

UFOPLAN

Abschlussbericht

**Anwendung des EURAD-Modell-Systems
im Rahmen des FE-Vorhabens (UFOPLAN Nr. 202 43 270)**

**„Entwicklung von Modellen zur Identifizierung von
Schadstoffquellen – insbesondere im Verkehrsbereich
– im Rahmen der 22. BimSchV –
Dokumentation, Weiterentwicklung und Validierung und
Maßnahmenplanung für
ein bundeseinheitliches Vorgehen“**

Teil C Regionale Simulationsrechnungen

Köln, Dezember 2005



**Fördervereins des Rheinischen Instituts für Umweltforschung an der
Universität zu Köln e.V.**

als Unterauftrag für die FU Berlin

Teil C

Regionale Studien

Stand: Februar 2006

1 Modellbeschreibung und Eingangsdaten

Meteorologische Analysedaten

Bei der Jahresrechnung für 1999 kamen die NCAR/NCEP-Re-Analysis Daten (NNRP) zum Einsatz. Diese haben eine horizontale Auflösung von 2.5° .

Ab 2001 standen die besser aufgelösten AVN/MRF-Daten bzw. GFS-Daten zur Verfügung.

Unterschiede in den verwendeten Modellversionen bei den regionalen und hemisphärischen Untersuchungen

Bei den hemisphärischen Rechnungen und den regionalen Simulationen wurden in einigen Bereichen unterschiedliche Modellkonfigurationen und Parametrisierungen verwendet.

- die regionalen meteorologischen Rechnungen wurden hydrostatisch durchgeführt mit der Modellversion MM5 V2 – die hemisphärischen Jahres-Simulationen mit der Version MM5 V3 im nicht-hydrostatischen Modus.
- Es wurde regional ein Lambert-konformes Horizontalgitter verwendet – hemisphärisch ein polar-stereographisches.
- Das vertikale Gitter umfasst 23 Schichten bis 100 hPa mit erhöhter Auflösung in der Grenzschicht – hemisphärisch 27 Schichten bis 30 hPa
- Die Gitterweite im groben Gitter (Europa) beträgt 125 km – wie bei den hemisphärischen Experimenten – dazu kommt noch ein genestetes Gebiet (Mitteleuropa) mit 25 km Gitterweite.
- Die Gasphasen-Chemie wird mit dem RACM Mechanismus berechnet (hemisphärisch RADM2).
- Bei den regionalen Modellrechnungen wurden beim Aerosolmodul zusätzlich die sekundären organischen Aerosole behandelt (SORGAM, Schell et al., 2001)

Das verwendete Aerosol Modell MADE (Ackermann et al., 1998) ist ein so genanntes modales Modell, bei dem die Aerosole in drei Moden behandelt werden: Aitken-, Akkumulations- und Grobpartikel-Mode (siehe Abbildung 5). Es werden Advektion, Diffusion, Sedimentation, trockene Deposition, Nukleation, Koagulation, Kondensation und Evaporation, sowie die Wechselwirkung mit Wolken behandelt.

Es wurden die vollständigen chemischen Komponenten abgespeichert, welche vom Aerosol-Modell behandelt werden. Dabei handelt es sich um die folgenden chemischen Kategorien (aufgelöst auf die verschiedenen Moden):

- Sulfat (SO₄A)
- Nitrat (NO₃A)
- Ammonium (NH₄A)
- Elementarer Kohlenstoff (EC)
- Primärer organischer Kohlenstoff (ORGP)
- Anthropogener organischer Kohlenstoff (ORG)
- Biogener organischer Kohlenstoff (ORG_B)
- Primäres PM_{2.5} (P25A)

Sowie TSP, PM₁₀, PM_{2.5} und PM₁ (diagnostizierbar)

Tabelle 1: Vertikalstruktur des Modellgitters für die regionalen Simulationsrechnungen (bei Standard-Bodendruck)

Höhenstruktur in Sigma-Schichten 23 Schichten

Level	σ_F	$\Delta\sigma$	σ_H	Druck	
				Oberkante	Mitte
0	1			1013,00	
1	0,995	0,005	0,9975	1008,44	1010,72
2	0,99	0,005	0,9925	1003,87	1006,15
3	0,985	0,005	0,9875	999,31	1001,59
4	0,98	0,005	0,9825	994,74	997,02
5	0,97	0,01	0,975	985,61	990,18
6	0,96	0,01	0,965	976,48	981,05
7	0,945	0,015	0,9525	962,79	969,63
8	0,93	0,015	0,9375	949,09	955,94
9	0,91	0,02	0,92	930,83	939,96
10	0,89	0,02	0,9	912,57	921,70
11	0,865	0,025	0,8775	889,75	901,16
12	0,84	0,025	0,8525	866,92	878,33
13	0,81	0,03	0,825	839,53	853,23
14	0,78	0,03	0,795	812,14	825,84
15	0,74	0,04	0,76	775,62	793,88
16	0,7	0,04	0,72	739,10	757,36
17	0,6	0,1	0,65	647,80	693,45
18	0,5	0,1	0,55	556,50	602,15
19	0,4	0,1	0,45	465,20	510,85
20	0,3	0,1	0,35	373,90	419,55
21	0,2	0,1	0,25	282,60	328,25
22	0,1	0,1	0,15	191,30	236,95
23	0	0,1	0,05	100,00	145,65

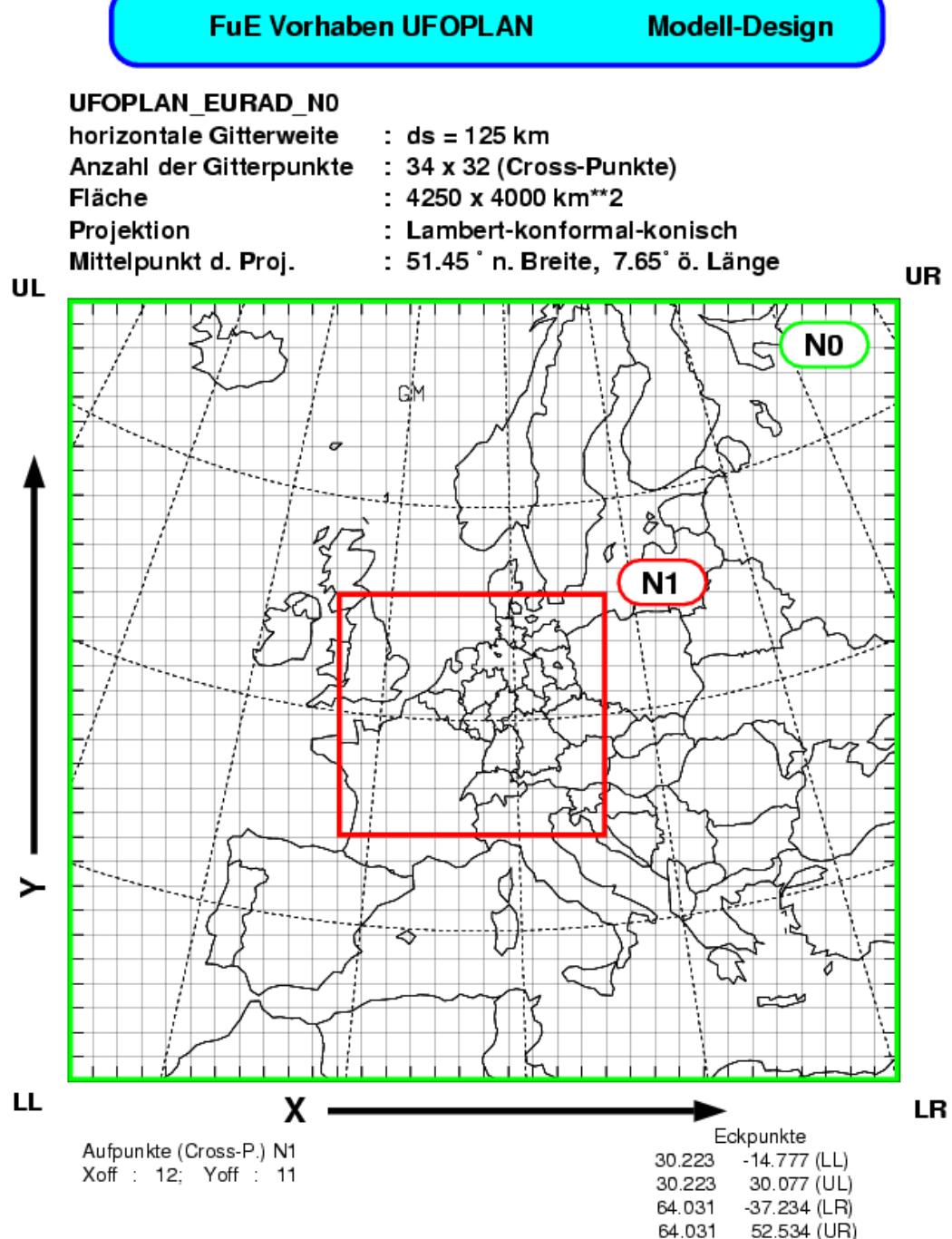


Abbildung 1.1: Modellgebiet und Gitter für die regionalen Simulationsrechnungen mit dem EURAD-CTM: Grobes Gitter mit Lage des Nest 1 Gebietes.

FuE Angebot UFOPLAN

Modell-Design

UFOPLAN_EURAD_N1

horizontale Gitterweite : $ds = 25 \text{ km}$
 Anzahl der Gitterpunkte : 55×50 (Cross-Punkte)
 Fläche : $1350 \times 1250 \text{ km}^2$
 Projektion : Lambert-konformal-konisch
 Mittelpunkt d. Proj. : $51.45^\circ \text{ n. Breite}, 7.65^\circ \text{ ö. Länge}$

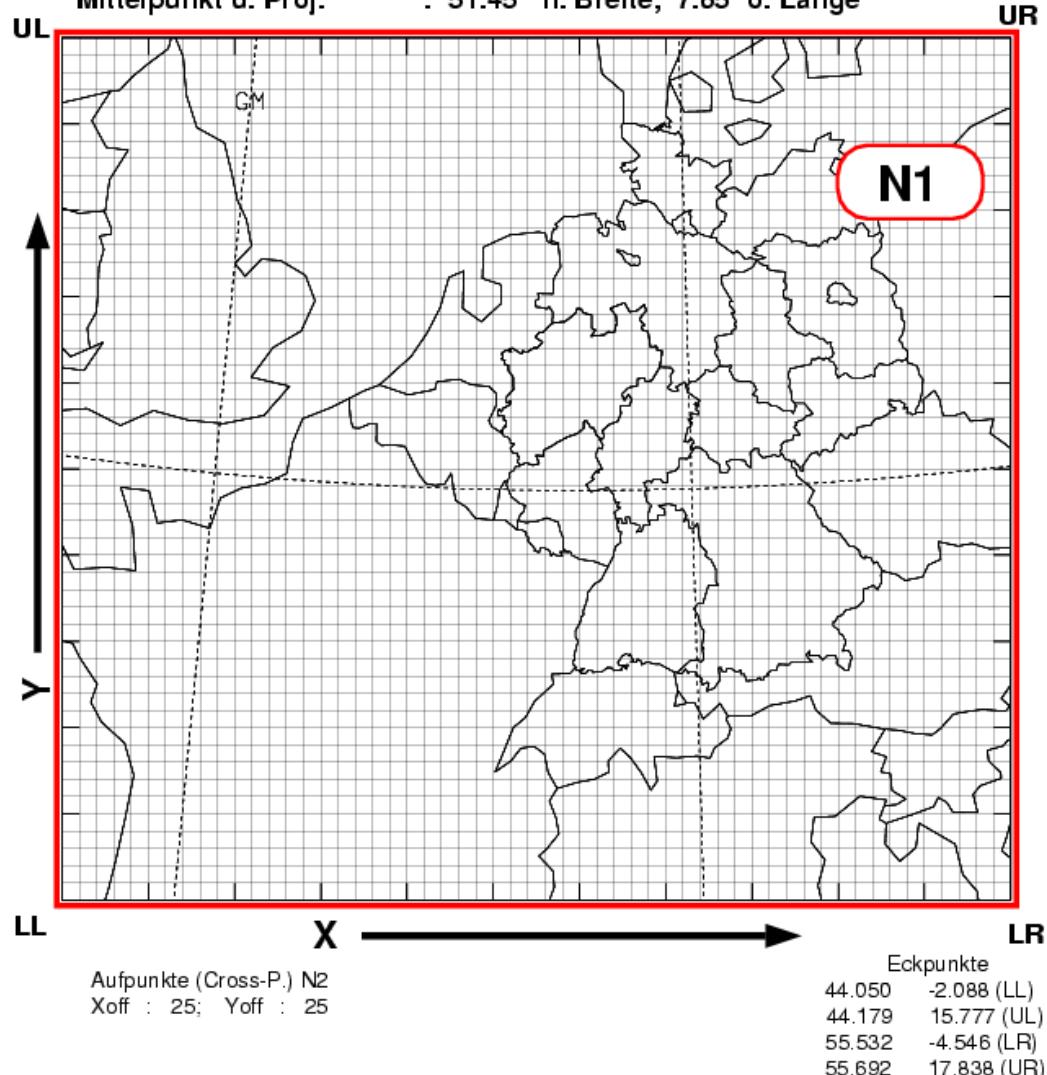


Abbildung 1.2: Modellgebiet und Gitter für die regionalen Simulationsrechnungen mit dem EURAD-CTM: Nest 1 Gebiet.

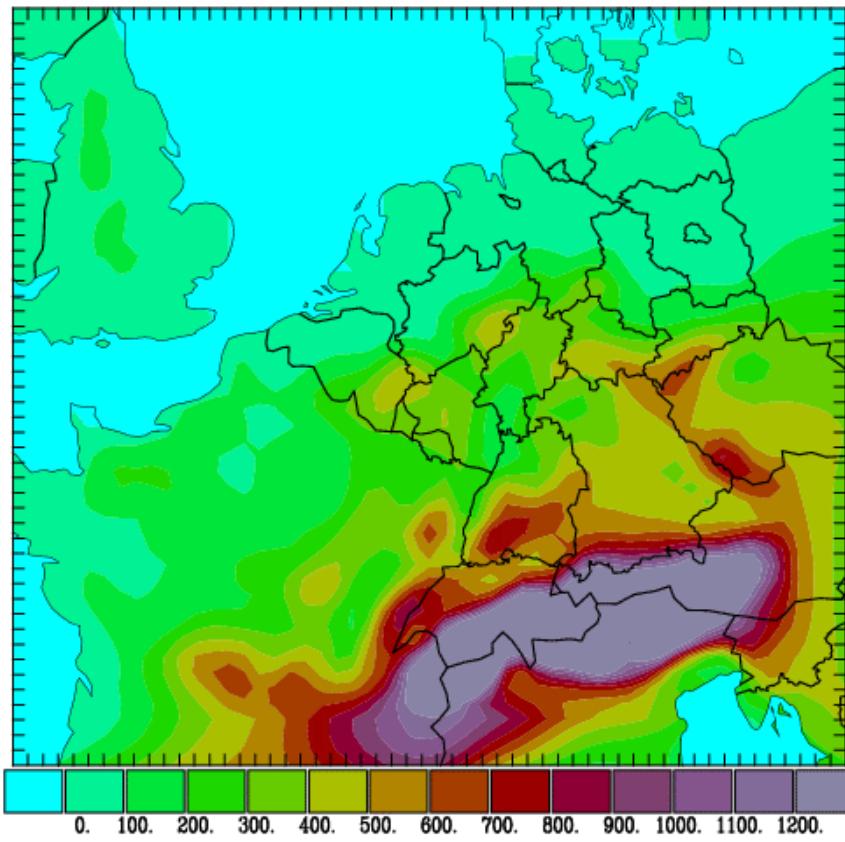


Abbildung 1.3: Topographie des Nest1 Gebietes.

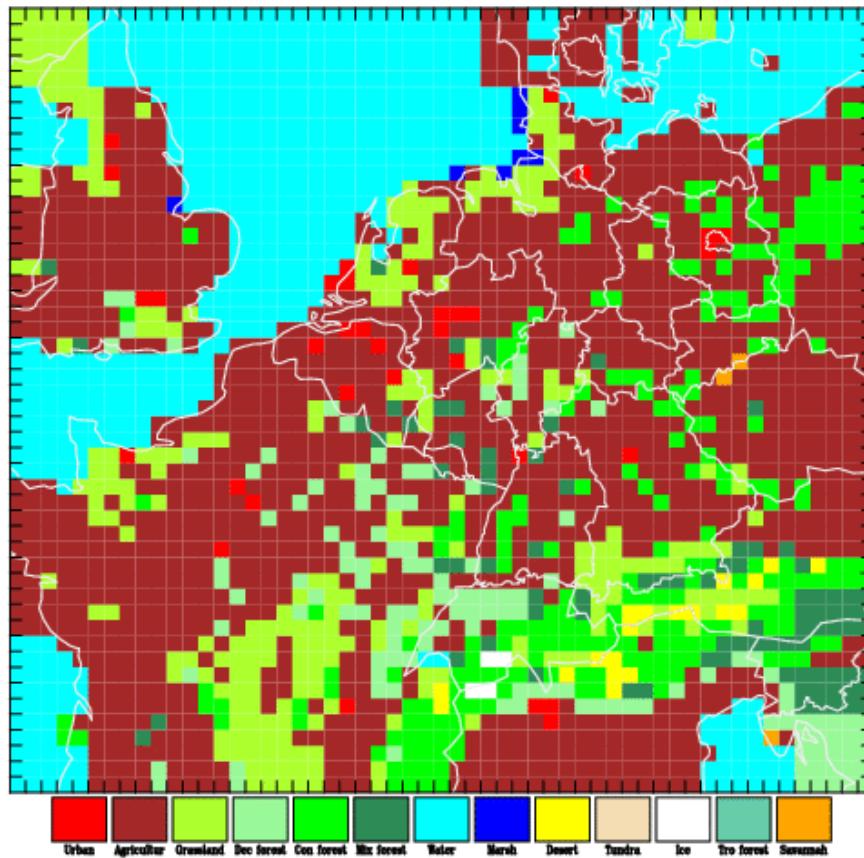


Abbildung 1.4: Landnutzungsklassifizierung (dominanter Landnutzungstyp) des Nest 1 Gebietes

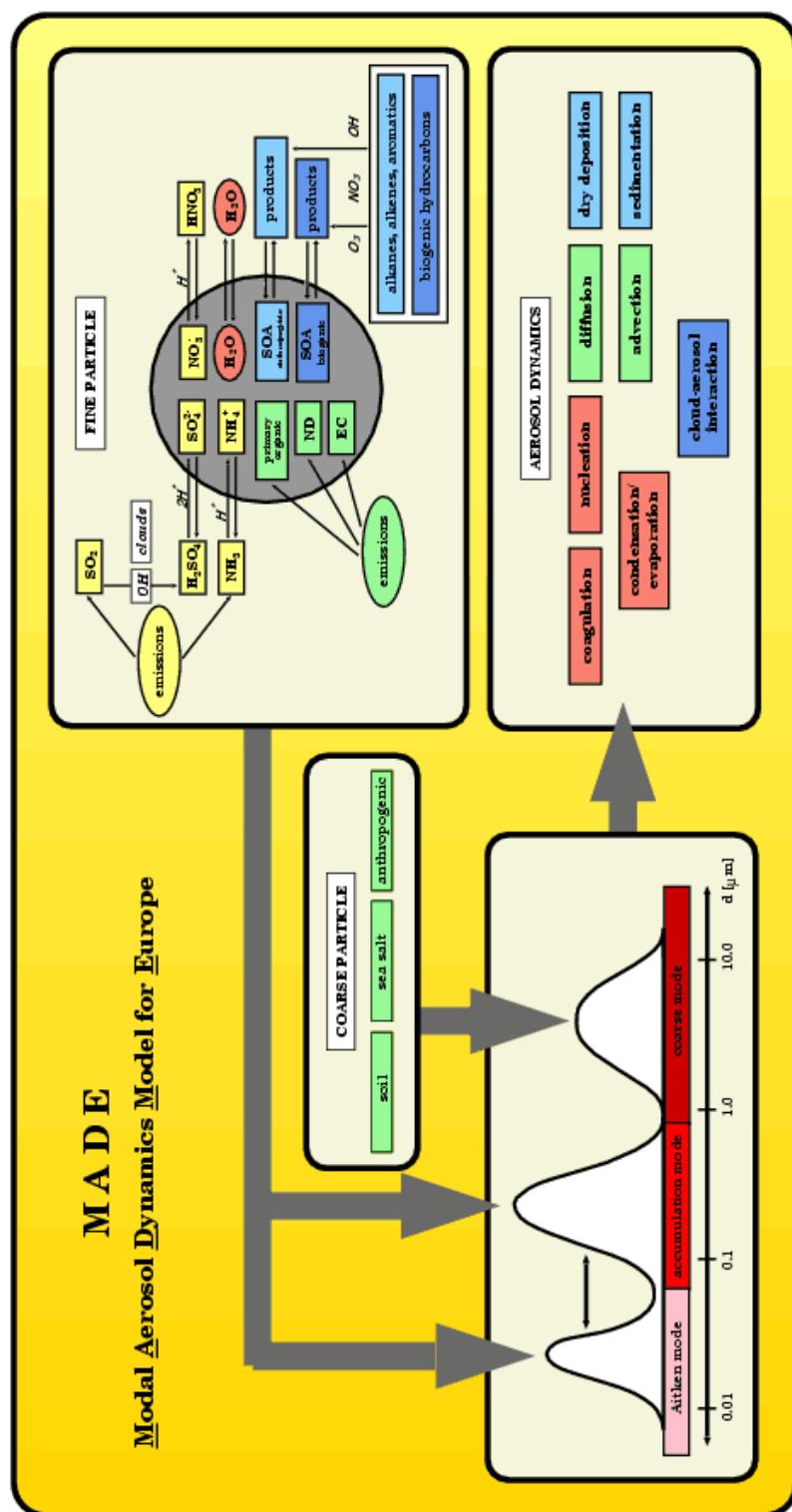


Abbildung 1.5: Struktur des Aerosol Submodells MADE des EURAD-CTMs.

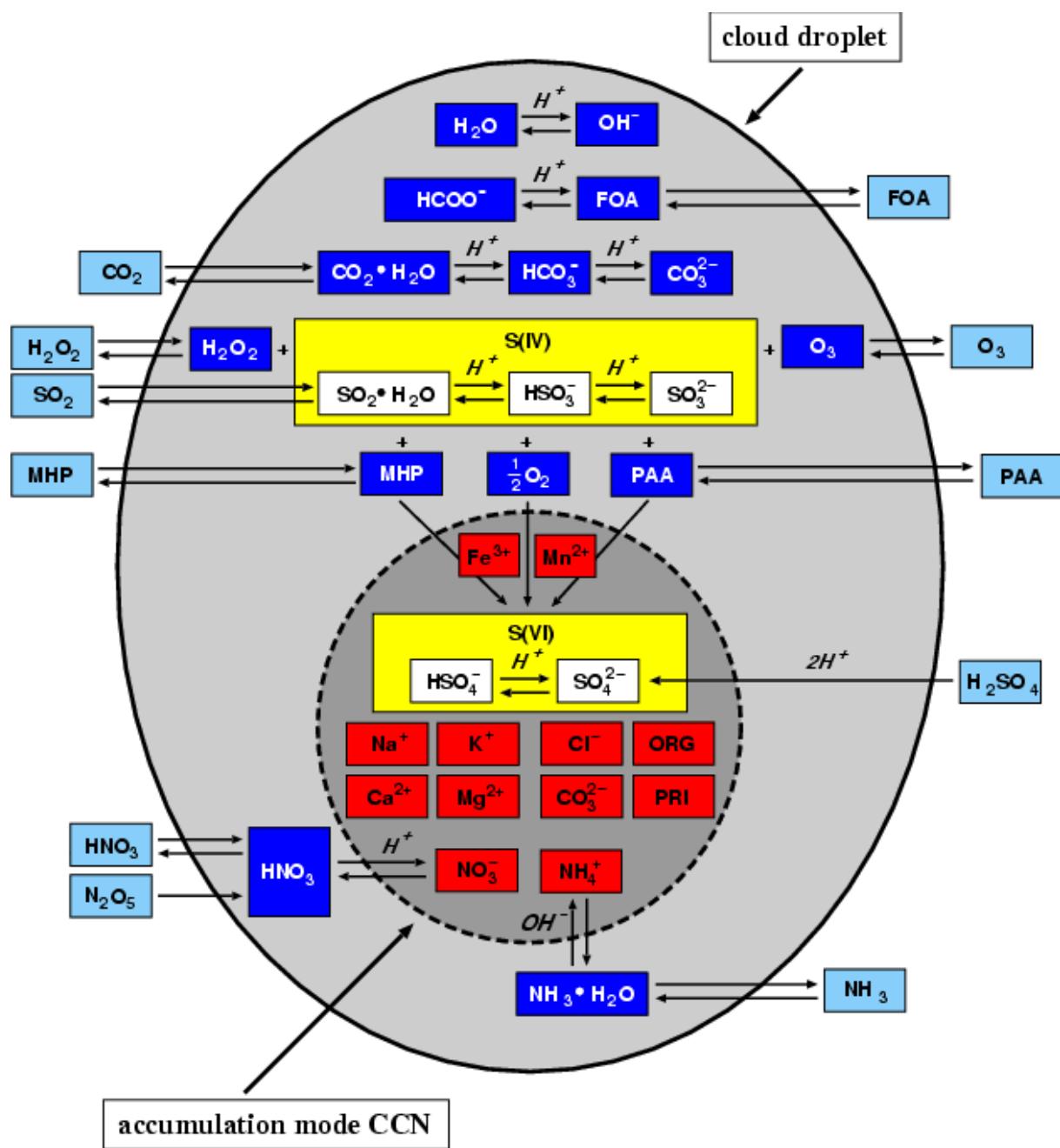


Abbildung 1.6: Nassphasenprozesse im EURAD-CTM.

2 Episoden und Studien

In den regionalen Studien wurden die folgenden Zeiträume untersucht:

- Winterepisode: 01.01.2003 – 06.04.2003 (R03)
- Sommerepisode: 01.07.2003 – 30.09.2003 (S03)

Die Winterepisode zeichnet sich durch mehrere stabile Hochdrucklagen aus, in deren Folge es zu einer deutlichen Akkumulation von Schadstoffen über Mitteleuropa kam.

Der Sommer 2003 war ebenfalls durch eine lang andauernde Hochdrucklage geprägt, welche zu extremen Temperaturen und hoher Ozonbelastung führte.

Neben einer Basis Simulation welche unter der Verwendung der TNO-LOTOS Emissionen durchgeführt wurden verschiedene Sensitivitätsstudien durchgeführt:

- B3: Basis Simulation
- D3: Reduzierte vertikale Auflösung
- E3: „Keine Aerosol-Dynamik“

Die Ziele der Experimente sind:

Basis-Simulation

- Nutzung im einem Modellvergleich
- Modellevaluierung
- Analyse insbesondere im Hinblick auf Zusammensetzung und Größenverteilung der Aerosole

Sensitivitätsstudien

- Auswirkung vereinfachender Annahmen auf Modellergebnisse - insbesondere
- Einfluss der einer größeren Vertikalauflösung (Exp. D3)
- Effekt der Aerosoldynamik

3 Winterepisode (R03 – 01.01.2003 – 06.04.2003)

3.1 Basis Simulation

Die Daten der Basis-Simulation wurde der Gruppe der FU-Berlin für einen Modellvergleich zu Verfügung gestellt. Es wurden die meteorologischen Daten der EURAD-Prognose verwendet (<http://www.eurad.uni-koeln.de>). In der Prognose Datenbank sind Grafiken zu Meteorologie und Luftschatdstoffen für die beiden Episoden online einsehbar. Dabei wurde allerdings eine vereinfachte Modellkonfiguration ohne die sekundären organischen Aerosole verwendet sowie ein anderer Emissionsdatensatz auf der Basis des EMEP-Katasters.

Die Episode ist geprägt durch mehrere Phasen in denen insbesondere Ost-Europa unter Hochdruck Einfluss liegt. In diesen Phasen kommt es – aufgrund der austauscharmen Wetterlage – zu einer Akkumulation von Spurenstoffen.

Drei Phasen stechen dabei besonders heraus:

- 10. – 14. Februar
- 22. Februar – 8. März
- 25. – 29 März

Die höchsten Konzentrationen werden dabei Anfang März erreicht. Abbildung 3.1.1 zeigt den Verlauf der PM_{10} Konzentration während dieser Akkumulationsphase. Eine Luftmassengrenze zieht sich quer über Deutschland, deren Lage sich im Laufe der Zeit ändert. Eine Zone mit sehr hoher Schadstoffbelastung zieht sich vom so genannten „Schwarzen Dreieck“ (dem Dreiländereck, Polen, Tschechien, Deutschland) nordwestwärts.

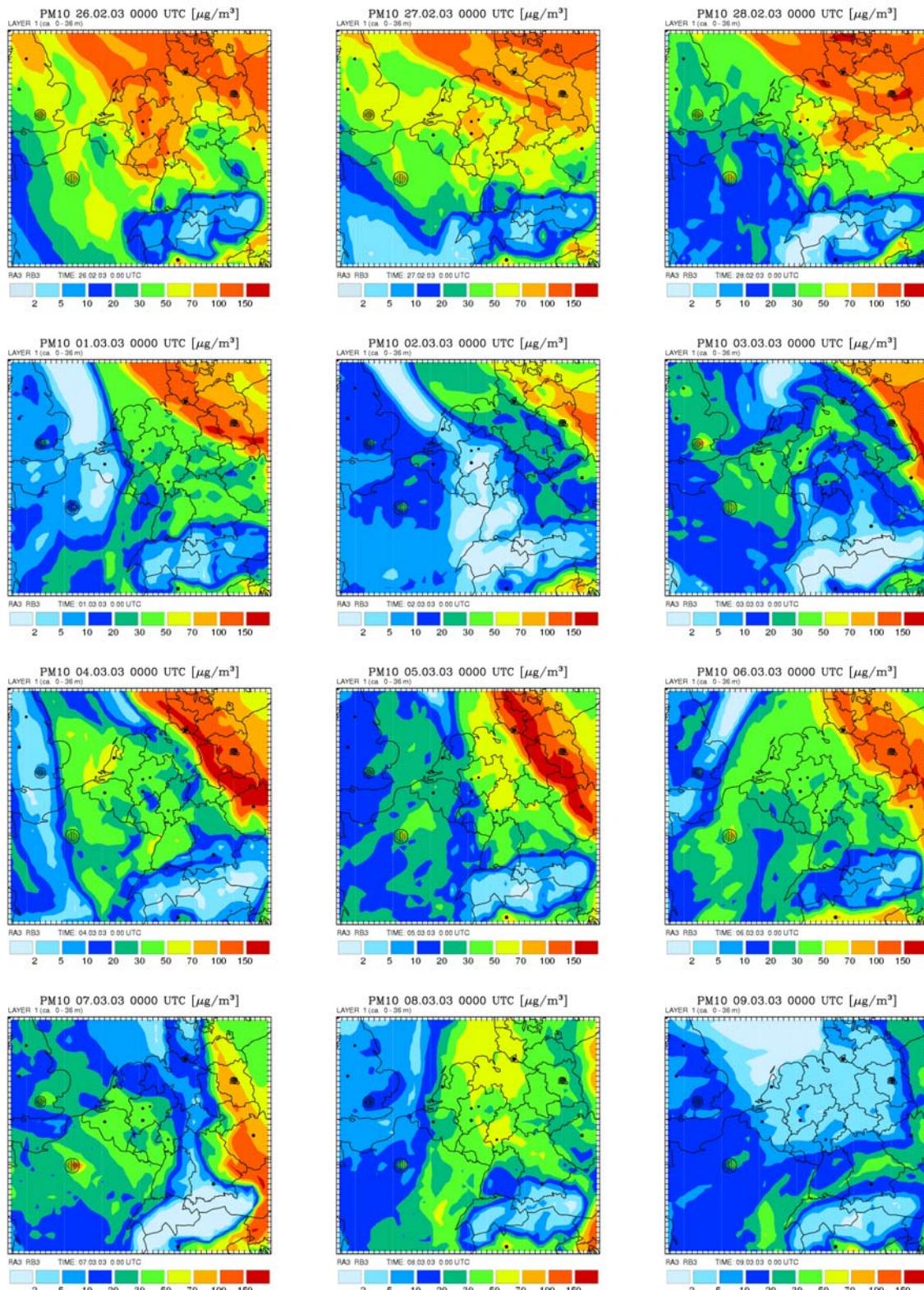


Abbildung 3.1.1 PM₁₀ [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] – bodennahe Schicht – vom 26.02.2003 bis 09.03.2003, alle 24 Stunden, jeweils 0 UTC.

SO₂ / NO₂ / NH₃ (N1) 04.03.03

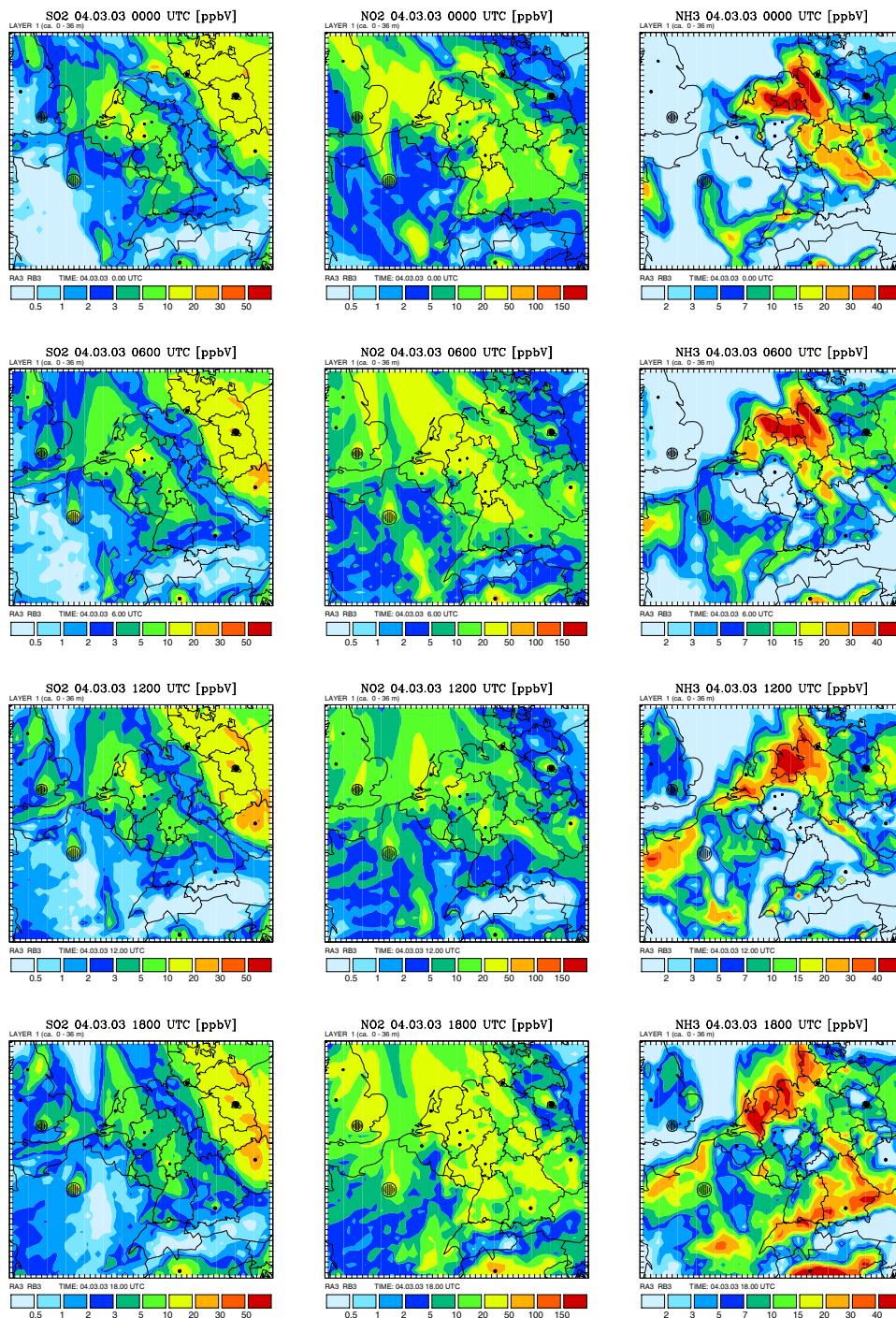


Abbildung 3.1.2 Aerosol Vorläufer-Substanzen im Verlauf des 04. März 2003 - Links SO₂, Mitte NO₂, Rechts NH₃, alle in [ppb] – von oben nach unten 0, 6, 12 und 18 UTC

O3 / NO2 / PM10 (N1) 04.03.03

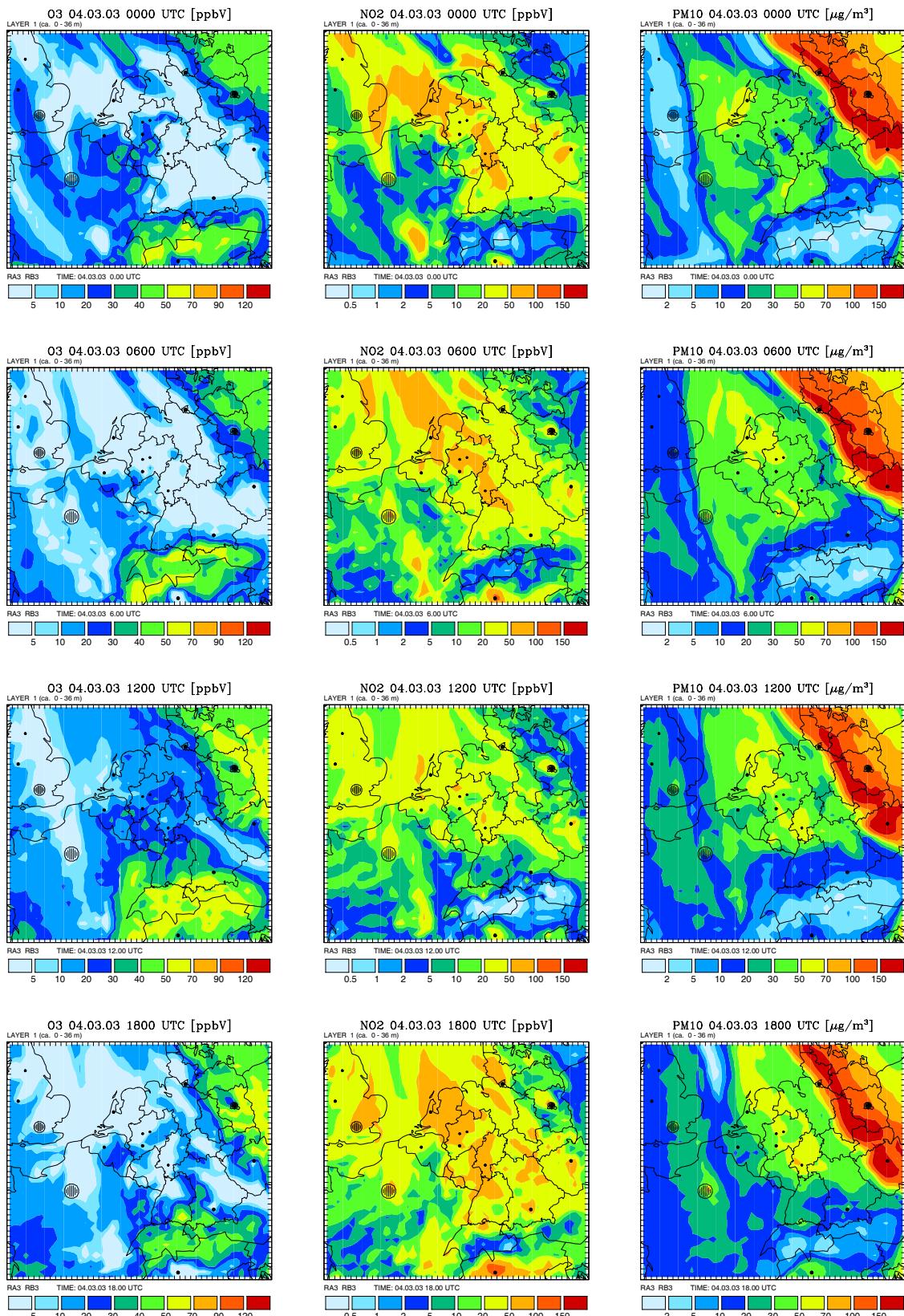


Abbildung 3.1.3 Konzentrationsverlauf am 04. März 2003 - Links O₃, Mitte NO₂, beide in [ppb] Rechts PM₁₀ in [µg/m³] – von oben nach unten 0, 6, 12 und 18 UTC

SO₄ / NO₃ / NH₄ (N1) 04.03.03

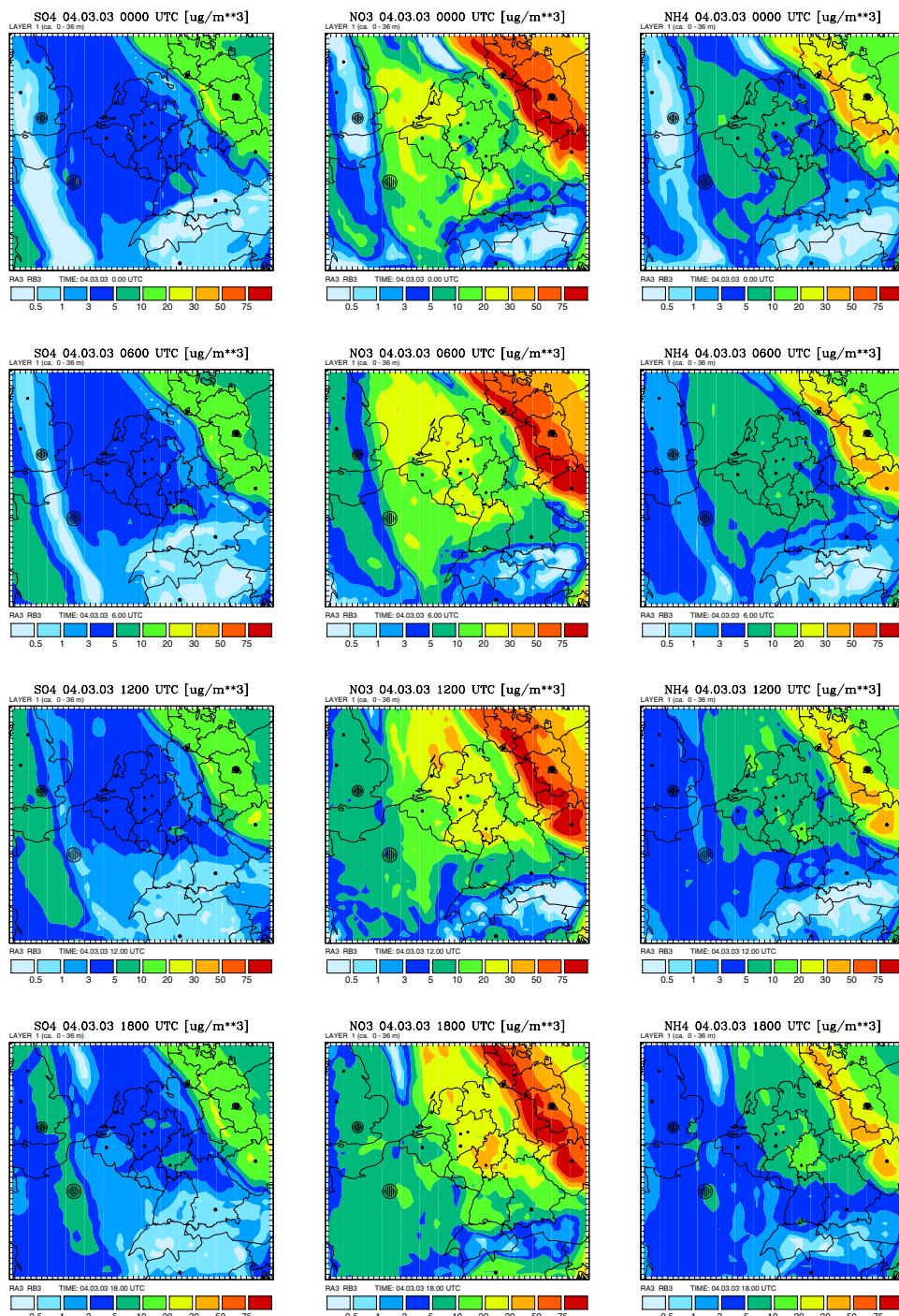


Abbildung 3.1.4 Wichtige Aerosol Komponenten im Verlauf des 04. März 2003 - Links Sulfat, Mitte Nitrat, Rechts Ammonium, alle in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ – von oben nach unten 0, 6, 12 und 18 UTC

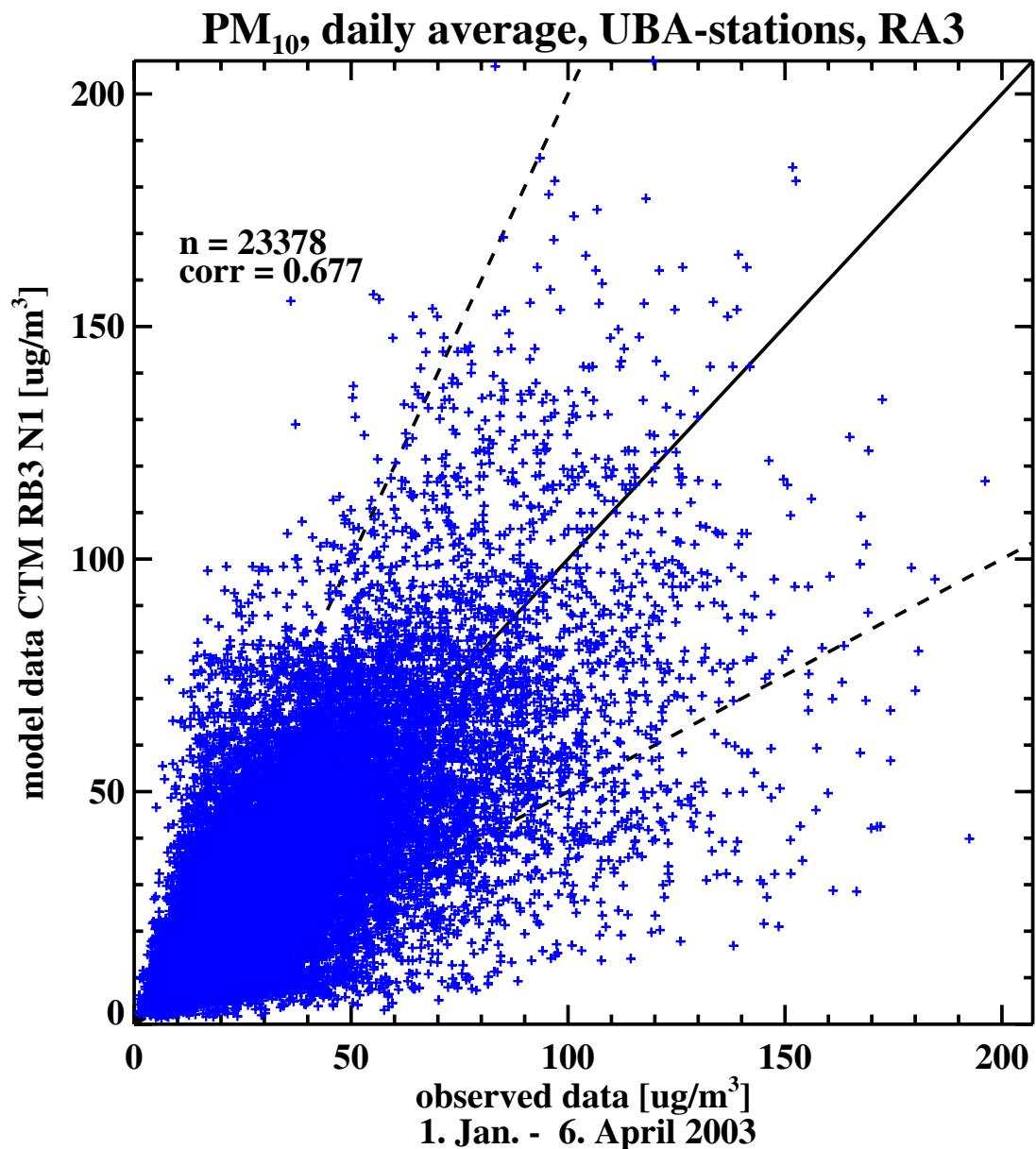
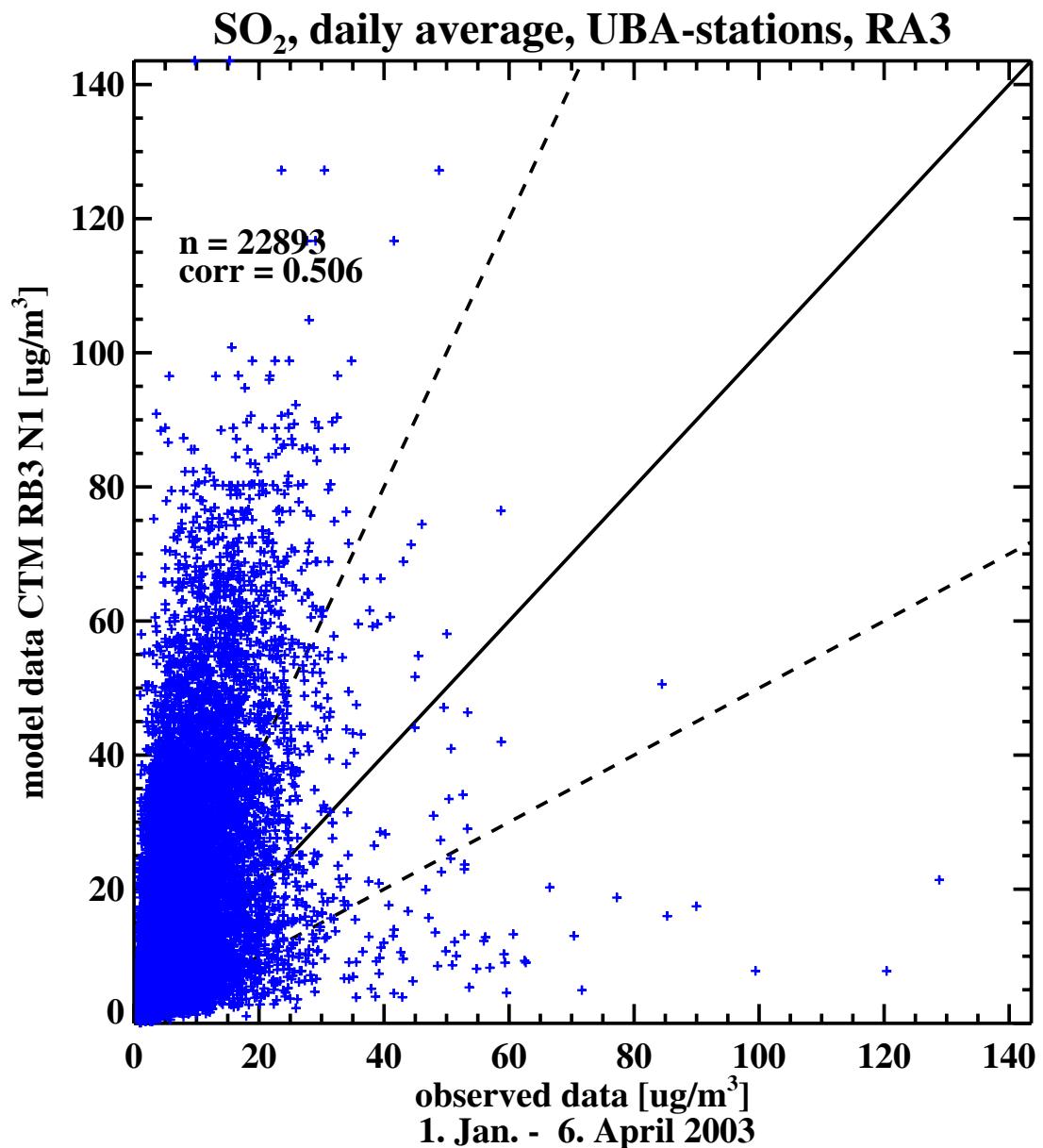


Abbildung 3.1.5 Scatter-Diagramm PM₁₀ Basis Simulation im Vergleich mit UBA-Messungen



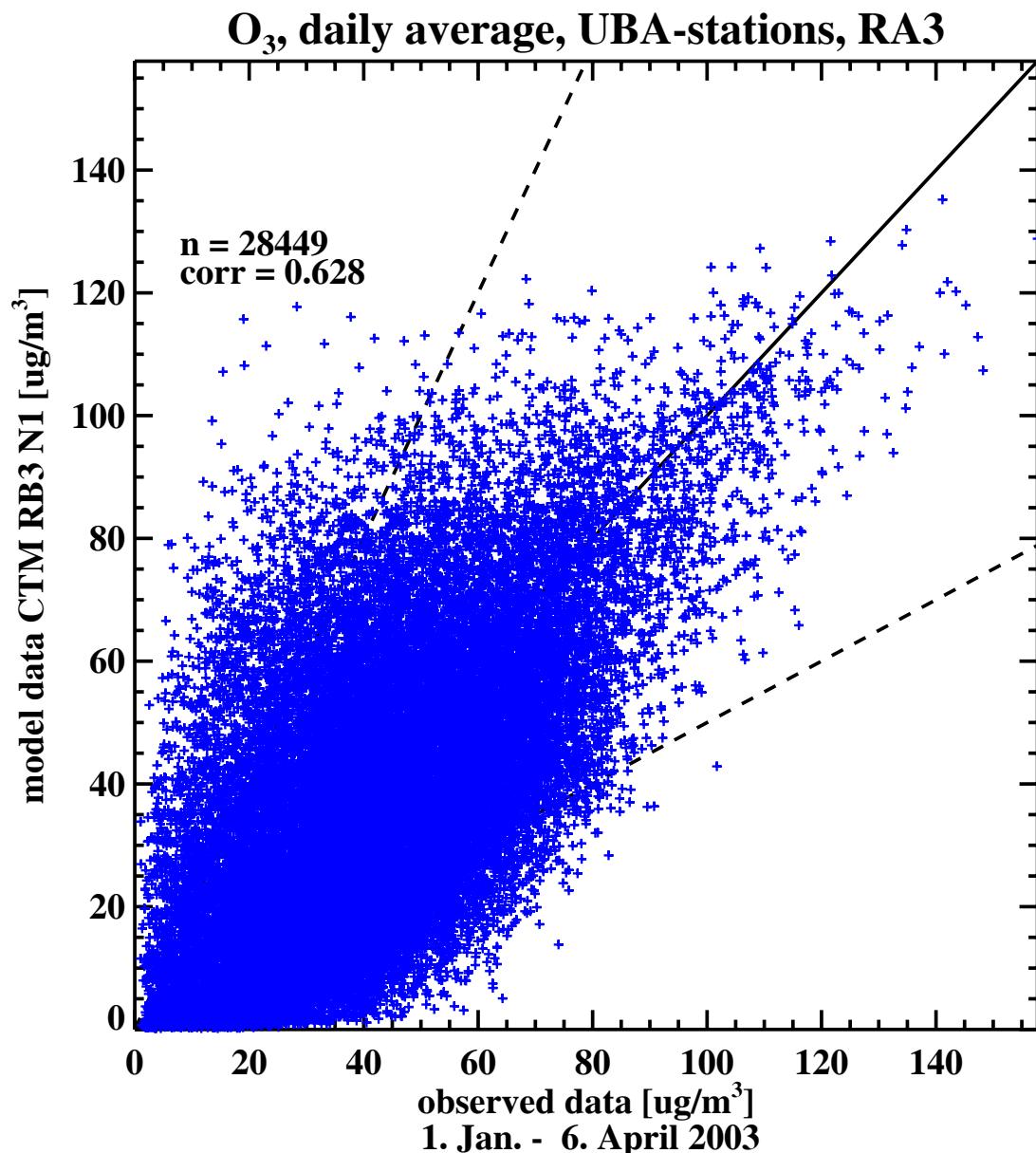


Abbildung 3.1.6 Scatter-Diagramm SO₂ Basis Simulation im Vergleich mit UBA-Messungen

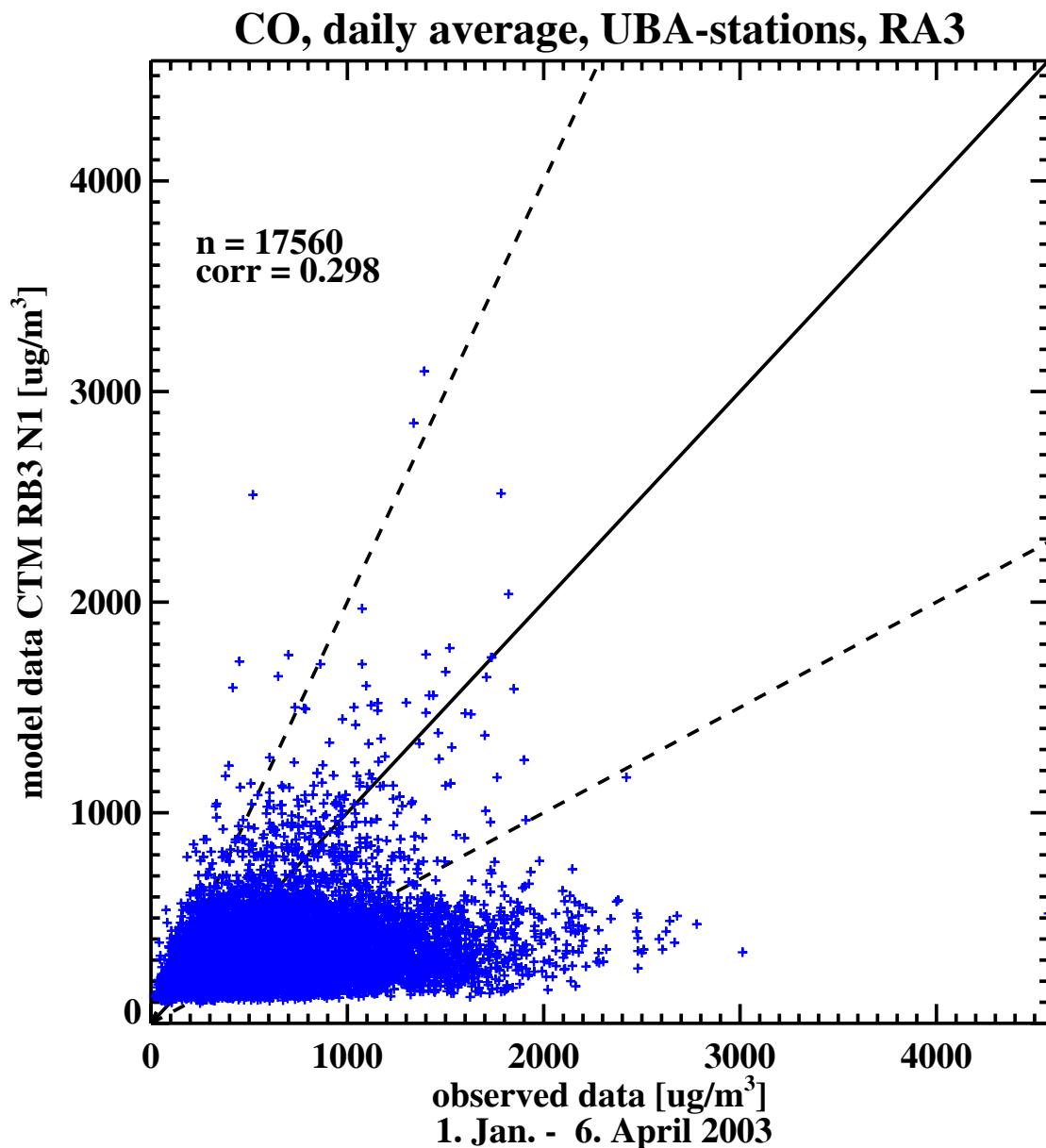


Abbildung 3.1.7 Scatter-Diagramm CO Basis Simulation im Vergleich mit UBA-Messungen

CG,N1 1.1. - 6.4.2003
Daily Average
RB3:CG,N1 (UBA Stations)

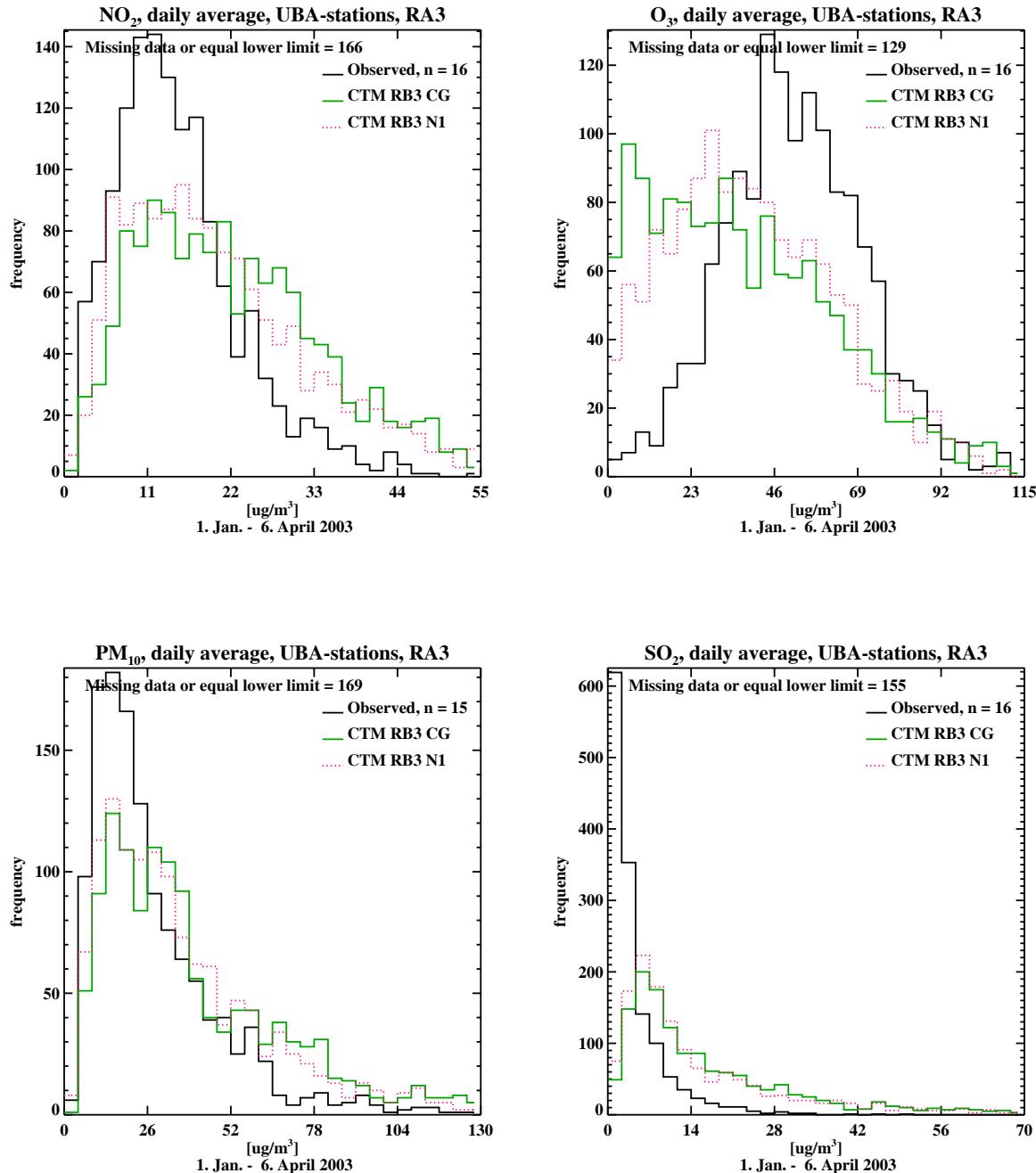


Abbildung 3.1.8 Häufigkeits-Verteilungen der Tagesmittelwerte Basis Simulation Coarse Grid (grün), Nest 1 (rot) und Messungen des UBA (schwarz) NO₂, Ozon, PM₁₀ und SO₂

CG,N1 1.1. - 6.4.2003
Daily Maximum
RB3:CG,N1 (UBA Stations)

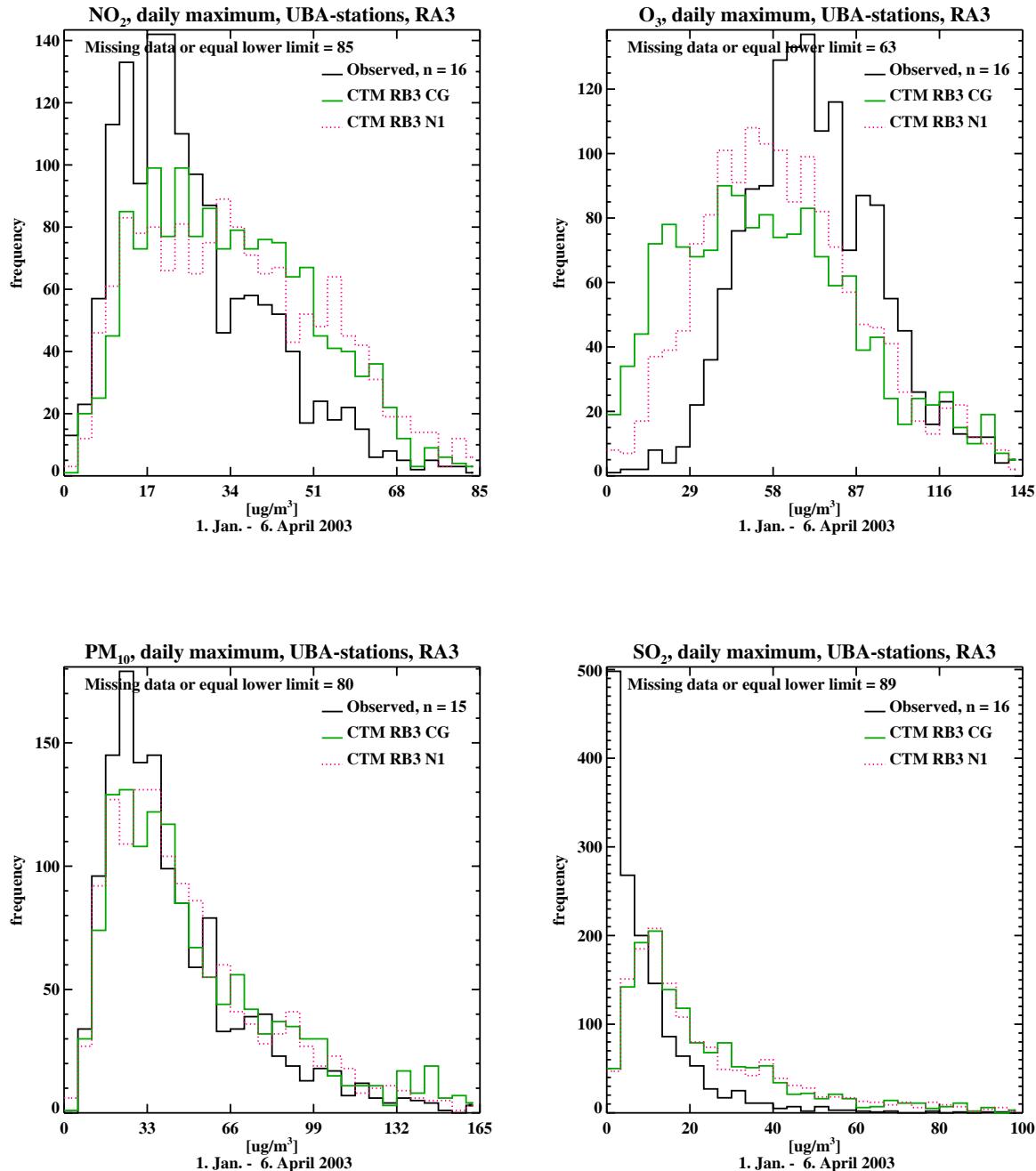


Abbildung 3.1.9 Häufigkeits-Verteilungen der Tagesmaxima Basis Simulation Coarse Grid (grün), Nest 1 (rot) und Messungen des UBA (schwarz) NO₂, Ozon, PM₁₀ und SO₂

3.2 Studie mit niedriger vertikaler Auflösung (RD3)

Ziel dieses Experimentes war es, den Effekt einer drastisch reduzierten vertikalen Gitterauflösung auf die Ergebnisse der Chemie-Transport-Simulation zu studieren. Um die Sensitivitätsstudie und das Basisexperiment vergleichbar zu halten, wurden für beide Simulationen auf dieselben MM5 Meteorologie Datensätze zurückgegriffen. Die vertikale Auflösung des MM5-Gitters sind 23 Schichten bis 100 hPa und mit dem Gitter der EURAD-CTM Basissimulation identisch. Für die Studie wurden nun die meteorologischen Felder über mehrere Schichten gemittelt, wobei die unterste Schicht beibehalten wurde. Das resultierende Gitter hatte dann 6 Schichten mit den untersten 3 Schichten im Bereich der Grenzschicht. Die Obergrenze des Modells blieb bei 100 hPa.

Tabelle 2: Vertikalstruktur bei den Experimenten mit reduzierter Schichtenzahl.

Höhenstruktur in Sigma-Schichten			6/23 Schichten				
P0	1013						
Ptop	100		Oberkante	Dicke	Schichtmitte	Druck Oberkante	Druck Mitte
Level	σ_F	$\Delta\sigma$			σ_H	P_F	P_H
0		1				1013,00	
1	0,995	0,005			0,9975	1008,44	1010,72
2	0,96	0,035			0,9775	976,48	992,46
3	0,84	0,12			0,9	866,92	921,70
4	0,6	0,24			0,72	647,80	757,36
5	0,3	0,3			0,45	373,90	510,85
6	0	0,3			0,15	100,00	236,95
						Gemittelt über	
							1
							5
							6
							5
							3
							3

Ergebnisse

Der Effekt der reduzierten vertikalen Auflösung im Experiment RD3 wirkt sich regional unterschiedlich aus. Der Nordosten Europas – und des Nest 1 Untersuchungsgebietes - lag während der Winter Episode längere Zeit unter dem Einfluss eines Hochs, welches zu einer stabilen Schichtung führte. Die vertikale Durchmischung spielte in dieser Region eine geringere Rolle. Daher blieben die Unterschiede zwischen Basislauf und RD3 kleiner als im Rest des Modellgebietes Nest1. Die Konzentrationen sind in der Tendenz eher niedriger (siehe Abbildung 3.2.3 – 3.2.5 und Zeitreihen).

Im westlichen und südlichen Teil des Gebietes waren die Abweichungen ausgeprägter. Dies gilt besonders für stark belastete Emissionsgebiete (London, Paris, Ruhr-Gebiet, Po-Ebene). Die regionale Ausbreitung der Schadstoffe ist im Sensitivitätsexperiment abgeschwächt. Daher sind die Konzentrationen quellennah deutlich erhöht.

Wesentliche Unterschiede finden sich – wie zu erwarten war – über topographisch stark gegliedertem Gelände (z.B. Alpenraum, Mittelgebirge; siehe Abbildung 3.2.3 – 3.2.5 sowie die Zeitreihen für die Stationen Schauinsland und Brotjacklriegel). Hier ist die Mischung mit der freien Troposphäre verstärkt. Dies führt besonders bei Ozon – welches im Winter in der freien Troposphäre reichlicher vorhanden ist - zu deutlich höheren (unrealistischen) Konzentrationen.

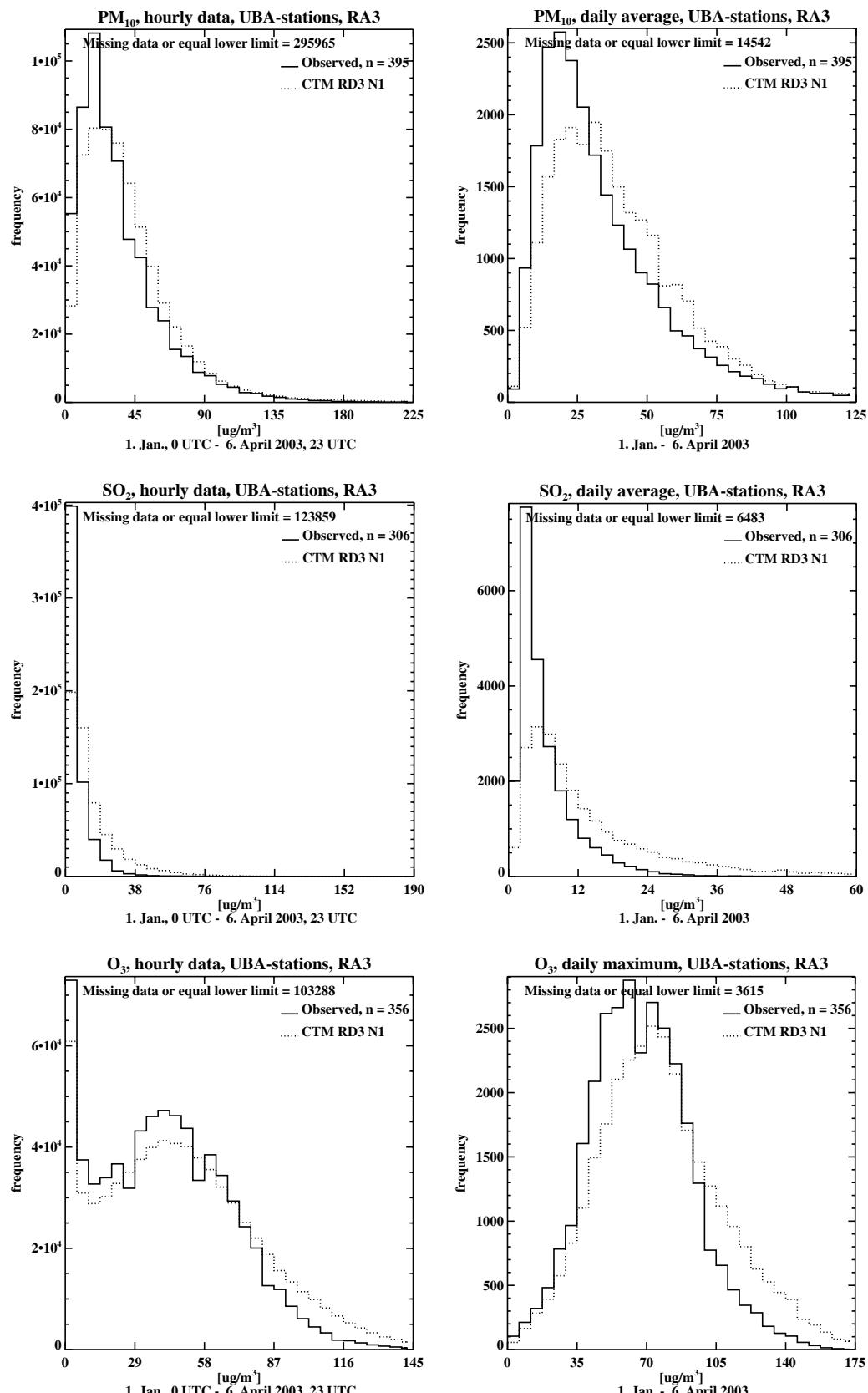


Abbildung 3.2.1: Häufigkeitsverteilungen für das Experiment mit niedriger Vertikalauflösung RD3 im Vergleich mit den Messdaten des UBA Messnetzes.

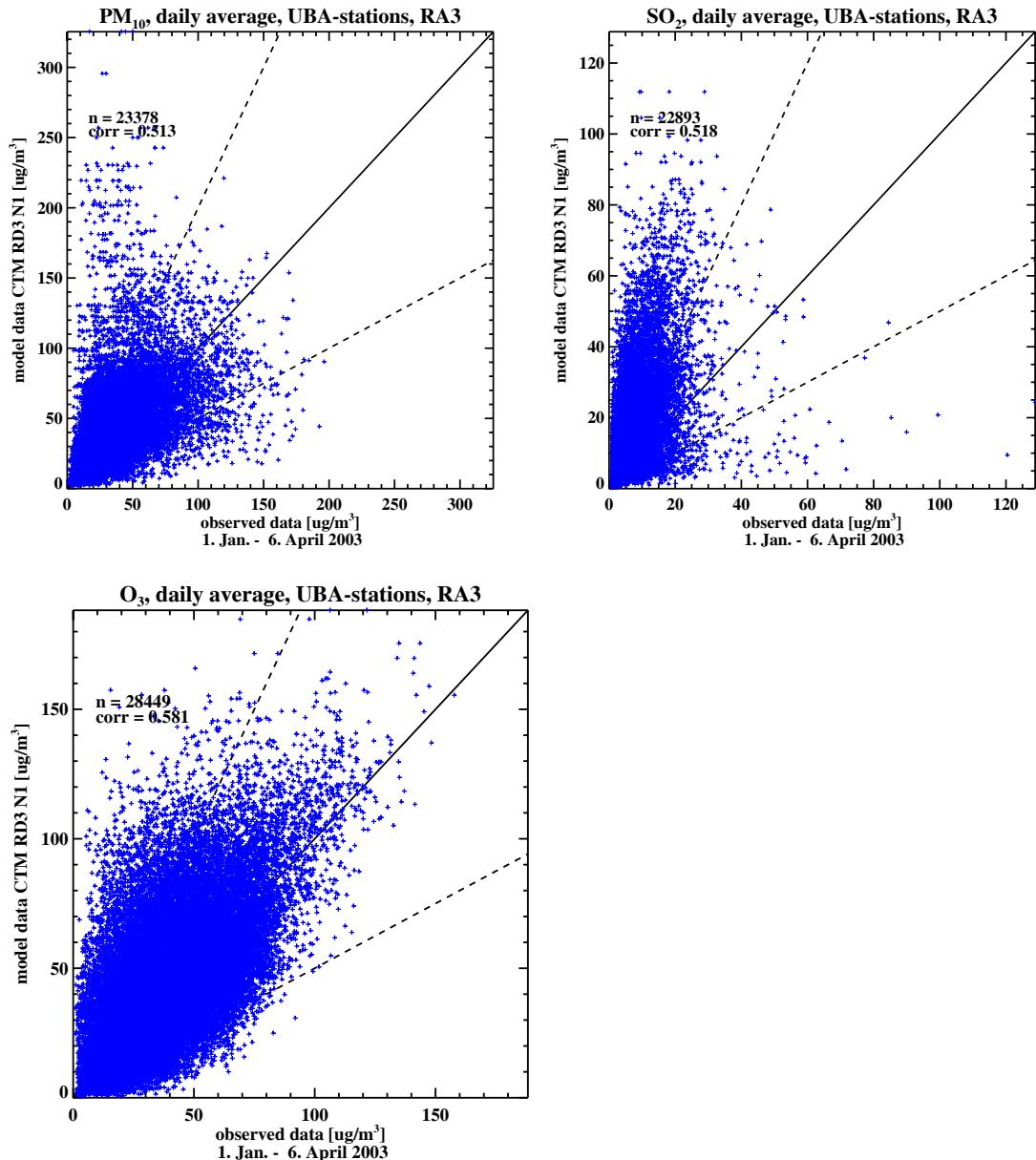
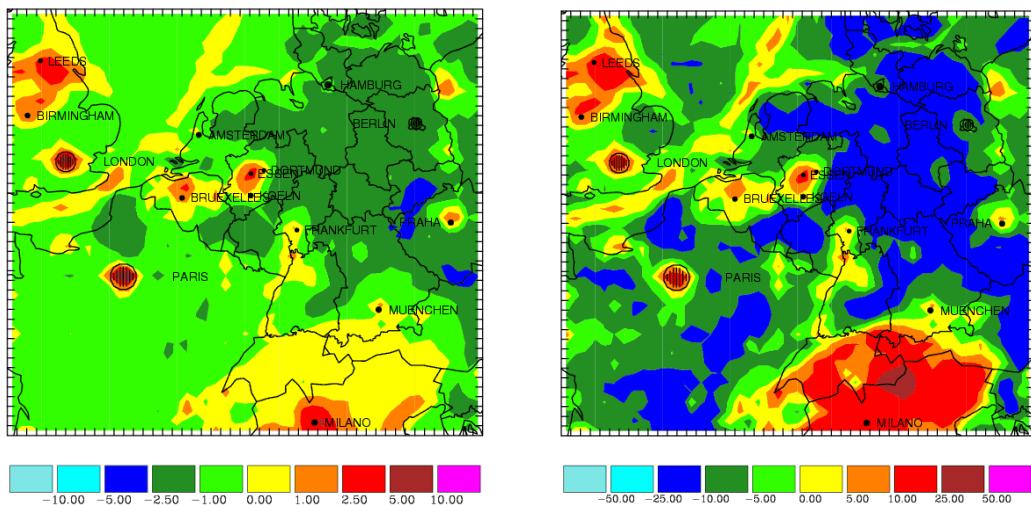
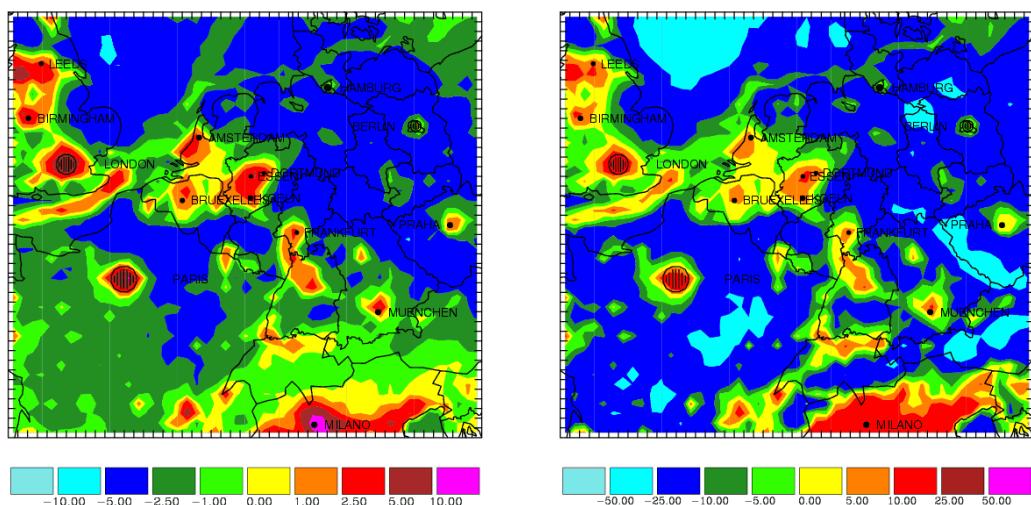


Abbildung 3.2.2: Scatter-Diagramme für das Experiment mit niedriger Vertikalauflösung RD3 im Vergleich mit den Messdaten des UBA Messnetzes.

SO₂



NO₂



NH₃

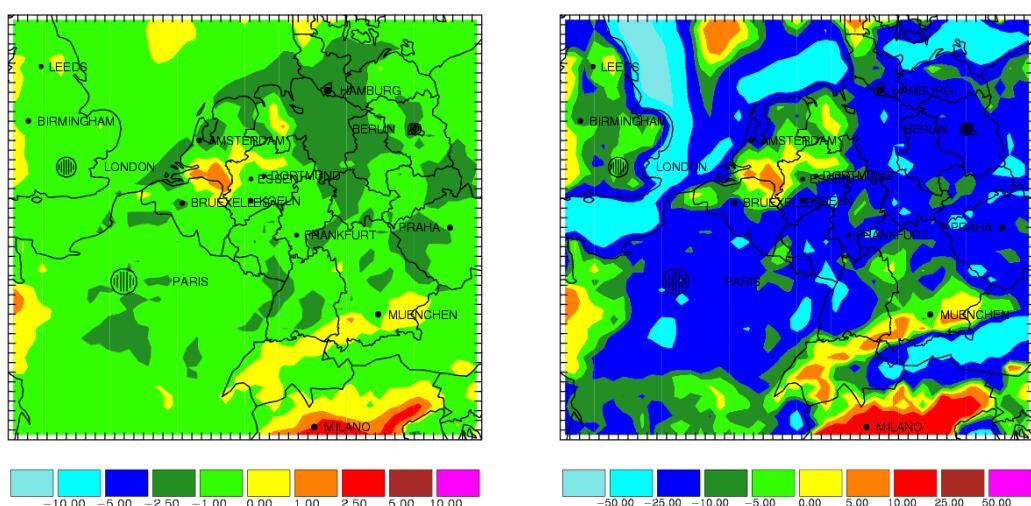
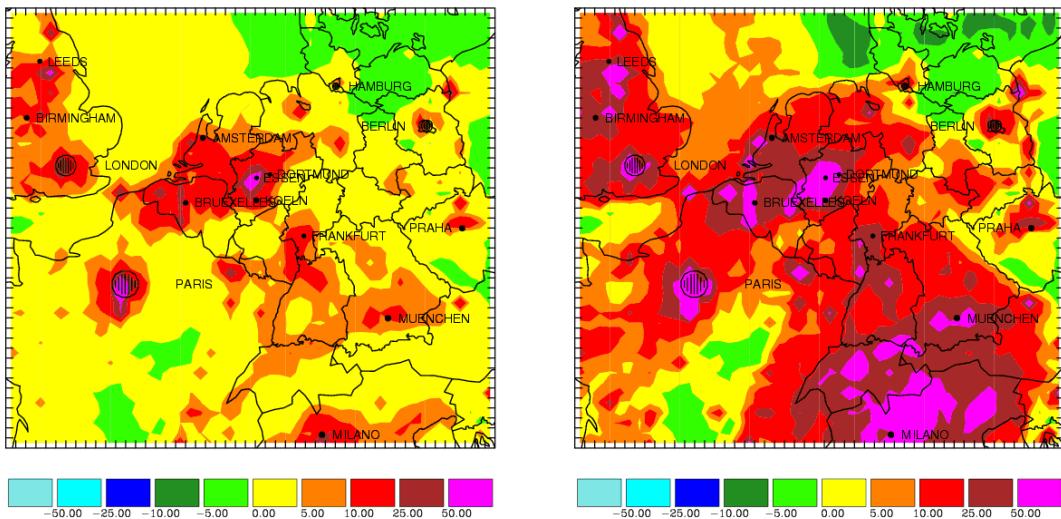
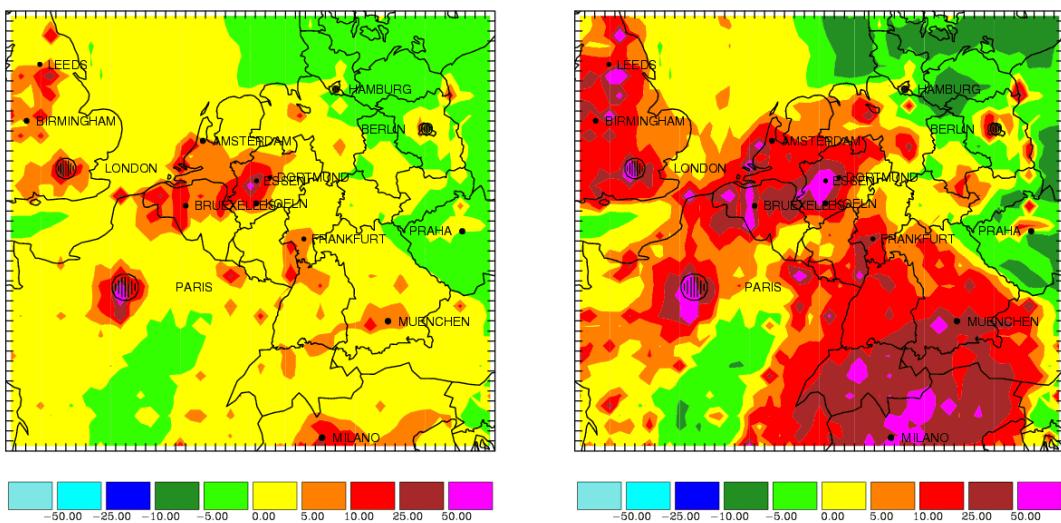


Abbildung 3.2.3: Änderung RD3/Basis Exp. Episodenmittel Winterepisode 01.01.2003 – 05.04.2003. Von oben nach unten SO₂, NO₂, NH₃ – links: absolute Änderung [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] – rechts: relative Änderung [%].

PM₁₀



PM_{2.5}



PM₁

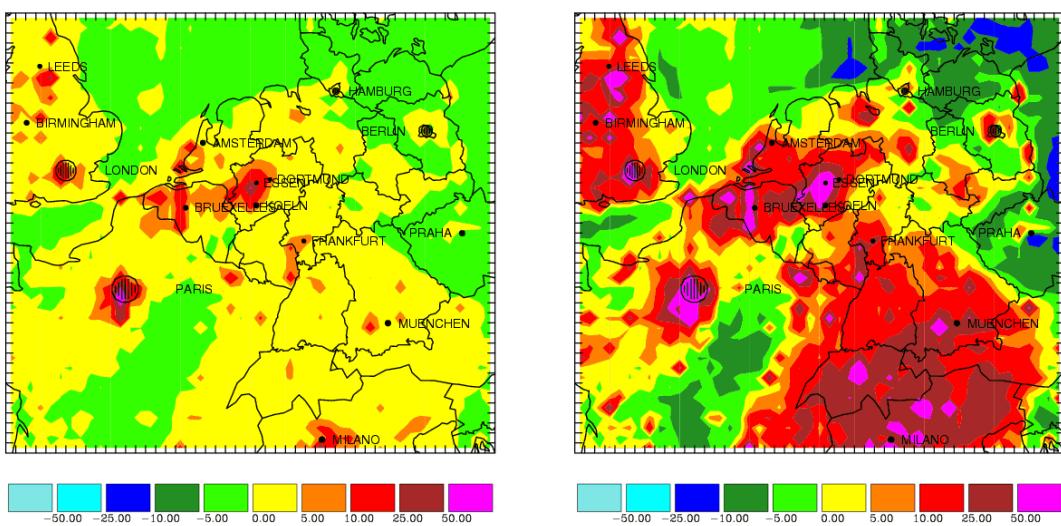
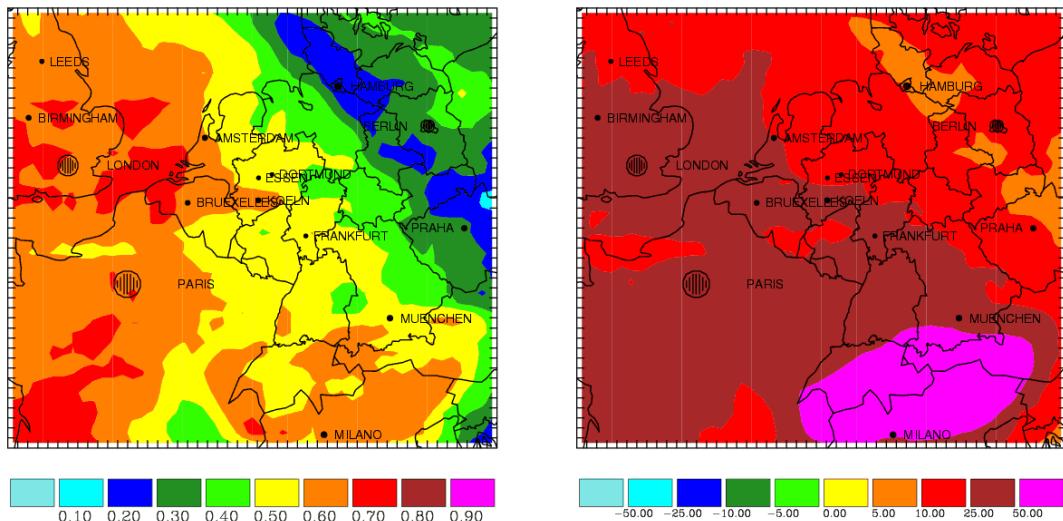
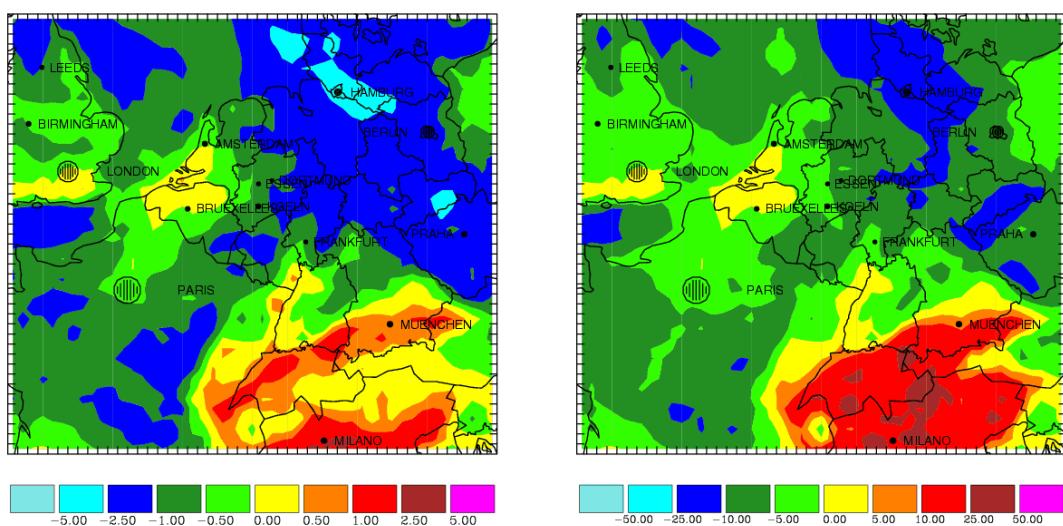


Abbildung 3.2.4: Änderung RD3/Basis Exp. Episodenmittel Winterepisode 01.01.2003 – 05.04.2003. Von oben nach unten PM₁₀, PM_{2.5} und PM₁ – links: absolute Änderung [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] – rechts: relative Änderung [%].

Aerosol-Sulfat



Aerosol-Nitrat



Aerosol-Ammonium

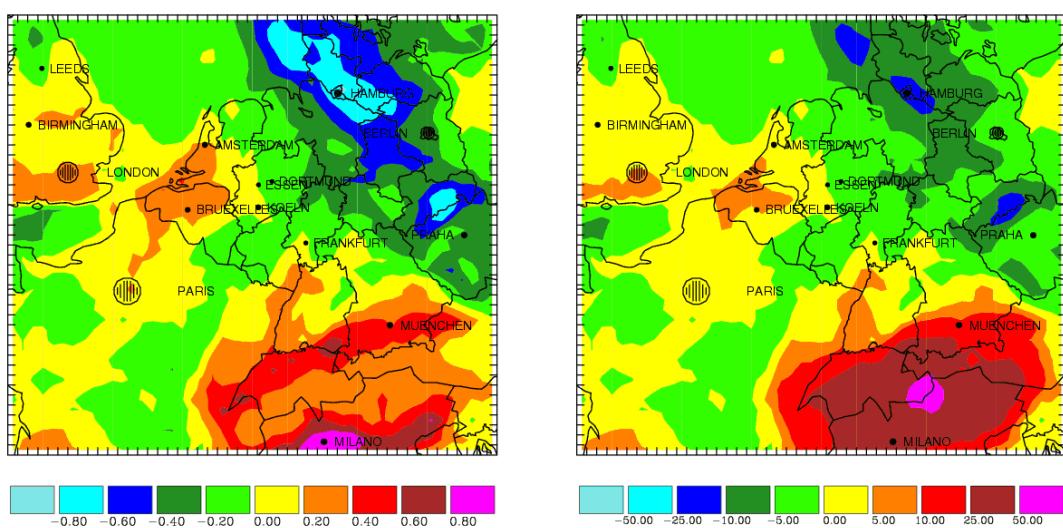


Abbildung 3.2.5: Änderung RD3/Basis Exp. Episodenmittel Winterepisode 01.01.2003 – 05.04.2003. Von oben nach unten Aerosol-Komponenten Sulfat, Nitrat und Ammonium – links: absolute Änderung [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] – rechts: relative Änderung [%].

3.3 Simulation ohne Aerosoldynamik

Die im Aerosol Modell MADE behandelten Aerosol-spezifischen Prozesse sind in Abbildung 1.5 aufgezeigt. Dabei handelt es sich um Koagulation, Nukleation, Diffusion, Advektion, Deposition, Sedimentation sowie die chemische und thermodynamische Wechselwirkung mit Wolken.

Bei MADE handelt es sich um ein modales Aerosol-Modell, dessen Grundstruktur bei der Studie beibehalten wurde. Eine Umsetzung der gestellten Aufgabe wurde dahingehend durchgeführt, dass die Transfergeschwindigkeiten der Koagulation und der Nukleation auf 0 reduziert wurden. Dadurch wurden diese Prozesse unterbunden. Unverändert gelassen wurden dagegen die anderen genannten Prozesse. Dies gilt auch für die Kondensation von Sulfat aus der Gasphase. Weiterhin blieb die Aufteilung der Emissionen auf die Moden erhalten. Dieses Vorgehen soll es ermöglichen, die Effekte der beiden unterbundenen Prozesse auf die Konzentration und Zusammensetzung der Aerosole heraus zu filtern.

Ergebnisse

Schaltet man die Koagulation ab, nimmt das Wachstum der Aerosole ab. Die Anzahl größerer Partikel (PM_{10}) wird dadurch verringert, auf Kosten der Anzahl feiner Partikel (PM_1). Ein konkurrierender Effekt kommt durch die trockene Deposition ins Spiel: Sehr kleine Partikel werden stärker durch die Brownsche Molekularbewegung beeinflusst und haben dadurch eine geringere Lebensdauer und Reichweite.

Die Abschaltung der Nukleation bewirkt eine Verringerung der Partikel Neubildung. Dieser Prozess spielt aber in den Modellrechnungen eine geringere Rolle gegenüber den anderen Prozessen.

Insgesamt bewirken die Änderungen im Mittel eine Abnahme der Aerosolbelastung. Diese fällt aber regional unterschiedlich aus. So macht sich die Abnahme im Nordosten des Nest 1 Gebietes stärker bemerkbar (siehe Abbildung 3.3.1) insbesondere bei hoher Belastung (Abbildung 3.3.2 und Zeitreihen Zingst und Melpitz). Im geringer Belasteten Alpenraum ist die Abnahme am schwächsten ausgeprägt.

Sulfat auf der einen Seite und Nitrat und Ammonium auf der anderen Seite zeigen in der Tendenz ein gegenläufiges Verhalten (Abbildung 3.3.3).

Der Einfluss der organischen Aerosole auf die Partikelbelastung bleibt meist gering.

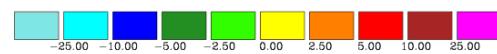
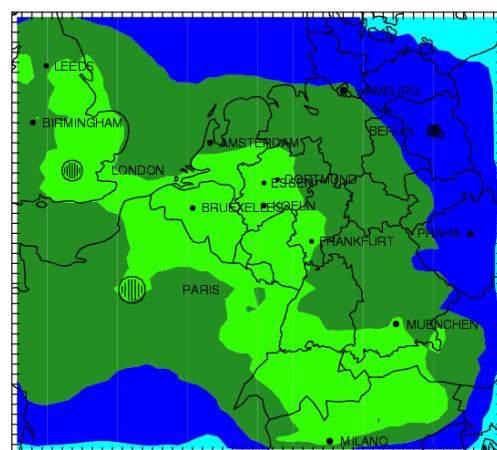
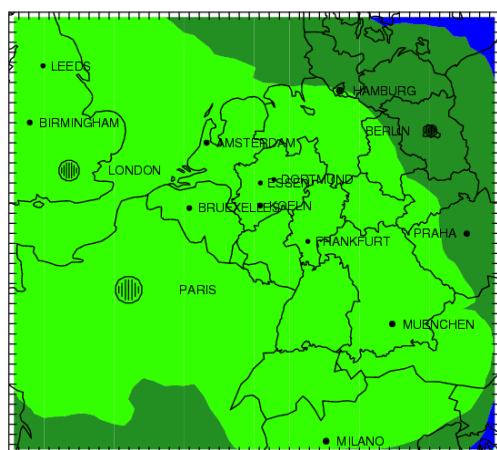
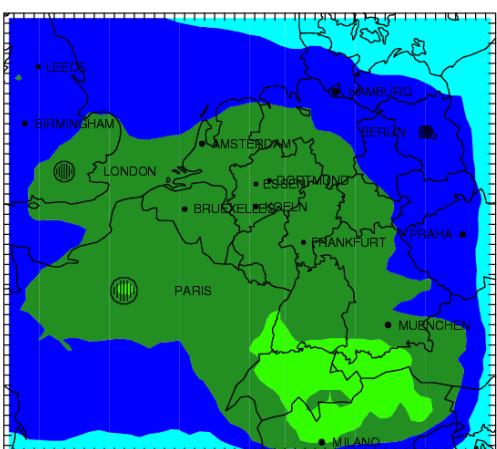
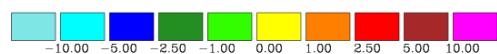
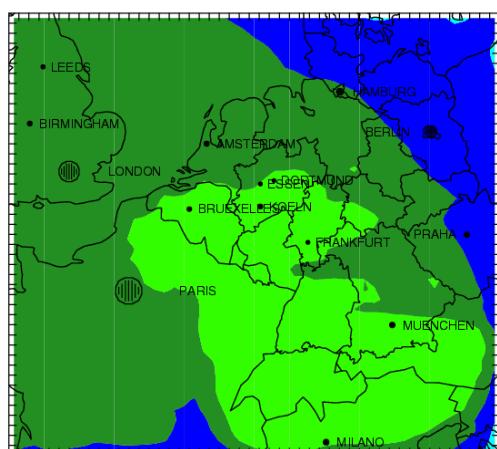
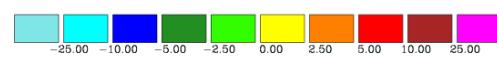
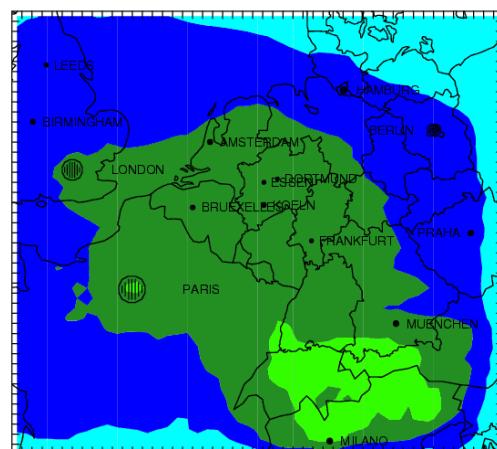
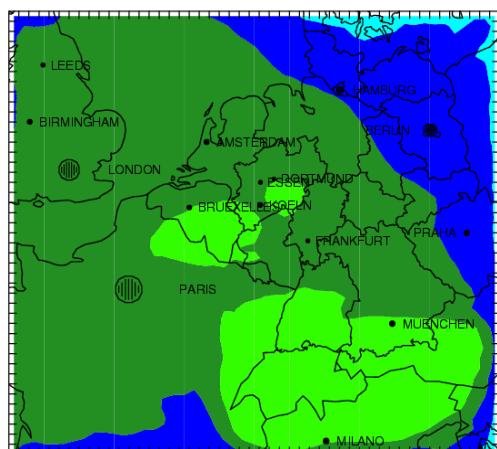


Abbildung 3.3.1: Änderung der Episodenmittelwerte Winterfall – links absolute Änderung [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] – recht relative Änderung [%] – Oben: PM₁₀, Mitte PM_{2.5} unten PM₁.

PM10 (N1) 04.03.03

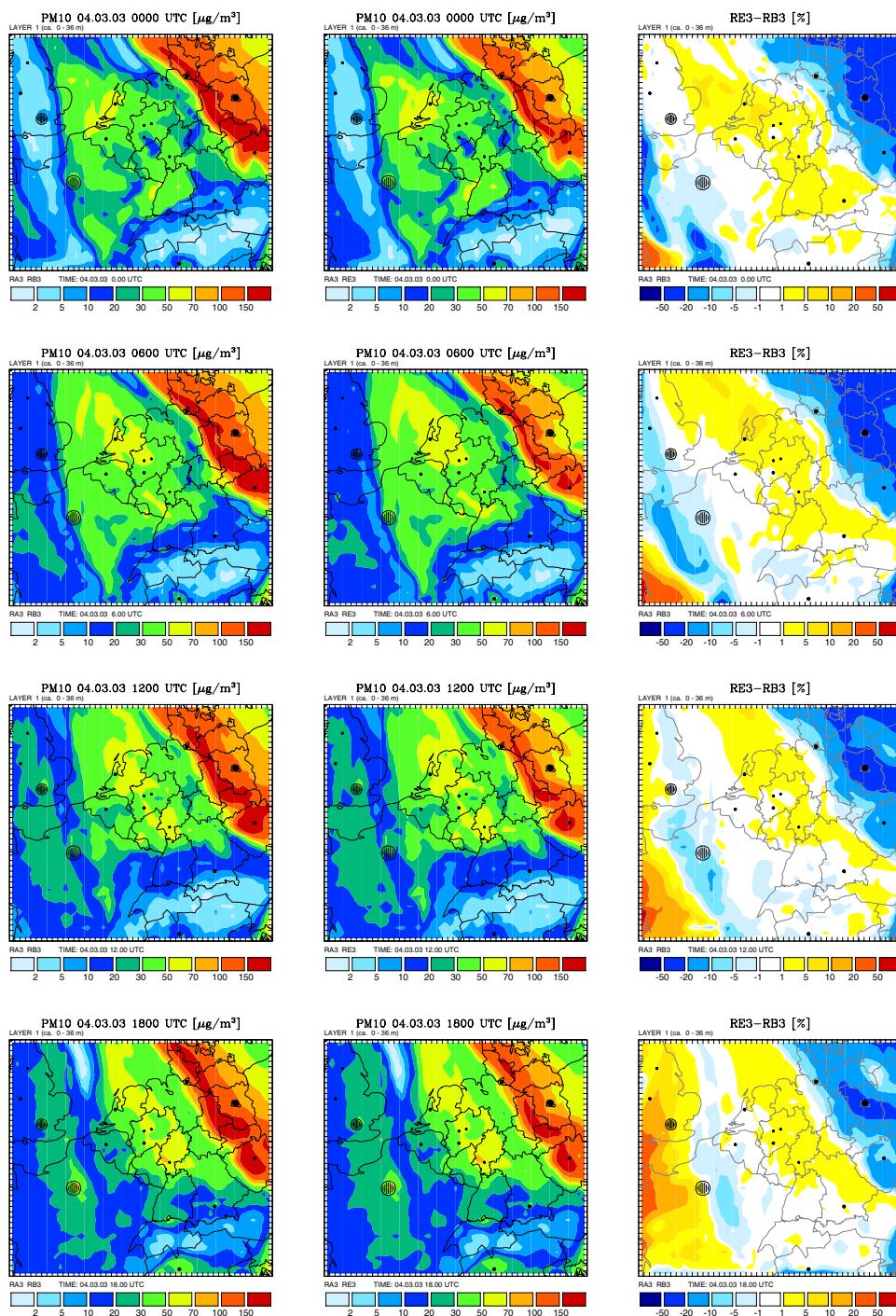


Abbildung 3.3.2: PM₁₀ Basis Experiment (links) und RE3 (Mitte) in [µg/m³] und relative Änderung (rechts) in [%] am 04.03.2003 – dem Tag des Episodenmaximums.

SO4 / NO3 / NH4 (N1) 04.03.03

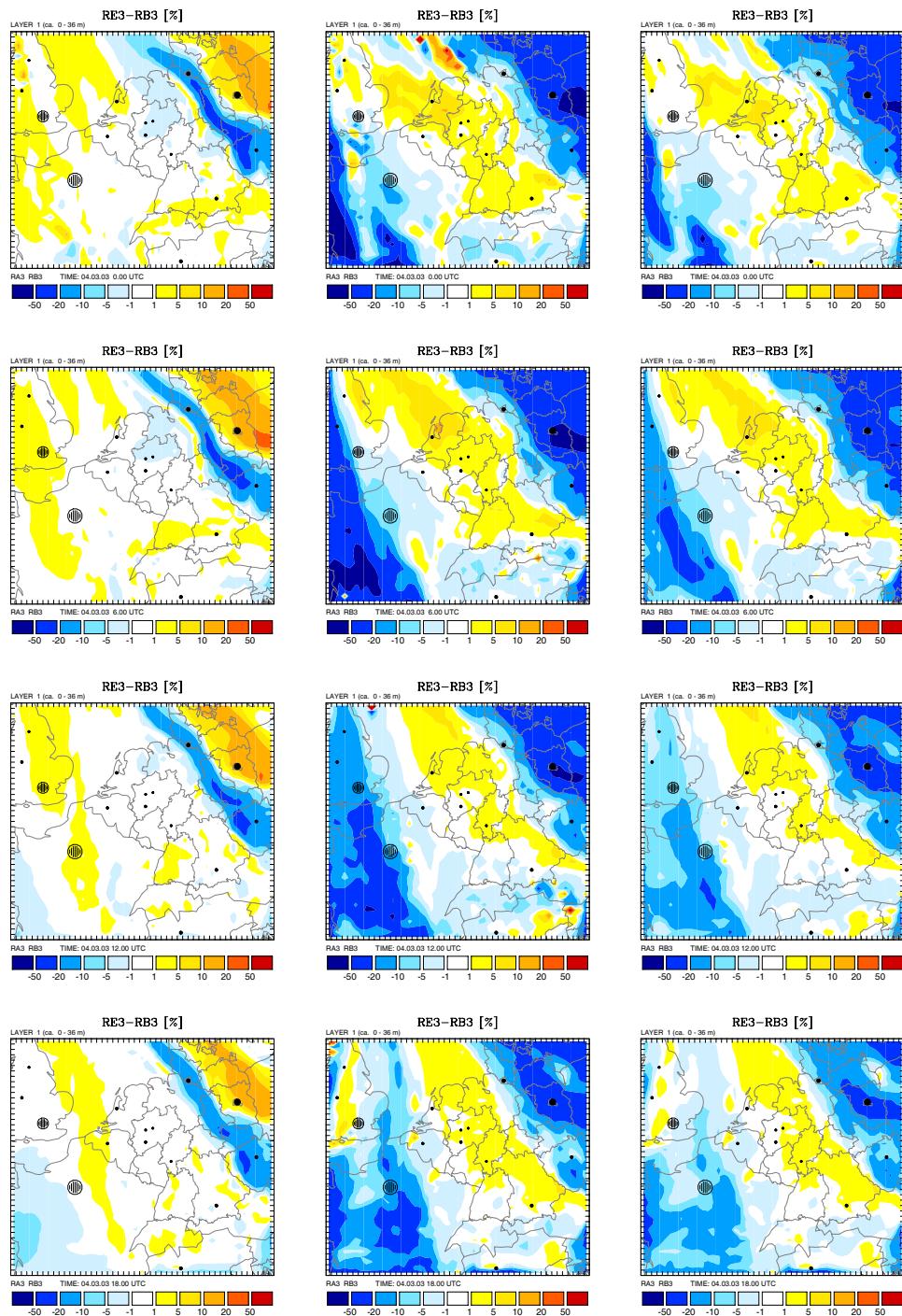


Abbildung 3.3.3: Relative Änderung RE3 zu Basis Experiment in [%] am 04.03.2003 – links Sulfat, Mitte Nitrat und rechts Ammonium.

3.4 Zeitreihen-Vergleich

Exemplarisch wurden 6 UBA Stationen für einen Vergleich der Zeitreihen herangezogen. Dabei handelt es sich um je 2 Stationen im Norden Deutschlands (Westerland, Zingst) – 2 in der „Mitte“ (Deuselbach und Melpitz) – sowie 2 im Süden (Brotjacklriegel und Schauinsland) welche zusätzlich Bergstationen sind.

Melpitz und Zingst liegen während der Episode im wesentlich unter Hochdruck Einfluss.

Weitere Stationsdaten sind in die Scatter-Diagramme und Häufigkeitsverteilungen eingegangen.

Weitere detaillierte Messvergleiche finden sich auch im Modellvergleich, bei dem die Daten der Basis Simulation verwendet wurden.

Die Zeitreihen wurden – um Wiederholungen zu vermeiden – für alle drei Simulationsrechnungen gezeigt. Dabei ist

- RB3 Basis Simulation Winterfall (lila)
- RD3 reduzierte Vertikalauflösung (pink)
- RE3 ohne Aerosol Dynamik (grün)
- Messung (schwarz)

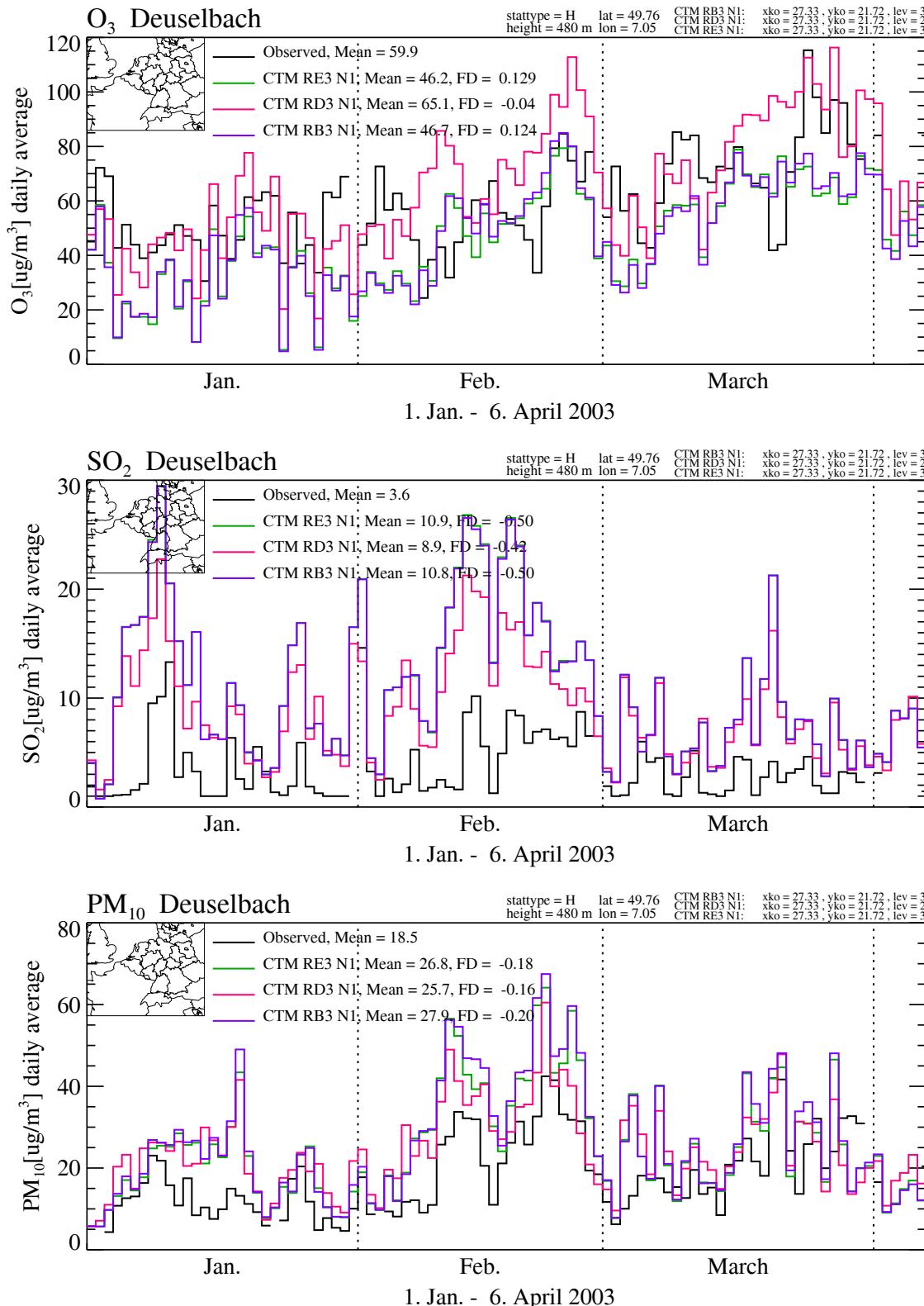


Abbildung 3.4.1. Tagesmittelwerte Deuselbach – oben: Ozon, Mitte, SO₂, unten PM₁₀ alle in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ - Messung (schwarz), RE3 (grün), RD3 (pink), Basis Experiment RB3 (lila).

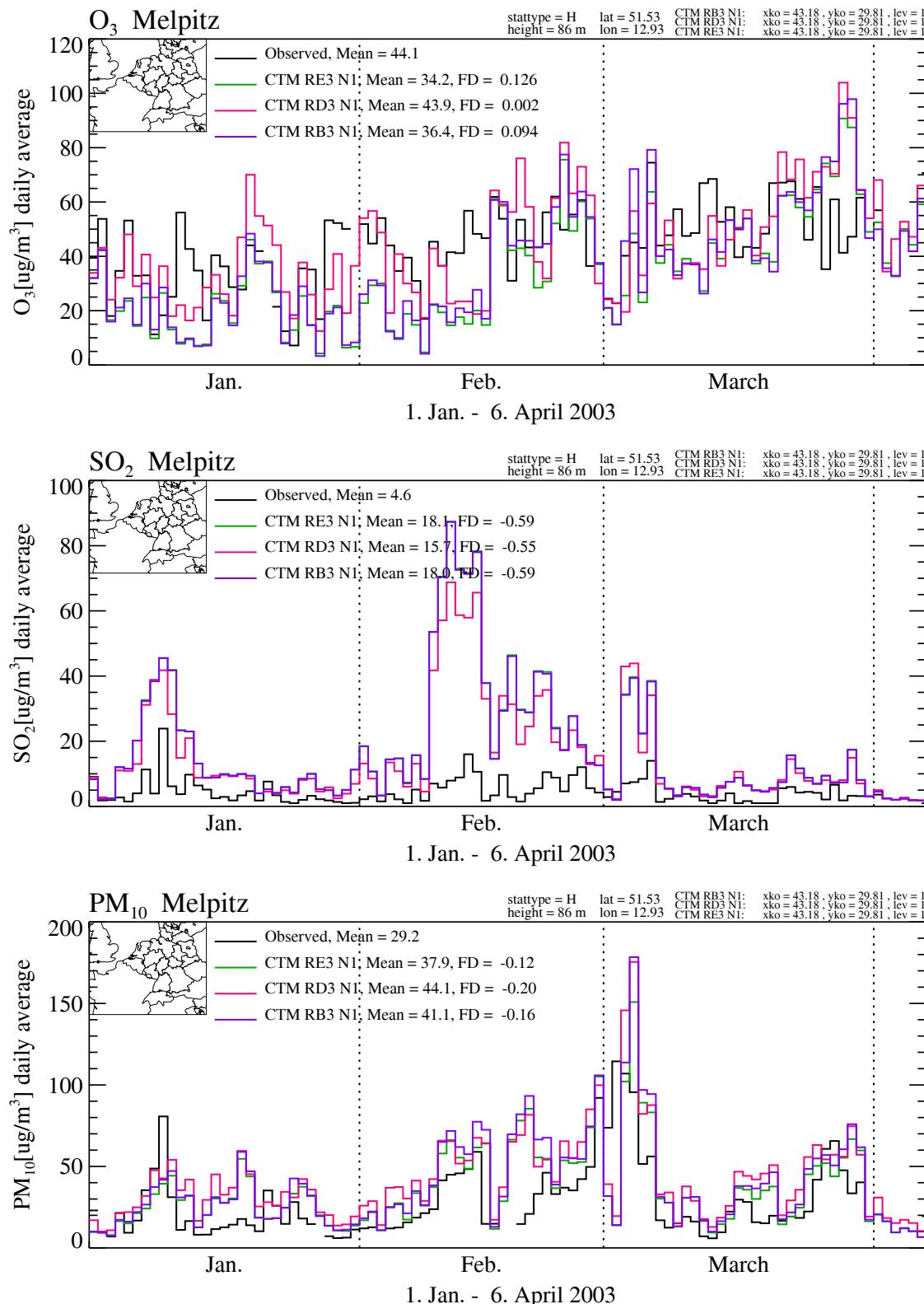


Abbildung 3.4.2. Tagesmittelwerte Melpitz – oben: Ozon, Mitte, SO₂, unten PM₁₀ alle in [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] - Messung (schwarz), RE3 (grün), RD3 (pink), Basis Experiment RB3 (lila).

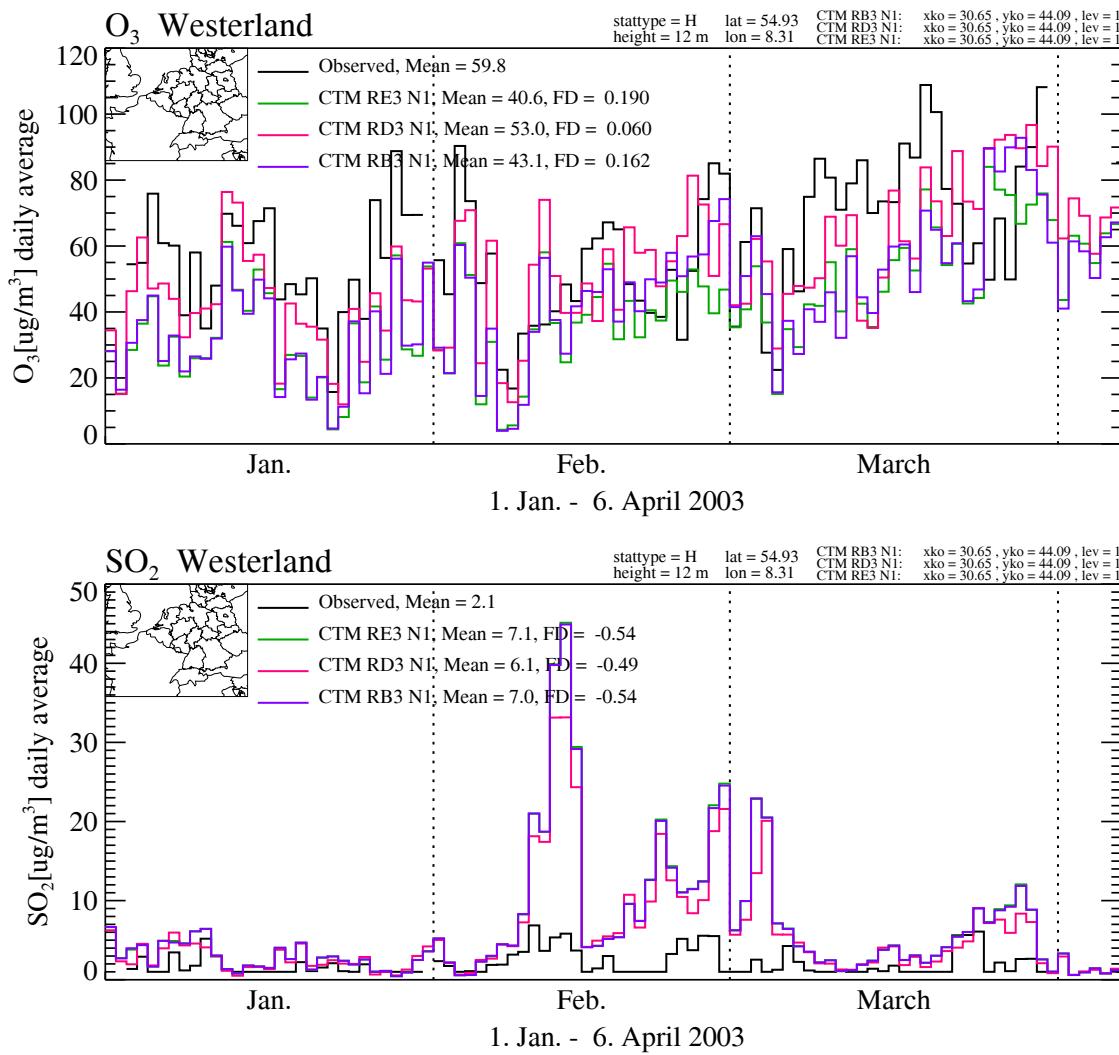


Abbildung 3.4.3. Tagesmittelwerte Westerland – oben: Ozon, unten: SO₂ alle in [µg/m³] - Messung (schwarz), RE3 (grün), RD3 (pink), Basis Experiment RB3 (lila).

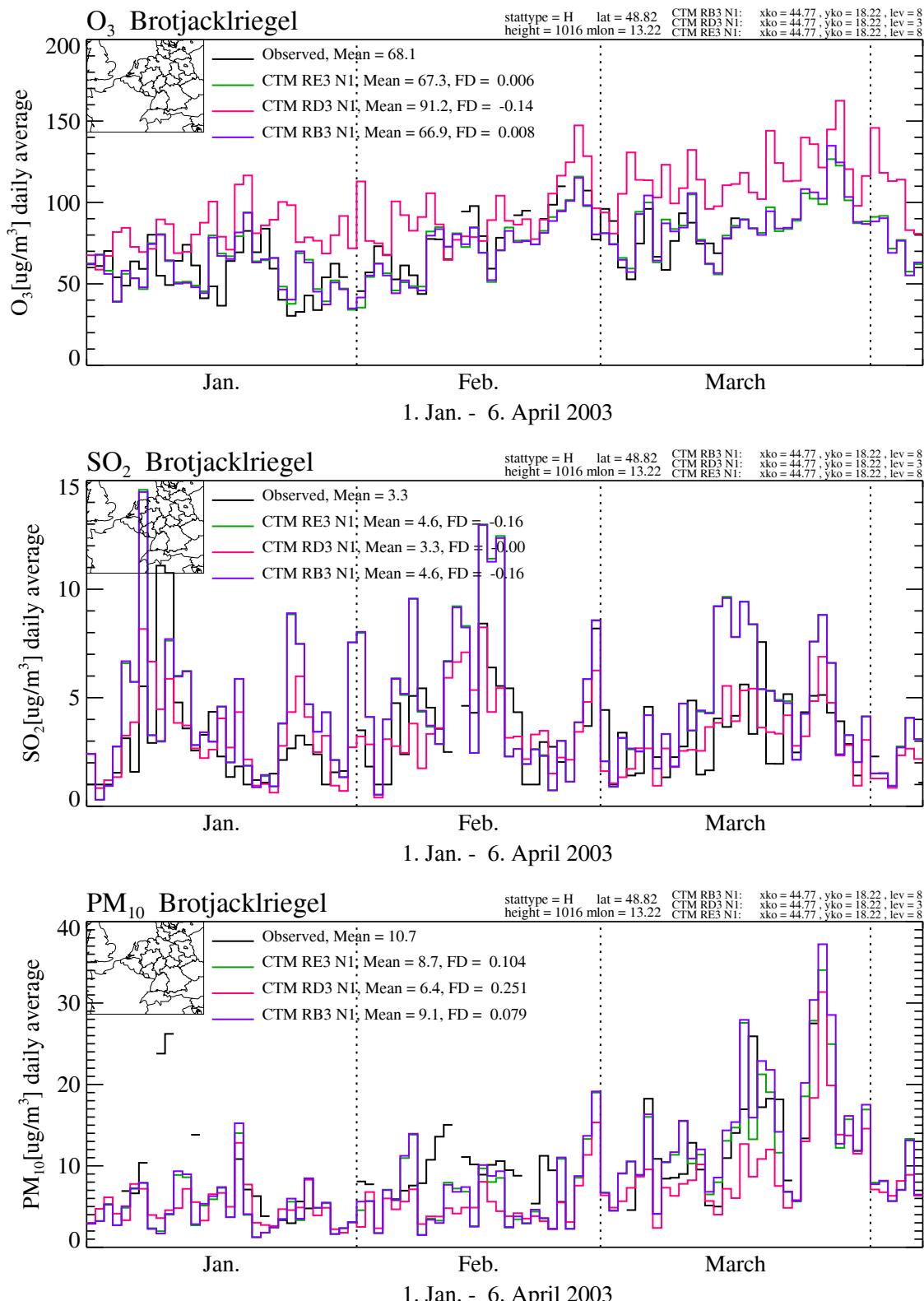


Abbildung 3.4.4. Tagesmittelwerte Brotjacklriegl – oben: Ozon, unten: SO₂ alle in [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] - Messung (schwarz), RE3 (grün), RD3 (pink), Basis Experiment RB3 (lila).

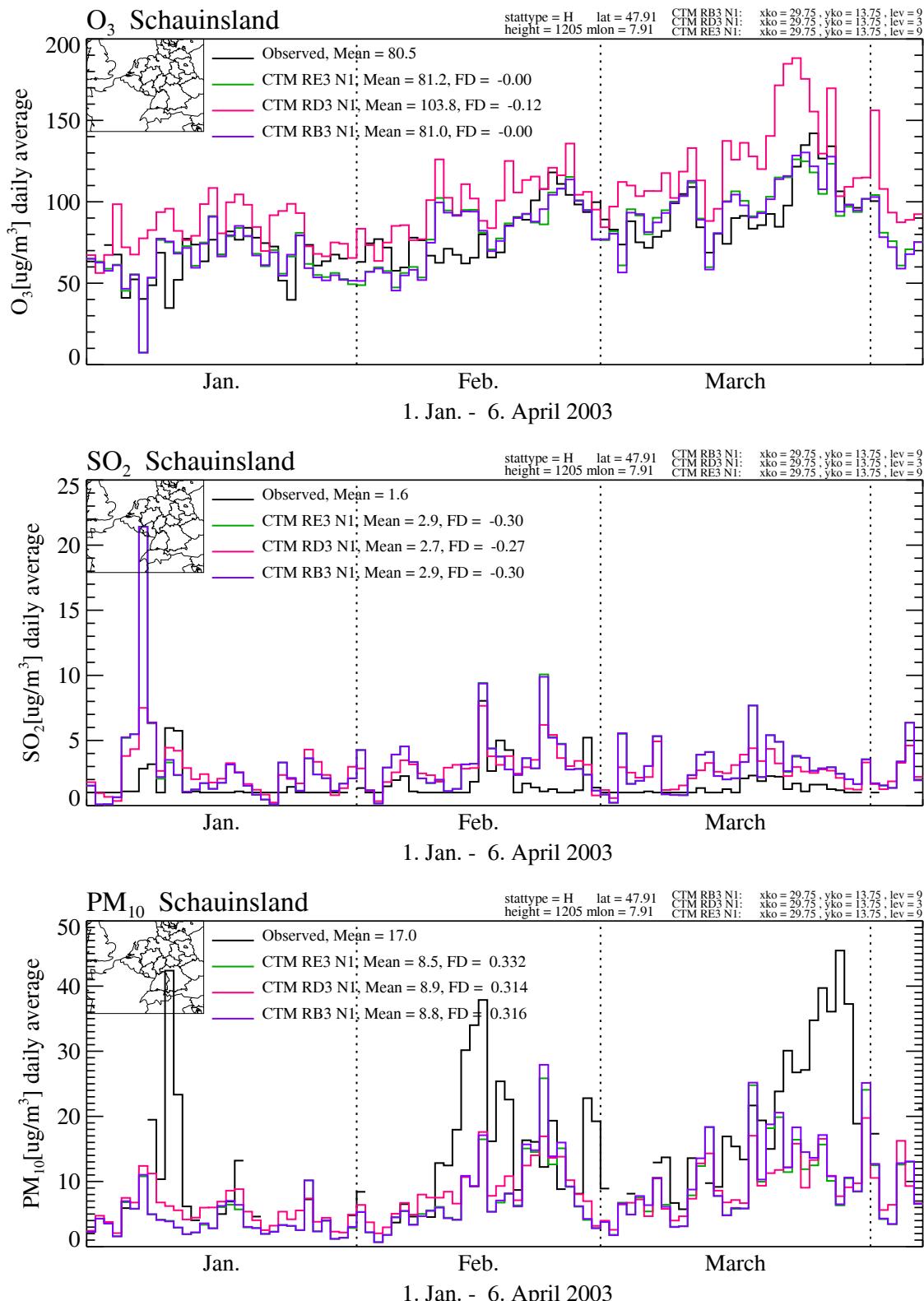


Abbildung 3.4.5. Tagesmittelwerte Schauinsland – oben: Ozon, unten, SO₂ alle in [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] – Messung (schwarz), RE3 (grün), RD3 (pink), Basis Experiment RB3 (lila).

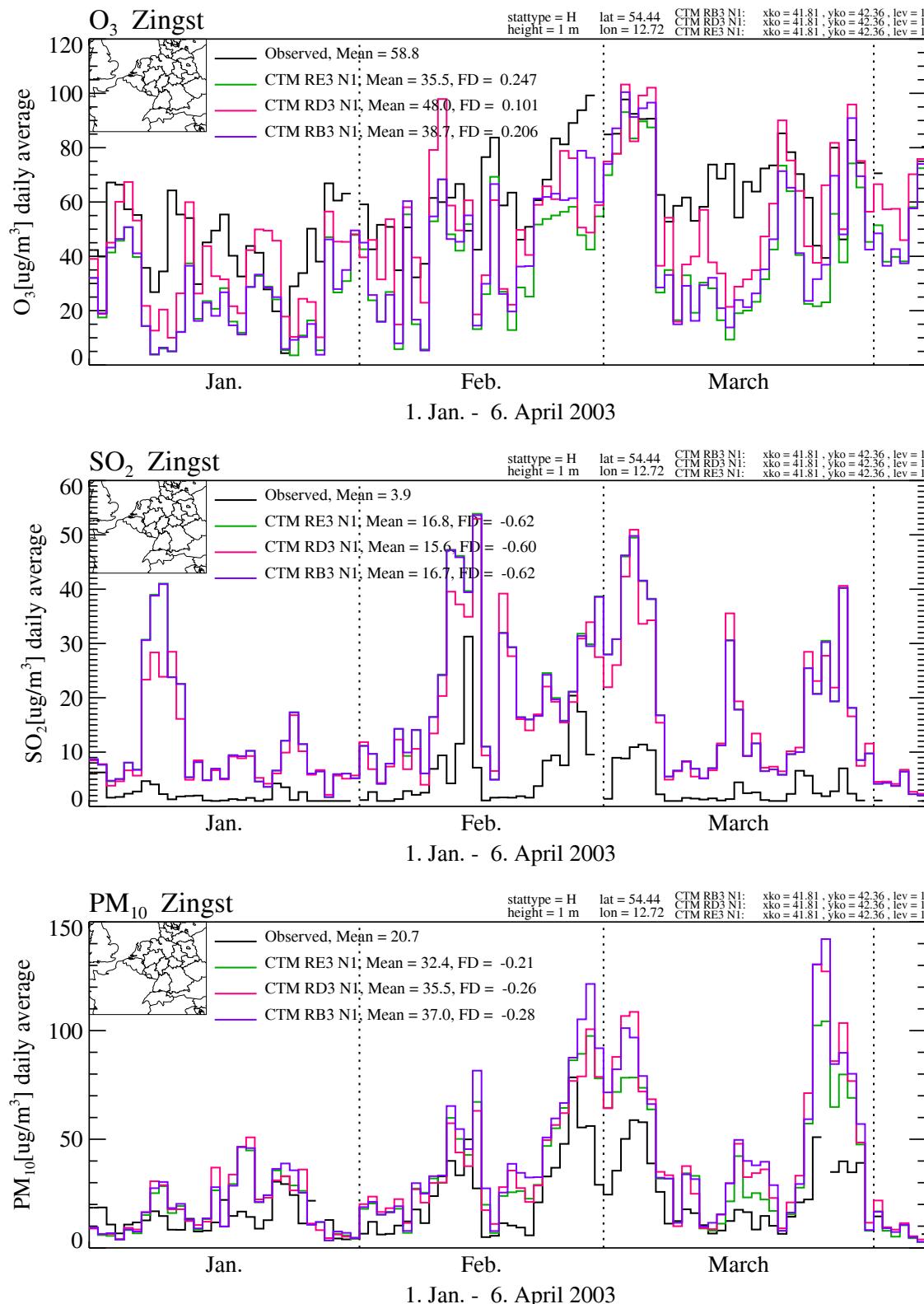


Abbildung 3.4.6. Tagesmittelwerte Zingst – oben: Ozon, unten, SO₂ alle in [µg/m³] - Messung (schwarz), RE3 (grün), RD3 (pink), Basis Experiment RB3 (lila).

4 Sommer Episode S03 (01.07. – 30.09.2003)

Der Sommer 2003 war durch eine sehr lange heiße und trockene Periode geprägt, die ihren Höhepunkt und Abschluss Mitte August hatte. Dabei war der Westen Deutschlands (und Europas) stärker betroffen als der Osten (Abbildung 4.1.1 – 4.1.7 und Abbildung 4.1.17). Im Verlauf dieser Hochdruckepisode kam es auch zu einer intensiven Photooxidantien Bildung. Der Wert von $240 \mu\text{g}/\text{m}^3$ wurde dabei an vielen Messstationen überschritten. Neben dem Ozon stiegen auch die Partikel-Emissionen an.

Abbildung 4.1.1 – 4.1.7 zeigen exemplarisch die Zeitreihen von 6 UBA-Stationen und die zugehörigen Modell Ergebnisse für Ozon, PM_{10} , SO_2 und NO_2 .

Abbildung 4.1.8 bis 4.1.16 zeigen Scatter-Diagramme und Häufigkeits-Verteilungen der Modell und Beobachtungsdaten für einen vergrößerten Satz von Stationen.

Die Übereinstimmung der Modellergebnisse ist im Sommer größtenteils besser als im Winter. So ist die Überschätzung von SO_2 geringer als in der Winterepisode. Dagegen fällt auf, dass NO_2 im Sommer – anders als im Winter – unterschätzt wird.

Hingegen werden die Konzentrationen von Ozon und PM_{10} recht gut wieder gegeben.

Ab Abbildungen 4.1.17 folgen die Episoden Mittelwerte und Maxima.

Die Spitzenwerte von Ozon treten im Einflussbereich der Ballungsgebiete Westeuropas und des Mittelmeerraums auf. Nord- und Osteuropa sind weniger stark mit Ozon belastet.

Abbildung 4.1.19 zeigt die Verteilung der Partikel in dieser Episode in Abhängigkeit von der Partikelgröße (PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$ und PM_1). Die höchsten Konzentrationen finden sich in der Region wo hohe Emissionen und langer Hochdruckeinfluss wirksam waren in einer Zone von Westdeutschland über Benelux und Nordfrankreich bis nach Südengland. In diesem Gürtel treten auch stark erhöhte Feinst-Staub Konzentrationen auf (PM_1).

Bei der Zusammensetzung des Aerosols (Abbildungen 4.1.20 und 4.1.21) in der Simulation macht - wie im Winter das Nitrat den größten Einzelbeitrag. Hohe Nitrat-Werte treten besonders im Bereich des Partikelmaximums auf. Sulfat hingegen kommt in weiteren Regionen in signifikanten Mengen vor (Mittelmeer-Raum).

Der Anteil der kohlenstoffhaltigen und organischen Aerosole ist im Sommer höher als im Winter (Abbildung 4.1.21). Die höchsten Konzentrationen treten in einem breiten Band von West nach Osteuropa auf.

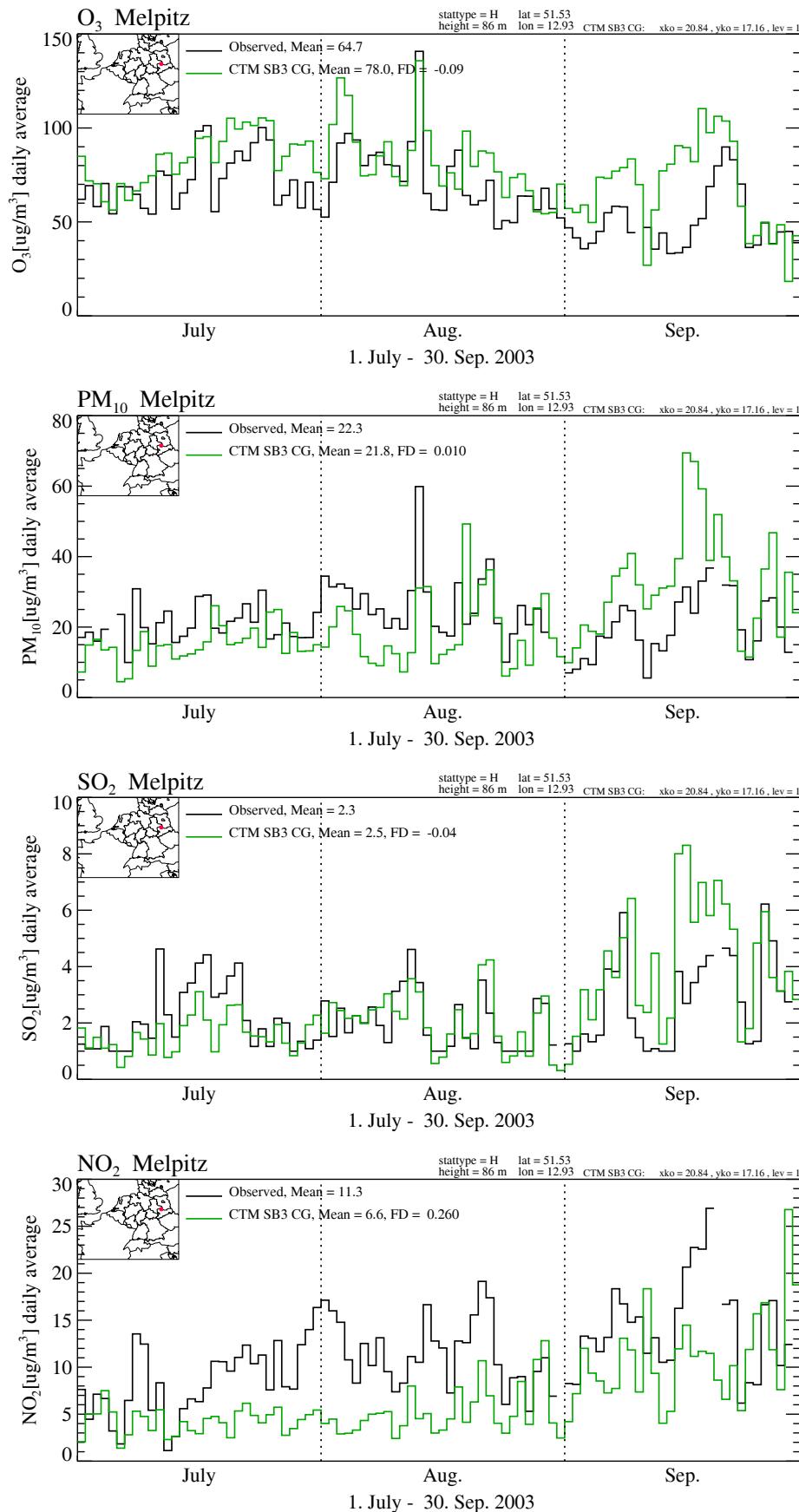


Abbildung 4.1.1 Tagesmittelwerte Melpitz – von oben: Ozon, PM₁₀, SO₂, unten NO₂ alle in [ug/m³] - Messung (schwarz), SB3 (grün)

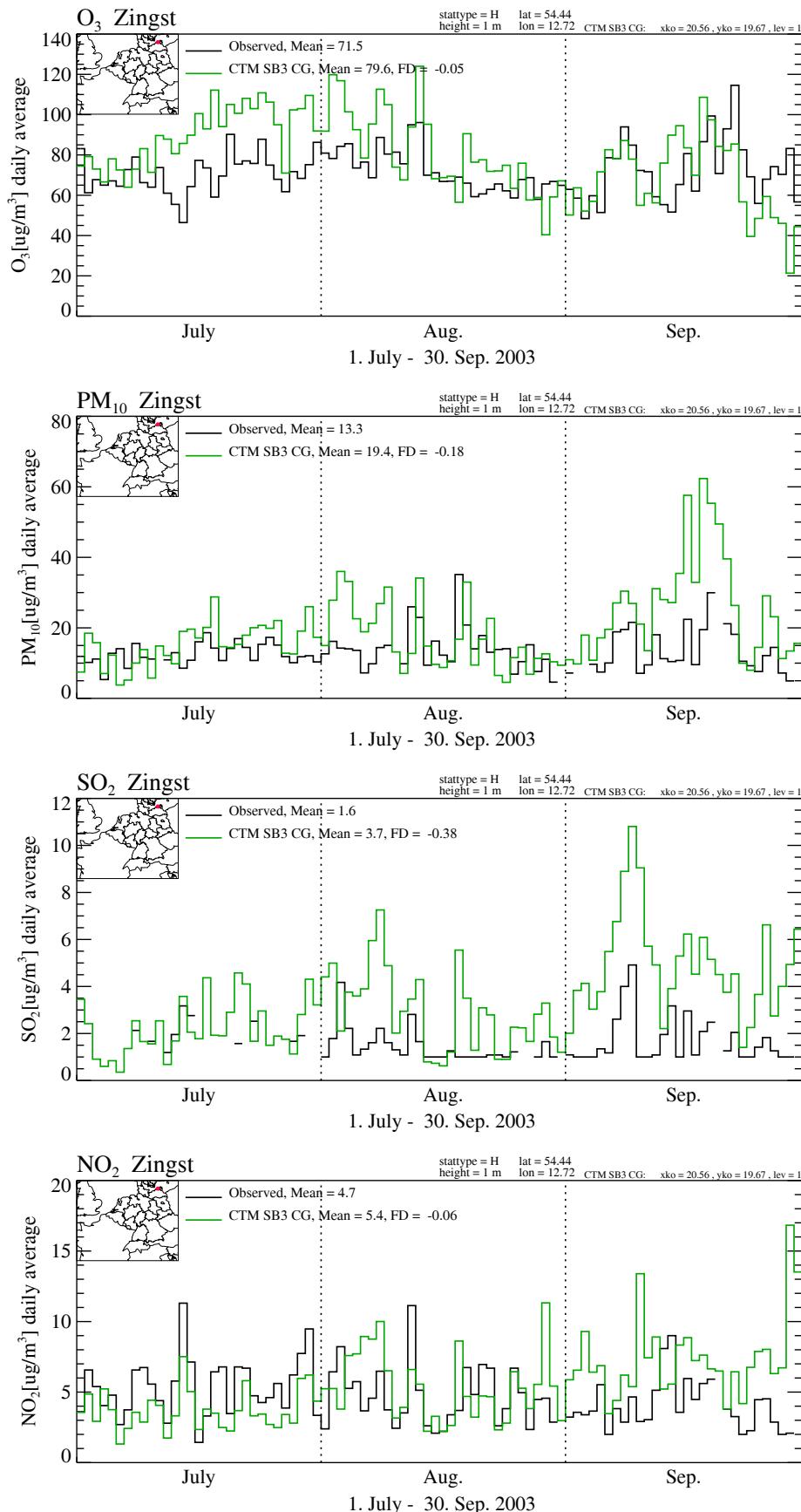


Abbildung 4.1.2 Tagesmittelwerte Zingst – von oben: Ozon, PM₁₀, SO₂, unten NO₂ alle in [ug/m³] - Messung (schwarz), SB3 (grün)

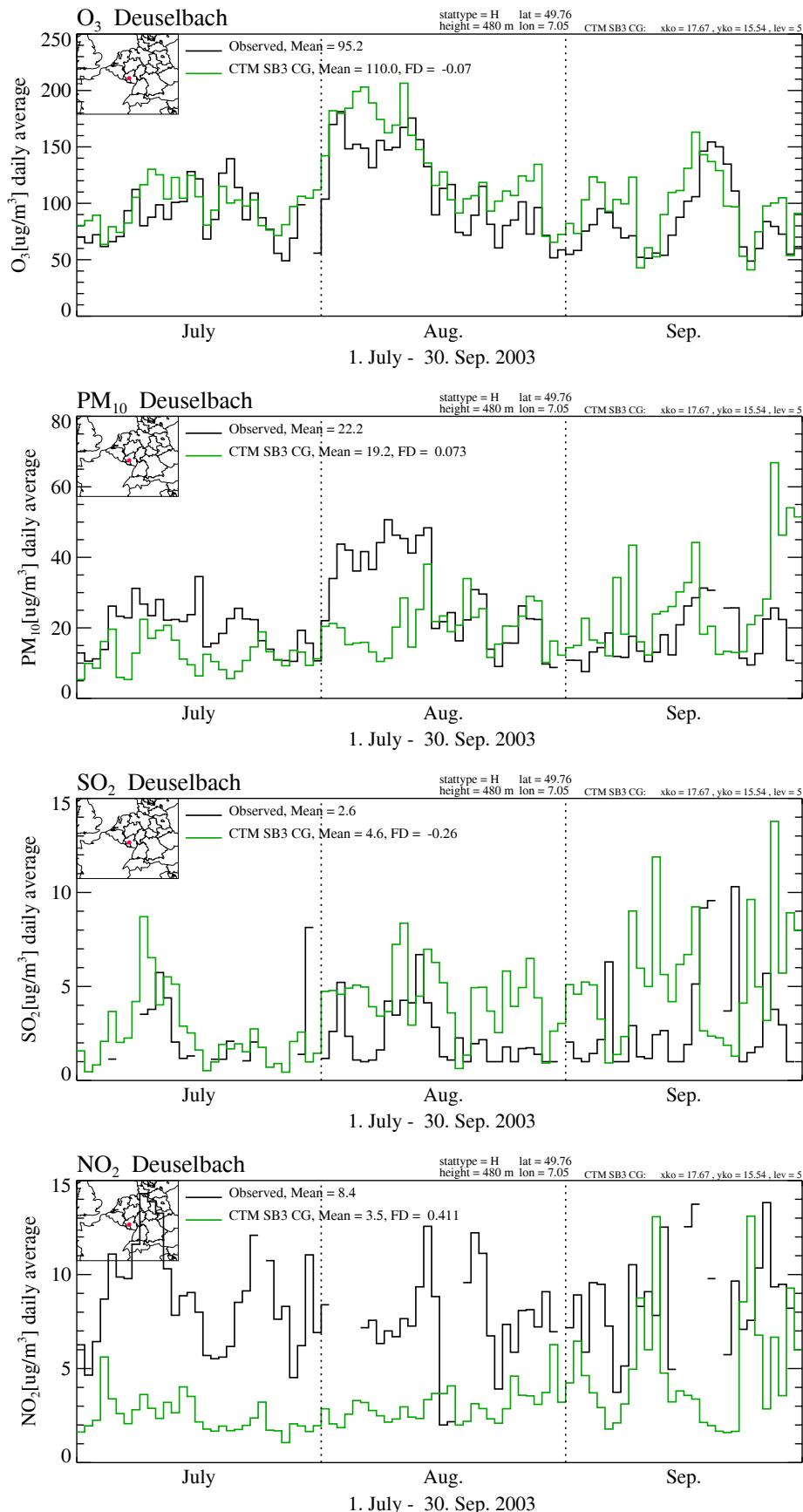


Abbildung 4.1.3 Tagesmittelwerte Deuselbach – von oben: Ozon, PM₁₀, SO₂, unten NO₂ alle in [ug/m³] - Messung (schwarz), SB3 (grün)

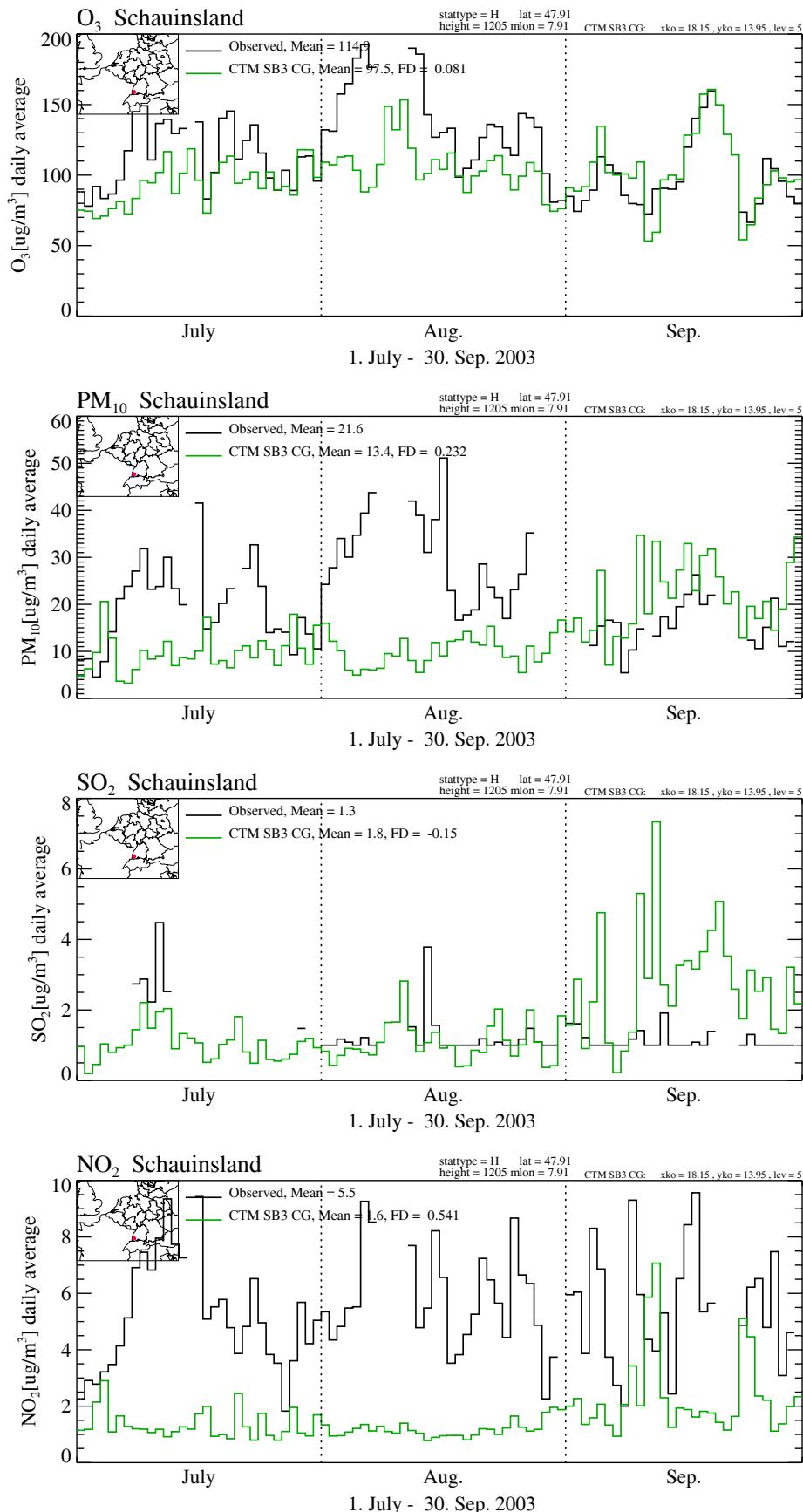


Abbildung 4.1.4 Tagesmittelwerte Schauinsland – von oben: Ozon, PM₁₀, SO₂, unten NO₂ alle in [µg/m³] - Messung (schwarz), SB3 (grün)

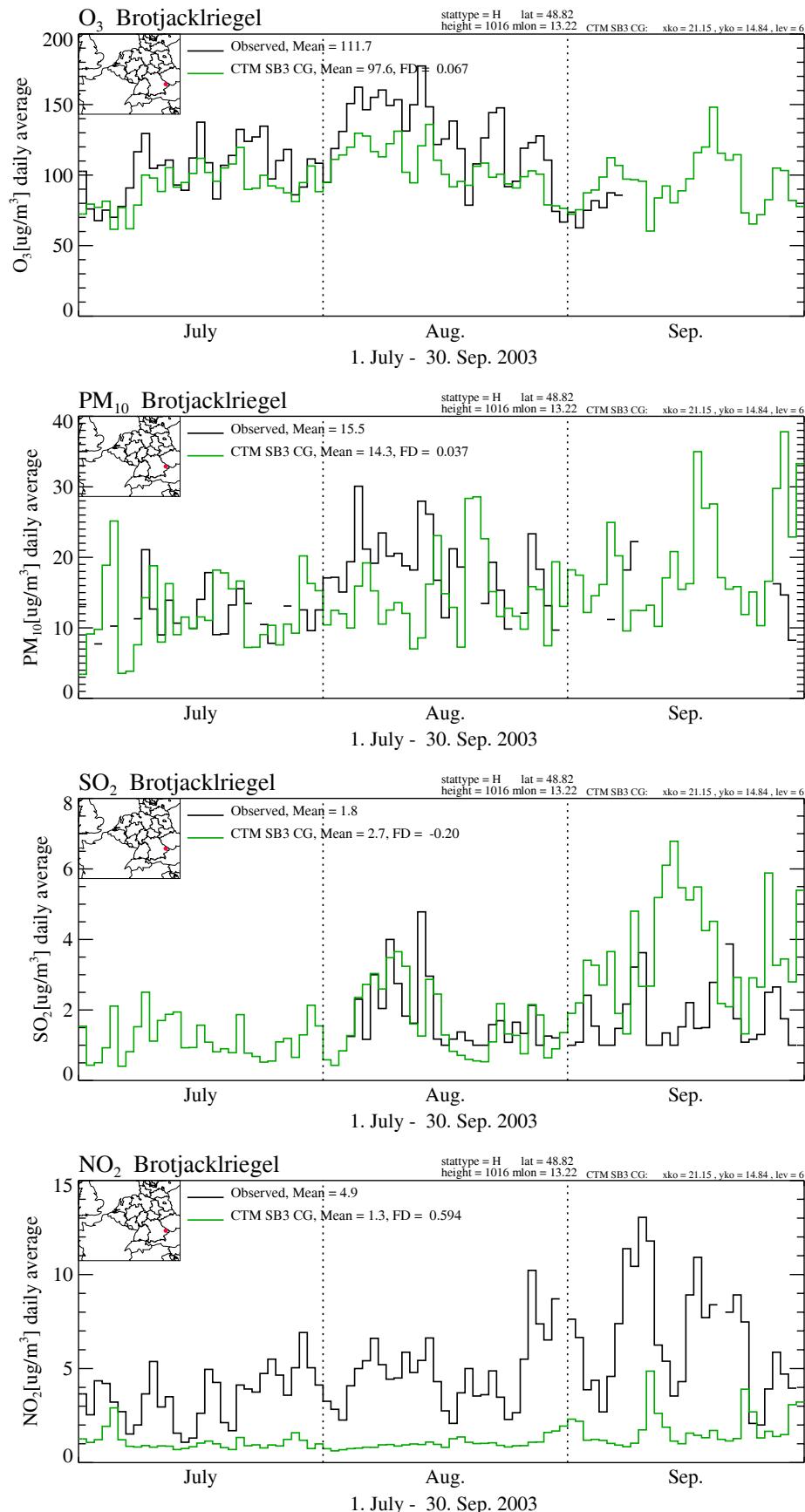


Abbildung 4.1.5 Tagesmittelwerte Brotjacklriegel – von oben: Ozon, PM₁₀, SO₂, unten NO₂ alle in [µg/m³] - Messung (schwarz), SB3 (grün)

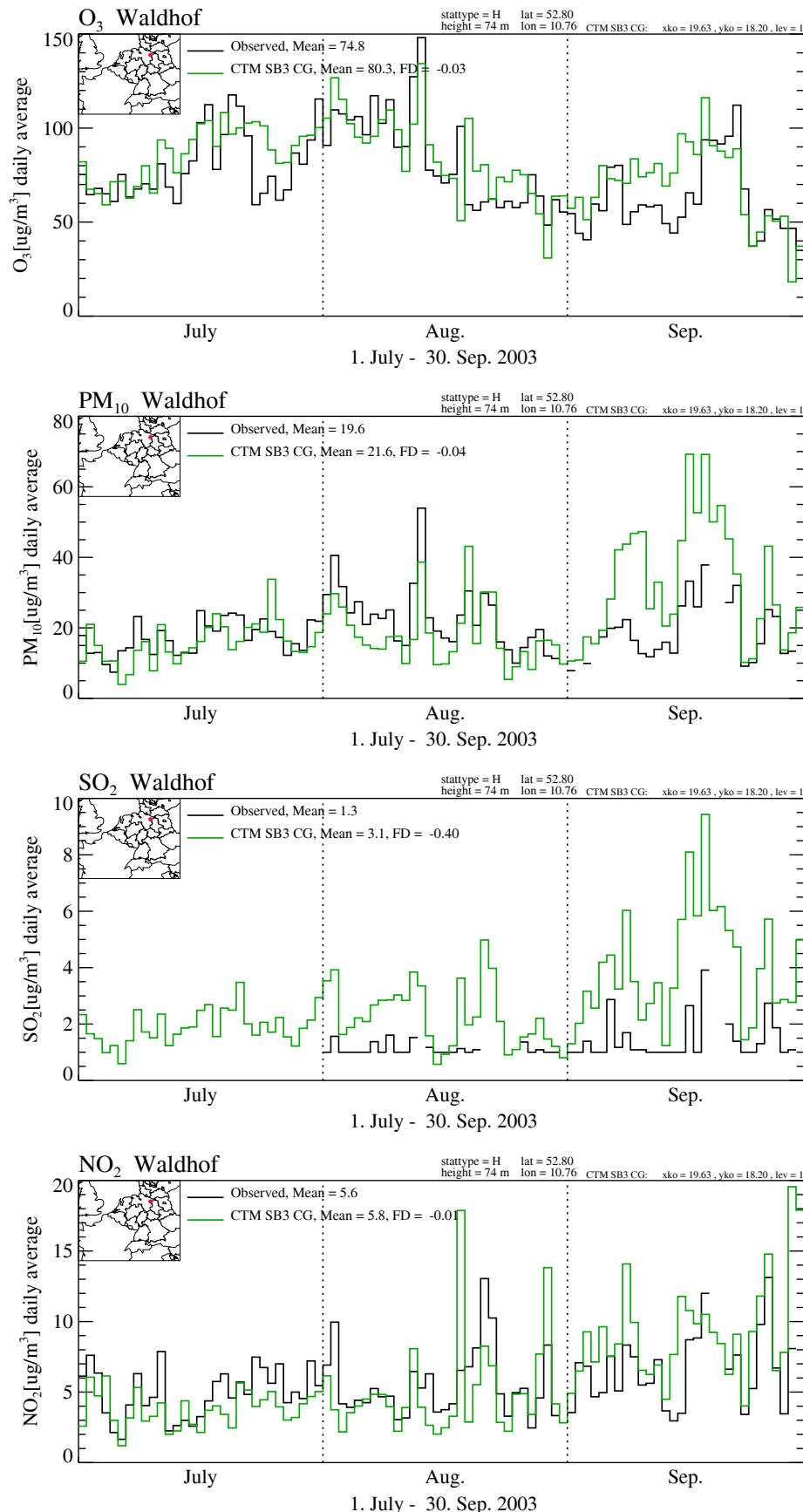


Abbildung 4.1.6 Tagesmittelwerte Waldhof – von oben: Ozon, PM₁₀, SO₂, unten NO₂ alle in [ug/m³] - Messung (schwarz), SB3 (grün)

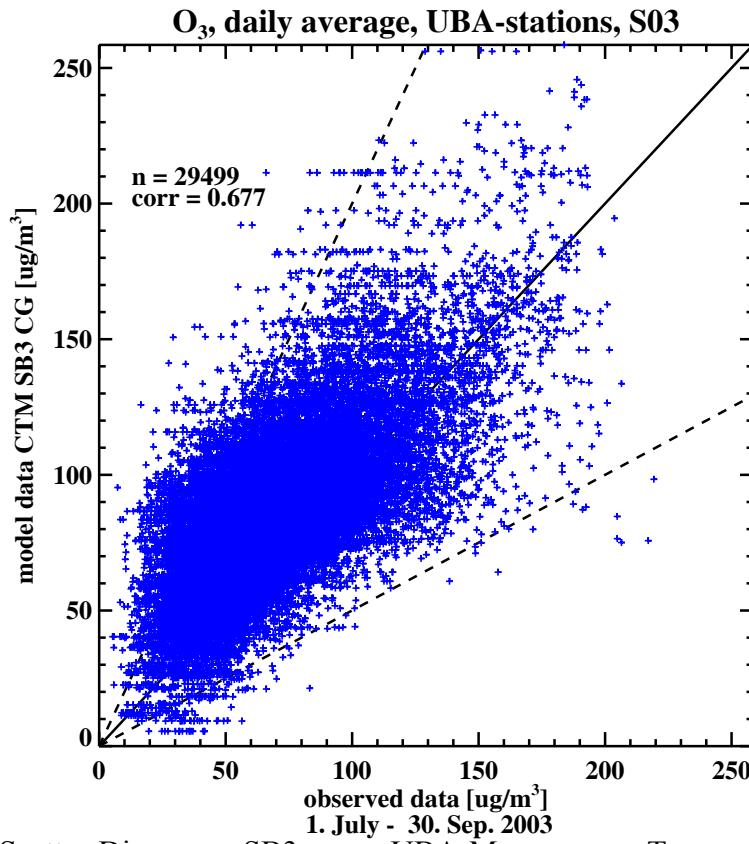


Abbildung 4.1.7 Scatter-Diagramm SB3 gegen UBA-Messungen – Tagesmittelwerte Ozon $[\mu\text{g}/\text{m}^3]$

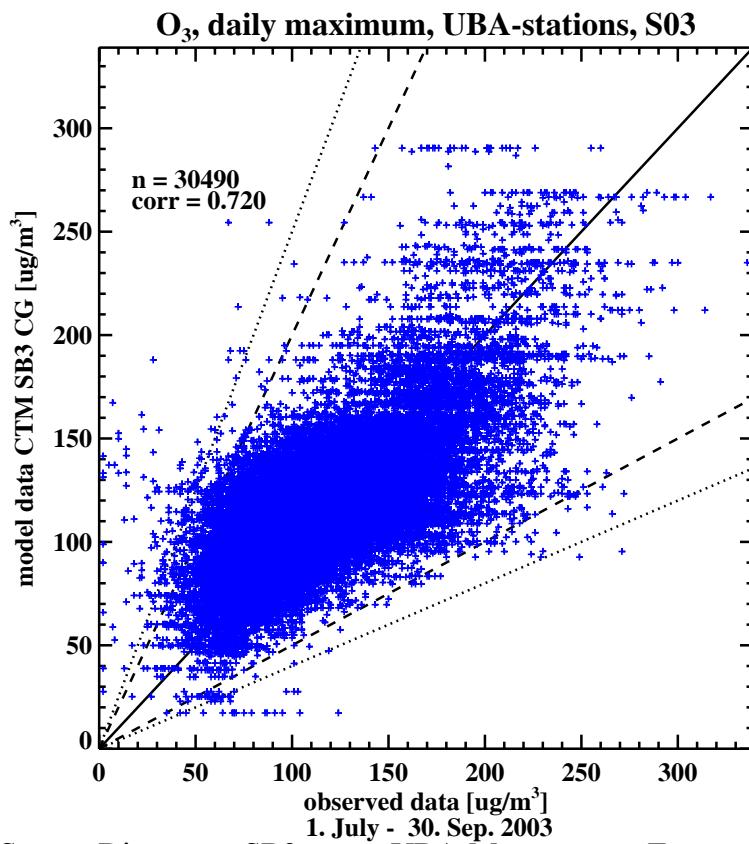


Abbildung 4.1.8 Scatter-Diagramm SB3 gegen UBA-Messungen – Tagesmaxima Ozon $[\mu\text{g}/\text{m}^3]$

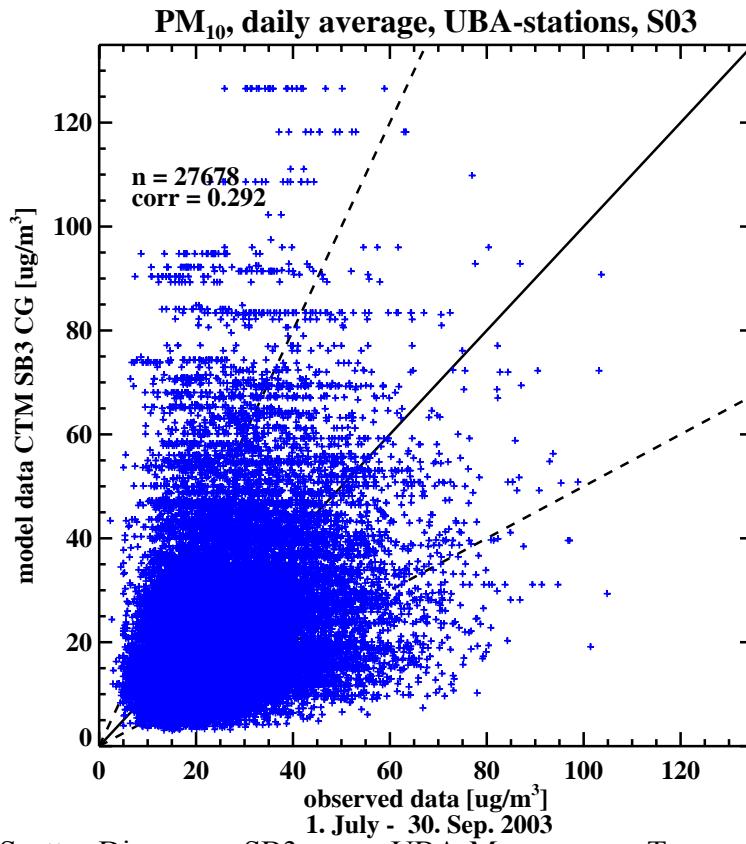


Abbildung 4.1.9 Scatter-Diagramm SB3 gegen UBA-Messungen – Tagesmittelwerte PM₁₀ [ug/m³]

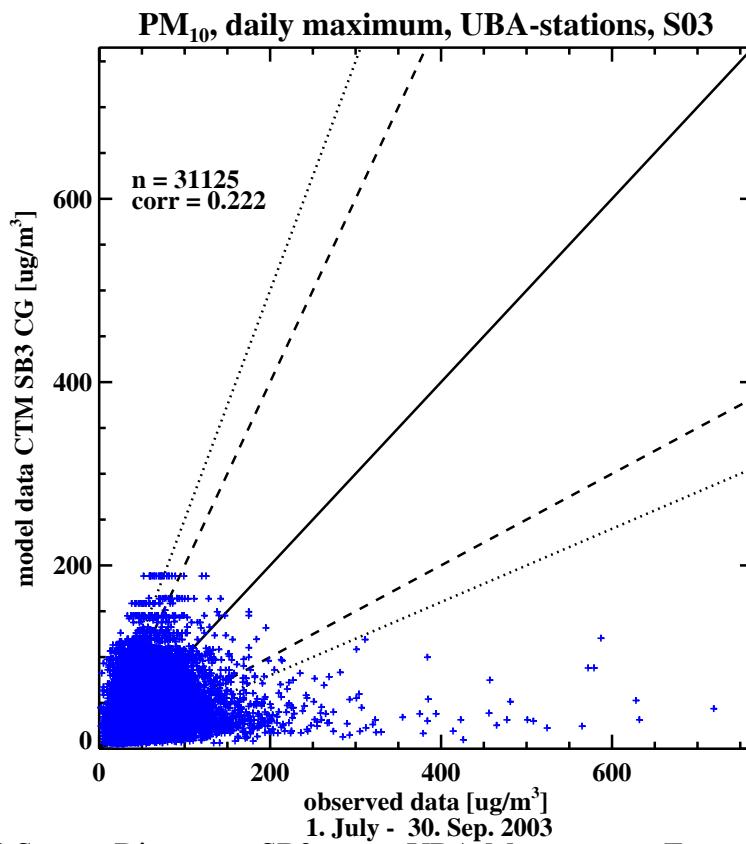


Abbildung 4.1.10 Scatter-Diagramm SB3 gegen UBA-Messungen – Tagesmaxima PM₁₀ [ug/m³]

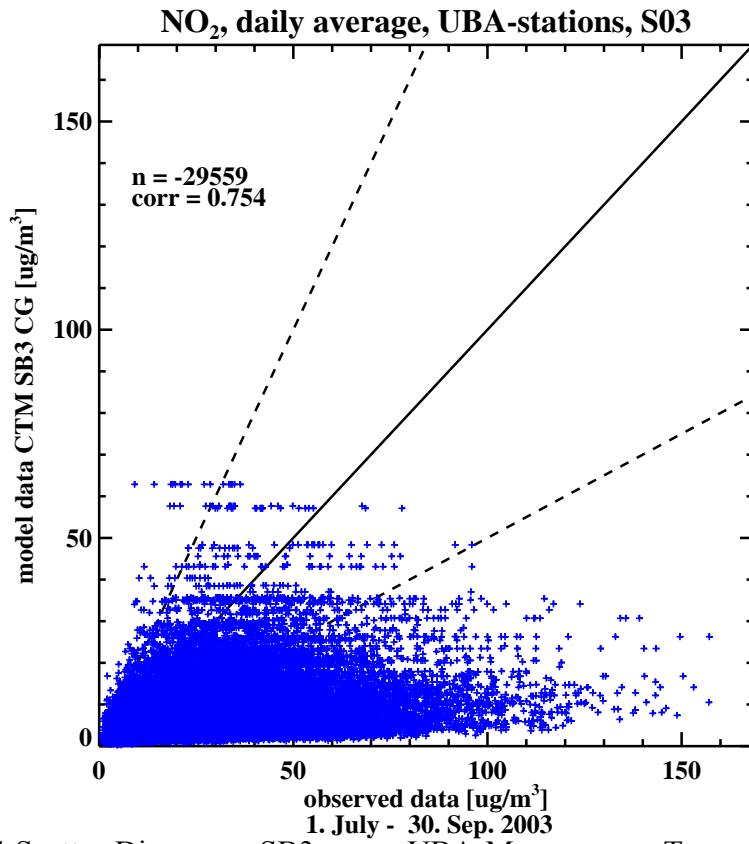


Abbildung 4.1.11 Scatter-Diagramm SB3 gegen UBA-Messungen – Tagesmittelwerte NO₂ [ug/m³]

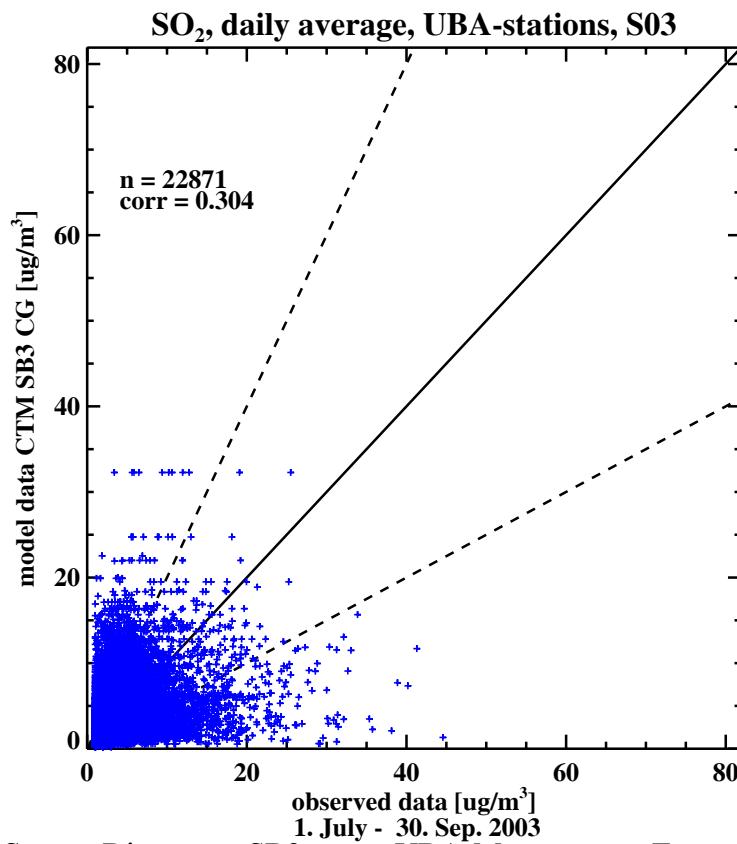


Abbildung 4.1.12 Scatter-Diagramm SB3 gegen UBA-Messungen – Tagesmaxima SO₂ [ug/m³]

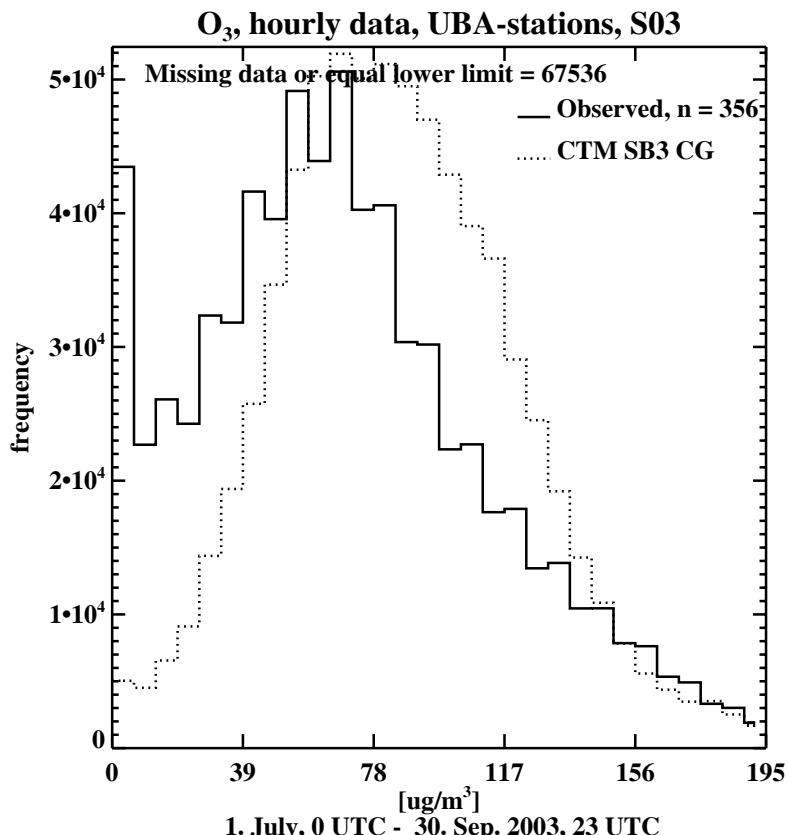


Abbildung 4.1.13 Häufigkeitsverteilung Ozon [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] auf der Basis von stündlichen Werten – schwarz UBA-Messdaten – gestrichelt Simulation

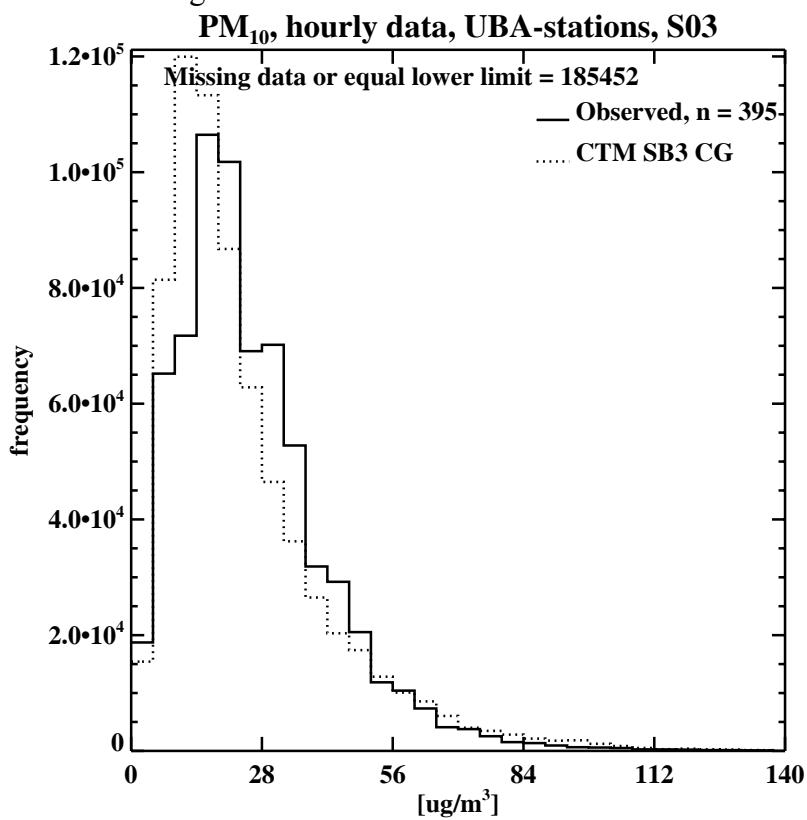


Abbildung 4.1.14 Häufigkeitsverteilung PM₁₀ [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] auf der Basis von stündlichen Werten – schwarz UBA-Messdaten – gestrichelt Simulation

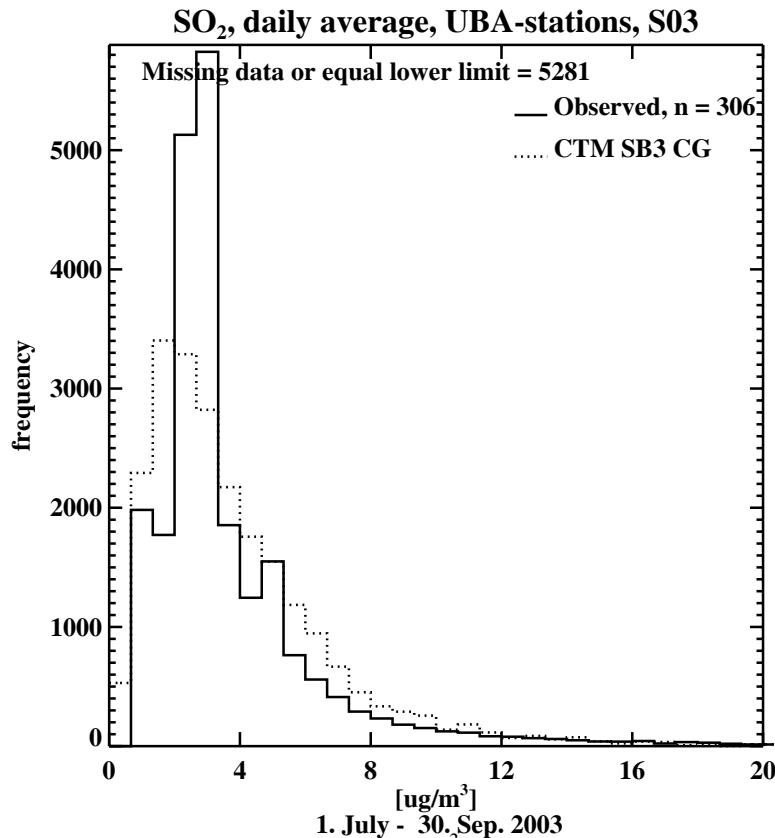


Abbildung 4.1.15 Häufigkeitsverteilung SO₂ [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] auf der Basis von Tagesmittelwerten – schwarz UBA-Messdaten – gestrichelt Simulation

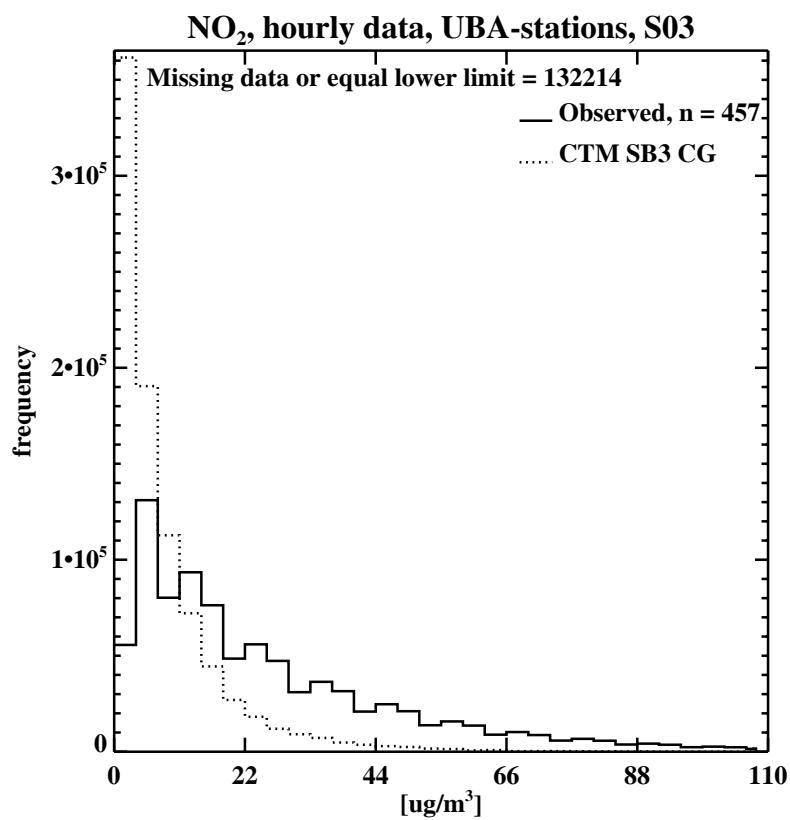
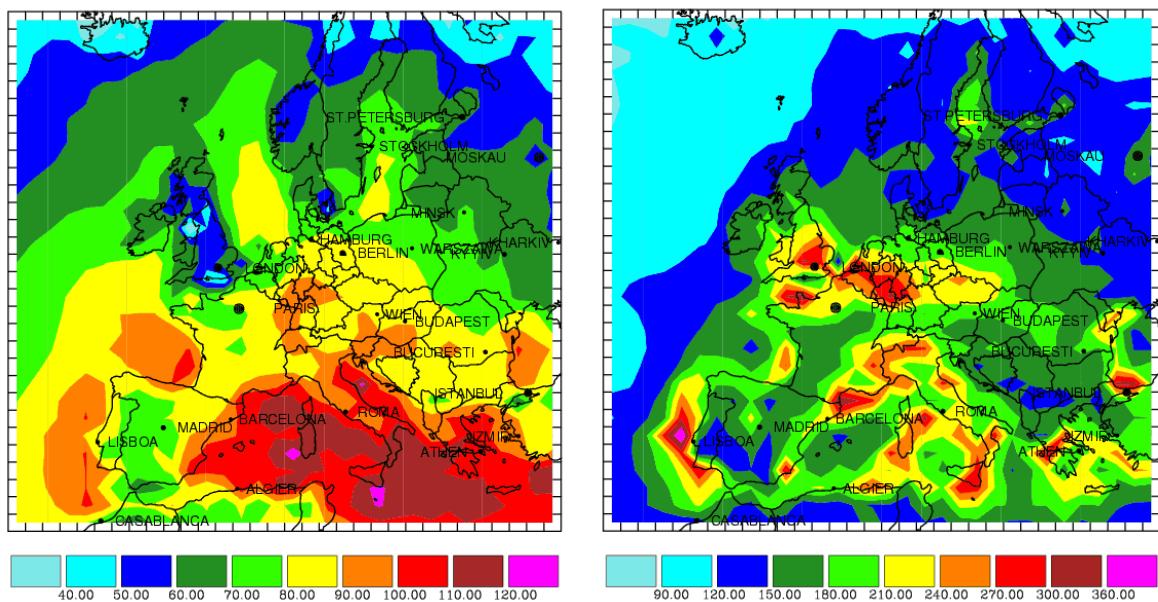


Abbildung 4.1.16 Häufigkeitsverteilung NO₂ [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] auf der Basis von stündlichen Werten – schwarz UBA-Messdaten – gestrichelt Simulation

Ozon



NO₂

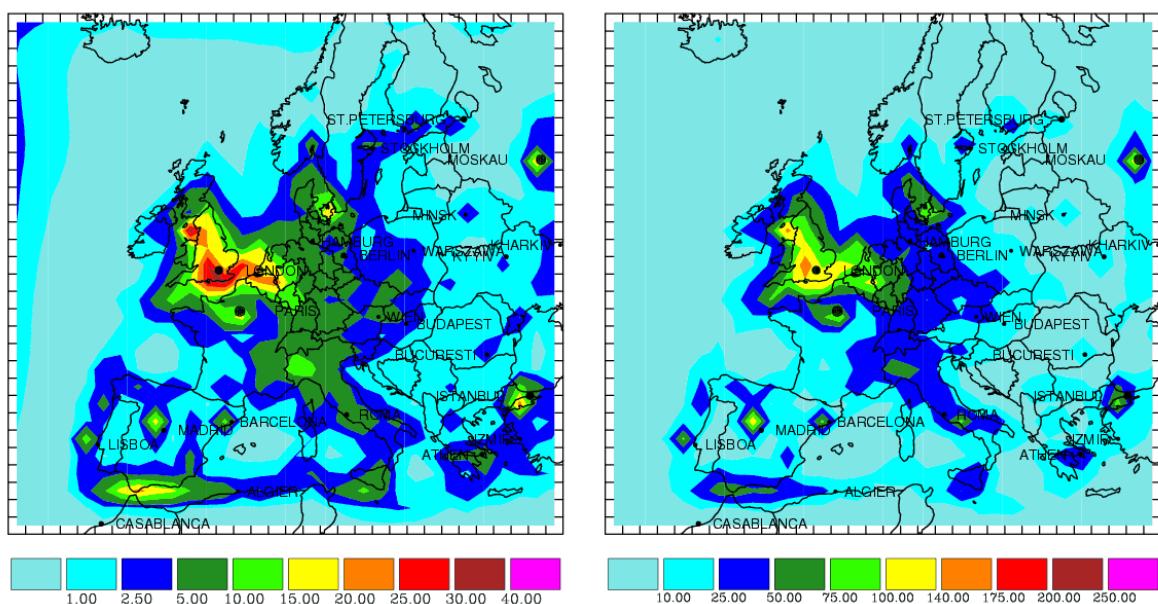
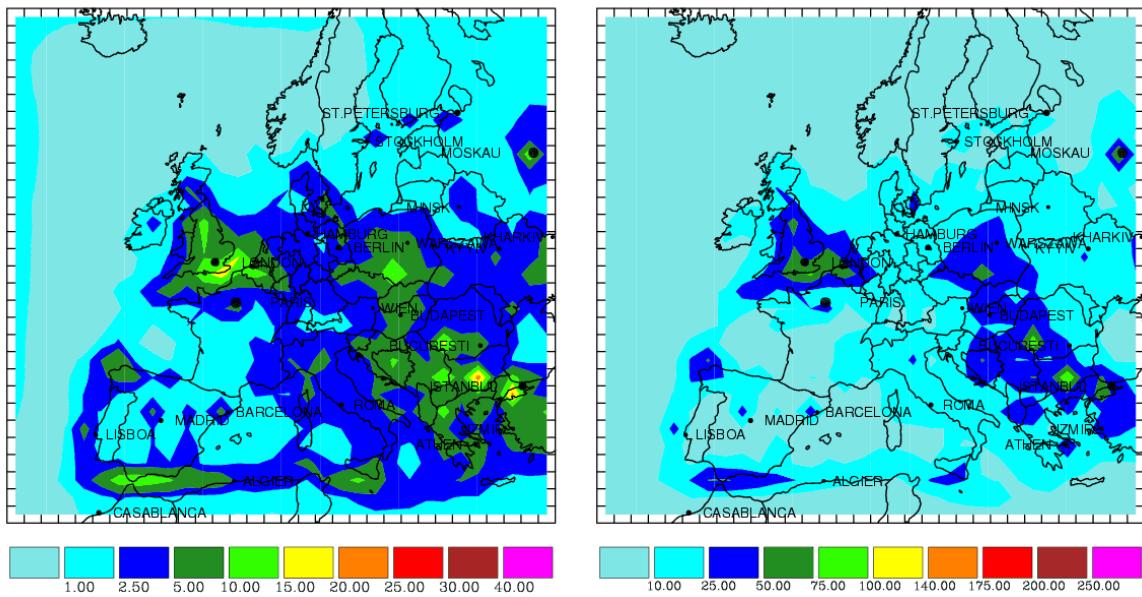


Abbildung 4.1.17 Sommer Episode 2003 – Episodenmittel (links) und Maximum (rechts)-
oben: Ozon, unten NO₂ alle in $\mu\text{g}/\text{m}^3$

SO₂



CO

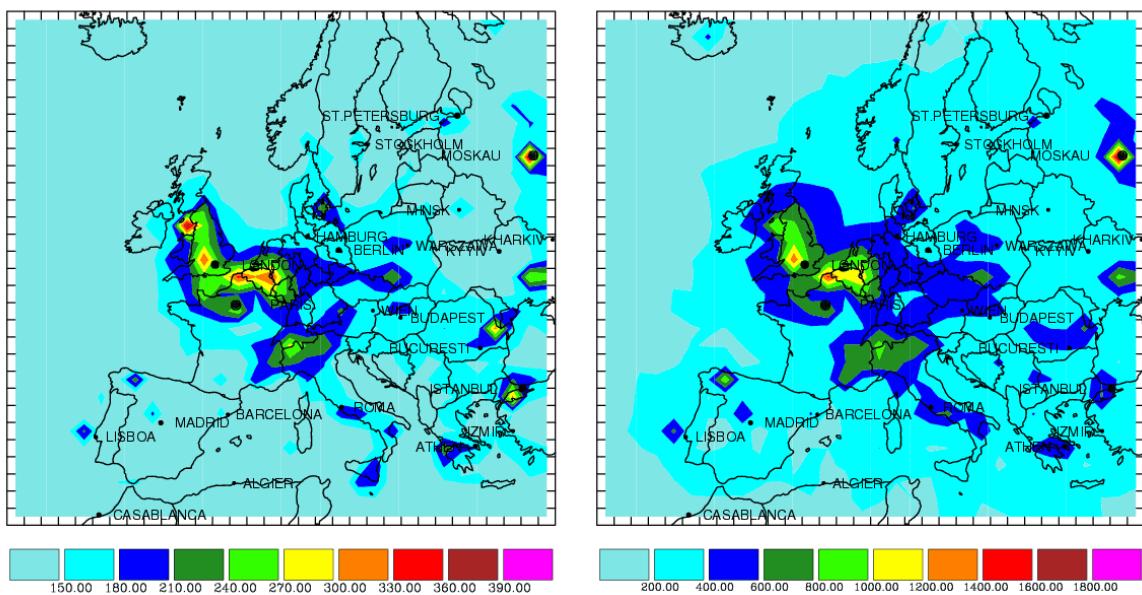
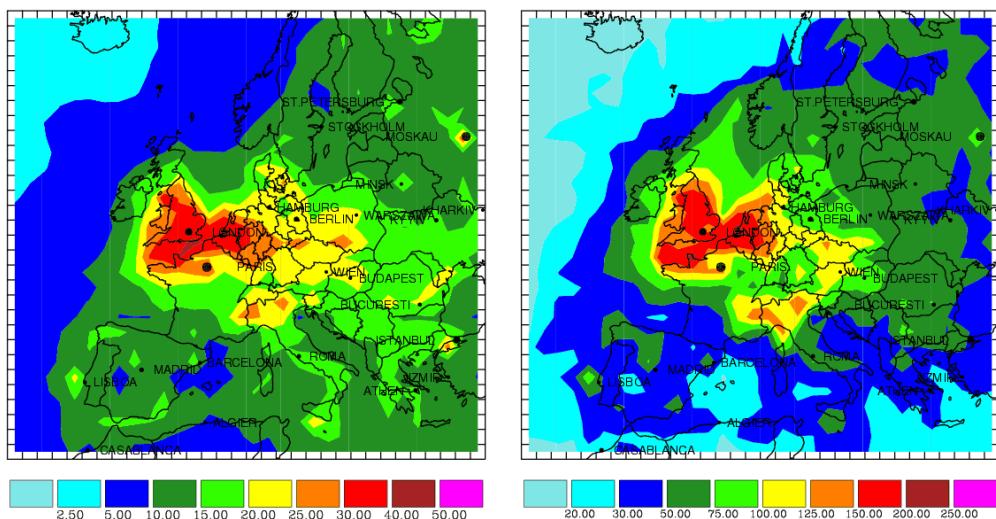
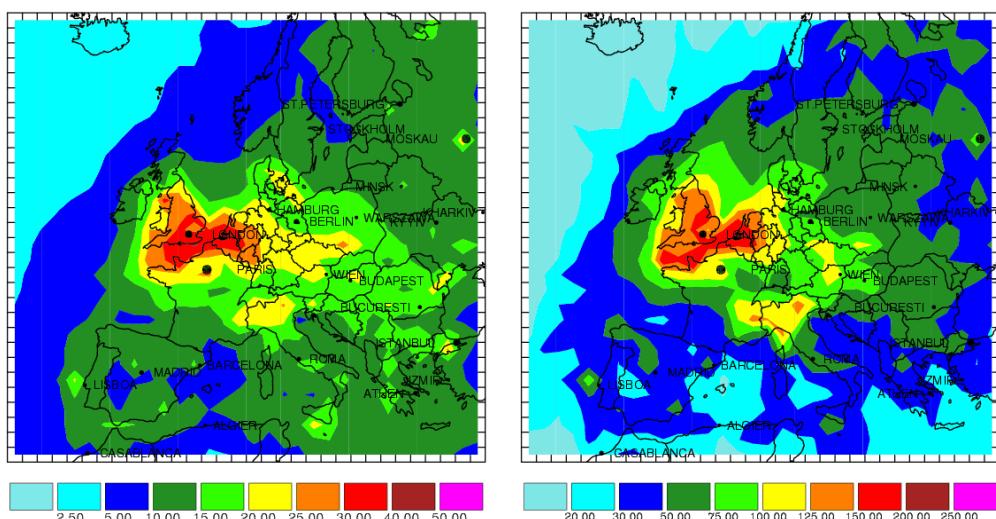


Abbildung 4.1.18 Sommer Episode 2003 – Episodenmittel (links) und Maximum (rechts)-
oben: SO₂ unten CO alle in $[\mu\text{g}/\text{m}^3]$

PM₁₀



PM_{2.5}



PM₁

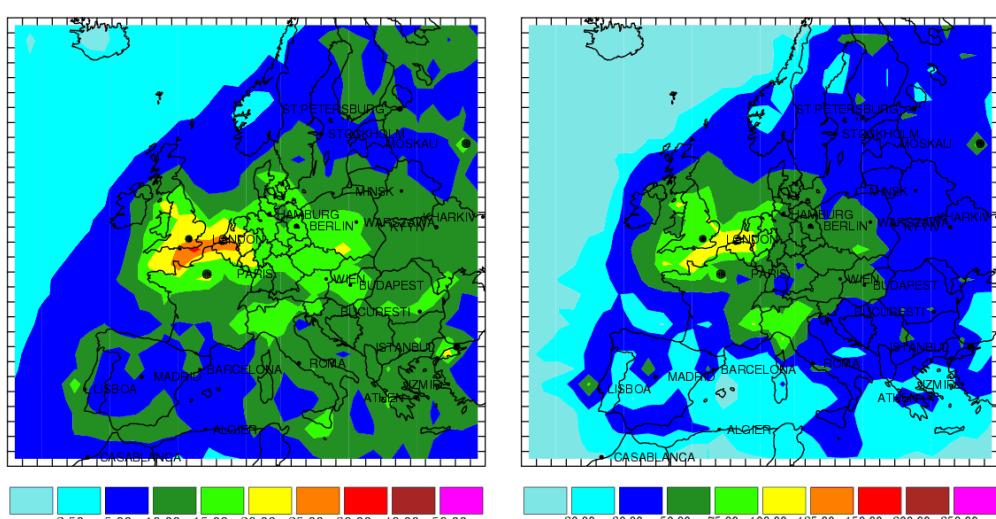
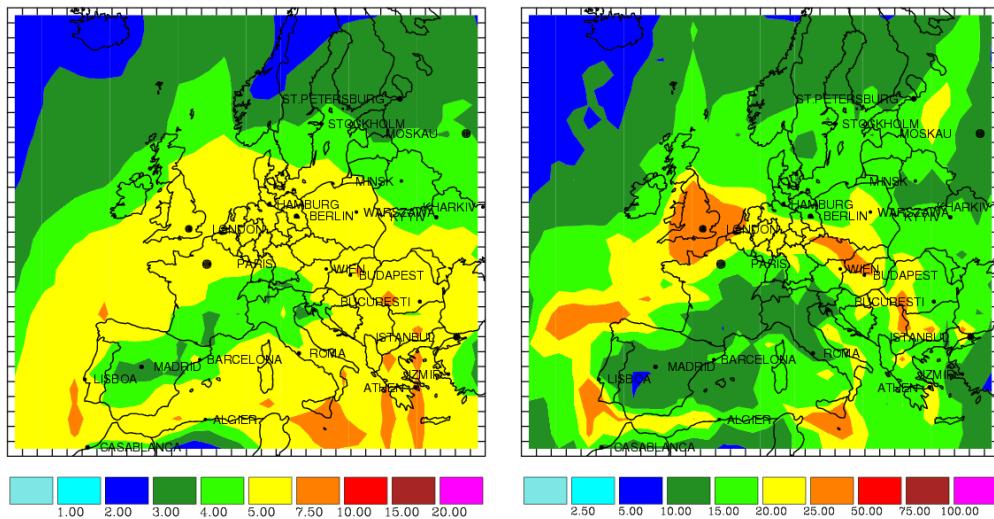
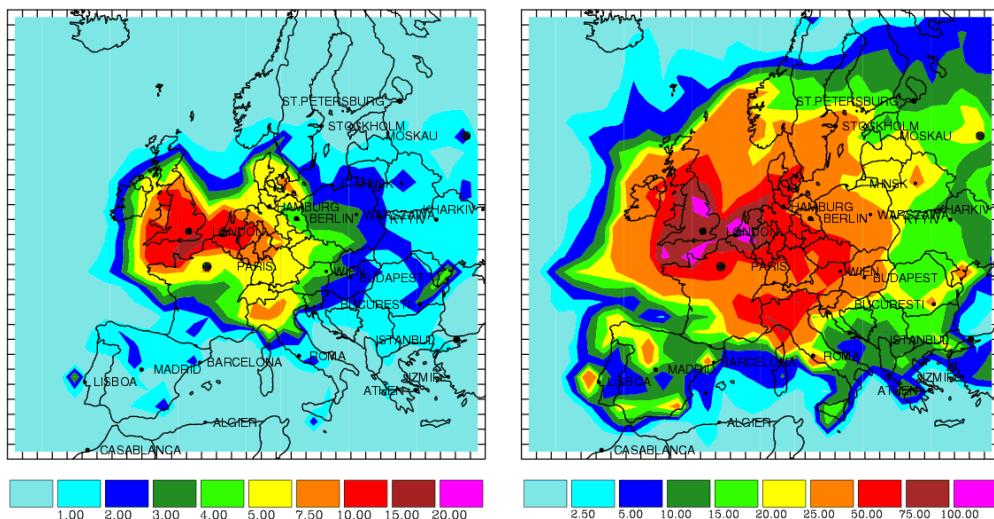


Abbildung 4.1.19 Sommer Episode 2003 – Episodenmittel (links) und Maximum (rechts)-
oben: PM₁₀ Mitte: PM_{2.5} unten PM₁ alle in $[\mu\text{g}/\text{m}^3]$

Sulfat



Nitrat



Ammonium

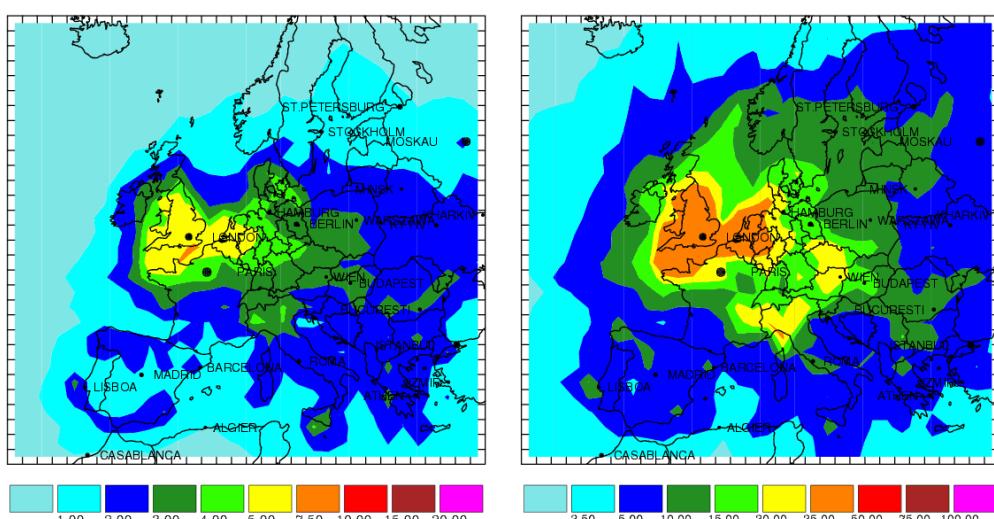
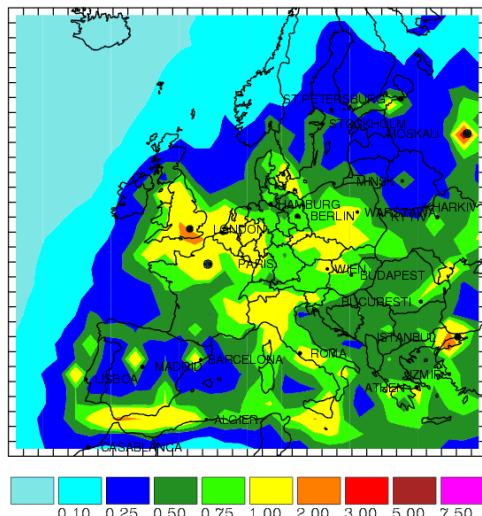
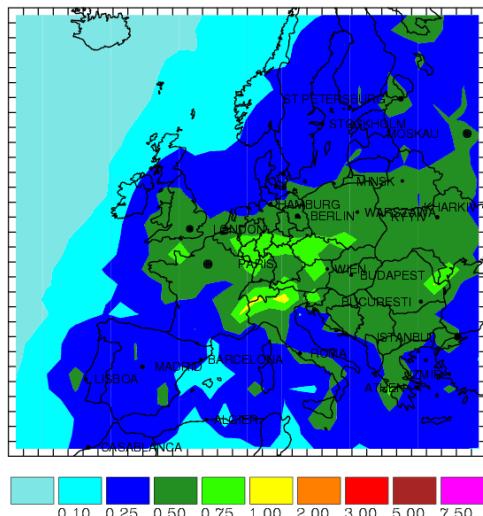


Abbildung 4.1.20 Sommer Episode 2003 – Aerosolkomponenten Episodenmittel (links) und Maximum (rechts)- oben: Sulfat Mitte: Nitrat unten Ammonium alle in $[\mu\text{g}/\text{m}^3]$

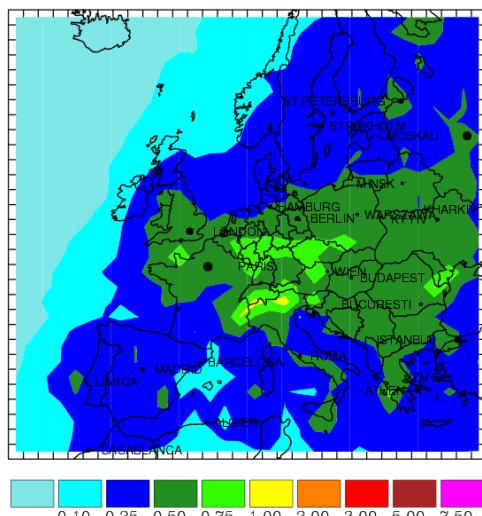
Elementarer Kohlenstoff



Primärer organischer Kohlenstoff



Sekundäres org. Aerosol – anthr.



Sekundäres org. Aerosol - biogen

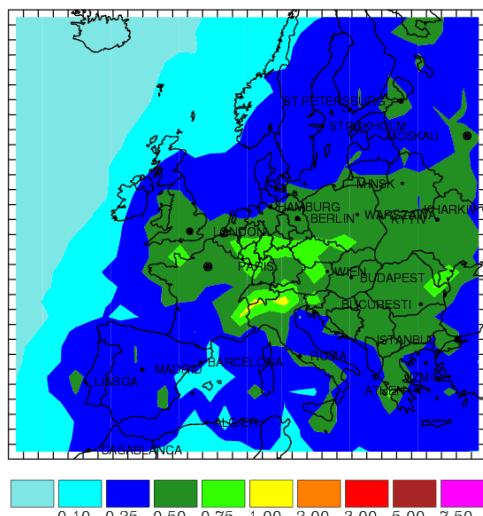


Abbildung 4.1.21 Sommer Episode 2003 – Aerosolkomponenten Episodenmittel – von links oben nach rechts unten: Elementarer Kohlenstoff, primäres organisches Aerosol, anthropogenes sekundäres organisches Aerosol und biogenes sekundäres organisches Aerosol alle in $\mu\text{g}/\text{m}^3$

Literatur

Ackermann, I. J., H. Hass, M. Memmesheimer, A. Ebel, F.B. Binkowski, and U. Shankar: Modal Aerosol dynamics model for Europe: Development and first applications. *Atmos. Environm.*, 32, 2891-2999, 1998.

Elbern, H. and H. Schmidt: Ozone episode analysis by four-dimensional variational chemistry data assimilation. *J. Geophys. Res.*, 106, 3569 - 3690, 2001.

Friese, E., H.J. Jakobs, M. Memmesheimer, H. Feldmann, A. Ebel, M.J. Kerschgens: Long-term simulation of particulate matter over Europe with the EURAD Modeling System. *Proceedings from the EUROTRAC-2 Symposium 2002*, Eds.: P.M. Midgley, M. Reuther, Margraf Verlag, Weikersheim, 2002a.

Friese, E., H.J. Jakobs, M. Memmesheimer, H. Feldmann, C. Kessler, G. Piekorz, A. Ebel: Ausbreitungsrechnungen für Nordrhein-Westfalen zur Anwendung im Rahmen der Beurteilung der Luftqualität nach EU-Richtlinien. *Abschlußbericht zum FuE-Vorhaben ANABEL*, im Auftrag des Landesumweltamtes Nordrhein-Westfalen, Juni 2002b.

Jakobs, H.J., H. Feldmann, H. Hass, M. Memmesheimer: The use of nested models for air pollution studies: an application of the EURAD model to a SANA episode. *J. Appl. Met.*, 34, 1301-1319, 1995.

Jakobs, H.J., S. Tilmes, A. Heidegger, K. Nester, G. Smiatek: Short-term ozone forecasting with a network model system during summer 1999. *J. Atmos. Chem.*, 42, 23 - 40, 2002a.

Jakobs, H.J., E. Friese, M. Memmesheimer, A. Ebel: Entwicklung und Erprobung einer Prognose-Systems zur Vorhersage der Luftqualität in Nordrhein-Westfalen. *Abschlußbericht zum FuE-Vorhaben PROSYS*, 20 Seiten, im Auftrag des Landesumweltamtes Nordrhein-Westfalen. November 2001.

Kessler, C., W. Brücher, M. Memmesheimer, M.J. Kerschgens, A. Ebel: Simulation of Air Pollution with Nested Models in North-Rhine-Westphalia. *Atmos. Environment*, in press, 2001.

Memmesheimer, M., E. Friese, H.J. Jakobs, A. Ebel: Anwendungsmöglichkeiten von 3-D-Chemie-Transport-Modellen für die PMx-Quellenidentifizierung. *Zusammenfassung des Vortrags auf dem Workshop „PMx-Quellenidentifizierung: Methoden und Ergebnisse“*, Duisburg 12./13. September 2001, 16 Seiten.

Memmesheimer, M., Friese, E., Ebel, A. Jakobs, H.J. Feldmann, H., Kessler C. and Piekorz, G. (2004) ,Long-term simulations of particulate matter in Europe on different scales using sequential nesting of a regional model', *Int. J Environment and Pollution*, Vol. 22, Nos 1/2, pp. 108-132.

Schell, B., I.J. Ackermann, H. Hass, F.S. Binkowski, A. Ebel: Modeling the formation of secondary organic aerosol within a comprehensive air quality modeling system. *J. Geophys. Res.*, 106, 28275 – 28293, 2001.