

Die Analyse atmosphärischer Strömungen

Von Sebastian Limbach, Marcus Marto, Patrick Jöckel, Elmar Schömer und Heini Wernli

Die Atmosphäre unserer Erde ist ständig in Bewegung, und mit den sich in Bewegung befindenden Luftmassen werden auch andere Gase und Partikel durch die Atmosphäre transportiert. Die Verfolgung solcher Luftpakete mithilfe effizienter Software ist für unterschiedliche Fragestellungen der Atmosphärenwissenschaften von Interesse, beispielsweise für die Vorhersage der Ausbreitung radioaktiver Substanzen nach einem Störfall.

Bei der sogenannten Lagrangeschen Betrachtungsweise von atmosphärischen Strömungen wird die Atmosphäre in „Luftpakete“ unterteilt und deren Bewegung in Form von Trajektorien berechnet, analysiert und visualisiert. Dabei wird angenommen, dass zwischen den Luftpaketen in einem Zeitraum von einigen Tagen kein oder ein vernachlässigbar schwacher Austausch stattfindet. Eine Trajektorie ist festgelegt durch eine Startposition und eine Startzeit; sie besteht aus einer Reihe von Daten, die die Positionen zu diskreten zukünftigen oder vorherigen Zeitpunkten angeben, und somit die zeitliche Bewegung des Luftpaketes beschreiben. Diese Positionsdaten werden anhand von Windfeldern berechnet, die von einem numerischen Modell oder von sogenannten meteorologischen „Analysen“ stammen. In den letzten 20 Jahren wurden unabhängig voneinander verschiedene Softwarepakete zur Berechnung von Trajektorien entwickelt und in einer sehr großen Zahl von Studien zu den unterschiedlichsten Fragestellungen eingesetzt, so dass sich das Lagrangesche Konzept als ein essentielles Werkzeug zur Untersuchung von atmosphärischen Strömungen etabliert hat. Beispiele sind HYSPLIT¹, FLEXTRA² und das auch in Mainz intensiv verwendete und aktuell von uns weiterentwickelte Lagrangian Analysis Tool LAGRANTO³. Beim Design dieser Programme standen bisher die flexible Einsatzfähigkeit und die Nutzerfreundlichkeit

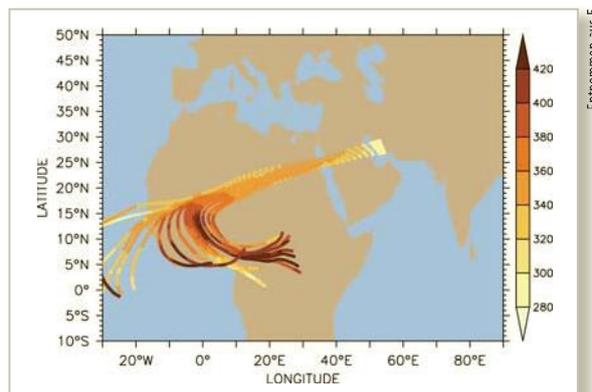
im Vordergrund – der numerischen Effizienz wurde vergleichsweise wenig Beachtung geschenkt.

Trajektorienrechnungen in den Atmosphärenwissenschaften

Eine klassische Anwendung von Trajektorien ist die Ausbreitungsrechnung im Falle von bodennahen Emissionen, zum Beispiel aufgrund eines chemischen oder nuklearen Unfalls. Dabei steht die Frage im Vordergrund, welche Regionen von einer Emission an einem bestimmten Unfallort zu einem zukünftigen Zeitpunkt betroffen sind. Heute werden für diese Fragestellung jedoch meist komplexere Modelle eingesetzt, bei denen die Mischungsprozesse in der turbulenten Grenzschicht explizit berücksichtigt werden können. Eine damit verwandte interessante Anwendung von LAGRANTO war die Untersuchung der Luftmassenherkunft, nachdem in der Nähe von Zürich erhöhte Werte von radioaktivem Jod gemessen worden waren. Die Trajektorienrechnungen zeigten, dass das Jod mit großer Wahrscheinlichkeit von den Wiederaufbereitungsanlagen in La Hague und Sellafield stammte. In den nächsten Abschnitten wird eine Auswahl aktueller Projekte am Max-Planck-Institut für Chemie und am Institut für Physik der Atmosphäre in Mainz kurz vorgestellt. Trajektorienrechnungen spielen dabei stets eine zentrale Rolle.

Ein erstes Projekt befasst sich mit der Interpretation von flugzeuggetragenen chemischen Messungen. Die Region um die Tropopause ist aus der Sicht der Atmosphärenchemie interessant, da hier stratosphärische und troposphärische Luftmassen mit zum Beispiel sehr unterschiedlichen Ozonkonzentrationen aneinander grenzen. Im Rahmen des Projektes CARIBIC⁴ (Civil Aircraft for the Regular Investigation of the atmosphere Based on an Instrument Container) werden an Bord eines Lufthansa Passagierflugzeuges regelmäßig Messungen der Luftzusammensetzung in dieser Region durchgeführt. Zur Interpretation der Daten werden ausgehend vom Flugweg, also dem Punkt der Messung, zunächst Rückwärtstrajektorien berechnet (Abb. 1). Entlang dieser Trajektorien kann dann die chemische Evolution der Luftmassen mithilfe eines fotochemischen Modells vom Startpunkt der Trajektorie bis hin zum Messpunkt rekonstruiert werden. Dabei werden die Anfangsbedingungen, also die ursprüngliche chemische Zusammensetzung der Luft am Ausgangspunkt der Trajektorie, mit einem globalen Atmosphärenchemie- und Klimamodell abgeschätzt. Die Methode erlaubt eine quantitative

Abb. 1: Die Abbildung zeigt ein Trajektorienbündel (im Januar 2000) aus der Sub-Sahelzone, welches über dem Persischen Golf, dem Punkt der Flugzeugmessung, konvergiert (die Farbe der Trajektorie zeigt die Druckhöhe in Hektopascal).



Entnommen aus 5

Trennung der Beiträge von Transport, Mischung und chemischer Umwandlung auf die Zusammensetzung der Luft am Messpunkt und gibt Aufschlüsse über die Quellenregion der Bestandteile.⁵

In einem zweiten Projekt werden sogenannte „Warm Conveyor Belts“ (WCBs) untersucht. Diese stellen kohärente Bündel von Trajektorien dar, die typischerweise innerhalb von ein bis zwei Tagen aus der subtropischen Grenzschicht (das heißt aus einer Höhe von ungefähr 500 Metern und einer geographischen Breite von etwa 35°N) entlang von Kaltfronten in die obere Troposphäre (das heißt auf eine Höhe von ungefähr acht bis zehn Kilometern bei 50 bis 65°N) aufsteigen. Diese Luftmassen sind sehr feucht, so dass entlang (fast) des ganzen Weges Wasserdampf kondensiert und sich Wolken und Niederschlag bilden. WCBs sind die für den Niederschlag in den mittleren Breiten wichtigsten atmosphärischen Strömungen. Für die Chemie der Atmosphäre sind sie von Bedeutung, da sie beispielsweise Abgase bis in die obere Troposphäre oder sogar bis in die untere Stratosphäre transportieren können. Aktuell wird die Frage untersucht, welche Rolle WCBs bei der Anregung von sogenannten Rossby-Wellen in der Atmosphäre spielen. Diese bestimmen das Wettergeschehen in den mittleren Breiten auf einer Zeitskala von ein bis zehn Tagen. Die korrekte Modellierung ihrer Anregung und Verstärkung ist entscheidend für die Qualität der Wettervorhersagen auf diesen Zeitskalen.

Ein drittes Projekt beschäftigt sich mit der Untersuchung erhöhter bodennaher Ozonkonzentrationen. Während die Ozonschicht in der Stratosphäre das Leben auf der Erde vor zu starker UV-Strahlung schützt, sind hohe Ozonwerte in Bodennähe gesundheitsschädlich. Fotochemische Reaktionen in der Atmosphäre können jedoch besonders an warmen Sommertagen dazu führen, dass in industrialisierten Regionen hohe Ozonwerte auftreten können. Aber auch in wenig belasteten Gebieten kann die bodennahe Ozonkonzentration während einiger Stunden oder Tage auf kritische Werte ansteigen. Ein dafür möglicherweise verantwortlicher Prozess sind stratosphärische Intrusionen, in denen ozonreiche stratosphärische Luft innerhalb von wenigen Tagen zum Boden absinkt. In einer Kooperation mit Wissenschaftlern aus den USA sind wir dabei, die Bedeutung dieses Prozesses in entlegenen Regionen Nordamerikas zu quantifizieren.

Trajektorienrechnungen aus Sicht der Informatik

Ein wichtiges Qualitätskriterium von Software ist die Effizienz. Für die flexible Benutzung eines Programms ist die Zeit, die die Berechnung der Ergebnisse in Anspruch nimmt, oft von entscheidender Bedeutung. Auch bei der Trajektorienberechnung würden sich wesentlich flexiblere und dynamischere Einsatzmög-

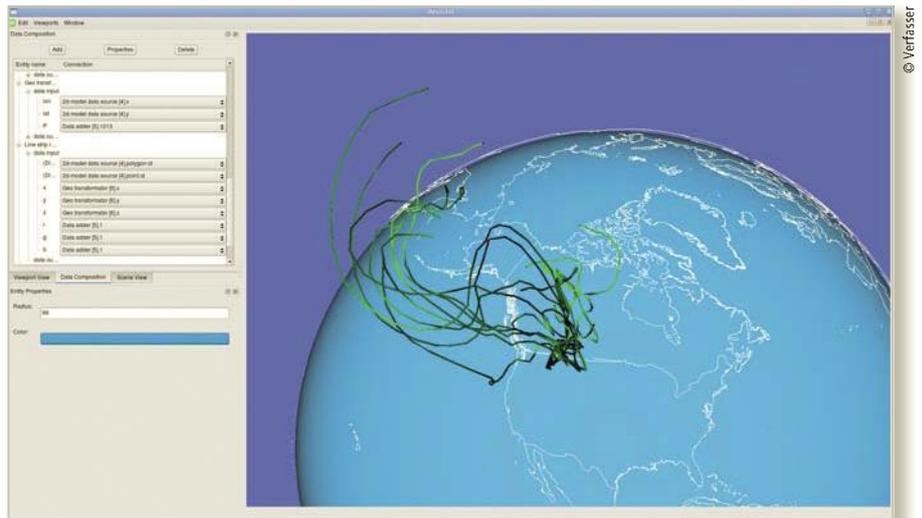


Abb. 2: 3D-Visualisierung von Trajektorien, gestartet vom Yellowstone National Park, durch das INSIGHT-Programm (die Farbe kennzeichnet die potenzielle Vortizität (PV)).

lichkeiten bieten, müsste man auf einzelne Ergebnisse statt mehrerer Stunden, Tage oder sogar Monate nur Minuten warten.

Die Effizienz von Software kann dabei durch verschiedene Faktoren beeinflusst werden. Bei der Berechnung von Trajektorien ist der beschränkende Faktor weniger die Komplexität der Verfahren als vielmehr die große Menge der benötigten Daten. Diese liegen in der Regel auf einem Massenspeicher vor, typischerweise auf einer Festplatte. Bevor ein Programm mit diesen Daten effizient arbeiten kann, müssen sie in den wesentlich schnelleren, aber auch kleineren Arbeitsspeicher des Computers geladen werden. Die Zugriffszeiten liegen bei Festplatten üblicherweise im Bereich von einigen Millisekunden, beim Arbeitsspeicher hingegen im Nanosekundenbereich.

Während der Berechnung von Trajektorien benötigt das Programm Informationen über die Windfelder und über alle Messgrößen, die zusätzlich entlang jeder Trajektorie betrachtet werden sollen. Die Gesamtmenge dieser Daten wird bestimmt durch die Größe des Untersuchungsgebiets sowie durch die räumliche und zeitliche Auflösung der Messdaten. Im Fall der bodennahen Ozonkonzentrationen in Nordamerika beschränkt sich das Gebiet auf die nördliche Hemisphäre. Die Daten liegen alle sechs Stunden mit einer horizontalen Auflösung von einem halben Grad geographischer Länge beziehungsweise Breite auf 90 Höhenschichten vor. An jedem Gitterpunkt werden jeweils ein aus drei Komponenten bestehender Windvektor, der Bodendruck sowie drei zusätzliche Messwerte gespeichert. Insgesamt ergibt sich eine Datenmenge von über 300 Megabyte pro erfasstem Zeitpunkt. Bei einem Beobachtungszeitraum von mehreren Monaten werden schnell Datenmengen erreicht, die nicht mehr vollständig im Arbeitsspeicher gehalten werden können. Die Art und Weise des Nachladens der Daten bestimmt somit die Gesamtlaufzeit des Programms zur Trajektorienberechnung. Für die Untersuchung der Ozonwerte werden alle

sechs Stunden Gruppen von Trajektorien bei verschiedenen Messstationen gestartet (vgl. Abb. 2), insgesamt in dieser Studie zirka 10.000 Trajektorien. Die Bewegungen der Luftteilchen wurden für jede Gruppe separat zehn Tage lang verfolgt. Diese bisherige Vorgehensweise erforderte das mehrmalige Laden derselben Daten von der langsamen Festplatte.

Daher bieten sich zur Verbesserung der Gesamtlaufzeit zwei Möglichkeiten an: Als erstes kann man die Anzahl der Ladevorgänge auf ein Minimum beschränken. Jede Datei sollte möglichst nur ein einziges Mal in den Speicher geladen werden. Zweitens kann man die zu ladenden Daten auf die nähere Umgebung der aktuellen Trajektorienpositionen beschränken. Diese Umgebung muss jedoch für jeden Zeitschritt neu berechnet werden. Sie kann im Laufe einer Trajektorienrechnung sehr stark zunehmen und sich eventuell auf den gesamten Datenbereich erstrecken. Zunächst wurde der erste Optimierungsansatz verfolgt, wodurch es gelungen ist, bei der Untersuchung der bodennahen Ozonwerte die Laufzeit der

Trajektorienberechnungen von mehreren Stunden auf wenige Minuten zu reduzieren. Der Anteil von Dateizugriffen an der Gesamtlaufzeit des neuen Systems liegt bei etwa 98 Prozent. Da jede Datei nur genau ein Mal eingelesen wird, haben wir unser erstes Optimierungsziel erreicht. Offen bleibt, ob sich durch eine Realisierung des zweiten Optimierungsansatzes eine weitere Steigerung der Performance erzielen lässt.

Summary

In atmospheric sciences, trajectories are a common tool for tracing the movement of "air parcels". Up to now, existing software tools often require days or even months for the calculation of the typically large number of trajectories. Interdisciplinary collaboration enabled us to optimize the existing methods and to considerably improve their performance. In this article we present research projects where the calculation of trajectories is essential, and then we describe in detail possible optimizations of the calculation process and software.

INSIGHT – Ein neuartiges Werkzeug zur Visualisierung von Wetterdaten

Auf Grundlage einer Bachelorarbeit zur Visualisierung von dreidimensionalen Isoflächen, so nennt man die Bereiche eines Datenvolumens, die den gleichen Wert besitzen, entsteht derzeit ein neuartiges 3D-Visualisierungswerkzeug (Abb. 3). Die Software ist auf Flexibilität und Benutzerfreundlichkeit ausgelegt und soll in enger Zusammenarbeit mit den Anwendern weiterentwickelt werden. Sie ist als Ergänzung zu bestehenden Visualisierungstools (beispielsweise HIPHOP und Vis5d) gedacht und soll eine Plattform für neuartige Darstellungstechniken bieten. Bereits geplant sind Erweiterungen zur Erprobung alternativer Eingabegeräte sowie die Unterstützung von stereoskopischen Darstellungen.

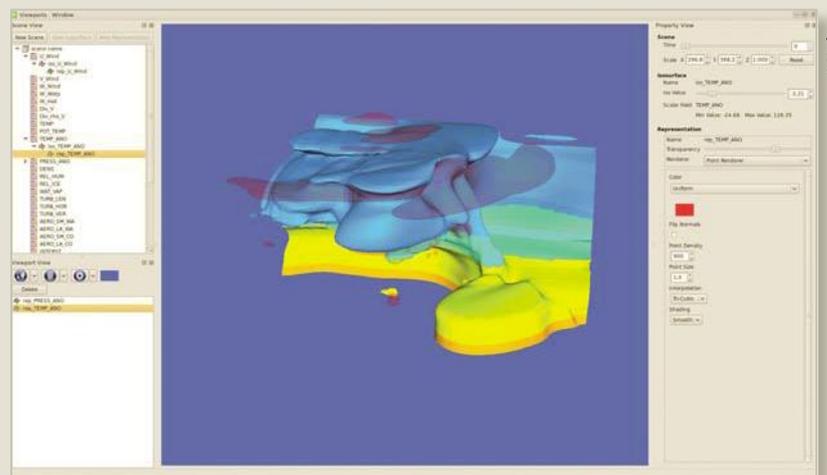


Abb. 3: Visualisierung von 3D-Isoflächen mit unterschiedlicher Färbung und Transparenz durch das INSIGHT-Programm.

Literatur

1. Draxler RR & Hess GD. Description of the Hysplit_4 modeling system. Report No. NOAA Tech Memo ERL ARL-224, December 1997. Prepared by Air Resources Laboratory, NOAA, Silver Spring, MD.
2. Stohl A & Seibert P. Accuracy of trajectories as determined from the conservation of meteorological tracers. Quart J Roy Meteor Soc 1998; 124: 1465-1484.
3. Wernli H & Davies HC. A Lagrangian-based analysis of extratropical cyclones. I: The method and some applications. Quart J Roy Meteor Soc 1997; 123: 467-489.
4. www.caribic-atmospheric.com
5. Riede H, Jöckel P, Sander R. Quantifying atmospheric transport, chemistry, and mixing using a new trajectory-box model and a global atmospheric-chemistry GCM, Geosci Model Dev Discuss 2009; 2: 455-484. <http://www.geosci-model-dev-discuss.net/2/455/2009/>



Vlnr: Univ.-Prof. Dr. Elmar Schömer, Sebastian Limbach, M.Sc., Dr. Patrick Jöckel, Marcus Marto, Univ.-Prof. Dr. Heini Wernli.

Dr. Patrick Jöckel

Patrick Jöckel studierte Physik an der Technischen Universität Darmstadt. Im Jahr 2000 promovierte er an der Universität Heidelberg und am Max-Planck-Institut für Chemie in Mainz bei Prof. Dr. Ulrich Platt und Prof. Dr. Paul Crutzen über Radiokohlenstoffmonoxid (^{14}CO) in der Atmosphäre. Seit 2008 ist er Gruppenleiter der Gruppe „Erdsystemmodellierung“ am Max-Planck-Institut für Chemie. Die Forschungsschwerpunkte der Gruppe beinhalten die Entwicklung und Anwendung eines umfassenden skalenübergreifenden Erdsystemmodells zur Untersuchung der Atmosphärenchemie und globaler Stoffkreisläufe sowie von Lagrangeschen Methoden in der Modellierung atmosphärischer Transportprozesse.

Univ.-Prof. Dr. Heini Wernli

Heini Wernli studierte Physik an der Eidgenössischen Technischen Hochschule (ETH) in Zürich. In der Gruppe von Prof. Dr. Huw Davies an der ETH Zürich promovierte und habilitierte er mit Untersuchungen zur Dynamik und Struktur von außertropischen Tiefdruckgebieten. Seit Herbst 2003 ist er Professor für Theoretische Meteorologie am Institut für Physik der Atmosphäre der Universität Mainz. Die Forschungsschwerpunkte in seiner Arbeitsgruppe sind: Dynamik und Vorhersagbarkeit von Wettersystemen in den mittleren Breiten (Tiefdruckgebiete, Konvektion), globale Transportprozesse (Wasserkreislauf, Spurengase) sowie Anwendungen im Bereich der numerischen Wettervorhersage.

Sebastian Limbach, M.Sc.

Sebastian Limbach studierte Informatik an der Johannes Gutenberg-Universität Mainz und an der Universität des Saarlandes in Saarbrücken. Er arbeitet seit 2009 im Rahmen des Schwerpunktes für Rechnergestützte Forschungsmethoden in den Naturwissenschaften als Doktorand und wissenschaftlicher Mitarbeiter am INSIGHT-Projekt und an weiteren Projekten mit Bezug zu den Atmosphärenwissenschaften.

Marcus Marto

Marcus Marto studiert Physik und Informatik an der Johannes Gutenberg-Universität in Mainz. Im Rahmen seiner Informatik-Bachelorarbeit hat er am INSIGHT-Projekt mitgearbeitet und ist weiterhin als wissenschaftlicher Mitarbeiter für das Projekt tätig.

Univ.-Prof. Dr. Elmar Schömer

Elmar Schömer, Jahrgang 1963, studierte Informatik an der Universität des Saarlandes. Nach seiner Promotion (1994) und seiner Habilitation (1999) war er als Senior Researcher im Bereich Computational Geometry am Max-Planck-Institut für Informatik tätig. Seit Oktober 2002 ist er Professor für Praktische Informatik an der Johannes Gutenberg-Universität Mainz. Seine Forschungsschwerpunkte sind die Computergrafik sowie effiziente geometrische Algorithmen und Optimierungsmethoden.

■ Kontakt

Sebastian Limbach, M.Sc.
 Institut für Informatik
 Johannes Gutenberg-Universität Mainz
 Staudingerweg 9
 D-55128 Mainz
 Tel. +49 (0) 6131-39 22 454
 Email: limbach@uni-mainz.de