

# **Optimierung langfristiger Simulation der Luftqualität in Baden-Württemberg**

**Hans-Jürgen Panitz**

**IMK Mitarbeiterseminar**

**28.01.2005**

Auftragsprojekt im Rahmen des Forschungsprogramms  
„Simulation und Modellierung auf Hochleistungsrechnern“  
der Landesstiftung Baden-Württemberg

**Projektbeginn:**

**01.09.2004**

- **Vorstellung des Projekts**
  - **Motivation und Ziel**
  - **Vorgehensweise**
- **Stand der Arbeiten**
  - **Aufbereitung externer Daten**
    - **Shellskript gesteuerte Programmketten für Emissions- und EURAD-Daten**
  - **Testrechnungen mit KAMM1/DRAIS unter Berücksichtigung von Niederschlag und Wolken**
- **Wie geht es weiter**

# Motivation

- ✚ **Charakterisierung der Luftqualität erfolgt durch statistische Kenngrößen wie z.B. Mittelwert, Perzentilwerte, Überschreitungshäufigkeiten von Grenzwerten für verschiedene Schadstoffe wie z.B. NO<sub>x</sub>, CO, O<sub>3</sub>**
- ✚ **Berechnung der Kenngrößen anhand von langjährigen Messreihen oder entsprechenden Ergebnissen atmosphärischer Ausbreitungsmodelle**
- ✚ **Will man Kenngrößen prognostizieren, um z.B. Auswirkungen von Emissionsminderungsmaßnahmen zu beurteilen, kann man sich nur auf Modellrechnungen stützen**
- ✚ **Atmosphärische Bedingungen haben entscheidenden Einfluss auf die Schadstoffbelastung einer Region**
- ✚ **Daher: Berücksichtigung des gesamten Spektrums meteorologischer Bedingungen für Aussagen über längerfristige Luftqualität notwendig**
- ✚ **Zeitraum: mindestens 10 Jahre unter Berücksichtigung der tages- und jahreszeitlichen Variabilität**

# Motivation

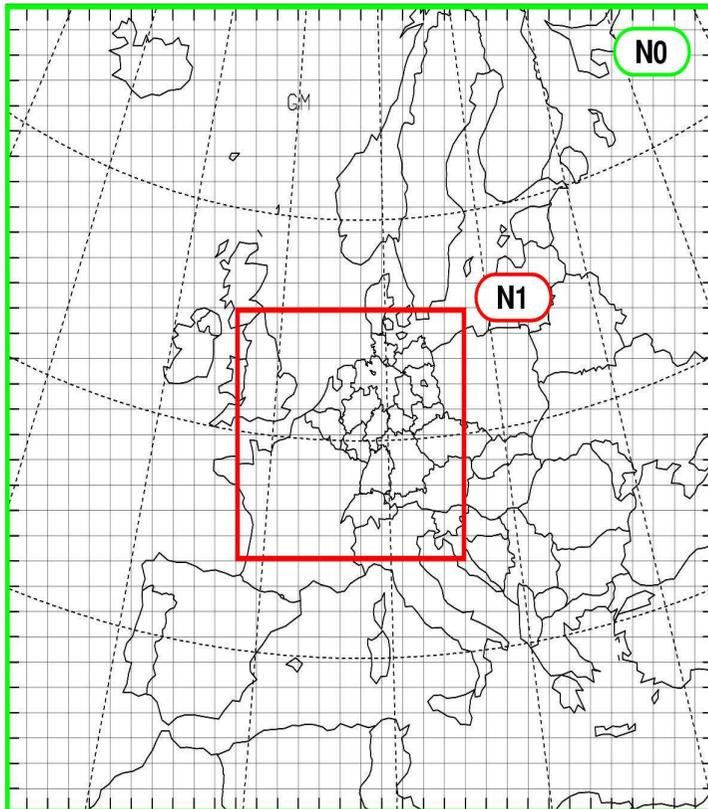
- ✚ **Bei Verwendung komplexer Modellsystem wie KAMM/DRAIS bedeutet das aber hohen Rechenzeitaufwand und hohe Kosten**
  
- ✚ **Für praktische Anwendungen muss also ein effektives Berechnungsverfahren bereitgestellt werden, das**
  - **Den Rechenaufwand reduziert**
  - **Zu realistischen und aussagekräftigen Ergebnissen führt**
  
- ✚ **Kann erreicht werden durch Klassifizierung der meteorologischen Bedingungen**
  - **Simulation für jede der resultierenden Klassen**
  - **Berechnung der statistischen Kenngrößen unter Berücksichtigung der jeweiligen Klassenhäufigkeiten**

# Ziel

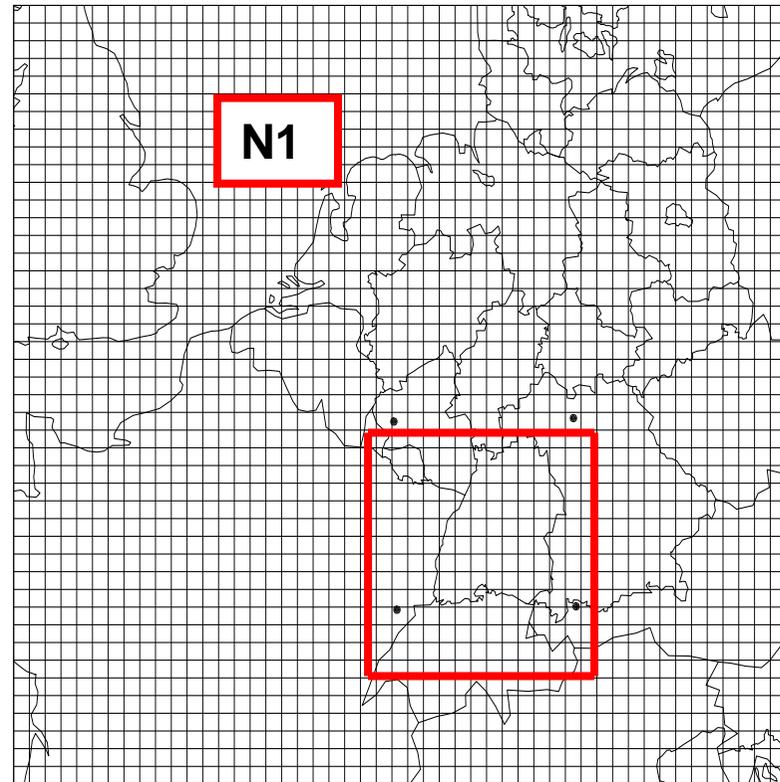
- ④ Bereitstellung einer Methode zur Klassifizierung der atmosphärischen Bedingungen im Hinblick auf die Bestimmung der langfristigen Luftqualität in Baden-Württemberg
  
- + Bewertung von drei Klassifizierungstechniken:
  - Klassische Clusteranalyse
  - CART-Technik (Classification and Regression Tree, Breiman et al., 1984)
  - SOM (Self Organizing Map, Kohonen 1995)
  
- + Kriterien zur Bewertung der Methoden:
  - Effizienz hinsichtlich Anwendungsfreundlichkeit und Rechenzeit
  - Repräsentativität der gefundenen Klassen in Bezug auf das gesamte Spektrum der möglichen atmosphärischen Situationen
  
- + Beurteilung des zweiten Kriteriums durch Vergleich der statistischen Kenngrößen, die auf Basis der klassifizierten Bedingungen errechnet wurden, mit denen aus KAMM/DRAIS Detailsimulation über ein Jahr in stündlicher Auflösung

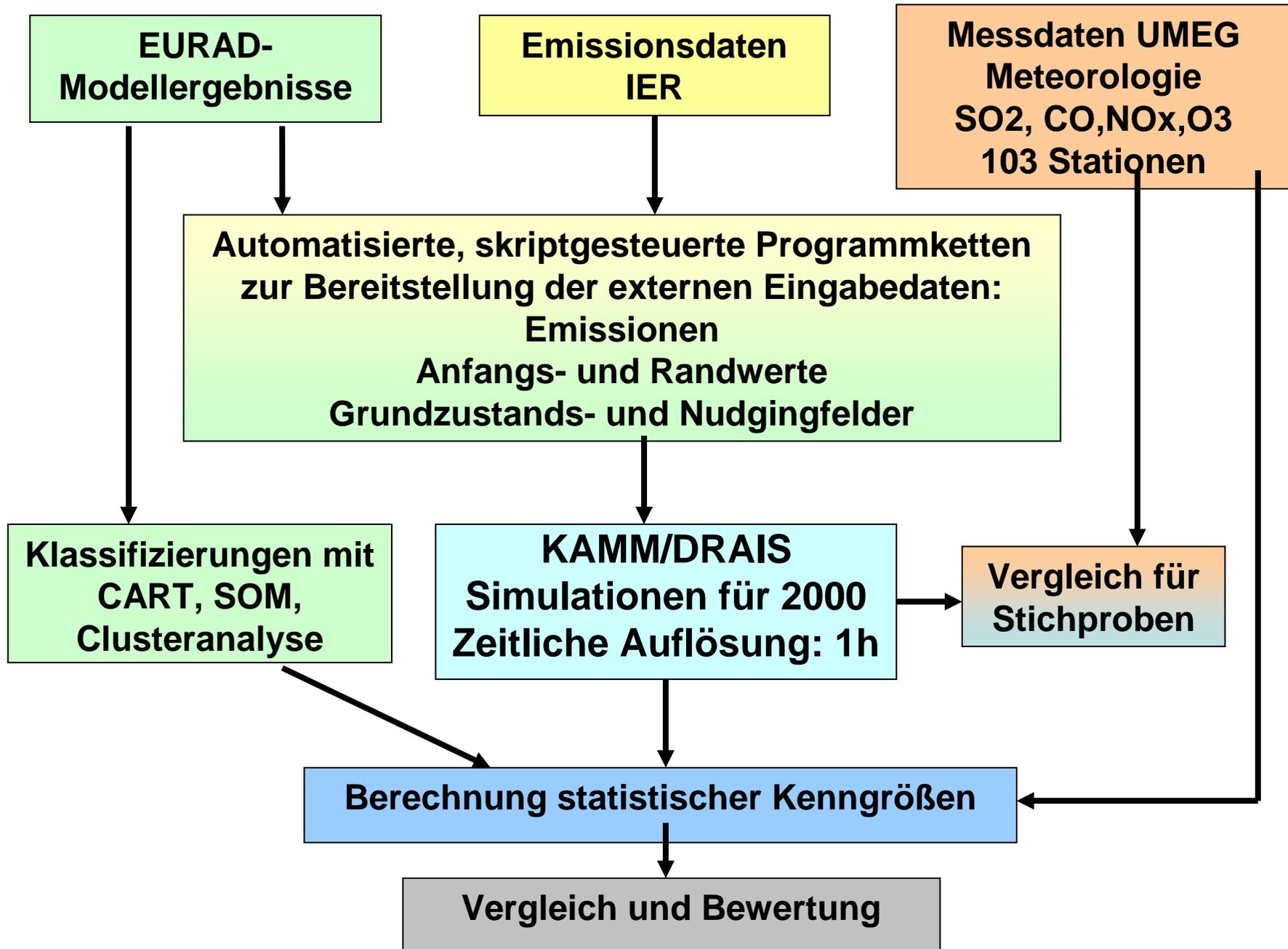
# KAMM/DRAIS in EURAD

EURABAD\_EURAD\_N0  
horizontale Gitterweite : ds = 125 km  
Anzahl der Gitterpunkte : 34 x 32 (Cross-Punkte)  
Fläche : 4250 x 4000 km\*\*2  
Projektion : Lambert-konformal-konisch  
Mittelpunkt d. Proj. : 51.45 ° n. Breite, 7.65° ö. Länge



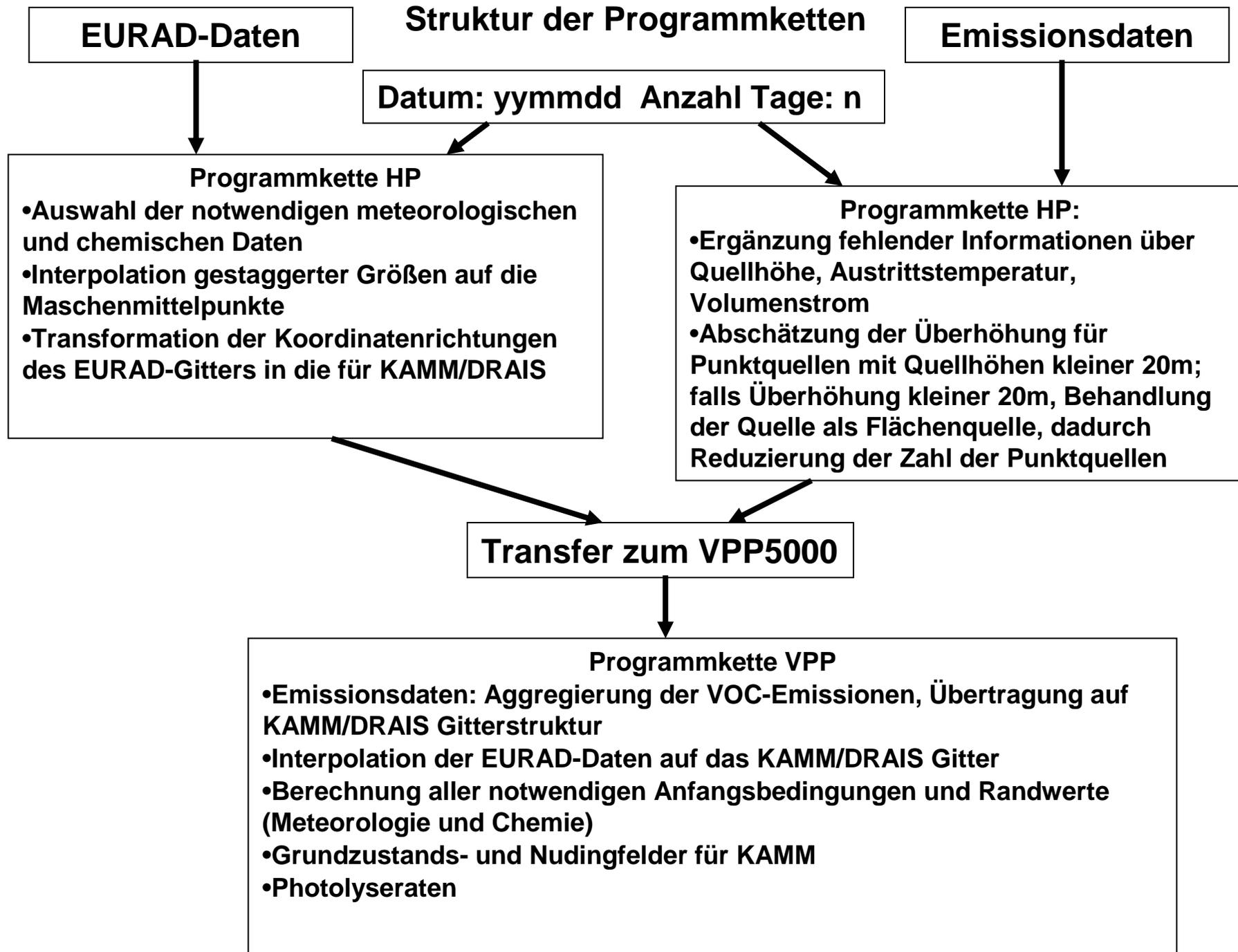
**Nest N1:**  
**Horizontale Gitterweite: 25km**  
**Anzahl Gitterpunkte: 55\*50**





# Stand der Arbeiten

- ✚ Modifikation bereits vorhandener Programmketten zur quasi automatischen Aufbereitung der externen Daten und Bereitstellung als Eingabedaten für KAMM/DRAIS fertig gestellt
- ✚ Testrechnungen mit KAMM/DRAIS für einen 3-Tages-Zeitraum (30.05.00-01.06.00) laufen noch hinsichtlich des Vergleichs mit Messungen



# Bearbeitung Emissionsdaten

✚ Flächenquellen unkritisch, alle notwendigen Informationen vorhanden

- Lage der Quelle im Gebiet, Zeit, Spezie, Emission

✚ Punktquellen

- nur Information über Lage, Zeit und spezieabhängige Emissionen vollständig
- Daten über Quellhöhe, Austrittstemperatur und Volumenstrom fehlen häufig
- Sind aber notwendig für Berechnung der Überhöhung, die in DRAIS zu jedem Zeitschritt für jede Punktquelle erfolgt

## Einige Informationen über die Punktquellen

< 0 bedeutet: keine Information über die jeweilige Größe, Codierung in Koordinatendatei des IER durch -999

Anzahl Punktquellen <b>7092</b> davon:			T<0	T<0, Vol>0	Vol<0	Vol<0, T>0	Vol<0, T<0	Vol>0 T>0	T=0	V=0
h < 0m	<b>70</b>	davon:	70	<b>0</b>	70	<b>0</b>	<b>70</b>	<b>0</b>	0	<b>0</b>
0<= h <=20m	<b>4799</b> (h=0m: 160)		1516	<b>218</b>	1436	<b>153</b>	<b>1283</b>	<b>2982</b>	0	<b>163</b>
h > 20m	<b>2223</b>		856	<b>109</b>	763	<b>18</b>	<b>745</b>	<b>1287</b>	0	<b>64</b>
								<b>4269</b>	0	

# Überhöhungsformel

## TA Luft neutrale Schichtung

$$M = 1.36^{-3} V_s \frac{T - 10}{3600}$$

M = Wärmestrom in MWatt  
V<sub>s</sub> = Volumenstrom in m<sup>3</sup>/h  
T = Austrittstemperatur in C

Falls M ≤ 6 MW:

$$DH = \frac{78.4M^{0.75}}{U}$$

Falls M > 6 MW:

$$DH = \frac{102M^{0.6}}{U}$$

U = Windgeschwindigkeit (m/s) in Quellhöhe

DH = maximale Überhöhung (m)

# Bestimmung fehlender Werte durch Regressionsgleichungen

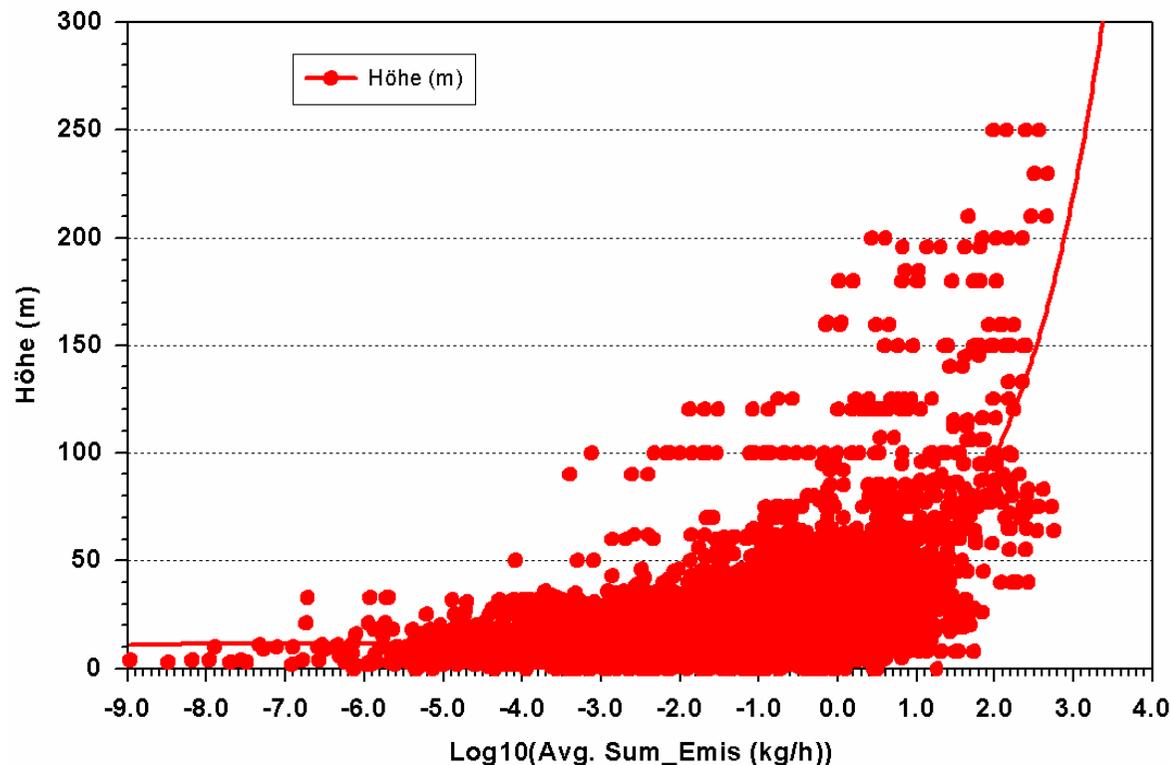
Kriterien: höchste Korrelation

keine negativen Werte für Quellhöhe und Volumenstrom

Quellhöhe als Funktion der mittleren Emissionssumme

$$Sum.Avg\_Emis^P = \frac{1}{24} \sum_{n=1}^{24} \sum_i Emis_{i,n}^P \quad \begin{array}{l} i=SO_2, NO_x, CO, VOC_{Total}, NH_3 \\ P = \text{jede Punktquelle} \end{array}$$

## Alle Punktquellen mit VOC + NH3 alle Tage



Höhe (m)

Nicht-Lineare Regression: (N = 12807)

$a+b \cdot \exp(c \cdot (x-d))$  #Exp. Growth

$a+b \cdot \exp(c \cdot (x-d)) \cdot x$  S=-

1; xE=1; a=0; b=1; c=5; d=0.5;

Least square minimized

Iterationen: 10

Goodness of Fit:

Chi<sup>2</sup> = 3276170.3586, p = 100 %

Parameter:

a = 11,2232 ±0,0174

b = 2,3324 ±0E+000

c = 0,8744 ±0,0009

d = -2,1428 ±0E+000

Varianz der Residuen = 255,8908

Stdabw. der Residuen = 15,9966

Korrelationskoeffizient = 0.6236

df = 12803

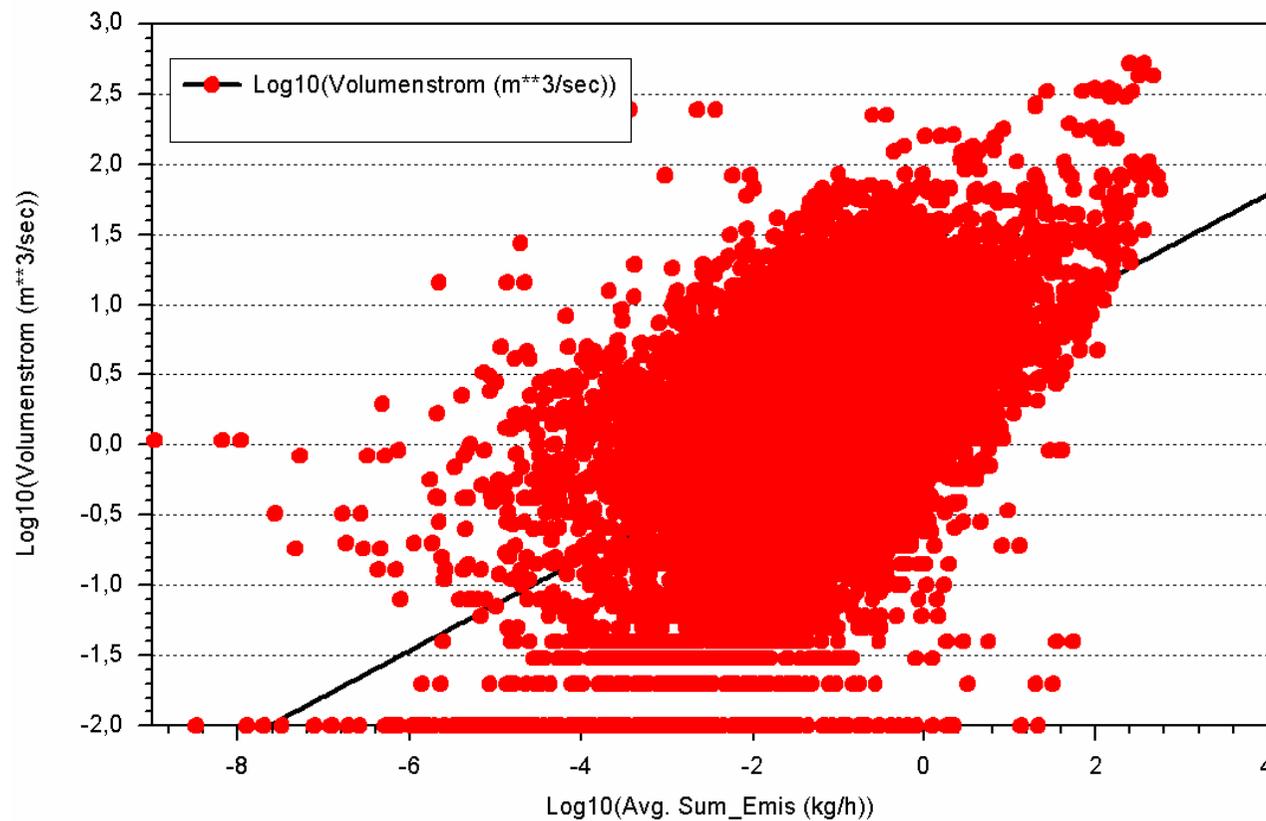
p <= 0.001%

Eta<sup>2</sup> = 0.3889

Eta<sup>2</sup><sub>adj.</sub> = 0.3888

# Bestimmung fehlender Werte durch Regressionsgleichungen Volumenstrom als Funktion der mittleren Emissionssumme

## Alle Punktquellen mit VOC + NH3 alle Tage



Log10(Volumenstrom (m<sup>3</sup>/sec))

Lineare Regression: (N = 12807)

$y = a + bx$

$a = 0,4864$

$b = 0,3252$

Varianz der Residuen = 0,474

Stdabw. der Residuen = 0,6885

Korrelationskoeffizient = 0,526

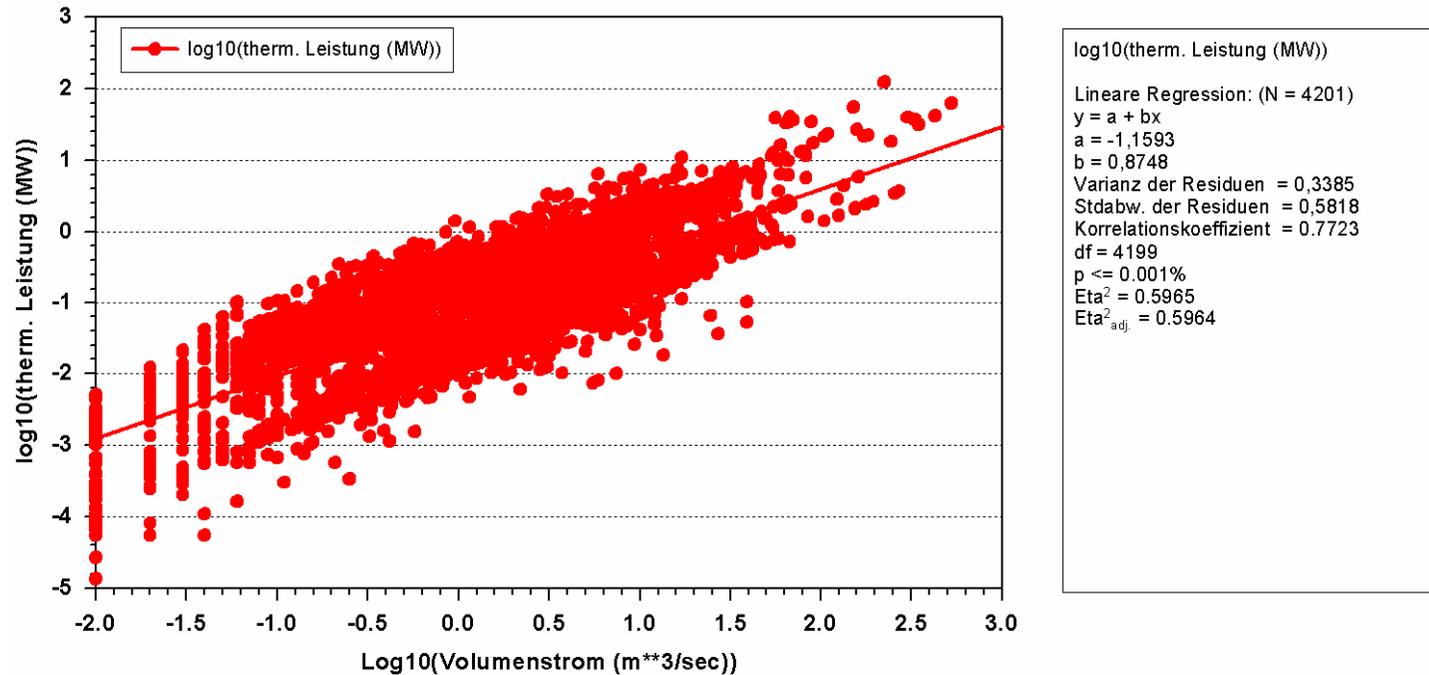
df = 12805

$p \leq 0,001\%$

$\text{Eta}^2 = 0,2766$

$\text{Eta}^2_{\text{adj.}} = 0,2766$

Bestimmung fehlender Werte durch Regressionsgleichungen  
Bestimmung der Austrittstemperatur  
zunächst: thermische Leistung M als Funktion des Volumenstroms  $V_s$



Dann Austrittstemperatur T aus TA-Luft Gleichung

$$M = 1.36^{-3} V_s \frac{T - 10}{3600}$$

# Abschätzung der Überhöhung für Punktquellen mit Quellhöhen $\leq 20\text{m}$

- ✚ In DRAIS werden die Flächenquellen nicht in die unterste Ebene IZ (= Erdboden) sondern in die darüber liegende Ebene IZ-1 gesetzt (IZ = Anzahl der vertikalen Niveaus).
- ✚ Ebene IZ-1 befindet sich in der Regel zwischen 10m und etwa 20m über Grund, je nach Anzahl der vertikalen Schichten, Höhe des Modellgebietes und des gewählten Transformationsparameters.
- ✚ Typische Höhen über Grund (m) der vertikalen Ebenen IZ-1 und IZ-2 in KAMM/DRAIS für typische Transformationsparameter  $f$ , eine Modellhöhe  $H=5000$ , und  $IZ=35$  vertikale Ebenen

Transformationsparameter	$H_{IZ-1}$	$H_{IZ-2}$
$f=49$	10m	28m
$f=20$	18m	44m

- ✚ Konsequenz: Punktquellen mit  $0\text{m} < QH \leq 20\text{m}$  und  $DH \leq 20\text{m}$  werden in die Ebene IZ-1 gesetzt und sind von Flächenquellen nicht zu unterscheiden  
➔ Berechnung der Überhöhung überflüssig

Abschätzung der normierten Überhöhung ( $U=1\text{m/s}$ ) für Punktquellen mit  $QH \leq 20\text{m}$

Obere Tabelle: Originaldaten vor dem Ergänzen fehlender Werte

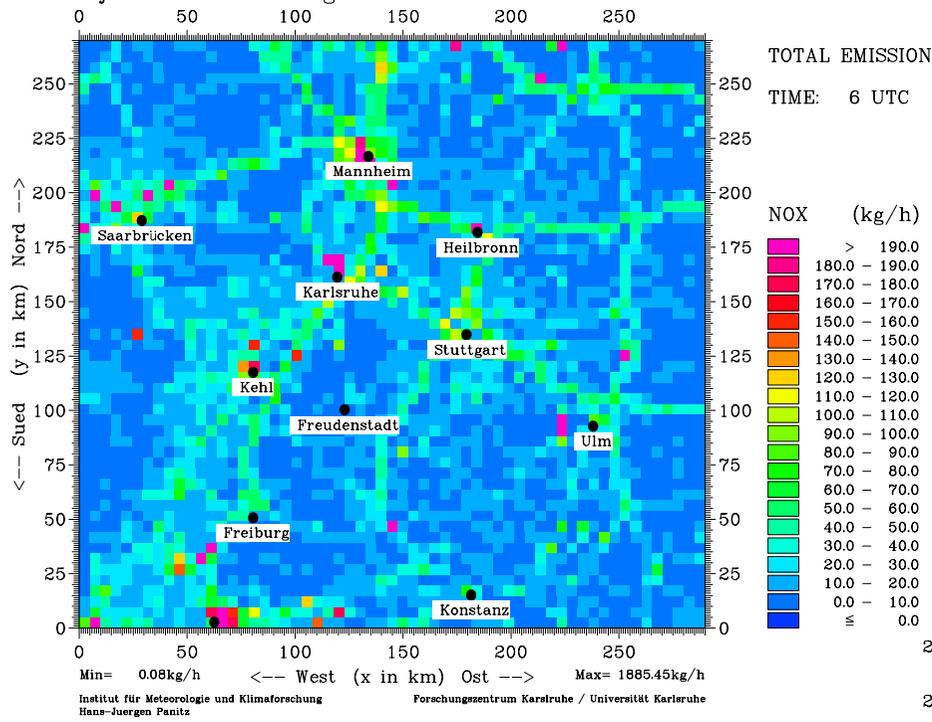
	Überhöhung für Quellen mit $0\text{m} < QH \leq 20\text{m}$ , $T > 0$ , $V_S > 0$ (2982)		
	$\leq 10\text{m}$	$\leq 20\text{m}$	$\leq 30\text{m}$
<b>Anzahl der Fälle</b>	<b>1637</b>	<b>2197</b>	<b>2496</b>
	<b>54.9%</b>	<b>73.7%</b>	<b>83.7%</b>

	30.05.2000			31.05.2000			01.06.2000		
	QH $\leq 20\text{m}$	DH $\leq 20\text{m}$		QH $\leq 20\text{m}$	DH $\leq 20\text{m}$		QH $\leq 20\text{m}$	DH $\leq 20\text{m}$	
<b>#Fälle</b>	<b>4799</b>	<b>3834</b>	<b>79.9%</b>	<b>4799</b>	<b>3863</b>	<b>80.5%</b>	<b>4799</b>	<b>3902</b>	<b>81.3%</b>
<b>Anzahl aller verbleibenden Punktquellen (von 7092)</b>	<b>3258</b>			<b>3229</b>			<b>3190</b>		

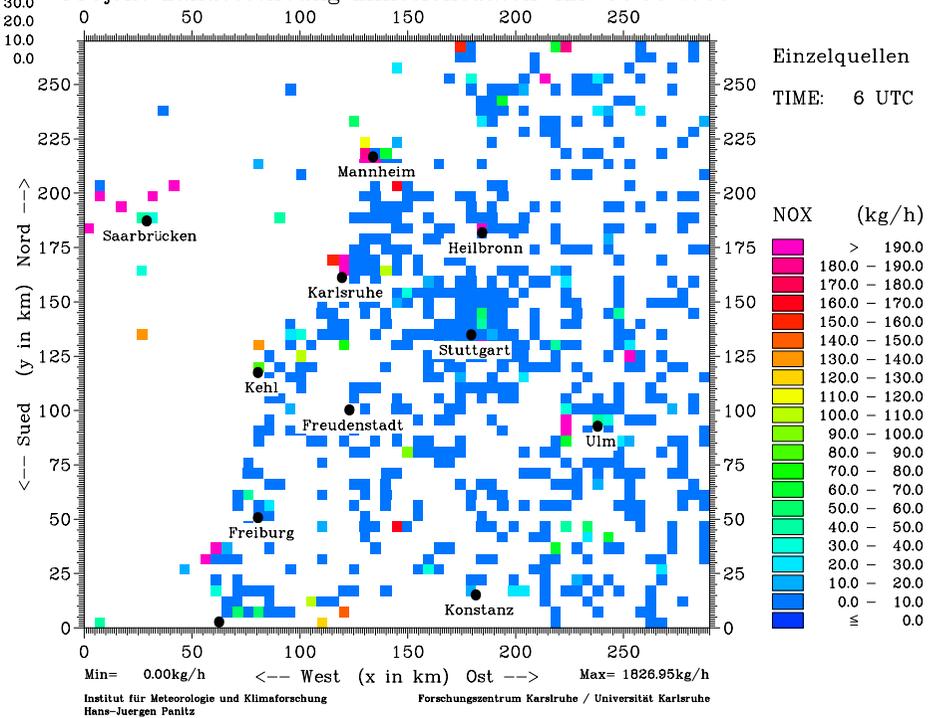
Untere Tabelle: alle Quellen mit  $QH \leq 20\text{m}$  nach dem Ergänzen fehlender Werte

- Alle Punktquellen mit  $QH \leq 20\text{m}$  und  $DH \leq 20\text{m}$  wurden aus dem Kataster der Punktquellen entfernt und dem der Flächenquellen zugeschlagen
- → erhebliche Reduktion der Zahl der Punktquellen

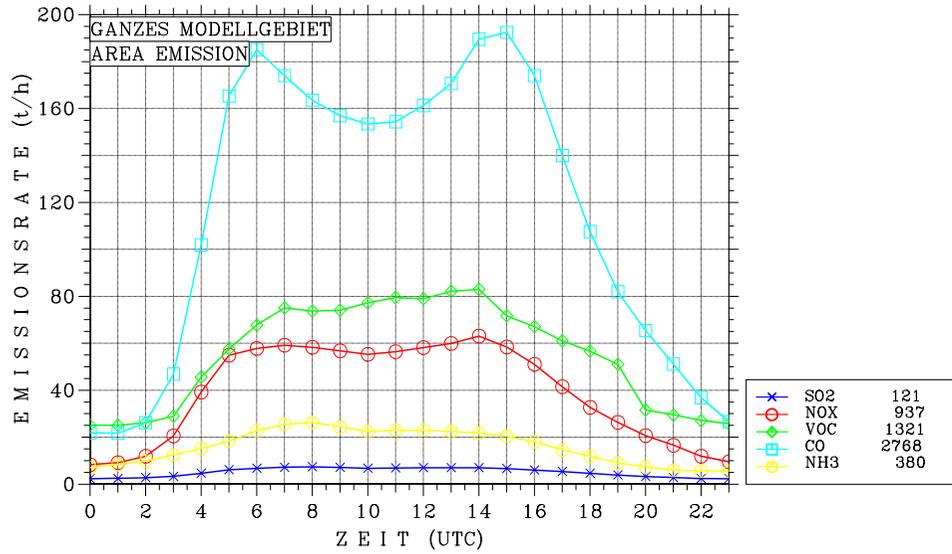
Projekt Landesstiftung Emissionsdaten-IER 30.05.2005



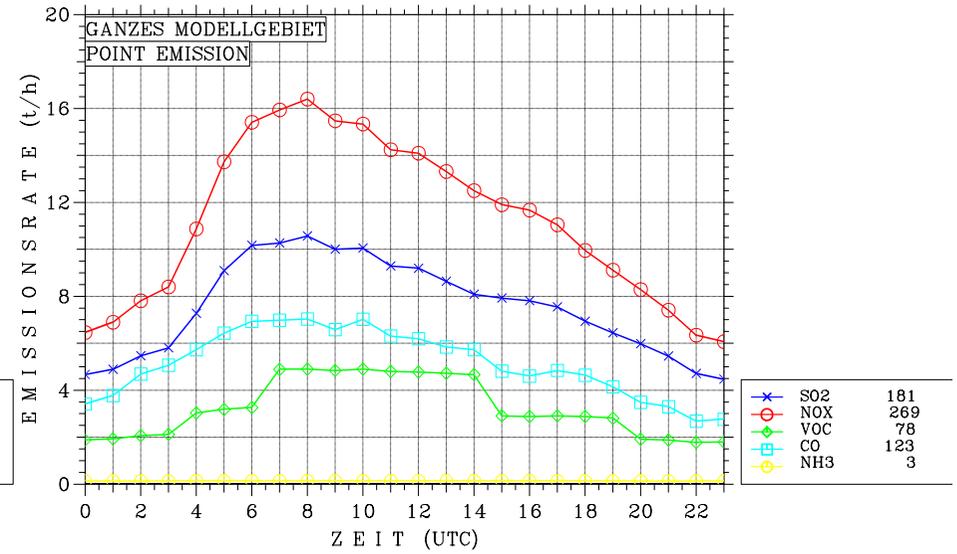
Projekt Landesstiftung Emissionsdaten-IER 30.05.2005



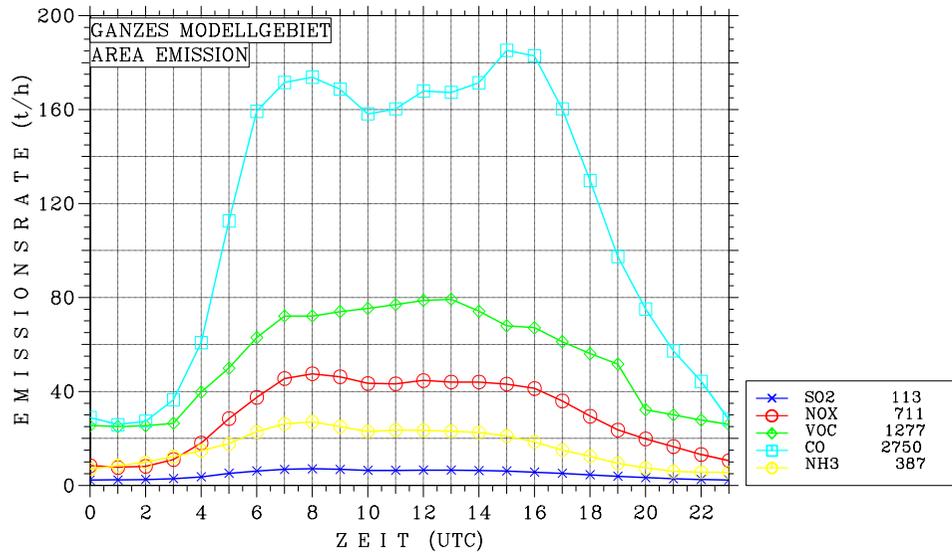
Projekt Landesstiftung Emissionsdaten-IER 30.05.2005



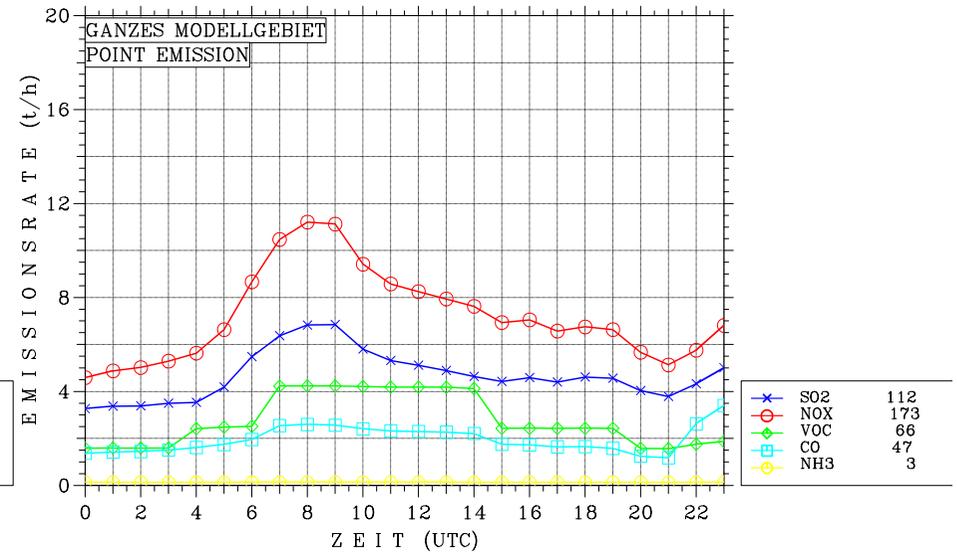
Projekt Landesstiftung Emissionsdaten-IER 30.05.2005



Projekt Landesstiftung Emissionsdaten-IER 01.06.2000



Projekt Landesstiftung Emissionsdaten-IER 01.06.2000



# Modifikationen des Modells und Testrechnungen

## ✚ Programmtechnische Modifikationen

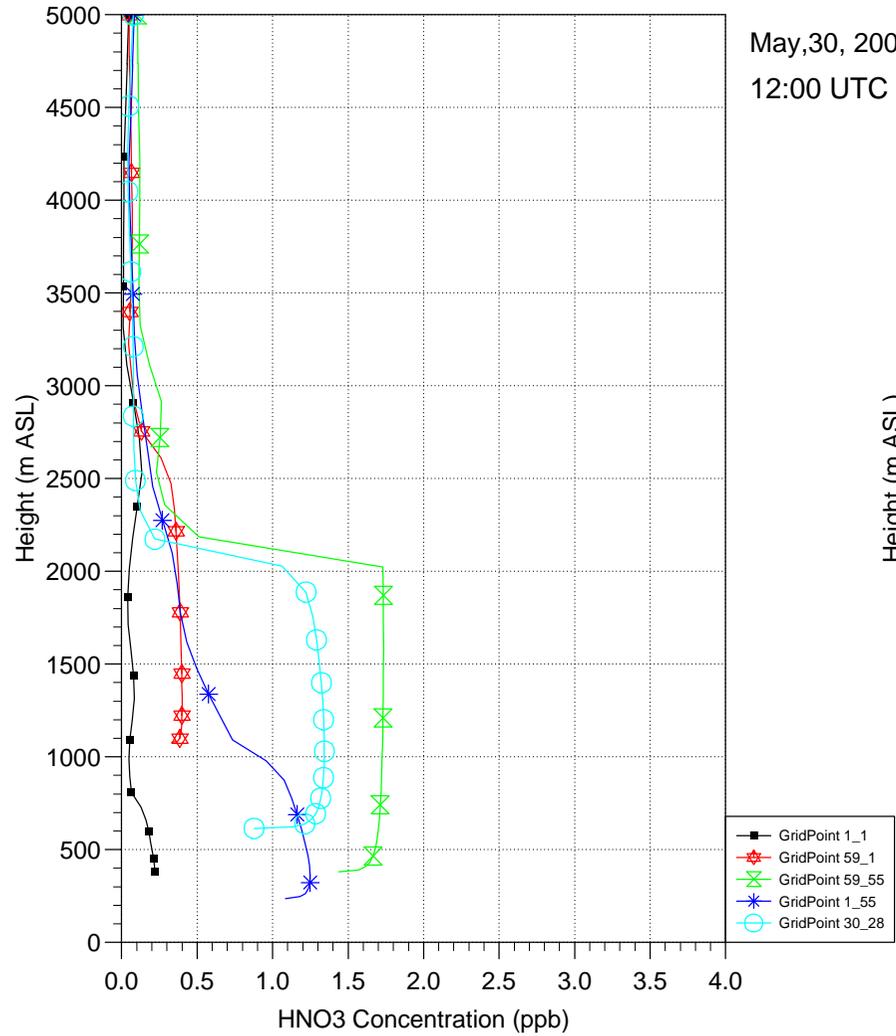
- Unterscheidungen der Dateien mit zeitlich variablen Daten durch Angabe des Datums und der Uhrzeit im Dateinamen
- Um auch mehrtägige Simulationen zu ermöglichen, war Modifikation des Modells hinsichtlich des korrekten Zugriffs auf die notwendigen Dateien nötig
- Testrechnungen über 3 Tage durchgeführt

# Modifikationen des Modells und Testrechnungen

- ✚ Funktion des Wolkenmoduls in DRAIS getestet
- ✚ Unterscheidung zwischen Schönwetter- und Regenwolken – Unterscheidungskriterium ist die Regenrate an einem Gitterpunkt
- ✚ Regenrate wird auch aus den EURAD Modellergebnissen ermittelt
- ✚ In bisherigen Anwendungen in KAMM/DRAIS nur Berücksichtigung der Schönwetterwolke
- ✚ Im Test zunächst zwei Fälle:
  - Rechnung ohne Niederschlag
  - Rechnung mit 5 mm/h Niederschlag an jedem Gitterpunkt zu jeder Stunde
- ✚ Erste Erkenntnis: Programm stürzt auch mit Niederschlag nicht ab
- ✚ Zweite Erkenntnis: Ergebnisse qualitativ sinnvoll

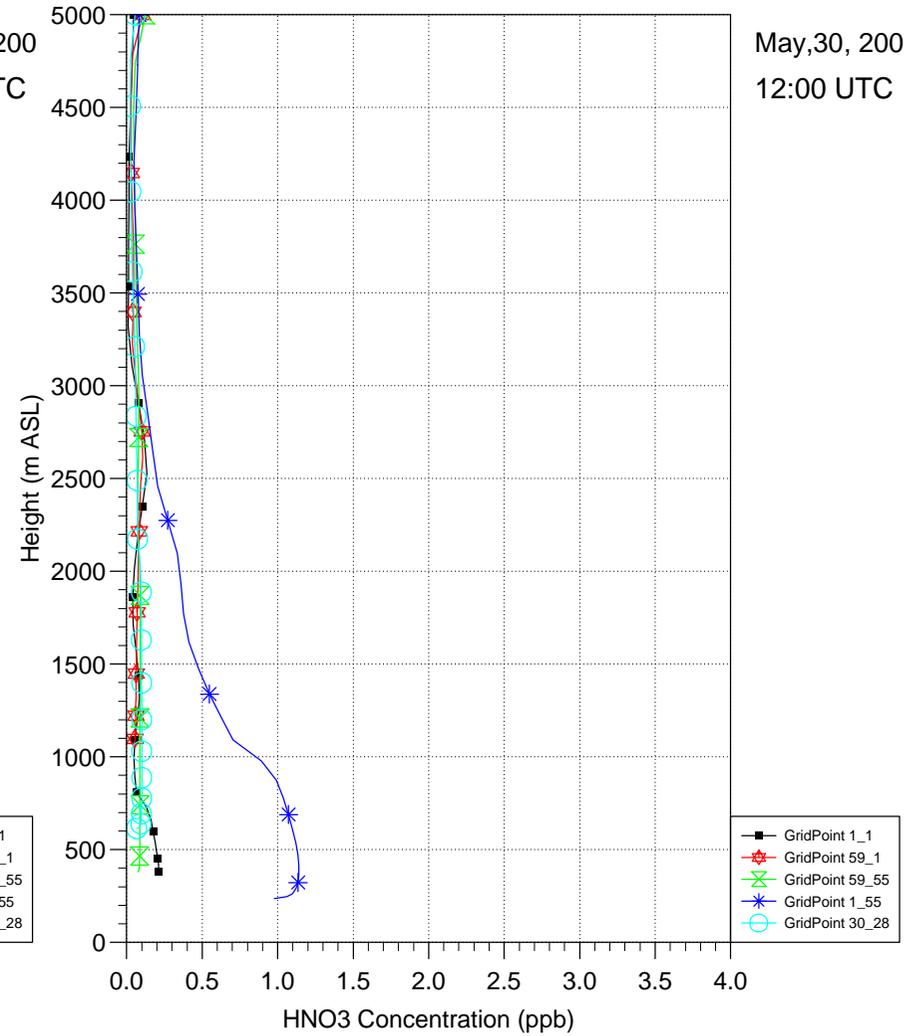
Projekt Landesstiftung DRAIS Simulation 30.05.2000 ohne Regen

May,30, 2000 12:00 UTC



Projekt Landesstiftung DRAIS Simulation 30.05.2000 mit Regen

May,30, 2000 12:00 UTC



# Was steht noch aus, wie geht es weiter

- ✚ Quantitativer Vergleich der Testrechnungen mit Messdaten steht noch aus
- ✚ Bei zu großen Abweichungen, Überarbeitung der Programme zur Berechnung der Grundzustände und Nudgingfelder notwendig
- ✚ Einfluss der Wolken auf Strahlung in KAMM ?
- ✚ in externen Daten keine „Fehler“ mehr zu erkennen
- ✚ daher beginnen die Partner jetzt mit der eigentlichen Datenproduktion, so dass wegen der quasi automatischen Datenaufbereitung sehr zeitnah mit dem Eintreffen der ersten Daten mit den Simulationen begonnen werden kann
- ✚ Stichprobenartige Überprüfung der Modellergebnisse durch Vergleich mit Messungen nötig, ggfs. Wiederholung von Simulationsläufen
- ✚ Parallel dazu Implementierung der Klassifizierungssoftware und Einarbeitung in die entsprechenden Techniken