

7 Zusammenfassung und Ausblick

Am Ende der Arbeit steht die Aufgabe, die Ergebnisse zusammenzufassen. Dabei sind besonders der eigenständige und neuartige Anteil und die weitergebbaren konkreten Erfahrungen herauszuarbeiten. Der Abschluss ist ein Ausblick auf durch die Arbeit entstandene oder noch nicht beantwortete Fragen.

7.1 Was wurde gemacht?

Gegenstand der Arbeit sind die Felder der bodennahen Spurenstoffimmissionen von Ozon, NO₂, NO, SO₂ und Feinstaub (PM₁₀) in Deutschland. Die hier betrachteten Immissionswerte stammen zum einen aus den operationellen Luftgütemessnetzen der Bundesländer, zum anderen wurden sie mit dem Eulerschen Chemie-Transport-Modell REM/Calgrid simuliert. Die horizontale Auflösung der Modellfelder beträgt 0.5° geografische Länge mal 0.25° Breite (ca. 25*25 km²).

Der grundlegende methodische Ansatz der Arbeit ist die Gegenüberstellung und die Kombination beider Informationsquellen zum Zweck der klimatologischen Zusammenschau, der Modellevaluierung und der Analyse bzw. der Datenassimilation.

Unter dem Begriff „Analyse“ versteht man eine räumliche Interpolation der Beobachtung durch die Kombination mit einem bereits vorgegebenen Feld. Im Fall dieser Arbeit ist das immer ein vom Modell REM/Calgrid berechnetes Feld. Die Analyse ist ein wichtiger Bestandteil der Datenassimilation, da sie die Beobachtungen in das Modellfeld einfügt. Man spricht von „passiver Datenassimilation“, wenn die analysierten Felder nicht aktiv in der Modellrechnung weiterverwendet werden.

In Kapitel 2 wurde eine Klassifikation von stoffspezifischen Immissionsregimes erarbeitet, die auf den mittleren Werten und den typischen Tagesschwankungen der Beobachtungen beruht. Die Klassifikation erfolgte mit Hilfe eines robusten hierarchischen Clusterverfahrens. Je nach Stoff werden dabei die Regimes „Berg“, „Land“, „Vorstadt“, „Stadt“, „belastete Stadt“, „Straße“, „Straße extrem“ oder fünf unterschiedliche Belastungsstufen unterschieden. Die gewonnene Klassifikation stimmt für Ozon gut mit der offiziellen Umweltbundesamt-Klassifikation überein, die auf der Ozonimmission der Jahre 1990-96 beruht, und verfeinert diese. Die Klassifikationen der Messstationen für die anderen Stoffe stellen ein neues Ergebnis dar.

Die Klassifikation der Regimes wurde auf die Modellrechnung übertragen, so dass für jede modellierte Jahreszeitreihe ein Regime angegeben werden kann. Für eine angemessene Modellevaluierung ist die Kenntnis der Regimes von Beobachtung und Modellrechnung unerlässlich, aufgrund der unterschiedlichen Skalen und der überproportional hohen Anzahl von Beobachtungen in städtischen und verkehrsnahen Regimes.

Kapitel 3 enthält eine regimeorientierte Klimatologie von Beobachtungen und Modell-daten. Durch sie werden Unterschiede und Übereinstimmungen hinsichtlich der mittleren Belastung, der chemischen Kopplung und der Periodizität im Tages-, Wochen- und Jahresgang sowie der zwischenjährlichen Variabilität im Zeitraum 1995-2001 aufgezeigt. Das Modell und die Beobachtungen stimmen in ihrer zeitlichen Variabilität gut überein. Das Modell überschätzt etwas den Tagesgang und Jahresgang und unterschätzt den Wochengang.

Das Kapitel 4 befasst sich mit der Methodik von Analyse und Datenassimilation unter dem Blickwinkel der statistischen Besonderheiten der Immissionsdaten. Ein umfangreicher Literaturüberblick stellt wichtige Arbeiten zur Kartierung von Immissionsdaten, zur inhomogenen Kovarianzmodellierung und zur Assimilation von Immissionsmessungen in Chemie-Transport-Modelle vor. In einem theoretischen Teil wird auf die Beschreibung von räumlichen Zufallsprozessen und die Schätzung seiner Momente aus Raum-Zeit-Daten eingegangen. Weiterhin werden die Gleichungen der statistischen Analyse und verschiedener Formen der Datenassimilation diskutiert.

Das Grundproblem der statistischen Analyse ist die Bereitstellung der räumlichen Momente der Beobachtungen, der Modellrechnung bzw. die von deren Differenz (Beobachtungsinkremente). Diesem Problem ist das Kapitel 5 gewidmet. Für die Schätzung der Momente aus einer Stichprobe sind vereinfachende Annahmen zur Bildung eines Kovarianzmodells erforderlich. In der Arbeit werden ein homogenes terminbezogenes (A) und zwei inhomogene klimatische Kovarianzmodelle (B, C) entwickelt und miteinander verglichen.

Das homogene Kovarianzmodell A beruht auf den Beobachtungen eines Termins und liefert eine abstandsabhängige homogene Kovarianzfunktion für verschiedene Richtungssektoren. Es kann gut die zeitliche Variabilität der räumlichen Kovarianz abbilden, da es für jeden Termin neu ermittelt wird. Die inhomogenen Ansätze werden separat für jede Tagesstunde gewonnen; sie können jedoch die über den Tagesgang hinausgehende zeitliche Variabilität nicht erfassen. Sie beruhen auf stationspaarbezogenen Kovarianzwerten, die aus gefilterten Zeitreihendaten geschätzt werden. Das Kovarianzmodell B greift auf die abgeleiteten Regimes zurück und setzt sich aus homogenen Kovarianzfunktionen für jede Kombination von Regimes zusammen. Das inhomogene Kovarianzmodell C beruht auf einer Interpolation der Eigenvektoren der empirischen Kovarianzmatrix.

Wichtigstes praktisches Ergebnis der Kovarianzmodellierung ist die Quantifizierung der Standardabweichung eines unkorrelierten biasfreien Beobachtungsfehlers für alle Stationen. Der Beobachtungsfehler ist neben dem Messinstrumentenfehler ein Maß für die räumliche Repräsentativität der Messung. Der Betrag der Varianz des klimatischen Beobachtungsfehlers macht von ca. 20% für Ozon bis zu ca. 60% für NO der Gesamtvarianz der Beobachtungsinkremente aus. Der Bias zwischen Modell und Beobachtung wurde klimatisch stationsbezogen oder homogen für alle Stationen zu einem Termin ermittelt. Er zeichnet sich durch einen ausgeprägten Tagesgang aus, der auf einen zu schwachen vertikalen Austausch in der Nacht und zu starken Austausch während des Tages durch die Modellierung schließen lässt.

Weiterhin werden die mit Hilfe der Kovarianzmodelle erfassten räumlichen Strukturen und deren Anisotropie diskutiert. Die festgestellte Anisotropie der Kovarianz geht eher auf die Lage der Emissionszentren und der Messnetzanordnung als auf meteorologische Einflussfaktoren zurück. Für eine Testanwendung eines Kalman-Filters für

REM/Calgrid wurde dessen dynamische Kovarianzmodellierung mit der hier durchgeführten empirischen verglichen. Damit wurde eine Möglichkeit zur gezielten Verbesserung der Assimilationsleistung mit dem Kalman-Filter aufgezeigt.

Das 6. und letzte Kapitel widmet sich der Analyse von stündlichen Immissionsfeldern auf der Basis von Beobachtungen und Modellrechnungen. Die angestrebte horizontale Auflösung beträgt dabei ca. 15 km. Es werden verschiedene technische Fragestellungen der Implementierung, wie z. B. die Anzahl der beeinflussenden Stationen, die Biaskorrektur bzw. die Log-Transformation, diskutiert. Die Analyse erfolgt unter Verwendung der Kovarianzmodelle A, B und C und zusätzlich mit Kovarianzmodell A für die logarithmisch transformierten Werte. Um die Güte der Analyseleistung zu ermitteln, wurde ein cross-validation-Ansatz entwickelt. Er bewertet die Interpolationsgüte an den Stationsorten, ohne dass die zugehörige Beobachtung zur Interpolation verwendet wird. Dabei stellte sich heraus, dass damit keine bemerkenswerten Unterschiede zwischen der Analyse mit den unterschiedlichen Kovarianzmodellen festzustellen waren. Nur die logarithmische Transformation brachte für Ozon eine Verschlechterung der Ergebnisse. Die Gleichwertigkeit der Kovarianzmodelle kann an dem Umstand liegen, dass der cross-validation-Analysefehler bereits von ähnlicher Größe wie der geschätzte Beobachtungsfehler ist und somit keine wesentliche Verbesserung möglich ist. Weiterhin wurden nur 8 Stationen in der Umgebung des Analysepunktes verwendet, so dass die Unterschiede der Kovarianzmodelle für große Abstände nicht zum Tragen kommen. Der cross-validation-Fehler liegt jedoch über dem theoretischen Analysefehler, bei dessen Berechnung man davon ausgeht, dass das Kovarianzmodell perfekt ist. Folglich sind die Kovarianzmodelle nur eine Approximation. Es ist fraglich, inwieweit die „wahre“ Kovarianzfunktion aus den Stichproben ermittelt werden kann.

Abschließend werden die Karten der analysierten stündlichen Felder anhand ihrer Mittelwerte für das Jahr 2001 in Deutschland präsentiert. Dabei werden Karten mit den punktförmigen Beobachtungswerten und der Modellrechnung den Karten der vier Analysevarianten (A, A(log), B und C) als kontinuierliches Feld gegenübergestellt. Die Unterschiede sind für die verschiedenen Implementierungen mit Ausnahme der log-transformierten Daten gering. Das homogene Kovarianzmodell A und das terminbezogene C liefern sehr ähnliche Strukturen. Mit dem Kovarianzmodell B wird der ländliche Charakter über großen Teilen des Gebietes besser wiedergegeben, während die Werte in den urbanen Ballungsgebieten außerhalb des Ruhrgebietes zu niedrig erscheinen.

Neben diesen passiven Ansätzen wurde eine aktive Datenassimilation auf Basis des homogenen Kovarianzmodells A getestet. Die Karten der Jahresmittelwerte zeigen keine großen Unterschiede zum passiven Fall für das hier betrachtete deutsche Gebiet mit hoher Stationsdichte. Die passive Analyse ist von gleicher Güte, wie die aktive Verbesserung des Modellfeldes durch die Assimilation und seine dann weniger starke Korrektur in der Analyse zum Termin.

7.2 Was ist neu?

Die folgende Auflistung liefert eine Zusammenstellung der neuen Entwicklungen und Ansätze, die die Arbeit erbracht hat:

- Klimatologischer Ansatz für die Gegenüberstellung von Immissionsbeobachtung und Rechenergebnissen eines Chemie-Transport-Modells hinsichtlich ihrer ersten und zweiten statistischen Momente
- Klassifikation der deutschen Messstationen nach der NO₂, NO, SO₂ und PM10-Immission und nicht nur bezüglich des Ozons
- Ableitung von Immissionsregimes der Modellrechnung
- Modellevaluierung auf der Basis von Regimes für Erwartungswerte und die zeitliche und räumliche Variabilität
- Analyseverfahren für Immissionsdaten aus Modell und Beobachtung unter Berücksichtigung der Besonderheiten der Immissionsdaten (d. h. die räumliche Inhomogenität, die Überzahl der urbanen Messungen und die starke zeitliche Periodizität)
- Entwicklung und Vergleich von terminbezogenen homogenen und klimatischen inhomogenen räumlichen Kovarianzmodellen der bodennahen Spurenstoffkonzentration hinsichtlich der räumlichen und zeitlichen Variabilität
- Stationsbezogene Quantifizierung der Varianz des Beobachtungsfehlers für deutsche Immissionsmessungen
- Verfahren zur Evaluierung von Immissionskarten mit cross validation
- Vergleich zwischen der dynamischen Kovarianzmodellierung des Kalman-Filters und der empirischen geschätzten Kovarianz.

7.3 Was sind praktische Schlussfolgerungen?

Beobachtung:

- Die Höhe der Ozonmaxima ist regimeunabhängig, d. h. auch im Regime „Verkehr“ können sehr hohe Werte auftreten.
- PM10-Messungen haben eine hohe Variabilität, aber keinen ausgeprägten Tagesgang. Die stündlichen Werte können in der betrachteten Skala durch Tagesmittelwerte ersetzt werden, da diese wesentlich kleinere Beobachtungsfehler aufweisen.
- Relative Beobachtungsfehlermaße sind insbesondere für Ozon nicht empfehlenswert, absolute Angaben sind besser.
- Die Messstrategien einiger Bundesländer unterscheiden sich:
 - in den unteren Messbereichsgrenzen
 - im Anteil von Messungen in ländlichen Regionen
 - im Verhältnis der Belastungen verschiedener Stoffe untereinander

Modellierung, Datenassimilation:

- Fehler im vertikalen Austausch scheinen die wichtigste Ursache des Modellbias zu sein:
 - Zu starker Austausch tagsüber, zu schwacher Austausch nachts
 - Starke Antikorrelation des Bias von PM10 und Ozon
- Überbetonung des Ruhrgebietes als Immissionsschwerpunkt
- Der dynamische Ansatz des hier verwendeten Kalman-Filters liefert im Vergleich zu der empirischen Kovarianzmatrix zu schwache und viel zu großräumig korrelierte Kovarianzmatrizen.

- Die Biaskorrektur zwischen Modell und Beobachtung besitzt große Bedeutung für die statistische Analyse der Immissionsdaten.

Technische Durchführung der Analyse:

- SVD ist immer notwendig bei der Lösung des Gleichgewichtes (siehe Kapitel 5.2.5.3).
- Robuste Ansätze zur Schätzung bewähren sich zur Kovarianzmodellierung.
- Die analytische Form des Kovarianzmodells (exponentiell, Gaußsch oder sphärisch) ist für die hier bearbeiteten Daten von geringer praktischer Bedeutung.
- Die Transformation mit dem Logarithmus, d. h. angenommene Lognormal-Verteilung, bringt im Allgemeinen keine besseren Analyseergebnisse.

7.4 Was bleibt zu tun?

Inhaltliche Fragestellungen:

- Kartierung weiterer Luftgütestandards der EU-Rahmenrichtlinie, d. h. neben den Jahresmittelwerten auch z. B. Maximal- oder AOT40-Werte, mit spezifischer cross validation.
- Analyseverfahren für die Immission mit höherer räumlicher Auflösung im urbanen Bereich bzw. die Kartierung der lokalen Überschreitung von Grenzwerten
- Untersuchung des Einflusses von Witterung und Emissionsänderungen auf die Immission der Jahre 1995-2001 mit Hilfe von Szenariorechnungen (gleiche Meteorologie für alle Jahre vs. keine Emissionsfortschreibung)
- Vertiefende Untersuchung von Besonderheiten der Beobachtungen mit Hilfe des Vergleichs von Regimes für unterschiedliche Stoffe und Jahre
- Untersuchung der Auswirkung der Beobachtungsdichte auf die Schätzung der Varianz der klimatischen Beobachtungsfehler.
- Untersuchung für eine optimale Messnetzdicke auf Basis der ermittelten Analysefehler
- Weitere Untersuchungen zum Zusammenhang zwischen Wetterlage und Modellfehler sowie den räumlichen Strukturen der Kovarianzfunktion
- Quantifizierung des systematischen Beobachtungsfehlers der Immissionsmessung und seiner Skalenabhängigkeit.

Datenassimilation und Modellierung:

- Methoden zur inhomogenen Biaskorrektur für Analyse und Datenassimilation, z. B. auf Basis von median polishing (Cressie, 1993)
- Überprüfung der Austauschverhältnisse (K_z , Mischungsschichtwachstum) durch „noise-parameter“-Analyse mit dem Kalman-Filter
- Verbesserung der aktiven Datenassimilation durch Beobachtungsoperatoren für die zweite Modellschicht
- Aktive Datenassimilation mit Optimaler Interpolation zur Erzeugung von Randwerten für die kleinräumige Modellierung

- Verbesserung des Beobachtungsoperator für PM10 bei aktiver Datenassimilation
- Klimatologische Verallgemeinerung der inhomogenen Kovarianzmodelle aus Kalman-Filter-Rechnung zur Verwendung in der Analyse ohne den hohen numerischen Aufwand des Kalman-Filters
- Untersuchung des Einflusses der mathematisch formalen Eigenvektoraufspaltung des RRSQRT-Ansatzes auf die physikalisch-chemische Eigenschaften des Modellzustandsvektors beim Kalman-Filter
- Verstärkung der Varianzen des Kalman-Filters durch direkte Assimilation der Beobachtungen in das prognostische Modellfeld und nicht in das akkumulierte Feld der Stundenmittelwerte