

**Sächsisches Staatsministerium für Umwelt und Landwirtschaft**

vertreten durch das

**Sächsische Landesamt für Umwelt und Geologie**

**Sachgebiet: Luftqualität**

Abschlussbericht

zum

Forschungs- und Entwicklungsvorhaben

**Modellierung der**  
**Sekundärpartikelbildung und -ausbreitung**  
**von Großfeuerungsanlagen in Sachsen**

von

**Dr. Detlef Hinneburg, Prof. Dr. Eberhard Renner, Dr. Ralf Wolke,  
Birgit Heinrich, Wolfram Schröder, Dr. Detlef Theiss**

**Leibniz-Institut für Troposphärenforschung e.V.  
Permoserstraße 15  
04318 Leipzig**

**Prof. Dr. E. Renner (Projektleiter)**

**November 2005**



Berichts-Kennblatt

1. Zwischen- bzw. Abschlussberichts-Nr.:	2. Berichtszeitraum 01.10.04 - 31.05.05
3. Titel des Berichts Modellierung der Sekundärpartikelbildung und -ausbreitung von Großfeuerungsanlagen in Sachsen	
4. Autor D. Hinneburg, E. Renner, R. Wolke, B. Heinrich, W. Schröder, D. Theiss	5. Abschlussdatum Entw.-Version: 11.05.05 End-Version: 30.11.05
6. Durchführende Institution(en), Projektleiter Leibniz-Institut für Troposphärenforschung e.V. 04318 Leipzig Prof. Dr. E. Renner	7. Aktenzeichen/Förderkennzeichen 8802.3521/58
8. Fördernde Institution(en) Freistaat Sachsen Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie, 01101 Dresden	9. Gesamtlaufzeit 01.10.04 - 31.05.05
10. Zusätzliche Angaben, Sonstiges	11. Seitenzahl 154
	12. Tabellen (Anzahl) 19
	13. Abbildungen (Anzahl) 72
	14. Anlagen (Anzahl) 0
15. Kurzfassung Mittels eines mesoskaligen Meteorologie-Chemie-Transport-Modells wurden genestete hochaufgelöste Simulationen für das Gebiet Sachsen durchgeführt. Emissionsseitig wurden alle verfügbaren Punkt- und Flächenquellen berücksichtigt. Zwei 8-tägige Sommer- bzw. Winterepisoden wurden jeweils mit und ohne Berücksichtigung der Großfeuerungsanlagen Boxberg und Lippendorf simuliert, so dass deren Einfluss auf die Bildung und Ausbreitung von Sekundärpartikeln explizit bestimmt werden konnte. Im Modell sind u.a. die zur Sulfat- und Nitratbildung führenden mehrphasigen chemischen Reaktionspfade der emittierten Vorläufgase SO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub> und NH <sub>3</sub> in Abhängigkeit von den lokalen meteorologischen Bedingungen erfasst. Als Ergebnis stellt sich heraus, dass die bodennahen Abluftfahnen zwar hohe PM <sub>10</sub> -Konzentrationen enthalten können (bis 20 µg/m <sup>3</sup> , überwiegend Ammoniumsulfat), jedoch nur lokal und sehr kurzzeitig wirksam werden (im Jahresmittel nicht über 0,2 µg/m <sup>3</sup> ).	
16. Schlagwörter, Deskriptoren Aerosol, Modellierung, Sekundärbildung, Kühlturm, Überhöhung, PM, Partikel, Sulfat	
17. Sonstiges	



<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>3</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>7</b>
<b>1. Zielstellung</b>	<b>9</b>
<b>2. Modellbeschreibung</b>	<b>11</b>
2.1 Meteorologie-Modell LM	11
2.2 Chemie-Transport-Modell MUSCAT	11
2.3 Aerosolmodell	13
2.4 LM-MUSCAT-Kopplung	15
<b>3. Simulationsmethode</b>	<b>17</b>
3.1 Gebietsnestung	17
3.2 Modellgebiet Sachsen	19
3.3 Zeitfenster, Szenarien	22
3.4 Modellsteuerung	23
<b>4. Emissionen</b>	<b>27</b>
4.1 Kühlturm-Emissionen	27
4.2 Kühlturm-Überhöhung	28
4.3 Emissionskataster	32
4.4 Split- und Zeitfaktoren	36
4.5 Biogene Emissionen	38
<b>5. Modell-Validierung</b>	<b>39</b>
5.1 Vergleich meteorologischer Größen	39
5.2 Vergleich von Konzentrationswerten	49
<b>6. Ergebnisse</b>	<b>58</b>
6.1 Sommer-Analyse	59
6.1.1 Einzeltage	59
6.1.1.1 Sommertag S1	62
6.1.1.2 Sommertag S2	74
6.1.1.3 Sommertag S3	86
6.1.2 Sommer-Zeitraum	98
6.1.2.1 Mittags-Situationen	98
6.1.2.2 Stations-Zeitreihen	104
6.2 Winter-Analyse	125
6.2.1 Wintertag W1	125
6.2.2 Winter-Zeitraum	139
<b>7. Zusammenfassung</b>	<b>151</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>153</b>



**Abbildungsverzeichnis**

Abb. 1:	Chemie-Transport-Modell MUSCAT (Hellmuth, 2005)	12
Abb. 2:	Sekundäre Aerosolbildung aus emittierten Vorläufergasen	15
Abb. 3:	Nestung des Modellgebietes Sachsen (blau) im Modellgebiet Mitteleuropa (braun); mit regulärem sphärischen Erdnetz (schwarz)	18
Abb. 4:	MUSCAT-Gitter Sachsen (grün) innerhalb der LM-Gitter für Sachsen (blau) und Mitteleuropa (braun); mit km-Netz (schwarz)	18
Abb. 5:	Untersuchungsgebiet Sachsen (grün) mit spezieller Gitterverfeinerung (grün/blau/rot); mit km-Netz (schwarz)	19
Abb. 6:	Tagesgang mehrerer simulierter Größen am 2./3.6.2002 am Ort Melpitz (Sachsen) für verschiedene Vertikalgitter (bzw. Höhen über Grund). Blau: 40 Schichten (34 m); rot: 50 Schichten (4 m). Helmert (2005)	20
Abb. 7:	Untersuchungsgebiet Sachsen mit Landnutzungsstruktur im 1-km-Raster	21
Abb. 8:	Zeitlicher Verlauf der effektiven Emissionshöhen der Kühltürme in Boxberg und Lippendorf sowie der Temperaturgradienten, Windgeschwindigkeiten und relativen Luftfeuchten in Bauwerkshöhe (Sommerintervall)	30
Abb. 9:	Zeitlicher Verlauf der effektiven Emissionshöhen der Kühltürme in Boxberg und Lippendorf sowie der Temperaturgradienten, Windgeschwindigkeiten und relativen Luftfeuchten in Bauwerkshöhe (Winterintervall)	31
Abb. 10:	SO <sub>2</sub> -Jahresemissionen aller sächsischen Punktquellen (außer GFA Boxberg und Lippendorf). Nichtlineare Skala.	34
Abb. 11:	SO <sub>2</sub> -Jahresemissionen aller Flächenquellen im Modellgebiet Sachsen (in Sachsen: 1,4 km × 1,4 km; außerhalb: 50 km × 50 km [EMEP])	34
Abb. 12:	NH <sub>3</sub> -Jahresemissionen aller Flächenquellen im Modellgebiet Sachsen (in Sachsen: 1,4 km × 1,4 km; außerhalb: 50 km × 50 km [EMEP])	35
Abb. 13:	PPM <sub>grob</sub> -Jahresemissionen aller Flächenquellen im Modellgebiet Sachsen (in Sachsen: 1,4 km × 1,4 km; außerhalb: 50 km × 50 km [EMEP])	35
Abb. 14:	Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Schwartenberg (Sommerperiode)	40
Abb. 15:	Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Schwartenberg (Winterperiode)	41
Abb. 16:	Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Collm (Sommerperiode)	42
Abb. 17:	Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Collm (Winterperiode)	43
Abb. 18:	Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Radebeul (Sommerperiode)	44
Abb. 19:	Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Radebeul (Winterperiode)	45
Abb. 20:	Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Leipzig-West (Sommerperiode)	46
Abb. 21:	Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Leipzig-West (Winterperiode)	47

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 22:	Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Schwartenberg (Sommerperiode)	50
Abb. 23:	Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Schwartenberg (Winterperiode)	51
Abb. 24:	Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Collm (Sommerperiode)	52
Abb. 25:	Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Collm (Winterperiode)	53
Abb. 26:	Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Radebeul (Sommerperiode)	54
Abb. 27:	Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Radebeul (Winterperiode)	55
Abb. 28:	Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Leipzig-West (Sommerperiode)	56
Abb. 29:	Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Leipzig-West (Winterperiode)	57
Abb. 30 (a):	SO <sub>2</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S1)	62
Abb. 30 (b):	SO <sub>2</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S1)	63
Abb. 31 (a):	SULFAT im Tagesverlauf (Sommertag S1)	64
Abb. 31 (b):	SULFAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S1)	65
Abb. 32 (a):	NITRAT im Tagesverlauf (Sommertag S1)	66
Abb. 32 (b):	NITRAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S1)	67
Abb. 33 (a):	PPM <sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S1)	68
Abb. 33 (b):	PPM <sub>10</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S1)	69
Abb. 34 (a):	PM <sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S1)	70
Abb. 34 (b):	PM <sub>10</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S1)	71
Abb. 35:	NH <sub>3</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S1)	72
Abb. 36 (a):	SO <sub>2</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S2)	74
Abb. 36 (b):	SO <sub>2</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S2)	75
Abb. 37 (a):	SULFAT im Tagesverlauf (Sommertag S2)	76
Abb. 37 (b):	SULFAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S2)	77
Abb. 38 (a):	NITRAT im Tagesverlauf (Sommertag S2)	78
Abb. 38 (b):	NITRAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S2)	79
Abb. 39 (a):	PPM <sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S2)	80
Abb. 39 (b):	PPM <sub>10</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S2)	81
Abb. 40 (a):	PM <sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S2)	82
Abb. 40 (b):	PM <sub>10</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S2)	83
Abb. 41:	NH <sub>3</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S2)	84
Abb. 42 (a):	SO <sub>2</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S3)	86
Abb. 42 (b):	SO <sub>2</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S3)	87
Abb. 43 (a):	SULFAT im Tagesverlauf (Sommertag S3)	88
Abb. 43 (b):	SULFAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S3)	89
Abb. 44 (a):	NITRAT im Tagesverlauf (Sommertag S3)	90
Abb. 44 (b):	NITRAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S3)	91

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 45 (a): PPM <sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S3)	92
Abb. 45 (b): PPM <sub>10</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S3)	93
Abb. 46 (a): PM <sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S3)	94
Abb. 46 (b): PM <sub>10</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S3)	95
Abb. 47: NH <sub>3</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S3)	96
Abb. 48: NO <sub>2</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S3)	97
Abb. 49: SO <sub>2</sub> -Differenz im 8-Tage-Überblick (Sommer)	99
Abb. 50: SULFAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Sommer)	100
Abb. 51: NITRAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Sommer)	101
Abb. 52: PPM <sub>10</sub> -Differenz im 8-Tage-Überblick (Sommer)	102
Abb. 53: PM <sub>10</sub> -Differenz im 8-Tage-Überblick (Sommer)	103
Abb. 54 (a): SO <sub>2</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collmberg, Radebeul	106
Abb. 54 (b): SO <sub>2</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen	107
Abb. 54 (c): SO <sub>2</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau	108
Abb. 55 (a): SULFAT-Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collmberg, Radebeul	109
Abb. 55 (b): SULFAT-Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen	110
Abb. 55 (c): SULFAT-Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau	111
Abb. 56 (a): NITRAT-Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collmberg, Radebeul	112
Abb. 56 (b): NITRAT-Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen	113
Abb. 56 (c): NITRAT-Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau	114
Abb. 57 (a): PPM <sub>2,5</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collmberg, Radebeul	115
Abb. 57 (b): PPM <sub>2,5</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen	116
Abb. 57 (c): PPM <sub>2,5</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau	117
Abb. 58 (a): PPM <sub>grob</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collmberg, Radebeul	118
Abb. 58 (b): PPM <sub>grob</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen	119
Abb. 58 (c): PPM <sub>grob</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau	120
Abb. 59 (a): PM <sub>10</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collmberg, Radebeul	121
Abb. 59 (b): PM <sub>10</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen	122
Abb. 59 (c): PM <sub>10</sub> -Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau	123
Abb. 60: Lippendorfer Abluftfahne über dem Leipziger Stadtgebiet (SO <sub>2</sub> , PM <sub>10</sub> ). Vergrößerte Darstellung (36 km × 30 km) aus Abb. 49 bzw. 53 (unten links)	124
Abb. 61: SO <sub>2</sub> -Zeitreihen (Sommer) für Leipzig-M. und Radebeul im Vergleich mit virtuellen Tracern aus Lippendorf bzw. Boxberg	124
Abb. 62 (a): SO <sub>2</sub> im Tagesverlauf (Wintertag W1)	126
Abb. 62 (b): SO <sub>2</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Wintertag W1)	127
Abb. 62 (c): SO <sub>2</sub> -Differenz in 300 m Höhe im Tagesverlauf (Wintertag W1)	128
Abb. 63 (a): SULFAT im Tagesverlauf (Wintertag W1)	129
Abb. 63 (b): SULFAT-Differenz im Tagesverlauf (Wintertag W1)	130
Abb. 63 (c): SULFAT-Differenz in 300 m Höhe im Tagesverlauf (Wintertag W1)	131
Abb. 64 (a): NITRAT im Tagesverlauf (Wintertag W1)	132
Abb. 64 (b): NITRAT-Differenz im Tagesverlauf (Wintertag W1)	133
Abb. 65 (a): PPM <sub>10</sub> im Tagesverlauf (Wintertag W1)	134
Abb. 65 (b): PPM <sub>10</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Wintertag W1)	135
Abb. 66 (a): PM <sub>10</sub> im Tagesverlauf (Wintertag W1)	136
Abb. 66 (b): PM <sub>10</sub> -Differenz im Tagesverlauf (Wintertag W1)	137
Abb. 67: NH <sub>3</sub> im Tagesverlauf (Wintertag W1)	138

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 68 (a): SO <sub>2</sub> -Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter)	140
Abb. 68 (b): SO <sub>2</sub> -Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter), Fortsetzung von (a)	141
Abb. 69 (a): SULFAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter)	142
Abb. 69 (b): SULFAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter), Fortsetzung von (a)	143
Abb. 70 (a): NITRAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter)	144
Abb. 70 (b): NITRAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter), Fortsetzung von (a)	145
Abb. 71 (a): PPM <sub>10</sub> -Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter)	146
Abb. 71 (b): PPM <sub>10</sub> -Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter), Fortsetzung von (a)	147
Abb. 72 (a): PM <sub>10</sub> -Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter)	148
Abb. 72 (b): PM <sub>10</sub> -Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter), Fortsetzung von (a)	149

**Tabellenverzeichnis**

Tab. 1:	Gebietsnestung (horizontal)	17
Tab. 2:	Gitterstruktur im Untersuchungsgebiet Sachsen	21
Tab. 3:	Zeitfensterstaffelung	22
Tab. 4:	Typische meteorologische Situationen	22
Tab. 5:	Notwendige Windrichtungen für Schadstofftransport	22
Tab. 6:	Simulierte Sommer/Winter-Perioden 2002	23
Tab. 7:	Ausgewählte analysierte Tage	23
Tab. 8:	Nestungsprinzip des Modellsystems LM-MUSCAT	24
Tab. 9:	Schema der Modell- bzw. Gebietsnestung	25
Tab. 10:	Kühlturm- und Rauchschwaden-Merkmale	27
Tab. 11:	Kühlturm-Emissionswerte 2002 (Mittelwerte)	27
Tab. 12:	Abhängigkeit der effektiven Emissionshöhe (in m) von der thermischen Stabilität (vertikal konstant) und Windgeschwindigkeit für 12°C Bodentemperatur und 65% relative Feuchte (konstant)	28
Tab. 13:	Abhängigkeit der effektiven Emissionshöhe (in m) von der relativen Feuchte (vertikal konstant) und Windgeschwindigkeit für 12°C Bodentemperatur und -2 K/km thermische Stabilität (konstant, stabil)	29
Tab. 14:	Verursachergruppen in Sachsen	32
Tab. 15:	SNAP-Klassen und Zuordnung der Verursachergruppen aus Tab. 14	33
Tab. 16:	Faktoren zur zeitlichen Differenzierung von Jahresemissionen (nach: Fath, 2002)	37
Tab. 17:	Parameter der biogenen Emission (siehe Gleichung (8))	38
Tab. 18:	Maximale Effekte infolge der GFA-Emissionen (Sommer)	98
Tab. 19:	Maximale Effekte infolge der GFA-Emissionen (Winter)	139





(Leipziger Volkszeitung LVZ, 2005)

### 1. Zielstellung

Nachdem Schwefeldioxid, Ozon und Grobstaub als Luftschadstoffe weitgehend beherrschbar geworden sind, tritt zunehmend die Feinstaub-Belastung in den Vordergrund der Umweltpolitik. Das hat seine Ursachen einerseits im Erkennen der epidemiologischen Gesundheitsgefährdung durch Feinstaub und andererseits im nach wie vor hohen Emissionspotential von Verkehr und Industrie. Als primäre Hauptquellen von Feinstaub gelten dieselgetriebene Kraftfahrzeuge und Kohlekraftwerke. Darüber hinaus spielt jedoch auch die sekundäre Entstehung von Teilchen aus gasförmigen Vorläufersubstanzen (Partikelneubildung) eine bedeutende Rolle.

Die in nationales Recht umgesetzte EU-Luftqualitäts-Rahmenrichtlinie schreibt seit 01.01.2005 u.a. für Partikel ( $PM_{10}$ ) Grenzwerte der Immission sowie Aktionspläne bei Überschreitung vor (siehe Rahmenrichtlinie 96/62/EG). Die Einhaltung dieser Grenzwerte ist jedoch nur möglich und ökonomisch sinnvoll, wenn die Verursacher lokalisiert und in ihren Auswirkungen quantifiziert sind. In Vorbereitung auf akut notwendig werdende umweltpolitische Maßnahmen bedarf es daher einer bilanzmäßigen Aufbereitung der Feinstaub-Problematik und einer Klärung der Verursacher- und Prozesskette.

Deshalb soll in diesem Projekt der Anteil der beiden Braunkohle-Großkraftwerke Boxberg und Lippendorf an der Gesamtbelastung durch Feinstaub in den urbanen Zentren Sachsens mittels eines Ausbreitungsmodells untersucht werden. Von Interesse ist dabei nicht nur der direkte Einfluss dieser Emittenten auf die großflächige Verteilung des Feinstaubes, sondern insbesondere die indirekte Wirkung über dessen Neubildungs- und Alterungsprozesse. Die Analyse muss sich demzufolge auf eine chemisch und größenmäßig variable Zusammensetzung der Partikel stützen können und vor allem die möglichen chemischen Reaktionen der Vorläufergase einbeziehen.

Für die Modellierung der komplexen Vorgänge wird ein Modellsystem angewendet, das die meteorologischen Prozesse, die Ausbreitung der gas- und partikelförmigen Luftschadstoffe sowie ihre physikalisch-chemische Veränderung in online-gekoppelter Form miteinander verbindet (siehe Kapitel 2). Als meteorologisches Vorhersage-Modell steht das mesoskalige Lokalmodell des Deutschen Wetterdienstes zur Verfügung, das sich mittels großskaliger Antriebs- und Reanalyse-Daten hervorragend zur realitätsnahen Simulation der atmosphärischen Grenzschicht auch für zurückliegende Zeiträume eignet. Die Gesamtheit der Chemie- und Transport-Berechnungen wird von dem angekoppelten Modell MUSCAT

## 1. Zielstellung

getragen, das wiederum eigenständige Modelle für die Emissionen und für die aerosolspezifischen Bildungs-, Wachstums- und Umwandlungsprozesse enthält.

Um dem zeitlichen und räumlichen Ausmaß typischer Wetterlagen und Ausbreitungsszenarien gerecht zu werden, wird das Modellsystem in einer zweistufigen Modell-Nestung angewendet (siehe Kapitel 3). Dabei werden die Daten einer erdumspannenden Globalmodell-Rechnung für das Referenzjahr 2002 in grober räumlicher Auflösung zur Steuerung einer episodien-orientierten Simulation für Mitteleuropa mit höherer Auflösung genutzt, die ihrerseits die endgültigen, hochaufgelösten Simulationen im Untersuchungsgebiet Sachsen für diese Episoden steuert. Hierbei ist es erforderlich, alle vorhandenen Emissionsquellen auch außerhalb Sachsens hinsichtlich ihrer zeitlichen Intensitätsverläufe und spezifischen Substanzen zu berücksichtigen.

Die nach meteorologischen und immissionsbezogenen Gesichtspunkten ausgewählten sommer- und wintertypischen Szenarien sind zweifach, mit und ohne Zuschaltung der beiden genannten Großfeuerungsanlagen (GFA), zu simulieren, damit deren nichtlinearen Auswirkungen auf die Immissionsverteilung nachgegangen werden kann. Den Bedingungen des Nah- und Ferntransportes primärer und sekundärer Partikel wird zweckmäßigerweise durch ein horizontal variables Gitter (bis unter 1 km) innerhalb Sachsens Rechnung getragen, so dass einerseits die emittentennahen und andererseits die immissionsrelevanten Gebiete gleichermaßen besondere Differenzierung erfahren.

## 2. Modellbeschreibung

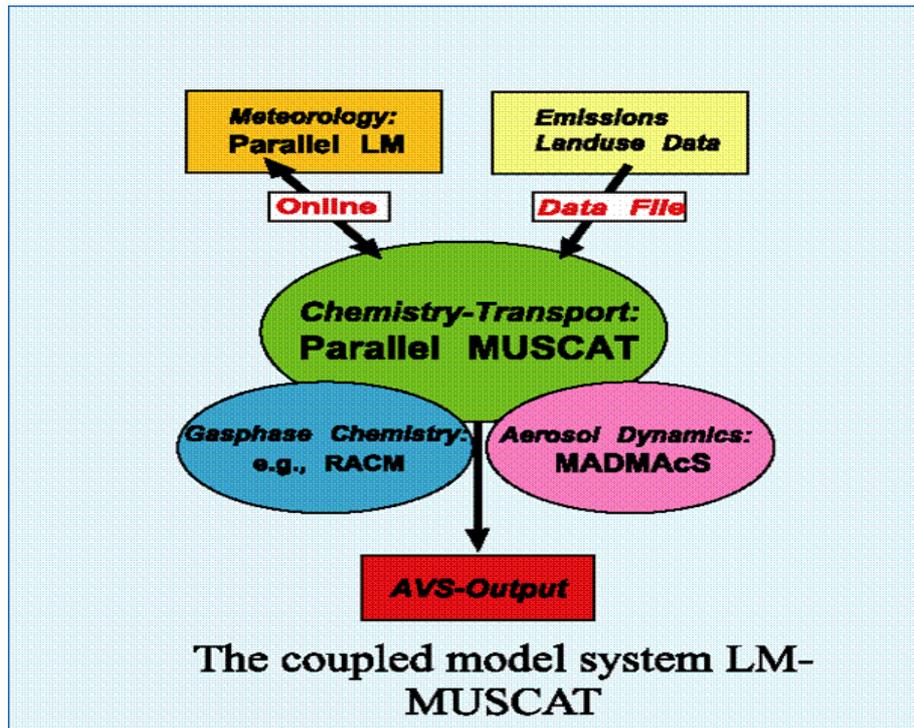
### 2.1 Meteorologie-Modell LM

Primärer Bestandteil des angewendeten Modellsystems ist das operationelle Vorhersagemodell LM (Lokal-Modell, siehe Doms und Schättler, 1999) des Deutschen Wetterdienstes. 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 nicht-hydrostatische und orographiefolgende Gitterpunktsmodell Phänomene unterschiedlichster Größenordnung im Ausmaß von Hoch- und Tiefdruck-Gebieten (Meso- $\alpha$ -Skala: Gitterweite 100 km) bis zu lokalen Windsystemen (Mikro- $\alpha$ -Skala: Gitterweite 100 m). Die vertikale Gitterauflösung des Modells beruht auf einer Einteilung der Atmosphäre in ungefähr 50 orographiefolgende Schichten, wobei die unterste Schicht eine Höhe von ungefähr 65 m aufweist. Damit ist das LM in der Lage, insbesondere 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 und benötigt zur Steuerung seiner Randwerte das auf erdumspannender Skala operierende Global-Modell GME des Deutschen Wetterdienstes. In umgekehrter Richtung ist das LM zur Selbst-Nestung fähig, d.h. es eignet sich für eine schrittweise Verkleinerung des Modellgebietes, verbunden mit entsprechend erhöhter Auflösung und der Erzeugung der steuernden Randwerte (siehe Kapitel 3). So können in einer abgestuften Anwendungskette global oder großskalig kontrollierte Simulationen bis hinab zu einer Auflösung von 100 m 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 LM in zunehmendem Maße die Rolle des meteorologischen Treibers in unterschiedlichsten mesoskaligen Anwendungen.

### 2.2 Chemie-Transport-Modell MUSCAT

Die Berechnung des Transports und der chemischen Umwandlungen für definierte Spurenstoffe in der Atmosphäre erfolgt im Chemie-Transport-Modell MUSCAT (Multi-Scale Atmospheric Transport Model: Wolke und Knoth, 2000; Knoth und Wolke, 1998a). Zu den modellierten dreidimensionalen Transport-Prozessen zählen Advektion und turbulente Diffusion ebenso wie Sedimentation und Deposition (trocken und nass; siehe Kapitel 2.3). Die dafür erforderlichen transportierenden Flüsse, Diffusionskoeffizienten und anderen Parameter bezieht das Modell aus dem meteorologischen Treibermodell (LM), mit dem es online verbunden ist (siehe Kapitel 2.4). 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 (siehe Abbildung 1).



**Abbildung 1:** Chemie-Transport-Modell MUSCAT (Hellmuth, 2005)

Das Gasphasenchemie-Modul RACM (Stockwell et al., 1997) betrachtet 76 reaktive Spurengase in insgesamt 239 Reaktionen. Zu den anorganischen Spezies gehören u.a.  $\text{NO}_x$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{SO}_2$  und  $\text{NH}_3$ ; 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 (siehe REMSAD). Auch andere meteorologische Größen wie beispielsweise Dichte, Temperatur und Feuchte, die Einfluss auf Reaktionsmechanismen haben, werden vom Modell LM geliefert. Das ebenfalls in MUSCAT integrierte Aerosoldynamikmodell MADMACs verwendet eine modale Größenverteilung der Aerosole. Die physikalisch-chemische Bildung und Veränderung der Partikel wird in direkter Wechselwirkung mit der gesamten Gasphasenchemie modelliert (siehe Kapitel 2.3). Auf Grund der Online-Kopplung mit dem Meteorologie-Modell LM laufen die Transport- und Reaktionsvorgänge unter aktuell berechneten Mischungs- und Ausbreitungsbedingungen der Atmosphäre ab.

Das Emissionsmodul von MUSCAT berücksichtigt die anthropogenen Emissionen in Form von Punkt- und Flächenquellen. Die notwendige zeitliche Differenzierung von Jahres-Emissionswerten erfolgt mittels der aktuellen emittentenspezifischen saisonalen und diurnalen Verteilungsfunktionen, so dass die jahres-, wochentags- und tageszeitlichen Schwankungen beschrieben werden können (siehe: CORINAIR; Fath, 2002). Punktquellen werden zusätzlich mit entsprechenden Überhöhungswerten ihrer Emissions-Austrittshöhe versehen. Für starke Punktquellen kann gebietsweise ein feinerer horizontaler Auflösungsgrad gewählt werden, um die nichtlinearen Effekte hoher Konzentrationen (Ketzler und Berkowicz, 2004) zu erfassen (wie in dieser Arbeit für die Kühltürme praktiziert). Die biogenen Emissionen werden in Abhängigkeit von Bewuchs, Temperatur und Tageszeit im Modell generiert (Einzelheiten zur Emissionsmodellierung siehe in Kapitel 4).



Schwefelsäure, die nicht durch Ammoniak gemäß (2) 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:



Dieser Prozess verläuft im allgemeinen langsam, so dass der Reaktionsmechanismus auf überschüssiges, nicht bereits durch Schwefelsäure über Gleichung (2) neutralisiertes Ammoniak angewiesen ist. Außerdem schwankt die Lage des Gleichgewichtes stark in Abhängigkeit von der Temperatur und der Feuchte.

### 4) 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 Sedimentationsgeschwindigkeit wird in Abhängigkeit von der Partikelgröße berechnet, wobei alle sekundären Partikel der Größe  $\text{PM}_{2,5}$  zugeordnet werden. Die trockene Deposition wird über ein Widerstandsmodell aus dem atmosphärischen Turbulenzzustand, der kinetischen Viskosität und der Sedimentationsgeschwindigkeit hergeleitet (siehe: EMEP). Die relative Luftfeuchte greift dabei modifizierend auf die durchschnittliche Partikelgröße jeder Größenklasse ein.

Als Zusammenfassung aller Komponenten, die zum  $\text{PM}_{10}$ -Gehalt beitragen, ergibt sich demnach die Gleichung (7) bzw. das Schema der Abbildung 2:



Primär emittiert	Sekundäre Bildung in fester bzw. flüssiger Phase (Aerosol)
---------------------	---

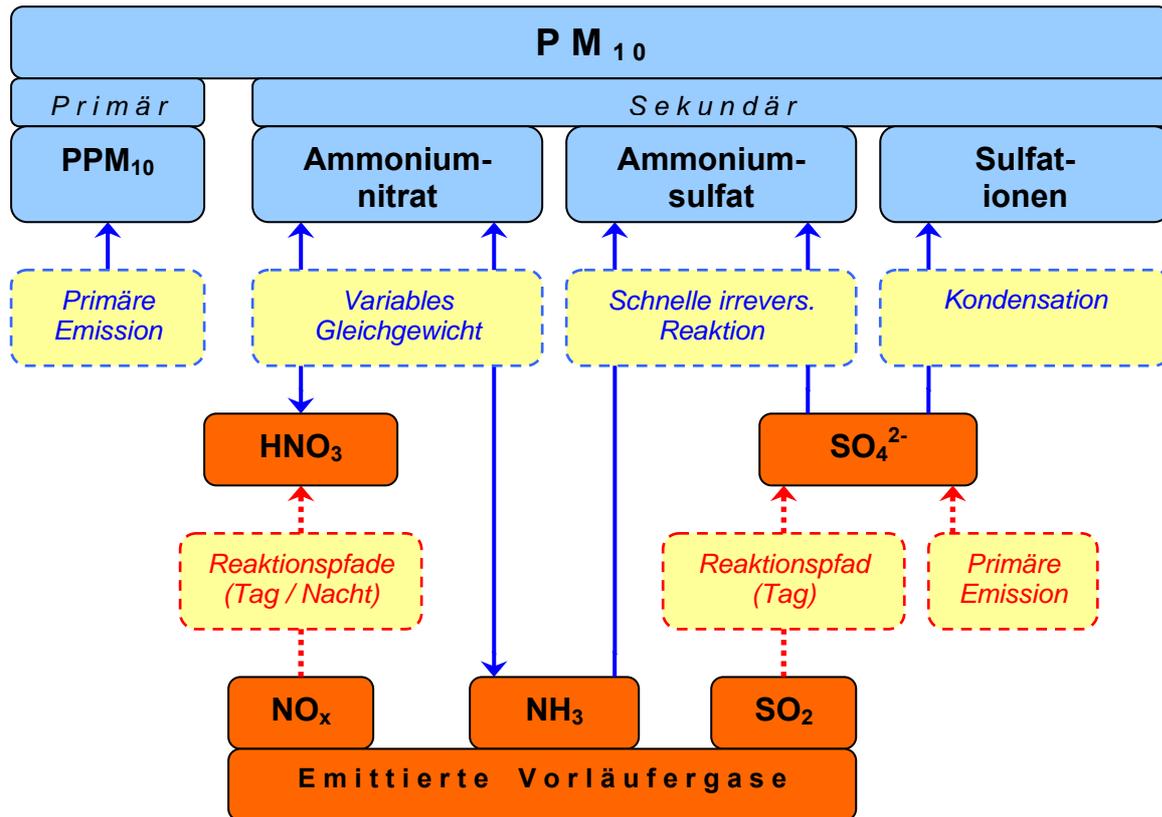


Abbildung 2: Sekundäre Aerosolbildung aus emittierten Vorläufergasen

## 2.4 LM-MUSCAT-Kopplung

Die vom Chemie-Transport-Modell MUSCAT benötigten meteorologischen Größen werden durch das Meteorologie-Modell LM über Online-Kopplung bereitgestellt. Im Unterschied zu vielen anderen Chemie-Transport-Modellen (z.B.: Ebel et al., 1997; Andreani-Aksoyoglu, 2004), die den Zustand der Atmosphäre nur in bestimmten Zeitabständen (z.B. stündlich) aus einer abgespeicherten Datenbasis vermittelt erhalten, stehen bei LM-MUSCAT die meteorologischen Daten in jedem Zeit- und Gitterpunkt zur Verfügung, so dass die Umwandlungs- und Transportvorgänge stets unter aktuellen Bedingungen ablaufen.

Effiziente Transport-Prozeduren nutzen eine eigene Schrittweitensteuerung für die Integrationszeit (IMEX, implizit-explizites Zeitintegrationsschema: Knuth und Wolke, 1998b) und sind auch unabhängig von der horizontalen Auflösung des meteorologischen Modells. Das Windfeld wird divergenzfrei reproduziert und ebenso wie die anderen skalaren Größen in zeit- und ortsinterpolierter Form zur Lösung der Gleichungen für die Spurenstoffe herangezogen. Alle chemischen bzw. aerosoldynamischen Umwandlungen werden implizit und gemeinsam mit den vertikalen Advektions-, Diffusions- und Depositionsvorgängen berechnet, während der horizontale Transport in expliziter Weise einbezogen wird. Anders als in den meisten Chemie-Transport-Modellen werden somit die MUSCAT-Strukturen den hochgradig nichtlinear gekoppelten Gleichungen und den unterschiedlichen Zeitskalen der verschiedenartigen Prozesse gerecht (Anwendungen siehe in: Wolke, Hellmuth et al., 2004; Wolke, Knuth et al., 2004).

Die unabhängigen Modellprozeduren eröffnen die Möglichkeit, in MUSCAT ein eigenes, variabel untergliedertes horizontales Gitter zu wählen (Multiblock-Gittertechnik: Knoth und Wolke, 1998b), womit die räumliche Auflösung der Simulationen (einschließlich Orographie und Topographie) unabhängig von der des meteorologischen Modells LM gebietsweise erhöht werden kann. Von diesem wesentlichen Vorzug des Modells MUSCAT wird in dieser Arbeit Gebrauch gemacht, indem urbane und quellnahe Problemzonen eine abgestufte Verfeinerung der horizontalen Auflösung erfahren (siehe Kapitel 3.2). Darüber hinaus besteht eine gewisse Unabhängigkeit zwischen MUSCAT und LM auch in deren Randwert-Steuerung, d.h. die Konzentrations-Verteilungen und die meteorologischen Größen müssen nicht von derselben übergeordneten Nestungsstufe stammen (Nestungsfreiheit; siehe Kapitel 3.4). Bis in eine festzulegende Höhe weit oberhalb der atmosphärischen Grenz- bzw. Mischungsschicht wird von MUSCAT das vertikale Gitter des Modells LM übernommen (einschließlich der entsprechenden meteorologischen Felder).

Gemeinsam mit LM liegt MUSCAT in parallelisierter Form vor und kann auf mehreren Prozessoren betrieben werden. Diese Rechenzeit sparende Programmausführung findet blockweise (auf das horizontale Modellgebiet bezogen) statt, wobei beide Modellteile separat auf eine vordefinierte Anzahl von Prozessoren verteilt werden. Die dafür erforderliche Block-einteilung des Modellgebietes wird von einem speziellen Zerlegungsverfahren erzeugt. Die Simulationen können in Abhängigkeit von der Komplexität des Szenarios auf einer unterschiedlichen Anzahl von Prozessoren ausgeführt werden.

### 3. Simulationsmethode

#### 3.1 Gebietsnestung

In Anbetracht der Größenunterschiede zwischen dem auszuwertenden Zielgebiet und dem zu erfassenden Einflussbereich wird das Modellsystem LM-MUSCAT genestet angewendet, wodurch sich schrittweise auch die räumliche Auflösung erhöht. Darüber hinaus wird es dem Globalmodell GME des DWD als primärem Meteorologiemodell unterstellt. Die Nestung vollkommen identischer Modelle gewährleistet einen optimalen Informationsfluss von den äußeren Regionen in das zentrale Untersuchungsgebiet, der über die jeweiligen Randwerte durchgesetzt wird. In dieser Arbeit wird eine zweifache Nestung durchgeführt, die mit der globalen Erdatmosphäre startet und sich zunächst Mitteleuropa zuwendet, bevor in der zweiten Stufe auf Sachsen fokussiert wird. Während damit das einheitliche meteorologische Modellgitter eine zweifache Erhöhung der Auflösung erfährt, bestehen für das variabelere Gitter des Chemie-Transport-Modells MUSCAT zusätzliche Möglichkeiten der Verfeinerung, die hier ausgenutzt werden:

**Tabelle 1:** Gebietsnestung (horizontal)

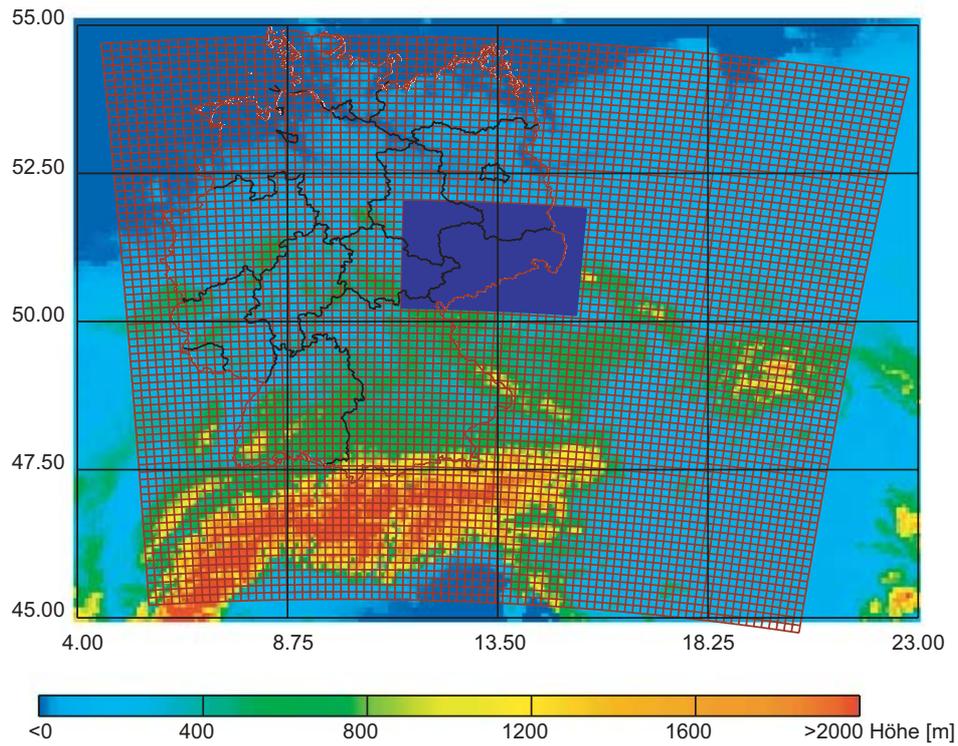
<b>Modellgebiet</b>	Globale Erde → Mitteleuropa → Sachsen		
<b>Gitterauflösung Meteorologie</b>	60 km	16 km	2,8 km
<b>Gitterauflösung Chemie/Transport <sup>1)</sup></b>	÷	8 km	0,7 km

<sup>1)</sup> Maximal erreichter Wert (in Teilgebieten)

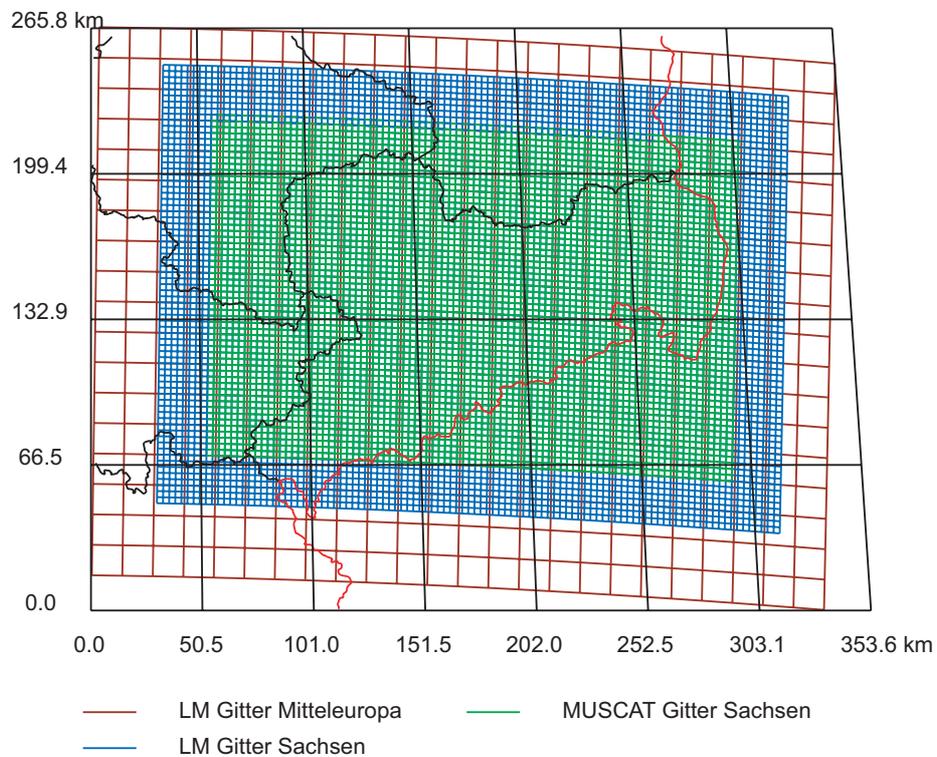
Das Zwischengebiet Mitteleuropa umfasst Deutschland und seine unmittelbaren östlichen und südlichen Nachbarstaaten, speziell Polen und Tschechien. In Abbildung 3 ist das vorgesehene LM-Gitter der Auflösung 16 km zusammen mit dem darin eingebetteten Modellgitter für Sachsen dargestellt. Das MUSCAT-Gitter für Mitteleuropa übernimmt zunächst das LM-Gitter (16 km), um in der zentralen Gebietshälfte, die auch Sachsen enthält, auf die feinere Auflösung (8 km) überzugehen (in Abbildung 3 nicht gezeigt).

Die genaue Lage des Modellgebietes Sachsen bzw. des zugehörigen MUSCAT-Auswertungsgebietes innerhalb des Gitters für Mitteleuropa geht aus Abbildung 4 hervor. Dabei ist zu erkennen, dass das MUSCAT-Gebiet Sachsen kleiner als das entsprechende LM-Gebiet gewählt ist. Der eingeräumte Rahmen von 8 Zellen Breite dient der abgestuften Vermittlung der außen angrenzenden Größen vom Mitteleuropa-Gitter als Randwerte an die im Innern ablaufende Simulation (Nudging). Außerdem ist in dieser Abbildung als äußerstes Gitter ein km-Netz gezeigt, das im Gitterabstand (nicht jedoch in Form und Lage) etwa in der Größenordnung des globalen GME-Netzes liegt.

### 3.1 Gebietsnestung



**Abbildung 3:** Nestung des Modellgebietes Sachsen (blau) im Modellgebiet Mitteleuropa (braun); mit regulärem sphärischen Erdnetz (schwarz)

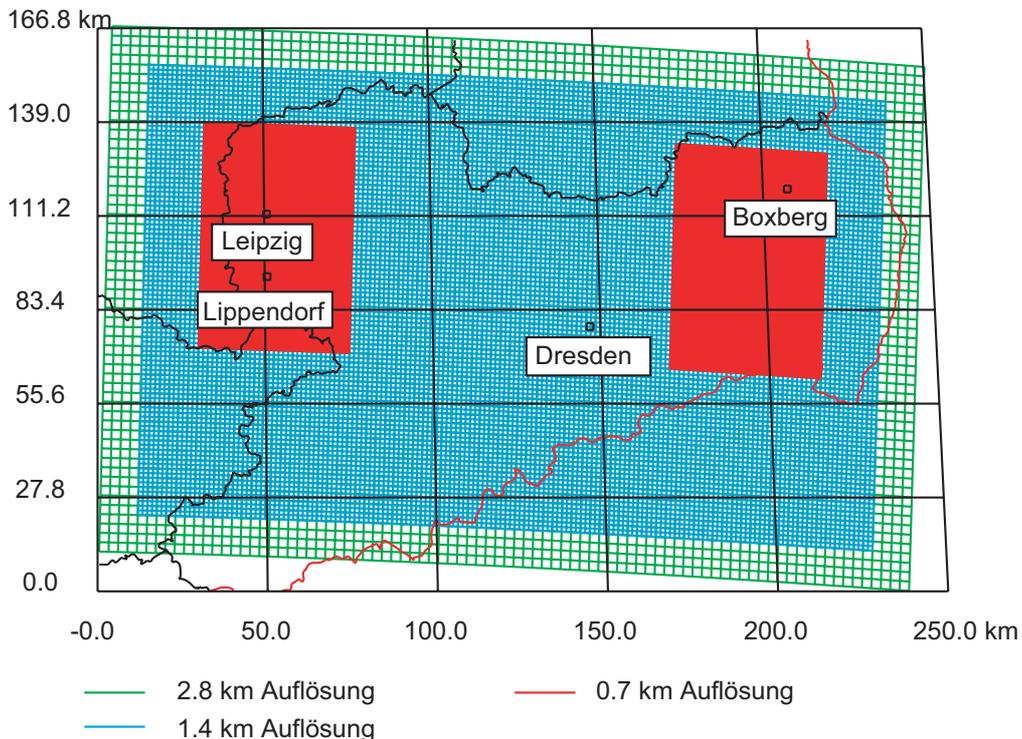


**Abbildung 4:** MUSCAT-Gitter Sachsen (grün) innerhalb der LM-Gitter für Sachsen (blau) und Mitteleuropa (braun); mit km-Netz (schwarz)

### 3.2 Modellgebiet Sachsen

#### *Horizontales Gitter:*

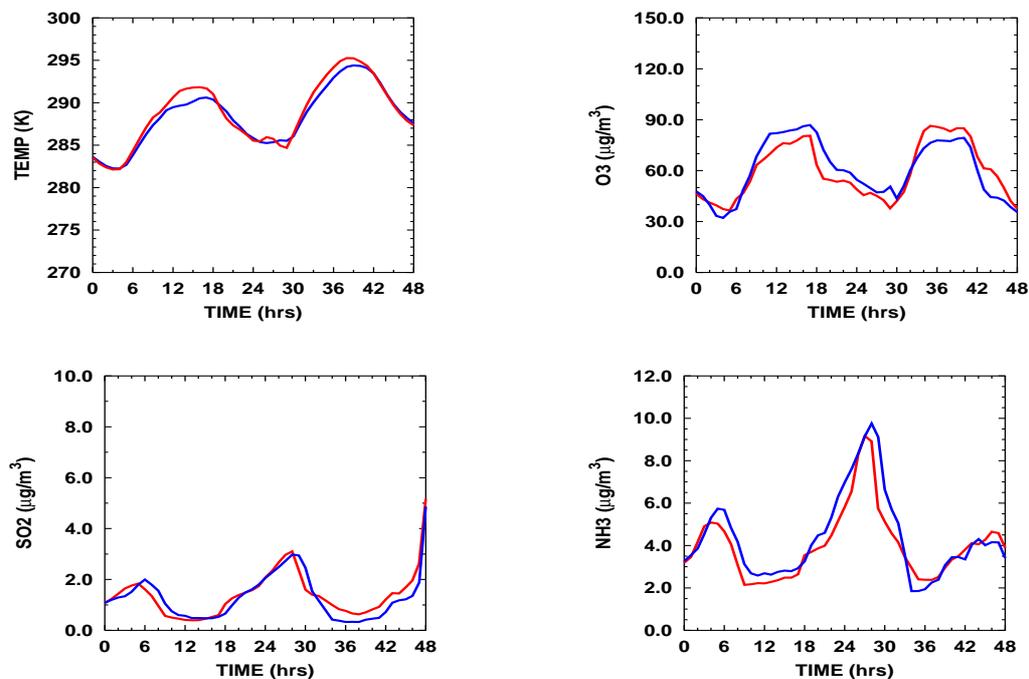
Das in Abbildung 4 grün markierte Untersuchungsgebiet Sachsen ist in Abbildung 5 einschließlich der weiteren Gitterverfeinerung dargestellt. Das Gebiet umfasst die Fläche des Landes Sachsen (mit Ausnahme des äußersten Südzipfels), wobei im Westen eine schmale Zone aus Sachsen-Anhalt (Halle, Merseburg, Zeitz) und Thüringen (Altenburg, Gera) einbezogen wurde. Es ist ersichtlich, dass die Gitterauflösung von außen nach innen in zwei Stufen erhöht wurde: Zunächst ist außen ein Rahmen von je 4 Zellen der Breite 2,8 km belassen, der dem einheitlichen und etwas umfangreicheren Gitter des Meteorologie-Modells angehört. Im Innengebiet ist eine halbierte Gitterstruktur mit 1,4 km Zellengröße gewährleistet, wobei zwei größere Teilgebiete von ca. 45 km × 68 km Ausdehnung, die die Großfeuerungsanlagen (GFA) Lippendorf und Boxberg umgeben, mit einer nochmals halbierten Größe von 0,7 km ausgestattet sind. Das westliche dieser Teilgebiete enthält auch den Großraum Leipzig als potentiellen Hauptbetroffenen der Emissionen, während sich das östliche bis nahe an Dresden erstreckt. Die gestaffelte, in den Problemzonen stark erhöhte horizontale Auflösung bildet die Grundlage aller Transport-, Ausbreitungs- und Reaktions-Berechnungen für die betrachteten Gasspezies und Aerosole. Die dazu erforderlichen meteorologischen Größen wie Windgeschwindigkeit, Windrichtung, Luftdichte, Temperatur, Feuchte und Austauschkoefizienten werden ebenfalls auf diesem Gitternetz bereitgestellt, indem räumlich und zeitlich lineare Interpolationen auf dem regelmäßigen Meteorologie-Gitter angewendet werden.



**Abbildung 5:** Untersuchungsgebiet Sachsen (grün) mit spezieller Gitterverfeinerung (grün/blau/rot); mit km-Netz (schwarz)

*Vertikales Gitter:*

Die Teilmodelle LM und MUSCAT arbeiten mit derselben vertikalen Gitterstruktur. Diese ist bodenfolgend und weist eine variable, nach oben zunehmende Schichthöhe auf, beginnend mit ca. 65 m unmittelbar über dem Boden. Damit sind die ersten 1000 m der Atmosphäre durch ungefähr 9 Schichten repräsentiert. Die untersten beiden Koordinatenebenen für meteorologische Größen liegen demnach in Bodenhöhe sowie ca. 30 m darüber. In dieser Höhe sind interne Grenzschichten (Stull, 1988), die im Gleichgewicht mit dem jeweiligen Untergrund stehen, voll ausgebildet, da die minimale Streichlänge (Fetch) bzw. die Gitterweite im vorliegenden Fall von der Größenordnung 1 km ist. Die Formierung spezifischer Gleichgewichtsprofile erfolgt für die einzelnen Variablen über stabilitäts- und untergrundabhängige Ähnlichkeitsrelationen bzw. Randbedingungen durch das Modell. Temperatur, Windgeschwindigkeit, Feuchte, Turbulenzkoeffizienten, Konzentrationen, Stoffflüsse und andere Parameter passen sich dadurch der jeweiligen Bodenbeschaffenheit an und spiegeln im Gittergerüst die untere Grenzschicht und deren Austauschbedingungen ausreichend gut wider. Eine ähnliche Struktur der Modellschichten findet sich deshalb in vielen mesoskaligen Anwendungen (Ackermann, 1997; Ebel et al., 1997, Renner und Münzenberg, 2003; Andreani-Aksoyoglu, 2004). Unmittelbar verbunden mit der Geometrie des Rechengitters ist die Frage nach der Vergleichbarkeit von an einzelnen Messpunkten bestimmten Größen mit den entsprechenden simulierten Größen als Zellmittelwerten. Die Problematik dieser Aufgabe ist allgemein bekannt (Ebel et al., 1997; Göldner et al., 1997). Die Untersuchungen dazu weisen nach, dass eine verbesserte horizontale Auflösung eindeutig zu befriedigenderen Resultaten führt als eine weitere Verfeinerung des vertikalen Gitters. Abbildung 6 zeigt beispielhaft an eigenen Tests, dass eine Erhöhung der vertikalen Auflösung nur wenig Auswirkung auf die simulierten Konzentrationswerte in der untersten Modellschicht hatte und auch keinen einheitlichen Trend erkennen ließ. Die untersten modellierten Werte gelten mithin weitestgehend als repräsentativ über die jeweilige Schichthöhe. Ausnahmen bilden sicher unmittelbar in Straßenschluchten aufgestellte Messcontainer.



**Abbildung 6:** Tagesgang mehrerer simulierter Größen am 2./3.6.2002 am Ort Melpitz (Sachsen) für verschiedene Vertikalgitter (bzw. Höhen über Grund). Blau: 40 Schichten (34 m); rot: 50 Schichten (4 m). Helmert (2005)

In Ergänzung zu Tabelle 1 ergibt sich folgende Gitterstruktur im Modellgebiet Sachsen:

**Tabelle 2:** Gitterstruktur im Untersuchungsgebiet Sachsen

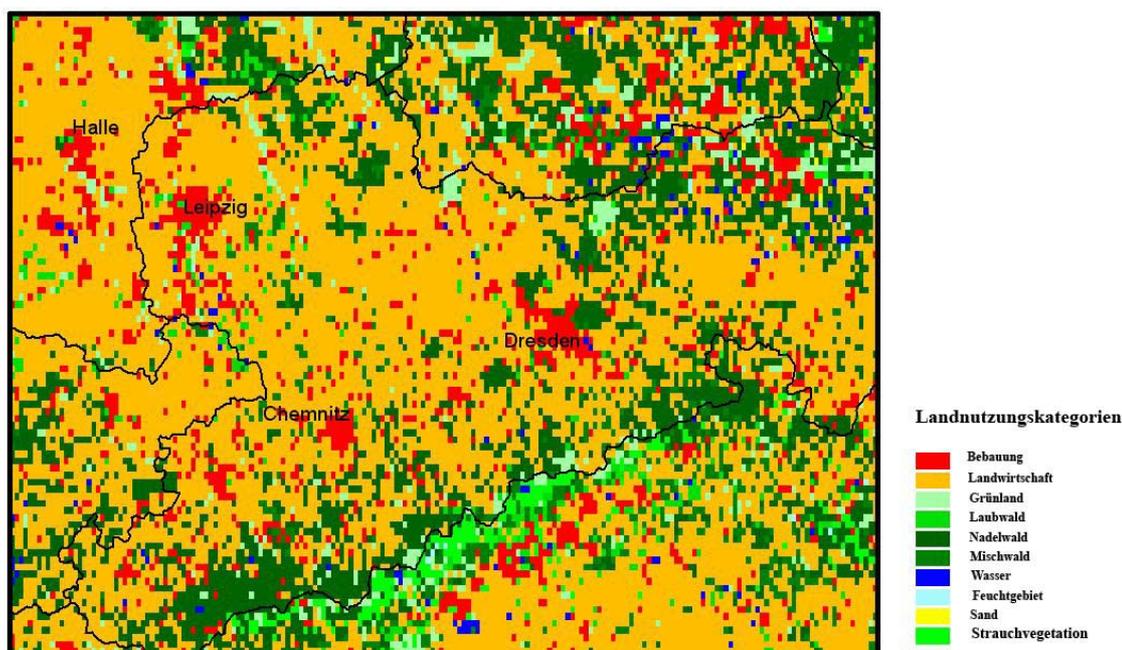
Modell	Horizontale Gitterauflösung			Schichtenzahl (unterste Schichtdicke) <sup>1)</sup>	Modell-Obergrenze
	Rahmen	Innen	Teilgebiete um Lippend., Boxb.		
<b>LM</b>	2,8 km	2,8 km	2,8 km	40 (60 m)	15,0 km
<b>MUSCAT</b>	2,8 km	1,4 km	0,7 km	16 (60 m)	3,5 km

<sup>1)</sup> Modellhöhe für die Variablen ist jeweils in Schichtmitte

#### Untergrundstruktur:

Die für die Modellanwendung notwendigen topographischen Basisdaten wie beispielsweise die Orographie und Landnutzungstypen sind Bestandteile des peripheren Umfeldes der entsprechenden Modelle GME, LM (jeweils DWD Offenbach) und MUSCAT (IfT Leipzig). Die in Abbildung 7 dargestellte Gliederung des Untersuchungsgebietes nach Landnutzungstypen dient als Basis für alle meteorologischen und Chemie-Transport-Berechnungen hinsichtlich der Einflüsse des Untergrundes, z.B. über die aerodynamische Rauigkeit, Albedo, Wärmekapazität, Bodenfeuchte, Depositionsgeschwindigkeit, biogene Emission usw.

#### Landnutzung auf der Basis TFS Europa Version 2.4



**Abbildung 7:** Untersuchungsgebiet Sachsen mit Landnutzungsstruktur im 1-km-Raster

### 3.3 Zeitfenster, Szenarien

In Analogie zur räumlichen Nestung der Modell-Anwendung wurde auf Grund der Unterschiede in der Rechenzeit, Abspeicherung und Steuerungs-Reihenfolge eine Staffelung der modellierten Zeitabschnitte des Bezugsjahres 2002 vorgenommen:

**Tabelle 3:** Zeitfensterstaffelung

<b>Modellgebiet</b>	Globale Erde → Mitteleuropa → Sachsen
<b>Zeitfenster</b>	Bezugsjahr 2002 → 5-wöchige Sommer-/Winter-Perioden → Szenarien

Die zusammenhängenden Mitteleuropa-Simulationen in den Sommer- und Winterperioden, die zur Ermittlung der Hintergrundbelastung für Sachsen dienen, sollten möglichst viele typische und für das Auswertungsziel maßgebliche Szenarien bereithalten. Dazu ist ein Zusammentreffen folgender beobachtbarer Sachverhalte entscheidend zu berücksichtigen:

a) *Typische Sommer- bzw. Winter-Wetterlage:*

Für die Festlegung der Merkmale einer typischen meteorologischen Situation wurden die Tagesmittelwerte von Temperatur, Feuchte, Niederschlag und Windgeschwindigkeit an der Mess-Station Collm herangezogen:

**Tabelle 4:** Typische meteorologische Situationen

Periode	Temperatur	Feuchte	Niederschlag	Windgeschw.
<b>Sommer</b>	hoch	niedrig	wenig	gering
<b>Winter</b>	tief	hoch	wenig	gering

b) *Windrichtungsmäßige Beeinflussung urbaner Zentren und Mess-Stationen durch die GFA:*

Die Windrichtungen für eine mögliche Beeinflussung verschiedener Stations-Orte durch die Großfeuerungsanlagen (GFA) ergeben sich aus den geografischen Beziehungen:

**Tabelle 5:** Notwendige Windrichtungen für Schadstofftransport

GFA	Immissionsort				
	Leipzig	Collm	Görlitz	Dresden	Hoyerswerda
<b>Boxberg</b>			Nordwest	Nordost	Ost
<b>Lippendorf</b>	Süd	West			

c) *Beobachtung von Hot-Spot-Immissionen an den Mess-Stationen:*

Ein mehrmaliges Erreichen oder Überschreiten von PM<sub>10</sub>-Tagesmittelwerten in Höhe von 30 µg/m<sup>3</sup> an den Stationen Leipzig und Görlitz innerhalb der auszuwählenden Perioden wird vorausgesetzt.

Nach einer Überschau des Bezugsjahres 2002 anhand der festgelegten Merkmale fiel die Entscheidung auf zwei je 5-wöchige Perioden im Sommer und Winter, die zusammenhängend

unter Zugrundelegung der realen bzw. mittleren GFA-Emissionen simuliert wurden. Innerhalb dieser Perioden wurden anschließend relevante Situationen gesucht und eingeschränkte, je 8-tägige Episoden festgelegt, die zum Gegenstand für die Referenz-Simulationen ohne GFA-Emissionen gemacht wurden. Aus den Differenzen zwischen den Simulationen mit und ohne GFA werden schließlich die Analysen gefertigt (siehe Kapitel 6).

**Table 6:** Simulierte Sommer/Winter-Perioden 2002

<b>Sommerperiode</b> - mit GFA - ohne GFA	11. August – 15. September	36 Tage
	15. August – 22. August	8 Tage
<b>Winterperiode</b> - mit GFA - ohne GFA	11. November – 16. Dezember	36 Tage
	23. November – 30. November	8 Tage

Die Auswertung der Simulationen ergab eine Reihe von typischen, wiederkehrenden Tagesabläufen, von denen vier ausgewählt wurden. Dabei wurde zugunsten einer ausführlicheren Sommerauswertung nur eine der sich ähnelnden Wintersituationen in Betracht gezogen:

**Table 7:** Ausgewählte analysierte Tage

Szenario	Datum	Charakteristik
<b>S1</b>	15.08.2002	schwacher Nordwind, hohe Temp.
<b>S2</b>	18.08.2002	schwacher Ostwind, sehr hohe Temp.
<b>S3</b>	20.08.2002	mäßiger Südostwind, sehr hohe Temp.
<b>W1</b>	24.11.2002	mäßiger Südwind, niedrige Temp.

### 3.4 Modellsteuerung

Das Modellsystem LM-MUSCAT ist entsprechend der Gebietsuntergliederung mehrfach mit unterschiedlicher Auflösung und Ansteuerung anzuwenden. Die Online-Kopplung zwischen dem Meteorologiemodell LM und dem Chemie-Transport-Modell MUSCAT gewährleistet auf dem jeweiligen Modellgebiet die maximal mögliche Verwertung der aktuellen meteorologischen Felder für die Berechnung der Konzentrationsverteilungen. Die Meteorologie liefert dabei genaue Angaben zum Tagesgang aller wesentlichen Größen, die beispielsweise den Wind, die Temperatur, die Turbulenz, die Mischungsschicht oder die Wolken charakterisieren.

Unabhängig von der engen Verbindung der Modelle kann die horizontale Gitterauflösung des Chemie-Transport-Modells weiter erhöht werden. Außerdem lassen sich beide Modelle vollkommen unabhängig voneinander steuern, d.h. jedes Modell benötigt bei einer Nestung

nur die Daten zu den modelltypischen aktiven Größen (siehe Tabelle 8). Die Steuerung der Modelle versteht sich dabei als passive Unterstützung der Berechnungen, indem die Verteilungen der einzelnen Größen über die Modellgrenzen hinaus fortgesetzt werden durch diejenigen Werte, die vorher im größeren Gebiet mit geringerer Auflösung und zum gleichen Zeitpunkt bereits berechnet worden sind. Damit wird hauptsächlich dem Fall Rechnung getragen, dass außerhalb geprägte Luftmassen in das Modellgebiet vordringen können (Advektion). Deshalb erfordert die Nestung eine sequentielle Anwendung des Modellsystems von außen nach innen.

**Tabelle 8:** Nestungsprinzip des Modellsystems LM-MUSCAT

Höhere Nestungsstufe	Randwert-Steuerung	Niedrigere Nestungsstufe	
meteorologische Größen (LM)	→	meteorologische Größen (LM)	
↓		↓	Online-Kopplung
Konzentrationsverteilungen (MUSCAT)	→	Konzentrationsverteilungen (MUSCAT)	

Dieses Grundmuster der Steuerung wird im vorliegenden Fall der Zweifachnestung wie folgt praktiziert (vergleiche zusammenfassende Tabelle 9):

*1.) Simulation in Mitteleuropa (Hintergrund-Konzentrationen für Sachsen):*

Zur Ermittlung der für das Modellgebiet Sachsen geltenden zeit- und ortsveränderlichen Hintergrundkonzentrationen, die von außerhalb in das Gebiet eingetragen werden, wird LM-MUSCAT auf dem Gebiet Mitteleuropa angewendet. Das Modell nutzt dafür den gesamten gas- und aerosolchemischen Mechanismus, der auch im eigentlichen Untersuchungsgebiet Sachsen Anwendung findet. Die Simulationen lösen die meteorologischen Felder mit einem Raster von 16 km und die Konzentrationsverteilungen mit 8 km auf. Dazu erhalten beide Modelle Unterstützung an den Außenrändern von Mitteleuropa: Die meteorologischen Eigenschaften der Atmosphäre am Rande Mitteleuropas werden durch Daten bestimmt, die das global operierende Modell GME im Abgleich mit Beobachtungswerten geliefert hat (so genannte Reanalysedaten). Damit ist sichergestellt, dass die Meteorologie in Mitteleuropa weitgehend realitätsnah abläuft. Die Berechnung der zugehörigen Konzentrationsverteilungen erfolgt dagegen autochthon auf der Basis der im Gebiet vorliegenden Emissionen unterschiedlichster Art, die aktuell für Europa ermittelt worden sind (siehe EMEP). Je eine 5-wöchige Sommer- bzw. Winterperiode werden auf diese Weise für Mitteleuropa zur Hintergrundbestimmung für Sachsen simuliert.

*2.) Simulation in Sachsen (Konzentrationsverteilung in Sachsen):*

Die Simulation der meteorologischen Entwicklung und der Verteilung der chemisch veränderlichen Luftbestandteile vollzieht sich in Sachsen prinzipiell genauso wie im größeren Gebiet Mitteleuropa. Unterschiede ergeben sich allerdings in speziellen Aspekten: (a) Die

räumliche Auflösung sowohl der meteorologischen wie auch der chemischen und Transport-Berechnungen ist um ein Vielfaches genauer; die Auflösung der Meteorologie beträgt 2,8 km, die der Konzentrationen erreicht 0,7 km. (b) Die verwendeten Emissionsquellen beinhalten neben den sächsischen Flächenquellen, die hier in einem einheitlichen Raster von 1,4 km aufbereitet wurden, auch sämtliche existierenden Punktquellen, die dem horizontal variablen Gitter entsprechend auf Flächenelemente bis hinab zu 0,7 km × 0,7 km zugeordnet werden (siehe Kapitel 4.3). Nur in den Randgebieten jenseits der sächsischen Grenzen wird auf die gröber aufgelösten EMEP-Emissionen zurückgegriffen. (c) Während die meteorologische Entwicklung im Untersuchungsgebiet Sachsen wiederum durch die GME-Reanalysedaten von außen kontrolliert wird (vgl. Mitteleuropa), erfolgen sowohl die Initialisierung als auch die Bereitstellung von Hintergrundwerten am Außenrand für jede Spezies mittels der in Mitteleuropa berechneten Verteilungen aus Schritt 1. Diese selbst-konsistenten, windrichtungsabhängigen Profile werden im 1-Stunden-Takt zur Verfügung gestellt. Da Simulationen mit höherer räumlicher Auflösung potenzartig gesteigerte Rechenzeiten beanspruchen, wurden die realisierten Zeiträume auf je 8-tägige Episoden beschränkt. Diese Rechnungen waren sogar zweifach auszuführen: mit und ohne Berücksichtigung der hier betrachteten Hauptemittenten (GFA Boxberg und Lippendorf).

**Tabelle 9:** Schema der Modell- bzw. Gebietsnestung

	Global	Steuer.	Mittel-Europa	Steuerung	Sachsen
<b>Meteorol. Modell</b>  Horiz. Auflös. Vert. Auflös. <sup>1)</sup>	GME-Reanalyse-Daten  60 km ca. 60 m	→ GME-Randwerte <sup>2)</sup>	LM  16 km ca. 60 m	...→ GME-Randwerte <sup>2)</sup>	LM  2,8 km ca. 60 m
<b>Online-Kopplung</b>			↓		↓
<b>Chemie-Transport-Modell</b>  Horiz. Auflös. Vert. Auflös. <sup>1)</sup>	÷	→ Hintergrundprofile	MUSCAT  16...8 km ca. 60 m	→ MUSCAT-Randwerte <sup>3)</sup>	MUSCAT  2,8...1,4...0,7 km ca. 60 m
<b>Emission</b>  Horiz.Auflös.	÷		EMEP  50 km		Punktquellen, Flächenquell. (1,4 km), EMEP (50 km) <sup>4)</sup>
<b>Zeitintervall</b>	Referenzjahr 2002		11.08.-15.09. 11.11.-16.12.		15.08.-22.08. <sup>5)</sup> 23.11.-30.11. <sup>5)</sup>

<sup>1)</sup> unterste Schicht, entsprechende Modellhöhe ca. 30 m

<sup>2)</sup> 6-stündliche Datenübergabe

<sup>3)</sup> 1-stündliche Datenübergabe

<sup>4)</sup> hier nur außerhalb der Grenzen Sachsens verwendet

<sup>5)</sup> doppelte Simulationen (mit/ohne GFA-Emissionen)

## 3.4 Modellsteuerung

## 4. Emissionen

### 4.1 Kühlturm-Emissionen

Die an den beiden Standorten der Großfeuerungsanlagen (GFA) Boxberg und Lippendorf bestehenden 3 bzw. 2 Rauchgasanlagen sind so genannte Naturzug-Kühltürme und weisen folgende auf die Austrittsöffnung bezogene Bau- und Betriebsmerkmale auf (Heinze, 2005):

**Tabelle 10:** Kühlturm- und Rauchschwaden-Merkmale

Standort	Boxberg	Boxberg	Boxberg	Lippend.	Lippend.
Anlage	III N	III P	IV	R	S
Höhe (m)	113	113	175	175	175
Durchmesser (m)	48	48	73	73	73
Temperatur (°C) <sup>1)</sup>	37	37	37	34	34
Geschwind. (m/s) <sup>1)</sup>	3,95	3,95	4,60	4,45	4,45

<sup>1)</sup> von den Autoren ermittelte Durchschnittswerte

Diese vier Eigenschaften bestimmen die unter gegebenen meteorologischen Bedingungen erreichte Endhöhe der Rauchgasfahne (siehe Kapitel 4.2). Für die Überhöhungsberechnungen des Modells sowie für die Bereitstellung der Emissionsflüsse können die baugleichen Anlagen eines jeden Standortes zusammengefasst werden, da die Größe der Modellgitterzellen ca. 700 m beträgt und den gegenseitigen Abstand übersteigt. Dabei wurden jahreszeitlich differenzierte Mittelwerte der täglichen Emissionen gebildet und längere Ausfallzeiten durch die entsprechenden Jahresmittelwerte ersetzt, so dass die Ergebnisse den mittleren Betriebszustand der GFA widerspiegeln und zur Verallgemeinerung herangezogen werden können. Datengrundlage für die Mittelung und Zusammenfassung sind die dokumentierten Tageswerte des Rauchgasvolumenstroms und der Schadstoffdichte der einzelnen Bestandteile (Bereitstellung auch der Mittelwerte durch den Auftraggeber). Somit ergeben sich die folgenden mittleren Emissionswerte, getrennt nach Anlage, Periode und chemischem Bestandteil.

**Tabelle 11:** Kühlturm-Emissionswerte 2002 (Mittelwerte <sup>1)</sup>)

Emission (kg/h)	Boxberg III N + III P		Boxberg IV		Lippendorf R + S	
	Sommer	Winter	Sommer	Winter	Sommer	Winter
CO	592	518	210	153	139	106
SO <sub>2</sub> <sup>2)</sup>	652	659	558	592	2008	2125
NO <sub>x</sub>	698	690	381	384	824	845
Staub	30	32	12	12	64	64

<sup>1)</sup> Bereitstellung durch Auftraggeber

<sup>2)</sup> 12% Masseanteil davon wird in Form von Sulfationen emittiert (lt. Auftraggeber)

Die in vorstehender Tabelle auffallenden Unterschiede in der CO-Emission an allen Standorten ergeben sich auf Grund der starken Schwankungsbreiten des gemessenen CO-Gehaltes. Die NO<sub>x</sub>-Emissionen wurden im üblichen Verhältnis 90% zu 10% auf NO und NO<sub>2</sub> aufgeteilt, während die Staub-Emissionen gemäß den Vorgaben des Auftraggebers zu 100% der Größenklasse < 10 µm (d.h. PPM<sub>10</sub>) zugeordnet wurden.

## 4.2 Kühlturm-Überhöhung

In Ergänzung der von MUSCAT standardmäßig angewendeten Überhöhungsfunktionen für Schornsteine (TA Luft) wurde das speziell für die hier betrachteten Naturzug-Kühltürme als VDI-Richtlinie (siehe VDI 3784, Blatt 2) geschaffene S/P-Modell (Schatzmann und Policastro, 1984) nutzbar gemacht. Das Modell berechnet die Endhöhe der mit dem Wasserdampfschwaden vermischten Rauchgase nach Austritt aus dem Kühlturm und ihrer horizontalen Einlenkung bei Erreichen des Gleichgewichts mit den meteorologischen Umgebungsbedingungen. Dabei werden die Einflüsse sowohl der Kühlturm-Eigenschaften (Geometrie, Austrittstemperatur und -geschwindigkeit nach Tabelle 10) als auch der atmosphärischen Profile (Wind, Temperatur, Feuchte) berücksichtigt.

Das Modell geht von den physikalischen Erhaltungsgleichungen für Impuls, Energie und Feuchte aus und bezieht die turbulente Vermischung mittels Parametrisierung ein. Die Validierung erfolgte anhand einer Vielzahl von Labor- und Feldmessungen (Schatzmann und Policastro, 1984). Das Modell wurde in die aktuelle Anwendung integriert, so dass die lokale meteorologische Situation die Kühlturmüberhöhung bestimmt. In Abhängigkeit vom höhenintegrierten Temperaturprofil erfolgt eine Begrenzung der maximalen Schwadenhöhe auf 800 m bei stabiler bzw. 1100 m bei neutraler Schichtung (gemäß den Ausbreitungsklassen der TA Luft). Darüber hinaus wird vom Modell die Überhöhungsberechnung konservativ ausgelegt (begrenzt), wenn numerische Abbruchkriterien dies fordern.

Der prinzipielle Einfluss von Windgeschwindigkeit, Stabilität und relativer Feuchte auf die berechnete effektive Emissionshöhe wird aus den Tabellen 12 und 13 ersichtlich. Zur Vereinfachung wurde dabei von vertikal konstanten Werten dieser Einflussgrößen ausgegangen sowie von folgenden Parametern für den Kühlturm: 175 m Höhe, 73 m Durchmesser, 37°C Austrittstemperatur und 4,2 m/s Austrittsgeschwindigkeit. Deutlich tritt der starke Einfluss der Windgeschwindigkeit zutage. In den Modellrechnungen selbst findet der tatsächliche, veränderliche Profilverlauf innerhalb der durchlaufenen Überhöhungsstrecke Berücksichtigung.

**Tabelle 12:** Abhängigkeit der effektiven Emissionshöhe (in m) von der thermischen Stabilität (vertikal konstant) und Windgeschwindigkeit für 12°C Bodentemperatur und 65% relative Feuchte (konstant)

Stabilität	Windgeschwindigkeit				
	1 m/s	2 m/s	5 m/s	10 m/s	20 m/s
<b>+2 K/km (sehr stabil)</b>	615	499	396	336	259
<b>- 2 K/km (stabil)</b>	707	552	423	353	268
<b>- 6 K/km (gering stabil)</b>	800 <sup>1)</sup>	661	471	378	280

<sup>1)</sup> Begrenzung

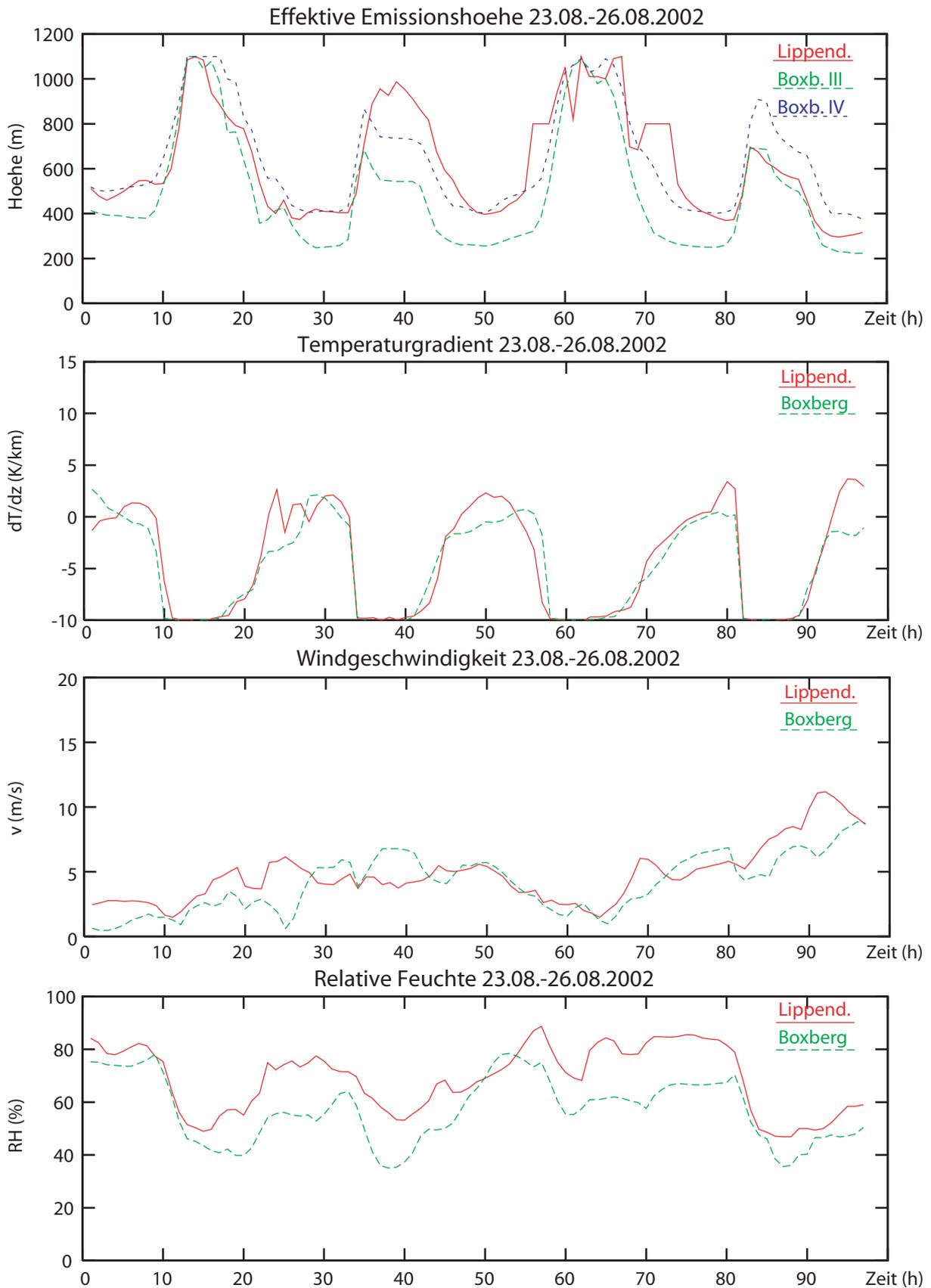
**Table 13:** Abhängigkeit der effektiven Emissionshöhe (in m) von der relativen Feuchte (vertikal konstant) und Windgeschwindigkeit für 12°C Bodentemperatur und -2 K/km thermische Stabilität (konstant, stabil)

Relative Feuchte	Windgeschwindigkeit				
	1 m/s	2 m/s	5 m/s	10 m/s	20 m/s
65 %	707	552	423	353	268
80 %	800 <sup>1)</sup>	630	475	390	292
95 %	800 <sup>1)</sup>	800 <sup>1)</sup>	627	511	389

<sup>1)</sup> Begrenzung

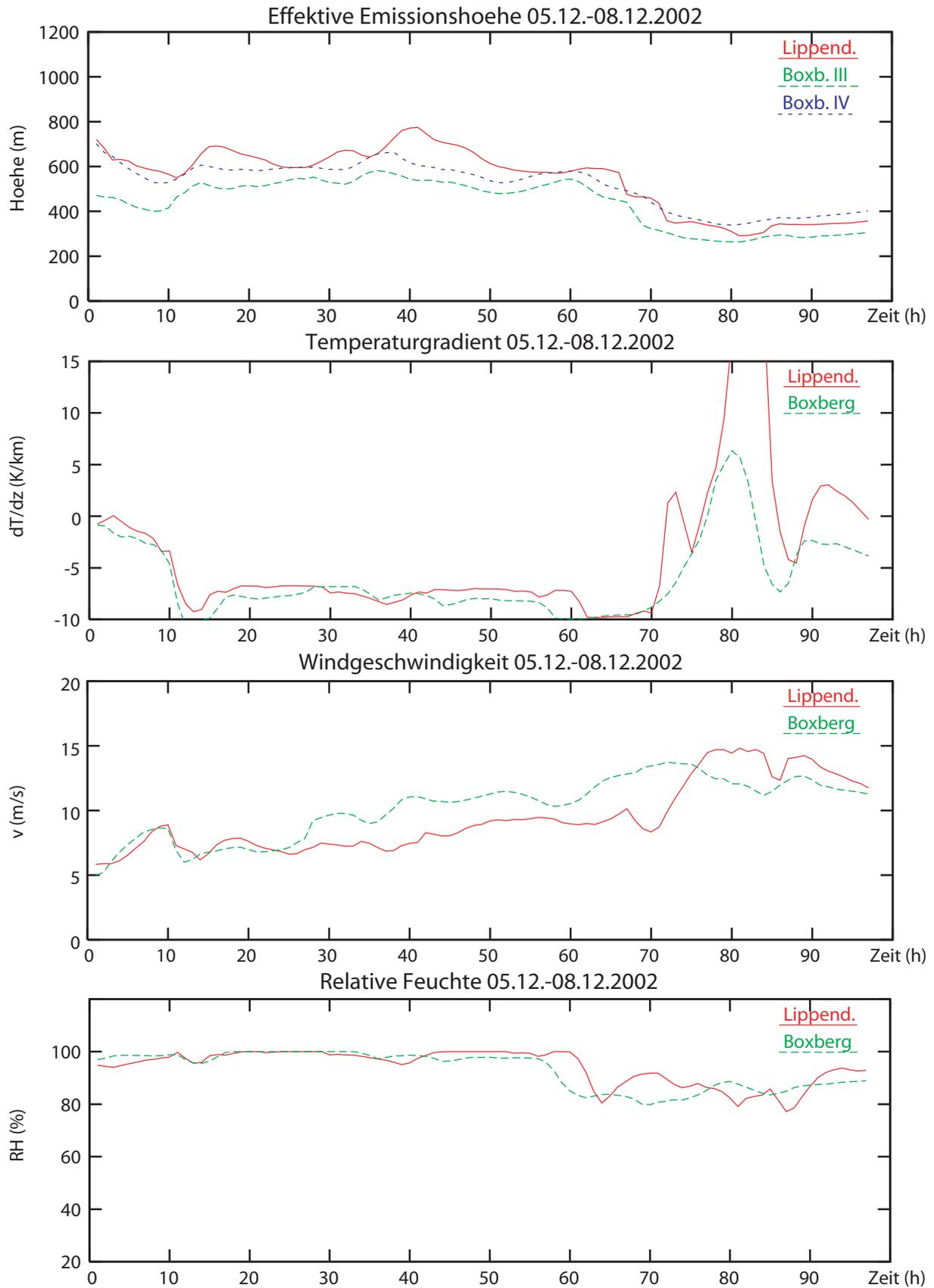
Als Beispiel für das Zusammenwirken der atmosphärischen Parameter wird in den Abbildungen 8 und 9 der reale Zeitverlauf verschiedener Größen für die Kühltürme Boxberg und Lippendorf während eines simulierten Sommerintervalls (23.08.-26.08.2002) und Winterintervalls (05.12.-08.12.2002) wiedergegeben. Die Abbildungen zeigen die erreichten effektiven Emissionshöhen an den jeweiligen Standorten gemeinsam mit den in Bauwerkshöhe herrschenden aktuellen Temperaturgradienten, Windgeschwindigkeiten und Feuchtewerten. Die tageszeitlich bedingten starken Schwankungen der Emissionshöhe im Sommer sind verständlich, da ein regelmäßiger Wechsel von stabiler und neutraler Schichtung stattfindet. Im Winter sind diese Unterschiede nicht so stark ausgeprägt, allerdings zeigen sich auch hier die größten Überhöhungen bei neutraler Schichtung ( $dT/dz = -10$  K/km). Die beiden ungleich hohen Kühltürme in Boxberg weisen wie erwartet einen nahezu parallelen Verlauf der effektiven Emissionshöhen auf, während sich die Differenzen zwischen den baugleichen Kühltürmen Lippendorf und Boxberg IV auf die lokalen Unterschiede in der Windgeschwindigkeit, Temperatur und relativen Feuchte zurückführen lassen.

## 4.2 Kühlturm-Überhöhung



**Abbildung 8:** Zeitlicher Verlauf der effektiven Emissionshöhen der Kühltürme in Boxberg und Lippendorf sowie der Temperaturgradienten, Windgeschwindigkeiten und relativen Luftfeuchten in Bauwerkshöhe (Sommerintervall)

## 4.2 Kühlturm-Überhöhung



**Abbildung 9:** Zeitlicher Verlauf der effektiven Emissionshöhen der Kühltürme in Boxberg und Lippendorf sowie der Temperaturgradienten, Windgeschwindigkeiten und relativen Luftfeuchten in Bauwerkshöhe (Winterintervall)

### 4.3 Emissionskataster

Die in Kapitel 4.1 beschriebenen Kühlturm-Emissionen der beiden GFA Boxberg und Lippendorf sind mit der Gesamtheit aller anderen Emissionsquellen zu kombinieren. Zu diesen zählen neben den biogenen Quellen (siehe Kapitel 4.5) die folgenden Verursachergruppen, getrennt nach identifizierten Punktquellen und zusammengefassten Flächenquellen:

**Tabelle 14:** Verursachergruppen in Sachsen

<b>1</b>	Genehmigungspflichtige Einzelemittenten (Kraftwerke)	<b>1061 Punktquellen</b>
<b>2</b>	Kleinverbraucher (Industrie)	<b>Flächenquellen (1 km × 1 km)</b>
<b>3</b>	Hausbrand	
<b>4</b>	Haushalte (ohne Verbrennung)	
<b>5</b>	Straßenverkehr	
<b>6</b>	Schienenverkehr	
<b>7</b>	Schiffsverkehr	
<b>8</b>	Luftverkehr	
<b>9</b>	Landwirtschaft	

Während die Jahresemissionen und geographischen Koordinaten der Punktquellen (Anzahl: 1061 innerhalb Sachsens, incl. GFA Boxberg und Lippendorf) infolge der Genehmigungspflicht bekannt sind, werden die übrigen (flächenbezogenen) Quellen aus infrastrukturellen Aktivitäten, Besiedlungsdichten und Verkehrsflüssen in Verbindung mit spezifischen Emissionsfaktoren abgeleitet (siehe Göldner et al., 1998). Die den einzelnen Gruppen zugeordneten Jahresemissionskataster für das Gebiet Sachsen wurden vom Auftraggeber im 1-km-Raster geliefert und auf das mittelfein aufgelöste Modellgitter für Sachsen aggregiert (1,4 km; vgl. Abb. 5 und Tab. 2). Die Flächenkataster enthalten getrennte Angaben für die hauptsächlichsten Abluftkomponenten SO<sub>2</sub>, NO, NO<sub>2</sub>, CO, NH<sub>3</sub>, Methan, andere Kohlenwasserstoffe, PPM<sub>2,5</sub> und PPM<sub>10</sub>. Bei den Punktquellen hingegen liegen für NO<sub>x</sub> und Staub nur allgemeine Werte vor, so dass eine nachträgliche massenmäßige Aufspaltung von NO<sub>x</sub> in NO und NO<sub>2</sub> (90% bzw. 10%) bzw. von Staub in PPM<sub>2,5</sub> und PPM<sub>10</sub> (55% bzw. 85%) vorzunehmen ist (siehe Kapitel 4.4).

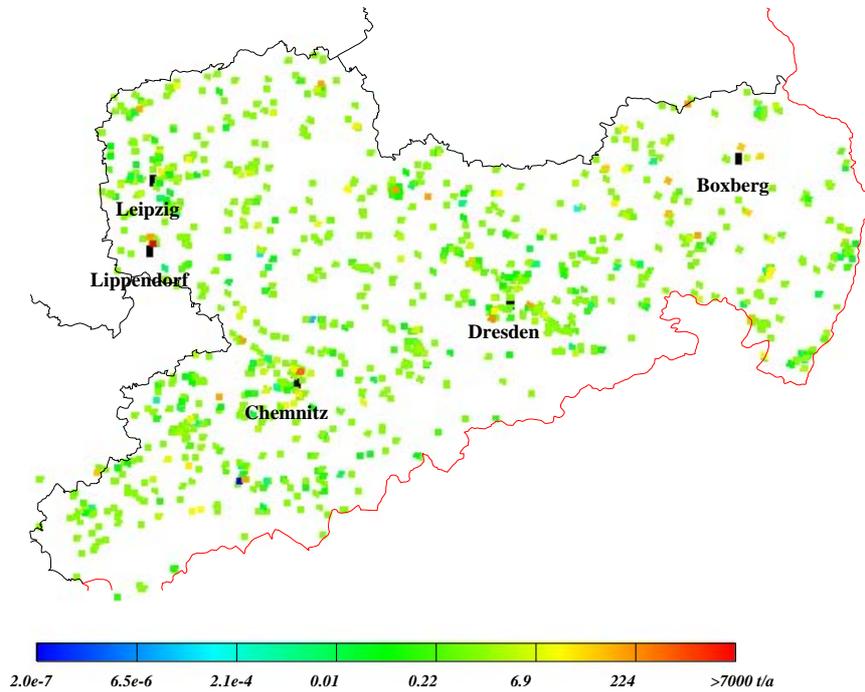
Da die Nutzung von Jahresemissionen für Ausbreitungsrechnungen weitere Differenzierungsschritte beispielsweise hinsichtlich des genauen zeitlichen Verlaufs erfordert, werden die oben aufgeführten Verursachergruppen auf die international üblichen SNAP-Klassen (siehe: CORINAIR) aufgeteilt, für die entsprechende zeitliche Disaggregationsfunktionen entwickelt wurden und in Gebrauch sind (siehe Kapitel 4.4):

**Tabelle 15:** SNAP-Klassen und Zuordnung der Verursachergruppen aus Tabelle 14

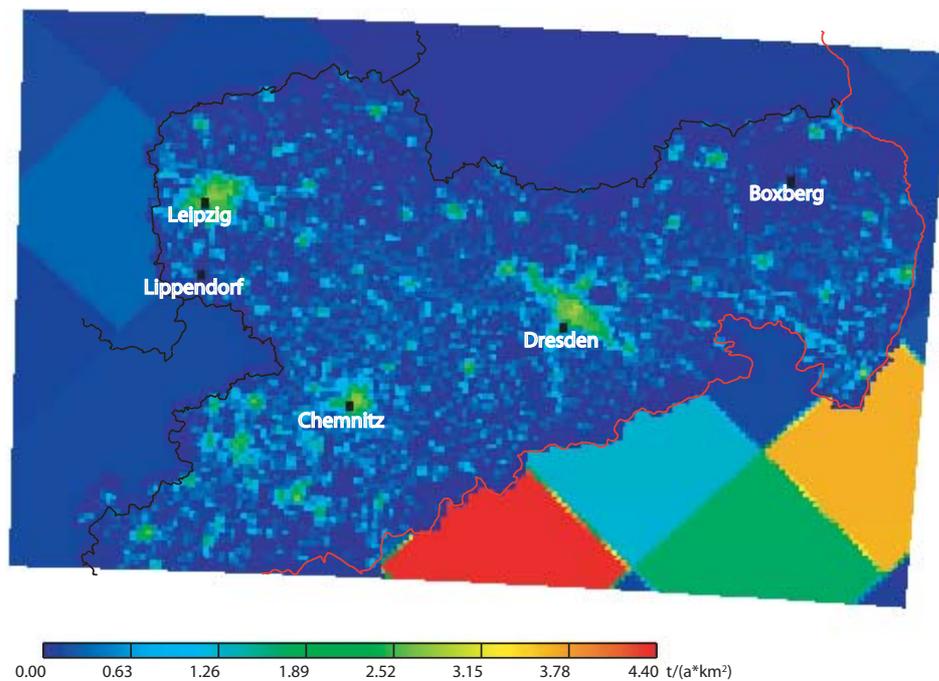
<b>SNAP</b>	<b>Emissionstyp</b>	<b>Nr. aus Tabelle 14</b>
<b>1</b>	Verbrennungsanlagen in Energie- und Rohstoffindustrie (Kraftwerke)	1
<b>2</b>	Nicht-industrielle Verbrennungsanlagen (Heizung)	3
<b>3</b>	Verbrennungsanlagen in der verarbeitenden Industrie	2
<b>4</b>	Industrielle Produktionsprozesse ohne Verbrennung	÷
<b>5</b>	Förderung und Verteilung fossiler Brennstoffe, geotherm. Anlagen	÷
<b>6</b>	Freisetzung von Lösungsmitteln (Chemieindustrie)	4
<b>7</b>	Straßenverkehr	5
<b>8</b>	Schienen-, Schiffs- und Luftverkehr	6 + 7 + 8
<b>9</b>	Abfallwirtschaft, Deponien	÷
<b>10</b>	Landwirtschaft	9

Im Unterschied zu den auf das sächsische Territorium bezogenen Emissionskatastern wurden für die außersächsischen Gebiete sowohl innerhalb Deutschlands als auch in Polen und Tschechien die EMEP-Emissionsdaten benutzt. Diese liegen bereits in der nach SNAP-Klassen aufgeschlüsselten Form in einer räumlichen Auflösung von 50 km × 50 km als Flächenquellen vor (siehe: EMEP; Wolke, Hellmuth et al., 2004). Sie bilden auch die Grundlage für die Mitteleuropa-Simulationen.

Die Abbildungen 10-13 vermitteln einen Eindruck von der Verteilung der im Modellgebiet Sachsen berücksichtigten Punkt- und Flächenquellen. Die dargestellten Emissionen beschränken sich dabei auf die Komponenten SO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub> und PM<sub>10</sub>. Die Punktquellen (Abbildung 10; nur SO<sub>2</sub> gezeigt) enthalten nicht die GFA Boxberg und Lippendorf (deren Emissionswerte sind in Tabelle 11 ausgewiesen). Alle Punktquellen gehen mit ihren berechneten effektiven Emissionshöhen in das Modell ein. Interessanter als die Punktquellenverteilung sehen die Verteilungsbilder der Flächenquellen aus. Hier fallen die starken, aber auch nur sehr grob gerasterten tschechischen SO<sub>2</sub>-Emissionsgebiete auf (Abbildung 11), wobei jedoch zu berücksichtigen ist, dass die entsprechenden sächsischen Emittenten als Punktquellen in dieser Abbildung nicht in Erscheinung treten. In Abbildung 12 zeichnen sich vorwiegend die landwirtschaftlichen NH<sub>3</sub>-Quellgebiete und in Abbildung 13 das Straßenverkehrsnetz als PM<sub>10</sub>-Verursacher ab.

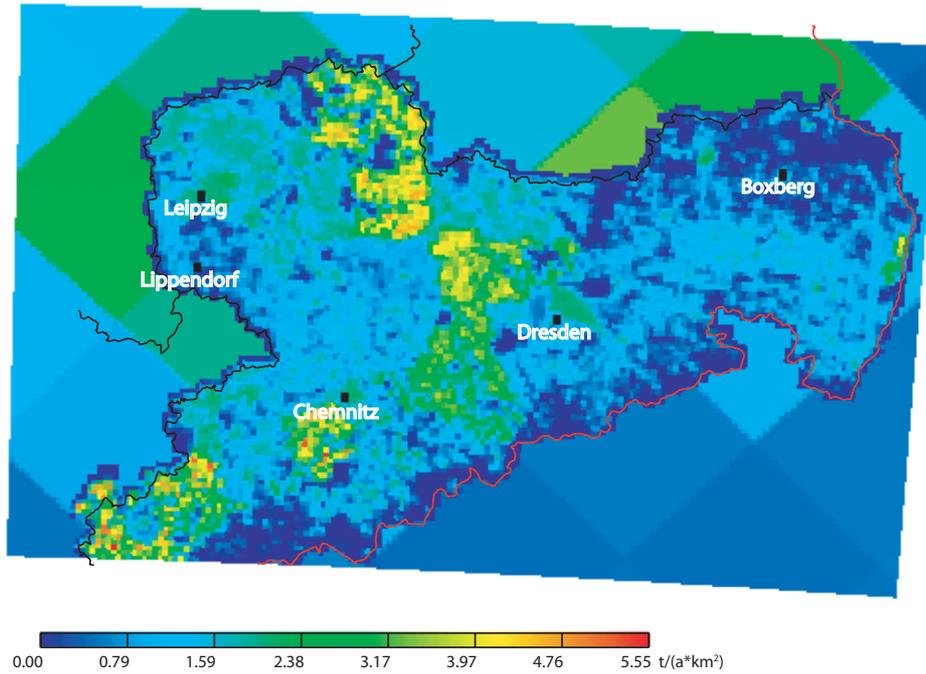


**Abbildung 10:** SO<sub>2</sub>-Jahresemissionen aller sächsischen Punktquellen (außer GFA Boxberg und Lippendorf). Nichtlineare Skala.

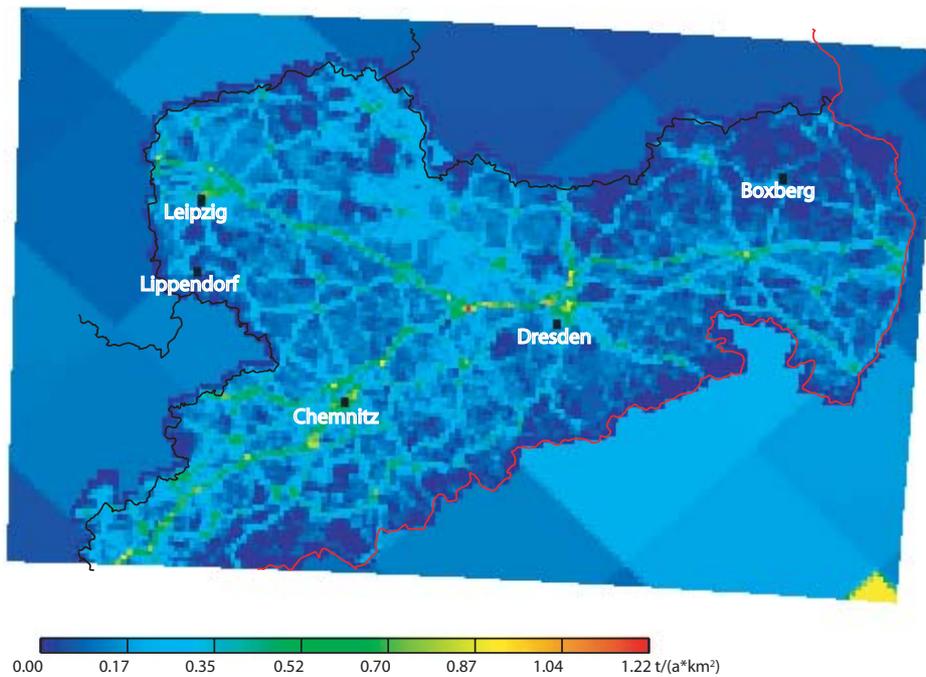


**Abbildung 11:** SO<sub>2</sub>-Jahresemissionen aller Flächenquellen im Modellgebiet Sachsen (in Sachsen: 1,4 km × 1,4 km; außerhalb: 50 km × 50 km [EMEP])

### 4.3 Emissionskataster



**Abbildung 12:** NH<sub>3</sub>-Jahresemissionen aller Flächenquellen im Modellgebiet Sachsen (in Sachsen: 1,4 km × 1,4 km; außerhalb: 50 km × 50 km [EMEP])



**Abbildung 13:** PPM<sub>grob</sub>-Jahresemissionen aller Flächenquellen im Modellgebiet Sachsen (in Sachsen: 1,4 km × 1,4 km; außerhalb: 50 km × 50 km [EMEP])

#### 4.4 Split- und Zeitfaktoren

##### 1) *NO<sub>x</sub>-Split:*

Die Aufspaltung der NO- und NO<sub>2</sub>-Anteile aus den NO<sub>x</sub>-Emissionswerten der Punktquellen basiert auf dem allgemein üblichen Massensplit für das NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Verhältnis von 10%, welches auch bei den Flächenquellen Anwendung findet.

##### 2) *VOC-Split:*

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 (siehe Kapitel 2.2) generiert.

##### 3) *Staub-Split:*

Da die Staubkomponente für die Punktquellen nur allgemein ausgewiesen ist, wird die Differenzierung gemäß den Größenklassen von PM<sub>2,5</sub> und PM<sub>10</sub> nach den Referenzlisten zur Berechnung des Feinstaubanteils vorgenommen (siehe: Referenzlisten). Für alle Punktquellen (außer GFA: siehe Kapitel 4.1) werden entsprechend den verwendeten Entschwefelungs- und Entstaubungsanlagen die Werte 55% für den PPM<sub>2,5</sub>-Anteil und 85% für den PPM<sub>10</sub>-Anteil des Staubes gewählt.

##### 4) *Zeitlicher Verlauf:*

Die als Jahreswerte gegebenen anthropogenen Emissionen lassen über den Mittelwert hinaus keine Aussagen zum tatsächlichen zeitlichen Verhalten zu, auch wenn sie in Verursacher- oder SNAP-Klassen getrennt vorliegen. Für die mesoskalige Modellierung ist es jedoch unentbehrlich, die Emissionen in ihrem täglichen, wöchentlichen und jahreszeitlichen Zyklus zu erfassen. Deshalb sind normierte Funktionen der zeitlichen Variation in diesen Zyklen für jede SNAP-Klasse getrennt entwickelt worden (Winiwarter und Züger, 1996), mit denen die Jahresemissionswerte zu multiplizieren sind. So schwanken beispielsweise Heizungs- und Landwirtschaftsemissionen im täglichen und jahreszeitlichen Rhythmus besonders stark, während industrielle Prozesse nahezu gleichbleibende Aktivität entfalten. In diesem Projekt wurden die für Europa aktuell geltenden Funktionen verwendet (Fath, 2002). Die Kühlturm-Emissionen wurden im Unterschied zu den übrigen Punktquellen nicht dieser Differenzierung unterzogen (bis auf die jahreszeitlichen Unterschiede gemäß Tabelle 11). Tabelle 16 gibt einen Überblick über diese Faktoren zu ausgewählten Zeitpunkten wieder (Die Faktoren der verschiedenen Zeitzyklen sind jeweils auf 1 normiert).

**Tabelle 16:** Faktoren zur zeitlichen Differenzierung von Jahresemissionen (nach: Fath, 2002)

SNAP incl. GFA Boxb./Lipp.	Monatsfaktor				Faktor für Wochentag und Stunde							
					Montag-Freitag				Sonnabend/Sonntag			
	Aug.	Sept.	Nov.	Dez.	Nacht	Morg.	Mitt.	Abend	Nacht	Morg.	Mitt.	Abend
<b>GFA</b>	1,00	1,00	1,00	1,00	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
<b>1</b>	0,88	0,95	1,08	1,15	0,8	1,3	1,2	1,1	0,7	1,0	1,0	0,9
<b>2</b>	0,40	0,70	1,40	1,65	0,4	1,7	1,1	1,6	0,3	1,3	0,8	1,2
<b>3</b>	0,95	0,97	1,03	1,05	0,8	1,1	1,4	1,1	0,6	0,8	1,0	0,8
<b>4</b>	0,88	1,01	1,01	0,87	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
<b>5</b>	1,00	1,00	1,00	1,00	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
<b>6</b>	1,01	1,04	1,01	0,91	0,2	1,6	1,8	1,6	0,1	0,7	0,8	0,7
<b>7</b>	1,02	1,06	1,01	0,93	0,2	2,0	1,3	2,2	0,1	1,5	1,0	1,7
<b>8</b>	1,02	1,06	1,01	0,93	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
<b>9</b>	1,00	1,00	1,00	1,00	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
<b>10</b>	1,00	1,10	0,45	0,45	0,6	1,0	1,8	1,0	0,6	1,0	1,8	1,0

## 4.5 Biogene Emissionen

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 NO-Emission 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:

$$F_{\text{bio}} = F_0 c_L c_T \quad (8)$$

mit den in Tabelle 17 spezifizierten Größen.

**Tabelle 17:** Parameter der biogenen Emission (siehe Gleichung (8))

Parameter/Funktion		Emission von		
		NO <sup>1)</sup>	Isopren <sup>2)</sup>	Terpen <sup>2)</sup>
$F_0$ [ng/m <sup>2</sup> 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		
$c_L$ <sup>3)</sup>		1	$\cos \alpha / \cos \alpha_0$	1
$c_T$ <sup>4)</sup>		$\exp[0,071 T_s]$	$\log_{10}(c_T) = -0,796$ $+ 1,2 / \{1 + \exp[-0,4 (T_s - T_1)]\}$	$\exp[0,1 (T_s - T_2)]$

<sup>1)</sup> Williams et al., 1992; Stohl et al., 1996

<sup>2)</sup> Pierce et al., 1990; Veldt, 1991; Günther et al., 1993

<sup>3)</sup>  $\alpha$ ,  $\alpha_0$ : aktueller und Zenit-Sonnenstandswinkel;

<sup>4)</sup>  $T_s$ ,  $T_1$ ,  $T_2$ : Bodentemperatur und Referenztemperaturen 28,3 bzw. 30 (jeweils °C).

### 5. Modell-Validierung

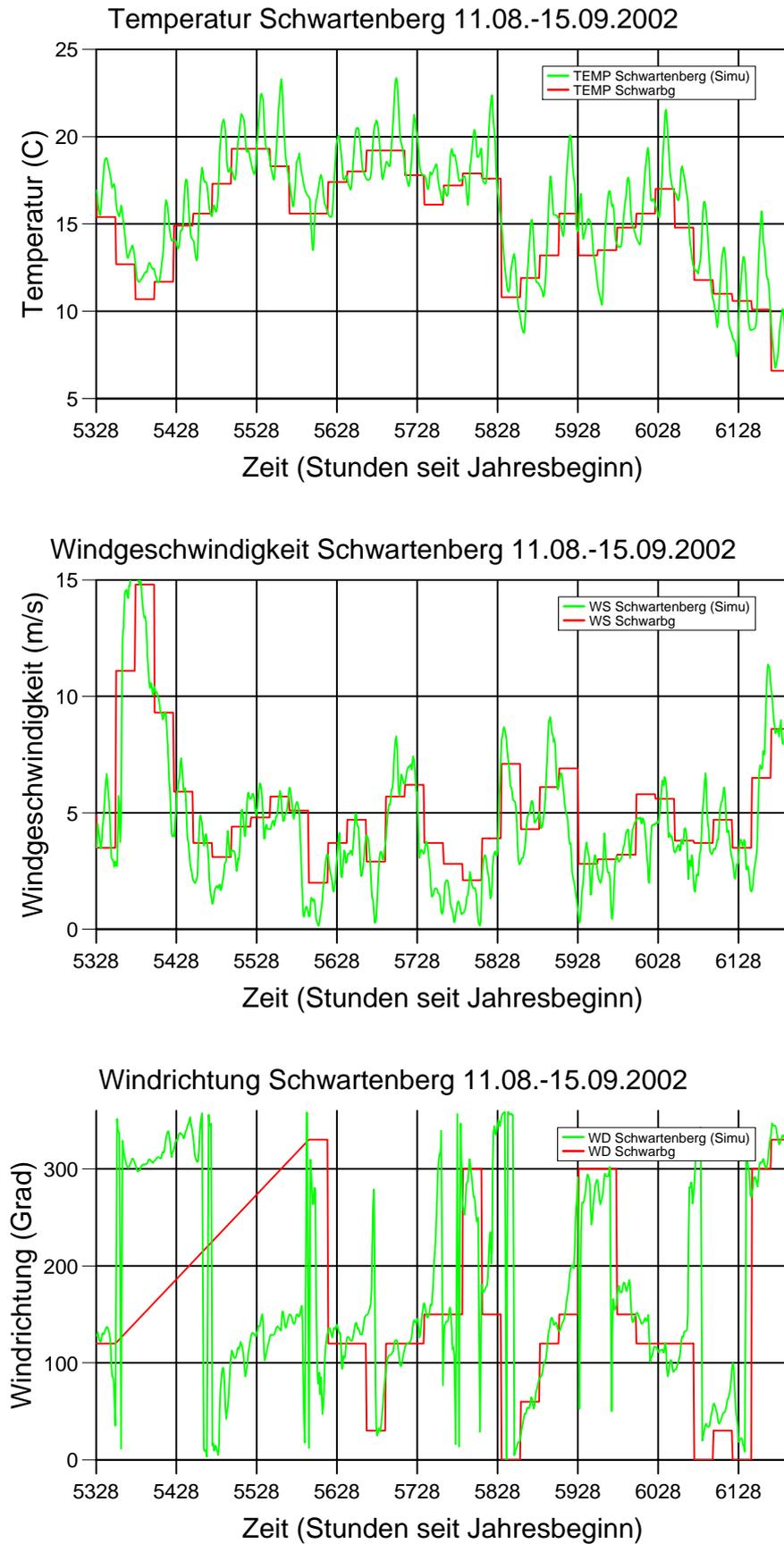
Zur Bewertung der Brauchbarkeit bzw. Güte des Modells wurden die simulierten meteorologischen Größen Windrichtung, Windgeschwindigkeit und Temperatur sowie die Konzentrationen von  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_2$  und  $\text{PM}_{10}$  mit gemessenen Werten an verschiedenen sächsischen Stationen verglichen. In den Abbildungen dieses Kapitels bedeuten die roten Linien die gemessenen Tagesmittelwerte, die grünen Linien die simulierten Stundenwerte. Die starken Schwankungen der stündlich vorliegenden Modelldaten geben einen Eindruck davon, welche Varianz sich auch hinter den gemittelten Beobachtungswerten verbirgt. Zur Problematik des Vergleichs zwischen Mess- und Modelldaten wurde bereits in Kapitel 3.2 eingegangen. Die Ursache dafür, dass selbst Mittelwerte nicht immer gut übereinstimmen, liegt zum einen an den Schwierigkeiten beim Vergleich von Modellgitterzellen mit Messpunkten (Problem der Repräsentanz) und zum anderen (bei den Konzentrationen) auch an teilweise erheblichen Fehlern bei den Emissionsdaten. Für diese Erklärung spricht jahrelange Erfahrung auf dem Gebiet der atmosphärenchemischen Modellierung und auch die Tatsache, dass die gemessenen und simulierten meteorologischen Größen deutlich besser übereinstimmen als die entsprechenden Konzentrationen.

Die ausgewählten Stationen repräsentieren unterschiedliche Standortbedingungen: Schwartenberg ist eine Höhenstation im Erzgebirge, der Collm liegt im Tiefland zwischen Leipzig und Dresden (beide sind eher emittententfern), Radebeul ist suburbanes Gebiet und Leipzig-West eine Innenstadtstation. Verglichen wurden die Werte über die gesamte Sommer- und Winterperiode.

#### 5.1. Vergleich meteorologischer Größen

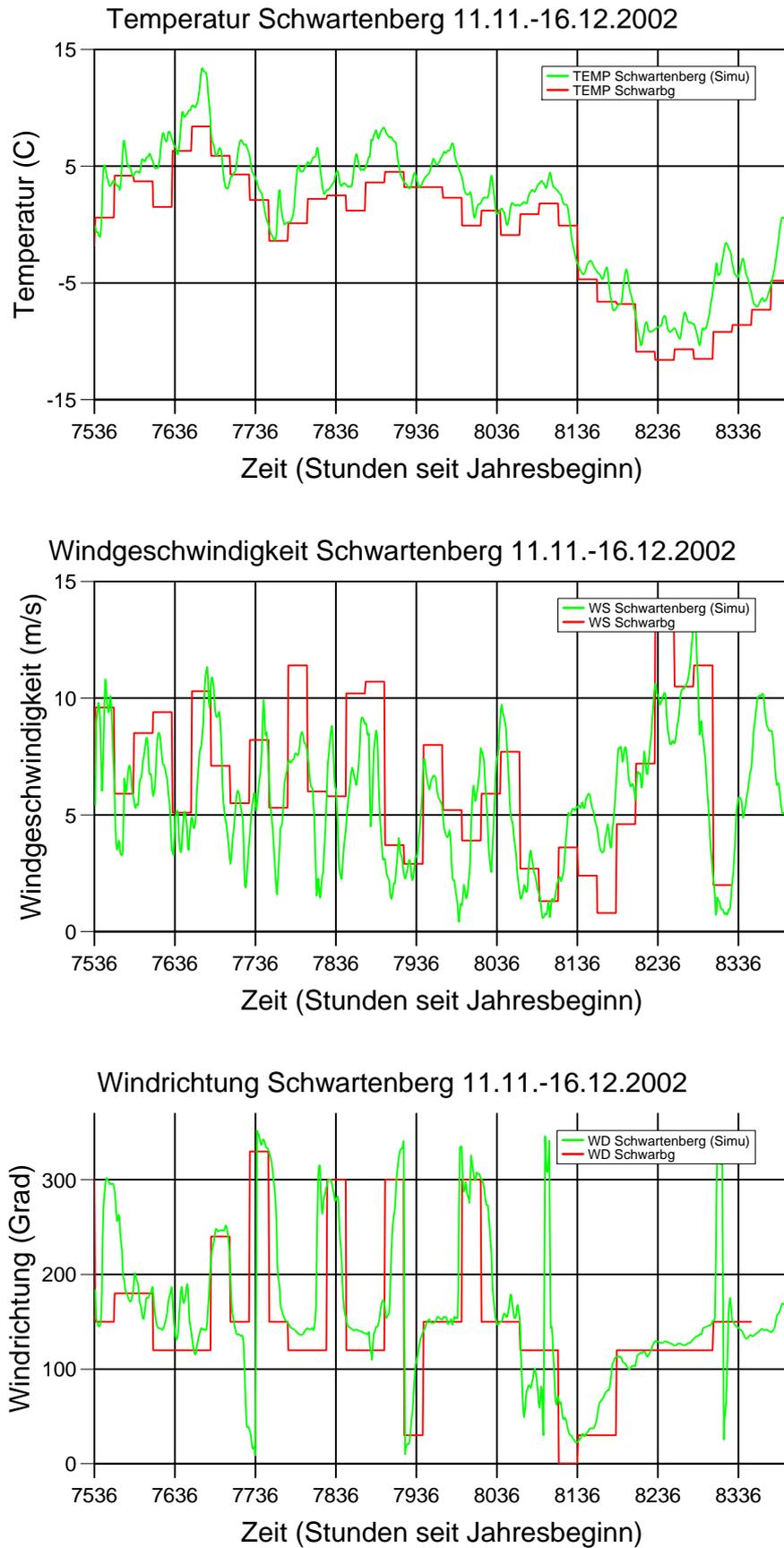
Die Abbildungen 14 bis 21 zeigen den Vergleich der meteorologischen Größen Temperatur, Windgeschwindigkeit und Windrichtung. Unter diesen Größen weist die *Windrichtung* prinzipiell die geringste vertikale Variation unmittelbar über dem Erdboden auf. Deshalb fällt ihr Vergleich an allen Stationen sehr gut aus. Auch die bodennahe *Temperatur* liefert kaum signifikante Abweichungen, obwohl ihre Variation im Tagesverlauf, aber auch in größeren Zeiträumen sowie zwischen Sommer und Winter beträchtlich ist. Darin drückt sich die Qualität der modellierten dynamischen und energetischen Prozesse des Modells LM aus. Einzig bei der *Windgeschwindigkeit* stellen sich systematische Abweichungen heraus, die allerdings ihren Grund im logarithmischen Vertikalprofil dieser Größe haben. Dieses prägt sich unterhalb der ersten Modellhöhe (ca. 30 m), also insbesondere in Messhöhe, voll aus, wird vom Gitter jedoch nicht getragen. Deswegen liegen die simulierten Windgeschwindigkeiten im doppelten Sinne oberhalb der gemessenen. Dabei bildet die Station Schwartenberg eine positive Ausnahme (evt. begründet durch exponierte Lage), während die Stadt-Station Leipzig-West verständlicherweise die größten Abweichungen aufweist.

## 5.1 Vergleich meteorologischer Größen



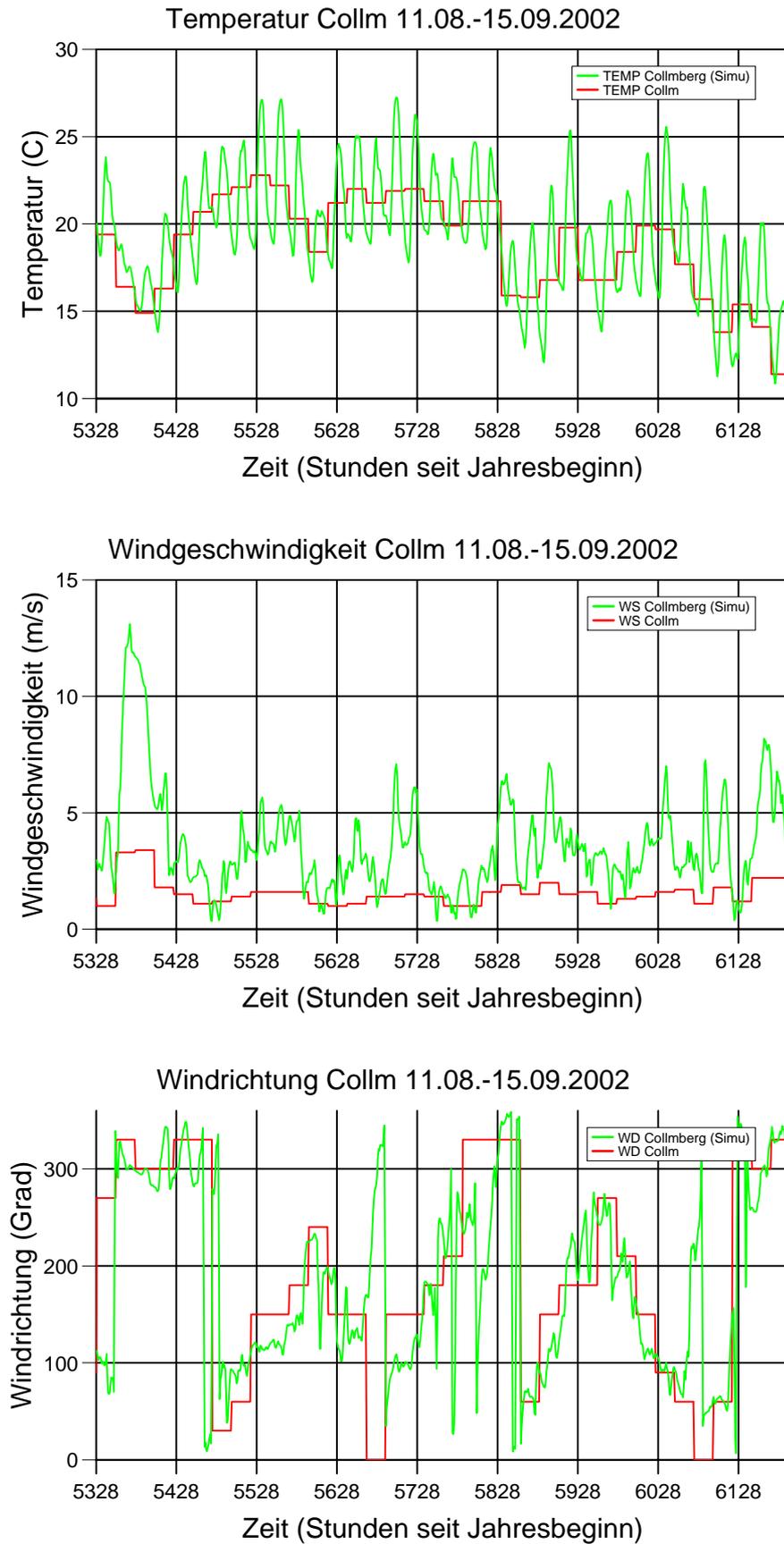
**Abbildung 14:** Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Schwartenberg (Sommerperiode)

## 5.1 Vergleich meteorologischer Größen



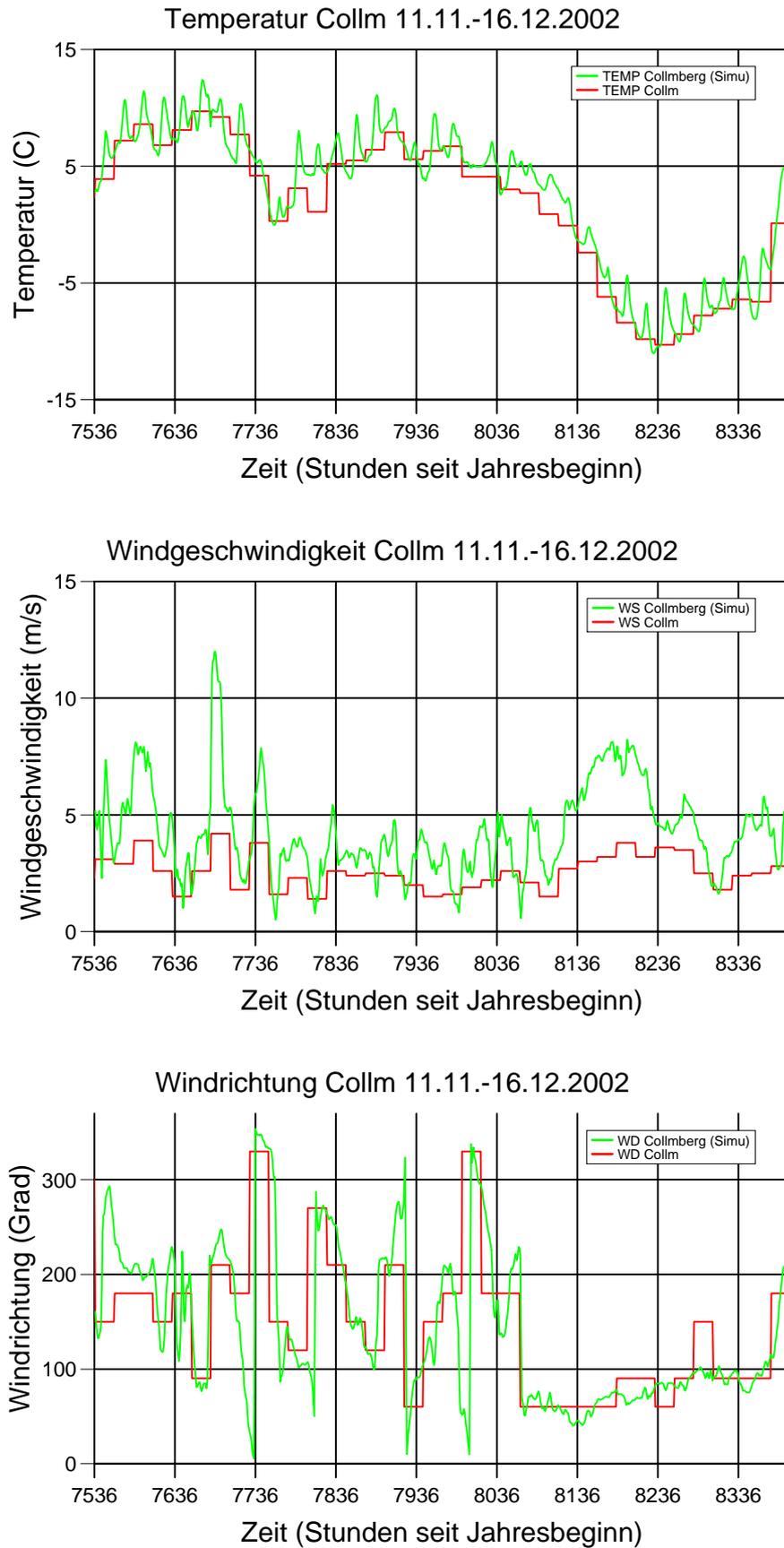
**Abbildung 15:** Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Schwartenberg (Winterperiode)

## 5.1 Vergleich meteorologischer Größen



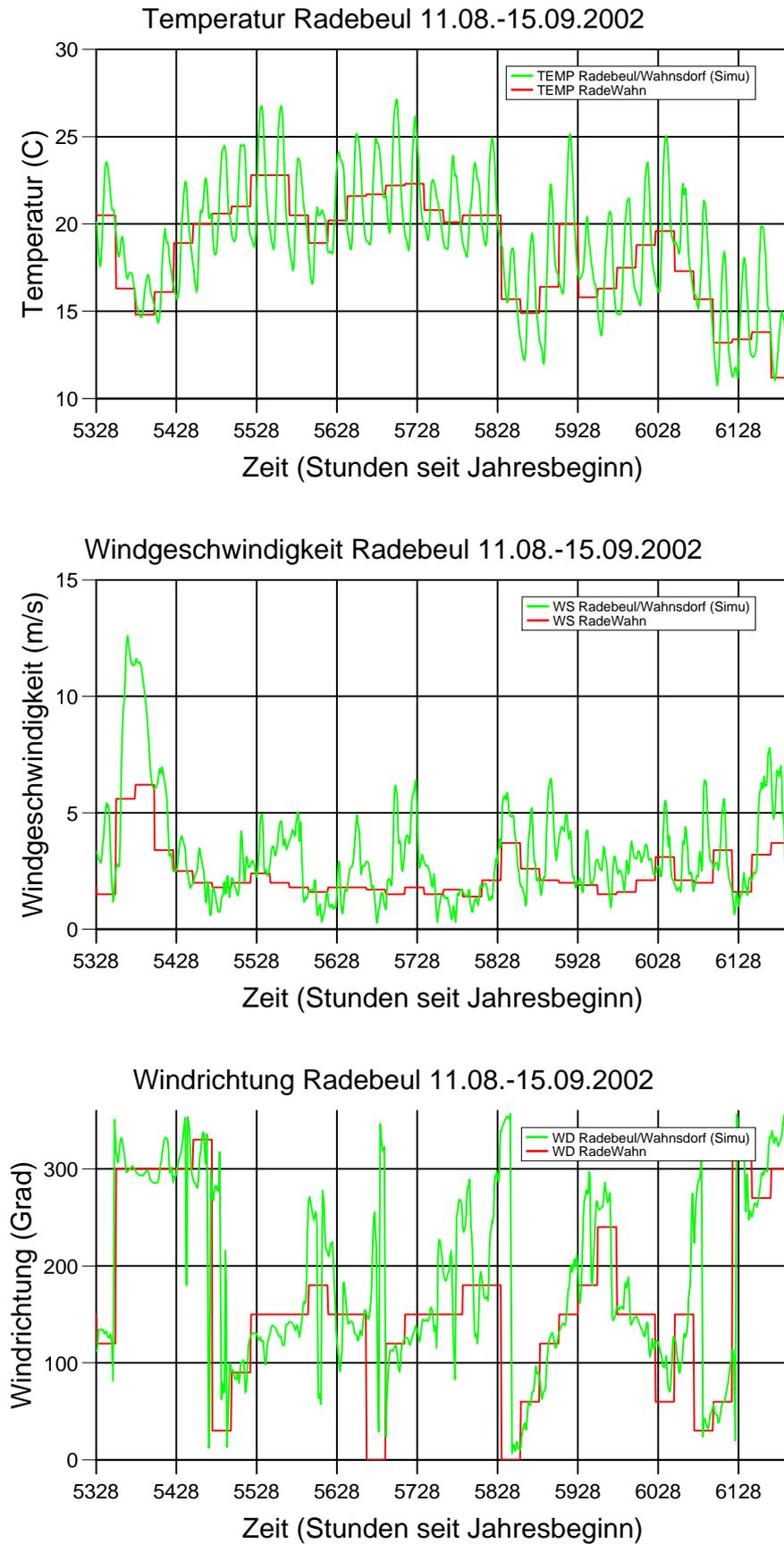
**Abbildung 16:** Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Collm (Sommerperiode)

## 5.1 Vergleich meteorologischer Größen



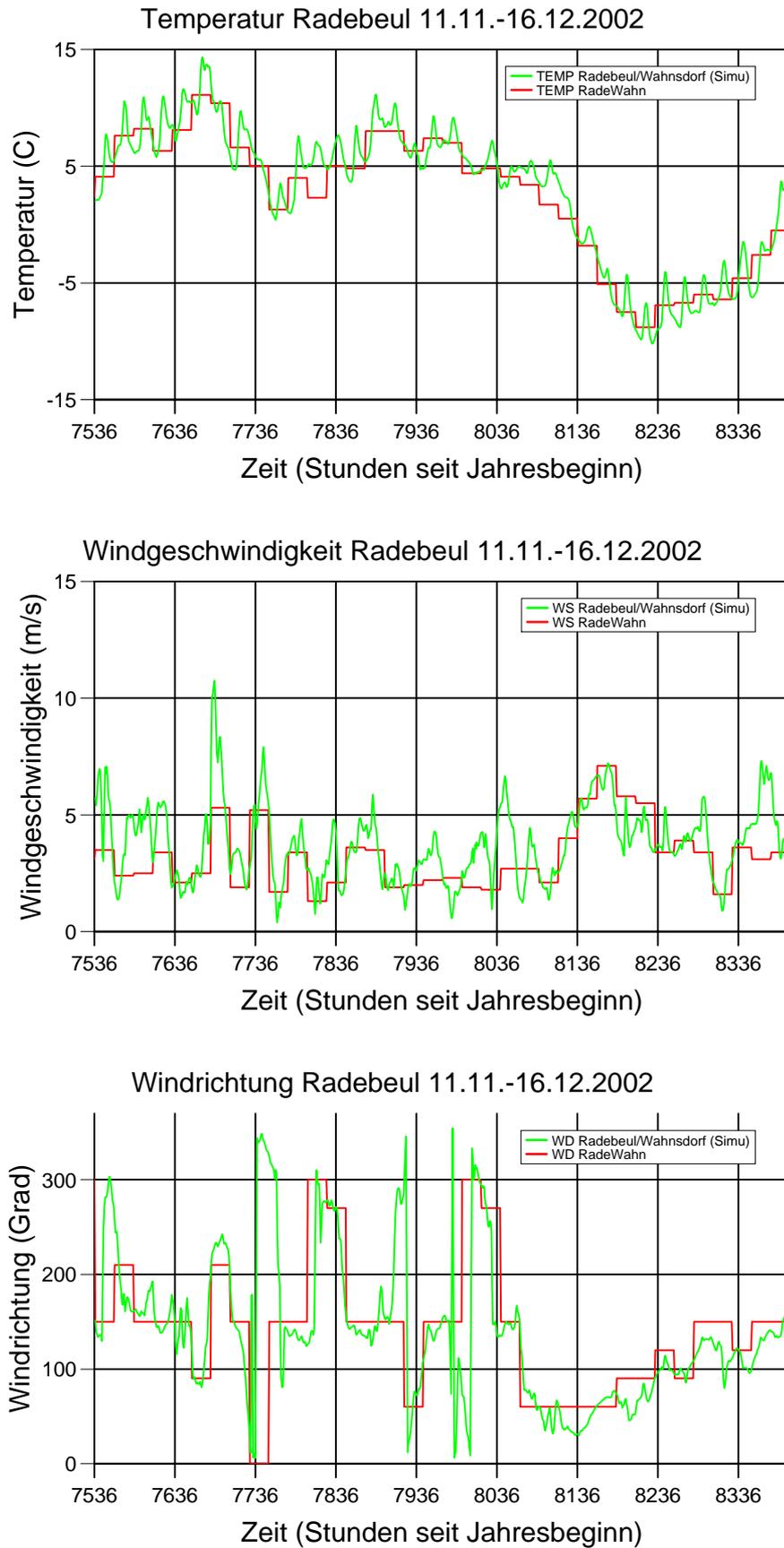
**Abbildung 17:** Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Collm (Winterperiode)

## 5.1 Vergleich meteorologischer Größen



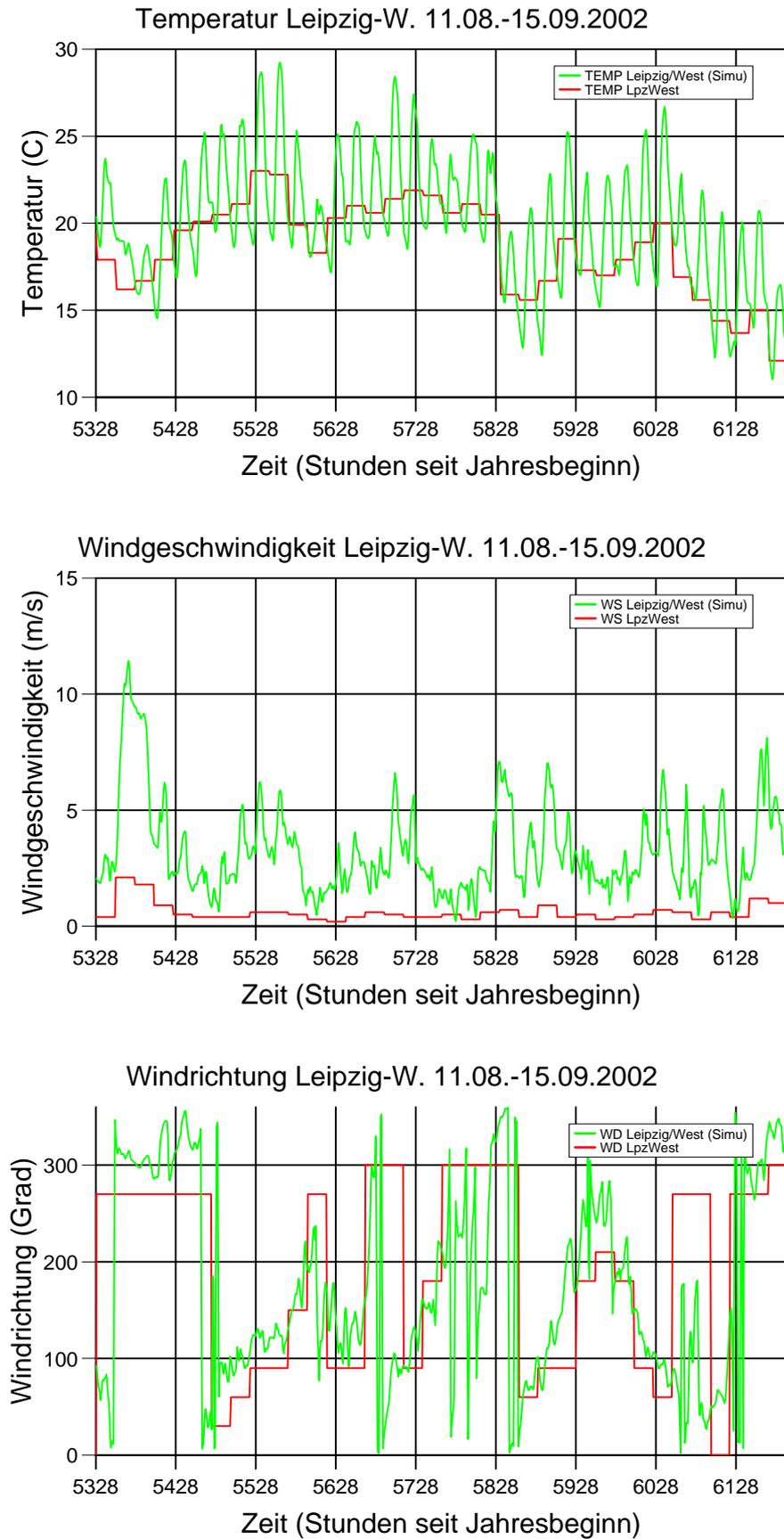
**Abbildung 18:** Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Radebeul (Sommerperiode)

## 5.1 Vergleich meteorologischer Größen



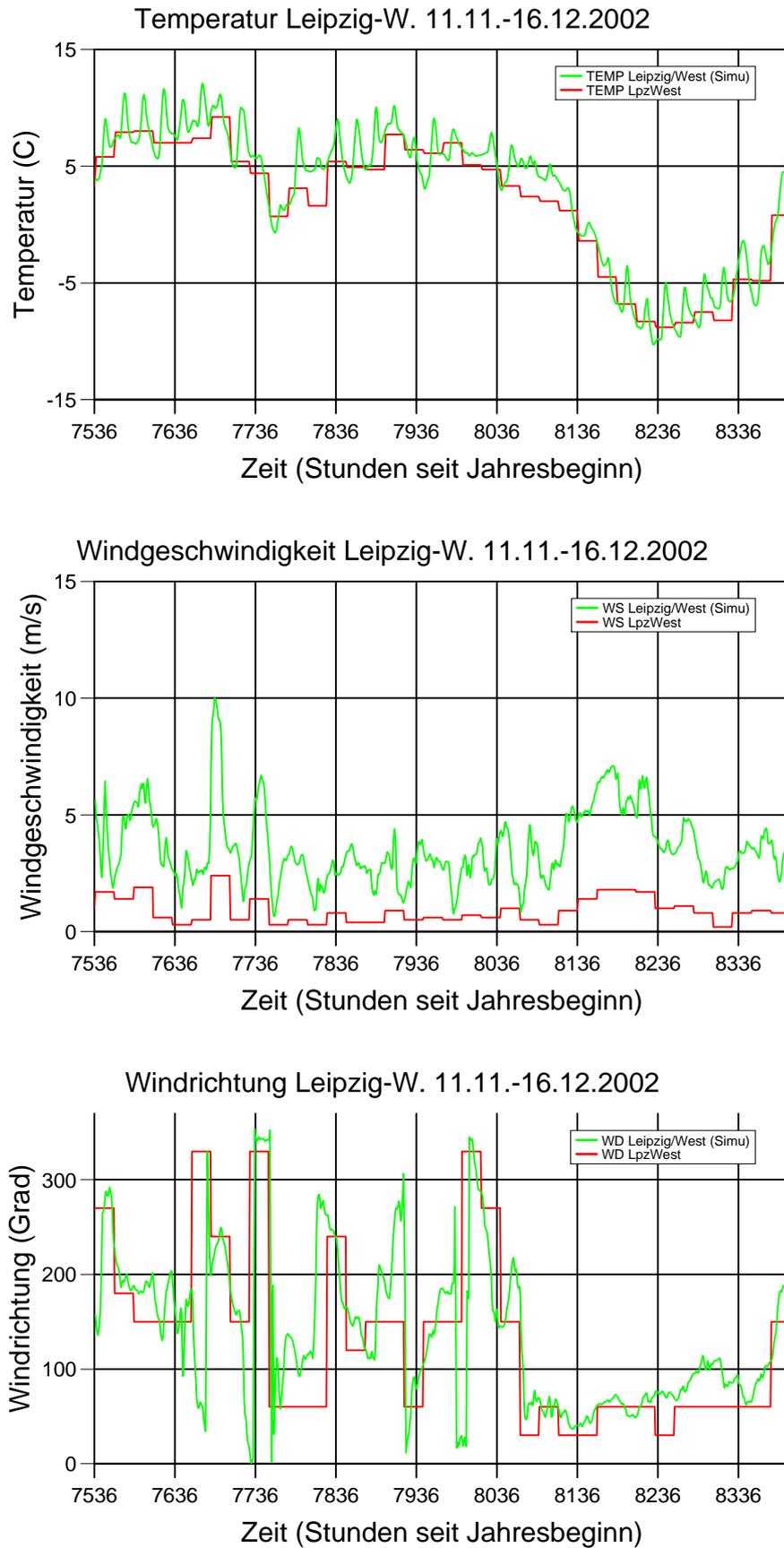
**Abbildung 19:** Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Radebeul (Winterperiode)

## 5.1 Vergleich meteorologischer Größen



**Abbildung 20:** Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Leipzig-West (Sommerperiode)

## 5.1 Vergleich meteorologischer Größen



**Abbildung 21:** Zeitreihen meteorologischer Größen (Simul./Beob.). Station Leipzig-West (Winterperiode)

## 5.1 Vergleich meteorologischer Größen

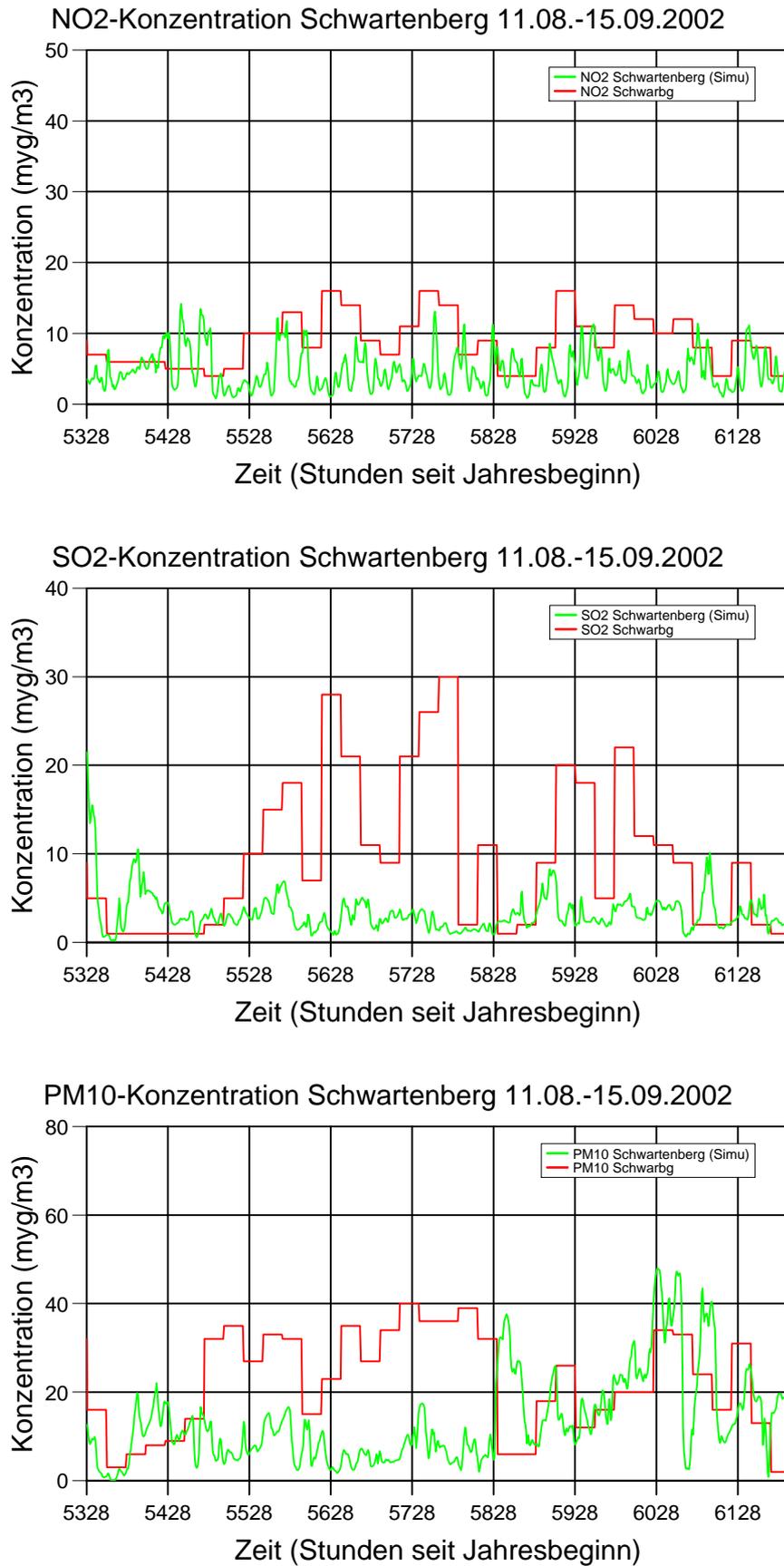
## 5.2 Vergleich von Konzentrationswerten

Der Vergleich der Konzentrationen fällt im Unterschied zu den meteorologischen Größen nicht so gut aus (siehe die folgenden Abbildungen 22-29). Hier spielt die Qualität der Eingabedaten eine ungleich größere Rolle, beispielsweise durch den Einfluss der Hintergrundbelastung oder der verfügbaren Emissionen. Auf jeden Fall schlägt negativ zu Buche, dass die hohe räumliche Auflösung der Kataster unmittelbar an den Grenzen Sachsens endet und außerhalb eine vielfach gröbere Emissionsstruktur vorliegt (siehe die Abbildungen 11-13). Außerdem kann man im allgemeinen davon ausgehen, dass die Emissionskataster nicht qualifiziert genug sind und vor allem bei den Partikelemissionen erhebliche Anteile nicht-anthropogener Bestandteile (Erosionsstaub, Pollen u.ä.) fehlen. Auch die tschechischen Emissionen sind oft unterschätzt (siehe auch Göldner et al., 1997).

Die  $NO_2$ -Werte werden offenbar stets zu gering berechnet, was besonders im Winter auffällt (bis etwa um Faktor 2). Diese Problematik hängt nicht nur von den Emissionen ab, sondern sehr empfindlich auch von der Ozonchemie und den Strahlungsbedingungen. Im  $SO_2$ -Vergleich gibt es große Unterschiede zwischen den Stationen. Während das Modell an den Stationen Collm, Radebeul und Leipzig die Beobachtung zumindest streckenweise relativ gut widerspiegelt, können manche Zeitintervalle nicht reproduziert werden: Schwarzenberg generell nicht (viele sehr hohe Ausschläge der Messwerte nach oben); Collm, Radebeul und z.T. Leipzig in der ersten Sommerwoche nicht (Faktor 2 nach unten) und in der letzten Winterwoche nicht (Faktor 2 nach oben). Diese Ereignisse lassen sich auch nicht unbedingt einer bestimmten Anströmungsrichtung zuordnen. Allerdings sind die auseinanderliegenden Stationen stets im gleichen Maß und mit gleicher Tendenz betroffen, was auf einen systematischen Zusammenhang hinweist, z.B. mit dem großskaligen Hintergrund. Ähnlich kompliziert wie bei  $SO_2$  gestaltet sich der Vergleich bei  $PM_{10}$ . Die modellierten Werte erscheinen als die Basis, von der die Beobachtungswerte mehr oder weniger oft nach oben abweichen (bis über Faktor 2). Im Sommer gibt es ein zweiwöchiges Zeitintervall (17.-30. August) mit konstant um den Faktor 3 überhöhten Messwerten an allen Stationen, die eindeutig einer ebenso lange anhaltenden Südost-Anströmung zuzuordnen sind (d.h. aus Richtung Tschechien). Im Winter dagegen treten viele Einzelereignisse von ähnlichem Ausmaß auf, dazwischen liegen die Beobachtungswerte wieder in der Nähe der berechneten.

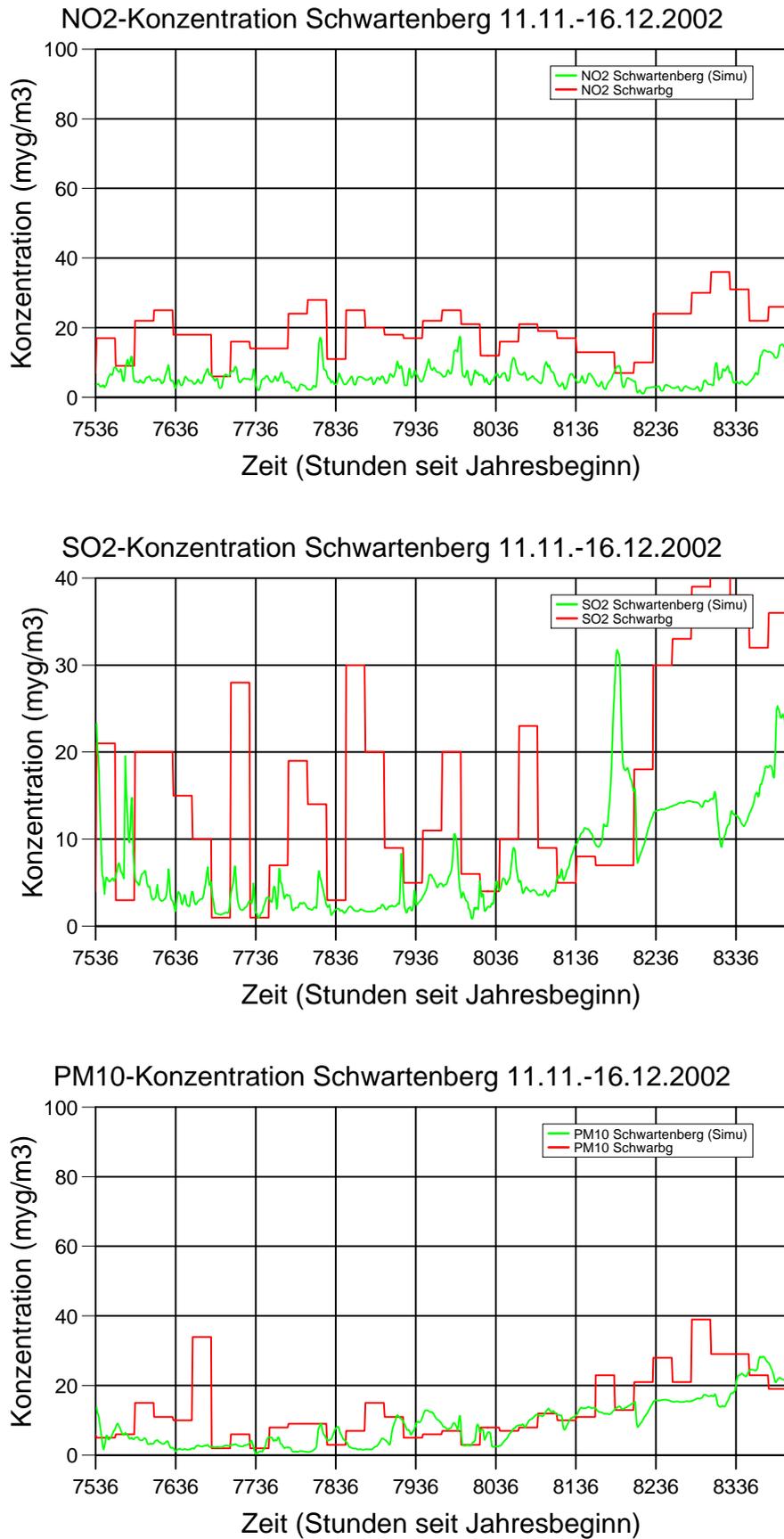
Insgesamt entsprechen die festgestellten Abweichungen in der Tendenz und in der Größenordnung etwa dem, was ein europäischer Modellvergleich für ähnliche Simulationen im Rahmen des City-Delta-Projekts (Wolke, Hellmuth et al., 2004) ebenfalls ergeben hat. Als Hauptgrund werden die mit Defiziten in Qualität und räumlicher Auflösung behafteten Emissionskataster angesehen. Doch auch die lokalen Bedingungen der Messstationen können im allgemeinen nicht ebenso differenziert von den Modellen erfasst werden. Zusammenfassend kann man feststellen, dass das Modellsystem dazu geeignet ist, die im Projekt formulierte Aufgabenstellung erfolgreich zu bearbeiten. Die Beeinflussung der Staubimmission durch die Emissionen der GFA Boxberg und Lippendorf wurde durch Differenzbildung zu Referenzsimulationen ohne GFA ermittelt, so dass die relativen Effekte maßgebend sind und nicht primär die möglichen systematischen Abweichungen von den Beobachtungswerten.

## 5.2 Vergleich von Konzentrationswerten



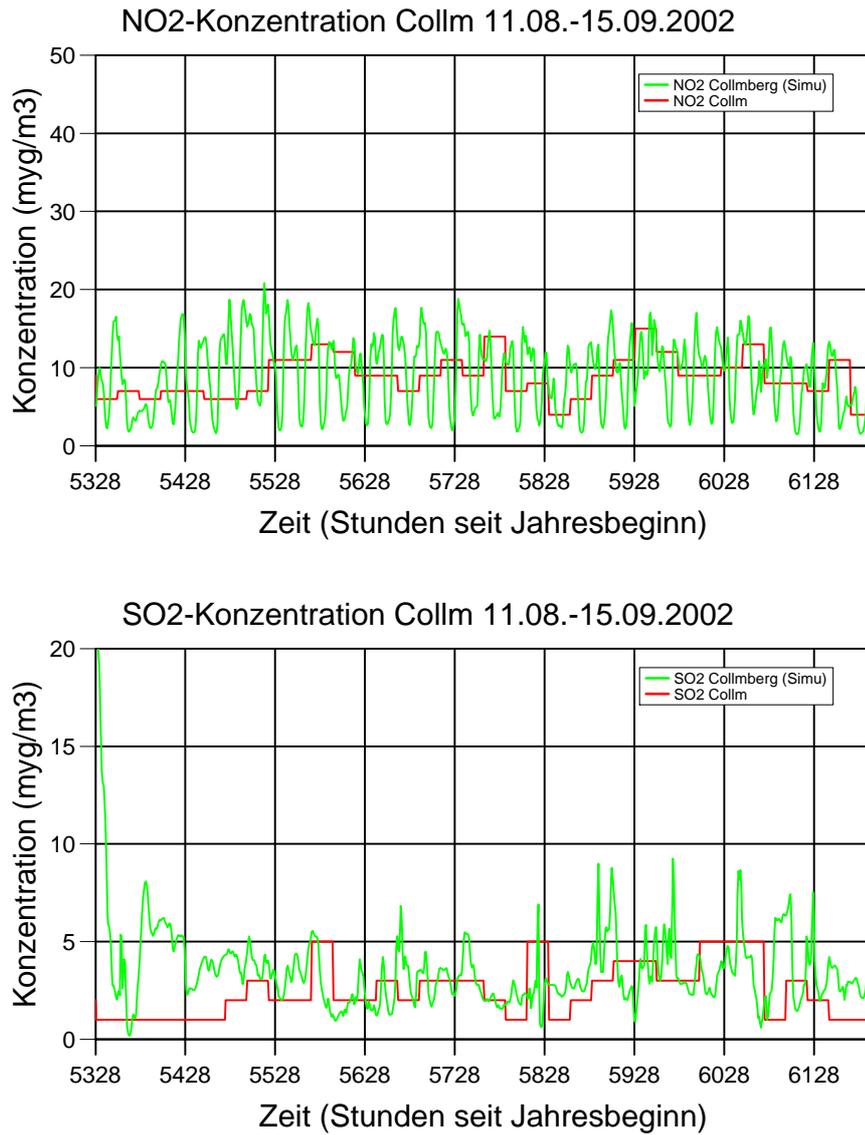
**Abbildung 22:** Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Schwartenberg (Sommerperiode)

## 5.2 Vergleich von Konzentrationswerten



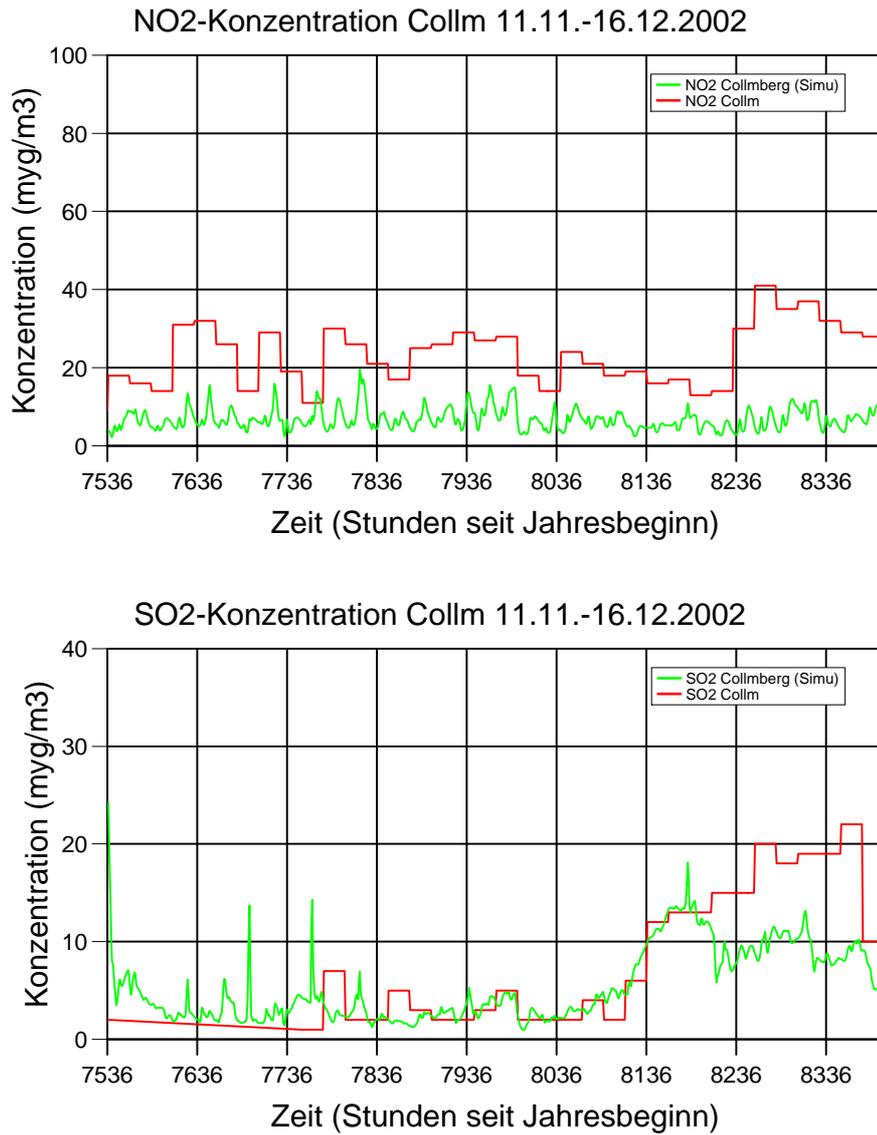
**Abbildung 23:** Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Schwartenberg (Winterperiode)

## 5.2 Vergleich von Konzentrationswerten



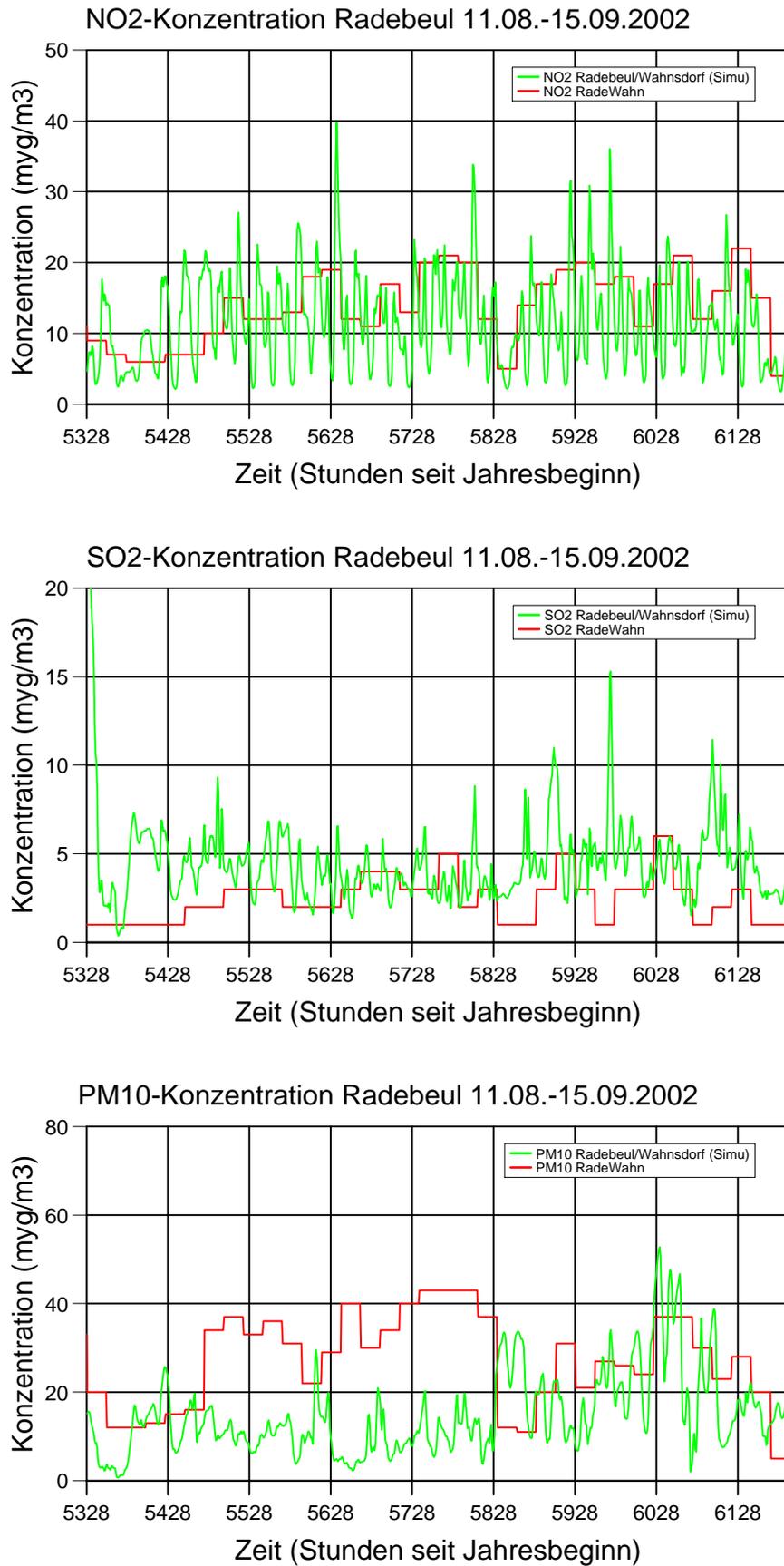
**Abbildung 24:** Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Collm (Sommerperiode)

## 5.2 Vergleich von Konzentrationswerten



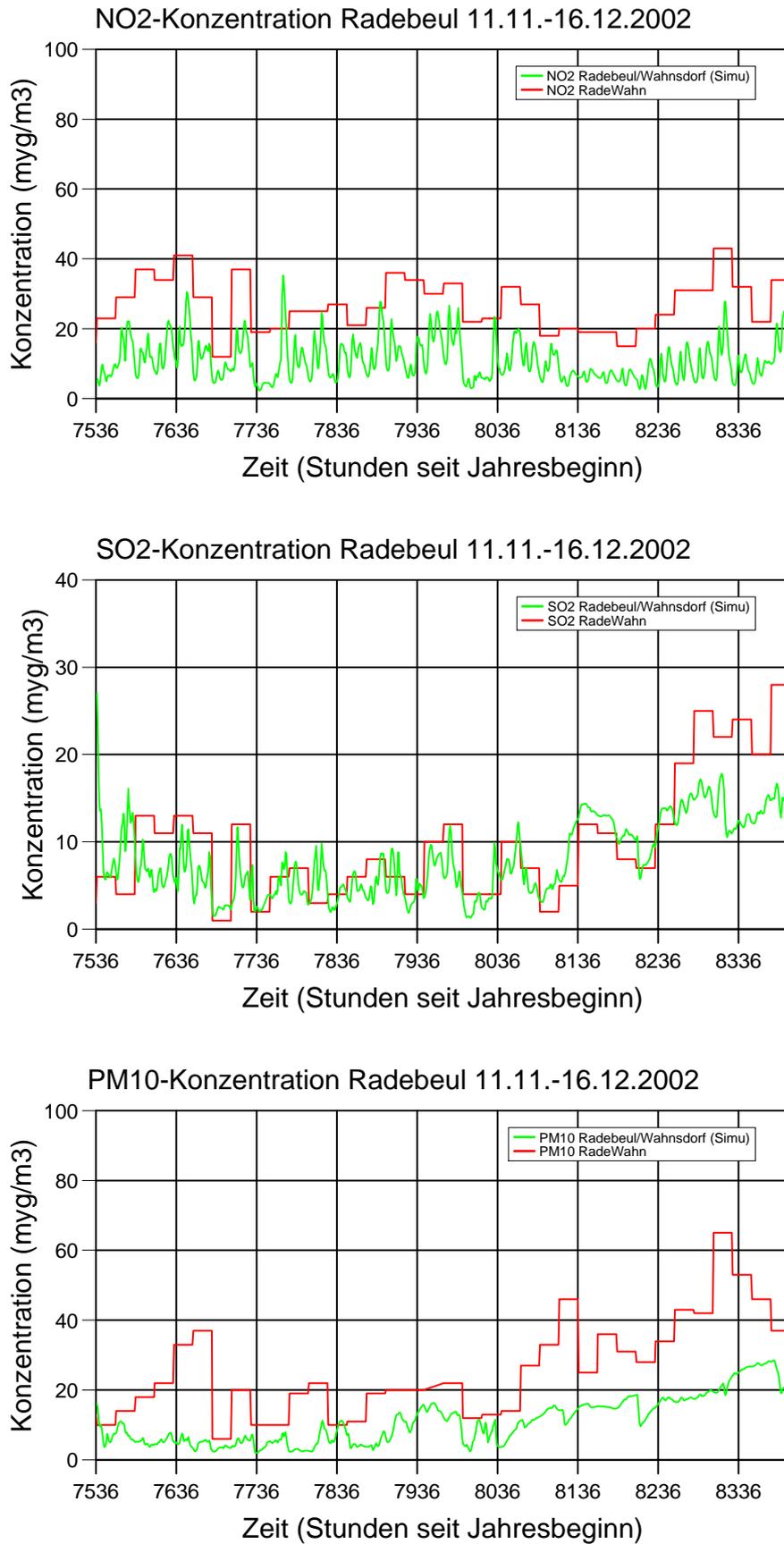
**Abbildung 25:** Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Collm (Winterperiode)

## 5.2 Vergleich von Konzentrationswerten



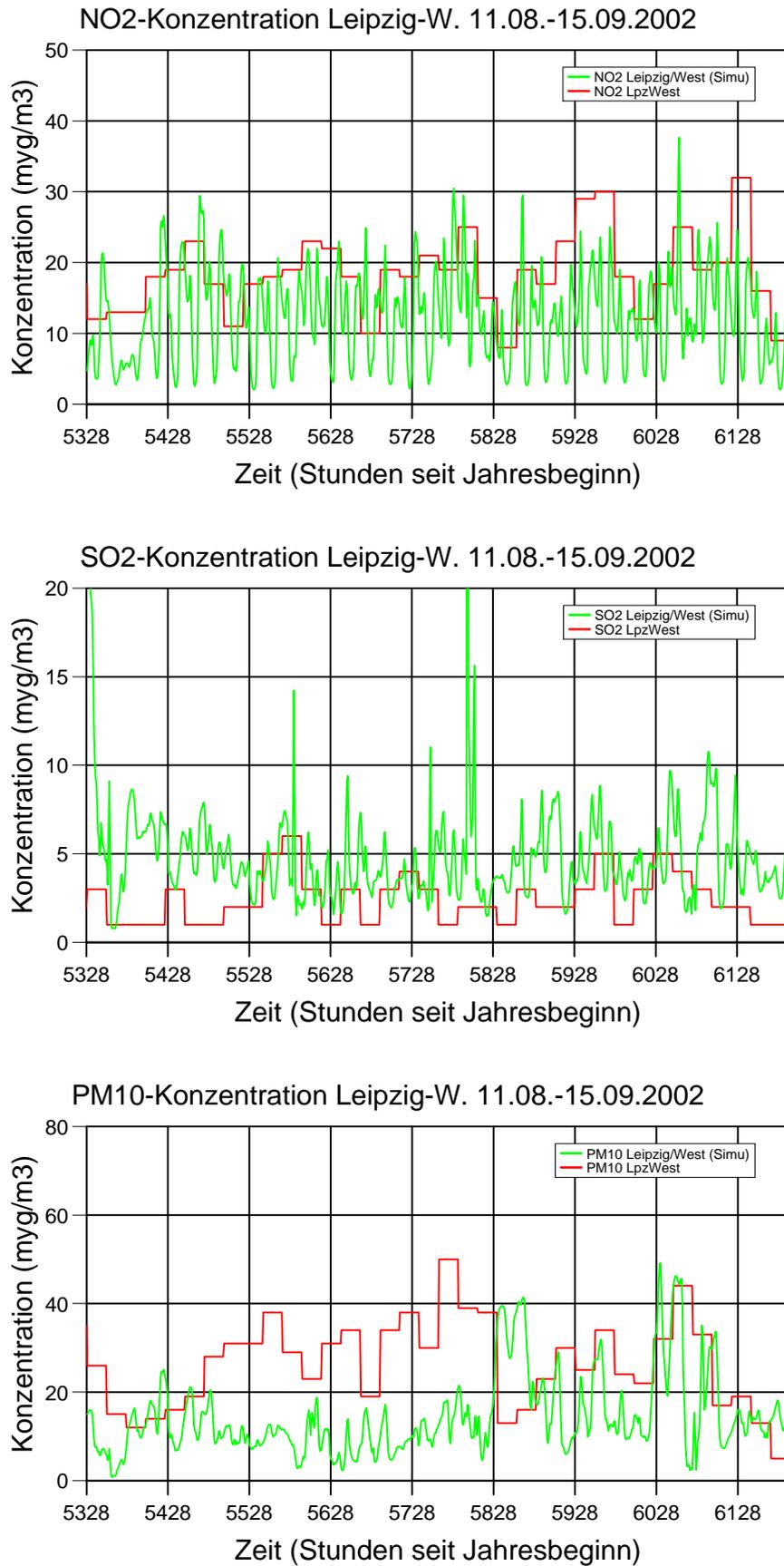
**Abbildung 26:** Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Radebeul (Sommerperiode)

## 5.2 Vergleich von Konzentrationswerten



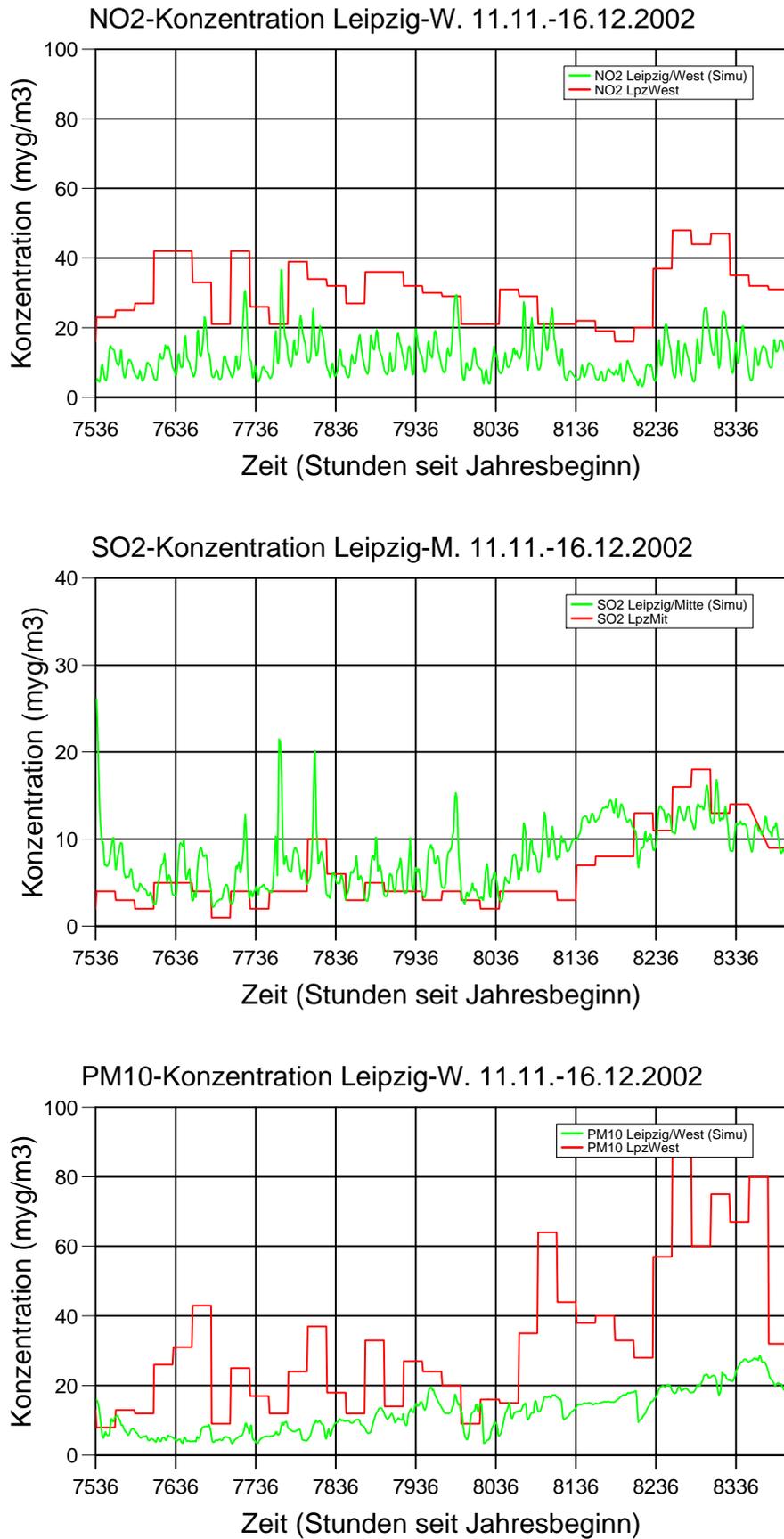
**Abbildung 27:** Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Radebeul (Winterperiode)

## 5.2 Vergleich von Konzentrationswerten



**Abbildung 28:** Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Leipzig-West (Sommerperiode)

## 5.2 Vergleich von Konzentrationswerten



**Abbildung 29:** Zeitreihen von Konzentrationen (Simul./Beob.). Station Leipzig-West (Winterperiode)

## 6. Ergebnisse

Für die hier analysierten Bildungsprozesse und Verteilungsmuster von sekundären anthropogenen Aerosolbestandteilen sind hauptsächlich folgende, in den vorangegangenen Kapiteln beschriebene Näherungen bzw. Prinzipien der Modellanwendung von Bedeutung:

a) Die meteorologischen Bedingungen, unter denen die Partikel und gasförmigen Vorläufersubstanzen chemisch verändert und transportiert werden, sind von einem kommerziellen meteorologischen Prognosemodell unter Einbeziehung der jeweiligen Beobachtungsdaten generiert worden. Die räumliche und zeitliche Feinauflösung dieser meteorologischen Felder berücksichtigt die topografischen Strukturen des Untergrundes in ausreichend hohem Maße. In Kapitel 5.1 wurde nachgewiesen, dass die Modellergebnisse die Beobachtungsdaten zuverlässig auch für größere Zeitintervalle widerspiegeln.

b) Transport und Diffusion von Luftbestandteilen sowie deren Reaktionsbedingungen sind vom meteorologischen Modell vorbestimmt und somit hier gut repräsentiert. Zur Beschreibung der chemischen Reaktionen wurden fundierte und in der einschlägigen Literatur standardmäßig genutzte Mechanismen verwendet, deren Reaktionskonstanten auf vielfacher Überprüfung beruhen. Eventuell auftretende systematische Differenzen in den Konzentrationen zwischen Modell und Beobachtung sind nach aller Erfahrung vor allem auf bestehende Defizite in den Emissionskatastern zurückzuführen. Das trifft auch auf die Erzeugung der Hintergrundkonzentrationen für das Untersuchungsgebiet durch die Mitteleuropa-Simulationen zu. Diese Abweichungen sind jedoch für die aktuelle Fragestellung von untergeordneter Bedeutung, da die zu untersuchenden Effekte von genau bekannten Emissionsdaten der Großfeuerungsanlagen (GFA) Boxberg und Lippendorf abhängen.

Die von den Kühltürmen primär emittierten Partikel ( $\text{PPM}_{2,5}$  und  $\text{PPM}_{\text{grob}}$ , zusammengefasst als  $\text{PPM}_{10}$ ) tragen unmittelbar zur  $\text{PM}_{10}$ -Masse bei. Das sekundär gebildete Ammoniumsulfat kondensiert irreversibel auf den vorhandenen Partikeln, und eventuell gebildetes Ammoniumnitrat steht im Gleichgewicht zwischen Partikel- und Gasphase. Alle diese Aerosolbestandteile werden in der folgenden Analyse einzeln dokumentiert und diskutiert. Für die zwei 8-tägigen Analysezeiträume wurden je zwei Simulationen durchgeführt: einmal mit Emissionen der GFA Boxberg und Lippendorf (Normallauf) und einmal ohne diese (Referenzlauf). Somit ist sichergestellt, dass der direkte oder indirekte Einfluss der GFA auf die Gesamtsituation durch Differenzbildung beschrieben werden kann. Zusätzlich wurde der jeweils 5-wöchige Normallauf mit einem virtuell emittierten nicht-reaktiven Tracer simuliert, um die Ausbreitung bzw. Herkunft der Abluftfahnen in unklaren Situationen nachweisen und statistische Aussagen für lokale Ereignisse treffen zu können (siehe Kapitel 6.1.2.2).

Grundsätzlich werden in den folgenden Analysen für alle Partikelkomponenten erstens die Gesamtbelastung (Abbildungsteile a) und zweitens die Konzentrationsdifferenzen als die alleinigen Beiträge der GFA (Abbildungsteile b) gezeigt. Die Sommer- und Winter-Analysen beginnen jeweils mit der Auswertung einzelner prägnanter Tagesabläufe, bevor eine Darstellung der relevanten (mittäglichen) Situationen im Verlauf einer ganzen Woche (8 Tage) im Überblick erfolgt. Die Sommerauswertung bezieht auch Konzentrationszeitreihen an ausgewählten Orten ein, um dort die Zusatzbelastung durch die GFA zu dokumentieren. Die in den Abbildungen gezeigten Modellergebnisse repräsentieren bodennahe, jedoch oberhalb des „surface layer“ lokalisierte Konzentrationswerte (bis auf zwei explizit ausgewiesene Ausnahmen im Winter). Angegebene Tageszeiten verstehen sich stets als Mitteleuropäische Zeitangaben (d.h. ohne Berücksichtigung der Sommerzeit).

## 6.1 Sommer-Analyse

Die für eine detaillierte Auswertung gewählte 8-tägige Sommerperiode vom 15. bis 22. August 2002 weist relativ einheitliche meteorologische Verhältnisse mit zumeist intensiver Sonneneinstrahlung, Höchsttemperaturen zwischen 25°C und 30°C sowie geringen bis mäßigen Winden aus unterschiedlichen Richtungen auf. Im Unterschied zu der in Kapitel 5.2 für Validierungszwecke verwendeten realen Emissionssituation mit um 50% verringerten Emissionen der GFA Lippendorf im August/September 2002 wurden für die Ermittlung der Zusatzbelastung in diesem Kapitel die Jahresmittelwerte der Emissionen angenommen.

Drei typische Tage dieser Episode wurden in ihrem Tagesgang 3-stündlich verfolgt und näher ausgewertet (Kapitel 6.1.1). Sie unterscheiden sich trotz gewisser Wind-, Bewölkungs- und Temperaturschwankungen überraschend wenig in der prinzipiellen Gestalt, Intensität und Zusammensetzung der Abluftfahnen, so dass hauptsächlich nur die Windrichtung jeweils eine andere ist. In Ergänzung zur Einzelanalyse der Kühlturmfahnen wurden anschließend die Hauptergebnisse für alle simulierten Tage zusammengestellt sowie die Auswirkungen der Abluftfahnen an bestimmten Orten zeitlich untersucht und auch statistisch verallgemeinert (Kapitel 6.1.2).

### 6.1.1 Einzeltage

*Sommertag S1 (15. August 2002): Siehe Abbildungen 30-35 in Kapitel 6.1.1.1*

Während dieses Tages herrschte leichter, wenig veränderlicher Nordwind bei Temperaturen bis 25°C und teilweise bewölktem Himmel. Gegenüber sonnenscheinreicheren Tagen sind sowohl die Konvektion als auch die photooxidativen Reaktionen etwas weniger ausgeprägt. Der Turbulenzzustand der Atmosphäre führt zu vertikal mäandrierenden Abluftfahnen, was sich in Bodennähe u.U. als nichtstetige Konzentrationsverteilung in Ausbreitungsrichtung bemerkbar macht.

*Sommertag S2 (18. August 2002): Siehe Abbildungen 36-41 in Kapitel 6.1.1.2*

Dieser Tag zeichnet sich durch heiteren Himmel, heiße Temperaturen bis 30 °C und ebenfalls nur leichten Wind, diesmal aus östlicher Richtung, aus.

*Sommertag S3 (20. August 2002): Siehe Abbildungen 42-48 in Kapitel 6.1.1.3*

Der Sommertag S3 gleicht in den Einstrahlungsbedingungen und erreichten Temperaturen dem Tag S2, er ist allerdings von etwas stärkerem Südostwind geprägt.

*Diskussion:*

Zuerst soll am Beispiel der  $SO_2$ -Konzentrationen das generelle Ausbreitungsverhalten der Abluftfahnen diskutiert werden. Im Allgemeinen wechselt die thermische Stabilität der Atmosphäre an den Sommertagen zwischen stabil in Erdbodennähe bei Nacht und instabil in der gesamten Grenzschicht am Tage. Das führt dazu, dass nachts die effektiven Kühlturmhöhen über der stabilen Grenzschicht liegen und die Kühlturmfahnen den Erdboden nicht erreichen. Am Tage, wenn die strahlungsgetriebene bodennahe Konvektion einsetzt und die gesamte planetare Grenzschicht vertikal durchmischt, erreichen die  $SO_2$ -Emissionen der GFA trotz Verdünnung innerhalb der Fahne den Erdboden. In den Mittagsstunden fällt zudem die unmittelbar am Standort der Kühltürme aufsetzende Abluftfahne auf, während sie sonst erst in einiger Entfernung davon den Boden erreicht. Obwohl die Kühltürme in gleich bleibender Stärke emittieren, beginnt am Abend bereits wieder das allmähliche Entfernen der sichtbaren

Fahne vom Standort und das Abkoppeln vom Boden, so dass die Situation wieder derjenigen in der Nacht und am frühen Morgen ähnelt. Im Vergleich der beiden GFA macht sich oft ein etwas früheres Aufsetzen der Boxberger Abluftfahne auf Grund der dort teilweise geringeren Bauhöhe bemerkbar, allerdings beherrschen in der Mittagszeit die ungefähr doppelt so starken Lippendorfer Emissionen das Bild. Die den Abluftfahnen zuzuschreibenden  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen in Bodennähe erreichen an den Tagen S1 und S2 etwa  $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$  und am Tag S3 auf Grund des stärkeren Windes nur noch  $30 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . Beim Vergleich der Abbildungen für die Absolutwerte (a) und die Differenzwerte (b) ist leicht zu erkennen, dass die Umgebungskonzentrationen gegenüber den direkten Beiträgen praktisch vernachlässigbar sind.

Nach den Abbildungen für  $\text{SO}_2$  allgemein und als Differenzeffekt werden die Abbildungen der Komponenten SULFAT, NITRAT,  $\text{PPM}_{10}$  sowie die resultierenden  $\text{PM}_{10}$ -Konzentrationen gezeigt und deren Beiträge, verursacht durch die GFA, diskutiert. Die primär emittierten freien Sulfationen spielen in der weiteren Auswertung keine Rolle, da sie in schneller, irreversibler Reaktion vollständig zu Ammoniumsulfat reagieren und somit nicht mehr explizit in Erscheinung treten. Es liegt in der Natur der Sache, dass sich die Fahnen aller Komponenten in der Form gleichen und deshalb nur die spezifischen Konzentrationswerte zu betrachten sind. Da sich zeigen wird, dass das Ammoniumsulfat den entscheidenden Beitrag liefert, soll dessen Bildung im Folgenden etwas ausführlicher diskutiert werden.

Die Bildung des *Ammoniumsulfats* vollzieht sich auf zwei Wegen. Der erste ist die unmittelbare, schnelle und effektive Reaktion der primär emittierten freien Sulfat-Ionen mit Ammoniak. Der zweite ist die Reaktion von  $\text{NH}_3$  mit  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , wobei die Schwefelsäure im wesentlichen am Tage erst durch die Reaktion von OH mit  $\text{SO}_2$  entstehen muss. Diese Bildung ist aber wenig effektiv und beträgt maximal 2 bis 3% pro Stunde. Die direkt emittierten freien Sulfationen sind also der bestimmende Reaktionspartner. Die verlässliche Angabe der Emissionsmenge dieser Spezies ist deshalb für die Abschätzung der sekundären Ammoniumsulfatbildung unerlässlich. Mit den angegebenen Emissionsmengen für  $\text{SO}_2$  und der Information, dass 12% davon als freie Sulfat-Ionen im Abgas vorliegen, ergeben sich als maximale Ammoniumsulfat-Konzentrationen am Tage in Bodennähe ca.  $15 \mu\text{g}/\text{m}^3$  für die Tage S1 und S2 und ca.  $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$  für den Tag S3, die eine entsprechende Zusatzbelastung in der näheren Umgebung der GFA bedeuten. Vergleichbare Konzentrationen liegen auch in der nächtlichen abgehobenen Abgasfahne vor, die wiederum zur großräumigen Belastung, also einer Erhöhung der Hintergrundkonzentration beitragen.

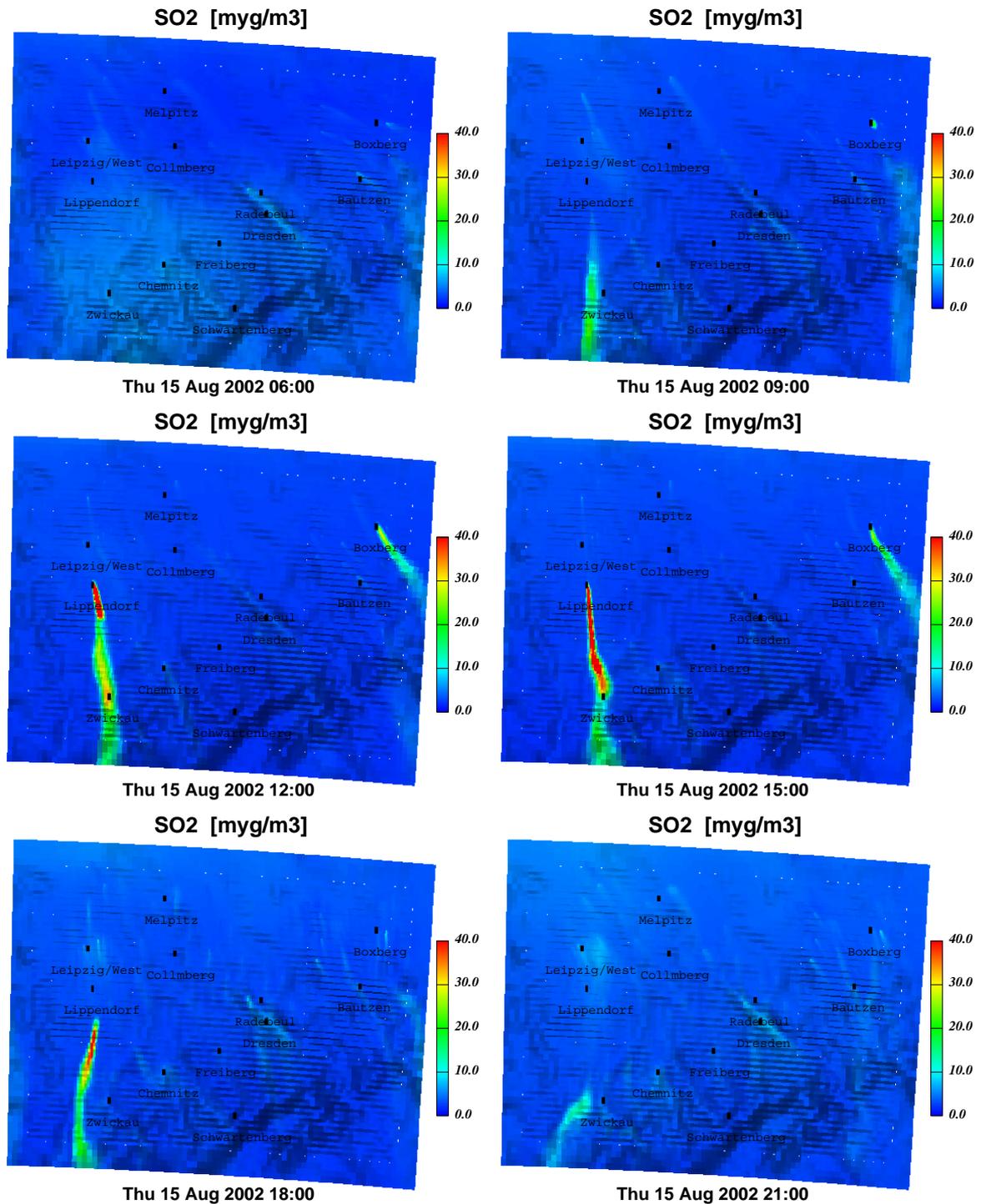
Die *NITRAT*-Bildung vollzieht sich im betrachteten Fall über die Reaktion von  $\text{HNO}_3$  mit  $\text{NH}_3$  zu Ammoniumnitrat. Die Salpetersäure wird über verschiedene Reaktionspfade tags wie auch nachts aus den  $\text{NO}_x$ -Emissionen der GFA gebildet. Zwei Effekte beeinflussen dabei die Ammoniumnitratbildung, so dass diese etwas komplizierter zu diskutieren ist. Zum einen steht sie in Konkurrenz zur Ammoniumsulfatbildung, die generell schneller und irreversibel bei gleichzeitigem  $\text{NH}_3$ -Verbrauch verläuft und einer Nitratbildung nur überschüssiges Ammoniak überlässt. Falls sich dann Ammoniumnitrat bei Verfügbarkeit von ausreichend Ammoniak bilden sollte, stellt sich zum anderen ein temperatur- und feuchteabhängiges Gleichgewicht zwischen Partikel- und Gasphase ein. Dieses Gleichgewicht ist bei warmen, trockenen Bedingungen eindeutig zur Gasphase hin verschoben. An Sommertagen ist also kaum mit der Bildung von partikulärem Ammoniumnitrat in der Fahne zu rechnen. Tatsächlich zeigen die Bilder kein zusätzliches Ammoniumnitrat sowie mehr oder weniger vollständig verbrauchtes Ammoniak in der Abluftfahne. Das gilt am Tage in der bodennahen Abluftfahne genauso wie in der Nacht in der abgehobenen Fahne oberhalb der stabilen nächtlichen Grenzschicht (nicht gezeigt). Das Ergebnis beweist, dass die *Ammoniumnitrat*- gegenüber der *Ammoniumsulfat*bildung in Konkurrenz um das gemeinsam notwendige  $\text{NH}_3$

unterlegen ist. Die Emissionen der GFA bilden also kein sekundäres NITRAT, das zur massenmäßigen Zunahme der  $PM_{10}$ -Belastung beitragen würde. Abschließend sei erwähnt, dass nicht Mangel an  $NO_x$  der Grund für fehlende NITRAT-Bildung ist. Als Beleg wird die  $NO_2$ -Verteilung für den Tag S3 dargestellt, die deutlich sichtbare  $NO_2$ -Konzentrationen in der Fahne erkennen lässt.

Die *Primäremission* von Partikeln aus den Kühltürmen ist vergleichsweise gering. Die maximale  $PPM_{10}$ -Zusatzbelastung ist danach in der bodennahen Abgasfahne nicht größer als  $2 \mu\text{g}/\text{m}^3$  an den Tagen S1 und S2 und  $1 \mu\text{g}/\text{m}^3$  am Tag S3.

Wenn man sich abschließend die Werte für die eigentliche Zielgröße  $PM_{10}$  anschaut, kann man erkennen, dass die kühlturnbedingten Zusatzkonzentrationen an Tagen mit hoher Belastung zwischen  $10$  und  $15 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (in Ausnahmesituationen vielleicht gering darüber) liegen.

## 6.1.1.1 Sommertag S1

Abbildung 30 (a): SO<sub>2</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S1)

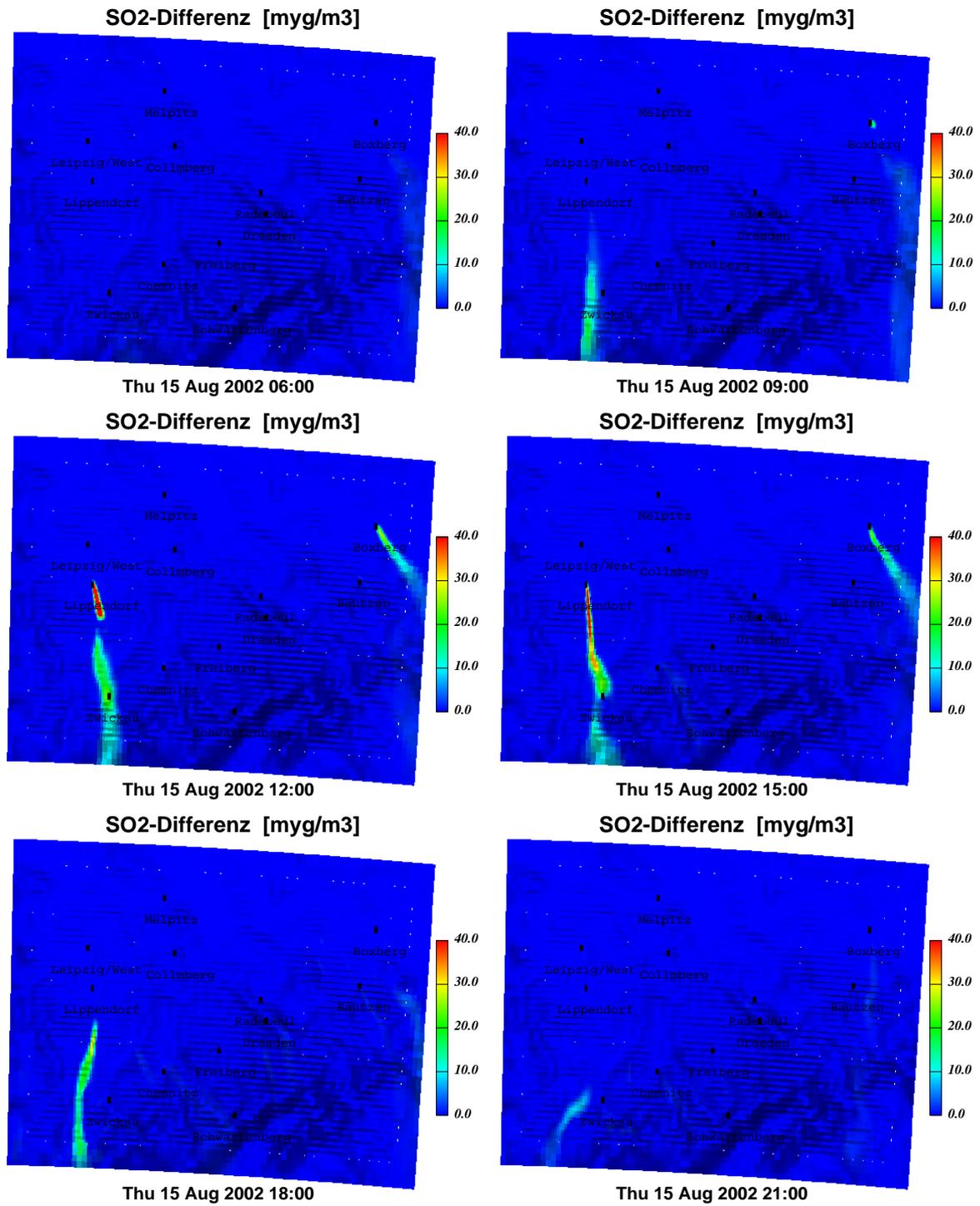


Abbildung 30 (b): SO<sub>2</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S1)

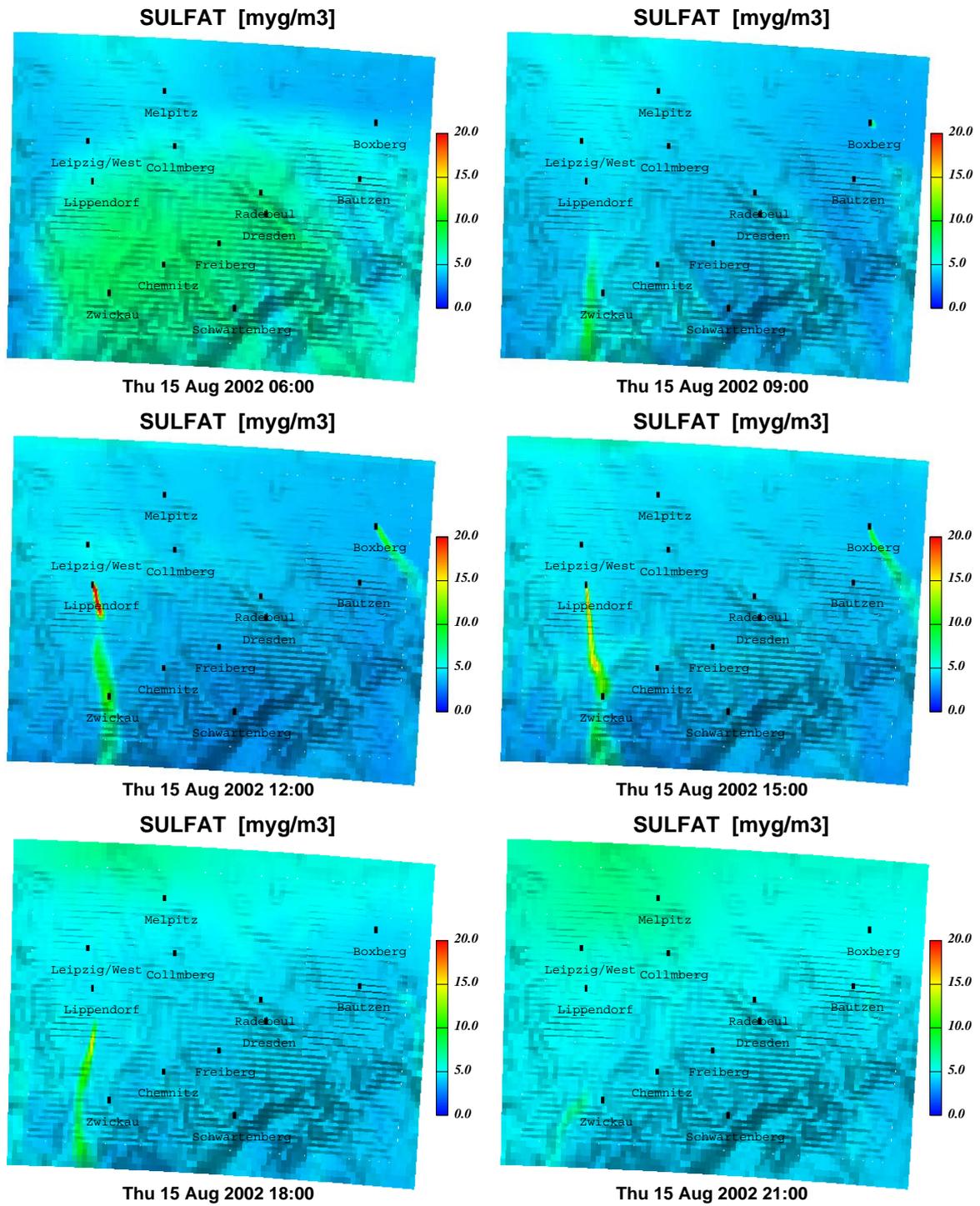


Abbildung 31 (a): SULFAT im Tagesverlauf (Sommertag S1)

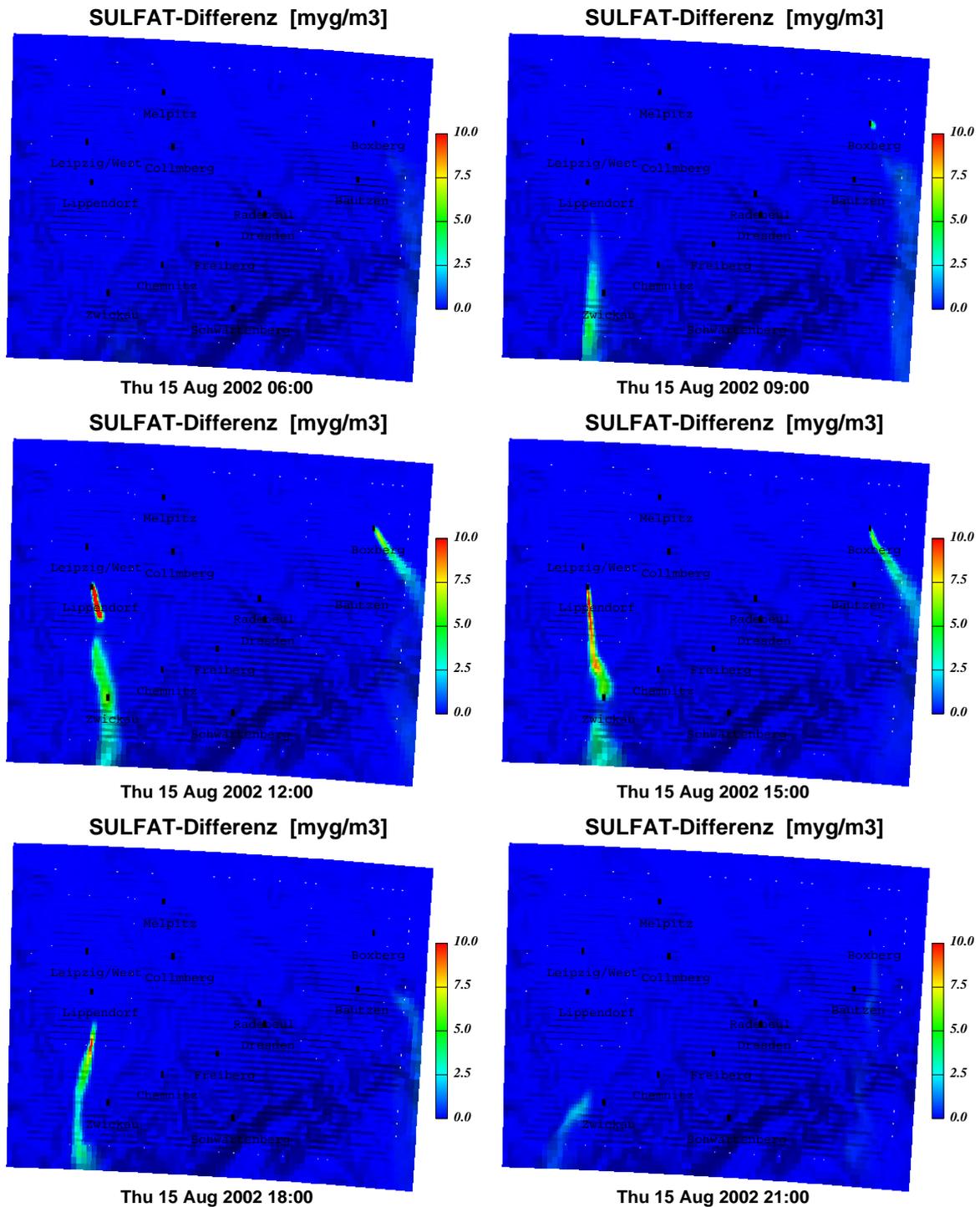


Abbildung 31 (b): SULFAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S1)

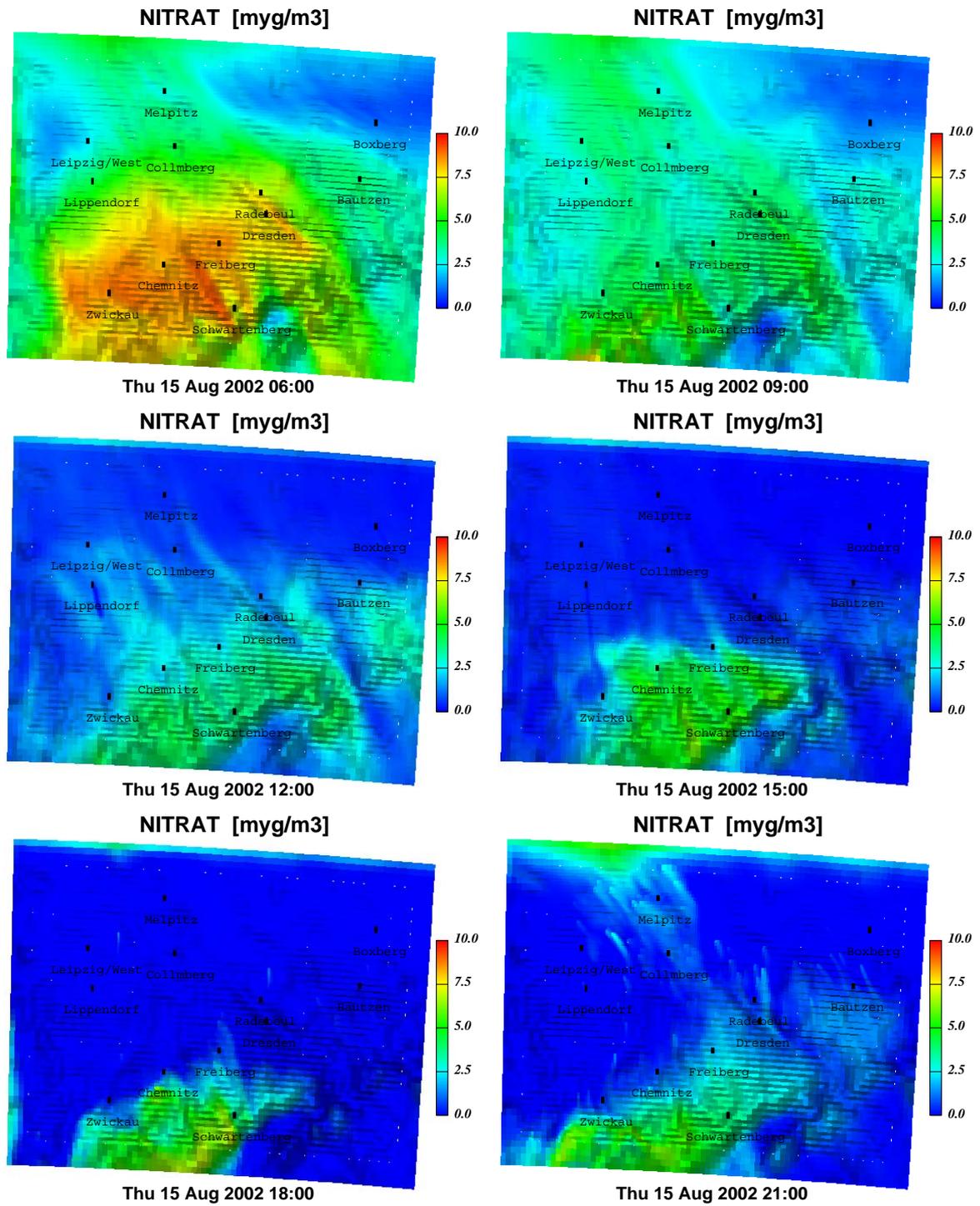


Abbildung 32 (a): NITRAT im Tagesverlauf (Sommertag S1)

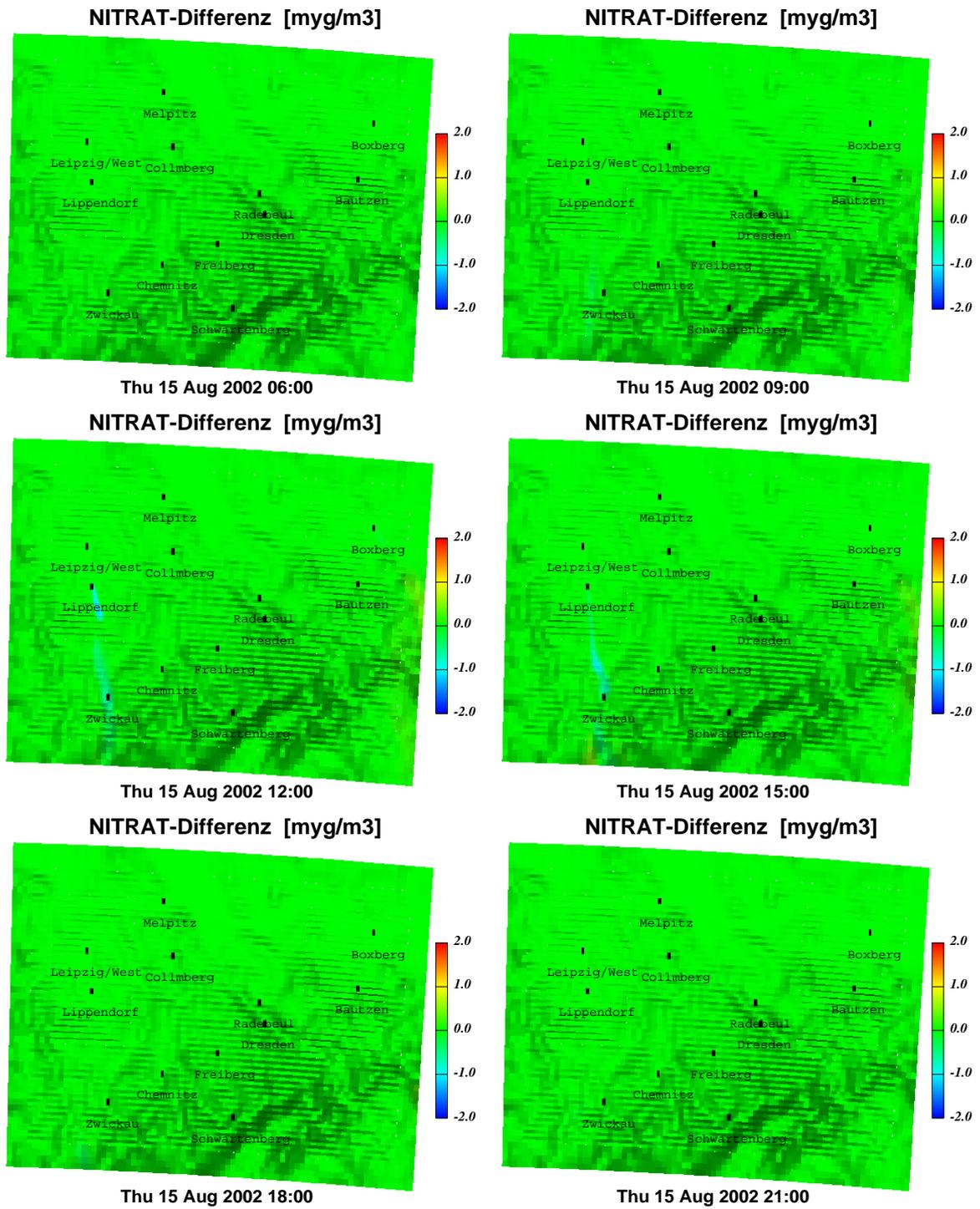


Abbildung 32 (b): NITRAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S1)

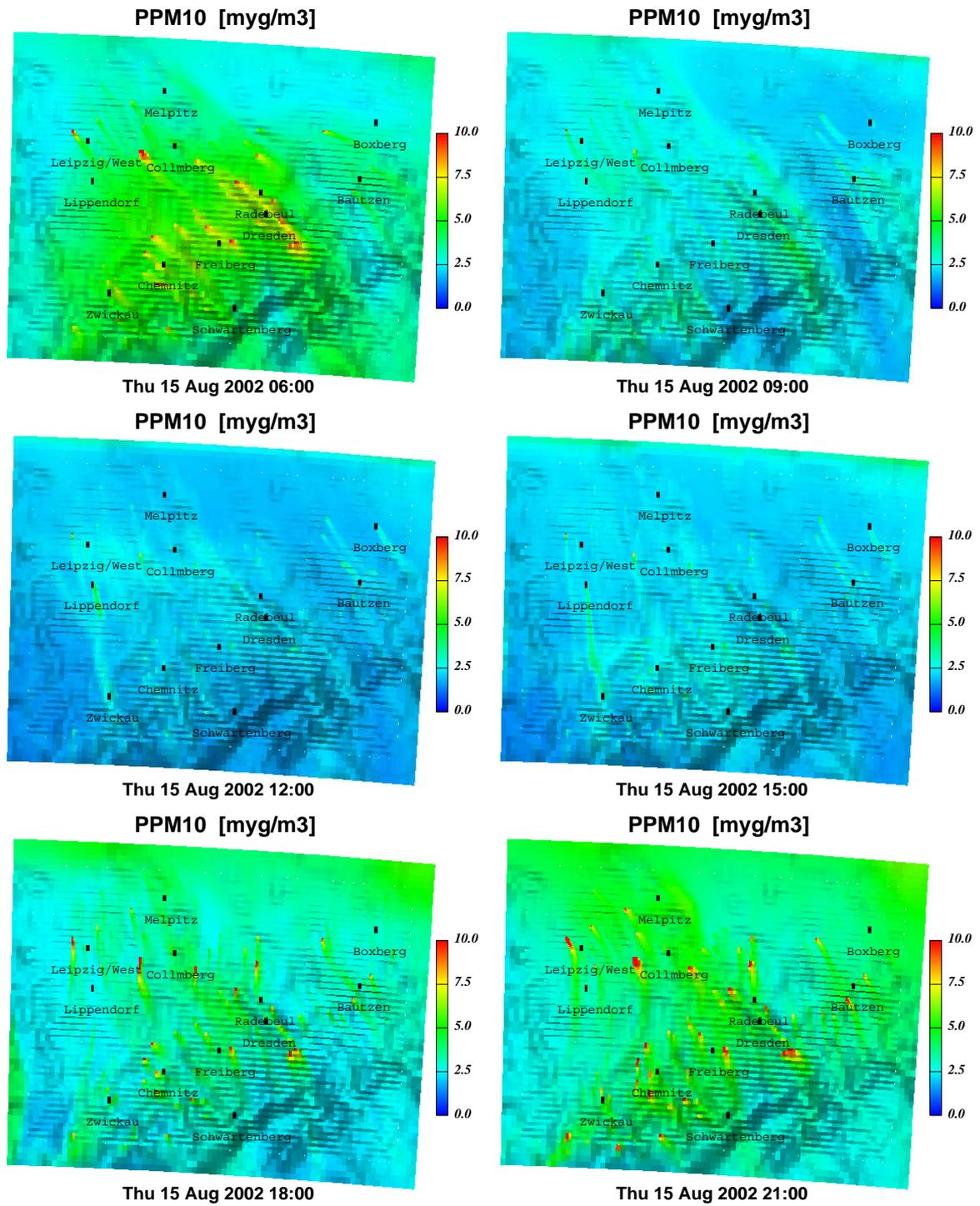


Abbildung 33 (a): PPM<sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S1)

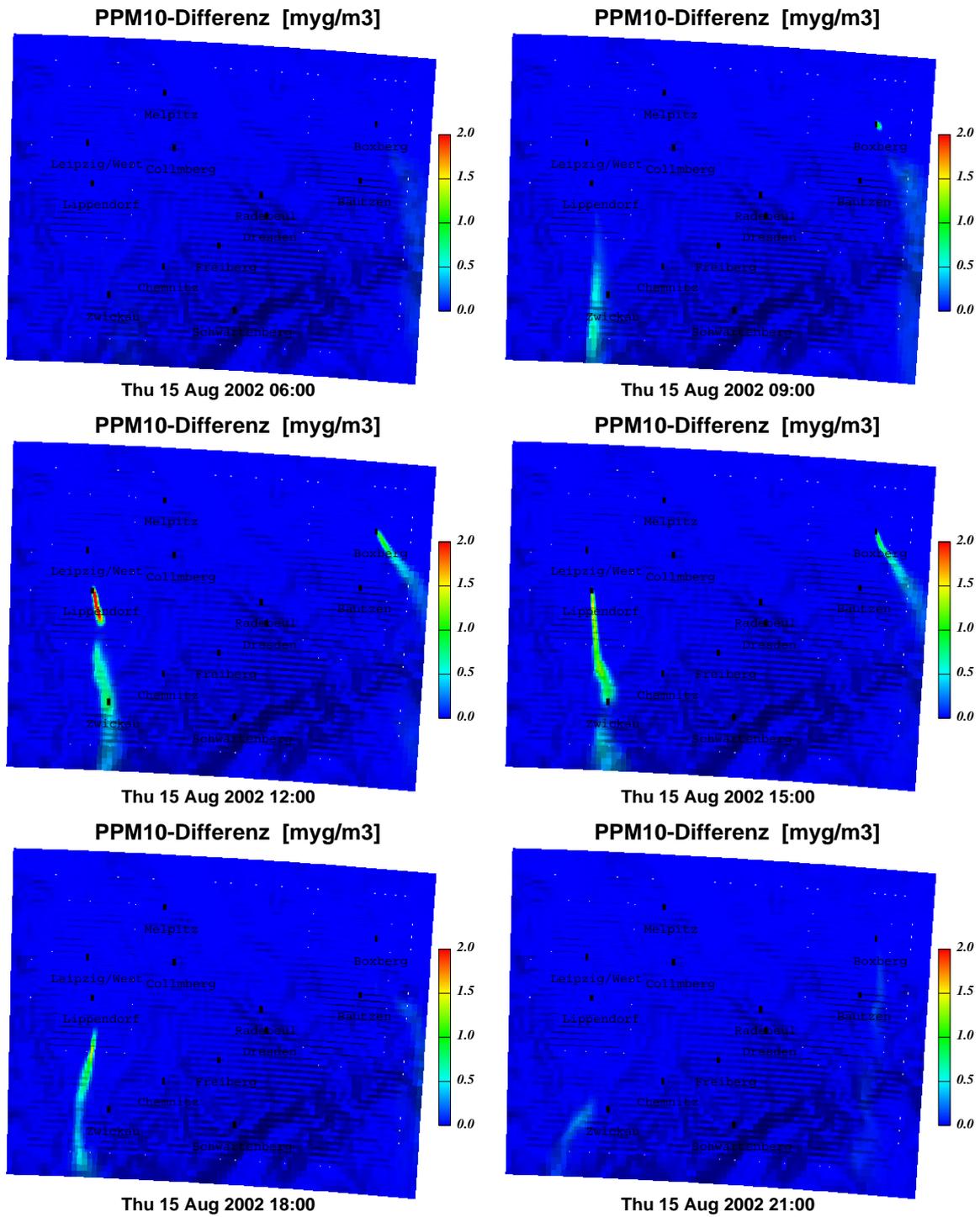


Abbildung 33 (b): PPM<sub>10</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S1)

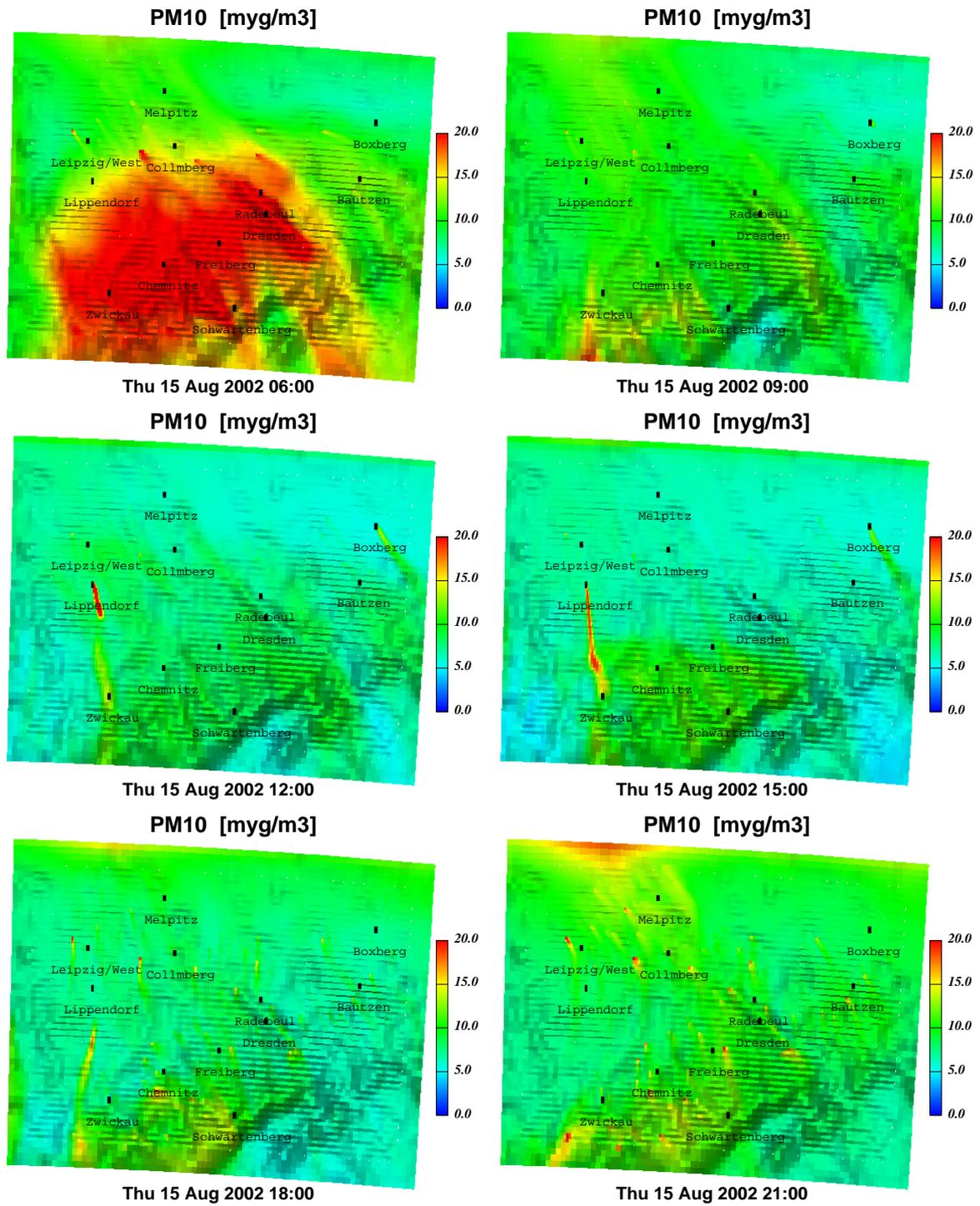


Abbildung 34 (a):  $\text{PM}_{10}$  im Tagesverlauf (Sommertag S1)

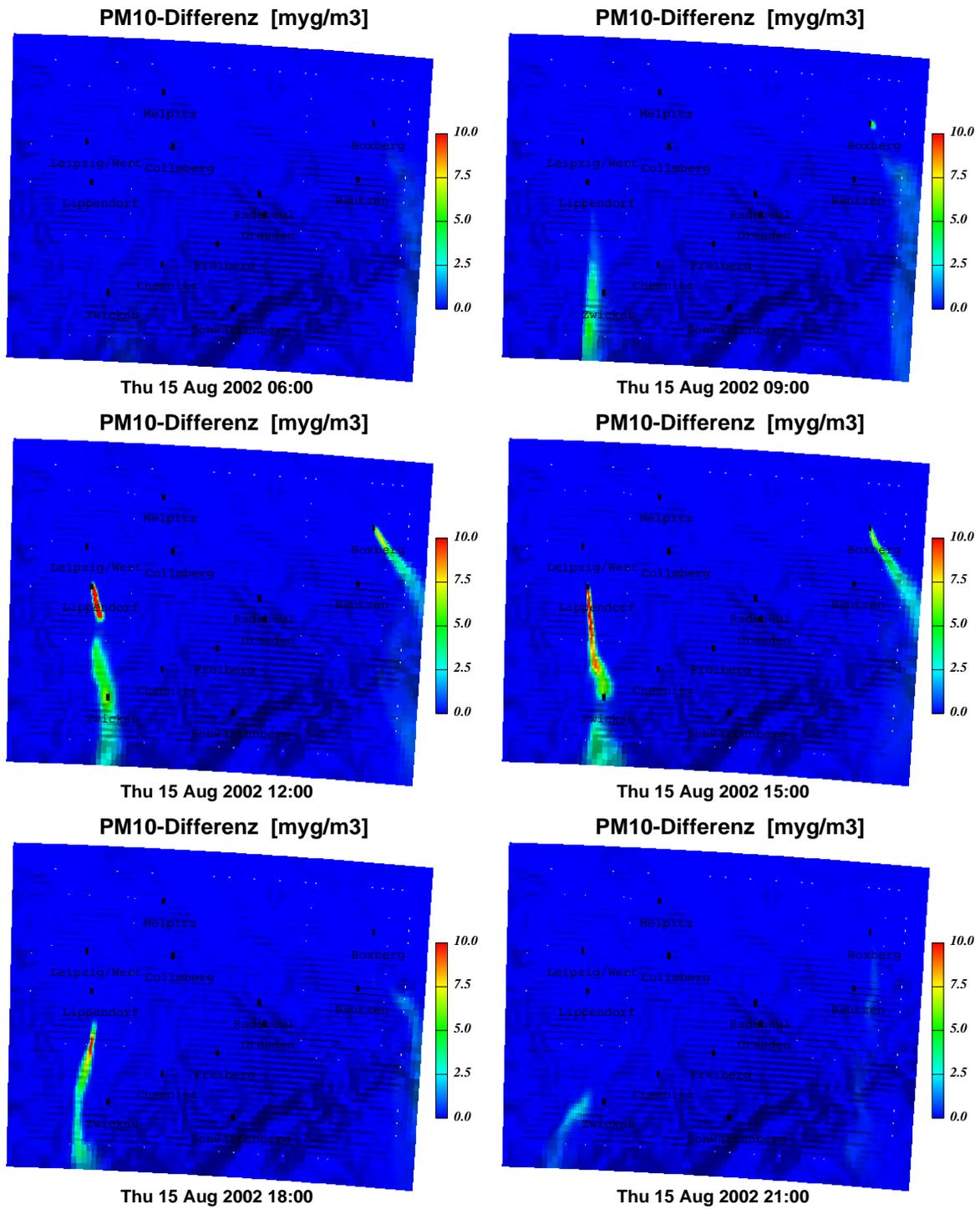


Abbildung 34 (b): PM<sub>10</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S1)

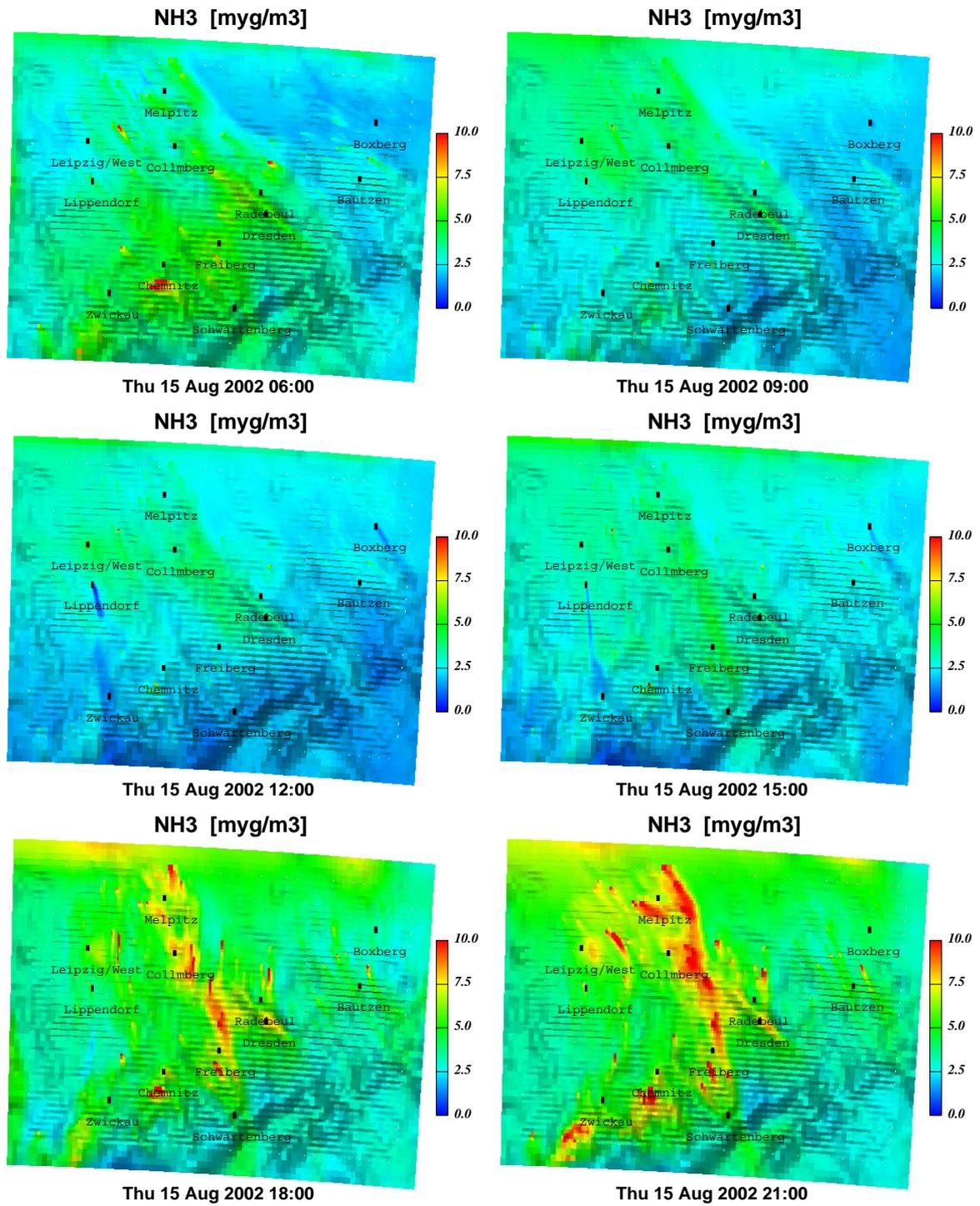
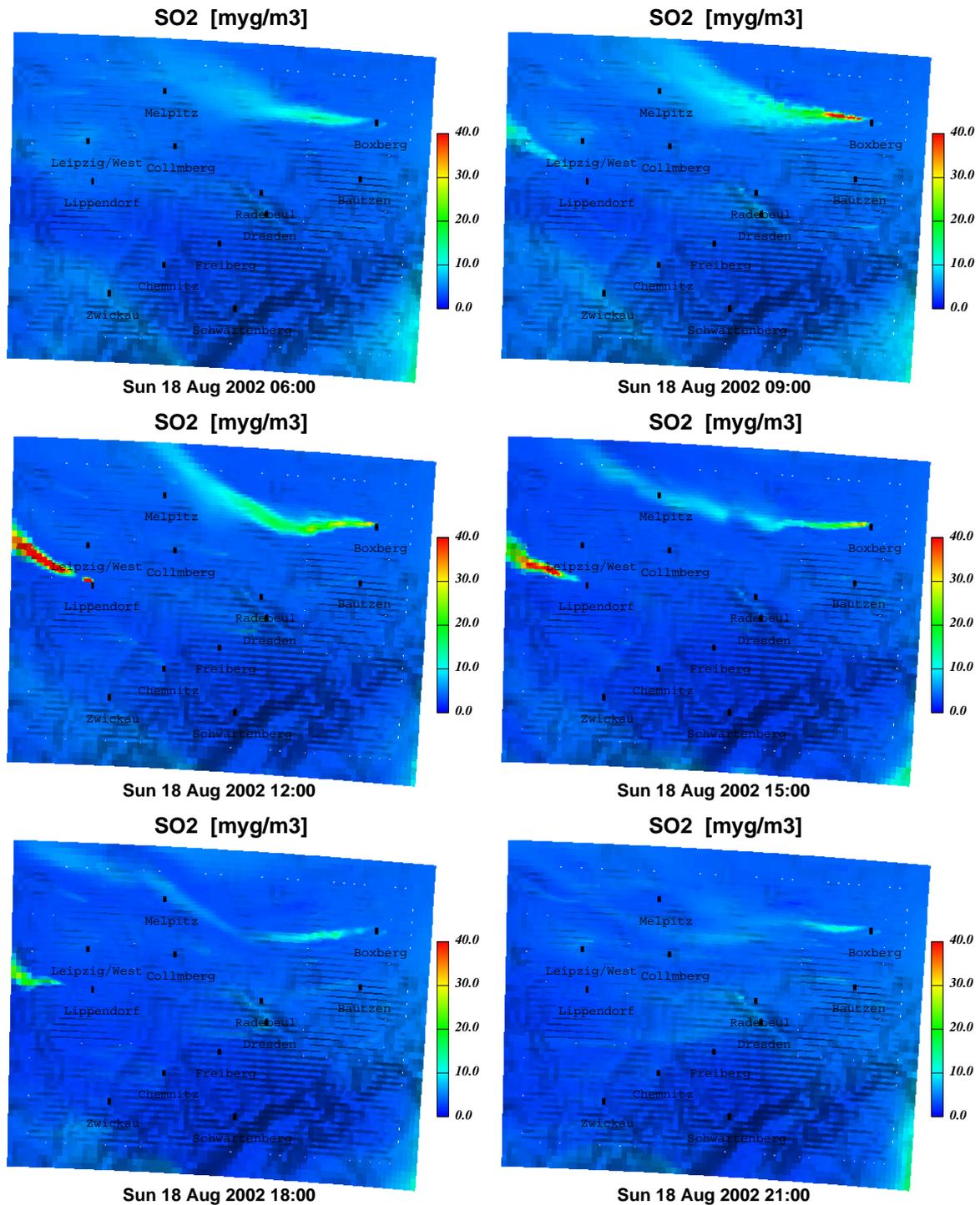


Abbildung 35:  $\text{NH}_3$  im Tagesverlauf (Sommertag S1)



## 6.1.1.2 Sommertag S2

Abbildung 36 (a): SO<sub>2</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S2)

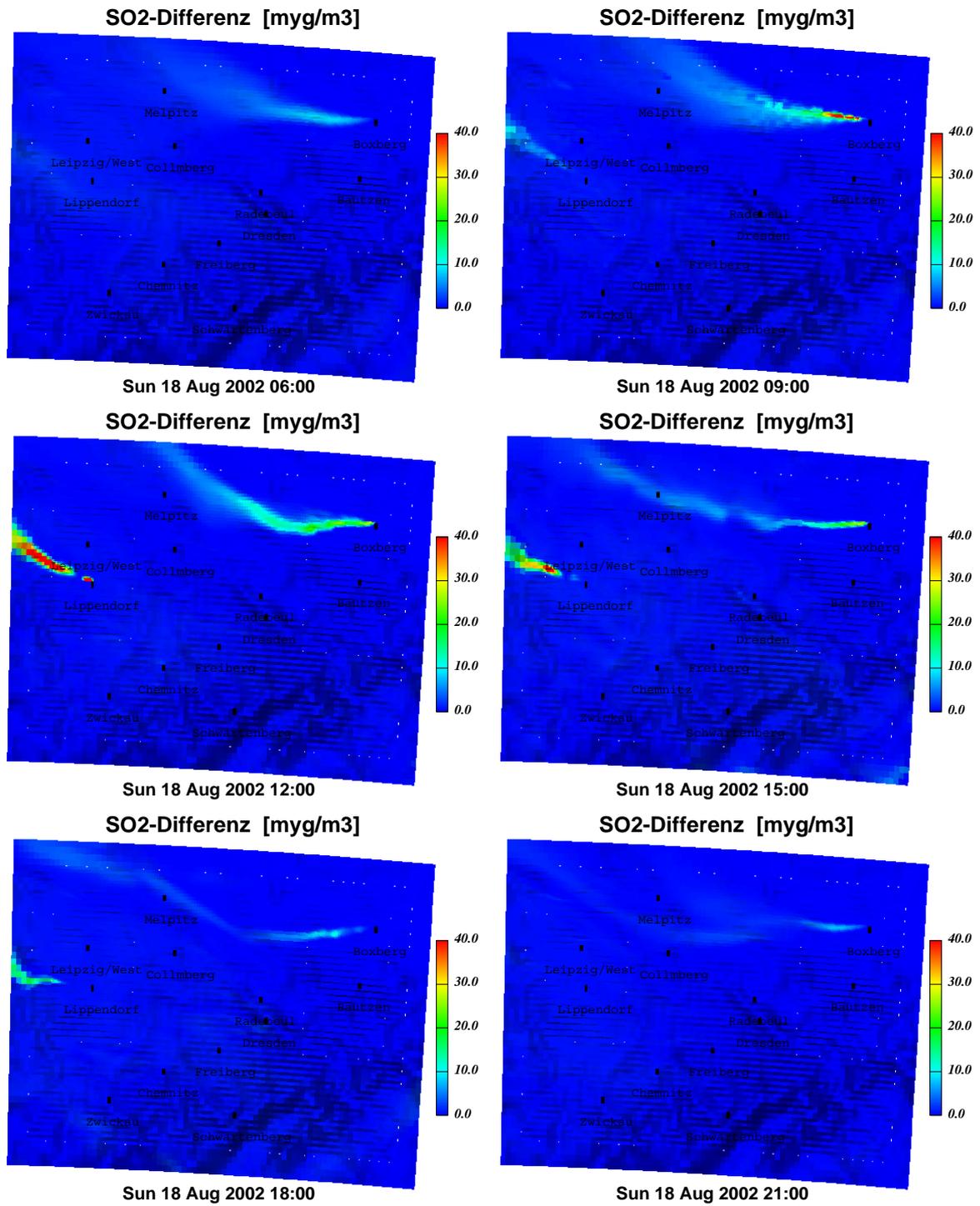


Abbildung 36 (b): SO<sub>2</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S2)

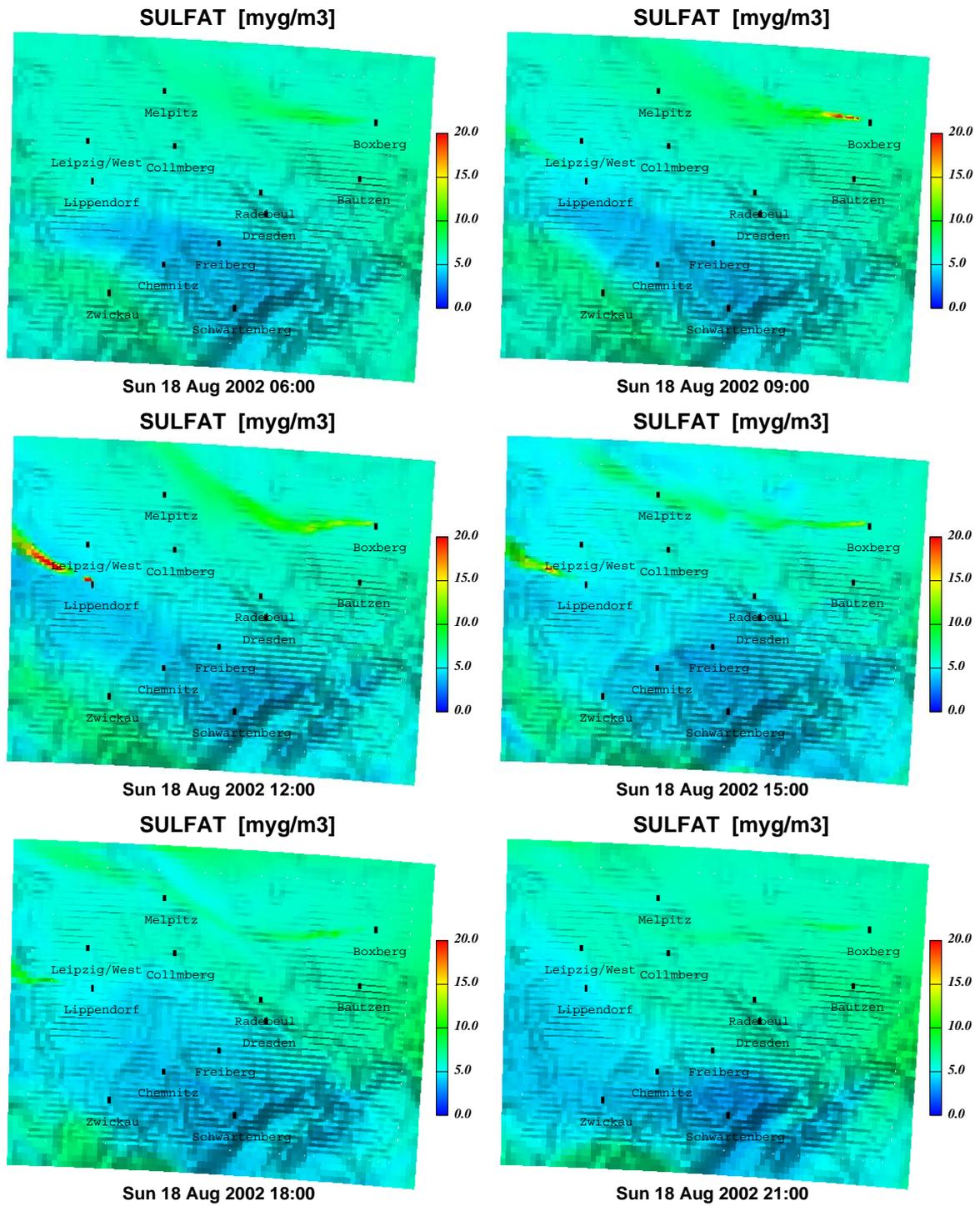


Abbildung 37 (a): SULFAT im Tagesverlauf (Sommertag S2)

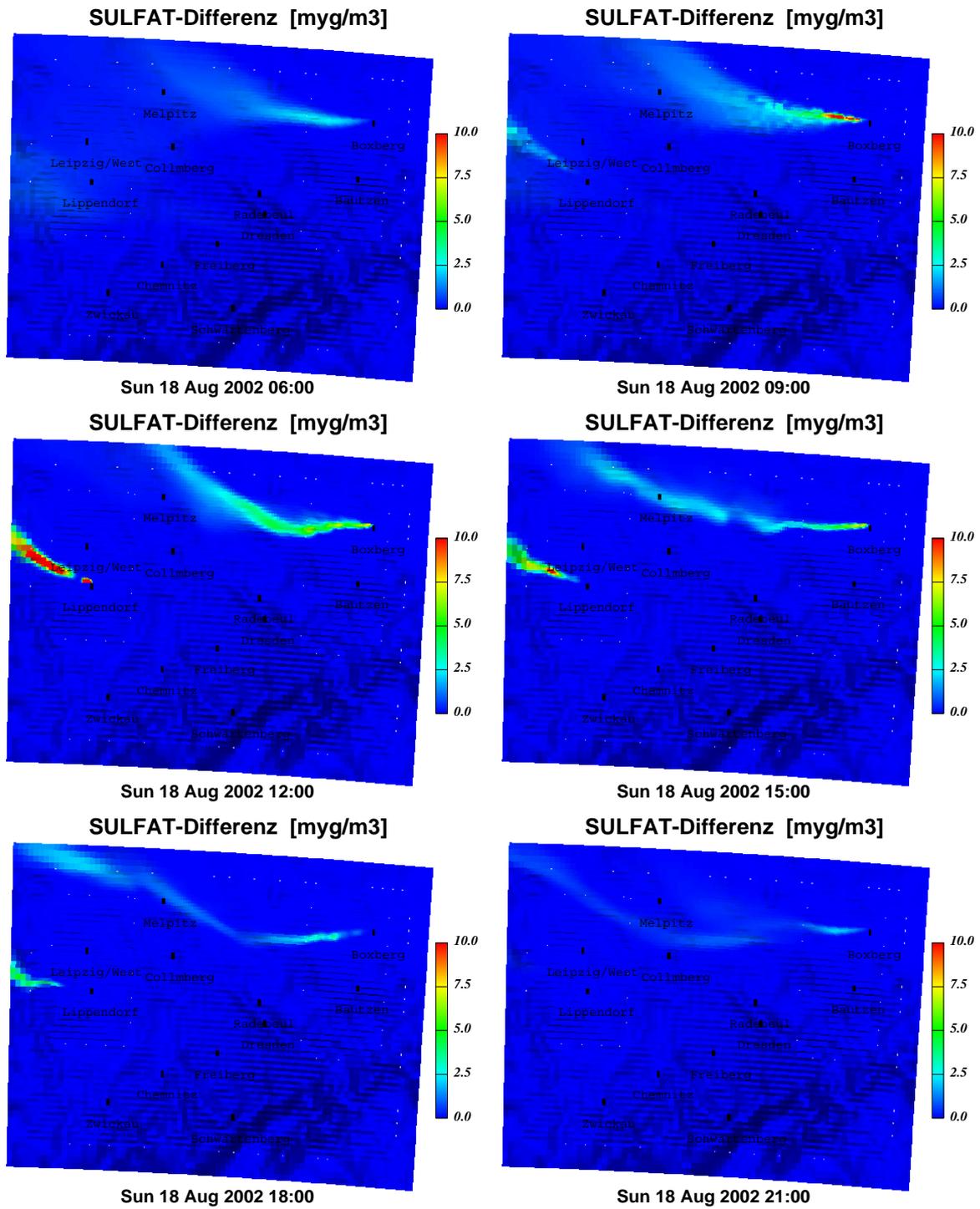


Abbildung 37 (b): SULFAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S2)

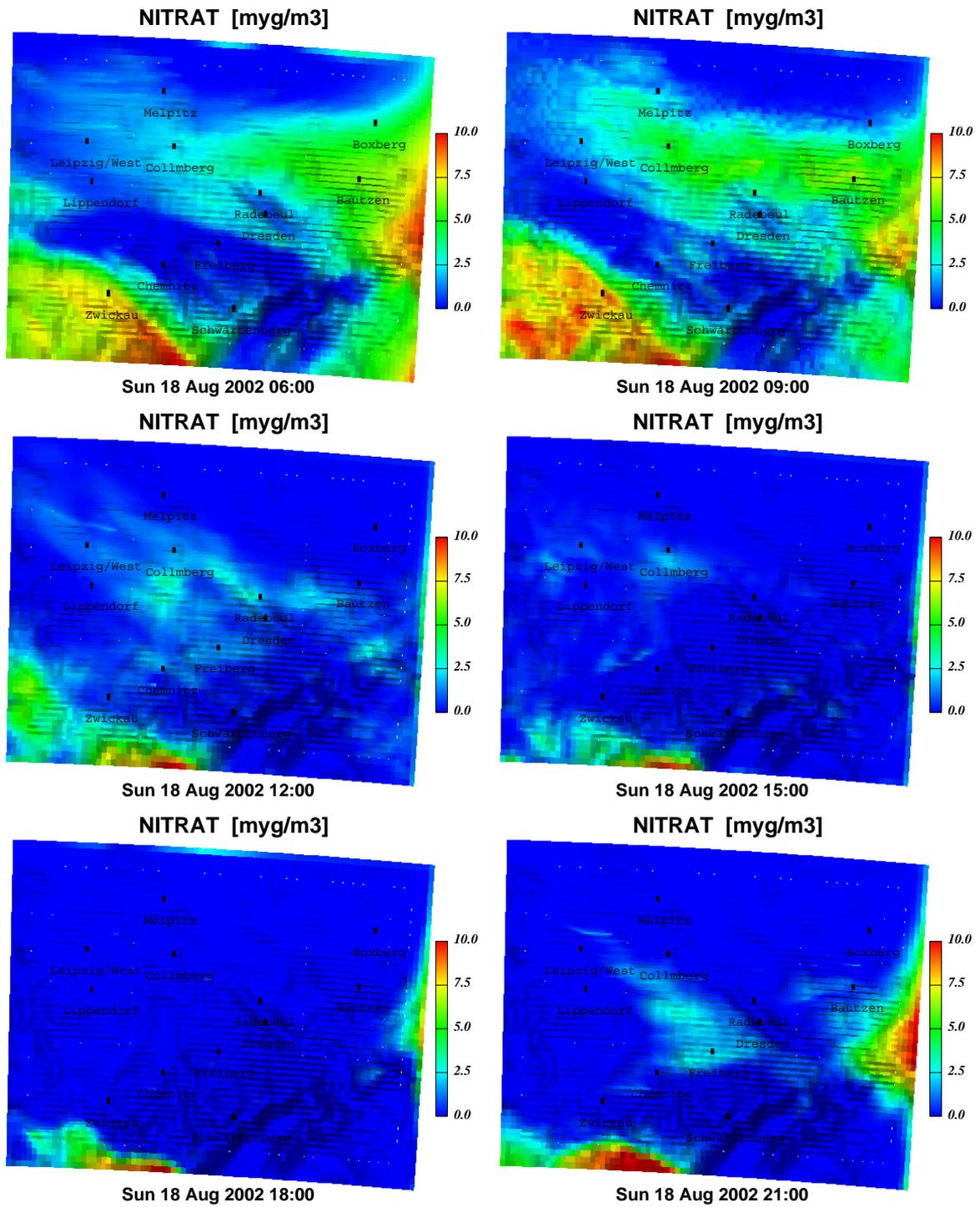


Abbildung 38 (a): NITRAT im Tagesverlauf (Sommertag S2)

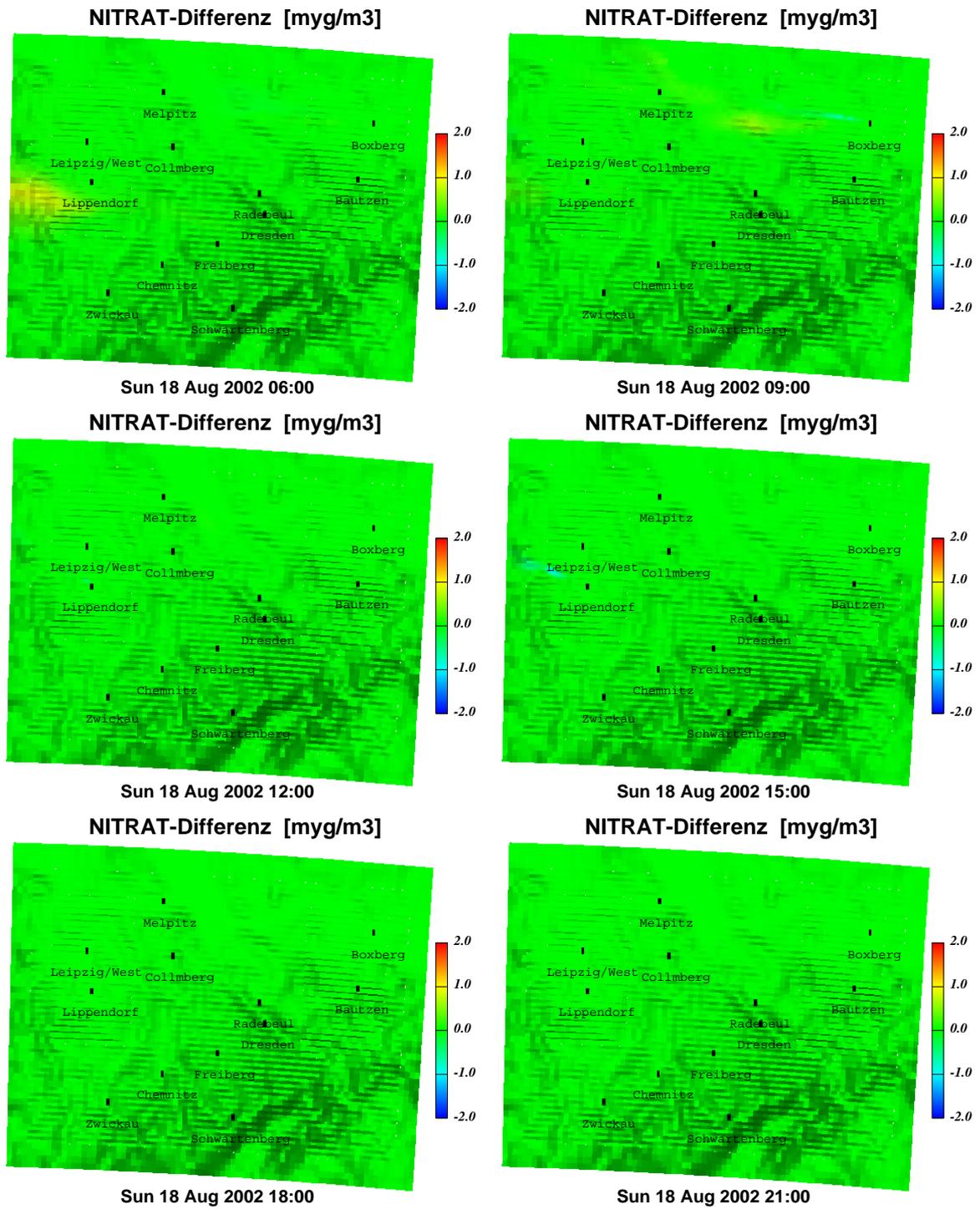


Abbildung 38 (b): NITRAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S2)

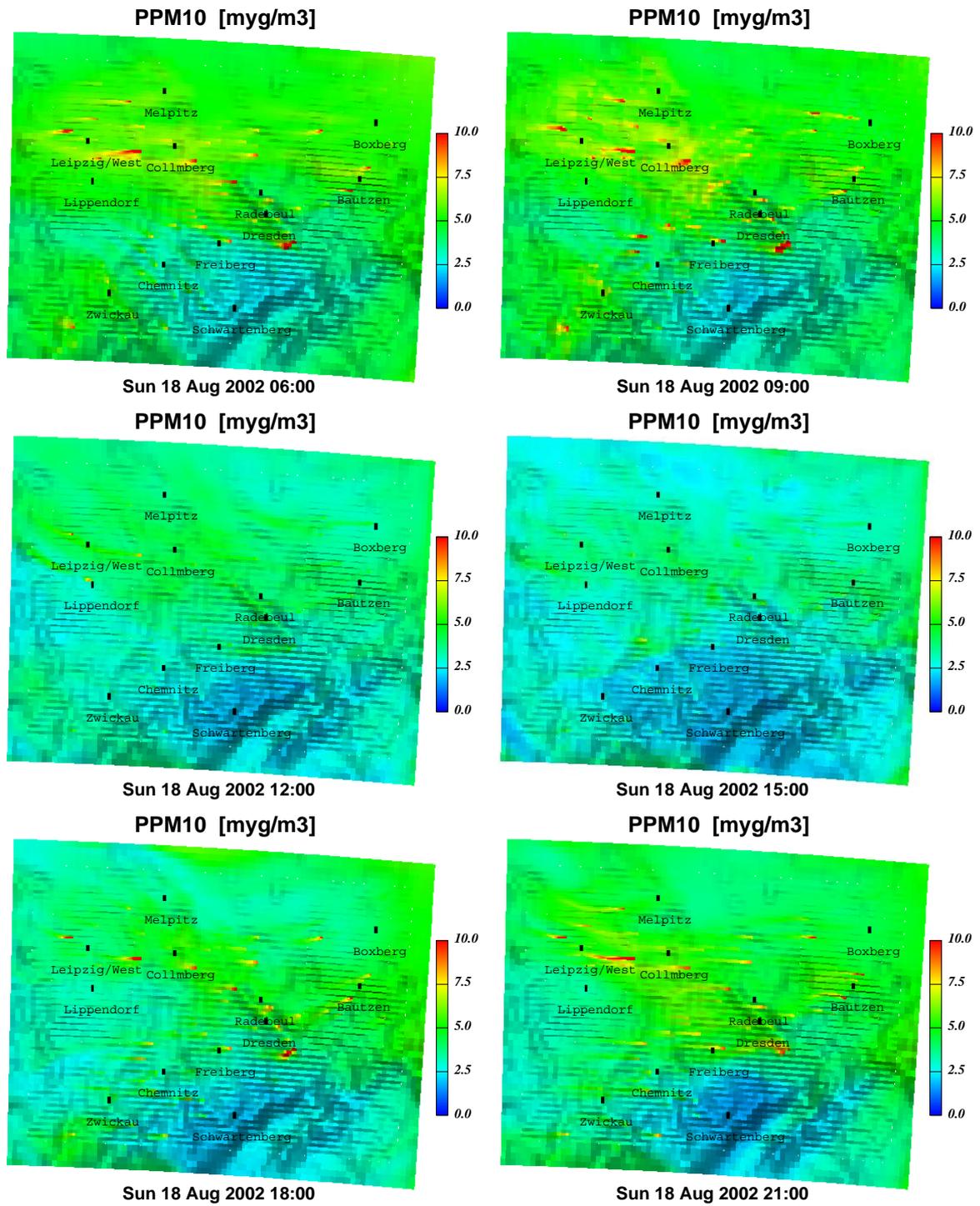


Abbildung 39 (a): PPM<sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S2)

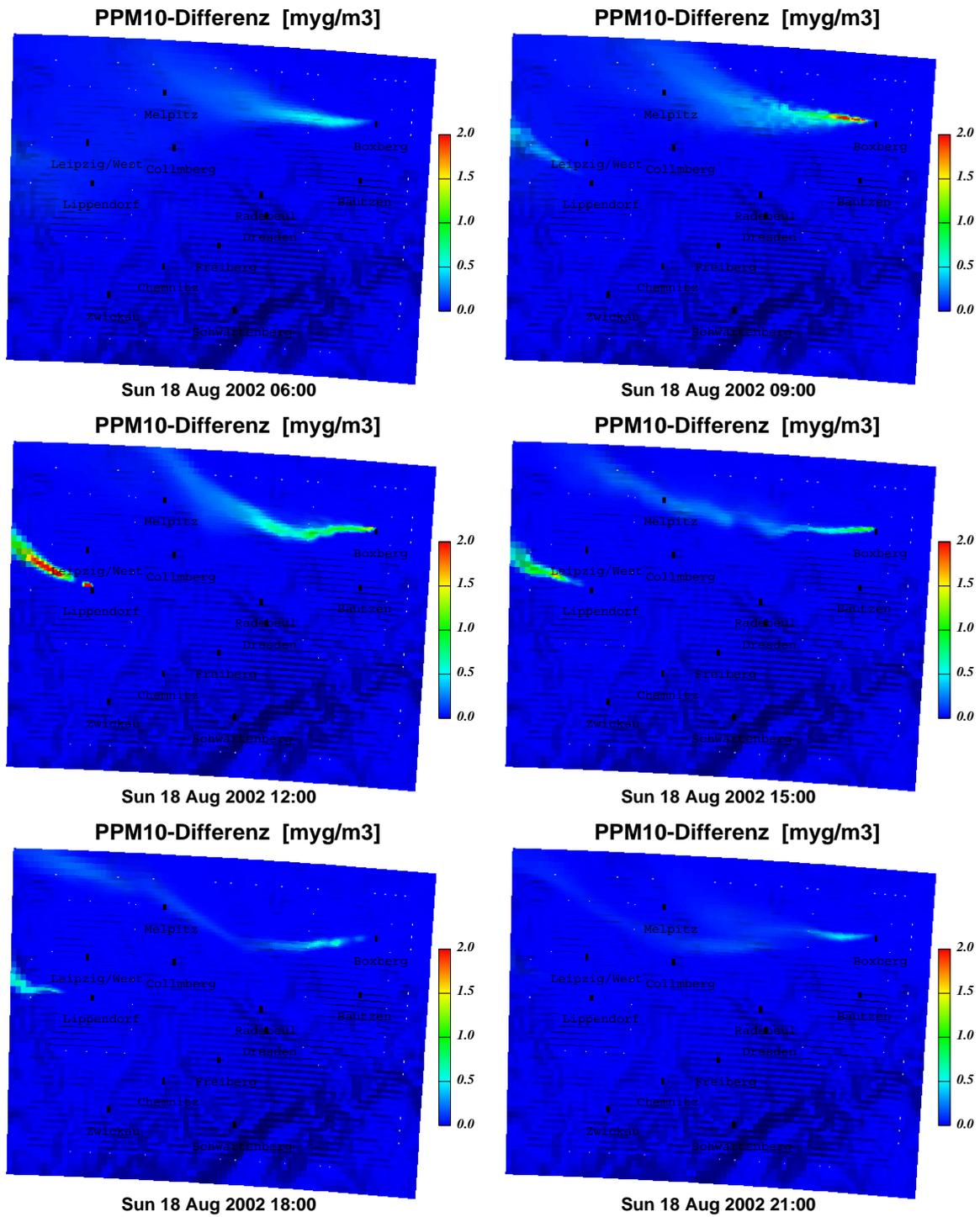


Abbildung 39 (b): PPM<sub>10</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S2)

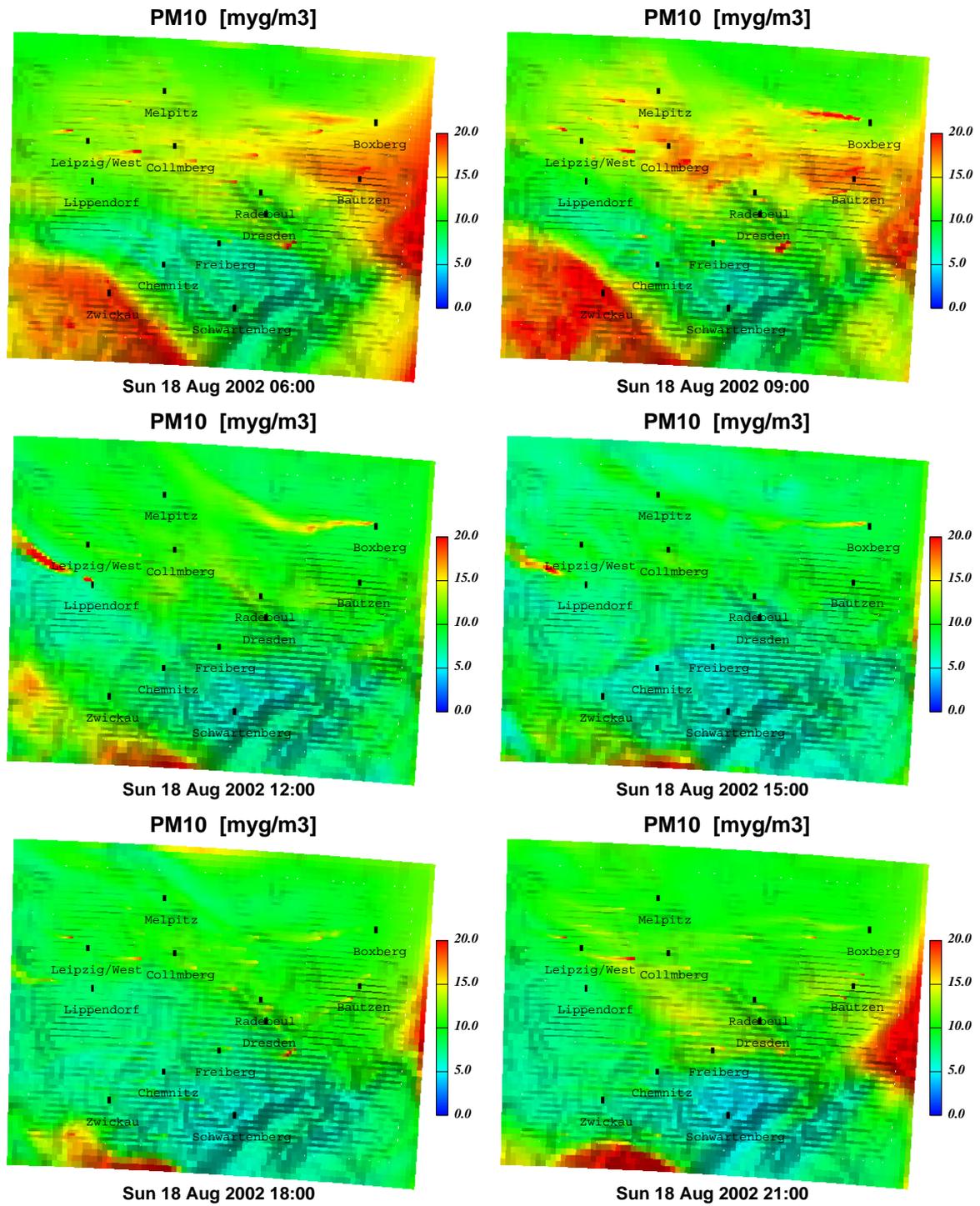


Abbildung 40 (a): PM<sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S2)

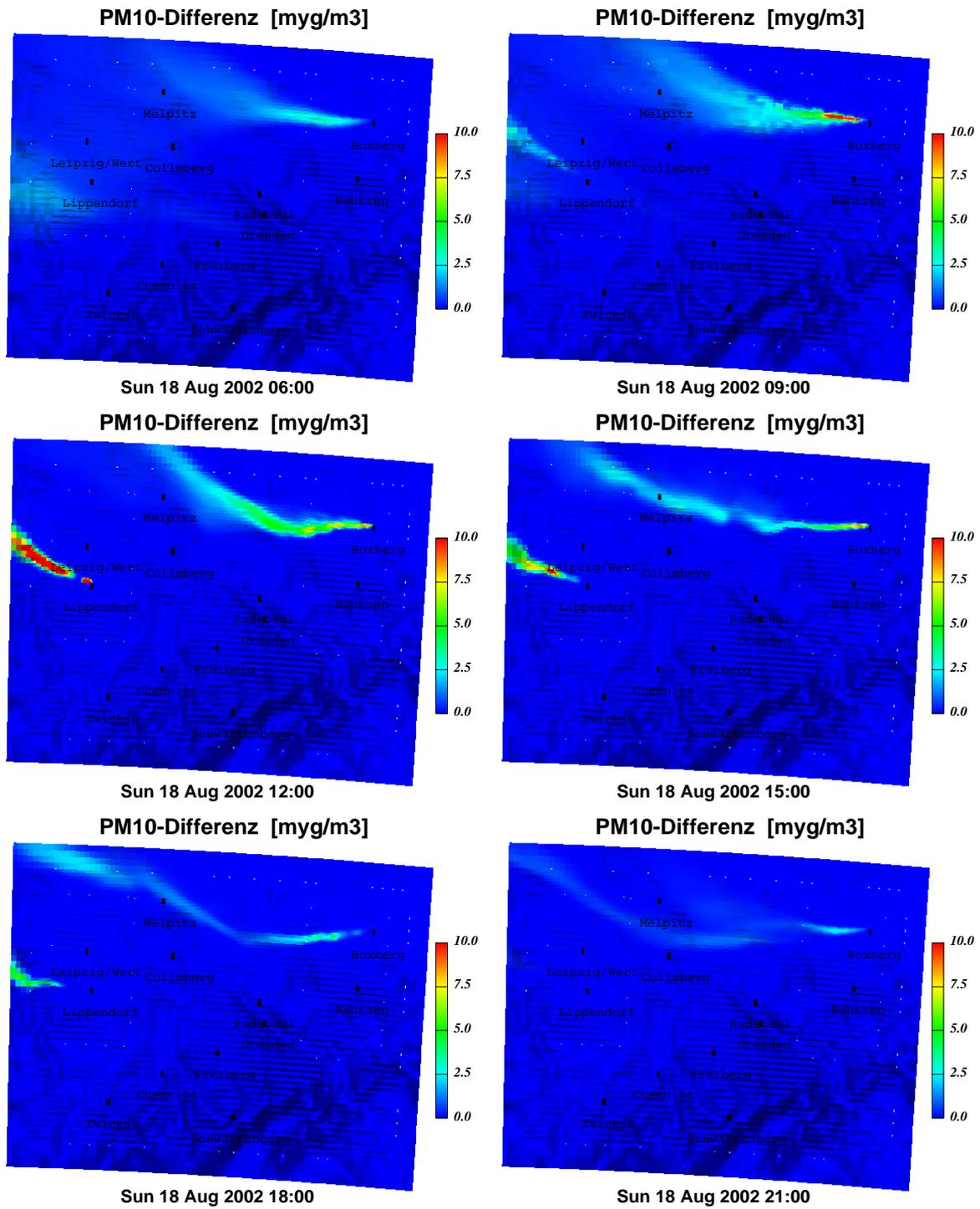


Abbildung 40 (b): PM<sub>10</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S2)

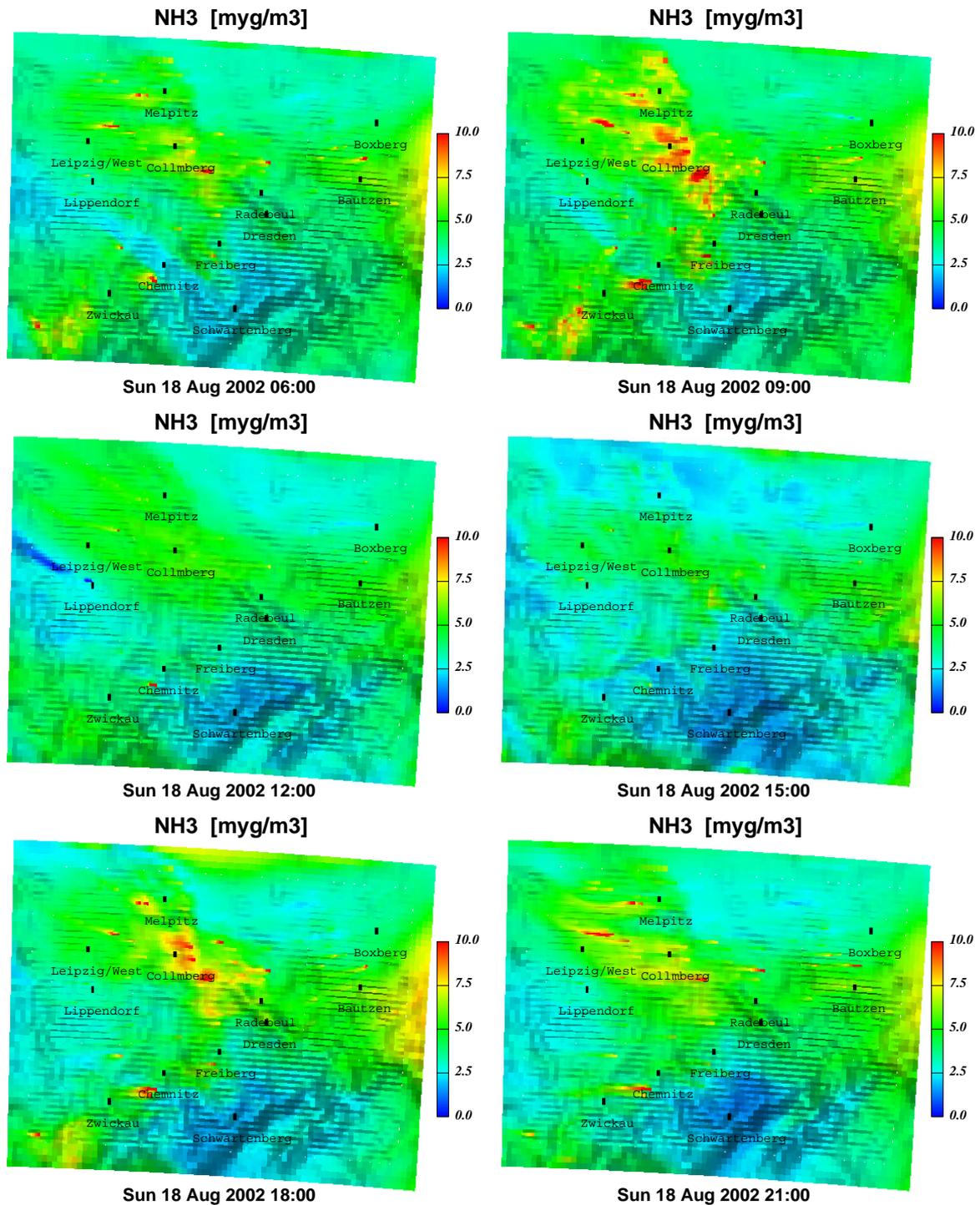


Abbildung 41:  $\text{NH}_3$  im Tagesverlauf (Sommertag S2)



6.1.1.3 Sommertag S3

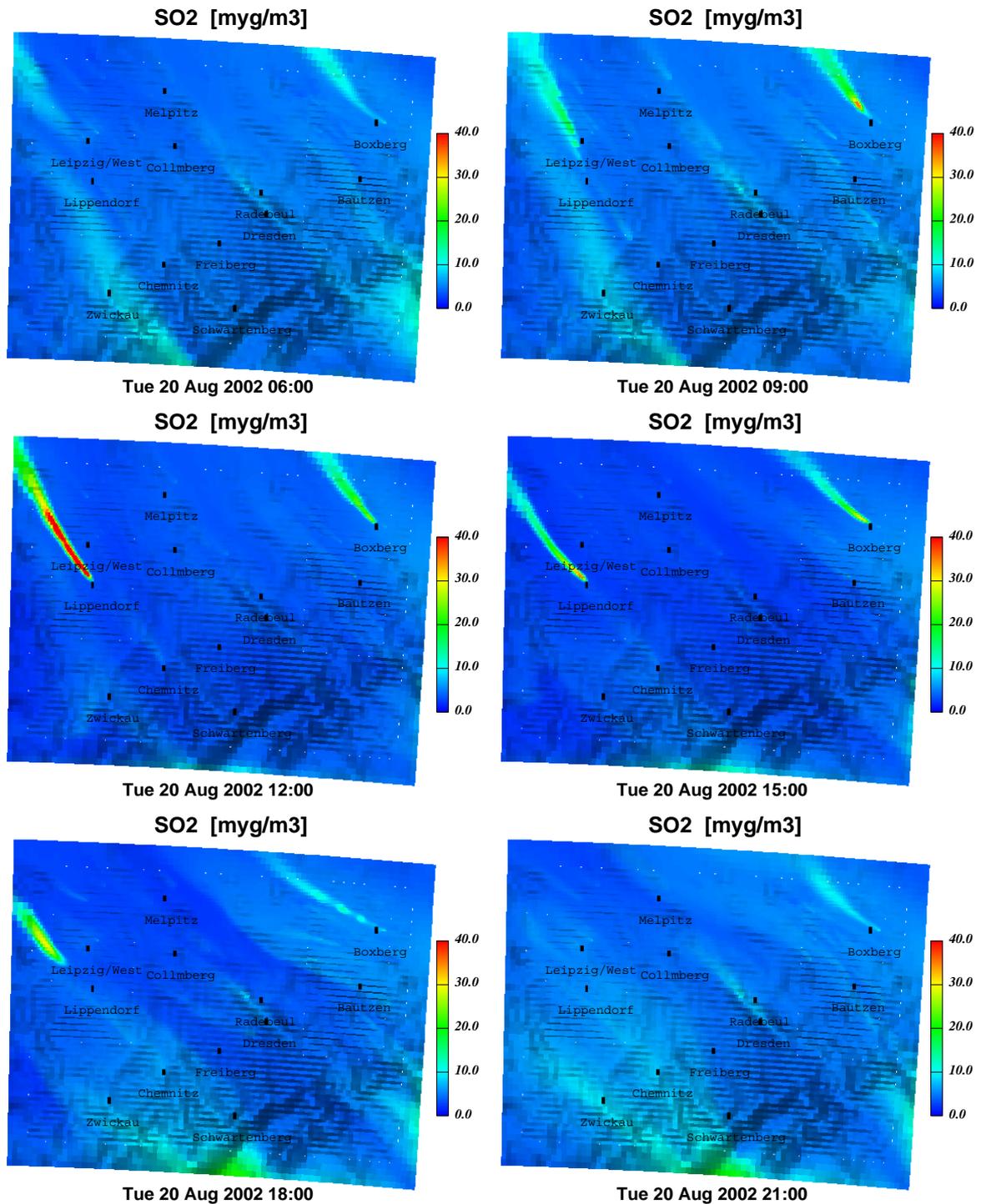


Abbildung 42 (a): SO<sub>2</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S3)

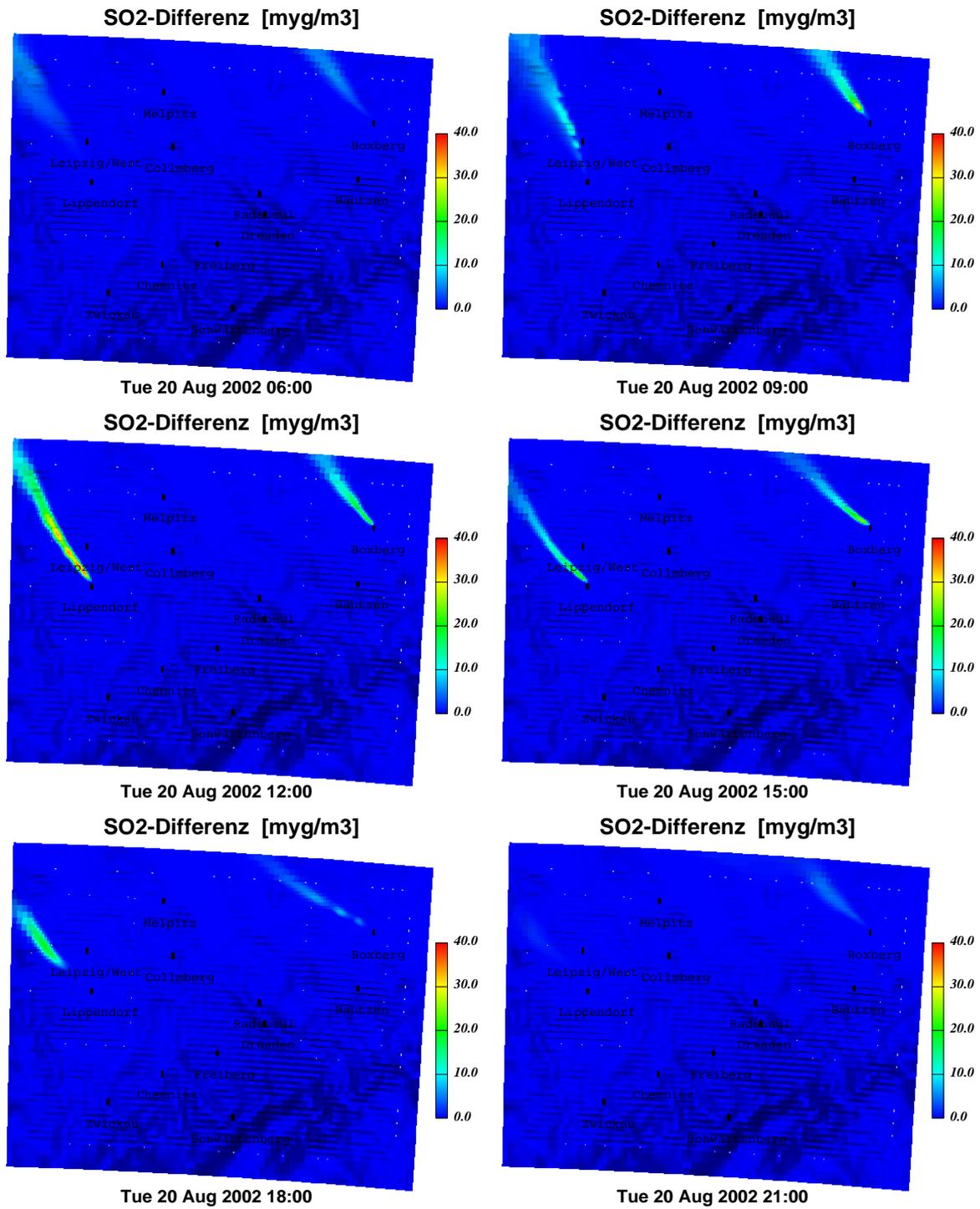


Abbildung 42 (b): SO<sub>2</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S3)

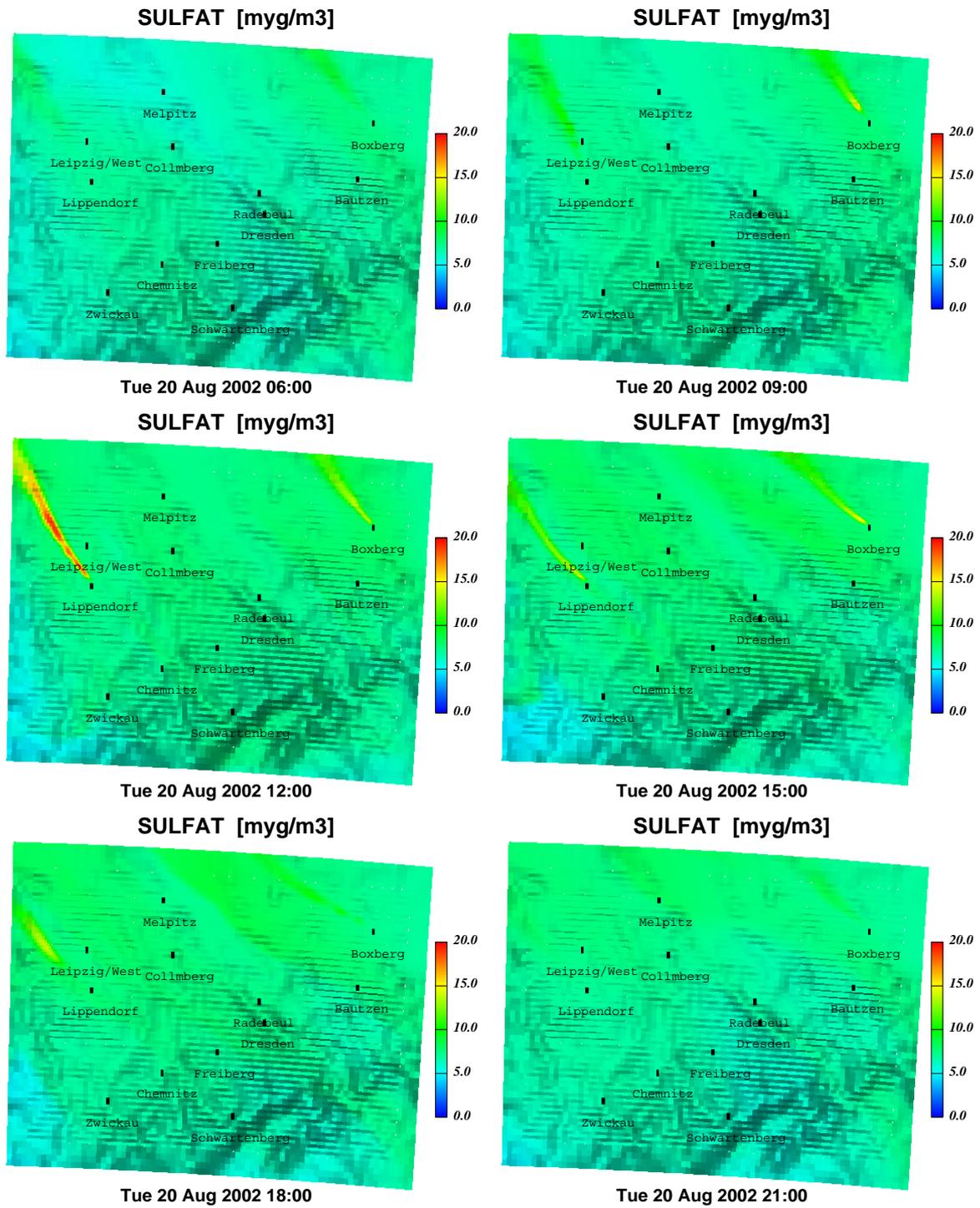


Abbildung 43 (a): SULFAT im Tagesverlauf (Sommertag S3)

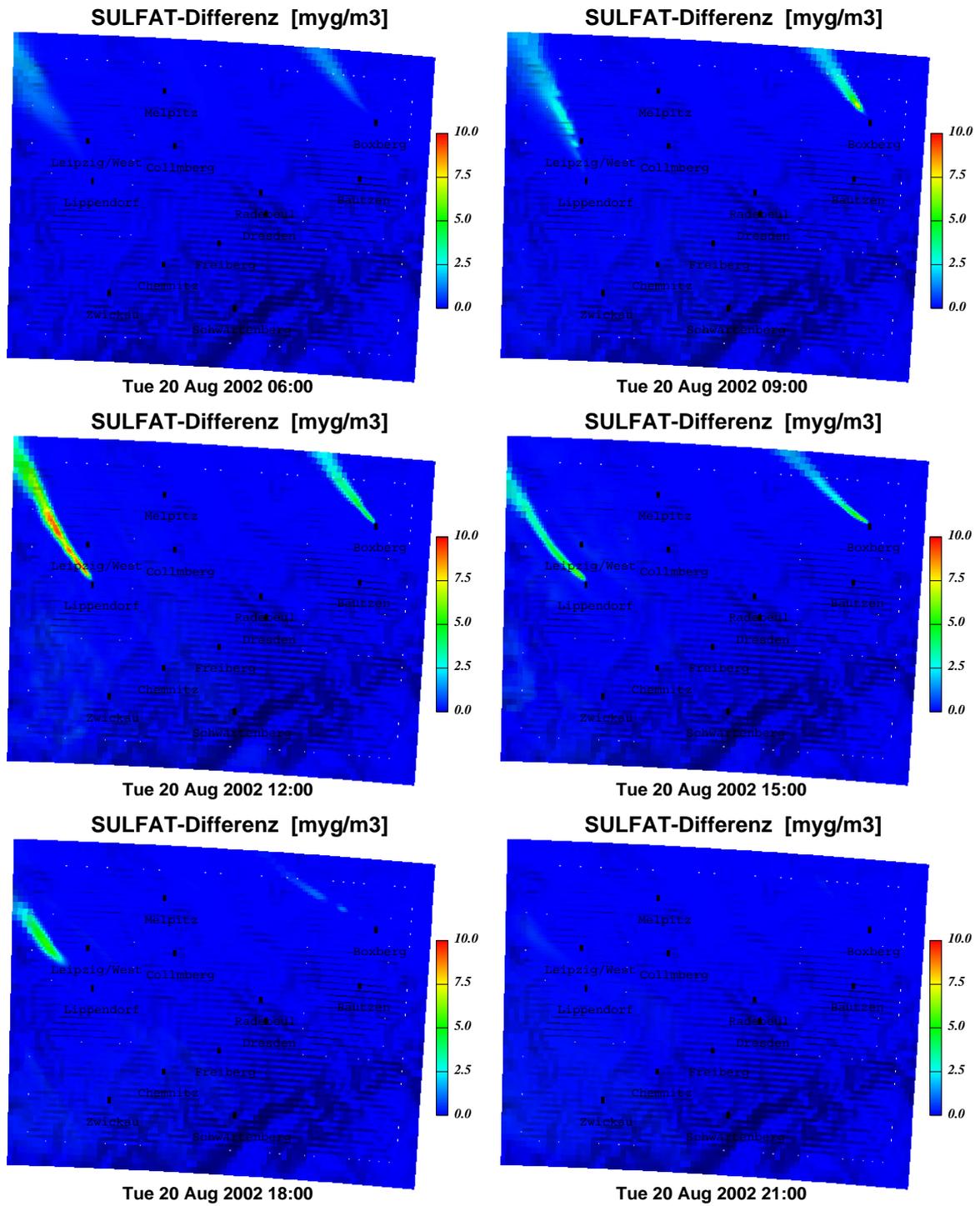


Abbildung 43 (b): SULFAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S3)

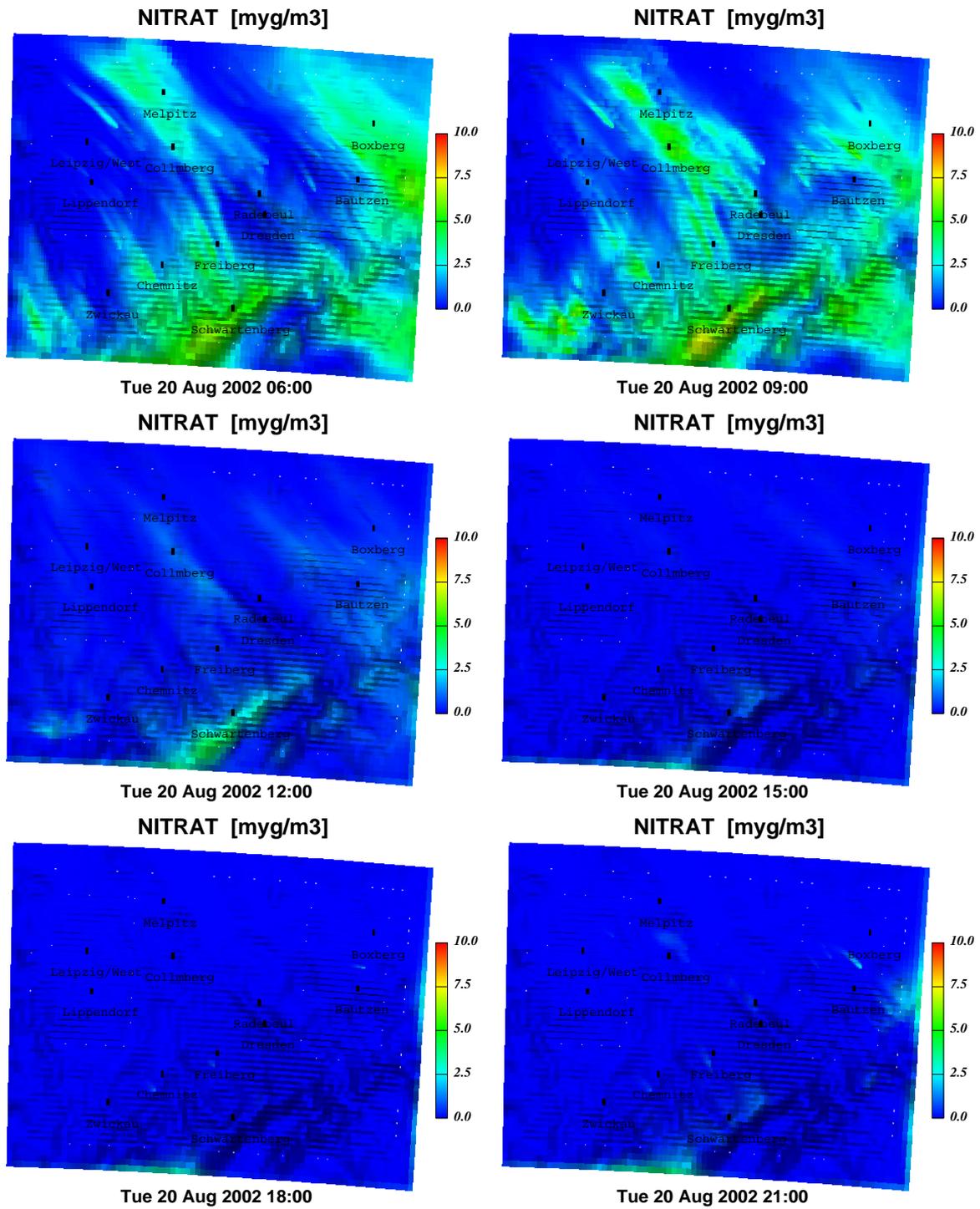


Abbildung 44 (a): NITRAT im Tagesverlauf (Sommertag S3)

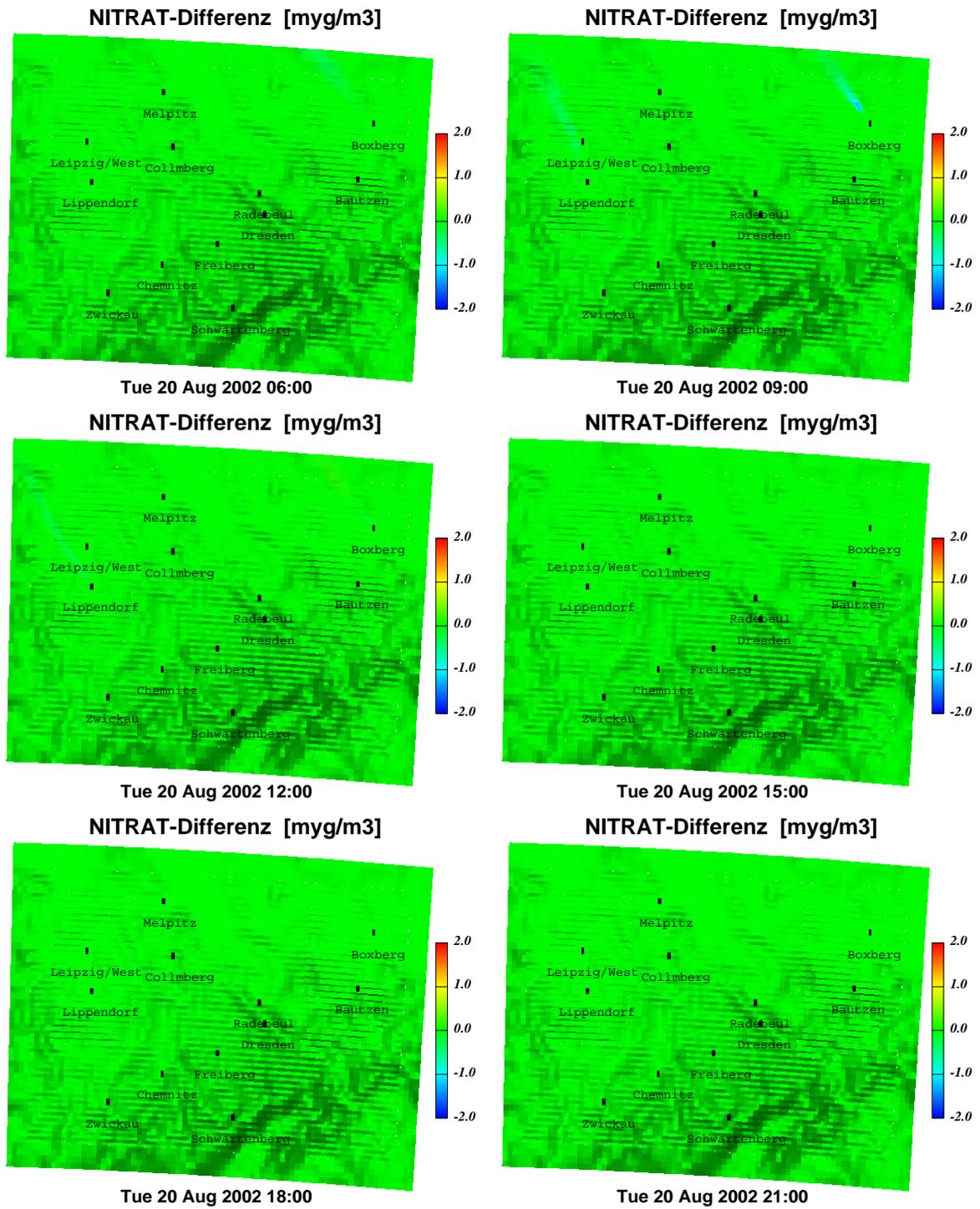


Abbildung 44 (b): NITRAT-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S3)

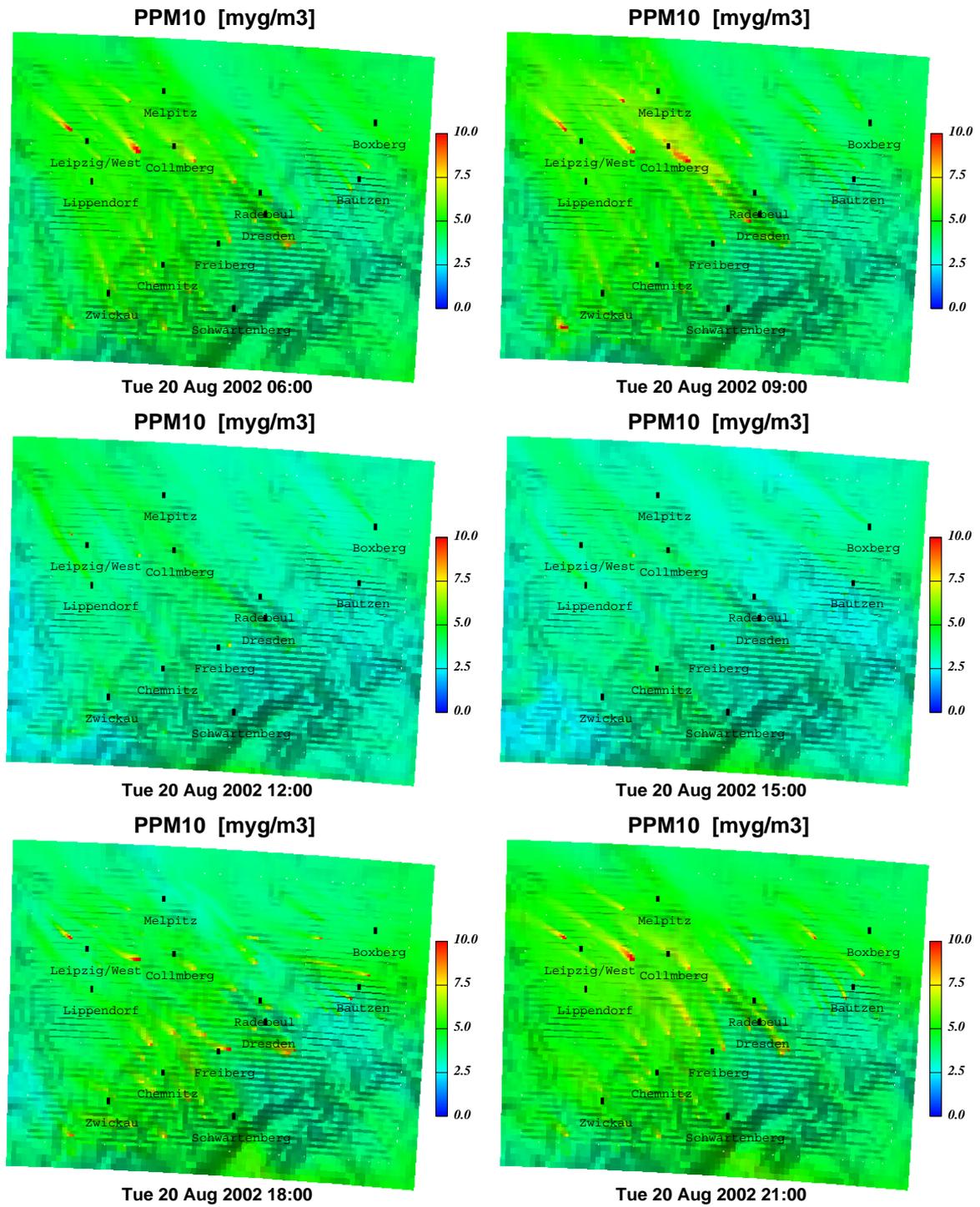


Abbildung 45 (a): PPM<sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S3)

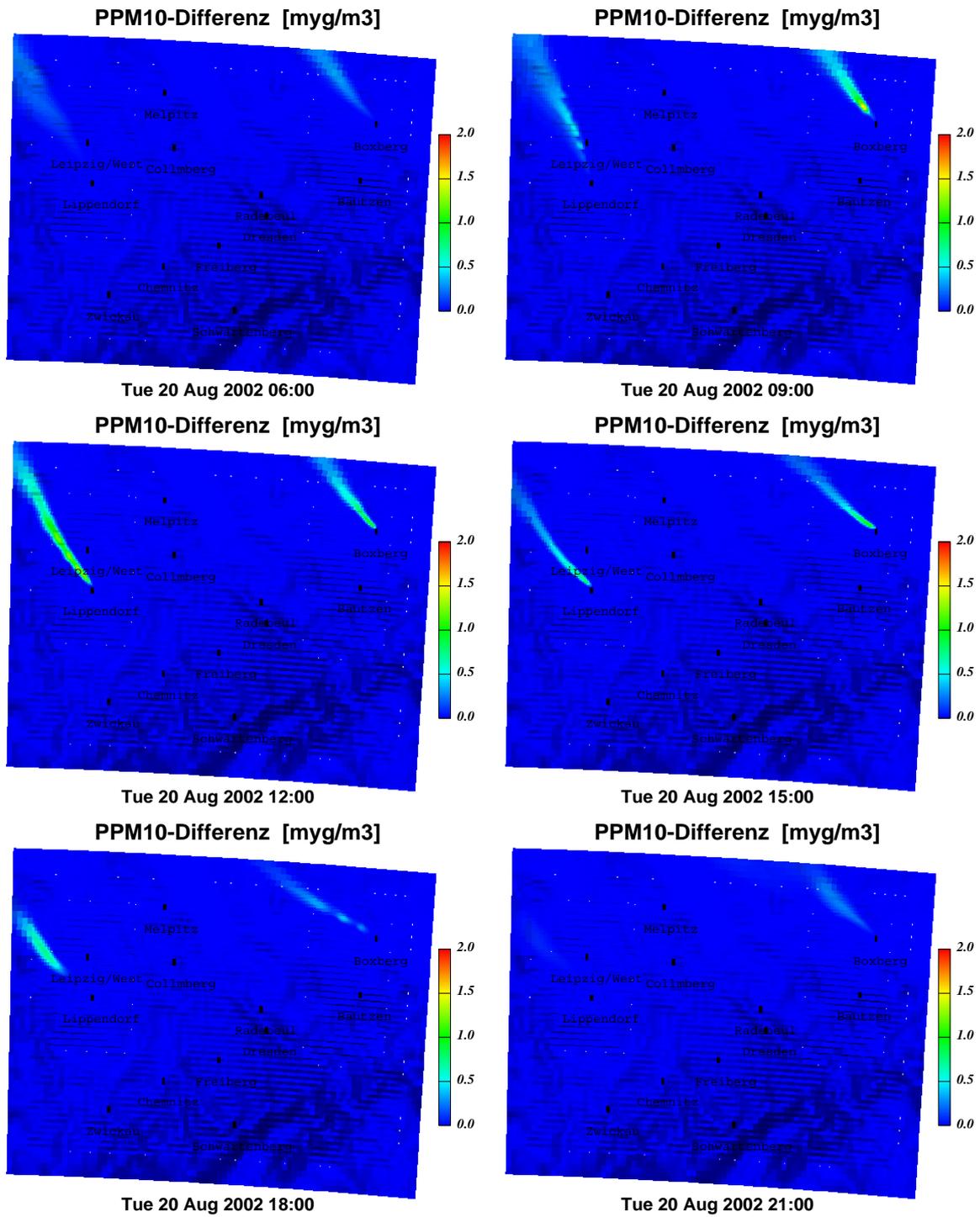


Abbildung 45 (b): PPM<sub>10</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S3)

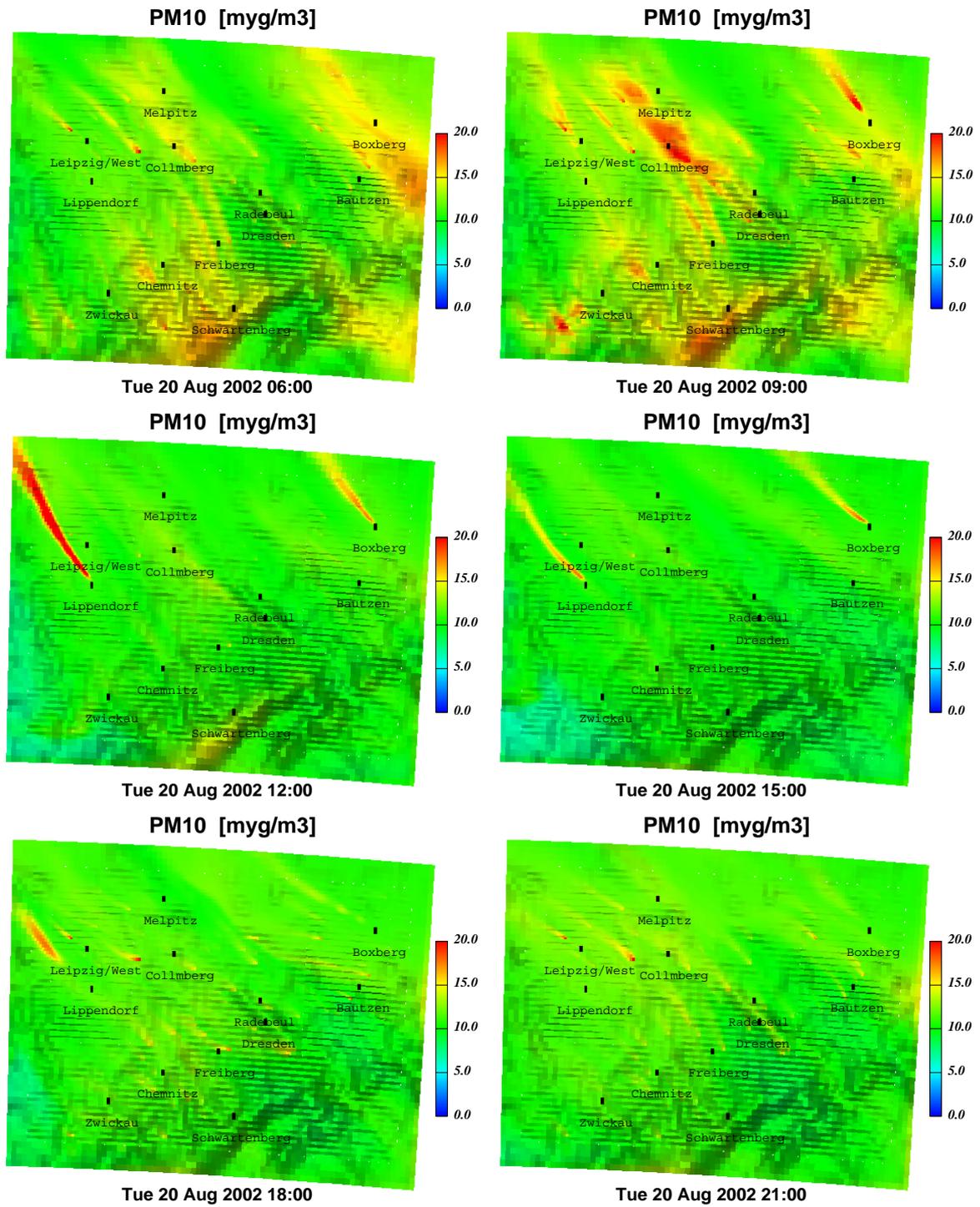


Abbildung 46 (a): PM<sub>10</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S3)

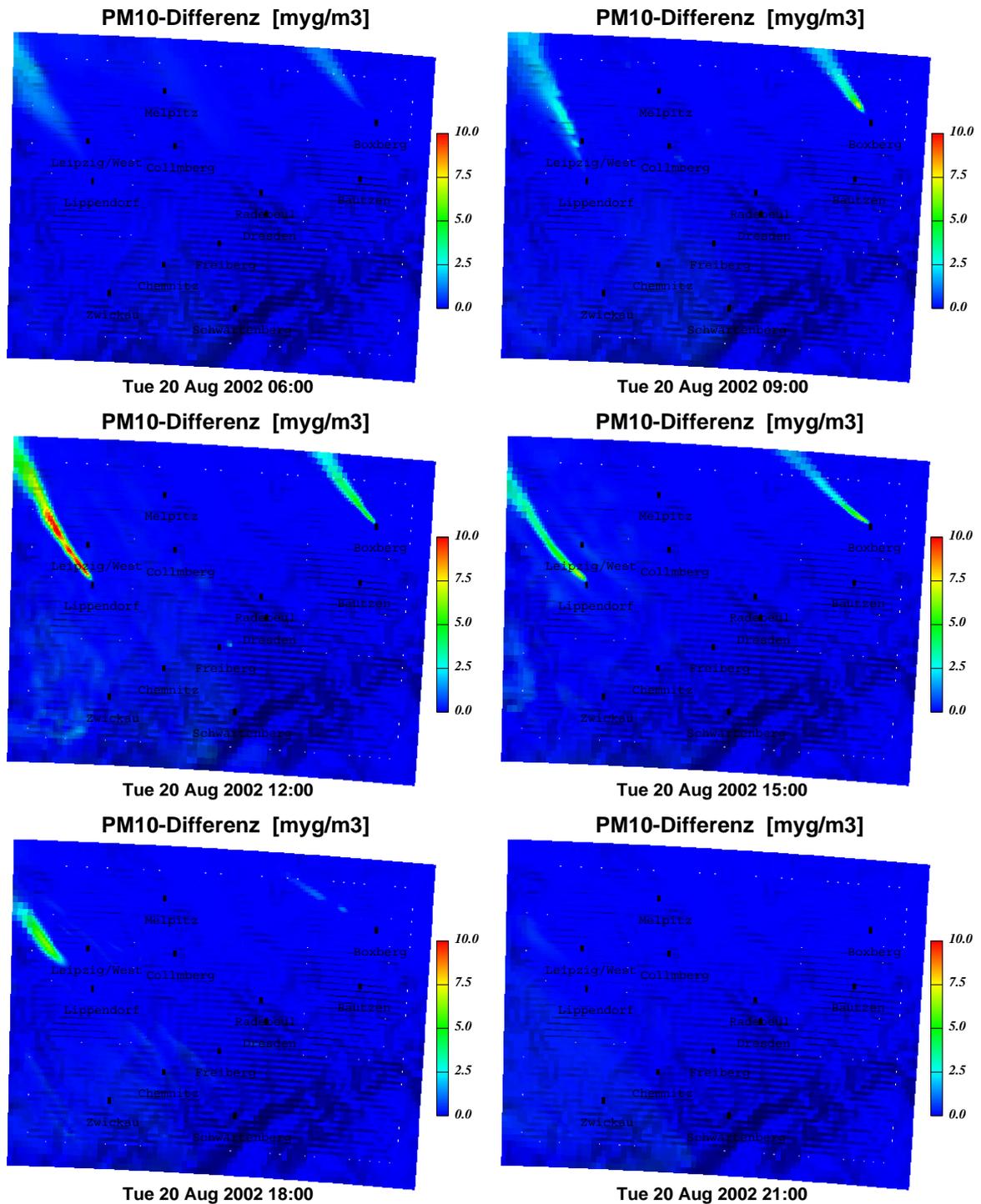


Abbildung 46 (b): PM<sub>10</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Sommertag S3)

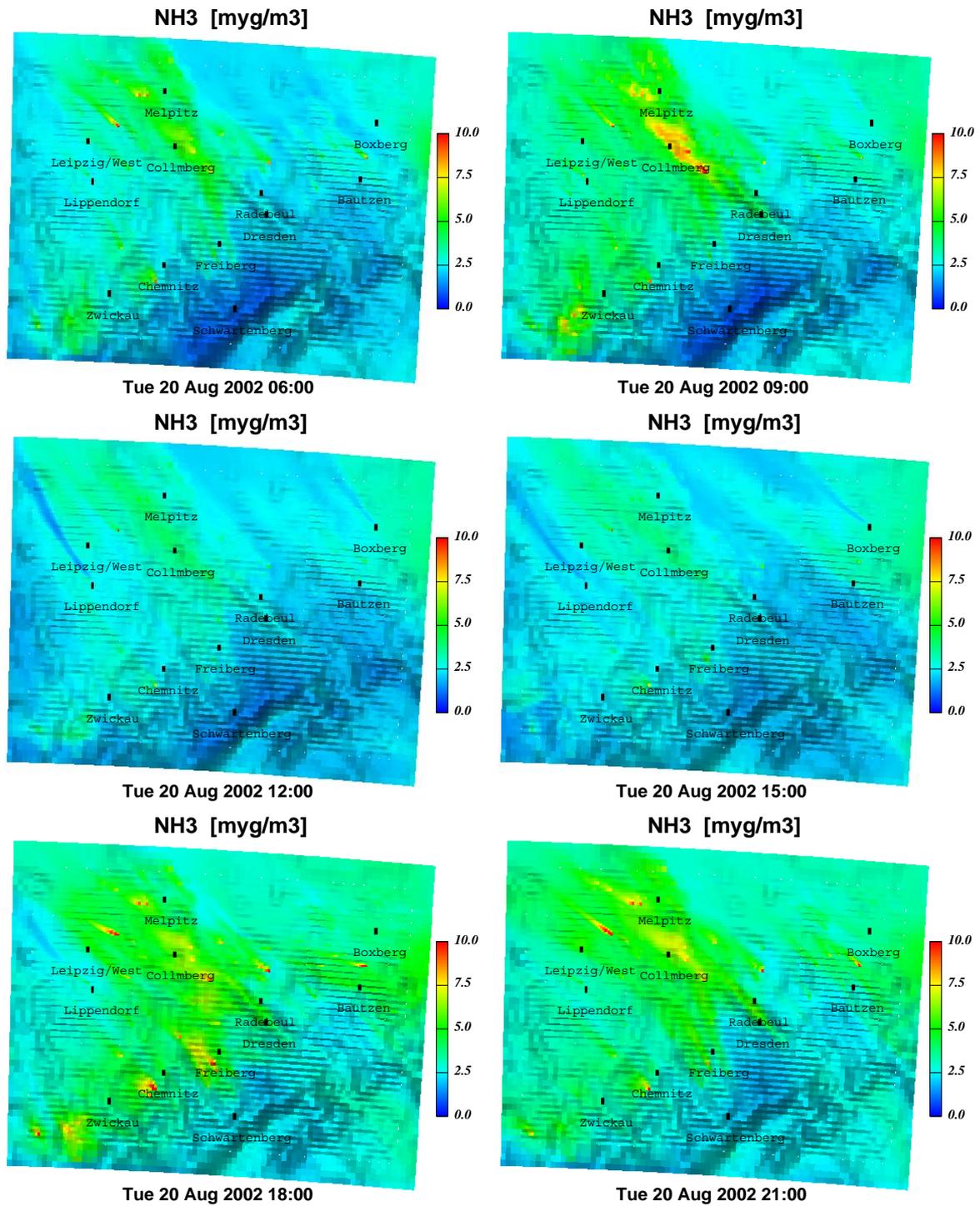


Abbildung 47:  $\text{NH}_3$  im Tagesverlauf (Sommertag S3)

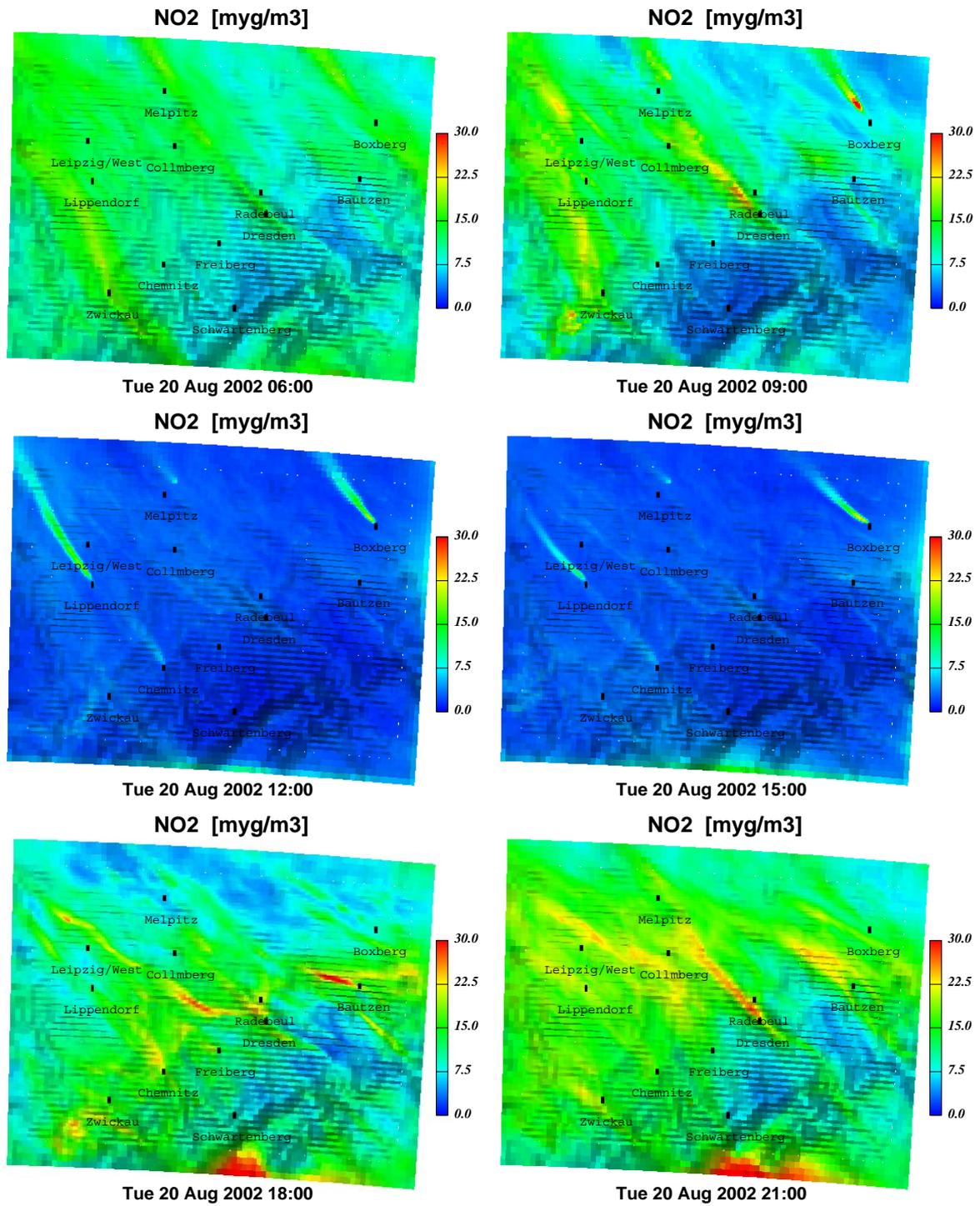


Abbildung 48: NO<sub>2</sub> im Tagesverlauf (Sommertag S3)

## 6.1.2 Sommer-Zeitraum

### 6.1.2.1 Mittags-Situationen

Wenn die maximalen, auch flächenmäßig in Erscheinung tretenden Effekte der Kühlturm-fahnen für alle vorliegenden 8 Tage (siehe die folgenden Abbildungen 49-53) gesammelt werden, ergibt sich Tabelle 18 als Gesamtüberblick:

**Tabelle 18:** Maximale Effekte infolge der GFA-Emissionen (Sommer)

Tag	$\Delta \text{SO}_2$	$\Delta \text{PM}_{10}$	davon:		
			$\Delta \text{PPM}_{10}$	$\Delta \text{SULFAT}$	$\Delta \text{NITRAT}$
$\mu\text{g}/\text{m}^3$					
15.08.	50...60	10...15	1...2	10...15	-1...0
16.08.	30...40	5...10	0...1	5...10	-2...1
17.08.	40...50	10...15	1...2	10...15	-2...1
18.08.	50...60	15...20	1...2	15...20	0
19.08.	20...30	5... 8	0...1	5... 8	0
20.08.	20...30	8...10	0...1	8...10	0
21.08.	50...60	10...15	1...2	10...15	0
22.08.	10...20	5... 8	<0,5	5... 8	-1...1
<b>Maxima</b>	60	20	2	20	-2...1

Zusammenfassend kann man feststellen, dass die  $\text{PM}_{10}$ -Zusatzbelastung durch die GFA Boxberg und Lippendorf im wesentlichen von der Sulfatbildung geprägt wird, wohingegen die Nitratbildung praktisch keine Rolle spielt und auch die direkten Staubemissionen der Kühltürme um eine Größenordnung geringer ausfallen. Das Verhältnis zwischen  $\text{PM}_{10}$ - und  $\text{SO}_2$ -Belastung liegt – zumindest bei den maximalen Effekten zwischen 12 und 15 Uhr – nahe bei 25%, dem emissionsseitigen Massenverhältnis zwischen Sulfationen und  $\text{SO}_2$  für die GFA (siehe Tabelle 11):  $(12\% \times \text{Ammoniumsulfat-Molekulargewicht}) / (88\% \times \text{SO}_2\text{-Molekulargewicht}) \approx 25\%$ . Dieser Zusammenhang ermöglicht es, die gewonnenen Einzelergebnisse zu verallgemeinern auf Zeiträume, in denen nur die  $\text{SO}_2$ -Konzentrationen der Kühlturm-fahnen bekannt sind (siehe Kapitel 6.1.2.2). Der Anteil der Zusatzbelastung in der Fahne durch die primären Partikelemissionen lässt sich aus deren Verhältnis zur  $\text{SO}_2$ -Emission ebenfalls abschätzen, da man das Ausbreitungsverhalten im Nahbereich der Quellen als gleich ansehen kann.

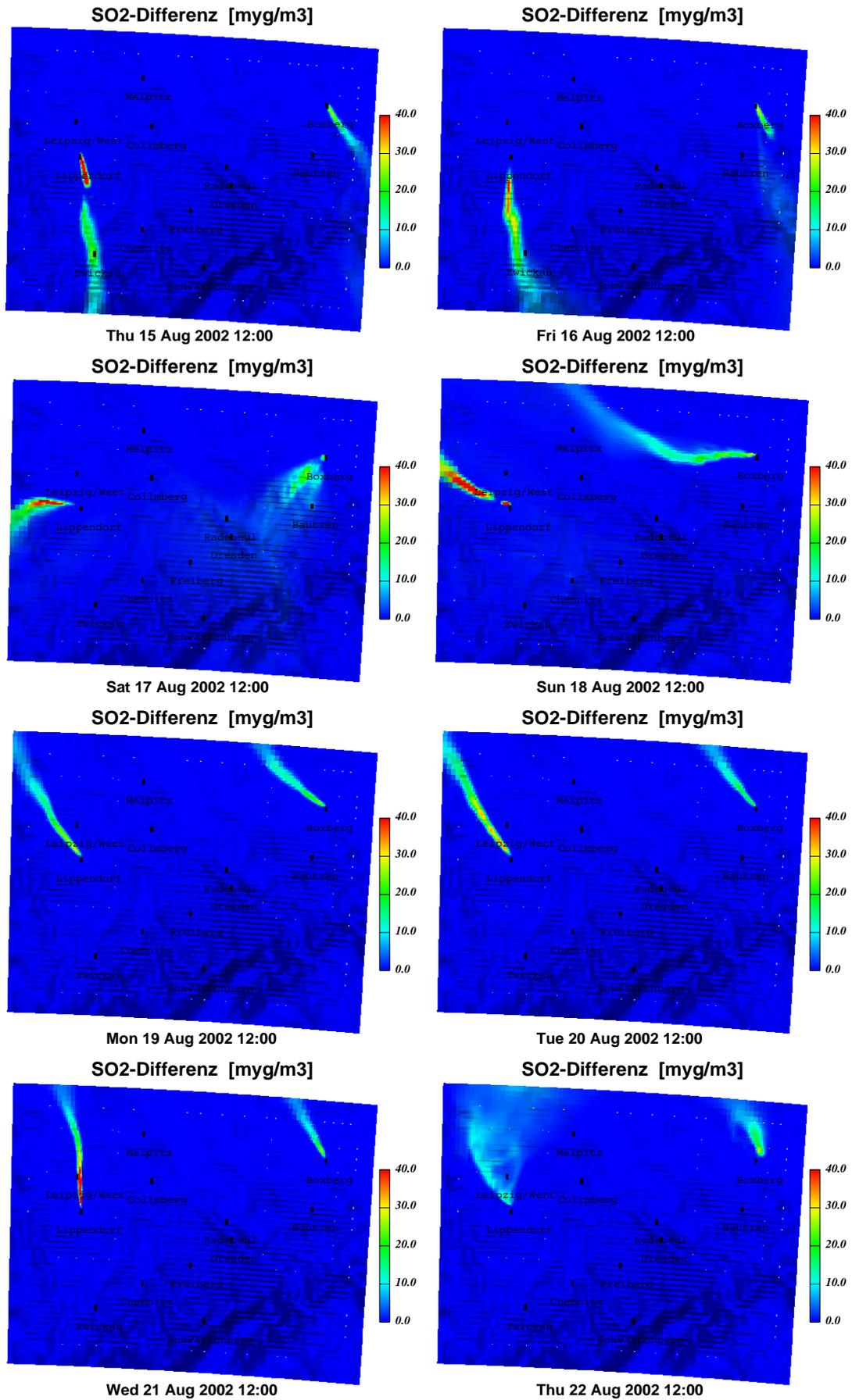


Abbildung 49: SO<sub>2</sub>-Differenz im 8-Tage-Überblick (Sommer)

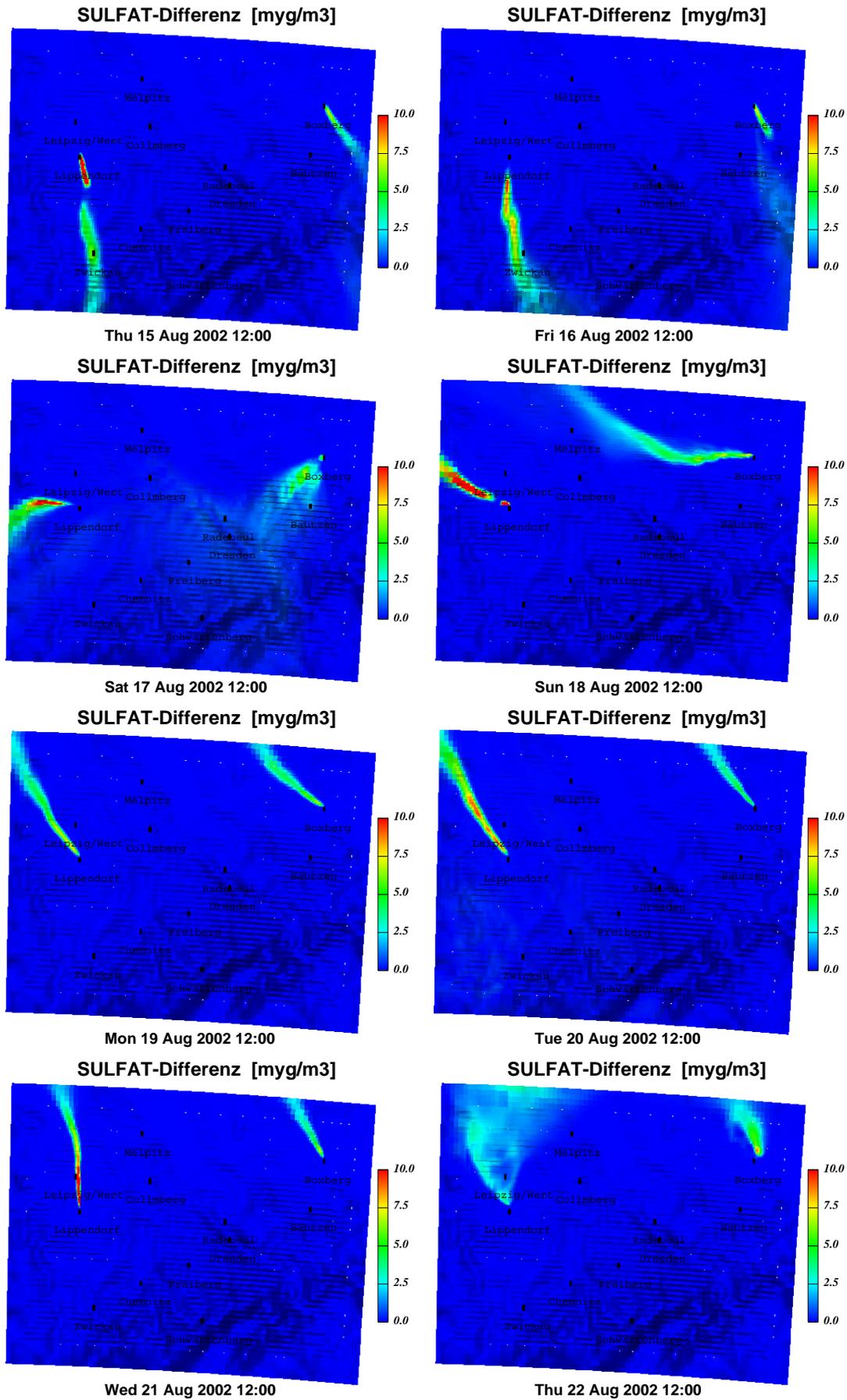


Abbildung 50: SULFAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Sommer)

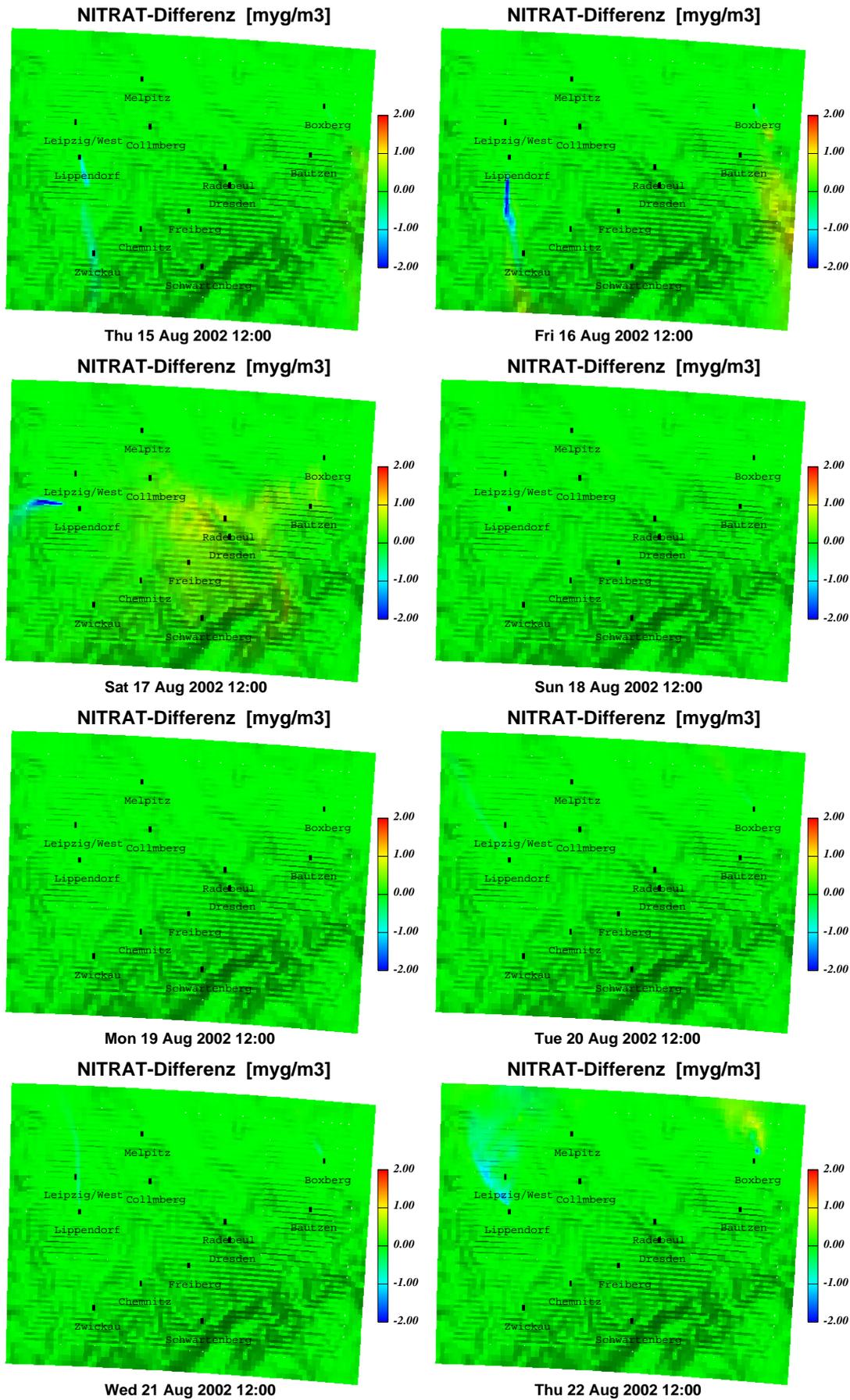


Abbildung 51: NITRAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Sommer)

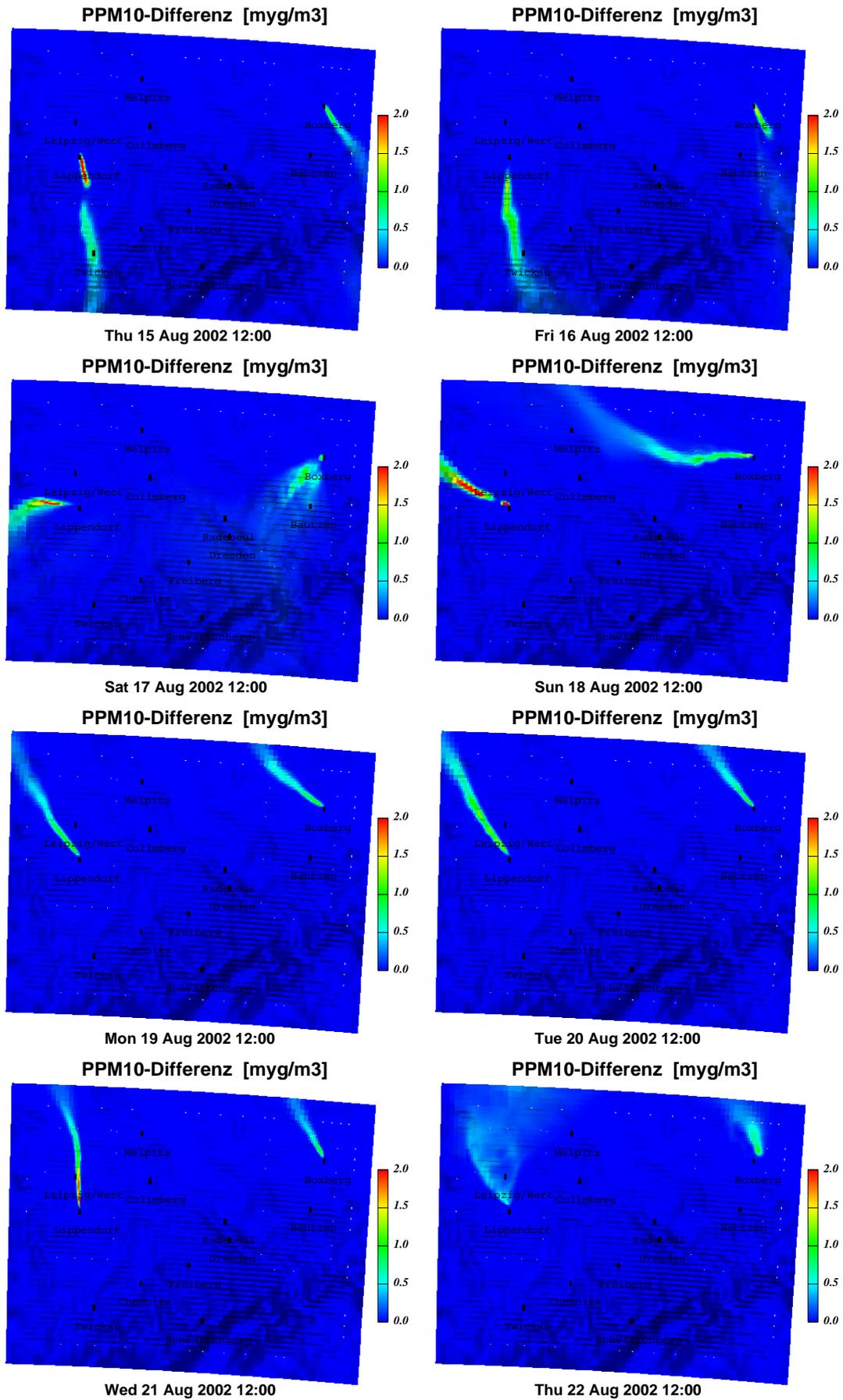


Abbildung 52: PPM<sub>10</sub>-Differenz im 8-Tage-Überblick (Sommer)

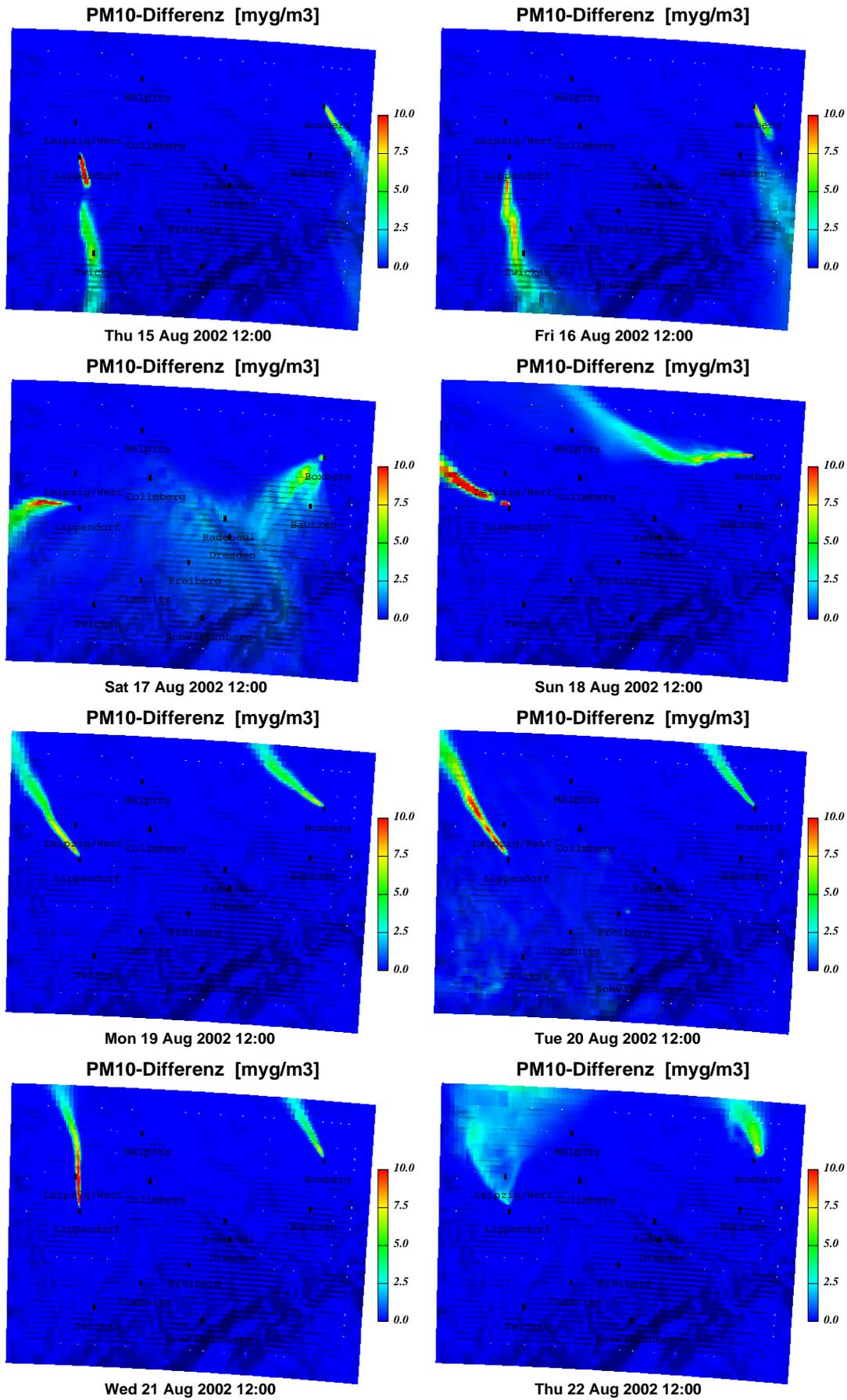


Abbildung 53: PM<sub>10</sub>-Differenz im 8-Tage-Überblick (Sommer)

### 6.1.2.2 Stations-Zeitreihen

Die hier gezeigten Zeitreihen sollen an Hand der zur  $PM_{10}$ -Belastung beitragenden Komponenten verdeutlichen, wann und wie sich die Kühlturmfahnen an 9 über Sachsen verteilten Orten bemerkbar machen. In den Abbildungen 54-59 sind die Konzentrationskurven jeweils mit (rote Linie) und ohne (grüne Linie) Kühlturmmissionen dargestellt, wobei nur im Falle auftretender Differenzen beide Farben erscheinen. Es wird an Hand der  $SO_2$ -Zeitreihen (Abb. 54) schnell erkennbar, dass die Abluftfahnen der beiden Kühltürme in den 8 Tagen insgesamt nur eine sehr geringe Auswirkung an den ausgewählten Orten hatten (bis auf eine kurzzeitige Ausnahme am 21.8. in Leipzig). Die drei markantesten Überströmungsereignisse (mit maximal  $8 \mu\text{g}/\text{m}^3$   $PM_{10}$ -Erhöhung) sollen kurz beschrieben werden:

#### 1.) GFA Lippendorf → Leipzig am 21.8.:

Das Ereignis findet sich bereits im vorangegangenen Kapitel wiedergegeben (Abbildungen 49-53 jeweils unten links). Die Abluftfahne der GFA Lippendorf bewegt sich bei anhaltend südlichem Wind in der Mittagszeit mehrere Stunden lang über dem Stadtgebiet von Leipzig. Trotzdem macht sich an einem festen Punkt die Zusatzbelastung meist viel kürzer bemerkbar, wie an den Stationen Leipzig-Mitte und -West abzulesen ist: Beide innerstädtischen Orte weisen an diesem Tag sehr kurzzeitige Erhöhungen der  $SO_2$ -Konzentration um  $30 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (Abb. 54c) und der  $PM_{10}$ -Konzentration (d.h. Ammoniumsulfat) um  $8 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (Abb. 59c) auf. Andererseits liegt 12 Uhr die Fahne (mit einem Maximum von  $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$   $SO_2$  bzw.  $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$   $PM_{10}$ ) genau zwischen den 5 km voneinander entfernten Stationen, ohne dass diese selbst davon betroffen sind. Die Situation wird in stark vergrößerter Darstellung des Großraumes Leipzig in Abbildung 60 gezeigt. Das 3 km breite Band der konzentrierten Abluftfahne erweist sich als sehr schmal gegenüber der Ausdehnung des Stadtgebietes, das ungefähr die Fläche von  $12 \text{ km} \times 15 \text{ km}$  einnimmt. Auf Grund des 20 km entfernten Ursprungsortes der Fahne ist auch bei „konstanter“ Windrichtung ein nahezu sprunghafter Wechsel der belasteten Zonen innerhalb des Stadtbereiches die Folge. So wird die Station Leipzig-Mitte zweimal und die Station Leipzig-West nur einmal an diesem Tag beeinflusst.

#### 2.) GFA Lippendorf → Zwickau am 15.8.:

Auch in diesem Falle ist es die Lippendorfer Abluftfahne, die in der Mittagszeit für wenige Stunden mit ihrem Ausläufer über Zwickau steht, wobei mit etwa  $15 \mu\text{g}/\text{m}^3$   $SO_2$  (Abb. 54c) ein der großen Distanz geschuldeter geringerer Effekt zustande kommt. Die damit verbundene Erhöhung des  $PM_{10}$ -Wertes beträgt  $5 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (Abb. 59c). Die Situation findet sich in den Abbildungen 49-53 jeweils oben links wiedergegeben.

#### 3.) GFA Lippendorf → Zwickau am 16.8.:

Bei nördlichen Winden zieht die im Stadium des vormittäglichen Entstehens begriffene bodennahe Abluftfahne von Lippendorf über Zwickau hinweg und erhöht dort die  $SO_2$ -Konzentration kurzzeitig um  $8 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (Abb. 54c). Der entsprechende Wert für  $PM_{10}$  liegt bei nur noch  $3 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (Abb. 59c). In den Abbildungen 49-53 (jeweils oben rechts) ist die kurze Zeit später voll ausgebildete Fahne beim Abschwenken von Zwickau zu sehen.

Eine Reihe kleinerer Ereignisse, die sich bereits in der  $SO_2$ -Zeitreihe kaum noch von anderen Fluktuationen unterscheiden lassen, seien wenigstens benannt, obwohl deren Beiträge zu  $PM_{10}$  absolut unbedeutend sind:

GFA Lippendorf → Chemnitz	am 16.8.,	Vormittag:	$3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ $SO_2$ -Beitrag;
GFA Lippendorf → Melpitz	am 21/22.8.,	Nacht:	$3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ $SO_2$ -Beitrag;
GFA Lippendorf → Leipzig	am 22.8.,	Mittag:	$4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ $SO_2$ -Beitrag;

<i>GFA Boxberg</i>	→ <i>Bautzen</i>	<i>am 17.8.,</i>	<i>Vor-/Mittag:</i>	$4 \mu\text{g}/\text{m}^3$	<i>SO<sub>2</sub>-Beitrag;</i>
<i>GFA Boxberg</i>	→ <i>Radebeul</i>	<i>am 17.8.,</i>	<i>Abend:</i>	$5 \mu\text{g}/\text{m}^3$	<i>SO<sub>2</sub>-Beitrag;</i>
<i>GFA Boxberg</i>	→ <i>Freiberg</i>	<i>am 17.8.,</i>	<i>Abend:</i>	$3 \mu\text{g}/\text{m}^3$	<i>SO<sub>2</sub>-Beitrag;</i>
<i>GFA Boxberg</i>	→ <i>Chemnitz</i>	<i>am 17.8.,</i>	<i>Abend:</i>	$2 \mu\text{g}/\text{m}^3$	<i>SO<sub>2</sub>-Beitrag;</i>
<i>GFA Boxberg</i>	→ <i>Melpitz</i>	<i>am 18.8.,</i>	<i>Vor/Nachmittag:</i>	$4 \mu\text{g}/\text{m}^3$	<i>SO<sub>2</sub>-Beitrag.</i>

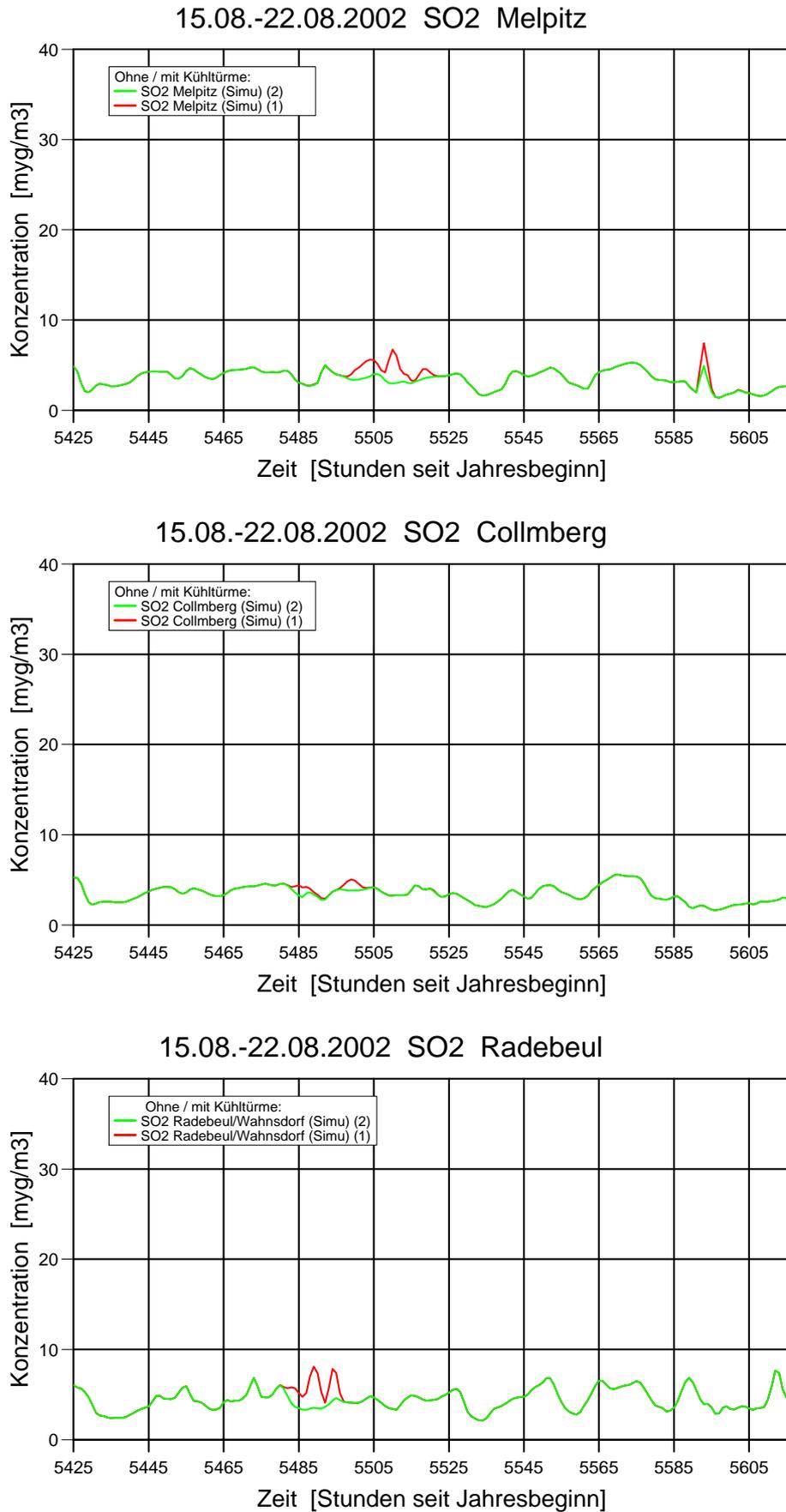
Wenn man die Konzentrationswerte von PM<sub>10</sub> (Hintergrund + GFA; siehe Abb. 59) hinsichtlich ihrer Zusammensetzung betrachtet, kann man erkennen, dass an allen Standorten die primär emittierten Partikel (Abbn. 57, 58) und das sekundär gebildete Ammoniumsulfat (Abb. 55) einen annähernd gleich großen Anteil an der Belastung haben. Das sekundär gebildete Ammoniumnitrat (Abb. 56) unterliegt dagegen wesentlich größeren Schwankungen sowohl in seiner absoluten Größe als auch in seiner tageszeitlichen Variation. Durch die komplizierten Gleichgewichtsverhältnisse zwischen Partikel- und Gasphase sind die Nitratverhältnisse nicht einfach zu erklären. Dies ist aber auch nicht Gegenstand der vorliegenden Untersuchung.

#### *Statistische Auswertung:*

Die statistische Auswertung des schwerpunktmäßig analysierten Zeitraumes 15.-22. August 2002 hinsichtlich eines zeitlichen Mittelwertes der PM<sub>10</sub>-Zusatzbelastung durch die Kühlturmmissionen ergibt nach Abb. 59 folgendes Fazit: Alle 9 betrachteten Standorte gelangen im 8-Tage-Mittel nicht über eine PM<sub>10</sub>-Zusatzkonzentration von  $0,2 \mu\text{g}/\text{m}^3$  hinaus. Dieser maximale Wert wurde für Leipzig ermittelt; Zwickau und Freiberg kommen auf  $0,1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , während Radebeul (als nächstliegender Standort zu Dresden), Chemnitz und Melpitz nur noch  $0,05 \mu\text{g}/\text{m}^3$  erreichen und Collm sowie Bautzen gar keine Auswirkungen erfahren.

Eine Auswertung des größeren, 5-wöchigen Zeitraumes 11.08.-15.09. 2002 ist nur mittels der im Normallauf gewonnenen Tracer-Konzentrationen (siehe Beginn von Kapitel 6) möglich. In Abbildung 61 werden diese virtuellen Tracer, die der Identifikation des SO<sub>2</sub>-Ausstoßes der beiden GFA separat von allen anderen Quellen dienen, den tatsächlich modellierten SO<sub>2</sub>-Werten gegenübergestellt. Dabei ist in Leipzig hauptsächlich die Lippendorfer und in Radebeul die Boxberger Abluftfahne in Betracht zu ziehen. Es fällt auf, dass nur in Leipzig Überströmungsereignisse (grüne Peaks) auch tatsächlich zu herausragenden SO<sub>2</sub>-Werten (rote Peaks) führen. Die in der Abbildung jeweils zuerst auftretenden Tracer-Peaks liegen im engeren Analysezeitraum und wurden bereits ausgewertet. Die im übrigen Zeitraum sichtbaren Tracer-Peaks deuten eine eher geringere Häufigkeit an. Insgesamt liegen die Durchschnittswerte (für alle Komponenten) in diesem 5-wöchigen Zeitraum um ca. 30% niedriger als die oben genannten.

Da der insgesamt analysierte Zeitraum ausgeprägte Sommer-Wetterlagen umfasste, ist davon auszugehen, dass die ermittelten Werte für den Sommer typisch sind. Die Abschätzung wird auch durch die allgemeine Erwartungswahrscheinlichkeit für den Fall des Überstreichens eines Ortes durch eine konzentrierte Abluftfahne gestützt, die unter Berücksichtigung der Windfahnenstatistik und weiterer statistischer Differenzierungen unter 1 Prozent liegt, was bei einem angenommenen Fahnenmaximum ( $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$  PM<sub>10</sub>) höchstens  $0,2 \mu\text{g}/\text{m}^3$  PM<sub>10</sub> im Jahresmittel bedeutet.



**Abbildung 54 (a):** SO<sub>2</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collm, Radebeul

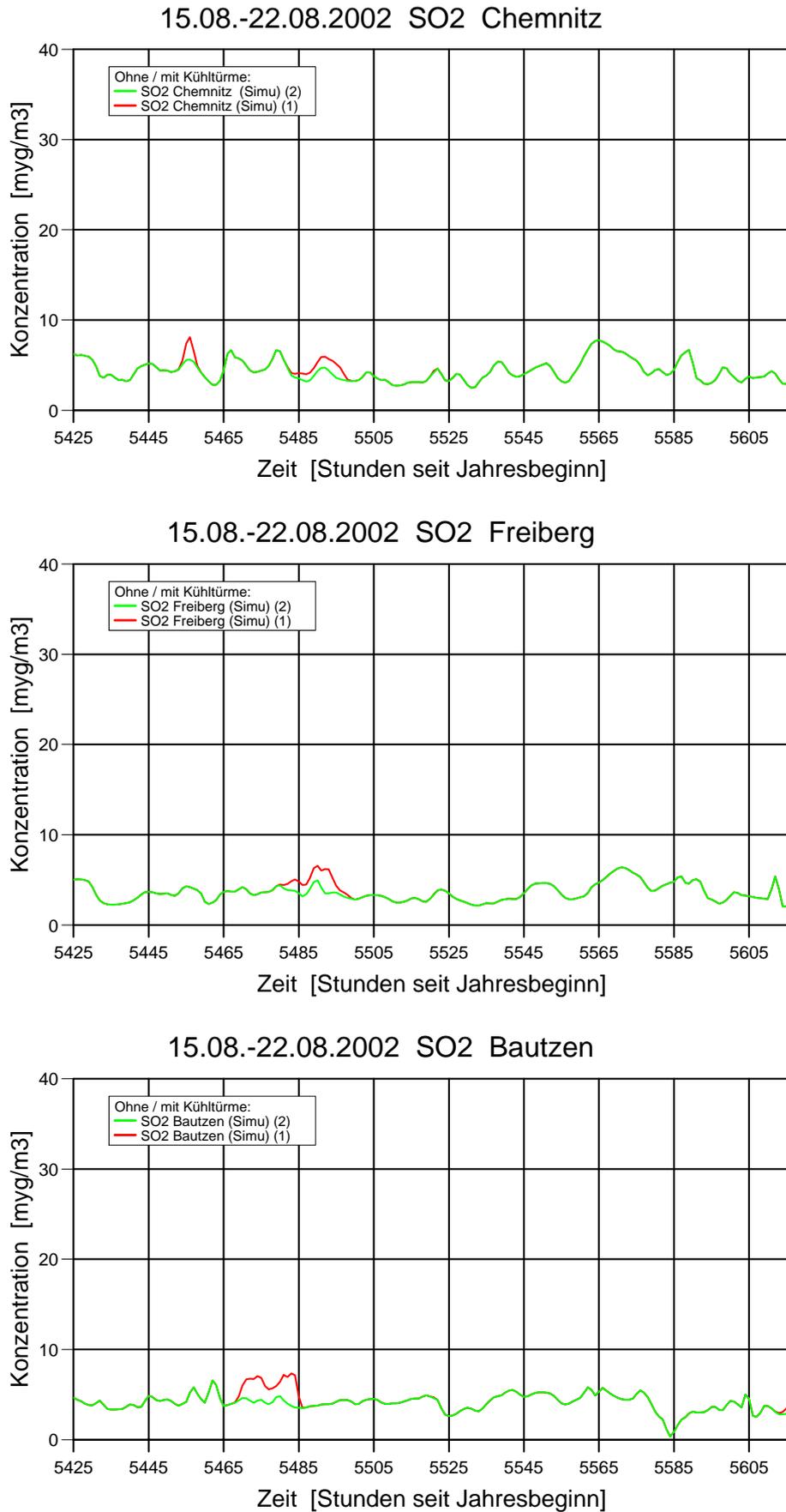


Abbildung 54 (b): SO<sub>2</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen

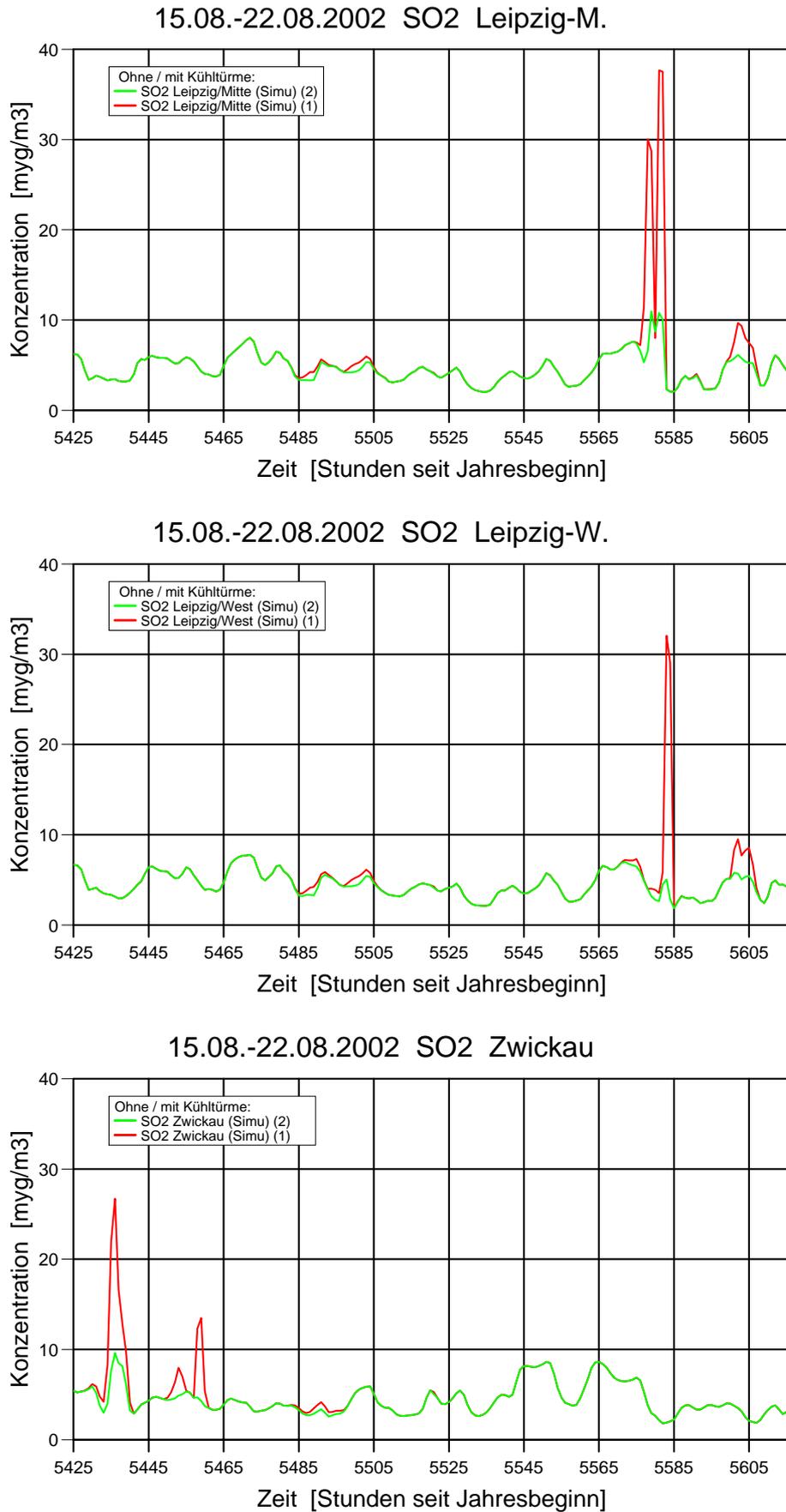
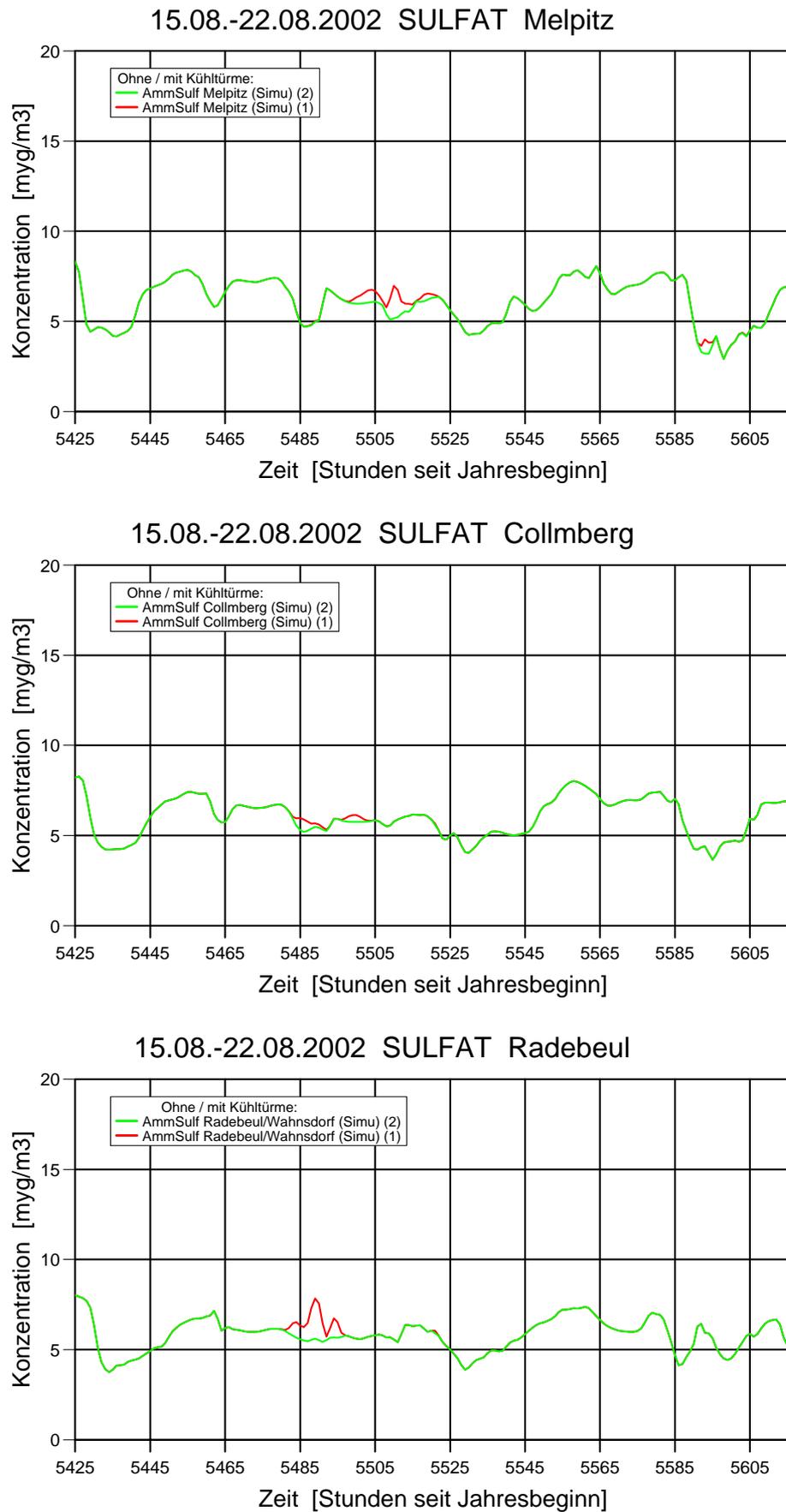


Abbildung 54 (c): SO<sub>2</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau



**Abbildung 55 (a):** SULFAT-Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collm, Radebeul

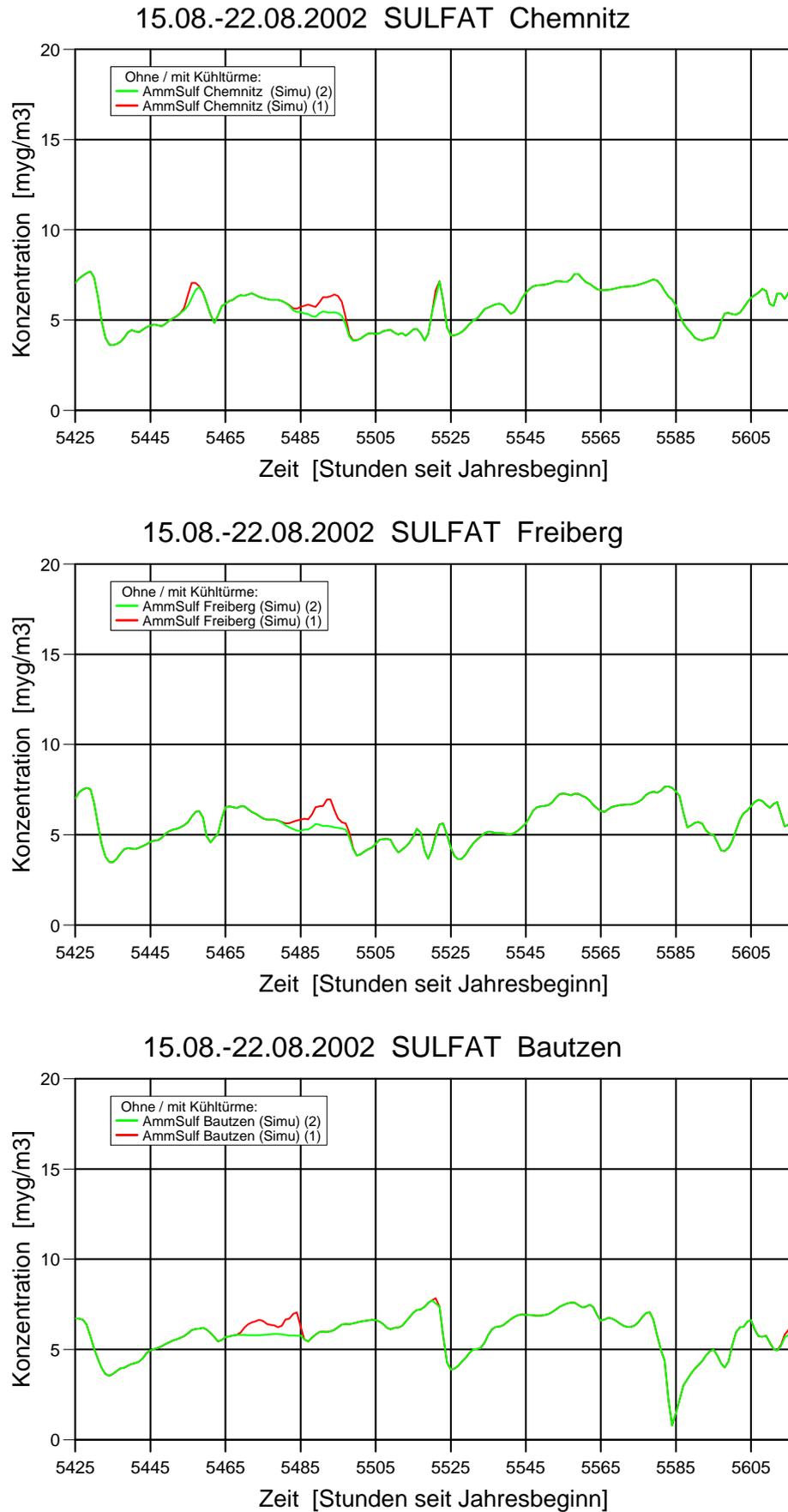


Abbildung 55 (b): SULFAT-Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen

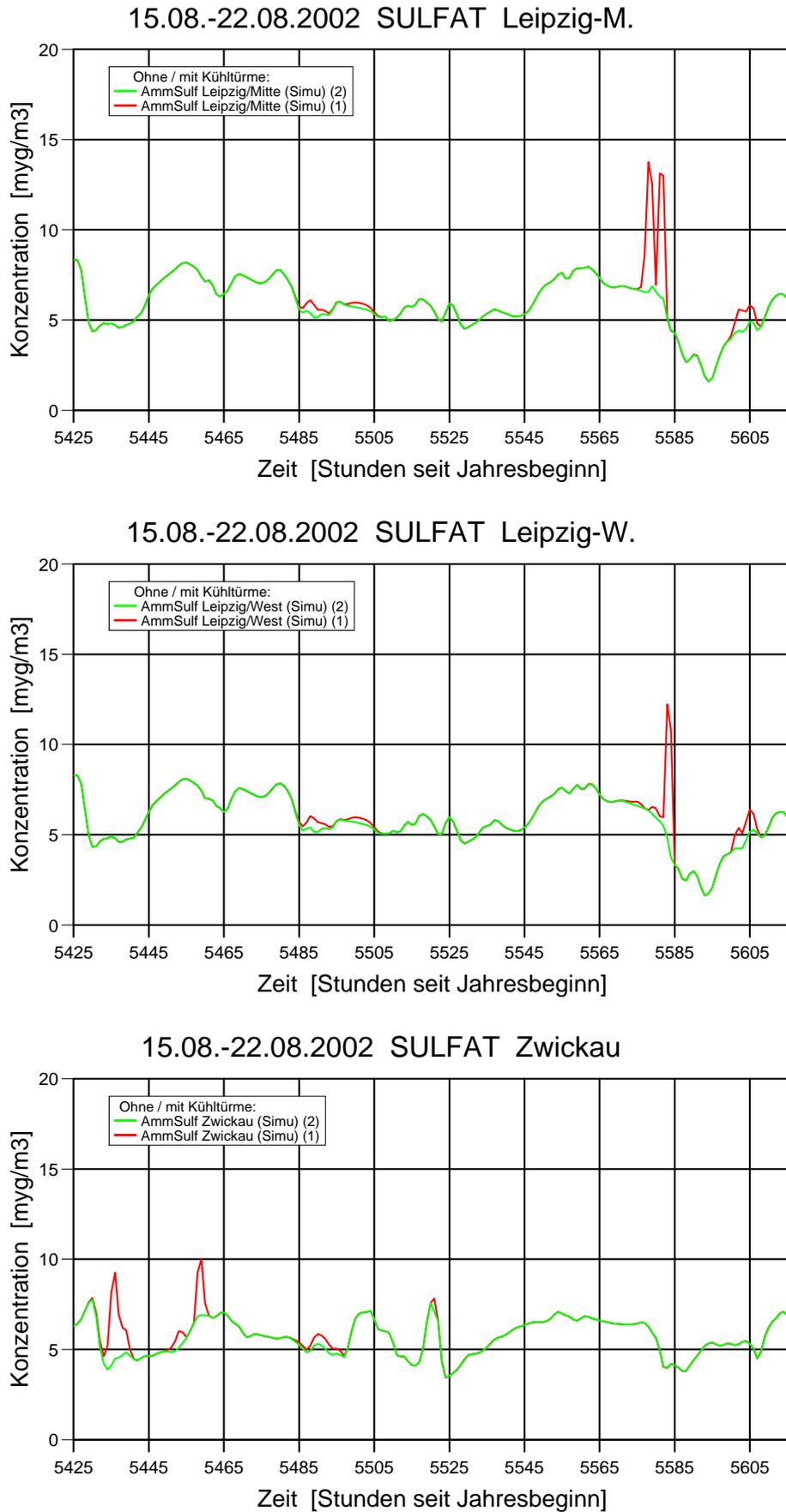


Abbildung 55 (c): SULFAT-Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau

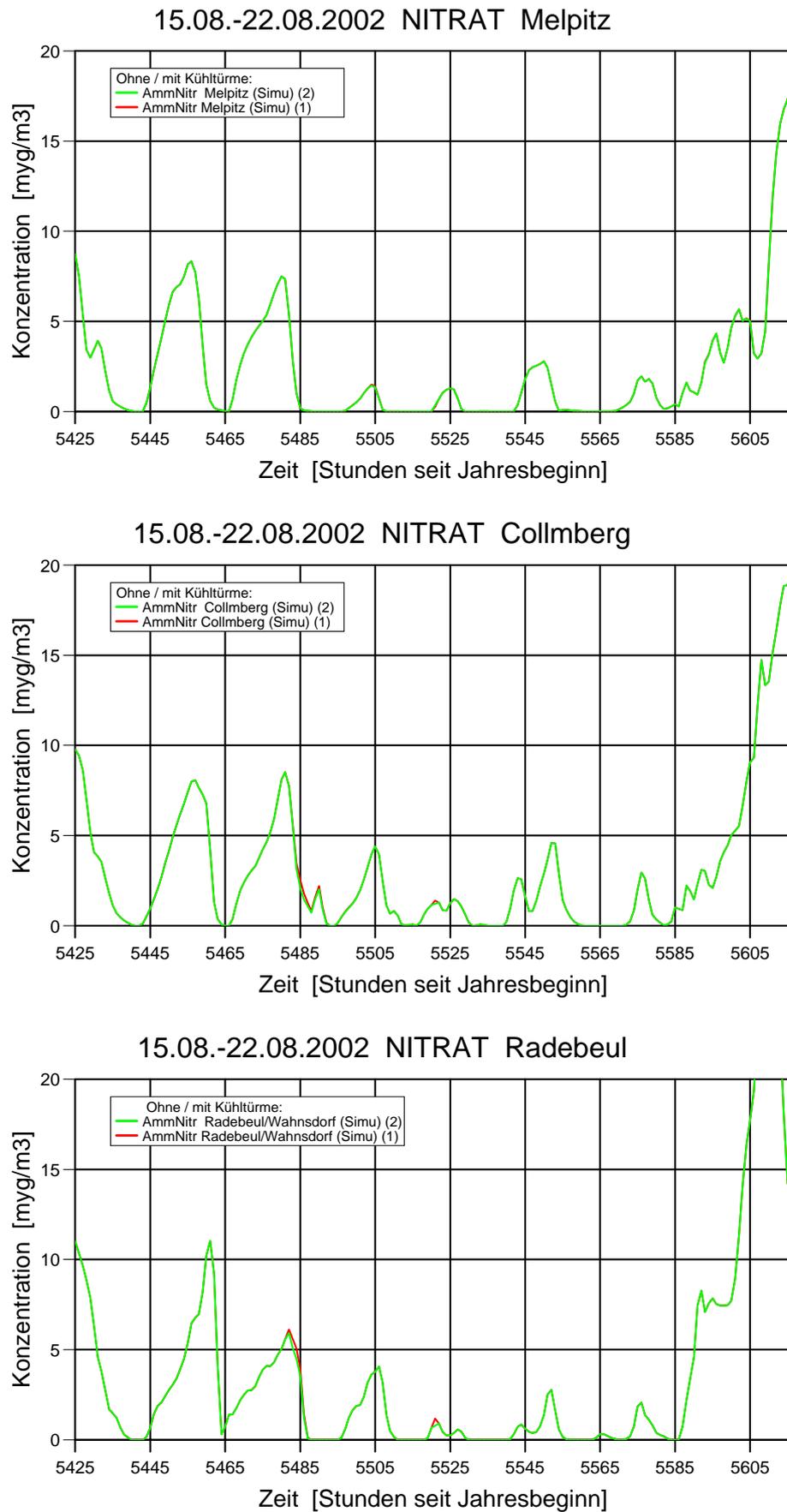
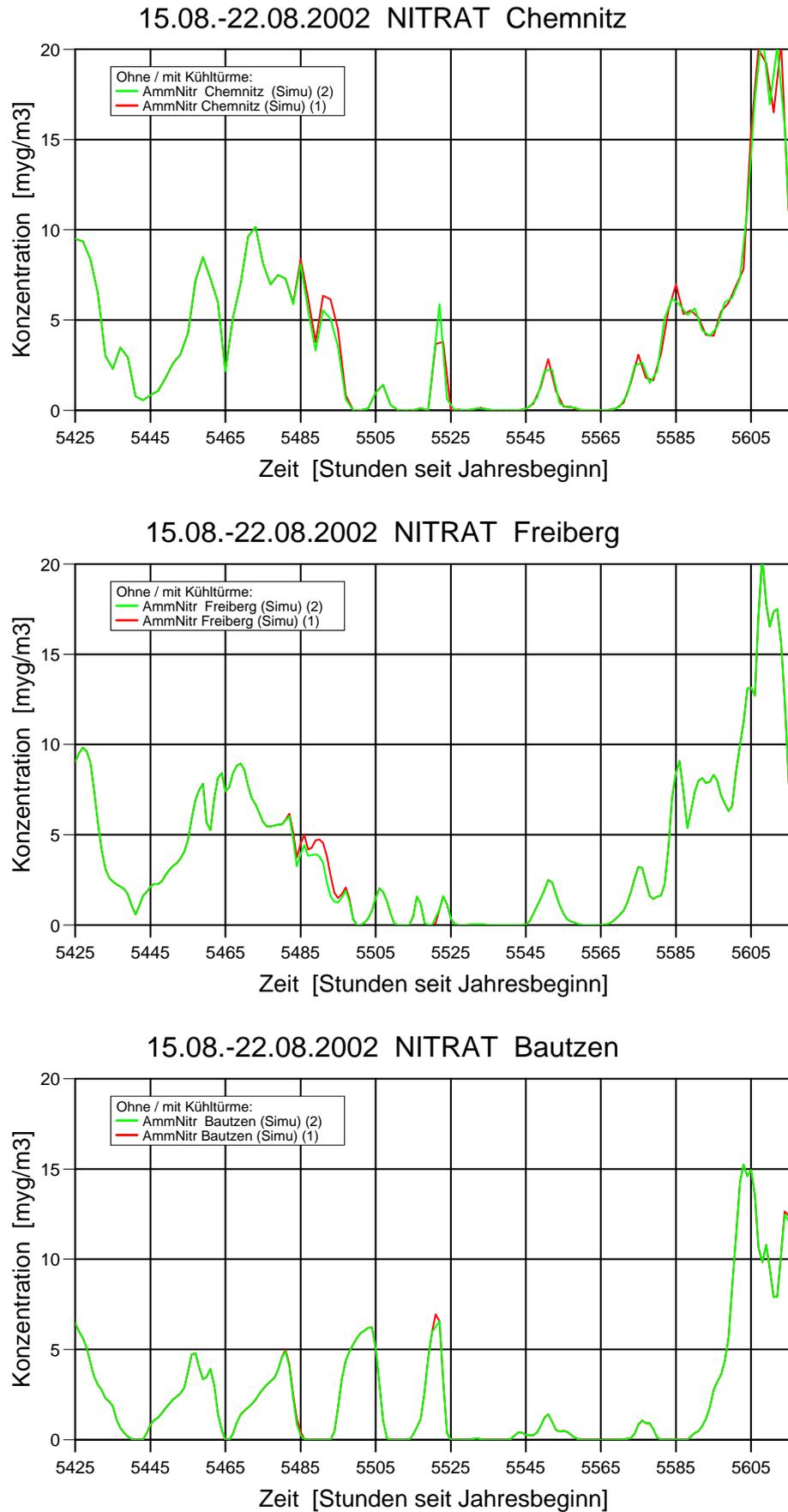


Abbildung 56 (a): NITRAT-Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collm, Radebeul



**Abbildung 56 (b):** NITRAT-Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen

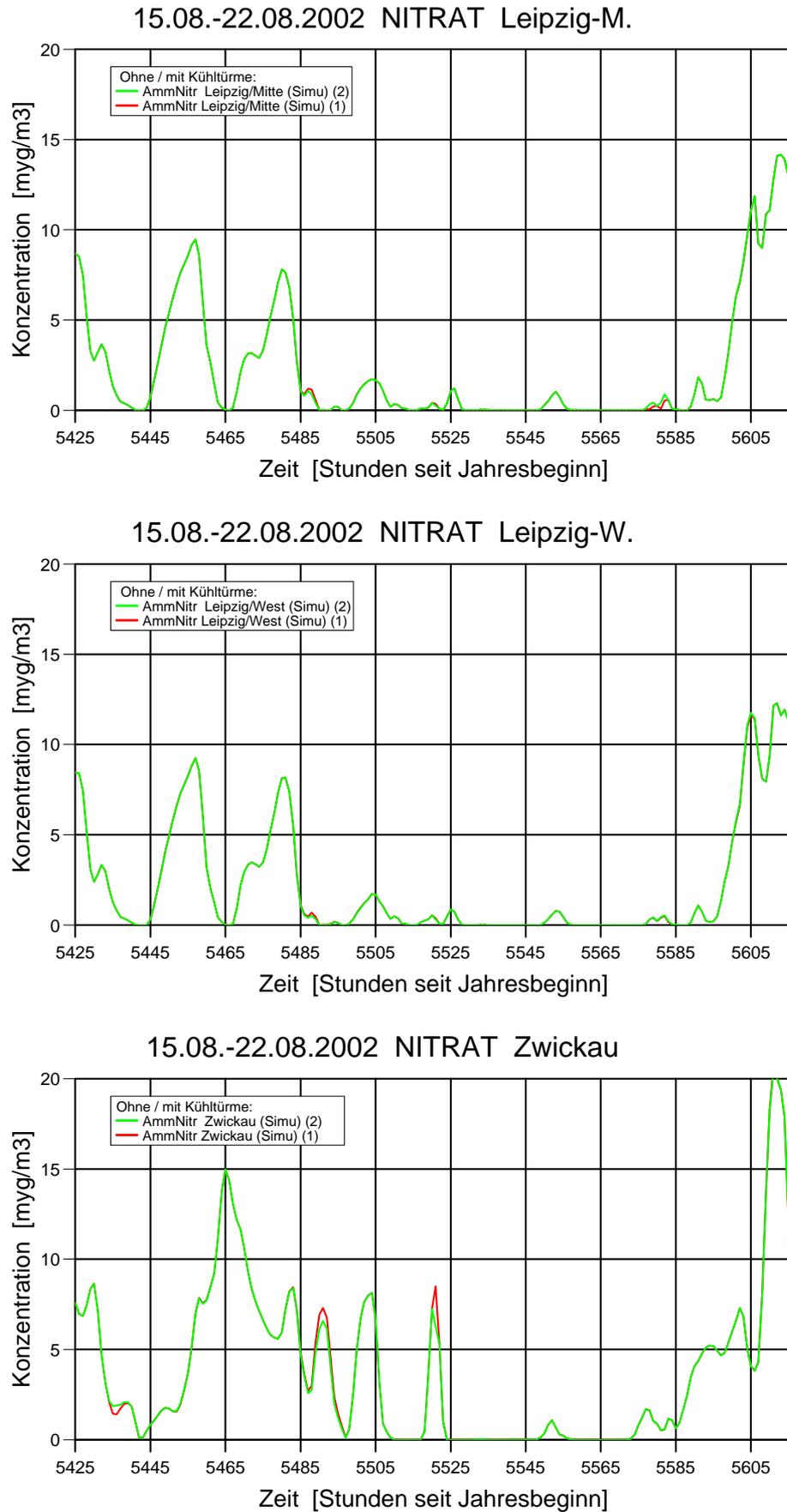


Abbildung 56 (c): NITRAT-Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau

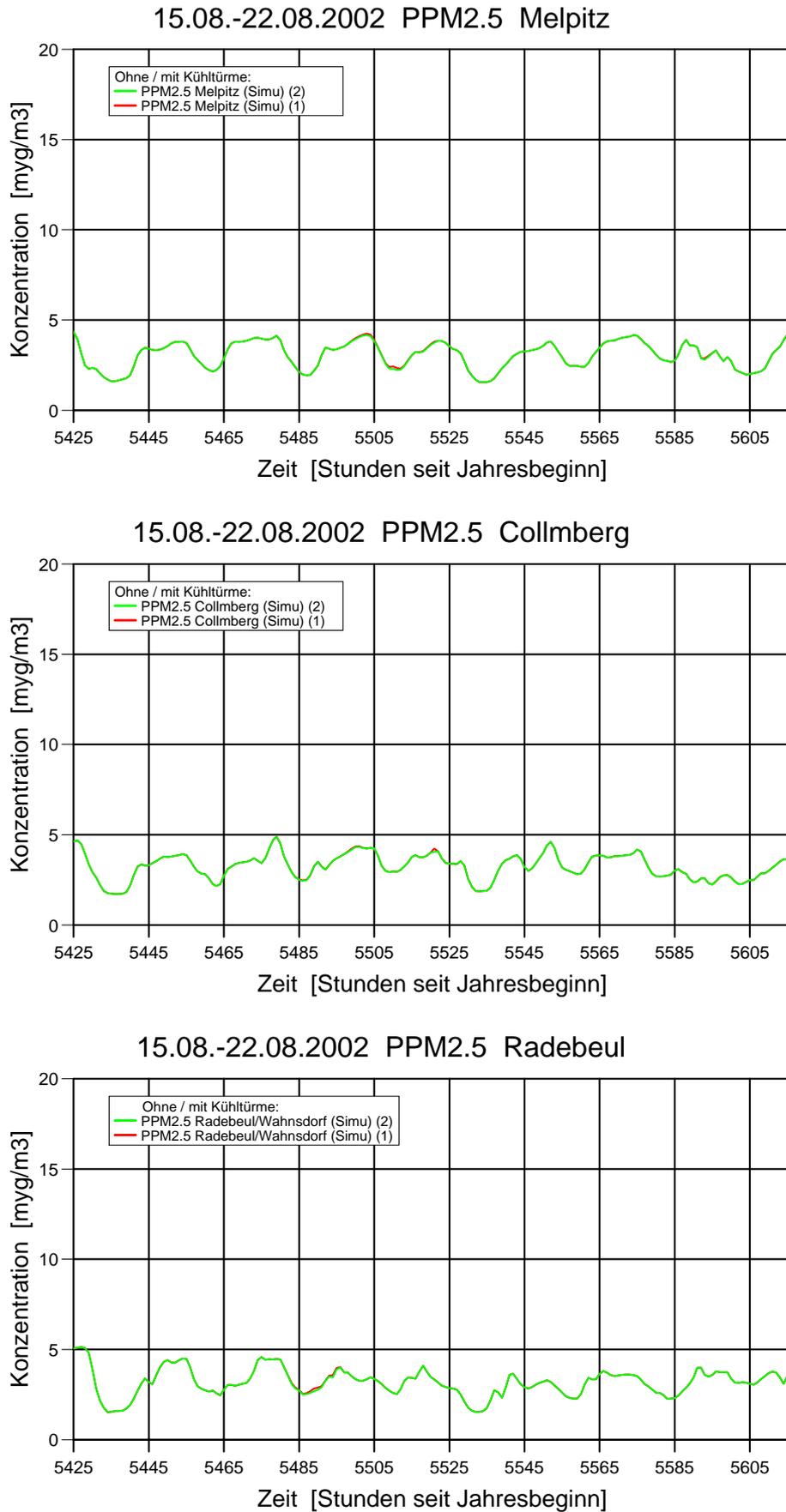


Abbildung 57 (a): PPM<sub>2,5</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collm, Radebeul

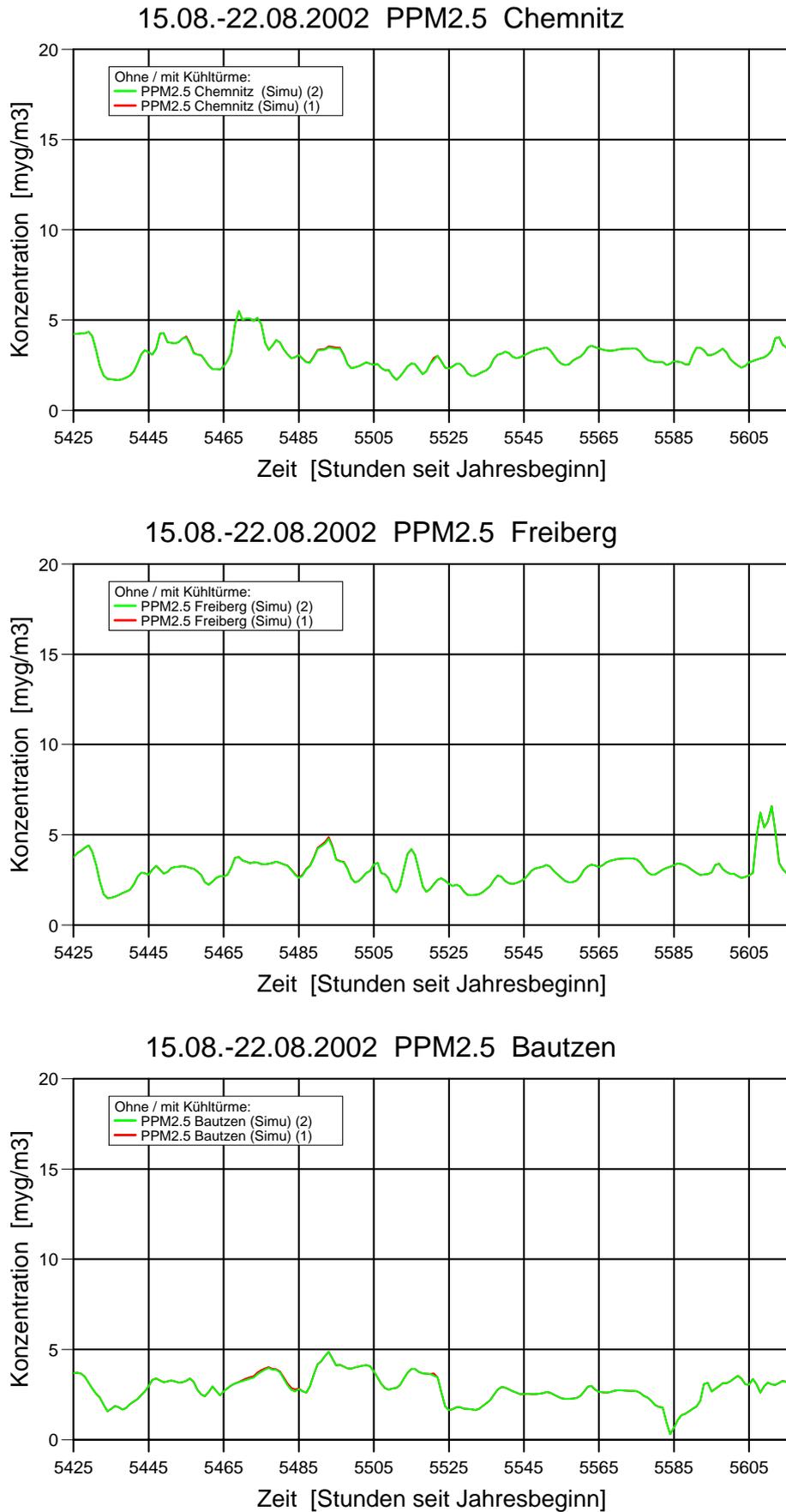


Abbildung 57 (b): PPM<sub>2,5</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen

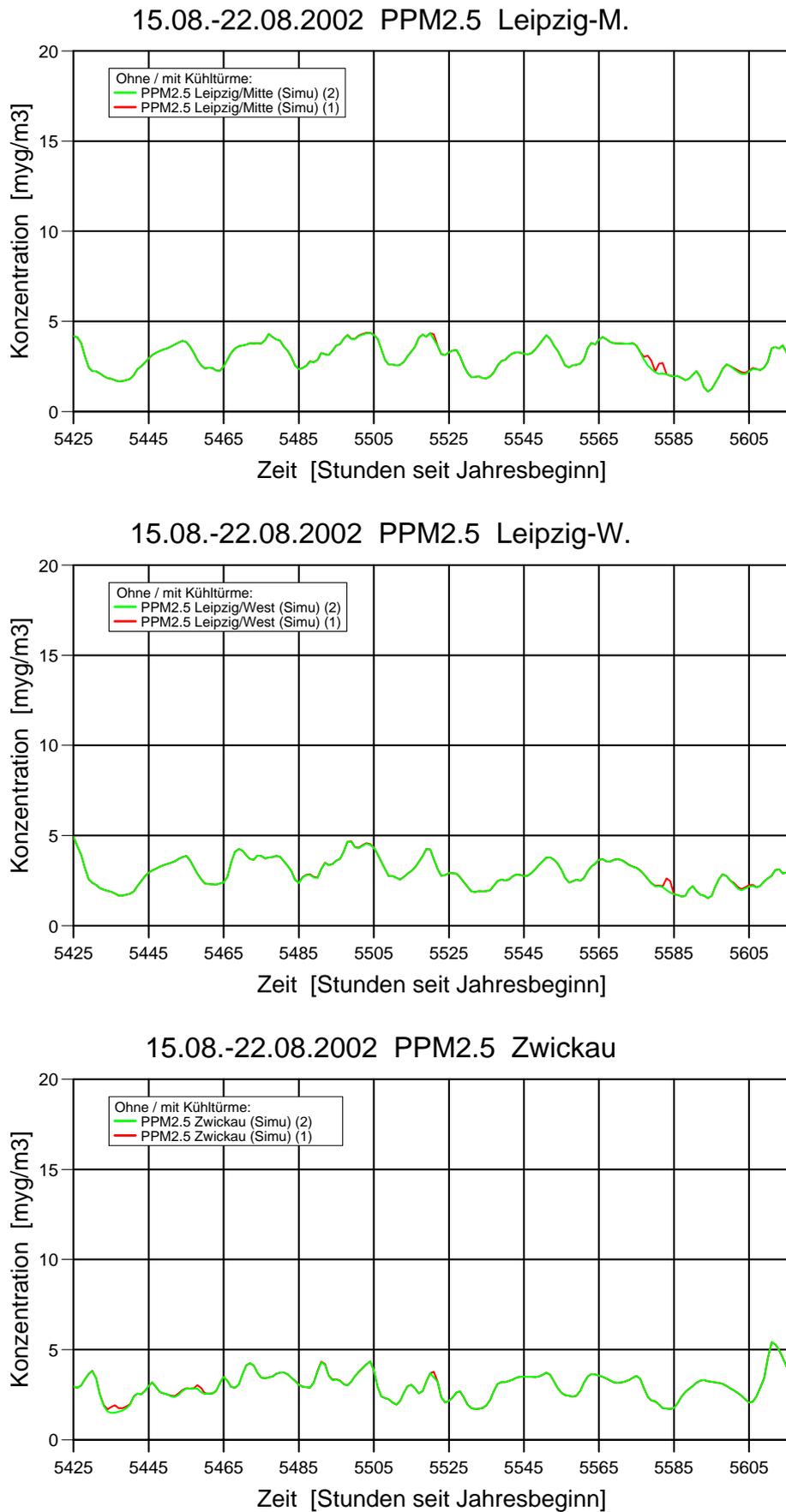


Abbildung 57 (c): PPM<sub>2,5</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau

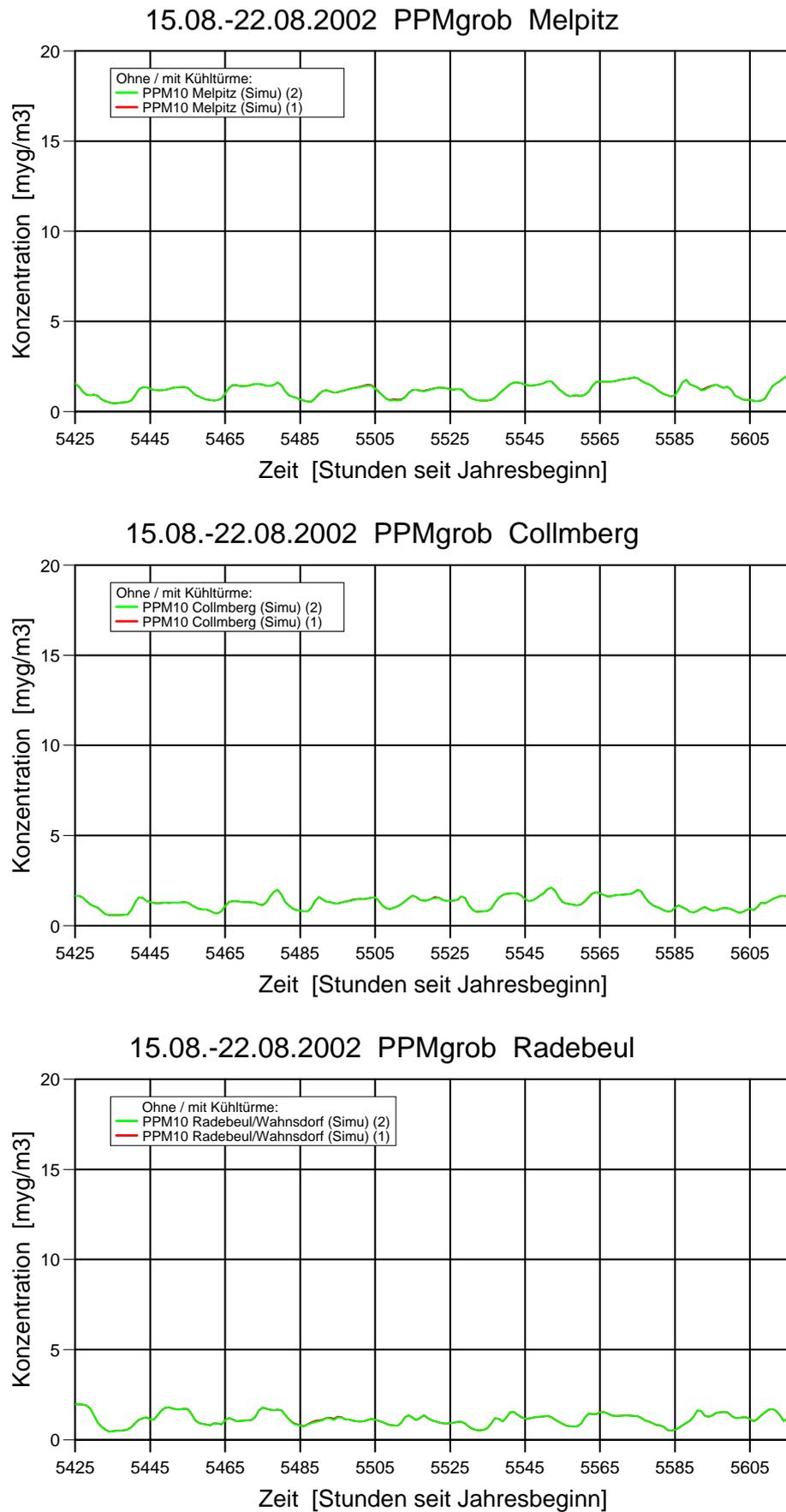


Abbildung 58 (a): PPM<sub>grob</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collm, Radebeul

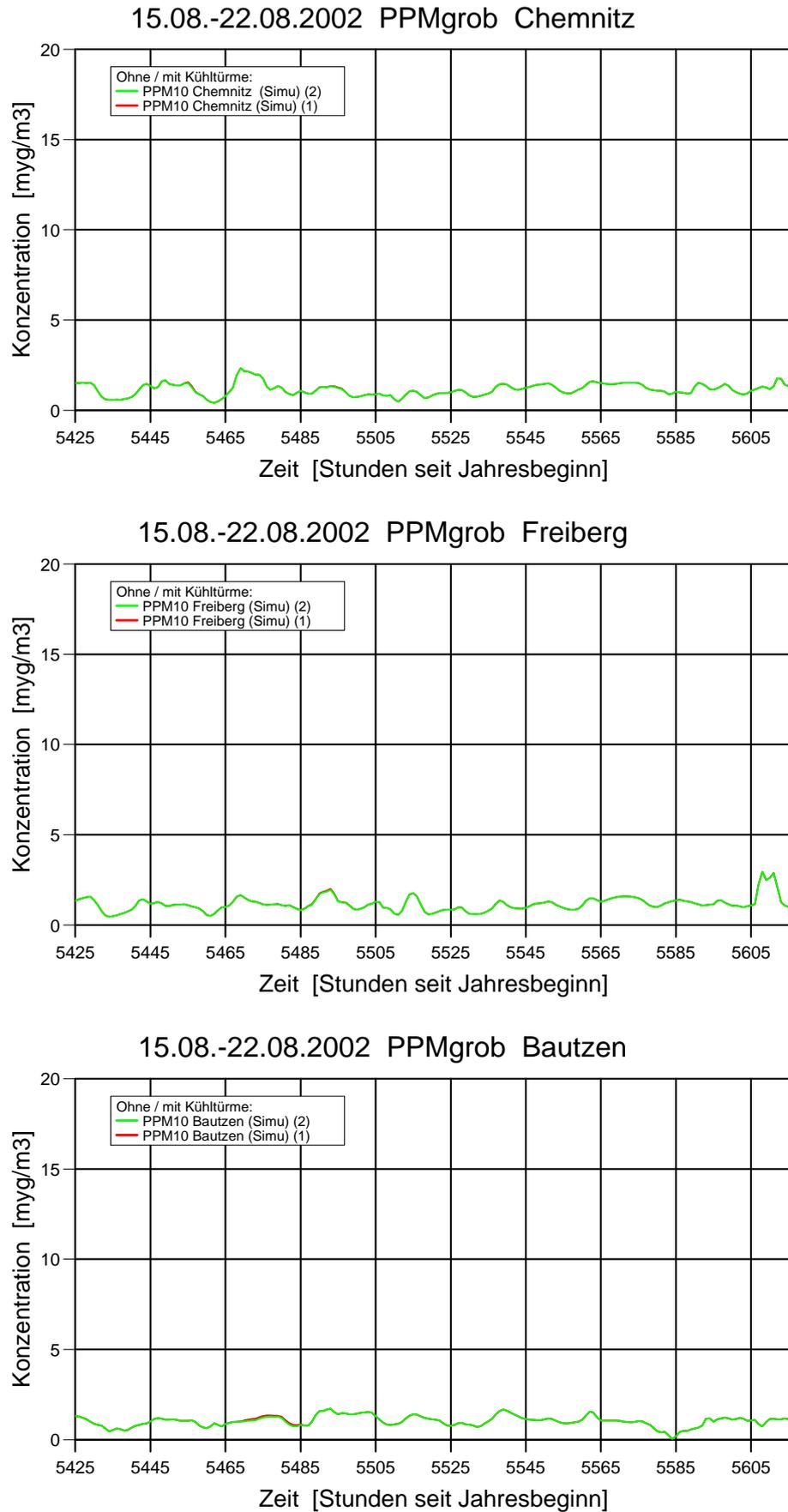


Abbildung 58 (b): PPM<sub>grob</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen

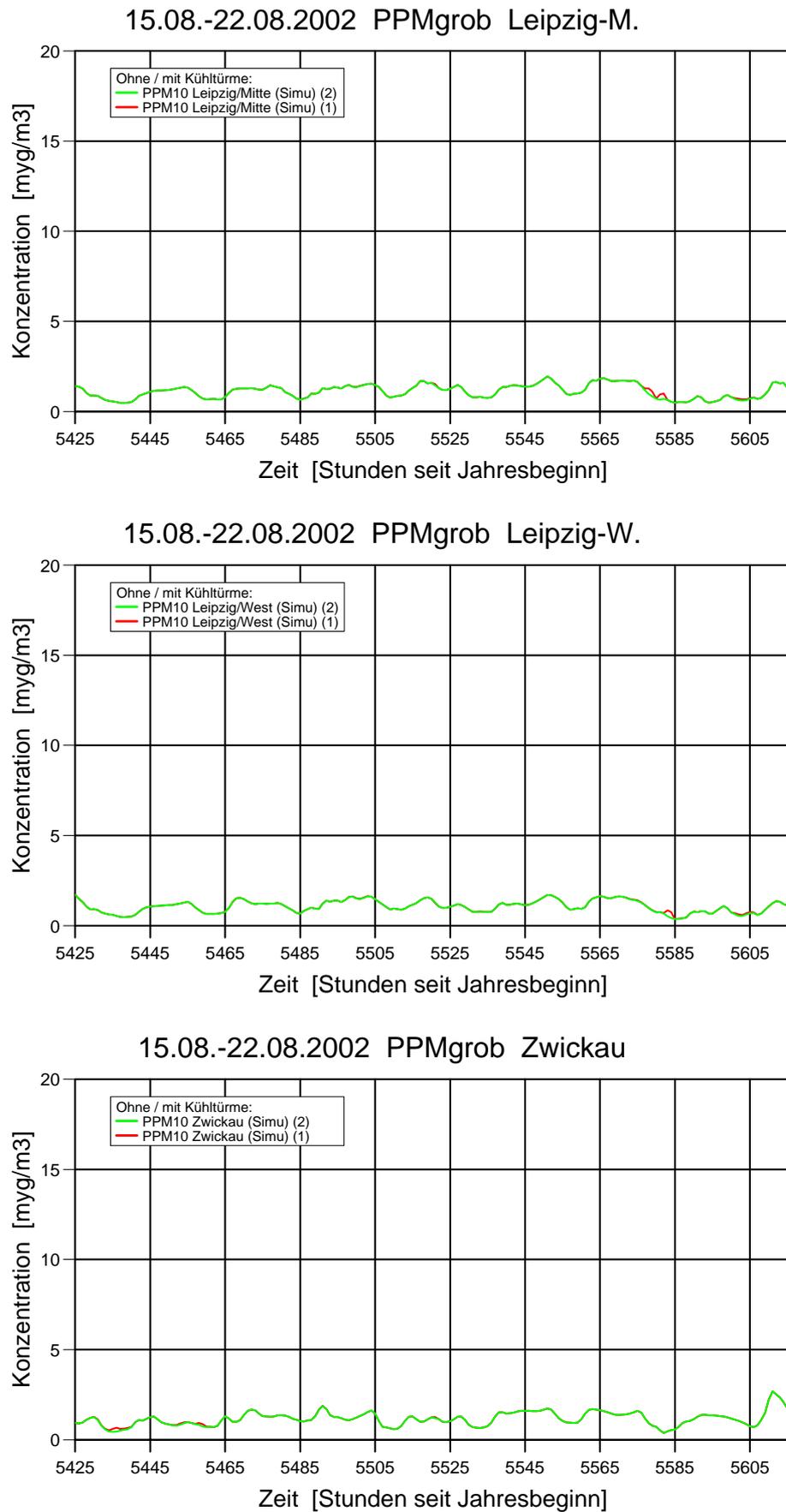


Abbildung 58 (c): PPM<sub>grob</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau

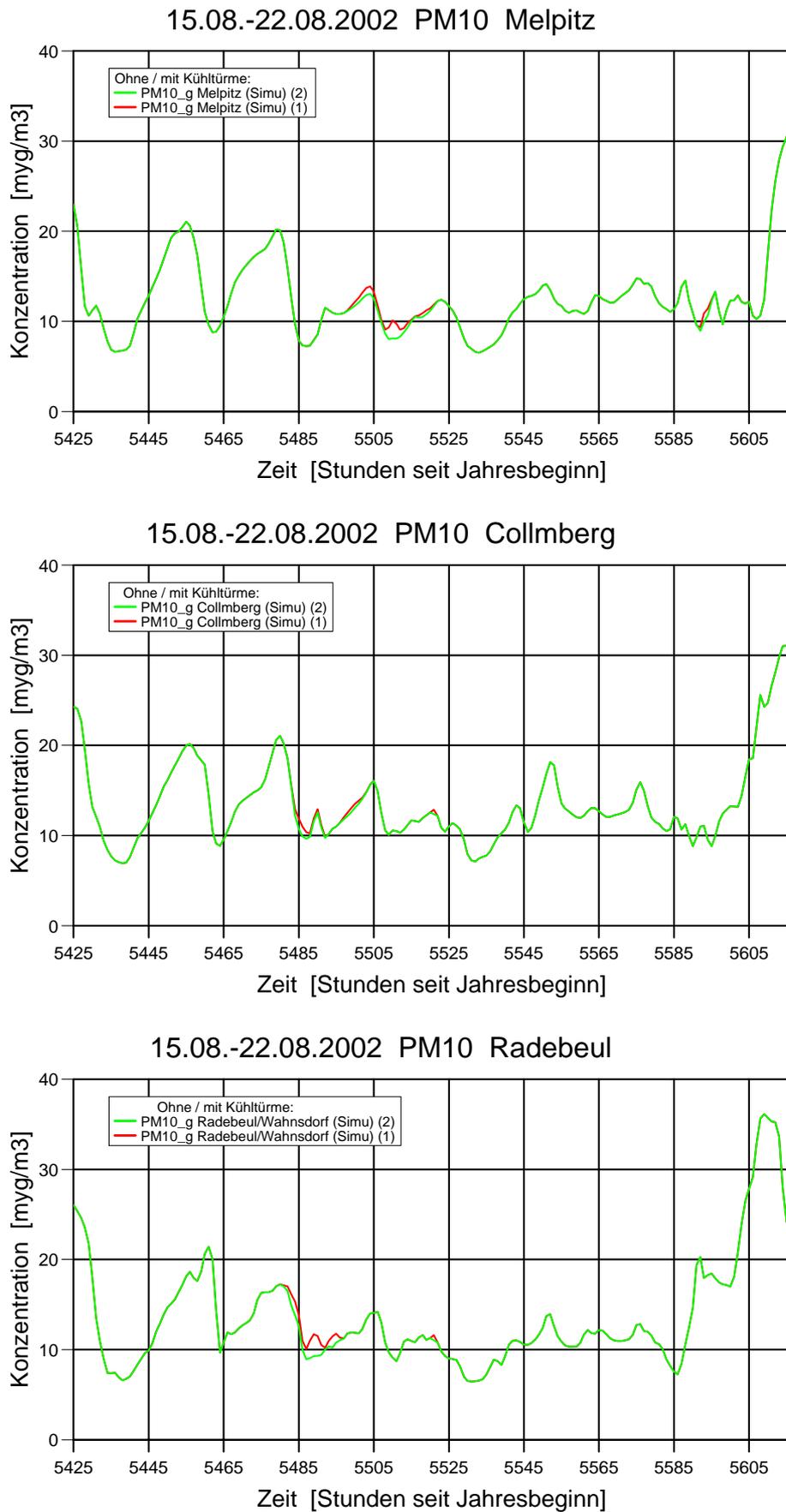


Abbildung 59 (a): PM<sub>10</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Melpitz, Collm, Radebeul

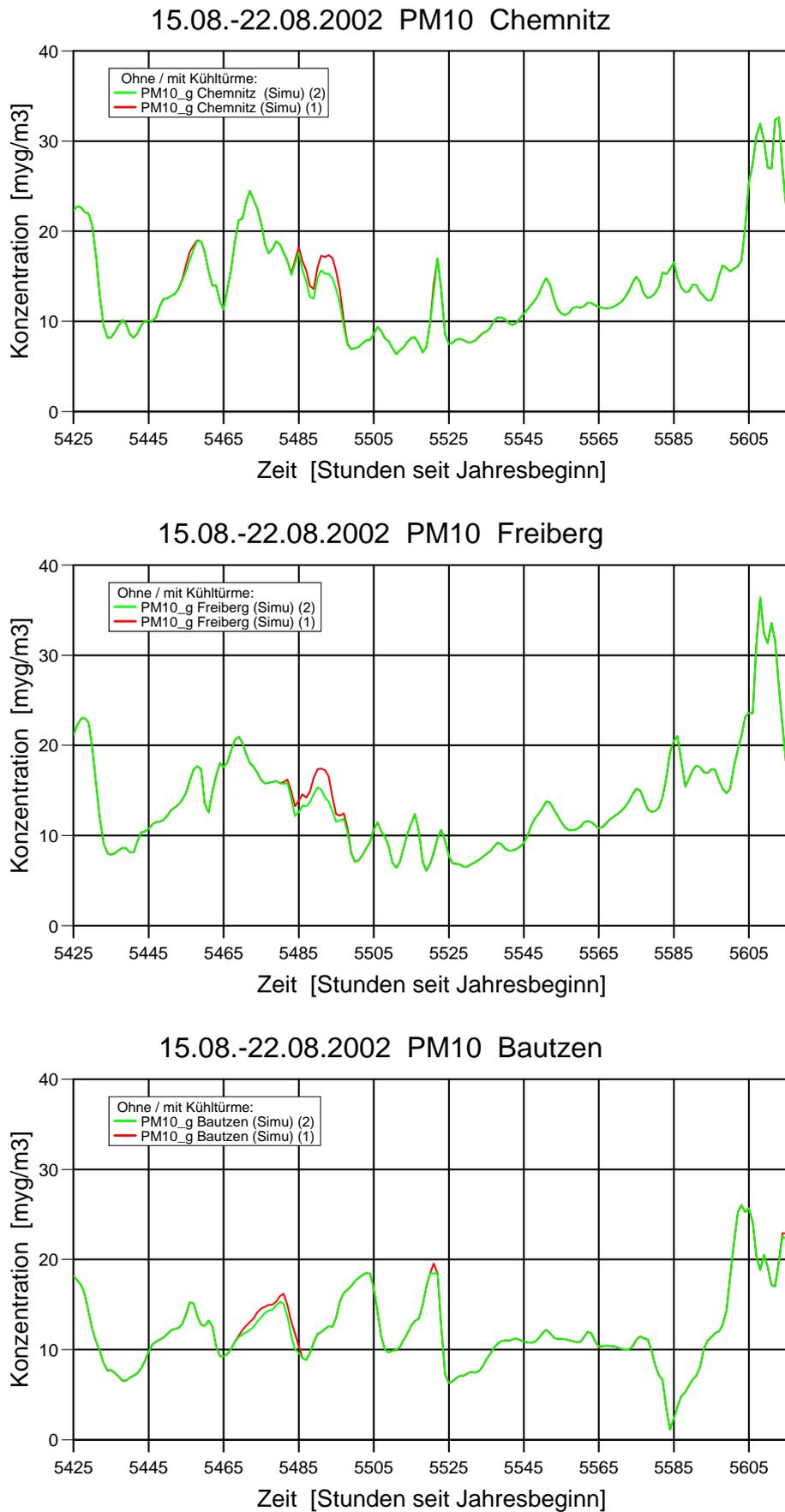


Abbildung 59 (b): PM<sub>10</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Chemnitz, Freiberg, Bautzen

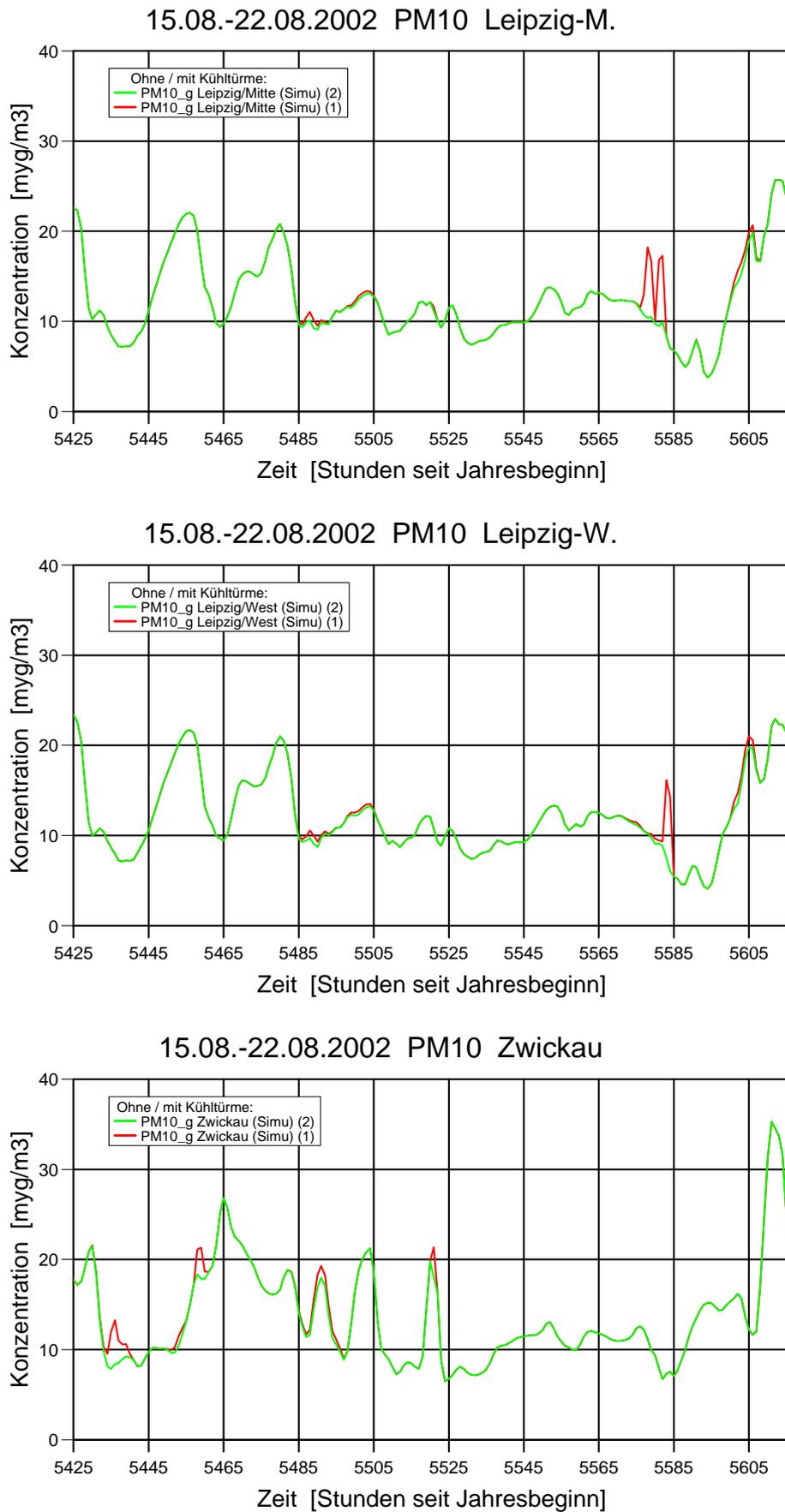
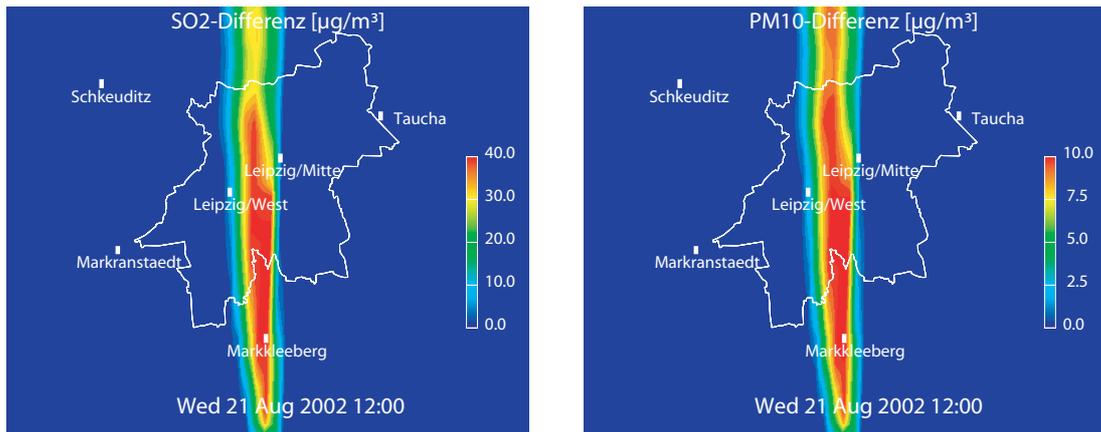
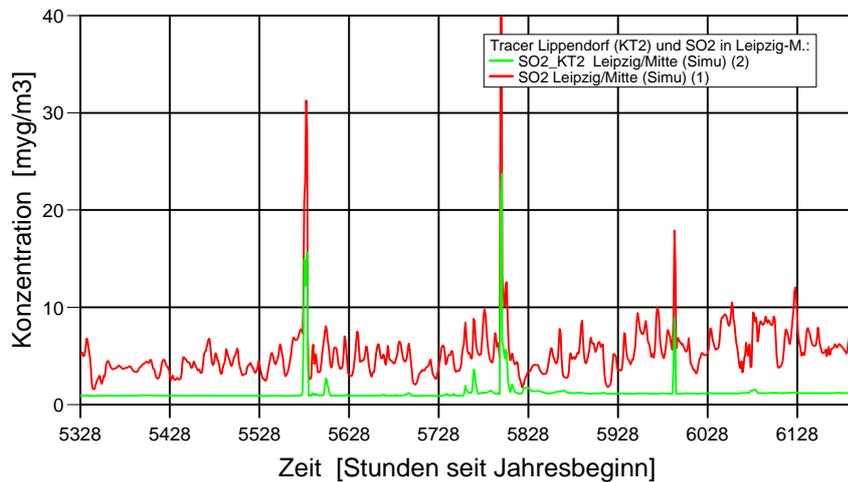


Abbildung 59 (c): PM<sub>10</sub>-Zeitreihe (Sommer) für Leipzig-M., -W., Zwickau

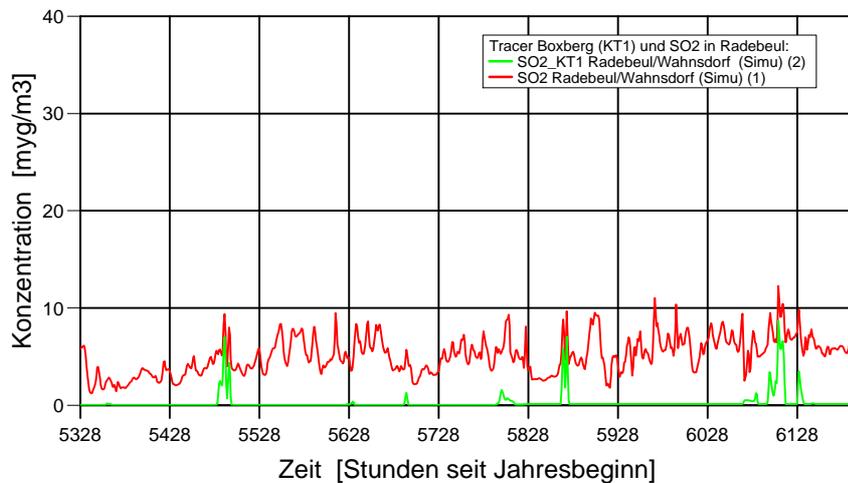


**Abbildung 60:** Lippendorfer Abluftfahne über dem Leipziger Stadtgebiet (links:  $\text{SO}_2$ ; rechts:  $\text{PM}_{10}$ ). Vergrößerte Darstellung ( $36 \text{ km} \times 30 \text{ km}$ ) aus Abb. 49 bzw. 53 (unten links)

**SO<sub>2</sub> und Lippendorfer Tracer in Leipzig-M. 11.08.-15.09.2002**



**SO<sub>2</sub> und Boxberger Tracer in Radebeul 11.08.-15.09.2002**



**Abbildung 61:**  $\text{SO}_2$ -Zeitreihen (Sommer) für Leipzig-M. und Radebeul im Vergleich mit virtuellen Tracern aus Lippendorf bzw. Boxberg

## 6.2 Winter-Analyse

### 6.2.1 Wintertag W1

Da die Simulationsergebnisse eindeutig zeigen, dass im Winter bei weitem nicht so hohe Zusatzbelastungen durch die GFA Boxberg und Lippendorf auftreten wie im Sommer, wurde nur ein repräsentativer Einzeltag detailliert dokumentiert, dafür jedoch der Wochenüberblick auf die Mitternachtsverhältnisse ausgedehnt. Der 24. November 2002 ist gekennzeichnet durch mäßigen Südwind, Temperaturen zwischen 0°C und 10°C und eine den ganzen Tag anhaltende stabile thermische Schichtung. Die Abluffahnen der GFA-Kühltürme erreichen unter diesen Bedingungen nur effektive Höhen zwischen 300 m und 350 m. Trotz dieser vergleichsweise geringen Emissionshöhen beeinflussen die Kühlturmahnen wegen der stabilen thermischen Schichtung in der unteren Grenzschicht auch tagsüber die Bodenkonzentrationen nur wenig.

Die folgende Abbildung 62 zeigt  $SO_2$ -Konzentrationswerte in Bodennähe, verursacht durch die Kühltürme (d.h. die Differenz der Simulationen mit bzw. ohne Kühlturmmissionen), von bis zu  $8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , also um eine Größenordnung kleiner als an Sommertagen und damit in vergleichbarer Größe zu den anderen Punktquellen Sachsens. Ebenfalls anders als im Sommer ist das zeitliche Verhalten, das hier im 4-Stunden-Rhythmus durchgängig für den gesamten Tag wiedergegeben ist. Zwischen Tag und Nacht gibt es keine prinzipiellen Unterschiede. Die unverändert hohen  $SO_2$ -Emissionen in der Höhe vermögen offenbar nicht, sich ähnlich wie im Sommer am Tage in die bodennahe Schicht einzumischen. Zur Kontrolle dieser Aussage wird die  $SO_2$ -Differenzkonzentration auch in der effektiven Emissionshöhe (ca. 300 m; siehe Abb. 62c) gezeigt, die die GFA-Abluffahnen in vielfach stärkerer Konzentration erkennen lässt.

Ähnlich wie im Sommer stellt sich in Bodennähe ein ungefähr 25%-iges Verhältnis zwischen *Ammoniumsulfat* ( $2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ; siehe Abb. 63) und  $SO_2$  ein, das aus dem direkten Emissionsverhältnis von freien Sulfationen zu  $SO_2$  resultiert. Dieses Verhältnis wird am Boden über den gesamten Tag eingehalten. Wenn jedoch die entsprechenden Werte in 300 m Höhe ins Verhältnis zueinander gesetzt werden, ergeben sich, anders als im Sommer, mitunter nur ungefähr 10%. Darin zeigt sich die im Winter verminderte Verfügbarkeit von  $NH_3$  in den höheren Luftschichten, da Ammoniak im wesentlichen bodennahen Quellen entstammt und die turbulente Durchmischung stark eingeschränkt ist. Die sekundäre Ammoniumsulfatbildung über die Oxidation von  $SO_2$  mit OH spielt im Winter nur eine untergeordnete Rolle und ist zu vernachlässigen.

Die von den Kühltürmen primär emittierten Partikel ( $PPM_{10}$  maximal  $0,4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ; siehe Abb. 65) spiegeln sich in der entsprechenden Konzentrationsverteilung in ähnlicher Form wie  $SO_2$  wider, und auch das Verhältnis zwischen ihnen entspricht ungefähr dem der Emissionswerte (ca. 4% wie im Sommer). Auch der Einfluss auf die *Nitrat*bildung liegt in dieser Größenordnung (Abb. 64). Somit ergibt sich im Winter die gleiche Aussage wie im Sommer, dass ausschließlich die Sulfatbildung infolge der hohen Schwefelemissionen die  $PM_{10}$ -Zusatzbelastung bestimmt, die demzufolge nur  $2 \mu\text{g}/\text{m}^3$  und damit 1/10 der sommerlichen Werte erreicht (Abb. 66). Als Fazit kann man feststellen, dass die Kühltürme im Winter weder eine merkbare Quelle für Sulfat noch für Nitrat sind und deshalb einen vernachlässigbaren Beitrag zur  $PM_{10}$ -Belastung darstellen.

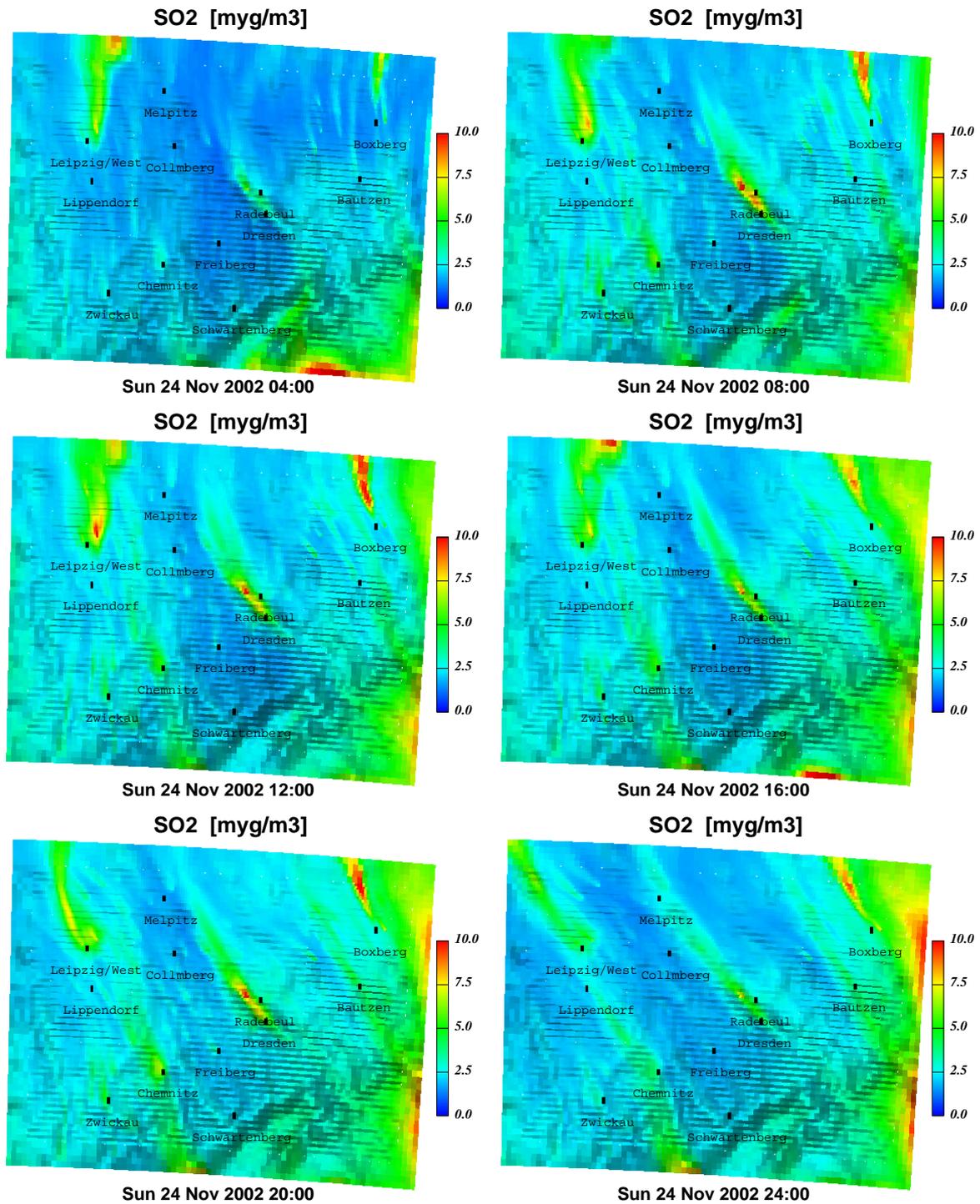


Abbildung 62 (a): SO<sub>2</sub> im Tagesverlauf (Wintertag W1)

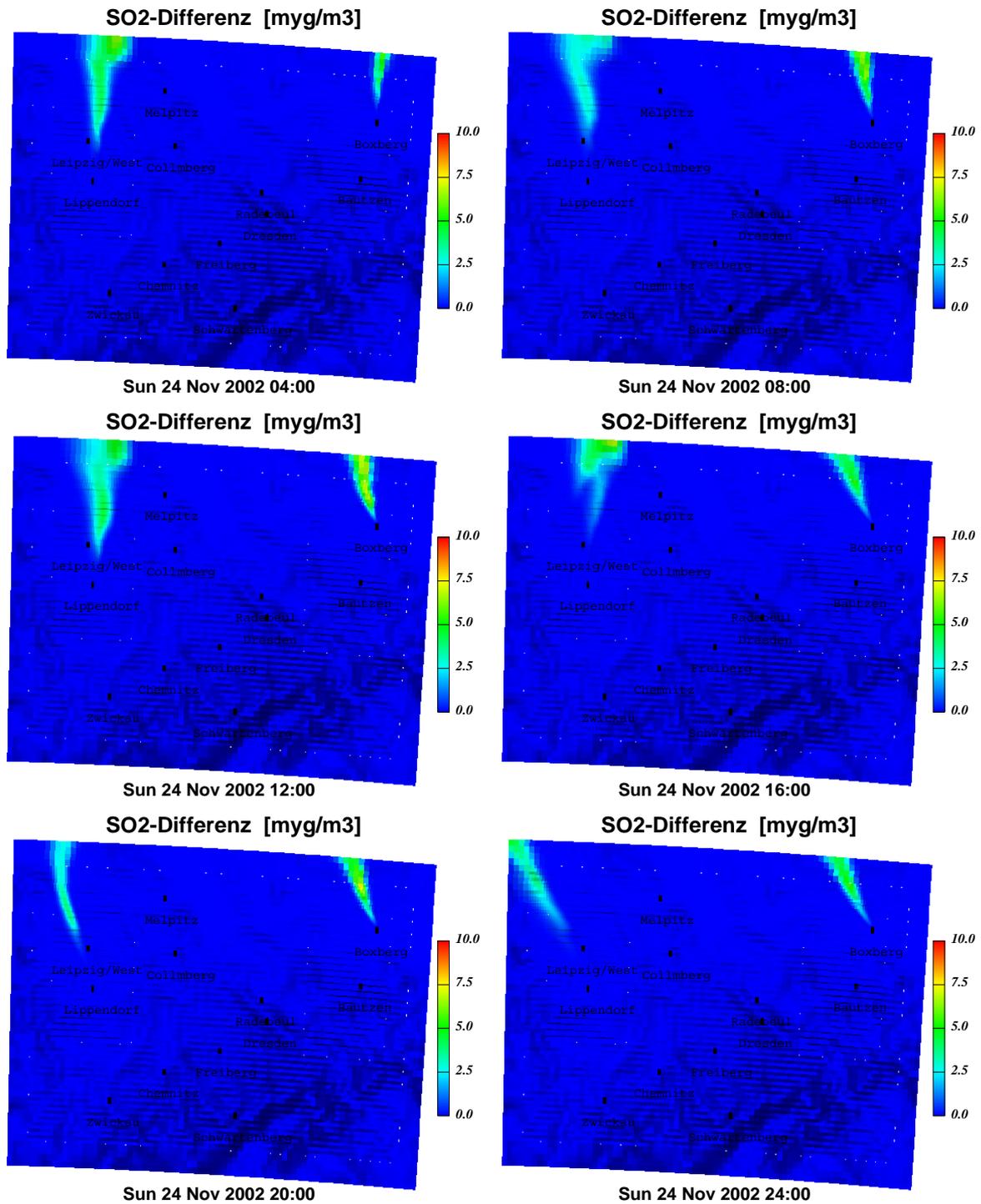


Abbildung 62 (b): SO<sub>2</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Wintertag W1)

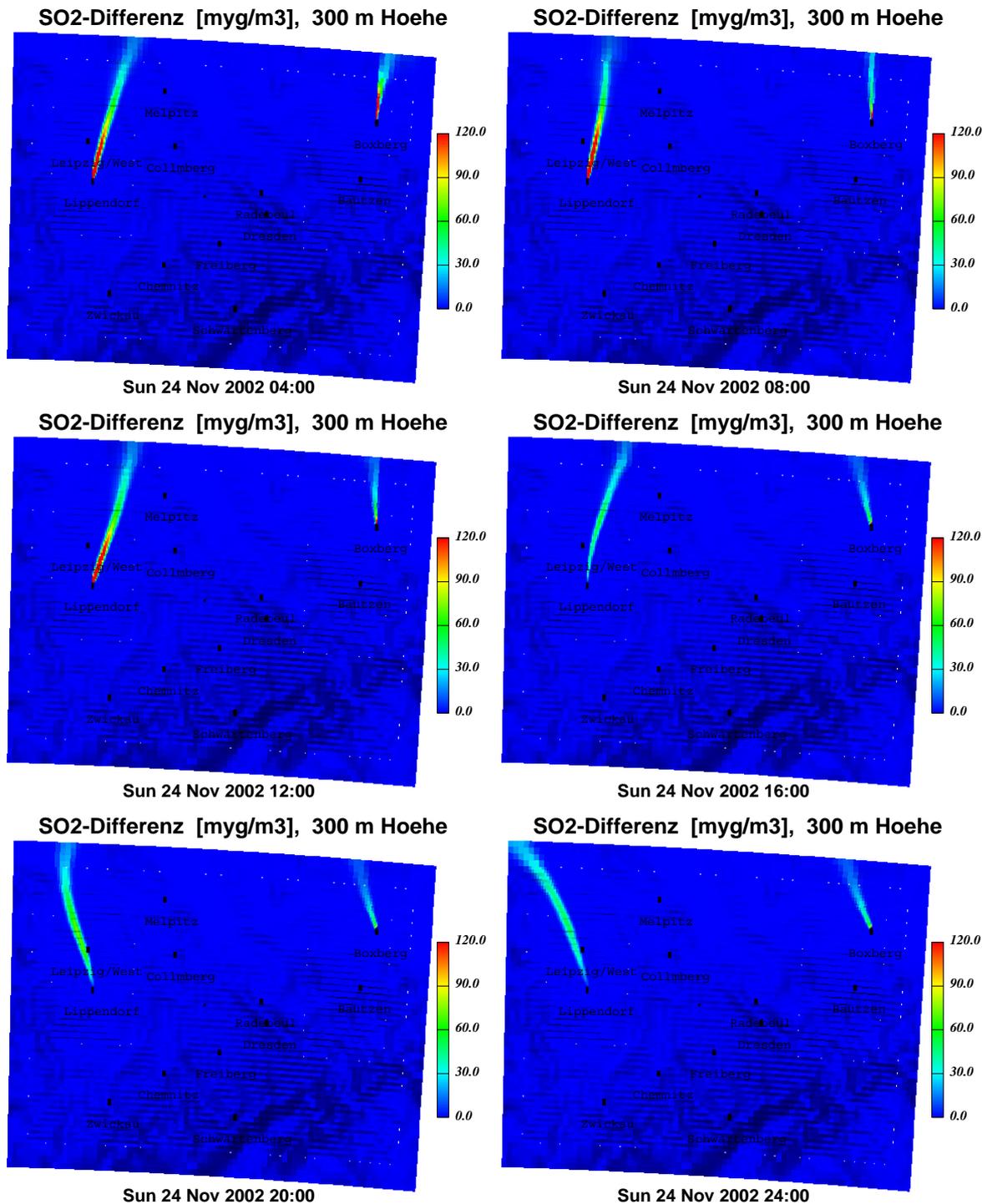


Abbildung 62 (c): SO<sub>2</sub>-Differenz in 300 m Höhe im Tagesverlauf (Wintertag W1)

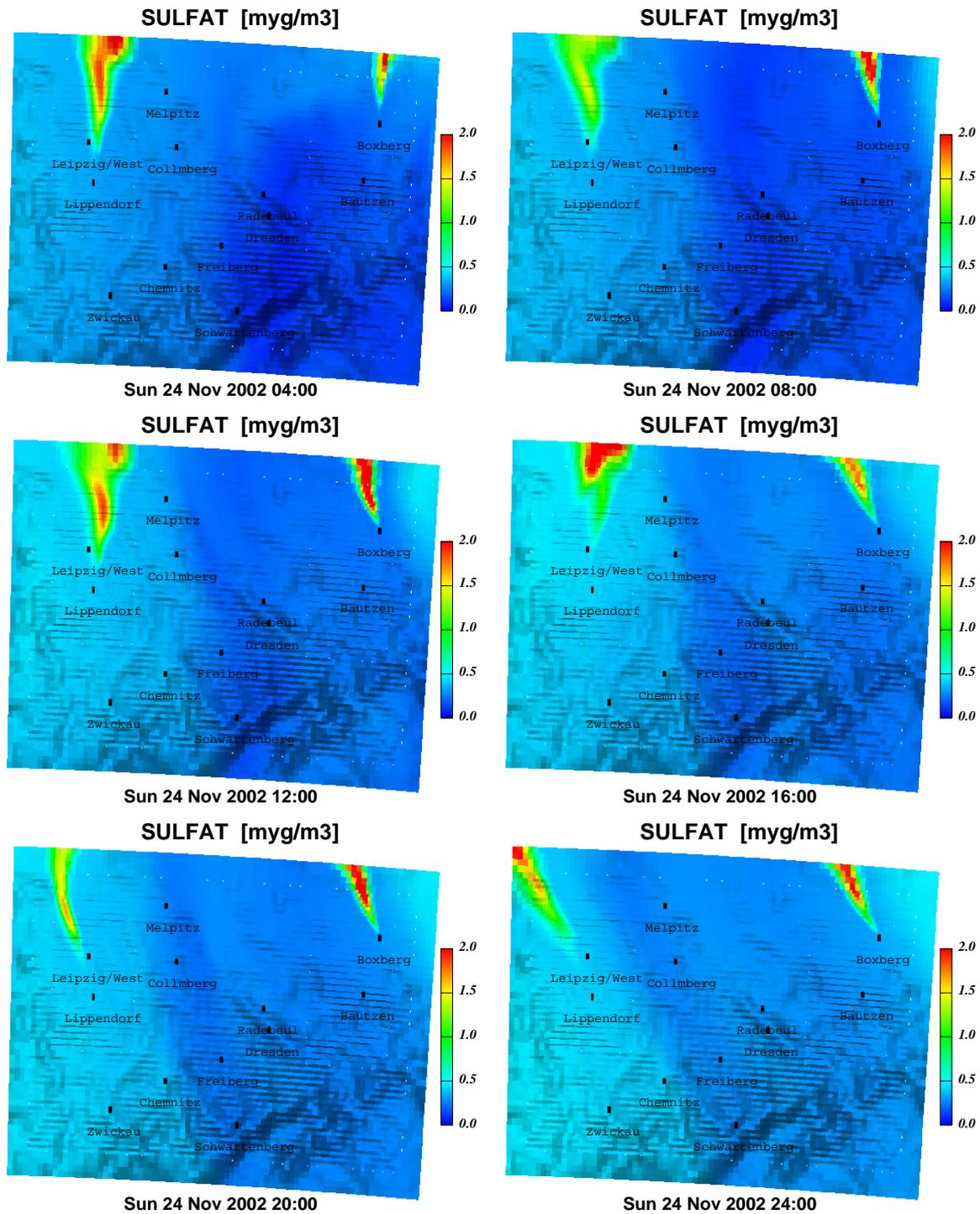


Abbildung 63 (a): SULFAT im Tagesverlauf (Wintertag W1)

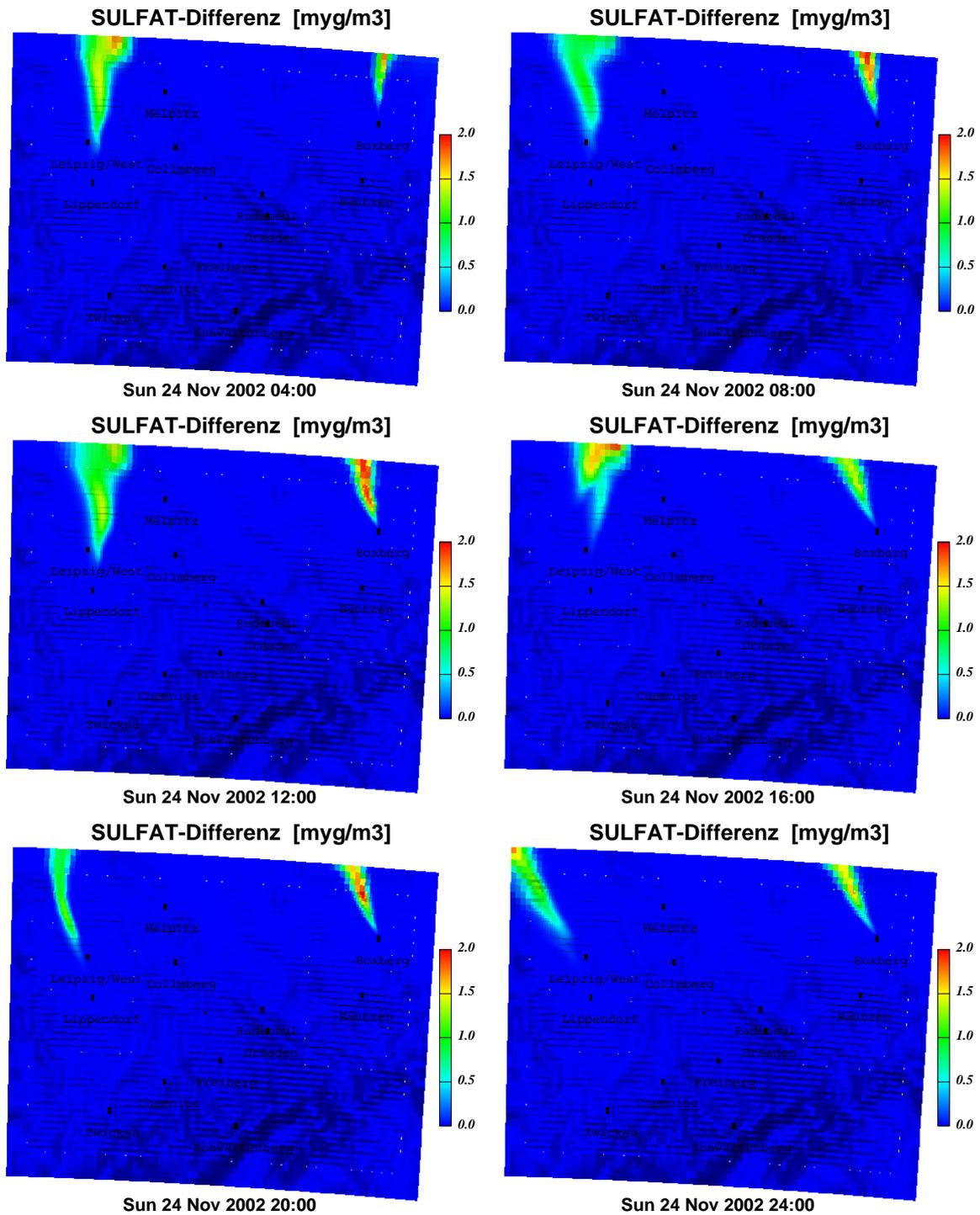


Abbildung 63 (b): SULFAT-Differenz im Tagesverlauf (Wintertag W1)

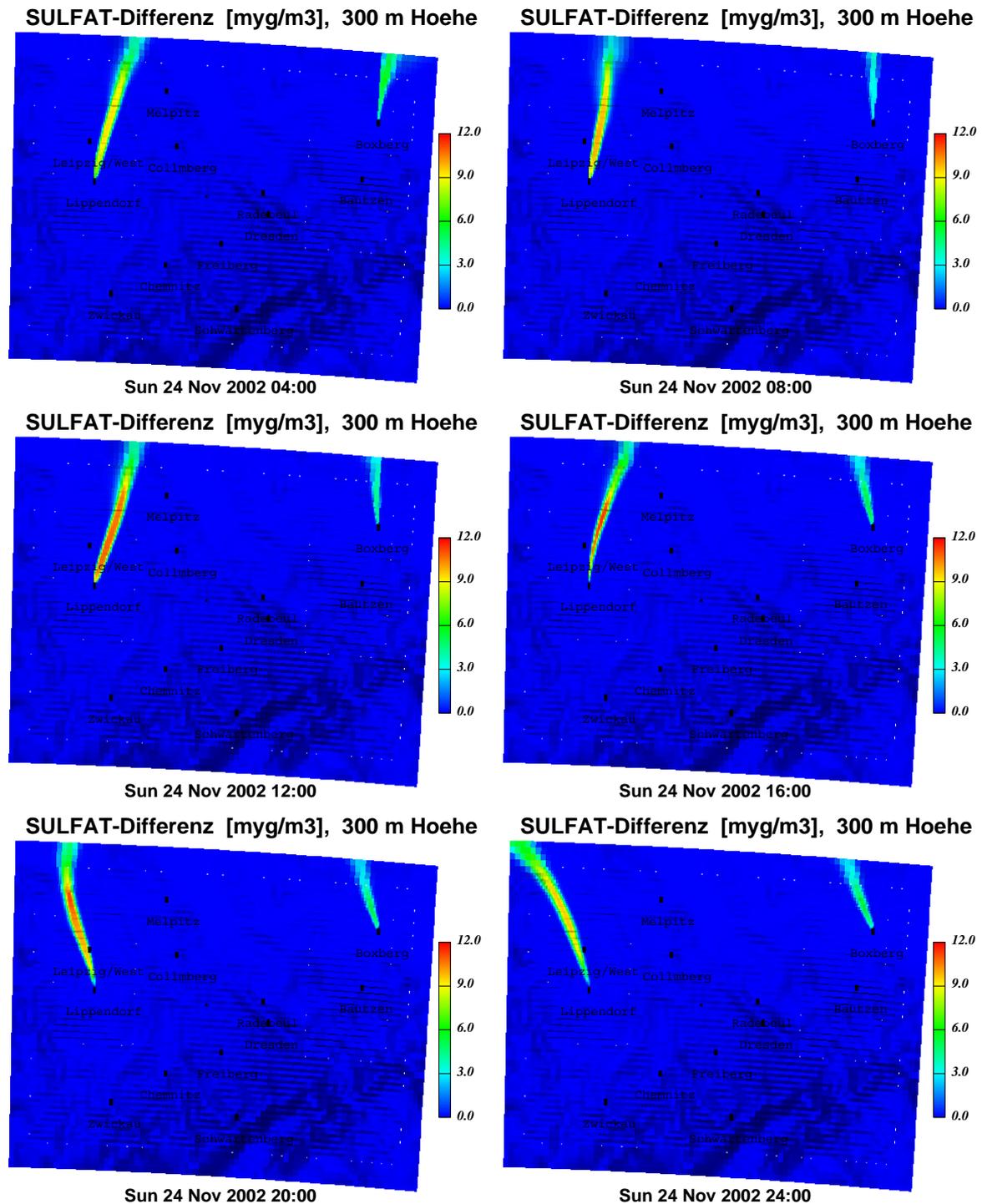


Abbildung 63 (c): SULFAT-Differenz in 300 m Höhe im Tagesverlauf (Wintertag W1)

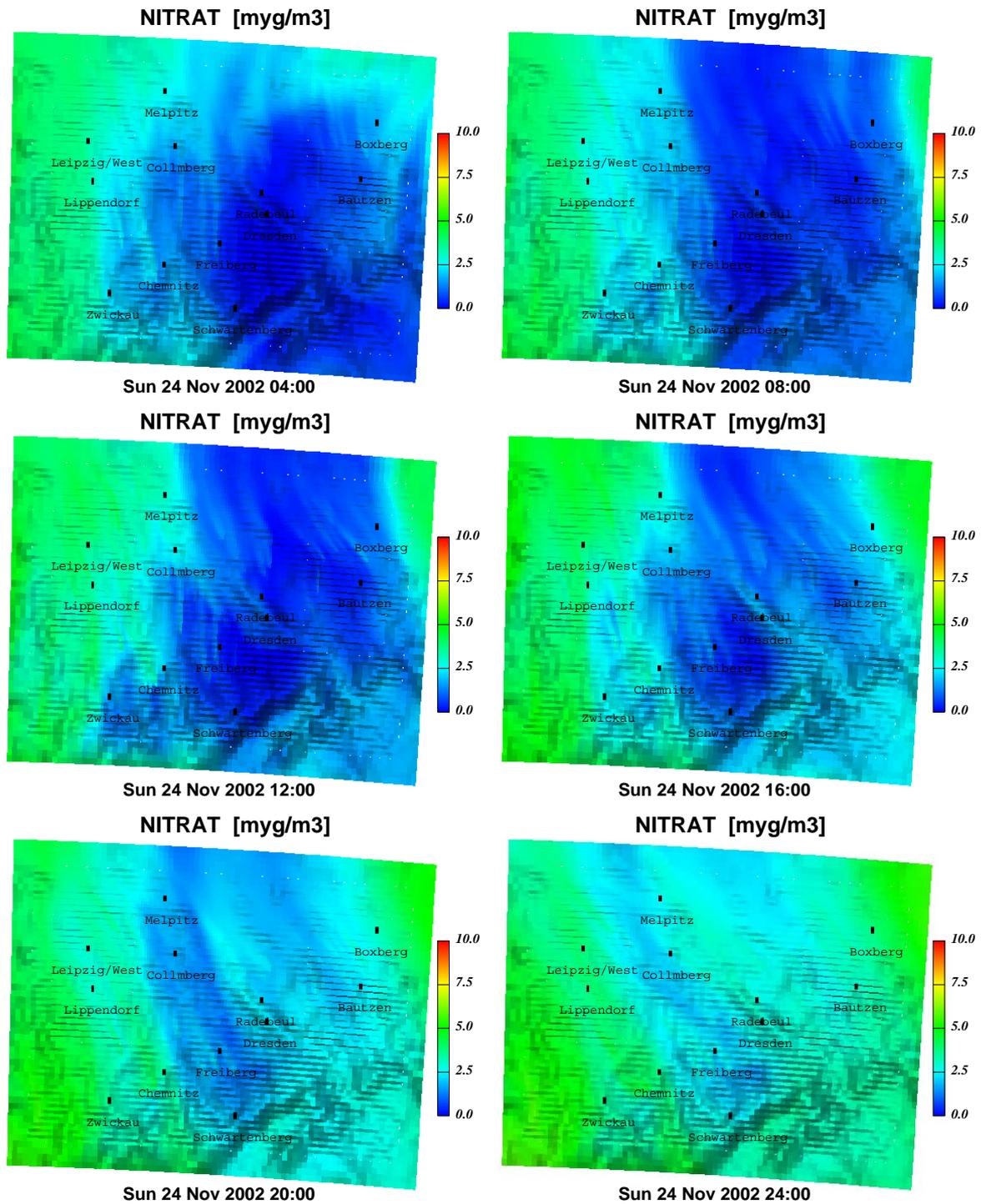


Abbildung 64 (a): NITRAT im Tagesverlauf (Wintertag W1)

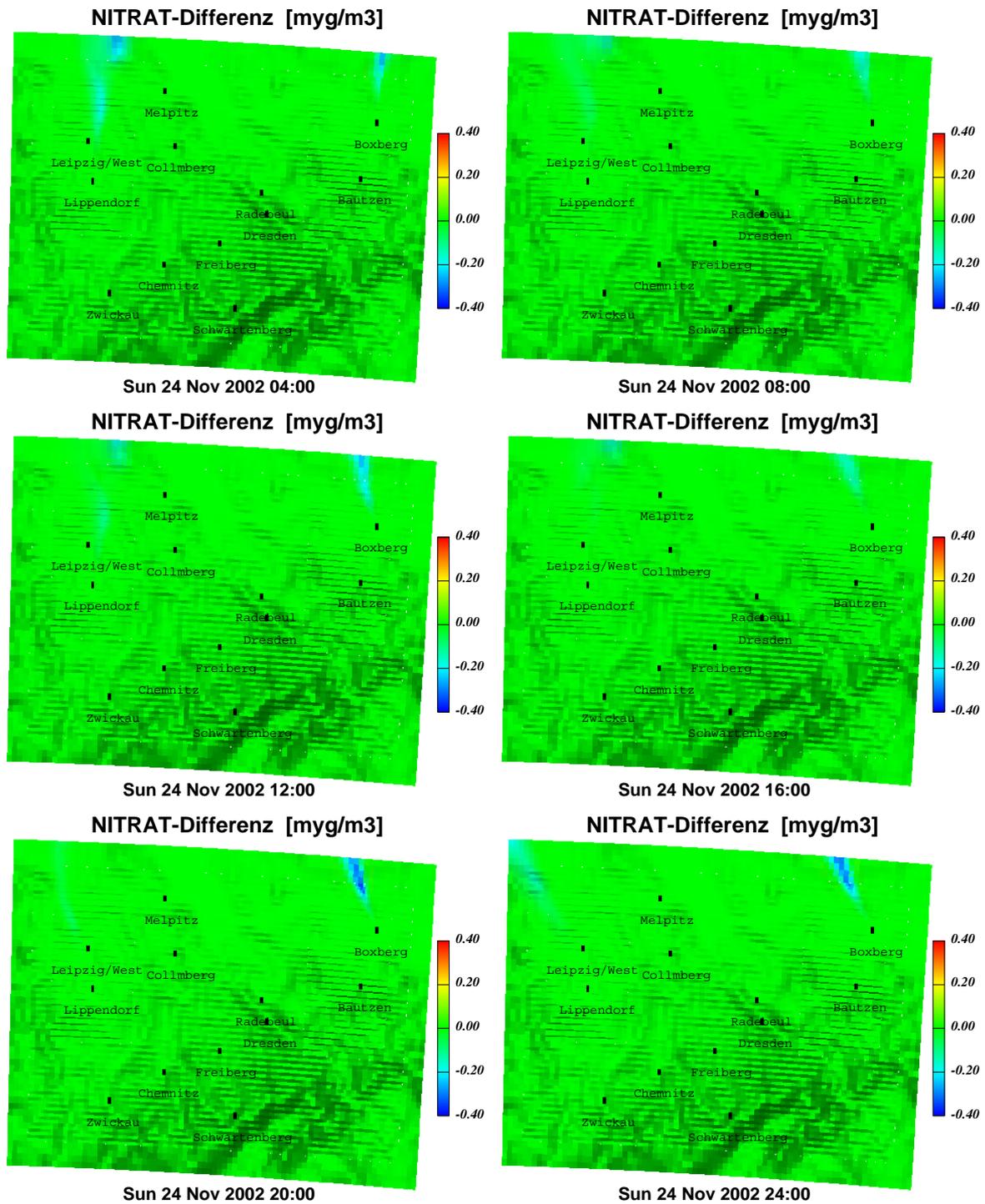


Abbildung 64 (b): NITRAT-Differenz im Tagesverlauf (Wintertag W1)

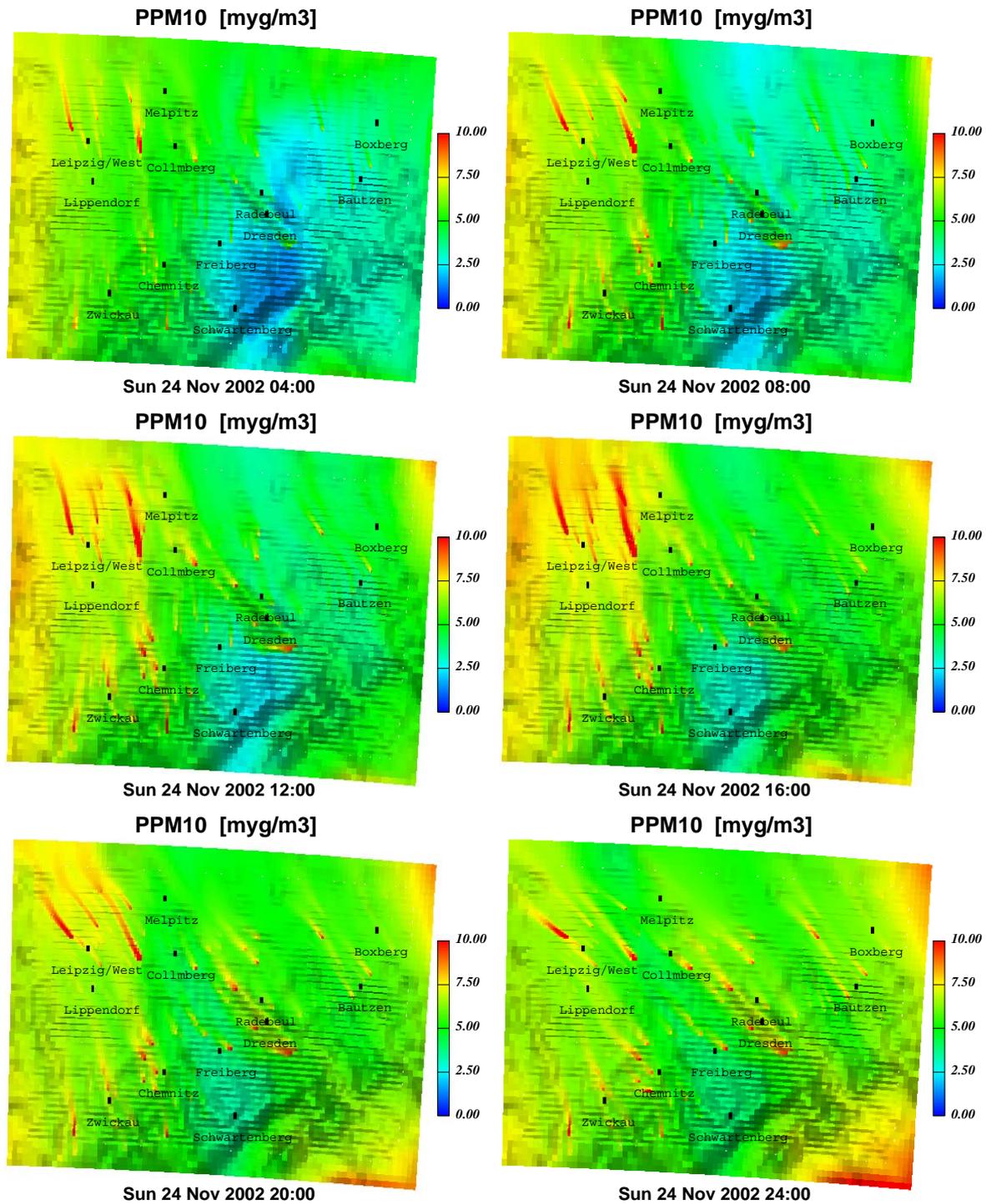


Abbildung 65 (a): PPM<sub>10</sub> im Tagesverlauf (Wintertag W1)

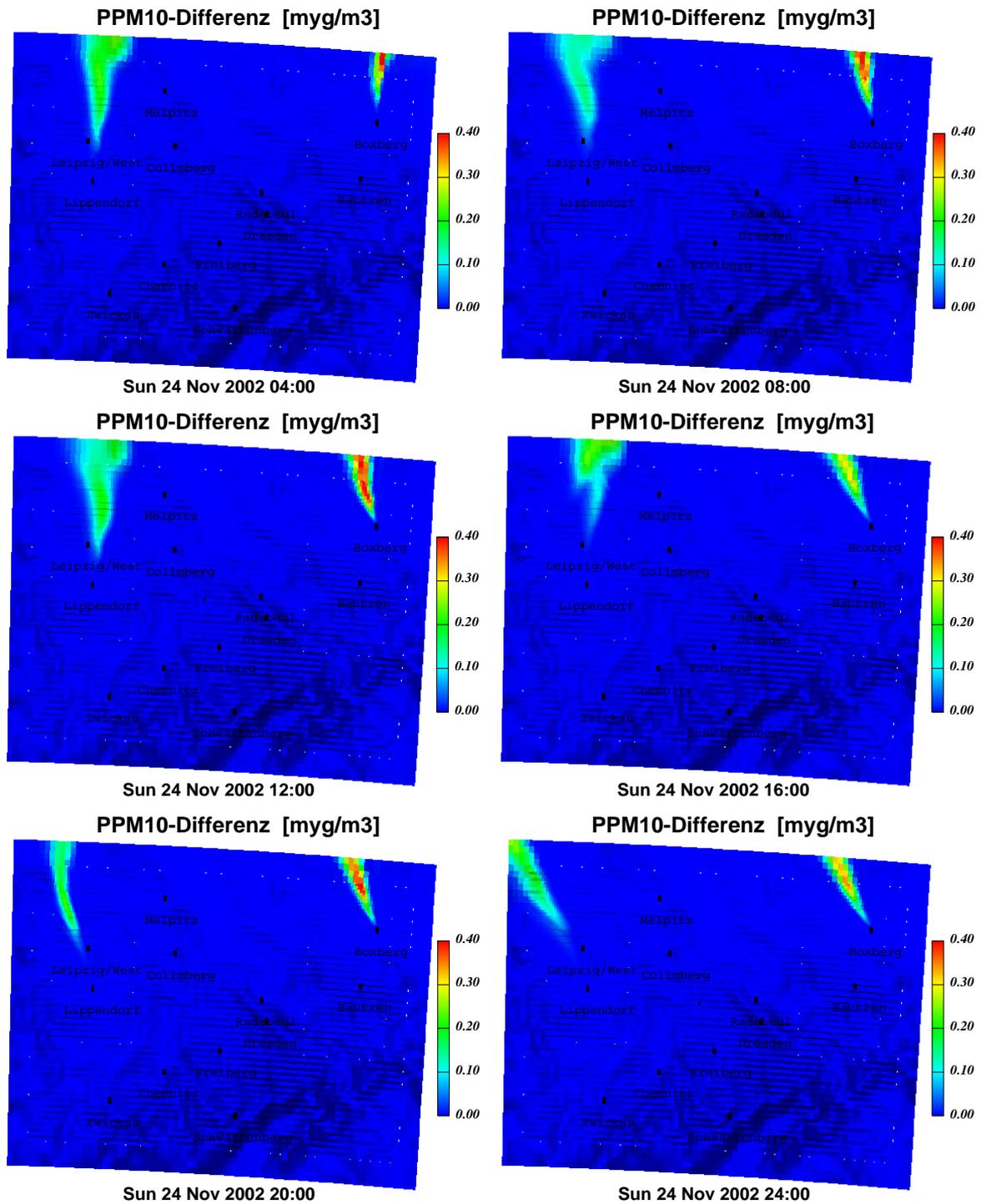
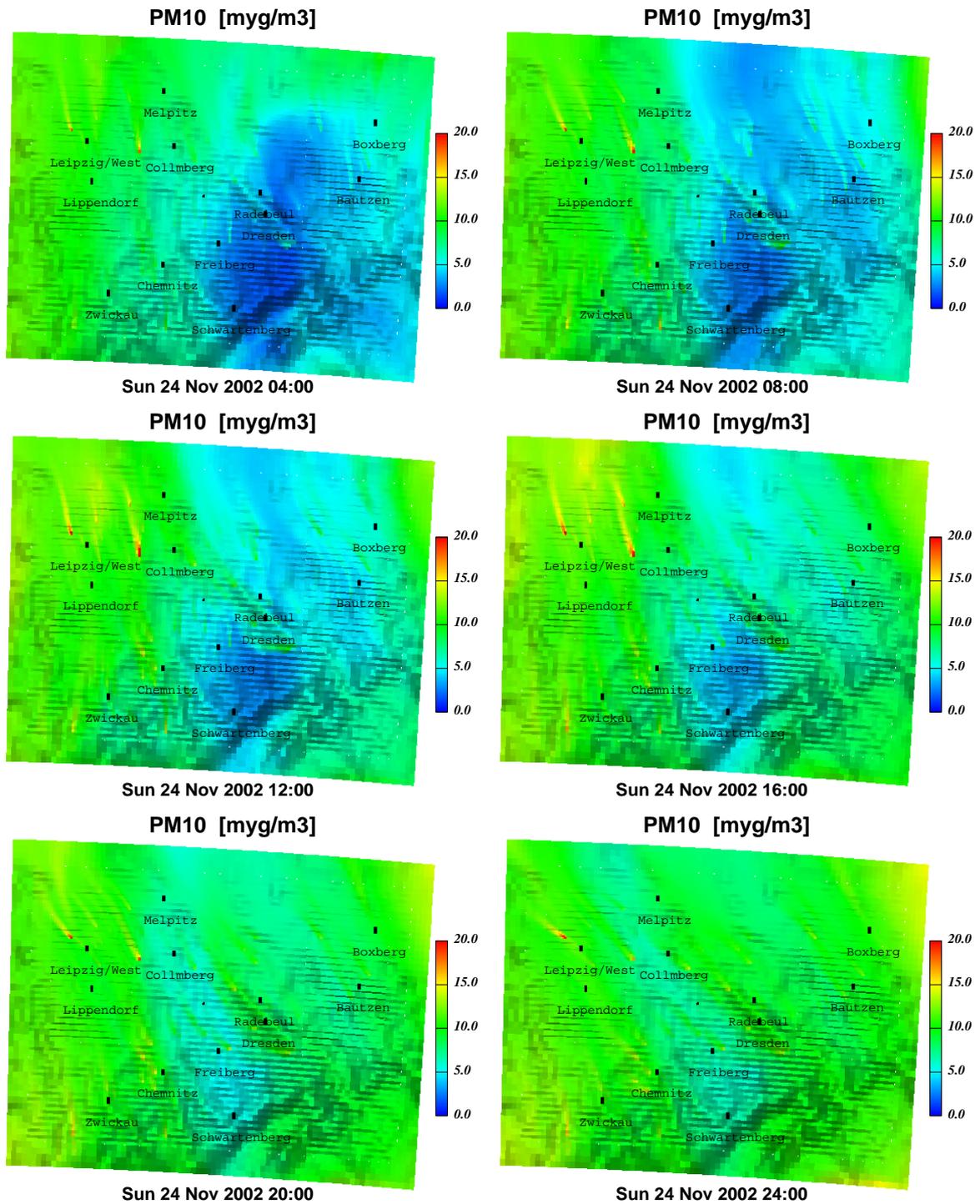


Abbildung 65 (b): PPM<sub>10</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Wintertag W1)

Abbildung 66 (a): PM<sub>10</sub> im Tagesverlauf (Wintertag W1)

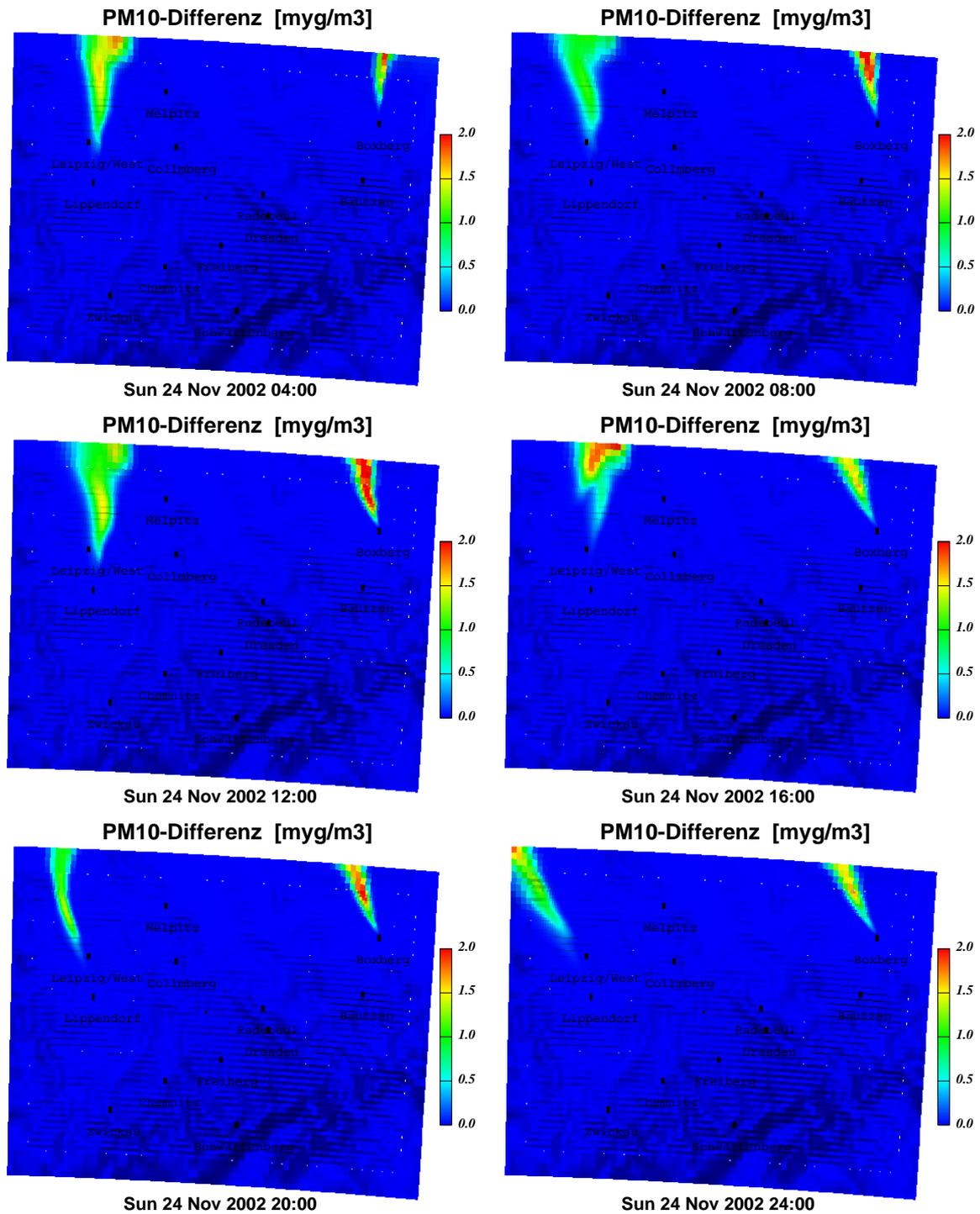


Abbildung 66 (b): PM<sub>10</sub>-Differenz im Tagesverlauf (Wintertag W1)

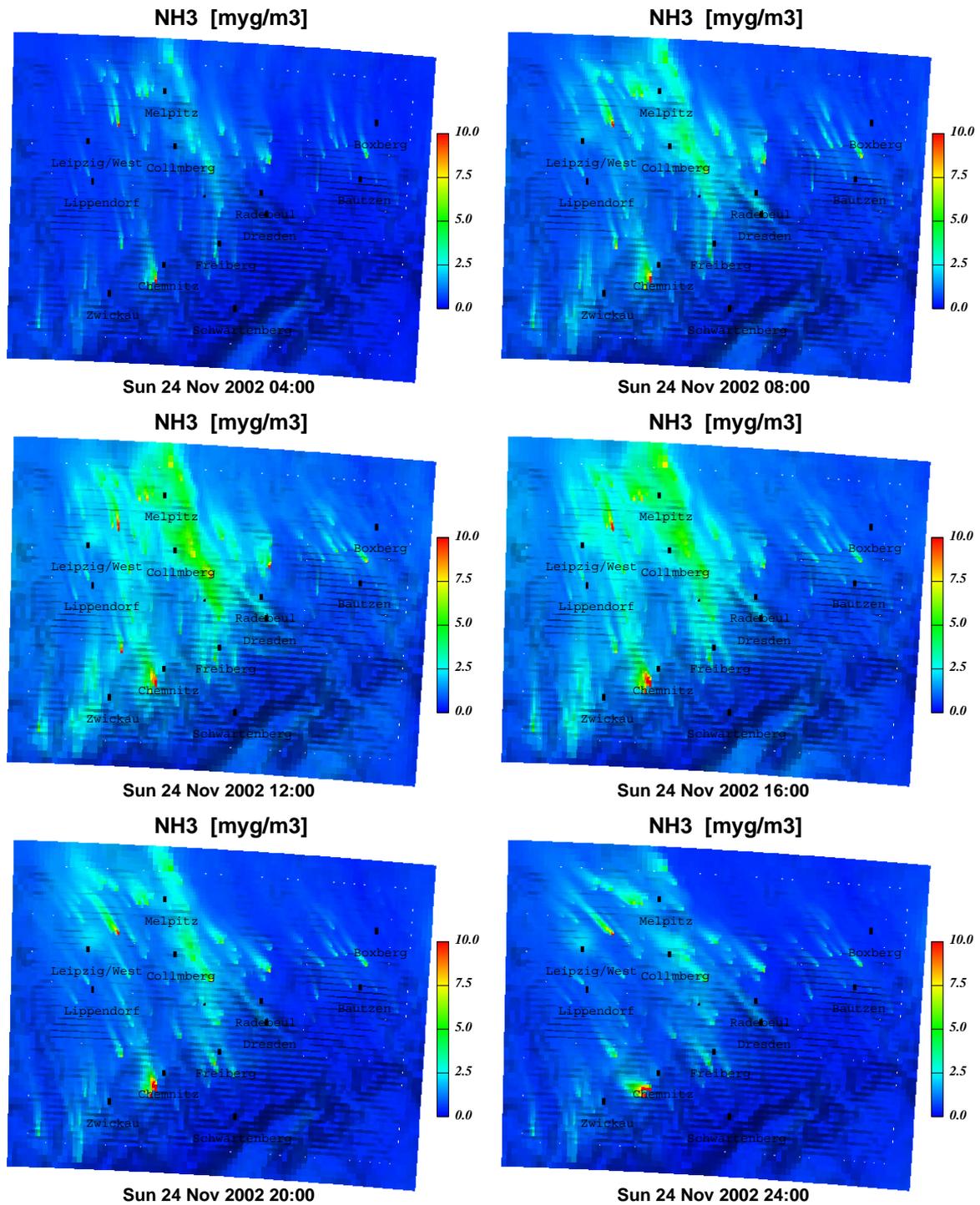


Abbildung 67: NH<sub>3</sub> im Tagesverlauf (Wintertag W1)

### 6.2.2 Winter-Zeitraum

Die im Folgenden gezeigten Abbildungen 68-72, die sämtliche Partikelkomponenten sowohl am Tage als auch in der Nacht über eine 8-tägige Winterperiode verfolgen, erbringen durchgängig ungefähr dieselben Ergebnisse wie die am Beispiel des Wintertages W1 bereits gewonnenen. Deshalb erfolgt in Tabelle 19 nur die Auflistung der in diesen 8 Tagen erreichten Maximalwerte.

**Tabelle 19:** Maximale Effekte infolge der GFA-Emissionen (Winter)

8 Tage	$\Delta \text{SO}_2$	$\Delta \text{PM}_{10}$	davon:		
			$\Delta \text{PPM}_{10}$	$\Delta \text{SULFAT}$	$\Delta \text{NITRAT}$
$\mu\text{g}/\text{m}^3$					
<b>Maxima</b>	8	2	0,4	2	-0,4...0

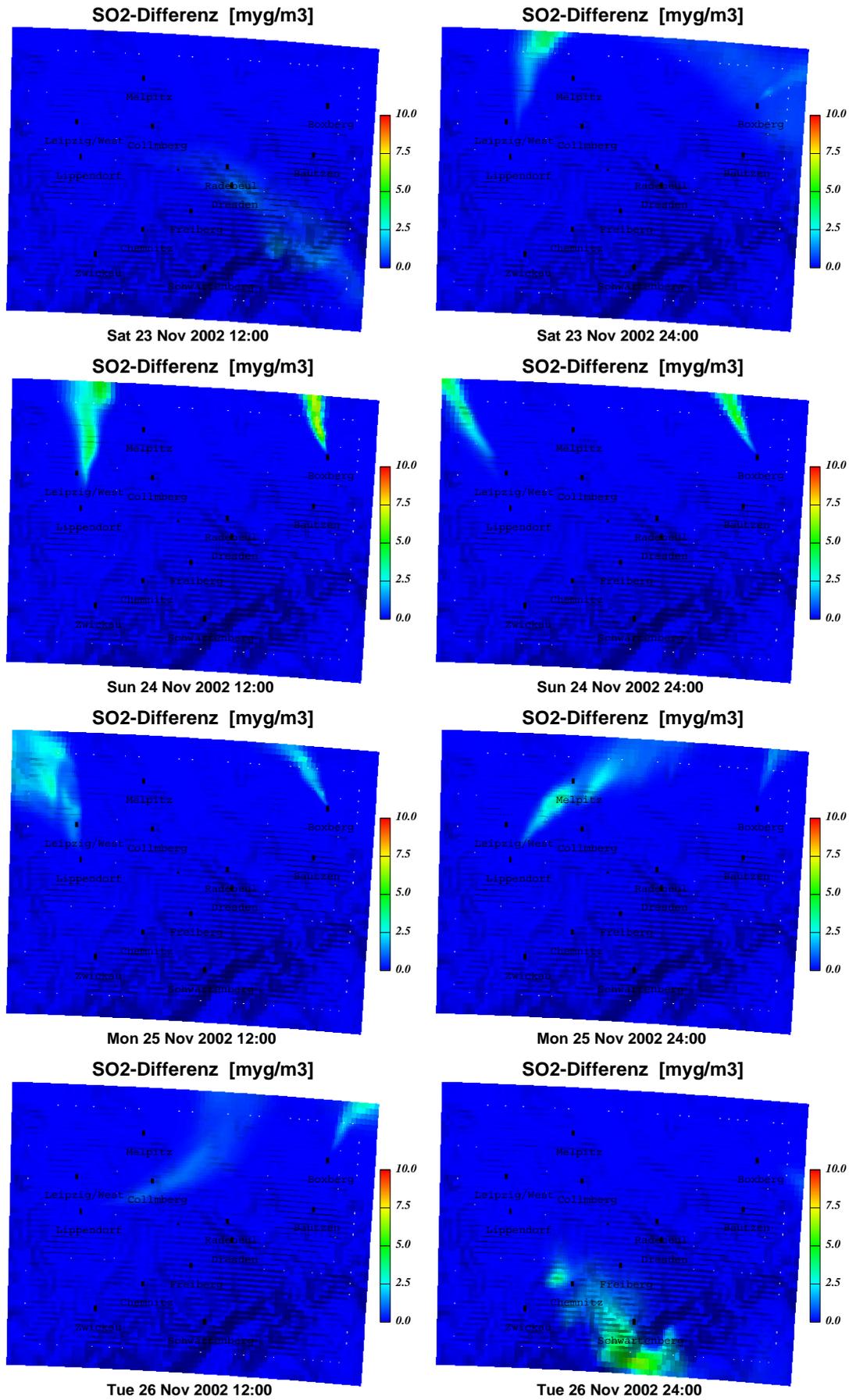


Abbildung 68 (a): SO<sub>2</sub>-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter)

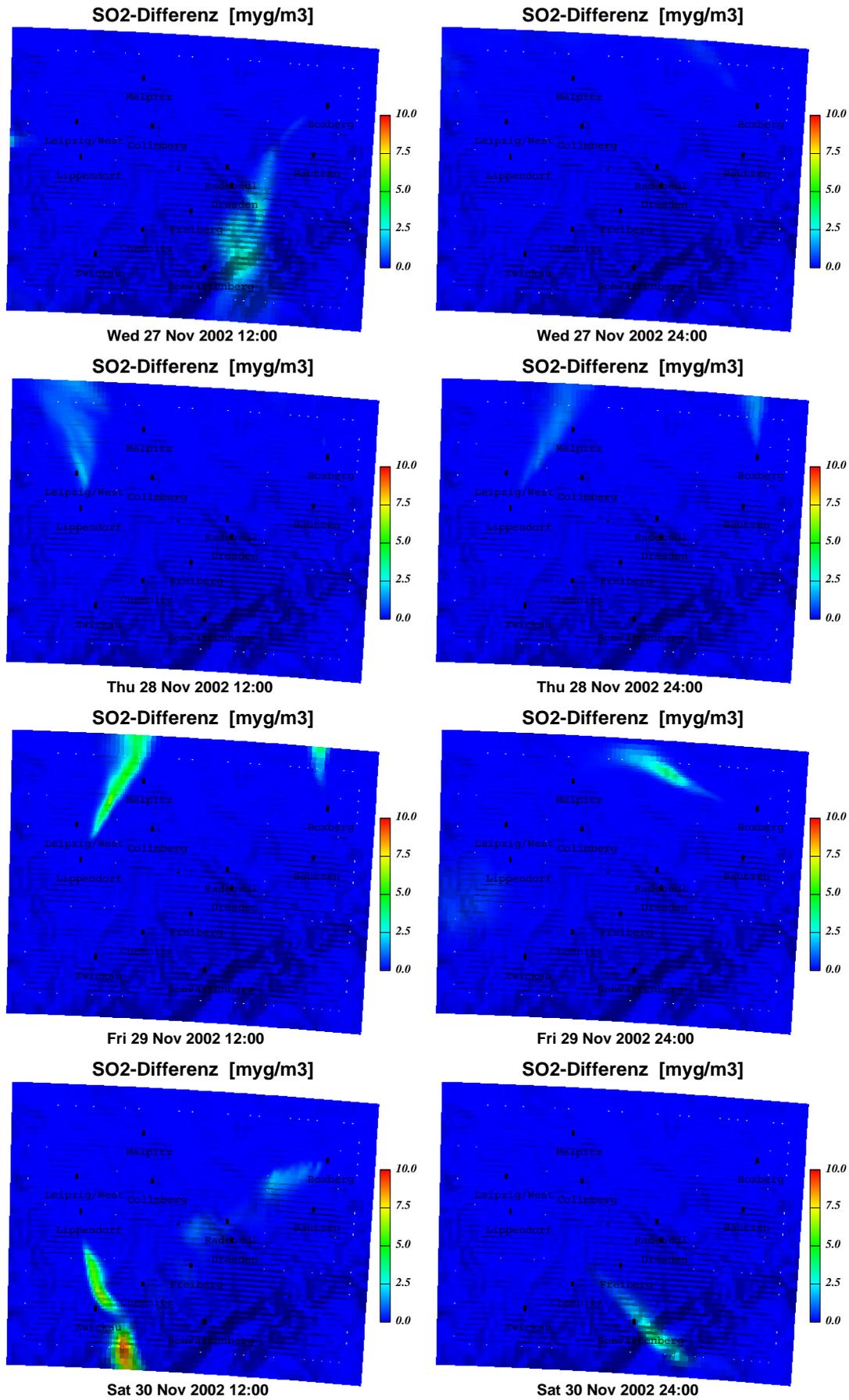


Abbildung 68 (b): SO<sub>2</sub>-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter), Fortsetzung von (a)

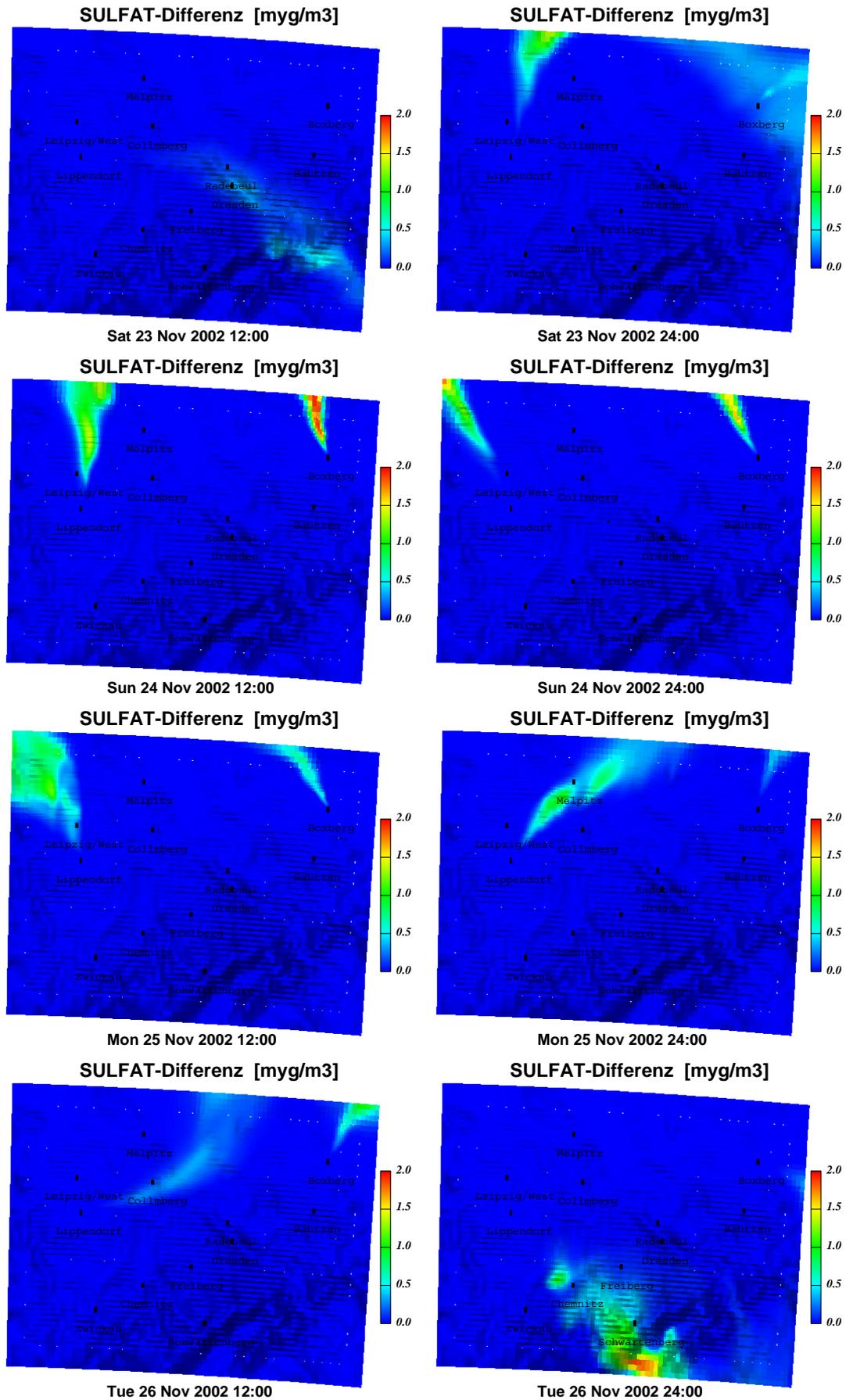


Abbildung 69 (a): SULFAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter)

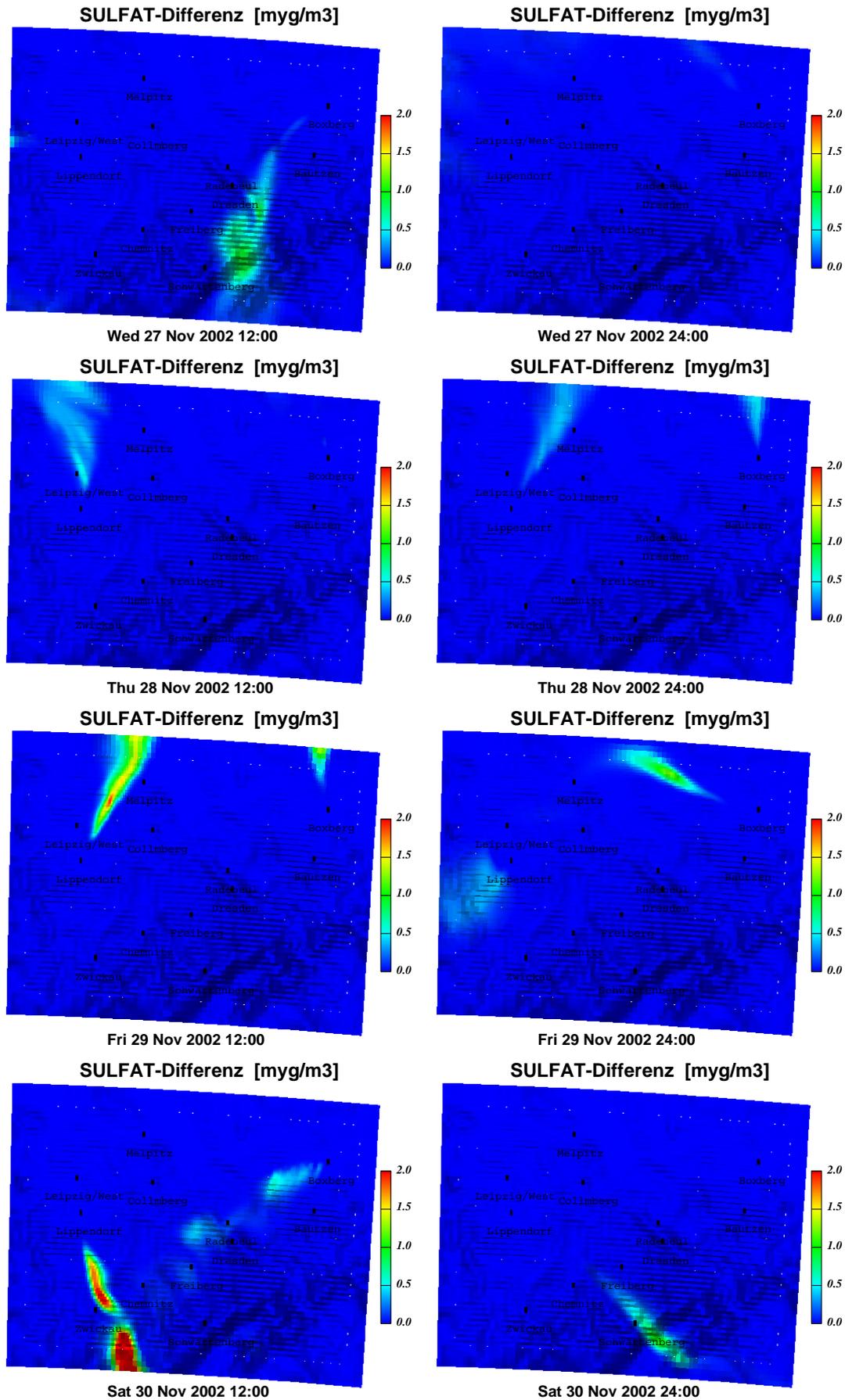


Abbildung 69 (b): SULFAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter), Fortsetzung von (a)

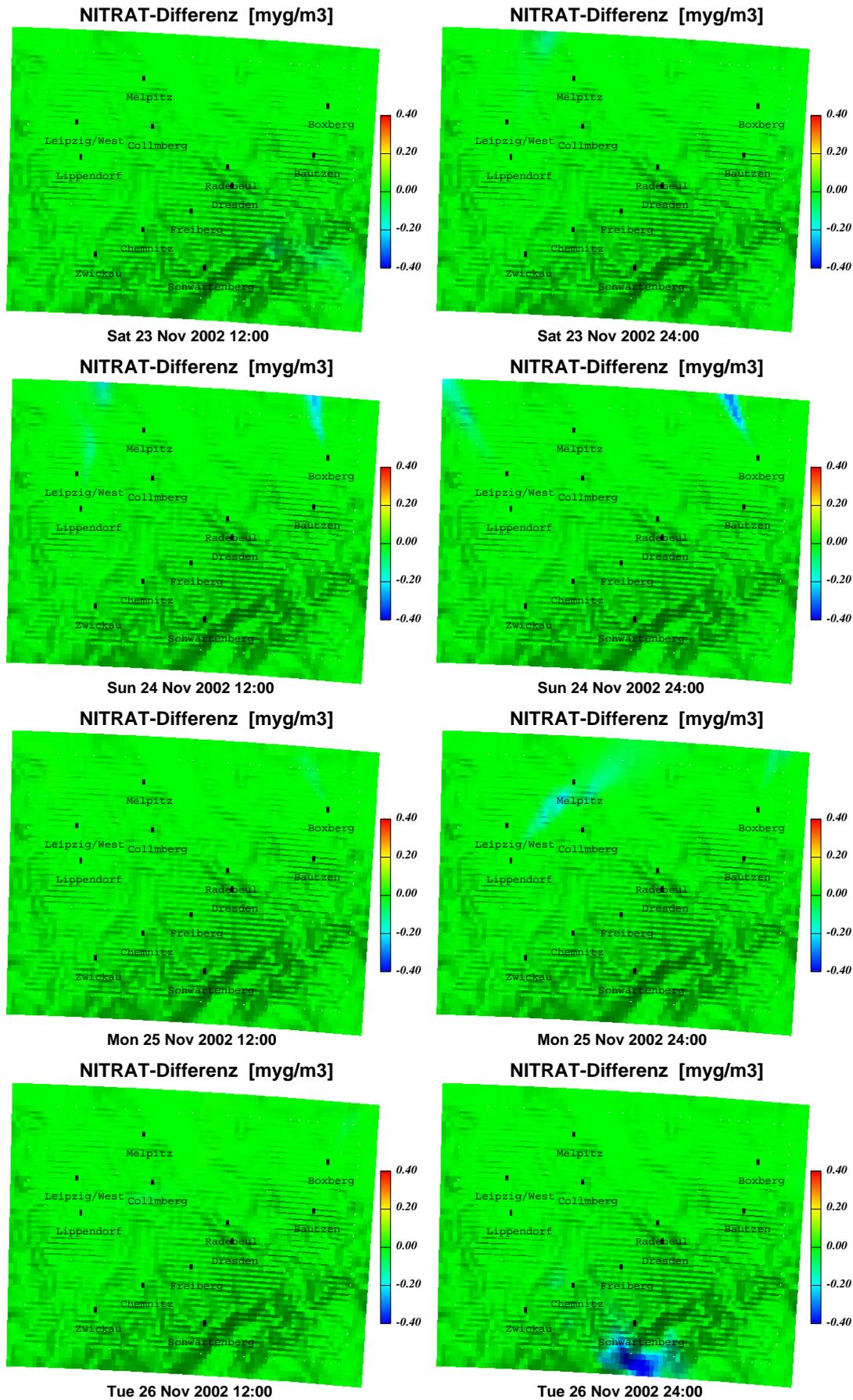


Abbildung 70 (a): NITRAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter)

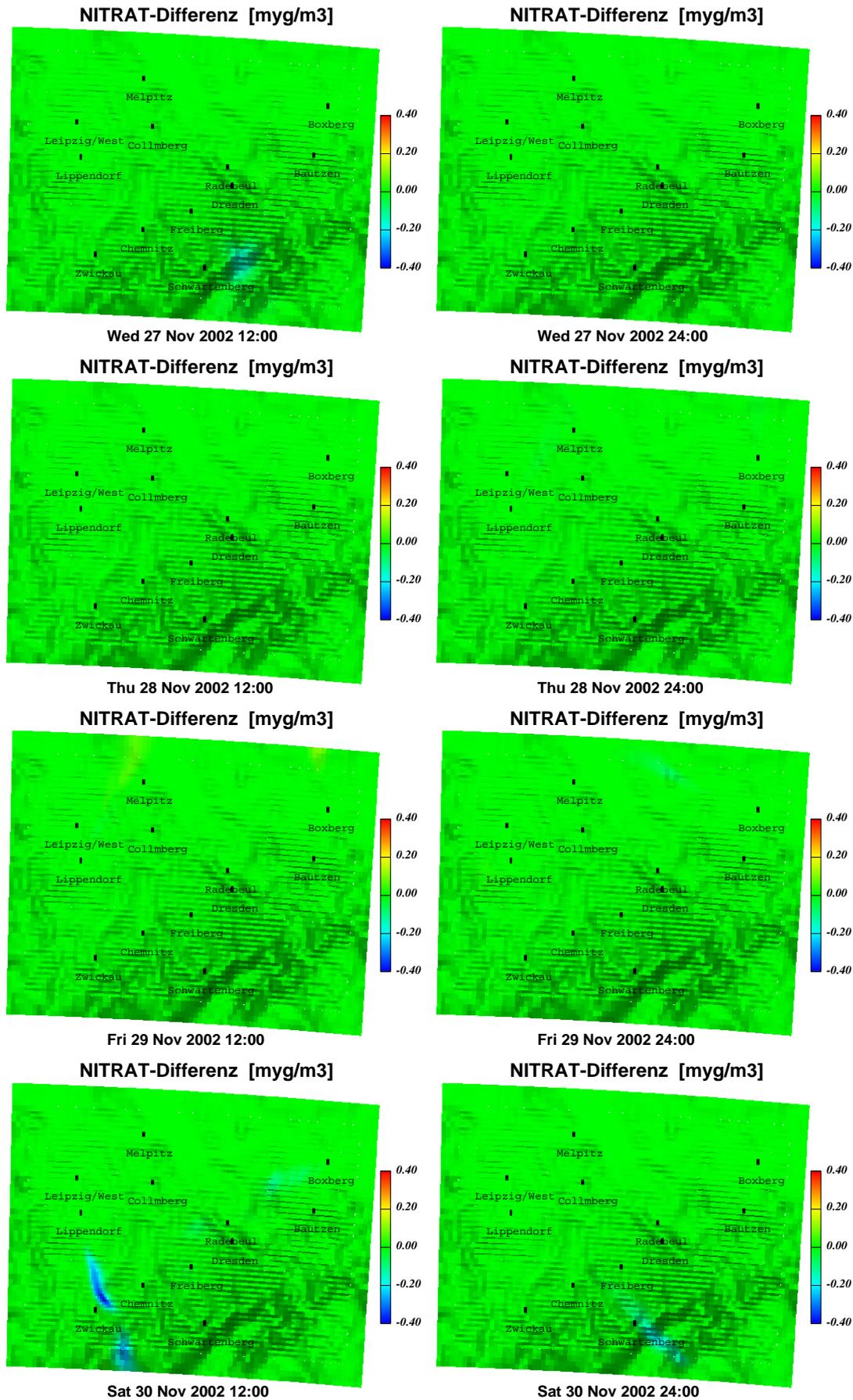


Abbildung 70 (b): NITRAT-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter), Fortsetzung von (a)

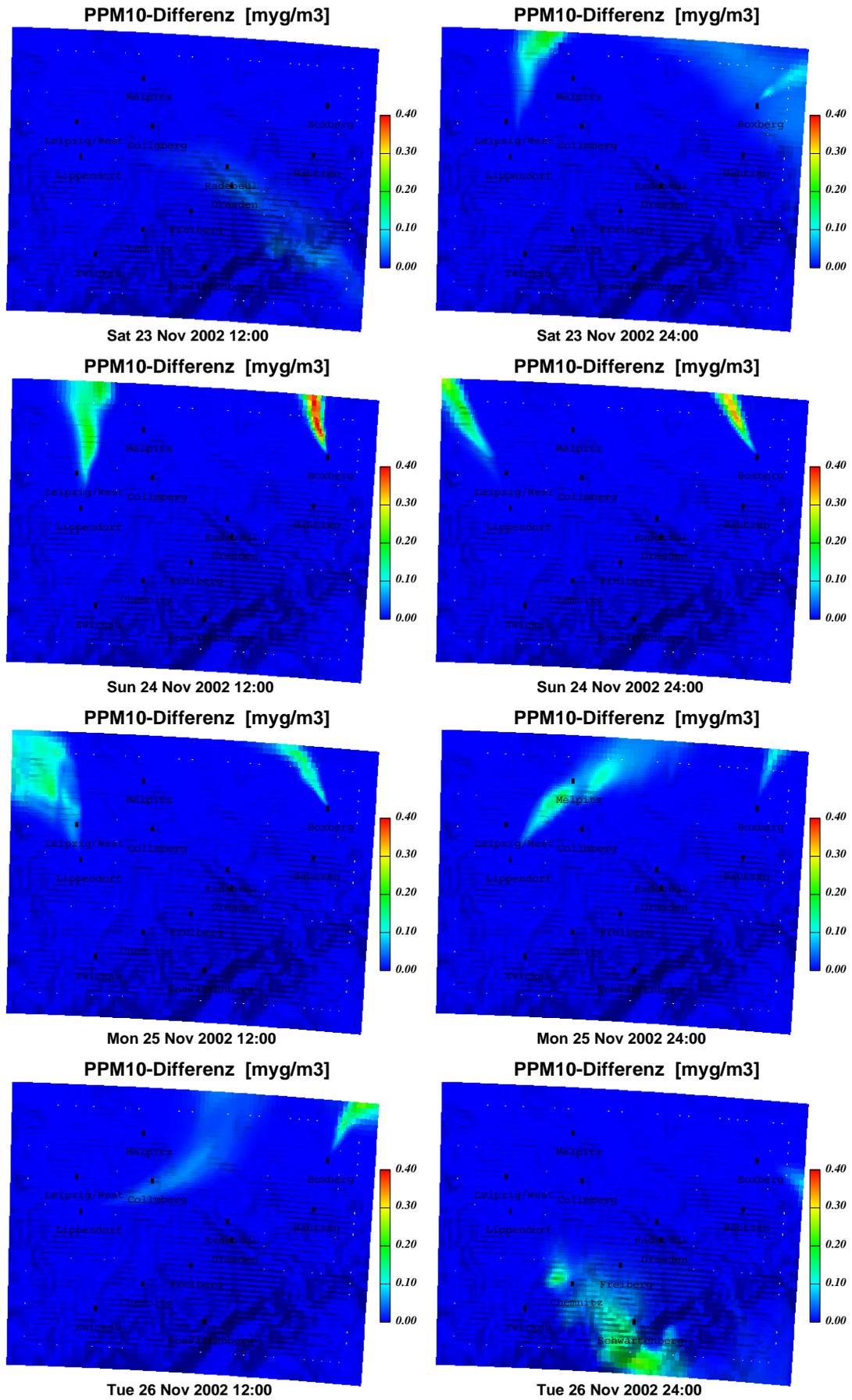


Abbildung 71 (a): PPM<sub>10</sub>-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter)

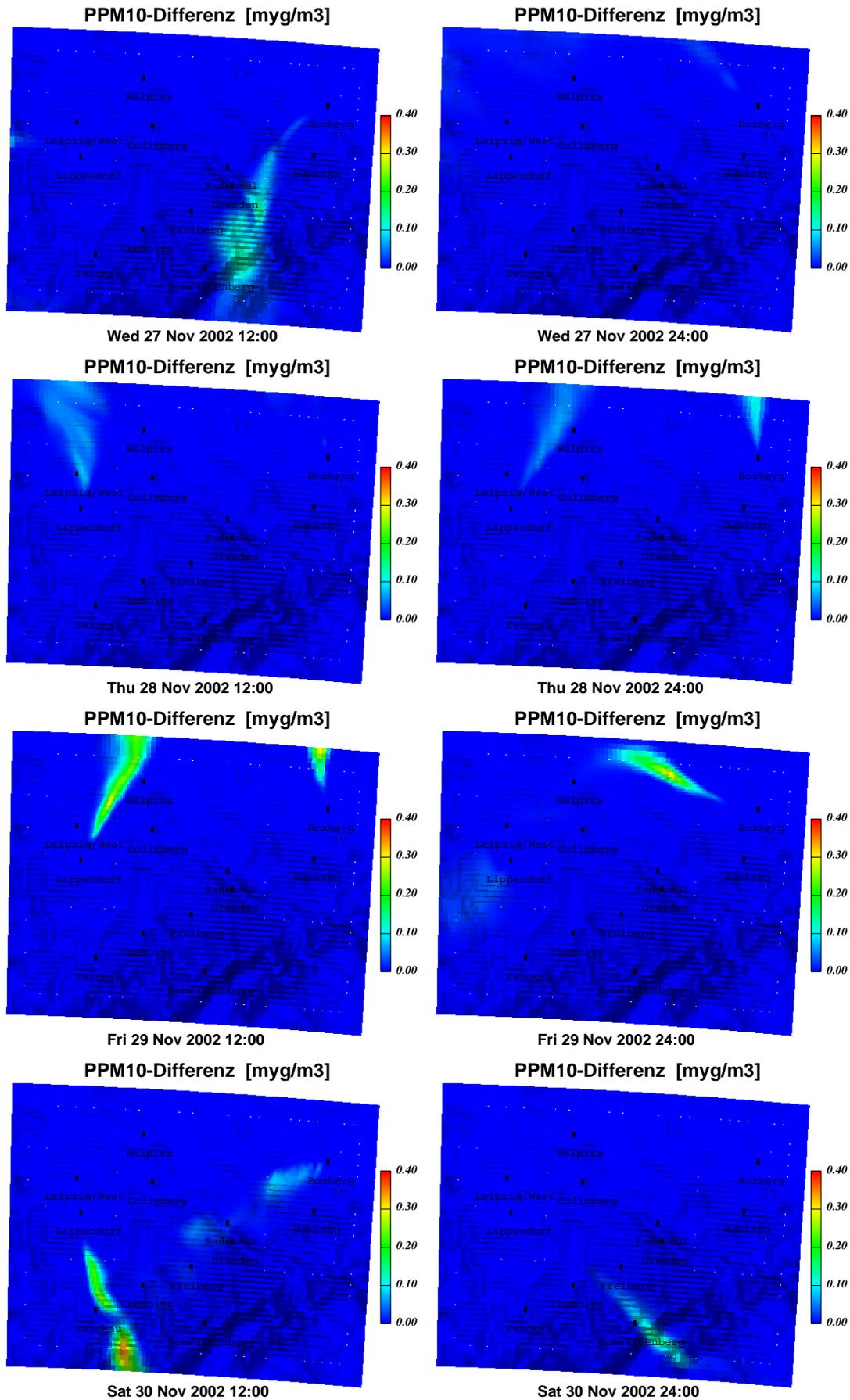


Abbildung 71 (b): PPM<sub>10</sub>-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter), Fortsetzung von (a)

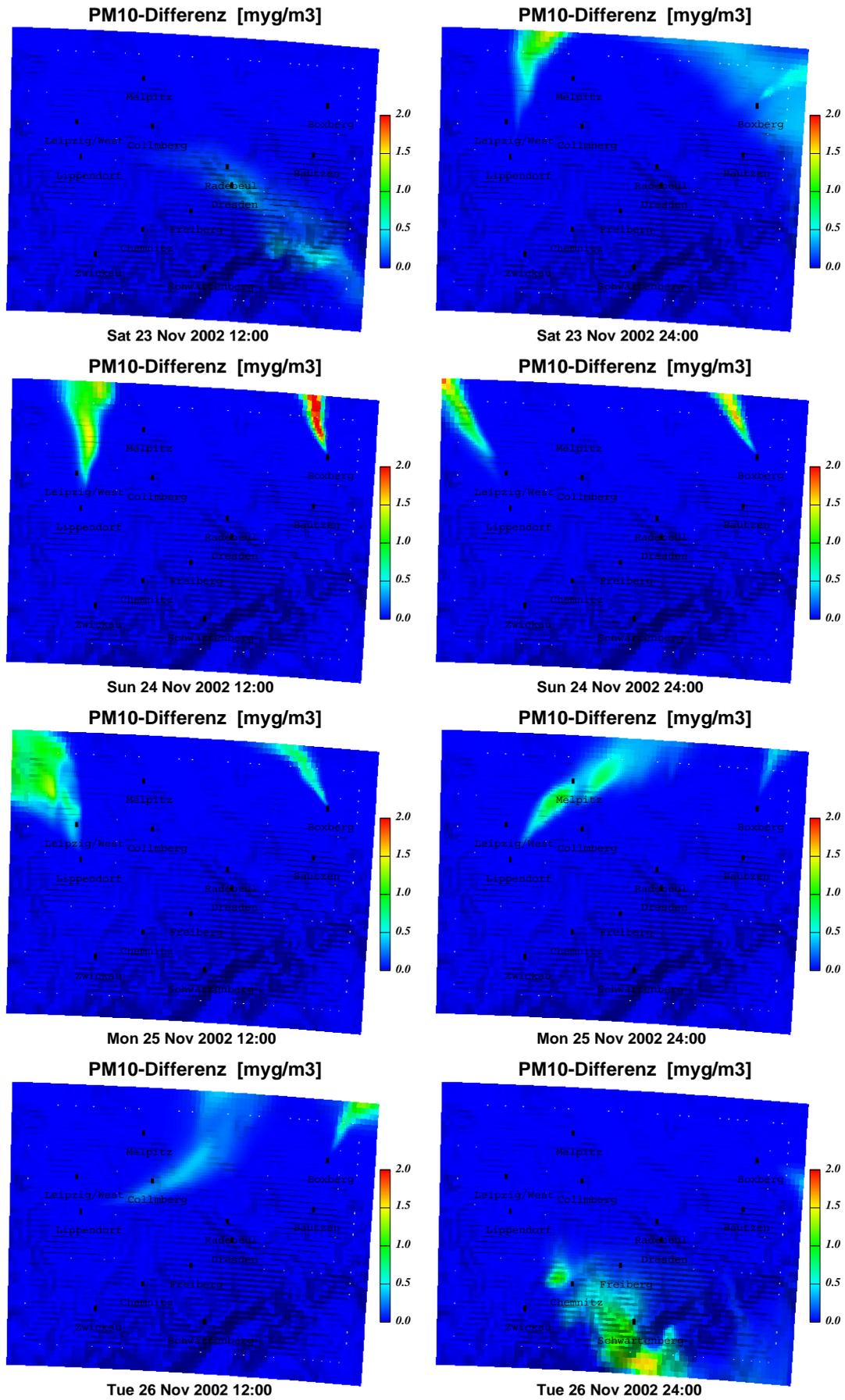


Abbildung 72 (a): PM<sub>10</sub>-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter)

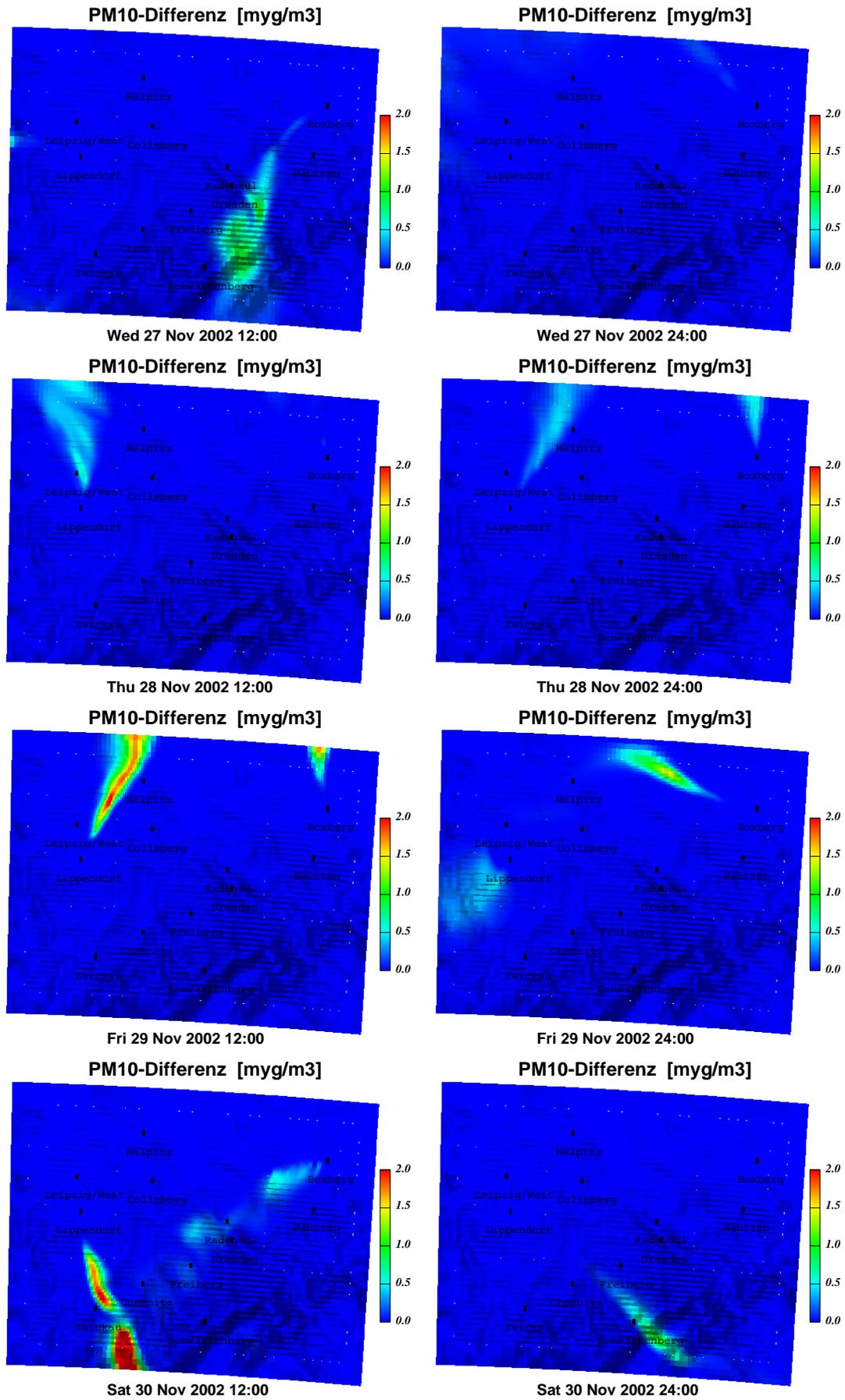


Abbildung 72 (b): PM<sub>10</sub>-Differenz im 8-Tage-Überblick (Winter), Fortsetzung von (a)



## 7. Zusammenfassung

Mittels eines ausführlich beschriebenen mesoskaligen Chemie-Transport-Modells wurden global angetriebene und mehrfach genestete Simulationen für das Gebiet Sachsen durchgeführt. Dabei wurde die Umgebung der Großfeuerungsanlagen (GFA) Boxberg und Lippendorf mit einer horizontalen Gitterweite von 700 m aufgelöst. Die Emissionen dieser beiden Kühlturmstandorte wurden einmal im Zusammenwirken mit allen anderen verfügbaren Punkt- und Flächenquellen berücksichtigt und zum anderen in zusätzlichen Referenzsimulationen „abgeschaltet“. Somit konnten direkte und indirekte Effekte, verursacht durch beide GFA, als Differenzergebnisse ermittelt werden. Im Mittelpunkt der Auswertung stand die Partikelmassezunahme infolge der sekundären Bildung von Ammoniumsulfat und -nitrat durch die SO<sub>2</sub>- und NO<sub>x</sub>-Emissionen. Deren Umwandlung über Schwefelsäure und Salpetersäure zur Partikelphase sowie die direkte Wirkung der emittierten freien Sulfationen wurden im verwendeten Aerosolmodell mit den hierfür üblichen Bildungspfaden simuliert. Die PM<sub>10</sub>-Gesamtbelastung durch die Kühltürme inklusive des primär von den GFA emittierten Staubes wurde für ausgewählte Zeiträume ermittelt.

Nach Aufgabenstellung wurden zur jahreszeitabhängigen Beurteilung eine Sommerperiode vom 11.8. bis 15.9.2002 und eine Winterperiode vom 11.11. bis 16.12.2002 simuliert. Um die Ergebnisse mit Messungen vergleichen zu können und die Brauchbarkeit des Modells zu belegen, wurde ein Teil der Simulationen mit den Emissionen des tatsächlichen Betriebszustandes der beiden GFA ausgeführt, d.h. unter Berücksichtigung der 50%-igen Leistungs- und Emissionseinschränkung der GFA Lippendorf während der gesamten Sommerperiode. Der Vergleich dieser Simulationsergebnisse erfolgte mit Messzeitreihen mehrerer Stationen an Hand verschiedener meteorologischer Größen sowie ausgewählter Substanzen (NO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, PM<sub>10</sub>). Es wurde eine brauchbare, größtenteils gute Übereinstimmung bei den Luftbeimengungen und eine sehr gute bei den meteorologischen Größen erzielt.

Zur Ermittlung der Zusatzbelastung durch die GFA wurde anschließend innerhalb der Sommer- bzw. Winterperiode je eine charakteristische 8-tägige Episode festgelegt, für die ein zusätzlicher Referenzlauf ohne Kühlturmmissionen ausgeführt wurde. Außerdem wurden für die Simulationen mit Kühltürmen Jahresmittelwerte anstelle der für Validierungszwecke verwendeten 50%-igen Emissionen angenommen. Aus diesen Ergebnissen sind zur Abschätzung einer maximalen Belastung vier beispielhafte Tage ausgesucht und eingehend diskutiert worden. Die drei Sommertage überstreichen diejenigen Fälle, in denen sich maximale Partikelbildung und deutliche Wahrnehmung der Abluftfahnen zugleich in den Simulationen niederschlagen. An den restlichen simulierten Tagen fielen die entsprechenden Effekte geringer aus. Das gleiche gilt für den Wintertag, der sich als repräsentativ für eine größere Zahl von Wintertagen erweist.

An den *Sommertagen* mit schmalen, konzentrierten Abluftfahnen wurde in Bodennähe eine maximale Zusatzbelastung durch neu gebildetes Sulfat aus den Kühlturmmissionen von 15...20 µg/m<sup>3</sup> ermittelt (für maximal 6 Stunden). Die resultierende PM<sub>10</sub>-Zusatzbelastung summierte sich einschließlich der primären Staubemissionen von 1...2 µg/m<sup>3</sup> ebenfalls zu maximal 15...20 µg/m<sup>3</sup>. Eine Nitratbildung fand nicht statt. Situationen ohne ausgeprägte Abluftfahnen bleiben weit unter diesen Werten. Auch an den *Wintertagen* mit der für sie typischen stabilen thermischen Schichtung und eingeschränkten photochemischen Aktivität ist die Zusatzbelastung durch Sulfatbildung und primäre Partikelemissionen in Bodennähe sehr gering. Die Nitratbildung spielt ebenfalls keine Rolle, so dass die resultierende PM<sub>10</sub>-Belastung mit maximal 2 µg/m<sup>3</sup> vernachlässigbar ist. Dieses Ergebnis ist in erster Linie durch

die Inversionssituation bedingt, die die erdbodennahe Schicht für die Abgasfahnen unerreichbar werden lässt.

Die Simulationen haben gezeigt, dass die Sulfatbildung sehr direkt von der Emission freier Sulfationen abhängt. Der Zuverlässigkeit dieser Emissionsgröße kommt deshalb in den Untersuchungen größte Bedeutung zu. Die Simulationen haben auch gezeigt, dass die meteorologischen Verhältnisse sehr vielfältig sind und einen entscheidenden Einfluss auf die bodennahe Belastung haben. Das für die gesamte 36-tägige Sommerperiode verfügbare zeitliche und räumliche Verhalten der Kühlturmfahnen (an Hand der passiven Tracer; siehe beigelegte CD) lässt den Schluss zu, dass mit den analysierten Beispieltagen die maximal möglichen Effekte in der bodennahen Abluftfahne gefunden wurden. Indes relativieren sich die Konsequenzen für eine ortsfeste Station, da die Spitzenwerte ( $20 \mu\text{g}/\text{m}^3 \text{PM}_{10}$ ) erstens nur kurzzeitig (maximal 6 Stunden um die Mittagszeit) im Sommer auftreten können, zweitens die Ausprägung einer eng begrenzten Abluftfahne voraussetzen und drittens an sehr enge Toleranzen für eine vorbestimmte Windrichtung gebunden sind.

Als Verallgemeinerung der Ergebnisse hin zu einer Abschätzung der Zusatzbelastung der näheren Umgebung durch die beiden GFA Lippendorf und Boxberg kann man im Lichte der gegenwärtigen Diskussion um die  $\text{PM}_{10}$ -Grenzwertüberschreitungen zusammenfassen, dass die betrachteten GFA bezüglich  $\text{PM}_{10}$  immer nur dann eine relevante Belastung darstellen, wenn eine schmale konzentrierte Abgasfahne ein bestimmtes Gebiet überstreicht. Dass das an den einzelnen Messstellen seltene Ereignisse sind, haben die Rechnungen erwiesen. Leipzig beispielsweise, das als Ort der GFA Lippendorf „optimal“ nahe liegt, hat dieses Ereignis im 8-tägigen Analysezeitraum nur einmal ereilt. Die für den Sommer abgeschätzte mittlere Zusatzbelastung ( $0,2 \mu\text{g}/\text{m}^3 \text{PM}_{10}$  in Leipzig durch GFA Lippendorf;  $0,05 \mu\text{g}/\text{m}^3 \text{PM}_{10}$  in Radebeul durch GFA Boxberg) kann als obere Grenze für die Jahreszusatzbelastung durch die GFA angesehen werden.

**Literaturverzeichnis**

- 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, Heft 115, 1-153.
- Andreani-Aksoyoglu, S., Prévôt, S. H., Baltensperger, U., Keller, J., Dommen, J., 2004. Modeling of formation and distribution of secondary aerosols in the Milan area (Italy). *Journal of Geophysical Research* 109, D05306.
- CITY-DELTA: <http://rea.ei.jrc.it/netshare/thunis/citydelta/>
- CORINAIR (CO-ordinated INFORMATION on the Environment in the European Community – AIR). Web-Adresse: <http://reports.eea.eu.int/EMEP/CORINAIR3/en>.
- Doms, G. und Schättler, U., 1999. The Nonhydrostatic Limited-Area Model LM (Lokal-Modell) of DWD: Part I: Scientific Documentation (Version LM-F90 1.35). Deutscher Wetterdienst, Offenbach.
- Ebel, A., Elbern, H., Feldmann, H., Jakobs, H. J., Kessler, C., Memmesheimer, M., Oberreuter, A., Piekorz, G., 1997. Air pollution studies with the EURAD model system (3): EURAD – European air pollution dispersion model system. Mitteilungen Inst. f. Geophys. u. Meteorol. Univ. Köln, Heft 120, 1-172.
- EMEP (Co-operative Programme for Monitoring and Evaluation of the Long-Range Transmission of Air Pollutants in Europe). Web-Adresse: <http://www.EMEP.int>.
- Fath, J., 2002. Freie Universität Berlin, Institut für Meteorologie, persönliche Mitteilung.
- Göldner, R., Münzenberg-St.Denis, A., Renner, E., Schröder, W., 1997. Szenarienrechnungen zur SO<sub>2</sub>-Situation im Erzgebirgsraum. Zwischenbericht zum OMKAS-Teilprojekt 1. Institut für Troposphärenforschung Leipzig.
- Göldner, R., Theiss, D., Renner, E., Gerike, R., Zimmermann, F., Eichmann, V., Becker, U., 1998. Dynamisiertes Emissionskataster im Freistaat Sachsen. Abschlussbericht Phase 1, Forschungsprojekt 13-8802.3521/42, Institut für Troposphärenforschung Leipzig und Institut für Verkehrsplanung und Straßenverkehr der TU Dresden, 148 S.
- 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.
- Heinze, 2005. Persönliche Mitteilung (Firma Vattenfall, Cottbus).
- Hellmuth, 2005. Persönliche Mitteilung.
- Helmert, Jürgen, 2005. Persönliche Mitteilung.
- Knoth, O. und Wolke, R., 1998a. An explicit-implicit numerical approach for atmospheric chemistry-transport modelling. *Atmos. Env.*, 32, 1785-1797.
- Knoth, O. und Wolke, R., 1998b. Implicit-explicit Runge-Kutta methods for computing atmospheric reactive flows. *Applied Numerical Mathematics*, 28, 327-341.
- 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, P.A., paper 90-94.3.
- Rahmenrichtlinie 96/62/EG des Rates der Europäischen Union vom 27.9.1996 über die Beurteilung und die Kontrolle der Luftqualität sowie Tochterrichtlinie 1999/30/EG vom 22.4.1999 über Grenzwerte für Schwefeldioxid, Stickstoffdioxid und Stickstoffoxide, Partikel und Blei in der Luft.
- Referenzlisten zur Berechnung des Feinstaubanteils für verschiedene Entstaubungsanlagen in Kraftwerken. Bereitstellung durch Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie (LfUG), 2004.
- REMSAD (Regional Modeling System for Aerosols and Deposition). Web-Adresse: <http://remsad.saintl.com>.

- 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.
- Schatzmann, M. und Policastro, A. J., 1984. An advanced integral model for cooling tower plume dispersion. *Atmos. Env.*, 18, 663-674.
- Stull, R. B., 1988. An introduction to boundary layer meteorology. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston/London.
- Stockwell, W. R., Kirchner, F., Kuhn, M., Seefeld, S., 1997. A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling. *J. Geophys. Res.*, 102, 25847-25879.
- Stohl, A., Williams, E., Wotawa, G., Kromp-Kolb, H., 1996. A European inventory of soil nitric oxide emissions and the effect of these emissions on the photochemical formation of ozone. *Atmos. Environ.* 30, 3741-3755.
- VDI-Richtlinie. Ausbreitungsrechnung bei Ableitung von Rauchgasen über Kühltürme. VDI 3784, Blatt 2, Verein Deutscher Ingenieure VDI, Düsseldorf, März 1990.
- 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.
- 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., Hellmuth, O., Knoth, O., Schröder, W., Heinrich, B., Renner, E., 2004. The chemistry-transport modeling system LM-MUSCAT: Description and CITYDELTA applications. C. Borrego und S. Incecik (Ed.). In: *Air Pollution Modeling and its Application XVI*, Kluwer Academic / Plenum Publishers, 427-439.
- Wolke, R. und Knoth, O., 2000. Implicit-explicit Runge-Kutta methods applied to atmospheric chemistry-transport modelling. *Environmental Modelling and Software*, 15, 711-719.
- Wolke, R., Knoth, 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.