Erhöhung städtischer Luftschadstoffkonzentrationen - AERO-TRAM Messungen und COSMO-ART Simulationen -

Zur Erlangung des akademischen Grades eines DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN der Fakultät für Physik des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

angenomme

DISSERTATION

von

Dipl.-Met. Rowell Hagemann aus Karlsruhe

Tag der mündlichen Prüfung:12. Mai 2017ReferentProf. Dr. Ch. KottmeierKorreferentProf. Dr. Th. Leisner



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung -Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz (CC BY-SA 4.0): https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.de

Abstract

Air quality in urban areas is a major issue as more than 70 % of the population in Germany live in cities. To minimize adverse health effects of air pollution, concentration of pollutants are reduced by emission regulations. These air quality measures include limit values for different pollutants like nitrogen dioxide (NO₂) or particulate matter. Their compliance is mostly ensured for average conditions over extended parts of a city like over several square kilometers and on annual, daily or hourly basis. In contrast, observations reveal frequent violations of limit values on small scales like over a few hundret meters. For example, in 2008 for more than 50 % of stations mainly affected by road traffic the annual limit value for NO₂ (40 µg m⁻³) was exceeded (UBA, 2010).

Monitoring of compliance with observations is straight forward compared to an approach using a regional air quality model. Such models calculate spatial means of concentrations and therefore are merely able to provide urban background concentration. Streetlevel conditions, as they are observed at traffic stations, cannot be captured due to the model resolution.

Within the scope of this thesis a statistical procedure was developed to derive annual averages of nitrogen oxides on street levels from their areal means. This method is based on spatial distributions of nitrogen oxides obtained with the mobile measurement system AERO-TRAM. Furthermore, information about population density, emissions strengths of nitrogen oxides and road lengths were available. As the mobile measurements took place on line-shaped routes, annual averages along route sections were transformed to spatial average concentrations by means of a correction factor. This factor is based on a linear regression between means along route sections and means over an area covering $2.8 \,\mathrm{km} \times 2.8 \,\mathrm{km}$, both in terms of population density.

Thus calculated spatial means of nitrogen oxides concentrations were connected with maximum concentrations which occured along the specific sections of the observed concentration profiles on annual average. A regression analysis was performed to explain the maximum concentrations by spatial means and the remaining parameters of emissions strengths and road length. Different regression models could be determined, each of them capable to derive the annual averaged maximum concentration of nitric oxide, nitrogen dioxide and nitrogen oxides from their spatial mean.

Furthermore, COSMO-ART simulations were carried out to determine annual average concentrations of nitrogen oxides across Germany for 2008 based on a $2.8 \text{ km} \times 2.8 \text{ km}$ grid. As COSMO-ART is able to reproduce observed conditions at urban background stations, the simulation results were used to evaluate the most suitable regression model.

In-depth comparison with observations at traffic-influenced stations revealed one regression model as the most suitable. This model captured in good agreement the amount of these traffic stations (~ 75 percent) which exceeded the annual limit value of NO₂ in 2008. At the same time it reproduced a realistic distribution of local enhanced concentrations in urban areas. Applied on COSMO-ART results for future nitrogen oxides pollution, generated with emission prognosis for 2030, the method indicates a compliance of annual limit values at 75 % of traffic stations.

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung	1
2	Das	Messsystem AERO-TRAM	9
	2.1	Messaufbau der AERO-TRAM	19
		2.1.1 Instrumentierung \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	22
		2.1.2 Einlass systeme \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	35
		2.1.3 Qualitätssicherung der Messungen	44
	2.2	Messgebiet und -strecken	48
3	Met	thoden der Datenauswertung der AERO-TRAM	55
	3.1	Identifizierung der Messfahrten	56
	3.2	Glättung der Rohdaten	60
	3.3	Segmentierung der Messtrecken	62
	3.4	Ableitung der NO ₂ -Konzentration aus den	
		NO- und $\mathrm{NO}_{\mathrm{x}}\text{-}\mathrm{Messungen}$	65
	3.5	Koordinatentransformation der Windkomponenten	67
4	Räu	mliche Verteilungen von Luftschadstoffen	
	und	meteorologischen Parametern	71
	4.1	Die Karlsruher Wärmeinsel	71
	4.2	Bodennahe Ozonproduktion	76
	4.3	Beeinflussung ländlicher Luftqualität durch	
		städtische Industrieemissionen	77
5	Stat	tistisches Verfahren zur Ermittlung von	
	loka	len Maximalkonzentrationen	87
	5.1	Datengrundlage	89
	5.2	Korrekturfunktion zur Ableitung	
		räumlicher Mittel aus Streckenmittel	93

	5.3	Verfahren zur Ableitung lokaler	
		Maximalkonzentrationen	95
		5.3.1 Regressionsmodell I	96
		5.3.2 Regressionsmodell II	98
		5.3.3 Regressionsmodell III	99
	5.4	Verifikation der Regressionsmodelle	100
		5.4.1 Stickstoffmonoxid \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	103
		5.4.2 Stickstoffdioxid \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	105
		5.4.3 Stickoxid	106
	5.5	Fazit	109
6	Deι	ıtschlandweite, mit dem Modellsystem	
	COS	SMO-ART berechnete, Stickoxidkonzentrationen	113
	6.1	Das Vorhersagemodell COSMO und dessen	
		Erweiterung ART	113
	6.2	Stickoxidchemie in der urbanen Troposphäre	118
	6.3	Methode zur approximierten Bestimmung	
		von Jahresmitteln	121
	6.4	Modellkonfiguration	125
	6.5	Validierung der simulierten räumlichen	
		Mittel der Stickoxidkonzentrationen	128
7	Anv	vendung des Verfahrens zur Ermittlung	
	von	lokalen Maximalkonzentrationen auf	
	Mo	dellergebnisse	137
	7.1	Stickstoffmonoxid	137
	7.2	Stickstoffdioxid	139
	7.3	Stickoxid	143
	7.4	Fazit	145
8	Lok	ale Maximalkonzentrationen der	
	Stic	koxide im Jahr 2030	151
	8.1	Lokale Maximalkonzentrationen der	
		Stickoxide im Jahr 2030	153
9	Zus	ammenfassung	159
Lit	terat	urverzeichnis	165
Α	Part	tikeleinlasseffizienz	179

В	Anzahl Messfahrten der übrigen Messparameter	181
С	Rohdaten von Einzelfahrten	183
D	Standardabweichung der Stickoxidmessungen	185
Е	Grundlagen des Gaußmodells	187
F	Quellstärken der Hauptemittenten in Karlsruhe	191
G	Methoden der linearen RegressionsanalyseG.1Voraussetzungen und Testgrößen	193 196

1. Einleitung

Schon immer hat der Mensch durch Verbrennungsprozesse Substanzen in die Atmosphäre eingebracht. Da zu Beginn der Menschheit die Population lediglich aus kleinen Gruppen von Nomaden bestand, war der Eintrag in die Atmosphäre aufgrund des Energiebedarfs so gering, dass er keine Auswirkung hatte. Das Sesshaftwerden und die damit verbundene Bildung von Zivilisationen führten zu einem Wandel hin zu einer erzeugenden Lebensweise. In Verbindung mit einem kontinuierlichen Anstieg der Bevölkerungszahlen bewirkte dies eine stetige Zunahme des Energiebedarfs. Die benötigte Energie wurde jahrhundertelang in erster Linie über Verbrennung von Biomasse erzeugt, was eine fortlaufende Entwaldung der Erdoberfläche verursachte.

Die Abnahme des zur Verfügung stehenden biogenen Brennstoffs bewirkte bereits im Mittelalter eine verstärkte Nutzung von fossilen Brennstoffen in Form von Kohle. Die Verbrennung von Kohle setzt den darin enthaltenen Schwefel in Form von Schwefeldioxid frei, das in Verbindung mit Wasser schwefelhaltige Aerosoltröpfchen in der Atmosphäre bildet. Besonders im Winter begünstigten in Städten starke Emissionen von Schwefeldioxid aufgrund großer Mengen verbrannter Kohle zu Heizzwecken und niedrige Temperaturen die häufige Entstehung von schwefelhaltigen Dunstansammlungen bzw. von Smog, so dass bereits 1306 König Edward I. die Verbrennung von Kohle in Großbritannien durch einen Erlass untersagte. Allerdings konnte sich dieses Verbot aufgrund von fehlenden Brennstoffalternativen nicht durchsetzen.

Mit Beginn der Industrialisierung im 18. Jahrhundert kam es zu einem exponentiellen Anstiegs des Energiebedarfs und damit zu einer exponentiellen Verwendung fossiler Brennstoffe. Dies machte sich in einer deutlichen Verschlechterung der Luftqualität in Städten bemerkbar. Beispielsweise traten in London regelmäßig ausgeprägte Smogereignisse während des Winters auf, die negative Auswirkungen auf die menschliche Gesundheit hatten. Den Höhepunkt stellte ein Ereignis 1952 dar (*The Great Smog*), bei dem die extreme Luftverschmutzung zu mehreren tausend Toten innerhalb weniger Tage führte (Wilkins, 1954). In der Folge wurde 1956 in Großbritannien der *Clean Air Act* verabschiedet. Dieses Gesetz bewirkte eine Verbesserung der Luftqualität, indem durch die Verordnung zur Verwendung raucharmer Brennstoffe und die Verbannung von Industrie aus den Innenstädten Emissionen von Luftschadstoffen reglementiert wurden. Das starke Wirtschaftswachstum nach Ende des 2. Weltkrieges hatte auch in Deutschland, besonders im Ruhrgebiet, drastische Auswirkungen auf die Luftqualität. Ein mehrtägiges Smogereignis im Ruhrgebiet im Winter 1962, während dem ebenfalls eine Zunahme von Todesfällen beobachtet wurde (Steiger und Brockhaus, 1966), führte ähnlich wie in Großbritannien zu Maßnahmen zur Verbesserung der Luftqualität.

Das starke Wirtschaftswachstum in den Nachkriegsjahren bewirkte außerdem einen Anstieg des Wohlstands, was unter anderem zu einer Zunahme des Individualverkehrs führte. Emissionen des Straßenverkehrs können ebenfalls Smogereignisse auslösen, wobei diese nicht durch Schwefeldioxid verursacht werden, sondern sich durch hohe Konzentrationen von Stickoxiden und Ozon auszeichnen und bei Wetterlagen mit intensiver Sonneneinstrahlung auftreten. Das prominenteste Beispiel stellt Los Angeles dar, wo solche Ereignisse bereits seit den 40er Jahren des 20. Jahrhunderts beobachtet wurden. Da die Ursache der hohen Ozonkonzentrationen auf durch den Straßenverkehr emittierte Stickoxide und Kohlenwasserstoffe zurückgeführt werden konnte (Haagen-Smit, 1952; Haagen-Smit und Fox, 1954), konnten durch Maßnahmen zur Emissionsreduzierung die Ausmaße solcher Ereignisse trotz Zunahme des Straßenverkehrs deutlich verringert und so schädliche Auswirkungen des Ozons wie Atemwegsreizungen vermindert werden.

Die Maßnahmen zur Emissionsminderung brachten in den Städten der westlichen Industrienationen eine Verbesserung der Luftqualitätssituation während der letzten Jahrzehnte mit sich. Demgegenüber sind Schwellenländer mit einem extrem starken Wirtschaftswachstums, insbesondere im industriellen Sektor und der damit verbundenen Verkehrszunahme, mittlerweile mit ähnlichen Problemen konfrontiert. So kann in Asien eine erhebliche Zunahme der Stickoxidemissionen während der letzten Jahrzehnte beobachtet werden (Akimoto, 2003), die mittlerweile höher als die der westlichen Wirtschaftsräume ist. Aufgrund der negativen Auswirkungen hoher Luftverschmutzung sehen sich auch diese Länder gezwungen, Minderungsmaßnahmen zu ergreifen, so dass beispielsweise in China zumindest ein Rückgang der Freisetzungen von Schwefeldioxid verzeichnet werden kann (Lu et al., 2010). Dieser Trend lässt sich für Stickoxide, unter anderem wegen der ungebrochenen Zunahme des Straßenverkehrs, nicht beobachten (Wang et al., 2014; Zhao et al., 2013), so dass eine hohe Luftbelastung in Chinas Städten weiterhin ein großes Problem darstellt. Allerdings zeigt die drastische Reduktion von Emissionen während den Olympischen Spiele 2008, dass auch kurzfristige Maßnahmen zu einer Verminderung von Beschwerden bedingt durch Luftverschmutzung führen (Li et al., 2010; Rich et al., 2012).

Die weltweite Zunahme der Emissionen von Luftbeimengungen durch Verbrennungsprozesse beschränkt sich nicht nur auf städtische Luftqualität, sondern beeinflusst aufgrund atmosphärischen Transports auch die Luftverschmutzung weltweit (Akimoto, 2003; Fenger, 2009). Zudem haben sie auch Auswirkungen auf Wetter und Klima. So können anthropogene Emissionen die Niederschlagsbildung beeinflussen (Junkermann et al., 2011b; Ramanathan et al., 2001; Rosenfeld, 2000) oder, neben der allgemeinen Erwärmung der Atmosphäre durch Zunahme des Kohlendioxidgehaltes der Atmosphäre, zu regionalen Klimaveränderungen führen (Ramanathan et al., 2001; Ramanathan und Feng, 2009; Seinfeld, 2008).

Weitere Untersuchungen zeigen, dass nicht nur eine kurzfristige Schadstoffexposition unter Bedingungen ausgeprägter Luftbelastung gesundheitsschädliche Folgen hat (z. B. Bell et al., 2005; Brunekreef und Holgate, 2002; Gryparis et al., 2004; Samoli et al., 2008), sondern auch eher niedrige Konzentrationsdosen über längere Zeiträume negative Konsequenzen auf die menschliche Gesundheit haben (Dockery et al., 1993; Brunekreef und Holgate, 2002; Hoek et al., 2013; Pope III et al., 2002).

Diese Studien über die Auswirkungen einer dauerhaften Schadstoffexposition zeigen die Wichtigkeit der Gewährleistung einer niedrigen Luftbelastung über längere Zeiträume auf. Aus diesem Grund wurden vielfach Jahresgrenzwerte zum Schutz der Bevölkerung vor langfristigen Gesundheitsfolgen festgesetzt (Tab. 1.1). Zur Minimierung akuter Erkrankungen existieren Grenzwerte, die innerhalb eines kurzen Zeitraums, meist einer Stunde, nicht überschritten werden dürfen. Die Einhaltung der Grenzwerte wird

Schadstoff	Mittelungs- zeitraum	${ m Grenzwert} { m in \ \mu g \ m^{-3}}$	zulässige Überschrei- tungen ^a
SO	eine Stunde	350	24
50_2	ein Tag	125	3
NO	eine Stunde	200	18
NO_2	ein Jahr	40	_
PM10	ein Tag	50	35
1 1110	ein Jahr	40	_
PM2.5	ein Jahr	25	_
Pb	ein Jahr	$0,\!5$	_
Benzol	ein Jahr	5	_
CO	acht Stunden	10	_

Tabelle 1.1.: Grenzwerte verschiedener Luftschadstoffe in Deutschland zum Schutz der menschlichen Gesundheit nach der 39. BImSchV (2010).

 a in Kalendertagen

mit Hilfe von Messnetzen überwacht, die in Gebieten eingerichtet sind, die sich durch eine hohe Luftbelastung auszeichnen, für eine Schadstoffexposition der Bevölkerung relevant sind und für die Öffentlichkeit zugänglich sind. Diese Voraussetzung haben zur Folge, dass die Luftqualität in Deutschland in bewohnten Umgebungen mit hohen Emissionen, also vor allem in Städten zu überwacht wird.

Die räumliche Konzentrationsverteilung von Luftschadstoffen zeichnet sich durch weitgehend geringe Belastungen in ländlichen Gebieten aus, die in den städtischen Randbereichen zunehmen und in Innenstadtbereichen am größten ist. Die maximal erhöhten Konzentrationswerte treten punktuell auf und sind verkehrsbedingt (Lenschow et al., 2001). Aus dieser Verteilung folgt, dass die wichtigsten Umgebungen zur Luftqualitätsüberwachung zum einen innerstädtische Gebiete im allgemeinen und zum anderen kleinräumige Bereiche mit hohen Verkehrsaufkommen darstellen. Im Rahmen der Luftreinhaltung werden Messungen in diesen Umgebungen als städtischer Hintergrund und als städtisch verkehrsnah bezeichnet. Dabei repräsentieren Messungen an den sogenannten städtischen Hintergrundstationen die Situation für ein Gebiet mit einer Ausdehnung weniger Quadratkilometer, während an Verkehrsstationen die Gegebenheiten entlang einer Straße widergespiegelt werden. Die Überwachung, die für die Bundesrepublik Deutschland als Mitglied der Europäischen Union verpflichtend ist, zeigt, dass vor allem an verkehrsnahen Messstationen Grenzwertsverletzungen auftreten (UBA, 2016b).

Die Überwachung der städtischen Luftqualität beschränkt sich im Allgemeinen auf Messungen an einigen wenigen Standorten. Hinsichtlich der Grenzwerteinhaltung ist dies auch ausreichend, da deren Verletzung sich auf kleinräumige Umgebungen mit stark erhöhten Emissionen beschränkt. Die tatsächliche räumliche Schadstoffverteilung, die innerhalb einer Stadt aufgrund der Vielfalt und Veränderlichkeit der Emissionsquellen eine hohe Variabilität aufweist, kann so nicht erfasst werden, da hierfür ein dichtes Netzwerk aus Messstationen notwendig wäre, was nicht nur aus Kostensicht unpraktikabel ist. Eine Möglichkeit zur Erhebung der räumlichen Variabilität der Luftbeimengungen stellen mobile Messsysteme dar (z. B. Bukowiecki et al., 2002; Drewnick et al., 2012). Mit deren Hilfe kann auf vergleichsweise einfache Art und Weise die räumliche Verteilung von Luftschadstoffen entlang von Messrouten erfasst werden. Zur Überwachung der Grenzwerteinhaltung können diese allerdings nicht eingesetzt werden, da für solche Zwecke kontinuierliche Messungen an einem Standort gefordert werden. Sie können aber ein nützliches Instrument zur Lokalisierung von Gebieten mit ungewöhnlich hoher Schadstoffbelastung darstellen (z. B. Hagemann et al., 2014; Weijers et al., 2004).

Um das Potential des mobilen Messsystems AERO-TRAM aufzuzeigen, werden im ersten Teil dieser Arbeit Auswertungen ausgewählter Messparameter vorgestellt. Durch die getroffene Wahl der Messparameter innerhalb der Stadt Karlsruhe wie auch im Umland zu erfassen. Da nicht nur Luftqualitätsparameter sondern auch meteorologische Variablen wie die Temperatur durch die AERO-TRAM erfasst werden, kann so die Karlsruher Wärmeinsel mit einer räumlichen Auflösung erfasst werden, die so mit konventionellen Messungen nicht möglich wäre. Anhand von Ozonmessungen wird gezeigt, dass bei idealen Bedingungen der bodennahnen Ozonproduktion eine Verdopplung der Ozonbelastung während einer einstündigen Messfahrt auftritt. Eine Besonderheit stellen die Partikelanzahlmessungen der AERO-TRAM dar. Hier kann eine außerordentliche Partikelbelastung im nördlichen Umland von Karlsruhe festgestellt werden. Diese ist nicht durch lokale Ursachen bedingt, sondern kann mittels einer Clusteranalyse auf den Einfluss der Abluftfahne Karlsruher Industrieanlagen zurückgeführt werden und mit Hilfe von Ausbreitungsrechnungen mit einem Gaußmodell bestätigt werden (Hagemann et al., 2014).

Neben der Erfassung durch Messungen ist eine weitere Alternative zur Bestimmung der räumlichen Variabilität der städtischen Luftqualität ist die Verwendung von Ausbreitungsmodellen in Form von regionalen Chemie-Transportmodellen (z. B. Vogel et al., 2009). Mit solchen regionalen Modellen kann die räumliche Verteilung von Luftbeimengungen z. B. für die gesamte Fläche von Deutschland simuliert werden und damit die räumliche Verteilung innerhalb aller deutschen Städte. Aufgrund der Modellauflösung ist es allerdings nur möglich die Situation bestenfalls an städtischen Hintergrundstationen abzubilden, da Modelle lediglich räumliche Gebietsmittel gemäß ihrer Modellauflösung liefern. Die lokalen Maximalkonzentrationen, die für die Grenzwerteinhaltung maßgeblich sind, können mit solchen Modellen nicht bestimmt werden, da solche Situationen durch das Modell nicht mehr aufgelöst werden.

Mit Hilfe von Messdaten ist es jedoch möglich, Verfahren zu entwickeln, um aus Modellergebnissen Konzentrationsverhältnisse abzuleiten, die durch das Simulationsmodell nicht aufgelöst werden. Zum Beispiel haben Moussiopoulos et al. (2012) eine Beziehung zwischen ländlichen und städtischen Hintergrundstationen abgeleitet, mit der auf einfache Art und Weise mittels eines Europa umfassenden Chemie-Transportmodells, das lediglich ländliche Hintergrundkonzentrationen liefert, die Konzentrationsverhältnisse für Stadtgebiete bestimmt werden können. Ebenso können Beobachtungen an städtischen Hintergrund- und Verkehrstationen verwendet werden, um Methoden zur Bestimmung der Luftbelastung für verkehrsnahe Umgebungen aus Modellergebnissen abzuleiten (Kiesewetter et al., 2014, 2015). Im zweiten Teil dieser Arbeit wird nun ebenfalls ein Verfahren entwickelt, mit dessen Hilfe eine Ableitung lokaler Maximalkonzentrationen aus Simulationen des Modellsystems COSMO-ART ermöglicht wird. Die Datengrundlage bilden Messdaten des mobilen Messsystems AERO-TRAM über einen fast zweijährigen Zeitraum, sowie deutschlandweite Emissionsdaten, Angaben zur Bevölkerungsdichte und Informationen über das Straßennetzes.

Die Messdaten der AERO-TRAM werden verwendet, um Konzentrationsprofile der Stickoxide entlang den Messstrecken im Jahresmittel zu bestimmen. Durch Unterteilung der Messstrecke in Abschnitte können mehrere Kombinationen zwischen Abschnittsmittel und Abschnittsmaximum gebildet werden. Zusätzlich ist jeder Abschnitt durch eine bestimmte Stickoxidemission, Bevölkerungsdichte und Straßennetzlänge charakterisiert. Im Gegensatz zu einem Simulationsmodell, dass der Modellauflösung entsprechende Gebietsmittel berechnet, entspricht das Abschnittsmittel dem Mittel entlang einer Strecke bzw. Linie, so dass die Frage aufkommt:

• Kann aus einem Streckenmittel ein Gebietsmittel abgeleitet werden?

Um dies zu beantworten, wird eine Rasterung der Messstrecken mit einem 2,8 km \times 2,8 km-Gitter vorgenommen. Unter Verwendung der Angaben zur Bevölkerungsdichte als Proxy-Variable, die für ein 100 m \times 100 m-Raster vorliegen, wird untersucht, ob ein Zusammenhang zwischen dem Strecken- und Gebietsmittel der Bevölkerungsdichte existiert. Wenn ein Zusammenhang existiert, so kann dieser dazu genutzt werden, um Gebietsmittel aus den Messdaten der AERO-TRAM abzuleiten. Im Anschluss kann folgender Sachverhalt untersucht werden:

• Existieren funktionale Beziehungen, mit der lokale Maximalkonzentrationen der Stickoxide im Jahresmittel durch deren räumliche Mittel und andere Parameter erklärt werden können?

Solch ein Zusammenhang kann dazu genutzt werden, um ein statistisches Verfahren zu entwickeln, mit dem aus Jahresmittel der städtischen Hintergrundkonzentrationen der Stickoxide das Jahresmittel der Stickoxidbelastung an verkehrsnahen Stationen abgeleitet werden kann. Mit Hilfe von deutschlandweiten Simulationsrechnungen mit COSMO-ART zur Bestimmung der räumlichen Stickoxidverteilung in deutschen Städten, werden im weiteren Verlauf folgende Fragen untersucht:

- Eignen sich die Verfahren zur Ableitung des Jahresmittels der Stickoxidbelastung an Verkehrstationen aus modellierten städtischen Hintergrundkonzentrationen im Jahresmittel 2008?
- In welchem Maße ändert sich die Luftbelastung im Jahr 2030?

In dieser Dissertation wird im Vorfeld zunächst das mobile Messsystem AERO-TRAM in Kap. 2 vorgestellt und die Messausrüstung und das Messgebiet beschrieben. Anschließend fasst Kap. 3 allgemeine Methoden zusammen, die zur Datenauswertung der Messparameter benötigt werden. Kap. 4 zeigt anhand exemplarischer Auswertungen ausgewählter Messparameter entlang der Messstrecken das Potential der AERO-TRAM auf. Zum einen kann die städtische Wärmeinsel durch solch ein Messsystem mit einer räumlichen Auflösung untersucht werden, wie es mit konventionellen Messungen nicht möglich wäre. Anschließend wird in Kap. 5 das Verfahren zur Ableitung lokaler Maximalkonzentrationen mit Hilfe einer Regressionsanalyse durch Verwendung von Messdaten der AERO-TRAM für das Jahr 2010 entwickelt und anhand von Messdaten aus dem Jahr 2011 einer ersten Verifikation unterzogen. Die Beschreibung des Modellsystems COSMO-ART und der Simulationsrechnungen zur Bestimmung der räumlichen Verteilung von Stickoxiden in Deutschland im Jahresmittel 2008 finden sich in Kap. 6. Zunächst wird eine Methode vorgestellt, um Jahresmittel von Konzentrationen mit Hilfe weniger Simulationsrechnungen zu approximieren. Anschließend werden die Modellergebnisse anhand von Stationsmessungen validiert und im Anschluss verwendet, um mit Hilfe des Verfahrens aus Kap. 5 die lokalen Maximalkonzentrationen an Verkehrstationen in Kap. 7 zu bestimmen. Beobachtungsdaten an Verkehrstationen werden für eine zweite Verifikation des Verfahrens eingesetzt, woraufhin sich in Kap. 8 eine Prognose für die Luftqualität in deutschen Städten anschließt.

2. Das Messsystem AERO-TRAM

Zur Untersuchung der räumlichen und zeitlichen Variabilität ausgewählter Luftschadstoffe im Raum Karlsruhe betreibt das Institut für Meteorologie und Klimaforschung – Department Troposphärenforschung (IMK-TRO) am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) das mobile Messsystem "AERO-TRAM" (Abb. 2.1). Die-



Abbildung 2.1.: Das mobile Messsystem AERO-TRAM des IMK-TRO am KIT (Foto: P. Langer, KIT).

ses entstand im Zuge des Projektes "Messungen der räumlichen Variabilität der Luftqualität in einem Ballungsraum mittels einer Straßenbahn"(Hagemann et al., 2012), das unter dem Kennzeichen BWU 27003 durch das Programm BWPLUS (Baden-Württemberg Programm Lebensgrundlage Umwelt und ihre Sicherung) über einen Zeitraum von drei Jahren gefördert wurde.

Das Projekt hatte zum Ziel, die nach Richtlinie $2008/50/\text{EG}^1$ bzw. nach 39. BImSchV² obligatorischen stationären Punktmessungen der Luftqualität in Karlsruhe durch mobile Messungen zu ergänzen. Luftqualitätsuntersuchungen mit Hilfe von mobilen Messsystemen beschränken sich derzeit auf wissenschaftliche Anwendungen und werden nicht zur Überwachung der Grenzwerteinhaltung eingesetzt, da solche Messverfahren nicht in den Richtlinien zur Luftreinhaltung vorgesehen sind.

Im Allgemeinen werden mobile Messsysteme als Anlagen definiert, bei denen Messgeräte während des Messbetriebes durch einen mobilen Messgeräteträger bewegt werden. Sie sind damit von anderen Messsystemen abzugrenzen, die zwar ebenfalls nicht ortsfest sind und mit relativ geringen Aufwand verlagert werden können, aber während des eigentlichen Messbetriebs ortsgebunden sind und meist mit Hilfe einer am Einsatzort vorhandenen Energieversorgung betrieben werden. Solche werden zwar gelegentlich ebenfalls als mobile Messsysteme bezeichnet, präziser ist aber eine Bezeichnung als transportable Messsysteme.

Gegenüber ortsfesten Messungen können mobile Messsysteme keine kontinuierliche Erfassung einer Messgröße an individuellen Standorten gewährleisten, da der Messort stetig mit der Fortbewegung des Messgeräteträgers verändert wird. Gleichzeitig stellt dies aber auch einen entscheidenden Vorteil dar. Auf diese Weise kann die Variabilität einer Messgröße entlang einer Messstrecke mit einer hohen räumlichen Auflösung bestimmt werden. Wiederkehrende Messungen entlang der selben Strecke ermöglichen es, die zeitliche Variabilität zumindest teilweise zu erfassen. Als Messgeräteträger werden dabei je nach Fragestellung die unterschiedlichsten Fahrzeuge eingesetzt:

- Luftfahrzeuge
 - Flugzeuge (z. B. Corsmeier et al., 2001; Ducrocq et al., 2014; Kaufmann et al., 2015; Kottmeier et al., 2002; Petzold et al., 2015; Wieser, 2011; Zahn et al., 2014)
 - Ultraleichtflugzeuge (z. B. Junkermann et al., 2016)
 - Drohnen (z. B. Altstädter et al., 2015; Naftel, 2009)

¹Richtlinie des Europäischen Parlaments und des Rates vom 21. März 2008 über Luftqualität und saubere Luft für Europa

²Bundes-Immissionsschutzverordnung.

- Wasserfahrzeuge
 - Schiffe (z. B. Klappenbach et al., 2015; Schreier et al., 2015)
- Landfahrzeuge
 - Personenkraftwagen (z. B. Hu et al., 2012; Ibrahim et al., 2010; Isakov et al., 2007; Tang und Wang, 2006)
 - Kleintransporter (z. B. Kolb et al., 2004; Pirjola et al., 2012; von der Weiden-Reinmüller et al., 2014)
 - Lastkraftwagen (z. B. Kittelson et al., 2004b)
 - Anhänger (z. B. Cocker et al., 2004a,b)
 - Schienenfahrzeuge (z. B. Costanzo et al., 2006; Elansky et al., 2010; Hasenfratz et al., 2015)
 - Fahrräder (z. B. Boogaard et al., 2009; Elen et al., 2012)

Obwohl die hier genannten Beispiele sich nicht nur auf Studien der bodennahen Luftqualität beschränken, eignen sich alle der vorgestellten Fahrzeuge als Messgeräteträger für mobile Untersuchungen der Luftqualität in Bodennähe. In der Praxis unterliegen allerdings einige Fahrzeuge bestimmten Einschränkungen, wie beispielsweise im Falle von Luftfahrzeugen. Aus Gründen der Flugsicherheit ist die minimale Flughöhe stark eingeschränkt, womit Messungen in Bodennähe praktisch nicht möglich sind. Weiterhin liegt für Flugzeuge bei Verwendung nicht-hochfrequenter Messanalysatoren das räumliche Auflösungsvermögen aufgrund der typischen Fluggeschwindigkeiten deutlich über dem Meterbereich. Eine Ausnahme stellen hierbei Drohnen dar, insbesondere die sogenannten Quadrocopter (Alvarado et al., 2015; Cheng et al., 2014), die allerdings erst seit jüngster Vergangenheit für Luftqualitätsuntersuchungen eingesetzt werden. Diese können problemlos in der bodennahen Grenzschicht bei gleichzeitig niedrigen Geschwindigkeiten eingesetzt werden. Die Nutzlast ist jedoch durch ihre geringe Größe stark eingeschränkt. Hingegen befinden sich Wasserfahrzeuge zwar ebenfalls in der bodennahen Grenzschicht, allerdings nicht in Gebieten, die für die Schadstoffbelastung der Bevölkerung gewöhnlich relevant sind.

Aus diesen Gründen basieren mobile Messsysteme, die im Rahmen bodennaher Luftqualitätsuntersuchungen eingesetzt werden, in der Regel auf Landfahrzeugen (Tab. 2.1), da deren Eigenschaften

	0	v 1	0
Messsystem	Langform	Betreiber	Messgeräte- träger
MoLa	Mobiles Aerosolforschungs La bor	Max-Planck-Institut für Chemie, Mainz	Lieferwagen
MOSQUITA	Measurements Of Spatial QUantitative Imissions of Trace gases and Aerosols	Paul Scherrer Institut, Villigen, CH	Lieferwagen
Sniffer	-	Helsinki Metropolia University of Applied Sciences, FI	Lieferwagen
Mobilab	Mobi le lab oratory for environmental pollution measurements	Chemical Process & Energy Resources Institute, Thermi, GR	Lieferwagen
FML	Ford Mobile Laboratory	Ford Forschungszentrum Aachen GmbH	Lieferwagen
MMP	Mobile Measurement Platform	California Air Resources Board, Sacramento, USA	$\begin{array}{l} {\rm PKW} \\ ({\rm elektrisch}) \end{array}$
MEL	$\mathbf{M} \mathbf{o} \mathbf{b} \mathbf{i} \mathbf{e} \mathbf{E} \mathbf{m} \mathbf{i} \mathbf{s} \mathbf{o} \mathbf{o} \mathbf{s} \mathbf{t} \mathbf{o} \mathbf{v} \mathbf{o} \mathbf{s} \mathbf{o} \mathbf{s} \mathbf{t} \mathbf{o} \mathbf{s} \mathbf{s} \mathbf{s} \mathbf{s} \mathbf{s} \mathbf{s} \mathbf{s} s$	University of Minnesota, USA	LKW

 Tabelle 2.1.: Übersicht über häufig verwendete mobile Messsysteme für Luftqualitätsuntersuchungen

 Tabelle 2.1 (Fortsetzung): Übersicht über häufig verwendete mobile Messsysteme für Luftqualitätsuntersuchungen

Messsystem	Langform	Betreiber	Messgeräte- träger
TROICA	Transcontinental Observations Into the Chemistry of the Atmosphere	Oboukhov Institute of Atmospheric Physics of the Russian Academy of Sciences, Moskau, RU	Zug

bei solchen Anwendungen Vorteile gegenüber anderen Messgeräteträgern aufweisen. Zum einen erfolgen mobile Messungen von Luftschadstoffen mittels Landfahrzeugen in dem für die menschliche Gesundheit relevanten, unteren Teil der Atmosphäre, der bodennahen Grenzschicht. Gleichzeitig können solche Messsysteme in Gebieten mit hohen Emissionen operieren. Zum anderen kann durch den Geschwindigkeitsbereich, in dem Landfahrzeuge in der Regel operieren, verbunden mit der zeitlichen Auflösung üblicher Messanalysatoren, ein hohes räumliches Auflösungsvermögen im Meterbereich realisiert werden. Die hier vorgestellten Messanlagen nutzen dabei Kraftfahrzeuge als Messgeräteträger, wobei besonders die Mobile Measurement Platform der Luftreinhaltungskommission Kaliforniens hervorzuheben ist, da es einen elektrisch betriebenen PKW nutzt. Damit ist eine Kontamination der Messung durch Eigenemissionen des Messgeräteträgers grundsätzlich ausgeschlossen. Durch entsprechende Maßnahmen kann diese Selbstkontamination bei auf konventionellen Kraftfahrzeugen basierenden Messsystem ebenfalls verhindert werden, indem die Einlasssysteme im Bereich der Fahrzeugfront installiert werden, wie es, mit Ausnahme der Mobile Measurement Platform, bei allen Messsystemen in Tab. 2.1 der Fall ist.

Die in Tab. 2.1 aufgelisteten Messsysteme ähneln sich stark in ihrer Ausrüstung (Tab. 2.2) und sind durchweg in der Lage, neben meteorologischen Parametern wie Temperatur, Druck, Feuchte und Wind, die für die Luftqualität relevanten, gasförmigen Luftbeimengungen zu erfassen. Beispielsweise ist die Bestimmung der Belastung durch Stickoxide (NO_x) , dass die Summe von Stickstoffmonoxid (NO) und Stickstoffdioxid (NO₂) darstellt, mit allen Messsystemen möglich, genauso wie die Konzentration der Einzelverbindungen. Die Belastung durch Ozon (O_3) und Kohlenstoffmonoxid (CO) kann mit Hilfe der Mehrheit der Systeme analysiert werden. Weiterhin wird meist die Konzentration von Kohlenstoffdioxid (CO_2) erfasst, obwohl es für die Luftqualität nicht von Bedeutung ist. Allerdings ist CO₂ ein hilfreicher Parameter, um Emissionsquellen zu lokalisieren, da CO_2 bei Verbrennungsprozessen freigesetzt wird. Einige Messsysteme wie MOSQUITA oder TROICA besitzen außerdem Analysatoren, um weitere gesundheitsschädliche Substanzen festzustellen, die ebenfalls bei (unvollständigen) Verbrennungsprozessen entstehen, wie z. B. polyzyklische aromatische

		0	U
Messsystem	Messparameter	isokinetische Probennahme (Geschwindig- keit)	Referenz
MoLa	CO ₂ , O ₃ , SO ₂ , NO, NO ₂ , Partikelanzahlgrößenverteilung, -anzahldichte, -masse, chemische Partikelzusammensetzung	$\checkmark(65{\rm km}{\rm h}^{-1})$	Drewnick et al. (2012)
MOSQUITA	CO ₂ , CO, O ₃ , NO, NO _x , NO _y , HNO ₃ , PAK, H ₂ O ₂ , HCHO, Partikelanzahlgrößenverteilung, -anzahldichte, -masse, chemische Partikelzusammensetzung	$\checkmark (50\mathrm{km}\mathrm{h}^{-1})$	Bukowiecki et al. (2002) Mohr et al. (2011)
Sniffer	CO ₂ , CO, SO ₂ , NO, NO ₂ , NO _x , Partikelanzahlgrößenverteilung, -anzahldichte, -masse	$\checkmark(30\mathrm{km}\mathrm{h}^{-1})$	Pirjola et al. (2004) Pirjola et al. (2014)
Mobilab	CO, SO ₂ , NO _x , O ₃ Partikelanzahlgrößenverteilung, -anzahldichte, -masse	√(n.a.)	Argyropoulos et al. (2016)

Tabelle 2.2.: Charakteristika der in Tab. 2.1 aufgelisteten Messsysteme

Tabelle 2.2	(Fortsetzung):	Charakteristika der i	n Tab. 2.1	aufgelisteten Messsysteme
-------------	----------------	-----------------------	------------	---------------------------

Messsystem	Messparameter	isokinetische Probennahme (Geschwindig- keit)	Referenz
FML	CO, O ₃ , NO _x , Partikelanzahlgrößenverteilung, -anzahldichte, chemische Partikelzusammensetzung	√(n.a.)	Vogt et al. (2003a) Vogt et al. (2003b)
MMP	CO ₂ , CO, NO, NO ₂ , NO _x , Partikelanzahlgrößenverteilung, -anzahldichte, -masse	_	Westerdahl et al. (2005)
MEL	CO ₂ , CO, NO, NO _x , Partikelanzahlgrößenverteilung, -anzahldichte, -masse,	✓ (n. a.)	Kittelson et al. (2004a)
TROICA	CO ₂ , CO, O ₃ , SO ₂ , NO, NO ₂ , CH ₄ , NH ₃ , VOCs, Partikelanzahlgrößenverteilung, -anzahldichte, -masse, chemische Partikelzusammensetzung	$\checkmark(80{\rm km}{\rm h}^{-1})$	Crutzen et al. (1998) Elansky et al. (2012)

Kohlenwasserstoffe (PAK), Formaldehyd (HCHO) oder flüchtige organische Verbindungen (VOCs).

Neben gasförmigen Luftbeimengungen sind diese Messsysteme dafür ausgelegt, die Luftbelastung durch partikelförmige Beimengungen zu bewerten. Dabei werden mit der Partikelanzahlgrößenverteilung, der Partikelanzahldichte und der Partikelmasse die wichtigsten Aerosoleigenschaften von allen Messsystemen erfasst. Zusätzlich sind MoLa, MOSQUITA und TROICA in der Lage eine chemische Analyse der Partikelzusammensetzung durchzuführen. Im Gegensatz zur Probennahme bei gasförmigen Substanzen ist es im Falle von Aerosolpartikeln von Bedeutung, eine isoaxiale und isokinetische Probennahme vorzunehmen, um Partikelverluste während der Probennahme zu minimieren. Die Besonderheiten der Probennahme von Aerosolpartikeln werden in Kap. 2.1.2 im Detail erläutert. Mit Ausnahme der MMP ist eine Minimierung der Partikelverluste bei allen Messsystem, allerdings nur für bestimmte Fahrtgeschwindigkeiten des Messgeräteträgers, gewährleistet. Für eine optimale Funktion des Partikeleinlasses muss also darauf geachtet werden, dass das Messsystem mit dieser Fahrtgeschwindigkeit betrieben wird.

Wie bereits erwähnt, nutzen mit Ausnahme von TROICA die hier vorgestellten Messsysteme Kraftfahrzeuge als Messgeräteträger. Damit sind diese Messsysteme an das Straßennetz, sowie an den momentanen Verkehrsfluss gebunden und so deren mobile Luftqualitätsmessungen durch Verkehrsemissionen beeinflusst. Im Gegensatz dazu basiert TROICA auf einem Schienenfahrzeug und kann deshalb an Standorten operieren die nicht primär durch Verkehrsemissionen geprägt sind. Allerdings wird dieses Messsystem auf der Strecke der Transsibirischen Eisenbahn eingesetzt und befindet sich somit häufig auf abgelegenen Streckenabschnitten. Solche dünnbesiedelten Gebiete spiegeln jedoch nicht die für den Großteil der Bevölkerung gesundheitsrelevanten Wohn- und Arbeitsgebieten wieder. Weiterhin erfolgt der Einsatz der Messsysteme in Tab. 2.1 stets im Rahmen einzelner Messkampagnen in wechselnden Regionen, so dass Langzeituntersuchungen der Luftqualität für eine bestimmte Region nicht möglich sind. Als problematisch erweist sich dabei die Tatsache, dass in jedem Fall für den Fahrbetrieb sowie auch oft für den eigentlich Messbetrieb Personal notwendig ist und somit Langzeitmessungen mit hohen Personalkosten verbunden wären. Eine Ausnahme stellt hier wieder das TROICA Messsystem dar, da es regelmäßig auf derselben Strecke eingesetzt wird. Allerdings wird nur einmal im Jahr eine Messfahrt durchgeführt, die aufgrund der Ausdehnung der Eisenbahnstrecke mehrere Tage in Anspruch nimmt und dadurch eine Vergleichbarkeit zwischen den einzelnen Messfahrten erschwert.

Im Unterschied dazu nutzt das Messprojekt AERO-TRAM eine Stadtbahn des Karlsruher Verkehrsverbunds (KVV) als Messgeräteträger. Das Schienennetz des KVV weist in der Regel eine bauliche Trennung zwischen des Schienen- und des Straßenkörpers auf. Die Verwendung einer Stadtbahn bzw. Straßenbahn im Rahmen eines mobilen Messsystems hat gegenüber Straßenfahrzeugen so den Vorteil, dass sie nicht an den allgemeinen Verkehrsfluss gebunden und unabhängig von der aktuellen Verkehrssituation ist. Des Weiteren verläuft der Gleiskörper zum Teil auch in einiger Entfernung zu Verkehrsstraßen oder in Gebieten die nicht für den allgemeinen Straßenverkehr zugänglich sind, wie beispielsweise in Fußgängerzonen. Insgesamt umfasst das Schienennetz des KVV eine Streckenlänge von über 500 km. Es verbindet das innerstädtische Schienennetz mit zahlreichen Kommunen in der Region Mittlerer Oberrhein, zudem existieren Verbindungen in angrenzende Regionen. Damit können durch Verwendung einer Stadtbahn des KVV als Messgeräteträger Luftqualitätsmessungen nicht nur im Stadtgebiet von Karlsruhe, sondern auch in weniger stark bis überhaupt nicht besiedelten Gebieten im Umland durchgeführt werden.

Der Einsatz der AERO-TRAM erfolgt nicht während spezieller Messfahrten, sondern im Rahmen des regulären öffentlichen Personennahverkehrs (ÖPNV). Verglichen zu konventionellen mobilen Messsystem können damit auf einfache Art und Weise Langzeitmessungen der Luftqualität realisiert werden, da der Messgeräteträger ohnehin im ÖPNV betrieben wird. Darüberhinaus verkehren die Stadtbahn- und Straßenbahnfahrzeuge der KVV auf festen Strecken nach einem Fahrplan sowohl im gesamten Jahresverlauf, als auch im 24-Stunden Betrieb. Des Weiteren weist eine Stadtbahn gegenüber mit Verbrennungsmotoren betriebenen Fahrzeugen kaum Eigenemissionen auf. Lediglich Bremsvorgänge und Abriebprozesse an der Kohleschleifleiste des Stromabnehmers führen zu einer Erzeugung von Partikeln.

Aufgrund der Nutzung einer Stadtbahn als Messgeräteträger ergaben sich während der Konzeptionierung des Messprojekts folgende Anforderungen, die teilweise auch für auf konventionellen Messgeräteträgern basierende mobile Messsysteme für bodennahe Luftqualitätsuntersuchungen gelten:

- Verwendung von Messgeräten mit einer Zeitauflösung zwischen 1s und 10s, um eine räumliche Auflösung im Meterbereich erzielen zu können.
- Verwendung von Messgeräten mit geeigneten Messbereichen, um sowohl in Reinluftgebieten, wie auch im stark belasteten Innenstadtbereich Messungen von hoher Qualität zu erzielen.
- Sicherstellung einer kontaminationsfreien Probennahme.
- Realisierung einer isokinetischen Probennahme unter den sich ändernden Fahrzuständen der Stadtbahn.
- Unterbringung des gesamten Messsystems auf dem Dach der Stadtbahn.
- Sicherstellung eines ganzjährigen Messbetriebs unter den dabei auftretenden Witterungsbedingungen.
- Gewährleistung eines autonomen Betriebs über mehrere Wochen.

Im Folgenden werden die Einzelheiten der AERO-TRAM, die aus diesen Anforderungen folgen, im Detail beschrieben. Im Anschluss werden das Messgebiet und die Messstrecken des Messsystems vorgestellt.

2.1. Messaufbau der AERO-TRAM

Die Konzeptionierung des Messsystems begann im Oktober 2007 (Wieser et al., 2008) in Zusammenarbeit mit der Fa. enviscope GmbH in Frankfurt (Main). Das Konzept sah vor, die bodennahe Luftqualität anhand der Konzentrationen von CO_2 , CO, NO, NO_x und O_3 , sowie durch Bestimmungen der Partikelanzahldichte und der Partikelanzahlgrößenverteilung zu charakterisieren. Innerhalb eines Zeitraums von zwei Jahren wurden das Projekt realisiert (Rinke et al., 2009) und erste Testfahrten im Dezember 2009 durchgeführt (Rinke et al., 2010). Im Januar 2010 konnte der operationelle Betrieb des Messsystems aufgenommen werden. Seit dem Ende des Projekts im Rahmen von BWPlus wird das mobile Messsystem AERO-TRAM vom IMK-TRO des KIT unabhängig weiter betrieben.

Für das Messsystem wird ein Stadtbahnfahrzeug vom Typ GT8-80C des Herstellers DUEWAG (Tab. 2.3) als mobile Plattform genutzt. Als geeignete Plattform wurde das Fahrzeug 560 der

Tabelle 2.3.: Technische Daten des Stadtbahnwagens DUEWAGGT8-80C.

Baujahr	1989	Länge	$38,1\mathrm{m}$
Stromversorgung	$750\mathrm{V}$	Breite	$2,7\mathrm{m}$
Sitzplätze	117	Höhe	$3,\!6\mathrm{m}$
Stehplätze	126	Gewicht	$51{,}0\mathrm{t}$

Albtal Verkehrs Gesellschaft mbH (AVG) ausgewählt, das in Kooperation mit der Verkehrsbetriebe Karlsruhe GmbH (VBK) auf zwei Linien der Stadtbahn Karlsruhe innerhalb des KVV eingesetzt wird. Da Einschränkungen der Passagierkapazität durch Einbau der Messausrüstung in den Fahrzeuginnenraum nicht erwünscht sind, ist es notwendig, die gesamte Ausrüstung auf dem Wagendach unterzubringen. Aufgrund der räumlichen Gegebenheiten auf dem Wagendach war es notwendig, die Messausrüstung aufzuteilen und in mehreren Modulen unterzubringen, wie es in Abb. 2.2 dargestellt ist. Die gesamte Mess- und Betriebstechnik verteilt sich dabei auf drei Module. Zur Befestigung der Module auf dem Dach ist eine Unterkonstruktion mit dem Wagendach verklebt. Diese Konstruktion dient als Untergrund, mit dem die einzelnen Module verschraubt sind.

Eine Ausnahme stellt das sogenannte Aerosolmodul über der Fahrzeugfront dar. Hier weichen die räumlichen Gegebenheiten stark vom Rest des Daches des Stadtbahnwagens ab, so dass hier eine Unterkonstruktion nicht benutzt werden konnte. Allerdings ist es aufgrund der Beschaffenheit in diesem Dachbereich möglich, dieses Modul allein mit Hilfe von Klemmverbindungen auf dem Wagendach zu befestigen. Das Aerosolmodul beinhaltet neben den Aersolanalysatoren deren Pumpen sowie einen Messrechner zur



Abbildung 2.2.: Schematischer Überblick über den modularen Aufbau des Messsystems.

Steuerung des Messablaufes und zur Datenerfassung. In dieses Modul endet der isokinetische Partikeleinlass, dessen Steuerungselektronik ebenfalls innerhalb des Aerosolmoduls installiert ist. An dem Partikeleinlass sind außerdem verschiedene meteorologischen Sensoren befestigt, auch deren Messwerte werden vom Messrechner des Aerosolmoduls erfasst. Um die aktuelle Wetterund Verkehrssituation zu erfassen, wurde zudem eine Videokamera am Aerosolmodul angebracht.

Im sogenannten Hauptmodul befinden sich die Analysatoren zur Bestimmung der gasförmigen Luftbeimengungen und deren Pumpen, sowie eine Gasmischvorrichtung zur Kalibrierung der Analysatoren. Der Messablauf wird ebenfalls über einen Messrechner gesteuert, der über eine Kabelverbindung mit dem Messrechner im Aerosolmodul ein Rechnernetzwerk bildet und mit einem GPS-Modul zur Ortsbestimmung der Messdaten ausgerüstet ist. Neben den geographischen Koordinaten wird außerdem die Geschwindigkeit v_{Bahn} der Stadtbahn mit Hilfe des GPS erfasst. Zur Steuerung und Überwachung des gesamten Messsystems während des eigentlichen Messbetriebs ist eine Kommunikationseinheit installiert, so dass sowohl über eine Funknetzwerkverbindung (WLAN) wie auch über eine Mobilfunkverbindung (UMTS) ein Fernzugriff auf das System möglich ist. Dabei kann zum einem der momentane Zustand des Systems geprüft werden, wie beispielsweise aktuelle Messwerte und korrekte Funktionalität der Messgeräte. Zum anderen können auch einzelne Analysatoren an- oder ausgeschaltet werden. Auch eine Übertragung der Messdaten ist über die Funkverbindungen möglich. Außerdem befindet sich im Hauptmodul eine unterbrechungsfreie Stromversorgung (USV) mit einer Leistung von 4,2 kW und einer Überbrückungszeit von 4 min bei Volllast, über die das Aerosol- und Hauptmodul abgesichert sind.

Im dritten Modul in Abb. 2.2 befinden sich fünf Gasdruckzylinder, in denen die notwendigen Betriebs- und Kalibriergase mitgeführt werden. Das Gesamtgewicht der Anlage beträgt 750 kg, die maximale Leistungsaufnahme ca. 5 kW, wobei die Klimatisierung der Messanlage den größten Verbraucher darstellt.

Die eigentliche Stromversorgung des Messsystems erfolgt über einen Abgriff im Stromkreis des Stromabnehmers der Stadtbahn. In diesem Stromkreis beträgt die Spannung 750 V Gleichstrom. In der Wagenmitte ein Strom- und Spannungsumformer installiert, um den Gleichstrom in Wechselstrom mit 230 V zu transformieren. Da die gesamte Stromversorgung zunächst über die USV läuft, können Spannungsschwankungen ausgeglichen werden. Gleiches gilt für kurzzeitige Unterbrechungen der Stromversorgung, welche regelmäßig an den sogenannten Trennstellen der Oberleitung auftreten.

Ein Zugang auf das Straßenbahndach ist nur in monatlichen Abständen der regulären Wartungsterminen im Betriebshof möglich. Deshalb muss gewährleistet sein, dass zwischen den Wartungsterminen das Messsystem autonom operieren kann. Dies bedeutet, dass Betriebsstoffe, die einige Analysatoren benötigen, in ausreichender Menge mit transportiert werden.

Um Messdaten von hoher Güte während des ganzjährigen Einsatzes des Messsystems sicherzustellen, ist es nötig die Gas- und Partikelanalysatoren stets in einem definierten Temperaturbereich zu betreiben. Aus diesem Grund sind das Aerosol- und das Hautpmodul klimatisiert. Die Klimaanlage des Hauptmoduls ist zudem in der Lage, das Modul in den Wintermonaten zu heizen, so dass es jahreszeitenunabhängig möglich ist, Messungen unter gleichbleibenden Umgebungstemperaturen durchzuführen. Im Aerosolmodul ist keine Heizung notwendig, da aufgrund des geringen Modulvolumens die Geräteabwärme der Partikelanalysatoren ausreichend ist, um im Winter ein starkes Abfallen der Gehäusetemperatur zu verhindern.

2.1.1. Instrumentierung

Bei einem mobilen Messsystem ist es notwendig, Analysatoren mit einer geeigneten Zeitauflösung zur verwenden, um ein hohes räumliches Auflösungsvermögen des Messsystems im Meterbereich zu erzielen. Der Stadtbahnwagen der AERO-TRAM erreicht Geschwindigkeiten von bis zu 80 km h^{-1} bzw. 22 m s^{-1} , wobei diese Spitzengeschwindigkeit nur gelegentlich und nicht im Stadtbereich erreicht wird. Im Stadtbereich selber liegen die Fahrgeschwindigkeiten zumeist unter 40 km h^{-1} bzw. 11 m s^{-1} . Mit Hilfe von Messgeräten mit einer zeitlichen Auflösung unterhalb von 10 s kann so gewährleistet werden, dass zumindest im Stadtbereich, wo auch die höchste räumliche Variabilität der Luftbeimengungen zu erwarten ist, die einzelnen Messpunkte nicht mehr als 100 m voneinander entfernt sind. Die gesamte Instrumentierung der AERO-TRAM erfüllt diese Anforderungen (Tab. 2.4).

CO₂/H₂O - LI-COR LI-7000

 $\rm CO_2$ -Moleküle besitzen die Eigenschaft, Infrarotstrahlung (IR-Strahlung) zu absorbieren. Die stärkste Absorptionsbande liegt bei 4,3 µm. Der zur CO₂-Messung eingesetzte LI-COR LI-7000 Analysator nutzt diese Eigenschaft, indem mittels einer IR-Quelle mit einer Wellenlänge von 4,255 nm die Abschwächung des IR-Lichts aufgrund der CO₂-Konzentration innerhalb einer Messzelle detektiert wird. Der gesamte Vorgang dieses Messprinzips beruht auf dem Lambert-Beerschen Gesetz:

$$I_t = I_0 e^{-\varepsilon c\ell} , \qquad (2.1)$$

bzw.

$$c = \frac{1}{\varepsilon\ell} \ln \frac{I_0}{I_t} , \qquad (2.2)$$

Messparameter	Messprinzip	Zeitauflösung	Nachweisgrenze
Hauptmodul			
$\rm CO_2, H_2O$	IR-Absorption	$1\mathrm{s}$	$0.1 \mathrm{ppm}$ bzw. $0.1 \mathrm{g kg^{-1}}$
CO	UV-Resonanzfluoreszenz	$1\mathrm{s}$	$2,5\mathrm{ppb}$
NO, NO_{x}	Chemilumineszenz (NO $_2$ Konversion mittels UV-Lichtquelle)	$1\mathrm{s}$	$0.5\mathrm{ppb}$
O_3	UV-Absorption	$6 \mathrm{s}$	$1,0\mathrm{ppb}$
Aerosolmodul			
Partikelanzahl- konzentration	$\begin{array}{l} \text{Mie-Streuung} \\ 10\text{nm} < d_p < 3\mu\text{m} \end{array}$	3 s	$10^4 \mathrm{Partikel} \mathrm{cm}^{-3}$
Partikelanzahl- konzentration	$\begin{array}{l} \text{Mie-Streuung} \\ 4\text{nm} < d_p < 3\mu\text{m} \end{array}$	$4\mathrm{s}$	$10^7 \mathrm{Partikel} \mathrm{cm}^{-3}$
Partikelanzahl- größenverteilung	$\begin{array}{l} \text{Mie-Streuung} \\ 250\text{nm} < d_p < 32\mu\text{m} \end{array}$	6 s	$10^6 \mathrm{Partikel} \mathrm{cm}^{-3}$
Temperatur	elektrischer Widerstand		$-40^{\circ}\mathrm{C}$ bis $+60^{\circ}\mathrm{C}$
Druck	elektrische Kapazität	$2\mathrm{s}$	$500\mathrm{hPa}$ bis $1100\mathrm{hPa}$

Tabelle 2.4 (Fortsetzung): Instrumentierung der AERO-TRAM					
Messparameter	Messprinzip	Zeitauflösung	Nachweisgrenze		
relative Feuchte	elektrische Kapazität	8 s	0% bis $100%$		
horizontale Windkomponenten	Laufzeit von Ultraschallwellen	1 s	$0{\rm ms^{-1}}$ bis $60{\rm ms^{-1}}$		

Tabelle 2.4	(Fortsetzung)	: Ins	trumentierung	der	AERO-T	RAM
-------------	---------------	-------	---------------	----------------------	--------	-----

mit: $I_0 = Anfangsintensität$,

- $I_t =$ Intensität nach Abschwächung,
- $\varepsilon = \text{Extinktionskoeffizient},$
- c = Konzentration,
- $\ell =$ Weglänge.

Die Bestimmung der CO_2 -Konzentration findet unter Umgebungsbedingungen statt, die in der Regel von Normalbedingungen ($T_0 = 273,15 \text{ K}$ und $p_0 = 1013,25 \text{ hPa}$) verschieden ist, so dass eine Korrektur notwendig ist:

$$c = \frac{1}{\varepsilon\ell} \ln \frac{I_0}{I_t} \frac{p_0}{p} \frac{T}{T_0} , \qquad (2.3)$$

mit: p = aktueller Luftdruck,T = aktuelle Temperatur.

Um Messfehler aufgrund der Alterung der IR-Quelle zu vermeiden ist der NO₂-Analysator mit zwei Messzellen ausgerüstet. Während einer der Zellen kohlenstoffdioxidhaltige Umgebungsluft zugeführt wird, dient die andere als Referenzzelle, um die Intensitätsabschwächung bei einer bekannten CO₂-Konzentration zu bestimmen. Im Betrieb der AERO-TRAM wird die Referenzzelle CO_2 -frei gehalten. Zu diesem Zweck wird mit Hilfe einer Pumpe ein geschlossener Kreislauf aus der Referenzzelle und eines CO₂-Filters (Atemkalk³: Ca(OH)₂, NaOH und H₂O) gebildet.

Die Bestimmung des Wasserdampfgehalts erfolgt mit derselben Messmethode. Hierfür wird die Absorptionsbande des Wasserdampfs bei 2,595 µm genutzt. Für die Konzentrationsmessung von Wasserdampf ($H_2O(g)$) werden ebenfalls dieselben Messzellen genutzt. Neben Entfernung von CO_2 aus der Referenzzelle muss diese auch von $H_2O(g)$ befreit werden. Hierfür befindet sich in dem geschlossenen Kreislauf der Referenzzelle ein weiterer Filter mit Magnesiumperchlorat ($Mg(ClO_4)_2$):

$$Mg(ClO_4)_2 + 6 H_2O \longrightarrow Mg(ClO_4)_2 \cdot 6 H_2O$$
. (R2.1)

Unter Hydratbildung kann so Wasser aus der Referenzzelle entfernt werden.

 $^{^{3}}$ Soda Lime

CO - Aero-Laser AL5001

Der CO-Analysator Aero-Laser AL5001 besteht aus einer Lichtquelle, einer optischen Kammer und einer Messzelle und (Gerbig et al., 1999) basiert auf der VUV-Resonanzfluoreszenz-Technik nach Volz und Kley (1985):

$$\operatorname{CO} + h\nu(\lambda_W < 200 \,\mathrm{nm}) \longrightarrow \operatorname{CO}^*$$
, (R2.2)

$$CO^* \longrightarrow CO + h\nu_{\text{Fluoreszenz}}$$
. (R2.3)

Dieser Reaktionsmechanismus findet nur bei UV-Strahlung unterhalb von 200 nm statt, so dass es notwendig ist, den Strahlungsweg weitestgehend frei von Sauerstoff (O₂) zu halten, da dieser sonst die Photonen absorbieren würde. Deshalb wird die optische Kammer, durch die die UV-Strahlung geleitet wird, mit Stickstoffstoff gespült. Das UV-Licht wird mittels Glimmentladung einer mit CO₂/Argon⁴ gefüllten Gasentladungsröhre erzeugt. Ein Filter schränkt das Licht auf einen Wellenlängenbereich um 150 nm ein, da in diesem Bereich Kohlenmonoxid die höchste Empfindlichkeit zur Resonanzanregung aufweist. Die gasförmigen Betriebsmittel werden in 101 Druckgasflaschen mitgeführt.

Da der Messzelle Umgebungsluft zugeführt wird, ist in dieser die Anwesenheit von glso2 unvermeidbar. Um eine vollständige Absorption der UV-Strahlung durch O_2 zu verhindern, steht die Messzelle unter geringem Druck (4 hPa), um die Stoßwahrscheinlichkeit zwischen Photonen und O_2 zu verringern. Die gemäß Reaktion R2.3 erzeugten Fluoreszenzphotonen werden durch einen Detektor registriert, wobei die Photonenanzahl proportional zur CO-Konzentration ist.

NO/NO_x - ECO PHYSICS CLD 66

Die Instrumentierung der AERO-TRAM zur NO/NO_x-Messung setzt sich aus zwei ECO PHYSICS CLD 66 Analysatoren zusammen, um beide Parameter mit einem jeweils separaten Gerät erfassen zu können. Ähnlich wie beim CO-Analysator beruht das Messprinzip zur Bestimmung der NO- bzw. NO_x-Konzentration auf der Detektion von Photonen, die durch Desaktivierung angeregter Moleküle freigesetzt werden. Gegenüber der (Resonanz-)Fluoreszenz werden diese allerdings durch Chemilumineszenz emittiert. Bei

 $^{^40,\!25\,\%}$ CO_2 in Argon

diesem Phänomen ist eine chemische Reaktion notwendig, um ein Molekül auf ein höheres Energieniveau anzuheben:

$$\mathrm{NO} + \mathrm{O}_3 \longrightarrow \mathrm{NO_2}^{\star} + \mathrm{O}_2 , \qquad (\mathrm{R2.4})$$

$$\mathrm{NO_2}^{\star} \longrightarrow \mathrm{NO_2} + h\nu_{\mathrm{Chemilumineszenz}}$$
 (R2.5)

Um die NO_x -Konzentration bestimmen zu können, ist es notwendig das in der Messprobe enthaltene NO_2 vor Zuführung in die Messzelle dem obigen Reaktionsmechanismus verfügbar zu machen. Hierfür sind die eingesetzten Analysatoren werkseitig mit einem Molybdänkonverter ausgerüstet. Dieser wandelt NO_2 bei Temperaturen oberhalb von 300 °C in NO um:

$$3 \operatorname{NO}_2 + \operatorname{Mo} \longrightarrow 3 \operatorname{NO} + \operatorname{MoO}_3$$
. (R2.6)

Allerdings zeigt ein Molybdänkonverter Querempfindlichkeiten zu anderen Formen des Stickstoffs, dadurch kann es zu einer Überschätzung der NO_x -Belastung kommen.

Alternativ kann NO_2 auch durch Photolyse in NO umgewandelt werden:

$$NO_2 + h\nu(\lambda_W < 380 \,\mathrm{nm}) \longrightarrow NO + O$$
. (R2.7)

Dieses Verfahren hat den Vorteil, dass es keine Querempfindlichkeit zu anderen Formen des Stickstoffs aufweist, jedoch bei geringerer Konversionseffizienz. Durch Bestimmung der Konvertereffizienz ist es unter separater Messung der NO- und NO_x -Konzentration prinzipiell möglich, den nicht erfassten NO_2 -Anteil der Stickoxide nachträglich zu berücksichtigen.

Beim mobilen Messsystem AERO-TRAM kommt zur photolytischen Aufspaltung des NO₂ ein sogenannter *Blue Light Converter* (BLC) zum Einsatz, der in der Regel eine Konversioneffizienz von 90 % aufweist (Sadanaga et al., 2010). Bei diesem NO₂-Konverter erzeugen LEDs UV-Licht in einem Wellenlängenbereich um 385 nm, das für die NO₂-Photolyse notwendig ist.

Das für die Chemilumineszenzreaktion notwendige O_3 wird mittels stillen elektrischen Entladung produziert(Yagi und Tanaka, 1979):

$$O_2 + e^- \longrightarrow 2 O + e^-$$
 (R2.8)

$$O + O_2 + M \longrightarrow O_3 + M$$
. (R2.9)
Die durch Chemilumineszenz emittierten Photonen (Reaktion R2.5) werden photoelektrisch detektiert und über das Messsignal auf die NO- bzw. NO_x -Konzentration zurück geschlossen.

O₃ - Environnement O342M

Die Bestimmung der Ozonkonzentration beruht wie bei der CO_2 -Messung auf dem Lambert-Beerschen Gesetz. Die Ozonkonzentration kann also mit Hilfe von Gl. 2.3 bestimmt werden. Der Environnment O342M Analysator nutzt das Absorptionsvermögen von O_3 im UV-Bereich. Das Absorptionsmaximum von Ozon liegt bei 253,7 nm. Die zur Messung nötige UV-Strahlung wird mit Hilfe einer Quecksilberdampflampe erzeugt. Diese Lichtquelle emittiert Strahlung in einem sogenannten Linienspektrum. Eine dieser Emissionslinien fällt genau mit dem Absorptionsmaximum von Ozon zusammen, Spektrallinien unterhalb von 253,7 nm werden mit Hilfe eines Filters ausgelöscht, da diese ansonsten zu einer unerwünschten, zusätzlich Ozonbildung durch photolytische Aufspaltung des Sauerstoffs führen würden.

Wie beim CO₂-Analysator wird auch bei der Bestimmung der O_3 -Konzentration das Messsignal einer Referenzkonzentration (I_0) mit der zur messenden Konzentration (I_t) verglichen, um Einflüsse durch Lichtschwankungen und Alterung der Lampe auf das Messergebnis zu kompensieren. Als Referenzkonzentration dient dabei ozonfreie Luft. Allerdings ist der O₃-Analysator nur mit einer Messzelle ausgerüstet, mit der sowohl I_0 als auch I_t bestimmt werden. Aus diesem Grund wird die Messzelle zu Beginn eines Messzyklus zunächst für einige Sekunden mit ozonfreier Luft gespült und anschließend I_0 bestimmt. Um ozonfreie Luft zu erzeugen wird der Messgasstrom zunächst durch einen Ozonfilter⁵ geführt, der Mangandioxid (MnO_2) enthält. Durch dieses MnO_2 wird Ozon katalytisch in Sauerstoff umgewandelt. Im nächsten Schritt wird der Ozonfilter umgangen und der Messgasstrom direkt in die Messzelle geleitet. Diese wird ebenfalls einige Sekunden gespült, damit eine Kontamination der Messzelle mit ozonfreier Restluft aus dem vorherigen Schritt ausgeschlossen werden kann. Im Anschluss wird die Intensität I_t des transmittierten Lichts photoelektrisch erfasst.

⁵Hopkalit

Partikelanzahlkonzentration (PNC⁶) - TSI CPC 3772/3775

Um die Belastung der Luft mit Aerosolpartikeln festzustellen, werden zwei sogenannte Kondensationspartikelzähler des Herstellers TSI verwendet. Das grundsätzliche Messprinzip wurde bereits vor über 100 Jahren von Aitken (1889) verwendet. Aufgrund ihrer geringen Größe von wenigen Nanometern bis mehreren Mikrometern sind atmosphärische Aerosolpartikel kaum mit optischen Messverfahren detektierbar. Aus diesem Grund werden diese vor der messtechnischen Erfassung mit Hilfe der heterogenen Nukleation vergrößert. Dabei kondensiert eine übersättigte Substanz auf den Aerosolpartikeln und führt so zu einer Zunahme der Partikeldurchmesser. Aitken (1889) verwendete dazu mit Wasser gesättigte Luft, die mit Hilfe adiabatischer Expansion in einen übersättigten Zustand versetzt wurde. Das Wasser kondensierte auf den vorhandenen Aerosolpartikeln und bildete einen Nebel. Mit Hilfe eines Vergrößerungsglases konnten so die einzelnen Nebeltröpfchen sichtbar gemacht und gezählt werden. Da mit dieser Methode nur schwache Übersättigungen erzeugt werden können, kondensiert das Wasser nur auf bereits vorhandenen Nukleationskeimen, eine homogene Nukleation ist also nicht möglich. Damit ist sichergestellt, dass jeder Nebeltropfen auch ein Aerosolpartikel enthält.

Die beiden Kondensationspartikelzähler TSI CPC⁷ 3772 und 3775, die bei der AERO-TRAM eingesetzt werden, sind im Prinzip gleich aufgebaut. Im Unterschied zum Messaufbau von Aitken (1889) wird jedoch 1-Butanol zur Vergrößerung der Aerosolpartikel verwendet und die Übersättigung auf andere Art erzeugt. Die eingesetzten Kondensationpartikelzähler setzen sich im wesentlichen aus drei Komponenten zusammen. Der Messgasstrom wird zunächst durch den sogenannten Sättiger geleitet, einen Bereich der auf eine Temperatur von 39 °C geheizt ist. Diesem Bereich wird mit Hilfe eines Schaumstoffdochts flüssiges 1-Butanol zugeführt, welches aufgrund der erhöhten Temperatur im Sättiger verdampft und mit dem Messgas ein gesättigtes Gemisch aus Luft und 1-Butanol bildet. An diesen Bereich schließt der Kondensator an. Die Wände dieses Abschnitts sind auf eine Temperatur von 22 °C (CPC 3772) bzw. 14°C (CPC 3775) gekühlt. Durch Wärmediffusion kühlt der Messgasstrom darin ab, wodurch sich eine Übersättigung des Luft-

⁶particle number concentration

⁷Condensation particle counter.

Butanol Gemischs im Messgasstroms einstellt. Das gasförmige 1-Butanol kondensiert auf den Aerosolpartikeln und vergrößert diese. Die resultierenden Aerosolpartikel weisen unabhängig von ihrem ursprünglichen Durchmesser eine ähnliche Größe auf (Cheng, 2011). Die vergößerten Aerosolpartikel werden in der dritten Komponente, der Messzelle, detektiert. In dieser Messzelle trifft der Messgasstrom senkrecht auf einen Laserstrahl. Trifft nun der Laserstrahl ein Aerosolpartikel, wird dieser gestreut. Ein Teil des Streulichts wird gebündelt, auf eine Photodiode gelenkt und die Streulichtimpulse der einzelnen Partikel detektiert.

Die photoelektrische Erfassung der einzelnen Streulichtimpulse wird auch als Einzelpartikelzählung bezeichnet. Da der Fluss des Messgastroms bekannt ist, kann dieser mit den detektierten Streulichtimpulsen pro Zeit in Beziehung gesetzt werden und so die Partikelanzahldichte abgeleitet werden. Mit Hilfe der Einzelpartikelzählung können mit den eingesetzten Kondensationspartikelzähler Partikelanzahldichten von bis zu 10^4 Partikel cm⁻³ (CPC 3772) bzw. $5 \cdot 10^4$ Partikel cm⁻³ (CPC 3775) durch die AERO-TRAM erfasst werden. Bei einer höheren Partikelbelastung der Luft ist allerdings die Zeitspanne zwischen den einzelnen Streulichtimpulsen zu gering, damit diese von der Photodiode auseinander gehalten werden können. Der TSI CPC 3775 Kondensationspartikelzähler besitzt darüber hinaus ein weiteres Verfahren zu Bestimmung noch höherer Partikelanzahldichte. Hierbei wird die Anzahl der Aerosolpartikel mit einer photometrischen Methode bestimmt. Bei diesem Verfahren wird über die Intensität des Streulichts, die Partikelanzahldichte abgeleitet, wobei bis zu 10^7 Partikel cm⁻³ detektiert werden können.

Partikelanzahlgrößenverteilung (PSD⁸) - GRIMM Dustmonitor 1.109

Messgeräte zur Bestimmung der Anzahlgrößenverteilung des atmosphärischen Aerosols werden häufig auch als Partikel- oder Aerosolspektrometer bezeichnet. Das Messverfahren des GRIMM Dustmonitor 1.109 Aerosolspektrometers weist eine hohe Ähnlichkeit zu der Einzelpartikelzählung der zuvor beschriebenen Kondensationspartikelzählern auf. Es werden ebenfalls Streulichtimpulse genutzt, um die Partikel zu detektieren und so deren Anzahl zu erfassen. Im Unterschied zu einem Kondensationspartikelzähler werden jedoch die Aerosolpartikel vor der Messung nicht vergrößert,

⁸particle size distribution

da zusätzlich zur Partikelanzahl auch die Durchmesser d_p der einzelnen Aerosolpartikel bestimmt werden. Die Größenbestimmung erfolgt dabei durch Zuordnung in Größenklassen (Tab. 2.5).

Kanal	Schwel- lenwert in μm	Kanal	Schwel- lenwert in μm	Kanal	Schwell- wert in µm
#1	$0,\!25$	#2	0,28	#3	0,30
#4	$0,\!35$	#5	$0,\!40$	#6	$0,\!45$
#7	$0,\!50$	#8	$0,\!58$	#9	$0,\!65$
#10	0,70	#11	$0,\!80$	#12	$1,\!00$
#13	$1,\!30$	#14	$1,\!60$	#15	$2,\!00$
#16	2,50	#17	$3,\!00$	#18	$3,\!50$
#19	$4,\!00$	#20	$5,\!00$	#21	$6,\!50$
#22	$7,\!50$	#23	8,50	#24	$10,\!00$
#25	$12,\!50$	#26	$15,\!00$	#27	$17,\!50$
#28	$20,\!00$	#29	$25,\!00$	#30	$30,\!00$
#31	$32,\!00$				

 Tabelle 2.5.: Größenkanäle des GRIMM Dustmonitor 1.109 Aerosolspektrometers.

Das Laserlicht des eingesetzten Aerosolspektrometers wird durch eine Laserdiode erzeugt und hat eine Wellenlänge von 655 nm. Da das Messverfahren auf der Mie-Streuung basiert, können so Partikeldurchmesser von minimal 250 nm bestimmt werden. Bei noch kleineren Aerosolpartikeln erfolgt die Streuung nach der Rayleigh-Theorie, wodurch die Intensität des Streulichts zu gering ist, um detektiert werden zu können. Durch Modulation der Lichtintensität des Lasers können Partikeldurchmesser bis zu 32 µm detektiert werden. Wie im Fall der Einzelpartikelzählung bei einem Kondensationspartikelzähler wird das Laserlicht an den einzelnen Aerosolpartikeln gestreut. Zusätzlich zur Detektion der Streulichtimpulse wird auch die Impulsintensität erfasst. Die Partikelgröße bzw. die Größenkanalzuordnung resultiert aus der Proportionalität zwischen Streulichtintensität und Partikeldurchmesser.

Temperatur, Druck und Feuchte - VAISALA PTU303

Zur Erfassung von Temperatur, Druck und Feuchte der Umgebungsluft wird das VAISALA PTU303 Kombinessgerät eingesetzt. Mit dieser meteorologischen Sonde ist eine gleichzeitige Messung dieser drei Parameter möglich. Das Kombinessgerät ist außerhalb des Frontmoduls montiert (Abb. 2.3), um eine korrekte Messung der Parameter zu garantieren. Die Temperaturmessung erfolgt mit-



Abbildung 2.3.: Partikeleinlasssystem der AERO-TRAM mit Ultraschallanemometer (A) und Strahlungsschutzgehäuse des VAI-SALA Kombimessgeräts (B).

tels eines Pt-Drahtwiderstandshermometers. Der Luftdruck sowie die Feuchte wird kapazitiv gemessen.

Horizontale Windkomponenten - Gill WindSonic

Die Bestimmung der horizontalen Windkomponenten erfolgt mit Hilfe eines Ultraschallanemometers. Wie das VAISALA Kombinessgerät ist das Gill WindSonic Anemometer ebenfalls am Partikeleinlasssystem montiert (Abb. 2.3). Bei dem eingesetzten Anemometer werden Laufzeitunterschiede von Ultraschallwellen entlang zweier horizontalen Strecken ausgewertet, die senkrecht zueinander orientiert sind, um so die Komponenten des horizontalen Windvektors

$$\vec{v}_h = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{2.4}$$

zu bestimmen. Zur Bestimmung einer Komponente befinden sich auf beiden Seiten einer Strecke mit der Länge ℓ Transceiver. Die Schallgeschwindigkeit in Luft ist abhängig von der Lufttemperatur und -feuchte. Um eine zusätzliche Temperatur- und Feuchtemessung zu umgehen, werden die Laufzeiten t_1 und t_2 für beide Laufrichtungen bestimmt. Für die Windgeschwindigkeit in z. B. u-Richtung gilt dann:

$$u = \frac{\ell}{2} \left(\frac{1}{t_1} - \frac{1}{t_2} \right) .$$
 (2.5)

Gl. 2.5 zur Berechnung der Windgeschwindigkeitskomponente ist unabhängig von der Schallgeschwindigkeit. Mit Hilfe der v-Komponente, die analog zur u-Komponente bestimmt wird, gilt dann für die horizontale Windgeschwindigkeit v_h :

$$v_h = |\vec{v}_h| = \sqrt{u^2 + v^2}$$
 (2.6)

Normalerweise wird bei einer stationären Windmessung ein Ultraschallanemometer so ausgerichtet, dass die u-Komponente mit dem zonalen Wind und die v-Komponente mit dem meriodionaler Wind zusammenfällt. Für die Berechnung der Windrichtung gilt dann zunächst:

$$\alpha = \arctan \frac{|u|}{|v|} \cdot \frac{180^{\circ}}{\pi} . \tag{2.7}$$

So würde man stets einen Wind der in nordöstliche Richtung weht erhalten. Um die wahre Windrichtung δ zu erhalten, ist noch eine Korrektur notwendig, indem eine Fallunterscheidung durchgeführt wird:

I. Nordostwind (u < 0 und v < 0):

$$\delta = 180^\circ + \alpha \ . \tag{2.8}$$

II. Südostwind $(u < 0 \text{ und } v \ge 0)$:

$$\delta = 360^{\circ} - \alpha , \qquad (2.9)$$

III. Südwestwind $(u \ge 0 \text{ und } v \ge 0)$:

$$\delta = \alpha , \qquad (2.10)$$

IV. Nordwestwind $(u \ge 0 \text{ und } v < 0)$:

$$\delta = 180^{\circ} - \alpha , \qquad (2.11)$$

Auf diese Art und Weise kann aus den Komponenten des horizontalen Windvektors \vec{v}_h die Windrichtung δ abgeleitet werden. Bei der Windmessung des Gill WindSonic Anemometers muss berücksichtigt werden, dass die gemessenen Windkomponenten u^{\bullet} bzw. v^{\bullet} gegenüber dem geographischen Koordinatensystem eine Rotation um 90° aufweisen (Abb. 2.4), so dass diese mit den folgenden



Abbildung 2.4.: Unterschied zwischen dem geographischen (a) und dem Koordinatensystem des Gill WindSonic Anemometers (b).

Beziehungen zunächst transformiert werden müssen:

$$u = -v^{\bullet} . \tag{2.12}$$

$$v = u^{\bullet} , \qquad (2.13)$$

Bei einem Einsatz des Ultraschallanemometers in einem mobilen Messsystem wie die AERO-TRAM stellt die Bewegung des Messträgers ein zusätzliches Problem dar. Eine Ausrichtung des Anemometers in Übereinstimmung mit dem geographischen Koordinatensystems ist nur mit erheblichen Aufwand möglich, z. B. durch eine drehbare Anemometerbefestigung, die in Abhängigkeit der Fahrtrichtung in Echtzeit verstellt werden kann. Bei der AERO-TRAM wurde auf so eine aufwändige Lösung verzichtet. Stattdessen zeigt die u^* -Komponente des eingesetzten Gill Wind-Sonic Anemometer stets in Fahrtrichtung der Bahn. Vor einer Verwendung der Windmessdaten müssen zunächst Transformationen durchgeführt werden, um \vec{v}_h^* aus dem bahnfesten Koordinatensystem in das u^{\bullet} - v^{\bullet} -Koordinatensystem des Ultraschallanemometers überzuführen, bevor diese in das geographische Koordinatensystem transformiert werden. Dieses Verfahren wird in Kap. 3.5 im Detail vorgestellt.

2.1.2. Einlasssysteme

Zur Versorgung der einzelnen Analysatoren mit Messluft müssen verschiedene Anforderungen an das Einlasssystem gestellt werden. Zum einen ist die Kontamination der Messluft mit Emissionen des Stromabnehmers zu vermeiden. Aus diesem Grund befindet sich das Einlasssystem vor dem Stromabnehmer an der Fahrzeugfront in 3,5 m Höhe. Da zum anderen ein Aerosolpartikeleinlass andere Eigenschaften wie ein Einlass für gasförmige Luftbeimengungen aufweisen muss, besteht das Einlasssystem aus zwei einzelnen Komponenten (Abb. 2.5).



Abbildung 2.5.: Partikel- (A) und Gaseinlass mit Tropfenabscheider (B) der AERO-TRAM (Foto: P. Langer, KIT).

Die Zuleitung zur Versorgung der Gasanalysatoren mit Messluft besteht aus einem Kunststoffschlauch aus $\rm PFA^9$ mit einer Länge

⁹Perfluoralkoxy-Polymer

von ca 8 m. PFA ist chemisch inert und somit sind Veränderungen der chemischen Zusammensetzung der Messluft aufgrund von Reaktionen zwischen Bestandteilen der Messluft und dem Material des Gaseinlasses ausgeschlossen. Um zu verhindern, dass während Wetterbedingungen mit Niederschlag Wasser in den Gaseinlass gelangt, ist dieser mit einem Tropfenabscheider an der Einlasspitze versehen. Über einen Lüfter am Ende des Gaseinlasses wird die Messluft von der Fahrzeugspitze in das Hauptmodul geleitet. Kurz vor dem Lüfter befindet sich der eigentliche Messluftabgriff, über den die einzelnen Gasanalysatoren versorgt werden. Während der Aero-Laser AL5001 CO-Analysator direkt an diesen Messluftabgriff angeschlossen ist, wird die Messluft für die übrigen Messgeräte zunächst in das Prüfgaserzeugungssystem geleitet, das im anschließenden Kapitel 2.1.3 beschrieben wird. In diesem Prüfgaserzeugungssystem wird die Messluft anschließend an die einzelnen Analysatoren verteilt. Aufgrund der Länge des Gaseinlasses tritt eine Verzögerung zwischen Eintritt der Messluft an der Einlassspitze und Messignal an den Analysatoren auf. Diese Verzögerung wurde mit Hilfe eines Rauchexperiments ermittelt und liegt bei ca. 9 s.

Im Vergleich zur Probennahme von gasförmigen Luftbeimengungen, bei der lediglich chemische Reaktionen zwischen der Messluft und dem Leitungsmaterial zu verhindern sind, sind die Anforderung an einen Aerosolpartikeleinlass viel komplexer. Entscheidend für solch einen Einlass, ist seine Funktionalität zur repräsentativen Probennahme von atmosphärischen Aerosolpartikeln. Während gasförmige Luftqualitätsparameter nur durch ihre Konzentration charakterisiert werden, können Aerosolpartikel neben der Konzentration noch durch viele weitere Eigenschaften, wie ihre Größe oder ihre Masse, beschrieben werden. Eine repräsentative Probennahme bedeutet, dass sich die Eigenschaften der in der Luft enthaltenen Aerosolpartikel am Messgerät nicht von den Eigenschaften der Partikel am Lufteinlass unterscheiden. Durch verschiedene Prozesse kann es dabei während der Aufenthaltsdauer innerhalb der Messgerätezuleitungen, aber auch bereits bei der Probennahme an der Einlassspitze zu Partikelverlusten kommen.

Wenn der Messluftabgriff bereits stattgefunden hat und sich das atmosphärische Aerosol innerhalb des Leitungssystems des Partikeleinlass befindet, können folgende Effekte zur Partikelverlusten führen:

- Sedimentation,
- Impaktion,
- Interzeption,
- Diffusion in laminaren Strömungen,
- Diffusion in turbulenten Strömungen,
- Elektrophorese und
- Thermophorese.

Partikelverluste aufgrund der Sedimentation werden durch die Gravitation verursacht, die auf die Aerosolpartikel wirkt. Da die Gravitation proportional zur Masse ist, spielt dieser Verlustprozess vor allem für größere Partikel eine Rolle, da die Partikelmasse proportional zur dritten Potenz des Partikeldurchmessers ist:

$$m_p = \varrho_p \frac{4}{3} \pi \left(\frac{d_p}{2}\right)^3, \qquad (2.14)$$

mit: $m_p = \text{Partikelmasse},$ $\varrho_p = \text{Partikeldichte},$ $d_p = \text{Partikeldurchmesser}.$

Bei einem senkrechten Partikeleinlass sind Sedimentationsverluste ausgeschlossen. Sollte eine senkrechte Probennahme nicht möglich sein, können Sedimentationsverluste durch möglichst kurze Rohrleitungen und damit möglichst kurze Verweildauer der Aerosolpartikel in den Leitungen zumindest minimiert werden.

Bei der Impaktion treten Partikelverluste durch Hindernisse, Kuven oder Querschnittsverkleinerungen im Leitungssystem des Einlasses auf. Vornehmlich größere Partikel unterliegen Impaktionsverlusten. Die Stromlinien eine Richtungsänderung auf, denen die Partikel nicht folgen können. Sie werden am Hindernis oder an der Wand des Leitungssystems abgelagert.

Die Interzeption ähnelt der Impaktion, wobei hier die größeren Partikel zwar den Stromlinien bezüglich ihres Massenschwerpunkts folgen, aber aufgrund ihrer Ausdehnung dennoch mit dem Hindernis bzw. der Rohrwand in Kontakt kommen und anhaften.

Die Diffusion in laminaren Strömungen ist ein Prozess, der kleinere Partikel betrifft. Diese folgen zwar den Stromlinien, weisen aber zufällige Abweichungen aufgrund der Brownschen Bewegung auf. Durch diese zufällige Bewegung können kleine Partikel an Hindernissen oder der Einlasswand abgelagert werden. Partikelverluste durch Diffusion in laminaren Strömungen können konstruktiv nicht verhindert werden, aber wie bei der Sedimentation durch ein möglichst kurzes Leitungssystem verringert werden.

Im Gegensatz dazu werden bei der Diffusion in turbulenten Strömungen, auch turbulente Diffusion genannt, auch größere Partikel an der Wand des Leitungssystem abgelagert. Bei einer turbulenten Strömung innerhalb einer Rohrleitung wird das Konzentrationsprofil im Rohrzentrum abgeflacht, gleichzeitig verstärkt sich der Konzentrationsgradient zur Rohrwand (Abb. 2.6). Durch die



Abbildung 2.6.: Vergleich des Geschwindigkeits- (Pfeile) und Konzentrationsprofils (Linie) bei laminarer und turbulenter Rohrströmung (Oertel et al., 2015).

Turbulenz gelangen vermehrt größere Partikel in die Nähe des Wandbereichs, wo sie sich ablagern können. Da dieser Effekt nur bei turbulenten Strömung innerhalb des Leitungssystem auftritt, kann dieser prinzipiell verhindert werden.

Verluste kleinerer Partikel an der Rohrwand werden außerdem durch die Elektro- und Thermophorese verursacht. Bei der Elektrophorese kann eine elektrische Aufladung des Leitungssystem zu einer zur Wand gerichteten Bewegung der Partikel führen, da auch Partikel elektrische Ladungen tragen können. Treten Temperaturunterschiede zwischen der Rohrwand und der Strömung auf, beispielsweise durch Probennahme von Messluft aus einem heißen Abgasstrom, führt der Temperaturgradient ebenfalls zu einer Bewegung kleiner Partikel in Richtung der Rohrwand. Die Elektrophorese kann durch elektrische Erdung des Einlassystems verhindert werden, die Thermophorese spielt für die Probennahme von Aerosolen bei der AERO-TRAM keine Rolle, da die Messluft unter Umgebungsbedingungen abgegriffen wird.

Zusammengefasst sollte also ein ideales Einlasssystem für atmosphärische Aerosolpartikel folgende Eigenschaften aufweisen:

- senkrechte oder möglichst kurze Leitungsführung zur Vermeidung bzw. Verringerung von Sedimentationsverlusten,
- gerade Leitungsführung ohne Querschnittsverkleinerung zur Verhinderung von Impaktions- und Interzeptionsverlusten,
- kurze Rohrleitungen zur Verringerung der Diffusionsverluste,
- laminare Rohrströmung zur Vorbeugung von turbulenten Diffusionsverlusten,
- keine großen Temperaturunterschiede zwischen Messluft und Einlassystem und
- elektrische Erdung des Leitungssystem zur Verhinderung von Verlusten aufgrund der Elektrophorese.

Neben den Partikelverlusten innerhalb des Partikelleitungssystems existieren Prozesse, die zu Partikelverlusten an der Einlassspitze während der eigentlich Probennahme führen können. Die Spitze eines Aerosolpartikeleinlasses sollte so ausgerichtet werden, dass sie frontal bzw. isoaxial angeströmt wird. Ansonsten kann eine Unterrepräsentation großer Aerosolpartikel gegenüber den kleineren auftreten (Abb. 2.7). Durch die Ausrichtung in Fahrtrichtung ist dies beim Messsystem AERO-TRAM für Fahrzustände mit ausreichender Geschwindigkeit gewährleistet. In Fällen niedriger Fahrgeschwindigkeit kann dies nicht mehr sichergestellt werden. Um dennoch für einen großen Geschwindigkeitsbereich eine isoaxiale Anströmung der Partikeleinlasspitze zu realisieren, ist die Spitze des Partikeleinlasses mit einer Hülle ausgerüstet, wie es in Abb. 2.8 dargestellt ist. Die Hülle, meist mit dem englischen Fachbegriff *shroud* bezeichnet, richtet die Strömung parallel zum eigentlichen



Abbildung 2.7.: Vergleich zwischen der Trajektorie eines trägen Partikels und den Stromlinien bei einer nicht-isoaxialen Probennahme (Tränkler und Reindl, 2015).



Abbildung 2.8.: Aerosolpartikeleinlass mit *shroud* zur Gewährleistung der isoaxialen Probennahme.

Partikeleinlass aus (Klaus, 2009). Durch die isoaxiale Ausrichtung des Partikeleinlasses der AERO-TRAM ist eine senkrechte Ausrichtung zur Vermeidung von Sedimentationsverlusten nicht möglich. Indem allerdings die Leitungslänge zwischen Einlassspitze und Partikelmessgeräten minimiert wurde, sind diese Verluste von Aerosolpartikel soweit wie möglich reduziert. Zusätzlich ragt der Partikeleinlass über das Stadtbahndach hinaus, so dass die Aerosolpartikel außerhalb der fahrzeugeigenen Grenzschicht gesammelt werden.

Neben der isoaxialen Anströmung muss bei der Probennahme von Aerosolpartikeln auch auf einen geschwindigkeitsgleichen Eintritt der Messluft in den Einlass geachtet werden. Bei diesem Vorgang, auch als isokinetische Probennahme bezeichnet, werden Veränderungen der Aerosoleigenschaften während des Einlasseintritts vermieden, indem die Strömungsgeschwindigkeiten innerhalb und außerhalb des Aerosoleinlasses identisch sind (Abb. 2.9(a)). Nur unter solchen Bedingungen kann eine Veränderung der Größenverteilung der Aerosolpartikel während der Probennahme ausgeschlossen werden, da in diesem Fall die Stromlinien mit den Traktorien der Aerosolpartikel identisch sind. Im unter-isokinetischen Fall (Abb. 2.9(b)), d. h. wenn die Strömungsgeschwindigkeit innerhalb des Einlasses kleiner ist als außerhalb, tritt wie bei einer nichtisoaxialen Probennahme eine Überrepräsentation größerer Partikel auf, da diese, im Gegensatz zu kleineren Partikeln, aufgrund ihrer Trägheit nicht der Strömung folgen können. Im umgekehrten Fall, wenn die Strömungsgeschwindigkeit im Partikeleinlass größer ist als außen (über-isokinetisch, Abb. 2.9(c)), kommt es zu einer Überrepräsentation kleinerer Partikel bei gleichzeitiger Unterpräsentation der größeren, da durch die Verdichtung der Stromlinien vermehrt kleinere Partikel in den Einlass geraten.

Das Prinzip der isokinetischen Probennahme bedeutet also, dass die Strömungsgeschwindigkeit an die Umgebungsbedingungen angepasst werden muss. Die Strömungsgeschwindigkeit außerhalb des Einlasses wird in erster Linie durch die Fahrgeschwindigkeit bestimmt. In der Regel sind mobile Messsysteme mit einer Vorrichtung ausgerüstet, die so etwas für eine bestimmte Fahrgeschwindigkeit leistet (Tab. 2.2). Da bei Nutzung einer Straßenbahn als Messgeräteträger nicht auf die Fahrgeschwindigkeit Einfluss genommen werden kann und diese eine große Variabilität aufweist, musste dies bei der Entwicklung berücksichtigt werden. Die isokinetische Pro-



Abbildung 2.9.: Vergleich zwischen der Trajektorie eines trägen Partikels und den Stromlinien bei der Probennahme für unterschiedliche Bedingungen der Strömungsgeschwindigkeiten U_0 und U bei (a) isokinetischer, (b) unter-isokinetischer und (c) überisokinetischer Probennahme (Tränkler und Reindl, 2015).

bennahme ist in einem Geschwindigkeitsbereich zwischen $1,4\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ und $22\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ bzw. zwischen $5\,\mathrm{km\,h^{-1}}$ und $80\,\mathrm{km\,h^{-1}}$ gewährleistet (Klaus, 2009). Die obere Grenze entspricht der Höchstgeschwindig-

keit der genutzten Stadtbahn. Die untere Grenze ergibt sich aus der Tatsache, dass ein isoaxiales Anströmen des Partikeleinlasses bei stehendem Fahrzeug selbst unter zu Hilfenahme des *shrouds* nicht sichergestellt werden kann. Beim Übergang in den bewegten Zustand werden jedoch rasch Geschwindigkeiten über 1.4 m s^{-1} oder größer erreicht. Die Strömungsgeschwindigkeiten im Bereich des Partikeleinlasses ist also durch den festgelegten Geschwindigkeitsbereich, in dem der Partikeleinlass optimal arbeitet, bestimmt. Nach Abb. 2.9(a) muss die Strömungsgeschwindigkeit innerhalb des Einlasses identisch mit der relativen Luftbewegung der Umgebung sein. Durch einen regelbaren Lüfter am Ende des Partikeleinlasses in Abhängigkeit der Fahrgeschwindigkeit angepasst. Die Fahrgeschwindigkeit selbst wird von der in Fahrtrichtung gemessenen Windgeschwindigkeitskomponente abgeleitet.

Nach der Probennahme an der Einlassspitze schließt das Probennahmerohr an den eigentlichen Messluftabgriff an, an dessen Ende sich die Probenleitungen zu den Partikelmessgeräten befinden (Abb. 2.10(a)). Alle Bauteile sind aus Edelstahl gefertigt und geerdet, um Partikelverluste aufgrund der Elektrophorese auszuschließen. Bei einer Strömungsgeschwindigkeit von $1,4 \text{ m s}^{-1}$ sind das Probennahmerohr und der Messluftabgriff wie in Abb. 2.10(a) dargestellt miteinander verbunden. Die Geometrie der einzelnen Bauteile wurde so gewählt, dass der Luftvolumenstrom, den die Partikelanalysatoren benötigen und an den Probeleitungen abgreifen, bei einer Strömungsgeschwindigkeit von $1,4 \text{ m s}^{-1}$ im gesamten Einlasssystem konstant ist. Darüber hinaus liegen aufgrund der Einlassgeometrie für diese Strömungsgeschwindigkeit laminare Bedingungen für die Rohrströmung vor.

Da die isokinetische Probennahme auch für höhere Fahrgeschwindigkeiten von bis zu $22 \,\mathrm{m\,s^{-1}}$ gewährleistet sein soll, muss die Strömungsgeschwindigkeit im Probennahmerohr mit Hilfe des regelbaren Lüfters erhöht werden. Im Messluftabgriff sind die Strömungsbedingungen allerdings durch den Volumenstrom, den die Messgeräte benötigen, bestimmt. Um nun die höhere Strömungsgeschwindigkeit im Probennahmerohr wieder auf die Geschwindigkeit des Messluftabgriffs zu reduzieren, werden diese zwei Bauteile getrennt, indem das Probenahmerohr mittels Zahnstangenantrieb zusammengeschoben wird (Abb. 2.10(b)). Dadurch wird ein Diffusor freigegen, der den Rohrdurchmesser erweitert und so die Strö-



Abbildung 2.10.: Bauteile des Partikeleinlasses mit (A) Probennahmerohr, (B) Messluftabgriff und (C) Probenleitungen bei einer Fahrgeschwindigkeit von (a) 5 km h^{-1} und (b) 80 km h^{-1} (Klaus, 2009).

mungsgeschwindigkeit auf die Bedingungen im Probennahmerohr reduziert. Die effektive Diffusorlänge ist variabel und abhängig von der momentanen Fahrgeschwindigkeit der Stadtbahn. Aufgrund von bautechnischen Gründen musste ein Öffnungswinkel des Diffusors gewählt werden, der zur Ausbildung einer turbulenten Strömung im Diffusor führt. Weiterhin führt die Einlassgeometrie bei Strömungsgeschwindigkeiten oberhalb von $1.4 \,\mathrm{m\,s^{-1}}$ ebenfalls zu turbulenten Strömungsbedingungen im Probennahmerohr (Klaus, 2009).

In seiner Gesamtheit erfüllt das Partikeleinlasssystem der AERO-TRAM also folgenden Bedingungen:

- isoaxiale und isokinetische Probennahme in einem für den Messgeräteträger relevanten Geschwindigkeitsbereich,
- Minimierung von Sedimentations- und laminaren Diffusionsverlusten durch kurze Rohrleitungen und

• Verhinderung von Impaktions- und Interzeptionsverlusten durch gerade Rohrleitungen.

Außerdem können Partikelverluste aufgrund der Elektro- und Thermophorese vernachlässigt werden, da der Partikeleinlass elektrisch geerdet ist und die Temperaturunterschiede zwischen Messluft und Einlassbauteilen während dem Messbetrieb keine großen Differenzen aufweisen. Da Sedimentations- und Diffusionsverluste lediglich minimiert sind und Partikelverluste bei höheren Fahrgeschwindigkeiten als 1.4 m s^{-1} durch turbulente Diffusion auftreten, wurde während der Entwicklung des Partikeleinlasses (Klaus, 2009) eine theoretische Quantifizierung der Einlasseffizienz durchgeführt (Abb. 2.11). Für Partikel mit einem Durchmesser zwischen 40 nm



Abbildung 2.11.: Gesamteffizienz des Partikeleinlasses für verschiedene Fahrgeschwindigkeiten des Messgeräteträgers (Klaus, 2009).

und 1 µm sind keine Verluste zu erwarten. Die Partikelverluste für Partikeldurchmesser unterhalb von 40 nm werden nur durch die Diffusion aufgrund der Brownschen Partikelbewegung verursacht, wobei die Gesamteffizienz nicht unter 90 % fällt. Für Partikelduchmesser größer als 1 µm sinkt die Einlasseffizienz aufgrund von Sedimentations- und turbulenten Diffusionsverlusten, wobei letztere sich vor allem ab Fahrgeschwindigkeiten von 10 m s⁻¹ bemerkbar machen. Allerdings führen diese Verlustprozesse erst ab einem Par-

tikeldurchmesser oberhalb von 3 µm zu einem starken Rückgang der Effizienz. Als Resultat lässt sich daraus folgern, dass sich für Partikeldurchmesser unterhalb von 2,5 µm eine Probennahme des atmosphärischen Aerosols fast unverfälscht vornehmen lässt, da in diesem Größenbereich die Einlasseffizienz stets größer als 90 % ist. In Anhang A findet sich die Einlasseffizienz hinsichtlich der drei Verlustprozesse jeweils einzeln dargestellt.

Nach Eintritt der Messluft in die Probenleitungen, wird diese zu den Messgeräten geleitet. Die Zeitverzögerung zwischen Eintritt der Messluft an der Einlassspitze und Änderung des Messsignals an des Partikelanalysatoren beträgt ca. 2 s. Aus Platzgründen war eine Zuführung der Messluft zu den Partikelkondensationszählern ohne 90° Bögen nicht möglich. In diesen Zuleitungen verläuft die Strömung laminar, damit treten keine weitere Partikelverluste in den für die Kondensationspartikelzählern relevanten Partikelgrößenbereichen aufgrund der Impaktion auf (Klaus, 2009). Da die Zuleitung zu den Kondensationspartikelzählern eine Verlängerung des Einlasssystems darstellt, können Partikelverluste aufgrund der Sedimentation und Diffusion verstärkt auftreten. Bei der gesonderten Betrachtung der Gesamteffizienz bis zu den einzelnen Geräteeingängen zeigt sich, das sich die Gesamteffizienz im Fall des TSI CPC3772 Kondensationspartikelzähers nicht wesentlich von der zuvor gezeigten Gesamteffizienz des Partikeleinlasses (Abb. 2.11) unterscheidet. Im Gegensatz dazu geht beim TSI CPC 3775 Kondensationspartikelzähler die Sammeleffizienz für Partikeldurchmesser unterhalb von 10 nm auf bis zu 70 % zurück. Da das GRIMM Aerosolspektrometer deutlich größere Partikel als die Kondensationspartikelzähler detektieren kann, wurde das Spektrometer so im Aerosolmodul montiert, dass seine Probenleitung ohne Bögen verläuft, um Impaktionsverluste großer Partikel aufgrund Änderungen der Strömungsrichtung zu verhindern. Die Gesamteffizienz bis zum Messlufteingang am Messgerät unterscheidet sich kaum von der Gesamteffizienz in Abb. 2.11. Bereits vor den Probenleitungen geht die Sammeleffizienz für Aerosolpartikel mit einem Durchmesser oberhalb von 3 µm stark zurück. Aus diesem Grund sollten Messungen ab dieser Partikelgröße nicht berücksichtigt werden. Zusätzlich besteht ein Abschnitt der Zuleitung aus einem Nafionschlauch. Da Nafion eine hohe Wasserdampfduchlässigkeit aufweist, wird so die Messluft vor Eintritt in das Aerosolspektrometer getrocknet. Somit kann der korrekte Partikeldurchmesser für trockenes Aerosol bestimmt werden. Die Abbildungen der Gesamteffizienz hinsichlich den einzelnen Partikelmessgeräten befinden sich ebenfalls in Anhang A.

Da das Partikeleinlasssystem zur Probennahme außerhalb der fahrzeugeigenen Grenzschicht über das Stadtbahndach herausragt, könnte dieses während der Reinigung der Stadtbahn in der Waschanlage durch die Bürsten beschädigt werden. Aus diesem Grund ist der Partikeleinlass auf einem beweglichen Schlitten montiert, um den überstehenden Teil im Reinigungsfall zurückfahren zu können (Abb. 2.12(a) und 2.12(b)). Um Beschädigungen des



Abbildung 2.12.: Positionierung des Partikeleinlass während (a) des Messbetriebs und (b) der Fahrzeugwäsche in der Waschstraße (Klaus, 2009).

Ultraschallanemometers zu verhindern, wird dieses während der Stadtbahnreinigung in den *shroud* hinein geklappt.

2.1.3. Qualitätssicherung der Messungen

Während des Betrieb des Messsystems AERO-TRAM ist zu gewährleisten, dass die Messdaten eine hohe Qualität aufweisen. Dazu ist es notwendig, regelmäßig mittels bekannten Konzentrationen die Funktion der Messgeräte zur Erfassung der gasförmigen Luftqualitätsparameter zu überprüfen. Der CO-Analysator ist für diesen Zweck mit einer geräteinternen, automatisierten Kalibriervorrichtung ausgerüstet. Hierfür wird ein Prüfgasgemisch aus 1 ppm CO und synthetischer Luft¹⁰ in einer 101 Druckgasflasche im dritten Modul mitgeführt. Während der Kalibrierung wird anstatt des Messgasstroms dieses Gasgemisch in die Messzelle geleitet. Zur Erfassung des Messsignals bei kohlenmonoxidfreier Luft, wird das Gasgemisch durch einen MnO₂-haltigen Filter geleitet, in dem das CO katalytisch in CO₂ umgewandelt wird. Unter Umgehung des Filters wird das Messsignal für eine CO-Konzentration von 1 ppm erfasst. Diese zwei Messpunkte sind ausreichend, da der Analysator in diesem Messbereich ein lineares Verhalten aufweist (Zellweger et al., 2012).

Zur Kalibrierung der Messgeräte der übrigen Luftqualitätsparameter (CO_2 , O_3 , NO, NO_x) wird ein ANSYCO SYCOS K-GPT Prüfgaserzeugungssystem eingesetzt. Dieses ist in der Lage, Prüfgase der einzelnen Luftschadstoffe in für den Messbetrieb relevanten Konzentrationsbereichen bereitzustellen. Um verschiedene Prüfgaskonzentrationen zu erzeugen, muss das ursprüngliche Kalibriergas unterschiedlich stark mit sogenanntem Nullgas verdünnt werden. Als Nullgas bezeichnet man ein Gasgemisch, das Messgaskomponenten in für das Messgerät nicht nachweisbaren Konzentrationen enthält. Für den Einsatz im Messsystem AERO-TRAM muss das Nullgas also frei von CO_2 , O_3 sowie von Stickoxidverbindungen sein und wird mittels einer Vorrichtung zur Nullgasaufbereitung erzeugt.

Diese Vorrichtung besteht aus fünf Patronen, die mit unterschiedlichen granulatförmigen Adsorptions- und Reaktionsfiltern befüllt sind, durch die Umgebungsluft geleitet wird. Diese Vorrichtung stellt also einen trockenen Gaswäscher dar. Die einzelnen Substanzen werden wie folgt aus der Umgebungsluft entfernt:

 O_3 : Aktivkohle

$$2 O_3 + C \longrightarrow 2 O_2 + CO_2$$
, (R2.10)

CO₂: Atemkalk

$$\rm CO_2 + Ca(OH)_2 \longrightarrow CaCO_3 + H_2O$$
 (R2.11)

 $^{^{10}20,5\,\%}$ O_2 und $79,5\,\%$ N_2

 NO_x : Kaliumpermanganat (KMnO₄)

$$NO + KMnO_4 \longrightarrow KNO_3 + MnO_2$$
, (R2.12)

$$2\,\mathrm{NO}_2 + \mathrm{KMnO}_4 \longrightarrow 2\,\mathrm{KNO}_3 + 2\,\mathrm{MnO}_2 + \mathrm{O}_2\ , \qquad (\mathrm{R2.13})$$

 H_2O : Kieselgel (SiO₂) und Molekularsieb (3Å)

Adsorption.

Bei Verwendung der Filtersubstanzen in der obigen Reihenfolge, werden unerwünschte Nebenprodukte der einzelnen Filter (z. B. CO_2 in Reaktion R2.10) durch nachfolgende Filtersubstanzen entfernt.

Die Kalibrierstrategie besteht aus einer Zweipunktkalibrierung, bestehend aus einer Messung bei schadstofffreier Luft zur Nullpunktbestimmung und einer Messung bei einer zuvor festgelegten Referenzkonzentration.Während der Kalibrierung muss darauf geachtet werden, dass der Gasvolumenstrom hoch genug ist, damit das Nullgas bzw. das Prüfgas immer mit Überschuss zugeführt wird. Im Betrieb ist ein Gasvolumenstrom von $2,51 \text{min}^{-1}$ zur gleichzeitigen Versorgung aller Geräte ausreichend, zur Sicherheit wird das Prüfgaserzeugungssystem mit einem Volumenstrom von $3,01 \text{min}^{-1}$ durch die Filterpatronen betrieben.

Für die Erzeugung der Referenzkonzentration kommen während des Betriebs zwei Verfahren zum Einsatz. Zur Kalibrierung des CO_2 - und des NO-Analysators werden zertifizierte Gasgemische in 101 Druckgasflaschen mitgeführt (CO_2 : 60 000 ppm, NO: 50 ppm), die an das Prüfgaserzeugungssystem angeschlossen sind. Zur Erzeugung einer Referenzkonzentration wird zu dem Volumentrom des Nullgases eine bestimmte Menge des zertifizierten Kalibriergases hinzugemischt und so auf die gewünschte Konzentration verdünnt. Die hinzuzumischende Kalibriergasmenge ist abhängig vom Volumenstrom des Nullgases und der zu erzeugenden Prüfgaskonzentrationen, kann aber relativ einfach über folgende Beziehung bestimmt werden:

$$c_{\text{Kalibriergas}}Q_{\text{Kalibriergas}} = c_{\text{Prüfgas}}Q_{\text{Prüfgas}}, \qquad (2.15)$$

mit:
$$c_{\text{Kalibriergas}} = \text{Konzentration des Kalibriergases},$$

 $c_{\text{Prüfgas}} = \text{Konzentration nach Verdünnung},$
 $Q_{\text{Kalibriergas}} = \text{Volumenstrom des Kalibriergases},$
 $Q_{\text{Prüfgas}} = \text{Gesamtvolumenstrom nach Verdünnung}.$

Für den Gesamtvolumenstrom $Q_{Prüfgas}$ gilt dann:

$$Q_{\rm Prüfgas} = Q_{\rm Nullgas} + Q_{\rm Kalibriergas} \tag{2.16}$$

und damit für Gl. 2.15:

$$c_{\text{Kalibriergas}}Q_{\text{Kalibriergas}} = c_{\text{Prüfgas}}(Q_{\text{Nullgas}} + Q_{\text{Kalibriergas}})$$
 (2.17)

bzw. für den gesuchten hinzuzumischenden Volumenstrom des Kalibriergases:

$$Q_{\text{Kalibriergas}} = \frac{Q_{\text{Nullgas}}}{\frac{C_{\text{Kalibriergas}}}{C_{\text{Prüfgas}}} - 1} .$$
(2.18)

Die Stickoxidanalysatoren werden mit einer Referenzkonzentration in Höhe von 90 % des Messbereichs kalibriert, was einer NO-Konzentration von 225 ppb enstpricht¹¹. Mit Hilfe von Gl. 2.18 ergibt sich dann ein Volumenstrom für $Q_{\text{Kalibriergas, NO}}$ in Höhe von 13,6 ml min⁻¹, mit der das NO-Prüfgas dem Nullgas hinzugemischt werden muss.

Das zweite Verfahren zur Erzeugung der Referenzkonzentration kommt bei der Kalibrierung des Ozonanalysators zum Einsatz. Das hierfür benötigte O_3 wird direkt durch das Prüfgaserzeugungssystem mittels Photolyse erzeugt. In Abhängigkeit der gewünschten Ozonmenge, wird durch Regelung des Lampenstroms der UV-Lichtquelle und damit durch Regelung der Lichtintensität das Ozon durch photolytische Spaltung des Sauerstoffs im Nullgas produziert. Gegenüber der Ozonproduktion mit Hilfe der stillen Entladung (Reaktion R2.8 und R2.9) hat dieses Verfahren den Vorteil, dass die erzeugte Ozonmenge sehr genau über den Lampenstrom geregelt werden kann. Die photolytische Produktion von O_3 basiert auf folgendem Reaktionsmechanismus:

$$O_2 + h\nu(\lambda_W < 240 \,\mathrm{nm}) \longrightarrow 2 \,\mathrm{O} \;, \tag{R2.14}$$

$$O_2 + O + M \longrightarrow O_3 + M$$
. (R2.15)

Neben der Kalibrierung des Ozonanalysators kann mit Hilfe des Ozongenerators die Effizienz des NO_2 -Konverters, der für die Erfassung der NO_x -Konzentration zum Einsatz kommt, bestimmt werden. Dabei wird mit Hilfe der sogenannten Gasphasentitration

 $^{^{11}}$ Messbereich: 0 ppb–250 ppb

eine bekannte NO-Prüfgaskonzentration durch Ozon partiell zu NO₂ oxidiert (Reaktion R2.4). Der oxidativ erzeugte NO₂-Anteil ist abhängig von der photolytisch produzierten Ozonmenge, die sehr genau geregelt werden kann. Unter der Annahme, dass jedes Ozonmolekül ein NO-Molekül oxidiert, entspricht dann die zugemischte Ozonmenge der erzeugten NO₂-Konzentration. Allerdings ist eine komplette Oxidation des Stickstoffmonixid über die Gasphasentitration nicht möglich, da selbst mit einem Überschuss an Ozon nur ca. 92 %–94 % des NO oxidiert werden können (Günzler et al., 1996). Zur Effizienzbestimmung des NO₂ reicht jedoch eine beispielsweise achtzigprozentige Umwandlung ges Stickstoffmonoxids aus, da bei solch einem Umwandlungsgrad die obige Annahme der Eins-zu-Eins-Umsetzung von NO zu NO₂ durch Oxidation mittels O₃ erfüllt ist (Rehme, 1976).

Die Kalibrierung der Partikelmessgeräte ist aufgrund der aufwändigen Vorgehensweise während des Messbetriebs nicht möglich, so dass eine jährliche Kalibrierung durch den Hersteller veranlasst wird. Während des Betriebs der AERO-TRAM führen die Partikelmessgeräte regelmäßig einen Funktionstest durch, so dass zumindest verfälschte Messergebnisse aufgrund von Gerätefehlfunktionen ausgeschlossen werden können.

2.2. Messgebiet und -strecken

Das mobile Messsystem AERO-TRAM wird im Schienennetz des KVV im Raum Karlsruhe eingesetzt. Karlsruhe ist mit einer Einwohnerzahl von über 300000 Einwohnern die zweitgrößte Stadt in Baden-Württemberg und liegt im Rheingraben. Neben zahlreichen Dienstleistungsunternehmen befinden sich insbesondere im Westen von Karlsruhe mehrere größere Industrieanlagen. Außer durch den Straßenverkehr werden signifikante Freisetzungen von Luftbeimengungen durch ein Steinkohlekraftwerk und Deutschlands zweitgrößte Erdölraffinerie verursacht. Neben der Hintergrundbelastung, die im wesentlichen durch Ferntransport bestimmt wird, beeinflussen diese zusätzlichen Beiträge aus lokalen Emissionsquellen die städtische Luftqualität. Darüber hinaus führen Emissionen des Straßenverkehr zu einer kleinräumig stark erhöhten Luftbelastung. Im nördlichen und südlichen Umland von Karlsruhe finden sich zahlreiche Gemeinden, von denen aus ein bedeutender Teil der Bevölkerung regelmäßig zu seinem Arbeits- oder Ausbildungsplatz nach Karlsruhe pendelt. Südöstlich von Karlsruhe beginnt der Nordschwarzwald, der vor allem als Ferienregion und Naherholungsgebiet genutzt wird. In diesen Umgebungen wird die Luftqualität vor allem durch großräumigen Ferntransport sowie einer windrichtungsabhängiger Advektion städtischer Luftmassen beeinflusst.

Der zur Verfügung gestellte Stadtbahnwagen 560 wird auf den Stadtbahnlinien S1/S11 und S2 während des regulären ÖPNV eingesetzt. Diese zwei Linien verbinden das nördliche und südliche Umland von Karlsruhe entlang einer Achse von Norden nach Süden (S1/11) bzw. von Nordosten nach Südwesten (S2) bei gleichzeitiger Durchquerung des Stadtgebiets (Abb. 2.13). Die Planung des Linieneinsatz der Stadtbahn erfolgt durch die Verkehrsbetriebe, wobei der Linienwechsel ungefähr im Monatsrhytmus durchgeführt wird.

Die Gesamtstrecke der Linie S1/S11 beträgt ca. 40 km, für die eine Fahrzeit von etwa 70 min benötigt wird. Sie verbindet vom Norden ausgehend die Ortschaften Linkenheim-Hochstetten (12000 Einwohner) und Eggenstein-Leopoldshafen (15000 Einwohner) mit dem Stadtgebiet von Karlsruhe. Diese Ortschaften haben einen dörflichen Charakter mit eher niedrigerer Bebauungshöhe und neben dem lokalen Straßenverkehr keine größeren Emittenten von Luftschadstoffen. In den Ortschaften verläuft die Stadtbahnstrecke in der Regel entlang den Hauptverkehrsstraßen. Die Verbindungsstrecken zwischen den Ortschaften und in das Stadtgebiet liegen entlang von landwirtschaftlich genutzten Flächen, die sich mit kleineren Waldgebieten abwechseln.

Bei der anschließenden Nord-Süd Durchquerung des Karlsruher Stadtgebiets führt die Linie S1/S11 zunächst durch die nördlichen Stadtteile Neureut und Nordweststadt. Beide stellen reine Wohngebiete mit vorwiegender Einzelbebauung dar, durch die keine Hauptverkehrsstraßen führen. Außer durch Pendlerverkehr verursacht, treten hier ebenfalls kaum nennenswerte Emissionen auf. Während in Neureut die Stadtbahnlinie mitten durch das Zentrum des Stadtteils verläuft, befindet sich die Strecke in der Nordweststadt zum größten Teil am östlichen Rand des Stadtteils, an den sich ein kleineres Naturschutzgebiet anschließt. Damit kann entlang



Abbildung 2.13.: Verlauf der Linien S1/S11 und S2 mit Lage der Wendeschleifen (weiße Balken). Der grüne Ring markiert die Karlsruher Umweltzone.

dieser Teilstrecke der Linie S1/S11 eine geringere Luftbelastung im Vergleich zu Neureut erwartet werden. Im weiteren Streckenverlauf wird der Karlsruher Innenstadtbereich durchfahren, der vollständig als Umweltzone ausgewiesen ist. Der innerstädtische Linienabschnitt wird entlang meist mehrspurigen Hauptverkehrsstraßen durchfahren. Dabei werden auch mehrere stark frequentierte Straßenkreuzungen überquert. Eine Besonderheit im Innenstadtbereich der Linie S1/S11 stellt die Fahrt durch ein ca. 800 m langes Teilstück der Karlsruher Fußgängerzone dar. Hier kann die innerstädtische Luftbelastung unter Bedingungen untersucht werden, bei denen keine Verkehrsemissionen in der unmittelbaren Umgebung vorhanden sind. Nach Durchfahren des Innenstadtbereichs verläuft die Messstrecke außerhalb der Umweltzone durch den südlichen Stadtteil Rüppürr entlang einer vierspurigen Hauptverkehrsstraße und überquert die Autobahn A5. Die vierspurige Straße ist stark frequentiert, da sie den Verkehr zwischen der Autobahn und der Stadt Karlsruhe aufnimmt.

Nach der Überquerung der Autobahn durchfährt die Stadtbahn die Kleinstadt Ettlingen (40000 Einwohner). Die Verbindungsstrecke zwischen Karlsruhe und Ettlingen führt durch landwirtschaftlich genutzte Flächen. In Ettlingen selbst durchfährt die Stadtbahn eine ähnliche Umgebung wie in den nördlichen Stadtteilen von Karlsruhe, außer dem Straßenverkehr treten keine signifikanten Emissionsquellen auf und die Umgebung ist vor allem durch Wohnbebauung geprägt. Nach der Durchquerung von Ettlingen teilt sich östlich der Stadt die Linie in die Teilstrecken S1 und S11. Beide Teilstrecken verbinden Teile des Nordschwarzwalds mit Karlsruhe. Die Strecke S1 führt durch das Albtal zur Endehaltestelle in Bad Herrenalb (7500 Einwohner). Im Albtal verläuft der Strecke inmitten von ausgedehnten Waldgebieten, gelegentlich parallel entlang der Hauptverbindungsstraße nach Bad Herrenalb. Die Strecke S11 verläuft weiter östlich und bedient einzelne Ortsteile der Gemeinde Karlsbad (16000 Einwohner) im Nordschwarzwald. Die Endhaltestelle liegt im Karlsbader Orsteil Ittersbach. Da die Linie S1/S11 zu großen Teilen im ebenen Rheintal liegt, weist die Strecke bis zur Stadt Ettlingen ein flaches Streckenprofil auf (Abb. 2.14), mit einer mittleren Höhe von 110 m NN. Ab Ettlingen kann ein ansteigendes Streckenprofil beobachtet werden, das besonders im weiteren Streckenverlauf im Nordschwarzwald deutlich wird. Auf den dortigen



Abbildung 2.14.: Höhenprofil der Linie S1/S11.

Teilstrecken S1 und S11 liegt die Strecke teilweise auf einer Höhe von ca. 350 m NN.

Die Linie S2 verbindet die im Nordosten liegende Kreisstadt Stutensee (24000 Einwohner) mit der Innenstadt von Karlsruhe. Die nördliche Endhaltestelle liegt in Spöck, einem Ortsteil von Stutensee. Im Verlauf nach Süden werden die Ortsteile Friedrichstal, Blankenloch und Büchig bedient. Ähnlich wie für den nördlichen Teil der Linie S1/S11 verlaufen die Verbindungstrecken zwischen den Ortsteilen vor allem durch landwirtschaftlich genutzte Flächen, während die Bebauung in den Ortsteilen durch ländlichen Charakter geprägt ist. Emissionen von Luftbeimengungen sind außer durch Kraftfahrzeuge während des Pendlerverkehrs gering.

Im weiteren Verlauf werden zunächst die Karlsruhe Stadtteile Hagsfeld und Rintheim durchfahren. Wie bei der Linie S1/S11 sind diese nördlichen Stadtteile ebenfalls durch Wohnbebauung charakterisiert. Im Unterschied zu der Linienführung der Linie S1/S11 verläuft die S2 im Norden von Karlsruhe entlang einer mehrspurigen Hauptverkehrsstraße, die als Zubringer für den Verkehr aus dem nördlichen Umland in die Innenstadt genutzt wird. Im Anschluss wird die Innenstadt von Karlsruhe auf einer Ost-West Achse durchquert. Auf diesem Teilstück verläuft die Strecke wieder entlang einer Hauptverkehrstraße mit mehreren Fahrspuren, wobei ca. 1 km durch die Karlsruher Fußgängerzone führt. Im Südwesten von Karlsruhe werden nach der Überquerung der Südtangente die Stadtteile Grünwinkel und Daxlanden bedient, die wieder durch Häuser mit vergleichweise niedriger Bebauungshöhe gekennzeichnet sind. Wie bereits bei der Linie S1/S11 liegt der innerstädtische Abschnitt der Linie S2 ebenfalls innerhalb der Umweltzone.

Nach der Durchquerung der Stadt wird im Südwesten Rheinstetten (20000 Einwohner) mit Karlsruhe verbunden. Hier ist ebenfalls hauptsächlich Einzelbebauung anzutreffen und außer Verkehrsemissionen durch den Pendlerverkehr treten entlang der Stadtbahnstrecke kaum größere Emissionsquellen auf. Allerdings befindet sich parallel zur Strecke eine Bundesstraße in ca. 250 m Entfernung. Nach der Durchfahrt des Rheinstettener Stadtteils Forchheim endet die Linie S2 im Stadtteil Mörsch. Die zurückgelegte Gesamtdistanz der Linie S2 beträgt 30 km bei einer Fahrzeit von 50 min. Da die Strecke komplett in der Rheinebene liegt, weist die Linie S2 ein durchgängig flaches Streckenprofil auf, dessen einzige Erhebungen durch Brücken verursacht werden (Abb. 2.15).



Abbildung 2.15.: Höhenprofil der Linie S2.

Die einzelnen Messfahrten finden oft nicht auf den kompletten Stadtbahnlinien statt. Entlang beider Linien existieren mehrere Wendeschleifen (Abb. 2.13), so dass auch nur Teilstrecken bedient werden können. Für die Linie S1/S11 existieren Wendemöglichkeiten am nördlichen Rand von Neureut und in Ettlingen. Die Wendeschleifen der S2 befinden sich am nördlichen Rand von Blankenloch, im Süden von Büchig und südlich von Daxlanden. Die regulären Messstrecken S sind in Tab. 2.6 und 2.7 aufgelistet.

Tabelle 2.6.: Reguläre Messstrecken S1x der Stadtbahnlinie S1/S11.

Messst	Codierung S	
Hochstetten –	Bad Herrenalb	S1a
Hochstetten –	Ittersbach	S1b
Hochstetten –	Ettlingen	S1c
Neureut –	Bad Herrenalb	S1d
Neureut –	Ittersbach	S1e
Neureut –	Ettlingen	S1f

Tabelle 2.7.: Reguläre Messstrecken S2x der Stadtbahnlinie S2.

Mess	Codierung S		
Spöck -		Mörsch	S2a
Spöck	_	Daxlanden	S2b
Blankenloch	_	Mörsch	S2c
Blankenloch	_	Daxlanden	S2d
Büchig	_	Mörsch	S2e
Büchig	_	Daxlanden	S2f

3. Methoden der Datenauswertung der AERO-TRAM

Die Verwendung einer Stadtbahn als Messgeräteträger in Verbindung der zeitlichen Auflösung der verwendeten Analysatoren ermöglicht es, räumlich hochaufgelöste Messdaten mit Hilfe des mobilen Messsystems AERO-TRAM entlang den Messstrecken zu gewinnen. Da die Stadtbahn nicht nur im Stadtgebiet, sondern auch im Umland verkehrt, kann die Situation der Luftqualität unter den unterschiedlichsten Bedingungen erfasst werden. Entlang den Messstrecken ändert sich in deren Umgebung im Streckenverlauf die Landnutzung, damit ändern sich auch die Emissionsverhältnisse in der Umgebung der Messstrecken. Aufgrund des besonderen Messkonzepts ist die AERO-TRAM weitgehendst in der Lage autonom zu operieren. Eine Besonderheit des KVV ist, dass die meisten Straßen- und Stadtbahnlinien, wie auch die Linien S1/S11 und S2, an jedem Wochentag und zu jeder Tageszeit bedient werden. In den Nachtstunden und an den Wochenende werden die Linien allerdings mit einer niedrigeren Taktfrequenz befahren. Damit können Messdaten prinzipiell zu jeder Tageszeit erfasst werden.

In der Praxis werden allerdings nachts und an Wochenenden weniger Messfahrten durchgeführt, weil durch die Verringerung der Taktfrequenz weniger Fahrzeuge auf den Linien eingesetzt werden. Da die Einsatzplanung der Fahrzeuge in der Verantwortung der Verkehrsbetriebe liegt, kann es vorkommen, dass z. B. an einem Wochenende der Messgeräteträger nicht eingesetzt wird und deshalb keine Messfahrten durchgeführt werden können. Der gewonnene Datensatz des mobilen Messsystems weist also Messungen mit Zeiträumen von mehreren Stunden bis zu einigen Tagen auf, an denen die Stadtbahn abgestellt war. Weiterhin wird die Stadtbahn, wie in Kap. 2.2 beschrieben, abwechselnd auf den Linien S1/S11 und S2 eingesetzt. Zusätzlich finden die Messfahrten oft nicht entlang den gesamten Strecken statt, sondern nur auf den zuvor beschrieben Teilstrecken. Dies muss bei der Datenauswertung berücksichtigt werden, da sich die Anzahl der Messfahrten für die einzelnen Teilstrecken zum Teil deutlich unterscheiden.

Eine weitere Herausforderung stellt die mobile Erfassung der Messgrößen selbst dar. Das Messsystem liefert zwar räumlich hochaufgelöste Messdaten, gleichzeitig wird die Situation der Luftqualität an einem Ort nur alle 1 h bis 2 h erfasst. Der räumlich hochaufgelösten Messung entlang den Messstrecken steht also eine niedrige zeitliche Auflösung der Messungen an den einzelnen Messpunkten gegenüber. Dies stellt ein Problem dar, da sich während einer einzelnen Messfahrt die Rahmenbedingungen für die Luftqualität ändern können und dadurch Konzentrationsunterschiede zwischen einzelnen Messorten nicht nur durch räumliche Unterschiede bedingt sind.

Um diese Gegebenheiten zu kompensieren und die Interpretation zu der Messdaten zu erleichtern, müssen bestimmte Methoden in der Datenaufbereitung angewendet werden. Zunächst werden in den Rohdaten alle individuellen Messfahrten entlang den unterschiedlichen Strecken identifiziert und die Messdaten der einzelnen Fahrten mit Hilfe von Filterfunktionen geglättet, um räumliche Unterschiede in den gemessenen Konzentrationsprofilen stärker hervorzuheben. Anschließend wird durch Zerlegung der Messstrecken in Segmente eine Mittelung über mehrere Messfahrten durchgeführt und damit eine Vergleichbarkeit auf Basis der Segmente erreicht .

3.1. Identifizierung der Messfahrten

Die Messdaten der Instrumente werden für jedes Gerät in separaten Dateien gespeichert. Unabhängig von der zeitlichen Geräteauflösung (Tab. 2.4) werden die Messwerte sekündlich aufgezeichnet. Neben den Messwerten wird außerdem die Messzeit protokolliert, wobei die Messzeit für alle Messgeräte synchronisiert ist. Für die Zuordnung des Messortes werden die Messzeiten der Messgeräte mit den Daten des aufgezeichneten GPS Signals abgeglichen. Dabei wird die die Zeitverzögerung zwischen Messlufteintritt an den Einlasspitzen und Messsignal berücksichtigt. Nach dieser ersten Vorbereitung der Messdaten liegen diese als kontinuierliche Zeitreihen vor, die neben den eigentlichen Messwerten auch die geographischen Koordinaten des Messortes sowie die aus den GPS Messungen abgeleitete Fahrgeschwindigkeiten enthalten. Allerdings ist noch nicht ersichtlich, auf welchen Teilstrecken der beiden Linien die einzelnen Messfahrten stattgefunden haben. Dies wird im nächsten Schritt durchgeführt.

Die Zeitreihen der einzelnen Messfahrten werden mit Hilfe der geographischen Koordinaten der Messdaten identifiziert. Eine Messfahrt beginnt und endet immer an einer Wendeschleife. Während der Messfahrt werden alle Messungen, die bei einer Fahrgeschwindigkeit unterhalb von $0.1 \,\mathrm{m\,s^{-1}}$ stattgefunden haben, nicht berücksichtigt. Damit werden Messungen an Haltestellen oder an Straßenkreuzungen verworfen. Zum einen werden an Haltestellen beim Öffnen der Türen Schadstoffe wie z. B. CO_2 freigesetzt, die sich während der Fahrt im Innenraum ansammeln und damit die Messungen kontaminieren. Zum anderen befinden sich in Kreuzungsbereichen während Rotlichtphasen oft Kraftfahrzeuge vor oder in der unmittelbaren Umgebung der Stadtbahn, so dass die Messungen nicht die aktuelle Luftbelastung repräsentieren, da sich die Einlasssysteme in den Abluftfahnen der Fahrzeuge befinden. Die zweite Einfahrt in eine Wendeschleife wird als Endpunkt der aktuellen Messfahrt und als Startpunkt der nächsten Fahrt gekennzeichnet. Falls die Kombination aus Start- und Endpunkt keiner der in Tab. 2.6 und 2.7 gelisteten regulären Strecken entspricht, wird diese Messfahrt verworfen. Dies ist der Fall bei Fahrten in Betriebshöfe zu Wartungszwecken, kann aber auch aufgrund von Lücken in den Zeitreihen verursacht werden, die durch Fehlfunktionen des Messsystems entstehen können. In Tab. 3.1 und 3.2 sind die Anzahl der Messfahrten $N_{\chi,S,\text{Jahr}}$, aufgeschlüsselt nach den Messparametern χ und Messstrecken S, für die Jahre 2010 und 2011 zusammengefasst. Die Anzahl Messfahrten der restlichen Messparameter finden sich im Anhang (Tab. B.1 und B.2). Insgesamt konnten mehr als 3600 erfolgreiche Messfahrten durchgeführt werden. Allerdings wurde nicht bei allen Fahrten jeder Messparameter erfasst. Die daraus folgende unterschiedliche Anzahl der Messfahrten zwischen den einzelnen Messparametern werden durch gelegentliche Ausfälle von Messgeräten verursacht. Die zum Teil deutlich niedrigere Anzahl von Messfahrten im Jahr 2011 ist durch die kürzere Messperiode bedingt. Während 2010 das Messsystem im

Streaks NO NO O DNC DSD $\mathcal{A} = \mathcal{B} \mathcal{A}$									
	stre	ске		NU	NO _x	O_3	PNC3775	PSD	<i>v</i> , <i>p</i> , <i>кн</i>
2010									
Hochstetten	_	Bad Herrenalb	(S1a)	175	173	160	150	149	163
Hochstetten	_	Ittersbach	(S1b)	113	114	98	81	97	99
Hochstetten	_	Ettlingen	(S1c)	156	150	147	130	167	150
Neureut	_	Bad Herrenalb	(S1d)	41	36	31	34	39	40
Neureut	_	Ittersbach	(S1e)	119	121	116	91	115	119
Neureut	_	Ettlingen	(S1f)	244	240	241	184	238	238
Fahrten insgesamt		$(S1^{*})$	848	834	793	670	805	809	
2011									
Hochstetten	_	Bad Herrenalb	(S1a)	140	143	143	101	135	143
Hochstetten	_	Ittersbach	(S1b)	99	99	99	75	99	99
Hochstetten	_	Ettlingen	(S1c)	107	108	108	99	116	108
Neureut	_	Bad Herrenalb	(S1d)	21	21	21	17	20	21
Neureut	_	Ittersbach	(S1e)	78	78	78	50	78	78
Neureut	_	Ettlingen	(S1f)	242	242	242	133	244	240
Fahrten insgesamt		$(S1^*)$	687	691	691	467	692	689	

Tabelle 3.1.: Anzahl der Messfahrten $N_{\gamma,S,Jahr}$ auf der Linie S1/S11

Tabelle 3.2.: Anzani der Messianiten $N_{\chi,S,Jahr}$ auf der Lille 52.									
Strecke				NO	NO_x	O_3	PNC ₃₇₇₅	PSD	$\boldsymbol{\vartheta}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{R} \boldsymbol{H}$
2010									
Spöck	_	Mörsch	(S2a)	991	948	999	645	725	728
Spöck	_	Daxlanden	(S2b)	56	53	56	33	45	46
Blankenloch	_	Mörsch	(S2c)	175	173	185	127	146	146
Blankenloch	_	Daxlanden	(S2d)	12	13	14	12	12	12
Büchig	_	Mörsch	(S2e)	190	186	192	110	124	129
Büchig	_	Daxlanden	(S2f)	106	107	220	94	110	110
Fahrten	Fahrten insgesamt		$(S2^{*})$	1530	1480	1566	1021	1162	1171
2011									
Spöck	_	Mörsch	(S2a)	292	292	292	14	285	287
Spöck	_	Daxlanden	(S2b)	14	14	14	2	14	14
Blankenloch	_	Mörsch	(S2c)	51	51	51	9	51	51
Blankenloch	_	Daxlanden	(S2d)	10	10	10	5	10	10
Büchig	_	Mörsch	(S2e)	94	94	94	7	93	93
Büchig	_	Daxlanden	(S2f)	51	51	51	6	50	51
Fahrten insgesamt		$(S2^*)$	512	512	512	43	503	506	

Tabelle 3.2.: Anzahl der Messfahrten $N_{\gamma S, \text{Labr}}$ auf der Linie S2.

gesamten Jahresverlauf betrieben wurde, endete der Messbetrieb 2011 bereits im August.

Falls bei der Datenanalyse eine Betrachtung von bestimmten Teilstrecken ausreichend ist, kann die Anzahl der zur Verfügung stehenden Messfahrten erhöht werden. Möchte man beispielsweise Ozonmessungen für den innerstädtischen Abschnitt der Linie S1/S11 im Jahr 2010 untersuchen, stehen hierfür alle 793 Zeitreihen zur Verfügung ($N_{O_3,S1^*,2010}$), da bei allen möglichen Teilstrecken der S1/S11 der Stadtbereich durchfahren. Bei Untersuchungen über die Ozonbelastung entlang der Linie S2 für die komplette nördliche Umgebung von Karlsruhe für 2011 können z. B. 306 Fahrten ($N_{O_3,S2a,2011}+N_{O_3,S2b,2011}$) verwendet werden, weil sowohl die Teilstrecke "Spöck–Mörsch", wie auch die Strecke "Spöck–Daxlanden" das komplette nördliche Teilstück der S2 bedient.

3.2. Glättung der Rohdaten

Die Rohdaten c_{χ} der einzelnen Messfahrten weisen zum Teil starke Fluktuationen auf (Abb. 3.1). Diese werden in der Regel durch



Abbildung 3.1.: Partikelkonzentration (PNC) entlang der Linie S2 einer Messfahrt am 23.7.2010.
Emissionen von vorausfahrenden Kraftfahrzeugen in unmittelbarer Nähe der Einlasssysteme an der Fahrzeugfront verursacht. Messungen in den Abgasfahnen dieser Fahrzeuge führen zu den in Abb. 3.1 deutlich erkennbaren Spitzenkonzentrationen der Partikelanzahldichte mit einer Dauer von wenigen Sekunden entlang der Messstrecke. Typischerweise treten diese kurzzeitig erhöhten Messwerte in städtischen Umgebungen auf, da dort die Verkehrsdichte verglichen zum Umland erhöht ist. Allerdings unterscheiden sich zwischen den einzelnen Messfahrten einerseits die Ausprägung und andererseits auch der Messort der Spitzenkonzentrationen (Anhang C), da diese Ereignisse zufällig sind. Teilweise können diese stark erhöhten Messwerte auch in der ländlichen Umgebung von Karlsruhe beobachtet werden. Die Fluktuationen erschweren die Interpretation der Messdaten, da stellenweise räumliche Unterschiede durch die Spitzenkonzentrationen überlagert werden. Beispielsweise kann bei alleiniger Betrachtung der Rohdaten der Partikelanzahldichten $c_{\rm CPC-3775}$ in Abb. 3.1 kein Unterschied zwischen dem nördlichen Teil von Karlsruhe und der innerstädtischen Umweltzone hinsichtlich der Luftbelastung festgestellt werden. Die Fluktuationen entlang den Zeitreihen sind im Fall der Partikelanzahldichte am stärksten ausgeprägt, können aber mit Ausnahme der meteorologischen Größen auch bei den übrigen Messparametern beobachtet werden (Anhang C). Um die Ereignisse, die zu diesen stark erhöhten Konzentrationswerten führen, zu filtern und die räumlichen Unterschiede hervorzuheben, werden die ursprünglichen Zeitreihen der Luftqualitätsparameter mit Hilfe eines Tiefpass-Filters geglättet. Der Tiefpass-Filter wird mit Hilfe des gleitenden Mittelwerts realisiert. Nach erfolgter Glättung der Rohdaten ist im Streckenprofil der Partikelanzahldichte in Abb. 3.1 erkennbar, dass bei Betrachtung der gleitenden Mittels $c_{\text{Mittel}, CPC_{3775}}$ zwischen der Umweltzone und dem nördlichen Teil von Karlsruhe doch Unterschiede, wenn auch geringe, in der Partikelkonzentration vorliegen.

In der Zeitreihenanalyse ist es oft üblich, die Berechnung des gleitenden Mittelwerts über ein Zeitintervall von beispielsweise einer Minute durchzuführen. Allerdings weisen die einzelnen Zeitreihen der zuvor identifizierten Messfahrten zeitliche Lücken auf, da Messungen bei Stillstand der Bahn verworfen wurden. Anstelle über ein Zeitintervall Δt , wird die Berechnung des gleitenden Mittelwerts $c_{\text{Mittel},\chi}(n_x, \Delta n = N)$ über ein Intervall Δn mit N Datenpunkten vorgenommen. Die Glättung der Zeitreihen werden für alle Luftqualitätsparameter vorgenommen und erfolgt zentriert. Dies ist in Abb. 3.2 veranschaulicht.



Abbildung 3.2.: Ausschnitt aus der in Abb. 3.1 gezeigten Messfahrt am 23.7.2010 zwischen 8:06 und 8:09 mit Kennzeichnung des Datenintervalls $\Delta n = 60$ zur Berechnung des gleitenden Mittelwerts.

Neben dem gleitenden Mittel werden außerdem der Median $c_{.50,\chi}$, sowie die 5 %- und 95 %-Perzentile $c_{.05,\chi}$ bzw. $c_{.95,\chi}$, ebenfalls gleitend über das Datenintervall Δn ermittelt. Gegenüber dem gleitenden Mittelwert weist der gleitende Medianwert den Vorteil auf, dass er unempfindlicher auf Ausreißer, also auf die stark erhöhten Spitzenkonzentrationen reagiert. Die ursprüngliche Zeitreihe wird demnach stärker geglättet. In Verbindung mit den übrigen Quantilwerten (Abb. 3.3) kann außerdem eine Abschätzung über die Variation der Messwerte in der lokalen Umgebung eines Messpunkts getroffen werden. Bukowiecki et al. (2002) definieren die gleitenden 5 %-Perzentile als lokale Hintergrundkonzentration. Dieser Perzentilenwert repräsentiert die Hintergrundkonzentration besser als beispielsweise der Minimalwert im Intervall $\Delta n = 60$, da dieser durch das Signalrauschen des Messgerätes beeinflusst sein kann. Dieser Definition folgend repräsentiert der 95%-Perzentilenwert die lokale Maximalkonzentration. Demge-



Abbildung 3.3.: Quantilwerte der Partikelkonzentration für $\Delta n = 60$ entlang der Linie S2 einer Messfahrt am 23.7.2010.

genüber ist z. B. der Maximalwert im Intervall $\Delta n = 60$ durch Messungen innerhalb verkehrsbedingter Abgasfahnen beeinflusst. Analog dazu können diese gleitenden Größen auch für jedes andere Datenintervall berechnet werden.

3.3. Segmentierung der Messtrecken

Das mobile Messystem AERO-TRAM ermöglicht eine Erhebung räumlich hochaufgelöster Luftqualitätsparameter. Allerdings ist die Repräsentativität der Messungen von einzelnen Messfahrten meist nicht gegeben, da die Situation der Luftbelastung an einem Messort nur einmal pro Stunde oder noch seltener für einige wenige Sekunden erfasst wird. Zwischen den Zeitpunkten können sich emissionsspezifische und meteorologische Einflussparameter zum Teil stark ändern. Dies gilt ebenfalls für Messpunkte zwischen denen eine gewisse Distanz liegt. Neben der eingeschränkten Vergleichbarkeit zwischen einzelnen Messfahrten sind also auch räumliche Konzentrationsunterschiede anhand von einzelnen Messfahrten schwierig zu identifizieren.

Diese Einschränkungen erhalten weniger Gewicht, wenn die mittleren Konzentrationsprofile über eine ausreichend große Zahl von Messfahrten betrachtet werden. Prinzipiell können nur Messfahrten gemittelt werden, die dieselbe Strecke einer Linie bedient haben. Allerdings kann mit den zuvor identifizierten Messfahrten nicht ohne Weiteres eine Mittelung durchgeführt werden. Zum einen unterscheiden sich die einzelnen Messfahrten gleicher Strecken in der Anzahl ihrer Datenpunkte, da die Fahrzeit nie exakt gleich lang ist. Die Unterschiede in der Fahrtdauer werden durch variierende Fahrgeschwindigkeiten der Stadtbahn verursacht, bedingt z.B. durch die aktuelle Verkehrssituation im Innenstadtbereich. Zum anderen unterscheidet sich die geographische Lage der einzelnen Messpunkte zwischen Messfahrten auf denselben Strecken aufgrund der Ungenauigkeit des aufgezeichneten globales Positionsbestimmungssystem (GPS)-Signals. Der eingesetzte GPS-Empfänger besitzt eine maximale Genauigkeit von 2 m. Um trotz dieser Schwierigkeiten dennoch die mittleren Profile der Luftbelastung entlang den Messstrecken bestimmen zu können, wird zuvor eine Unterteilung in 50 m Segmente der Linien S1/S11 und S2 vorgenommen. Hierfür wird jeweils die GPS-Aufzeichnung einer Messfahrt, die die jeweilige Linie komplett abdeckt, als Referenzfahrt verwendet. Mit Hilfe der aufgezeichneten geographischen Koordinaten werden zunächst die Abstände $d(\vec{p}_i, \vec{p}_{i-1})$ zwischen den einzelnen Messpunkten $\vec{p}_i(\phi, \lambda)$ berechnet. Dazu werden vorab die Koordinaten der Messpunkte ins kartesische Koordinaten $\vec{p}_i(x, y)$ transformiert:

$$x = R_E \cos\varphi \cos\lambda , \qquad (3.1)$$

$$y = R_E \cos\varphi \sin\lambda . \tag{3.2}$$

mit: x, y = kartesische Koordinaten, $\varphi, \lambda =$ geographische Koordinaten, $R_E =$ Erdradius.

Der Abstand d zwischen den zwei Messpunkten $\vec{p_i}$ und $\vec{p_{i-1}}$ wird anschließend wie folgt berechnet:

$$d(\vec{p}_i(x,y), \vec{p}_{i-1}(x,y)) = |\vec{p}_i(x,y) - \vec{p}_{i-1}(x,y)|$$

= $\sqrt{(p_{i,x} - p_{i-1,x})^2 + (p_{i,y} - p_{i-1,y})^2}$. (3.3)

Zur Festlegung der Koordinaten der 50m-Segmente werden nun die Abstände der einzelnen Messpunkte solange aufsummiert bis der Gesamtabstand größer als 50 m ist. In diesem Fall wird der Messpunkt, an dem dieses Kriterium erfüllt wird, als Mittelpunkt \vec{a} eines 50 m-Segments gekennzeichnet. Anschließend wird ab diesem Messpunkt das Vorgehen wiederholt, bis die gesamte Strecke segmentiert ist. Die so vorgenommene Unterteilung wird für alle folgenden Datenanalysen verwendet, wobei sich für Linie S1/S11 eine Unterteilung in 1185 Segmente und für Linie S2 in 594 Segmente ergibt.

Mit Hilfe der segmentierten Mess
strecken können nun mittlere Verteilungen der Luftbelastung und auch der übrigen Mess
parameter über mehrere Messfahrten bestimmt werden. Dazu werden zunächst die Mess
daten der berücksichtigten Messfahrten auf die entsprechenden 50 m-Segmente verteilt. Ähnlich dem Vorgehen zur Streckensegmentierung, werden die Abstände zwischen den einzelnen Messpunkten $\vec{p_i}$ und den Mittelpunkten $\vec{a_j}$ der 50 m-Segmente bestimmt:

$$d(\vec{p}_i(x,y), \vec{a}_j(x,y)) = |\vec{p}_i(x,y) - \vec{a}_j(x,y)|$$

= $\sqrt{(p_{i,x} - a_{j,x})^2 + (p_{i,y} - a_{j,y})^2}$. (3.4)

Ist der Abstand $d(\vec{p}_i(x, y, z), \vec{a}_j(x, y))$ kleiner als 25 m, wird dieser Messpunkt dem jeweiligen 50 m-Segment zugeordnet. Nach erfolgreicher Zuordnung aller Messpunkte der berücksichtigten Messfahrten werden die gleitenden Größen aus Kap. 3.2 wie folgt segmentweise gemittelt:

$$\tilde{c}_{\text{Mittel},\chi,j}(\Delta n) = \frac{1}{n_j} \sum_{k=1}^{n_j} c_{\text{Mittel},\chi,k}(\Delta n) , \qquad (3.5)$$

$$\tilde{c}_{.05,\chi,j}(\Delta n) = \frac{1}{n_j} \sum_{k=1}^{n_j} c_{.05,\chi,k}(\Delta n) , \qquad (3.6)$$

$$\tilde{c}_{.50,\chi,j}(\Delta n) = \frac{1}{n_j} \sum_{k=1}^{n_j} c_{.50,\chi,k}(\Delta n) , \qquad (3.7)$$

$$\tilde{c}_{.95,\chi,j}(\Delta n) = \frac{1}{n_j} \sum_{k=1}^{n_j} c_{.95,\chi,k}(\Delta n) , \qquad (3.8)$$

mit: $\tilde{c}_{\text{Mittel}\chi,j} = \text{Segmentmittel von } c_{\text{Mittel},\chi},$ $\tilde{c}_{.05,\chi,j} = \text{Segmentmittel von } c_{.05,\chi},$ $\tilde{c}_{.50,\chi,j} = \text{Segmentmittel von } c_{.50,\chi},$ $\tilde{c}_{.95,\chi,j} = \text{Segmentmittel von } c_{.95,\chi},$ j = Segmentnummer, $n_j = \text{Anzahl der Messpunkte im j-ten Segment.}$

Da die Rohdaten der meteorologischen Messparameter keiner Glättung unterzogen werden, werden für diese die einzelnen Segmentmittel direkt aus den Rohdaten bestimmt, die sich beispielsweise für die Temperatur wie folgt berechnen:

$$\tilde{\vartheta}_{Mittel,j} = \frac{1}{n_j} \sum_{k=1}^{n_j} \vartheta_k .$$
(3.9)

3.4. Ableitung der NO₂-Konzentration aus den NO- und NO_x-Messungen

Die $\rm NO_x-Konzentration$ stellt die Summe aus NO- und $\rm NO_2-Konzentration dar. Da sowohl die Konzentrationen von NO und <math display="inline">\rm NO_x$ durch das mobile Messsystem AERO-TRAM parallel erfasst werden, können damit prinzipiell die $\rm NO_2$ -Konzentrationen aus diesen Messungen abgeleitet werden:

$$c_{\rm NO_2} = c_{\rm NO_x} - c_{\rm NO}$$
 . (3.10)

Hierfür ist es von äußerster Wichtigkeit, dass die Messungen mit hoher Qualität durchgeführt werden bzw. die Analysatoren regelmäßig und sehr genau kalibriert werden. Andernfalls kann beispielsweise eine Nullpunktverschiebung eines Analysators dazu führen, dass die gemessenen NO_{x} -Werte geringer als die NO-Werte sind, was zu NO₂-Konzentrationen kleiner Null führen würde. Aufgrund von technischen Problemen war eine Kalibrierung der ECO PHYSICS CLD 66 Analysatoren mit Hilfe des für diesen Zweck vorgesehenen Prüfgaserzeugungssystems nicht möglich. Diese Probleme äußerten sich dadurch, dass das Prüfgaserzeugungssystem nicht die Referenzkonzentration bereitstellen konnte, da diese sich nicht auf den eingestellten Wert stabilisierte. Aus diesem Grund wurde lediglich an Wartungsterminen eine Überprüfung des Nullpunktes vorgenommen. Da so Nullpunktsverschiebungen nicht

ausgeschlossen werden können, ist eine direkte Bestimmung der NO₂-Werte aus den vorhandenen Messungen nicht möglich, weil bei einer Berechnung der Werte mit Hilfe von Gl. 3.10 sich teilweise negative NO₂-Konzentrationen ergeben.

Bestimmte Methoden erlauben es allerdings aus den vorhandenen Messdaten NO_2 -Werte in einer Form abzuleiten, sodass zumindest relative räumliche Konzentrationsunterschiede untersucht werden können. So können stark belastete Gebiete von schwach belasteten unterschieden werden. Gleichzeitig ist es möglich, Verhältnisse zwischen diesen Gebieten zu bestimmen, um so die Unterschiede zu quantifizieren. Bei einer Sichtung der Daten stellte sich heraus, dass bei der Berechnung der NO_2 -Konzentration negative Werte nicht bei allen Messfahrten auftreten.

Einerseits führen Fehlfunktionen der ECO PHYSICS CLD 66 Analysatoren zu negativen NO₂-Konzentrationen. Solche Ereignisse sind einfach herauszufiltern, weil sie relativ lange andauern, mindestens über die Dauer einer einzelnen Messfahrt, und dadurch die Standardabweichung $\sigma_{c_{\chi}}$ der NO- bzw. NO_x Zeitreihe einer Messfahrt gleich Null ist.

Andererseits treten NO₂-Konzentrationen kleiner als Null auf, wenn Daten von Messfahrten zur NO₂-Berechnung verwendet werden, während denen das Prüfgaserzeugungssystem aktiviert war. In den NO- und NO_x-Zeitreihen der Messfahrten äußert sich der Kalibrierbetrieb durch eindeutige Signale. Wenn den Messinstrumenten schadstofffreie Luft zugeführt wird, ist das Messsignal konstant und schwankt nur sehr geringfügig (Abb. 3.4(a)), es weist also eine sehr geringe Standardabweichung $\sigma_{c_{\chi}}$ auf. Im Gegensatz dazu steigt das Messignal während der Zuführung der Referenzkonzentration kontinuierlich an und $\sigma_{c_{\chi}}$ nimmt einen sehr hohen Wert an (Abb. 3.4(b)). Unter Annahme, dass für $\sigma_{c_{\chi}} < 1$ und $\sigma_{c_{\chi}} > 200$ ein Kalibrierungsvorgang vorlag, können solche Fälle automatisch aus dem Datensatz entfernt werden (Abb. 3.5 und Anhang D).

Nach Entfernung der ungültigen Messfahrten werden zunächst die NO- und $\mathrm{NO_x}$ -Zeitreihen der verbleibenden Messfahrten mittels des gleitenden Mittels über ein Datenintervall der LängeN=60geglättet. Anschließend werden segmentierte Konzentrationsprofile aller individuellen Messfahrten gemäß Gl. 3.5 bestimmt. Mit Hilfe dieser können die segmentierten NO₂-Konzentrationsprofile der einzelnen Messfahrten abgeleitet werden, indem die Differenz zwischen den jeweiligen NO_x- und NO-Segmentmittel ermittelt wird.



NO₂ in ppb



Abbildung 3.4.: Beispiele für die Zuführung von Nullgas (a) und einer Referenzkonzentration (b) während einer Messfahrt am 5.7.2010 bzw. 21.7.2011.



Abbildung 3.5.: Standardabweichung $\sigma_{c_{NO}}$ für NO-Messfahrten auf der Linie S1/S11 im Jahr 2010. Ungültige Messfahrten sind hervorgehoben.

Unter Vernachlässigung der ungültigen Messfahrten können so für die Linie S1/S11 539 segmentierte NO_2 -Profile für das Jahr 2010 und 557 Profile für das Jahr 2011 abgeleitet werden. Für die Linie S2 ergeben sich 882 bzw. 506 NO_2 -Profile.

3.5. Koordinatentransformation der Windkomponenten

Das zur Erfassung der horizontalen Windkomponenten eingesetzte Ultraschallanemometer weist wie in Kapitel 2.1.1 beschrieben eine von der Fahrtrichtung der Stadtbahn abhängige Rotation gegenüber dem geographischen Koordinatensystem auf, da die u^* -Komponente stets in Fahrtrichtung zeigt. Bevor die Messdaten des Anemometers ausgewertet werden können, müssen diese deshalb zunächst aufbereitet werden. Der tatsächlich gemessene Windvektor

$$\vec{v}_{h,\text{Messung}}^{\star} = \begin{pmatrix} u_{\text{Messung}}^{\star} \\ v_{\text{Messung}}^{\star} \end{pmatrix}$$
(3.11)

ist aufgrund der Bewegung der AERO-TRAM und der daraus resultierenden Anströmung beeinflusst. Durch die Orientierung des bahnfesten Koordinatensystems des Anemometers führen Anströmungen entgegengesetzt der Fahrtrichtung zu negativen Werten von $u^{\star}_{\text{Messung}}$. Aus diesem Grund muss die Fahrtgeschwindigkeit v_{Bahn} auf die gemessene Windkomponente $u^{\star}_{\text{Messung}}$ addiert werden, um die wirkliche u^{\star} -Komponente im bahnfesten Koordinatensystem zu erhalten:

$$u^{\star} = u^{\star}_{\text{Messung}} + v_{\text{Bahn}} \tag{3.12}$$

mit: $u_{\text{Messung}}^{\star} =$ gemessene Windkomponente, $v_{\text{Bahn}} =$ Fahrtgeschwindigkeit der AERO-TRAM, $u^{\star} =$ korrigierte Windkomponente.

Für die rechtwinklig dazu stehende $v_{\text{Messung}}^{\star}$ -Komponente ist keine Korrektur notwendig, da diese nicht durch die Anströmung aufgrund der Fahrtgeschwindigkeit beeinflusst wird:

$$v^{\star} = v^{\star}_{\text{Messung}} . \tag{3.13}$$

Um \vec{v}_h^* aus dem bahnfesten Koordinatensystem in das $u^{\bullet} \cdot v^{\bullet}$ -Koordinatensystem, in dem die u^{\bullet} -Komponente nordwärts gerichtet ist, zu transformieren, ist eine Rotation des bahnfesten Koordinatensystems um den Winkel γ notwendig. Dieser Winkel entspricht im geographischen Koordinatensystem dem Winkel zwischen der Fahrtrichtung der AERO-TRAM und der Nordrichtung. Der Winkel γ wird für alle Datenpunkte der Rohdaten berechnet, die zuvor entsprechend Kap. 3.1 den einzelnen Messfahrten zugeordnet wurden. Die Winkelbestimmung erfolgt mit Hilfe der geographischen Koordinaten zweier aufeinander folgender Messpunkte $\vec{p}_{i-1}(\varphi, \lambda)$ und $\vec{p}_i(\varphi, \lambda)$ die unter Berücksichtigung von Gl. 3.1 und 3.2 in das kartesische Koordinatensystem transformiert werden. Da die Abszisse des kartesischen Koordinatensystems mit der Nordrichtung zusammenfällt, entspricht γ dem Winkel zwischen dem zweiten kanonischen Einheitsvektor \vec{e}_u und dem Differenzvektor

$$\vec{p}_{diff} = \vec{p}_i - \vec{p}_{i-1} \ . \tag{3.14}$$

Der Winkel γ kann mit Hilfe des Skalarprodukts

$$\vec{e}_y \cdot \vec{p}_{diff} = |\vec{p}_2| |\vec{p}_{diff}| \cdot \cos\gamma \tag{3.15}$$

bestimmt werden. Mit Hilfe von

$$\vec{e}_{y} \cdot \vec{p}_{diff} = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} p_{i,x} - p_{i-1,x}\\ p_{i,y} - p_{i-1,y} \end{pmatrix} = p_{i,y} - p_{i-1,y}$$
(3.16)

folgt für den Schnittwinkel γ zwischen den Vektoren \vec{e}_y und \vec{p}_{diff} :

$$\gamma = \begin{cases} \arccos \frac{p_{i,y} - p_{i-1,y}}{|\vec{e}_2| |\vec{p}_{diff}|} \cdot \frac{180^{\circ}}{\pi} , & \text{falls } p_{i-1,x} \le p_{i,x} , \\ 360^{\circ} - \arccos \frac{p_{i+1,y} - p_{i,y}}{|\vec{e}_2| |\vec{p}_{diff}|} \cdot \frac{180^{\circ}}{\pi} , & \text{falls } p_{i-1,x} > p_{i,x} . \end{cases}$$

$$(3.17)$$

Die Fallunterscheidung ist notwendig, da mit Hilfe des Skalarprodukts nur der Innenwinkel zwischen zwei Vektoren bestimmt wird, der niemals größer als 180° sein kann. Bei einer westwärts gerichteten Fahrtrichtung entspricht jedoch der Außenwinkel zwischen \vec{e}_2 und \vec{p}_{diff} dem für die Transformation gesuchten Rotationswinkel γ (Abb. 3.6). Die eigentliche Koordinatentransformation wird mit



Abbildung 3.6.: Bestimmung des Rotationswinkel γ bei (a) östlicher und (b) westlicher Fahrtrichtung.

der Drehmatrix R_{γ} durchgeführt, dabei ist:

$$R_{\gamma} = \begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma \\ -\sin \gamma & \cos \gamma \end{pmatrix} . \tag{3.18}$$

Den horizontalen Windvektor \vec{v}_h^{\bullet} im nordwärts gerichteten u^{\bullet} v°-Koordinatensystem erhält man mit Hilfe des Matrix-Vektor-Produkts von R_{γ} und \vec{v}_h^{\star} :

$$\vec{v}_h^{\bullet} = R_{\gamma} \cdot \vec{v}_h^{\star} = \begin{pmatrix} u^* \cos \gamma + v^* \sin \gamma \\ -u^* \sin \gamma + v^* \cos \gamma \end{pmatrix}.$$
 (3.19)

Unter Berücksichtigung von Gl. 2.12 und 2.13 folgt dann für den horizontalen Wind im geographischen Koordinatensystem:

$$\vec{v}_h = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -v^{\bullet} \\ u^{\bullet} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u^* \sin \gamma - v^* \cos \gamma \\ u^* \cos \gamma + v^* \sin \gamma \end{pmatrix} .$$
(3.20)

4. Räumliche Verteilungen von Luftschadstoffen und meteorologischen Parametern

Mit Hilfe von mobilen Messsystemen können auf einfache Art und Weise räumliche Verteilungen von Messparametern entlang Messstrecken bestimmt werden. In Verbindung mit zeitlich hochauflösenden Messgeräten kann zudem die Variabilität der räumlichen Verteilung untersucht werden, die insbesondere bei Luftschadstoffen in städtischen Ballungsräumen auftritt. Die AERO-TRAM eignet sich ideal für solche Studien, da sie aufgrund ihrer Messausrüstung in der Lage ist, räumlich hochaufgelöste Verteilungen zu erfassen. In Verbindung mit Langzeitmessungen während des Einsatzes der Straßenbahn im regulären ÖPNV kann außerdem die räumliche Variabilität entlang der Messstrecken im Jahresmittel und die Einflussfaktoren untersucht werden. Im Folgenden werden exemplarische Beispiele solcher Untersuchungen vorgestellt.

4.1. Die Karlsruher Wärmeinsel

Durch Sesshaftwerdung der Menschen ließen sich im Laufe der Zeit immer mehr Menschen an gemeinsamen Orten nieder. Bei günstigen Bedingungen wuchsen die Ansiedlungen immer weiter bis zur Größe heutiger Städte. Dieser Prozess dauert bis heute an und spiegelt sich im steten Anwachsen fast aller Städte wieder. Aufgrund des Städtewachstums werden immer mehr natürliche Flächen durch Bebauung versiegelt. Die Versiegelung führt zu Änderungen der Albedo sowie der Wärmekapazität der Landoberfläche und damit zu einer Modifikation der Strahlungs- und Energiebilanz der Fläche (Oke, 1982). Im Vergleich zum unbebauten Umland verursachen diese Anderungen innerhalb der Städte eine Erhöhung der Lufttemperatur. Dieser als urbane Wärmeinsel bezeichnete Effekt kann bereits mit Hilfe von Temperaturmessungen an zwei Messorten festgestellt werden. Innerhalb von Städten können allerdings auch Temperaturunterschiede beobachtet werden, die durch einen variierenden Grad der Oberflächenversiegelung hervorgerufen werden (Kottmeier et al., 2007). Auch im Umland ist die Temperatur variabel, da hier ebenfalls keine homogene Landoberfläche vorliegt. Beispielsweise befinden sich im städtischen Umland außer Forstgebieten landwirtschaftlich genutzte oder natürliche Flächen die unterschiedliche Eigenschaften im Strahlungs- und Energiehaushalt aufweisen. Um neben dem urbanen Wärmeinseleffekt diese räumliche Temperaturvariabilität zu erfassen, stellen mobile Messsysteme ein hervorragendes Hilfsmittel dar (z. B. Hart und Sailor, 2009; Oke, 1973; Sofer und Potchter, 2006).

Neben Untersuchungen in Italien von Costanzo et al. (2006) unter Einsatz einer Straßenbahn wurde auch die Karlsruher Wärmeinsel auf diese Art und Weise mit Hilfe von Messdaten der AERO-TRAM untersucht (Hinze, 2011). An dieser Stelle wird die überarbeitete mittlere Temperaturverteilung entlang der Linie S2 basierend auf 728 Messfahrten für das Jahr 2010 vorgestellt, ergänzt mit einer Gegenüberstellung des Wärmeinseleffekts während der Tages- und Nachtstunden. Als Tagesstunden wird dabei der Zeitraum zwischen 7:30 Uhr und 19:30 Uhr verwendet. Bei Verwendung dieses Kriteriums werden 542 der Messfahrten als Tagfahrten und 274 als nächtliche Fahrten klassifiziert. Wenn bei der Bestimmung der Segmentmittel nach Gl. 3.9 die Rohdaten der Temperaturmessung verwendet werden, für die Messungen unterhalb einer Fahrzeuggeschwindigkeit von $0.1 \,\mathrm{m\,s^{-1}}$ vernachlässigt werden, können im Jahresmittel der Temperaturverteilung Unterschiede von bis zu 2°C innerhalb von wenigen 100 m festgestellt werden (Abb. 4.1). Diese sehr großen und gleichzeitig kleinräumigen Temperaturdifferenzen stellen für ein Jahresmittel kein realistisches Phänomen dar. Sie können nicht durch Unterschiede in der Bebauung erklärt werden, da insbesondere der stärkste Temperaturunterschied in der Karlsruher Fußgängerzone auftritt, in der das Straßenbild sehr homogen ist. Dieses Phänomen wird durch unerwünschte Einflüsse auf die Temperaturmessung während den einzelnen Messfahrten hervorgerufen. Während des Stillstands der AERO-TRAM erwärmt sich unter dem Einfluss der Sonneneinstrahlung



Abbildung 4.1.: Jahresmittel der Temperaturverteilung entlang der Messstrecke S2a.

das Strahlungsschutzgehäuse des VAISALA Kombinessgeräts und führt so zu einer Verfälschung der gemessenen Temperatur(Abb. 4.2). Durch Erhöhung der minimalen Fahrzeuggeschwindigkeit auf



Abbildung 4.2.: Rohdaten der Temperatur (schwarz) entlang der Messstrecke S2a inklusive Messungen während Stillstands der Stadtbahn (grau) am 21.7.2010.

 $v_{Bahn}=2.8\,{\rm m\,s^{-1}},$ ab der Temperaturmessungen berücksichtigt werden, können die großen
Temperaturdifferenzen innerhalb der



Stadt verringert werden (Abb. 4.3). Die im Vergleich zum Um-

Abbildung 4.3.: Jahresmittel der Temperaturverteilung in Karlsruhe und seinem Umland über alle Messfahrten (schwarz), während der Tagesstunden (hellgrau) und während der Nachtstunden (dunkelgrau) entlang der Messstrecke S2a bei Berücksichtigung von Messungen oberhalb einer Fahrzeuggeschwindigkeit von $2.8 \,\mathrm{m\,s^{-1}}$.

land höhere Temperaturen in der Innenstadt werden aber immer noch beobachtet. Darüber hinaus können im Streckenverlauf Erhöhungen der Temperatur im Bereich der Ortschaften im Umland festgestellt werden, die insbesondere nachts deutlich werden.

Da die Wärmestrahlung des Strahlungsschutzgehäuses einen systematischen Fehler darstellt und die dadurch verursachte Temperaturabweichung im gesamten Streckenverlauf stets positiv ist, kann dennoch die Intensität der Karlsruher Wärmeinsel bestimmt werden. Deshalb wird nicht das Temperaturmaximum mit seinem Minimum entlang der Strecke verglichen. Statt dessen werden Temperaturdifferenzen zwischen gemittelten 250 m Abschnitten der Innenstadt und dem nördlichen bzw. südlichen Umland gebildet (Tab. 4.1). Der Innenstadtabschnitt liegt in der Karlsruher Fußgängerzone im Bereich des Temperaturmaximums, welches selbst allerdings nicht enthalten ist. Im nördlichen Umland wird das Mittel über einen Abschnitt in einem Waldgebiet bestimmt. Das Abschnittsmittel des südlichen Umlands befindet sich nahe der Endhaltestelle in Mörsch, wo sich die Messstrecke zwischen landwirtschaftlich genutzten Flächen befindet. Zwischen der Innen-

Gebiet	relative Entfernung zum Marktplatz in km
Innenstadt	0,05 bis $0,30$
nördl. Umland	-12,35 bis $-12,60$
südl. Umland	11,70 bis 11,95

Tabelle 4.1.: Streckenabschnitte, entlang denen Mittelwerte derTemperatur berechnet werden.

stadt und den nördlichen und südlichen Abschnitten im Karlsruher Umland ergeben sich zur Beschreibung des Wärmeinseleffekts die in Tab. 4.2 aufgelisteten Temperaturunterschiede. Wie bereits im

Tabelle 4.2.: Temperaturdifferenzen zwischen Innenstadt undKarlsruher Umland.

Differenz	insgesamt	tagsüber	nachts
Innenstadt - nördliches Umland	1,3 °C	0,9 °C	$2,0{\rm ^{o}C}$
Innenstadt - südliches Um- land	1,1 °C	1,0 °C	1,5 °C

mittleren Temperaturprofil in Abb. 4.3 erkennbar, ist der Wärmeinseleffekt wie erwartet (vergl. Oke, 1982) nachts am stärksten ausgeprägt. Weiterhin wird deutlich, dass die Temperaturdifferenzen zwischen Innenstadt und Umland abhängig von der Landnutzung sind. Verglichen zu den landwirtschaftlich genutzten Flächen im südlichen Umland sind die Temperaturen im Abschnitt des nördlichen Umlands geringer, da hier die Messstrecke durch einen kleineren Wald verläuft.

Mit geeigneten Interpolationsmethoden können solche räumlichen Temperaturverteilungen, die mit Hilfe von mobilen Messsystemen entlang einer Linie bzw. Strecke erfasst werden, verwendet werden, um die räumliche Temperaturvariabilität für größere Gebiete abzuleiten. Ein häufig verwendetes Verfahren ist das sogenannte Kriging, das beispielsweise von Bottyán und Unger (2003); Hinkel et al. (2003) oder Szymanowski und Kryza (2009) verwendet wurde, um mit Hilfe fahrzeuggestützter Temperaturmessungen die räumliche Temperaturverteilung innerhalb einer Stadt zu bestimmen.

4.2. Bodennahe Ozonproduktion

In städtischen Umgebungen ist die Entstehung von bodennahem Ozon primär abhängig von der Intensität der Sonneneinstrahlung. Hohe Ozonkonzentrationen treten deshalb vor allem in den Sommermonaten auf, mit Spitzenkonzentrationen an sogenannten Hitzetagen, an denen eine Tageshöchsttemperatur von mindestens 30 °C erreicht wird. Solche Bedingungen lagen z.B. am 21.07.2010 vor, einem fast wolkenlosen Hochsommertag. Im Tagesverlauf wurde eine Lufttemperaturen von fast 34 °C erreicht, wobei Temperaturen oberhalb von 30 °C über mehrere Stunden zwischen 11:00 Uhr und 19:00 Uhr vorlagen (Abb. 4.4). Gleichzeitig ist erkennbar, dass eine eindeutige Korrelation zwischen der Intensität der Sonneneinstrahlung bzw. der Temperatur als Maß dafür und der Ozonkonzentration vorliegt. In den Abendund Nachtstunden kommt es zu einem Rückgang der Ozonbelastung. Nach Sonnenuntergang kommt die Neuproduktion von Ozon komplett zum Erliegen, so dass Verlustprozesse durch chemische Reaktion mit Stickstoffmonoxid und durch Deposition voll zum Tragen kommen. Verglichen dazu, führt die intensiver werdende Einstrahlung während den Tagesstunden zu einer immer weiter zunehmenden Ozonbelastung.

Im Gegensatz zu diesem Tag, der für die Ozonbildung optimale Eigenschaften aufweist, liegen einen Tag später gegenteilige Bedingungen vor. Der in Abb. 4.4 dargestellte Tagesgang der Temperatur am 22.07.2010 weist im gesamten Tagesverlauf gleichbleibende Temperaturen um 20,5 °C auf. An diesem Tag warder Himmel bedeckt. Damit verbunden ist eine starke Abschwächung der direkten Sonneneinstrahlung, was die Bildung hoher Ozonwerte verhindert.



Abbildung 4.4.: Mittlerer Tagesgang der Temperatur und der Ozonkonzentration am 21.07.2010 (schwarz) und 22.07.2010 (grau) abgeleitet aus AERO-TRAM Messdaten.

Die besonderen Bedingungen am 21.07.2010, die sich insbesondere zwischen 09:00 Uhr und 11:00 Uhr durch eine Verdopplung der Ozonkonzentration auszeichnen, können auch in den einzelnen Messfahrten an diesem Tag beobachtet werden (Abb. 4.5). Wie beim mittleren Tagesgang für Ozon, ist auch im Streckenprofil der einzelnen Messfahrten erkennbar, wie im Tagesverlauf die Ozonkonzentration entlang der gesamten Messstrecke ansteigt, bis um ca. 16:00 Uhr das Tagesmaximum erreicht wird. Anschließend nimmt die Ozonbelastung im Messgebiet wieder ab. Mit Ausnahme der Messfahrt gegen 10:00 Uhr ist die Ozonkonzentration im Streckenverlauf mehr oder weniger konstant, da keine großen Konzentrationsunterschiede an den Endhaltestellen festgestellt werden können. Die extrem starke Ozonerhöhung im Tagesgang zwischen 09:00 Uhr und 11:00 Uhr (Abb. 4.4) spiegelt sich auch in der Messfahrt in diesem Zeitraum wider. Während bei Beginn der Fahrt in Rheinstetten um 10:15 Uhr Ozonwerte zwischen 30 ppb und 40 ppb beobachtet werden können, kommt es im weiteren Streckenverlauf aufgrund der zunehmenden Intensität der Sonneneinstrahlung zu einer starken Zunahme der Ozonproduktion, so dass gegen Ende



Abbildung 4.5.: Segmentierte Einzelfahrten für die Strecke S2a am 21.07.2010. Fahrtrichtung ist durch Pfeile dargestellt.

der Messfahrt die Ozonkonzentration mit ca. 60 ppb fast doppelt so hoch ist.

Die räumliche Verteilung der Ozonkonzentration für die Messtrecke S2a zeigt, dass entlang dieser Messstrecke im nördlichen und südlichen Umland von Karlsruhe die Ozonbelastung vergleichbar ist. Auch im nördlichen Teil von Karlsruhe, wo die AERO-TRAM die Stadtteile Büchig und Hagsfeld durchfährt treten ähnlich hohe Konzentrationen auf, da dort im Unterschied zur übrigen Streckenführung im Stadtgebiet nicht entlang Straßen mit hohen Verkehrsaufkommen verläuft. Im Gegensatz dazu treten in der Innenstadt und im südlichen Teil von Karlsruhe im Tagesverlauf die geringsten Ozonkonzentration im Streckenverlauf auf, da hier in der direkten Umgebung der Messstrecke S2a große Mengen an NO durch den Straßenverkehr emittiert werden.

4.3. Beeinflussung ländlicher Luftqualität durch städtische Industrieemissionen

Die städtische Luft ist aufgrund der größeren Anzahl von Emissionsquellen und dem stärkeren Verkehrsaufkommen höher belastet als im Umland. Damit ist eine Stadt selber auch eine Emissionsquelle, deren Abluftfahne die Umgebung beeinflusst (Junkermann et al., 2016). Auch im Karlsruher Umland kann solch eine Beeinflussung festgestellt werden. Im Jahresmittel 2010 der Partikelanzahlund Stickoxidkonzentrationen entlang der Messstrecke Hochstetten – Ettlingen (S1c) liegt im Karlsruher Stadtgebiet die höchste Belastung vor (Abb. 4.6). In beiden Fällen wird das Konzentrati-



Abbildung 4.6.: Vergleich der mittleren Konzentrationsprofile für (a) $\tilde{c}_{0.5,\text{PNC}_{3775}}(\Delta n = 60)$ in cm⁻³ (387 Messfahrten) und (b) $\tilde{c}_{0.5,\text{NO}_x}(\Delta n = 60)$ in ppb (437 Messfahrten) entlang der Messstrecke S1c für das Jahr 2010.

onsmaximum von $19\,000\,\mathrm{Partikel/cm^3}$ bzw. $34\,\mathrm{ppb}$ am Mühlburger

Tor, einer stark befahrenen Kreuzung in der Karlsruher Innenstadt erreicht. Außerhalb der Innenstadt kommt es in den nördlichen Stadtteilen zu einem Rückgang der Konzentrationen beider Messparameter, der auf die Abnahme der Verkehrsdichte zurückgeführt werden kann. Während die partikelförmige Luftbelastung bezogen auf das Maximum um ca. 50% auf 9200 Partikel/cm³ zurückgeht, lässt sich für NO_x mit 13 ppb eine viel stärkere Abnahme um fast $65\,\%$ be obachten. Im weiteren Streckenverlauf verharrt die Stickoxidbelastung auf diesem Wert, wogegen für die Partikelanzahlkonzentration eine erneute Zunahme in der nördlichen Umgebung von Karlsruhe im Bereich der Gemeinde Eggenstein-Leopoldshafen festzustellen ist. In dieser Gemeinde ist die Partikelbelastung lediglich 20% geringer als in der Karlsruher Innenstadt. Da gleichzeitig keine erneute Zunahme der NO_x-Konzentration auftritt, kann diese Partikelzunahme nicht auf lokale Emissionsquellen in Eggenstein-Leopoldshafen zurückgeführt werden. Eine naheliegende Vermutung für die Ursache der erhöhten Partikelanzahlkonzentrationen ist, dass diese Luftverunreinigung im nördlichen Umland durch städtische Emissionsquellen verursacht wird.

Eine Clusteranalyse der gemessenen Partikelanzahlkonzentrationen erhärtet diesen Verdacht. Für diese Analyse werden die Messdaten in zwei Gruppen unterteilt. Die erste Gruppe umfasst Messfahrten, während denen großräumig südwestliche Anströmrichtungen vorherrschten. Messfahrten, die unter nordöstlichen Windrichtungsbedingungen stattfanden, werden der zweiten Gruppe zugeordnet. Da durch die geographische Lage des Rheingrabens diese zwei großräumigen Anströmrichtungen dominieren (Groß und Wippermann, 1987; Kalthoff und Vogel, 1992; Vogel et al., 1986), sind diese zwei Gruppen ausreichend, um die zwei Hauptwindrichtungen zu repräsentieren. Zur Gruppenzuordnung der Messfahrten werden Windrichtungsmessungen des KIT-Messmasts in 200m Höhe verwendet, wobei eine Zuordnung vorgenommen wird, wenn für 75 % der Fahrtzeit einer Messfahrt die jeweilige Bedingung vorliegt. Untersuchungen von Kalthoff und Vogel (1992) zeigen, dass die Mastmessungen in dieser Höhe als repräsentative Messung für die großräumigen Bedingungen verwendet werden können.

Bei Betrachtung der mittleren Streckenprofile unter dem Einfluss der Anströmrichtung (Abb. 4.7) wird deutlich, dass die Zunahme der partikelförmigen Luftbelastung in der nördlichen Umgebung von Karlsruhe nur bei südwestlichen Anströmrichtungen auftreten, also bei solchen Bedingungen durch Emissionsquellen des Industriegebiets südwestlich der Innenstadt beeinflusst wird. Tatsächlich finden sich südwestlich von Eggenstein-Leopoldshafen mehrere große Emittenten, da sich in dieser Richtung das Karlsruher Industriegebiet befindet. Dort angesiedelt sind unter anderem die zweitgrößte Erdölraffinerie Deutschlands in der jährlich bis zu 15 Mt Rohöl verarbeitet werden, sowie das Rheinhafendampfkraftwerk mit einer elektrischen Bruttoleistung von 1800 MW, die hauptsächlich durch Kohleverstromung erzeugt wird.



Abbildung 4.7.: Vergleich zwischen den Streckenprofilen der mittleren Partikelanzahlkonzentration $\tilde{c}_{.50, \text{PNC}_{3775}}(\Delta n = 60)$ in cm⁻³ bei (a) südwestlicher (142 Messfahrten) und (b) nordöstlicher Anströmung (110 Messfahrten).

Im folgenden soll nun untersucht werden, ob die Beeinflussung der partikelförmigen Luftbelastung im nördlichen Teil der Messstrecke durch städtische Industrieemissionen durch Ausbreitungsrechnungen mit Hilfe eines Gauß-Fahnenmodells bestätigt werden kann. Dieses Ausbreitungsmodell ermöglicht es, die Konzentrationsverteilung in der Abgasfahne einer kontinuierlichen Punktquelle zu bestimmen.

Die mittlere Konzentrationsverteilung berechnet sich mit folgender Gleichung:

$$\bar{\rho}_{\chi}(x,y,z) = \frac{E_{\chi}}{2\pi\sigma_x(x)\sigma_z(x)\bar{u}} \cdot e^{-\frac{(y-y_{\text{Quelle}})^2}{2\sigma_y^2(x)}} \\ \cdot \left(e^{-\frac{(z-h_{eff})^2}{2\sigma_z^2(x)}} + e^{-\frac{(z+h_{eff})^2}{2\sigma_z^2(x)}}\right) , \qquad (4.1)$$

mit: $\sigma_y(x)$, $\sigma_z(x) =$ Sigmaparameter, $h_{eff} =$ effektive Quellhöhe,

und

$$\sigma_y(x) = \sqrt{2K_y \frac{x}{u}} , \qquad (4.2)$$

$$\sigma_z(x) = \sqrt{2K_z \frac{x}{u}} . \tag{4.3}$$

Eine genauere Beschreibung des verwendeten Gaußmodells findet sich im Anhang E.

Die Sigmaparameter $\sigma_y(x)$ und $\sigma_z(x)$ beschreiben die Aufweitung der Fahne horizontal und vertikal zur Fahnenachse in Abhängigkeit zum Abstand der Quelle P_{Quelle} aufgrund turbulenter Diffusion. Die effektive Quellhöhe h_{eff} setzt sich zusammen aus der Bauhöhe eines Schornsteins und der Höhe, um die austretende Abgase zunächst aufsteigen, bevor diese ausschließlich horizontal advehiert werden:

$$h_{eff} = h_S + \Delta h , \qquad (4.4)$$

mit: h_S = Schornsteinhöhe, Δh = Schornsteinüberhöhung.

Die in Abhängigkeit vom Quellabstand zunehmende Fahnenaufweitung kann nach Klug (1969) wie folgend parametrisiert werden:

$$\sigma_y(x) = F \cdot x^f , \qquad (4.5)$$

$$\sigma_z(x) = G \cdot x^g , \qquad (4.6)$$

wobei die Koeffizienten F, G, f und g von der Schichtungsstabilität der atmosphärischen Grenzschicht abhängig sind. Diese kann beispielsweise mit Hilfe der Stabilitätsklassen nach Pasquill (1961) beschrieben werden, nach denen die Sigmaparameter mit den in Tab. 4.3 aufgelisteten Koeffizientenwerte bestimmt werden können. Die Schonsteinüberhöhung Δh weist ebenfalls eine Abhängigkeit

der Sigmaparameter in Abhängigkeit der Stabilitätsklassen nach Pasquill (1961). Stabilitätsklasse E f G a

Tabelle 4.3.: Koeffizientenwerte nach Klug (1969) zur Bestimmung

Stabilitätsklasse	$oldsymbol{F}$	f	G	g
A (sehr labil)	0,469	0,903	$0,\!017$	1,380
B (labil)	$0,\!306$	$0,\!885$	$0,\!072$	$1,\!021$
C (leicht labil)	0,230	$0,\!855$	$0,\!076$	$0,\!879$
D (neutral)	$0,\!219$	0,764	$0,\!140$	0,727
E (leicht stabil)	0,237	$0,\!691$	0,217	$0,\!610$
F (stabil)	$0,\!273$	$0,\!594$	0,262	0,500

von der Schichtungsstabilität auf und kann z.B. mit Hilfe der Parametrisierung nach Briggs (1969) bestimmt werden:

I. Stabilitätsklassen A–D:

$$\Delta h = 1, 6 \cdot \frac{\sqrt[3]{F \cdot x^2}}{u} , \qquad (4.7)$$

II. Stabilitätsklassen E–F

$$\Delta h = 2,9 \cdot \sqrt[3]{\frac{F \cdot T_U}{g \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} \cdot u}}$$
(4.8)

mit: F = Auftriebsflussparameter, T_U = Umgebungstemperatur, g = Gravitationsbeschleunigung, $\frac{\partial \theta}{\partial z}$ = potentieller Temperaturgradient, wobei

$$F = g d_S^2 v_S \frac{T_S - T_U}{4T_S} , (4.9)$$

mit: d_S = Schornsteindurchmesser, v_S = Austrittsgeschwindigkeit am Schornstein, T_S = Austrittstemperatur am Schornstein, T_U = Umgebungstemperatur am Schornstein.

Das Ergebnis einer Gaußmodellrechnung stellt eine mittlere Konzentrationsverteilung einer Abgasfahne dar. Das Konzentrationsprofil im Jahresmittel in Abb. 4.7 wurde jedoch aus individuellen Messfahrten der AERO-TRAM bestimmt. Somit basiert dieses Konzentrationsprofil auf Messungen zu Zeiträumen in denen sich das Messsystem auf der Messstrecke befand. Um dies zu berücksichtigen wird statt einer Modellrechnung basierend auf dem Jahresmitteln der Ausbreitungsbedingungen in 2008 mehrere Simulationen entsprechend der Anzahl der Messfahrten durchgeführt. Dabei werden diese Ausbreitungsbedingungen verwendet, die zum jeweiligen Zeitpunkt während einer Messfahrt auf der Messstrecke S1c vorlag. Die Ausbreitungsrechnungen wurden jeweils für die MiRo Raffinerien und das Rheinhafendampfkraftwerk als Emissionsquellen von Aerosolpartikeln bzw. deren Vorläufersubstanzen durchgeführt. Die hierfür verwendeten Parameter können Tab. 4.4 entnommen werden (siehe auch Anhang F). Die Informationen

	MiRo Raffinerien	Rheinhafen- dampfkraftwerk
$E_{\rm PNC}$ in kg h ⁻¹	850	335
v_S in m s ⁻¹	7	10
T_S in K	$473,\!15$	$373,\!15$
h_S in m	233	210

Tabelle 4.4.: Parameter des Gauß-Fahnenmodells zur Durchführung der Ausbreitungsrechnungen für freigesetzte Luftbeimengungen durch Karlsruher Industrieanlagen.

über die Austrittstemperatur und -geschwindigkeit am Schornstein

wurden der Arbeit von Pregger und Friedrich (2009) entnommen. Weiterhin wurde zur Vereinfachung für beide Emissionsquellen eine Bauhöhe des Schornsteins von $h_S = 220 \text{ m}$ bei einem Durchmesser von $d_S = 15 \text{ m}$ angenommen. Die Umgebungstemperatur am Schornstein T_U entspricht dem langjährigen Temperaturmittel von Karlsruhe (283,85 K). Die restlichen Daten für die Windgeschwindigkeit u und der Stabilitätsklasse, die zwischen den einzelnen Ausbreitungsrechnungen variieren, stammen aus Messdaten des 200 m-Messmasts des KIT, die in 10-minütiger Auflösung vorliegen. Für u wurde die Windgeschwindigkeitsmessung in 200 m Höhe verwendet. Die Stabilitätsklassen leiten sich aus der Standardabweichung der Windrichtung in 100 m Höhe für ein 10 min-Intervall ab (Tab. 4.5). Der in Gl. 4.8 eingehende vertikale Gradient der

Tabelle 4.5.: Stabilitätsklassen in Abhängigkeit der Standardabweichung der Windrichtung $\delta_{100 \text{ m}}$ in 100 m Höhe (KTA, 2006).

Stabilitätsklasse	$\sigma(\delta_{ m 100m})$
А	> 16, 9
В	> 12, 0
С	> 8, 8
D	> 5, 0
Ε	> 3, 0
F	sonst

potentiellen Temperatur wird mit $\frac{\partial \theta}{\partial z} = 2 \frac{K}{100m}$ im leicht stabilen Fall und $\frac{\partial \theta}{\partial z} = 3 \frac{K}{100m}$ im stabilen Fall gleichgesetzt.

Eine so berechnete Konzentrationsverteilung einer Abgasfahne weist keine Abhängigkeit von der Windrichtung auf, so dass die Fahnenachse parallel zur x-Achse verläuft (Abb. 4.8(a)). Um die variierende Windrichtung während der Messfahrten zu berücksichtigen, werden die berechneten Abgasfahnen in Abhängigkeit der jeweiligen Windrichtung rotiert (Abb. 4.8(b)). Hierfür wurden ebenfalls die Messungen der Windrichtung in 200 m Höhe $\delta_{200 \text{ m}}$



Abbildung 4.8.: Schematische Darstellung der Vorgehensweise zur Bestimmung der modellierten Verteilung der Partikelanzahlkonzentration in Abb. 4.7. Details siehe Text.

am KIT Messmast verwendet. Die Rotation der Abgasfahne erfolgt mit Hilfe der Rotationsmatrix

$$R_{\delta_{200\,\mathrm{m}}} = \begin{pmatrix} \cos \delta_{200\,\mathrm{m}} & -\sin \delta_{200\,\mathrm{m}} \\ \sin \delta_{200\,\mathrm{m}} & \cos \delta_{200\,\mathrm{m}} \end{pmatrix}$$
(4.10)

um den Punkt P_{Quelle} , so dass für die rotierte Fahne $\bar{\rho}'(x', y', z' = z)$ folgt:

$$\bar{\rho}' = 2 \begin{pmatrix} \bar{\rho}_x \cos \delta_{200 \,\mathrm{m}} - (\bar{\rho}_y - y_{\mathrm{Quelle}}) \sin \delta_{200 \,\mathrm{m}} \\ \bar{\rho}_x \sin \delta_{200 \,\mathrm{m}} + (\bar{\rho}_y - y_{\mathrm{Quelle}}) \cos \delta_{200 \,\mathrm{m}} \end{pmatrix} .$$
(4.11)

Nach Drehung der Abgasfahnen der einzelnen Ausbreitungsrechnungen beider Emissionsquellen werden die mittleren Abgasfahnen für die verwendeten Ausbreitungsbedingungen im Jahr 2010 bestimmt. Anschließend erfolgt eine Überlagerung der Abgasfahnen beider Quellen gemäß ihrer geographischen Lage zueinander (Abb. 4.8(c)) und die Bestimmung der Schadstoffverteilung am Boden entlang eines Teilstück der Messstrecke, dass den Segmenten 1 bis 287 von Messstrecke S1c entspricht. Um die modellierte mit der beobachteten Verteilung mittelnander vergleichen zu können, ist die modellierte Verteilung mittels der beobachteten innerhalb des Teilstücks der Strecke mit folgender Vorschrift normiert:

$$\bar{\rho}_{i,\text{norm.,PNC}} = \left(\bar{\rho}_{i,\text{PNC}} - \min_{1 \le i \le 287} \tilde{c}_{.50,\text{PNC}_{3775}} \right) \\ \cdot \frac{\max_{1 \le i \le 287} \tilde{c}_{.50,\text{PNC}_{3775}} - \min_{1 \le i \le 287} \tilde{c}_{.50,\text{PNC}_{3775}}}{\max_{1 \le i \le 287} \bar{\rho}_{i,\text{PNC}} - \min_{1 \le i \le 287} \bar{\rho}_{i,\text{PNC}}} \\ + \min_{1 \le i \le 287} \tilde{c}_{.50,\text{PNC}_{3775}} \cdot$$
(4.12)

Diese Normierung ist notwendig, da im Gauß-Fahnenmodell zum einen keine Hintergrundkonzentrationen der Partikelanzahlen berücksichtigt werden, die zudem zwischen den einzelnen Messfahrten variieren und zum anderen jegliche Aerosolprozesse vernachlässigt werden.

Das so berechnete Streckenprofil der Partikelanzahlkonzentrationen zeigt bei südwestlichen Windrichtungen eine fast perfekte Übereinstimmung gegenüber dem gemessen Profil (Abb. 4.9). Lediglich die kleinskalige Variabilität entlang dem Konzentrationsprofil aufgrund lokaler Emissionen werden nicht wiedergeben, da solche im Gaußmodell nicht berücksichtigt werden. Somit bestätigt sich die Vermutung, dass die partikelförmige Luftbelastung im nördlichen Umland von Karlsruhe durch Industrieemissionen aus dem Westteil von Karlsruhe verursacht wird. Diese Beeinflussung der nördlichen Umgebung von Karlsruhe durch partikelförmige städtische Industrieemissionen wurde auch in Untersuchungen von



Abbildung 4.9.: Vergleich zwischen gemessenen und modellierten Streckenprofilen der mittleren Partikelanzahlkonzentration $\tilde{c}_{.50, \text{PNC}_{3775}}(\Delta n = 60)$ bei südwestlicher (142 Messfahrten, schwarz) und nordöstlicher Anströmung (110 Messfahrten, grau).

Junkermann et al. (2011a) gezeigt. Im Sommer 2016 wurde eine mehrwöchige stationäre Messung an der Messstrecke im nördlich Umland (Projekt TRAM01) durch das IMK-AAF durchgeführt. Mit Hilfe von Erfassung der Partikelgrößenverteilungen und der chemischen Partikelzusammensetzung soll in Projekt TRAM01 unter anderem untersucht werden, ob Partikel bei einer südwestlichen Anströmung typische Eigenschaften von Raffinerieemissionen vorweisen und so die Ergebnisse der Messungen der AERO-TRAM und der Gaußmodellrechnungen bestätigen.

5. Statistisches Verfahren zur Ermittlung von lokalen Maximalkonzentrationen

Modellgestützte Untersuchungen der Luftqualität stellen stets einen Kompromiss von verschiedenen Faktoren wie z. B. der Modellauflösung, des Modellgebiets, der berücksichtigten Prozesse oder der verfügbaren Rechnerleistung dar. Das in Kap. 4.3 verwendete Gaußmodell vernachlässigt außer der Advektion und der Turbulenz jegliche Prozesse, welche die Ausbreitung von Luftschadstoffen aus einer Punktquelle beeinflussen. Diese Vereinfachung erlaubt es, hoch aufgelöst eine mittlere räumliche Konzentrationsverteilung für ein wenige Quadratkilometer großes Gebiet bei geringen Rechenaufwand zu modellieren. Allerdings kann solch ein Modell nur eingeschränkt unter bestimmten Voraussetzungen eingesetzt werden.

Demgegenüber beschreiben Euler-Ausbreitungsmodelle wie COSMO-ART atmosphärische Vorgänge sehr detailliert und enthalten alle relevante Prozesse. Mit solchen Modellen ist es möglich die Luftbelastung für ein Modellgebiet, dass z. B. das gesamte Bundesgebiet Deutschland umfasst, zu simulieren. Aufgrund der hohen Modellkomplexität ist der Rechenaufwand stark erhöht, so dass im Vergleich zu einem Gaußmodell die räumliche Modellauflösung deutlich geringer ist. So wird z. B. in COSMO-ART für ein Modellgebiet, das die gesamte Bundesrepublik umfasst, eine horizontale Auflösung von 2,8 km × 2,8 km verwendet. Die berechnete Schadstoffkonzentration an einem Gitterpunkt beschreibt somit ein räumliches Mittel für eine der Modellauflösung entsprechenden Fläche.

Stark erhöhte Schadstoffkonzentrationen, die in der Regel durch Straßenverkehr verursacht werden und für die Problematik der Grenzwerteinhaltung relevant sind, treten allerdings im direkten Umfeld der Emissionsquelle auf und sind lokal stark eingegrenzt. Solch hohe Luftbelastungen, die zum Teil Grenzwerte verletzen, können von COSMO-ART nicht erfasst werden, da diese nur kleinräumig auftreten. Dies kann mit Hilfe von Abb. 5.1 illustriert werden. Die simulierte Zeitreihe der NO_2 -Belastung basiert auf ei-



Abbildung 5.1.: Simulierte und beobachtete zeitliche Entwicklung der NO_2 -Konzentration in Bremen vom 29.04.2008 bis 30.04.2008. Die städtische Hintergrundstation ("Bremen-Mitte") und die Verkehrsstation ("Bremen-Verkehr 1") befinden sich im gleichen Gitterpunkt.

ner COSMO-ART Simulation mit einer horizontalen Auflösung von 2,8 km × 2,8 km. Die simulierte Zeitreihe weist eine hohe Ähnlichkeit mit der Zeitreihe auf, die an einer Station gemessen wurde, die repräsentativ für den städtischen Hintergrund ist. Die Übereinstimmung zwischen dem simulierten Flächenmittel und einer Punktmessung kann dadurch erklärt werden, dass nach 39. BImSchV¹ Messstationen für den städtischen Hintergrund für mehrere Quadratkilometer repräsentativ sein müssen. Im Gegensatz dazu wird die beobachtete NO₂-Belastung an einer Verkehrsstation stark unterschätzt, da solche Stationen nur die kleinräumige Situation

¹Neununddreißigste Verordnung zur Durchführung des Bundes-Immissionsschutzgesetzes.

an einem Straßenabschnitts mit einer Länge von wenigen hundert Metern abbilden und solche kleinräumigen Situationen aufgrund der Modellauflösung nicht aufgelöst werden können. Allerdings sind genau solche Situationen von großen Interesse, da wie bereits erwähnt, diese für Grenzwertüberschreitungen relevant sind. Im Umkehrschluss bedeutet das, dass Modelle wie COSMO-ART eigentlich nicht dazu verwendet werden können, Verletzungen der Grenzwerte zu untersuchen.

Im folgenden soll nun ein Verfahren vorgestellt werden, dass es ermöglicht aus Simulationsergebnissen des Modells COSMO-ART die stickoxidförmige Luftqualitätssituation an Verkehrstationen abzuleiten. Es soll also die kleinskalige, erhöhte Stickoxidbelastung aus einem modellierten räumlichen Mittelwert der Stickoxidkonzentration bestimmt werden können. Hierfür werden die Stickoxidprofile im Jahresmittel verwendet, die mittels des mobilen Messsystems AERO-TRAM entlang den Messstrecken im Raum Karlsruhe erfasst wurden. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird mit Hilfe des Modellsystems COSMO-ART dieses Verfahren verwendet, um die kleinräumige, verkehrsbedingte Erhöhung der Stickoxidbelastung auch in anderen deutschen Städten abzuleiten.

5.1. Datengrundlage

Das Messsystem AERO-TRAM kann dazu genutzt werden, die mittlere Stickoxidkonzentration mit Hilfe der in Kap. 3 vorgestellten Methoden entlang einer Messstrecke zu bestimmen, die z. B. in Kap. 4.3 für die Messstrecke S1c bestimmt wurde. Für solch eine Konzentrationsverteilung entlang einer Messstrecke kann, wie in Abb. 5.2 dargestellt, innerhalb eines 2,8 km-Abschnitt das Mittel $\hat{c}'_{\rm Mittel,\chi}$ über diese Strecke bestimmt werden. Gleichzeitig ist für diesen Abschnitt das Maximum $\hat{c}_{\rm Max,\chi}$ der mittleren Konzentrationsverteilung bekannt. Bei einer sukzessiven Unterteilung der Messstrecken erhält man beispielsweise im Fall der Strecke S2a, die eine Länge von ca. 30 km aufweist, ca. zehn Abschnitte und damit zehn Kombination von $\hat{c}'_{\rm Mittel,\chi}$ und $\hat{c}_{\rm Max,\chi}$. Diese Anzahl ist zu gering, um einen statistisch gesicherten Zusammenhang zwischen den beiden Parametern zu bestimmen.

Zur Erhöhung der Kombinationen von $\hat{c}'_{\text{Mittel},\chi}$ und $\hat{c}_{\text{Max},\chi}$ werden zunächst für jede Einzelfahrt in den Jahren 2010 und 2011 die



Abbildung 5.2.: Segmentierte NO_x -Konzentration $\tilde{c}_{Mittel,NO_x}(\Delta n = 60)$ im Jahresmittel entlang der Messstrecke S2e.

Konzentrationsverteilungen $\tilde{c}_{\text{Mittel,NO}}(\Delta n = 60), \tilde{c}_{\text{Mittel,NO}}(\Delta n =$ 30) und $\tilde{c}_{\text{Mittel,NO}}(\Delta n = 30)$ entlang den entsprechenden Messstrecken bestimmt. Im nächsten Schritt wird aus den so segmentierten Einzelfahrten der Verlauf im Jahresmittel der Konzentrationen von Stickstoffmonoxid $\tilde{c}_{\text{Mittel,NO,Jahr}}(\Delta n = 60)$, Stickstoffdioxid $\tilde{c}_{\text{Mittel,NO}_{\star},\text{Jahr}}(\Delta n = 30)$ und deren Summe $\tilde{c}_{\text{Mittel,NO}_{\star},\text{Jahr}}(\Delta n =$ 30) entlang den Messstrecken S1a und S2a bestimmt, unabhängig davon ob die Einzelfahrten auf der jeweiligen Gesamtstrecke oder nur auf einer Teilstrecke durchgeführt wurden. Im Anschluss wird jetzt über das Messgebiet, das die Messstrecken umfasst, ein Raster mit einer horizontalen Gitterauflösung von $2.8 \,\mathrm{km} \times 2.8 \,\mathrm{km}$ gelegt (Abb. 5.3). Anschließend wird dieses Raster entlang der Messtrecke in 100 m-Schritten verschoben, unter Sicherstellung, dass der Mittelpunkt eines Gitterpunkts mit einem Punkt der Messstrecke zusammenfällt (Abb. 5.4). Verwendet werden nur solche Gitterpunkte, bei denen das enthaltene Teilstück der Messstrecke an einem Rand beginnt und einem beliebig anderen Rand endet. In Verbindung mit der Voraussetzung, dass die Messstrecke durch den Mittelpunkt eines Gitterpunkts verläuft, wird so sichergestellt, dass das enthaltene Teilstück eine Mindestlänge von 2.8 km aufweist. Insgesamt erhält man auf diese Art und Weise 819 Gitterpunkte für die $\hat{c}'_{\rm Mittel,\chi}$ und $\hat{c}_{{\rm Max},\chi}$ bestimmt werden können. Neben den Messdaten der AERO-TRAM stehen deutschland-

Neben den Messdaten der AERO-TRAM stehen deutschlandweite Daten über die Stickoxidemissionen des Straßenverkehrs $E_{\text{NO}_{\times},\text{Verkehr}}$ mit einer horizontalen Auflösung von 2,8 km × 2,8 km,



Abbildung 5.3.: Gerastertes Modellgebiet.

über die Bevölkerungsdichten ψ mit einer horizontalen Auflösung von 100 m × 100 m und über das Straßennetz zur Verfügung. Die $\rm NO_x$ -Emissionen des Straßenverkehrs sind einem Emissionsdatensatz entnommen, der am Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung (IER) an der Universität Stuttgart im Rahmen des Projekts "Verkehrsentwicklung und Umwelt" (VEU) erstellt wurde (Kugler et al., 2013). Dieser Datensatz umfasst Gesamtemissionen von Luftschadstoffen und Treibhausgasen aus Flächen- und Punktquellen in Deutschland für das Jahr 2008, sowie mehrere Szenarien für die Jahre 2020 und 2030. Mit Hilfe von Zeitkurven für jeden Tag eines Jahres kann eine stündliche Auflösung der Emissionen abgeleitet werden. Darüber hinaus sind die Emissionen der einzelnen Luftschadstoffe nach SNAP²-Kategorien aufgeteilt, so dass eine weitere Unterscheidung in zehn Emittentengruppen möglich ist.

²Standardized Nomenclature of Air Pollutants



Abbildung 5.4.: Illustration der Verschiebung des Messgebietsrasters in 100 m-Schritten.

Wie bereits erwähnt, werden im Rahmen des Verfahrens zur Ableitung der Stickoxidbelastung an Verkehrsstationen aus städtischen Hintergrundkonzentrationen lediglich die Verkehrsemissionen der Stickoxide verwendet, die der SNAP-Kategorie Nr. 8 entspre-
chen. Aus den Daten für Gesamtdeutschland wird nur der Teil verwendet, der das Messgebiet aus Abb. 5.3 abdeckt. Das Raster der Emissionsdaten ist deckungsgleich mit dem in Abb. 5.3. Über dieses Raster wird ein feineres Raster mit einer Auflösung von 100 m × 100 m gelegt. Für dieses verfeinerte Raster entspricht die Emissionsstärke an einem Gitterpunkt dem 784-sten Teil der Emissionsstärke des zugehörigen Gitterpunkts des gröberen Gitters. Auf diese Art und Weise kann für die 819 Gitterpunkte, die man durch Verschiebung des Rasters in 100 m-Schritten erhält, die jeweilige verkehrsbedingte NO_x-Emission $\hat{E}_{\rm NO_x,Verkehr}$ bestimmt werden.

Die Daten über die Bevölkerungsdichte werden von der Europäischen Umweltagentur zur Verfügung gestellt und decken die gesamte Europäische Union ab (EEA, 2009). Dieser Datensatz wurde mit Hilfe durch die Eurostat³ erhobener statistischer Bevölkerungsdaten und höchstaufgelöster Informationen über die Landnutzung, die durch das CORINE Land Cover Projekt bestimmt werden (EEA, 2014), abgeleitet (Gallego, 2010). Diesem Datensatz werden zunächst Daten des deutschen Bundesgebiets entnommen, welche später noch weiter verwendet werden. Aus den Bevölkerungsdaten für das Bundesgebiet werden die entsprechenden Daten für das betrachtete Messgebiet in Abb. 5.3 entnommen. Da dieser Datensatz bereits auf einem Raster mit einer Auflösung von $100\,\mathrm{m}\times100\,\mathrm{m}$ basiert, kann anschließend direkt die mittlere Bevölkerungsdichte $\hat{\psi}$ für jeden der 819 Gitterpunkte berechnet werden. Aufgrund der hohen Auflösung der Bevölkerungsdaten ist es außerdem möglich deren Mittel entlang der Messstrecke $\hat{\psi}'$ zu bestimmen.

Das verwendete deutsche Straßennetz beruht auf Daten der OpenStreetMap Foundation. Der Datensatz liegt im Shape-Format vor und kann z.B. auf http://www.mapcruzin.com⁴ abgerufen werden. Das Straßennetz ist weiter unterteilt in beispielsweise Fernverkehrs-, Schnell-, Bundes-, Land-, Kreis- und Nebenstraßen aber auch in Wege wie Rad- und Fußwege. Da primär der Verkehr an stark befahrenen Straßen die kleinräumige Luftbelastung beeinflusst, werden aus dem Gesamtdatensatz des Straßennetz nur die Klassen Fernverkehrs-, Schnell-, Bundes- und Landstraßen verwendet. Diese Straßen liegen jeweils als Punktkoordinaten vor.

³Statistisches Amt der Europäischen Union

⁴http://www.mapcruzin.com/download-shapefile/germany-roads-shape. zip

Für jeden der 819 Gitterpunkte wird die Gesamtlänge des Straßennetzes \hat{L}_S berechnet, indem die Summe der Abstände zwischen den Punktkoordinaten der Straßen, die innerhalb eines Gitterpunkts liegen, bestimmt wird, wobei die Abstände mit Hilfe von Gl. 3.3 ermittelt werden.

Zusammengefasst stehen also folgende Daten an 819 Gitterpunkten zur Verfügung:

- Jahresmittel für 2010 und 2011 der Stickoxidkonzentrationen $\hat{c}'_{\rm Mittel,NO},~\hat{c}'_{\rm Mittel,NO_2}$ und $\hat{c}'_{\rm Mittel,NO_x}$ entlang einer 2,8 km langen Strecke,
- Jahresmittel des Maximums für 2010 und 2011 der Stickoxidkonzentrationen $\hat{c}_{\text{Max,NO}}$, $\hat{c}_{\text{Max,NO}_2}$ und $\hat{c}_{\text{Max},glsnox}$ entlang einer 2,8 km langen Strecke,
- Emissionsstärken $\hat{E}_{NO_x,Verkehr}$ des Straßenverkehrs in einem 2,8 km × 2,8 km-Gebiet,
- mittlere Bevölkerungsdichte $\hat{\psi}$ in einem 2,8 km × 2,8 km-Gebiet,
- mittlere Bevölkerungsdichte $\hat{\psi}'$ entlang einer 2,8 km langen Strecke,
- Länge des Straßennetz \hat{L}_S in einem 2,8 km × 2,8 km-Gebiet.

 $\hat{c}'_{\text{Mittel},\chi}$ entspricht mehr oder weniger dem räumlichen Mittel von χ für eine Fläche mit einer Ausdehnung von 2,8 km × 2,8 km, das durch eine städtische Hintergrundstation erfasst wird. $\hat{c}_{\text{Max},\chi}$ kann mit der kleinräumigen, durch den Straßenverkehr beeinflussten Situation der Luftqualität verglichen werden, die im Jahresmittel an Verkehrsstationen erfasst wird. Mit Hilfe einer linearen Regressionsanalyse kann unter Zuhilfenahme von $\hat{E}_{\text{NO}_x,\text{Verkehr}}, \hat{\psi}$ und \hat{L}_S ein Verfahren abgeleitet werden, um aus einem räumlichen Mittel der Stickoxidkonzentrationen die kleinräumig, verkehrsinduzierte Erhöhung der Belastung bestimmen zu können. Diese Methoden sind im Anhang G genauer beschrieben.

5.2. Korrekturfunktion zur Ableitung räumlicher Mittel aus Streckenmittel

Das Mittel $\hat{c}'_{\text{Mittel},\chi}$ entlang eines Streckenabschnitts in einem 2,8 km × 2,8 km-Gebiet entspricht nicht exakt dem räumlichen Mittel dieses Gebiets. Die Messung entlang einer Strecke in einem solchen Gebiet erfasst nur einen Teil der darin vorliegenden räumlichen Konzentrationsverteilung. Die Abweichung vom wahren Gebietsmittel ist durch die Streckenführung beeinflusst. Dies kann anhand einer räumlichen Verteilung eines synthetischen Parameters ξ in Abb. 5.5(a) veranschaulicht werden. Hier wurde ähnlich



Abbildung 5.5.: (a) Schematische Darstellung zufälliger Streckenverläufe in einem 2,8 km × 2,8 km-Gebiet mit einer räumlichen Verteilung eines synthetischen Parameters ξ . (b) Verteilung des Verhältnisses zwischen Strecken- und Gebietsmittel bei unterschiedlichen Streckenverläufen (Boxplot: Antennen umfassen 90 % der Daten).

wie bei der Erstellung der Gitterpunkte in Kap. 5.1 unter der Voraussetzung, dass diese Strecke horizontal oder vertikal durch den Gebietsmittelpunkt verlaufen muss, eine Messstrecke zufällig durch das Gebiet gelegt. Bei einem vertikalen Streckenverlauf repräsentiert das Mittel $\hat{\xi}'$ entlang der Messstrecke das Gebietsmittel $\hat{\xi}$ mit guter Übereinstimmung, während es bei einem horizontalen

Verlauf überschätzt wird. Bei einer großer Anzahl von Wiederholungen des Experiments bestätigt sich dieses Verhalten (Abb. 5.5(b)). Im Mittel ist die vertikale Streckenführung in der Lage das Gebietsmittel eins-zu-eins zu erfassen, entlang der horizontalen Strecke wird das Gebietsmittel um mehr als 40 % überschätzt. In der Realität ist der Streckenverlauf gegeben, so dass bei den Streckenmitteln $\hat{c}'_{\text{Mittel},\chi}$ zumindest davon ausgegangen werden muss, dass eine Abweichung vom Gebietsmittel existiert.

Die Frage ist nun, ob ein Zusammenhang existiert, mit dem aus dem Streckenmittel $\hat{c}'_{\text{Mittel},\chi}$ der Stickoxide ihre Gebietsmittel $\hat{c}_{\text{Mittel},\text{NO}}$ berechnet werden kann:

$$\hat{c}_{\text{Mittel,NO}} = \text{fct}(\hat{c}'_{\text{Mittel},\chi}) = ?$$
 (5.1)

Zur Entwicklung dieser Funktion, um das Gebietsmittel abzuleiten, werden die Informationen über die Bevölkerungsdichte an den 819 Gitterpunkten verwendet. Diese dienen dabei als Proxy-Variable für die reale räumliche Verteilung der Stickoxide, da die bodennahe Stickoxidbelastung vor allem durch bodennahe Emissionen bestimmt wird, die vor allem an Orten mit starker menschlicher Aktivität erhöht sind. Wie in Abb. 5.6 dargestellt, liegt zwischen dem Gebietsmittel der Bevölkerungsdichte $\hat{\psi}$ und der mittleren Bevölkerungsdichte entlang der Strecke $\hat{\psi'}$ ein starker Zusammenhang vor. Mit Hilfe der einfach linearen Regressionsanalyse kann



Abbildung 5.6.: Streudiagramm für das Streckenmittel $\hat{\psi}'$ und das Gebietsmittel $\hat{\psi}$ der Bevölkerungsdichten.

dieser mit dem Regressionsmodell

$$\dot{\psi}' = 1,24\hat{\psi} + 329,23\tag{5.2}$$

beschrieben werden. Dieses beschreibt die Varianz von $\hat{\psi}'$ zu 75 % und weist eine große Signifikanz mit einem p-Wert von deutlich oberhalb von 0,95 auf. Gl. 5.2 sagt also aus, dass im Mittel das Verhältnis zwischen $\hat{\psi}'$ und $\hat{\psi}$ mit folgender Beziehung beschrieben werden kann:

$$\lambda_{\psi} = \frac{\hat{\psi}}{\dot{\psi}'} = \frac{\hat{\psi}}{1,24\hat{\psi}+329,23} < 1 .$$
 (5.3)

Im Mittel überschätzt also das Streckenmittel das Gebietsmittel. Da das Verhältnis in Gl. 5.3 immer kleiner als 1 ist, werden in der weiteren Datenauswertung diejenigen Gitterpunkten vernachlässigt, für diese das Verhältnis von $\frac{\psi}{dt}$ größer als 1 ist. Solche Verhältnisse ergeben sich für Gitterpunkte, die Streckenabschnitte des südlichen Teils der Linie S1/S11 enthalten. Dort verläuft die Messstrecke durch das dünnbesiedelte Albtal (S1) bzw. durch den nördlichen Teil des Schwarzwalds (S11), der ebenfalls dünn besiedelt ist und verbindet die dortigen Gemeinden miteinander. Die Messtrecke verläuft durch diese Gemeinden, die relativ klein und einige Kilometer voneinander entfernt sind, so dass sich außer den Gemeinden meist keine andere besiedelten Gebiete in den Gitterpunkten befinden. Damit ergeben sich in solchen Gitterpunkten für die mittleren Bevölkerungsdichten entlang der Strecke höhere Werte als im gesamten $2.8 \text{ km} \times 2.8 \text{ km}$ -Gebiet. Durch Vernachlässigung dieser Gitterpunkte reduziert sich für die weitere Auswertung die Anzahl der Gitterpunkte von 819 auf 585.

Gl. 5.3 wird nun genutzt, um aus den Streckenmittel $\hat{c}'_{\text{Mittel},\chi}$ der Stickoxide deren Gebietsmittel mit folgender Beziehung abzuleiten:

$$\hat{c}_{\text{Mittel},\chi} = \hat{c}'_{\text{Mittel},\chi} \cdot \frac{\hat{\psi}}{1,24\hat{\psi}+329,23}$$
 (5.4)

Dabei wird angenommen, dass sich die Strecken- und Gebietsmittel der Stickoxide zueinander genauso verhalten wie die Mittel der BEvölkerungsdichten. Die so berechneten $\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}$ (Abb. 5.7) werden im weiteren Verlauf der Datenauswertung verwendet.



Abbildung 5.7.: Aus Streckenmitteln abgeleitete Gebietsmittel für das Jahr 2010 am Beispiel für NO_2 .

5.3. Verfahren zur Ableitung lokaler Maximalkonzentrationen

Zur Ableitung eines Verfahrens, um lokal erhöhte Stickoxidkonzentrationen aus räumlichen Mittelwerten zu bestimmen stehen nun also 585 Gitterpunkte mit einer räumlichen Ausdehnung von 2,8 km × 2,8 km zur Verfügung, die durch spezifische räumliche Jahresmittel $\hat{c}_{\text{Mittel,NO}}$, $\hat{c}_{\text{Mittel,NO}_2}$ und $\hat{c}_{\text{Mittel,NO}_x}$ der Stickoxide charakterisiert sind. Diese Gebietsmittel werden mit Hilfe von Gl. 5.4 aus den Streckenmitteln $\hat{c}_{\text{Mittel,X}}^p rime$ entlang den Messstrecken der AERO-TRAM berechnet. Weiter ist jeder Gitterpunkt durch eine lokale jahresmittlere Maximalkonzentrationen $\hat{c}_{\text{Max,NO}}$, $\hat{c}_{\text{Max,NO}_2}$ und $\hat{c}_{\text{Max,NO}_x}$ gekennzeichnet. Weitere Gebietseigenschaften der Gitterpunkte stellen die Straßennetzlänge \hat{L}_S und Emissionsstärke \hat{E}_{NO_x} , Verkehr dar.

Unter der Annahme, dass von der Gesamtemission der Stickoxide 90 % direkt in Form von NO und 10 % direkt als NO₂ emittiert werden, können aus der Emissionsstärke $\hat{E}_{\rm NO_x, Verkehr}$ die Emissionsstärken $\hat{E}_{\rm NO, Verkehr}$ und $\hat{E}_{\rm NO_2, Verkehr}$ bestimmt werden. Zur Ableitung des Verfahrens werden Stickoxidmessungen der AERO-TRAM aus dem Jahr 2010 genutzt. Die lokal erhöhten Maximalkonzentrationen $\hat{c}_{Max,\chi}$ sollen nun im folgenden als abhängige Variablen durch die restlichen Parameter beschrieben werden

5.3.1. Regressionsmodell I

Alle 585 Gitterpunkten unterscheiden sich durch variierende Gebietsmittel $\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}$. Gleichzeitig sind mehrere Gitterpunkte durch die gleiche Maximalkonzentration charakterisiert (Abb. 5.8). Dies



Abbildung 5.8.: Maximalkonzentrationen $\hat{c}_{\text{Max,NO}_2}$ und Gebietsmittel $\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}$ der 585 Gitterpunkte.

entsteht durch die in Kap. 5.1 beschriebene Verschiebung der Gitterpunkte. Die Verschiebung eines Gitterpunkts in 100 m-Schritten führt zu leichten Änderungen des Ausschnitts des Konzentrationsprofils, das zur Bestimmung der Gebietsmittel verwendet wird. Während in das Gebietsmittel alle Werte eines Ausschnitts einfließen, stellt das Konzentrationsmaximum einen bestimmten Wert, den Höchstwert, innerhalb eines Ausschnitts dar. Dieser Höchstwert ändert sich nicht zwingend durch die Gitterverschiebung, sondern erst wenn dieser durch die Verschiebung aus dem betrachteten Profilausschnitt wegfällt, oder ein neu hinzukommender Wert größer ist.

Da zwischen den Maximalkonzentrationen $\hat{c}_{\text{Max},\chi}$ und den Gebietsmitteln $\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}$ ein hoch signifikanter linearer Zusammenhang existiert (Tab. 5.1), ist die nächstliegende Möglichkeit zur Bestim-

	NO	NO_2	NO_x
r	0,93	0,90	0,90
p-Wert	$\ll 0,01$	$\ll 0,01$	$\ll 0,01$

Tabelle 5.1.: Korrelationen zwischen $\hat{c}_{Max,\chi}$ und $\hat{c}_{Mittel,\chi}$ der Stickoxide und deren statistische Signifikanz.

mung der lokalen Maximalkonzentrationen ein einfach lineares Regressionsmodell mit dem Gebietsmittel als Regressor:

$$\dot{c}_{\text{Max},\chi} = \beta_0 + \beta_1 \cdot \hat{c}_{\text{Mittel},\chi} .$$
(5.5)

Die Regressionskoeffizienten, Gütemaße und Ergebnisse der Tests auf Gesamteffizienz sind in Tab. 5.2 zusammengefasst. Diese Re-

Tabelle 5.2.: Regressionsmodelle I_χ zur Bestimmung lokaler Maximalkonzentration aus räumlichen Mittelwerten der Stickoxide.

Regressions- modell	$m eta_{0}$ in ppb	eta_1	$ar{R}^2$	p-Wert für $F_{\mathbf{Gesamt}}$
I _{NO}	3,94	1, 59	0,86	$\ll 0,01$
I_{NO_2}	3,77	1, 34	0, 81	$\ll 0,01$
I_{NO_x}	4, 15	1,73	0, 80	$\ll 0,01$

gressionsmodelle besagen, dass die lokale Maximalkonzentrationen bereits alleinig durch das räumliche Mittel der Stickoxide abgeleitet werden können und dabei mindestens 80 % der Varianz von $\hat{c}_{\text{Max},\chi}$ durch die Regressionsmodelle beschrieben wird. Der beschriebene Zusammenhang ist für alle Regressionsmodelle hoch signifikant.

5.3.2. Regressionsmodell II

Alternativ kann die lokale Maximalkonzentration auch als relative lokale Überhöhung dargestellt werden:

$$\hat{\lambda}_{\chi} = \frac{\hat{c}_{\text{Max},\chi}}{\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}} .$$
(5.6)

Dies hat gegenüber der Betrachtung der absoluten Maximalkonzentrationen den Vorteil, dass nun jeder Gitterpunkt durch variierende relative Maximalkonzentrationen charakterisiert ist (Abb. 5.9). Für



Abbildung 5.9.: Relative lokale Überhöhung $\hat{\lambda}_{NO_2}$ und inverse Gebietsmittel $\hat{c}_{Mittel, \gamma}^{-1}$ der 585 Gitterpunkte.

das Verhältnis $\hat{\lambda}_{\chi}$ existiert ein hoch signifikanter linearer Zusammenhang mit dem Inversen des Gebietsmittel (Tab. 5.3), weswegen

Tabelle 5.3.: Korrelationen zwischen $\hat{\lambda}_{\chi}$ und $\frac{1}{\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}}$ der Stickoxide und deren statistische Signifikanz.

	NO	NO_2	NO_x
r	0,83	0,91	0,85
p-Wert	$\ll 0,01$	$\ll 0,01$	$\ll 0,01$

dieser zur Erstellung eines weiteren einfach linearen Regressionsmodells verwendet wird:

$$\dot{\lambda}_{\chi} = \beta_0 + \frac{\beta_1}{\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}} .$$
(5.7)

Diese Regressionsmodelle beschreiben, dass mit zunehmender Stickoxidbelastung im räumlichen Mittel die relative lokale Überhöhung abnimmt. Die Regressionsmodelle sind in der Lage ca. 70 % der Gesamtvarianz von $\hat{\lambda}_{\chi}$ zu beschreiben (Tab. 5.4).

Tabelle 5.4.: Regressionsmodelle II_{χ} zur Bestimmung relativer lokaler Überhöhungen aus räumlichen Mittelwerten der Stickoxide.

Regressions- modell	eta_0	eta_1 in ppb	$ar{R}^2$	p-Wert für $F_{\mathbf{Gesamt}}$
II _{NO}	1, 10	7, 52	0,68	$\ll 0,01$
II_{NO_2}	0,85	7,48	0, 83	$\ll 0,01$
$\mathrm{II}_{\mathrm{NO}_{\mathrm{x}}}$	0,93	15,07	0,72	$\ll 0,01$

5.3.3. Regressionsmodell III

Neben dem Gebietsmittel bzw. dessen Inversen wird die lokal erhöhte Stickoxidbelastung auch durch andere Faktoren beeinflusst. Diese werden durch lokale, also standortspezifische Parameter, wie das Verkehrsaufkommen bestimmt. Da solche kleinräumigen Faktoren ebenfalls nicht von einem $2,8 \text{ km} \times 2,8 \text{ km}$ -Gitter aufgelöst werden, müssen diese Faktoren durch Eigenschaften beschreiben werden, die mit so einer Gitterauflösung vorliegen.

Eine lokal erhöhte Stickoxidbelastung wird meist durch Emissionen des Straßenverkehrs verursacht. Die gesamte Emissionsstärke \hat{E}_{χ} steht dabei in direkten Zusammenhang mit der Verkehrsdichte \hat{L}_S , allerdings stehen solche Daten nicht zur Verfügung. Stattdessen werden als Proxy-Daten die Straßennetzlänge verwendet, da angenommen werden kann, dass Gitterpunkte die viele Straßenkilometer umfassen, auch durch ein hohes Verkehrsaufkommen geprägt sind. Eine Regressionsanalyse zeigt auf, dass die zusätzliche Berücksichtigung des Produkts aus \hat{E}_{χ} und \hat{L}_{S} zu einer Verbesserung der Modellgüte des Regressionsmodells II_{χ} führt. Dieses zweifach lineare Regressionsmodell hat die Form

$$\dot{\lambda}_{\chi} = \beta_0 + \frac{\beta_1}{\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}} + \beta_2 \cdot \hat{E}_{\chi} \hat{L}_S . \qquad (5.8)$$

Die Korrelationen zwischen $\hat{\lambda}_{\chi}$ und $\hat{E}_{\chi}\hat{L}_{S}$ sind in Tab. 5.5 zusammengefasst. Obwohl der Zusammenhang durch eine negative

Tabelle 5.5.: Korrelationen zwischen $\hat{\lambda}_{\chi}$ und $\hat{E}_{\chi}\hat{L}_{S}$ der Stickoxide und deren statistische Signifikanz.

	NO	NO_2	NO_x
r	-0, 26	-0, 25	-0, 20
p-Wert	$\ll 0,01$	$\ll 0,01$	$\ll 0,01$

Korrelation beschrieben wird, geht der Parameter $\hat{E}_{\chi}\hat{L}_S$ mit einem positiven Korrelationskoeffizienten in das zweifach lineare Regressionsmodell ein (Tab. 5.6). Dieser Vorzeichenwechsel kommt durch

Regres- sions- modell	eta_0	eta_1 in ppb	eta_2 in h kg ⁻¹ km ⁻¹	$ar{R}^2$	p-Wert für F _{Gesamt}
$\mathrm{III}_{\mathrm{NO}}$	0, 83	8, 18	$1,72\cdot 10^{-4}$	0,70	$\ll 0,01$
III_{NO_2}	0, 64	8,02	$1,19\cdot 10^{-3}$	0,85	$\ll 0,01$
$\mathrm{III}_{\mathrm{NO}_{\mathrm{x}}}$	0, 55	16, 81	$2,11\cdot 10^{-4}$	0,76	$\ll 0,01$

Tabelle 5.6.: Regressionsmodelle III_{χ} zur Bestimmung relativer lokaler Überhöhungen aus räumlichen Mittelwerten der Stickoxide.

die Multikollinearität zwischen den beiden Regressoren zustande, da zwischen diesen ebenfalls eine gewisse Linearität vorliegt (Tab. 5.7). Trotzdem führt die zusätzliche Berücksichtigung von

Tabelle 5.7.: Korrelationen zwischen $\frac{1}{\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}}$ und $\hat{E}_{\chi}\hat{L}_S$ der Stickoxide und deren statistische Signifikanz.

	NO	NO_2	NO_x
r	-0,47	-0, 42	-0,45
p-Wert	$\ll 0,01$	$\ll 0,01$	$\ll 0,01$

 $\hat{E}_{\chi}\hat{L}_S$ in den Regressionsmodellen III_{χ} zu einer Verringerung der unerklärten Varianz von $\hat{\lambda}_{\chi}$ um bis zu vier Prozentpunkte.

5.4. Verifikation der Regressionsmodelle

Die Regressionsmodelle I_{χ} , II_{χ} und III_{χ} , die mit Hilfe von Messdaten der AERO-TRAM aus dem Jahr 2010 abgeleitet wurden, können mit Hilfe der Messdaten der AERO-TRAM aus dem Jahr 2011 überprüft werden. Dazu werden die lokalen Maximalkonzentrationen $\hat{c}'_{Max,\chi}$ mittels den abgeleiteten Regressionsmodelle berechnet und mit den beobachteten Maximalkonzentrationen $\hat{c}_{Max,\chi}$ verglichen. Da die Regressionsmodelle II_{χ} und III_{χ} die relative lokale Überhöhungen $\dot{\lambda}_{\chi,II}$ bzw. $\dot{\lambda}_{\chi,III}$ berechnen, werden diese durch Multiplikation mit den Gebietsmitteln $\hat{c}_{Mittel,\chi}$ in die lokalen Maximalkonzentrationen umgerechnet:

$$\dot{c}_{\text{Mittel},\chi,II} = \dot{\lambda}_{\chi,II} \cdot \hat{c}_{\text{Mittel},\chi} \tag{5.9}$$

bzw.

$$\dot{c}_{\text{Mittel},\chi,III} = \dot{\lambda}_{\chi,III} \cdot \hat{c}_{\text{Mittel},\chi}.$$
(5.10)

Für die Verifikation werden zum einen die Verteilungen beider Variablen unter Zuhilfenahme von Boxplots gegenübergestellt und zum anderen Kenngrößen berechnet, die die Übereinstimmung zwischen den beiden Variablen quantifizieren. Als erste Kenngröße wird der sogenannte *mean fractional bias* (MFB) nach Seigneur et al. (2000) verwendet:

MFB =
$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{C_{\text{mod},i} - C_{\text{obs},i}}{\frac{C_{\text{mod},i} + C_{\text{obs},i}}{2}}$$
, (5.11)

mit: $C_{\text{mod}} = \text{modellierte Konzentration},$ $C_{\text{obs}} = \text{beobachtete Konzentration},$ N = Anzahl der Beobachtungs- bzw. Schätzwerten.

Er ist im Intervall [-2; 2] begrenzt. Dessen Vorteil ist seine Symmetrie bezüglich 0, wobei MFB = 0 eine perfekte Übereinstimmung zwischen beobachteten und geschätzten Werten bedeutet. Positive Werte für MFB weisen auf eine Überschätzung der Beobachtungsdaten hin, während negative Werte mit einer Unterschätzung gleichzusetzen sind.

Ein Nachteil des MFB stellt die Normierung der Abweichung der Schätzwerte von den Beobachtungswerten über den Mittelwert der beiden Größen dar. Dies erschwert die Interpretation des MFB-Werts, da aus diesem nicht direkt die prozentuale Abweichung zwischen mittlerem Schätz- und Beobachtungswert abgelesen werden kann. Darüber hinaus erweist es sich als problematisch, dass beispielsweise MFB = 0,5 und MFB = -0,5 die Über- bzw. Unterschätzung nicht im gleichen Umfang quantifizieren. Ein MFB-Wert von 0,5 weist im Mittel auf eine 67 % Überschätzung der Beobachtungswerte hin, wohingegen MFB = -0, 5 eine Unterschätzung um 40% beschreibt. Trotz dieses starken Einflusses des Vorzeichens des MFB-Werts auf die prozentuale Über- und Unterschätzung der Beobachtungsdaten schlagen Boylan und Russell (2006) symmetrische Grenzen zur Identifikation einer guten bzw. akzeptablen Modellübereinstimmung vor. Diese Grenzen wurden ursprünglich zur Evaluierung modellierter Massen von Aerosolpartikeln entwickelt und werden in dieser Arbeit gleichwertig für Stickoxidkonzentrationen verwendet. Eine gute Modellübereinstimmung mit Beobachtungswerten liegt vor, wenn Gl. 5.11 die Bedingung

$$|MFB| \le 0,3$$
 (5.12)

erfüllt. Eine akzeptable Übereinstimmung ist anzunehmen, wenn

$$|MFB| \le 0, 6$$
 (5.13)

ist. Da die Bestimmung der Abweichungen zwischen Schätz- und Beobachtungswerten und deren Normierung zunächst paarweise stattfindet, wird diese Tatsache genutzt, um ähnlich wie bei der Gegenüberstellung der Absolutwerte dieser Variablen, die Verteilung anhand Lageparameter in einem Boxplot darzustellen. Die Werte MFB_i der einzelnen Paare aus Schätz- und Beobachtungsdaten stellen dabei die Elemente der Summe aus Gl. 5.11 dar.

Als zweite Kenngröße wird der *normalized mean bias factor* (NMBF) verwendet (Yu et al., 2006). Dieser ist wie folgt definiert:

$$\text{NMBF} = \frac{C_{\text{mod}}}{\bar{C}_{\text{obs}}} - 1 \qquad \text{für } \bar{C}_{\text{mod}} \ge \bar{C}_{\text{obs}} , \qquad (5.14)$$

$$\text{NMBF} = 1 - \frac{\bar{C}_{\text{obs}}}{\bar{C}_{\text{mod}}} \qquad \text{für } \bar{C}_{\text{mod}} < \bar{C}_{\text{obs}} . \tag{5.15}$$

Der NMBF ist ebenfalls zu 0 symmetrisch. Eine perfekte Übereinstimmung zwischen $C_{\rm mod}$ und $C_{\rm obs}$ liegt vor, wenn NMBF = 0 ist. Im Gegensatz zum *mean fractional bias* kann aus dem NMBF-Wert direkt der Faktor bestimmt werden, mit dem die Schätzwerte im Mittel von den Beobachtungswerten abweichen. Für NMBF > 0 beträgt der Abweichungsfaktor

$$NMBF + 1$$
 (5.16)

und gibt an, um welchen Faktor die Schätzwerte größer als die Beobachtungswerte sind Bei negativen NMBF-Werten ergibt sich die relative Abweichung über

$$1 - \text{NMBF}$$
, (5.17)

also den Faktor, um den die Beobachtungswerte im Mittel größer als die modellierten Werte sind.

Der Interquartilsabstand IQR stellt die dritte Kenngröße dar. Er bestimmt sich über den Abstand bzw. die Differenz zwischen dem dritten und ersten Quartil einer Variablen und entspricht damit der Größe der Box eines Boxplots. Ähnlich zur Standardabweichung beschreibt der IQR die Streuung der Daten. Zwischen IQR_{obs} der Beobachtungswerte und IQR_{mod} sollten keine zu großen Unterschiede auftreten.

5.4.1. Stickstoffmonoxid

Die Ergebnisse der Kenngrößen sind in Tab. 5.8 zusammengefasst. Dem *normalized mean bias factor* nach überschätzen die Regressionsmodelle die tatsächlich gemessen Werte um nicht mehr als 5%.

Regressions- modell	NMBF	MFB	$\mathrm{IQR}_{\mathrm{Obs}}$	$\mathrm{IQR}_{\mathrm{Mod}}$
I _{NO}	0,04	0,11	$13,\!87$	$13,\!27$
II_{NO}	0,01	$0,\!14$	$13,\!87$	9,23
III _{NO}	0,03	0,16	$13,\!87$	9,93

Tabelle 5.8.: Kenngrößen der Regressionsmodelle I_{NO} , II_{NO} und III_{NO} für Stickstoffmonoxid.

Der fractional bias zeigt ebenfalls an, dass die mittleren Abweichungen zwischen geschätzten und beobachteten Maximalkonzentrationen sehr gering sind. Nur bei der Streuung der modellierten und beobachteten Werte können Unterschiede zwischen den Regressionsmodellen festgestellt werden. Das Regressionsmodell $I_{\rm NO}$ ist in der Lage die beobachtete Streuung der lokalen Maximalkonzentrationen fast identisch wiederzugeben. Für die zwei übrigen Regressionsmodelle ist der Interquartilsabstand ca. 30 % geringer als in der Realität.

Dies kann ebenfalls bei Betrachtung der Lageverteilung der Beobachtungs- und Schätzwerte in Abb. 5.10(a) festgestellt werden. Bei Regressionsmodell I_{NO} wird deutlich, dass zwar die Streuung der Daten, durch die Größe der Box dargestellt, gleich groß ist, diese aber leicht höhere Werte abdeckt. Insgesamt wird die Verteilung der modellierten Werte im Vergleich zu den Beobachtungswerten allerdings schmaler, insbesondere die Lage der 90%-Perzentile ist ca. 10 ppb niedriger. Dies bedeutet, dass außergewöhnlich hohe Maximalkonzentrationen stärker unterschätzt werden als die restlichen Daten. Das arithmetische Mittel beider Verteilungen weist jedoch kaum Unterschiede auf, was bereits durch den NMBF verdeutlicht wird. Die Verteilung der Einzelwerte des MFB (Abb. 5.10(b)) kann genutzt werden, um zu untersuchen, wie stark die Schätzwerte von ihren zugehörigen Beobachtungswerten abweichen. Hier stellt sich ebenfalls ein zufriedenstellendes Ergebnis ein, da mehr als 50 % der Daten innerhalb des Intervalls $MFB_i = \pm 0, 3$ und 90 % innerhalb von MFB_i = $\pm 0, 6$ liegen.



Abbildung 5.10.: (a) Verteilung der gemessen bzw. modellierten lokalen Maximalkonzentrationen $\hat{c}_{\text{Max,NO}}$ und $\dot{c}_{\text{Max,NO}}$ (Horizontale Linien repräsentieren die Quantilenwerte der Beobachtung). (b) Einzelwerte MFB_i (Horizontale Linien repräsentieren die ±0, 3 und ±0, 6 Grenzen des MFB) des MFB. Boxplot: Antennen umfassen 90% der Daten.

Die festgestellte geringere Streuung der durch Regressionsmodell II_{NO} modellierten Maximalkonzentrationen $\dot{c}_{\rm Max,NO}$ spiegelt sich in der geringeren Ausdehnung der Box in Abb. 5.10(a) wider. Auch die Streuung 90% ist deutlich geringer als für die tatsächlichen Werte $\hat{c}_{\rm Max,NO}$. Die unteren 75% von $\dot{c}_{\rm Max,NO}$ entsprechen den mittleren 50% der Beobachtungswerte $\hat{c}_{\rm Max,NO}$. Daraus resultiert, dass nicht nur außergewöhnlich hohe Maximalkonzentrationen stärker unterschätzt, sondern auch vergleichweise niedrige Maximalkonzentrationen überschätzt werden. Dies macht sich ebenfalls in einer Verbreiterung der Verteilung der Einzelwerte des mean fractional bias bemerkbar. Die Lage der 90%-Perzentile, die oberhalb der Grenze von 0, 6 liegt, kann auf diese Überschätzung der niedrigen Maximalkonzentrationen zurückgeführt werden, wobei 70% aller Werte von MFB_i immer noch eine akzeptable Übereinstimmung mit den Beobachtungsdaten aufweisen.

Regressionsmodell III_{NO} zeigte bereits bei der Bestimmung der Kenngrößen in Tab. 5.8 kaum Unterschiede zu Regressionsmodell II_{NO} . Auch bei Betrachtung der Lageverteilungen in Abb. 5.10 treten nur sehr geringe Unterschiede auf, so dass in diesem Fall die Verwendung eines komplexeren Regressionsmodells, da zweifach linear, nicht sinnvoll ist. Zudem kann eine leichte Rechtschiefe der Verteilung beobachtet werden, da der Median der Daten eine Verschiebung zum ersten Quartil aufweist.

Insgesamt lässt sich feststellen, das für Stickstoffmonoxid Regressionsmodell I_{NO} am besten dazu geeignet ist, die aus Messdaten der AERO-TRAM abgeleiteten lokalen Maximalkonzentrationen wiederzugeben. Regressionsmodell II_{NO} bestimmt im Mittel $\hat{c}_{\text{Max,NO}}$ geringfügig besser, repräsentiert aber die beobachtete Verteilung schlechter.

5.4.2. Stickstoffdioxid

Im Vergleich zu Stickstoffmonoxid sind die Abweichungen zwischen den mittels den Regressionsmodelle für NO_2 berechneten und den tatsächlich gemessenen lokal erhöhten Maximalkonzentrationen größer. Sowohl der *normalized mean bias factor* wie auch der *mean fractional bias* weisen auf eine zum Teil starke Überschätzung der Maximalkonzentrationen für Stickstoffdioxid im Mittel hin (Tab. 5.9). Regressionsmodell I_{NO_2} weist dabei im Mittel noch die beste Übereinstimmung auf, da eine mittlere Überschätzung von

Regressions- modell	NMBF	MFB	$\mathrm{IQR}_{\mathrm{Obs}}$	$\mathrm{IQR}_{\mathrm{Mod}}$
I _{NO2}	0,21	$0,\!19$	2,96	4,28
$\mathrm{II}_{\mathrm{NO}_2}$	0,32	$0,\!14$	2,96	2,71
$\mathrm{III}_{\mathrm{NO}_2}$	$0,\!35$	$0,\!32$	2,96	$3,\!68$

Tabelle 5.9.: Kenngrößen der Regressionsmodelle I_{NO_2} , II_{NO_2} und III_{NO_2} für Stickstoffmonoxid.

 $\hat{c}_{\rm Max,NO}$ durch $\dot{c}_{\rm Max,NO}$ mit dem Faktor 1,21 vorliegt. Die zwei übrigen Regressionsmodelle weisen im Mittel eine Überschätzung der Beobachtungsdaten mit einem Faktor von ca. 1,35 auf. Bei Betrachtung der Streuung der mittleren 50% der Daten zeigt sich, dass diese durch Regressionsmodell $\rm II_{NO_2}$ mit der größten Ähnlichkeit wiedergeben wird. Das Regressionsmodell $\rm I_{NO_2}$ weist hier die größte Abweichung auf.

Dies bestätigt sich auch bei der genaueren Betrachtung der Verteilungen der modellierten und beobachteten lokalen Maximalkonzentrationen in Abb. 5.11(a). Während der Interquartilsabstand der mit Hilfe von Regressionsmodell I_{NO_2} bestimmten Werte deutlich zu groß ist, ist die mittlere Abweichung bei diesem Regressionsmodell am geringsten. Die Verteilung der mittleren 90%der Daten zeigt zudem eine zur Messung ähnliche Streuungsbreite. Die Einzelwerte des MFB zeigen, dass 70 % der modellierten Maximalkonzentrationen $\dot{c}_{Max,NO}$ stehen in guter Übereinstimmung mit $\hat{c}_{\text{Max,NO}}$ während ca. 20% der Daten immer noch eine ausreichende Übereinstimmung aufweisen. Im Gegensatz dazu sind die Abweichungen für die zwei anderen Regressionsmodelle zur Ableitung lokaler Maximalkonzentrationen der Stickoxide größer, da insgesamt die Verteilungen zu höheren Konzentrationswerten verschoben sind. Allerdings kann bei Regressionsmodell II_{NO_2} festgestellt werden, dass der Interquartilsabstand, dargestellt durch die die Größe der Box, identisch mit dem beobachteten Abstand ist. Gleichzeitig ist jedoch die Streuungsbreite betrachtet über 90 % der Daten deutlich geringer ist. Dies ist für Regressionsmodell III_{NO_2} nicht der Fall. Hier ist diese Streuungsbreite ebenfalls identisch zur



Abbildung 5.11.: (a) Verteilung der gemessen bzw. modellierten lokalen Maximalkonzentrationen $\hat{c}_{\text{Max,NO}_2}$ und $\dot{c}_{\text{Max,NO}_2}$ (Horizontale Linien repräsentieren die Quantilenwerte der Beobachtung). (b) Einzelwerte MFB_i (Horizontale Linien repräsentieren die ±0, 3 und ±0,6 Grenzen des MFB) des MFB. Boxplot: Antennen umfassen 90 % der Daten.

Beobachtung, wobei bei diesem Regressionsmodell die Maximalkonzentrationen insgesamt am stärksten überschätzt werden. Bei beiden Regressionsmodellen zeigen die Einzelwerte des mean fractional bias für ca. 50 % der Daten eine gute Übereinstimmung an. Auch die restlichen Maximalkonzentrationen werden im Vergleich zur Beobachtung mit einer zumindest ausreichenden Übereinstimmung wiedergegeben, so dass über alle drei Regressionsmodelle betrachtet, jedes eine ähnlich gute Eignung zur Ableitung lokaler NO₂-Maximalkonzentrationen aufweist.

5.4.3. Stickoxid

Im Mittel bestimmen alle drei Regressionsmodelle die lokale Maximalkonzentrationen der Stickoxide ohne zu große Abweichungen (5.10), wobei Regressionsmodell $I_{NO_{\star}}$ wieder das beste Regressi-

Regressions- modell	NMBF	MFB	$\mathrm{IQR}_{\mathrm{Obs}}$	$\mathrm{IQR}_{\mathrm{Mod}}$
I _{NO_x}	0,08	0,09	16,90	$19,\!54$
II_{NO_x}	0,07	$0,\!16$	$16,\!90$	$10,\!42$
$\mathrm{III}_{\mathrm{NO}_{\mathbf{x}}}$	$0,\!11$	$0,\!17$	$16,\!90$	$13,\!85$

Tabelle 5.10.: Kenngrößen der Regressionsmodelle I_{NO_x} , II_{NO_x} und III_{NO} für Stickoxide.

onsmodell zur Beschreibung der lokalen Maximalkonzentrationen darstellt. Mit einer Überschätzung von ca. 10 % kann bei Regressionsmodell $\rm III_{NO_x}$ die größte Diskrepanz zu den tatsächlichen Maximalkonzentrationen $\hat{c}_{\rm Max,NO}$ festgestellt werden. Dieses Regressionsmodell weist mit MFB = 0.17 die stärkste Nullabweichung des mean fractional bias auf. Im Gegensatz zum Regressionsmodell $\rm II_{NO_x}$ ist der Unterschied des Interquartilsabstands und damit der Streuung der Daten gegenüber den tatsächlichen Werten allerdings deutlich geringer. Bei Regressionsmodell $\rm II_{NO_x}$ kann festgestellt werden, dass hier die Streuung der Maximalkonzentrationen geringfügig höher ist als bei den AERO-TRAM Daten.

Dies wird ebenfalls in den Verteilungen der modellierten Werte für $\dot{c}_{\text{Max,NO}}$ in Abb. 5.12(a) deutlich. Gegenüber Regressionsmodell $III_{NO_{v}}$ entspricht die Ausdehnung der Box von Regressionsmodell $III_{NO_{n}}$ besser dem Umfang der mittleren 50 % der Beobachtungsdaten $\hat{c}_{\text{Max,NO}}$. Allerdings weisen beide Regressionsmodelle eine Rechtsschiefe auf, die insbesondere bei Regressionsmodell III_{NO}, ausgeprägt ist, da hier bereits 25 % der modellierten Maximalkonzentrationen Werte zwischen 23 ppb und 25 ppb aufweisen. Wie bei Stickstoffmonoxid sind diese zwei Regressionsmodelle in der Lage im Mittel die beobachteten Verhältnisse wiederzugeben, wobei die Extremwerte der Verteilung der aus AERO-TRAM Daten abgeleiteten lokalen Maximalkonzentrationen unter- bzw. überschätzt werden. Die Verteilung der mittleren 90 % der Daten von Regressionsmodell III_{NO_v} ist jedoch breiter und entspricht stärker der Verteilung der Beobachtungsdaten, was sich auch in der Verteilung der Einzelwerte des *mean fractional bias* in Abb. 5.12(b) widerspiegelt. Der gesamte Boxplot ist schmaler als bei Regressionsmodell $II_{NO_{\star}}$ und fast 90 % der Daten weisen eine akzeptable bzw. 75 % eine gute Übereinstimmung mit den Beobachtungen auf. Für Regressionsmodell $II_{NO_{\nu}}$ ist der Umfang der Daten, der in diese Grenzen fällt geringer, außerdem überschätzt ein kleiner Teil der modellierten $\dot{c}_{\text{Max,NO}_{x}}$ die beobachteten $\hat{c}_{\text{Max,NO}_{x}}$ sehr stark, da der 90%-Perzentilenwert von MFB_i deutlich größer als 0,6 ist.

Regressionsmodell $\mathrm{I}_{\mathrm{NO}_{\star}}$ weist wie im Fall für Stickstoffmonoxid eine hohe Übereinstimmung mit den Messdaten der AERO-TRAM auf, was bereits bei der Auswertung der Kenngrößen aus Tab. 5.10 festgestellt wurde. Die Verschiebung hin zu höheren Konzentrationswerten und die etwas breitere Verteilung der mittleren 50% der Daten deutet darauf hin, dass die beobachteten Maximalkonzentrationen leicht überschätzt werden. Das Regressionsmodell ist jedoch in der Lage auch geringe Werte von $\hat{c}_{\text{Max,NO}}$, wiederzugeben, da die Lage der 5%-Perzentile identisch zum beobachteten Wert ist, die 95 %-Perzentile wird leicht unterschätzt. Dieses Verhalten lässt sich auch in der Verteilung der Einzelwerte des mean fractional bias ablesen. Fast der gesamte Boxplot liegt innerhalb des [-0, 3; 0, 3]Intervalls. Die leichte Überschätzung der tatsächlichen Werte der lokalen Maximalkonzentration spiegelt sich darin wieder, dass 70%der Werte für MFB_i größer als Null sind. Abschließend kann gesagt werden, dass zur Abschätzung lokaler Maximalkonzentration



Abbildung 5.12.: (a) Verteilung der gemessen bzw. modellierten lokalen Maximalkonzentrationen $\hat{c}_{\text{Max,NO}_{x}}$ und $\dot{c}_{\text{Max,NO}_{x}}$ (Horizontale Linien repräsentieren die Quantilenwerte der Beobachtung). (b) Einzelwerte MFB_i (Horizontale Linien repräsentieren die ±0, 3 und ±0, 6 Grenzen des MFB) des MFB. Boxplot: Antennen umfassen 90 % der Daten.

der Stickoxide auch hier wieder Regressionsmodell \mathbf{I}_{χ} am besten geeignet ist.

5.5. Fazit

Bei der bisherigen Verifizierung muss berücksichtigt werden, dass sich diese auf Daten des Messsystems AERO-TRAM aus dem Jahr 2011 stützt. Verglichen zu den Daten aus dem Jahr 2010, die zur Entwicklung der Regressionsmodelle verwendeten wurden, stammen diese zwar aus einem anderen Beobachtungszeitraum, basieren jedoch auf den gleichen Messstrecken. In beiden Zeiträumen treten die signifikanten Maximalkonzentrationen an den selben Orten auf. Auch die gemessen Konzentrationsprofile der Stickoxide im Jahresmittel ähneln sich stark, da das Verkehrsaufkommen in der Umgebung der Messstrecken und Standorte anderer Emissionsquellen, also Einflussfaktoren der Karlsruher Luftbelastung mit Stickoxiden, sich nicht wesentlich verändert haben.

Diese starke Ähnlichkeit beider Datensätze führt dazu, dass das Regressionsmodell, das bereits bei der Entwicklung die größten Modellgüte aufwies(Regressionsmodell I_{χ}), insgesamt am besten geeignet ist, um Maximalkonzentrationen der Stickoxide zu bestimmen. Das abgeleitete Verfahren sollen jedoch zur Ableitung von Maximalkonzentrationen auch in anderen deutschen Städten verwendet werden. Dabei kann angenommen werden, dass sich die dortigen Einflussfaktoren zum Teil deutlich zu den Verhältnissen in Karlsruhe unterscheiden und somit standortspezfische Parameter wie sie in Regressionsmodell III_{χ} enthalten sind, möglicherweise nicht vernachlässigt werden dürfen. Dies wird im folgenden weiter untersucht.

6. Deutschlandweite, mit dem Modellsystem COSMO-ART berechnete, Stickoxidkonzentrationen

Um die Maximalkonzentrationen von Stickoxiden mit dem in Kap. 5 vorgestellten Verfahren auch in anderen deutschen Städten zu bestimmen, werden die Gebietsmittel der Stickoxidkonzentrationen in diesen Städten benötigt. Zu diesem Zweck wird die mittlere Stickoxidbelastung für Deutschland für das Jahr 2008 mittels Modellrechnungen anhand eines $2,8 \text{ km} \times 2,8 \text{ km}$ -Gitters bestimmt. Hierfür wird das Modellsystem COSMO-ART eingesetzt. Dieses Modellsystem basiert auf dem nicht-hydrostatischen, regionalen Vorhersagemodell COSMO des Deutschen Wetterdiensts (Baldauf et al., 2011; Steppeler et al., 2003).

Zunächst werden in diesem Kapitel die Modellgleichungen des Vorhersagemodells COSMO und die Grundlagen der Berücksichtigung gasförmiger Luftbeimengungen in der Erweiterung ART vorgestellt. Daran schließt sich eine Zusammenfassung der für troposphärische Stickoxide grundlegende Chemie an. Anschließend wird die simulierte Stickoxidbelastung für Deutschland im Jahresmittel 2008 vorgestellt. Diese wird mittels mehrerer Simulationen über einzelne Zeiträume approximiert. Die Validierung der berechneten Luftbelastung mit Sickoxiden erfolgt anhand von Beobachtungsdaten.

6.1. Das Vorhersagemodell COSMO und dessen Erweiterung ART

COSMO (**CO**nsortium for **S**mall-Scale **MO**delling) beschreibt die Atmosphäre mit Hilfe der ungefilterten Eulerschen Gleichungen der

Hydro-Thermodynamik. Um kleinskalige turbulente Fluktuationen, die aufgrund der Modellauflösung nicht erfasst werden, berücksichtigen zu können werden alle Modellvariablen einer Reynoldsmittelung unterzogen. Für eine Modellvariable Ψ gilt somit:

$$\Psi = \bar{\Psi} + \Psi' \tag{6.1}$$

wobei

$$\bar{\Psi} = \frac{1}{\Delta V \Delta t} \int \int \Psi \mathrm{d}t \mathrm{d}V \tag{6.2}$$

das Mittel einer Variable über das vom Modellgitter aufgespannte Volumenelement ΔV und dem numerischen Zeitschritt Δt darstellt. Weiter gilt:

$$\bar{\Psi}' = 0. \tag{6.3}$$

Für die Mittel der Geschwindigkeit, der Temperatur und den spezifischen Anteilen der einzelnen Komponenten feuchter Luft werden die von Hesselberg (1926) vorgeschlagene, mit der Dichte des betreffenden Mediums gewichtete Mittel verwendet. Dabei gilt:

$$\Psi = \hat{\Psi} + \Psi'' \tag{6.4}$$

wobei

$$\hat{\Psi} = \frac{\rho \Psi}{\bar{\rho}} \tag{6.5}$$

und

$$\hat{\Psi}'' = 0 \tag{6.6}$$

ist. Außerdem werden alle molekularen Flüsse außer der diffusen Flüsse von Flüssigwasser und Eis vernachlässigt, die spezifische Wärme feuchter Luft mit der spezifischen Wärme trockener Luft gleichgesetzt und Druckänderungen aufgrund von Änderungen in den Wasserkonzentrationsfeldern durch Phasenübergängen nicht berücksichtigt. Damit ergeben sich folgende Modellgleichungssystem, mit dem in COSMO-ART der Atmosphärenzustand beschrieben wird: I. Prognostische Bewegungsgleichung:

$$\bar{\rho}\frac{\hat{\mathrm{d}}\vec{v}}{\mathrm{d}t} = -\nabla\bar{p} + \bar{\rho}\vec{g} - 2\vec{\Omega} \times \left(\bar{\rho}\vec{v}\right) - \nabla\cdot\boldsymbol{T}$$
(6.7)

II. Prognostische Drucktendenzgleichung:

$$\frac{\hat{\mathrm{d}}\bar{p}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hat{c}_{pd}}{\hat{c}_{vd}}\bar{p}\nabla\cdot\hat{\vec{v}} + \left(\frac{\hat{c}_{pd}}{\hat{c}_{vd}} - 1\right)\bar{Q}_h \tag{6.8}$$

III. Prognostische Wärmegleichung:

$$\bar{\rho}\hat{c}_{pd}\frac{\mathrm{d}\hat{T}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}t} + \bar{Q}_h \tag{6.9}$$

IV. Prognostische Bilanzgleichung für Wasserdampf:

$$\bar{\rho}\frac{\hat{d}\hat{q}^{v}}{dt} = -\nabla \cdot \vec{A}^{v} - \left(\bar{I}^{l} + \bar{I}^{f}\right) \tag{6.10}$$

V. Prognostische Bilanzgleichung für Flüssigwasser und Eis:

$$\bar{\rho}\frac{\hat{\mathrm{d}}\hat{q}^{l,f}}{\mathrm{d}t} = -\nabla\cdot\left(\vec{A}^{l,f} + \vec{J}^{l,f}\right) + \bar{I}^{l,f} \tag{6.11}$$

VI. Diagnostische Gleichung für die Dichte feuchter Luft:

$$\bar{\rho} = \bar{p} \left[R_d \left(1 + \left(\frac{R_v}{R_d} - 1 \right) \hat{q}^v - \hat{q}^l - \hat{q}^f \right) \hat{T} \right]^{-1} \tag{6.12}$$

mit:	ho	Dichte feuchter Luft,			
	$\hat{\mathrm{d}}/\mathrm{d}t$	= Lagrangsches Differential			
		$(\partial/\partial t + \hat{ec v} \cdot abla),$			
	\vec{v}	= baryzentrische Geschwindigkeit,			
	p	= Luftdruck,			
	\vec{g}	= Gravitationsbeschleunigung,			
	$ec \Omega$	= konstante Winkelgeschwindigkeit der			
		Erdrotation,			
	T	= Reynoldsscher Spannungstensor			
		(turbulenter Fluss des Impulses),			
	p	= Druck,			
	c_{pd}, c_{vd}	= spezifische Wärme bei konstanten			
		Druck (pd) bzw. konstanten Volumen (vd) ,			
	c_{vd}	= spezifische Wärme bei konstanten Volumen,			
	Q_h	= diabatische Erwärmungsrate,			
	T	= Temperatur,			
	q^v, q^l, q^f	= spezifischer Gehalt an Wasserdampf $(^{v})$,			
	$\rightarrow \rightarrow \rightarrow \rightarrow \rightarrow a$	an Flüssigwasser $(^{l})$ und an Eis $(^{f})$,			
	A^v, A^l, A^f	$=$ turbulenter Fluss des Wasserdampfs $\binom{v}{\cdot}$,			
		des Flüssigwassers $\binom{l}{l}$ und des Eises $\binom{f}{l}$,			
	I^v, I^l, I^f	= Quellen bzw. Senken des Wasserdampfs $(^{l})$,			
		des Flüssigwasser $\binom{l}{}$ und des Eises $\binom{f}{}$,			
	R_d, R_v	= Gaskonstante für trockene Luft $(_d)$			
		bzw. feuchter Luft (v) .			

Die adiabatische Erwärmungsrate Q_h setzt sich wie folgt zusammen:

$$\bar{Q}_h = \hat{L}_V \bar{I}^l + \hat{L}_S \bar{I}^f - \nabla \cdot \left(\vec{H} + \vec{F}\right)$$
(6.13)

mit: $L_V =$ latente Verdampfungswärme,

 L_S = latente Sublimationswärme,

 \vec{H} = turbulenter Fluss der fühlbaren Wärme,

 \vec{F} = Strahlungsflussdichte.

Die turbulenten Flüsse des Impulses ($\mathbf{T} = \overline{\rho \vec{v}'' \vec{v}''}$), der fühlbaren Wärme ($\vec{H} = \hat{c}_{pd} \overline{\rho \vec{v}'' T}$) und der Komponenten feuchter Luft ($\vec{A}^{v,l,f} = \overline{\rho \vec{v}'' q^{v,l,f''}}$) enthalten kleinskalige Fluktuationen, die nicht vom Modell aufgelöst werden können. Daher werden diese Prozesse in COSMO mit Hilfe von Parametrisierungen aus der mittleren Modellvariablen berechnet.

Mit ART (Aerosol and Reactive Trace Gases) steht eine Erweiterung für COSMO in Form eines Chemie-Transport-Modell zur Verfügung (Vogel et al., 2009) um Luftbeimengungen in der Atmosphäre berücksichtigen zu können. Das Modellsystem umfasst neben einer Gasphasenchemieformulierung nach Stockwell et al. (1997) eine modale Beschreibung von Aerosolpartikeln nach Ackermann et al. (1998), die zudem Ruß-, Seesalz- und Mineralstaubpartikel sowie biogenes Aerosol beinhaltet (Lundgren et al., 2013; Riemer et al., 2009; Stanelle et al., 2010; Vogel et al., 2008). COSMO-ART ist ein online gekoppeltes Chemie-Transport-Modell, womit nicht nur die Ausbreitung und chemische Reaktionen von Luftbeimengungen in Abhängigkeit des Atmosphärenzustands modelliert werden, sondern auch Rückkopplungen mit der Atmosphäre berücksichtigt werden.

Da in dieser Arbeit der Schwerpunkt auf der Stickoxidbelastung in Deutschland liegt, wird das Modellsystem COSMO-ART ohne Berücksichtigung jeglicher Aerosolprozesse angewendet. Hinsichtlich atmosphärischen Prozessen, für die Aerosolpartikel unabdingbar sind, wie z. B. die Bildung von Flüssigwasser, ist eine vorgeschriebene Aerosolklimatologie implementiert. Die Grundlage der räumlichen und zeitlichen Änderung des Konzentrationsfelds einer Luftbeimengung *i* bildet die Diffusionsgleichung für deren Partialdichte ρ_i :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_i \vec{v}) + P_i + L_i \tag{6.14}$$

mit: P_i = Produktionsprozess infolge chemischer Reaktionen, L_i = Verlustprozesse infolge chemischer Reaktionen.

Unter Verwendung des Massenmischungsverhältnisses

$$\Psi_i = \frac{\rho_i}{\rho} \tag{6.15}$$

kann die Diffusionsgleichung für das Massenmischungsverhältnisses Ψ_i abgeleitet werden:

$$\frac{\partial \Psi_i \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\Psi_i \rho \vec{v}) + P_i - L_i.$$
(6.16)

Wie bei den Modellgleichungen von COSMO wird Gl. 6.16 einer Reynoldsmittelung unterzogen und das Mittel des Massenmi-

schungsverhältnisses $\overline{\Psi}_i$ mit dem, mit der Dichte des betreffenden Mediums gewichtete Mittel $\hat{\Psi}_i$ ersetzt und es folgt:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \Psi_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\bar{\rho} \hat{\vec{v}} \Psi_i \right) - \nabla \cdot \vec{F}^{\Psi_i} + \bar{P}_i - \bar{L}_i \tag{6.17}$$

mit: \vec{F}^{ψ_i} = turbulenter Fluss des

Massenmischungsverhältnisses Ψ_i .

Dieser turbulente Fluss $(\vec{F}^{\Psi_i} = \overline{\rho} \vec{v}'' \Psi_i'')$ wird analog zu den turbulenten Flüssen in COSMO mit Hilfe einer Parametrisierung aus dem mittleren Massenmischungsverhältnisses $\hat{\Psi}_i$ berechnet. Etwaige Emissionen einer Luftbeimengung *i* gehen als Randbedingung in Gl. 6.17 ein.

6.2. Stickoxidchemie in der urbanen Troposphäre

Die chemischen Reaktionen, die die Stickoxidkonzentrationen in der urbanen Troposphäre bestimmen, sind in der Gasphasenformulierung von COSMO-ART berücksichtigt. Deren Grundlagen sollen nun im folgenden beschrieben werden. In städtischen Gebieten stellen anthropogene Verbrennungsprozesse die dominierende Quelle der Stickoxide dar. Insbesondere der Straßenverkehr kann dabei als Hauptverursacher der Emissionen angesehen werden. Der größte Anteil der Stickoxide gelangt in Form von NO in die Atmosphäre, während nur ein geringer Anteil direkt als NO_2 emittiert wird. Durch Oxidation des Kohlenmonoxids bildet sich weiteres NO_2 . Eine Möglichkeit stellt dabei die Oxidation durch Ozon dar. Dabei stellt sich tagsüber ein photochemisches Gleichgewicht ein:

$$NO_2 + h\nu(\lambda_W < 420 \text{ nm}) \longrightarrow NO + O$$
, (R6.1)

$$O + O_2 + M \longrightarrow O_3 + M$$
, (R6.2)

$$NO + O_3 \longrightarrow NO_2$$
. (R6.3)

Neben der Reaktion zwischen Ozon und Stickstoffmonoxid, die zur $\rm NO_2\text{-}Bildung$ führt, kann $\rm O_3$ durch Photolyse aufgespaltet werden:

$$\mathcal{O}_3 + h\nu (\lambda_W < 320\,\mathrm{nm}) \qquad \longrightarrow \mathcal{O} \ , \qquad (\mathrm{R6.4})$$

$$O_3 + h\nu(320 \,\mathrm{nm} < \lambda_W < 1200 \,\mathrm{nm}) \longrightarrow O^*$$
. (R6.5)

Der atomare Sauerstoff im Grundzustand in Reaktion R6.4 reagiert rasch mit molekularem Sauerstoff zu Ozon zurück. Dazu ist das energetisch angeregte Sauerstoffmolekül aus Reaktion R6.5 nicht in der Lage, kann aber mit Hilfe eines Stoßpartners in seinen Grundzustand zurückfallen und so wieder zu O₃ zurück reagieren. Eine weitere Möglichkeit stellt die Reaktion mit Wasserdampf dar, bei der Hyrodxylradikale gebildet werden:

$$O^* + H_2O \longrightarrow 2OH^{\cdot}$$
. (R6.6)

Dieses Radikal oxidiert beispielsweise Kohlenmonoxid, das ebenfalls bei anthropogenen Verbrennungsprozessen entstehen kann. Dabei kann folgende Reaktionskette ablaufen, bei der mit dem Hydroperoxiradikal (HO₂⁻) eine weitere stark reaktive Verbindung gebildet wird, die wiederum NO zu NO₂ oxidiert:

 $\mathrm{CO} + \mathrm{OH}^{\text{\cdot}} \longrightarrow \mathrm{CO}_2 \ + \mathrm{H}^{\text{\cdot}} \tag{R6.7}$

$$H' + O_2 + M \longrightarrow HO_2' + M$$
 (R6.8)

$$NO + HO_2$$
 $\longrightarrow NO_2 + OH$. (R6.9)

Am Ende der Reaktionskette steht wieder ein Hydroxylradikal zur Verfügung, so dass diese Kette prinzipiell wieder von vorne beginnen kann. Da nun ein weiterer Reaktionsmechanismus existiert, der zur NO₂-Bildung führt, wird sich auch das Gleichgewicht der Reaktionen R6.1-R6.3 ändern.

Aufgrund der starken Reaktivität sind die Hydroxylradikale in der Lage mit einer Vielzahl von Stoffen in der Atmosphäre zu reagieren. Eine besondere Rolle spielen dabei flüchtige organische Verbindungen (VOC) die vielfältige Kohlenstoffverbindungen umfassen. Eine wichtige Komponente in städtischen Umgebungen stellt Formaldehyd dar (HCOH). Der Straßenverkehr stellt dabei eine bedeutende Quelle dar. Unter der Einwirkung von OH⁻ reagiert Formaldehyd zu Wasser und einem Formylradikal (HCO⁻):

$$\text{HCOH} + \text{OH}^{\cdot} \longrightarrow \text{HCO}^{\cdot} + \text{H}_2\text{O}$$
. (R6.10)

Aus dem Formylradikal bildet sich unter dem Einfluss von molekularem Sauerstoff wiederum ein Hydroperoxiradikal, das damit wieder über Reaktion R6.9 zur Bildung von NO_2 führen kann:

$$\text{HCO'} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{CO} + \text{HO}_2$$
. (R6.11)

Neben der Reaktion von HCOH mit OH kann außerdem durch photolytische Spaltung von Formaldehyd HO_2 zur Bildung von NO_2 entstehen:

$$\text{HCOH} + h\nu(\lambda_W < 340 \,\text{nm}) \longrightarrow \text{H}^{\cdot} + \text{HCO}^{\cdot}$$
 (R6.12)

$$H' + O_2 \longrightarrow HO_2'$$
. (R6.13)

Das photolytisch erzeugte Formylradikal aus Reaktion R6.12 steht nun wieder Reaktion R6.11 zur Bildung eines weiteren HO_2 -Radikals zur Verfügung.

Diese Reaktionen zeigen, dass die städtischen Konzentrationen der Komponenten der Stickoxide durch ein Gleichgewicht mit Ozon bestimmt werden. Dieses Gleichgewicht wird allerdings durch andere chemische Verbindungen beeinflusst, wobei nur einige vorgestellt wurden. Kohlenwasserstoffe stellen eine weitere wichtige Einflussgruppe dar. Sie werden ebenfalls in städtischen Umgebungen emittiert, beispielsweise durch Verbrennungsprozesse und Lösemittelemissionnen, aber auch direkt durch Verdampfen kohlenwasserstoffhaltiger Brennstoffe an Tankstellen oder durch Ausgasungen an Kraftstofftanks von Fahrzeugen. Allerdings wurde bei dieser Betrachtung vereinfacht angenommen, dass alle Reaktionspartner, die das photochemische Gleichgewicht in Reaktionen R6.1-R6.3 beeinflussen, aus lokalen, also städtischen Quellen stammen. In der Realität spielen jedoch auch Transportvorgänge eine wichtige Rolle.

Während der Nachtstunden ist dieses Gleichgewicht nicht mehr gültig, da Reaktion R6.1 nicht mehr stattfindet. Da nachts auch die Emissionen stark zurückgehen, findet gemäß Reaktion R6.3 eine verstärkte Oxidation des Stickstoffmonoxids statt. Weiterhin kann nun auch NO_2 in Nitrat (NO_3) weiteroxidiert werden:

$$NO_2 + O_3 \longrightarrow NO_3 + O_2$$
. (R6.14)

Prinzipiell findet diese Reaktion auch tagsüber statt, jedoch wird NO_3 sehr rasch wieder photolytisch in NO_2 und atomaren Sauerstoff gespaltet. In der Nacht reagiert Nitrat mit NO_2 zu Distickstoffpentoxid (N_2O_5):

$$NO_3 + NO_2 \longrightarrow N_2O_5$$
. (R6.15)

Unter dem Einfluss von Wärme kann N_2O_5 wieder in seine Ausgangsstoffe zerfallen. Bei Anwesenheit von Flüssigwasser bildet sich aus N_2O_5 Salpetersäure:

$$N_2O_5 + H_2O(aq) \longrightarrow 2 HNO_3(aq)$$
. (R6.16)

Mit dieser Reaktion werden gasförmige Stickoxide aus der Atmosphäre entfernt, sie ist aber eigentlich eine heterogene Reaktion und somit in der, in dieser Arbeit verwendeten, Konfiguration von COSMO-ART ohne Aerosolprozesse nicht enthalten. Um dennoch diesen wichtigen Umwandlungsprozess der Stickoxide zu berücksichtigen, ist dieser Vorgang als pseudo-heterogene Reaktion implementiert. Niederschlagsereignisse entfernen durch die sogenannte nasse Deposition diese an Flüssigwasser gebundene Stickoxide.

Weitere wichtige Umwandlungsprozesse, die zur Bildung von Salpetersäure führen, sind die Oxidation von Nitrat durch Hydroperoxiradikale in den Nachtstunden sowie die tageszeitunabhängige Oxidation von Stickstoffdioxid durch Hydroxylradikale:

$$NO_3 + HO_2 \longrightarrow HNO_3 + O_2$$
 (R6.17)

$$NO_2 + OH^- \longrightarrow HNO_3$$
. (R6.18)

Ein weiterer Prozess, der zu einer Verringerung der Stickoxidkonzentrationen in der Atmosphäre führt, stellt der Senkprozess der trockenen Deposition dar. Bei diesem Vorgang diffundieren gasförmige Stickoxidverbindungen an Oberflächen und verbleiben auf diesen bzw. gehen Reaktionen mit ihnen ein.

6.3. Methode zur approximierten Bestimmung von Jahresmitteln

Um den benötigten Rechenaufwand der Simulationen zur Bestimmung der deutschlandweiten Stickoxidbelastung im Jahresmittel zu verringern, werden die Rechnungen nicht über alle Tage eines Jahres durchgeführt. Statt dessen wird das Jahresmittel durch das Mittel über mehrere 2-Tagesepisoden approximiert. Beobachtungen an Messstationen zur Überwachung der Luftqualität zeigen, dass die gemessenen Parameter einen charakteristischen Tagesgang aufweisen. Diese Tagesgänge werden durch Transporteinflüsse sowie wetterbedingte und saisonale Auswirkungen überlagert. Unterschiede im Tagesgang aufgrund der Jahreszeiten kann bereits durch vier, über das Jahr verteilte 2-Tagesepisoden beschrieben werden. Die übrigen Einflussparameter sind schwieriger zu erfassen, da z. B. Niederschlagsereignisse, die Luftschadstoffe aus der Atmosphäre auswaschen, mehr oder weniger zufällig im Jahr verteilt auftreten. Die restlichen Einflussparameter hängen stark vom aktuellen Atmosphärenzustand ab, der durch großräumige Wettersysteme bestimmt wird. Hier kann in Deutschland ein Muster beobachtet werden, da sich das Bundesgebiet oder Teile davon abwechselnd unter dem Einfluss von Hochdruck- und Tiefdruckwetterlagen befindet. Es stellt sich nun die Frage, wie viele 2-Tagesepisoden notwendig sind, um neben dem jahreszeitlichen auch den Einfluss durch die großräumige Wetterlage zu erfassen.

Allgemein kann beispielsweise die Konzentration eines Messparameters im Jahresmittel mit folgender Vorschrift berechnet werden:

$$\bar{c}_{\chi,\text{Jahr}} = \frac{1}{183} \sum_{i=1}^{183} \bar{c}_{\chi,2\text{Tage},i}$$
 (6.18)

mit: $\bar{c}_{\chi,2\text{Tage}} = \text{Mittel über einen Zeitraum von zwei Tagen.}$

Wenn nun das Schätzmittel $\bar{c}'_{\chi,\text{Jahr}}$ mit Hilfe einer bestimmten Anzahl *n* zufällig ausgewählten 2-Tagesmitteln bestimmt wird, wird dieses eine Abweichung vom wirklichen Mittel aufweisen, die mit Hilfe des Schätzfehlers

$$\sigma_{\bar{c}_{\chi},\text{Jahr}}' = \frac{\sigma_{\bar{x}_{\chi},\text{Jahr}}}{\sqrt{n}} \tag{6.19}$$

mit: $\sigma_{\bar{x}_{\chi},\text{Jahr}} = \sqrt{\frac{1}{183}\sum(\bar{c}_{\chi,2\text{Tage},i} - \bar{c}_{\chi,\text{Jahr}})^2}$

beschrieben werden kann. Er kann dazu genutzt werden, um zu bestimmen, mit welcher Wahrscheinlichkeit das Schätzmittel wie stark vom wirklichen Mittel abweicht. Beispielsweise liegen Schätzmittel die aus n Werten berechnet werden in 95 % der Fälle innerhalb des Intervalls

$$\bar{c}_{\chi,\text{Jahr}} \pm 1,96\sigma'_{\bar{c}_{\chi},\text{Jahr}} . \tag{6.20}$$

Setzt man nun voraus, dass die Schätzmittel zu $95\,\%$ höchstens $10\,\%$ vom tatsächlichen Mittelwert abweichen dürfen, ergibt sich aus der Beziehung

$$1,96\sigma'_{\bar{c}_{\chi},\text{Jahr}} = 0,1\bar{c}_{\chi,\text{Jahr}} \tag{6.21}$$

folgende Bedingung für die Mindestanzahl der zu verwendenden 2-Tagesmitteln:

$$n = \left(\frac{1,96\sigma_{\bar{x}_{\chi},\text{Jahr}}}{0,1\bar{c}_{\chi,\text{Jahr}}}\right)^2 .$$
(6.22)

Im Folgenden wird nun mit Hilfe von Beobachtungsdaten für das Jahr 2008 des deutschen Messnetzwerks zur Überwachung der Luftqualität untersucht, wie viele Mittel über zwei Tage notwendig sind, um das Jahresmittel der Stickoxide an städtischen Hintergrundstationen zu approximieren. Dabei soll der Fehler nicht größer als 10% des wirklichen Mittels sein. Die Beobachtungsdaten der Messstationen des Messnetzwerks liegen in stündlicher Auflösung vor. Aus diesen Stundenwerten werden je Station 183 2-Tagesmittel $\bar{c}'_{\chi,\text{Jahr}}$ für NO, NO₂ und NO_x sowie die daraus abgeleiteten Jahresmittel $\bar{c}_{\chi,\text{Jahr}}$ und Standardabweichungen $\sigma_{\bar{x}_{\chi},\text{Jahr}}$ berechnet. Im Mittel über alle Messtationen ergeben sich so die in Abb. 6.1 zusammengefassten Anzahlen der 2-Tagesmittel. Mit Ausnahme

Messparameter	Anzahl der 2-Tagesmittel	Anzahl Messstationen
NO	23	163
NO_2	2	99
$\rm NO_x$	6	77

Tabelle 6.1.: Benötigte mittlere Anzahl der 2-Tagesmittel zur

 Approximation des Jahresmittel.

von Stickstoffmonoxid wird nur eine geringe Anzahl von simulierten Perioden über zwei Tage benötigt, um das tatsächliche Jahresmittel in guter Übereinstimmung bestimmen zu können. Daraus kann geschlossen werden, dass die Tagesgänge für $\rm NO_2$ und $\rm NO_x$ kaum Veränderungen im Jahresverlauf aufweisen und auch sehr gering durch meteorologische Einflüsse modifiziert werden. Stickstoffmonoxid zeigt allerdings ein komplett anderes Verhalten. Für diesen Messparameter werden mehr als 20 Episoden über zwei Tage benötigt, um das Jahresmittel mit einer Genauigkeit hinsichtlich der zuvor genannten Bedingungen anzunähern. Bei einer genaueren Analyse der Daten kann jedoch festgestellt werden, dass bei über

50 Stationen des städtischen Hintergrunds einzelne Stundenwerte NO-Konzentrationen größer als 100 ppb aufweisen, ein Wert der eher für Verkehrsstationen typisch ist. Der Großteil der Messwerte liegt hingegen unter 5 ppb. Weiter zeigt sich, dass die Tagesmittel für Stickstoffmonoxid im Jahresverlauf sich stark ähneln, einzelne Tage aber deutlich vom Rest abweichen. Diese Besonderheiten werden durch das Verhalten von Stickstoffmonoxid in der Atmosphäre verursacht. NO ist eine relativ kurzlebige Luftbeimengung und kann nur in unmittelbarer Nähe zum Emissionsort beobachtet werden. Nach Einbringen in die Atmosphäre wird Stickstoffmonoxid rasch in NO₂ und andere Oxidationsprodukte umgewandelt. Insbesondere in städtischen Umgebungen weist es im Vergleich zu NO₂ oder NO_x eine extrem hohe räumliche und zeitliche Variabilität auf, die direkt an Emissionen gebunden ist.

Betrachtet man das approximierte Jahresmittel für 2008, abgeleitet aus zehn zufällig ausgewählten 2-Tagesmitteln, zeigt sich jedoch, das trotz deutlicher Unterschreitung der zuvor bestimmten Anzahl der benötigten 2-Tagesmitteln, die Abweichungen zum wirklichen Jahresmittel sehr gering sind. Hierfür werden die Differenzen $\bar{c}_{\chi,\text{Jahr},\text{Diff}}$ zwischen approximierten und tatsächlichen Jahresmitteln $\bar{c}'_{\chi,\text{Jahr}}$ bzw. $\bar{c}_{\chi,\text{Jahr}}$ der Messstationen gebildet und deren Verteilung dargestellt (Abb. 6.1). Obwohl für NO die benötigte Anzahl der 2-Tageszeiträume deutlich unterschritten wird, findet man hier die geringste Abweichung, die unter ± 0.5 ppb liegt. Auch für die restlichen Messparameter ist die Abweichung vernachlässigbar, da 90 % der approximierten Jahresmittel sich nicht mehr als 1,0 ppb von den tatsächlichen Mitteln unterscheiden. Mit diesen Erkenntnissen kann eine approximierte Bestimmung mit Hilfe von zehn Mittel über 2-Tageszeiträumen vertreten werden.

6.4. Modellkonfiguration

Da sich gezeigt hat, dass zehn zufällig zufällig gewählte Mittel über zwei Tage für eine approximierte Bestimmung des Jahresmittel des Stickoxids und seiner Komponenten an städtischen Hintergrundstationen ausreichend sind, wird die mittlere Stickoxidbelastung in Deutschland für das Jahr 2008 mit COSMO-ART ebenfalls über zehn solcher Zeiträume bestimmt. Die Auswahl dieser Zeiträume erfolgt gleichverteilt über das Jahr. Die ausgewählten Zeiträume


Abbildung 6.1.: Verteilung der Abweichungen $\bar{c}_{\chi,\text{Jahr,Diff}}$ zwischen aus zehn 2-Tagesmitteln approximierte und tatsächliche Jahresmittel 2008 der Stickoxide an städtischen Hintergrundstationen. (Boxplot: Antennen umfassen 90% der Daten).

sind in Tab. 6.2 aufgelistet und umfassen jeweils drei Tage, wobei

11.02.2008-13.02.2008
23.04.2008 - 25.04.2008
04.07.2008 – 06.07.2008
14.09.2008 - 16.09.2008
25.11.2008 - 27.11.2008

Tabelle 6.2.: Simulationszeiträume.

lediglich die letzten zwei Tage zur Bestimmung des Jahresmittel der Stickoxidkonzentrationen verwendet werden. Die ersten 24 h werden verworfen, um der Tatsache Rechnung zu tragen, dass ein regionales Simulationsmodell einige Zeit benötigt, um die räumliche Verteilung der Modellparameter realistisch abzubilden. Dies ist dadurch begründet, dass die Startwerte, mit denen ein regionales Modell initalisiert wird, aus einem übergeordneten Modell mit einer gröberen Gitterauflösung stammen. Da sich damit zu Beginn des Simulationszeitraums die räumliche Verteilung der Modellparameter kaum von den Verteilungen des gröberen Modells, welches die Anfangswerte liefert, unterscheidet, treten hier noch nicht die Vorteile eines höher aufgelösten Modells in Erscheinung, so einem regionalen Modell immer eine gewisse Einschwingzeit gewährleistet werden muss. Neben den Anfangsbedingungen wird ein gröberes Modell außerdem zur Bereitstellung von Randwerten benötigt, da ein regionales Modell nur einen Ausschnitt der Atmosphäre abdeckt.

COSMO-ART wird in der Modellversion 5.1 verwendet. Die räumliche Verteilung der Stickoxidbelastung in Deutschland im Jahresmittel 2008 wird anhand von Simulationsrechnungen für das Modellgebiet COSMO-DE des Deutschen Wetterdiensts (DWD) bestimmt. Das Modellgebiet umfasst das gesamte deutsche Bundesgebiet und erstreckt sich von ca. 1,0 °O bis 19,8 °O sowie von ca. 44,7 °O bis 56,2 °O. Zur Erstellung eines äquidistanten Modellgitters wird die geographische Lage des Nordpols in die Mitte des Modellgebiets gelegt. Dieses rotierte Modellgebiet erstreckt sich von 5.0 °W bis 5.5 °O sowie von ca. 5.0 °S bis 5.5 °N. Das verwendete Modellgitter umfasst 421×461 Gitterpunkte mit einer horizontalen Auflösung von ca. $2,8 \text{ km} (0,025^{\circ})$ sowie 50 vertikale Schichten. Die Modellkonfiguration von COSMO-ART ist mit den Einstellungen des DWD für dieses Modellgebiet fast vollständig identisch. Auf Abweichungen von der operationellen Modellkonfiguration des DWD wird am Ende dieses Abschnitts näher eingegangen.

Die meteorologischen Anfangs- und Randbedingungen stammen aus COSMO-ART Modellrechnungen mit einer horizontalen Auflösung von ca. 7 km (0,0625°). Deren Modellgebiet deckt Europa ab und entspricht dem COSMO-EU Rechengebiet des DWD. Die $7 \text{ km} \times 7 \text{ km}$ Simulationen werden mit der identischen Modellkonfiguration des DWD für dieses Gebiet durchgeführt. Da diese Modellrechnungen auch nur einen Ausschnitt der Atmosphäre umfassen, wird das 7 km-Modell mit meteorologischen Anfangs- und Randdaten aus dem Globalmodell GME des Deutschen Wetterdiensts angetrieben. Die Initial- und Randwerte für Luftbeimengungen stammen aus dem globalen Chemie-Transportmodell MOZART (Brasseur et al., 1998). Die Ergebnisse der Luftbeimengungsparameter für das $7\,{\rm km}\times7\,{\rm km}$ -Gitter werden ebenfalls für den Antrieb des 2,8 km-Modells genutzt.

Die Emissionen von Luftbeimengungen werden in COSMO-ART mit Hilfe des VEU-Datensatzes beschrieben. Dieser wurde auch bei der Erstellung der Regressionsmodelle zur Ableitung lokal erhöhter Maximalkonzentrationen der Stickoxide verwendet und ist in Kap. 5.1 beschrieben. Neben den Informationen für Deutschland, die mit einer horizontalen Auflösung von 2,8 km × 2,8 km vorliegen, ist der Datensatz für die übrigen europäischen Länder mit 7 km × 7 km aufgelöst. Da in diesem Emissionsdatensatz nur Emissionsstärken für NO_x enthalten sind, entsprechen in den Modellrechnungen in Übereinstimmung zu den Regressionsmodellen NO-Emissionen 90 % der Stickoxidgesamtemission. Im Fall von NO₂ wird angenommen, dass 10 % der Stickoxidemissionen direkt in dieser Form in die Atmosphäre eingebracht werden. Diese Aufteilung ist das Resultat von Sensitivitätsstudien.

Bei diesen Sensitivitätstudien wurde neben dieser 90-10-Aufteilung außerdem noch eine 75-25-Aufteilung der Stickoxidemissionen verwendet. Diese Studien wurden durchgeführt, da die Jahresmittel der NO₂-Konzentrationen an Gitterpunkten, die städtische Hintergrundstatonen enthalten, zu Beginn durch die 2,8 km-Modellrechnungen überschätzt wurden. Allerdings wird bei dieser Aufteilung die NO-Konzentration im Jahresmittel an Gitterpunkten, die städtische Hintergrundstationen enthalten gegenüber der gemessenen stark unterschätzt. Dies ist bei einer 90-10-Aufteilung nicht der Fall. Für das Jahresmittel der NO₂-Belastung im städtischen Hintergrund hat eine unterschiedliche Aufteilung der Emissionsstärken der Gesamtstickoxide lediglich geringe Auswirkungen. Das Problem der überschätzten NO₂-Konzentrationen im Jahresmittel konnte mit Hilfe des Einstellungsparameters für die minimale Diffusionskoeffizienten des Impulses tkmmin und der Energie tkhmin in der Modellkonfiguration zu großen Teilen behoben werden. Diese Parameter wurden von ihrem Standardwert 0,4 auf 1,0 erhöht. Damit verstärkt sich im Modell die atmosphärische Turbulenz und damit die Verdünnung von Luftbeimengungen aufgrund von Diffusion. Der Wert 1,0 für tkmmin und tkhmin wurde in der Vergangenheit ebenfalls operationell vom DWD verwendet.

Ein weiteres Problem, das auch durch die modifizierte Modellkonfiguration nicht behoben wird, sind stark erhöhte NO_2 -Konzentrationen während den Nachtstunden (Abb. 6.2(a)). Abends



Abbildung 6.2.: Tagesgang der NO_2 -Konzentrationen (a) und O_3 -Konzentrationen (b) an städtischen Hintergrundstationen im Jahresmittel 2008 (Mod Std: COSMO-ART ohne Modifikationen, Mod adj: COSMO-ART mit erhöhter Depositionsgeschwindigkeit für NO_2).

und nachts findet ein NO₂-Abbau durch Reaktionen mit Ozon statt (Reaktion R6.14). In Abb. 6.2(b) weist der modellierte Ozontagesgang allerdings in den Abendstunden deutlich niedrigere Konzentrationen gegenüber den Beobachtungen auf. Die Ozonverringerung tritt zu früh und zu stark auf, womit im Modell nicht genügend Ozon zum NO₂-Abbau zu Verfügung steht. Neben diesem ozonbedingten Abbau der NO₂-Konzentration trägt ansonsten nur die trockene Deposition zu einer Konzentrationsverringerung bei. Allgemein weisen die Depositionsparametrisierungen in chemischen Tranportmodellen große Unsicherheiten auf (Wesely und Hicks, 2000). In COSMO-ART wurde aus diesem Grund die nächtliche Depositionsgeschwindigkeit für NO_2 um den Faktor 5 erhöht. Unter dieser Voraussetzung weist der in Abb. 6.2(a) dargestellte mittlere Tagesgang ein realistischeres Verhalten auf.

6.5. Validierung der simulierten räumlichen Mittel der Stickoxidkonzentrationen

Neben der Luftbelastung im städtischen Hintergrund mit Stickoxiden und deren Einzelkomponenten werden in diesem Abschnitt außerdem die Ozonkonzentrationen im Jahresmittel 2008 im Detail betrachtet. Die zusätzliche Betrachtung von Ozon ist angebracht, da es, wie in Kap. 6.2 beschrieben, eine äußerst wichtige Rolle in der Atmosphärenchemie der Stickoxide spielt. Eine gute Modellübereinstimmung mit Beobachtungen ist Voraussetzung bei einer anschließenden Ableitung der lokalen Maximalkonzentrationen, da die räumlichen 2,8 km × 2,8 km-Konzentrationsmittel für diesen Zweck in den Regressionsmodellen verwendet werden.

Bei Betrachtung der räumlichen bodennahen NO-Verteilung in Abb. 6.3(a) wird deutlich, dass das Auftreten von Stickstoffmonoxid in großem Maße von lokalen Emissionen abhängig ist. Eine auffallende flächenhafte Erhöhung des Jahresmittels der Luftbelastung mit Stickstoffmonoxid ist im Ruhrgebiet mit seiner hohen Dichte an Industrieanlagen zu beobachten. Weitere Gebiete, die durch hohe NO-Konzentrationen charakterisiert werden, sind die Ballungszentren von Berlin, Hamburg, München, Nürnberg und Stuttgart sowie das Rhein-Main-Gebiet. Außerdem spiegeln sich die Hauptverkehrswege zu einigen Teilen in der räumlichen Verteilung für Stickstoffmonoxid wider, da sich die Autobahnen mit der höchsten Verkehrsbelastung im Jahresmittel der NO-Konzentrationsverteilung abbilden.

Das deutsche Autobahnnetz ist noch deutlicher in der räumlichen Verteilung für Stickstoffdioxid erkennbar (Abb. 6.3(b)). Da in ländlichen Umgebungen abgesehen von Verkehrswegen kaum nennenswerte Emissionsquellen des Vorläufergases Stickstoffmonoxid auftreten, wird in deren Umgebung NO rasch zu NO₂ oxidiert. Aus diesem Grund ist das Straßennetz auch nur schwach in der NO-Verteilung erkennbar. Neben Stickstoffmonoxid wird außerdem auch Stickstoffdioxid direkt durch den Straßenverkehr emittiert.



(a)



Abbildung 6.3.: Simulierte räumliche Verteilung der NO- und NO_2 -Konzentrationen in Bodennähe im Jahresmittel 2008 für Deutschland.

Darüber hinaus lässt sich in städtischen Umgebungen mit einem ausreichenden Angebot an Stickstoffmonoxid eine stark erhöhte Belastung mit Stickstoffdioxid beobachten. Im Jahresmittel treten besonders in den großen Ballungszentren bereits Konzentrationswerte der räumlichen 2,8 km × 2,8 km Mittel oberhalb des Jahresgrenzwert für NO₂ in Höhe von 20 ppb auf, so dass in diesen Umgebungen auch mit einer Überschreitung des Grenzwerts an Verkehrstationen gerechnet werden kann.

Das Zusammenspiel von Stickoxiden und Ozon schlägt sich in der Verteilung der Ozonbelastung in Abb. 6.4 nieder. In städtischen Gebieten ist die Ozonkonzentration stark verringert, da vorhandenes oder neu gebildetes Ozon rasch mit NO zu Stickstoffdioxid reagiert. Auch der Einfluss von Stickoxidemissionen des Straßenverkehrs auf Ozon wird in einer Verringerung bodennaher Ozonkonzentrationen entlang der Hauptverkehrswege deutlich. Im ländlichen Flachland, abseits von Straßen ist die Belastung mit Ozon erhöht, da hier kaum Stickstoffmonoxid und andere Reaktionspartner des Ozons emittiert werden. Die stärkste Belastung mit Ozon tritt in Höhenlagen und in Küstennähe auf. Im Tagesverlauf werden Ozon und Stickstoffdioxid aufgrund der atmosphärischen Turbulenz in höhere Luftschichten transportiert. Aufgrund der dortigen intensiveren Sonnenstrahlung wird verstärkt NO₂ photolytisch in O₃ gespalten, so dass in Höhenlagen ebenfalls stark verringerte NO₂-Konzentrationen zu beobachten sind. Das Ozonmaximum in Küstennähe wird ebenfalls durch Transportvorgänge verursacht. Über dem Meer kommt es besonders in den Morgenstunden zu einer verstärkten photochemischen Bildung von Ozon, dass durch Land-See-Windsysteme an die Küsten transportiert wird.

Zur quantitativen Validierung der Modellergebnisse kommen auch hier die Gütemaße *normalized mean bias factor*, *mean fractional bias* und der Interquartilsabstand zum Einsatz. Neben der Untersuchung der Verteilungen der Absolutkonzentrationen und den Einzelwerten des MBF anhand Boxplots, werden außerdem mittlere Tagesgänge betrachtet. Als Referenz dienen über das Jahr 2008 gemittelte Beobachtungen an städtischen Hintergrundstationen. Dabei werden nur Messdaten aus Beobachtungszeiträumen verwendet, die mit den Simulationsepisoden identisch sind.

Die simulierten und beobachteten Tagesgänge für Sticktoffmonoxid, Stickstoffdioxid, deren Summe sowie für Ozon im Jahresmittel 2008 sind Abb. 6.5 dargestellt. Neben der zeitlichen Mittelung wur-



(a)



Abbildung 6.4.: Simulierte räumliche Verteilung der NO_x - und O_3 -Konzentrationen in Bodennähe im Jahresmittel 2008 für Deutschland.



Abbildung 6.5.: Tagesgänge im Jahresmittel 2008.

de zusätzlich über alle Gitterpunkte gemittelt, die städtische Hintergrundstation enthalten. Entsprechend stellen die beobachteten zeitliche Konzentrationsverläufe ein Mittel über alle Messstationen dar.

Der Tagesverlauf der NO-Konzentrationen weist eine gute Übereinstimmung mit dem beobachteten mittleren Tagesgang auf. Die Maxima während den Vormittags- und Nachmittagsstunden treten ungefähr zu den gleichen Zeitpunkten auf. Allerdings unterschätzt das Modell die Höchstwerte am Morgen unterschätzt, während die Höchstwerte am frühen Abend überschätzt werden, wobei die Abweichung nur wenige ppb beträgt. Allgemein ist die emissionsbedingte NO-Zunahme morgens stärker und auf sehr wenige Stunden beschränkt, während der Anstieg in der zweiten Tageshälfte weniger stark ausgeprägt ist, sich aber auf einen längeren Zeitraum verteilt. Hauptsächlich werden die städtischen NO-Konzentrationen im Tagesverlauf durch den Straßenverkehr bestimmt. Dessen Emissionen weisen einen ähnlichen Tagesgang auf, da sich der Pendlerverkehr in den Morgenstunden mehr oder weniger auf zwei Stunden verteilt. Durch unterschiedliche lange Arbeitszeiten beginnt der Feierabendverkehr bereits nachmittags und endet in den Abendstunden. Dass dies im Modell nicht so wiedergegeben wird, ist dem verwendeten Emissionsdatensatz geschuldet. Die darin enthaltenen Tagesgänge der Straßenverkehrsemissionen (Kugler et al., 2013) gleichen mehr oder weniger dem simulierten Tagesgang für Stickstoffmonoxid in Abb. 6.5 und weichen damit von dem allgemein beobachteten zeitlichen Verlauf des Verkehrsaufkommens ab.

Der mittlere Tagesgang für Stickstoffdioxid wurde bereits in Kap. 6.4 teilweise untersucht. Abgesehen von der nächtlichen Überschätzung der NO_2 -Belastung, werden die Konzentrationsverhältnisse in den ersten zwölf Tagesstunden durch COSMO-ART fast perfekt wiedergegeben. Die maximale Abweichung liegt in diesem Zeitraum unter 2 ppb. Das Auftreten der Maxima und der Minima werden zu den selben Zeitpunkten simuliert, wie sie auch in der Realität beobachtet wurden. Lediglich das nächtliche Minima tritt in COSMO-ART ca. 1 Stunde später auf.

Der zeitliche Tagesverlauf für NO_x fasst die Eigenschaften der NO- NO_2 -Tagesgänge zusammen. Das Konzentrationsmaximum am Morgen wird durch COSMO-ART leicht unterschätzt, da zu dieser Tageszeit die NO-Belastung ebenfalls unterschätzt wird.

Die Unterschätzung in den Abendstunden wird vor allem durch $\rm NO_2\text{-}Unterschätzung$ am Abend verursacht.

In der ersten Tageshäfte werden die Ozonkonzentrationen fast perfekt durch COSMO-ART simuliert. Die Situation in der zweiten Tageshälfte weist allerdings Abweichungen auf, die bereits in Kap. 6.4 beschrieben wurden.

Im Vergleich der Jahresmittel zwischen Modellsimulation und Beobachtung in Tab. 6.3 bestätigen sich diese Ergebnisse. Es zeigt

Para- meter	NMBF	MFB	$\mathrm{IQR}_{\mathrm{Obs}}$	$\mathrm{IQR}_{\mathrm{Mod}}$	Anzahl Mess- statio- nen
NO	-0,13	-0,18	9,15	9,08	101
NO_2	$0,\!08$	$0,\!08$	$5,\!37$	$6,\!15$	101
NO_x	$0,\!05$	0,07	$12,\!22$	$13,\!39$	79
O_3	-0,13	-0,15	4,06	$4,\!85$	91

Tabelle 6.3.: Kenngrößen der simulierten Luftschadstoffbelastungan städtischen Hintergrundstationen im Jahresmittel 2008.

sich, dass die NO-Belastung an städtischen Hintergrundstationen leicht unterschätzt wird. Im Mittel sind die gemessenen NO-Konzentrationen im Jahresmittel um den Faktor 1,13 höher als in COSMO-ART. Die Jahresmittel der NO₂-Konzentrationen werden durch die erhöhten Konzentrationen in den Abendstunden im Mittel um 8% überschätzt. Auch für die Summe der Stickoxide lässt sich im Jahresmittel 2008 eine Überschätzung der Luftbelastung feststellen, wobei diese lediglich 5% beträgt, da die erhöhten Konzentrationen während der zweiten Tageshälfte durch die Unterschätzung des morgendlichen Konzentrationsmaximums teilweise kompensiert wird.

Insgesamt stellt aber COSMO-ART ein geeignetes Modell zur Beschreibung der Luftqualitätssituation für Stickoxide im Jahresmittel für 2008 dar, da für alle betrachteten Luftbeimengungen der *mean fractional bias* eine gute Modellübereinstimmung mit den Beobachtungen signalisiert. Darüber hinaus spiegelt COSMO-ART auch die Streuung der Konzentrationen wider. Im Fall für Stickstoffmonoxid sind diese mehr oder weniger zu den Beobachtungen identisch, für die restlichen Parameter unterscheiden sie sich nur geringfügig.

Die mittlere Überschätzung bzw. Unterschätzung des Stickoxids und seiner Einzelkomponenten sowie des Ozons lässt sich in den Verteilungen der gemessenen und modellierten städtischen Hintergrundkonzentration ebenfalls beobachten. Im Jahresmittel weist die Verteilung der Konzentrationswerte der einzelnen Messstationen bzw. Gitterpunkte eine Verschiebung der gesamten Verteilungen auf (Abb. 6.6). Die Breite der simulierten Verteilungen ist identisch mit der Verteilungsbreite der Jahresmittel an Messstationen, was bereits durch Vergleich der Interquartilsabstände bestätigt wurde. Unterschiede in der Schiefe der Verteilung können ebenfalls nicht festgestellt werden.

Eine systematische Abweichung zwischen Modell und Beobachtung liegt allerdings nicht vor, da die Verteilungen der Einzelwerte der mean fractional bias aller betrachteten Luftbeimengungen sowohl positive wie auch negative Werte umspannen. Die Einzelwerte des MFB zeigen auf, dass für Ozon und Stickstoffdioxid COSMO-ART sehr gut in der Lage ist die beobachteten Jahresmittel des städtischen Hintergrunds zu simulieren, da für diese Verbindungen fast 90 % der modellierten Konzentrationswerte eine gute Übereinstimmung mit den Beobachtungen aufweisen. Das Jahresmittel der Ozonbelastung wird an fast alle Stationen unterschätzt, demgegenüber wird für NO₂ die Mehrheit der Stationswerte überschätzt. Das Verhalten für NO_{x} ist nur unwesentlich schlechter, ca. 50 % der simulierten Jahresmittel stehen in guter und ungefähr 90 % in ausreichender Übereinstimmung mit den Beobachtungsdaten, wobei sich über- und unterschätzte Werte ungefähr die Waage halten. Für Stickstoffmonoxid zeigt COSMO-ART das schlechteste Verhalten. Das Modell ist nur für 25% der gemessenen Jahresmittel in der Lage diese mit guter Genauigkeit zu simulieren, etwas mehr als 50% werden immerhin ausreichend gut genug bestimmt.



Abbildung 6.6.: (a) Verteilung der gemessenen bzw. modellierten Jahresmittel an städtischen Hintergrundstationen. (b) Einzelwerte MFB_i (Horizontale Linien repräsentieren die $\pm 0, 3$ und $\pm 0, 6$ Grenzen des MFB) des MFB auf Grundlage dieser Daten. Boxplot: Antennen umfassen 90% der Daten.

7. Anwendung des Verfahrens zur Ermittlung von lokalen Maximalkonzentrationen auf Modellergebnisse

Die Validierung des Modellsystems COSMO-ART hat gezeigt, dass das Modell dazu geeignet ist, die städtische Hintergrundbelastung für Stickoxide im Jahresmittel zu großen Teilen mit guter Genauigkeit zu bestimmen. Die mit Hilfe von COSMO-ART bestimmten räumliche $2,8 \text{ km} \times 2,8 \text{ km}$ -Konzentrationsmittel für NO, NO₂ und NO_x werden nun zur Bestimmung der Jahresmittel der lokalen Maximalkonzentrationen mittels den Verfahren aus Kap. 5.3 verwendet. Die so berechneten Maximalkonzentrationen werden ebenfalls mit beobachteten lokalen Maximalkonzentrationen im Jahresmittel überprüft. Die Datengrundlage für die Verifikation bilden hier Messungen des deutschen Luftqualitätsnetzwerks an städtischen Verkehrsstationen. Zur Ableitung der lokalen Maximalkonzentrationen werden modellierte Gebietsmittel von Gitterpunkten verwendet, die eine Verkehrsstationen enthalten.

7.1. Stickstoffmonoxid

Für Stickstoffmonoxid stehen für das Jahr 2008 Jahresmittel an 156 verkehrsnahen Messstationen zur Verfügung. Die abgeleiteten lokalen Maximalkonzentrationen weisen für alle Regressionsmodelle eine starke Abweichung auf (Tab. 7.1), wobei die Werte des mean fractional bias noch knapp oberhalb von -0,60 liegen und somit zumindest eine ausreichende Wiedergabe der mittleren Beobachtungsdaten vorliegt. Im Mittel werden die Konzentrationsverhältnisse an Verkehrstationen um ca. 50 % unterschätzt, gleiches gilt für die Streuung. Insgesamt betrachtet, ist Regressionsmodell

Tabelle 7.1.: Kenngrößen der mit Regressionsmodellen I_{NO} , II_{NO} und III_{NO} aus COSMO-ART Simulationen abgleiteten lokale Maximalkonzentrationen, sowie mit COSMO-ART berechneten Gebietsmittel für Stickstoffmonoxid.

Modell	NMBF	MFB	${\rm IQR}_{\rm Obs}$	$\mathbf{IQR}_{\mathbf{Mod}}$
${\rm RegMod}~I_{\rm NO}$	-1,00	-0,58	$25,\!19$	14,02
${\rm RegMod}~{\rm II}_{\rm NO}$	-1,12	-0,58	$25,\!19$	9,76
${\rm RegMod}~{\rm III}_{\rm NO}$	-0.89	-0,52	$25,\!19$	$10,\!50$
COSMO-ART	-3,00	-1,15	25,29	8,84

 $\rm III_{\rm NO}$ noch am besten in der Lage, die mittlere Situation an Verkehrsstationen zu erfassen. Im Vergleich zu den übrigen Verfahren ist die Nullabweichung des NMBF und des MBF am geringsten und lediglich der Interquartilsabstand ist schlechter wiedergegeben als bei Regressionsmodell $\rm I_{\rm NO}$. Weiter zeigen die Kenngrößen, dass die Simulationsergebnisse von COSMO-ART alleinig überhaupt nicht dazu geeignet sind, um die Luftbelastung mit Stickstoffmonoxid an verkerhsbeeinflussten Stationen zu bestimmen.

Die starke Unterschätzung der beobachteten Werte durch die Regressionsmodelle entsteht durch die Tatsache, dass an 90 % der Verkehrstationen die Beobachtungswerte durch alle Verfahren zu niedrig wiedergegeben werden (Abb. 7.1(a)). Die Spannbreite der abgeleiteten Maximalkonzentrationen über 117 Stationen (= 75 %) entspricht der beobachteten Streuung über lediglich ca. 40 Stationen bzw. 25 % der berücksichtigten Verkehrstationen. Das bedeutet, dass für 75 % der Messstationen (= 117) die abgeleitete NO-Belastung Konzentrationswerte annimmt, die den Beobachtungen der 40 am geringsten belasteten Verkehrstationen im Jahresmittel entspricht. Immerhin ist Regressionsmodell III_{NO} in der Lage an 95 % der betrachteten Stationen Maximalkonzentrationen abzuleiten, die in 75 % der Fälle der beobachteten NO-Belastung entspricht.

Die Einzelwerte des *mean fractional bias* in Abb. 7.1(a) zeigen, dass alle Verfahren für ca. 45% der Messstationen in der Lage sind,



Abbildung 7.1.: (a) Verteilung der gemessenen und aus COSMO-ART Simulationen abgeleiteten lokalen Maximalkonzentrationen sowie mit COSMO-ART berechneten Gebietsmittel für Stickstoffmonoxid (Horizontale Linien repräsentieren die Quantilenwerte der Beobachtung). (b) Einzelwerte MFB_i (Horizontale Linien repräsentieren die $\pm 0,3$ und $\pm 0,6$ Grenzen des MFB) des MFB. Boxplot: Antennen umfassen 90% der Daten.

deren NO-Jahresmittel mit ausreichender Genauigkeit wiederzugeben, da für diese Messstationen die Einzelwerte des innerhalb des Intervalls [-0, 6; 0, 6] liegen.

Bei Betrachtung der $2,8 \,\mathrm{km} \times 2,8 \,\mathrm{km}$ Mittelwerte, wie sie von COSMO-ART berechnet werden, zeigt sich, dass diese überhaupt nicht dazu geeignet sind, um die Belastung der Luft mit Stickstoffmonoxid für Umgebungen zu beschreiben, wie sie durch Verkehrstationen repräsentiert wird. Im Mittel sind sie mehr als 50% niedriger als beobachtet. Im direkten Vergleich der Beobachtungswerten an Verkehrstationen mit den Konzentrationswerten der zugehörigen Gitterpunkte (Abb. 7.1(b)) zeigt sich, dass für die Mehrheit der Stationen die Situation auf diese Weise deutlich unterschätzt wird und für mehr als 75 % der Stationen die Übereinstimmung weit außerhalb des akzeptablen Bereichs liegt ($MFB_i < 0, 6$). Erst durch Verwendung der Regressionsmodelle ist man in der Lage, die Luftqualitätssituation an solchen Stationen zumindest annähernd zu beschreiben. An einigen wenigen Stationen ist die Übereinstimmung mit der Beobachtung dennoch akzetabel oder sogar im idealen Bereich ($|MFB_i| < 0.3$). Im Umkehrschluss bedeutet das jedoch, dass an solchen Gitterpunkten die mittlere räumliche Luftbelastung mit Stickstoffmonoxid deutlich überschätzt wird.

7.2. Stickstoffdioxid

Das Jahresmittel 2008 der Stickstoffdioxidkonzentration über 155 Verkehrstationen kann durch alle Verfahren mit guter Genauigkeit abgeleitet werden (Tab. 7.2). Das Mittel über alle Stationen wird durch Regressionsmodell I_{NO_2} in perfekter Übereinstimmung wiedergeben. Die zwei restlichen Regressionsmodelle weisen eine leichte Unterschätzung auf. Der MFB bestätigt dies, da dessen Wert für alle Verfahren innerhalb des Intervalls [-0, 3; 0, 3] liegt, womit eine gute Eignung der Regressionsmodelle zur Bestimmung der lokalen Maximalkonzentrationen vorliegt. Der Vergleich zwischen beobachteten und mittels den Verfahren abgeleiteten Interquartilsabstände zeigt, dass Regressionsmodell II_{NO_2} am schlechtesten die Streuung wiedergibt, da die Streuung bzw. der IQR nur halb so groß wie in der Beobachtung ist. Für dieses Verfahren ist auch die mittlere Übereinstimmung, dargestellt durch den *normalized mean bias factor*, am schwächsten ausgeprägt. Regressionsmodell I_{NO_2} und

Modell	NMBF	MFB	$\mathrm{IQR}_{\mathrm{Obs}}$	$\mathrm{IQR}_{\mathrm{Mod}}$
${\rm RegMod}~{\rm I_{\rm NO_2}}$	-0,01	0,02	11,60	7,25
${\rm RegMod}~{\rm II_{\rm NO_2}}$	-0,21	-0,14	$11,\!60$	$4,\!59$
${\rm Regmod}~{\rm III}_{{\rm NO}_2}$	-0,13	-0,11	11,60	8,02
COSMO-ART	-0,59	-0,42	11,60	5,42

Tabelle 7.2.: Kenngrößen der mit Regressionsmodellen I_{NO_2} , II_{NO_2} und III_{NO_2} aus COSMO-ART Simulationen abgleiteten lokale Maximalkonzentrationen, sowie mit COSMO-ART berechneten Gebietsmittel für Stickstoffdioxid.

-modell III_{NO_2} weisen für die Streubreite ein besseres Verhalten auf, wobei das Dritte die beste Übereinstimmung aufzeigt. Auch hier lässt sich feststellen, dass das Gebietsmittel für NO₂, das mit COSMO-ART bestimmt werden kann, nicht zur Bestimmung der NO₂-Belastung an Verkehrstationen verwendet werden kann.

Die geringste Eignung von Regressionsmodell II_{NO_2} zur Bestimmung von Maximalkonzentrationen kann außerdem mit Hilfe der abgeleiteten Verteilung der Konzentrationswerte in Abb. 7.2(a)festgestellt werden. 2008 wurde an 55 % der Verkehrstationen eine Verletzung des Jahresgrenzwerts für NO_2 (20 ppb) registriert (UBA, 2010). Im Mittel über die berücksichtigten Simulationsepisoden tritt an fast 75% der Messstationen eine Überschreitung des Jahresgrenzwert auf. Regressionsmodell II_{NO_2} kann diesen Anteil fast identisch wiedergeben, allerdings wird der Grenzwert an $95\,\%$ der Stationen maximal um 10 ppb überschritten. Demgegenüber weisen die Beobachtungswerte an 25% der Verkehrstationen eine deutliche Verletzung um mehr als 50 % auf. Für Regressionsmodell I_{NO_2} stellt sich zwar an einigen Messstationen im Jahresmittel eine NO₂-Konzentration von über 30 ppb ein, jedoch wird über 109 Verkehrstationen betrachtet, maximal eine Belastung von 35 ppb erreicht, während unter Berücksichtigung von 95 % der Beobachtungsdaten teilweise NO₂-Konzentrationen von fast 45 ppb vorliegen. Außerdem ist der Anteil der abgeleiteten Stationswerte, die unterhalb des Grenzwerts liegen deutlich geringer als beob-



Abbildung 7.2.: (a) Verteilung der gemessenen und aus COSMO-ART Simulationen abgeleiteten lokalen Maximalkonzentrationen sowie mit COSMO-ART berechneten Gebietsmittel für Stickstoffdioxid (Horizontale Linien repräsentieren die Quantilenwerte der Beobachtung). (b) Einzelwerte MFB_i (Horizontale Linien repräsentieren die $\pm 0,3$ und $\pm 0,6$ Grenzen des MFB) des MFB. Boxplot: Antennen umfassen 90% der Daten.

achtet. Regressionsmodell $\rm III_{\rm NO_2}$ ist insgesamt betrachtet, das am besten geeignete Verfahren zur Bestimmung lokaler Maximalkonzentrationen aus räumlichen Mitteln. Trotz der Tatsache, dass an lediglich 50 % der Messstationen eine Überschreitung des Grenzwerts vorliegt, ist das Verfahren auch in der Lage außerordentliche Überschreitungen wiederzugeben, da die 95 %-Perzentile ebenfalls fast 40 ppb beträgt. Zusätzlich wird die beobachtete Variabilität über 90 % der Verkehrstationen durch Regressionsmodell $\rm III_{\rm NO_2}$ auf fast identische Wiese reproduziert.

Bei näherer Betrachtung der Einzelwerte des mean fractional bias in Abb. 7.2(b) können keine große Unterschiede im Verhalten der Regressionsmodelle beobachtet werden. Alle drei sind in der Lage für etwas mehr als 50 % der Messstationen die dortige Situation in guter Übereinstimmung zu bestimmen und für fast 90 % der Stationen zumindest mit ausreichender Genauigkeit abzuleiten. In Verbindung mit der Verteilungsbreite der abgeleiteten Maximalkonzentrationen stellt jedoch Regressionsmodell III_{NO_2} das am besten geeignete Verfahren dar, da mit diesem auch NO_2 -Belastungen an jenen Stationen abgeleitet werden können, an denen Grenzwert-überschreitungen auftreten und besonders solche Verkehrstationen im Fokus stehen.

Ähnlich wie im Fall für Stickstoffmonoxid zeigt sich auch hier wieder, die COSMO-ART alleine nicht dazu verwendet werden kann, um Aussagen über die Luftqualität an Verkehrstationen zu treffen. Das simulierte räumliche Mittel in Abb 7.2(a) unterschätzt die Beobachtungswerte deutlich, im Mittel um ca. 40 %. Als Folge dessen, ist die Übereinstimmung zwischen dem Stationswert und dem Modellwert für Stickstoffdioxid für 75 % der Stationen lediglich im akzeptablen Bereich oder außerhalb davon (Abb. 7.2(b)). Erst in Verbindung mit den Verfahren zur Bestimmung von Maximalkonzentrationen können Jahresmittelwerte des Stickstoffdioxids aus den COSMO-ART Simulationen abgeleitet werden, die für die Mehrheit der Verkehrstationen den beobachteten entsprechen.

7.3. Stickoxid

Die Stickoxidbelastung wird an 111 Verkehrstationen überwacht. Für die Einzelkomponenten des Stickoxids konnte zuvor im Falle von Stickstoffmonoxid eine starke Unterschätzung der Beobachtungswerte und im Falle von Stickstoffdioxid eine gute Übereinstimmung der mit Hilfe der Regressionsmodelle abgeleiteten lokalen Maximalkonzentrationen mit den Beobachtungswerten festgestellt werden. Dieses Verhalten summiert sich in den abgeleiteten Maximalkonzentrationen für Stickoxid (Tab. 7.3). Für NO_x kommt

Tabelle 7.3.: Kenngrößen der mit Regressionsmodellen $I_{\rm NO_x}$, $\rm II_{\rm NO_x}$ und $\rm III_{\rm NO_x}$ aus COSMO-ART Simulationen abgleitete lokale Maximalkonzentrationen, sowie mit COSMO-ART berechneten Gebietsmittel für Stickoxid.

Modell	NMBF	MFB	${\rm IQR}_{\rm Obs}$	$\mathbf{IQR}_{\mathbf{Mod}}$
RegMod I_{NO_x}	-0,33	-0,18	37,99	22,94
$\mathrm{RegMod}\ \mathrm{II}_{\mathrm{NO}_{\mathbf{x}}}$	-0,62	-0,33	$37,\!99$	12,23
${\rm RegMod~III}_{\rm NO_x}$	-0,43	-0,28	$37,\!99$	$17,\!48$
COSMO-ART	-1,55	-0,76	37,99	13,22

es ebenfalls zu einer Unterschätzung, wobei diese gegenüber Stickstoffmonoxid nicht so stark ausgeprägt ist. Regressionsmodell $I_{NO_{\nu}}$ weist die beste mittlere Übereinstimmung mit den beobachteten NO_xJahresmitteln an Verkehrstationen auf. Für dieses Verfahren weisen die Werte des normalized mean bias factor und des mean fractional bias die kleinste Nullabweichung auf, und der Unterschied des Interquartilsabstands zwischen beobachteten und abgeleiten Maximalkonzentrationen ist am geringsten, wobei der Abstand für die berechneten Konzentrationen fast 50% geringer ist als bei der Beobachtung. Wie bei den Einzelkomponenten des Stickoxids ist auch hier Regressionsmodell $\mathrm{II}_{\mathrm{NO}_{\mathrm{x}}}$ das am wenigsten passende Verfahren zur Bestimmung der Konzentrationssituation an Verkehrstationen. Im Vergleich zum ersten Verfahren ist die mittlere Abweichung bei Regressionsmodell III_{NO}, zwar etwas stärker ausgeprägt. Im Mittel ist das Verfahren dennoch gut geeignet, da der MFB-Wert kleiner als -0,3 ist. Auch hier wird ebenfalls bestätigt, dass eine direkte Verwendung der Modellergebnisse von COSMO-ART zur Bestimmung von Konzentrationsverhältnisse an Verkehrstationen nicht sinnvoll ist.

Die Verteilungen der abgeleiteten NO_x-Maximalkonzentrationen in Abb. 7.3(a) zeigt gegenüber den gemessenen Konzentrationen an Verkehrstationen im Jahresmittel eine ähnliche Abweichung wie im Fall für Stickstoffmonoxid. Die ersten 50 % der abgeleiteten Stationswerte der Maximalkonzentrationen entsprechen einer Belastung, die an lediglich 25 % der Verkehrstationen beobachtet werden. Dies ist besonders bei Regressionsmodell II_{NO}, ausgeprägt, das für fast 70 % der Messstationen solch niedrige Konzentrationen liefert. Unter Berücksichtigung von 90 % der Messstationen wurden 2008 Stickoxidkonzentrationen zwischen 15 ppb und 125 ppb im Jahresmittel beobachtet. Regressionsmodell $\mathrm{II}_{\mathrm{NO}_{-}}$ ist überhaupt nicht in der Lage diesen Konzentrationsbereich zu reproduzieren, da sich für dieses Verfahren über 100 Stationen nur Werte von $30\,\mathrm{ppb}$ bis $60\,\mathrm{ppb}$ auftreten. Regressionsmodell $\mathrm{I}_{\mathrm{NO}_{x}}$ verhält sich vergleichsweise besser, da sich hier NO_x-Belastungen von bis zu 80 ppb ergeben. Wie für die Einzelkomponenten des Stickoxids ist für deren Summe das dritte Regresionsmodell $\mathrm{III}_{\mathrm{NO}_{\star}}$ ebenfalls am besten dazu geeignet, die Streuung über 90 % der Messstationen wiederzugeben. Dieses Verfahren unterschätzt die 95%-Perzentile der Beobachtung lediglich um 25 ppb.

Die Überprüfung der Einzelwerte des MBF zeigt keine große Unterschiede zwischen den Regressionsmodellen I_{NO_x} , II_{NO_x} und $RM3_{NO_x}$. Beide Verfahren können für ca. 70 % der Messstationen mit ausreichender Genauigkeit die Situation abzubilden.

Wie bereits bei den Einzelkomponenten spiegelt sich auch hier die Tatsache wider, dass sich Simulationsergebnisse basierend auf einer horizontalen Maschenweite von 2,8 km sich nicht dazu eignen, Stickoxidkonzentrationen im Jahresmittel an Verkehrstationen abzuleiten. Die mittlere Unterschätzung des Jahresmittelwerts beträgt 50% und für den Großteil des Messstationen kann dieser Wert nicht akzeptabel wiedergegeben werden. Erst die Verwendung der Simulationsergebnisse in einem der Regressionsmodelle führt dazu, dass für diesen Anteil der Stationen ein Wert des MFB_i erzielt werden kann, der innerhalb des akzeptablen Bereichs liegt $(|MFB_i| < 0, 6).$



Abbildung 7.3.: (a) Verteilung der gemessenen und aus COSMO-ART Simulationen abgeleiteten lokalen Maximalkonzentrationen sowie mit COSMO-ART berechneten Gebietsmittel für Stickoxid (Horizontale Linien repräsentieren die Quantilenwerte der Beobachtung). (b) Einzelwerte MFB_i (Horizontale Linien repräsentieren die $\pm 0,3$ und $\pm 0,6$ Grenzen des MFB) des MFB. Boxplot: Antennen umfassen 90 % der Daten.

7.4. Fazit

Über alle drei Luftbeimengungen betrachtet stellt das Regressionsmodell II_{χ} das am wenigsten geeignete Verfahren zur Ableitung lokaler Maximalkonzentrationen im Jahresmittel dar. Es weist bei allen berücksichtigten Schadstoffen die schlechteste mittlere Übereinstimmung auf. Welches der Regressionsmodelle I_{χ} und III_{χ} besser zur Bestimmung der Konzentrationsverhältnisse an Verkehrstationen geeignet ist, kann nicht eindeutig geklärt werden. Mit Ausnahme von Stickstoffmonoxid werden die mittlere Verhältnisse durch das erste Verfahren besser beschrieben, hingegen kann Regressionsmodell III_{χ} die Streuungsbreite der Konzentrationswerte im Jahresmittel 2008 für 90 % der Messstationen passender wiedergeben und somit Jahresmittel der Stickoxidkonzentrationen an jenen Stationen, die durch eine hohe Belastung mit Stickoxiden gekennzeichnet sind, also jene Stationen die im Bezug auf Grenzwertüberschreitungen von Interesse sind.

Bei Betrachtung der räumlichen Veteilung der Maximalkonzentrationen am Beispiel für Berlin wird deutlich, dass die mit Hilfe des Regressionsmodells III_{χ} berechneten Maximalkonzentrationen sich stärker auf den Innenstadtbereich konzentrieren (Abb. 7.4). Für Regressionsmodell \mathbf{I}_{χ} lassen sich hingegen stark erhöhte Konzentrationswerte auch in den städtischen Außenbezirken und im ländlichen Umland beobachten, da dieses Verfahren einen mehr oder weniger konstanten Faktor verwendet, um die erhöhte kleinräumige Luftbelastung zu bestimmen. Daraus würde resultieren, dass im gesamten Stadtgebiet von Berlin und Stuttgart sowie in deren Umland der Jahresgrenzwert von 20 ppb für NO₂ im Jahr 2008 überschritten wird. Die Konzentrierung der stark erhöhten Stickoxidkonzentrationen auf den Innenstadtbereich, wie sie sich bei Regressionsmodell III_{χ} ergibt, ist plausibler, da in solchen Umgebungen die Verkehrsemissionen durch das hohe Verkehrsaufkommen ebenfalls stark erhöht sind.

Der direkte Vergleich zwischen beobachteten und abgeleiteten Jahresmittel der Stickoxidkonzentrationen an Verkehrstationen gibt hier nicht so ein eindeutiges Bild ab (Tab. 7.4). Für die Station Hardenbergplatz überschätzt Regressionsmodell III_{χ} die Belastung mit Stickoxid und seiner Komponenten im Gegensatz zu Regressionsmodell I_{χ} deutlich. Mit Ausnahme der NO_x-Konzentration an der Verkehrstation Steglitz, die Regressionsmodell III_{χ} etwas zu



Abbildung 7.4.: Räumliche Verteilung der lokalen NO-, NO₂- und NO_x-Maximalkonzentrationen im Jahresmittel 2008, berechnet mit Regressionsmodell I_{χ} (links) bzw. III_{χ} (rechts) in Berlin. Beobachtung an Verkehrstationen als farbige Kreise.

Station	Obs.	Mod. I_{χ}	Mod. \mathbf{III}_{χ}
NO			
Frankfurter Allee	26	25	25
Hardenbergplatz	33	29	42
Neukölln 1	40	24	26
Neukölln 2	51	24	26
Steglitz	30	24	23
NO_2			
Frankfurter Allee	25	28	25
Hardenbergplatz	32	30	40
Neukölln 1	30	28	29
Neukölln 2	28	28	29
Steglitz	27	28	24
NO_x			
Frankfurter Allee	51	57	52
Hardenbergplatz	65	65	99
Neukölln 1	70	58	60
Neukölln 2	79	58	60
Steglitz	56	58	48

Tabelle 7.4.: Gemessene und abgeleitete Konzentrationen der Stickoxide in ppb an Berliner Verkehrstationen im Jahresmittel 2008.

niedrig bestimmt, sowie Frankfurter Allee, die Regressionsmodell I_{χ} etwas überschätzt, sind die abgeleiteten Maximalkonzentrationen beider Verfahren vergleichbar. Während die NO_x-Konzentration an der Verkehrsstation Steglitz durch Regressionsmodell III_{χ} etwas zu niedrig wiedergegeben wird, sowie die Belastung an der Station Frankfurter Allee durch Regressionsmodell II_{χ} geringfügig überschätzt wird, sind die abgeleiteten Maximalkonzentrationen von Stickoxid und seinen Komponenten beider Verfahren vergleichbar. Eine Ausnahme stellt die mit Regressionsmodell III_{χ} abgeleitete

 $\rm NO_x\text{-}Konzentrationen$ an der Verkehrsstation Hardenbergplatz dar, die deutlich höher als die der Beobachtung ist. Der Gitterpunkt, der diese Station enthält, ist durch eine hohe Emissionsstärke gekennzeichnet. In Verbindung mit einer große Straßenlänge führt dies zu einer starken Überschätzung durch das Verfahren, dass zusätzlich Gebietsparameter berücksichtigt.

Die Stickstoffdioxidbelastung an den übrigen Verkehrstationen kann mit beiden Verfahren ähnlich gut abgeleitet werden. Auch für NO_x und NO treten zwischen beiden Regressionsmodellen keine deutliche Unterschiede auf, allerdings sind im Vergleich zu den beobachteten Werten, die abgeleiteten Maximalkonzentrationen für die zwei Verkehrstationen in Neukölln deutlich zu niedrig.

In Stuttgart (Abb. 7.5) weisen die räumlichen Verteilungen die abgeleiteten lokalen Maximalkonzentrationen der Stickoxide dasselbe Verhalten wie in Berlin auf. Während Regressionsmodell I_{χ} auch im Stuttgarter Umland lokal stark erhöhte Konzentrationswerte ableitet, konzentrieren sich bei Regressionsmodell III_{χ} stark belastete Umgebungen vor allem auf städtische Bereiche.

Im Unterschied zu Berlin zeigt der Vergleich der beobachteten und die aus Hintergrundkonzentrationen abgeleitete Belastung an Verkehrstationen in Tab. 7.5, dass Regressionsmodell III_{χ} für alle betrachteten Luftqualitätsparameter an allen Stationen besser in der Lage ist, die beobachtete Luftbelastung im Jahresmittel wiederzugeben. Zwar werden die Konzentrationswerte für NO und NO_{χ} an einigen Messstationen stark unterschätzt, allerdings fällt dann die Unterschätzung von Regressionsmodell II_{χ} noch deutlicher. Im Falle für Stickstoffdioxid zeigt sich jedoch, dass Regressionsmodell III_{χ} sehr gut dazu geeignet ist, um die mittleren Verhältnisse an Stuttgarter Verkehrstationen im Jahr 2008 aus räumlichen Mitteln zu beschreiben.

In Verbindung mit der besseren Fähigkeit die Streuung der Luftbelastung über 90 % der Messstationen wiederzugeben, wird das dritte Verfahren (III_{χ}) zur Bestimmung der verkehrsverursachten Erhöhung der Stickoxidbelastung auf kleinräumigen Skalen im Jahr 2030 verwendet.



Abbildung 7.5.: Räumliche Verteilung der lokalen NO-, NO₂- und NO_x-Maximalkonzentrationen im Jahresmittel 2008, berechnet mit Regressionsmodell I_{χ} (links) bzw. Regressionsmodell III_{χ} (rechts) in Stuttgart. Beobachtung an Verkehrstationen als farbige Kreise.

Station	Obs.	Mod. I_{χ}	Mod. \mathbf{III}_{χ}
NO			
Am Neckartor	138	37	57
Hohenheimer Straße	95	36	43
Zuffenhausen	35	41	32
Arnulf-Klett-Platz	58	36	43
NO_2			
Am Neckartor	59	32	46
Hohenheimer Straße	57	30	34
Zuffenhausen	26	31	23
Arnulf-Klett-Platz	42	30	34
NO_x			
Am Neckartor	196	76	127
Hohenheimer Straße	152	73	87

Tabelle 7.5.: Gemessene und abgeleitete Konzentrationen der Stick-oxide in ppb an Stuttgarter Verkehrstationen im Jahresmittel 2008.

8. Lokale Maximalkonzentrationen der Stickoxide im Jahr 2030

Für die Berechnung der lokalen Erhöhung der Luftbelastung mit Stickoxiden im Jahresmittel 2030 werden analog zur Bestimmung des Jahresmittels der Luftbelastung in 2008 (Kap. 6) Modellrechnungen über 10 Simulationsepisoden mit COSMO-ART durchgeführt. Es wird die selbe Modellkonfiguration wie für die mittlere räumliche Stickoxidverteilung im Jahr 2008 verwendet. Im Unterschied zu diesen Simulationen werden für die Prognose der räumlichen Hintergrundkonzentrationen für das Jahr 2030 nur Modellrechnungen mit einer horizontalen Auflösung von $2,8 \,\mathrm{km} \times 2,8 \,\mathrm{km}$ umgesetzt. Die Initial- und Randdaten stammen aus den 7km-Modellläufen für das Jahr 2008. Zur Beschreibung der Emissionen wird nun die Basis-Abschätzung für 2030 des VEU-Datensatzes verwendet. Die Modellrechnungen für das Jahr 2030 beruhen auf der selben Meteorologie wie im Jahr 2008, stellen also die Situation der Luftqualität im Jahr 2008 unter Annahme stark verringerter Emissionen dar. Dass die Start- und Randbedingungen der Luftbeimengungen ebenfalls auf die Verhältnisse für 2008 zurückgehen, kann insofern vernachlässigt werden, da die ersten 24 h der Simulationen in die Bestimmung für das Jahresmittel der Stickoxidbelastung nicht mit einfließen und nur die Konzentrationsverhältnisse im deutschen Bundesgebiet betrachtet werden, die Ränder des Simulationsgebiets also ebenfalls vernachlässigt werden. Zudem ist die bodennahe Luftqualität in erster Linie durch Emissionen in Bodennähe geprägt, so dass davon ausgegangen werden kann, dass die so modellierten räumlichen Mittel der Stickoxide in erster Linie durch den nun verwendeten Emissionsdatensatz bestimmt werden.

Bevor nun mit Hilfe der COSMO-ART Simulationen die kleinräumig erhöhten Maximalkonzentrationen mit Hilfe des Regressionsmodells III_{χ} für das Jahresmittel 2030 bestimmt werden, werden die Veränderungen der räumlichen 2,8 km × 2,8 km-Mittel gegenüber dem Jahr 2008 an Gitterpunkten, die städtische Hintergrundstationen beinhalten, verglichen. Dabei lässt sich feststellen, dass insbesondere für Stickstoffmonoxid einige Gitterpunkte des städtischen Hintergrunds eine um 50 % höhere Belastung als im Jahr 2008 aufweisen (Abb. 8.1(a)). Diese starke Erhöhung ist nur an städtischen



Abbildung 8.1.: Simulierte Stickstoffmonoxidkonzentrationen an städtischen Hintergrundstationen im Verhältnis zwischen 2030 und 2008 (a). Räumliche Verteilung der Differenz für Stickstoffmonoxid zwischen 2030 und 2008 (b).

Hintergrundstationen in Hamburg zu beobachten. Dort treten im Jahresmittel 2030 bis zu 150 ppb höhere NO-Konzentrationen verglichen zu den Bedingungen im Jahr 2008 auf (Abb. 8.1(b)). Bei näherer Betrachtung des VEU-Emissionsdatensatzes in Abb. 8.2 wird deutlich, dass in der unmittelbaren Umgebung von Hamburg Gitterpunkte existieren, bei denen gegenüber 2008 die Emissionen von Stickoxiden im Jahr 2030 um den Faktor 15 erhöht sind. Zwar wird für das Jahr 2030 eine starke Zunahme des internationalen Schiffsverkehrs angenommen (Kugler et al., 2013), aber dass in Hamburg, wo sich der größte deutsche Hafen befindet, dadurch die Stickoxidemissionen derart stark zunehmen kann bezweifelt werden. Eher ist von einem Fehler im Emissiondatensatz auszugehen, da



Abbildung 8.2.: Räumliche Verteilung der Stickoxidemissionen in Hamburg als Verhältnis zwischen den Jahren 2030 und 2008.

ansonsten keine auffälligen Zunahmen der Emissionsstärken festgestellt werden können. Aus diesem Grund werden in der weiteren Auswertung Hamburger Messstationen vernachlässigt.

An den übrigen städtischen Hintergrundstationen kann ein deutlicher Rückgang der Stickoxidbelastung festgestellt werden. An keiner der in Abb. 8.3 dargestellten 90% der städtischen Hinter-



Abbildung 8.3.: Verteilung der modellierten Konzentrationen der Stickoxide an städtischen Hintergrundstationen im Vergleich 2008 und 2030. Boxplot: Antennen umfassen 90 % der Daten.

grundstationen tritt im Jahr 2030 eine Verletzung des heutigen Jahresgrenzwert für NO_2 auf. Bei Betrachtung des direkten Verhältnisses der Konzentrationswerte zwischen 2030 und 2008 in Abb. 8.4 verdeutlicht sich dies ebenfalls. Mit Ausnahme von Stickstoff-



Abbildung 8.4.: Verteilung der modellierten Konzentrationen der Stickoxide an städtischen Hintergrundstationen im Verhältnis zwischen 2030 und 2008. Boxplot: Antennen umfassen 90 % der Daten.

monoxid ist an 90 % der Mess
stationen die Belastung im Jahr 2030 geringer als 2008. Während der Rückgang für
 NO_2 und NO_x im Mittel ca. 20 % bzw. 30 % beträgt, liegt für Stickstoff
monoxid sogar eine fast 40 prozentige Abnahme der mittleren Konzentration vor. An einigen wenigen Mess
stationen kann allerdings eine Zunahme der NO-Belastung festgestellt werden. Da jedoch die Verteilung der Absolutwerte in Abb. 8.5 gegenüber 2008 signifikant zu kleineren Konzentrationswerten verschoben ist, wird wahrscheinlich die Zunahme an Mess
stationen auftreten, die 2008 eine deutlich geringe NO-Belastung vorweisen.

8.1. Lokale Maximalkonzentrationen der Stickoxide im Jahr 2030

Die mit COSMO-ART berechneten 2,8 km × 2,8 km-Jahresmittel für 2030 werden nun genutzt, um mit Hilfe des Regressionsmodells III_{χ} die zukünftige, lokal erhöhte Stickoxidbelastung zu bestimmen. Die so abgeleiteten Konzentrationswerte werden mit den in Kap. 7 bereits berechneten Maximalkonzentrationen an Verkehrsstationen für 2008 verglichen.

Wie bereits im vorhergehenden Abschnitt für Verhältnisse an städtischen Hintergrundstationen festgestellt, kann auch an Verkehrstationen im Jahresmittel ein deutlicher Rückgang Konzentrationen festgestellt werden (Abb. 8.5). Dies ist besonders stark



Abbildung 8.5.: Verteilung der abgeleiteten lokalen Maximalkonzentrationen der Stickoxide an städtischen Verkehrsstationen im Vergleich zwischen 2008 und 2030. Boxplot: Antennen umfassen 90 % der Daten.

für NO und $\rm NO_x$ ausgeprägt. Im Mittel beträgt die Abnahme für diese Komponenten ca. 30 %. Für Stickstoffdioxid ist dieser mittlere Rückgang mit 20 % etwas schwächer ausgeprägt, allerdings wird nun für mehr als 75 % der Messstationen der momentane

Grenzwert für NO₂ eingehalten. Dem
gegenüber war dies 2008 nur an 50 % der Stationen der Fall.

Werden die einzelnen Messstationen direkt miteinander verglichen (Abb. 8.6), wird deutlich, dass an fast allen berücksichtigten



Abbildung 8.6.: Verteilung der modellierten Konzentrationen der Stickoxide an städtischen Verkehrstationen im Verhältnis zwischen 2030 und 2008. Boxplot: Antennen umfassen 90 % der Daten.

Messstationen eine Abnahme der Stickoxidbelastung stattfindet. Nur für ca. 5% bis 10% tritt im Jahresmittel eine Zunahme, allerdings in geringen Maße, der Konzentrationen auf. Dies kann durchaus realistisch sein, da der Emissionsdatensatz für 2030 nicht nur von einer Emissionsverringerung der Einzelfahrten ausgeht, sondern auch Veränderungen der Verkehrsströme beinhaltet, die allgemein als zunehmend angenommen werden können. Beispielsweise gehen Kugler et al. (2013) neben eines Anstiegs des internationalen Schiffsverkehrs außerdem von einer Zunahme des Güterkraftverkehrs aus, so dass Emissionsreduzierungen aufgrund Effizienzsteigerungen oder ähnlichem durch eine Zunahme der Fahrzeuge teilweise kompensiert werden.

Im Vergleich zum mittleren Rückgang der Stickoxidbelastung an städtischen Hintergrundstationen findet die Verbesserung der Luftqualität an städtischen Verkehrstationen nicht im gleichen Maße statt, wenn die Veränderung stationsweise betrachtet wird
(Abb. 8.4 und 8.6). An städtischen Hintergrundstationen betrug die Veränderung für NO 40%, für NO₂ 20% und für NO_x 30%. Bei Betrachtung der Verkehrstationen fällt der mittlere Rückgang jeweils zehn Prozentpunkte geringer aus. Während die Streubreite der realtiven Konzentrationunterschiede zwischen 2030 und 2008 im Fall von Stickstoffmonoxid an städtischen Hintergrund- und Verkehrstationen gleich ausfällt, kann für die übrigen Komponenten an Verkehrstationen eine deutlich größere Streuung der Änderung in Form des Abstand der 5%- und 95%-Perzentile festgestellt werden. Die obere Perzentile zwischen beiden Stationstypen weist kaum Unterschiede auf, jedoch ist die 5%-Perzentile der relativen Änderung der NO₂- und NO_x-Belastung an Verkehrstationen deutlich niedriger als bei Hintergrundstationen. Daraus kann gefolgert werden, dass an einigen Verkehrstationen eine deutliche Verbesserung der Luftbelastung zu erwarten ist.

Bei Betrachtung der räumlichen Verteilungen der Stickoxide in Berlin und Stuttgart, kann der allgemeine Rückgang der lokalen Maximalkonzentrationen ebenfalls festgestellt werden. In Berlin (Abb. 8.7) bzw. Tab. 8.1 kommt es zwar vereinzelt immer noch zu Grenzwertüberschreitungen von Stickstoffdioxid, allerdings sind diese um bis zu 15 % niedriger als im Jahr 2008. Der momentane Grenzwert wird dabei immer noch um ca. 50 % überschritten. Mit bis zu 31 % ist der Rückgang für Stickstoffmonoxid stärker ausgeprägt, das Gesamtstickoxid reduziert sich um ca. 20 %.

Demgegenüber liegt in Stuttgart (Abb. 8.8 und Tab. 8.2) zwar ebenfalls eine Abnahme der lokal erhöhten Belastung mit Stickoxiden vor, diese beschränkt sich aber vor allem auf das Umland. Für das Stadtgebiet kann im Jahr 2030 mit einem Rückgang von bis zu 33 ppb der Gesamtstickoxide gerechnet werden. Die Einzelkomponente Stickstoffmonoxid verringert sich dabei um ca. 40 % im Vergleich zu 2008. Stickstoffdioxid weist ebenfalls eine Reduzierung auf, die für diese Komponente etwa 20 % beträgt. Allerdings treten in der Stuttgarter Innenstadt immer noch stark erhöhte NO₂-Konzentrationen an Verkehrsstationen auf, die auch im Jahr 2030 den momentanen Jahresgrenzwert in Höhe von 20 ppb stellenweise um fast das Doppelte überschreiten.

Abschließend kann gesagt werden, dass bei einer zukünftigen Emissionsverringerung sich im Jahresmittel die Situationan Ver-



Abbildung 8.7.: Räumliche Verteilung der lokalen NO-, NO₂- und NO_x-Maximalkonzentrationen im Jahresmittel 2008 (a) und 2030 (b) in Berlin. Beobachtung an Verkehrstationen als farbige Kreise im Jahresmittel 2008.

kehrsstationen verbessert und an einem Großteil der heutigen Verkehrsstationen der Jahresgrenzwert für NO_2 eingehalten wird. Die betrachteten Beispiele Berlin und Stuttgart zeigen allerdings, dass Städte, die bereits heute große Probleme mit der Einhaltung des Grenzwerts haben, auch in Zukunft weitere Anstrengungen

Station	2008	2030	rel. Änderung in Prozent
NO			
Frankfurter Allee	25	20	-20%
Hardenbergplatz	42	29	-31%
Neukölln 1	26	20	-23%
Neukölln 2	26	20	-23%
Steglitz	23	17	-26%
NO_2			
Frankfurter Allee	25	23	-8%
Hardenbergplatz	40	36	-10%
Neukölln 1	29	25	-14%
Neukölln 2	29	25	-14%
Steglitz	24	21	-12%
NO_x			
Frankfurter Allee	52	45	-13%
Hardenbergplatz	99	76	-23%
Neukölln 1	60	49	-18%
Neukölln 2	60	49	-18%
Steglitz	48	39	-19%

Tabelle 8.1.: Jahresmittel der abgeleiteten Konzentrationen derStickoxide in ppb an Berliner Verkehrstationen im Vergleich zwischen 2008 und 2030.

unternehmen müssen, um eine Verbesserung der Luftqualität zu erreichen.

 Tabelle 8.2.: Jahresmittel der abgeleiteten Konzentrationen der

 Stickoxide in ppb an Stuttgarter Verkehrstationen im Vergleich

 zwischen 2008 und 2030.

Station	2008	2030	rel. Änderung in Prozent
NO			
Am Neckartor	57	33	-42%
Hohenheimer Straße	43	25	-42%
Zuffenhausen	32	19	-41%
Arnulf-Klett-Platz	43	25	-42%
NO_2			
Am Neckartor	46	36	-22%
Hohenheimer Straße	34	27	-21%
Zuffenhausen	23	19	-17%
Arnulf-Klett-Platz	34	27	-21%
NO_x			
Am Neckartor	127	85	-33%
Hohenheimer Straße	87	60	-31%



Abbildung 8.8.: Räumliche Verteilung der lokalen NO-, NO₂- und NO_x-Maximalkonzentrationen im Jahresmittel 2008 (a) und 2030 (a) bzw. Modell III_{χ} (b) in Stuttgart. Beobachtung an Verkehrstationen als farbige Kreise im Jahresmittel 2008.

9. Zusammenfassung

In Städten ist die Luftbelastung mit Stickoxiden gegenüber dem Umland deutlich erhöht. Dies kann durch Stationsmessungen des ländlichen und städtischen Hintergrunds aber auch mit Hilfe von Simulationsrechnungen mit regionalen Luftqualitätsmodellen erfasst werden. Emissionen des Straßenverkehrs führen zu einer kleinräumigen, zum Teil stark erhöhten stickoxidförmigen Luftbelastung innerhalb von Städten, aber auch in anderen Umgebungen. Überschreitungen der Schutz der Gesundheit implementierten Grenzwerte für Luftschadstoffe treten in genau solchen Situationen auf. Aus diesem Grund werden an Orten mit hohen Verkehrsaufkommen die Luftqualität an sogenannten Verkehrstationen überwacht. Regionale Luftqualitätsmodelle können aufgrund der horizontalen Modellauflösung die Situation an diesen Stationen nicht wiedergeben, da deren Modellergebnisse einem Gebietsmittel entsprechen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde nun ein Verfahren entwickelt, dass es ermöglicht, aus modellierten städtischen Hintergrundkonzentrationen der Stickoxide die kleinräumig erhöhte Luftbelastung an Verkehrstationen im Jahresmittel abzuleiten. Zur Modellierung der räumlichen Verteilung der Stickoxidkonzentrationen in Städten im Jahresmittel wurde das Modellsystem COSMO-ART mit einer horizontalen Auflösung von 2,8 km × 2,8 km verwendet. Als Untersuchungszeitraum wurde das Jahr 2008 gewählt. Die Bestimmung der Konzentrationsverteilung im Jahresmittel erfolgte dabei approximiert. Dazu wurde mit Hilfe von Beobachtungsdaten an städtischen Hintergrundstationen des deutschen Stationsnetzwerks zur Überwachung der Luftqualität gezeigt, dass zehn Episoden, die jeweils zwei Tage umfassen und gleichverteilt über ein Jahr sind, genügen, um die Jahresmittel für NO, NO₂ und NO_x mit ausreichender Genauigkeit wiederzugeben.

Diese Beobachtungsdaten wurden weiterhin verwendet, um zu zeigen, dass COSMO-ART in der Lage ist, die Hintergrundkonzentration an Stickoxiden in Städten im Jahresmittel zu simulieren. Die simulierten räumlichen Mittel weisen also eine gute Übereinstimmung mit den Beobachtungswerten auf. Gleichzeitig unterschätzte das Modell, wie erwartet, die städtische Luftbelastung an Verkehrstation deutlich, da es aufgrund des verwendeten Modellgitters solche Situation nicht mehr auflösen kann. Erst durch Verwendung des entwickelten Verfahrens konnten Stickoxidkonzentration abgeleitet werden, die den Beobachtungen an Verkehrstationen entsprechen.

Das verwendete Verfahren basiert auf Messdaten des mobilen Messsystems AERO-TRAM. Die AERO-TRAM erfasst straßenbahngestützt, räumlich hochaufgelöst die Konzentrationsverteilung von Stickoxiden und anderer Messparameter im entlang zweier Messstrecken in Karlsruhe während Messfahrten im Jahresverlauf. Für die Messstrecken wurden zunächst die Streckenprofile der Stickoxide im Jahresmittel 2010 bestimmt. Diese mittleren Streckenprofile wurden genutzt, um Streckenmittel für verschiedene Abschnitte abzuleiten. Dazu wurden die Messstrecken gemäß der Modellauflösung von COSMO-ART mit einem 2,8 km × 2,8 km-Gitter gerastert. Durch zusätzliche Verschiebung des Raster entlang den Messstrecken in 100 m-Abständen konnten 819 Gitterpunkte erzeugt werden, für die jeweils die Streckenmittel $\hat{c}'_{Mittel,\chi}$ entlang Abschnitten der Messstrecken berechnet werden konnten.

Im Unterschied zu COSMO-ART, ist bei solchen räumlichen Mittel die Verteilung der Konzentrationswerte der Stickoxide bekannt und somit auch der Maximalwert $c_{\text{Max},\chi}$ der Verteilung. Es stehen also 819 Kombinationen aus räumlichen Mittel und Maximalwert zur Verfügung, die verwendet werden können, um zu untersuchen, ob aus einem räumlichen Mittel der Maximalwert bestimmt werden kann. Allerdings unterscheidet sich das räumliche Mittel entlang eines Abschnitts einer Messstrecke der AERO-TRAM, also ein Streckenmittel, von einem räumlichen Mittel von COSMO-ART, das ein Mittel über ein 2,8 km × 2,8 km-Gebiet darstellt, da ein Streckenmittel innerhalb eines solchen Gebiets selbst nur auf einem Teil der gesamten Konzentrationsverteilung des Gebiets darstellt, wodurch die Frage aufkam:

• Kann aus einem Streckenmittel ein Gebietsmittel abgeleitet werden?

Für die gerasterten Messstrecken existieren außer den Messungen der AERO-TRAM entlang den Messstrecken keine weiteren Informationen über die genaue Konzentrationsverteilung der einzelnen Gitterpunkte. Statt dessen wurden Daten über Bevölkerungsdichten verwendet. Diese liegen mit einer horizontalen Auflösung von 100 m vor. Somit konnten sowohl Streckenmittel wie auch die Gebietsmittel der Bevölkerungsdichten für 819 Gitterpunkte bestimmt werden. Zwischen diesen Größen existiert eine starke lineare Korrelation, so dass deren Zusammenhang sich mit Hilfe eines einfach linearen Regressionsmodells ($R^2 = 0,75$) beschreiben ließ. Unter der Annahme, dass sich die Konzentrationsverteilung der Stickoxide innerhalb der Gitterpunkte verhält wie die Verteilung der Bevölkerungsdichte, wird dieser Zusammenhang verwendet, um aus den Streckenmittel $\hat{c}'_{\text{Mittel},\chi}$ der Stickoxide deren Gebietsmittel $\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}$ der Gitterpunkte vernachlässigt werden, an denen die Umrechnung zu unrealistischen Ergebnissen führte.

Im nächsten Schritt wurden die verbleibenden 585 Gitterpunkte dazu verwendet, um folgenden Sachverhalt zu untersuchen:

• Existiert eine funktionale Beziehung, mit der lokale Maximalkonzentrationen der Stickoxide im Jahresmittel durch deren räumliche Mittel und anderer Parameter erklärt werden können?

Mit Hilfe einer Regressionsanalyse konnten insgesamt drei mögliche Verfahren abgeleitet werden, um lokale Maximalkonzentrationen zu bestimmen. Regressionsmodell I_{χ} (NO: $R^2 = 0,86$; NO₂: $R^2 = 0,81$; NO_x: $R^2 = 0,80$) berechnet die lokal erhöhte Stickoxidkonzentration lediglich aus dem Gebietsmittel:

$$c_{\text{Max},\chi} \sim \hat{c}_{\text{Mittel},\chi}$$
.

Die Rasterverschiebung entlang den Messstrecken führte allerdings dazu, dass sich zwar die Gebietsmittel der einzelnen Gitterpunkte stets unterschieden, die zugehörige Maximalkonzentrationen jedoch zeitweise unverändert blieb. Einzelne Maximalkonzentrationen konnten also unterschiedlichen Gebietsmittel der Stickoxide zugeordnet werden. Durch Berechnung des Verhältnisses $\lambda_{\chi} = \frac{c_{\text{Max},\chi}}{\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}}$ konnte dies behoben werden. Dieses Verhältnis beschreibt also die lokale Maximalkonzentration in Form der relativen Erhöhung gegenüber dem Gebietsmittel. Mit Hilfe von Regressionsmodell Π_{χ} (NO: $R^2 = 0, 68$;,NO₂: $R^2 = 0, 83$; NO_x: $R^2 = 0, 72$)

kann die relative Erhöhung durch das Inverse des Gebietsmittel beschrieben werden:

$$\dot{\lambda}_{\chi} \sim \frac{1}{\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}}$$

Die Güte dieses Regressionsmodell konnte noch weiter verbessert werden, indem in Regressionsmodell III_{χ} (NO: $R^2 = 0,70$; NO₂: $R^2 = 0,85$; NO_x: $R^2 = 0,76$) zusätzliche Eigenschaften eines Gitterpunktes in Form der Emissionsstärke E_{χ} und der Länge des Straßennetzes L_S berücksichtigt wurden:

$$\dot{\lambda}_{\chi} \sim \frac{1}{\hat{c}_{\text{Mittel},\chi}} + \hat{E}_{\chi}\hat{L}_S$$

Das erste Verfahren weist die höchste Güte zur Ableitung von Maximalkonzentrationen auf. Dies wurde durch Verifikation der Regressionsmodelle mit Hilfe von Messdaten der AERO-TRAM aus dem Jahr 2011 bestätigt, wobei jedoch auch die anderen zwei Verfahren in der Lage waren, die beobachteten Maximalkonzentration entlang den Messstrecken in Karlsruhe in ausreichender Genauigkeit wiederzugeben.

Im weiteren Verlauf wurde nun untersucht, ob es mit diesen Verfahren möglich ist, die Maximalkonzentration auch in anderen deutschen Städten abzuleiten. Die dafür notwendigen Gebietsmittel wurden mit Hilfe den zuvor beschriebenen COSMO-ART Simulationen bestimmt. Die so aus den modellierten Gebietsmittel abgeleiteten Maximalkonzentrationen wurden mittels Beobachtungsdaten an Verkehrstationen validiert. Dabei erwies sich Regressionsmodell II_{χ} als am wenigsten dazu geeignet, um folgende Frage zu beantworten:

• Eignet sich das Verfahren zur Ableitung des Jahresmittels der Stickoxidbelastung an Verkehrstationen aus modellierten städtischen Hintergrundkonzentrationen im Jahresmittel 2008?

Im Mittel über alle Verkehrstationen war Regressionsmodell I_{χ} am besten in der Lage, die Stickoxidbelastung wiederzugeben. Demgegenüber wiesen die mit Regressionsmodell III_{χ} abgeleiteten Maximalkonzentrationen eine bessere Übereinstimmung beobachteten Streuung der Konzentrationswerte zwischen den einzelnen Stationen auf. In Verbindung mit der Untersuchung der so abgeleiteten räumlichen Verteilung der Maximalkonzentrationen in Berlin und Stuttgart zeigte sich, dass das dritte Regressionsmodell das bessere Verfahren darstellt. Während Regressionsmodell I_{χ} auch im Umland der Städte Maximalkonzentrationen lieferte, die mit der innerstädtischen Luftbelastung vergleichbar war, konnte bei Regressionsmodell III_{χ} beschränken sich stark erhöhte Stickoxidkonzentrationen auf die Stadtgebiete. Somit stellte sich dieses Regressionsmodell durch die Berücksichtigung zusätzlicher Gebietsparameter als das am besten geeignete Verfahren zur Ableitung des Jahresmittels der Stickoxidbelastung an Verkehrstationen aus modellierten städtischen Hintergrundkonzentrationen im Jahresmittel dar.

Dieses Verfahren wurde im Anschluss verwendet, um den verbliebenen Sachverhalt zu klären:

• In welchem Maße ändert sich die Luftbelastung im Jahr 2030?

Hierfür wurden die Modellrechnungen mit COSMO-ART für das Jahr 2008 wiederholt, nun angetrieben mit Emissionsabschätzungen für das Jahr 2030. Der prognostizierte Rückgang der Emissionen führt in Städten zu einem Rückgang der Hintergrundkonzentration. Gegenüber 2008 beträgt die mittlere Abnahme für Stickstoffmonoxid ca. 40 %, für Stickstoffdioxid und Stickoxid 20 % bzw. 30%. Die mit Hilfe des entwickelten Verfahrens abgeleitete Maximalkonzentrationen im Jahresmittel 2030 weisen ebenfalls eine Reduzierung gegenüber dem Jahr 2008 auf, der im Vergleich zum städtischen Hintergrund jedoch im Mittel ca. zehn Prozentpunkte geringer ausfällt. An einzelnen Verkehrstation kann jedoch ein Rückgang festgestellt werden, der stärker ausfällt als an städtischen Hintergrundstationen. Es zeigte sich, dass zukünftig an etwa 75% der Mess
stationen der momentane Jahresgrenzwert von NO₂ (20 ppb) eingehalten wird, während im Jahr 2008 während den berücksichtigten Simulationsepisoden noch an fast 75% dieser Grenzwert verletzt wurde.

Literaturverzeichnis

- 39. BImSchV, 2010: Neununddreißigste Verordnung zur Durchführung des Bundes-Immissionsschutzgesetzes (Verordnung über Luftqualitätsstandards und Emissionshöchstmengen - 39. BImSchV). Bundesgesetzblatt Jahrgang 2010 Teil I Nr. 40, S. 1056–1004.
- Ackermann, I., H. Hass, M. Memmesheimer, A. Ebel, F. Binkowski, und U. Shankar, 1998: Modal aerosol dynamics model for Europe: Development and first applications. *Atmos. Environ.*, **32** (17), 2981–2999.
- Aitken, J., 1889: On the number of dust particles in the atmosphere. T. Roy. Soc. Edin., 35 (01), 1–19.
- Akimoto, H., 2003: Global air quality and pollution. Science, 302 (5651), 1716–1719.
- Altstädter, B., A. Platis, B. Wehner, A. Scholtz, N. Wildmann, M. Hermann, R. Käthner, H. Baars, J. Bange, und A. Lampert, 2015: ALADINE - an unmanned research aircraft for observing vertical and horizontal distributions of ultrafine particles within the atmospheric boundary layer. *Atmos. Meas. Tech.*, 8 (4), 1627–1639.
- Alvarado, M., F. Gonzalez, A. Fletcher, und A. Doshi, 2015: Towards the development of a low cost airborne sensing system to monitor dust particles after blasting at open-pit mine sites. *Sensors*, **15** (8), 19667–19687.
- Argyropoulos, G., C. Samara, D. Voutsa, A. Kouras, E. Manoli, A. Voliotis, A. Tsakis, L. Chasapidis, A. Konstandopoulos, und K. Eleftheriadis, 2016: Concentration levels and source apportionment of ultrafine particles in road microenvironments. *Atmos. Environ.*, **129**, 68–78.

- Baldauf, M., A. Seifert, J. Förstner, D. Majewski, M. Raschendorfer, und T. Reinhardt, 2011: Operational convective-scale numerical weather prediction with the COSMO model: description and sensitivities. *Mon. Weather Rev.*, **139** (12), 3887–3905.
- Bell, M., F. Dominici, und J. Samet, 2005: A meta-analysis of time-series studies of ozone and mortality with comparison to the national morbidity, mortality, and air pollution study. *Epidemiology*, **16** (4), 436.
- Boogaard, H., F. Borgman, J. Kamminga, und G. Hoek, 2009: Exposure to ultrafine and fine particles and noise during cycling and driving in 11 dutch cities. *Atmos. Environ.*, **43** (27), 4234– 4242.
- Bottyán, Z. und J. Unger, 2003: A multiple linear statistical model for estimating the mean maximum urban heat island. *Theor. Appl. Climatol.*, **75** (3-4), 233–243.
- Boylan, J. und A. Russell, 2006: PM and light extinction model performance metrics, goals, and criteria for three-dimensional air quality models. *Atmos. Env.*, 40 (26), 4946–4959.
- Brasseur, G., D. Hauglustaine, S. Walters, P. Rasch, J.-F. Müller, C. Granier, und X. Tie, 1998: MOZART, a global chemical transport model for ozone and related chemical tracers: 1. Model description. J. Geophys. Res.-Atmos., 103 (D21), 28 265–28 289.
- Briggs, G., 1969: Optimum formulas for buoyant plume rise. *Philos.* T. Roy. Soc. A, **265** (1161), 197–203.
- Brunekreef, B. und S. T. Holgate, 2002: Air pollution and health. Lancet, 360 (9341), 1233–1242.
- Bukowiecki, N., J. Dommen, A. Prevot, R. Richter, E. Weingartner, und U. Baltensperger, 2002: A mobile pollutant measurement laboratory—measuring gas phase and aerosol ambient concentrations with high spatial and temporal resolution. *Atmos. Environ.*, **36 (36)**, 5569–5579.
- Cheng, Y., X. Li, Z. Li, S. Jiang, Y. Li, J. Jia, und X. Jiang, 2014: Aircloud: A cloud-based air-quality monitoring system for everyone. *Proceedings of the 12th ACM Conference on Embedded Network Sensor Systems*, 251–265.

- Cheng, Y.-S., 2011: Condensation particle counters. Aerosol Measurement: Principles, Techniques, and Applications, P. Kulkarni, P. Baron, und K. Willeke, Hrsg., Wiley, Hoboken, N.J., Kap. 17, 381–392.
- Cocker, D. R., S. D. Shah, K. Johnson, J. W. Miller, und J. M. Norbeck, 2004a: Development and application of a mobile laboratory for measuring emissions from diesel engines. 1. regulated gaseous emissions. *Environ. Sci. Technol.*, 38 (7), 2182–2189.
- Cocker, D. R., S. D. Shah, K. C. Johnson, X. Zhu, J. W. Miller, und J. M. Norbeck, 2004b: Development and application of a mobile laboratory for measuring emissions from diesel engines. 2. sampling for toxics and particulate matter. *Environ. Sci. Technol.*, 38 (24), 6809–6816.
- Corsmeier, U., R. Hankers, und A. Wieser, 2001: Airborne turbulence measurements in the lower troposphere onboard the research aircraft Dornier 128-6, D-IBUF. *Meteorol. Z.*, 10 (4), 315–329.
- Costanzo, S., A. Cusumano, C. Giaconia, und S. Mazzacane, 2006: The study of the urban microclimate by means of public transport systems. Proceedings of the 5th WSEAS International Conference on Environment, Ecosystems and Development, 20–22.
- Crutzen, P., N. Elansky, M. Hahn, G. Golitsyn, C. Brenninkmeijer, D. Scharffe, I. Belikov, M. Maiss, P. Bergamaschi, T. Röckmann, et al., 1998: Trace gas measurements between Moscow and Vladivostok using the Trans-Siberian Railroad. J. Atmos. Chem., 29 (2), 179–194.
- Dockery, D., C. Pope, X. Xu, J. Spengler, J. Ware, M. Fay, B. Ferris Jr, und F. Speizer, 1993: An association between air pollution and mortality in six US cities. *New Engl. J. Med.*, **329** (24), 1753–1759.
- Drewnick, F., T. Böttger, S.-L. Weiden-Reinmüller, S. Zorn, T. Klimach, J. Schneider, und S. Borrmann, 2012: Design of a mobile aerosol research laboratory and data processing tools for effective stationary and mobile field measurements. *Atmos. Meas. Tech.*, 5 (6), 1443–1457.

- Ducrocq, V., I. Braud, S. Davolio, R. Ferretti, C. Flamant, A. Jansa, N. Kalthoff, E. Richard, I. Taupier-Letage, P.-A. Ayral, et al., 2014: HyMeX-SOP1: The field campaign dedicated to heavy precipitation and flash flooding in the northwestern mediterranean. B. Am. Meteorol. Soc., 95 (7), 1083–1100.
- EEA, 2009: Population density disaggregated with Corine land cover 2000. Europäische Umweltagentur, Kopenhagen, URL http://www.eea.europa.eu/data-and-maps/data/ds_ resolveuid/F6907877-C585-45DE-B93F-E7FC0975DE2A, abgerufen am 10. Oktober 2016.
- Corine EEA. 2014:Land Cover 2006daraster ta. Europäische Umweltagentur, Kopenhagen, URL http://www.eea.europa.eu/data-and-maps/data/ds resolveuid/a47ee0d3248146908f72a8fde9939d9d, abgerufen am 10. Oktober 2016.
- Elansky, N., A. Skorokhod, C. Brenninkmeijer, I. Belikov, O. Tarasova, O. Lavrova, und R. Shumsky, 2012: Train-Based Platform for Observations of the Atmosphere Composition (TROICA Project). INTECH Open Access Publisher.
- Elansky, N., I. Belikov, G. Golitsyn, A. Grisenko, O. Lavrova, N. Pankratova, A. Safronov, A. Skorokhod, und R. Shumskii, 2010: Observations of the atmosphere composition in the moscow megapolis from a mobile laboratory. *Dokl. Earth Sci.*, 432 (1), 649–655.
- Elen, B., J. Peters, M. Van Poppel, N. Bleux, J. Theunis, M. Reggente, und A. Standaert, 2012: The Aeroflex: a bicycle for mobile air quality measurements. *Sensors*, **13** (1), 221–240.
- Fenger, J., 2009: Air pollution in the last 50 years–From local to global. Atmos. Environ., 43 (1), 13–22.
- Gallego, F., 2010: A population density grid of the European Union. Popul. Environ., 31 (6), 460–473.
- Gerbig, C., S. Schmitgen, D. Kley, A. Volz-Thomas, K. Dewey, und D. Haaks, 1999: An improved fast-response vacuum-UV resonance fluorescence CO instrument. J. Geophys. Res.-Atmos., 104 (D1), 1699–1704.

- Groß, G. und F. Wippermann, 1987: Channeling and countercurrent in the upper Rhine Valley: Numerical simulations. J. Appl. Meteorol. Clim., 26 (10), 1293–1304.
- Gryparis, A., B. Forsberg, K. Katsouyanni, A. Analitis, G. Touloumi, J. Schwartz, E. Samoli, S. Medina, H. Anderson, E. Niciu, H.-E. Wichmann, B. Kriz, M. Kosnik, J. Skorkovsky, J. Vonk, und Z. Dörtbudak, 2004: Acute effects of ozone on mortality from the äir pollution and health: a European approach" project. Am. J. Resp. Crit. Care, **170** (10), 1080–1087.
- Günzler, H., A. Bahadir, R. Borsdorf, K. Danzer, W. Fresenius, R. Galensa, W. Huber, I. Lüderwald, G. Schwedt, G. Tölg, und H. Wisser, (Hrsg.), 1996: Analytiker-Taschenbuch. 14, Springer.
- Haagen-Smit, A., 1952: Chemistry and physiology of Los Angeles smog. Ind. Eng. Chem., 44 (6), 1342–1346.
- Haagen-Smit, A. und M. Fox, 1954: Photochemical ozone formation with hydrocarbons and automobile exhaust. Air Repair, 4 (3), 105–136.
- Hagemann, R., U. Corsmeier, G. Hinze, C. Kottmeier, R. Rinke, A. Wieser, und B. Vogel, 2012: Messungen der räumlichen Variabilität der Luftqualität in einem Ballungsraum mittels einer Straßenbahn – Forschungsbericht BWPLUS. Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Karlsruher Institut für Technologie.
- Hagemann, R., U. Corsmeier, C. Kottmeier, R. Rinke, A. Wieser, und B. Vogel, 2014: Spatial variability of particle number concentrations and no x in the karlsruhe (germany) area obtained with the mobile laboratory 'aero-tram'. *Atmos. Environ.*, 94, 341–352.
- Hart, M. und D. Sailor, 2009: Quantifying the influence of land-use and surface characteristics on spatial variability in the urban heat island. *Theor. Appl. Climatol.*, 95 (3-4), 397–406.
- Hasenfratz, D., O. Saukh, C. Walser, C. Hueglin, M. Fierz, T. Arn, J. Beutel, und L. Thiele, 2015: Deriving high-resolution urban air pollution maps using mobile sensor nodes. *Pervasive Mob. Comput.*, 16, 268–285.

- Hesselberg, T., 1926: Die Gesetze der ausgeglichenen atmosphärischen Bewegungen. Beitr. Phys. Atmos., 12, 141–160.
- Hinkel, K., F. Nelson, A. Klene, und J. Bell, 2003: The urban heat island in winter at Barrow, Alaska. Int. J. Climatol., 23 (15), 1889–1905.
- Hinze, G., 2011: Identifizierung von Stadt-Umlandeffekten anhand von mit der AERO-TRAM gemessenen meteorologischen Parametern. Seminararbeit, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Karlsruher Institut für Technologie.
- Hoek, G., R. Krishnan, R. Beelen, A. Peters, B. Ostro, B. Brunekreef, und J. Kaufman, 2013: Long-term air pollution exposure and cardio-respiratory mortality: a review. *Environ. Health*, 12 (1), 1.
- Hu, S., S. Paulson, S. Fruin, K. Kozawa, S. Mara, und A. Winer, 2012: Observation of elevated air pollutant concentrations in a residential neighborhood of Los Angeles California using a mobile platform. *Atmos. Environ.*, **51**, 311–319.
- Ibrahim, O., R. Shaiganfar, R. Sinreich, T. Stein, U. Platt, und T. Wagner, 2010: Car max-doas measurements around entire cities: quantification of no x emissions from the cities of mannheim and ludwigshafen (germany). Atmos. Meas. Tech., 3 (3), 709–721.
- Isakov, V., J. Touma, und A. Khlystov, 2007: A method of assessing air toxics concentrations in urban areas using mobile platform measurements. J. Air Waste Manag. Assoc., 57 (11), 1286–1295.
- Junkermann, W., R. Hagemann, und B. Vogel, 2011a: Nucleation in the Karlsruhe plume during the COPS/TRACKS-Lagrange experiment. Q. J. Roy. Meteor. Soc., 137 (S1), 267–274.
- Junkermann, W., B. Vogel, und M. Bangert, 2016: Ultrafine particles over Germany - an aerial survey. *Tellus B*, 68 (0), 29250.
- Junkermann, W., B. Vogel, und M. Sutton, 2011b: The climate penalty for clean fossil fuel combustion. Atmos. Chem. Phys., 11 (24), 12 917–12 924.

- Kalthoff, N. und B. Vogel, 1992: Counter-current and channelling effect under stable stratification in the area of Karlsruhe. *Theor. Appl. Climatol.*, 45 (2), 113–126.
- Kaufmann, M., J. Blank, T. Guggenmoser, J. Ungermann, A. Engel, M. Ern, F. Friedl-Vallon, D. Gerber, J.-U. Grooß, G. Günther, et al., 2015: Retrieval of three-dimensional small-scale structures in upper-tropospheric/lower-stratospheric composition as measured by GLORIA. Atmos. Meas. Tech., 8 (1), 81–95.
- Kiesewetter, G., J. Borken-Kleefeld, W. Schöpp, C. Heyes, P. Thunis, B. Bessagnet, E. Terrenoire, A. Gsella, und M. Amann, 2014: Modelling no₂ concentrations at the street level in the GAINS integrated assessment model: projections under current legislation. Atmos. Chem. Phys., 14 (2), 813–829.
- Kiesewetter, G., J. Borken-Kleefeld, W. Schöpp, C. Heyes, P. Thunis, B. Bessagnet, E. Terrenoire, H. Fagerli, A. Nyiri, und M. Amann, 2015: Modelling street level pm 10 concentrations across europe: source apportionment and possible futures. *Atmos. Chem. Phys.*, **15** (3), 1539–1553.
- Kittelson, D., W. Watts, J. Johnson, M. Remerowki, E. Ische, G. Oberdörster, R. Gelein, A. Elder, P. Hopke, E. Kim, et al., 2004a: On-road exposure to highway aerosols. 1. aerosol and gas measurements. *Inhal. Toxicol.*, 16 (sup1), 31–39.
- Kittelson, D. B., W. Watts, und J. Johnson, 2004b: Nanoparticle emissions on minnesota highways. Atmos. Environ., 38 (1), 9–19.
- Klappenbach, F., M. Bertleff, J. Kostinek, F. Hase, T. Blumenstock, A. Agusti-Panareda, M. Razinger, und A. Butz, 2015: Accurate mobile remote sensing of XCO₂ and XCH₄ latitudinal transects from aboard a research vessel. *Atmos. Meas. Tech.*, 8 (12), 5023–5038.
- Klaus, C., 2009: Entwicklung eines isokinetischen Einlasssystems autonomen Langzeitmessung von Aerosolen auf dem Dach einer Straßenbahn. Diplomarbeit, Fachbereich Ingenieurwissenschaften, Fachhochschule Wiesbaden.

- Klug, W., 1969: Ein Verfahren zur Bestimmung der Ausbreitungsbedingungen aus synoptischen Beobachtungen. Staub Reinhalt. Luft, 29 (4), 143–147.
- Kolb, C., S. Herndon, J. McManus, J. Shorter, M. Zahniser, D. Nelson, J. Jayne, M. Canagaratna, und D. Worsnop, 2004: Mobile laboratory with rapid response instruments for real-time measurements of urban and regional trace gas and particulate distributions and emission source characteristics. *Environ. Sci. Technol.*, **38 (21)**, 5694–5703.
- Kottmeier, C., C. Biegert, und U. Corsmeier, 2007: Effects of urban land use on surface temperature in Berlin: Case study. J. Urban Plann. Dev., 133 (2), 128–137.
- Kottmeier, C., U. Corsmeier, F. Fiedler, und R. Hankers, 2002: Forschungsflugzeug DO128–ein fliegendes Labor für die Umweltund Klimaforschung am FZK Research Aircraft DO128–a Flying Laboratory for Use in Environmental and Climate Research at the FZK. Forschungszentrum Karlsruhe GmbH.
- KTA, 2006: Instrumentierung zur Ermittlung der Ausbreitung radioaktiver Stoffe in der Atmosphäre. Kerntechnischer Ausschuß (KTA).
- Kugler, U., J. Theloke, B. Thiruchittampalam, R. Friedrich, S. Laufer, M. Knecht, C. Schieberle, und T. Kampffmeyer, 2013: Projekt "Verkehrsentwicklung und Umwelt"(VEU) - Dokumentation der vom IER erarbeiteten Beiträge. Tech. rep., Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung, Universität Stuttgart.
- Lenschow, P., H.-J. Abraham, K. Kutzner, M. Lutz, J.-D. Preuß, und W. Reichenbächer, 2001: Some ideas about the sources of PM10. Atmos. Environ., 35, S23–S33.
- Li, Y., W. Wang, H. Kan, X. Xu, und B. Chen, 2010: Air quality and outpatient visits for asthma in adults during the 2008 Summer Olympic Games in Beijing. *Sci. Total Environ.*, 408 (5), 1226–1227.
- Lu, Z., D. Streets, Q. Zhang, S. Wang, G. Carmichael, Y. Cheng, C. Wei, M. Chin, T. Diehl, und Q. Tan, 2010: Sulfur dioxide

emissions in china and sulfur trends in east asia since 2000. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, **10** (13), 6311–6331.

- Lundgren, K., B. Vogel, H. Vogel, und C. Kottmeier, 2013: Direct radiative effects of sea salt for the Mediterranean region under conditions of low to moderate wind speeds. J. Geophys. Res.-Atmos., 118 (4), 1906–1923.
- Mohr, C., R. Richter, P. F. DeCarlo, A. Prévôt, und U. Baltensperger, 2011: Spatial variation of chemical composition and sources of submicron aerosol in zurich during wintertime using mobile aerosol mass spectrometer data. Atmos. Chem. Phys., 11 (15), 7465–7482.
- Moussiopoulos, N., I. Douros, G. Tsegas, E. Chourdakis, und S. Ortiz, 2012: An approach for determining urban concentration increments. Int. J. Environ. Pollut., 50 (1-4), 376–385.
- Naftel, J., 2009: NASA Global Hawk: a new tool for Earth science research. NASA Dryden Flight Research Center.
- Oertel, H., M. Böhle, und T. Reviol, 2015: *Strömungsmechanik: für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Springer-Verlag.
- Oke, T., 1973: City size and the urban heat island. Atmos. Environ., 7 (8), 769–779.
- Oke, T., 1982: The energetic basis of the urban heat island. Q. J. Roy. Meteor. Soc., 108 (455), 1–24.
- Pasquill, F., 1961: The estimation of the dispersion of windborne material. *Meteorol. Mag.*, **90** (1063), 33–49.
- Petzold, A., V. Thouret, C. Gerbig, A. Zahn, C. Brenninkmeijer, M. Gallagher, M. Hermann, M. Pontaud, H. Ziereis, D. Boulanger, et al., 2015: Global-scale atmosphere monitoring by in-service aircraft-current achievements and future prospects of the european research infrastructure IAGOS. *Tellus B*, 67, 28452.
- Pirjola, L., A. Pajunoja, J. Walden, J.-P. Jalkanen, T. Rönkkö, A. Kousa, und T. Koskentalo, 2014: Mobile measurements of ship emissions in two harbour areas in finland. *Atmos. Meas. Tech.*, 7 (1), 149–161.

- Pirjola, L., H. Parviainen, T. Hussein, A. Valli, K. Hämeri, P. Aaalto, A. Virtanen, J. Keskinen, T. Pakkanen, T. Mäkelä, et al., 2004: "Sniffer" — a novel tool for chasing vehicles and measuring traffic pollutants. Atmos. Environ., 38 (22), 3625–3635.
- Pirjola, L., T. Lähde, J. Niemi, A. Kousa, T. Rönkkö, P. Karjalainen, J. Keskinen, A. Frey, und R. Hillamo, 2012: Spatial and temporal characterization of traffic emissions in urban microenvironments with a mobile laboratory. *Atmos. Environ.*, 63, 156–167.
- Pope III, C., R. Burnett, M. Thun, E. Calle, D. Krewski, K. Ito, und G. Thurston, 2002: Lung cancer, cardiopulmonary mortality, and long-term exposure to fine particulate air pollution. J. Am. Med. Assoc., 287 (9), 1132–1141.
- Pregger, T. und R. Friedrich, 2009: Effective pollutant emission heights for atmospheric transport modelling based on real-world information. *Environ. Pollut.*, **157** (2), 552–560.
- Ramanathan, V., P. Crutzen, J. Kiehl, und D. Rosenfeld, 2001: Aerosols, climate, and the hydrological cycle. *Science*, **294** (5549), 2119–2124.
- Ramanathan, V. und Y. Feng, 2009: Air pollution, greenhouse gases and climate change: Global and regional perspectives. Atmos. Environ., 43 (1), 37–50.
- Rehme, K., 1976: Application of gas phase titration in the calibration of nitric oxide, nitrogen dioxide, and ozone analyzers. *Calibration in air monitoring*, J. Wheeler, H. Hoersch, C. De-France, und E. McGlinchey, Hrsg., American Society for Testing and Materials, 198–209.
- Rich, D., H. Kipen, W. Huang, G. Wang, Y. Wang, P. Zhu, P. Ohman-Strickland, M. Hu, C. Philipp, S. Diehl, S.-E. Lu, J. Tong, J. Gong, D. Thomas, T. Zhu, und J. Zhang, 2012: Association between changes in air pollution levels during the Beijing Olympics and biomarkers of inflammation and thrombosis in healthy young adults. J. Am. Med. Assoc., 307 (19), 2068–2078.
- Riemer, N., H. Vogel, B. Vogel, T. Anttila, A. Kiendler-Scharr, und T. Mentel, 2009: Relative importance of organic coatings for

the heterogeneous hydrolysis of N_2O_5 during summer in europe. J. Geophys. Res.-Atmos., 114 (D17).

- Rinke, R., A. Wieser, B. Vogel, C. Corsmeier, und C. Kottmeier, 2009: Messungen der räumlichen Variabilität der Luftqualität in einem Ballungsraum mittels einer Straßenbahn – Zwischenbericht BWPLUS. Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Karlsruher Institut für Technologie.
- Rinke, R., A. Wieser, B. Vogel, C. Corsmeier, und C. Kottmeier, 2010: Messungen der räumlichen Variabilität der Luftqualität in einem Ballungsraum mittels einer Straßenbahn – Zwischenbericht BWPLUS. Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Karlsruher Institut für Technologie.
- Rosenfeld, D., 2000: Suppression of rain and snow by urban and industrial air pollution. *Science*, **287** (5459), 1793–1796.
- Sadanaga, Y., Y. Fukumori, T. Kobashi, M. Nagata, N. Takenaka, und H. Bandow, 2010: Development of a selective light-emitting diode photolytic NO_2 converter for continuously measuring NO_2 in the atmosphere. Anal. Chem., 82 (22), 9234–9239.
- Samoli, E., R. Peng, T. Ramsay, M. Pipikou, G. Touloumi, F. Dominici, R. Burnett, A. Cohen, D. Krewski, J. Samet, und K. Katsouyanni, 2008: Acute effects of ambient particulate matter on mortality in Europe and North America: results from the APHE-NA study. *Environ. Health Persp.*, **116** (11), 1480.
- Schreier, S., E. Peters, A. Richter, J. Lampel, F. Wittrock, und J. Burrows, 2015: Ship-based MAX-DOAS measurements of tropospheric NO₂ and SO₂ in the south china and sulu sea. *Atmos. Environ.*, **102**, 331–343.
- Seigneur, C., B. Pun, P. Pai, J.-F. Louis, P. Solomon, C. Emery, R. Morris, M. Zahniser, D. Worsnop, P. Koutrakis, W. White, und I. Tombach, 2000: Guidance for the performance evaluation of three-dimensional air quality modeling systems for particulate matter and visibility. J. Air Waste Manage., 50 (4), 588–599.
- Seinfeld, J., 2008: Atmospheric science: Black carbon and brown clouds. Nature Geosci., 1 (1), 15–16.

- Sofer, M. und O. Potchter, 2006: The urban heat island of a city in an arid zone: the case of Eilat, Israel. *Theor. Appl. Climatol.*, 85 (1-2), 81–88.
- Stanelle, T., B. Vogel, H. Vogel, D. Bäumer, und C. Kottmeier, 2010: Feedback between dust particles and atmospheric processes over West Africa during dust episodes in March 2006 and June 2007. Atmos. Chem. Phys., 10 (22), 10771–10788.
- Steiger, H. und A. Brockhaus, 1966: Untersuchungen über den Zusammenhang zwischen Luftverunreinigungen und Mortalität im Ruhrgebiet. *Naturwissenschaften*, **53** (19), 498–498.
- Steppeler, J., G. Doms, U. Schättler, H. Bitzer, A. Gassmann, U. Damrath, und G. Gregoric, 2003: Meso-gamma scale forecasts using the nonhydrostatic model LM. *Meteorol. Atmos. Phys.*, 82 (1-4), 75–96.
- Stockwell, W., F. Kirchner, M. Kuhn, und S. Seefeld, 1997: A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling. J. Geophys. Res.-Atmos., 102 (D22), 25847–25879.
- Szymanowski, M. und M. Kryza, 2009: GIS-based techniques for urban heat island spatialization. *Clim. Res.*, 38 (2), 171–187.
- Tang, U. und Z. Wang, 2006: Determining gaseous emission factors and driver's particle exposures during traffic congestion by vehicle-following measurement techniques. J. Air Waste Manag. Assoc., 56 (11), 1532–1539.
- Tränkler, H.-R. und L. M. Reindl, 2015: Sensortechnik: Handbuch für Praxis und Wissenschaft. Springer-Verlag.
- UBA, 2010: Auswertung der Luftbelastungssituation 2009. Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau.
- UBA, 2016a: Informationen zu Schadstofffreisetzungen. Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau, URL www.thru.de, abgerufen am 30. September 2016.
- UBA, 2016b: Luftqualität 2015. Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau.

- Vogel, B., G. Groß, und F. Wippermann, 1986: Mesoklip (First special observation period): observations and numerical simulation—a comparison. *Bound.-Lay. Meteorol.*, **35** (1-2), 83–102.
- Vogel, B., H. Vogel, D. Bäumer, M. Bangert, K. Lundgren, R. Rinke, und T. Stanelle, 2009: The comprehensive model system COSMO-ART-radiative impact of aerosol on the state of the atmosphere on the regional scale. *Atmos. Chem. Phys.*, 9 (22), 8661–8680.
- Vogel, H., A. Pauling, und B. Vogel, 2008: Numerical simulation of birch pollen dispersion with an operational weather forecast system. Int. J Biometeorol., 52 (8), 805–814.
- Vogt, R., U. Kirchner, V. Scheer, K. Hinz, A. Trimborn, und B. Spengler, 2003a: Identification of diesel exhaust particles at an autobahn, urban and rural location using single-particle mass spectrometry. J. Aerosol Sci., 34 (3), 319–337.
- Vogt, R., V. Scheer, R. Casati, und T. Benter, 2003b: On-road measurement of particle emission in the exhaust plume of a diesel passenger car. *Environ. Sci. Technol.*, **37** (18), 4070–4076.
- Volz, A. und D. Kley, 1985: A resonance-fluorescence instrument for the in-situ measurement of atmospheric carbon monoxide. J. Atmos. Chem., 2 (4), 345–357.
- von der Weiden-Reinmüller, S.-L., F. Drewnick, M. Crippa, A. Prévôt, F. Meleux, U. Baltensperger, M. Beekmann, und S. Borrmann, 2014: Application of mobile aerosol and trace gas measurements for the investigation of megacity air pollution emissions: the Paris metropolitan area. *Atmos. Meas. Tech.*, 7 (1), 279–299.
- Wang, S., B. Zhao, S. Cai, Z. Klimont, C. Nielsen, T. Morikawa, J. Woo, Y. Kim, X. Fu, J. Xu, et al., 2014: Emission trends and mitigation options for air pollutants in East Asia. Atmos. Chem. Phys. Discuss., 14 (13), 6571–6603.
- Weijers, E., A. Khlystov, G. Kos, und J. Erisman, 2004: Variability of particulate matter concentrations along roads and motorways determined by a moving measurement unit. *Atmos. Environ.*, **38** (19), 2993–3002.

- Wesely, M. und B. Hicks, 2000: A review of the current status of knowledge on dry deposition. Atmos. Environ., 34 (12), 2261– 2282.
- Westerdahl, D., S. Fruin, T. Sax, P. Fine, und C. Sioutas, 2005: Mobile platform measurements of ultrafine particles and associated pollutant concentrations on freeways and residential streets in Los Angeles. *Atmos. Environ.*, **39** (20), 3597–3610.
- Wieser, A., 2011: Messung turbulenter Spurengasflüsse vom Flugzeug aus. Dissertation, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe.
- Wieser, A., U. Corsmeier, C. Kottmeier, R. Rinke, und B. Vogel, 2008: Messungen der räumlichen Variabilität der Luftqualität in einem Ballungsraum mittels einer Straßenbahn – Zwischenbericht BWPLUS. Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Karlsruher Institut für Technologie.
- Wilkins, E., 1954: Air pollution aspects of the London fog of December 1952. Q. J. Roy. Meteor. Soc., 80 (344), 267–271.
- Yagi, S. und M. Tanaka, 1979: Mechanism of ozone generation in air-fed ozonisers. J. Phys. D Appl. Phys., 12 (9), 1509–1520.
- Yu, S., B. Eder, R. Dennis, S.-H. Chu, und S. Schwartz, 2006: New unbiased symmetric metrics for evaluation of air quality models. *Atmos. Sci. Let.*, 7 (1), 26–34.
- Zahn, A., E. Christner, P. Velthoven, A. Rauthe-Schöch, und C. Brenninkmeijer, 2014: Processes controlling water vapor in the upper troposphere/lowermost stratosphere: An analysis of 8 years of monthly measurements by the IAGOS-CARIBIC observatory. J. Geophys. Res.-Atmos., 119 (19), 11505—11525.
- Zellweger, C., M. Steinbacher, und B. Buchmann, 2012: Evaluation of new laser spectrometer techniques for in-situ carbon monoxide measurements. Atmos. Meas. Tech., 5 (10), 2555–2567.
- Zhao, B., S. Wang, H. Liu, J. Xu, K. Fu, Z. Klimont, J. Hao, K. He, J. Cofala, und M. Amann, 2013: NO_x emissions in China: historical trends and future perspectives. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 13 (19), 9869–9897.

A. Partikeleinlasseffizienz



Abbildung A.1.: Effizienz des Partikeleinlasses durch Sedimentationsverluste für verschiedene Fahrgeschwindigkeiten des Messgeräteträgers (Klaus, 2009).



Abbildung A.2.: Effizienz des Partikeleinlasses durch Diffusionsverluste für verschiedene Fahrgeschwindigkeiten des Messgeräteträgers (Klaus, 2009).



Abbildung A.3.: Effizienz des Partikeleinlasses durch turbulente Diffusionsverluste für verschiedene Fahrgeschwindigkeiten des Messgeräteträgers (Klaus, 2009).



Abbildung A.4.: Gesamteffizienz des Partikeleinlasses bis zum Messlufteingang des TSI CPC 3772 Kondensationspartikelzählers. Nur der geräterelevante Partikelgrößenbereich ist dargestellt (Klaus, 2009).



Abbildung A.5.: Gesamteffizienz des Partikeleinlasses bis zum Messlufteingang des TSI CPC 3775 Kondensationspartikelzählers. Nur der geräterelevante Partikelgrößenbereich ist dargestellt (Klaus, 2009).



Abbildung A.6.: Gesamteffizienz des Partikeleinlasses bis zum Messlufteingang des GRIMM Dustmonitor 1.109 Aerosolspektrometers. Nur der geräterelevante Partikelgrößenbereich ist dargestellt (Klaus, 2009).

B. Anzahl Messfahrten der übrigen Messparameter

Strecke		CO	CO_2	CPC ₃₇₇₂	v_h	
2010						
Hochstetten	_	Bad Herrenalb	81	178	132	163
Hochstetten	_	Ittersbach	37	116	78	99
Hochstetten	_	Ettlingen	59	159	105	150
Neureut	_	Bad Herrenalb	15	42	31	40
Neureut	_	Ittersbach	32	126	85	119
Neureut	_	Ettlingen	85	251	165	238
Fahrten insgesamt		309	872	596	809	
2011						
Hochstetten	_	Bad Herrenalb	37	143	114	143
Hochstetten	_	Ittersbach	37	99	77	99
Hochstetten	_	Ettlingen	20	108	102	108
Neureut	_	Bad Herrenalb	8	21	12	21
Neureut	_	Ittersbach	25	78	51	78
Neureut	_	Ettlingen	93	242	161	240
Fahrten insgesamt		220	691	517	689	

Tabelle B.1.: Anzahl der Messfahrten auf der Linie S1/S11.

Strecke		CO	CO_2	CPC_{3772}	v_h	
2010						
Spöck	_	Mörsch	19	972	464	690
Spöck	_	Daxlanden	7	54	27	44
Blankenloch	_	Mörsch	0	182	87	139
Blankenloch	_	Daxlanden	0	13	7	12
Büchig	_	Mörsch	1	180	69	124
Büchig	_	Daxlanden	1	118	62	108
Fahrten insgesamt		28	1519	716	1117	
2011						
Spöck	_	Mörsch	277	277	197	287
Spöck	_	Daxlanden	11	13	7	14
Blankenloch	_	Mörsch	42	51	32	51
Blankenloch	_	Daxlanden	5	10	4	10
Büchig	_	Mörsch	85	89	54	93
Büchig	_	Daxlanden	45	51	29	51
Fahrten insgesamt		465	491	323	506	

 Tabelle B.2.: Anzahl der Messfahrten auf der Linie S2.

C. Rohdaten von Einzelfahrten



Abbildung C.1.: Partikelkonzentration entlang der Linie S2 einer Messfahrt vom 23.7.2010.



Abbildung C.2.: Partikelkonzentration entlang der Linie S2 einer Messfahrt am 14.6.2010.

D. Standardabweichung der Stickoxidmessungen



Abbildung D.1.: Standardabweichung $\sigma_{c_{NO_2}}$ für NO₂-Messfahrten auf der Linie S1/S11 im Jahr 2010. Ungültige Messfahrten sind hervorgehoben.



Abbildung D.2.: Standardabweichung $\sigma_{c_{\rm NO}}$ für NO-Messfahrten auf der Linie S2 im Jahr 2010. Ungültige Messfahrten sind hervorgehoben. Zur einfacheren Darstellung wurden bei Messfahrten mit einer Standardabweichung von Null $\sigma_{c_{\rm NO}} = 0.1$ gesetzt.



Abbildung D.3.: Standardabweichung $\sigma_{c_{NO_2}}$ für NO₂-Messfahrten auf der Linie S2 im Jahr 2010. Ungültige Messfahrten sind hervorgehoben.


Abbildung D.4.: Standardabweichung $\sigma_{c_{\rm NO}}$ für NO-Messfahrten auf der Linie S1/S11 im Jahr 2011. Ungültige Messfahrten sind hervorgehoben. Zur einfacheren Darstellung wurden bei Messfahrten mit einer Standardabweichung von Null $\sigma_{c_{\rm NO}} = 0.1$ gesetzt.



Abbildung D.5.: Standardabweichung $\sigma_{c_{\rm NO_2}}$ für NO₂-Messfahrten auf der Linie S1/S11 im Jahr 2011. Ungültige Messfahrten sind hervorgehoben. Zur einfacheren Darstellung wurden bei Messfahrten mit einer Standardabweichung von Null $\sigma_{c_{\rm NO_2}} = 0.1$ gesetzt.



Abbildung D.6.: Standardabweichung $\sigma_{c_{\rm NO}}$ für NO-Messfahrten auf der Linie S2 im Jahr 2011. Ungültige Messfahrten sind hervorgehoben.



Abbildung D.7.: Standardabweichung $\sigma_{c_{NO_2}}$ für NO₂-Messfahrten auf der Linie S2 im Jahr 2011. Ungültige Messfahrten sind hervorgehoben.

E. Grundlagen des Gaußmodells

Aus der Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{\chi}}{\partial t} + \vec{\bar{v}} \cdot \nabla \bar{\rho}_{\chi} = (\nabla \cdot \boldsymbol{K}) \cdot \nabla \bar{\rho}_{\chi} + \bar{S}_{\chi} + \bar{E}_{\chi} , \qquad (E.1)$$

mit: $\bar{\rho}_{\chi}$ = Partialdichte des Stoffes χ , K = turbulenter Diffusionstensor, \bar{S}_{χ} = chemische Umwandlungsprozesse, \bar{E}_{χ} = Emissionen,

und

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_x & 0 & 0\\ 0 & K_y & 0\\ 0 & 0 & K_z \end{pmatrix}$$
(E.2)

und unter Berücksichtigung folgender Annahmen:

I. Stationarität:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{\chi}}{\partial t} = 0 , \qquad (E.3)$$

II. Grundstrom in *x*-Richtung:

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} \vec{u} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = const. , \qquad (E.4)$$

III. Räumliche Konstanz der Diffusionskoeffizienten:

$$\frac{\partial K_x}{\partial x} = \frac{\partial K_y}{\partial y} = \frac{\partial K_z}{\partial z} = 0 , \qquad (E.5)$$

IV. Keine Produktion oder Vernichtung aufgrund chemischer Umwandlungsprozesse:

$$\bar{S}_{\chi} = 0 , \qquad (E.6)$$

V. Ausbreitung des Stoffes χ in Richtung des Grundstroms erfolgt nur durch Advektion:

$$u \cdot \frac{\partial \bar{\rho}_{\chi}}{\partial x} \gg K_x \cdot \frac{\partial^2 \bar{\rho}_{\chi}}{\partial x^2}$$
. (E.7)

folgt:

$$\bar{u}\frac{\partial\rho_{\chi}}{\partial x} = K_y \frac{\partial^2 \bar{\rho}_{\chi}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{\rho}_{\chi}}{\partial z^2} + E_{\chi} .$$
(E.8)

Mit Hilfe der Normalverteilung, die in ihrer allgemeinen Form durch

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$
(E.9)

gegeben ist, erhält man für Gl. E.8 unter den Voraussetzungen der Totalreflektion am Boden

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{\chi}}{\partial z} = 0 \text{ für } z = 0 \tag{E.10}$$

und einer Emission von χ am Punkt

$$P_{\text{Quelle}} = \begin{pmatrix} 0\\ y_{\text{Quelle}}\\ h \end{pmatrix} \tag{E.11}$$

die Lösung

$$\bar{\rho}_{\chi}(x,y,z) = \frac{E_{\chi}}{2\pi\sigma_x(x)\sigma_z(x)\bar{u}} \cdot e^{-\frac{(y-y_{\text{Quelle}})^2}{2\sigma_y^2(x)}} \\ \cdot \left(e^{-\frac{(z-h_{eff})^2}{2\sigma_z^2(x)}} + e^{-\frac{(z+h_{eff})^2}{2\sigma_z^2(x)}} \right) , \qquad (E.12)$$

mit:
$$\sigma_y(x)$$
, $\sigma_z(x) =$ Sigmaparameter,
 $h_{eff} =$ effektive Quellhöhe,

und

$$\sigma_y(x) = \sqrt{2K_y \frac{x}{u}} , \qquad (E.13)$$

$$\sigma_z(x) = \sqrt{2K_z \frac{x}{u}} . \tag{E.14}$$

F. Quellstärken der Hauptemittenten in Karlsruhe

Tabelle F.1.: Freisetzungen verschiedener Luftbeimengungen durch die Karlsruher Raffinerien und des Karlsruher Dampfkraftwerks im Jahr 2011 (UBA, 2016a).

	MiRo		Rheinhafen- dampfkraft-
	Werk 1	Werk 2	werk
SO _x	$3180{ m ta^{-1}}$	$1180{\rm ta^{-1}}$	$1520{\rm ta^{-1}}$
NO_x	$1710{ m ta^{-1}}$	$682\mathrm{ta^{-1}}$	$1420{\rm ta^{-1}}$
NMVOC	$355{ m ta^{-1}}$	$263\mathrm{ta^{-1}}$	_
PM10	$76\mathrm{ta^{-1}}$	_	_
Σ	$5321 \mathrm{ta^{-1}}$	$2125\mathrm{ta^{-1}}$	$2940{ m ta^{-1}}$
	$7446 \mathrm{ta^{-1}}$		

G. Methoden der linearen Regressionsanalyse

Die lineare Regressionsanalyse stellt eine Methode dar, mit deren Hilfe untersucht wird, ob ein funktionaler Zusammenhang zwischen einer abhängigen und einer oder mehreren unabhängigen Variablen existiert. Die abhängige Variable wird auch als Regressand Y, die unabhängigen Variablen werden als Regressoren X_k bezeichnet. Dabei wird angenommen, dass der Zusammenhang zwischen X_k und Y durch eine Gleichung, das sogenannte lineare Regressionsmodell, beschrieben werden kann:

$$\dot{Y} = f(X_k) = \beta_0 + \sum_{k=1}^{q} (\beta_k X_k)$$
, (G.1)

mit: $\check{Y} = \text{Schätzwert von } Y$ $\beta = \text{Regressionskoeffizient},$

q = Anzahl Regressoren.

Dieses Regressionsmodell trägt die Bezeichung linear, da die Regressionskoeffizienten β_k linear in das Modell eingehen. Für die Ableitung dieses Zusammenhangs ist nur im Falle zweier Beobachtungen für X_k und Y eine Erwartungstreue sichergestellt, d. h. der Zusammenhang zwischen X_1 und $Y_{1,j}$ sowie X_2 und $Y_{2,j}$ wird durch die Regressionsgerade exakt erklärt:

$$E(\dot{Y}_l) = \beta_0 + \sum_{k=1}^{q} (\beta_k X_{l,k}) = Y_l \quad \text{mit } l = [1;m] \text{ und } m = 2 ,$$
(G.2)

mit: m =Anzahl der Beobachtungen.

Da normalerweise eine Vielzahl von Beobachtungen vorliegen, ist die Erwartungstreue in der Regel nicht mehr gewährleistet, so dass zwischen dem beobachteten Y_l und dem mit Hilfe des Regressionsmodells berechneten \dot{Y}_l eine Abweichung ϵ_l auftritt:

$$\dot{Y}_{l} = \beta_{0} + \sum_{k=1}^{q} (\beta_{k} X_{l,k}) + \epsilon_{l} = Y_{l}.$$
 (G.3)

Die Abweichung ϵ_l ist unabhängig und normalverteilt, mit $\mu_{\epsilon} = 0$ sowie $\sigma_{\epsilon} > 0$, und damit die Erwartungtreue des Regressionsmodells im Mittel gewährleistet:

$$\mathbf{E}(\bar{Y}) = \beta_0 + \sum_{k=1}^{q} \left(\beta_k \bar{X}_k \right) , \qquad (\mathbf{G.4})$$

mit: $\bar{Y} = \frac{1}{m} \sum_{l=1}^{m} Y_l,$ $\bar{X} = \frac{1}{m} \sum_{l=1}^{m} X_{l,k}.$

Die Regressionskoeffizienten β_k können mit Hilfe von Gl. G.3 bestimmt werden. Da die Anzahl m der Beobachtungen größer als die Anzahl q der zu bestimmenden Regressionskoeffizienten β_k ist, ist das resultierende Gleichungssystem überbestimmt und es existiert keine exakte Lösung für β_k . Aus diesem Grund müssen die Koeffizienten geschätzt werden, wobei die bestmögliche Schätzung durch eine Minimierung der Abweichungen ϵ_l resultiert. Die Schätzung erfolgt mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate, bei der die Summe der Quadrate der Abweichung minimiert wird:

$$Q(\beta_k) = \sum_{l=1}^{m} (Y_l - \dot{Y}_l)^2 = \sum_{l=1}^{m} \left(Y_l - \beta_0 - \sum_{k=1}^{q} (\beta_k X_{l,k}) \right)^2$$
$$= \sum_{l=1}^{m} \epsilon_l .$$
(G.5)

Die Summe $\sum_{l=1}^{m}$ wird durch Nullstellen der partiellen Ableitungen von Q nach β_k minimiert:

$$\frac{\partial Q}{\partial \beta_k} = 0 . \tag{G.6}$$

Dieses Gleichungssystem liefert die bestmöglichen Schätzwerte für β_k .

Bei der Ableitung des Verfahrens zur Bestimmung verkehrsbedingter, kleinräumiger Erhöhungen der Stickoxidbelastung aus räumlichen Mitteln werden maximal zwei Regressoren, also einfach und zweifach lineare Regressionsmodelle verwendet. Die genaue Bestimmung der Koeffizienten solcher Regressionsmodelle wird im folgenden im Detail erläutert. Im Fall der einfachen linearen Regression reduzieren sich die folgenden Gleichungen auf die unterstrichenen Terme und Elemente. Die Koeffizientenbestimmung gestaltet sich um einiges einfacher, wenn anstatt der Lösung des linearen Gleichungssystems von Gl. G.6 die sogenannten Normalengleichungen des Gleichungssystems

$$\underline{Y_l} = \underline{\beta_0} + \underline{\beta_1 X_{l,1}} + \beta_2 X_{l,2} \tag{G.7}$$

bestimmt werden. Dieses Gleichungssystem kann alternativ in Matrixform dargestellt werden:

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{\beta} \tag{G.8}$$

bzw. in Komponentendarstellung

$$\begin{pmatrix} \underline{Y}_2\\ \underline{Y}_2\\ \vdots\\ \underline{Y}_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{1} & \underline{X}_{1,1} & X_{1,2}\\ \underline{1} & \underline{X}_{2,1} & X_{2,2}\\ \vdots & \vdots & \vdots\\ \underline{1} & \underline{X}_{m,1} & X_{m,2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \underline{\beta}_0\\ \underline{\beta}_1\\ \underline{\beta}_2 \end{pmatrix} \quad . \tag{G.9}$$

Mit Hilfe der Transponierten der Matrix X können die Normalengleichungen von Gl. G.7 ermittelt werden:

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{Y}$$
 (G.10)

$$\Rightarrow \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{B} \tag{G.11}$$

bzw. in Komponentendarstellung:

$$\begin{pmatrix} \underline{m} & \underbrace{\sum_{l=1}^{m} X_{l,1}}_{\sum_{l=1}^{m} X_{l,2}} & \sum_{l=1}^{m} X_{l,2} \\ \underline{\sum_{l=1}^{m} X_{l,2}}_{l=1} & \underbrace{\sum_{l=1}^{m} X_{l,1}}_{\sum_{l=1}^{m} X_{l,1} X_{l,2}} & \sum_{l=1}^{m} X_{l,2} \\ \sum_{l=1}^{m} X_{l,2} & \underbrace{\sum_{l=1}^{m} X_{l,1} X_{l,2}}_{l=1} & \underbrace{\sum_{l=1}^{m} Y_{l}}_{\sum_{l=1}^{m} X_{l,2} Y_{l}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \underline{\beta_0} \\ \underline{\beta_1} \\ \underline{\beta_2} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} \underbrace{\sum_{l=1}^{m} Y_l}_{\sum_{l=1}^{m} X_{l,2} Y_l} \\ \underbrace{\sum_{l=1}^{m} X_{l,2} Y_l}_{\sum_{l=1}^{m} X_{l,2} Y_l} \end{pmatrix} .$$
(G.12)

Durch Auflösen von Gl. G.12 erhält man wieder das lineare Gleichungssystem von Gl. G.6. Die Regressionskoeffizienten lassen sich aber einfacher mit Hilfe der Cramerschen Regel bestimmen:

$$\beta_k = \frac{\det \boldsymbol{A_k}}{\det \boldsymbol{A}} \ . \tag{G.13}$$

Dabei ist $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$ diejenige Matrix, die durch Austausch der Elemente der (k+1)-ten Spalte der Matrix \mathbf{A} mit den Elementen der Matrix \mathbf{B} gebildet wird. Mit Gl. G.13 können prinzipiell die Regressionskoeffizienten linearer Regressionsmodelle mit beliebig vielen Regressoren berechnet werden. Allerdings gerät bereits für ein zweifach lineares Modell die Lösung der Determinanten sehr umfangreich und wird aufgrund des Rechenaufwands in der Regel numerisch oder zumindest rechnergestützt gelöst. Zur Veranschaulichung werden an dieser Stelle die Bestimmung der Regressionskoeffizienten des einfach linearen Modells dargestellt:

$$\beta_0 = \frac{\sum_{l=1}^m X_{l,1}^2 \sum_{l=1}^m Y_l - \sum_{l=1}^m X_{l,1} \sum_{l=1}^m X_{l,1} Y_l}{m \sum_{l=1}^m X_{l,1}^2 - (\sum_{l=1}^m X_{l,1})^2} , \qquad (G.14)$$

$$\beta_1 = \frac{m \sum_{l=1}^m X_{l,1} Y_l - \sum_{l=1}^m X_{l,1} \sum_{l=1}^m Y_l}{m \sum_{l=1}^m X_{l,1}^2 - (\sum_{l=1}^m X_{l,1})^2} .$$
(G.15)

G.1. Voraussetzungen und Testgrößen

Bei der Bestimmung des Regressionsmodells werden folgende Annahmen getroffen:

- **Linearität zwischen** Y_l und $X_{l,k}$: Prüfung mittels Streudiagrammen und/oder über Berechnung der Korrelationskoeffizienten nach Pearson.
- Keine Multikollinearität (bei multipler Regression): die Regressoren dürfen untereinander keine starke Korrelation aufweisen (Prüfung wie bei Linearität).

Die erste Annahme erklärt sich von selbst, da bei einer Verletzung dieser die prognostizierten \dot{Y}_l eine sehr starke Abweichung von den beobachteten Y_l aufweisen. Der Korrelationskoeffizient r nach Pearson berechnet sich wie folgt:

$$r(x,y) = \frac{\sum_{l=1}^{m} \left((x - \bar{x}) \cdot (y - \bar{y}) \right)}{\sqrt{\sum_{l=1}^{m} (x - \bar{x})^2 \cdot \sum_{l=1}^{m} (y - \bar{y})^2}} .$$
 (G.16)

Allerdings sollte sichergestellt werden, dass die Linearität zwischen Regressand und Regressoren nicht zufällig, sondern signifikant ist. Dies kann mit Hilfe des sogenannten Steiger-Z-Test überprüft werden:

$$T = \left|\frac{r^2\sqrt{m-2}}{\sqrt{1-r^2}}\right| > t_{m-2,1-\alpha/2} . \tag{G.17}$$

Dieser untersucht als Nullhypothese, ob x und y unkorreliert, also r(x, y) = 0 ist. Die Nullhypothese wird abgelehnt, wenn T größer als der $1 - \alpha/2$ -Quantilwert einer t-Verteilung mit m - 2 Freiheitsgraden ist und es wird die Alternativhypothese $r(x, y) \neq 0$ angenommen. Die Wahrscheinlichkeit, dass die Nullhypothese doch wahr ist, beträgt dann höchstens $\alpha \cdot 100$ %. Eine Verletzung der zweiten Annahme kann oft nicht vollständig ausgeschlossen werden, da in vielen Fällen eine gewisse Korrelation unter den Regressoren vorliegt.

Nach Bestimmung der β_k -Koeffizienten des Regressionsmodells sind weitere Voraussetzungen zu untersuchen:

Güte des Modells: Mit welcher Güte beschreibt das Modell den Regressand?

Gesamtsignifikanz des Modells: Ist diese Güte signifikant?

Signifikanz der einzelnen β_k : Tragen die einzelnen Regressoren einen maßgeblich Beitrag im Modell?

Die Modellgüte kann mit Hilfe des Bestimmtheitsmaß \mathbb{R}^2 bestimmt werden:

$$R^{2} = 1 - \frac{\frac{1}{m} \sum_{l=1}^{m} (Y_{l} - \dot{Y}_{l})^{2}}{\frac{1}{m} \sum_{l=1}^{m} (Y_{l} - \bar{Y})^{2}} .$$
(G.18)

Es beschreibt den Anteil der Gesamtvarianz des Regressanden, der durch das Regressionsmodell beschrieben oder erklärt wird. Da der erklärte Anteil durch Berücksichtigung zusätzlicher Regressoren immer weiter zunimmt, sollte alternativ das korrigierte Bestimmtheitsmaß verwendet werden, in dem die Anzahl q der Regressoren mit einfließt:

$$\bar{R}^{2} = 1 - \frac{\frac{1}{m-1} \sum_{l=1}^{m} (Y_{l} - \dot{Y}_{l})^{2}}{\frac{1}{m-q-1} \sum_{l=1}^{m} (Y_{l} - \bar{Y})^{2}} .$$
 (G.19)

Da in dieser Arbeit maximal zwei unabhängige Variablen verwendet werden und die Anzahl der Beobachtungen vergleichweise groß ist, werden keine große Unterschiede zwischen R^2 und \bar{R}^2 auftreten.

Der F-Test prüft, ob die über das (korrigierte) Bestimmheitsmaß ermittelte Modellgüte signifkant ist. Dabei wird getestet, ob alle Regressoren gleich Null sind, also die abhängige Variable mittels einer Konstante beschrieben werden kann. Wenn diese Nullhypthese abgelehnt wird, bedeutet dies, dass mindestens eine unabhängige Variable einen Einfluss im Regressionsmodell hat. Die Teststatistik F_{Gesamt} für ein zweifach lineares Regressionsmodell berechnet sich wie folgt:

$$F_{\text{Gesamt}} = \frac{(\boldsymbol{R}\boldsymbol{\beta})^{\text{T}} (\boldsymbol{R} \text{Cov}_{\text{rob}}(\boldsymbol{\beta})(\boldsymbol{R})^{\text{T}})^{-1} (\boldsymbol{R}\boldsymbol{\beta})}{q}$$
$$> F_{q,m-q-1,1-\alpha/2}$$
(G.20)

mit: $R = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ $\operatorname{Cov}_{\operatorname{rob}}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname{robuste} \operatorname{Kovarianzmatrix} \operatorname{von} \boldsymbol{\beta}.$

Die Beziehung für $Cov_{rob}(\beta)$ lautet:

$$\operatorname{Cov}(\boldsymbol{\beta}) = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1} (\boldsymbol{X}^{T}\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{I}_{\boldsymbol{l}}\boldsymbol{X}) (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1} , \qquad (G.21)$$

mit: $\epsilon = m \times 1$ -Matrix der Abweichungen ϵ , $I_l = m \times m$ -Einheitsmatrix,

Diese hat gegenüber dem herkömmlichen Schätzer von Cov(k) den Vorteil, dass dieser unter bestimmten Umständen verzerrt sein kann. Der F-Test für die Gesamtsignifikanz kann auch so interpretiert werden, dass dieser untersucht ob überhaupt ein Zusammenhang zwischen Regressand und Regressoren existiert, während das Bestimmtheitsmaß diesen Zusammenhang quantifiziert.

Analog zum Test des Regressionskoeffizienten wird die Nullhypthese mit einer maximalen Wahrscheinlichkeit von $\alpha \cdot 100 \%$ fälschlicherweise verworfen, wenn $F_{\rm Gesamt} > F_{q,m-q-1,1-\alpha/2}$ ist. Dabei stellt $F_{q,m-q-1,1-\alpha/2}$ den $1-\alpha/2$ -Quantilwert einer F-Verteilung mit q und m - q - 1 Freiheitsgraden dar.

Die Teststatistik F_{beta_k} für die Signifikanz einzelner Regressoren kann ebenfalls mit Gl. G.20 bestimmt werden, die sich dabei auf den Zähler reduziert und anstelle von \mathbf{R} die (k+1)-te Zeile der 3×3 -Einheitsmatrix zu verwenden ist. Ähnlich zur Gesamtsignifikanz

entspricht die Nullhypthese der Annahme, dass der untersuchte Regressor gleich Null ist, also keinen Einfluss im Regressionsmodell ausübt.

Für das einfach lineare Regressionsmodell reduziert sich die Matrix \boldsymbol{R} der Überprüfung auf Gesamtsignifikanz (Gl. G.20) auf die einzeilige Matrix

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \quad . \tag{G.22}$$

Damit wird die Signifikanzüberprüfung einzelner Merkmale hinfällig, da zum einen im einfach linearen Regressionsmodell q = 1 ist und die zweite Zeile der 2 × 2-Einheitsmatrix \boldsymbol{R} entspricht.

Die Ableitung des sogenanten p-Werts aus der Teststatistik T, F_{Gesamt} bzw. F_{β_k} stellt eine Alternative zum Vergleich der Teststatistik mit $F_{q,m-q-1,1-\alpha/2}$ bzw. $t_{m-2,1-\alpha/2}$ dar. Der p-Wert ergibt sich dabei aus der kumulativen Verteilungsfunktion der F- bzw. t-Verteilungen. Dessen Vorteil ist seine anschaulichere Interpretation, da dieser direkt angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit die Nullhypothese fälschlicherweise verworfen wird. Eine Ablehnung der Nullhypothese wird für einen *p*-Wert kleiner 0.05 als statistisch signifikant, für kleiner 0.01 als sehr signifikant und für kleiner 0.001 als hoch signifikant angenommen.

Formelzeichen

- ${\boldsymbol A}$ (Flächeninhalt) Größe eines zweidimensionalen Gebildes in m².
- \vec{a} (Segment) Mittelpunkt eines auf den Messstrecken liegenden 50 m-Segments.
- β (Regressionskoeffizient) Koeffizient im Regressionsmodell.
- $m{C}$ (eletrische Kapazität) Verhältnis von Ladungsmenge, die auf zwei voneinander isolierten Leitern gespeichert ist, und der zwischen ihnen herrschenden elektrischen Spannung in F.
- ${\boldsymbol c}$ (Konzentration) Gehaltsangabe eines Stoffes, bezogen auf die Gesamtteilchenzahl des Gemisches in ppb für Gase bzw. bezogen auf ein Volumen für Partikelanzahlen.
- c_{χ} (Konzentration) Rohdaten einer Messfahrt.
- \bar{c}_{χ} (Mittelwert) Mittelwert über alle Rohdaten c_{χ} einer Mess-fahrt.
- $\tilde{c}_{.50,\chi,j}(\Delta n)$ (Segmentmittel) Segmentmittel des gleitenden Medians $c_{.50,\chi}(\Delta n)$.
- $\tilde{c}_{\mathrm{Mittel},\chi,j}(\Delta n)$ (Segmentmittel) Segmentmittel des gleitenden Mittelwerts $c_{\mathrm{Mittel},\chi}(\Delta n)$.
- $\tilde{c}_{.05,\chi,j}(\Delta n)$ (Segmentmittel) Segmentmittel der gleitenden 5%-Perzentile $c_{.05,\chi}(\Delta n)$.
- $\tilde{c}_{.95,\chi,j}(\Delta n)$ (Segmentmittel) Segmentmittel der gleitenden 95%-Perzentile $c_{.95,\chi}(\Delta n)$.
- \hat{c}_{Max} , (Maximum) Maximum eines Messparameters χ innerhalb eines Streckenabschnitts der Länge 2,8 km.
- $\hat{c}_{Mittel,\chi}$ (Mittel) Mittel über einen Streckenabschnitt der Länge 2,8 km für einen Messparameter χ .
- $c_{.50,\chi}(\Delta n)$ (gleitender Median) Medianwert der Rohdaten c_{χ} , gleitend über das Intervall Δn .
- $c_{\text{Mittel},\chi}(\Delta n)$ (gleitendes Mittel) Mittelwert der Rohdaten c_{χ} , gleitend über das Intervall Δn .

- $c_{.05,\chi}(\Delta n)$ (gleitende 5%-Perzentile) 5%-Perzentile der Rohdaten c_{χ} , gleitend über das Intervall Δn .
- $c_{.95,\chi}(\Delta n)$ (gleitende 95%-Perzentile) 95%-Perzentile der Rohdaten c_{χ} , gleitend über das Intervall Δn .
- $\boldsymbol{c_S}$ (Schallgeschwindigkeit) Geschwindigkeit, mit denen sich Schallwellen in Luft ausbreiten
 $(v_S\approx 343\,\mathrm{m\,s^{-1}}).$
- χ (Messparameter) Luftchemischer oder meteorologischer Parameter.
- \boldsymbol{d} (Abstand) Länge der kürzesten Verbindungslinie zwischen zwei Punkten in m.
- d_p (Partikeldurchmesser) Durchmesser eines atmosphärischen Aerosolpartikels in n
m oder µm.
- $\boldsymbol{d_S}$ (Schornsteindurchmesser) Durchmesser eines Schornsteins in m.
- δ (Windrichtung) Horizontale Richtung, aus der der Wind weht in °.
- E_{χ} (Emission) Prozesse, die zum Eintrag eines chemischen Stoffes χ in die Atmosphäre führen (in kg h⁻¹).
- $\vec{e_y}$ (kanonischer Einheitsvektor) Zweiter kanonischer Einheitsvektor) zweiter kanonischer Einheitsvektor des kartesischen Koordinatensystems mit $\vec{e_y} = (0, 1, 0)$.
- $\vec{e_z}$ (kanonischer Einheitsvektor) Dritter kanonischer Einheitsvektor des kartesischen Koordinatensystems mit $\vec{e_y} = (0, 0, 1)$.
- ϵ_{P} (Permittivität) Durchlässigkeit eines Materials für elektrische Felder in As ${\rm V}^{-1}\,{\rm m}.$
- ε (Extinktionskoeffizient) Absorptionsvermögen eines Mediums, auf das Strahlung einfällt in ppb⁻¹cm⁻¹.
- F (Auftriebsflussparameter) Parameter, der den Auftrieb einer Abgasfahne aufgrund der Austrittsgeschwindigkeit v_S und der Austrittstemperatur T_S am Schornstein beschreibt (in m⁴ s⁻³).
- ${\pmb g}$ (Gravitationsbeschleunigung) Beschleunigung, die durch das Gravitationsfeld der Erde verursacht wird (in m s^{-2}).
- γ (Rotationswinkel) Zur Koordinatentransformation notwendiger Rotationswinkel.
- ${\boldsymbol h}$ (Planksches Wirkungsquantum) Verhältnis von Energie zur Frequenz eines Photons.

- Δh (Schornsteinüberhöhung) Höhe über h_S in m, um die Abgase nach Kaminaustritt aufgrund des Austrittimpulses und Abgastemperatur aufsteigen.
- h_{eff} (Effektive Quellhöhe) Höhe in m, in der Abgase nach Kaminaustritt zunächst aufsteigen, bevor sie sich horizontal ausbreiten ($h_{eff} = h + \Delta h$).
- h_{S} (Schornsteinhöhe) Bauhöhe eines Schornsteins in m.
- I (Intensität) Verhältnis von Leistung zu Fläche in W m⁻².
- i (Messpunktnummer) Index zur Unterscheidung individueller Messpunkte $\vec{p}.$
- j (Segmentnummer) Index zur Unterscheidung individueller Segmente \vec{a} .
- k (Index) Zählindex.
- K (Turbulenter Diffusionstensor) Tensor vom Rang 2 in Diagonalform, dessen Elemente die turbulenten Diffusionskoeffizienten darstellen (in m² s-1).
- l (Index) Zählindex.
- ℓ (Weglänge) Strecke, die eine (elektromagnetische) Welle zurücklegt in m.
- λ (geographische Breite) Breitengrad in °.
- λ_W (Wellenlänge) Strecke, die eine (elektromagnetische) Welle während einer Periodendauer zurücklegt.
- m (Anzahl) Anzahl von Beobachtungen, mit denen ein Regressionsmodell erstellt wird.
- $\boldsymbol{m_p}$ (Partikelmasse) Masse eines atmosphärischen Aerosol
partikels in g $\,{\rm cm}^{-3}.$
- ${\boldsymbol N}$ (Intervalllänge) Anzahl der Datenpunkte, über die gleitende Größen bestimmt werden.
- \boldsymbol{n} (Rohdatenanzahl) Anzahl der Messpunkte der Rohdaten einer Messfahrt.
- $N_{\chi,S,Jahr}$ (Fahrtanzahl) Anzahl der Messfahrten in Abhängigkeit vom Messparameter χ , Messstrecke S und Jahr.
- Δn (Intervall) Intervall über Δn Datenpunkte, über die gleitende Größen bestimmt werden.
- $\boldsymbol{n_j}$ (Messpunkteanzahl) Anzahl der zugeordneten Messpunkte in einem Segment
 $\vec{a_j}.$

- $\boldsymbol{n_x}$ (Datenpunkt) Aktueller Datenpunkt, an dem gleitende Größen bestimmt werden.
- ∇ (Nabla-Operator) Differential operator mit $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$.
- $\boldsymbol{\nu}$ (Frequenz) Kehrwert der Periodendauer einer (elektromagnetischen) Welle in Hz.

p (Luftdruck) Hydrostatischer Druck der Luft in Pa.

- $\boldsymbol{p_0}$ (Luftdruck) Normalbedingungen für Luftdruck nach DIN 1343 $(p_0=1013,25\,\mathrm{hPa}).$
- $P_{\mathbf{Quelle}}$ (Quellort) Punkt, an dem im Gauß-Fahnenmodell der Stoff χ emittiert wird.
- \vec{p}_{diff} (Differenzvektor) Differenzvektor zwischen zwei Messpunkten.
- $\vec{p}(\varphi, \lambda)$ (Messpunkt) Messpunkt im geographischen Koordinatensystem.
- $\vec{p}(x,y)$ (Messpunkt) Messpunkt im kartesischen Koordinatensystem.
- φ (geographische Länge) Längengrad in °.
- Q (Volumenstrom) Verhältnis aus Volumen und Zeit, für das ein Medium durch einen bestimmten Querschnitt transportiert wird in $1 \min^{-1}$.
- ${\boldsymbol q}$ (Anzahl) Anzahl der erklärenden Variablen in einem Regressionsmodell.
- ${\pmb R}_{\pmb E}$ (Erdradius) Radius der als Kugel angenäherten Erdgestalt mit $R_E=6371\,{\rm km}.$
- ${\pmb R}{\pmb H}$ (relative Luftfeuchtigkeit) Sättigungsgrad der Luft mit Wasserdampf in Prozent.
- ρ_0 (Luftdichte) mittlere Luftdichte am Boden.
- ρ_{χ} (Partialdichte) Gehaltsangabe eines chemischen Stoffes $\chi,$ bezogen auf dessen Masse in einem Gesamtvolumen.
- ϱ_p (Partikeldichte) Dichte eines atmosphärischen Aerosolpartikels in kg m $^{-3}.$
- \boldsymbol{S} (Messstrecke) Codierte Messstrecke der AERO-TRAM.
- S_{χ} (Chemische Umwandlungsprozesse) Prozesse, die zur chemischen Produktion oder Verlusten eines chemischen Stoffe
s χ führen (in kg h⁻¹).
- $\sigma_{c_{\chi}}$ (Standardabweichung) Standardabweichung über die Rohdaten c_{χ} einer Messfahrt eines Messparameter χ .

- $\sigma_y(x)$, $\sigma_z(x)$ (Sigmaparameter) Parameter zur Beschreibung der Fahnenaufweitung im Gauß-Fahnenmodell in Abhängigkeit zum Quellabstand (in m).
- T (Temperatur) Temperatur der Luft in K.
- T_0 (Temperatur) Normalbedingungen für Temperatur nach DIN 1343 ($T_0 = 273,15$ K).
- ${\cal T}_U$ (Umgebungstemperatur) Luftemperatur an einem spezifischen Ort in K.
- $\boldsymbol{\theta}$ (potentielle Temperatur) Temperatur eines Luftpakets in K, das trockenadiabatisch auf den Druck p_0 gebracht wird.
- θ_0 (potentielle Temperatur) mittlere potentielle Temperatur am Boden.
- ϑ (Temperatur) Temperatur der Luft in °C.
- \boldsymbol{u} (Windkomponente) Zonale Komponente des Windvektor
s \vec{v}_h in m $\mathrm{s}^{-1}.$
- u^{\bullet} (Windkomponente) Nordwärts gerichtete Komponente des Windvektors \vec{v}_{h}^{\bullet} in ms⁻¹.
- $\boldsymbol{u^{\star}}$ (Windkomponente) Zur Fahrtrichtung gerichtete Komponente des Windvektors \vec{v}_{h}^{\star} in m s⁻¹.
- $u^{\star}_{\mathbf{Messung}}$ (Windkomponente) Zur Fahrtrichtung gerichtete Komponente des Windvektors $\vec{v}^{\star}_{h,Messung}$ in m s⁻¹.
- \boldsymbol{v} (Windkomponente) Meridionale Komponente des Windvektors \vec{v}_h in m s⁻¹.
- $v_{\text{Messung}}^{\star}$ (Windkomponente) Senkrecht zur Fahrtrichtung gerichtete Komponente des Windvektors $\vec{v}_{h,Messung}^{\star}$ in m s⁻¹.
- v_{Bahn} (Bahngeschwindigkeit) Fahrtgeschwindigkeit der AERO-TRAM in m s⁻¹.
- $\boldsymbol{v_h}$ (horizontale Windgeschwindigkeit) Betrag des horizontalen Windvektors
 $\vec{v_h}.$
- v^{\bullet} (Windkomponente) Westwärts Komponente des Windvektors \vec{v}_{h}^{\bullet} in m s⁻¹.
- v^{\star} (Windkomponente) Senkrecht zur Fahrtrichtung gerichtete Komponente des Windvektors \vec{v}_h^{\star} in m s⁻¹.
- \vec{v} (dreidimensionaler Windvektor) Windvektor, bestehend aus den horizontalen Komponenten u und v, sowie des Vertikalwindes w.
- \vec{v}_h (horizontaler Windvektor) Windvektor, bestehend aus den horizontalen Komponenten u und v.

- $\vec{v_h}^{\bullet}$ (horizontaler Windvektor) Bei Anemometeraufbau nach Herstellerangaben resultierender Windvektor im $u^{\bullet} \cdot v^{\bullet} \cdot \text{Koordinatensystem}.$
- $\vec{v}_h^{\,\star}$ (horizontaler Windvektor) Windvektor im bahnfesten $u^{\star} {-} v^{\star} {-}$ Koordinatensystem.
- $\vec{v}_{h,\text{Messung}}^{\star}$ (horizontaler Windvektor) Durch Bahngeschwindigkeit v_{Bahn} beeinflusster Windvektor im bahnfesten $u^{\star}-v^{\star}$ -Koordinatensystem.
- \boldsymbol{w} (Windkomponente) vertikale Windgeschwindigkeit in m s⁻¹.
- X (Regressor) unabhängige Variable im Regressionsmodell.
- $\bar{\boldsymbol{x}}$ (Mittel) mittlerer Anteil einer Variablen, die der Reynolds-Mittelung unterzogen wurde.
- ${\boldsymbol x}'$ (Schwankungsanteil) turbulenzinduzierter, schwankender Anteil einer Variablen, die der Reynolds-Mittelung unterzogen wurde.
- $\Delta x, \Delta y$ (horizontale Modellauflösung) horizontale Abstände der Gitterpunkte in km.
- \boldsymbol{Y} (Regressand) abhängige Variable im Regressionsmodell.

Abkürzungen

- PNC_{3772} Partikelanzahlkonzentration mittels TSI CPC 3772 Kondensationszähler gemessen.
- PNC_{3775} Partikelanzahlkonzentration mittels TSI CPC 3775 Kondensationszähler gemessen.

Ar Argon.

C₄H₁₀O 1-Butanol.

 CO_2 Kohlenstoffdioxid.

 ${f CO}$ Kohlenstoffmonoxid.

Ca(OH)₂ Calciumhydroxid.

CaCO₃ Calciumkarbonat.

 $H_2O(g)$ Wasserdampf.

 H_2O Wasser.

HCHO Formaldehyd.

 $KMnO_4$ Kaliumpermanganat.

 $Mg(CIO_4)_2$ Magnesiumperchlorat.

MnO₂ Mangandioxid.

MoO₄ Molybdän(IV)-oxid.

Mo Molybdän.

 ${\sf M}$ Stoßpartner in einer chemischen Reaktion.

 N_2 molekularer Stickstoff.

NMVOC VOCs außer Methan.

- NO₃ Nitrat.
- NO_x Stickoxide (NO_x=NO + NO₂).
- ${\sf NO}_{\sf v}$ Sammelbegriff für Verbindungen des oxidierten Stickstoffs.
- ${f NO}$ Stickstoffmonoxid.
- Na₂CO₃ Natriumkarbonat.
- NaOH Natriumhydroxid.
- $\mathbf{0}_2$ Sauerstoff.
- **O**₃ Ozon.
- **PAK** polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe.
- **PAN** Peroxyacetylnitrat.
- **SO_x** Schwefeloxide.
- SiO₂ Siliciumdioxid.
- **VOC** flüchtige organische Verbindung.
- \mathbf{X}^{\star} angeregter Zustand eines chemischen Elements oder einer chemischen Verbindung.
- e Elektron.
- **AVG** Albtal Verkehrs Gesellschaft mbH.
- **BLC** Blue Light Converter.
- **EU** Europäische Union.
- **GPS** globales Positionsbestimmungssystem.
- **IER** Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung.
- **IMK-TRO** Institut für Meteorologie und Klimaforschung Department Troposphärenforschung.

 $\ensuremath{\mathsf{IR}}$ Infrarot.

- **KIT** Karlsruher Institut für Technologie.
- **KVV** Karlsruher Verkehrsverbund.
- **LED** Licht-emittierende Diode.
- **PNC** Partikelanzahlkonzentration(*particle number concentration*).
- **PSD** Partikelgrößenverteilung (*particle size distribution*).
- **S1*** alle Messtrecken der Linie S1/S11.
- **S1a** Hochstetten Bad Herrenalb.
- ${\color{black}{S1b}} \hspace{0.1in} {\rm Hochstetten-Ittersbach}.$
- **S1c** Hochstetten Ettlingen.
- **S1d** Neureut Bad Herrenalb.
- **S1e** Neureut Ittersbach.
- **S1f** Neureut Ettlingen.
- **S2*** alle Messstrecken der Linie S2.
- S2a Spöck Mörsch.
- **S2b** Spöck Daxlanden.
- S2c Blankenloch Mörsch.
- S2d Blankenloch Daxlanden.
- **S2e** Büchig Mörsch.
- **S2f** Büchig Daxlanden.
- **UMTS** Universal Mobile Telecommunications System (Mobilfunk-standard).
- **USV** unterbrechungsfreie Stromversorgung.

- ${\sf VBK}\,$ Verkehrsbetriebe Karlsruhe GmbH.
- **VUV** Vakuumultraviolet(-Strahlung) (Strahlung in einem Wellenlängenbereich zwischen 100 nm und 200 nm).
- WLAN wireless local area network (drahtloses lokales Netzwerk.
- ÖPNV öffentlicher Personennahverkehr.

Danksagung

Die vorliegende Dissertation wurde am Institut für Meteorologie und Klimaforschung am Karlsruher Institut für Technologie in der Arbeitsgruppe "Spurenstoffmodellierung und Klimaprozesse"angefertigt. Ich möchte mich bei allen bedanken, die mich bei bei dieser Arbeit unterstützt und begleitet haben.

Großer Dank gebührt meinem Referenten Herrn Prof. Dr. Christoph Kottmeier, der mir diese Doktorarbeit ermöglichte und mich stets hilfreich unterstützte sowie mir die Möglichkeit gab, mit dem mobilen Messsystem AERO-TRAM zu arbeiten. Herrn Prof. Dr. Thomas Leisner möchte ich danken, dass er sich für die Übernahme des Koreferats bereiterklärt hat.

Meinem Gruppenleiter und Betreuer Herrn Dr. Bernhard Vogel möchte ich ganz besonderen Dank für seine Unterstützung aussprechen. Durch konstruktive Diskussionen und Deine Begeisterung hast Du maßgeblich zum Gelingen meiner Arbeit beigetragen und stets dafür gesorgt, nie mein Ziel aus den Augen zu verlieren. Dank Dir durfte ich mit einem ganz besonderen Messsystem arbeiten. Außerdem hast Du mir neben den fachlichen Sachkenntnissen auch andere Kompetenzen vermittelt, die mir in meinem weiteren Berufsleben von großen Nutzen sein werden.

Frau Dr. Heike Vogel möchte ich neben den schönen Unterhaltungen für die Unterstützung im zweiten Teil meiner Arbeit danken. Dank Deiner Hilfe und Beschaffung notwendiger Daten konnte ich Probleme mit COSMO-ART schnell lösen und so in relativ kurzer Zeit meine Modellrechnungen durchführen. An dieser Stelle bedanke ich außerdem bei Tobias Schad für die Einweisung in das Modellsystem sowie INT2LM und ganz besonders für die Unterstützung bei der Aufbereitung der Emissionsdaten.

Auch allen anderen Mitgliedern meiner Arbeitsgruppe, Konrad Deetz, Simon Gruber, Philipp Gasch, Daniel Rieger, Carolin Walter und Andrew Barrett, möchte ich für die Unterstützung während meiner Zeit bei Euch danken. Bei Herrn Dr. Ulrich Corsmeier bedanke ich mich für die Unterstützung beim Betrieb des mobilen Messsystems AERO-TRAM. Deine Expertise hat mir geholfen, dass auch bei großen Problemen und Rückschlägen, die bei einem solch komplexen Instrumentarium auftreten, es immer Möglichkeiten gibt, um den Messbetrieb fortsetzen zu können.

Dem gesamten Werkstattteam des Instituts gilt ebenfalls besonderen Dank für die Unterstützung bei der AERO-TRAM. Jürgen Seringer und Timo Gamer haben auch bei großer Auslastung versucht, meine Anliegen so schnell wie möglich zu lösen. In diesem Rahmen bedanke ich mich weiterhin bei meinen Hiwis Gabriel Hinze und Paul Schmuck, die mir bei den etlichen Wartungsterminen geholfen haben, sowie bei den Verkehrsbetrieben Karlsruhe, namentlich Alexander Wetzl, deren Kooperation das Projekt AERO-TRAM erst ermöglichte.

Frau Gabi Klinck danke ich für die Unterstützung bei diversen Computerproblemchen und für die Pläusche, die so oft und gerne gehalten haben. Dies gilt auch für Herrn Stefan Kraut, an den ich mich immer bei diversen anderen technischen Problemen wenden konnte und Frau Rosalba Gräbner, die mich bei organisatorischen und administrativen Anliegen unterstützte.

Rike, dir möchte ich für die fast vier Jahre danken, in denen wir ein Büro geteilt haben, ganz besonders für die entspannte und angenehme Atmosphäre mit Dir. Bene, dir danke ich für den vielen Schabernack, den wir als neue Bürokollegen getrieben haben.

Herzlichen Dank an alle, mit denen ich tolle Abende nach Dienstschluss erleben durfte, ganz besonders, Rike, Bene, Thomas, Gabriel, Simone, Kai-Uwe, Sebastian, Simon, Alberto.

Zu guter Letzt bedanke ich mich bei meiner Freundin Simone sowie meinen Eltern Manfred und Gilda wie auch meiner übrigen Familie für die Motivation und Unterstützung, um meine Dissertation anzufertigen.