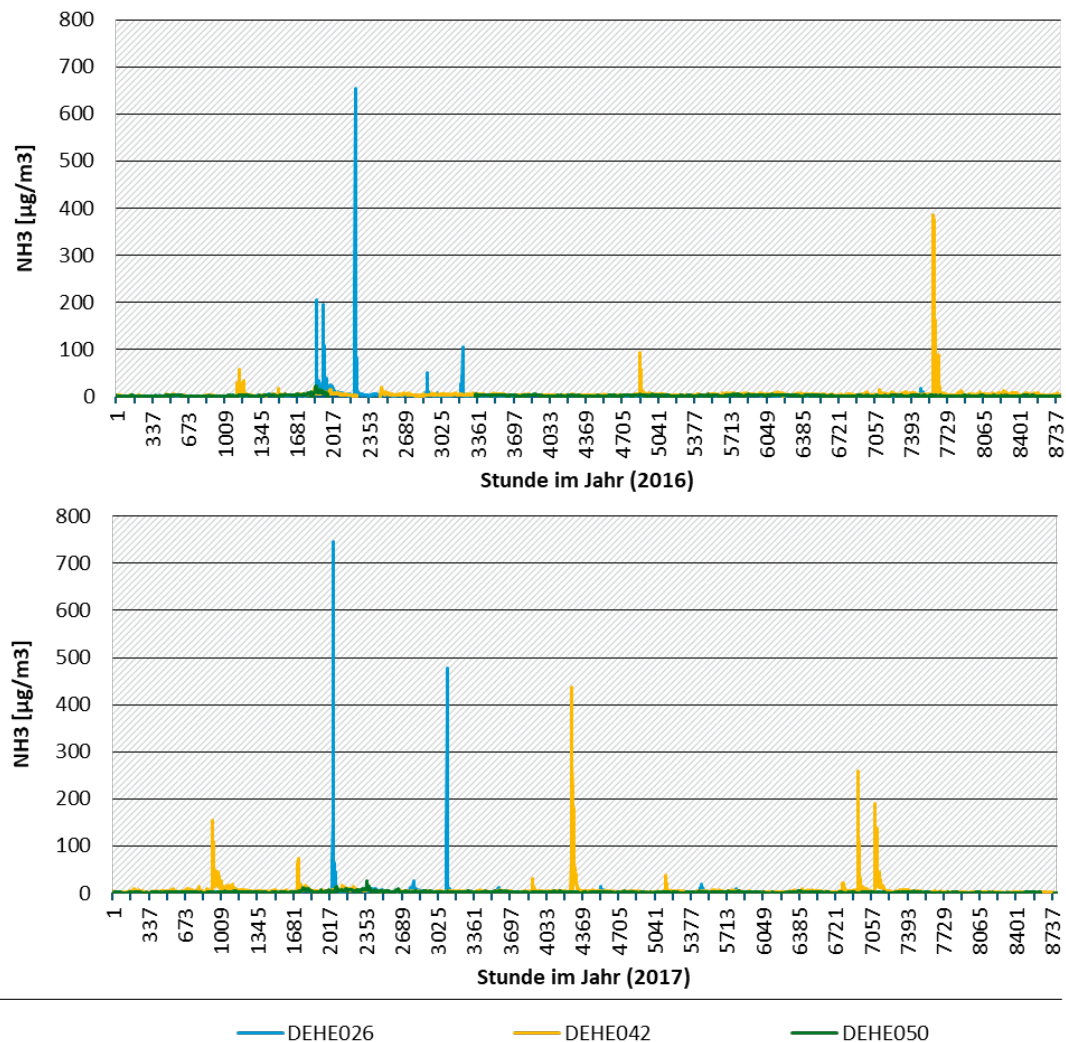
Hessen ist das einzige Bundesland, für das stündliche NH_3 -Messungen vorliegen, und zwar an einer Verkehrsstation und an drei ländlichen Hintergrundstationen. Die Zeitreihen der stündlichen Messdaten an diesen drei Stationen für die Jahre 2016 und 2017 sind in Abbildung 67 dargestellt.

Die Station DEHE050 (Zierenberg) befindet sich in einem Waldgebiet in Nordhessen. Die Stationen DEHE026 (Spessart) und DEHE042 (Linden) sind von Feldern umgeben. Die stündlichen NH_3 -Konzentrationen an den Stationen DEHE026 und DEHE042 sind in beiden Jahren durch Peaks dominiert, die jeweils einzelnen Düngegaben entsprechen und nicht der Summe einer großen Zahl unabhängiger Düngungen.

Die Unterschiede hinsichtlich Anzahl und Lage der Peaks einerseits zwischen den beiden Stationen und andererseits zwischen den beiden Jahren lassen sich nicht nur durch unterschiedliche Temperaturverläufe erklären, sondern weisen auf weitere Einflüsse hin, die über eine alleinige Temperaturabhängigkeit hinaus gehen: Auf den jeweiligen Feldern werden unterschiedliche Feldfrüchte angebaut mit jeweils eigenen Erfordernissen an Zeitpunkt und Häufigkeit der Düngung. Unter www.landwirtschaftskammer.de wird erklärt, wie Düngegaben und -zeiträume von den angebauten Früchten abhängen:

- ▶ Die meisten Kulturen werden zwei oder drei Mal im Jahr gedüngt.
- ▶ Bei Getreide wird die erste Düngung typischerweise im bereits gesäten Bestand nach Ende der Sperrfrist (31. Januar) durchgeführt, das ist früher als nach Abbildung 61 zu erwarten.
- ▶ Mais erhält typischerweise nur eine Düngung im Zuge der Bodenvorbereitung vor der Aussaat.
- ▶ Zweijährige Kulturen wie Wintergerste, Gemüse oder Erdbeeren werden typischerweise auch im Herbst noch gedüngt (bis zum 01.10. bzw. bis zum 01.12.).
- ▶ Auf Wiesen oder Weiden finden bis zu 5 Düngungen im Jahr statt.

Abbildung 67: Zeitreihen der stündlichen NH_3 -Messungen an drei ländlichen Hintergrundstationen in Hessen 2016 (oben) und 2017 (unten)



Datenquelle: HLNUG

Über die tatsächlich in einzelnen Jahren auf einzelnen Feldern angebauten Kulturen liegen keine Informationen vor. Die in Abschnitt 4.6 beschriebenen Funktionen fassen daher Mittelwerte und Streuungen aufgrund verschiedener Effekte zusammen:

- Mittelung über die in Deutschland angebauten Feldfrüchte, deren Düngehäufigkeiten sowie über die auf Basis der kumulierten Temperaturen dafür optimalen Zeitpunkte
- Mittelung über die tatsächlichen Düngzeitpunkte, die von den individuellen Planungen der Landwirte abhängen und neben der Temperatur von weiteren Parametern abhängen

Die Emissionspeaks auf einzelnen Feldern werden dadurch zu Glockenkurven beträchtlicher Halbwertsbreiten, die das tatsächliche Zeitverhalten der Emissionen sowohl räumlich wie auch von Jahr zu Jahr mal besser und mal weniger gut beschreiben.

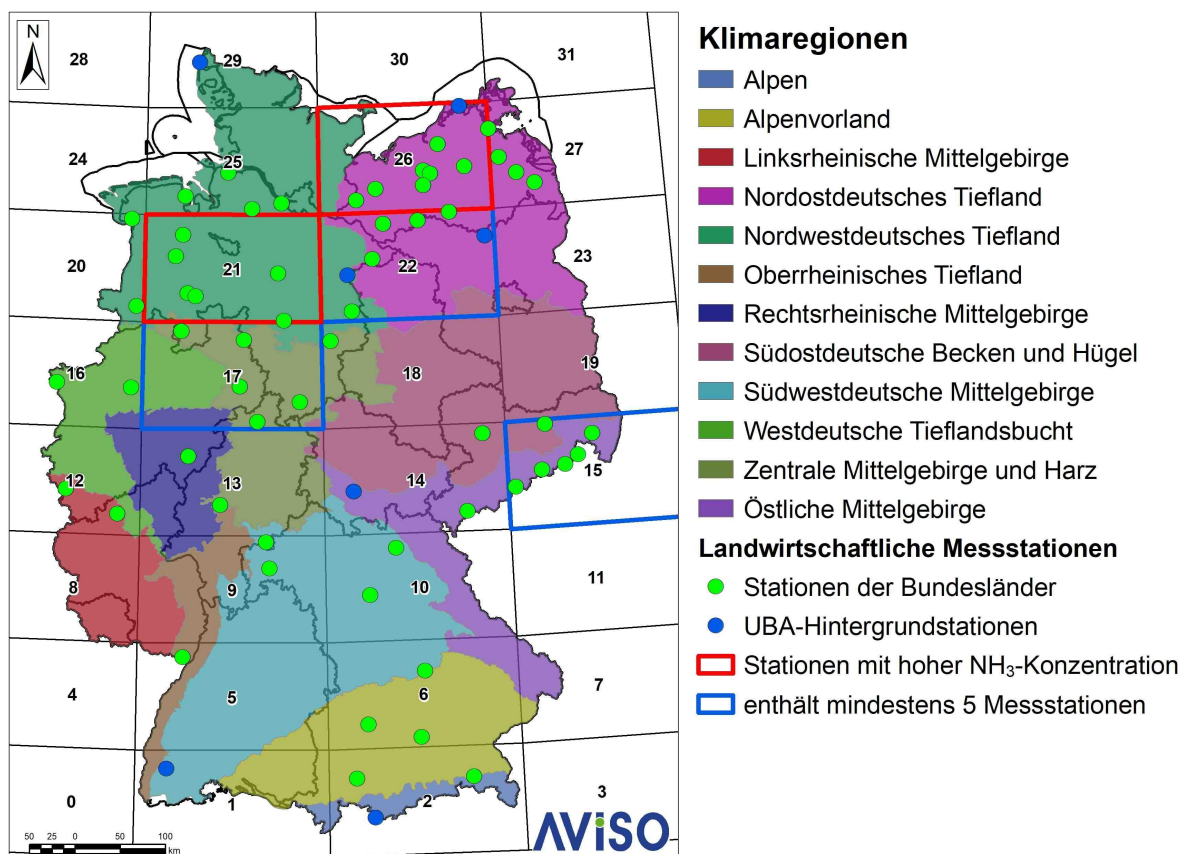
Eine Evaluierung der Landwirtschaftsfunktionen ist daher auch nur für gemittelte Konzentrationen (räumlich und zeitlich) sinnvoll. Es werden daher für die Evaluierung

- Monatswerte betrachtet (an vielen Messstationen wird NH_3 ohnehin nur mittels Passivsammlern gemessen, dort liegt die zeitliche Auflösung im Wochen- oder Monatsbereich)
- größere Raster betrachtet.

Die Raster für die Evaluierung müssen einerseits so groß sein, dass sie eine hinreichend hohe Zahl an Messstellen enthalten. Andererseits dürfen sie nicht zu groß sein, da einerseits die Zusammensetzung der zu den Landwirtschaftsemissionen beitragenden NFR-Sektoren räumlich variiert und andererseits die Temperaturverläufe pro Klimaregion unterschiedlich sind. Für die Evaluierung der Zeitprofile der landwirtschaftlichen Emissionen wurde das in Abbildung 68 dargestellte Raster gewählt, es besteht aus vier mal acht Rastern über Deutschland.

In der Evaluierung betrachtet werden die fünf Rasterelemente, die jeweils mindestens fünf Messstationen enthalten (in Abbildung 68 rot oder blau umrandet).

Abbildung 68: Raster für die Evaluierung der SF für die Landwirtschaft: Grüne Kreise: Landwirtschaftliche Messstationen der Bundesländer, blaue Kreise: UBA-Hintergrundstationen; rot oder blau umrandete Raster: Enthalten mindestens fünf Messstationen; rot umrandete Raster: Enthalten Stationen mit besonders hohen NH_3 -Konzentrationen; zusätzlich dargestellt: Klimaregionen in Deutschland



7.2.2 Parameter Bodenbearbeitung

Für die Prüfung und Anpassung der Parameter in den Zeitprofilen der landwirtschaftlichen Emissionen aus der Bodenbearbeitung werden Raster 21 und Raster 26 (in Abbildung 68 rot

umrandet) betrachtet. Diese liegen in landwirtschaftlich intensiv genutzten Gebieten und weisen unter den fünf für die spätere Evaluierung ausgewählten Rastern die höchsten gemessenen NH_3 -Konzentrationen auf.

Als optimale Zeitpunkte für die Düngung (Scheitelpunkte der Glockenkurven) ergeben sich für Raster 21 und 26 mit den von Backes (2014) verwendeten Parametern aus Tabelle 12 und Tabelle 13 und den Temperaturverläufen aus COSMO für 2016 und 2017 die in Tabelle 18 ausgewiesenen Tage. Für die Emissionen aus der Düngung mit Gülle gibt es vier optimale Düngetermine, aus der mit Mineraldünger zwei, von denen der erste etwas später liegt als der erste Termin für die Gülle.

Tabelle 18: Optimale Tage für Düngung mit Gülle und Mineraldünger gemäß Temperaturabhängigkeit nach Backes (2014) für die Raster 21 und 26 und die Jahre 2016 und 2017

| Ausbringung | 2016, Raster 21 | 2017, Raster 21 | 2016, Raster 26 | 2017, Raster 26 |
|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Gülle 1 | 25.03.2016 | 26.03.2017 | 03.04.2016 | 04.04.2017 |
| Gülle 2 | 29.04.2016 | 27.04.2017 | 05.05.2016 | 10.05.2017 |
| Gülle 3 | 05.07.2016 | 05.07.2017 | 05.07.2016 | 11.07.2017 |
| Gülle 4 | 06.09.2016 | 07.09.2017 | 06.09.2016 | 07.09.2017 |
| Mineraldünger 1 | 06.04.2016 | 05.04.2017 | 14.04.2016 | 17.04.2017 |
| Mineraldünger 2 | 05.07.2016 | 05.07.2017 | 05.07.2016 | 11.07.2017 |

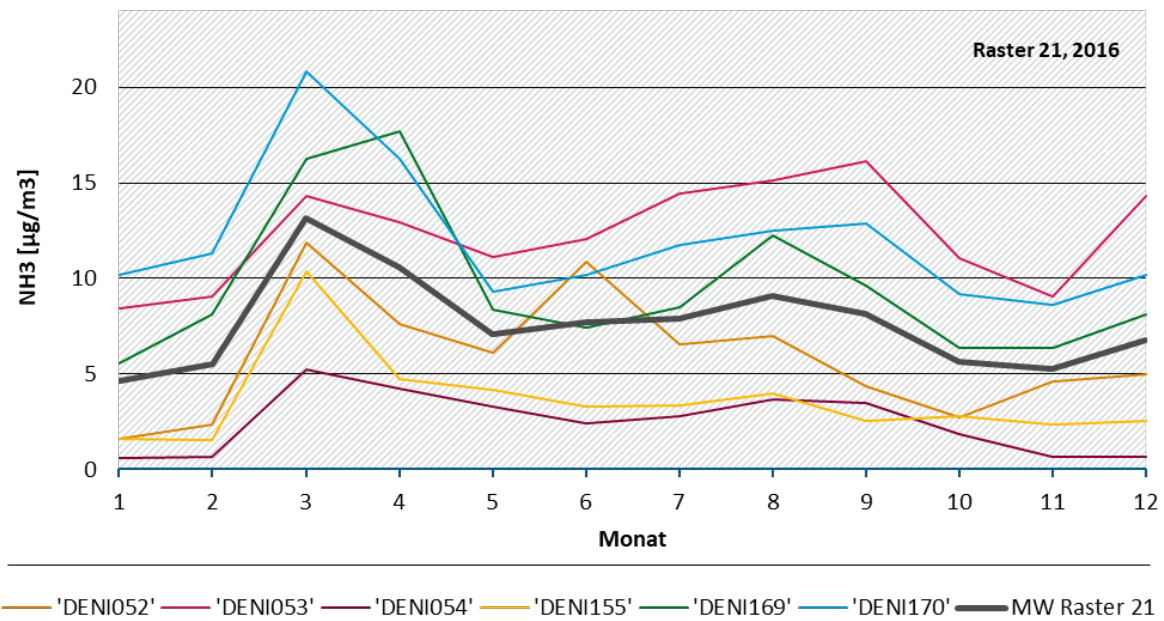
Raster 26 liegt weiter östlich als Raster 21, dort wird es im Frühling etwas später warm und entsprechend liegen die optimalen Düngetermine in Raster 26 für beide betrachteten Jahre tendenziell etwas später als in Raster 21.

In Abbildung 69 bis Abbildung 72 sind für die betrachteten Jahre 2016 und 2017 und Raster 21 und 26 Monatsmittelwerte gemessener NH_3 -Konzentrationen dargestellt, und zwar jeweils für alle in den Rastern gelegenen Messstationen sowie für die Rastermittelwerte (graue fett gedruckte Linien).

Diese Abbildungen zeigen:

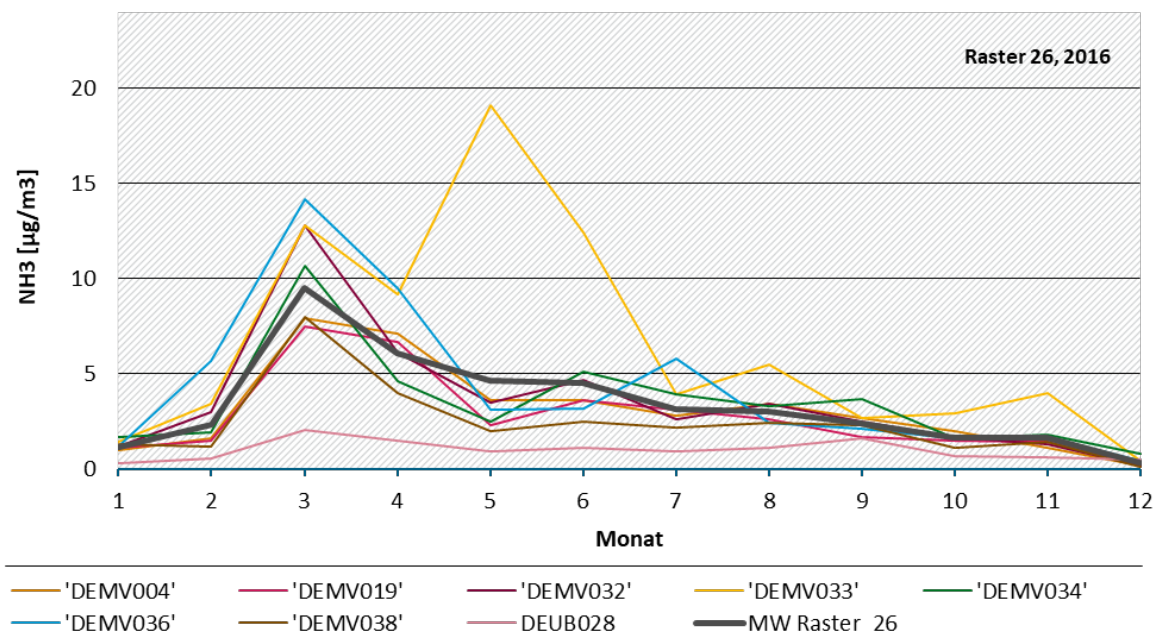
- ▶ Hohe Variabilität der Jahresgänge der Stationen innerhalb eines Rasters, trotz ähnlicher Temperaturverläufe und Zusammensetzung von NFR-Sektoren; dies bestätigt die Notwendigkeit einer Mittelung für die spätere Evaluierung der Modellrechnung
- ▶ Raster 21: Frühjahrsmaximum liegt im Jahr 2017 ca. 1 Monat später als im Jahr 2016, dies wäre nach Tabelle 18 nicht zu erwarten gewesen.
- ▶ Jahr 2017: Das Frühjahrsmaximum liegt in Raster 21 (NI) später als in Raster 26 (MV), nach Tabelle 18 wäre dies umgekehrt erwartet worden: Einerseits wird es im Frühling in NI eher warm als in MV, und andererseits trägt in NI die Düngung mit Gülle anteilmäßig stärker zu den Landwirtschaftsemissionen bei als in MV, wo mehr Mineraldünger zum Einsatz kommt.

Abbildung 69: Monatsmittelwerte 2016 gemessener NH₃-Konzentrationen an den Messstationen in Raster 21 sowie Mittelwerte (MW) für Raster 21



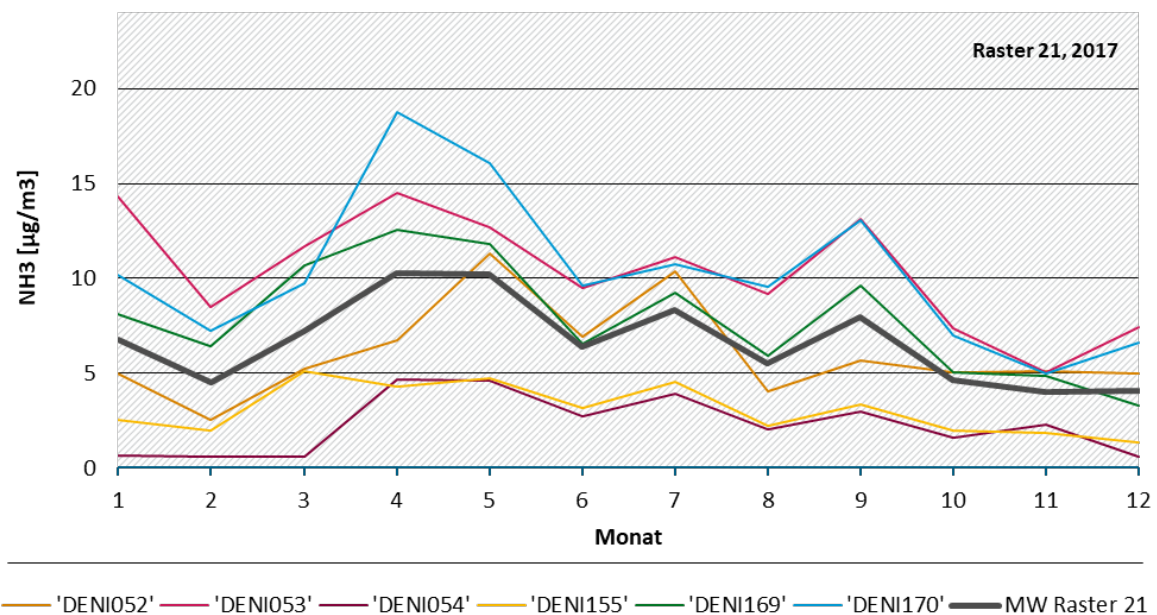
Datenquelle: UBA

Abbildung 70: Monatsmittelwerte 2016 gemessener NH₃-Konzentrationen an den Messstationen in Raster 26 sowie Mittelwerte (MW) für Raster 26



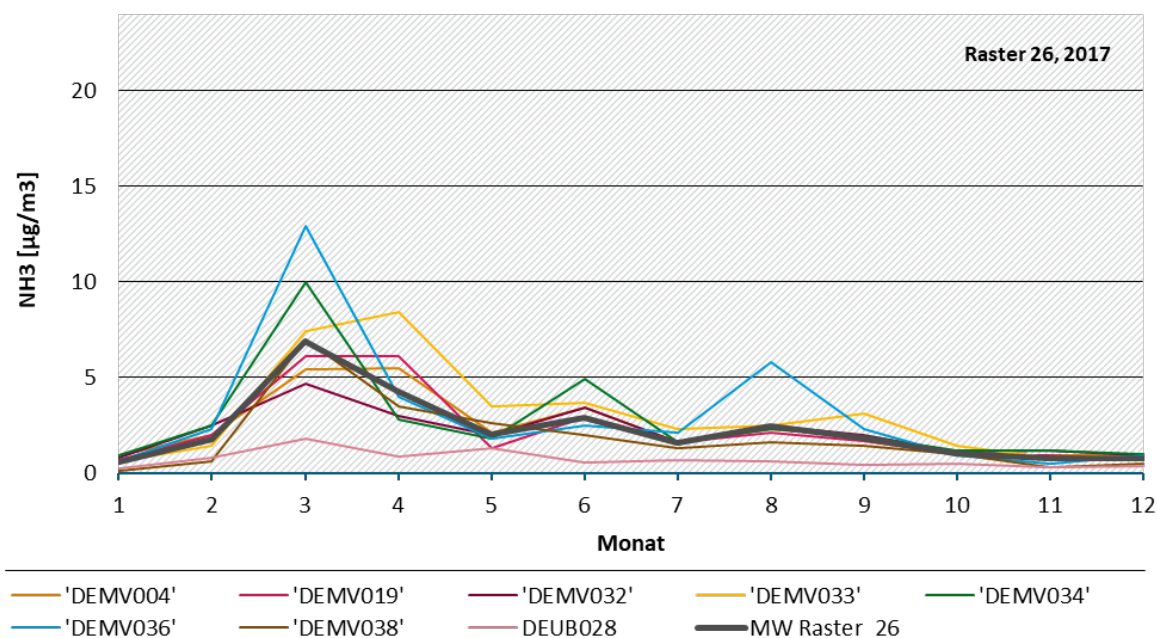
Datenquelle: UBA

Abbildung 71: Monatsmittelwerte 2017 gemessener NH₃-Konzentrationen an den Messstationen in Raster 21 sowie Mittelwerte (MW) für Raster 21



Datenquelle: UBA

Abbildung 72: Monatsmittelwerte 2017 gemessener NH₃-Konzentrationen an den Messstationen in Raster 26 sowie Mittelwerte (MW) für Raster 26



Datenquelle: UBA

In Abbildung 73 und Abbildung 74 sind für die Jahre 2016 und 2017 jeweils die Monatsmittelwerte der gemessenen NH₃-Konzentrationen für die Raster 21 und 26 im Vergleich mit den entsprechenden monatlichen SF für die Landwirtschaft nach Backes 2014 (inklusive der in diesem Abschnitt nicht betrachteten Landwirtschaftsemissionen aus der Tierhaltung etc.) für diese Raster sowie dem entsprechenden Default SF aus RCG dargestellt.

Abbildung 73: Monatsmittelwerte 2016 der gemessenen NH_3 -Konzentrationen für Raster 21 und 26 im Vergleich mit den monatlichen SF für die Landwirtschaft nach Backes 2014 für diese Raster sowie dem entsprechenden Default SF aus RCG

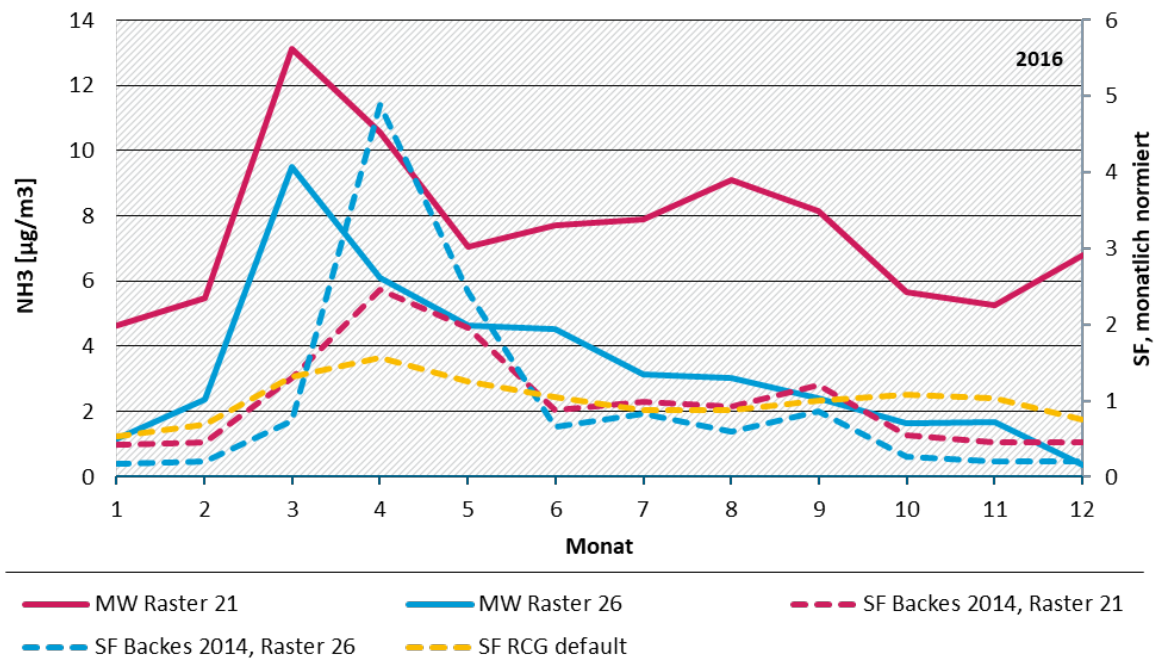
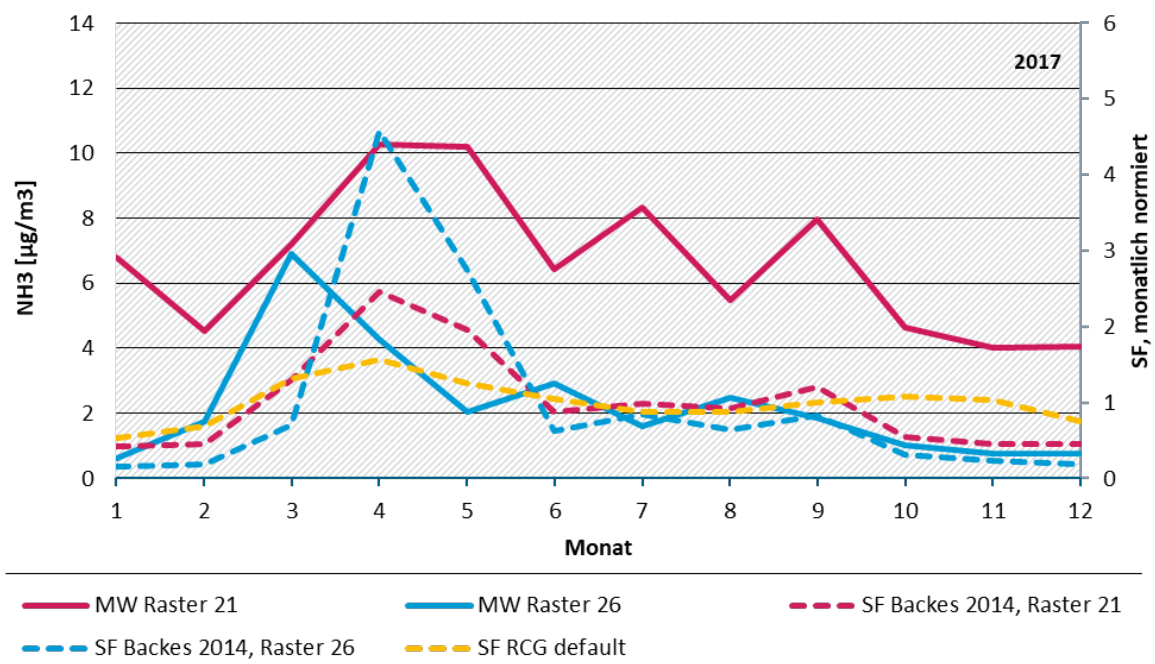


Abbildung 74: Monatsmittelwerte 2017 der gemessenen NH_3 -Konzentrationen für Raster 21 und 26 im Vergleich mit den monatlichen SF für die Landwirtschaft nach Backes 2014 für diese Raster sowie dem entsprechenden Default SF aus RCG



Der Vergleich der Lage der Frühjahrsmaxima der Splitting-Faktoren mit denen der gemessenen Konzentrationen zeigt:

- Jahr 2016: gemessene Maxima in Raster 21 und 26 früher als in SF nach Backes 2014

- Jahr 2017: gemessenes Maximum in Raster 21 etwas später, in Raster 26 früher als in SF nach Backes 2014

Tendenziell liegen die Frühjahrsmaxima der SF etwas zu spät, eine Ausnahme stellt Raster 21 im Jahr 2017 dar. Das kann, wie oben beschrieben, auch an weiteren nicht durch die Temperatur berücksichtigten Einflüssen liegen. Für die Evaluierung werden die Parameter aus Tabelle 12 und Tabelle 13 daher angepasst, um die Maxima zeitlich vorzuziehen.

Für die Emissionen aus der Düngung mit Gülle wurde die Verteilung auf die vier Güllegaben zugunsten der ersten Güllegabe verschoben, die jeweiligen Anteile sind in Tabelle 19 ausgewiesen.

Tabelle 19: Anpassung der Aufteilung der Emissionen aus der Düngung mit Gülle auf die vier Termine nach Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005)

| Anteil Güllegabe | Backes (2014) | angepasst |
|------------------|---------------|-----------|
| 1 | 23% | 50% |
| 2 | 57% | 30% |
| 3 | 5% | 5% |
| 4 | 15% | 15% |

Der Zeitverlauf in Raster 26 ist durch die Emissionen aus der Düngung mit Mineraldünger dominiert. Für diese gibt es nur zwei Funktionen nach Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005), und das Maximum der früheren Kurve liegt später als das Maximum der NH₃-Messungen in Raster 26. Für die Mineraldünger-Gaben wurde daher nicht die Gewichtung der Kurven angepasst, sondern der Wert für die kumulierte Temperatur, bei dem der Scheitelpunkt der ersten Glockenkurve liegt, und zwar von 350°C nach Backes (2014) auf 200°C.

In Tabelle 20 ist die gemeinsame Varianz (R²) zwischen den Monatswerten der gemessenen NH₃-Konzentrationen aller Stationen in Raster 21 sowie in Raster 26 jeweils mit den SF (auf Monatsebene) nach Backes (2014), den angepassten SF und den RCG-Default-SF ausgewiesen.

Tabelle 20: Gemeinsame Varianz (Quadrat des Pearsonschen Korrelationskoeffizienten) jeweils der monatlichen SF nach Backes (2014), der angepassten SF und der RCG Default SF für die Landwirtschaft mit den Monatsmittelwerten der gemessenen NH₃-Konzentrationen in Raster 21 und 26

| | 2016 | 2017 |
|----------------------------------|------|------|
| Raster 21: SF nach Backes (2014) | 0,39 | 0,67 |
| Raster 21: SF angepasst | 0,86 | 0,38 |
| Raster 21: SF RCG Default | 0,43 | 0,33 |
| Raster 26: SF nach Backes (2014) | 0,23 | 0,15 |
| Raster 26: SF angepasst | 0,76 | 0,72 |
| Raster 26: SF RCG Default | 0,54 | 0,44 |

Für das Jahr 2016 führt die beschriebene Anpassung der Parameter der Zeitfunktionen für die Düngung in beiden betrachteten Rastern zu deutlich höheren Korrelationen der SF mit den

monatlichen Messwerten: Die gemeinsame Varianz der SF auf Basis der Originalparameter nach Backes (2014) mit den Messwerten im Jahr 2016 ist niedriger als die der RCG Default SF mit den Messwerten. Durch die Anpassung wird sie mehr als verdoppelt.

Für das Jahr 2017 wird durch die Anpassung nur in Raster 26 eine Verbesserung erreicht, jedoch keine Verschlechterung gegenüber den RCG-Default-Faktoren. Dies liegt an dem im Jahr 2017 sehr spät liegenden Frühjahrsmaximum der Messungen, siehe auch Abbildung 74.

Wie oben beschrieben, ist sowohl die Variabilität zwischen unterschiedlichen Jahren wie auch zwischen unterschiedlichen Stationen hoch. Diese Unterschiede können nicht vollständig mit unterschiedlichen Temperaturverläufen und Gewichtungen der zu den Landwirtschaftsemissionen beitragenden NFR-Sektoren erklärt werden. Die hier durchgeführte Anpassung der Parameter auf Basis zweier Jahre und Stationen ist daher nur als schneller Patch zu verstehen. Es wird angeregt, in einem Folgeprojekt weitere Einflüsse und Datenquellen (z.B. Dokumentationen der Landwirte zu Dünger-Ausbringung, oder Daten zu tatsächlich angebauten Kulturen zumindest auf Länder-Ebene) systematischer zu untersuchen.

In TeResE können alle Parameter manuell geändert werden, die Evaluierung wird mit den hier beschriebenen angepassten Parametern durchgeführt.

7.3 Auswahl geeigneter Messstationen für die Evaluierung

Allgemein werden für die Evaluierung Hintergrundstationen aus dem städtischen oder ländlichen Hintergrund herangezogen, weil diese repräsentativ für größere Gebiete sind und daher mit modellierten Werten für Gitterzellen (in Nest 2: Mittelwerte über ein $2 \times 2 \text{ km}^2$ -Raster) vergleichbar sind. Für Stationen an Belastungsschwerpunkten gilt dies nicht.

Bei der hier durchgeführten Evaluierung wurden Messstationen aus dem städtischen Hintergrund, dem landwirtschaftlich geprägten ländlichen Hintergrund sowie aus dem gering belasteten ländlichen Hintergrund betrachtet. Grundsätzlich wird bei der Evaluierung zwischen den Landwirtschaftsstationen (Fokus auf NH_3) und den anderen Stationen (Fokus auf NO_2 , O_3 und $\text{PM}_{2.5}$ bzw. PM_{10}) unterschieden.

Landwirtschaft

Bereits vor der Durchführung der RCG-Rechnungen wurden in Abschnitt 7.2 zur Anpassung der Parameter in den Funktionen zur zeitlichen Verteilung der Landwirtschaftsemissionen Zeitverläufe gemessener NH_3 -Konzentrationen ausgewertet. Diese Untersuchungen ergaben, dass es bei Vergleichen zwischen Modellrechnungen und Messungen in durch landwirtschaftliche Emissionen dominierten Gebieten sinnvoll ist, über größere Gebiete und Zeiträume zu mitteln. Dafür wurden in Abbildung 68 größere Raster definiert. Für die Evaluierung ausgewählt wurden die Raster, in denen jeweils mindestens fünf NH_3 -Messstationen liegen, sie sind in Abbildung 68 rot oder blau umrandet:

- Raster 15 (Stationen DESN095, DESN096, DESN097, DESN098, DESN100, DESN101, NH_3 -Messungen im gering belasteten ländlichen Hintergrund in Sachsen),
- Raster 17 (Stationen DENI038, DENI041, DENI042, DENW313, DEHE050 aus Niedersachsen, Nordrhein-Westfalen und Hessen, mittlere NH_3 -Konzentrationen),
- Raster 21 (Stationen DENI052, DENI053, DENI054, DENI155, DENI169, DENI170 aus Niedersachsen, hohe NH_3 -Konzentrationen),

- ▶ Raster 22 (Stationen DEUB005, DEUB030, DENI020, DENI060, DEMV017, DEMV024, DEMV035 aus Niedersachsen, Mecklenburg-Vorpommern und dem UBA-Messnetz, niedrige bis hohe NH_3 -Konzentrationen),
- ▶ Raster 26 (Stationen DEMV004, DEMV019, DEMV032, DEMV033, DEMV034, DEMV036, DEMV038, DEUB029 aus Mecklenburg-Vorpommern und dem UBA-Messnetz, mittlere bis hohe NH_3 -Konzentrationen).

Die Evaluierung der landwirtschaftlichen NH_3 -SF wird für diese Raster anhand von Monatsmittelwerten über jeweils alle Stationen pro Raster durchgeführt.

Städtischer Hintergrund

Für die Evaluierung im städtischen Hintergrund wurden fünf Stationen ausgewählt:

- ▶ Berlin-Neukölln (DEBE034): Einzeln liegende große Großstadt (3,6 Mio. Einwohner)
- ▶ Mülheim-Styrum (DENW038): Ruhrgebiet: Ballungsraum mit viel Industrie
- ▶ Lingen im Emsland (DENI043): Mittelstadt (58.000 Einwohner), hohe Landwirtschaftsemissionen im Umland
- ▶ Freiburg im Breisgau (DEBW084): Großstadt (230.000 Einwohner), hoher Anteil Holzfeuerung an Gebäudeheizung
- ▶ Augsburg LfU (DEBY099): Großstadt (fast 300.000 Einwohner) im Südosten Deutschlands, nicht in Grenznähe

Gering belasteter ländlicher Hintergrund

Für die Evaluierung wurden drei Stationen aus dem gering belasteten ländlichen Hintergrund ausgewählt, alle drei gehören zum Messnetz des UBA. Es handelt sich um die Stationen

- ▶ Waldhof (DEUB004),
- ▶ Schauinsland (DEUB005),
- ▶ Schmücke (DEUB029).

Die Station auf dem Schauinsland liegt zwar zwischenzeitlich oberhalb der atmosphärischen Grenzschicht und ist damit zeitweise nur wenig von Emissionen in Deutschland geprägt. Allerdings werden dort im Sommer teilweise sehr hohe Ozonwerte gemessen. Hier bietet sich also die Möglichkeit, das Verhältnis der Vorläuferemissionen für Ozon, im Wesentlichen VOC und Stickstoffoxide, zu evaluieren.

An allen ausgewählten Stationen liegen für 2016 und 2017 stündliche Messwerte der Luftschadstoffe NO_2 , O_3 und $\text{PM}_{2.5}$ bzw. PM_{10} ohne größere Datenlücken vor. Für diese Stoffe werden bei der Evaluierung verschiedene zeitliche Skalen (saisonal, Wochen- und Tagesgänge) betrachtet.

7.4 Kartendarstellungen Jahresmittelwerte 2016

Abbildung 75, Abbildung 77, Abbildung 79 und Abbildung 81 zeigen Karten mit den Jahresmittelwerten (JMW) für NO_2 , O_3 , PM_{10} und NH_3 aus der RCG-Modellrechnung mit

statischen SF (Default). Weiße Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren dieser Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen JMW.

Die in den Karten sichtbare räumliche Verteilung der Schadstoff-Konzentrationen entspricht für alle Stoffe der Erwartung: Die NO_2 -Konzentration ist in Ballungsräumen, Großstädten und entlang von Verkehrsachsen wie dem Nord-Ostseekanal, dem Rhein und den Autobahnen erhöht, insbesondere das Rhein-/Ruhrgebiet tritt deutlich hervor (Abbildung 75). Etwas abgeschwächt gilt dies auch für PM_{10} (Abbildung 79). Für O_3 ist das Muster umgekehrt, hier sind die Konzentrationen in Gebieten mit hohen NO_x -Emissionen gegenüber dem Hintergrund erniedrigt (Abbildung 77).

Für die meisten der betrachteten Messstationen zeigt der Vergleich der gemessenen JMW mit der RCG-Modellrechnung eine gute Übereinstimmung. Im Rahmen der Auflösung der Farbskala sichtbare Abweichungen gibt es bei NO_2 für die Station Emsland (hier unterschätzt das Modell die Messung) und bei O_3 für die Stationen Waldhof und Schmücke (hier überschätzt das Modell die Messungen). Eine mögliche Erklärung für den höheren NO_2 -Messwert an der Station Emsland (städtischer Hintergrund) ist, dass dieser Wert von den Emissionen der Ortsumgebung oder der naheliegenden A31 teilweise beeinflusst ist. Die Autobahn ist in der Karte als dünne Linie mit erhöhten NO_2 -Konzentrationen erkennbar, in der Auflösung $2 \text{ km} \times 2 \text{ km}$ tritt sie jedoch nur schwach gegenüber dem Hintergrund hervor.

In Abbildung 81 sind alle NH_3 -Messstationen, die in die Evaluierung eingehen, einzeln dargestellt. Es ist gut zu erkennen, dass die Werte aufgrund der starken Beeinflussung durch lokale Emissionen stark streuen. Wie oben beschrieben werden sie daher für die weitere Evaluierung gemittelt.

Abbildung 76, Abbildung 78, Abbildung 80 und Abbildung 82 zeigen jeweils die relativen Differenzen der JMW der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF.

Obwohl sich die Gesamtsumme der Emissionen im Jahr nicht ändert, führt die aufgrund der dynamischen SF geänderte zeitliche Verteilung auch bei den jahresmittleren Konzentrationen zu Änderungen. Diese liegen bei NO_2 zwischen -23% und +6%, bei O_3 zwischen -3% und +17%, bei PM_{10} sind sie am geringsten und liegen zwischen -2,6% und +3,7%, und bei NH_3 liegen sie zwischen -36% und +16%.

Die Differenzkarte für NO_2 (Abbildung 76) zeigt tendenziell flächige Abnahmen für den NO_2 -JMW in landwirtschaftlich geprägten Gebieten mit geringen absoluten Emissionen sowie an einigen einzeln liegenden Gitterzellen (s.u. bei Ozon), und Zunahmen entlang der Autobahnen und des Rheins.

Die Ozonbildung liegt für die betrachtete Modellauflösung im Stickoxid-limitierten Bereich, d.h. abnehmende NO_2 -Konzentrationen führen zu zunehmenden O_3 -Konzentrationen und umgekehrt (Abbildung 78).

In fast allen Gitterboxen mit den stärksten NO_2 -Abnahmen bzw. O_3 -Zunahmen liegen Flughäfen: Düsseldorf, Köln/Bonn, Berlin-Tegel und München. Dazu kommen zwei Kraftwerke im Süden von München sowie eine landwirtschaftlich geprägte Fläche im Süden Hamburgs.

Bei Flughäfen und Kraftwerken, die in höhere Luftschichten emittieren, ist es plausibel, dass der Beitrag der Emissionen zur Luftbelastung besonders stark von den zum Zeitpunkt der Freisetzung der Emissionen herrschenden meteorologischen Bedingungen abhängt. Dies ist eine mögliche Erklärung für die großen Differenzen im Nahbereich der Flughäfen bzw. Punktquellen.

Bei NO_2 und O_3 ändert sich zudem im Jahresverlauf das photochemische Regime: Photolysefrequenzen, O_3 aus dem großräumigen Transport und auch O_3 -Vorläufersubstanzen

wie z.B. biogene NMVOC haben einen starken Jahresgang. Die Ozonkonzentration zum Zeitpunkt der Freisetzung der Stickstoffoxid-Emissionen beeinflusst die Lage des Gleichgewichts zwischen NO und NO₂ und damit das NO₂-Niveau.

Bei PM₁₀ sind die Differenzen der modellierten JMW geringer als bei den anderen betrachteten Luftschadstoffen. Tendenziell führen die dynamischen SF zu Zunahmen in den Ballungsräumen und zu Abnahmen in ländlich geprägten Gebieten.

Bei den NH₃-Emissionen hat sich der Jahresgang aufgrund der dynamischen SF stärker als für die anderen Luftschadstoffe verändert, weil sie zu 95% von einer einzelnen Quellgruppe, der Landwirtschaft, emittiert werden und sich die SF für die Landwirtschaft am stärksten geändert haben. Das führt zu den in Abbildung 82 sichtbaren großflächigen Veränderungen der modellierten jahresmittleren NH₃-Konzentrationen.

Die landwirtschaftlich geprägte Fläche im Süden Hamburgs, die in den Differenzplots für NO₂ und O₃ auffiel, ist im Differenzplot für NH₃ unauffällig, allerdings ist dort der NH₃-JMW mit 21 µg/m³ sehr hoch. Bei der Verteilung der NH₃-Emissionen auf Kreisebene entfallen auf Hamburg die zweitmeisten Emissionen in Deutschland. Da die landwirtschaftlich genutzten Flächen in Hamburg sich auf die genannte Fläche im Süden beschränken, werden die auf Kreisebene Hamburg zugeordneten Landwirtschaftsemissionen auf diese kleine Fläche verteilt, was zu einer sehr hohen Emissionsdichte führt. Es wird daher angeregt, die räumliche Verteilung zu prüfen.

Abbildung 75: 2016 NO₂: JMW-RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default); die weißen Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren der Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen JMW

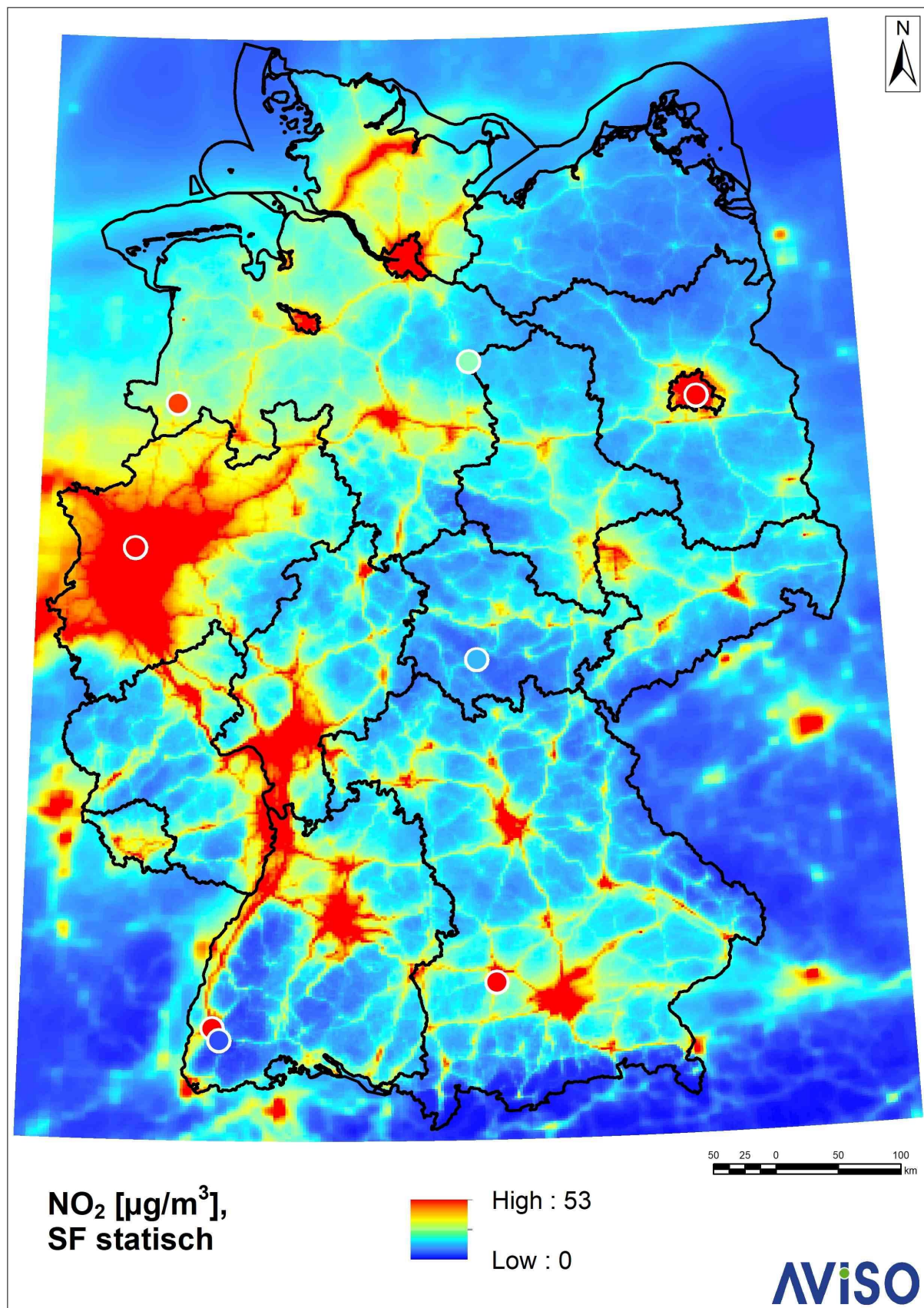


Abbildung 76: 2016 NO₂: Relative Differenz der Jahresmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF

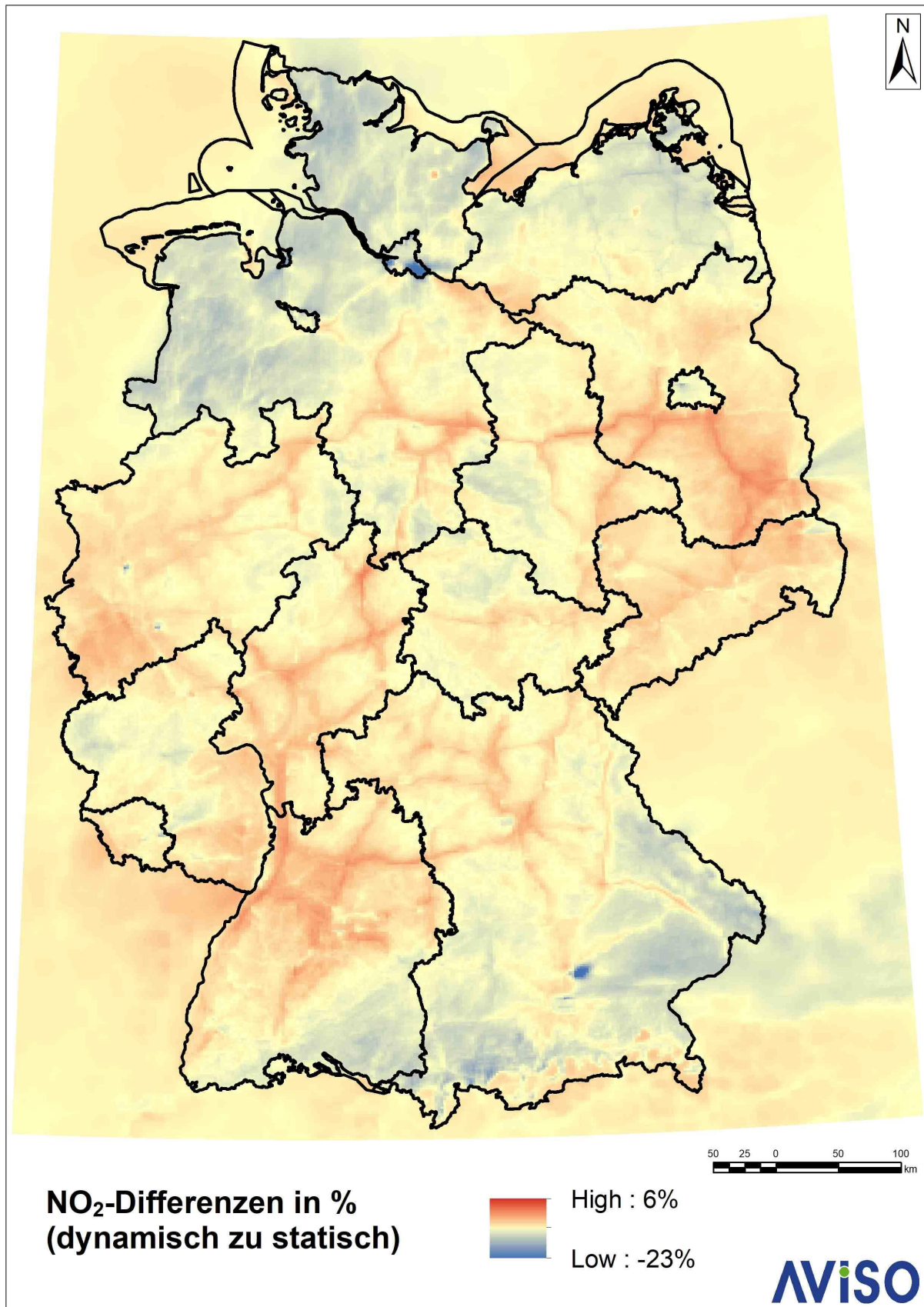


Abbildung 77: 2016 O₃: JMW-RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default); die weißen Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren der Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen JMW

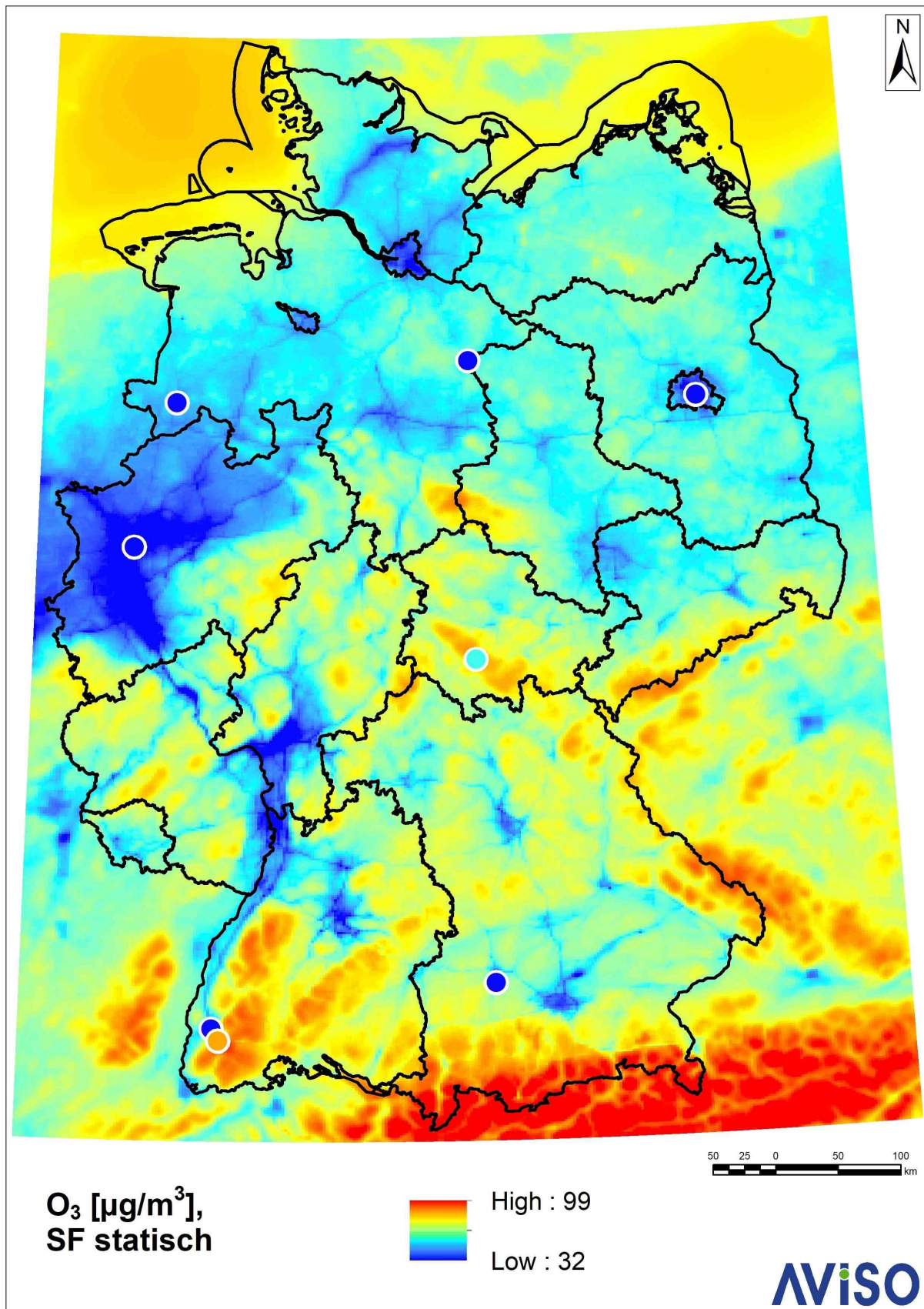


Abbildung 78 2016 O₃: Relative Differenz der Jahresmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF

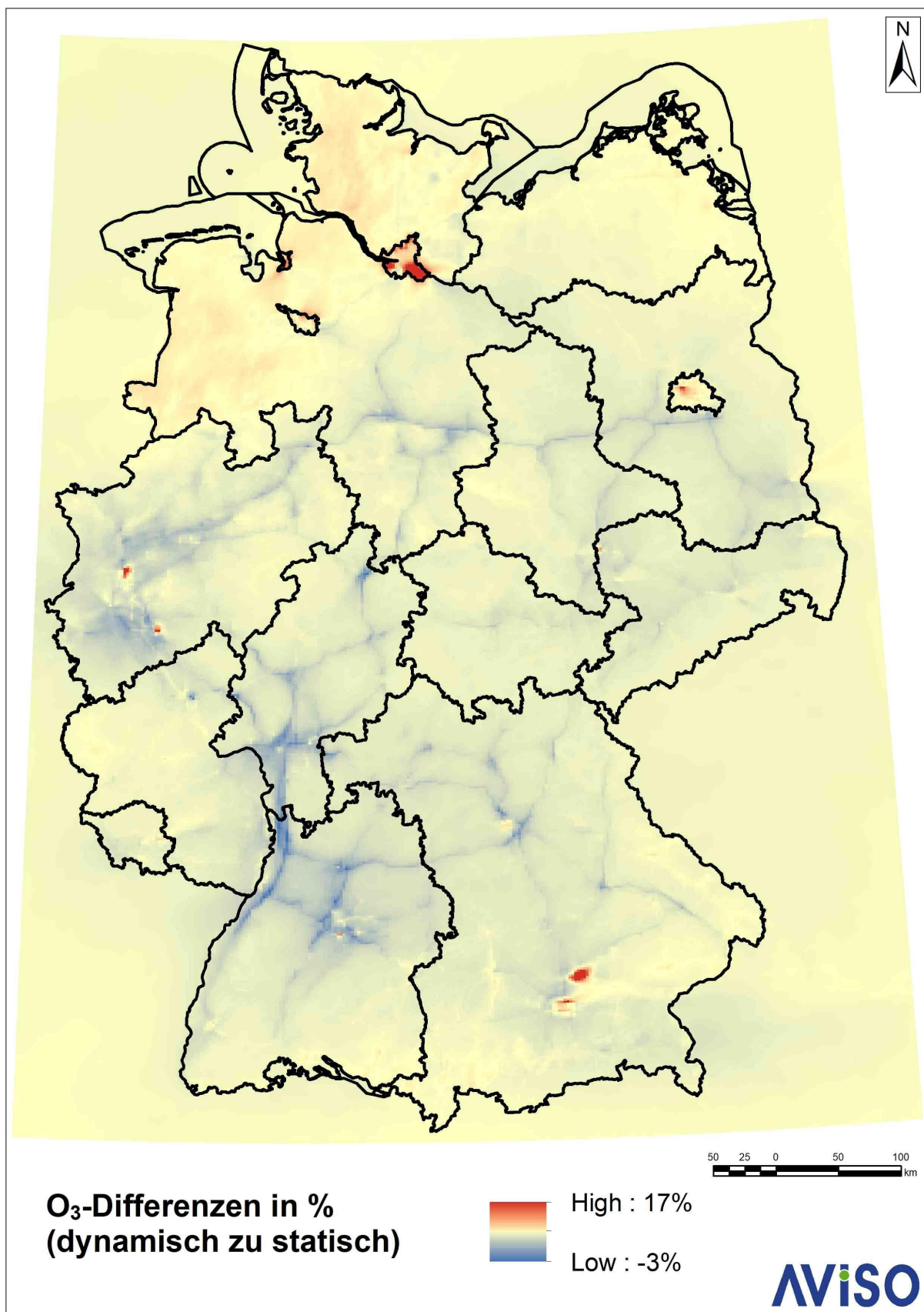


Abbildung 79: 2016 PM₁₀: JMW-RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default); die weißen Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren der Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen JMW

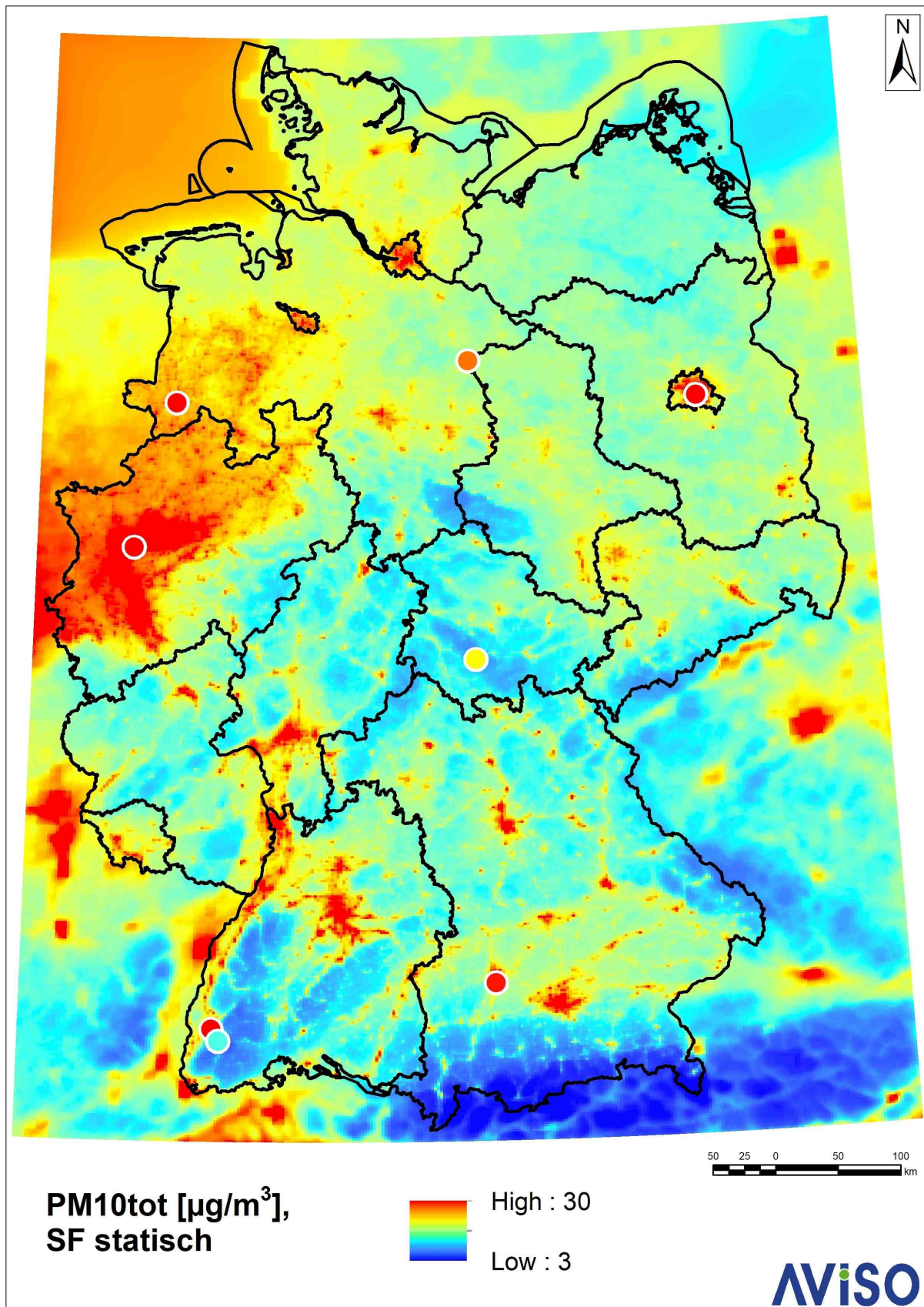


Abbildung 80: 2016 PM₁₀: Relative Differenz der Jahresmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF

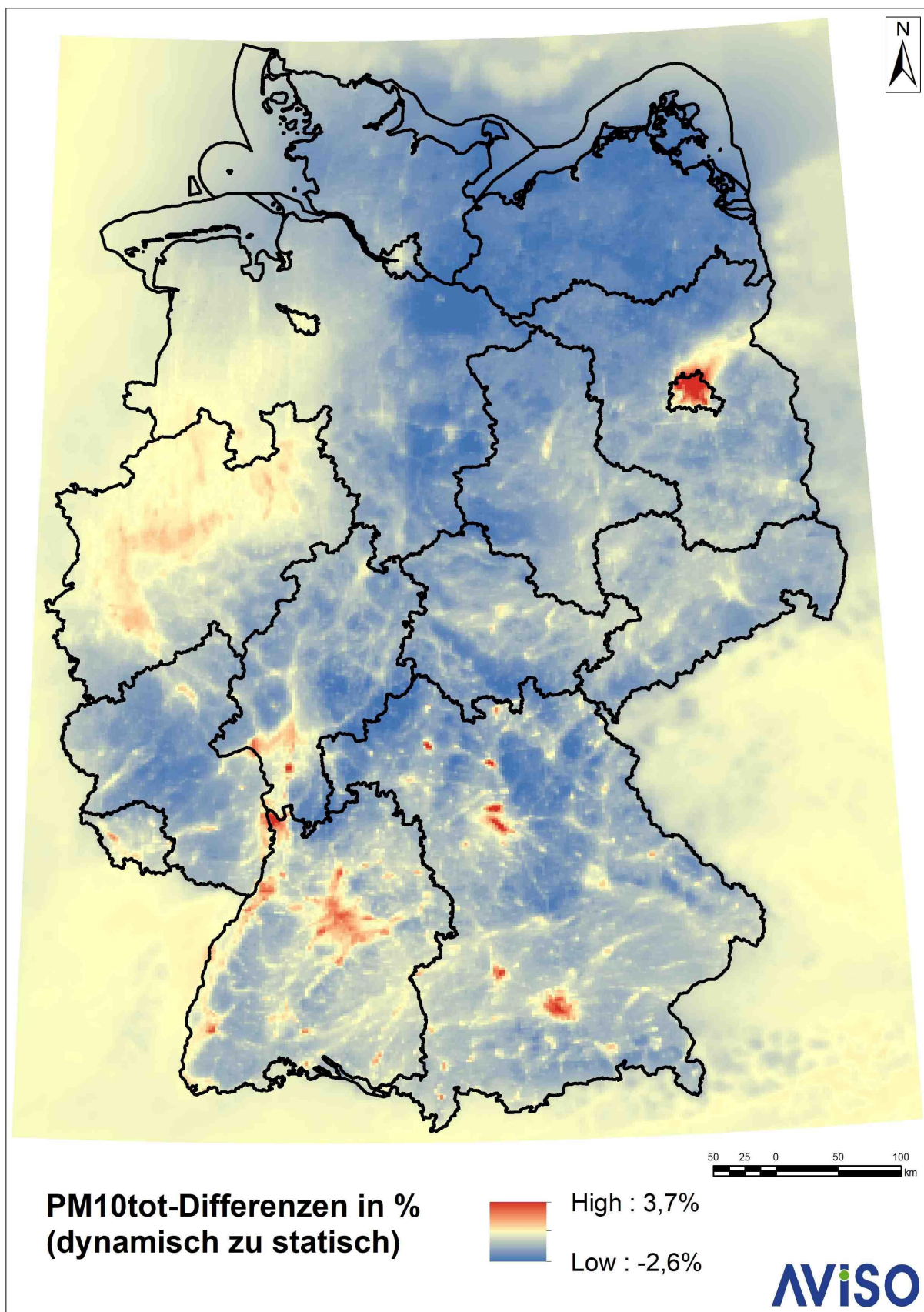


Abbildung 81: 2016 NH₃: JMW-RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default); die weißen Kreise markieren die Orte der betrachteten Messstationen, der Farbwert im Inneren der Kreise entspricht jeweils dem dort gemessenen JMW

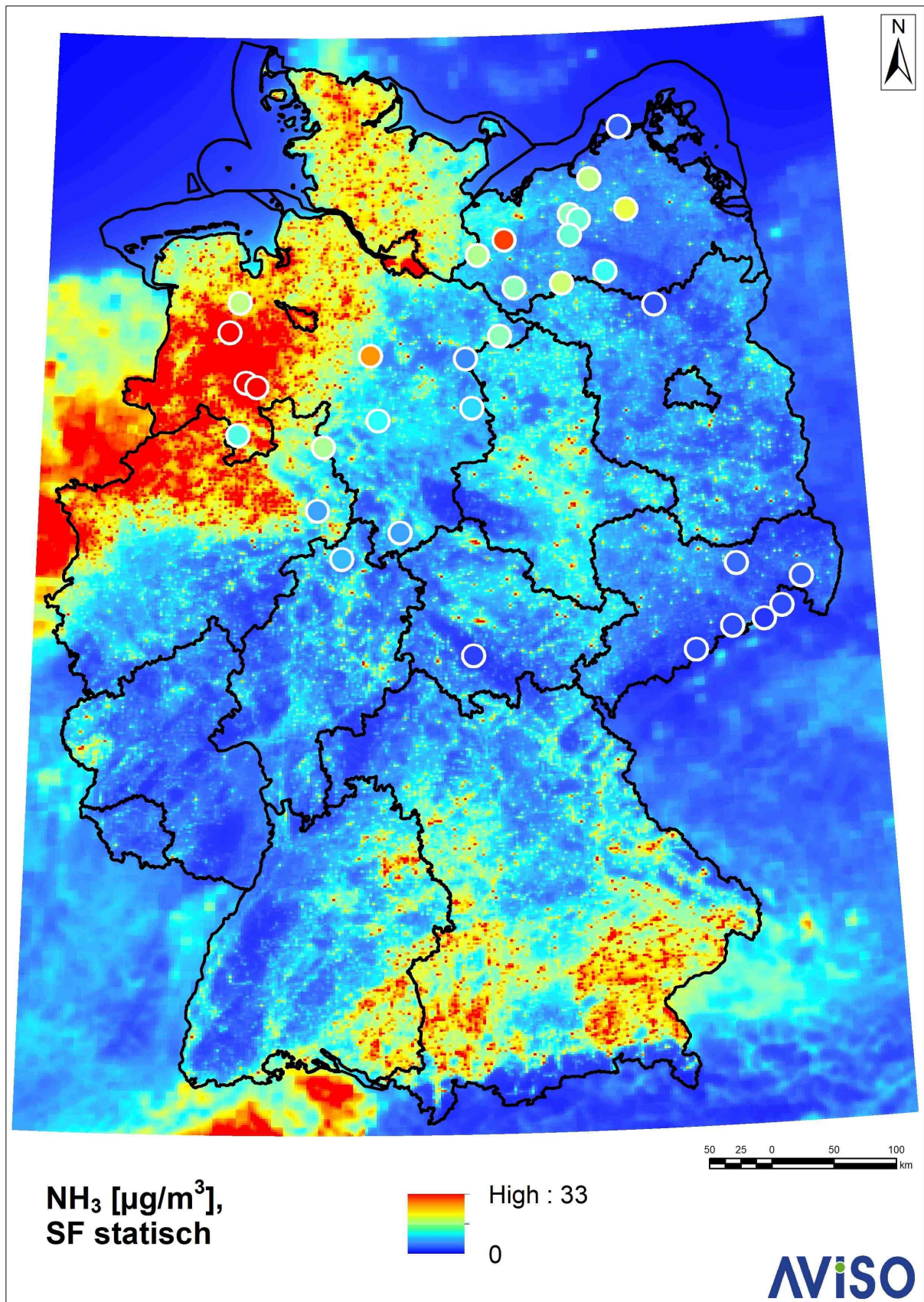
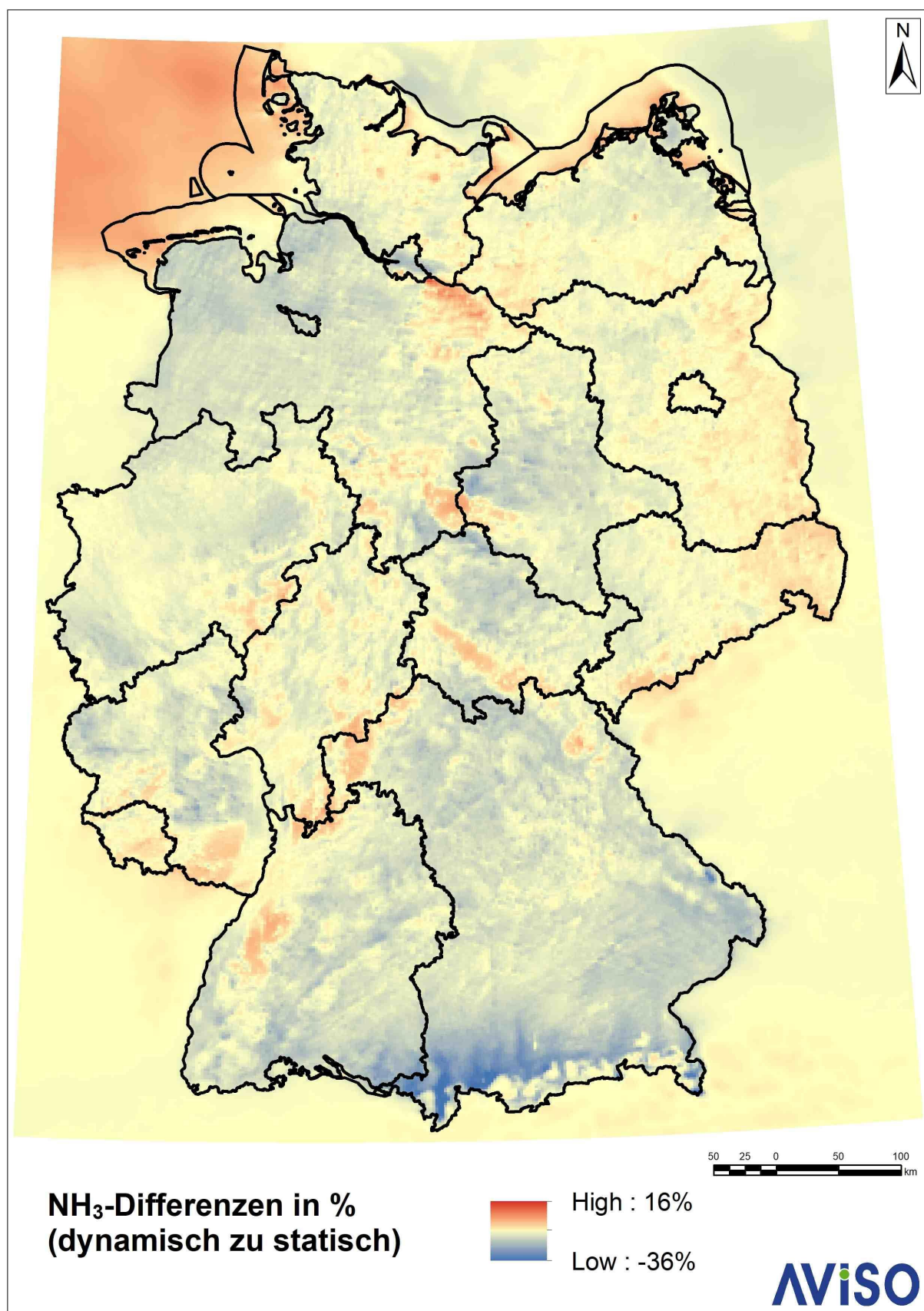


Abbildung 82 2016 NH₃: Relative Differenz der Jahresmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF



7.5 Kartendarstellungen Monatsmittelwerte 2016

Analog zu den Karten für die JMW im vorherigen Abschnitt werden im folgenden Abschnitt für alle betrachteten Schadstoffe modellierte Monatsmittelwertkonzentrationen 2016 der RCG-Rechnung mit statischen und mit dynamischen SF verglichen. Um den Monatsgang zu visualisieren, werden jeweils zwölf kleine Karten mit Monatsmittelwerten für alle Monate des Jahres auf einer Seite zusammengestellt, gefolgt von entsprechenden relativen Differenzplots. Kartendarstellungen mit absoluten Differenzen befinden sich in Anhang E.

Bei den jahresmittleren Konzentrationen ergaben sich trotz unveränderter jährlicher Emissionen Differenzen zwischen den beiden Modellrechnungen durch Wechselwirkungen zwischen Emissionen, Meteorologie und großräumigem Transport.

Bei der Betrachtung von Monatswerten kommt hinzu, dass sich die Monatssummen der Emissionen zwischen den beiden Modellrechnungen zum Teil deutlich ändern. Insbesondere für die Quellgruppe Landwirtschaft gab es Änderungen des Jahresgangs durch die Einführung der dynamischen SF. Dies führt verglichen mit den JMW zu entsprechend stärkeren Änderungen der modellierten monatsmittleren Konzentrationen.

Für **NO₂** sind die Karten mit Monatsmittelwerten in Abbildung 83 aus der statischen RCG-Modellrechnung 2016 dargestellt. Plots der relativen Differenzen der Monatsmittelwerte aus der RCG Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF befinden sich in Abbildung 84.

Die deutlichste Änderung durch die dynamischen SF sind starke Zunahmen der monatsmittleren NO₂-Konzentration im März (maximal Faktor 2,1, bzw. 39 µg/m³), im April gibt es geringere Zunahmen und in allen anderen Monaten Abnahmen, die stärksten in Norddeutschland im September.

Abbildung 83: 2016 NO₂: Monatsmittelwerte RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default)

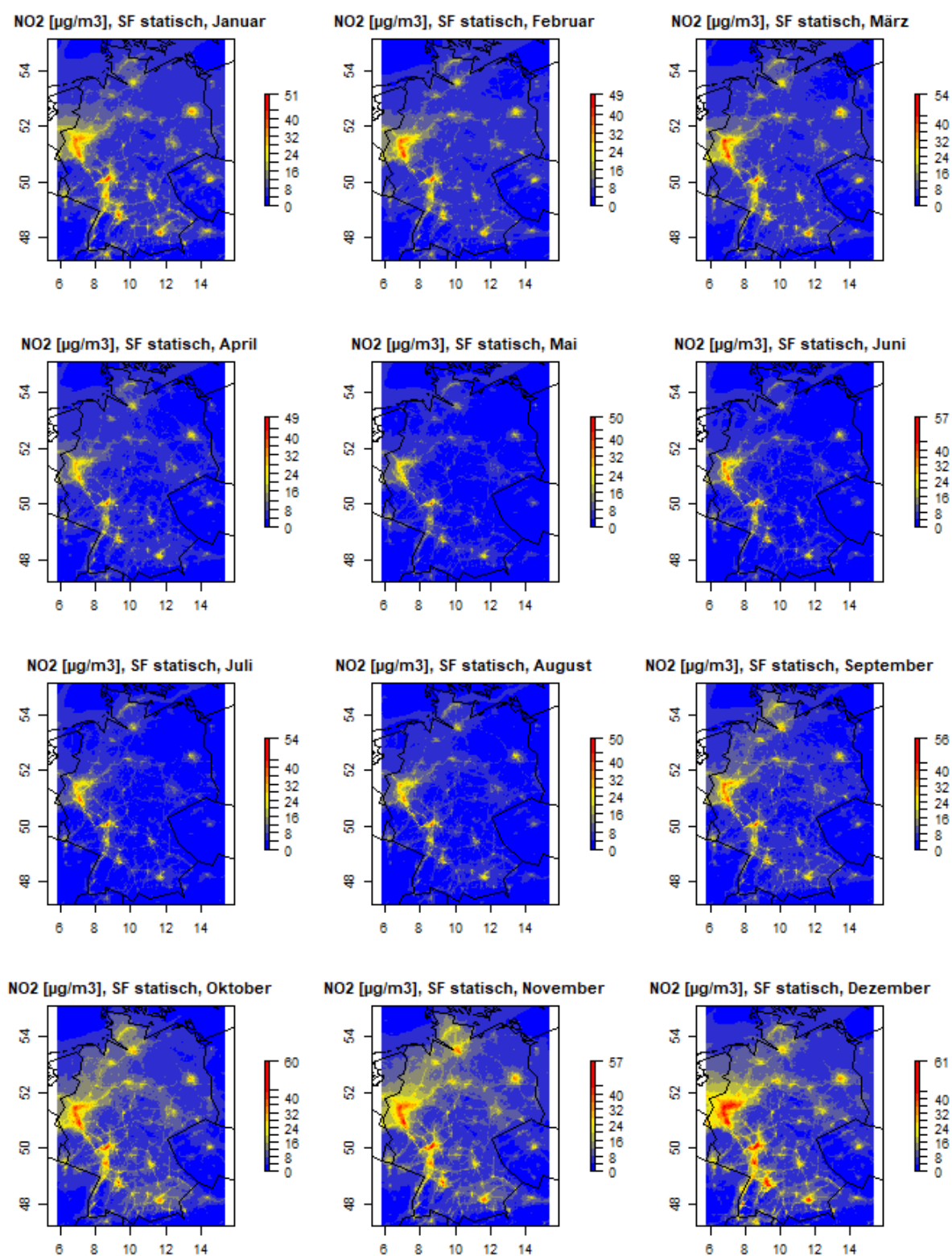
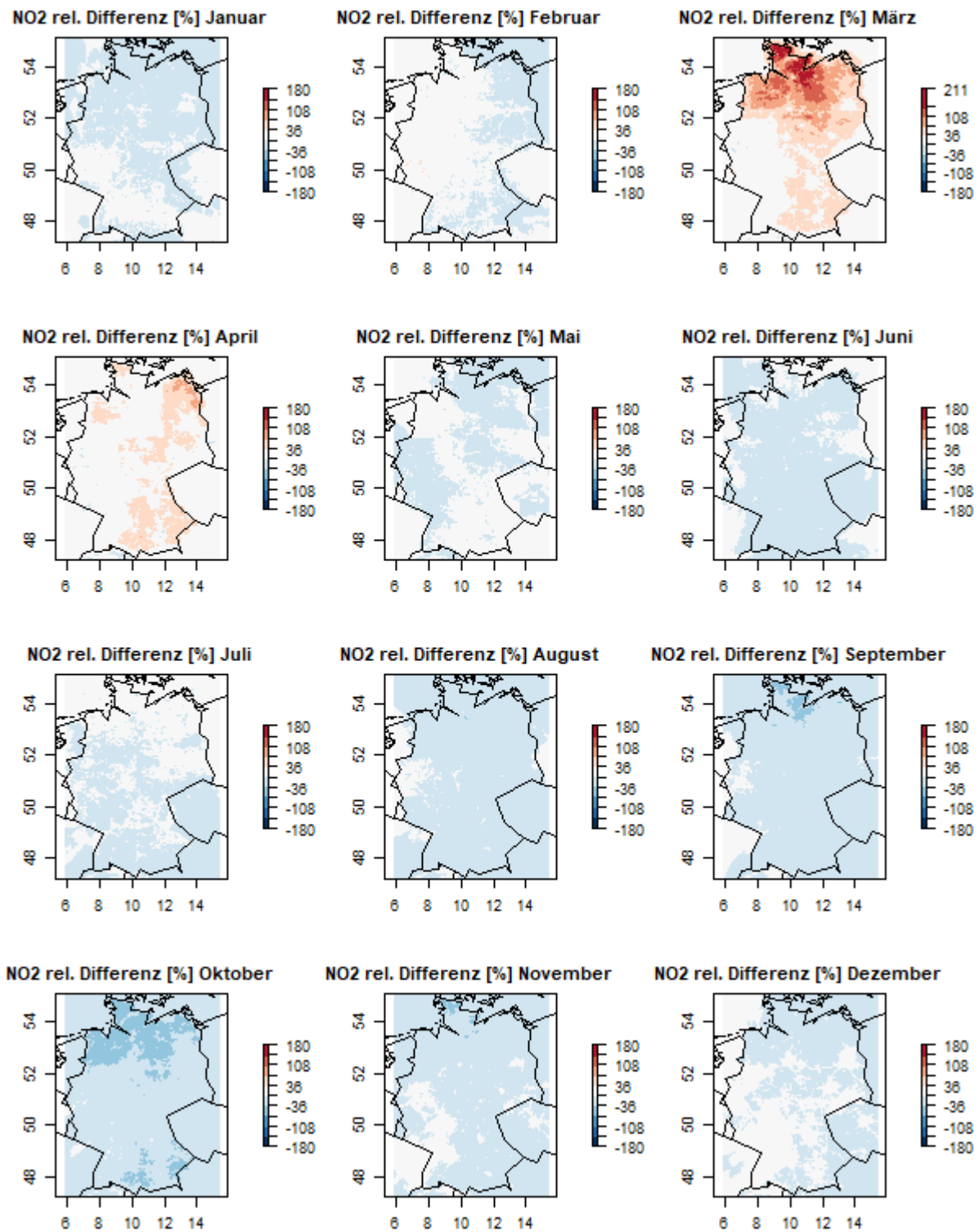


Abbildung 84: 2016 NO₂: Relative Differenz der Monatsmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF



Diese Zunahmen im März, und etwas schwächer ausgeprägt im April, sind auf die zeitliche Verteilung der Landwirtschaftsemissionen zurückzuführen:

- ▶ Deutschlandweit trug die Landwirtschaft 2016 zu ca. 10% zu den NO_x -Emissionen bei (bei der Mineraldüngung wird neben NH_3 auch NO emittiert), in dünn besiedelten ländlichen Gebieten mit wenig Verkehr und Industrie ist sie jedoch häufig die dominierende Quellgruppe.
- ▶ Entsprechend sind in Abbildung 84 in den Ballungsräumen und am Rhein sowie am Nord-Ostseekanal nur geringe Änderungen erkennbar, in landwirtschaftlich geprägten Gebieten jedoch deutliche Änderungen.
- ▶ Durch die dynamischen SF wird das Frühjahrsmaximum der düngerebedingten Emissionen zeitlich geschärft und aus dem April in den März (in warmen Klimaregionen teilweise auch in den Februar) verschoben.
- ▶ In der Landwirtschaft werden die Stickstoffoxid-Emissionen in Form von NO emittiert. Für den NO_2 -JMW (Abbildung 76) führt ein zeitlich früheres Frühjahrsmaximum der NO -Emissionen zu Abnahmen: Im März sind die Ozonkonzentrationen im Hintergrund geringer als im April, so dass bei früheren Emissionen ein kleinerer Anteil zu NO_2 reagiert.

Eine absolute Zunahme der monatsmittleren NO_2 -Konzentration im März um $39\mu\text{g}/\text{m}^3$ in der Gitterzelle im Süden Hamburgs (siehe absolute Differenzplots in Anhang E) erscheint dennoch sehr hoch. Eine mögliche Erklärung dafür ist, dass hier bereits die jährliche Emissionssumme zu hoch ist. Dies passt zum sehr hohen NH_3 -Jahresmittelwert in dieser Gitterzelle, siehe Ende des vorherigen Abschnitts.

Bei O_3 (statische Monatsplots in Abbildung 85, relative Differenzplots in Abbildung 86) ergeben sich (wie beim JMW) Veränderungen in umgekehrter Richtung wie bei NO_2 . Die größten Abnahmen treten im März auf, das Maximum liegt bei -57% bzw. $-31\mu\text{g}/\text{m}^3$, die größten Zunahmen im Oktober. Diese Änderungen liegen auch hier wieder in der Gitterzelle im Süden Hamburgs.

Abbildung 85: 2016 O₃: Monatsmittelwerte RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default)

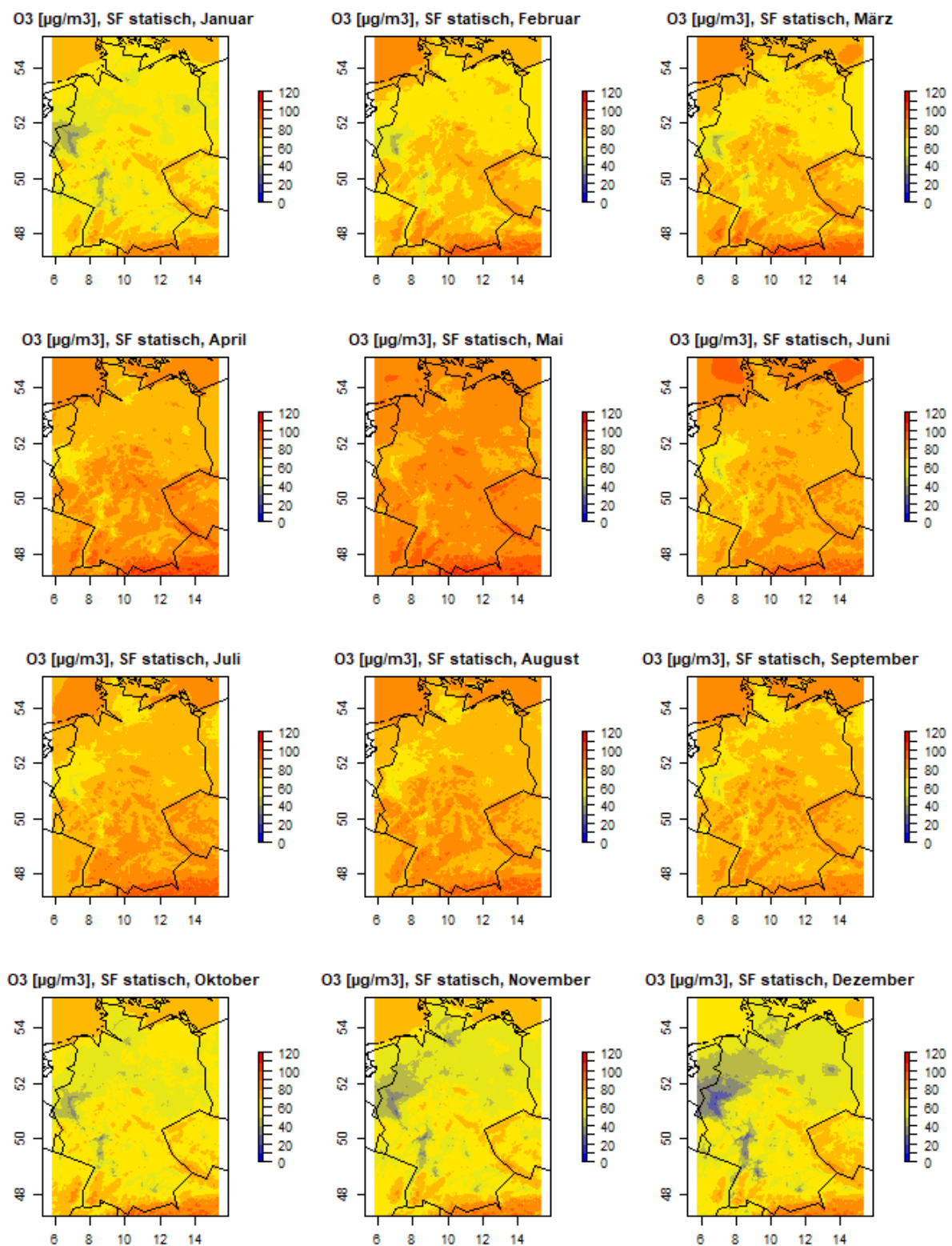
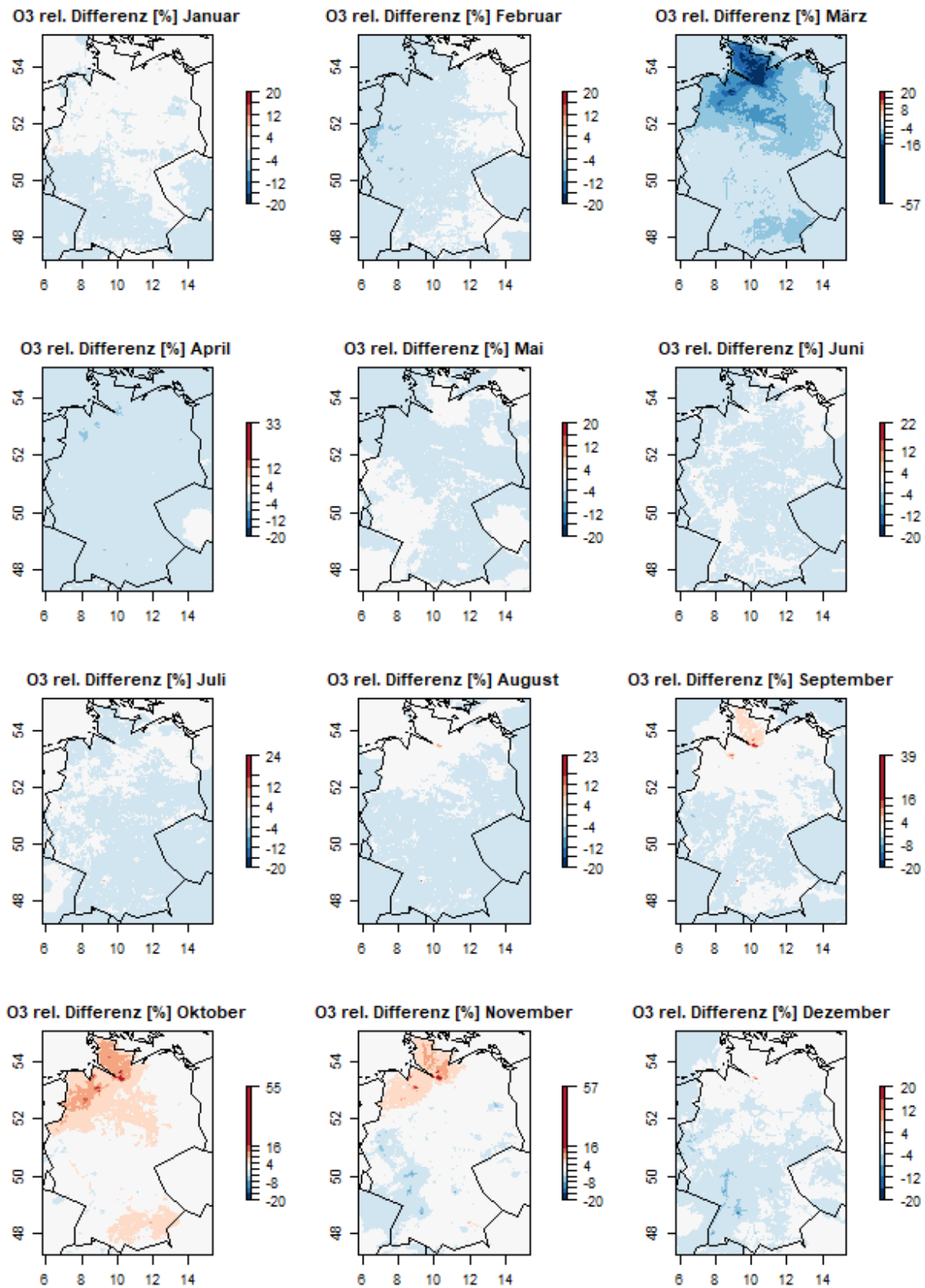


Abbildung 86: 2016 O₃: Relative Differenz der Monatsmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF



Bei **PM₁₀** (statische Monatsplots in Abbildung 87, relative Differenzplots in Abbildung 88) treten die größten Änderungen im Januar auf, und zwar Zunahmen um bis zu 53% bzw. 7µg/m³. Diese sind bedingt durch das Silvesterfeuerwerk, das insbesondere in Berlin einen großen Beitrag zu den PM₁₀-Emissionen leistet und auch im Monatsmittelwert noch sichtbar ist.

Die in Abbildung 88 erkennbaren Abnahmen im Oktober, und etwas schwächer ausgeprägt im November, sind ebenfalls auf Änderungen bei den Zeitfunktionen der Landwirtschaft zurückzuführen. Bei den RCG-Default-Profilen gibt ein eigenes Zeitprofil für die PM₁₀-Emissionen der Landwirtschaft, dessen Maximum anders als das der düngerelevanten Emissionen im Herbst liegt. Bei den dynamischen Profilen werden nur noch die PM₁₀-Emissionen der NFR-Sektoren 3Dc (Farm-level agricultural operations including storage, handling and transport of agricultural products) und 3Dd (Off-farm storage, handling and transport of bulk agricultural products), die deutschlandweit 56% der PM₁₀-Emissionen der Quellgruppe Landwirtschaft ausmachen, nach diesen Profilen zeitlich verteilt. Die übrigen landwirtschaftlichen PM₁₀-Emissionen stammen im Wesentlichen aus der Tierhaltung und werden gemäß den entsprechenden zeitlichen Verteilfunktionen ohne ausgeprägtes Herbstmaximum verteilt, was ggü. den RCG-Default-Profilen zu Abnahmen in den Monaten Oktober und November und zu leichten Zunahmen in den anderen Monaten führt.

Auch bei den Kleinf Feuerungsanlagen hat sich der Jahresgang der dynamischen Verteilung auf Basis der Gradtagzahlen gegenüber dem RCG-Default-Jahresgang geändert. In Abbildung 89 ist der Jahresgang für SNAP 2 aus TeResE (Mittelung über Monate) für alle Klimaregionen im Vergleich mit dem RCG-Default-Profil dargestellt. Für alle Klimaregionen liegen die dynamisch zeitverteilten Emissionen danach im Februar und im März unter und im Oktober und November über den Default-Emissionen.

Auf die Konzentrationen haben die Kleinf Feuerungsanlagen weniger Einfluss als andere Quellgruppen, weil sie 2016 zu den deutschlandweiten NO_x-Emissionen nur 8% und zu den deutschlandweiten PM₁₀-Emissionen nur 12% beitrugen. Anders als bei der Landwirtschaft gibt es hier weniger Gebiete, in denen sie als Quellgruppe dominieren. Der Rückgang der modellierten PM₁₀-Konzentrationen im Februar im Süden Deutschlands in Gebieten mit hohen Holzfeuerungsmissionen und im Nordosten Deutschlands mit geringen sonstigen Emissionen (Abbildung 88) ist jedoch ein Beispiel für den Einfluss der Kleinf Feuerungsanlagen auf die PM₁₀-Konzentrationen.

Abbildung 87: 2016 PM₁₀: Monatsmittelwerte RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default)

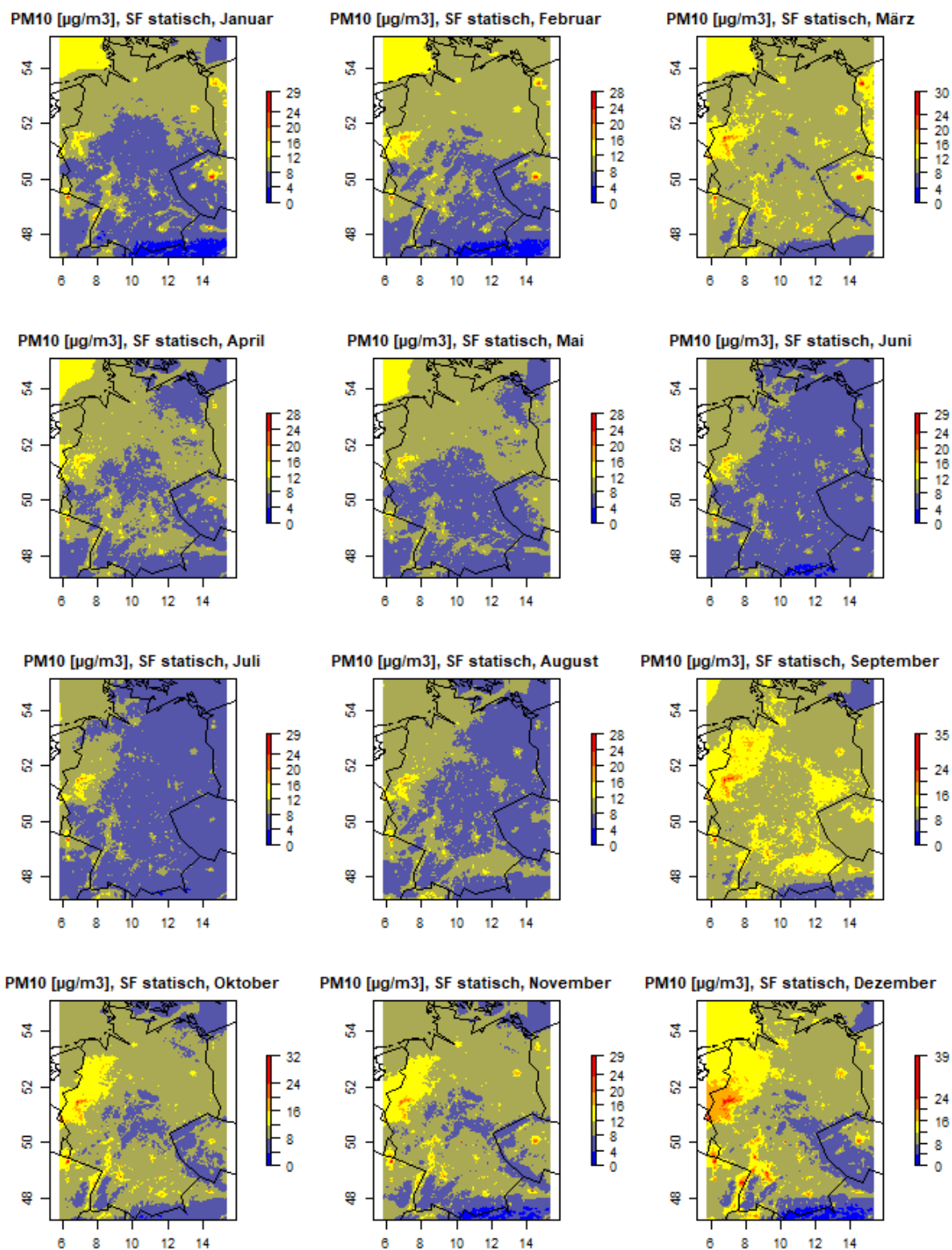


Abbildung 88: 2016 PM₁₀: Relative Differenz der Monatsmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF

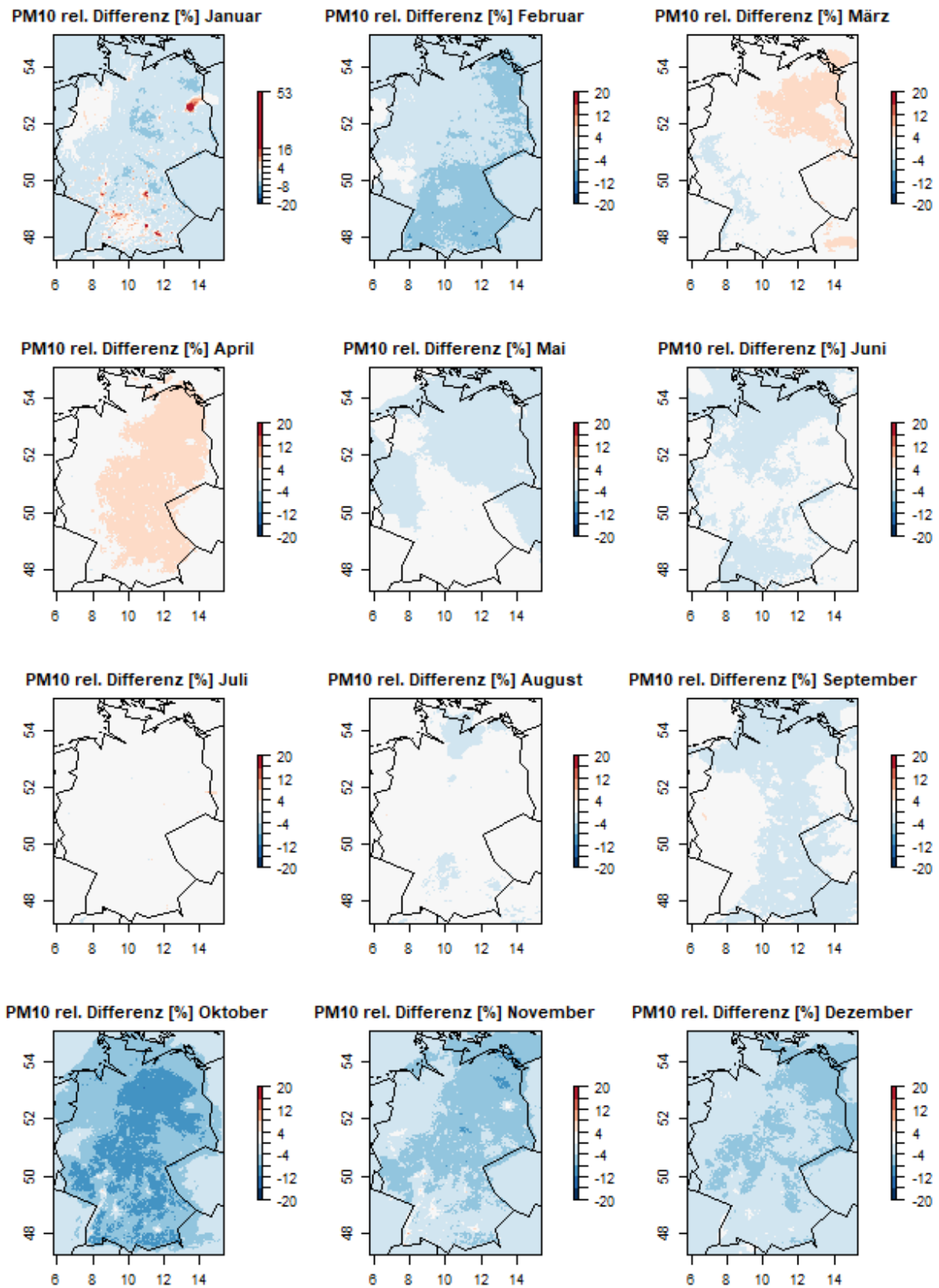
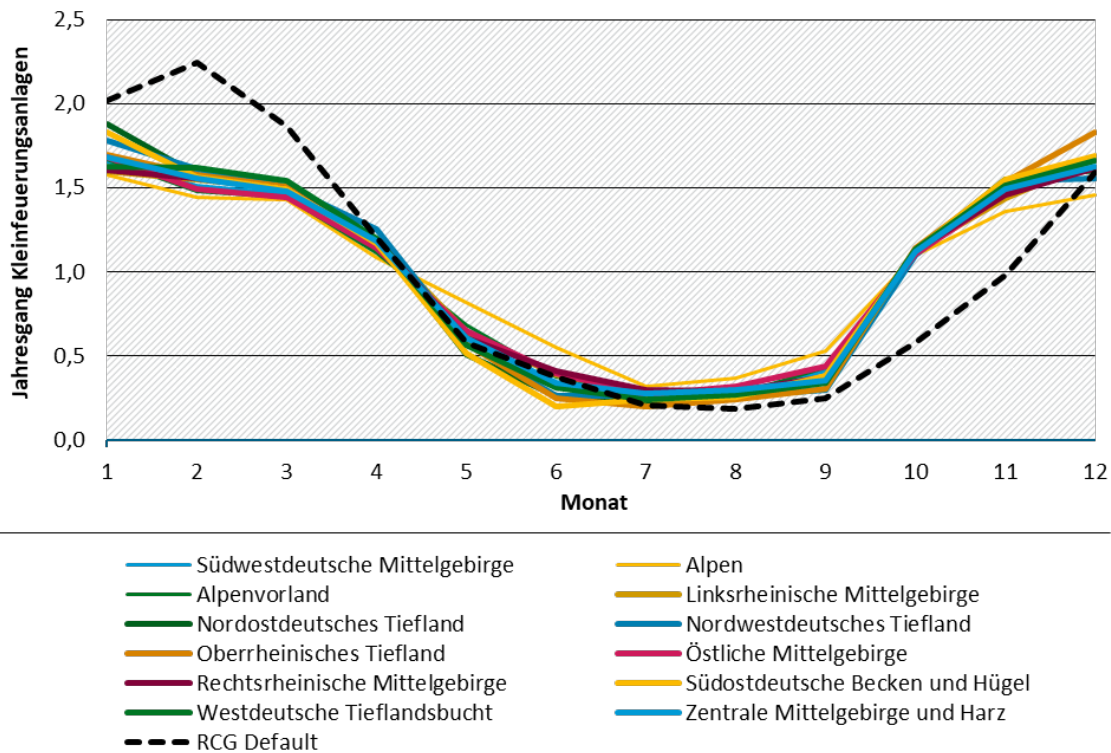


Abbildung 89: Jahresgang 2016 der Emissionen aus Kleinfeuerungsanlagen auf Basis der dynamischen SF für die Klimaregionen im Vergleich mit dem Default-Jahresgang aus RCG



NH₃ (statische Monatsplots in Abbildung 90, relative Differenzplots in Abbildung 91) stammt deutschlandweit zu 95% aus der Landwirtschaft, daher sind hier die Auswirkungen der geänderten Zeitfunktionen am deutlichsten. In den Karten mit relativen Differenzen sind die groben Raster (50 km x 50 km) zu erkennen, zu denen die Landwirtschafts-SF gruppiert sind. Durch die Verschneidung dieser Raster mit den Klimaregionen entstehen teilweise scharfe Grenzen der Übergänge zwischen zu- und abnehmenden Emissionen.

Die größten auftretenden relativen Änderungen in der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF ggü. der mit statischen SF sind Zunahmen um den Faktor 4,33 im Februar im Westen (Klimaregion westdeutsche Tieflandsbucht) um den Faktor 4,26 im bereits bei NO₂ auffälligen Rasterelement im Süden Hamburgs (Klimaregion nordwestdeutsches Tiefland). Die absoluten Differenzkarten in Anhang E zeigen, dass es im Februar im Westen in wenigen Rasterelementen maximal zu Zunahmen von 23 µg/m³ kommt. Die Zunahmen im März in Norddeutschland treten flächiger hervor, die maximale absolute Zunahme liegt wiederum im Süden Hamburgs bei 97 µg/m³.

Abbildung 90: 2016 NH₃: Monatsmittelwerte RCG-Modellrechnung mit statischen SF (Default)

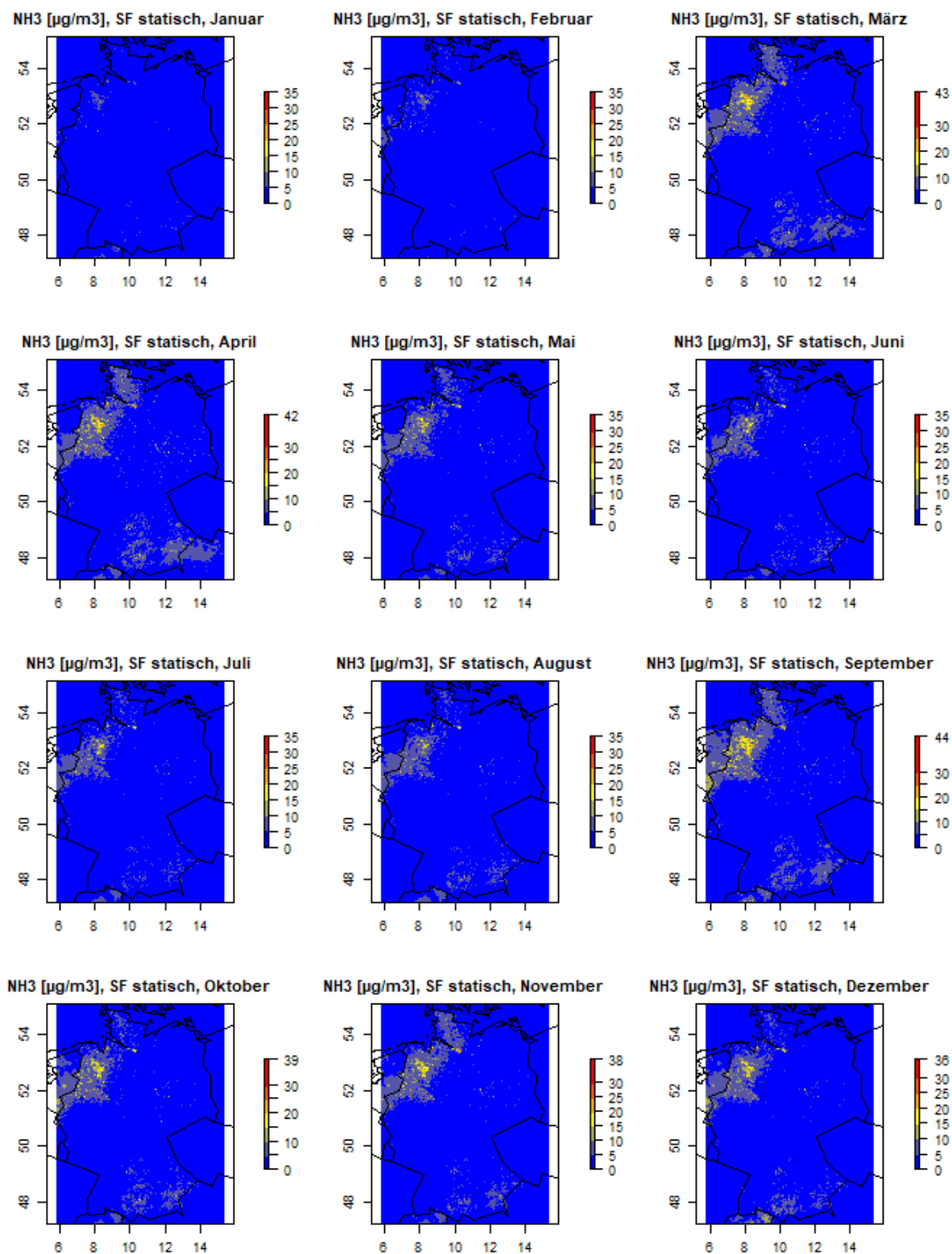
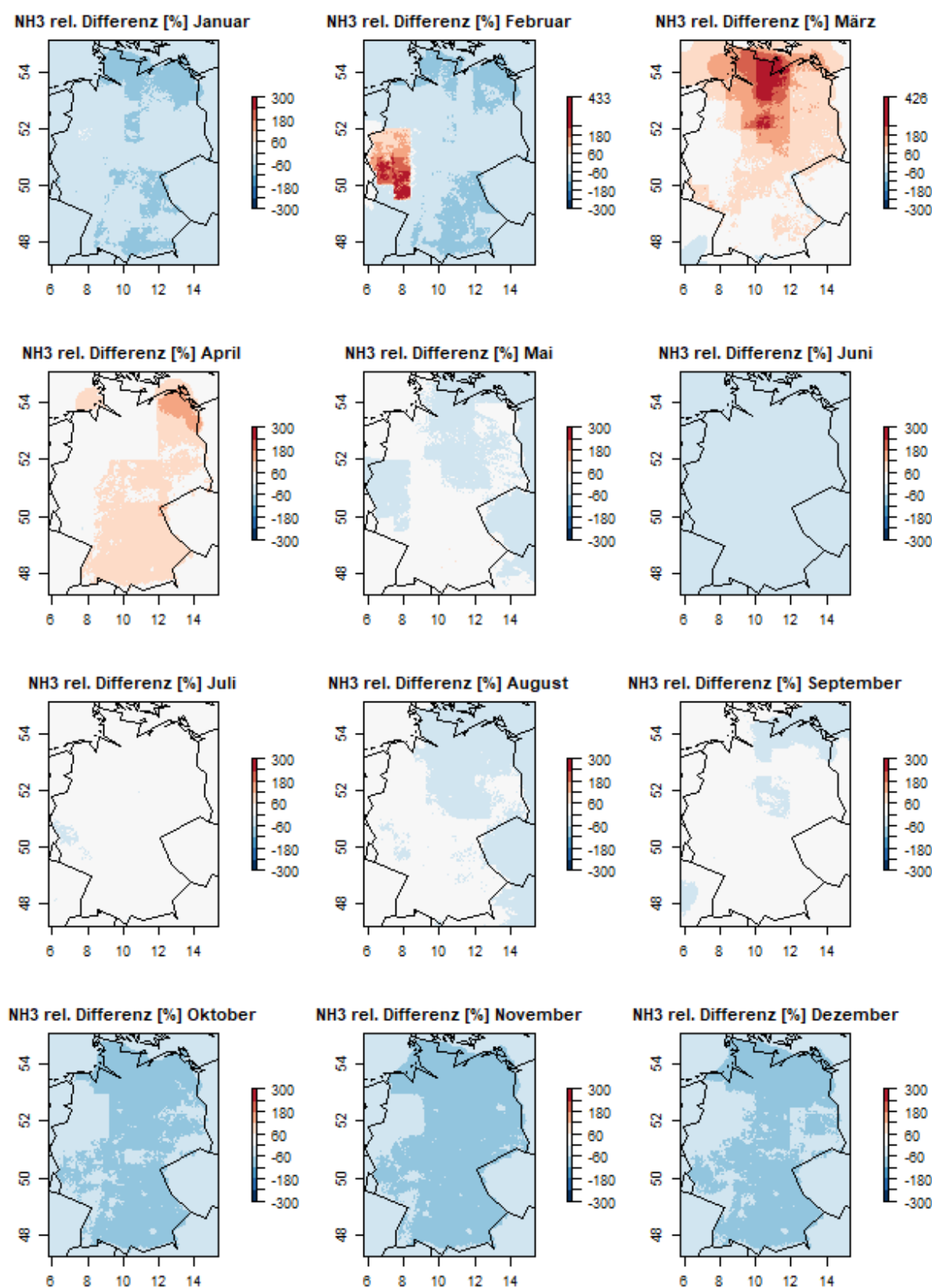


Abbildung 91: 2016 NH₃: Relative Differenz der Monatsmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF



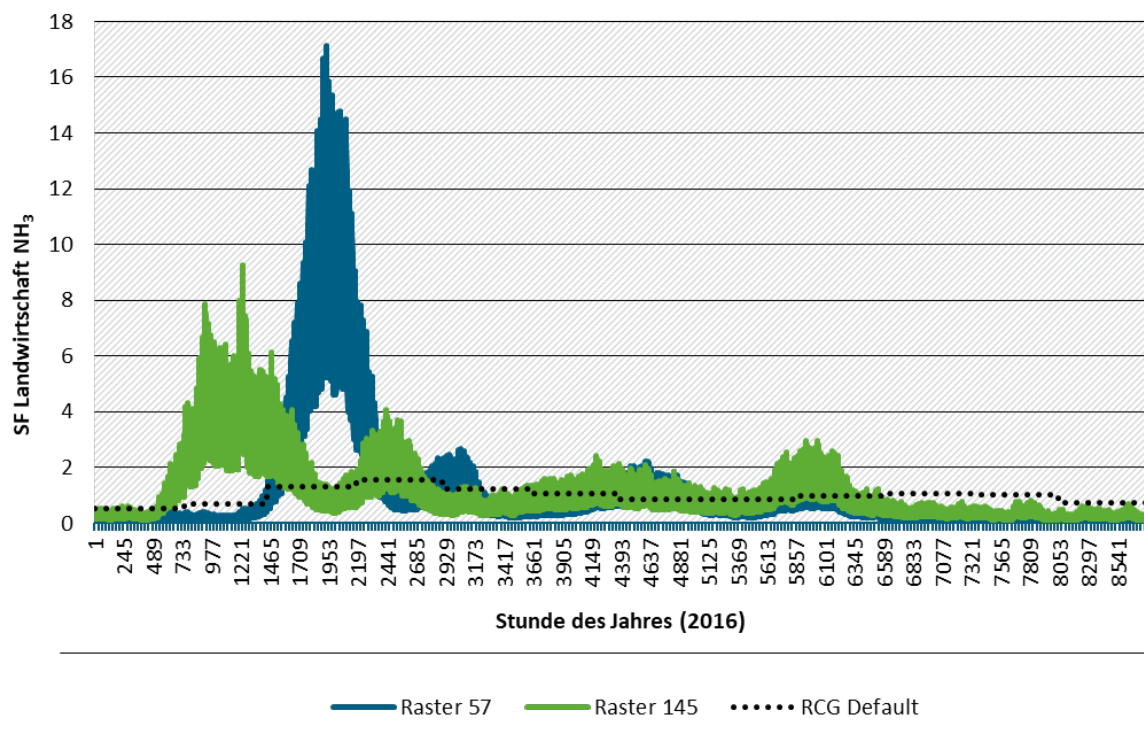
Zu den hohen Änderungsfaktoren tragen zwei Effekte bei: Zum einen ist die Frühjahrsspitze der Emissionen bei den dynamischen SF stärker ausgeprägt als im statischen Default und zum anderen liegt das Maximum früher. In der Klimaregion nordwestdeutsches Tiefland im März verstärken sich beide Effekte:

- Dynamische SF: scharfes Emissionsmaximum, vollständig im betrachteten Monat
- Statische SF: flacher Anstieg auf ein erst im Folgemonat liegendes Emissionsmaximum

In der Klimaregion „westdeutsche Tieflandsbucht“ tritt dieser Effekt bereits im Februar auf, in der Klimaregion „nordostdeutsches Tiefland“ (Mecklenburg-Vorpommern) und in Süddeutschland fällt er zum Teil in den April. Dies wird anhand von zwei Rasterelementen im Folgenden näher erläutert:

Abbildung 92 zeigt die dynamischen SF 2016 für NH_3 in den für die Landwirtschaft definierten Rastern 57 (auf Höhe von Hamburg) und 145 (im Westen Deutschlands) im Vergleich mit dem statischen Default Profil aus RCG.

Abbildung 92: Dynamische SF für NH_3 in den für die Landwirtschaft definierten Rastern 57 und 145 im Vergleich mit dem statischen Default Profil aus RCG



In beiden Rasterelementen weisen die SF zwei Frühjahrsmaxima auf, von denen das erste stärker ausgeprägt ist als das zweite. Diese ersten Frühjahrsmaxima liegen zeitlich früher und sind deutlich stärker ausgeprägt als im RCG Default-Profil. Sie ergeben sich in beiden Rasterelementen aus einer Überlagerung der ersten Gülle-Düngung (auf unbepflanztem Boden) mit der Frühjahrs-Mineraldüngung. Das zweite Frühjahrsmaximum entspricht der zweiten Gülle-Düngung (auf bepflanzttem Boden).

In Raster 57 ist der Mineraldünger-Anteil hoch, in Kombination mit den kühleren Temperaturen der Klimaregion Nordwestdeutsches Tiefland führt dies zu einem scharf ausgeprägten ersten Frühjahrsmaximum im März und einem deutlich schwächer ausgeprägten zweiten Frühjahrsmaximum im Mai. In Raster 145 ist der Beitrag der Gülle höher. In Kombination mit den höheren Temperaturen in der westdeutschen Tieflandsbucht führt dies dazu, dass das erste Frühjahrsmaximum nicht ganz so scharf ausgeprägt ist wie in Raster 57 und ca. einen Monat früher bereits im Februar auftritt. Das zweite Frühjahrsmaximum ist hier stärker ausgeprägt als in Raster 57 und liegt im März.

Hohe relative Zunahmen sind daher zu erwarten, eine absolute Zunahme von $97 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (siehe Karte mit absoluten Differenzen für NH_3 in Anhang E) erscheint sehr hoch. Die Gitterbox im Süden Hamburgs ist bereits beim JMW von NO_2 (und in Folge bei O_3) aufgefallen, die Vermutung liegt nahe, dass die jährliche Emissionssumme der Landwirtschaftsemissionen für Hamburg zu hoch ist.

7.6 Zeitreihen 2016

Durch Verwendung dynamischer SF soll das Zeitverhalten insgesamt verbessert werden, also für den längsten betrachteten Zeitraum (Jahr) und das kürzeste betrachtete Mittelungsintervall (Stunde). Ziel ist daher die bestmögliche Übereinstimmung zwischen Modellrechnung und Messung für den Jahresgang der Stundenmittelwerte. Diese Zeitreihe enthält alle zeitlichen Einflüsse (Tagesgänge, Wochengänge, Jahresgänge); im Fall niedriger Übereinstimmung für diese Zeitreihe können aber mögliche Ursachen für Abweichungen nur schwer ermittelt werden. Es wurden daher zusätzlich zum Jahresgang der Stundenmittelwerte weitere Zeitreihen betrachtet, um Tagesgänge, Wochengänge und saisonales Verhalten getrennt betrachten zu können.

Für die in Abschnitt 7.3 beschriebenen Stationen Berlin-Neukölln, Freiburg, Augsburg LfU, Emsland, Mülheim Styrum, Schauinsland, Waldhof und Schmücke wurden für die Schadstoffe NO_2 , NO_x , O_3 und PM_{10} Zeitreihen für folgende Zeitskalen und Mittelungsintervalle erzeugt:

- ▶ Jahresgang Stundenmittelwerte: 8784 Werte
- ▶ Jahresgang Tagesmittelwerte: 366 Werte
- ▶ Jahresgang Monatsmittelwerte: 12 Werte
- ▶ Wochengang, Tagesmittelwerte: 7 Werte
- ▶ Tagesgang, Stundenmittelwerte: 24 Werte
- ▶ Tagesgang Werktag, Stundenmittelwerte: 24 Werte
- ▶ Tagesgang Samstag, Stundenmittelwerte: 24 Werte
- ▶ Tagesgang Sonn- und Feiertag, Stundenmittelwerte: 24 Werte

Durch die getrennte Betrachtung der Zeitskalen können Effekte auf den Jahresgang, den Wochengang oder den Tagesgang unabhängig voneinander betrachtet werden. Gleiches gilt für die Differenzierung der Tagesgänge nach Werktag, Samstag, Sonn- und Feiertag und nach Jahreszeit. Dies ermöglicht Rückschlüsse auf die Quellgruppen, bei denen diese Zeitprofile dominieren.

Wie in Abschnitt 7.3 beschrieben wurde die Evaluierung der SF für die Landwirtschaftsemissionen anhand der NH_3 -Messungen für grobe Raster auf Monatsebene durchgeführt, dies ist Gegenstand von Abschnitt 7.8.

Die Zeitreihen für alle betrachteten Schadstoffe (außer NH_3) und Stationen sind in Anhang F dargestellt. Bereits durch qualitative Betrachtung der Darstellungen lässt sich Folgendes festhalten:

NO_2 :

Es ist ein deutlicher Jahresgang mit erhöhten Konzentrationen im Winter erkennbar, in beiden Modellrechnungen ist er an den ländlichen Hintergrundstationen Waldhof und Schmücke weniger stark ausgeprägt als in den Messungen. Am Schauinsland gehen die gemessenen NO_2 -Konzentrationen dagegen im Dezember deutlich zurück, während die modellierten Konzentrationen ansteigen. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die Messstation auf dem Schauinsland im Dezember häufig in der freien Troposphäre liegt, während die Modellrechnungen Werte aus der planetaren Grenzschicht liefern.

NO_2 weist auch einen Wochengang mit niedrigeren Konzentrationen am Wochenende auf, dieser ist in der Modellrechnung mit dynamischen SF häufig besser getroffen als in der statischen Rechnung. Auf der Schmücke wird ein Donnerstags-Maximum gemessen. Dies hat möglicherweise lokale Ursachen und ist in beiden Modellrechnungen nicht enthalten.

Die NO_2 -Konzentration hat einen ausgeprägten Tagesgang mit Morgen- und Abendspitze, der an den städtischen Hintergrundstationen stärker ausgeprägt ist als an den ländlichen Hintergrundstationen. Der Tagesgang ist durch das Zeitverhalten des Straßenverkehrs bestimmt. In beiden Modellrechnungen ist dieser Tagesgang etwas stärker ausgeprägt als in den Messungen.

Die getrennte Auswertung von Samstagen sowie Sonn- und Feiertagen zeigt eine deutliche Verbesserung durch die Verwendung dynamischer SF: In den statischen Zeitprofilen aus RCG wird bei den Tagesgängen nicht zwischen Werktag, Samstag sowie Sonn- und Feiertag unterschieden, lediglich im Wochengang gibt es eine Absenkung am Wochenende. In der RCG-Modellrechnung mit statischen SF weisen daher auch die Samstage sowie die Sonn- und Feiertage die gleichen Morgen- und Abendspitzen auf wie die Werktage, nur auf niedrigerem Niveau. In der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF entfallen die Morgenspitzen am Wochenende, was deutlich besser mit den Messungen übereinstimmt.

NO_x :

Die Zeitreihen für NO_x sind denen für NO_2 sehr ähnlich. Der Jahresgang ist tendenziell etwas stärker ausgeprägt als bei NO_2 . An einigen Messstationen kommt es ab Oktober und insbesondere im Dezember zu starken Anstiegen, die mit einem starken Rückgang der O_3 -Konzentrationen zusammenfallen. Hier findet eine Verschiebung des Gleichgewichts zwischen NO und NO_2 in Richtung NO statt.

O_3 :

Die Zeitreihen für Ozon verlaufen tendenziell umgekehrt wie bei den Stickstoffoxiden: Der Jahresgang von Ozon ist im Sommer erhöht und fällt ab Oktober abrupt ab, der Wochengang ist am Wochenende erniedrigt und der Tagesgang weist eine Nachmittagsspitze auf, die vor der Abendspitze des Straßenverkehrs liegt.

PM_{10} :

Die Zeitreihen der Stundenwerte zeigen hier deutliche Maxima in der ersten Stunde des Jahres aufgrund des Silvesterfeuerwerks. An den betrachteten Stationen fällt dieses im Vergleich zu den übrigen Stunden des Jahres in Berlin-Neukölln am stärksten aus, gefolgt von Augsburg LfU und etwas schwächer in Mülheim Styrum. Die Formen von Jahres-, Wochen und Tagesgang sind mit denen der Stickstoffoxide vergleichbar, jedoch überall etwas schwächer ausgeprägt.

7.7 Statistische Kenngrößen 2016

Für alle betrachteten Stationen, Schadstoffe und Zeitreihen wurden die statistischen Kenngrößen R , R^2 , Bias und RMSE berechnet, jeweils zwischen den Modellrechnungen (mit statischen sowie mit dynamischen SF) und den Messungen.

Der **Pearson'sche Korrelationskoeffizient R** ist das wichtigste Maß bei der Analyse von in Form numerischer Werte vorliegenden Zeitreihen. Er kann Werte zwischen -1 und +1 annehmen, negative Vorzeichen treten z.B. bei umgekehrt proportionalen Zusammenhängen auf. Beim Vergleich gemessener und modellierter Werte für dieselbe Größe werden positive Vorzeichen erwartet, es kommen jedoch bei einzelnen Zeitreihen mit schwach ausgeprägten Zeitprofilen auch kleine negative Werte vor. Diese zeigen den Effekt lokaler Einflüsse auf die Zeitreihe und wirken wie ein Rauschen.

Für alle betrachteten Zeitreihen sind die Werte beider Modellrechnungen für alle Zeitreihen grafisch im direkten Vergleich in Anhang G dargestellt.

Das **Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten R^2** kann interpretiert werden als der Anteil der Varianz der Messung, der auf der betrachteten Zeitskala durch die Modellrechnung erklärt werden kann. In Anhang H.1 sind für alle betrachteten Zeitreihen jeweils die Werte für R^2 für die RCG-Modellrechnung mit statischen und für die mit dynamischen SF ausgewiesen, und ebenso das Verhältnis R^2 SF dynamisch zu R^2 SF statisch. Dieses Verhältnis zeigt, wie sich der Anteil der durch das Modell erklärten Varianz der Messungen durch Einführung der dynamischen SF verändert. Werte > 1 für dieses Verhältnis zeigen also eine Verbesserung an. Wie oben beschrieben, treten auch negative Werte für R auf, die hier jedoch nicht signifikant sein können. Weil das Vorzeichen beim Quadrieren verloren geht, werden im Sinne leichter Interpretierbarkeit im Falle negativer R -Werte die Werte für R^2 nicht angegeben. In den oben beschriebenen grafischen Darstellungen für R sind alle Werte enthalten.

Der **Bias** ist ein Maß für den systematischen Modellfehler, Werte > 0 bedeuten eine systematische Überschätzung der Messung durch das Modell, Werte < 0 entsprechend eine systematische Unterschätzung. In Anhang H.2 sind für alle betrachteten Zeitreihen jeweils die Werte für den Bias für die RCG-Modellrechnung mit statischen und für die mit dynamischen SF ausgewiesen. Da der Bias vorzeichenbehaftet ist, werden hier keine Verhältnisse ausgewiesen.

Bei kleinem Bias ist der **Root Mean Square Error (RMSE)** ein Maß für den statistischen Modellfehler, also für die Streuung der Modellwerte um die Messwerte. In Anhang H.3 sind für alle betrachteten Zeitreihen jeweils die Werte für den RMSE für die RCG-Modellrechnung mit statischen und für die mit dynamischen SF ausgewiesen und ebenso das Verhältnis RMSE SF dynamisch zu RMSE SF statisch. Hier zeigen Werte < 1 für dieses Verhältnis eine Verbesserung an.

Für die nicht-vorzeichenbehafteten Größen R^2 und RMSE wurden Verhältnisse der jeweiligen Kenngröße für den RCG-Lauf mit dynamischen SF zu der entsprechenden Kenngröße für den RCG-Lauf mit statischen SF gebildet. Auf eine Verbesserung der Modellrechnung durch Verwendung dynamischer SF weisen folgende Werte hin:

► $R^2_{\text{dynamisch}} / R^2_{\text{statisch}} > 1$

► $RMSE_{\text{dynamisch}} / RMSE_{\text{statisch}} < 1$

Für die in Tabelle 21 aufgelisteten Zeitreihen werden diese Verhältnisse in den folgenden Abbildungen für alle Stationen als Netzdiagramme vergleichend dargestellt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden hier nur zwei der oben betrachteten Tagesgänge aufgenommen, der Tagesgang aller Stundenmittelwerte und der Tagesgang für Sonn- und Feiertage, an dem sich besonders deutlich die geänderten SF beim Straßenverkehr zeigen.

Tabelle 21: Übersicht über die Zeitreihen, für die statische Kenngrößen dargestellt werden

| Kürzel | Auswertungs- zeitraum | Mittelungs- intervall | Anzahl Werte | Beschreibung |
|--|--------------------------|--------------------------|-----------------|--|
| Jahr, Stunden- mittelwerte | Jahr | Stunde | 8784 | Zeitreihe aller Stundenmittelwerte des Jahres |
| Jahr, Tages- mittelwerte | Jahr | Tag | 366 | Zeitreihe aller Tagesmittelwerte des Jahres |
| Jahr, Monats- mittelwerte | Jahr | Monat | 12 | Zeitreihe aller Monatsmittelwerte des Jahres |
| Woche, Tages- mittelwerte | Woche | Tag | 7 | Mittlere Zeitreihe aller Tagesmittelwerte einer Woche; gemittelt wurde jeweils über alle Tage des Jahres nach Wochentag (Montag, Dienstag, ..., Sonntag) |
| Tag, Stunden- mittelwerte | Tag | Stunde | 24 | Mittlere Zeitreihe aller Stundenmittelwerte eines Tages; gemittelt wurde jeweils über alle Stunden des Jahres nach Uhrzeit (1:00, 2:00, ..., 24:00) |
| Sonn- u. Feiertag, Stunden- mittelwerte | Sonn- und Feiertag | Stunde | 24 | Mittlere Zeitreihe aller Stundenmittelwerte der Sonn und Feiertage; gemittelt wurde jeweils über alle Stunden der Sonn- und Feiertage des Jahres nach Uhrzeit (1:00, 2:00, ..., 24:00) |

Abbildung 93 enthält Netzdiagramme der Verhältnisse $R^2_{\text{dynamisch}} / R^2_{\text{statisch}}$ (linkes Diagramm) und $RMSE_{\text{dynamisch}} / RMSE_{\text{statisch}}$ (rechtes Diagramm) für die Zeitreihen aus Tabelle 21 an der Station „Berlin Neukölln“. Das schwarz gepunktete Sechseck entspricht der Linie „ $y=1$ “: Für die quadrierten Korrelationskoeffizienten (links) bedeuten Werte außerhalb dieses Sechsecks eine Verbesserung der Modellrechnung, für die RMSE (rechts) bedeuten Werte innerhalb dieses eine Verbesserung. Wie auch bei den Tabellen in Anhang H.1 werden negative Korrelationen weggelassen und führen zu Lücken in den Darstellungen.

An der Station Berlin-Neukölln treten die größten Verbesserungen bei den Korrelationen bei PM_{10} auf (Abbildung 93, links). Hier erhöht sich R^2 durch die dynamischen SF für die Zeitreihen „Jahr, Stundenmittelwerte“ und „Sonn- und Feiertag, Stundenmittelwerte“ im Vergleich zu der RCG-Modellrechnung mit statischen SF um einen Faktor von ca. 7 bzw. ca. 9. Diese Verbesserung liegt im Wesentlichen an zwei Dingen: An der Berücksichtigung des Silvester-Feuerwerks, das an dieser Station in der Feinstaub-Messung besonders ausgeprägt ist, und am Wegfall der Morgenspitze der Verkehrsganglinie an Sonn- und Feiertagen. Das Silvester-Feuerwerk ist auch im Monatsmittelwert für den Januar noch erkennbar, der Wert für R^2 verbessert sich daher auch im Jahresgang der Monatsmittelwerte bei PM_{10} durch die dynamischen SF noch um mehr als

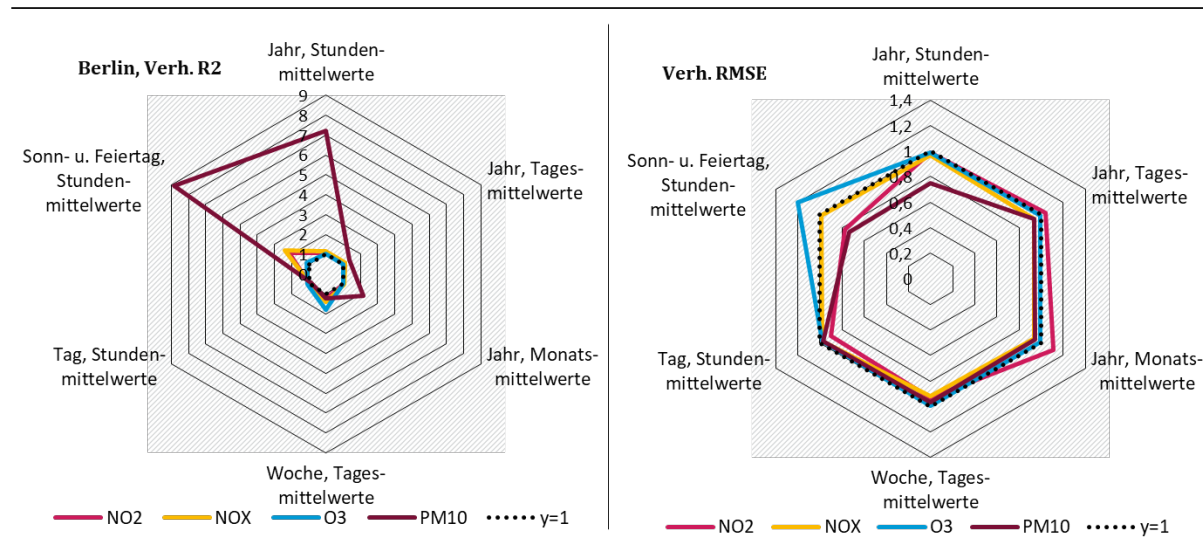
einen Faktor 2. Der geänderte SF des Straßenverkehrs am Wochenende führt auch bei NO_2 und NO_x zu Erhöhungen von R^2 beim Sonn- und Feiertag um mehr als einen Faktor 2. Beim Ozon zeigt sich dieser Effekt am Wochengang, auch hier erhöht sich R^2 um einen Faktor 2.

Leichte Verschlechterungen bei R^2 an der Station Berlin-Neukölln treten beim Tagesgang der Stundenmittelwerte bei NO_x und PM_{10} auf, der Wert wird hier durch Einführung der dynamischen SF um einen Faktor 0,96 bzw. 0,90 gemindert. Grund dafür ist, dass die Morgenspitze an der Station Berlin-Neukölln etwas später auftritt als in den dynamischen SF. Für Berlin passen diese hier an Werktagen etwas schlechter als die Default-Profile. Bei der Zeitreihe der Stundenmittelwerte überwiegt dennoch deutlich die Verbesserung.

Auch beim RMSE kommt es an der Station Berlin-Neukölln durch die dynamischen SF für die meisten Schadstoffe und Zeitreihen zu Verbesserungen (in Abbildung 93, rechts dargestelltes Verhältnis < 1). Für Ozon am Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) sowie für NO_2 beim Jahresgang der Monatsmittelwertwerte kommt es hingegen zu Verschlechterungen.

Die Erhöhung des RMSE beim Ozon beim Sonn- und Feiertag um 20% ist keine Folge des zeitlichen Verlaufs, sondern des hier nicht dargestellten positiven Bias: Das Modell überschätzt hier die Messwerte. Durch Wegfall der sonntäglichen Morgenspitze des Verkehrs entfällt im Modell auch ein Morgenminimum für O_3 , das zwar im Zeitverlauf der Messung nicht auftritt, das aber insgesamt die Modellwerte verkleinert und deshalb in Summe über den Tag Bias und RMSE verkleinert.

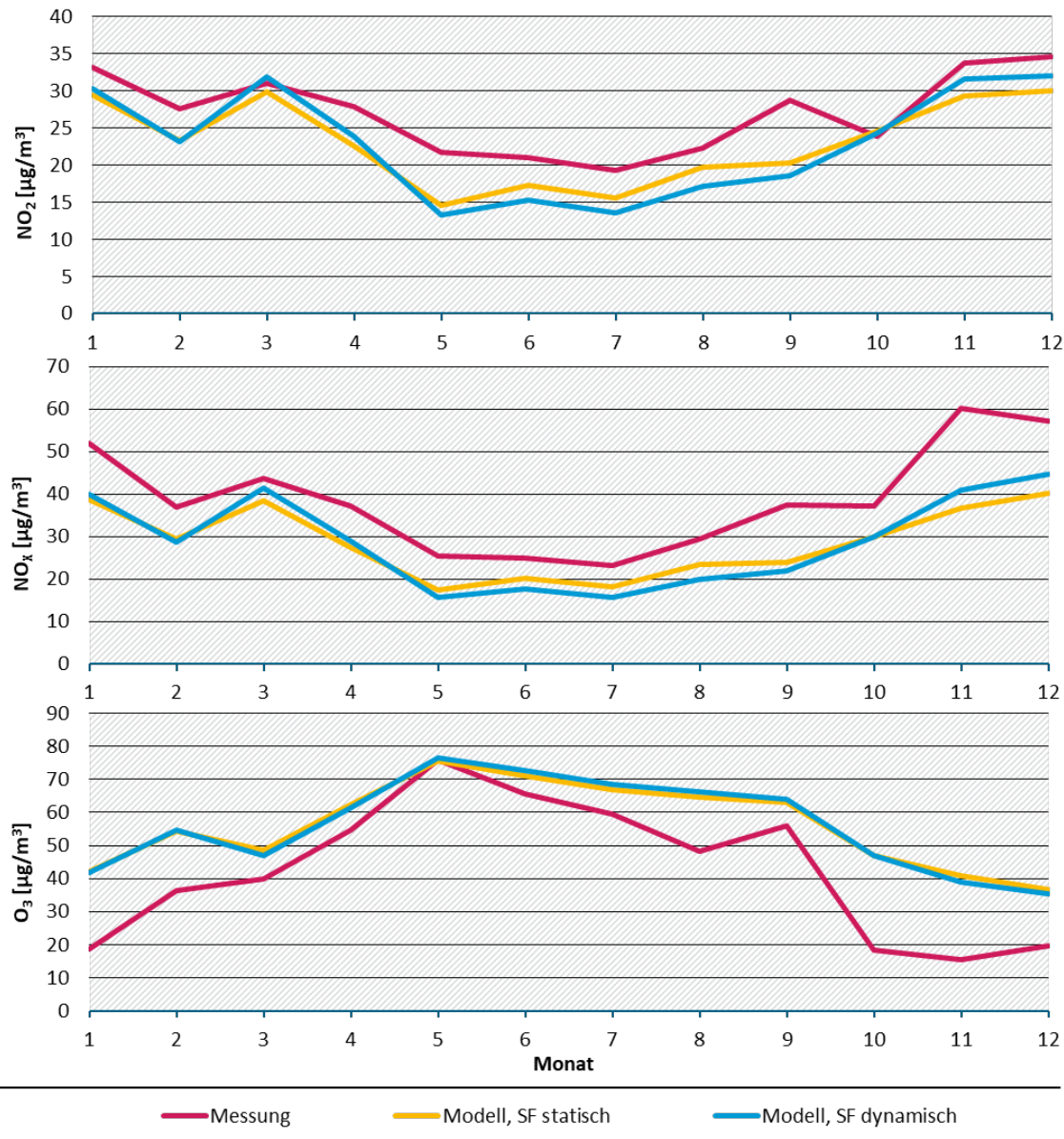
Abbildung 93: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Berlin-Neukölln 2016



Die Erhöhung des RMSE beim NO_2 beim Jahresgang der Monatsmittelwerte hängt ebenfalls mit dem Ozonverlauf zusammen. Alle Zeitreihen sind im Anhang dargestellt, die Jahresgänge nach Monaten sind für die Station Berlin-Neukölln und die Schadstoffe NO_2 , NO_x und O_3 in Abbildung 94 zusammengestellt: Bei NO_x unterschätzen beide Modellrechnungen die Messung (negativer Bias), bei Ozon ist es umgekehrt. Ab Oktober geht Ozon deutlich zurück, ab November steigen die Stickstoffoxide deutlich an, aufgrund des niedrigen Ozons steigt NO_2 schwächer an als NO . Der in der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF insgesamt stärker ausgeprägte Jahresgang

vergrößert den Bias im Sommer und verkleinert ihn im November und Dezember. Ein möglicher Grund für diesen Effekt kann eine Temperaturabhängigkeit der NO_2/NO_x -Verhältnisse der Emissionen des Straßenverkehrs sein, die hier nicht berücksichtigt ist. NO und NO_2 haben hier gleiche SF, auch in RCG bilden sie eine Stoffgruppe mit gleichem Zeitverhalten.

Abbildung 94: Jahresgang (Monatsmittelwerte) 2016 an der Station Berlin-Neukölln für die Messung und die Modellrechnungen mit statischen und dynamischen SF für NO_2 (oben), NO_x (Mitte) und Ozon (unten)



Auch in **Freiburg** verbessern sich die Korrelationen für den Wochengang (Tagesmittelwerte) und für den Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) aufgrund der besseren Sonntagsganglinie des Straßenverkehrs (Abbildung 95, links). Dass die Steigerung nicht so deutlich wie in Berlin ausfällt, liegt auch daran, dass die Werte für R^2 bereits in der Modellrechnung mit statischen SF etwas höher waren, unter anderem wegen einer geringeren Bedeutung des Silvester-Feuerwerks in Freiburg.

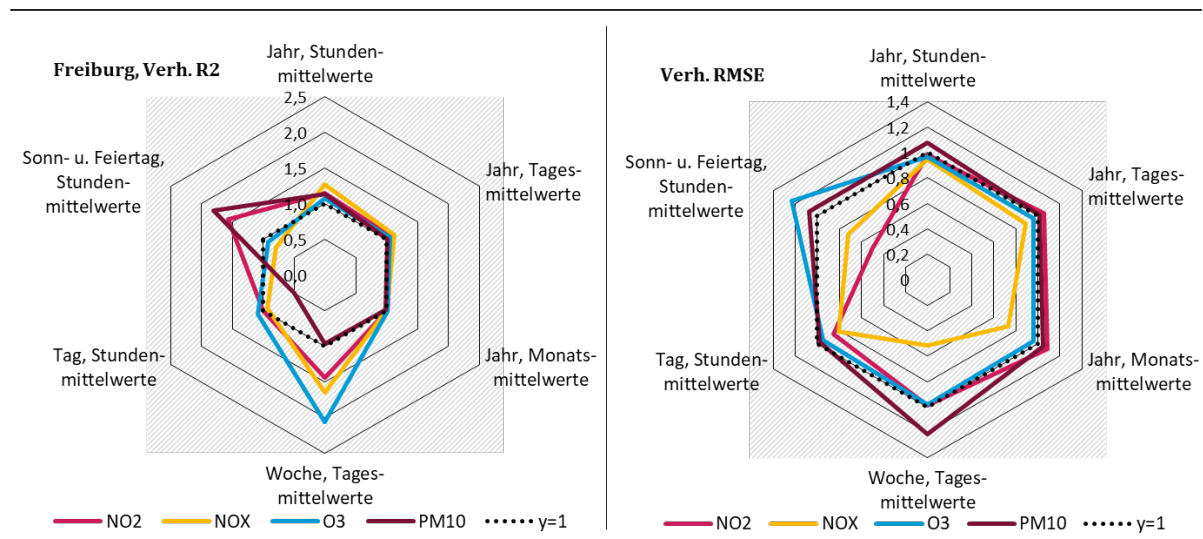
Eine Verschlechterung tritt in Freiburg bei PM_{10} bei der Korrelation für den Tagesgang (Stundenmittelwerte) auf. Hier ist der Tagesgang in der Messung nur schwach ausgeprägt, der Wert für R^2 lag in der statischen Rechnung mit $R^2=0,54$ bereits niedrig und wurde durch die dynamischen SF auf $R^2=0,38$ abgesenkt. Ein möglicher Grund ist, dass der aus den innerörtlichen Dauerzählstellen der BASt gemittelte Tagesgang für den Straßenverkehr im Umfeld der Station Freiburg nicht optimal ist: Die innerörtlichen Dauerzählstellen befinden sich überwiegend an hochbelasteten Ortsdurchfahrten, an denen sich Pendler-, Einkaufs- und Freizeitverkehr überlagern. Dies führt zu einer gegenüber der Morgenspitze stärker ausgeprägten Nachmittagsspitze. In den Messungen an der Station in Freiburg ist jedoch die Morgenspitze etwas stärker ausgeprägt als die Nachmittagsspitze.

Weiterhin ist der Tagesgang im Modell insgesamt stärker ausgeprägt als in der Messung. Ein möglicher Grund dafür ist, dass die Quellgruppe „Straßenverkehr“ im Modell zu den PM_{10} -Emissionen der betrachteten Gitterbox im Vergleich mit anderen Quellgruppen zu stark beiträgt.

Die Zunahme (+23%) des RMSE für Ozon beim Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) hat den gleichen Grund an der Station Berlin-Neukölln, siehe oben.

Für PM_{10} tritt eine Zunahme des RMSE beim Wochengang auf (+21%). Der Grund dafür ist, dass in den dynamischen Zeitprofilen für den innerörtlichen Straßenverkehr der Freitag etwas höher liegt als die anderen Werkstage. Dies passt für viele Städte gut und ist auf das erhöhte Pendleraufkommen vor dem Wochenende zurückzuführen, es ist jedoch im Umfeld der Luftqualitätsstation Freiburg nicht optimal. Während bei NO_x und NO_2 für die Korrelation die positiven Effekte des dynamischen Wochengangs überwiegen und beim RMSE positive und negative Effekte sich aufheben, führt dies bei PM_{10} , das ohnehin einen nur schwach ausgeprägten Wochengang aufweist, zu einer Zunahme beim RMSE. Ähnlich wie beim Tagesgang weist der im Modell stärker als in der Messung ausgeprägte Wochengang auf eine zu starke Gewichtung des Straßenverkehrsbeitrags auf die PM_{10} -Emissionen der betrachteten Gitterbox hin.

Abbildung 95: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Freiburg 2016

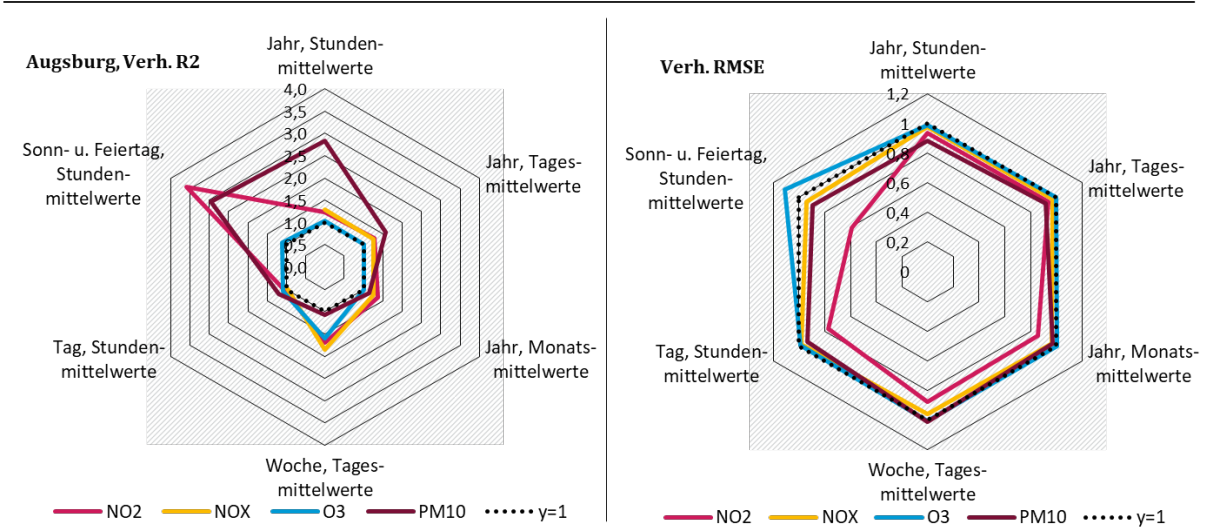


Wie schon in Berlin und Freiburg führen auch in **Augsburg** für PM_{10} die dynamischen SF zu einer deutlichen Erhöhung der Werte für R^2 beim Jahresgang (Stundenmittelwerte, Faktor 2,8) wie auch beim Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte, Faktor 2,9). Wie oben sind die Gründe dafür die Berücksichtigung des Silvester-Feuerwerks und der Wegfall der Morgenspitze beim Straßenverkehr.

Auch hier führen die dynamischen SF des Straßenverkehrs zu Verbesserungen der Korrelation NO_2 , NO_x (die Lücke im Plot resultiert daher, dass für den Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) die Korrelation mit statischen SF antikorreliert war) und O_3 für den Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) sowie für den Wochengang (Tagesmittelwerte). Auch beim Jahresgang der Monatsmittelwerte treten hier für alle Schadstoffe Verbesserungen der Korrelationen auf.

Der RMSE bleibt, mit Ausnahme von Ozon an Sonn- und Feiertagen, bei allen Schadstoffen und Zeitreihen durch die dynamischen SF entweder gleich oder wird verkleinert. Beim Ozon an Sonn- und Feiertagen tritt auch hier der oben bei Berlin beschriebene Effekt auf.

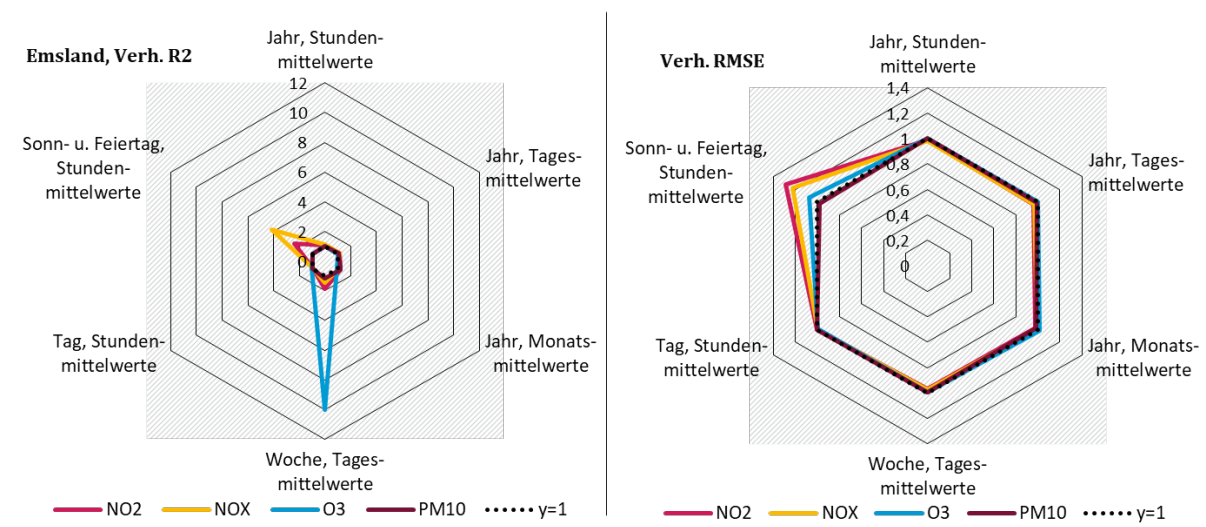
Abbildung 96: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Augsburg LfU 2016



An der **Station Emsland** gibt es Verbesserungen bei R^2 für den Wochengang insbesondere bei Ozon (Faktor 10), aber auch bei den anderen Schadstoffen (Zunahmen zwischen 14% bei PM_{10} und 86% bei NO_2). Auch beim Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) wird R^2 erhöht, am stärksten bei NO_x um den Faktor 4,2 und bei NO_2 um den Faktor 2,4.

Der RMSE nimmt für beide Schadstoffe, und auch für Ozon, bei dieser Zeitreihe dagegen zu. Dies liegt daran, dass die Unterschätzung der Messwerte durch das Modell hier zunimmt (negativer Bias, Betrag nimmt zu), was auch zu zunehmendem RMSE führt (NO_2 : RMSE+28%, NO_x : RMSE+22%, O_3 : RMSE+7%).

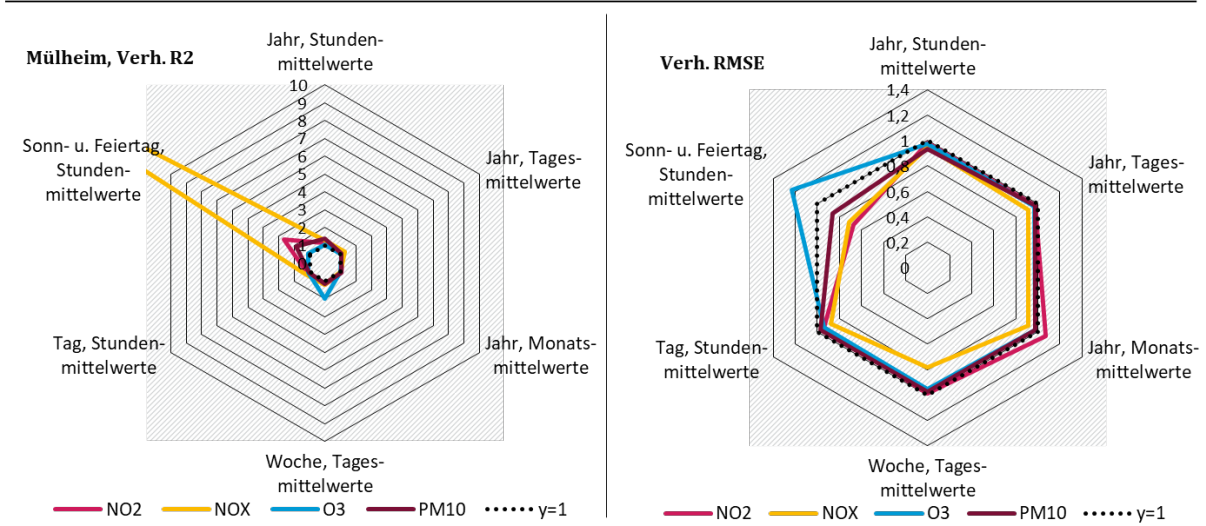
Abbildung 97: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Emsland 2016



Für die Station **Mülheim Styrum** fällt insbesondere die Zunahme von R^2 für den Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) auf (Faktor 22 durch Einführung der dynamischen SF), auch alle übrigen Korrelationen verbessern sich oder bleiben unverändert.

Der RMSE nimmt für Ozon für den Sonn- und Feiertag durch die dynamischen SF zu, wie auch an der Station Berlin und aus dem gleichen dort beschriebenen Effekt. Die Zunahme des RMSE beim Jahresgang (Monatsmittelwerte) für NO₂ ist ebenfalls auf den oben bei Berlin beschriebenen Effekt zurückzuführen. Für alle anderen Schadstoffe nimmt der RMSE durch die dynamischen SF ab.

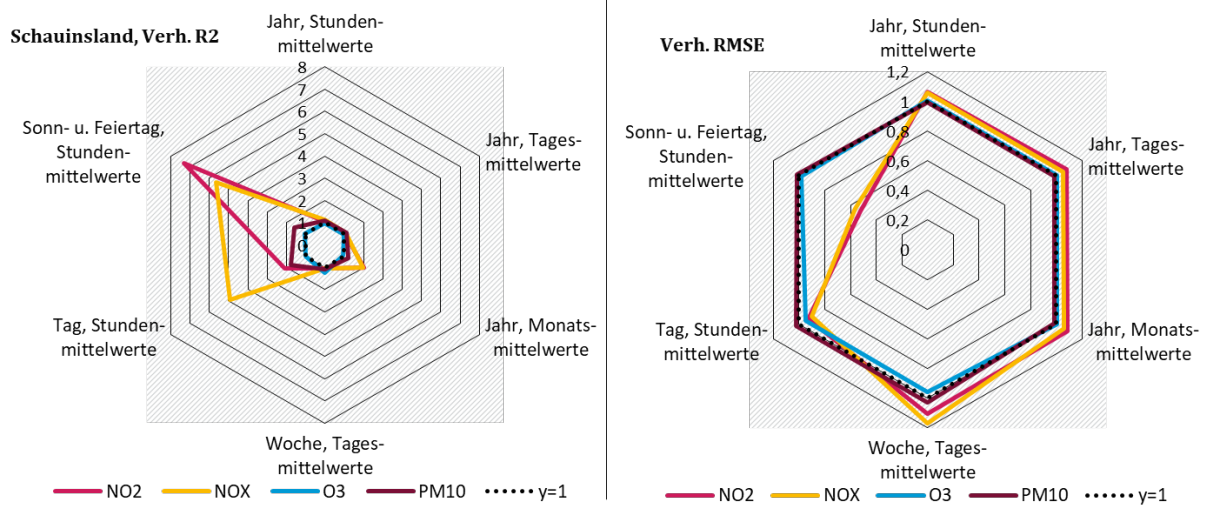
Abbildung 98: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Mülheim Styrum 2016



Die vorher genannten Stationen einschließlich Mülheim Styrum befinden sich im städtischen Hintergrund, die folgenden Stationen im gering belasteten ländlichen Hintergrund.

Am **Schauinsland** sind die Korrelationen generell niedriger als an den anderen Stationen, weil sich diese Station zeitweise in der freien Troposphäre befindet. Die Änderungen der hier betrachteten statistischen Kenngrößen R^2 und RMSE sind ähnlich wie bei den anderen Stationen, es treten insbesondere Verbesserungen bei den Stickstoffoxiden beim Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) auf.

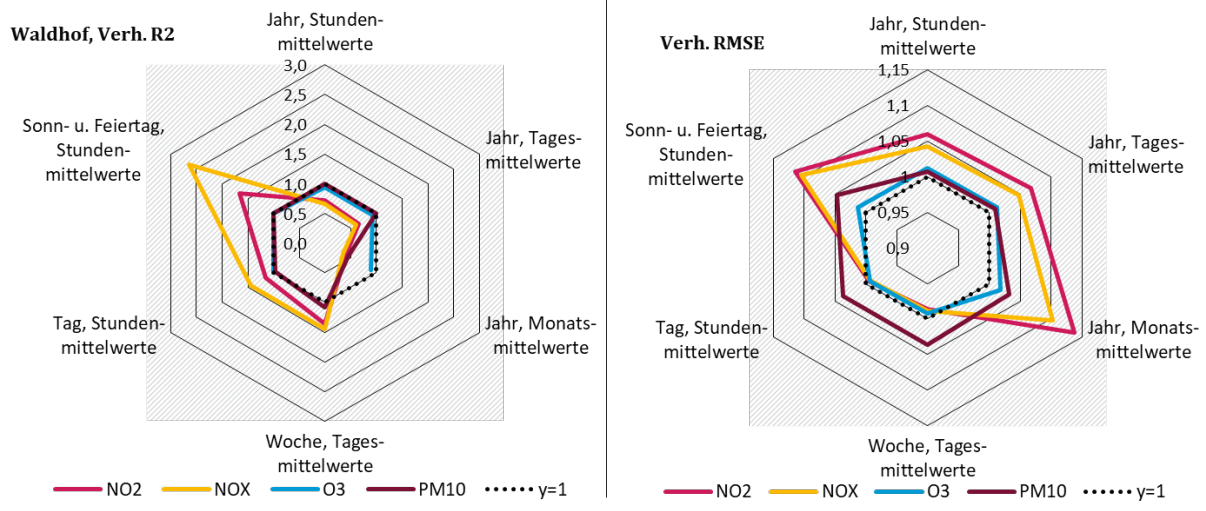
Abbildung 99: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Schauinsland 2016



An der Station **Waldhof** ist die Korrelation für den Wochengang (Tagesmittelwerte) bei Ozon bei der RCG-Rechnung mit statischen SF negativ, deshalb gibt es eine Lücke in der blauen Kurve links in Abbildung 100. Bei den anderen Zeitreihen kommt es für Ozon zu geringen Abnahmen der Korrelation durch die dynamischen SF.

Für die Stickstoffoxide erhöhen sich die Werte für R^2 durch die dynamischen SF bei den Tages- und Wochengängen, für die Jahresgänge werden sie jedoch erniedrigt. Grund für die Erhöhung auf niedrigen Zeitskalen sind wie bei den städtischen Hintergrundstationen die Änderungen der SF beim Straßenverkehr.

Abbildung 100: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R^2 (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Waldhof 2016

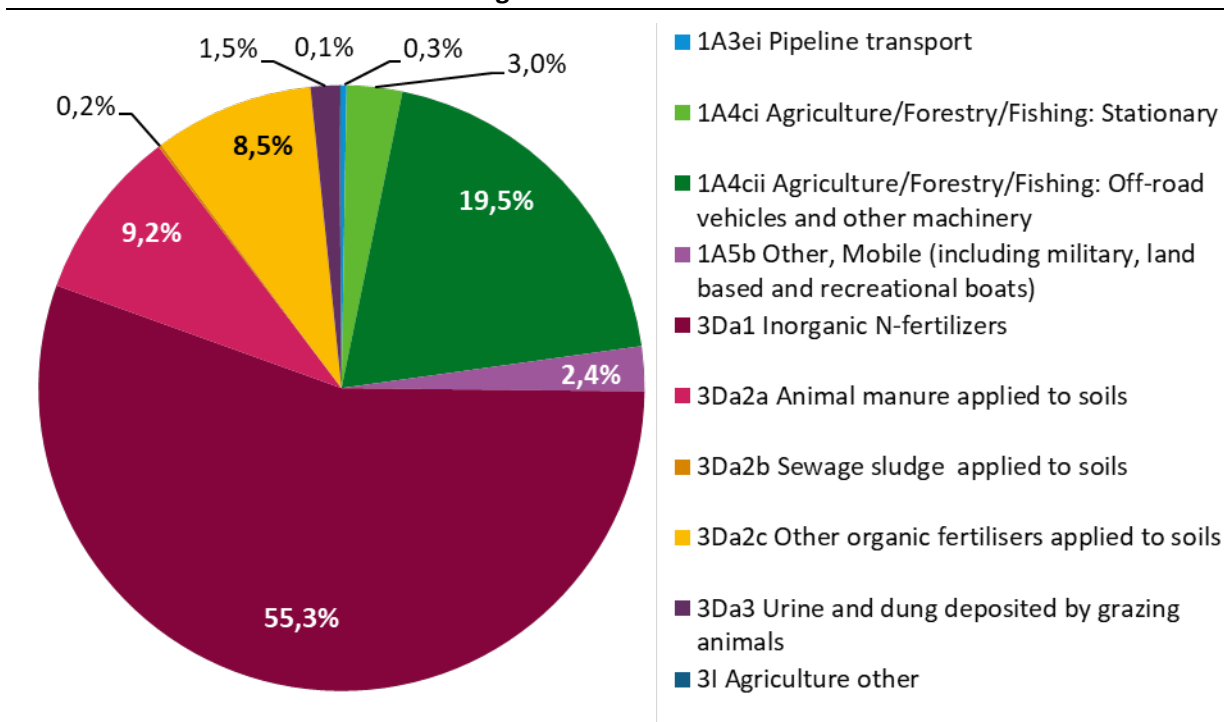


Die Verschlechterung der Korrelationen beim Jahresgang sind hier auf die Landwirtschaft zurückzuführen: In der RCG-Nest 2-Gitterbox, in der die Station Waldhof liegt, sind die lokalen NO_x-Emissionen durch die Landwirtschaft dominiert. Wie Abbildung 101 zeigt, stammen in dieser Gitterbox 55% der NO_x-Emissionen aus der Mineraldüngung und weitere 18% aus organischen Düngungen, insbesondere mit Gülle. Dies führt in der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu einem Konzentrationsmaximum der Stickstoffoxide im März, welches in den Messungen nicht vorhanden ist. Möglicherweise wurde bei der räumlichen Verteilung der Emissionen ein zu hoher Anteil auf die Gitterbox verteilt, in der die Station Waldhof liegt.

Der RMSE an der Station Waldhof vergrößert sich für fast alle Zeitreihen und Schadstoffe, die Zunahmen liegen jedoch überall unter 12%.

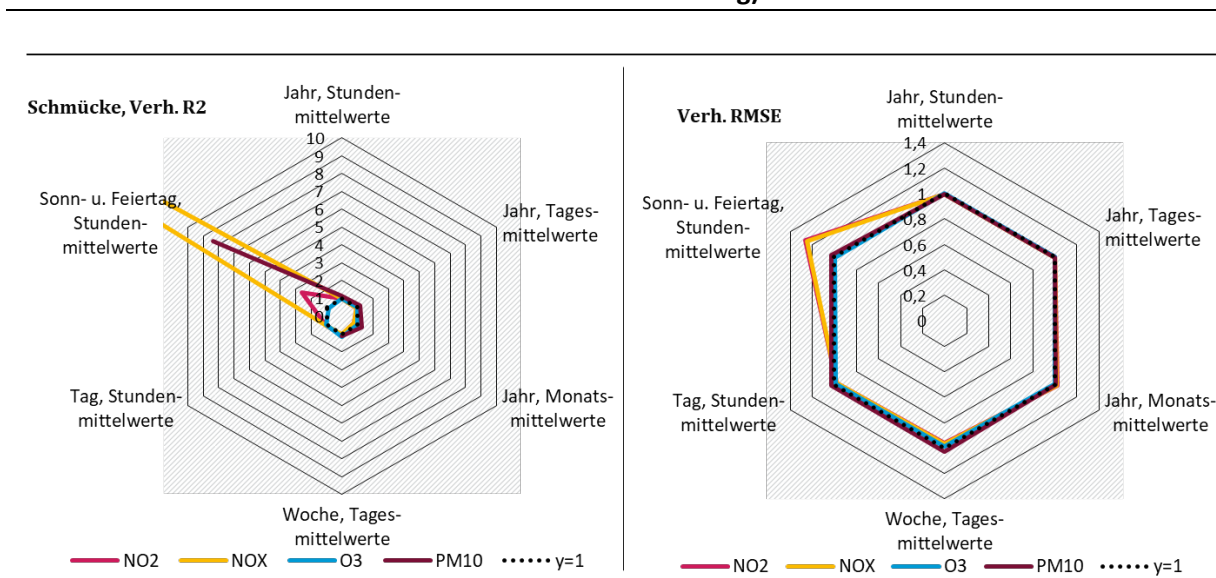
Die gleichzeitige Zunahme von R^2 und RMSE durch Einführung der dynamischen SF für die Stickstoffoxide am Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) ist auch hier ein Effekt eines stark negativen Bias (hier nicht dargestellt): Das Zeitverhalten verbessert sich (am stärksten bei NO_x um einen Faktor 2,7, ausgehend von einem niedrigen Wert für $R^2=0,36$ für statische SF), die Unterschätzung der Messwerte durch das Modell insgesamt nimmt jedoch zu.

Abbildung 101: Beiträge zu den NO_x-Emissionen in der RCG-Nest 2-Gitterbox, in der die Messstation Waldhof liegt



An der Station **Schmücke** springt insbesondere die Erhöhung des Werts für R² für NO_x beim Sonn- und Feiertag (Stundenmittelwerte) um den Faktor 33 ins Auge. Bei beiden Modellrechnungen sind die Werte für R² selbst jedoch gering (statische SF: R²=0,02, dynamische SF: R²=0,14). Die gleichzeitige Zunahme beim RMSE liegt auch hier am stärker negativen Bias.

Abbildung 102: Verhältnis dynamisch zu statisch jeweils für die statistischen Kenngrößen R² (links, hier bedeuten Verhältnisse > 1 eine Verbesserung) und RMSE (rechts, hier bedeuten Verhältnisse < 1 eine Verbesserung) an der Station Schmücke 2016



Insgesamt lässt sich festhalten:

- ▶ Für die meisten Stationen, Schadstoffe und Zeitskalen passen die unter Verwendung dynamischer SF modellierten Konzentrationen besser zu den gemessenen Konzentrationen als die unter Verwendung statischer SF modellierten Konzentrationen. Insbesondere die Berücksichtigung des Silvester-Feuerwerks und der Wegfall der morgendlichen Verkehrsspitze an Sonn- und Feiertagen führen zu deutlichen Verbesserungen.
- ▶ In einigen Fällen erhöhen die dynamischen SF zwar die Korrelationen mit den Messungen, vergrößern aber gleichzeitig den RMSE. Dies ist i.d.R. auf vergrößerte Werte des Modell-Bias zurückzuführen: Z.B. verbessert der Wegfall einer in der Messung nicht vorhandenen sonntäglichen Morgenspitze die zeitliche Übereinstimmung zwischen Modell und Messung, ein bereits zuvor vorhandener negativer Modell-Bias wird dadurch jedoch verstärkt.
- ▶ Die dynamischen SF sind im Vergleich zu den statischen Default-Profilen meist schärfer ausgeprägt. Je schärfer die Profile sind, desto wichtiger ist es, dass die zeitliche Lage der modellierten Maxima mit der in den Messungen übereinstimmt.
- ▶ Da die verschiedenen Quellgruppen sich in ihrem Zeitverhalten unterscheiden, müssen die Beiträge der Quellgruppen zu den Emissionen in den betrachteten Gitterboxen im richtigen Verhältnis zueinander gewichtet, damit das Zeitverhalten insgesamt optimal verbessert wird. Verbesserungen im Zeitverhalten hängen also auch von der räumlichen Verteilung der Emissionen ab.

7.8 Evaluierung SF Landwirtschaft

Die Evaluierung der SF der Landwirtschaft erfolgt anhand der NH_3 -Konzentrationen. Wie in Abschnitt 7.2.1 beschrieben, sind in den NH_3 -Messungen an Landwirtschaftsstationen einzelne Düngevorgänge als scharfe Konzentrationsspitzen sichtbar. Die Funktionen zur zeitlichen Verteilung dieser Emissionen beschreiben die Mittelung über eine große Zahl solcher Düngevorgänge. Für die Evaluierung der Landwirtschaft-SF wurde daher die räumliche und die zeitliche Auflösung so stark reduziert, dass pro Zeitschritt in den betrachteten Rastern eine größere Anzahl an Düngevorgängen enthalten sind. Es werden daher im Folgenden Monatsmittelwerte der Raster 15, 17, 21, 22 und 26 aus Abbildung 68 sowie die Hintergrundstationen Schmücke und Waldhof betrachtet.

Für das Jahr 2016 wurden die Parameter für die Funktionen zur zeitlichen Verteilung der Landwirtschaftsemissionen in Kapitel 7.2.2 an die Messungen angepasst. Es ist daher zu erwarten, dass die dynamischen SF 2016 zu Verbesserungen führen. Die Evaluierung für die Landwirtschaft wurde daher zusätzlich zum Jahr 2016 (Abschnitt 7.8.1) auch für das Jahr 2017 (Abschnitt 7.8.2) durchgeführt.

7.8.1 Evaluierung Landwirtschaft NH_3 2016

Die Zeitreihen der modellierten monatlichen mittleren NH_3 -Konzentrationen 2016 für diese Raster sowie für die Raster in Nest 2-Auflösung, in denen die Hintergrundstationen Schmücke und Waldhof liegen, sind für die RCG-Modellrechnungen mit statischen SF (RCG-Default) und mit dynamischen SF in Abbildung 103 dargestellt. Ebenfalls dargestellt sind die gemessenen monatsmittleren Konzentrationen über alle in diesen Rastern liegenden Messstationen.

Raster 15 enthält mit einer Ausnahme Messstationen im Erzgebirge in Grenznähe zu Tschechien. Hier werden, ebenso wie auf der Schmücke, sehr geringe NH_3 -Konzentrationen gemessen. Raster 21 liegt überwiegend in Niedersachsen im Gebiet mit vielen Schweinemastbetrieben, hier werden die höchsten NH_3 -Konzentrationen in Deutschland gemessen. Beides wird vom Modell unabhängig vom gewählten Zeitverhalten für die Emissionen wiedergegeben.

Abbildung 103 zeigt bereits qualitativ, dass für das Jahr 2016 die modellierten Konzentrationsverläufe auf Basis dynamischer SF (rote Linien) in den meisten Fällen besser zu den Messreihen (grüne Linien) passen als die Default-Modellrechnung (schwarze Linien). Die Maxima sind stärker ausgeprägt und liegen in den Monaten, in denen auch die Messwerte ihre Maxima annehmen.

In Raster 15 wird im Dezember (Monat 12) ein Anstieg der NH_3 -Konzentrationen gemessen, der in beiden Modellrechnungen nicht sichtbar ist. Eine mögliche Erklärung für diesen Anstieg ist, dass am Ende des Jahres vor dem einsetzenden Frost noch überschüssige Gülle ausgebracht worden ist. Bei dem insgesamt niedrigen Konzentrationsniveau in Raster 15 kann dies im Mittelwert sichtbar werden. Nach der Düngeverordnung war dies im Jahr 2016 noch zulässig, ab dem Jahr 2017 jedoch nicht mehr. Wegen dieser Verschärfung der Düngeverordnung wurde darauf verzichtet, eine zusätzliche Düngeausbringung im Dezember 2016 vor dem Frost in die Zeitfunktionen einzubauen.

In Abbildung 104 sind die statistischen Kenngrößen R (Pearson-Korrelation), Bias und RMSE jeweils für die modellierten Zeitreihen der Monatsmittelwerte (RCG Modellrechnung unter Verwendung statischer bzw. dynamischer SF) und die entsprechenden Messwerte aus Abbildung 103 dargestellt.

Abbildung 103: Zeitreihen der NH_3 -Monatsmittelwerte 2016 der für die Evaluierung gewählten Landwirtschafts-Raster 15, 17, 21, 22 und 26 (s. Abbildung 68) sowie der Hintergrund-Stationen Schmücke und Waldhof, jeweils Modellrechnung mit statischen und mit dynamischen SF sowie Messwerte; zur Orientierung ist Abbildung 68 unten links als kleine Karte eingefügt

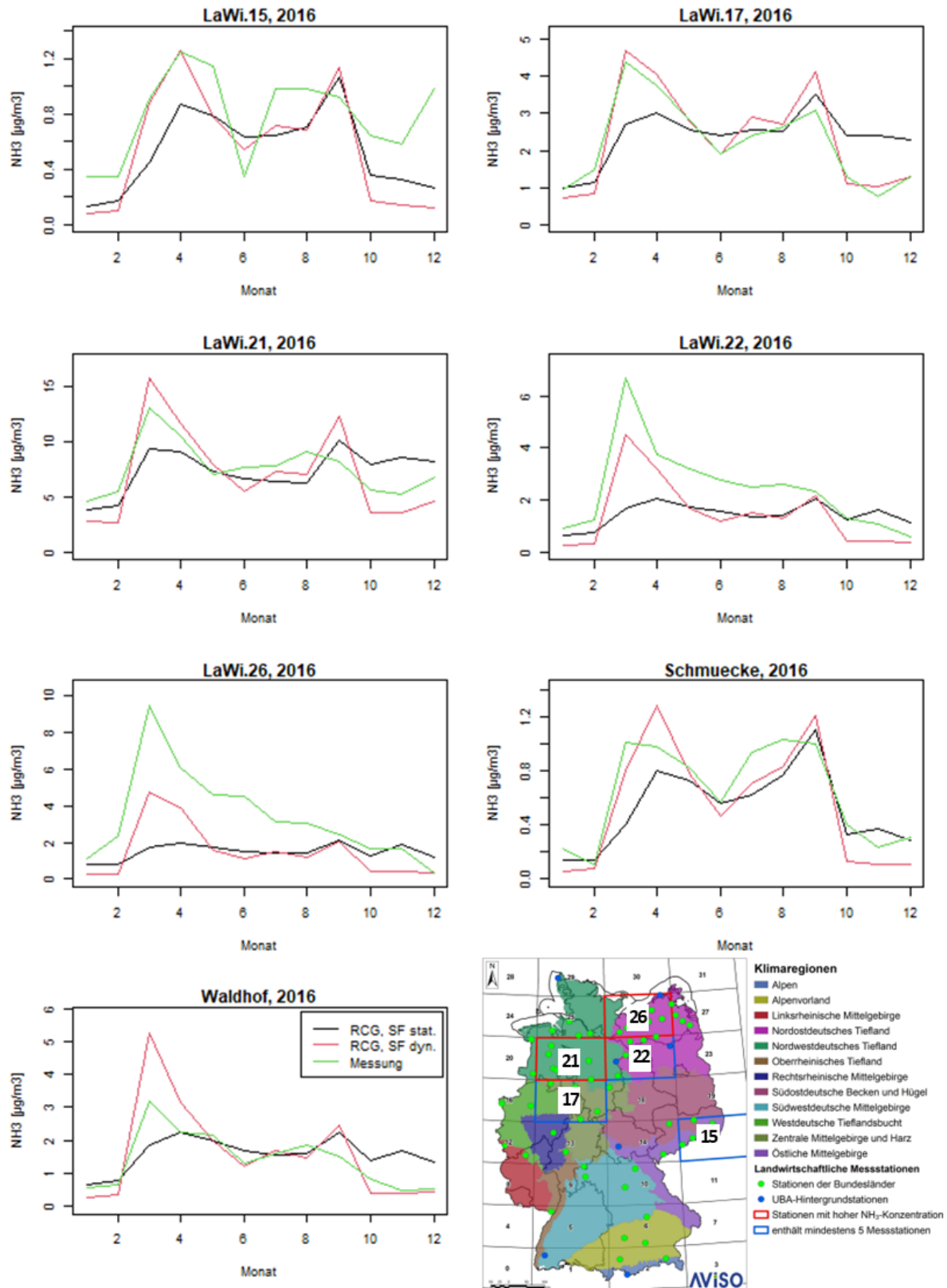
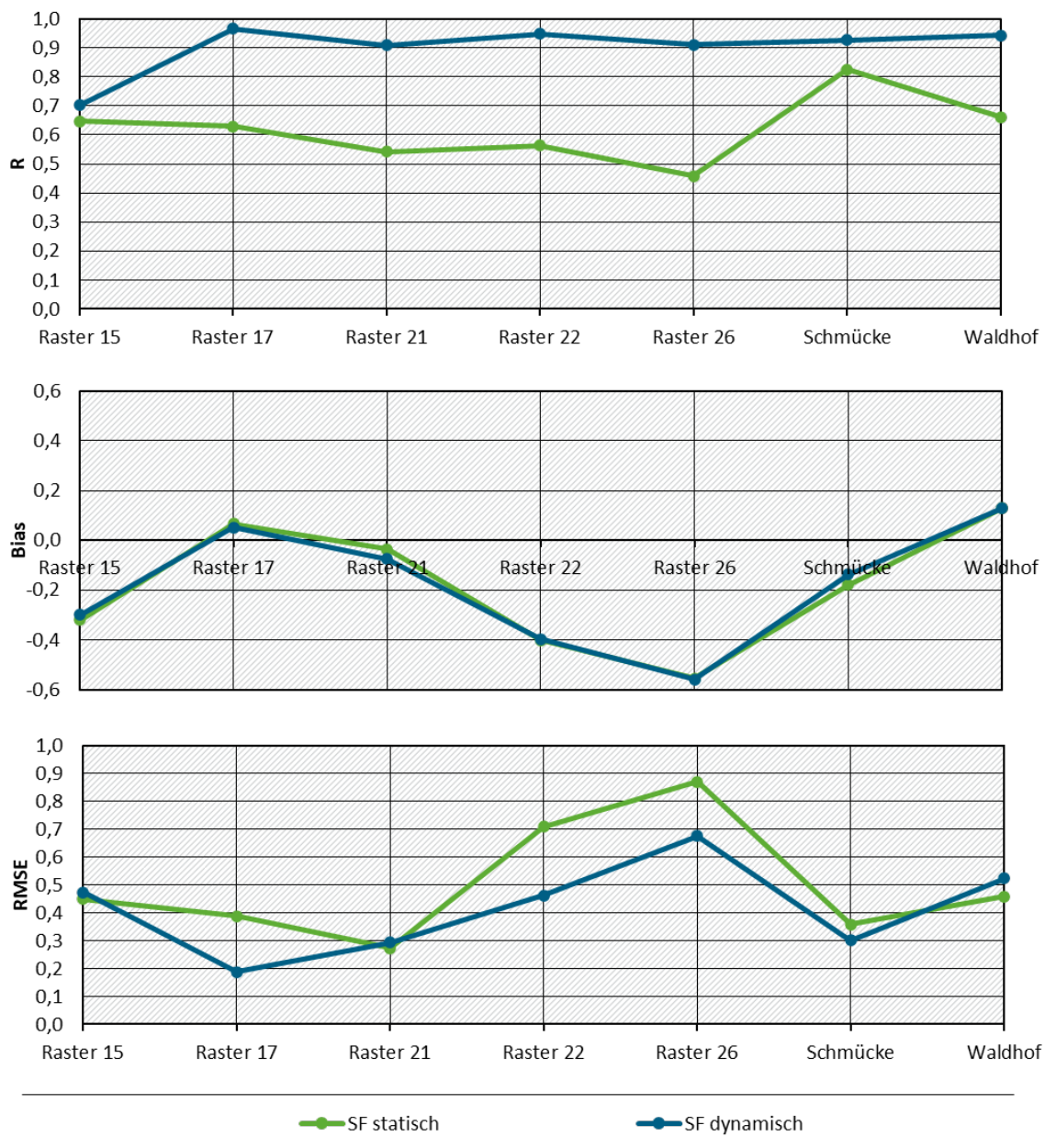


Abbildung 104: Evaluierung Landwirtschaft NH₃ 2016: Statistische Kenngrößen R (Pearson-Korrelation, oben), Bias (Mitte) und RMSE (unten) jeweils für die modellierten Zeitreihen der Monatsmittelwerte (RCG-Modellrechnung unter Verwendung statischer bzw. dynamischer SF) und die entsprechenden Messwerte aus Abbildung 103



Der **Korrelationskoeffizient R** zeigt deutliche Verbesserungen der Modellrechnung im Vergleich zu den Messungen. Mit Ausnahme von Raster 15, wo sehr niedrige NH₃-Konzentrationen gemessen werden und wo es wie oben beschrieben zu einem im Modell nicht abgebildeten Anstieg der NH₃-Konzentrationen im Dezember 2016 kam, liegt R zwischen der Modellrechnung mit dynamischen SF und den Messungen für alle betrachteten Raster über 0,9. D. h., es werden in diesen Rastern über 80% (R²) der gemessenen Varianz des Jahresgangs auf Monatsebene durch die Modellrechnung erklärt.

Der **Bias** (systematischer Fehler des Modells) ändert sich durch die neuen Zeitfunktionen im Modell nur wenig. Mit Ausnahme von Raster 17 und Waldhof ist er überall negativ (Unterschätzung der Messwerte durch das Modell überwiegt).

Der **RMSE** (statistischer Fehler des Modells) wird durch die neuen Zeitfunktionen an der Schmücke leicht und in Raster 17, 22 und 26 deutlich reduziert. Am Waldhof sowie den Rastern 15 und 21 erhöht sich der RMSE leicht.

Insgesamt führen die dynamischen SF bei der betrachteten räumlichen und zeitlichen Auflösung zu einer deutlichen Verbesserung des Zeitverlaufs der modellierten NH_3 -Konzentrationen. Wie oben beschrieben ist dies auch auf die spezifische Anpassung der entsprechenden Parameter für Deutschland und das Jahr 2016 zurückzuführen.

7.8.2 Evaluierung Landwirtschaft NH_3 2017

Die Evaluierung der landwirtschaftlichen Zeitfunktionen wurde auch für das Jahr 2017 durchgeführt, wieder wurden jeweils modellierte NH_3 -Monatsmittelwerte der ausgewählten Landwirtschafts-Raster aus RCG-Modellrechnungen mit statischen und dynamischen SF mit entsprechend gemittelten Messwerten verglichen.

Abbildung 105 zeigt die für das Jahr 2017 modellierten Konzentrationsverläufe auf Basis statischer SF (schwarze Linien) und dynamischer SF (rote Linien) jeweils im Vergleich mit den Messreihen (grüne Linien). Auch hier führt die stärkere Ausprägung der Frühjahrs-Maxima für die meisten Stationen zu besseren Übereinstimmungen mit den Messwerten; in Raster 17 und 21 liegt das Frühjahrsmaximum jetzt etwas zu früh, für die Hintergrundstationen Schmücke und insbesondere Waldhof ist es zu stark ausgeprägt.

Für die Gitterzelle mit der Station Waldhof war auch schon 2016 zu beobachten, dass der modellierte Jahresgang ggü. den Messwerten zu stark ausgeprägt war. Dies ist möglicherweise auf einen (zu) hohen Anteil lokaler Landwirtschaftsemissionen in diesem Raster zurückzuführen: Wie oben beschrieben wurden die Landwirtschaftsraster so gewählt, dass über eine größere Anzahl Messstationen in diesen Rastern gemittelt werden kann; bei den unbelasteten Hintergrundstationen Waldhof und Schmücke wurde angenommen, dass lokale Emissionen gegenüber dem Transport einen geringen Beitrag liefern, und dass durch den Weg der Luftpakete zur Station eine Mittelung über die dabei passierten Felder stattfindet. Für die Station Waldhof ist dies möglicherweise nicht gegeben.

In Abbildung 106 sind die statistischen Kenngrößen R (Pearson-Korrelation), Bias und RMSE jeweils für die modellierten Zeitreihen der Monatsmittelwerte (RCG Modellrechnung unter Verwendung statischer bzw. dynamischer SF) und die entsprechenden Messwerte aus Abbildung 105 dargestellt.

Abbildung 105: Zeitreihen der NH₃-Monatsmittelwerte 2017 der für die Evaluierung gewählten Landwirtschafts-Raster 15, 17, 21, 22 und 26 (s. Abbildung 68) sowie der Hintergrund-Stationen Schmücke und Waldhof, jeweils Modellrechnung mit statischen und mit dynamischen SF sowie Messwerte; zur Orientierung ist Abbildung 68 unten links als kleine Karte eingefügt

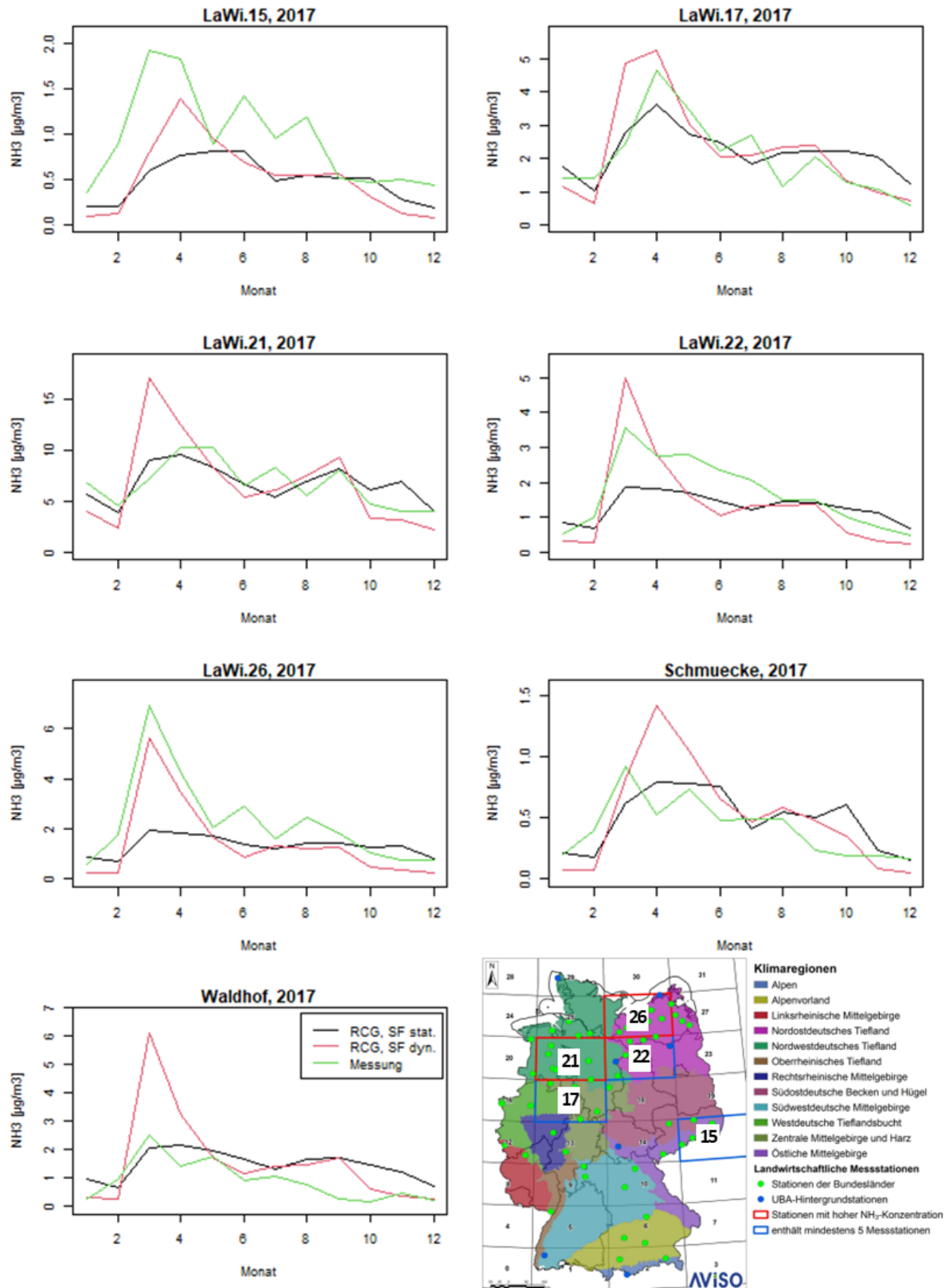
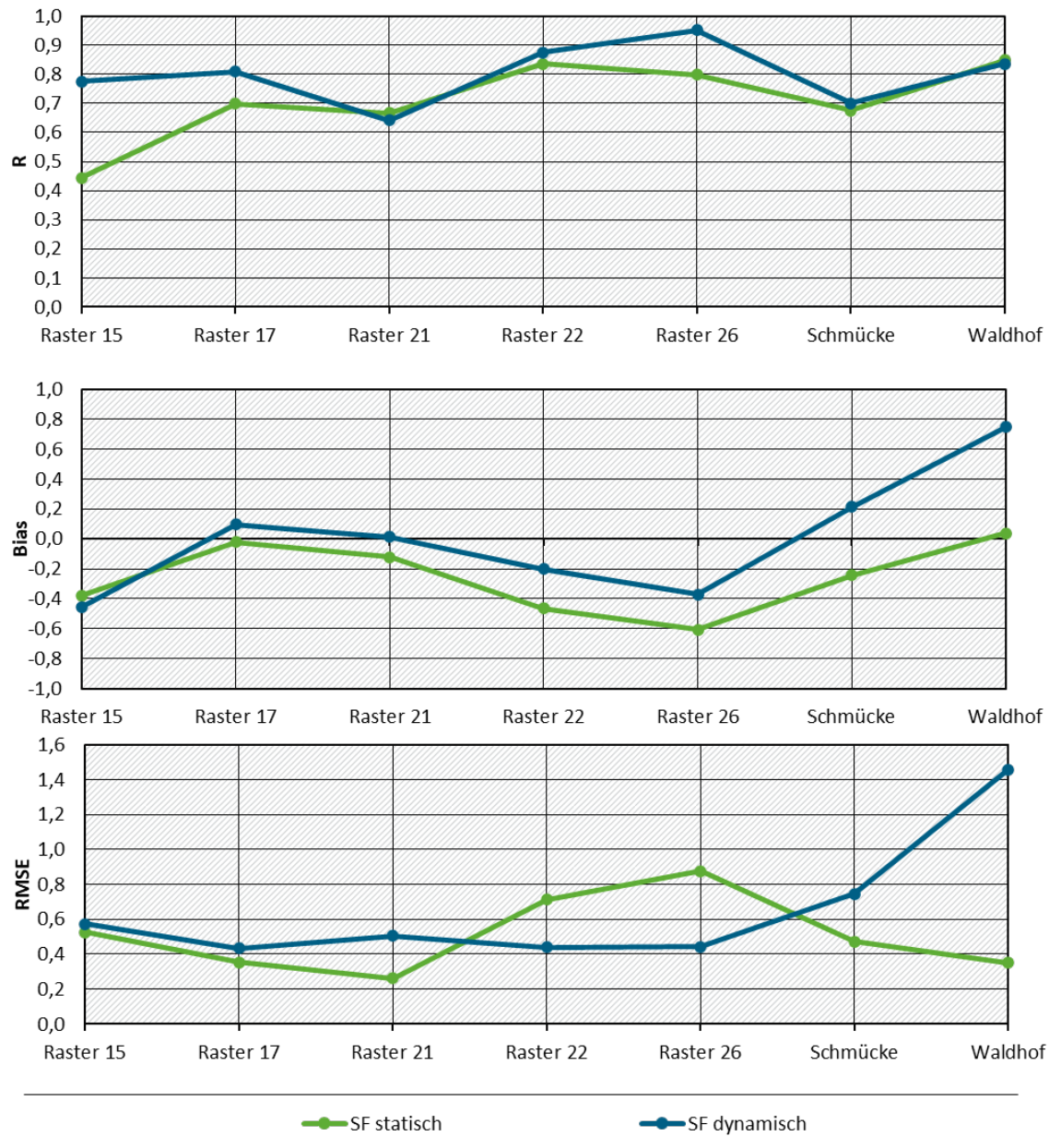


Abbildung 106: Evaluierung Landwirtschaft NH₃ 2017: Statistische Kenngrößen R (Pearson-Korrelation, oben), Bias (Mitte) und RMSE (unten) jeweils für die modellierten Zeitreihen der Monatsmittelwerte (RCG-Modellrechnung unter Verwendung statischer bzw. dynamischer SF) und die entsprechenden Messwerte aus Abbildung 105



Der **Korrelationskoeffizient R** zeigt auch für 2017 für die meisten Stationen Verbesserungen der Modellrechnung im Vergleich zu den Messungen bei Verwendung der dynamischen SF. Lediglich in Raster 21 und an der Station Waldhof nimmt R geringfügig ab.

Der **Bias** (systematischer Fehler des Modells) ist bei der Default-Modellrechnung fast überall negativ (Unterschätzung der monatsmittleren NH₃-Konzentration durch das Modell), in Raster 17 nahezu gleich Null und für die Station Waldhof leicht positiv. Durch Verwendung der dynamischen SF vergrößert sich der negative Bias für Raster 15 leicht, für Raster 17 wird der Bias leicht positiv und für die Station Waldhof deutlich positiv. Für die Station Schmücke wird

aus dem zuvor negativen Bias ein positiver Bias von vergleichbarem Betrag, für Raster 22 und 26 wird der Betrag des negativen Bias deutlich verkleinert und für Raster 21 ist der Bias bei dynamischen SF nahezu gleich Null. Insgesamt führt die Verwendung dynamischer SF zu einer Verbesserung.

Der **RMSE** (statistischer Fehler des Modells) wird durch die neuen Zeitfunktionen in Raster 15, 17 und 21 leicht sowie an der Station Schmücke und insbesondere an der Station Waldhof deutlich vergrößert. In Raster 22 und 26 wird der RMSE verkleinert. Mit Ausnahme der Hintergrundstationen Schmücke und Waldhof liegt der RMSE bei Verwendung dynamischer SF überall zwischen 40% und 60% und variiert damit weniger stark als in der Default-Modellrechnung.

Für die Landwirtschaft lässt sich als **Fazit** festhalten, dass die für das Jahr 2016 angepassten Zeitfunktionen insgesamt auch für das Jahr 2017 zu Verbesserungen der Modellrechnung führen, wie die für das Zeitverhalten wichtigste Größe, die Korrelation, zeigt. Eine mögliche Erklärung für Abweichungen an der Station Waldhof sind hohe lokale Emissionen im Modell.

Es wird jedoch deutlich, dass neben der Temperatur auch weitere hier noch nicht berücksichtigte Einflüsse auf die Zeitpunkte der Düngerausbringung relevant sind, wie z.B. die tatsächlich angebauten Feldfrüchte.

7.9 Auswertungen zur Feinstaub-Episode Anfang 2017

Insbesondere im Winter kann es zu sogenannten Feinstaub-Episoden kommen. Während solcher Episoden sind die PM_{10} - und $PM_{2.5}$ -Konzentrationen über einen längeren Zeitraum und über räumlich zusammenhängende größere Gebiete deutlich erhöht. Episoden können nur schwer in Modellen abgebildet werden.

Eine solche Episode fand vom 18. bis zum 26.01.2017 über Deutschland statt und ist in Abbildung 107 dargestellt. PM_{10} -Tagesmittelwerte über $50 \mu g/m^3$ sind in der Abbildung rot eingefärbt. In den Projekten „Grenzüberschreitende Luftverunreinigungen“ (UBA) und „PM Ost“ (Berliner Senatsverwaltung) wurde diese Feinstaub-Episode als „hausgemacht“ (d.h. nicht durch grenzüberschreitenden Transport bedingt) identifiziert.

Im Folgenden wird untersucht, ob eine RCG-Modellrechnung 2017 unter Verwendung dynamischer SF die Episode besser erklären kann als die entsprechende Default-Modellrechnung.

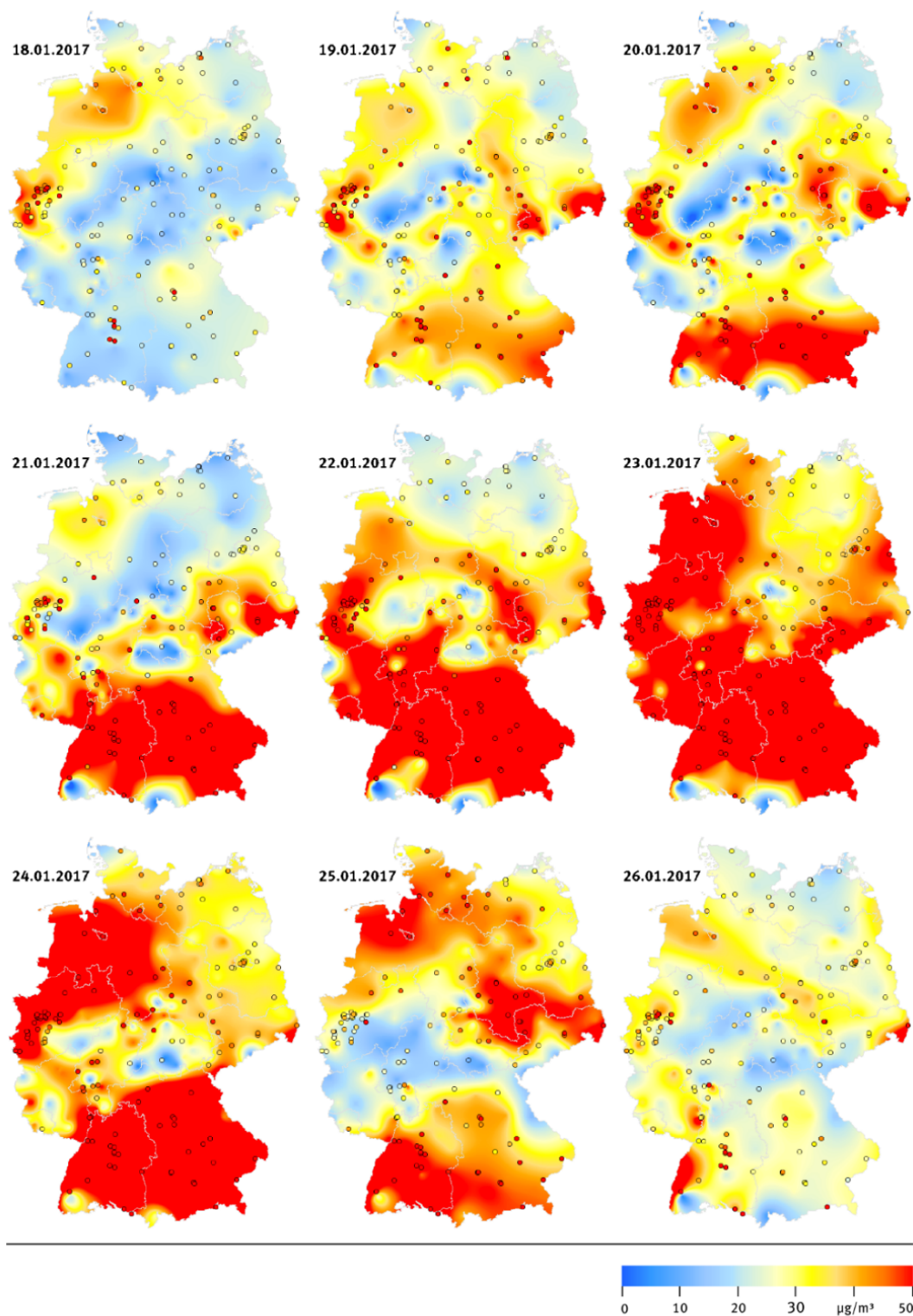
In Abbildung 108 sind die modellierten PM_{10} -Tagesmittelwerte im Zeitraum der Episode unter Verwendung statischer SF (Default) dargestellt. Der höchste auftretende Wert von $144 \mu g/m^3$ liegt in Tschechien, die Farbskala bis $50 \mu g/m^3$ ist mit der aus Abbildung 107 vergleichbar. Es ist deutlich zu erkennen, dass die rot eingefärbten Flächen sowohl räumlich wie auch zeitlich begrenzter sind als in Abbildung 107, das Modell kann die Episode nicht reproduzieren.

In Abbildung 108 ist die Lage der für die Evaluierung ausgewählten Stationen eingetragen. Ein Abgleich mit Abbildung 107 zeigt, dass insbesondere die Station Augsburg LfU sowie in geringerem Maße die Stationen Emsland und Mülheim Styrum (diese beiden zeitlich im zweiten Drittel) von der Episode betroffen sind. Die anderen für die Evaluierung ausgewählten Stationen liegen in nicht betroffenen Gebieten oder ragen nach oben aus der betroffenen Luftschicht heraus (Schmücke, Schauinsland).

Abbildung 107: Feinstaub-Episode vom 18. bis zum 26.01.2017 über Deutschland: PM₁₀-Tagesmittelwerte (gemessen, Interpolation); Bildquelle: UBA²

Tagesmittelwerte der Partikelkonzentration PM₁₀ in Mikrogramm pro Kubikmeter Luft

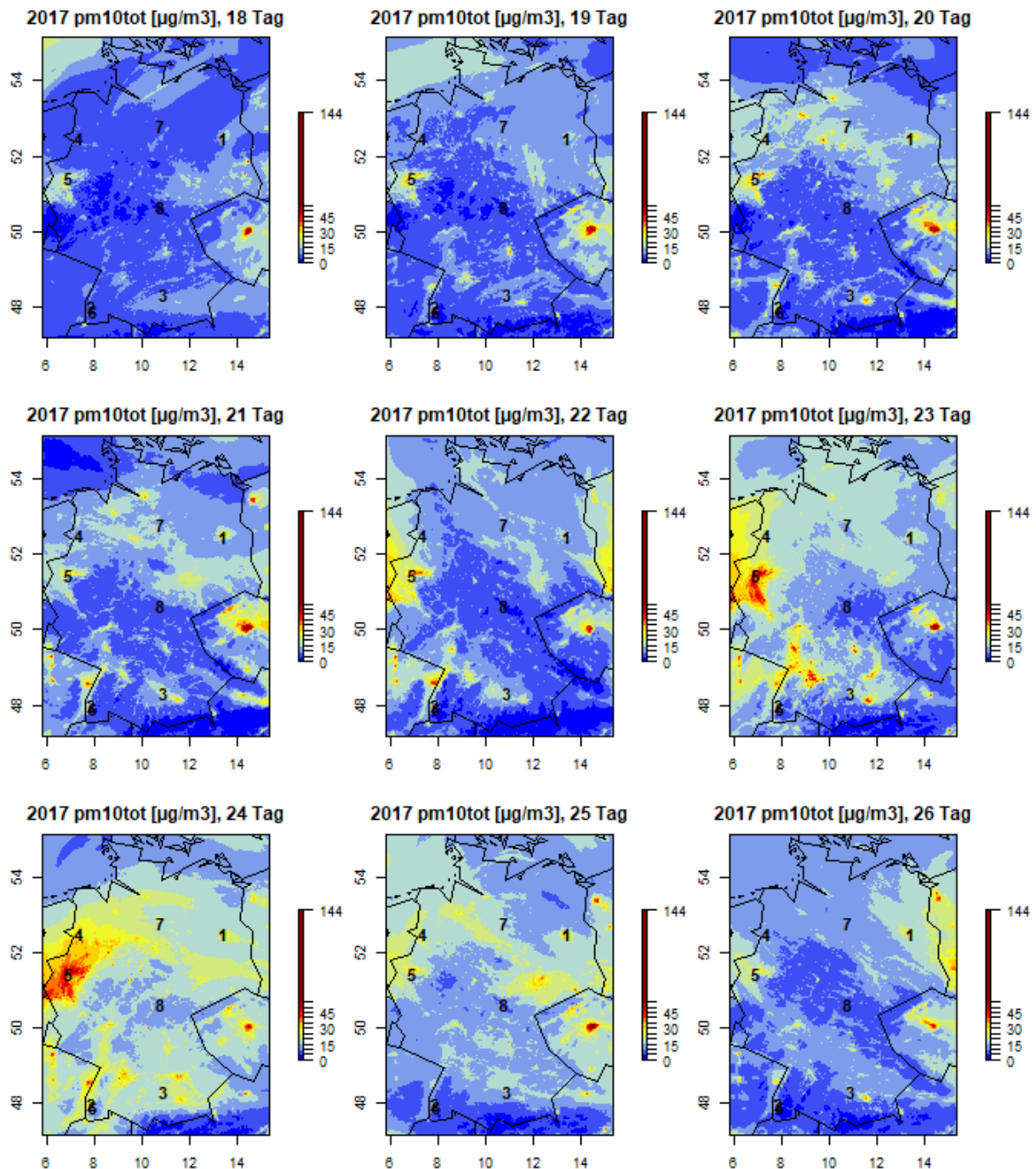
Episode vom 18.01.2017 bis 26.01.2017



Quelle: Messungen der Bundesländer und des Umweltbundesamtes 2017

² <https://www.umweltbundesamt.de/daten/luft/luftdaten/karten/>

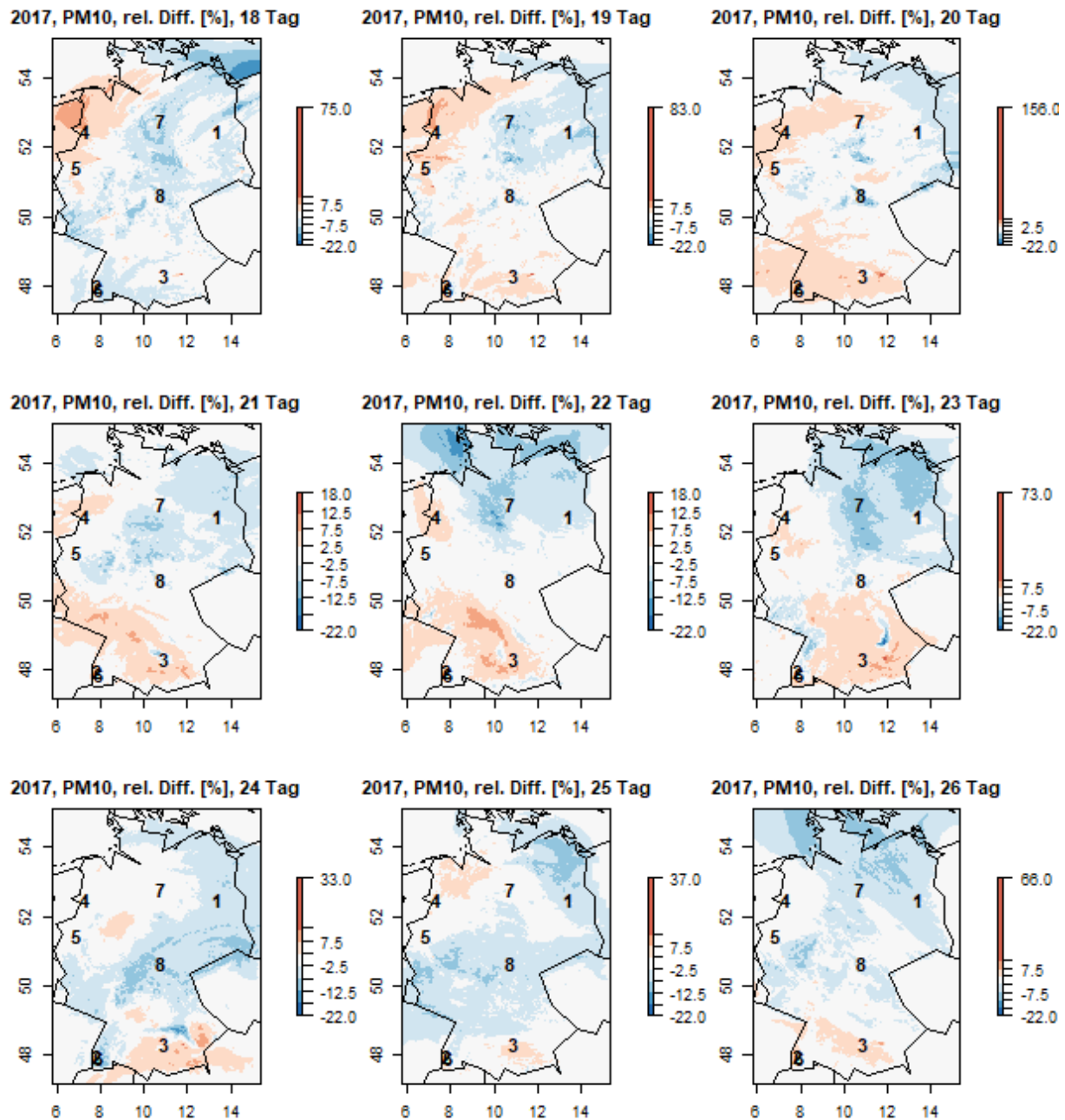
Abbildung 108: Default-Modellrechnung 2017: PM₁₀-Tagesmittelwerte während der Feinstaub-Episode vom 18. bis zum 26.01.2017; Standorte der für die Evaluierung gewählten Stationen: 1: Berlin-Neukölln, 2: Freiburg, 3: Augsburg LfU, 4: Emsland, 5: Mülheim Styrum, 6: Schauinsland, 7: Waldhof, 8: Schmücke



Hier nicht dargestellt sind die modellierten PM₁₀-Tagesmittelwerte im Zeitraum der Episode unter Verwendung dynamischer SF: Die Karten sehen denen aus Abbildung 108 so ähnlich, dass mit bloßem Auge kaum Unterschiede erkennbar sind, die rot eingefärbten Gebiete mit modellierten PM₁₀-Tagesmittelwerten über 50 µg/m³ sind nicht ausgedehnter als in der Default-Modellrechnung.

Abbildung 109 zeigt die relativen Differenzen der PM₁₀-Tagesmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF während der Feinstaub-Episode vom 18. bis zum 26.01.2017.

Abbildung 109: Relative Differenz der PM₁₀-Tagesmittelwerte der RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF zu der mit statischen SF während der Feinstaub-Episode vom 18. bis zum 26.01.2017; Standorte der für die Evaluierung gewählten Stationen: 1: Berlin-Neukölln, 2: Freiburg, 3: Augsburg LfU, 4: Emsland, 5: Mülheim Styrum, 6: Schauinsland, 7: Waldhof, 8: Schmücke



An den Karten der relativen Differenzen lässt sich Folgendes erkennen:

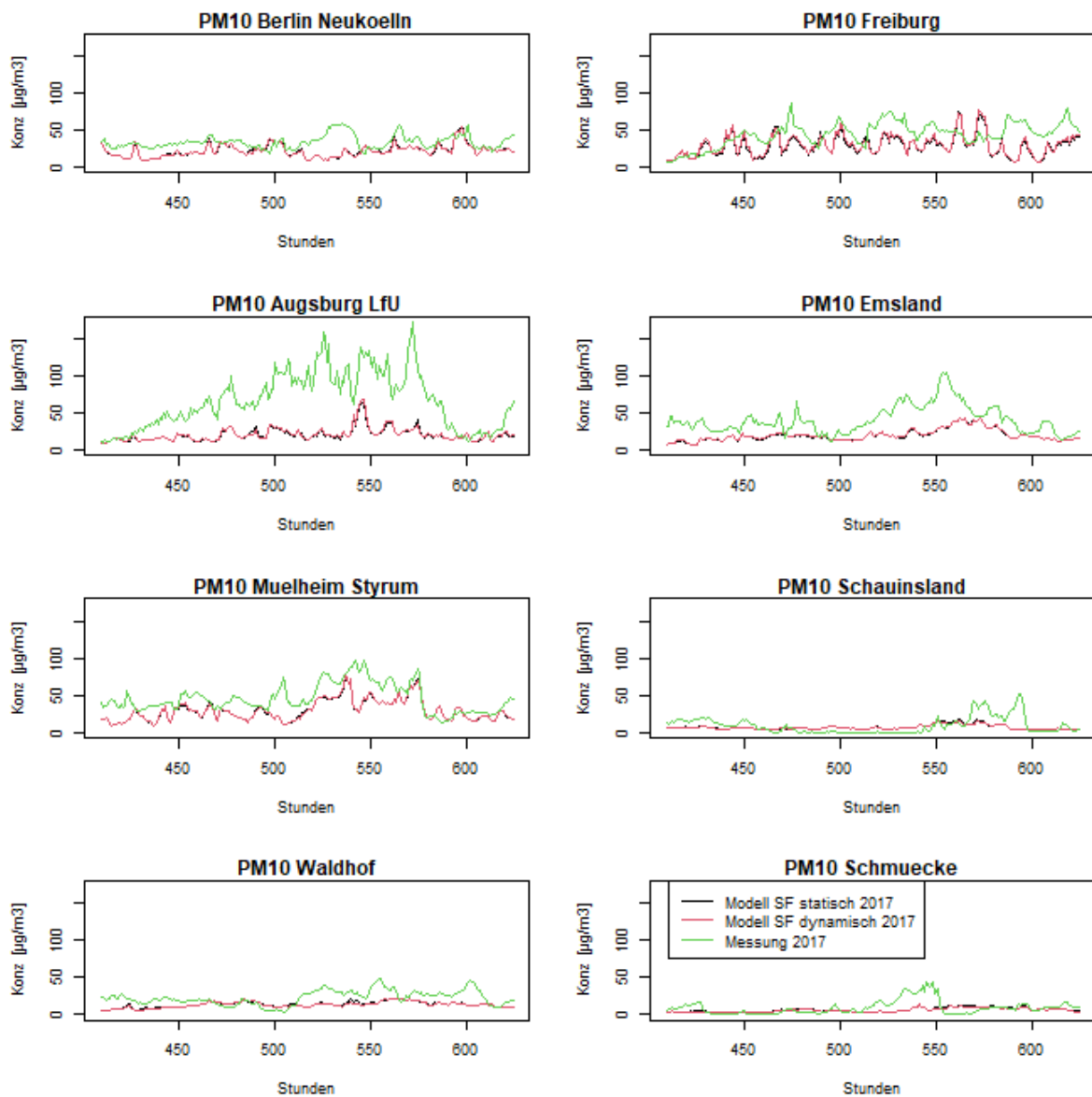
- ▶ In einzelnen Gitterzellen führt die Verwendung dynamischer SF zu großen Änderungen (maximale Zunahme: 156%) der modellierten tagesmittleren PM₁₀-Konzentrationen, dies ist auf Änderungen der Emissionsprofile einzelne starker Punktquellen zurückzuführen.
- ▶ Der Transport von Luftpaketen mit geänderten Konzentrationen über gering belastete Gebiete wie z.B. die Nord- und Ostsee führt dort zu deutlichen prozentualen Änderungen der PM₁₀-Konzentrationen, auch wenn sich in diesen Gebieten selbst keine Quellen befinden.
- ▶ Die relativen Änderungen der PM₁₀-Konzentrationen in der Größe zwischen $\pm 5\%$ ergeben flächige Muster; die Gebiete mit Konzentrationszunahmen (hellrot eingefärbte Flächen in Abbildung 109) entsprechen ziemlich genau den Gebieten der Feinstaub-Episode (rot eingefärbte Flächen in Abbildung 107). Diese Änderungen sind vornehmlich durch die geänderten SF der Kleinf Feuerungsanlagen bedingt, je nach Klimaregion kommt es im Januar 2017 zu Zu- oder Abnahmen der Feinstaub-Emissionen aus Kleinf Feuerungsanlagen ggü. dem statischen Default-Profil.

Nur durch Verwendung dynamischer SF kann die Feinstaub-Episode also nicht vom Modell reproduziert werden, dazu müssten die modellierten Konzentrationen nicht um ca. 5%, sondern um einen Faktor zwischen fünf und zehn erhöht werden. Die Tendenz, in welchen Gebieten es an welchen Tagen zu Zunahmen kommt, ist jedoch richtig getroffen und weist auf die Kleinf Feuerungsanlagen als mögliche zur Episode beitragende Quellgruppe hin.

In Abbildung 110 sind für die Gitterzellen mit den für die Evaluierung gewählten Stationen im Zeitraum der Episode die Zeitreihen der stündlichen PM₁₀ Konzentrationen jeweils aus der RCG-Modellrechnung unter Verwendung statischer (schwarze Linien) und dynamischer (rote Linien) SF im Vergleich mit den Messwerten (grüne Linien) dargestellt.

Insbesondere an der Station Augsburg, aber auch an den Stationen Emsland und Mülheim Styrum ist die Episode in den Messwerten deutlich zu erkennen. Keine der Modellrechnungen zeigt über längere Zeiträume erhöhte PM₁₀-Konzentrationen $> 50\mu\text{g}/\text{m}^3$, die beiden Modellrechnungen unterscheiden sich kaum, die roten Linien liegen fast überall auf den schwarzen Linien, so dass diese kaum erkennbar sind.

Abbildung 110: Zeitreihen der stündlichen PM₁₀-Konzentrationen während der Feinstaub-Episode vom 18. bis zum 26.01.2017 in den Gitterzellen mit den für die Evaluierung gewählten Stationen, jeweils Modellrechnung mit statischen und mit dynamischen SF sowie Messwerte



In Tabelle 22 sind für die Gitterzellen mit den ausgewählten Stationen die statistischen Kenngrößen R^2 (es treten keine negativen Korrelationen auf, deshalb wird hier das Quadrat des Korrelationskoeffizienten angegeben), Bias und RMSE jeweils zwischen den Zeitreihen der unter Verwendung statischer und dynamischer SF modellierten stündlichen PM₁₀-Konzentrationen über den Zeitraum der Episode und den entsprechenden Messwerten ausgewiesen. Ebenfalls ausgewiesen ist jeweils das Verhältnis der unter Verwendung dynamischer SF berechneten Größe zu der unter Verwendung statischer SF berechneten Größe.

Tabelle 22: Statistische Kenngrößen R^2 (Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten), Bias und RMSE (root mean square error) jeweils zwischen den Zeitreihen der stündlichen PM_{10} -Messwerte an den ausgewählten Stationen während der Episode vom 18. bis zum 26. 01.2017 und den entsprechenden Modellwerten unter Verwendung statischer (stat.) bzw. dynamischer (dyn.) SF sowie für alle Größen jeweils das Verhältnis dynamisch zu statisch

| Station | R^2 stat. | R^2 dyn. | R^2 dyn/stat | Bias stat. | Bias dyn. | Bias dyn/stat | RMSE stat. | RMSE dyn. | RMSE dyn/stat |
|---------|-------------|------------|----------------|------------|-----------|---------------|------------|-----------|---------------|
| DEBE034 | 0,136 | 0,133 | 0,978 | -0,348 | -0,356 | 1,022 | 0,472 | 0,476 | 1,008 |
| DEBW084 | 0,087 | 0,093 | 1,071 | -0,350 | -0,323 | 0,924 | 0,531 | 0,510 | 0,962 |
| DEBY099 | 0,575 | 0,588 | 1,022 | -0,696 | -0,686 | 0,986 | 0,861 | 0,850 | 0,987 |
| DENI043 | 0,090 | 0,094 | 1,041 | -0,520 | -0,511 | 0,982 | 0,639 | 0,630 | 0,985 |
| DENW038 | 0,652 | 0,660 | 1,012 | -0,363 | -0,355 | 0,978 | 0,481 | 0,474 | 0,984 |
| DEUB004 | 0,386 | 0,384 | 0,994 | -0,349 | -0,362 | 1,037 | 1,048 | 1,055 | 1,006 |
| DEUB005 | 0,303 | 0,281 | 0,928 | -0,402 | -0,418 | 1,040 | 0,567 | 0,582 | 1,026 |
| DEUB029 | 0,261 | 0,271 | 1,038 | -0,326 | -0,365 | 1,119 | 1,011 | 1,008 | 0,997 |

Die Veränderungen der statistischen Kenngrößen liegen alle im einstelligen Prozentbereich, dies bestätigt den qualitativen Eindruck aus Abbildung 110: Im Zeitraum der Episode sind die Änderungen durch die dynamischen SF gering. Die hier verwendeten dynamischen SF können quantitativ nicht zur Erklärung der Episode beitragen. Dennoch bleibt festzuhalten, dass die räumlichen Muster der relativen Änderungen der modellierten PM_{10} -Konzentrationen (Abbildung 109) qualitativ einen Beitrag der Quellgruppe „Kleinf Feuerungsanlagen“ zur Feinstaub-Episode zeigen.

7.10 Fazit Evaluierung anhand ausgewählter Stationen

Die Auswertungen der Zeitprofile modellierter und gemessener Schadstoffkonzentrationen auf unterschiedlichen Zeitskalen werden im Folgenden zusammengefasst.

Die Änderungen folgender Zeitprofile haben große Einzelwirkungen auf die modellierten Konzentrationen:

- ▶ Die Berücksichtigung des Silvester-Feuerwerks führt insbesondere in den Großstädten (Berlin, Augsburg, Mülheim) zu Verbesserungen der PM_{10} -Zeitreihen für den Jahresgang der Stundenwerte, den jahresmittleren Tagesgang an Sonn- und Feiertagen, den mittleren Tagesgang im Winter sowie, etwas schwächer ausgeprägt, auch den Jahresgang der Monatswerte.
- ▶ Änderungen beim Jahresgang (Monatswerte) sind insbesondere durch die Änderungen bei den Zeitprofilen der Landwirtschaftsemissionen bedingt. Auf dieser Zeitskala wurden auch andere Emissionsprofile geändert, wie z.B. Kleinf Feuerungsanlagen, Kraftwerke, Industrieanlagen oder der Flugverkehr. Bei den Kleinf Feuerungsanlagen sind die Änderungen

durch die dynamischen Zeitprofile jedoch weniger ausgeprägt, und Änderungen bei den Emissionsprofilen von Kraftwerken oder beim Flugverkehr in höhere Modellschichten sind an den für die Evaluierung betrachteten Stationen weniger sichtbar.

- ▶ Der Jahresgang von NO₂ hängt photochemisch mit dem Jahresgang von Ozon zusammen, neben der Sonneneinstrahlung beeinflusst auch die Ozonkonzentration die Lage des Gleichgewichts zwischen NO und NO₂. Ozon wird vom Modell häufig überschätzt. Eine Änderung des Bias beim Ozon im Jahresverlauf kann vergleichbare Auswirkungen auf den NO₂-Jahresgang haben wie der Jahresgang der NO_x-Quellen.
- ▶ Auf kurzen Zeitskalen (Tagesgänge aus Stundenwerten) haben Änderungen der Zeitprofile des Straßenverkehrs den größten Einfluss auf die Übereinstimmung der modellierten Konzentrationen mit den Messwerten. Insbesondere der Wegfall der Morgenspitze an Samstagen sowie an Sonn- und Feiertagen führt überall zu einer deutlichen Verbesserung der Modellrechnung. Die deutschlandweit gemittelten Innerortsprofile führen häufig, jedoch nicht an allen Stationen zu Verbesserungen.

Insgesamt lässt sich festhalten, dass die unter Verwendung dynamischer SF modellierten Konzentrationen für die meisten Stationen, Schadstoffe und Zeitskalen besser zu den gemessenen Konzentrationen passen als die unter Verwendung statischer SF modellierten Konzentrationen.

Die hohen gemessenen Feinstaub-Konzentrationen (PM₁₀-Tagesmittelwerte zum Teil deutlich über 100 µg/m³) während der Feinstaub-Episode vom 18. bis zum 26. 01.2017 können auch unter Verwendung von dynamischen SF vom Modell nicht reproduziert werden. Die Muster der relativen Änderungen der modellierten Feinstaub-Konzentrationen zwischen den Modellrechnungen mit statischen und dynamischen SF weisen darauf hin, dass die Kleinf Feuerungsanlagen bei der Entstehung der Feinstaub-Episode eine Rolle spielen. Z.B. könnten die Emissionen aus dem Hausbrandsektor insgesamt zu niedrig sein, wenn etwa die Kondensate nur teilweise erfasst sind.

Folgende weitere Effekte können dazu beigetragen haben, dass das Modell die Episode nicht erklären kann: Die Höhe der atmosphärischen Grenzschicht könnte an diesen Tagen besonders niedrig gewesen sein; ggf. war sie in den meteorologischen Eingangsdaten nicht niedrig genug. Weiterhin werden unter bestimmten atmosphärischen Bedingungen die Partikelneubildung und Kondensation organischer oder anorganischer Stoffe aus der Gasphase in die Partikelphase begünstigt. Möglicherweise werden auch diese Bedingungen im Modell nicht getroffen oder die implementierte Aerosoldynamik kann diese Effekte wiedergeben.

8 Evaluierung mit dem Delta-Tool

Das Delta-Tool wurde im Rahmen von FAIRMODE³ (Forum for Air Quality Modeling in Europe) entwickelt mit dem Ziel, Luftqualitätsmodelle für regulatorische Zwecke zu bewerten. Bei diesem Tool handelt es sich um ein idl-basiertes Softwarepaket, mit dem zusammenfassende Statistiken (z. B. Bias, RMSE, Korrelationskoeffizient) sowie verschiedene Diagrammtypen bereitgestellt werden können. Eingabedaten sind Modellergebnisse und Messdaten unterschiedlicher zeitlicher Auflösung. Der im Delta-Tool implementierte Benchmarking-Dienst erstellt auf dieser Basis zusammenfassende Leistungsindikatoren, die sich auf Modellanwendungen im Rahmen der EU-Luftqualitätsrichtlinie beziehen.

Ergänzend zur in Kapitel 7 durchgeführten Evaluierung anhand ausgewählter Stationen wurde seitens des Auftraggebers für das Modelljahr 2016 eine Evaluierung mittels des Delta-Tools durchgeführt. Als Eingangsdaten dienten dafür die Modellkonzentrationen von NO₂, PM₁₀ und O₃ der RCG-Modellrechnungen 2016 auf Basis statischer und dynamischer SF sowie die entsprechenden gemessenen Konzentrationen dieser Stoffe. Basis für die Evaluierung waren, passend zu den jeweiligen Zeitskalen für Kurzfrist-Grenzwerte bzw. Zielwerte nach der EU-Luftqualitätsrichtlinie, folgende Größen:

- NO₂: Stundenmittelwerte,
- PM₁₀: Tagesmittelwerte,
- O₃: 8hmax (maximaler 8-Stundenwert eines Tages).

Als Messwerte verwendet wurden die Daten aller Messstationen im ländlichen, vorstädtischen und städtischen Hintergrund in Deutschland, an denen die entsprechenden Größen 2016 ohne zu große Datenlücken vorliegen bzw. berechnet werden können. Für NO₂ ergaben sich dafür 243 gültige Stationen, für PM₁₀ 212 und für Ozon 241. Im Folgenden werden Evaluierungen für NO₂ (Abschnitt 8.1), PM₁₀ (Abschnitt 8.2) und Ozon (Abschnitt 8.3) beschrieben.

8.1 Evaluierung NO₂

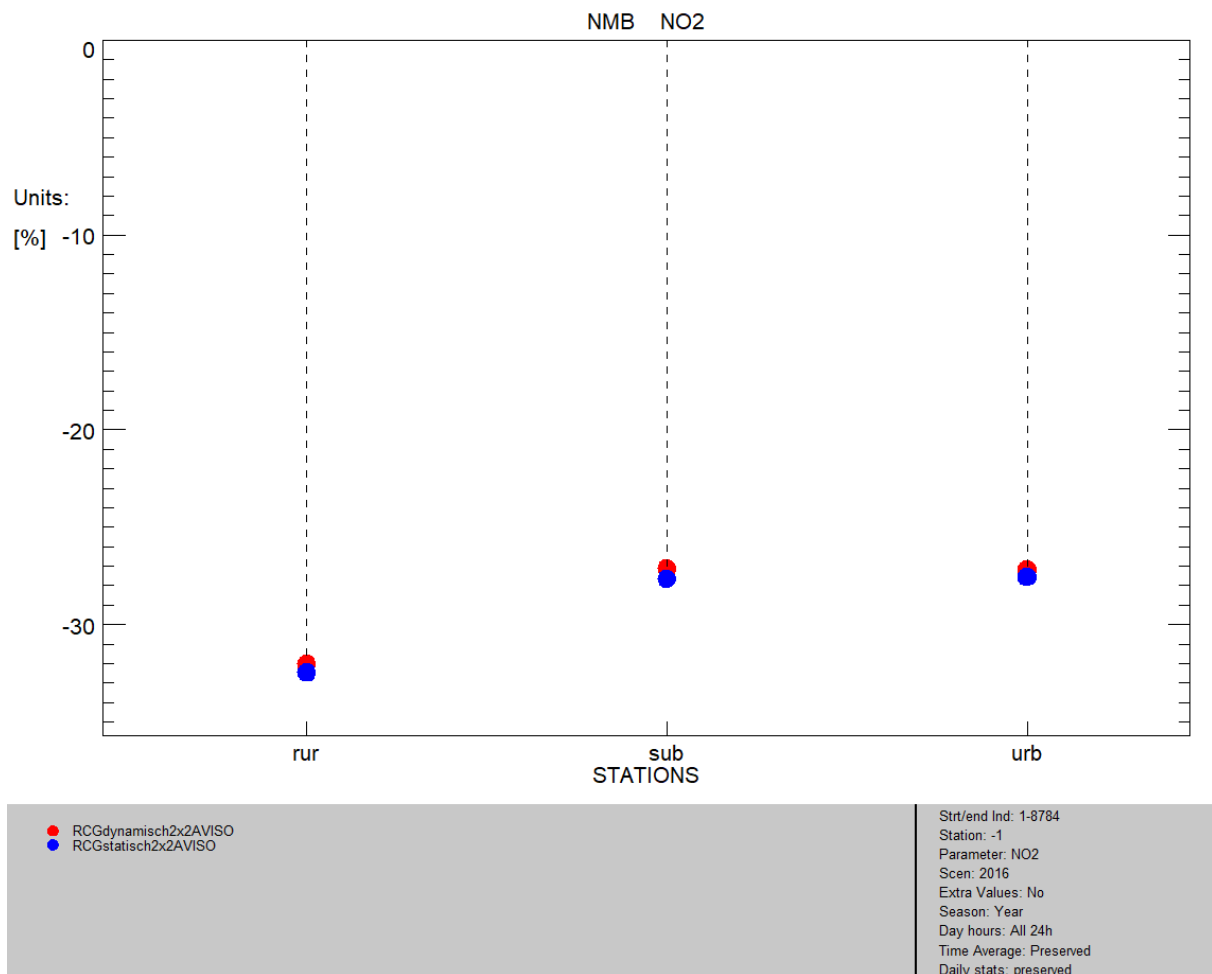
Für NO₂ wurden zum Vergleich der statischen und der dynamischen Modellrechnung Diagramme für die Größen NMB (normalized mean bias) und R (Pearson'scher Korrelationskoeffizient) erzeugt.

In Abbildung 111 ist die mit dem Delta-Tool berechnete **Kenngröße NMB** für die statische und die dynamische Modellrechnung 2016 für NO₂ jeweils für Messstationen im ländlichen, im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund dargestellt.

Der Bias ist in beiden Modellrechnungen für alle drei Gruppen negativ (Modell unterschätzt Messungen) und im ländlichen Hintergrund ist der Betrag etwas größer als im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund. Durch die dynamischen SF werden bei allen drei Gruppen leichte Verbesserungen erreicht.

³ <https://fairmode.jrc.ec.europa.eu/>

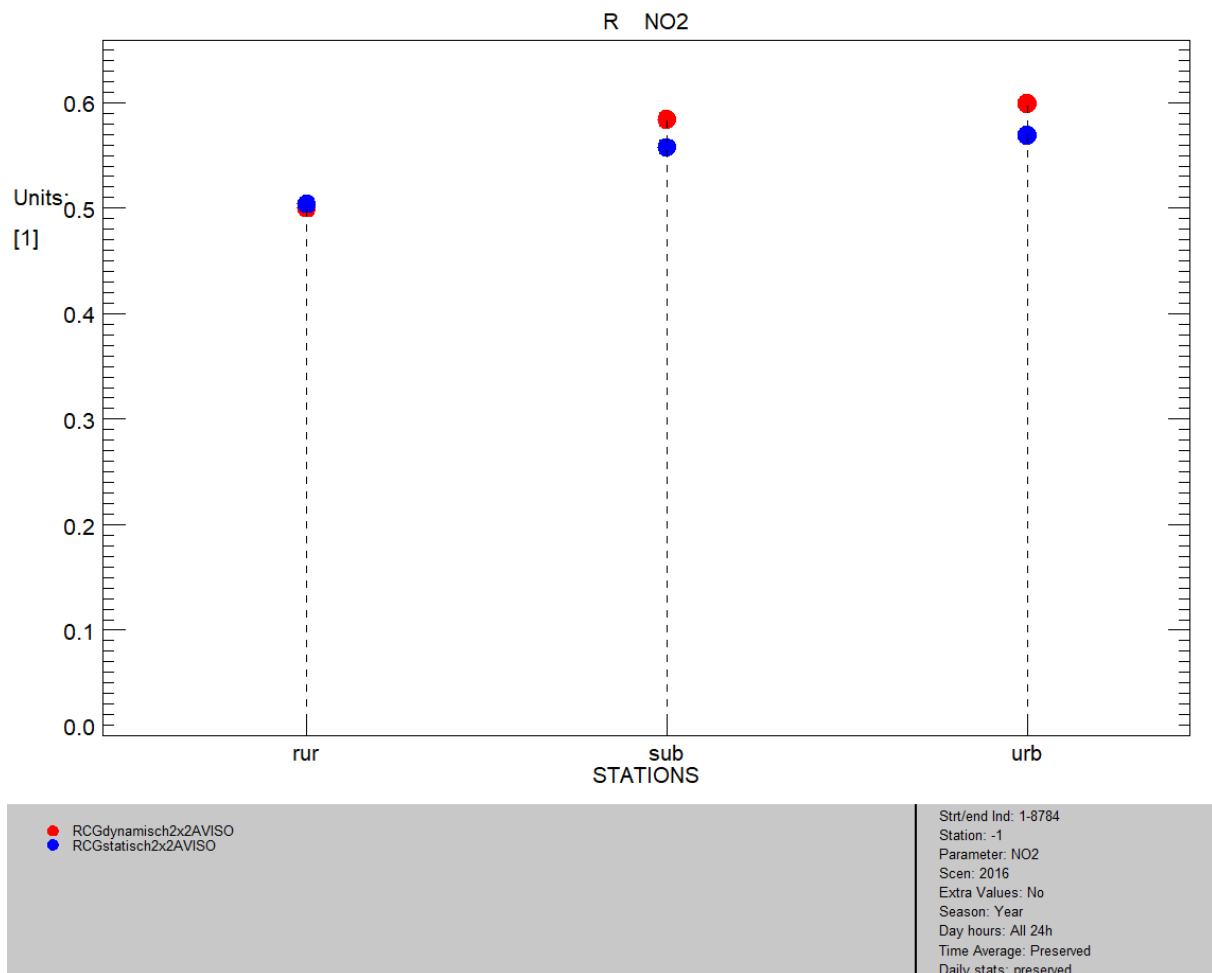
Abbildung 111: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool für NO₂: Vergleich anhand der Kenngröße NMB (normalized mean bias) jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb)



Analog zu Abbildung 111 ist in Abbildung 112 die mit dem Delta-Tool berechnete **Kenngröße R** für die statische und die dynamische Modellrechnung 2016 für NO₂ jeweils für Messstationen im ländlichen, im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund dargestellt.

Der Korrelationskoeffizient liegt im ländlichen Hintergrund in beiden Modellrechnungen bei ca. $R = 0,5$ und im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund etwas darüber. Durch die dynamischen SF werden im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund zudem leichte Verbesserungen erreicht.

Abbildung 112: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool für NO₂: Vergleich anhand der Kenngröße R jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb)



Im Delta-Tool wird als wesentliche Zielgröße der **MQI** (Model Quality Indicator) betrachtet, der definiert ist als das Verhältnis aus dem Bias Modell-Messung zur Messunsicherheit. Ein Modell, für das der MQI Werte größer als eins annimmt, für das also der systematische Modellfehler größer ist als die Messunsicherheit, erfüllt die Qualitätskriterien des Delta-Tools nicht.

MQI kann als Funktion von Bias, Standardabweichung und Korrelationskoeffizient dargestellt werden und vereint damit verschiedene Fehlermaße in einer Größe.

In Abbildung 113 ist ein vom Delta-Tool erzeugtes Ziendiagramm mit dem MQI für NO₂ aus der statischen RCG-Modellrechnung dargestellt. Folgende Informationen aus dem Diagramm werden für die Evaluierung im Weiteren herangezogen:

- ▶ Die bunten Symbole entsprechen den MQI-Werten für die Modelle an den gültigen Messstationen, der Abstand vom Ursprung entspricht dem MQI der Modellrechnung an diesen Stationen.
- ▶ Wenn 90% aller Punkte im „grünen Bereich“ liegen (MQI < 1), erfüllt die betrachtete Modellrechnung die Qualitätskriterien des Delta-Tools (an 10% aller Stationen sind größere

Abweichungen erlaubt, z.B. aufgrund im Modell nicht enthaltener lokaler Besonderheiten). In der oberen linken Ecke sind jeweils die höchsten MQI-Werte des für den MQI relevanten 90%-Quantils der Messstationen ausgewiesen, und zwar oben für die betrachtete zeitliche Auflösung (hier: NO₂: Stundenmittelwerte, PM₁₀: Tagesmittelwerte, Ozon: 8hmax) und darunter für den Jahresmittelwert. Liegen die maximalen MQI-Werte des 90%-Quantils unter eins (Qualitätskriterium erfüllt) sind sie grün eingefärbt, andernfalls rot. Da der MQI die Messunsicherheit im Nenner enthält, und diese für den Jahresmittelwert deutlich kleiner ist als für die zeitlich höher aufgelösten Werte, sind die MQI-Werte für den Jahresmittelwert i.d.R. deutlich höher als für letztere.

- Die Lage der Symbole in den vier Quadranten ergibt sich wie folgt: In den oberen beiden Quadranten sind Messstationen dargestellt, für die der Bias des Modells positiv ist (Modell überschätzt Messungen), in den unteren beiden Quadranten Messstationen, für die der Bias negativ ist (Modell unterschätzt Messwerte). In den rechten beiden Quadranten sind Messstationen dargestellt, an denen der MQI stärker von (hohen) Standardabweichung (SD, standard deviation) als von (geringen) Korrelationskoeffizienten (R) beeinflusst ist, in den linken beiden Quadranten trägt die (geringe) Korrelation stärker zum MQI bei. Insbesondere für die Stationen in den linken beiden Quadranten wird demnach ein Potenzial zur Verbesserung (d.h. Reduzierung) des MQI durch Verbesserungen des Zeitverhaltens und entsprechende Verbesserungen der Korrelationen erwartet.

Abbildung 113 zeigt für NO₂ aus der statischen Modellrechnung:

- Die Modellrechnung für die Stundenwerte liegt für alle gültigen Stationen im grünen Bereich, der höchste auftretende Wert für MQI liegt mit 0,762 deutlich unter eins.
- Gemittelt über das Jahr gibt es Stationen, an denen der Modell-MQI über eins liegt, der höchste auftretende Wert für MQI liegt bei 1,143.
- Die überwiegende Mehrheit der Stationen liegt in den linken beiden Quadranten, grundsätzlich sind diese Stationen also gute Kandidaten für Verbesserungen durch Änderungen des Zeitverhaltens.
- Für meisten dieser Stationen ist der Modell-Bias negativ.
- Eine kleine Gruppe von Stationen liegt im unteren rechten Quadranten (negativer Bias, Einfluss von SD auf MQI höher als von R).

Abbildung 114 zeigt das MQI-Zieldiagramm für NO₂ analog zu Abbildung 113 für die dynamische Modellrechnung.

Abbildung 113: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm NO₂ für die RCG-Modellrechnung auf Basis statischer SF

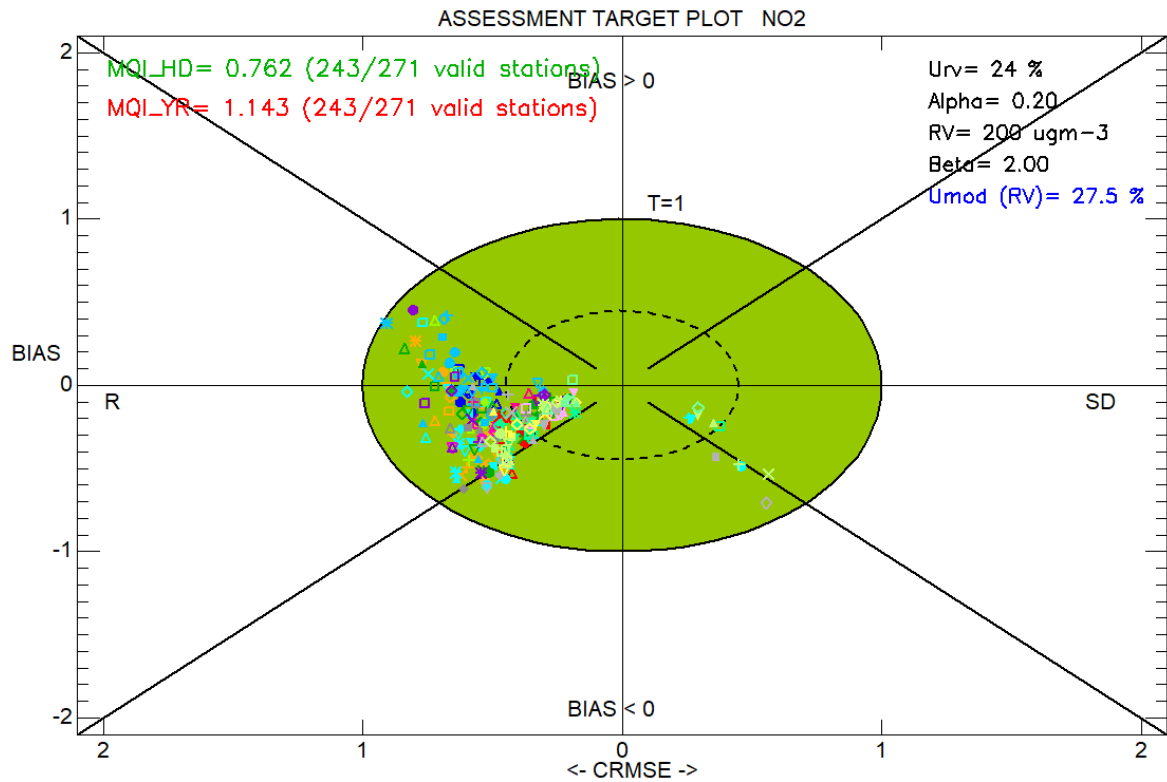
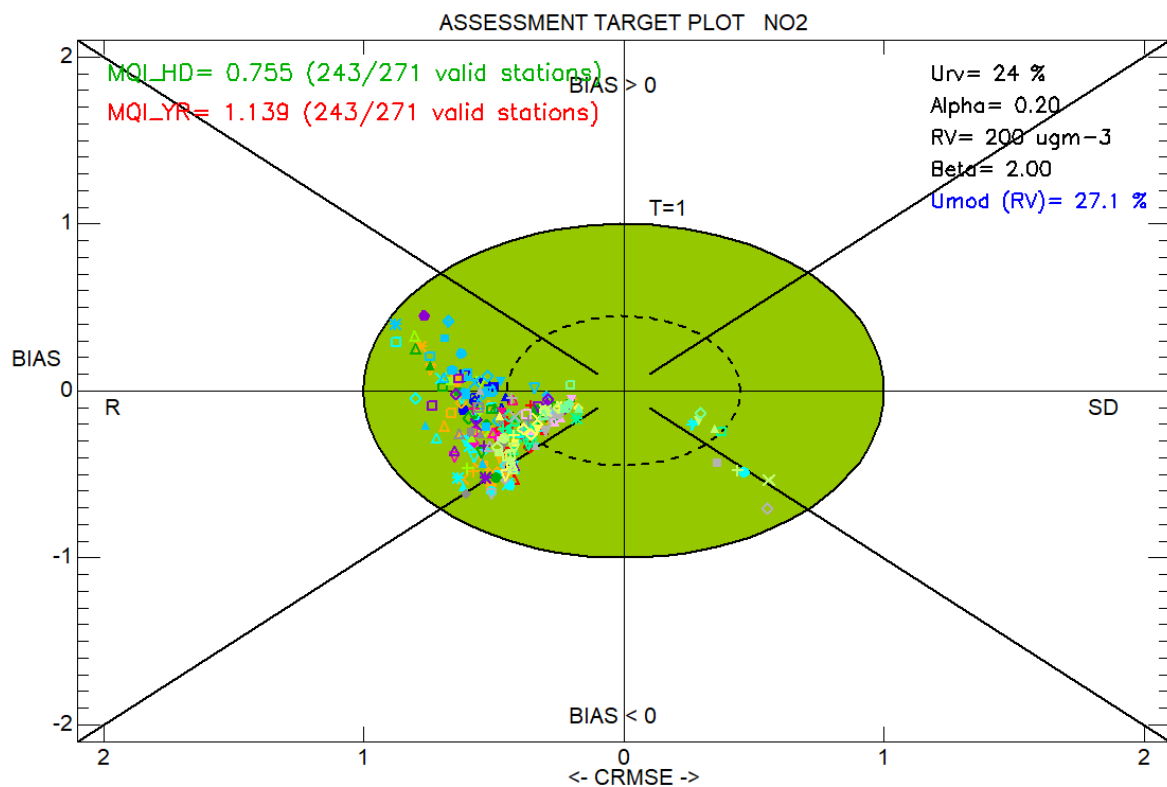


Abbildung 114: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm NO₂ für die RCG-Modellrechnung auf Basis dynamischer SF



Die Diagramme weisen nur geringe Unterschiede auf. Der Wert für den schlechtesten relevanten MQI verbessert (d.h. verringert) sich durch die dynamischen SF leicht, und zwar für die Stundenwerte von 0,762 auf 0,755 (MQI_HD) und für den Jahresmittelwert von 1,143 auf 1,139 (MQI_YR).

Da beim MQI die Messunsicherheit im Nenner steht, ist allgemein noch Folgendes anzumerken: Die im Delta-Tool angenommene Messunsicherheit für den Jahresmittelwert ist deutlich geringer als die für den Stundenmittelwert. Das führt dazu, dass das Niveau der MQI für den Jahresmittelwert deutlich über dem für den Stundenmittelwert liegt. Die Messunsicherheiten werden daher im Rahmen von FAIRMODE/CEN noch überarbeitet.

Es sind also leichte Verbesserungen zu beobachten, für die große Gruppe der Stationen im unteren linken Quadranten (negativer Modell-Bias, Auswirkung von R auf den MQI stärker als von SD) bleibt die Modellqualität jedoch nahezu unverändert.

Abbildung 115 und Abbildung 116 zeigen die gleichen MQI-Zieldiagramme für NO₂ für die statische und die dynamische Modellrechnung wie Abbildung 113 und Abbildung 114, die Darstellungen enthalten jedoch nur die acht Messstationen aus der Evaluierung in Kapitel 7.

Die Zieldiagramme zeigen, dass alle acht Stationen vom Delta-Tool als gültig klassifiziert werden. Die Symbole liegen in den linken beiden Quadranten, in denen auch die meisten Symbole in Abbildung 113 und Abbildung 114 liegen, und liegen gut verteilt über die entsprechenden Cluster aus allen gültigen Stationen in Abbildung 113 und Abbildung 114. Die in Kapitel 7 gewählten Stationen sind damit repräsentativ für die in diesem Kapitel betrachtete Gesamtheit aller gültigen Stationen.

Für die acht gewählten Stationen liegen die MQI-Werte auch für den Jahresmittelwert alle im „grünen Bereich“ (die Stationen gehören also nicht zu den schlechtesten Stationen). Die MQI-Werte verbessern sich durch die dynamischen SF leicht.

Abbildung 115: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm NO₂ für die RCG-Modellrechnung auf Basis statischer SF, Auswahl Stationen aus Kapitel 7

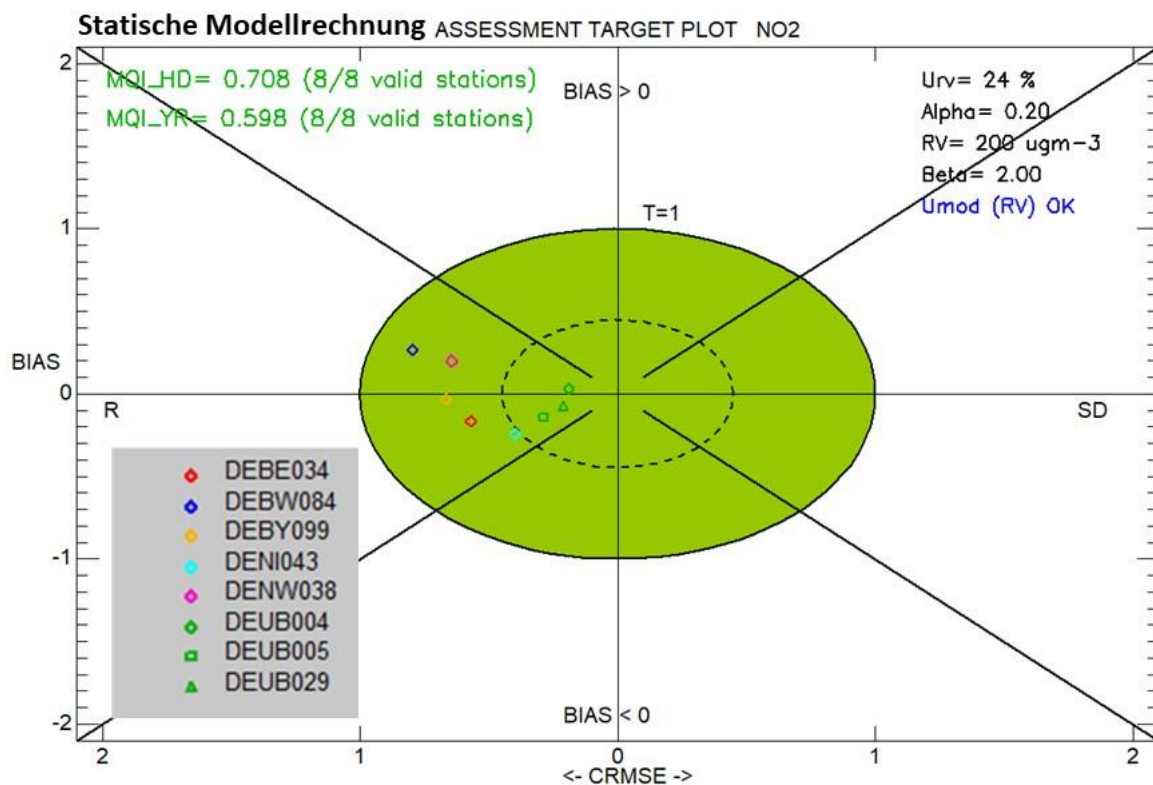
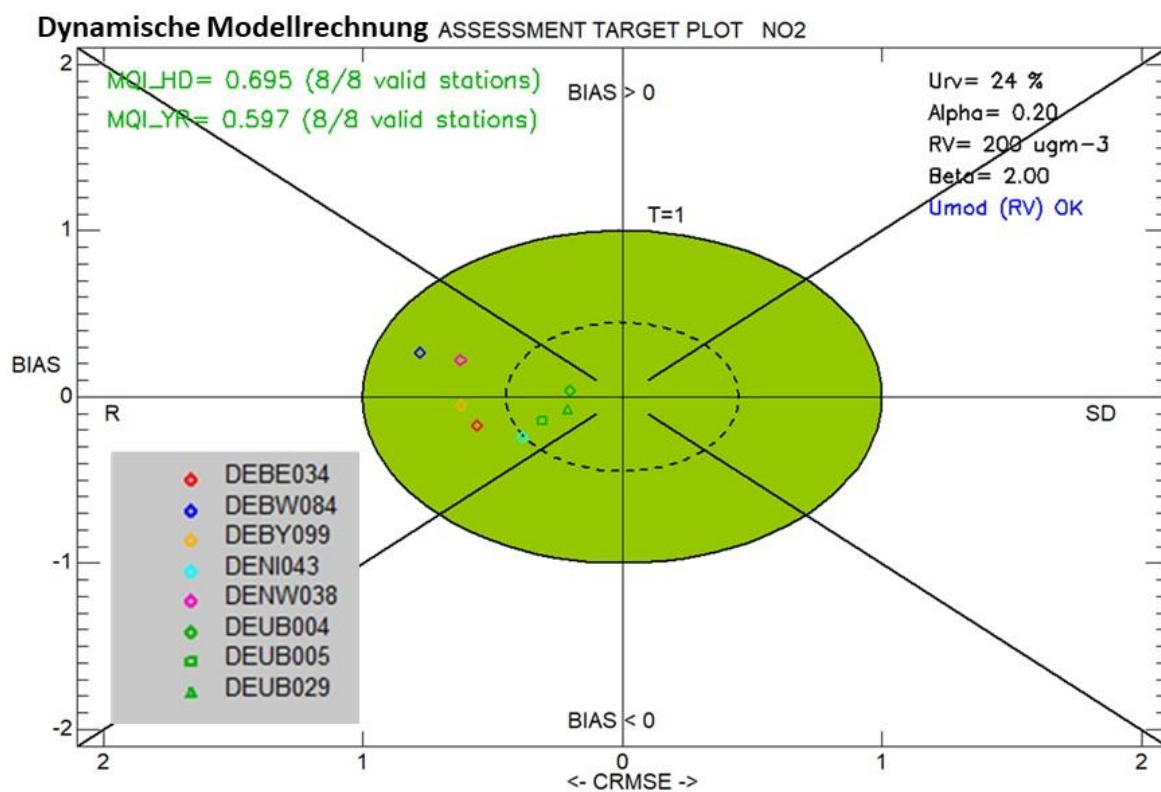


Abbildung 116: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm NO₂ für die RCG-Modellrechnung auf Basis dynamischer SF, Auswahl Stationen aus Kapitel 7

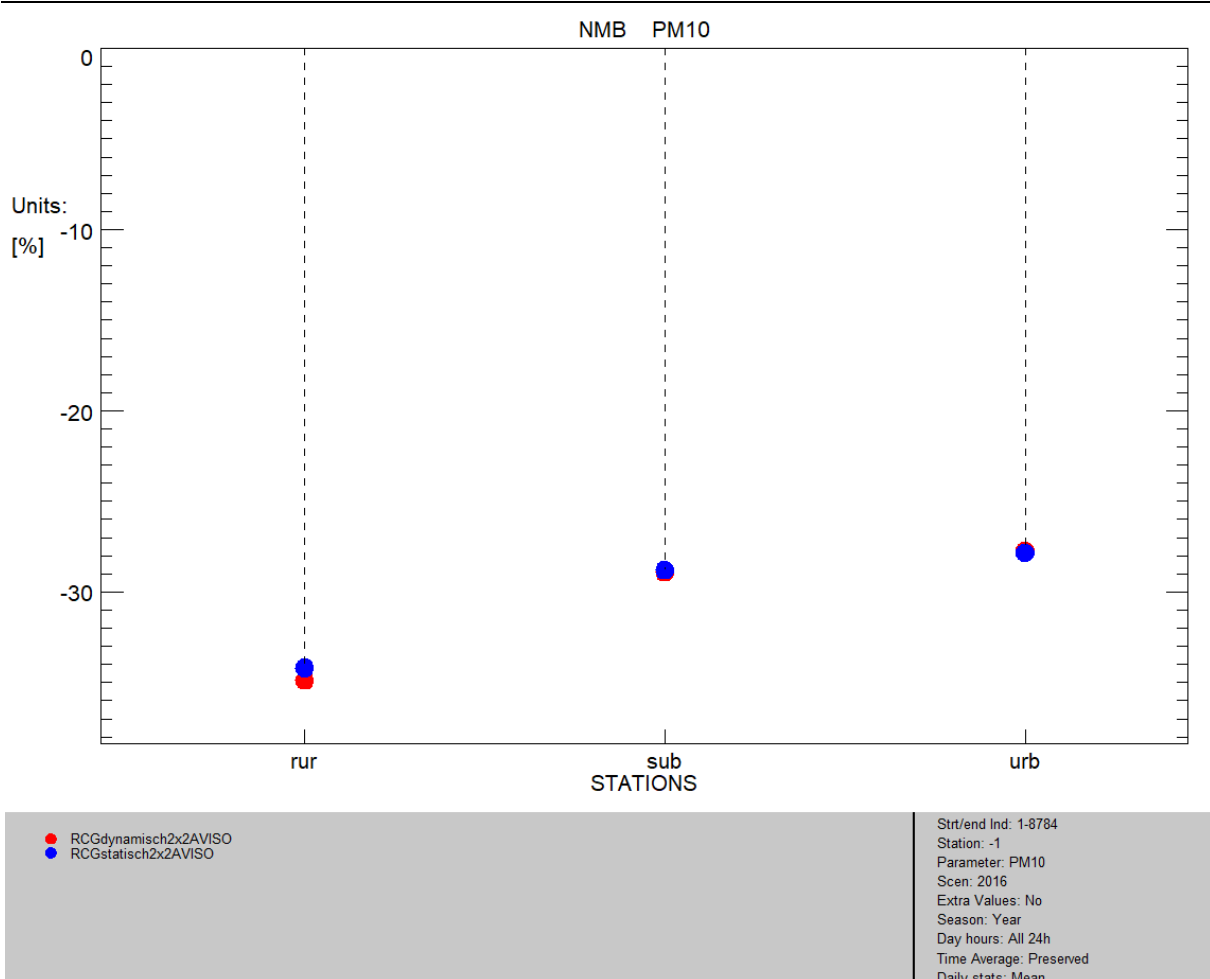


8.2 Evaluierung PM₁₀

Auch für PM₁₀ wurden die statische und die dynamische RCG Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool evaluiert.

In Abbildung 117 ist die mit dem Delta-Tool berechnete **Kenngröße NMB** für die statische und die dynamische Modellrechnung 2016 für PM₁₀ jeweils für Messstationen im ländlichen, im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund dargestellt.

Abbildung 117: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool für PM₁₀: Vergleich anhand der Kenngröße NMB (normalized mean bias) jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb)

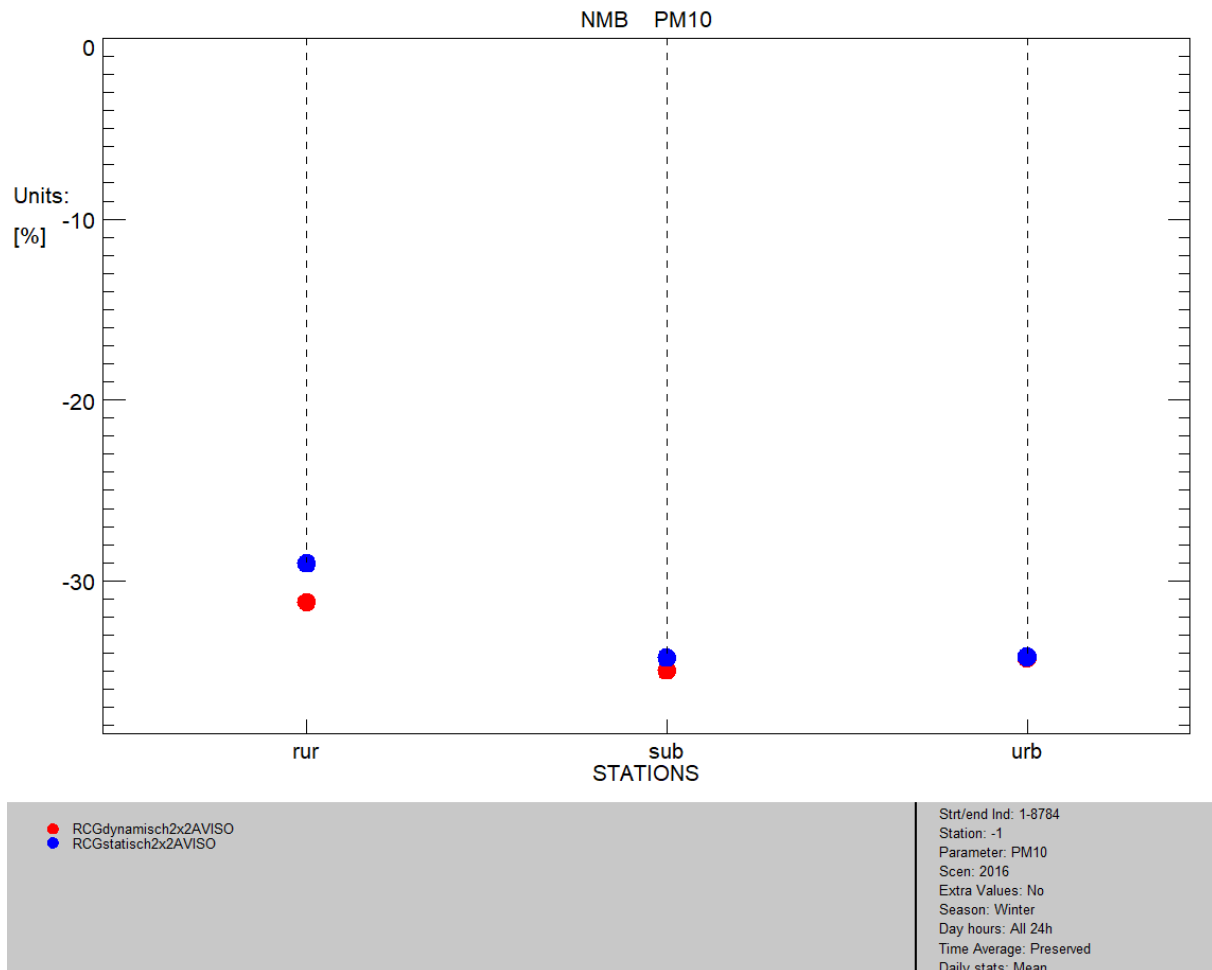


Der Bias ist in beiden Modellrechnungen für alle drei Gruppen negativ und im ländlichen Hintergrund ist der Betrag etwas größer als im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund. Durch die dynamischen SF verschlechtert sich die Modellrechnung für die ländlichen Hintergrundstationen, für die vorstädtischen und städtischen Hintergrundstationen treten nahezu keine Änderungen auf.

In Abbildung 118 wurde die Kenngröße NMB nur für die Wintermonate 2016 bestimmt. Auch im Winter ist der Bias überall negativ, an den ländlichen Stationen jedoch vom Betrag her etwas geringer als an den vorstädtischen und städtischen Stationen. Die Verschlechterung an den

ländlichen Stationen durch die dynamischen SF ist im Winter stärker ausgeprägt als im Sommer und in geringerem Maße auch an den vorstädtischen Hintergrundstationen zu beobachten.

Abbildung 118: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung Winter 2016 mit dem Delta-Tool für PM₁₀: Vergleich anhand der Kenngröße NMB (normalized mean bias) jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb)

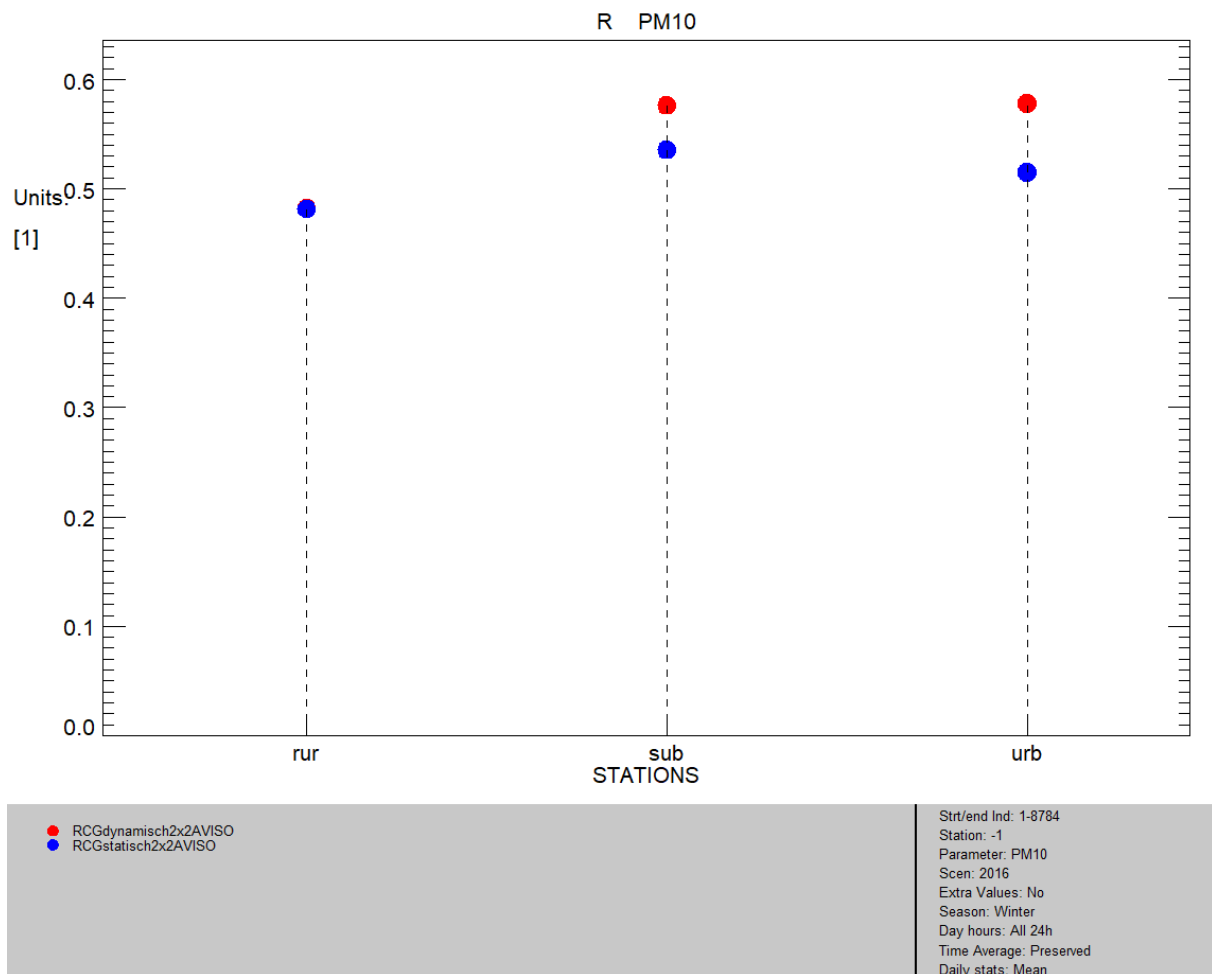


Analog zu Abbildung 118 ist in Abbildung 119 die mit dem Delta-Tool berechnete **Kenngröße R** für die statische und die dynamische Modellrechnung für die Wintermonate 2016 für PM₁₀ jeweils für Messstationen im ländlichen, im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund dargestellt.

Der Korrelationskoeffizient liegt im ländlichen Hintergrund in beiden Modellrechnungen bei etwas unter 0,5 und im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund etwas darüber. Durch die dynamischen SF werden im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund zudem Verbesserungen erreicht.

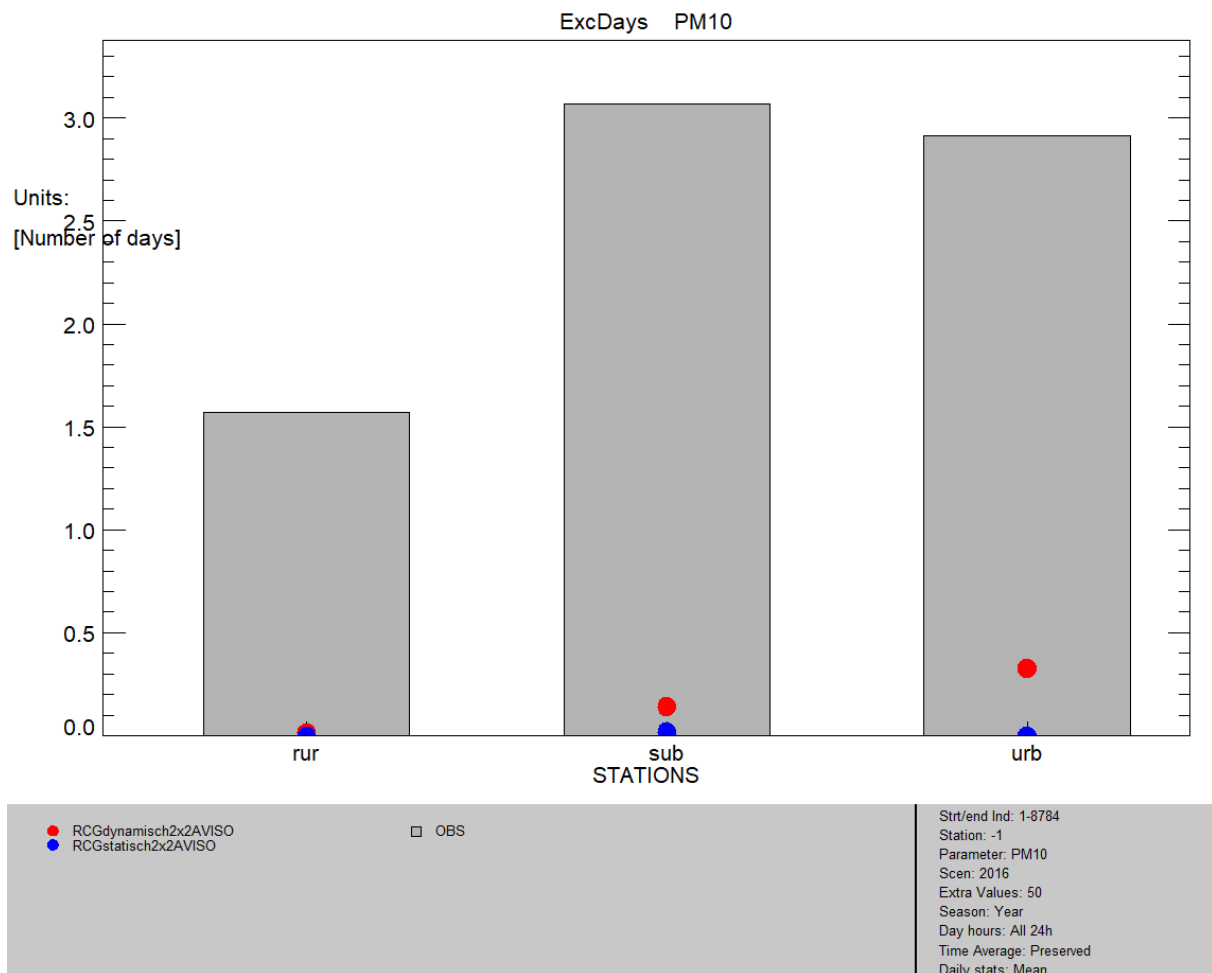
Die dynamischen SF führen also im Winter zu leichten Verschlechterungen beim Bias im ländlichen Hintergrund und leichten Verbesserungen bei R im vorstädtischen und städtischen Hintergrund.

Abbildung 119: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung Winter 2016 mit dem Delta-Tool für PM₁₀: Vergleich anhand der Kenngröße R (Pearson'scher Korrelationskoeffizient) jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb)



Beim Feinstaub kommt es auch immer wieder zu Überschreitungen des Kurzzeitgrenzwerts für den Tagesmittelwert, nach der aktuellen Luftqualitätsrichtlinie darf die tagesmittlere PM₁₀-Konzentration einen Wert von 50 µg/m³ nicht häufiger als 35-mal pro Jahr überschreiten. Abbildung 120 zeigt eine Evaluierung mit dem Delta-Tool für die prognostizierte Anzahl der Überschreitungstage durch die statische und die dynamische Modellrechnung 2016 für PM₁₀ jeweils für Messstationen im ländlichen, im vorstädtischen und im städtischen Hintergrund.

Abbildung 120: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool für PM₁₀: Vergleich anhand der Überschreitungstage jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb)



Im Mittel wurden 2016 an ländlichen Hintergrundstationen ca. 1,5 PM₁₀-Überschreitungstage gemessen und an vorstädtischen und städtischen Hintergrundstationen jeweils ca. 3 PM₁₀-Überschreitungstage. Mit statischen SF werden keine PM₁₀-Überschreitungstage modelliert, mit dynamischen SF im Mittel deutlich unter 0,5. Hier führen die dynamischen SF also zu einer leichten Verbesserung, das Modell ist jedoch auch mit dynamischen SF nicht in der Lage, die richtige Größenordnung für die Überschreitungstage zu treffen. Dies passt zu dem Befund, dass das Modell auch mit dynamischen SF nicht in der Lage ist, Feinstaub-Episoden zu reproduzieren, siehe Abschnitt 7.9.

Analog zu Abbildung 113 und Abbildung 114 für NO₂ zeigen Abbildung 121 und Abbildung 122 für PM₁₀ die MQI-Zieldiagramme für die statische und die dynamische Modellrechnung.

Abbildung 121: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm PM₁₀ für die RCG-Modellrechnung auf Basis statischer SF

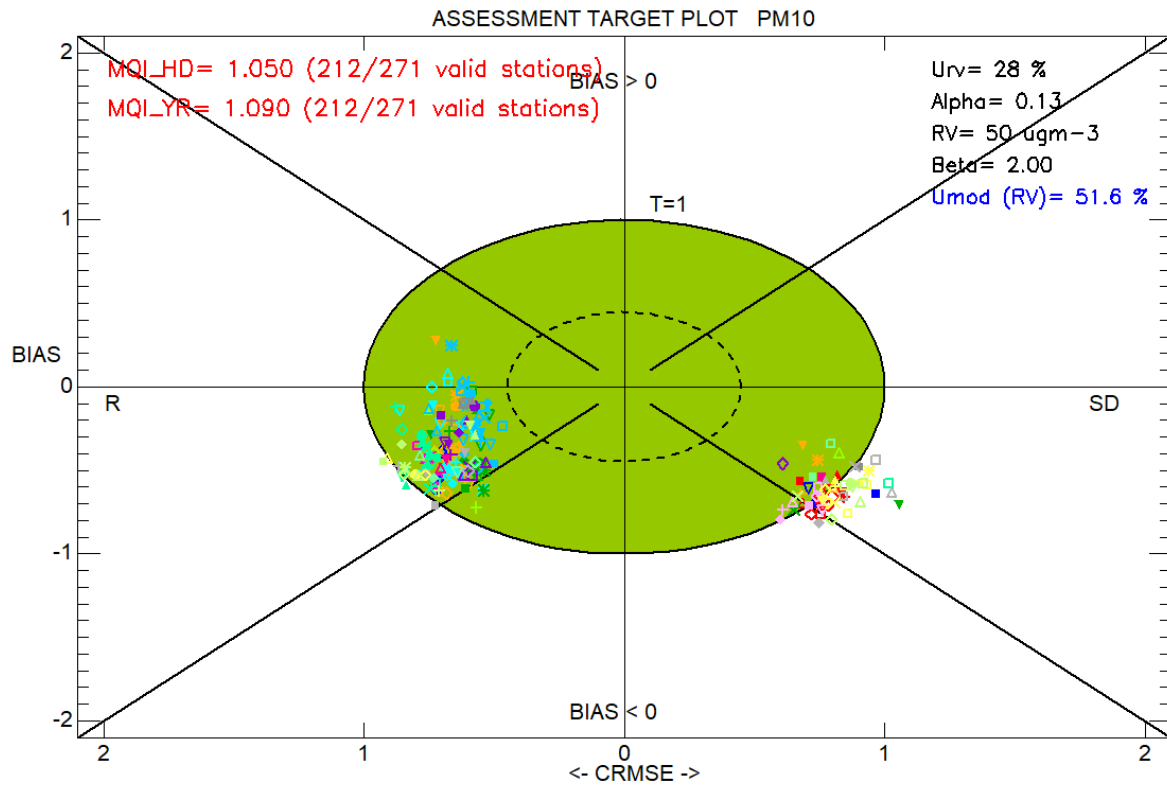
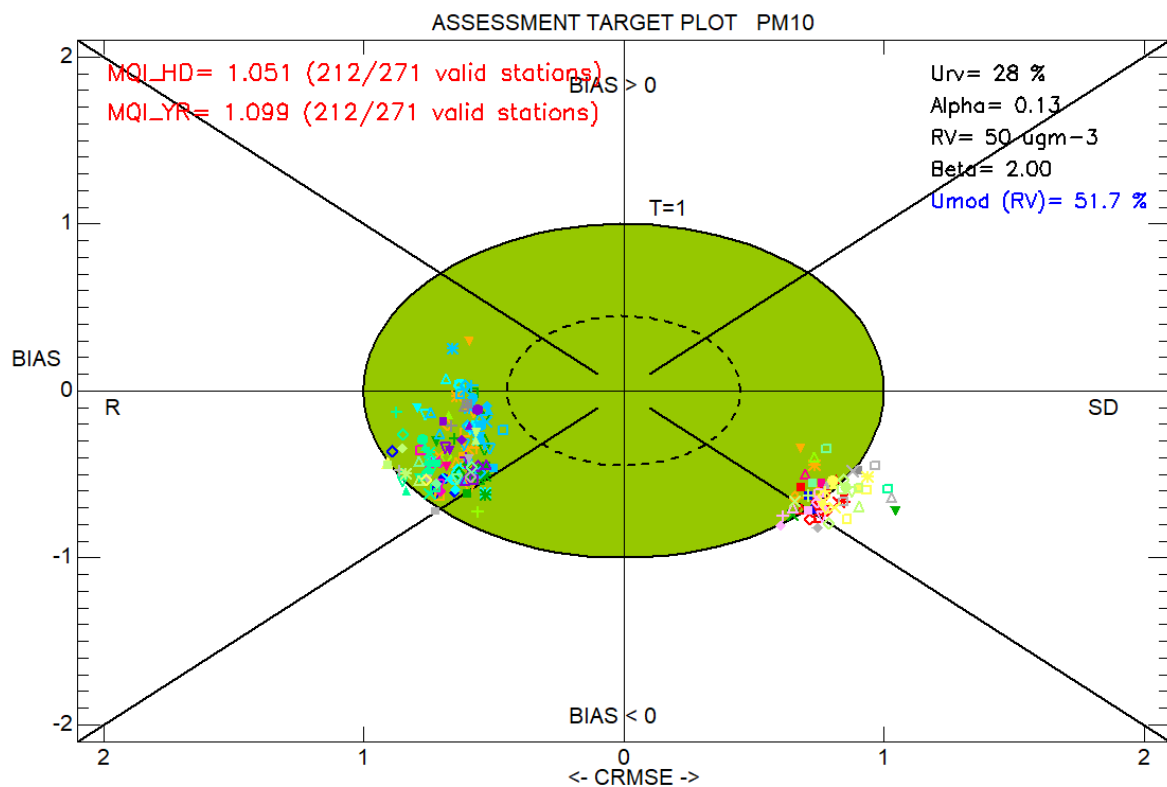


Abbildung 122: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm PM₁₀ für die RCG-Modellrechnung auf Basis dynamischer SF



Die Zieldiagramme für PM₁₀ weichen in folgenden Punkten von den Zieldiagrammen für NO₂ ab:

- ▶ Der Anteil der Stationen mit positivem Bias ist für PM₁₀ noch geringer als für NO₂.
- ▶ Der Anteil der Stationen, an denen der Beitrag der Standardabweichung (SD) zum MQI gegenüber dem der Korrelation (R) dominiert, ist größer.
- ▶ Sowohl bei den Tagesmittelwerten wie auch bei den Jahresmittelwerten liegen bei beiden Modellrechnungen nicht alle Stationen im „grünen Bereich“.
- ▶ Die Stationen mit den vom Betrag her höchsten Werten für MQI liegen im unteren rechten Quadranten (negativer Bias, SD dominiert ggü. R hinsichtlich des Beitrags zu MQI).
- ▶ Für die Station mit der schlechtesten Modell-Performanz tritt durch die dynamischen SF zusätzlich eine leichte Verschlechterung auf: Der höchste MQI der Tagesmittelwerte erhöht sich von 1,050 auf 1,051, der höchste MQI der Jahresmittelwerte von 1,090 auf 1,099.

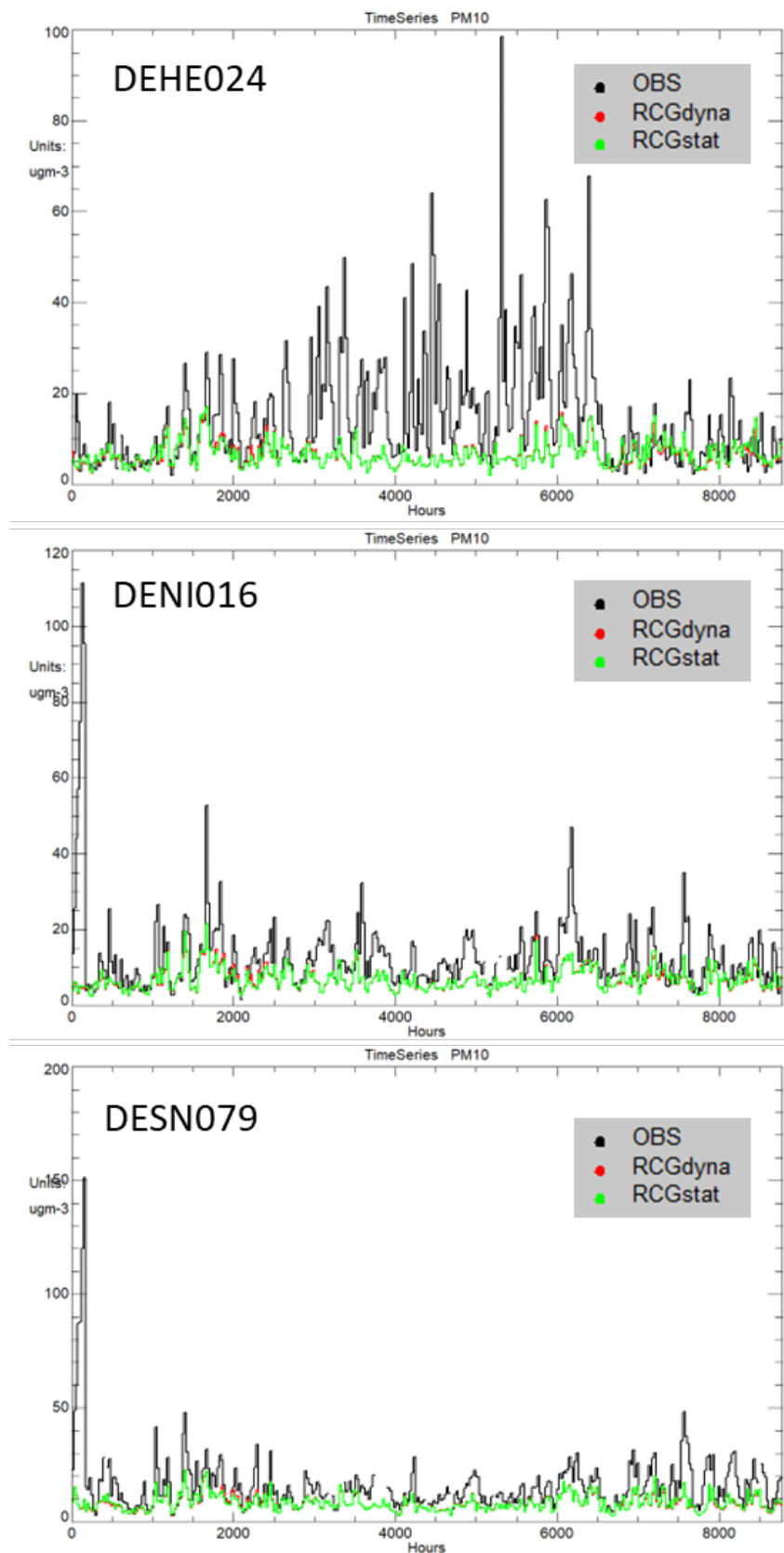
In Abbildung 123 sind die Zeitreihen (Stundenmittelwerte PM₁₀ in µg/m³) der Stationen mit den drei höchsten MQI (schlechteste Übereinstimmung von Modell und Messung) jeweils für die Messwerte und die Modellrechnung auf Basis statischer und dynamischer SF dargestellt.

An allen drei Stationen liegen die modellierten PM₁₀-Konzentrationen für beide Modellrechnungen deutlich unter den gemessenen Werten. An den Stationen DENI016 und DESN079 werden zudem deutliche Peaks zum Jahresbeginn gemessen, die auf ein Silvesterfeuerwerk hinweisen, und die in den Modellrechnungen an diesen Stellen nicht auftreten. Die Station DEHE024 weist hohe Messwerte im Sommer auf: Die maximal gemessene stündlich gemittelte PM₁₀-Konzentration liegt hier bei fast 100 µg/m³, während sie beiden Modellrechnungen ganzjährig unter 20 µg/m³ liegt.

Die Stationen DEHE024 und DESN079 liegen im ländlichen Hintergrund: Die Station DEHE024 liegt in Hessen in einem Waldgebiet auf über 600 m Höhe über NN, die Station DESN079 liegt in Sachsen unweit der Talsperre Quitzdorf auf dem Gebiet der Satzfishanlage Sproitz. Die Station DENI016 liegt im vorstädtischen Hintergrund in Oker, einem Vorort von Goslar im Harz, mit ca. 5.800 Einwohnern.

Im ländlichen Hintergrund sind hohe PM₁₀-Konzentrationen im Allgemeinen nicht zu erwarten, die Luftqualität sollte weitgehend unbeeinflusst sein von menschlichen Einflüssen. Für die Stationen DEHE024 und DESN079 wurde daher recherchiert, ob lokale und/oder zeitlich begrenzte Ursachen die gemessenen Konzentrationen erklären könnten.

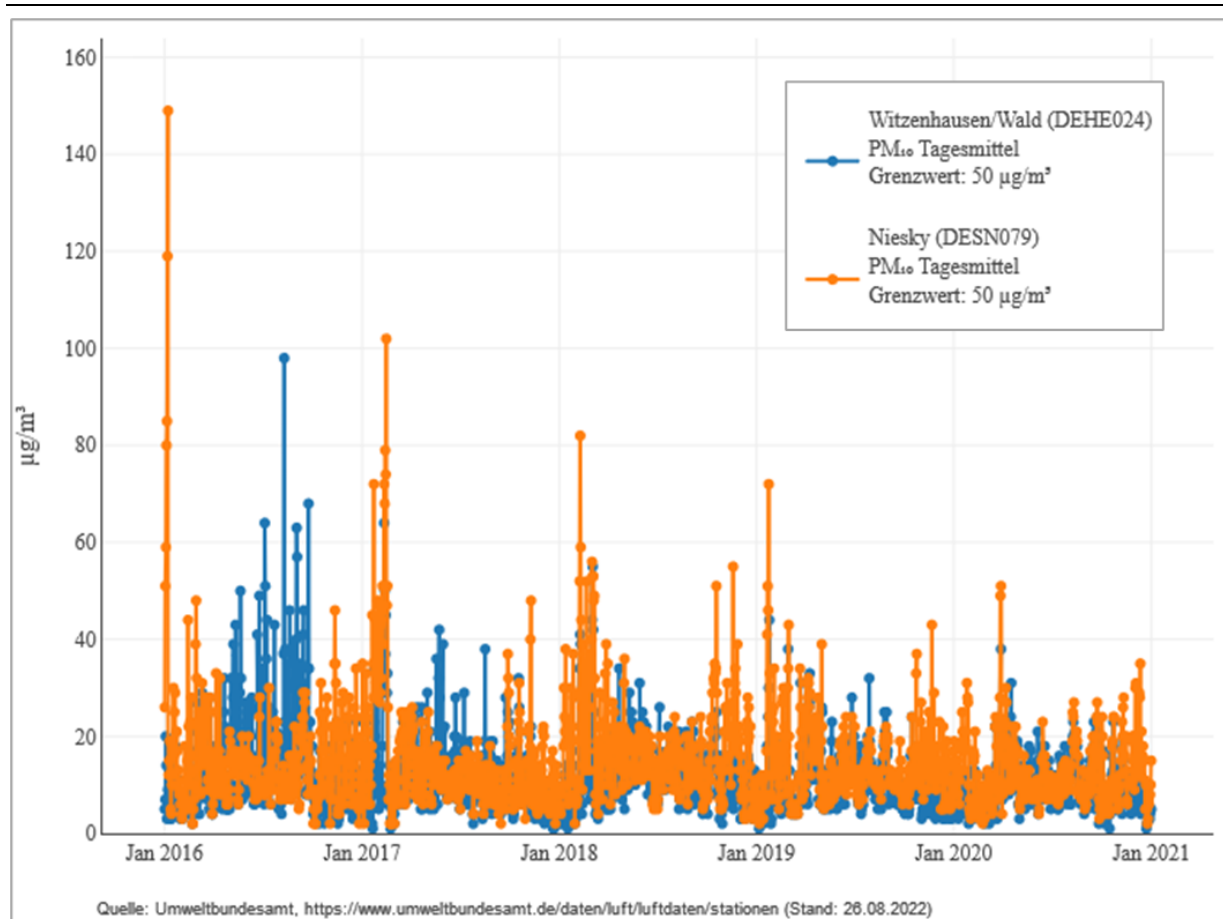
Abbildung 123: Zeitreihen der PM₁₀-Stundenmittelwerte (schwarz: Messwerte, rot: RCG-Modellrechnung mit dynamischen SF, grün: RCG Modellrechnung mit statischen SF) 2016 bis 2018 für die drei schlechtesten Punkte aus dem Delta-Tool Zieliagramm in Abbildung 122



Um festzustellen, ob die hohen PM₁₀-Konzentrationen an diesen Stationen regelmäßig auftreten, wurden die dort gemessenen tagesmittleren PM₁₀-Konzentrationen für 2016 und die Folgejahre bis 2020 in Abbildung 124 dargestellt.

An der Station DEHE024 traten sommerliche PM₁₀-Konzentrationen über 50 µg/m³ in den Jahren nach 2016 nicht mehr auf. Für die Station DESN079 wiederum zeigt sich, dass auch in den Folgejahren hohe PM₁₀-Konzentrationen zum Jahreswechsel auftraten, die Höhe der Maxima jedoch im Laufe der Jahre abnahm. Weiterhin ist in Abbildung 124 zu erkennen, dass die PM₁₀-Konzentrationen an der Station DESN079 auch in den Tagen vor und nach dem Jahreswechsel bereits gegenüber den restlichen Tagen im Jahr erhöht sind.

Abbildung 124: Zeitreihen der gemessenen PM₁₀-Tagesmittelwerte 2016 bis 2020 für die beiden ländlichen Hintergrundstationen (DEHE024 und DESN079) aus Abbildung 123; Bildquelle: UBA⁴



Die Station DEHE024 (Witzenhausen/Wald) liegt im Wald auf einer Bergkuppe im hessischen Bergland auf einer Höhe von 610 m über NN. Ende 2016 wurde auf dieser Bergkuppe der Windpark „Hausfirse“ in Betrieb genommen, bestehend aus 10 Windanlagen der 3 MW Klasse. Es ist davon auszugehen, dass es in den Monaten davor bei der Anlieferung der Anlagen und der für die Montage erforderlichen Geräte durch Lkw-Verkehr auf unbefestigten Straßen zu Staubentwicklung kam. Auch beim Aufbau können Emissionen der Baumaschinen vor Ort die PM₁₀-Konzentrationen beeinflusst haben.

⁴ <https://www.umweltbundesamt.de/daten/luft/luftdaten/stationen/> (Zugriff: 26.08.2022)

Ereignisse dieser Art können in lokalen Modellrechnungen auf der Mikroskala berücksichtigt werden, jedoch nicht in Regionalmodellen. Es gibt keine deutschlandweite Datenquelle zu Baustellenaktivitäten in Echtzeit, die zur Ableitung dynamischer SF für diesen Sektor herangezogen werden könnte.

Die Abweichungen beider Modellrechnungen von den Messungen 2016 an der Station DEHE024 können so zum großen Teil erklärt werden.

Wie oben beschrieben, liegt die Station DESN079 in Sachsen unweit der Talsperre Quitzdorf auf dem Gebiet der Satzfishanlage Sproitz. Die nächstgelegene Siedlung ist das Straßendorf Sproitz mit 406 Einwohnern (Stand 2014). Eine geringe Einwohnerzahl führt bei der räumlichen Verteilung zu geringen Emissionen aus dem Sektor „Sonstige Produktanwendungen“, zu denen die Emissionen aus dem Silvesterfeuerwerk gehören.

Angrenzend an die Talsperre Quitzdorf befinden sich verschiedene Ferienparks, Feriendörfer, Feriengesellschaften, Bungalowvermietungen und ein Schullandheim. Es ist also davon auszugehen, dass insbesondere in Ferienzeiten die Zahl der Touristen die Zahl der Anwohner überschreitet.

Eine mögliche Erklärung für hohe gemessene PM₁₀-Konzentrationen zum Jahreswechsel, die im Modell nicht auftreten, sind jährlich unterschiedlich stark ausgeprägte Silvesterfeuerwerke von Urlaubsgästen. Ein weiterer möglicher Beitrag sind Emissionen aus Holzfeuerungsanlagen, mit denen Ferienunterkünfte in ländlichen Gebieten mit Winter-Tourismus häufig ausgestattet sind, um eine heimelige Atmosphäre zu schaffen (Komfortkamine). Dafür spricht, dass auch in der Zeit vor und nach dem Jahreswechsel die an der Station DESN079 gemessenen Feinstaub-Konzentrationen erhöht sind (s Abbildung 124).

Eine Möglichkeit, solche Effekte im Modell zumindest teilweise zu berücksichtigen, wäre es, bei der räumlichen Verteilung der Emissionen der Sektoren „Kleinfeuerungsanlagen“ und „Sonstige Produktanwendungen“ in Touristenregionen neben den Einwohnern auch die Anzahl der Übernachtungsmöglichkeiten heranzuziehen.

8.3 Evaluierung O₃

In Abbildung 125 und Abbildung 126 sind die mit dem Delta-Tool erzeugten MQI-Zieldiagramme für Ozon für die statische und die dynamische Modellrechnung dargestellt. Umgekehrt wie bei NO₂ ist hier der Bias für fast alle Stationen positiv.

Die Modellrechnungen liegen für die zeitaufgelösten Werte an allen Stationen im „grünen Bereich“, der höchste auftretende MQI-Wert liegt für die statische Modellrechnung bei 0,783 und verbessert sich durch die dynamischen SF leicht auf 0,778. Wie bei NO₂ sind die MQI-Werte für die Jahresmittelwerte höher, die höchsten Werte liegen außerhalb des „grünen Bereiches“. Für die statische Modellrechnung bei 1,067 und die dynamische Modellrechnung etwas niedriger bei 1,052.

Weitere Evaluierungen mit dem Delta-Tool zu Ozon zeigen ebenfalls nur sehr geringe Unterschiede zwischen statischer und dynamischer Modellrechnung, analog zu Abbildung 111 und Abbildung 112 erzeugte Vergleichsdiagramme zeigen minimale Modellverbesserungen durch die dynamischen SF (hier nicht gezeigt). Hinsichtlich der modellierten O₃-Überschreitungstage kommt es durch die dynamischen SF zu leichten Verschlechterungen, dies ist in Abbildung 127 dargestellt.

Abbildung 125 Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm O₃ für die RCG-Modellrechnung auf Basis statischer SF

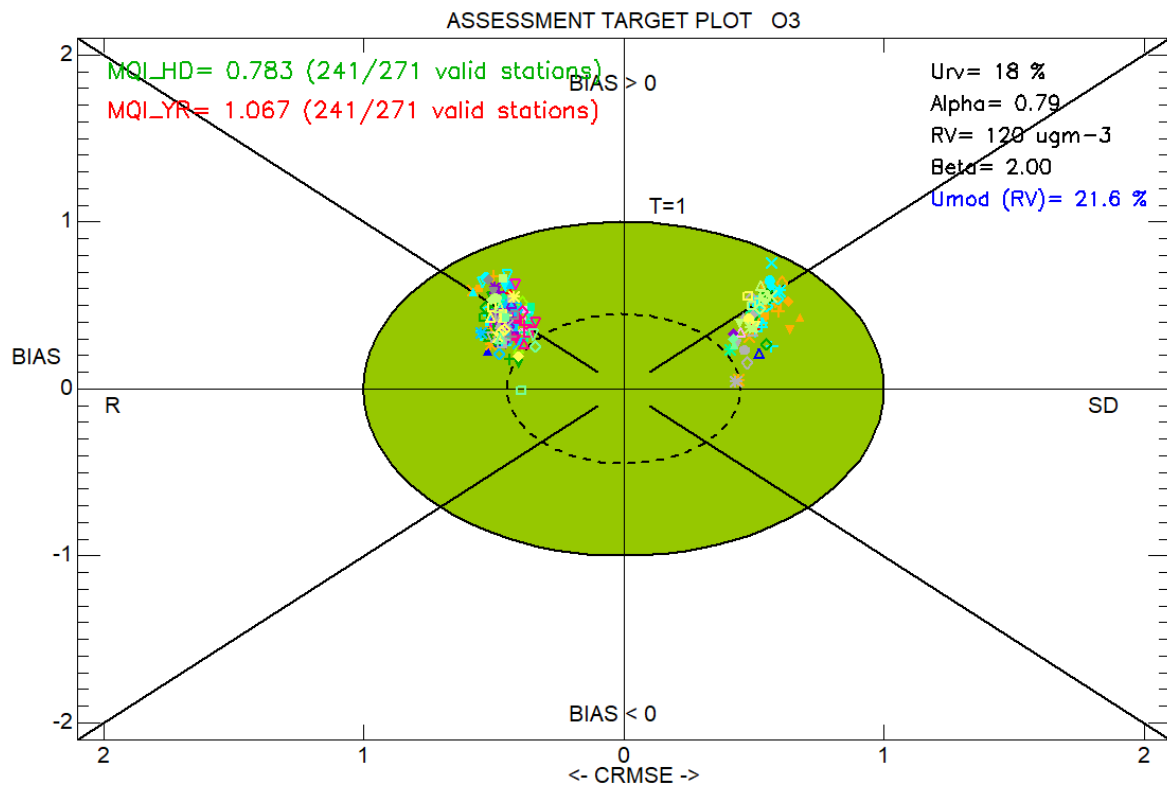


Abbildung 126: Delta-Tool: MQI-Zieldiagramm O₃ für die RCG-Modellrechnung auf Basis dynamischer SF

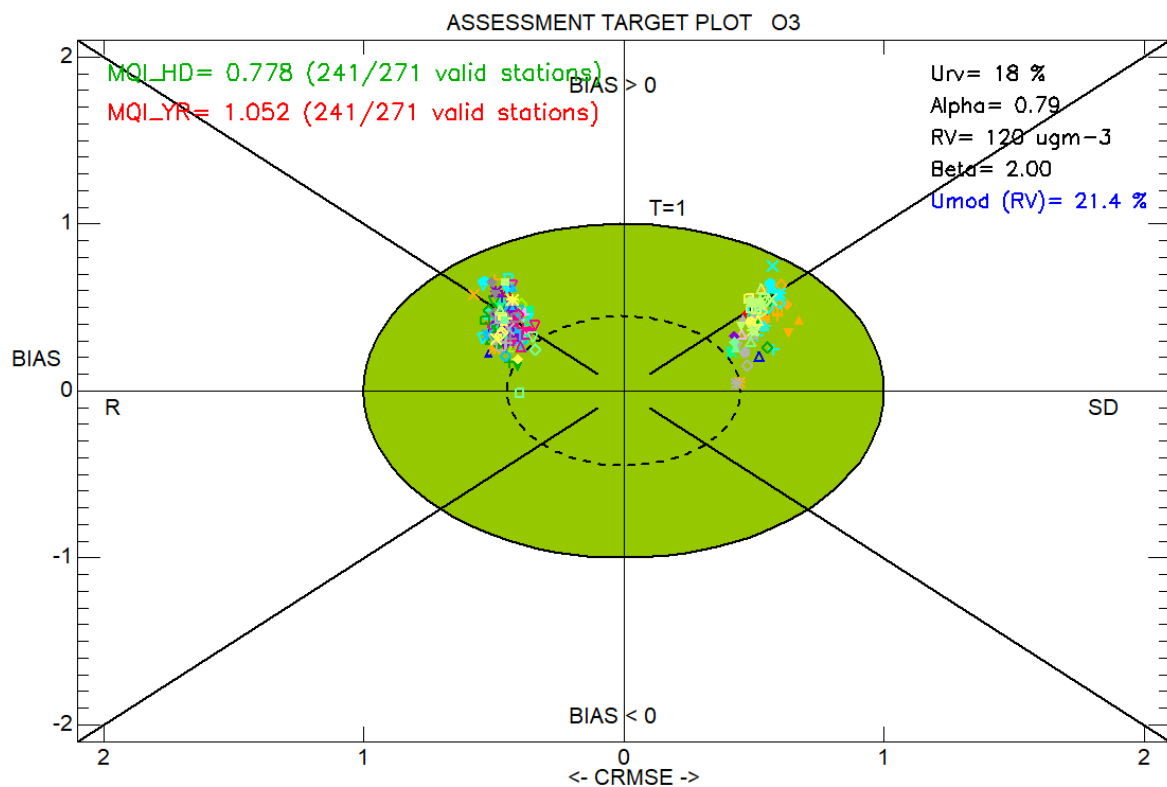
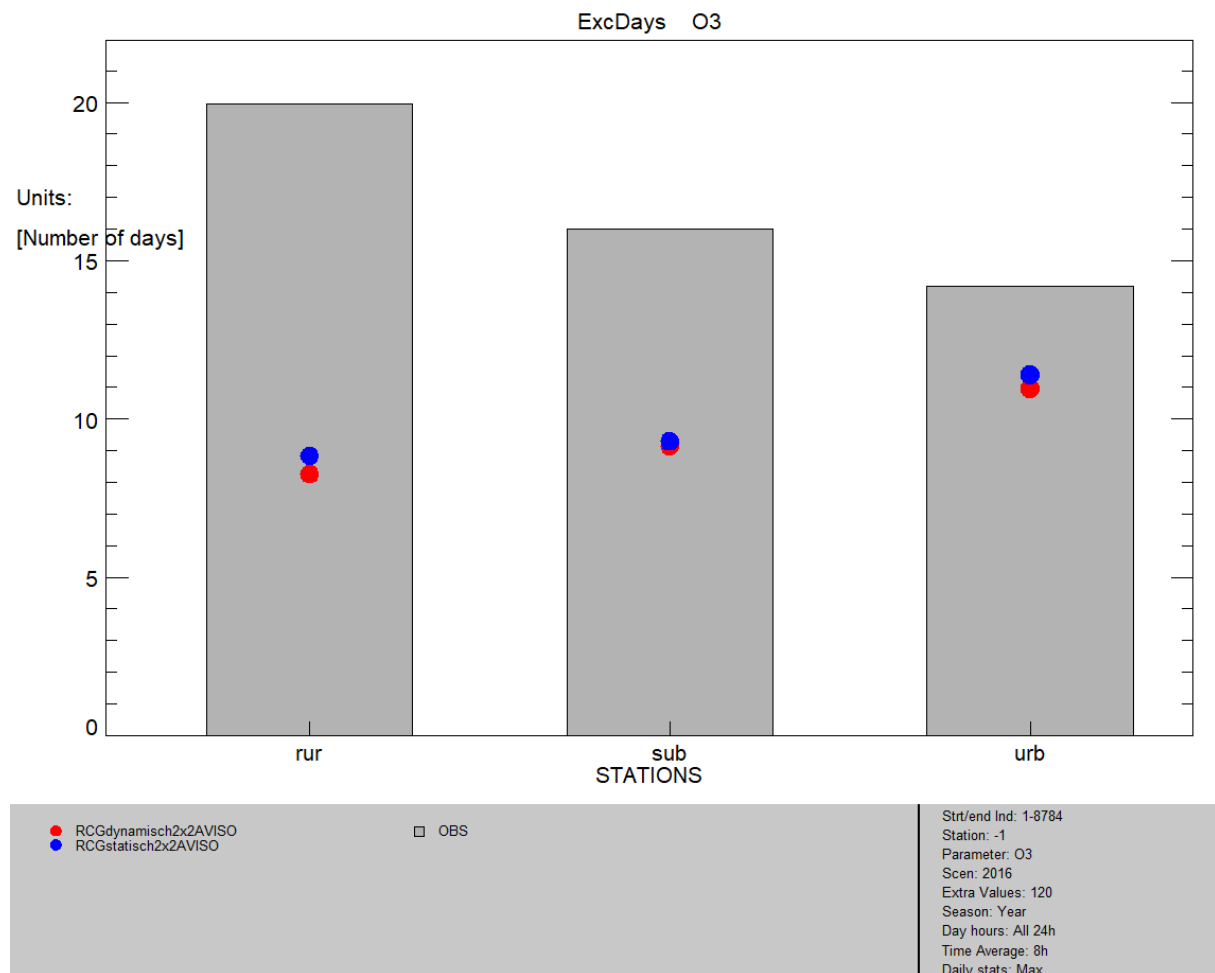


Abbildung 127: Evaluierung der statischen (blaue Symbole) und der dynamischen (rote Symbole) Modellrechnung 2016 mit dem Delta-Tool für Ozon: Vergleich anhand der Überschreitungstage jeweils für Messstationen im ländlichen Hintergrund (rur), im vorstädtischen Hintergrund (sub) und im städtischen Hintergrund (urb)



Da Ozon nicht direkt emittiert wird, beeinflussen die dynamischen SF die Ozon-Konzentration nur indirekt über geänderte Emissionsprofile der Vorläufer, im Wesentlichen über das Verhältnis der Stickstoffoxide zu den NMVOC. Letztere sind zum Teil auch biogenen Ursprungs, und nur die Zeitprofile der anthropogenen NMVOC-Emissionen ändern sich durch die dynamischen SF. Im Rahmen dieser Auswertung wird nicht versucht, ohnehin geringe Unterschiede bei der Ozon-Evaluierung durch Veränderungen der Verhältnisse der Vorläuferkonzentrationen zu erklären.

8.4 Fazit Evaluierung Delta-Tool

Die Evaluierung der RCG-Modellrechnungen unter Verwendung statischer und dynamischer SF lässt sich wie folgt zusammenfassen:

- Die dynamischen SF führen insgesamt zu einer leichten Verbesserung für den Korrelationskoeffizienten für PM₁₀ und NO₂ an urbanen Hintergrundstationen.
- Auch die PM₁₀-Überschreitungstage werden etwas besser getroffen,

- die O₃-Überschreitungstage hingegen etwas schlechter.

Dies entspricht dem Fazit aus der Evaluierung von acht ausgewählten Einzelstationen in Kapitel 7, wo auch insgesamt geringe Verbesserungen der Modellrechnung bei Verwendung dynamischer SF gefunden wurden. Die Evaluierung nur dieser acht in Kapitel 7 ausgewählten Stationen mit dem Delta-Tool zeigt, dass die Modellperformance dort als repräsentativ für die Performance am Gesamtkollektiv aller gültigen Stationen angesehen werden kann.

Eine detailliertere Betrachtung zweier ländlicher Hintergrundstationen, an denen die Messergebnisse von den Modellrechnungen besonders schlecht getroffen werden, zeigt für die Abweichungen mögliche lokale Ursachen, zu denen in regionalen Modellrechnungen keine Informationen vorliegen.

9 Ausblick: Vorschläge für Weiterentwicklungen von TeResE

Gegenstand des vorliegenden Berichts war die Erstellung eines Prototyps für ein Tool zur Berechnung dynamischer Zeitprofile zur Verwendung in CTMs. Mit TeResE (Temporal Resolution of Emission data) liegt dieser Prototyp nun vor, für alle relevanten Quellgruppen können damit dynamische Zeitprofile berechnet werden. Bereits während der Entwicklung wurden über die Möglichkeiten eines Prototyps hinausgehende Erweiterungspotenziale deutlich, die im Folgenden aufgelistet werden.

Landwirtschaft

Zur zeitlichen Verteilung der NH_3 -Emissionen aus der Landwirtschaft sind die Temperaturabhängigkeiten nach Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005) implementiert, mit geringfügigen Anpassungen der Parameter. Wie in Kapitel 7.2 beschrieben, entspricht dies einer Mittelung über eine große Zahl als unabhängig angenommener Düngevorgänge. Weitere Einflüsse auf die Düngezeiten, wie z.B. die lokal angebauten Feldfrüchte, oder Düngeprotokolle der Landwirte, konnten aufgrund fehlender Daten nicht berücksichtigt werden.

Weil die Evaluierung gezeigt hat, dass die Zeitfunktionen der Landwirtschaft auf den Jahresgang (Monatswerte) der modellierten Konzentrationen nicht nur von NH_3 , sondern auch von anderen Schadstoffen einen großen Einfluss hat, wird vorgeschlagen, in weitergehenden Untersuchungen zu recherchieren, ob Daten zu Düngeterminen (z.B. wegen strengerer Dokumentationsvorschriften in den Düngeverordnungen), oder zu den pro Jahr tatsächlich angebauten Feldfrüchten ggf. auf Länderebene vorliegen.

Flughäfen

Basis für die Zeitprofile des Flugverkehrs sind die monatlichen Anzahlen der Starts und Landungen für die 25 größten Flughäfen Deutschlands, die für vergangene Jahre jeweils beim statistischen Bundesamt vorliegen. Diese Flughäfen liegen als Punktquellen vor. Für die übrigen Emissionen aus dem Flugverkehr werden daraus gemittelte Jahresgänge verwendet.

Diese Daten liefern einen Jahresgang aus Monatswerten; Wochengang und Tagesgang werden aktuell aus dem RCG Default übernommen.

Stündliche Daten zu Starts und Landungen der Großflughäfen können auf Anfrage bei den Flughäfen bezogen werden. Liegen solche Daten vor, können in einer verfeinerten TeResE-Version optional Jahresgänge auf Basis von Stundenwerten ohne Verwendung von Default-Profilen verwendet werden.

Autobahntankstellen

Die Emissionen des NFR-Sektors 1B2av (Distribution of oil products) werden derzeit zeitlich verteilt auf Basis der monatlichen Daten des Statistischen Bundesamts zum Pipelinetransport. Räumlich sind aktuell in GRETA 90% dieser Emissionen entlang der Pipelines verteilt und 10% auf die Autobahntankstellen. Wenn der GRETA-Export um ein Punktquellen-Layer für die Autobahntankstellen erweitert wird, können zur zeitlichen Verteilung der räumlich auf diese Raster verteilten Emissionen aus NFR 1B2av die SF des Straßenverkehrs an diesen Autobahnabschnitten verwendet werden.

Straßenverkehr

Während im Außerortsbereich räumlich nach den Straßenverkehrszählungs-Regionen differenziert wurde, ist die Verkehrsabhängigkeit der SF im Innerortsbereich aktuell abgeleitet aus den mittleren Ganglinien für LV und SV aller BAST-Dauerzählstellen innerorts ohne Stadtautobahnen und Grenz-Zählstellen und damit bundesweit einheitlich.

Luftqualitäts-Messstationen liegen typischerweise im Innerortsbereich, und sind von den innerstädtischen Verkehrsemissionen unmittelbarer beeinflusst als von denen der Außerortsstraßen. Aufgrund der geringen Anzahl innerörtlicher Dauerzählstellen wird gerade der Innerortsbereich für die SF aktuell deutschlandweit gemittelt. Die Evaluierung zeigt, dass der Straßenverkehr insbesondere auf kurzen Zeitskalen (Tagesgänge auf Stundenbasis) für die modellierten Konzentrationsverläufe verschiedener Luftschadstoffe relevant ist. Die deutschlandweiten dynamischen Innerortsprofile führen häufig zu einer Verbesserung, passen aber nicht überall gleich gut zu den lokalen Verläufen.

In einer Weiterentwicklung kann nach zusätzlichen Datenquellen recherchiert werden, die die lokalen Zeitprofile besser abbilden.

Kraftwerke

Die Zuordnung der Kraftwerksblöcke, für die bei ENTSO-E stündliche Werte für die Stromerzeugung erhältlich sind, zu den Punktquellen bei PRTR wurde anhand der Kraftwerksliste (open power system data, 2018) über EIC codes und GPS-Koordinaten innerhalb eines Fangradius von 1 km durchgeführt. Da sich Anzahl und Lage der Kraftwerke über die Jahre nur langsam ändern, ist diese Zuordnung in der aktuellen TeResE-Version fest vorgegeben.

In einer Weiterentwicklung könnte die Option implementiert werden, dass die Zuordnung zumindest halbautomatisch neu berechnet werden kann.

Optimierungen hinsichtlich Rechenzeit und Speicherbedarf

Aktuell benötigt TeResE zur Berechnung der SF für ein Jahr auf NFR-Ebene inklusive anschließender Aggregation auf SNAP-Ebene für Nest 2 der RCG-Gitter (~2km x 2km) ca. fünf Stunden auf der in Abschnitt 6.2 beschriebenen Hardware.

In der gewählten räumlichen Auflösung werden jedem Gitterpunkt SF zugeordnet, jeweils pro NFR-Sektor und wo erforderlich nach Schadstoffen differenziert. Um die Anzahl der SF handhabbar zu halten, werden Gitterpunkte pro NFR-Sektor zu Gruppen zusammengefasst, allen Gitterpunkten innerhalb einer Gruppe sind für den jeweiligen NFR-Sektor die gleichen SF zugeordnet. Die Gruppen hängen von den jeweiligen Abhängigkeiten der NFR-Sektoren ab: Bei Temperaturabhängigkeiten bilden z.B. Gitterpunkte innerhalb einer Klimaregion eine Gruppe, bei Abhängigkeiten von der Verkehrsmenge z.B. alle durch Autobahnemissionen dominierten Raster innerhalb einer SVZ-Region, für die landwirtschaftlichen SF wurden gröbere Raster definiert, etc.

Die eigentliche Berechnung der SF findet aktuell räumlich im Nest 1 Gitter (~7km x 8km) statt, das Einlesen aller Eingangsdaten würde sonst zu viel Speicherplatz benötigen. Mit dieser räumlichen Auflösung werden Eingangsdaten verschnitten und die Gruppenmittelwerte berechnet. Für die Modellrechnungen mit RCG werden die für die Gruppen berechneten SF dem Nest 2 Gitter zugeordnet. Für am Rand von Klima- oder SVZ-Regionen gelegene Gitterpunkte kann es vorkommen, dass die Gewichtung bei der Mittelung der SF geringfügig von der Gewichtung abweicht, die bei einer Berechnung der SF auf dem Nest 2 Gitter vorgelegen hätte.

Das als Prototyp vorliegende Tool kann optimiert werden, sowohl hinsichtlich Rechenzeit wie auch hinsichtlich Speicherbedarf. Eine Speicheroptimierung (z.B. durch gestückeltes Einlesen

der COSMO-Daten) kann es ermöglichen, die SF in der Nest 2 Auflösung zu berechnen. Dies führt dann zu entsprechend längeren Rechenzeiten.

Rechen- und Ausgabegitter

Aktuell rechnet TeResE intern im RCG-Rechengitter Nest 1, die Ausgaben werden für das RCG-Rechengitter Nest 2 aufbereitet. Eine Anpassung an beliebige Rechengitter, z.B. als Input für andere CTMs, kann zukünftig zusätzlich implementiert werden.

10 Quellenverzeichnis

- Aulinger, A., Matthias, V., Quante, M. (2011): An Approach to Temporally Disaggregate Benzo(a)pyrene Emissions and Their Application to a 3D Eulerian Atmospheric Chemistry Transport Model. In: Water Air Soil Pollut (2011) 216:643–655, DOI 10.1007/s11270-010-0559-x
- AVISO, IB Rau, PTV (2017): Gesamtwirkungsgutachten zur immissionsseitigen Wirkungsermittlung der Maßnahmen der 3. Fortschreibung des Luftreinhalteplans Stuttgart Dokumentation, Teil 1
- AVISO (2019): Endenergiebedarf „Kleine und Mittlere Feuerungsanlagen“ in Baden-Württemberg, Abschlussbericht, im Auftrag der LUBW, 2019
- Backes, A. (2014): Temporal variations in ammonia emission and their influence on the formation of secondary aerosols in the North Sea region, Bachelorarbeit im Major Umweltwissenschaften, Leuphana Universität, Helmholtz-Zentrum Geesthacht
- Backes, A., Aulinger, A., Bieser, J., Matthias, V., Quante, M. (2016): Ammonia emissions in Europe, part I: Development of a dynamical ammonia emission inventory. In: Atmospheric Environment 131 (2016) 55-66, <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.01.041>
- BAST (2022): <https://www.bast.de/DE/Verkehrstechnik/Fachthemen/v2-verkehrszaehlung/Verkehrszaehlung.html>
- Denier van der Gon, H., van het Bolscher, M., Visschedijk, A., Zandveld, P. (2005). Study of the effectiveness of UNECE Persistent Organic Pollutants Protocol and cost of possible additional measures. Phase I: Estimation of emission reduction resulting from the implementation of the POP Protocol. TNO report B& O-A R 2005/194
- DLF (2019). Streit über Silvesterböller: Feuerwerk zwischen Freiheit und Feinstaub, https://www.deutschlandfunk.de/streit-ueber-silvesterboeller-feuerwerk-zwischen-freiheit.724.de.html?dram:article_id=466666
- DWD (2017): Nationaler Klimareport, Klima – Gestern, heute und in der Zukunft, https://www.dwd.de/DE/leistungen/nationalerklimateport/download_report_auflage-3.pdf
- DWD (2020) <https://www.dwd.de/DE/leistungen/klimadatendeutschland/klarchivtagmonat.html>
- Geels, C., Andersen, H. V., Skjøth, C. A., Christensen, J. H., Ellermann, T., Løfstrøm, P., Gyldenkerne, S., Brandt, J., Hansen, K. M., Frohn, L. M., Hertel, O. (2012): Improved modelling of atmospheric ammonia over Denmark using the coupled modelling system DAMOS. In: Biogeosciences, 9, 2625–2647, 2012, www.biogeosciences.net/9/2625/2012/, doi:10.5194/bg-9-2625-2012
- Gyldenkerne, S., Skjøth, C. A., Hertel, O., Ellermann, T. (2005): A dynamical ammonia emission parameterization for use in air pollution models. In: JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH, VOL. 110, D07108, doi:10.1029/2004JD005459
- Hendriks, C., Kranenburg, R., Kuenen, J.J.P., Van den Bril, B., Verguts, V., Schaap, M. (2016): Ammonia emission time profiles based on manure transport data improve ammonia modelling across north western Europe. In: Atmospheric Environment 131 (2016) 83-96, <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.01.043>
- ifeu (2020): persönliche Mitteilung
- Klimont, Z., Kupiainen, K., Heyes, C., Purohit, P., Cofala, J., Rafaj, P., Borken-Kleefeld, J., Schöpp, W. (2016): Global anthropogenic emissions of particulate matter including black carbon. In: Atmos. Chem. Phys., 17, 8681-8723, 2017, <https://doi.org/10.5194/acp-17-8681-2017>
- LUBW (2016): Verkehrsstärken an ausgewählten Verkehrs- und Spotmessstellen, Auswertungen 2014
- LUBW (2020): Verkehrsstärken 2016 und 2017 an drei Spotmessstellen, persönliche Mitteilung Bernd Ramser, LUBW

- Menut, L., Goussebaile, A., Bessagnet, B., Khvorostiyannov, D., Ung, A. (2012): Impact of realistic hourly emissions profiles on air pollutants concentrations modelled with CHIMERE. In: Atmospheric Environment 49 (2012), doi:10.1016/j.atmosenv.2011.11.057
- Mues, A., Kuenen, J., Hendriks, C., Manders, A., Segers, A., Scholz, Y., Hueglin, C., Builtjes, P., Schaap, M. (2014): Sensitivity of air pollution simulations with LOTOS-EUROS to the temporal distribution of anthropogenic emissions. In: Atmos. Chem. Phys., 14, 939–955, 2014, www.atmos-chem-phys.net/14/939/2014/, doi:10.5194/acp-14-939-2014
- Open power system data (2018), https://doi.org/10.25832/conventional_power_plants/2018-12-20
- Paulot, F., Jacob, D. J., Pinder, R.W., Bash, J. O., Travis, K., Henze, D. K. (2014): Ammonia emissions in the United States, European Union, and China derived by high-resolution inversion of ammonium wet deposition data: Interpretation with a new agricultural emissions inventory (MASAGE_NH3). In: Journal of Geophysical Research: Atmospheres 119 (7) (April 9): 4343–4364. doi:10.1002/2013jd021130
- Schneider, C. et al. (2016): ArcGIS basierte Lösung zur detaillierten, deutschlandweiten Verteilung (Gridding) nationaler Emissionsjahreswerte auf Basis des Inventars zur Emissionsberichterstattung. In: UBA Texte 71/2016
- Schwarzenbach, B., Hüglin, C. (2011): Selektive Messung von Stickstoffdioxid mit Photolysekonverter, Messbericht, Empa, Abteilung Luftfremdstoffe/Umwelttechnik, Dübendorf, Schweiz
- Simpson, D., Benedictow, A., Berge, H., Bergström, R., Emberson, L., Fagerli, H., Flechard, C., Hayman, G., Gauss, M., Jonson, J., Jenkin, M., Nyíri, A., Richter, C., Semeena, V., Tsyro, S., Tuovinen, J., Valdebenito, A., Wind, P. (2012): The EMEP MSC-W chemical transport model – technical description, Atmos. Chem. Phys., 12, 7825–7865, 2012, www.atmos-chem-phys.net/12/7825/2012/, doi:10.5194/acp-12-7825-2012
- Skjøth, C. A., Hertel, O., Gyldenkerne, S., Ellermann, T. (2004): Implementing a dynamical ammonia emission parameterization in the large-scale air pollution model ACDEP. In: JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH, VOL. 109, D06306, doi:10.1029/2003JD003895
- Skjøth, C. A., Geels, C., Berge, H., Gyldenkerne, S., Fagerli, H., Ellermann, T., Frohn, L. M., Christensen, J., Hansen, K. M., Hansen, K., Hertel, O. (2011): Spatial and temporal variations in ammonia emissions – a freely accessible model code for Europe. In: Atmos. Chem. Phys., 11, 5221–5236, 2011, www.atmos-chem-phys.net/11/5221/2011/, doi:10.5194/acp-11-5221-2011
- Stern, Rainer (2009): Das chemische Transportmodell REM-CALGRID, Modellbeschreibung. Freie Universität Berlin, Institut für Meteorologie, Troposphärische Umweltforschung, Januar 2009
- Thunis, P. et. Cuvelier, C.: DELTA Version 7.0, Concepts / User's Guide / Diagrams, April 2022
- TNO (2011): Description of current temporal emission patterns and sensitivity of predicted AQ for temporal emission patterns, EU FP7 MACC deliverable report D_D-EMIS_1.3, Dezember 2011
- TU Graz (2019): Update of Emission Factors for HBEFA Version 4.1, IVT, TU Graz, 2019
- TREMODO (2016): Aktualisierung „Daten- und Rechenmodell: Energieverbrauch und Schadstoffemissionen des motorisierten Verkehrs in Deutschland 1960-2035“ (TREMODO) für die Emissionsberichterstattung 2016 (Berichtsperiode 1990-2014), Anhang, 2016
- Villena, G., Bejan, I., Kurtenbach, R., Wiesen, P., Kleffmann, J. (2012): Interferences of commercial NO₂ instruments in the urban atmosphere and in a smog chamber, Atmos. Meas. Tech., 5, 149–159, 2012, www.atmos-meas-tech.net/5/149/2012/, doi:10.5194/amt-5-149-2012
- Werner, M., Kryza, M., Geels, C., Ellermann, T., Skjøth, C. A. (2015): Spatial, temporal and vertical distribution of ammonia concentrations over Europe – comparing a static and dynamic approach with WRF-Chem. In: Atmos. Chem. Phys. Discuss., 15, 22935–22973, 2015, www.atmos-chem-phys-discuss.net/15/22935/2015/, doi:10.5194/acpd-15-22935-2015

Werner, M., Kryza, M., Geels, C., Ellermann, T., Skjøth, C., A. (2017): Ammonia Concentrations over Europe – Application of the WRF-Chem Model Supported with Dynamic Emission. In: Polish Journal of Environmental Studies, April 2017

A Übersicht NFR-Sektoren, GNFR-Sektoren, SNAP-level 1 Sektoren

Tabelle 23: Zuordnung NFR-Sektoren, GNFR-Sektoren, SNAP-Sektoren (level 1)

| NFR code | Long name | GNFR (NFR Aggregation for Gridding and LPS) | SNAP code (international) | SNAP name |
|----------|--|---|---------------------------|--|
| 1A1a | Public electricity and heat production | A_PublicPower | 1 | combustion in energy and transformation industries |
| 1A1b | Petroleum refining | B_Industry | 1 | combustion in energy and transformation industries |
| 1A1c | Manufacture of solid fuels and other energy industries | B_Industry | 1 | combustion in energy and transformation industries |
| 1A2a | Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Iron and steel | B_Industry | 3 | combustion in manufacturing industries |
| 1A2b | Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Non-ferrous metals | B_Industry | 3 | combustion in manufacturing industries |
| 1A2c | Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Chemicals | B_Industry | 3 | combustion in manufacturing industries |
| 1A2d | Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Pulp, Paper and Print | B_Industry | 3 | combustion in manufacturing industries |
| 1A2e | Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Food processing, beverages and tobacco | B_Industry | 3 | combustion in manufacturing industries |
| 1A2f | Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Non-metallic minerals | B_Industry | 3 | combustion in manufacturing industries |
| 1A2gvii | Mobile combustion in manufacturing industries and construction (please specify in the IIR) | I_Offroad | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A2gviii | Stationary combustion in manufacturing industries and construction: Other (please | B_Industry | 3 | combustion in manufacturing industries |

| NFR code | Long name | GNFR (NFR Aggregation for Gridding and LPS) | SNAP code (international) | SNAP name |
|-----------|--|---|---------------------------|--|
| | specify in the IIR) | | | |
| 1A3ai(i) | International aviation LTO (civil) | H_Aviation | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A3aii(i) | Domestic aviation LTO (civil) | H_Aviation | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A3bi | Road transport: Passenger cars | F_RoadTransport | 7 | road transport |
| 1A3bii | Road transport: Light duty vehicles | F_RoadTransport | 7 | road transport |
| 1A3biii | Road transport: Heavy duty vehicles and buses | F_RoadTransport | 7 | road transport |
| 1A3biv | Road transport: Mopeds & motorcycles | F_RoadTransport | 7 | road transport |
| 1A3bv | Road transport: Gasoline evaporation | F_RoadTransport | 7 | road transport |
| 1A3bvi | Road transport: Automobile tyre and brake wear | F_RoadTransport | 7 | road transport |
| 1A3bvii | Road transport: Automobile road abrasion | F_RoadTransport | 7 | road transport |
| 1A3c | Railways | I_Offroad | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A3di(ii) | International inland waterways | G_Shipping | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A3dii | National navigation (shipping) | G_Shipping | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A3ei | Pipeline transport | I_Offroad | 1 | combustion in energy and transformation industries |
| 1A3eii | Other (please specify in the IIR) | I_Offroad | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A4ai | Commercial/Institutional: Stationary | C_OtherStationaryComb | 2 | non-industrial combustion plants |

| NFR code | Long name | GNFR (NFR Aggregation for Gridding and LPS) | SNAP code (international) | SNAP name |
|----------|---|---|---------------------------|---|
| 1A4aii | Commercial/Institutional: Mobile | I_Offroad | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A4bi | Residential: Stationary | C_OtherStationaryComb | 2 | non-industrial combustion plants |
| 1A4bii | Residential: Household and gardening (mobile) | I_Offroad | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A4ci | Agriculture/Forestry/Fishing: Stationary | C_OtherStationaryComb | 2 | non-industrial combustion plants |
| 1A4cii | Agriculture/Forestry/Fishing: Off-road vehicles and other machinery | I_Offroad | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A4ciii | Agriculture/Forestry/Fishing: National fishing | I_Offroad | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1A5a | Other stationary (including military) | C_OtherStationaryComb | 2 | non-industrial combustion plants |
| 1A5b | Other, Mobile (including military, land based and recreational boats) | I_Offroad | 8 | other mobile sources and machinery |
| 1B1a | Fugitive emission from solid fuels: Coal mining and handling | D_Fugitive | 5 | extraction and distribution of fossil fuels and geothermal energy |
| 1B1b | Fugitive emission from solid fuels: Solid fuel transformation | D_Fugitive | 4 | production processes |
| 1B1c | Other fugitive emissions from solid fuels | D_Fugitive | 5 | extraction and distribution of fossil fuels and geothermal energy |
| 1B2ai | Fugitive emissions oil: Exploration, production, transport | D_Fugitive | 5 | extraction and distribution of fossil fuels and geothermal energy |
| 1B2aiv | Fugitive emissions oil: Refining and storage | D_Fugitive | 4 | production processes |

| NFR code | Long name | GNFR (NFR Aggregation for Gridding and LPS) | SNAP code (international) | SNAP name |
|----------|--|---|---------------------------|---|
| 1B2av | Distribution of oil products | D_Fugitive | 5 | extraction and distribution of fossil fuels and geothermal energy |
| 1B2b | Fugitive emissions from natural gas (exploration, production, processing, transmission, storage, distribution and other) | D_Fugitive | 5 | extraction and distribution of fossil fuels and geothermal energy |
| 1B2c | Venting and flaring (oil, gas, combined oil and gas) | D_Fugitive | 9 | waste treatment and disposal |
| 1B2d | Other fugitive emissions from energy production | D_Fugitive | 5 | extraction and distribution of fossil fuels and geothermal energy |
| 2A1 | Cement production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2A2 | Lime production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2A3 | Glass production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2A5a | Quarrying and mining of minerals other than coal | B_Industry | 4 | production processes |
| 2A5b | Construction and demolition | B_Industry | 4 | production processes |
| 2A5c | Storage, handling and transport of mineral products | B_Industry | 4 | production processes |
| 2A6 | Other mineral products (please specify in the IIR) | B_Industry | 4 | production processes |
| 2B1 | Ammonia production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2B2 | Nitric acid production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2B3 | Adipic acid production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2B5 | Carbide production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2B6 | Titanium dioxide production | B_Industry | 4 | production processes |

| NFR code | Long name | GNFR (NFR Aggregation for Gridding and LPS) | SNAP code (international) | SNAP name |
|----------|--|---|---------------------------|-----------------------------------|
| 2B7 | Soda ash production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2B10a | Chemical industry: Other (please specify in the IIR) | B_Industry | 4 | production processes |
| 2B10b | Storage, handling and transport of chemical products (please specify in the IIR) | B_Industry | 4 | production processes |
| 2C1 | Iron and steel production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2C2 | Ferroalloys production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2C3 | Aluminium production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2C4 | Magnesium production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2C5 | Lead production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2C6 | Zinc production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2C7a | Copper production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2C7b | Nickel production | B_Industry | 4 | production processes |
| 2C7c | Other metal production (please specify in the IIR) | B_Industry | 4 | production processes |
| 2C7d | Storage, handling and transport of metal products (please specify in the IIR) | B_Industry | 4 | production processes |
| 2D3a | Domestic solvent use including fungicides | E_Solvents | 6 | solvent use and other product use |
| 2D3b | Road paving with asphalt | B_Industry | 4 | production processes |
| 2D3c | Asphalt roofing | B_Industry | 4 | production processes |
| 2D3d | Coating applications | E_Solvents | 6 | solvent use and other product use |
| 2D3e | Degreasing | E_Solvents | 6 | solvent use and other product use |
| 2D3f | Dry cleaning | E_Solvents | 6 | solvent use and other product use |

| NFR code | Long name | GNFR (NFR Aggregation for Gridding and LPS) | SNAP code (international) | SNAP name |
|----------|---|---|---------------------------|-----------------------------------|
| 2D3g | Chemical products | E_Solvents | 6 | solvent use and other product use |
| 2D3h | Printing | E_Solvents | 6 | solvent use and other product use |
| 2D3i | Other solvent use (please specify in the IIR) | E_Solvents | 6 | solvent use and other product use |
| 2G | Other product use (please specify in the IIR) | E_Solvents | 6 | solvent use and other product use |
| 2H1 | Pulp and paper industry | B_Industry | 4 | production processes |
| 2H2 | Food and beverages industry | B_Industry | 4 | production processes |
| 2H3 | Other industrial processes (please specify in the IIR) | B_Industry | 4 | production processes |
| 2I | Wood processing | B_Industry | 4 | production processes |
| 2J | Production of POPs | B_Industry | 4 | production processes |
| 2K | Consumption of POPs and heavy metals (e.g. electrical and scientific equipment) | B_Industry | 6 | solvent use and other product use |
| 2L | Other production, consumption, storage, transportation or handling of bulk products (please specify in the IIR) | B_Industry | 6 | solvent use and other product use |
| 3B1a | Manure management - Dairy cattle | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B1b | Manure management - Non-dairy cattle | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B2 | Manure management - Sheep | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B3 | Manure management - Swine | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B4a | Manure management - Buffalo | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B4d | Manure management - Goats | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B4e | Manure management - Horses | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B4f | Manure management - Mules and asses | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |

| NFR code | Long name | GNFR (NFR Aggregation for Gridding and LPS) | SNAP code (international) | SNAP name |
|----------|---|---|---------------------------|------------------------------|
| 3B4gi | Manure management - Laying hens | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B4gii | Manure management - Broilers | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B4giii | Manure management - Turkeys | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B4giv | Manure management - Other poultry | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3B4h | Manure management - Other animals (please specify in the IIR) | K_AgriLivestock | 10 | agriculture |
| 3Da1 | Inorganic N-fertilizers (includes also urea application) | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3Da2a | Animal manure applied to soils | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3Da2b | Sewage sludge applied to soils | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3Da2c | Other organic fertilisers applied to soils (including compost) | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3Da3 | Urine and dung deposited by grazing animals | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3Da4 | Crop residues applied to soils | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3Db | Indirect emissions from managed soils | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3Dc | Farm-level agricultural operations including storage, handling and transport of agricultural products | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3Dd | Off-farm storage, handling and transport of bulk agricultural products | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3De | Cultivated crops | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3Df | Use of pesticides | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3F | Field burning of agricultural residues | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 3I | Agriculture other (please specify in the IIR) | L_AgriOther | 10 | agriculture |
| 5A | Biological treatment of waste - Solid waste disposal on land | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |

| NFR code | Long name | GNFR (NFR Aggregation for Gridding and LPS) | SNAP code (international) | SNAP name |
|----------|---|---|---------------------------|---|
| 5B1 | Biological treatment of waste - Composting | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5B2 | Biological treatment of waste - Anaerobic digestion at biogas facilities | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5C1a | Municipal waste incineration | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5C1bi | Industrial waste incineration | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5C1bii | Hazardous waste incineration | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5C1biii | Clinical waste incineration | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5C1biv | Sewage sludge incineration | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5C1bv | Cremation | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5C1bvi | Other waste incineration (please specify in the IIR) | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5C2 | Open burning of waste | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5D1 | Domestic wastewater handling | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5D2 | Industrial wastewater handling | J_Waste | 9 | waste treatment and disposal |
| 5D3 | Other wastewater handling | J_Waste | 9 | Other wastewater handling |
| 5E | Other waste (please specify in the IIR) | J_Waste | 9 | Other waste (please specify in the IIR) |
| 6A | Other (included in national total for entire territory) (please specify in the IIR) | M_Other | 5 | waste treatment and disposal |

B Übersicht NFR-Sektoren und Splitting-Faktoren

Tabelle 24: Für alle NFR-Sektoren: Übersicht über die zur Konstruktion der Splitting-Faktoren verwendeten Daten zur Zeitabhängigkeit und die dabei berücksichtigte räumliche Differenzierung

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|---|---|---|
| 1A1a Public electricity and heat production | Jahresgang, stündliche Werte: Punktquellen, die zugeordnet werden können: ENTSO-E Punktquellen sonstige Punktquellen und Flächenquellen: mittlere Splitting-Faktoren der entsprechenden Übertragungsnetzbetreiber | Punktquellen: Eigene Splitting-Faktoren, Flächenquellen: mittlere Splitting-Faktoren für Gebiete der Übertragungsnetzbetreiber |
| 1A1b Petroleum refining | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-19 Kokerei und Mineralölverarbeitung Wochengang, Tagesgang: flach | einheitlich für D-gesamt |
| 1A1c Manufacture of solid fuels and other energy industries | Jahresgang, stündliche Werte: Punktquellen, die zugeordnet werden können: ENTSO-E Punktquellen sonstige Punktquellen und Flächenquellen: mittlere Splitting-Faktoren der entsprechenden Übertragungsnetzbetreiber | Punktquellen: Eigene Splitting-Faktoren, Flächenquellen: mittlere Splitting-Faktoren für Gebiete der Übertragungsnetzbetreiber |
| 1A2a Stationary combustion in manufacturing ...: Iron and steel | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-241 Erzeugung von Roheisen, Stahl und Ferrolegierungen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A2b Stationary comb. in manufacturing ... : Non-ferrous metals | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-24 Metallerzeugung und -bearbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A2c Stationary combustion in manufacturing ...: Chemicals | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A2d Stationary comb. in manufacturing ...: Pulp, Paper and Print | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-17 Herstellung von Papier, Pappe und Waren daraus Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|---|---|--|
| 1A2e Stat. comb. in manufacturing ...: Food proc., beverages, tobacco | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-17 Herstellung von Nahrungs- und Futtermitteln Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A2f Stationary comb. in manufacturing ...: Non-metallic minerals | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-23 H.v.Glas,-waren, Keramik, Verarb. v .Steinen u. Erden Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A2gvii Mobile Comb. in manufacturing industries and construction | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ Produzierendes Gewerbe allgemein Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A2gviii Stationary comb. in manufacturing ...: Other | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ Produzierendes Gewerbe allgemein Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A3ai(i) International aviation LTO (civil) | Starts+Landungen je Flughafen für Punktquellen, mittleres Verhalten für Rest | Punktquellen: Eigene Splitting-Faktoren, Flächenquellen: einheitlich D-gesamt |
| 1A3aii(i) Domestic aviation LTO (civil) | Starts+Landungen je Flughafen für Punktquellen, mittleres Verhalten für Rest | Punktquellen: Eigene Splitting-Faktoren, Flächenquellen: einheitlich D-gesamt |
| 1A3bi Road transport: Passenger cars | primär (alle Schadstoffe): stündliche Werte der Verkehrsstärke: LV aus Dauerzählstellen der BAST sekundär : Temperatur-Korrekturfaktoren (Tagesmittelwerte in 2 m Höhe) für NOx nach HB4.1 | Verkehrsstärke : BAB und sonst. AO: SVZ-Regionen; IO: bundeseinheitlich mit synthetischen Ferien- u. Feiertagen auf BL-Ebene Temperatur : bundeseinheitlich |
| 1A3bii Road transport: Light duty vehicles | analog 1A3bi | analog 1A3bi |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|---|---|---|
| 1A3biii Road transport: Heavy duty vehicles and buses | stündliche Werte der Verkehrsstärke: SV aus Dauerzählstellen der BAST | BAB und sonst. AO: SVZ-Regionen; IO: bundeseinheitlich mit synthetischen Ferien- u. Feiertagen auf BL-Ebene |
| 1A3biv Road transport: Mopeds & motorcycles | analog 1A3bi | analog 1A3bi |
| 1A3bv Road transport: Gasoline evaporation | primär (NMVOC): stündliche Werte der Verkehrsstärke: LV aus Dauerzählstellen der BAST sekundär : Temperaturkorrektur auf Basis der mittleren Tagestemperatur-Differenzen zur zeitlichen Verteilung der Emissionen aus der Tankatmung (80% von 1A3bv), analog TREMOD (2016) | analog 1A3bi |
| 1A3bvi Road transport: Automobile tyre and brake wear | analog 1A3bi | analog 1A3bi |
| 1A3bvii Road transport: Automobile road abrasion | analog 1A3bi | analog 1A3bi |
| 1A3c Railways | Jahresgang, Monatswerte: Destatis: monatliche Beförderungsleistung des Schienengüterverkehrs Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A3di(ii) International inland waterways | Jahresgang, Monatswerte: Destatis: monatliche Beförderungsleistung der Binnenschifffahrt Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A3dii National navigation (shipping) | Jahresgang, Monatswerte: Destatis: monatliche Beförderungsleistung der Binnenschifffahrt Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A3ei Pipeline transport | Jahresgang, stündliche Werte: Punktquellen, die zugeordnet werden können: ENTSO-E Punktquellen sonstige Punktquellen und Flächenquellen: mittlere Splitting-Faktoren der entsprechenden Übertragungsnetzbetreiber | Punktquellen: Eigene Splitting-Faktoren, Flächenquellen: mittlere Splitting-Faktoren für Gebiete der Übertragungsnetzbetreiber |
| 1A3eii Other | nicht berichtet | |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|--|--|---|
| 1A4ai Commercial/institutional: Stationary | Jahresgang: Basis: Gradtagzahlen nach Klimaregion, Heizgrenztemperatur und Anteil Prozesswärme parametrisierbar Wochengang: aus statischem Default-Profil Tagesgang: aus statischem Default-Profil | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 1A4aii Commercial/institutional: Mobile | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ Produzierendes Gewerbe allgemein Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1A4bi Residential: Stationary | Jahresgang: Basis: Gradtagzahlen nach Klimaregion, Heizgrenztemperatur und Anteil Warmwasser parametrisierbar Wochengang: nein Tagesgang: Gas, Öl: aus statischem Default-Profil, Holz: Morgenspitze ggü. Abendspitze abgesenkt | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 1A4bii Residential: Household and gardening (mobile) | statische Default-Profile | |
| 1A4ci Agriculture/Forestry/Fishing: Stationary | Jahresgang: Basis: Gradtagzahlen nach Klimaregion, Heizgrenztemperatur und Anteil Prozesswärme parametrisierbar Wochengang: aus statischem Default-Profil Tagesgang: aus statischem Default-Profil | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 1A4cii Agriculture/Forestry/Fishing: Off-road vehicles, other machinery | analog zu den NH ₃ -Emissionen aus der Bodenbearbeitung der Landwirtschaft (gewichtetes Mittel aus 3Da1 (Inorganic N-fertilizers), 3Da2a (Animal manure applied to soils), 3Da2b (Sewage sludge applied to soils), 3Da2c (Other organic fertilisers applied to soils), 3Da4 (Crop residues applied to soils)) | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 1A4ciii Agriculture/Forestry/Fishing: National fishing | statische Default-Profile | |
| 1A5a Other stationary (including military) | Jahresgang: Basis: Gradtagzahlen nach Klimaregion, Heizgrenztemperatur und Anteil Prozesswärme parametrisierbar Wochengang: aus statischem Default-Profil Tagesgang: aus statischem Default-Profil | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 1A5b Other, Mobile (incl. military, land based, recreational boats) | statische Default-Profile | |
| 1B1a Fugitive emission from solid fuels: Coal mining and handling | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-05 Kohlenbergbau Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|--|--|--------------------------|
| 1B1b Fugitive emission from solid fuels: Solid fuel transformation | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-05 Kohlenbergbau Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1B1c Other fugitive emissions from solid fuels | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-05 Kohlenbergbau Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1B2ai Fugitive emissions oil: Exploration, production, transport | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-19 Kokerei und Mineralölverarbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1B2aiv Fugitive emissions oil: Refining / storage | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-19 Kokerei und Mineralölverarbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1B2av Distribution of oil products | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-19 Kokerei und Mineralölverarbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1B2b Fugitive emissions from natural gas (...) | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-05 Kohlenbergbau Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1B2c Venting and flaring (oil, gas, combined oil and gas) | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-19 Kokerei und Mineralölverarbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 1B2d Other fugitive emissions from energy production | nicht berichtet | |
| 2A1 Cement production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-23 H.v.Glas,-waren, Keramik, Verarb. v.Steinen u. Erden Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2A2 Lime production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: | einheitlich für D-gesamt |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|--|---|--------------------------|
| | WZ08-23 H.v.Glas,-waren, Keramik, Verarb. v.Steinen u.Erden Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | |
| 2A3 Glass production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-23 H.v.Glas,-waren, Keramik, Verarb. v.Steinen u.Erden Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2A5a Quarrying and mining of minerals other than coal | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-08 Gewinnung von Steinen und Erden, sonstiger Bergbau Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2A5b Construction and demolition | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08_F (Baugewerbe) Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2A5c Storage, handling and transport of mineral products | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-23 H.v.Glas,-waren, Keramik, Verarb. v.Steinen u.Erden Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2A6 Other mineral products | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-23 H.v.Glas,-waren, Keramik, Verarb. v.Steinen u.Erden Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2B1 Ammonia production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2B2 Nitric acid production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2B3 Adipic acid production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|--|---|--------------------------|
| 2B5 Carbide production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2B6 Titanium dioxide production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2B7 Soda ash production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2B10a Chemical industry: Other | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2B10b Storage, handling and transport of chemical products | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2C1 Iron and steel production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-241 Erzeugung von Roheisen, Stahl und Ferrolegierungen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2C2 Ferroalloys production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-24 Metallerzeugung und -bearbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2C3 Aluminium production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-24 Metallerzeugung und -bearbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2C4 Magnesium production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-24 Metallerzeugung und -bearbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|--|--|--------------------------|
| 2C5 Lead production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-24 Metallerzeugung und -bearbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2C6 Zinc production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-24 Metallerzeugung und -bearbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2C7a Copper production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-24 Metallerzeugung und -bearbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2C7b Nickel production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-24 Metallerzeugung und -bearbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2C7c Other metal production | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-24 Metallerzeugung und -bearbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2C7d Storage, handling and transport of metal products | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-24 Metallerzeugung und -bearbeitung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2D3a Domestic solvent use including fungicides | statische Default-Profile | |
| 2D3b Road paving with asphalt | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08_F (Baugewerbe) Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2D3c Asphalt roofing | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08_F (Baugewerbe) Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2D3d Coating applications | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ Produzierendes Gewerbe allgemein Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|---------------------------------|---|--------------------------|
| 2D3e Degreasing | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ Produzierendes Gewerbe allgemein Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2D3f Dry cleaning | statische Default-Profile | |
| 2D3g Chemical products | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2D3h Printing | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-18 H.v. Druckerz., Vervielf.v.Ton-,Bild-, Datenträgern Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2D3i Other solvent use | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ Produzierendes Gewerbe allgemein Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2G Other product use | Feuerwerk: erste Stunde des Jahres Tabak: zeitlich konstant Grillen: statisches Profil, parametrisierbar | einheitlich für D-gesamt |
| 2H1 Pulp and paper industry | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-17 Herstellung von Papier, Pappe und Waren daraus Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2H2 Food and beverages industry | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-10 Herstellung von Nahrungs- und Futtermitteln Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2H2 Food and beverages industry | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-11 Getränkeherstellung Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2H3 Other industrial processes | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ Produzierendes Gewerbe allgemein Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2I Wood processing | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: | einheitlich für D-gesamt |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|---|---|---|
| | WZ08-31 Herstellung von Möbeln Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | |
| 2J Production of POPs | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-20 Herstellung von chemischen Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2K Consumption of POPs and heavy metals | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ08-26 H.v. DV-Geräten, elektron. u. opt. Erzeugnissen Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 2L Other production, consumption, storage, transportation ... | Jahresgang, Monatswerte: Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel: WZ Produzierendes Gewerbe allgemein Wochengang, Tagesgang: aus statischen Default-Profilen überlagert | einheitlich für D-gesamt |
| 3B1a Manure management - Dairy cattle | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): open barns (cattle) | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3B1b Manure management - Non-dairy cattle | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): open barns (cattle) | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3B2 Manure management - Sheep | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): grassing | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3B3 Manure management - Swine | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): pigs | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3B4a Manure management - Buffalo | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): open barns (cattle) | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3B4d Manure management - Goats | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): grassing | Jahresgang: Klimaregion; Tages- |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|---|--|---|
| | | /Wochengang: bundesweit |
| 3B4e Manure management - Horses | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): grassing | Jahresgang: Klimaregion; Tages- /Wochengang: bundesweit |
| 3B4f Manure management - Mules and asses | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): grassing | Jahresgang: Klimaregion; Tages- /Wochengang: bundesweit |
| 3B4gi Manure management - Laying hens | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): poultry | Jahresgang: Klimaregion; Tages- /Wochengang: bundesweit |
| 3B4gii Manure management - Broilers | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): poultry | Jahresgang: Klimaregion; Tages- /Wochengang: bundesweit |
| 3B4giii Manure management - Turkeys | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): poultry | Jahresgang: Klimaregion; Tages- /Wochengang: bundesweit |
| 3B4giv Manure management - Other poultry | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): poultry | Jahresgang: Klimaregion; Tages- /Wochengang: bundesweit |
| 3B4h Manure management - Other animals | nicht berichtet | |
| 3Da1 Inorganic N-fertilizers (includes also urea application) | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): mineral fertilizer 1, 2; Anteile 1, 2 nach Backes (2014) | Jahresgang: Klimaregion; Tages- /Wochengang: bundesweit |
| 3Da2a Animal manure applied to soils | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): manure applications 1, 2, 3, 4; Anteile 1-4 nach Backes (2014) | Jahresgang: Klimaregion; Tages- /Wochengang: bundesweit |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|--|--|--|
| 3Da2b Sewage sludge applied to soils | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): manure applications 1, 2, 3, 4; Anteile 1-4 nach Backes (2014) | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3Da2c Other organic fertilisers applied to soils (including compost) | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): manure applications 1, 2, 3, 4; Anteile 1-4 nach Backes (2014) | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3Da3 Urine and dung deposited by grazing animals | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): grassing | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3Da4 Crop residues applied to soils | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): manure applications 1, 2, 3, 4; Anteile 1-4 nach Backes (2014) | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3Db Indirect emissions from managed soils | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): manure applications 1, 2, 3, 4; Anteile 1-4 nach Backes (2014) | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3Dc Farm-level agricultural operations including storage, ... | statische Default-Profil | |
| 3Dd Off-farm storage, handling and transport of bulk agr. products | statische Default-Profil | |
| 3De Cultivated crops | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): crops | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3Df Use of pesticides | T-Abh.: Tagesmittelwerte nach Klimaregion, Zeitfunktionen nach Backes (2014): manure applications 1, 2, 3, 4; Anteile 1-4 nach Backes (2014) | Jahresgang: Klimaregion; Tages-/Wochengang: bundesweit |
| 3F Field burning of agricultural residues | nicht berichtet | |
| 3I Agriculture other | statische Default-Profil | |

| NFR | Zeitabhängigkeit für Splitting Faktor | Räuml. Differenzierung |
|---|---------------------------------------|------------------------|
| 5A Biological treatment of waste - Solid waste disposal on land | statische Default-Profile | |
| 5B1 Biological treatment of waste - Composting | statische Default-Profile | |
| 5B2 Biological treatment of waste - Anaerobic digestion ... | statische Default-Profile | |
| 5C1a Municipal waste incineration | statische Default-Profile | |
| 5C1bi Industrial waste incineration | statische Default-Profile | |
| 5C1bii Hazardous waste incineration | statische Default-Profile | |
| 5C1biii Clinical waste incineration | statische Default-Profile | |
| 5C1biv Sewage sludge incineration | statische Default-Profile | |
| 5C1bv Cremation | statische Default-Profile | |
| 5C1bvi Other waste incineration | statische Default-Profile | |
| 5C2 Open burning of waste | statische Default-Profile | |
| 5D1 Domestic wastewater handling | statische Default-Profile | |
| 5D2 Industrial wastewater handling | statische Default-Profile | |
| 5D3 Other wastewater handling | statische Default-Profile | |
| 5E Other waste | statische Default-Profile | |
| 6A Other (included in national total for entire territory) | statische Default-Profile | |

C TeResE (Temporal Resolution of Emission data)

C.1 Ablaufdiagramme

Übersicht Berechnungsablauf

Berechnungsablauf Gruppe 1 (NFR-Sektoren 1A1a, 1A1cm 1A3ei, 1B1b, 1B2b)

Berechnungsablauf Gruppe 2 und 4 (NFR-Sektoren industrie7Gewerbe, Energie ohne Kraftwerke)

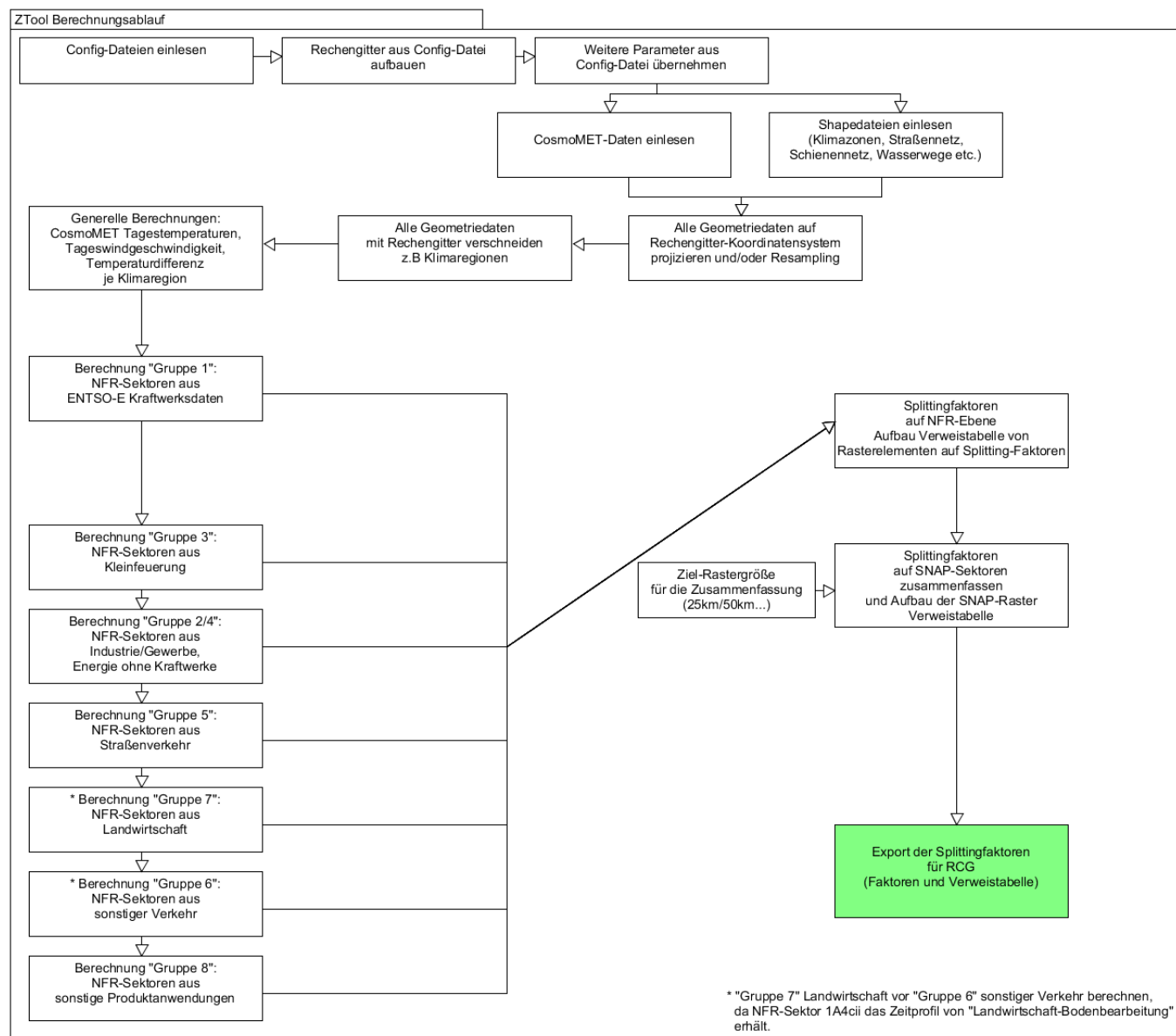
Berechnungsablauf Gruppe 3 (NFR-Sektoren Kleinf Feuerungsanlagen)

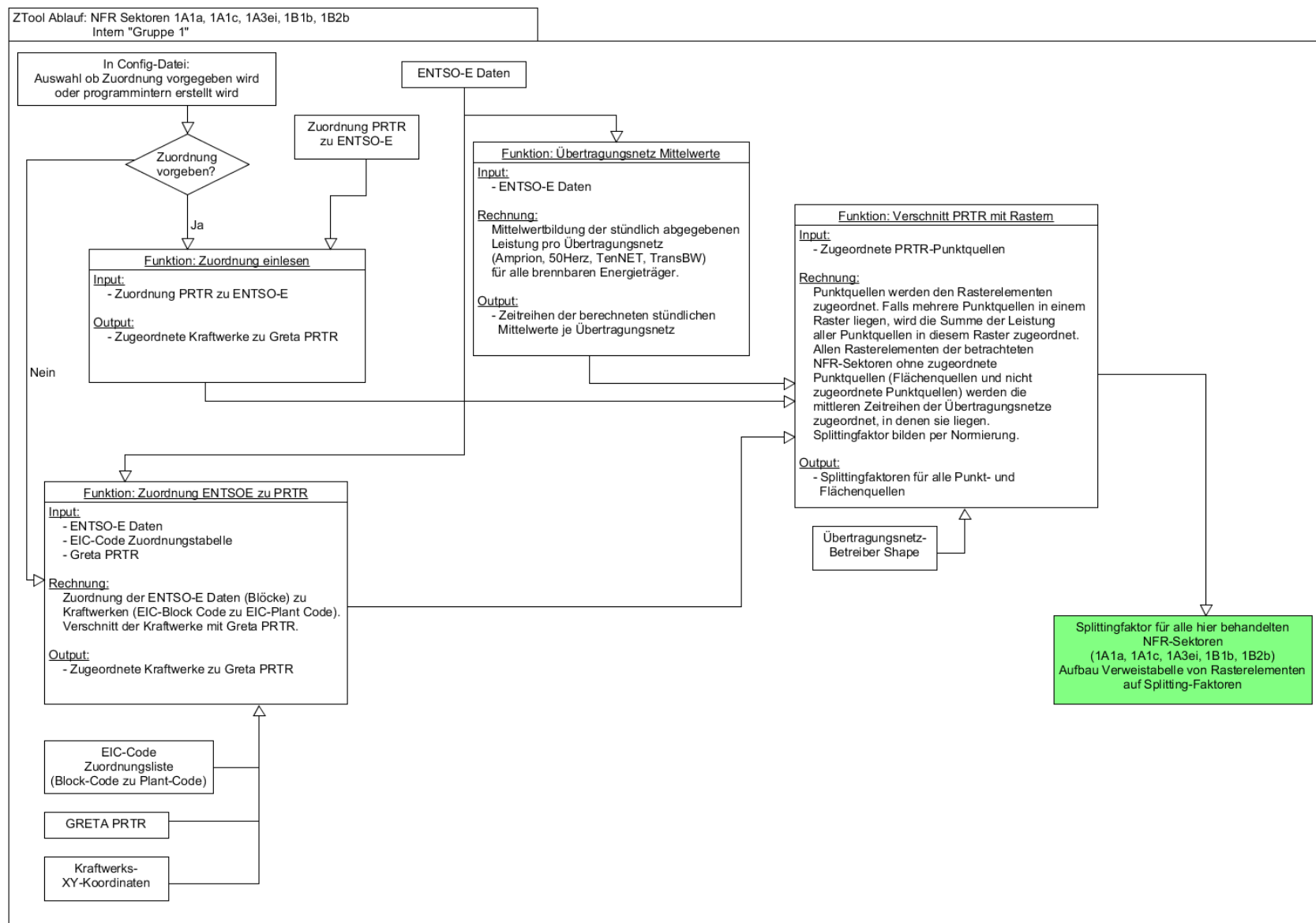
Berechnungsablauf Gruppe 5 (NFR-Sektoren Straßenverkehr)

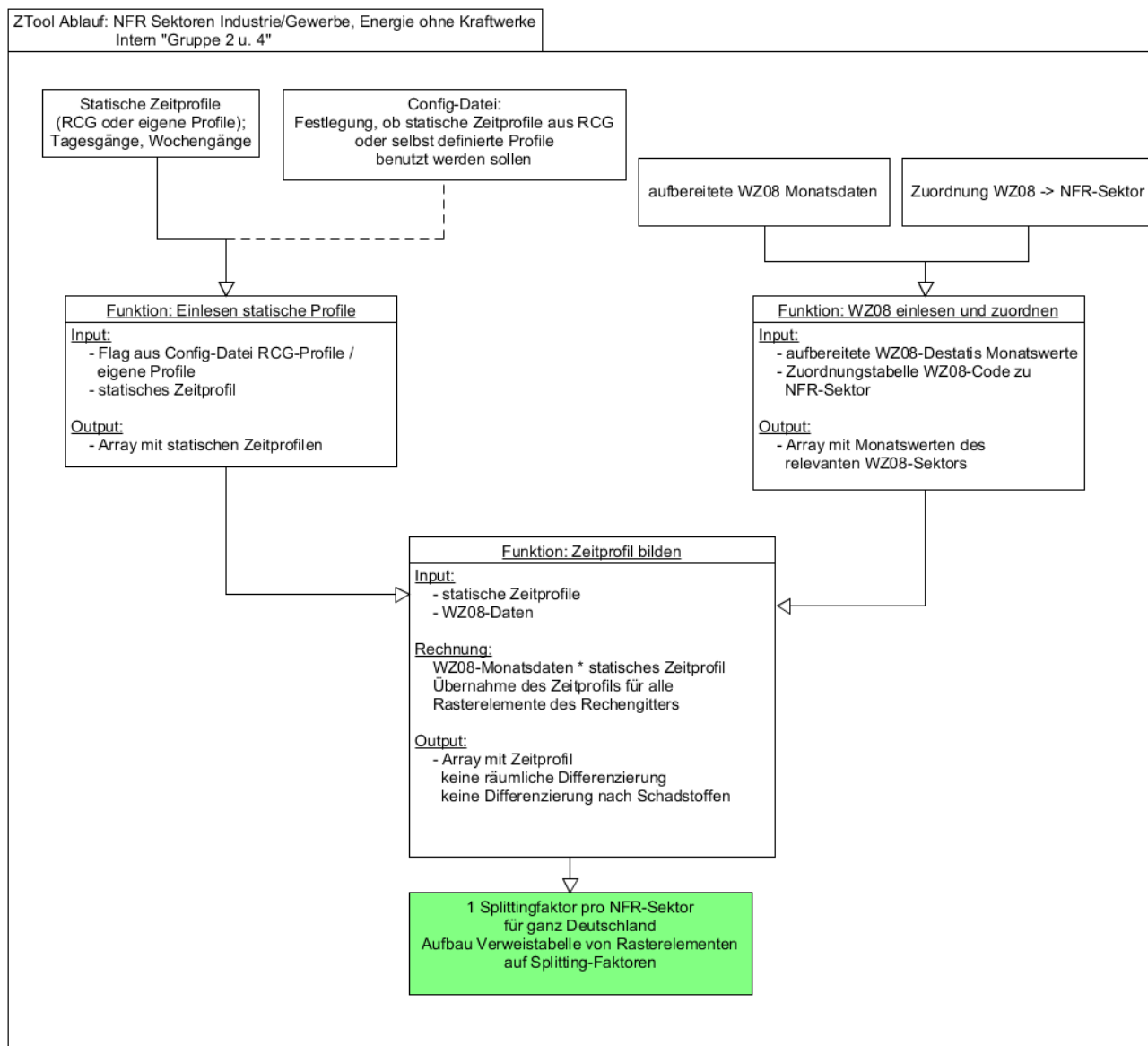
Berechnungsablauf Gruppe 6 (NFR-Sektoren sonstiger Verkehr)

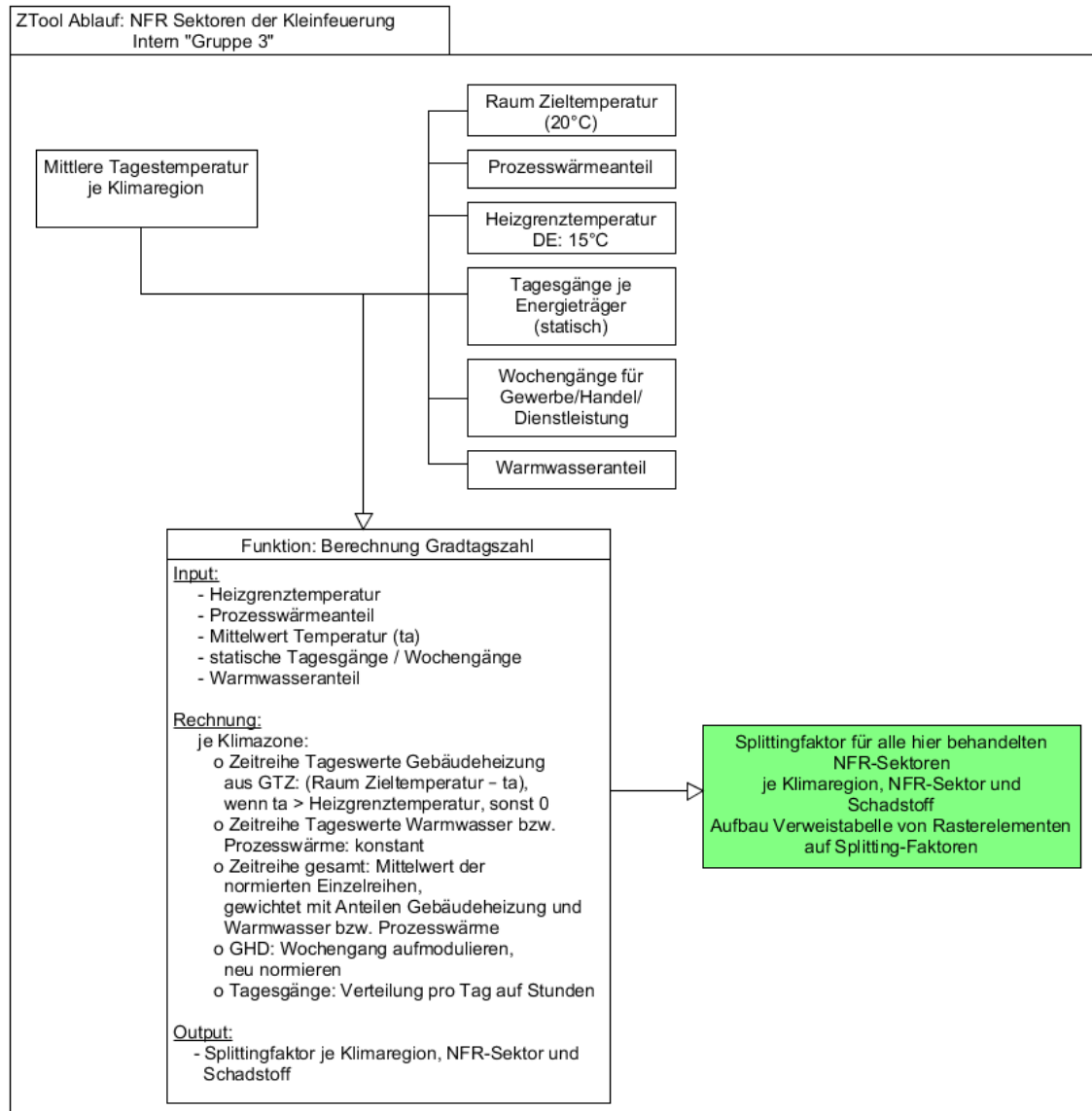
Berechnungsablauf Gruppe 7 (NFR-Sektoren Landwirtschaft)

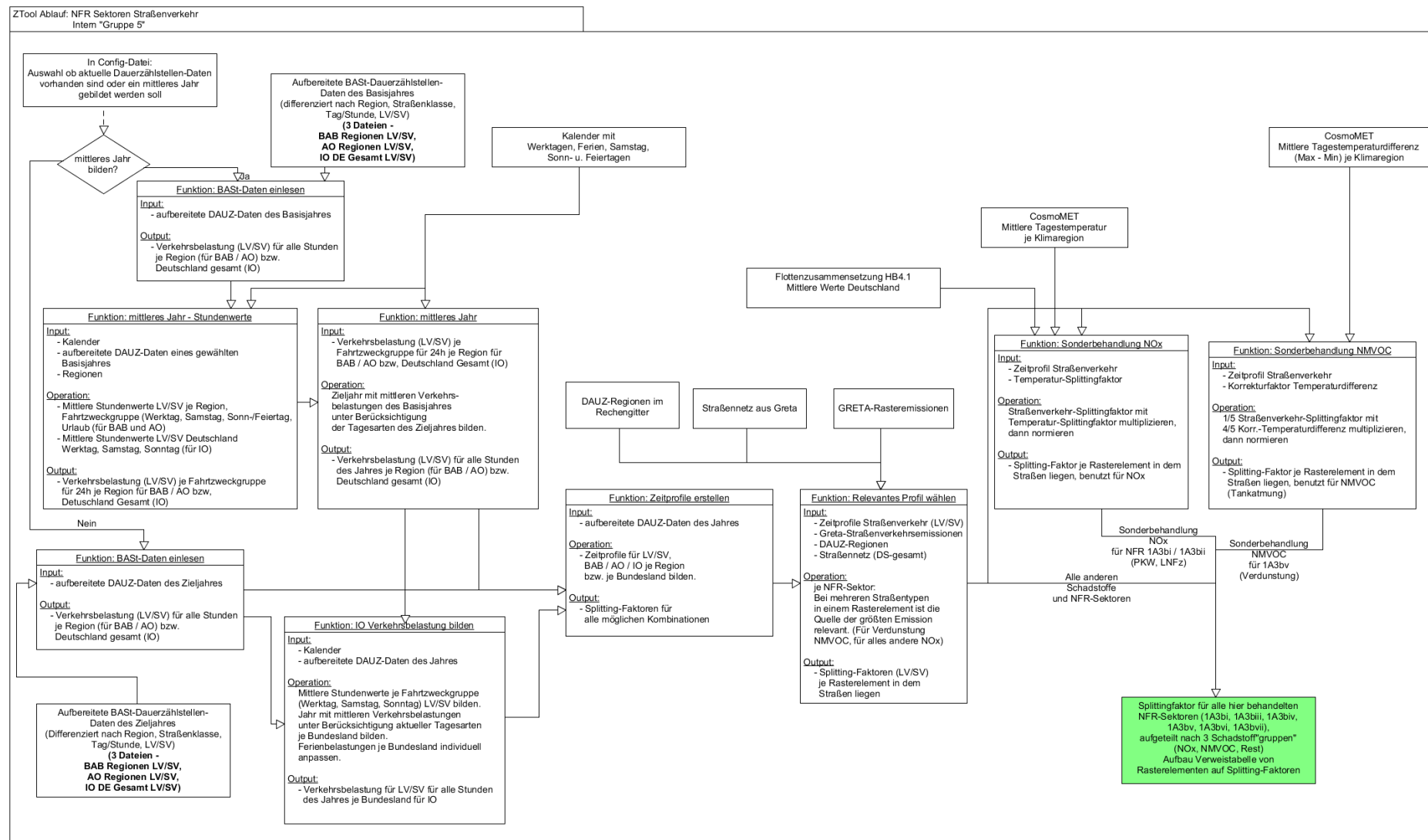
Berechnungsablauf Gruppe 8 (NFR-Sektoren 2G sonstige Produktanwendung)

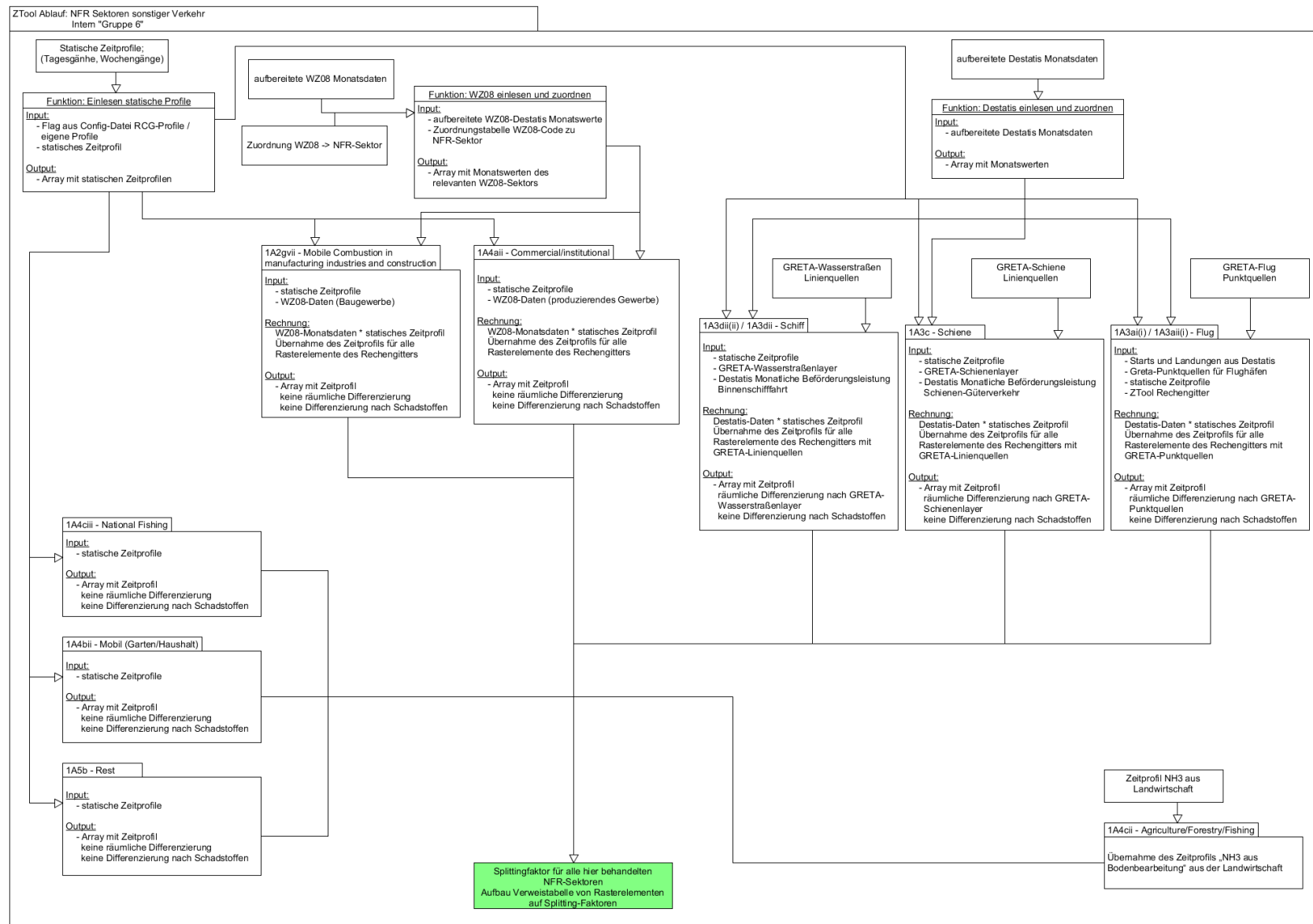


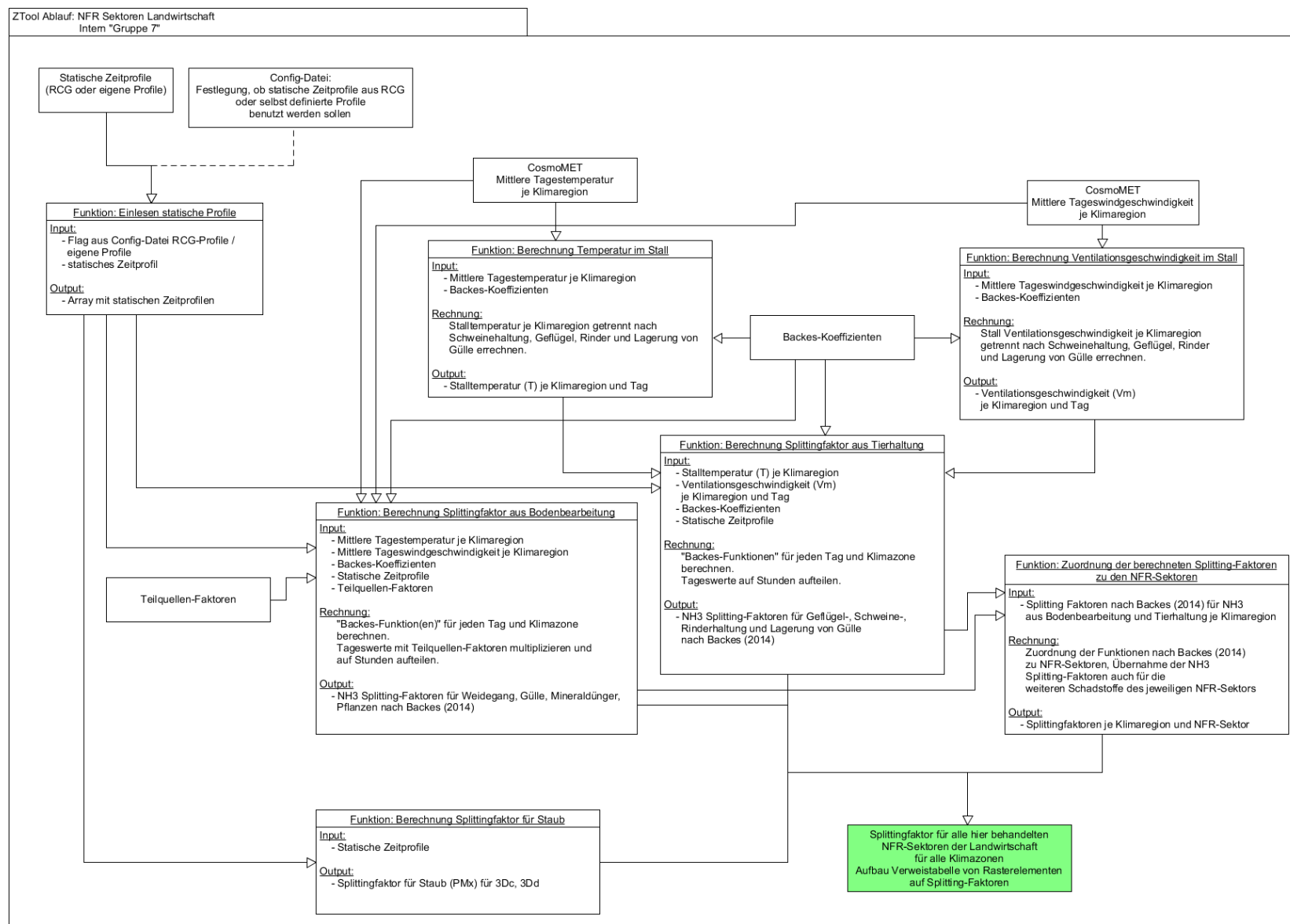


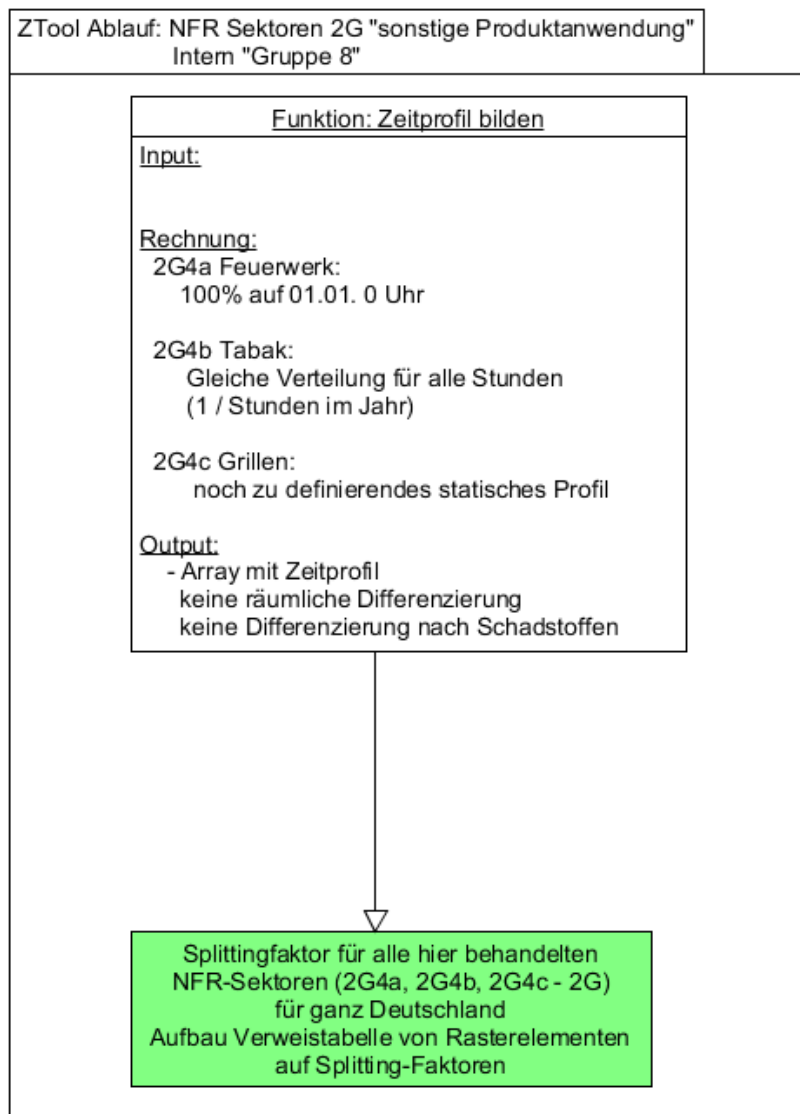












C.2 TeResE Eingabedateien

Im Folgenden werden die Eingabedateien für TeResE beschrieben. Dabei handelt es sich zum einen um Konfigurationsdateien, in denen Parameter zur Steuerung des Programmablaufs und Pfade zu weiteren Eingabe- und zu Ausgabedateien gesetzt werden können, und zum anderen um Dateien, die die zur Berechnung der SF benötigten Eingangsdaten enthalten.

C.2.1 Konfigurationsdateien

Die zur Konfiguration von TeResE nötigen Informationen sind auf zwei Dateien aufgeteilt: Die Datei *ztool_global.cfg* enthält globale, die Datei *ztool_groups.cfg* rechengruppenspezifische Einstellungen. In beiden Dateien leitet das Zeichen *hash* (#) Kommentare ein.

Globale Konfigurationsdatei

Die Datei *ztool_global.cfg* ist eine Konfigurationsdatei für globale Einstellungen, die nicht rechengruppenspezifisch sind.

Hier muss zunächst das Jahr gesetzt werden, für das die SF berechnet werden sollen (Voraussetzung: die entsprechenden Eingangsdaten beziehen sich auf dieses Jahr, im aktuellen Projekt wurden Daten für die Jahre 2016 und 2017 bereitgestellt).

Weiterhin müssen hier Pfade zu ein- und Ausgabedateien und auch Dateinamen gesetzt werden.

Pfade zu den Ausgabedateien:

- ▶ *TEMPDIR*: Temporäres Verzeichnis für Zwischenergebnisse, wird bei jedem Programmstart gelöscht
- ▶ *RESULTDIR*: Basis-Ergebnisverzeichnis, in diesem Verzeichnis wird ein Unterordner mit Datum des Starts des Rechenlaufs erstellt, in den die Ergebnisse geschrieben werden.

Pfade zu den Eingabedateien:

- ▶ *COSMOMET*: Pfad zu den meteorologischen Eingangsdaten aus der COSMO-Meteorologie für das zu berechnende Jahr; das Flag *COSMOTEMPINKELVIN* enthält die Information, ob die Temperatur in der Einheit Kelvin (1 = Ja) oder Grad Celsius (0 = Nein) gegeben ist.
- ▶ *WZ08DIR*: Pfad zu den monatlichen Produktionsindizes nach Wirtschaftszweigschlüssel des statistischen Bundesamts
- ▶ *SHAPEGDB*: Pfad zur Geo Database mit den nicht-gruppenspezifischen Featurelayers und Definition zugehöriger Feature-Namen:
FEAT_CLIMATE = Klimaregionen_2015, FEAT_STATE_BORDERS = Bundeslaender,
FEAT_WATERWAYS = F_SHIPPING DISSOLVE, FEAT_RAIL = F_RAIL DISSOLVE,
FEAT_FLIGHT_POINT = F_FLIGHT_POINT, FEAT_FLIGHT_FUNNEL = F_FLIGHT_FUNNEL,
FEAT_ROAD = F_ROAD DISSOLVE EINFACH, FEAT_CLC_IGO = CLC_IGO AREAS,
FEAT_BAB_STATIONS = F_BAB_STATION, *GRETA_EMI_FILE*: Emissionsdatei aus GRETA mit Pfad, *NFRCONF*: Pfad zur Sektor-spezifischen Konfigurationsdatei, *BANKHOLIDAYS*: Datei mit bundesweiten Feiertagen des gewählten Jahres mit Pfad

Nach den Pfaden folgen Gitterdefinitionen: Zur Berechnung der SF werden verschiedene Gitter benötigt, die in der Konfigurationsdatei definiert werden. Die Definition der Gitter entspricht der aus der Konfigurationsdatei für RCG, d.h. es sind jeweils folgende Werte erforderlich:

- ▶ die Koordinaten der unteren linken Ecke (Longitude, Latitude),
- ▶ die Gitterweiten (Longitude, Latitude) sowie
- ▶ die Anzahl Gitterzellen (Longitude, Latitude).

Die Variable *CRS* (coordinate reference system) enthält das verwendete Koordinatensystem, hier: EPSG:4326.

Insgesamt werden drei Gitter benötigt:

- ▶ Exportgitter: In diesem Gitter werden die Ergebnisse exportiert. Die Werte `RCG_EXPORT_RASTER_nX = 310`, `RCG_EXPORT_RASTER_nY = 510`, `RCG_EXPORT_RASTER_xORG = 5.71875`, `RCG_EXPORT_RASTER_yORG = 47.171875` entsprechen Nest 2 für die RCG-Rechenläufe. Bei der Wahl des Exportgitters ist zu beachten, dass die Gitterabstände ein ganzzahliges Vielfaches der Abstände des Gitters der verwendeten Meteorologie sein müssen. Aktuell entspricht dieses Gitter dem RCG-Nest 2.
- ▶ Rechengitter: (*XORG* und *YORG*), (*DX* und *DY*), (*NX* und *NY*): Aus Rechen- und Speicherplatzgründen kann die Berechnung der SF nicht im RCG-Nest 2 -Gitter (dem für die Evaluierung benötigten Export-Gitter) durchgeführt werden. Es wird daher ein Rechengitter definiert, das ein ganzzahliges Vielfaches des Exportgitters darstellt. Aktuell entspricht dieses Gitter dem RCG-Nest 1.
- ▶ Gitter für die Gruppierung der SF der Landwirtschaft: Wie in Abschnitt 5.2.7 beschrieben, wird für die SF der Landwirtschaft ein Gitter definiert, das einerseits (aus Speicherplatzgründen) deutlich gröber als RCG-Rechengitter für Nest 2 ist, und andererseits insbesondere im Norden im Bereich hoher Landwirtschaftsemissionen eine bessere Auflösung bietet als die Klimaregionen. Dem in Abbildung 66 dargestellten Raster entsprechen die Werte
#LAWI-Aggregationsraster, ca. 50x64km-Raster
`LAWI_XORG = 4.5625`, `LAWI_YORG = 47.03125`, `LAWI_NX = 13`, `LAWI_NY = 18`, `LAWI_DX = 0.9`, `LAWI_DY = 0.5`

Weiterhin gibt es in der globalen Konfigurationsdatei das Flag *SNAPART*; bei *SNAPART = RCG* werden SF für 16 SNAP-Sektoren ausgegeben (zur Eingabe in RCG), andernfalls 10 SNAP-Sektoren (wie international definiert).

Gruppenspezifische Konfigurationsdatei

Die Datei *ztool_groups.cfg* ist ebenfalls eine Konfigurationsdatei, sie enthält Flags und Pfade zur rechengruppenspezifischen Konfiguration.

- ▶ Gruppe 1 (Kraftwerke): Hier kann per Flag entschieden werden, ob für die SF für die Übertragungsnetzbetreiber vorgegebene Mittelwerte verwendet werden, oder die Mittelwerte neu berechnet werden sollen. Weiterhin werden in der *SHAPEGDB* die Features

für die Gebiete der Übertragungsnetzbetreiber (*FEAT_POWER_NET_AREA = Uebertragungsnetzbetreiber_Gebiete*) für die PRTR-Punktquellen in GRETA (*FEAT_GRETA_PRTR = GRETA_PRTR*) sowie für die ENTSO-E-Punktquellen (*FEAT_ENTSOE_POINTS = Zuordnung_ENTSOE_PRTR_GRETA*) gesetzt. Durch das Flag *GRP1_F_PRTR_ISEC* kann bestimmt werden, ob die für 2016 bereits vorliegende Zuordnung zwischen Punktquellen in GRETA und PRTR-Punktquellen verwendet werden, oder ob die Zuordnung neu bestimmt werden soll (noch nicht implementiert). *ENTSOE_DAT* enthält den Pfad zu den ENTSO-E-Daten.

- ▶ Gruppe 2 (Industrie/Gewerbe): Durch Setzen des Flags *GRP2_F_STATIC* kann entschieden werden, ob statische Default-Zeitprofile oder selbst-definierte Zeitprofile verwendet werden sollen. *GRP2_WZ08_ZUO* verweist (mit Pfad) auf eine Datei, in der die entsprechenden NFR-Sektoren den Wirtschaftszweigschlüsseln zugeordnet sind, für die monatliche Produktionsindizes vorliegen.
- ▶ Gruppe 3 (Kleinfeuerungsanlagen): Auch hier kann durch das Flag *GRP3_F_STATIC* gesteuert werden, ob statische Default-Zeitprofile oder selbst-definierte Zeitprofile verwendet werden sollen. Weiterhin müssen die Werte für die in Abschnitt 4.2 beschriebenen Parameter (Anteil Warmwasser/Prozesswärme, Heizgrenztemperatur und Zieltemperatur) gesetzt werden. Bei den privaten Kleinfeuerungsanlagen weicht der Tagesgang der Holzfeuerungen (dominiert die Feinstaub-Emissionen) von dem der übrigen Energieträger (Gas, Öl) ab. *KLEINFEU_PFAD* verweist auf die Datei (mit Pfad), in der die entsprechenden Tagesgänge abgelegt sind
- ▶ Gruppe 5 (Straßenverkehr): Auch hier kann durch das Flag *GRP5_F_STATIC* gesteuert werden, ob statische Default-Zeitprofile oder selbst-definierte Zeitprofile verwendet werden sollen. Der Pfad *GRP5_DAUZ_PATH* verweist auf die aufbereiteten Daten der BASt-Dauerzählstellen. Mit dem Flag *GRP5_F_SYNTH_YEAR* wird gesteuert, ob das Rechenjahr synthetisch aus einem vorliegenden Basisjahr berechnet werden soll, oder ob vorliegende Daten für das Rechenjahr verwendet werden sollen. Aktuell ist nur die Variante *GRP5_F_SYNTH_YEAR = 0* (kein synthetisches Jahr) implementiert. *FEAT_SVZ_REGION* enthält den Feature-Namen für die SVZ-Regionen. Das Flag *VOLATILISATION_BREAK_TYRE_SNAP7* steuert, ob die Emissionen aus Reifen- und Bremsabrieb (in RCG: SNAP 10) und der Verdunstung (in RCG: SNAP 11) mit in SNAP 7 eingerechnet werden sollen. Dieses Flag sollte aktuell auf 1 gesetzt sein, weil dies der Einleseroutine in RCG für Emissionen aus dem GRETA-Export entspricht. *TEMP_FACTORS* verweist (mit Pfad) auf die Datei mit den Faktoren zur Temperaturkorrektur bei den NO_x-Emissionen pro Euronormstufe. *EMI_SHARES* verweist (mit Pfad) auf eine Datei mit den Anteilen der Euronormstufen an den Pkw-NO_x-Emissionen des zu rechnenden Jahres.
- ▶ Gruppe 6 (Sonstiger Verkehr): Auch hier kann durch das Flag *GRP6_F_STATIC* gesteuert werden, ob statische Default-Zeitprofile oder selbstdefinierte Zeitprofile verwendet werden sollen. *GRP6_PATH* verweist auf ein Verzeichnis, das die erforderlichen Eingangsdaten enthält.

- ▶ Gruppe 7 (Landwirtschaft): Auch hier kann durch das Flag *GRP7_F_STATIC* gesteuert werden, ob statische Default-Zeitprofile oder selbstdefinierte Zeitprofile verwendet werden sollen. *LAWI_PFAD* verweist auf ein Verzeichnis, das die erforderlichen Eingangsdaten enthält.
- ▶ Gruppe 8 (Sonstiges): *SONST_PFAD* verweist auf ein Verzeichnis, das die erforderlichen Eingangsdaten enthält.

C.2.2 Eingangsdaten

Die Namen und Pfade zu den Dateien mit den benötigten Eingangsdaten sind in den Konfigurationsdateien festgelegt. Hier werden diese Daten beschrieben.

- ▶ COSMO-Meteorologie: Für viele Quellgruppen sind meteorologische Größen ein wichtiger Einfluss auf die Zeitabhängigkeit der Emissionen. TeResE benötigt diese Daten für das zu berechnende Jahr in der gleichen Form wie die für die Evaluierung verwendete Version von RCG, d.h. als monatliche .ctl und .dat Dateien.
- ▶ Gegriddete Emissionen: Bei der Mittelwertbildung verschiedener Zeitprofile, z.B. bei der Zusammenfassung von SF auf NFR-Ebene zu SF auf SNAP-Ebene, gehen die absoluten Emissionen pro Gitterzelle (oder pro Gruppe Gitterzellen) als Gewichtungsfaktoren ein. TeResE benötigt die Emissionen für das zu berechnende Jahr als netCDF- (Network Common Data Form) Datei in der gleichen Form wie die für die Evaluierung verwendete Version von RCG.
- ▶ ENTSO-E Daten: Für die SF aus Gruppe 1 (Kraftwerke) werden für das zu berechnende Jahr pro Kraftwerksblock die stündlichen Stromerzeugungswerte benötigt. Diese können nach einer kostenfreien Registrierung bei ENTSO-E über einen ftp-Server heruntergeladen werden. Auf der Webseite https://transparency.entsoe.eu/content/static_content/Static%20content/knowledge%20base/SFTP-Transparency_Docs.html sind das sowohl das Datenformat wie auch die erforderlichen Schritte zur Registrierung beschrieben. Als Eingangsdaten für TeResE werden die Daten in dem Format benötigt, in dem sie bei ENTSO-E erhältlich sind. Die Zuordnung zu den PRTR-Punktquellen ist aktuell fest vorgegeben.
- ▶ BAST-Dauerzählstellen: Für Gruppe 5 (Straßenverkehr) ist der Zeitverlauf der Emissionen primär von den Verkehrswerten bestimmt, die Daten kommen aus den Dauerzählstellen der BAST. Als Eingangsdaten für TeResE werden für das zu berechnende Jahr zwei Dateien mit stündlichen Werten benötigt, eine für die Zählstellen an Autobahnen und eine an sonstigen Außerortsstraßen (im Wesentlichen Bundesstraßen). Die Dateien werden in dem Format übernommen, in dem sie bei der BAST erhältlich sind. Zur Auswertung wird zusätzlich ein Zählstellenverzeichnis (ZV.csv) benötigt, dies enthält z.B. Informationen zur Differenzierung der Fahrzeugarten pro Zählstelle. Das Grundkollektiv der Zählstellen ändert sich von Jahr zu Jahr nicht stark, bei Bedarf kann das Zählstellenverzeichnis manuell ergänzt werden.
- ▶ Für Gruppe 5 (Straßenverkehr) werden weiterhin benötigt: Eine Datei mit Faktoren zur Temperaturkorrektur bei den Pkw-NO_x-Emissionen in Abhängigkeit von Euronormstufe und

Außentemperatur (*PKW_Tkorr.csv*) sowie eine Datei mit den Anteilen der Pkw nach Euronormstufe an den NO_x-Emissionen (*Emi_Anteile_PKW.csv*). Letztere muss zum jeweiligen Rechenjahr passen.

- ▶ Für Gruppe 3 (Kleinf Feuerungsanlagen) werden die Tages- und Wochenganglinien für die fünf enthaltenen NFR-Sektoren (Abweichungen aufgrund von Unterschieden bei kommerzieller und die privater Gebäudeheizung sowie von Unterschieden bei der Heizung mit Gas/Öl bzw. mit Holz) benötigt, und weiterhin Informationen zur Zuordnung von Schadstoffen zu den Energieträgern, die jeweils am meisten zur Emission dieser Schadstoffe beitragen. Diese Daten sind in den Dateien *Tagesgang_Energietraeger.csv*, *Wochengang.csv* und *Energietraeger_Schadstoffe.csv* enthalten. Sie sind nicht jahresspezifisch, können aber bei Bedarf angepasst werden.
- ▶ Für Gruppe 7 (Landwirtschaft) werden benötigt: Eine Zuordnung der NFR-Sektoren zu den Zeitfunktionen nach Skjoth et al. (2004) und Gyldenkerne et al. (2005), die von diesen Funktionen verwendeten Parameter sowie Default-Zeitprofile für die nicht nach diesen Funktionen zeitlich verteilten Emissionen. Diese Daten sind in den Dateien *NFR_ART_ZUORDNUNG.csv*, *Funktionsfaktoren.csv*, *Default_Profil_Tag.csv*, *Default_Profil_Woche.csv*, *Default_Profil_Monat.csv* enthalten. Sie sind nicht jahresspezifisch, können aber bei Bedarf angepasst werden.
- ▶ Für die Gruppen 2/4 (Industrie und Gewerbe), 6 (sonstiger Verkehr) und 8 (Sonstiges) werden jeweils Tages-, Wochen- und Monatsgänge benötigt. Die Tages- und Wochengänge entsprechen jeweils den RCG-Default-Profilen, die Monatsgänge sind aus Daten des Statistischen Bundesamts abgeleitet (Produktionsindizes, Beförderungsleistungen, Starts und Landungen etc.) und müssen jeweils an das zu rechnende Jahr angepasst werden. Alle Profile können auch manuell geändert werden.
- ▶ Für Gruppe 8 (Sonstiges) werden weiterhin die Beiträge der Subsektoren „Feuerwerk“, „Tabak“ und „Grillen“ zum übergeordneten NFR-Sektor 2g (sonstige Produktanwendung) benötigt. Sie sind in der Datei *Faktoren_NFR2G_Subsektoren.csv* enthalten und müssen an das jeweilige Rechenjahr angepasst werden.

C.2.3 Erforderliche Änderungen bei Änderung des Rechenjahres

In diesem Abschnitt werden die Eingangsdaten aufgelistet, die vom Rechenjahr abhängen, die also bei Wahl eines neuen Rechenjahres angepasst werden müssen:

- ▶ COSMO-Meteorologie
- ▶ Gegriddete Emissionen
- ▶ ENTSO-E-Daten, ggf. auch Anpassung der Zuordnung zu den PRTR-Punktquellen
- ▶ Verkehrsdaten aus den BAST-Dauerzählstellen, ggf. Ergänzung des Zählstellenverzeichnisses
- ▶ Aufteilung der Pkw-NO_x-Emissionen nach Euronormstufen

- Monatsgänge für Industrie/Gewerbe und Sonstigen Verkehr aus WZ08-Produktionsindizes, Beförderungsleistungen, Starts/Landungen vom Statistischen Bundesamt
- Anteile der Subsektoren Feuerwerk, Tabakkonsum und Grillen am NFR-Sektor 2g (sonstige Produktanwendung)

Für alle Dateien müssen ggf. die Namen und die Pfade in den Konfigurationsdateien angepasst werden.

C.3 TeResE Ausgabedateien

Unter dem in der Konfigurationsdatei definierten Ausgabepfad wird ein Ergebnis-Verzeichnis angelegt, das das Datum des Rechenlaufs im Namen trägt. In diesem Verzeichnis liegen die Verzeichnisse *SplittingFaktoren* (enthält die eigentlichen Ausgabedaten zu SF und die benötigten Zuordnungen) und *Plots* (enthält mit R automatisiert erzeugte Bilder der SF). Je nach Debug-Einstellung werden weiterhin verschiedene Test-Dateien erzeugt. Die Ausgabedateien im Verzeichnis *SplittingFaktoren* werden im Folgenden beschrieben.

C.3.1 Ausgabe NFR-Ebene

Auf NFR-Ebene findet die Berechnung der Splitting-Faktoren wie in Abschnitt C.1 gezeigt in acht Gruppen statt. Für jede dieser Gruppen n ($n = 1$ bis 8) gibt es drei Ausgabedateien:

- `SPLIT_GRUPPE_n_FAKT.csv`
Diese Datei enthält die Werte der Splitting-Faktoren, jede Zeile entspricht einem SF. Sie beginnt mit der ID des jeweiligen SF, dann folgen die Werte des SF, einer für jede Stunde des Jahres. Die Werte sind auf die Anzahl Stunden im Jahr (also 8760 für ein Normaljahr bzw. 8784 für ein Schaltjahr wie 2016) normiert und jeweils durch Semikolon getrennt. Beispiel 2016:
ID_1;H_1;H_2;H_3; ...;H_8784
ID_2;H_1;H_2;H_3; ...;H_8784
...
- `ZTOOL_NFR_ZUORDNUNG_GRUPPEN.dat`
Der Aufbau dieser Datei ist folgender: Für jeden Schadstoff und jeden NFR-Sektor sind in Blöcken, deren Anzahl Spalten und Zeilen denen des Export-Rasters nX und nY entsprechen, die zu diesem Schadstoff, diesem NFR-Sektor und dieser Gitterbox gehörenden IDs der SF angegeben. Beispiel:
1 CO
NFR 1A1a
ID_1_1 ID_1_2 ID_1_3 ... ID_1_nX
ID_2_1 ID_2_2 ID_2_3 ... ID_2_nX
...
ID_nY_1 ID_nY_2 ID_nY_3... ID_nY_nX
NFR 1A1c
ID_1_1 ID_1_2 ID_1_3 ... ID_1_nX

ID_2_1 ID_2_2 ID_2_3 ... ID_2_nX

...

ID_nY_1 ID_nY_2 ID_nY_3... ID_nY_nX

Für jeden NFR-Sektor, für den SF erzeugt wurden, gibt es einen solchen Block, dann schließt sich der nächste Schadstoff jeweils mit entsprechenden Blöcken für alle NFR-Sektoren an.

► Gruppe_n_Zuordnung_Faktoren_Namen.csv

Diese Datei enthält je nach Rechengruppe variierende Informationen zur Herkunft der SF. In Gruppe 1 (Kraftwerke) kann dies bei Punktquellen der Name des Kraftwerks sein. In Gruppe 3 (Kleinfeuerungsanlagen) wird die ID der Klimaregion, der NFR-Sektor (1A4ai, 1A4bi, 1A4ci, 1A5a) und der Brennstoff (Holz oder Kohle_Gas_Oel) angegeben.

C.3.2 Ausgabe SNAP-Ebene

Auf SNAP-Ebene werden drei Dateien erzeugt:

► ZTOOL_RCG_SNAP_SPLITTINGFAKTOREN.dat

Diese Datei enthält die SF in dem Format, in dem RCG sie auf SNAP-Ebene einlesen kann. Sie entspricht den auf NFR-Ebene erzeugten Dateien SPLIT_GRUPPE_n_FAKT.csv, enthält jedoch alle SF. Die IDs sind hier von 1 an durchnummeriert und können in RCG als Index verwendet werden.

► ZTOOL_RCG_SNAP_ZUORDNUNG.dat

Diese Datei enthält analog zu den Dateien ZTOOL_NFR_ZUORDNUNG_GRUPPENn.dat die Zuordnung zu SNAP-Sektoren und Schadstoffen im von RCG lesbaren Format.

► ERKL_SPLITTING_ID_HERKUNFT.csv

Diese Datei entspricht den auf NFR-Ebene erzeugten Dateien Gruppe_n_Zuordnung_Faktoren_Namen.csv und enthält Informationen zur Herkunft der SF.

D Durchgeführte Modifikationen am Quellcode von RCG

In Abschnitt D.1 werden die Routinen und Datenstrukturen beschrieben, mit denen die statischen Zeitprofile in RCG (Stand: vor Projektbeginn) eingelesen und verwendet werden. Abschnitt D.2 enthält die am Quellcode von RCG durchgeführten Modifikationen, um alternativ die Möglichkeit zu schaffen, als dynamische Zeitabhängigkeit der Emissionen die Splitting-Faktoren aus TeResE zu verwenden.

D.1 Routinen und Datenstrukturen zur Verwendung statischer Zeitprofile in RCG

Bisher ist in RCG eine statische Zeitabhängigkeit der Emissionen implementiert. Routinen und Datenstrukturen zur Behandlung der Emissionen sind im Modul *emissions_mod.for* gekapselt. Dieses Modul enthält Routinen zum Einlesen der Emissionen, Routinen zur Qualitäts- und Fehlerprüfung, zu Emissionsszenarien (Ausschalten oder skalieren bestimmter Quellgruppen in bestimmten Ländern), zur zeitlichen Verteilung der Emissionen (statisch) und zur Ausgabe von Emissionssummen pro Land.

In der zentralen Routine von RCG zur Berechnung der Konzentrationen (chemische Umwandlung, Advektion, Quellen, Senken) wird pro Stunde Modellzeit jeweils die Routine *emis_into_grid* aufgerufen, darin werden die stündlichen Emissionen aktualisiert und aufsummiert (alle anthropogenen Quellgruppen (Punkt- und Flächenquellen) sowie nicht-anthropogene Emissionen), und als Quellterm pro Gitterbox übergeben.

Für die Emissionen gibt es in *emissions_mod.for* folgende Arrays:

- ▶ *af_emis*: enthält die Jahresemissionen der anthropogenen Flächenquellen, differenziert nach Quellgruppen
Dimension: Anzahl Gitterpunkte in Länge und Breite, Anzahl Spezies, Anzahl SNAP-Sektoren, zwei Höhenlevel (Aufteilung Flächenquellen auf die unteren beiden Level)
- ▶ *qave*: enthält die Jahresemissionen der anthropogenen Punktquellen, sowie, wenn vorhanden, Informationen zu Temperatur, Volumenstrom, ...
Dimension: Anzahl Schadstoffe, zusätzlich Daten zu Höhe, SNAP-Sektor, Schornsteinhöhe, ...
- ▶ *emarea*: enthält die stündlichen anthropogenen Flächenemissionen, summiert über alle SNAP-Sektoren
Dimension: Anzahl Gitterpunkte in Länge und Breite, Anzahl Spezies, zwei Höhenlevel (Aufteilung Flächenquellen auf die unteren beiden Level)
- ▶ *emtot*: enthält die stündlichen Gesamtemissionen (Summe der anthropogenen Punkt- und Flächenquellen sowie der biogenen Quellen (aufgewirbelter Staub, Seesalz, ...)
Dimension: Anzahl Gitterpunkte in Länge, Breite und Höhe, Anzahl Spezies
Dieses Array wird stündlich aktualisiert an die Routine zur Berechnung der Konzentrationen zurückgegeben.

Von diesen Arrays ist das für die Punktquellen (*qave*) über Commonblocks global verfügbar und wird auch im Master Array abgespeichert, die anderen sind nur im Modul *emissions_mod.for* Modul-global verfügbar.

Bei der Aktualisierung der stündlichen anthropogenen Emissionen wird zwischen Punktquellen (Routine *ps_upd*) und Flächenquellen (Routine *aes_upd_hour*) unterschieden. Im Fall der Flächenquellen gibt es eine Schleife über alle Gitterpunkte, Verursachergruppen und Spezies, im Fall der Punktquellen ist die entsprechende Schleife auf die Gitterpunkte mit Punktquellen beschränkt. In beiden Fällen wird die Routine *emtempvar* aufgerufen, die in Abhängigkeit von Land, Quellgruppe und Schadstoff einen statischen Splitting-Faktor zur Umrechnung von Jahresemission in Stundenemission zurückgibt. Dieser ergibt sich als Produkt aus Monats-, Tages- und Stundenfaktoren, die beim Setup länder-, schadstoff- und quellgruppenspezifisch aus der Datei *Emissions_adjustment_factors.dat* eingelesen wurden und in entsprechenden Arrays gespeichert sind.

D.2 Durchgeführte Modifikationen am RCG Quellcode

Um in RCG die Möglichkeit zu schaffen, alternativ zu den statischen Zeitprofilen die dynamischen SF aus TeResE zu verwenden, wurde die Routine *emtempvar_dyn* implementiert, die für Punkt- und Flächenquellen statt der Ursprungsroutine *emtempvar* aufgerufen werden kann, und die statt des statischen den entsprechenden dynamischen Splitting Faktor zurückgibt.

Je nach Land (zunächst nur für Deutschland, da für andere Länder keine dynamischen Splitting-Faktoren vorliegen), Quellgruppe und Schadstoff wird entweder die Ursprungsroutine oder die neu implementierte Routine aufgerufen. Zusätzlich kann das dynamische Zeitverhalten über ein globales Flag insgesamt abgeschaltet werden.

Weiterhin wurden Routinen implementiert zum Einlesen

- ▶ der Information, für welche SNAP-Sektoren und welche Schadstoffe dynamische oder statische SF verwendet werden sollen,
- ▶ der dynamischen SF selbst sowie
- ▶ der Information, welche SF den einzelnen Gitterboxen pro Schadstoff und SNAP-Sektor zugeordnet sind.

Für die Information, ob individuell pro SNAP und Schadstoff statische oder dynamische SF verwendet werden sollen, wurde im Verzeichnis INPUT_EMI zusätzlich die Datei *Emissions_dyn_stat.dat* angelegt, die analog aufgebaut ist zur Datei *country_data_2016.dat* (ohne die Abschnitte zum Abschalten von Punktquellen und zu Wald-Typen). Darin kann pro Land, Quellgruppe und Schadstoff ein Flag gesetzt werden, ob dynamische oder statische Splitting-Faktoren verwendet werden sollen.

Analog zum statischen Zeitverhalten (sowie zur Skalierung von Emissionen bei Szenarien) werden dabei Stoffe in 8 mögliche Gruppen eingeteilt (cross references): Es haben

- ▶ NO und NO₂ (in der Datei als NO_x),
- ▶ SO₂ und SULF (in der Datei als SO₂),
- ▶ OLE, PAR, TOL, XYL, FORM, ALD2, ETH, BENZ (in der Datei als NMVOC),
- ▶ PM25, EC, OC, RDFI (in der Datei als PM25) sowie
- ▶ PMCO, RDCO (in der Datei als PMCO)

jeweils ein gemeinsames Zeitverhalten. Dazu kommen CO und NH₃ mit jeweils eigenem Zeitverhalten.

Aktuell sollten diese Flags nur für Deutschland und für die Quellgruppen, für die dynamische Splitting-Faktoren tatsächlich vorliegen, gesetzt werden.

Zusätzlich gibt es nach dem Header ein Flag, mit dem das dynamische Zeitverhalten insgesamt abgeschaltet werden kann. Zeile 7 (die erste Zeile nach dem Header, die beim Einlesen ausgewertet wird) lautet:

1 general switch: 1: time profiles dynamic where defined, 0: all time profiles static

Die SF selbst (jeweils Zeitreihen der Länge der Anzahl Stunden pro Jahr, also 8.784 für das Schaltjahr 2016) sowie die Zuordnung der SF pro Gitterbox in der Ebene (keine Höhenabhängigkeit), pro Schadstoff mit unabhängigem Zeitverhalten und pro SNAP-Sektor kommen jeweils als Ausgabe aus TeResE.

Zum Einlesen dieser drei Dateien wurden in RCG folgende Änderungen durchgeführt:

- ▶ Die Dateien wurden als Flag und als Pfad analog zu den anderen Input-Dateien im Controlfile (*Control_file_rcg.inp*) ergänzt.
- ▶ In der Datei *Filenam.grd* wurde die Anzahl der möglichen Dateinamen um 3 auf 41 erhöht.
- ▶ In der Datei *Blkdta00.for* wurden folgende interne Filenames vergeben EMIDYN (Emissionsprofile dynamisch oder statisch), EMISPF (Splitting-Faktoren) und SPFPTR (Pointer auf die Splitting-Faktoren) und in *filnam_int(35)*, *filnam_int(36)* und *filnam_int(37)* gesetzt.
- ▶ In der Datei *Params.grd* wurden dafür *io82*, *io83*, *io84* als filehandle ergänzt
- ▶ In *open_files_rcg.for* wurde die EMIDYN, EMISPF, SPFPTR mit *io82*, *io83*, *io84* bei den zu öffnenden Dateien ergänzt
- ▶ In der Datei *emscen.grd* wurden folgende Variablen eingefügt:
- ▶ das Flag *iemidyn* zum generellen Abschalten des dynamischen Zeitverhaltens
- ▶ das Array *time_flags* mit der Dimension Anzahl Länder x Anzahl Quellgruppen x Anzahl cross references (Schadstoffe mit unabhängigem Zeitverhalten, s.o.); dieses enthält individuelle Flags zur Steuerung, ob statische oder dynamische Splitting-Faktoren verwendet werden sollen. Die Reihenfolge der Spezies und Gruppierung (cross references) ist analog zu den Szenarien(*scenfac*).
- ▶ Im Modul *emissions_mod.for* wurde Folgendes eingefügt:
- ▶ Array *split_fac_pointers*: Integer, Dimension: Anzahl Gitterpunkte in Länge und Breite, Anzahl Schadstoffe mit unabhängigem Zeitverhalten (cross references), Anzahl Quellgruppen; weist jeder Gitterzelle differenziert nach Quellgruppe und Schadstoff den passenden dynamischen Splitting-Faktor zu, Modul-global
- ▶ Array *splitting_factors*: Real, Dimension: Anzahl Splitting-Faktoren, Länge Splitting-Faktoren (Anzahl Stunden des Jahres); enthält alle unabhängigen Splitting-Faktoren, Modul-global

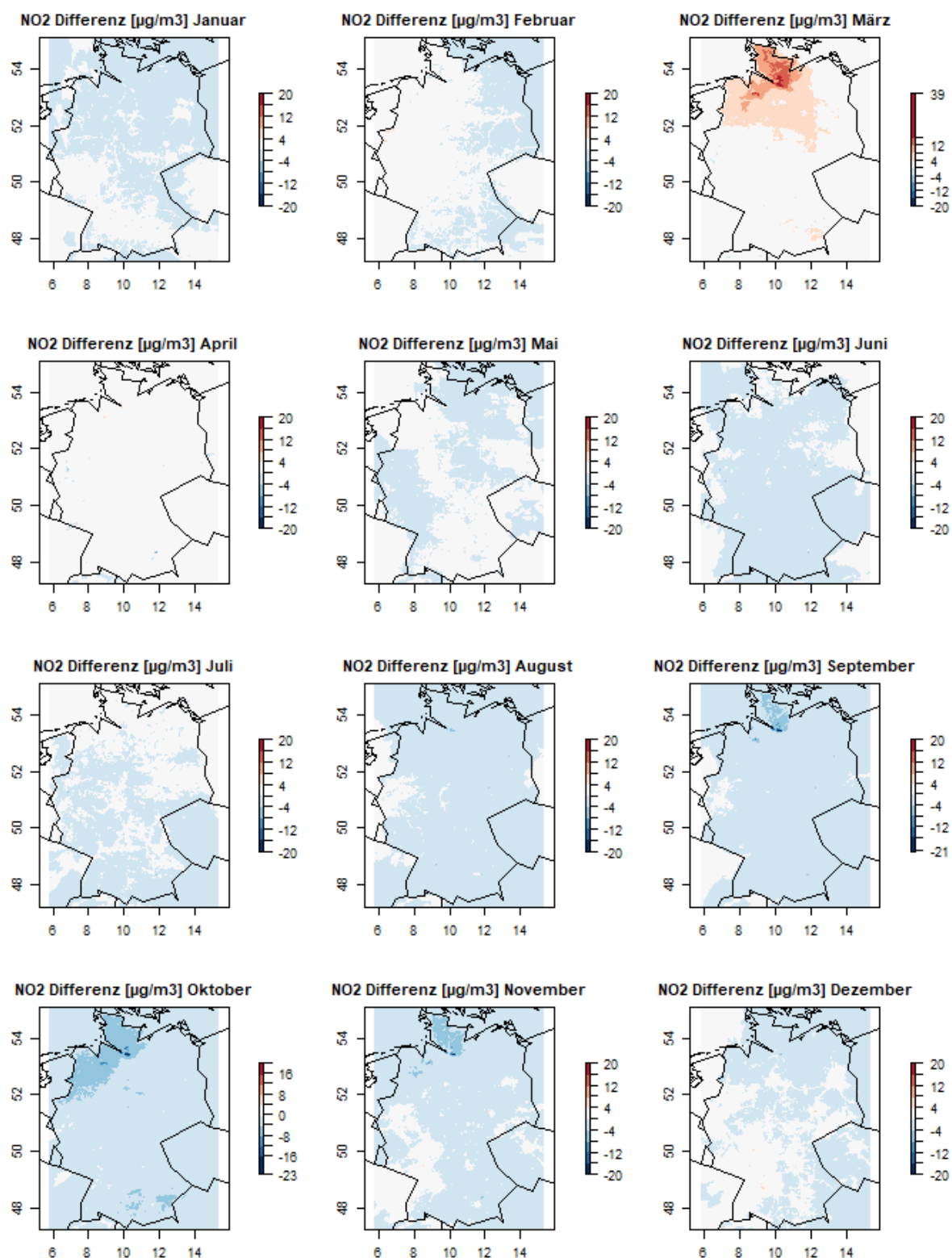
- ▶ Integer für Länge und Anzahl der SF: *lensplitfac*, *numsplitfac*, die Länge ist konstant auf 8.784 Stunden gesetzt (Stunden im Schaltjahr), die Anzahl ist variabel wird beim Einlesen der Datei, welche die SF enthält, bestimmt; Modul-global
- ▶ Subroutines *read_splittingFactors* und *read_splitFacPointers* zum Einlesen der SF und ihrer Zuweisungen in die oben definierten arrays
- ▶ Es wurde die Routine *read_timeprofiles_dyn_stat.for* in einer eigenen Datei zum Lesen der Datei *Emissions_dyn_stat.dat* implementiert
- ▶ Die Einleseroutinen wurde in *Setup_rcg.for* bei den einzulesenden Dateien ergänzt.

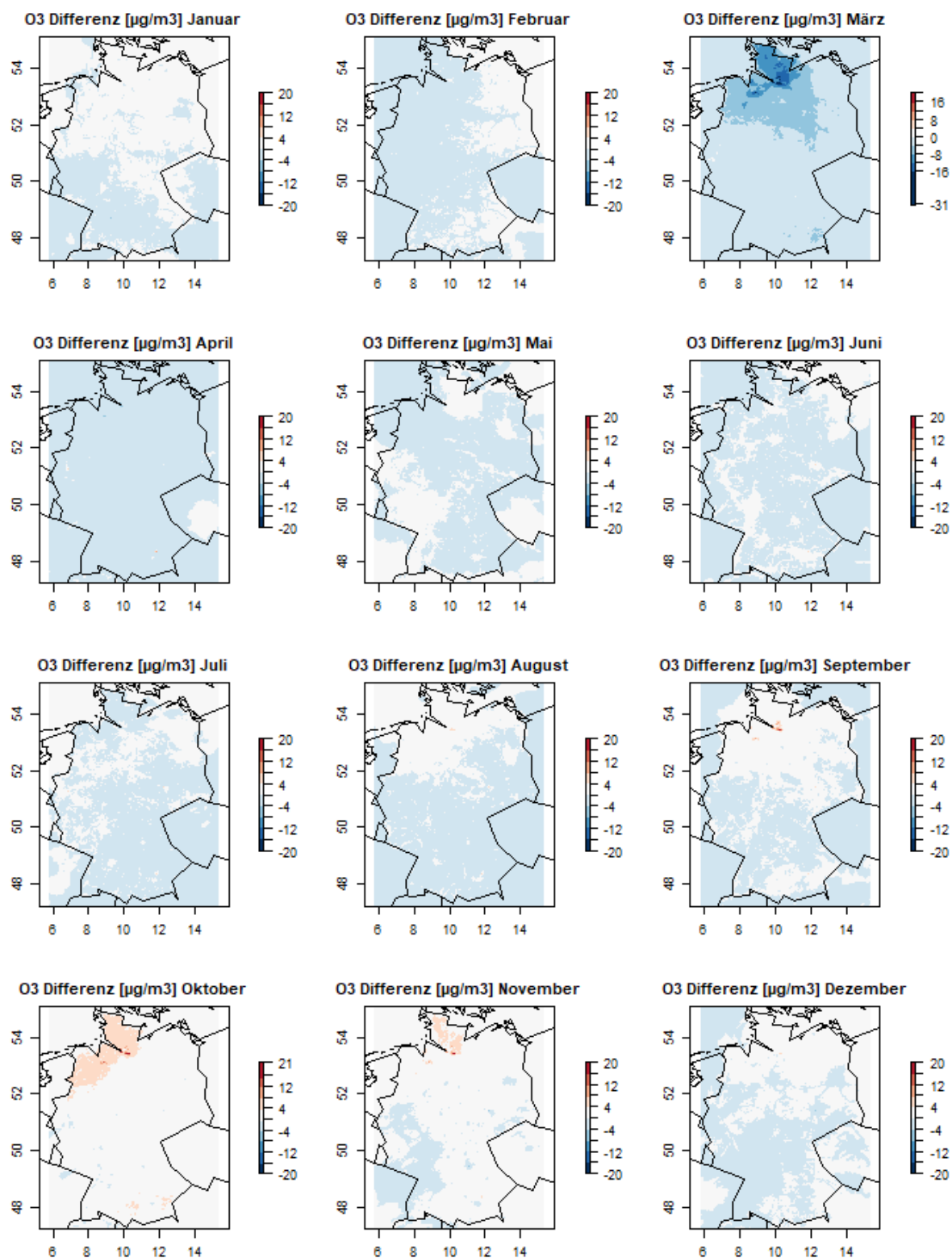
Nach dem Setup sind damit in RCG folgende Informationen vorhanden: die SF selbst, ihre Zuweisungen zu Gitterzellen, Schadstoffen und SNAP-Sektoren sowie die Flags, welche SF dynamisch oder statisch verwendet werden sollen.

Zur Verwendung der SF im eigentlichen Programmablauf wurde Folgendes implementiert:

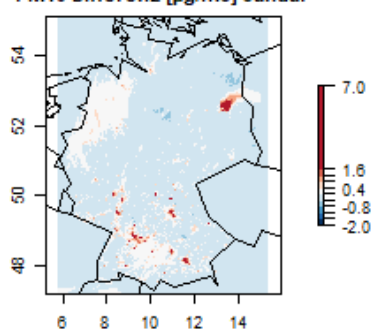
- ▶ Im Modul *emissions_mod.for* wurde die Routine *emtempvar_dyn* implementiert, die in Abhängigkeit Land, Schadstoff und Quellgruppe pro Gitterbox und Modellzeit den passenden dynamischen Splitting-Faktor zurückgibt.
- ▶ In den Routinen *aes_upd_hour* und *ps_upd* wird eine Verzweigung eingeführt und je nach Steuerflag die Routine *emtempvar* (Verwendung statischer Zeitprofile) oder die Routine *emtempvar_dyn* (Verwendung dynamischer Zeitprofile) aufgerufen.

E Evaluierung, Karten absolute Differenzen Monatsmittelwerte 2016

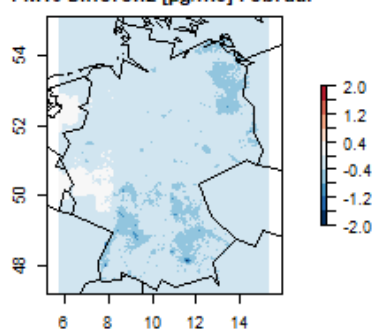




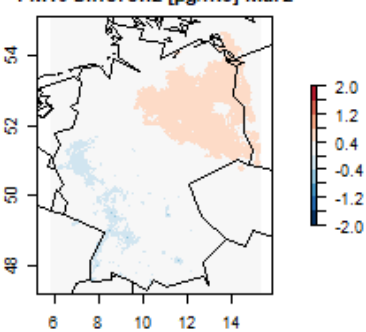
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] Januar



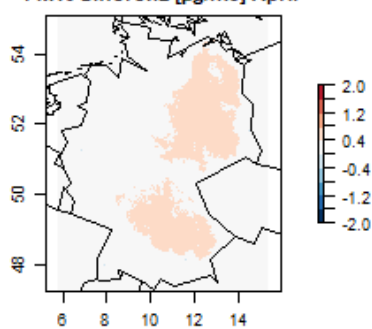
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] Februar



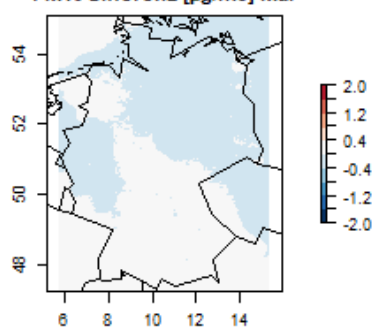
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] März



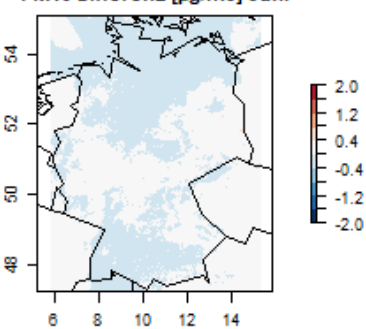
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] April



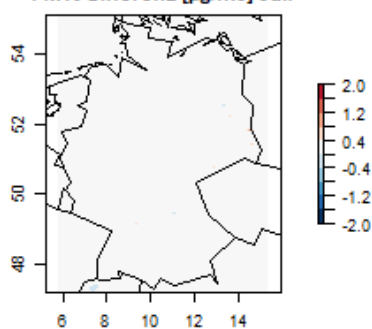
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] Mai



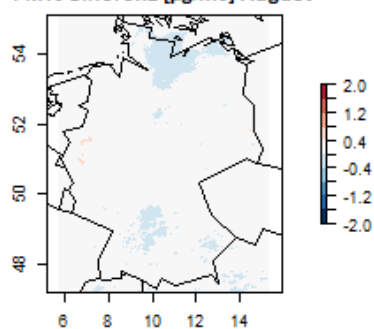
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] Juni



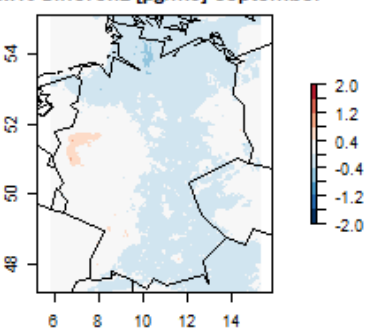
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] Juli



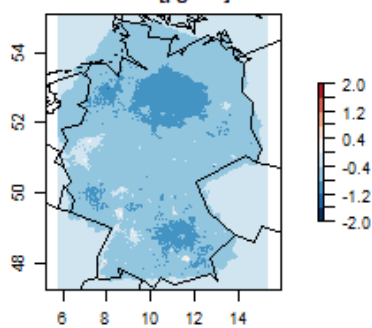
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] August



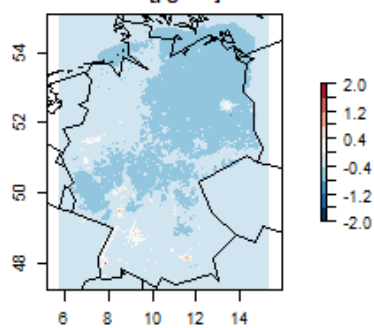
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] September



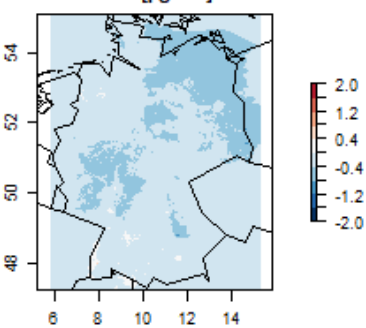
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] Oktober

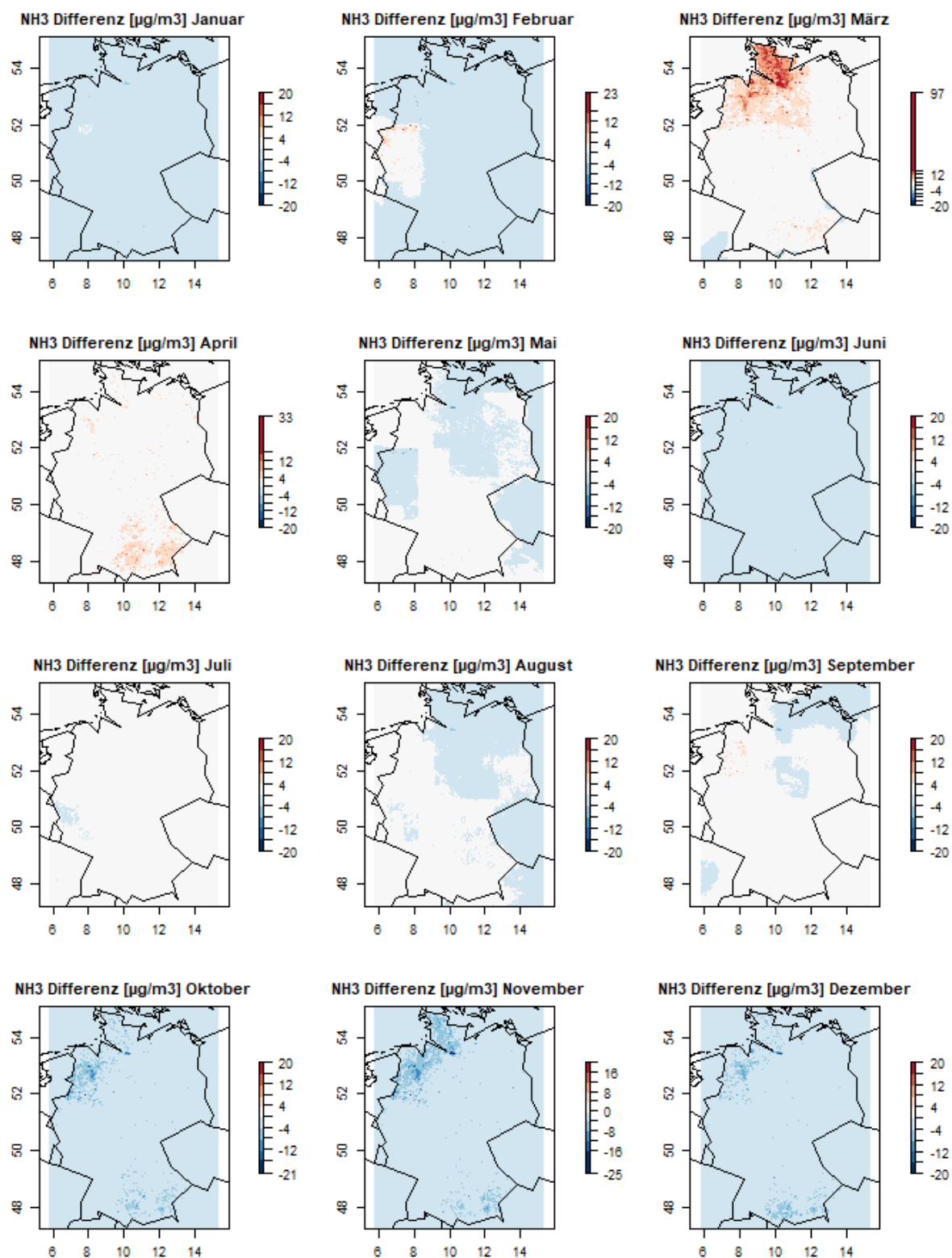


PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] November



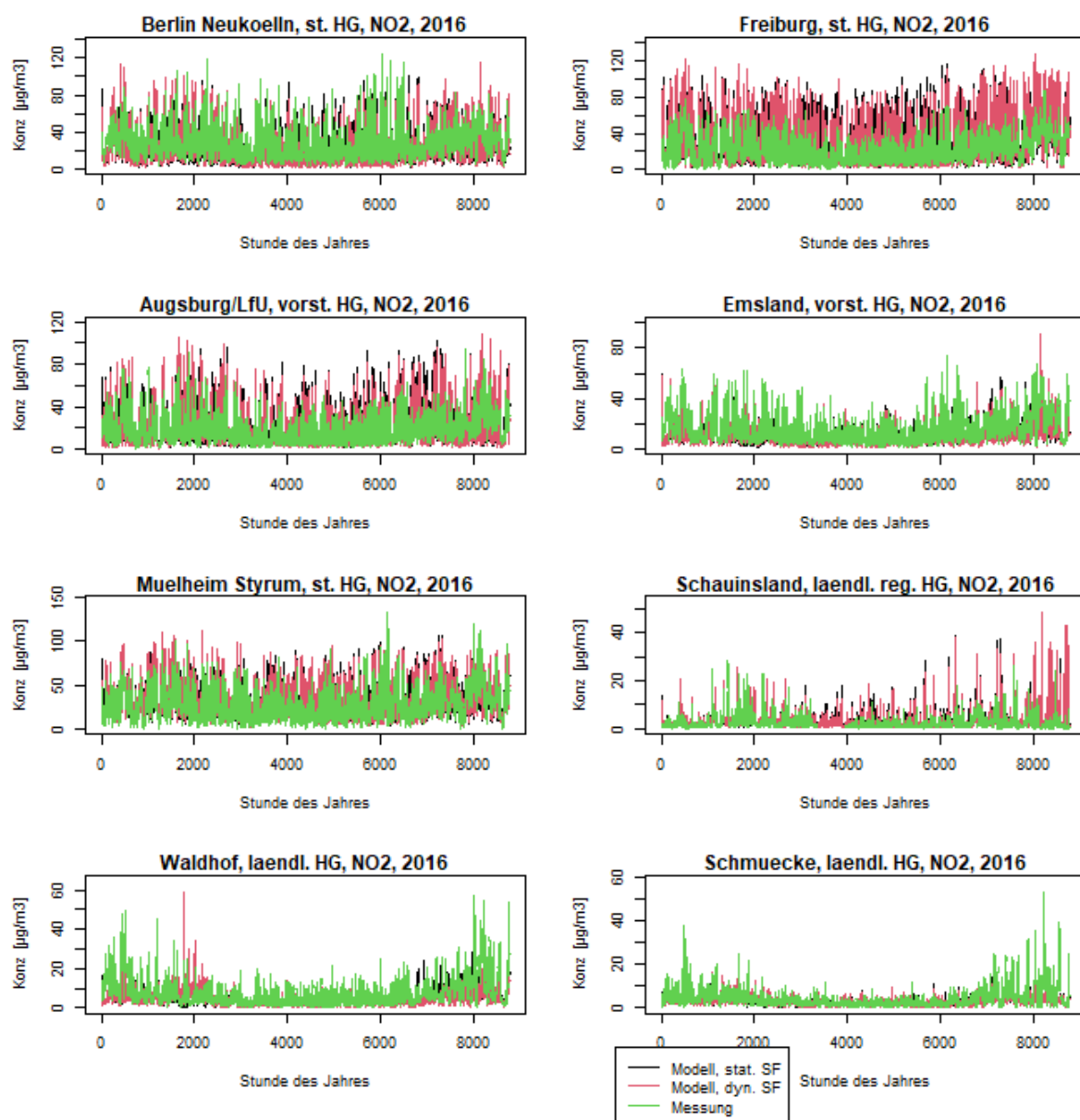
PM10 Differenz [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] Dezember

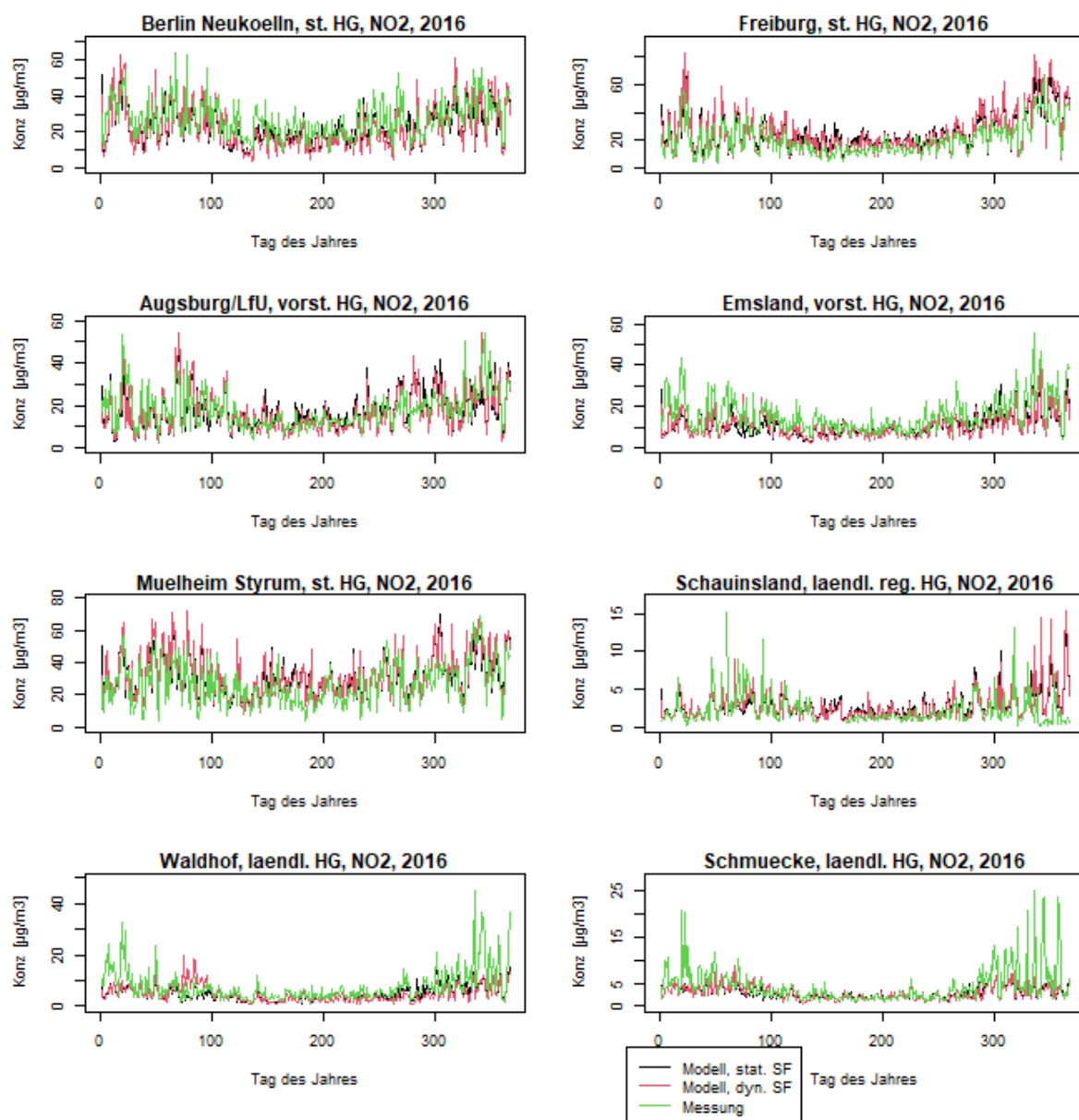


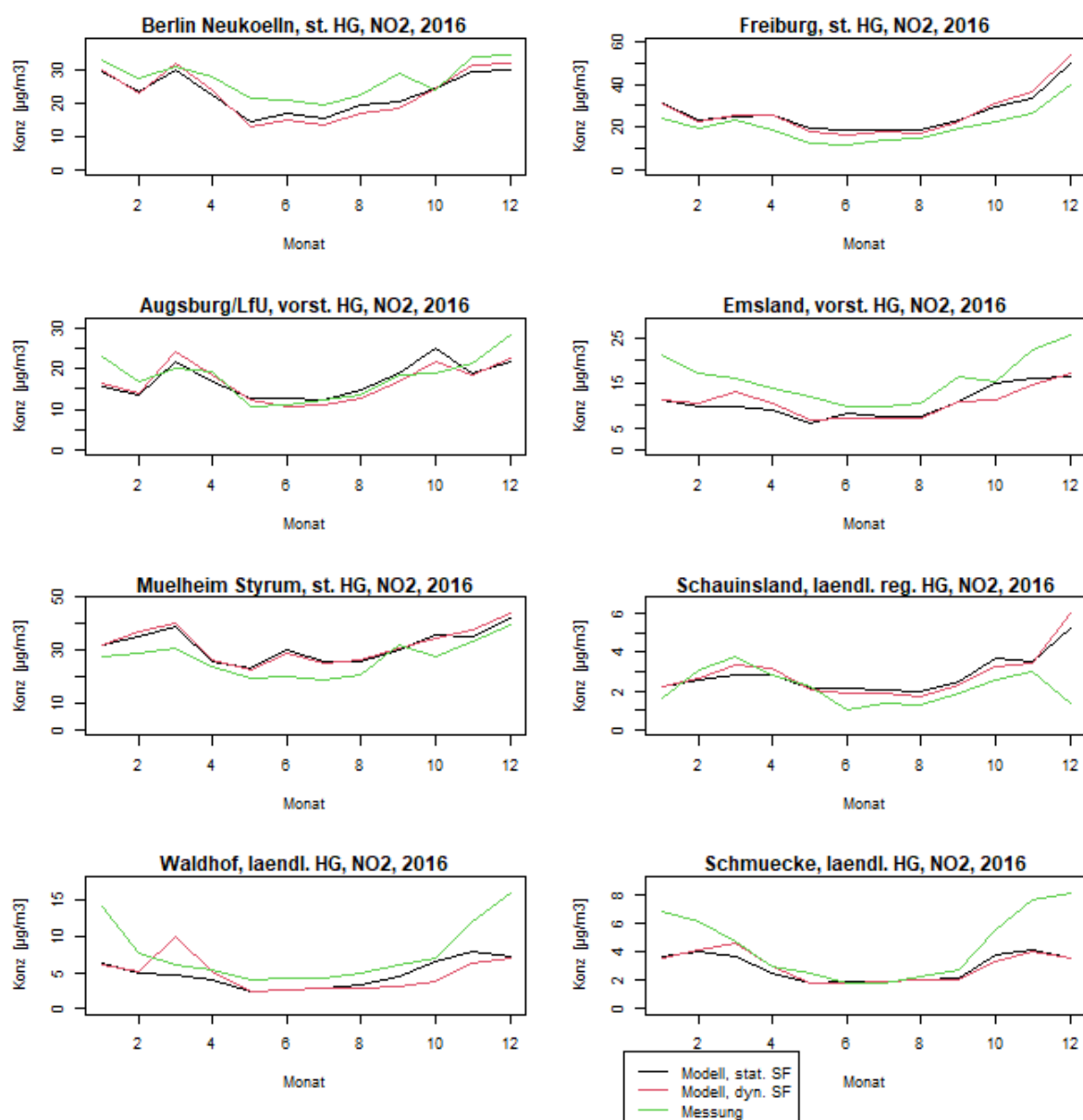


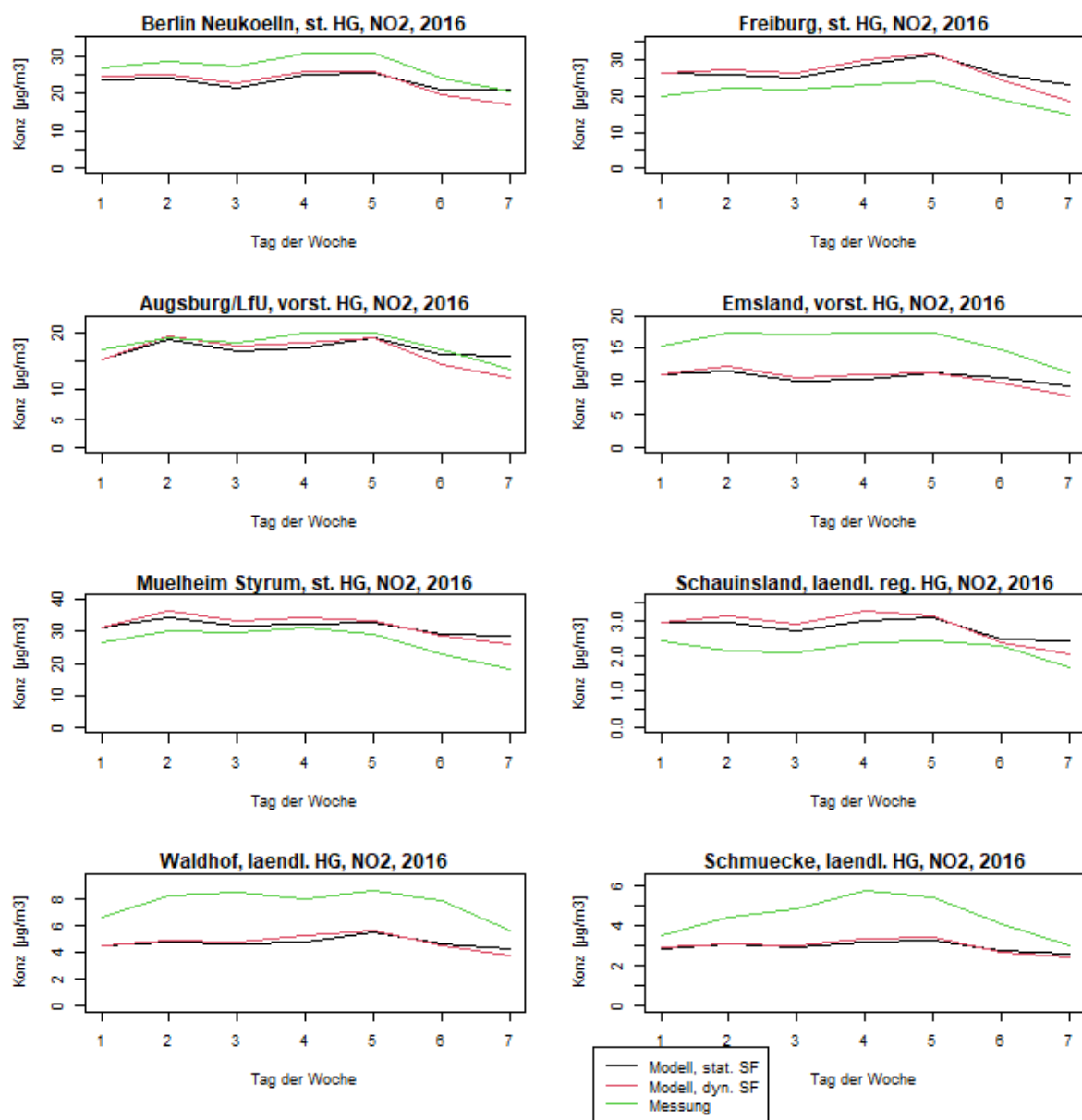
F Evaluierung: Plots Zeitreihen 2016

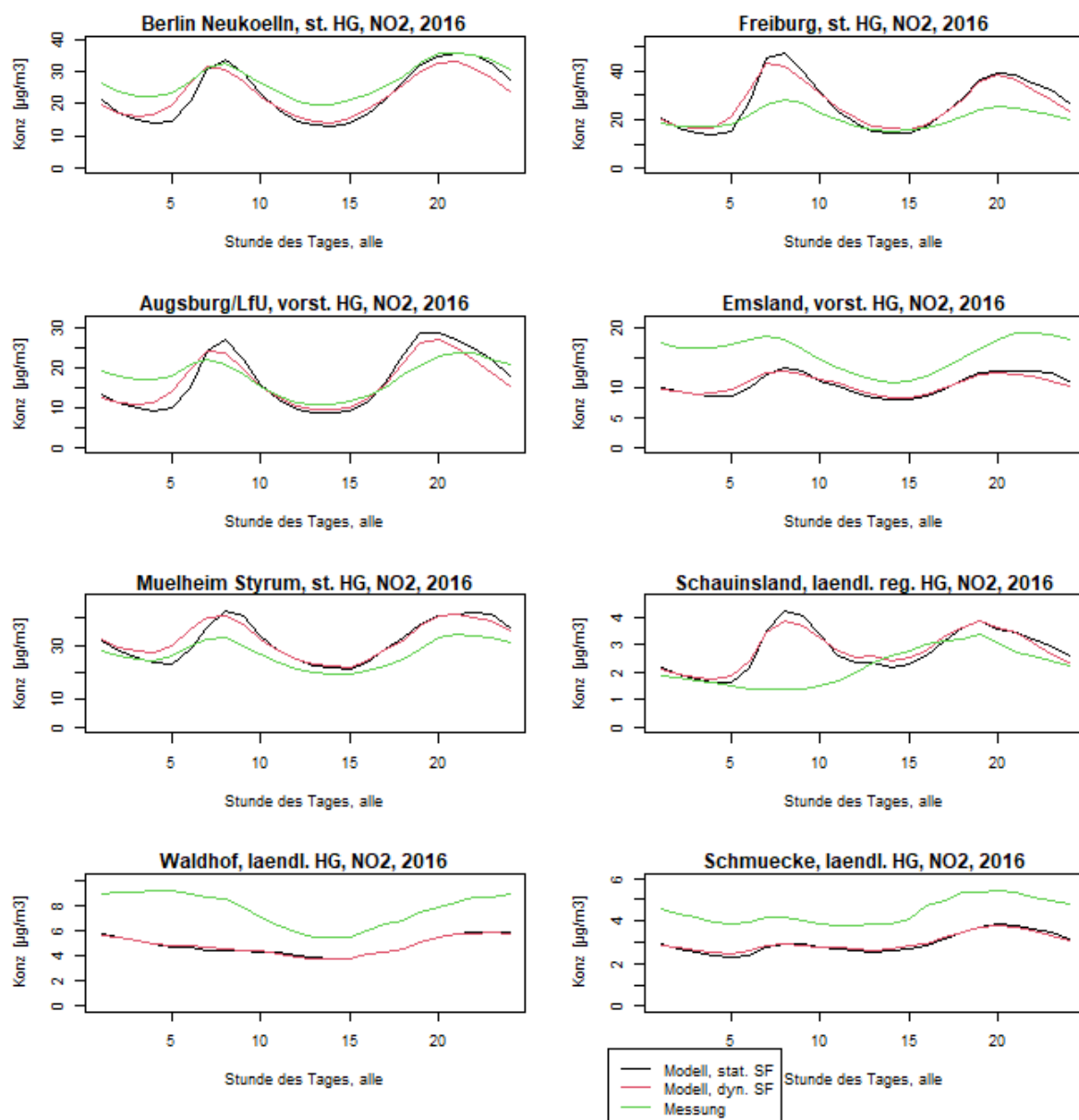
F.1 Zeitreihen NO₂

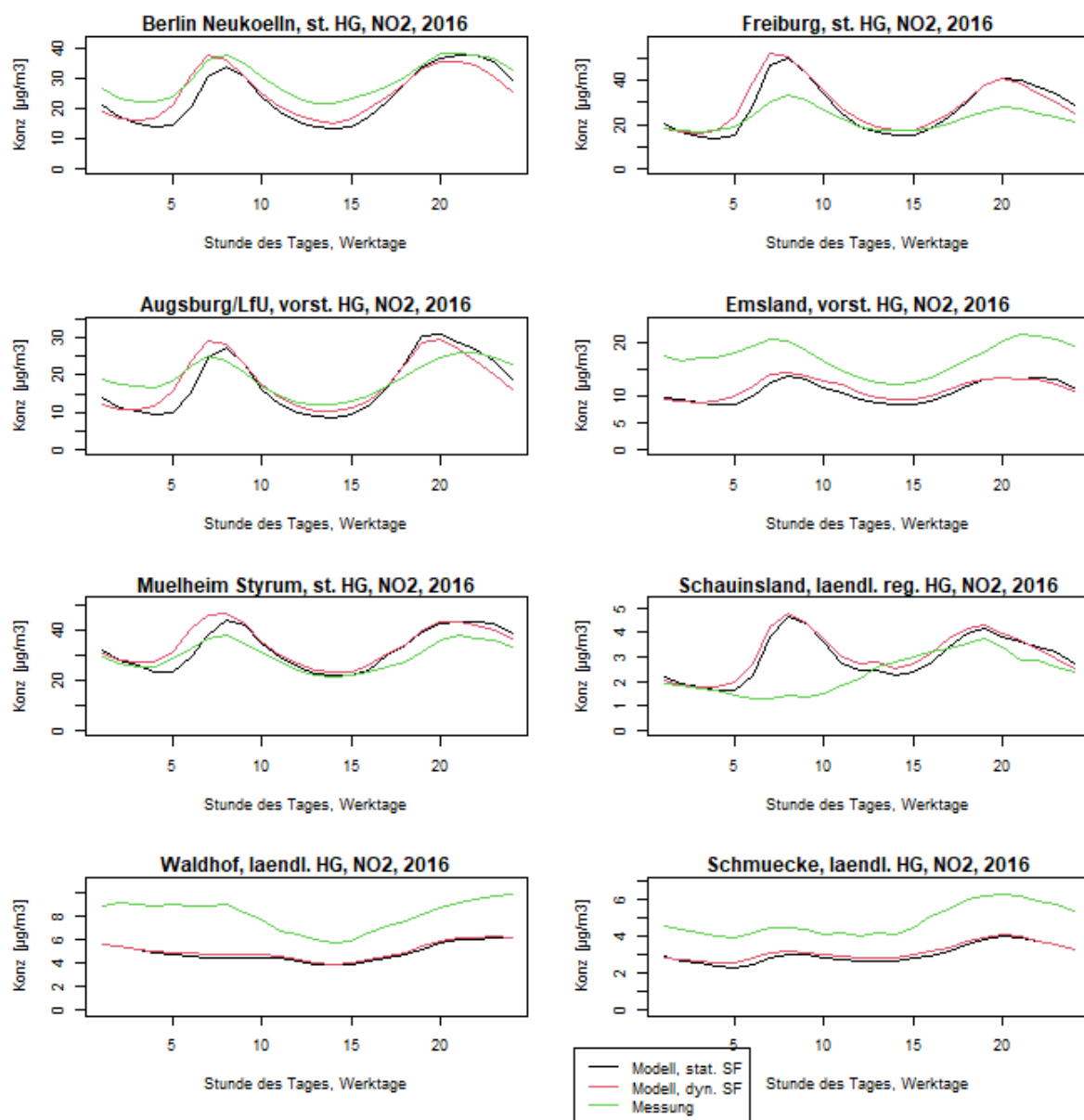


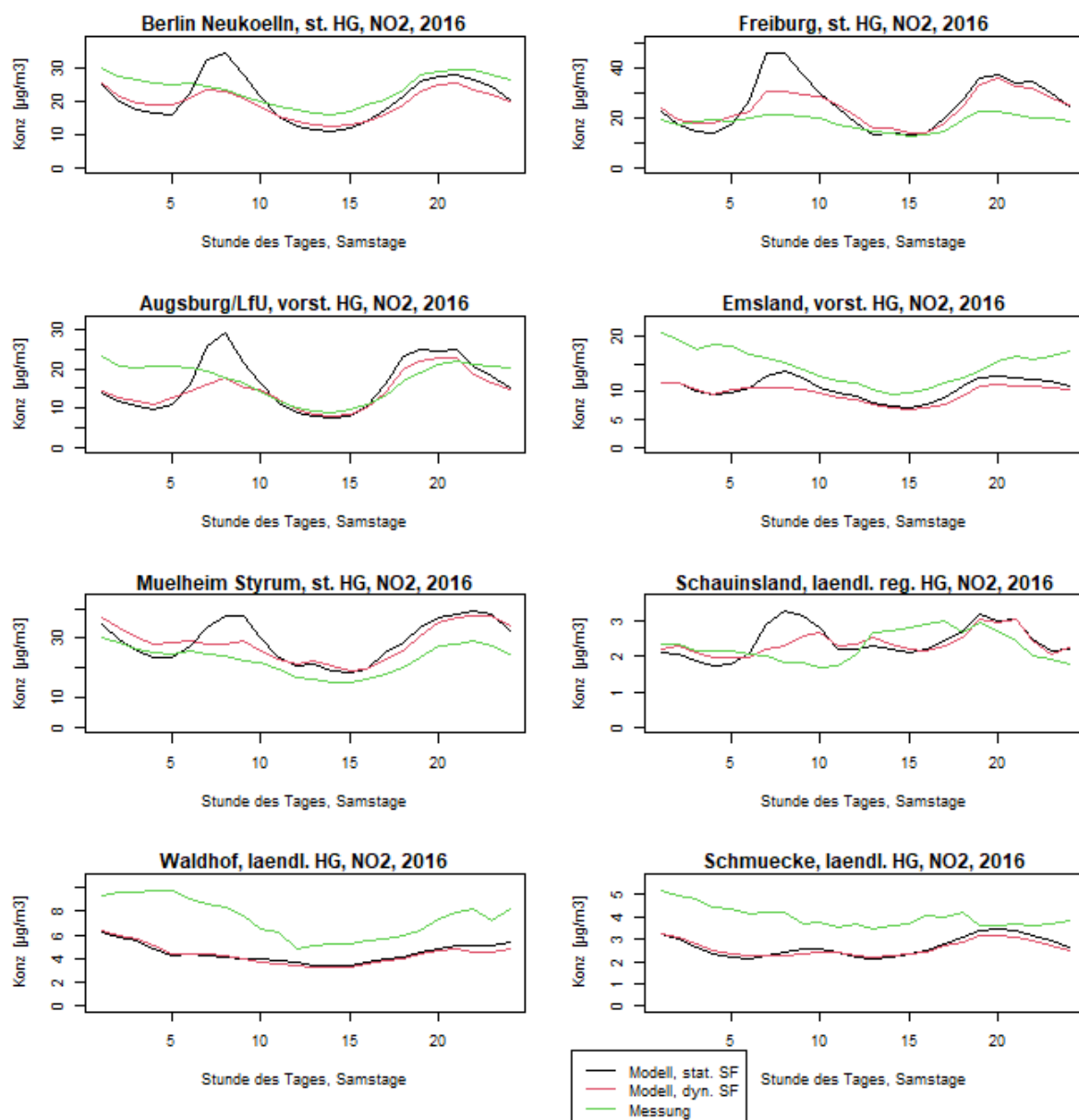


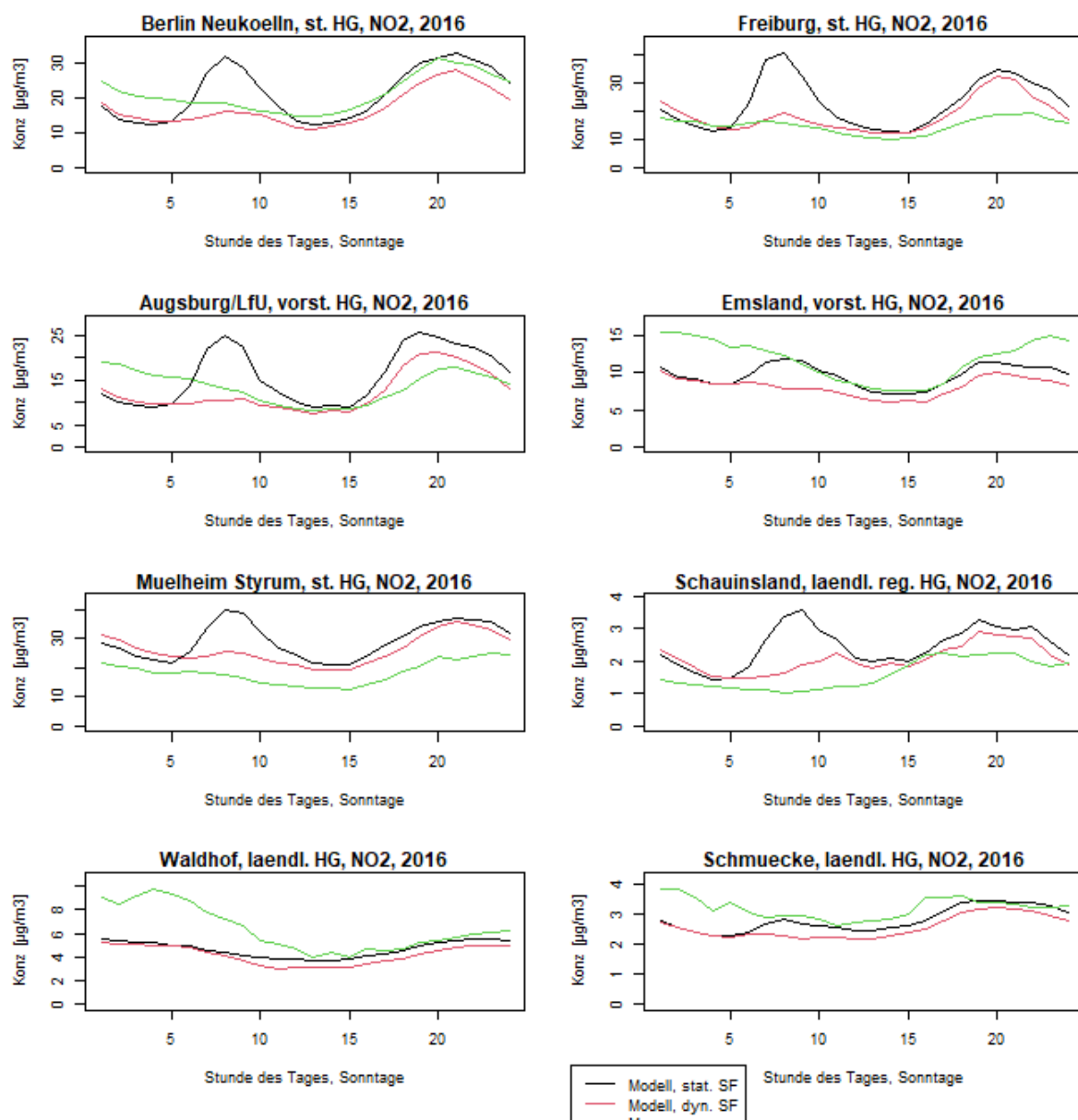




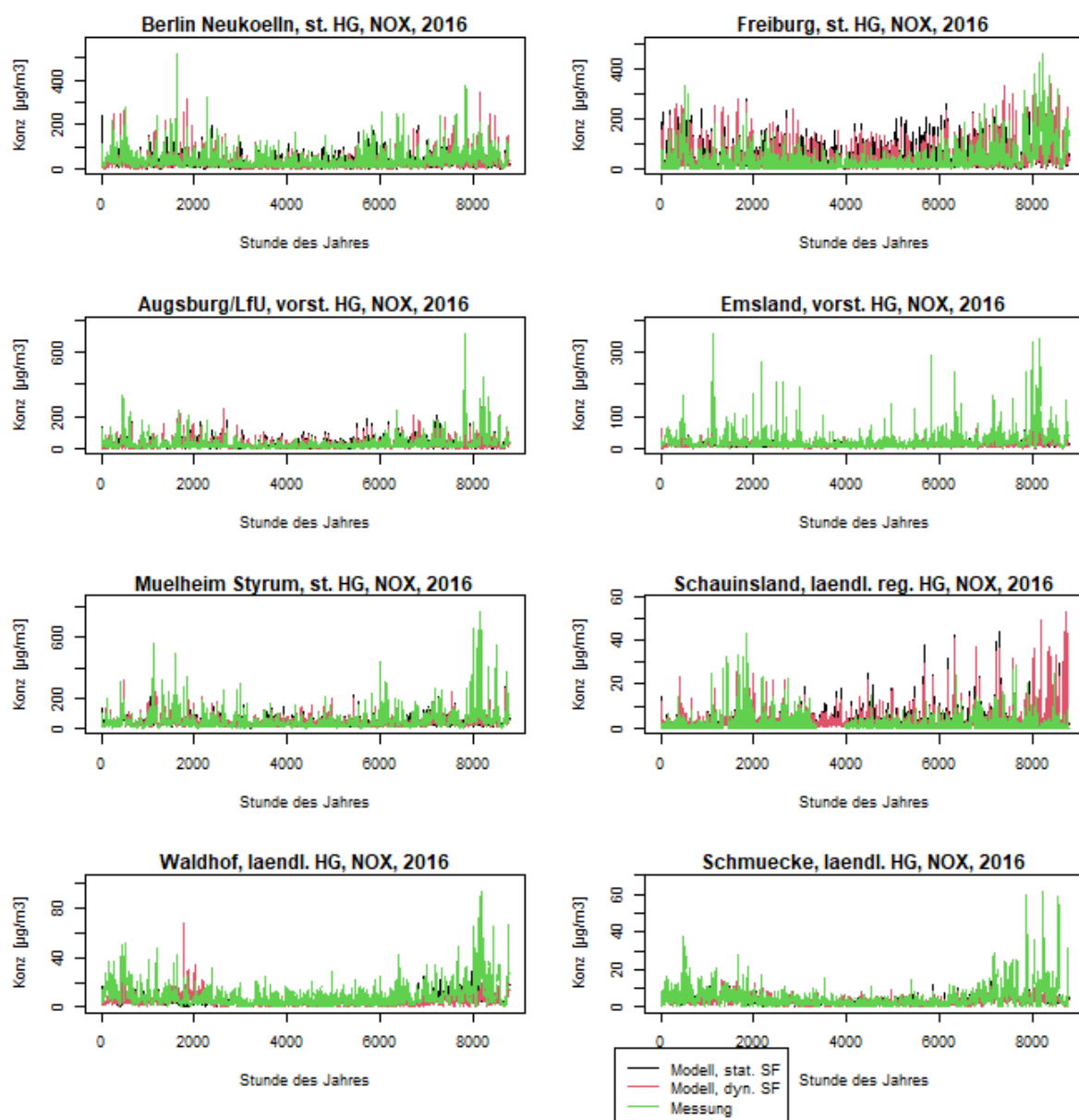


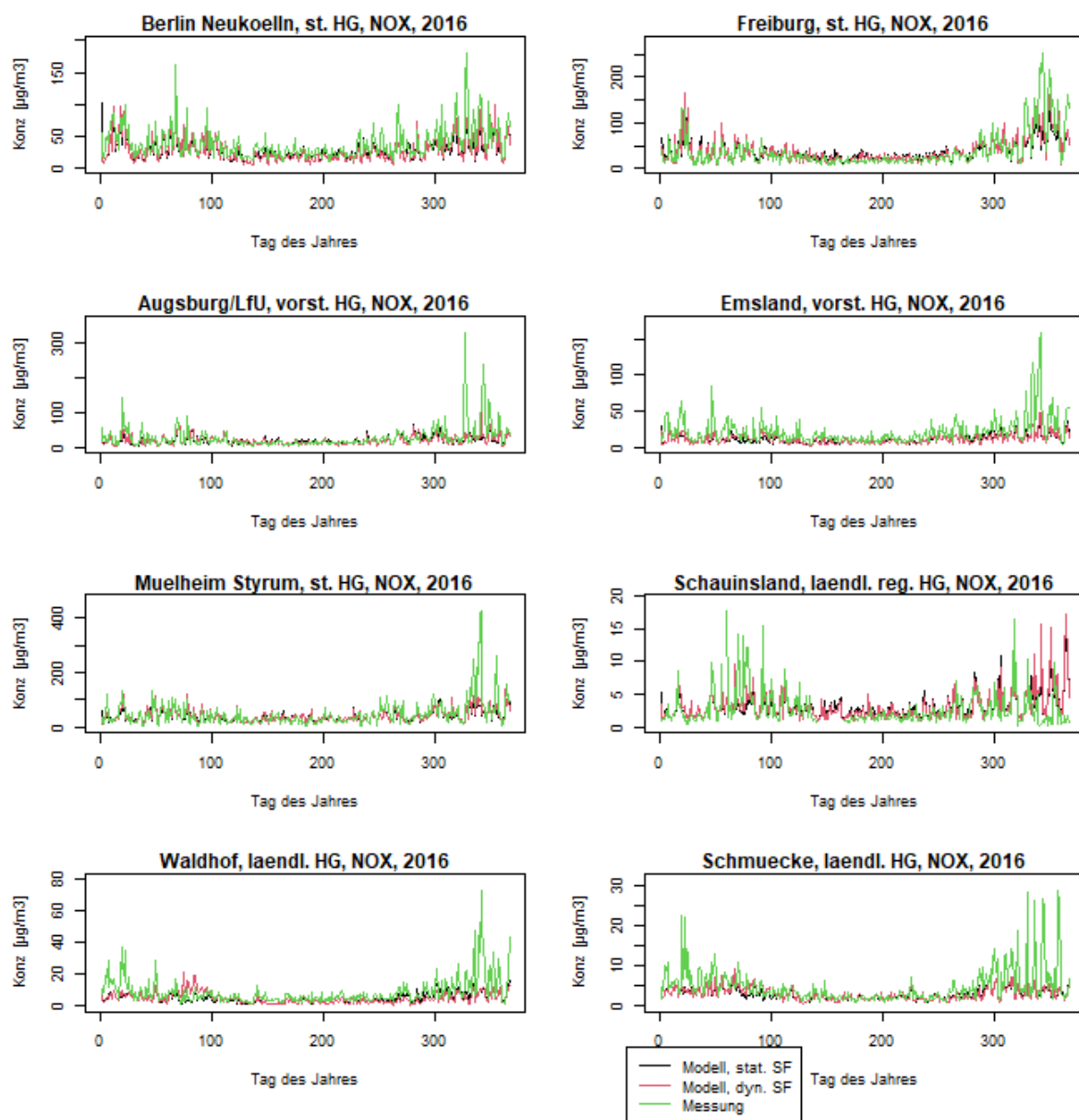


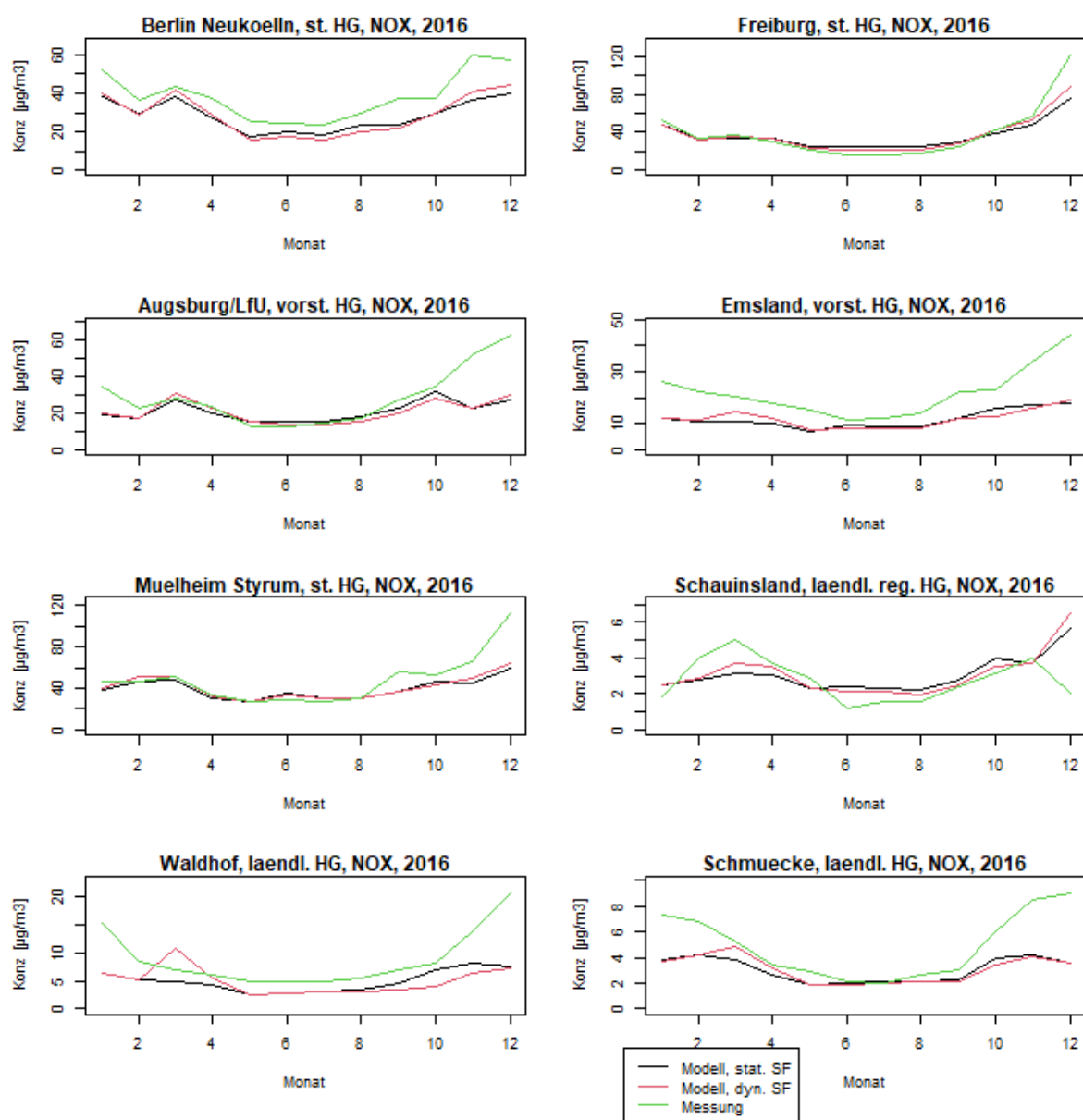


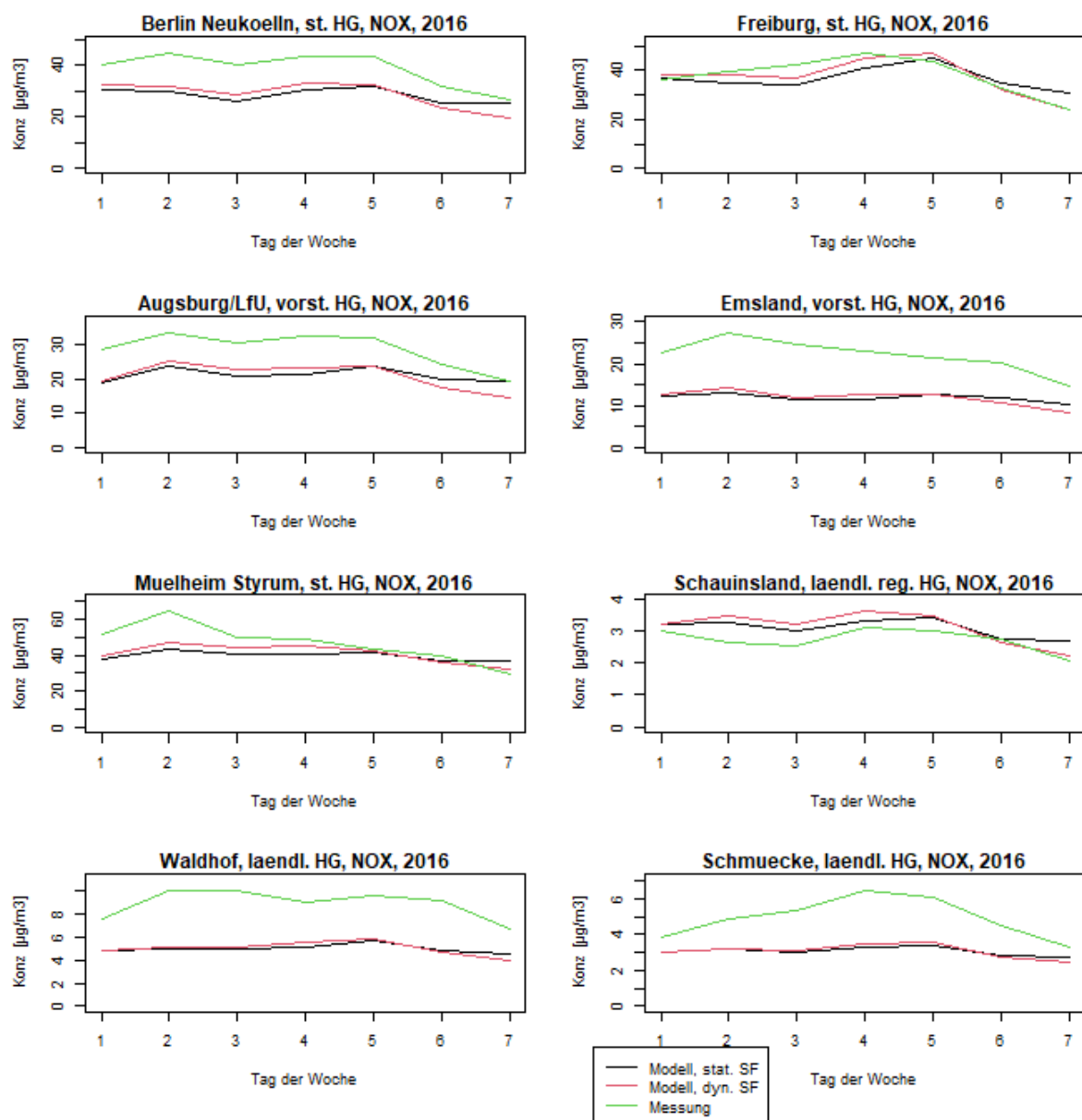


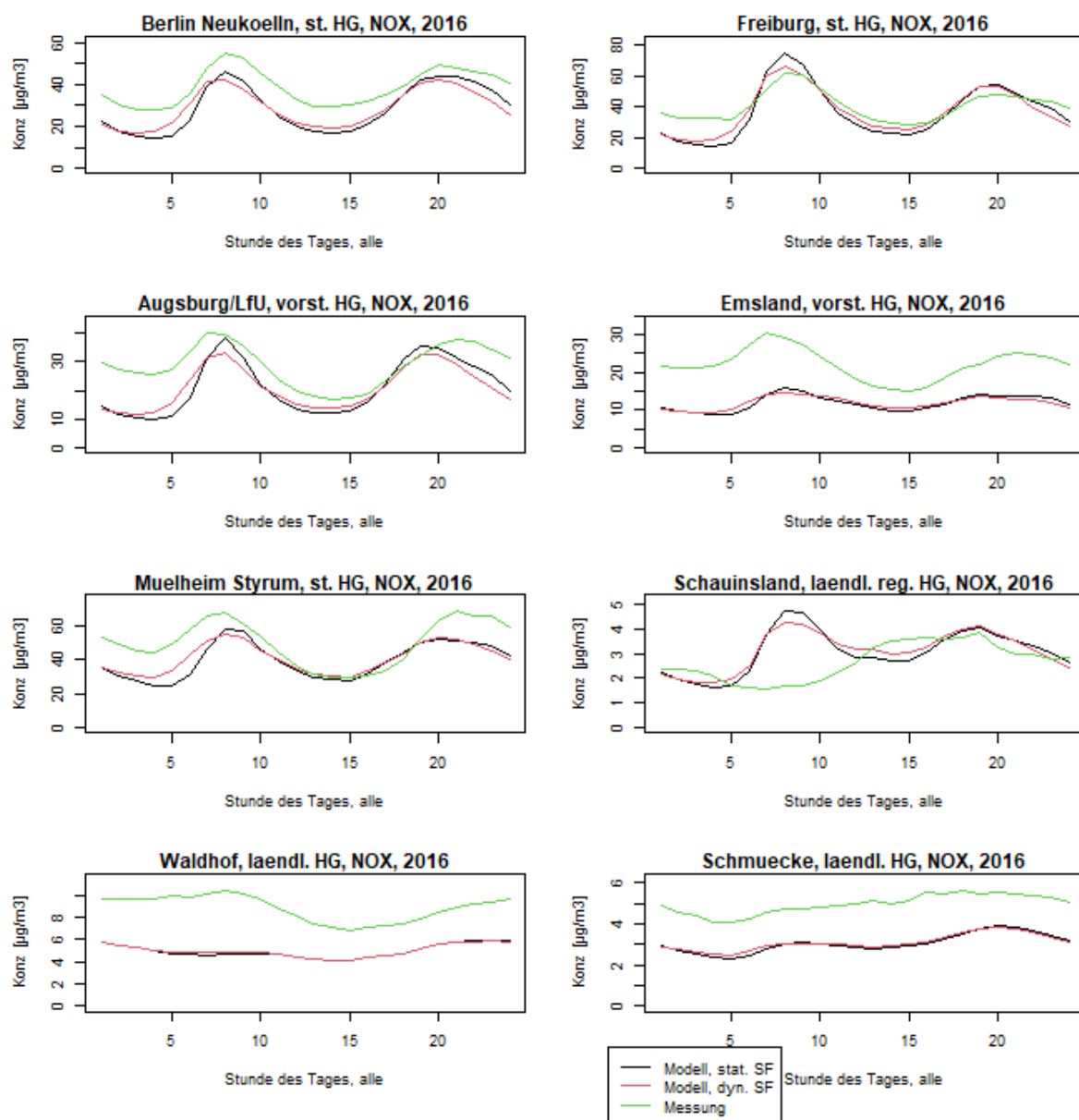
F.2 Zeitreihen NO_x

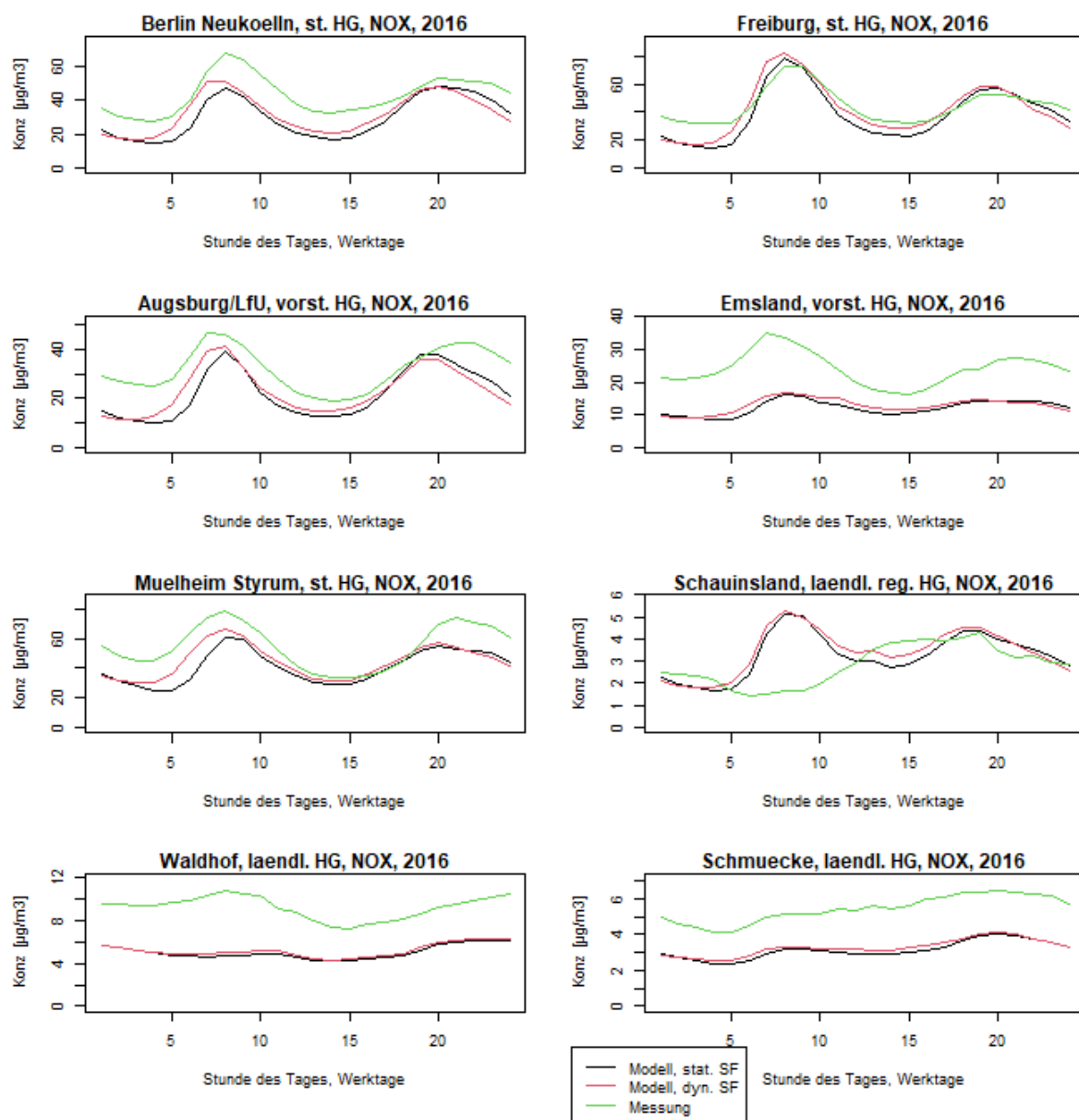


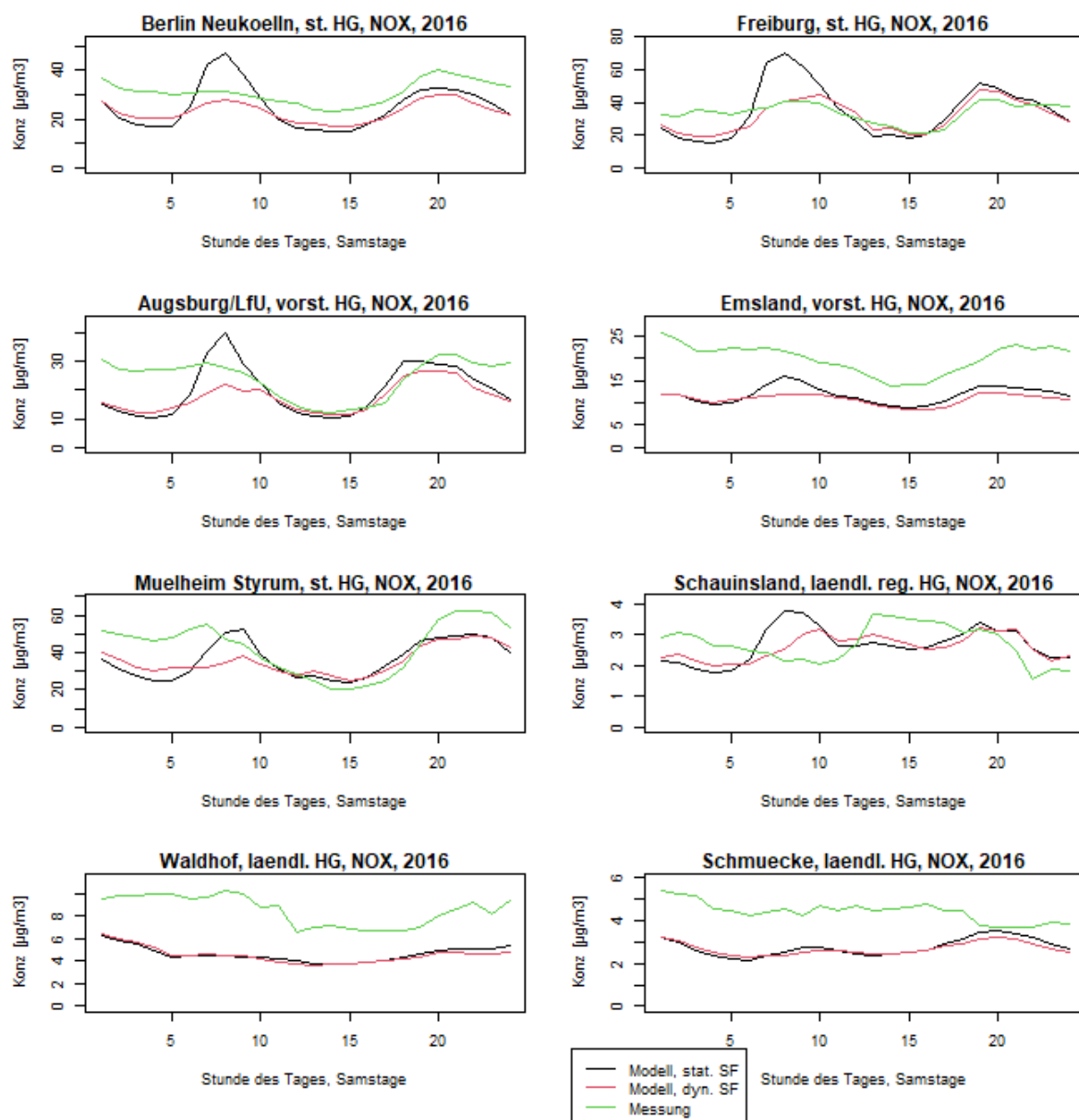


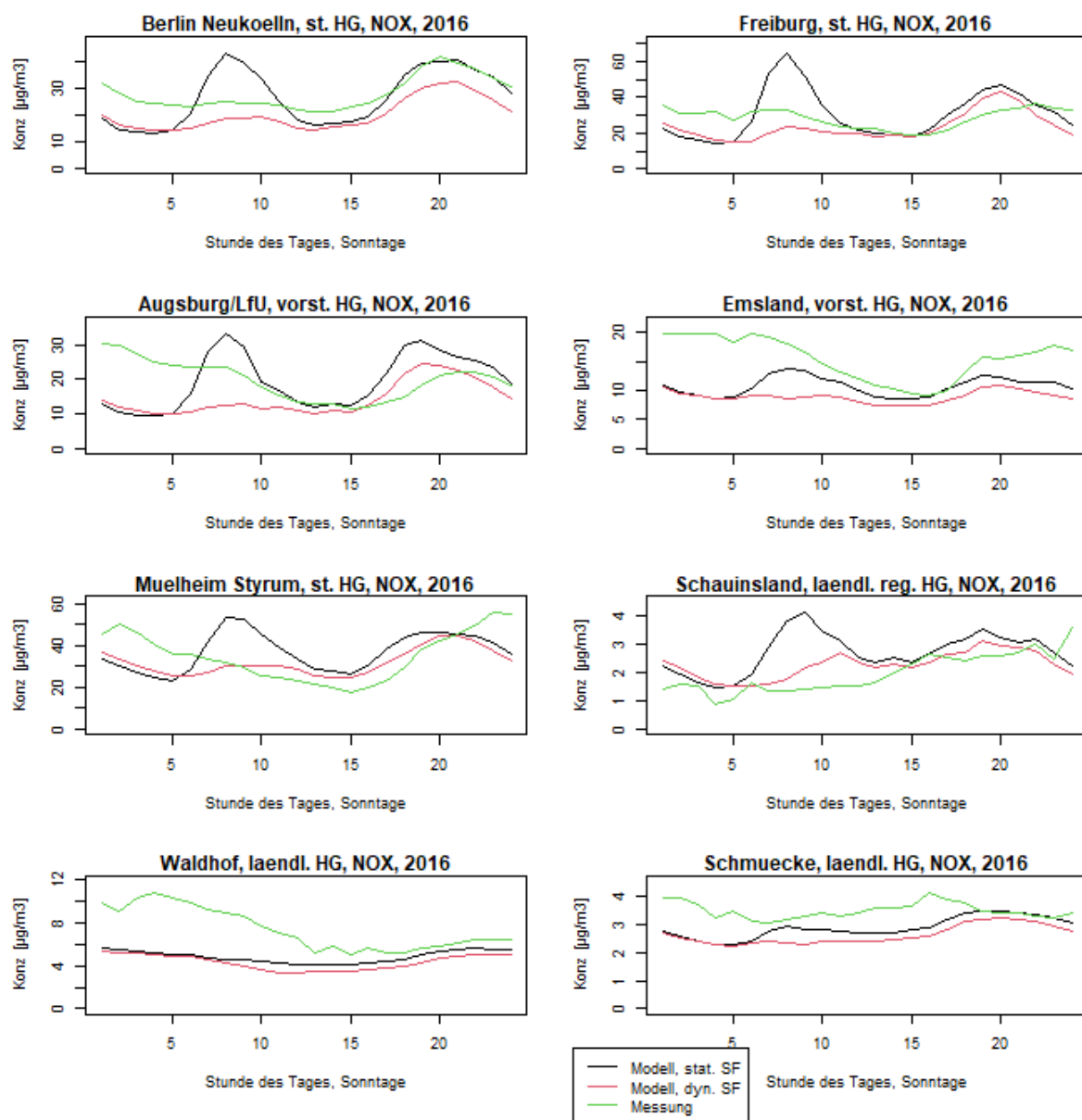




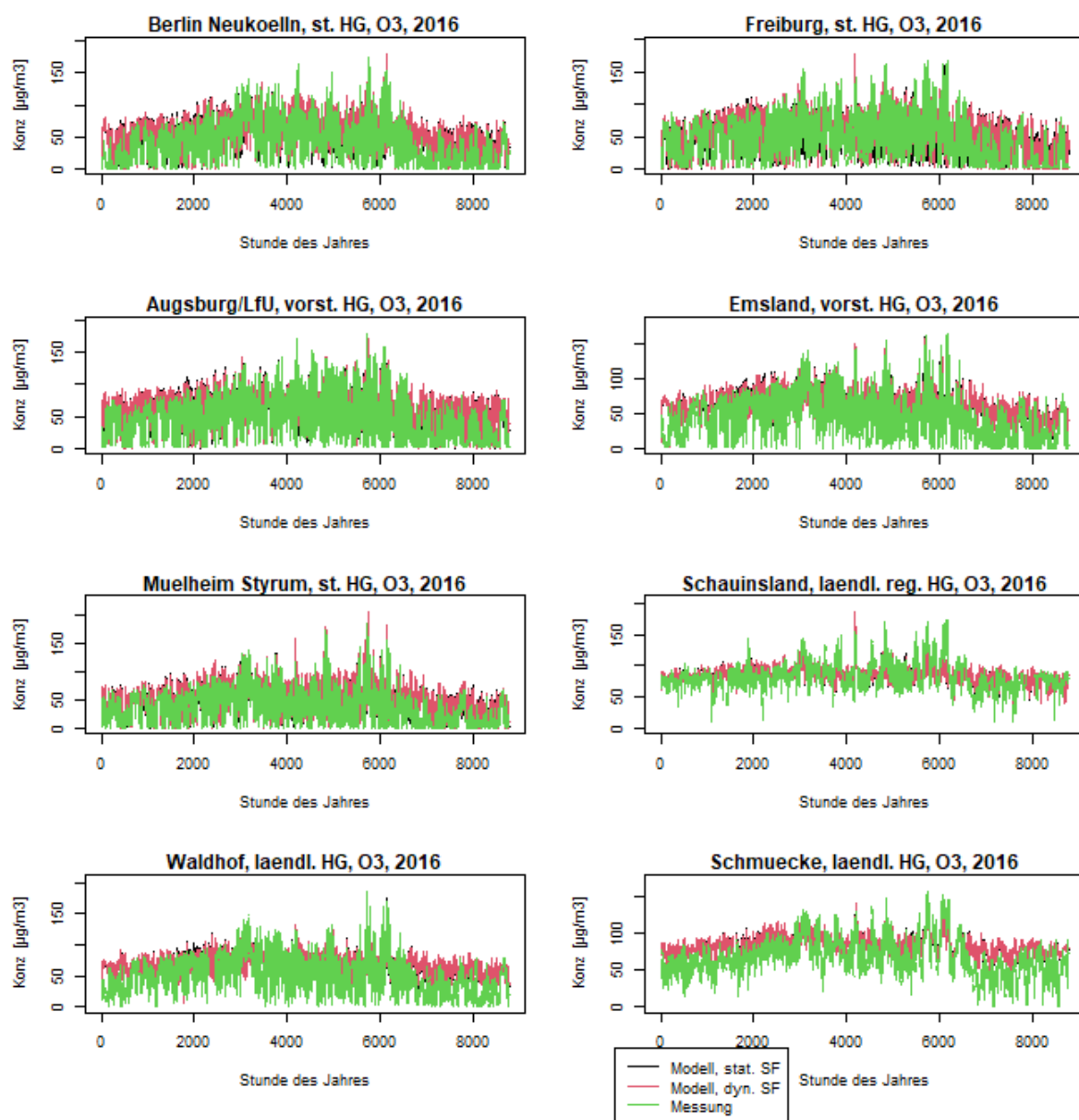


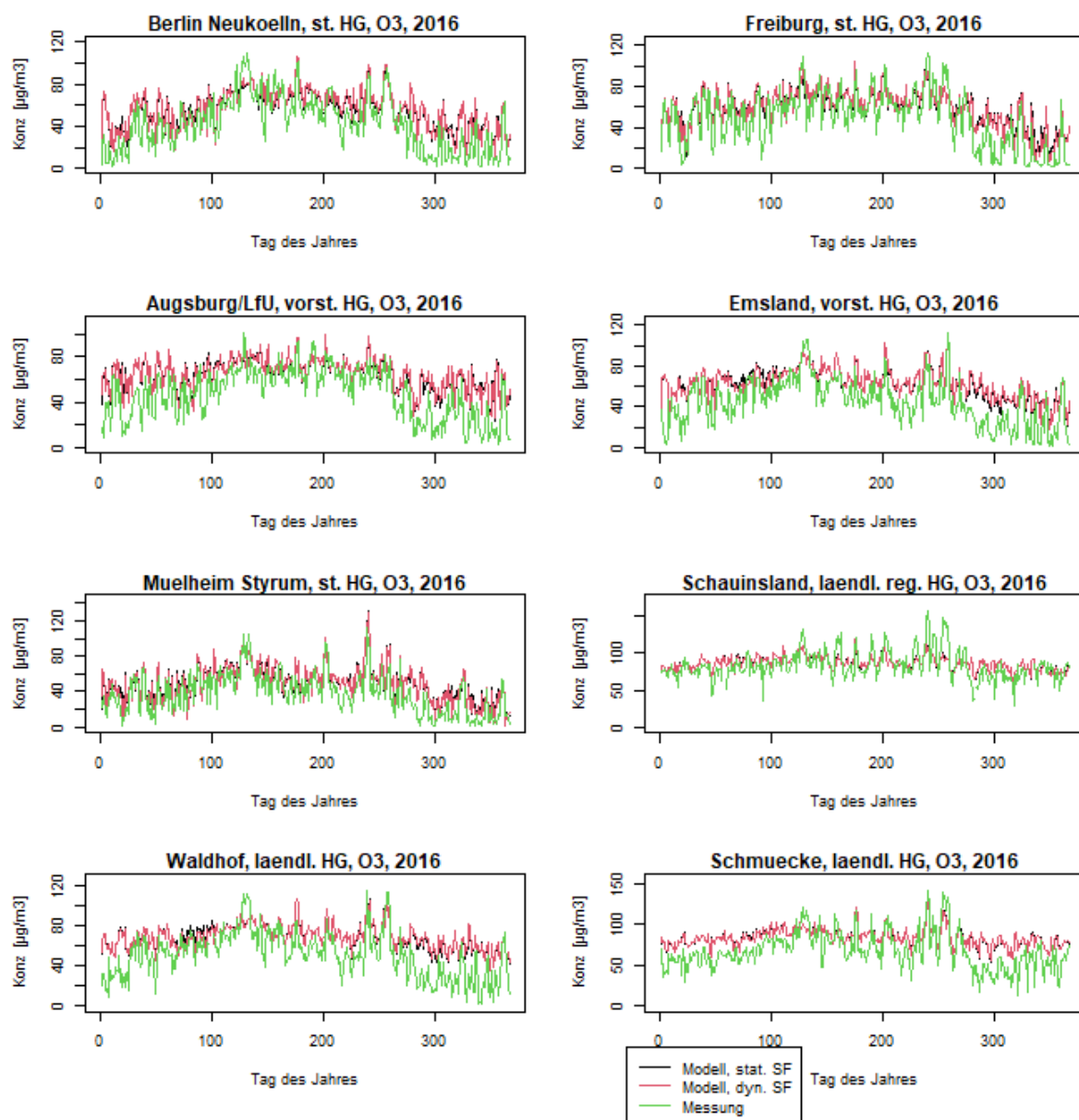


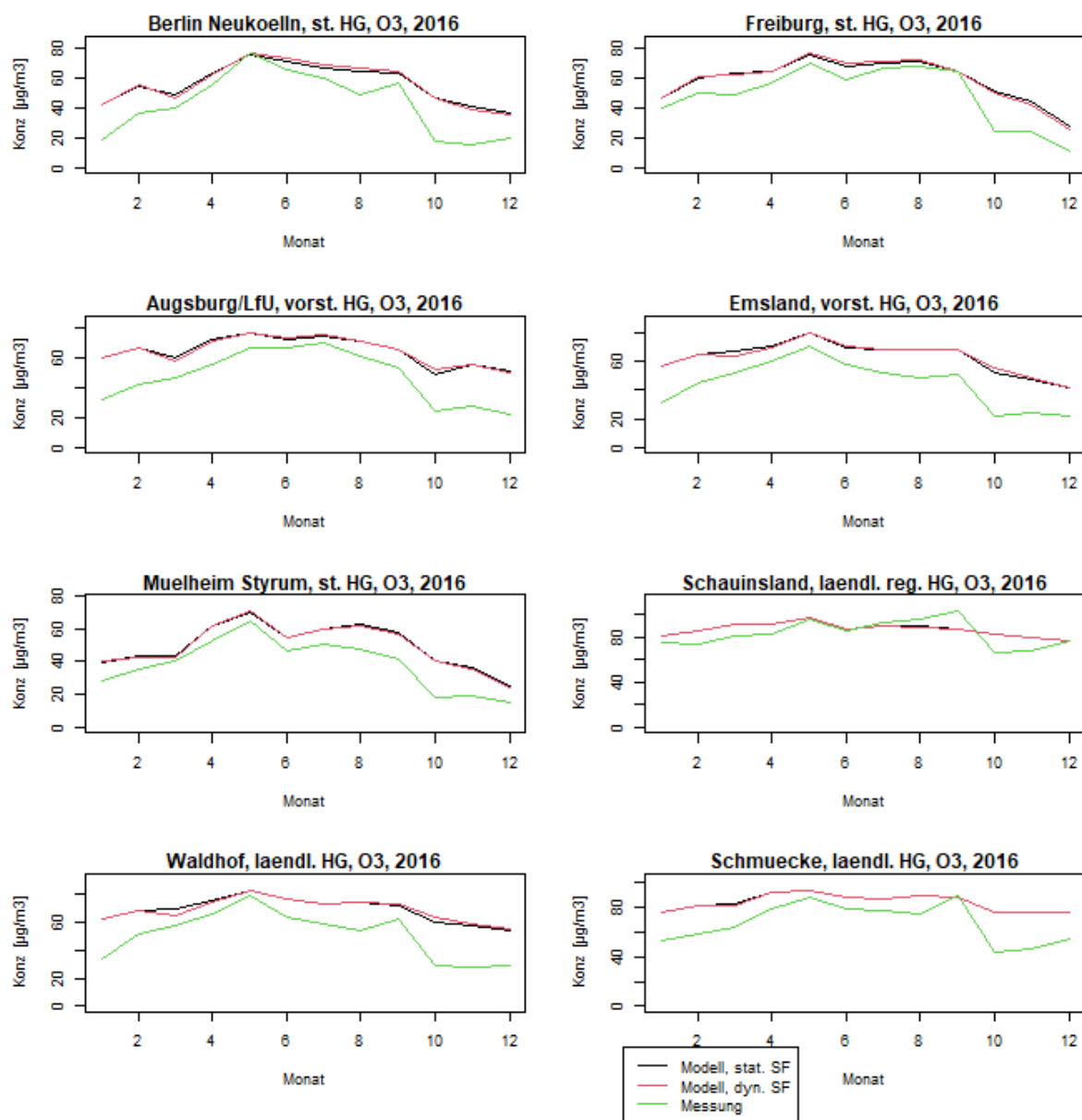


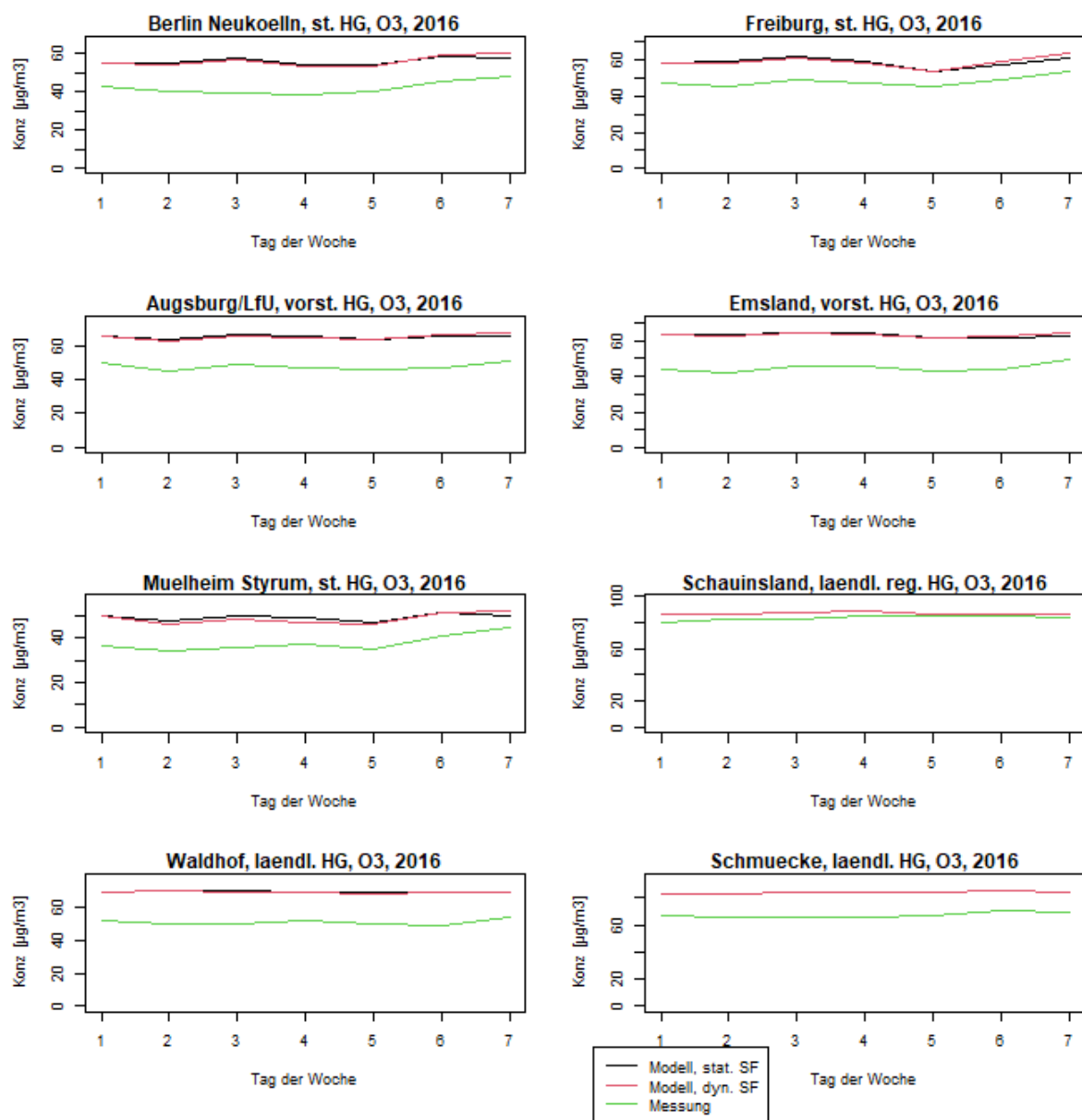


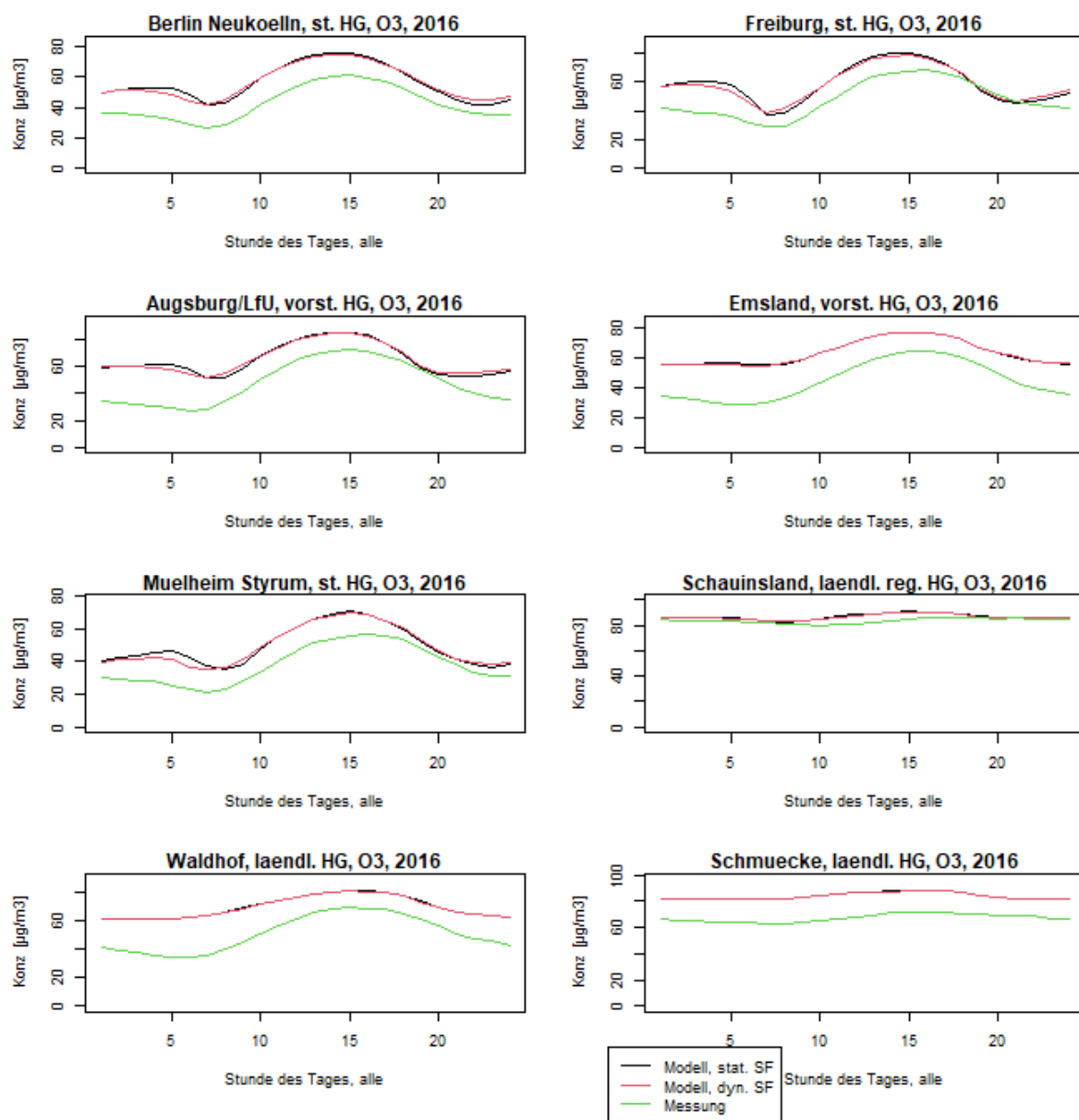
F.3 Zeitreihen O₃

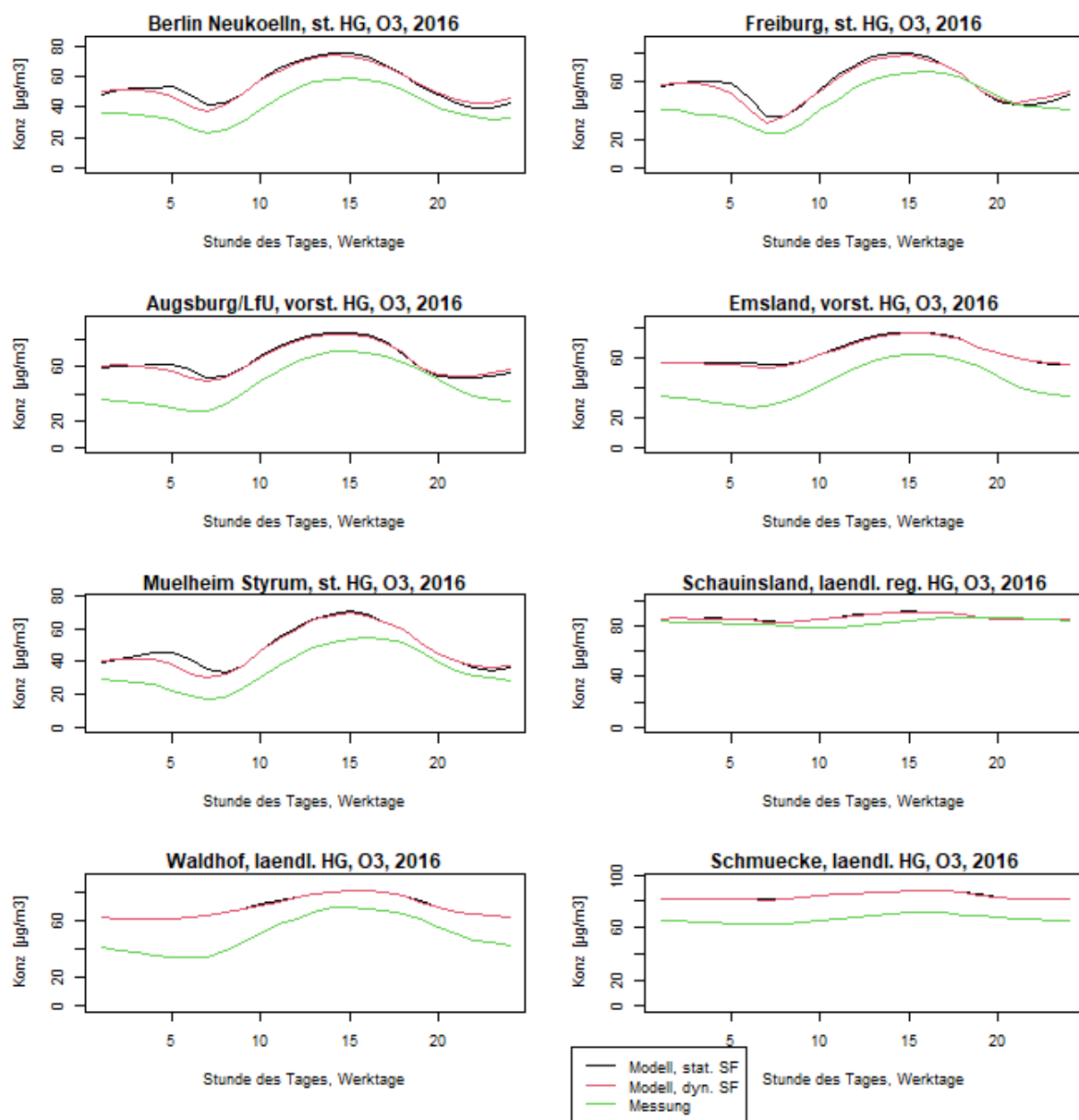


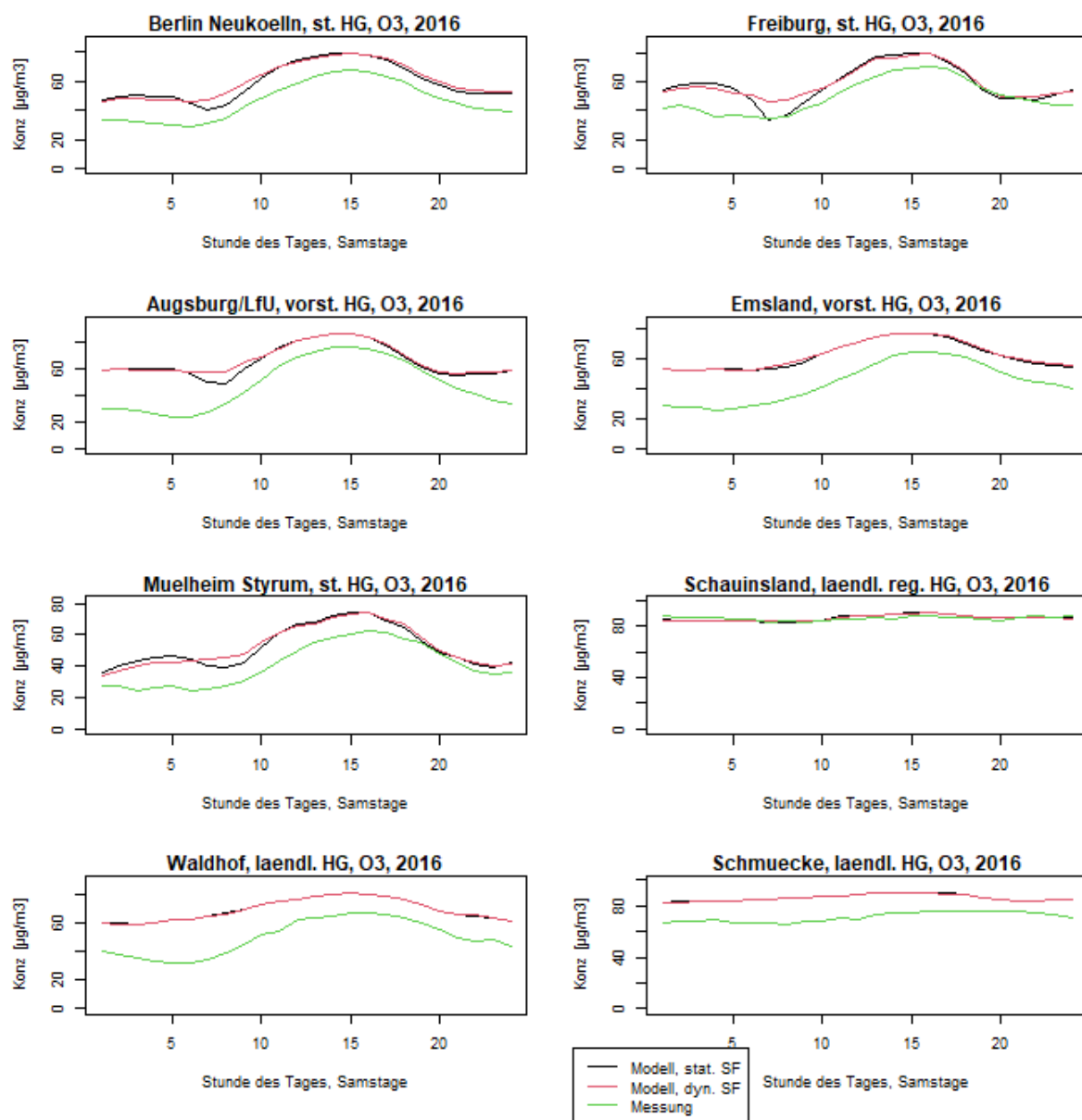


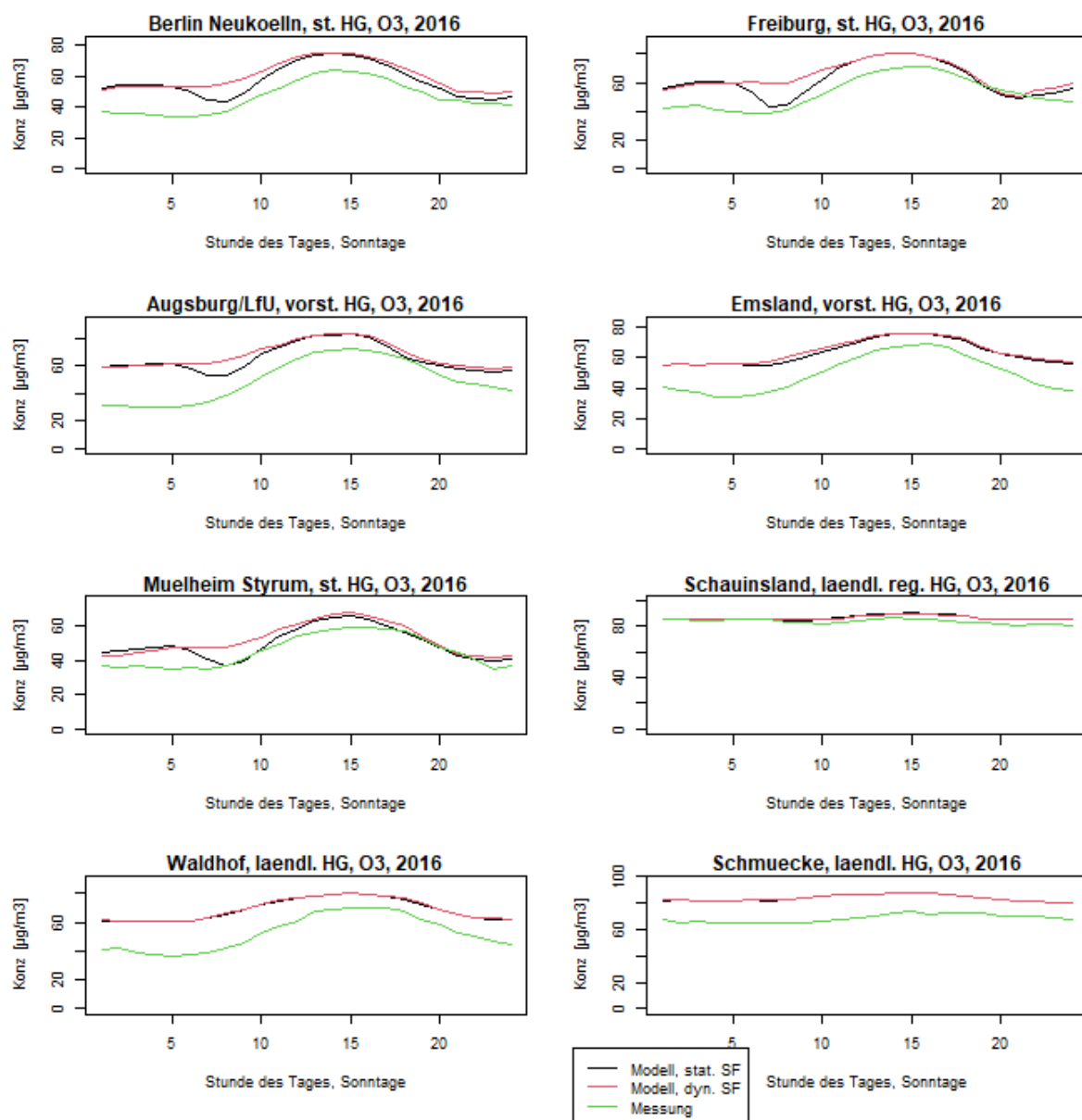




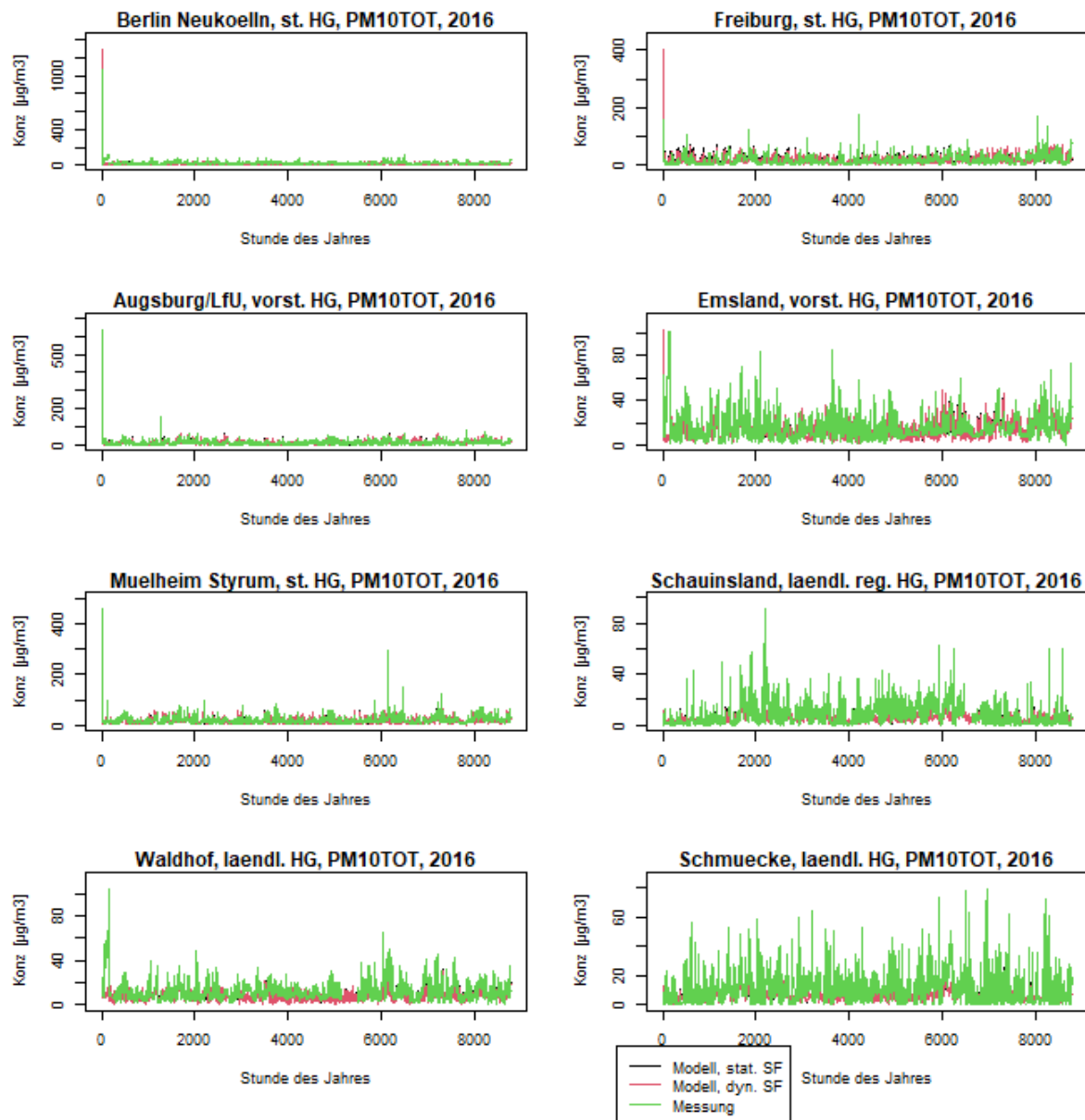


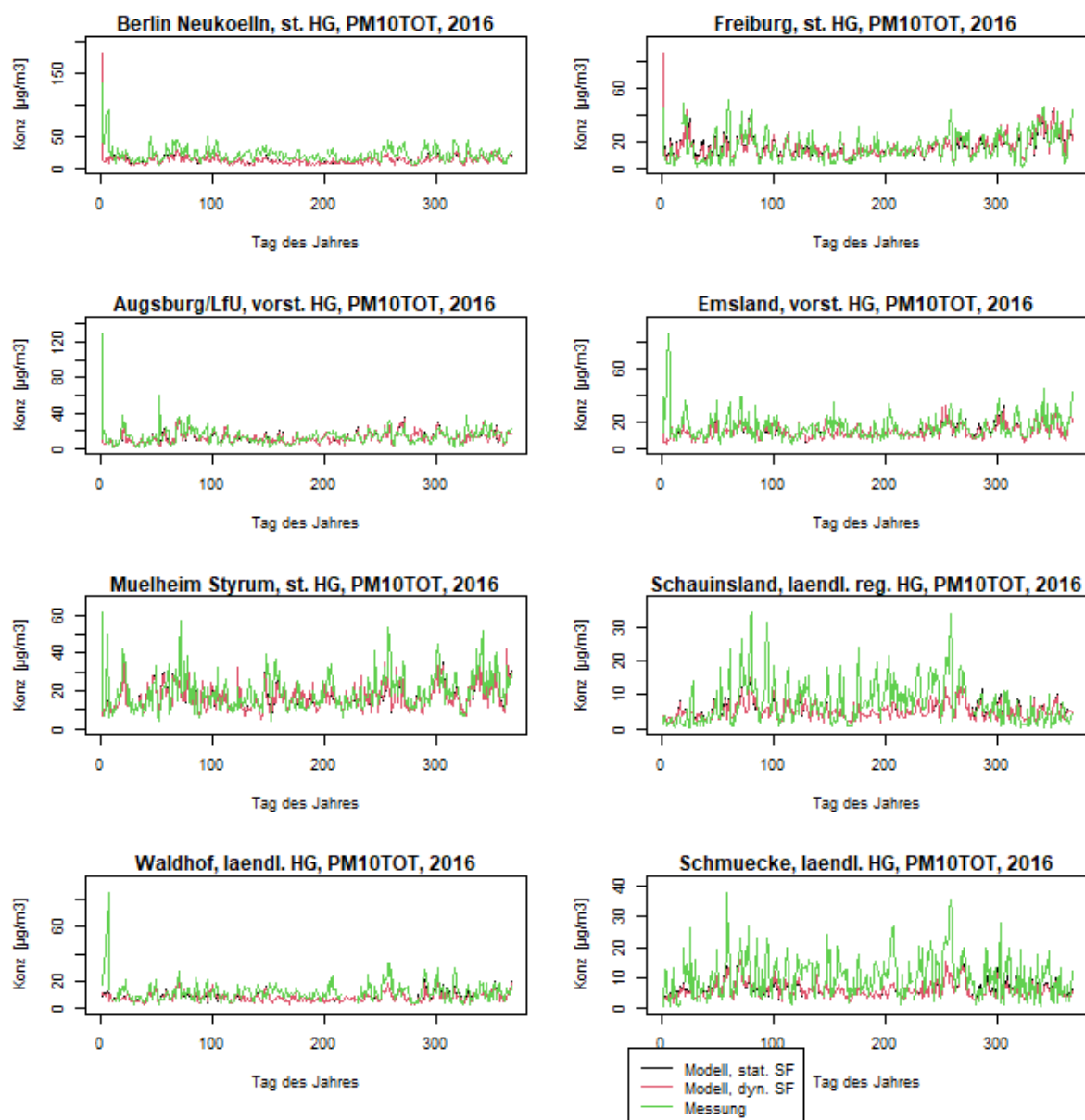


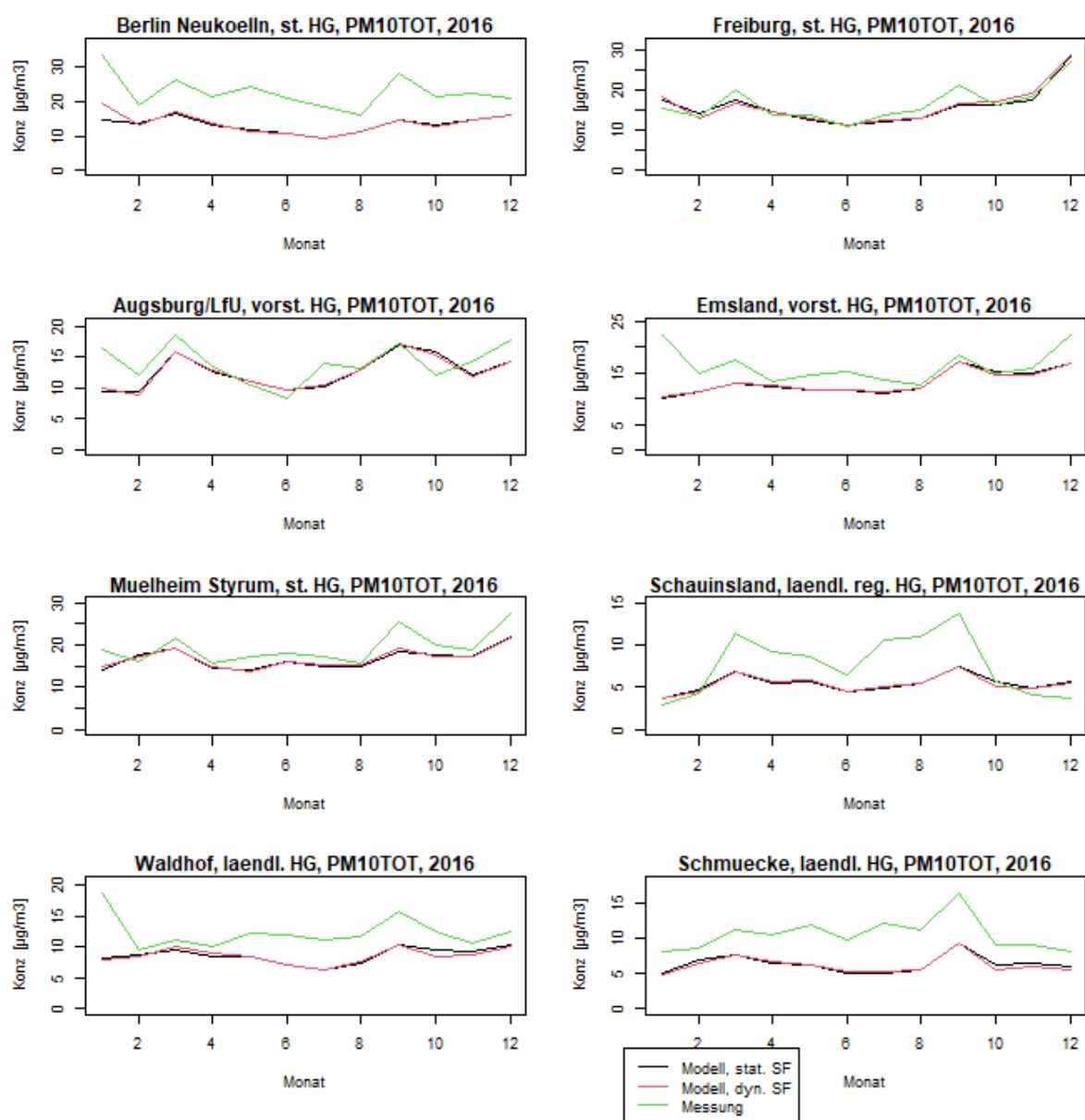


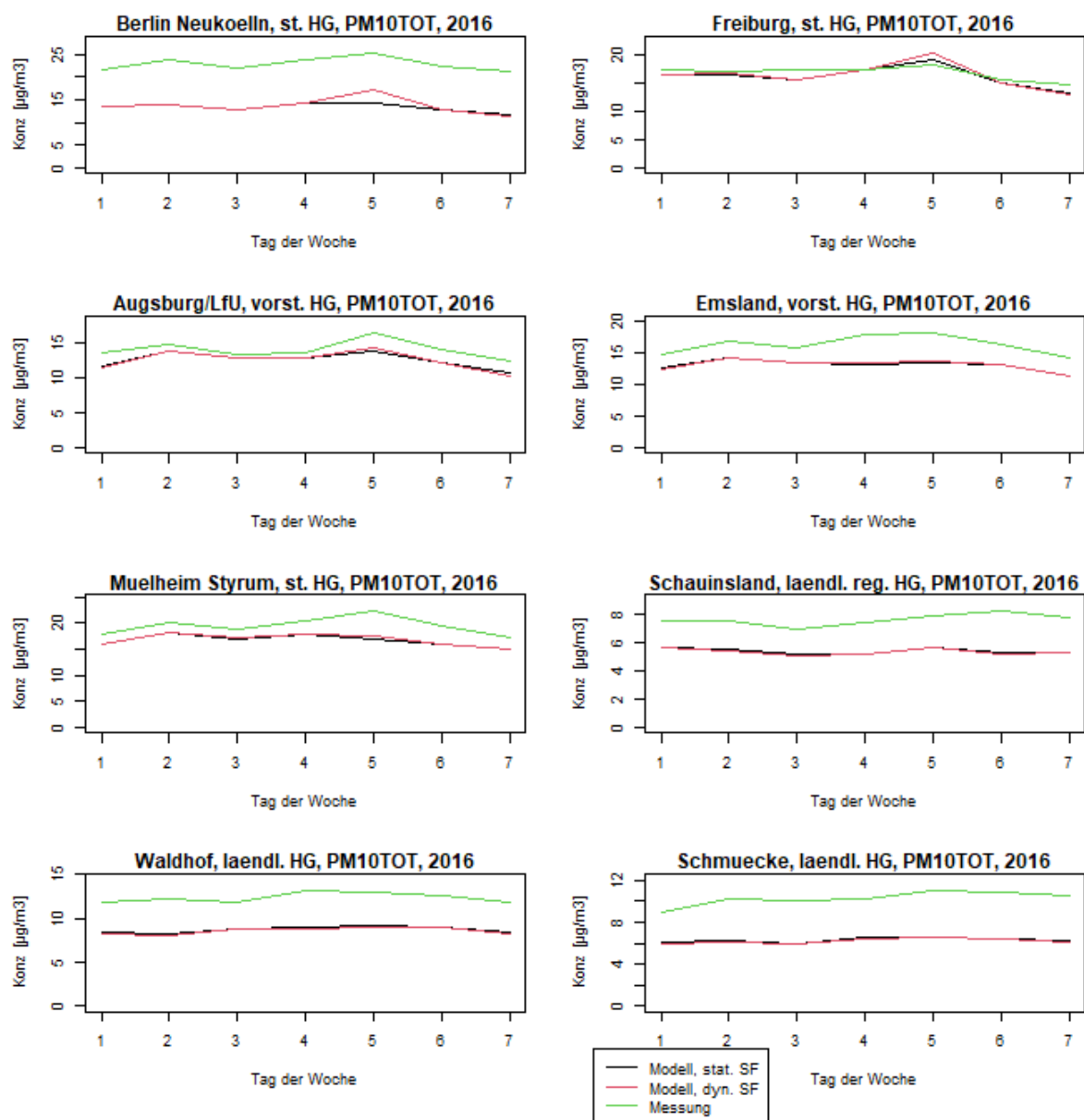


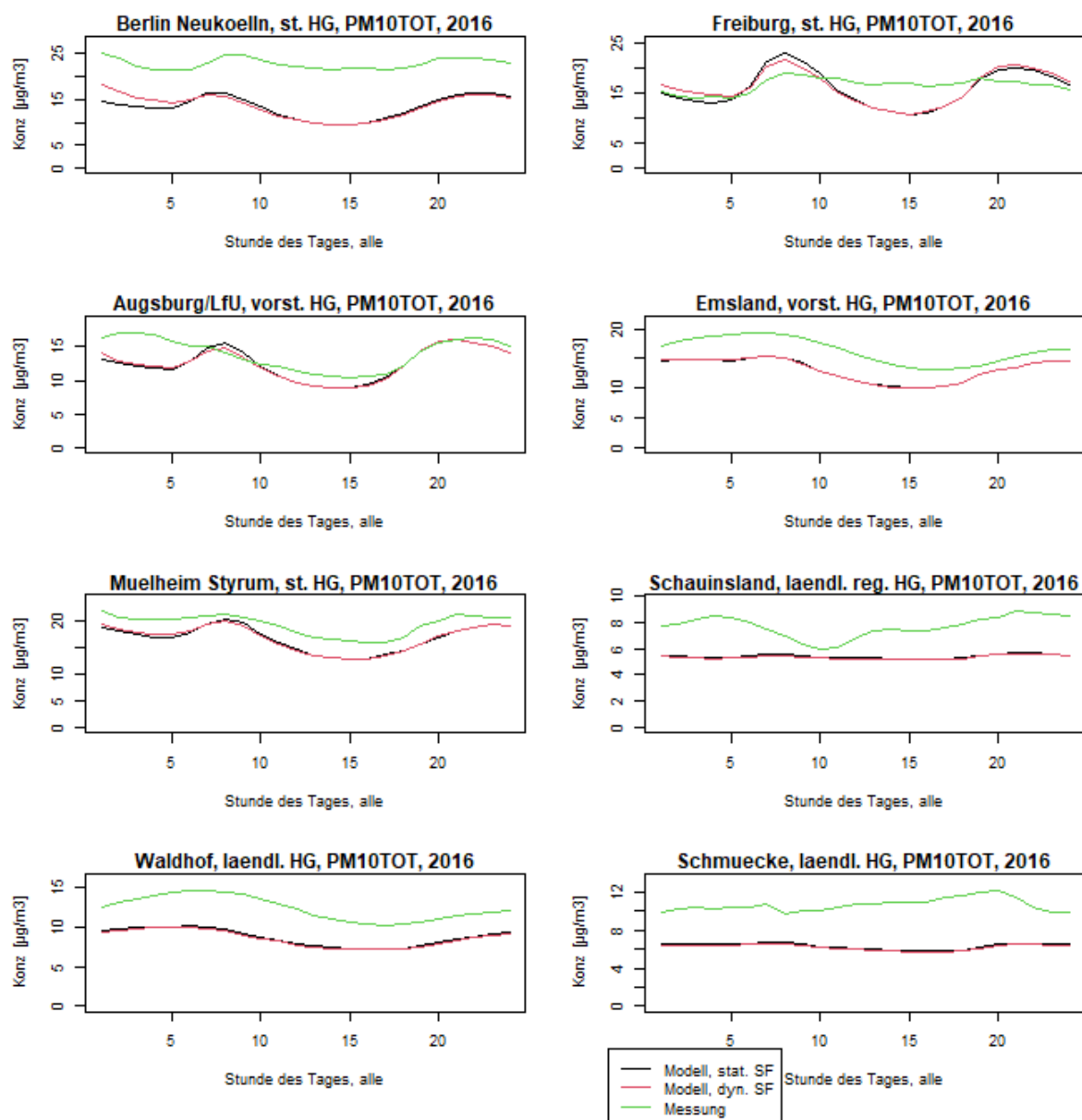
F.4 Zeitreihen PM10

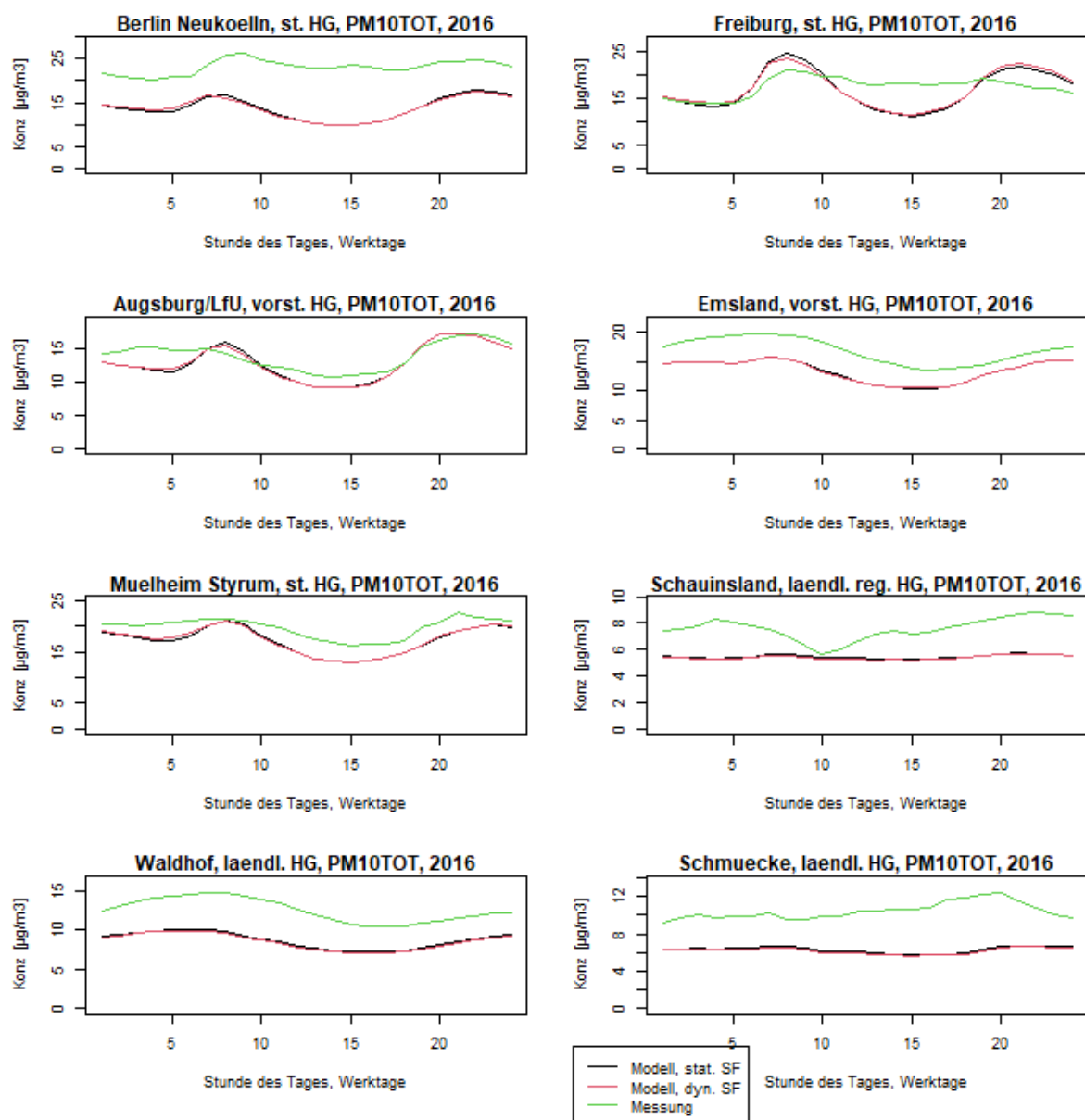


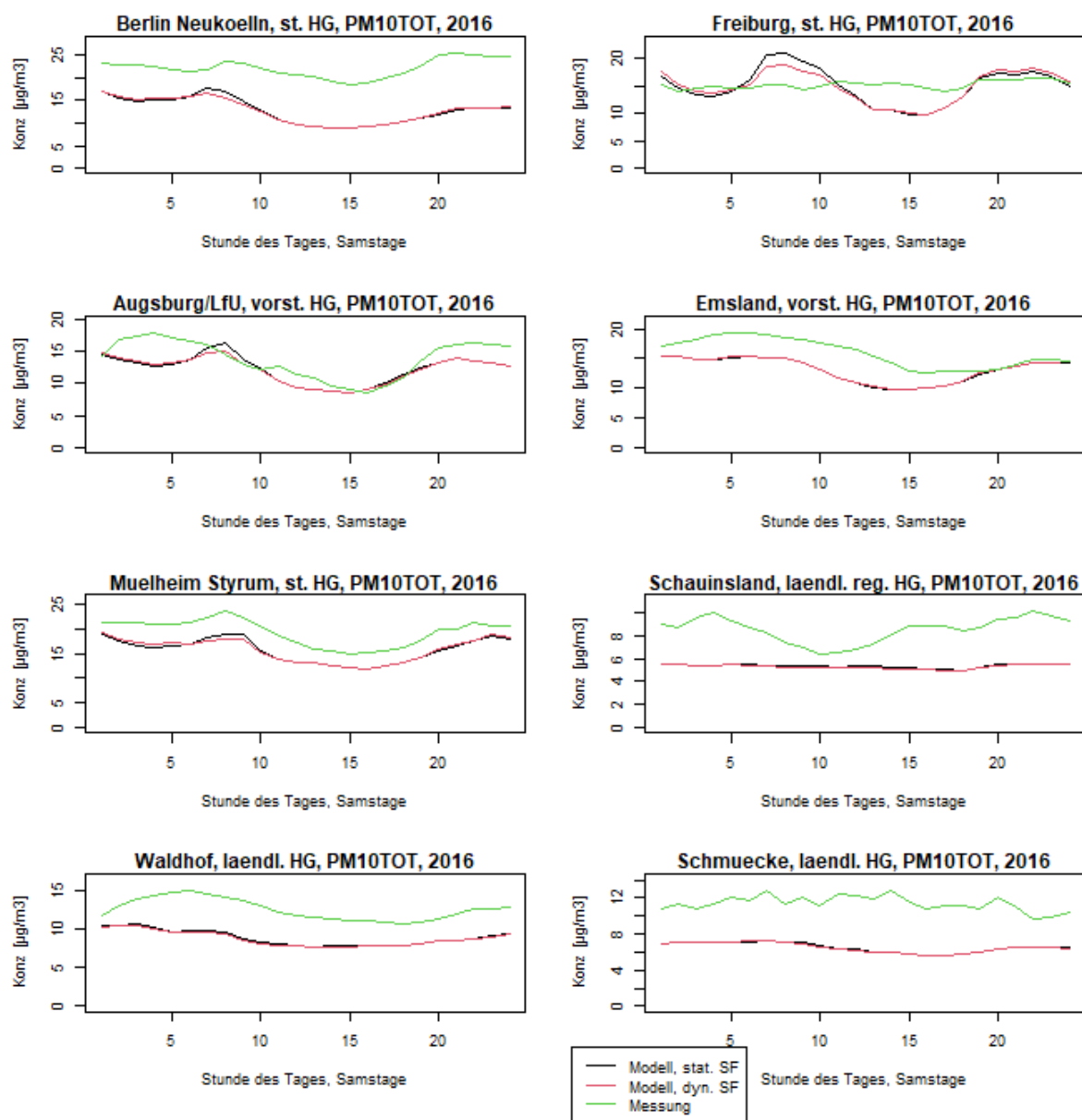


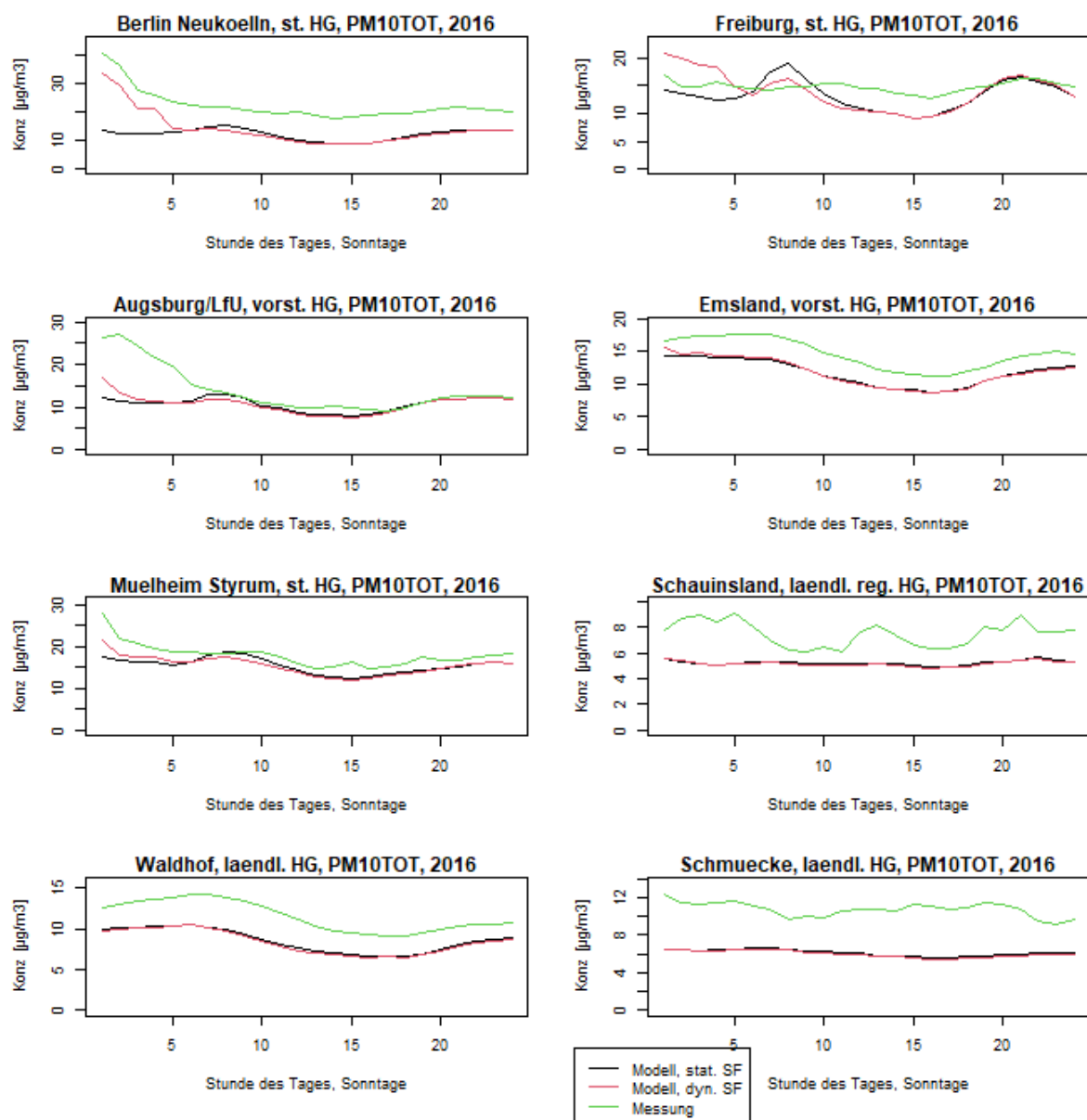












G Korrelationen 2016, Plots









H Evaluierung: Statistische Kenngrößen, Zahlenwerte 2016

H.1 Korrelationen

Es werden jeweils die Quadrate der Pearson'schen Korrelationskoeffizienten der entsprechenden Modellrechnungen und der Messungen angegeben. Diese können interpretiert werden als Anteil der Varianz der gemessenen Zeitreihe, der durch die Modellrechnung erklärt werden kann. Die in den letzten vier Spalten ausgewiesenen Verhältnisse zeigen, wie sich der Anteil der durch das Modell erklärten Varianz durch Einführung der dynamischen SF ändert.

Im Falle von negativen Werten geht dabei das Vorzeichen verloren. Da hier keine Antikorrelationen erwartet werden, werden negative oder sehr kleine Werte, die zu unrealistisch hohen Verhältnissen führen, hier weggelassen, weil sie hier zu Fehlinterpretationen führen würden. In Anhang G werden in Form von Plots die nicht quadrierten Korrelationskoeffizienten im direkten Vergleich gezeigt. Dort sind alle Werte enthalten.

Tabelle 25: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch

| R^2 | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,48 | 0,39 | 0,58 | 0,09 | 0,50 | 0,44 | 0,60 | 0,63 | 1,06 | 1,14 | 1,03 | 7,21 |
| Freiburg | 0,43 | 0,30 | 0,51 | 0,21 | 0,49 | 0,39 | 0,54 | 0,23 | 1,15 | 1,28 | 1,07 | 1,13 |
| Augsburg | 0,27 | 0,12 | 0,47 | 0,09 | 0,33 | 0,15 | 0,49 | 0,26 | 1,23 | 1,29 | 1,04 | 2,83 |
| Emsland | 0,41 | 0,39 | 0,58 | 0,14 | 0,43 | 0,43 | 0,57 | 0,15 | 1,06 | 1,10 | 0,99 | 1,03 |
| Mülheim | 0,43 | 0,24 | 0,58 | 0,23 | 0,49 | 0,31 | 0,61 | 0,32 | 1,13 | 1,28 | 1,04 | 1,37 |
| Schauinsland | 0,04 | 0,02 | 0,31 | 0,19 | 0,04 | 0,02 | 0,30 | 0,21 | 1,05 | 1,13 | 0,97 | 1,11 |
| Waldhof | 0,37 | 0,32 | 0,51 | 0,17 | 0,27 | 0,21 | 0,48 | 0,16 | 0,72 | 0,67 | 0,94 | 0,99 |
| Schmücke | 0,24 | 0,22 | 0,51 | 0,12 | 0,24 | 0,22 | 0,51 | 0,13 | 0,99 | 0,99 | 0,99 | 1,15 |

Tabelle 26: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresgang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch

| R^2 | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,56 | 0,56 | 0,66 | 0,31 | 0,62 | 0,63 | 0,67 | 0,42 | 1,09 | 1,12 | 1,01 | 1,38 |
| Freiburg | 0,72 | 0,58 | 0,67 | 0,46 | 0,77 | 0,66 | 0,70 | 0,47 | 1,08 | 1,12 | 1,05 | 1,01 |
| Augsburg | 0,35 | 0,21 | 0,55 | 0,20 | 0,46 | 0,26 | 0,56 | 0,32 | 1,29 | 1,27 | 1,02 | 1,57 |
| Emsland | 0,55 | 0,58 | 0,64 | 0,14 | 0,61 | 0,65 | 0,63 | 0,15 | 1,11 | 1,11 | 0,98 | 1,07 |
| Mülheim | 0,55 | 0,40 | 0,67 | 0,43 | 0,63 | 0,50 | 0,69 | 0,45 | 1,16 | 1,27 | 1,03 | 1,06 |

| R ² | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Schauinsland | 0,11 | 0,09 | 0,43 | 0,31 | 0,11 | 0,10 | 0,42 | 0,35 | 1,01 | 1,09 | 0,96 | 1,11 |
| Waldhof | 0,51 | 0,44 | 0,58 | 0,18 | 0,34 | 0,27 | 0,54 | 0,18 | 0,65 | 0,60 | 0,93 | 0,99 |
| Schmücke | 0,38 | 0,35 | 0,63 | 0,22 | 0,35 | 0,33 | 0,62 | 0,26 | 0,93 | 0,93 | 0,99 | 1,17 |

Tabelle 27: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R²): Jahresgang
Monatsmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit
Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R² dynamisch zu statisch

| R ² | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,82 | 0,85 | 0,93 | 0,27 | 0,84 | 0,88 | 0,91 | 0,58 | 1,02 | 1,03 | 0,98 | 2,17 |
| Freiburg | 0,95 | 0,98 | 0,90 | 0,80 | 0,96 | 0,98 | 0,91 | 0,79 | 1,01 | 1,00 | 1,01 | 0,98 |
| Augsburg | 0,46 | 0,43 | 0,90 | 0,28 | 0,64 | 0,54 | 0,90 | 0,32 | 1,37 | 1,25 | 1,00 | 1,15 |
| Emsland | 0,70 | 0,79 | 0,94 | 0,11 | 0,84 | 0,86 | 0,89 | 0,13 | 1,19 | 1,09 | 0,95 | 1,21 |
| Mülheim | 0,75 | 0,78 | 0,88 | 0,69 | 0,79 | 0,78 | 0,87 | 0,74 | 1,06 | 1,00 | 0,99 | 1,07 |
| Schauinsland | 0,02 | 0,04 | 0,43 | 0,52 | 0,04 | 0,08 | 0,41 | 0,62 | 2,01 | 1,98 | 0,95 | 1,19 |
| Waldhof | 0,73 | 0,69 | 0,93 | 0,03 | 0,30 | 0,23 | 0,84 | 0,02 | 0,41 | 0,34 | 0,90 | 0,45 |
| Schmücke | 0,82 | 0,81 | 0,89 | 0,40 | 0,66 | 0,63 | 0,88 | 0,52 | 0,80 | 0,78 | 0,99 | 1,29 |

Tabelle 28: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R²): Jahresmittlerer Wochengang
Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit
Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R² dynamisch zu statisch

| R ² | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,77 | 0,67 | 0,44 | 0,69 | 0,94 | 0,93 | 0,78 | 0,85 | 1,22 | 1,38 | 1,79 | 1,22 |
| Freiburg | 0,66 | 0,53 | 0,39 | 0,81 | 0,95 | 0,88 | 0,80 | 0,78 | 1,44 | 1,65 | 2,06 | 0,96 |
| Augsburg | 0,52 | 0,52 | 0,44 | 0,65 | 0,88 | 0,95 | 0,70 | 0,70 | 1,69 | 1,85 | 1,60 | 1,07 |
| Emsland | 0,45 | 0,59 | 0,05 | 0,56 | 0,83 | 0,87 | 0,54 | 0,65 | 1,86 | 1,49 | 10,03 | 1,14 |
| Mülheim | 0,79 | 0,62 | 0,38 | 0,41 | 0,95 | 0,75 | 0,76 | 0,48 | 1,19 | 1,22 | 2,00 | 1,16 |
| Schauinsland | 0,50 | 0,57 | 0,04 | 0,09 | 0,54 | 0,59 | 0,05 | 0,10 | 1,06 | 1,05 | 1,26 | 1,07 |
| Waldhof | 0,53 | 0,38 | | 0,48 | 0,71 | 0,54 | 0,01 | 0,51 | 1,35 | 1,45 | | 1,08 |
| Schmücke | 0,75 | 0,77 | 0,29 | 0,42 | 0,79 | 0,80 | 0,33 | 0,46 | 1,05 | 1,04 | 1,15 | 1,10 |

**Tabelle 29: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresmittlerer Tagesgang
Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit
Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch**

| R^2 | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,97 | 0,93 | 0,86 | 0,46 | 0,93 | 0,86 | 0,93 | 0,42 | 0,96 | 0,92 | 1,08 | 0,90 |
| Freiburg | 0,96 | 0,90 | 0,70 | 0,29 | 0,96 | 0,83 | 0,77 | 0,14 | 1,00 | 0,93 | 1,10 | 0,50 |
| Augsburg | 0,62 | 0,58 | 0,73 | 0,51 | 0,65 | 0,57 | 0,80 | 0,60 | 1,05 | 0,97 | 1,10 | 1,19 |
| Emsland | 0,48 | 0,38 | 0,95 | 0,75 | 0,45 | 0,36 | 0,96 | 0,74 | 0,93 | 0,94 | 1,02 | 0,99 |
| Mülheim | 0,82 | 0,52 | 0,82 | 0,90 | 0,96 | 0,65 | 0,89 | 0,94 | 1,16 | 1,24 | 1,09 | 1,04 |
| Schauinsland | 0,06 | 0,01 | 0,25 | 0,16 | 0,11 | 0,04 | 0,25 | 0,29 | 2,07 | 4,93 | 1,01 | 1,77 |
| Waldhof | 0,58 | 0,21 | 0,92 | 0,78 | 0,67 | 0,31 | 0,92 | 0,76 | 1,16 | 1,44 | 1,00 | 0,98 |
| Schmücke | 0,86 | 0,76 | 0,66 | | 0,88 | 0,79 | 0,66 | | 1,03 | 1,05 | 1,01 | |

**Tabelle 30: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresmittlerer Tagesgang
Werktag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF)
mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch**

| R^2 | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,96 | 0,80 | 0,83 | 0,13 | 0,92 | 0,81 | 0,92 | 0,07 | 0,95 | 1,02 | 1,11 | 0,53 |
| Freiburg | 0,95 | 0,92 | 0,69 | 0,26 | 0,95 | 0,87 | 0,76 | 0,19 | 0,99 | 0,95 | 1,11 | 0,74 |
| Augsburg | 0,76 | 0,71 | 0,72 | 0,76 | 0,74 | 0,70 | 0,80 | 0,80 | 0,97 | 0,98 | 1,10 | 1,06 |
| Emsland | 0,56 | 0,42 | 0,94 | 0,73 | 0,40 | 0,43 | 0,97 | 0,72 | 0,73 | 1,01 | 1,02 | 0,98 |
| Mülheim | 0,86 | 0,64 | 0,80 | 0,88 | 0,94 | 0,71 | 0,89 | 0,90 | 1,10 | 1,12 | 1,11 | 1,02 |
| Schauinsland | 0,06 | 0,01 | 0,16 | 0,19 | 0,07 | 0,02 | 0,17 | 0,30 | 1,08 | 1,55 | 1,05 | 1,55 |
| Waldhof | 0,67 | 0,28 | 0,93 | 0,76 | 0,69 | 0,34 | 0,93 | 0,74 | 1,04 | 1,22 | 1,00 | 0,97 |
| Schmücke | 0,91 | 0,85 | 0,81 | | 0,91 | 0,88 | 0,82 | | 0,99 | 1,03 | 1,01 | |

**Tabelle 31: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Jahresmittlerer Tagesgang
Samstag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit
Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch**

| R^2 | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,43 | 0,29 | 0,94 | 0,31 | 0,85 | 0,72 | 0,98 | 0,34 | 1,98 | 2,47 | 1,04 | 1,12 |
| Freiburg | 0,62 | 0,45 | 0,74 | 0,07 | 0,78 | 0,51 | 0,83 | 0,15 | 1,24 | 1,14 | 1,12 | 2,27 |
| Augsburg | 0,24 | 0,23 | 0,75 | 0,61 | 0,40 | 0,29 | 0,82 | | 1,65 | 1,25 | 1,09 | |

| R ² | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Emsland | 0,34 | 0,28 | 0,87 | 0,49 | 0,71 | 0,62 | 0,89 | 0,48 | 2,07 | 2,23 | 1,02 | 0,99 |
| Mülheim | 0,59 | 0,39 | 0,81 | 0,90 | 0,89 | 0,63 | 0,83 | 0,87 | 1,51 | 1,63 | 1,02 | 0,96 |
| Schauinsland | 0,00 | | 0,23 | 0,06 | 0,08 | 0,04 | 0,20 | 0,17 | | | 0,84 | 3,01 |
| Waldhof | 0,56 | 0,31 | 0,84 | 0,56 | 0,70 | 0,42 | 0,85 | 0,51 | 1,26 | 1,36 | 1,01 | 0,92 |
| Schmücke | 0,00 | | 0,19 | | 0,08 | | 0,21 | | | | 1,09 | 1,63 |

Tabelle 32: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R²): Jahresmittlerer Tagesgang Sonn- und Feiertag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R² dynamisch zu statisch

| R ² | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,43 | 0,38 | 0,77 | 0,11 | 0,92 | 0,91 | 0,85 | 0,96 | 2,12 | 2,40 | 1,11 | 8,86 |
| Freiburg | 0,43 | 0,16 | 0,69 | 0,29 | 0,67 | 0,13 | 0,64 | 0,53 | 1,56 | 0,79 | 0,92 | 1,81 |
| Augsburg | 0,09 | | 0,68 | 0,18 | 0,33 | | 0,76 | 0,53 | 3,59 | | 1,11 | 2,95 |
| Emsland | 0,32 | 0,09 | 0,96 | 0,94 | 0,75 | 0,39 | 0,96 | 0,91 | 2,35 | 4,17 | 1,00 | 0,97 |
| Mülheim | 0,33 | 0,02 | 0,79 | 0,44 | 0,88 | 0,35 | 0,86 | 0,84 | 2,67 | 22,93 | 1,10 | 1,90 |
| Schauinsland | 0,08 | 0,06 | 0,15 | 0,17 | 0,57 | 0,32 | 0,16 | 0,26 | 7,34 | 5,65 | 1,06 | 1,58 |
| Waldhof | 0,36 | 0,13 | 0,90 | 0,87 | 0,59 | 0,35 | 0,90 | 0,87 | 1,67 | 2,65 | 1,00 | 1,00 |
| Schmücke | 0,12 | | 0,33 | | 0,30 | 0,02 | 0,29 | 0,02 | 2,60 | | 0,87 | |

Tabelle 33: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R²): Mittlerer Tagesgang Frühling Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R² dynamisch zu statisch

| R ² | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,95 | 0,85 | 0,88 | 0,48 | 0,96 | 0,88 | 0,92 | 0,39 | 1,01 | 1,03 | 1,04 | 0,82 |
| Freiburg | 0,95 | 0,77 | 0,77 | 0,23 | 0,96 | 0,76 | 0,82 | 0,15 | 1,01 | 0,98 | 1,06 | 0,66 |
| Augsburg | 0,61 | 0,55 | 0,78 | 0,61 | 0,74 | 0,66 | 0,84 | 0,65 | 1,21 | 1,20 | 1,08 | 1,06 |
| Emsland | 0,50 | 0,34 | 0,97 | 0,92 | 0,81 | 0,66 | 0,97 | 0,91 | 1,60 | 1,94 | 1,00 | 0,99 |
| Mülheim | 0,77 | 0,42 | 0,87 | 0,81 | 0,91 | 0,66 | 0,90 | 0,81 | 1,18 | 1,55 | 1,03 | 0,99 |
| Schauinsland | 0,00 | | 0,17 | 0,21 | 0,00 | | 0,18 | 0,33 | 0,41 | | 1,06 | 1,56 |
| Waldhof | 0,71 | 0,50 | 0,91 | 0,82 | 0,72 | 0,48 | 0,91 | 0,80 | 1,00 | 0,96 | 0,99 | 0,97 |
| Schmücke | 0,89 | 0,69 | 0,73 | | 0,94 | 0,79 | 0,73 | | 1,05 | 1,15 | 1,00 | |

**Tabelle 34: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Mittlerer Tagesgang Sommer
Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit
Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch**

| R^2 | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,96 | 0,95 | 0,93 | 0,25 | 0,82 | 0,79 | 0,96 | 0,18 | 0,86 | 0,83 | 1,03 | 0,72 |
| Freiburg | 0,89 | 0,88 | 0,81 | 0,18 | 0,85 | 0,85 | 0,85 | 0,10 | 0,95 | 0,97 | 1,05 | 0,57 |
| Augsburg | 0,40 | 0,36 | 0,77 | 0,48 | 0,54 | 0,54 | 0,84 | 0,55 | 1,34 | 1,49 | 1,09 | 1,14 |
| Emsland | 0,46 | 0,36 | 0,94 | 0,70 | 0,60 | 0,55 | 0,96 | 0,68 | 1,29 | 1,50 | 1,01 | 0,97 |
| Mülheim | 0,85 | 0,63 | 0,92 | 0,92 | 0,95 | 0,87 | 0,95 | 0,94 | 1,12 | 1,38 | 1,03 | 1,01 |
| Schauinsland | | | 0,46 | 0,01 | | | 0,48 | 0,02 | | | 1,03 | 3,14 |
| Waldhof | 0,95 | 0,92 | 0,98 | 0,96 | 0,96 | 0,96 | 0,98 | 0,95 | 1,01 | 1,04 | 1,00 | 1,00 |
| Schmücke | 0,78 | 0,49 | 0,67 | | 0,83 | 0,53 | 0,66 | | 1,07 | 1,06 | 0,99 | |

**Tabelle 35: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Mittlerer Tagesgang Herbst
Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit
Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch**

| R^2 | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,95 | 0,95 | 0,89 | 0,22 | 0,91 | 0,87 | 0,94 | 0,19 | 0,96 | 0,91 | 1,06 | 0,87 |
| Freiburg | 0,91 | 0,77 | 0,71 | 0,31 | 0,95 | 0,78 | 0,80 | 0,21 | 1,04 | 1,02 | 1,12 | 0,69 |
| Augsburg | 0,89 | 0,72 | 0,77 | 0,86 | 0,87 | 0,69 | 0,83 | 0,89 | 0,98 | 0,96 | 1,08 | 1,03 |
| Emsland | 0,82 | 0,71 | 0,97 | 0,62 | 0,33 | 0,40 | 0,99 | 0,61 | 0,41 | 0,57 | 1,02 | 0,97 |
| Mülheim | 0,90 | 0,59 | 0,80 | 0,81 | 0,97 | 0,70 | 0,89 | 0,84 | 1,07 | 1,19 | 1,12 | 1,04 |
| Schauinsland | 0,00 | | | 0,04 | 0,00 | | | 0,10 | 3,43 | | | 2,41 |
| Waldhof | 0,56 | 0,07 | 0,87 | 0,85 | 0,51 | 0,11 | 0,88 | 0,83 | 0,92 | 1,69 | 1,01 | 0,98 |
| Schmücke | 0,79 | 0,58 | 0,44 | 0,09 | 0,82 | 0,65 | 0,45 | 0,09 | 1,03 | 1,13 | 1,04 | 0,94 |

**Tabelle 36: Quadrat des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (R^2): Mittlerer Tagesgang Winter
Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit
Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse R^2 dynamisch zu statisch**

| R^2 | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,97 | 0,87 | 0,61 | | 0,95 | 0,83 | 0,58 | 0,79 | 0,98 | 0,96 | 0,95 | |
| Freiburg | 0,89 | 0,55 | 0,51 | 0,25 | 0,87 | 0,36 | 0,49 | 0,32 | 0,98 | 0,66 | 0,95 | 1,28 |
| Augsburg | 0,64 | 0,50 | 0,48 | 0,00 | 0,57 | 0,30 | 0,48 | 0,04 | 0,90 | 0,60 | 1,01 | |

| R ² | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|
| Emsland | 0,48 | 0,46 | 0,77 | 0,61 | 0,37 | 0,33 | 0,79 | 0,65 | 0,78 | 0,72 | 1,02 | 1,08 |
| Mülheim | 0,83 | 0,40 | 0,58 | 0,46 | 0,84 | 0,35 | 0,62 | 0,70 | 1,02 | 0,87 | 1,07 | 1,53 |
| Schauinsland | 0,39 | 0,08 | | 0,18 | 0,46 | 0,08 | 0,00 | 0,24 | 1,19 | 0,97 | | 1,36 |
| Waldhof | 0,24 | 0,26 | 0,60 | 0,03 | 0,22 | 0,22 | 0,60 | 0,04 | 0,91 | 0,82 | 1,00 | 1,11 |
| Schmücke | 0,65 | 0,74 | 0,53 | 0,23 | 0,66 | 0,77 | 0,54 | 0,23 | 1,01 | 1,04 | 1,02 | 1,02 |

H.2 Bias

Es werden jeweils die Werte für den Bias der entsprechenden Modellrechnungen ggü. den Messungen ausgewiesen. Um die Vergleichbarkeit zu erleichtern, wurden alle Werte mit den entsprechenden Messwerten normiert.

Da der Bias grundsätzlich vorzeichenbehaftet ist, werden hier keine Verhältnisse angegeben.

Tabelle 37: Bias: Jahresgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,149 | -0,260 | 0,325 | -0,414 | -0,154 | -0,257 | 0,327 | -0,400 |
| Freiburg | 0,289 | 0,059 | 0,211 | -0,040 | 0,287 | 0,072 | 0,212 | -0,025 |
| Augsburg | -0,039 | -0,257 | 0,362 | -0,102 | -0,062 | -0,272 | 0,364 | -0,104 |
| Emsland | -0,329 | -0,460 | 0,415 | -0,198 | -0,329 | -0,458 | 0,412 | -0,198 |
| Mülheim | 0,180 | -0,149 | 0,320 | -0,137 | 0,201 | -0,119 | 0,312 | -0,135 |
| Schauinsland | 0,283 | 0,618 | 0,039 | -0,289 | 0,311 | 0,654 | 0,037 | -0,295 |
| Waldhof | -0,376 | -0,437 | 0,360 | -0,291 | -0,376 | -0,435 | 0,358 | -0,302 |
| Schmücke | -0,333 | -0,371 | 0,248 | -0,391 | -0,326 | -0,364 | 0,246 | -0,401 |

Tabelle 38: Bias: Jahresgang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|----------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,149 | -0,260 | 0,326 | -0,414 | -0,154 | -0,256 | 0,328 | -0,400 |
| Freiburg | 0,282 | -0,033 | 0,212 | -0,038 | 0,282 | -0,018 | 0,211 | -0,025 |
| Augsburg | -0,041 | -0,258 | 0,363 | -0,105 | -0,063 | -0,272 | 0,365 | -0,107 |
| Emsland | -0,330 | -0,462 | 0,410 | -0,199 | -0,331 | -0,460 | 0,408 | -0,198 |
| Mülheim | 0,175 | -0,151 | 0,304 | -0,139 | 0,196 | -0,125 | 0,293 | -0,136 |

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Schauinsland | 0,278 | 0,143 | 0,040 | -0,292 | 0,304 | 0,166 | 0,038 | -0,299 |
| Waldhof | -0,378 | -0,438 | 0,356 | -0,290 | -0,379 | -0,436 | 0,353 | -0,301 |
| Schmücke | -0,334 | -0,379 | 0,249 | -0,386 | -0,327 | -0,371 | 0,246 | -0,397 |

Tabelle 39: Bias: Jahresgang Monatsmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,149 | -0,260 | 0,326 | -0,413 | -0,154 | -0,256 | 0,327 | -0,400 |
| Freiburg | 0,282 | -0,071 | 0,211 | -0,039 | 0,282 | -0,057 | 0,210 | -0,026 |
| Augsburg | -0,045 | -0,259 | 0,363 | -0,103 | -0,066 | -0,274 | 0,365 | -0,105 |
| Emsland | -0,331 | -0,463 | 0,408 | -0,198 | -0,331 | -0,460 | 0,406 | -0,198 |
| Mülheim | 0,173 | -0,177 | 0,296 | -0,136 | 0,194 | -0,151 | 0,286 | -0,134 |
| Schauinsland | 0,290 | 0,109 | 0,044 | -0,293 | 0,304 | 0,121 | 0,042 | -0,301 |
| Waldhof | -0,375 | -0,435 | 0,354 | -0,295 | -0,376 | -0,434 | 0,351 | -0,306 |
| Schmücke | -0,334 | -0,380 | 0,249 | -0,400 | -0,327 | -0,373 | 0,246 | -0,411 |

Tabelle 40: Bias: Jahresmittlerer Wochengang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,149 | -0,260 | 0,326 | -0,414 | -0,153 | -0,256 | 0,328 | -0,401 |
| Freiburg | 0,282 | -0,033 | 0,213 | -0,038 | 0,282 | -0,019 | 0,211 | -0,025 |
| Augsburg | -0,043 | -0,260 | 0,363 | -0,104 | -0,065 | -0,274 | 0,364 | -0,106 |
| Emsland | -0,330 | -0,463 | 0,410 | -0,199 | -0,330 | -0,460 | 0,408 | -0,198 |
| Mülheim | 0,175 | -0,151 | 0,304 | -0,138 | 0,196 | -0,125 | 0,293 | -0,136 |
| Schauinsland | 0,267 | 0,133 | 0,039 | -0,291 | 0,281 | 0,145 | 0,037 | -0,299 |
| Waldhof | -0,378 | -0,438 | 0,357 | -0,295 | -0,379 | -0,436 | 0,355 | -0,305 |
| Schmücke | -0,334 | -0,378 | 0,249 | -0,387 | -0,327 | -0,371 | 0,246 | -0,397 |

Tabelle 41: Bias: Jahresmittlerer Tagesgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,148 | -0,261 | 0,324 | -0,414 | -0,153 | -0,257 | 0,326 | -0,401 |
| Freiburg | 0,285 | -0,096 | 0,222 | -0,040 | 0,285 | -0,083 | 0,220 | -0,027 |
| Augsburg | -0,043 | -0,260 | 0,361 | -0,103 | -0,065 | -0,274 | 0,363 | -0,105 |
| Emsland | -0,333 | -0,462 | 0,420 | -0,199 | -0,333 | -0,460 | 0,418 | -0,198 |
| Mülheim | 0,174 | -0,207 | 0,304 | -0,137 | 0,195 | -0,183 | 0,294 | -0,135 |
| Schauinsland | 0,276 | 0,152 | 0,037 | -0,299 | 0,290 | 0,165 | 0,035 | -0,306 |
| Waldhof | -0,376 | -0,437 | 0,363 | -0,296 | -0,377 | -0,436 | 0,361 | -0,307 |
| Schmücke | -0,333 | -0,384 | 0,248 | -0,406 | -0,326 | -0,377 | 0,245 | -0,416 |

Tabelle 42: Bias: Jahresmittlerer Tagesgang Werktag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,182 | -0,307 | 0,365 | -0,403 | -0,143 | -0,254 | 0,343 | -0,404 |
| Freiburg | 0,229 | -0,134 | 0,252 | -0,031 | 0,290 | -0,062 | 0,230 | -0,022 |
| Augsburg | -0,082 | -0,311 | 0,374 | -0,069 | -0,047 | -0,275 | 0,360 | -0,070 |
| Emsland | -0,370 | -0,497 | 0,467 | -0,204 | -0,338 | -0,467 | 0,454 | -0,204 |
| Mülheim | 0,093 | -0,251 | 0,380 | -0,126 | 0,150 | -0,193 | 0,344 | -0,123 |
| Schauinsland | 0,277 | 0,155 | 0,045 | -0,281 | 0,344 | 0,218 | 0,042 | -0,289 |
| Waldhof | -0,397 | -0,453 | 0,373 | -0,306 | -0,379 | -0,435 | 0,368 | -0,317 |
| Schmücke | -0,369 | -0,421 | 0,263 | -0,395 | -0,344 | -0,397 | 0,259 | -0,407 |

Tabelle 43: Bias: Jahresmittlerer Tagesgang Samstag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|----------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,117 | -0,186 | 0,273 | -0,420 | -0,178 | -0,253 | 0,296 | -0,421 |
| Freiburg | 0,377 | 0,027 | 0,170 | -0,012 | 0,300 | -0,062 | 0,188 | -0,020 |
| Augsburg | -0,049 | -0,177 | 0,364 | -0,110 | -0,146 | -0,274 | 0,385 | -0,118 |

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Emsland | -0,272 | -0,407 | 0,399 | -0,175 | -0,332 | -0,457 | 0,413 | -0,174 |
| Mülheim | 0,270 | -0,154 | 0,282 | -0,190 | 0,246 | -0,174 | 0,291 | -0,187 |
| Schauinsland | 0,060 | -0,017 | 0,005 | -0,374 | 0,038 | -0,042 | 0,003 | -0,380 |
| Waldhof | -0,394 | -0,456 | 0,391 | -0,293 | -0,409 | -0,467 | 0,390 | -0,300 |
| Schmücke | -0,334 | -0,378 | 0,210 | -0,426 | -0,349 | -0,391 | 0,209 | -0,427 |

Tabelle 44: Bias: Jahresmittlerer Tagesgang Sonn- und Feiertag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | 0,004 | -0,048 | 0,227 | -0,457 | -0,190 | -0,281 | 0,290 | -0,371 |
| Freiburg | 0,513 | 0,074 | 0,160 | -0,102 | 0,233 | -0,177 | 0,213 | -0,050 |
| Augsburg | 0,181 | -0,017 | 0,311 | -0,234 | -0,088 | -0,271 | 0,359 | -0,235 |
| Emsland | -0,183 | -0,309 | 0,274 | -0,197 | -0,305 | -0,422 | 0,297 | -0,192 |
| Mülheim | 0,601 | 0,056 | 0,098 | -0,139 | 0,430 | -0,086 | 0,151 | -0,141 |
| Schauinsland | 0,539 | 0,375 | 0,032 | -0,302 | 0,294 | 0,146 | 0,033 | -0,309 |
| Waldhof | -0,262 | -0,345 | 0,307 | -0,258 | -0,337 | -0,411 | 0,312 | -0,271 |
| Schmücke | -0,121 | -0,176 | 0,224 | -0,429 | -0,200 | -0,250 | 0,224 | -0,442 |

Tabelle 45: Bias: Mittlerer Tagesgang Frühling Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,168 | -0,219 | 0,095 | -0,425 | -0,143 | -0,189 | 0,083 | -0,422 |
| Freiburg | 0,287 | -0,007 | 0,170 | -0,064 | 0,266 | -0,026 | 0,175 | -0,076 |
| Augsburg | 0,031 | -0,013 | 0,240 | -0,073 | 0,109 | 0,057 | 0,218 | -0,063 |
| Emsland | -0,417 | -0,484 | 0,205 | -0,187 | -0,282 | -0,373 | 0,174 | -0,175 |
| Mülheim | 0,191 | -0,063 | 0,130 | -0,130 | 0,219 | -0,031 | 0,119 | -0,131 |
| Schauinsland | -0,149 | -0,237 | 0,076 | -0,388 | -0,059 | -0,152 | 0,073 | -0,376 |
| Waldhof | -0,297 | -0,344 | 0,128 | -0,211 | 0,114 | 0,055 | 0,096 | -0,187 |
| Schmücke | -0,215 | -0,277 | 0,164 | -0,399 | -0,086 | -0,155 | 0,157 | -0,384 |

Tabelle 46: Bias: Mittlerer Tagesgang Sommer Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,161 | -0,204 | 0,169 | -0,439 | -0,266 | -0,313 | 0,197 | -0,439 |
| Freiburg | 0,394 | 0,447 | 0,091 | -0,083 | 0,260 | 0,270 | 0,107 | -0,079 |
| Augsburg | 0,085 | 0,108 | 0,098 | -0,065 | -0,053 | -0,043 | 0,110 | -0,066 |
| Emsland | -0,229 | -0,299 | 0,323 | -0,162 | -0,274 | -0,344 | 0,328 | -0,155 |
| Mülheim | 0,355 | 0,107 | 0,253 | -0,097 | 0,341 | 0,083 | 0,252 | -0,084 |
| Schauinsland | 0,609 | 0,606 | -0,029 | -0,480 | 0,452 | 0,440 | -0,031 | -0,479 |
| Waldhof | -0,344 | -0,391 | 0,273 | -0,394 | -0,371 | -0,417 | 0,273 | -0,392 |
| Schmücke | -0,007 | -0,088 | 0,144 | -0,523 | -0,023 | -0,102 | 0,141 | -0,518 |

Tabelle 47: Bias: Mittlerer Tagesgang Herbst Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,139 | -0,326 | 0,683 | -0,406 | -0,135 | -0,311 | 0,674 | -0,405 |
| Freiburg | 0,258 | -0,068 | 0,422 | -0,103 | 0,304 | -0,009 | 0,391 | -0,050 |
| Augsburg | 0,068 | -0,311 | 0,617 | 0,034 | -0,025 | -0,370 | 0,652 | 0,021 |
| Emsland | -0,225 | -0,415 | 0,733 | -0,040 | -0,328 | -0,484 | 0,781 | -0,059 |
| Mülheim | 0,096 | -0,278 | 0,747 | -0,171 | 0,112 | -0,258 | 0,729 | -0,165 |
| Schauinsland | 0,298 | 0,132 | 0,039 | -0,220 | 0,203 | 0,045 | 0,040 | -0,246 |
| Waldhof | -0,240 | -0,309 | 0,607 | -0,247 | -0,474 | -0,527 | 0,646 | -0,287 |
| Schmücke | -0,358 | -0,408 | 0,342 | -0,383 | -0,406 | -0,453 | 0,343 | -0,416 |

Tabelle 48: Bias: Mittlerer Tagesgang Winter Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|----------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Berlin | -0,130 | -0,260 | 0,796 | -0,389 | -0,102 | -0,224 | 0,777 | -0,343 |
| Freiburg | 0,254 | -0,318 | 0,337 | 0,070 | 0,296 | -0,274 | 0,324 | 0,073 |

| Bias | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|
| Augsburg | -0,260 | -0,477 | 0,850 | -0,288 | -0,230 | -0,445 | 0,837 | -0,291 |
| Emsland | -0,416 | -0,558 | 0,671 | -0,361 | -0,397 | -0,539 | 0,662 | -0,358 |
| Mülheim | 0,127 | -0,304 | 0,369 | -0,140 | 0,168 | -0,258 | 0,347 | -0,146 |
| Schauinsland | 0,728 | 0,395 | 0,080 | 0,298 | 0,871 | 0,517 | 0,076 | 0,255 |
| Waldhof | -0,508 | -0,570 | 0,632 | -0,325 | -0,518 | -0,579 | 0,635 | -0,348 |
| Schmücke | -0,465 | -0,500 | 0,414 | -0,289 | -0,469 | -0,504 | 0,414 | -0,322 |

H.3 Root Mean Square Error

Es werden jeweils die Werte für RMSE der entsprechenden Modellrechnungen und der Messungen ausgewiesen. Um die Vergleichbarkeit zu erleichtern, wurden alle Werte mit den entsprechenden Messwerten normiert.

Tabelle 49: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|
| Berlin | 0,53 | 0,76 | 0,59 | 0,94 | 0,52 | 0,74 | 0,58 | 0,70 | 0,98 | 0,97 | 0,99 | 0,75 |
| Freiburg | 0,92 | 1,20 | 0,54 | 0,75 | 0,90 | 1,13 | 0,52 | 0,81 | 0,98 | 0,95 | 0,97 | 1,07 |
| Augsburg | 0,82 | 1,36 | 0,62 | 1,09 | 0,76 | 1,33 | 0,61 | 0,96 | 0,93 | 0,98 | 0,99 | 0,88 |
| Emsland | 0,63 | 1,04 | 0,60 | 0,68 | 0,62 | 1,02 | 0,60 | 0,68 | 0,98 | 0,98 | 1,00 | 1,00 |
| Mülheim | 0,61 | 1,11 | 0,62 | 0,63 | 0,60 | 1,06 | 0,60 | 0,59 | 0,98 | 0,95 | 0,97 | 0,94 |
| Schauinsland | 1,71 | 2,34 | 0,22 | 0,98 | 1,82 | 2,47 | 0,22 | 0,97 | 1,06 | 1,06 | 1,00 | 0,99 |
| Waldhof | 0,84 | 0,99 | 0,55 | 0,72 | 0,89 | 1,03 | 0,55 | 0,73 | 1,06 | 1,04 | 1,01 | 1,01 |
| Schmücke | 0,99 | 1,04 | 0,37 | 0,90 | 0,98 | 1,03 | 0,36 | 0,90 | 1,00 | 1,00 | 1,00 | 1,00 |

Tabelle 50: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresgang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|------------------------|
| Berlin | 0,31 | 0,47 | 0,48 | 0,63 | 0,32 | 0,45 | 0,47 | 0,59 | 1,04 | 0,94 | 0,99 | 0,94 |
| Freiburg | 0,45 | 0,68 | 0,38 | 0,45 | 0,48 | 0,60 | 0,37 | 0,46 | 1,05 | 0,89 | 0,96 | 1,01 |
| Augsburg | 0,44 | 1,02 | 0,48 | 0,63 | 0,42 | 1,00 | 0,48 | 0,57 | 0,94 | 0,97 | 1,00 | 0,92 |
| Emsland | 0,49 | 0,79 | 0,51 | 0,56 | 0,47 | 0,77 | 0,51 | 0,56 | 0,96 | 0,97 | 1,00 | 0,99 |

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Mülheim | 0,38 | 0,80 | 0,46 | 0,39 | 0,38 | 0,73 | 0,44 | 0,38 | 0,98 | 0,91 | 0,97 | 0,98 |
| Schauinsland | 1,03 | 1,01 | 0,18 | 0,74 | 1,11 | 1,06 | 0,19 | 0,73 | 1,08 | 1,05 | 1,01 | 0,99 |
| Waldhof | 0,72 | 0,86 | 0,47 | 0,63 | 0,76 | 0,90 | 0,48 | 0,64 | 1,07 | 1,05 | 1,01 | 1,01 |
| Schmücke | 0,80 | 0,84 | 0,34 | 0,67 | 0,80 | 0,84 | 0,34 | 0,67 | 1,00 | 1,00 | 1,00 | 1,00 |

Tabelle 51: Root Mean Square Error (RMSE) Jahresgang Monatsmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,17 | 0,30 | 0,38 | 0,45 | 0,19 | 0,28 | 0,38 | 0,42 | 1,11 | 0,94 | 0,99 | 0,94 |
| Freiburg | 0,30 | 0,36 | 0,26 | 0,12 | 0,33 | 0,26 | 0,25 | 0,13 | 1,09 | 0,73 | 0,96 | 1,04 |
| Augsburg | 0,22 | 0,50 | 0,41 | 0,22 | 0,19 | 0,48 | 0,41 | 0,21 | 0,86 | 0,97 | 1,00 | 0,97 |
| Emsland | 0,38 | 0,54 | 0,43 | 0,28 | 0,37 | 0,54 | 0,43 | 0,27 | 0,97 | 0,99 | 1,01 | 0,98 |
| Mülheim | 0,21 | 0,37 | 0,33 | 0,17 | 0,22 | 0,34 | 0,32 | 0,17 | 1,07 | 0,91 | 0,97 | 0,97 |
| Schauinsland | 0,60 | 0,49 | 0,11 | 0,47 | 0,66 | 0,52 | 0,11 | 0,47 | 1,09 | 1,06 | 1,00 | 0,99 |
| Waldhof | 0,50 | 0,58 | 0,39 | 0,36 | 0,57 | 0,64 | 0,40 | 0,37 | 1,14 | 1,10 | 1,02 | 1,03 |
| Schmücke | 0,47 | 0,51 | 0,29 | 0,43 | 0,48 | 0,52 | 0,29 | 0,44 | 1,02 | 1,01 | 1,00 | 1,01 |

Tabelle 52: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresmittlerer Wochengang Tagesmittelwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,17 | 0,28 | 0,33 | 0,42 | 0,16 | 0,26 | 0,33 | 0,40 | 0,93 | 0,92 | 0,99 | 0,97 |
| Freiburg | 0,29 | 0,13 | 0,22 | 0,06 | 0,29 | 0,07 | 0,21 | 0,08 | 0,98 | 0,52 | 0,98 | 1,21 |
| Augsburg | 0,09 | 0,29 | 0,36 | 0,12 | 0,08 | 0,28 | 0,37 | 0,12 | 0,87 | 0,96 | 1,00 | 1,01 |
| Emsland | 0,35 | 0,48 | 0,41 | 0,21 | 0,34 | 0,47 | 0,41 | 0,21 | 0,97 | 0,97 | 0,99 | 0,99 |
| Mülheim | 0,21 | 0,23 | 0,31 | 0,15 | 0,20 | 0,18 | 0,30 | 0,15 | 0,99 | 0,78 | 0,95 | 0,98 |
| Schauinsland | 0,28 | 0,16 | 0,04 | 0,30 | 0,31 | 0,18 | 0,04 | 0,30 | 1,10 | 1,17 | 0,96 | 1,02 |
| Waldhof | 0,39 | 0,45 | 0,36 | 0,30 | 0,39 | 0,45 | 0,36 | 0,31 | 0,99 | 0,99 | 0,99 | 1,04 |
| Schmücke | 0,37 | 0,42 | 0,25 | 0,39 | 0,36 | 0,40 | 0,25 | 0,40 | 0,96 | 0,96 | 0,99 | 1,03 |

Tabelle 53: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresmittlerer Tagesgang Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,19 | 0,28 | 0,34 | 0,42 | 0,17 | 0,27 | 0,33 | 0,41 | 0,90 | 0,98 | 0,98 | 0,97 |
| Freiburg | 0,43 | 0,23 | 0,27 | 0,19 | 0,37 | 0,19 | 0,25 | 0,19 | 0,85 | 0,81 | 0,95 | 0,98 |
| Augsburg | 0,26 | 0,33 | 0,40 | 0,16 | 0,20 | 0,33 | 0,40 | 0,15 | 0,77 | 0,98 | 0,99 | 0,94 |
| Emsland | 0,36 | 0,49 | 0,43 | 0,21 | 0,36 | 0,49 | 0,43 | 0,21 | 1,01 | 1,00 | 0,99 | 1,00 |
| Mülheim | 0,22 | 0,28 | 0,33 | 0,14 | 0,21 | 0,24 | 0,31 | 0,14 | 0,94 | 0,88 | 0,94 | 0,98 |
| Schauinsland | 0,49 | 0,44 | 0,04 | 0,32 | 0,46 | 0,39 | 0,04 | 0,32 | 0,93 | 0,90 | 0,95 | 1,02 |
| Waldhof | 0,39 | 0,45 | 0,38 | 0,30 | 0,39 | 0,45 | 0,38 | 0,31 | 1,00 | 0,99 | 0,99 | 1,04 |
| Schmücke | 0,34 | 0,39 | 0,25 | 0,41 | 0,33 | 0,38 | 0,25 | 0,42 | 0,98 | 0,98 | 0,99 | 1,02 |

Tabelle 54: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresmittlerer Tagesgang Werktag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,21 | 0,33 | 0,38 | 0,42 | 0,17 | 0,28 | 0,35 | 0,42 | 0,80 | 0,84 | 0,92 | 1,01 |
| Freiburg | 0,37 | 0,22 | 0,30 | 0,20 | 0,40 | 0,20 | 0,27 | 0,20 | 1,08 | 0,92 | 0,90 | 1,00 |
| Augsburg | 0,24 | 0,35 | 0,41 | 0,12 | 0,20 | 0,32 | 0,39 | 0,11 | 0,85 | 0,90 | 0,95 | 0,95 |
| Emsland | 0,39 | 0,52 | 0,48 | 0,21 | 0,36 | 0,49 | 0,47 | 0,22 | 0,94 | 0,95 | 0,97 | 1,01 |
| Mülheim | 0,15 | 0,30 | 0,41 | 0,14 | 0,17 | 0,24 | 0,36 | 0,13 | 1,15 | 0,81 | 0,88 | 0,97 |
| Schauinsland | 0,52 | 0,48 | 0,06 | 0,30 | 0,56 | 0,50 | 0,05 | 0,31 | 1,07 | 1,04 | 0,95 | 1,02 |
| Waldhof | 0,41 | 0,46 | 0,39 | 0,31 | 0,39 | 0,44 | 0,38 | 0,32 | 0,96 | 0,96 | 0,99 | 1,04 |
| Schmücke | 0,38 | 0,42 | 0,26 | 0,41 | 0,35 | 0,40 | 0,26 | 0,42 | 0,94 | 0,95 | 0,99 | 1,03 |

Tabelle 55: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresmittlerer Tagesgang Samstag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,24 | 0,30 | 0,28 | 0,43 | 0,19 | 0,27 | 0,30 | 0,43 | 0,81 | 0,89 | 1,07 | 1,00 |
| Freiburg | 0,58 | 0,38 | 0,21 | 0,21 | 0,37 | 0,20 | 0,21 | 0,18 | 0,65 | 0,54 | 0,99 | 0,86 |
| Augsburg | 0,35 | 0,37 | 0,42 | 0,17 | 0,27 | 0,36 | 0,44 | 0,17 | 0,76 | 0,98 | 1,04 | 0,97 |

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Emsland | 0,32 | 0,43 | 0,42 | 0,21 | 0,36 | 0,47 | 0,43 | 0,21 | 1,12 | 1,10 | 1,03 | 1,00 |
| Mülheim | 0,33 | 0,29 | 0,32 | 0,19 | 0,26 | 0,27 | 0,32 | 0,19 | 0,80 | 0,93 | 1,02 | 0,99 |
| Schauinsland | 0,27 | 0,31 | 0,02 | 0,39 | 0,20 | 0,24 | 0,02 | 0,40 | 0,72 | 0,77 | 0,97 | 1,01 |
| Waldhof | 0,43 | 0,47 | 0,41 | 0,30 | 0,43 | 0,48 | 0,41 | 0,31 | 1,02 | 1,02 | 1,00 | 1,03 |
| Schmücke | 0,37 | 0,41 | 0,22 | 0,43 | 0,37 | 0,41 | 0,21 | 0,44 | 1,01 | 1,00 | 0,99 | 1,00 |

Tabelle 56: Root Mean Square Error (RMSE): Jahresmittlerer Tagesgang Sonn- und Feiertag Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,26 | 0,29 | 0,25 | 0,51 | 0,20 | 0,29 | 0,30 | 0,38 | 0,77 | 0,99 | 1,20 | 0,74 |
| Freiburg | 0,69 | 0,44 | 0,20 | 0,18 | 0,35 | 0,32 | 0,25 | 0,19 | 0,50 | 0,72 | 1,23 | 1,07 |
| Augsburg | 0,48 | 0,48 | 0,36 | 0,42 | 0,29 | 0,45 | 0,40 | 0,38 | 0,59 | 0,94 | 1,11 | 0,89 |
| Emsland | 0,26 | 0,38 | 0,29 | 0,20 | 0,34 | 0,47 | 0,31 | 0,20 | 1,28 | 1,22 | 1,07 | 0,98 |
| Mülheim | 0,66 | 0,39 | 0,14 | 0,18 | 0,44 | 0,28 | 0,17 | 0,15 | 0,67 | 0,71 | 1,23 | 0,86 |
| Schauinsland | 0,67 | 0,57 | 0,04 | 0,32 | 0,35 | 0,32 | 0,04 | 0,33 | 0,52 | 0,56 | 0,99 | 1,02 |
| Waldhof | 0,36 | 0,42 | 0,32 | 0,27 | 0,40 | 0,46 | 0,33 | 0,28 | 1,11 | 1,10 | 1,01 | 1,05 |
| Schmücke | 0,18 | 0,22 | 0,23 | 0,44 | 0,22 | 0,27 | 0,23 | 0,45 | 1,26 | 1,25 | 1,00 | 1,03 |

Tabelle 57: Root Mean Square Error (RMSE): Mittlerer Tagesgang Frühling Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,22 | 0,26 | 0,14 | 0,44 | 0,17 | 0,22 | 0,12 | 0,43 | 0,78 | 0,84 | 0,84 | 1,00 |
| Freiburg | 0,51 | 0,34 | 0,22 | 0,26 | 0,42 | 0,27 | 0,21 | 0,24 | 0,82 | 0,79 | 0,96 | 0,94 |
| Augsburg | 0,32 | 0,33 | 0,28 | 0,15 | 0,26 | 0,26 | 0,25 | 0,13 | 0,81 | 0,78 | 0,90 | 0,90 |
| Emsland | 0,46 | 0,56 | 0,22 | 0,19 | 0,32 | 0,44 | 0,19 | 0,18 | 0,69 | 0,79 | 0,86 | 0,94 |
| Mülheim | 0,25 | 0,28 | 0,16 | 0,15 | 0,24 | 0,21 | 0,15 | 0,15 | 0,96 | 0,74 | 0,92 | 1,01 |
| Schauinsland | 0,40 | 0,47 | 0,08 | 0,40 | 0,37 | 0,42 | 0,08 | 0,39 | 0,93 | 0,90 | 0,96 | 0,97 |
| Waldhof | 0,33 | 0,38 | 0,15 | 0,22 | 0,18 | 0,18 | 0,12 | 0,20 | 0,53 | 0,46 | 0,82 | 0,90 |
| Schmücke | 0,22 | 0,29 | 0,17 | 0,41 | 0,10 | 0,17 | 0,16 | 0,40 | 0,44 | 0,58 | 0,96 | 0,97 |

Tabelle 58: Root Mean Square Error (RMSE): Mittlerer Tagesgang Sommer Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,23 | 0,25 | 0,19 | 0,47 | 0,31 | 0,35 | 0,21 | 0,47 | 1,34 | 1,42 | 1,11 | 1,00 |
| Freiburg | 0,71 | 0,80 | 0,18 | 0,30 | 0,51 | 0,49 | 0,18 | 0,30 | 0,72 | 0,61 | 1,00 | 1,00 |
| Augsburg | 0,48 | 0,49 | 0,25 | 0,19 | 0,34 | 0,32 | 0,25 | 0,18 | 0,71 | 0,66 | 0,98 | 0,93 |
| Emsland | 0,34 | 0,43 | 0,37 | 0,21 | 0,36 | 0,46 | 0,38 | 0,21 | 1,07 | 1,06 | 1,01 | 0,99 |
| Mülheim | 0,40 | 0,26 | 0,28 | 0,12 | 0,37 | 0,17 | 0,27 | 0,12 | 0,93 | 0,63 | 0,96 | 0,94 |
| Schauinsland | 0,99 | 1,00 | 0,05 | 0,49 | 0,78 | 0,76 | 0,05 | 0,49 | 0,79 | 0,77 | 1,01 | 1,00 |
| Waldhof | 0,43 | 0,47 | 0,33 | 0,40 | 0,45 | 0,49 | 0,33 | 0,39 | 1,05 | 1,04 | 1,00 | 0,99 |
| Schmücke | 0,11 | 0,16 | 0,15 | 0,55 | 0,09 | 0,16 | 0,15 | 0,54 | 0,82 | 0,98 | 0,98 | 0,99 |

Tabelle 59: Root Mean Square Error (RMSE): Mittlerer Tagesgang Herbst Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,18 | 0,33 | 0,69 | 0,42 | 0,16 | 0,33 | 0,68 | 0,42 | 0,88 | 0,98 | 0,98 | 1,00 |
| Freiburg | 0,43 | 0,25 | 0,47 | 0,20 | 0,41 | 0,20 | 0,42 | 0,21 | 0,94 | 0,81 | 0,91 | 1,03 |
| Augsburg | 0,28 | 0,36 | 0,66 | 0,08 | 0,18 | 0,40 | 0,68 | 0,07 | 0,66 | 1,13 | 1,04 | 0,88 |
| Emsland | 0,24 | 0,44 | 0,74 | 0,10 | 0,36 | 0,52 | 0,79 | 0,11 | 1,51 | 1,18 | 1,07 | 1,06 |
| Mülheim | 0,18 | 0,33 | 0,78 | 0,18 | 0,14 | 0,29 | 0,75 | 0,18 | 0,80 | 0,90 | 0,96 | 0,97 |
| Schauinsland | 0,63 | 0,55 | 0,06 | 0,26 | 0,53 | 0,47 | 0,05 | 0,28 | 0,85 | 0,87 | 0,98 | 1,08 |
| Waldhof | 0,26 | 0,33 | 0,62 | 0,25 | 0,48 | 0,54 | 0,66 | 0,29 | 1,89 | 1,62 | 1,06 | 1,16 |
| Schmücke | 0,36 | 0,41 | 0,34 | 0,39 | 0,41 | 0,46 | 0,34 | 0,42 | 1,13 | 1,10 | 1,00 | 1,08 |

Tabelle 60: Root Mean Square Error (RMSE): Mittlerer Tagesgang Winter Stundenwerte, jeweils Modellrechnung (statische bzw. dynamische SF) mit Messung; letzte vier Spalten: Verhältnisse RMSE dynamisch zu statisch

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|----------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Berlin | 0,21 | 0,30 | 0,83 | 0,42 | 0,17 | 0,26 | 0,80 | 0,35 | 0,81 | 0,89 | 0,97 | 0,84 |
| Freiburg | 0,39 | 0,38 | 0,40 | 0,22 | 0,39 | 0,37 | 0,36 | 0,16 | 1,01 | 0,95 | 0,92 | 0,73 |
| Augsburg | 0,32 | 0,50 | 0,86 | 0,37 | 0,29 | 0,48 | 0,85 | 0,36 | 0,90 | 0,96 | 0,98 | 0,96 |

| RMSE | stat. NO ₂ | stat. NO _x | stat. O ₃ | stat. PM ₁₀ | dyn. NO ₂ | dyn. NO _x | dyn. O ₃ | dyn. PM ₁₀ | Verh. NO ₂ | Verh. NO _x | Verh. O ₃ | Verh. PM ₁₀ |
|--------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
| Emsland | 0,42 | 0,56 | 0,67 | 0,37 | 0,41 | 0,55 | 0,66 | 0,36 | 0,96 | 0,97 | 0,99 | 0,99 |
| Mülheim | 0,19 | 0,37 | 0,41 | 0,16 | 0,21 | 0,33 | 0,37 | 0,16 | 1,07 | 0,92 | 0,92 | 0,98 |
| Schauinsland | 0,87 | 0,63 | 0,08 | 0,33 | 1,02 | 0,76 | 0,08 | 0,29 | 1,17 | 1,21 | 0,96 | 0,88 |
| Waldhof | 0,52 | 0,57 | 0,64 | 0,34 | 0,53 | 0,58 | 0,64 | 0,36 | 1,02 | 1,02 | 1,00 | 1,07 |
| Schmücke | 0,48 | 0,51 | 0,41 | 0,30 | 0,48 | 0,51 | 0,41 | 0,33 | 1,01 | 1,01 | 1,00 | 1,11 |