

**Bild 1** Die verschiedenen Modelle und Schadstofftransportpfade, die im Prototyp von ERAMAS berücksichtigt werden.

# ERAMAS — Analyse- und Managementsystem von schadstoffbedingten Umweltrisiken

Steffen Unger, Andreas Hoheisel, Berlin, Eberhard Beger, Rossendorf, Ulrich Beims, Dresden

Wissenschaftliche Simulationen zur Prognose der Ausbreitung von Schadstoffen liefern bei Störfällen in Industrieanlagen oder bei Gefahrguttransporten detaillierte Entscheidungsgrundlagen. Das Fraunhofer-Institut für Rechnerarchitektur und Softwaretechnik (Fraunhofer FIRST, Berlin), die Dresdner Grundwasser Consulting GmbH (DGC, Dresden) und das Ingenieurbüro Beger für Umweltanalyse und Forschung (IBB Rossendorf) entwickeln das Simulationssystem ERAMAS, das als kommerziell betriebenes Dienstleistungssystem zur Vorfeldanalyse im Havariefall unter Echtzeitbedingungen und zu Nachsorgeuntersuchungen bei Störfällen eingesetzt werden kann. Durch eine intuitiv bedienbare Web-Oberfläche ist die Nutzung von jedem Computer mit Internetzugang möglich. Die Technologie des Fraunhofer Resource Grid (FhRG), welche die Kopplung verteilter Software- und Hardwarekomponenten über das Internet ermöglicht, gewährleistet die Verfügbarkeit der benötigten Rechenressourcen.

**B**ei Störfällen in Industrieanlagen oder bei Gefahrguttransporten sind sofortige Analysen und schnelles Handeln gefragt. Naturkatastrophen, wie das Hochwasser der Elbe und deren Nebenflüssen mit abfließendem, möglicherweise kontaminiertem Wasser, erfordern ebenfalls umfangreiche, koordinierte Maßnahmen. Erschwert werden diese dadurch, dass die zur Bekämpfung der Folgen notwendige Infrastruktur oft ebenfalls betroffen ist und dann nur eingeschränkt eingesetzt werden kann. Daraus resultieren zusätzliche Probleme sowohl bei der unmittelbaren Schadensbekämpfung als auch bei der Nachsorge.

Gerade Katastrophen wie das Hochwasser im vergangenen Jahr zeigen, wie hochgradig komplex die beim Management sol-

cher Vorkommnisse auftretenden Probleme sind. Die Minimierung des Schadens für die Menschen, die Umwelt und die Wirtschaft insgesamt kann nur unter Berücksichtigung aller Phasen des Risikomanagements erreicht werden:

- Risikominimierung („mitigation“) im Vorfeld: Bei der Genehmigung industrieller Ansiedlungen oder der Planung von Transportwegen müssen umfangreiche Untersuchungen über mögliche Folgen von Havarien angestellt werden. Die dazu gesetzlich vorgeschriebenen Regeln werden ständig weiterentwickelt und erfordern von Planern und Betreibern dieser Anlagen erhebliche Aufwendungen.

- Vorbereitung („preparedness“) auf Störfälle: Konkrete Maßnahmenpläne für die Bekämpfung möglicher Schadensfälle sind

zu erstellen, sowohl auf der Ebene der Unternehmen, als auch regional und regionsübergreifend. Trainingsmaßnahmen für das Einsatzpersonal sind vorzubereiten und durchzuführen.

- Unmittelbare Schadensbekämpfung („response“): Der Einsatz der verschiedenen Havariedienste muss optimiert und koordiniert werden. Vorhandene Einsatzpläne sind ständig an die aktuellen Verhältnisse anzupassen.

- Schadensbeseitigung („recovery“): Die entstandenen Schäden müssen klassifiziert und notwendige Maßnahmen für deren Beseitigung konzipiert und durchgeführt werden. In diesem Zusammenhang sind auch mögliche Langzeitwirkungen abzuschätzen. Mit dieser Auswertung schließt sich gleichfalls der Kreis. Schluss-

folgerungen fließen in die Vorfeldanalyse ein.

Wissenschaftliche Simulationen zur Prognose des Havarieverlaufs und der Ausbreitung von Schadstoffen können detaillierte Informationen für den gesamten Prozess liefern. Der Gesetzgeber sieht in der Genehmigungsphase ausdrücklich solche Szenarioanalysen vor.

Der Ablauf vieler Katastrophen zeigt aber nach wie vor, dass Gefahren zu spät erkannt und der Ablauf falsch vorhergesagt wird. Entscheidungen werden auf der Basis unvollständiger und veralteter Daten sowie ungeeigneter Modellrechnungen gefällt. Erinnert sei hier an den Zusammenstoß zweier Güterzüge am 9. September 2002 in Bad Münde. Da der herbeigerufenen Feuerwehr keine ausreichenden Informationen über die Fracht der beschädigten Kesselwagen vorlagen, konnte sie keine effektive Brandbekämpfung vornehmen. Noch Tage nach der Katastrophe standen keine gesicherten Informationen über die tatsächliche Belastung für die Bevölkerung zur Verfügung.

Andererseits sind viele aktuelle Informationen derzeit schon zugänglich und könnten mit den modernen Kommunikationsmitteln abgerufen werden, wie z. B. meteorologische Informationen und Daten über die Eigenschaften transportierter Stoffe. Das derzeit im Aufbau befindliche

deutsche Notfallvorsorge-Informationssystem deNIS vereint eine Vielzahl solcher Informationen.

Das Problem besteht im unmittelbaren Zugriff auf diese Daten, auf die Erfahrungsberichte früherer Schadensfälle und auch auf die Ergebnisse der bei den Genehmigungsverfahren durchgeführten Simulationen und deren Aktualisierung. Es gibt derzeit noch keine standardisierten Prozeduren und Hilfsmittel für den Zugriff auf diese Daten und Simulationsprogramme sowie deren Ergebnisse. Zudem garantiert noch kein System die Aktualität der darin enthaltenen Informationen.

Vorhandene Simulationssysteme sind i. d. R. teuer, erfordern zusätzliche Rechnerressourcen oder liefern Ergebnisse unzureichender Qualität. Zudem genügt die Aufbereitung der Ergebnisse nicht den Anforderungen an einen Einsatz in der Akutphase, in der die Ergebnisse schnell und intuitiv erfassbar sein müssen.

### Das ERAMAS-Konzept

ERAMAS ist ein erster Schritt, ein internetgestütztes Dienstleistungssystem zu entwickeln, welches in allen Phasen des Risikomanagements eingesetzt werden kann und damit die Übertragung der Erfahrungen und Ergebnisse zwischen den Phasen ermöglicht und die Aktualität der Informationen im System garantiert. Es

dient zur Prognose und Bewertung der Ausbreitung von bei Havarien freigesetzten Schadstoffen in der Atmosphäre, im Boden und im Grundwasser sowie des Gefährdungsgrades für den Menschen unter Echtzeitbedingungen mit Hilfe von hochwertigen Simulationsprogrammen. Darüber hinaus kann es als Dienstleistungssystem zur Vorfeldanalyse – z. B. für Genehmigungsverfahren und die Erstellung von Maßnahmenplänen – genutzt werden.

ERAMAS wird derzeit vom Fraunhofer-Institut für Rechnerarchitektur und Softwaretechnik (Fraunhofer FIRST, Berlin) zusammen mit der Dresdner Grundwasser Consulting GmbH (DGC, Dresden) und dem Ingenieurbüro Beger für Umweltanalyse und Forschung (IBB, Rossendorf) entwickelt. Die Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungseinrichtungen „Otto von Guericke“ (AiF) fördert dieses Projekt im Rahmen des Programms „Innovationskompetenz mittelständischer Unternehmen“ (PRO INNO).

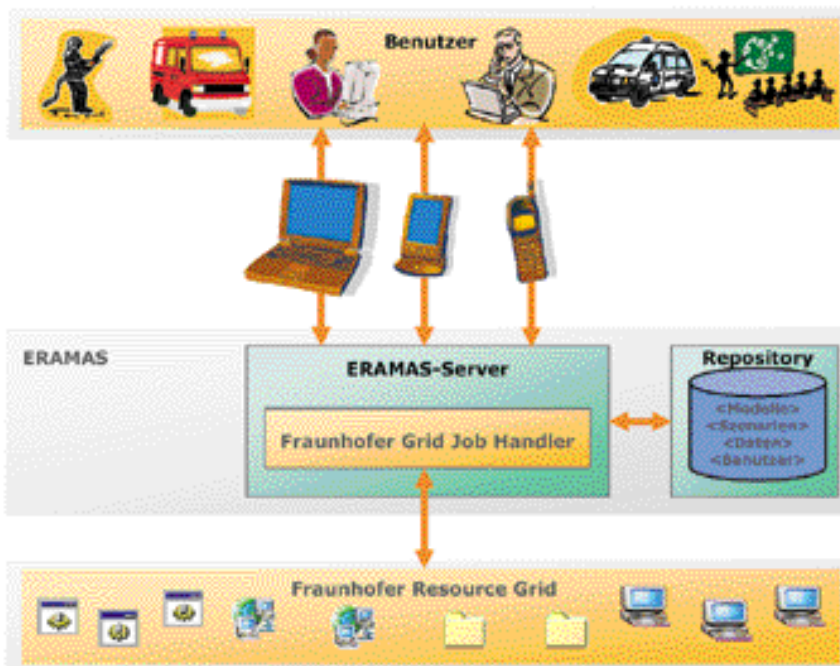
**Bild 1** zeigt eine Übersicht der betrachteten Aufgabenstellung für den Prototyp, wie er im Projekt entwickelt wird. Die Demonstration erfolgt an zwei Testfällen, einem Transportunfall mit Freisetzung giftiger Substanzen in einem Trinkwassereinzugsgebiet sowie einem Unfall in einer Chemieanlage.

Zur Simulation und Prognose des **Schadstofftransports in der Atmosphäre** werden folgende Modelle<sup>1)</sup> verwendet:

- Diagnostisches Windfeldmodell, das mit einem geringen Umfang an dynamischen Eingangsgrößen (Messungen bzw. Beobachtungen einer Wetterstation wie Windgeschwindigkeit und -richtung, Temperatur, Mischungsschichthöhe bzw. Stabilitätsklasse) realistische Windfelder berechnet.

- Quellstärkemodelle für verschiedene Arten der Schadstofffreisetzung – Schornstein, Strahl, Verdampfung aus der Lache, Linienquellen etc. Da die Eingangsparameter für diese Modelle zum Teil mit großen Unsicherheiten behaftet sind kann eine Monte-Carlo-Analyse für solche Parameterngen durchgeführt werden. Als Resultat erhält man dann verschiedene Quellstärkefunktionen in Abhängigkeit von der Zeit: Mittelwert, 95-Perzentile für worst-case-Abschätzungen etc.

- Lagrangesches Partikelmodell, das die Ausbreitung der Schadstoffwolke im



**Bild 2** Die Systemarchitektur von ERAMAS: Die Benutzer können mit Hilfe verschiedener Zugänge auf ERAMAS zugreifen. Der ERAMAS-Server nimmt die Eingabedaten entgegen und delegiert die Berechnungen mittels des Fraunhofer Grid Job Handlers an das Fraunhofer Resource Grid. Zudem verwaltet der ERAMAS-Server die Szenarien und Benutzerdaten.

1) Unter Modellen verstehen wir hier Computerprogramme zur Simulation von Prozessen.

Windfeld berechnet. Jedes Partikel bewegt sich entsprechend dem Windfeld (Advektion) und erhält zusätzlich eine zufällige Fluktuation, um die Diffusion zu simulieren. Es trägt einen Teil der Schadstoffmasse. Durch Auszählen der Partikel im Auswertegitter kann dann eine räumliche Konzentrationsverteilung als Funktion der Zeit ermittelt werden.

Diese Modelle sind auf Parallelrechnern (z. B. PC-Cluster) implementiert, liefern schneller als in Realzeit Ergebnisse und sind somit für die Prognose geeignet. Durch die parallele Abarbeitung können typischerweise Partikelzahlen von 500 000 bis zu einer Million berechnet werden.

Die aus den Simulationen resultierenden Konzentrationsfelder sind entweder selbst Grundlage für die Bewertung oder bilden Randbedingungen für die Modellierung des Schadstofftransports im Wasser oder Boden z. B. bei Deposition an der Oberfläche oder bei einem gemeinsamen Quellterm bei Freisetzung aus der Lache.

**Schadstofftransport im Boden:** Für die ungesättigte Zone wurde das Programm HYDRUS - 1D für die Modellierung ausgewählt. Dieses Programm wird seit 1991 sehr erfolgreich bei der Lösung praktischer Aufgaben eingesetzt. Das Programm HYDRUS 6.0 ist ein Programm zur Simulation von eindimensionalen Wasser-, Stoff- und Wärmetransportprozessen in einem Bodenbereich mit variabler Sättigung. Das Programm realisiert die numerische Lösung der Richards-Gleichung für den variabel gesättigten Strömungstransport und der Konvektions-Dispersions-Gleichung für den Stoff- und Wärmetransport. Das Programm beinhaltet einen Senken-Term für den Wurzelwasserentzug, nichtlineare Gleichgewichtsreaktionen für die Schadstoffverteilung zwischen Feststoff und Wasser sowie einen Stoffabbau 0-ter- und 1-ter-Ordnung. Das Strömungsfeld kann aus unterschiedlichen Materialien bestehen, die beliebig diskretisierbar sind.

**Schadstofftransport im Grundwasser:** Für die gesättigte Zone wird das Programmpaket MODFLOW/MT3D verwendet. Das Programm MODFLOW dient der dreidimensionalen Berechnung der Grundwasserströmung unter Berücksichtigung nahezu aller Konstellationen an Randbedingungen, stationär und instationär sowie gespannter und ungespannter Strömungsverhältnisse. Die Grundwasserleiter können geschichtet sein. An jedem Modellelement kann eine zeitlich variable Randbedingung realisiert werden. Die Berechnung erfolgt auf der Grundlage eines FDM-Verfahrens, wobei zwischen zwei

mathematischen Lösungsverfahren gewählt werden kann.

**Simulation der Exposition von Schadstoffen beim Menschen:** In ERAMAS werden aktuelle Entwicklungszustände der Modellierung von Migrationsvorgängen in der Atmosphäre, in der ungesättigten Bodenzone (Aerationszone) sowie in Grund- und Oberflächengewässern mit der expositionsabhängigen, schutzgut- und nutzungsbezogenen toxikologischen Bewertung (Biosphärenmodellierung) gekoppelt. Die Charakterisierung schadstoffbelasteter Böden erfolgt über eine Datenbank mit bodenphysikalischen (Sand-, Schluff-, Tongehalte, Wassergehalte etc.) und geochemischen Parametern (Verteilungskoeffizienten, Abbauraten etc.).

Eine mögliche Expositionsbelastung des Menschen resultiert in ERAMAS bei den betrachteten Wirkungspfaden Boden-Mensch und Boden-Nutzpflanze-Mensch aus der Entfaltungsmöglichkeit des Schadstoffgefährdungspotenzials, welches wiederum von der vertikalen Schadstoffverteilung in der ungesättigten Bodenzone, den Migrationsbedingungen am Standort und der Standortnutzung selbst abhängig ist.

Die Exposition wird standortspezifisch sowie schutzgut- und nutzungsabhängig über alle im betrachteten Szenario relevanten oralen und inhalativen Expositionspfade und Altersgruppen berechnet und charakterisiert nach der Transformation in Risikowerte anschaulich das resultierende Gesundheitsrisiko für den Menschen.

## ERAMAS-Architektur

ERAMAS ist ein webbasiertes, modular aufgebautes verteiltes System dessen Architektur in **Bild 2** schematisch dargestellt ist. Die Basisbausteine von ERAMAS sind:

- Ein **Web-Portal** zur Anmeldung von Nutzern und für den Zugriff auf das System über das Internet mithilfe allgemein verfügbarer Web-Browser.

- Der **ERAMAS-Client**, der Dateneingabe-, Darstellungs- und Auswertungs-

werkzeuge in einer Benutzeroberfläche integriert und über das Internet oder einem anderen Netzwerk mit dem ERAMAS-Server verbunden ist. Der ERAMAS-Client kann ggf. an schon vorhandene geografische Informationssysteme angebunden werden.

- Der zentrale **ERAMAS-Server**, der rechenintensive Simulationen und andere Aufgaben an das Fraunhofer Resource Grid delegiert.

- Ein **Repository**, das in erster Linie als zentrales Verzeichnis über die im System eingebundenen und aktuell verfügbaren Modelle, Daten und Dienste dient. Darüber hinaus werden in dem Repository zusätzliche Metadaten abgelegt, welche einerseits als Wissensbasis für eine schnelle und treffsichere Abbildung der Problemstellung des Benutzers auf die geeignetsten Modelle, Daten und Dienste (semantische Metadaten) sowie andererseits für den konkreten Zugriff auf eben diese verteilten Ressourcen (technische Metadaten) benötigt werden. Das Repository ermöglicht die konsistente Bereitstellung von Informationen aus unterschiedlichen Quellen.

- Die von Modell- und Datenprovidern bereitgestellten **Modelle und Daten**. Durch die Verwendung von Grid-Technologien können die Modelle und Daten über viele Rechner verteilt werden. Die Modelle können somit bei den Entwicklern verbleiben, so dass eine ständige Aktualisierung und Weiterentwicklung möglich ist. Die Daten sind i. d. R. schon verteilt, z. B. meteorologische Daten, Datenbanken mit Stoffeigenschaften etc.

Durch eine intuitiv bedienbare Web-Oberfläche ist die Nutzung von jedem Computer mit Internetzugang aus möglich. ERAMAS liefert auch ohne spezielle Kenntnisse der Systeminhalte, wie z. B. der benutzten Modelle und Methoden, entscheidungsrelevante Ergebnisse. Das macht ERAMAS nicht nur für große Wirtschafts- und Verwaltungseinheiten attraktiv, die auf ausgebildete Fachleute zurückgreifen können, sondern auch für Einrichtungen und Betriebe, denen derartige Spe-

## Weiterführende Informationen im Internet

[www.erasmas.de](http://www.erasmas.de) (ERAMAS)  
[www.first.fraunhofer.de](http://www.first.fraunhofer.de) (Fraunhofer FIRST)  
[www.ibbeger.de](http://www.ibbeger.de) (Ingenieurbüro Beger für Umweltanalyse und Forschung)  
[www.dgc-gmbh.de](http://www.dgc-gmbh.de) (Dresdner Grundwasser Consulting GmbH)  
[www.fhrg.fhg.de](http://www.fhrg.fhg.de) (Fraunhofer Resource Grid)



zialisten nicht zur Verfügung stehen (z. B. KMU mit störfallrelevanten Anlagen und beratende Firmen). Das System durchläuft im Nutzungsprozess selbst verschiedene Phasen von seiner Initialisierung für ein bestimmtes Problem, der Verifizierung der Ergebnisse durch Vergleichsuntersuchungen mit Mess- und Erfahrungswerten bis hin zur Nutzung als Unterstützungswerkzeug für Genehmigungsverfahren, zu Szenariountersuchungen in Vorbereitung der Bekämpfung von Störfällen und zur Unterstützung der Einsatzkräfte im Havariefall. Zur Verwendung von ERAMAS muss i. d. R. keine neue Hardware angeschafft werden, da der Zugriff auf ERAMAS über allgemein verfügbare Web-Browser oder über ein kleines Computerprogramm – den ERAMAS-Client – erfolgt. Nur die erbrachte Leistung wird abgerechnet, so dass der Einsatz von ERAMAS auch für KMU interessant ist, die keine größeren Anschaffungen von Software und Hardware vornehmen möchten. Die Technologie des Fraunhofer Resource Grid (FhRG), welche die Kopplung verteilter Software- und Hardwarekomponenten über das Internet ermöglicht, gewährleistet die Verfügbarkeit der benötigten Rechenressourcen.

Das Fraunhofer Resource Grid ist eine Grid-Computing-Initiative mehrerer Fraunhofer-Institute in Zusammenarbeit mit Industriepartnern. Dem Grid-Computing liegt der Gedanke zugrunde, dass über das Internet überall und jederzeit Rechenleistung gegen ein Entgelt zur Verfügung stehen soll, ähnlich wie bei einem Stromnetz, bei dem sich elektrische Leistung einfach über eine standardisierte Steckdose abgreifen lässt. Ziel ist es, umfassende Rechenleistung und zahlreiche Anwendungen für Unternehmen bereitzustellen, die Bedarf an rechenintensiven Großanwendungen im Bereich der Computersimulationen haben. Die Computing-Grid-Technologien erlauben einen einheitlichen und zuverlässigen Zugriff auf verteilte Rechenressourcen, Datenspeicher und andere Ressourcen. Die Grid-Middleware bietet dem Nutzer den Zugriff auf die notwendigen Systemressourcen, ohne dass sich dieser um die technischen Details der koordinierten Nutzung selbst kümmern muss. Ausgehend von den durch das Global Grid Forum geschaffenen Grundlagen, insbesondere dem Globus-Toolkit, werden Middleware-Komponenten geschaffen, welche die Wechselwirkung von Software mit den Grid-Diensten vereinfachen und dem Benutzer eine leicht zu bedienende Schnittstelle zur Steuerung von Anwendungen und Diensten im Grid-Umfeld bieten. Die

Entwicklung des Fraunhofer Resource Grid ist noch nicht abgeschlossen, sondern erfolgt parallel zur Realisierung von ERAMAS. Daher kann im Rahmen des Fraunhofer Resource Grid auf die speziellen Anforderungen eingegangen werden, die sich durch ERAMAS ergeben.

Da bei den Simulationen oft sicherheitsrelevante Daten verwendet werden, wird besonderes Augenmerk auf die Einhaltung hoher Sicherheitsstandards gelegt. Die Authentifizierung, die Vertraulichkeit, die Datenintegrität und der Schutz gegen Wiedereinspielung von Daten erfolgen durch Verschlüsselung der Daten bei der Übertragung über das Internet auf Basis von X509-Zertifikaten. Zur Autorisierung wird ein Security-Service entwickelt, der mit einer Benutzerdatenbank verbunden ist. Der ERAMAS-Server fragt diesen Service an, um sicherzustellen, dass die Benutzer jeweils nur auf die Komponenten und Daten zugreifen, für die sie autorisiert sind.

Die gewählte Systemarchitektur gestattet nicht nur die Nutzung externer Informationsquellen (z. B. Datenerfassungssysteme, Datenbanken, Informationsdienste), sondern auch die Nutzung externer Datenverarbeitungssysteme. Der Zugriff auf die Modelle des Systems erfolgt über standardisierte plattform- und programmierspracheunabhängige Schnittstellen und Protokolle, so dass Modelle und Dienste hinzugefügt bzw. ausgetauscht werden können, was eine dynamische Anpassung des Systems an den wissenschaftlich-technischen Höchststand ermöglicht. Der ERAMAS-Server koordiniert die Aktionen des Systems und hat Zugriff auf ein Repository, in dem umfangreiche Metadaten über die in ERAMAS verfügbaren Dienste, Modelle und Daten in verteilten Datenbanken abgespeichert sind.

### Schlussfolgerungen und Ausblick

Das ERAMAS-System wird derzeit im Rahmen des von der AiF geförderten Projekts (Laufzeit 7/2002 bis 6/2004) entwickelt. Informationen zum aktuellen Stand können im Internet unter [www.erasmas.de](http://www.erasmas.de) verfolgt werden. Nach Abschluss des Projekts wird das System zumindest den in Bild 1 gezeigten Problembereich bearbeiten können.

Die wesentlichen Vorteile von ERAMAS für die Anwender sind:

- Die Nutzung von ERAMAS ist kostengünstig und ökonomisch, da Kosten für den Anwender nur im Umfang der tatsächlich stattfindenden Systemnutzung anfallen.

- Hohe Aktualität und Leistungsfähigkeit der Modelle (Zugriffsmöglichkeiten auf aktuelle, für die Untersuchungsaufgabe besonders geeignete Modelle).

- Möglichkeiten zur medienübergreifenden Modellierung (medienübergreifende Modellsysteme sind am Markt kaum vertreten).

- Benutzer können modernste Simulationstechnologien nutzen, ohne eigenes Know-how aufbauen zu müssen.

- Der Benutzer ist unabhängig von den immer kürzeren Innovationszyklen von Hard- und Software

Problematisch kann die Benutzung für Anwender sein, die nicht auf die Sicherheitsarchitektur des Systems vertrauen und ihre sensiblen Daten trotz der berücksichtigten hohen Sicherheitsstandards nicht über das Internet oder vergleichbare Netzwerke übertragen möchten. Für große Unternehmen wäre es vorstellbar, das gesamte System betriebsintern zu installieren, die o. g. Vorteile fallen dann jedoch größtenteils weg. Die Ausfallsicherheit des Systems wird weitgehend durch Verwendung ausfalltoleranter Protokolle und durch die zugrunde liegende Grid-Infrastruktur gewährleistet. Sehr große Katastrophen, die auch zu Totalausfällen der Netzwerkverbindungen führen, können mit ERAMAS im Vorfeld, aber nicht in der Akutphase simuliert werden.

Ein erster Test für die generische Erweiterbarkeit des Systems wird die Erweiterung um Modelle für die Simulation der Schadstoffausbreitung in Oberflächengewässern sein, die für die Zeit unmittelbar nach Fertigstellung des Prototyps geplant ist. Der Einbau weiterer Modelle, insbesondere für Genehmigungsverfahren zertifizierter Luftmodelle, wird vorbereitet. Gegebenenfalls werden Vereinbarungen mit weiteren Partnern geschlossen, die über solche Modelle verfügen.

Des Weiteren ist angestrebt, ERAMAS eng mit dem deutsche Notfallvorsorge-Informationssystem (deNIS) und dem German Environmental Information Network (GEIN) zu verknüpfen. TÛ 403

Dr. **Steffen Unger**, Dipl.-Geophys.  
**Andreas Hoheisel**, Fraunhofer-Institut für Rechnerarchitektur und Softwaretechnik, Berlin.  
**Eberhard Beger**, Ingenieurbüro Beger für Umweltanalyse und Forschung, Rossendorf.  
 Prof. Dr.-Ing. habil. **Ulrich Beims**, Dresdner Grundwasser Consulting GmbH, Dresden.