

6 Analyse und Datenassimilation der Immissionsfelder

In diesem Kapitel werden die auf Basis der Kovarianzmodelle A, B und C (siehe Kapitel 5.3) erzeugten Immissionsfelder diskutiert. Ausgangspunkt für die statistische Analyse (siehe Kapitel 4.5.4) sind die stündlichen Beobachtungen in Deutschland und modellierte Felder des Modells REM/Calgrid (siehe Kapitel 1.4.2) für das Jahr 2001. Die stündlich analysierten Felder werden anhand ihrer Jahresmittelwerte¹⁶⁵ zusammengefasst und den reinen Modellrechnungen sowie den Beobachtungen gegenübergestellt. Die Bewertung des Analyseerfolgs erfolgt mit zwei unterschiedlichen Gütekriterien. Sie beruhen auf theoretisch abgeleiteten Fehlermaßen und einem voraussetzungsfreien cross-validation-Ansatz.

Die passiven Ansätze der Verbindung von Modell- und Beobachtungsinformation stehen im Mittelpunkt der Betrachtung. Im Kapitel 6.2.2 wird zusätzlich das aktive Verfahren auf Basis des homogenen Kovarianzmodells (A) untersucht. Neben dem Vergleich der Leistungsfähigkeit der verschiedenen Kovarianzmodelle für die Analyse werden technische Fragen der Implementierung dargelegt.

6.1 Verschiedene statistische Analyseverfahren der Immission

Vier passive Ansätze für die Analyse auf Basis der Optimalen Interpolation (OI, siehe Kapitel 4.5.5) wurden im Rahmen der Arbeit für Ozon, NO₂, NO, SO₂ und PM10 durchgeführt. Die Analyse erfolgt mit den drei Kovarianzmodellen A, B und C sowie für die logarithmisch transformierten Immissionswerte mit Kovarianzmodell A. Zusätzlich wird eine aktive Datenassimilation mit Kovarianzmodell A für eine Modellrechnung des Jahres 2001 durchgeführt. Für die Analyse müssen folgende Verfahrensmerkmale festgelegt werden:

1. Transformation der Variablen
2. Bestimmung und Korrektur des Bias
3. Festlegung der Beobachtungsfehlervarianz (Matrix \mathbf{R})
4. Festlegung der Kovarianzen zwischen den an der Interpolation beteiligten Messstationen (Matrix \mathbf{HBH}^T)

¹⁶⁵ Wäre die alleinige Erzeugung von Feldern des Jahresmittelwertes die Aufgabe, so wäre unter Umständen die direkte Analyse von Jahresmittelwerten mit einem terminbezogenen Kovarianzmodell ein ebenfalls vertretbarer Weg. Die stündlichen Werte werden jedoch für die Ableitung komplexer Luftgütestandards wie AOT40 (accumulation over threshold 40 ppb) benötigt. Darüber hinaus muss für die aktive Datenassimilation die zeitliche Auflösung der Beobachtung mit der der Modellierung übereinstimmen.

5. Festlegung der Kovarianz zwischen Beobachtungsort und Interpolationspunkt (Matrix **HB**)
6. Art und Größe des Background-Feldes
7. Anzahl der beeinflussenden Stationen
8. Auflösung der Analyse und der parametrischen Kovarianzmodelle
9. mehrmaliges Durchlaufen mit homogenem Ansatz

Eine Diskussion dieser Punkte erfolgt in den Kapiteln 6.1.1 bis 6.1.7. Eine Zusammenfassung wichtiger Verfahrensmerkmale wird in Tabelle 8 gegeben.

	aktive Assimilation	passiv terminbezogen & homogen		passiv klimatisch & Inhomogen	
Bezeichnung	DA	A	A_log	B	C
Background	Modell_DA	Modell	Modell	Modell	Modell
Log-Trafo	-	+	-	+	+
Biaskorrektur	-	Land-Stationen	Land-Stationen	Land-Stationen	Land-Stationen
$R + HBH^T$	hom. σ_B^2	hom. σ_B^2	hom. σ_B^2	$B + \sigma_{O_i}^2$	$C + \sigma_{O_i}^2$
HB	A	A	A	B	C
Auflösung	$0.5^\circ * 0.25^\circ$	$0.25^\circ * 0.125^\circ$	$0.25^\circ * 0.125^\circ$	$0.25^\circ * 0.125^\circ$	$0.25^\circ * 0.125^\circ$
Gebiet	Mitteleuropa	Deutschland	Deutschland	Deutschland	Deutschland

Tabelle 8 Untersuchte Variante des OI-Verfahrens für die Immission von Spurenstoffen

Modell	Berechnetes Feld von REM/Calgrid
Modell_DA	Berechnetes Feld von REM/Calgrid ausgehend von der Analyse vor 1 Stunde
Land-Station	Homogener Bias aus der Differenz der Land-Stationen zum Modellergebnis
A	terminbezogenes homogenes Kovarianzmodell A
B	klimatisches inhomogenes Kovarianzmodell B
C	klimatisches inhomogenes Kovarianzmodell C
$\sigma_{O_i}^2$	individuelle Beobachtungsfehlervarianz
hom. σ_B^2	homogene Varianz der Beobachtungssinkremente

6.1.1 Transformation der Variablen

Die Analyse wird zum einem mit den unveränderten und zum anderen mit den logarithmisch transformierten Größen durchgeführt. Die Transformiert wird, da so die Häufigkeitsverteilung aller betrachteten Spurenstoffe besser einer Normalverteilung folgt und dies eine Voraussetzung der Analyse ist. Bei der Rücktransformation findet die in Kapitel 5.1.1, Abschnitt „Abweichung von der Normalverteilung“, beschriebene Korrektur statt. Trotz dieser Korrektur gilt das für die Analyse grundlegende Prinzip der Varianzminimierung (siehe Kapitel 4.5.4) für die logarithmierte Größe. Dadurch werden die Unterschiede im Bereich der niedrigen Werte höher bewertet. Dies widerspricht den umweltpolitischen Intentionen der Luftreinhaltung, die an der Quantifizierung der hohen Belastung orientiert sind.

Neben diesem praktischen Argument ist die Analyse der unveränderten Variablen durch den Umstand zu rechtfertigen, dass die Beobachtungssinkremente, d. h. die Abweichungen zwischen Modell und Beobachtungen, betrachtet werden.

6.1.2 Biaskorrektur

Die Korrektur des Bias zwischen Modell und Beobachtungen ist ein Problem, da er für unterschiedliche Stationen und Regimes sehr unterschiedlich sein kann (siehe Kapitel 5.3.2). Daraus folgt das Problem seiner sinnvollen und skalengerechten Interpolation über das gesamte Feld. Es ist besonders bei den aktiven Verfahren relevant, da bei diesen eine ungerechtfertigte Änderung in Gebieten ohne Messung, z. B. über dem Meer, das Modellergebnis negativ beeinflussen kann. Für die passiven Verfahren liegt der Schwerpunkt der Aufmerksamkeit in Deutschland und damit in den Gebieten, für die Messungen vorhanden sind. Weiterhin hängt der Bias stark von der Modellkonfiguration ab und hat damit keinen allgemeingültigen Charakter.

Aus diesen Gründen erfolgt für die passive Analyse im klimatischen wie auch im terminbezogenen Fall eine homogene Korrektur des Bias an den Land-Stationen (\mathbf{R} , siehe Kapitel 5.3.2). Das gesamte Modellfeld wird in den passiven Verfahren um einen konstanten Wert verändert. In den aktiven Verfahren werden die Modellfelder nicht korrigiert, mit der Annahme, dass der Bias durch die vorangegangene Assimilation stark verringert ist.

6.1.3 Beobachtungsfehler und räumliche Kovarianz

Für die homogenen Ansätze mit dem Kovarianzmodell \mathbf{A} ergibt sich pro Termin ein Wert für die Gesamtvarianz ($\sigma_{\text{OB}}^2 = \sigma_{\text{B}}^2 + \sigma_{\text{O}}^2$) und ein sektoren- und abstandsabhängiges Kovarianzmodell. Die Gesamtvarianz wird für die Hauptdiagonalelemente von $\mathbf{HBH}^T + \mathbf{R}$ verwendet. Mit dem homogenen Kovarianzmodell werden die Kovarianzen zwischen den beeinflussenden Stationen \mathbf{HBH}^T und zwischen Interpolationspunkt und den Stationen \mathbf{HB} in Abhängigkeit von ihrem Abstand bestimmt.

Bei den klimatischen Ansätzen stehen die empirische Kovarianzmatrix $\widehat{\mathbf{HBH}^T + \mathbf{R}}$ zwischen den Beobachtungsorten i , die daraus abgeleiteten Kovarianzmodelle \mathbf{B} und \mathbf{C} und die lokal geschätzte Varianz des Beobachtungsfehlers $\widehat{\sigma_{\text{O}_i}^2}$ zur Verfügung.

Die Kovarianz zwischen Beobachtungsort und Interpolationspunkt wird mit Hilfe der Kovarianzmodelle \mathbf{B} und \mathbf{C} ermittelt. Der Abstand sowie das Regime der Beobachtung und des Modellgitterpunktes sind die Kriterien für die Bildung des Kovarianzwerts für das Kovarianzmodell \mathbf{B} . Bei Kovarianzmodell \mathbf{C} wird die Kovarianz mit Hilfe der aus den interpolierten Eigenvektoren approximierten Kovarianzmatrix zwischen allen Gitterpunkten gewonnen (siehe Kapitel 5.1.3).

Die Bereitstellung der Matrix $\mathbf{HBH}^T + \mathbf{R}$ kann alternativ durch direktes Verwenden der empirischen Kovarianzmatrix oder durch das Kovarianzmodell für \mathbf{HBH}^T und die lokal geschätzte Varianz des Beobachtungsfehlers $\widehat{\sigma_{\text{O}_i}^2}$ erfolgen. In ersten Fall ist keine separate Spezifizierung des Beobachtungsfehlers notwendig. Die Kovarianzen zwischen den Beobachtungen sind gut durch die empirische Kovarianz quantifiziert.

Diesem Vorteil steht die Verschiedenartigkeit in der Bestimmung von \mathbf{HB} und \mathbf{HBH}^T gegenüber, die mit dem Kovarianzmodell gewonnen werden. Beide Vorgehensweisen wurden hinsichtlich des cross-validation-Analysefehlers getestet (siehe Kapitel 6.2.2). Dabei stellte sich heraus, dass der zweite Ansatz, d. h. die Bestimmung von \mathbf{HBH}^T durch das Kovarianzmodell und von \mathbf{R} durch die lokale Schätzung, bessere Ergebnisse bringt und demzufolge hier angewendet wird.

Hinsichtlich der Eignung von „sphärischer“, „exponentieller“ oder „Gaußscher“ Form des parametrischen Kovarianzmodells (Kapitel 5.2.3) ergab sich in Tests der Approximationsgüte eine Überlegenheit der „sphärischen“ und „exponentiellen“ Form. Beide ergeben gleichwertige Resultate hinsichtlich den damit abgeleiteten Beobachtungs- und Analysefehlern. Aufgrund des robusteren Verhaltens für sehr kurze Abstände und seiner häufigen Anwendung für Immissionswerte (siehe 4.3.2) wurde dem „sphärischen“ Kovarianzmodell der Vorrang eingeräumt.

6.1.4 Auflösung, Interpolation von Gitterboxmittelwerten

Die Auflösung des modellierten Feldes beträgt $0.5^\circ \times 0.25^\circ$ (ca. 25km * 25 km). Demzufolge ist sie die angestrebte Auflösung für die aktive Datenassimilation. Die geringsten Abstände zwischen den Stationen betragen im urbanen Bereich einige Kilometer. Das ist damit auch die untere Schranke der Auflösung (siehe auch Kapitel 4.1) für den lokal geschätzten Beobachtungsfehler. Um einen größeren Anteil der kleinräumigen Strukturen sichtbar zu machen, wurde in einem Kompromiss die Auflösung der passiven Analyse auf $0.25^\circ \times 0.125^\circ$ (ca. 12km * 12 km) festgelegt. Die Auflösung der Analyse beeinflusst die Weite der Abstandsklassen für die parametrischen Kovarianzmodelle (siehe 5.2.1). Hierfür wird ein Wert von 7 km festgelegt. Bei kleiner Stichprobenanzahl vergrößert sich das Intervall, um mindestens 30 Stichprobenelemente pro Abstandsklasse zu erreichen.

Die Modellfelder bestehen aus Gitterboxmittelwerten; der vorgestellte Ansatz liefert jedoch zunächst nur die Interpolation von punktbezogenen Werten. Um dem Mittelwertcharakter gerecht zu werden, könnte eine Interpolation für mehrere Punkte in der Box mit anschließender Mittelwertbildung erfolgen. Es lässt sich jedoch zeigen, dass bereits eine Interpolation mit dem Mittelwert von **HB**, d. h. die Kovarianz zwischen Beobachtungsort und Analysepunkt, über dem Mittelungsgebiet den gewünschten Mittelwert liefert („Block-Kriging“, Cressie, 1993).

6.1.5 Auswahl der beeinflussenden Stationen

Nach Gleichung {4.31} ist jeder Analysepunkt durch die Gesamtheit aller Stationen beeinflusst. Die Größe des zu lösenden Gleichungssystems lässt sich stark verringern, wenn für jeden Punkt nur eine Auswahl von umliegenden Stationen zur Interpolation verwendet wird (siehe Kapitel 4.5.5). Für die Analyse wurden die 8 nächsten¹⁶⁶ Beobachtungen ausgewählt. Mehrere Tests mit einer erhöhten Anzahl von Stationen führten zu leicht glatteren Feldern ohne große weitere Unterschiede. Eine geringere Anzahl erwies sich teilweise als mathematisch instabil, da Artefakte einzelner Beobachtungen nicht ausreichend gedämpft wurden bzw. die Analysegleichung schlecht konditioniert war (siehe Kapitel 5.2.5.3).

Neben der Anzahl der beeinflussenden Stationen stellt sich die Frage, ob die Kenntnis des Regimes die Auswahl der Stationen bestimmen soll. Dies ist bereits in dem regime-abhängigen Kovarianzmodell B verwirklicht. Bei ihm sind die Kovarianzen zwischen

¹⁶⁶ Für die Analyse von Immissionsmessungen ist eine feste Anzahl von beeinflussenden Stationen empfehlenswerter, als alle Stationen innerhalb eines Einflussgebietes zu verwenden. Durch letzteres Vorgehen werden die Unterschiede zwischen Stadt und Land zu sehr verwischt.

sehr verschiedenen Regimes Null gesetzt worden. Es scheint jedoch für alle Analysen sinnvoll, die Beobachtungen des Regimes „Straße“ und „Straße extrem“ aus dem Analyseprozess auszuschließen. Ihre räumliche Repräsentativität ist deutlich kleiner als die gewählte Auflösung und ihr Beobachtungsfehler ist systematisch. Er ist deswegen mit der Varianz nur unvollständig erfasst.

6.1.6 Iterative Analyse

Viele Analyseverfahren für meteorologische Ansätze der 60er bis 80er Jahre sind iterativ, d. h. die Analyse wird mehrmals durchgeführt, wobei das jeweils letzte Analysefeld als Background für die nächste Analyse verwendet wird (Daley, 1991). Da das Backgroundfeld sich verändert, ist für die nachfolgenden Analysen nur ein terminbezogener Ansatz möglich. Durch die nachfolgenden Analyseschritte wird meist die lokale Übereinstimmung mit den Beobachtungen erhöht.

Ob ein weiterer Analyseschritt sinnvoll ist, kann durch das Rausch-Signal-Verhältnis entschieden werden (siehe Kapitel 5.3.3.2): ist die Backgroundfehlervarianz im Vergleich zur Beobachtungsfehlervarianz zu gering, so lohnt sich kein weiterer Analysezyklus mehr und es besteht die Gefahr von instabilem Verhalten. Die in dieser Arbeit mit der iterativen Analyse durchgeführten Tests ergaben keine Verbesserung des Analyseergebnisses. In vielen Fällen konnte keine positiv definite Kovarianzfunktion approximiert werden.

Darauf aufbauend wurde für die Durchführung der Vergleiche verschiedener Ansätze generell auf ein iteratives Vorgehen verzichtet, da es sich nur mit größerem Aufwand im Rahmen einer korrekten cross validation einbinden lässt.

6.1.7 Aktive Datenassimilation mit Optimaler Interpolation

Die aktive Datenassimilation mit Optimaler Interpolation ergibt sich aus einem Modelllauf, bei dem jede Stunde die Modellfelder der Bodenschicht (siehe Kapitel 1.4.2) an die Beobachtungen angepasst werden. Dies geschieht, indem jede Stunde die Analyse aus Modellfeld und Beobachtungen das Modellfeld ersetzt. Das Vorgehen gleicht dem Prinzip des Kalman-Filters (siehe Kapitel 4.5.7, Abbildung 4.3) mit dem wichtigen Unterschied, dass die Kovarianz nicht mit Hilfe eines Ensembles von gestörten Modellzuständen prognostiziert, sondern aus den Beobachtungsincrementen zum Termin mit Modell A geschätzt wird. Ein terminbezogener Ansatz wurde gewählt, da die vorangegangene Assimilation die Modellfelder verändert.

Die aktive Variante unterscheidet sich von der passiven dadurch, dass hierbei keine Biaskorrektur durchgeführt werden kann (siehe Kapitel 6.1.2) und dass die horizontale Auflösung des Feldes (siehe Kapitel 6.1.4) nicht erhöht wird.

Da PM10 keine prognostische Modellvariable ist, muss ein Beobachtungsoperator (siehe Kapitel 4.5.3) für die Transformation in die PM10-Bestandteile existieren. Für die Aufteilung der PM10-Beobachtungen in die Modellvariablen wird hier das vom Modell gelieferten Massenverhältnis verwendet. Problematisch ist dabei, dass gewisse Aerosolbestandteile, wie die organischen, noch nicht in der Modellrechnung berücksichtigt werden. Weitere Untersuchungen sind notwendig, um eine angemessene Korrektur der Modellrechnung auf Grundlage PM10-Beobachtung zu verwirklichen.

6.2 Methoden zur Beurteilung der Verfahrensgüte

Eine Eigenheit der statistischen Interpolationsverfahren ist, dass sie neben dem Analyseergebnis ein zugehöriges Fehlermaß liefern. Dies ist die minimierte Varianz, die als Ausgangspunkt der Analysegleichung {4.31} dient. Die Varianz des Analysefehlers {4.37} basiert auf den Kovarianzmodellen und kann als ein die Analyse begleitendes Feld geliefert werden. Der so erfasste Analysefehler ist korrekt, wenn das geschätzte Kovarianzmodell fehlerfrei ist. Er hängt nur vom geschätzten Kovarianzmodell sowie dem Beobachtungsfehler ab und lässt sich im klimatischen Fall im Voraus bestimmen. Diese Analysefehlervarianz ist ein theoretisches Maß und stellt eine untere Schranke für den realen Analysefehler dar.

Wegen der Abhängigkeit der theoretischen Analysefehlervarianz vom Kovarianzmodell besteht die Forderung nach einem voraussetzungsfreien Qualitätstest. Er beruht auf der Idee der „cross validation“: Einzelne Beobachtungen werden vom Analyseprozess ausgenommen¹⁶⁷ und es wird überprüft, inwieweit die übrigen Messungen die ausgelassene Messung reproduzieren können. Im Idealfall sollte der durch cross validation bestimmte Fehler kleiner als der reale Beobachtungsfehler sein. Dies gilt sowohl für seinen Erwartungswert (Bias) als auch für seine Varianz. Unterschiedliche Schätzungen der Beobachtungsfehlervarianz führen demzufolge zu unterschiedlichen Bewertungen des Analyseerfolgs. In umgekehrter Schlussfolgerung kann man mit einem vernachlässigten Beobachtungsfehler eine genaue – aber unrealistische – Übereinstimmung zwischen Beobachtung und Analyse am Beobachtungsort erzwingen (siehe Kapitel 4.5.5).

Bei der aktiven Datenassimilation beeinflusst das Analyseergebnis eines Termins das Backgroundfeld für den nächsten Analysezeitpunkt. Durch diese Abhängigkeit von vorangegangenen Analysen lässt sich der cross-validation-Ansatz nur durch Weglassen einzelner Stationen für den gesamten Analyseverlauf realisieren. Es bedarf deswegen einer Vorauswahl eines ganzen Sets von Teststationen, da ein mehrmaliges Durchlaufen des Assimilationszyklus rechentechnisch zu aufwendig wäre. Durch das Weglassen eines großen Ensembles von Stationen wird jedoch die Assimilationsleistung verringert bzw. die ermittelten Kovarianzmodelle können verschiedenartig sein.

6.2.1 Die theoretische Analysefehlervarianz

Die Analysefehlervarianz für die optimalen Gewichte {4.37} hängt ab von der Varianz des Backgroundfehlers σ_B^2 am Analysepunkt, den Analysegewichten \mathbf{K} und der Kovarianz \mathbf{HB} zwischen den Beobachtungen und dem Analysepunkt. Die Analysefehlervarianz ist damit unabhängig von dem Wert der Beobachtungen und kann bei Kenntnis der Kovarianzstruktur im Voraus bestimmt werden. Die Betrachtung des Feldes der Analysefehlervarianz stellt damit eine Methode dar, die geschätzten Kovarianzen zu veranschaulichen.

Abbildung 6.1 zeigt beispielhaft für PM10 die mittleren Standardabweichungen, d. h. die Wurzel der Varianz, des theoretischen Analysefehlers für das homogene terminbezogene Kovarianzmodell A und das inhomogene klimatische Kovarianzmodell C. Im homogenen Fall ist die Standardabweichung des Backgroundfehlers konstant und die Fehlergröße ein Maß für die Stationsdichte: Am Rande des Gebietes sind demzufolge

¹⁶⁷ Für die Schätzung des Kovarianzmodells wurden jedoch der Vereinfachung wegen alle Stationen einbezogen, so dass das Kovarianzmodell immer das Gleiche ist.

die Analysefehler am größten. Ein anderes Bild liefert der inhomogene Fall. Die höchsten Fehlerwerte sind hier in den belasteten Gebieten und damit häufig auch in den Gebieten mit hoher Stationsdichte zu finden. Der Grund dafür ist die räumlich variable Varianz des Beobachtungsfehlers.

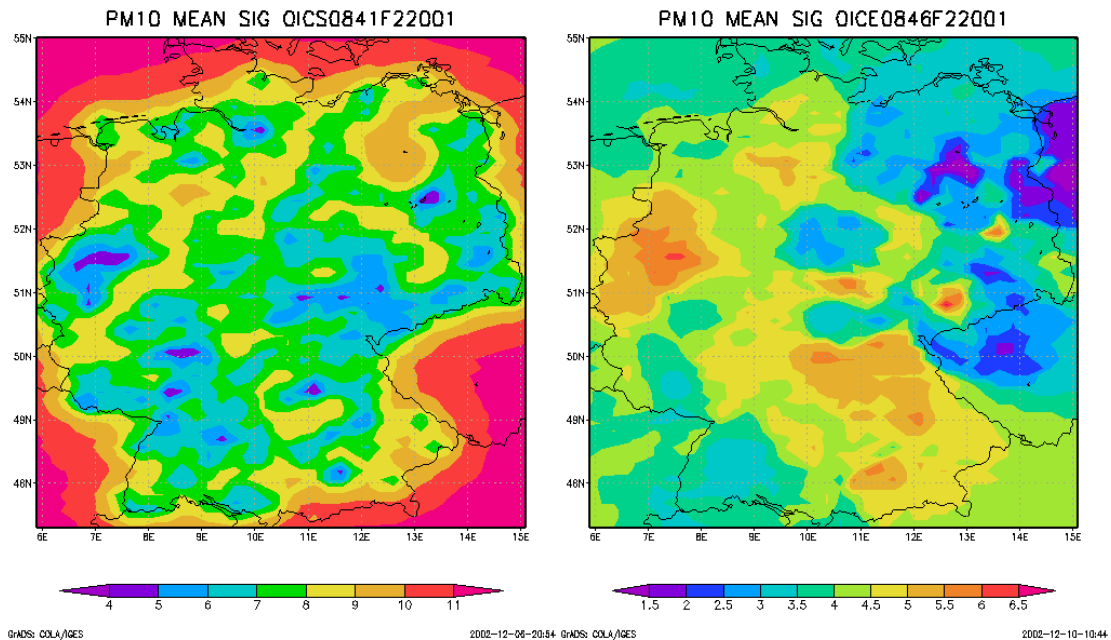


Abbildung 6.1 Mittelwert der theoretischen Analysefehlerstandardabweichung für PM10, links für das homogene terminbezogene Kovarianzmodell A, rechts für das inhomogene klimatische Kovarianzmodell C.

6.2.2 Der cross-validation-Analysefehler

Die Leistungsfähigkeit der verschiedenen passiven Analyseimplementierungen (siehe Tabelle 8) wurde mit einem cross-validation-Ansatz untersucht. Als Basis der Bewertung dient ein Ensemble von Abweichungen zwischen dem Messwert und dem für den Messort interpolierten Feldwert für jede Station und jeden Zeitpunkt. Der Feldwert wurde dabei ohne Verwendung des Messwertes interpoliert. Für die Bewertung der Analyseleistung wurden diese Abweichungen pro Station mit dem rmse^{168} zusammengefasst, da er sowohl die mittlere Abweichung als auch die Streuung bewertet.

Der rmse des cross-validation-Analysefehlers ist für jeden Stoff in Abbildung 6.6 bis Abbildung 6.6 dargestellt. Es ergibt sich, dass die einzelnen Implementierungen nur geringe Unterschiede in der Interpolationsgüte aufweisen. Die rmse -Werte des cross-validation-Analysefehlers sind deutlich größer als die Werte des theoretischen Analysefehlers. Die Log-Transformation bei Ozon hat einen erkennbar negativen Einfluss auf die Interpolationsgüte. Das Kovarianzmodell B zeichnet sich für alle Stoffe durch einen leicht geringeren Fehler bei den Land-Stationen aus.

Das Erzielen einer gleichartigen Analysequalität durch die verschiedenartigen Kovarianzmodelle A, B, und C erscheint zunächst unerwartet. Betrachtet man den Wertebereich des cross-validation-Analysefehlers, so ist er von annähernder Größe wie der in

¹⁶⁸ rmse = root mean square error.

Kapitel 5.3.1 geschätzten Standardabweichungen des Beobachtungsfehlers. Damit ist eine Schranke der Genauigkeit erreicht, die durch die Analyse nicht unterschritten werden kann (siehe Kapitel 4.5.5). Eine weitere Erklärung für die Gleichwertigkeit der Ergebnisse liegt vermutlich in der hohen Stationsdichte und der relativ geringen Anzahl von beeinflussenden Beobachtungen. Deshalb wird das Kovarianzmodell nur für kurze Entfernungen angewendet. Die großräumig erfasste Inhomogenität kann das Analyseergebnis nicht verbessern.

O3 RMSE OI Performance (Cross Val.)

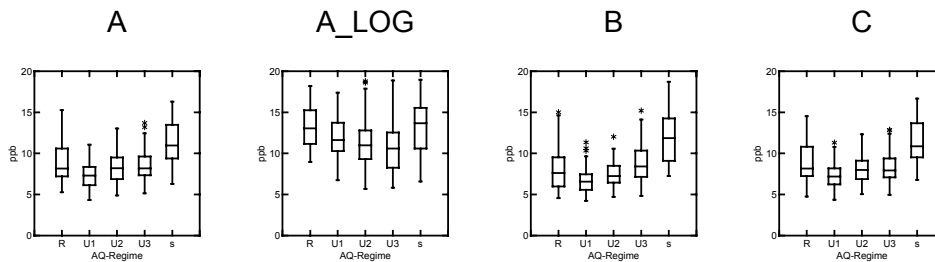


Abbildung 6.2 Häufigkeitsverteilung des rmse des cross-validation-Analysefehlers der passiven Analyse mit verschiedenen Kovarianzmodellen (A, A_LOG, B, C, siehe Tabelle 8) für Ozon.

NO2 RMSE OI Performance (Cross Val.)

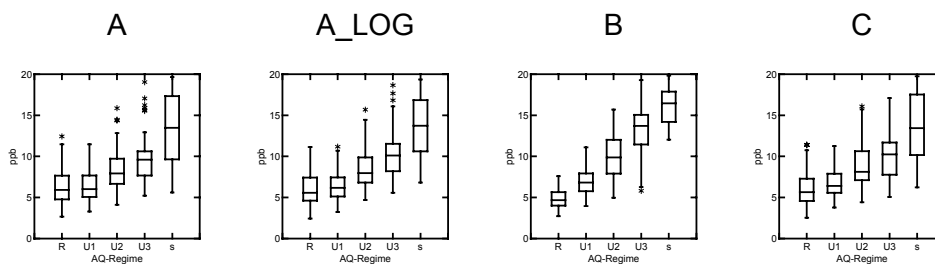


Abbildung 6.3 Häufigkeitsverteilung des rmse des cross-validation-Analysefehlers der passiven Analyse mit verschiedenen Kovarianzmodellen (A, A_LOG, B, C, siehe Tabelle 8) für NO₂.

NO RMSE OI Performance (Cross Val.)

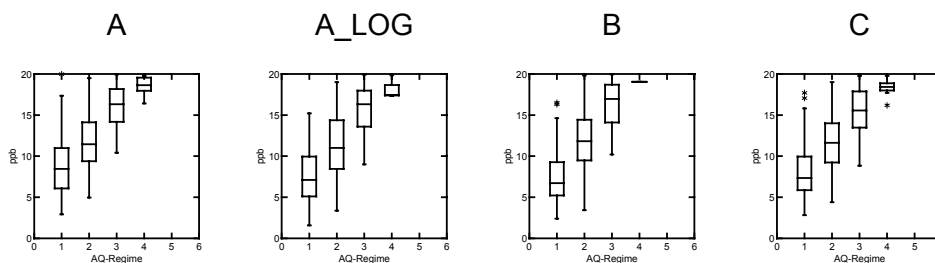


Abbildung 6.4 Häufigkeitsverteilung des rmse des cross-validation-Analysefehlers der passiven Analyse mit verschiedenen Kovarianzmodellen (A, A_LOG, B, C, siehe Tabelle 8) für NO.

PM10 RMSE OI Performance (Cross Val.)

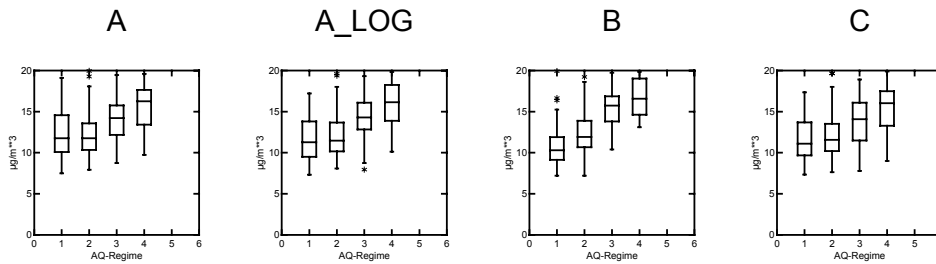


Abbildung 6.5 Häufigkeitsverteilung des rmse des cross-validation-Analysefehlers der passiven Analyse mit verschiedenen Kovarianzmodellen (A, A_LOG, B, C, siehe Tabelle 8) für PM10.

SO2 RMSE OI Performance (Cross Val.)

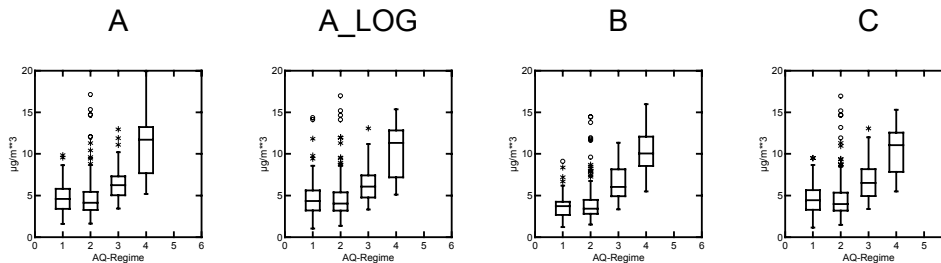


Abbildung 6.6 Häufigkeitsverteilung des rmse des cross-validation-Analysefehlers der passiven Analyse mit verschiedenen Kovarianzmodellen (A, A_LOG, B, C, siehe Tabelle 8) für SO₂.

6.3 Die analysierten Immissionsfelder aus Beobachtung und Modellrechnung für 2001

In diesem Kapitel werden die analysierten Felder anhand von Karten der Jahresmittelwerte vorgestellt. Für jeden Stoff werden dazu 6 Karten präsentiert (Abbildung 6.7 - Abbildung 6.21). Es sind dies 1. eine Darstellung des allein aus den Beobachtungen abgeleiteten Mittelwertes am Stationsort und 2. das Feld des Jahresmittelwertes der reinen Modellrechnung. Dann folgen 3. – 6. vier Karten der analysierten Felder, die durch eine Kombination von Beobachtung und Modellrechnung mit Hilfe der Optimalen Interpolation (siehe Kapitel 4.5.4) entstanden sind. Sie beruhen auf den 4 passiven Analysevarianten mit unterschiedlicher Kovarianzmodellierung (siehe Tabelle 8).

Vergleicht man zunächst die räumliche Struktur von Beobachtung und Modellrechnung, so fällt naturgemäß die höhere Variabilität in den Beobachtungen auf. Dies liegt nicht zuletzt an dem Umstand, dass hier alle Stationen, d. h. auch die Verkehrsregimes und bei Ozon das Bergregime dargestellt werden. Markantestes Merkmal der Modellrechnung ist das Ruhrgebiet mit seinen für die primären Stoffe sehr hohen und für Ozon sehr geringen Immissionen. Dies hat in diesem Umfang keine Entsprechung in der Beobachtung. Folgerichtig ist die starke Ausprägung des Ruhrgebietes in allen Analysen abgeschwächt. Durch das Einbringen der Beobachtung erscheint ein neuer Immissionsschwerpunkt für NO_x im Bereich des dichtbesiedelten Oberrheingraben,

der sich bis in den Raum München fortsetzt. Der Ballungsraum Oberrhein-Graben wird vom Modell, wenn auch in abgeschwächter Form, wiedergegeben. Eine größere Diskrepanz besteht für den bayerischen Raum. Hier liefert das Modell geringe Immissionen insbesondere von PM₁₀. Die wenigen, aber stets urbanen Beobachtungen geben dagegen eine großflächig hohe Immission vor.

Das homogene terminbezogene Kovarianzmodell A und das klimatische C zeigen hinsichtlich der Struktur und der Höhe der Immission sehr ähnliche Bilder. Das Kovarianzmodell B liefert für die primären Stoffe einen mehr großflächig ländlichen Charakter. Die logarithmische Transformation hat unterschiedliche Auswirkungen: Für Ozon bewirkt sie eine großflächige Erhöhung, für NO und NO₂ werden vornehmlich einzelne hochbelastete Orte besser sichtbar und für PM₁₀ ergibt sich eine Verringerung der Gradienten. Diese unterschiedlichen Effekte kann man mit den unterschiedlichen Wertebereichen erklären. Es scheint in Zukunft angebracht zu sein, neben der Transformation auch eine Verschiebung in einen anderen Wertebereich vorzunehmen.

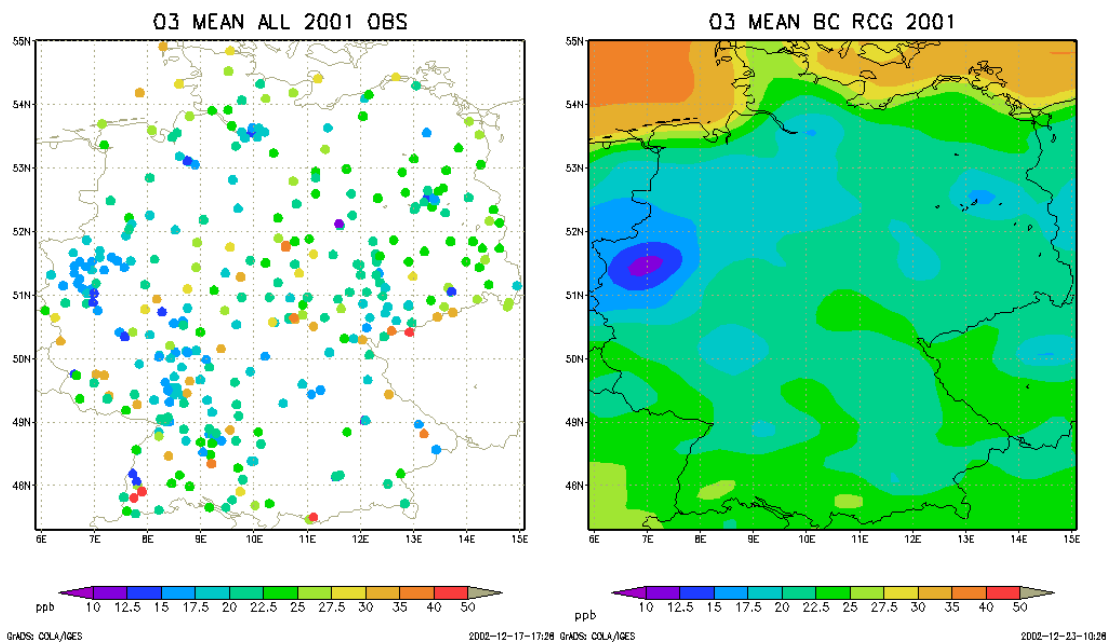


Abbildung 6.7 Jahresmittelwert 2001 der Ozonkonzentration in ppb aus der Beobachtung (links) und der Modellrechnung (rechts).

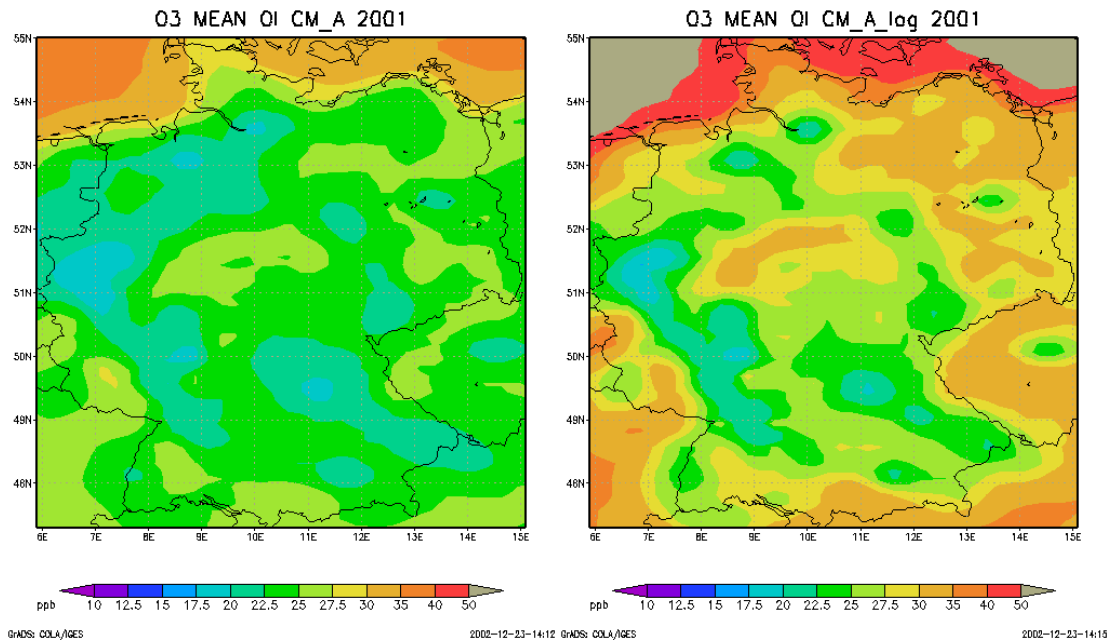


Abbildung 6.8 Jahresmittelwert der Ozonkonzentration 2001 in ppb aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung auf der Basis von stündlichen Analysen mit dem homogenen Kovarianzmodell A (links) und für die Analyse mit der log-transformierten Größe (rechts).

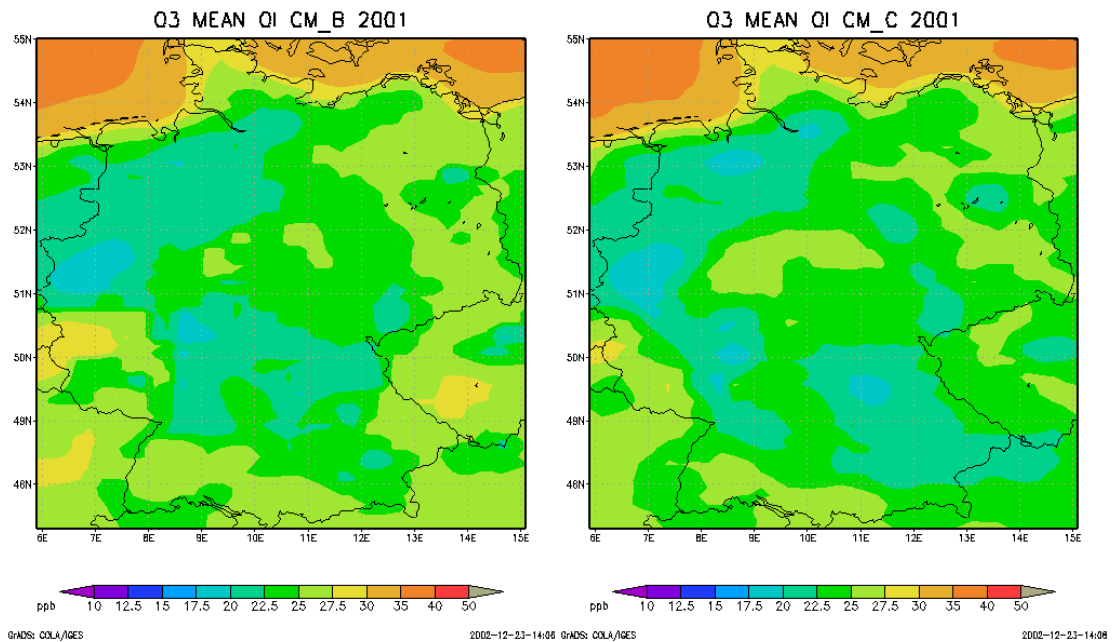


Abbildung 6.9 Jahresmittelwert der Ozonkonzentration 2001 in ppb aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung auf der Basis von stündlichen Analysen mit den inhomogenen klimatischen Kovarianzmodellen B (links) und C (rechts).

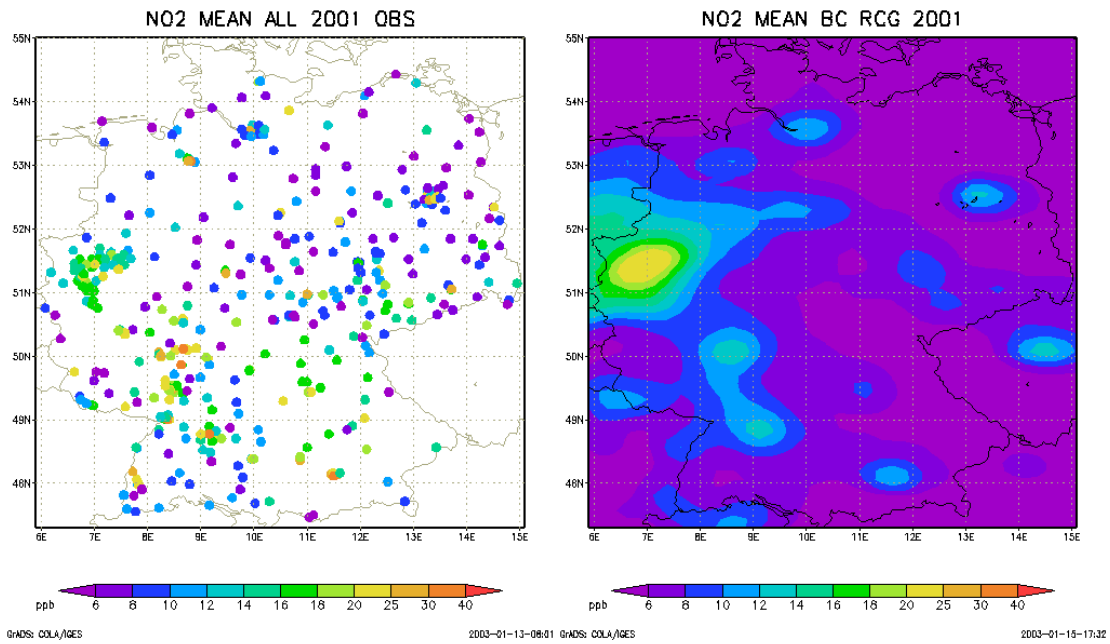


Abbildung 6.10 Jahresmittelwert 2001 der NO₂-Konzentration in ppb aus der Beobachtung (links) und der Modellrechnung (rechts).

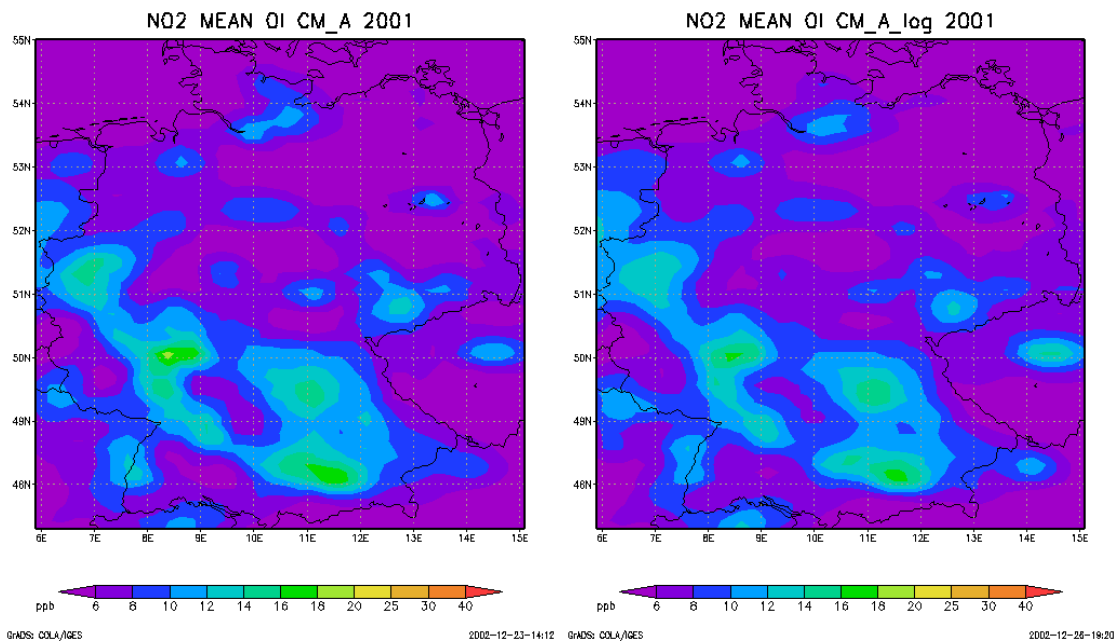


Abbildung 6.11 Jahresmittelwert der NO₂-Konzentration 2001 in ppb aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung auf der Basis von stündlichen Analysen mit dem homogenen Kovarianzmodell A (links) und für die Analyse mit der log-transformierten Größe (rechts).

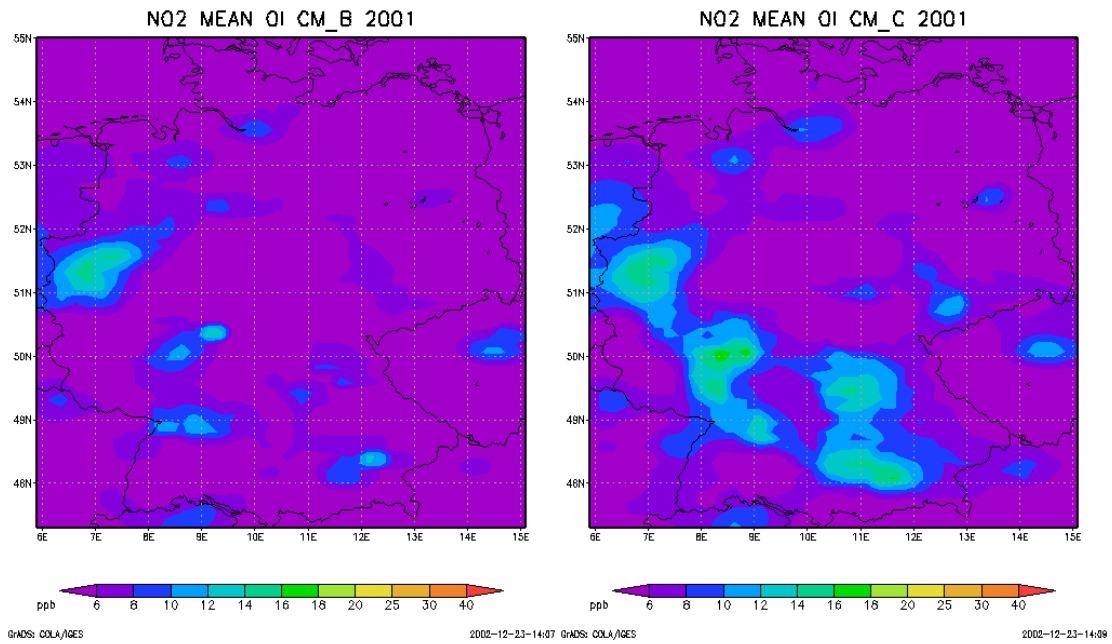


Abbildung 6.12 Jahresmittelwert der NO_2 -Konzentration 2001 in ppb aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung auf der Basis von stündlichen Analysen mit den inhomogenen klimatischen Kovarianzmodellen B (links) und C (rechts).

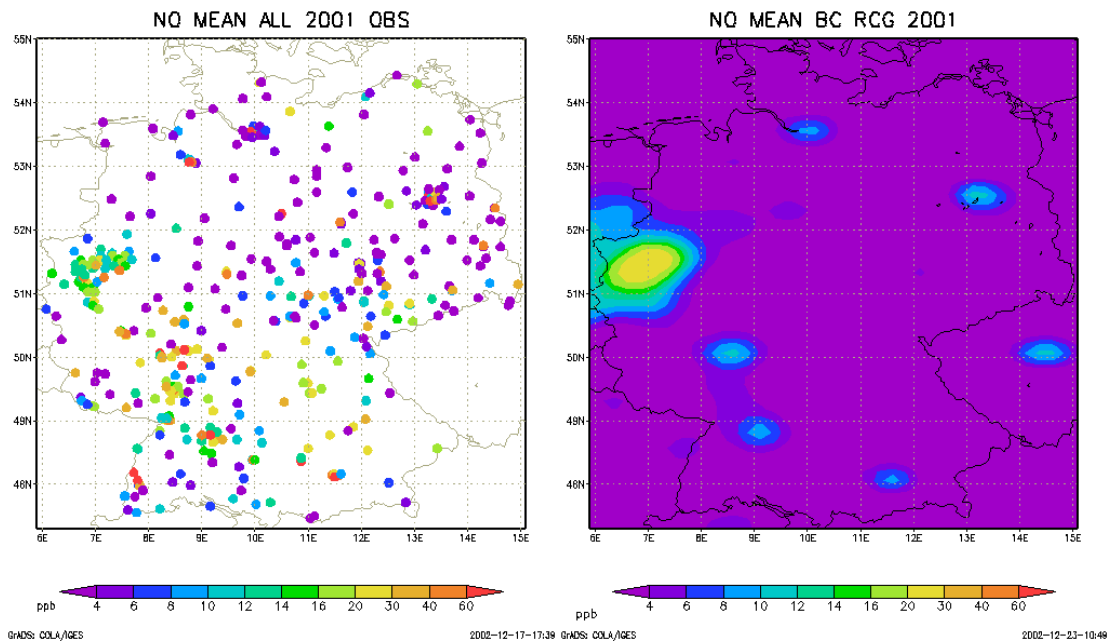


Abbildung 6.13 Jahresmittelwert 2001 der NO -Konzentration in ppb aus der Beobachtung (links) und der Modellrechnung (rechts).

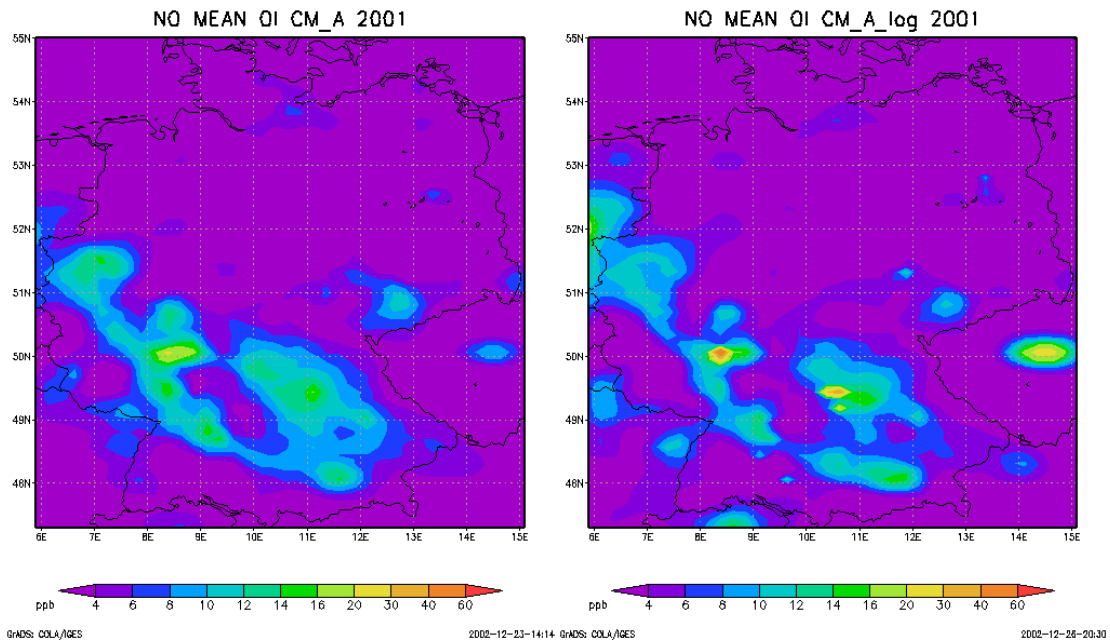


Abbildung 6.14 Jahresmittelwert der NO-Konzentration 2001 in ppb aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung auf der Basis von stündlichen Analysen mit dem homogenen Kovarianzmodell A (links) und für die Analyse mit der log-transformierten Größe (rechts).

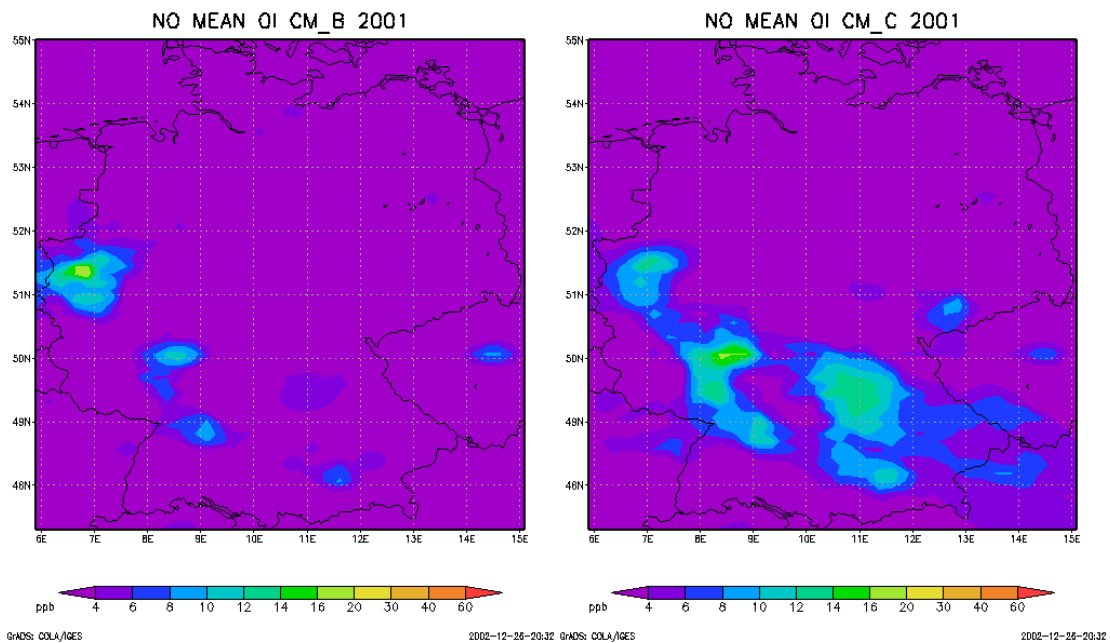


Abbildung 6.15 Jahresmittelwert der NO-Konzentration 2001 in ppb aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung auf der Basis von stündlichen Analysen mit den inhomogenen klimatischen Kovarianzmodellen B (links) und C (rechts).

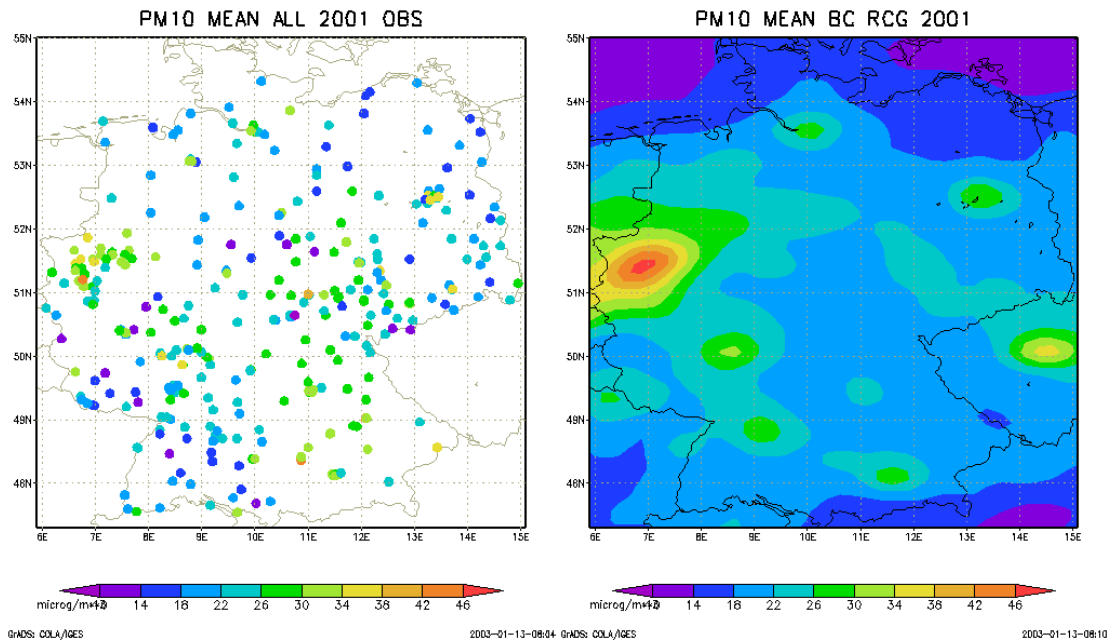


Abbildung 6.16 Jahresmittelwert 2001 der PM10-Konzentration in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ aus der Beobachtung (links) und der Modellrechnung (rechts).

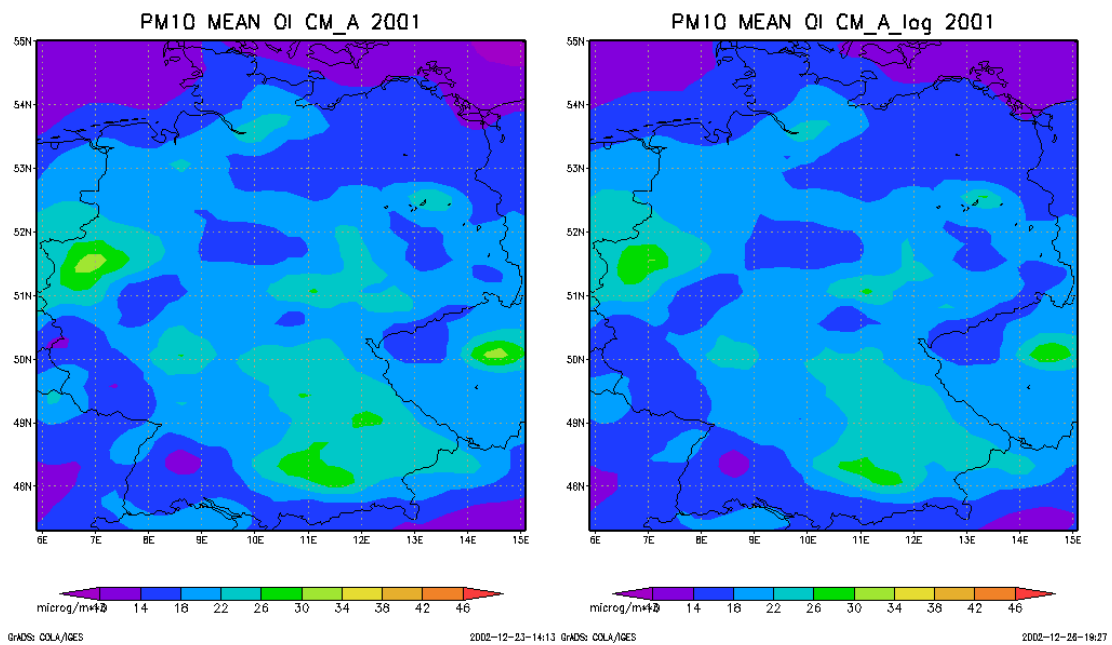


Abbildung 6.17 Jahresmittelwert der PM10-Konzentration 2001 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung auf der Basis von stündlichen Analysen mit dem homogenen Kovarianzmodell A (links) und für die Analyse mit der log-transformierten Größe (rechts).

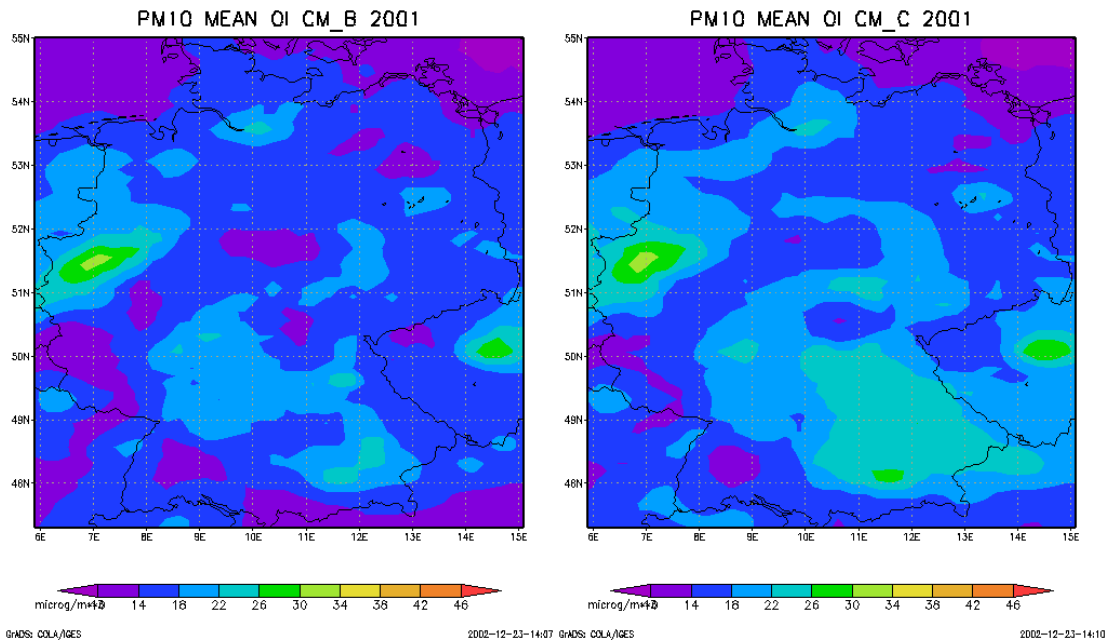


Abbildung 6.18 Jahresmittelwert der PM10-Konzentration 2001 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung auf der Basis von stündlichen Analysen mit den inhomogenen klimatischen Kovarianzmodellen B (links) und C (rechts).

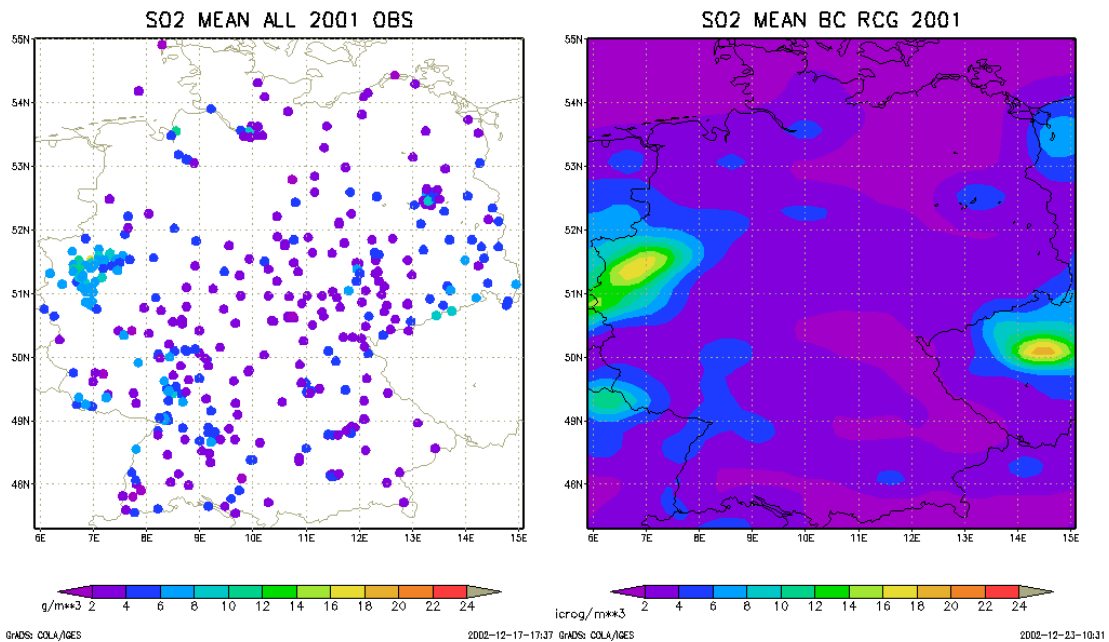


Abbildung 6.19 Jahresmittelwert 2001 der SO_2 -Konzentration in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ aus der Beobachtung (links) und der Modellrechnung (rechts).

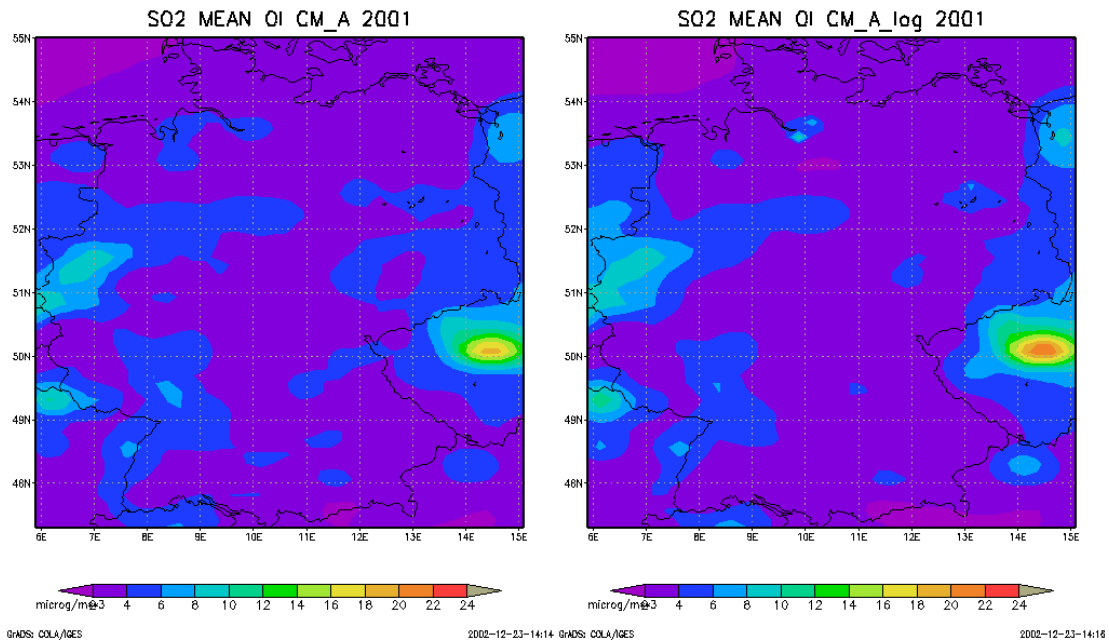


Abbildung 6.20 Jahresmittelwert der SO₂-Konzentration 2001 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung auf der Basis von stündlichen Analysen mit dem homogenen Kovarianzmodell A (links) und für die Analyse mit der log-transformierten Größe (rechts).

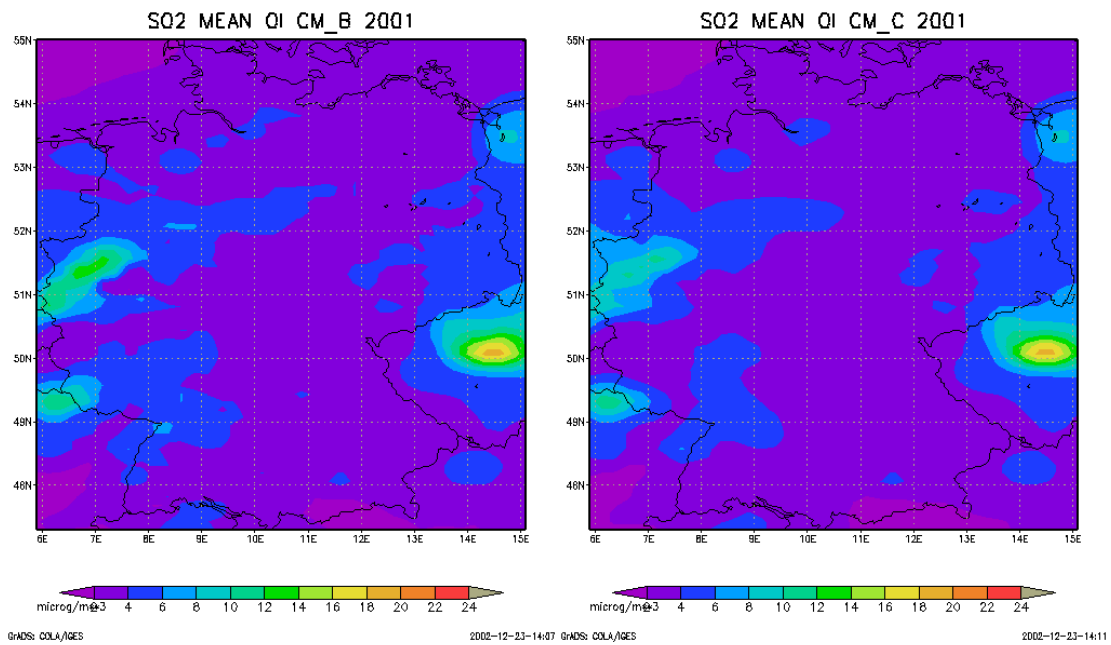


Abbildung 6.21 Jahresmittelwert der SO₂-Konzentration 2001 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ aus der Kombination von Beobachtung und Modellrechnung auf der Basis von stündlichen Analysen mit den inhomogenen klimatischen Kovarianzmodellen B (links) und C (rechts).

6.4 Aktive Datenassimilation mit Optimaler Interpolation

Die Felder der Jahresmittelwerte gleichen in hohem Maße den Feldern der passiven Variante mit dem ebenfalls verwendeten Kovarianzmodell A. Offensichtlich kann durch das aktive Vorgehen keine zusätzliche Veränderung oder Verbesserung der Analysequalität erzielt werden.

Bei der aktiven Datenassimilation beeinflussen die vorherigen Analysen das Backgroundfeld für die Analyse zum gegebenen Zeitpunkt. Die Frage nach der Stärke des Einflusses ist die nach dem „Gedächtnis“ des Modells. Das Gedächtnis des Modells drückt sich in der Wichtigkeit von Anfangsbedingungen für den entsprechenden Modellzeitschritt aus. Während bei der numerischen Wettervorhersage die Initialfelder von enormer Bedeutung für die Prognose von bis zu mehreren Tagen sind, ist das Gedächtnis der Chemie-Transport-Modelle nur sehr gering, insbesondere wenn nur die Bodenschicht des Modells verändert wird (Flemming, 1996). Dies liegt an den starken Quellen und Senken, und dabei vorrangig an der ständigen Wirkung der Emission. Abbildung 6.22 zeigt beispielhaft den Jahresmittelwert für Ozon und NO₂ des Backgroundfeldes, d. h. der Felder einer Stunde nach der Analyse. Diese gleichen in der Struktur eher den entsprechenden Modellfeldern im passiven Fall als den abgeleiteten Analysen. Hinsichtlich der Beobachtungen stellen sie jedoch bereits eine Verbesserung dar. Die Verbesserung des Backgrounds hat zunächst nur eine Erhöhung des Signal-Rasch-Verhältnisses (siehe Kapitel 5.3.3.2) und damit einen geringeren Einfluss der Beobachtungen bei der Analyse zur Folge. Das Ergebnis ist dann die festgestellte Gleichwertigkeit¹⁶⁹ zwischen dem passiven und aktiven Ansatz. Durch die hohe Stationsdichte und die Beschränkung auf Deutschland kommt ein wesentlicher Vorteil der aktiven Verfahren nur unzureichend zur Geltung: Der Transfer der Messinformation in Gebiete oder Modellvariablen ohne direkte Beobachtung.

Den Vorteilen der aktiven Variante stehen weiterhin praktische Nachteile bei dieser Implementierung gegenüber: die mangelnde Biaskorrektur (siehe Kapitel 6.1.2) und die kompliziertere Transformation der PM₁₀-Beobachtung auf das Modellfeld.

Auch wenn für die Felddarstellung keine Verbesserung durch den aktiven Ansatz entstanden ist, kann die Erzeugung von korrekteren Randbedingungen für kleinräumige Rechnungen eine lohnende Anwendung darstellen.

¹⁶⁹ Eine optimistische Argumentation kann davon ausgehen, dass der passive Ansatz bereits ein Optimum darstellt und keine Verbesserung mehr möglich ist.

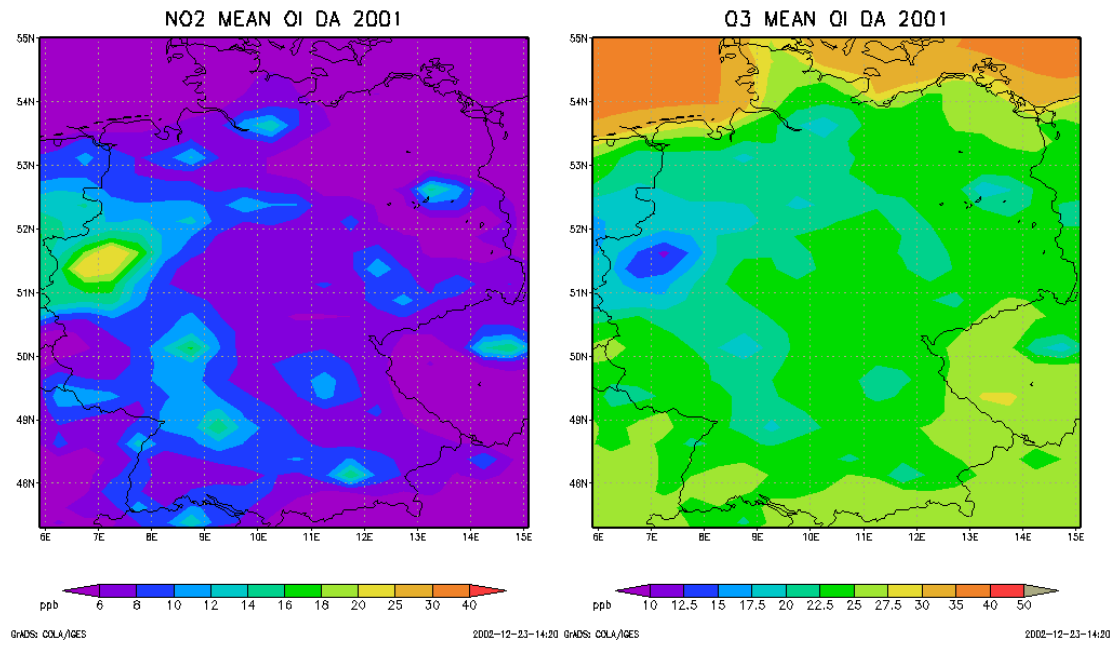


Abbildung 6.22 Jahresmittelwert der NO₂(links) und Ozon-Konzentration (rechts) aus der aktiven Assimilation mit OI, Mittelbildung mit den Feldern eine Stunde nach der Analyse.