

Abschlußbericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben
298 41 252 auf dem Gebiet des Umweltschutzes „Modellie-
rung und Prüfung von Strategien zur Verminderung der Belas-
tung durch Ozon“

Anwendung von Optimaler Interpolation und Kalman-Filtertechniken für Ausbreitungsrechnungen mit dem chemischen Transportmodell REM/CALGRID

-Grundlagen-

Johannes Flemming



Freie Universität Berlin
Institut für Meteorologie
Troposphärische Umweltforschung

Carl-Heinrich-Becker-Weg 6-10
12165 Berlin

Februar 2003

Berichts-Kennblatt

BerichtsnummerUBA-FB	2.	3.
4. Titel des Berichts Anwendung von Optimaler Interpolation und Kalman-Filtertechniken für die Ausbreitungsrechnungen mit dem chemischen Transportmodell REM/CALGRID		
5. Autor(en), Name(n), Vorname(n) Flemming, Johannes	8. Abschlußdatum Februar 2003	
	9. Veröffentlichungsdatum	
6. 5. Autor(en), Name(n), Vorname(n)	UFOPLAN-Nr. 298 41 252	
	11. Seitenzahl 104	
	12. Literaturangaben 110	
7. Fördernde Institution (Name, Anschrift) Umweltbundesamt, Postfach 33 00 22, D-14191 Berlin	13. Tabellen und Diagramme 2	
	14. Abbildungen 45	
15. Zusätzliche Angaben		
16. Kurzfassung <p>Methoden zur Vereinigung Beobachtungen und Modellrechnungen werden unter dem Stichwort Datenassimilation zusammengefasst. Der Bericht befasst sich mit den Grundlagen und der Methodenentwicklung zur Datenassimilation von den operationellen Immissionsmessungen in das Chemie-Transport-Modell REM/Calgrid. Der hauptsächliche Nutzen der Datenassimilation ist es, die räumlich beschränkte Information der Beobachtungen durch Modellinformationen zu erweitern. Damit werden Immissionsfelder für die Luftgütebewertung bereitgestellt, die sich aus Beobachtungen und Modellierungsergebnissen zusammensetzen.</p> <p>Die Optimale Interpolation und Kalman Filter sind Verfahren der Datenassimilation die auf der Theorie räumlicher Zufallsprozesse basieren. Es wird ein Instrumentarium entwickelt, um diese Methoden auf die Besonderheiten der Immissionsmessungen anwenden zu können. Die Immissionsmessungen zeichnen sich durch starke lokale Unterschiede, eine sehr unregelmäßige Stationsanordnung und durch nicht normalverteilte Häufigkeitsverteilungen aus. Der Bericht umfasst eine Einführung und eine umfangreichen Literaturüberblick über die Datenassimilation und Kartierung von Immissionsdaten. Es werden drei verschiedene Kovarianzmodelle für die Optimale Interpolation zur Beschreibung der räumlich und zeitlich variablen räumlichen Kovarianzstruktur der Felder von Ozon, NO₂, NO, SO₂ und PM10 entwickelt. Dabei werden insbesondere die im Rahmen dieses Projektes abgeleiteten Immissionsregimes berücksichtigt. Die empirisch geschätzten Kovarianzmodelle werden mit den dynamischen modellierten Kovarianzmodellen eines Kalman Filter Laufs verglichen. In einem weiteren Schritt wird die räumliche Repräsentativität der einzelnen Messstationen pro Spezies durch den Vergleich mit umliegenden Messungen ermittelt. Das Maß für die Repräsentativität ist der räumlich unkorrelierte Beobachtungsfehler für alle Immissionsregimes, der in seinem Tagesgang quantifiziert wird. Abschließend werden verschiedene Implementation der Optimalen Interpolation mit Hilfe eines cross validation Ansatzes getestet und mit Kalman Filter Lauf verglichen.</p>		
17. Schlagwörter Datenassimilation, Chemie Transport Modellierung, Optimale Interpolation, Kalman Filter, Kovarianzmodellierung, räumliche Statistik		
18. Preis	19.	20.

Report Cover Sheet

Report No.UBA-FB	2.	3.
4. Report Title Use of optimum interpolation and Kalman Filter for calculations with the chemical transport model REM/CALGRID		
5. Autor(s), Family Name(s), First Name(s) Flemming. Johannes		8. Report Date February 2003
6. Performing Organisation (Name, Address) Institut für Meteorologie Freie Universität Berlin Carl-Heinrich-Becker Weg 6-10 12165 Berlin		9. Publication Date
7. Sponsoring Agency (Name, Address) Umweltbundesamt, Postfach 33 00 22, D-14191 Berlin		10. UFOPLAN-Ref. No. 298 41 252
		11. No. of Pages 104
		12. No. of Reference 110
		13. No. of Tables, Diagrams 2
		14. No. of Figures 125
15. Supplementary Notes		
16. Abstract <p>Operational observations and model calculations supply information about the air quality status. Methods for the combination of these information sources are summarised under the keyword data assimilation. The report covers fundamentals and methodological development for the assimilation of the operational air quality measurements into the chemistry transportation model REM/Calgrid. The results are concentration fields consisting of both observations and modelling results, which can be used in air quality assessment.</p> <p>The optimum interpolation and Kalman filter are techniques of data assimilation and are based on the theory of spatial stochastic processes. An equipment is developed in order to adapt these methods to the heterogeneous characteristics of the air quality measurements.</p> <p>The report starts with an introduction and an extensive literature survey over data assimilation and mapping of air quality data. Three different covariance models for the optimum interpolation are developed in order to describe the heterogeneous and temporally variable spatially covariance structure of ozone, NO₂, NO, SO₂ and PM₁₀. Thereby, different air quality regimes are considered. The empirically estimated covariance models were compared with the dynamic modelled covariance models of a Kalman filter run. In a further step the spatial representativeness of individual measuring stations is determined by the comparison with surrounding measurements. Finally, different implementation of the optimum interpolation are compared with the help of a cross validation and with a Kalman filter run.</p>		
17. Keywords Data assimilation, chemistry transport modelling, optimum interpolation, Kalman filter, covariance modelling, spatial statistics		
18. Price	19.	20.

**Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 298 41 252
auf dem Gebiet des Umweltschutzes
„Modellierung und Prüfung von Strategien zur
Verminderung der Belastung durch Ozon“**

Abschlußbericht:

**Anwendung von Optimaler Interpolation und Kal-
man-Filtertechniken für Ausbreitungsrechnungen mit
dem chemischen Transportmodell REM/CALGRID
- Grundlagen -**

für:

Umweltbundesamt

II 6.1

Postfach 33 00 22

14191 Berlin

Johannes Flemming

**Institut für Meteorologie
Freie Universität Berlin**

Februar 2003

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	3
2	Methodik der Analyse und Datenassimilation.....	4
2.1	Problemstellung	4
2.2	Zielstellung	6
2.3	Literaturüberblick	6
2.3.1	Anwendungsgebiete.....	7
2.3.2	Interpolation von Messwerten	7
2.3.3	Datenassimilation	10
2.4	Räumliche Zufallsprozesse.....	14
2.4.1	Beschreibung räumlicher Zufallsprozesse.....	15
2.4.2	Raum-Zeit-Prozesse.....	19
2.5	Theorie der statistischen Analyse und Datenassimilation	22
2.5.1	Grundprinzip.....	22
2.5.2	Definition der Fehlermaße.....	23
2.5.3	Beobachtungsoperator	25
2.5.4	Analyse durch Varianzminimierung – Optimale Interpolation	26
2.5.5	Vereinfachung und Diskussion der Analysegleichungen	27
2.5.6	Variationsansätze.....	29
2.5.7	Kalman-Filter.....	30
2.5.8	RRSQRT-Ansatz für Kalman-Filter.....	32
3	Kovarianzmodellierung der Immissionsfelder	35
3.1	Kovarianzmodelle für räumliche Prozesse	35
3.1.1	Besonderheiten der Kovarianzmodellierung von Immissionsdaten	38
3.1.2	Datenbasis für die empirischen Kovarianzmodelle	42
3.1.3	Drei Kovarianzmodelle (A, B und C) für Immissionsdaten.....	43
3.2	Die Schätzung der empirischen Kovarianzmodelle.....	44
3.2.1	Schätzung homogener terminbezogener Kovarianzwerte	44
3.2.2	Schätzung klimatischer Kovarianzwerte	46
3.2.3	Analytische Form des parametrischen Kovarianzmodells	49
3.2.4	Approximation des parametrischen Kovarianzmodells.....	51
3.2.5	Nichtparametrisches inhomogenes Kovarianzmodell aus EOFs	52
3.2.6	Schätzung der Beobachtungsfehlervarianz.....	55
3.3	Diskussion der Ergebnisse der Kovarianzmodellierung.....	57
3.3.1	Der Beobachtungsfehler	58
3.3.2	Der Bias	63
3.3.3	Die Varianz des „glatten“ Feldes.....	68
3.3.4	Räumliche Strukturen der Kovarianzmodelle A, B und C	71
3.3.5	Alternative dynamische Kovarianzmodelle.....	79
4	Analyse und Datenassimilation der Immissionsfelder	82
4.1	Verschiedene statistische Analyseverfahren der Immission.....	82

4.1.1	Transformation der Variablen	83
4.1.2	Biaskorrektur	83
4.1.3	Beobachtungsfehler und räumliche Kovarianz.....	84
4.1.4	Auflösung, Interpolation von Gitterboxmittelwerten	85
4.1.5	Auswahl der beeinflussenden Stationen.....	85
4.1.6	Iterative Analyse.....	86
4.1.7	Aktive Datenassimilation mit Optimaler Interpolation	86
4.2	Methoden zur Beurteilung der Verfahrensgüte	87
5	Zusammenfassung	88
6	Symbole	91
7	Literaturverzeichnis	95

1 Einführung

Für die Einschätzung umweltpolitischer Fragestellungen ist die genaue Kenntnis der Immissionssituation in verschiedenen räumlichen und zeitlichen Maßstäben unabdingbar. Die Messung und die numerische Simulation atmosphärischer Spurenstoffkonzentrationen ergeben aber immer nur ein unvollständiges Abbild der Wirklichkeit. Die Modellrechnungen sind aufgrund der Unzulänglichkeit der Modelle und der von ihnen benötigten Eingabedaten einschließlich der Rand- und Startwerte fehlerhaft. Modelle können jedoch für verschiedenste Zeiten und Gebiete Immissionsdaten berechnen.

Messungen der Immission sind nur für ausgewählte Orte und für wenige Spezies vorhanden. Sie sind mit einem Messgerätefehler behaftet und ihre räumliche Repräsentativität ist äußerst variabel und schwer spezifizierbar. Messungen liegen nur für bodennahe Konzentrationen von Ozon, Stickoxiden, Schwefeldioxid, Kohlenmonoxid und TSP vor. Die Stationsdichte ist dabei in Mitteleuropa am höchsten. Die Genauigkeit der Messungen ist insbesondere für Stickoxide und Kohlenmonoxid unzureichend. Einzelne operationelle Radiosondenaufstiege vermitteln das vertikale Profil der Ozonkonzentration. Satellitenmessungen (z.B. von GOME¹ auf dem Satelliten ERS-2) der troposphärischen Ozonsäule sind in den letzten Jahren verfügbar geworden. Der guten Flächenabdeckung steht eine große Messunsicherheit (Standardabweichung von 40-50 %) gegenüber (Debruyn, 1998). Daneben sind Feldmesskampagnen (z.B. BERLIOZ) durchgeführt worden, um einen genauen Einblick in die Prozesse und die dreidimensionale Verteilung der atmosphärischen Spurenstoffe zu gewinnen.

Die möglichst realitätsnahe räumliche Darstellung der Spurenstoffkonzentration wird in Anlehnung an die meteorologische Praxis **Analyse**² genannt. Die modernen Analyseverfahren³ führen die Information der einzelnen Beobachtungen mit modellierten Feldern zusammen. Sie sind damit eine (passive) Form der **Datenassimilation**. Die dabei gewonnenen Analysen sind modellbezogen und abhängig von der Modellauflösung.

Bei der passiven Datenassimilation werden Modellfelder und Beobachtungen verbunden, ohne dass die Analyse im Modell weiterverwendet wird. Die passive Datenassimilation dient vorrangig der Kartierung der Immissionsfelder und relevanter Luftgüteparameter.

Man spricht von **aktiver Datenassimilation**, wenn Informationen aus Messungen zu verschiedenen Zeitpunkten im Modelllauf verwendet werden. Durch die Analyse werden die Beobachtungsdaten in skalengerecht in den Modellzustandsvektor eingebracht. Durch die aktive Datenassimilation wird die Information der Beobachtungen im Modell fortgepflanzt. Sie wird dadurch für Gebiete und Modellgrößen nutzbar gemacht, für die keine Beobachtungen vorliegen. Die Modelldynamik bewirkt, dass die entstandene Analyse in physikalisch chemischer Hinsicht konsistenter wird.

¹ Global Ozone Monitoring Experiment

² Unter Analyse versteht man sowohl den Prozess der Erstellung als auch deren Resultat

³ Im Gegensatz zur subjektiven Analyse werden meist statistisch motivierte Kriterien für die Analyse verwendet. Die Erstellung der Analyse erfolgt numerisch

2 Methodik der Analyse und Datenassimilation

2.1 Problemstellung

Die Vorstellung eines kontinuierlichen Feldes der atmosphärischen Eigenschaften ist von zentraler Bedeutung in der Meteorologie. Die dreidimensionale Variabilität wird häufig mit der Vorstellung von zweidimensionalen Feldern in mehreren Höhengniveaus ausgedrückt.

Die Kontinuität des Feldes impliziert eine gewisse „Glattheit“ und damit eine untere Schranke für die räumliche **Skala** (Größenmaßstab) der darstellbaren Phänomene. Der Begriff der Skala ist für die Meteorologie entscheidend, da die Prozesse in verschiedenen Skalen häufig methodisch separiert⁴ werden.

Die Eigenschaften des Feldes werden gewöhnlich nur an ausgewählten Orten mit Messinstrumenten beobachtet. Methoden der räumlichen Interpolation, mit denen aus punktbezogenen Messungen eine Felddarstellung an regelmäßig verteilten Gitterpunkten gewonnen wird, werden in der Meteorologie mit dem Begriff **Analyse** zusammengefasst.

Die gewonnene Felddarstellung wird gleichfalls Analyse genannt. Sie hat eine bestimmte räumliche Auflösung, die die untere Schranke für die kleinste darstellbare Skala vorgibt. Die Wahl der Auflösung sollte demzufolge durch die interessierenden bzw. die erfassbaren Skalen bestimmt sein.

Die **Kartierung**⁵ als Grundlage der Visualisierung von atmosphärischen Feldern ist eine wichtige Motivation für die Analyse. Durch die Felddarstellung können räumliche Beziehungen, wie z. B. das geostrophische Gleichgewicht, erkannt werden. Darüber hinaus kann das erzeugte Feld als Zustandsvektor eines dynamischen Modells verwendet werden. Die Analyse ist damit eine Methode, um Beobachtungswerte in Modellrechnungen einfließen zu lassen. Die Analyse ist ein Kernpunkt in allen Verfahren der **Datenassimilation**. Die Modellauflösung stellt hierbei die Begrenzung für die erfassbaren Skalen dar, die sich von denen der Beobachtungen in vielen Fällen unterscheidet. Die Separation der für Analyse und Beobachtungen relevanten Skalen ist ein wichtiger Punkt bei allen Analyseverfahren.

In den letzten 40 Jahren ist in der numerischen Wettervorhersage ein umfangreiches Instrumentarium von Analyse- und Datenassimilationsmethoden entwickelt worden⁶.

⁴ Durch die Nichtlinearität der zugrundeliegenden physikalischen und chemischen Gleichungen beeinflussen die Prozesse der nicht erfassten Skalen die größerskaligen Phänomene. Dies führt zum Schließungsproblem, d. h. zur Parametrisierung des Einflusses der nichtaufgelösten Skalen auf der Basis der aufgelösten Skalen.

⁵ Auch bei der Kartierung ist die räumliche Auflösung von Bedeutung; insbesondere für den Algorithmus zur Isolinienfindung.

⁶ Ein Standardwerk zu dieser Thematik ist das Buch von Daley (1991).

Die modernen Verfahren beruhen auf der Theorie der Prognose⁷ von **stochastischen Prozessen**, die unter dem Begriff Optimale Interpolation von Gandin (1965) in die Meteorologie eingeführt wurden. Parallel dazu ist der statistische Zugang für die räumliche Interpolation unter dem Begriff Kriging⁸ in der Geostatistik ausgearbeitet worden. Immissionsdaten werden häufig mit dem Kriging-Ansatz interpoliert.

Die statistischen Methoden haben sich bewährt, da sie ein Instrumentarium bieten, um die räumlichen Beziehungen zu quantifizieren. Die statistisch geschätzte räumliche Kovarianzfunktion ist die Grundlage für die Bestimmung des Einflusses der Beobachtungen bei der räumlichen Interpolation. Gleichzeitig kann ein möglicher Beobachtungsfehler berücksichtigt werden, der sowohl Ausdruck des Messgerätefehlers als auch des Fehlers durch mangelnde Repräsentativität ist. Letzterer ist die Folge mangelnder Übereinstimmung zwischen den erfassten Skalen von Beobachtung und Analyse. Die statistischen Ansätze beinhalten die Möglichkeit zur Bestimmung von Vertrauensbereichen der interpolierten Werte. Damit kann die Güte der Analyse bewertet und in einem weiteren Schritt die Messnetzanordnung optimiert werden. Der erste Punkt ist für die Aufgabenstellung dieses Forschungsvorhabens von besonderem Interesse, da die Felddarstellungen zur Ableitung von administrativen Luftgütestandards dienen können.

Die Anwendung der modernen Methoden der Analyse und der Datenassimilation für die numerische Wettervorhersage beruht meist auf der Annahme von homogenen statistischen Eigenschaften der Felder und Beobachtungen. Diese Annahmen sind für bodennahe Immissionsfelder häufig nicht gerechtfertigt. Im Folgenden sind Eigenschaften der Immissionsfelder und ihrer Messung aufgelistet, die bei der Anwendung von statistischen Analyseverfahren zu berücksichtigen sind:

1. Die bodennahen Immissionsfelder sind aufgrund der Emissionsverteilung räumlich sehr inhomogen.
2. Die Messstationen liegen gehäuft in den belasteten Gebieten und dienen hauptsächlich dazu, kleinräumige Spitzenkonzentrationen und nicht ein möglichst großes Gebiet zu erfassen.
3. Die räumliche Repräsentativität und die Güte der Messung sind nur in geringem Maße bekannt.
4. Die Häufigkeitsverteilungen der semi-positiv definiten⁹ Immissionswerte sind unsymmetrisch und können mehrere Größenordnungen umfassen.
5. Immissionsdaten zeichnen sich durch eine hohe zeitliche Variabilität aus.
6. Es existieren keine räumlichen Balancebeziehungen¹⁰, dafür aber lokale chemische Kopplungen¹¹.
7. Die Güte der Chemie-Transport-Modelle liegt hinsichtlich der relevanten Variablen unter denen der numerischen Wettervorhersage¹².

⁷ In Anlehnung an die Statistik von Zeitreihen wird häufig von Prädiktion bei der räumlichen Interpolation gesprochen.

⁸ Benannt nach einem südafrikanischen Bergbauingenieur D.G. Krige, der das Verfahren zur Interpolation von Probebohrungen entwickelte.

⁹ Stets größer gleich Null

¹⁰ wie z. B. der geostrophische Wind

¹¹ z. B. das fotostationäre Gleichgewicht zwischen Ozon, NO und NO₂

¹² Da CTM häufig mit modellierten Daten der Wettervorhersage angetrieben werden, ist diese Aussage trivial. Hier ist jedoch gemeint, dass die Fehlermaße für Ozon etc. weit größer sind als die der Temperatur- oder Windprognose.

2.2 Zielstellung

Das Ziel dieses Forschungsvorhabens ist die Entwicklung, Anwendung und der Vergleich von Verfahren zur statistischen Analyse von bodennahen Immissionsmessungen. Damit sollen Felder von stündlichen Werten von Ozon, NO₂, NO, SO₂ und PM₁₀ für Deutschland bzw. Mitteleuropa erzeugt werden. Die räumliche Auflösung der Analysen beträgt dabei ca. 15 km. Eine Darstellung der Strukturen der urbanen Skala wird damit nicht angestrebt.

Die aufgeführten Stoffe unterscheiden sich hinsichtlich der räumlichen Variabilität aufgrund der Struktur ihrer Quellen und ihrer atmosphärischen Lebensdauer. Aus Gründen der Vereinfachung und der Vergleichbarkeit wird jedoch versucht, eine möglichst einheitliche Methodik für alle Stoffe zu entwickeln.

Der methodische Ansatz der Analyse ist vorrangig die passive Datenassimilation, d. h. die Kombination der Beobachtungen mit den Modellfeldern des Eulerschen Ausbreitungsmodells REM/Calgrid (Stern, 2003a; Stern, 1994). In Anbetracht der gestellten Aufgabe, stündliche Immissionsfelder für mehrere Jahre zu gewinnen, wird auf die Anwendung der numerisch aufwendigen aktiven 4-dimensionalen Datenassimilationsverfahren verzichtet. Es wird ein auf der Optimalen Interpolation beruhendes passives Analyseverfahren¹³ entwickelt, dass die in Kapitel 2.1 aufgeführten Besonderheiten der Immissionsdaten berücksichtigt. Zu Vergleichszwecken wird jedoch eine aktive Assimilation auf der Basis der Optimalen Interpolation und die Anwendung eines Kalman-Filter diskutiert. Bei der aktiven Datenassimilation ersetzt die Analyse die Modellfelder und bewirkt damit eine Assimilation der Beobachtungen während des Modellaufes.

In dem Bericht wird den räumlich statistischen Eigenschaften der Beobachtung und ihrer Fehler besondere Aufmerksamkeit geschenkt. Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind auch für alle weiteren Datenassimilationsverfahren von Bedeutung. Für das Analyseverfahren werden terminbezogene und klimatische Kovarianzmodelle der Beobachtungsinkremente bzw. Modellfehler abgeleitet. Die terminbezogenen Kovarianzmodelle erlauben eine bessere Wiedergabe der zeitlichen Variabilität; klimatische Kovarianzmodelle sind besser geeignet, die räumliche Inhomogenität abzubilden.

Darüber hinaus werden ausschließlich auf Beobachtungen oder auf Modelldaten beruhende räumliche Kovarianzmodelle gewonnen. Diese können für die Evaluierung von Modellen verwendet werden, die über den Vergleich der ortsbezogenen statistischen Maße, wie Mittelwert und Varianz, hinausgeht.

2.3 Literaturüberblick

Die für dieses Forschungsvorhaben relevante Literatur lässt sich in zwei Gruppen einteilen. Es sind zum einen Arbeiten, die die Interpolation von Immissionsbeobachtungen für deren Kartierung zum Thema haben (Kapitel 2.3.2). Zum anderen werden Arbeiten zur Datenassimilation von vorrangig bodennahen Messungen mit Eulerschen Chemie-Transportmodellen (Kapitel 2.3.3) vorgestellt. Zu Beginn wird ein kurzer Überblick über praktische Anwendung gegeben (Kapitel 2.3.1), da der gegebene Über-

¹³ Da die Analyse immer ein wesentlicher Bestandteil der 4D-Datenassimilation ist, können die dabei gewonnenen Erkenntnisse zur Verbesserung der Assimilation von Spurenstoffkonzentrationen verwendet werden.

blick vorrangig durch die Methodik motiviert ist. Es liegt in der Natur der Sache, dass die vorgestellte Auswahl unvollständig und subjektiv ist.

2.3.1 Anwendungsgebiete

Die meisten Verfahren der Immissionskartierung dienen der räumlichen Darstellung der Luftqualität. Sie beziehen sich auf die wirkungsspezifischen Eigenschaften, d. h. auf abgeleitete klimatische Felder¹⁴, mit denen Luftreinhalteziele formuliert werden. Es sind dies Jahresmittelwerte, Maximalwerte oder dosisbezogene Größen wie AOT40¹⁵-Werte. Die Darstellung orientiert sich dabei vorrangig an der Überschreitung von umweltpolitisch vorgegebenen Grenzwerten oder ökologischen Toleranzbereichen. Neben der Kartierung sind Untersuchungen zur optimalen Messnetzgestaltung ein weiteres Anwendungsgebiet der Geostatistik. Es beruht auf der Untersuchung der Interpolationsfehler für verschiedene Messnetzkonfigurationen (Nychka und Saltzman, 1998 und Shindo et al., 1990).

Ein weiteres Anwendungsfeld der Immissionskartierung ist die Evaluierung von Chemie-Transport-Modellen. Aufgrund des Skalenunterschiedes der Beobachtungen hinsichtlich der Gitterboxmittelwerte des Modells erscheint ein direkter Vergleich von Rechnung und Messung problematisch (McNair et al., 1996). Dies gilt besonders dann, wenn die räumliche Repräsentativität der Messung gering oder unbekannt ist. Ein möglicher Lösungsansatz ist, die Modellergebnisse mit einer aus den Beobachtungen interpolierten Felddarstellung zu vergleichen. Die Felddarstellung muss dabei der Auflösung bzw. Skala des Modells entsprechen. Beispiele für dieses Vorgehen bei der Evaluierung sind die Arbeiten von Schaug et al. (1993), Davis et al. (2000) und Fleming et al. (2001).

Aufgrund der hohen Komplexität wird die Datenassimilation für Chemie-Transport-Modelle meist nur in Prozess- und Modellstudien mit Episodencharakter angewendet. Neben den bodennahen Immissionsmessungen liegt der Schwerpunkt auf der Assimilation von Satellitendaten für großräumige Modellrechnungen (Jeuken et al., 1999). Die Initialisierung von operationellen Immissionsprognosen mit gemessenen Ozonkonzentrationen ist ein Beispiel für die Anwendungen von einfachen Assimilationstechniken (Fleming, 1996). In einem weiteren Zusammenhang stehen Methoden der inversen Modellierung, bei denen aus Beobachtungsdaten Emissionswerte abgeleitet werden.

2.3.2 Interpolation von Messwerten

Das Standardwerk für Fragen der räumlichen Statistik, mit Beispielen für Immissionsdaten, ist Cressie (1993). Darauf aufbauend werden neue inhomogene Ansätze von Smith (2001) behandelt.

Die Auswahl der nun vorgestellten Arbeiten orientiert sich vorrangig an der Methodik, mit der Lösungsansätze für die in Kapitel 2.1 erwähnten Probleme angeboten werden. Homogenere Felder wie die von Ozon sind mit geringeren Schwierigkeiten zu interpolieren als die stark strukturierten Felder von NO oder Feinstaub (PM₁₀).

¹⁴ Für die Datenassimilation mit einem dynamischen Modell, aber auch für die Sommersmogproblematik werden Analyseverfahren für aktuelle Immissionsfelder benötigt.

¹⁵ Akkumulierte Dosis über 40 pbb Belastung.

Obwohl Beobachtungsfehler und die ungleichmäßige Stationsdichte nicht ohne weiteres behandelt werden können, sind für die Interpolation der Messwerte formale nichtstochastische Methoden geläufig, da sie die aufwendige Schätzung der Kovarianzfunktion und der Beobachtungsfehler vermeiden (Wiegand und Dickmann, 2000). Die direkte Berücksichtigung¹⁶ der Stationsdichte muss bei diesen Ansätzen (siehe 2.5.5) zusätzlich eingeführt werden. Falke und Husar (1998) liefert hierfür ein Beispiel bei der Interpolation von Ozonmessungen.

2.3.2.1 Homogene statistische Ansätze

Zier (1976) entwickelte ein verteilungsunabhängiges Interpolationsverfahren auf der Basis von Quantilkorrelationsmaßen für die Staubbelastung in der DDR. Das Interpolationsergebnis ist kein absoluter Wert, sondern die Wahrscheinlichkeit, dass der Wert in einem bestimmten Werteintervall liegt¹⁷.

Eine grundlegende Anwendung der statistischen Interpolation stündlicher Werte von SO₂ und zusätzlich für NO₂, NO sowie Ozon in den Niederlanden geben van Egmond und Onderdelinden (1981). Die erstellte Analyse hat dabei eine Auflösung von 40 bzw. 28 km. Die Autoren vergleichen drei Interpolationsmethoden mit 1) einem exponentiellen Korrelationsmodell (Optimale Interpolation, OI), 2) einem nichtparametrischen Ansatz (Eigenvektorinterpolation, siehe Kapitel 3.2.5.2) und 3) mit formaler Abstandwichtung. Dabei wird eine leichte Überlegenheit der ersten beiden statistischen Ansätze festgestellt. Die notwendigen empirischen Korrelationswerte werden sowohl terminbezogen (rein räumlich, siehe Kapitel 3.2.1) als auch klimatisch (aus Zeitreihen, siehe Kapitel 3.2.2) ermittelt. Aufgrund mangelnder zeitlicher Filterung ergeben sich dabei größere Unterschiede, die für die Bewertung der relativen Analysefehler und Beobachtungsfehler von Bedeutung sind. Die Beobachtungsfehlervarianz wird für SO₂ auf ca. 5-10 % der terminbezogenen Varianz geschätzt.

Cressie et al. (1999) liefern ein Beispiel für die räumliche Interpolation von PM10 in der urbanen Skala. In dieser Arbeit wird Standard-Kriging für logarithmisch normalverteilte Daten mit einem modernen Markov-Zufallsfeld-Ansatz mit Hilfe von cross validation¹⁸ verglichen. Letzteres Verfahren liefert Felder mit stärkeren Gradienten, berücksichtigt jedoch nicht die Wirkung von Beobachtungsfehlern. Weiterhin treten Probleme bei ungleichmäßiger Stationsverteilung auf

2.3.2.2 Raum-Zeit-Zusammenhänge

Die Gesamtheit der Raum-Zeit Variabilität erfasst Bilonick (1985 und 1988) mit der Modellierung von verbundenen Raum-Zeit Kovariogrammen zur Kartierung der monatlichen sauren Deposition in den USA. Weiterentwicklungen der Kriging-Technik werden zur Bildung von Flächenmitteln (Block Kriging) und lokalen Histogrammen (Indikator Kriging) angewandt. Der letzte Ansatz ist eine Form der nichtlinearen statis-

¹⁶ Dies gilt für die Interpolation und nicht für die Kovarianzmodellierung.

¹⁷ Das Verfahren ähnelt sehr dem sogenannten Indikator-Kriging (siehe Kapitel 2.4.1.3).

¹⁸ Die Interpolation für den Stationsort wird mit dem dabei nicht verwendeten Messwert verglichen.

tischen Interpolation, bei der die Interpolationsgewichte vom Messwert selbst abhängen¹⁹.

Die Spezifikation der zeitlich periodischen Erwartungswerte ist die Grundlage für die Interpolation von Ozon-AOT40-Werten in Norwegen (Host und Follestad (1999)). Die vom Jahres- und Tagesgang befreiten Abweichungen bilden die Grundlage für die Schätzung der Kovarianzstruktur. Für die Gewinnung normalverteilter Ensembles werden die logarithmierten Ozonmessungen betrachtet.

2.3.2.3 Inhomogene Kovarianzmodellierung

Seit Beginn der 90er Jahre sind in der Geostatistik verstärkt Ansätze zur Behandlung inhomogener und anisotroper Zufallsfelder entwickelt worden (Meiring et al., 1997), die auch für Luftverschmutzungsprobleme angewendet werden. Smith (2001) gibt eine gute Darstellung und Diskussion dieser Entwicklungen. Es kann zwischen den folgenden Ansätzen²⁰ der Kovarianzmodellierung unterschieden werden:

- Moving-Window-Ansatz
- Deformationsansatz
- EOF-Erweiterung

Der Moving-Window-Ansatz (Haas, 1990) spezifiziert eigenständige Kovarianzmodelle für Teile des Untersuchungsgebietes. Der Deformationsansatz (McNair et al., 1996) ist eine vielversprechende Methode, mit der anisotrope Strukturen behandelt werden können. Es wird dabei eine Verzerrung des räumlichen Koordinatensystems vorgenommen, so dass die zugehörige Kovarianzfunktion möglichst homogen und isotrop ist. Die EOF-Ansätze bilden ein nichtparametrisches Kovarianzmodell, das auf der Eigenvektoraufspaltung (SVD) der empirischen Kovarianzmatrix der Messwerte beruht (Obled und Creutin, 1986, siehe auch Kapitel 3.2.5.2).

Die Basis für das Aufspüren der Inhomogenität ist die empirische Kovarianzmatrix für alle Paare von Stationsorten. Sie wird aus Zeitreihendaten ermittelt (siehe Abbildung 3.1, S. 37). Damit ergibt sich für alle Methoden die Notwendigkeit zur Separation der zeitlichen Variabilität, um zeitlich unabhängige Realisierungen eines Zufallsfeldes zu erhalten (siehe 3.2.2).

Das Grundproblem, die unbekannte Kovarianz zwischen Beobachtungs- und Interpolationspunkt zu bestimmen, bleibt zunächst bestehen. Es wird gelöst, indem die für die Beobachtungsorte bestimmte Größen mit einfachen Ansätzen auf die Orte ohne Beobachtung übertragen werden. Eine Alternative sind flächendeckende Immissionswerte, die durch Eulersche Modelle simuliert wurden.

Mit dem Moving-Window-Ansatz identifiziert Haas (1995) für die USA 6 verschiedene Gebiete mit einer unterschiedlichen Kovarianzstruktur hinsichtlich der monatlichen Sulfatdeposition. Für jedes Teilgebiet wird ein homogenes Variogramm der logarithmierten Werte geschätzt und für das Kriging des gesamten Gebietes verwendet.

Der Deformationsansatz ist die Grundlage für die Analyse der stündlichen Ozonkonzentration in Gitterpunktdarstellung in Meiring et al. (1998). Die Analyse wird zur

¹⁹ Die räumliche Kovarianzstruktur ist für höhere bzw. niedrigere Belastung verschiedenartig.

²⁰ Darüber hinaus gibt es komplexere Methoden, die mit Bayesschen Ansätzen die Linearität des traditionellen Krigings aufgeben.

Evaluierung des Eulerschen Ausbreitungsmodells SARMAP in North Carolina für eine 2-monatige Ozonepisode verwendet. Diese Arbeit ist von besonderem Interesse, da das Vorgehen bei der Behandlung der Zeit-Raum-Trennung Ähnlichkeiten mit dem hier gewählten aufweist. Aus einer Vorarbeit von Sampson und Guttorp (1998) stammt die Erkenntnis, dass die räumliche Kovarianzstruktur große Unterschiede im Verlauf des Tages aufweist und kein geeigneter Separationsansatz (siehe 2.4.2) für Raum und Zeit zu bilden ist. Aus diesem Grund wurde – wie in dieser Arbeit – ein eigenständiges räumliches Kovarianzmodell für jede Tagesstunde geschätzt. Die Analyse bezog sich dabei auf die logarithmierten Ozondaten, um eine Normalverteilung zu gewährleisten. Die Zeitreihen für jede Tagesstunde wurden mit dem Mittelwert zentriert und die weiterhin vorhandene zeitliche Korrelation mit Hilfe eines AR(2)-Modells²¹ detektiert. Die Residuen zu der mit AR(2) geglätteten Reihe wurden dann als zeitlich unabhängiges Ensemble zur Bildung der paarbezogenen Kovarianzwerte verwendet. Der Deformationsansatz verzerrte nun das Koordinatensystem, um möglichst homogene exponentielle Kovarianzmodelle bilden zu können. Mit Hilfe dieser Modelle wurde dann der Wert des Residuums am Interpolationsort mit Block-Kriging ermittelt, um dem Mittelwertcharakter der Gitterzellendarstellung gerecht zu werden. Zu diesem Wert wurden nun in Umkehrung der Filterung der Wert des AR(2)-Modells und der Mittelwert addiert. Da diese Werte für den Interpolationsort unbekannt sind, wurden die Koeffizienten für AR(2) und der Mittelwert von den Beobachtungsorten mit Hilfe eines einfachen numerischen Interpolators ermittelt.

Eine Anwendung der EOF-Erweiterung ist die Analyse der jahresgangbefreiten Wochenmittel von SO₂ im Osten der USA (Holland et al., 1999). Für diese Arbeit werden drei Kovarianzmodelle mit unterschiedlicher Komplexität angenommen: 1) das traditionelle homogene und isotrope Kovarianzmodell, 2) ein homogenes und isotropes Korrelationsvarianzmodell bei räumlich variabler Varianz (siehe Gleichung {0.12}) und 3) ein Kovarianzmodell analog zu 2) mit einer zusätzlichen Erweiterung auf Basis der EOF der Kovarianzmatrix der Abweichung der empirischen Kovarianzmatrix vom Kovarianzmodell 2. Durch diese Erweiterung werden die großräumige Inhomogenität und Isotropie erfasst, der kleinräumigen Variabilität wird eine isotrope Struktur zugeschrieben. Median und 98%-Perzentil des Interpolationsfehlers lagen bei dem Kovarianzmodell 3) deutlich unter denen der anderen Ansätze.

2.3.3 Datenassimilation

Daley (1991) liefert die Grundlagen zur Analyse für die numerische Wettervorhersage. Einen guten Überblick über die modernen Methoden der Datenassimilation enthält die Darstellung von Bouttier und Courtier (1999).

Die komplexen vier-dimensionalen Verfahren (Kalman-Filter, 4D-VAR) bedeuten einen hohen mathematisch-numerischen Aufwand, dessen Bewältigung auch häufig der Schwerpunkt der entsprechenden Publikationen ist. Dieser Überblick beleuchtet hauptsächlich die Frage, wie die besondere Spezifik (siehe Kapitel 2.1) der Immissionsbeobachtungen und ihrer Modellierung behandelt wurden.

Es wird vorrangig auf die Assimilation der bodennahen Messungen aus den Luftgütemessnetzen für Eulersche Chemie-Transport-Modelle eingegangen; Arbeiten mit Satellitendaten oder Lagrangesche Modelle sind nur kurz aufgeführt. Weiterhin werden

²¹ Autoregressives Modell auf Basis der beiden zurückliegenden Datenwerte

Arbeiten erwähnt, die sich mit der Analyse auf Basis von Beobachtungen und Modellbetrachtungen befassen und damit als Vorstufen der Datenassimilation dienen können.

2.3.3.1 Einfache Ansätze

Einfache Ansätze für die Verbindung von Modellierung und Beobachtung stellt die Arbeit von Venkatram (1988) zur Kartierung der Sulfatdeposition dar. Hier wird ein Gauß-Modell verwendet, um einen inhomogenen Erwartungswert für die anschließende Interpolation mit normalem Kriging zu gewinnen.

Stedman et al. (1997) gehen den umgekehrten Weg für die hochaufgelöste Kartierung der NO_x -Jahresmittelwerte in Großbritannien. Sie verwenden die Jahresmittelwerte von Stationen mit ländlicher Charakteristik für die Interpolation eines Hintergrundfeldes mit Hilfe von Kriging. Die Darstellung der Immission in belasteten Gebieten beruht auf einem hochaufgelösten Emissionskataster. Mit Hilfe eines einfachen Regressionsmodells wird ein Zusammenhang zwischen der Jahresemission und -immission gewonnen und für die Kartierung verwendet.

Eine methodische Ähnlichkeit zum Kalman-Filter ist in der Arbeit von Nychka und Saltzman (1998) für die räumliche Interpolation von Ozonmessungen im Mittelwesten der USA zu finden. Hier werden die Ergebnisse des Eulerschen Modells ROM zur Schätzung eines inhomogenen Kovarianzmodells herangezogen. Das Modell liefert somit nicht die aktuellen Werte, sondern nur die räumlich statistischen Eigenschaften. Es wird dabei der Umstand ausgenutzt, dass die Modellrechnungen für jeden beliebigen Ort vorliegen und somit Inhomogenitäten erfassbar sind.

Initialisierung von Ozonprognosen

Für ein UBA-Projekt zur operationellen Ozonprognose mit REM3 wurde ein Initialisierungsverfahren mit Ozonbeobachtungen entwickelt (Flemming et al., 1999a,b). Für den Termin des Modellstarts um 15 UTC wird aus dem prognostizierten Ozonfeld und vorliegenden Messungen aus Deutschland eine Analyse mit Hilfe der optimalen Interpolation gewonnen (Gandin, 1965). Die Korrektur des Modellfehlers ist dabei auf die Ozonkonzentrationen in Deutschland beschränkt. Die Varianz des Beobachtungsfehlers wird mit der Beobachtungsmethode nach Hollingsworth und Lönnberg (1986) mit Hilfe eines terminbezogenen und homogenen Kovarianzmodells bestimmt.

Diese Analyse dient als Startfeld für den nächsten Prognoselauf. Aufgrund des beschränkten Repräsentationsgebietes der Messungen erfolgte eine Änderung des Ozonfeldes nur im deutschen Gebiet. Untersuchungen zeigten, dass eine alleinige Änderung der Ozonkonzentration der Bodenschicht des Modells keine Auswirkungen auf die prognostizierten Ozonkonzentrationen des nächsten Tages hat (Flemming, 1996). Mit der Annahme guter vertikaler Durchmischung der Grenzschicht zum Zeitpunkt des Modellstarts wurden die Bodenmessungen auch zur Analyse der zweiten Modellschicht herangezogen. Gleichzeitig wurden die NO_x -Konzentrationen mit Hilfe des fotostationären Gleichgewichtes an die veränderten Ozonwerte angepasst. In einer Fallstudie für eine typische Sommersmog-Periode (20.7.-30.7.1994) reagierte das Modell auf diese Initialisierung mit besseren Ergebnissen, insbesondere bei hohen Ozonkonzentrationen. Für die Untersuchung wurden diagnostische Daten verwendet. Bei der Auswertung über den gesamten Zeitraum der Prognoseanwendung verringerte sich die festgestellte mittlere Beeinflussung des nächsten Tages durch die Initialisierung. Der Einfluss des zunehmenden Prognosefehlers der meteorologischen Daten überlagert den Effekt der

Initialisierung. Deutlich erkennbar ist jedoch der „Export“ der Initialisierung mit der Hauptwindrichtung nach Polen. Dies macht deutlich, dass Beobachtungen aus ganz Mitteleuropa für eine Initialisierung notwendig sind. Der Umstand, dass die Anfangsbedingungen des Ozons für die Rechnung mit troposphärischen Chemie-Transport-Modellen keinen großen Einfluss haben, wird auch durch anderen Autoren bestätigt (Petty, 1993).

2.3.3.2 Variationsansätze

Assimilation von stratosphärischem Ozon

Eine Hauptanwendung für die Datenassimilation von Spurengasen ist die Gewinnung von Anfangszuständen für globale numerische Wettervorhersagemodelle, in denen die atmosphärische Ozonkonzentration eine prognostische Variable ist (z. B. in Modellen am ECMWF, UK Met Office und NCEP). Dabei stehen die Dynamik und die Wechselwirkung mit der Strahlung des stratosphärischen Ozons im Mittelpunkt des Interesses. Chemische Reaktionen werden von diesen Modellen nur in einfacher Form behandelt.

Die Beobachtungen werden mit Hilfe satellitengestützter Fernerkundungsmethoden gewonnen. Um aus den Strahlungsdaten Konzentrationen zu gewinnen, müssen inverse Strahlungsrechnungen unter Vorgabe von Druck- und Temperaturprofilen durchgeführt werden. Variationsmethoden eignen sich besonders, diese Daten mit ihren komplizierten Beobachtungsoperatoren in Modellzustände zu assimilieren bzw. zu analysieren (Anderson, 1992).

Die europäischen Aktivitäten auf diesem Gebiet sind im SODA²²-Projekt zusammengefasst. Variationsmethoden (4DVAR) wurden z. B. am ECMWF und am UK Met Office für die Satellitenmessungen von Ozon und weiteren Spurenstoffen entwickelt. Durch die Assimilation von stratosphärischem Ozon erhofft man sich eine Verbesserung der Strahlungsrechnung, der UV-Strahlungsvorhersage am Boden und eine Überprüfung von Strömungsfeldern in der Stratosphäre (Fisher und Lary, 1995).

4DVAR für das EURAD System

In den letzten Jahren wurde von Elbern und Schmidt (2001) ein 4DVAR System für das Ausbreitungsmodell EURAD CTM2 entwickelt. Das adjoint model zur Minimierung der Kostenfunktion ist für den Transportteil und den RADM2-Gasphasen-Chemismus formuliert.

Das Verhalten dieses Systems wurde mit „identical twin“-Experimenten untersucht. Dazu werden synthetische „Beobachtungen“ aus einem Modellauf mit bestmöglicher Konfiguration (Auflösung, Parameter etc.) entnommen. Das Assimilationsverhalten einer anderen Modellkonfiguration bezüglich dieser Beobachtungen ist dann Gegenstand der Untersuchung.

Experimente mit 70 realen Ozonmessungen aus ganz Europa wurden für den August 1997 durchgeführt. Die Assimilation erfolgte in einem 6-stündigen Intervall von 6 bis 12 UTC. Von diesen Analysen ausgehend, konnten deutlich verbesserte Modellsimulationen der Ozonkonzentration bis in die Abendstunden, d. h. mit einem Zeithorizont von 6 Stunden, verzeichnet werden.

²² European Union Satellite Ozone Data Assimilation

Der 4DVAR Ansatz wurde auch zur Analyse und Optimierung von Emissionsraten herangezogen. Eine genaue Einschätzung des praktischen Erfolgs dieser Optimierung war aus den beiden vorliegenden Publikationen nicht zu entnehmen.

2.3.3.3 Kalman-Filter-Ansätze

Ausbreitungsrechnung von SO₂

Erste Anwendungen vom Kalman-Filter für die Luftreinhaltung stammen aus den siebziger Jahren (Fronza et al., 1979).

Für die SO₂-Ausbreitungsrechnung wurden Kalman-Filter-Ansätze im Rahmen des UBA-Projektes "Anwendung statistisch-systemdynamischer Methoden in der Ausbreitungsrechnung von Luftbeimengungen" untersucht (Dlabka et al., 1986). Mit dem Kalman-Filter wurde die Schätzung der optimalen Anfangskonzentrationsfelder für die SO₂-Prognose des TUB-Modells durchgeführt. Das TUB-Modell ist ein Eulersches Ausbreitungsmodell ohne chemische Prozesse mit einer horizontalen Gitterweite von 3 km und 10 Modellschichten. Es überdeckt das Stadtgebiet von Berlin. SO₂-Messungen des Berliner Stadtmessnetzes BLUME wurden für die Assimilation in einer Winter-Smog Episode vom 20.2.-28.2.1982 verwendet. Der Kalman-Filter wurde mit einem reduced-rank-Ansatz implementiert. Die Größe der Kovarianzmatrix des Modellzustandsvektors ist mit einer Aufspaltung in Modellteilgebiete verringert worden. Die mit dem Kalman-Filter erzeugten Anfangsfelder bewirkten eine verbesserte Prognoserechnung für einen Zeitraum von drei Stunden. Diese relativ geringe Zeitspanne ist mit der geringen räumlichen Ausbreitung des Modellgebiets zu erklären. Die Randbedingungen haben so einen besonders großen Einfluss. Die Untersuchung widmete sich darum dem Vergleich von Randbedingungen aus Messungen und aus einer Rechnung eines großräumigen Ausbreitungsmodells.

Ozonmodellierung mit LOTOS

Im Umfeld der Abteilung für Technische Mathematik und Informatik der TU Delft wurden numerische Verfahren für die Implementierung von Kalman-Filter mit dem RRSQRT-Ansatz für nichtlineare Modelle entwickelt (Heemink et al., 1999). Die Anwendungen betreffen sowohl Gezeitenvorhersagemodelle als auch verschiedene Chemie-Transport-Modelle.

Im Rahmen des RITFOZ (Regional differences in tropospheric Ozone) Projektes wurde zusammen mit der TNO ein Programmpaket für den KF im RRSQRT-Ansatz in verschiedenen Ausbaustufen für das Modell LOTOS entwickelt (Segers et al., 1998 und van Loon et al., 1998). Für die Anwendung des Programmpaketes sind keine wesentlichen Modifikationen des Ausbreitungsmodells notwendig, so dass es relativ leicht auf andere Modelle übertragbar ist. Diese Implementierung wird auch im Rahmen dieser Arbeit angewendet werden.

Um die Modellunsicherheiten für den Kalman-Filter zu beschreiben, wurde ein Set von länder- und speziesspezifischen Emissionsfaktoren für die noise-Parameter verwendet. Ihre Aufgabe ist es, eine stochastische Schwankung der Emissionen mit einer Standardabweichung von 25% zu simulieren. Die Schwankungen werden jedoch zeitlich korreliert, so dass eine allzu schnelle Variation der Emission vermieden wird. Mit der Aufnahme der noise-Parameter in den Zustandsvektor kann deren Verhalten untersucht werden. Die Analyse der noise-Parameter, d. h. die Betrachtung der Korrelationen zwischen diesen Parametern und den Abweichungen zwischen Modell und Beobach-

tung, kann systematische Abweichungen aufdecken. Diese geben Hinweise auf mögliche Unter- oder Überschätzung der verwendeten Emissionsdaten.

Die Simulation galt einer Periode im August 1997, in der bodennahe Ozonbeobachtungen in Deutschland und den Niederlanden sowie drei Ozonsondenmessungen assimiliert wurden. Für alle Messungen ist eine Fehlerstandardabweichung von 10 % angenommen worden. Die Satellitenmessungen der Ozonsäule durch den GOME-Satelliten konnten nicht direkt assimiliert werden; sie dienten als die obere Randbedingung des Modells.

Das Assimilationsverhalten wurde mit Beobachtungen, die nicht in die Assimilation einbezogen wurden, bestimmt. Es konnte gezeigt werden, dass für diese Stationen eine deutliche Verbesserung der Modellrechnung erreicht wird (van Loon et al., 1998).

Es kam jedoch auch zum Ausdruck, dass die durch die Emission eingeführten Modellfehler nur einen Teil der Unsicherheiten erfassten. Die Analyse der noise-Parameter ergab bisher keine belastbaren Aussagen über systematische Abweichungen der Emission. Ein wesentlicher Einfluss der GOME-Daten auf die Ozonkonzentration am Erdboden konnte nicht nachgewiesen werden (van Loon et al., 1999).

2.4 Räumliche Zufallsprozesse

Die atmosphärischen Eigenschaften sind in Raum und Zeit variable Größen. Deren Untersuchung im Rahmen der Theorie der Zufallsprozesse beschränkt sich meist auf eine rein zeitliche oder rein räumliche Herangehensweise. Im ersten Fall handelt es sich um die Betrachtung von Zeitreihen, im zweiten um jene von Feldern, die häufig „Geostatistik“ genannt wird (Cressie, 1993).

Es gibt keine theoretischen Unterschiede bei der Behandlung von zeitlichen und räumlichen Zufallsprozessen. Dies führt dazu, dass in Lehrbüchern häufig nur Zeitreihen behandelt werden mit dem Hinweis, dass die Theorie auf räumliche Prozesse übertragbar sei. Es gilt jedoch, die folgenden Besonderheiten der Zufallsfelder zu beachten:

- Die unabhängige Variable der Zufallsfelder ist der mehrdimensionale Ortsvektor \mathbf{r} (2D oder 3D).
- Die Beobachtungen von Zeitreihen liegen fast immer in äquidistanten Abständen vor, während die räumliche Anordnung der Messstationen im Allgemeinen irregulär²³ ist.
- Begriffe wie Vergangenheit und Zukunft können für Felder nicht angewandt werden.

Die statistische Analyse ist eine Anwendung der Geostatistik und beruht damit vorrangig auf der Theorie räumlicher Zufallsprozesse. Für die Schätzung der Momente der räumlichen Prozesse wird jedoch ein Ensemble benötigt, das aus den Beobachtungen des Feldes zu verschiedenen Zeitpunkten gewonnen werden kann²⁴. Aufgrund des zeitlichen Zusammenhangs ist jedoch die notwendige Unabhängigkeit der Realisierungen nicht gewährleistet. Die Beschäftigung mit der zeitlichen Komponente des Zufalls-

²³ Dadurch ist die Anwendung der spektralen Betrachtungsweise in der Praxis eingeschränkt. Daten eines Eulerschen Modells bilden dafür eine geeignete Grundlage.

²⁴ Es handelt sich dann um ein klimatologisches Kovarianzmodell, mit dem eine höhere räumliche Spezifizierung möglich ist (siehe Kapitel 3.2.2)

prozesses ist deshalb notwendig, um die zeitliche und räumliche Variabilität angemessen zu trennen. Eine zusammenhängende Behandlung der Raum-Zeit-Prozesse bieten 4D-Datenassimilationsverfahren.

2.4.1 Beschreibung räumlicher Zufallsprozesse

Der räumliche Zufallsprozess $X(\mathbf{r})$ kann methodisch in eine mittlere Komponente $\mu(\mathbf{r})$, gegeben durch den Erwartungswert $E(X(\mathbf{r}))$, und eine stochastische Komponente $e(\mathbf{r})$ mit verschwindendem Erwartungswert zerlegt werden:

$$X(\mathbf{r}) = \mathbf{m}(\mathbf{r}) + e(\mathbf{r}) \quad \{0.1\}$$

$$E(X(\mathbf{r})) = \mathbf{m}(\mathbf{r}) \quad \text{und} \quad E(e(\mathbf{r})) = 0 \quad \{0.2\}$$

Für die Beschreibung der statistischen räumlichen Beziehungen²⁵ wird auf die Momente zweiter Ordnung zurückgegriffen. Handelt es sich um einen Gaußschen Zufallsprozess, so ist er mit den Momenten erster und zweiter Ordnung ausreichend charakterisiert. Es bieten sich hierfür zwei Größen an:

1. Die Autokovarianzfunktion $C = f(r_i, r_j)$ beruht auf den Produkten des stochastischen Anteils e :

$$C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \text{Cov}(X(\mathbf{r}_1), X(\mathbf{r}_2)) = E(e(\mathbf{r}_1)e(\mathbf{r}_2)) \quad \{0.3\}$$

2. Die Strukturfunktion $2g = f(r_i, r_j)$ beschreibt den Erwartungswert der quadratischen Differenz zwischen zwei Orten des Feldes \mathbf{r}_i und \mathbf{r}_j . (Gandin, 1965):

$$2g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \text{Var}(X(\mathbf{r}_1) - X(\mathbf{r}_2)) = E((e(\mathbf{r}_1) - e(\mathbf{r}_2))^2) \quad \{0.4\}$$

Die Kovarianzfunktion $C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ muß positiv definit sein, d. h. es gilt für jede Menge von Orten \mathbf{r}_i und willkürlichen Koeffizienten a_i die folgende Gleichung:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j C(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \geq 0 \quad \{0.5\}$$

Ein positive Spektraldichte ist dafür eine hinreichende Voraussetzung (Bochner-Theorem). Die stetige Differenzierbarkeit der Kovarianzfunktion für den Abstand Null ist Ausdruck der Differenzierbarkeit des zugrundeliegenden Prozesses (Schweschnikow, 1965).

²⁵ Persistenz

2.4.1.1 Statistisch motivierte Skalentrennung

Der stochastische Anteil $e(\mathbf{r})$ kann in unabhängige Komponenten aufgeteilt werden (Cressie, 1993), die im Sinne des meteorologischen Skalenbegriffs interpretierbar sind²⁶. Die Kovarianzfunktionen der einzelnen Subprozesse addieren sich wegen der gegenseitigen Unabhängigkeit zu der des gesamten Prozesses:

$$\begin{aligned} e(\mathbf{r}) &= e_s(\mathbf{r}) + e_{ss}(\mathbf{r}) + e_e(\mathbf{r}) \\ \text{Var}(e(\mathbf{r})^2) = \mathbf{s}^2(\mathbf{r}) &= \mathbf{s}_s^2(\mathbf{r}) + \mathbf{s}_{ss}^2(\mathbf{r}) + \mathbf{s}_e^2(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad \{0.6\}$$

Die Komponente $e_s(\mathbf{r})$ ist die räumliche Variabilität²⁷, für die eine von Null verschiedene kontinuierliche Kovarianzfunktion bzw. Strukturfunktion existiert. Die subskalige räumliche Variabilität²⁸ $e_{ss}(\mathbf{r})$ besitzt eine Kovarianz- bzw. Strukturfunktion nur im Bereich der nicht aufgelösten räumlichen Unterschiede, d. h. für Distanzen, die kleiner als der minimale Abstand der Beobachtungen bzw. Modellgitterpunkte sind. Der Beitrag $e_e(\mathbf{r})$ weist keine räumliche Korrelation auf. Er entspricht einem weißen Rauschen und wird häufig als Meßgerätefehler interpretiert. Zusammen mit dem subskaligen Anteil $e_{ss}(\mathbf{r})$ bildet er den sogenannten Beobachtungsfehler $e_o(\mathbf{r})$ (siehe Kapitel 2.5.2). Der Zufallsprozess $X_s(\mathbf{r})$ ohne den Beobachtungsfehler:

$$X_s(\mathbf{r}) = \mathbf{m}(\mathbf{r}) + e_s(\mathbf{r}) \quad \{0.7\}$$

wird als der „glatte“ bzw. „rauschfreie“ Prozess von $X(\mathbf{r})$ bezeichnet. Er ist das eigentliche Ziel der Interpolationsbemühungen (siehe Kapitel 2.4.1.3).

Die konkrete Form der Zerlegung eines räumlichen Zufallsprozesses ist nicht eindeutig und hängt von der Problemstellung, der Datenverfügbarkeit und von der subjektiven Einschätzung ab.

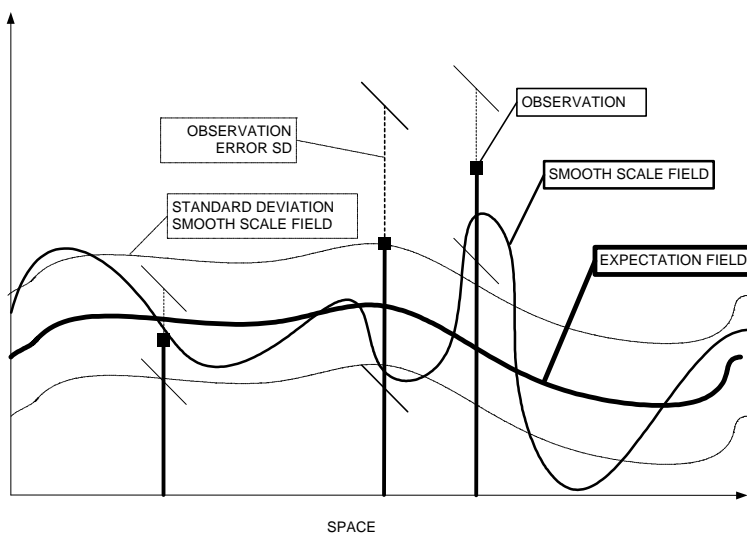


Abbildung 2.1 Schema eines räumlichen Zufallsprozesses und seiner Messung

²⁶ Dieser Skalenbegriff ist mit dem Problem der Auflösung verbunden und geht nicht auf die physikalisch motivierten Skalen ein.

²⁷ Smooth scale variation

²⁸ sub scale variation

2.4.1.2 Homogenität und Isotropie

Durch die Annahme der Homogenität²⁹ und Isotropie hinsichtlich der 1. und 2. Momente ist es möglich, die Komplexität der statistischen Eigenschaften des Zufallsfeldes $X(\mathbf{r})$ zu verringern. Homogenität hinsichtlich des Erwartungswertes bedeutet, dass er für das gesamte Feld einen konstanten Wert μ besitzt. Ist dieser Umstand nicht gegeben, so wird vor der weiteren statistischen Behandlung versucht, den mittleren Anteil $\mu(\mathbf{r})$ zu bestimmen. Die Abweichungen $X'(\mathbf{r}) = X(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r})$ bilden dann ein Zufallsfeld mit homogenem mittleren Anteil.

Homogenität hinsichtlich der Kovarianzfunktion bzw. der Strukturfunktion bewirkt, dass diese nicht mehr von der Lage im Raum, sondern nur noch von dem Differenzvektor $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ abhängt. Durch die Annahme von **Isotropie** wird die Richtungsabhängigkeit aufgegeben. Die Annahme der Homogenität und Isotropie führt dazu, dass die Kovarianz- und Strukturfunktion allein vom skalaren Abstand $|\mathbf{r}| = r$ der beiden Orte bestimmt ist. In diesem Fall, d. h. bei Homogenität und Isotropie, ist der statistische Apparat für Zeitreihen und räumliche Prozesse gleichartig.

Homogenität für den Erwartungswert und die Kovarianzfunktion, d. h. das erste und zweite Moment, wird als Homogenität 2. Ordnung³⁰ bezeichnet.

$$\begin{array}{ll} \text{Homogenität 2. Ordnung} & \\ E(X(\mathbf{r})) = \mu \quad \text{und} \quad \text{Cov}(X(\mathbf{r}_1), X(\mathbf{r}_2)) = C(\Delta\mathbf{r}) & \{0.8\} \end{array}$$

Homogenität hinsichtlich der Strukturfunktion und ein konstanter Erwartungswert wird intrinsische Homogenität (intrinsic stationarity) genannt. Diese Annahme ist etwas schwächer, da die Erwartungswerte homogen, aber nicht bekannt sein müssen. Die Strukturfunktion für einen homogenen (stationären) Prozess wird als Variogramm³¹ bezeichnet (Cressie, 1993).

$$\begin{array}{ll} \text{"Intrinsische Homogenität"} & \\ E(X(\mathbf{r}_1) - X(\mathbf{r}_2)) = 0 \quad \text{und} \quad \text{Var}(X(\mathbf{r}_1) - X(\mathbf{r}_2)) = 2g(\Delta\mathbf{r}) & \{0.9\} \end{array}$$

Unter der Annahme der Homogenität 2. Ordnung lässt sich jedoch eine einfache Beziehung zwischen Strukturfunktion und räumlicher Autokovarianzfunktion finden.

$$2g(\Delta\mathbf{r}) = 2C(0) - 2C(\Delta\mathbf{r}) \quad \{0.10\}$$

Autokovarianzfunktion und Strukturfunktion sind bei Homogenität 2. Ordnung gleichwertig.³² Variogramme können jedoch robuster geschätzt werden (Gneiting et al., 2000) und mit Gleichung {0.10} die Kovarianzfunktion festlegen (siehe 3.2.1). Der gegenläufige Charakter von Kovarianzfunktion und Variogramm (Strukturfunktion) wird bei großen Abständen deutlich. Geht man von einer verschwindenden Kovarianz-

²⁹ In Anlehnung an Zeitreihen auch häufig Stationarität (stationarity) genannt; Homogenität bezeichnet dann Stationarität und Isotropie.

³⁰ auch Stationarität im weiteren Sinne (weak stationarity) genannt.

³¹ g heißt Semivariogramm

³² mit Einschränkung der schwächeren Forderung der „intrinsic stationarity“

funktion aus, so entspricht das Variogramm bei sehr großen Abständen der homogenen Varianz s_s^2 des glatten Feldes.

Aufgrund der Wirkung der räumlich nichtkorrelierten Schwankung e_{ss} und der nicht auflösbaren Anteile e_e (Gleichung {0.6}) ist die Varianz des glatten Prozesses $s_s^2(\mathbf{r})$ um den Beitrag der Varianz des Beobachtungsfehlers $s_o^2(\mathbf{r}) = s_{ss}^2(\mathbf{r}) + s_e^2(\mathbf{r})$ erhöht:

$$C(r) = \begin{cases} s_s^2 + s_o^2 & r = 0 \\ s_s^2 r(r) & r > 0 \end{cases} \quad \{0.11\}$$

Die Kovarianzfunktion des „kontaminierten“ Prozesse weist also einen Sprung am Abstand Null im Vergleich zum „glatten“ Prozess auf. Dieser Umstand wird genutzt, um mit Hilfe eines Kovarianzmodells die Varianz der Beobachtungsfehler zu schätzen (siehe Kapitel 3.2.6).

Eine komplexere Form der Kovarianzfunktion ist gegeben, wenn sich Homogenität und Isotropie nur auf die Korrelationsfunktion³³ $\rho(r)$ beziehen. Die räumlich variable Varianz $s_s^2(\mathbf{r})$ wird zur Normierung der Kovarianzfunktion verwendet (Daley, 1991).

$$C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} s_s^2(\mathbf{r}) + s_o^2(\mathbf{r}) & r = 0 \\ s_s(\mathbf{r}_1) s_s(\mathbf{r}_2) r(r) & r > 0 \end{cases} \quad \{0.12\}$$

2.4.1.3 Interpolation

Die räumliche Interpolation, d. h. die Prädiktion des unbekannten Wertes $X(\mathbf{r}_0)$ aus $i=1, n$ bekannten Werten $X(\mathbf{r}_i)$, ist eine der Hauptanwendungen der räumlichen Statistik. Sie ist eine objektive Methode der Geowissenschaften, mit der aus Beobachtungswerten ein zusammenhängendes Feld gewonnen wird. Die Interpolation bewirkt jedoch immer eine Glättung, da nur der Prozess ohne den räumlich unkorrelierten Anteil $e(\mathbf{r})$ prognostiziert werden soll.

Der verallgemeinerte Ansatz für die statistische Interpolation besteht darin, den Erwartungswert (Minimale Varianz) oder den wahrscheinlichsten Wert (maximum likelihood) der verbundenen Wahrscheinlichkeit $p(X(\mathbf{r}_0) | X(\mathbf{r}_i), i = 1, n)$ zu finden.

Daraus leiten sich zwei allgemeine Teilaufgaben ab: 1. Die Schätzung der statistischen Eigenschaften des Zufallsfeldes $X(\mathbf{r})$ und 2. die Bestimmung des konkreten Feldwertes $X(\mathbf{r}_0)$ mit Hilfe der bekannten Beobachtung $X(\mathbf{r}_i)$ unter Verwendung der Ergebnisse von 1. Der erste Punkt umfasst meist die Schätzung von Erwartungswert und Autokovarianzfunktion. Der zweite Schritt wird zur Unterscheidung vom ersten auch im geostatistischen Kontext häufig Prädiktion genannt. Die Qualität der Interpolation ist wesentlich von der Richtigkeit der Schätzung der Momente bestimmt.

Der optimale Prädiktor minimiert eine Kostenfunktion, die den Interpolationsfehler, also die Abweichung des interpolierten Werts vom wahren Wert bemißt. In dieser Arbeit wird die Schätzung über die Minimierung der Varianz gewonnen:

³³ In den meisten Darstellungen der Optimalen Interpolation (Daley, 1991 und Gandin, 1965) werden Homogenität und Isotropie angenommen. Die Interpolationsgleichungen werden nur in Form von Korrelationen entwickelt. Die allgemeinere Darstellung mit Kovarianzen in dieser Arbeit wird verwendet, um die Zusammenhänge zwischen OI 3/4D-VAR und Kalman-Filter herauszuarbeiten.

$$E\left(\left(X_p(\mathbf{r}) - X(\mathbf{r})\right)^2\right) \Rightarrow \min \quad \{0.13\}$$

Diese Prädiktion³⁴ ist biasfrei und linear. Der gesuchte Wert ergibt sich aus dem Mittelwert $\mu(\mathbf{r})$ und einer linearen Kombination der beobachteten Werte $X(\mathbf{r}_i)$, wobei für X Gaußscher Zufallsprozess³⁵ angenommen wird. $X_p(\mathbf{r}_0)$ repräsentiert den „glatten“ Prozess“ (siehe 2.4). Die Gewichte k_i hängen nicht von den aktuellen Beobachtungswerten ab. Aus der Minimierung des quadratischen Interpolationsfehlers von $X_p(\mathbf{r}_0)$ werden die Koeffizienten k_i aus der Kovarianzfunktion oder dem Variogramm gewonnen. Die Lösung für die k_i für die statistische Analyse ist Inhalt des Kapitels 2.5.4.

In der statistischen Analyse und der Datenassimilation wird vorrangig mit Autokovarianzen gearbeitet. Sind Variogramme die Grundlage für die räumliche Interpolation, dann spricht man von der Kriging-Methode. Beruht die Interpolation auf Kovarianzen, dann muss nicht von Homogenität ausgegangen werden. Sie ist jedoch häufig die Voraussetzung, um die Kovarianzfunktion aus vorgegebenem Datenmaterial abzuleiten (siehe Kapitel 3).

Es existieren verschiedene Kriging-Entwicklungen (Cressie, 1993). Im Falle von „Einfachem Kriging“ ist $\mu(\mathbf{r})$ bekannt, beim „Gewöhnlichen Kriging“ ist $\mu(\mathbf{r})$ unbekannt, aber konstant. Man spricht von „Universellem Kriging“, wenn der Mittelwert räumlich variabel ist und durch eine Funktionsfolge parametrisiert wird. „Block-Kriging“ ist ein Verfahren, um aus Beobachtungen Flächenmittelwerte oder Gitterzellenmittelwerte zu interpolieren. „Indikator-Kriging“ ist eine nichtlineare Interpolation, mit der lokale Histogramme geschätzt werden.

2.4.2 Raum-Zeit-Prozesse

Für die zusammenhängende Bearbeitung der Raum-Zeit-Zufallsprozesse gibt es nur wenige Beispiele (Bilonick, 1985). Zur Vereinfachung geht man von einer Separation in eine räumliche und zeitliche Komponente aus (Gneiting und Schlather, 2001). Damit werden die Raum- und Zeitkomponente als unabhängig voneinander angesehen:

$$\begin{aligned} \mu(\mathbf{r}, t) &= \mu_r(\mathbf{r})\mu_t(t) \\ e(\mathbf{r}, t) &= e_r(\mathbf{r})e_t(t) \\ \text{mit} & \\ \text{Cov}(X(\mathbf{r}_1, t_1)X(\mathbf{r}_2, t_2)) &= C_r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)C_t(t_1, t_2) \end{aligned} \quad \{0.14\}$$

oder

$$\begin{aligned} \mu(\mathbf{r}, t) &= \mu_r(\mathbf{r}) + \mu_t(t) \\ e(\mathbf{r}, t) &= e_r(\mathbf{r}) + e_t(t) \\ \text{mit} & \\ \text{Cov}(X(\mathbf{r}_1, t_1)X(\mathbf{r}_2, t_2)) &= C_r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + C_t(t_1, t_2) \end{aligned} \quad \{0.15\}$$

³⁴ auch BLUE („best linear unbiased estimate“) genannt

³⁵ Bei der Varianzminimierung für nicht-normalverteilte Prozesse ist diese Schätzung die optimalste in der Klasse der linearen Schätzungen.

Dieses Vorgehen erscheint geeignet, wenn eine ortsunabhängige zeitliche Periodizität, wie z. B. der Tagesgang, erfasst werden soll. Die Wechselbeziehung der raum- und zeitabhängigen Prozesse kann damit nicht wiedergegeben werden.

Ansätze ohne Separation entstehen z. B. durch die Bildung einer einheitlichen Raum-Zeitmetrik. Dabei wird zu dem räumlichen Abstand der zeitliche Abstand in skaliert Form addiert. Die Skalierungsgröße der Zeit kann als eine konstante Driftgeschwindigkeit physikalisch interpretiert werden.

Auch wenn man sich auf Zeitreihenanalyse oder Geostatistik beschränkt, kann die fehlende Betrachtung der Raum-Zeit-Persistenz Fehlinterpretationen von statistischen Tests zur Folge haben, wenn die Unabhängigkeit der Stichprobe vorausgesetzt wurde. Aus dem Blickwinkel der Geostatistik führen weiterhin die Nichtbeachtung von zeitlicher Persistenz oder die Periodizität zu Fehlern in der Schätzung der Momente des räumlichen Prozesses.

2.4.2.1 Schätzung der räumlichen Momente aus Zeitreihen

In der statistischen Interpolation bzw. Analyse bestimmt sich der unbekannte Wert des Zufallsfeldes aus den bekannten Beobachtungen des gleichen Termins. Dafür wird nur die räumliche Struktur von Erwartungswert und Kovarianzfunktion benötigt (siehe 2.4.1.3).

Der zeitliche Zusammenhang ist jedoch bei der Bestimmung der Kovarianzfunktion von Bedeutung, wenn dies mit Hilfe eines klimatischen Kovarianzmodells (siehe 3.2.2) erfolgt. Es werden dafür Felder zu verschiedenen Zeitpunkten als Realisierungen des selben räumlichen Prozesses aufgefasst. Die Zeitreihen der Beobachtungen dienen der Schätzung von stationspaarbezogenen räumlichen Kovarianzwerten. Das klimatische Kovarianzmodell erlaubt aufgrund des erweiterten Ensembles eine höhere räumliche Strukturierung³⁶.

Aufgrund der zeitlichen Persistenz können die Felder zu verschiedenen Zeiten nicht ohne weiteres als unabhängige Realisierung des räumlichen Prozesses angesehen werden (Zwiers und von Storch, 1995). Es bedarf einer Trennung der zeitlichen und räumlichen Kovarianzanteile durch Filterung der Daten (siehe Kapitel 3.2.2.1). Sie entspricht einer zeitlichen Hochpassfilterung, die durch Differenzbildung mit einer geglätteten, die zeitliche Variation widerspiegelnden Datenreihe erfolgt. Das Ensemble der Residuen wird dann zur Schätzung der räumlichen Kovarianz herangezogen. Die Zeitreihe der Residuen muss dazu ergodisch sein.

Im Gegensatz zum klimatischen wird das terminbezogene Kovarianzmodell nur aus den Daten der vorliegenden Realisierung unter der Annahme von räumlicher³⁷ Ergodizität³⁸ gewonnen. Das Konzept der Ergodizität für räumliche Zufallsprozesse ist nur unvollständig ausgearbeitet³⁹ (Cressie, 1993). Analog zur Stationarität ergodischer Zeitreihen ist dabei von einer räumlichen Homogenität auszugehen. Weiterhin gilt die physikalisch sinnvolle Forderung der verschwindenden Kovarianzfunktion für große

³⁶ Dieser Ansatz ist die Grundlage für die Entwicklung von nichtstationären Kovarianzmodellen (Sampson et al., 2001).

³⁷ Das Konzept der räumlichen Ergodizität ist nicht vollständig ausgearbeitet.

³⁸ Die Folge von Ergodizität ist, dass die Parameter des Prozesses aus einer Realisierung gewonnen werden können.

³⁹ Insbesondere für die Turbulenzforschung ist der Zusammenhang zwischen Eulerscher (Zeitmittel) und Lagrangescher (Ensemblemittel) Kovarianzfunktion interessant (Roedel, 1992, S.246).

Abstände. Die Plausibilität der klimatischen Kovarianzmodelle kann mit Hilfe der terminbezogenen überprüft werden.

2.4.2.2 Ergodizität von Zeitreihen

Um für die klimatischen Kovarianzmodelle die Erwartungswerte aus zeitlichen Mittelwerten zu gewinnen, müssen die entsprechenden Zeitreihen ergodisch sein (Schweschnikow, 1965). Der Erwartungswert einer ergodischen und damit stationären Gaußschen Zeitreihe $X(\mathbf{r}, t)$ ergibt sich für den Ort \mathbf{r} aus dem zeitlichen Mittelwert:

$$E(X(\mathbf{r})) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \int_{-t}^t (X(\mathbf{r}, t)) dt \quad \{0.16\}$$

Die räumliche Kovarianz $\text{Cov}(X(\mathbf{r}_1), X(\mathbf{r}_2))$ für zwei Orte \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 kann aus den zwei ergodischen Gaußschen Zeitreihen $X(\mathbf{r}_1, t=t_1 \dots t_2)$ und $X(\mathbf{r}_2, t=t_1 \dots t_2)$ über deren Kreuzvarianz gebildet werden:

$$\text{Cov}(X(\mathbf{r}_1), X(\mathbf{r}_2)) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \int_{t_2}^{t_1} (X(\mathbf{r}_1, t) - E(X(\mathbf{r}_1, t)))(X(\mathbf{r}_2, t) - E(X(\mathbf{r}_2, t))) dt \quad \{0.17\}$$

Für die Ergodizität einer stationären Zeitreihe lässt sich die hinreichende Bedingung angeben, dass für große Zeitdifferenzen Δt die zeitliche Kovarianzfunktion C_t gegen Null geht (Schweschnikow, 1965, S. 167):

$$\lim_{\Delta t \rightarrow \infty} C_t(\Delta t) = 0 \quad \{0.18\}$$

Taubenheim (1969) erläutert die Bedingung für die zeitliche Ergodizität in der spektralen Betrachtungsweise. Danach darf das Spektrum der ergodischen Zeitreihe keine diskreten Spektrallinien enthalten, denn diese führen zu einer Schwingung der Autokovarianzfunktion, die auch für große Zeitabstände erhalten bleibt⁴⁰.

Für die Verwendung von Zeitreihen zur Berechnung der räumlichen Kovarianz für zwei Orte ist die Folge mangelnder Ergodizität sofort einsehbar. Weist das Feld an zwei weit entfernten Orten eine periodische Schwingung⁴¹ bzw. einen linearen Trend auf und werden die lokalen Erwartungswerte durch zeitliche Mittelbildung gewonnen, so wird eine empirische Kovarianz geschätzt, die keine Entsprechung in der räumlichen Dimension hat. Um dies zu vermeiden, muss der periodische Anteil entfernt bzw. dem mittleren Anteil $\mu(\mathbf{r}, t)$ zugeordnet werden.

Trägt man die zeitlichen Kreuzvarianzwerte als Schätzung der räumlichen Kovarianz in Abhängigkeit vom Abstand auf, so sollten die Werte für große Abstände gegen Null streben. Damit besteht die Möglichkeit, die Ergodizität der Zeitreihen $X(\mathbf{r}, t)$ zu testen.

⁴⁰ Die Kovarianzfunktion ist die Fouriertransformierte des Energiespektrums (Wiener-Chinchin-Theorem).

⁴¹ z. B. der durch den Verkehr bedingte Tagesgang der Immission

2.5 Theorie der statistischen Analyse und Datenassimilation

2.5.1 Grundprinzip

Die Analyse stellt die bestmögliche Wiedergabe des Feldes von atmosphärischen Variablen in einer regelmäßigen räumlichen Auflösung dar. Der Begriff Analyse wird dabei auch für die Methode zur Gewinnung der Analyse aus Beobachtungsdaten verwendet. Man spricht von objektiver Analyse, wenn numerische Verfahren für die Analyse angewendet werden (Gandin, 1965).

Die Auflösung der Analyse führt zu einer unteren Schranke für die kleinste darstellbare Skala. Weil die Beobachtungen auch durch nichtaufgelöste Prozesse beeinflusst werden, ist die angemessene Separation⁴² der relevanten Skalen ein wichtiges Problem im Rahmen der Analyseverfahren.

Die modernen Analyseverfahren beruhen auf statistischen Ansätzen zur Interpolation (siehe Kapitel 2.4.1, Interpolation). Sie zeichnen sich dadurch aus, dass sie neben den Beobachtungen \mathbf{y} auf einer unabhängig vorgegebenen Feldverteilung \mathbf{x}_b basieren. Diese wird als Background⁴³ bezeichnet und kann als eine erste Vorgabe für die Analyse betrachtet werden. Es handelt sich dabei meist um ein von einem Eulerschen Modell berechnetes Feld. Ein klimatologisch bestimmtes Feld oder die Analyse eines vorangegangenen Zeitpunkts sind weitere Möglichkeiten für den Background. Die räumliche Auflösung⁴⁴ stimmen in Background und Analyse überein.

Durch die Methodik, einen vorgegebenen Background durch Messungen zu verändern, werden neben der Information aus den Beobachtungen zusätzliche Informationsquellen⁴⁵ für die zu erstellende Analyse herangezogen. Dies ist von Vorteil, wenn die Messungen aufgrund ihrer begrenzten Repräsentativität keine befriedigenden Rückschlüsse auf die gesamte Feldverteilung zulassen, wie es in beobachtungsarmen Gebieten der Fall ist. Dies gilt auch lokal, falls die Messungen Skalen wiedergeben, die in der Analyse nicht enthalten sein sollen.

Im Fall der Datenassimilation ist der Background das von einem Modell berechnete Feld. Der Background \mathbf{x}_b ist somit ein Teil oder der gesamte Zustandsvektor des dynamischen Modells. Die Beobachtungen fließen bei der Datenassimilation in die Modellrechnung ein, indem die Analyse den berechneten Zustandsvektor des Modells ersetzt. Für die statistische Analyse ist die verbundene Wahrscheinlichkeit von \mathbf{x} bei gegebenen \mathbf{y} und \mathbf{x}_b der theoretische Ausgangspunkt:

$$p(\mathbf{x} | \mathbf{y}, \mathbf{x}_b) \quad \{0.19\}$$

⁴² Filterung

⁴³ Der Background darf im Zusammenhang mit der Immissionsanalyse nicht mit einem Hintergrund im Sinne einer unbelasteten bzw. natürlichen Immissionssituation verwechselt werden.

⁴⁴ Falls in der Analyse vom Modell nicht wiedergegebene Skalen dargestellt werden sollen, so wird formal die Auflösung des Backgrounds erhöht. Die Auflösung ist eine technische, die kleinste wiedergegebene Skala eine inhaltliche Fragestellung. Die Auflösung stellt nur die untere Schranke für die kleinste wiedergegebene Skala dar.

⁴⁵ Da die Anzahl der Messwerte im Allgemeinen wesentlich geringer als die der Analysepunkte ist, stellt die Analyse im mathematischen Sinne ein unterbestimmtes Problem dar. Zu dessen Lösung werden weitere Informationsquellen (d. h. der Background) benötigt.

Die Analyse \mathbf{x}_A kann sich aus dem Erwartungswert $\{0.20\}$ oder dem Modalwert $\{0.21\}$ ergeben. Der erste Fall entspricht einer Schätzung nach dem Kriterium der minimalen Varianz, der zweite einem modifizierten⁴⁶ Maximum likelihood Ansatz (Lorenc, 1986):

$$\mathbf{x}_A^{mv} = \int \mathbf{x} p(\mathbf{x} | \mathbf{y}, \mathbf{x}_B) d\mathbf{x} \quad \{0.20\}$$

$$\mathbf{x}_A^{ml} = \mathbf{x} \quad \text{für} \quad p(\mathbf{x} | \mathbf{y}, \mathbf{x}_B) = \max \quad \{0.21\}$$

Datenassimilaton

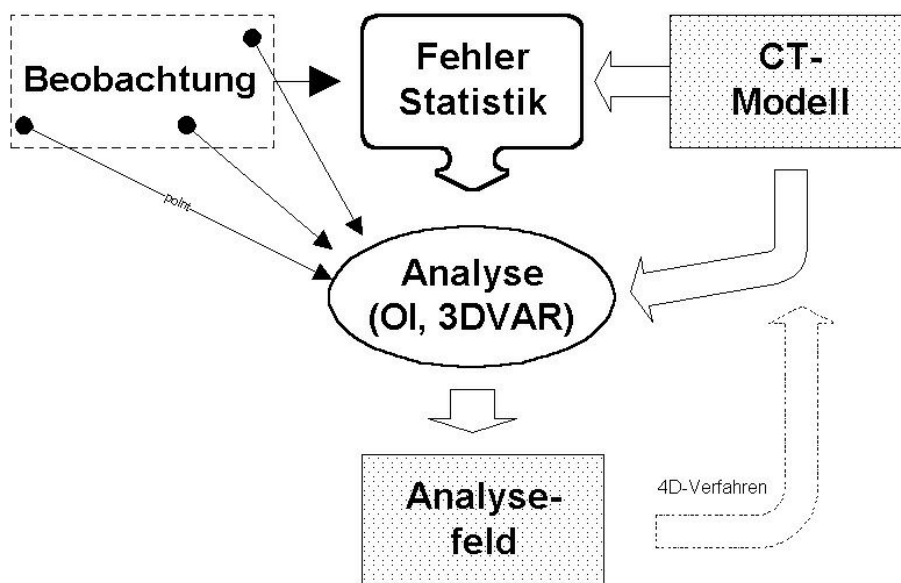


Abbildung 2.2 Schematisches Grundprinzip der Analyse und Datenassimilation

2.5.2 Definition der Fehlermaße

Die Zustandsvektoren bzw. die für Gitterpunkte I gegebenen Felder werden mit dem Vektor \mathbf{x} bezeichnet. Es sind dies der Background \mathbf{x}_B , die Analyse \mathbf{x}_A und das nur methodisch eingeführte „wahre“ Feld \mathbf{x}_{true} . Die Analyse wird durch eine Korrektur des Backgrounds gewonnen. Sie zielt damit auf die Abweichungen⁴⁷ des Backgrounds hinsichtlich des „wahren“ Feldes \mathbf{x}_{true} , das durch \mathbf{x}_A geschätzt wird.

Die Abweichung zwischen der Analyse und dem wahren Wert ist der zu minimierende Analysefehler \mathbf{e}_A :

$$\mathbf{e}_A = \mathbf{x}_A - \mathbf{x}_{true} \quad \mathbf{x}_A \in R^N \quad \{0.22\}$$

⁴⁶ „Maximum a posteriori probability estimation“ Todling R. (1999)

⁴⁷ Damit ergibt sich ein enger Zusammenhang zwischen Analyse und der Modellevaluierung.

Der Fehlervektor des Backgrounds \mathbf{e}_B stellt die Abweichung des Modellzustandsvektors \mathbf{x}_B von dem hypothetischen wahren Zustandsvektor \mathbf{x}_{true} dar:

$$\mathbf{e}_B = \mathbf{x}_B - \mathbf{x}_{true} \quad \mathbf{x}_B, \mathbf{x}_{true} \in R^N, (x_{iB} = 1, N) \quad \{0.23\}$$

Die unregelmäßig verteilten Beobachtungen \mathbf{y} bilden den Vektor \mathbf{y} . Die Fehler der Beobachtungen \mathbf{e}_o sind die Differenzen zwischen den Beobachtungen \mathbf{y} und dem mit dem Beobachtungsoperator H transformierten Zustandsvektor \mathbf{x}_{true} .

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_o &= \mathbf{y} - H(\mathbf{x}_{true}) && \text{Beobachtungsfehler} \\ \mathbf{y} &\in R^m, (y_i, i = 1, m) && \\ H &\in R^{N \times m} && \text{Beobachtungsoperator} \end{aligned} \quad \{0.24\}$$

Der Beobachtungsfehler besteht aus dem Messgerätefehler ($\mathbf{y} - \mathbf{y}_{true}$) und einem Fehler, der durch die Ungenauigkeit des Beobachtungsoperators H hervorgerufen wird. Dieser Anteil kann mit dem Fehler in der Repräsentativität der Messung für die Modellvariable interpretiert werden (siehe Kapitel 2.5.3)

Die aktuellen Werte von Modell- und Beobachtungsfehler sind unbekannt, da die „wahren“ Werte naturgemäß nicht bekannt sind. Die statistische Analyse beruht jedoch auf der Annahme, dass probabilistische Angaben über beide Fehler gemacht werden können. Es wird davon ausgegangen, dass die Fehler von Background und Beobachtung als Gaußsche Zufallsprozesse behandelbar und damit durch den Erwartungswert und die räumliche Kovarianzfunktion ausreichend beschrieben sind.

Die Schätzung dieser Größen aus Modell- und Beobachtungsdaten ist der Inhalt von Kapitel 3. Es wird dabei auf die Beobachtungsinkremente \mathbf{e}_{OB} zurückgegriffen, die im Gegensatz zu den Fehlern direkt bestimmbar sind:

$$\mathbf{e}_{OB} = \mathbf{y} - H(\mathbf{x}_B) \quad \text{Beobachtungsinkrement} \quad \{0.25\}$$

Die räumliche Beziehung der Fehler zwischen den einzelnen Elementen des Modellzustandsvektors bzw. zwischen den einzelnen Beobachtungen wird durch die Kovarianzmatrizen \mathbf{B} und \mathbf{R} erfasst.

Genauso wie der Zustandsvektor \mathbf{x} die Diskretisierung eines kontinuierlichen Feldes darstellt, so ist die Matrix \mathbf{B} die Diskretisierung der räumlichen Kovarianzfunktion C (siehe Kapitel 2.4). Die Beobachtungsfehler werden als unkorreliert angenommen, und so ergibt sich \mathbf{R} als Diagonalmatrix:

$$\mathbf{B} = E(\mathbf{e}_B \mathbf{e}_B^T) = E((\mathbf{x}_B - \mathbf{x}_{true})(\mathbf{x}_B - \mathbf{x}_{true})^T) \quad \{0.26\}$$

$$\mathbf{R} = E(\mathbf{e}_o \mathbf{e}_o^T) = E((\mathbf{y} - H \mathbf{x}_{true})(\mathbf{y} - H \mathbf{x}_{true})^T) = \mathbf{I} E(\mathbf{e}_o^2) \quad \{0.27\}$$

Beide Matrizen sind symmetrisch und positiv definit⁴⁸. Das Quadrat⁴⁹ der Anzahl der Elemente des Modellzustandsvektors bzw. der Beobachtungen ist die Anzahl der Elemente in den entsprechenden Matrizen.

Die Hauptdiagonalelemente von **B** und **R** sind die Varianzen der entsprechenden Fehler s_{BI}^2 und s_{Oj}^2 für jeden Gitterpunkt *I* bzw. jede Beobachtung *j*.

Analog zu den Matrizen **B** und **R** kann die Kovarianzmatrix **A** des Analysefehlers definiert werden:

$$\mathbf{A} = \mathbf{E}(\mathbf{e}_A \mathbf{e}_A^T) = \mathbf{E}((\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_{true})(\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_{true})^T) \quad \{0.28\}$$

2.5.3 Beobachtungsoperator

Im Allgemeinen entsprechen die analysierten Modellvariablen **x** nicht vollkommen den Beobachtungen **y**: Die Beobachtungsorte stimmen meist nicht mit den Gitterpunkten überein bzw. die Modellvariablen besitzen einen anderen räumlichen und zeitlichen Mittelungscharakter als die Beobachtungen. Darüber hinaus können die Modellvariablen und Beobachtungen keine direkte Entsprechung haben, wie dies bei Satellitenbeobachtungen oder bei der hier vorgestellten aktiven Assimilation für PM10 (siehe Kapitel 4.1.7) der Fall ist. Die ursprünglichen Strahlungsmesswerte müssen erst in die prognostische Modellvariable umgerechnet werden bzw. die PM10-Masse muss auf die modellierten PM10-Bestandteile verteilt werden.

Der Übergang⁵⁰ aus dem Raum der Zustandsvektoren **x** (Modell oder Analysefeld) in den der Beobachtungen wird formal durch den Beobachtungsoperator **H** geleistet (Bouttier und Courtier, 1999):

$$\mathbf{y} \leftrightarrow H(\mathbf{x}) \quad \{0.29\}$$

Für die Ableitung der Gleichungen der Gewichte **K** durch eine Minimierung der Varianz des Analysefehlers (siehe Kapitel 2.5.4) wird die Existenz eines linearisierten Beobachtungsoperators **H** gefordert⁵¹. Das bedeutet, dass dieser Beobachtungsoperator auch auf Differenzen bzw. Fehler des Zustandsvektors **x_B** anwendbar ist. **H** ergibt sich aus einer Taylor-Reihenentwicklung von *H*

:

$$H(\mathbf{x}_B + \Delta\mathbf{x}) \approx H(\mathbf{x}_B) + \mathbf{H}\Delta\mathbf{x} \quad \text{mit} \quad \mathbf{H} = \left. \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}_B} \quad \{0.30\}$$

⁴⁸ Diese aus der Autokorrelation über das Bochner-Chinchin Theorem (eine Funktion ist positiv definit, wenn ihr Spektrum positiv ist) ableitbare Eigenschaft muss insbesondere bei der numerischen Behandlung der Backgroundfehlermatrix beachtet werden.

⁴⁹ Im Falle eines REM/Calgrid-Feldes (80*96 Gitterpunkte) hat sie 58 982 400 Elemente.

⁵⁰ z. B. falls Modellvariablen und Beobachtungen keine direkte Entsprechung haben, wie es bei aus Satellitenbeobachtungen abgeleiteten Temperaturprofilen der Fall ist.

⁵¹ Im Rahmen der Datenassimilation mit 3/4DVAR ist diese Forderung nicht nötig. Darum eignet sich dieses Verfahren besonders für komplexe Beobachtungsoperatoren, wie es bei Satellitendaten der Fall ist.

Durch die Linearität ist \mathbf{H} mit der Erwartungswertbildung vertauschbar, so dass \mathbf{H} auf die Kovarianzmatrix \mathbf{B} angewendet werden kann. Die entsprechenden Terme lauten \mathbf{HBH}^T und \mathbf{HB} .

Die elementarste Anwendung des Beobachtungsoperators ist die räumliche Verschiebung: Mit Hilfe des Beobachtungsoperators H oder \mathbf{H} wird der Backgroundwert oder seine Varianz am Gitterpunkt J auf den Ort j der vorliegenden Beobachtung transformiert, um die Beobachtungsinckremente bilden zu können. Die Beobachtung j liegt dabei in der zugehörigen Gitterbox J . Die \mathbf{HBH}^T ist damit die Kovarianzmatrix zwischen den Orten der Beobachtung, \mathbf{HB} zwischen den Beobachtungsorten und den Gitterpunkten. $\mathbf{HBH}^T + \mathbf{R}$ entspricht demzufolge der Kovarianzmatrix der Beobachtungsinckremente \mathbf{e}_{OB} .

Eine numerische Formulierung des Beobachtungsoperators H für den Skalenübergang ist meist nicht bekannt. Eine statistische Beschreibung des Skalenunterschieds kann jedoch mit dem Ansatz {0.6} erfolgen. Mit ihm wird die subskalige Komponente e_{ss} mit dem unkorrelierten Messfehler e zum Beobachtungsfehler zusammengefasst. Der Beobachtungsfehler ist damit auch Ausdruck der Unzulänglichkeit von H . Die Berücksichtigung des Skalenunterschiedes erfolgt somit durch die Erhöhung der Varianz des Beobachtungsfehlers, der Bestandteil der Matrix \mathbf{R} ist.

Der statistische Ansatz für die Skalentrennung geht von einer „Kontaminierung“ des „glatten“ Prozesses durch eine subskalige Komponente mit verschwindendem Mittelwert aus. Dieses Vorgehen ist für Immissionsbeobachtungen nur teilweise gerechtfertigt, da die subskalige Komponente meist ein zusätzlicher und systematischer Aufschlag aufgrund kleinräumiger Emissionen ist. Der auf die Kovarianzmatrix angewendete linearisierte Beobachtungsoperator \mathbf{H} enthält diesen Aufschlag nicht. Die entsprechende Emissionssituation kann aus den in Flemming (2003) bestimmten Immissionsregimes geschlussfolgert werden. Sie werden im folgenden verwendet, um eine sinnvolle Klassifizierung innerhalb des Kovarianzmodells einzuführen (siehe 3.1.3).

2.5.4 Analyse durch Varianzminimierung – Optimale Interpolation

Für die genaue Herleitung der Analysegleichung durch eine Minimum-Varianz-Schätzung mit Hilfe der in Kapitel 2.5.1 angedeuteten Prinzipien wird auf Todling (1999) oder Lorenc (1986) verwiesen. Die Herleitung wird vereinfacht, wenn man von folgendem linearen Ansatz ausgeht:

$$\mathbf{x}_a = \mathbf{x}_b + \mathbf{K}(\mathbf{y} - H(\mathbf{x}_b)) \quad \{0.31\}$$

Die Analyse wird dabei aus dem Background \mathbf{x}_b und den Beobachtungsinckrementen $(\mathbf{y} - H\mathbf{x}_b)$ gebildet. Die Matrix \mathbf{K} legt die Gewichte für den Einfluss der Beobachtungsinckremente fest.

Die Gleichung für die Gewichte {0.35} wird aus der Minimierung⁵² der Gesamtvarianz des Analysefehlers s^2_A gewonnen. Die Gesamtvarianz s^2_A ist die Spur Tr der Kovarianzmatrix des Analysefehlers \mathbf{A} {0.28}.

$$Tr(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^N s_{iA}^2 = \sum_{i=1}^N E((x_{iA} - x_{itrue})^2) \rightarrow \min \quad \{0.32\}$$

Bei der Minimierung werden folgende Voraussetzungen gemacht:

1. Kein Bias zwischen den Beobachtungen und dem Modellfeld:

$$E(\mathbf{e}_B) = E(\mathbf{e}_O) = \mathbf{0} \quad \{0.33\}$$

2. Keine Korrelation (Kovarianz) zwischen den Fehlern von Modell und Beobachtungen:

$$E(\mathbf{e}_O \mathbf{e}_B^T) = \mathbf{0} \quad \{0.34\}$$

3. Existenz eines linearisierten Beobachtungsoperators, der auf die Kovarianzmatrizen des Backgroundfehlers \mathbf{B} anwendbar ist.

Unter diesen Voraussetzungen ergibt sich für \mathbf{K} das folgende Gleichungssystem aus den Kovarianzmatrizen von Background \mathbf{B} und Beobachtung \mathbf{R} .

$$\begin{aligned} (\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R}) \mathbf{K}^T &= \mathbf{H}\mathbf{B} \\ \text{bzw. Invertierbarkeit} & \\ \mathbf{K} &= \mathbf{H}\mathbf{B}(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1} \end{aligned} \quad \{0.35\}$$

Setzt man Gleichung {0.31} in Gleichung {0.28} ein, so ergibt sich die Matrixgleichung für die Kovarianzmatrix des Analysefehlers \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{B}(\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})^T + \mathbf{K}\mathbf{R}\mathbf{K}^T \quad \{0.36\}$$

Mit den optimalen Gewichten \mathbf{K} vereinfacht sich der Ausdruck für den Analysefehler:

$$\mathbf{A} = \mathbf{B} - \mathbf{K}\mathbf{H}\mathbf{B} \quad \{0.37\}$$

2.5.5 Vereinfachung und Diskussion der Analysegleichungen

Die Struktur der Analysegleichungen {0.31} und {0.35} kann durchschaubarer gemacht werden, wenn die Analyse nur für einen Wert x_{AJ} am Punkt J formuliert wird. Eine weitere Vereinfachung ergibt sich, wenn nur eine Auswahl von $i = 1, n_J$ Stationen zur Interpolation am Punkt J beiträgt. Der Backgroundwert x_{Bi} an den Beobachtungsort-

⁵² Gleichwertig ist eine maximum-likelihood-Schätzung der Wahrscheinlichkeitsfunktion bei Gaußschen pdfs (Lorenc, 1986).

ten i wird durch den Beobachtungsoperator⁵³ $H(x_{BI})$ aus dem zugehörigen Gitterpunktswert gewonnen:

$$x_{AJ} = x_{BJ} + \sum_{i=1}^{n_J} k_{ji} (y_i - x_{Bi}) \quad \{0.38\}$$

Diese Form der Analyse ist von Gandin (1965) unter dem Begriff **Optimale Interpolation** in die Meteorologie eingeführt worden. Die Schätzung der räumlichen Kovarianzfunktionen beruht bei den meisten weiteren Anwendungen auf homogenen und meist isotropen Verhältnissen.

Es erscheint sinnvoll, nur Stationen in der Nähe des Analysepunktes zu verwenden. Das Verschwinden der Kovarianz **HB** kann als ein formales Kriterium für die Auswahl gelten. Es zeigt sich jedoch häufig, dass eine viel geringere Anzahl⁵⁴ für die Analyse ausreicht, d. h. keine wesentlichen Veränderungen hinzukommen⁵⁵. Durch die Datenselektion wird der numerische Aufwand für die Analyse stark reduziert, da für jeden Gitterpunkt ein Gleichungssystem von deutlich geringerer Größe gelöst werden muss. Die Analyse zeichnet sich durch folgende Eigenschaften aus, die aus der Diskussion von Gleichung {0.39} begründet werden:

- Hohe Kovarianz des Backgrounds zwischen Beobachtungsort und Analysepunkt führen zu hohem Einfluss des zugehörigen Beobachtungsincrements.
- Hohe Kovarianz des Backgrounds zwischen zwei Beobachtungsorten verringert den Einfluss der zugehörigen Beobachtungsincremente.
- Hohe Varianz des Beobachtungsfehlers einer Messung führt zu einem geringen Einfluss des zugehörigen Beobachtungsincrementes.

Durch die Stationsauswahl vereinfacht sich die Matrixgleichung {0.35} zu einem inhomogenen linearen Gleichungssystem n_J -ter Ordnung für die Gewichte k_{ji} :

$$\begin{pmatrix} b_{11} + r_{11} & \cdots & b_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{1n} & \cdots & b_{nn} + r_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_{j1} \\ \vdots \\ k_{jn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{j1} \\ \vdots \\ b_{jn} \end{pmatrix} \quad \{0.39\}$$

Die k_{ji} werden hauptsächlich durch die rechte Seite, d. h. die Kovarianzen des Backgroundfehlers b_{ji} zwischen den Beobachtungsorten i und dem Analysepunkt J bestimmt. Je ausgeprägter die Beziehung, ausgedrückt durch die Kovarianzen, zwischen Beobachtungsort und Interpolationspunkt ist, desto wichtiger wird das ermittelte Beobachtungsincrement für die Analyse.

Die Matrix der linken Seite beschreibt die Eigenschaften und Beziehungen zwischen den Beobachtungen. Dabei werden die Beobachtungsfehler und die Beziehung des

⁵³ Der Beobachtungsoperator ist hier eine bilineare Interpolation von den Gitterpunktswerten am Stationort.

⁵⁴ Gandin zeigt für das 500 hPa Geopotential, dass ca. 10 Stationen ausreichend sind.

⁵⁵ Dies gilt nicht, wenn Gradienten etc. des Feldes betrachtet werden, da hier die von Punkt zu Punkt veränderliche Stationsauswahl zu Sprüngen führen kann.

Backgroundfeldes an den Beobachtungsorten berücksichtigt. Eine hohe Varianz des Beobachtungsfehlers $r_{ii} = s_{O_i}^2$ der Messung i verringert den Einfluss der Beobachtung i für die Analyse. Die Stärke dieser Verringerung wird durch Varianz des Backgroundfehlers $b_{ii} = s_{B_i}^2$ relativiert. Es lässt sich zeigen, dass das Verhältnis s_{O_i} und s_{B_i} für die Bewertung des Beobachtungsincrements am Ort i entscheidend ist (siehe Kapitel 3.3.3.2).

Weiterhin trägt die Beobachtungsfehlervarianz zur numerischen Stabilität des Gleichungssystems bei. Ohne ihn könnte die Matrix \mathbf{HBH}^T durch zwei nahezu identische Beobachtungsorte singulär werden.

Die Nichtdiagonalelemente b_{ij} ($i \neq j$) beschreiben die Beziehungen⁵⁶ der Backgroundfehler an verschiedenen Beobachtungsorten zueinander. Hohe Werte der Kovarianz für zwei Orte reduzieren die individuellen Gewichte beider Beobachtungsincremente. Die Beobachtungsincremente sind in diesem Fall nicht unabhängig. Ihr individueller Einfluss auf den Analysewert sollte individuell kleiner sein als der eines unabhängigeren Beobachtungsincrements. Das Berücksichtigen der Beziehungen zwischen den Beobachtungsorten wird als „declustering“ bezeichnet und ist ein Vorteil der statistischen Analyse gegenüber anderen Verfahren. Durch ihn wird die variable Stationsdichte⁵⁷ berücksichtigt: Geht man von einem homogenen und isotropen Kovarianzmodell aus⁵⁸, so erhalten alle Beobachtungen mit dem gleichen Abstand zum Analysepunkt das gleiche Gewicht. Befinden sich nun viele dieser Stationen dicht gedrängt, z. B. in einer Stadt, so würde der Analysewert stark durch die Beobachtungsincremente aus diesem Gebiet beeinflusst werden. Die Berücksichtigung der Kovarianzen des Backgroundfehlers führt jedoch dazu, dass der ungerechtfertigt hohe Einfluss dieses Gebietes verringert wird.

Aus der Gleichung {0.36} ergibt sich die Varianz des Analysefehlers im Falle optimal spezifizierter Gewichte k_{ji} aus:

$$s_{JA}^2 = s_{JB}^2 - \sum_{i=1}^{n_I} k_{ji} b_{ji} \leq \hat{s}_{JA}^2$$

Die Varianz des Fehlers der optimalen Analyse s_{JA}^2 liegt unter dem des Backgrounds s_{JB}^2 . Der Wert stellt die theoretische untere Schranke für die tatsächliche Varianz des Analysefehlers \hat{s}_{JA}^2 dar, bei nicht optimalen Koeffizienten aufgrund unzureichender Kenntnis der Matrizen \mathbf{B} und \mathbf{R} . Für eine suboptimale aber sinnvolle Interpolation sollte \hat{s}_{JA}^2 kleiner als s_{BI}^2 sein.

Eine Möglichkeit, den tatsächlichen Analysefehler abzuschätzen, ergibt sich durch einen cross-validation-Ansatz für die Stationsorte. Dabei werden die Stationswerte prognostiziert, ohne sie bei der Interpolation zu verwenden (siehe Kapitel 4.2).

2.5.6 Variationsansätze

Neben der Minimierung der Varianz des Analysefehlers⁵⁹ (siehe Kapitel 2.5.1) kann die Analyse als Variationsproblem formuliert werden. Der Ausgangspunkt ist die maximum-likelihood-Schätzung für die Analyse, die sich aus den mehrdimensionalen

⁵⁶ Da keine Korrelation der Beobachtungsfehler angenommen wird, gilt $r_{ij} = 0$ für $i \neq j$.

⁵⁷ Die Immissionsbeobachtungen zeichnen sich durch große Unterschiede in der Stationsdichte aus.

⁵⁸ gleichbedeutend mit einer reinen Abstandsabhängigkeit

⁵⁹ entspricht der Bestimmung des Erwartungswertes

Wahrscheinlichkeitsfunktionen für Background und Beobachtung ergibt (siehe Gleichung {0.19}). Gehorchen diese einer Gauß-Verteilung, so ist das Ergebnis des Ansatzes identisch mit dem der Varianzminimierung (Lorenc, 1986).

Das Ergebnis des Maximum-Likelihood-Ansatzes ist eine skalare Kostenfunktion J {0.40}, die ihr Minimum bei dem wahrscheinlichsten Wert für $\mathbf{x} = \mathbf{x}_A$ hat. Die Kostenfunktion besteht aus zwei Teilen, die die Abweichungen zum Background und zu den Beobachtungen bewerten. Die inversen Kovarianzmatrizen der Fehler von Background \mathbf{B} und Beobachtung \mathbf{R} dienen als verallgemeinerte Gewichte. Je höher der Fehler, umso geringer wird die Abweichung bewertet.

Die Analyse wird durch die Minimierung der Kostenfunktion gefunden, die auf dem Gradient von J beruht. Ein Vorteil des Variationsansatzes ist, dass der Beobachtungsoperator nicht linearisiert werden muss. Weiterhin können leicht Zwangsbedingungen eingeführt werden, denen der Zustandsvektor exakt oder in möglichst hohem Maße gehorchen soll (Sasaki, 1970). Dafür bieten sich physikalische und chemische Gleichgewichte⁶⁰ oder eine Modellrechnung an. In der 4-dimensionalen Variationsrechnung (4D-VAR) werden die Abweichungen zu den Beobachtungen für mehrere Zeitpunkte einbezogen. Dabei gilt die starke Zwangsbedingung, dass die Modellzustandsvektoren \mathbf{x} für verschiedene Zeiten durch eine Modellintegration gebildet werden. Für die iterative Bestimmung des Minimums der Kostenfunktion wird der Gradient der Kostenfunktion verwendet. Für seine Berechnung wird die Adjungierte des linearisierten⁶¹ Modelloperators (adjoint model) benötigt (Bouttier und Courtier, 1999). Sie entspricht der transponierten Linearisierung des ursprünglichen Modells. Für die mit zeitlichen Differenzenschemata formulierten Modellteile (Advektion, Chemie etc.) ist die Programmierung des adjungiert-linearen Modells möglich (Talagrand, 1997). Im Rahmen der Chemie-Transport-Modellierung wird 4D-VAR für das EURAD-Modell verwendet (Elbern und Schmidt, 1997, 2001):

$$J(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_B)^T \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_B) + \sum_{i=1}^{n_t} (\mathbf{y}^i - H\mathbf{x}^i)^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y}^i - H\mathbf{x}^i) \quad \{0.40\}$$

$$\begin{aligned} J(\mathbf{x}_A) &= \min \quad \text{mit Zwangsbedingung} \quad \mathbf{x}^{i+1} = M\mathbf{x}^i \\ M &\quad \dots \quad \text{Modelloperator} \\ \text{Zeitpunkte } i &= 1 \dots n_t \end{aligned} \quad \{0.41\}$$

2.5.7 Kalman-Filter

Der Kalman-Filter⁶² kann als ein vierdimensionales Verfahren zur Datenassimilation verwendet werden. Sein Grundprinzip ist der Wechsel von Prognose und Analyse des Modellzustandsvektors \mathbf{x} und seiner Fehlerkovarianzmatrix \mathbf{P} ⁶³ (Abbildung 2.3). Der

⁶⁰ z. B. das geostrophische Gleichgewicht für Wind- und Geopotentialfelder bzw. das fotostationäre Gleichgewicht.

⁶¹ Die Linearisierung komplexer Modelle ist, wenn überhaupt, nur für kleine Zeitschritte möglich. Man spricht dann von dem tangential-linearisierten Modell.

⁶² Kalman-Filter sind eine große Gruppe von optimalen rekursiven Methoden zur Prognose. Sie müssen nicht wie hier mit einem dynamischen Modell gekoppelt sein.

⁶³ Da diese sich ständig verändert, wird sie in Abgrenzung zur empirischen Kovarianzmatrix \mathbf{B} mit \mathbf{P} bezeichnet.

Kalman-Filter ist für lineare Modelle formuliert. Er wird als Kalman Bucy Filter für nichtlineare Modelle erweitert, wenn das Modell M durch eine lineare Approximation \mathbf{M} für die Prognose der Kovarianzmatrix der Fehler \mathbf{P} verwendet werden kann⁶⁴ {0.43}. Bei dieser Prognose wird der Fehlerhaftigkeit des Modells durch die Modellprognosefehlermatrix \mathbf{Q} Rechnung getragen. Liegen Messungen \mathbf{y} vor, so erfolgt eine Analyse \mathbf{x}_A , bei der der prognostizierte Zustandsvektor an die Messungen angepasst wird {0.45}. Die prognostizierte Kovarianzmatrix \mathbf{P}^{t+1} und die Fehlervarianzen der Messungen bestimmen dabei die Analysegewichte \mathbf{K} {0.44}. Gleichzeitig wird die Kovarianzmatrix für den analysierten Zustand \mathbf{P}_A berechnet {0.46}. Die Analysen des Modellzustandes und der Kovarianzmatrix werden nun als Ausgangspunkt für den nächsten Prognoseschritt verwendet.

$$\begin{array}{ll} \text{Prognose des Zustandsvektors:} & \\ \mathbf{x}^{t+1} = \mathbf{M}\mathbf{x}_A & \{0.42\} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{Prognose der Fehlerkovarianzmatrix:} & \\ \mathbf{P}_B^{t+1} = \mathbf{M}\mathbf{P}_A^t\mathbf{M}^T + \mathbf{Q} & \{0.43\} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{Bestimmung der Analysegewichte:} & \\ \mathbf{K}^t = \mathbf{H}\mathbf{P}_B^t(\mathbf{H}\mathbf{P}_B^t\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1} & \{0.44\} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{Analyse des Zustandsvektors:} & \\ \mathbf{x}_A^t = \mathbf{x}_B^t + \mathbf{K}^t(\mathbf{y}^t - \mathbf{H}\mathbf{x}_B^t) & \{0.45\} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{Bestimmen der Fehlerkovarianzmatrix der Analyse:} & \\ \mathbf{P}_A^t = (\mathbf{I} - \mathbf{K}^t\mathbf{H})\mathbf{P}_B^t & \{0.46\} \end{array}$$

Der Analyseschritt gleicht dem nach dem Minimum-Varianz-Ansatz {0.31}. Es gelten auch für den Kalman-Filter die gleichen Voraussetzungen, d. h. kein Bias und keine Korrelation zwischen den Modell- und Beobachtungsfehlern. Für die Berechnung der Fehlerkovarianzen wird von deren Normalverteilung ausgegangen.

Die Besonderheit des Kalman-Filters besteht in der Prognose und Analyse der Kovarianzmatrix \mathbf{P} . Die Prognose ist dynamisch und durch die zugrundeliegenden Modellgleichungen bestimmt. Dadurch können Zusammenhänge innerhalb des Zustandsvektors (z. B. Advektion oder chemische Kopplung) erfasst und bei der Analyse berücksichtigt werden: Ist eine entsprechende statistische Beziehung in \mathbf{P} entwickelt worden, so erfolgt eine Korrektur auch in Teilen des Zustandsvektors, für die keine direkten Beobachtungen vorliegen. Durch das mehrmalige Durchlaufen des Zyklus wird der Analysefehler schrittweise bis zu einem Konvergenzniveau verringert. Für die Initialisierung des Kalman-Filters muss eine Kovarianzmatrix aus anderen Quellen bereitgestellt werden.

Im einfachsten Fall ist die Kovarianzmatrix \mathbf{Q} des Modellprognosefehlers eine reine Diagonalmatrix, die den Elementen des Zustandsvektors eine Varianz (Unsicherheit) zuordnet. Nichtprognostische Modellparameter können in gewissem Sinne überprüft werden, indem man sie in den Zustandsvektor und die Analyse mit einbezieht. Bewirkt die Analyse zu verschiedenen Zeitpunkten eine gleichgerichtete Korrektur dieser Werte, so deutet dies auf einen systematischen Fehler hin, der im Modell korrigiert werden kann. Aufgrund des rein statistischen Zusammenhanges muss jedoch sichergestellt

⁶⁴ Vereinfachend wird bei der Datenassimilation jedoch nur vom Kalman-Filter gesprochen.

werden, dass die richtige Ursache für die Modellfehler gefunden wurde und kein unphysikalisches und rein episodenbezogenes „Modelltuning“ vorgenommen wird. Van Loon et al. (1999) verwenden diesen Ansatz, um Emissionsangaben in dem Modell LOTOS für eine bessere Modellleistung zu verändern.

Der numerische Aufwand für die Prognose der Kovarianzmatrix ist sehr groß und würde N Modellintegrationen entsprechen, wobei N die Anzahl der Elemente des Modellzustandsvektors ist⁶⁵. Aus diesem Grund sind Vereinfachungen nötig. Mit dem RRSQRT-Ansatz (reduced rank square root, siehe Kapitel 2.5.8) wird die Kovarianzmatrix auf die wichtigen Moden der Variabilität beschränkt, so dass der Rechenzeitbedarf nur ca. 50-100 Modellintegrationen entspricht (Heemink et al., 1999). Für die Chemie-Transport-Modellierung werden Kalman-Filter-Ansätze z. B. für das LOTOS-Modell angewendet (van Loon und Heemink, 1997):

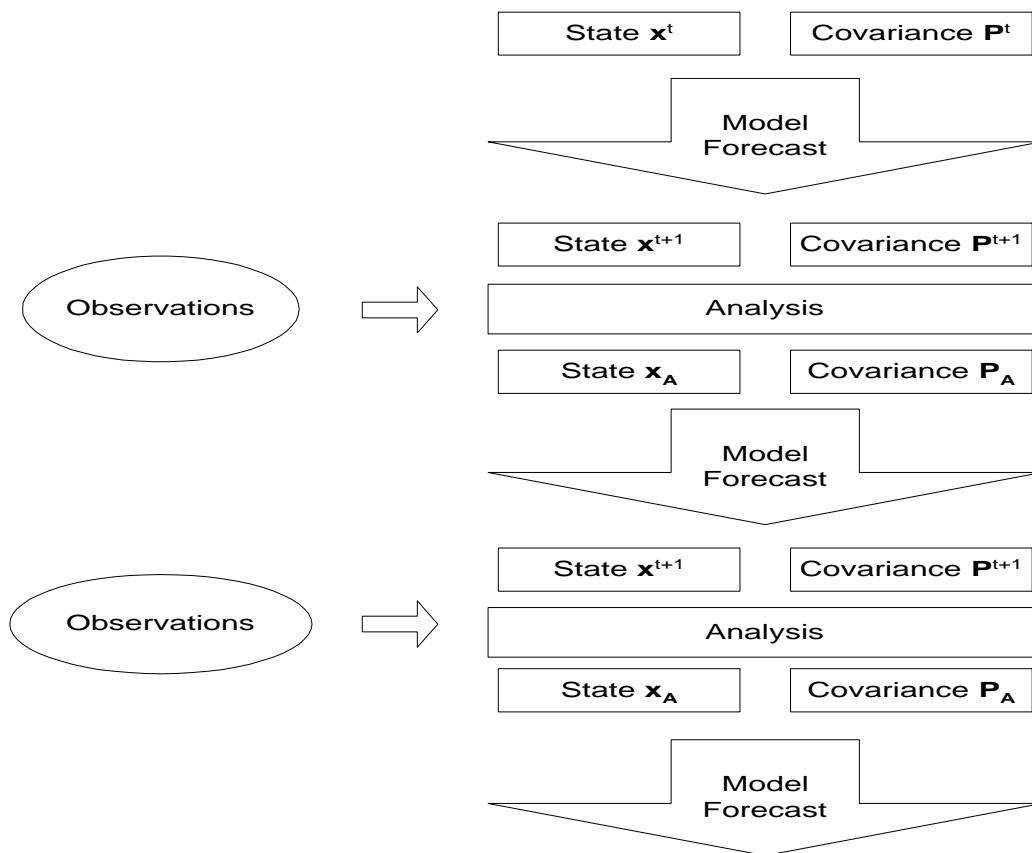


Abbildung 2.3 Funktionsprinzip des Kalman-Filters

2.5.8 RRSQRT-Ansatz für Kalman-Filter

Die Abkürzung RRSQRT steht für reduced rank square root. Es ist eine Methode, die Prognose der Kovarianzmatrix \mathbf{P} für nichtlineare Modelle M zu realisieren, ohne explizit eine linearisierte Form \mathbf{M} angeben zu müssen (van Loon und Heemink, 1997). Zunächst wird die originale Kovarianzmatrix \mathbf{P} durch die square root Matrix \mathbf{S} („Wurzelmatrix“) ausgedrückt:

⁶⁵ REM/Calgrid besitzt einen Zustandsvektor mit ca. 10^6 Elementen, der Rechenzeitaufwand beträgt damit für den vollständigen KBF das 10^6 -fache der Modellrechenzeit.

$$\mathbf{P} = \mathbf{S}\mathbf{S}^T \quad \{0.47\}$$

Dadurch wird auch erreicht, dass die Matrix \mathbf{P} immer positiv definit ist, was bei einer direkten Behandlung von \mathbf{P} aufgrund von numerischen Ungenauigkeiten nicht immer der Fall sein muss. Die square root Matrix \mathbf{S} ist eine Matrix aus m Reihen von Vektoren der Größe des Modellzustandsvektors \mathbf{x} :

$$\mathbf{S} = [\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_3 \cdots \mathbf{x}'_m] \quad \{0.48\}$$

Die Anzahl m der Spalten bestimmt den Rang der Matrix \mathbf{P} und damit deren statistische Güte. Für eine approximative Darstellung von \mathbf{P} kann \mathbf{S} jedoch eine bedeutend geringere Anzahl von Spalten als die Dimension von \mathbf{x} haben (Seghers, 2002). Selbst mit einer einspaltigen Matrix \mathbf{S} lässt sich eine gültige Kovarianzmatrix bilden.

Anschaulich kann man sich die Spalten von \mathbf{S} als ein Ensemble von $j = 1, m$ verschiedenen, d. h. gestörten Modellzuständen \mathbf{x}' , von denen der jeweilige Mittelwert abgezogen wurde, vorstellen. Je größer die Anzahl m , um so mehr Ensembleelemente, d. h. Realisierungen von Modellzuständen, wurden verwendet, um die Varianzen bzw. Kovarianzen in der Matrix \mathbf{P} zu berechnen.

Die Formulierung der Kalman-Filter-Gleichungen erfolgt mit der Matrix \mathbf{S} und die Prognose von \mathbf{P} wird mit einer Prognose von \mathbf{S} ersetzt {0.43}. Dafür wird zu jeder Spalte von \mathbf{S} ein Grundzustand addiert, so dass m Realisierungen eines Modellzustandsvektors entstehen. Diese können mit Hilfe des Computercodes des Modells M prognostiziert werden. Anschließend wird durch Abzug des prognostizierten Grundzustandes die prognostizierte Matrix \mathbf{S}^{t+1} gebildet.

Um den Modellfehler, ausgedrückt durch die Matrix \mathbf{Q} , in die Prognose der Matrix \mathbf{S} einfließen zu lassen, werden q zusätzliche Modellzustände mit einer Störung zeitlich integriert. Die Störung wird gebildet, indem ausgewählte Modellparameter wie die Emission oder die Stärke des vertikalen Austauschs verändert werden. Sie werden mit angenommenen Unsicherheiten der Modellierung quantifiziert und als q Rausch-Parameter (noise) formuliert. Die Differenz der so gestörten Zustände \mathbf{x}^* vom Grundzustand werden als zusätzliche Spalten in die square root Matrix \mathbf{S} aufgenommen. Mit jedem Prognoseschritt erhöht sich demzufolge die Anzahl der Spalten in \mathbf{S} um q :

$$\mathbf{S}^{t+1} = [\mathbf{x}'_1^{t+1}, \mathbf{x}'_2^{t+1}, \mathbf{x}'_3^{t+1} \cdots \mathbf{x}'_m^{t+1}, \mathbf{x}^*_{1^*} \cdots \mathbf{x}^*_{q^*}] \quad \{0.49\}$$

Um die Anzahl der Spalten von \mathbf{S} und damit die Anzahl der notwendigen Modellschritte konstant zu halten, wird eine Eigenvektoraufspaltung der Matrix \mathbf{P} vorgenommen. Für den nächsten Prognoseschritt werden dann nur die m größten Eigenvektoren beibehalten. Die Matrix \mathbf{S} wird damit durch Modellzustände repräsentiert, die einen wesentlichen Anteil an der Varianz bilden. Sie heißen darum auch die **Moden** von \mathbf{S} . Im übertragenen Sinn bedeutet die Eigenvektoraufspaltung, dass gestörte Modellzustände konstruiert werden, die ein bedeutsames Anwachsen der Varianz vermuten lassen. Ohne die Eigenvektoraufspaltung wäre ein großes Ensemble von Modellzuständen nötig, um \mathbf{P} in ausreichender Güte zu gewinnen. Durch die Einführung von Moden reicht eine geringere Anzahl von Spalten und damit von notwendigen Modellprognosen aus, um \mathbf{P} gleichwertig zu repräsentieren.

Zum Beginn der Kalman-Filter Rechnung sind die Matrizen \mathbf{S} bzw. \mathbf{P} unbekannt. Man nimmt für sie Null Matrizen an. Mit jedem Prognoseschritt werden q neue Spalten in

die Matrix **S** eingebettet, um den stochastischen Modellfehler zu berücksichtigen. Übersteigt die Anzahl der Spalten die Anzahl m von handhabbaren Moden, so wird deren Anzahl mit der Eigenvektoraufspaltung auf die m größten beschränkt. Somit wird kontinuierlich die Matrix **S** bzw. **P** entwickelt. Dabei ist zu beachten, dass nur Kovarianzen modelliert werden, die durch die Wahl der Störung, z. B. Emissionsvariationen, im Modell entstehen. Die maximale Anzahl der notwendigen Moden muss durch Konvergenzkriterien und die numerische Kapazität festgelegt werden. In den zitierten Anwendungen von LOTOS werden ca. 30-50 Moden verwendet.

Es ist günstig, den konkreten Wert der q Rausch-Parameter (noise), z. B. eine Erhöhung der NO_x -Emission, in den Modellzustand einzubeziehen. Jeder Analyseschritt verändert diese Werte im Lichte der vorliegenden Beobachtungen aufgrund der aufgebauten Kovarianzen. Die Auswirkung der gebildeten noise-Parameter auf die Modellrechnung ist dadurch erkennbar.

3 Kovarianzmodellierung der Immissionsfelder

Im Kapitel 2.5 wurde die statistische Analyse der Immission auf Basis der Kovarianzmatrizen von Background und Beobachtungen beschrieben, ohne Hinweise über deren Gewinnung zu geben. Die korrekte Schätzung dieser statistischen Momente, d. h. \mathbf{HBH} , \mathbf{HB} und \mathbf{R} und der Erwartungswerte, ist das Hauptproblem bei der Analyse. Sie werden mit Hilfe von Kovarianzmodellen geschätzt und ausgedrückt. Das Kapitel beinhaltet einen Überblick über die Kovarianzmodellierung und stellt die für dieses Forschungsvorhaben entwickelten Kovarianzmodelle vor. Die Varianz des Beobachtungsfehlers \mathbf{R} wird häufig durch subjektive Abschätzung festgelegt. Die Beobachtungsmethode (siehe Kapitel 3.2.6) stellt eine Möglichkeit dar, den Beobachtungsfehler mit Hilfe eines Kovarianzmodells des Backgrounds und der Varianz der Beobachtungssinkremente zu bestimmen. Im Kapitel 3.3 werden die Ergebnisse vorgestellt und diskutiert.

3.1 Kovarianzmodelle für räumliche Prozesse

Da der betrachtete räumliche Zufallsprozess X bzw. seine Diskretisierung \mathbf{x} nur unzureichend bekannt ist, müssen seine Momente aus Stichproben geschätzt werden. Das Ergebnis der Schätzung ist ein Kovarianzmodell, das alle benötigten Kovarianzen für die Analyse liefert. Dieses Kovarianzmodell beruht neben der Stichprobeninformation auf vereinfachenden Annahmen, um die Information der Stichprobe z. B. auf Orte ohne Messinformation zu erweitern. Die Unterschiede dieser Annahmen sind entscheidend für die verschiedenen Typen von Kovarianzmodellen. In einem weiteren Sinne wird in diesem Bericht auch die Ableitung der Beobachtungsfehler mit Kovarianzmodellen als Kovarianzmodellierung bezeichnet.

Die Kovarianzmatrix \mathbf{B} ist für große Zustandsvektoren nicht handhabbar⁶⁶. Die zusammenfassende Beschreibung von \mathbf{B} stellt weiterhin eine wichtige Aufgabe des Kovarianzmodells dar, auch wenn \mathbf{B} vollständig bekannt wäre.

Von entscheidender Bedeutung für die Kovarianzmodellierung und die gesamte Analyse ist die Bestimmung des Erwartungswertes. Im Falle der Datenassimilation fungiert der Background, d. h. das biasfreie Modellfeld, als Erwartungswert. Die Bestimmung des Bias ist damit genauso wie die Schätzung des Beobachtungsfehler Bestandteil der Kovarianzmodellierung.

Es gibt unterschiedlichste Varianten der Kovarianzmodelle, die sich durch ihre Komplexität, ihren Aufwand und ihren Erfolg bei der Analyse unterscheiden. Im Folgenden wird versucht, eine Klassifizierung der Einteilungsprinzipien von Kovarianzmodellen zu geben. Kovarianzmodelle können unterteilt werden nach der Art

⁶⁶ das Quadrat der Anzahl der Elemente des Zustandsvektors

- ihrer Gewinnung (empirisch – dynamisch)
- des wahrscheinlichkeits-theoretischen Ansatzes (bayessch)
- ihrer Darstellung (parametrisch – nichtparametrisch)
- der zugrundeliegenden Annahmen hinsichtlich des Prozesses (homogen, isotrop, normalverteilt etc.)
- der räumlichen oder zeitlichen Aggregation des Stichprobenmaterials (terminbezogen oder klimatisch⁶⁷)

Empirische oder dynamische Kovarianzmodelle

Empirische Kovarianzmodelle werden mit Hilfe von empirisch geschätzten Kovarianzwerten gewonnen. Dynamische Kovarianzmodelle sind aus Kenntnissen der zugrundeliegenden physikalischen Vorgänge abgeleitet (Balgovind et al., 1983). Beim Kalman-Filter wird die Kovarianzmatrix dynamisch mit einem deterministischen Modell bestimmt.

Nichtbayessche (klassische) oder bayessche Kovarianzmodelle

Die klassischen Methoden beruhen auf der Annahme, dass die Kovarianzfunktion unbekannt, aber feststehend ist und durch empirische Daten geschätzt werden kann. Bayesianische Ansätze erlauben es, eine Wahrscheinlichkeitsfunktion für die Parameter der Kovarianzfunktion zu berücksichtigen.

Parametrische oder nichtparametrische Kovarianzmodelle

Parametrische Kovarianzmodelle gehen von einer bestimmten analytischen Funktion der Kovarianzfunktion aus. Deren Parameter werden durch Approximation (Fit) der Funktion mit empirischen Kovarianzwerten gewonnen. Dabei ist ein Kompromiss zwischen der Anzahl der Parameter und der Güte ihrer Schätzung zu finden.

Nichtparametrische Kovarianzmodelle verzichten auf die Approximation mit einer analytischen Funktion. Sie verwenden Kernel-Ansätze (Altman, 1990) oder eine Eigenvektoraufspaltung (SVD) der empirischen Kovarianzmatrix **HBH** an den Beobachtungsorten und deren Interpolation für **HB** (siehe Kapitel 3.2.5.2).

Homogene, isotrope oder normalverteilte Kovarianzmodelle

Um ein Ensemble mit gleichen statistischen Eigenschaften für die Schätzung der empirischen Kovarianzwerte zu bilden, sind vereinfachende Annahmen notwendig. Der Standardfall für die Kovarianzmodellierung ist dabei die Annahme von Homogenität und Isotropie, so dass das Kovarianzmodell nur abstandsabhängig ist. Ist der betrachtete Prozess normalverteilt, so kann der Erwartungswert mit dem arithmetischen Mittelwert geschätzt werden.

Terminbezogene oder klimatische Kovarianzmodelle

Terminbezogene Kovarianzmodelle werden empirisch aus rein räumlichen Daten für einen Zeitpunkt geschätzt. Klimatische Kovarianzmodelle verwenden die Daten zu mehreren Terminen, um die räumliche Kovarianz zu schätzen (siehe Kapitel 2.4.2.1). Es wird dabei davon ausgegangen, dass die Felder zu verschiedenen Zeitpunkten unab-

⁶⁷ Diese Bezeichnung wurde vom Verfasser eingeführt, um beide Methoden begrifflich zu unterscheiden. Sehr häufig wird der Unterschied zwischen beiden Ansätzen nicht herausgearbeitet. Es kann jedoch zu Fehlern der geschätzten räumlichen Kovarianz führen, falls die zeitliche Korrelation nicht beachtet wird.

hängige Realisierungen eines räumlichen Zufallsprozesses sind. Um diese Annahme zu rechtfertigen, müssen die Zeitreihen gefiltert werden (siehe Kapitel 2.4.2. und 3.2.2). Die Abbildung 3.1 vergleicht schematisch die beiden Methoden. Im klimatischen Fall kann für jedes Paar von Beobachtungen ein Kovarianzwert angegeben werden. Damit ist eine differenzierte räumliche Struktur erfassbar. Die terminbezogenen⁶⁸ Kovarianzmodelle benötigen Toleranzgebiete zur Ensemblebildung und verlangen aufgrund des beschränkten Datenangebots meist die Annahme von Homogenität⁶⁹ und Isotropie. Durch die Zusammenstellung von terminbezogenen Kovarianzmodellen zu verschiedenen Zeitpunkten kann jedoch die zeitliche Variabilität der Kovarianzfunktion wiedergegeben werden. Problematisch ist bei den klimatologischen Kovarianzmodellen die Erfassung des Erwartungsfeldes an den Punkten ohne Messinformation.

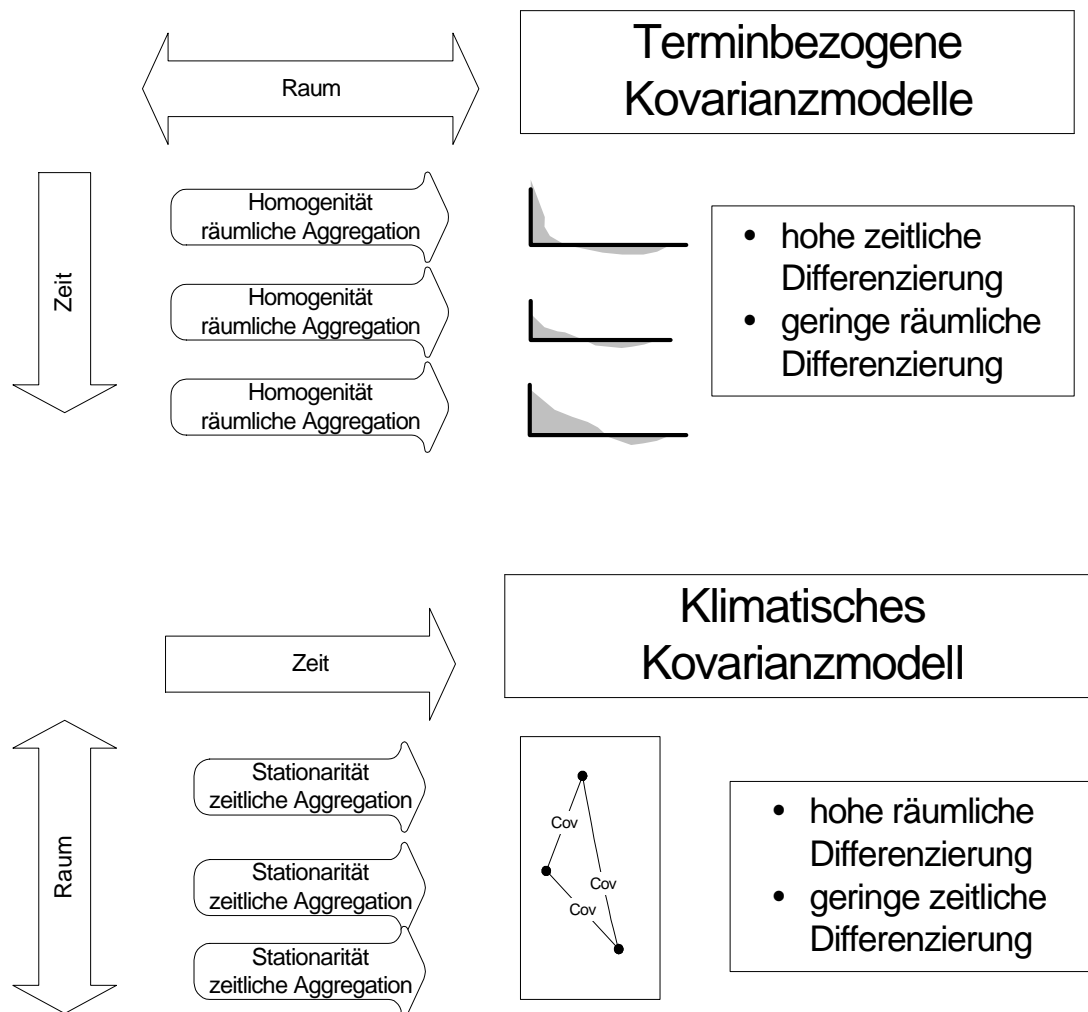


Abbildung 3.1 Schematische Übersicht der terminbezogenen und klimatischen Kovarianzmodelle

Der häufigste und einfachste Ansatz für die Kovarianzmodellierung ist das empirische, nichtbayessche, Gaußsche, homogene, isotrope, parametrische Modell. Das Kovarianzmodell ist dann eine eindimensionale analytische Funktion, die die Abstandsabhängigkeit der räumlichen Kovarianz beschreibt.

⁶⁸ Terminbezogene Kovarianzmodelle beruhen allein auf dem Apparat der räumlichen Statistik.

⁶⁹ Die Toleranzgebiete vereinfachen sich dadurch zu Klassen gleichen räumlichen Abstands.

Für großskalige meteorologische Felder kann die Annahme von Homogenität und Isotropie häufig gerechtfertigt werden. Die Felder der Immissionswerte sind jedoch inhomogen (siehe Kapitel 2.1), so dass diese Annahmen fragwürdig erscheinen. Es gibt in der Praxis jedoch viele Beispiele für homogene Ansätze zur Interpolation von Messwerten. Seit Anfang der neunziger Jahre gibt es verstärkt Bemühungen, empirische inhomogene Kovarianzmodelle zu entwickeln (Sampson et al., 2001), die für die Analyse von Immissionsdaten Verwendung finden (siehe Kapitel 2.3). Um die Inhomogenität zu erfassen, muss ausreichendes Datenmaterial vorhanden sein. Aus diesem Grund ist der klimatische Ansatz, d. h. die Schätzung von Kovarianzmodellen unter Verwendung von Raum-Zeit-Daten, die Basis für die Beschreibung inhomogener räumlicher Kovarianzen. Er kann jedoch die zeitliche Variabilität der Kovarianzfunktion nur ungenügend wiedergeben.

Die meteorologischen Anwendungen der statistischen Analyse beruhen vorrangig auf klimatischen Kovarianzmodellen⁷⁰ (z. B. Hollingsworth und Lönnberg, 1986 und Gandin, 1965). Im Kriging-Ansatz der Geostatistik wird das Kovarianzmodell bzw. das Variogramm (siehe Kapitel 2.4) aus den Daten des Termins⁷¹ geschätzt⁷². Reimer (1986) verwendet z. B. ein terminbezogenes Kovarianzmodell für die Analyse meteorologischer Felder auf den zeitlich variablen isentropen Koordinaten.

3.1.1 Besonderheiten der Kovarianzmodellierung von Immissionsdaten

Will man die statistischen Eigenschaften aus einer Stichprobe schätzen, so sollten die Daten aus der gleichen statistischen Grundgesamtheit stammen. Eine wesentliche Besonderheit der Immissionsmessung ist die Existenz von unterschiedlichen Regimes. Die Kenntnis des Regimes der Beobachtungen ist demzufolge eine Voraussetzung für eine sachgerechte Interpolation der Daten bzw. die Analyse. Durch den Einbezug der Modellrechnung in die Analyse wird eine weitere wichtige Informationsquelle, insbesondere an Orten ohne Beobachtung, nutzbar gemacht. Genauso wie bei den Beobachtungen kann die flächendeckende Kenntnis der Immissionsregimes der Modellfelder die statistische Analyse verbessern (Flemming, 2003).

Die mangelnde Berücksichtigung der Besonderheiten der Immissionsdaten (siehe Kapitel 2.1) kann die empirische Kovarianzmodellierung, insbesondere bei homogenen Ansätzen, beeinträchtigen. Im Folgenden werden die Auswirkungen mangelnder Beachtung der Besonderheiten und Ansätze zur Behandlung diskutiert. Die Lösungen beruhen auf einer Verwendung der Klassifikation der Immissionsregimes (Flemming, 2003) und der Modellrechnung einschließlich der aus ihr abgeleiteten statistischen Information. In Kapitel 3.1.3 werden drei konkrete, für die Analyse verwendete Kovarianzmodelle vorgestellt.

Inhomogenität der Immissionsfelder

Die Inhomogenität der Immissionsfelder bezieht sich sowohl auf die Erwartungswerte als auch auf die Kovarianzfunktion. Durch den Ansatz der Datenassimilation, eine

⁷⁰ ohne die Stationarität und Ergodizität der Zeitreihen zu überprüfen

⁷¹ In geologischen Anwendungen sind die Daten meist überhaupt nicht zeitlich variabel.

⁷² Die mangelnde Zeitabhängigkeit des Variogramms ist ein Unterschied zwischen Optimaler Interpolation und einfachem Kriging.

Modellrechnung als Grundlage für die Schätzung des Erwartungswertes zu verwenden, kann bereits ein hohes Maß an Inhomogenität beschrieben werden. Dies gilt z. B. auch für die Grenzfläche von Land und Meer. Aufgrund der Unzulänglichkeiten der Rechenmodelle (siehe Kapitel 3.3.2) ist jedoch davon auszugehen, dass das Feld der Fehler weder einen homogenen Erwartungswert Null noch eine homogene und isotrope Kovarianzstruktur hat.

Im Gegensatz zu anderen inhomogenen atmosphärischen Feldern wie z. B. dem Niederschlag, sind die Inhomogenitäten der Immissionsfelder in hohem Maße ortsfest. Dieser Umstand wird genutzt, indem die aus langfristigen Modellrechnungen abgeleitete räumliche Verteilung der Immissionsregimes als Klassifikationsmerkmal bei der Kovarianzmodellierung verwendet wird. Weiterhin gestattet dieser Umstand die Anwendung von klimatischen inhomogenen Kovarianzmodellen.

Geometrische Anisotropie

Das homogene Zufallsfeld ist anisotrop, wenn die Kovarianz von der Richtung abhängt. Diese Eigenschaft heißt geometrische Anisotropie, weil sie durch Skalierung und Drehung der Raumkoordinaten aufgehoben werden kann. Geometrische Anisotropie wird in der Atmosphäre z. B. bei der Form der Tiefdruckgebiete beobachtet (Daley, 1991). Die Immissionsfelder können gleichfalls eine solche Anisotropie z. B. aufgrund der vorherrschenden westlichen Windrichtung besitzen.

Die Richtungsabhängigkeit kann bei einer großen Stichprobe festgestellt werden, indem homogene parametrische Kovarianzmodelle für verschiedene Richtungen ermittelt werden. In diesem Forschungsvorhaben werden unterschiedliche Kovarianzmodelle für vier Sektoren mit einer Breite von 45 ° geschätzt. Der gesuchte Kovarianzwert wird dann aus einer gewichteten linearen Kombination der Kovarianzmodelle der benachbarten Sektoren gebildet. Auf den Nachweis der statistischen Verschiedenartigkeit der Kovarianzmodelle für verschiedene Sektoren wird verzichtet. Die festgestellte Anisotropie wird in Kapitel 3.3.4.1 diskutiert.

Abweichung von der Normalverteilung

Immissionsdaten sind meist nicht normalverteilt. Das ist für die Schätzung der empirischen Kovarianzwerte mit der Momentenmethode von Bedeutung. Immissionsdaten können durch Transformation mit dem Logarithmus (Hogrefe und Rao, 2001) oder der Quadratwurzel (Meiring et al., 1998) auf eine annähernd normalverteilte Form gebracht werden. Die Kovarianzmodellierung und die Analyse erfolgt in der transformierten Größe und anschließend wird in die eigentliche Größe zurücktransformiert. Diesem formal richtigen Vorgehen steht entgegen, dass die logarithmische Transformation die Unterschiede in den höheren Wertebereichen unterbewertet, was den Intensionen der Luftreinhaltung widerspricht.

Führt man die Analyse eines Feldes Z mit der log-transformierten Größe $Y = \log(Z)$ durch, so muss bei der Rücktransformation des interpolierten Werts $Y_A(\mathbf{r}_1)$ ein Bias⁷³ korrigiert werden. Er entspricht der Hälfte der Varianz des Analysefehlers (Cressie et al., 1999, S. 135) s_{AY}^2 :

⁷³ Der Bias entsteht durch den Umstand, dass der Erwartungswert der normalverteilten log-transformierten Größe nicht dem log-transformierten Erwartungswert der nichttransformierten Größe entspricht.

$$Y = \log(Z) \quad Y = N_{\text{Gauß}}(\mu_Y, \mathbf{s}_Y^2) \quad \{1.1\}$$

$$Z_A(r_I) = \exp\left(Y_A(r_I) + \frac{\mathbf{s}_{A,Y}^2}{2}\right)$$

Neben der Transformation besteht die Möglichkeit, die empirische Kovarianz mit Hilfe verteilungsunabhängiger und robuster Methoden zu schätzen. Die auf den Perzentilen basierenden Schätzformeln weisen eine geringe Anfälligkeit für Ausreißer auf, was besonders bei NO- und Staubmessungen (PM10) wichtig ist. Hiervon wird in dieser Arbeit Gebrauch gemacht (siehe Kapitel 3.2.1 und 3.2.2).

Die Mehrzahl der Beobachtungen stammt aus urbanen und belasteten Regimes und die Stationsdichte ist heterogen

Die Mehrzahl der städtischen und verkehrsbeeinflussten Messungen verleiht den homogenen Kovarianzmodellen einen „urbanen“ Charakter, der sich in der Analyse niederschlägt. Es ist deshalb empfehlenswert, das Ensemble zur Schätzung nach dem Regimetyp zu unterscheiden.

Die stärkere räumliche Konzentration der Beobachtungen in Ballungsräumen wird vom Analyseverfahren berücksichtigt (siehe Kapitel 2.5.5). Die heterogene Stationsdichte verfälscht jedoch die Kovarianzmodellierung, da Messungen mit geringen Abständen fast ausschließlich aus belasteten Gebieten stammen. Die Werte des Kovarianzmodells für kurze Abstände sind jedoch von besonderer Wichtigkeit: 1) Aufgrund der eingeführten Stationsauswahl aus der Umgebung des Analysepunktes (siehe Kapitel 2.5.5) und der hohen Beobachtungsdichte werden vorrangig nahe Stationen berücksichtigt. 2) Die Abschätzung der Beobachtungsfehler beruht auf der mit dem Kovarianzmodell für den Abstand Null extrapolierten Varianz.

Systematische Modell- und Beobachtungsfehler

Die Analyse {0.31} verlangt eine Biasfreiheit zwischen Modell (\mathbf{x}_B) und Beobachtung ($H\mathbf{y}$) sowie einen unabhängigen und räumlich unkorrelierten Beobachtungsfehler (siehe Kapitel 2.5.4) mit dem Erwartungswert Null. Die mangelhafte Erfüllung dieser Forderungen beruht auf der Fehlerhaftigkeit des Modells und einem systematischen Repräsentativitätsfehler der Beobachtung in den Gebieten mit hoher Immission.

Die Fehlerhaftigkeit der Eulerschen Ausbreitungsmodellierung ist vorrangig durch die ungenaue Kenntnis der Emission und im geringeren Maße von mangelhaften meteorologischen Daten bestimmt. Man kann jedoch annehmen, dass trotz fehlerhafter Mengenangaben die Lokalisierung der Emissionsschwerpunkte vertrauenswürdig ist.

Korrektur des Bias

Die sachkundige Quantifizierung und Korrektur des Bias zwischen Modell und Messung, d. h. die Abweichung der Erwartungswerte, ist problematisch. Wird der Erwartungswert der Beobachtungen als homogener Mittelwert über alle vorliegenden Beobachtungen ohne Berücksichtigung der Stationsdichte geschätzt, so bestimmen wiederum vorrangig die belasteten Beobachtungen den Wert. Das Problem wird noch verschärft, da häufig die hochbelasteten Beobachtungen eine vom Modell nicht auflösbare Skala wiedergeben. Versucht man einen räumlich variablen Bias im Kontext der klimatischen Kovarianzmodelle zu ermitteln, so steht man wiederum vor einem Inter-

polationsproblem. Es stellt sich die Frage, wie aus den nur an den Beobachtungsorten bekannten Beobachtungssinkrementen eine Korrektur für das gesamte Feld zu finden ist. Der Kompromiss ist die Annahme eines homogenen Bias, der nur durch Stationen mit einem großen Repräsentationsbereich geschätzt wird. Aus diesem Grund wird nur der Bias hinsichtlich der Land-Stationen für die Korrektur verwendet.

Systematischer Beobachtungsfehler

Das übliche statistische Modell für den Beobachtungsfehler, d. h. von Repräsentativitäts- und Messfehler, geht von einem räumlich unkorrelierten Beobachtungsfehler (siehe Kapitel 2.5.4) mit Erwartungswert Null aus. Diesen Ansatz nützt die Beobachtungsmethode (siehe Kapitel 3.2.6). Im klimatischen Ansatz besteht die Möglichkeit, die Beobachtungsfehler stationsbezogen zu bestimmen. Dabei muss sinnvoll zwischen dem unkorrelierten und dem systematischen Beobachtungsfehler unterschieden werden. Letzteren könnte man mit dem Beobachtungsoperator korrigieren.

Einfluss eines nichtkorrigierten Bias

Bei der Kovarianzschätzung führt ein Bias zu einer starken Überschätzung, da es sich um einen quadratischen Term handelt. Die Linearität der Analysegleichung {0.31} bewirkt einen linearen Einfluss des Bias. Geht man von einem Bias des Modellzustandsvektors \mathbf{x}_B und geringen Beobachtungsfehlern aus, so wird der Bias der Analyse gleichwertig oder im Einflussgebiet der Beobachtungen geringer sein. Ist eine Beobachtung aufgrund subskaliger Einflüsse biasbehaftet, so wird für sie eine große Beobachtungsfehlervarianz (siehe 3.2.6) bestimmt. Damit wird der Einfluss der Beobachtung auf die Analyse reduziert (siehe Kapitel 2.5.5). Alternativ könnte solch ein Bias durch eine Korrektur mit dem Beobachtungsoperator H berücksichtigt werden.

Zeitliche Periodizität

Die Periodizität, bzw. die damit verbundene zeitliche Korrelation, ist ein Problem für die Schätzung der empirischen Kovarianzwerte der klimatischen Kovarianzmodelle (siehe Kapitel 2.4.2). Um die Zeitreihendaten als unabhängige Beobachtungen eines räumlichen Prozesses ansehen zu können, ist die Identifizierung der zeitlich korrelierten Komponente („pre-whitening“) notwendig, damit die zeitliche Kovarianz nicht die Schätzung der räumlichen verfälscht. Hierfür sind die Klassenbildung und zeitliche Filterung⁷⁴ geeignet.

In Flemming (2003) werden die typische zeitliche Variabilität der hier betrachteten Stoffe diskutiert. Der Tagesgang ist meist die am stärksten ausgeprägte zeitliche Struktur. Auch die räumliche Kovarianz kann starke Tagesschwankungen aufweisen. Elbern et al. (1998) zeigen dies z.B. für die Beobachtungssinkremente der Ozonimmission. Der Tagesgang in der Raum-Zeit-Kovarianz lässt sich demzufolge nur unzureichend separieren (siehe Kapitel 2.4.2). Aus diesem Grund ist es sinnvoll, den Tageszyklus nicht durch Filterung zu entfernen, sondern für jede Tagesstunde ein eigenes räumliches Kovarianzmodell zu bilden.

Weitere wichtige Zyklen sind Jahresgang und Wochengang. Diese werden durch robuste Filterung entfernt. Damit wird von einer Separation der mittleren zeitlichen und räumlichen Komponente ausgegangen.

Meiring et al. (1998) bilden gleichfalls tagesstundenbezogene Kovarianzmodelle und verwenden ein autoregressives Modell AR(2), um den restlichen Teil der zeitlichen

⁷⁴ Die technische Durchführung der Filterung kann unter Artefakten des Verfahrens leiden.

Korrelation zu beseitigen. Host und Follestad (1999) entfernen nur den Tages- und Jahresgang durch Filterung.

3.1.2 Datenbasis für die empirischen Kovarianzmodelle

Die Kovarianzmodelle können für verschiedene Zufallsfelder bestimmt werden. Die Wahl der Datenbasis hängt von der Aufgabenstellung ab.

Für die Bestimmung der empirischen Kovarianzmodelle der Immissionsfelder stehen mehrjährige Zeitreihen von stündlichen Beobachtungen und die stündlichen Jahresrechnungen für die Gitterpunkte des Modells REM/Calgrid zur Verfügung. Die Schätzung der empirischen Kovarianzwerte kann auf folgender Datenbasis beruhen und den angegebenen Aufgabenstellungen dienen:

1. Beobachtungsinkremente, d. h. die Abweichung zwischen Beobachtung und Modell \Rightarrow Analyse und Datenassimilation, Beobachtungsfehlerbestimmung
2. Beobachtungsdaten \Rightarrow Messwertinterpolation, Beobachtungsfehlerbestimmung, Beobachtungsklimatologie, Modellevaluierung
3. Modellrechnung \Rightarrow Modellklimatologie, Modellevaluierung

1. Bei der Datenassimilation ist die Kovarianzstruktur des biasfreien Modellfehlerfeldes und der Modellbias gesucht (siehe Kapitel 2.5.4). Die Kovarianzmodellierung erfolgt für die Beobachtungsinkremente. Gleichzeitig kann mit der Beobachtungsmethode aus Kapitel 3.2.6 der auflösungsabhängige Beobachtungsfehler mit Hilfe des Kovarianzmodells abgeschätzt werden.

2. Von modellunabhängiger und damit allgemeinerer Aussagekraft ist die Kovarianzstruktur des Immissionsfeldes, wie es durch die Beobachtungen registriert wird. Problematisch ist dabei die Ermittlung des kontinuierlichen Erwartungswertfeldes $\mu(\mathbf{r})$ und der Kovarianz aufgrund der beschränkten Beobachtungsdichte. Der Beobachtungsfehler lässt sich in gleicher Weise wie bei den Beobachtungsinkrementen abschätzen. Betrachtet man das Modellfeld als eine biasfreie Schätzung des Erwartungswertes $\mu(\mathbf{r})$, so entspricht dies dem Vorgehen bei der Datenassimilation.

3. Die Vorteile bei der Schätzung von Kovarianzmodellen aus Modelldaten sind, dass für alle Raumpunkte Informationen vorliegen und dass diese nicht mit dem Beobachtungsfehler kontaminiert sind. Im Idealfall einer Übereinstimmung der statistischen Eigenschaften (Erwartungswert und Kovarianzfunktion) des Modells mit denen des „wahren“ Feldes \mathbf{x}_{true} können die Modellwerte als empirische Datenbasis für die Kovarianzmodellierung verwendet werden. Die Kovarianzstruktur des Modells kann auch direkt mit der der reinen Beobachtungen in einer anspruchsvollen Modellevaluierung verglichen werden (siehe Kapitel 3.3.3.1).

Die Kovarianzmodellierung für Modelldaten hat Tradition in der numerischen Wettervorhersage. Die „NMC⁷⁵-Methode“ vergleicht Modellprognosen für einen Termin aus einer 24- bzw. 48-stündigen Vorhersage (Parrish und Derber, 1992). Die Analysis-Ensemble-Methode verwendet ein Ensemble von Prognosen mit leicht variierten Anfangsbedingungen (Fisher und Courtier, 1995). Diese Methoden gehen schließlich im Kalman-Filter auf, bei dem die Kovarianz aus gestörten Modellzuständen gebildet wird (siehe Kapitel 2.5.7).

⁷⁵ National Meteorological Center

3.1.3 Drei Kovarianzmodelle (A, B und C) für Immissionsdaten

Im Rahmen des Forschungsvorhabens sind drei empirische Kovarianzmodelle A, B und C für die Analyse von stündlichen Immissionsdaten entwickelt und verglichen worden. Es handelt sich dabei um ein homogenes, terminbezogenes Kovarianzmodell A und zwei klimatische, inhomogene Kovarianzmodelle B und C, die jeweils für Ozon, NO₂, NO SO₂ und PM10 abgeleitet werden.

Das terminbezogene homogene Modell A liefert einen räumlich homogenen Wert der gesuchten Größen für jeden Termin. Die klimatischen Kovarianzmodelle geben stationsbezogene bzw. räumlich inhomogene Werte für jeweils eine Stunde des Tages an, die für einen langen Zeitraum Gültigkeit haben (siehe Abbildung 3.1).

Das klimatische Kovarianzmodell B beruht auf Kombination von mehreren parametrischen, homogenen Kovarianzmodellen, die für jeweils eine Kombination von Immissionsregimes aufgestellt werden. Das klimatische Kovarianzmodell C ist nichtparametrisch und wird durch die Eigenvektoraufspaltung der empirischen Kovarianzmatrix **HBH** gebildet. Die klimatischen Kovarianzmodelle B und C sind für jede Tagesstunde separat formuliert und berücksichtigen so die Variabilität der räumlichen Kovarianz im Tagesgang.

Alle drei Kovarianzmodelle werden hinsichtlich der erzielten Analysequalität untersucht. Der Vergleich unterschiedlicher Kovarianzmodelle als Ansatz einer Modell- und Beobachtungsklimatologie erfolgt in Kapitel 3.3.

Terminbezogenes homogenes parametrisches Kovarianzmodell A

Es stellt den klassischen Ansatz der Optimalen Interpolation für homogene Felder dar. Der Ausgangspunkt der Schätzung ist eine Stichprobe der Beobachtungsinkremente zu dem gegebenen Termin. Aus ihnen werden empirische Kovarianzwerte pro Abstands-kategorie und für 4 verschiedene Richtungssektoren geschätzt und mit Hilfe einer analytischen Funktion approximiert (siehe 3.2.3). Es erfolgt eine Korrektur mit dem homogenen Bias der Land-Stationen. Die durch die Beobachtungsmethode bestimmte Varianz des Beobachtungsfehlers gilt für alle Stationen. Dieses des Kovarianzmodells wurde in der ersten Anwendung der Optimalen Interpolation für das Jahr 1999 (Stern und Fleming, 2001) verwendet.

Der Vorteil dieses Kovarianzmodells ist seine einfache Schätzung aus vorliegenden Daten. Mit diesem Kovarianzmodell kann auch die Analyse von Jahresmittelwerten der Beobachtung direkt erfolgen. Im Rahmen der aktiven Datenassimilation mit OI wird auch dieses Kovarianzmodell verwendet, um während der Modellrechnung Beobachtungen zu assimilieren. Auch die Eigenvektoren für Kovarianzmodell C werden mit diesem Modell A ohne Biaskorrektur interpoliert.

Klimatisches inhomogenes parametrisches Kovarianzmodell B auf Basis der Immissionsregimes der Modellrechnung

Der Ansatz, die Inhomogenität zu beschreiben, beruht auf einer Superposition verschiedener homogener Kovarianzmodelle. Es wird dabei angenommen, dass innerhalb eines Regimes eine homogene Kovarianzstruktur zu finden ist. Die Verteilung der Regimes wird aus der Modellrechnung gewonnen.

Die Basis für die Modellbildung sind die empirischen klimatischen stationspaarbezogenen Kovarianzwerte. Sie werden aus den Zeitreihen der Werte zu einer Tagesstunde für das ganze Jahr und getrennt für Sommer und Winter gebildet. Somit liegt für jede Tagesstunde und Saison ein homogenes Kovarianzmodell für jede Kombination von

Regimes vor. Die Auswahl des anzuwendenden Kovarianzmodells für die Analysepunkte, d. h. für **HB**, wird durch das Regime der Gitterbox aus der Modellrechnung und dem der verwendeten Beobachtung festgelegt.

Die Varianzen des Beobachtungsfehlers werden, aufbauend auf diesem Kovarianzmodell, für jede Kombination des Regimes des Backgrounds am Stationsort und dem Regime der Stationsmessung bestimmt.

Klimatisches inhomogenes Kovarianzmodell C auf Basis der EOF der empirischen Kovarianzmatrix

Anders als beim klimatischen Kovarianzmodell B wird bei diesem Kovarianzmodell die Struktur der räumlichen Inhomogenität aus der empirischen Kovarianzmatrix abgeleitet. Mit Hilfe einer Eigenvektoraufspaltung der empirischen Kovarianzmatrix lassen sich die wichtigen Anteile der Kovarianz, d. h. die Eigenvektoren, an den Stationsorten bestimmen und in einem weiteren Schritt auf die Analysepunkte ohne Messinformation interpolieren. Aus den interpolierten Eigenvektoren wird dann die vollständige Kovarianzmatrix für alle geforderten Paare von Orten rekombiniert. Eine genauere Beschreibung dieses Kovarianzmodells erfolgt in Kapitel 3.2.5.2.

Das hier verwendete Kovarianzmodell auf Basis der EOF unterscheidet sich von anderen Anwendungen (Holland et al., 1999, Obled und Creutin, 1986, und van Egmond und Onderdelinden, 1981) durch die vorherige Separation des Beobachtungsfehlers und die Anwendung der Optimalen Interpolation (Kovarianzmodell A) zur Interpolation der Eigenvektoren. Die anderen Autoren verwenden hierfür mathematische formale Verfahren ohne statistische Komponente.

3.2 Die Schätzung der empirischen Kovarianzmodelle

3.2.1 Schätzung homogener terminbezogener Kovarianzwerte

Das Ensemble zur Schätzung der empirischen Kovarianzwerte $\hat{C}(r)$ wird für den homogenen Prozess aus der Menge $N(r)$ von Beobachtungen $y(\mathbf{r}_i)$ am Ort \mathbf{r}_i im gleichen Abstandsintervall $r \pm \Delta r$ gewonnen:

$$\hat{C}(r) = \frac{1}{|N(r)|} \sum_{i,j \in N(r)} \left(y(\mathbf{r}_i) - \hat{\mu}(\mathbf{r}_i) \right) \left(y(\mathbf{r}_j) - \hat{\mu}(\mathbf{r}_j) \right) \quad \{1.2\}$$

$$N(r) = \left\{ (\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) : r \leq |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < r + \Delta r, \quad i, j = 1, \dots, n \right\}$$

$$\hat{\mu}(r) = \hat{\mu} = \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_i y(\mathbf{r}_i) \quad \{1.3\}$$

Die Breite der Abstandsintervalle wird von der Datenlage und der räumlichen Auflösung bestimmt. Cressie (1993) gibt an, dass mindesten 30 Paare von Daten für die Bildung eines empirischen Kovarianzwertes vorhanden sein sollten.

Liegen keine anderen Informationen vor, so wird der homogene Erwartungswert aus dem Mittelwert der Beobachtungen geschätzt. In diesem Fall kann jedoch auf Bildung

des Erwartungswertes verzichtet werden, wenn auf das geschätzte empirische Variogramm $2\hat{g}(r)$ zurückgegriffen wird:

$$2\hat{g}(r) = \frac{1}{|N(r)|} \sum_{i,j \in N(r)} (y(\mathbf{r}_j) - y(\mathbf{r}_i))^2 \quad \{1.4\}$$

Aus ihm kann mit Kenntnis der Varianz $\hat{C}(0)$ der Kovarianzwert mit Hilfe von Formel {0.10} bestimmt werden. Die Verwendung von Variogrammen hat den Vorteil, dass sie robuster gegenüber einem unbeseitigten Trend in den Daten, d. h. gegenüber einer Abweichung von der Annahme der Homogenität, sind (Cressie, 1993, S. 72). Neben den klassischen⁷⁶ Schätzungen gibt es robuste Ansätze, die weniger fehlerhaft auf Ausreißer und Abweichungen von der Normalverteilung reagieren. Robuste Schätzungen der Kovarianz sind mit der folgenden Gleichung möglich:

$$\hat{C}(r) = \frac{1}{4} \text{MAD} \{y(\mathbf{r}_j) + y(\mathbf{r}_i)\} - \text{MAD} \{y(\mathbf{r}_j) - y(\mathbf{r}_i)\} \quad \{1.5\}$$

Sie beruhen auf dem Zusammenhang zwischen Kovarianz und Varianz und deren robuster Schätzung mit der absoluten Medianabweichung (MAD):

$$\begin{aligned} \text{Cov}(a, b) &= \{\text{Var}(a + b) - \text{Var}(a - b)\} / 4 \\ \sqrt{\text{Var}(a)} &= 1.486 \text{MAD}(a) \\ \text{MAD} &\equiv \text{med}\{|x_i - \text{med}\{x_i, i = 1, n\}|; i = 1, n\} \end{aligned} \quad \{1.6\}$$

Variogrammwerte können in gleicher Weise mit Hilfe des Medians robust geschätzt werden:

$$2\hat{g}(R) = \frac{1}{0.457} \text{Median} \left\{ (y(\mathbf{r}_j) - y(\mathbf{r}_i))^2 \right\}_{i,j \in N(R)} \quad \{1.7\}$$

Der Vorfaktor ist die Korrektur des Bias, der durch das Ersetzen des Mittelwertes durch den Median entsteht⁷⁷ (Smith, 2001). Die folgende, häufig verwendete robuste Schätzung ist auf weiteren theoretischen Argumenten aufgebaut (Cressie, 1993):

$$2\hat{g}(R) = \frac{1}{.457 + .495/|N(R)|} \left\{ \frac{1}{|N(r)|} \sum_{i,j \in N(R)} |y(\mathbf{r}_j) - y(\mathbf{r}_i)|^{\frac{1}{2}} \right\}^4 \quad \{1.8\}$$

⁷⁶ auch Momentenmethode

⁷⁷ Der Bias ist damit zu erklären, dass für eine annähernd symmetrisch-verteilte Größe x die Größe x^2 nicht symmetrisch ist. Der Median von x^2 bedarf damit einer Korrektur, wenn er als Schätzung für den Erwartungswert herangezogen wird.

3.2.2 Schätzung klimatischer Kovarianzwerte

3.2.2.1 Filterung der zeitlichen Periodizität und Persistenz

Die klimatischen Kovarianzmodelle werden separat für jede Tagesstunde gewonnen. Um die notwendige zeitliche Unabhängigkeit des Ensembles zu erreichen, muß nun noch die Filterung von Jahres- und Wochengang und „synoptischer Persistenz“ erfolgen (siehe Kapitel 2.4.2).

Der Jahresgang wird mit einem Tiefpass geschätzt, der durch einen gleitenden Medianfilter (Wilks, 1995) von 21 Tagen realisiert wird. Die Abweichung des Jahresganges vom Median der gesamten Zeitreihe ist die Korrekturgröße der Zeitreihe $(y_d^h)^y$ für jede Tagesstunde h , die dann keinen Jahresgang mehr aufweist:

$$(y_d^h)^y = y_d^h - \left(\text{med}_{d'=d-10, d+10} \{y_{d'}^h\} \right) + \left(\text{med}_{d'=1, 365} \{y_{d'}^h\} \right) \quad \{1.9\}$$

Der Wochengang als eine typische Eigenschaft von Immissionsdaten stellt eine periodische aber keine harmonische Schwingung dar. Die üblichen, auf der spektralen Betrachtungsweise aufgebauten Filter sind demzufolge nicht ohne weiteres anwendbar. Die Beseitigung des Wochengangs erfolgt jedoch prinzipiell nach dem gleichen Vorgehen wie beim Jahresgang. Der Wochengang wird ermittelt, in dem für jeden Wochentag der Median der jahresganggefilterten Zeitreihe der Tagesstundenwerte bestimmt wird. Die Differenz zum Median der gesamten Zeitreihe bildet die Korrekturgröße:

$$(y_d^h)^{wy} = (y_d^h)^y - \left(\text{med}_{d'=\text{mod}(d+1,7), 365,7} \{(y_{d'}^h)^y\} \right) + \left(\text{med}_{d'=1, 365} \{(y_{d'}^h)^y\} \right) \quad \{1.10\}$$

Neben Jahres- und Wochengang hat die Dauer der Wettersituationen eine zeitliche Korrelation zur Folge. Im Gegensatz zu den durch externe Faktoren bestimmten systematischen Schwankungen ist die Ausprägung dieser Erhaltungsneigung variabel. Um diesen Anteil aus den Daten zu entfernen, wird auf ein autoregressives Modell zurückgegriffen. Autoregressive Modelle bilden die Zeitreihe aus einer Regression zurückliegender Werte. Aufbauend auf die Erfahrung von Meiring et al. (1998) wurde ein AR-Modell zweiter Ordnung gewählt. Die mit diesem AR(2) Modell konstruierte Zeitreihe wird biaskorrigiert von der ursprünglichen, d. h. der jahres- und wochenganggefilterten Reihe abgezogen. Somit realisiert sich der Hochpass wiederum durch die Subtraktion einer tiefpassgefilterten Zeitreihe.

$$(y_d^h)^* = (y_d^h)^{yw} - \left(\text{AR2} \left((y_d^h)^{yw} \right) \right) + \left(\text{med}_{d'=1, 365} \left\{ \text{AR2} \left((y_{d'}^h)^{yw} \right) \right\} \right) \quad \{1.11\}$$

mit

$$\text{AR2}(y_t) = \mathbf{m}_x + \mathbf{a}_1(y_{t-1}) + \mathbf{a}_2(y_{t-2})$$

3.2.2.2 Diskussion der Filterung am Beispiel

Die Abbildung 3.2 zeigt die tägliche Zeitreihe der NO_2 -Konzentration um 7 Uhr für die Vorstadt-Station Burg (BB001, U1) und die zugehörige Autokorrelationsfunktion. Deutlich sichtbar ist die hohe Persistenz und eine 7-tägige Schwingung, die durch den Wochengang bedingt ist.

Abbildung 3.3, Abbildung 3.4 und Abbildung 3.5 zeigen die Anwendung des Jahresgangs-, Wochengangs- und AR(2)-Filters auf die Messreihe und die entsprechenden zeitliche Autokorrelationsfunktionen. Die nacheinanderfolgende Anwendung der drei Filter führt zu der Zeitreihe in Abbildung 3.6. Die entsprechend dargestellte Autokorrelationsfunktion weist fast keine signifikanten zeitlichen Autokorrelationen mehr auf.

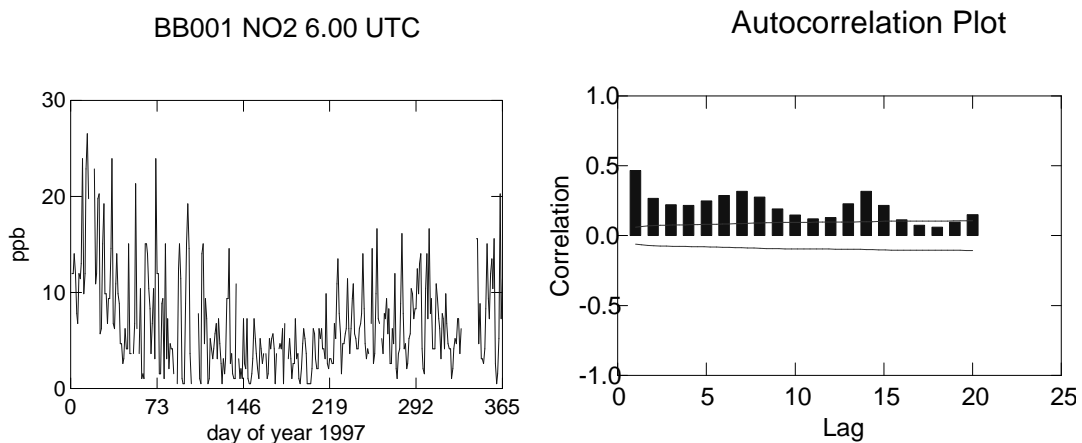


Abbildung 3.2 Tägliche Zeitreihe der NO_2 -Konzentration um 7 Uhr (MEZ) an der Station Burg (BB001) und Autokorrelationsfunktion (Lag = Anzahl der verschobenen Tage).

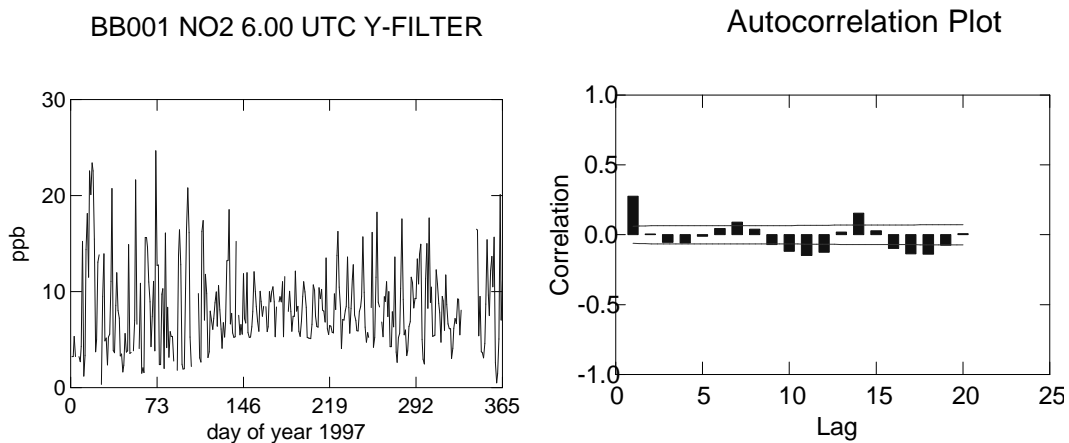


Abbildung 3.3 Tägliche Zeitreihe der NO_2 -Konzentration um 7 Uhr (MEZ) an der Station Burg (BB001), jahresganggefiltert, und deren Autokorrelationsfunktion (Lag = Anzahl der verschobenen Tage).

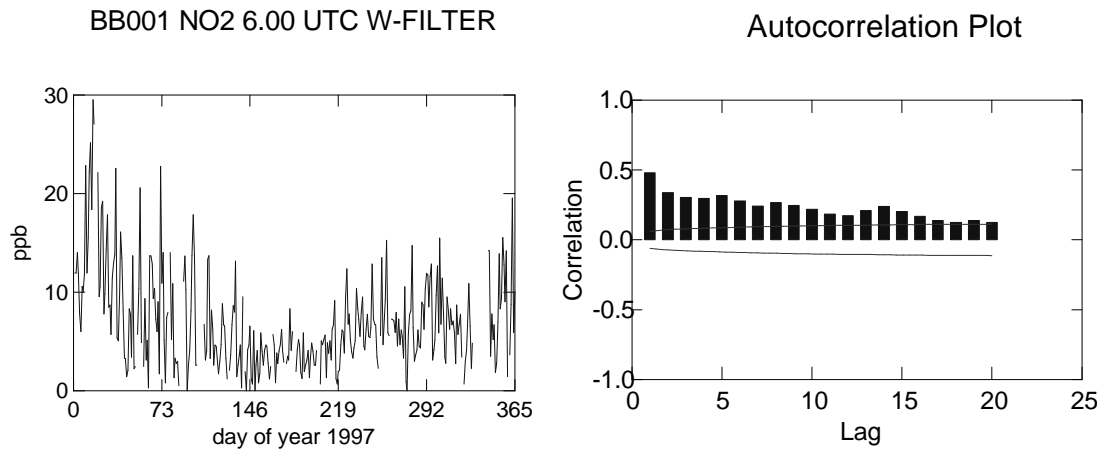


Abbildung 3.4 Tägliche Zeitreihe der NO₂-Konzentration 7 Uhr (MEZ) an der Station Burg (BB001), wochenganggefiltert, und deren Autokorrelationsfunktion (Lag = Anzahl der verschobenen Tage).

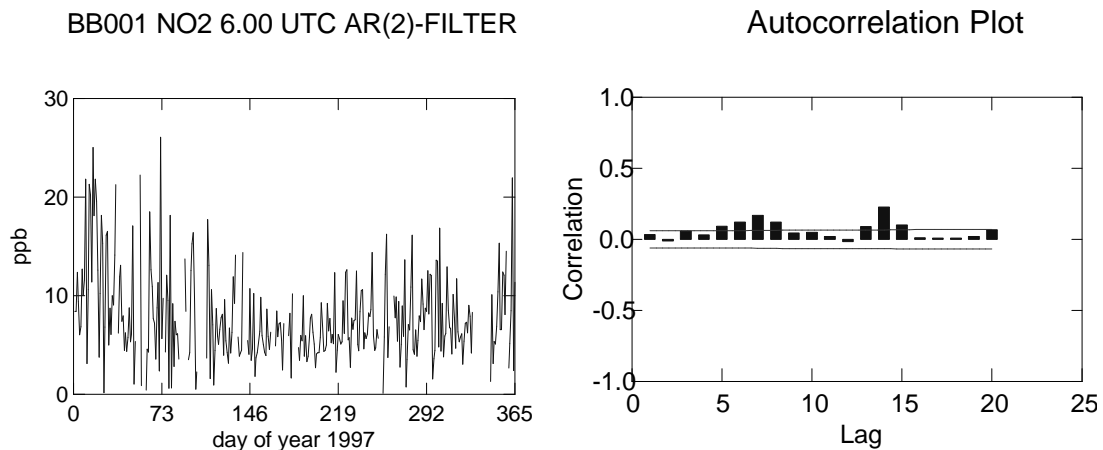


Abbildung 3.5 Tägliche Zeitreihe der NO₂-Konzentration um 7 Uhr (MEZ) an der Station Burg (BB001), AR(2)-gefiltert, und deren Autokorrelationsfunktion (Lag = Anzahl der verschobenen Tage).

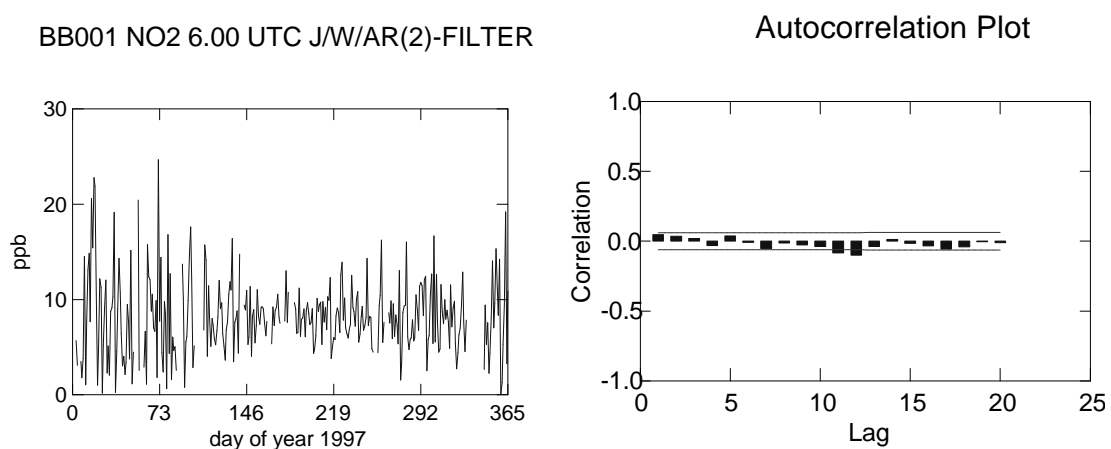


Abbildung 3.6 Tägliche Zeitreihe der NO₂-Konzentration um 7 Uhr (MEZ) an der Station Burg (BB001), Jahresgang-, Wochengang- und AR(2)-gefiltert, und deren Autokorrelation (Lag = Anzahl der verschobenen Tage) .

3.2.2.3 Schätzung stationspaarbezogener Kovarianzwerte

Die gefilterten Zeitreihen $(x_d^h)^*$ bilden das Ensemble, um für jede Tagesstunde

$h = 1 \dots 24$ und jedes Stationspaar $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ einen empirischen Kovarianzwert $\hat{C}^h(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ zu schätzen:

$$\hat{C}^h(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{N} \sum_{d=1}^N \left((x_d^h)^*(\mathbf{r}_i) - \overline{(x_d^h)^*(\mathbf{r}_i)} \right) \left((x_d^h)^*(\mathbf{r}_j) - \overline{(x_d^h)^*(\mathbf{r}_j)} \right)$$

$h \dots$ Stunde des Tages
 $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j \dots$ Beobachtungsorte
 $d = 1 \dots N \dots$ Tage pro Jahr/Saison
 $()^* \dots$ jahres- und wochengangsbereinigte Zeitreihe
 $\overline{(x)} = \frac{1}{N} \sum_{d=1}^N x_d$

{1.12}

Analog zur Schätzformel {1.5} kann eine robuste Schätzung $\hat{C}^h(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ des stationsbezogenen Kovarianzwerts erfolgen. Die Bildung der empirischen Variogramme ist nur sinnvoll unter der Annahme intrinsischer Homogenität (siehe Gleichung {0.9}). Aus diesen Werten kann ein Variogrammmodell und daraus mit Gleichung {0.10} das Kovarianzmodell gebildet werden.

3.2.3 Analytische Form des parametrischen Kovarianzmodells

Die Aussage der empirischen Kovarianzwerte $\hat{C}(R)$ bzw. $\hat{C}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ lässt sich durch die Approximation mit einer analytischen Funktion erweitern. Die Parameter einer vorgegebenen Funktion werden dabei aufgrund der vorliegenden Datenpunkte bestimmt. Die analytische Form der Funktion stellt sicher, dass das Kovarianzmodell den theoretischen Eigenschaften (siehe Kapitel 2.4), d. h. positive Definität und Konvergenz gegen Null für große Abstände, genügt. Weiterhin sind durch die Wahl der Funktion die spektralen Eigenschaften des Feldes bestimmt, falls es sich um einen homogenen Prozess 2. Ordnung handelt⁷⁸.

Für eine umfassende Zusammenstellung von Funktionsklassen, die als Kovarianzmodell für räumliche Zufallsfunktionen dienen können, sei auf Cressie Cressie (1993) verwiesen. Verschiedene Kovarianzmodelle für meteorologische Anwendungen und deren Abhängigkeit von der Art des Backgrounds (Modell oder klimatisches Feld aus Beobachtungen) werden in Thiebaux (1985) und Daley (1991) vorgestellt. Die vorge-

⁷⁸ Mit Hilfe des Wiener-Chinchin-Theorems lässt sich das Energiespektrum eines stationären Prozesses zweiter Ordnung aus der Fouriertransformierten der Kovarianzfunktion gewinnen. Für die Anwendung der spektralen Betrachtungsweise wird aus Gründen der Vereinfachung Homogenität und Isotropie für den Erwartungswert und den stochastischen Anteil vorausgesetzt.

schlagenen Kovarianzmodelle bestehen meist aus der Kombination einer linear⁷⁹ oder quadratisch abfallenden Exponentialfunktion und Kosinustermen⁸⁰. Der Exponentialterm impliziert ein abfallendes Energiespektrum („rotes Rauschen“), das aufgrund des Kosinusterns einen hervortretenden Wellenlängenbereich („farbiges Rauschen“) besitzt (Schweschnikow, 1965). In den Anwendungen zur Interpolation von Immissionsbeobachtungen ist meist kein Nulldurchgang der empirischen Kurve und somit auch kein hervortretender Frequenzbereich feststellbar. In vielen Kriging-Anwendungen werden neben exponentiellen und Gaußschen Funktionen, Kombinationen von Besselfunktionen oder sphärische Variogramme verwendet (Smith, 2001).

Für die Auswahl einer theoretisch möglichen Funktion ist die Güte der Approximation der empirischen Werte das entscheidende Merkmal. Im Fall der Immissionsdaten gilt dies besonders für geringe Abstände, da meist keine weit entfernten Beobachtungen für die Analyse verwendet werden⁸¹. Von besonderem Interesse ist das Verhalten der Funktion beim Abstand Null für die Robustheit der Schätzung der Varianz des Beobachtungsfehlers (Beobachtungsmethode, siehe Kapitel 3.2.6). Denn für die Beobachtungsmethode wird die Varianz des Backgroundfehlers durch die Extrapolation mit Hilfe des Kovarianzmodells für den Abstand Null gewonnen.

Getestet wurden das exponentielle, Gaußsche und sphärische Kovarianzmodell ({1.13}, {1.14} und {1.15}), da sie augenscheinlich gut der Abstandsabhängigkeit der ermittelten empirischen Kovarianzwerte des Modellfehlers (Background) entsprechen.

Die genannten Funktionen hängen von zwei Parametern ab; es sind dies die geschätzte Varianz s_B^2 und der räumliche Skalenparameter (Range) L (Abbildung 3.7). Letzterer ist ein Maß für die Größe des Gebiets, in dem eine räumliche Beziehung in Form einer Kovarianz besteht:

$$f_{\text{exp}}(r) = s_B^2 \exp\left(-\frac{|r|}{L}\right) \quad \{1.13\}$$

$$f_{\text{gau}}(r) = s_B^2 \exp\left(-\frac{r^2}{L^2}\right) \quad \{1.14\}$$

$$f_{\text{sph}}(r) = \begin{cases} s_B^2 \left(1 + \frac{1}{2}\left(\frac{r}{L}\right)^3 - \frac{3}{2}\left(\frac{r}{L}\right)\right) & r \leq L \\ 0 & r > L \end{cases} \quad \{1.15\}$$

⁷⁹ Der Funktion f_1 ist aufgrund des linearen Exponentialterms an der Stelle $r = 0$ nicht stetig differenzierbar. In der Praxis liegen nur diskrete Beobachtungen des Prozesses vor, so dass die Annahme mangelnder Differenzierbarkeit kein Hindernis für die Anwendung dieser Kovarianzfunktion ist. Eine detaillierte Diskussion ist bei Taubenheim (1969) zu finden.

⁸⁰ Die Lage der Nullstelle der Kovarianzfunktion, bedingt durch den Kosinustern, korrespondiert mit der Wellenlänge mit maximaler Spektralenergie.

⁸¹ In meteorologischen Anwendungen gilt das nicht, wenn z. B. über dem Meer nur wenige Beobachtungen vorliegen.

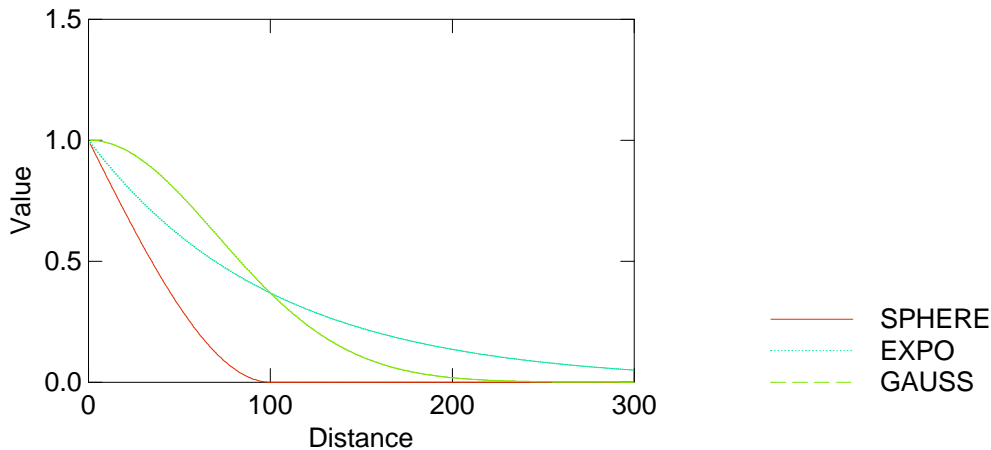


Abbildung 3.7 Exponentielles, Gaußsches und sphärisches Kovarianzmodell (Gleichung {1.13}, {1.14} und {1.15}), $s_B^2=1.0$, $L=100$

3.2.4 Approximation des parametrischen Kovarianzmodells

Bei der Approximation des terminbezogenen homogenen Kovarianzmodells existiert für jede Abstandsklasse ein Wert. Im Fall der klimatischen Kovarianzmodelle ist die Punktwolke der paarweisen Kovarianzwerte zu approximieren. Das parametrische Kovarianzmodell stellt eine Kurve durch die Punktwolke dar. Für jede Abstandsklasse existieren damit mehrere Werte, deren Streuung die Bandbreite möglicher Kovarianzen angibt und auf die Unzulänglichkeit der Annahme von Homogenität und Isotropie verweist. Für die größere Robustheit und um die Anzahl der Normalgleichungen zu verringern, wird in diesem Fall der Median der Kovarianzwerte als Maß für die Kovarianz in dieser Abstandsklasse gebildet.

Nach der Methode der gewichteten kleinsten Quadrate (w.l.s.⁸²) werden die nichtlinearen Parameter θ_i ($i=1, k$) der Funktion f_c durch die Minimierung der folgenden Kostenfunktion gebildet:

$$\sum_{i=1}^n w_i \left(\widehat{C}(R_i) - f_c(R_i, \theta) \right)^2 \rightarrow \min, \quad \theta = \{\theta_1, \dots, \theta_k\} \quad \{1.16\}$$

Die Gewichte w_i bestimmen den Einfluss, den der einzelne empirische Kovarianzwert bei der Approximation erhält. Eine statistisch motivierte Wahl der w_i ist ein Maß für die Sicherheit von $\widehat{C}(R)$. Bei den klimatischen Kovarianzmodellen wird hierfür der Quartilabstand IQR ⁸³ der Kovarianzwerte der Abstandsklasse herangezogen. Die Streuung der terminbezogenen Kovarianzwerte wird mit einem Ansatz für Streuung von Korrelations- bzw. Kovarianzwerten (Taubenheim, 1969) gewonnen. Die geforderte Unabhängigkeit der Daten wird vernachlässigt. Diese Vertrauensbereiche verringern sich mit zunehmender Stichprobenanzahl und zunehmender relativer Größe der Kovarianzwerte. Von besonderer praktischer Bedeutung ist das Kovarianzmodell für kurze

⁸² weighted least squares

⁸³ Differenz zwischen 75%-Perzentil und 25%-Perzentil

Abstände r (siehe Kapitel 3.2.3). Eine bessere Übereinstimmung in diesem Bereich wird mit einer höheren Wichtung erzwungen:

$$w_i^* = \left(\frac{r_{Max} - r_i}{r_{Max}} \right)^2 \sqrt{N(R)} \begin{cases} \frac{1}{IQR} & \dots \text{ klimatisches KM} \\ \frac{\widehat{C(r_i)}}{\widehat{C(r_1)}} & \text{terminbezogene KM} \end{cases} \quad \{1.17\}$$

Im Falle einer linearen Abhängigkeit der Parameter φ_i führt Gleichung {1.16} zu den Gaußschen Normalgleichungen. Für die nichtlineare Abhängigkeit der verwendeten Kovarianzmodelle {1.13}, {1.14} und {1.15} wird eine Taylorentwicklung der Funktion f_c hinsichtlich φ_i , d. h. s_B^2 und L , gebildet, die eine lineare Funktion für $d\varphi_i$ darstellt:

$$f_c(R, \varphi + d\varphi) = f_c(R, \varphi) + \sum_{i=1}^K \frac{\partial f(R, \varphi)}{\partial \varphi_i} d\varphi_i \quad \{1.18\}$$

Mit dem iterativen Verfahren nach Levenberg-Marquard (Press, 1992) wird das Minimum des Ausdrucks {1.16} gesucht. Für die praktische Durchführung der Approximation müssen initiale Werte der Parameter s_B^2 und L vorgegeben werden. Die Größe der beiden Parameter wird durch die Schnittpunkte mit der y- und x-Achse einer linearen Regression der Daten gewonnen.

3.2.5 Nichtparametrisches inhomogenes Kovarianzmodell aus EOFs

Neben der Methode, die empirischen stationsbezogenen klimatischen Kovarianzwerte durch eine analytische Funktion zu approximieren, können auch Ansätze aus dem Umfeld der Hauptkomponentenanalyse (PCA⁸⁴) verwendet werden, um die Kovarianzfunktion zu modellieren. Die PCA beruht auf einer reduzierten Darstellung eines Datensatzes von Zeitreihen an verschiedenen Orten, und zwar mit Hilfe einer Auswahl von Eigenvektoren (EOF) der empirischen Kovarianzmatrix und zeitlich variierenden Koeffizienten (Hauptkomponenten, Zwiers und von Storch, 2000).

Der Gedanke, durch eine Eigenwertaufspaltung die bedeutsamen Anteile der empirischen Kovarianzmatrix zu separieren, findet auch bei der räumlichen Kovarianzmodellierung Anwendung (siehe Kapitel 3.2.5.2). Ausgangspunkt ist der klimatische Ansatz, der auf die stationsbezogene Kovarianzmatrix zurückgreifen kann. Sie wird durch die Eigenvektorzerlegung komprimiert dargestellt. Neben der Erfassung von inhomogenen Strukturen sind numerische Aspekte eine wichtige Motivation für die reduzierende Eigenvektorzerlegung (SVD⁸⁵) der empirischen Kovarianzmatrix (siehe Kapitel 3.2.5.3).

⁸⁴ Principal Component Analysis

⁸⁵ Singular Value Decomposition

3.2.5.1 Matrixapproximation durch SVD

Durch eine Hauptachsentransformation mit der orthogonalen Matrix \mathbf{V} kann eine beliebige symmetrische Matrix \mathbf{A} , wie es alle Kovarianzmatrizen sind, in eine Diagonalmatrix $\mathbf{\Lambda}$ transformiert werden, deren Diagonalelemente die Eigenwerte λ_i von \mathbf{A} sind:

$$\mathbf{\Lambda} = \mathbf{V}^T \mathbf{A} \mathbf{V} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} \quad \text{mit } \mathbf{A} \mathbf{x}_{ei} = \lambda_i \mathbf{x}_{ei} \quad \text{und} \quad \mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{I} \quad \{1.19\}$$

Die Spalten der Matrix \mathbf{V} sind dabei die zugehörigen Eigenvektoren \mathbf{x}_{ei} . Gilt für gewisse Eigenwerte $\lambda_i = 0$, so ist \mathbf{A} singulär. Die Aufteilung der singulären Anteile einer Matrix mit Hilfe der Eigenwerte wird als singular value decomposition (SVD) bezeichnet. In umgekehrter Reihenfolge kann \mathbf{A} aus \mathbf{V} und $\mathbf{\Lambda}$ gebildet werden. Die SVD kann man benutzen, um die Matrix \mathbf{A} zu approximieren⁸⁶ (Press, 1992). Dazu werden kleine Eigenwerte in $\mathbf{\Lambda}$ gleich Null gesetzt ($\mathbf{\Lambda}'$) und die entsprechenden Spalten, d. h. die zugehörigen Eigenvektoren, in der Matrix \mathbf{V} entfernt (\mathbf{V}'). Die approximierte Matrix \mathbf{A}' ergibt sich dann aus:

$$\mathbf{A}' = \mathbf{V}' \mathbf{\Lambda}' \mathbf{V}'^T \quad \{1.20\}$$

Der Rang der Matrix \mathbf{A}' ist geringer als der von \mathbf{A} , da dies für $\mathbf{\Lambda}'$ und \mathbf{V}' gilt. Basiert man die rechentechnische Speicherung von \mathbf{A}' auf \mathbf{V}' und $\mathbf{\Lambda}'$, so verringert sich der Aufwand zur Speicherung der originalen Matrix \mathbf{A} . Dies wird bei der RRSQR-Approximation der Kovarianzmatrix ausgenutzt (siehe Kapitel 2.5.8). Hierbei wird die räumliche Kovarianzmatrix \mathbf{P} durch ihre Wurzel dargestellt: $\mathbf{P} = \mathbf{S} \mathbf{S}^T$. Die Matrix \mathbf{S} wird durch $\mathbf{S} = \mathbf{V}' \mathbf{\Lambda}'^{1/2}$ approximiert.

3.2.5.2 Auf SVD basierendes inhomogenes Kovarianzmodell C

Das Kovarianzmodell C ist durch die Implementierung des Kalman-Filters in der RRSQR-Form motiviert (Kapitel 2.5.8). Ausgangspunkt ist die Eigenvektorzerlegung der empirischen Kovarianzmatrix.

Die empirische Kovarianzmatrix \mathbf{C} der Beobachtungsinkremente entspricht der Matrix $\mathbf{H} \mathbf{B} \mathbf{H}^T + \mathbf{R}$. Durch sie ist bereits ein wichtiger Teil der für die Gewinnung der Analysegewichte \mathbf{K} notwendigen Kovarianzinformation gegeben (siehe Gleichung {0.35}). Unbekannt bleibt noch $\mathbf{H} \mathbf{B}$, d. h. die Kovarianz zwischen den Beobachtungsorten und den Analysepunkten ohne Beobachtung. Grundgedanke des Kovarianzmodells C ist es, die wichtigen Eigenvektoren der gesamten Kovarianzmatrix \mathbf{B} an den Stationsorten, d. h. für die Matrix $\mathbf{H} \mathbf{B} \mathbf{H}^T$ zu bestimmen und diese dann auf die anderen Analyseorte zu extrapolieren. Die Elemente eines Eigenvektors der Matrix $\mathbf{H} \mathbf{B} \mathbf{H}^T$ sind einem Stationssort zugeordnet. So kann der Eigenvektor als ein an den Beobachtungsorten vorgegebenes skalares Feld aufgefasst werden. Mit einer räumlichen Interpolation mit dem homogenen terminbezogenen Kovarianzmodell A können sie für alle Analysepunkte bestimmt werden. Damit wird die Kovarianzmodellierung für die Interpolation der

⁸⁶ z. B. für eine effektive Speicherung von großen Matrizen beim reduced rank square root (RRSR) Kalman-Filter bzw. für die eindeutige Singularisierung bei linearen Gleichungssystemen.

Immissionsbeobachtung auf eine weitere Interpolationsaufgabe zurückgeführt. Im Gegensatz zu den originalen Größen kann jedoch bei den Elementen der bedeutsamen Eigenvektoren von einer größeren Glattheit und damit einer einfacheren Interpolation ausgegangen werden (Smith, 2001). Die Eigenvektoren, multipliziert mit den entsprechenden Eigenwerten, werden dann zu einer Kovarianzmatrix $\hat{\mathbf{B}}$ für alle Ortspaare rekombiniert:

1. empirische Kovarianzmatrix für die Stationsorte:

$$\hat{\mathbf{C}} = \widehat{\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T} \quad \mathbf{C} \in R^{n \times n} \quad n \dots \text{Anzahl der Beobachtungen}$$

2. Eigenvektoraufspaltung:

$$\hat{\mathbf{C}} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T \quad \mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_n] \quad \mathbf{v}_i \in R^n$$

3. Reduzierung für $\mathbf{I}_k \ll \mathbf{I}_1$:

$$\mathbf{V} \rightarrow \tilde{\mathbf{V}} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_k] \quad k \ll n \quad \{1.21\}$$

4. Interpolation ($R^n \rightarrow R^N$ $N \dots$ Anzahl der Gitterpunkte):

$$\mathbf{v}_i \rightarrow \mathbf{v}_i^* \quad \mathbf{v}_i^* \in R^N$$

5. Rekombination der Kovarianzmatrix für alle Feldpunkte:

$$\hat{\mathbf{C}}^* = \tilde{\mathbf{V}}^* \mathbf{\Lambda}^* \tilde{\mathbf{V}}^{*T} = \hat{\mathbf{B}} \quad \mathbf{C}^*, \hat{\mathbf{B}} \in R^{N \times N}$$

Die Bestimmung der Eigenvektoren und Eigenwerte der gesuchten Backgroundkovarianzmatrix kann nicht direkt auf der Kovarianzmatrix der Beobachtungsincrementen beruhen, da diese die Beobachtungsfehlervarianz enthält. Um $\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T$ zu schätzen, ist folglich \mathbf{R} von der empirischen Kovarianzmatrix zu subtrahieren, d. h. die Hauptdiagonalelemente müssen um die Werte der Beobachtungsfehlervarianz (siehe Kapitel 3.2.6) verringert werden. Nach der Bestimmung der Eigenwerte (Press, 1992) stellt sich die Frage, ab welchem Eigenwert λ_i die zugehörigen Eigenvektoren vernachlässigbar sind. Hierzu kann der zugehörige Anteil an der Gesamtvarianz, der sich durch die Summe aller Eigenwerte ergibt, verwendet werden. Ist der Anteil größer als 5%, so wird der zugehörige Eigenwert als relevant betrachtet:

$$\frac{\lambda_i}{\sum_{j=1}^N \lambda_j} \geq 0.05 \quad \{1.22\}$$

Van Egmond und Onderdelinden (1981) verwenden Eigenwerte bis zur Größe des geschätzten Messinstrumentenfehlers. Hier wird die SVD auf die „kontaminierte“ Kovarianz, d. h. die Schätzung von $\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R}$, angewandt. Die Frage, ob der Beobachtungsfehler von den Eigenvektoren mit Eigenwerten in dieser Größe erfasst und durch dieses Vorgehen entfernt wird, bleibt unbeantwortet.

3.2.5.3 SVD für numerische Stabilität

Wendet man eine Hauptachsentransformation auf die Matrix \mathbf{HBH}^T an, so werden die Kovarianzwerte an den Beobachtungsorten linear kombiniert. Diese „neuen Beobachtungsorte“ weisen nun keine Korrelation hinsichtlich der Backgroundfehler auf. Dadurch vereinfacht sich das Gleichungssystem und seine Lösung. Gleichzeitig lässt sich anhand der Eigenwerte überprüfen, ob die Kovarianzmatrix positiv definit oder schlecht konditioniert⁸⁷ ist.

Ein lineares Gleichungssystem $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ kann hinsichtlich der Eigenvektorbasis \mathbf{V} umgeformt werden, wobei die Matrix \mathbf{A} durch $\mathbf{\Lambda}$ ersetzt wird:

$$\begin{aligned}\mathbf{Ax}=\mathbf{b} &\rightarrow \mathbf{\Lambda x}^*=\mathbf{b}^* \\ \mathbf{x}^*=\mathbf{V}^T\mathbf{x} &\text{ und } \mathbf{b}^*=\mathbf{V}^T\mathbf{b}\end{aligned}\quad \{1.23\}$$

Befinden sich unter den ausgewählten Stationen zwei eng benachbarte und haben sie einen geringen Beobachtungsfehler⁸⁸, so hat die Matrix des Gleichungssystems zwei ähnliche Spalten und Zeilen. Dadurch ist das Gleichungssystem schlecht konditioniert, was zu numerischen Problemen bei seiner Lösung führt. Die Konditionierung einer reellen, symmetrischen und positiv definiten Matrix lässt sich aus dem Verhältnis des größten zum kleinsten Eigenwert ableiten (Kiesewetter und Maess, 1974). In der numerischen Praxis empfiehlt es sich, die Eigenvektoren mit sehr kleinen Eigenwerten zu vernachlässigen und nur die approximierte Matrix \mathbf{A}' bzw. $\mathbf{\Lambda}'$ zu verwenden⁸⁹. Im Gegensatz zur SVD bei dem Kovarianzmodell C steht hierbei nicht der Aspekt der Handhabbarkeit sondern jener der numerischen Stabilität im Vordergrund. Deswegen werden hierbei erst Eigenwerte, die das um 10-fache kleiner als die in {1.22} sind, vernachlässigt.

3.2.6 Schätzung der Beobachtungsfehlervarianz

Der Beobachtungsfehler wird als eine räumlich nicht korrelierte Komponente der Beobachtung mit verschwindendem Erwartungswert angesehen (siehe Kapitel 2.5.2). Die Beobachtungsmethode nach Hollingsworth und Lönnberg (1986) benutzt die Beobachtungssinkremente⁹⁰, d. h. die Differenz zwischen Beobachtung und Background ($\mathbf{y} - \mathbf{Hx}_B$) zur Schätzung seiner Varianz.

Bildet man die Kovarianzmatrix der Beobachtungssinkremente unter der Annahme, dass die Fehler des Backgrounds und der Beobachtung nicht korreliert sind, so ergibt sie sich aus der Kovarianzmatrix der Beobachtungen \mathbf{R} und der mit dem linearisierten Beobachtungsoperator \mathbf{H} auf die Variable der Beobachtungen transformierten Matrix des Backgroundfehlers \mathbf{B} (vergleiche Gleichung {0.23} und {0.24}):

$$E\left((\mathbf{y} - \mathbf{Hx}_B)(\mathbf{y} - \mathbf{Hx}_B)^T\right) = \mathbf{R} + \mathbf{HBH}^T \quad \{1.24\}$$

⁸⁷ Die Matrix ist „fast“ singular.

⁸⁸ Die Varianz des Beobachtungsfehlers trägt zur numerischen Stabilität bei.

⁸⁹ d. h. die Eigenwerte und ihre reziproken Werte gleich Null zu setzen

⁹⁰ die durch die „nährhafte“ Null ($\mathbf{Hx}_{\text{true}} - \mathbf{Hx}_{\text{true}}$) erweitert werden

Mit der weiteren Annahme, dass die Beobachtungsfehler nicht korreliert sind⁹¹ und der Beobachtungsoperator \mathbf{H} eine Verschiebung auf den Ort der Beobachtung ist, folgt für einen Kovarianzwert C_{ij} der Beobachtungssinkremente an den Orten i und j :

$$C_{ij} = E((y_i - Hx_i)(y_j - Hx_j)) = \begin{cases} \mathbf{s}_{Bi}^2 + \mathbf{s}_{Oi}^B & i = j \\ \mathbf{b}_{ij} & i \neq j \end{cases} \quad \{1.25\}$$

Für verschiedene Orte i und j gleicht der Kovarianzwert der Beobachtungssinkremente dem der Backgroundfehler, d. h. dem entsprechenden Element aus $\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T$; für gleiche Orte entspricht der Wert der Summe der Varianzen des Beobachtungsfehlers s_{Oi}^2 und des Backgrounds s_{Bi}^2 .

Der extrapolierte Wert eines Kovarianzmodells für den Abstand Null wird nun als Schätzung der Varianz des Backgroundfehlers verwendet. Die Güte der Schätzung wird sowohl durch die Gültigkeit der statistischen Schätzung der Kovarianzen als auch durch die Wahl des Kovarianzmodells bestimmt⁹² (siehe Kapitel 3.2.3). Von Bedeutung ist dabei analytischen Form des parametrischen Kovarianzmodells.

Die Differenz zur Varianz der Inkremente liefert dann die gesuchte Varianz des Beobachtungsfehlers s_{Oi}^2 . Das Prinzip der Schätzung der Varianz des Beobachtungsfehler mit Hilfe eines Kovarianzmodells ist in Abbildung 3.8 dargestellt.

Für den homogenen terminbezogenen Ansatz ergibt die Beobachtungsmethode einen Wert für die Varianz des Beobachtungsfehlers aller Stationen. Mit dem klimatischen Ansatz können stationsspezifische Fehler ermittelt werden. Für jede Station ist aus der Zeitreihenauswertung der Beobachtungssinkremente die Gesamtvarianz bekannt. Die Aufgabe besteht nun in einer möglichst guten Schätzung der Varianz des Backgrounds bzw. des glatten Feldes am Stationsort. Hierzu wird ein lokales homogenes und isotropes Kovarianzmodell auf Basis der empirischen Kovarianzwerte mit der betrachteten Station in einem Radius von 100 km herangezogen.

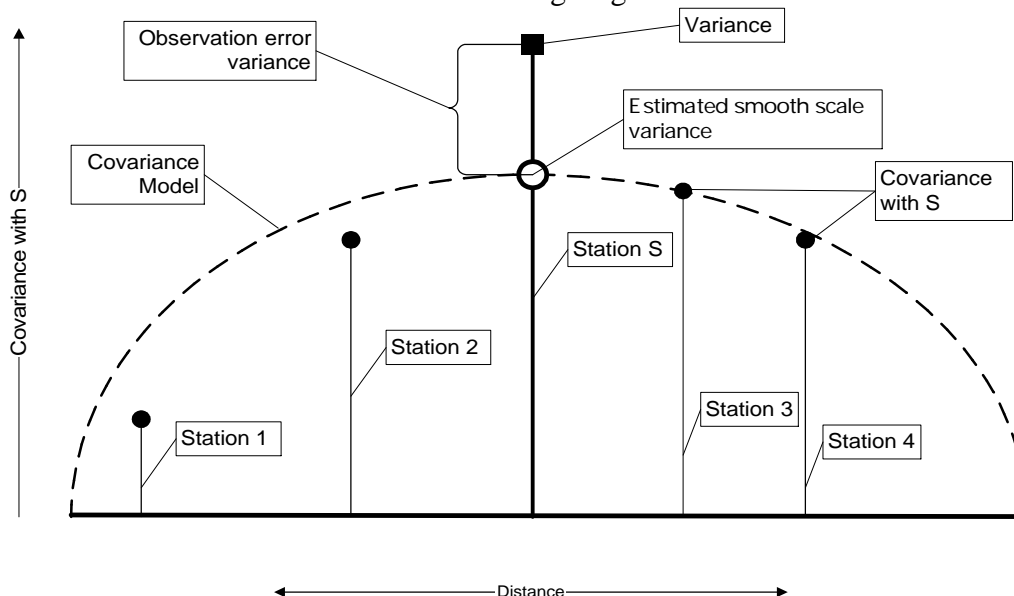


Abbildung 3.8 Schätzung der Varianz des klimatischen Beobachtungsfehlers (observation error variance) der Station S mit Hilfe eines Kovarianzmodells nach der Beobachtungsmethode.

⁹¹ \mathbf{R} ist damit eine Diagonalmatrix

⁹² Von besonderer Bedeutung ist die Steigung des Kovarianzmodells in der Nähe des Abstandes Null.

3.3 Diskussion der Ergebnisse der Kovarianzmodellierung

Dieses Kapitel beinhaltet die Darstellung der Ergebnisse der Kovarianzmodellierung nach Kapitel 3.2. Es werden im folgenden die Schätzungen der Beobachtungsfehlervarianz, des Modelbias und der räumlichen Kovarianz, einschließlich der Varianz⁹³ des „glatten“ Feldes, diskutiert.

Die räumliche Kovarianz wird für drei Datenquellen aus Kapitel 3.1.2 geschätzt, d. h. für die Beobachtungssinkremente, die Beobachtungen und die reinen Modelldaten. Die Kovarianz der Beobachtungssinkremente dient der Analyse, die Kovarianz der Beobachtung und Modelldaten wird für die klimatologische Darstellung und die Modellevaluierung benötigt. Der Erwartungswert der Beobachtungssinkremente, d. h. der Modelbias, gibt den systematischen Modellfehler an. Er muss für die Analyse beseitigt werden. Häufig wird die Kovarianzmodellierung nur als Zwischenschritt zur Analyse betrachtet und ihren Ergebnissen keine große Aufmerksamkeit geschenkt. Hier schließt sich nun eine genauere Diskussion der Ergebnisse der Kovarianzmodellierung aus folgenden Gründen an:

- Die Größe des Beobachtungsfehlers, der hauptsächlich ein Maß für mangelnde Repräsentativität ist, soll veranschaulicht werden
- Der Vergleich von Bias und der räumlichen Kovarianz von Modellrechnung und Beobachtung ist eine Modellevaluierung, die 1. und 2. statistische Momente berücksichtigt.
- Bewertung des Vermögens der Kovarianzmodelle A, B und C aus Kapitel 3.1.3 die Struktur der räumlichen Kovarianz und deren zeitliche Veränderung widerzugeben
- Abschätzung der Stärke der Veränderung des Modellfeldes (Background) durch die Beobachtung bei der Analyse.
- Vergleich der Kovarianzmodellierung von passiven und aktiven Verfahren (Kalman-Filter, aktive Assimilation mit OI)

Die Frage des Erfolgs der Kovarianzmodelle der Beobachtungssinkremente für die Analyse ist in dem Bericht der Inhalt des nächsten Kapitels 4. Die direkte Interpretation der Beobachtungssinkremente hat aufgrund des Differenzcharakters und der spezifischen Konfiguration des Chemie-Transport-Modells eine geringere Aussagekraft. Deshalb wird in diesem Kapitel die räumliche Struktur der Kovarianzen der „reinen“ Beobachtungen und der Modellwerte präsentiert und verglichen⁹⁴ (siehe Kapitel 3.1.2). Die präsentierten Ergebnisse hängen von dem verwendeten Kovarianzmodell und seinen Annahmen ab. So erzeugt das homogene Modell A einen räumlich homogenen Wert der betrachteten Größen für jeden Termin. Die klimatischen Kovarianzmodelle liefern stationsbezogene bzw. räumlich inhomogene Werte für jeweils eine Stunde des Tages über einen langen Zeitraum. Sie beruhen auf der empirischen klimatischen Kovarianzmatrix der Beobachtungsorte. Die separate Bildung der klimatischen Kovarianzmodelle für jede Tagesstunde erfasst nur die tagesgangabhängige Variabilität.

⁹³ Die Varianzen werden dabei meist durch ihre Wurzel, d. h. die Standardabweichung, dargestellt.

⁹⁴ Für eine Modellevaluierung hinsichtlich der zweiten räumlichen Momente, d. h. der Kovarianzfunktion, ist es zunächst empfehlenswerter, die beiden abgeleiteten Kovarianzmodelle zu vergleichen und nicht das Kovarianzmodell der Abweichungen zu untersuchen.

Die betrachtete räumliche Variabilität bezieht sich innerhalb der gewählten Modellvorstellung des Zufallsfeldes (siehe Kapitel 2.4.1) auf die Abweichungen vom Erwartungswert. Hier wird zusätzlich auf den Erwartungswert der Beobachtungsinkremente eingegangen, da er der Bias zwischen Modell und Beobachtung ist.

Von besonderer praktischer Bedeutung ist der ermittelte Beobachtungsfehler, da er für alle Arbeiten zur statistischen Analyse und Datenassimilation sowie für die Modellevaluierung⁹⁵ von grundlegender Bedeutung ist.

Die Auswertung der terminbezogenen homogenen Kovarianzmodelle (A) für verschiedene Termine eignet sich zur Untersuchung der zeitlichen Variabilität der Kovarianz und der Stärke der Anisotropie. Die Darstellung der inhomogenen klimatischen Kovarianzmodelle (B, C) liefert einen Eindruck von der Ausprägung der Inhomogenität der zweiten Momente der Felder bzw. von der Möglichkeit, sie zu erfassen (siehe Abbildung 3.1). Die Gegenüberstellung beider Ansätze kann die Rechtfertigung der Grundannahmen zur Stichprobenbildung, d. h. Homogenität oder Stationarität, des jeweils anderen Ansatzes überprüfen.

Die Kovarianzmodellierung erfolgte empirisch unter der Verwendung von Beobachtungsdaten. Eine dynamische Form der Kovarianzmodellierung beinhaltet der Kalman-Filters (siehe Kapitel 2.5.7) für das Chemie-Transport-Modell REM/Calgrid (Stern, 1994). Ein Vergleich der empirischen Kovarianzmodellierung mit den Kovarianzen des Kalman-Filters wird in Kapitel 3.3.5 gegeben.

3.3.1 Der Beobachtungsfehler

Nach der Definition in Kapitel 2.5.2 ist der Beobachtungsfehler eine räumlich nicht korrelierte Komponente der Messung. Seine Varianz wird mit der Beobachtungsmethode aus Kapitel 3.2.6 geschätzt. Der Umstand der Unkorreliertheit wird von den hier gewonnenen Ergebnissen bestätigt: Unabhängig davon, ob Beobachtungen oder Beobachtungsinkremente verwendet werden, sind die ermittelten Fehlergrößen sehr ähnlich. Weiterhin hat die Wahl der analytischen Kovarianzfunktion (siehe Kapitel 3.2.3) keinen erkennbaren Einfluss auf die geschätzten Beobachtungsfehlervarianzen.

In der Literatur wird der Beobachtungsfehler häufig ad hoc als Prozentsatz des Messwertes angenommen oder mit statistischen Methoden geschätzt (Tilmes und Zimmerman, 1998). Die in diesem Forschungsvorhaben gewonnenen Ergebnisse sprechen insbesondere bei Ozon gegen dieses Vorgehen, da für alle Regimes ein gleich großer Beobachtungsfehler ermittelt wurde und weil der absolute Beobachtungsfehler am Nachmittag geringer als in den Nachstunden⁹⁶ ist.

3.3.1.1 Der stationsbezogene Beobachtungsfehler

Die Gesamtheit der stationsbezogen bestimmten Standardabweichungen, d. h. die Wurzel der Varianz, der Beobachtungsfehler aller betrachteten Spurenstoffe, ist in Abbildung 3.9 zu finden. Abbildung 3.12 gibt einen Überblick über die räumliche Verteilung der Beobachtungsfehler für Ozon und PM10.

⁹⁵ Die „perfekte“ Modellsimulation muss demzufolge nur im Rahmen der Standardabweichung des Beobachtungsfehlers mit der Messung übereinstimmen.

⁹⁶ Die Ozonwerte sind nachmittags höher als in der Nacht

Für NO und PM₁₀ sind die geschätzten stationsbezogenen Beobachtungsfehler deutlich größer als für NO₂, Ozon und SO₂ an allen Tagesstunden. Dies entspricht der Erwartung, dass Messungen für das kurzlebige NO in der Nähe der Quellen von nur geringer räumlicher Repräsentativität sind. Die stündliche Variabilität von PM₁₀ ist sehr hoch und dementsprechend werden große Fehler geschätzt. Da PM₁₀ keinen ausgeprägten Tagesgang aber eine große Tagesschwankung besitzt (Flemming, 2003), ist es im Sinne der räumlichen Repräsentativität empfehlenswert, die stündlichen Werte durch das Tagesmittel zu ersetzen. Die zugehörigen Beobachtungsfehler sind dann deutlich geringer.

Der Zusammenhang zwischen Beobachtungsfehler und dem Immissionsregime, d. h. der typischen Belastung, ist in Abbildung 3.10 und Tabelle 1 dargestellt. Für die primär emittierten Spurenstoffe, d. h. mit Ausnahme von Ozon, steigt der Beobachtungsfehler mit zunehmender mittlerer Immission an. Bei PM₁₀, SO₂ und NO bleibt der relative, d. h. auf die mittlere Belastung bezogene Fehler, nahezu konstant in allen Regimes; bei NO₂ sinkt der relative Fehler leicht mit zunehmender Belastung.

Stoff/Regime:	B	R / 1	U1 / 2	U2 / 3	U3 / 4	S / 5	S2	Tagesgang
O ₃ (ppb)	8	6	6	6	6	6		schwach
NO ₂ (ppb)		3	4	5	6	7	8	schwach
NO (ppb)		3	7	10	15	20	30	8 Uhr-Max
PM ₁₀ (µg/m ³)		8	8	10	12	15		schwach
SO ₂ (µg/m ³)		2	3	4	6	18		schwach

Tabelle 1 Geschätzte Standardabweichung des klimatischen Beobachtungsfehlers der stündlichen Messung, dargestellt als Median aller Stationen innerhalb der Immissionsregimes nach Fleming (2003) (B = Berg, R = Land, U1 = Vorstadt, U2 = Stadt, U3 = belasteter Stadt, S = Straße, S2 = Straße extrem)

Bei Ozon ist die Standardabweichung des Beobachtungsfehlers für alle Regimes mit Ausnahme der Berg-Stationen nahezu konstant. Die scheinbar geringe räumliche Repräsentativität der Berg-Stationen erklärt sich aus dem hier gewählten Vorgehen, den Beobachtungsfehler mit Hilfe der umgebenden Stationen abzuschätzen. In der Tat sind die Berg-Stationen aufgrund der geringen Deposition in der Nacht nicht repräsentativ für die Verhältnisse in der Bodenschicht über Land. Sie entsprechen eher den Verhältnissen in der zweiten Modellschicht. Der relative Beobachtungsfehler der Berg-Stationen ist ungefähr von gleicher Größe wie der der Land-Stationen. Mit zunehmender Urbanisierung und Verkehrseinfluss steigt der relative Beobachtungsfehler.

Der Ausgangspunkt für die klimatische Kovarianzmodellierung sind separate Kovarianzmodelle für jede Tagesstunde. Betrachtet man die geschätzten Standardabweichungen des Beobachtungsfehlers für jede Tagesstunde, so stellt man nur einen geringen Tagesgang fest (siehe Abbildung 3.11). Bei NO gibt es während des morgendlichen Immissionsmaximums einen Anstieg des Fehlers. Interessant ist, dass für Ozon in der Zeit der höchsten Konzentrationen eine leichte Abnahme des absoluten und eine große des relativen klimatischen Beobachtungsfehlers festzustellen ist. Offensichtlich ist bei der nachmittäglichen Ozonbildung und guter Durchmischung die räumliche Repräsentativität größer als in den nächtlichen Stunden, wo lokale NO-Immission und Depositionsvorgänge die Ozonkonzentration steuern.

SD of climatic Obs. error 2001 all stations

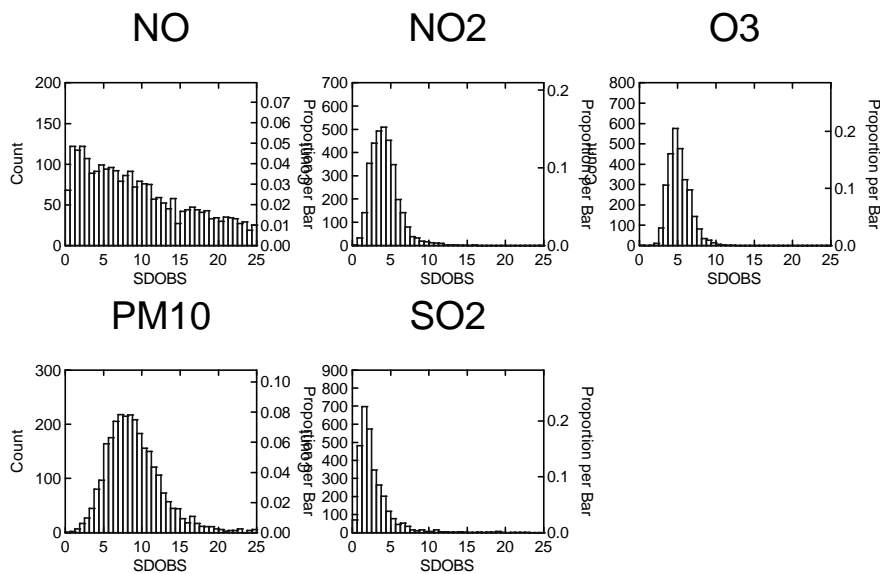


Abbildung 3.9 Histogramme der Standardabweichung des klimatischen Beobachtungsfehlers (SDOBS) für alle Stationen und alle Tagesstunden (oben in ppb, unten in $\mu\text{g}/\text{m}^3$)

SD of climatic Obs. error vs AQ regime

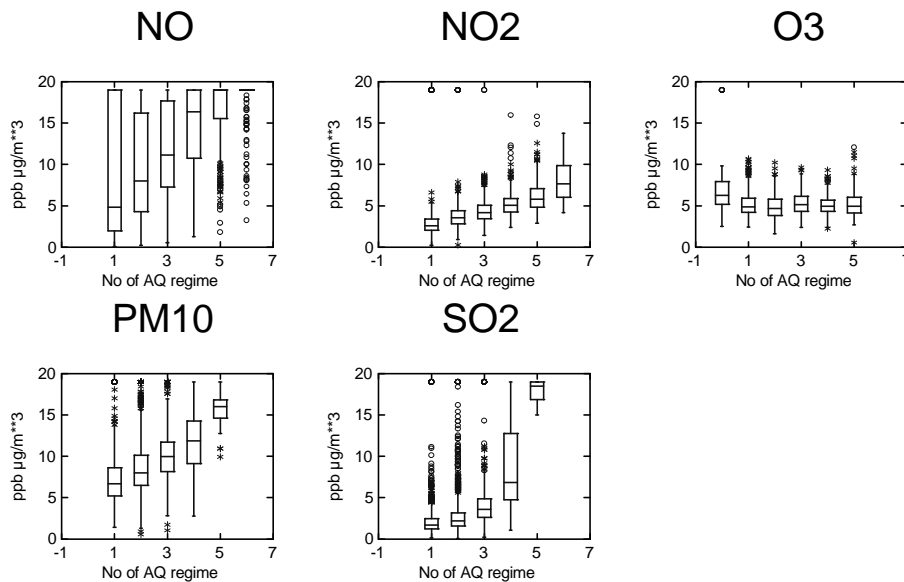


Abbildung 3.10 Standardabweichung⁹⁷ des klimatischen Beobachtungsfehlers für alle Stationen und alle Tagesstunden, geordnet nach dem Immissionsregime (obere Reihe in ppb, 0=Berg/Küste, 1=ländlich, 2=Vorstadt, 3=Stadt, 4=belastete Stadt, 5=Verkehr, 6=Verkehr extrem, untere Reihe in $\mu\text{g}/\text{m}^3$, Belastungsstufen 1 – 5)

⁹⁷ Die grafische Darstellung beschränkt sich auf Werte kleiner als 20 ppb bzw. $\mu\text{g}/\text{m}^3$

Daily Var. of climatic Obs. error (SD)

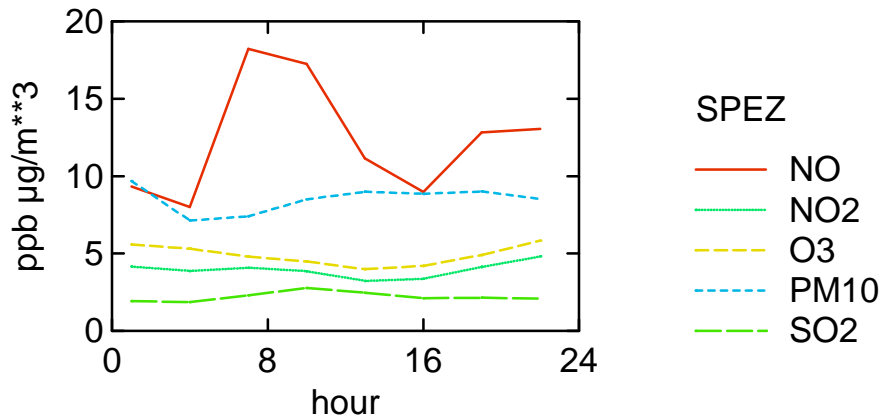


Abbildung 3.11 Tagesgang der Standardabweichung des klimatischen Beobachtungsfehlers für alle Stationen (O3, NO2 und NO in ppb, SO2 und PM10 in µg/m³)

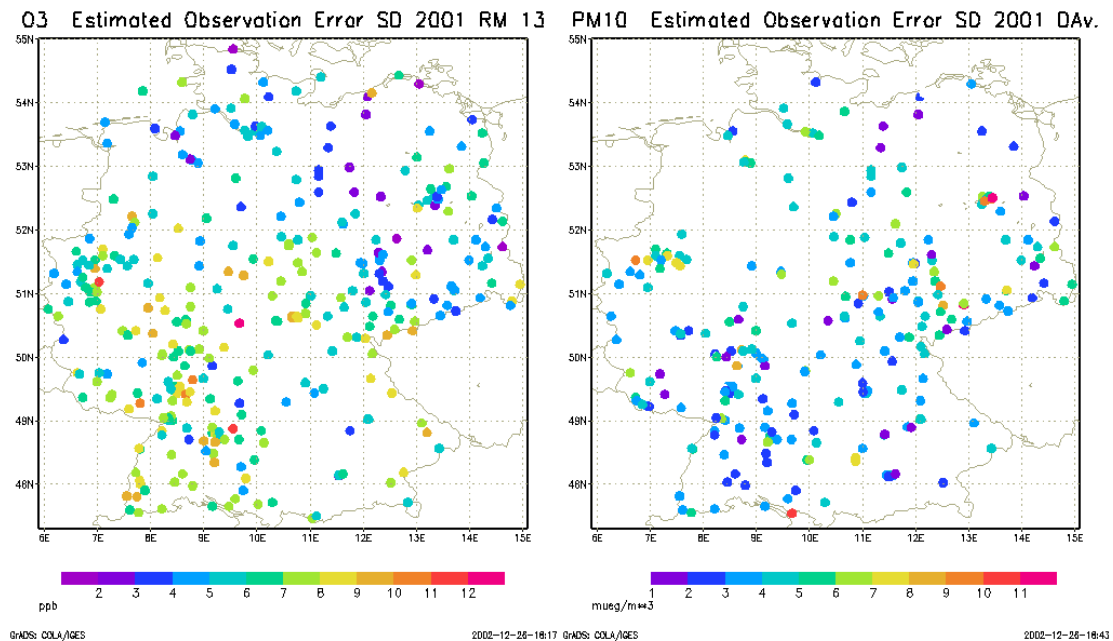


Abbildung 3.12 Karte der stationsbezogenen Standardabweichung des Beobachtungsfehlers für Ozon um 13 Uhr (links) und der Tagesmittelwerte von PM10 (rechts)

3.3.1.2 Der homogene terminbezogene Beobachtungsfehler

Im Gegensatz zum stationsbezogenen Beobachtungsfehler liegt der terminbezogene Beobachtungsfehler als Zeitreihe für alle Stunden des Jahres vor. Pro Termin fasst ein Wert den typischen Beobachtungsfehler aller Stationen zusammen, mit Ausnahme der Stationen der Verkehrs-Regimes (S, S2 bzw. 5, Flemming, 2003). Die Charakteristik

dieses Wertes ist durch die urbanen Stationen geprägt, da sie den größten Anteil der verwendeten Stationen stellen.

Der terminbezogene Beobachtungsfehler ist auf Basis des terminbezogenen Kovarianzmodells A ermittelt worden (siehe Kapitel 3.1.3). Durch die Zusammenschau der terminbezogenen Kovarianzmodelle für alle Zeitpunkte kann die zeitliche Variabilität der Kovarianzstruktur untersucht werden.

Abbildung 3.13 zeigt analog zu Abbildung 3.9 die Häufigkeitsverteilung der Standardabweichung des homogenen Beobachtungsfehlers für alle Termine. Die Wertebereiche sind von ähnlicher Größenordnung wie die der individuellen klimatischen Fehler. Für NO und PM10 sind die individuellen Unterschiede größer als die Unterschiede zwischen den homogenen Werten zu verschiedenen Zeitpunkten. Die Darstellung der Beobachtungsfehler, geordnet nach Tagesstunden, liefert ein ähnliches Bild wie im klimatischen Fall (siehe Abbildung 3.14 und Abbildung 3.11).

Der Jahresgang, ermittelt durch die monatliche Zusammenfassung des homogenen Beobachtungsfehlers, enthält Abbildung 3.15. Für NO₂ und PM10 ergibt sich keine erkennbare Jahresgangabhängigkeit, NO und SO₂ zeigen ein Sommerminimum, während Ozon ein leichtes Maximum im Sommer aufweist.

Insgesamt kann festgestellt werden, dass der homogene Beobachtungsfehler keinen sehr ausgeprägten Jahresgang liefert. Dies rechtfertigt das Konzept des klimatischen Beobachtungsfehlers, da die individuellen Unterschiede größer erscheinen als die zeitliche Variabilität.

SD of homogeneous Obs. error all hours

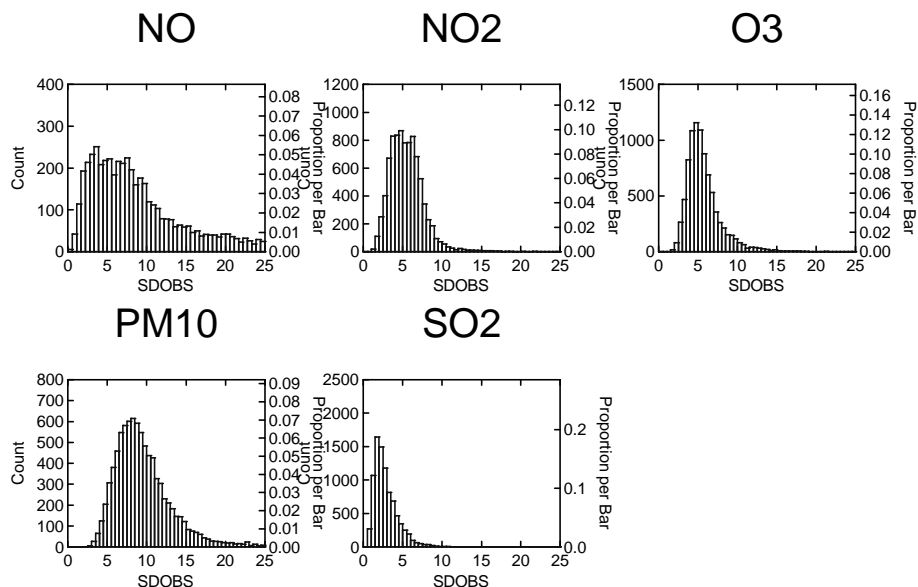


Abbildung 3.13 Histogramme der Standardabweichung des terminbezogenen homogenen Beobachtungsfehlers (SDOBS) für alle Termine im Jahr 2001 (obere Reihe in ppb, untere in $\mu\text{g}/\text{m}^3$)

Daily Var. of hom. Obs. error (SD)

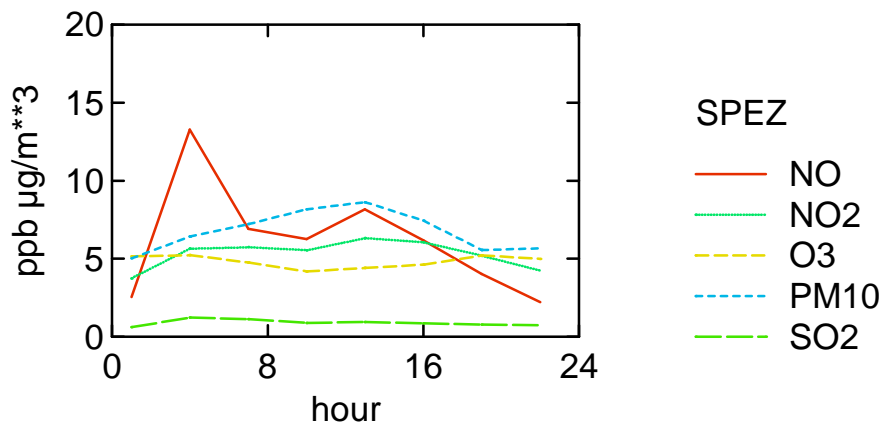


Abbildung 3.14 Tagesgang der Standardabweichung des homogenen terminbezogenen Beobachtungsfehlers für alle Stunden des Jahres (O₃, NO₂ und NO in ppb, SO₂ und PM₁₀ in µg/m³)

Annual Var. of hom. Obs. error (SD)

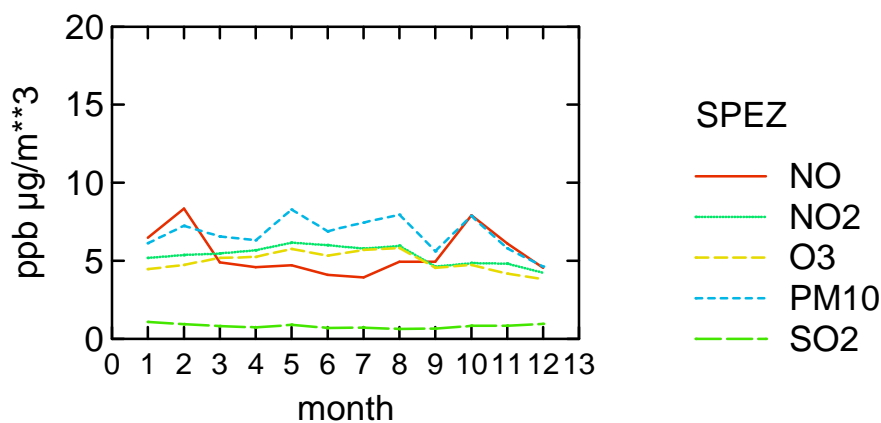


Abbildung 3.15 Jahresgang der Standardabweichung des homogenen Beobachtungsfehlers für alle Termine (für O₃, NO und NO₂ in ppb, für SO₂ und PM₁₀ in µg/m³)

3.3.2 Der Bias

Der Bias beschreibt die Abweichung der Erwartungswerte von Modell und Beobachtung und ist demzufolge von grundlegender Bedeutung für die Modellevaluierung. Ein positiver Bias ist Anzeichen für eine Unterschätzung der Beobachtung durch das Chemie-Transport-Modell. Für die Analyse stellt sich zusätzlich die Frage, inwieweit die Hypothese vom Erwartungswert Null der Beobachtungssinkremente {0.33} Gültigkeit hat bzw. durch welche Korrektur eine Biasfreiheit erreicht werden kann. Die Gegenüberstellung der zeitlichen Variabilität innerhalb der Immissionsregimes in Flemming (2003) gibt einen Einblick in die zeitliche Variabilität des Bias. Eine Diskussion des

Bias-Tagesgangs für verschiedene chemisch gekoppelte Stoffe liefert weitere Hinweise zum Modellverständnis.

Die Histogramme des terminbezogenen und des stationsbezogenen Bias sind in Abbildung 3.16 und Abbildung 3.17 dargestellt. Die Maximalwerte des Bias liegen in beiden Fällen in der Größe der Erwartungswerte selbst. Die individuellen Unterschiede oder die Unterschiede zu verschiedenen Zeiten haben eine ähnlich große Spannweite. Wie schon in Kapitel 3.1.1 ausgeführt, ist die Bewertung des terminbezogenen Bias zwischen Modell und Beobachtung nicht ohne eine Berücksichtigung der Zusammensetzung der Beobachtungen hinsichtlich ihrer Regimezugehörigkeit beantwortbar. Der stationsbezogene Bias im klimatischen Fall ist in Abbildung 3.18 für die verschiedenen Regimetypen der Beobachtung dargestellt. Bei NO_x weisen die ländlichen Regimes fast keinen Bias auf; mit zunehmender Belastung steigt der Bias an. Dieses Verhalten ist konsistent mit der Annahme, dass diese Regimes nicht die räumliche Ausdehnung einer Modellgitterbox haben und damit nicht vom Modell erfasst werden können⁹⁸. Trotz einer gewissen Streuung ist die Simulation von SO_2 in allen Regimes nahezu biasfrei, d. h. auch die belasteteren Regimes werden vom Modell richtig erfasst. Bei Ozon und PM_{10} sind die suburbanen bzw. die Stationen der Belastungsstufe 2 biasfrei. Die Werte der Land-Stationen der Ozonbeobachtung werden im Mittel unterschätzt bzw. bei PM_{10} vom Modell überschätzt.

Der bisher betrachtete Bias setzt sich gleichmäßig aus allen Stunden zusammen. Eine genauere Beurteilung der Ursachen des Bias kann eine Betrachtung seines Tagesganges ergeben. Der Tagesgang des Bias für alle Stationen bzw. nur für die Land-Stationen ist in Abbildung 3.19 und Abbildung 3.20 dargestellt. Es zeigt sich dabei eine deutliche Tageszeitabhängigkeit, die vom terminbezogenen und stationsspezifischen Ansatz qualitativ gleichwertig wiedergegeben wird.

Am auffälligsten ist der gegenläufige Tagesgang des Bias für Ozon und PM_{10} . Die Ozonsimulation ist nachts deutlich zu gering und tagsüber für die Gesamtheit der Stationen zu hoch. Letzteres gilt für die Land-Stationen nur in geringem Umfang. Für PM_{10} gilt der umgekehrte Verlauf mit einer nächtlichen Überschätzung und einer Unterschätzung am Tage. Da beide Stoffe nicht unmittelbar chemisch miteinander gekoppelt sind, ist die mögliche Ursache dieses Verhaltens vorrangig in den vertikalen Austauschprozessen zu vermuten: Stabile Verhältnisse sind zu stabil und labile zu labil. Der zu geringe nächtliche Austausch führt zu erhöhten PM_{10} -Werten und zu überschätztem Ozonabbau durch Deposition und Titration mit NO ohne eine Kompensation durch vertikale Ozoneinmischung in die Bodenschicht. Tagsüber führt der überschätzte Austausch zur Verringerung der PM_{10} -Konzentration und zu Ozoneinmischung von oben bzw. zu einer sehr starken Verdünnung des NO .

Ozon, NO und NO_2 sind durch das sich in wenigen Minuten einstellende fotochemische Gleichgewicht gekoppelt. Die nachmittägliche Überschätzung von Ozon ist mit unterschätzten NO_2 -Werten verbunden, was für richtige O_x ⁹⁹-Verhältnisse sprechen könnte. Nachts gilt das nur bei den Land-Stationen, da für diese eine leichte Unterschätzung durch das Modell im klimatologischen Fall zu verzeichnen ist.

⁹⁸ Dieser Umstand widerspricht nicht der Tatsache, dass einige Gitterboxen z. B. im Ruhrgebiet als Gebiete höchster NO_x -Belastung simuliert werden.

⁹⁹ O_x ist die Summe aus NO_2 und O_3 . Die Untersuchung von O_x ist sinnvoll, da dadurch die Bilanz über das zwischen beiden Stoffen ausgetauschte O-Radikal gebildet wird. Bei unveränderter Einstrahlung und konstantem NO_x wird das Verhältnis der beiden Stoffe nur von der meist sehr variablen NO -Konzentration gesteuert.

Der Jahresgang des homogenen terminbezogenen Bias für 2001 auf der Basis von Monatswerten zeigt große Schwankungen zwischen den verschiedenen Monaten (alle Stationen in Abbildung 3.21, Land-Stationen in Abbildung 3.22). Frühjahr und Winter sind Zeiten mit der stärksten Unterschätzung von Ozon und mit der stärksten Überschätzung von PM10. Insbesondere die starke Schwankung von Monat zu Monat innerhalb einer Jahreszeit unterstützt die These, dass die Wettersituation sehr wichtig für die Entstehung des Bias von Ozon und PM10 ist. Auch hier ergibt sich das beim Tagesgang gefundene gegenläufige Verhalten der jeweiligen Bias.

NO und NO₂ zeigen einen geordneteren Jahresgang mit einer Unterschätzung der Gesamtheit der NO-Beobachtungen im Winter und einer Überschätzung von NO₂ im Sommer. Betrachtet man lediglich die Land-Stationen, so ist nur für NO₂ eine leichte sommerliche Unterschätzung und eine winterliche Überschätzung zu erkennen. Für das ländliche Ozon und PM10 ist die winterliche Unterschätzung bzw. Überschätzung besonders ausgeprägt.

Bias of climatic Model error 2001 all stations

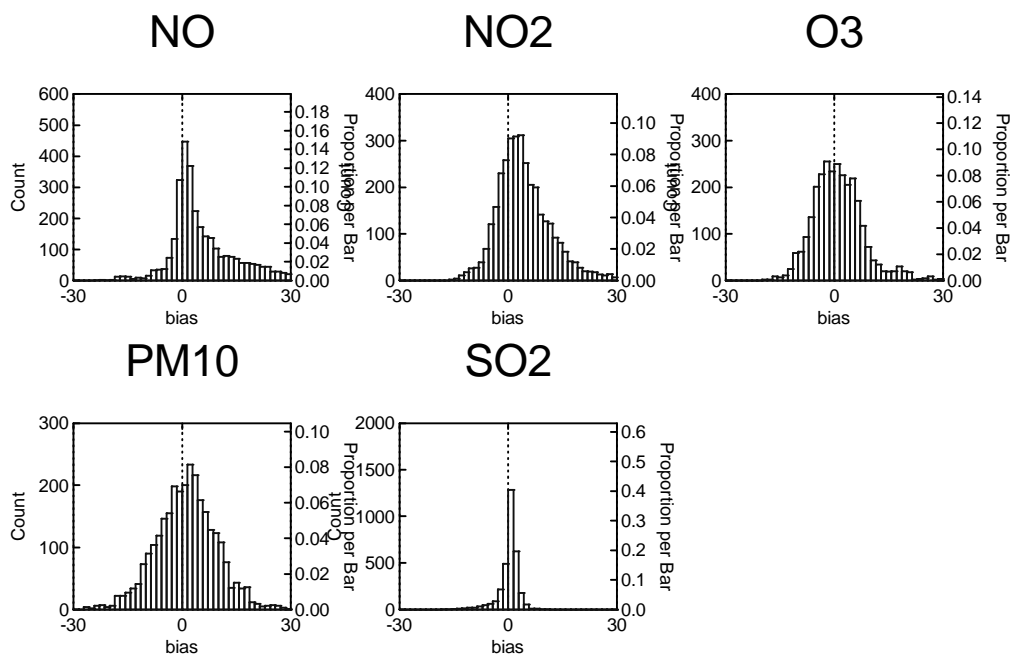


Abbildung 3.16 Histogramme des stationsbezogenen Bias zwischen Modell und Beobachtung für alle Stationen (obere Reihe in ppb, unten in $\mu\text{g}/\text{m}^3$)

Bias of homogeneous Model error 2001 all hours

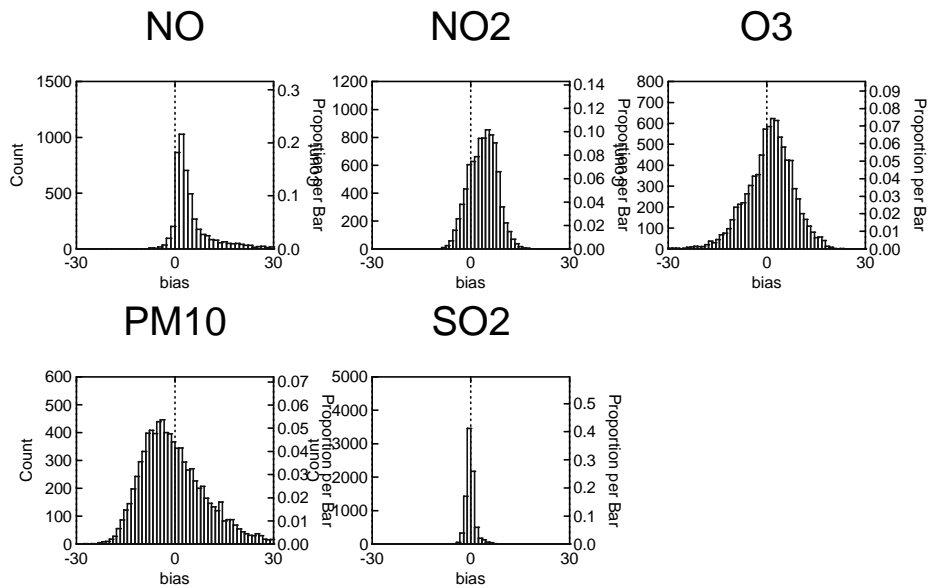


Abbildung 3.17 Histogramme des terminbezogenen homogenen Bias zwischen Modell und Beobachtung für alle Termine 2001 (obere Reihe in ppb, unten in $\mu\text{g}/\text{m}^3$).

Bias of climatic Obs. error vs AQ regime

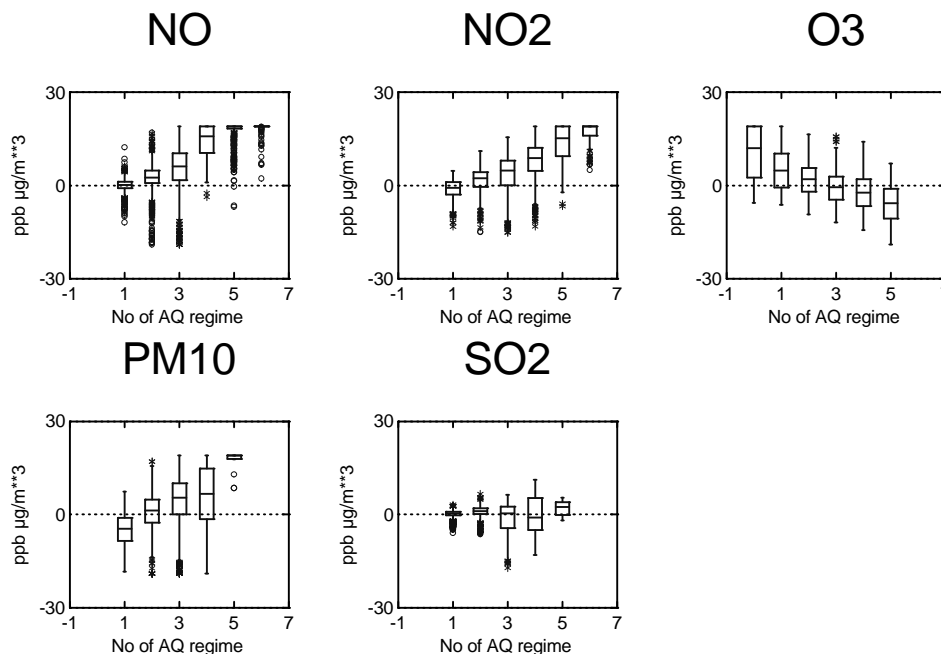


Abbildung 3.18 Bias zwischen Beobachtung und Modellrechnung für alle Stationen, geordnet nach dem Regime (AQ regime) der Beobachtung (obere Reihe in ppb, 0=Berg/Küste, 1=ländlich, 2=Vorstadt, 3=Stadt, 4=belastete Stadt, 5=Verkehr, 6=Verkehr extrem, untere Reihe in $\mu\text{g}/\text{m}^3$, Belastungsstufen 1– 5).

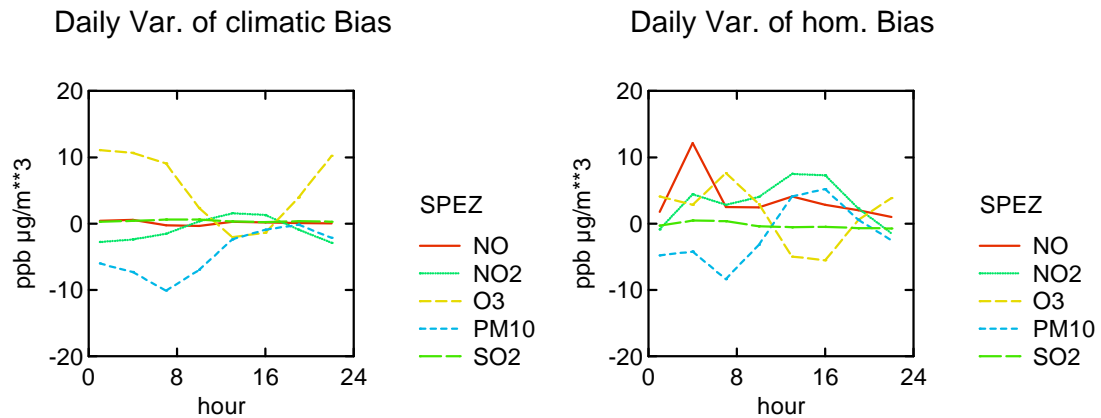


Abbildung 3.19 Tagesgang des klimatischen Bias für alle Stationen (links) und des homogenen terminbezogenen Bias für alle Stunden des Jahres 2001 (rechts) (O₃, NO₂ und NO in ppb, SO₂ und PM₁₀ in $\mu\text{g}/\text{m}^3$)

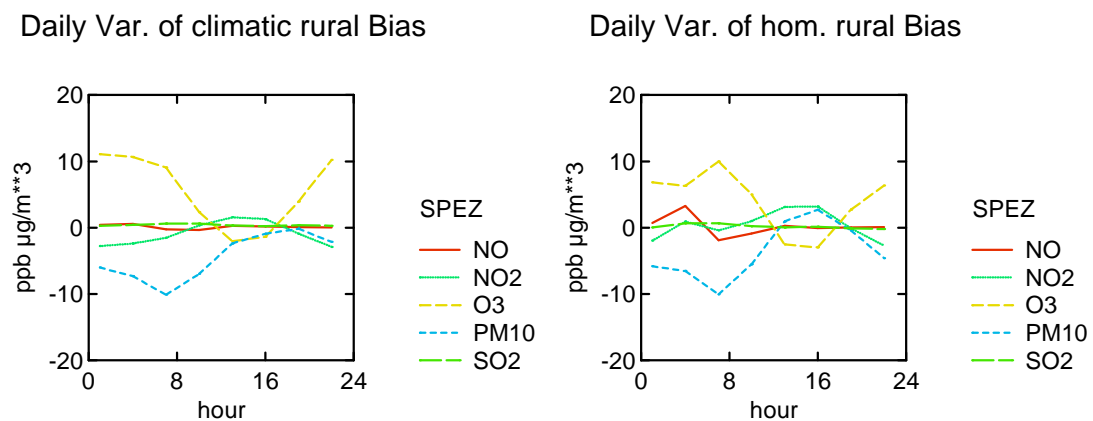


Abbildung 3.20 Tagesgang des klimatischen Bias für alle Land-Stationen (links) und des homogenen terminbezogenen Bias der Land-Stationen für alle Stunden des Jahres (rechts) (O₃, NO₂ und NO in ppb, SO₂ und PM₁₀ in $\mu\text{g}/\text{m}^3$)

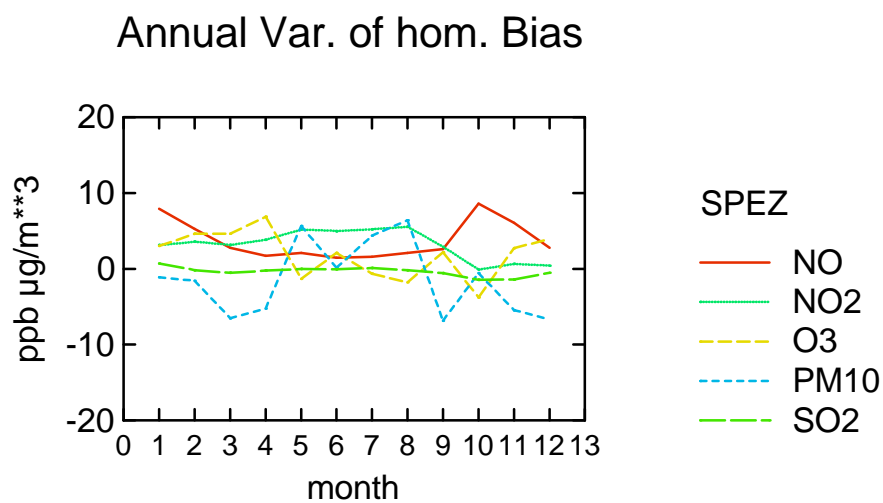


Abbildung 3.21 Jahresgang des homogenen terminbezogenen Bias aller Stationen für alle Termine 2001 (O₃, NO und NO₂ in ppb, für SO₂ und PM₁₀ in $\mu\text{g}/\text{m}^3$)

Annual Var. of hom. rural Bias

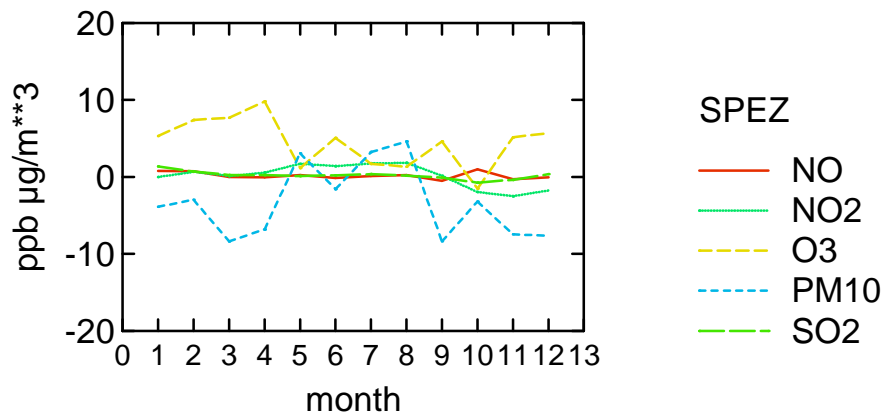


Abbildung 3.22 Jahresgang des homogenen terminbezogenen Bias der Land-Stationen für alle Termine 2001 (O₃, NO und NO₂ in ppb, für SO₂ und PM₁₀ in µg/m³)

3.3.3 Die Varianz des „glatten“ Feldes

Während der Beobachtungsfehler eine singuläre Eigenschaft der Messorte ist und der Bias die Differenz von Erwartungswerten beschreibt, werden nun die Variationen des glatten, d. h. des räumlich korrelierten Immissionsfeldes untersucht (siehe Kapitel 2.4.1.1) Die hier untersuchte Varianz ist die Kovarianz für den Abstand Null, die nicht durch den Beobachtungsfehler beeinflusst ist.

Die folgende Diskussion der Varianz soll zwei Aufgaben erfüllen:

- Vergleich der räumlichen Variabilität von Modellrechnung und Beobachtung
- Abschätzen der Stärke des Einflusses der Beobachtungsinkremente auf die Veränderung des Modellfeldes bei der Analyse

3.3.3.1 Varianz von Modell, Beobachtung und Beobachtungsinkrement

Der Vergleich der Varianz des glatten Feldes von Modellrechnung und Beobachtungen soll überprüfen, ob die Variabilität der beiden Quellen übereinstimmt. Der Vergleich der Varianz und Kovarianz gibt erste Hinweise, ob das Modell in der Lage sein könnte, die Variabilität¹⁰⁰ des gesuchten „glatten“ Immissionsfeldes zu erfassen.

Das generelle Ziel der Modellierung ist es jedoch, nur das „glatte“ Beobachtungsfeld ohne das „Rauschen“ der Beobachtungsfehler zu simulieren. Für den Vergleich der Variabilität ist es demzufolge notwendig, den Varianzanteil des Beobachtungsfehlers zu entfernen und nur den räumlich korrelierten Teil der Beobachtungen zu betrachten. Die Schätzung der Varianz des glatten Feldes erfolgt mit einem Kovarianzmodell, da Beobachtungsdaten und Beobachtungsinkremente durch den räumlich unkorrelierten Beobachtungsfehler „kontaminiert“ sind.

¹⁰⁰ z. B. kann die abgebildete Variabilität des Modells durch eine Erhöhung der Auflösung verbessert werden.

Würde die Modellrechnung genau dem Erwartungswertfeld der Beobachtungen entsprechen (siehe Kapitel 2.4.1), dann wäre die Varianz des glatten Feldes von Beobachtungssinkrementen und Beobachtungsdaten die gleiche. Eine verringerte Varianz der Beobachtungssinkremente ist demzufolge ein Hinweis darauf, dass das Modell bereits einen Teil der Variabilität wiedergegeben hat. Dies ist für die meisten der hier behandelten Stoffe der Fall. Folglich ist die Varianz des glatten Feldes der Beobachtungssinkremente kleiner als die der reinen Beobachtungsdaten.

Die Varianz ist ein Maß für die Variabilität des Feldes jenseits der des Erwartungswertes. Die Stärke der Varianz hängt von der Methode zur Schätzung des Erwartungswertes sowie von der Korrektur des Bias ab. Aus Gründen der Vereinfachung werden hier nur die klimatischen Varianzen an den Beobachtungsorten untersucht. Der Erwartungswert wird dabei durch den zeitlichen Mittelwert geschätzt.

Abbildung 3.23 zeigt die geschätzten Standardabweichungen, d. h. die Wurzel der Varianz, für das glatte Feld der Modellrechnung, der Beobachtung und der Beobachtungssinkremente im Tagesgang. Mit Ausnahme der nachmittäglichen Ozonimmission ist die räumliche Variabilität der Modellrechnung deutlich geringer als die des unkontaminierten glatten Immissionsfeldes aus den Beobachtungen. Dieser Unterschied ist bei der NO-Immission am größten. Durch den Einbezug der Modellrechnung wird nachmittags bei Ozon, PM10 und SO₂ die Variabilität verringert, da hier die Beobachtungssinkremente eine geringere Varianz als die Beobachtung aufweisen. Dieser Umstand ist Ausdruck einer sinnvollen Prognoseleistung durch das Modell.

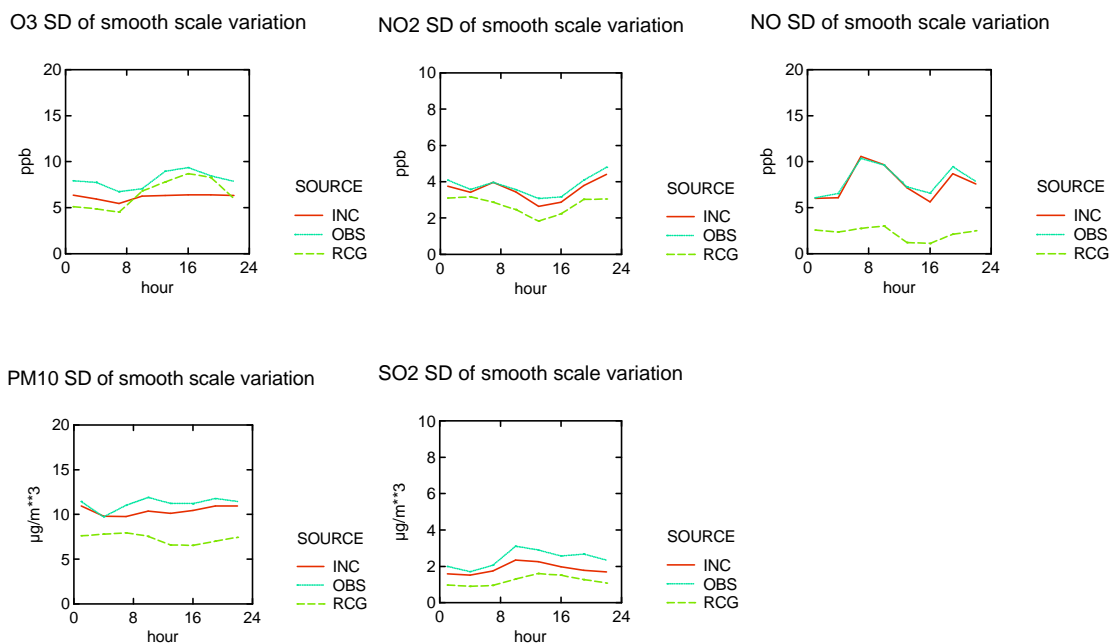


Abbildung 3.23 Tagesgang der klimatischen Varianz des „glatten“ rauschfreien Feldes für die Modelldaten (RCG), die Beobachtungsdaten (OBS) und die Beobachtungssinkremente (INC), dargestellt als Standardabweichung. Der dargestellte Wert ist der Median über alle Stationen.

3.3.3.2 Rausch-Signal-Verhältnis

Die Stärke des lokalen Einflusses der Beobachtung auf die Analyse hängt von dem Verhältnis der Varianzen der zugehörigen Fehler ab. Große Beobachtungsfehlervarian-

zen s_o^2 im Vergleich zu der des Backgrounds bzw. Modells s_B^2 führen zu einer nur geringen Änderung des Backgrounds bzw. Modellfeldes am Stationsort nach der Gleichung {0.31}. Als Maß dafür dient das sogenannte Rausch-Signal-Verhältnis h , dass als das Verhältnis der Beobachtungsfehlervarianz zur Gesamtvarianz der Beobachtungssinkremente definiert ist (Gandin, 1965):

$$h = \frac{s_o^2}{s_o^2 + s_B^2} \quad \{1.26\}$$

Für Geopotentialfelder liegt der Wert des Rausch-Signal-Verhältnisses im Bereich von 10-15% (Daley, 1991). Nur die nachmittäglichen Ozonbeobachtungen liegen im klimatischen Fall in einem ähnlichen Größenbereich. Die Werte h für den Rest der hier betrachteten bodennahen Immissionsfelder sind deutlich größer (über 50%). Damit ist im Allgemeinen nicht zu erwarten, dass die analysierten Felder am Messort sehr genau mit der Beobachtung übereinstimmen. Der hohe Rauschanteil tritt sowohl bei den klimatischen (Abbildung 3.24) als auch mit den terminbezogenen Kovarianzmodellen auf. In der Praxis der Analyse kann der Bias häufig nicht feldübergreifend bestimmt und korrigiert werden. Dadurch werden erhöhte Varianzen des Backgroundfeldes s_B^2 geschätzt, woraus sich ein verringertes Rausch-Signal-Verhältnis ergibt (siehe auch Kapitel 3.1.1).

Climatic noise signal ratio

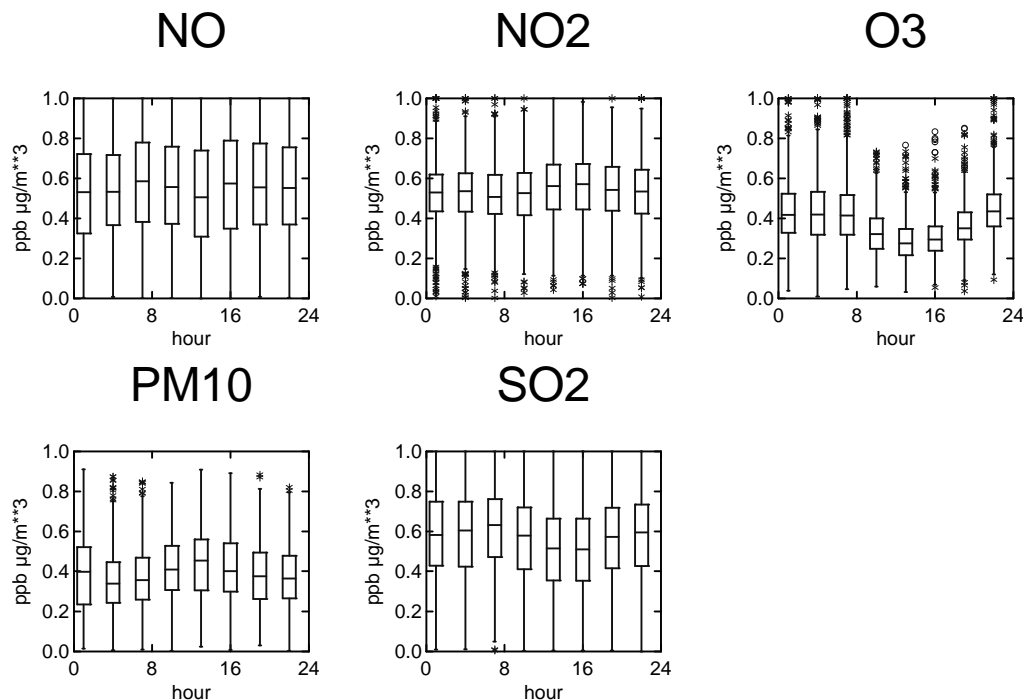


Abbildung 3.24 Verhältnis der Beobachtungsfehlervarianz zur Gesamtvarianz des klimatischen Kovarianzmodells für die Stunden des Tages (hour)

3.3.4 Räumliche Strukturen der Kovarianzmodelle A, B und C

Die Heterogenität der Immissionsfelder ist in diesem Bericht häufig hervorgehoben worden. Sie betrifft die Erwartungswerte und die davon abweichende räumlich korrelierte stochastische Komponente.

Im Fall der terminbezogenen homogenen Kovarianzmodelle wird die Abweichung von einem konstanten Erwartungswert betrachtet. Im klimatischen Fall wird die Beziehung der Abweichungen vom stationsbezogenen Erwartungswert betrachtet. Die räumliche Heterogenität dieser Erwartungswerte, d. h. der mittleren Verhältnisse der Beobachtungen, wird aus den Betrachtungen zur Regimeklassifikation (Flemming, 2003) deutlich. In diesem Kapitel wird nun versucht, die Inhomogenität und Anisotropie der räumlichen Beziehung der Abweichungen, d. h. der Kovarianzfunktion, darzustellen. Die Darstellung der Inhomogenität der Kovarianzfunktion ist aufgrund der im Vergleich zum Feld verdoppelten Dimension keine leichte Aufgabe. Dies gilt sowohl für die geschätzte empirische Kovarianzmatrix an den Stationsorten als auch für die gesamte Kovarianzfunktion, so wie sie für die Analyse benötigt wird. Eine Möglichkeit wäre die Darstellung des Feldes der Varianzen. Eine Veranschaulichung der räumlichen Beziehungen könnte für einen festgelegten Punkt erfolgen, indem man das zugehörige Feld der Kovarianzen abbildet. Eine indirekte Veranschaulichung des Feldes der Varianzen findet sich in Kapitel 0. Eine beispielhafte Darstellung der empirischen Kovarianzen hinsichtlich einer Station ist Abbildung 3.36.

Im Gegensatz zu diesen Darstellungsformen wird in diesem Kapitel das Vermögen der Kovarianzmodelle A, B und C (siehe Kapitel 3.1.3), räumliche Strukturen wiederzugeben, dargelegt. Für das homogene terminbezogene Kovarianzmodell A beschränkt sich die Untersuchung der räumlichen Struktur auf die Untersuchung der geometrischen Anisotropie in Kapitel 3.3.4.1. Das klimatische Kovarianzmodell B beruht auf homogenen Kovarianzmodellen für verschiedene Kombinationen von Regimes (siehe Kapitel 3.3.4.2). Eine allgemeinere Möglichkeit zur Wiedergabe der Inhomogenität liegt in der Darstellung der Eigenvektoren der Kovarianzmatrix in Kapitel 3.3.4.3, was dem Grundgedanken des Kovarianzmodells C entspricht.

3.3.4.1 Homogene Anisotropie (KM A)

In dem homogenen Ansatz ist die Anisotropie feldübergreifend. Sie äußert sich in ellipsenförmigen Strukturen der Kovarianzfunktion. Durch eine lineare Koordinatentransformation¹⁰¹ kann die Isotropie und damit eine reine Abstandsabhängigkeit der Kovarianzfunktion hergestellt werden (siehe Kapitel 2.4.1.2). Dieses anisotrope Verhalten wird in den meteorologischen Strömungsmustern häufig festgestellt¹⁰² und mit anisotropen Kovarianzmodellen erfasst (Thiebaux, 1976).

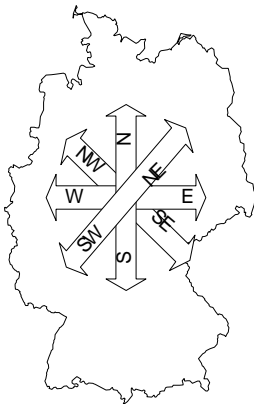
Mögliche Ursachen für eine geometrische Anisotropie der Immissionsfelder sind zum einen in geografischen Faktoren, wie der Lage der Messstationen, der Form des Untersuchungsgebiets und der räumlichen Verteilung der Ballungsgebiete in Deutschland zu suchen. Dem gegenüber stehen meteorologische Einflüsse, wie die mittlere Windrichtung und -stärke oder die Temperaturverteilung. Die mit den terminbezogenen Kovari-

¹⁰¹In den modernen Formen der Deformationsansätze erfolgt eine nichtlineare Verzerrung des Koordinatensystems (siehe Kapitel 2.3.2.3).

¹⁰²Die horizontale Neigung der Achsen der Rossby-Wellen ist z. B. Voraussetzung für den meridionalen Impulstransport.

anzumodellen ermittelbare Zeitabhängigkeit der Prozesse kann den Zusammenhang zwischen der veränderlichen Wettersituation erklären und damit eine Trennung der beiden Ursachengruppen ermöglichen.

Windstärke und -richtung scheinen die aussichtsreichsten Kandidaten für die Erklärung der witterungsbedingten Anisotropie zu sein. Der zunächst naheliegenden Erklärung der Anisotropie als Wirkung des Transportes durch den Wind in eine Richtung steht jedoch der Umstand gegenüber, dass mit Zunahme der Windstärke die Verdünnung vergrößert und somit die „Störung“ abgeschwächt wird.



Die Überprüfung der Anisotropie erfolgte nur für die Beobachtungsdaten und die Modellrechnung. Dafür wurden terminbezogene Kovarianzmodelle hinsichtlich eines homogenen Erwartungswertfeldes für vier Richtungssektoren (Nord/Süd, Ost/West, Nordwest/Südost und Südwest/Nordost) mit einem Winkel von 45° gebildet¹⁰³. Der für die sphärische Kovarianzfunktion ermittelte räumliche Skalierungsparameter L (siehe Kapitel 3.2.3) wurde dann für verschiedene Richtungen verglichen. Als Maß für die Anisotropie wurde die relative Differenz des Rangeparameters zu dem um 90° gedrehten Sektor gewählt. Die deutlichere Anisotropie ergab sich für Modellrechnung und

Beobachtung hinsichtlich des Sektorenpaars Nord/Süd und Ost/West¹⁰⁴ am Mittag. Abbildung 3.25 und Abbildung 3.26 zeigen Histogramme dieser relativen Differenz für die Nord/Süd und Ost/West Sektoren um 13 Uhr für Beobachtung und Modelldaten. Auffällig ist die deutliche Anisotropie der Modelldaten mit längeren Kovarianzen in Ost-West-Richtung für NO , NO_2 und SO_2 . Diese Struktur lässt sich so in den Beobachtungsdaten nicht feststellen. Für NO existiert sogar die stärkere Anisotropie in Nord-Süd-Richtung.

Nach der Betrachtung der mittleren Anisotropie stellt sich die Frage nach einem Zusammenhang zwischen Anisotropie und meteorologischer Situation. Dafür wurden die Wettersituationen mit Hilfe der Großwetterlagen nach Hess und Brezowsky H. (1977) klassifiziert. Die über 30 Wetterlagen sind weiterhin nach Gerstengarbe und Werner (1999) in den drei Grundströmungsmustern „Zonal“, „Meridional“ und „Übergang“ zusammengefasst worden. Mit dieser Einteilung konnte kein Zusammenhang zwischen der Ausprägung der Isotropie und der Wetterlage festgestellt werden. Mögliche Ursachen für die systematische Anisotropie sind demzufolge eher in der Form des Untersuchungsgebietes und in den unterschiedlichen realen und modellierten räumlichen Emissionsverteilungen zu vermuten.

¹⁰³ Problematisch erschien dabei der Umstand, dass die für verschiedene Sektoren geschätzte Varianz leichte Unterschiede aufwies. Die Frage, ob es sich dabei um Zufälligkeiten oder zu berücksichtigende Abweichungen handelt, konnte nicht beantwortet werden.

¹⁰⁴ Für die Beobachtungsinkremente tritt die größere Anisotropie im Sektorenpaar Nordwest/Südost und Südwest/Nordost auf, d. h. in einem um 45° gegen das geografische gedrehten Koordinatensystem.

ANISOTROPY W-O/N-S (OBS)

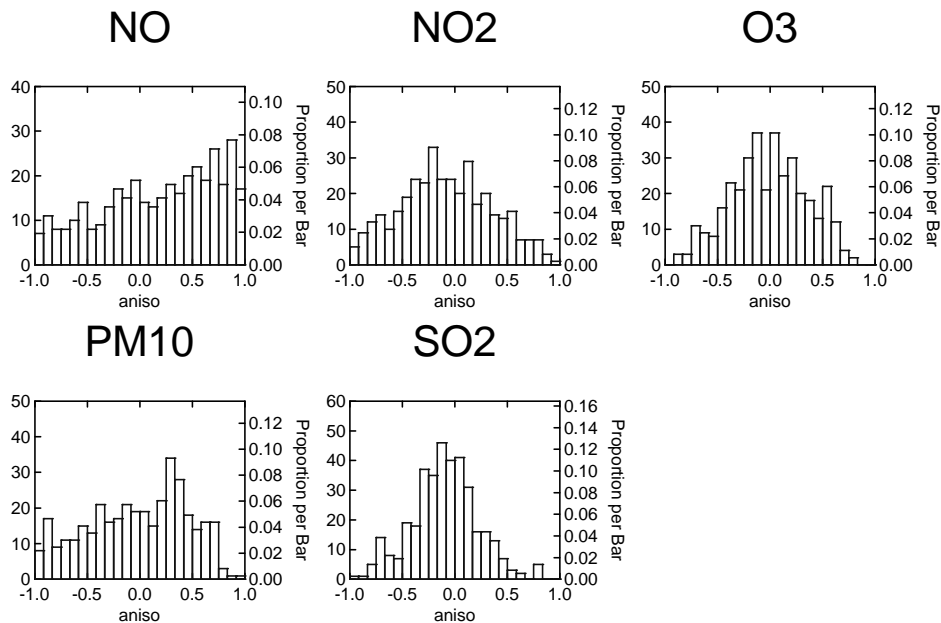


Abbildung 3.25 Relative Differenz (aniso) zwischen dem terminbezogenen homogenen Range-Parameter L in Ost-West- und in Nord-Süd-Richtung für die Beobachtungswerte um 13 Uhr. Positive Differenzen stehen für einen größeren Kovarianz-Range L in Nord-Süd Richtung

ANISOTROPY W-O/N-S (RCG)

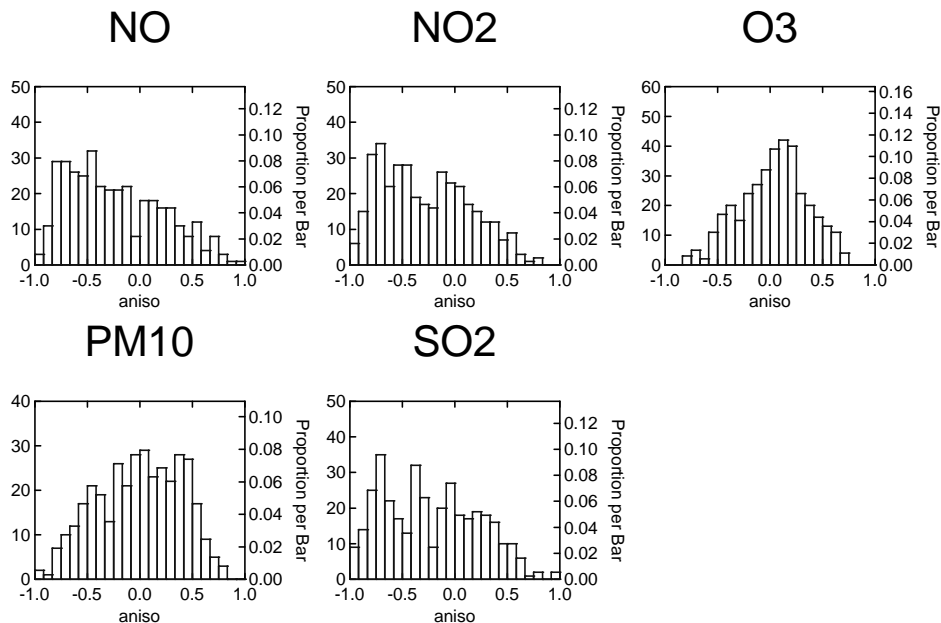


Abbildung 3.26 Relative Differenz(aniso) zwischen dem terminbezogenen homogenen Range-Parameter L in Ost-West- und in Nord-Süd-Richtung für die Modellwerte um 13 Uhr. Positive Differenzen stehen für einen größeren Kovarianz-Range L in Nord-Süd Richtung

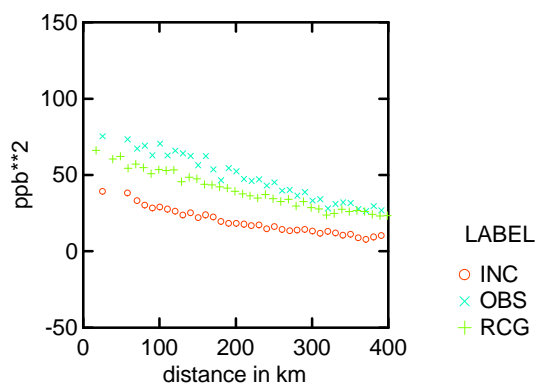
3.3.4.2 Kovarianz für verschiedene Immissionsregimes (KM B)

Die unabhängigen Variablen für das Kovarianzmodell B sind neben dem Abstand die Regimes der beiden Orte der Kovarianz (siehe Kapitel 3.1.3). Die Regimes sind die der Stationen für **HBH^T** bzw. die des Analysepunkts und der Station für **HB**. Das Regime des Analysepunkts wird aus der Modellrechnung abgeleitet. Folgerichtig wird die durch das Kovarianzmodell B wiedergegebene Struktur durch die Verteilung der beobachteten Regimes und die Modellrechnung bestimmt. Die Regimeverteilung der Stationen wurde bereits in Flemming (2003) beschrieben.

Im Folgenden werden nun die Kovarianzen für verschiedene Regimes am Beispiel für die Beobachtungsinkremente, Beobachtung und Modellrechnung diskutiert. Dazu wird die entsprechende abstandabhängige empirische Kovarianzfunktion innerhalb des ländlichen und des urbanen Regimes für Ozon (16 Uhr) und NO₂ (7 Uhr) präsentiert. Auffälligstes Merkmal der Kurven ist die Abhängigkeit von der Varianz und damit gewissermaßen die Skalierung der Kurven. Für das nachmittägliche Ozon ergeben sich keine großen Unterschiede in der Kovarianzstruktur innerhalb des ländlichen und des urbanen Regimes (Abbildung 3.27). In beiden Fällen ist die Kovarianzfunktion für Modellrechnung und Beobachtung von ähnlichem Verlauf. Bei den Beobachtungsinkrementen ist die Varianz deutlich kleiner (siehe Kapitel 3.3.3). Die Stärke des relativen Abfalls ist geringer, was auf einen im Vergleich zu Messung und Beobachtung größeren räumlichen Skalierungsparameter L (Range) schließen lässt.

Bei NO₂ um 7 Uhr sind die Varianzen der Abweichung vom Erwartungswert erwartungsgemäß in urbanen Regimes deutlich höher als in den ländlichen (Abbildung 3.28). Im urbanen Regime ist die Form des Abfalls für Modelldaten, Beobachtungsinkremente und Beobachtung etwa gleichartig; die Varianz der Beobachtung und der Inkremente ist jedoch deutlich höher als die der Modellrechnung. Die Existenz einer beachtlichen Kovarianz innerhalb des urbanen Regimes für große Abstände erklärt sich durch den Umstand, dass durch die Regimeunterscheidung bei der Approximation gewissermaßen von einem deutschlandweiten Gebiet mit urbaner Charakteristik ausgegangen wird. Innerhalb der ländlichen Regimes ist die Kovarianz deutlich geringer als in den urbanen; der Skalierungsparameter ist aufgrund des geringen Abfalls jedoch höher.

CM B RURAL-RURAL O3 16.00



CM B URBAN-URBAN O3 16.00

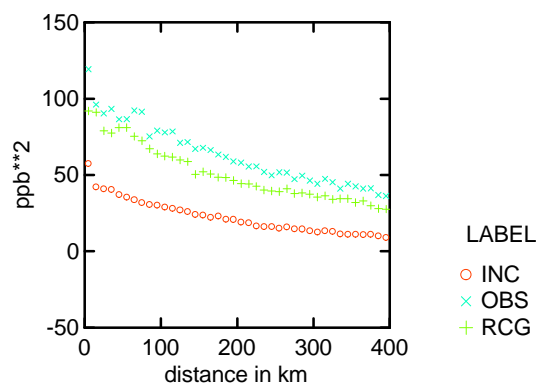


Abbildung 3.27 Klimatische Kovarianz (Kovarianzmodell B) für Ozon um 16 Uhr zwischen den ländlichen (links) und den urbanen Regimes (rechts) der Beobachtung (OBS), der Modellrechnung (RCG) und der Beobachtungsinkremente (INC). Dargestellt ist der Median aller empirischen Kovarianzwerte innerhalb einer Abstandsklasse.

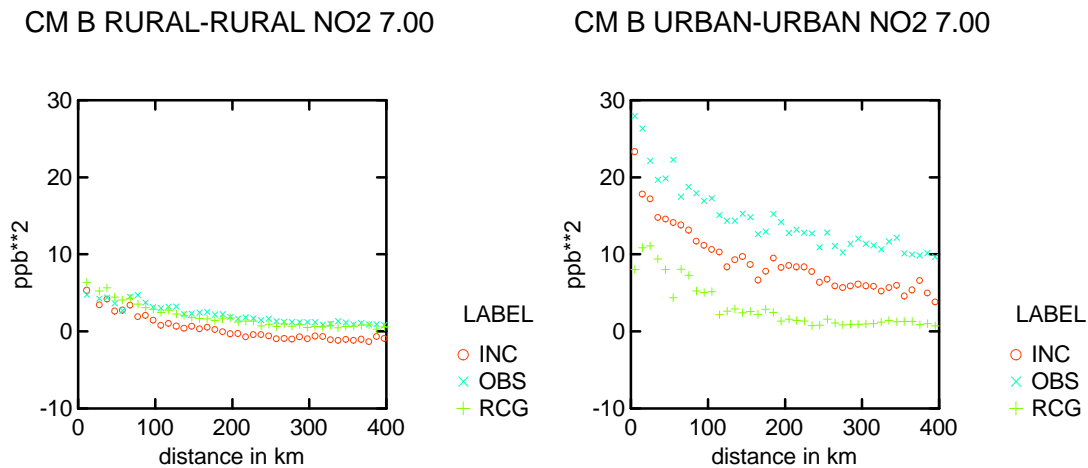


Abbildung 3.28 Klimatische Kovarianz (Kovarianzmodell B) für NO₂ um 7 Uhr zwischen den ländlichen Regimes der Beobachtung (OBS), der Modellrechnung (RCG) und der Beobachtungsinkremente (INC). Dargestellt ist der Median aller empirischen Kovarianzwerte innerhalb einer Abstandsklasse.

3.3.4.3 Die Eigenvektoren der Kovarianzmatrix (KM C)

Die Eigenvektoren, multipliziert mit der Wurzel des zugehörigen Eigenwertes, können als die die Kovarianzmatrix aufbauenden Felder aufgefasst werden (siehe Kapitel 2.5.8 und 3.2.5.2). Diese Felder besitzen eine „voneinander unabhängige“¹⁰⁵ räumliche Variation. Das Quadrat der Elemente an einem Ort ergibt den Anteil an der Varianz; das Produkt zwischen zwei Orten ergibt deren Kovarianzanteil. Die separat geschätzte Beobachtungsfehlervarianz wird vor der Eigenvektoraufspaltung von der empirischen Kovarianzmatrix abgezogen, wenn es die der Beobachtungen oder Beobachtungsinkremente ist.

Die prozessorientierte Interpretation der Eigenvektoren (EOF) ist ein viel und kontrovers diskutiertes Hilfsmittel in der globalen Klimaforschung (Dommenges und Latif, 2002). Die Eigenvektoren werden dabei als wichtige Moden der Variabilität interpretiert. Die Interpretation wird jedoch durch den formalen mathematischen Charakter der Eigenvektoren eingeschränkt. Dies gilt vorrangig für die Eigenvektoren ab dem zweitgrößten Eigenwert, da diese orthogonal zu allen vorangegangenen sein müssen. Die Muster der Eigenvektoren zeigen eine Abhängigkeit von der Form des betrachteten Gebietes. Weiterhin ergeben sich statistisch motivierte Entartungen, wenn die zugehörigen Eigenwerte von ähnlicher Größe sind (Richman, 1986). Ein Lösungsansatz dafür ist die Drehung der Eigenvektoren, der hier aber nicht verfolgt wird.

¹⁰⁵ aufgrund ihrer Orthogonalität

Im Folgenden werden für Ozon und NO_2 beispielhaft Eigenvektoren der empirischen klimatischen Kovarianzmatrix aus den Beobachtungsdaten, der Modellrechnung¹⁰⁶ und den Beobachtungsinkrementen miteinander verglichen (siehe Abbildung 3.29 bis Abbildung 3.34). Die an den Stationsorten vorliegenden Eigenvektoren wurden für eine bessere Darstellung analog zum Kovarianzmodell C räumlich interpoliert. Bei der Interpretation ist aus den dargelegten Gründen Vorsicht geboten. Der Vergleich scheint jedoch möglich, da die Artefakte für alle drei Datenbasen gleichwertige Auswirkungen haben sollten¹⁰⁷.

Für Ozon um 13 Uhr zeigen Modellrechnung und Beobachtungsdaten eine sehr ähnliche Struktur im ersten Eigenvektor (siehe Abbildung 3.29 und Abbildung 3.30). Das Zentrum des „Monopols“ ist jedoch in der Modellrechnung nach Süden verschoben. Der zugehörige Eigenwert erklärt bei der Beobachtung 44% und für die Modellrechnung 51% der Gesamtvarianz. Die nächsten beiden Eigenvektoren zeigen übereinstimmend¹⁰⁸ einen Dipol mit Nord-Süd und NW-SO Orientierung. Ihr Erklärungsanteil liegt bei 13 % (Modell) und 8 % (Beobachtung) bzw. bei 7 und 6 %. Der erste Eigenvektor der Beobachtungsinkremente (Abbildung 3.31) hat einen wesentlich geringeren Erklärungsanteil von nur 13 % und zeigt einen SW-NE gelagerten Dipol. Der zweite Eigenvektor der Beobachtungsinkremente entspricht in seiner Struktur dem dritten Eigenvektor von Modellrechnung und Beobachtung.

Die Struktur der Eigenvektoren der NO_2 -Immission um 7 Uhr ist wesentlich heterogener als bei Ozon um 13 Uhr (Abbildung 3.32 und Abbildung 3.33). Der erste Eigenvektor trägt nur 22 % (Beobachtung) bzw. 29% (Modellrechnung) der Gesamtvarianz. Der erste Eigenvektor der Beobachtungsinkremente gleicht in seiner Struktur stark dem der Beobachtung (Abbildung 3.34). In den Beobachtungen sind die Räume Berlin und München weitere wichtige Moden der Variabilität, die in den Modelldaten so nicht zu finden sind. Hier herrscht die größte Variabilität in der Nähe der Ruhrgebietes.

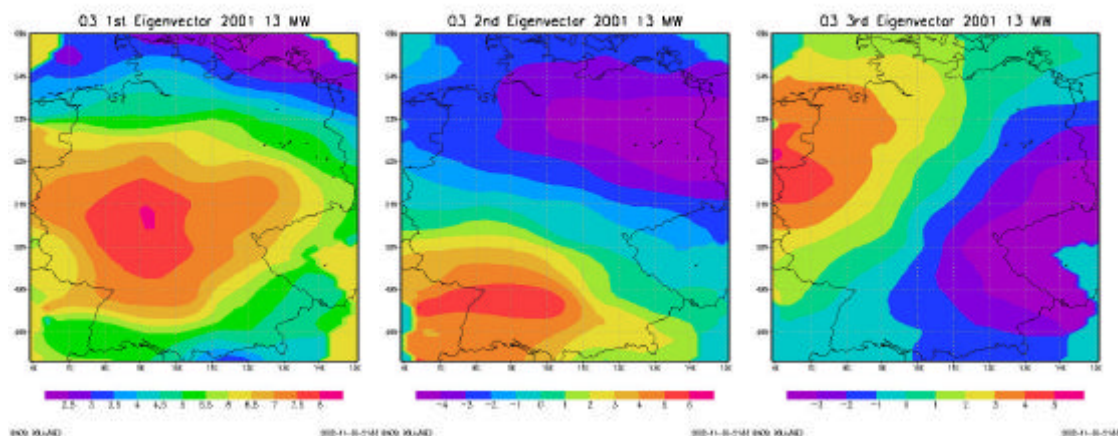


Abbildung 3.29 Die ersten drei Eigenvektoren (interpoliert) der empirischen Kovarianzmatrix der Beobachtungen für Ozon um 13 Uhr.

¹⁰⁶ Die Kovarianzmatrix der Modelldaten wird nur für die Messorte gebildet, so dass die Größe und Bedeutung der Kovarianzmatrix in allen Fällen die gleiche ist.

¹⁰⁷ Die Untersuchung der Frage, ob beim RRSQRT-Ansatz für Kalman-Filter degenerierte oder „unphysikalische“ Eigenvektoren entstehen und welche Auswirkungen sie haben, scheint lohnenswert.

¹⁰⁸ Die Struktur der Eigenvektoren ist vom Vorzeichen unabhängig.

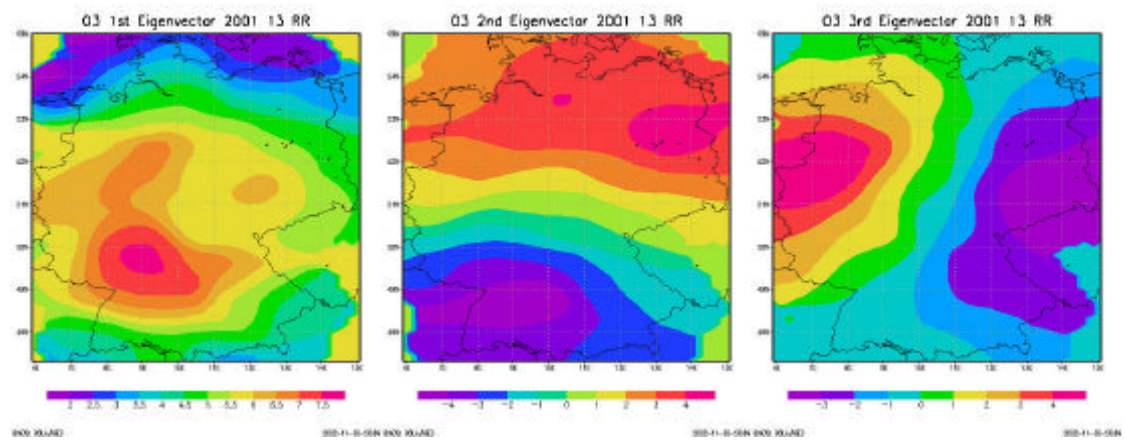


Abbildung 3.30 Die ersten drei Eigenvektoren (interpoliert) der empirischen Kovarianzmatrix der Modellrechnung für Ozon um 13 Uhr.

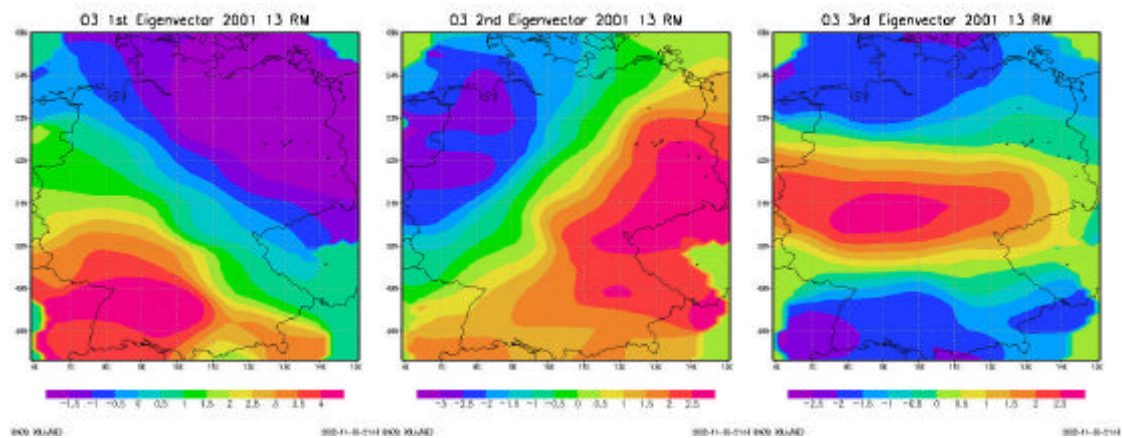


Abbildung 3.31 Die ersten drei Eigenvektoren (interpoliert) der empirischen Kovarianzmatrix der Beobachtungsincremente (Beobachtung minus Modell) für Ozon um 13 Uhr.

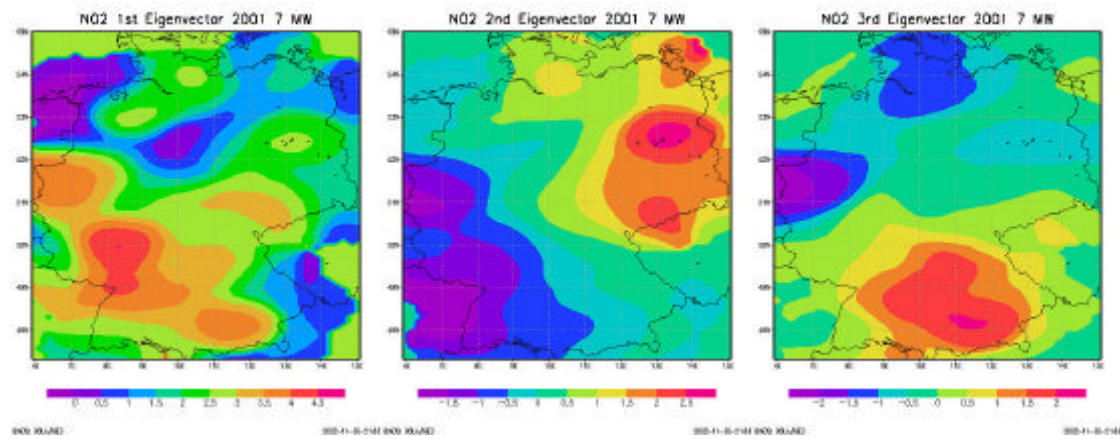


Abbildung 3.32 Die ersten drei Eigenvektoren (formal interpoliert) der empirischen Kovarianzmatrix der Beobachtungen für NO₂ 7.00 Uhr.

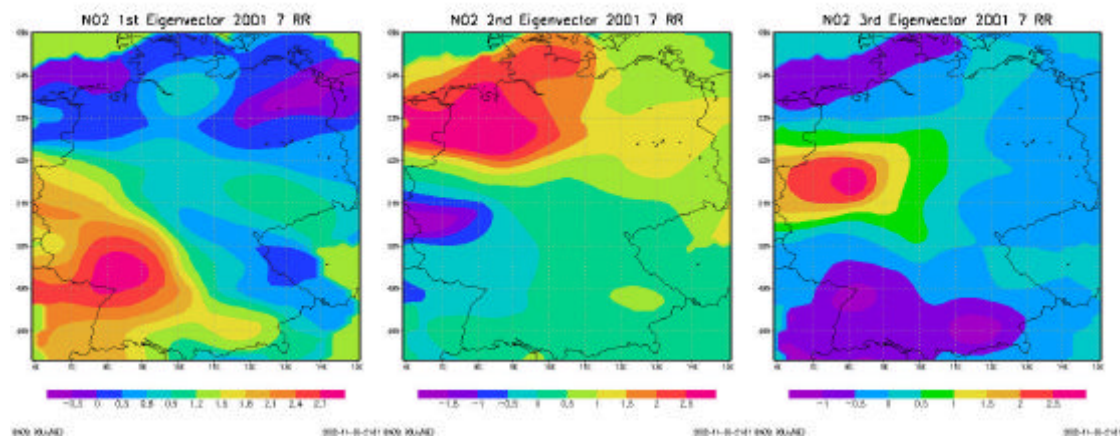


Abbildung 3.33 Die ersten drei Eigenvektoren (formal interpoliert) der empirischen Kovarianzmatrix der Modellrechnung für NO₂ 7 Uhr.

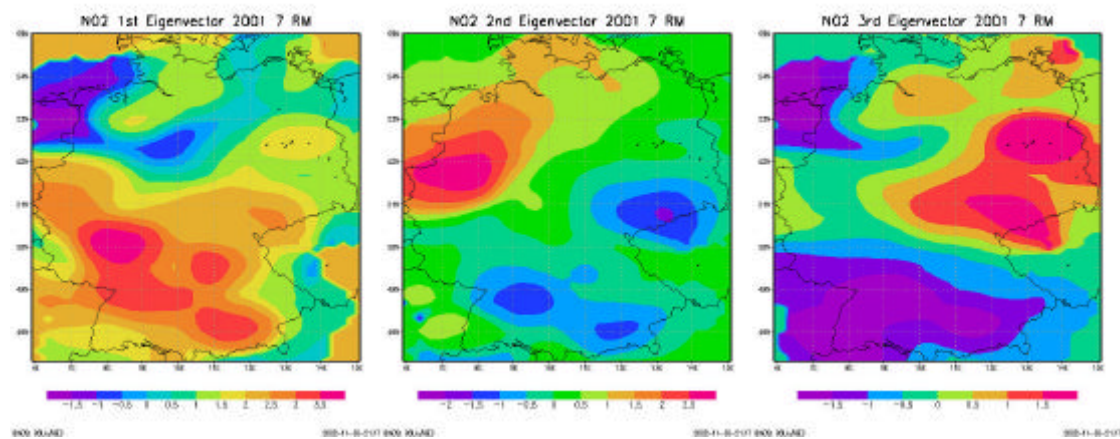


Abbildung 3.34 Die ersten drei Eigenvektoren (formal interpoliert) der empirischen Kovarianzmatrix der Beobachtungssinkremente für NO₂ 7 Uhr.

3.3.5 Alternative dynamische Kovarianzmodelle

Im Rahmen dieses Forschungsvorhabens werden vorrangig passive Ansätze der Datenassimilation angewendet. Die geschätzten Kovarianzmodelle des Backgrounds sind demzufolge unabhängig vom vorhergehenden Verlauf der Datenassimilation. Zusätzlich wurden jedoch zwei aktive Verfahren getestet:

1. aktive OI während des Modelllaufs für das gesamte Jahr 2001 (siehe 4.1.7)
2. der Kalman-Filter Lauf für den Juli 2001.

Bei diesen Verfahren erfolgt die Kovarianzmodellierung während des Modelllaufs, denn beim aktiven Ansatz beeinflusst das Analyseergebnis zu einem Termin das Backgroundfeld für den nächsten Termin. Aus diesem Grund sind klimatische Ansätze weniger geeignet.

1. Bei der aktiven OI geschieht die Kovarianzmodellierung empirisch mit dem terminbezogenen homogenen Kovarianzmodell A der Beobachtungsinkremente. Vergleicht man das Rausch-Signal-Verhältnis der aktiven und passiven Variante, so stellt man ein um ca. 20% höheres Verhältnis bei gleichwertiger Beobachtungsfehlervarianz fest. Dies spricht für eine geringere Ausprägung der Varianz des Background- bzw. Modellfehlers und damit für den positiven Effekt der Analyse im vorangehenden Zeitschritt.

2. Beim Kalman-Filter ist die Prognose der Kovarianzmatrix die grundlegende Eigenschaft des Verfahrens (siehe Kapitel 2.5.7). Hier wird ein zeitlich veränderliches und räumlich inhomogenes Kovarianzmodell prognostiziert. Das Kovarianzmodell des Kalman-Filters liefert nicht nur die Kovarianz zwischen verschiedenen Punkten eines Feldes, sondern zwischen allen Elementen des Modellzustandsvektors. Der RRSQRT-Ansatz des Kalman-Filters beruht auf der Eigenvektoraufspaltung der dynamisch modellierten Kovarianzmatrix \mathbf{P} (siehe Kapitel 2.5.8).

Eine Evaluierung des Kalman-Filters beschränkt sich meist auf den Nachweis seiner Funktionalität, d. h. der verbesserten Wiedergabe von Beobachtungen, die nicht an der Assimilation beteiligt waren (van Loon et al., 1999). Die Frage nach einer Verbesserung der Assimilationsleistung kann durch dieses Vorgehen nicht beantwortet werden. Der Vergleich mit den in Kapitel 3.3.4.3 diskutierten Eigenvektoren und Eigenwerten der empirischen klimatischen Kovarianzmatrix kann zur Prozessevaluierung des Kalman-Filters herangezogen werden. Dieser Vergleich ist angemessen, da die Stärke der Beeinflussung des Modellzustandsvektors durch die Beobachtungen mit dem Rausch-Signal-Verhältnis abgeschätzt werden kann. Die Beobachtungsfehlervarianz in der passiven Datenassimilation (Analyse) und der Kalman-Filter-Anwendung ist dieselbe, so dass auch die Varianzen des Backgrounds bzw. des Modellzustandsvektors vergleichbar sind.

Der hier verwendete Kalman-Filter-Lauf ist eine erste Testversion. Der durchgeführte Vergleich hat demzufolge nur methodischen Charakter. Abbildung 3.35 zeigt beispielhaft die mit dem Kovarianzmodell C an den Stationsorten geschätzte empirische Standardabweichung für 13 Uhr im Sommerhalbjahr 2001 und den Mittelwert der Standardabweichung zur selben Zeit aus dem Kalman-Filter Lauf für den Juli 2001. Die Standardabweichungen des Kalman-Filter-Laufes sind um den Faktor 10 geringer.

Demzufolge ist auch die Möglichkeit der Veränderung des Feldes durch Beobachtungen deutlich herabgesetzt¹⁰⁹.

Ein weiterer Unterschied ist die unterschiedliche Struktur der räumlichen Kovarianz. Abbildung 3.36 zeigt die Kovarianz zur Station Burg (BB001). Während bei den empirischen geschätzten Werten erwartungsgemäß eine Abnahme der Kovarianz mit wachsender Entfernung auftritt, ist dies beim Kalman-Filter nicht zu erkennen. Die Stärke der Kovarianz hängt offensichtlich nicht von der Entfernung ab.

Dieser Umstand lässt sich mit der hier angewandten dynamischen Methode zur Modellierung der Kovarianz durch die Modellprognosefehler (model noise, siehe 2.5.7) erklären. Der Modellfehler wird induziert, indem für das gesamte Modellgebiet eine konstante Änderung von NO_x - und VOC-Emission sowie vom vertikalen turbulenten Austauschkoefizienten K_z angesetzt wird. Folgerichtig sind diese Modellprognosefehler über das gesamte Gebiet räumlich hoch korreliert. Folglich empfiehlt es sich, die Variation der Modellparameter gebietsabhängig zu machen. Aufgrund des erhöhten numerischen Aufwandes ist dies nur begrenzt möglich. Ansätze zur lokalen Begrenzung der Kovarianz sind in Bultjes et al. (2000) zu finden. Die in dem vorliegenden Bericht empirisch modellierten Kovarianzen können diese Ansätze verbessern, da sie eine Spezifizierung von Einflussgebieten ermöglichen.

Weitere zukünftige Untersuchungen könnten sich dem Einfluss der formalen Eigenvektorerlegung und Reduktion (RRSQRT, siehe 2.5.8) auf die physikalisch-chemische Konsistenz der gebildeten Modellzustandsvektoren widmen. Dabei spielt die Frage der Entartung bzw. Rotation der Eigenvektoren eine Rolle. Die Ergebnisse des Kapitels 3.3.4.3 bilden hierfür eine Arbeitsgrundlage.

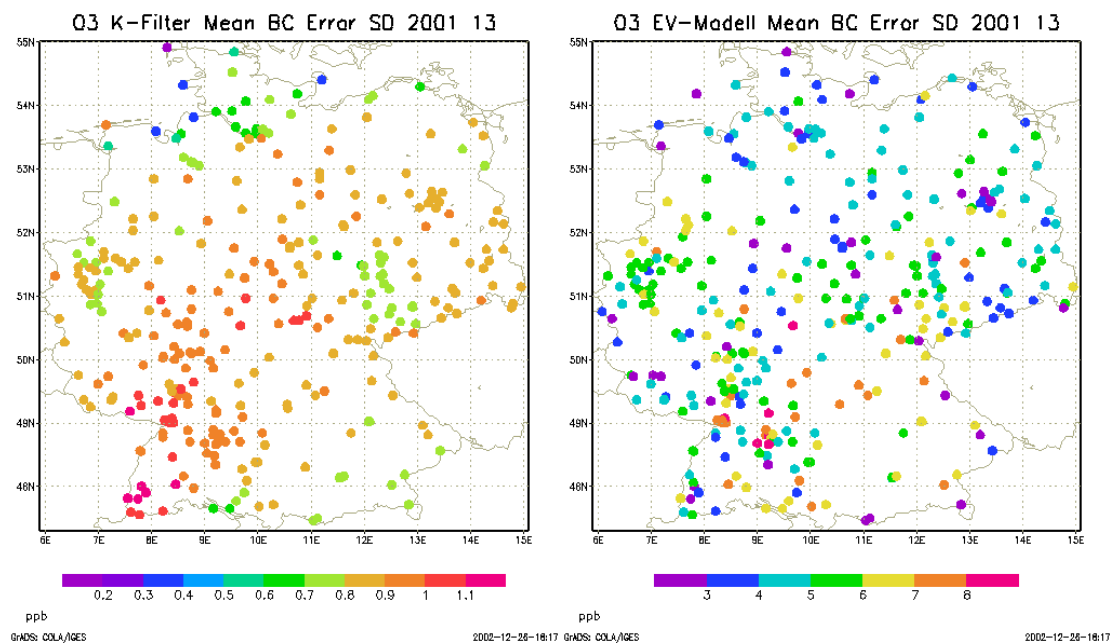


Abbildung 3.35 Standardabweichung (in ppb) des Fehlers des Backgrounds für Ozon um 13 Uhr aus dem Kalman-Filter-Lauf (links, Mittelwert im Juli 2001) und dem empirischen klimatischen Kovarianzmodell C (Sommer 2001). Die Skalierung ist für die Karten unterschiedlich.

¹⁰⁹ Dieser Umstand wird noch verstärkt, da in der gegebenen Implementierung die Analyse mit dem Feld der Stundenmittelwerte und nicht mit dem prognostizierten Modellfeld erfolgt. Letzteres wird „nur“ über die Kovarianzen zum Feld der Stundenmittelwerte mit der Analyse verändert.

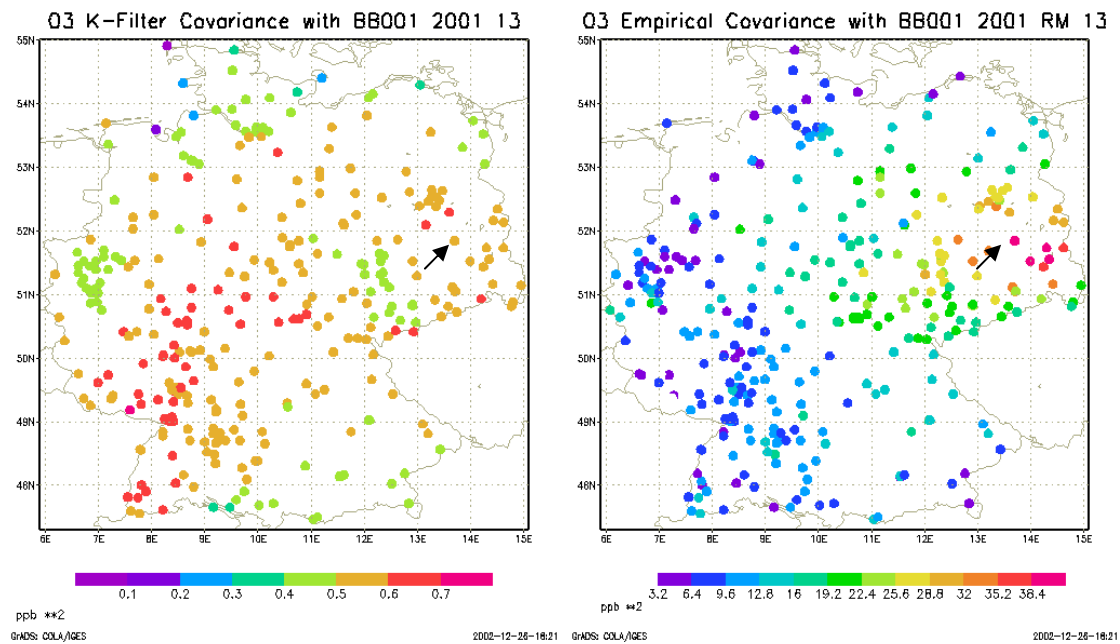


Abbildung 3.36 Kovarianz (in ppb^2) zur Station Burg (BB001) (Pfeil) des Fehlers des Backgrounds für Ozon um 13 Uhr aus der Kalman-Filter-Lauf (links, Mittelwert im Juli 2001) und dem empirischen klimatischen Kovarianzmodell C (Sommer 2001). Die Skalierung ist für die Karten unterschiedlich.

4 Analyse und Datenassimilation der Immissionsfelder

In diesem Kapitel werden die auf Basis der Kovarianzmodelle A, B und C (siehe Kapitel 3.3) erzeugten Immissionsfelder diskutiert. Ausgangspunkt für die statistische Analyse (siehe Kapitel 2.5.4) sind die stündlichen Beobachtungen in Deutschland und modellierte Felder des Modells REM/Calgrid (Flemming, 2003) für das Jahr 2001. Die stündlich analysierten Felder werden anhand ihrer Jahresmittelwerte¹¹⁰ 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 vorraussetzungsfreien cross-validation-Ansatz.

Die passiven Ansätze der Verbindung von Modell- und Beobachtungsinformation stehen im Mittelpunkt der Betrachtung.

4.1 Verschiedene statistische Analyseverfahren der Immission

Vier passive Ansätze für die Analyse auf Basis der Optimalen Interpolation (OI, siehe Kapitel 2.5.5) wurden im Rahmen des Berichtes 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 **R**)
4. Festlegung der Kovarianzen zwischen den an der Interpolation beteiligten Messstationen (Matrix **HBH^T**)
5. Festlegung der Kovarianz zwischen Beobachtungsort und Interpolationspunkt (Matrix **HB**)
6. Art und Größe des Background-Feldes
7. Anzahl der beeinflussenden Stationen

¹¹⁰ 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.

8. Auflösung der Analyse und der parametrischen Kovarianzmodelle
9. mehrmaliges Durchlaufen mit homogenem Ansatz

Eine Diskussion dieser Punkte erfolgt in den Kapiteln 4.1.1 bis 4.1.7. Eine Zusammenfassung wichtiger Verfahrensmerkmale wird in Tabelle 2 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. s_B^2	hom. s_B^2	hom. s_B^2	$B + s_{O_i}^2$	$C + s_{O_i}^2$
HB	A	A	A	B	C
Auflösung	$0.5^\circ \times 0.25^\circ$	$0.25^\circ \times 0.125^\circ$	$0.25^\circ \times 0.125^\circ$	$0.25^\circ \times 0.125^\circ$	$0.25^\circ \times 0.125^\circ$
Gebiet	Mitteleuropa	Deutschland	Deutschland	Deutschland	Deutschland

Tabelle 2 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
$s_{O_i}^2$	individuelle Beobachtungsfehlervarianz
hom. s_B^2	homogene Varianz der Beobachtungssinkremente

4.1.1 Transformation der Variablen

Die Analyse wird zum einen 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 3.1.1, Abschnitt „Abweichung von der Normalverteilung“, beschriebene Korrektur statt. Trotz dieser Korrektur gilt das für die Analyse grundlegende Prinzip der Varianzminimierung (siehe Kapitel 2.5.4) 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.

4.1.2 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 3.3.2). 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 3.3.2). 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.

4.1.3 Beobachtungsfehler und räumliche Kovarianz

Für die homogenen Ansätze mit dem Kovarianzmodell A ergibt sich pro Termin ein Wert für die Gesamtvarianz ($s_{OB}^2 = s_B^2 + s_O^2$) 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 B und C und die lokal geschätzte Varianz des Beobachtungsfehlers $\widehat{s_{oi}^2}$ zur Verfügung.

Die Kovarianz zwischen Beobachtungsort und Interpolationspunkt wird mit Hilfe der Kovarianzmodelle B und C ermittelt. Der Abstand sowie das Regime der Beobachtung und des Modellgitterpunktes sind die Kriterien für die Bildung des Kovarianzwerts für das Kovarianzmodell B. Bei Kovarianzmodell C wird die Kovarianz mit Hilfe der aus den interpolierten Eigenvektoren approximierten Kovarianzmatrix zwischen allen Gitterpunkten gewonnen (siehe Kapitel 3.1.3).

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 $\widehat{s_{oi}^2}$ 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. 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 3.2.3) 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 2.3.2) wurde dem „sphärischen“ Kovarianzmodell der Vorrang eingeräumt.

4.1.4 Auflösung, Interpolation von Gitterboxmittelwerten

Die Auflösung des modellierten Feldes beträgt $0.5^\circ \times 0.25^\circ$ (ca. $25\text{ km} \times 25\text{ km}$). 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 2.1) 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. $12\text{ km} \times 12\text{ km}$) festgelegt. Die Auflösung der Analyse beeinflusst die Weite der Abstandsklassen für die parametrischen Kovarianzmodelle (siehe 3.2.1). 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).

4.1.5 Auswahl der beeinflussenden Stationen

Nach Gleichung {0.31} 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 2.5.5). Für die Analyse wurden die 8 nächsten¹¹¹ 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 3.2.5.3).

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

¹¹¹ 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.

4.1.6 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 3.3.3.2): 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 diesem Forschungsvorhaben 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.

4.1.7 Aktive Datenassimilation mit Optimaler Interpolation

Die aktive Datenassimilation mit Optimaler Interpolation ergibt sich aus einem Modelllauf, bei dem jede Stunde die Modellfelder der Bodenschicht an die Beobachtungen angepasst werden. Dies geschieht, in dem jede Stunde die Analyse aus Modellfeld und Beobachtungen das Modellfeld ersetzt. Das Vorgehen gleicht dem Prinzip des Kalman-Filters (siehe Kapitel 2.5.7, Abbildung 2.3) mit dem wichtigen Unterschied, dass die Kovarianz nicht mit Hilfe eines Ensembles von gestörten Modellzuständen prognostiziert, sondern aus den Beobachtungsinkrementen 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 4.1.2) und dass die horizontale Auflösung des Feldes (siehe Kapitel 4.1.4) nicht erhöht wird.

Da PM10 keine prognostische Modellvariable ist, muss ein Beobachtungsoperator (siehe Kapitel 2.5.3) 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.

4.2 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 {0.31} dient. Die Varianz des Analysefehlers {0.37} 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 ausgenommen¹¹² 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 2.5.5). 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.

¹¹² Für die Schätzung des Kovarianzmodells wurden jedoch der Vereinfachung wegen alle Stationen einbezogen, so dass das Kovarianzmodell immer das Gleiche ist.

5 Zusammenfassung

Der grundlegende methodische Ansatz dieses Teils des Forschungsvorhabens ist die Kombination von Beobachtungen mit Modellrechnungen. Dieses Vorgehen nennt man „Datenassimilation“. Unter dem Begriff „Analyse“ versteht man eine räumliche Interpolation der Beobachtung durch die Kombination mit einem bereits vorgegebenen Feld. Im Fall dieses Forschungsvorhabens ist das ein vom Modell REM/Calgrid (Stern, 2003a) berechnetes Feld. Die Analyse ist ein wichtiger Bestandteil der Datenassimilation, da sie die Beobachtungen in das Modellfeld einfügt. Das Modellfeld wird dabei durch die Analyse zu einem Zeitpunkt ersetzt. Man spricht von „passiver Datenassimilation“, wenn die analysierten Felder nicht aktiv in der Modellrechnung weiterverwendet werden.

Die Optimale Interpolation ist das im Forschungsvorhaben angewendete Analyseverfahren. Sie wird zur passiven und aktiven Datenassimilation verwendet. Der Kalman Filter ist eine komplexere Form der aktiven Datenassimilation, die besser die raumzeitliche Variabilität der Immissionsfelder berücksichtigt.

Im Rahmen des Berichtes werden die bodennahen Spurenstoffimmissionen von Ozon, NO₂, NO, SO₂ und Feinstaub (PM10) in Deutschland behandelt. Die hier betrachteten Immissionsdaten stammen zum einen aus den operationellen Luftgütemessnetzen der Bundesländer, zum anderen wurden sie mit dem Eulerschen Chemie-Transport-Modell REM/Calgrid (Stern, 2003a) simuliert. Die horizontale Auflösung der Modellfelder beträgt 0.5° geografische Länge mal 0.25° Breite (ca. 25*25 km²).

In diesem Bericht wird die Methodik von Analyse und Datenassimilation unter dem Blickwinkel der statistischen Besonderheiten der Immissionsdaten vorgestellt. Dabei wird auf die in diesem Forschungsvorhaben erstellte Klassifikation von Immissionsregimes (Flemming, 2003) zurückgegriffen. Ein Schwerpunkt des Berichtes ist die Schätzung der statistischen Eigenschaften von Modell- und Beobachtungsfehler mit Hilfe von statistischen Modellen. Dies ist eine notwendige Voraussetzung für die Anwendung der Analyse- und Datenassimilationsverfahren, da die Gewichtung von Beobachtung und Modellrechnung durch die Größe des jeweiligen Fehlers festgelegt wird.

Die skalengerechte Kartierung von Luftgütestandards nach der EU-Rahmenrichtlinie zur Reinhaltung der Luft und deren Tochterrichtlinien (EU, 1996, 1999, 2000, 2002) ist die wichtigste Anwendung der Datenassimilation. Die genaue Darstellung der Luftgütestandards für das Jahr 2001 ist jedoch der Bestandteil eines gesonderten Berichtes, der im Rahmen des FE-Vorhabens 201 43 250 „Anwendung modellgestützter Beurteilungssysteme für die bundeseinheitliche Umsetzung der EU-Rahmenrichtlinie Luftqualität und ihrer Tochterrichtlinien“ erstellt werden wird. Eine erste Anwendung der OI zur Bewertung der Luftqualität 1999 kann in Stern und Fleming (2001) gefunden werden.

Die Beschreibung der Kalman Filter Anwendung, deren wichtigstes Ergebnis die Optimierung von Modellparametern ist, erfolgt im Rahmen des FE-Vorhabens 299 43 246 „Entwicklung eines Beurteilungssystems für das Zusammenspiel von Messung und

Modellrechnung für die bundeseinheitliche Umsetzung der EU-Rahmenrichtlinie Luftqualität und ihrer Tochterrichtlinien“.

Ein umfangreicher Literaturüberblick stellt wichtige Arbeiten zur Kartierung von Immissionsdaten, zur inhomogenen Kovarianzmodellierung und zur Assimilation von Immissionsmessungen in Chemie-Transport-Modelle vor. In einem theoretischen Teil wird auf die Beschreibung von räumlichen Zufallsprozessen und die Schätzung seiner Momente aus Raum-Zeit-Daten eingegangen. Weiterhin werden die Gleichungen der statistischen Analyse und verschiedener Formen der Datenassimilation diskutiert.

Das Grundproblem der statistischen Analyse ist die Bereitstellung der räumlichen Momente der Beobachtungen, der Modellrechnung bzw. die von deren Differenz (Beobachtungsinkremente). Diesem Problem ist das Kapitel 3 gewidmet. Für die Schätzung der Momente aus einer Stichprobe sind vereinfachende Annahmen zur Bildung eines Kovarianzmodells erforderlich. In diesem Bericht werden ein homogenes terminbezogenes (A) und zwei inhomogene klimatische Kovarianzmodelle (B, C) entwickelt und miteinander verglichen.

Das homogene Kovarianzmodell A beruht auf den Beobachtungen eines Termins und liefert eine abstandsabhängige homogene Kovarianzfunktion für verschiedene Richtungssektoren. Es kann gut die zeitliche Variabilität der räumlichen Kovarianz abbilden, da es für jeden Termin neu ermittelt wird. Dieses Kovarianzmodell wurde für die ersten Arbeiten zur Kartierung der Immissionssituation für das Jahr 1999 verwendet (Stern und Flemming, 2001). Die neu entwickelten inhomogenen Ansätze werden separat für jede Tagesstunde gewonnen; sie können jedoch die über den Tagesgang hinausgehende zeitliche Variabilität nicht erfassen. Sie beruhen auf stationspaarbezogenen Kovarianzwerten, die aus gefilterten Zeitreihendaten geschätzt werden. Das Kovarianzmodell B greift auf die abgeleiteten Regimes zurück und setzt sich aus homogenen Kovarianzfunktionen für jede Kombination von Regimes zusammen. Das inhomogene Kovarianzmodell C beruht auf einer Interpolation der Eigenvektoren der empirischen Kovarianzmatrix.

Wichtigstes praktisches Ergebnis der Kovarianzmodellierung ist die Quantifizierung der Standardabweichung eines unkorrelierten biasfreien Beobachtungsfehlers für alle Stationen. Der Beobachtungsfehler ist neben dem Messinstrumentenfehler ein Maß für die räumliche Repräsentativität der Messung. Der Betrag der Varianz des klimatischen Beobachtungsfehlers macht von ca. 20% für Ozon bis zu ca. 60% für NO der Gesamtvarianz der Beobachtungsinkremente aus. Der Bias zwischen Modell und Beobachtung wurde klimatisch stationsbezogen oder homogen für alle Stationen zu einem Termin ermittelt. Er zeichnet sich durch einen ausgeprägten Tagesgang aus, der auf einen zu schwachen vertikalen Austausch in der Nacht und zu starkem Austausch während des Tages durch die Modellierung schließen lässt.

Weiterhin werden die mit Hilfe der Kovarianzmodelle erfassten räumlichen Strukturen und deren Anisotropie diskutiert. Die festgestellte Anisotropie der Kovarianz geht eher auf die Lage der Emissionszentren und der Messnetzanordnung als auf meteorologische Einflussfaktoren zurück. Für eine Testanwendung eines Kalman-Filters für REM/Calgrid wurde dessen dynamische Kovarianzmodellierung mit der hier durchgeführten empirischen verglichen. Damit wurde eine Möglichkeit zur gezielten Verbesserung der Assimilationsleistung mit dem Kalman-Filter aufgezeigt.

Das abschließende Kapitel widmet sich technischen Aspekten der Analyse von stündlichen Immissionsfeldern auf der Basis von Beobachtungen und Modellrechnungen. Die angestrebte horizontale Auflösung beträgt dabei ca. 15 km. Es werden verschiedene Formen der Implementierung, wie z. B. die Anzahl der beeinflussenden Stationen, die

Biaskorrektur bzw. die Log-Transformation, diskutiert. Die Analyse erfolgt unter Verwendung der Kovarianzmodelle A, B und C und zusätzlich mit Kovarianzmodell A für die logarithmisch transformierten Werte. Um die Güte der Analyseleistung zu ermitteln, wurde ein cross-validation-Ansatz entwickelt. Er bewertet die Interpolationsgüte an den Stationsorten, ohne dass die zugehörige Beobachtung zur Interpolation verwendet wird.

6 Symbole

Mathematische Symbole

$\{Kapitel.Nummer\}$	Gleichungsnummer
\mathbf{M}	Matrix (fetter Großbuchstabe)
m_{ij}	Element der Matrix \mathbf{M}
\mathbf{a}	Vektor(fetter Kleinbuchstabe)
\mathbf{r}_i	Ortsvektor
r_i	Abstand
$\mathbf{?}$	Diagonalmatrix der Eigenwerte
λ	Eigenwert
\mathbf{V}	Matrix der Eigenvektoren

Statistische Definitionen

$X(\mathbf{r})$räumlicher Zufallsprozess

$p(X)$Wahrscheinlichkeitsdichte von X

$p(X | Y)$bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte
von X bei Y

$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = E(X(\mathbf{r})) = \int_{-\infty}^{\infty} X(\mathbf{r}) p(X) dX$Erwartungswert (1. statistisches Moment)

$\mathbf{s}^2(\mathbf{r}) = \text{Var}(X(\mathbf{r})) = E((X(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r}))^2)$Varianz (2. statistisches Moment)

\mathbf{s}Standardabweichung

$C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \text{Cov}(X(\mathbf{r}_1), X(\mathbf{r}_2)) = E((X(\mathbf{r}_1) - \mathbf{m}(\mathbf{r}_1))(X(\mathbf{r}_2) - \mathbf{m}(\mathbf{r}_2)))$

.....Kovarianz

\hat{C}Schätzung von C

\hat{C}robuste Schätzung von C

$\text{med}_{i=1,n}(x_i)$Median des Ensembles x_i

Definitionen für die statistische Analyse

N	Anzahl der Gitterpunkte / Elemente des Modellzustandsvektor
m	Anzahl der Beobachtungen
$\mathbf{x}_A \in R^N$	Zustandsvektor Analyse
$\mathbf{x}_B \in R^N$	Zustandsvektor Modell/Background
$\mathbf{x}_{true} \in R^N$	hypothetischer "wahrer" Zustandsvektor
$\mathbf{y} \in R^m$	Beobachtungsvektor
$H, \mathbf{H} \in R^{N \times m}$	Beobachtungsoperator, linearisiert
$\mathbf{K} \in R^{m \times N}$	Analysegewichte
$\mathbf{e}_{OB} = (\mathbf{y} - H\mathbf{x}_B)$	Beobachtungssinkrement
$\mathbf{e}_O = \mathbf{y} - H\mathbf{x}_{true}$	Beobachtungsfehler
$\mathbf{e}_A = \mathbf{x}_A - \mathbf{x}_{true}$	Analysefehler
$\mathbf{e}_B^* = \mathbf{x}_B - \mathbf{x}_{true}$	Modell- bzw. Backgroundfehler
$\mathbf{e}_B = \mathbf{x}_B - \mathbf{x}_{true} - E(\mathbf{e}_B)$	biasfreier Modell- bzw Backgroundfehler
$E(\mathbf{e}_B)$	Bias von Modell- bzw. Backgroundfehler
$\widehat{(\mathbf{y} - H\mathbf{x}_B)}$	Schätzung des Bias

Varianz und Kovarianz der Fehler

$\mathbf{s}_B^2 = E(\mathbf{e}_B^2)$	Varianz des Modell- bzw. Backgroundfehlers
$\mathbf{B} = E(\mathbf{e}_B \mathbf{e}_B^T) \in R^{N \times N}$	Kovarianzmatrix des Modell- bzw. Backgroundfehlers
$\mathbf{s}_O^2 = E(\mathbf{e}_O^2)$	Varianz des Beobachtungsfehlers
$\mathbf{R} = E(\mathbf{e}_O \mathbf{e}_O^T) \in R^{m \times m}$	Kovarianzmatrix des Beobachtungsfehlers
$\mathbf{R} = I E(\mathbf{e}_O^2)$	\mathbf{R} bei unkorreliertem Beobachtungsfehler
$\widehat{E(\mathbf{e}_{OB} \mathbf{e}_{OB}^T)} = \widehat{(\mathbf{y} - H\mathbf{x}_B)} = \widehat{(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})}$	empirische Kovarianzmatrix der Beobachtungssinkremente

$\mathbf{s}_{OB}^2 = E(\mathbf{e}_{OB}^2) = \mathbf{s}_O^2 + \mathbf{s}_B^2$ Varianz der Beobachtunginkremente bei
unkorrelierten Beobachtungsfehler

$h = \frac{\mathbf{s}_O^2}{\mathbf{s}_O^2 + \mathbf{s}_B^2}$ Rausch-Signal-Verhältnis

$\mathbf{s}_A^2 = E(\mathbf{e}_A^2)$ Varianz des Analysefehlers

$\mathbf{A} = E(\mathbf{e}_A \mathbf{e}_A^T) \in R^{N \times N}$ Kovarianzmatrix des Analysefehlers

L Räumlicher Skalierungsparameter
der parametrischen Kovarianzmodelle

7 Literaturverzeichnis

Altman, N. S. (1990)

Kernel smoothing of data with correlated errors, Journal of the American Statistical Association, Bd. 85, 411, S. 749-759.

Anderson, E. (1992)

Use of radiances in 3d / 4d variational data assimilation, Workshop on variational data assimilation with emphasis on 3dimensional aspects, ECMWF.

Bacher, J. (1994)

Clusteranalyse, R. Oldenburg Verlag, München.

Balgovind, R., Dalcher, A., Ghil, M. und Kalnay, E. (1983)

A stochastic-dynamic model for the spatial structure of forecast error statistics, Monthly Weather Review, Bd. 111, S. 701-722.

Beilke, S. und Uhse, K. (1999)

Jahresbericht 1998 aus dem Messnetz des Umweltbundesamtes, UBA-Texte, Bd. 66.

Bilonick, R. A. (1985)

The space-time distribution of sulphate deposition in the northeastern United States, Atmospheric Environment, Bd. 19, 11.

Bilonick, R. A. (1988)

Monthly hydrogen ion deposition maps for the northeastern U.S. from July 1982 to September 1984, Atmospheric Environment, Bd. 22, 9, S. 1909-1924.

Bouttier, F. und Courtier, P. (1999)

Data assimilations concepts and methods, in Data assimilations concepts and methods, eds. F. Bouttier und P. Courtier, Meteorological Training Course Lecture Series, ECMWF, Reading.

Builtjes, P. J. H., ten Brink, H. M., de Leeuw, G., van Loon, M., Gonzales, C. R. und Schaap, M. (2000)

Aerosol air quality satellite data, TNO report, Bd. 4.1/AP-06.

Cressie, N. (1993)

Statistics for Spatial Data, John Wiley & Sons, New York.

Cressie, N., Kaiser, M., Daniels, M., Aldworth, J., Lee, J., Lahiri, S. und Cox, L. H. (1999)

Spatial analysis of particulate matter in an urban environment, in geoENV II, eds. J. Gomez-Hernandez, A. Soares und R. Froidevaux, Kluwer, Dordrecht, S. 41-52.

Daley, R. (1991)

Atmospheric Data Analysis, Cambridge University Press, Cambridge.

Davis, J. M., Nychka, D. und Bailey, B. (2000)

A comparison of regional oxidant model (ROM) output with observed ozone data, Atmospheric Environment, Bd. 34, S. 2413-2423.

Dlabka, M., Ossing, F. J. und Sprenger, D. (1986)

Anwendung statistisch systemdynamischer Methoden in der Ausbreitungsrechnung für Luftbeimengungen, Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren.

Dommenget, D. und Latif, M. (2002)

A cautionary note on the interpretation of EOFs, Journal of Climate, Bd. 15, 2, S. Vol. 15, No. 2, pp. 216–225.216-225.

Elbern, H. und Schmidt, H. (1997)

Ozone episode analysis by four-dimensional chemistry data assimilation, Journal of Geophysical Research, Bd. 102105, D4, S. 15967-15985.

Elbern, H. und Schmidt, H. (2001)

Ozone episode analysis by four-dimensional chemistry data assimilation, Journal of Geophysical Research, Bd. 106105, D4, S. 3569-3590.

Elbern, H., Schmidt, H. und Ebel, A. (1998)

Four-dimensional data assimilation for tropospheric ozone analysis, in SODA Workshop on Chemical Data Assimilation, eds. A. Stoffelen, H. Eskes und H. Kelder, KNMI-publikatie, 188, De Bilt.

Enke, W., Seewöster, J. und Heiermeier, H. (1998)

Erfassung und Beschreibung der Immissions-Meßzeitreihen in Deutschland, Teil I Kategorisierung der Ozonstationen, Abschlussbericht zum UBA FE-Vorhaben 20402841.

Enke, W. (1999)

Analyse historischer Ozonzeitreihen und Entwicklung einer Methode zur quasi wetterbereinigten Trendanalyse von bodennahem Ozon, Bericht zum UBA-Forschungsvorhaben 10402131.

EU (1996)

Richtlinie 96/62/EG des Rates vom 27.9.1996 über die Beurteilung und die Kontrolle der Luftqualität, Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften, Bd. L 296/55 vom 21.11. 1996.

EU (1999)

Richtlinie 1999/30/EG des Rates vom 22.4.1999 über Grenzwerte für Schwefeldioxid, Stickstoffdioxid und Stickstoffoxide, Partikel und Blei in der Luft, Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften, Bd. L 163/41 vom 29.6. 1999.

EU (2000)

Richtlinie 2000/69/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16.11.2000 über Grenzwerte für Benzol und Kohlenmonoxid in der Luft, Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften, Bd. L 313/12 vom 13.12. 2000.

EU (2002)

Richtlinie 2002/3/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 12.2.2002 über den Ozongehalt der Luft, Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften, Bd. L 67/14 vom 9.3. 2002.

Falke, S. R. und Husar, R. B. (1998)

Declustering in the spatial interpolation of air quality data, in Air & Waste Management Association Annual Meeting, San Diego.

Fisher, M. und Courtier, P. (1995)

Estimating the covariance matrix of analysis and forecast error in variational data assimilation, ECMWF Technical Memorandum, Bd. 220.

Fisher, M. und Lary, D. J. (1995)

Lagrangian four-dimensional data assimilation of chemical species, Bd. 121.

Flemming, J. (1996)

Studie zur Initialisierung des Ausbreitungsmodells REM3, Diplomarbeit, Institut für Meteorologie der Freien Universität Berlin.

Flemming, J., Reimer, E. und Stern, R. (1999a)

Ozonprognose mit REM3, Teil B im Abschlußbericht zum UBA-Forschungsvorhaben FE-Vorhaben 29543817, Freie Universität Berlin, Institut für Meteorologie.

Flemming, J., Reimer, E. und Stern, R. (1999b)

Comparison of photochemical model results based on diagnostic and prognostic meteorological input data, in Proceedings of EUROTRAC Symposium 98, eds. P. M. Borell und P. Borell, WITpress, Southampton.

Flemming, J., Reimer, E. und Stern, R. (2000)

The impact of special features of numerically predicted and analysed meteorological data on the results of ozone forecast by a PBL chemical transport model, in ITM Air pollution modelling and its applications XXIII, eds. S. Gryning und E. Batchvarova, NATO CMS, Kluwer Academic / Plenum Publishers, New York.

Flemming, J., Reimer, E. und Stern, R. (2001)

Long term evaluation of the ozone forecast by an Eulerian model, Physics and Chemis-

try of the Earth (B), Bd. 26, 10, S. 775-779.

Flemming, J., Reimer, E. und Stern, R. (2002)

Data assimilation for CT-Modelling based on optimum interpolation, in ITM Air pollution modelling and its applications XXIV, eds. C. Borrego und G. Schayes, NATO CMS, Kluwer Academic / Plenum Publishers, New York.

Flemming J. (2003)

Klimatische Auswertung von modellierten und beobachteten Zeitreihen für Ozon, NO₂, NO, SO₂ und PM₁₀ in Deutschland für die Jahre 1995-2001 und deren Charakterisierung nach Immissionsregimes mit einem Clusterverfahren, Abschlußbericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 298 41 252 des Umweltbundesamts „Modellierung und Prüfung von Strategien zur Verminderung der Belastung durch Ozon“.

Fronza, G., Spiritio, A. und Tonielli, A. (1979)

Real time forecast of air pollution episodes in the venetian region, part II: the Kalman predictor, Applied mathematical modeling, Bd. 3, S. 409-415.

Gandin, L. S. (1965)

Objective Analysis of meteorological fields, Israeli Program for Scientific Translations, Jerusalem.

Gerstengarbe, F. und Werner, P. C. (1999)

Katalog der Großwetterlagen Europas (1881-1998) Nach Paul Hess und Helmuth Brezowsky, Berichte des Deutschen Wetterdienstes, Potsdam, Offenbach a. M.

Gery, M., Whitten, G., Killus, J. und Dodge, M. (1989)

A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computing, J. of Geophysical Res., Bd. 94, S. 12925-12956.

Gneithing, T., Sasvari, Z. und Schlather, M. (2000)

Analogies and correspondences between variograms and covariance functions, NRCSE-Technical Report Series.

Gneiting, T. und Schlather, M. (2001)

Space-time-covariance models, in Encyclopedia of Environmetrics, eds. A. El-Shaaravi und W. W. Piegorsch, John Wiley & Sons, New York.

Haas, T. C. (1990)

Lognormal and moving-window methods of estimating acid deposition, Journal of the American Statistical Association, Bd. 85, 412, S. 950-963.

Haas, T. C. (1995)

Local prediction of a spatial-temporal Process with an application to wet sulfate deposition, J. Amer. Statist. Assoc, Bd. 85, 432, S. 1189-1199.

Heemink, A. W., Segers, A. J., Verlaan, M., Builtjes, P. und van Loon, M. (1999)

Data assimilation for tropospheric ozone prediction problems using Kalman-Filtering, in SODA Workshop on Chemical Data Assimilation, eds. A. Stoffelen, H. Eskes und H. Kelder, KNMI-publikatie, 188, De Bilt.

Heidke, P. (1926)

Über die Auswertung der Windstärkevorhersage für den Sturmwarndienst, Geographische Annalen, Bd. 8.

Hogrefe, C. und Rao, S. Trivikrama, (2001)

Demonstrating attainment of the air quality standards: integration of observations and model predictions into the probabilistic Framework, J. Air & Waste Manage. Assoc., Bd. 51, S. 1060-1072.

Holland, D., Saltzman, N., Cox, L. und Nychka, D. (1999)

Spatial prediction of sulfur dioxide in the eastern United States, in geoENV II (Geostatistics for Environmental Applications), eds. J. Gomez-Hernandez, A. Soares und R. Froidevaux, Kluwer, Dordrecht, S. 65-76.

Hollingsworth, A. und Lönnberg, P. (1986)

The statistical structure of short-range forecast errors as determined from radio sonde data Part I: The wind field, Tellus, Bd. 38 A, S. 111-136.

Host, G. und Follestad, T. (1999)

Spatial interpolation of ozone exposure in Norway from space-time data, in geoENV II (Geostatistics for Environmental Applications), eds. J. Gomez-Hernandez, A. Soares und R. Froidevaux, Kluwer, Dordrecht.

Hess, P. und Brezowsky H., (1977)

Katalog der Großwetterlagen Europas 1881-1976, Berichte des Deutschen Wetterdienstes .

Jeuken, A. B. M., Eskes, H. J., van Velthoven, P. F. J., Kelder, H. M. und Holm, E. V. (1999)

Assimilation of total ozone satellite measurements in a three-dimensional tracer transport model, Journal of Geophysical Research, Bd. 104, D5, S. 5551-5563.

Kalkstein, L. S., Tan, G. und Skindlov, J. A. (1987)

An Evaluation of three clustering Procedures for Use in Synoptic Climatological Classification, Bd. 26.

Kiesewetter, H. und Maess, G. (1974)

Elementare Methoden der numerischen Mathematik, Akademie-Verlag, Berlin.

Lange, H. (2002)

Die Physik des Wetters und des Klimas, Dietrich Reimer Verlag, Berlin.

Lenschow, P., Abraham, H., Kutzner, K., Lutz, M. und Preuß, J. R. W. (2001)

Some ideas about the sources of PM10, Atmospheric Environment, Bd. 35, supplement 1, S. 23-33.

Logan, J. A. (1999)

An analysis of ozone sonde data for the troposphere: Recommendations for testing 3-D models and development of a gridded climatology for tropospheric ozone, *Journal of Geophysical Research*, Bd. 104104, 16, S. 115-16.

Lorenc, A. C. (1986)

Analysis methods for numerical weather prediction, *Quart. J. R. Met. Soc.*, Bd. 112, S. 1177-1194.

McNair, L. A., Harley, R. A. und Russel, A. G. (1996)

Spatial inhomogeneity in pollutant concentrations, and their implications for air quality model evaluation, *Atmospheric Environment*, Bd. 30, S. 4291-4301.

Meiring, W., Guttorp, P. und Sampson, P. D. (1998)

Space-time estimation of grid cell hourly ozone levels for assessment of a deterministic model, *Environmental and Ecological Statistics*, Bd. 5, S. 197-222.

Meiring, W., Monestiez, P., Sampson, P. D. und Guttorp, P. (1997)

Developments in the modelling of nonstationary spatial covariance structure from space-time monitoring data, in *Geostatistics Wollongong '96*, eds. E. Y. Baafi und N. Schofield, 1, Kluwer, Dordrecht, S. 162-173.

Nychka, D. und Saltzman, N. (1998)

Design of air-quality monitoring networks, in *Case studies in environmental statistics*, eds. D. Nychka, W. W. Piegorsch und L. H. Cox, *Lecture Notes in Statistics*, 120, Springer, S. 51-76.

Obled, C. und Creutin, J. D. (1986)

Some developments in the use of empirical orthogonal functions for mapping meteorological fields, *Journal of Climate and Applied Meteorology*, Bd. 25, 9, S. 1189-1204.

Oltmans, S. J. (1998)

Trends of ozone in the troposphere, *Geophysical Research Letters*, Bd. 25, 2, S. 139-142.

Ostro, B. (1994)

Estimating Health Effects of Air Pollutants: A Methodology with an Application to Jakarta, *Policy Research Working Paper*, World Bank, Bd. 1301, Washington, D.C.

Parrish, D. und Derber, J. C. (1992)

The National Meteorological Center's spectral statistical interpolation analysis system, *Monthly Weather Review*, Bd. 120, S. 1747-1763.

Petry, H. J. (1993)

Zur Wahl der Anfangskonzentration für die numerische Modellierung regionaler troposphärischer Schadstofffelder, *Mitteilungen aus dem Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität Köln*, Bd. 89.

Press, W. H. (1992)

Numerical Recipes in Fortran 77, Cambridge University Press, Cambridge.

Reimer, E. (1986)

A test of objective analysis with optimum utilisation of the radiosonde network in Central Europe, Beiträge zur Physik der Atmosphäre, Bd. 53, S. 311-335.

Reimer, E., Weiss, W. und Berendorf, K. (1997)

Analyse emissionsarmer Tage im Hinblick auf die Ozonbildungsrelevanz und Wettersituation, Abschlußbericht, Abschlussbericht zum Projekt AZ: Z-8802.3521/27 des Landesamtes für Umwelt und Geologie des Freistaates Sachsen.

Reimer, E. und Scherer, B. (1992)

An operational meteorological diagnostic system for regional air pollution analysis and long term modeling, in Air Pollution Modelling and its Application IX, eds. H. v. Dop und G. Kallos, NATO Challenges of Modern Society, Kluwer Academic/Plenum Publisher, New York.

Richman, M. B. (1986)

Rotation of principal components, Journal of Climatology, 6, S. 293-355.

Roedel, W. (1992)

Physik der Atmosphäre, Springer Verlag, Berlin.

Roemer, M. (2001)

Trends of ozone and precursors in Europe, TNO-report, Bd. R2001/244, Appeldoorn.

Romesburg, C. H. (1984)

Cluster Analysis for Researchers, Lifetime learning Publications.

Sampson, P. und Guttorp, P. (1998)

Operational evaluation of air quality models, NRCSE-Technical Report Series, Bd. 18.

Sampson, P., Damain, D. und Guttorp, P. (2001)

Advances in modeling interferences for environmental processes with nonstationary spatial covariance, NRCSE-Technical Report Series, Bd. 61.

Schaap, M. (2000)

Aerosol in LOTOS, TNO-MEP-report, Bd. R2000/405.

Sasaki, Y. (1970)

Some basic formalism in numerical variational analysis, Monthly Weather Review, Bd. 98, S. 875-883.

Schaug, J., Iversen, T. und Pedersen, U. (1993)

Comparison of measurement and model results for airborne sulphur and nitrogen components with kriging, Atmospheric Environment, Bd. 27A, 6, S. 831-844.

Schweschnikow, A. A. (1965)

Theorie der Zufallsfunktionen mit praktischen Anwendungen, B. G. Teubner, Leipzig.

Segers, A. J., Heemink, A. W., Verlaan, M. und Loon, M. v. (1998)

A modified rrsqrt-filter for assimilating data in atmospheric chemistry models, in Proceedings of Air Pollution Modelling and Simulation '98, INRIA, France.

Seghers, A. (2002)

Data assimilation in atmospheric chemistry models using Kalman-Filtering, Delft University, Delft.

Seinfeld, J. H. (1986)

Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution, John Wiley & sons, New York.

Shindo, J., Oi, K. und Matsumoto, Y. (1990)

Considerations on air pollution monitoring network design in the light of spatio-temporal variations of data, Atmospheric Environment, Bd. 24B, 2, S. 335-342.

Smith, R. L. (2001)

Environmental Statistics, www.stat.unc.edu/postscript/rs/envnotes.ps.

Stedman, J. R., Vincent, K. J., Campbell, G. W., Goodwin, J. W. L. und Downing, C. E. H. (1997)

New high resolution maps of estimated background ambient NO_x and NO₂ concentrations in the U.K., Atmospheric Environment, Bd. 31, 21, S. 3591-3602.

Stern, R. (1994)

Entwicklung und Anwendung eines dreidimensionalen photochemischen Ausbreitungsmodells mit verschiedenen chemischen Mechanismen, Meteorologische Abhandlungen Serie A, Institut für Meteorologie der Freien Universität Berlin, Bd. 8.

Stern, R. und Flemming, J. (2001)

Vorläufige Einschätzung der Luftqualität 1999 in Deutschland auf der Basis von Messungen und Modellrechnungen, Ergänzung der Ausgangsbeurteilung der Luftqualität 1999 nach Richtlinie 96/62/EG, Artikel, Zwischenbericht zum UBA-Forschungsvorhaben FE-Vorhaben 299 43 246.

Stern, R. (2003a)

Modellierung und Prüfung von Strategien zur Verminderung der Belastung durch Ozon. Entwicklung und Anwendung des chemischen Transportmodells REM/CALGRID. Zusammenfassender Abschlussbericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 298 41 252 des Umweltbundesamts.

Stern, R. (2003b)

Erstellung einer europaweiten Emissionsdatenbasis mit Bezugsjahr 1995 und die Erarbeitung von Emissionsszenarien für die großräumigen Ausbreitungsrechnungen mit REM/CALGRID. Abschlußbericht zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben 298 41 252 des Umweltbundesamts „Modellierung und Prüfung von Strategien zur Verminderung der Belastung durch Ozon“.

Stockwell, W. R. (1995)

Effects of Turbulence on Gas-Phase Atmospheric Chemistry, Meteorology and Atmospheric Physics, Bd. 57, S. 159-171.

Talagrand, O. (1997)

Assimilation of Observations, an Introduction, in Data Assimilation in Meteorology and Oceanography: Theory and Practice, eds. G. m. und I. K., Journal of the Meteorological Society of Japan.

Taubenheim, J. (1969)

Statistische Auswertung meteorologischer und geophysikalischer Daten, Akademische Verlagsanstalt Geest und Portig, Leipzig.

Thiebaut, H. J. (1976)

Anisotropic correlation functions for objective analysis, Monthly Weather Review, Bd. 104, S. 994-1002.

Thiebaut, H. J. (1985)

On approximations to geopotential and wind-field correlation structures, Tellus, Bd. 37, A, S. 126-131.

Tilmes, S. und Zimmerman, J. (1998)

Investigation on the spatial scales of the variability in measured near - ground ozone mixing ratios, Geophysical Research Letters, Bd. 25, S. 3827-3830.

Tilmes, S. (1999)

Verfahren zur Analyse von Messungen atmosphärischer Spurengase mit dem Ziel der Assimilation in Chemie-Transport-Modelle, Berichte des DWD, Bd. 207, Offenbach.

Todling R. (1999)

Estimation theory and foundations of atmospheric data assimilation, DAO Office Note, Bd. 1999-1.

van Egmond, N. D. und Onderdelinden, D. (1981)

Objective analysis of air pollution monitoring network data; spatial interpolation and network density, Atmospheric Environment, Bd. 15, 6, S. 1035-1046.

van Loon, M. und Heemink, A. W. (1997)

Kalman-Filtering for non linear atmospheric chemistry models: first experiences, MAS-R9711 CWI, Amsterdam.

van Loon, M., Builtjes, P. H. J. und Segers, A. J. (1998)

Data assimilation of ozone in the atmospheric transport model LOTOS, Proceedings of the 2nd Glorean Workshop.

van Loon, M., Builtjes, P. H. J., Segers, A. und Roemer, M. (1999)

Reactive Trace Gas Assimilation, TNO-MEP report, Apeldorn.

van Ulden, A. P. und Holtslag, A. A. M. (1985)

Estimation of Atmospheric Boundary Layer Parameters for Diffusion Applications,, Journal of Climate and Applied Meteorology

Venkatram, A. (1988)

On the use of kriging in the spatial analysis of acid precipitation data, Atmospheric Environment, Bd. 22, 9, S. 1963-1975.

Wiegand, G. und Dickmann, V. (2000)

FLADIS - A system for extending air pollution point data to continuous spatial information (according to EU Council Directive 96/62/EC), WIT Press.

Wilks, D. S. (1995)

Statistical Methods in Atmospheric Science, International Geophysics Series, Academic Press, Bd. 59, London.

Zier, M. (1976)

Statistische Analyse der raum-zeitlichen Struktur des Feldes der Staubkonzentration in der bodennahen Luftschicht, TU-Dresden, Dresden.

Zwiers, F. und von Storch, H. (1995)

Taking serial correlations into account in tests of the mean, Journal of Climate, Bd. 8, S. 336-335.

Zwiers, F. und von Storch, H. (2000)

Statistical methods for climate research, Cambridge University Press, Cambridge.