

VEREIN
DEUTSCHER
INGENIEURE

Umweltmeteorologie
Reaktionsmechanismus zur Bestimmung der
Stickstoffdioxid-Konzentration
Environmental meteorology
Reaction mechanism for the determination of the
nitrogen dioxide concentration

VDI 3783
Blatt 19 / Part 19

Ausg. deutsch/englisch
Issue German/English

Der Entwurf dieser Richtlinie wurde mit Ankündigung im Bundesanzeiger einem öffentlichen Einspruchsverfahren unterworfen.

Die deutsche Version dieser Richtlinie ist verbindlich.

The draft of this standard has been subject to public scrutiny after announcement in the Bundesanzeiger (Federal Gazette).

The German version of this standard shall be taken as authoritative. No guarantee can be given with respect to the English translation.

Inhalt	Seite	Contents	Page
Vorbemerkung	2	Preliminary note.....	2
Einleitung.....	2	Introduction.....	2
1 Anwendungsbereich	3	1 Scope	3
2 Normative Verweise	3	2 Normative references	3
3 Begriffe	3	3 Terms and definitions	3
4 Formelzeichen und Abkürzungen	5	4 Symbols and abbreviations	5
5 Chemischer Reaktionsmechanismus	6	5 Chemical reaction mechanism	6
5.1 Einfacher Ansatz M1.....	6	5.1 Simplified approach M1.....	6
5.2 Erweiterter Reaktionsmechanismus M2.....	7	5.2 Extended reaction mechanism M2.....	7
5.3 Einfluss des Transports.....	9	5.3 Effect of transport.....	9
5.4 Wahl des Reaktionsmechanismus.....	9	5.4 Choice of reaction mechanism.....	9
5.5 Fotolysefrequenzen.....	11	5.5 Photolysis frequencies.....	11
5.6 Güte des Mechanismus.....	12	5.6 The mechanism's quality.....	12
6 Eingangsgrößen	16	6 Input variables	16
6.1 Fotolysefrequenzen.....	16	6.1 Photolysis frequencies.....	16
6.2 Geschwindigkeitskonstanten.....	18	6.2 Rate constants.....	18
6.3 Konzentrationsbereich der Reaktanden.....	18	6.3 Concentration range of the reactants.....	18
6.4 Meteorologische Parameter.....	19	6.4 Meteorological parameters.....	19
Anhang A Berechnung der charakteristischen Zeiten.....	20	Annex A Calculating the characteristic times.....	20
Anhang B Rechenbeispiel – Straßenschlucht.....	23	Annex B Calculation example – street canyon.....	23
Schrifttum.....	30	Bibliography.....	30

VDI/DIN-Kommission Reinhaltung der Luft (KRdL) – Normenausschuss
Fachbereich Umweltmeteorologie

VDI/DIN-Handbuch Reinhaltung der Luft, Band 1b: Umweltmeteorologie

Vorbemerkung

Der Inhalt dieser Richtlinie ist entstanden unter Beachtung der Vorgaben und Empfehlungen der Richtlinie VDI 1000.

Alle Rechte, insbesondere die des Nachdrucks, der Fotokopie, der elektronischen Verwendung und der Übersetzung, jeweils auszugsweise oder vollständig, sind vorbehalten.

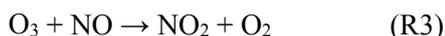
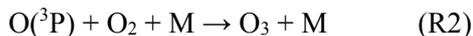
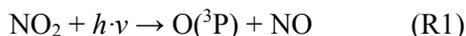
Die Nutzung dieser Richtlinie ist unter Wahrung des Urheberrechts und unter Beachtung der Lizenzbedingungen (www.vdi.de/richtlinien), die in den VDI-Merkblättern geregelt sind, möglich.

Allen, die ehrenamtlich an der Erarbeitung dieser Richtlinie mitgewirkt haben, sei gedankt.

Eine Liste der aktuell verfügbaren Blätter dieser Richtlinienreihe ist im Internet abrufbar unter www.vdi.de/3783.

Einleitung

Bei Verbrennungsvorgängen fossiler Brennstoffe, z.B. in Motoren von Kraftfahrzeugen oder in Großfeuerungsanlagen, entstehen auch die lufthygienisch relevanten Gase Stickstoffmonoxid (NO) und Stickstoffdioxid (NO₂), und zwar in unterschiedlichen Emissionsraten, die von der Art des Verbrennungsprozesses abhängen. In der Atmosphäre unterliegen NO und NO₂ chemischen Reaktionen, die von der meteorologischen Situation und der Spurengaszusammensetzung der Umgebungsluft abhängig sind. Die wichtigsten Prozesse sind die Spaltung von NO₂ durch die Strahlung von der Sonne ($h \cdot \nu$) unter Bildung von NO (Reaktion (R1)) und die Oxidation des NO durch Ozon (O₃) zu NO₂ (Reaktion (R3)). Das dabei verbrauchte Ozon wird über die Reaktion (R2) aus dem Sauerstoffatom im elektronischen Grundzustand (O(³P)) und molekularem Sauerstoff (O₂) zurückgebildet. Die Bildungsenergie der Reaktion (R2) wird durch die Luftmoleküle M abgeführt.



In der Richtlinie wird ein erweitertes Reaktionssystem beschrieben, mit dem die Chemie der Stickstoffoxide hinreichend genau erfasst ist, um im Rahmen eines Chemie- und Transportmodells eine quantitative Immissionsprognose zu ermöglichen. Unter Verwendung eines Lebensdauerkonzepts werden Möglichkeiten der Vereinfachung des vorgelegten Reaktionsmechanismus angegeben, die vom jeweiligen Anwendungszweck abhängen.

Preliminary note

The content of this standard has been developed in strict accordance with the requirements and recommendations of the standard VDI 1000.

All rights are reserved, including those of reprinting, reproduction (photocopying, micro copying), storage in data processing systems and translation, either of the full text or of extracts.

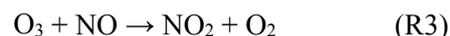
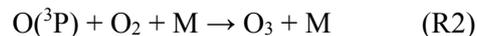
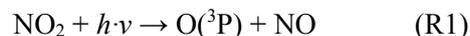
The use of this standard without infringement of copyright is permitted subject to the licensing conditions (www.vdi.de/richtlinien) specified in the VDI Notices.

We wish to express our gratitude to all honorary contributors to this standard.

A catalogue of all available parts of this series of standards can be accessed on the Internet at www.vdi.de/3783.

Introduction

The combustion of fossil fuels, e.g. in the engines of vehicles or in large-scale combustion plants, produces nitrogen monoxide (NO) and nitrogen dioxide (NO₂), gases that are significant for air quality, with variable emission rates that depend on the type of the combustion process. In the atmosphere, NO and NO₂ undergo chemical reactions that depend on meteorological conditions and on the trace gas composition of the ambient air. The most important processes are the decomposition of NO₂ molecules through the effect of solar radiation ($h \cdot \nu$), with the formation of NO (Reaction (R1)) and the oxidation of NO by ozone (O₃) to NO₂ (Reaction (R3)). The consumed ozone is recycled via Reaction (R2), from an oxygen atom in the electronic ground state (O(³P)) and molecular oxygen (O₂). The formation energy of Reaction (R2) is dissipated via the air molecule M.



This standard describes an extended reaction system which accounts for the chemistry of nitrogen oxides with sufficient accuracy, in order to allow a quantitative immission forecast as part of a chemistry and transport model. Using a lifetime concept, it offers options for simplifying the proposed reaction mechanism for particular applications.

In Anhang B wird anhand von Beispielen gezeigt, wie vorzugehen ist, um einen für den jeweiligen Anwendungsfall relevanten Reaktionsmechanismus zu erhalten.

1 Anwendungsbereich

Einige gesetzliche Regelungen (z.B. 2008/50/EG; BImSchG; 39. BImSchV; TA Luft) erfordern die Berechnung der NO₂-Konzentration, die sich unter Einfluss lokaler NO- und NO₂-Emissionen auf Entfernungen von einigen Metern bis zu wenigen Kilometern einstellt. Für solche Aufgabenstellungen wird in der vorliegenden Richtlinie ein Reaktionssystem beschrieben, mit dem die NO₂-Konzentration berechnet werden kann. Dieses Reaktionssystem wurde aus einem komplexeren System RACM (Regional Atmospheric Chemistry Model) [1] mit dem Ziel reduziert, ein möglichst einfaches, aber ausreichend genaues Verfahren zur Berechnung der NO₂-Konzentration zur Verfügung zu stellen. Im Rahmen numerischer Transportmodelle angewendete Chemiemodule zur Berechnung der NO₂-Konzentration sollten wenigstens dem vorgestellten Reaktionsmechanismus genügen.

Das beschriebene System der chemischen Umwandlungen ist so ausgelegt, dass es für die Bestimmung der NO₂-Belastung durch Abgasfahnen von Feuerungsanlagen (auch Großfeuerungsanlagen, siehe VDI 3783 Blatt 13) genauso verwendet werden kann wie für die Berechnung der NO₂-Konzentration, die durch Kraftfahrzeugverkehr in Straßenschluchten und auf Autobahnen (VDI 3783 Blatt 14) hervorgerufen wird.

Damit eignet es sich zur Bewertung von Maßnahmen zur Verminderung der Stickstoffoxidbelastung mit dem Ziel der Einhaltung gesetzlicher Regelungen.

Ein Beispiel zur Anwendung im Straßenbereich, z.B. Straßenschluchten und Autobahnen, ist in Anhang B dieser Richtlinie aufgeführt. Die Anwendung auf Abgasfahnen aus Industrieanlagen wird in einem Folgeblatt behandelt.

2 Normative Verweise

Das folgende zitierte Dokument ist für die Anwendung dieser Richtlinie erforderlich:

VDI 3783 Blatt 18:2017-04 Umweltmeteorologie; Fotolysefrequenzen für Berechnungen von Schadstoffkonzentrationen in der Troposphäre

Annex B shows, with examples, how to proceed in order to obtain a reaction mechanism that is relevant in a given case.

1 Scope

Several statutory provisions (e.g. 2008/50/EC; BImSchG (German Federal Immission Control Act); 39. BImSchV (39th German Federal Immission Control Ordinance); TA Luft) require a calculation of the NO₂ concentration that arises under the effect of local NO and NO₂ emissions at distances ranging from a few metres to a few kilometres. For such tasks, this standard describes a reaction system with which the NO₂ concentration can be calculated. This reaction system was reduced from the more complex RACM (Regional Atmospheric Chemistry Model) system [1], with the objective of providing a method for calculating NO₂ concentrations that is as simple as possible but sufficiently accurate. Chemistry modules for calculating NO₂ concentrations as part of numerical transport models, should at least be compatible with the presented reaction mechanism.

The described system of chemical transformations is so designed, that it can be used for determining NO₂ pollution resulting from exhaust gas plumes of combustion plants (including large-scale ones, see VDI 3783 Part 13) just as it can be used for calculating the NO₂ concentration caused by vehicular traffic in street canyons and on motorways (VDI 3783 Part 14).

It is suitable, therefore, for evaluating procedures for reducing nitrogen oxide pollution with the aim of complying with statutory provisions.

An example of an application in the road sector, e.g. street canyons and motorways, is shown in Annex B of this standard. The application to exhaust gas plumes from industrial plants will be covered in a later part of this series.

2 Normative references

The following referenced document is indispensable for the application of this standard:

VDI 3783 Part 18:2017-04 Environmental meteorology; Photolysis frequencies for calculating pollutant concentrations in the troposphere