

Modellierung vom Feinsten

N. Riemer, H. Vogel, IMK

Beschreibung der Gesamtproblematik

In den letzten Jahren wurden große Anstrengungen unternommen, die Ausbreitung und die Umwandlung von gasförmigen Luftbeimengungen zu erforschen. Zur Beschreibung der in der Atmosphäre ablaufenden Prozesse wurden Chemie-Transport-Modelle, wie das am Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) betriebene Modellsystem KAMM/DRAIS, entwickelt. Diese haben mittlerweile einen Stand erreicht, der – analog zur täglichen Wettervorhersage – unter anderem eine Prognose der alljährlich wiederkehrenden Sommersmog-episoden ermöglicht.

Neben den gasförmigen Luftbeimengungen sind in der Atmosphäre jedoch auch partikelförmige Luftbeimengungen, sogenannte Aerosolpartikel, vorhanden. Der Wissensstand bezüglich der Aerosolphase weist, verglichen mit dem der Gasphase, wesentlich größere Defizite auf. Dabei stehen gerade die Aerosolpartikel im Verdacht, erhebliche Gesundheitsbeeinträchtigungen zu verursachen. Unklar ist im Moment noch, ob der entscheidende Parameter, der zur Schädigung führt, die Konzentration der Partikel, die Größe der Partikel oder die Zusammensetzung der Partikel ist. Aufgrund der möglichen Gesundheitsgefährdung wurden von der Europäischen Kommission neue Grenzwerte für die Partikelmasse verabschiedet, die deutlich unter denen bislang in Deutschland geltenden Werten liegen. Tatsächlich werden aber auch die letzteren in

vielen Gebieten Deutschlands nicht eingehalten.

Neben ihrer Wirkung auf die Gesundheit des Menschen greifen Aerosole aber auch in vielfältiger Weise in das System Atmosphäre ein und stellen einen entscheidenden Klimafaktor dar. Ihr Einfluss auf den Strahlungshaushalt kann von jedermann als reduzierte Sichtweite wahrgenommen werden. Strahlung wird absorbiert, kurzwellige Sonnenstrahlung wird zurückgestreut. Diese Vorgänge werden als direkter Klimaantrieb bezeichnet. Weiterhin sind Aerosolpartikel bei den Prozessen der Wolkenbildung wichtig, wodurch sie das Klima indirekt beeinflussen.

Während Spurengase durch einen Parameter, nämlich die Konzentration, charakterisiert werden können, benötigt die Beschreibung des atmosphärischen Aero-

sols mehrere Parameter. So spielen, außer der chemischen Zusammensetzung, die Größenverteilung, die Morphologie, der Phasenzustand und der Mischungszustand des Aerosols eine entscheidende Rolle für sein physikalisches und chemisches Verhalten. In die Atmosphäre gelangen Aerosole auf zwei Wegen. Die sogenannten Primärpartikel werden direkt in die Atmosphäre emittiert. Zu dieser Kategorie gehören Mineralstaub, Seesalz, aber auch Partikel, die infolge von Verbrennungsprozessen entstehen. Sekundärpartikel dagegen werden aus Vorläufersubstanzen in der Gasphase gebildet. Diese unterschiedlichen Bildungsprozesse haben zur Folge, dass sich die Durchmesser der atmosphärischen Aerosolpartikel über mehrere Größenordnungen erstrecken (Abb. 1). Die Nukleation aus der Gasphase führt zu sehr

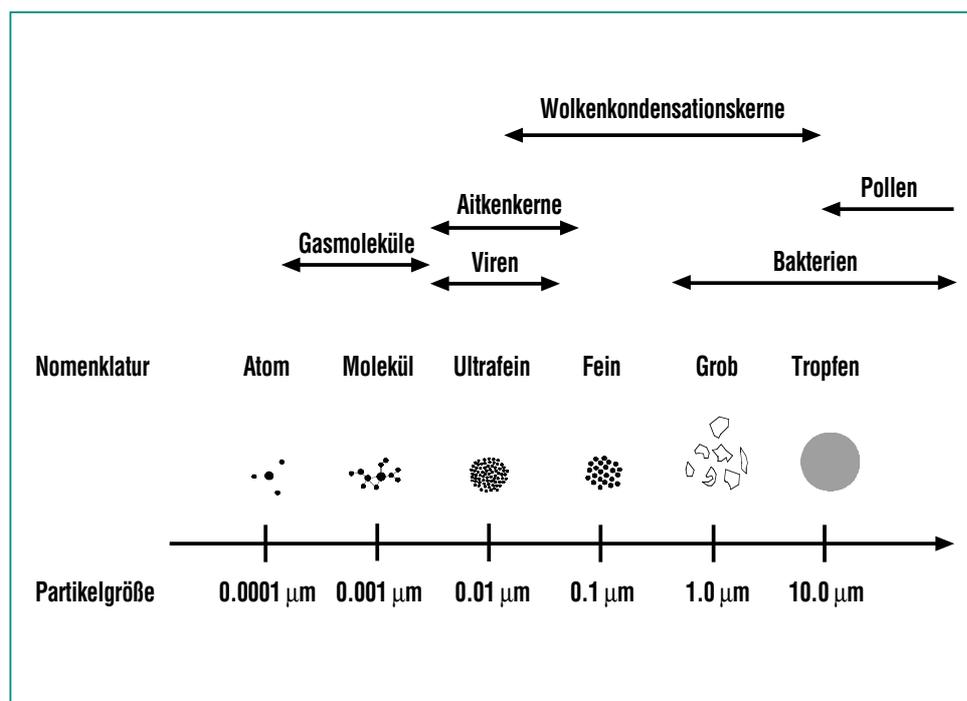


Abb. 1: Größeneinteilung des atmosphärischen Aerosols.

kleinen Partikeln, deren Durchmesser im Nanometerbereich liegt, während Dispersionspartikel eher im Bereich von 0.1 - 1 μm zu finden sind.

Der Zustand und die Dynamik der Atmosphäre beeinflussen ganz entscheidend den Eintrag und die Ausbreitung von primären Aerosolpartikeln und Aerosol-Vorläufergasen einschließlich deren Umwandlung in sekundäre Aerosole. Beeinflusst werden auch die Größe und Zusammensetzung der Partikel durch physikalische

und chemische Alterungsprozesse, sowie schließlich das Entfernen der gealterten Partikel aus der Atmosphäre durch trockene und nasse Deposition. So haben z.B. die Windstärke und der Turbulenzzustand der Atmosphäre in Bodennähe einen erheblichen Einfluss auf die Quellstärke und die Ausbreitung von Primärpartikeln aus Reifenabrieb oder aus der Bau- und Landwirtschaft. Gleiches gilt für biogene Primärpartikel wie Bakterien, Sporen und Pollen. Der Eintrag von natürlichem Wüstenstaub wird in Mitteleuropa

durch bestimmte großräumige Transportprozesse ermöglicht. Ob bei der Oxidation von Aerosol-Vorläufergasen neue Partikel entstehen oder lediglich die Masse bereits vorhandener Partikel durch Kondensation zunimmt, hängt von den Konzentrationen der Vorläufergase und der spezifischen Oberfläche des bereits vorhandenen Aerosols und damit ebenfalls vom Zustand der Atmosphäre und seiner Vorgeschichte ab. Abbildung 2 fasst alle wichtigen Prozesse schematisch zusammen, die zusätzlich zu

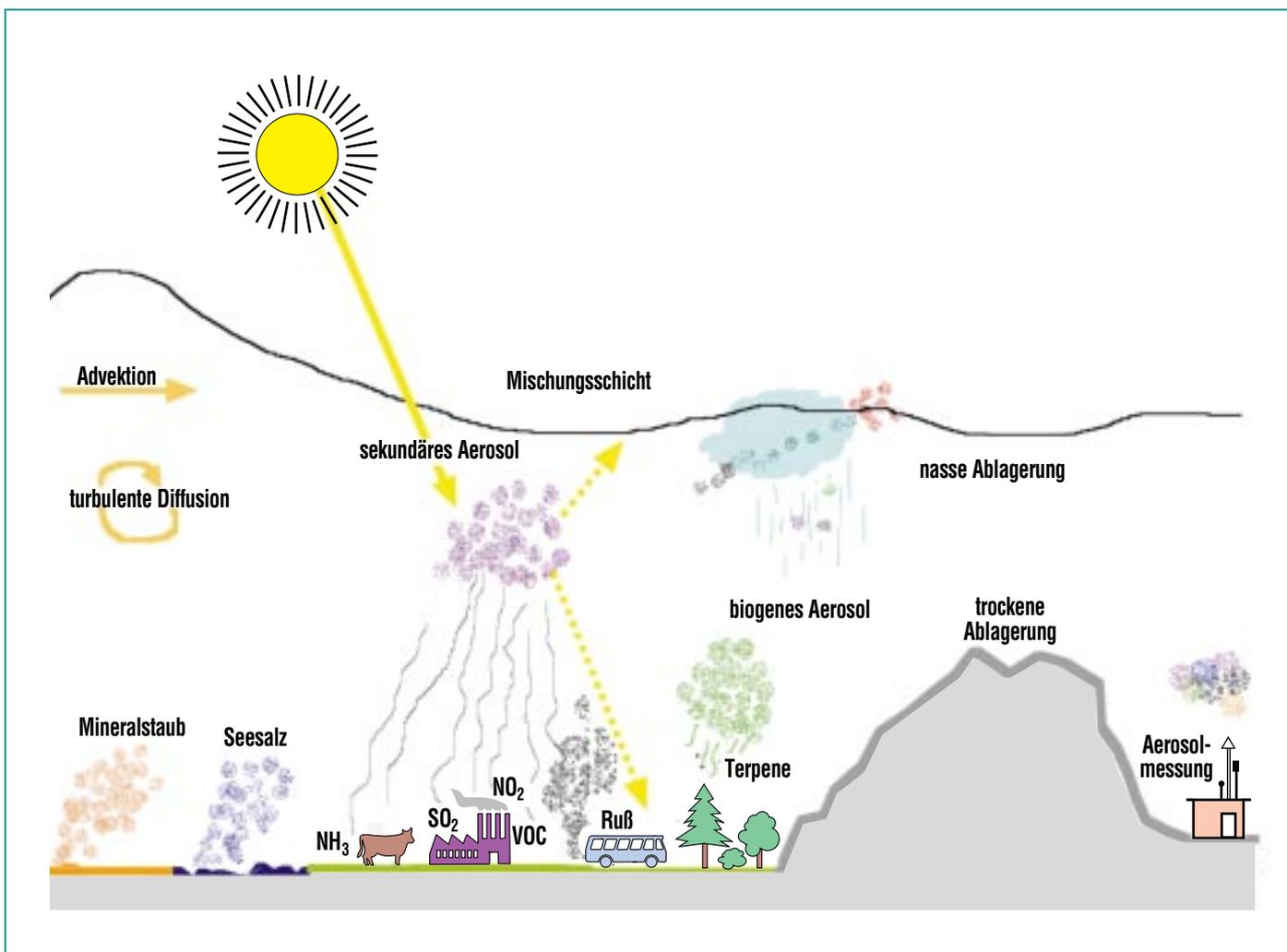


Abb. 2: Aerosoltypen und ablaufende Prozesse in der Atmosphäre.

den direkt kontrollierbaren anthropogenen Emissionen die Menge, die Größenverteilung und die chemische Zusammensetzung des Aerosols bestimmen und zwar dort, wo es auf Mensch und Umwelt einwirkt.

Die dargestellten Prozesse verlaufen räumlich sehr inhomogen und auf unterschiedlichen Zeitskalen. Sie sind zudem stark witterungsabhängig. Ein Problem ergibt sich aus der Forderung, die tatsächliche Belastung durch menschliche Aktivitäten zu erfassen. Allein durch Messungen lässt sich diese Frage nur unzureichend beantworten. Noch schwieriger zu beurteilen ist die Wirksamkeit von emissionsmindernden Maßnahmen zum Schutze der Bevölkerung vor Grenzwertüberschreitungen.

Zur Klärung dieser Fragen muss auf komplexe dreidimensionale Aerosol-Chemie-Transport-Modelle zurückgegriffen werden. Für gegebene Emissionen lassen sich durch numerische Simulation die in Abb. 2 zusammengefassten Transport- und Transformationsprozesse einschließlich ihrer zeitlichen Änderung detailliert darstellen. Damit wird eine wichtige Grundlage geschaffen, um die Wirkung von Aerosolemissionen und die Auswirkung emissionsmindernder Maßnahmen auf die Bevölkerung zu bewerten. Gleiches gilt für andere unerwünschte Wirkungen des Aerosols wie z.B. die Minderung der Sichtweite oder die Modifikation des Klimas. Die wesentlichen Ziele, die mit der Modellierung verfolgt werden, sind deshalb:

- die Quantifizierung der beteiligten Prozesse,
- die Quantifizierung des Einflusses der partikelförmigen Luftbeimengungen auf den physikalischen und chemischen Zustand der Atmosphäre,
- die Quantifizierung des anthropogenen Beitrages zur Gesamtbelastung,
- die Prognose des räumlichen und zeitlichen Verhaltens partikelförmiger Luftbeimengungen analog zur täglichen Wettervorhersage.

Beschreibung eines erweiterten Chemie-Transport-Modells

Das am IMK vorhandene mesoskalige Chemie-Transport Modellsystem KAMM/DRAIS [1] wurde erweitert, um die aerosoldynamischen Prozesse zu berechnen. Das Modell kommt hauptsächlich in der regionalen Skala zum Einsatz. Typische Gebietsgrößen haben eine horizontale Ausdehnung von 200 x 200 km². Die horizontalen Maschenweiten liegen zwi-

schen 500 m und 4 km. In der Vertikalen arbeitet das Modell mit 25 Schichten. In Bodennähe beträgt die vertikale Auflösung 20 m, am Oberrand des Modells in 8 km Höhe beträgt die vertikale Maschenweite 400 m. Die verwendeten Zeitschritte bewegen sich im Sekundenbereich.

Die Behandlung der Aerosole erfolgt mit dem Modell MADEsoot [2, 3, 4]. Es hat modalen Charakter, das bedeutet, die Partikelverteilungen werden durch überlagerte Log-Normalverteilungen beschrieben. Die Partikelneubildung durch Nukleation von Schwefelsäuredampf wird in stark vereinfachter und parametrisierter Form behandelt. Bis auf den Dieselruß liegen die Bestandteile der Partikel (Nitrat, Sulfat, Ammonium, organische Substanzen) stets als interne Mischung vor. Dies bedeutet, dass ein Partikel aus mehreren Substanzen besteht und die Zusammensetzung nicht von der Größe abhängt. Im Gegensatz dazu bestehen bei einer externen Mischung die einzelnen Partikel jeweils aus einer reinen Substanz. Abbildung 3 illustriert die beiden Mischungszustände. Frisch emit-

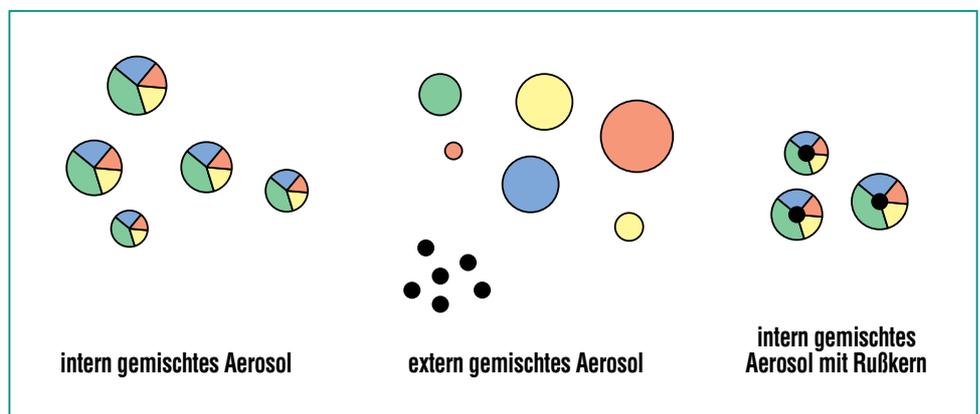


Abb. 3: Verschiedene Aerosolmischungstypen. Die Farben stehen für unterschiedliche Aerosolinhaltsstoffe.

tierter Dieselruß ist zunächst extern gemischt, kann jedoch durch Koagulation und Aufkondensieren von Schwefelsäuredampf in die interne Mischung übergeführt werden.

Zusätzlich zu den Differentialgleichungen, die zur Beschreibung des atmosphärischen Zustandes erforderlich sind und den Gleichungen für die gasförmigen Substanzen müssen nun weitere Differentialgleichungen für die verschiedenen Aerosolkomponenten gelöst werden, was den Rechenaufwand weiter deutlich erhöht. Um mit der Rechenzeit unter der Realzeit zu liegen, was für Prognosesimulationen unabdingbar ist, wurde das Programm in Zusammenarbeit mit HIK hinsichtlich der Vektorisierbarkeit deutlich optimiert. Im Folgenden soll exemplarisch dargestellt werden, für welche Fragestellungen

das Modellsystem eingesetzt werden kann.

Ergebnisse

Als Ausgangsfall für die Untersuchungen dient ein typischer Sommertag, bei dem das Modellgebiet, welches große Teile von Baden-Württemberg, das Elsass, Teile der Nordschweiz, sowie von Reinland-Pfalz und dem Saarland abdeckt, großräumig aus Osten angeströmt wird. An anthropogenen Emissionen werden dem Modell flächendeckende Werte für SO_2 , NO_x , VOC, NH_3 und Dieselruß vorgegeben. Biogene VOC- und NO -Emissionen werden simultan vom Modell in Abhängigkeit von Landnutzung, Temperatur und Strahlung berechnet.

Abbildung 4 zeigt simulierte Horizontalverteilungen des extern gemischten Rußes und der Gesamt-

partikelmasse in Bodennähe. Während der extern gemischte Ruß noch die Emissionsstruktur erkennen lässt, zeigt die Verteilung der Gesamtpartikelmasse keinen Zusammenhang mit der Lage der Quellen. Dieses Ergebnis unterstreicht die Notwendigkeit des Einsatzes numerischer Simulationsmodelle, wenn es darum geht, den Erfolg von Emissionsminderungsmaßnahmen zur Reduktion der Belastung der Atmosphäre mit Aerosolpartikeln abzuwägen. Des weiteren zeigt die Abbildung, dass es im Rheintal infolge der Überlagerung der Abluftfahnen der verschiedenen städtischen Gebiete zu einer Anreicherung der Partikelmasse kommt. Neben der Massenkonzentration ist auch die Zusammensetzung der Aerosole von Bedeutung. Abbildung 5 zeigt für einen Punkt in einem Stadtgebiet den berechneten zeitlichen Ver-

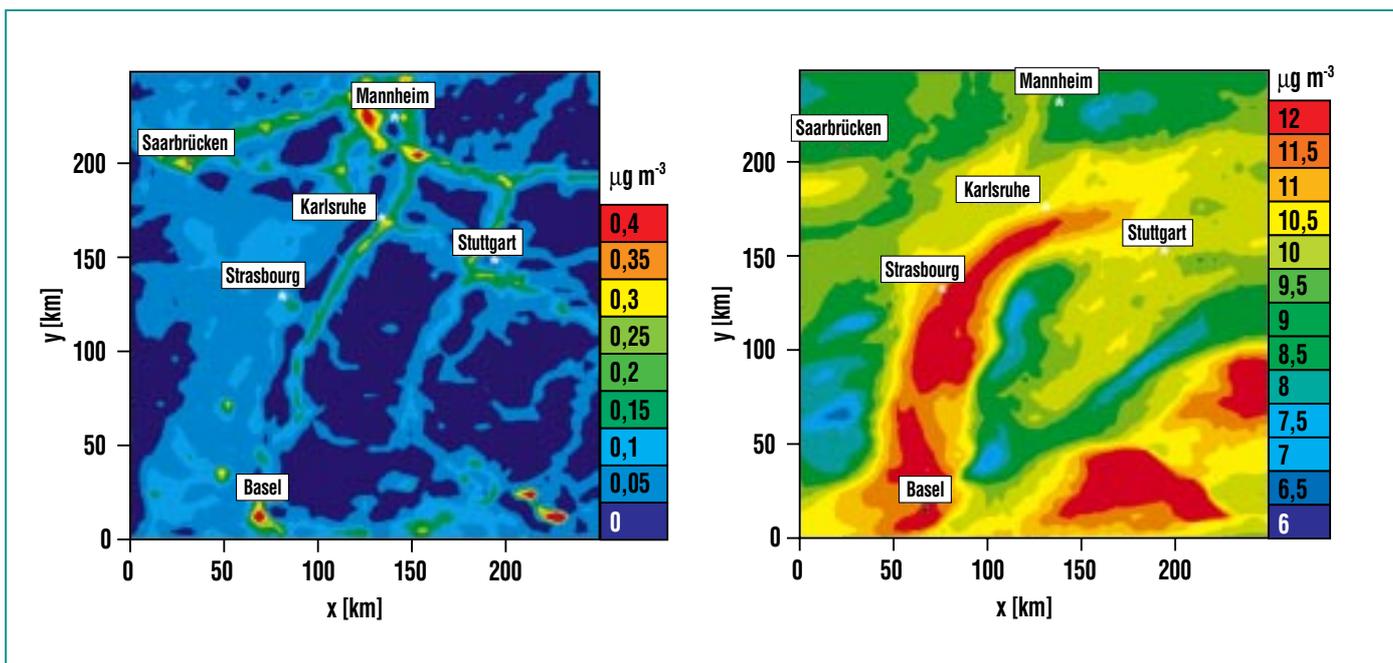


Abb. 4: Simulierte Horizontalverteilung des extern gemischten Rußes (links) und der Gesamtpartikelmasse (rechts) in 20 m über Grund um 14 Uhr.

lauf verschiedener Aerosolkomponenten. Hierbei wird deutlich, dass es aufgrund der schon angesprochenen Variabilität sowohl des atmosphärischen Zustands als auch der Emissionen zu deutlichen Unterschieden im Tagesverlauf der einzelnen Komponenten kommt. Der hohen zeitlichen Auflösung, die mit dem Modell erreicht wird, stehen auf der Messseite noch recht lange Probenahmezeiten von mehreren Stunden gegenüber. Hier besteht daher auch messtechnisch gesehen ein erheblicher Forschungsbedarf.

Basierend auf den simulierten dreidimensionalen Aerosolverteilungen können die Auswirkungen auf die atmosphärische Strahlung berechnet werden. Exemplarisch zeigt Abb. 6 die berechnete Sichtweite für die Station Hornisgrinde in den Morgen- und Mittagsstunden. In die Berechnung fließt die Zusammensetzung der Partikel und ihre Größenverteilung ein. Es zeigt sich, dass die hohen Aerosolmassenkonzentrationen im Rheingraben, wie in Abb. 3 dargestellt, in Kombination mit der tageszeitlichen Grenzschichtentwicklung zu einer deutlichen Reduktion der Sichtweite in den Mittagsstunden führen. Neben diesem unmittelbar beobachtbaren Einfluss der Aerosole auf die Strahlung wird durch Absorption und Streuung auch der Strahlungshaushalt modifiziert. Sensitivitätsstudien haben ergeben, dass für die untersuchte Sommersituation die an der Erdoberfläche ankommende solare Strahlung aufgrund der vorhandenen Aerosole um 25 W m^{-2} verringert wird. Dabei sind 30 % des Effektes auf die Wirkung der Rußparti-

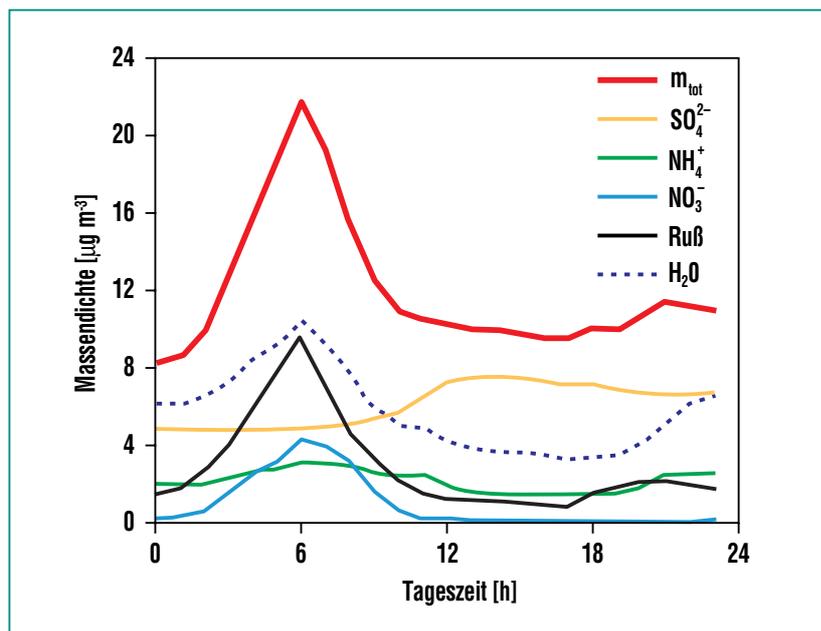


Abb. 5: Tagesgänge der Massendichten ausgewählter Substanzen und der trockenen Gesamtmassendichte für einen Gitterpunkt bei Mannheim, 20 m über Grund.

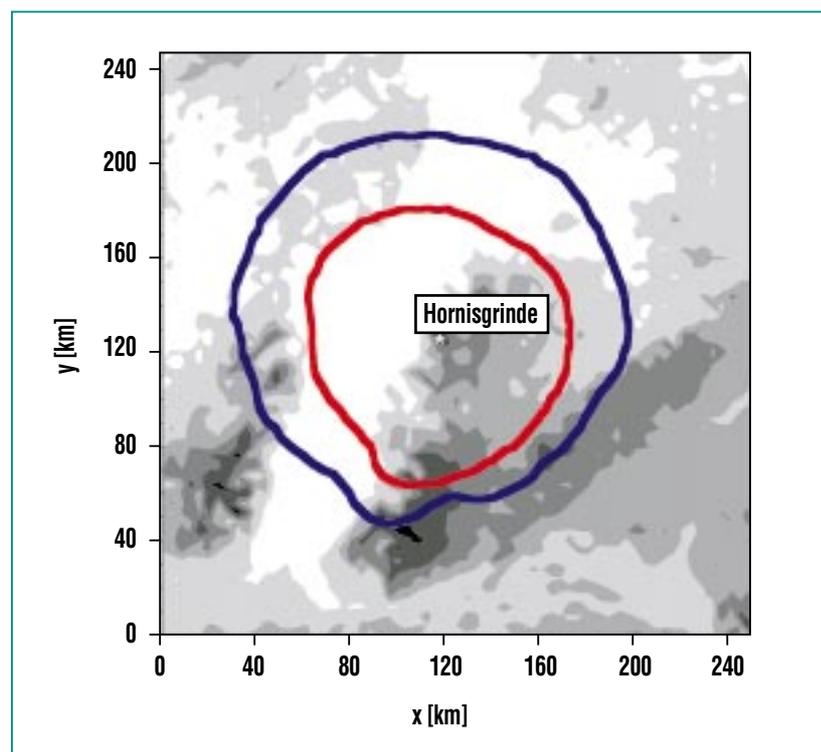


Abb. 6: Berechnete Sichtrosen unter Berücksichtigung der Aerosolverteilung für die Station Hornisgrinde um 6:00 MEZ (blau) und 14:00 MEZ (rot).

kel zurückzuführen, obgleich diese nur eben 10 % der Gesamtmasse ausmachen.

Zusammenfassung und Ausblick

Dreidimensionale Aerosol-Chemie-Transportmodelle wie das Modellsystem KAMM/DRAIS sind ein wichtiges Instrument zur Analyse der Aerosolbefrachtung der Atmosphäre und ihrer Wirkung.

Neben der Analyse des Istzustands kann durch die Betrachtung unterschiedlicher Emissionsszenarien der Beitrag des natürlichen Aerosols an der Belastung der Atmosphäre und der voraussichtliche Erfolg von Minderungsstrategien untersucht werden. Daneben ist auch die Bestimmung von regionalen Beiträgen zur Belastung der globalen Atmosphäre und deren Folgen von Bedeutung.

Infolge der Entwicklung immer leistungsfähigerer Computer und verbesserter Algorithmen wird es zukünftig möglich sein, längere Zeiträume und größere Regionen zu simulieren und somit diese Vorgänge noch besser zu prognostizieren.

Literatur

- [1] B. Vogel, F. Fiedler, H. Vogel, *J. Geophys. Res.*, 100, 22907-22928, 1995
- [2] I.J. Ackermann, H. Hass, M. Memmesheimer, A. Ebel, F.S. Binkowski, U. Shankar, *Atmos. Environ.* 32, 2981-2999, 1998
- [3] B. Schell, I.J. Ackermann, H. Hass, F.S. Binkowski, A. Ebel, *J. Geophys. Res.*, 106, 28275-28293, 2001
- [4] N. Riemer, *Wiss. Ber. Inst. Meteorol. Klimaforsch. der Univ. Karlsruhe*, 29, 2002