

Anwendung des Modellsystems COSMO-MUSCAT zur Absicherung der RCG-Ergebnisse für zwei ausgewählte Minderungs-szenarien und für Ballungsraum-Simulationen mit unterschiedlichen Gitterauflösungen

UMWELTFORSCHUNGSPLAN DES
BUNDESMINISTERIUMS FÜR UMWELT,
NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT

Forschungskennzahl 206 43 200/01
UBA-FB 001524/ANH,30

Anwendung des Modellsystems COSMO- MUSCAT zur Absicherung der RCG- Ergebnisse für zwei ausgewählte Minderungsszenarien und für Ballungsraum-Simulationen mit unterschiedlichen Gitterauflösungen

**Teilbericht zum F&E-Vorhaben „Strategien zur
Verminderung der Feinstaubbelastung - PAREST“**

von

**Ralf Wolke
Eberhard Renner**

Leibniz-Institut für Troposphärenforschung, Leipzig

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

UMWELTBUNDESAMT

Diese Publikation ist ausschließlich als Download unter
<http://www.uba.de/uba-info-medien/4545.html>
verfügbar.

Die in der Studie geäußerten Ansichten
und Meinungen müssen nicht mit denen des
Herausgebers übereinstimmen.

ISSN 1862-4804

Durchführung
der Studie:

Leibniz-Institut für Troposphärenforschung e.V.
Permoserstr. 15
04318 Leipzig

Abschlussdatum:

Dezember 2010

Herausgeber:

Umweltbundesamt
Wörlitzer Platz 1
06844 Dessau-Roßlau
Tel.: 0340/2103-0
Telefax: 0340/2103 2285
E-Mail: info@umweltbundesamt.de
Internet: <http://www.umweltbundesamt.de>
<http://fuer-mensch-und-umwelt.de/>

Redaktion:

Fachgebiet II 4.1 Grundsatzfragen der Luftreinhaltung
Johanna Appelhans

Dessau-Roßlau, Juni 2013

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis.....	2
1 Einleitung.....	3
2 Ziel und Methodik der Untersuchungen.....	4
3 Modellbeschreibung.....	6
3.1 Meteorologie-Modell COSMO.....	6
3.2 Chemie-Transport-Modell MUSCAT.....	7
3.3 Aerosolmodell.....	7
3.4 COSMO-MUSCAT-Kopplung.....	10
4 Emissionen.....	11
4.1 Anthropogene Emissionen.....	11
4.2 Biogene Emissionen.....	11
5 Modellevaluierung für den Basislauf 2005: Vergleich der Tagesmittelwerte an ausgewählten Stationen.....	13
6 Abschätzung der Reduzierung der mittleren jährlichen Schadstoffbelastung für zwei ausgewählte Emissionsminderungsszenarien.....	24
7 Ballungsraum-Simulationen mit unterschiedlichen Gitterauflösungen.....	41
8 Zusammenfassung.....	48
9 Literatur.....	49
Tabellenverzeichnis.....	52
Abbildungsverzeichnis.....	52

1. Einleitung

Ziel des PAREST-Vorhabens war es, die Ursachen für die Grenzwertüberschreitungen von PM_{10} und des geplanten Grenzwerts von $\text{PM}_{2,5}$ zu ermitteln und geeignete emissionsmindernde Maßnahmen zur Reduzierung der Feinstaubbelastung zu identifizieren. Die bereits in vorhergehenden Forschungsvorhaben des Umweltbundesamts untersuchten Einzelmaßnahmen wurden dazu zu Maßnahmenbündeln zusammengefasst (Maßnahmenszenario). Die Minderungspotentiale der Maßnahmenbündel und die damit verbundenen Kosten waren zu ermitteln. Die immissionsseitigen Auswirkungen der Maßnahmenbündel sollten mit Hilfe geeigneter Ausbreitungsrechnungen bestimmt werden. Die auf Basis der einzelnen Maßnahmenbündel prognostizierte Immissionssituation sollte mit den Zielvorgaben der 39. Verordnung zur Durchführung des Bundesimmissionsschutzgesetzes verglichen werden, um den zur Einhaltung der Grenzwerte notwendigen Umfang der Emissionsminderungen zu ermitteln.

Innerhalb des Gesamtprojekts PAREST kam als Ausbreitungsmodell hauptsächlich das im Institut für Meteorologie der Freien Universität Berlin entwickelte REM-CALGRID-Modell zur Anwendung. Insbesondere zur Qualitätssicherung und zur Abschätzung der Bandbreite der Modellergebnisse wurden aber weitere Simulationen mit den Modellsystemen LOTOS-EUROS und COSMO-MUSCAT ausgeführt. Neben dem Basislauf für das Referenzjahr 2005 sind dazu auch die Emissionsreferenz 2020 und das MFR-Szenario 2020 („Maximum feasible reduction“) mit allen drei Modellen berechnet worden. Der Vergleich der Modellergebnisse für 2005 ist in sehr detaillierter Form in den PAREST-Berichten „Anwendungen von chemischen Transportmodellen im Rahmen des PAREST-Projekts: Ergebnisvergleich REM-CALGRID, LOTOS-EUROS und MUSCAT-COSMO“ (R. Stern, 2010c) für die Schadstoffkonzentrationen und „Meteorologie – Vergleich zum besseren Verständnis der unterschiedlichen Schadstoffkonzentrationssimulationen mit verschiedenen Chemie-Transport-Modellen“ (A. Kerschbaumer, Mai 2010) für die meteorologischen Größen dargestellt worden. Hier findet man auch einen Vergleich mit Bodenmessungen für ausgewählte Stationen und eine statistische Analyse der Simulationsergebnisse. Im Bericht „Analyse der Unsicherheiten/Bandbreiten in der im PAREST-Projekt verwendeten Kausalkette Emission-Transmission-Immission“ (R. Stern, 2010d) werden die Simulationen der Zukunftsszenarien und die daraus abgeleiteten Reduktionspotentiale für die drei Modellsysteme miteinander verglichen, bewertet und diskutiert.

In diesem Bericht werden anhand der Simulationen mit dem am Leibniz-Institut für Troposphärenforschung (IfT) entwickelten komplexen Modellsystem COSMO-MUSCAT die Beiträge der primär emittierten und der sekundär gebildeten Partikelmasse an der Gesamtbelastung etwas detaillierter untersucht. Dabei zeigt sich, dass insbesondere in ländlichen Regionen der Hauptteil der bis 2020 prognostizierten PM-Reduktion durch eine Verringerung des sekundär gebildeten Anteils erreicht wird. Die Ansätze zur Beschreibung der sekundären Aerosolbildung sind in den drei verwendeten Modellsystemen zum Teil unterschiedlich. Neben den ebenfalls unterschiedlichen meteorologischen Antrieben (mit insbesondere als Resultat verschiedenen Mischungsschichthöhen) sollte hierin eine Hauptursache der beobachteten Bandbreite in den Reduktionsszenarien liegen. COSMO-MUSCAT wurde außerdem für Untersuchungen zum Einfluss ausgewählter Ballungsräume auf die Immissionssituation in Deutschland eingesetzt. Durch die Option zur Verwendung feinerer oder gröberer Gitterauflösungen in einzelnen Teilgebieten und dem damit einhergehenden „two-way nesting“ bietet MUSCAT hierfür sehr gute Möglichkeiten.

2. Ziel und Methodik der Untersuchungen

Das COSMO-MUSCAT-System benutzt als meteorologischen Antrieb das operationelle Vorhersagemodell des Deutschen Wetterdienstes COSMO. Dieses Modell wird gegenwärtig für die operationelle Wettervorhersage mit einer Maschenweite von ca. 2,8 km betrieben. Die mit MUSCAT gekoppelte aktuelle Version enthält aber auch Optionen zur Verwendung feinerer Auflösungen (bis zu 1 km horizontaler Gitterweite) und einen Klima-Mode, bei dem klimatologische Änderungen berücksichtigt werden können. Durch das implementierte Online-Kopplungsschema werden auch kleinere zeitliche und räumliche meteorologische Schwankungen direkt für die Ausbreitungsrechnung berücksichtigt.

Die Simulationen mit dem Modellsystem COSMO-MUSCAT hatten im Wesentlichen die zwei folgenden Ziele:

(i) **Ergebnisabsicherung.** Hierzu wurden das Basisszenario und zwei ausgewählte Minderungsszenarien simuliert und die Ergebnisse mit den RCG- und LOTOS-Rechnungen verglichen. Die Anwendung des Modellsystems erfolgte auf zwei Nestern mit folgenden Gitterauflösungen für COSMO (vgl. Abb. 2.1):

- a) Nest N1 (europäische Skala) mit einer horizontalen Gitterweite von $0.25^\circ \times 0.25^\circ$ und 40 vertikalen Schichten bis zu einer Modellhöhe von ca. 25 km Höhe
- b) Nest N2 (Deutschland) mit einer horizontalen Gitterweite von $0.0625^\circ \times 0.0625^\circ$ und 50 vertikalen Schichten bis zu einer Modellhöhe von ca. 25 km.

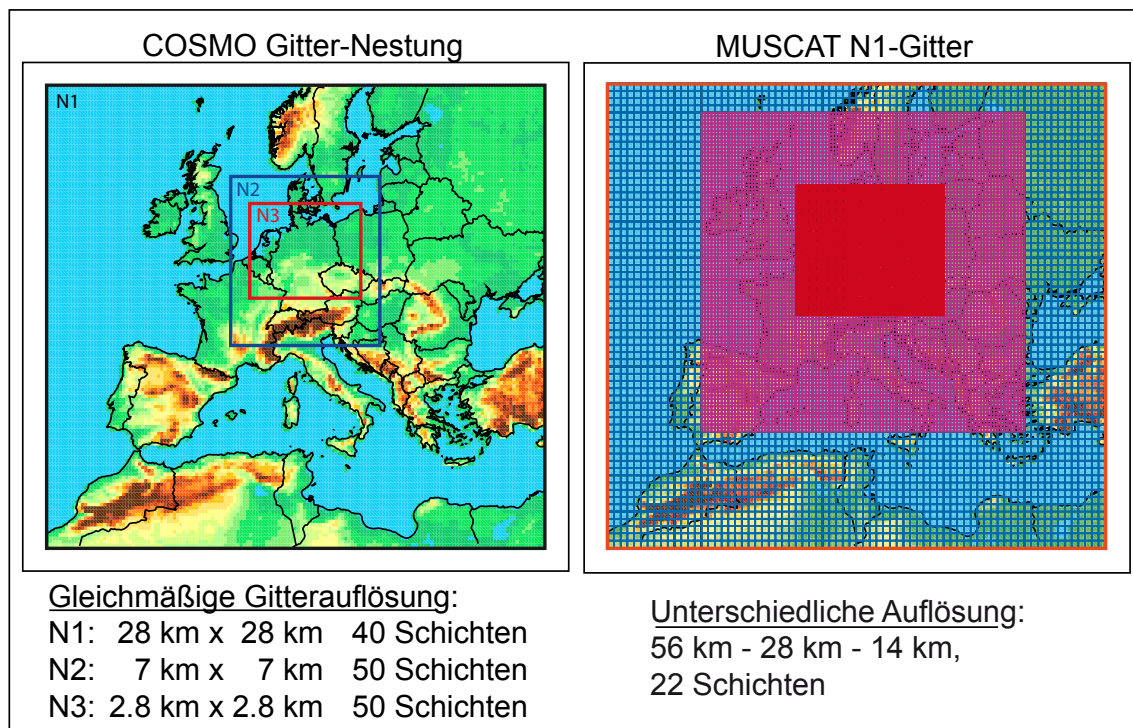


Abb. 2.1: Modellierungsgebiete und Gitterauflösungen

COSMO verwendet rotierte Lambda-Phi-Koordinaten in den horizontalen Raumrichtungen, die aus den geographischen Koordinaten durch eine Verschiebung des Nordpols hervorgehen. In der Regel wird die Transformation so gewählt, dass das Simulationsgebiet in Äquaturnähe liegt. Damit werden Singularitäten in Polnähe, wie sie bei den geographischen Koordinaten auftreten, vermieden und man erhält ein horizontales Rechengitter mit "fast quadratischen" Gitterzellen. Die obigen Angaben zur horizontalen Gitterweite beziehen sich auf das rotierte Gitter. Deshalb erhält man beispielsweise in Äquaturnähe für 0.25° eine horizontale Auflösung von ca. 28 km. Da es durch die Koordinatentransformation zu einer "Verzerrung" der Zellen kommt, lassen sich die Gitterweiten in geographischen Koordinaten nur näherungsweise angeben. Bei der Longitude ergibt sich etwa der Faktor 1,6 und bei der Latitude ca. 1,1. Die rotierten sphärischen Koordinaten sind für regionale Modelle sehr flexibel und rechenökonomisch, haben allerdings den Nachteil, dass alle Eingangsdaten im Rasterformat (z. B. Landnutzung, Flächenquellen) sowie alle Felder für die graphische Darstellung transformiert werden müssen. Für die in PAREST bereitgestellten Emissions- und Landnutzungsdaten wurden die entsprechenden Preprozessoren modifiziert und weiterentwickelt. Außerdem ist ein Tool implementiert worden, das die Ausgabedateien von COSMO-MUSCAT in ein von FLADIS lesbares NetCDF-Format überführt.

In MUSCAT kann für ausgewählte Gebiete eine feinere oder gröbere horizontale Auflösung gewählt werden. Unter Ausnutzung dieser Option wurde bei den N1-Simulationen das Deutschlandgebiet bereits mit einer einmal verfeinerten Auflösung von $0,125^\circ$ gerechnet (vgl. Abb. 2.1). Bei den N2-Simulationen wurde ein uniformes Gitter mit derselben Auflösung verwendet. Die Modellhöhe wird in MUSCAT auf ca. 6000 m begrenzt, um Rechenzeit zu sparen. Aufgrund der Unterschiede in der Auflösung, dem meteorologischen Antrieb und in einigen Prozessparametrisierungen waren Differenzen in den Ergebnissen der drei Modellsysteme zu erwarten. Diese gestatten Aussagen über die Sensitivität der simulierten Immissionsfelder gegenüber den Emissionsdaten und damit über die Belastbarkeit der Bewertungen der Minimierungsszenarien. Für die N1-Simulationen standen die großräumigen GME-Reanalysedaten vom DWD als Rand- und Anfangswerte für COSMO zur Verfügung. Für die N1-MUSCAT-Simulationen wurden als Rand- und Anfangswerte der Konzentrationsfelder klimatologisch bestimmte Höhenprofile eingesetzt.

(ii) Bewertung von unterschiedlich aufgelösten Emissionskatastern in ausgewählten Ballungsräumen. Für das Gebiet Deutschland (Nest N3 in Abb. 2.1) erfolgten Modellsimulationen, bei denen zwei Regionen (NRW und Großraum Berlin) mit feiner aufgelösten Emissionskatastern gerechnet wurden. Die Emissionsdaten sind ebenfalls nach dem „top-down“-Prinzip abgeleitet worden, und unterscheiden sich vom Basisdatensatz nur durch die feinere horizontale Auflösung. Mit den durchgeführten Simulationen können Einflüsse unterschiedlicher räumlicher Auflösungen zwischen den Katastern besser bewertet werden. Durch das "two way nesting" lässt sich außerdem die Sensitivität der Simulationsergebnisse gegenüber unterschiedlichen Emissionskatastern für das gesamte Modellgebiet abschätzen. Mit dieser Vorgehensweise können auch die Auswirkungen von gezielt in Ballungsräumen angewendeten Minderungsmaßnahmen auf die angrenzenden Regionen und die gesamte Immissionssituation in Deutschland quantifiziert werden. Die Auswahl der entsprechenden Bundesländer bzw. Ballungsräume erfolgte in Abstimmung mit dem UBA und den anderen Projektpartnern. Als feinste horizontale Auflösung innerhalb der Ballungsräume wurden 1,4 km innerhalb von MUSCAT verwendet (vgl. Abschnitt 7). Der hierfür verwendete Emissionsdatensatz ist im Rahmen des Projektes durch das IER erarbeitet und durch die FU bereitgestellt worden.

3. Modellbeschreibung

Am Leibniz-Institut für Troposphärenforschung Leipzig wird das Modellsystem COSMO-MUSCAT entwickelt und für lufthygienische Untersuchungen eingesetzt (Wolke et al., 2004; Hinneburg et al., 2009). Dabei wurde das Chemie-Transport-Modell MUSCAT (MultiScale Chemistry Aerosol Transport) mit dem meteorologischen Modell COSMO gekoppelt. Die Modelle arbeiten hierbei weitestgehend unabhängig. Der Austausch von Daten und Steuerparametern wurde in separaten Kopplerroutinen implementiert. Auf Grund der Online-Kopplung mit dem Meteorologie-Modell COSMO laufen die Transport- und Reaktionsvorgänge unter aktuell berechneten Mischungs- und Ausbreitungsbedingungen der Atmosphäre ab.

3.1 Meteorologie-Modell COSMO

Das drei-dimensionale nicht-hydrostatische Model COSMO ist das operationelle Vorhersagemodell des Deutschen Wetterdienstes (Steppeler et al., 2003; Schättler et al., 2008). Es beschreibt die den meteorologischen Abläufen in der Troposphäre zu Grunde liegenden Prozesse und Erhaltungsgesetze, beispielsweise hinsichtlich der Dynamik der Luftmassen, der bodennahen Austauschbedingungen für Impuls, Temperatur und Feuchte, der Strahlungsbilanz und der Wolkenbildung. Je nach gewählter räumlicher Auflösung beherrscht das Gitterpunktsmodell Phänomene unterschiedlichster Größenordnung im Ausmaß von Hoch- und Tiefdruck-Gebieten (Meso- α -Skala: Gitterweite 100 km) bis zu lokalen Windsystemen (Mikro- α -Skala: Gitterweite 100 m). In der Vertikalen wird eine verallgemeinerte geländefolgende Höhenkoordinate benutzt. Auf der europäischen Skala (Gebiet N1) werden 40 vertikale Schichten mit 65 m Schichtdicke am Boden bis in ca. 25 km Höhe verwendet. Für die Deutschland- Simulationen (N2-Gebiet) wird die vertikale Auflösung in Bodennähe bis auf ca. 20 m verfeinert. Damit ist COSMO in der Lage, auch die Eigenschaften der bodennahen Grenz- und Mischungsschicht differenziert nachzubilden.

Das nicht-hydrostatische, kompressible und assimilationsfähige Modell ist auf ein räumlich begrenztes (mesoskaliges) Modellgebiet anwendbar. Für die europäische Skala werden die Randwerte i. Allg. durch das Global-Modell GME des Deutschen Wetterdienstes bereitgestellt. Auf kleineren Skalen kann das mesoskalige Modell COSMO in sich selbst genestet werden, d. h. es eignet sich für eine schrittweise Verkleinerung der Modellgebiete mit entsprechend feineren Auflösungen. So können in einer abgestuften Anwendungskette global oder großskalig kontrollierte Simulationen bis zu einer Auflösung von 1 km durchgeführt werden. Wenn entsprechende Reanalysedaten (verifizierte Wetterabläufe) bereit stehen, lassen sich zurückliegende Episoden sehr realitätsnah modellieren. Auf Grund seiner umfassenden Modellphysik, kleinskaligen Orientierung und datenmäßigen Absicherung übernimmt das COSMO in zunehmendem Maße die Rolle des meteorologischen Treibers in unterschiedlichsten mesoskaligen Anwendungen.

3.2 Chemie-Transport-Modell MUSCAT

Die Berechnung des Transports und der chemischen Umwandlungen für definierte Spurenstoffe in der Atmosphäre erfolgt mit dem Chemie-Transport-Modell MUSCAT (Knoth und Wolke, 1998; Wolke und Knoth, 2000). Zu den modellierten dreidimensionalen Transport-Prozessen zählen Advektion und turbulente Diffusion ebenso wie Sedimentation sowie trockene und nasse Deposition. Die dafür erforderlichen transportierenden Flüsse, Diffusionskoeffizienten und anderen Parameter bezieht das Modell aus dem meteorologischen Treibermodell COSMO, mit dem es online gekoppelt ist. Bezüglich der physikalisch-chemischen Reaktions- und Emissionsmechanismen ist MUSCAT prinzipiell uneingeschränkt, und auch in der Zahl der zu betrachtenden gas- oder partikelförmigen Spurenstoffe setzt das Modell keine Grenzen. Zum standardmäßigen und auch hier genutzten Bestandteil des Modells gehören je ein Chemie- und Aerosolmodul zur Beschreibung der luftchemischen bzw. aerosoldynamischen Prozesse sowie ein komplexes Emissionsmodul.

Das verwendete Gasphasenchemie-Modul RACM-MIM2 (Karl et al., 2006) beinhaltet neben dem RACM-Mechanismus (Stockwell et al., 1997) auch eine im Wesentlichen aus Laboruntersuchungen abgeleitete Isopren-Chemie. Insgesamt werden 95 reaktive Spurengase in ca. 300 Reaktionen betrachtet. Zu den anorganischen Spezies gehören u. a. NO_x , O_3 , SO_2 und NH_3 ; die organische Gasphase wird durch eine Vielzahl umweltrelevanter Kohlenwasserstoffe charakterisiert. Der Mechanismus schließt 22 photolytische Reaktionen in Abhängigkeit von Sonnenstand und Bewölkung ein, wobei die aus dem Meteorologie-Modell übernommene Bewölkungssituation in Abschattungsverhältnisse umgewandelt wird. Auch andere meteorologische Größen wie beispielsweise Dichte, Temperatur und Feuchte, die Einfluss auf Reaktionsmechanismen haben, werden vom Modell COSMO geliefert. Das Aerosolmodell ist ein massebasierter Mechanismus, der vor allem die Kondensation von sekundärem anorganischen Material auf vorhandenen Aerosolpartikeln beschreibt. Die physikalisch-chemische Bildung und Veränderung der Partikel wird in direkter Wechselwirkung mit der Gasphasenchemie modelliert.

3.3 Aerosolmodell

Innerhalb von PAREST wurde in COSMO-MUSCAT wie in den beiden anderen Modellsystemen ein massenbasiertes Aerosolmodell verwendet. Insbesondere die Bildung des sekundären Aerosols wird dabei in den Modellen zum Teil unterschiedlich beschrieben. Deshalb sollen hier einige Modellansätze des in MUSCAT verwendeten Aerosolmoduls noch einmal kurz dargestellt werden.

Im Blickpunkt der Untersuchungen stehen Aerosole mit einem Durchmesser kleiner als $2,5\ \mu\text{m}$ ($\text{PM}_{2,5}$) bzw. $10\ \mu\text{m}$ (PM_{10}), da deren zukünftige Konzentrationen innerhalb dieses Projekts abgeschätzt werden sollen. Eine Zunahme an Aerosolmasse erfolgt vorwiegend durch heterogene Kondensation von Vorläufergasen auf vorhandenen, kleinen Partikeln. Durch verschiedene Bildungspfade ist die Aerosolphase unmittelbar mit der Gasphasenchemie gekoppelt. Aus primären Luftschadstoffen entstehen beispielsweise Schwefel- und Salpetersäure, die zur Entstehung von Sulfat- und Nitrataerosolen in fester bzw. flüssiger Phase führen. Im Einzelnen wirken an der Bildung und dem Abbau der Aerosole folgende im Modell berücksichtigte Prozesse mit:

1) *Primäre Aerosolemission:*

Die Emission von primärem Feinstaub der Größe $< 10 \mu\text{m}$ (PPM_{10}) ergibt sich aus den Staub-Emissionsflüssen der Punkt- und Flächenquellen. Dabei wird eine größenmäßige Aufteilung von PPM_{10} auf die Intervalle $0 \dots 2,5 \mu\text{m}$ ($\text{PPM}_{2,5}$) und $2,5 \dots 10 \mu\text{m}$ ($\text{PPM}_{10-2,5}$) mit entsprechender Auswirkung auf die Depositions- bzw. Sedimentationsgeschwindigkeiten vorgenommen. Seesalz-Emissionen werden in Abhängigkeit von den konkreten meteorologischen Verhältnissen (insbesondere der Windgeschwindigkeit) direkt im Modell berechnet. Hierfür wird ein Ansatz von Gong (2003) verwendet.

2) *Bildung von Sulfataerosol:*

Die Sulfatbildung setzt die Entstehung von Schwefelsäure bzw. Sulfationen voraus. Im Modell werden sowohl die Reaktion von Schwefeldioxid mit Hydroxylradikalen in der Gasphase als auch eine Flüssigphasenreaktion, die in stark vereinfachter Form die Oxidation von Schwefeldioxid in Wolken abbildet, berücksichtigt.

Die Gasphasenreaktion wird in folgender Weise formuliert:



Diese von Druck, Temperatur und Feuchte abhängige Reaktion steht in enger Wechselwirkung mit der strahlungsbedingten Photooxidantienchemie, die für freie OH-Radikale sorgt.

Die Flüssigphasenreaktion wird als Reaktion erster Ordnung mit einer Reaktionskonstante R_k beschrieben, die als Funktion der relativen Feuchte (in %) und dem Grad der Wolkenbedeckung (ϵ) berechnet wird:

$$R_k = 8,3\text{e-}5(1+2\epsilon)(\text{min}^{-1})$$

Für $\text{RH} < 90 \%$

$$R_k = 8,3\text{e-}5(1+2\epsilon)[1,0+0,1(\text{RH}-90,0)](\text{min}^{-1})$$

Für $\text{RH} \geq 90 \%$.

Die Parametrisierung ist gleich der, die in Schaap et al. (2004) beschrieben ist. Diese Reaktion erhöht die Sulfatbildung unter kühlen und feuchten Bedingungen.

SO_4 -Ionen können auch direkt aus Emissionsquellen freigesetzt werden. Bei den beschriebenen Simulationen wird angenommen, dass 5% der SO_2 -Emissionen direkt als Sulfat emittiert werden (Simpson et al., 2003).

Bei Vorhandensein von Ammoniak wird die Aerosolbildung durch die schnelle irreversible Reaktion der Schwefelsäure (bzw. der SO_4 -Ionen) mit NH_3 auf der Partikeloberfläche in zwei Reaktionspfaden bestimmt.

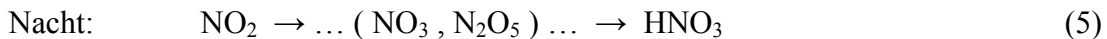


Als Näherung wird angenommen, dass beide Reaktionsprodukte in der gleichen Konzentration vorliegen. Deshalb wird mit einer „Pseudospezies mit einem effektiven stöchiometrischen Faktor $(\text{NH}_4)_{1,5}\text{SO}_4$ gerechnet (Ackermann, 1997, Simpson et al., 2003).

Schwefelsäure, die nicht durch Ammoniak gemäß (2 und 3) neutralisiert ist, liegt in kondensierter Form an der Partikeloberfläche vor und trägt ebenfalls zum Sulfatgehalt bei.

3) *Bildung von Ammoniumnitrat:*

Die zur Entstehung von Ammoniumnitrat notwendige Salpetersäure bildet sich hauptsächlich über die folgenden Reaktionsketten:



Im Gegensatz zu Ammoniumsulfat vollzieht sich die Bildung von Ammoniumnitrat in einem Gleichgewichtsprozess zwischen den gasförmigen Ausgangssubstanzen Ammoniak und Salpetersäure sowie dem Produkt auf der Aerosolhülle (Mozurkewich, 1993; Zhang et al., 2000):



Dieses Gleichgewicht ist abhängig von der Temperatur und der Feuchte und ist bei warmen, trockenen Bedingungen hin zur Gasphase verschoben. Die implementierte Aufteilung ist gleich der, die in Galperin and Sofiev (1998) unter der Nutzung der Gleichgewichtsbedingung von Mozurkewich (1993) beschrieben ist.

4) *Bildung von sekundärem organischen Aerosol (SOA):*

Zur Beschreibung der SOA-Bildung wird in MUSCAT das Modell SORGAM (Schell et al., 2001) verwendet. Es basiert auf einem 2-Produkt-Schema und wird gegenwärtig in einer Reihe von Chemie-Transport-Modellen eingesetzt.

5) *Gesamt PM₁₀*

Als Zusammenfassung aller Komponenten, die zum PM₁₀-Gehalt beitragen, ergibt sich demnach:

$$\text{PM}_{10} = \text{PPM}_{2.5} + \text{PPM}_{10-2.5} + \{(\text{NH}_4)_{1.5}\text{SO}_4\}_a + \{\text{SO}_4^{2-}\}_a + \{\text{NH}_4\text{NO}_3\}_a + \text{SOA} \quad (7)$$

6) *Aerosolsenken:*

Die nicht chemisch bedingten Verluste (Senken) für die Gas- und Aerosolspezies sind durch trockene Deposition, Auswaschung durch Niederschlag sowie gravitatives Absinken (Sedimentation) gegeben. Die Depositions- bzw. Sedimentationsgeschwindigkeiten werden in Abhängigkeit von der Partikelgröße berechnet, wobei alle sekundären Partikel der Größe PM_{2.5} zugeordnet werden. Die trockene Deposition wird über ein Widerstandsmodell aus dem atmosphärischen Turbulenzzustand, der kinetischen Viskosität und der Sedimentationsgeschwindigkeit hergeleitet. Eine effektive Senke für Partikel ist die nasse Deposition. Dabei werden „in-cloud“ bzw. „sub-cloud“ Aerosolprozesse unterschieden, die in Abhängigkeit von der „scavenging“ and „collection“ Effektivität parametrisiert werden (Tsyro and Erdman, 2000).

3.4 COSMO-MUSCAT-Kopplung

Die vom Chemie-Transport-Modell MUSCAT benötigten meteorologischen Größen werden durch das Meteorologie-Modell COSMO über Online-Kopplung zu jedem Zeit- und in jedem Gitterpunkt zur Verfügung gestellt, sodass die Umwandlungs- und Transportvorgänge stets unter aktuellen Bedingungen ablaufen. Um die Massenerhaltung zu sichern, wird hierbei ein modifiziertes divergenzfreies Windfeld verwendet. Im Unterschied zu anderen Ansätzen (z. B. Odman & Russell, 2000) werden in COSMO-MUSCAT neben den Vertikalflüssen auch die horizontalen Flüsse korrigiert. Gelöst wird ein Optimierungsproblem, bei dem die Flüsse so adjustiert werden, dass die Masseerhaltung gilt und die Flüsse selbst "möglichst wenig" geändert werden. Die modifizierten Windfelder werden ebenso wie die benötigten skalaren Größen in zeit- und ortsinterpolierter Form zur Lösung der Gleichungen für die Spurenstoffe herangezogen.

Das in MUSCAT verwendete implizit-explicite Verfahren (Wolke und Knoth, 2000) nutzt eine vom meteorologischen Code weitestgehend unabhängige eigene Schrittweitensteuerung bei der Zeitintegration der Chemie-Transport-Gleichungen und berücksichtigt mögliche Unterschiede in der horizontalen Auflösung. Alle chemischen bzw. aerosol-dynamischen Umwandlungen werden implizit und gemeinsam mit den vertikalen Advektions-, Diffusions- und Depositionsvorgängen integriert, während der horizontale Transport in expliziter Weise einbezogen wird.

In MUSCAT wird ein eigenes, variabel untergliedertes horizontales Gitter verwendet (Multiblock-Gittertechnik: Knoth und Wolke, 1998), womit die räumliche Auflösung der Simulationen gebietsweise erhöht werden kann. Das vertikale Gitter wird aus COSMO übernommen, wobei die oberen COSMO-Schichten weggelassen werden können, um Rechenzeit einzusparen. Das Modellsystem ist voll parallelisiert. Dabei wird die Blockstruktur in MUSCAT ausgenutzt. Die "sequentielle" Kopplungsstrategie sowie eine in MUSCAT implementierte Strategie zur Lastbalancierung sichern die Skalierbarkeit und gute numerische Effizienz des Codes.

Das Modellsystem COSMO-MUSCAT nahm an verschiedenen Modellvergleichen und Studien erfolgreich teil, bei denen die Simulation der Partikel-Ausbreitung den Fokus bildete (Stern et al., 2008; Hinneburg et al., 2009; Renner und Wolke, 2010).

4. Emissionen

4.1 Anthropogene Emissionen

Das Emissionsmodul von MUSCAT berücksichtigt die anthropogenen Emissionen in Form von Punkt- und Flächenquellen. Bei großen Punktquellen können dabei optional zugehörige "Schornsteinüberhöhungen" in Abhängigkeit von den konkreten meteorologischen Bedingungen und gegebenen quellspezifischen Parametern (z. B. Volumenstrom, Austrittstemperatur) berechnet werden. Diese Möglichkeit wurde in PAREST nicht genutzt. Hier waren die entsprechenden Überhöhungen (Einzelwert oder Profil) bereits als Jahresmittelwert im Punktquellen-Datensatz berücksichtigt worden. Die verfügbaren Emissionskataster enthalten in der Regel Jahresemissionssummen für die hauptsächlichen Abluftkomponenten SO₂, NO_x, CO, NH₃, Methan, andere Kohlenwasserstoffe sowie die primären Partikelemissionen PPM_{2.5} und PPM_{2.5-10}. Diese sind nach Verursachergruppen auf die international üblichen SNAP-Klassen aufgeteilt. Die notwendige zeitliche Differenzierung von Jahres-Emissionswerten erfolgt mittels emittentenspezifischer saisonaler und diurnaler Verteilungsfunktionen, so dass die jahres-, wochentags- und tageszeitlichen Schwankungen beschrieben werden können (siehe: CORINAIR; Fath, 2002). Innerhalb des PAREST-Projektes wurde die zeitliche Disaggregation in den verwendeten Modellen vereinheitlicht und länderspezifisch modifiziert.

Die für das Basisjahr 2005 benutzten europäischen und deutschen Emissionsdaten wurden im Rahmen des PAREST-Projekts erstellt. Für Deutschland basieren sie auf den im Arbeitspaket I des FE-Vorhabens entwickelten deutschen Emissionsabschätzungen für das Referenzjahr 2005 (Jörß et al., 2010). Außerhalb von Deutschland wurden die ebenfalls im Rahmen des FE-Vorhabens von der TNO erhobenen Emissionen verwendet (Denier van der Gon et al., 2010). Beide Datensätze enthalten Abschätzungen zu den durch Kfz verursachten PM₁₀-Aufwirbelungsemissionen. Neben diesem Referenzszenarium wurde das Minderungspotential für zwei unterschiedliche Zukunftsszenarien untersucht. Das Referenzszenarium 2020 beschreibt den prognostizierten Emissionszustand, der nach Umsetzung jetzt bereits beschlossener Maßnahmen im Jahr 2020 erreicht werden soll. Darüber hinaus ist das sogenannte MFR-Szenario ("Maximum Feasible Reduction") simuliert worden, bei dem weitere Bündel von technischen und nichttechnischen Minderungsmaßnahmen realisiert werden, die im Detail in Theloke et al. (2010) beschrieben sind.

Die entsprechenden Datensätze wurden in das MUSCAT-Gitter transformiert und an die in MUSCAT erforderlichen Datenstrukturen angepasst. Die Differenzierung der in den Emissionskatastern angegebenen Nicht-Methan-Kohlenwasserstoffe erfolgt mit Hilfe des VOC-Splits von Winiwarter und Züger (1996), der die spezifischen Eigenschaften der SNAP-Klassen berücksichtigt. Die Emissionswerte von 32 VOC-Spezies werden auf diese Weise in Anpassung an das Chemiemodell RACM generiert.

4.2 Biogene Emissionen

Die biogenen Emissionen werden in Abhängigkeit von Bewuchs, Temperatur und Tageszeit im Modell generiert. Die Einbeziehung der biogenen NO- und VOC-Emission erfolgt als vertikal nach oben gerichtete Flussrate durch den unteren Modellrand (Renner und Münzenberg, 2003), separat für jeden Modellzeitschritt und jede untere Modellzelle. Die Flussrate für die NO-Emissionen ist in Abhängigkeit von Vegetationstyp und Oberflächentemperatur und die für VOC-Emission in zusätzlicher Abhängigkeit vom

Sonnenstand modelliert. Diese Berechnung führt zwangsläufig zu einer zeitlichen und räumlichen Differenzierung entsprechend den meteorologischen Bedingungen und der Untergrundstruktur im Modellgitter. Im Einzelnen bestimmt sich die Flussrate aus einem Standardwert F_0 , der von der Spezies und der Vegetationsart abhängt, und zwei Korrekturfaktoren, die die Abhängigkeiten von Sonnenstand (c_L) und Temperatur (c_T) berücksichtigen:

$$F_{\text{bio}} = F_0 * c_L * c_T \quad (9)$$

mit den in Tab. 4.1 spezifizierten Größen.

Das Isopren ist in RACM als Spezies enthalten. Das Terpen wird anteilig auf API (Alpha-Pinene) und LIM (Limonene) verteilt (API mit 0.67 und LIM mit 0.33 Anteilen). Primäre Partikelemissionen aus biogenen Quellen (z. B. Pollen) und Staubaufwirbelungen aus landwirtschaftlichen Aktivitäten (z. B. Bodenbearbeitung, Mähdrusch) werden nicht berücksichtigt.

Die verwendeten Landnutzungsdaten basieren auf Smiatek (1998) und haben eine Auflösung von 0.0083333° . Sowohl die Deposition als auch die biogenen Emissionen werden anteilig für jede Landnutzungsklasse und Gitterzelle berechnet. Der Gesamtfluss pro Zelle wird dann als Summe über die Flächenanteile gebildet.

Tab. 4.1: Parameter der biogenen Emissionen.

Parameter/Funktion		Emission von		
		NO ¹⁾	Isopren ²⁾	Terpen ²⁾
F₀ [ng/m ² s]	Feld (Mai-Aug)	15,9		
	Feld (Sept-April)	1,2		
	Wiese	1,5		
	Heide	0,9		
	Buschwerk	0,9	584	103
	Laubwald	0,12	584	103
	Nadelwald	0,12	207	380
	Stadt	0,12		
c_L ³⁾		1	$\cos \alpha / \cos \alpha_0$	1
c_T ⁴⁾		$\exp[0,071 T_s]$	$\log_{10}(c_T) = -0,796$ $+ 1,2 / \{1 + \exp[-0,4 (T_s - T_1)]\}$	$\exp[0,1 (T_s - T_2)]$

¹⁾ Williams et al., 1992; Stohl et al., 1996

²⁾ Pierce et al., 1990; Veldt, 1991; Günther et al., 1993

³⁾ α, α_0 : aktueller und Zenit-Sonnenstandswinkel

⁴⁾ T_s, T_1, T_2 : Bodentemperatur und Referenztemperaturen 28,3 bzw. 30 (jeweils °C)

5. Modellevaluierung für den Basislauf 2005: Vergleich der Tagesmittelwerte an ausgewählten Stationen

Der Vergleich der Modellergebnisse für 2005 ist in sehr detaillierter Form in den PAREST-Berichten "Anwendungen von chemischen Transportmodellen im Rahmen des PAREST-Projekts: Ergebnisvergleich REM-CALGRID, LOTOS-EUROS und MUSCAT-COSMO" (R. Stern, 2010c) für die Schadstoffkonzentrationen und "Meteorologie – Vergleich zum besseren Verständnis der unterschiedlichen Schadstoffkonzentrationssimulationen mit verschiedenen Chemie-Transport-Modellen" (A. Kerschbaumer, Mai 2010) für die meteorologischen Größen dargestellt worden. Hier findet man auch einen Vergleich mit Bodenmessungen für ausgewählte Stationen und eine statistische Analyse der Simulationsergebnisse. Nachfolgend soll noch einmal speziell auf die mit COSMO-MUSCAT berechneten NO_2 und PM_{10} -Konzentrationen eingegangen werden. Bei den PM liegt dabei der Fokus auf einer detaillierteren Diskussion der Anteile der primär emittierten und der sekundär gebildeten Partikelmasse an der Gesamtbelastung.

Eine zeitliche Auswertung im Vergleich mit gemessenen Tagesmittelwerten erfolgt für ausgewählte Stationen in Deutschland. An einigen wenigen Hintergrundstationen stehen für solch einen Vergleich neben PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$ (nur 2 Stationen) und NO_2 auch Messungen der Aerosolkomponenten zur Verfügung: Westerland, Waldhof, Zingst, Neuglobsow und Melpitz.

Außerdem werden die NO_2 - und PM_{10} -Tagesmittelwerte für zwei hoch belastete Stationen aus dem Ruhrgebiet verglichen: Bottrop und Duisburg-Bruckhausen.

Die Abbildungen 5.1 und 5.2 zeigen den Vergleich der an den Hintergrundstationen berechneten und beobachteten Tagesmittelwerte als Streudiagramme für verschiedene Stoffe. Die zeitlichen Verläufe der Tagesmittelwerte sind für die Station Melpitz in den Abbildungen 5.3 bis 5.6 dargestellt. Für NO_2 und PM_{10} sind hier außerdem die Zeitreihen für die Stationen Waldhof und Westerland abgebildet worden, um die räumliche Variabilität deutlich zu machen.

Die niedrigen beobachteten NO_2 -Tagesmittelwerte werden von COSMO-MUSCAT überschätzt (Abb. 5.1). Dagegen werden hohe gemessene Werte deutlich unterschätzt. Auffällig ist hier die große Streuung der NO_2 -Tagesmittelwerte. Die Analyse der Jahreszeitreihen (Abb. 5.3) bestätigt diese deutliche Unterschätzung gerade bei hohen NO_2 -Tagesmittelwerten. Insbesondere in Melpitz können die hohen Konzentrationen während der Wintermonate nicht reproduziert werden. Dafür werden niedrigere Messwerte im Juli/August stark überschätzt. Dies ist auch während des Sommers in Waldhof zu beobachten. Auffällig ist das fast gleiche Winter-Sommer-Niveau der Melpitz-Ergebnisse, was sich auch in dem flachen Verlauf der Punktwolke im Streudiagramm widerspiegelt (Abb. 5.1). Abgesehen von den bereits diskutierten Problemen (Unterschätzung für sehr hohen NO_2 -Tagesmittelwerte, Überschätzung im Sommer), werden die zeitlichen Verläufe für Waldhof und Westerland relativ gut reproduziert.

Die hohen beobachteten PM_{10} -Tagesmittelwerte werden nicht reproduziert (Abb. 5.1 und 5.4). COSMO-MUSCAT unterschätzt die über die 5 Hintergrund-Stationen gemittelten PM_{10} -Jahresmittelwerte um circa 15 %. (vgl. auch Tab. 6.1). Diese relativ geringe Unterschätzung der Jahresmittelwerte wird aber nur bedingt durch eine bessere Simulation der hohen Tagesmittelwerte sondern eher durch eine größere Anzahl von Überschätzungen im unteren Konzentrationsbereich hervorgerufen. Die Tagesmittelwerte für $\text{PM}_{2.5}$ liegen nur für 2 Stationen vor, Melpitz und Waldhof (Abb. 5.1 und 5.5). Die gemessenen Tagesmittelwerte werden zumeist unterschätzt. Lediglich in den unteren

Konzentrationsbereichen zeigen sich an manchen Tagen Überschätzungen der gemessenen $\text{PM}_{2.5}$ -Tagesmittelwerte. Im Mittel über die 2 untersuchten Stationen unterschätzt COSMO-MUSCAT die $\text{PM}_{2.5}$ -Jahresmittelwerte um circa 15% (vgl. auch Tab. 6.1).

$\text{PM}_{2.5}$ besteht zu einem großen Teil aus den anorganischen sekundären Aerosol-Ionen Sulfat, Nitrat und Ammonium, für die ebenfalls Messungen vorliegen. Die Streudiagramme für diese Komponenten zeigt Abb. 5.2. Die Zeitreihen für Melpitz sind exemplarisch in Abb. 5.6 zusammengestellt.

Die Sulfatbildung wird im Mittel um circa 20% unterschätzt (vgl. auch Tab. 6.1). Dafür überschätzt MUSCAT im Mittel die Ammonium- und die Nitrat-Konzentrationen. Interessant ist die stärkere Streuung der berechneten Nitrat-Tagesmittelwerte im Vergleich zu den Sulfat- und Ammonium-Tagesmittelwerten.

Der Anteil der sekundär gebildeten Partikelmasse an der Gesamtmasse ist insgesamt sehr groß (vgl. Flächenplot der Jahresmittelwerte in Abb. 6.6). Im ländlichen Bereich liegt er im Mittel bei 50 % oder darüber. Lediglich in Regionen mit starken Primäremissionen (z. B. Ruhrgebiet, Rhein-Main-Region, Großraum Berlin und München) überwiegt der Beitrag der primär emittierten Partikelmasse. Die entsprechende Zeitreihe für Melpitz (Abb. 5.7) verdeutlicht außerdem, dass dieser hohe Anteil über das gesamte Jahr auftritt. Simulierte PM-Spitzen werden im Wesentlichen durch einen starken Anstieg der sekundär gebildeten Partikelmasse verursacht. In den Messwerten werden solche hohen Belastungen häufig bei starken Einträgen durch Ferntransport (Saharastaub oder Emissionen durch Brände) oder bei stabilen Wetterlagen mit starken Inversionen hervorgerufen. Ferntransport-Ereignisse scheiden hier als Ursache aus, da sie in den verwendeten Emissionen und Randdaten nicht berücksichtigt sind. Offenbar kommt es im Falle starker Inversionen zu einer starken Erhöhung der gasförmigen Vorläufersubstanzen, was dann wiederum die Bildung sekundärer Partikelmasse forciert.

Beim Vergleich der Modelle (Stern, 2010c) wurde festgestellt, dass COSMO-MUSCAT im Vergleich zu den anderen Modellen relativ hohe Konzentrationen an sekundär gebildeter Partikelmasse modelliert. Dies führt dann in der Fläche zu vergleichsweise hohen PM_{10} -Konzentrationen. Sulfat entsteht aus der Oxidation des Schwefeldioxids wobei der Hauptoxidationspfad über die Nassphase läuft. Dieser Prozess wird in allen Modellen nur vereinfacht aber unterschiedlich dargestellt, was eine Erklärung für die unterschiedlich hohen Sulfatkonzentrationen ist. Die Berechnung der Ammoniumnitrat-Aerosole erfolgt in allen Modellen mit Hilfe eines Aerosolmoduls, das von einem thermodynamischen Gleichgewichtszustand zwischen der Aerosol- und der Gasphase ausgeht (vgl. Abschnitt 3.3). Aerosoldynamische Prozesse wie Koagulation oder Kondensation von Spurengasen an existierende Partikel werden innerhalb des Projektes von keinem der Modelle betrachtet. Die Menge des gebildeten Ammoniumnitrats hängt von der Temperatur, der Feuchte und den Konzentrationen der Vorläufersubstanzen Ammoniak und Salpetersäure ab. Alle diese Größen haben in den verschiedenen Modellen unterschiedliche Werte, was dann trotz ähnlicher physikalischer Behandlung zu unterschiedlichen Nitrat- und Ammonium-Konzentrationen führt. Das komplexe Zusammenwirken der meteorologischen Einflussgrößen und der Konzentrationen in der Gasphase beeinflusst letztlich die sekundäre Aerosolbildung und damit die PM-Konzentrationen.

Im Mittel werden die $PM_{2.5}$ -Konzentrationen stärker unterschätzt als die sekundären anorganischen Aerosole. Wesentliche andere Bestandteile von $PM_{2.5}$ sind das primäre EC und OC sowie die sekundären organischen Aerosole (SOA). Für diese Komponenten liegen sehr wenige Messungen vor, da deren messtechnische Erfassung außerordentlich schwierig ist (Putaud et al., 2004). Auch in der Modellrechnung ist die Behandlung dieser Komponenten schwierig, da die Emissionsabschätzungen für EC und OC ungenau sind und die physikalisch/chemischen Prozesse, die zur Bildung der organischen Aerosole führen, nur zum Teil bekannt sind (Simpson et al., 2007).

Das Modellverhalten an zwei stark durch industrielle Emissionen geprägten Stationen zeigen die Abb. 5.8 und 5.9. An beiden Standorten reproduziert COSMO-MUSCAT die Höhe der gemessenen NO_2 - und PM_{10} -Konzentrationen relativ gut. An einzelnen Tagen zeigt sich aber auch hier die schon mehrfach diskutierte Überschätzung der Messung, die wahrscheinlich durch einen zu geringen vertikalen Austausch verursacht wird. Es muss auch berücksichtigt werden, dass durch die Maschenweite der Modelle in Gebieten mit hoher Emissionsdichte eine Station in der Rechnung unter Umständen von Quellen beeinflusst wird, die sich bei bestimmten Windrichtungen im Luv des Messgerätes befinden und damit keinen Konzentrationsbeitrag liefern können. Eine solche Überschätzung des Emissionseinflusses kann dann in Abhängigkeit von der meteorologischen Situation zu Überschätzungen der gemessenen Konzentrationen führen, andererseits bei entgegen gesetzten Windrichtungen eher zur Unterschätzung führen. Dies kann ohne eine Detailanalyse der lokalen Umgebungsverhältnisse an den Stationen nicht geklärt werden. Diese Problematik wird im Zusammenhang mit den höher aufgelösten Ballungsraumrechnungen in Abschnitt 7 noch einmal diskutiert.

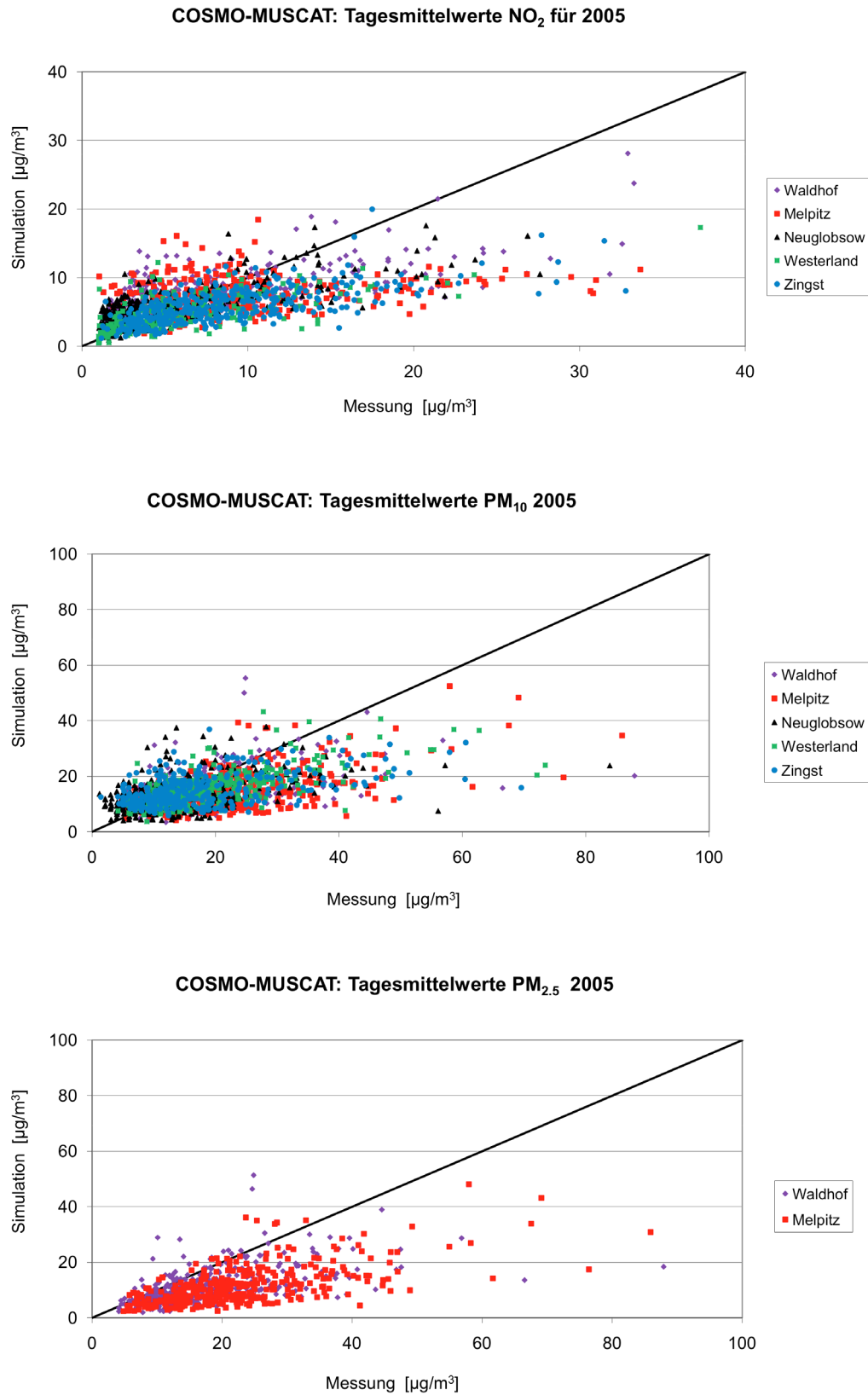


Abb. 5.1: Streudiagramme der berechneten und gemessenen Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Umlandstationen für NO₂ (oben), PM₁₀ (mitte) und PM_{2.5} (unten).

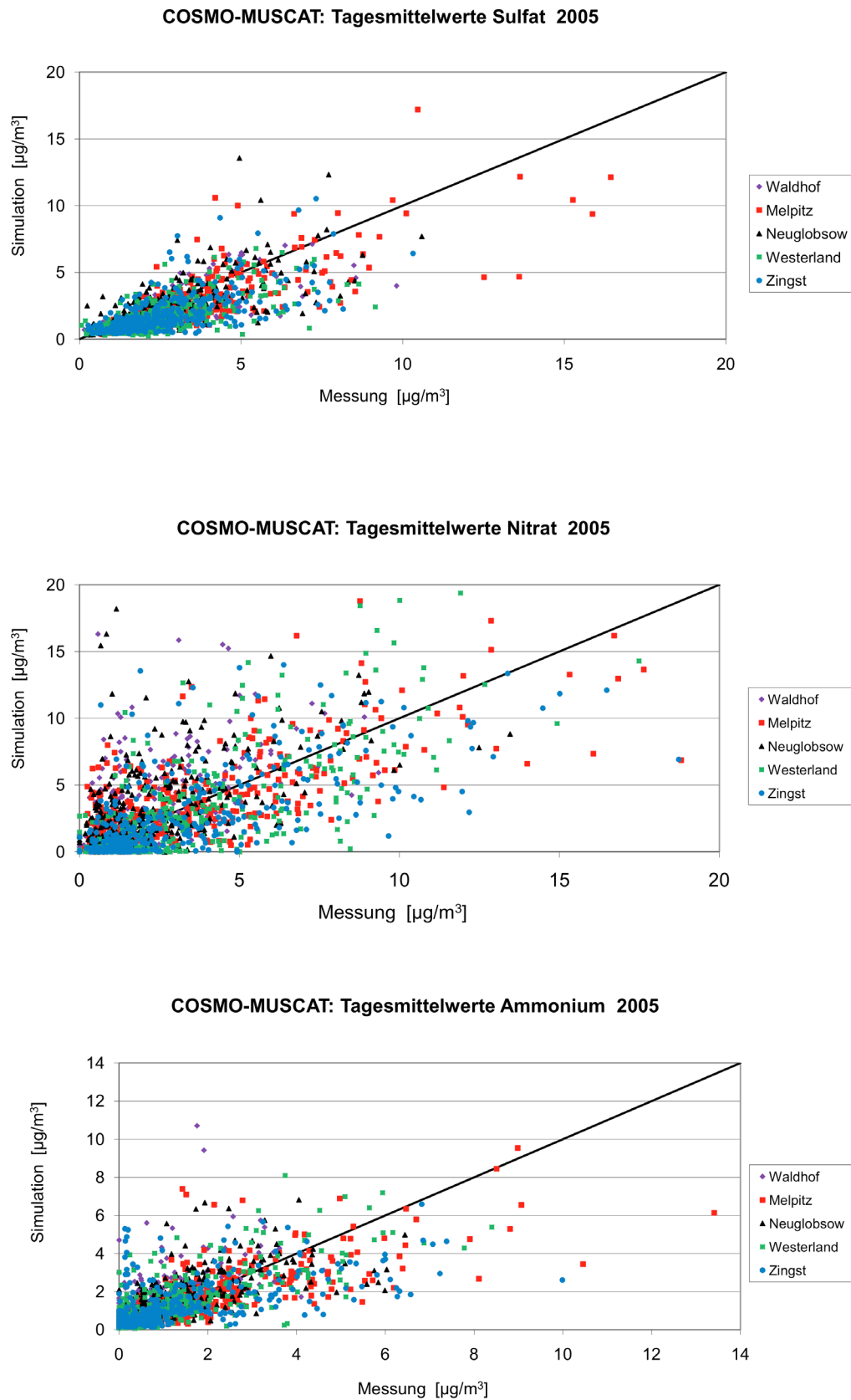


Abb. 5.2: Streudiagramme der berechneten und gemessenen Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Umlandstationen für Sulfat (oben), Nitrat (mitte) und Ammonium (unten).

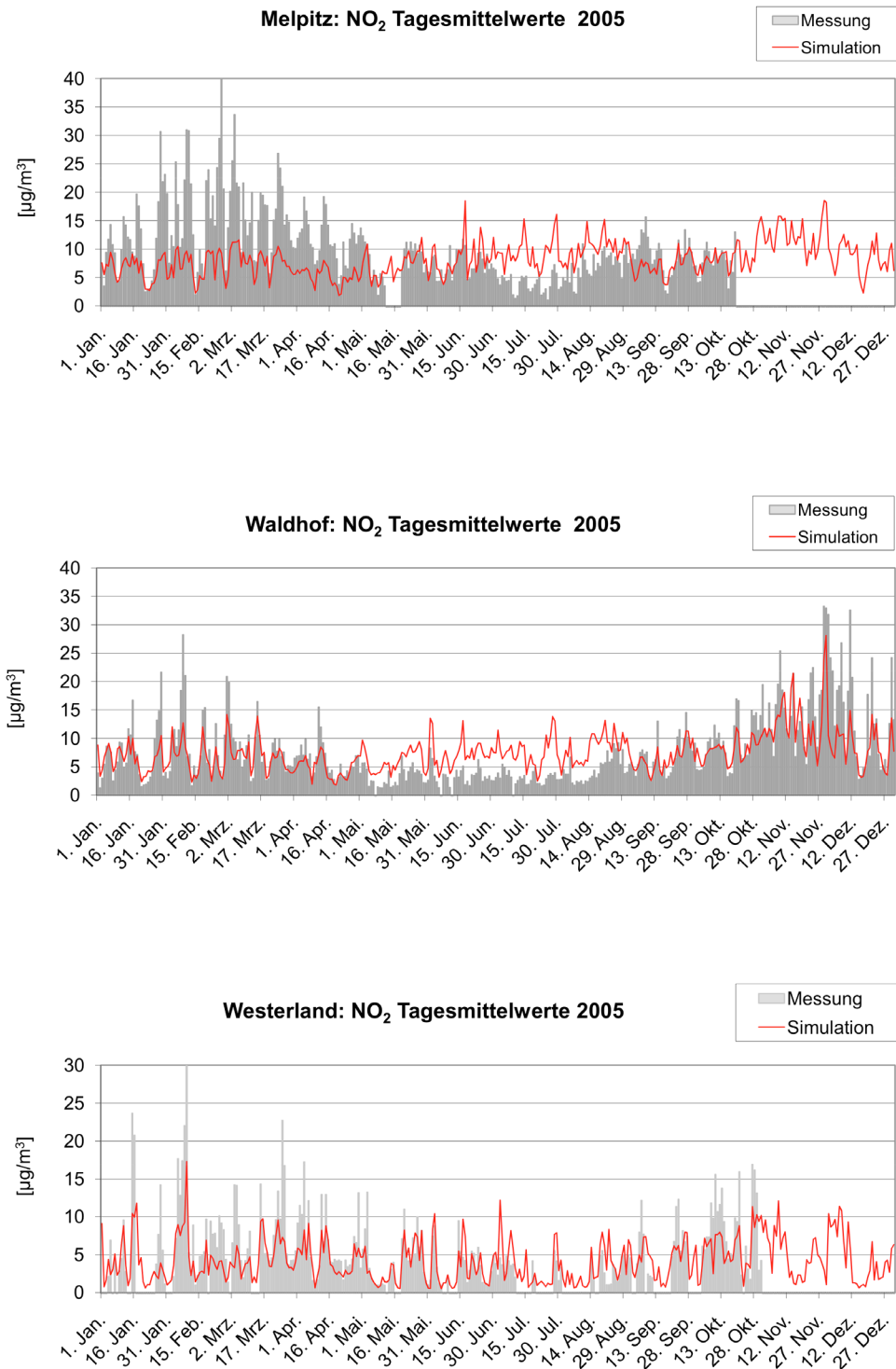


Abb. 5.3: Zeitreihen der berechneten und gemessenen NO₂-Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Melpitz (oben), Waldhof (mitte) und Westerland (unten).

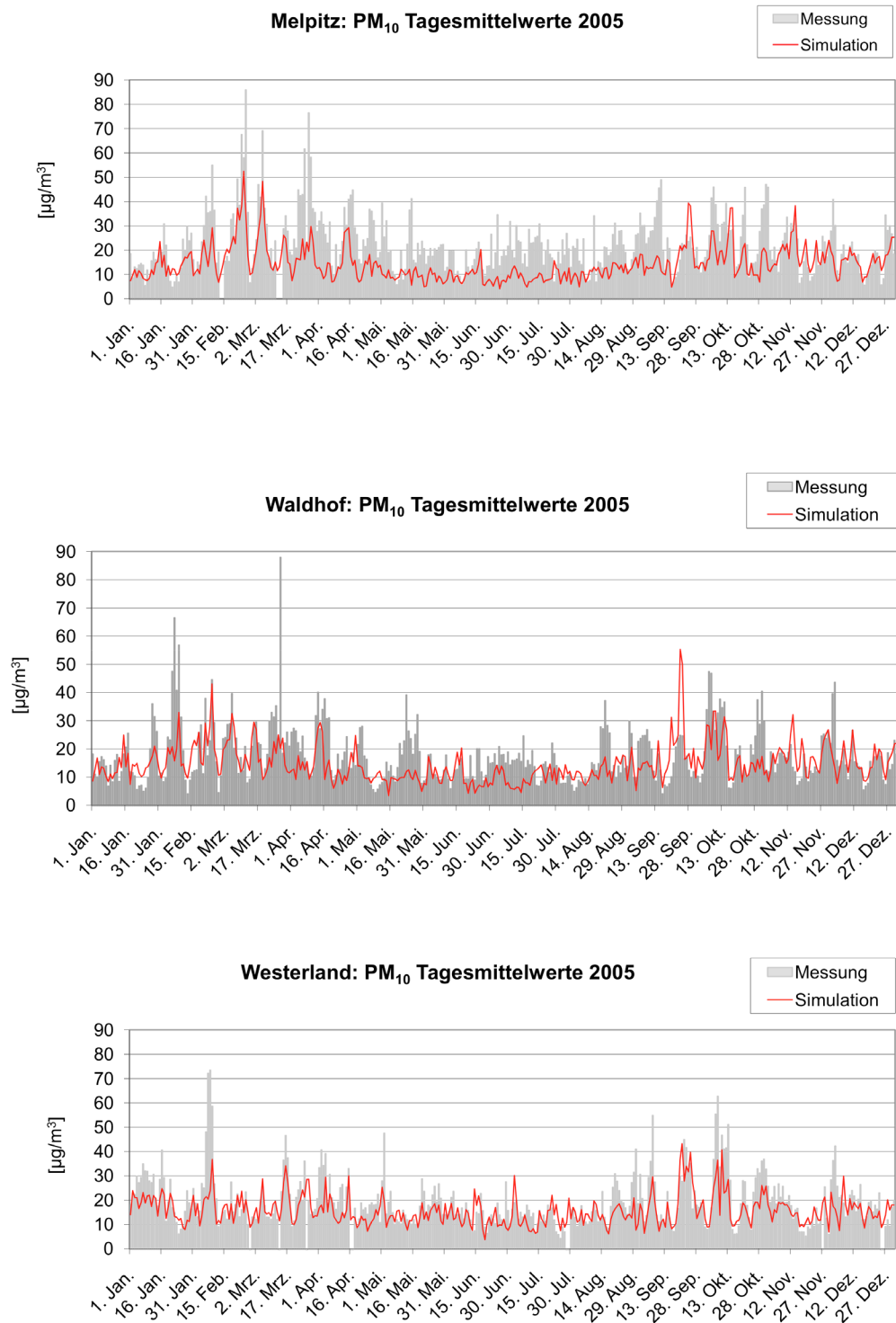


Abb. 5.4: Zeitreihen der berechneten und gemessenen PM₁₀-Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Melpitz (oben), Waldhof (mitte) und Westerland (unten).

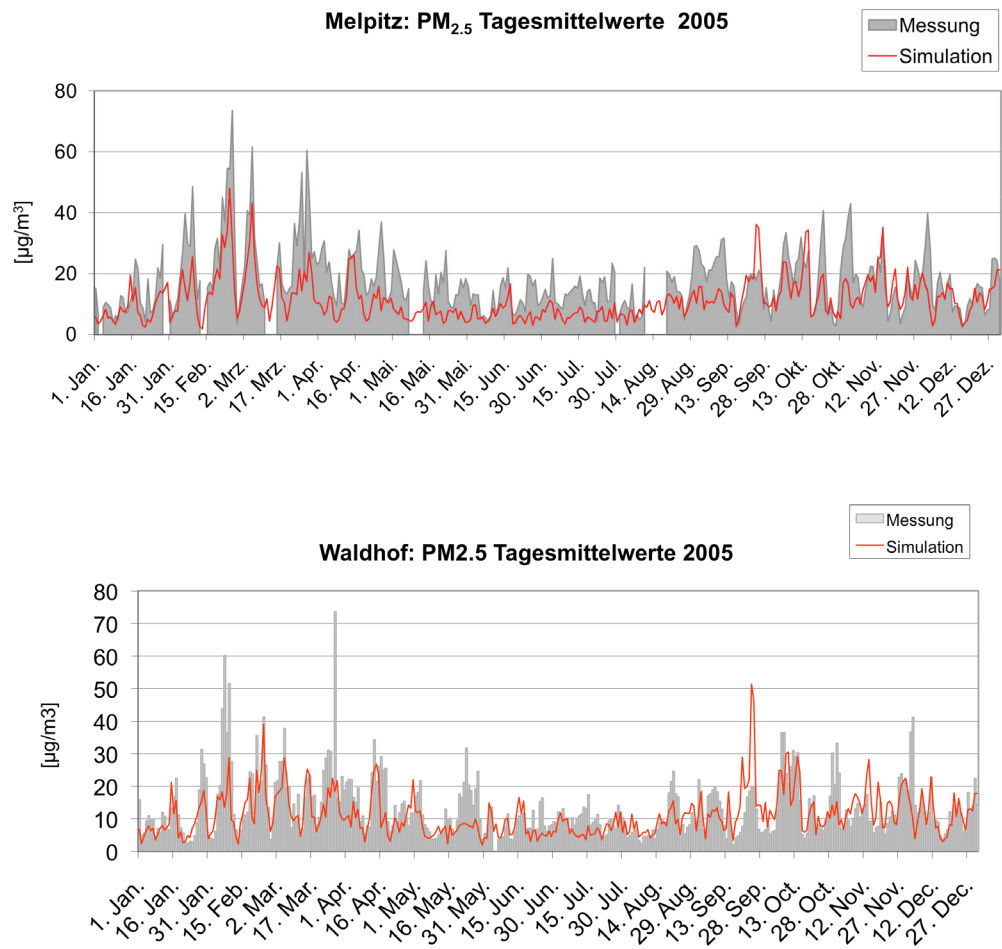


Abb. 5.5: Zeitreihen der berechneten und gemessenen PM_{2.5}-Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Melpitz (oben) und Waldhof (unten).

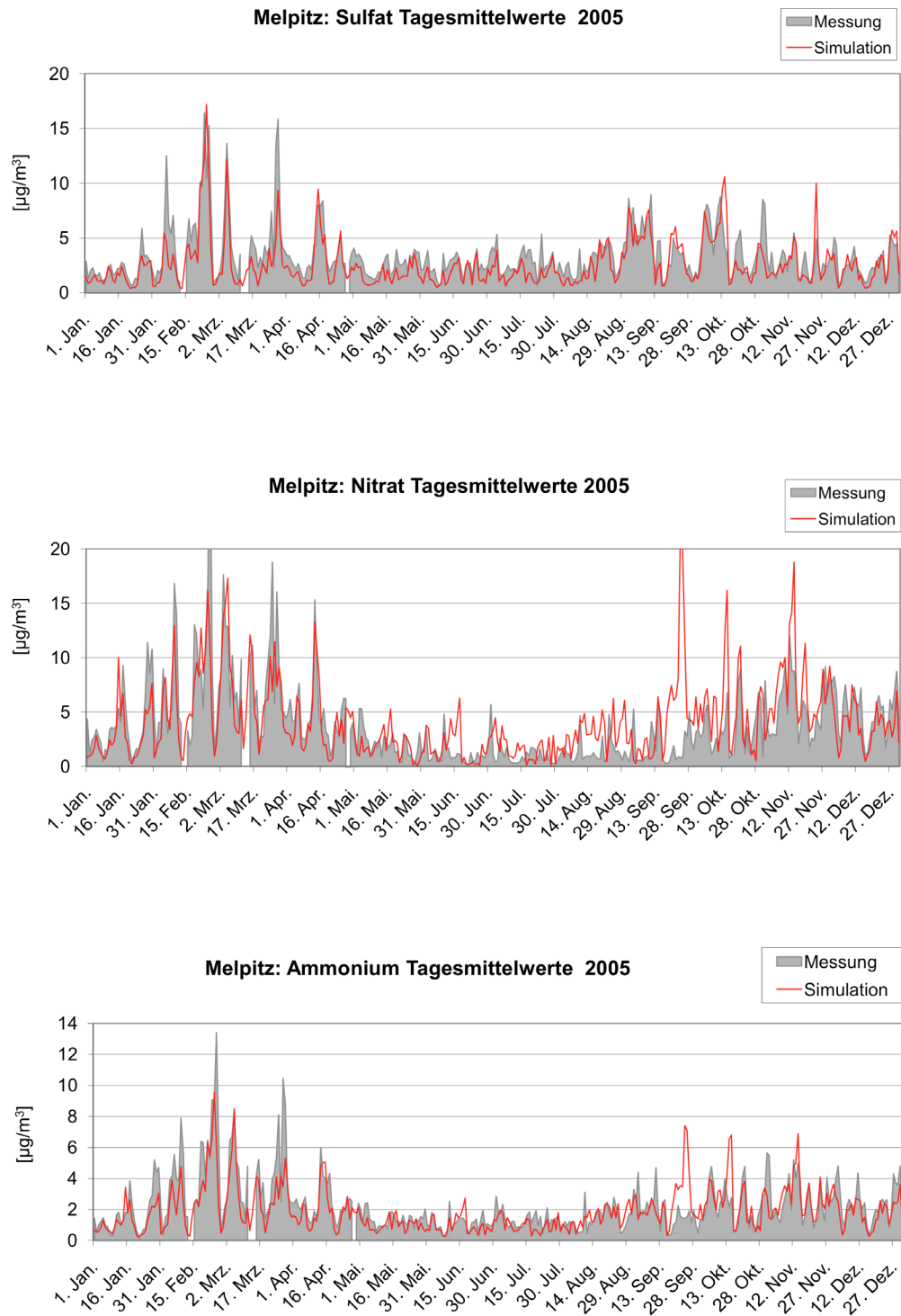


Abb. 5.6: Zeitreihen berechneten und gemessenen Tagesmittelwerte $[\mu\text{g}/\text{m}^3]$ an der Stationen Melpitz für Sulfat (oben), Nitrat (mitte) und Ammonium (unten).

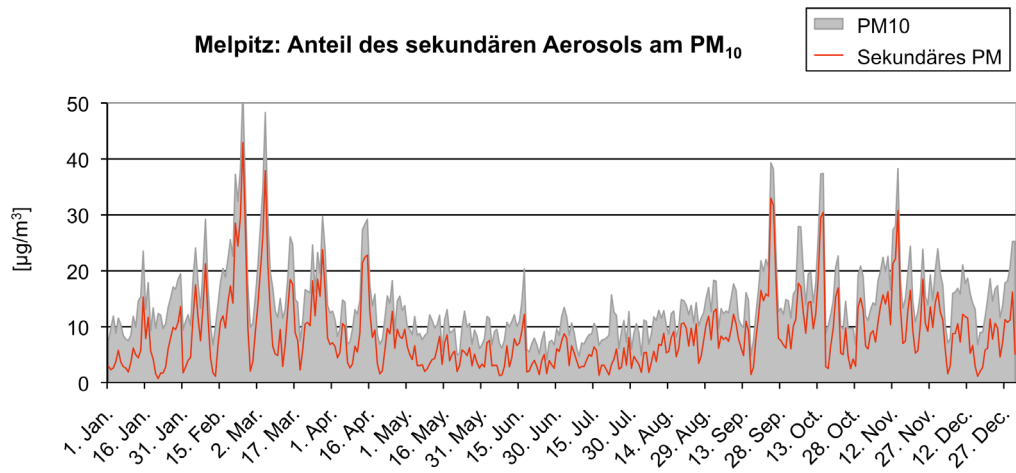


Abb. 5.7: Zeitreihen berechneten und gemessenen Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an der Stationen Melpitz für die sekundär gebildete Partikelmasse.

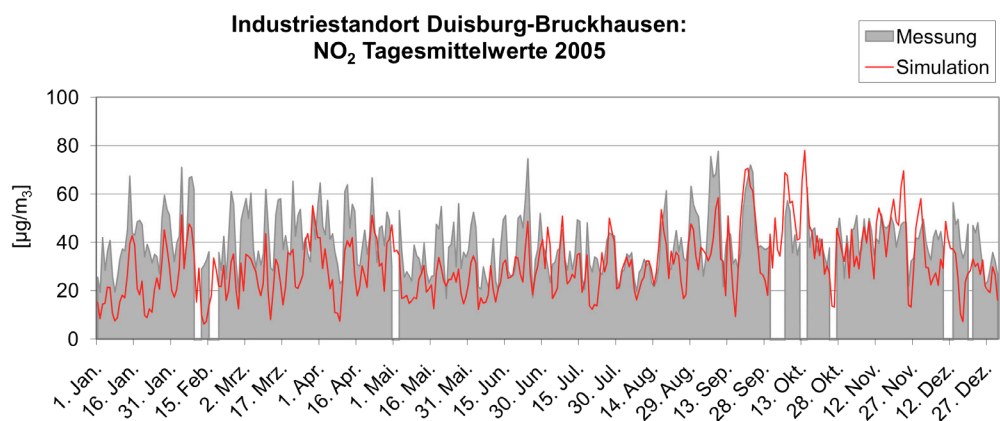
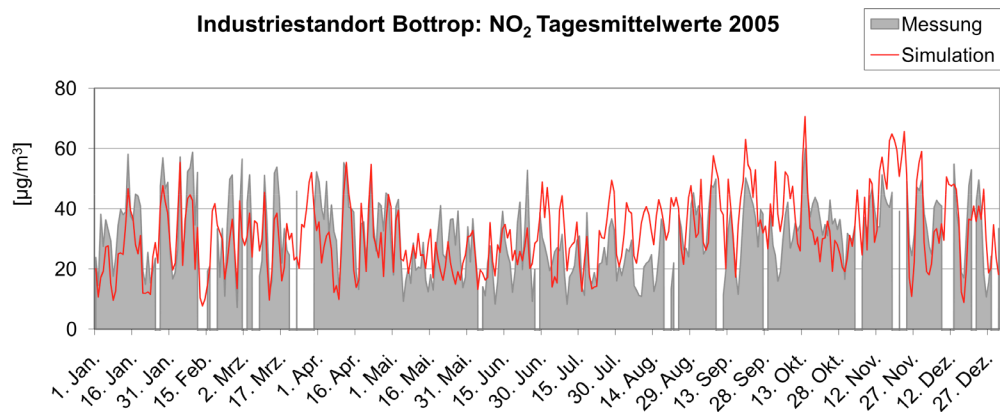


Abb. 5.8: Zeitreihen der berechneten und gemessenen NO_2 -Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Bottrop (oben) und Duisburg-Bruckhausen (unten).

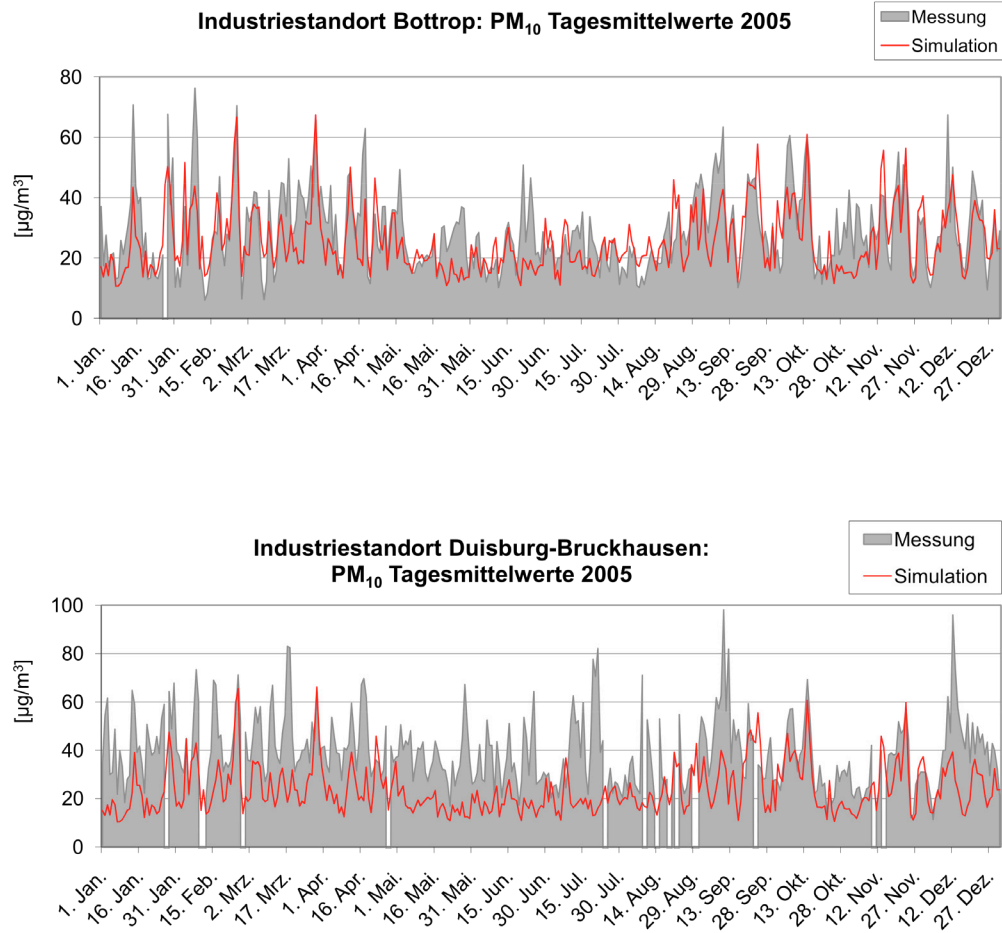


Abb. 5.9: Zeitreihen der berechneten und gemessenen PM₁₀–Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Bottrop (oben) und Duisburg-Bruckhausen (unten).

6. Abschätzung der Reduzierung der mittleren jährlichen Schadstoffbelastung für zwei ausgewählte Emissionsminderungsszenarien

Die Anwendung mehrerer Modelle innerhalb des PAREST-Projektes diente der Ergebnisabsicherung und der Abschätzung einer Bandbreite der zu erwartenden Reduzierung der mittleren Jahresbelastungen. Im Bericht “Analyse der Unsicherheiten/Bandbreiten in der im PAREST-Projekt verwendeten Kausalkette Emission-Transmission-Immission“ (R. Stern, 2010d) werden die Simulationen der Zukunftsszenarien und die daraus abgeleiteten Reduktionspotentiale für die drei Modellsysteme miteinander verglichen, bewertet und diskutiert. Die nachfolgende Darstellung bezieht sich ausschließlich auf die mit COSMO-MUSCAT berechneten Minderungspotentiale für NO₂ und PM. Bei der Analyse zeigt sich, dass insbesondere in ländlichen Regionen der Hauptanteil der bis 2020 prognostizierten PM-Reduktion durch eine Verringerung des sekundär gebildeten Anteils erreicht wird. Die Minderung der primären PM-Emissionen wirkt dagegen vor allem in den hoch belasteten Regionen. Diese Effekte sollen hier näher untersucht werden. Dabei werden sowohl Flächenplots der Jahresmittelwerte als auch Streudiagramme und Zeitreihen für die in Abschnitt 5 betrachteten Messstandorte berücksichtigt. Die grafischen Darstellungen werden durch einen Vergleich der entsprechenden Jahresmittelwerte in Tab. 6.1 und 6.2 ergänzt.

Mit COSMO-MUSCAT wurde die Minderung der Schadstoffbelastung für zwei unterschiedliche Zukunftsszenarien untersucht. Das Referenzszenarium 2020 beschreibt den prognostizierten Emissionszustand, der nach Umsetzung jetzt bereits beschlossener Maßnahmen im Jahr 2020 erreicht werden soll. Darüber hinaus ist das sogenannte MFR-Szenario (“Maximum Feasible Reduction“) simuliert worden, bei dem weitere Bündel realisiert werden, die im Detail in Theloke et al. (2010) beschrieben sind. Diese Maßnahmenbündel beschreiben die gegenwärtig mit technischen und nicht-technischen Maßnahmen noch erreichbaren Emissionsminderungen. Das MFR-Szenario beschreibt also die maximalen Emissionsminderungen, die mit heute umsetzbaren Maßnahmen bis zum Jahr 2020 erreicht werden könnten.

Die Simulation der Zukunftsszenarien erfolgte mit demselben Modell-Setup wie für das Basisjahr 2005. Es wurden lediglich die entsprechenden Datenfiles für die anthropogenen Emissionen ersetzt. Dabei sind die benötigten Randwerte für das Deutschlandgebiet N2 vorab mit einen N1-Lauf generiert worden, bei dem die Emissionen des Referenzszenarios 2020 für Europa verwendet wurden. Die daraus resultierenden Randwerte sind dann für beide Zukunftsszenarien genutzt worden. Allen Simulationen liegt die Meteorologie des Jahres 2005 zugrunde.

Die Abb. 6.1 zeigt die mit COSMO-MUSCAT für 2005, das Referenzszenario 2020 und das MFR-Szenario berechnete Verteilung der NO₂-Jahresmittelwerte in Deutschland. Zur besseren Einschätzung der Auswirkungen der Maßnahmenpakete zeigt die Abbildung auch die absoluten NO₂-Abnahmen bezüglich der Emissionsreferenz 2005 und die Differenz “Referenz 2020 – MFR2020“ (unterschiedliche Skala!). Alle Abbildungen wurden so skaliert, dass die flächenmäßigen Minderungen deutlich sichtbar sind. Bei der gewählten Niveauflächen-Darstellung steht dabei der oberste Wert der Skala für alle Gebiete, in denen mindestens diese Konzentrationen erreicht werden. Darüber hinaus sind zur Analyse der Ergebnisse weitere Abbildungen verwendet worden. Dies trifft insbesondere für die Untersuchung aufgetretener Maxima und der Konzentrationsänderungen innerhalb von Ballungsräumen zu.

Im Jahr 2005 werden die maximalen NO_2 -Jahresmittelwerte von über $25 \mu\text{g}/\text{m}^3$ hauptsächlich im Ruhrgebiet berechnet. Lokale Maxima findet man weiterhin im Bereich der großen Ballungsräume (Rhein-Main, München, Berlin). Einen großen Beitrag leisten hier auch große Flughäfen mit sehr hohen NO_x -Emissionen. Wie die Abbildung zeigt, liegt in diesen Regionen auch das höchste Minderungspotential. Durch die bis zum Jahre 2020 umgesetzten Maßnahmen sinken die NO_2 -Jahresmittelwerte hier zum Teil um mehr als $15 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Sehr hohe Abnahmen der NO_2 -Jahresmittelwerte werden auch im Umfeld der Hauptverkehrsadern berechnet, da die NO_x -Emissionen des Straßenverkehrs im Referenzszenario 2020 um 70% bis 80% abnehmen (vgl. Stern, 2010b). Die zusätzlichen Maßnahmen des MFR-Szenarios führen zu einer weiteren Senkung der Konzentrationen um ca. $2 \mu\text{g}/\text{m}^3$, speziell in den Ballungsräumen mit großen Flughäfen. Durch die relativ starke Reduzierung der NO_x -Konzentrationen zeichnen sich die Emissionen der internationalen Schifffahrt auf dem Nord-Ostseekanal noch deutlicher in den 2020-Szenarien ab.

Im Streudiagramm (Abb. 6.7) ist die Reduktion der NO_2 -Konzentrationen an den Umlandstandorten sehr gut ablesbar. Die relativ große Streuung zeigt aber auch, dass die Abnahme nicht linear verläuft, sondern räumlich und zeitlich variiert. Im Jahresmittel kann die NO_2 -Belastung außerhalb der stark belasteten Gebiete beim Referenzszenario 2020 auf ca. 60-70 % und beim MFR-Szenario um weitere 5 % gesenkt werden (Tab. 6.1). In den Ruhrstandorten (Tab. 6.2) wird für das Referenzszenario 2020 eine Reduzierung um ca. $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auf ebenfalls 60-70 % der 2005-Werte prognostiziert. Durch die zusätzlichen Maßnahmen des MFR-Szenarios lässt sich die Belastung etwas mehr als im Umland um ungefähr 6-10 % verringern. Die Melpitz-Zeitreihe (Abb. 6.10) macht deutlich, dass die Minderungsmaßnahmen vor allem bei sehr hohen Konzentrationen in den Winter- und Herbstmonaten sehr effektiv sind. Dagegen können hohe Belastungen während des Sommers vergleichsweise nur wenig verringert werden. Die Abb. 6.2 zeigt die für das Emissions-Referenzjahr 2020 und das MFR-Szenario berechneten Verteilungen der PM_{10} -Jahresmittelwerte in Deutschland. Die maximalen Werte von über $30 \mu\text{g}/\text{m}^3$ werden im Ruhrgebiet und im Raum Ludwigshafen/Mannheim berechnet. Zur besseren Einschätzung der Auswirkungen der Maßnahmenpakete zeigt die Abbildung außerdem die absoluten PM_{10} -Abnahmen (unterschiedliche Skalen!). Durch die bis zum Jahre 2020 umgesetzten Maßnahmen sinken die PM_{10} -Jahresmittelwerte nach den Berechnungen zwischen 2 und $6 \mu\text{g}/\text{m}^3$. In Tab. 6.1 erkennt man die Bandbreite der im Umland berechneten Immissionsminderungen für die Emissionsentwicklung von 2005 nach 2020. Insgesamt kann die PM_{10} -Belastung hier auf 75-80 % reduziert werden. Dass diese Werte in den Küstenbereichen (Westerland, Zingst) nicht ganz erreicht werden, liegt hier am relativ hohen Seesalz-Anteil an der Gesamtmasse. Die geringere Reduzierung in Westerland (grün) ist auch sehr gut im Streudiagramm (Abb. 6.7) erkennbar. Innerhalb der Ballungsräume kann die PM_{10} -Konzentration bis 2020 auf fast 80 % verringert werden (Tab. 6.2). Die Umsetzung der MFR-Maßnahmen würde hier zu einer zusätzlichen Minderung um mehr als $1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und in ländlichen Gebieten um $0,5\text{-}0,9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ führen.

Tab. 6.1: Zusammenstellung der gemessenen und berechneten Jahresmittelwerte an den Umlandstandorten.

Station	Stoff	Messung Mittel- wert [µg/m³]	2005 Mittel- wert [µg/m³]	2020		MFR2020	
				Mittel- wert [µg/m³]	Verhält- nis zu 2005 [%]	Mittel- wert [µg/m³]	Verhält- nis zu 2005 [%]
Melpitz	NO2	6.30	8.18	4.85	59	4.44	54
	PM10	22.44	15.86	12.17	76	11.27	71
	PM2.5	17.65	12.94	9.10	70	8.25	63
	Sulfat	3.40	2.57	1.48	57	1.30	50
	Nitrat	3.78	4.05	2.41	59	2.02	49
	Ammonium	2.23	1.90	1.12	58	0.95	50
	Primäre PM	-	4,55	4.52	99	4.360	95
Neuglobsow	NO2	5.45	5.51	3.26	59	2.98	53
	PM10	13.78	14.72	11.67	79	11.00	74
	PM2.5	-	11.49	8.52	74	7.88	68
	Sulfat	2.63	2.20	1.36	61	1.24	56
	Nitrat	2.36	3.30	2.08	63	1.77	53
	Ammonium	1.26	1.58	0.99	62	0.86	54
	Primäre PM	-	4.18	4.12	98	4.02	96
Waldhof	NO2	7.54	7.45	4.60	61	4.22	56
	PM10	17.71	16.21	12.68	78	11.90	73
	PM2.5	13.37	12.73	9.18	72	8.44	66
	Sulfat	1.90	2.10	1.34	63	1.21	57
	Nitrat	1.67	4.30	2.62	60	2.24	52
	Ammonium	0.94	1.84	1.14	61	0.99	54
	Primäre PM	-	4.42	4.32	97	4.19	94
Westerland	NO2	6.30	4.18	2.89	69	2.70	64
	PM10	19.62	17.17	14.67	85	14.26	83
	PM2.5	-	10.48	8.05	76	7.66	73
	Sulfat	2.59	1.63	1.15	70	1.10	67
	Nitrat	3.56	3.16	1.98	62	1.75	55
	Ammonium	1.27	1.37	0.90	65	0.82	59
	Primäre PM	-	4.12	4.12	100	4.08	99
Zingst	NO2	8.47	5.83	4.25	72	4.04	69
	PM10	17.26	15.18	12.57	82	12.07	79
	PM2.5	-	10.66	8.15	76	7.66	71
	Sulfat	2.69	1.96	1.32	67	1.23	62
	Nitrat	3.39	2.84	1.77	62	1.52	53
	Ammonium	1.43	1.37	0.88	64	0.79	57
	Primäre PM	-	4.21	4.25	100	4.18	98

Tab. 6.2: Zusammenstellung der gemessenen und berechneten Jahresmittelwerte an zwei urbanen Standorten im Ruhrgebiet.

Station	Stoff	Messung Mittel- wert [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2005 Mittel- wert [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	2020		MFR2020	
				Mittel- wert [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	Verhält- nis zu 2005 [%]	Mittel- wert [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	Verhält- nis zu 2005 [%]
Duisburg- Bruckhausen	NO ₂	40.123	30.81	22.56	73	19.45	63
	PM ₁₀	39.399	24.00	19.86	82	18.69	77
	PM _{2.5}	-	17.49	12.95	74	11.89	67
	Sulfat	-	2.91	1.96	67	1.68	57
	Nitrat	-	5.38	3.42	63	3.10	57
	Ammonium	-	2.38	1.54	64	1.37	57
	Primäre PM	-	10.70	9.53	89	9.16	85
Bottrop- Welheim	NO ₂	31.134	31.78	20.50	64	18.45	58
	PM ₁₀	28.686	25.73	20.76	80	19.44	75
	PM _{2.5}	-	18.32	13.53	73	12.32	67
	Sulfat	-	3.29	2.25	68	1.90	57
	Nitrat	-	5.17	3.34	64	3.01	58
	Ammonium	-	2.42	1.60	66	1.41	58
	Primäre PM	-	10.97	10.14	84	9.69	80

Für PM_{2.5} liegen die erreichbaren absoluten Minderungspotentiale im selben Bereich wie die für PM₁₀ diskutierten Werte (Abb. 6.3). Dies führt sowohl in urbanen als auch ländlichen Regionen zu einer Verringerung der PM_{2.5}-Belastung auf 70-75 %. Für das MFR-Szenario ist eine weitere Reduzierung um ca. 5 % zu erwarten. Wie die Simulationen zeigen, beruht ein Großteil der zu erwartenden PM-Minderung auf einer Reduzierung der sekundär gebildeten Partikelmasse. Nachfolgend sollen deshalb die Minderungspotentiale der einzelnen Anteile detaillierter diskutiert werden. Neben den in Tab. 6.1 und 6.2 aufgeführten PM-Quellen werden in MUSCAT noch Seesalz und SOA modelliert. Die Seesalz-Emissionen werden im Modell in Abhängigkeit von der meteorologischen Situation (insbesondere der Windgeschwindigkeit) direkt berechnet. Da in allen Szenarien dieselbe Meteorologie verwendet wird, gibt es hier keine relevanten Unterschiede. Auch die biogenen Vorläufersubstanzen für die SOA-Bildung (Schell et al., 2001) werden im Modell unter Berücksichtigung der aktuellen meteorologischen Felder (Temperatur, Feuchte, Strahlung) emittiert. Der Bildungsmechanismus berücksichtigt aber auch anthropogene Vorläufersubstanzen und Reaktionspartner aus der Gasphase, die in den beiden Szenarien für 2020 ebenfalls reduziert wurden. Die resultierenden Änderungen in den SOA-Konzentrationen bewegen sich aber nur im Bereich von 0,2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ und sollen deshalb hier nicht diskutiert werden.

Das Minderungspotential für die primären Partikelemissionen ist relativ gering (Abb. 6.5). Die Jahresmittel der primär emittierten Partikel ($\text{PPM}_{10} = \text{PPM}_{2.5} + \text{PPM}_{2.5-10}$) erreichen in den Ballungsräumen (vgl. Tab. 6.2) zwar Werte über 10 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, können aber im Referenzszenario 2020 nur um ca. 1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ und durch die zusätzlichen MFR-Maßnahmen um weitere 0,5 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ gesenkt werden. In den ländlichen Regionen ist die vorhergesagte Reduktion noch wesentlich geringer ($\leq 0,3 \mu\text{g}/\text{m}^3$). Das belegen auch die entsprechenden Streudiagramme für die Umlandstandorte (Abb. 6.9).

Die erreichbaren Minderungen in der PM-Belastung basieren im Wesentlichen auf der Verringerung der sekundär gebildeten Masse an Ammonium-Sulfat und Ammonium-Nitrat. Der Bildungsprozess ist nichtlinear und hängt stark von den Vorläufersubstanzen SO_2 , NO_x und NH_3 ab, die direkt emittiert bzw. in der Gasphase gebildet werden (vgl. Abschnitt 4). Die entsprechenden Bildungsraten werden teilweise wesentlich durch meteorologische Parameter (Temperatur, Feuchte) beeinflusst. In Abb. 6.4 sind die Jahresmittelwerte für Ammonium-Sulfat und Ammonium-Nitrat flächenmäßig dargestellt. Im Jahr 2005 erreichen die mittleren Konzentrationen für Ammonium-Nitrat maximale Werte von über $7 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und für Ammonium-Sulfat von über $4 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Die hohen Sulfat-Werte im Südosten resultieren aus den immer noch recht hohen SO_2 -Emissionen im angrenzenden Polen und Tschechien. Diese Emissionen in den Nachbarländern sollen bis 2020 gesenkt werden, was zur Reduzierung des Ammonium-Sulfats im Südosten Deutschlands führen wird. Die Ammoniak-Emissionen bleiben im Referenzszenario 2020 nahezu konstant. Sie werden erst durch die zusätzlichen MFR-Maßnahmen verringert, was dann zu einer Verminderung der Ammonim-Sulfat-Konzentrationen um ca. 2 % in dieser Region führt.

Beim Nitrat zeichnen sich zwei Regionen mit Spitzwerten deutlich ab: Nordwestdeutschland und Mittelbayern. Im Nordwesten und in den angrenzenden Niederlanden gibt es eine intensive Viehhaltung mit sehr großen Ammoniak-Emissionen. Im nicht weit entfernten dicht besiedelten Ruhrgebiet mit viel Verkehr und Industrie wird wiederum sehr viel NO_x emittiert. Beides zusammen bietet gute Voraussetzungen für die Ammonium-Nitrat-Bildung. Die Ursache für die bis 2020 prognostizierte Verringerung des Jahresmittelwertes um über $3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ liegt in der drastischen Reduktion der NO_x -Emissionen in diesem Gebiet. In Mittelbayern gibt es ebenfalls Tierhaltung und viele Verkehrstrassen. Hinzu kommt hier außerdem der Großflughafen München. Ähnlich wie im Nordwesten würde dies sowohl die Spitzenwerte als auch die Reduktion bis 2020 erklären. Die Umsetzung der MFR-Maßnahmen würde bei Ammonium-Nitrat nur zu einer zusätzlichen Minderung um maximal $0,5 \mu\text{g}/\text{m}^3$ führen. Bei Ammonium-Sulfat könnte damit die Belastung insbesondere im Südosten um weiter $2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ gesenkt werden.

Der Anteil der sekundär gebildeten Partikelmasse am gesamten PM_{10} wird in Abb. 6.6 gezeigt. Im Jahr 2005 waren dies im Mittel außerhalb der urbanen Regionen 50 % oder mehr. Dabei fällt auf, dass der relative Anteil vor allem in Südost-Deutschland (Bayern, Thüringen, Sachsen) besonders hoch ist. Dieser Effekt lässt sich bereits bei den Absolutwerten feststellen, wird aber durch die kleineren PM_{10} -Konzentrationen in diesen Bereichen noch verstärkt. In den Ballungsräumen (Ruhrgebiet, Rhein-Main-Region, Regionen um Mannheim, München und Berlin) liegt der relative Anteil um die 40 %. Für 2020 wird eine Reduzierung des sekundären Anteils um bis zu 25 % auf durchschnittlich 35-45 % vorhergesagt. Die zusätzlichen MFR-Maßnahmen führen nur zu einer weiteren unwesentlichen Verringerung des Anteils um 1-2 %. Bemerkenswert in Abb. 6.6 ist außerdem der starke Süd-Nord-Gradient in den Differenzen zu den Jahresmittelwerten von 2005. Wie bereits ausgeführt, liegt das Hauptpotential zur Minderung der PM-Belastung in der Verringerung des sekundären Anteils. Dies zeigt auch ein Vergleich der Mittelwerte der sekundär gebildeten Aerosolmassen an den Stationsstandorten in den Tab. 6.1 und 6.2. Für das Referenzszenario 2020 wird eine Reduzierung auf 55-65 % des Niveaus von 2005 prognostiziert. Lediglich in Küstennähe können diese Werte nicht ganz erreicht werden. Die MFR-Maßnahmen führen zu einer weiteren Reduzierung um ca. 5 %. Die prozentuale Abnahme ist für alle drei anorganischen sekundären Komponenten vergleichbar. Massenmäßig leistet Nitrat den größten Beitrag. Die Heterogenität in Raum und Zeit bei der Minderung der Konzentrationen erkennt man in den entsprechenden Streudiagrammen sehr gut (Abb. 6.8). Hierin kommt auch das nichtlineare Verhalten der Bildungsprozesse zum Ausdruck. Die Zeitreihen für Melpitz in Abb. 6.11 zeigen dies ebenfalls, da die Abnahme

von 2005 nach 2020 nicht streng anteilig erfolgt. Die Konzentrationsspitzen werden teilweise fast vollständig reduziert. Während der Sommermonate werden deutlich kleinere Tagesmittelwerte prognostiziert. Die große zeitliche Variabilität findet man aber auch hier. Auf Grund des hohen Anteils der sekundären Partikelmasse am PM_{10} wird diese Variabilität auch den PM_{10} -Konzentrationen aufgeprägt (Abb. 6.10). Insbesondere gilt dies für die hohen Maxima im Frühjahr und Herbst.

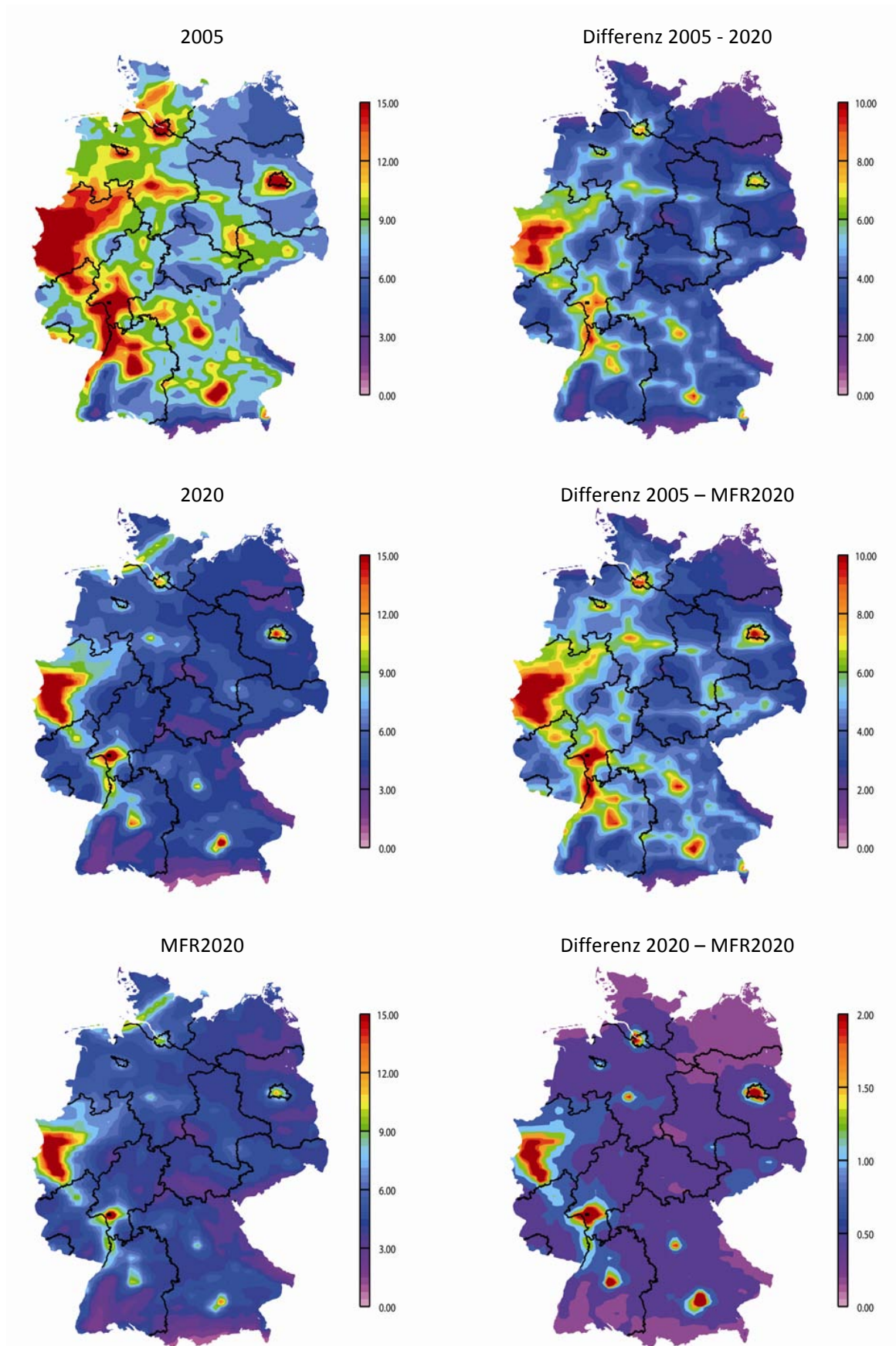


Abb. 6.1: NO₂ –Jahresmittelwerte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$, links: Konzentrationen der Szenarien 2005, 2020 und MFR2020, rechts: die entsprechenden Differenzen.

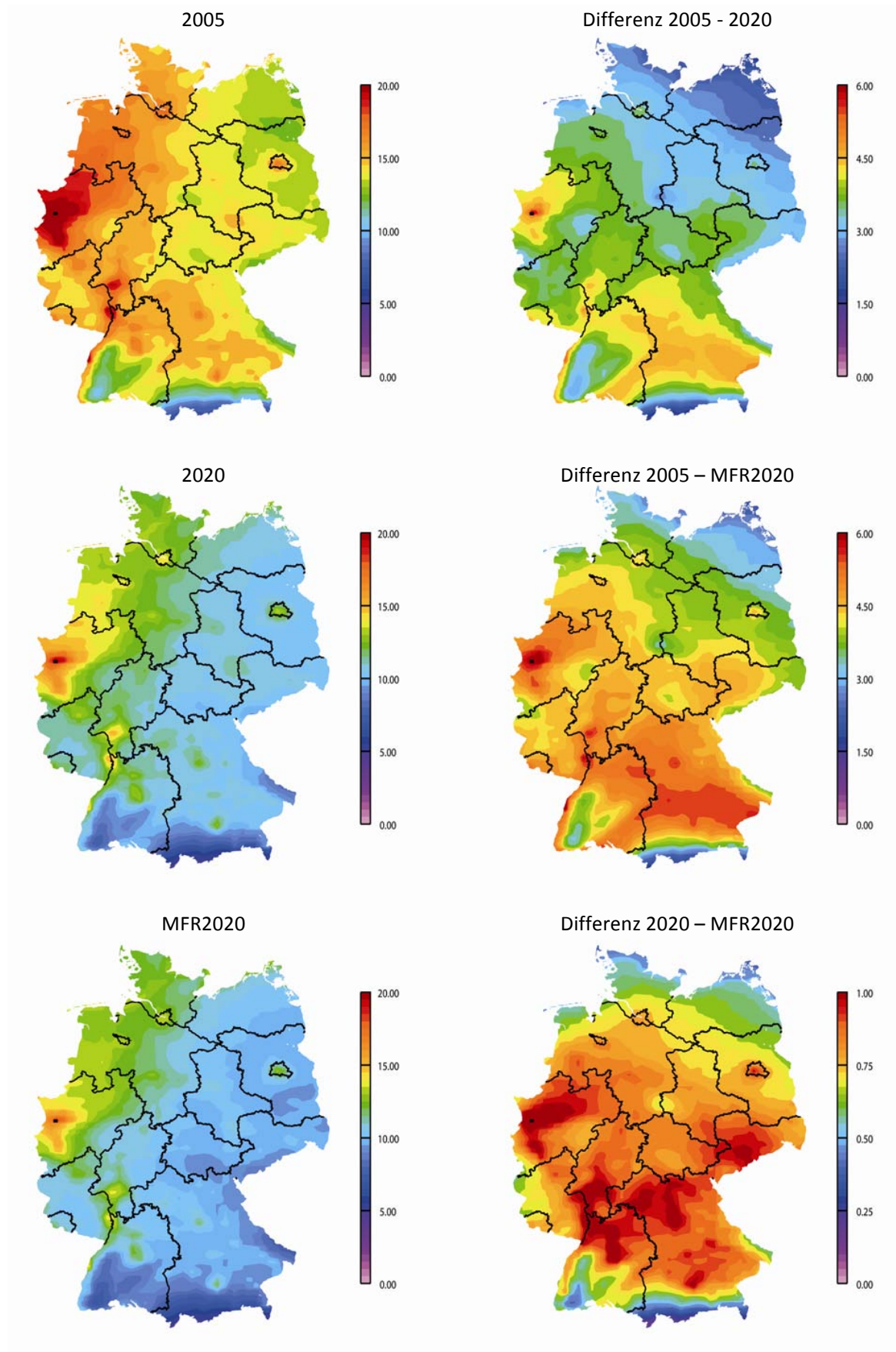


Abb. 6.2: PM₁₀ –Jahresmittelwerte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$, links: Konzentrationen der Szenarien 2005, 2020 und MFR2020, rechts: die entsprechenden Differenzen.

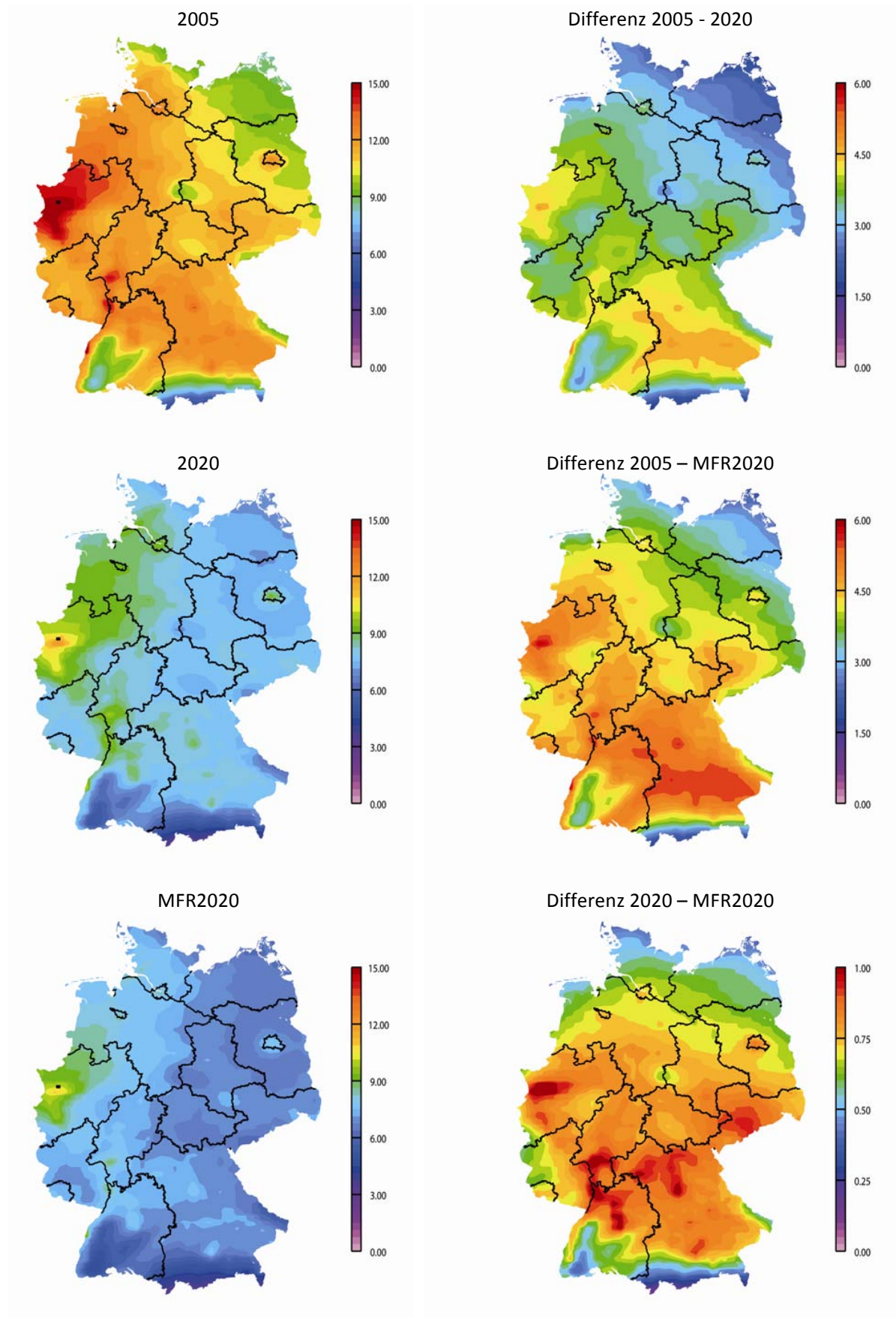


Abb. 6.3: PM_{2.5} –Jahresmittelwerte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$, links: Konzentrationen der Szenarien 2005, 2020 und MFR2020, rechts: die entsprechenden Differenzen.

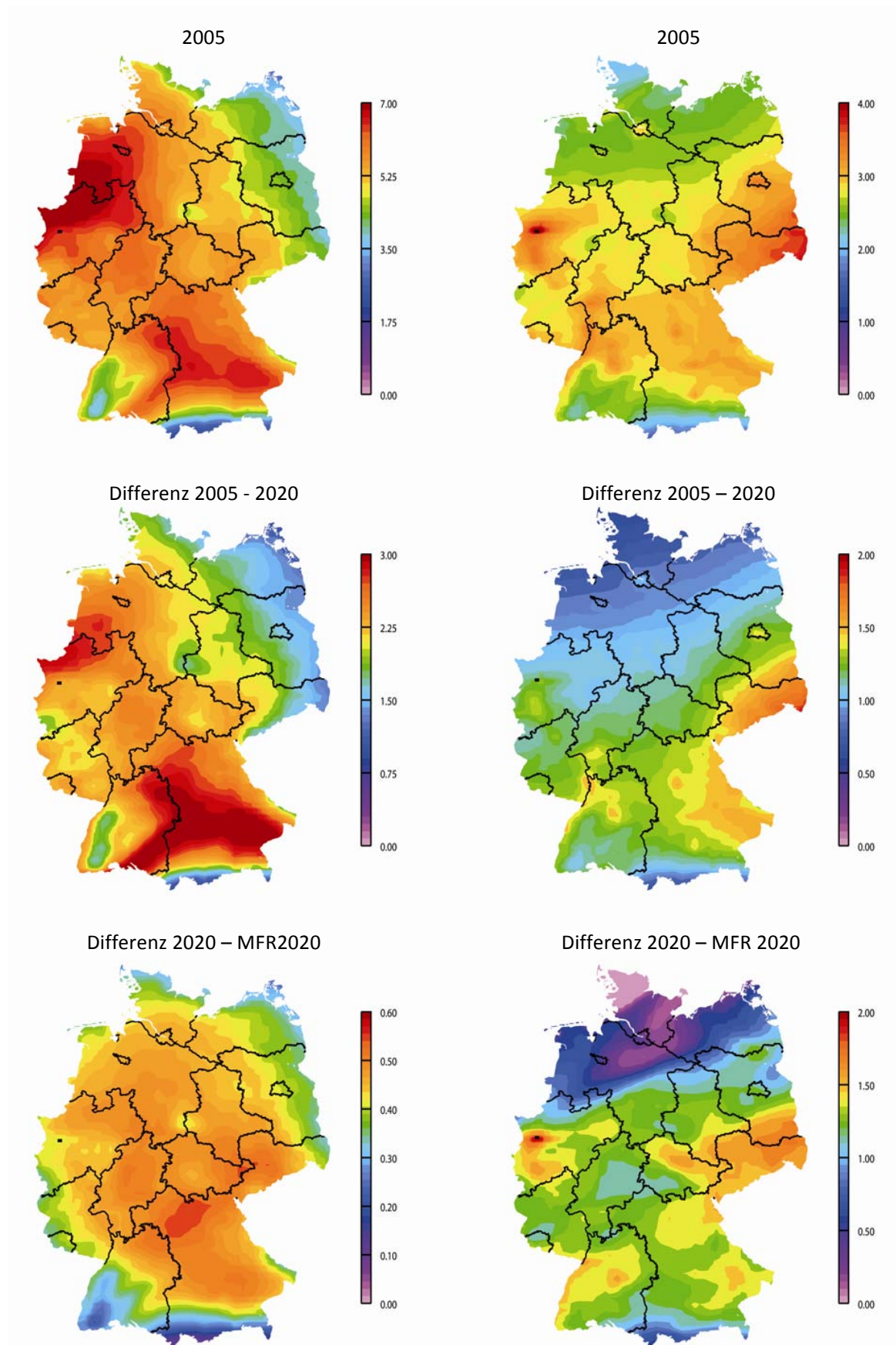


Abb. 6.4: Jahresmittelwerte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für 2005 und die Differenzen 2005 und 2020 sowie 2020 und MFR2020: Ammoniumnitrat (links) und Ammoniumsulfat (rechts).

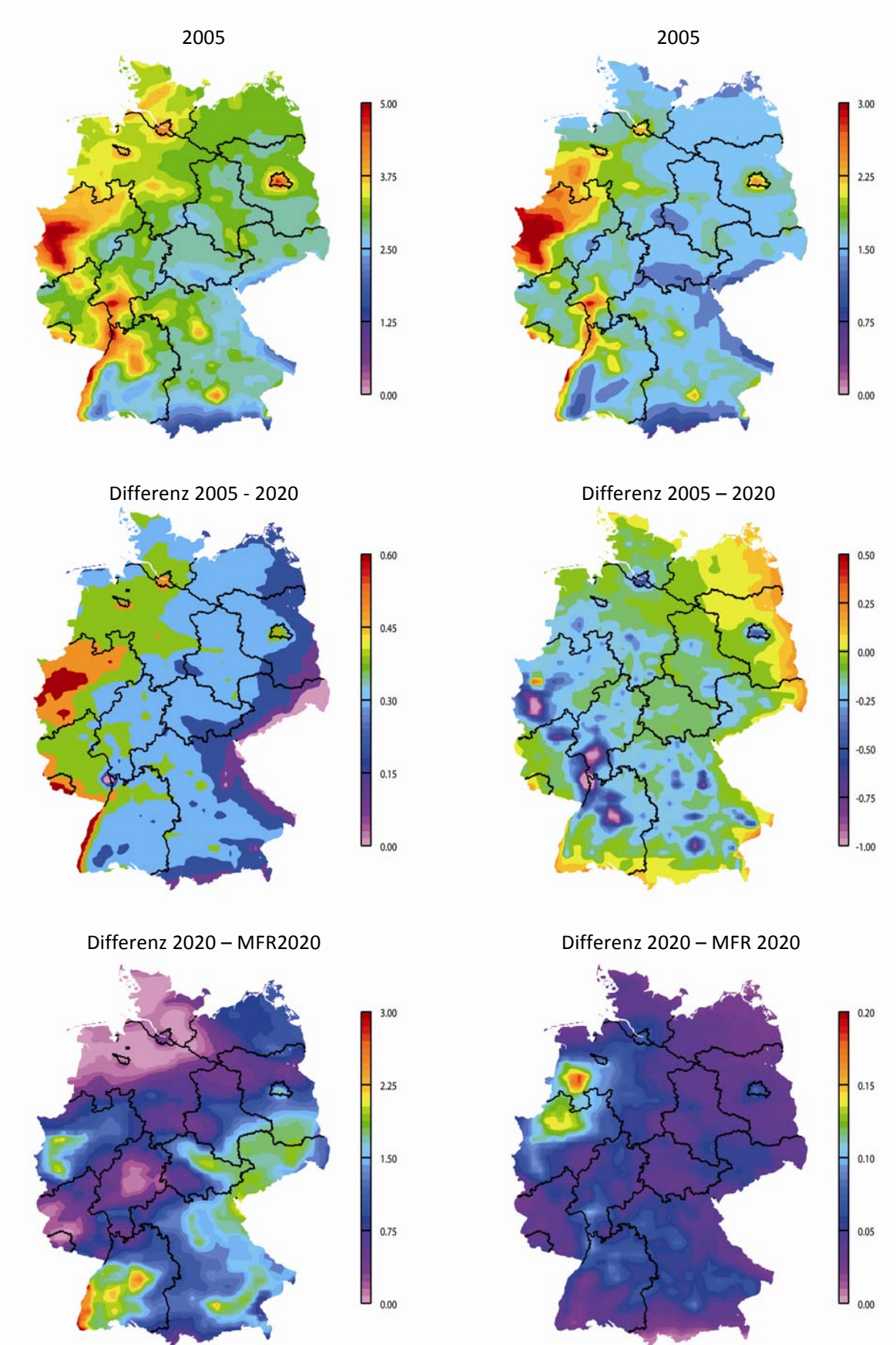


Abb. 6.5: Jahresmittelwerte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für 2005 und die Differenzen 2005 und 2020 sowie 2020 und MFR2020: $\text{PPM}_{2.5}$ (links) und PPM_{10} (rechts).

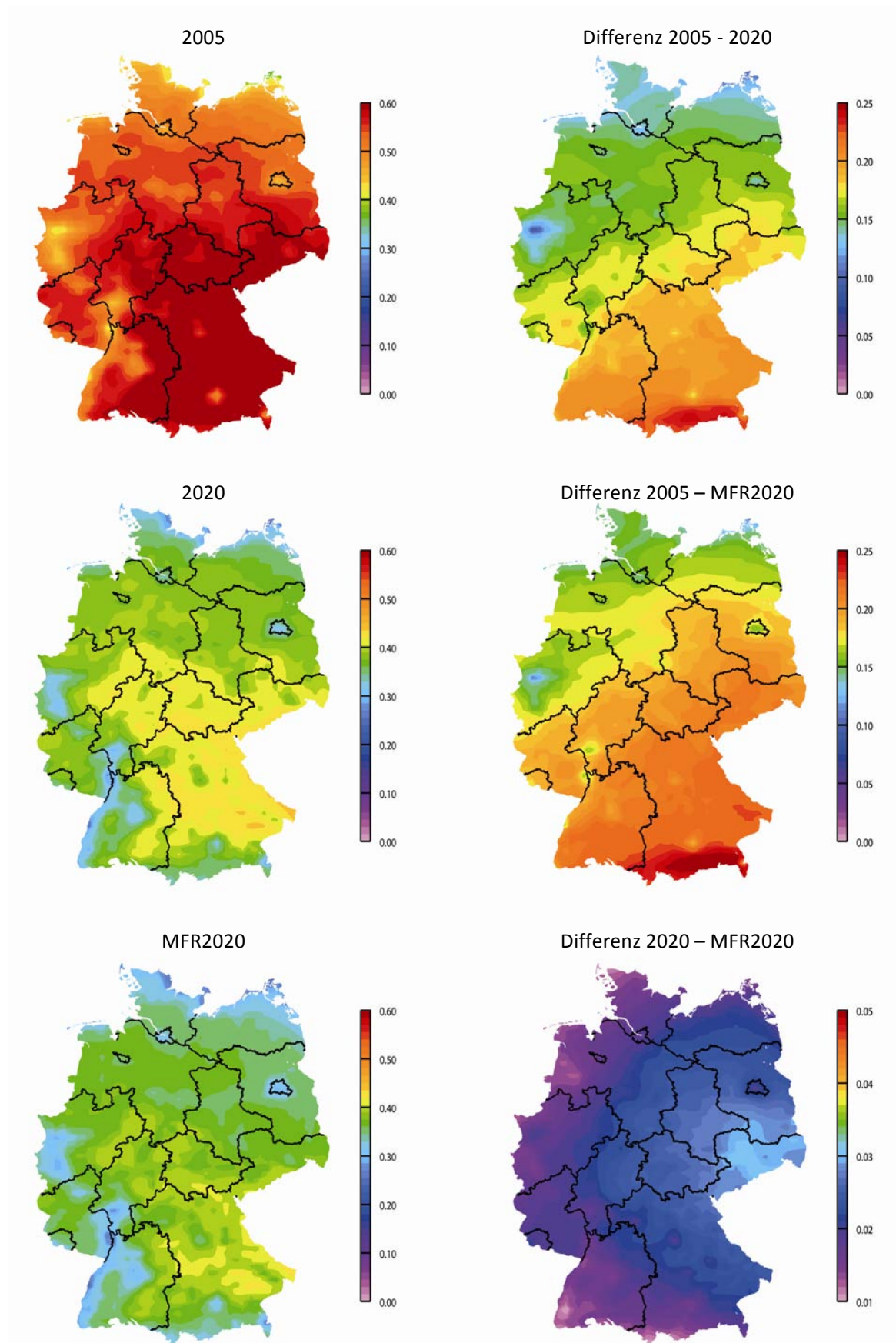


Abb. 6.6: Anteil der sekundär gebildeten Partikelmasse an der gesamten Partikelmasse, links: Szenarien 2005, 2020 und MFR2020; rechts: entsprechende Differenzen.

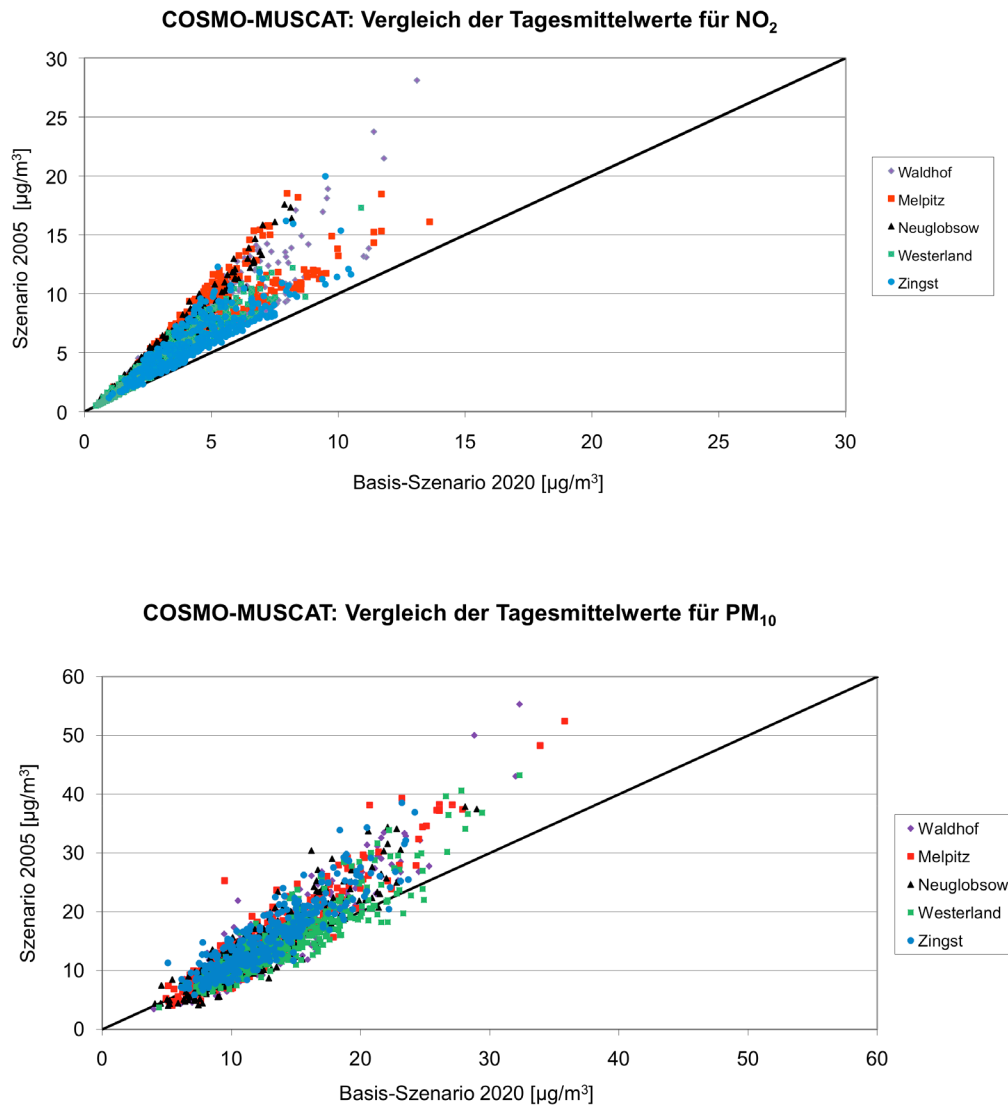


Abb. 6.7: Streudiagramme der Jahresmittelwerte [µg/m³] für 2005 und das Referenz-Szenario 2020 an den Umlandstandorten für NO₂ (oben) und PM₁₀ (unten) .

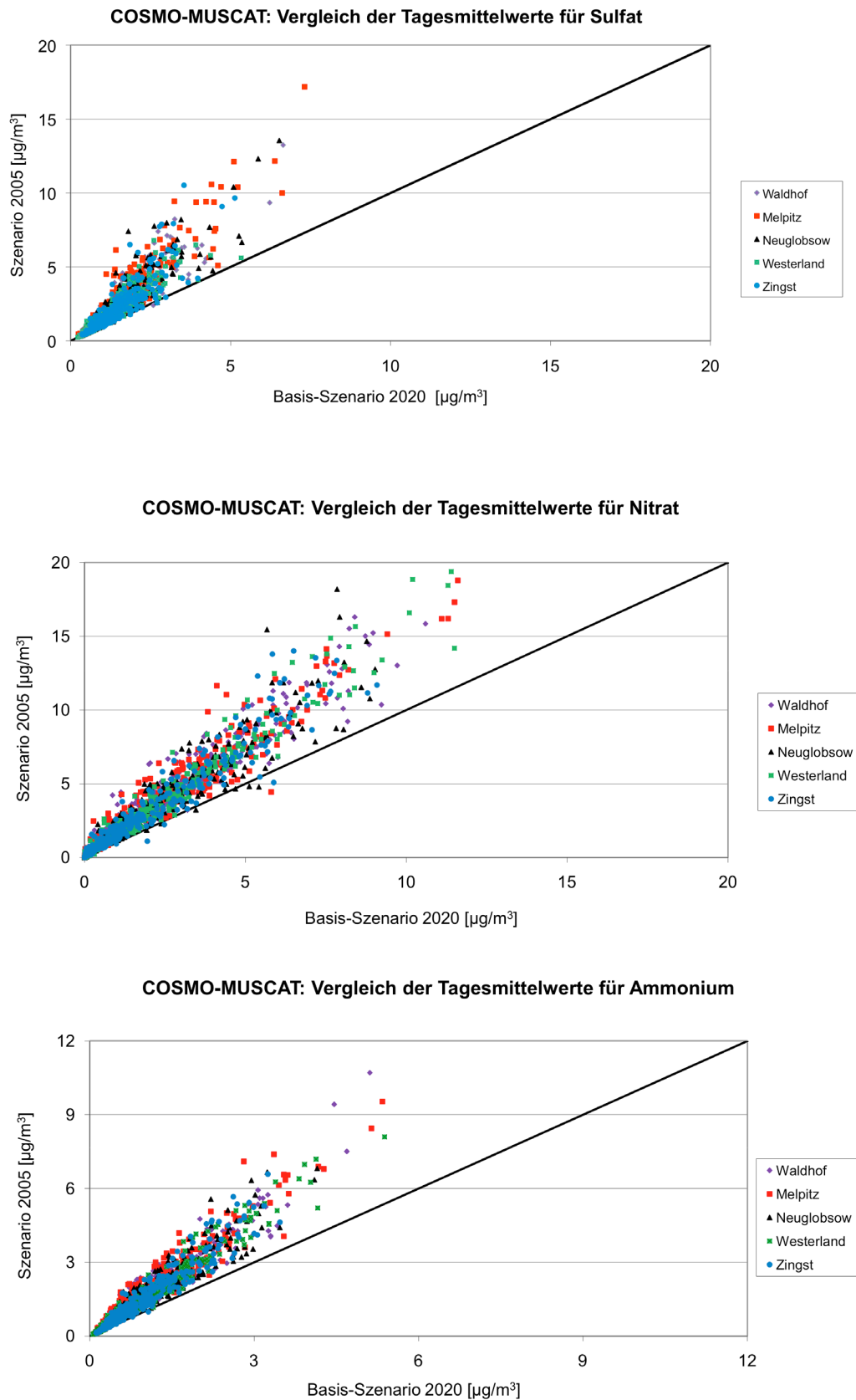


Abb. 6.8: Streudiagramme der Jahresmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] für 2005 und das Referenz-Szenario 2020 an den Umlandstandorten für Sulfat (oben), Nitrat (mitte) und Ammonium (unten).

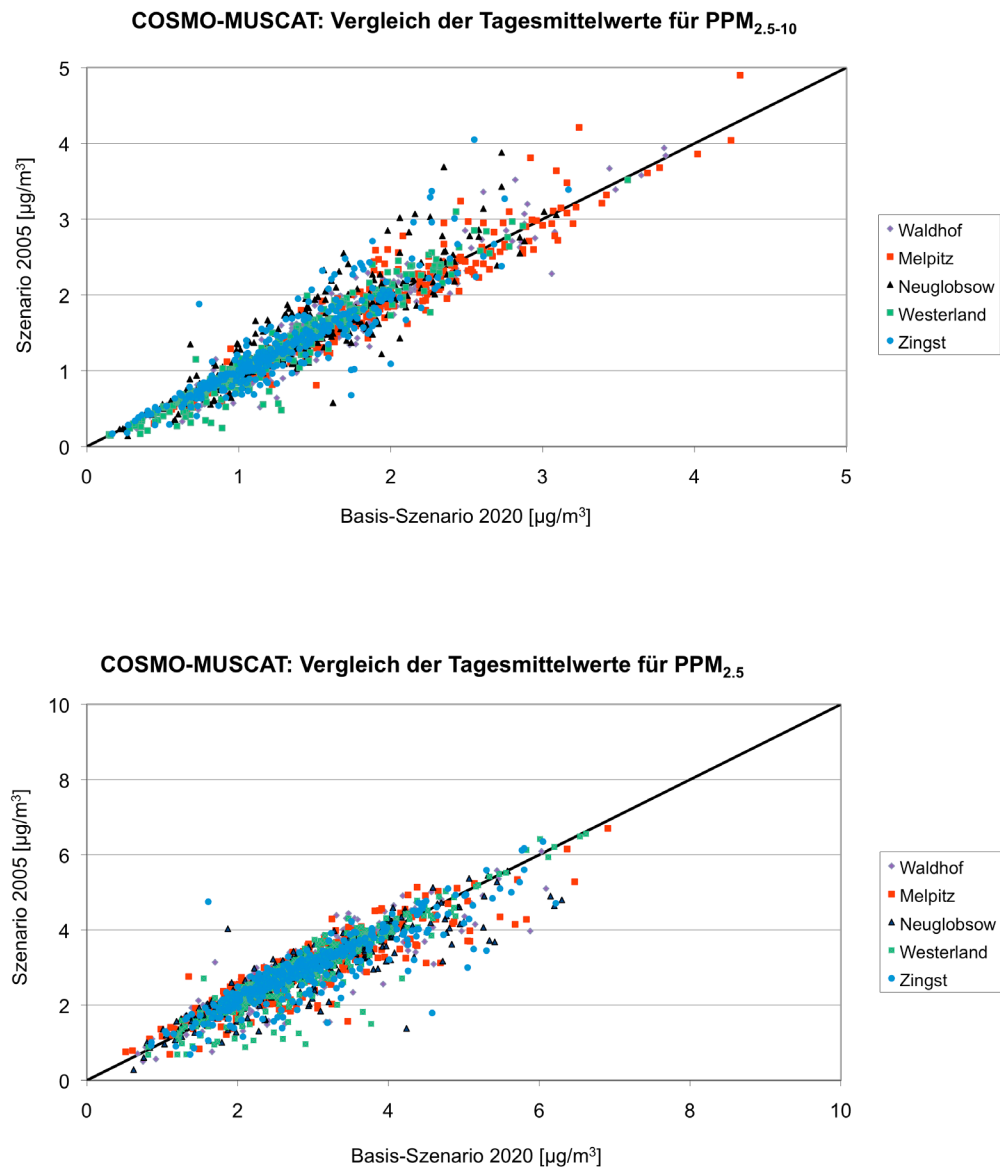


Abb. 6.9: Streudiagramme der Jahresmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] für 2005 und das Referenz-Szenario 2020 an den Umlandstandorten für primär emittierte Partikel: PPM_{10-2.5} (oben) und PPM_{2.5} (unten).

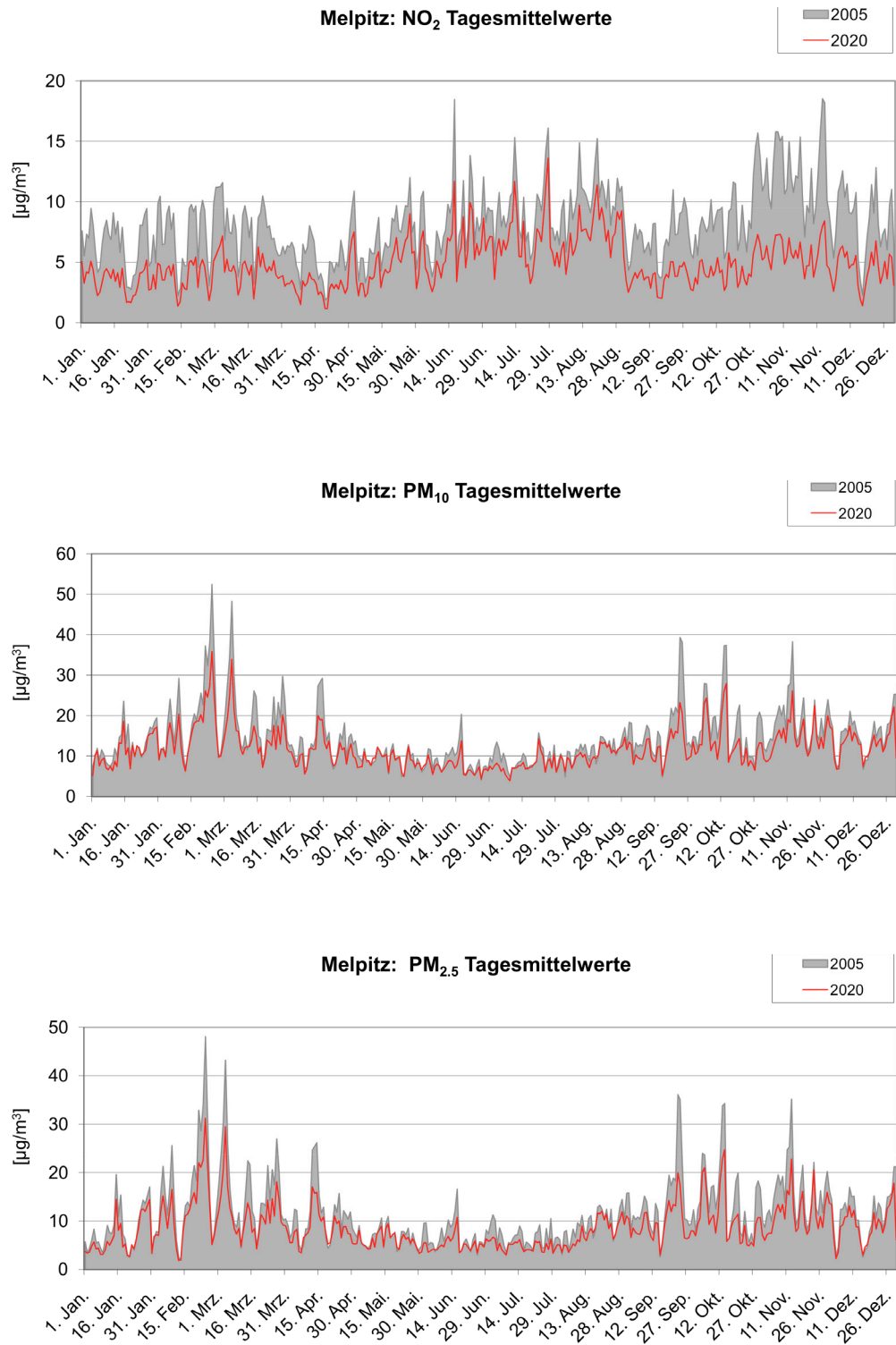


Abb. 6.10: Zeitreihen der Tagessmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] für 2005 und das Referenz-Szenario 2020 am Standort Melpitz für NO₂ (oben), PM₁₀ (mitte) und PM_{2.5} (unten).

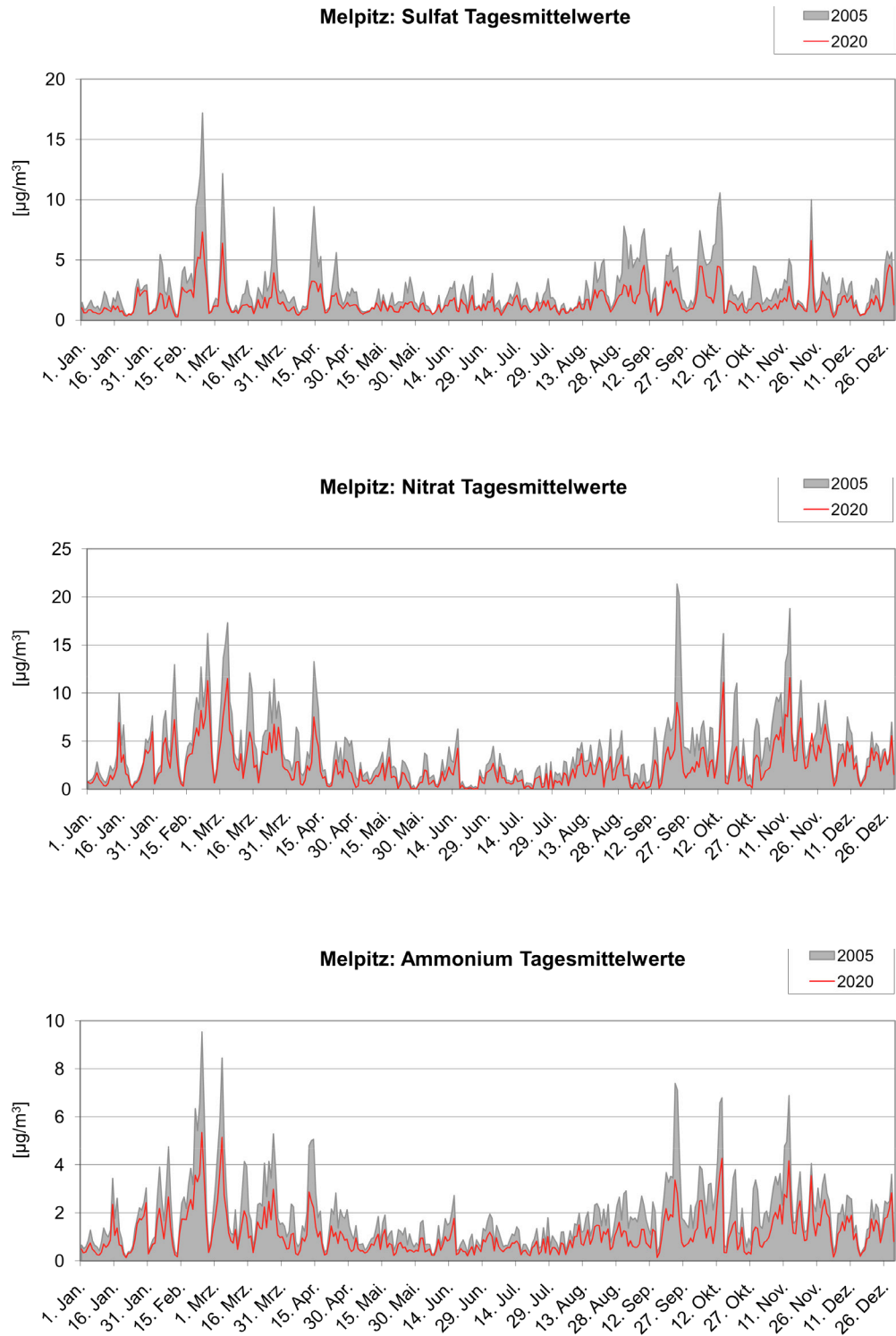


Abb. 6.11: Zeitreihen der Tagessmittelwerte $[\mu\text{g}/\text{m}^3]$ für 2005 und das Referenz-Szenario 2020 am Standort Melpitz für Sulfat (oben), Nitrat (mitte) und Ammonium (unten).

7. Ballungsraum-Simulationen mit unterschiedlichen Gitterauflösungen

Für das Deutschland-Gebiet N3 (Abb. 2.1) erfolgten Modellsimulationen mit höherer horizontaler Gitterauflösung, bei denen zusätzlich zwei Regionen (NRW und Großraum Berlin) mit feiner aufgelösten Emissionskatastern simuliert wurden. Dadurch können Einflüsse unterschiedlicher räumlicher Auflösungen bei den Modellrechnungen und zwischen den Katastern besser bewertet werden. Das Ziel ist auch hier, die Absicherung der Ergebnisse und die Abschätzung von Bandbreiten für die prognostizierten Minderungspotentiale. Durch das “two way nesting” in MUSCAT lässt sich außerdem die Sensitivität der Simulationsergebnisse gegenüber unterschiedlichen Emissions-Katastern für das gesamte Modellgebiet abschätzen. Die Auswahl der entsprechenden Bundesländer bzw. Ballungsräume erfolgte in Abstimmung mit dem UBA und den anderen Projektpartnern. Der hierfür verwendete hoch aufgelöste Emissionsdatensatz ist im Rahmen des Projektes durch das IER erarbeitet und durch die FU bereitgestellt worden.

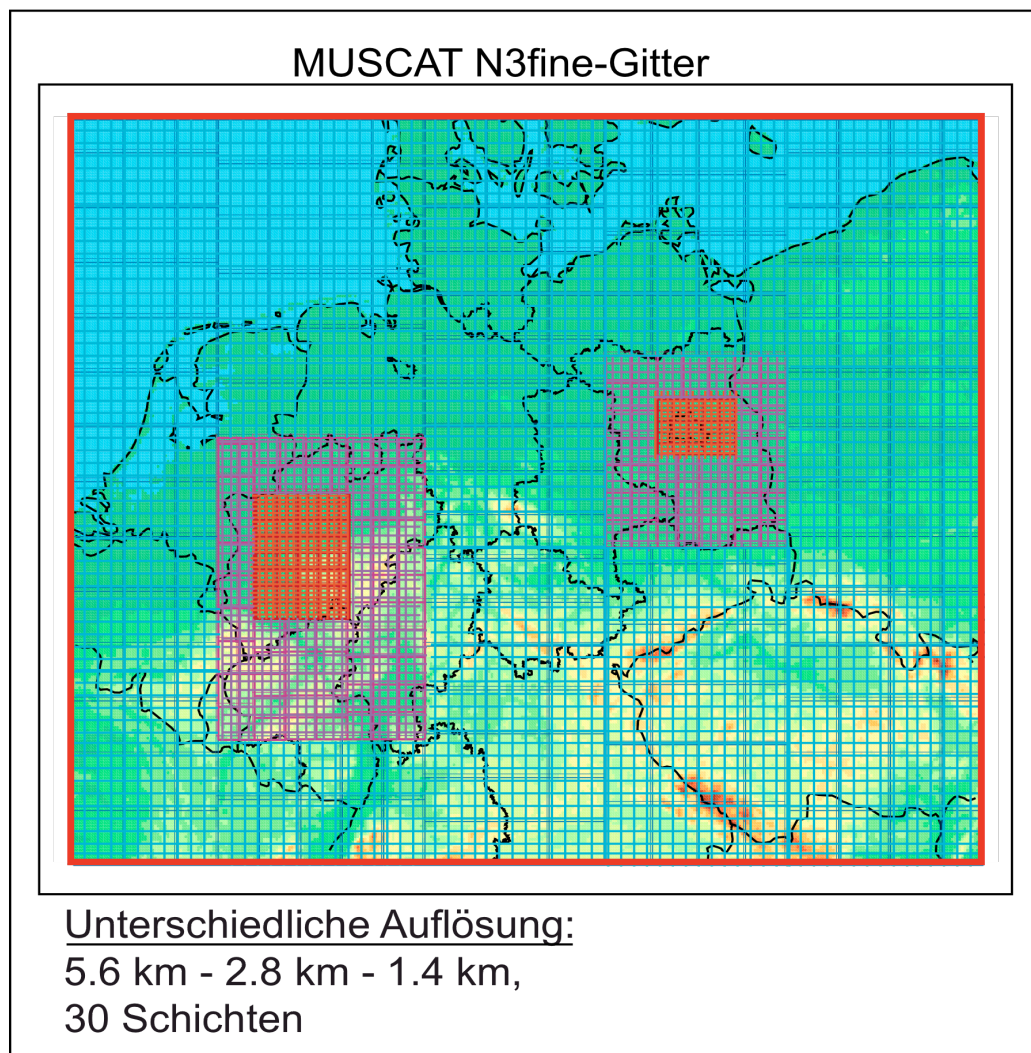


Abb. 7.1: Modellierungsgebiet und MUSCAT-Gitter zur Simulation zweier ausgewählter Ballungsräume (Ruhrgebiet und Berliner Raum) mit unterschiedlichen Auflösungen.

Auf Grund des großen Rechenaufwands konnte die Simulation nur für eine Beispielepisode durchgeführt werden. Unter Einbeziehung der N2-Ergebnisse (Animation der PM_{10} —Bodenkonzentrationen und Auswertung der entsprechenden Zeitreihen) ist hierfür die Periode vom 1.-15. Februar 2005 ausgewählt worden. Für COSMO wurde ein uniformes Gitter mit $0,025^\circ$ -Auflösung verwendet, was in etwa einer horizontalen Gitterweite von 2,8 km entspricht. Für MUSCAT ist ein Gitter mit drei unterschiedlichen horizontalen Auflösung verwendet worden (Abb. 7.1). Als feinste horizontale Auflösung innerhalb der Ballungsräume wurde dabei 1,4 km verwendet. Die vertikale Diskretisierung sowohl für COSMO als auch für MUSCAT entsprach derselben Konfiguration wie bei den N2-Simulationen. Der meteorologische Antrieb erfolgte direkt mit Reanalyse-Daten von COSMO-DE-Läufen. Die hoch aufgelösten Simulationen (N3fine) wurden mit Messwerten, den N2-Ergebnissen und Läufen mit einer uniformen MUSCAT-Auflösung von ca. 5,6 km (N3coarse) verglichen. Die N2-Rechnung entspricht dem Basislauf 2005. Hier wurde die Meteorologie mit 7 km Auflösung und das entsprechende "grobe" Emissionskataster verwendet. N3-fein und N3-grob unterscheiden sich nur in der Gitterauflösung von MUSCAT innerhalb der Ballungsräume.

Die Abb. 7.2 bis 7.4 zeigen Konzentrationsfelder für NO_2 und PM_{10} am 6. Februar um 8.00 Uhr in der Bodenschicht für Deutschland, das Ruhrgebiet und den Berliner Raum. Dabei wurden die beiden Ballungsgebiete jeweils aus dem Deutschland-Plot herausgezoomt. Diese "Momentaufnahmen" sollen beispielhaft deutlich machen, wie die Emissionsstrukturen in den unterschiedlich aufgelösten Konzentrationsfeldern abgebildet werden. Für Deutschland (Abb. 7.2) sind zwischen N3coarse und N3fine kaum Differenzen zu erkennen. Erwartungsgemäß sind die Unterschiede zur N2-Simulation größer. In den feiner aufgelösten Ergebnissen sieht man deutlichere Strukturen (z. B. die Autobahnen im NO_2 -Plot). Aber auch hier sind die Abweichungen in der Fläche nicht sehr markant. Schaut man in die Ballungsräume (Abb. 7.3 und 7.4), so sind zwischen den drei Simulationen deutliche Unterschiede zu erkennen. Insbesondere bei NO_2 wird das feine Emissionskataster im Ruhrgebiet im N3fine-Lauf sehr gut abgebildet (Abb. 7.3). In Abhängigkeit von der jeweiligen Auflösung werden die feinen Strukturen immer mehr verschmiert, was gleichzeitig zu einer Verringerung der maximalen Konzentrationen im Gebiet führt. Da NO_x direkt emittiert wird, sind hier die Strukturen deutlicher ausgeprägt als bei PM_{10} . Wie in den Abschnitten 5 und 6 dargestellt, wird der Großteil von PM_{10} als sekundäres Aerosol gebildet. Dieser zeitabhängige Prozess führt zu einer größeren räumlichen Verschmierung auch in der hoch aufgelösten Rechnung.

Beim Berlin-Plot (Abb. 7.4) spiegelt sich die Auflösung sehr gut an den Rändern der Abluftfahne der Stadt wider. Unterschiede in der Höhe der Konzentrationen innerhalb der Abluftfahne sind aber kaum festzustellen. Das wird auch durch den Vergleich der Zeitreihen in Neuglobsow (Abb. 7.5 und 7.6) unterstrichen. Obwohl innerhalb des Simulationszeitraums überwiegend Südwind zu beobachten war, sind die drei berechneten Zeitreihen in dieser nördlich von Berlin gelegenen Station nahezu identisch. Das lässt vermuten, dass der Einfluss der Auflösungen innerhalb der Ballungsräume nur geringen Einfluss auf die Konzentrationsfelder im "weiteren" Umland hat. Vergleiche von Flächenplots zu anderen Zeitpunkten untermauern diese These. Die Zeitreihen der Ruhrgebiet-Stationen zeigen deutliche Abhängigkeiten von der entsprechenden Gitterauflösung. Höhere Konzentrationen können besser reproduziert werden. Das zeigt sich vor allem an den Konzentrationsspitzen zwischen 6.-10. Februar 2005. Insgesamt lässt sich feststellen, dass weder die höhere Auflösung im meteorologischen Modell COSMO noch das feinere Emissionskataster einen wesentlichen Einfluss auf Konzentrationen im Umland haben. Innerhalb der Ballungsräume werden die feineren Strukturen aber besser abgebildet.

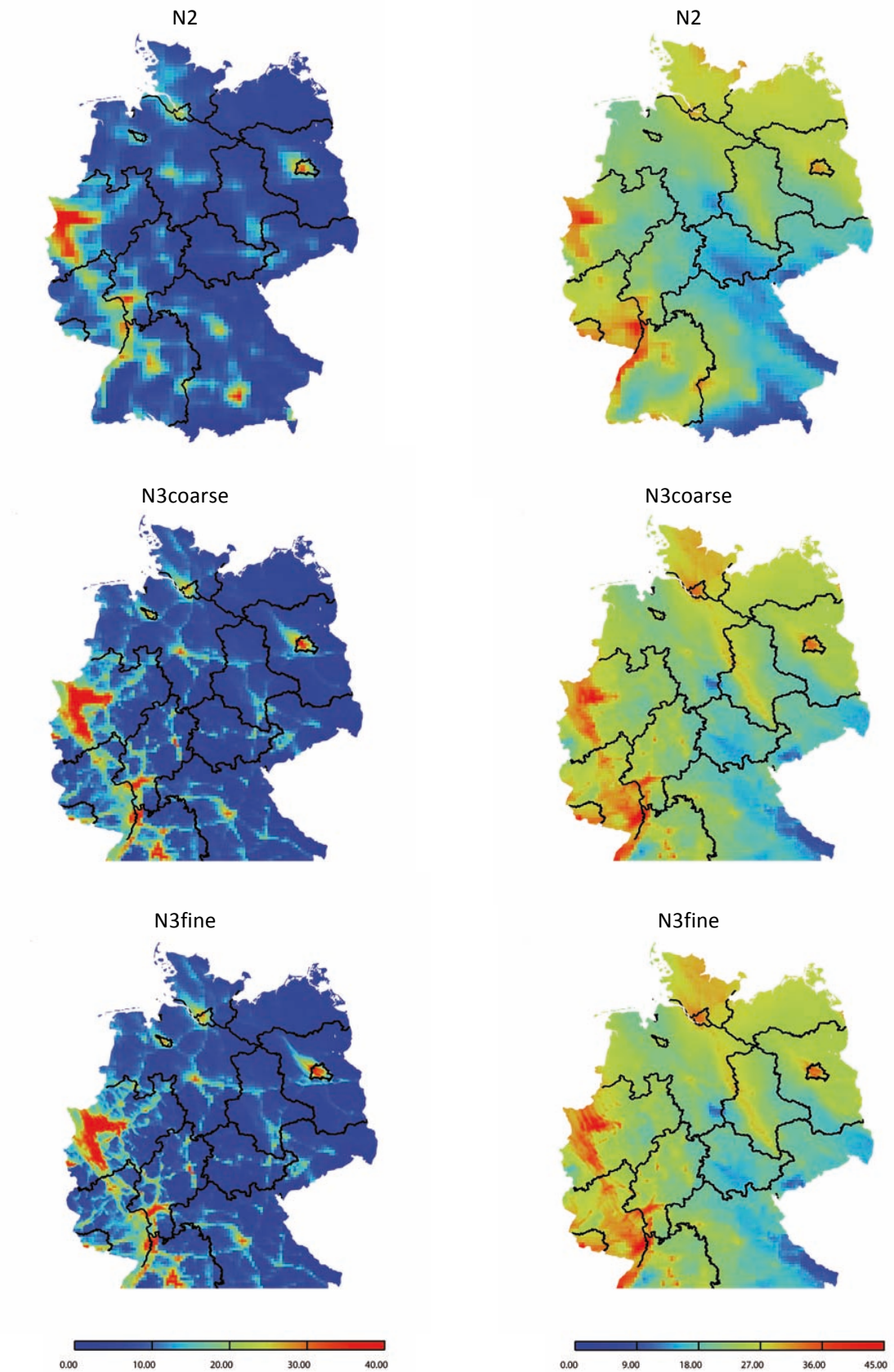


Abb. 7.2: Konzentrationen (Deutschland) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für Simulationen mit unterschiedlichen Gitterauflösungen am 6. Februar 2005, 8:00 Uhr: NO₂ (links) und PM₁₀ (rechts).

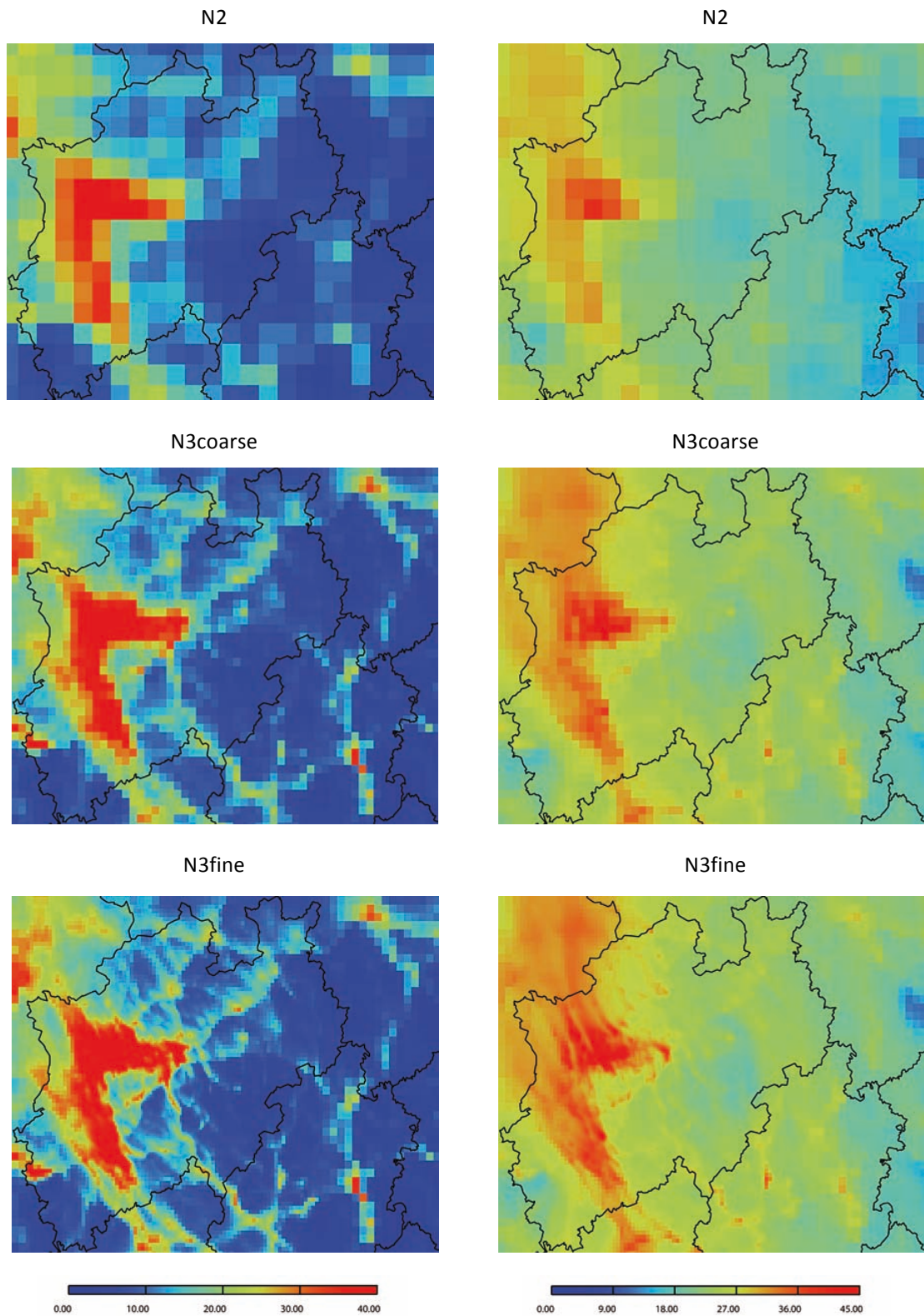


Abb. 7.3: Konzentrationen (NRW) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für Simulationen mit unterschiedlichen Gitterauflösungen am 6. Februar 2005, 8:00 Uhr: NO_2 (links) und PM_{10} (rechts).

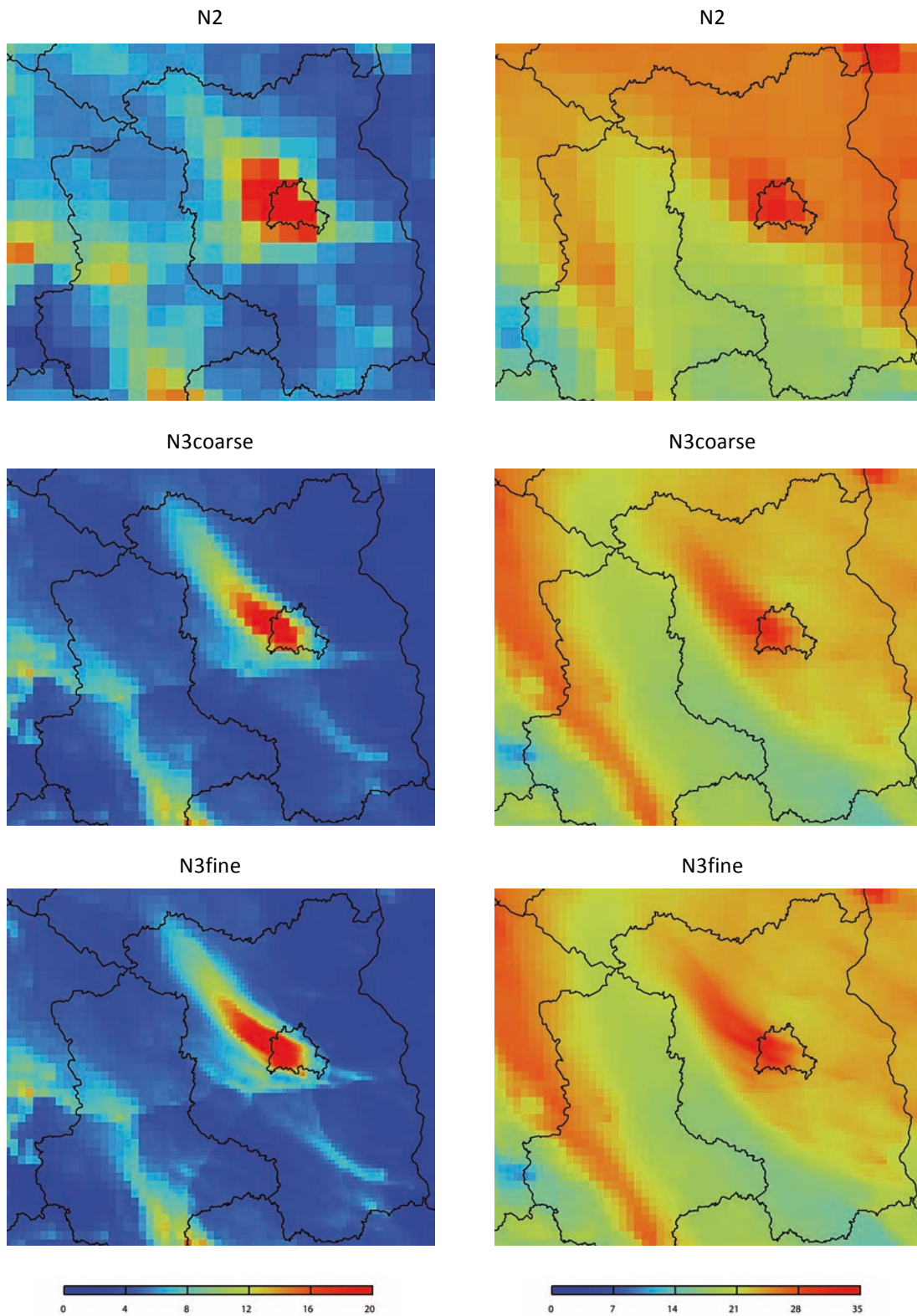


Abb. 7.4: Konzentrationen (Berliner Raum) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für Simulationen mit unterschiedlichen Gitterauflösungen am 6. Februar 2005, 8:00 Uhr: NO₂ (links) und PM₁₀ (rechts).

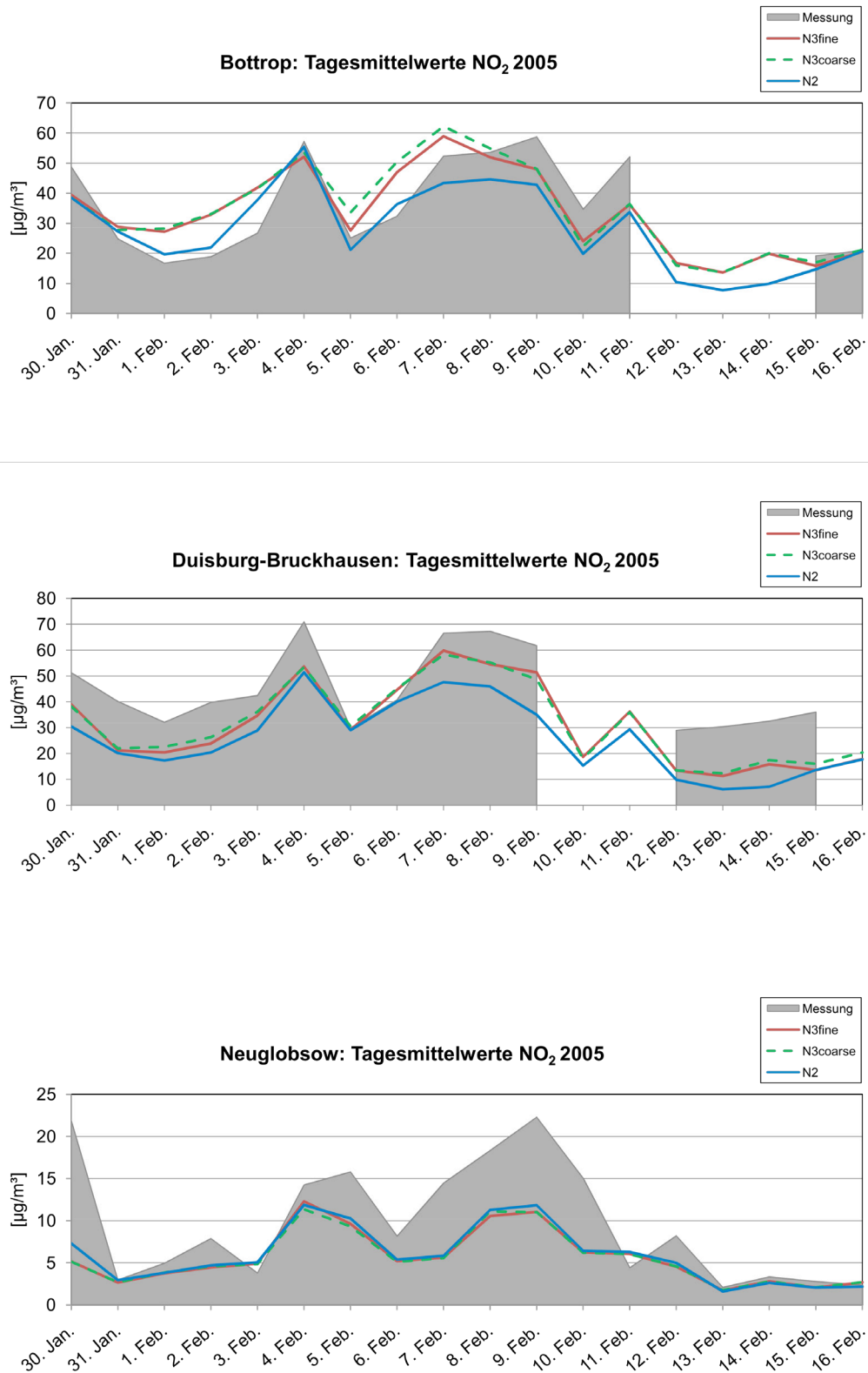


Abb. 7.5: Zeitreihen der berechneten und gemessenen NO₂-Tagesmittelwerte [µg/m³] an den Stationen Bottrop (oben), Duisburg-Bruckhausen (mitte) und Neuglobsow (unten).

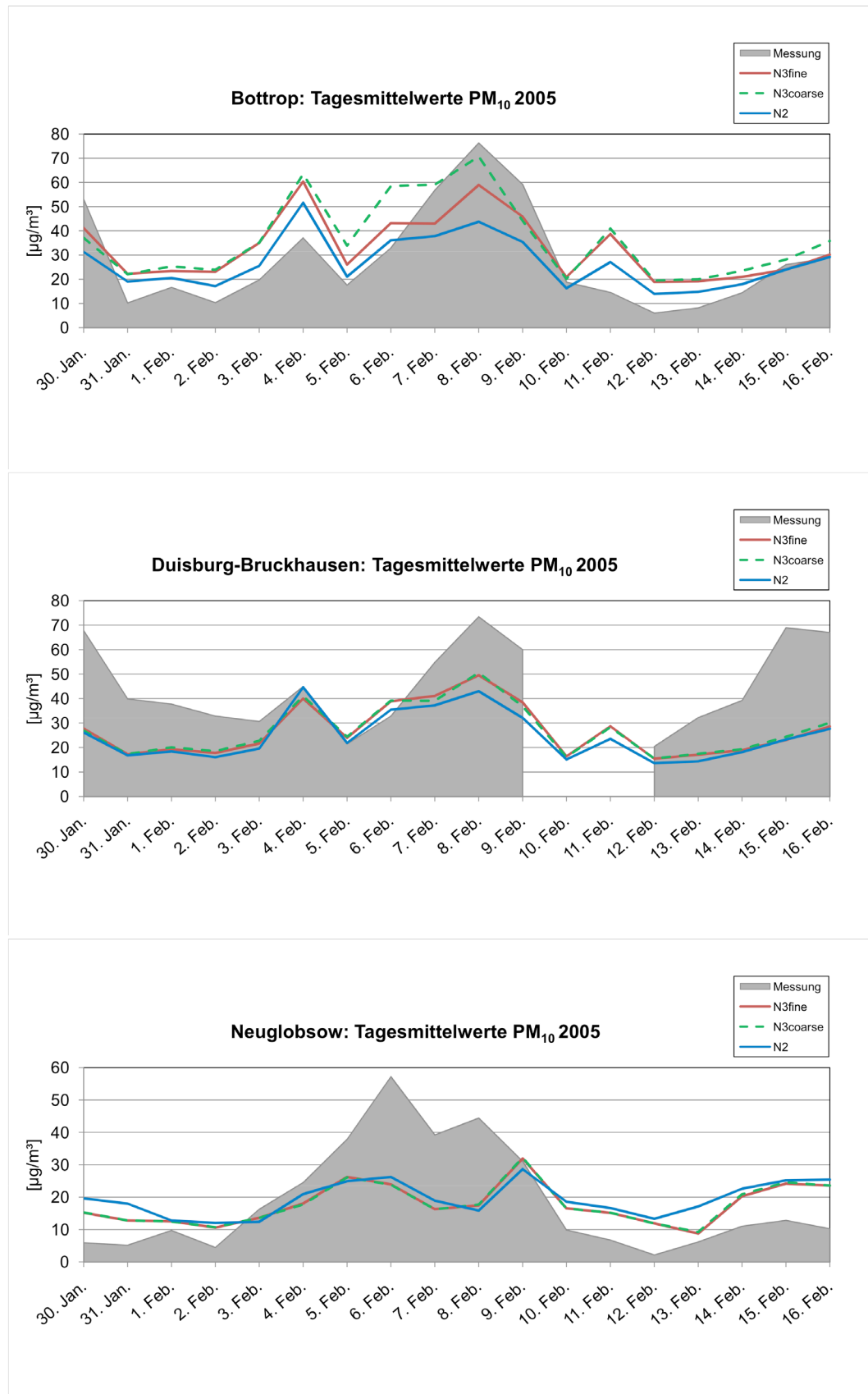


Abb. 7.6: Zeitreihen der berechneten und gemessenen PM₁₀ – Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Bottrop (oben), Duisburg-Bruckhausen (mitte) und Neuglobsow (unten).

8. Zusammenfassung

Ziel des PAREST-Vorhabens war es, die Ursachen für die Grenzwertüberschreitungen von NO_2 , PM_{10} und des geplanten Grenzwerts von $\text{PM}_{2.5}$ zu ermitteln und geeignete emissionsmindernde Maßnahmen zur Reduzierung der Feinstaubbelastung zu identifizieren. Für die Abschätzung der Minderungspotentiale wurde hauptsächlich das RCG-Modell verwendet (Stern, 2010a, b). Insbesondere zur Qualitätssicherung und zur Abschätzung der Bandbreite der Modellergebnisse sind weitere Simulationen mit den Modellsystemen LOTOS-EUROS und COSMO-MUSCAT ausgeführt worden. Neben dem Basislauf für das Referenzjahr 2005 sind dazu auch die Emissionsreferenz 2020 und das MFR-Szenario 2020 mit allen drei Modellen berechnet worden. Der Vergleich der Modellergebnisse untereinander sowie mit Messungen ist in sehr detaillierter Form in mehreren PAREST-Berichten (Stern, 2010c, d, f; Kerschbaumer, 2010) zusammengefasst worden.

Im vorliegenden Bericht wurden anhand der COSMO-MUSCAT-Simulationen die Beiträge der primär emittierten und der sekundär gebildeten Partikelmasse zur Gesamtbelastung detaillierter untersucht. Dabei zeigt sich für das Basisszenario 2005, dass insbesondere außerhalb der urbanen Regionen über 50 % der Partikelmasse sekundär gebildet werden. Hier liegt auch das größte Minderungspotential, so dass der Hauptteil der bis 2020 prognostizierten PM-Reduktion durch eine Verringerung dieses Anteils erreicht wird. Die Ursache für diese Verringerung wiederum sind die zum Teil drastischen Emissionsminderungen für die Vorläufersubstanzen NO_x und SO_2 . Die Ansätze zur Beschreibung der sekundären Aerosolbildung sind in den drei verwendeten Modellsystemen zum Teil unterschiedlich. Neben den ebenfalls unterschiedlichen meteorologischen Antrieben (mit insbesondere als Resultat verschiedenen Mischungsschichtthöhen) sollte hierin eine Hauptursache der beobachteten Bandbreite im vorhergesagten Minderungspotential liegen (Stern, 2010c). Dabei prognostiziert COSMO-MUSCAT vergleichsweise hohe Reduktionen für PM_{10} .

Für den Basislauf 2005 unterschätzt das Modell COSMO-MUSCAT die sehr hohen NO_2 -Tagesmittelwerte, tendiert aber zur Überschätzung in den Sommermonaten. Außer in Melpitz werden die zeitlichen Verläufe aber relativ gut simuliert. Die hohen beobachteten PM_{10} -Tagesmittelwerte werden nicht reproduziert. COSMO-MUSCAT unterschätzt die über die 5 Hintergrund-Stationen gemittelten PM_{10} -Jahresmittelwerte um circa 15 %. (Tab. 6.1). Der Anteil der sekundär gebildeten Partikelmasse an der Gesamtmasse ist mit über 50 % im Durchschnitt sehr groß. Lediglich in Regionen mit starken Primäremissionen (z. B. Ruhrgebiet, Rhein-Main-Region, Großraum Berlin und München) überwiegt die direkt emittierte Partikelmasse. Die verfügbaren Messungen der Nitrat-, Sulfat- und Ammonium-Massen werden durch das Modellsystem gut reproduziert (vgl. Abschnitt 5 und Tab. 6.1).

Durch die bis zum Jahre 2020 umgesetzten Maßnahmen im Referenzszenario sinken die NO_2 -Jahresmittelwerte zum Teil um mehr als $15 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Die PM_{10} -Jahresmittelwerte verringern sich nach den Berechnungen um $2\text{--}6 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Für $\text{PM}_{2.5}$ liegen die erreichbaren absoluten Minderungspotentiale im selben Bereich. Dies führt sowohl in urbanen als auch ländlichen Regionen zu einer Verringerung der PM_{10} -Belastung auf ca. 75-80 % und der $\text{PM}_{2.5}$ -Mittelwerte auf ca. 70-75 %. Für das MFR-Szenario ist jeweils eine weitere Reduzierung um ca. 5 % zu erwarten. Wie die Simulationen zeigen, beruht ein Großteil der zu erwartenden PM-Minderung auf einer Reduzierung der sekundär gebildeten Partikelmasse. Die Ursache für die bis 2020 prognostizierte Verringerung des sekundär gebildeten Anteils liegt in der starken Reduzierung der Emissionen für NO_x in Deutschland

und für SO₂ in den östlichen Nachbarländern. Für das Referenzszenario 2020 wird für die sekundäre Partikelmasse eine Reduzierung auf 55-65 % des Niveaus von 2005 prognostiziert (vgl. Abschnitt 6).

Im Abschnitt 7 wurden anhand einer Beispielepisode die Einflüsse unterschiedlicher horizontaler Gitter-Auflösungen bei den Modellrechnungen und zwischen den Katastern untersucht. Das Ziel war auch hier, die Absicherung der Ergebnisse und die Abschätzung von Bandbreiten für die prognostizierten Minderungspotentiale. Insgesamt lässt sich feststellen, dass weder die höhere Auflösung im meteorologischen Modell COSMO noch das feinere Emissionskataster einen wesentlichen Einfluss auf Konzentrationen im Umland haben. Innerhalb der Ballungsräume werden die feineren Strukturen aber besser abgebildet.

9. Literatur

- Ackermann, I., 1997. MADE: Entwicklung und Anwendung eines Aerosol-Dynamikmodells für dreidimensionale Chemie-Transport-Simulationen in der Troposphäre. Mitteilungen Inst. f. Geophys. u. Meteorol. Univ. Köln, 115, 1-153.
- CORINAIR (CO-ordinated INformation on the Environment in the European Community – AIR). Web-Adresse: <http://reports.eea.eu.int/EMEPCORINAIR3/en>.
- Denier van der Gon, H., Visschedijk, A., van der Brugh, H., Droge, R., 2009. A high resolution European emission data base for the year 2005. PAREST-Bericht Nr. 2, UBA Dessau, Dezember 2009.
- Fath, J., 2002. Freie Universität Berlin, Institut für Meteorologie, persönliche Mitteilung.
- Galperin, M. V., Sofiev M. A., 1998. The long-range transport of ammonia and ammonium in the northern hemisphere. *Atmos. Env.*, 32, 373-380.
- Gon, S. L., 2003. A parametrization of sea-salt aerosol source function for sub- and super-micron particles. *Global Biogeochemical Cycles*, 17, 1097-1103.
- Günther, A. B., Zimmerman, P. R., Harley, P. C., 1993. Isoprene and Monoterpene Emission Rate Variability: Model Evaluations and Sensitivity Analyses. *J. Geophys. Res.*, 98, 12609-12617.
- Knoth, O. und Wolke, R., 1998a. An explicit-implicit numerical approach for atmospheric chemistry-transport modelling. *Atmos. Env.*, 32, 1785-1797.
- Hinneburg, D., Renner, E., Wolke, R., 2009. Formation of secondary inorganic aerosols by power plant emissions exhausted through cooling towers in Saxony. *Environ. Sci. & Pollut. Res.*, 16, 25-35.
- Jörß, W., Kugler, U., Theloke, J., 2010. Emissionen im PAREST-Referenzszenario 2005-2020. Parest-Endbericht.
- Karl, M., Dorn, H.P., Holland, F., Koppmann, R., Poppe, D., Rupp, L., Schaub, A., Wahner, A., 2006. Product study of the reaction of OH radicals with isoprene in the atmosphere simulation chamber SAPHIR. *J. Atmos. Chem.*, 55 (2), 167-187.
- Kerschbaumer, A., 2010. Ein Meteorologievergleich zum besseren Verständnis der unterschiedlichen Schadstoffkonzentrationssimulationen mit verschiedenen Chemie-Transport-Modellen, PAREST-Bericht Nr. 25, UBA Dessau, Mai 2010.
- Knoth, O. and Wolke, R. (1998a). An explicit-implicit numerical approach for atmospheric chemistry-transport modelling. *Atmos. Env.*, 32, 1785-1797.
- Mozurkewich, M., 1993. The dissociation constant of ammonium nitrate and its dependence on temperature, relative humidity and particle size. *Atmos. Env.*, 27 A, 261-270.
- Odman, M.T., Russell, A.G., 2000. Mass conservative coupling of non-hydrostatic meteorological models with air quality models. In: Gryning, S.-E., Batchvarova, E. (Ed.), *Air Pollution Modeling and its Application XIII*. Kluwer/Plenum, New York, pp. 651–660.

- Pierce, T. E., Lamb, B. K., Van Meter, A. R., 1990. Development of a biogenic emissions inventory system for regional scale air pollution models. 83th Annual Meeting & Exhibition of the Air & Waste Management Association, Pittsburgh, paper 90-94.3.
- Renner, E. und Münzenberg, A., 2003. Impact of Biogenic Terpene Emissions from *Brassica napus* on Tropospheric Ozone over Saxony (Germany). Environ. Sci. & Pollut. Res., 10, 147-153.
- Renner, E. and Wolke, R., 2010. Modelling the formation and atmospheric transport of secondary inorganic aerosols with special attention to regions with high ammonia emissions. Atmos. Env., 44, 1904-1912.
- Schaap, M., M. van Loon, H. M. ten Brink, F. J. Dentener, P. J. H. Builtjes, 2004. Secondary inorganic aerosol simulations for Europe with special attention to nitrate. Atmos. Chem. Phys., 4, 857-874.
- Schättler, U., Doms, G., Schraff, C., 2008. A Description of the Nonhydrostatic Regional COSMO-Model. Deutscher Wetterdienst, Offenbach, 2008. <http://www.cosmo-model.org>.
- Schell, B., Ackermann, I. J., Binkowski, F. S., and Ebel, A., 2001. Modeling the formation of secondary organic aerosol within a comprehensive air quality model system. J. Geophys. Res., 106, 28275–28293.
- Simpson, D. Fagerli, H., Jonson, J. E., Tsyro, S., Wind P., 2003. Transboundary Acidification, Eutrophication and Ground Level Ozone in Europe. PART I, Unified EMEP Model Description. EMEP/MSC-W, Status Report 2003, ISSN 0806-4520.
- Steppeler, J., Doms, G., Schättler, U., Bitzer, H.W., Gassmann, A., Damrath, U., Gregoric, G., 2003. Meso-gamma scale forecasts using the nonhydrostatic model LM. Meteorological Atmospheric Physics, 82, 75–96.
- Stern, R., Builtjes, P., Schaap, M., Timmermans, R., Vautard, R., Hodzic, A., Memmesheimer, M., Feldmann, H., Renner, E., Wolke, R., Kerschbaumer, A., 2008. A model intercomparison study focussing on episodes with elevated PM10 concentrations. Atmos. Env., 42, 4567-4588.
- Stern, R., 2010a: Bewertung von Emissionsminderungsszenarien mit Hilfe chemischer Transportberechnungen: PM₁₀- und PM_{2,5}-Minderungspotenziale von Maßnahmenpaketen zur weiteren Reduzierung der Immissionen in Deutschland, PAREST-Bericht Nr. 19, UBA Dessau, März 2010.
- Stern, R., 2010b. Bewertung von Emissionsminderungsszenarien mit Hilfe chemischer Transportberechnungen: NO₂-und O₃-Minderungspotenziale von Maßnahmenpaketen zur weiteren Reduzierung der Immissionen in Deutschland. PAREST-Bericht Nr. 20, UBA Dessau, März 2010.
- Stern, R., 2010c. Anwendungen von chemischen Transportmodellen im Rahmen des PAREST-Projekts: Ergebnisvergleich REM-CALGRID, LOTOS-EUROS und MUSCAT-COSMO. PAREST-Bericht Nr. 16, UBA Dessau, Mai 2010.
- Stern, R., 2010d. Analyse der Unsicherheiten/Bandbreiten in der im PAREST Projekt verwendeten Kausalkette Emission-Transmission-Immission. PAREST-Bericht Nr. 29, UBA Dessau, Juni 2010.
- Stern, R., 2010e. Immissionsseitige Bewertung von Emissionsminderungspotentialen. Tagungsband zum PAREST-Fachgespräch, UBA Dessau, Juni 2010.
- Stockwell, W. R., Kirchner, F., Kuhn, M., Seefeld, S., 1997. A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling. J. Geophys. Res., 102, 25847-25879.
- Theloke, J., Builtjes, P., Stern, R., Jörß, W., Kugler, J., 2010. Definition, Kodierung und Beschreibung aller in PAREST berechneten Szenarien. PAREST-Bericht Nr. 9, UBA Dessau, Dezember 2009.

- Tsyro, S., Erdman, L., 2000. Parameterization of aerosol deposition processes in EMEP MSC-E and MSC-W transport models. EMEP/MSC-E & MCS-W Note 7/00, Norwegian Meteorological Institute, Oslo.
- Williams, E. A., Günther, A., Fehsenfeld, F. C., 1992. An inventory of nitric oxide emissions from soils in the United States. J. Geophys. Res., 97, 7511-7519.
- Winiwarter, W. und Züger, J., 1996. Pannonisches Ozon Projekt, Teilbericht Emissionen. Endbericht, Seibersdorf Report OEFZS-A-3817.
- Wolke, R. and Knöth, O. 2000: Implicit-explicit Runge-Kutta methods applied to atmospheric chemistry-transport modelling. Environmental Modelling and Software, 15, 711-719.
- Wolke, R., Knöth, O., Hellmuth, O., Schröder, W., Renner, E., 2004. The parallel model system *LM-MUSCAT* for chemistry-transport simulations: Coupling scheme, parallelization and applications. G.R. Joubert, W.E. Nagel, F.J. Peters and W.V. Walter (Ed.). In: Parallel Computing: Software Technology, Algorithms, Architectures, and Applications. Elsevier, 363-370.
- Veldt, C., 1991. The use of biogenic VOC measurements in emission inventories. TNO report 91-323, TNO Institute of Environmental and Energy Technology, Apeldoorn, The Netherlands.

Tabellenverzeichnis

Tab. 4.1: Parameter der biogenen Emission.	12
Tab. 6.1: Zusammenstellung der gemessenen und berechneten Jahresmittelwerte an den Umlandstandorten.	26
Tab. 6.2: Zusammenstellung der gemessenen und berechneten Jahresmittelwerte an zwei urbanen Standorten im Ruhrgebiet.	27

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1: Modellierungsgebiete und Gitterauflösungen.	4
Abb. 5.1: Streudiagramme der berechneten und gemessenen Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Umlandstationen für NO_2 , PM_{10} und $\text{PM}_{2.5}$	16
Abb. 5.2: Streudiagramme der berechneten und gemessenen Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Umlandstationen für Sulfat, Nitrat und Ammonium.	17
Abb. 5.3: Zeitreihen der berechneten und gemessenen NO_2 -Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Melpitz, Waldhof und Westerland.	18
Abb. 5.4: Zeitreihen der berechneten und gemessenen PM_{10} -Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Melpitz, Waldhof und Westerland.	19
Abb. 5.5: Zeitreihen der berechneten und gemessenen $\text{PM}_{2.5}$ -Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Melpitz und Waldhof.	20
Abb. 5.6: Zeitreihen berechneten und gemessenen Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an der Stationen Melpitz für Sulfat, Nitrat und Ammonium.	21
Abb. 5.7: Zeitreihen berechneten und gemessenen Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an der Station Melpitz für die sekundär gebildete Partikelmasse.	22
Abb. 5.8: Zeitreihen der berechneten und gemessenen NO_2 -Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Bottrop und Duisburg-Bruckhausen.	22
Abb. 5.9: Zeitreihen der berechneten und gemessenen PM_{10} -Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Bottrop und Duisburg-Bruckhausen.	23
Abb. 6.1: NO_2 –Jahresmittelwerte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$, Konzentrationen der Szenarien 2005, 2020 und MFR2020 sowie die entsprechenden Differenzen.	30
Abb. 6.2: PM_{10} –Jahresmittelwerte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$, Konzentrationen der Szenarien 2005, 2020 und MFR2020 sowie die entsprechenden Differenzen.	31
Abb. 6.3: $\text{PM}_{2.5}$ –Jahresmittelwerte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$, links: Konzentrationen der Szenarien 2005, 2020 und MFR2020 sowie die entsprechenden Differenzen.	32
Abb. 6.4: Jahresmittelwerte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für 2005 und die Differenzen 2005 und 2020 sowie 2020 und MFR2020: Ammoniumnitrat und Ammoniumsulfat.	33

Abb. 6.5: Jahresmittelwerte in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für 2005 und die Differenzen 2005 und 2020 sowie 2020 und MFR2020: $\text{PPM}_{2.5}$ und PPM_{10}	34
Abb. 6.6: Anteil der sekundär gebildeten Partikelmasse an der gesamten Partikelmasse, links: Szenarien 2005, 2020 und MFR2020 sowie die entsprechende Differenzen.	35
Abb. 6.7: Streudiagramme der Jahresmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] für 2005 und das Referenz-Szenario 2020 an den Umlandstandorten für NO_2 und PM_{10}	36
Abb. 6.8: Streudiagramme der Jahresmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] für 2005 und das Referenz-Szenario 2020 an den Umlandstandorten für Sulfat, Nitrat und Ammonium.	37
Abb. 6.9: Streudiagramme der Jahresmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] für 2005 und das Referenz-Szenario 2020 an den Umlandstandorten für primär emittierte Partikel: $\text{PPM}_{10-2.5}$ und $\text{PPM}_{2.5}$	38
Abb. 6.10: Zeitreihen der Tagessmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] für 2005 und das Referenz-Szenario 2020 am Standort Melpitz für NO_2 , PM_{10} und $\text{PM}_{2.5}$	39
Abb. 6.11: Zeitreihen der Tagessmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] für 2005 und das Referenz-Szenario 2020 am Standort Melpitz für Sulfat, Nitrat und Ammonium.	40
Abb. 7.1: Modellierungsgebiet und MUSCAT-Gitter zur Simulation zweier ausgewählter Ballungsräume (Ruhrgebiet und Berliner Raum) mit unterschiedlichen Auflösungen.	41
Abb. 7.2: Konzentrationen (Deutschland) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für Simulationen mit unterschiedlichen Gitterauflösungen am 6. Februar 2005, 8:00 Uhr: NO_2 und PM_{10}	43
Abb. 7.3: Konzentrationen (NRW) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für Simulationen mit unterschiedlichen Gitterauflösungen am 6. Februar 2005, 8:00 Uhr: NO_2 und PM_{10}	44
Abb. 7.4: Konzentrationen (Berliner Raum) in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für Simulationen mit unterschiedlichen Gitterauflösungen am 6. Februar 2005, 8:00 Uhr: NO_2 und PM_{10}	45
Abb. 7.5: Zeitreihen der berechneten und gemessenen NO_2 -Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Bottrop (oben), Duisburg-Bruckhausen und Neuglobsow.	46
Abb. 7.6: Zeitreihen der berechneten und gemessenen PM_{10} -Tagesmittelwerte [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] an den Stationen Bottrop, Duisburg-Bruckhausen und Neuglobsow.	47