

Abschlussbericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 201 43 250 auf dem Gebiet des Umweltschutzes „Anwendung modellgestützter Beurteilungssysteme für die bundeseinheitliche Umsetzung der EU-Rahmenrichtlinie Luftqualität und ihrer Tochterrichtlinien“

# **Datenassimilation auf der Basis der Optimalen Interpolation für die Kartierung von Immissionsbelastungen Beschreibung der Methodik und praktische Anwendung für 2002**

Johannes Flemming

Rainer Stern



**Freie Universität Berlin  
Institut für Meteorologie  
Troposphärische Umweltforschung**

Mai 2004



## Berichts-Kennblatt

Berichtsnummer UBA-FB	2.	3.
<b>4. Titel des Berichts</b> Datenassimilation auf der Basis der Optimalen Interpolation für die Kartierung von Immissionsbelastungen - Beschreibung der Methodik und praktische Anwendung für 2002		
<b>5. Autor(en), Name(n), Vorname(n)</b>  Flemming, Johannes Stern, Rainer		<b>8. Abschlussdatum</b>  Mai 2004
<b>6. Durchführende Institution (Name, Anschrift)</b>  Institut für Meteorologie Freie Universität Berlin Carl-Heinrich becker Weg 6-10 12165 Berlin		<b>9. Veröffentlichungsdatum</b>  Mai 2004
<b>7. Fördernde Institution (Name, Anschrift)</b> Umweltbundesamt, Postfach 33 00 22, D-14191 Berlin		<b>10. UFOPLAN-Nr.</b>  201 43 250
		<b>11. Seitenzahl</b> 60
		<b>12. Literaturangaben</b> 15
		<b>13. Tabellen und Diagramme</b> 6
		<b>14. Abbildungen</b> 33
<b>15. Zusätzliche Angaben</b>		
<b>16. Kurzfassung</b>  Der Bericht liefert eine Zusammenfassung der ausgeführten Arbeiten zur Erzeugung von Karten der flächenhaften Immissionsbelastung in Deutschland auf Basis der Optimalen Interpolation (OI). Mit diesem Ansatz werden Messung und Modellrechnungen, hier durchgeführt mit dem Chemie Transport Modell REM-CALGRID zu einer Flächendarstellung (Analyse) der Immission in Deutschland kombiniert. Die stündlich gewonnenen Felder für das Jahr 2002 werden nach den Maßgaben der EU-Richtlinie zur Luftgüte ausgewertet. Dafür wurden verschiedene Verfahrenparameter mit Hilfe eines cross validation Ansatzes optimiert. Neben der deutschlandweiten Anwendung wird eine kleinräumige Version der OI-Methode für Berlin/Brandenburg vorgestellt.		
<b>17. Schlagwörter</b> Immissionskartierung, Datenassimilation, Chemie Transport Modellierung, Optimale Interpolation, EU-Rahmenrichtlinie, Grenzwerte		
<b>18. Preis</b>	<b>19.</b>	<b>20.</b>

# Report Cover Sheet

Report No.UBA-FB BBBB	2.	3.
4. Report Title Data assimilation for air quality mapping based on optimum interpolation – Description of the method and practical application for 2002		
5. Autor(s), Family Name(s), First Name(s)  Flemming, Johannes Stern, Rainer	8. Report Date  May 2004	
	9. Publication Date March 2004	
6. Performing Organisation (Name, Address) Institut für Meteorologie Freie Universität Berlin Carl-Heinrich-Becker Weg 6-10 12165 Berlin	10. UFOPLAN-Ref. No. 201 43 250	
	11. No. of Pages 60	
	12. No. of Reference 15	
7. Sponsoring Agency (Name, Address) Umweltbundesamt, Postfach 33 00 22, D-14191 Berlin	13. No. of Tables, Diagrams 6	
	14. No. of Figures 33	
15. Supplementary Notes		
16. Abstract  The report contains a summary of the work on optimum interpolation based air quality mapping for Germany. The approach combines air quality measurements with the simulated fields of the Chemical transport model REM-CALGRID. The final results are nation wide air quality maps based on information both of the observed and the modelled fields. The hourly fields produced for 2002 are analysed according to the needs of the EU-framework directive on air quality. Various technical parameters were optimized by a cross validation approach. Beside the application for Germany a small scale version of the OI-method for the Berlin /Brandenburg area is presented.		
17. Keywords air quality mapping, data assimilation, chemical transport modelling, optimum interpolation, EU EU-framework directive, limit values		
18. Price	19.	20.

**Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 201 43 250**

**auf dem Gebiet des Umweltschutzes**

„Anwendung modellgestützter Beurteilungssysteme für die bundeseinheitliche Umsetzung der EU-Rahmenrichtlinie Luftqualität und ihrer Tochterrichtlinien“

**Datenassimilation auf der Basis der Optimalen Interpolation für die Kartierung von Immissionsbelastungen**

**Beschreibung der Methodik und praktische Anwendung für 2002**

für:

**Umweltbundesamt**

II 6.1

Postfach 33 00 22

14191 Berlin

Johannes Flemming

Rainer Stern

**Institut für Meteorologie**

**Freie Universität Berlin**

**Mai 2004**



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Verknüpfung von Messungen und Modellrechnungen mit der Optimalen Interpolation .....</b>	<b>3</b>
2.1	<i>Formulierung der Gleichungen für die Optimale Interpolation .....</i>	4
2.2	<i>Schätzung der Kovarianz des Modellfehlers und des Beobachtungsfehlers .....</i>	5
2.2.1	Kovarianzmodell .....	5
2.2.2	OI mit einem inhomogenen Kovarianzmodell unter Berücksichtigung verschiedener Immissionsregimes.....	6
2.2.3	Varianz des Beobachtungsfehlers .....	9
2.2.4	Die stationsbezogene Beobachtungsfehlervarianzen für deutsche Messstationen .....	10
<b>3</b>	<b>Interpolationsgüte .....</b>	<b>13</b>
<b>4</b>	<b>Auswahl der Verfahrensparameter und Stationsauswahl.....</b>	<b>14</b>
4.1	<i>Methoden der Biaskorrektur .....</i>	15
4.2	<i>Stationsauswahl.....</i>	18
4.2.1	Vollständigkeit .....	18
4.2.2	Repräsentativität.....	19
4.2.3	Homogenisierung der bundesländerspezifischen Besonderheiten .....	23
<b>5</b>	<b>Kleinräumige Anwendung.....</b>	<b>25</b>
<b>6</b>	<b>Zusammenfassende technische Verfahrensbeschreibung .....</b>	<b>30</b>
<b>7</b>	<b>Literatur .....</b>	<b>34</b>
<b>8</b>	<b>Abbildungsverzeichnis .....</b>	<b>36</b>
<b>9</b>	<b>Anhang A: Karten für 2002.....</b>	<b>39</b>
<b>10</b>	<b>Anhang B: Liste der Stationen mit unterschiedlicher Einschätzung der Repräsentativität .....</b>	<b>50</b>
<b>11</b>	<b>Anhang C: Liste der Fortan Routinen .....</b>	<b>53</b>





# 1 Einführung

Der Bericht liefert eine abschließende Zusammenfassung der am Institut für Meteorologie im Rahmen mehrerer FE-Vorhaben des Umweltbundesamts ausgeführten Arbeiten zur Erzeugung von Karten der flächenhaften Immissionsbelastung in Deutschland auf Basis der Optimalen Interpolation (OI). Mit diesem Ansatz werden Messung und Modellrechnungen, hier durchgeführt mit dem Chemie Transport Modell REM-CALGRID (Stern, 2003), zu einer Flächendarstellung (Analyse) der Immission kombiniert.

Die Grundidee einer solchen Datenassimilation auf der Basis der OI beruht darauf, Lücken im Beobachtungsnetz mit Modellergebnissen aufzufüllen und dadurch die folgenden Nachteile einer reinen Mess-Interpolation aufzuheben oder zu mindestens zu vermindern:

- Stationsdichte außerhalb der Stadtgebiete ist gering, insbesondere wenn man den in den EU-Richtlinien definierten Datenumfang von mindestens 90% ansetzt.
- Räumliche Repräsentativität der Stationen ist oft unklar.

Diese Punkte können zu Problemen führen bei der Konstruktion von Konzentrationsfeldern ausschließlich auf der Basis von Messungen. Bei Schadstoffen mit maximalen Konzentrationen in Stadtgebieten kann die reine Mess-Interpolation eine Überschätzung der Ausdehnung der Gebiete ergeben, in denen es zu Überschreitungen der Grenzwerte und der Beurteilungsschwellen nach den EU-Tochterraichtlinien kommt, bei Schadstoffen mit maximalen Konzentrationen außerhalb der Stadtgebiete dagegen eine Unterschätzung dieser Gebiete.

Der Bericht gibt eine Übersicht über das angewendete Verfahren und fasst damit die Ergebnisse zur OI aus dem FE-Vorhaben 298 41 252 „Modellierung und Prüfung von Strategien zur Verminderung der Belastung durch Ozon“ (Flemming 2003 a) sowie dem FE-Vorhaben 299 43 246 „Entwicklung eines Modellsystems für das Zusammenspiel von Messung und Rechnung für die bundeseinheitliche Umsetzung der EU-Rahmenrichtlinie Luftqualität“ (Stern und Flemming, 2001) zusammen. Es werden objektive Bewertungskriterien zur Interpolationsgüte entwickelt und angewandt. Mit den vorgestellten Ansätzen zur Gütebewertung (cross-validation und subjektive Bewertung) wird die Wirkung von technischen Verfahrensparametern wie Stationsauswahl, bundesländerspezifischen Messstrategien und Biaskorrektur untersucht. Die Diskussion erfolgt anhand der Felder für PM10 und NO<sub>2</sub> für 2002, da deren Erzeugung die vorrangige Aufgabenstellung war. Eine Zusammenstellung der für die praktische Anwendung zu wählenden Verfahrensparameter sowie eine Beschreibung des technischen Ablaufs des Verfahrens bilden einen weiteren wichtigen Bestandteil des Berichtes.

Die für die OI verwendeten Messungen stammen aus den Messnetzen der Bundesländer und des Umweltbundesamts und wurden vom Umweltbundesamt zur Verfügung gestellt. Die großräumigen Modellergebnisse stammen aus einer Anwendung des photochemischen Transportmodells REM-CALGRID (RCG) auf West- und Zentraleuropa in einer zeitlichen Auflösung von 1 Stunde und einer räumlichen Auflösung von 0,5° Länge und 0,25° Breite. Die Optimale Interpolation benutzt die Modellergebnisse als Hintergrundfeld, in das die Messungen integriert werden. Dazu werden Repräsentativitätsgebiete der Messungen aus den statistisch abgeleiteten Strukturen (räumliche Autokorrelation) gewonnen. Rechenergebnisse werden dann vorrangig außerhalb dieser Gebiete benutzt. Zur Interpolation wird über das Gebiet ein Raster mit einer Auflösung in der Größenordnung von 15 Kilometern gelegt. Wie bei nahezu jeder Interpolation kommt es dadurch zu einer Nivellierung singulärer Ereignisse

im Raster, d. h. der Messwert wird dem Umgebungsniveau angepasst, sofern die Extremmessung nicht durch andere Messungen im Raster bestätigt wird. Tendenziell werden dadurch hohe (oder niedrige) Messwerte, die nur isoliert an einer Station auftreten (sog. „hot-spots“), in den flächenhaften Darstellungen für ganz Deutschland nicht ausgewiesen. In Ballungsgebieten dürfte es sich dabei hauptsächlich um verkehrsnahen Stationen handeln, deren Repräsentanzbereich gering ist. Im ländlichen Bereich können insbesondere Messungen von Bergstationen, aber auch Messungen im Einflussbereich stark befahrener Straßen, nicht in der OI-Darstellung wieder gefunden werden, da solche Messungen oft aus dem Immissionsniveau der umliegenden Stationen herausfallen.

Es zeigte sich im Verlauf der praktischen Arbeiten für das Jahr 2002, dass die Auswahl der bei der Interpolation verwendeten Stationen große Bedeutung hat. Diese Auswahl wird zum einen durch die von den zuständigen Landesbehörden vorgenommene Einteilung der Stationen in solche, die nicht für die Interpolation geeignet sind (sog. „Spot-Messungen“) und in zur Interpolation geeignete Stationen, und zum anderen durch das in Flemming (2003a) vorgeschlagene Auswahl-Kriterium bestimmt. Letzteres bedeutet, dass keine Stationen vom Typ „Straße“ und „Straße, extrem“ (zur Entwicklung dieser Kategorien siehe Flemming, 2003b) für die Flächeninterpolation verwendet werden. Beide Auswahlkriterien stimmen qualitativ überein. Es gibt jedoch etliche Stationen, die jeweils nur nach einem dieser Kriterien zur Flächeninterpolation zugelassen werden. Dies gilt insbesondere für mehrere Stationen des Immissionsregimes „belastete Stadt“, die zum Teil in die Rubrik „Spot-Messung – keine Interpolation“ eingeordnet werden. Da diese Einordnung jedoch nicht bundesweit einheitlich erfolgt, wird vorgeschlagen, auch die Stationen dieses Typs nicht in die Interpolation einzubeziehen und damit das Kriterium nach Flemming (2003a) zu verschärfen.

Neben der bundesweiten Anwendung in einem Raster von circa  $15 \times 15 \text{ km}^2$  erfolgte auch ein erster Versuch der Anwendung der OI Methode mit einer höheren Auflösung von  $2 \times 2 \text{ km}^2$  für den Raum Berlin Brandenburg. Aufgrund des im Vergleich zur großräumigen Anwendung deutlich größeren Verhältnisses zwischen der Anzahl der Gitterzellen und der Anzahl der Messungen kommt der Strukturinformation des Modells in dieser urbanen Anwendung eine höhere Bedeutung bei.

## 2 Verknüpfung von Messungen und Modellrechnungen mit der Optimalen Interpolation

Die Optimale Interpolation (OI) ist ein geostatistisches Verfahren, um aus den Beobachtungen einer atmosphärischen Variablen zu einem Zeitpunkt eine räumliche Analyse zu gewinnen (Reimer und Scherer, 1992, Kerschbaumer und Reimer, 2003). Unter Analyse versteht man eine Felddarstellung mit einer vorgegebenen Auflösung bzw. räumlichen Skala, die meist mit Hilfe einer Gitterpunktdarstellung wiedergegeben wird. Die Optimale Interpolation wurde 1963 von Gandin (1963) eingeführt und hat sich seitdem in meteorologischen und ozeanographischen Anwendungen, insbesondere in der numerischen Wettervorhersage, etabliert. Komplexere Verfahren der Datenassimilation (Kalman Filter und 4DVAR, siehe z.B. Flemming, 2003a, 2003b) beruhen auf dem selben theoretischen Gerüst wie die optimale Interpolation („best linear unbiased estimate“), die bei diesen Verfahren noch um die zeitliche Komponente erweitert ist.

Die Optimale Interpolation zeichnet sich durch folgende allgemeine Eigenschaften aus:

- Die Interpolation erfolgt auf Basis der Beobachtungen unter Verwendung von weiteren Informationsquellen (Hintergrund, auch „first guess“). Der Hintergrund wird in dieser Anwendung aus Modellrechnungen gewonnen.
- Messung und Modell werden in Abhängigkeit von ihrer Fehlerstatistik am Interpolationspunkt zusammengeführt.
- Der räumliche Einflussbereich der Messungen wird statistisch mit Hilfe von räumlichen Kovarianzen bestimmt.
- Der Einfluss einer inhomogenen Anordnung der Messstellen wird berücksichtigt bzw. kompensiert („declustering“).
- Die Interpolation beruht auf der Minimierung der Varianz der Analysefehler (optimal).
- Nicht alle Messpunkte, sondern eine zu treffende Auswahl der Messpunkte wird für die Interpolation des Gitterpunktes herangezogen.

Die im Verlauf der Projektarbeiten entwickelte OI-Implementierung erstellt stündliche Immissionsfelder für das gesamte Jahr. Diese Felder werden dann nach den Kenngrößen der EU-Richtlinien ausgewertet. Ein alternatives Vorgehen wäre, die entsprechenden Kenngrößen an den Messstationen zu bestimmen und mit einer einzigen Interpolation mit dem entsprechenden Feld dieser Kenngrößen aus der Modellrechnung zu verbinden.

Die Standard-Anwendung der Optimalen Interpolation beruht auf der Annahme von Homogenität und Isotropie der betrachteten Felder, genauer gesagt ihrer ersten und zweiten räumlich-statistischen Momente. Die Annahme von homogenen statistischen Eigenschaften der Felder und Beobachtungen sind für bodennahe Immissionsfelder häufig nicht gerechtfertigt. Aufgrund der starken Inhomogenität der Immissionsfelder und ihrer Messung bedarf die hier verwendete Implementierung der OI einer Anpassung an diese Besonderheiten. Im Folgenden sind die Eigenschaften der Immissionsfelder und ihrer Messung noch einmal aufgelistet, die bei der Anwendung von statistischen Analyseverfahren zu berücksichtigen sind:

1. Die bodennahen Immissionsfelder sind aufgrund der Emissionsverteilung räumlich sehr inhomogen.
2. Die Messstationen liegen gehäuft in den belasteten Gebieten und dienen hauptsächlich dazu, kleinräumige Spitzenkonzentrationen und nicht ein möglichst großes Gebiet zu erfassen.
3. Die räumliche Repräsentativität und die Güte der Messung sind nur in geringem Maße bekannt.

Im Rahmen der hier verwendeten OI-Implementierung wurden diese Probleme berücksichtigt, in dem ein Kovarianzmodell entwickelt wurde, das auf einer Unterscheidung von Immissionsregimes in Beobachtung und Modellrechnung beruht. Weiterhin wurde für jede Immissionsstation in Deutschland ein Maß (Beobachtungsfehlervarianz) für die Repräsentativität durch den Vergleich mit umliegenden Messstationen geschätzt (Flemming 2003c).

## 2.1 Formulierung der Gleichungen für die Optimale Interpolation

Der Wert der Analyse  $x_a$  an dem Interpolationspunkt I wird nach der Gleichung (1.1) aus den umliegenden Messungen  $y_i$  und einem für I bereits vorgegebenem Feldwert  $x_b$  gebildet. Das vorgegebene Feld wird als „Background“<sup>1</sup> bezeichnet und ist in dieser Anwendung das simulierte Feld des Modells RCG. Der „Background“ muss für die Analyse an allen Punkten vorhanden sein und sollte der Skala der Analyse entsprechen. Der Einbezug der Messungen erfolgt in Form der Beobachtungskorrekturen, d.h. der Abweichungen der Messwerte  $y_i$  vom Modellfeld  $x_b$  am Messort  $i$ , und ist durch die Koeffizienten  $k_i$  gewichtet.

$$x_{Ia} = x_{Ib} + \sum_{i=1}^N k_i (y_i - x_{ib})$$

$$\text{Beobachtung: } y \quad (1.1)$$

$$\text{Modellwert: } x_b$$

$$\text{Analysegewicht: } k$$

Die den Einfluss der Messwerte bestimmenden Gewichte  $k_i$  werden mit Hilfe des Gleichungssystems (1.2) ermittelt:

$$\begin{pmatrix} b_{11} + r_{11} & b_{12} & b_{13} & \dots & b_{1N} \\ b_{21} & b_{22} + r_{22} & b_{23} & \dots & b_{2N} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} + r_{33} & \dots & b_{3N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{N1} & b_{N2} & b_{N3} & \dots & b_{NN} + r_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ \dots \\ k_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{1I} \\ b_{2I} \\ b_{3I} \\ \dots \\ b_{NI} \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

<sup>1</sup> Die Bezeichnung „Background“ bedeutet nicht, dass es sich dabei um das Feld der sogenannten Hintergrundbelastung, d.h. der Immission ohne den Einfluss von lokalen Quellen, handelt. Es ist vielmehr eine erste Abschätzung des Konzentrationsfeldes.

$$\text{Modellfehler: } \varepsilon_b = x_b - x_{true} \quad \text{mit } \overline{\varepsilon_b} = 0$$

$$\text{Ko-/Varianz: } b_{ij} = \overline{\varepsilon_{ib} \varepsilon_{jb}}$$

$$\text{Fehler der Beobachtung: } \varepsilon_r = y - y_{true} \quad \text{mit } \overline{\varepsilon_r} = 0$$

$$\text{Varianz: } r_{ii} = \overline{\varepsilon_{ir}^2}$$

Dabei sind folgende Größen von Bedeutung:

- die **Varianz  $r_{ii}$**  des unkorrelierten **Beobachtungsfehlers** der Beobachtung  $i$
- die räumliche **Kovarianz  $b_{ij}$  der Fehler des Modells** hinsichtlich der Messorte  $i$  ( $i = 1 \dots N$ ) und des Interpolationspunkts  $I$  und die **Kovarianz  $b_{ij}$**  zwischen den Messorten  $i$  und  $j$ .

Der Beobachtungsfehler charakterisiert den reinen Messgerätefehler und den so genannten Repräsentativitätsfehler. Letzterer beschreibt statistisch die Streubreite der Abweichung der Beobachtungen von dem „wahren“ Gitterboxmittelwert (die Gitterbox wird aufgespannt durch das gewählte Interpolationsraster) aufgrund der Tatsache, dass die Beobachtung nicht vollkommen repräsentativ für das gesamte Gebiet der Gitterbox ist. Dieser Beobachtungsfehler wird als unkorreliert zwischen den einzelnen Beobachtungen angenommen. Setzt man die Varianz des Beobachtungsfehlers null, so folgt aus dem Gleichungssystem 1.2, dass das interpolierte Feld am Messort der Beobachtung entspricht.

Die Kovarianzen des Modellfehlers beschreiben die Struktur des zugrunde liegenden Feldes. Sie bestimmen die Größe des im klimatischen Sinne repräsentativen Gebietes im Bereich der umliegenden Gitterboxen. Je langsamer die Kovarianz  $b_{ij}$  mit zunehmender Entfernung vom Beobachtungsort abnimmt, desto größer ist das repräsentative Gebiet der Messung unter Berücksichtigung des Beobachtungsfehlers. Die Repräsentativität hängt demzufolge nicht nur von der Beobachtung selbst, sondern auch von den typischen Gradienten des zu erfassenden Feldes am Messort ab.

Die Nichtdiagonalelemente  $b_{ij}$  der Matrix bewirken die oben erwähnte Eigenschaft der „Dec-lusterung“. Im Rahmen der Theorie wird ein verschwindender Erwartungswert des Beobachtungsfehlers vorausgesetzt, d.h. Beobachtung und Modell sind ohne Bias. Gleichzeitig müssen die Fehler einer Gaußverteilung gehorchen, um die Kovarianzen (Erwartungswerte) durch Mittelbildung gewinnen zu können.

## 2.2 Schätzung der Kovarianz des Modellfehlers und des Beobachtungsfehlers

### 2.2.1 Kovarianzmodell

Die Gleichungen (1.1) und (1.2) beschreiben die allgemeine Struktur der Optimalen Interpolation. Das Ergebnis der Interpolation, d.h. die Eigenschaften des interpolierten Feldes, hängt jedoch wesentlich von der korrekten Bestimmung der Fehlerstatistiken von Beobachtung und Modellfeld ab. Sie ist das eigentliche Hauptproblem bei der Optimalen Interpolation.

Die große Anzahl der für die Interpolation eines Feldes notwendigen Kovarianzen kann nicht explizit ermittelt werden und wird deshalb mit Hilfe eines **Kovarianzmodells** zusammengefasst. Die für die Interpolation auf das Gitter notwendigen Kovarianzen  $b_{ij}$  werden nun mit diesem Kovarianzmodell bestimmt.

Das Kovarianzmodell ist meist eine analytische Darstellung einer im Allgemeinen 2-dimensionalen und räumlich variablen Kovarianzfunktion. Da die Kovarianz ein Ensemble von Daten charakterisiert und aus einem Ensemble geschätzt werden muss, ist die Gewinnung eines vollständigen Autokovarianzmodells nur schwer möglich. Es werden deswegen Annahmen notwendig, um Daten mit gleichen vermuteten statistischen Eigenschaften zusammenzufassen. Bei der Standard-Anwendung der Optimalen Interpolation wird die Annahme von Isotropie und Homogenität vorausgesetzt, so dass die Kovarianz des Modellfehlers unabhängig von der Richtung des Abstandes zwischen zwei Feldpunkten ist und die Kovarianz und Varianz in allen Gebieten des Feldes gleich ist. Die Kovarianz des Modellfehlers hängt damit nur vom Abstand der Punkte im Feld ab und das Autokovarianzmodell ist eine rein abstandsabhängige Kovarianzfunktion.

Für die Varianz des Beobachtungsfehlers bedeutet die Annahme von Isotropie und Homogenität, dass allen Beobachtungen die gleiche Fehlervarianz zugesprochen wird. Hinsichtlich der räumlichen Repräsentativität wird demzufolge kein Unterschied zwischen den Stationen gemacht.

Die Schätzung nur eines Kovarianzmodells zur Optimalen Interpolation von Immissionsdaten hat weiterhin das Problem, dass das Datenensemble aus einem überproportionalen Anteil von städtischen und verkehrsbelasteten Stationen besteht. Das abgeleitete Kovarianzmodell entspräche dann einer großräumigen Immissionsverteilung mit urbaner Charakteristik. Dadurch wird die Kovarianz überschätzt und der Einfluss der Stadtstationen zu stark in die ländlichen Gebiete hinein getragen. Gleichzeitig können damit stadtnahe Landstationen die Spitzenwerte in den Belastungszentren verringern.

Aus diesen Gründen wurden mehrere Ansätze für die inhomogene Kovarianzmodellierung in Flemming (2003 b) getestet. Die inhomogenen Kovarianzmodelle wurden mit einer klimatischen Herangehensweise ermittelt, bei der nicht nur die Daten eines Termins verwendet werden. Der klimatologische Ansatz bedeutet, dass gefilterte Zeitreihen der Immissionsbeobachtung zur Schätzung der Kovarianzmodelle verwendet werden.

Mit der Filterung (siehe Flemming 2003b) werden zeitliche Variabilitäten wie Jahres- und Wochengang sowie die synoptische Schwankung entfernt, da sie die Schätzung der räumlichen Momente beeinflussen würden. Der meist noch bedeutendere Tagesgang wird durch Separation eliminiert, indem für jede Tagesstunde ein eigenes Kovarianzmodell entwickelt wurde. Die besten Ergebnisse wurden nach Flemming (2003b) mit dem im folgenden Kapitel beschriebenen inhomogenen Kovarianzmodell erzielt.

### **2.2.2 OI mit einem inhomogenen Kovarianzmodell unter Berücksichtigung verschiedener Immissionsregimes**

Das inhomogene Kovarianzmodell benutzt die von Flemming (2003c) entwickelte stoffspezifische Einordnung der an den Messstationen beobachteten Zeitreihen in Immissionsregime. Diese Klassifikation erfolgt separat für jede Spezies mit einem hierarchischen Clusterverfahren für ausgewählte klimatologische Parameter der Jahreszeitreihen, die durch Tests der linearen Unabhängigkeit und der Stabilität des Clusterergebnisses für die Clusterung aus-

gewählt und skaliert wurden. Die Klassifikation beruht für alle Spezies auf einem Maß für die mittlere Belastung und einem für die Ausprägung des Tagesganges (normierte Tageschwankung). Für NO, NO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub> und PM10 spielt der Tagesgang eine untergeordnete Rolle, für Ozon ist er jedoch für eine stabile Clusterung von Bedeutung.

Für Ozon unterscheidet die mit der Cluster-Methode abgeleitete Klassifikation für die Messstationen die Regime:

- B = Berg
- R = Land
- U1 = Vorstadt
- U2 = Stadt
- U3 = belastete Stadt
- S = Strasse

Für NO und NO<sub>2</sub> werden mit Ausnahme der Kategorie „Berg“ die gleichen Regimetypen wie beim Ozon ermittelt. Zusätzlich ergibt die Clusterung bei den Stickoxiden noch das Regime „Straße extrem“. Die SO<sub>2</sub>- und PM10-Immissionen werden in fünf Regime mit zunehmender Belastung eingeteilt. Die für die Messungen abgeleiteten Klassifikationskriterien wurden auch auf die modellierten Zeitreihen angewendet, so dass auch für jeden Ort im Modellgebiet (definiert durch die Gitterpunkte I, J) das modellierte Immissionsregime angegeben werden kann. Eine Zusammenstellung der mit Hilfe der Clusterung ermittelten Immissionsregime zeigt die Tabelle 1.

Das entwickelte inhomogene Kovarianzmodell bestimmt die Kovarianz  $b_{ij}$  in Abhängigkeit von den folgenden Eingabeparametern:

- Abstand in km
- Immissionsregime der Messorte bzw. der Gitterpunkte i und j
- Stunde des Tages
- Sommer – oder Winterhalbjahr

Das Kovarianzmodell besteht aus einer Kombination von homogenen abstandsabhängigen Kovarianzmodellen, die jeweils für eine bestimmte Kombinationen der übrigen Eingabeparameter Gültigkeit hat. In Abhängigkeit von den Eingabeparametern wird das entsprechende Kovarianzmodell ausgewählt und dann wird mit ihm die räumliche Kovarianz bei dem vorgegebenen Abstand bestimmt.

Die einzelnen homogenen, d.h. rein abstandsabhängigen Kovarianzmodelle für eine Parameterkombination werden mit der Beobachtungsmethode (Hollingsworth und Lönnberg 1986) geschätzt. Die Ausgangsbasis für die Ableitung des Kovarianzmodells ist die Schätzung der Kovarianzen für alle Stationspaare gesondert für jede mögliche Regime-Kombination des Stationspaares, jede Tagesstunde und jedes Halbjahr. Die Kovarianzwerte werden aus den gefilterten Zeitreihen der Beobachtungsincremente, d.h. der Abweichung zwischen Modellrechnung und Messung, für jedes Stationspaar einer Regime-Kombination, für jede Tagesstunde und jedes Halbjahr bestimmt. Diese Kovarianzwerte werden nun für jede Parameter-

kombination in Abstandsklassen geordnet und mit einer analytisch vorgegebenen Kovarianzfunktion approximiert.

Da die Immissionsklasse für eine Messreihe und die Immissionsklasse für die berechnete Zeitreihe in der dem Ort der Messung entsprechenden Gitterbox aufgrund der unterschiedlichen Skalen nicht in jedem Fall übereinstimmen, ist der Kovarianzwert durch einen Abstand und 4 Immissionsklassen (je 2 durch den Abstand verknüpfte Immissionsklassen der Messungen bzw. der zugehörigen Gitterpunkte des Modellfeldes) charakterisiert. Die dadurch möglichen Kombinationen würden jedoch die Anzahl der Wertepaare pro Kovarianzmodell sehr stark verringern. Aus diesem Grund erfolgt die Unterscheidung in dem hier vorgestellten Ansatz nur hinsichtlich der Klassifizierung der Messzeitreihen. Damit ergeben sich aus der Kombination der 5 Immissionsklassen (bei NO<sub>2</sub>) 15 verschiedene Kovarianzmodelle für jede Tagesstunde und Saison.

Da die Wahl des Kovarianzmodells von dem Immissionsregime am Ort des jeweiligen Interpolationsgitterpunktes abhängt, wird die Inhomogenität der Immissionsfelder berücksichtigt. Die Regimes an den Gitterpunkten werden dabei aus der Modellrechnung bestimmt. Die Abbildung 1 zeigt beispielhaft die für 3 mögliche Kombinationen von Immissionsklassen ermittelten Kovarianzfunktionen bei NO<sub>2</sub> um 7 Uhr. Die Funktionen zeigen die Abstandsabhängigkeit der Kovarianz zwischen zwei Stadt-Stationen (U-U), zwischen zwei Land-Stationen (R\_R) und zwischen einer Stadt und einer Land-Station (und umgekehrt). Die geringe räumliche Repräsentativität der Stadtstationen zeigt sich in dem schnellen Abfall der Kovarianzfunktion mit wachsendem Abstand. Die hohen Werte der Kovarianz bei kleinen Abständen sind durch die hohen Messwerte zu erklären. Die Kovarianzfunktion zwischen den Landstationen ist durch einen geringen Abfall der Kovarianz mit zunehmendem Abstand gekennzeichnet. Die geringe Kovarianz und der schnellere Abfall der Kovarianz für die Kombination Stadt-Land zeigen den geringen räumlich-statistischen Zusammenhang zwischen den Regimes. Für die Optimale Interpolation bedeutet dies, dass die Stadt-Stationen nur wenig bei der Interpolation für Punkte mit Land-Charakteristik bzw. Land-Stationen für Punkte mit Stadt-Charakteristik verwendet werden.

		Name und Abkürzung des Regimes						
Spezies	Kriterium:							
Ozon	Log (P50ME) P50TA	Berg B	Land R	Vorstadt U1	Stadt U2	Belastete Stadt U3	Straße S	
NO <sub>2</sub>	P50ME	Land R		Vorstadt U1	Stadt U2	Belastete Stadt U3	Straße S	Straße ex- trem S2
PM10	P50ME	#1		#2	#3	#4	#5	
SO <sub>2</sub>	Log (P50ME)	#1		#2	#3	#4	#5	

**Tabelle 1 Immissionsregimes nach Flemming (2003c). Clusterparameter sind: P50ME = Median des Tagesmittelwertes und P50TA = Median der normierten Tagesschwankung, Log = Logarithmische Transformation**



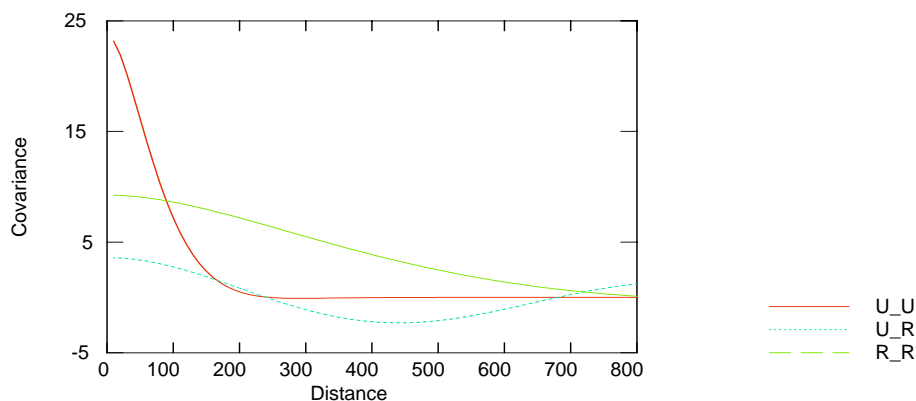


Abbildung 1 Klimatische Kovarianz für NO<sub>2</sub> um 7 Uhr zwischen den ländlichen (R\_R), den urbanen (U\_U) sowie zwischen ländlich und urbanen Regimes (U\_R) der Beobachtungsincremente. Dargestellt ist das durch eine analytische Funktion approximierte Kovarianzmodell.

### 2.2.3 Varianz des Beobachtungsfehlers

Der Beobachtungsfehler wird als eine räumlich nicht korrelierte Komponente der Beobachtung mit verschwindendem Erwartungswert angesehen (siehe Flemming 2003a). Er wurde für die zeitlichen Auswahlparameter des Kovarianzmodells des Modellfehlers, d.h. Spezies, Tagesstunde und Halbjahr, für jede Station ermittelt. Dazu wurde ein homogenes lokales Kovarianzmodell für jede Station aus den Kovarianzen zwischen den betrachteten Stationen und den Nachbarstationen abgeleitet. Durch den Vergleich der totalen empirischen Varianz der Station mit der lokalen, durch Kovarianzmodell ermittelten Varianz des glatten Feldes kann die Varianz des Beobachtungsfehlers geschätzt werden.

Denn für verschiedene Orte  $i$  und  $j$  gleicht der Kovarianzwert  $C_{ij}$  der Beobachtungsincremente dem der Modellfehler  $b_{ij}$ , für gleiche Orte  $i=j$  entspricht der Wert der Summe der Varianzen des Beobachtungsfehlers  $\sigma_{O_i}^2$  und des Modellfehlers  $\sigma_{B_i}^2$ . Für den Kovarianzwert  $C_{ij}$  der Beobachtungsincremente an den Orten  $i$  und  $j$  gilt demzufolge:

$$C_{ij} = \frac{(y_i - x_{B_i})(y_j - x_{B_j})}{(y_i - x_{B_i})(y_j - x_{B_j})} = \begin{cases} b_{ij} + \sigma_{O_i}^2 = \sigma_{B_i}^2 + \sigma_{O_i}^2 & i = j \\ b_{ij} & i \neq j \end{cases} \quad \{1.3\}$$

Die Differenz zur totalen Varianz der Inkremente liefert dann die gesuchte Varianz des Beobachtungsfehlers  $\sigma_{O_i}^2$ . Das Prinzip der Schätzung der Varianz des Beobachtungsfehlers mit Hilfe eines Kovarianzmodells ist in Abbildung 2 dargestellt.

Mit dem klimatischen Ansatz können stationsspezifische Fehler ermittelt werden. Für jede Station ist aus der Zeitreihenauswertung der Beobachtungsincremente die Gesamtvarianz bekannt. Die Aufgabe besteht nun in einer möglichst guten Schätzung der Varianz des Modellfehlers bzw. des glatten Feldes am Stationsort. Hierzu wird ein lokales homogenes und isotropes Kovarianzmodell auf Basis der empirischen Kovarianzwerte mit der betrachteten Station in einem Radius von 100 km herangezogen.

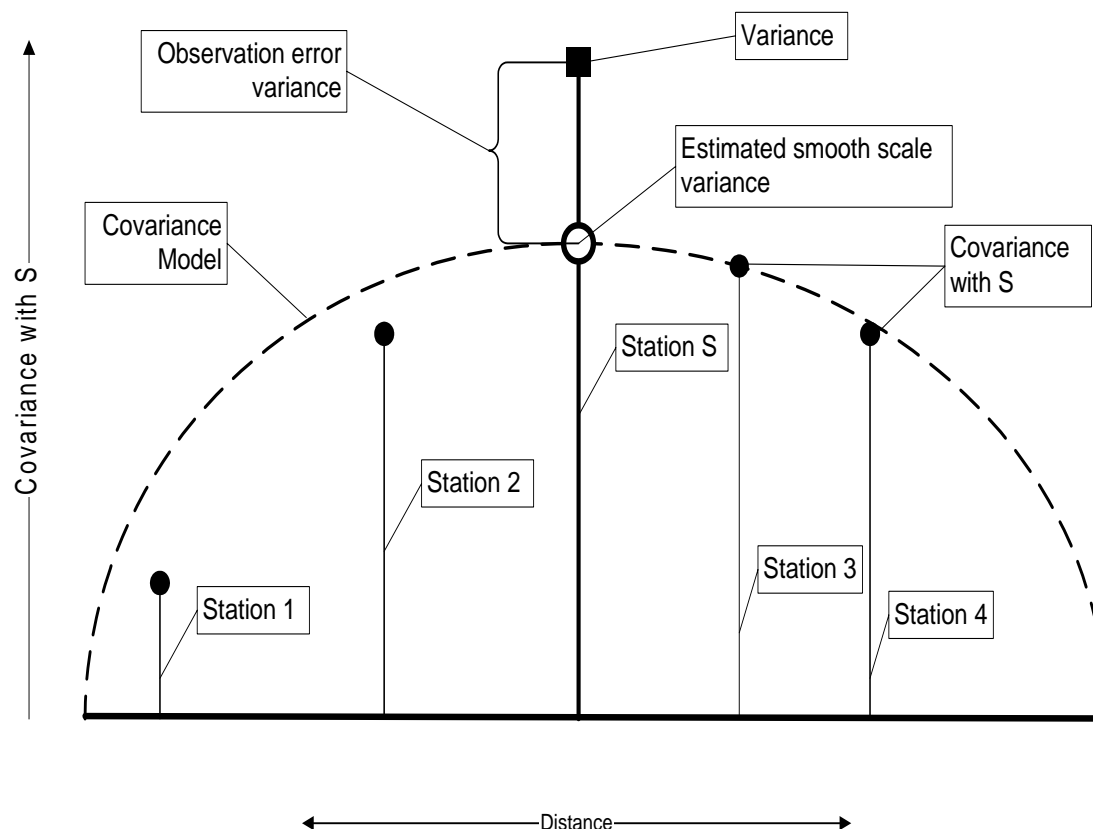


Abbildung 2 Schätzung der Varianz des klimatischen Beobachtungsfehlers (observation error variance) der Station S mit Hilfe eines Kovarianzmodells nach der Beobachtungsmethode.

#### 2.2.4 Die stationsbezogene Beobachtungsfehlervarianzen für deutsche Messstationen

Die Gesamtheit der stationsbezogen bestimmten Standardabweichungen, d. h. die Wurzel der Varianz, der Beobachtungsfehler aller betrachteten Spurenstoffe, ist in Abbildung 3 zu finden. Abbildung 4 gibt einen Überblick über die räumliche Verteilung der Beobachtungsfehler für Ozon und PM10.

Für PM10 sind die geschätzten stationsbezogenen Beobachtungsfehler deutlich größer als für NO<sub>2</sub>, Ozon und SO<sub>2</sub> an allen Tagesstunden. Die stündliche Variabilität von PM10 ist sehr hoch und dementsprechend werden große Fehler geschätzt. Da PM10 keinen ausgeprägten Tagesgang aber eine große Tagesschwankung besitzt (Flemming, 2003a), ist es im Sinne der räumlichen Repräsentativität empfehlenswert, die stündlichen Werte durch das Tagesmittel zu ersetzen. Die zugehörigen Beobachtungsfehler sind dann deutlich geringer.

Der Zusammenhang zwischen Beobachtungsfehler und dem Immissionsregime, d. h. der typischen Belastung, ist in Abbildung 3 und Tabelle 2 dargestellt. Für die primär emittierten Spurenstoffe, d. h. mit Ausnahme von Ozon, steigt der Beobachtungsfehler mit zunehmender mittlerer Immission an. Bei PM10 und SO<sub>2</sub> bleibt der relative, d. h. auf die mittlere Belastung bezogene Fehler, nahezu konstant in allen Regimes; bei NO<sub>2</sub> sinkt der relative Fehler leicht mit zunehmender Belastung.

Bei Ozon ist die Standardabweichung des Beobachtungsfehlers für alle Regimes mit Ausnahme der Berg-Stationen nahezu konstant. Die scheinbar geringe räumliche Repräsentativi-

tät der Berg-Stationen erklärt sich aus dem hier gewählten Vorgehen, den Beobachtungsfehler mit Hilfe der umgebenden Stationen abzuschätzen. In der Tat sind die Berg-Stationen aufgrund der geringen Deposition in der Nacht nicht repräsentativ für die Verhältnisse in der Bodenschicht über Land. Sie entsprechen eher den Verhältnissen in der zweiten Modellschicht. Der relative Beobachtungsfehler der Berg-Stationen ist ungefähr von gleicher Größe wie der der Land-Stationen. Mit zunehmender Urbanisierung und Verkehrseinfluss steigt der relative Beobachtungsfehler.

Der Ausgangspunkt für die klimatische Kovarianzmodellierung sind separate Kovarianzmodelle für jede Tagesstunde. Betrachtet man die geschätzten Standardabweichungen des Beobachtungsfehlers für jede Tagesstunde, so stellt man bei den primären Stoffen eine Übereinstimmung zwischen dem Tagesgang der Immission und dem des Beobachtungsfehlers fest. Interessant ist jedoch, dass für Ozon in der Zeit der höchsten Konzentrationen eine leichte Abnahme des absoluten und eine große des relativen klimatischen Beobachtungsfehlers festzustellen ist. Offensichtlich ist bei der nachmittäglichen Ozonbildung und guter Durchmischung die räumliche Repräsentativität größer als in den nächtlichen Stunden, wo lokale NO-Immission und Depositionsprozesse die Ozonkonzentration steuern.

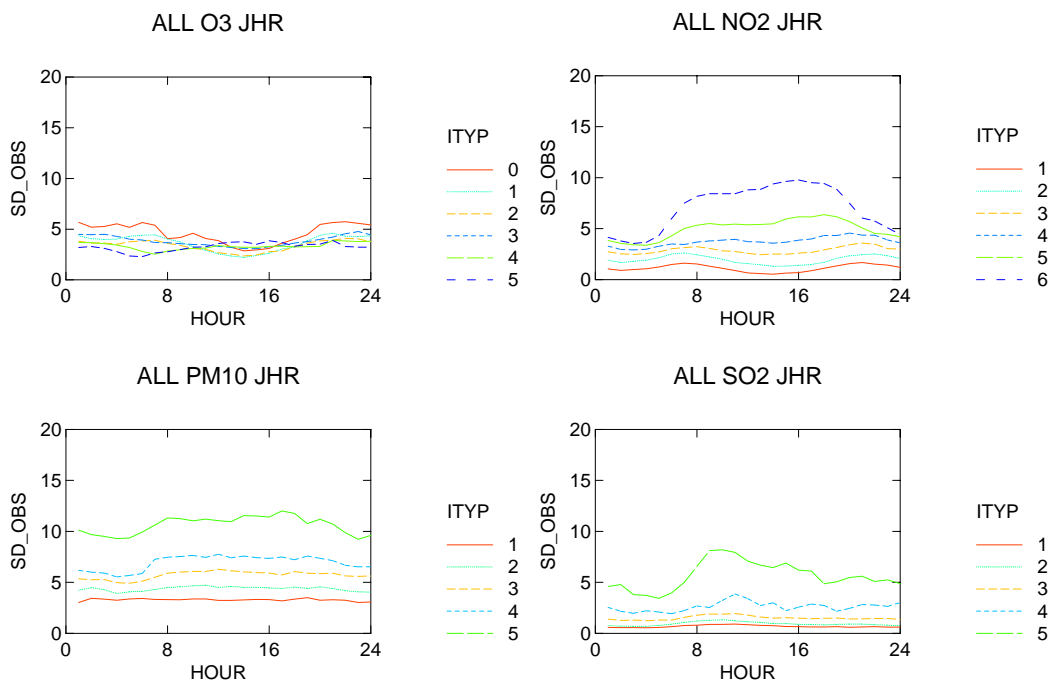


Abbildung 3 Tagesgang der Standardabweichung des Beobachtungsfehlers von O<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub>, PM<sub>10</sub> und SO<sub>2</sub> für verschiedene Immissionsregimes im Jahr 2002 in Deutschland. (O<sub>3</sub> und NO<sub>2</sub> B: Berg/Küste, U1: Vorstadt U2: Stadt, U3: belastete Stadt, S: Strasse, S2: Strasse extrem, 1-5: Immissionsregime mit wachsender Verschmutzung für SO<sub>2</sub> und PM<sub>10</sub> Niveau)

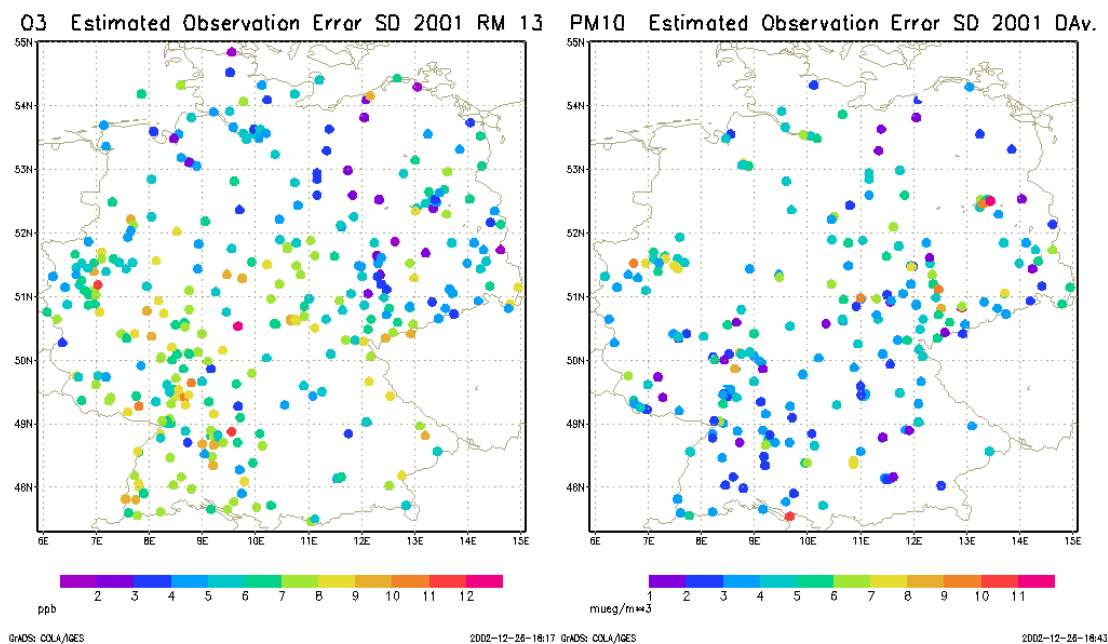


Abbildung 4 Karte der stationsbezogenen Standardabweichung des Beobachtungsfehlers für Ozon um 13 Uhr (links) und für die Tagesmittelwerte von PM10 (rechts)

Stoff\Regime:	B	R / 1	U1 / 2	U2 / 3	U3 / 4	S / 5	S2	Tagesgang
O3 (ppb)	8	6	6	6	6	6		schwach
NO2 (ppb)		3	4	5	6	7	8	schwach
PM10 (µg/m <sup>3</sup> )		8	8	10	12	15		schwach
SO2 (µg/m <sup>3</sup> )		2	3	4	6	18		schwach

Tabelle 2 Geschätzte Standardabweichung des klimatischen Beobachtungsfehlers der stündlichen Messung, dargestellt als Median aller Stationen innerhalb der Immissionsregimes nach Flemming (2003) (B = Berg, R = Land, U1 = Vorstadt, U2 = Stadt, U3 = belastetet Stadt, S = Straße, S2 = Straße extrem)

### 3 Interpolationsgüte

Wie Modellrechnungen oder Messungen muss auch die Güte des OI-Verfahrens mit möglichst objektiven Methoden bewertet werden. Für die Bewertung der Interpolationsgüte bei der Erzeugung der Immissionsfelder aus Modellrechnung und Beobachtung werden die folgenden zwei Ansätze verwendet:

- Auswertung des cross-validation Interpolationsfehlers an den Messstationen
- Subjektive Bewertung der Karten

Für den cross-validation Ansatz wird die Differenz zwischen dem Messwert und dem dortigen Interpolationsergebnis ausgewertet (Flemming, 2003a), wobei der Messwert bei der Interpolation nicht verwendet wird. Die Interpolationsgüte ist nach diesem Ansatz nur an den Messorten objektiv bestimmbar. Der cross-validation Interpolationsfehler bildet ein Ensemble, das für jeden Termin und jeden Messort einen Wert liefert. Dieses Ensemble muss statistisch ausgewertet werden, um zu einer verallgemeinerbaren Aussage zu kommen. Dafür bietet sich der Mittelwert, der den Bias des Interpolationsfehlers darstellt, und der RMSE<sup>2</sup> des Interpolationsfehlers an. Die Varianz des Beobachtungsfehlers ist dabei die untere Schranke für den RMSE des Interpolationsfehlers.

Von der Theorie her ist der Bias des Interpolationsfehlers bei der Optimalen Interpolation null und der Ansatz der Interpolation beruht auf einer Minimierung des RMSE. Bei der Auswertung der Interpolationsfehler muss jedoch beachtet werden, dass die vorliegenden Beobachtungen verschiedenen Regimes angehören, die unterschiedlich flächenmäßig repräsentativ sind. Darüber hinaus stammt die Mehrzahl der Messungen aus urbanen und verkehrsbelasteten Regimes. Diesem ersten Punkt kann Rechnung getragen werden, in dem die Interpolationsfehlerstatistik regimebezogen ausgewertet wird. Die Basis dafür ist die von Flemming (2003c) entwickelte Klassifikation der deutschen Messstationen (Tabelle 1). Die Interpolationsgüte sollte dann vorrangig für die Land- und suburbanen Stationen bewertet werden, da diese für eine größere Fläche repräsentativ sind.

Neben diesen quantifizierbaren Maßen ist die subjektive Beurteilung der Karten notwendig, um die Konsistenz der ermittelten Felder zu bewerten. Dies betrifft insbesondere die Flächen der Karte zwischen den Messorten und dabei besonders die Ränder des betrachteten Gebietes. Das Qualitätsmerkmal ist eine möglichst geringe „Verschmierung“ der hohen Konzentrationswerte der Ballungsgebiete auf die ländliche Umgebung, d.h. die Erhaltung des Konzentrationsgradienten zwischen den Gebieten mit hoher Emissionsdichte und solchen mit niedrigen Emissionsdichten. Hierbei müssen auch lokale Unterschiede bewertet werden, da u.U. eine Verbesserung in einem Gebiet zu einer Verschlechterung in einem anderen führen kann.

Diese starken lokalen Besonderheiten sind nicht nur eine Konsequenz der Variabilität der Immissionsfelder sondern in hohem Maße auch der unterschiedlichen Messstrategien der einzelnen Bundesländer. Auf die Besonderheiten der Messstrategien der Bundesländer insbesondere bei der PM<sub>10</sub>-Messung wurde bereits in Flemming (2003b) aufmerksam gemacht. Sie werden hier in Kapitel 4.2.3 betrachtet.

---

<sup>2</sup> Root Mean Square Error

## 4 Auswahl der Verfahrensparameter und Stationsauswahl

Die Parameter der OI-Methode wurden bereits in Flemming (2003a) festgelegt. In diesem Bericht wird nur die Biaskorrektur vertiefend erörtert, da ihr bei der gestellten Aufgabe eine besondere Bedeutung zukommt. Dies liegt an dem Umstand, dass die stündlichen Analysen zu Jahreswerten zusammengefasst werden und sich so ein systematischer Bias stark bemerkbar macht.

Im Folgenden werden die wichtigen Verfahrensparameter nochmals aufgeführt. Bis auf die Frage der Biaskorrektur werden die bereits in Flemming (2003a) festgelegten Parameter verwendet. Für die Biaskorrektur ergeben sich alternative Ansätze, die zum einen die Biaskorrektur der Modellrechnung bzw. die Biaskorrektur der finalen Analyse umfassen. Sie werden im Kapitel 4.1 diskutiert. Die wichtigsten Verfahrensparameter sind.

- Stationsanzahl pro Gitterpunktsanalyse, Gitterweite
  - a) 8 Stationen pro Gitterpunkt, 15 km Gitterweite
- Zeitliche Akkumulation der Daten und AQ Auswertung
  - a) Stündliche OI und nachträgliche Auswertung
- Auswahl des Kovarianzmodells und Beobachtungsfehlers
  - Heterogener klimatischer Ansatz mit Diskriminierung der Regimes, individuelle Beobachtungsfehlermaße

Die Auswahl der bei der OI-Methode verwendeten Stationen ist von großer Bedeutung für das Analyseergebnis. Vom theoretischen Standpunkt aus kann das Verfahren jede beliebige Messung skalengerecht einbeziehen, sofern nur deren Beobachtungsfehlerstatistik richtig spezifiziert ist.

Für jede Station wird die Varianz des stationsbezogenen Beobachtungsfehlers aufgrund umliegender Stationen mit Hilfe der Kovarianzmodelle geschätzt. Der Beobachtungsfehler ist der räumlich nicht korrelierte Anteil der Beobachtung. Aufgrund dieses Beobachtungsfehlers stimmt häufig der Wert der flächenhaft interpolierten Karten am Messort nicht mit dem Messwert überein. Die Varianzschätzung geht jedoch von der üblichen Annahme aus, dass der Beobachtungsfehler biasfrei ist und somit eine sich im Mittel ausgleichende Störung ist.

Dieses Fehlermodell hat jedoch für die Immissionsbeobachtungen in sehr belasteten Regimes nur eine begrenzte Gültigkeit. Es ist hier davon auszugehen, dass die räumlich nicht repräsentative Messung einen systematisch erhöhten Wert aufweist. Nach Meinung des Verfassers gibt es in der derzeitigen Literatur zur Datenassimilation keinen Ansatz, dieses Problem zu lösen. Stattdessen wird der pragmatische Ansatz gewählt, offensichtlich unrepräsentative Stationen nicht für die Flächeninterpolation zu verwenden. Dazu bedarf es jedoch einer gründlichen Stationsauswahl, die nach der subjektiven Einschätzung der Bundesländer oder nach den in Flemming (2003a) vorgeschlagenen Auswahlkriterien erfolgen kann.

## 4.1 Methoden der Biaskorrektur

Der Hauptzweck der Biaskorrektur der Modellrechnung ist zunächst, den statistisch theoretischen Voraussetzungen des OI-Verfahrens zu genügen. Sie fordern, dass zwischen Modell und Beobachtung kein Bias bestehen darf. Dieser Umstand ist von besonderer Bedeutung für die Beobachtungsinkremente, die zur Kovarianzmodellierung verwendet werden. Da das ausgewählte klimatische Kovarianzmodell bereits vorliegt, ist dieser Umstand für die hier besprochene Interpolation nicht mehr entscheidend.

Während für die Kovarianzmodellierung aus statistischen Gründen ein Bias = 0 für das Ensemble der Beobachtungsinkremente gefordert wird, kann die Biaskorrektur der Modellrechnung bzw. auch der Analyse anwendungsorientiert erfolgen. Das Problem bei der Biasbestimmung zwischen Modellfeld und Messung ist, dass die Überzahl der Messungen aus den belasteten, flächenmäßig aber kleinen Gebieten stammt. Bestimmt man den Bias über alle Stationen, so erscheint ein Modellfeld als biasfrei, das großflächig eine urbane Charakteristik aufweist. Für so ein Modellfeld würde jedoch eine generelle Überschätzung in großen Teilen des Modellgebietes auftreten, da der Bias dann von den hochbelasteten Stadtstationen dominiert wird. Aus diesem Grund ist in Flemming (2003a) vorgeschlagen worden, den Modell- und Analysebias allein mit den Landstationen oder zusätzlich noch mit den suburbanen Stationen zu ermitteln.

Der so ermittelte Bias kann verwendet werden, um die Modellrechnung bzw. die aus Modellrechnung und Beobachtung gewonnenen Analyse zu korrigieren. Es zeigte sich, dass die Biaskorrektur der Modellrechnung einen sehr geringen Einfluss auf Mittelwert und Standardabweichung des cross-validation Interpolationsfehlers hat. Es macht an den Messstationen, an denen der cross-validation Interpolationsfehler nur ermittelt werden kann, offensichtlich keinen Unterschied, ob das biaskorrigierte Modellfeld mit einer geringen Abweichung der Beobachtung oder das unkorrigierte Modellfeld mit einem größeren Beobachtungsinkrement geändert wird. Die Korrektur des Modellbias hat jedoch einen Einfluss zwischen den Stationsorten. Dieser ist jedoch bei der hier vorliegenden hohen Stationsdichte gering.

Die erzeugte Flächeninterpolation (Analyse) ist bei der Optimalen Interpolation per se biasfrei hinsichtlich des gesamten Kollektivs der Beobachtungen. Eine Biaskorrektur der Analyse kann angewendet werden, um nachträglich Biasfreiheit hinsichtlich des Ensembles der Land- bzw. dem der Land- und Vorstadtstationen zu erzielen. Das erscheint sinnvoll, da diese Stationen im Allgemeinen flächenmäßig repräsentativer als die Stadtstationen sind. Für NO<sub>2</sub> und PM<sub>10</sub> bedeutet das eine homogene Absenkung des Niveaus, so dass der Bias über die genannte Stationsauswahl minimiert wird.

Die folgenden Abbildungen zeigen den Mittelwert (Bias) und die Standardabweichung des cross-validation Interpolationsfehlers sowie Karten des Jahresmittelwertes für die folgenden Versionen der Biaskorrektur für PM<sub>10</sub> und NO<sub>2</sub>:

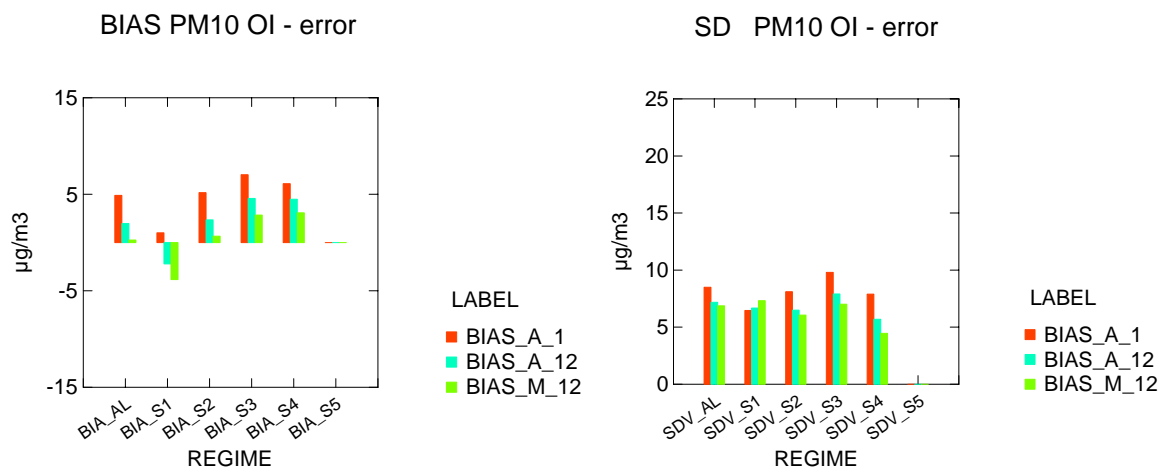
- a) Homogene Biaskorrektur der Modellrechnung mit Land- und Vorstadt Stationen (=> Minimaler Modellbias über alle Land- und Vorstadtstationen)
- b) Nachträgliche homogene Biaskorrektur der Analyse mit dem Modellbias der Land-Stationen (=> Minimaler Analysebias über alle Land- und Vorstadtstationen )

- c) Nachträgliche homogene Biaskorrektur der Analyse mit dem Modellbias der Land- und Vorstadt-Stationen (=> Minimaler Analysebias über alle Land-Stationen)

Die Biaskorrektur der Modellrechnung a) hat einen sehr kleinen Mittelwert (Bias) des cross-validation Interpolationsfehlers hinsichtlich aller Stationen (siehe Abbildung 5 und Abbildung 7). Betrachtet man jedoch die Aufteilung in die Regimes, so wird offensichtlich, dass eine Überschätzung an den Orten der Landstationen und eine kleine Unterschätzung an den Orten der verschiedenen urbanen Stationsklassen auftreten. Durch die Biaskorrektur der Analyse (Variante b) kann der Interpolationsbias an den Landstationen zuungunsten eines erhöhten Gesamtbias verringert werden. Einen Kompromiss stellt die Biaskorrektur der Analyse (Variante c) hinsichtlich des Ensembles der Land- und Vorstadtstationen dar.

Die Karten der Jahresmittelwerte (Abbildung 6 und Abbildung 8) zeigen die Unterschiede der verschiedenen Biaskorrekturen. Die Biaskorrektur der Analyse mit den Landstationen (Variante b) hat ein deutlich geringeres Niveau als die beiden anderen Methoden. Die Analysebiaskorrektur mit den Land- und Vorstadtstationen c) liegt näher an der Variante a) ohne Analysebiaskorrektur.

Die Entscheidung, ob eine Analysebiaskorrektur sinnvoll ist, hängt von der gegebenen Aufgabestellung ab. Da für die Luftgütebewertung vorrangig die höheren Werte von Interesse sind, wird vorgeschlagen, auf eine Biaskorrektur der Analyse zu verzichten. In der Standard-Anwendung der OI wird die Modellrechnung also mit dem Bias der Land- und Vorstadtstationen korrigiert (Variante c).



**Abbildung 5** Mittelwert (links) und RMSE (rechts) des cross-validation Interpolationsfehlers von PM10 bei verschiedenen Biaskorrekturen. **Bias\_M\_12**: Biaskorrektur der Modellrechnung (Variante a), **Bias\_A\_1**: Biaskorrektur der Analyse mit den Stationen des Regimes #1 (Variante b), **Bias\_A\_12**: wie Variante b und zusätzlich des Regimes #2 (Variante c). Dargestellt für alle Stationen (BIA\_AL, SDV\_AL) und separat für die Stationen der Regime #1 bis #5 (BIA\_S1, SDV\_S1 ... BIA\_S5, SDV\_S5).



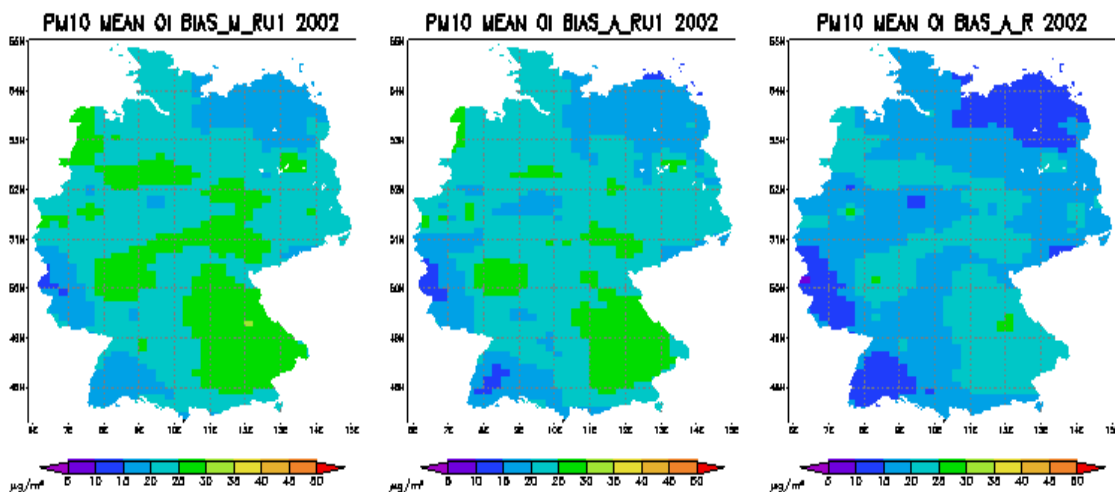


Abbildung 6 Jahresmittelwert der PM10 Konzentration für 2002 aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung nach der OI-Methode mit verschiedenen Ansätzen zur Biaskorrektur. Links: Biaskorrektur der Modellrechnung (Variante a), Mitte: Biaskorrektur der Analyse mit den Stationen der Regimes #1 und #2 (Variante c) Rechts: Biaskorrektur der Analyse mit den Stationen des Regimes #1 (Variante b)

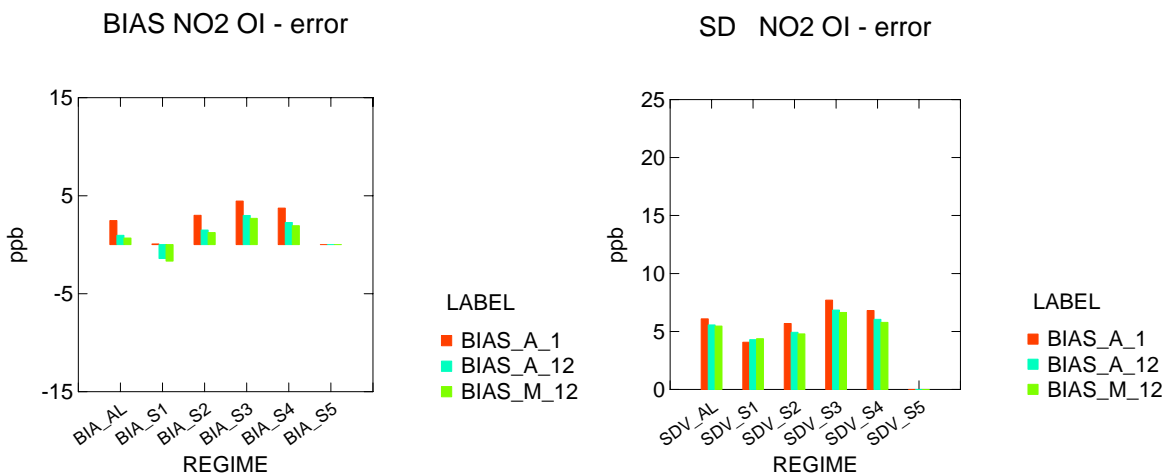


Abbildung 7 Mittelwert (links) und RMSE (rechts) des cross-validation Interpolationsfehlers von NO<sub>2</sub> bei verschiedenen Biaskorrekturen. Bias\_M\_12: Biaskorrektur der Modellrechnung (Variante a), Bias\_A\_1: Biaskorrektur der Analyse mit den Land-Stationen (Variante b), Bias\_A\_12: wie Variante b und zusätzlich mit den Vorstadt-Stationen (Variante c). Dargestellt für alle Stationen (BIA\_AL, SDV\_AL) und separat für die Stationen der Regime Land (BIA\_S1/SDV\_S1) Vorstadt (BIA\_S2/SDV\_S2), Stadt (BIA\_S3/SDV\_S3), belastete Stadt (BIA\_S4/SDV\_S4) und Straße (BIA\_S5/SDV\_S5).

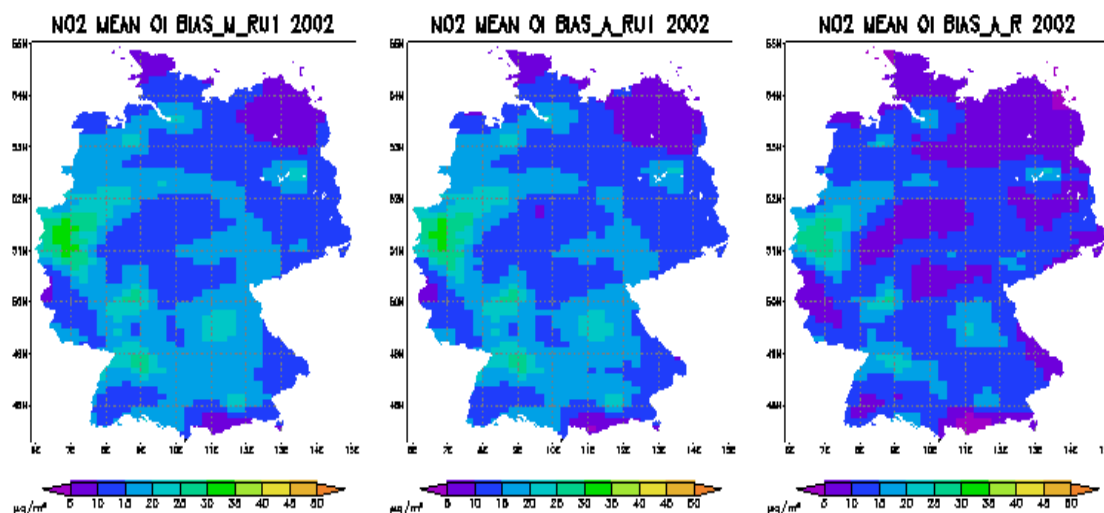


Abbildung 8 Jahresmittelwert der  $\text{NO}_2$  Konzentration für 2002 aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung nach der OI-Methode mit verschiedenen Ansätzen zur Biaskorrektur. Links: Biaskorrektur der Modellrechnung (Variante a), Mitte: Biaskorrektur der Analyse mit den Land- und Vorstadt-Stationen (Variante c), Rechts: Biaskorrektur der Analyse mit den Land-Stationen (Variante b).

## 4.2 Stationsauswahl

Bei der Stationsauswahl sollten folgende Gesichtspunkte berücksichtigt werden:

- Vollständigkeit
- Repräsentativität
- Unterschiedliche Messstrategie (Messmethode, Netzwerkstruktur) in den einzelnen Bundesländern

### 4.2.1 Vollständigkeit

Die Vollständigkeit der stündlichen Messwerte einer Messstation muss größer als 90% sein, wenn diese gemäß den EU-Tochterrichtlinien für die Luftgütebewertung herangezogen werden soll. Dieses Kriterium wird für alle Stoffe außer  $\text{PM}_{10}$  angewendet. Messreihen, die weniger Werte haben, werden nicht in den OI-Prozess einbezogen. Für  $\text{PM}_{10}$  hat sich dieses Kriterium als nicht praktikabel erwiesen, da ursprünglich die ausschließlich gravimetrischen Messungen der Bundesländer NRW und BW nur für höchstens jeden zweiten Tag vorlagen. Aus diesem Grund wurden für die  $\text{PM}_{10}$  Daten das Vollständigkeitskriterium für alle Stationen in Deutschland nicht angewendet. Ende August 2003 wurden jedoch zum Teil fehlwertersetzte Daten von den Ländern zu Verfügung gestellt, auf die Anwendung eines Vollständigkeitskriteriums für  $\text{PM}_{10}$  wurde jedoch weiterhin verzichtet. Es muss dabei berücksichtigt werden, dass die unvollständigen Messreihen einen entsprechend geringeren Einfluss auf die Karten der jahrebezogenen Luftgütekriterien haben, da letztere aus stündlichen Analysefeldern ermittelt werden. Dies kann insbesondere bei der Anzahl der Tage mit Überschreitungen von Grenzwerten einen deutlichen Einfluss haben. Aus diesem Grund wird für zukünftige

Anwendungen eine generelle Datenersetzung für möglichst viele Ausfallwerte vorgeschlagen.

#### 4.2.2 Repräsentativität

Die Auswahl der für die Kartierung zu verwendenden, flächenrepräsentativen Stationen wurde durch die einzelnen Bundesländer für die Messungen von NO<sub>2</sub> und PM10 vorgenommen. Die Stationen wurden dazu in die Kategorien „Spot – keine flächenmäßige Repräsentativität“ und „Area – flächenmäßig repräsentativ“ eingeteilt. Neben dieser subjektiven Einteilung gibt es das in Flemming (2003a) vorgeschlagene Kriterium, die Stationen des Typs „Straße“ und „Straße belastet“ bzw. der Belastungsstufe #5 nach Flemming (2003c, siehe Tabelle 1) nicht in der Interpolation zu verwenden. In Anbetracht der Auflösung von ca. 15 km erscheint es weiterhin sinnvoll, auch die Stationen des Typs „belastete Stadt“ (Ozon und NO<sub>2</sub>) bzw. Belastungsstufe #4 (PM10 und SO<sub>2</sub>) einer genaueren Überprüfung ihres Nutzens für die Flächeninterpolation zu unterziehen. Es wird vorgeschlagen, nur die Stationen dieses Typs zu verwenden, wenn die zugehörige Modellrechnung kein ländliches oder suburbanes Regime (analog #1 oder #2) am Stationsort ermittelt. Die Regimeklassifikation der für alle Gitterpunkte berechneten Zeitreihen erfolgt entsprechend der Vorgehensweise für die Beobachtungen.

Es ergeben sich damit die folgenden Variationen für die Stationsauswahl:

- a) Keine Messung mit Punktcharakteristik nach Einschätzung der Bundesländer für PM10 und NO<sub>2</sub> („Spot-Messung“)
- b) Keine Messung nach a) und keine aus den Regime „Straße“/#5 und „Straße extrem“ nach der Klassifikation von Flemming (2003c, siehe Tabelle 1).
- c) Keine Messung nach b) und zusätzliche nur Messungen aus den Regimes „belastete Stadt“/#4“, falls die zugehörige Modellrechnung „Land“/#1 oder „Vorstadt“/#2 ist.

Zwischen der Einteilung der Repräsentativität durch die Bundesländer nach a) („Spot“ oder „Area“) für NO<sub>2</sub> und PM10 und der aus den Immissionsregimes abgeleiteten Stationsauswahl b) existieren Unterschiede, die in Abbildung 9 und Abbildung 10 dargestellt sind. Bei den als nicht flächenrepräsentativ eingeschätzten Spots befinden sich Stationen aus den Regimes „Vorstadt“, „Stadt“ und „belastete Stadt“ bzw. #2, #3 und #4. Umgekehrt sind bei NO<sub>2</sub> einige Messungen des „Straßen“ – Regimes als flächenrepräsentativ eingestuft worden. Eine vollständige Auflistung der Stationen, die durch die Kriterien a) und b) unterschiedlich bewertet werden, ist im Anhang B zu finden.

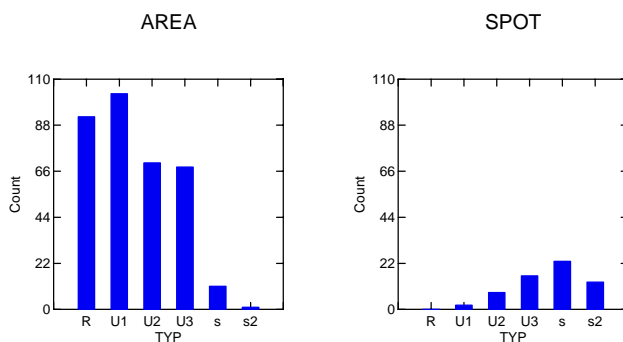
NO<sub>2</sub>

Abbildung 9 Verteilung der Immissionsregimes für NO<sub>2</sub>, geordnet nach der Repräsentativitätseinschätzung „AREA“ und „SPOT“ durch die Bundesländer. (R=Land, U1=Vorstadt, U2=Stadt U3=Stadt-Straße S=Straße, S2=Straße extrem) Die Immissionsregimes R bis U3 sind das Kriterium für die Stationsauswahl bei der OI-Methode nach Flemming (2003a)

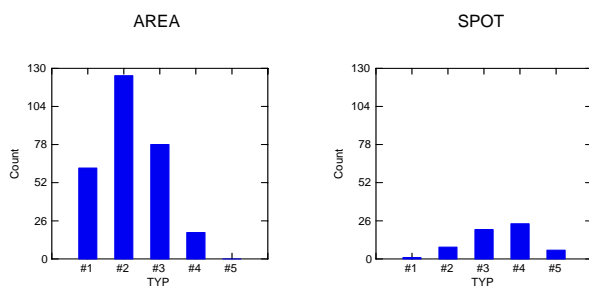
PM<sub>10</sub>

Abbildung 10 Verteilung der Immissionsregimes für PM<sub>10</sub>, geordnet nach der Repräsentativitätseinschätzung „AREA“ und „SPOT“ durch die Bundesländer. #1 bis #5 sind PM<sub>10</sub>-Regimes mit zunehmender mittlerer Belastung. Die Immissionsregimes #1 bis #4 sind das Kriterium für die Stationsauswahl bei der OI-Methode nach Flemming (2003a)

Die unterschiedlichen Ansätze a), b) und c) für die Stationsauswahl zeigen eine geringe Auswirkung bei dem bundesweit zusammengefassten cross-validation Interpolationsfehler. Sein Mittelwert und sein RMSE sind für PM<sub>10</sub> und NO<sub>2</sub> in Abbildung 14 und Abbildung 12 dargestellt. Der erkennbare Unterschied bei den Regimes #4 bzw. U3 ergibt sich hauptsächlich durch den Umstand, dass Stationen dieses Typs nach c) nicht für die Interpolation verwendet wurden. Die Auswirkung der Stationsanzahl pro Regime durch Stationsauswahl ist Abbildung 15 zu entnehmen.

Betrachtet man jedoch die Karten der Jahremittelwerte (Abbildung 11 und Abbildung 13) so erkennt man lokale Unterschiede. Durch den Ausschluss der Stationen aller Stationen der Regimes „Straße“ und „Straße extrem“ aus der Menge der von den Bundesländern als flächenrepräsentativ angesehenen Stationen (Variante b) wird bei NO<sub>2</sub> der sehr hohe Flächenwert im Raum Frankfurt etwas verringert.

Durch den weiteren Ausschluss der Stationen des Typs „belastete Stadt“ bzw. der PM<sub>10</sub>-Belastungsstufe #4, wenn dies mit dem entsprechenden Modellergebnis nicht vereinbar ist (Variante c), ergeben sich merkliche Reduzierungen der großflächigen Belastung im Bundes-

land Bayern. Wie in Kapitel 4.2.3 weiter erläutert führt die Messstrategie Bayerns zu einer flächenhaften Überschätzung der Konzentrationswerte. Aus diesem Grund ist die durch die Variante c) herbeigeführte Absenkung des Immissionsniveaus als eine Verbesserung des Interpolationsergebnisses zu betrachten. Die Variante c) wird deshalb in der Standard-Anwendung der OI verwendet.

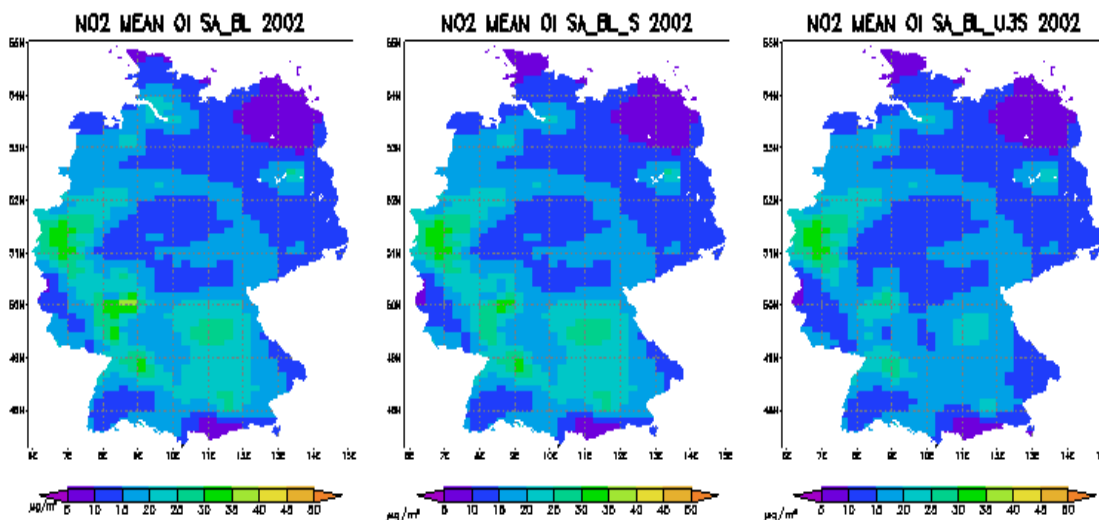


Abbildung 11 Jahresmittelwert der NO<sub>2</sub> Konzentration für 2002 aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung nach der OI-Methode mit verschiedenen Ansätzen zur Stationsauswahl. Links: Keine Beobachtung mit Spot-Charakteristik nach Bundesländereinschätzung (Version a), Mitte: wie Version a und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes „Straße“ und „Straße extrem“ (Version b), Rechts: wie Version b) und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes „belastete Stadt“ (Version c).

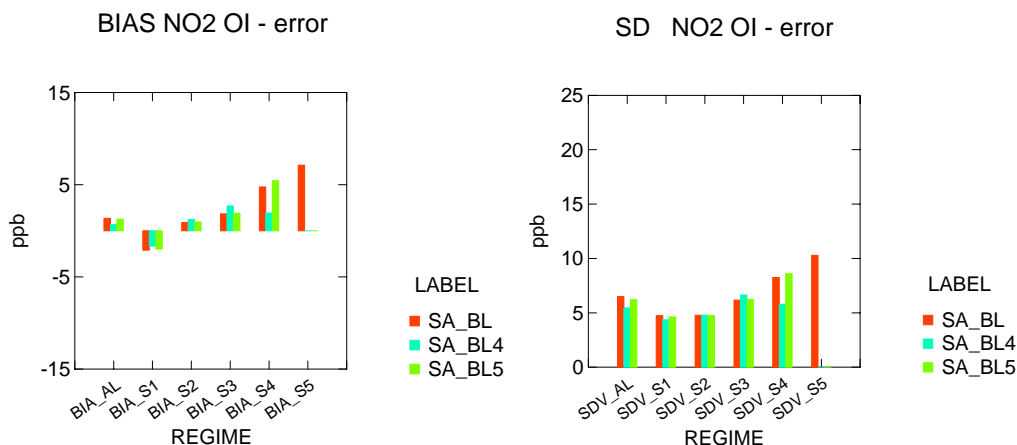


Abbildung 12 Auswirkung der Stationsauswahl auf den Mittelwert (links) und den RMSE (rechts) des cross-validation Interpolationsfehlers von NO<sub>2</sub> für alle Stationen (BIA\_AL, SDV\_AL) und separat für die Stationen der Regime #1 bis #5 (BIA\_S1, SDV\_S1, ...). SA\_BL = Keine Beobachtung mit Spot-Charakteristik nach Bundesländereinschätzung (Version a), SA\_BL5 = wie Version a und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes „Straße“ und „Straße extrem“ (Version b), SA\_BL4: wie Version b und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes „belastete Stadt“ (Version c).

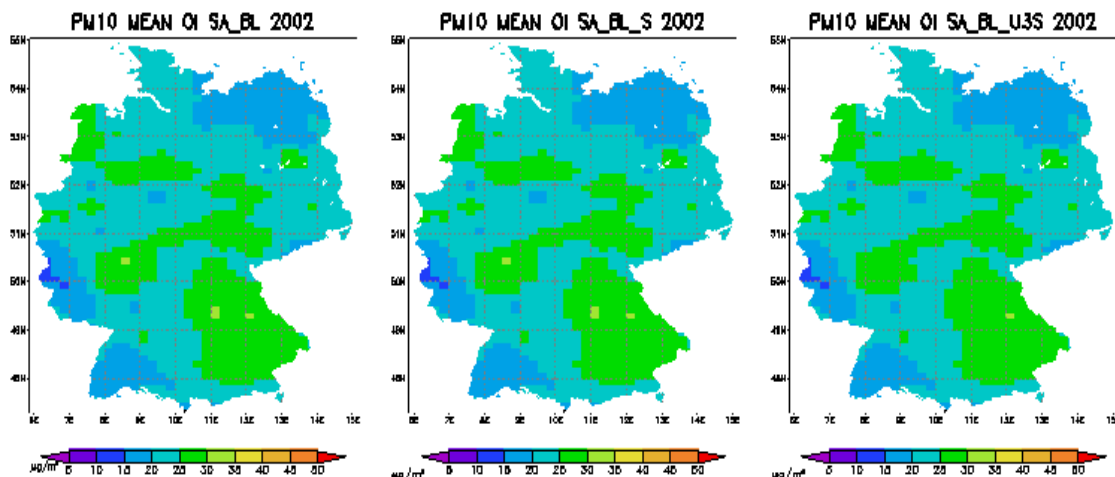


Abbildung 13 Jahresmittelwert der PM10 Konzentration für 2002 aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung nach der OI-Methode mit verschiedenen Ansätzen zur Stationsauswahl. Links: Keine Beobachtung mit Spot-Charakteristik nach Bundesländereinschätzung (Variante a), Mitte: wie Variante a und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes #5 (Variante b), Rechts: wie Variante b und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes #4 (Variante c).

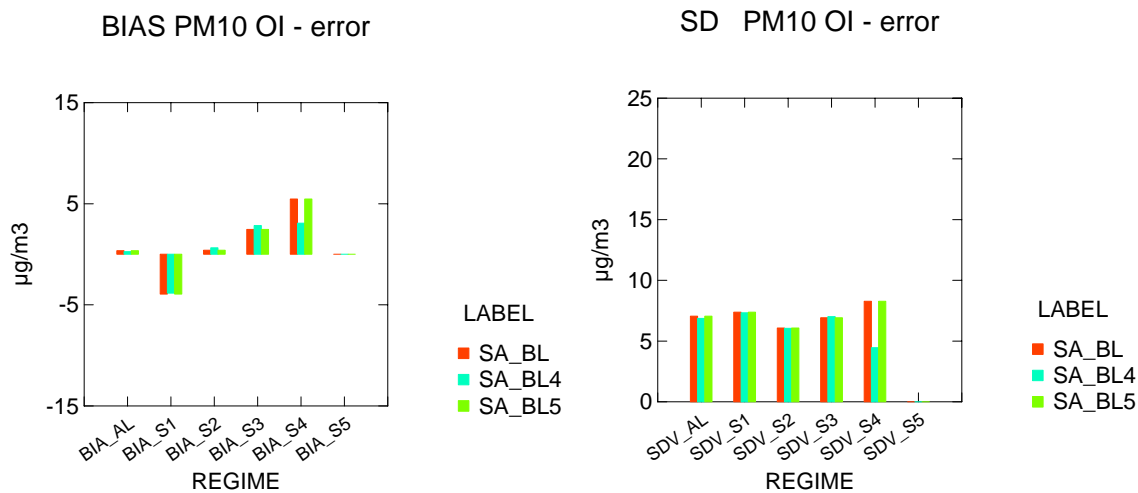


Abbildung 14 Auswirkung der Stationsauswahl auf den Mittelwert (links) und den RMSE (rechts) des cross-validation Interpolationsfehlers von PM10 für alle Stationen (BIA\_AL, SDV\_AL) und separat für die Stationen der Regime #1 bis #5 (BIA\_S1, SDV\_S1, ...). SA\_BL = Keine Beobachtung mit Spot-Charakteristik nach Bundesländereinschätzung (Version a), SA\_BL5 = wie Version a und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes #5 (Version b), SA\_BL4 = wie Version b und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes #4 (Version c).

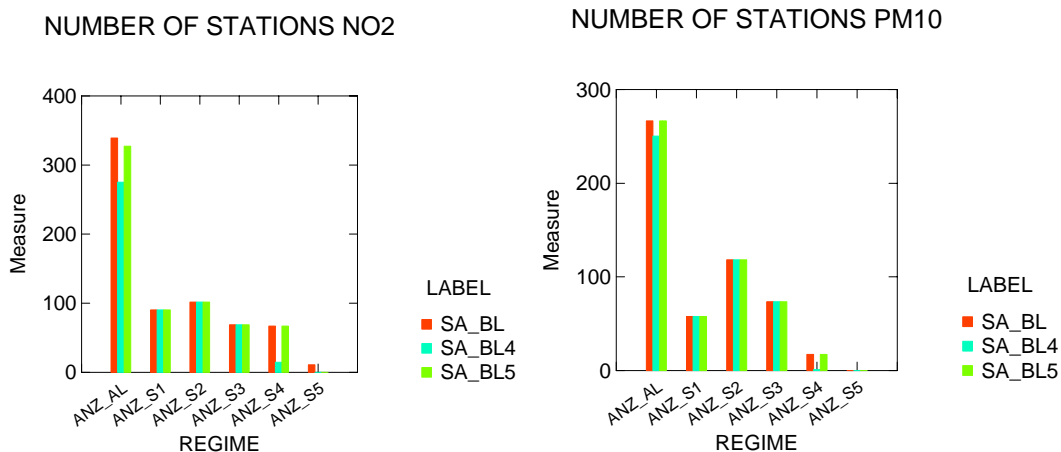


Abbildung 15 Anzahl der Stationen, gesamt (ANZ\_AL) und pro Regime für die OI von NO2 (links) und PM10 (rechts) bei verschiedenen Versionen der Stationsauswahl: SA\_BL = Version a, SA\_BL4 = Version c, SA\_BL5 = Version c.

### 4.2.3 Homogenisierung der bundesländerspezifischen Besonderheiten

Die Aufgabe der angewandten OI-Methode ist es, eine bundesweite und möglichst einheitliche Darstellung der Lüftgüte in einer räumlichen Auflösung von ca. 15 km bereitzustellen. Aufgrund der Tatsache, dass die operationelle Messung der Luftgüte von den einzelnen Bundesländern verantwortet wird, ergeben sich bei den gelieferten Daten bundeslandspezifische Besonderheiten, die sich in den folgenden Punkten bemerkbar machen:

- Zeitliche Auflösung der PM10-Messung
- Verhältnis der Stationsanzahl zwischen den ländlichen und den stärker belasteten Regimes
- Auswahl der flächenrepräsentativen Stationen

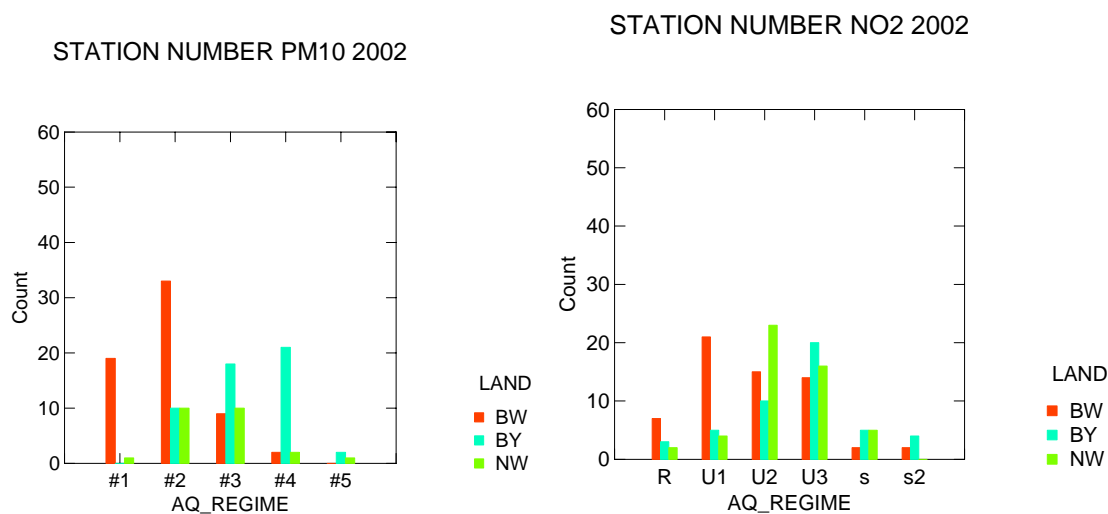
Die Bundesländer Nordrhein-Westfalen (NRW) und Baden-Württemberg (BW) lieferten (für 2002) nur gravimetrisch gemessene Tagesmittelwerte der PM10 Konzentration, Bayern (BY) lieferte 3-stündige Daten während aus den übrigen Bundesländern und vom Umweltbundesamt 1h-Werte bereitgestellt wurden. Aus Gründen der Verallgemeinerung wurde deswegen die gesamte PM10 Analyse auf Basis der Tagesmittelwerte durchgeführt. Dies ist möglich, da die in den EU-Richtlinien definierten PM10-Grenzwerte keine höhere zeitliche Auflösung verlangen. Zusätzlich wird durch die zeitliche Mittelung der Anteil des Rauschens im Stundenbereich beseitigt und somit auch die räumliche Repräsentativität der einzelnen Stationen erhöht (siehe Flemming, 2003a).

Jedes Bundesland hat verschiedene Messstrategien, was insbesondere an dem Verhältnis zwischen den Stationen aus wenig und aus stark belasteten Regimes deutlich wird. Die Erfahrungen im Projekt zeigen, dass dies offensichtlich nicht nur eine Folge der unterschiedlichen Emissionsstruktur der Bundesländer ist. Um diesen Umstand beispielhaft zu illustrieren, wird die Anzahl der Stationen pro Immissionsregime nach Flemming (2003a) für die drei Bundesländer Baden-Württemberg, Bayern und Nordrhein-Westfalen in Abbildung 16 gegenübergestellt. Geht man davon aus, dass Bayern und Baden-Württemberg eine vergleichbare räumliche Emissionsstruktur besitzen, lässt die unterschiedliche relative Anzahl der ländlichen und

urbanen Stationen auf einen deutlichen Unterschied in der Messstrategie beider Länder schließen.

Dieses unterschiedliche Verhältnis ist für die Interpolation insofern von Interesse, weil für die deutschlandweite Kartierung den Beobachtungen im ländlichen Bereich eine besondere Bedeutung zukommt. Sie sollen - neben der Modellrechnung - einen flächenmäßig zu großen Einfluss der urbanen und verkehrsbelasteten Stationen verhindern.

Als besonderes Problem in diesem Sinne hat sich hier das Gebiet Bayerns erwiesen, da hier relativ wenige ländliche Messungen vorliegen und urbane Messungen aus kleineren und mittleren Städten jedoch als flächenmäßig repräsentativ durch die Landesbehörde eingestuft wurden.



**Abbildung 16 Anzahl der Stationen in den verschiedenen Immissionsregimes von PM10 (links) und NO<sub>2</sub> (rechts) für die Bundesländer Baden-Württemberg (BW), Bayern (BY) und Nordrhein/Westfalen (NW) im Jahr 2002.**

Es liegt in der Natur der Sache einer subjektiven Expertenwahl der nicht flächenrepräsentativen Stationen, dass Stationen in einigen Ländern noch als repräsentativ in anderen als nicht mehr repräsentativ angesehen werden. Zur Untersuchung dieses Sachverhaltes wäre eine bundeslandabhängige Spezifizierung des Vergleich zwischen dem subjektiven („Spot“ – „Area“) und dem objektiven Auswahlkriterium nach Flemming (2003a) (siehe Kapitel 4.2.2) geeignet. Die in Anhang B aufgeführten Stationen können der Ausgangspunkt für eine solche Untersuchung sein. Dabei muss jedoch beachtet werden, dass die objektive Einteilung im Wesentlichen aufgrund der mittleren Belastung erfolgt. Messungen mit urbaner Charakteristik (z.B. U3) können in den weiträumigen Ballungsgebieten von NRW sehr flächenrepräsentativ sein, während sie dies beispielsweise im ländlichen Mecklenburg-Vorpommern nicht sind.



## 5 Kleinräumige Anwendung

Die bisherige deutschlandweite Anwendung der OI-Methode griff auf die großräumigen RCG-Modellrechnungen mit einer Auflösung von ca.  $25 \times 25 \text{ km}^2$  zurück. Im Folgenden werden erste Anwendungen der OI-Methode auf Basis der Modellierung für die Region Berlin/Brandenburg im Jahr 1999 mit einer Auflösung von  $2 \times 2 \text{ km}^2$  präsentiert (Stern et al., 2003).

Aufgrund der größeren Gitterpunktsanzahl pro Flächeneinheit ist das kleinräumige Interpolationsproblem in höherem Maße unterbestimmt als das der großräumigen Anwendung. Das Verhältnis zwischen Gitterpunktanzahl und Anzahl der Messstationen ist in der urbanen Anwendung deutlich größer als in der überregionalen Anwendung. Dies hat zu Folge, dass der Strukturinformation des Modells eine höhere Bedeutung zu kommen muss. Deshalb wird zusätzlich zu dem Auswahlkriterium nach Flemming (2003a) eine gitterpunktsbezogene Stationsauswahl eingeführt: Für die Interpolation an Gitterpunkten mit dem ländlichem Regimes („Land“/#1) hinsichtlich der Modellrechnung dürfen keine Stationen mit dem gemessenen Regimes „Stadt“/#3 und „belastete Stadt“/#4 verwendet werden. Aufgrund der sehr geringen Anzahl der PM10-Beobachtungen werden für dieses Jahr auch mit 0.83 um gerechnete TSP-Messungen für die PM10 Interpolation herangezogen.

Abbildung 17 bis Abbildung 20 zeigen den Jahresmittelwert der Konzentration von  $\text{NO}_2$ ,  $\text{O}_3$ , PM10 und  $\text{SO}_2$  aus der kleinräumigen Modellanwendung mit dem RCG-Modell und aus der Rechnung mit Messung verknüpfenden OI-Methode, die stationsbezogenen Mittelwerte aller vorhandenen Messungen, auch wenn diese nicht bei der Interpolation verwendet wurden, sowie die Jahresmittelwerte aus der OI-Interpolation ausschließlich auf der Basis der Messungen.

Bei der Betrachtung der Karten kann festgestellt werden, dass auch die kleinräumige Anwendung der OI-Methode zu plausiblen Ergebnissen hinsichtlich der in Kapitel 3 aufgeführten Gütekriterien führt. Die in erster Linie auf der Verteilung der Emissionen beruhende Strukturinformation des Modells wird auf das Niveau der vorliegenden Messungen transformiert. Die Karten erhalten somit einerseits Strukturen, die durch eine reine Messwertinterpolation nicht zu gewinnen sind, andererseits ergeben sich durch die OI Bereiche erhöhter Konzentrationen, die in der reinen Modellrechnung nicht auftreten. Im Allgemeinen findet im Vergleich zur großräumigen Anwendung eine geringere Änderung des Modellfeldes statt. Dies ist die Folge der bereits erzielten Güte des kleinräumigen Modellfeldes aber auch der vergrößerten Unterbestimmtheit des Interpolationsproblems (sehr viele Gitterzellen, im Vergleich dazu wenige Messungen). Der starke Einfluss des Modellfeldes zeigt sich deutlich in dem Gebiet hoher  $\text{SO}_2$ -Jahresmittelwerte im nördlichen Brandenburg an der Grenze zu Polen (Abbildung 19), die ausschließlich auf die aufgrund hoher Industrieemissionen berechneten Maxima zurückzuführen sind. Da es in dieser Region keine Messstation gibt, wird der hohe Rechenwert unverändert in die OI-Analyse übernommen. Aufgrund der wenigen Messstationen ergibt die nur auf Messungen beruhende OI so gut wie keine Struktur im interpolierten  $\text{SO}_2$ -Feld. Ähnliches zeigt sich auch bei den OI-Feldern der anderen betrachteten Stoffe, die im Bereich der Autobahnen um Berlin vor allem für  $\text{NO}_2$  erhöhte (Abbildung 17) beziehungsweise für  $\text{O}_3$  erniedrigte Konzentrationen (Abbildung 18) aufweisen. Beim PM-Feld ergibt sich im südöstlichen Brandenburg ein deutliches Maximum, das ebenfalls aus der Modellrechnung übernommen wird. In der reinen Messinterpolation ist die Struktur aufgrund der geringen Messdichte dagegen deutlich geringer.

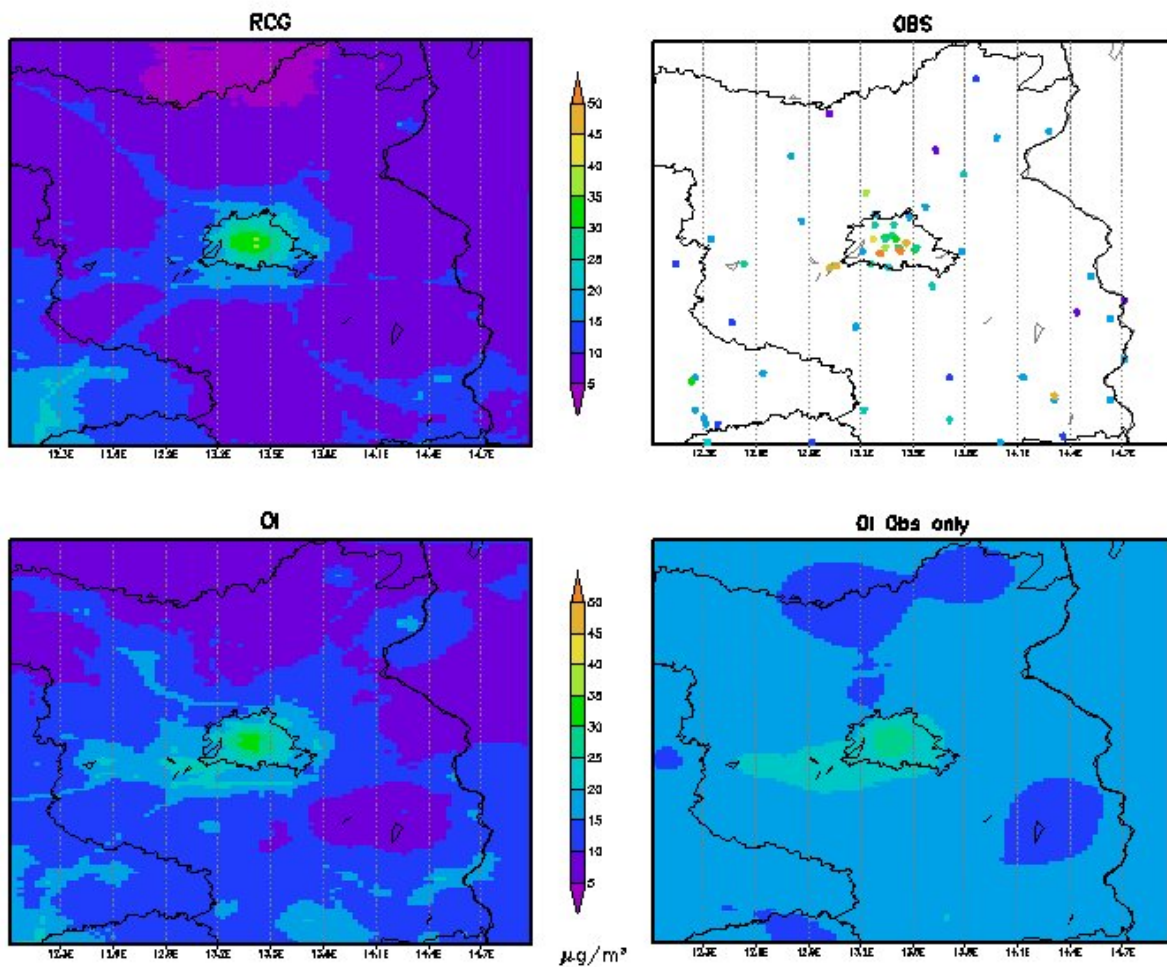
NO<sub>2</sub> MEAN 1999 BERLIN/BRB

Abbildung 17 Jahresmittelwert der NO<sub>2</sub>-Konzentration für Berlin\Brandenburg aus der kleinräumigen RCG-Modellrechnung (links, oben), der OI-Methode aus Modell und Beobachtung (links unten ) und der Beobachtung (rechts oben) und der OI-Methode ausschließlich aus Messungen für das Jahr 1999.

O<sub>3</sub> MEAN 1999 BERLIN/BRB

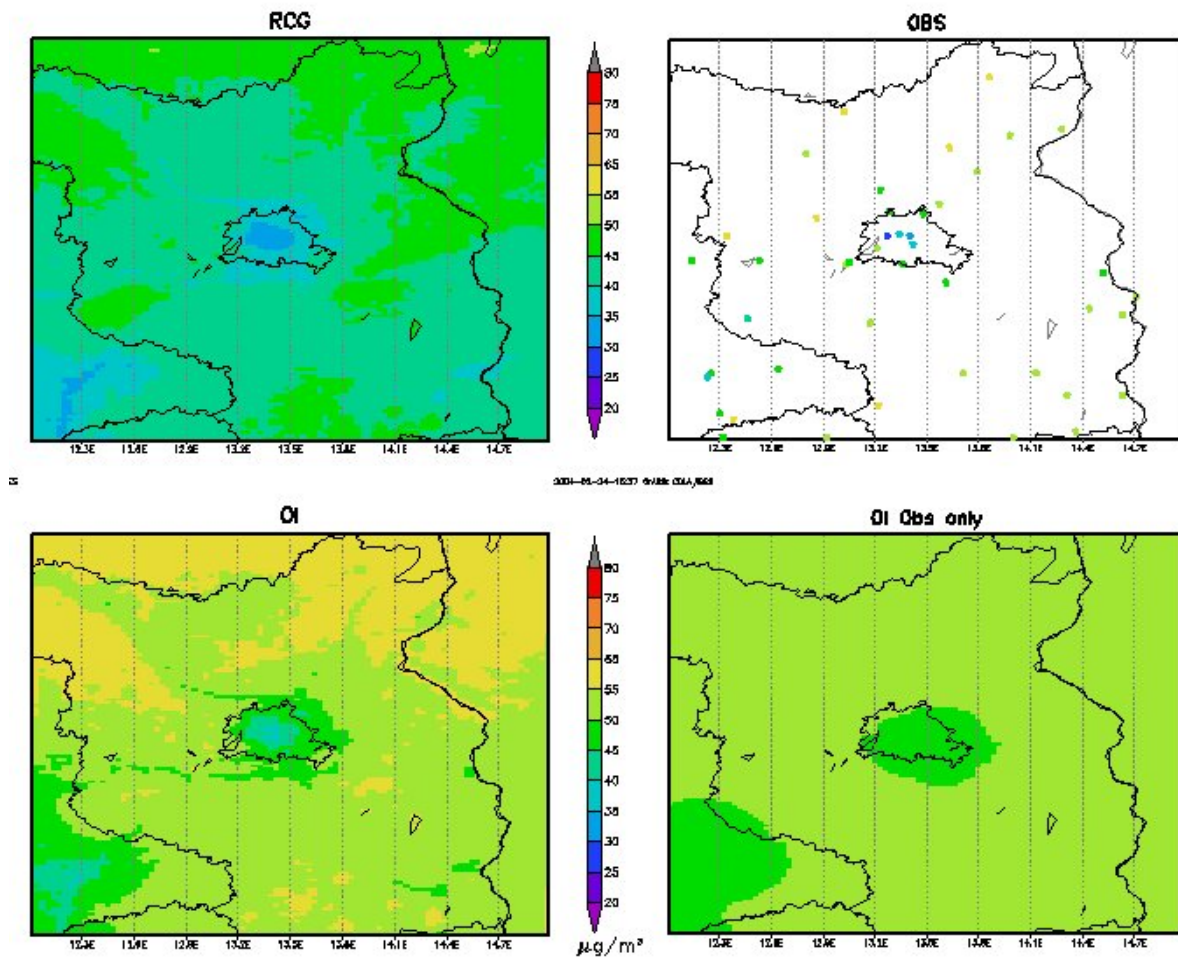


Abbildung 18 Jahresmittelwert der O<sub>3</sub>-Konzentration für Berlin\Brandenburg aus der kleinräumigen Modellrechnung (links, oben), der OI-Methode aus Modell und Beobachtung (links unten ) und der Beobachtung (rechts oben) und der OI-Methode ausschließlich aus Messungen für das Jahr 1999.

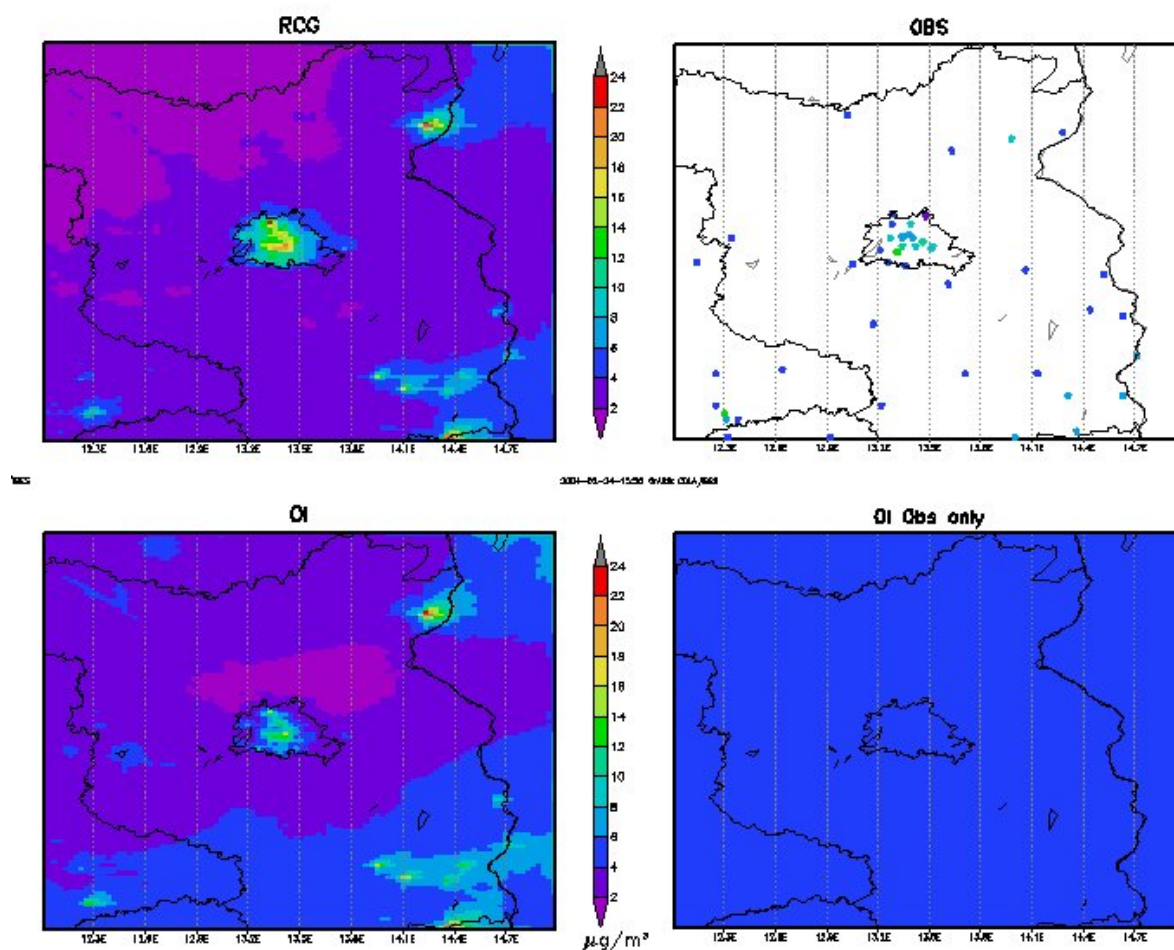
SO<sub>2</sub> MEAN 1999 BERLIN/BRB

Abbildung 19 Jahresmittelwert der SO<sub>2</sub>-Konzentration für Berlin\Brandenburg aus der kleinräumigen Modellrechnung (links, oben), der OI-Methode aus Modell und Beobachtung (links unten ) und der Beobachtung (rechts oben) und der OI-Methode ausschließlich aus Messungen für das Jahr 1999.

PM10 MEAN 1999 BERLIN/BRB

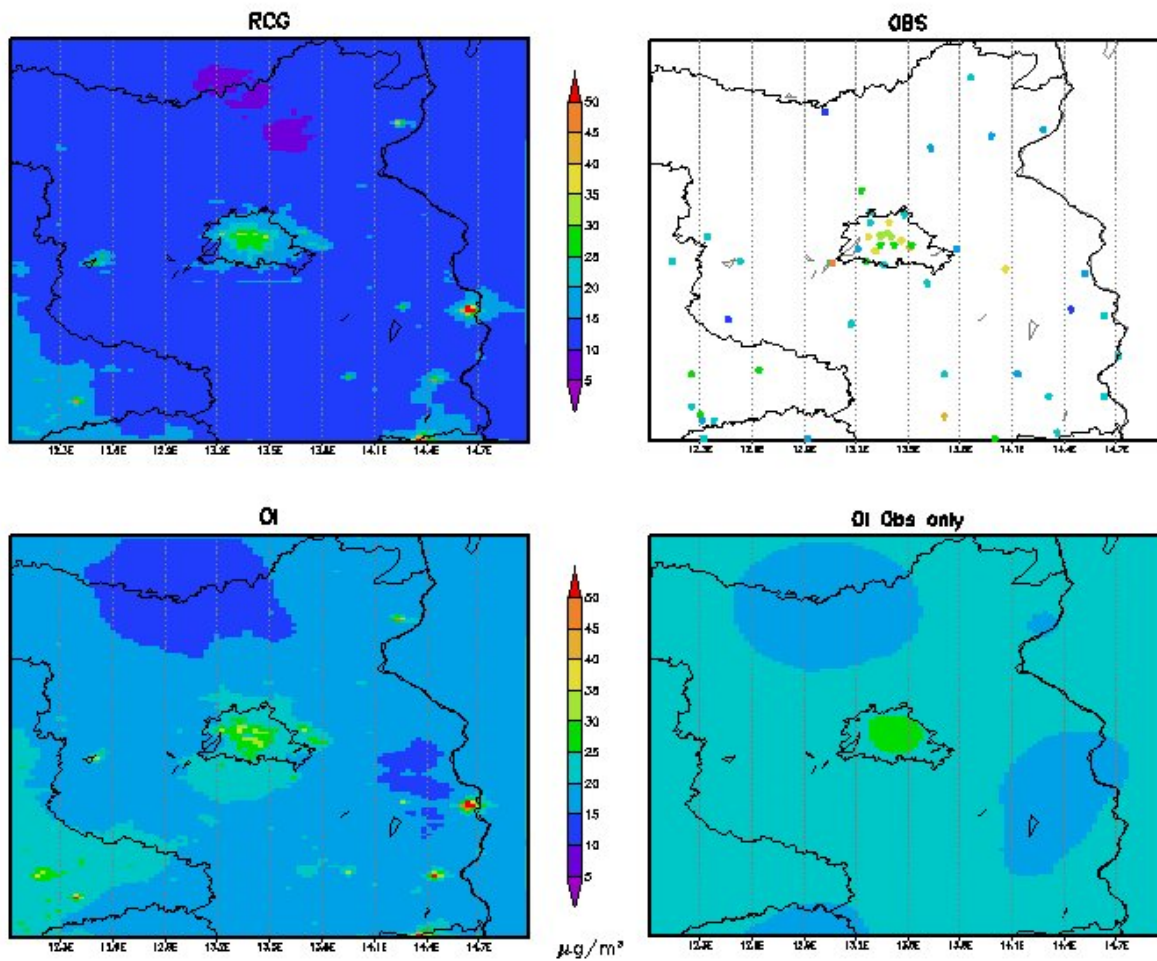


Abbildung 20 Jahresmittelwert der PM10-Konzentration für Berlin\Brandenburg aus der kleinräumigen Modellrechnung (links, oben), der OI-Methode aus Modell und Beobachtung (links unten ) und der Beobachtung (rechts oben) und der OI-Methode ausschließlich aus Messungen für das Jahr 1999.

## 6 Zusammenfassende technische Verfahrensbeschreibung

Die Methodik der Optimalen Interpolation (OI) bildet die Grundlage der hier vorgestellten Kartierung der flächenhaften Immissionsbelastung in Deutschland für das Jahr 2002. Dazu wurden für jede Stunde (bzw. jeden Tag bei PM10) des Jahres Immissionsfelder mit der OI-Methode aus einer Verknüpfung von Messungen und Modellrechnung gewonnen. Die Zeitreihen für jeden Gitterpunkt wurden anschließend nach den Luftgütekriterien der EU-Richtlinien ausgewertet und in Karten dargestellt. Diese Karten sind in Kapitel 9 zusammengestellt.

Die großräumigen Modellergebnisse stammen aus einer Anwendung des photochemischen Transportmodells REM-CALGRID für West- und Zentraleuropa in einer zeitlichen Auflösung von 1 Stunde und einer räumlichen Auflösung von 0,5° Länge und 0,25° Breite. Die OI benutzt die Modellergebnisse als Hintergrundfeld, in das die Messungen integriert werden. Dazu werden Repräsentativitätsgebiete der Messungen aus den statistisch abgeleiteten Strukturen (räumliche Autokovarianz) gewonnen. Rechenergebnisse werden dann stärker außerhalb dieser Gebiete benutzt.

Zur deutschlandweiten Interpolation wurde über das Gebiet ein Raster mit einer Seitenlänge von circa 15 km gelegt. Wie bei nahezu jeder Interpolation kommt es dadurch zu einer Nivellierung singulärer Ereignisse im Raster, d. h. der Messwert wird dem Umgebungsniveau angepasst, sofern die Extremmessung nicht durch andere Messungen im Raster bestätigt wird. Die gewonnenen Karten geben die Konzentrationsverhältnisse mit der Mittelwertcharakteristik der räumlichen Auflösung von ca. 15 km an. Dadurch werden hohe Messwerte, die nur isoliert an einer Station auftreten (sog. „Spots“), in den flächenhaften Darstellungen für ganz Deutschland nicht erfasst.

Die kleinräumige Anwendung der OI-Methode mit einer Maschenweite von 2 km auf die Region Berlin-Brandenburg hat gezeigt, dass der Strukturinformation der Modellrechnung in der urbanen Anwendung ein stärkeres Gewicht zu kommt als in der deutschlandweiten Anwendung. Ursache dieser Gewichtsverschiebung ist die im Vergleich zu der Anzahl der Gitterpunkte geringere Anzahl von Messungen. Das resultierende OI-Feld reflektiert dadurch deutlich die im Transportmodell verwendete Emissionsverteilung, die von der reinen Mess-Interpolation nicht wiedergegeben wird, da die geringe Anzahl der Messungen keine Auflösung der Emissionsstruktur gestattet. Die OI-Methode ist also auch ein geeignetes Hilfsmittel zur Erstellung von Konzentrationsverteilungen in der urbanen Skala.

Die standardmäßige Erstellung der Immissionsfelder auf Basis der OI-Methode sollte unter folgenden technischen Randbedingungen erfolgen:

1. **Stationsauswahl:** Die Messdaten stammen aus den Messnetzen der Bundesländer und des Umweltbundesamts. Die Beobachtungsdaten sind stündliche Zeitreihen der bodennahen Messung für Stickstoffdioxid (NO<sub>2</sub>), Feinstaub (PM10). In BY und NRW werden für die PM10-Auswertung die gravimetrischen Messreihen mit Tagesmittelwerten verwendet, solange keine höher aufgelösten Messungen vorliegen. Es werden keine Messung mit „Spot“-Charakter nach der Einschätzung der Bundesländer, kei-

ne Stationen des Regimes „Straße“/5 und „Straße extrem“ und weiterhin keine des Regimes „Belastete Stadt“/4 verwendet, falls ein solches Regime nicht durch die Modellrechnung bestätigt wird. Die Regimeeinteilung erfolgt nach Tabelle 1.

2. **Vollständigkeit:** In den Tochterrichtlinien zur EU-Luftqualitätsrahmenrichtlinie ist festgelegt, dass mindestens 90% der Daten einer kontinuierlichen Jahreszeitreihe für die Ableitung der Luftgütekriterien vorhanden sein müssen. Für NO<sub>2</sub> wird dieses Kriterium angewendet. Für PM<sub>10</sub> wird kein Vollständigkeitskriterium angesetzt, weil aus einigen Bundesländern lediglich gravimetrische Messungen für PM<sub>10</sub> mit einer Datenverfügbarkeit von deutlich weniger als 90% vorlagen. Eine eigenständige Fehlerersetzung wird nicht vorgenommen.
3. **Homogene Biaskorrektur der Analyse mit Land- und Vorstadt-Stationen** Die Theorie der Optimalen Interpolation verlangt, dass kein Bias zwischen Messung und Analyse besteht. Da die Mehrzahl der Stationen in Deutschland vorrangig einem urbanen Regime zugeordnet werden kann, ist der Mittelwert über alle Messstationen nicht flächenmäßig repräsentativ für ganz Deutschland. Aus diesem Grund erfolgt eine Biaskorrektur der Analyse anhand des Mittelwertes der ländlichen und suburbanen Messstationen, da diese eine höhere räumliche Repräsentativität als die urbanen Stationen besitzen.
4. **Heterogener Ansatz zur Autokovarianzmodellierung mit Diskriminierung der Regimes und individuelle Beobachtungsfehlermaße:** Standard-Verfahren der Optimalen Interpolation bzw. des Kriging (Cressie 1993) gehen von homogenen und isotropen statistischen Eigenschaften der betrachteten Felder aus. Diese Eigenschaften sind bei den heterogenen Immissionsdaten nur unzureichend erfüllt. Deshalb wurde ein inhomogener Ansatz zur Kovarianzmodellierung entwickelt, der auf einer Kombination von verschiedenen Kovarianzmodellen für unterschiedliche Immissionsregimes beruht. Das Regime der verwendeten Messung und das modellierte Regime für den zu interpolierenden Gitterpunkt ohne Messung sind dabei die Auswahlkriterien.

Die technische Durchführung der OI-Methodik umfasst vier aufeinander folgende Teilschritte:

1. Bestimmung der Immissionsregime für alle vollständigen beobachteten Stationszeitreihen und Gitterpunkte der 1-jährigen Modellrechnung.
2. Schätzung der klimatischen regimeabhängigen Kovarianzmodelle und individuellen Beobachtungsfehlervarianzen auf Basis gefilterter Zeitreihen für jede Tagesstunde und Sommer- und Winterhalbjahr.
3. Durchführung der Optimalen Interpolation für jede Stunde des Jahres mit allen ausgewählten Stationen unter Verwendung der Kovarianzmodelle und gleichzeitiger Bestimmung des cross-validation Interpolationsfehlers.
4. Auswertung der stündlichen Felder nach den Luftgütekriterien der EU-Richtlinien und deren Darstellung mit einem Grafikmodul (Fath 2003).

Der Datenfluss für die beiden vorbereitenden Teilschritte 1. zur Regimeklassifikation und 2. zur Kovarianzmodellierung ist in Abbildung 21 dargestellt. Abbildung 22 zeigt den Daten-

fluss bei der Analyse für einen Zeitpunkt. Die Schritte 1 – 3 werden jeweils mit einem eigenständigen Fortran-Programm berechnet. Eine Zusammenstellung wichtiger Fortran-Routinen enthält der Anhang C.

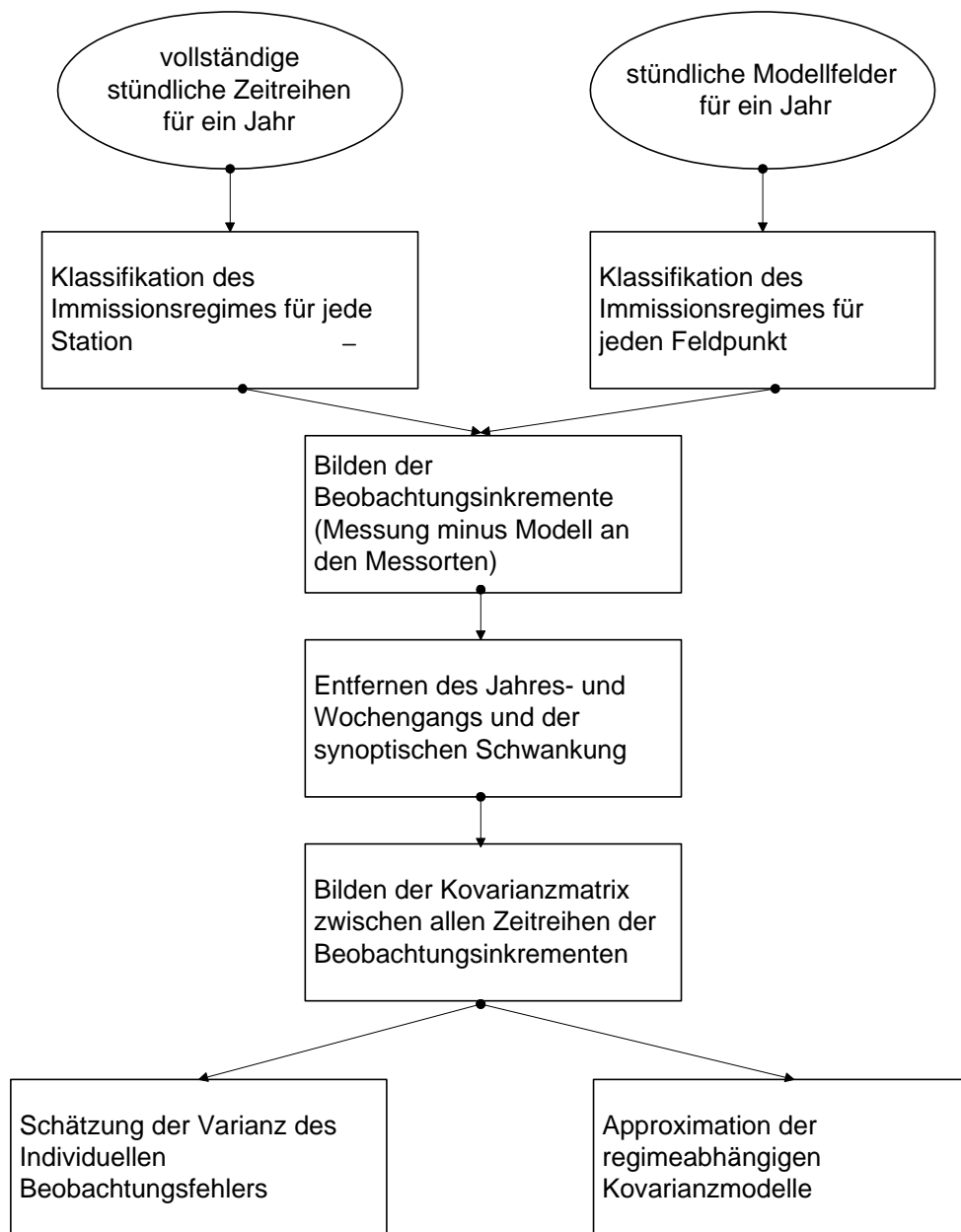
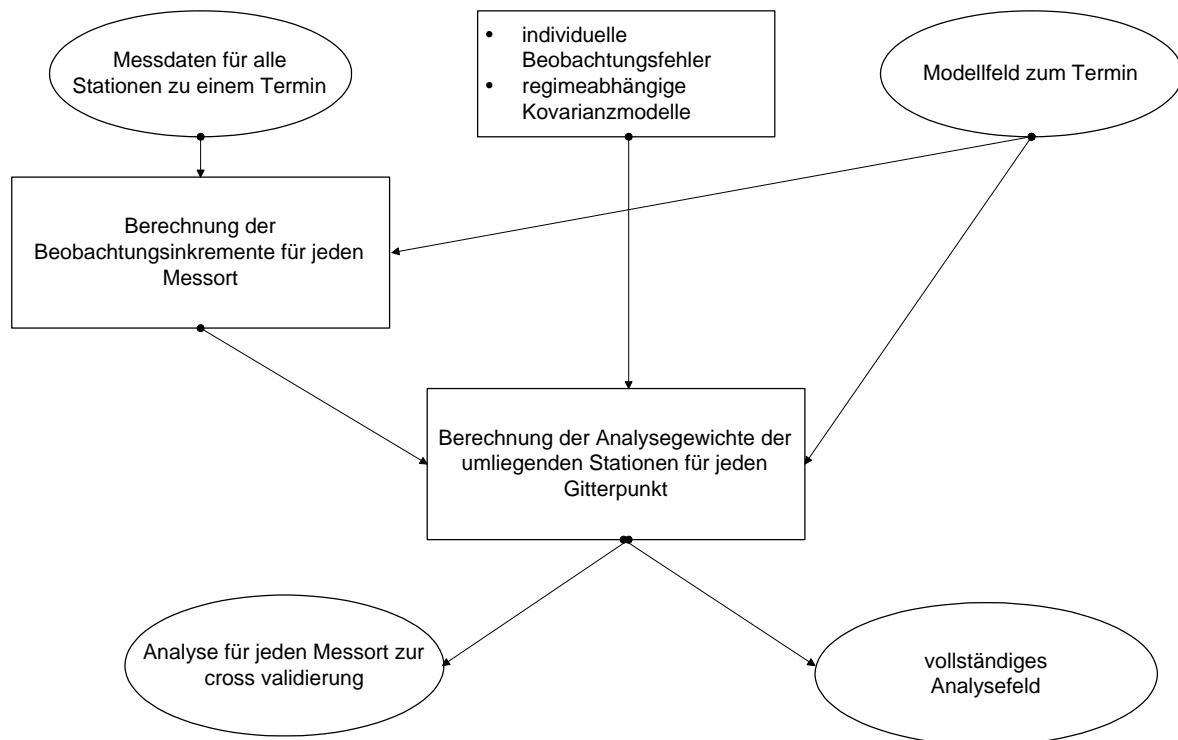


Abbildung 21 Datenfluss bei der Klassifikation der Immissionsregimes und der Kovarianzmodellierung





**Abbildung 22 Datenfluss bei der Analyse (OI-Methode) für die Kombination von Beobachtung und Modell für einen Termin**

## 7 Literatur

**Cressie, N. (1993)**

Statistics for Spatial Data, John Wiley & Sons, New York.

**Fath, J. (2003)**

Beschreibung und Benutzungsanleitung eines auf GRADS basierenden grafischen Moduls zur Darstellung von Immissionsfeldern. Abschlussbericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 298 41 252 des Umweltbundesamts "Modellierung und Prüfung von Strategien zur Verminderung der Belastung durch Ozon.

**Flemming, J. (2003a)**

Anwendung von Optimaler Interpolation und Kalman Filter Techniken für die Ausbreitungsrechnung mit dem chemischen Transportmodell REM/Calgrid, Abschlussbericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 298 41 252 des Umweltbundesamts "Modellierung und Prüfung von Strategien zur Verminderung der Belastung durch Ozon

**Flemming, J. (2003b)**

Immissionsfelder aus Beobachtung, Modellierung und deren Kombination, FU-Berlin, <http://www.diss.fu-berlin.de/2003/71>. (b)

**Flemming, J. (2003c)**

Klimatische Auswertung von modellierten und beobachteten Zeitreihen für Ozon, NO<sub>2</sub>, NO, SO<sub>2</sub> und PM<sub>10</sub> in Deutschland für die Jahre 1995-2001 und deren Charakterisierung nach Immissionsregimes mit einem Clusterverfahren, Abschlussbericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 298 41 252 des Umweltbundesamts "Modellierung und Prüfung von Strategien zur Verminderung der Belastung durch Ozon.

**Gandin, L. S. (1965)**

Objective Analysis of meteorological fields, Israeli Program for Scientific Translations, Jerusalem.

**Hollingsworth, A. und Lönnberg, P. (1986)**

The statistical structure of short-range forecast errors as determined from radiosonde data Part I: The wind field, Tellus, Bd. 38 A, S. 111-136.

**Kerschbaumer, A. und Reimer, E. (2003).**

Erstellung der Meteorologischen Eingangsdaten für das REM/CALGRID-Modell: Modellregion Berlin-Brandenburg. Abschlussbericht zum UBA-Forschungsvorhaben FE-Vorhaben 299 43 246. Freie Universität Berlin. Institut für Meteorologie.

**Reimer, E. und Scherer, B. (1992)**

An operational meteorological diagnostic system for regional air pollution analysis and long term modeling, in Air Pollution Modelling and its Application IX, eds. H. v. Dop und G. Kallos, NATO Challenges of Modern Society, Kluwer Academic/Plenum Publisher, New York.

**Stern, R., Kerschbaumer, A. und Fath, J. (2003)**

Anwendung des chemischen Transportmodells REM/CALGRID auf die Region Berlin-Brandenburg, Abschlussbericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 299 43 246 auf dem Gebiet des Umweltschutzes „Entwicklung eines Modellsystems für das Zusammenspiel von Messung und Rechnung für die bundeseinheitliche Umsetzung der EU-Rahmenrichtlinie Luftqualität“

**Stern, R. und Flemming, J. (2001).**

Vorläufige Einschätzung der Luftqualität 1999 in Deutschland auf der Basis von Messungen und Modellrechnungen. Ergänzung der Ausgangsbeurteilung der Luftqualität 1999 nach Richtlinie 96/62/EG, Artikel 5. Bericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 299 43 246 auf dem Gebiet des Umweltschutzes „Entwicklung eines Modellsystems für das Zusammenspiel von Messung und Rechnung für die bundeseinheitliche Umsetzung der EU-Rahmenrichtlinie Luftqualität“

**Stern, R. (2003)**

Entwicklung und Anwendung des chemischen Transportmodells REM/CALGRID. Abschlussbericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 298 41 252 des Umweltbundesamts „Modellierung und Prüfung von Strategien zur Verminderung der Belastung durch Ozon“.

## 8 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1 Klimatische Kovarianz für NO <sub>2</sub> um 7 Uhr zwischen den ländlichen (R_R), den urbanen (U_U) sowie zwischen ländlich und urbanen Regimes (U_R) der Beobachtungsinkremente. Dargestellt ist das durch eine analytische Funktion approximierete Kovarianzmodell.....	9
Abbildung 2 Schätzung der Varianz des klimatischen Beobachtungsfehlers (observation error variance) der Station S mit Hilfe eines Kovarianzmodells nach der Beobachtungsmethode. ....	10
Abbildung 3 Tagesgang der Standardabweichung des Beobachtungsfehlers von O <sub>3</sub> , NO <sub>2</sub> , PM10 und SO <sub>2</sub> für verschiedene Immissionsregimes im Jahr 2002 in Deutschland. (O <sub>3</sub> und NO <sub>2</sub> B: Berg/Küste, U1: Vorstadt U2: Stadt, U3: belastete Stadt, S: Strasse, S2: Strasse extrem, 1-5: Immissionsregime mit wachsender Verschmutzung für SO <sub>2</sub> und PM10 Niveau) .....	11
Abbildung 4 Karte der stationsbezogenen Standardabweichung des Beobachtungsfehlers für Ozon um 13 Uhr (links) und für die Tagesmittelwerte von PM10 (rechts) .....	12
Abbildung 5 Mittelwert (links) und RMSE (rechts) des cross-validation Interpolationsfehlers von PM10 bei verschiedenen Biaskorrekturen. Bias_M_12: Biaskorrektur der Modellrechnung (Variante a), Bias_A_1: Biaskorrektur der Analyse mit den Stationen des Regimes #1 (Variante b), Bias_A_12: wie Variante b und zusätzlich des Regimes #2 (Variante c). Dargestellt für alle Stationen (BIA_AL, SDV_AL) und separat für die Stationen der Regime #1 bis #5 (BIA_S1, SDV_S1 ... BIA_S5, SDV_S5).. .....	16
Abbildung 6 Jahresmittelwert der PM10 Konzentration für 2002 aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung nach der OI-Methode mit verschiedenen Ansätzen zur Biaskorrektur. Links: Biaskorrektur der Modellrechnung (Variante a), Mitte: Biaskorrektur der Analyse mit den Stationen der Regimes #1 und #2 (Variante c) Rechts: Biaskorrektur der Analyse mit den Stationen des Regimes #1 (Variante b).....	17
Abbildung 7 Mittelwert (links) und RMSE (rechts) des cross-validation Interpolationsfehlers von NO <sub>2</sub> bei verschiedenen Biaskorrekturen. Bias_M_12: Biaskorrektur der Modellrechnung (Variante a), Bias_A_1: Biaskorrektur der Analyse mit den Land-Stationen (Variante b), Bias_A_12: wie Variante b und zusätzlich mit den Vorstadt-Stationen (Variante c). Dargestellt für alle Stationen (BIA_AL, SDV_AL) und separat für die Stationen der Regime Land (BIA_S1/SDV_S1) Vorstadt (BIA_S2/SDV_S2), Stadt (BIA_S3/ SDV_S3), belastete Stadt (BIA_S4/ SDV_S4) und Straße (BIA_S5/ SDV_S5).. .....	17
Abbildung 8 Jahresmittelwert der NO <sub>2</sub> Konzentration für 2002 aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung nach der OI-Methode mit verschiedenen Ansätzen zur Biaskorrektur. Links: Biaskorrektur der Modellrechnung (Variante a), Mitte: Biaskorrektur der Analyse mit den Land- und Vorstadt-Stationen (Variante c), Rechts: Biaskorrektur der Analyse mit den Land-Stationen (Variante b). ....	18
Abbildung 9 Verteilung der Immissionsregimes für NO <sub>2</sub> geordnet nach der Repräsentativitätseinschätzung "AREA" und "SPOT" durch die Bundesländer.	

- (R=Land, U1=Vorstadt, U2=Stadt U3=Stadt-Straße S=Straße, S2=Straße extrem) Die Immissionsregimes R bis U3 sind das Kriterium für die Stationsauswahl bei der OI-Methode nach Flemming (2003a) ..... 20
- Abbildung 10 Verteilung der Immissionsregimes für PM10, geordnet nach der Repräsentativitätseinschätzung "AREA" und "SPOT" durch die Bundesländer. #1 bis #5 sind PM10 -Regimes mit zunehmender mittlerer Belastung. Die Immissionsregimes #1 bis #4 sind das Kriterium für die Stationsauswahl bei der OI-Methode nach Flemming (2003a)..... 20
- Abbildung 11 Jahresmittelwert der NO<sub>2</sub> Konzentration für 2002 aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung nach der OI-Methode mit verschiedenen Ansätzen zur Stationsauswahl. Links: Keine Beobachtung mit Spot-Charakteristik nach Bundesländereinschätzung (Version a), Mitte: wie Version a und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes „Straße“ und „Straße extrem“ (Version b), Rechts: wie Version b) und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes „belastete Stadt“ (Version c). ..... 21
- Abbildung 12 Auswirkung der Stationsauswahl auf den Mittelwert (links) und den RMSE (rechts) des cross-validation Interpolationsfehlers von NO<sub>2</sub> für alle Stationen (BIA\_AL, SDV\_AL) und separat für die Stationen der Regime #1 bis #5 (BIA\_S1, SDV\_S1, ...). SA\_BL = Keine Beobachtung mit Spot-Charakteristik nach Bundesländereinschätzung (Version a), SA\_BL5 = wie Version a und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes „Straße“ und „Straße extrem“ (Version b), SA\_BL4: wie Version b und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes „belastete Stadt“ (Version c). ..... 21
- Abbildung 13 Jahresmittelwert der PM10 Konzentration für 2002 aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung nach der OI-Methode mit verschiedenen Ansätzen zur Stationsauswahl. Links: Keine Beobachtung mit Spot-Charakteristik nach Bundesländereinschätzung (Variante a), Mitte: wie Version a und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes #5 (Variante b), Rechts: wie Variante b und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes #4 (Variante c). ..... 22
- Abbildung 14 Auswirkung der Stationsauswahl auf den Mittelwert (links) und den RMSE (rechts) des cross-validation Interpolationsfehlers von PM10 für alle Stationen (BIA\_AL, SDV\_AL) und separat für die Stationen der Regime #1 bis #5 (BIA\_S1, SDV\_S1, ...). SA\_BL = Keine Beobachtung mit Spot-Charakteristik nach Bundesländereinschätzung (Version a), SA\_BL5 = wie Version a und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes #5 (Version b), SA\_BL4 = wie Version b und zusätzlich keine Beobachtung des Regimes #4 (Version c). ..... 22
- Abbildung 15 Anzahl der Stationen, gesamt (ANZ\_AL) und pro Regime für die OI von NO<sub>2</sub> (links) und PM10 (rechts) bei verschiedenen Versionen der Stationsauswahl: SA\_BL = Version a, SA\_BL4 = Version c, SA\_BL5 = Version c ..... 23
- Abbildung 16 Anzahl der Stationen in den verschiedenen Immissionsregimes von PM10 (links) und NO<sub>2</sub> (rechts) für die Bundesländer Baden-Württemberg (BW), Bayern (BY) und Nordrhein/Westfalen (NW) im Jahr 2002. .... 24
- Abbildung 17 Jahresmittelwert der NO<sub>2</sub>-Konzentration für Berlin\Brandenburg aus der kleinräumigen RCG-Modellrechnung (links, oben), der OI-Methode aus Modell und

---

Beobachtung (links unten ) und der Beobachtung (rechts oben) und der OI-Methode ausschließlich aus Messungen für das Jahr 1999.....	26
Abbildung 18 Jahresmittelwert der O <sub>3</sub> -Konzentration für Berlin\Brandenburg aus der kleinräumigen Modellrechnung (links, oben), der OI-Methode aus Modell und Beobachtung (links unten ) und der Beobachtung (rechts oben) und der OI-Methode ausschließlich aus Messungen für das Jahr 1999.....	27
Abbildung 19 Jahresmittelwert der SO <sub>2</sub> -Konzentration für Berlin\Brandenburg aus der kleinräumigen Modellrechnung (links, oben), der OI-Methode aus Modell und Beobachtung (links unten ) und der Beobachtung (rechts oben) und der OI-Methode ausschließlich aus Messungen für das Jahr 1999.....	28
Abbildung 20 Jahresmittelwert der PM10-Konzentration für Berlin\Brandenburg aus der kleinräumigen Modellrechnung (links, oben), der OI-Methode aus Modell und Beobachtung (links unten ) und der Beobachtung (rechts oben) und der OI-Methode ausschließlich aus Messungen für das Jahr 1999.....	29
Abbildung 21 Datenfluss bei der Klassifikation der Immissionsregimes und der Kovarianzmodellierung.....	32
Abbildung 22 Datenfluss bei der Analyse (OI-Methode) für die Kombination von Beobachtung und Modell für einen Termin.....	33
Abbildung 23: PM10-Jahresmittel 2002.....	39
Abbildung 24 Überschreitungen von PM10-Tagesmittelwerten > 50 µg/m <sup>3</sup> .....	40
Abbildung 25 Überschreitungen von PM10-Tagesmittelwerten > 65 µg/m <sup>3</sup> .....	41
Abbildung 26 Flächen mit Überschreitungen der Tagesmittelwerte.....	42
Abbildung 27 NO <sub>2</sub> -Jahresmittel.....	43
Abbildung 28 Überschreitungen von NO <sub>2</sub> -Stundenmittelwerten > 100 µg/m <sup>3</sup> .....	44
Abbildung 29 Ozon Jahresmittel.....	45
Abbildung 30 Stündliches Ozon-Maximum im Jahr 2002.....	46
Abbildung 31 Höchstes Ozon-8-Stundenmittel.....	47
Abbildung 32 Tage mit einer Überschreitung des Ozon-8-Stundenmittel von 120 µg/m <sup>3</sup> ....	48
Abbildung 33 SO <sub>2</sub> -Jahresmittel.....	49

## 9 Anhang A: Karten für 2002

Die Karten wurden mit den in Kapitel 6 (Zusammenfassende technische Verfahrensbeschreibung) beschriebenen Verfahrensparametern erstellt.

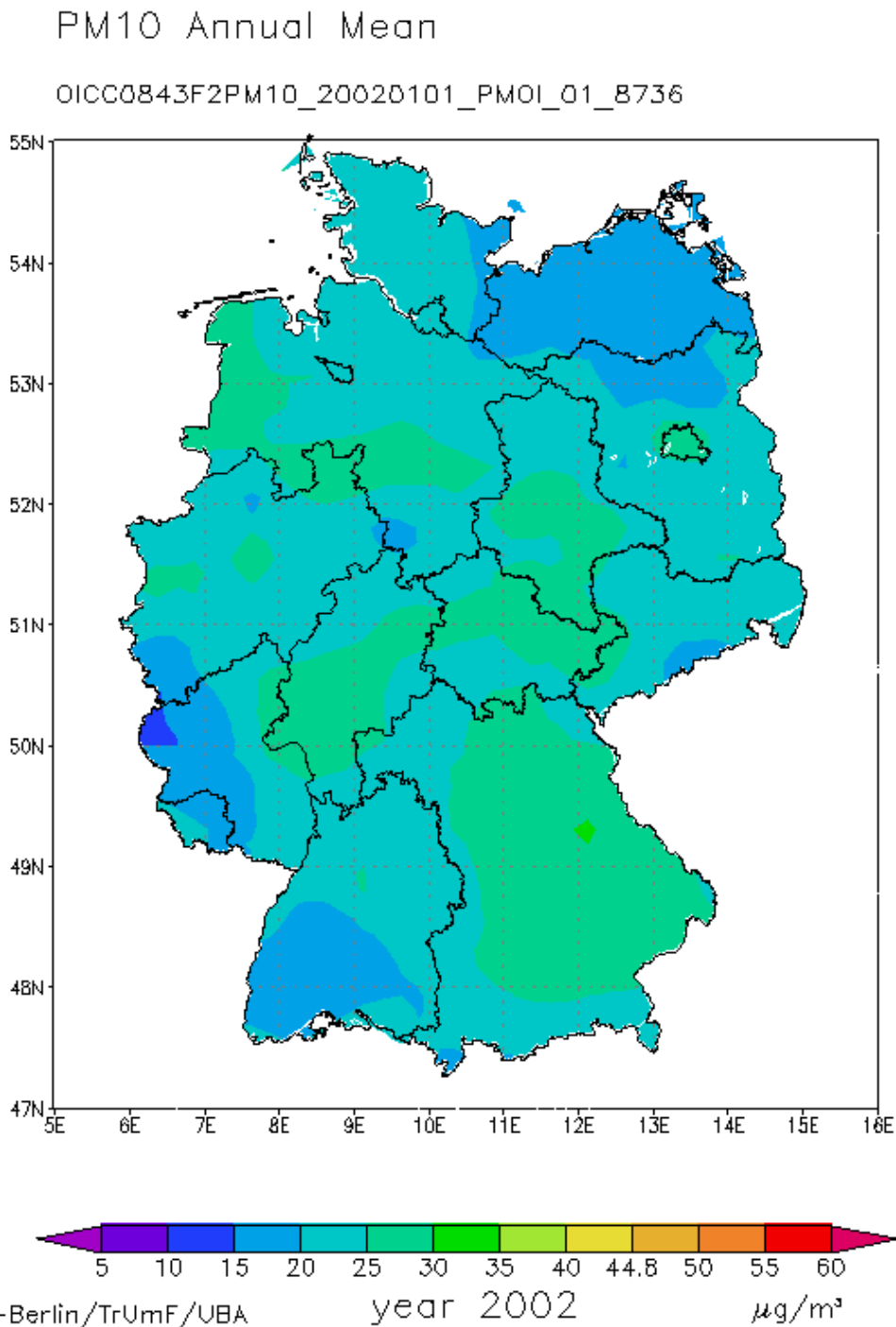
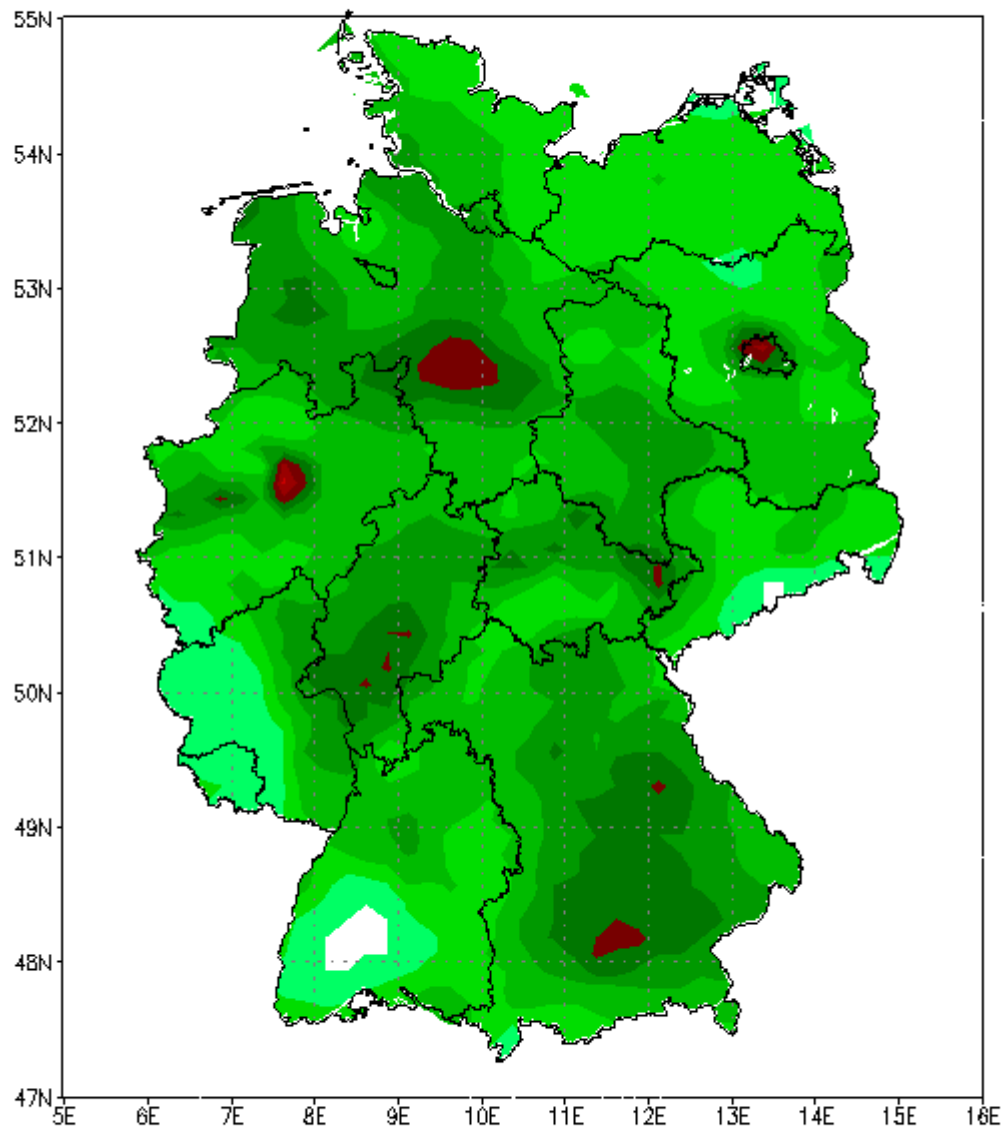
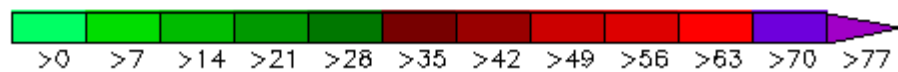


Abbildung 23: PM10-Jahresmittel 2002

## PM10 Daily Mean &gt; LV

OICC0843F2PM10\_20020101\_PM01\_01\_8736

LV = 50  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  [35 excd]

FU-Berlin/TrUmF/UBA

year 2002

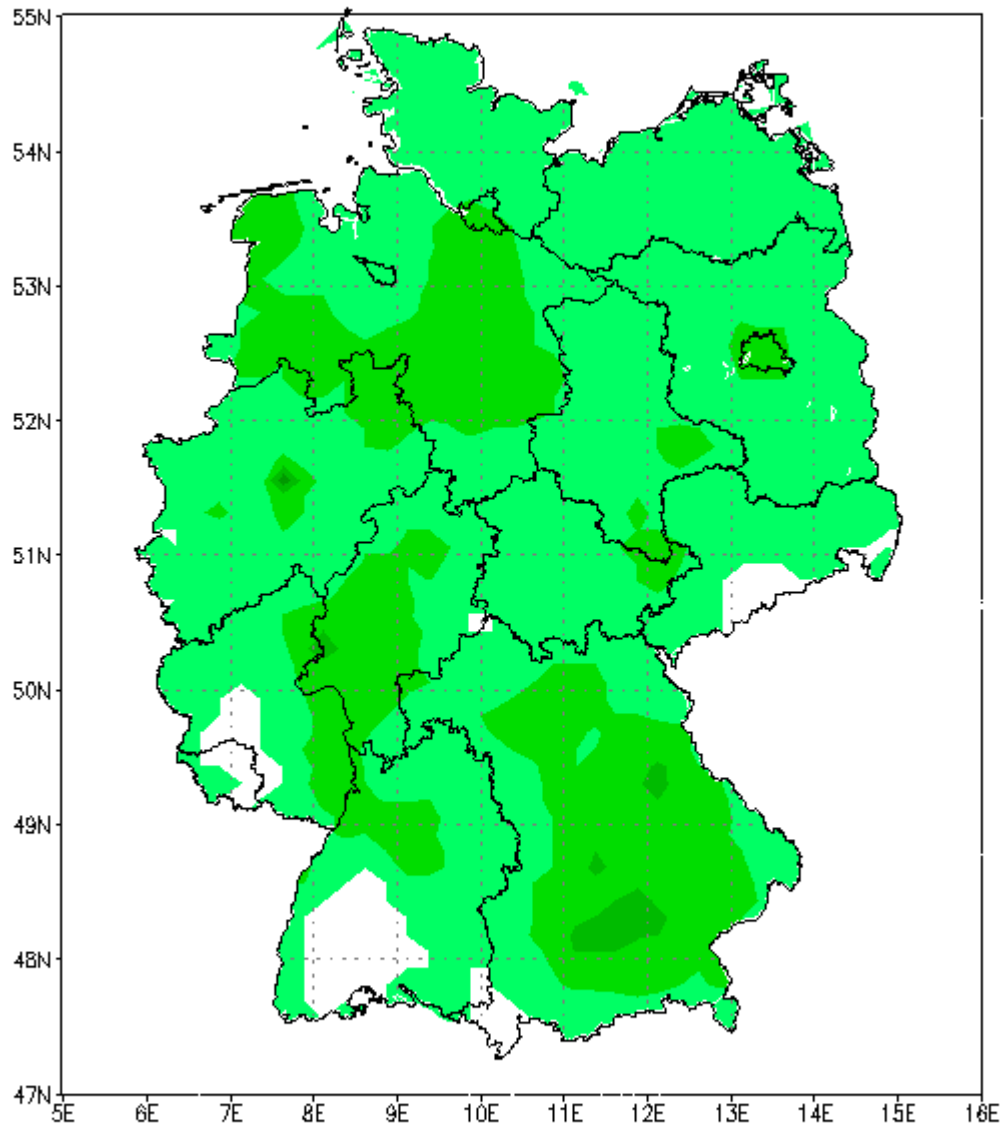
days

Abbildung 24 Überschreitungen von PM10-Tagesmittelwerten > 50  $\mu\text{g}/\text{m}^3$

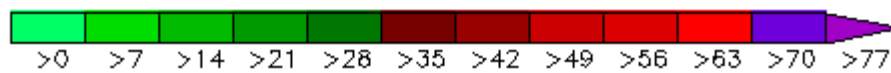


### PM10 Daily Mean > LV+MOT

OIC00843F2PM10\_20020101\_PMOI\_01\_8736



LV+MOT = 65 µg/m³



FU-Berlin/TrUmF/UBA year 2002 days

Abbildung 25 Überschreitungen von PM10-Tagesmittelwerten > 65 µg/m³

## PM10 Areas of Exceedances Daily Means

OICC0843F2PM10\_20020101\_PM01\_01\_8736

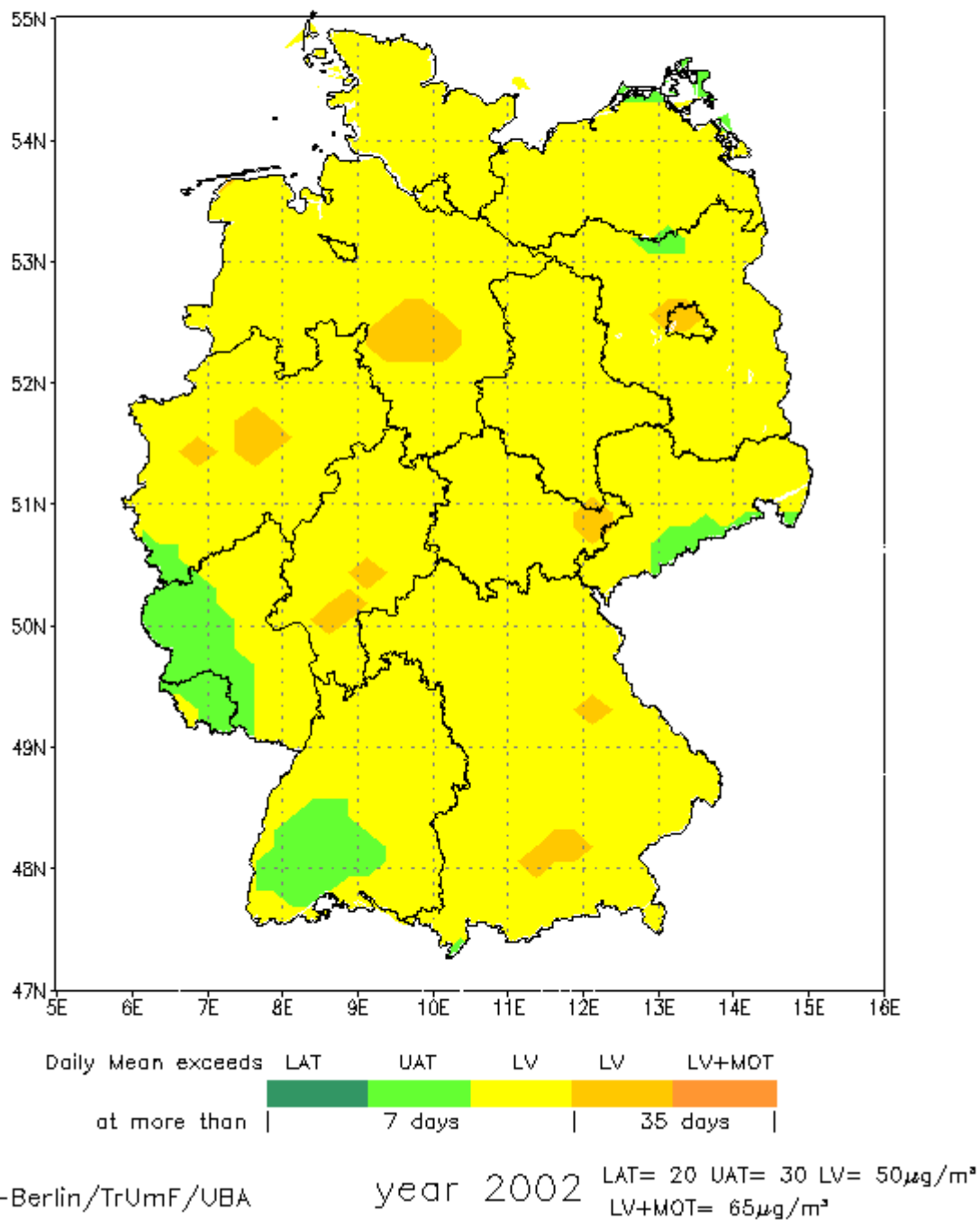


Abbildung 26 Flächen mit Überschreitungen der Tagesmittelwerte

# NO2 Annual Mean

OICCC0843F2ND2\_20020101\_N20I\_01

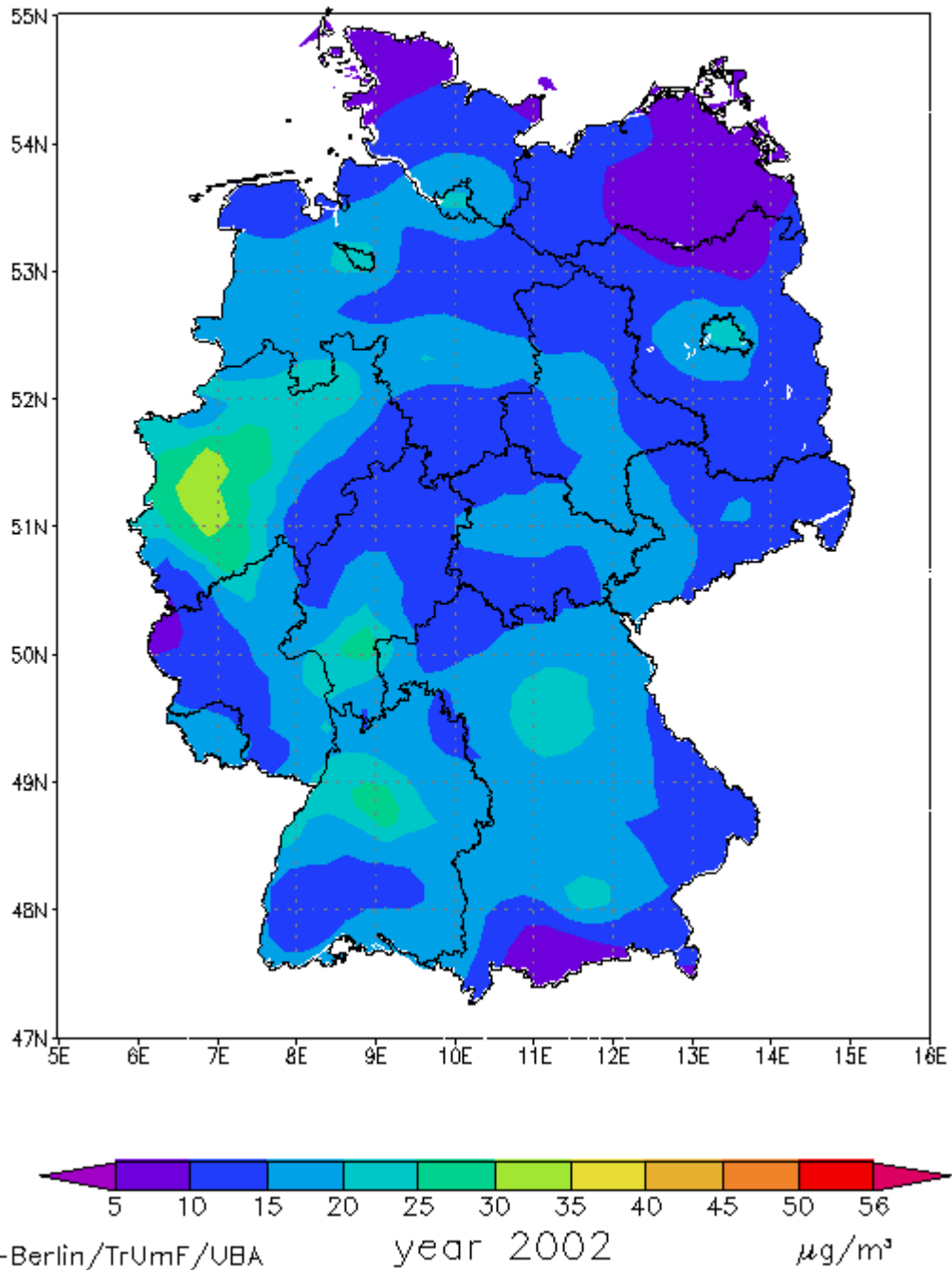
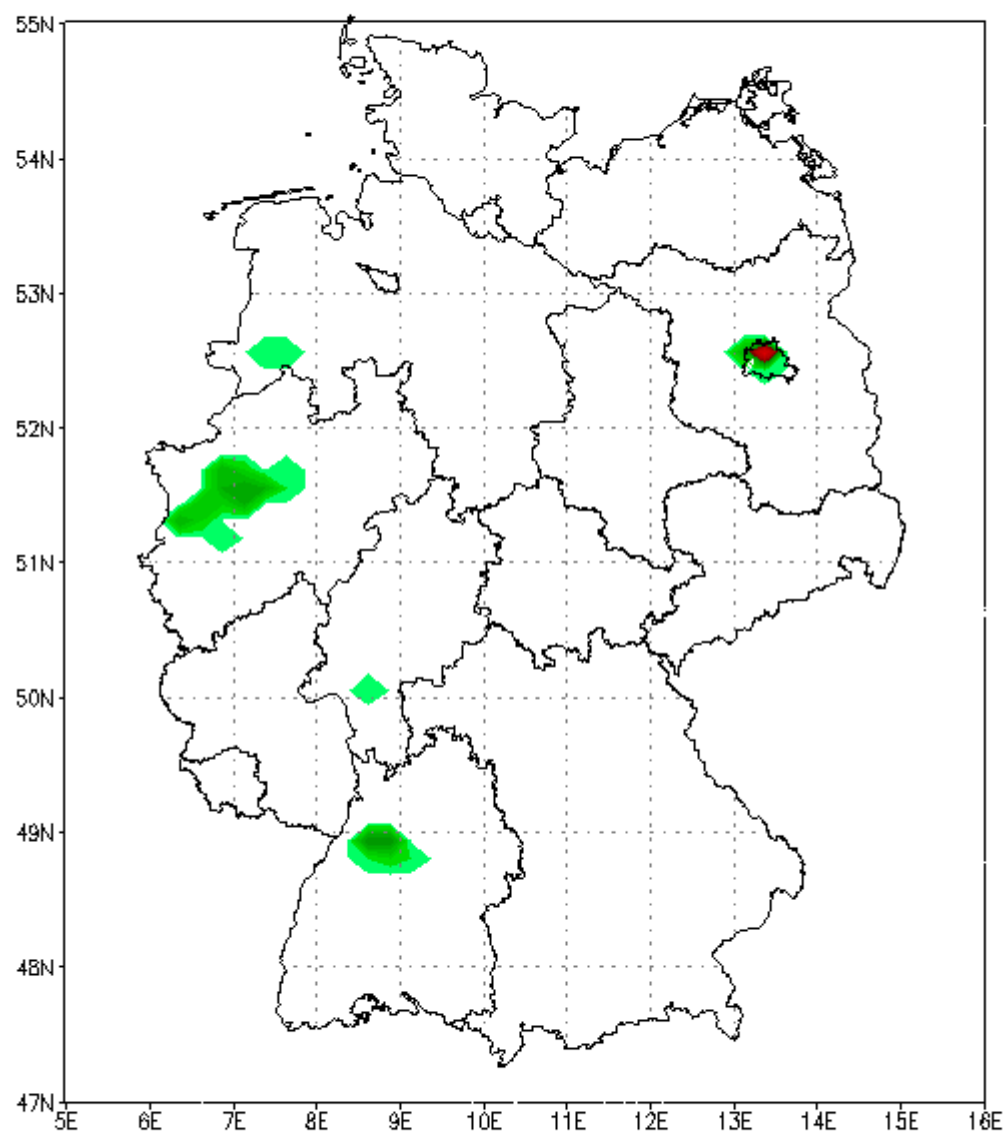


Abbildung 27 NO2-Jahresmittel

Hourly Mean NO<sub>2</sub> > LAT

OIC0843F2ND2\_20020101\_N20I\_01

LAT = 100 µg/m<sup>3</sup>

FU-Berlin/TrUmF/UBA

year 2002

hours

**Abbildung 28** Überschreitungen von NO<sub>2</sub>-Stundenmittelwerten > 100 µg/m<sup>3</sup>

### O3 Mean in simulation period

OICC0843F203\_20020101\_030I\_01

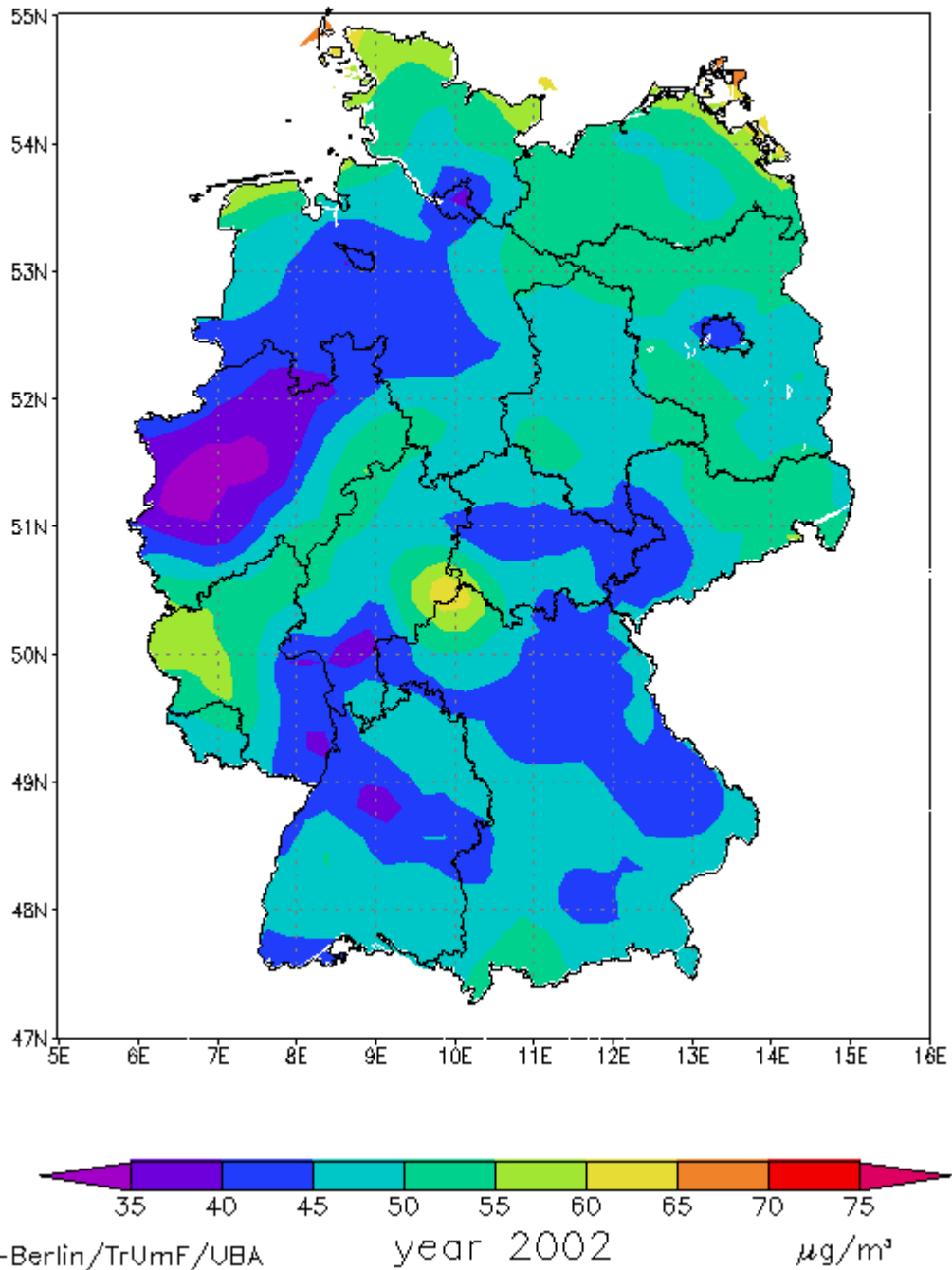
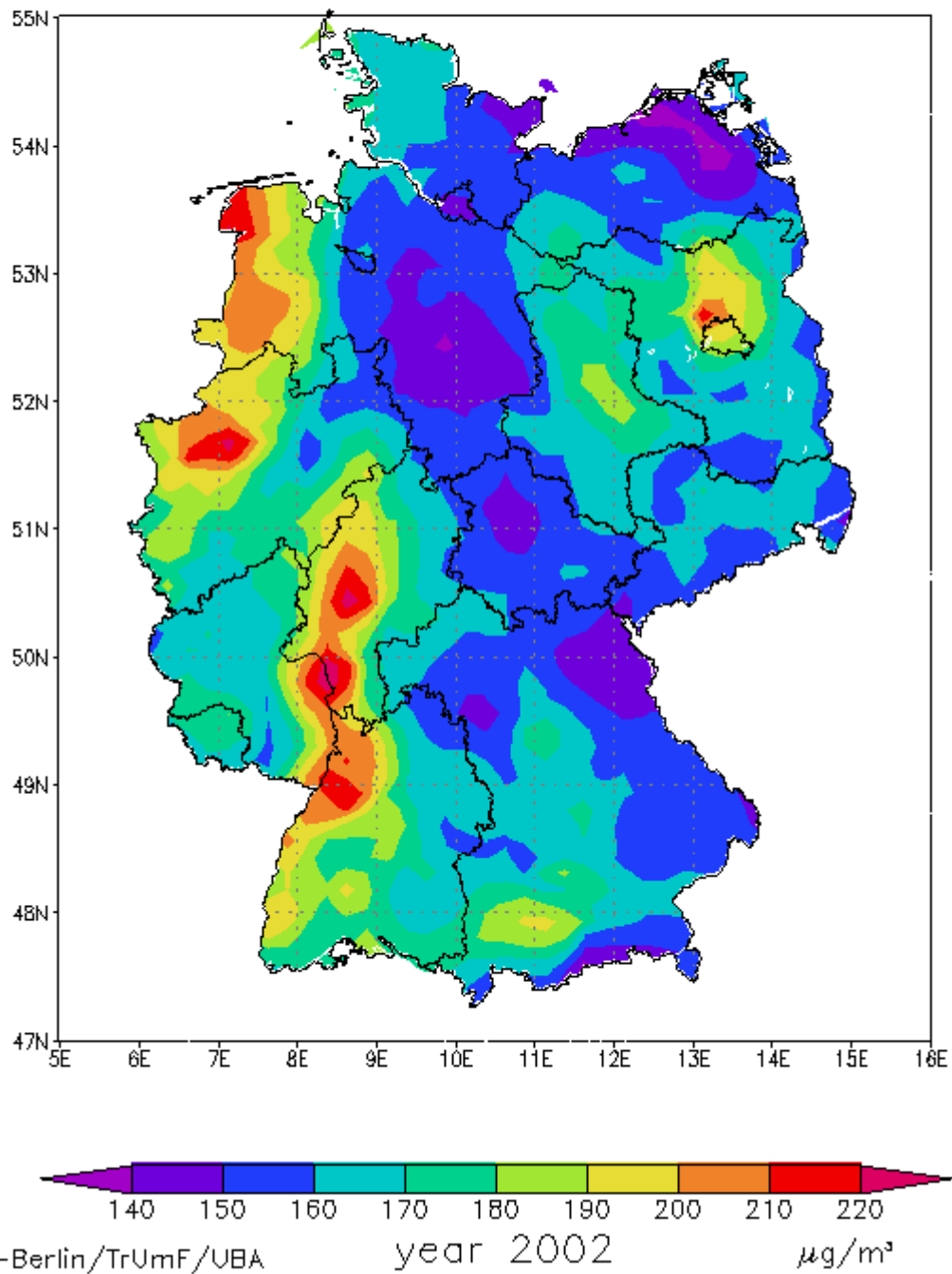


Abbildung 29 Ozon Jahresmittel

## O3 Maxima in simulation period

O1CC0843F203\_20020101\_0301\_01

**Abbildung 30 Stündliches Ozon-Maximum im Jahr 2002**

O3 Highest 8hmean (max),

OICCC0843F203\_20020101\_030I\_01

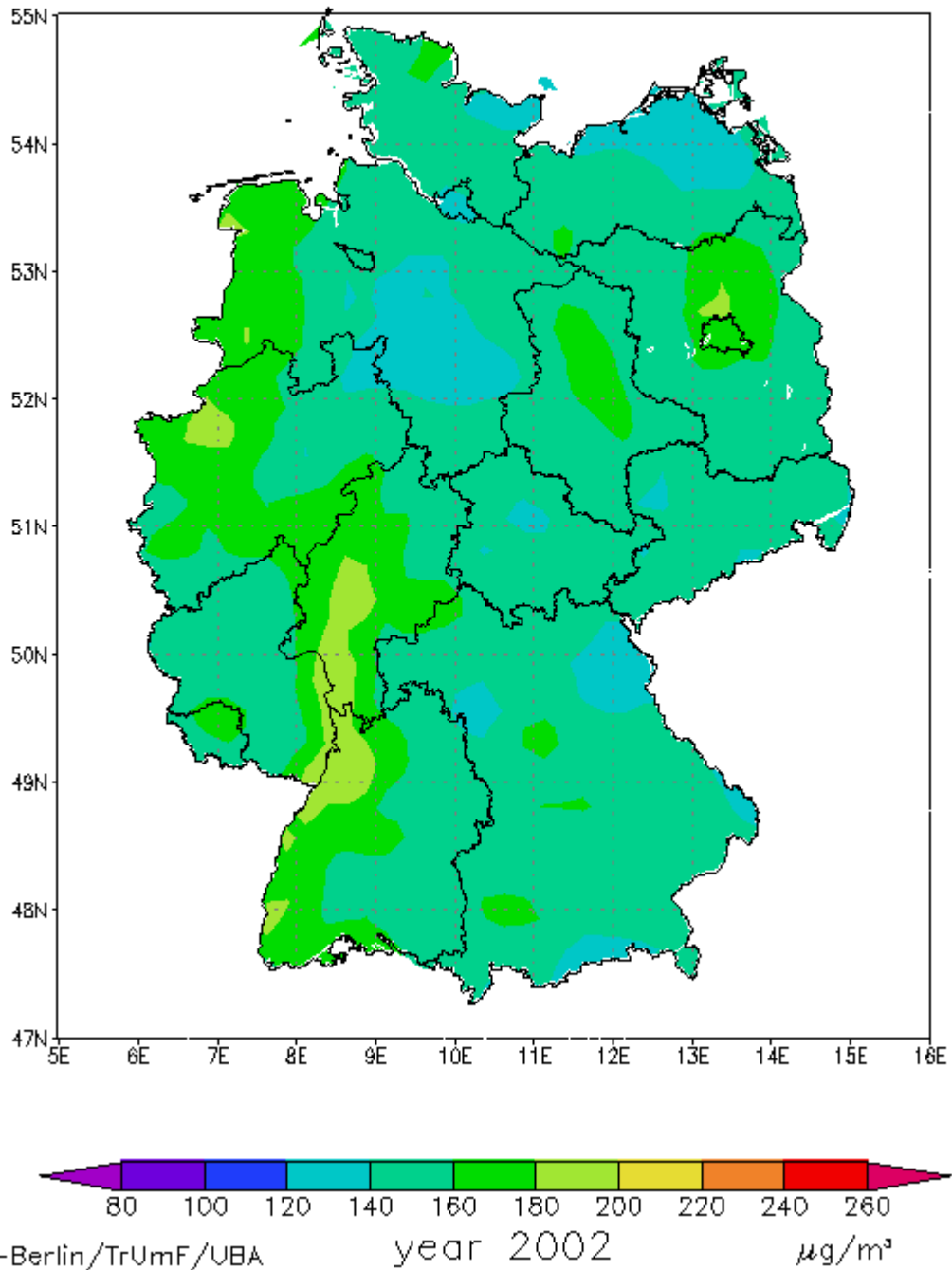
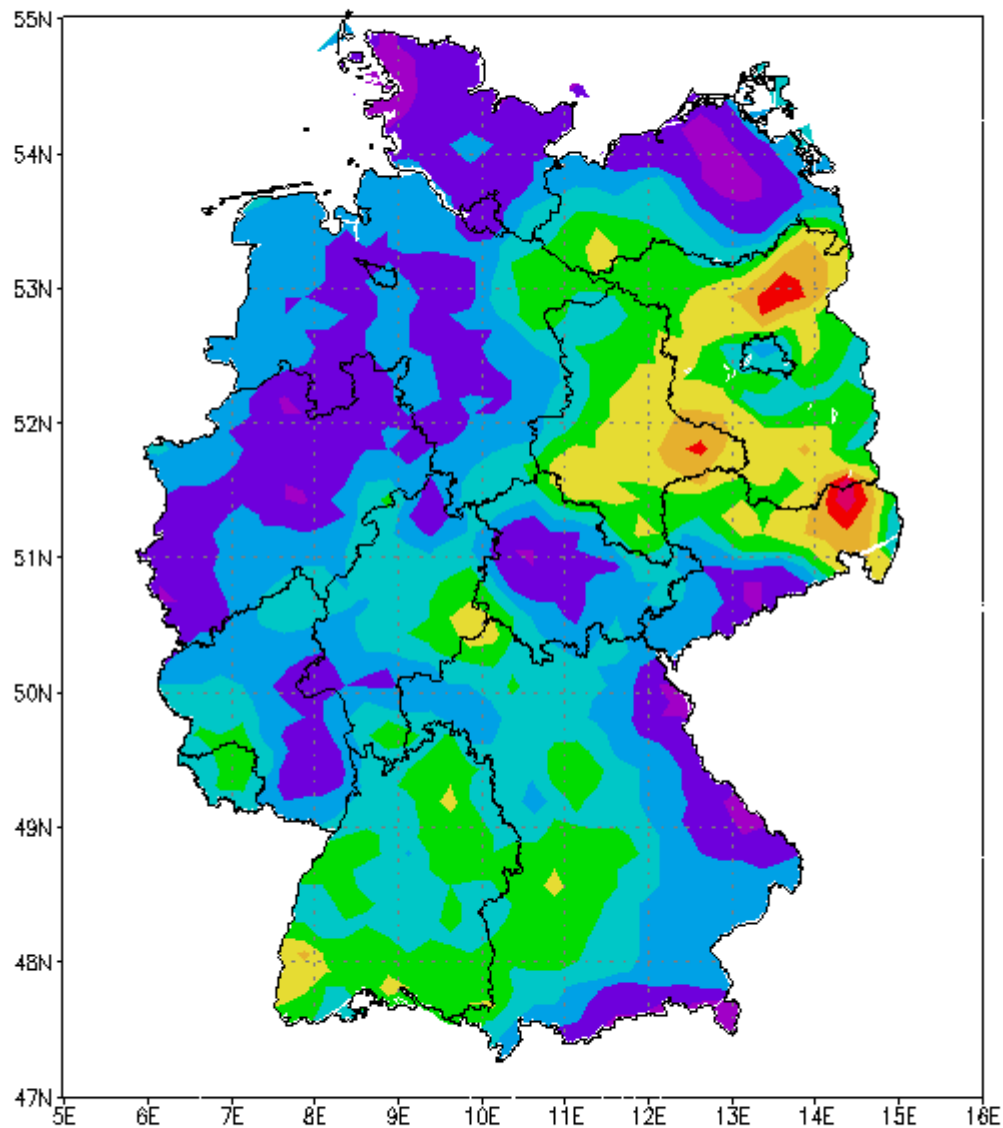


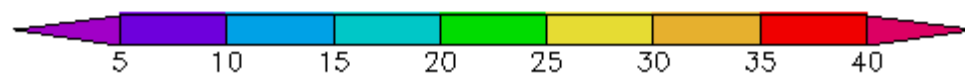
Abbildung 31 Höchstes Ozon-8-Stundenmittel

O<sub>3</sub> 8hmean days > 120  $\mu\text{g}/\text{m}^3$

OICC0843F203\_20020101\_0301\_01



(Target value: no more than 25 days)



FU-Berlin/TrUmF/UBA

year 2002

days

Abbildung 32 Tage mit einer Überschreitung des Ozon-8-Stundenmittel von 120  $\mu\text{g}/\text{m}^3$



### Annual Mean

OICCC0843F2SD2\_20020101\_S20I\_01

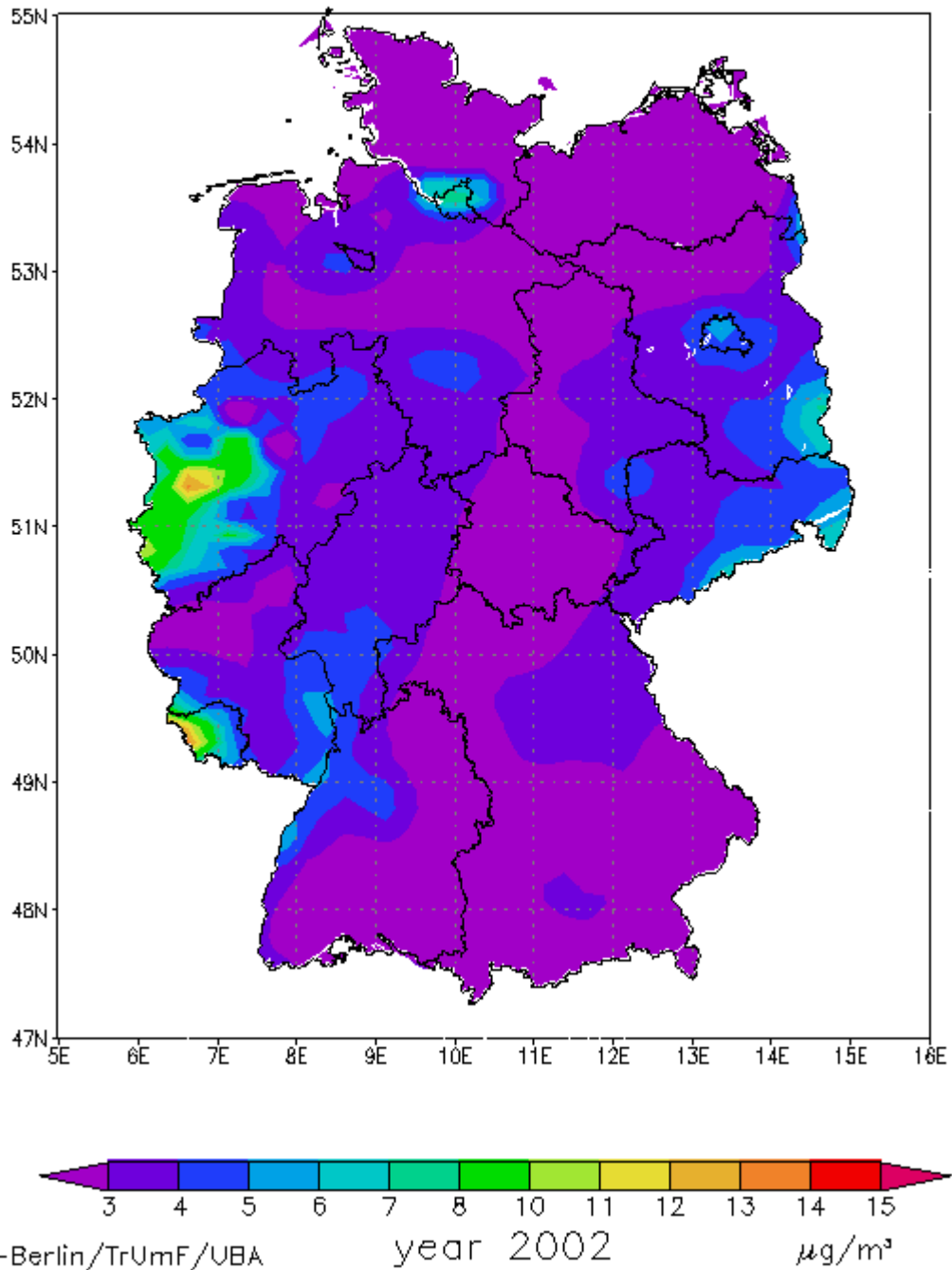


Abbildung 33 SO<sub>2</sub>-Jahresmittel

## 10 Anhang B: Liste der Stationen mit unterschiedlicher Einschätzung der Repräsentativität

Dieser Anhang listet PM10 und NO<sub>2</sub> messende Stationen auf, bei denen die Einschätzung der Repräsentativität durch die subjektive Auswahl der Landesämter und der nach objektiven Immissionsregimes zu einem unterschiedlichen Ergebnis kommt (siehe Kapitel 4.2.2)

Einschätzung der Bundesländer:

Plottyp=AREA (zur Flächeninterpolation geeignet)

Plottyp=SPOT (zur Flächeninterpolation nicht geeignet)

Einschätzung nach dem Immissionsregime (AQ-Regime, siehe Kapitel 4.2.2 und Flemming 2003 a). Eine Beschreibung der Regimes kann in Tabelle 1 gefunden werden.

Die Regimes "Straße (S)", "Belastungsstufe #5" sowie "Straße, extrem (S2)" sind nicht zur Flächeninterpolation geeignet.

Spezies	Station	Plot-typ	AQ-Regime
NO2	HE005	AREA	s
NO2	HE010	AREA	S
NO2	HE011	AREA	S
NO2	RP009	AREA	S
NO2	RP010	AREA	S
NO2	RP011	AREA	S
NO2	RP012	AREA	S
NO2	RP020	AREA	S
NO2	RP026	AREA	S
NO2	RP029	AREA	S
NO2	RP041	AREA	S
NO2	SH025	AREA	S2

**Tabelle 3 Stationen, flächenrepräsentativ nach dem Kriterium der Bundesländer, aber nicht nach dem hinsichtlich des Immissionsregimes**

Spezies	Station	Plot-typ	AQ-Regime
NO2	BB044	SPOT	U3
NO2	BB049	SPOT	
NO2	BW097	SPOT	U3
NO2	BW106	SPOT	U3
NO2	BY061	SPOT	U2
NO2	HB006	SPOT	
NO2	HH015	SPOT	U3
NO2	HH070	SPOT	
NO2	MV002	SPOT	U2
NO2	MV003	SPOT	U2
NO2	MV005	SPOT	U2
NO2	MV006	SPOT	U2
NO2	NW098	SPOT	U3
NO2	NW100	SPOT	U2
NO2	NW102	SPOT	U3
NO2	SH010	SPOT	U3
NO2	SH019	SPOT	U3
NO2	SH021	SPOT	U1
NO2	SH022	SPOT	U3

NO2	SH023	SPOT	U1
NO2	SH024	SPOT	U3
NO2	ST075	SPOT	U3
NO2	ST076	SPOT	U3
NO2	ST081	SPOT	U2
NO2	ST091	SPOT	U2
NO2	ST092	SPOT	U3
NO2	ST095	SPOT	U3
NO2	ST096	SPOT	U3
NO2	TH039	SPOT	U3

**Tabelle 4 Stationen, nicht flächenrepräsentativ nach dem Kriterium der Bundesländer, aber nach dem hinsichtlich des Immissionsregimes für NO<sub>2</sub>**

Spezies	Station	Plot-typ	AQ-Regime
PM10	BB044	SPOT	#4
PM10	BE014	SPOT	#4
PM10	BE061	SPOT	#4
PM10	BE065	SPOT	#4
PM10	BW080	SPOT	#3
PM10	BW096	SPOT	#3
PM10	BW097	SPOT	#3
PM10	BW098	SPOT	#4
PM10	BW099	SPOT	#4
PM10	BW106	SPOT	#2
PM10	BY003	SPOT	#4
PM10	BY038	SPOT	#4
PM10	BY040	SPOT	#4
PM10	BY053	SPOT	#4
PM10	BY059	SPOT	#4
PM10	BY061	SPOT	#4
PM10	BY063	SPOT	#4
PM10	BY085	SPOT	#4
PM10	HB006	SPOT	#4
PM10	HB007	SPOT	#4
PM10	HE037	SPOT	#3
PM10	HE040	SPOT	#4
PM10	HE049	SPOT	#4
PM10	HH015	SPOT	#3
PM10	HH026	SPOT	#3
PM10	HH070	SPOT	#3
PM10	MV002	SPOT	#1
PM10	MV003	SPOT	#2
PM10	MV005	SPOT	#2
PM10	MV006	SPOT	#3
PM10	NI008	SPOT	#4
PM10	NW043	SPOT	#3
PM10	NW082	SPOT	#4
PM10	NW097	SPOT	#3
PM10	NW098	SPOT	#3
PM10	NW099	SPOT	#3
PM10	NW100	SPOT	#2
PM10	NW105	SPOT	#3
PM10	NW106	SPOT	#4
PM10	SH021	SPOT	#2
PM10	SH023	SPOT	#2
PM10	SN020	SPOT	#3

---

PM10	SN025	SPOT	#3
PM10	SN060	SPOT	#2
PM10	SN061	SPOT	#3
PM10	ST075	SPOT	#4
PM10	ST076	SPOT	#3
PM10	ST081	SPOT	#2
PM10	ST091	SPOT	#3
PM10	ST092	SPOT	#4
PM10	TH039	SPOT	#3
PM10	TH072	SPOT	#3

**Tabelle 5 Stationen, nicht flächenrepräsentativ nach dem Kriterium der Bundesländer, aber nach dem hinsichtlich des Immissionsregimes für PM10.**

## 11 Anhang C: Liste der Fortan Routinen

Main routine	Subroutine	Zweck
M_det_class.		Bestimmen des Immissionsregimes für eine stündliche Jahreszeitreihe
	inptsall	Einlesen der Stationskoordinaten
	rdzeitrh	Einlesen der gemessenen Zeitreihen
	rdccenter	Einlesen der Clusterzentrums für die Klassifikation
	Det_class	Bestimmen der Regime
M_var_corstat		Schätzen der Kovarianzmodelle und Beobachtungsfehlervarianz
	inptsall	Einlesen der Stationskoordinaten
	rdzeitrh	Einlesen der Zeitreihen
	hochpass1	Filtern vom Jahresgang
	wochengang	Filtern vom Wochengang
	arpass	Filtern von synoptischer Schwankung
	corvc	Berechnen der Kovarianzmatrix (IMSL library)
	distance	Berechnen der Matrix der Abstände und Sektoren
	fit_local_acmodell	Schätzung der individuellen Beobachtungsfehlervarianz
	fit_acmodell	Schätzung der regimeabhängigen Kovarianzmodelle
M_optinitini		
	inptsall	Einlesen der Stationskoordinaten und Klassifikation
	rdzeitrh	Einlesen der Zeitreihen
	get_sigobs	Einlesen der Beobachtungsfehlervarianz
	get_classfield	Einlesen der Modellfeldklassifikation
	Get_actyp	Einlesen der Parameter der regimeabhängigen Kovarianzmodelle
	diff	Berechnen der Beobachtungsinckremente zum Termin
	acsurf	Biaskorrektur des Modellfelds
	s_ord	Raubssuchen der 8 nächsten Stationen für jeden Gitterpunkt
	Correcs_test	Analyse am Messort ohne Verwendung des Messwertes
	Put_stat_ana	Bestimmen und Zusammenfassung des cross validation Interpolationsfehlers
	Correcs	Analyse für alle Gitterpunkte
	Put_field_ana	Rauschreiben der Analyse in grads Container

**Tabelle 6 Wichtige Fortran Routinen und deren Kurzbeschreibung**