Technische Universität Berlin Fakultät III – Prozesswissenschaften Institut für Technischen Umweltschutz Umweltverfahrenstechnik



Entwicklung und Anwendung eines rechnergestützten Modells zur Ursachenanalyse großräumiger Luftschadstofftransporte

Diplomarbeit im Studiengang Technischer Umweltschutz

> vorgelegt von Roman Finkelnburg

Wissenschaftliche Leitung: Prof. Dr.-Ing. Sven-Uwe Geißen Wissenschaftliche Betreuung: Dr.-Ing. Markus Pesch

Berlin, November 2007

Danksagung

Ich bedanke mich bei Markus Pesch für die kompetente und herzliche Betreuung. Seine sachkundige Unterstützung zu fachlichen Fragen, seine umfassende Anleitung und seine Offenheit für eigene Ideen und Vorschläge machten diese Arbeit erst möglich.

Bei Mathias Eberle und Uwe Stühler bedanke ich mich für ihre Unterstützung beim Korrekturlesen. Sven-Uwe Geißen möchte ich herzlich danken, dass ich diese Arbeit am Fachgebiet Umweltverfahrenstechnik schreiben durfte.

Inhaltsverzeichnis

| Danksagung ii | | | | | | | | |
|---------------|--------------|---|---|----|--|--|--|--|
| 1 | 1 Einleitung | | | | | | | |
| 2 | Sch | webstau | dı | 2 | | | | |
| | 2.1 | Physikalische Zusammensetzung von Schwebstaub | | | | | | |
| | 2.2 | Chemis | sche Zusammensetzung von Feinstaub (PM2,5) | 4 | | | | |
| | | 2.2.1 | Kohlenstoffhaltiges Material (EC und OM) | 5 | | | | |
| | | 2.2.2 | Sekundäraerosole (Ammonium, Nitrat und Sulfat) | 6 | | | | |
| | | 2.2.3 | Überwiegend natürlich emittierte Metalle (Aluminium, Calcium, Eisen, Kalium, | | | | | |
| | | | Magnesium, Natrium und Silizium) | 8 | | | | |
| | | 2.2.4 | Überwiegend anthropogen emittierte Metalle (Antimon, Arsen, Blei, Cadmium, | | | | | |
| | | | Chrom, Kupfer, Nickel, Selen, Titan, Vanadium und Zink) | 8 | | | | |
| | 2.3 | Einfluß | 3 der Meteorologie auf die Feinstaubbelastung (PM2,5) | 8 | | | | |
| | 2.4 | Transn | nission von Feinstaub (PM2,5) | 11 | | | | |
| | 2.5 | Immiss | sion von Feinstaub (PM2,5) | 12 | | | | |
| | 2.6 | Wirkur | ngen von Feinstaub auf die menschliche Gesundheit | 13 | | | | |
| | 2.7 | Gesetz | liche Situation | 15 | | | | |
| 3 | Bes | chreibu | ng des entwickelten rechnergestützten Modells | 18 | | | | |
| | 3.1 | Trajekt | torienberechnungsmodell | 18 | | | | |
| | | 3.1.1 | Theoretische Ansätze | 19 | | | | |
| | | 3.1.2 | Bedienung des Programms | 22 | | | | |
| | | 3.1.3 | Vergleich mit Modellergebnissen des zuvor am FG eingesetzten Programms \ldots | 30 | | | | |
| | | 3.1.4 | Berechnungsbeispiele und Interpretation | 31 | | | | |
| | 3.2 | Trajekt | toriendichteberechnungsmodell | 43 | | | | |
| | | 3.2.1 | Theoretische Ansätze | 43 | | | | |
| | | 3.2.2 | Bedienung des Programms | 45 | | | | |
| | | 3.2.3 | Berechnungsbeispiele und Interpretation | 53 | | | | |
| 4 | Herl | kunftsa | nalyse ausgewählter Inhaltsstoffe der PM2,5-Immissionen am Frohnauer Turm | 64 | | | | |
| | 4.1 | Messu | ngen am Frohnauer Turm (MC045) | 64 | | | | |
| | 4.2 | Validie | rung des Modells mit Natrium und Chlorid als Tracer für Seesalzemissionen | 64 | | | | |
| | 4.3 | Herkur | nftsanalyse für Sulfat (schwefelhaltige Brennstoffe) | 69 | | | | |
| | 4.4 | Herkur | nftsanalyse für Vanadium (Raffinerie- und Petrochemieemissionen) | 73 | | | | |
| | 4.5 | Herkunftsanalyse für PM2,5-Schwebstaub | | | | | | |

83

| Inhaltsverzeichnis | iv |
|---|-----|
| Literaturverzeichnis | 86 |
| trajectory.bat | 89 |
| trajectory.sh | 91 |
| trajectory.c | 92 |
| B20060127_12.trj | 93 |
| frequency.bat | 94 |
| frequency.sh | 96 |
| frequency.c | 97 |
| freq.kml | 98 |
| Mischungsschichthöhen für Berlin | 105 |
| Windgeschwindigkeiten an der Messstation Berlin-Tegel | 107 |

Abbildungsverzeichnis

| 2.1 2.2 | Trimodale Verteilung der Oberfläche über die Partikelradien des Schwebstaubs [WHO06] Mittlere PM2,5-Zusammensetzung der Messtation Frohnauer Turm (MC045) (1.Dezem- | 3 |
|------------|--|----|
| | ber 2006 bis 28.Februar 2007) [Pes07] | 5 |
| 2.3 | Verteilung verschiedener Ionen in Schwebstaubfraktionen unterschiedlicher aerodynami- | |
| | scher Durchmesser [WHO06] | 7 |
| 2.4 | Verteilungschema der Feinstaubbelastung (PM10) in Berlin und Umgebung [Sen05] | 12 |
| 2.5 | Eindringtiefe von Partikeln unterschiedlicher Größe in die menschliche Lunge [Bun05] | 14 |
| 3.1 | Schematische Darstellung der zeitlichen Interpolation der Stundenwindfelder aus Wind- | |
| | datenfeldern | 21 |
| 3.2 | Schematische Darstellung der zeitlichen Interpolation des momentanen Windfeldes aus | |
| | Stundenwindfeldern | 21 |
| 3.3 | Schematische Darstellung der örtlichen Interpolation von Windvektoren in Vorwärts- und | |
| | Rückwärtsrichtung | 22 |
| 3.4 | Schematische Darstellung der Parameter MINR und MAXR bei der räumlichen Interpo- | |
| | lation eines Windvektors | 27 |
| 3.5 | Vergleich der mit altem und neuem Algorithmus berechneten Trajektorien (I) \ldots . | 30 |
| 3.6 | Vergleich der mit altem und neuem Algorithmus berechneten Trajektorien (II) \ldots . | 31 |
| 3.7 | Vergleich der mit altem und neuem Algorithmus berechneten Trajektorien (III) \ldots | 31 |
| 3.8 | Verschiedene Werte der Iterationsparameter | 32 |
| 3.9 | Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (96 h) \ldots | 34 |
| 3.10 | Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (72 h) \ldots | 35 |
| 3.11 | Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (48 h) \ldots | 36 |
| 3.12 | Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (36 h) \ldots | 37 |
| 3.13 | Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (30 h) \ldots | 37 |
| 3.14 | Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (96 h) | 38 |
| 3.15 | Vorwärtstrajektorie mit anschließender Rückwärtstrajektorie vom Endpunkt (96 h) | 39 |
| 3.16 | Darstellung der Winddateneinzugsgebiete zur Interpolation zweier Trajektorienaufpunkte | |
| | der Abbildung 3.15 | 40 |
| 3.17 | Rückwärtstrajektorien von zwei verschiedenen Startpunkten ohne und mit Stationsfilte- | |
| | rung ab 3.00 Standardabweichung | 41 |
| 3.18 | Rückwärtstrajektorien von zwei verschiedenen Startpunkten ohne und mit Stationsfilte- | |
| | rung ab 2.00 Standardabweichung | 41 |
| 3.19 | Rückwärtstrajektorien von zwei verschiedenen Startpunkten ohne und mit Stationsfilte- | |
| | rung ab 1.00 Standardabweichung | 42 |
| 3.20 | Rückwärts- und Vorwärtstrajektorienvergleich von zwei verschiedenen Startpunkten mit | |
| | Stationsfilterung ab 2.00 Standardabweichung | 43 |

| 3.21 | Schematische Darstellung einer Trajektorienverlaufsprojektion auf das Berechnungsnetz . | 44 |
|------|--|----|
| 3.22 | Gleichmäßig verteilte und quasiparallele Trajektorienverläufe mit gleichem Startpunkt \ldots | 45 |
| 3.23 | Hauptordner in der KML-Datei | 51 |
| 3.24 | Informationsfenster der KML-Datei | 51 |
| 3.25 | Unterordner der KML-Datei | 51 |
| 3.26 | Infofenster der Trajektoriendichtedarstellung | 52 |
| 3.27 | Unterordner des Trajektoriendichte-Ordners | 53 |
| 3.28 | Trajektoriendichte als absolute Häufigkeit (Einzel- und Mehrfachtrajektoriendarstellung). | 54 |
| 3.29 | Trajektoriendichte gewichtet mit dem Startpunktabstand (Einzel- und Mehrfachtrajek- | |
| | toriendarstellung) | 55 |
| 3.30 | Trajektoriendichte gewichtet mit der Wurzel des Startpunktabstands (Einzel- und Mehr- | |
| | fachtrajektoriendarstellung) | 56 |
| 3.31 | Verschiedene Netzelementgrößen (5, 25 und 125 km) | 57 |
| 3.32 | Trajektoriendichten mit unterschiedlichen Skalengrenzen (\geq 20 % und $<$ 30 %, \geq 60 %, | |
| | 0 – 100 % mit abgewählten Klassen) | 59 |
| 3.33 | Änderung der Klassenaufteilung durch Skalengrenzen (\geq 20 % und $<$ 30 %, \geq 60 %, 0 | |
| | – 100 % mit abgewählten Klassen) | 60 |
| 3.34 | Trajektoriendichten mit unterschiedlichen Plotbereichen | 61 |
| 3.35 | Trajektoriendichten mit einfarbiger Skala | 62 |
| 3.36 | Gemeinsame Darstellung der Trajektoriendichten aus Abbildung 3.35 in einem Plot $\ .\ .\ .$ | 63 |
| 4.1 | Werteverteilung für Na und Cl im Zeitraum 1.12.06 bis 31.5.07 | 66 |
| 4.2 | Trajektoriendichte der gemeinsamen 90%-Perzentilwerttage von Na und Cl | 67 |
| 4.3 | Werteverteilung für Sulfat im Zeitraum 1.12.06 bis 31.5.07 | 70 |
| 4.4 | Trajektoriendichte der ausgewählten 90%-Perzentilwerttage von Sulfat aus Tabelle 4.7 | 72 |
| 4.5 | Werteverteilung für Vanadium im Zeitraum 1.12.06 bis 31.5.07 | 74 |
| 4.6 | Trajektoriendichte der 90%-Perzentilwerttage von Vanadium | 76 |
| 4.7 | Werteverteilung für PM2,5 im Zeitraum 1.12.06 bis 31.5.07 | 77 |
| 4.8 | Trajektoriendichte der 90%-Perzentilwerttage von PM2,5 | 79 |
| 4.9 | Farbliche Differenzierungskarte der 0%- bis 10%-, 10%- bis 25%-, 25%- bis 75%-, 75%- | |
| | bis 90%- und $>$ 90%-Perzentilwerttage von PM2,5 \ldots | 81 |

Tabellenverzeichnis

| 2.1 | Klimaelemente und ihre für Berlin zu erwartenden Auswirkungen auf die Partikelkonzen- | |
|------|---|----|
| | tration der Luft [Völ07] | 11 |
| 3.1 | Umgebungsvariablen bzw. Startparameter des Trajektorienberechnungsprogramms (I) $$. | 23 |
| 3.2 | Umgebungsvariablen bzw. Startparameter des Trajektorienberechnungsprogramms (II) | 24 |
| 3.3 | Modi des Programmparameters DATAUNIT | 27 |
| 3.4 | Zeitparameter der Trajektorienvergleiche der Abbildungen 3.5, 3.6 und 3.7 | 30 |
| 3.5 | Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.8 | 32 |
| 3.6 | Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.9 | 33 |
| 3.7 | Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.10 | 34 |
| 3.8 | Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.11 | 35 |
| 3.9 | Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.12 und 3.13 | 36 |
| 3.10 | Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.14 | 38 |
| 3.11 | Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.15 | 39 |
| 3.12 | Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.20 | 42 |
| 3.13 | Umgebungsvariablen bzw. Startparameter des Trajektoriendichteberechnungsprogramms | 46 |
| 3.14 | Werte der Umgebungsvariable COLOR | 49 |
| 3.15 | Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.28 | 54 |
| 3.16 | Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.29 | 55 |
| 3.17 | Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.30 | 56 |
| 3.18 | Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.31 | 57 |
| 3.19 | Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.32 | 59 |
| 3.20 | Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.34 | 60 |
| 3.21 | Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.35 | 62 |
| 4.1 | Fehlende Messdatentage von CI und Na vom 1.12.2006 bis 31.5.2007 | 65 |
| 4.2 | Statistische Kennwerte der Messdaten [μ g/m ³] von Cl und Na vom 1.12.2006 bis 31.5.2007 | 65 |
| 4.3 | Tage von Cl und Na vom 1.12.2006 bis 31.5.2007, die 90%-Perzentil überschreiten und | |
| | Mischungsschichthöhen für Berlin | 66 |
| 4.4 | Fehlende Messdatentage von Sulfat vom 1.12.2006 bis 31.5.2007 | 69 |
| 4.5 | Statistische Kennwerte der Messdaten $[\mu g/m^3]$ von Sulfat vom 1.12.2006 bis 31.5.2007 . | 70 |
| 4.6 | Tage von Sulfat vom 1.12.2006 bis 31.5.2007, die 90%-Perzentil überschreiten und Mi- | |
| | schungsschichthöhen für Berlin | 70 |
| 4.7 | Ausgewählte Zeiten aus Tabelle 4.6 | 71 |
| 4.8 | Fehlende Messdatentage von Vanadium vom 1.12.2006 bis 31.5.2007 | 73 |
| 4.9 | Statistische Kennwerte der Messdaten $[\mu g/m^3]$ von Vanadium vom 1.12.2006 bis 31.5.2007 | 74 |

| 4.10 | Tage von Vanadium vom 1.12.2006 bis 31.5.2007, die 90%-Perzentil überschreiten und | |
|------|--|----|
| | Mischungsschichthöhen für Berlin | 75 |
| 4.11 | Ausgewählte Zeiten aus Tabelle 4.10 | 75 |
| 4.12 | Fehlende Messdatentage von PM2,5 vom 1.12.2006 bis 31.5.2007 | 76 |
| 4.13 | Statistische Kennwerte der Messdaten $[\mu g/m^3]$ von PM2,5 vom 1.12.2006 bis 31.5.2007 | 77 |
| 4.14 | Tage von PM2,5 vom 1.12.2006 bis 31.5.2007, die 90%-Perzentil überschreiten und | |
| | Mischungsschichthöhen für Berlin | 78 |
| 4.15 | Ausgewählte Zeiten aus Tabelle 4.14 | 78 |

1 Einleitung

Schwebstaub hat nach heutigem Kenntnisstand viele negative Wirkungen auf die menschliche Gesundheit. Häufig werden Herz-Kreislauf- und Atemwegserkrankungen bei hohen Schwebstaubbelastungen festgestellt. Die Europäische Union legt daher mit der Luftqualitäts-Rahmenrichtlinie und ihren Tochterrichtlinien Grenzwerte für Schwebstaubimmissionen gesetzlich fest. Die zur Zeit geltenden Grenzwerte für Schwebstaub beziehen sich auf Partikel mit einem aerodynamischen Durchmesser kleiner als 10 μ m und sind von allen Mitgliedstaaten einzuhalten.

Berlin konnte die bestehenden Grenzwerte für die Schwebstaubbelastung teilweise nicht einhalten und ist somit gezwungen, Maßnahmen zur Verminderung der Schwebstaubbelastung zu entwickeln. In diesem Zusammenhang ist der Berliner Luftreinhalteplan entstanden, dessen Umsetzung das Erreichen der geforderten Luftqualität sichern soll.

Ein Teil des Schwebstaubs besteht aus sehr kleinen Feinstaubpartikeln (PM2,5), die über große Distanzen transportierbar sind und eine lange Verweildauer in der Atmosphäre besitzen. Um die genauen Ursachen der Belastungssituation durch PM2,5-Feinstaub in Berlin zu untersuchen, ist das Fachgebiet Umweltverfahrenstechnik/Luftreinhaltung der TU Berlin von der Berliner Senatsverwaltung für Gesundheit, Umwelt und Verbraucherschutz beauftragt worden eine Ursachenanalyse der PM2,5-Immissionen für Berlin durchzuführen. Diese Studie beschränkt sich auf den Staubanteil mit einem aerodynamischen Durchmesser kleiner als 2,5 μ m, da diese Fraktion eine höhere Wirksamkeit auf die menschliche Gesundheit besitzt als die größeren Fraktionen. Aus diesem Grund wird auch in der derzeit laufenden Novellierung der EU-Luftqualitätsrichtlinien ein Grenz- oder Zielwert für PM2,5-Feinstaub diskutiert.

PM2,5 kann über mehrere hundert bis tausend Kilometer in der Atmosphäre transportiert werden und ist daher die Fraktion, in der zu einem großen Anteil Ferntransportaerosole zu finden sind. Um die fernliegenden Quellen dieses Feinstaubs identifizieren zu können, die die PM2,5-Immissionssituation in Berlin signifikant beeinflussen, ist in dieser Arbeit ein rechnergestütztes Modell zur Berechnung der Bewegungslinien von Luftmassen (Trajektorien) und ein Programm zur Darstellung von Trajektoriendichten, die aus den Trajektorien verschiedener Einzelereignisse generiert werden, entwickelt worden. Die Entwicklung des Trajektorienberechnungsprogramms stützte sich hierbei auf weitreichende Erfahrungen mit einem zuvor am FG UVT eingesetzten Modell zur Berechnung zweidimensionaler Trajektorien. [She92] Es werden die Funktionsweise und Bedienung der entwickelten Programme erklärt und Untersuchungen über signifikante Zusammenhänge zwischen bestimmten Immisionssituationen in Berlin und dem Herkunftsort der antransportierten Luftmassen durchgeführt. Wenn ein solcher Zusammenhang aufgezeigt werden kann, könnten die Programme eingesetzt werden, um bedeutenden Verursacher leichter zu identifizieren und somit einen Beitrag zur Entwicklung geeigneter Maßnahmen zur Minderung der PM2,5-Belastungsituation in Berlin leisten.

2 Schwebstaub

2.1 Physikalische Zusammensetzung von Schwebstaub

Staub ist eine partikelförmige, feste oder flüssige Luftverunreinigung. Er kann bezogen auf seinen Entstehungsprozess in Primär- und Sekundäraerosole oder in Dispersions- und Kondensationsaerosole eingeteilt werden. Primäaerosole sind Aerosole, wie beispielsweise Ruß, die durch Emission direkt in die Atmosphäre eingetragen werden. Sekundäraerosole hingegen bilden sich erst in der Atmosphäre aus Vorläufersubstanzen (z.B. Ammoniumsulfat). Die beiden Luftschadstoffe Ruß und Ammoniumsulfat zählen zu den Kondensationsaerosolen, da sie durch Kondensationsprozesse entstehen. Dispersionsaerosole werden durch mechanische Prozesse, wie Erosion und Aufwirbelung von Bodenpartikeln, gebildet. Sie sind also ausschließlich Primäraerosole.

Der Entstehungsprozess hat großen Einfluss auf die Morphologie (Form, Größe, Oberflächenbeschaffenheit, etc.) der Partikel. Somit sind beispielsweise Kohlenstoffpartikel aus Kondensationsprozessen wie Ruß kleiner und scharfkantiger als Kohlenstoffpartikel aus Dispersionsprozessen wie Reifenabrieb.

Aufgrund der geringen Sedimentationsgeschwindigkeit in der Atmosphäre werden Partikel mit einem aerodynamischen Durchmesser kleiner als 100 μ m als Schwebstaub bezeichnet. Der Schwebstaub ist weiterhin in Grob- (> 10 μ m) und Feinstaub (< 10 μ m) unterteilt. Teilweise wird die Grenze zwischen Grob- und Feinstaub auch bei 2,5 μ m gezogen. Die Feinstaubfraktion ist nach unten durch den Übergang zu den Gasmolekülen bei ca. 0,001 μ m begrenzt.

In der Fraktion des Feinstaubs sind kaum Dispersionsaerosole enthalten, da die Van-der-Waals-Kräfte eine mechanische Zerkleinerung unter 1 μ m Partikeldurchmesser durch atmosphärische Prozesse kaum zulassen. Umgekehrt ist auch der Anteil der Kondensationsaerosole in der Grobstaubfraktion sehr niedrig, da die Partikel anwachsender Größe meist schon vorher aus der Armosphäre durch trockene und nasse Disposition entfernt werden. Die folgende Abbildung zeigt eine schematische Darstellung der Schwebstaubgrößenverteilung.



Abbildung 2.1: Trimodale Verteilung der Oberfläche über die Partikelradien des Schwebstaubs [WHO06]

In der Abbildung 2.1 sind drei klar voneinander abgrenzbare Größenbereiche des Schwebstaubs erkennbar. Partikel im Größenbereich der Übergangskerne oder ultrafeine Partikel von 0,001 bis 0,1 μ m sind durch Kondensationsprozesse entstanden. Sie bilden sich zum Teil bei Umwandlungsprozessen aus atmosphärischen Gasmolekülen und natürlichen wie auch anthropogenen Vorläufersubstanzen. Außerdem werden sie zu einem großen Teil direkt durch natürliche und anthropogene Quellen emittiert. Natürliche Emittenten können hierbei Brände, Vulkanausbrüche und biogene Stoffwechselprozesse sein. Als anthroprogene Quellen können technische Verbrennungsprozesse in Verkehr, Kraftwerken, Industrie, Heizsystemen und auch Emissionen von Gasen und Dämpfe aus Lacken, leichtflüchtigen Betriebsmitteln, Petrochemie und ähnlichen Stoffen genannt werden. Diese ultrafeinen Partikel koagulieren sehr schnell zu größeren Partikeln im Akkumulationsbereich von 0,1 bis 1 μ m. Die Dauer, bis die Partikel in diesen Bereich hineingewachsen sind, beträgt nur einige Minuten bis Stunden.

Partikel der Größen des Akkumulationsbereichs werden von den oben genannten Quellen teilweise direkt emittiert. Jedoch ist der Anteil der Sekundäraerosole wie Ammoniumsulfat, Ammoniumnitrat und Carbonaten deutlich höher als bei den ultrafeinen Partikeln. Die Aufenthaltsdauer der Partikel des Akkumulationsbereichs ist sehr viel größer als die der ultrafeinen Partikel, da der Einfluss von Diffusion schnell abnimmt. Hierdurch wird auch das weitere Anwachsen der Partikel verlangsamt. Die Partikel können einige Tage bis Wochen in der Atmosphäre verweilen bis sie durch trockene und feuchte Depositionsprozesse ausgetragen werden.

Der Grobstaub, der größer als 1 μ m ist, besteht hauptsächlich aus Dispersionsaerosolen, die durch me-

chanische Zerkleinerung und Aufwirbelung entstanden sind. Natürliche Quellen sind Winderosion und Wiederaufwirbelung von Bodenmaterial, aber auch die Emission von Partikeln entsprechender Größe bei Bränden und Vulkanausbrüchen. Außerdem sind hier biogene Substanzen wie Pollen, Viren, Bakterien und Seesalzaerosole zu nennen. Als anthropogene Quellen gelten Reifen-, Staßen- und Bremsabrieb, wie auch Aufwirbelung durch den Verkehr, Schüttgutumschlag, Bau- und Abrißarbeiten, landwirtschaftliche Tätigkeit, sowie Ascheemissionen aus unkontrollierten Verbrennungsprozessen. Die Aufenthaltsdauer der Partikel beträgt durch die erhöhten Sedimentationsgeschwindigkeiten einige Minuten bis Tage.

matter 10 μ m) und kleiner 2,5 μ m als PM2,5 bezeichnet. Aus Gesundheitsaspekten und der Dauer des Aufenthalts in der Atmosphäre ist hierbei die Fraktion PM2,5 von besonderem Interesse. Diese Partikel werden kaum durch Sedimentation aus der Atmosphäre ausgetragen und können dadurch über große Entfernungen verfrachtet werden. [IES⁺92, WHO06]

2.2 Chemische Zusammensetzung von Feinstaub (PM2,5)

PM2,5-Feinstaub besteht aus Kohlenstoffverbindungen, Salzen und Metalloxiden. Demnach können die chemischen Bestandteile in die vier Gruppen

- kohlenstoffhaltiges Material, bestehend aus organischem Material (OM) und elementarem Kohlenstoff (EC)
- Sekundäraerosole wie Ammoniumverbindungen, Nitrate und Sulfate
- überwiegend natürlich emittierte Metalle wie Aluminium, Calcium, Eisen, Kalium, Magnesium, Natrium und Silizium
- überwiegend anthropogen emittierte Metalle wie Antimon, Arsen, Blei, Cadmium, Chrom, Kupfer, Nickel, Selen, Titan, Vanadium und Zink

eingeteilt werden.

Bedingt durch die Abhängigkeit der Teilchengröße vom Entstehungsprozess ist auch die chemische Zusammensetzung von Partikeln unterschiedlicher aerodynamischer Durchmesser verschieden. So enhält PM0,1 vorwiegend Sulfate, EC, Spuren von Metallen und leichtflüchtige organische Verbindungen. Die Fraktion von 0,1 bis 1 μ m besteht hauptsächlich aus Sulfaten, Nitraten, Carbonaten, EC, organische Verbindungen, Blei, Cadmium, Vanadium, Nickel, Kupfer, Zink, Magnesium, Eisen und an Partikel gebundenes Wasser.

In der Abbildung 2.2 ist die aus Messungen der Messstelle Frohnau (MC045) (vgl. Kapitel 4.1) ermittelte PM2,5-Feinstaubzusammensetzung dargestellt. Der nicht analysierte Rest des PM2,5-Feinstaubs besteht im Wesentlichen aus Wasser, den Sauerstoffatomen der Metalloxide und Siliziumoxiden. [IES⁺92, Pes07]



Abbildung 2.2: Mittlere PM2,5-Zusammensetzung der Messtation Frohnauer Turm (MC045) (1.Dezember 2006 bis 28.Februar 2007) [Pes07]

2.2.1 Kohlenstoffhaltiges Material (EC und OM)

In der Chemie wird nach Organik und Anorganik unterschieden. Dementsprechend können auch Kohlenstoffverbindungen des Schwebstaubs in organisches material (OM) und anorganischen Kohlenstoff (EC) unterschieden werden. Die Gruppe der Carbonate wird wegen ihrer sehr geringen Menge und lufthygienischen Bedeutung hier nicht gesondert betrachtet.

Die organischen Kohlenstoffverbindungen im Schwebstaub enhalten Elemente wie Wasserstoff (Kohlenwasserstoffe), Sauerstoff und Stickstoff. Für das organische Material (OM) wird bei der Analyse oft nur die Menge an organischem Kohlenstoff (OC) bestimmt. Daher muss auf die Gesamtmenge des OM zurückgerechnet werden. Hierfür muss die genaue Zusammensetzung des OM im Schwebstaub bekannt sein. In Untersuchungen von [VVVC78] werden als Hauptgruppen organischer Substanzen im Schwebstaub aliphatische Kohlenwasserstoffe, Carbonsäuren und polyzyklisch aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK) genannt. Am FG UVT wird zur Umrechnung des OC in OM der Faktor 1,2 angenommen. [UIr94] Der OC lässt sich weiter nach Kohlenstoff aus Kohlenwasserstoffverbindungen mit geringem Dampfdruck (OC I) und Kohlenstoff aus Kohlenwasserstoffverbindungen mit hohem Dampfdruck (OC II) unterscheiden. Bei der Analyse der Partikelzusammensetzung werden von den OC I jedoch nur die Anteile erfasst, die an den Oberflächen der Staubpartikel adsorbiert sind.

Die Gruppe des kohlenstoffhaltigen Materials bildet für die in Abbildung 2.2 dargestellte Feinstaubzusammensetzung den zweitgrößten Anteil (6,67 % + 20,53 %). Dieser im Feinstaub enthaltene Kohlenstoff stammt hauptsächlich aus Emissionen von Kraftwerken, Hausbrand und Verkehr.

Der Anteil des EC besteht haupsächlich aus Ruß, der bei der unvollständigen Verbrennung bzw. thermischen Spaltung von kohlenstoffhaltigem Material entsteht. Quellen sind unzureichend gesteuerte Verbrennungsprozesse wie bei Bränden, im Hausbrand und in Kraftwerken. Die Emissionen des Verkehrs stammen hauptsächlich von Dieselmotoren.

Das organische Material im Schwebstaub stammt wie auch der elementare Kohlenstoff zum größten Teil aus den genannten Verbrennungsprozessen. Hinzu kommt die Bildung von Sekundäraerosolen wie PAN durch photochemische Oxidationsprozesse in der Atmosphäre und der Eintrag leichtflüchtiger organischer Kohlenstoffverbindugen aus anthropogenen Quellen (Lacke, leichtflüchtige Betriebsmittel, Petrochemie, etc.) und biogenem Stoffwechsel.

Elementarer und organischer Kohlenstoff wird neben dem Sulfat als typischer Bestandteil des Ferntransportaerosols betrachtet. Der elementare Kohlenstoff wird auf dem Transportweg kaum chemisch umgewandelt. Daher kann aus der Konzentration des elementaren Kohlenstoffs nicht auf die Entfernung zur Emissionsquelle geschlossen werden. Die Quellen können also sowohl lokal als auch in weiter entfernten Regionen liegen. [IES⁺92, Pes07, Völ07]

2.2.2 Sekundäraerosole (Ammonium, Nitrat und Sulfat)

Die Ionen NH₄⁺, NO₃⁻ und SO₄²⁻, die im Feinstaub enthalten sind, stammen aus Sekundäraerosolen wie Ammoniumsulfat und Ammoniumnitrat, die sich erst in der Atmosphäre aus den gasförmigen Komponenten NH₃, SO₂ und NO_x gebildet haben. Diese Sekundäraerosole liegen vorwiegend im Größenbereich des Feinstaubs vor.



Abbildung 2.3: Verteilung verschiedener Ionen in Schwebstaubfraktionen unterschiedlicher aerodynamischer Durchmesser [WHO06]

In Abbbildung 2.3 wird eine typische Verteilung der Ionen über die Partikelgrößen dargestellt. Die hohen Nitratmengen des Grobstaubs stammen wahrscheinlich aus biologischen Prozessen im Boden bzw. aus der landwirtschaftlichen Nutzung durch Düngung. Sie werden mit den Bodendispersionsaerosolen in die Atmosphäre eingetragen.

Hauptquellen der gasförmigen Vorläufersubstanzen der sekundären Kondensationsaerosole sind die SO₂und NO_x-Emissionen aus Kraftwerken, die NO_x-Emissionen des Verkehrs sowie die NH₃-Bildung durch biogene Stoffumwandlung und landwirtschaftlicher Nutzung.

Da Sulfat erst während der Transmission der SO₂-Emissionen als Sekundäraerosol durch Gas-Partikel-Umwandlung in der Atmosphäre gebildet wird, kann es als guter Indikator für Ferntransportaerosole aus Kraftwerksemissionen dienen.

Die Gruppe der Sekundäraerosole macht in der PM2,5-Feinstaubzusammensetzung in Abbildung 2.2 den Hauptanteil aus (13,27 % + 7,78 % + 4,86 %). Sulfat stellt hierbei den größten Anteil, was auf erhebliche Mengen an Ferntransportaerosol hindeutet. [IES⁺92, Völ07, WHO06]

2.2.3 Überwiegend natürlich emittierte Metalle (Aluminium, Calcium, Eisen, Kalium, Magnesium, Natrium und Silizium)

Die Elemente Aluminium, Eisen und Silizium gehören zu den häufigsten Elementen der Erdkruste. Sie liegen in der Natur vorwiegend als Oxide vor. Calcium, Magnesium, Kalium und Natrium gehören ebenfalls zu den Erdkrustenelemente. Sie kommen in der Natur oft in Form von Karbonaten, Sulfaten, Phosphaten, Fluoriden, Chloriden, Mineralien, Salzen oder Oxiden vor.

Im Schwebstaub liegen die Elemente dieser Gruppe hauptsächlich als Dispersionsaerosole aus Bodenerosion, durch Aufwirbelung und mechanischem Abrieb oder Seesalzemissionen vor. Der Großteil besitzt somit einen aerodynamischen Durchmesser größer als 2,5 μ m und ist damit dem Grobstaub zuzurechnen. Die wesentlichen Anteile im Feinstaub sind Dispersionsaerosole mit sehr kleinen Partikelgrößen. Ein geringer Anteil im Feinstaub kann auch auf Verbrennungsprozesse von aus der Erdkruste stammenden Brennstoffen wie Kohle und Erdöl zurückgeführt werden.

In der Abbildung 2.2 sind die Anteile von Natrium und Chlorid in dieser Gruppe am größten. Dies deutet auf Seesalzimmissionen hin, die durch ihren Entstehungsprozess im allgemeinen aus sehr kleinen Dispersionsaerosolen bestehen und somit stärker in der Feinstaubfraktion vertreten sind als die Erdkrustendispersionsaerosole. Der Anteil der übrigen hauptsächlich auf Bodenerosion zurüzuführenden Elemente ist im Feinstaub der Abbildung 2.2 sehr gering. [IES⁺92, Pes07, Völ07]

2.2.4 Überwiegend anthropogen emittierte Metalle (Antimon, Arsen, Blei, Cadmium, Chrom, Kupfer, Nickel, Selen, Titan, Vanadium und Zink)

Die im Feinstaub enhaltenen Elemente Antimon, Arsen, Blei, Cadmium, Chrom, Kupfer, Nickel, Selen, Titan, Vanadium und Zink werden hauptsächlich durch Verbrennungsprozesse emittiert und liegen demzufolge als Oxide meist in ihrer höchsten Oxidationsstufe vor.

Die Spurenelemente sind in verschiedenen Brennstoffen enthalten und werden bei Verbrennungsprozessen und Hochtemperaturprozessen in Kraftwerken, Industrie, Heizsystemen und Verkehr freigesetzt. Daher bestehen oft charakteristische Zusammenhänge von Quellgruppe und emittiertem Element. Tracer sind für die Kohleverbrennung Arsen und Selen, für die Ölverbrennung bzw. Ölraffinerien Vanadium und Nickel und für den Verkehr Blei, Kupfer und Zink. [IES⁺92]

2.3 Einfluß der Meteorologie auf die Feinstaubbelastung (PM2,5)

Die Meteorologie beschreibt die Dynamik der unteren Erdatmosphäre. Dieser Teil der Atmosphäre, die Troposphäre, steht in direktem Kontakt zur Erdoberfläche und damit zum menschlichen Lebensraum. Die Troposphäre umfasst die laminare Grenzschicht der untersten Milimeter, die Prandtl-Schicht über einige Dekameter, die Ekman-Schicht über der Prandtl-Schicht bis ca. 1000 – 3000 m und die freie Atmosphäre re oberhalb der Ekman-Schicht. Die laminare Grenzschicht, die Prandtl-Schicht und die Ekman-Schicht

werden häufig als Planetare Grenzschicht zusammengefasst, da nur innerhalb dieser Schicht ein direkter Einfluss der Erdoberfläche auf die Atmosphäre besteht. Fast alle Prozesse der Emission, Transmission und Immission des Schwebstaubs laufen innerhalb der Planetaren Grenzschicht ab. [IES⁺92, Stu00] In der Prandtl-Schicht sind Impuls-, Wärme- und Feuchteflüsse annähernd höhenunabhängig. Die Windgeschwindigkeit nimmt hier logarithmisch mit der Höhe zu, während die Windrichtung konstant bleibt. In der Ekman-Schicht sind dagegen Impuls-, Wärme- und Feuchteflüsse höhenabhängig und das vertikale Windprofil wird durch Gradient- und Corioliskraft beeinflusst. Dies führt zu einer Drehung der Windrichtung in der Ekman-Schicht bei weiterer Zunahme der Windgeschwindigkeit mit der Höhe. In der Mischungsschicht, die durch von der Erdoberfläche induzierte mechanische und thermische Turbulenzen erzeugt wird, liegen die Luftschadstoffe homogen verteilt vor. Da die Variablilität der mechanisch induzierten Turbulenzen sehr viel kleiner ist als die der thermisch induzierten Turbulenzen, ist die Mischungsschichthöhe stark von der Änderung der thermisch induzierten Turbulenzen abhängig. Sie kann eine Mächtigkeit von wenigen hundert bis zu ein paar tausend Metern ausbilden. Je geringer die Mischungsschichthöhe ist, desto höher sind meist die Luftschadstoffkonzentrationen, da sich die Luftschadstoffe dann nur auf ein kleines Volumen verteilen können.

Die vertikale Temperatur- und Feuchtigkeitsverteilung bedingt den Gleichgewichtszustand der Atmosphäre. Die damit verbundene thermische Schichtung von Luftmassen kann von unterschiedlicher Stabilität sein (stabil, indifferent und labil). Das Schichtungsverhalten hindert (stabil) oder unterstützt (labil) den vertikalen Austausch von Luftmassen. Dadurch können bei labilen Schichtungen sehr viel größere Mischungsschichthöhen erreicht werden als bei stabilen. Die Schichtungsstabilität ist auch mit der Höhe veränderlich (Bodeninversion, stabile nächtliche Bodenschicht, etc.), wodurch das Ein- oder Austreten von Schadstoffen in andere höher- oder tieferliegende Schichten verhindert oder unterstützt werden kann und die Transport- und Verdünnungsprozesse der Luftschadstoffe damit sehr stark vom Gleichgewichtszustand der Atmosphäre beeinflusst werden. [Kra04, Stu00]

Auch andere meteorologische Bedingungen haben großen Einfluss auf die Partikelkonzentrationen in der Luft. Niederschläge können die Staubkonzentration in der Luft senken, wobei nicht nur die Niederschlagsmenge sondern auch die Niederschlagshäufigkeit bedeutsam ist. Wenige und kurze Niederschlagsereignisse mit hoher Intensität senken die Staubkonzentration weniger als langanhaltende und oft auftretende Niederschlagsereignisse geringer Intensität.

Mit zunehmendem Luftdruck kann oft ein Anstieg der PM2,5-Konzentration beobachtet werden. Dieser Anstieg wird auf die typischerweise mit Hochdruckwetterlagen verbundene geringe Niederschlagshäufigkeit (nasse Deposition) zurückgeführt. Der Feinstaubkonzentrationsverlauf weist teilweise eine leicht versetzte Korrelation mit dem Luftdruckverlauf auf. Dieser verzögerte Zusammenhang von Luftdruckverlauf und PM2,5-Konzentrationsverlauf kann dadurch erklärt werden, dass der Luftdruck bis zum Erreichen der wetterwirksamen Luftmassenfront (Niederschlag) schon absinkt, wobei die Feinstaubpartikel erst ab diesem Zeitpunkt durch nasse Deposition ausgetragen werden. Die nach der Front antransportierte neue Luftmasse stammt eventuell aus weniger belasteten Gebieten, was zu einem weiteren Absinken der PM2,5-Konzentration führen kann. Beim Folgen eines stabilen Hochdrucksystems kann die PM2,5-Konzentration wieder durch die Emissionen ansteigen. Hierbei zeigt sich, dass nicht nur der Luftdruck selbst, sondern auch die Stabilität des Luftdrucksystems von Bedeutung ist. [Dra05, Völ07] Die Feinstaubbelastung ist bei hohen Windgeschwindigkeiten oft geringer als bei niedrigen Windgeschwindigkeiten. Dies ist einerseits darauf zurückzuführen, dass im gleichen Zeitraum mehr Luftvolumen an der Emissionsquelle vorbeitransportiert wird und eine stetige Emission sich somit auf ein größeres Luftvolumen verteilt als bei geringen Windgeschwindigkeiten. Andererseits sind höhere Windgeschwindigkeiten oft auch mit stärkeren Turbulenzen verbunden, die zu einer schnelleren und besseren Durchmischung führen. [Stu00]

Ein Anstieg der Globalstrahlung kann auch zu erhöhten Partikelkonzentration in der Luft führen. Photochemische Prozesse in der Atmosphäre sind stark von der Globalstrahlungsintensität abhängig. Durch die Zunahme des kurzwelligen Stahlungsanteils bilden sich vermehrt OH-Radikale in der Atmosphäre, die in der Luft enthaltene Kohlenwasserstoffe zu Peroxiden oxidieren. Die Kohlenwasserstoff-Peroxide kondensieren in der Atmosphäre zu Aerosolen. Auch Komponenten wie SO₂, NH₃ und NO_x werden durch die OH-Radikale vermehrt oxidiert und bilden über den Prozess der Gas-Partikel-Umwandlung Sekundäaerosole. Die höhere Globalstrahlung kann außerdem bei biogenen Stoffwechselprozessen (z.B Pflanzen) zu einer vermehrten Abgabe von biosynthetischen Stoffen (z.B. Terpene) und damit zur zusätzlichen Sekundäraerosolbildung führen. Daher werden oft besonders hohe Konzentrationen ultrafeiner Partikel an Tagen überdurchschnittlich hoher Globalstrahlung beobachtet.

Da die Temperatur und die Intensität der Globalstrahlung miteinander zusammenhängen, sind erhöhte Partikelkonzentrationen bei erhöhten Temperaturen (Sommer) mit den oben beschriebenen Prozessen erklärbar. Hohe Globalstrahlung ist auch meist mit einer geringen Bewölkung verbunden, die wiederum oft mit Hochdruckwetterlagen einhergeht.

In Berlin ist die durch meteorologische Bedingungen verbundene zeitliche Veränderung der Schwebstaubkonzentration daher sehr viel größer als die räumliche Änderung. Die folgende Tabelle zeigt zusammenfassend die Wirkung der verschiedenen meteorologischen Einflüsse auf die Berliner Feinstaubbelastung. [Dra05, Pes07, Völ07]

| Klimaelemente, die <i>hohe</i> Partikelkonzentra- tionen begünstigen | Klimaelemente, die <i>niedrige</i> Partikelkonzen- trationen begünstigen | | | |
|--|---|--|--|--|
| Trockenheit | Niederschlag | | | |
| niedrige Windgeschwindigkeiten und Wind- stille; bei Trockenheit auch mittlere Wind- geschwindigkeiten von 2 – 3 m/s | hohe Windgeschwindigkeiten über 3 m/s | | | |
| hohe Globalstrahlung | geringe Globalstrahlung | | | |
| stabile Hochdrucksysteme | Tiefdruckeinfluss | | | |
| Süd-, Südost- und Südwestwetterlagen | Nord- und Nordwestwetterlagen | | | |
| stabile Luftschichten und Inversionsschich- ten | labiler Gleichgewichtszustand der Luft- schichten | | | |
| geringe Ausdehnung der Mischungsschicht | hohe Ausdehnung der Mischungsschicht | | | |

 Tabelle 2.1: Klimaelemente und ihre f
 ür Berlin zu erwartenden Auswirkungen auf die Partikelkonzentration der Luft [Völ07]

2.4 Transmission von Feinstaub (PM2,5)

Die Transmission von Luftschadstoffen umfasst alle Prozesse zwischen ihrer Emission und der Immission. Hierzu zählen die horizontale und vertikale Verfrachtung, die Verdünnung (Dispersion), die trockene und nasse Deposition und die chemische und physikalische Umwandlung der Luftschadstoffe in der Atmosphäre. Bezogen auf den Feinstaub sind vor allem die Prozesse der Advektion (horizontale Verfrachtung), der Sekundäraerosolbildung, der nassen Deposition (washout, rainout) und der Verdünnung in der Mischungsschicht von besonderem Interesse.

Durch Prozesse der Verdünnung und Durchmischung wird der Feinstaub in der Mischungsschicht homogen verteilt. Diese Prozesse sind stark zeit- und witterungsabhängig (vgl. Kapitel 2.3). Der Transport des Feinstaubs ist hauptsächlich von der Aufenthaltsdauer der Partikel in der Atmosphäre und den herrschenden Windverhältnissen abhängig. Beim Ferntransport liegen somit vorwiegend die Feinstaubfraktionen des Akkumulationsbereichs der aerodynamischen Durchmesser 0,1 bis 1 μ m vor, die sich wegen der geringen Einflüsse der Diffusion (nimmt mit der Größe ab) und der Sedimentation (nimmt mit der Größe zu) einige Tage bis Wochen in der Atmosphäre halten und dadurch über Distanzen von mehreren hundert Kilometern verfrachtet werden können.

Während des Transports in der Atmosphäre können aus gasförmigen Vorläufersubstanzen Feinstaubaerosole durch den Prozess der Sekundäraerodolbildung enstehen (vgl. Kapitel 2.2 und 2.3). Diese Pratikel werden daher häufig als Indikatoren für Ferntransportaerosole angesehen. Eine detailliertere Darstellung des atmosphärischen Transports von Feinstaub wird im Kapitel 3 bei der Beschreibung des theoretischen Trajektorienmodellansatzes gegeben.

Die atmosphärischen Partikel werden letztendlich durch trockene (Impaktion, Interzeption) oder nasse (rainout, washout) Depositionsprozesse aus der Atmosphäre ausgetragen. [IES⁺92, WHO06]

2.5 Immission von Feinstaub (PM2,5)

Die Kenntnis der Feinstaubverteilung und die Einflussfaktoren, die auf sie wirken, sind für die Beurteilung der lokalen Immissionssituation sehr bedeutend. So wird die Feinstaubkonzentration in Städten nicht nur durch den Straßenverkehr beeinflußt, sondern auch in erheblichem Maß durch das Zusammenwirken aller übrigen städtischen Quellen. Die Lage des Immissionsortes und die herrschenden Witterungseinflüsse spielen eine bedeutende Rolle, da sie auch das Ausmaß der aus weiter entfernt liegenden Quellen zuströmenden Staubkonzentrationen beeinflussen können.

Es wird versucht die lokal auftretende Immissionsbelastung nach Anteilen aus lokalen Quellen, Anteilen aus dem urbanen Hintergrund und Anteilen aus dem regionalen Hintergrund zu trennen.



Abbildung 2.4: Verteilungschema der Feinstaubbelastung (PM10) in Berlin und Umgebung [Sen05]

Mit dem in Abbildung 2.4 dargestellten Verteilungsschema lässt sich anschaulich darstellen, woraus sich die Immissionssituation an unterschiedlichen Standorten (städtisches Umland, Stadtrand, städtisches Wohngebiet und Verkehrsmessstelle) in Berlin zusammensetzt. Für die Orte der höchsten Belastungen (Verkehrsmessstellen), an denen die gesetzlichen Grenzwerte überschritten werden, wird deutlich, dass ein erheblicher Anteil der Immissionen aus dem regionalen Hintergrund stammt.

Die regionale Hintergrundbelastung charakterisiert das Immissionsniveau, dass großräumig gleichmäßig verteilt vorliegt. Dieser Anteil ist in der Luftmasse der vorhandenen Mischungsschicht enthalten und kann keiner genauen Quelle mehr zugeordnet werden. Durch atmosphärische Transportprozesse in der Planetaren Grenzschicht können Luftmassen aus Regionen starker Emmission antransportiert werden, die die regionale Hintergrundbelastung erhöhen. Steigt der Beitrag des regionalen Hintergrundes aufgrund der Advektion von vorbelasteten Luftmassen an, so werden Grenzwerte überschritten, obwohl sich an der lokalen Emissionssituation nichts geändert hat. Interessant sind somit die Anteile des Ferntransportaerosols an der regionalen Hintergrundbelastung und seine Herkunft.

Den Hauptanteil der Partikel des Ferntransportaerosols machen während des Transports in der Atmosphäre aus gasförmigen Vorläufersubstanzen gebildete Sekundäraerosole wie Ammoniumsulfat und Ammoniumnitrat, sowie elementarer und organischer Kohlenstoff aus (vgl. Kapitel 2.2 und 2.3). Ihr Nachweis kann somit als Indikator für Ferntransportaerosol herangezogen werden. [IES⁺92, Pes07, Sen05]

2.6 Wirkungen von Feinstaub auf die menschliche Gesundheit

Feinstaub kann negativ auf die menschliche Gesundheit wirken. Seine Schädlichkeit ist von Partikeleigenschaften (physikalisch, chemisch), der Konzentration und der Expositionsdauer abhängig. In einigen Studien wird Feinstaub als Luftschadstoff beschrieben, der gesundheitsrelevanter als O₃, NO₃, SO₂ oder CO ist. [Kol05, Völ07]

Durch Feinstaub können Herz-Kreislauf- und Atemwegserkrankungen ausgelößt werden. Empfindliche Gruppen wie ältere Menschen, Kinder und Personen mit Erkrankungen des Atemweg- oder Herz-Kreislauf-Systems sind hierbei besonders gefährdet. Auch Erkrankungen wie Lungenkrebs können durch Feinstaub verursacht werden. Somit zeichnet sich eine Verringerung der Lebenserwartung und eine erhöhte Mortalitätsrate in Gebieten hoher Feinstaubbelastungen ab.

Eine der gesundheitlich bedeutsamsten Eigenschaften der Partikel ist ihr aerodynamisches Verhalten. Kleinere Partikel dringen sehr viel tiefer in den menschlichen Atemtrakt ein und können dort zu Erkrankungen führen. [Ä07, Bun05]



Abbildung 2.5: Eindringtiefe von Partikeln unterschiedlicher Größe in die menschliche Lunge [Bun05]

Erst Partikel mit einem aerodynamischen Durchmesser kleiner als 10 μ m werden für den Menschen als gesundheitlich relevant angesehen. Die Fraktionen zwischen PM10 und PM2,5 lagern sich hauptsächlich auf den Schleimhäuten in der Nase, im Rachenraum und der Luftröhre ab und können vom Körper meist schnell wieder entfernt werden. Bei Personen, die an Asthma leiden, können die abgeschiedenen Partikel entzündliche Abwehrreaktionen hervorrufen. Durch die Reizung verengen sich die Atemwege und es kann zu Atemnotanfällen kommen.

Feinstaub mit Partikeln kleiner als 2,5 μ m dringt tiefer in die Lunge (Bronchien, Bronchiolen und Alveolen) vor. Aus den Bronchien und Bronchiolen können Partikel zwischen 2,5 und 0,1 μ m durch das Flimmerepithel entfernt werden. Kleinere Partikel werden durch Makrophagen aus den Alveolen entfernt. Die ultrafeinen Partikel (kleiner als 0,1 μ m) können durch die körpereigenen Schutzmechanismen nur sehr schlecht entfernt werden. Aufgrund ihrer geringen Größe gelangen sie über die Lunge sogar bis in den Blutkreislauf und werden mit dem Blut in andere Organe transportiert. [Bun05, WHO06]

In [Ä07] wird allgemein angenommen, dass kurzfristige Auswirkungen des Feinstaubs eher durch den gröberen Anteil des Feinstaubs verursacht werden, während die langfristigen Auswirkungen eher durch ultrafeine Partikel verursacht werden. Weiterhin konnte bisher kein Schwellenwert für Partikelkonzentrationen gefunden werden, unter dem eine Exposition gesundheitlich unbedenklich wäre. Die derzeit geltenden gesetzlichen Grenzwerten gehen von einer linearen Expositionswirkung aus. Sie beziehen sich ausserdem auf die Massekonzentration der Partikel in der Luft. Bei einem massebezogenen Ansatz der Grenzwerte wird wenigen großen Partikeln somit das gleiche toxikologische Potenzial zugeschrieben wie vielen kleinen. Ein solcher Zusammenhang ist aufgrund der oben beschriebenen unterschiedlichen Ablagerungsmechanismen im menschlichen Körper jedoch kaum zu erwarten.

Da die ultrafeinen und feinen Partikel nur einen geringen Anteil an der Gesamtstaubmasse haben, jedoch

stark gesundheitsgefährdend wirken, ist das Gefährdungspotenzial über die Erfassung von Partikelanzahl und -oberfläche möglicherweise besser abschätzbar, als durch die Erfassung der reinen Partikelmassenkonzentrationen. Durch ausschließlich massenbezogene Grenzwerte bleiben auch die chemische Zusammensetzung und die Morphologie der Partikel unberücksichtigt (Giftigkeit der Inhaltsstoffe, Scharfkantigkeit der Partikel, etc.).

Es wird deutlich, dass nur eine umfassendere Analyse des Feinstaubs eine Abschätzung des wirklichen Gefährdungspotenzials zuläßt. Jedoch kann über die Größenklassierung schon eine erste Voreinschätzung gewonnen werden. [Völ07, VHK⁺05, WHO06]

2.7 Gesetzliche Situation

Während des fünften (1992 – 2000) und sechsten (2001 – 2010) Umweltaktionsprogramms der Europäischen Union sind rechtliche Grundlagen und langfristige Ziele für die Luftqualität in den Mitgliedsstaaten der Europäischen Union geschaffen worden. Die Richtlinie 96/62/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 27. September 1996 über die Beurteilung und die Kontrolle der Luftqualität (Luftqualitäts-Rahmenrichtlinie) beinhaltet folgende Kernpunkte.

- Definition und Festlegung von Luftqualitätszielen im Hinblick auf die Vermeidung, Verhütung oder Verringerung schädlicher Auswirkungen auf die menschliche Gesundheit und die Umwelt
- die Beurteilung der Luftqualit\u00e4t in den Mitgliedsstaaten anhand einheitlicher Methoden und Kriterien
- Verfügbarkeit von sachdienlichen Informationen über die Luftqualität und die Unterrichtung der Öffentlichkeit hierüber (u.a. anhand von Alarmstufen)
- Erhaltung guter Luftqualität und die Verbesserung der Luftqualität, wo dies nicht der Fall ist

Die in der Luftqualitäts-Rahmenrichtlinie genannten Ziele und Prinzipien werden in Tochterrichtlinien konkretisiert. Das bislang bestehende Luftreinhalterecht der EG soll auf diese Weise allmählich harmonisiert und nach einem Arbeitsprogramm ergänzt und verbessert werden. Bis heute sind vier Tochterrichtlinien verabschiedet worden, in denen einzelne Bestimmungen zu Luftschadstoffen einschließlich der Grenz- und Zielwerte festgelegt sind.

- Richtlinie 1999/30/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 22. April 1999 über Grenzwerte für Schwefeldioxid, Stickstoffdioxid und Stickoxide, Partikel und Blei in der Luft
- Richtlinie 2000/69/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. November 2000 über Grenzwerte für Benzol und Kohlenmonoxid in der Luft
- Richtlinie 2002/3/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 12. Februar 2002 über den Ozongehalt der Luft
- Richtlinie 2004/107/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 15. Dezember 2004 über Arsen, Kadmium, Quecksilber, Nickel und polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe in

der Luft

Die Richtlinien 2000/69/EG und 2002/3/EG sind für die Schwebstaubproblematik hierbei nicht relevant. [Amt96, Lan07, Sen05]

Werden die Grenzwerte überschritten, so schreibt die Rahmenrichtlinie 96/63/EG die Erstellung eines Plans oder Programms vor, mit dem die Einhaltung der Grenzwerte bis zu einer festgelegten Frist erreicht wird. Die Aktionspläne können Maßnahmen zur Kontrolle und zur Aussetzung von Tätigkeiten, die zur Überschreitung der Grenzwerte beitragen (z.B. Kraftfahrzeugverkehr) beinhalten. [Amt96, Amt00, Amt02]

Die erste Tochterrichtlinie (1999/30/EG) ist in zwei Stufen eingeteilt. Die erste Stufe enthält die derzeit geltenden Grenzwerte für Schwebstaub (PM10):

- maximales 24-Stundenmittel von 50 μ g/m³ bei 35 zulässigen Überschreitungen pro Jahr
- maximales Jahresmittel von 40 μ g/m³

Eine Verschärfung der Grenzwerte durch eine zweite Stufe ab 2010 auf

- maximales 24-Stundenmittel von 50 μ g/m³ bei 7 zulässigen Überschreitungen pro Jahr
- maximales Jahresmittel von 20 μ g/m³

ist in der Richtlinie vorgesehen. Vor ihrer Umsetzung ist jedoch mit den in der ersten Stufe gemachten Erfahrungen ihre Umsetzbarkeit zu prüfen.

Zusätzlich sind Standortkriterien und Kriterien zur Festlegung der Mindestanzahl an Probenahmestellen für Messgebiete enhalten. Die Mindestanzahl der Messstellen und der Messstandort hängen von der Bevölkerungsdichte, der zu erwartenden Belastungssituation und der durchschnittlichen Exspositionsdauer der Bevölkerung am Messstandort ab. So sollen Messorte der höchsten Belastungssituation (meistens Verkehrsmessstellen) und der städtischen Hintergrundbelastung im Messnetz enthalten sein. Für Berlin ergibt sich aus den gesetzlichen Vorgaben eine Mindestanzahl von 7 Messstellen für PM10-Messungen, wobei mindestens eine Messstelle für städtische Hintergrundquellen und eine für den Verkehr vorgesehen werden soll. Die Messung von Luftschadstoffen erfolgt in Berlin durch das Berliner Luftgütemessnetz der Senatsverwaltung für Stadtentwicklung. Das Berliner Luftgütemessnetz bestimmt die Schwebstaubkonzentration an derzeit 13 Standorten in Berlin. [Pes07, Amt99]

Auch die Position des Messeinlasses ist festgelegt (1,5 bis 4 m Höhe, frei anströmbar). Die Emissionsquelle sollte nicht in unmittelbarer Nähe sein (z.B. Verkehr: mindestens 25 m von der nächsten Kreuzung bzw. 4 m von Mitte der nächsten Fahrspur). Die Aussagekraft über die Belastung im Messgebiet muss gegeben sein (Verkehr: mindestens 200 m², städtischer Hintergrund: mehrere km²). Als Messverfahren selbst können alle Verfahren eingesetzt werden, die die gleichen Ergebnisse wie das in den Richtlinien festgelegte Referenzverfahren liefern oder deren Ergebnisse eine feste Beziehung zum Referenzverfahren aufweisen. [Völ07]

Derzeit sind die europäischen Bestimmungen der ersten und zweiten Tochterrichtlinie in Form der 22. BImSchV und die der dritten Tochterrichtlinie in Form der 33. BImSchV in deutsches Recht übernommen und mit dem 7. Gesetz zur Änderung des BImSchG von 2002 in Kraft gesetzt worden. Die TA-Luft wurde ebenfalls 2002 an die neuen europäischen Grenzwerte angepasst. [Zwe07, Dre04] Die vierte Tochterrichtlinie (2004/107/EG) vervollständigt die Rahmenrichtlinie mit Bestimmungen zu den Staubinhaltsstoffen Arsen, Kadmium, Quecksilber, Nickel und polyzyklisch aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK). Für die PAK mit der Leitkomponente Benz[a]pyren sowie Arsen, Kadmium und Nickel in PM10 sind Zielwerte festgelegt, die bis zum 31. Dezember 2012 einzuhalten sind, wenn dies nicht unverhältnismäßig hohe Kosten verursacht. [Amt04]

In den letzten Jahren hat sich jedoch gezeigt, dass die derzeitigen Grenzwerte in sehr vielen europäischen Städten nicht eingehalten werden. Eine Änderung der PM10-Grenzwerte wird diskutiert, wodurch der Grenzwert für das Jahresmittel von derzeit 40 μ g/m³ auf zukünftig 30 μ g/m³ gesenkt, dafür aber die Anzahl der zulässigen Überschreitung des Tagesgrenzwertes von 35 auf 55 Tage angehoben werden soll. Zusätzlich soll eine Übergangsfrist zur Einhaltung der Grenzwerte und eine Anpassung des Grenzwertes an Standorten mit hohen natürlich bedingten Staubbelastungen beantragen werden dürfen, wenn nachgewiesen wird, dass eine besonders ungünstige geografische oder meteorologische Situation besteht bzw. alle zumutbaren Maßnahmen zur Reduzierung ohne Erfolg angewendet wurden.

Darüber hinaus wird die Zusammenfassung bestehender Richtlinien und die Einführung eines Zielwertes für PM2,5 diskutiert. Dieser soll anfangs als Zielwert bei 25 μ g/m³ als Jahresmittel liegen und ab 2015 in einen Grenzwert umgewandelt werden. Auch bestimmte Staubinhaltstoffe wie beispielsweise Sulfat, Nitrat und elementarer Kohlenstoff sollen bestimmt werden. Weiterhin sind Änderungnen des NO₂-Grenzwertes und der Standortkriterien für Messstationen vorgesehen. Die Grenzwerte für PM10 sollen neben den PM2,5-Grenzwerten erhalten bleiben, da auch Partikel der Größe PM10 – PM2,5 gesundheitsschädigende Wirkungen besitzen. [Kom06, RS06]

Die PM2,5-Bestimmung gibt wertvolle Informationen über die Ursachen hoher PM10-Konzentrationen. An Tagen mit hohem Ferntransport ist der PM2,5-Anteil im PM10-Feinstaub sehr hoch. Die Ursache dieser Belastungssituation ist demnach oft keinen lokalen Quellen zuzuschreiben. Die Berücksichtigung eines Grenz- oder Zielwertes für PM2,5 im Rahmen der derzeit laufenden Novellierung der EU-Luftqualitätsrichtlinien unterstützt darüber hinaus die Wichtigkeit einer Ursachenanalyse für PM2,5. Sie dient damit einerseits der Vorbereitung auf die kommenden gesetzlichen Grenzwerte und ist andererseits ein wichtiger Beitrag für die bevorstehende Überarbeitung des Luftreinhalteplans in Berlin. [Pes07]

3 Beschreibung des entwickelten rechnergestützten Modells

Die im Folgenden dargestellten rechnergestützten Modelle stellen den praktischen Teil dieser Diplomarbeit dar. Sie sind auf einem unixähnlichen Betriebssystem (OpenBSD) in der Programmiersprache C entwickelt worden. Die Kompilierung der Quelltexte ist mit dem Gnu C Compiler (gcc version 3.3.5 bzw. 4.1.2) getestet. Lauffähige Binärdateien lassen sich mit entsprechenden Compilern für Unix/Linux, Mac OS X und DOS/Windows aus den Quelltexten erstellen. Die Quelltexte der entwickelten Programme sind im Anhang enthalten. Es wurde versucht den Programmablauf durch Kommentare in den Quelltexten verständlich darzustellen, so dass in diesem Kapitel nur zusammenfassend auf die Funktionsweise und die Bedienung der Programme eingegangen wird.

Um den ausführbaren Programmen die gewünschten Parameter zu übergeben werden Umgebungsvariablen benutzt. Diese sind unter DOS/Windows mit dem Befehl *set* (MS-DOS-Umgebung) und unter Unix, Linux bzw. Mac OS X mit dem Befehl *export* (Bourne Shell) bzw. *setenv* (C Shell) zu setzen. Die Programme überprüfen beim Start, ob die einzelnen Variablen gesetzt sind und übernehmen, wenn vorhanden, ihre Werte. Ist eine Variable nicht gesetzt, so wird ein programminterner Standardwert für diesen Parameter benutzt.

Diese Weise der Parameterübergabe ist gewählt worden, da die Kommandozeile unter DOS/Windows nur Befehle bis zu 256 Zeichen Länge zulässt. Bei entsprechend vielen Parameterangaben bzw. langen Pfadangaben kann diese Zeichenanzahl schnell erreicht sein. Eine Variable der DOS/Windows-Umgebung kann selbst jedoch mindestens 256 Zeichen aufnehmen. Durch die Benutzung mehrere Variablen können die Probleme der Zeichenkettenlänge somit weitgehend vermieden werden.

In einer Shell sind pro Kommando meist 65536 Zeichen zugelassen. Hier stellt sich die oben beschriebene Problematik also meist nicht. Um die Programmschnittstelle jedoch einheitlich zu halten, werden auch beim Programmaufruf aus einer Shell Umgebungsvariablen zur Parameterübergabe verwendet.

Da die Berechnungsprogramme rein kommandozeilenbasiert funktionieren, sind sie gut aus Shell-Skripten und Stapelverarbeitungsdateien ausführbar. Sie können jedoch auch direkt aus anderen Programmen und aus graphischen Oberflächen (sogenannten Frontends) ausgeführt werden, die die gewünschten Umgebungsvariablen setzen und ihre Prozessumgebung dem Prozess des Berechnungsprogramms beim Start vererben.

3.1 Trajektorienberechnungsmodell

Der Quelltext des Trajektorienberechnungsprogramm ist im Anhang unter trajectory.c enthalten.

3.1.1 Theoretische Ansätze

Die theoretischen Grundlagen des rechnergestützten Trajektorienmodells gehen auf Arbeiten von [She92] zurück. Das Programm selbst ist jedoch vollständig neu entwickelt worden.

Eine Trajektorie beschreibt zeitlich aufeinander folgende Ortsvektoren einer Bewegungslinie. In der Luftreinhaltung setzt man den Begriff Trajektorie mit der Bewegungslinie eines Luftteilchens oder einer Luftmasse gleich. Die zeitliche Verfrachtung einer Luftmasse wird hierbei auf ihr Zentrum bezogen. Die Trajektorie setzt sich somit aus infinitesimalen Wegstücken zusammen, welche von den orts- und zeitabhängigen Windvektoren beschrieben werden. Mathematisch kann sie durch die Formel

$$\vec{x}(t) = \vec{x}(t_0) + \int_{t_0}^t \vec{u}(\vec{x}, t) dt$$
(3.1)

beschrieben werden, wobei $\vec{x}(t_0)$ die Startposition des Luftpaketes und $\vec{u}(\vec{x},t)$ den am Ort \vec{x} zur Zeit t herrschenden Windvektor bezeichnet. Da \vec{x} im Integranden erscheint, lässt sich das Integral nicht direkt bestimmen. Es kann jedoch durch numerische Integration beschrieben werden.

$$\vec{x}(t_1) = \vec{x}(t_0) + \Delta T \cdot \vec{u}[\vec{x}(t_0), t_0]$$
 (3.2)

$$\vec{x}(t_2) = \vec{x}(t_1) + \Delta T \cdot \vec{u}[\vec{x}(t_1), t_1]$$
 (3.3)

$$\vec{x}(t_n) = \vec{x}(t_{n-1}) + \Delta T \cdot \vec{u}[\vec{x}(t_{n-1}), t_{n-1}]$$
(3.4)

Die Integrationsgenauigkeit lässt sich theoretisch durch Verkleinerung des Zeitschritts ΔT beliebig erhöhen, ist aber in der Praxis durch Rechenzeit und Rundungsfehler des Rechners begrenzt.

Die Luftmassenbewegungen können mit der natürlichen Zeitrichtung als Vorwärtstrajektorien und entgegen der natürlichen Zeitrichtung als Rückwärtstrajektorien berechnet werden. Für die Berechnung von Vorwärtstrajektorien muss, wenn die betrachtete Zeitspanne nicht in der Vergangenheit liegt, auf prognostizierte Windfelder zugegriffen werden, die einen zusätzlichen Fehler eintragen können. Rückwärtstrajektorienberechnungen basieren im allgemeinen auf gemessenen Winddaten, die wegen der räumlichen Auflösung und der daraus notwendigen Interpolation zu fehlerhaften Annahmen führen können.

Bezieht man in die Transportberechnung horizontale wie auch vertikale Betrachtungen mit ein, erhält man ein dreidimensionales Transportmodell. Aufgrund der fehlenden vertikal aufgelösten Eingabedaten wird hier ein zweidimensionaler Ansatz verwendet, der nur die horizontale Verfrachtung der Luftmassen betrachtet. Es wird eine Art Kolbenströmung innerhalb der Mischungsschicht angenommen, deren Geschwindigkeit und Richtung aus dem herrschenden logarithmischen sich mit der Höhe drehenden Windprofil abgeleitet wird.

Die Windgeschwindigkeit nimmt innerhalb der Planetaren Grenzschicht mit der Höhe logarithmisch zu. Eine heute gängige mathematische Beschreibung dieses Zusammenhangs ist der Potenzansatz.

$$\vec{u}(z) = \vec{u}(z_a) \cdot \left(\frac{z}{z_a}\right)^M \tag{3.5}$$

Dieser Ansatz stellt den Bezug von der in der Höhe z_a (Anemometerhöhe) gemessenen Windgeschwindigkeit $\vec{u}(z_a)$ zur Windgeschwindigkeit $\vec{u}(z)$ der Höhe z her. M ist ein von der atmosphärischen Stabilität abhängiger Parameter.

Bedingt durch die Erdrotation wirkt auf bewegte Massen (m) die Corioliskraft (F_c) . Sie wirkt auf der Nordhalbkugel bezogen auf die Bewegungsrichtung rechtwinklig nach rechts und auf der Südhalbkugel rechtwinklig nach links. Ihr Einfluss nimmt proportional zur Geschwindikeit (\vec{v}) , zur Erdrotation $(\vec{\omega})$ und dem Sinus des Winkels zum Äquator (ϕ) zu. Die Windrichtung ändert sich also aufgrund der zunehmenden Windgeschwindigkeit in der Mischungsschicht mit der Höhe für alle Breitengrade ungleich 0°. Die Stärke der Drehung nimmt hierbei für gleiche Windgeschwindigkeiten mit dem Winkel der Breite zu.

Ausgehend von der Formel für die Corioliskraft

$$\vec{F}_c = -2 \cdot m \cdot \vec{\omega} \times \vec{v} \tag{3.6}$$

kann die Beschleunigung, die der Wind durch den Corioliseffekt erfährt, als

$$\vec{a}_{c} = -2 \cdot \vec{\omega} \times \vec{v} = -2\omega \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \cos(\varphi) \\ \sin(\varphi) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} v_{east} \\ v_{north} \\ v_{height} \end{pmatrix}$$
(3.7)

dargestellt werden. Vernachlässigt man die vertikalen Anteile, so kann auf die folgende Form vereinfacht werden. [Wik07]

$$\vec{a}_c = 2\omega \cdot \sin(\varphi) \cdot \begin{pmatrix} v_{north} \\ -v_{east} \end{pmatrix}$$
 (3.8)

Nimmt man eine neutrale Schichtung (M = 0,22 nach TA-Luft) mit einer Höhe von 1000 m für den Breitengrad Berlins an, so ergibt sich ein gemittelter Windvektor für die Mischungsschicht, der um $+10^{\circ}$ in der Richtung und um den Faktor 2 im Betrag vom Bodenwindvektor abweicht. Diese Annahmen sind für früheren Modellrechnungen am Fachgebiet verwendet worden und haben zu guten Ergebnissen geführt. [Bur89, IES⁺92, She92]

Über diesen Ansatz ist es möglich zweidimensionale Trajektorien der Mischungsschicht aus Bodenwinddaten zu berechnen. Bodenwinddaten liegen jedoch nicht für jeden Ort und zu jeder Zeit vor. Somit wird eine örtliche und zeitliche Interpolation zwischen den gemessenen Winddaten für die aktuelle Berechnungsposition zur aktuellen Berechnungszeit erforderlich.

Aus den vorhandenen Winddaten ($\vec{u}_{a,k}$ zur Zeit t_a , $\vec{u}_{b,k}$ zur Zeit t_b) werden stundenweise Windfelder interpoliert. Man erhält ein Stundenwindfeld ($\vec{u}(\vec{x}_k,t)$) für jede volle Zeitstunde (t).

$$\vec{u}(\vec{x}_k,t) = \frac{t_b - t}{t_b - t_a} \cdot \vec{u}_{a,k} + \frac{t - t_a}{t_b - t_a} \cdot \vec{u}_{b,k}$$
(3.9)



Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der zeitlichen Interpolation der Stundenwindfelder aus Winddatenfeldern

Liegt die momentane Berechnungszeit zwischen zwei Zeitstunden, so wird entsprechend mit den zuvor berechneten zeitlich angrenzenden Stundenwindfeldern ein Windfeld für die Berechnungszeit interpoliert.



Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der zeitlichen Interpolation des momentanen Windfeldes aus Stundenwindfeldern

Aus dem erhaltenen Windfeld zur Berechnungszeit werden die Windvektoren mit dem Abstand (r_k) zum Berechnungspunkt (\vec{x}) reziprok gewichtet. Zuvor werden alle Vektoren, deren Abstand zum Berechnungspunkt zu groß ist, aus dem Windfeld entfernt. Ein Mindestabstand zum Berechnungspunkt wird zusätzlich eingeführt, um die Überbewertung sehr nahe liegender Windvektoren zu verhindern. Für den Mindestabstand wurden in früheren Berechnungen [She92] 2 km und für den Maximalabstand 200 km angenommen. Der Wichtungsfaktor (W_k) läßt sich somit durch

$$W_k = \frac{1}{r_k^2} \tag{3.10}$$

$$r_k = |\vec{x} - \vec{x}_k| \tag{3.11}$$

beschreiben.

Aus dem nun zeitlich und örtlich interpolierten und gewichteten Windfeld kann der Windvektor ($\vec{u}(\vec{x},t)$) der Berechnungsposition (\vec{x}) zur Berechnungszeit (t) bestimmt werden. [Bur89, IES⁺92, She92]

$$\vec{u}(\vec{x},t) = \frac{\sum W_k \cdot \vec{u}(\vec{x}_k,t)}{\sum W_k}$$
(3.12)

Allgemein sind die Trajektorienverläufe in Vorwärts- bzw. Rückwärtsrichtung unterschiedlich. Betrachtet man den räumlichen Versatz während eines Iterationsschritts (Abbildung 3.3 blauer zum roten Kreis), so wird die Richtung und der Betrag des Versatzes aus den Windvektoren mit dem Abstand (s1 und s2) gewichtet interpoliert. Rechnet man mit dem selben Windvektorenfeld in entgegengesetzte Richtung (vom roten zum blauen Kreis), wird aufgrund der anderen Position (nun roter Kreis) mit anderen Abständen gewichtet und man bekommt einen anderen Bewegungsvektor. Man erreicht also zwangsläufig nicht genau den Ausgangspunkt.



Abbildung 3.3: Schematische Darstellung der örtlichen Interpolation von Windvektoren in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung

Ist das Windvektorenfeld örtlich stark variabel, so kann sich der Unterschied zwischen Hin- und Rückrechnung mit jedem Rechenschritt stark vergrößern. Besteht dagegen ein sehr homogenes Windfeld, bleibt der Unterschied eher gering.

Generell sind die Fehler der Trajektorienverfolgung bei einer hohen Variabilität des Windfeldes als groß anzunehmen. Die Abweichung der Hin- und Rückrechnung kann als erste Abschätzung der Vertrauenswürdigkeit der Trajektorienverfolgung dienen.

Ein anderes Problem, das mit der räumlichen Auflösung der Wetterdaten zu tun hat, ist eine mögliche Verzerrung durch eine hohe Wetterstationenenkonzentration an einem Punkt. Das dort herrschende lokale Windsystem erhält durch die Stationsanzahl ein starkes Gewicht in der Interpolation. Ist die Anzahl an Wetterstationen in einem Gebiet sehr hoch und in einem anderen sehr niedrig, so ist der Anteil des Gebietes mit der hohen Stationsdichte sehr viel größer als der mit der niedrigen Stationsdichte. Will man diese Verfälschung vermeiden, so muss darauf geachtet werden, dass die Datenbasis eine gleichmäßige räumliche Verteilung aufweist, was durch eine geziehlte Auswahl an Wetterstationen oder die Einführung von "Dummystationen" erreicht werden kann.

3.1.2 Bedienung des Programms

Das Programm benötigt Eingabedatensätze und Startparameter. Als Eingabedaten werden einerseits Nummer, Lage und Messeinheit der Wetterstationen in Form einer Wetterstationsinformationsdatei übergeben. Zusätzlich werden die eigentlichen Winddatensätze benötigt. Sie enthalten die Stationsnummer, den Messzeitpunkt, die gemessene Windrichtung und -stärke und sind in Dateien tageweise zusammengefasst. Die genauen Formate dieser Datensätze (Stationsinformationen, meteorologische Datensätze) sind in der Arbeit [Fin07] detailliert beschrieben.

Die Datei- bzw. Verzeichnisnamen der Eingabedatensätze werden dem Programm durch Umgebungsvariablen als Startparameter übergeben. Auch alle weiteren Programmparameter werden über entsprechende Umgebungsvariablen gesetzt. Ist ein Parameter bzw. eine Umgebungsvariable nicht gesetzt, so wird ein programminterner Standardwert benutzt. Die Umgebungsvariablen und ihre Standardwerte sind im Folgenden aufgeführt.

| Variablenname Standardwert | | Wertebereich | Erklärung |
|----------------------------|--------------|----------------|--|
| LO | 13.4167 | -180.0 - 180.0 | Längengrad (Startposition) |
| LA | 52.5167 | -90.0 - 90.0 | Breitengrad (Startposition) |
| YYYY | 2000 | | Jahresangabe (Startzeit) |
| MM | 1 | 1 – 12 | Monatsangabe (Startzeit) |
| DD | 1 | 1 – 31 | Tagesangabe (Startzeit) |
| HH | 0 | 0 - 23 | Stundenangabe (Startzeit) |
| TRACE | -96 | eq 0 | Verfolgungsdauer in Stunden |
| SPEED | 2.0 | > 0.0 | Windgeschwindigkeitskorrekturfaktor |
| ROT | 10.0 | | Windrichtungskorrektur in Grad |
| MAXR | 200 | > 0 | Radius des Berechnungsgebiets in km |
| MINR | 2 | > 0 | Mindestabstand für Wichtungsbe- rechnung in km |
| IPERH | 20 | > 0 | Iterationen pro Zeitstunde |
| IPERPOINT | 20 | > 0 | Iterationen pro Trajektorienaufpunkt |
| ZONEDIFF | -1 | | Zeitzonendifferenz zwischen Daten- sätzen und Startzeitangabe in Stun- den |
| ZONENAME | MEZ | | Zeitzonenname |
| STATION | wstation.dat | | Stationsinformationsdatei |
| METEO | meteo/ | | Verzeichnis mit Winddatensätzen |
| OUTPUT | traj/ | | Ausgabeverzeichnis |
| STDDEVIATION | 0.0 | ≥ 0.0 | zulässige Standardabweichung der Windvektoren (0.0: off) |

| Tabelle 3.1: Umgebungsvariablen | bzw. | Startparameter | des | Trajektorienberechnungspro- |
|---|------|----------------|-----|-----------------------------|
| gramms (I) | | | | |

| Variablenname | Standardwert | Wertebereich | Erklärung |
|---------------|--------------|--------------|--|
| DATAUNIT | 0 | 0; 1; 2 | Messeinheit der Windgeschwindigkeit; 0: kn; 1: m/s; 2: aus Stationsinformations- datei |
| RES | 3 | 0 – 24 | zeitliche Winddatenauflösung in Stunden (0: off) |

 Tabelle 3.2: Umgebungsvariablen bzw. Startparameter des Trajektorienberechnungsprogramms (II)

Im Anhang ist ein Shell-Skript *trajectory.sh* und eine Stapelverarbeitungsdatei *trajectory.bat* als Beispiel für einen Programmaufruf enthalten.

Positionsparameter (LO, LA)

Die Startposition der Trajektorienberechnung wird als Längengrad und Breitengrad angegeben. Hierbei ist zu beachten, dass die übergebenen Werte als Grad ohne Minuten- oder Sekundenangabe eingelesen werden. Der Wert wird als Dezimalzahl nach amerikanischer Syntax mit einem Punkt erwartet. Die Positionsangabe für Berlin 52°31'N 13°25'E wird somit als

$$LO = 13.416667$$
 (3.13)

$$LA = 52.516667$$
 (3.14)

übergeben. Dies sind auch jeweils die programminternen Standardwerte, die benutzt werden falls die Positionsparameter beim Programmaufruf nicht gesetzt sind.

Zeitparameter (YYYY, MM, DD, HH, ZONEDIFF, ZONENAME)

Die Startzeit der Berechnung wird als Jahr, Monat, Tag und Stunde festgelegt. Hierbei muss die Zeitzone der eingegebenen Startzeit und ihre Stundendifferenz zur Zeitzone der Zeitangaben in den Winddatensätzen bekannt sein. Meteorologische Daten werden standardmäßig in Greenwich Mean Time (GMT) festgehalten. Die Zeitzone für Berlin ist im Winter Mitteleuropäische Zeit (MEZ) und im Sommer Mitteleuropäische Sommerzeit (MESZ). Nach der Richtlinie 2000/84/EG wird am letzten Sonntag im März um 2:00 Uhr (MEZ) auf 3:00 Uhr (MESZ) vorgestellt und am letzten Sonntag im Oktober von 3:00 Uhr (MESZ) auf 2:00 Uhr (MEZ) zurückgestellt. [Amt01] Somit ergeben sich für eine Berliner Startzeit 12 Uhr am 10. Juli 2007 bezogen auf meteorologische Datensätze in GMT die Zeitparameter

$$YYYY = 2007$$
 (3.15)

$$MM = 7 \tag{3.16}$$

$$DD = 10$$
 (3.17)

$$HH = 12 \tag{3.18}$$

$$ZONEDIFF = -2 \tag{3.19}$$

$$ZONENAME = MESZ (3.20)$$

und analog für die Berliner Startzeit 0 Uhr am 1. Januar 2000 die Zeitparameter

$$YYYY = 2000$$
 (3.21)

$$MM = 1 \tag{3.22}$$

$$DD = 1 \tag{3.23}$$

$$HH = 0 \tag{3.24}$$

$$ZONEDIFF = -1 \tag{3.25}$$

$$ZONENAME = MEZ (3.26)$$

Die Werte der einzelnen Zeitparameter der Zeitangabe des 1. Januar 2000, 0 Uhr sind hier die programminternen Standardwerte, die für ungesetzte Zeitparameter beim Programmaufruf benutzt werden.

Iterationsparameter (TRACE, IPERH, IPERPOINT)

Die Berechnung der Trajektorie kann über weitere Parameter gesteuert werden. Die Verfolgungsdauer und -richtung wird in Stunden mit negativem oder positivem Vorzeichen angegeben (*TRACE*). Hierbei bedeutet ein positives bzw. kein Vorzeichen die Verfolgung entsprechend des natürlichen Zeitverlaufs und ein negatives Vorzeichen eine Vorfolgung entgegen des natürlichen Zeitverlaufs. Desweiteren kann die Berechnungsgenauigkeit über die Iterationsanzahl pro Verfolgungsstunde (*IPERH*) gesteuert werden. Die Auflösung der Ausgabedaten wird über die Anzahl der Iterationen pro Trajektorienaufpunkt (*IPERPOINT*) gesteuert.

Eine Vorwärtstrajektorienberechnung über 35 Stunden mit 1 Iteration pro Stunde und 5 Iterationen pro Aufpunkt führt somit zu den Parametern

$$TRACE = 35 \tag{3.27}$$

$$IPERH = 1 \tag{3.28}$$

$$IPERPOINT = 5 \tag{3.29}$$

Nach diesen Parametern wird alle 60 Minuten ein neuer Transportvektor an der aktuellen Position zur aktuellen Zeit berechnet. Der Trajektorienverlauf ist bis zum Erreichen der nächsten 60 Minuten entsprechend der Richtung und des Betrags des Transportvektors konstant. Alle 5 Stunden wird die aktuelle Berechnungsposition als Trajektorienaufpunkt gespeichert.

Diese Werte können zu großen Verlaufsabweichungen der Trajektorie führen, da für einen sehr langen Zeitraum (1 Iteration pro Stunde) ein konstanter Transportvektor angenommen wird und eine Änderung des Windfeldes durch die Positionsverschiebung erst zur nächsten Iteration überprüft und angepasst wird. Bei einer starken Änderung des Windfeldes auf kurze Distanzen kann dies zu erheblichen Fehlern führen. Wählt man eine sehr große Anzahl von Iterationen pro Stunde, kommt es auf die Auflösung der Winddatensätze an, ob ein entsprechend großer Wert sinnvoll ist oder nur unnötige Rechenzeit bedeutet. Am Fachgebiet sind mit Verfolgungszeiten von maximal 96 Stunden für Rückwärtstrajektorien und 20 Iterationen pro Stunde und Aufpunkt gute Ergebnisse erziehlt worden. Die Winddatenauflösung betrug hierbei 3 Stunden. [Hai03, IES⁺92, Pes94, She92, Tre00]

$$TRACE = -96 \tag{3.30}$$

$$IPERH = 20 \tag{3.31}$$

$$IPERPOINT = 20 \tag{3.32}$$

Diese Werte entsprechen den programminternen Standardwerten.

Verarbeitungsparameter der Winddatensätze (MINR, MAXR, STDDEVIATION, DATAUNIT, RES, SPEED, ROT)

In den Winddatensätzen sind nicht für jede Zeitstunde Daten vorhanden, da die meisten Wetterstationen nur dreistündig Winddaten liefern. Zur Überprüfung einer konsistenten Datenauflösung kann dem Parameter *RES* ein Wert zugewiesen werden. Ist die vorhandene Datenauflösung an einer Stelle höher oder geringer, so wird die Berechnung abgebrochen. Wird RES = 0 gesetzt, so wird die Auflösung der Daten ignoriert, solange sie nicht 24 Stunden überschreitet. Die am Fachgebiet vorliegenden Winddatensätze haben eine Auflösung von drei Stunden. Daher wird programmintern RES = 3 gesetzt, falls der Parameter beim Programmstart nicht gesetzt wurde.

Die Winddatensätzen enthalten nur den Betrag jedoch nicht die Einheit der Windgeschwindigkeiten. Die Information über die Einheit, in der eine Station die Windgeschwindigkeit misst, muss somit bekannt sein. Über den Parameter *DATAUNIT* können drei verschiedene Modi der Windgeschwindigkeitverarbeitung unterschieden werden.

Tabelle 3.3: Modi des Programmparameters DATAUNIT

- DATAUNIT = 0 in allen Winddatensätzen ist die Windgeschwindigkeit in Knoten angegeben
- DATAUNIT = 1 in allen Winddatensätzen ist die Windgeschwindigkeit in m/s angegeben
- *DATAUNIT* = 2 die Einheit der Windgeschwindgeschwinidigkeit ist stationsabhängig

Wird der dritte Modus (DATAUNIT = 2) gewählt, so ist unbedingt darauf zu achten, dass der Einheitenparameter in der Stationsinformationsdatei für alle Stationen richtig gesetzt wurde. Die Winddatensätze, die das Fachgebiet zur Zeit vom DWD erhält, beinhalten ausschließlich Windgeschwindigkeitsangaben in Knoten. Daher ist der programminterne Standardwert für diesen Parameter auf DATAUNIT = 0 gesetzt. Der Parameter MAXR grenzt das Gebiet ein, aus dem Windvektoren für die Interpolation des Transportvektors an der momentanen Berechnungsposition berücksichtig werden. Die Windvektoren sind mit dem Abstand zur Berechnungsposition reziprok gewichtet, wodurch ein Mindestabstand MINR erforderlich wird, um naheliegende Windvektoren nicht überzubewerten. Die zugrundeliegenden Formeln (3.11 und 3.12) sind in Kapitel 3.1.1 genauer erklärt.

In der Abbildung 3.4 ist ein Interpolationswindfeld graphisch dargestellt. Die roten Windvektoren liegen außerhalb von *MAXR* und werden daher nicht zur Interpolation herangezogen. Die grünen Vektoren haben einen zu geringen Abstand zum Berechnungspunkt und erhalten den Wichtungsabstand *MINR*. Zusammen mit den schwarzen Vektoren wird aus ihnen der blaue interpolierte Transportvektore berechnet.



Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der Parameter MINR und MAXR bei der räumlichen Interpolation eines Windvektors

Wird *MAXR* sehr groß, so werden Windvektoren berücksichtigt, die auf die lokale Windsituation kaum mehr Einfluss haben. Ein Extremum wäre ein Transportvektor, der über alle Windvektoren auf der Erde gemittelt ist. Er ließe keine lokale Aussage mehr zu. Wird *MAXR* und damit die Anzahl der Windvek-

toren jedoch zu klein, so erhalten kleinräumige Windsysteme einen großen Einfluss, die den mittleren lokalen Transportvektor der Mischungsschicht ungenügend wiedergeben. *MAXR* stellt also eine Skalierung des meteorologischen Einflussssystems auf die lokalen Transportbedingungen der Mischungsschicht dar. Darüber hinaus wird allen Windvektoren, die näher als *MINR* am Berechnungspunkt liegen, der Mindestabstand *MINR* zugewiesen, um die Überbewertung naheliegender lokaler Windsysteme zu vermeiden. In früheren Arbeiten sind meistens die Werte

$$MINR = 2 \tag{3.33}$$

$$MAXR = 200 \tag{3.34}$$

verwendet worden (entspricht 2 und 200 km), die auch als programminterne Standardwerte benutzt werden, wenn die Parameter nicht beim Programmstart gesetzt sind. [Hai03, IES⁺92, Pes94, She92, Tre00] Da es sich bei den verwendeten Winddaten um Bodenwinddaten handelt, muss wegen der in Kapitel 3.1.1 dargestellten Windänderung mit der Höhe und mit dem Breitengrad eine Windvektorkorrektur erfolgen. Diese Korrektur kann dem Programm über den Windgeschwindigkeitsfaktor *SPEED* und der Windrichtungsabweichung *ROT* übergeben werden.

Der Windgeschwindigkeitsfaktor *SPEED* ist ein Multiplikator, über den die mittlere Transportgeschwindigkeit in der Mischungsschicht aus der Bodenwindgeschwindigkeit errechnet wird. Die Windrichtungsabweichung *ROT* ist der Winkel, um den der Transportvektor der Mischungsschicht vom Bodenwind abweicht. Er ist von der Mischungsschicht (Stabilität, Höhe) und dem Breitengrad abhängig. Nach den Ansätzen in Kapitel 3.1.1 für eine durchschnittliche Mischungsschicht ergibt sich eine zweifache Bodenwindgeschwindigkeit und eine Windrichtungskorrektur um $+10^{\circ}$ für den Transportvektor der Mischungsschicht auf dem Berliner Breitengrad.

$$SPEED = 2 \tag{3.35}$$

$$ROT = 10 \tag{3.36}$$

Sind die Parameter nicht gesetzt, so werden diese Werte als programminterne Standardwerte verwendet.

Darüber hinaus können über das statistische Werkzeug der Standardabweichung (*STDDEVIATION*) Ausreißerstationen aus der Interpolation entfernt werden. Für das Interpolationsgebiet wird ein ungewichteter Mittelwert (\bar{x}) der pro Dimension betrachteten Windvektoren (x_i) gebildet. Mit dem erhaltenen Mittelwert wird die Varianz errechnet. Die Wurzel der Varianz ist die Standardabweichung (s).

$$s = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n}} \tag{3.37}$$

(n: Gesamtanzahl)

Die erhaltene Standardabweichung muss nun noch durch eine Z-Transformation auf eine Standardnormalverteilung projiziert werden.

$$z = \frac{x_i - \bar{x}}{s} \tag{3.38}$$
Für den Betrag von z kann dem Programmparameter *STDDEVIATION* ein Wert zugewiesen werden, der nicht überschritten werden darf. Damit fallen alle Windvektoren aus der Berechnung, die den Betrag dieses Wertes in mindestens einer Dimension überschreiten. Ist der Programmparameter *STDDEVIATION* = 0.0, so bleiben alle Windvektoren im Berechnungsgebiet in der Interpolation berücksichtigt. Der statistische Ausreißertest über die normierte Standardabweichung ist somit ausgeschaltet. Dies entspricht auch den programminternen Einstellungen, falls der Parameter *STDDEVIATION* zum Programmstart nicht gesetzt ist.

Eingabe- und Ausgabedaten (STATION, METEO, OUTPUT)

Die Ausgabedatei wird in das mit dem Parameter *OUTPUT* übergebene Verzeichnis geschrieben. Ist das Verzeichnis nicht vorhanden, so bricht das Programm mit einer Fehlermeldung ab. Der Name der Ausgabedatei wird aus der Startzeit und der Verfolgungsrichtung generiert. Der erste Buchstabe des Ausgabenamens ist ein *B* für eine Rückwärtstrajektorie und ein *F* für eine Vorwärtstrajektorie. Es folgen das Jahr (vierstellig), der Monat (zweistellig), der Tag (zweistellig), ein Unterstrich und die Stunde (zweistellig) der Berechnungsstartzeit. Die Endung der Trajektorienausgabedateien ist immer *.trj.* Eine Rückwärtstrajektorie mit der Startzeit 12 Uhr am 1. Januar 2000 wird somit in der Ausgabedatei *B20000101_12.trj* gespeichert. Eine Vorwärtstrajektorie mit der Startzeit 18 Uhr am 24. November 2006 erhält entsprechend den Namen *F20061124_18.trj.*

Das interne Format der Ausgabedatei besteht aus einem siebenzeiligen Kopf gefolgt von den Trajektorienaufpunkten. Im Kopf sind bis auf die Verzeichnis- und Dateinamenangaben (*STATION*, *METEO* und *OUTPUT*) alle Programmparameter aufgeführt, die zur Berechnung verwendet wurden. Nach den Parameterangaben wird die Anzahl der Trajektorienpunkte aufgeführt. Es folgt die Ausgabe der Trajektorienaufpunkte. Pro Zeile ist ein Trajektorienaufpunkt aufgeführt, wobei der erste Wert der Längengrad und der zweite Wert der Breitengrad der Aufpunktposition ist. Die beiden Werte sind im Bogenmass angegeben und durch ein Semikolon getrennt. Eine Beispieldatei ist im Anhang unter *B20060127_12.trj* enthalten.

Die für die Berechnung benötigten Winddatensätze müssen alle in einem Verzeichnis, dessen Namen über den Parameter *METEO* übergeben wird, enthalten sein. Die Dateien dürfen nicht in Unterverzeichnissen in diesem Verzeichnis liegen.

Der Name der zu verwendenden Stationsinformationsdatei wird mit dem Parameter *STATION* übergeben. Die Angabe beinhaltet also nicht nur das Verzeichnis, in dem die Datei liegt, sondern auch den genauen Dateinamen.

Die Formate der meteorologischen Datensätze und der Stationsinformationsdatei sind in der Arbeit [Fin07] detailliert dargestellt.

3.1.3 Vergleich mit Modellergebnissen des zuvor am FG eingesetzten Programms

Um die Richtigkeit der Berechnungsergebnisse des neuentwickelten Programms abschätzen zu können, sind im Folgenden Trajektorien mit einer dem alten Programm vergleichbaren Berechnungskonfiguration berechnet worden. Die erhaltenen Trajektorien des alten und neuen Programms wurden anschließend grafisch verglichen.

Der Parameter *DATAUNIT* musste entsprechend der Funktionsweise des alten Algorithmus auf den Wert 2 (vgl. Kapitel 3.1.2) gesetzt werden. Für alle weiteren Parameter sind bis auf die verschiedenen Berechnungszeitparameter die Standardwerte verwendet worden.

Tabelle 3.4: Zeitparameter der Trajektorienvergleiche der Abbildungen 3.5, 3.6 und 3.7

| Vergleichsdarstellung | Startzeit |
|-----------------------|-------------------------|
| Abbildung 3.5 links | 24.1.2007, 12 Uhr, MEZ |
| Abbildung 3.5 rechts | 24.2.2007, 12 Uhr, MEZ |
| Abbildung 3.6 links | 24.3.2007, 12 Uhr, MEZ |
| Abbildung 3.6 rechts | 24.4.2007, 12 Uhr, MESZ |
| Abbildung 3.7 | 24.5.2007, 12 Uhr, MESZ |



Abbildung 3.5: Vergleich der mit altem und neuem Algorithmus berechneten Trajektorien (I)



Abbildung 3.6: Vergleich der mit altem und neuem Algorithmus berechneten Trajektorien (II)



Abbildung 3.7: Vergleich der mit altem und neuem Algorithmus berechneten Trajektorien (III)

Die Berechnungen sind mit identischen Eingabedaten (Stationsinformationsdatei und meteorologische Datensätze) durchgeführt worden. Keine der Darstellungen zeigt eine Abweichungen der Trajektorienverläufe. Somit kann ein Bezug von Ergebnissen des neuen Programms auf ältere Berechnungen und Untersuchungen hergestellt werden, wenn die oben genannte Berechnungskonfiguration verwendet wird. Beim Gebrauch von anderen Programmparametern müsste eine entsprechende Abschätzung erst noch durchgeführt werden.

Unter Verwendung äquivalenter Berechnungsparameter sind Berechnungen des alten und des neuen Programms vergleichbar.

3.1.4 Berechnungsbeispiele und Interpretation

Um die Funktionsweise des Programms besser zu verstehen, werden im Folgenden einige Berechnungsbeispiele diskutiert.

Variation der Parameter IPERH und IPERPOINT

In der Abbildung 3.8 ist eine sechsundneunzigstündige Rückwärtstrajektorienberechnung gezeigt, bei der die Anzahl der Iterationen pro Stunde (*IPERH*) und der Iterationen pro Trajektorienaufpunkt (*IPERPOINT*) variiert wurden. Als Startzeitpunkt wurde 12 Uhr am 27. Januar 2006 gewählt. Alle weiteren Parameter entsprechen den Standardwerten.

 Tabelle 3.5:
 Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.8

| | violett | blau | grün | rot |
|--------------------|------------------------------|--------|---------|-----|
| IPERH | 1 | 20 | 20 | 200 |
| IPERPOINT | 20 | 20 | 80 | 20 |
| Startzeit | 27. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ | | | |
| sonstige Parameter | Sta | ndards | verwend | det |



Abbildung 3.8: Verschiedene Werte der Iterationsparameter

Die violette Trajektorie ist sehr grobgliedrig, da nur eine Iteration pro Stunde berechnet und ein Aufpunkt alle 20 Iterationen geplottet wurde. Sie weicht zwischenzeitlich stark von den anderen Berechnungen ab, da der Transportvektor für lange Zeit (1 Stunde) als konstant angenommen wird. Hierbei ist zu beachten, dass die zeitliche Aufpunktdifferenz von *IPERH* und *IPERPOINT* abhängt. Sie beträgt für die violette Trajektorie 20 Stunden.

Die rote Trajektorie bietet mit 200 Iterationen pro Stunde und einem Aufpunkt pro 20 Iterationen (ein Aufpunkt pro 6 Minuten) hier die genaueste zeitliche Auflösung. Jedoch schränkt die zeitliche Auflösung der für die Berechnung verwendeten meteorologischen Datensätze das mögliche Ergebnis ein. Deshalb ist der Verlauf der blauen Trajektorie, die mit weniger Iterationen (20 pro Stunde und 20 pro Aufpunkt)

bzw. geringerer zeitlicher Auflösung (ein Aufpunkt pro Stunde) berechnet wurde, nahezu identisch. Der Rechenaufwand der roten Trajektorie kann also ohne großen Informationsverlust durch die Verringerung von 200 auf 20 Iterationen pro Stunde beschränkt werden.

Für die grüne Trajektorie wurde alle 80 Iterationen (alle 4 Stunden) ein Aufpunkt bei 20 Iterationen pro Stunde geplottet. Man erhält weniger Aufpunkte aus der Berechnung, wodurch die Ausgabedatei kleiner wird. Die Darstellung des Trajektorienverlaufs verschlechtert sich jedoch auch durch das graphische Hervortreten der linearen Interpolation zwischen den einzelnen Aufpunkten. Dies gilt noch sehr viel stärker bei der violetten Trajektorie.

20 Iterationen pro Stunde und Aufpunkt sind f
ür die verwendete meteorologische Datensatzauflösung von drei Stunden und die betrachtete Verfolgungszeit von 96 Stunden gut geeignet.

Variation des Berechnungsstartpunkts, der Verfolgungsdauer und -richtung

Wie in Kapitel 3.1.1 dargestellt, ist der berechnete Verlauf von Rückwärts- und Vorwärtstrajektorie durch die räumliche Wichtung bei der Interpolation nicht identisch. Die jeweilige Abweichung der Verläufe hängt stark von der Homogenität des Windfeldes ab. Daher kann aus der Abweichung des Rückwärtsund Vorwärtstrajektorienverlaufs näherungsweise die Homogenität des Windfeldes abgeschätzt werden. Bei lokalen Inhomogenitäten bzw. dem Vorkommen von "Ausreißerstationen" können anfänglich kleine Verlaufsdifferenzen sehr schnell anwachsen. Es kann jedoch auch passieren, dass sich Abweichungen gegeneinander aufheben oder weit entfernte Inhomogenitäten durch die räumliche Wichtung kaum Einfluss haben und somit nicht im Vergleich der Verläufe sichtbar werden. Darüber hinaus wird jeder Trajektorienverlauf mit zunehmender Verfolgungszeit durch die Summe der Interpolationsfehler fehlerhafter. [Bur89] Bei einer Abweichung von Rückwärts- und Vorwärtstrajektorie kann daher einerseits versucht werden, die Abweichung durch die Verkürzung der Verfolgungszeit zu verringern und andererseits, die "Ausreißerstationen" herauszufiltern (vgl. nächstes Kapitel).

Für die folgenden Abbildungen sind zuerst Rückwärtstrajektorien (rot) berechnet worden. Ab ihrem Endpunkt und ihrer Ankunftszeit wurden daraufhin Vorwärtstrajektorien (grün) berechnet. Außer der Verfolgungsdauer, dem jeweiligen Startpunkt und der Startzeit entsprechen alle Berechnungsparameter den Standardwerten.

| | rot | grün |
|--------------------|------------------------------|------------------------------|
| Startpunkt | 52°19'N 13°15'E | 49°15'N 22°40'E |
| Verfolgungszeit | -96 h | 96 h |
| Startzeit | 27. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ | 23. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | |

Tabelle 3.6: Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.9



Abbildung 3.9: Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (96 h)

In Abbildung 3.9 ist eine deutliche Abweichung der Verläufe von roter Rückwärtstrajektorie (B20060127_12.trj) und grüner Vorwärtstrajektorie (F20060123_12.trj) zu erkennen. Die beiden Verfolgungen laufen ab dem "Kringel" beim Längengrad 0.34 Rad auseinander. An dieser Stelle scheint das Windfeld stark zu variieren. Ab dem Breitengrad 0.32 scheint die Verlaufsdifferenz nochmals stark zuzunehmen. Auffällig ist auch, dass im letzte Drittel der grünen Vorwärtstrajektorie die Trajektoriengeschwindigkeiten stark schwanken (Abstand der Trajektorienaufpunkte).

Verkürzt man die Verfolgungszeit von 96 Stunden (Abbildung 3.9) auf 72 Stunden (Abbildung 3.10), so ist einer deutliche Verbesserung der Übereinstimmung von Rückwärts- und Vorwärtsverfolgung zu erkennen.

| | rot | grün |
|--------------------|------------------------------|------------------------------|
| Startpunkt | 52°19'N 13°15'E | 46°9'N 19°44'E |
| Verfolgungszeit | -72 h | 72 h |
| Startzeit | 27. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ | 24. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | |

Tabelle 3.7: Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.10



Abbildung 3.10: Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (72 h)

Man erkennt gut, dass der "Kringel" selbst nicht die Abweichung in Abbildung 3.9 verursacht hat. Die Ursache der vorherigen Abweichung scheint nordöstlich des "Kringels" gelegen zu haben. Sie hat nun keinen Einfluss mehr, da sich die Trajektorienverläufe durch die Verkürzung im Einflussbereich der Störung kaum mehr unterscheiden. Die grüne Vorwärtstrajektorie weicht nun ab dem Längengrad 0.3 südlich von der roten Rückwärtstrajektorie ab. Verkürzt man die Verfolgungszeit weiter auf 48 Stunden (Abbildung 3.11), so nimmt die Verlaufsdifferenz ab dieser Stelle stark zu.

Tabelle 3.8: Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.11

| | rot | grün |
|--------------------|------------------------------|------------------------------|
| Startpunkt | 52°19'N 13°15'E | 46°31'N 19°29'E |
| Verfolgungszeit | -48 h | 48 h |
| Startzeit | 27. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ | 25. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | |



Abbildung 3.11: Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (48 h)

Der rein verfolgungszeitabhängige Interpolationsfehler ist somit kaum für die Abweichungen verantwortlich. Einzelne "Ausreißerstationen" scheinen einen wesentlich grösseren Einfluss zu haben.

Die grüne Vorwärtstrajektorie weicht nun in Abbildung 3.11 nördlich von der Rückwärtstrajektorie ab. Diese Differenz der Vorwärtstrajektorienverläufe aus Abbildung 3.10 und 3.11 scheinen mindestens zwei stark unterschiedliche (konkurrierende) Windvektoren zu verursachen. Sie heben sich in der Abbildung 3.10 weitgehend auf, so dass sich die Vorwärtstrajektorie der Rückwärtstrajektorie angleicht. In Abbildung 3.11 ist der Einfluss jedoch deutlich sichtbar, was dafür spricht, dass der Ausgleich in Abbildung 3.10 nur von der Position abhängt.

Eine weitere Verkürzung der Verfolgungszeit auf 36 Stunden (Abbildung 3.12) bzw. 30 Stunden (Abbildung 3.13) zeigt eine zunehmende Angleichung der Rückwärts- und Vorwärtstrajektorienverläufe. Hierbei ist die Abweichung von Rückwärts- und Vorwärtstrajektorie durch den Interpolationsfehler noch zu gering, um die Inhomogenitäten sichtbar zu machen.

| | rot | | grün | |
|--------------------|------------------------------|-------|--------------|--------------|
| Abbildung | 3.12 3.13 | | 3.12 | 3.13 |
| Startpunkt | 52°19'N 13°15'E | | 47°56'N | 49°0'N |
| | | | 18°54'E | 17°29'E |
| Verfolgungszeit | -36 h | -30 h | 36h | 30h |
| | | | 26. Januar | 26. Januar |
| Startzeit | 27. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ | | 2006, 0 Uhr, | 2006, 6 Uhr, |
| | | | MEZ | MEZ |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | | | |

Tabelle 3.9: Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.12 und 3.13



Abbildung 3.12: Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (36 h)



Abbildung 3.13: Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (30 h)

Für die starke Positionsabhängigkeit der resultierenden Abweichungen spricht auch die folgende Berechnung für einen geringfügig anderen Startpunkt. Alle Berechnungsparameter, den Startpunkt ausgenommen, entsprechen den Berechnungsparametern der Abbildung 3.9. Die Übereinstimmung der Rückwärtsund der Vorwärtstrajektorie ist schon bei einer sechsundneunzigstündigen Verfolgung erstaunlich gut (Abbildung 3.14).

| | rot | grün |
|--------------------|------------------------------|------------------------------|
| Startpunkt | 52°31'N 13°25'E | 48°27'N 22°29'E |
| Verfolgungszeit | -96 h | 96 h |
| Startzeit | 27. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ | 23. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | |

Tabelle 3.10: Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.14



Abbildung 3.14: Rückwärtstrajektorie mit anschließender Vorwärtstrajektorie vom Endpunkt (96 h)

Die Verschiebung des Startpunkts hat eine Verschiebung des Interpolationsgebiets zur Folge. Die Inhomogenitäten des Windfeldes haben durch ihre Lage nun anscheinend einen angleichenden Effekt auf die Verläufe der Rückwärts- und der Vorwärtstrajektorie. In den Beispielen der Stationsfilterung (Abbildung 3.18) wird der Einfluss der "Ausreißerstationen" auf die Trajektorienverläufe sichtbar. Ein Vergleich von Rückwärts- und Vorwärtstrajektorien analog den Abbildungen 3.9 und 3.14 mit Stationsfilterung ist in Abbildung 3.20 dargestellt.

Im folgenden Beispiel (Abbildung 3.15) ist zu erkennen, wie sich das Programm verhält, wenn keine Daten zur Berechnung mehr gefunden werden (grüne Trajektorie). Zuerst wurde die rote Vorwärtstrajektorie mit sechsundneunzigstündiger Berechnungszeit berechnet. Von ihrem Endpunkt aus wurde eine sechsundneunzigstündige Rückwärtstrajektorienberechnung (grün) gestartet.

| | rot | grün |
|--------------------|------------------------------|------------------------------|
| Startpunkt | 52°31'N 13°25'E | 44°14'N 2°7'W |
| Verfolgungszeit | 96 h | -96 h |
| Startzeit | 27. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ | 31. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | |

Tabelle 3.11: Berechnungsparameter der Trajektorien in Abbildung 3.15



Abbildung 3.15: Vorwärtstrajektorie mit anschließender Rückwärtstrajektorie vom Endpunkt (96 h)

Durch den abweichenden Verlauf gerät die grüne Rückwärtstrajektorie ausser Reichweite zu den zur Interpolation herangezogenen Messstationsdaten. Die Berechnung wird nach 18 Stunden abgebrochen, da kein Windvektor mehr berechnet werden kann. Der Aufpunkt der grüne Rückwärtstrajektorie, der schon ausser Reichweite der Messstationsdaten liegt, liegt nahe an der roten Vorwärtstrajektorie. Somit werden auch für die Berechnung der Vorwärtstrajektorie in diesem Bereich kaum Messstationsdaten mehr vorhanden sein. Der Interpolationsbereich mit dem Radius 200 km (*MAXR*) wurde für den letzten Aufpunkt der grünen Trajektorie in Abbildung 3.16 eingezeichnet. Davon ausgehend ist der letzte vertrauenswürdige Aufpunkt der roten Trajektorie markiert.



Vorwärtsverfolgung mit darauf folgender Rückwärtsverfolgung (96 h)

Abbildung 3.16: Darstellung der Winddateneinzugsgebiete zur Interpolation zweier Trajektorienaufpunkte der Abbildung 3.15

- \implies Eine homogene Messstationsverteilung für das gesamte Interpolationsgebiet (*MAXR*) jedes Berechnungspunkts muss bestehen.
- Inhomogenitäten des Windfeldes ("Ausreißerstationen") können große Fehler bei Trajektorienverläufen verursachen. Durch einen Vergleich von Rückwärts- und Vorwärtstrajektorie können diese teilweise sichtbar gemacht werden. Sowohl eine Stationsfilterung wie auch eine Verringerung der Verfolgungszeit können die Vertrauenswürdigkeit einer Trajektorie erhöhen.

Herausfiltern von Stationen über die Standardabweichung

Das statistische Werkzeug der Standardabweichung kann dazu eingesetzt werden, Stationen, die stark von den im Mittel vorherrschenden Windverhältnissen abweichen, herauszufiltern. Wieviele Stationen herausfallen, hängt von der angegebenen zulässigen Standardabweichung und von der Variabilität des Windfeldes ab.

Im Folgenden werden beispielhaft Rückwärtsverfolgungen mit und ohne Stationsfilterung dargestellt. In der Abbildung 3.17 ist deutlich zu erkennen, dass die Verläufe ohne Stationsfilterung (rot und blau) stark voneinander abweichen. Sie unterscheiden sich in den Berechnungsparametern neben dem Filtermodus nur im Startpunkt (A: 52°31'N 13°25'E, B: 52°19'N 13°15'E). Alle weiteren Parameter entsprechen den Standardwerten. Ihre räumliche Differenz ist eigentlich so gering, dass man kaum einen unterschiedlichen Verlauf erwarten würde, da die Transportvektoren aus einem großräumigen Gebiet (200 km) interpoliert werden. Sie unterscheiden sich jedoch in Abbildung 3.17 stark. Filtert man Stationen mit einer Standardabweichung größer als 3.0 heraus, so gleicht sich der Verlauf sichtlich an (grün und violett).



Abbildung 3.17: Rückwärtstrajektorien von zwei verschiedenen Startpunkten ohne und mit Stationsfilterung ab 3.00 Standardabweichung

Mit einer Stationsfilterung ab Standardabweichungen größer 2.0 (Abbildung 3.18) ist kaum eine Veränderung zu den mit der Standardabweichung 3.0 gefilterten Verläufen der Abbildung 3.17 erkennbar. Dies zeigt, dass die meisten Stationen eine geringere Standardabweichung als 2.0 vom Mittelwert besitzen und die starken Abweichungen durch wenige Stationen mit einer Standardabweichung größer als 3.0 hervorgerufen wurden.



Abbildung 3.18: Rückwärtstrajektorien von zwei verschiedenen Startpunkten ohne und mit Stationsfilterung ab 2.00 Standardabweichung

Eine weitere Verringerung des Standardabweichungsparameters auf 1.0 führt zu einer starken Änderung der Verläufe (Abbildung 3.19: grün und violett). Es werden nun sehr viele Stationen aus der Interpolation herausgenommen. Die Werte, die in der Berechnung bleiben, liegen nun dicht um den jeweiligen Mittelwert gestreut. Ein geringer Unterschied des Mittelwerts aufgrund der unterschiedlichen Berechnungspositionen in A und B führt somit zur Nichtberücksichtigung verschiedener Stationen. Daher führt der Unterschied des Mittelwerts zusammen mit der strikten Stationsfilterung zu den abweichenden Verläufen in Abbildung 3.19 (grün und violett).



Abbildung 3.19: Rückwärtstrajektorien von zwei verschiedenen Startpunkten ohne und mit Stationsfilterung ab 1.00 Standardabweichung

Im Folgenden soll die Idee des Vergleichs von Rückwärts- und Vorwärtstrajektorie wieder aufgegriffen werden. Die Berechnungen der Abbildungen 3.9 und 3.14 sind mit einer Stationsfilterung ab einer Standardabweichung von 2.0 wiederholt worden (Abbildung 3.20).

| | rot | blau | grün | violett |
|--------------------|------------------------------|---------|----------------|----------------|
| Startpunkt | 52°31'N 52°19'N 4 | | 47°57'N | 48°02'N |
| | 13°25'E | 13°15'E | 21°32'E | 22°04'E |
| Verfolgungszeit | -96 h | | 96 h | |
| Startzeit | 27. Januar 2006, 12 Uhr, MEZ | | 23. Januar 200 | 5, 12 Uhr, MEZ |
| Standardabweichung | 2.0 | | | |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | | | |



0.2 0.22 0.24 0.26 0.28 0.3 0.32 0.34 0.36 0.38 0.4 Longitude in Rad

Abbildung 3.20: Rückwärts- und Vorwärtstrajektorienvergleich von zwei verschiedenen Startpunkten mit Stationsfilterung ab 2.00 Standardabweichung

Im Vergleich mit Abbildung 3.9 ist eine deutlich geringere Abweichung der Rückwärts- und Vorwärtstrajektorie durch die Filterung in Abbildung 3.20 (Position B, blau und violett) zu erkennen. Die Abweichung für Position A (rot und grün) hat im Vergleich zur Abbildung 3.14 leicht zugenommen. Durch die Stationsfilterung nimmt die rote Rückwärtstrajektorie einen geringfügig anderen Verlauf (vgl. Abbildung 3.18) als ohne den Filter. Dies führt zu den unterschiedlichen Verläufen und damit zu der anderen Verlaufsabweichung. Eine Verringerung der Verlaufsabweichungen von Rückwärts- und Vorwärtstrajektorie durch die Stationsfilterung ist jedoch erkennbar.

Die Verwendung einer Standardabweichung von 2 bis 3 ist geeignet, um einzelne kleinräumig auftretende Windsituationen herauszufiltern.

3.2 Trajektoriendichteberechnungsmodell

Der Quelltext des Trajektoriendichteberechnungsprogramm ist im Anhang unter frequency.c enthalten.

3.2.1 Theoretische Ansätze

Aufbauend auf den berechneten Trajektorien können nun mehrere Trajektorienverläufe (z.B. von grenzwertüberschreitenden Ereignissen) zusammen in einer Auftrittshäufigkeitsverteilung pro Region abgebildet werden. Diese Häufigkeitsverteilung oder Trajektoriendichte kann Aufschluss darüber geben, wie häufig die transportierten Luftmassen bestimmte Areale zu den betrachteten Belastungssituationen überstrichen haben. Unter Berücksichtigung aller anderen belastungssteuernden Faktoren (Emissionsaktivität, meteorologische Faktoren, etc.) könnten Regionen, die zur Hintergrundbelastung am Rezeptor durch Ferntransport beitragen, hierüber identifiziert werden.

Um die Trajektoriendichten abzubilden wird ein Berechnungsnetz gleichgroßer Netzelemente generiert. Die Größe der Netzelemente kann beim Programmstart festgelegt werden. Die Trajektoriendichte ist die Anzahl verschiedener Trajektorien, die ein Netzelement durchlaufen. Sie kann ungewichtet als absolute Auftrittshäufigkeit und gewichtet erhoben werden. Eine Trajektorie erhöht die Dichte eines Netzelements nur einmalig, auch wenn sie in ihrem Verlauf mehrmals über das gleiche Netzelement läuft (Abbildung 3.21). Zwischen zwei Trajektorienaufpunkten (blaue Punkte) einer Trajektorie wird ihr Verlauf linear interpoliert (rote Linie) und mit der so erhaltenen Geradengleichung der Verlauf durch die dazwischenliegenden Netzelemente dargestellt. Generell muss bei einem Vergleich von verschiedenen Trajektorienut und der Wichtungsmodus der Berechnungen identisch sind.



Abbildung 3.21: Schematische Darstellung einer Trajektorienverlaufsprojektion auf das Berechnungsnetz

Da die Trajektorien einer Darstellung meist alle den selben Startpunkt besitzen, führen die geometrischen Randbedingungen zu hohen Werten nahe des Startpunkts. Je geringer die Entfernung zum Startpunkt ist, desto kleiner ist die Kreisfläche um den Startpunkt, auf die sich die Trajektorien verteilen können. Damit fallen sie durch die räumliche Einschränkung öfter in den gleichen Netzelementen zusammen. Entfernt man sich vom Startpunkt, so vergrößert sich die Fläche, auf die sich die Trajektorien verteilen können. Die Wahrscheinlichkeit, dass zwei Trajektorien im gleichen Netzelement zusammentreffen, nimmt bei einer Gleichverteilung der Trajektorien in alle Windrichtungen (Abbildung 3.22 links) mit dem Abstand um den Faktor 1/r ab. [IES⁺92].

Um die Häufigkeit, die auf die geometrischen Randbedingungen zurückzuführen ist, herauszurechnen, müsste mit dem Abstand zum Startpunkt gewichtet werden. Sind die Trajektorien jedoch nicht stark gestreut, sonder verlaufen annähernd parallel (Abbildung 3.22 rechts), so würde eine Wichtung mit dem

direkten Abstand zum Startpunkt zu einer Überbewertung der entfernteren Regionen führen, obwohl sich die Trajektoriendichte nicht ändert. Da eine reale Trajektorienverteilung zwischen den Fällen der Gleichverteilung in alle Windrichtungen und der Parallelität liegt, ist eine Wichtung mit der Wurzel des Abstands nach [IES⁺92] gut geeignet.



Abbildung 3.22: Gleichmäßig verteilte und quasiparallele Trajektorienverläufe mit gleichem Startpunkt

Die erhaltene Häufigkeitsverteilung wird im Format einer KML-Datei ausgegeben, die sich in der Google Earth-Umgebung darstellen läßt. Die unterschiedlichen Dichten sind nach ihren Werten in der KML-Datei farbig klassiert. Ihre räumliche Verteilung wird durch verschiedenfarbige Flächen auf einer Karte abgebildet. Die gewählte Struktur der erzeugten KML-Datei bietet im nachhinein die Möglichkeit, bestimmte Häufigkeitsklassen oder Elemente der Trajektoriendichtedarstellung in der Google Earth-Umgebung ausund einzublenden und sich die für die Berechnung verwendeten Trajektorien zusätzlich anzeigen zu lassen. Sie beinhaltet außerdem alle Informationen über die zur Berechung verwendeten Parameterwerte. Die erzeugte KML-Datei hält sich an das Format der KML-Version 2.1.

Google Earth ist eine Software, die mit Luft- und Satellitenbildern einen virtuellen Globus darstellt. Da der Zeitpunkt und die Auflösung der verwendeten Bilder variiert, kann dies eine genaue Quellzuordnung erschweren. Eine Unschärfe in der räumlichen Quellzuordnung wird hierbei jedoch eher auf die zugrundeliegenden zweidimensionalen Trajektorienrechnungen als auf die verwendeten Bilder zurückzuführen sein. [Pes07]

3.2.2 Bedienung des Programms

Dem Programm müssen Eingabedatensätze und Startparameter übergeben werden. Als Eingabedaten werden die zuvor berechneten Trajektoriendateien, die in der Trajektoriendichteberechnung berücksichtigt werden sollen, benötigt. Das Format der Trajektoriendateien wird in Kapitel 3.1.2 genauer beschrie-

ben. Der Name des Verzeichnisses, das die Eingabedatensätze enthält, sowie alle weiteren erforderlichen Programmparameter werden dem Programm durch Umgebungsvariablen als Startparameter übergeben. Ist ein Parameter bzw. eine Umgebungsvariable nicht gesetzt, so wird ein programminterner Standardwert verwendet. Die Umgebungsvariablen und ihre Standardwerte sind im Folgenden aufgeführt.

| Variablenname | Standardwert | Wertebereich | Erklärung | |
|---------------|--------------|----------------|---|--|
| FILENAME | freq.kml | | Name der Ausgabedatei | |
| INPUTDIR | traj/ | | Verzeichnis der Trajektoriendateien | |
| RES | 25 | > 0 | Seitenlänge der Berechnungsnetzele- mente in km | |
| SCALEMIN | 0 | 0 - 100 | Untergrenze des Plotwertebereichs in % vom Maximalwert | |
| SCALEMAX | 100 | 0 - 100 | Obergrenze des Plotwertebereichs in % vom Maximalwert | |
| OPACITY | 88 | 00 – FF | Transparenz der farbigen Netzelemente als Hexadezimalwert | |
| OFFLO | 0.0 | 180.0 - 180.0 | Offset des Berechnungsnetzlängengrads zur Google Earth-Karte in Grad | |
| OFFLA | 0.0 | -90.0 - 90.0 | Offset des Berechnungsnetzbreitengrads zur Google Earth-Karte in Grad | |
| COLOR | 0 | 0 - 10 | Farbmodus des Plots (0: mehrfarbig, 1 – 10: einfarbig) | |
| WEIGHT | 0 | 0 – 2 | Wichtungsmodus (0: keine, 1: mit Start- punktabstand, 2: mit Wurzel des Start- punktabstands) | |
| SIZE | 0 | ≥ 0 | Größe des Plottausschnittes als Anzahl der Netzelemente pro Seite (0: gesamtes Netz) | |
| MIDLO | 13.4167 | -180.0 - 180.0 | Längengrad des Plottbereichmittel- punktes in Grad | |
| MIDLA | 52.5167 | -90.0 - 90.00 | Breitengrad des Plottbereichmittel- punktes in Grad | |

 Tabelle 3.13: Umgebungsvariablen bzw. Startparameter des Trajektoriendichteberechnungsprogramms

Im Anhang ist ein Shell-Skript *frequency.sh* und eine Stapelverarbeitungsdatei *frequency.bat* als Beispiel für einen Programmaufruf enthalten.

Ausgabedatei (FILENAME)

Der Name der Ausgabedatei (*FILENAME*) ist frei wählbar. Er sollte jedoch immer auf *.kml* enden, damit die Google Earth-Umgebung die Datei auch problemlos importieren kann. Ist die Umgebungsvariable *FILENAME* beim Programmstart nicht gesetzt, so wird der Name *freq.kml* für die Ausgabedatei verwendet.

Das Format der Ausgabedatei entspricht der KML-Version 2.1. Sie ist in zwei Hauptteile gegliedert. Der erste Teil beinhaltet die zur Berechnung verwendeten Trajektorienverläufe. Diese sind als ausgeblendet deklariert und beim Öffnen der KML-Datei in der Google Earth-Umgebung zuerst nicht auf der Karte sichtbar. Der zweite Teil beinhaltet die Trajektoriendichteverteilung. Die Netzelemente sind nach Wertigkeit in Unterstrukturen als farbige Klassen zusammengefasst. Die Farbigkeit und Transparenz jeder Klasse ist zu Beginn der KML-Datei definiert. Darüberhinaus sind den jeweiligen Strukturen Informationen über ihren Inhalt beigefügt, die in der Google Earth-Umgebung direkt einzusehen sind. Eine Beispieldatei ist im Anhang unter *freq.kml* enthalten.

Eingabedaten (INPUTDIR)

Es muss ein Eingabedatenverzechnis (*INPUTDIR*) angegeben werden, in dem sich die Trajektoriendateien befinden, die zur Berechnung der Trajektoriendichten herangezogen werden sollen. Das Verzeichnis darf nur Dateien enthalten, die dem Format der Ausgabedateien des Trajektorienberechnungsprogramms (vgl. Kapitel 3.1.2) entsprechen. Außerdem dürfen keine Unterverzeichnisse in diesem Verzeichnis bestehen. Ist die Umgebungsvariable *INPUTDIR* zum Programmstart nicht gesetzt, so wird der Verzeichnisname *traj*/ als Eingabedatenverzeichnis angenommen.

Berechnungsparameter (RES, WEIGHT)

Der Trajektoriendichteberechnung ist ein Berechnungsnetz zugrunde gelegt. Die Größe der Netzelemente dieses Berechnungsnetzes kann über die Umgebungsvariable *RES* festgelegt werden. Die Größe eines Netzelements wird als Seitenlänge in km angegeben. Ein Berechnungsnetz mit 25x25 km Elementen wird somit durch die Anweisung

$$RES = 25 \tag{3.39}$$

festgelegt. Dies ist auch der programminterne Standardwert, der verwendet wird, wenn die Umgebungsvariable *RES* nicht gesetzt ist.

Darüber hinaus kann die Wertigkeit eines Trajektorienvorkommens pro Netzelement mit dem Abstand

zum Trajektorienstartpunkt gewichtet werden. Die absolute Häufigkeit pro Netzelement nimmt zum Startpunkt der Trajektorien zu, wenn sie alle den selben Startpunkt besitzen. Daher kann mit dem Abstand zum Startpunkt (WEIGHT=1) oder mit der Wurzel des Abstands zum Startpunkt (WEIGHT=2) gewichtet werden. Wird die Umgebungs WEIGHT=0 gesetzt oder beim Programmstart kein Wert zugewiesen, so wird die Trajektoriendichte ungewichtet als absolute Häufigkeit gemessen. Trajektoriendichten sind nur innerhalb eines Plotts verläßlich miteinander vergleichbar. Die Dichten verschiedener Plotts können höchstens qualitativ jedoch nicht absolut miteinander vergleichen werden.

Plotparameter (SCALEMIN, SCALEMAX, OPACITY, OFFLO, OFFLA, COLOR, SIZE, MIDLO, MIDLA)

Die Trajektoriendichten werden in 10 Klassen eingeteilt. Die Unter- und Obergrenze der Klassifizierung kann über die Umgebungsvariablen *SCALEMIN* und *SCALEMAX* angegeben werden. Die Werte werden als Prozent der in der Berechnung auftretenden maximalen Trajektoriendichte angegeben. Die Werte müssen positiv sein und *SCALEMIN* darf nicht gleich oder größer als *SCALEMAX* und *SCALEMAX* nicht kleiner oder gleich *SCALEMIN* sein. Über das Setzen der Ober- und Untergrenze können interessante Bereiche im Plot herausgearbeitet werden. Ist beispielsweise die Anzahl an Trajektoriendichten kleiner 60 % und größer 70 % des Maximalwertes sehr gering, so kann man über das Setzen der Ober- und Untergrenze auf

$$SCALEMIN = 60$$
 (3.40)

$$SCALEMAX = 70$$
 (3.41)

die Werte <60 % des Maximalwertes ausblenden und die Werte >70 % der obersten Klasse zuweisen. Will man den gesamten Wertebereich darstellen, so sind die Grenzen auf

$$SCALEMIN = 0$$
 (3.42)

$$SCALEMAX = 100$$
 (3.43)

zu setzen, was auch den Standardwerten entspricht, falls die Umgebungsvariablen zum Programmstart nicht gesetzt sind.

Über die Umgebungsvariable *COLOR* kann die Farbgebung der Klassifizierungsdarstellung als einfarbig oder mehrfarbig angegeben werden. Die einfarbige Darstellung ist dazu gedacht, um in der Google Earth-Umgebung mehrere KML-Dateien gleichzeitig anzeigen und unterscheiden zu können. Die einzelnen Klassen erhalten für Werte *COLOR* > 0 die selbe Farbe und können untereinander damit nicht mehr farblich unterschieden werden. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick der Werte und der damit verbundenen Farbgebung.

| Wert | Farbgebung |
|------|--|
| 0 | mehrfarbig (Klassen werden aufsteigend entsprechend 1 bis 10 eingefärbt) |
| 1 | einfarbig dunkelblau |
| 2 | einfarbig blau |
| 3 | einfarbig hellblau |
| 4 | einfarbig türkis |
| 5 | einfarbig grün |
| 6 | einfarbig hellgrün |
| 7 | einfarbig gelb |
| 8 | einfarbig orange |
| 9 | einfarbig rot |
| 10 | einfarbig pink |

 Tabelle 3.14:
 Werte der Umgebungsvariable COLOR

Wird die Umgebungsvariable *COLOR* nicht gesetzt, so wird der programminterne Wert 0 (mehrfarbige Darstellung) verwendet.

Die Umgebungsvariable *OPACITY* gibt die Transparenz der farbigen Netzelemente über der Google Earth-Karte an. Der Wert wird als Hexadezimalwert angegeben und kann Werte von 00 (durchsichtig) bis ff (massiv) annehmen. Als programminterner Standardwert ist *OPACITY* = 88 eingestellt, was einer halbtransparenten Darstellung entspricht.

Wenn ein Versatz zwischen Koordinaten der Google Earth-Karte und dem Berechnungskoordinatensystem besteht, kann dieser mit den Umgebungsvariablen *OFFLO* und *OFFLA* angegeben werden. Der Versatz wird beim Erzeugen der KML-Datei berücksichtigt und die erhaltene Projektion wird korrekt auf der Google Earth-Karte dargestellt. Der Versatz wird als Längen- und Breitengradversatz in Grad angegeben. Wird kein Versatz angegeben, so wird die programminterne Standardeinstellung von *OFFLO* = 0.0 und *OFFLA* = 0.0 verwendet.

Über die Umgebungsvariablen *SIZE*, *MIDLO* und *MIDLA* kann der Bereich des Berechnungsgebiets definiert werden, der in die KML-Datei geplottet wird. Somit können interessante Teilbereiche ohne die weniger interessanten Randbereiche betrachtet werden. Die Skalierung der Klassen bezieht sich nur auf den angegebenen Teilbereich. Damit ist eine genauere farbliche Auflösung des Teilbereichs möglich. Die

Größe des Plotbereichs wird als Seitenlänge in Netzelementen angegeben. Die Anzahl *SIZE* darf die Anzahl an Netzelementen pro Seite des gesamten Berechnungsnetzes nicht überschreiten. Weiterhin wird der Mittelpunkt des Plottbereichs durch die Umgebungsvariablen *MIDLO* und *MIDLA* in Grad angegeben. Dieser Punkt muss innerhalb des Berechnungsnetzes liegen. Ragt der Plotbereich an einer Stelle über das Berechnungsnetz hinaus, so wird an dieser Stelle der Plot abgeschnitten. Will man beispielsweise ein Plot von 10x10 Elementen im Bereich Berlin erzeugen, so werden die Umgebungsvariablen auf

$$SIZE = 10 \tag{3.44}$$

$$MIDLO = 13.4167$$
 (3.45)

$$MIDLA = 52.5167$$
 (3.46)

gesetzt. Die absolute Größe des Plotbereich hängt von der Größe der Netzelemente (*RES*) ab. Wird der Anzahl an Netzelementen pro Seite der Wert 0 zugewiesen, so wird das gesamte Berechnungsnetz dargestellt und *MIDLO* sowie *MIDLA* ignoriert. Wenn die Umgebungsvariablen nicht zum Programmstart gesetzt sind, werden die programminternen Standardwerte

$$SIZE = 0 \tag{3.47}$$

$$MIDLO = 13.4167$$
 (3.48)

$$MIDLA = 52.5167$$
 (3.49)

verwendet.

Google Earth-Umgebung

Um die berechnete Trajektoriendichtedarstellung anzeigen zu können, muss die frei verfügbare Software Google Earth installiert sein und ein Zugang zum Internet bestehen. Nachdem die Google Earth-Umgebung gestartet wurde, wird über den Menupunkt *Datei->Öffnen* die gewünschte Trajektoriendichtedatei geladen. Hierbei muss die Trajektoriendichtedatei die Endung *.kml* besitzten und dem KML-Format (Keyhole Markup Language) entsprechen.

Die geladene KML-Datei enthält verschiedene Ordner- und Informationsstrukturen des darzustellenden Trajektoriendichtebildes. Sie sind über das am linken Rand befindliche Fenster Orte zugänglich.



Abbildung 3.23: Hauptordner in der KML-Datei

Der Name der KML-Datei ist in blauer Schrift gehalten und unterstrichen. Durch Auswählen des Namens mit der linken Maustaste öffnet sich ein Informationsfenster, in dem der Dateiname, die Maschengröße des Berechnungsnetzes und die Wichtungsoption aufgeführt sind, die zur Berechnung verwendet wurden.

| freq.kml | |
|--------------|-----------------------|
| Trajektorien | dichte/ Resolution: |
| 25x25 km/V | Vichtung ueber Wurzel |
| des Abstan | des zum Startpunkt |

Abbildung 3.24: Informationsfenster der KML-Datei

Öffnet man den in Abbilding 3.23 dargestellten Hauptordner, so gelangt man zu den Unterordnern *Trajektorien und Trajektoriendichte*.



Abbildung 3.25: Unterordner der KML-Datei

In Abbildung 3.25 ist rechts neben dem Astansatz des jeweiligen Ordners ein Rechteck zu erkennen, das leer ist oder einen Punkt oder Haken enthält. Dies sind die drei Zustände der Sichtbarkeit, wobei ein leeres Rechteck nicht sichtbar, ein Punkt teilweise sichtbar und ein Haken vollständig sichtbar bedeutet. Diese Angabe bezieht sich immer auf den Inhalt des jeweiligen Ordners. Die Gesamtstruktur *freq.kml* ist also teilweise sichtbar, da die enthaltene Elemente der Unterstruktur *Trajektorien* alle unsichtbar und die der Unterstruktur *Trajektoriendichte* alle sichtbar sind. Durch Klicken in das rechteckige Kästchen kann der Sichtbarkeitsmodus zwischen vollständig sichtbar und unsichtbar geändert werden.

Der Unterordner *Trajektorien* enthält die Namen und Verläufe aller zur Berechnung der Trajektoriendichte verwendeten Trajektorien. Ihre Darstellung wird beim Laden der KML-Datei unterdrückt, kann aber manuell aktiviert werden.

Der Unterordner *Trajektoriendichte* ist unterstrichen und in blauer Schrift gehalten, da sich durch das Auswählen des Ordnernamens mit der linken Maustaste ein Informationsfenster wie zuvor beschrieben öffnen lässt.



Abbildung 3.26: Infofenster der Trajektoriendichtedarstellung

Dieses Informationsfenster enthält Informationen zum absoluten Höchstwert innerhalb des gesamten Berechnungsgebiets, über die Ober- und Untergrenze der Farbskala (zehn äquidistante Klassen zwischen Skalenminimum und -maximum) und über den Mittelpunkt und die Größe des geplotteten Bereichs. Hierbei steht die Angabe *0x0 Elemente* für das Plotten des gesamtes Berechnungsgebiets. Öffnet man den Unterordner *Trajektoriendichte*, dann erscheinen nach ihren Dichten in zehn Klassen eingeteilte Berechnungsnetzelemente.



Abbildung 3.27: Unterordner des Trajektoriendichte-Ordners

Auch hier lassen sich die Elemente einzeln ein- und ausblenden. Durch die Einstellungen, die in der Abbildung 3.27 dargestellt sind, werden somit nur Netzelemente mit einer Trajektoriendichte ab 70 % der Maximal-Trajektoriendichte eingeblendet.

3.2.3 Berechnungsbeispiele und Interpretation

Für die folgenden Beispiele werden 12 Trajektorien als Datenbasis der Trajektoriendichteberechnungen verwendet. Ihre Startzeitpunkte folgen vom 27.1.2006, 12 Uhr, MEZ bis zum 28.1.2006, 0 Uhr, MEZ stündlich aufeinander. Bis auf die Startzeiten sind die in Kapitel 3.1.2 beschriebenen programminternen Standardwerte zur Trajektorienberechnung verwendet worden.

Variation des Parameters WEIGHT

In den Abbildungen 3.28, 3.29 und 3.30 ist der Einflus des Wichtungsfaktors *WEIGHT* auf die Trajektoriendichtedarstellung gezeigt. Für jede Wichtungsart ist die Dichtedarstellung einer einzelnen Trajektorie und einer Trajektorienschar abgebildet. Die zur Berechnung verwendeten Trajektorien wurden zusätzlich in die Plots eingeblendet (vgl. Kapitel 3.2.2), um die Funktionsweise der Wichtung besser zu verstehen. Für Abbildung 3.28 sind folgende Parameter verwendet worden.

| Tabelle 3.15: | Berechnungsparameter | der 🛛 | Trajektoriendichten | in | Abbildung | 3.28 |
|---------------|----------------------|-------|----------------------------|----|-----------|------|
|---------------|----------------------|-------|----------------------------|----|-----------|------|

| | Einzeltrajektorie | Trajektorienschar | |
|--------------------|--------------------------------|-----------------------|--|
| Inputdaten | 27 1 2006 12 Ubr MEZ | 27.1.2006, 12 Uhr bis | |
| | 27.1.2000, 12 OHI, MLZ | 28.1.2006, 0 Uhr, MEZ | |
| Wichtung | absolute Häufigkeit (Standard) | | |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | | |



Abbildung 3.28: Trajektoriendichte als absolute Häufigkeit (Einzel- und Mehrfachtrajektoriendarstellung)

Die Abbildung 3.28 zeigt die sich ergebende Dichtedarstellung bei absoluter Häufigkeitsverteilung. Aus der Darstellung der Einzeltrajektorie ist deutlich zu erkennen, dass alle Netzelemente pro Trajektoriendurchlauf den gleichen Wert erhalten. In der Dichtedarstellung der Trajektorienschar erkennt man, dass die Netzelemente je nach Anzahl der sie durchlaufenden Trajektorien in zehn farbige Klassen eingeteilt sind (vgl. Kapitel 3.2.2). Die Klassen reichen von 0 bis 100 % des Maximalwertes im Berechnungsgebiet, wobei die Klasse 0 bis 10 % farblos ist. Daher gibt es Bereiche, in denen eine Trajektorie verläuft, jedoch die Dichte unterhalb der 10 % liegt und damit nicht in der Farbdarstellung auftaucht. Es fällt weiterhin auf, dass die Klasse 10 (100 %) nicht in der Darstellung auftaucht. Dies ist auf Rundungsfehler bei der Erstellung der Klassengrenzen zurückzuführen, wodurch der Maximalwert leicht unterhalb der Klasse

10 auch abgebildet ist.

Sehr nah am Startpunkt sind die Trajektorien noch dicht geschart, wodurch hohe Trajektoriendichten enstehen. Daher ist die Vergleichbarkeit von startpunktnahen und startpunktfernen Feldern nur eingeschränkt möglich. Die ringförmige Fläche um den Startpunkt, auf die sich die Trajektorien verteilen können, ist bei geringen Abständen aufgrund der Kreisgeometrie schlichtweg geringer, was zu den hohen Werten führt.

Eine Wichtung mit dem Abstand zum Startpunkt ist in Abbildung 3.30 gezeigt.

Tabelle 3.16: Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.29

| | Einzeltrajektorie | Trajektorienschar | |
|--------------------|---------------------------|-----------------------|--|
| Inputdaten | 27 1 2006 12 Ubr MEZ | 27.1.2006, 12 Uhr bis | |
| | 27.1.2000, 12 OHI, MLZ | 28.1.2006, 0 Uhr, MEZ | |
| Wichtung | mit dem Startpunktabstand | | |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | | |



Abbildung 3.29: Trajektoriendichte gewichtet mit dem Startpunktabstand (Einzel- und Mehrfachtrajektoriendarstellung)

Die Einzeltrajektoriendarstellung zeigt nun gut, wie sich die Wichtung über den Abstand zum Startpunkt verhält. In der Mehrfachtrajektoriendarstellung ist zu erkennen, dass die Flächen nahe des Startpunktes nun nicht mehr überbewertet sind. Der Einfluß des Wichtungsfaktors ist jedoch sehr groß für Elemente, die weit vom Startpunkt entfernt sind. Dies kann zu einer Überbewertung weit entfernter Netzelemente führen.

Die Abbildung 3.30 zeigt eine Wichtung mit der Wurzel des Abstands zum Startpunkt. Diese Wichtung berücksichtigt, dass die Trajektorien meist eine Verteilung aufweisen, die zwischen einer gleichmäßigen

Verteilung in alle Windrichtungen (Abbildung 3.22 links) und einer Quasiparallelität (Abbildung 3.22 rechts) liegt.

| | Einzeltrajektorie | Trajektorienschar | |
|--------------------|---------------------------------------|-----------------------|--|
| Inputdaten | 27.1.2006, 12 Uhr, MEZ | 27.1.2006, 12 Uhr bis | |
| | | 28.1.2006, 0 Uhr, MEZ | |
| Wichtung | mit der Wurzel des Startpunktabstands | | |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | | |

Tabelle 3.17: Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.30



Abbildung 3.30: Trajektoriendichte gewichtet mit der Wurzel des Startpunktabstands (Einzel- und Mehrfachtrajektoriendarstellung)

In der Mehrfachtrajektoriendarstellung der Abbildung 3.30 ist zu erkennen, dass die Elemente nahe des Startpunktes nicht mehr überbewertet sind. Je weiter sich die Trajektorien vom Startpunkt entfernen, desto größer ist theoretisch die Ringfläche, auf die sich die Trajektorien verteilen könnten und ein Zusammentreffen wird stärker gewichtet. Wie oben bereits beschrieben ist die Wichtung mit der Wurzel des Startpunktabstands hier sehr gut geeignet.

Es lassen sich vier Maxima entlang des Trajektorienscharverlaufs erkennen. Sie treten immer dort auf, wo die Trajektorien sehr dicht zusammen kommen. Die größten Maxima sind durch die Wichtung hierbei am weitesten vom Startpunkt entfernt, da hier die Wahrscheinlichkeit eines Zusammentreffens der Trajektorien in einem Netzelement immer unwahrscheinlicher wird und damit eine identische Häufigkeit an Gewicht gewinnt.

Die Darstellungen der Einzeltrajektorien der Abbildungen 3.28, 3.29 und 3.30 sollen hier nur als Referenz dienen, da das Wichtungsverhalten alleine aus der Mehrfachtrajektoriendarstellung schwer zu interpretie-

ren ist. Eine Wichtung bzw. überhaupt die Berechnung einer Trajektoriendichte für eine Einzeltrajektorie ist darüber hinaus kaum von Nutzen.

⇒ Für die gewichtete Darstellung von Trajektoriendichten aus Trajektorien mit gleichem Startpunkt ist die Wichtung mit der Wurzel des Startpunktabstands gut geeignet.

Variation des Parameters RES

Über den Parameter *RES* läßt sich die Größe der Maschen des Berechnungsnetzes steuern. Je größer ein solches Element wird, desto größer ist auch die Wahrscheinlichkeit, dass mehrere Trajektorien hindurchlaufen. Sind die Maschen sehr klein, so treffen immer weniger Trajektorien in ihnen zusammen. Bei hinreichend kleinen Maschen erkennt man lediglich den Verlauf jeder einzelnen Trajektorie und ihre direkten Schnittpunkte, man erhält jedoch kaum mehr Informationen über eine regionale Dichteverteilung. Die Trajektorien selbst sind durch die vereinfachenden Modellannahmen und die Interpolationen während ihrer Berechnung eher als Bewegungslinien von größräumigen Mischungsschichtelementen anzusehen. Eine sehr hohe Auflösung zur Dichteberechnung ist auch aus diesem Grund fragwürdig. In der Abbildung 3.31 sind zur Veranschaulichung drei Dichtedarstellungen mit unterschiedlichen Maschenweiten des Berechnungsnetzes gezeigt.

| Tabelle 3.18: | Berechnungsparameter | der Trajektoriendichten | in Abbildung 3. | 31 |
|---------------|----------------------|-------------------------|-----------------|----|
|---------------|----------------------|-------------------------|-----------------|----|

| | Abbildung links | Abbildung mitte | Abbildung rechts |
|--------------------|---|-----------------------|------------------|
| Netzelementgröße | 5 x 5 km | 25 x 25 km (Standard) | 125 x 125 km |
| Inputdaten | 27.1.2006, 12 Uhr bis 28.1.2006, 0 Uhr, MEZ | | |
| Wichtung | mit der Wurzel des Startpunktabstands | | |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | | |



Abbildung 3.31: Verschiedene Netzelementgrößen (5, 25 und 125 km)

Man erkennt, dass durch die hohe Auflösung der linken Abbildung eine abschätzende Aussage über die regionale Dichteverteilung sehr schwierig ist. Für ein kleineres Berechungsgebiet bzw. kürzere Trajektorien kann ein Berechnungsnetz mit einer Maschenweite von 5×5 km durchaus sinnvoll sein. Bei dem vorliegenden Berechnugsgebiet mit einer Ausdehnung von ca. 800 x 800 km ist diese Maschenweite jedoch zu klein.

Die rechte Abbildung ist mit einem Berechnungsnetz der Maschenweite 125 x 125 km erstellt worden. Die Netzelemente sind so groß, dass nur noch ein Maximum erkennbar und eine regionale Differenzierung nur schwer möglich ist. Die Flächengröße würde die Identifikation von einzelnen Emittenten kaum mehr zulassen.

Die Maschenweite in der mittleren Abbildung beträgt 25 x 25 km. Für Berechnungsgebietgrößen, wie sie beim regionalen Ferntransport von Schwebstaub auftreten, ist sie gut geeignet. In Arbeiten von [Bur89, IES⁺92, She92] sind ähnliche Größen verwendet worden. Die farbliche Darstellung der Trajektoriendichte bei dieser Maschengröße lässt die Maxima gut erkennen. Die überstrichenen Areale sind genauer zu bestimmen, da sich farbliche Abstufungen um die Maxima ergeben.

⇒ Eine Maschenweite von 25 x 25 km ist f
ür Berechnungsnetze mit einer Ausdehnung von ca. 1000 x 1000 km gut geeignet.

Variation der Parameter SCALEMIN und SCALEMAX

Um die unterschiedlichen Dichtewerte der Netzelemente graphisch darstellen zu können, werden zehn farbige Klassen verwendet (vgl. Tabelle 3.14). Das Minimum und das Maximum der Klasseneinteilung kann über die Parameter *SCALEMIN* und *SCALEMAX* gesteuert werden. Diese Schranken werden als Prozent des Maximaldichtewertes angegeben. Es wird nur der Wertebereichs, der von *SCALEMIN* und *SCALEMAX* eingeschlossen ist, in zehn Klassen eingeteilt. Daher werden alle Werte, die kleiner als *SCALEMIN* sind, der untersten farblosen Klasse 0 und alle Werte, die größer als *SCALEMAX* sind, der höchsten Klasse 10 zugeordnet.

Durch das Beschränken der Klassifizierung auf einen Teil des gesamten Wertebereichs wird dieser Teilbereich farblich genauer aufgelöst. Desweiteren kann durch das Setzen der Ober- bzw. Untergrenze der Wertebereich gedeckelt werden. Beispielsweise könnten nur Bereiche, die oberhalb der 60 % des Maximalwertes liegen, von Interesse seien. Alles was darunter liegt fällt durch das Setzen der Untergrenze *SCALEMIN* auf 60 % aus der Darstellung heraus und der interessante Bereich oberhalb dieser Grenze wird genauer aufgelöst.

Die Abbildung 3.32 zeigt verschiedene Beispiele, in denen die Ober- und Untergrenzen bei gleichbleibender Datenbasis verändert wurden. Als Vergleich kann die mittlere Darstellung in Abbildung 3.31 dienen.

| | Abbildung links | Abbildung mitte | Abbildung rechts |
|--------------------|---|-----------------|------------------|
| Skalenminimum | 0 % | 60 % | 0 % |
| Skalenmaximum | 30 % | 100 % | 100 % |
| sichtbare Elemente | alle | alle | Klassen 6 - 10 |
| Inputdaten | 27.1.2006, 12 Uhr bis 28.1.2006, 0 Uhr, MEZ | | |
| Wichtung | mit der Wurzel des Startpunktabstands | | |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | | |

 Tabelle 3.19:
 Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.32



Abbildung 3.32: Trajektoriendichten mit unterschiedlichen Skalengrenzen (\geq 20 % und < 30 %, \geq 60 %, 0 – 100 % mit abgewählten Klassen)

In der linken Darstellung ist der Wertebereich zwischen 20 und 30 % des Maximalwertes dargestellt. Alle Werte unterhalb von 20 % sind nicht farblich dargestellt. Die Werte größer als 30 % sind in der Klasse 10 (pink) zusammengefasst. Eine solche Darstellung würde gewählt werden, wenn der Dichtebereich zwischen 20 und 30 % von besonderem Interesse ist.

In der mittleren Darstellung ist die Untergrenze auf 60 % angehoben. Der Klassierungsbereich reicht bis zum Maximaldichtewert. Diese Einstellung würde gewählt werden, wenn wie oben beschrieben die Dichten unterhalb der 60%-Grenze nicht interessieren.

Analog zu den Grenzeinstellungen des Klassierungswertebereichs durch die Parameter *SCALEMIN* und *SCALEMAX* können auch in der Google Earth-Umgebung Elemente direkt ausgeblendet werden. Für die rechte Darstellung in Abbildung 3.32 sind alle Netzelemente unterhalb von 60 % manuell ausgeblendet worden (vgl. mittlere Darstellung in Abbildung 3.31). Die Abbildung 3.33 zeigt eine Gegenüberstellung der Sichtbarkeitsmodi, die in der Google Earth-Umgebung für die Darstellungen in Abbildung 3.32



Abbildung 3.33: Änderung der Klassenaufteilung durch Skalengrenzen (\geq 20 % und < 30 %, \geq 60 %, 0 – 100 % mit abgewählten Klassen)

Es ist zu erkennen, dass der Maximaldichtewert (33,68) bei allen drei Darstellungen identisch ist. Die farbliche Werteklassierung unterscheidet sich jedoch. Beispielsweise beträgt die Klassenbreite in der rechten Struktur 10 % des Maximalwertes und in der mittleren Struktur beträgt sie 4 % des Maximalwertes. Durch das Abwählen aller Elemente unterhalb von 60 % in der rechten Struktur werden nur die Elemente dargestellt, die auch in der mittleren Dichtedarstellung in Abbildung 3.32 gezeigt sind. Sie unterscheiden sich jedoch in ihrer Färbung, da die Klassengrenzen sich unterscheiden.

Variation der Parameter SIZE, MIDLO und MIDLA

Ist nur ein kleinerer Teilbereich der gesamten betrachteten Transportregion interessant, kann dieser durch das Eingrenzen des Plotbereichs gesondert betrachtet werden. Durch die Begrenzung des Plotbereichs werden alle nicht im Plotbereich befindlichen Netzelemente aus der Berechnung und damit auch aus der farblichen Darstellung genommen. Die farbliche Klassierung wird also nur für die Werte des ausgewählten Bereichs vorgenommen. Damit ist die farbliche Differenzierung des Teilbereichs unabhängig von außerhalb des Plotbereiches liegenden Maxima und Minima.

Die Abbildung 3.34 enthält Dichtedarstellungen von zwei unterschiedlichen Teilplotbereichen (Darstellung in der Mitte und rechts) und eine Dichtedarstellung des gesamten Transportgebiets (links).

| | Abbildung links | Abbildung mitte | Abbildung rechts |
|-------------------------|---|------------------|------------------|
| Plotbereichgröße | alle Elemente | 10 x 10 Elemente | |
| Plotbereichsmittelpunkt | - | 47°30'N 18°06'E | 46°24'N 20°25'E |
| Inputdaten | 27.1.2006, 12 Uhr bis 28.1.2006, 0 Uhr, MEZ | | |
| Wichtung | mit der Wurzel des Startpunktabstands | | |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | | |

Tabelle 3.20: Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.34



Abbildung 3.34: Trajektoriendichten mit unterschiedlichen Plotbereichen

Die beiden Teilplotbereiche habe die selbe Größe. Sie bestehen jeweils aus 10 × 10 Netzelementen. Nur der Plotbereichmittelpunkt unterscheidet sich. Durch die Verschiebung des Plotbereichs werden unterschiedliche Netzelemente mit unterschiedlichen Werten bei der Berechnung berücksichtigt. Damit ändert sich, wie oben beschrieben, die farbliche Skalierung und gleiche Netzelemente erhalten in den verschiedenen Darstellungen eine unterschiedliche Färbung.

Die absolute Größe in km x km eines Teilplotbereichs ist immer von der Maschenweite des verwendeten Berechnungsnetzes abhäbgig. Der absolute Plotbereich wird damit zusätzlich durch die Berechnungsnetzauflösung skaliert.

Variation des Parameters COLOR

Um Dichteverteilungen verschiedener Ereignisse miteinander in einer Abbildung anschaulich darstellen zu können, kann eine einfarbige Farbskala zur Anzeige der Berechnung eines Plots gewählt werden. Die jeweilige Farbe sollte sich hierbei von den Farben der anderen Plots, die zusammen dargestellt werden sollen, unterscheiden.

Durch eine einfarbige Farbskala können die Dichten jedoch nicht mehr nach ihrer Wertigkeit unterschieden werden. Man kann jedoch analog zu der rechten Darstellung in Abbildung 3.32 die Sichtbarkeit bestimmter Netzelemente oder Werteklassen in der Google Earth-Umgebung manuell deaktivieren. In der Abbildung 3.35 wurde das bisher verwendete Trajektorienfeld in drei Trajektorienscharen aufgeteilt und mit verschiedenen einfarbigen Farbskalen geplottet.

| | Abbildung links | Abbildung mitte | Abbildung rechts |
|--------------------|--|--------------------------------------|---|
| Farbskalierung | einfarbig dunkelblau | einfarbig grün | einfarbig rot |
| Inputdaten | 27.1.2006, 12, 13, 14 und 18, Uhr MEZ | 27.1.2006, 15, 16 und 17 Uhr, MEZ | 27.1.2006, 19 Uhr bis 28.1.2006, 0 Uhr, MEZ |
| Wichtung | mit der Wurzel des Startpunktabstands | | |
| sonstige Parameter | Standards verwendet | | |

 Tabelle 3.21:
 Berechnungsparameter der Trajektoriendichten in Abbildung 3.35



Abbildung 3.35: Trajektoriendichten mit einfarbiger Skala

Zur besseren Übersichtlichkeit sind die Trajektorien jeweils so zusammengefaßt worden, dass Trajektorienscharen möglichst geringer Abweichung entstehen. Die erhaltenen Plots aus Abbildung 3.35 haben bei ihrer Erstellung unterschiedliche Namen erhalten, damit sie sich nicht gegenseitig überschreiben. Daraufhin sind sie nacheinander in die Google Earth-Umgebung geladen worden. Das resultierende Bild ist in Abbildung 3.36 dargestellt.



Abbildung 3.36: Gemeinsame Darstellung der Trajektoriendichten aus Abbildung 3.35 in einem Plot

4 Herkunftsanalyse ausgewählter Inhaltsstoffe der PM2,5-Immissionen am Frohnauer Turm

Die Trajektorienberechnungen und die darauf aufbauenden Trajektoriendichteberechnungen haben zum Ziel, Quellregionen zu identifizieren, die außerhalb der Stadt liegen und zur PM2,5-Belastung in Berlin beitragen. Die Herkunft der Luftmassen wird über Rückwärtstrajektorien mit Berlin als Startpunkt zu Ereignissen hoher Immissionsbelastungen berechnet. Zur Identifizierung von solchen Zeitpunkten werden Messungen der Staubimmission an der Messstation MC045 auf dem Frohnauer Turm verwendet. [Pes07]

4.1 Messungen am Frohnauer Turm (MC045)

Die Messdaten der Messstation MC045 auf dem Frohnauer Turm sind als Grundlage für die Untersuchungen in dieser Arbeit gewählt worden, da hier explizit PM2,5 und dessen chemische Zusammensetzung bestimmt wird. Wie in Kapitel 2.1 beschrieben, ist die Partikelgröße entscheidender Faktor für die Transportfähigkeit von Staub über große Distanzen. Die Messstation ist in einer Höhe von 325 m über der Geländeoberkante an einem Gittermast angebracht, was die Rahmenbedingungen zur Erfassung von Ferntransportaerosol mit wenig lokalem Emissionenanteil darüber hinaus begünstigt. Die Messstation befindet sich am Stadtrand (nordnordwestlich) von Berlin.

Eine Analyse der chemischen Zusammensetzung des am Frohnauer Turm gemessenen Staubes lässt Aussagen über die zugrundeliegenden Entstehungsprozesse zu (vgl. Kapitel 2.2). Durch die gezielte Betrachtung von verschiedenen Tracer-Substanzen können ähnliche Ferntransportereignisse herausgearbeitet werden. Die Komponenten elementarer Kohlenstoff (EC), organischer Kohlenstoff (OC I und OC II), organisches Material ($1,2 \cdot (OC I + OC II)$), Chlorid, Nitrat, Sulfat, Natrium, Ammonium, Kalium, Magnesium, Aluminium, Calcium, Titan, Vanadium, Chrom, Eisen, Nickel, Zink, Arsen, Antimon und Blei sind aus dem PM2,5-Staub bestimmt worden.

An der Messstation wird ein Filterwechsler des Typs SEQ47/50 von der Fa. Leckel mit einem PM2,5-Kopf und ein PM2,5-Staubmessgerät des Typs Sharp5030 der Fa. Thermo eingesetzt. Die chemische Analyse des gesammelten Staubs wird am FG UVT der TU Berlin durchgeführt. Informationen zu allen eingesetzten Verfahren an der Messstation sind detailiert in [Pes07] enthalten.

4.2 Validierung des Modells mit Natrium und Chlorid als Tracer für Seesalzemissionen

Die Stoffe Natrium und Chlorid werden als Seesalzemissionen direkt in die Atmosphäre eingebracht und sind somit Primäraerosole. Neben den Meeren gibt es kaum Emittenten dieser Stoffe, wodurch sie als eindeutiger Tracer für Seesalzemissionen gelten. [IES⁺92] Luftmassen mit hohen Natrium- und Chlorid-
konzentrationen, die nach Berlin advehiert werden, sollten daher aus Regionen des Atlantik, Nord- oder Ostsee stammen.

Dieser Zusammenhang von Staubinhaltsstoff und Herkuft der Luftmasse soll im Folgenden genutzt werden, um das Trajektoriendichtemodell zu validieren. Es werden für Tage hoher Natrium- und Chloridkonzentrationen Rückwärtstrajektorien berechnet. Mit diesen Trajektorien wird anschliessend die Trajektoriendichteberechnung durchgeführt. Die Trajektoriendichtedarstellung sollte den Atlantik, die Nordund Ostsee eindeutig als Quellregionen aufzeigen.

Betrachtet wird hierbei der Zeitraum vom 1. Dezember 2006 bis zum 31. Mai 2007 (182 Tage). Der verwendete Datensatz enthält jedoch nicht für jeden dieser Tage Messwerte. Die Tabelle 4.1 führt die Tage an, für die keine Messdaten vorliegen.

| CI (76 Tage) | Na (70 Tage) | | | |
|--------------------------|---------------------|--|--|--|
| 4., 6., 10. und 19.12.06 | _ | | | |
| 31.12.06 bis 3 | 3.1.07 | | | |
| 5.1.07 | | | | |
| 12.1.07 bis 14 | 4.1.07 | | | |
| 20. und 21.1.07 | 19.1.07 | | | |
| 26.1.07 bis 22.2.07 | | | | |
| 27.2.07 bis 1.3.07 | 27. und 28.2.07 | | | |
| 9.3.07 bis 26 | .3.07 | | | |
| 7.4.07 | 5.4.07 | | | |
| 11.4.07 bis 21.4.07 | | | | |
| 25.4.07 | 28.4.07 | | | |

Tabelle 4.1: Fehlende Messdatentage von Cl und Na vom 1.12.2006 bis 31.5.2007

Aus den vorhandenen Daten sind zur Veranschaulichung ihrer Verteilung Boxplots in der Abbildung 4.1 dargestellt und einige der statistischen Kennwerte in Tabelle 4.2 aufgeführt.

| 0.0 | 0.011 |
|--------|---|
| 0.14 | 0.5 |
| 0.3641 | 0.1382 |
| 0.03 | 0.1085 |
| 0.0256 | 0.1090 |
| 0.0125 | 0.0343 |
| 0.02 | 0.06 |
| 0.04 | 0.1978 |
| 0.07 | 0.289 |
| | 0.0 0.14 0.3641 0.03 0.0256 0.0125 0.02 0.04 0.04 0.07 |

Tabelle 4.2: Statistische Kennwerte der Messdaten $[\mu g/m^3]$ von Cl und Na vom 1.12.2006
bis 31.5.2007



Abbildung 4.1: Werteverteilung für Na und Cl im Zeitraum 1.12.06 bis 31.5.07

Ausgehend von der Konzentration des 90%-Perzentilwerts werden die Tage bestimmt, an denen diese Konzentration erreicht oder überschritten wird. Die erhaltenen Tagesangaben sind in der Tabelle 4.3 zusammengefasst.

| Tag Cl | Tag Na | durchschnittliche Mischungsschichthöhe |
|------------------|----------------------|--|
| _ | 4. und 6.12.06 | - |
| 7. | 12.06 | - |
| 25. und 27.12.06 | 10.12.06 und 4.1.07 | - |
| 11.1.07 | | 1000 m |
| 18. und 22.1.07 | 15., 20. und 21.1.07 | - |
| 23.2.07 | - | - |
| 2. und 5.3.07 | - | - |
| 4. und 5.4.07 | - | - |
| 8 | .4.07 | 700 m |
| - | 13.5.07 | - |

Tabelle 4.3: Tage von Cl und Na vom 1.12.2006 bis 31.5.2007, die 90%-Perzentil überschrei-
ten und Mischungsschichthöhen für Berlin

Da Seesalz als Natriumchlorid emittiert wird und beide Komponenten (Na und Cl) zu gleichen Teilen enthält, werden nur die Tage betrachtet, an denen auch beide Komponenten gemeinsam erhöht sind. Aus Tabelle 4.3 ergeben sich damit die Tage 7.12.2006, 11.1.2007 und 8.4.2007. Die Berliner Mischungsschicht ist am 11.1.2007 mit ca. 1000 m für die Jahreszeit sehr gut ausgeprägt. Dagegen ist sie am 8.4.2007 mit ca. 700 m eher schlecht ausgeprägt (vgl. Anhang *Mischungsschichthöhen für Berlin*). Für den 7.12.2006 lagen leider keine Daten zur Mischungsschichthöhe vor. Eine Mischungsschichthöhe von 700 m unterstützt hohe Konzentrationswerte von Stoffen, da ein geringeres Volumen bei gleicher Masse

zur Verfügung steht als bei großen Mischungsschichthöhen. Die hohe Konzentration am 8.4.2007 ist somit wahrscheinlich das Ergebnis des Zusammenspiels von Mischungsschichthöhe und Ferntransport. Die hohe Konzentration am 11.1.2007 ist dagegen ausschließlich mit Ferntransport erklärbar.

Für die genannten Tage ist für jede dritte Stunde (analog der meteorologischen Datenauflösung 0, 3, 6, 9, 12, 15, 18 und 21 Uhr) eine 48-stündige Rückwärtstrajektorie mit einer Stationsfilterung ab einer Standardabweichung von 3.0 berechnet worden. Alle weiteren Berechnungsparameter entsprachen den Standardwerten (vgl. Tabelle 3.1 und 3.2). Aus den 32 erhaltenen Trajektorien ist die Trajektoriendichte mit der Wichtung über die Wurzel des Startpunktabstands berechnet worden. Alle weiteren Berechnungsparameter entsprachen bei der Trajektoriendichteberechnung den Standardwerten in Tabelle 3.13. Die sich ergebende Dichteveteilung ist in Abbildung 4.2 gezeigt.



Abbildung 4.2: Trajektoriendichte der gemeinsamen 90%-Perzentilwerttage von Na und Cl

28 der 32 Tajektorien (87,5 %) führen direkt zum Atlantik oder zur Nordsee. Die restlichen vier Trajektorien (12,5 %) enden nach 48 Stunden über Deutschland oder Frankreich. Alle vier Trajektorien sind am Mittag bzw. Nachmittag des 7.12.2006 gestartet worden (12, 15, 18 und 21 Uhr). Es scheinen sich während des 7.12.2006 die großräumigen Windverhältnisse zwischen Vormittag und Nachmittag verändert zu haben. Die über den gesamten Tag aufkommende Masse an Natrium und Chlorid würde somit am 7.12.2006 hauptsächlich am Vormittag antransportiert worden sein. Leider kann diese Annahme nicht überprüft werden, da kein Konzentrationstagesgang vorliegt.

Ohne einen Konzentrationstagesgang der untersuchten Komponenten wird angenommen, dass der Antransport der untersuchten Komponente über den Tag verteilt stattfindet. Es werden an einem Tag mit einem hohen Tagessummenwert Trajektorienberechnungen zeitlich gleichmäßig verteilt gestartet. Wird jedoch die Hauptmasse eines Stoffes sehr konzentriert in nur ein paar Stunden des Tages antransportiert, verzerren die Trajektorien, die nicht in diesem Zeitfenster gestartet wurden, die Darstellung. Im schlimmsten Fall kann dies zu einer Fehlannahme des Transportweges des untersuchten Stoffes führen. Unter der Annahme, dass die vier Trajektorienberechnungen (12, 15, 18, 21 Uhr) am 7.12.2006 nicht den Transport von Natrium und Chlorid darstellen, können ihre überstrichenen Regionen als Quellregionen ignoriert werden.

Eine größere Problematik zeigt sich auch bei der Interpretation der Dichtedarstellung in Abbildung 4.2. Da die Quellregionen eine sehr große Fläche besitzen und um den Rezeptor herumreichen, teilen sich die Trajektorien auf ein großes Gebiet auf. Sie laufen nicht auf eine lokal begrenzte Emissionsquelle zu, wodurch sie sich im Bereich der Emissionen kaum kreuzen. Eine Annäherung oder Kreuzung von Trajektorien während des Transportweges führt somit zu einem hohen Dichtewert (vgl. Abbildung 4.2). Würde man versuchen die Quellen nur durch die Dichtedarstellung zu identifizieren, so würde dies unweigerlich die falschen Quellregionen hervorbringen.

Zur Quellidentifizierung muss also bei der Betrachtung der Trajektoriendichteverteilung auch die Streuung bzw. die Art der Trajektorienverteilung mit einbezogen werden. Wenn topografische Effekte wie beispielsweise eine Kanalisierung durch Gebirge vorhanden sind, werden diese auch zu einem starken Anstieg der Dichte in diesem Bereich führen und müssen bei der Interpretation des Dichtebildes berücksichtigt werden.

Durch die Verteilungssystematik der Trajektorien, die durch die großen Flächenquellen Atlantik und Nordsee hervorgerufen wird, können die inländischen Maxima in Abbildung 4.2 als Quellregionen mit großer Wahrscheinlichkeit ausgeschlossen werden.

Unter diesen Annahmen zeigt der Vergleich von angenommener Tracerquellregion und berechneter Herkunftsregion eine gute Übereinstimmung.

- ⇒ Für die Identifizierung großflächiger Emissionsquellen ist die Dichtedarstellung nur bedingt geeignet.
- Topografische oder meteorologische Bedingungen können zu hohen Trajektoriendichten führen, die nicht über Quelleregionen auftreten müssen. Wenn die Regionen, in denen die Dichte durch diese Prozesse erhöht wird, unbekannt sind, kann eine falsch-positive Quellregionidentifizierung stattfinden.
- Die Advektion eines Stoffes muss nicht gleichmäßig über einen Tag mit hohem Tagesmittelwert verteilt stattfinden. Bei unbekanntem Tagesgang und einem entsprechend kurzen und konzentrierten Antransport des Stoffes, kann der dadurch große Anteil der Trajektorientagesschar, der nicht den Transportprozess beschreibt, zu Fehlannahmen führen.
- \Rightarrow Sollen Tage mit hohem Ferntransport aus Konzentrationswerten bestimmter Staubinhaltsstoffe

bestimmt werden, so muss bei der Betrachtung der Konzentrationen die Mischungsschichthöhe mit berücksichtigt werden.

⇒ Das Trajektorienberechnungsmodell bestätigt die angenommenen Quellregionen f
ür Seesalzemissionen im Atlantik und der Nordsee.

4.3 Herkunftsanalyse für Sulfat (schwefelhaltige Brennstoffe)

Im folgenden Abschnitt soll für den Staubinhaltsstoff Sulfat eine Herkunftsanalyse über das Instrument der Trajektoriendichteberechnung durchgeführt werden. Das Sulfat als Staubbestandteil stammt aus Prozessen der Sekundäraerosolbildung. Es liegt größtenteils als Ammoniumsulfat, das aus Ammoniak und Schwefeldioxid in der Atmosphäre gebildet wird, vor. Sulfat ist hierbei ein Tracer für die Verbrennung schwefelhaltiger Brennstoffe (vgl. Kapitel 2.2.2). Außerdem ist es ein guter Indikator für den Ferntransport, da es erst auf dem Transportweg als Sekundäraerosol gebildet wird.

Betrachtet wird hierbei der Zeitraum vom 1. Dezember 2006 bis zum 31. Mai 2007 (182 Tage). Der verwendete Datensatz enthält jedoch nicht für jeden dieser Tage Messwerte. Die Tabelle 4.4 führt die Tage an, für die keine Messdaten vorliegen.

Tabelle 4.4: Fehlende Messdatentage von Sulfat vom 1.12.2006 bis 31.5.2007

31.12.06 und 1.1.07 26.1.07 bis 22.2.07 27.2.07 9.3.07 bis 26.3.07 11.4.07 bis 19.4.07 58 Tage

Aus den vorhandenen Daten sind zur Veranschaulichung ihrer Verteilung ein Boxplot in der Abbildung 4.3 dargestellt und einige der statistischen Kennwerte in Tabelle 4.5 aufgeführt.

31.5.2007

| Minimalwert | 0.34 |
|--------------------|--------|
| Maximalwert | 6.63 |
| Mittelwert | 1.8224 |
| Median | 1.395 |
| Standardabweichung | 1.3924 |
| 10%-Perzentil | 0.686 |
| 25%-Perzentil | 0.88 |
| 75%-Perzentil | 2.265 |
| 90%-Perzentil | 3.9793 |

Tabelle 4.5: Statistische Kennwerte der Messdaten $[\mu g/m^3]$ von Sulfat vom 1.12.2006 bis



Abbildung 4.3: Werteverteilung für Sulfat im Zeitraum 1.12.06 bis 31.5.07

Ausgehend von der Konzentration des 90%-Perzentilwerts werden die Tage bestimmt, an denen diese Konzentration erreicht oder überschritten wird. Die erhaltenen Tagesangaben sind in der Tabelle 4.6 zusammengefasst.

Tabelle 4.6: Tage von Sulfat vom 1.12.2006 bis 31.5.2007, die 90%-Perzentil überschreitenund Mischungsschichthöhen für Berlin

| Tag | durchschnittliche Mischungsschichthöhe |
|----------------------|--|
| 23. und 24.2.07 | 700 m |
| 29.3.07 bis 2.4.07 | > 1000 m |
| 26.4.07 bis 28.4.07 | > 1000 m |
| 22., 24. und 25.5.07 | > 1000 m |

Außer an den Tagen des 23. und 24.2.2007 erreicht die Mischungsschicht eine Ausprägung von > 1000 m (vgl. Anhang *Mischungsschichthöhen für Berlin*). Um die in Kapitel 4.2 beschriebene zeitliche Unsicherheit der Transportprozesse während eines Tages und den Einfluss der Mischungsschicht zu minimieren, wird eine Auswahl der Zeiten aus Tabelle 4.6 getroffen. Es werden die Episoden genauer untersucht, die über einen Tag hinaus andauern. Die Betrachtung startet am ersten Tag einer Episode um 12 Uhr und endet am letzten Tag einer Episode um 12 Uhr, um die Transportprozesse weitestgehend zeitlich auszublenden, die nicht für die Advektion des Sulfats verantwortlich sind. Darüber hinaus werden die Tage 23.2.2007 und 24.2.2007 wegen der geringen Mischungsschicht aus der Betrachtung genommen. Damit ergeben sich die in der Tabelle 4.7 aufgeführten Zeiten.

Tabelle 4.7: Ausgewählte Zeiten aus Tabelle 4.6

| Startzeit | Endzeit |
|-----------------|-----------------|
| 29.3.07,12 Uhr | 2.4.07, 12 Uhr |
| 26.4.07, 12 Uhr | 28.4.07, 12 Uhr |
| 24.5.07, 12 Uhr | 25.5.07, 12 Uhr |

Für die aufgeführten Episoden werden alle drei Stunden (analog der meteorologischen Datenauflösung 0, 3, 6, 9, 12, 15, 18 und 21 Uhr) 48-stündige Rückwärtstrajektorien mit einer Stationsfilterung ab einer Standardabweichung von 3.0 berechnet. Alle weiteren Berechnungsparameter entsprechen den Standardwerten (vgl. Tabelle 3.1 und 3.2). Aus den 56 erhaltenen Trajektorien ist die Trajektoriendichte mit der Wichtung über die Wurzel des Startpunktabstands berechnet worden. Alle weiteren Berechnungsparameter entsprechen den Standardwerten in Tabelle 3.13. Die sich ergebende Darstellung ist in Abbildung 4.4 gezeigt.



Abbildung 4.4: Trajektoriendichte der ausgewählten 90%-Perzentilwerttage von Sulfat aus Tabelle 4.7

Das Modell zeigt eine Advektion aus südöstlicher Richtung für hohe Sulfatwerte klar an. In der Dichtedarstellung sind drei Maxima erkennbar. Eines liegt östlich von Berlin in Polen, eines südöstlich im Dreiländereck Polen-Tschechien-Deutschland und eines erstreckt sich von Nordwest nach Südost über Tschechien, die Slowakei, Ungarn und Rumänien. Die Trajektorien, die das letzte beschriebene Maximum bilden, führen auch direkt über das Dreiländereck nach Berlin. Darüber hinaus ist das Maximum über Tschechien, der Slowakei, Ungarn und Rumänien weiter vom Startpunkt Berlin entfernt als die anderen beiden Maxima und wird durch die Wichtung damit höher bewertet.

In den Regionen, die den Maxima der Dichtedarstellung entsprechen, befinden sich viele Kohlekraftwerke, die ihre Abgase kaum gefiltert in die Atmosphäre abgeben. Die Identifizierung dieser Gebiete als Quellregionen ist daher durchaus plausibel.

Es ist zu berücksichtigen, dass sich für südöstliche Winde die Messstation Frohnauer Turm in der Abluftfahne Berlins befindet. Eine Überlagerung durch lokale Emissionen aus Berlin mit den Ferntransportaerosolen ist damit möglich. Eine nähere Betrachtung der Windgeschwindigkeiten zeigt für die Episoden einen durchschnittlichen Wind von 2 bis 3 m/s in Berlin (vgl. Anhang *Windgeschwindigkeiten an der Messstation Berlin-Tegel*). Da es sich bei Sulfat um ein Sekundäraesosol handelt, das Zeit benötigt, bis es in der Atmophäre gebildet wird, ist eine direkte Herkunft des gemessenen Sulfats am Frohnauer Turm aus Berlin unwahrscheinlich.

Soweit die Trajektoriendichten in Abbildung 4.4 nicht stark von den in Kapitel 4.2 beschriebenen Prozessen überlagert sind, können die Maxima der Trajektoriendichtedarstellung als Quellregionen für Sulfat im gemessenen PM2,5-Schwebstaub angenommen werden.

Unter der Annahme, dass die in Kapitel 4.2 angesprochenen Ursachen für nicht emissionsbedingte Dichtewerte hier nicht vorliegen, können Gebiete in West- und Südwestpolen, in Osttschechien, in der Westslowakei, in Zentralungarn und in Westrumänien als Quellregionen hoher Sulfatimmissionen am Frohnauer Turm während der betrachteten Episoden identifiziert werden.

4.4 Herkunftsanalyse für Vanadium (Raffinerie- und Petrochemieemissionen)

Vanadium gilt als Tracer für die Ölverbrennung bzw. für die Ölverarbeitung. Es wird bei der Verbrennung, der Raffinierung, der Petrochemie oder der Förderung von Erdöl direkt emittiert und ist damit ein Primäraerosol. Seine Emission ist fast ausschließlich auf anthropogene Quellen beschränkt. Bei einer Untersuchung der Quellregionen der Vanadiumimmissionen am Frohnauer Turm sollten damit Gebiete, in denen Ölfelder und Ölförderung, Ölraffinerien, ölverarbeitende Industrien und Ölverfeuerung vorhanden sind, sichtbar werden.

Betrachtet wird hierbei der Zeitraum vom 1. Dezember 2006 bis zum 31. Mai 2007 (182 Tage). Der verwendete Datensatz enthält jedoch nicht für jeden dieser Tage Messwerte. Die Tabelle 4.8 führt die Tage an, für die keine Messdaten vorliegen.

Tabelle 4.8: Fehlende Messdatentage von Vanadium vom 1.12.2006 bis 31.5.2007

| 31.12.06, 1.1.07 und 24.1.07 |
|------------------------------|
| 26.1.07 bis 22.2.07 |
| 9.3.07 bis 26.3.07 |
| 11.4.07 bis 19.4.07 |
| 58 Tage |

Aus den vorhandenen Daten sind zur Veranschaulichung ihrer Verteilung ein Boxplot in der Abbildung 4.5 dargestellt und einige der statistischen Kennwerte in Tabelle 4.9 aufgeführt.

| Fabelle 4.9: Statistische | Kennwerte der | Messdaten | $[\mu g/m^3]$ | von | Vanadium | vom | 1.12.2006 |
|----------------------------------|---------------|-----------|---------------|-----|----------|-----|-----------|
| bis 31.5.200 | 7 | | | | | | |

| Minimalwert | 0.0 |
|--------------------|---------|
| Maximalwert | 0.003 |
| Mittelwert | 0.0008 |
| Median | 0.001 |
| Standardabweichung | 0.0006 |
| 10%-Perzentil | 0.0 |
| 25%-Perzentil | 0.0004 |
| 75%-Perzentil | 0.001 |
| 90%-Perzentil | 0.00107 |



Abbildung 4.5: Werteverteilung für Vanadium im Zeitraum 1.12.06 bis 31.5.07

Ausgehend von der Konzentration des 90%-Perzentilwerts werden die Tage bestimmt, an denen diese Konzentration erreicht oder überschritten wird. Die erhaltenen Tagesangaben sind in der Tabelle 4.10 zusammengefasst.

| Tag | durchschnittliche Mischungsschichthöhe |
|-----------------|--|
| 15.1.07 | 600 m |
| 23. und 25.2.07 | 600 m |
| 4.3.07 | 500 m |
| 5.4.07 | 700 m |
| 9.4.07 | 800 m |
| 24.4.07 | 500 m |
| 25.4.07 | > 1000 m |
| 4.5.07 | > 1000 m |
| 8.5.07 | 800 m |
| 22.5.07 | > 1000 m |
| 23.5.07 | 800 m |
| 24.5.07 | > 1000 m |

| Tabelle 4.10: | Tage von | Vanadium | vom | 1.12.2006 | bis | 31.5.2007, | die | 90%-Perzentil | über- |
|---------------|-------------|------------|-------|-------------|-----|------------|-----|---------------|-------|
| | schreiten ı | und Mischu | ngssc | chichthöhen | für | Berlin | | | |

Analog zu den in Kapitel 4.3 aufgeführten Auswahlkriterien ergeben sich die in Tabelle 4.11 aufgeführten Zeiten zur weiteren Untersuchung.

Tabelle 4.11: Ausgewählte Zeiten aus Tabelle 4.10

| Startzeit | Endzeit |
|-----------------|-----------------|
| 22.5.07, 12 Uhr | 24.5.07, 12 Uhr |

Für die aufgeführten Episoden werden alle drei Stunden (analog der meteorologischen Datenauflösung 0, 3, 6, 9, 12, 15, 18 und 21 Uhr) 48-stündige Rückwärtstrajektorien mit einer Stationsfilterung ab einer Standardabweichung von 3.0 berechnet. Alle weiteren Berechnungsparameter entsprechen den Standardwerten (vgl. Tabelle 3.1 und 3.2). Aus den 16 erhaltenen Trajektorien ist die Trajektoriendichte mit der Wichtung über die Wurzel des Startpunktabstands berechnet worden. Alle weiteren Berechnungsparameter entsprechen den Standardwerten in Tabelle 3.13. Die sich ergebenden Darstellung ist in Abbildung 4.6 gezeigt.



Abbildung 4.6: Trajektoriendichte der 90%-Perzentilwerttage von Vanadium

In Abbildung 4.6 wird die Ölförderung in der Nord- und Ostsee und die Raffinerien bzw. Petrochemie an den Küsten der Nord- und Ostsee sichtbar. Die Emittenten des Vanadiums sind, wie in Kapitel 4.2 für die Seesalzemissionen beschrieben, weit verteilt. Nicht alle Gebiete mit hohen Dichten in der Dichtedarstellung sind auch gleich Quellregionen. Beispielsweise werden die Gebiete nordwestlich von Berlin, durch Schnittpunkte der Trajektorien, die zu den Quellregionen in der Nord- und Ostsee führen, hervorgerufen und zeigen damit wahrscheinlich selber keine Quellregionen an.

Unter der Annahme, dass die in Kapitel 4.2 angesprochenen topografischen und meteorologischen Ursachen für nicht emissionsbedingte Dichtewerte hier nicht vorliegen, können Vanadiumemissionen in der Nord- und Ostsee und an ihren Küsten ausgemacht werden.

4.5 Herkunftsanalyse für PM2,5-Schwebstaub

Im folgenden sollen die Quellregionen untersucht werden, die zu hohen PM2,5-Immissionen am Frohnauer Turm durch Ferntransport führen. Hierzu wird einerseits ein Trajektoriendichtebild aus Berechnungen für Tage mit hohen Werten und andererseits eine Karte mit einer farblichen Differenzierung der Quellregionen für verschiedene Perzentilbereiche erstellt.

Betrachtet wird hierbei der Zeitraum vom 1. Dezember 2006 bis zum 31. Mai 2007 (182 Tage). Der verwendete Datensatz enthält jedoch nicht für jeden dieser Tage Messwerte. Die Tabelle 4.12 führt die Tage an, für die keine Messdaten vorliegen.

Tabelle 4.12: Fehlende Messdatentage von PM2,5 vom 1.12.2006 bis 31.5.2007

31.12.06, 1.1.07 26.1.07 bis 22.2.07 8.3.07 bis 26.3.07 11.4.07 bis 19.4.07 58 Tage Aus den vorhandenen Daten sind zur Veranschaulichung ihrer Verteilung ein Boxplot in der Abbildung 4.7 dargestellt und einige der statistischen Kennwerte in Tabelle 4.13 aufgeführt.

| Tabelle 4.13: Statistische Kennwerte der Messda | ten $[\mu\mathrm{g}/\mathrm{m}^3]$ von PM2,5 vom 1.12.2006 bis |
|---|--|
| 31.5.2007 | |

| Minimalwert | 3.428 |
|--------------------|--------|
| Maximalwert | 47.425 |
| Mittelwert | 11.131 |
| Median | 8.729 |
| Standardabweichung | 7.066 |
| 10%-Perzentil | 5.305 |
| 25%-Perzentil | 6.812 |
| 75%-Perzentil | 13.33 |
| 90%-Perzentil | 19.157 |



Abbildung 4.7: Werteverteilung für PM2,5 im Zeitraum 1.12.06 bis 31.5.07

Ausgehend von der Konzentration des 90%-Perzentilwerts werden die Tage bestimmt, an denen diese Konzentration erreicht oder überschritten wird. Die erhaltenen Tagesangaben sind in der Tabelle 4.14 zusammengefasst.

Tabelle 4.14: Tage von PM2,5 vom 1.12.2006 bis 31.5.2007, die 90%-Perzentil überschreitenund Mischungsschichthöhen für Berlin

| Tag | durchschnittliche Mischungsschichthöhe | | |
|---------------------|--|--|--|
| 23.2.07 bis 25.2.07 | 700 m | | |
| 28.3.07 bis 2.4.07 | > 1000 m | | |
| 9.4.07 | 800 m | | |
| 25.4.07 bis 27.4.07 | > 1000 m | | |

Analog zu den in Kapitel 4.3 aufgeführten Auswahlkriterien ergeben sich die in Tabelle 4.15 aufgeführten Zeiten zur weiteren Untersuchung.

Tabelle 4.15: Ausgewählte Zeiten aus Tabelle 4.14

| Startzeit | Endzeit |
|-----------------|-----------------|
| 28.3.07,12 Uhr | 2.4.07, 12 Uhr |
| 25.4.07, 12 Uhr | 27.4.07, 12 Uhr |

Für die aufgeführte Episode wird alle drei Stunden (analog der meteorologischen Datenauflösung 0, 3, 6, 9, 12, 15, 18 und 21 Uhr) eine 48-stündige Rückwärtstrajektorie mit einer Stationsfilterung ab einer Standardabweichung von 3.0 berechnet. Alle weiteren Berechnungsparameter entsprechen den Standardwerten (vgl. Tabelle 3.1 und 3.2). Aus den 56 erhaltenen Trajektorien ist die Trajektoriendichte mit der Wichtung über die Wurzel des Startpunktabstands berechnet worden. Alle weiteren Berechnungsparameter entsprechen den Standardwerten in Tabelle 3.13. Die sich ergebende Darstellung ist in Abbildung 4.8 gezeigt.



Abbildung 4.8: Trajektoriendichte der 90%-Perzentilwerttage von PM2,5

Im Vergleich der Abbildungen 4.8 und 4.4 wird deutlich, dass die Quellregionen für die 90%-Perzentiltage des Sulfats und des PM2,5 identisch sind. Die Annahme, dass Sulfat ein Tracer für PM2,5-Ferntransport ist, kann somit bestätigt werden.

Das Modell zeigt wie für das Sulfat eine Advektion aus südöstlicher Richtung für hohe PM2,5-Werte klar an. In der Dichtedarstellung sind drei Maxima erkennbar. Eines liegt östlich von Berlin in Polen, eines südöstlich im Dreiländereck Polen-Tschechien-Deutschland und eines erstreckt sich von Nordwest nach Südost über Tschechien, die Slowakei, Ungarn und Rumänien. Die Trajektorien, die das letzte beschriebene Maximum bilden, führen auch direkt über das Dreiländereck nach Berlin. Darüber hinaus ist das Maximum über Tschechien, der Slowakei, Ungarn und Rumänien weiter vom Startpunkt Berlin entfernt, als die anderen beiden Maxima und wird durch die Wichtung damit höher bewertet.

In den Regionen, die den Maxima der Dichtedarstellung entsprechen, befinden sich viele Kohlekraftwerke, die ihre Abgase kaum gefiltert in die Atmosphäre abgeben. Die Identifizierung dieser Gebiete als Quellregionen ist somit plausibel.

Es ist zu berücksichtigen, dass sich für südöstliche Winde die Messstation Frohnauer Turm in der Abluftfahne Berlins befindet. Eine Überlagerung durch lokale Emissionen aus Berlin mit den Ferntransportaerosolen ist damit möglich.

Soweit die Trajektoriendichten in Abbildung 4.8 nicht stark von den in Kapitel 4.2 beschriebenen Prozessen überlagert sind, können die Maxima der Trajektoriendichtedarstellung als Quellregionen für PM2,5-Schwebstaub angenommen werden. In der Abbildung 4.9 sind die Quellregionen der Perzentilbereiche

- 0%- bis 10%-Perzentile (blau)
- 10%- bis 25%-Perzentile (hellblau)
- 25%- bis 75%-Perzentile (grün)
- 75%- bis 90%-Perzentile (orange)
- > 90%-Perzentile (pink)

farblich differenziert dargestellt. Hierzu wurden für alle Tage eines Perzentilbereichs alle drei Stunden (analog der meteorologischen Datenauflösung 0, 3, 6, 9, 12, 15, 18 und 21 Uhr) 48-stündige Rückwärtstrajektorien mit einer Stationsfilterung ab einer Standardabweichung von 3.0 berechnet. Alle weiteren Berechnungsparameter entsprechen den Standardwerten (vgl. Tabelle 3.1 und 3.2). Die Mischungsschichthöhe ist zur Auswahl der Berechnungstage hierbei nicht berücksichtigt worden.

Aus den erhaltenen Trajektorien ist für jeden Perzentilbereich einzeln eine Trajektoriendichtedarstellung ohne Wichtung (absolute Auftrittshäufigkeit) erstellt worden. Dabei ist das Skalenmaximum auf 1% des Maximaldichtwertes gesetzt worden. Somit ist sichergestellt, dass alle Bereiche, die von einer Trajektorie überstrichen werden, in der Dastellung auftauchen. Darüber hinaus sind einfarbige Dichteskalen verwendet worden. Ihre Farben unterscheiden sich in den Darstellungen der verschiedenen Perzentilbereiche (vgl. obige Aufzählung). Alle weiteren Berechnungsparameter entsprechen den Standardwerten in Tabelle 3.13.

Alle fünf sich ergebende Einzeldarstellung der Perzentilbereiche wurden daraufhin in der Google Earth-Umgebung in einer Gesamtdarstellung zusammengefügt. Das resultierende Bild ist in Abbildung 4.9 gezeigt.



Abbildung 4.9: Farbliche Differenzierungskarte der 0%- bis 10%-, 10%- bis 25%-, 25%- bis 75%-, 75%- bis 90%- und > 90%-Perzentilwerttage von PM2,5

Die Darstellung zeigt, dass die Luftmassen der 0%- bis 75%-Perzentilwerttage (blau, hellblau und grün) vorwiegend aus Gebieten nördlich bis südwestlich Berlins stammen. Die Luftmassen der 75%bis 90%-Perzentilwerttage (orange) stammen aus Gebieten aller Himmelsrichtungen mit mehr Gewicht auf Westen, wogegen die Luftmassen der Tage mit Werten größer des 90%-Perzentilwertes (pink) fast ausschließlich aus Gebieten nordöstlich bis südöstlich Berlins stammen.

Sowohl die Einzelbetrachtung der hohen PM2,5-Werte in Abbildung 4.8 als auch die Tatsache, dass Luftmassen an Tagen geringerer Belastung nicht aus Gebieten nordöstlich bis südöstlich Berlins stammen (vgl. Abbildung 4.9), führen zu dem Schluss, dass ein Zusammenhang von Ferntransport aus den genannten Quellgebieten und hohen PM2,5-Immissionswerten am Frohnauer Turm sehr wahrscheinlich ist.

Unter der Annahme, dass die in Kapitel 4.2 angesprochenen Ursachen für nicht emissionsbedingte Dichtewerte hier nicht vorliegen, können Gebiete in West- und Südwestpolen, in Osttschechien, in der Westslowakei, in Zentralungarn und in Westrumänien als Quellregionen hoher PM2,5-Immissionen am Frohnauer Turm während der betrachteten Episoden identifiziert werden. ⇒ Ein Zusammenhang von Ferntransport aus den genannten Quellgebieten nordöstlich bis südöstlich Berlins und hohen PM2,5-Immissionswerten am Frohnauer Turm ist sehr wahrscheinlich.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Der Luftinhaltsstoff Schwebstaub hat nach heutigem Kenntnisstand viele negative Wirkungen auf die menschliche Gesundheit. Häufig werden Herz-Kreislauf- und Atemwegserkrankungen bei hohen Schwebstaubbelastungen festgestellt. Daher sind Grenzwerte für die Schwebstaubimmission gesetzlich definiert. Berlin kann die Grenzwerte für Schwebstaub teilweise nicht einhalten und versucht die Emissionquellen und Transportprozesse, die zur Belastungssituation betragen, zu identifizieren und daraus geeignete Maßnahmen abzuleiten (Berliner Luftreinhalteplan, Ursachenanalyse der PM2,5-Immsissionen in Berlin). Die lokale Schwebstaubimmission stammt teilweise aus der Advektion von Ferntransportaerosolen. Diese Partikel liegen im Größenbereich des PM2,5-Feinstaubs und können über große Distanzen mit der atmosphärischen Strömung in der Planetaren Grenzschicht transportiert werden. Durch ihre größenabhängigen Eigenschaften sind sie gesundheitsschädlicher als größere Partikel.

Das hier vorgestellte rechnergestützte Modell baut auf Erfahrungen mit einem am FG existierenden Modell von [She92] auf und soll als Hilfsmittel zur Quellidentifizierung von PM2,5-Immissionen herangezogen werden. Es kann vereinfacht die Advektion von Ferntransportaerosolen aus Bodenwinddaten berechnen und mit einer Trajektoriendichtedarstellung mögliche Quellregionen aufzeigen. Damit ist es als Hilfsinstrument zur Identifizierung von Emittenten geeignet und kann zur Entwicklung geeigneter Maßnahmen, die zur Verbesserung der Luftqualität führen, beitragen.

Die theoretischen Grundlagen des Modells, die Bedienung und das Verhalten sind an Beispielen erklärt und untersucht worden. Ein Vergleich der Ergebnisse des neu entwickelten Trajektorienberechnungsmodells mit Ergebnissen des alten Modells zeigte bei äquivalenten Berechnungsparametern keine Abweichungen. Die Variation der Iterationsanzahl ergab, dass 20 Iterationen pro Stunde und Aufpunkt gut für dreistündige meteorologische Datensatzauflösungen und Verfolgungszeiten von 96 Stunden geeignet sind. Weiterhin ist der Einfluss von Inhomogenitäten im Windfeld ("Ausreißerstationen") untersucht worden. Ihr Auftreten kann zu großen Fehlern in den Trajektorienverläufen führen. Ein Vergleich von Rückwärts- und Vorwärtstrajektorien kann ihren Einfluss teilweise sichtbar machen. Das Herausfiltern der Inhomogenitäten erhöht jedoch die Vertrauenswürdigkeit der Trajektorieberechnungen. Für eine Filterung der "Ausreißerstationen" hat sich die Verwendung einer Standardabweichung von 2 bis 3 als geeignet erwiesen.

Bei der Trajektoriendichteberechnung ist eine Maschenweite des Berechnungsnetzes von 25 auf 25 km für Berechnungsgebiete einer Ausdehnung von ca. 1000 auf 1000 km gut geeignet. Wenn die Trajektorien, aus denen eine Trajektoriendichtedarstellung berechnet werden soll, einen gemeinsamen Startpunkt besitzen, wird eine Wichtung mit dem Abstand zum Startpunkt erforderlich, um startpunktnahe Netzelemente nicht überzubewerten. Die Wichtung mit der Wurzel des Netzelementabstands zum gemeinsamen Trajektorienstartpunkt zeigt für Berechnungsgebiete bis ca. 1000 km eine gute Eignung. Es sollten jedoch auch noch andere Abstandsfunktionen, wie beispielsweise $\ln(r+1)/\ln(2)$, die für große Abstände weniger stark zunimmt als \sqrt{r} , auf ihre Eignung als Wichtung untersucht werden.

Die Farblichkeit der Dichten einer Darstellung resultiert nur aus der zugrundeliegenden Werteverteilung in der momentanen Darstellung und den Werten der Darstellungsparameter. Die erhaltenen farblichen Dichtedarstellungen sind damit nicht normiert und untereinander höchstens qualitativ vergleichbar.

Eine Untersuchung der Quellregionen ausgewählter Inhaltstoffe und der PM2,5-Gesamtimissionen am Rezeptor Frohnauer Turm (MC045) wurde für den Zeitraum 1.12.2006 bis 31.5.2007 durchgeführt. Hierbei sind Natrium und Chlorid als Tracer für Seesalzemissionen verwendet worden, um die Eignung der erhaltenen Dichtedarstellung zur Quellregionidentifizierung zu diskutieren und zu validieren. Die Quellregionen Atlantik und Nordsee konnten für die Stoffe Natrium und Chlorid identifiziert werden. Bei dieser Untersuchung ist deutlich geworden, dass ein berechnetes Dichtebild ausgehend von einem Rezeptor zur Identifizierung großflächiger Emittenten wie Meere nur bedingt geeignet ist.

Eine Untersuchung des Inhaltsstoffes Vanadium, der als Tracer für Raffinerie- und Petrochemieemissionen gilt, ergab Quellregionen in der Nord- und Ostsee und an ihren Küsten.

Die Berechnungen für den PM2,5-Inhaltstoffes Sulfat ergab mögliche Quellregionen in West- und Südwestpolen, in Osttschechien, in der Westslowakei, in Zentralungarn und in Westrumänien. Hierbei ist zu beachten, dass bei südöstlichen Windrichtungen die Messstation Frohnauer Turm in der Abluftfahne Berlins liegen kann und eine Beinflussung der Immisionssituation durch Berliner Emissionen möglich ist. Im Vergleich konnte ein starker Zusammenhang von Sulfat und PM2,5-Gesamtimmissionen im Dichtebild gezeigt werden, was Sulfat als Tracer für hohe PM2,5-Immissionen aus Ferntransport bestätigt.

Die Untersuchung der PM2,5-Gesamtimmissionen mit einer Dichtedarstellung für hohe Werte und einer farblich differenzierten Darstellung der Quellregionen zu unterschiedlichen Belastungssituationen ergab, dass ein Zusammenhang von Ferntransport aus Quellgebieten im Nordosten, Osten bis Südosten Berlins mit hohen PM2,5-Immissionen an der Messstation Frohnauer Turm sehr wahrscheinlich ist. Die Dichtedarstellung der hohen PM2,5-Gesamtimmissionen ist mit der Dichtedarstellung für hohe Sulfatwerte nahezu identisch, woraus sich die gleichen Quellregionen ergeben.

Bei der Beurteilung und Identifizierung von Tagen mit hohem Ferntransportanteil, die aus Konzentrationstageswerten abgeleitet sind, muss der Einfluss der Mischungsschicht und anderer meteorologischer Faktoren noch genauer Untersucht werden. Hinzu kommt, dass der Advektionsprozess der betrachteten Luftinhaltstoffe nicht gleichbleibend über Tage mit hohem Summenwert verteilt ist. Die Darstellung der Transportprozesse mit gleichmäßig über den Tag verteilten Trajektorienberechnungen ohne die Berücksichtigung eines Konzentrationstagesgangs kann somit zu Fehlannahmen führen.

Auch die topografischen und meteorologischen Bedingungen, die zu hohen Dichtewerten in der Darstellung führen und damit keine Quellregionen darstellen, müssen noch genauer untersucht werden. Eine Option zum Ausblenden von solchen bekannten Regionen könnte in das Dichteberechnungsprogramm eingebunden werden.

Eine Verbesserung der Quellregionidentifizierung ist durch die Betrachtung von zwei räumlich getrennten Rezeptororten für einen Schadstoffs möglich. Wird von beiden Rezeptororten ausgehend die Herkunft der Luftmassen über Trajektorienberechnungen bestimmt und die erhaltenen Trajektorienverläufe als Berechnungsgrundlage eines gemeinsamen Dichtebildes verwendet, so werden die Regionen in der Dichtedarstellung stärker hervortreten, in denen sich die Trajektorien beider Rezeptoren schneiden. Man erhält somit eine Kreuzpeilung des Emissionsortes und kann dessen Lage genauer bestimmen.

Eine Trajektoriendichtedarstellung und die darauf aufbauende Quellregionidentifizierung kann jedoch immer nur so gut sein, wie die verwendeten Ausgangsdaten. Die Qualitätssicherung der verwendeten Trajektorienberechungen ist somit zwingend notwendig. Hierbei besteht ein großer Verbesserungsbedarf bei der statistischen Analyse der verwendeten Datengrundlage einer Trajektorienberechnung. Es kann beispielsweise eine Art Gütewert der Berechnung definiert werden, der bei der Berechnung die Homogenität der Stationsverteilung, die Homogenität bzw. Variabilität des Windfeldes, die Anzahl und Lage zur Interpolation verwendeter Wetterstationen und verbesserte Ausreißertests berücksichtigt und zur Interpretation herangezogen werden kann. Eine Überprüfung der Trajektorienberechnungen mit Tracern ist darüber hinaus auch denkbar.

Da das Trajektorienberechnungsmodell zur Zeit nur Bodenwinddaten berücksichtigt, die die lokalen Auswirkungen der übergeordneten Großwetterlage darstellen, ist eine zusätzliche Verwendung von Daten der übergeordneten meteorologischen Prozesse zur Qualitätsicherung denkbar. Beispielsweise könnten ausgehend von modellierten meteorologischen Bedingungen des 800hPa-Niveaus die Transportprozesse in der Mischungsschicht parallel berechnet werden und die Berechnungsergebnisse mit denen aus den Bodenwinddaten abgeglichen werden. Hierdurch könnte die Fehleranfälligkeit weiter verringert und die Stabilität des Modells erhöht werden.

Literaturverzeichnis

- [Ä07] ÄRZTINNEN UND ÄRZTE FÜR DEN UMWELTSCHUTZ: Feinpartikel (Particulate Matter PM). Version: 2007. http://www.aefu.ch/pdf/Feinstaubdoc.pdf, Abruf: 02.07.2007. - Mediendokumentation
- [Amt96] AMTSBLATT NR. L 296 VOM 21/11/1996: Richtlinie 96/62/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 27. September 1996 über die Beurteilung und die Kontrolle der Luftqualität. Version: 1996. http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=CELEX: 31996L0062:DE:HTML, Abruf: 03.07.2007
- [Amt99] AMTSBLATT NR. L 163/41 VOM 29/06/1999: Richtlinie 1999/30/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 22. April 1999 über Grenzwerte für Schwefeldioxid, Stickstoffdioxid und Stickoxide, Partikel und Blei in der Luft. Version: 1999. http://eur-lex.europa.eu/ LexUriServ/LexUriServ.do?uri=0J:L:1999:163:0041:0060:DE:PDF, Abruf: 03.07.2007
- [Amt00] AMTSBLATT NR. L313/12 VOM 13/12/2000: Richtlinie 2000/69/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. November 2000 über Grenzwerte für Benzol und Kohlenmonoxid in der Luft. Version: 2000. http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/site/de/oj/ 2000/1_313/1_31320001213de00120021.pdf, Abruf: 13.07.2007
- [Amt01] AMTSBLATT NR. L31/21 02/02/2001: Richtlinie 2000/84/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 19. Januar 2001 zur Regelung der Sommerzeit. Version: 2001. http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=0J:L:2001: 031:0021:0022:DE:PDF, Abruf: 19.07.2007
- [Amt02] AMTSBLATT NR. L67/14 09/03/2002: Richtlinie 2002/3/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 12. Februar 2002 über den Ozongehalt der Luft. Version: 2002. http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/site/de/oj/2002/1_067/ 1_06720020309de00140030.pdf, Abruf: 13.07.2007
- [Amt04] AMTSBLATT NR. L23/3 26/01/2005: Richtlinie 2004/107/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 15. Dezember 2004 über Arsen, Kadmium, Quecksilber, Nickel und polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe in der Luft. Version: 2004. http://eur-lex.europa.eu/ LexUriServ/site/de/oj/2005/1_023/1_02320050126de00030016.pdf, Abruf: 13.07.2007
- [Bun05] BUNDESAMT FÜR UMWELT, WALD UND LANDSCHAFT DER SCHWEIZ: Feinstaub macht krank. Version: 2005. http://www.bafu.admin.ch/php/modules/shop/files/pdf/ phpVyjqqR.pdf, Abruf: 09.07.2007
- [Bur89] BURCKHARD, U.: Herkunftsanalyse von Luftschadstoffen mittels Trajektorienverfolgung. 1989.
 Diplomarbeit am FG Luftreinhaltung, TU Berlin
- [Dra05] DRANHEIM, T.: Die r\u00e4umliche und zeitliche Variabilit\u00e4t der PM10-Schwebstaubkonzentration in Berlin unter Ber\u00fccksichtigung der Gro
 u005. – Dissertation, HU Berlin

- [Dre04] DREIUNDDREISSIGSTE VERORDNUNG ZUR DURCHFÜHRUNG DES BUNDESIMMISSIONS-SCHUTZGESETZES VOM 13.07.2004: Bundesgesetzblatt Jahrgang 2004 Teil I S.3626. Version: 2004. http://www.gesetze-im-internet.de/bundesrecht/bimschv_33/gesamt. pdf, Abruf: 22.09.2007
- [Fin07] FINKELNBURG, R.: Analyse eines rechnergestützten Trajektorienmodells zur Darstellung von regionalen Luftschadstofftransporten. 2007. – Projektarbeit am FG UVT, TU Berlin
- [Hai03] HAINSCH, A.: Ursachenanalyse der PM10-Immission in urbanen Gebieten am Beispiel der Stadt Berlin. 2003. – TU Berlin
- [IES⁺92] ISRAËL, G.W. ; ERDMANN, A. ; SHEN, J. ; FRENZEL, W. ; ULRICH, E.: Analyse der Herkunft und Zusammensetzung der Schwebstaubimmision. 1992. – Abschlußbericht zum F+E-Vorhaben: Herkunft und Zusammensetzung der Schwebstaubimmissionsbelastung UBA F+E-Nr. 104 025 97, Im Auftrag der Senatsverwaltung für Stadtentwicklung und Umweltschutz und des Umweltbundesamtes
- [Kol05] KOLLER, U.: Feinstaub Kleine Partikel mit großer Wirkung. GSF Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit, ÖA-FLUGS, 2005
- [Kom06] KOMMISSION REINHALTUNG DER LUFT IM VDI UND DIN NORMENAUSSCHUSS KRDL: Feinstaub und Stickstoffdioxid. 2006. – KRdL-Schriftenreihe 36
- [Kra04] KRAUS, H.: Die Atmosphäre der Erde Eine Einführung in die Meteorologie. 2004
- [Lan07] LANDESAMT FÜR NATUR, UMWELT UND VERBRAUCHERSCHUTZ NORDRHEIN-WESTFALEN: EU-Luftqualitätsrichtlinien. Version: 2007. http://www.lanuv.nrw.de/ luft/immissionen/beurteilungsma/euluftqua.htm, Abruf: 13.07.2007
- [Pes94] PESCH, M.: Ursachenanalyse hoher Ozonkonzentrationen in Berlin. 1994. Dissertation, TU Berlin
- [Pes07] PESCH, M.: Zwischenbericht zur Ursachenanalyse der PM2,5-Immissionen in Berlin Methodenbeschreibung und erste Ergebnisse. März 2007. – Im Auftrag der Senatsverwaltung für Gesundheit, Umwelt und Verbraucherschutz, Abteilung III, Umweltpolitik
- [RS06] REICH, B.; SCHMIDT, B.: Feinstaubkonferenz 2005: Feinstaubproblematik ist nur im interdisziplinären Ansatz lösbar. 2006 (Dtsch Med Wochenschr 131)
- [Sen05] SENATSVERWALTUNG FÜR STADTENTWICKLUNG: Luftreinhalteplan und Aktionsplan für Berlin 2005 – 2010. August 2005
- [She92] SHEN, J.: Rezeptororientierte Mathoden zur Ursachenanalyse der Schwebstaubimmission in Deutschland - Anwendung auf Berlin und Waldhof. 1992. – Doktorarbeit D83 am FG Luftreinhaltung, TU Berlin
- [Stu00] STULL, R. B.: *Meteorology for scientists and engineers*. 2000. A technical companion book with Ahrens' Meteorology Today
- [Tre00] TREFFEISEN, R.: Räumliche und zeitliche Analyse der Ozonkonzentration an Höhenmesssta-

tionen. 2000. - Fortschritt-Berichte VDI Teihe 15 Umwelttechnik

- [UIr94] ULRICH, E.: Entwicklung eines thermographischen Verfahrens zur Analyse von Dieselpartikelemissionen. 1994. – Dissertation, TU Berlin
- [VHK+05] VOSHAAR, T.H.; HEYDER, J.; KÖHLER, D.; KRUG, D.; SCHEUCH, G.; SCHULZ, H.
 ; WITT, C.: Partikuläre Luftverunreinigungen und ihre Folgen für die menschliche Gesundheit.
 2005 (Pneumologie 59). Stellungnahme der deutschen Gesellschaft für Pneumologie (DGP)
- [Völ07] Völger, S.: Detailierte Untersuchung einer Episode hoher PM10-Konzentrationen in Berlin. Fenruar 2007. – Diplomarbeit im Studiengang Technischer Umweltschutz, TU Berlin
- [VVVC78] VAN VAECK, L. ; VAN CAUWENBERGHE, K.: Cascade impactor measurements of the size distribution of the major classes or organic pollutants in atmospheric particulate matter. 1978 (Atmospheric Environment 12)
- [WHO06] WHO REGIONAL OFFICE FOR EUROPE: Health risks of particulate matter from long-range transboundary air pollution. Version: 2006. www.euro.who.int/document/E88189.pdf, Abruf: 05.07.2007
- [Wik07] WIKIPEDIA: Coriolis effect. Version: 2007. http://en.wikipedia.org/wiki/Coriolis_ effect, Abruf: 05.10.2007
- [Zwe07] ZWEIUNDZWANZIGSTE VERORDNUNG ZUR DURCHFÜHRUNG DES BUNDESIMMISSI-ONSSCHUTZGESETZES VOM 27.02.2007: Bundesgesetzblatt Jahrgang 2007 Teil I Nr.25. Version: 2007. http://www.bgblportal.de/BGBL/bgbl1f/bgbl107s1006.pdf, Abruf: 02.10.2007

trajectory.bat

```
rem Laengengrad (Startposition)
set LO=13.4167
rem Breitengrad (Startposition)
set LA=52.5167
rem Jahresangabe (Startzeit)
set YYYY=2000
rem Monatsangabe (Startzeit)
set MM=1
rem Tagesangabe (Startzeit)
set DD=1
rem Stundenangabe (Startzeit)
set HH=0
rem Berechnungsdauer in Stunden
set TRACE=-96
rem Windgeschwindigkeitskorrekturfaktor
set SPEED=2
rem Windrichtungskorrektur in Grad
set ROT=10
rem Radius des Berechnungsgebiets in km
set MAXR=200
rem Mindestabstand fuer Wichtungsberechnung in km
set MINR=2
rem Iterationen pro Zeitstunde
set IPERH=20
```

set IPERPOINT=20

rem Stundendifferenz Datenzeitzone zu Startzeitzeitzone set ZONEDIFF=-1 rem Zeitzonenname set ZONENAME=MEZ rem Stationsinformationsdatei set STATION=wstation.dat rem Verzeichnis mit Winddatensaetzen set METEO=meteo/ rem Ausgabeverzeichnis set OUTPUT=traj/ rem zulaessige Standardabweichung der Windvektoren set STDDEVIATION=0.0 rem 0: kn | 1: m/s | 2: aus Stationsliste set DATAUNIT=0 rem zeitliche Winddatenaufloesung (0: max. 24h) set RES=3

trajectory.exe

trajectory.sh

#!/bin/sh

| export | LO=13.4167; | # | Laengengrad (Startposition) |
|--------|----------------------------------|---|---|
| export | LA=52.5167; | # | Breitengrad (Startposition) |
| export | YYYY=2000; | # | Jahresangabe (Startzeit) |
| export | MM=1; | # | Monatsangabe (Startzeit) |
| export | DD=1; | # | Tagesangabe (Startzeit) |
| export | HH=0; | # | Stundenangabe (Startzeit) |
| export | TRACE=-96; | # | Berechnungsdauer in Stunden |
| export | SPEED=2; | # | Windgeschwindigkeitskorrekturfaktor |
| export | ROT=10; | # | Windrichtungskorrektur in Grad |
| export | MAXR=200; | # | Radius des Berechnungsgebiets in km |
| export | MINR=2; | # | Mindestabstand fuer Wichtungsberechnung in km |
| export | IPERH=20; | # | Iterationen pro Zeitstunde |
| export | <pre>IPERPOINT=20;</pre> | # | Iterationen pro Trajektorienaufpunkt |
| export | ZONEDIFF=-1; | # | Stundendifferenz Datenzeitzone zu Startzeitzeitzone |
| export | ZONENAME=MEZ; | # | Zeitzonenname |
| export | <pre>STATION=wstation.dat;</pre> | # | Stationsinformationsdatei |
| export | METEO=meteo/; | # | Verzeichnis mit Winddatensaetzen |
| export | OUTPUT=traj/; | # | Ausgabeverzeichnis |
| export | <pre>STDDEVIATION=0.0;</pre> | # | zulaessige Standardabweichung der Windvektoren |
| export | DATAUNIT=0; | # | 0: kn 1: m/s 2: aus Stationsliste |
| export | RES=3; | # | zeitliche Winddatenaufloesung (0: max. 24h) |
| | | | |

./trajectory;

trajectory.c

Der Quelltext *trajectory.c* ist wegen seines Umfangs und zur besseren Handhabbarkeit in der Form eines eigenen Bandes mit dem Titel Anhang I zur Diplomarbeit Entwicklung und Anwendung eines rechnergestützten Modells zur Ursachenanalyse großräumiger Luftschadstofftransporte - trajectory.c beigefügt.

B20060127_12.trj

YYYY=2006 | MM= 1 | DD=27 | HH=12 | ZONEDIFF=-1 | ZONENAME=MEZ LO= 13.4167 | LA= 52.5167 | IPERH=20 | IPERPOINT=20 | TRACE=-20 MINR=2 | MAXR=200 | STDDEVIATION= 0.000 | RES=3 | DATAUNIT=0 SPEED=2.00 | ROT=10.00

Trajektorienpunkte: 21

0.2341655898;0.9165893273 0.2379956360;0.9163643270 0.2416551665;0.9162561786 0.2450481356;0.9161891160 0.2480276995;0.9159355995 0.2505295533;0.9155881540 0.2522901005;0.9153176077 0.2531568536;0.9151134051 0.2540050816;0.9150162913 0.2550546180;0.9150094955 0.2565934873;0.9150761649 0.2589776866;0.9152739773 0.2617222509;0.9153220770 0.2645118419;0.9150113507 0.2673292711;0.9144566700 0.2700520690;0.9139010521 0.2725995524;0.9135757308 0.2750445730;0.9135094373 0.2775975658;0.9135021330 0.2802122915;0.9133304704 0.2825883384;0.9130687838

frequency.bat

```
rem Name der Ausgabedatei
set FILENAME=freq.kml
rem Trajektorienverzeichnis (INPUT)
set INPUTDIR=traj/
rem Groesse der Berechnungsnetzelemente in km (Aufloesung)
set RES=25
rem Angabe der Wichtung (0, 1, 2)
rem 0: absolute Haeufigkeit,
rem 1: Wichtung ueber Abstand zum Startpunkt,
rem 2: Wichtung ueber Wurzel des Abstands zum Startpunkt
set WEIGHT=0
rem Maximalwert der Skala (% von maximaler Dichte)
set SCALEMAX=100
rem Minimalwert der Skala (% von maximaler Dichte)
set SCALEMIN=0
rem Transparenz (00 - ff)
set OPACITY=88
rem Laengengrad-Offset zum Kartennullpunkt (Versatz in Grad)
set OFFLO=0.0
rem Breitengrad-Offset zum Kartennullpunkt (Versatz in Grad)
set OFFLA=0.0
rem Darstellung der Farbskala (>0: einfarbig)
rem 0: alle Farben, 1: dunkelblau, 2: blau, 3: hellblau
rem 4: mint, 5: gruen, 6: hellgruen, 7: gelb, 8: orange,
rem 9: rot, 10: pink
set COLOR=0
```

set SIZE=0

rem Mittelpunkt der Darstellung - Laengengrad (Grad)
set MIDLO=0.0
rem Mittelpunkt der Darstellung - Breitengrad (Grad)
set MIDLA=0.0
frequency.exe

frequency.sh

#!/bin/sh

```
export FILENAME=freq.kml; # Name der Ausgabedatei
                          # Trajektorienverzeichnis (InPUT)
export INPUTDIR=traj/;
export RES=25;
                          # Groesse der Berechnungsnetzelemente in km (Aufloesung)
export WEIGHT=0;
                          # Angabe der Wichtung (0, 1, 2)
                          # 0: absolute Haeufigkeit,
                          # 1: Wichtung ueber Abstand zum Startpunkt,
                          # 2: Wichtung ueber Wurzel des Abstands zum Startpunkt,
export SCALEMAX=100;
                          # Maximalwert der Skala (% von maximaler Dichte)
export SCALEMIN=0;
                          # Minimalwert der Skala (% von maximaler Dichte)
                          # Transparenz (00 - ff)
export OPACITY=88;
export OFFL0=0.0;
                         # Laengengrad-Offset zum Kartennullpunkt (Versatz in Grad)
                         # Breitengrad-Offset zum Kartennullpunkt (Versatz in Grad)
export OFFLA=0.0;
export COLOR=0;
                          # Darstellung der Farbskala (>0: einfarbig)
                          # 0: alle Farben, 1: dunkelblau, 2: blau, 3: hellblau
                          # 4: mint, 5: gruen, 6: hellgruen, 7: gelb, 8: orange,
                          # 9: rot, 10: pink
                          # Groesse der Darstellung (Elemente pro Seite) (0: alle)
export SIZE=0;
export MIDL0=0.0;
                          # Mittelpunkt der Darstellung - Laengengrad (Grad)
export MIDLA=0.0;
                          # Mittelpunkt der Darstellung - Breitengrad (Grad)
```

./frequency;

frequency.c

Der Quelltext *frequency.c* ist wegen seines Umfangs und zur besseren Handhabbarkeit in der Form eines eigenen Bandes mit dem Titel Anhang II zur Diplomarbeit Entwicklung und Anwendung eines rechnergestützten Modells zur Ursachenanalyse großräumiger Luftschadstofftransporte - frequency.c beigefügt.

freq.kml

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<kml xmlns="http://earth.google.com/kml/2.1">
<Document>
```

```
<description>Trajektoriendichte/
Resolution: 25x25 km/
Wichtung ueber Wurzel des Abstandes zum Startpunkt
</description>
```

<name>freq.kml</name>

```
<Style id="1">
<PolyStyle>
<color>88ff0000</color>
<colorMode>normal</colorMode>
<fill>1</fill>
<outline>0</outline>
</PolyStyle>
</Style>
```

```
<Style id="2">
<PolyStyle>
<color>88ff8800</color>
<colorMode>normal</colorMode>
<fill>1</fill>
<outline>0</outline>
</PolyStyle>
</Style>
```

```
<Style id="3">
<PolyStyle>
<color>88ffff00</color>
<colorMode>normal</colorMode>
<fill>1</fill>
<outline>0</outline>
</PolyStyle>
</Style>
```

<Style id="4"> <PolyStyle> <color>88888ff00</color> <colorMode>normal</colorMode> <fill>1</fill> <outline>0</outline> </PolyStyle> </Style>

<Style id="5"> <PolyStyle> <color>8800ff00</color> <colorMode>normal</colorMode> <fill>1</fill> <outline>0</outline> </PolyStyle> </Style>

<Style id="6"> <PolyStyle> <color>8800ff88</color> <colorMode>normal</colorMode> <fill>1</fill> <outline>0</outline> </PolyStyle> </Style>

<Style id="7"> <PolyStyle> <color>8800ffff</color> <colorMode>normal</colorMode> <fill>1</fill> <outline>0</outline> </PolyStyle> </Style>

<Style id="8"> <PolyStyle> <color>880088ff</color> <colorMode>normal</colorMode> <fill>1</fill> <outline>0</outline> </PolyStyle> </Style>

```
<Style id="9">
<PolyStyle>
<color>880000ff</color>
<colorMode>normal</colorMode>
<fill>1</fill>
<outline>0</outline>
</PolyStyle>
</Style>
```

```
<Style id="10">
<PolyStyle>
<color>888800ff</color>
<colorMode>normal</colorMode>
<fill>1</fill>
<outline>0</outline>
</PolyStyle>
</Style>
```

<Folder> <name>Trajektorien</name> <Folder> <name>B20060127_12.trj</name> <Placemark> <visibility>0</visibility> <LineString> <coordinates> 13.416700, 52.516700, 0 13.636145, 52.503808, 0 13.845821, 52.497612, 0 14.040224, 52.493770, 0 14.210940, 52.479244, 0 14.354286, 52.459337, 0 14.455158, 52.443836, 0 14.504819, 52.432136, 0
14.553419, 52.426572, 0 14.613553, 52.426182, 0 14.701724, 52.430002, 0 </coordinates> </LineString> </Placemark> </Folder> <Folder> <name>B20060127_15.trj</name> <Placemark> <visibility>0</visibility> <LineString> <coordinates> 13.416700, 52.516700, 0 13.630739, 52.486028, 0 13.834405, 52.446786, 0 14.028809, 52.407709, 0 14.221049, 52.386407, 0 14.376895, 52.379568, 0 14.454352, 52.373480, 0 14.471676, 52.362655, 0 14.469201, 52.347407, 0 14.469959, 52.330906, 0 14.487480, 52.319382, 0 </coordinates> </LineString> </Placemark> </Folder> </Folder> <Folder>

<name>Trajektoriendichte/</name> <description> Hoechstwert: 1.33/ Skalenmaximum: 1.33 Skalenminimum: 0.00 Plotmittelpunkt: 15.60 51.40 Plotgroesse: 0x0 Elemente </description> <Folder>

<name>ab 10%</name> </Folder> <Folder> <name>ab 20%</name> </Folder> <Folder> <name>ab 30%</name> <Placemark> <styleUrl>#3</styleUrl> <Polygon> <altitudeMode>relativeToGround</altitudeMode> <outerBoundaryIs> <LinearRing> <coordinates> 13.416700, 52.319382,0 13.784571, 52.319382,0 13.786453, 52.544247,0 13.416700, 52.544247,0 13.416700, 52.319382,0 </coordinates> </LinearRing> </outerBoundaryIs> </Polygon> </Placemark> </Folder> <Folder> <name>ab 40%</name> </Folder> <Folder> <name>ab 50%</name> </Folder> <Folder> <name>ab 60%</name> <Placemark>

```
<styleUrl>#6</styleUrl>
<Polygon>
<altitudeMode>relativeToGround</altitudeMode>
<outerBoundaryIs>
<LinearRing>
<coordinates>
13.784571, 52.319382,0
14.152442, 52.319382,0
 14.154324, 52.544247,0
13.784571, 52.544247,0
 13.784571, 52.319382,0
</coordinates>
</LinearRing>
</outerBoundaryIs>
</Polygon>
</Placemark>
<Placemark>
<styleUrl>#6</styleUrl>
<Polygon>
<altitudeMode>relativeToGround</altitudeMode>
<outerBoundaryIs>
<LinearRing>
<coordinates>
 14.520313, 52.319382,0
14.888184, 52.319382,0
 14.890066, 52.544247,0
 14.520313, 52.544247,0
 14.520313, 52.319382,0
</coordinates>
</LinearRing>
</outerBoundaryIs>
</Polygon>
</Placemark>
</Folder>
<Folder>
<name>ab 70%</name>
</Folder>
```

```
<Folder>
<name>ab 80%</name>
</Folder>
<Folder>
<name>ab 90%</name>
</Folder>
<Folder>
<name>ab 100%</name>
<Placemark>
<styleUrl>#10</styleUrl>
<Polygon>
<altitudeMode>relativeToGround</altitudeMode>
<outerBoundaryIs>
<LinearRing>
<coordinates>
14.152442, 52.319382,0
14.520313, 52.319382,0
14.522195, 52.544247,0
14.152442, 52.544247,0
 14.152442, 52.319382,0
</coordinates>
</LinearRing>
</outerBoundaryIs>
</Polygon>
</Placemark>
</Folder>
</Folder>
```

</Document>

</kml>

Mischungsschichthöhen für Berlin

Die Daten zu den hier dargestellten Mischungsschichthöhen für Berlin stammen von Dr. Eberhard Reimer, Institut für Meteorologie, Freie Universität Berlin.



Mischungsschichthöhe Februar 2007







Mischungsschichthöhe Januar 2007



Mischungsschichthöhe April 2007







Windgeschwindigkeiten an der Messstation Berlin-Tegel

Windgeschwindigkeit Tegel Episode 2



Windgeschwindigkeit Tegel Episo de 3

