

# Evaluierung flächenhafter Daten der Luftschadstoffbelastung in Deutschland aus der Chemie-Transportmodellierung

S. Nordmann, A. Mues, S. Feigenspan

**ZUSAMMENFASSUNG** Zur Beurteilung der Luftqualität erstellt das Umweltbundesamt (UBA) auf Basis von Berechnungen mit dem Chemie-Transportmodell (CTM) REM-Calgrid (RCG) flächenhafte Konzentrationsfelder der mittleren deutschlandweiten Luftschatstoffssituation. CTM-Rechnungen weisen im Allgemeinen Unsicherheiten auf, die auf die Eingangsdaten, aber auch auf Unsicherheiten in der Prozessbeschreibung im Modell zurückgeführt werden können. Diese Unsicherheiten drücken sich in Abweichungen der Modellergebnisse zu den Luftschatstoffmessungen aus und können durch die Assimilation von Messdaten verringert werden. Für die RCG-Rechnungen hat sich dafür das Verfahren der Optimalen Interpolation (OI) bewährt. Zur Evaluierung des finalen Datenproduktes der mittleren flächenhaften Luftschatstoffbelastung in Deutschland wurde die Methode der Kreuzvalidierung verwendet, bei der unabhängige Daten für die Evaluierung genutzt werden. Die Modellwerte für die betrachteten Luftschatstoffe Stickstoffdioxid ( $\text{NO}_2$ ), Feinstaub ( $\text{PM}_{10}$ ) und Ozon ( $\text{O}_3$ ) können mit OI deutlich verbessert werden. Die mittleren prozentualen Abweichungen verringerten sich für  $\text{PM}_{10}$  von maximal -38 % ohne OI auf -7 % mit OI, für  $\text{NO}_2$  von maximal -42 % ohne OI auf 12 % mit OI und für  $\text{O}_3$  von maximal 30 % ohne OI auf 9 % mit OI. Die zeitliche Variabilität, d. h. das Auftreten und die Ausprägung von Spitzenkonzentrationen, konnte mit der OI für alle Schadstoffe ebenfalls deutlich besser wiedergegeben werden.

## Evaluation of area-related air quality data in Germany from chemistry-transport modelling

**ABSTRACT** For the assessment of the air quality, the German Environment Agency (UBA) produces concentration fields of the average air quality situation on the basis of simulations with the chemistry-transport model (CTM) REM-Calgrid (RCG). Such CTM simulations generally show uncertainties due to the input data and limited understanding of relevant processes in the model. These uncertainties express in deviations between raw model data and observations and may be reduced by applying data assimilation techniques. For the RCG simulations, the optimal interpolation (OI) technique was identified to be suitable for improving the model output. For the evaluation of the final data product, the cross-validation method was applied to compare an independent data set. The modeled values of nitrogen dioxide ( $\text{NO}_2$ ), particulate matter ( $\text{PM}_{10}$ ) and ozone ( $\text{O}_3$ ) could be considerably improved. The average percentage deviation could be reduced for  $\text{PM}_{10}$  from maximum -38% without OI to -7% with OI, for  $\text{NO}_2$  from maximum -42% without OI to 12% with OI and for  $\text{O}_3$  from maximum 30% without OI to 9% with OI. In addition, the temporal variability, i. e. the occurrence of peak values, was considerably improved for all pollutants by combining RCG model values with observations by applying the OI methodology.

## 1 Einleitung

Zur Berechnung der Konzentrationsfelder von Luftschatstoffen für ein Gebiet wie Deutschland werden häufig Chemie-Transportmodelle (CTM) verwendet. Diese Modelle simulieren die Ausbreitung und Bildung von Luftschatstoffen auf Basis von Emissionsdaten und meteorologischen Größen. Dabei wird eine Vielzahl von chemischen Umwandlungen und physikalischen Prozessen berücksichtigt. Die Modelle bieten damit die Möglichkeit,

- die Luftqualität für unterschiedliche Emissionsszenarien zu projizieren, z. B. Minderung des Schadstoffausstoßes in der Landwirtschaft,
- Verursacher für Luftverschmutzung zu identifizieren,
- die Luftqualität vorherzusagen sowie
- zunehmend als ein mögliches Werkzeug die Beurteilung der Luftqualität mit flächendeckenden Informationen und deren Entwicklungen auch im Hinblick auf die Einhaltung von Grenzwerten zu unterstützen.

Das Umweltbundesamt (UBA) führt jahresweise Ausbreitungsrechnungen mit dem CTM REM-Calgrid (RCG) [1; 2] zur Be-

stimmung der Jahresmittelwerte flächenhafter Konzentrationsfelder von Luftschatstoffen für Deutschland durch. Das RCG-Modell hat sich in mehreren Studien hinsichtlich der Qualität der Modellierungsergebnisse im Vergleich zu anderen CTM bewährt [3; 4]. Für die RCG-Ausbreitungsrechnungen werden für Deutschland Emissionsdaten aus der jährlichen Emissionsberichterstattung [5] des UBA verwendet, die räumlich mit dem Gridding Emission Tool for ArcGIS (GRETA) [6] verteilt wurden. Für Gebiete außerhalb von Deutschland wird ein skalierter europäischer Emissionsdatensatz aus dem Projekt Luft 2020/2030 [7] verwendet. Die meteorologischen Eingangsdaten stammen aus den Modellen Icosahedral Nonhydrostatic (ICON) und Consortium for Small-scale Modeling (COSMO) [8] des Deutschen Wetterdienstes. Die Ausbreitungsrechnungen werden für drei unterschiedlich große und ineinander liegende Modellgebiete mit zunehmend höherer Auflösung durchgeführt. So kann eine Modellauflösung von ca.  $2 \times 2 \text{ km}^2$  über Deutschland erreicht werden. In der Simulation werden eine Vielzahl chemischer Verbindungen z. B. Stickstoffdioxid ( $\text{NO}_2$ ), Ammoniak ( $\text{NH}_3$ ), Schwefeldioxid ( $\text{SO}_2$ ) sowie Partikelbestandteile wie elementarer Kohlenstoff (EC) und organischer Kohlenstoff (OC) berücksichtigt. Die auf

dieser Datengrundlage simulierten stündlichen Konzentrationsfelder weichen abhängig vom Luftschadstoff unterschiedlich stark von den Messungen der Messnetze der Bundesländer ab. Für den Vergleich werden Daten mit zur Modellauflösung passender räumlicher Repräsentativität verwendet. Ursachen für die Abweichungen sind beispielsweise Unsicherheiten in der Prozessbeschreibung und den Modelleingangsdaten. Die auf Basis von Modellrechnungen erzeugten flächenhaften Konzentrationsfelder werden als Datenprodukte im Kartendienst des UBA [9] veröffentlicht.

Im Folgenden wird der Fokus auf die Luftschadstoffe Feinstaub ( $PM_{10}$ ), Stickstoffdioxid ( $NO_2$ ) und Ozon ( $O_3$ ) gelegt. Die Berechnungen erfolgten für das Jahr 2018.

## 2 Methode der optimalen Interpolation (OI)

Um die Qualität der Modellierungsergebnisse zur erhöhen, d. h. die Abweichungen zwischen Modell- und Messwerten zu verringern, werden die modellierten Konzentrationsfelder nachträglich mit der Methode der Optimalen Interpolation (OI) [10] mit stündlichen Messungen nivelliert. Bei der OI werden räumliche Beziehungen der Messungen untereinander quantifiziert und mögliche Messfehler berücksichtigt. Die Klassifizierung und die Einstufung des Gebietes der Messungen erfolgt in der Verantwortung der Messnetze der Bundesländer nach europäisch einheitlichen Regelungen [11; 12]. Für die OI und deren Evaluierung werden Messungen der Stationsklassen ländlicher Hintergrund, städtischer Hintergrund, vorstädtischer Hintergrund und Verkehr herangezogen. Jeder Beobachtung wird dabei für die OI entsprechend der Stationsklassifizierung ein Einflussbereich zugewiesen. Diese Informationen werden mit den RCG-Modellkonzentrationsfeldern kombiniert, um die Modellwerte räumlich differenziert zu korrigieren. Die OI modifiziert den modellierten Zustand der Atmosphäre dahingehend, dass sich die modellierten Konzentrationen den beobachteten Werten annähern. Ein Nachteil ist, dass diese Annäherung nicht auf physikalisch-chemischen Gesetzmäßigkeiten beruht, sondern rein statistischer Natur ist. Daraus kann geschlussfolgert werden, dass CTM-Simulationen mit OI nicht verwendet werden sollten, wenn damit beispielsweise auf den Einfluss einzelner Emissionsquellen rückgeschlossen werden soll. Der Vorteil der RCG-Rechnung mit OI liegt insbesondere in der präzisen Erfassung der mittleren Luftschadstoffkonzentrationen. Die Ergebnisse können somit verwendet werden, um sich einen Überblick über die großräumige Luftscha-dostsituation zu verschaffen. Außerdem eignen sich die Daten für weiterführende Auswertungen zur Luftschadstoffexposition der Bevölkerung mit nachgeschalteten Ableitungen der Krankheitslasten [13].

Für die Anwendung der OI am UBA wird die Software FLADIS [14] verwendet. Eine Beschreibung der zugrundeliegenden Theorie wird im FLADIS-Benutzerhandbuch gegeben.

## 3 Methode der Evaluierung

Da bei der OI die Messdaten direkt einfließen, kann keine unabhängige Evaluierung des RCG-OI-Produktes mit Messungen erfolgen. Vielmehr muss die Methode der Kreuzvalidierung angewendet werden. Bei dieser Methode werden für jedes betrachtete Stundenmittel der Konzentration mehrere OI-Rechnungen unter Vernachlässigung der Daten jeweils einer Messstation durchge-

führt. Der Modellwert wird anschließend mit dem bei der OI nicht berücksichtigten Messwert verglichen. Diese in der Richtlinie VDI 4280 Blatt 5 [15] beschriebene Methode wird auch als „leave one out“-Verfahren bezeichnet und ist ebenfalls in FLADIS implementiert. Die Datenpaare aus Modell (M) und unabhängigen Messungen (O) werden mit der Metrik mittlere Abweichung (Bias)

$$Bias = \bar{M} - \bar{O} \quad (1)$$

als Mittelwert der Beobachtungen mit

$$\bar{O} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O_i \quad (2)$$

$$\text{und } \bar{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i \text{ verglichen.} \quad (3)$$

Weitere in dieser Studie verwendete statistische Maßzahlen sind der normierte Bias (mittlere Abweichung normiert mit dem Mittelwert der Messungen),

$$NMB = \frac{\bar{M} - \bar{O}}{\bar{O}} \quad (4)$$

die mittlere quadratische Abweichung (RMSE)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (M_i - O_i)^2} \quad (5)$$

und das Bestimmtheitsmaß  $R^2$ .

Zur besseren Einordnung der berechneten Metriken wurden diese zusätzlich für die Modellrechnung ohne OI und Kreuzvalidierung bestimmt.

Die europäische Luftqualitätsrichtlinie 2008/50/EG sieht derzeit für Modellrechnungen einen Modellqualitätsindikator vor, der als maximale Abweichung bezeichnet wird. Das Modellqualitätsziel wird beispielsweise für die modellierten  $NO_2$ -Stundenmittelwerte als maximale Abweichung von 50 % im Bereich des Grenzwertes festgelegt. Der Vergleich zwischen Modell und Messungen erfolgt dabei unabhängig vom betrachteten Zeitpunkt. Zur Erweiterung dieses wenig ambitionierten Modellqualitätsziels wurde vom Forum for air quality modelling in Europe (FAIRMODE) ein Modellqualitätsindikator (MQI) entwickelt, der aus der Abweichung zwischen Messungen und Modell sowie anschließender Normierung mit der Messunsicherheit berechnet wird. Die Messunsicherheit wird dabei mit einem Faktor skaliert, der die Strenge des MQI bestimmt. Der MQI wird an einem Modellqualitätsziel (MQO) gemessen, das zur Erfüllung kleiner als 1 sein muss. Die Messunsicherheit wird schadstoffspezifisch parametrisiert. Die Methodik wird im Detail in [16] beschrieben und ist Gegenstand aktueller Normungsaktivitäten auf europäischer Ebene in CEN/TC 264/WG43 [17]. Die Methodik ist im Delta-Tool [18] aus FAIRMODE implementiert.

Die Modellqualität kann mit diesen Metriken nur im Umfeld der Messstandorte untersucht werden. In Gebieten, in denen das Messnetz größere Lücken aufweist, können Aussagen zur Modellqualität nur anhand von Analogieschlüssen getroffen werden.

## 4 Ergebnisse

Die Untersuchung der Modellqualität für die Luftschadstoffe  $NO_2$ ,  $PM_{10}$  und  $O_3$  erfolgte auf Basis der stündlichen Modell- und Messwerte und wurde für alle Stationen für die Belastungsregime ländlicher, urbaner und suburbaner Hintergrund erstellt.

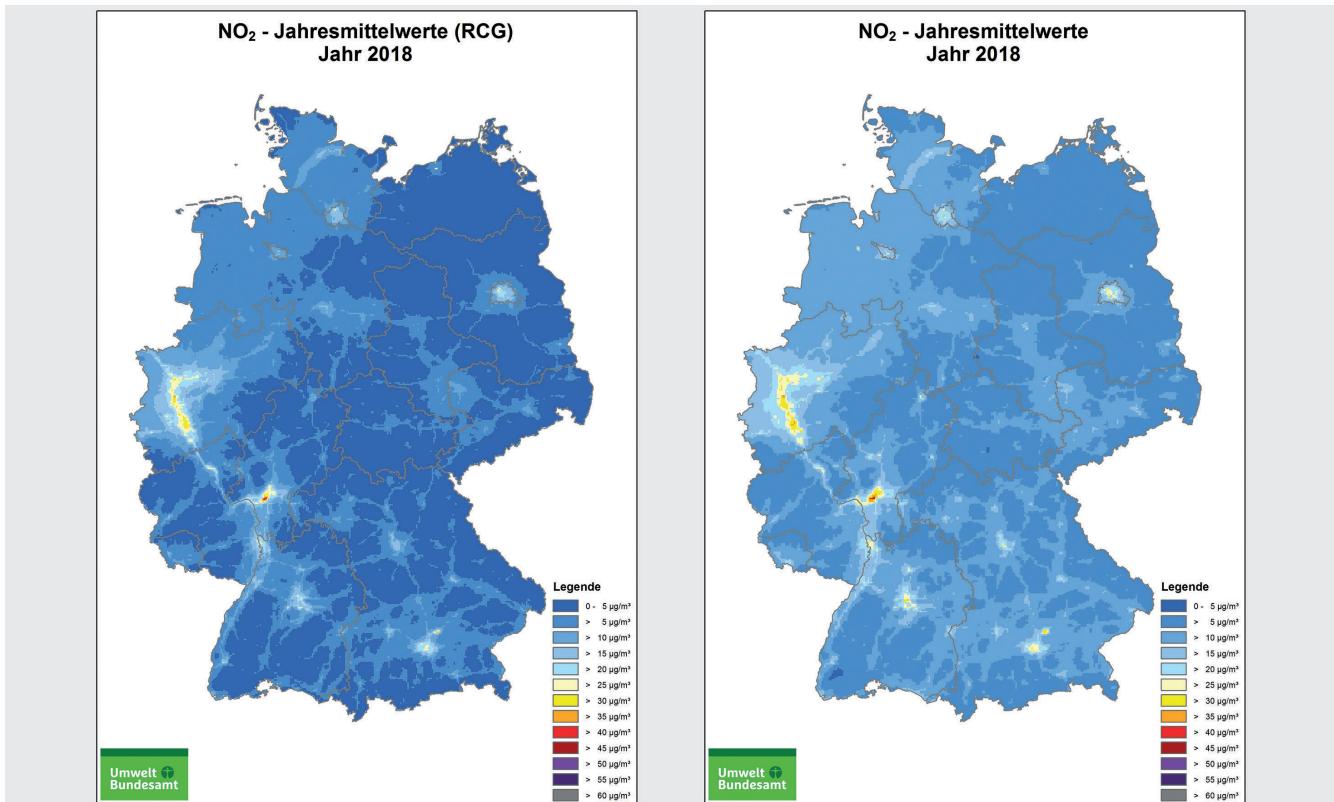


Bild 1. Kartendarstellung der NO<sub>2</sub>-Jahresmittelwerte aus den Ergebnissen der RCG-Simulation ohne OI (links) und mit OI (rechts). Quelle: Umweltbundesamt

Zusätzlich wurden die Auswertungen auch für Verkehrsstationen durchgeführt, deren Messungen allerdings nur für Gebiete aussagekräftig sind, die deutlich kleiner sind als die Gitterweite der RCG-Rechnung von 2 x 2 km<sup>2</sup>. Für den Vergleich wurden alle verfügbaren Messungen für jede Stunde über alle Stationen im jeweiligen Belastungsregime gemittelt und für diese mittleren Zeitreihen die in Abschn. 3 beschriebenen Metriken berechnet. Für den Vergleich wurden sowohl die RCG-Rechnungen ohne OI als auch die Rechnungen mit OI herangezogen. Zur Veranschaulichung des Effektes der OI wird in Bild 1 beispielhaft ein Vergleich der mittleren NO<sub>2</sub>-Konzentrationsfelder mit und ohne OI im Jahr 2018 gezeigt. Die Karten verdeutlichen, dass die OI die RCG-Modellwerte unter Beibehaltung der räumlichen Strukturen nahezu überall erhöht. Die Erhöhung ist vor allem im ländlichen Hintergrund ausgeprägt.

#### 4.1 NO<sub>2</sub>

Die Modellergebnisse für NO<sub>2</sub> werden beispielhaft anhand einer Zeitreihe der stündlich gemessenen und modellierten Konzentrationen an der zufällig ausgewählten sächsischen Station Glauchau (städtischer Hintergrund) im Januar 2018 in Bild 2 dargestellt. Die Messstation befindet sich in einer städtischen Umgebung mit lockerer Bebauung ohne größere Emissionsquellen in unmittelbarer Nähe. Das Gebiet ist schwach orografisch gegliedert, sodass die meteorologische Situation mit der räumlichen Auflösung der Eingangsdaten in die RCG-Modellrechnung hinreichend genau beschrieben werden kann. Dennoch sind die Werte aus der RCG-Modellrechnung ohne OI deutlich geringer als die Messwerte, was vermutlich auf Unsicherheiten im eingeschlossenen Emissionskatastet zurückgeführt werden kann.

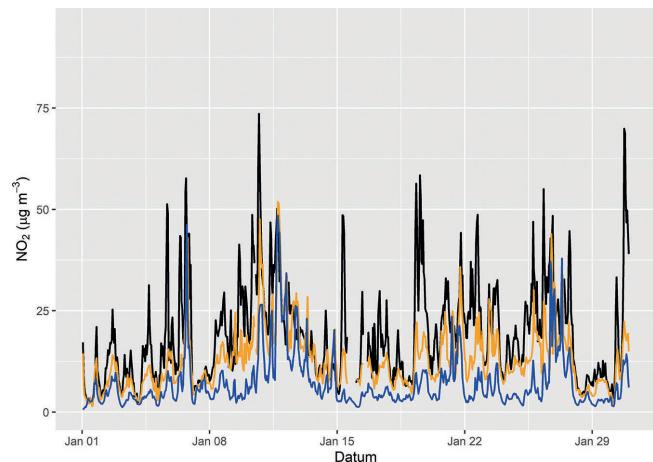
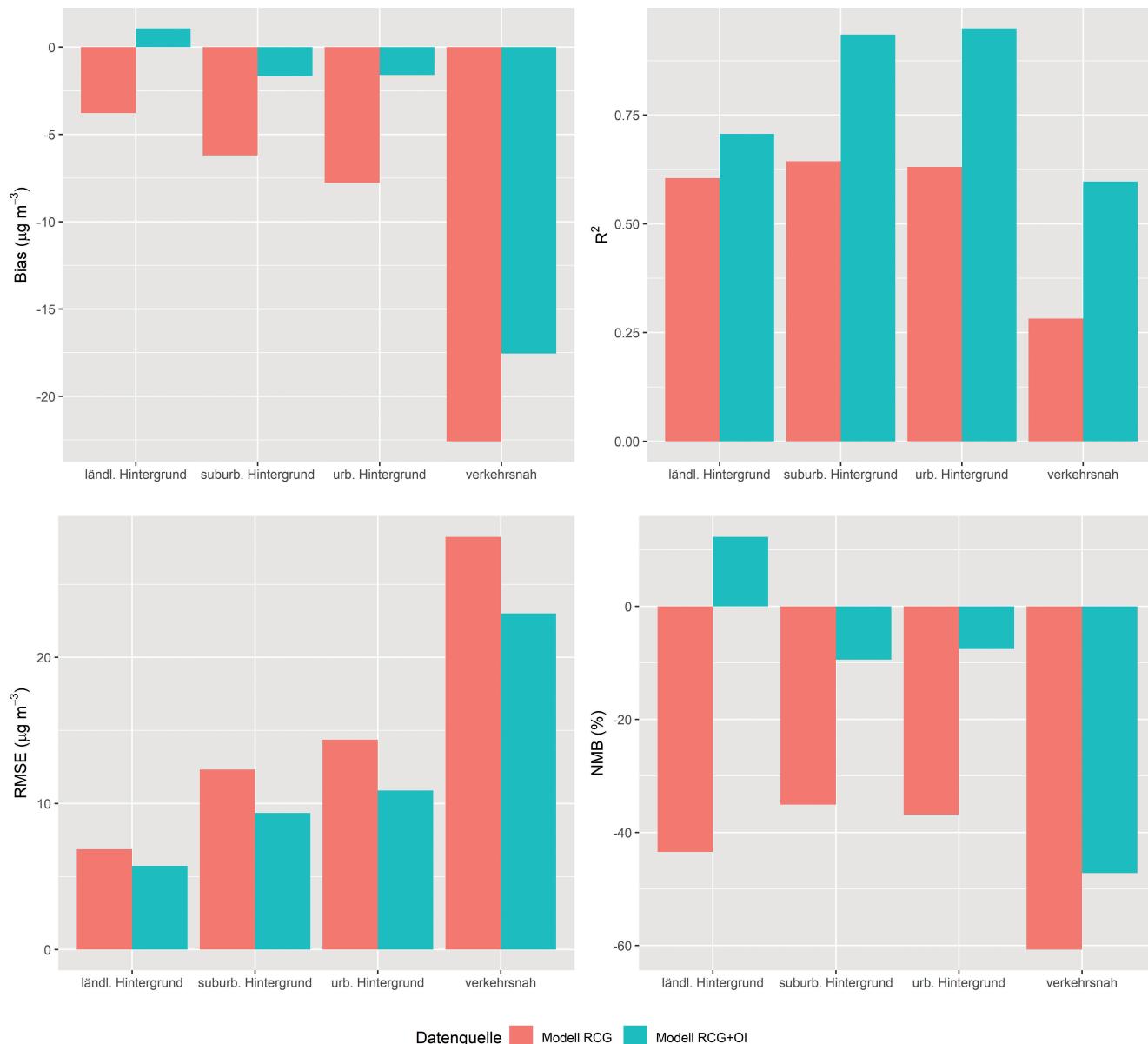


Bild 2. Zeitreihe der stündlichen NO<sub>2</sub>-Konzentrationen in µg/m<sup>3</sup> im Januar 2018 an einer sächsischen Station im urbanen Hintergrund (Glauchau) für Messung (schwarz), Modell (blau) und Modell mit optimaler Interpolation (orange). Quelle: Umweltbundesamt

Die Werte aus der Kreuzvalidierung der RCG-OI-Rechnung nähern sich hingegen den beobachteten Werten an.

Zur Quantifizierung der Abweichungen zwischen Modell- und Messwerten wurden die Metriken aus Abschn. 3 auf Basis des deutschlandweiten Datensatzes berechnet (Bild 3). Der mittlere Modell-Bias ist in Bild 3 für die unterschiedlichen Belastungsregime dargestellt. Für die Bereiche im städtischen Hintergrund werden die Messungen vom RCG-Modell ohne OI um bis zu 8 µg/m<sup>3</sup> unterschätzt. Mit OI hingegen verbessert sich dies deutlich auf Werte von höchstens 2 µg/m<sup>3</sup>. Dies entspricht im normierten Fall – wie in Bild 3 ersichtlich – bis zu 40 % für RCG



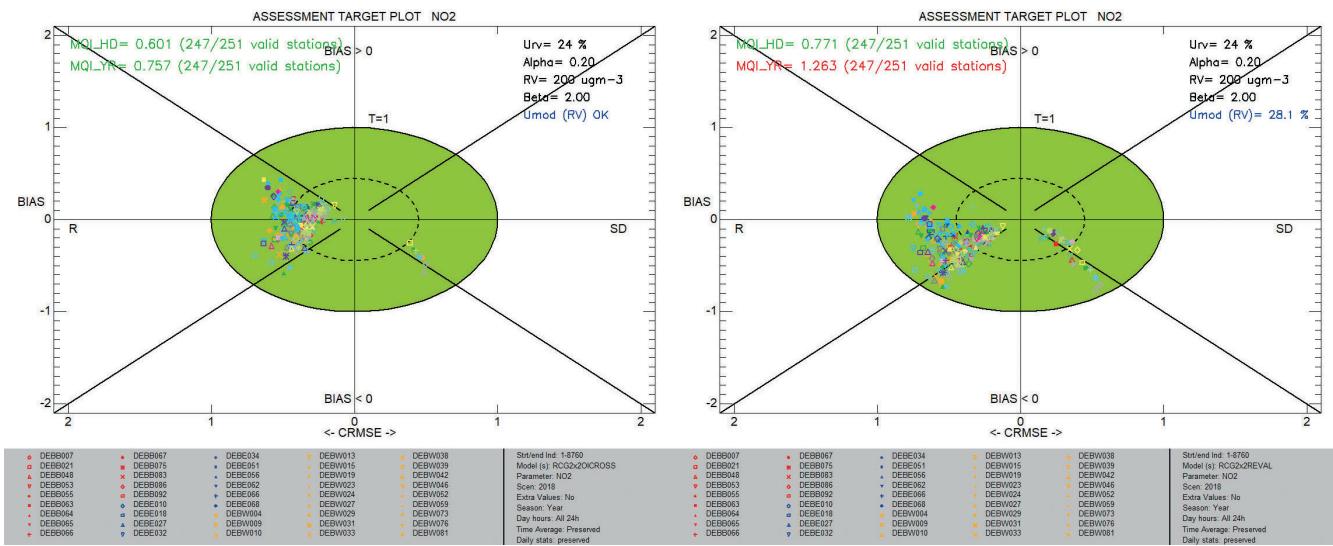
**Bild 3.** Zusammenfassende Statistik zum Vergleich von Modell- und Messwerten für  $\text{NO}_2$ , berechnet aus den Daten für die einzelnen Stationen und gemittelt für unterschiedliche Belastungsregime in Deutschland für 2018. Gezeigt werden die mittlere Abweichung (Bias) oben links, das Bestimmtheitsmaß ( $R^2$ ) oben rechts, die mittlere quadratische Abweichung (RMSE) unten links und die normierte mittlere Abweichung (NMB) unten rechts. Quelle: Umweltbundesamt

und höchstens 5 % für RCG mit OI. Für den ländlichen Hintergrund führt die OI zu einer leichten Überschätzung der Werte, deren Ursache im Rahmen dieser Untersuchung nicht abschließend geklärt werden konnte. Deutlich schlechter wird der Vergleich für die Verkehrsstationen, da das Modell nicht in der Lage ist, die räumlichen Strukturen entsprechend aufzulösen.

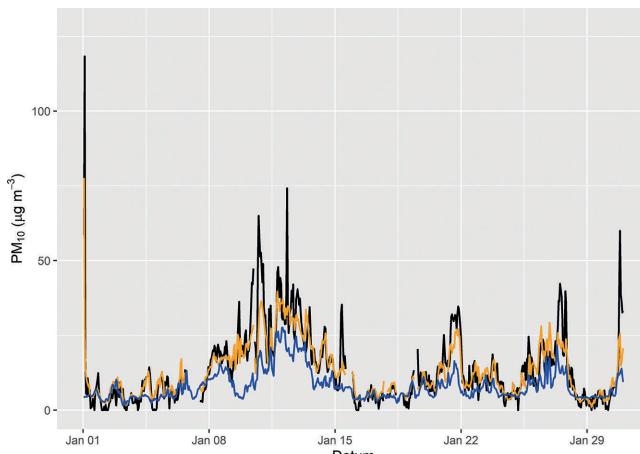
Dies führt zu einer Unterschätzung von  $23 \mu\text{g/m}^3$  (60 %) ohne und  $17 \mu\text{g/m}^3$  (46 %) mit OI. Die Methode ist demzufolge nicht für die Analyse der kleinräumigen  $\text{NO}_2$ -Variabilität in Straßenschluchten geeignet. Ähnliche Schlussfolgerungen können aus der Auswertung der mittleren quadratischen Abweichungen zwischen Modell und Messung gezogen werden (Bild 3).

Mit den zuvor diskutierten Metriken können die absoluten Konzentrationen aus der Modellrechnung im Vergleich zu den Messungen bewertet werden. Dies ist vor allem für jährliche Mit-

telwerte relevant. Für die Bewertung der Qualität des Modells hinsichtlich der Wiedergabe der zeitlichen Variabilität innerhalb eines Jahres (z. B. Episoden mit höherer Belastung) bietet sich dagegen die Berechnung des Bestimmtheitsmaßes ( $R^2$ ) zwischen Modell und Messungen an. Die mittleren Werte für das Bestimmtheitsmaß für die unterschiedlichen Belastungsregime sind ebenfalls in Bild 3 dargestellt. Für den ländlichen und städtischen Hintergrund liegt das jeweilige Bestimmtheitsmaß für RCG ohne OI bei etwa 0,60. Die zeitlichen Verläufe der gemessenen und modellierten Konzentrationen weisen damit eine gewisse Ähnlichkeit auf. Mit OI werden die Modellwerte, insbesondere für den urbanen Hintergrund, deutlich besser und erreichen ein Bestimmtheitsmaß von über 0,90. Somit wird mit der OI die zeitliche Variabilität für den ländlichen und städtischen Hintergrund sehr gut erfasst. Für die verkehrsnahen Stationen werden



**Bild 4.** Target-Diagramm aus dem FAIRMODE Delta-Tool mit Modellqualitätsindikator (MQI) für stündliche Werte (HD) und Jahresmittelwerte (YR) in Deutschland für 2018. Das linke Diagramm zeigt die Auswertung der RCG-Rechnung mit OI, das rechte ohne OI. Quelle: Umweltbundesamt



**Bild 5.** Zeitreihe der stündlichen PM<sub>10</sub>-Konzentrationen in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  im Januar 2018 an einer sächsischen Station im urbanen Hintergrund (Glauchau) für Messung (schwarz), Modell (blau) und Modell mit optimaler Interpolation (orange). Quelle: Umweltbundesamt

die Bestimmtheitsmaße mit OI ebenfalls besser und liegen bei etwas unter 0,60 im Vergleich zu 0,25 ohne OI.

Eine typische Darstellungsart des MQI aus Abschn. 3 ist das Target-Diagramm, das für die RCG-Rechnungen mit und ohne OI in **Bild 4** gezeigt wird. Der MQI liegt für die RCG-Simulation ohne OI für die Stundenwerte bei 0,77. Für die Berechnung mit OI ist der MQI-Wert mit 0,60 noch etwas besser. Das MQO ist somit in beiden Fällen erfüllt. Für die Jahresmittelwerte ist das MQO nur für die RCG-Rechnung mit OI erfüllt. Die Ursache für den Unterschied zu stündlichen Werten liegt darin, dass die Messunsicherheit, die für die Normierung des MQI verwendet wird, für Jahresmittelwerte kleiner ist als für die Stundennmittelwerte.

#### 4.2 PM<sub>10</sub>

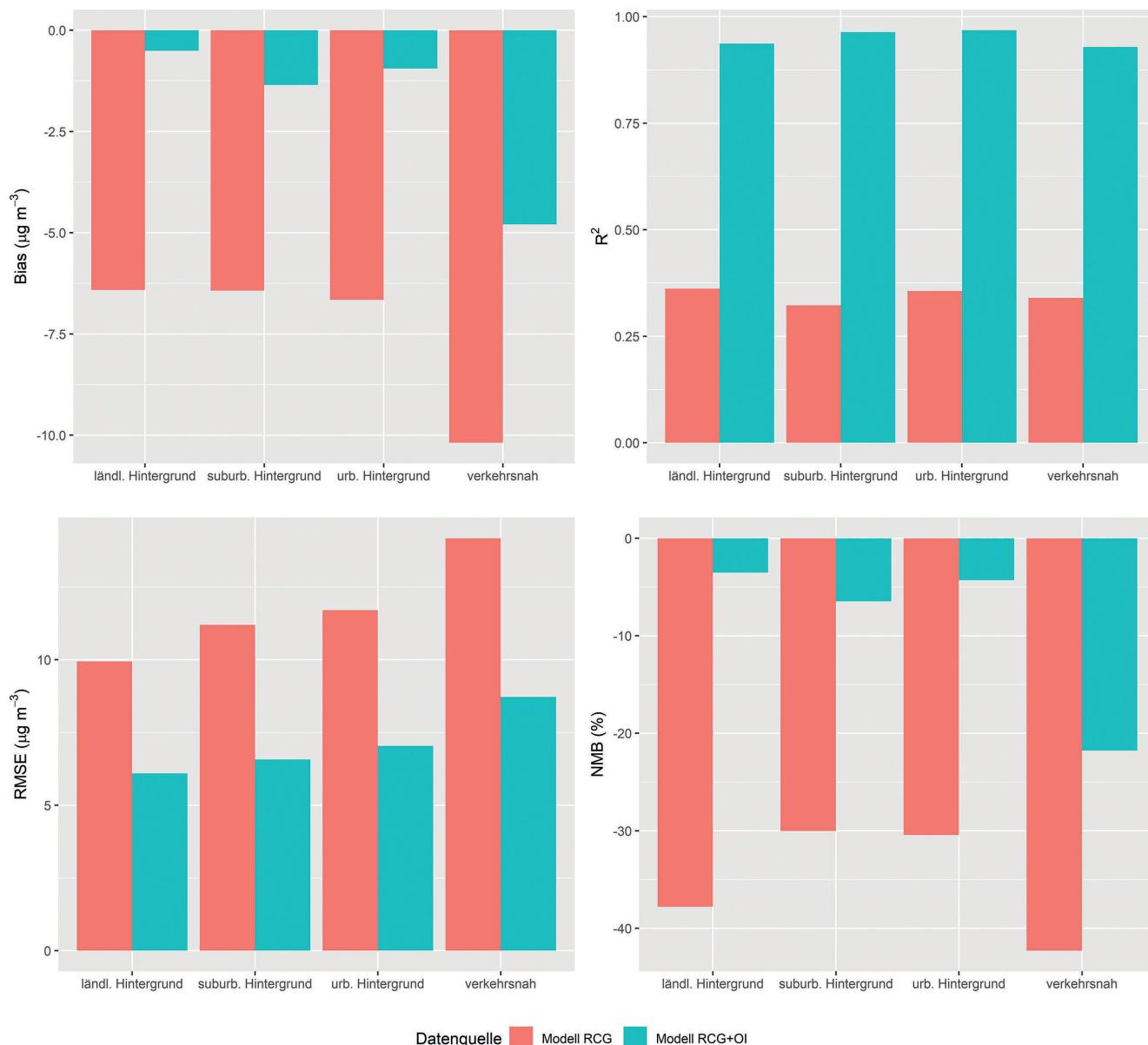
Die Evaluierung der RCG-Rechnung mit OI wurde analog zu NO<sub>2</sub> auch für PM<sub>10</sub> durchgeführt. In **Bild 5** sind beispielhaft die an der Station Glauchau im urbanen Hintergrund gemessenen und modellierten Zeitreihen der PM<sub>10</sub>-Konzentration im Januar

2018 dargestellt. Der Zeitraum war geprägt von Episoden mit höheren Feinstaubwerten, die auch das RCG-Modell simuliert. Die Feinstaubepisoden können teilweise auf lokale Emissionsquellen in unmittelbarer Nähe der Messstation aber auch auf Quellen in größerer Entfernung zurückgeführt werden, da Feinstaub auch über größere Distanzen in der Atmosphäre transportiert werden kann. Die Spitzenkonzentrationen – einschließlich der an Silvester – können dabei nicht wiedergegeben werden. Deutlich besser werden dagegen die Konzentrationen vom RCG-Modell mit OI erfasst.

In **Bild 6** sind die aggregierten Auswertungen des Bias, normierten Bias, R<sup>2</sup> und RMSE dargestellt. Das RCG-Modell unterschätzt die an ländlichen und urbanen Hintergrundstationen gemessenen PM<sub>10</sub>-Konzentrationen mit ca. 6  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ . Die normierten Abweichungen liegen bei Werten zwischen -30 und -40 %. Mit der RCG-Rechnung mit OI werden die gemessenen Konzentrationen um etwa 1  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  (5 %) unterschätzt. Die größten Abweichungen werden für verkehrsnahen Standorte ermittelt, die für die reine RCG-Rechnung bei -40 % und für RCG mit OI bei etwa -20 % liegen. Die RCG-OI-Karte ist damit auch für PM<sub>10</sub> im verkehrsnahen städtischen Bereich ungeeignet.

Die zeitliche Variabilität der stündlichen PM<sub>10</sub>-Werte wird vom RCG-Modell mit R<sup>2</sup> von maximal 0,40 für alle Belastungsregime wiedergegeben. Die Ergebnisse sind für die RCG-OI-Rechnung mit R<sup>2</sup> über 0,90 für alle Belastungsregime besser. Auch die zeitliche Variabilität an verkehrsnahen Stationen wird vergleichsweise gut wiedergegeben. Eine mögliche Ursache kann in dem Umstand begründet sein, dass Feinstaub im Unterschied zu NO<sub>2</sub> über größere Distanzen transportiert werden kann und damit eine großräumigere Ausprägung aufweist. Quellen im verkehrsnahen Bereich, z. B. aus Reifenabrieb, liefern zwar einen lokalen Beitrag, den das RCG-Modell nicht erfasst, dies wird aber durch die nachgeschaltete OI kompensiert.

Die Target-Diagramme für PM<sub>10</sub> sind in **Bild 7** dargestellt. Für die RCG-Rechnung ohne OI wird das Modellqualitätsziel sowohl für die stündlichen als auch für die jährlichen Werte knapp verfehlt. Im Gegensatz dazu wird das Modellqualitätsziel für die RCG-Rechnung mit OI mit MQI kleiner 0,50 erfüllt.



**Bild 6.** Zusammenfassende Statistik zum Vergleich von Modell- und Messwerten für PM<sub>10</sub> berechnet aus den Daten für die einzelnen Stationen und gemittelt für unterschiedliche Belastungsregime in Deutschland für 2018. Gezeigt werden die mittlere Abweichung (Bias) oben links, das Bestimmtheitsmaß (R<sup>2</sup>) oben rechts, die mittlere quadratische Abweichung (RMSE) unten links und die normierte mittlere Abweichung (NMB) unten rechts. Quelle: Umweltbundesamt

#### 4.3 Ozon

Die Ozonkonzentration in der Außenluft folgt aufgrund der strahlungsabhängigen Ozonchemie üblicherweise einem ausgeprägten Tagesgang mit höheren Werten am Tag und niedrigeren Werten in der Nacht. In **Bild 8** sind Zeitreihen der modellierten und gemessenen Ozonkonzentrationen an einem zufällig ausgewählten vorstädtischen Standort in Elsterwerda in Deutschland für August 2018 dargestellt. Die Messstation befindet sich in einem vorstädtischen Wohngebiet in ca. 100 m Entfernung von einer Bundesstraße als wesentliche Emissionsquelle. Dieser Standort wurde für den Vergleich mit den Modelldaten herangezogen, da die sommerlichen Ozonspitzenkonzentrationen aufgrund der Ozonchemie in Verbindung mit Stickoxiden aus dem Verkehr insbesondere im städtischen und vorstädtischen Hinter-

grund auftreten. Das RCG-Modell ohne OI erfasst den zeitlichen Verlauf der Messungen, gibt die Minimal- und Maximalwerte jedoch nicht korrekt wieder.

Mit der OI werden insbesondere die täglichen Spitzenkonzentrationen besser erfasst. Eine Auswertung der maximalen 8-Stunden-Mittelwerte in den Sommermonaten Juni, Juli und August ergab, dass das RCG-Modell für ländliche und städtische Hintergrundstationen um etwa 15 % unterschätzt. Mit der OI liegt die Unterschätzung des Modells bei nur noch etwa 8 %. Die OI führt damit auch zu einer deutlichen Verbesserung bei der Erfassung von Überschreitungstagen des maximalen 8-Stunden-Mittelwertes von 120 µg/m<sup>3</sup>.

Der absolute und normierte Modellbias für die unterschiedlichen Belastungsregime und für alle Stundenmittelwerte im Jahr

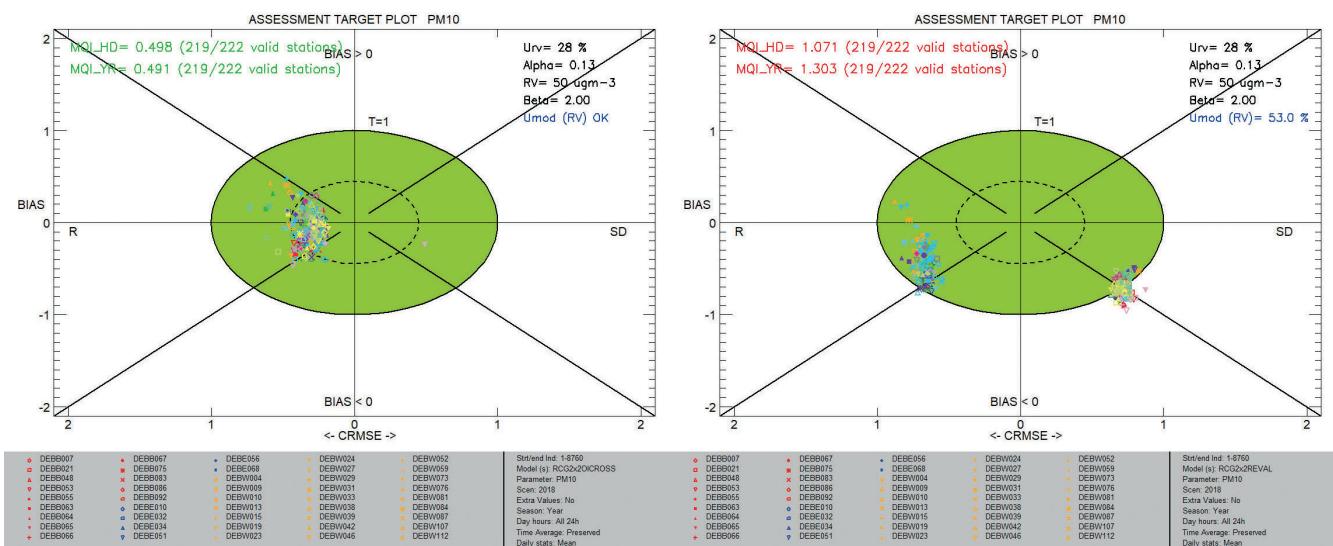


Bild 7.Target-Diagramm aus dem FAIRMODE Delta-Tool mit Modellqualitätsindikator (MQI) für stündliche Werte (HD) und Jahresmittelwerte (YR) in Deutschland für 2018. Das linke Diagramm zeigt die Auswertung der RCG-Rechnung mit OI, das rechte ohne OI. Quelle: Umweltbundesamt

sind in Bild 9 dargestellt. Im Falle der RCG-Rechnung ohne OI ergibt sich für die ländlichen und städtischen Hintergrundstationen eine Abweichung von bis zu 30 % im Mittel über alle Stundewerte. Dies ist hauptsächlich auf die Überschätzung der nächtlichen Ozonminima zurückzuführen. Mit OI kann die RCG-Rechnung deutlich verbessert werden, so dass die Abweichung im Mittel nur noch bei höchstens 10 % liegt. Für die wenigen Verkehrsstationen ergibt sich für beide Modellrechnungen eine deutlich höhere positive Abweichung. Wie bereits für PM<sub>10</sub> und NO<sub>2</sub> festgestellt wurde, ist das Modell aufgrund der Auflösung ungeeignet, die kleinräumige Variabilität an verkehrsnahen Standorten wiederzugeben. In Bild 9 ist zudem das Bestimmtheitsmaß zwischen Ozonmessung und Modellrechnungen dargestellt. Darin wird deutlich, dass sich mit der OI die Simulation der zeitlichen Variabilität deutlich verbessert. Mit der OI zeigt sich ein sehr guter statistischer Zusammenhang mit R<sup>2</sup> > 0,90 für alle Belastungsregime. Für die Modellrechnung ohne die OI liegt R<sup>2</sup> dagegen bei 0,60. Der Modellqualitätsindikator nach FAIRMODE wird für Ozon für die maximalen 8-Stunden-Mittelwerte berechnet (Bild 10). Die Werte von MQI zeigen, dass die Korrektur mittels OI zu besseren Modellergebnissen führt. MQO ist aber auch für die RCG-Rechnung ohne OI erfüllt.

## 5 Ausblick

Die RCG-Rechnungen basieren gegenwärtig auf aktuellen nationalen Emissionen, allerdings besteht für die europäischen Daten außerhalb Deutschlands Aktualisierungsbedarf. Für diese Eingangsdaten ist ein Update auf anthropogene Emissionen aus dem Copernicus Atmosphärendienst (CAMS) [19] vorgesehen. Dieser Emissionsdatensatz basiert auf aktuelleren Informationen zur räumlichen Verteilung der Quellen als die derzeit in RCG verwendeten Daten. Die Emissionen aus dem CAMS basieren außerdem auf nationalen Berichterstattungen und aktuellen wissenschaftlichen Erkenntnissen. Sie werden für den operativen Betrieb der CAMS-Modelle regelmäßig aktualisiert. Die sektoralen und länderspezifischen Zeitprofile (Jahres-, Wochen- und Tagesgänge) der Emissionen im RCG-Modell werden aktua-

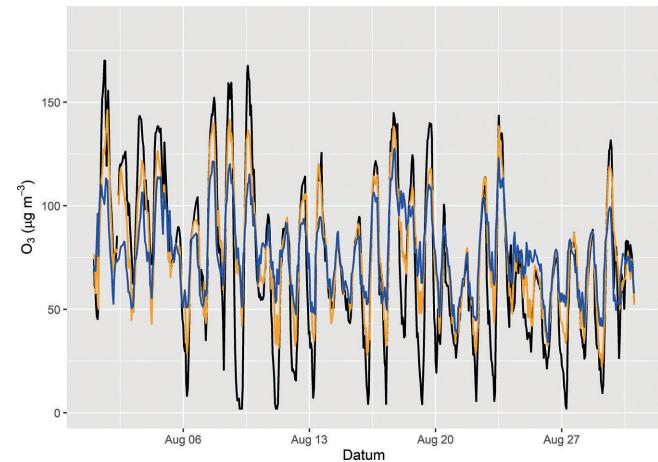


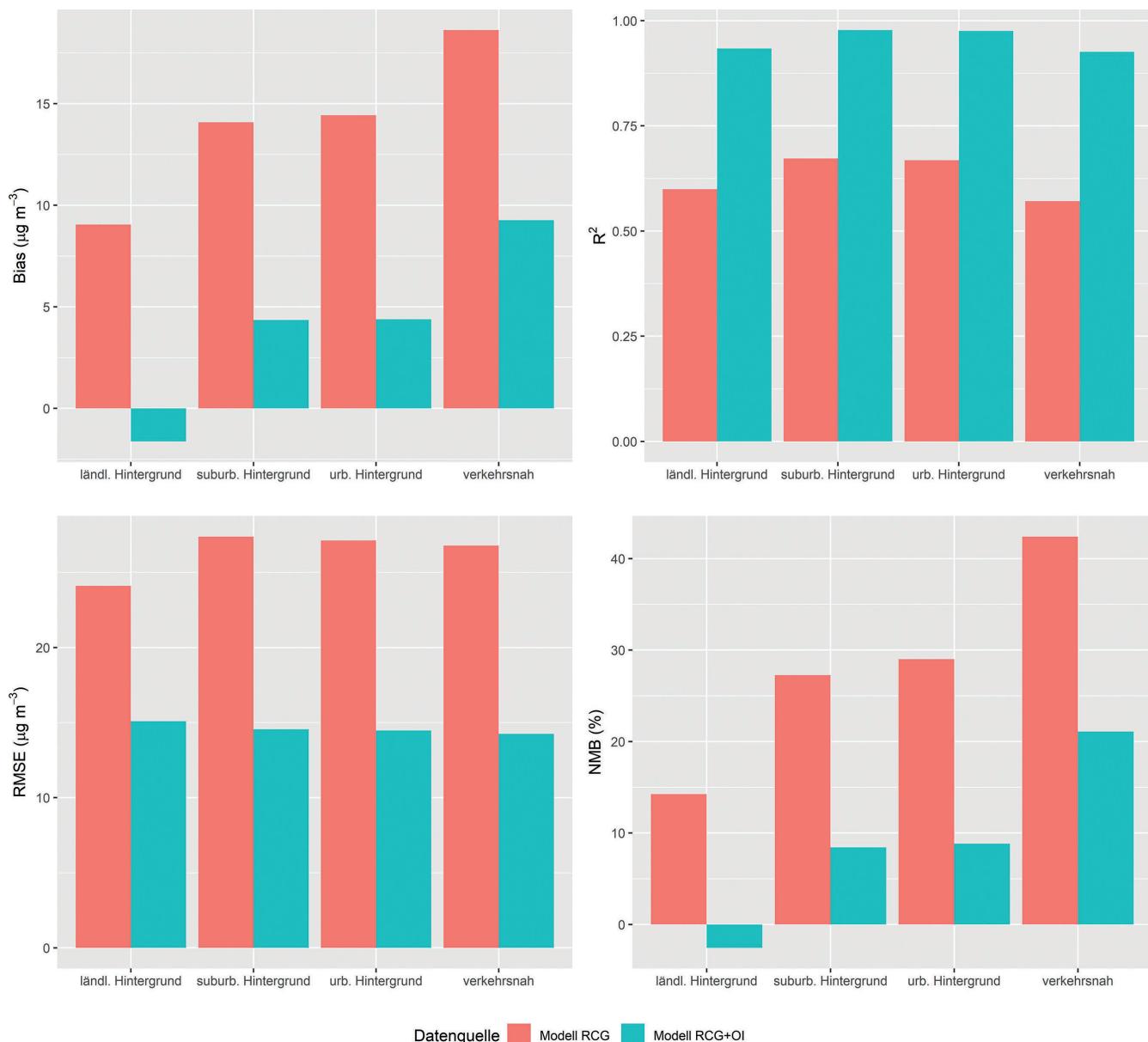
Bild 8. Beispielzeitreihe der stündlichen  $\text{O}_3$  Konzentrationen in  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  im August 2018 an einer brandenburgischen Station im vorstädtischen Hintergrund (Elsterwerda) für Messung (schwarz), Modell (blau) und Modell mit optimaler Interpolation (orange). Quelle: Umweltbundesamt

lisiert. Dies wird derzeit in einem Forschungsvorhaben untersucht, dessen Ergebnisse 2021 zur Verfügung stehen werden.

In den RCG-Modellrechnungen werden natürliche Emissionen, z. B. aus Waldbränden oder Saharastaub, nicht berücksichtigt, obwohl diese signifikant zur Luftschadstoffbelastung beitragen können. Um die Beschreibung des Eintrages von Luftschadstoffen in das Modellgebiet über Deutschland zu verbessern, werden in Zukunft die Randbedingungen aus den europäischen CAMS-Ensemble-Läufen verwendet. Damit wird ein deutlich größerer Erfahrungsschatz zur Luftschadstoffsituation in Europa in die nationale Betrachtung einfließen.

## 6 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

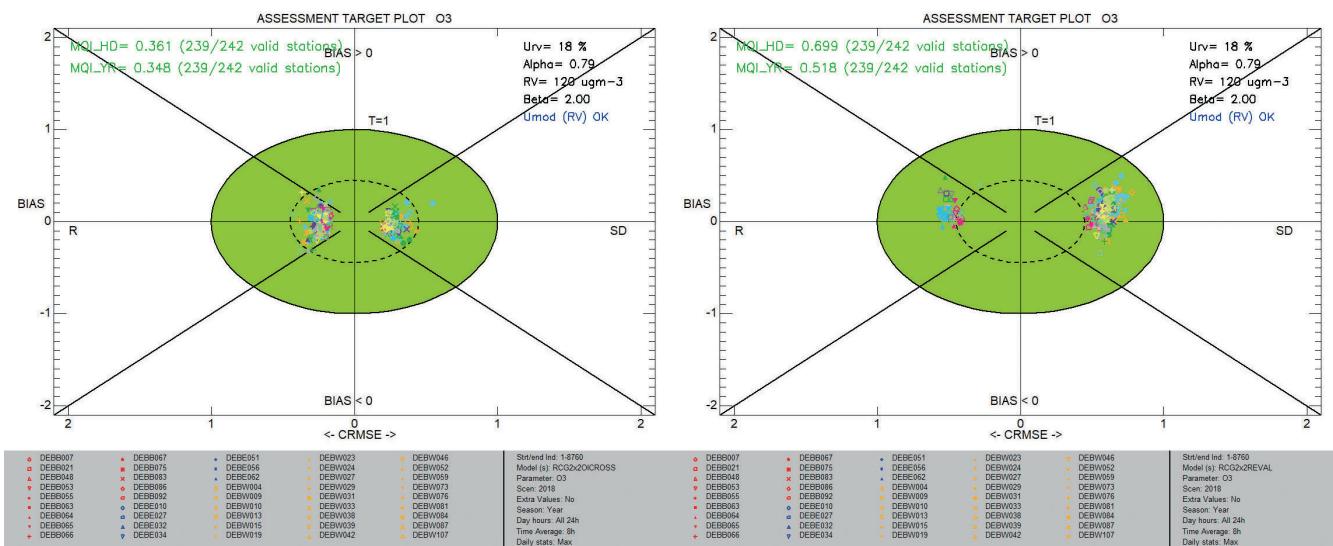
Das RCG-Modell erfasst für die Luftschadstoffe PM<sub>10</sub>, NO<sub>2</sub> und O<sub>3</sub> bereits ohne OI den zeitlichen Verlauf der Messungen, ist jedoch nicht in der Lage, die Minimal- und Maximalwerte wie-



**Bild 9.** Zusammenfassende Statistik zum Vergleich von Modell- und Messwerten für Ozon berechnet aus den Daten für die einzelnen Stationen und gemittelt für unterschiedliche Belastungsregime in Deutschland für 2018. Gezeigt werden die mittlere Abweichung (Bias) oben links, das Bestimmtheitsmaß ( $R^2$ ) oben rechts, die mittlere quadratische Abweichung (RMSE) unten links und die normierte mittlere Abweichung (NMB) unten rechts.  
Quelle: Umweltbundesamt

derzugeben. Mit der OI werden die Schwankungen und auftretenden Spitzen deutlich besser beschrieben. In der Tabelle wird eine zusammenfassende Auflistung der Modellqualitätsparameter für die Modellrechnung mit OI getrennt nach unterschiedlichen Schadstoffen und Belastungsregimen gegeben. Für die Luftsäfte  $\text{PM}_{10}$ ,  $\text{NO}_2$  und  $\text{O}_3$  kann die RCG-Simulation mit der OI erheblich verbessert werden. Der Modellfehler liegt für die Belastungsregime ländlicher, städtischer und vorstädtischer Hintergrund überwiegend unter 10 %. Auch der zeitliche Verlauf der simulierten Luftsäftkonzentration und damit das Auftreten und die Höhe der Spitzenkonzentrationen wird mit der OI verbessert. Die nach der Richtlinie 2008/50/EG geforderte Modell-

qualität wird in allen Fällen erreicht. Das etwas strengere Modellqualitätsziel nach FAIRMODE ist ebenfalls erfüllt. Die Werte für die verkehrsnahen Standorte werden nicht aufgeführt, da das Modell nicht für eine kleinräumige Interpretation geeignet ist (siehe Abschn. 3). Diese Untersuchung konnte zeigen, dass die Methode der RCG-Luftsäftsimulation mit einer nachgeschalteten OI geeignet ist, die flächendeckende Luftsäftbelastung mit Ausnahme der kleinräumigen Variabilität auszuwerten und im UBA-Kartendienst darzustellen. Weitere Verbesserungen dieses Datenproduktes sind in Zukunft mit der Verwendung von Daten aus CAMS zu erwarten.



**Bild 10.** Target-Diagramm aus dem FAIRMODE Delta-Tool mit Modellqualitätsindikator (MQI) für stündliche Werte (HD) und Jahresmittelwerte (YR) in Deutschland für 2018. Jeder Datenpunkt steht für die Ozonkonzentrationen an einer Messstation. Quelle: Umweltbundesamt

**Tabelle.** Modellqualität der RCG-OI-Rechnung für die Luftschadstoffe  $\text{PM}_{10}$ ,  $\text{NO}_2$  und  $\text{O}_3$  in Deutschland für 2018, abgeleitet mit der Methode der Kreuzvalidierung. Die maximale Unsicherheit nach der Richtlinie 2008/50/EG bezieht sich für Ozon auf die Informationsschwelle von  $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$  für den maximalen 8-Stunden-Mittelwert (50 %) und für  $\text{NO}_2$  und  $\text{PM}_{10}$  auf Stundenwerte (50 %) bzw. Tageswerte. MQI wird bei  $\text{NO}_2$  für Stundenwerte, bei  $\text{PM}_{10}$  für Tageswerte und bei  $\text{O}_3$  für maximale 8-Stunden-Mittelwerte angegeben.

Schadstoff	Hintergrund	Anzahl der Stationen	Normierte Abweichung Modell vs. Messung (NMB) in %	Bestimmtheitsmaß, $R^2$	Modellqualitätsindikator nach FAIRMODE (MQI)	Maximale Unsicherheit (<50 %) 2008/50/EG in %
Feinstaub ( $\text{PM}_{10}$ )	ländlich	64	-3,5	0,94	0,56	13
	suburban	57	-6,5	0,96	0,45	12,5
	städtisch	101	-4,3	0,97	0,48	12,1
Stickstoffdioxid ( $\text{NO}_2$ )	ländlich	76	12,3	0,71	0,39	7,2
	suburban	67	-9,4	0,93	0,57	9,5
	städtisch	108	-7,6	0,94	0,64	10,4
Ozon ( $\text{O}_3$ )	ländlich	82	-2,6	0,93	0,41	13,6
	suburban	69	8,4	0,98	0,34	11,2
	städtisch	91	8,8	0,98	0,32	10,5

## L iteratur

- [1] Stern, R.: Entwicklung und Anwendung des chemischen Transportmodells REM/CALGRID. Modellierung und Prüfung von Strategien zur Verminderung der Belastung durch Ozon. Hrsg.: Umweltbundesamt (UBA), Berlin 2003. [www.umweltbundesamt.de/publikationen/entwicklung-anwendung-des-chemischen](http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/entwicklung-anwendung-des-chemischen)
- [2] Stern, R.; Yamartino, R.: Analyzing the response of a chemical transport model to emissions reductions utilizing various grid resolutions. Hrsg.: Umweltbundesamt (UBA), Dessau-Roßlau 2006. [www.umweltbundesamt.de/en/publikationen/analyzing-response-of-a-chemical-transport-model-to-emissions-reductions-utilizing-various-grid-resolutions](http://www.umweltbundesamt.de/en/publikationen/analyzing-response-of-a-chemical-transport-model-to-emissions-reductions-utilizing-various-grid-resolutions)
- [3] Stern, R.; Builtjes, P.; Schaap, M.; Timmermans, R.; Vautard, R.; Hodzic, A. et al.: A model inter-comparison study focussing on episodes with elevated  $\text{PM}_{10}$  concentrations. *Atmos. Environ.* 42 (2008) Nr. 19, S. 4567-4588.
- [4] Bessagnet, B.; Pirovano, G.; Mircea, M.; Cuvelier, C.; Aulinger, A.; Calori, G. et al.: Presentation of the EURODELTa III intercomparison exercise – evaluation of the chemistry transport models performance on criteria pollutants and joint analysis with meteorology. *Atmos. Chem. Phys.* 16 (2016), S. 12667-12701.
- [5] Emissionen von Luftschadstoffen. Hrsg.: Umweltbundesamt (UBA), Dessau-Roßlau. [www.umweltbundesamt.de/themen/luft/emissionen-von-luftschadstoffen](http://www.umweltbundesamt.de/themen/luft/emissionen-von-luftschadstoffen)
- [6] Schneider, C.; Pelzer, M.; Toenges-Schuller, N.; Nacken, M.; Niederau, A.: ArcGIS basierte Lösung zur detaillierten, deutschlandweiten Verteilung (Gridding) nationaler Emissionsjahreswerte auf Basis des Inventars zur Emissionsberichterstattung. Texte 71/2016.
- [7] Jörß, W.; Emele, L.; Scheffler, M.; Cook, V.; Theloke, J.; Thiruchittampalam, B.: Luftqualität 2020/2030: Weiterentwicklung von Prognosen für Luftschadstoffe unter Berücksichtigung von Klimastrategien. Hrsg.: Umweltbundesamt (UBA), Dessau-Roßlau. [www.umweltbundesamt.de/publikationen/luftqualitaet-20202030-weiterentwicklung-von](http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/luftqualitaet-20202030-weiterentwicklung-von)
- [8] Wettermodelle in Deutschland. Hrsg.: Deutscher Wetterdienst (DWD), Offenbach. [www.dwd.de/DE/forschung/wettervorhersage/num\\_modellierung/01\\_num\\_vorhersagemodelle/01e\\_unsere\\_modellkette/unser\\_modellkette\\_node.html](http://www.dwd.de/DE/forschung/wettervorhersage/num_modellierung/01_num_vorhersagemodelle/01e_unsere_modellkette/unser_modellkette_node.html)
- [9] Luftschadstoffbelastung in Deutschland. Hrsg.: Umweltbundesamt (UBA), Dessau-Roßlau. <http://gis.uba.de/Website/luft/>
- [10] Flemming, J.; Stern, R.: Datenassimilation auf der Basis der Optimalen Interpolation für die Kartierung von Immissionsbelastungen. Hrsg.: Umweltbundesamt (UBA), Berlin 2004. [www.umweltbundesamt.de/publikationen/datenassimilation-auf-basis-optimalen-interpolation](http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/datenassimilation-auf-basis-optimalen-interpolation)
- [11] <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/PDF/?uri=CELEX:32011D0850&from=EN>
- [12] [www.eionet.europa.eu/aportal/doc/IPR%20guidance\\_2.0.1\\_final.pdf](http://www.eionet.europa.eu/aportal/doc/IPR%20guidance_2.0.1_final.pdf)
- [13] Schneider, A.; Cyrys, J.; Breitner, S.; Kraus, U.; Peters, A.; Diegmann, V. et al.: Quantifizierung von umweltbedingten Krankheitslasten aufgrund der Stickstoffdioxid-Exposition in Deutschland. Umwelt & Gesundheit 01/2018. Hrsg.: Umweltbundesamt (UBA), Dessau-Roßlau 2018. [www.umweltbundesamt.de/publikationen/quantifizierung-von-umweltbedingten](http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/quantifizierung-von-umweltbedingten)

- [14] Programmsystem FLADIS. Hrsg.: IVU Umwelt, Freiburg. [www.fladis.de/front\\_content.php?idcat=42](http://www.fladis.de/front_content.php?idcat=42)
- [15] VDI 4280 Blatt 5: Planung von Immissionsmessungen – Ermittlung der Unsicherheit räumlicher Beurteilungen der Luftqualität. Berlin: Beuth 2009.
- [16] Thunis, P.; Pernigotti, D.; Gerboles, M.: Model quality objectives based on measurement uncertainty. Part I: Ozone. *Atmos. Environ.* 79 (2013), S. 861-868.
- [17] Nordmann, S.; Quass, U.; Schlünzen, H.; Müller, W.; Jäckel, S.: CEN-Normungsaktivitäten zur Qualitätssicherung von Ausbreitungsrechnungen und Verursacheranalysen. *Gefahrstoffe – Reinhalt. Luft* 77 (2017) Nr. 7/8, S. 303-308.
- [18] <https://aqm.jrc.ec.europa.eu/index.aspx>
- [19] <https://atmosphere.copernicus.eu/anthropogenic-and-natural-emissions>

---

Dr. Stephan Nordmann,  
Dr. Andrea Mües,  
Stefan Feigenspan,  
Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau.