

# Chemische data-assimilatie

Frank Daerden (Belgisch Instituut voor Ruimte-Aëronomie)

**N**A HET EERSTE ARTIKEL over de stratosfeer en de ozonlaag (zie *Heelal* maart 2005, blz.78), gaan we hier dieper in op een van de nieuwste technieken in het atmosferonderzoek: chemische data-assimilatie. Deze methode is pas vanaf midden jaren 1990 ontwikkeld, onder meer aan het BIRA. Het aldaar ontwikkelde systeem BASCOE werd halfweg 2002 het allereerste operationele chemische data-assimilatiesysteem ter wereld. In dit artikel wordt dit systeem uit de doeken gedaan. Een vrij technische inleiding is daarbij onvermijdelijk. Daarna tonen we een aantal resultaten van BASCOE.

## Wat is data-assimilatie?

Wanneer we een systeem in de natuur willen bestuderen, kunnen we daarbij beroep doen op twee bronnen van informatie. Enerzijds zijn er de *waarnemingen*. Dit zijn metingen van bepaalde grootheden in het systeem (bijvoorbeeld temperatuur of ozonconcentratie), die als zodanig verondersteld worden de *realiteit* weer te geven (op een inschatbare meetfout na). De gele punten in figuur 1a kunnen bijvoorbeeld metingen zijn van een bepaalde grootheid tijdens een bepaalde dag. De meetfouten zijn ook aangeduid bij elke meting.

Anderzijds is er onze vooronderstelde *kennis van de natuurwetten* die in het systeem geldig zijn (bijvoorbeeld chemische reacties of transport door wind). Op basis van de gekende natuurwetten kan men een computermodel van het systeem opstellen. Op die manier kan men het systeem simuleren in een computer en een resultaat van zo'n modelberekening zou bijvoorbeeld de blauwe curve in figuur 1a kunnen zijn.

Waarnemingen hebben het nadeel dat het steeds gaat om geïsoleerde

punten in ruimte en tijd. Het zijn *momentopnames*. Daarnaast zijn ook niet alle systeempunten steeds toegankelijk voor waarnemingen. Instrumenten op satellieten kunnen bijvoorbeeld niet alle chemische bestanddelen detecteren die in de aardatmosfeer aanwezig zijn.

Anderzijds zullen computermodellen van de werkelijkheid nooit perfect zijn. Misschien zijn niet alle natuurwetten of systeempunten gekend. Zo ziet men in het voorbeeld van figuur 1a dat het model meestal naast de werkelijkheid zit. Maar ook de resolutie in ruimte en tijd zal steeds beperkt zijn, gezien de beperkingen in

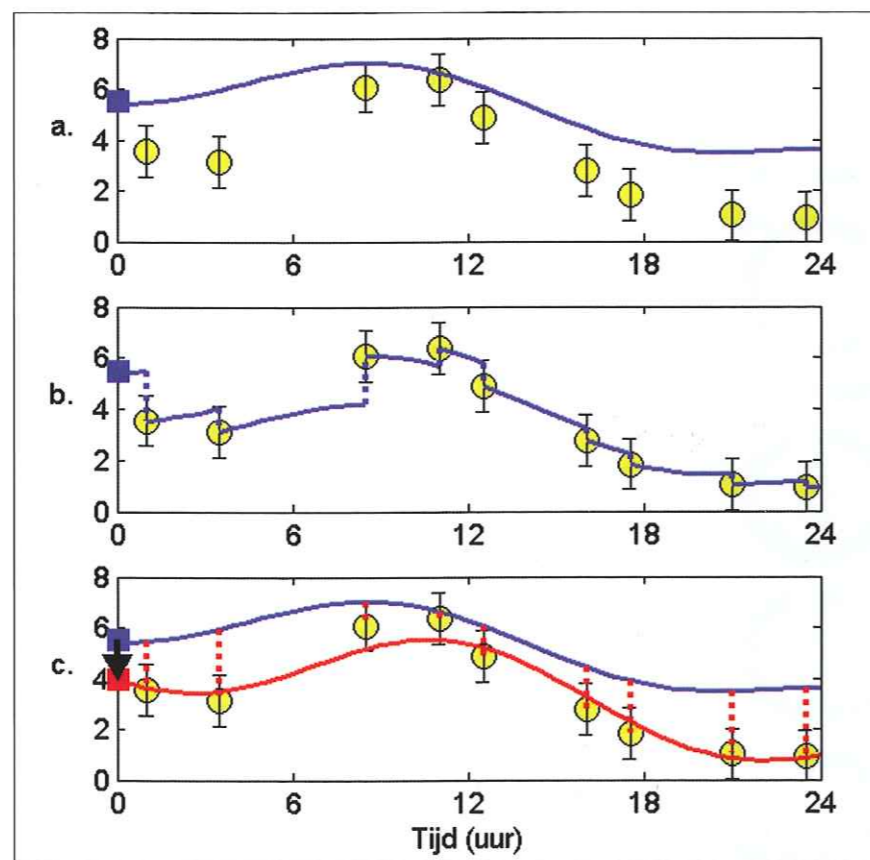
beschikbaar computergeheugen.

Men zit dus met twee onafhankelijke informatiebronnen over het systeem, die elk hun voordelen en beperkingen hebben. Het idee achter data-assimilatie is nu om deze beide bronnen van informatie op een duidelijke en optimale manier te koppelen, zodat men tot de best mogelijke kennis van het systeem kan komen.

## Types data-assimilatie

Bij data-assimilatie gaan we op de één of andere manier de modelberekening met behulp van de informatie uit de observaties bijsturen. Hier bestaan verschillende methodes voor.

Figuur 1. Eenvoudige illustratie van het principe van data-assimilatie. a. probleemstelling: model verschilt van de observaties; b. sequentiële assimilatie; c. variationele assimilatie.



De meest eenvoudige techniek om dit te doen, is weergegeven in figuur 1b. Telkens men op het tijdstip van een observatie komt, verschuift men het hele model naar de waarde van deze observatie en laat het model vanuit dit nieuwe beginpunt verder rekenen. Dit type van data-assimilatie heet *sequentiële assimilatie*. Het resultaat van sequentiële assimilatie is een discontinue functie, waarvan men verwacht dat ze dichter bij de realiteit aansluit dan het oorspronkelijke modelresultaat. Nadeel van dit type assimilatie is dat men langs de andere kant ook weet dat een dergelijke discontinue evolutie niet erg realistisch kan zijn.

In figuur 1c is een meer geavanceerde assimilatiemethode geïllustreerd, namelijk *variationele data-assimilatie*. Hierbij berekent men de "afstand" tussen model en observaties (de rode stippellijnen). Vanuit deze afstand bepaalt men met een geavanceerde techniek een nieuwe startwaarde voor het model (het rode blokje). Men bepaalt deze startwaarde zodanig dat men zeker is dat wanneer men het model vanuit deze nieuwe startwaarde laat beginnen (rode lijn), de overeenkomst tussen model en observaties optimaal is. Met andere woorden, variationele data-assimilatie levert de *best mogelijke schatting op voor de werkelijke toestand* van een systeem, uitgaande van de informatie die observaties en model geven.

## Chemische data-assimilatie

Data-assimilatie is een methode die haar oorsprong vindt in de meteorologie. Dit is de discipline bij uitstek die steunt op meetresultaten maar waarbij men ook de toestand wil kennen op andere plaatsen waar niet gemeten is. Ook voor het doen van voorspellingen steunt men op data-assimilatie. Een voorspelling is niets anders dan een modelberekening in de toekomst. Zoals we gezien hebben, is het van cruciaal belang om dan de optimale startwaarden aan het model mee te geven. Welnu, de beste startwaarde die men vanuit alle beschikbare informatie kan meegeven, is deze die komt uit variationele data-assimilatie.

Gaandeweg werd data-assimilatie ook toegepast in de studie van de oceanstromingen en de luchtstromingen in de hogere atmosfeer. Tot nog toe ging het dan telkens om zogenaamde *dynamische data-assimilatie*. Steeds werd vanuit een dynamisch model getracht de dynamische grootheden te bestuderen, zoals temperatuur, druk, wind- of watersnelheid, luchtvochtigheid, ...

Sinds midden jaren 1990 werd een nieuwe toepassing van data-assimilatie ontwikkeld, namelijk *chemische data-assimilatie*. Waar de meteorologie zich toespitst op de dynamische toestand van de atmosfeer, is ook de chemische samenstelling van de atmosfeer erg belangrijk. In de troposfeer denken we dan aan luchtvervuiling, in de stratosfeer aan de complexe en subtiele chemische evenwichten die daar heersen, met als belangrijkste component de ozonlaag. De chemische toestand van de atmosfeer hoort mede tot het terrein van wat men de *aëronomie* noemt. De onderzoeksgroep onder leiding van D. Fonteyn aan het Belgisch Instituut voor Ruimte-Aëronomie (BIRA) stond mee aan de wieg van chemische data-assimilatie.

## BASCOE

Sinds midden 2002 heeft het BIRA het eerste operationele chemische data-assimilatiesysteem ter wereld. Dit systeem heet BASCOE, wat staat voor *Belgian Assimilation System of Chemical Observations from Envisat*. Met operationeel bedoelen we een systeem dat dagelijks analyses en voorspellingen doet door assimilatie van de meest recente observaties. De observaties in casu zijn metingen van de chemische samenstelling van de stratosfeer door het instrument MIPAS op de Europese milieusatelliet Envisat<sup>1</sup>. MIPAS

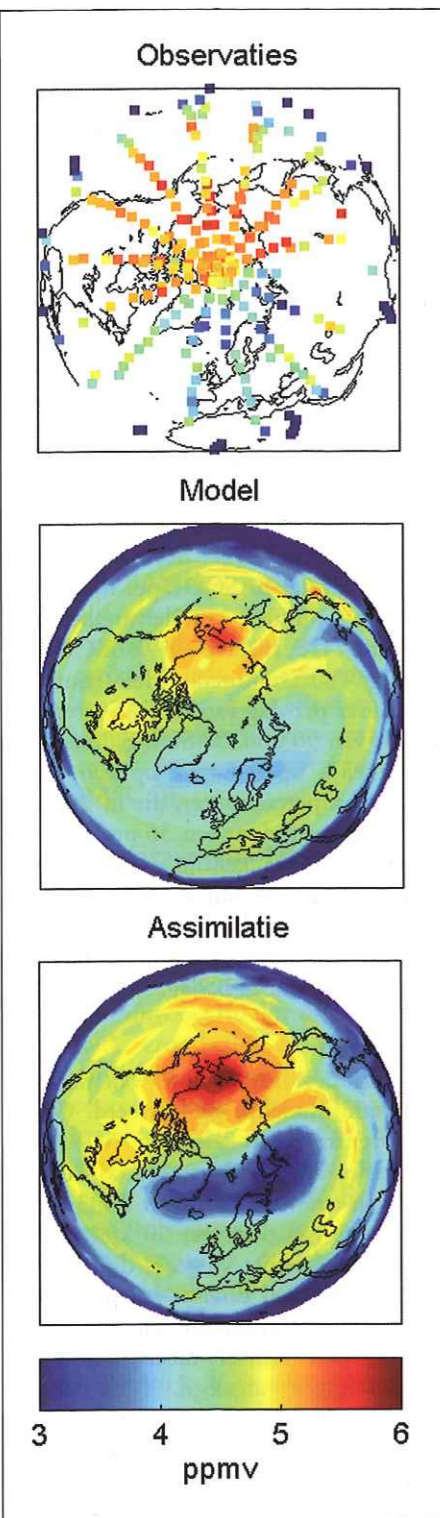
<sup>1</sup> Vanaf maart 2004 begon MIPAS ernstige technische problemen te ondervinden en kon niet langer op een operationele manier gegevens verstrekken. Sindsdien is BASCOE nog steeds operationeel maar louter met modelberekeningen en niet meer als assimilatiesysteem.

staat voor *Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding*, en dit instrument kan de concentraties van zes chemische bestanddelen opmeten: ozon (O<sub>3</sub>), water (H<sub>2</sub>O), salpeterzuur (HNO<sub>3</sub>, een belangrijk bestanddeel van polaire stratosferische wolken), methaan (CH<sub>4</sub>, een broeikasgas), lachgas (N<sub>2</sub>O) en stikstofdioxide (NO<sub>2</sub>). Als invoer in het systeem gebruikt BASCOE verder de dynamische velden van het *European Centre for Medium-Range Weather Forecasts* (ECMWF) in Reading. BASCOE beschrijft de evolutie van 57 chemische stoffen die onderling en met het zonlicht honderden reacties aangaan. Over heel de atmosfeer betekent dit dat BASCOE per tijdstap zo'n 25 miljoen modelvariabelen uitrekent. De tijdstap in BASCOE bedraagt 30 minuten. Het aantal observaties per dag van MIPAS is van de orde van 50 000. BASCOE draaide aanvankelijk operationeel op een 12 processor supercomputer, die in 2004 vervangen werd door een 36 processor machine. De rekentijd voor een assimilatie van 24 uur neemt, afhankelijk van het aantal observaties en de aanwezigheid van polaire wolken, tussen 1 en 2 uur in beslag.

## Resultaten

In figuur 2 wordt het nut van data-assimilatie duidelijk geïllustreerd. Op de bovenste kaart zijn de MIPAS observaties afgebeeld van de concentratie van ozon op 10 maart 2003 op een hoogte van ongeveer 20 km. Het pad dat de satelliet volgt, is duidelijk zichtbaar, en daar Envisat een periode heeft van 100 minuten, zijn er gedurende een etmaal meer dan 14 omwentelingen afgelegd. Men ziet duidelijk dat MIPAS lage ozonwaarden opmeet boven Noord-Europa en gebieden van hoge waarden boven Canada, Alaska en oostelijk Siberië. Dit geeft al enige informatie over de atmosferische toestand, maar deze informatie is beperkt tot het gebied waar er effectief meetwaarden zijn.

De middelste kaart toont het resultaat van een pure modelberekening om 12 h UT. De ozonwaarden van het model zijn duidelijk te hoog



Figuur 2. Vergelijking tussen de MIPAS observaties (boven), een modelberekening (midden) en de BASCOE analyse (onder) van ozon op 10 maart 2003 om 12 h UT op ongeveer 20 km hoogte (ozon mengverhouding uitgedrukt in ppmv, dit is deeltjes ozon per miljoen luchtdeeltjes).

boven Noord-Europa en te laag boven Canada. De kaart onderaan is de BASCOE-analyse om 12 h UT van de vierdimensionale chemische data-assimilatie van de MIPAS observaties voor de vermelde dag. De pure modelberekeningen zijn duidelijk bijgestuurd aan de hand van de observaties. Men ziet een soort van mini-ozongat boven Noord-Europa. Ook de waarden boven Canada zijn beter in overeenstemming met de waarnemingen.

De diverse stroomlijnen die men kan zien op de model- en assimilatiekaarten, bijvoorbeeld van Centraal-Azië naar het Middellandse Zeegebied, boven de Atlantische Oceaan of boven het noordelijk gedeelte van de Stille Oceaan, zijn niet of moeilijk op te maken uit de observaties. Inderdaad, het zijn dynamische structuren, die niet kunnen vastgelegd worden door een ogenblikkelijke observatie. Dit is een voorbeeld van hoe het model de informatie uit de observaties kan aanvullen.

Vergelijkingen tussen BASCOE en zogenaamde *onafhankelijke observaties* zijn van groot belang bij data-assimilatie. Deze geven aan hoe nauwkeurig de assimilatie is. Onafhankelijke observaties kunnen bijvoorbeeld komen van andere instrumenten of eventueel andere satellieten, of van metingen vanop de grond of vanuit ballons of stratosferische vliegtuigen. Dergelijke vergelijkingen worden geregeld gedaan en zijn zeer bemoedigend. Zo kan men dan stellen dat BASCOE het vooropgezette doel bereikt heeft, namelijk dat het de best mogelijke kennis van de werkelijke toestand van de stratosfeer oplevert vanuit MIPAS en onze kennis van de natuurwetten. Met andere woorden, BASCOE produceert vierdimensionale velden (alle ruimtelijke dimensies plus de tijd) die de toestand van de stratosfeer weergeven zoals die lokaal opgemeten wordt door MIPAS.

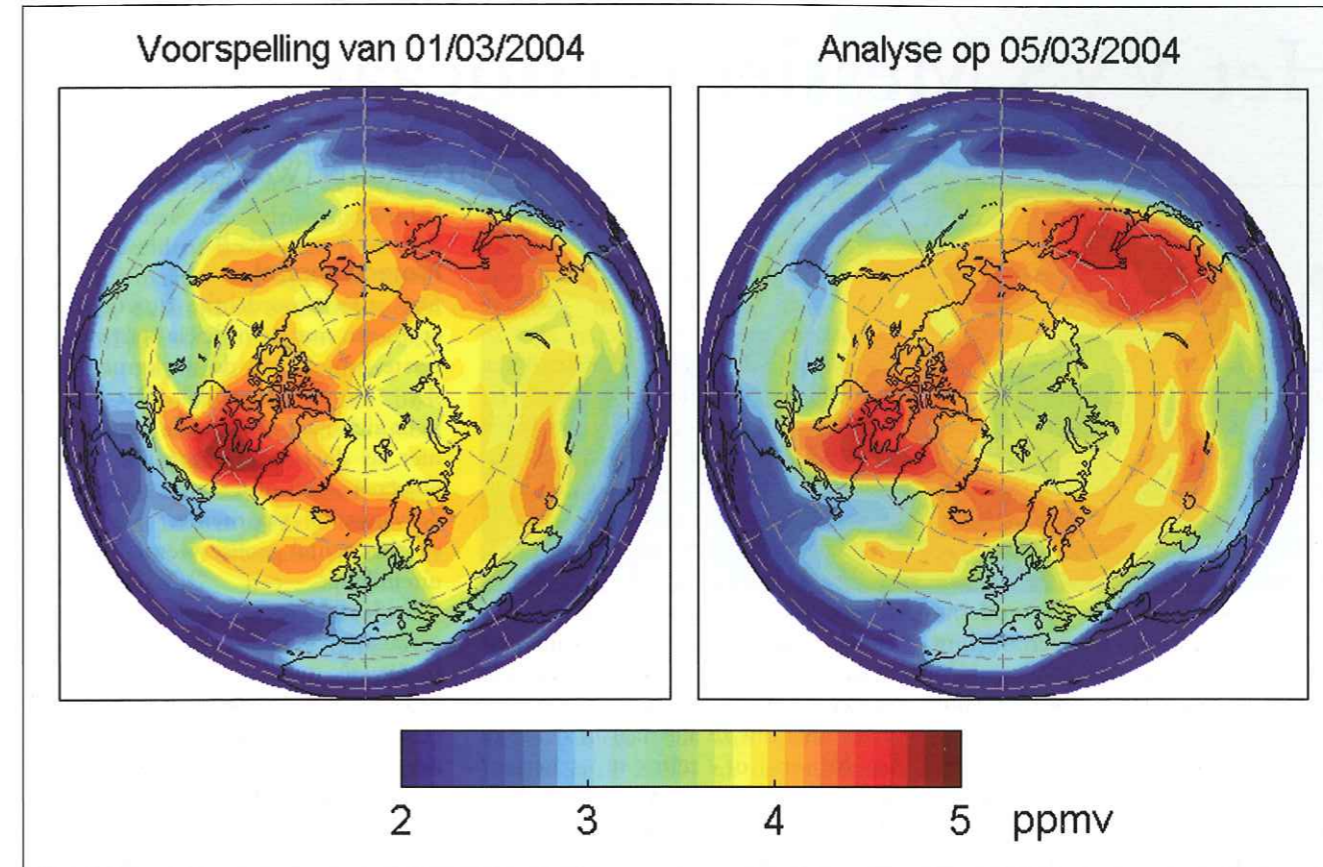
### Chemisch weer

Net zoals bij gewone weersvoorspelling, is chemische data-assimilatie in staat om *chemische weersvoorspelling* te doen, de voorspelling van de chemi-

sche toestand van de atmosfeer. Met de toenemende luchtvervuiling en smog in grote steden is de vraag naar dergelijke voorspellingen actueler dan ooit. Een groot probleem is echter dat de chemische toestand van de troposfeer veel moeilijker te modelleren is dan deze van de kalme stratosfeer. Zo is het bijvoorbeeld niet evident om de erg complexe en variabele emissie te modelleren, laat staan te voorspellen. Het menselijk gedrag is moeilijk voorspelbaar en indien men elke individuele fabriek, auto of huisverwarmingsinstallatie in het model moet opnemen, is de huidige computer-capaciteit verre van toereikend.

BASCOE neemt deel aan de ontwikkeling van chemische weersvoorspelling door als eerste systeem operationele chemische voorspellingen te doen in de stratosfeer. Aangezien de stratosfeer veel rustiger is dan de troposfeer, is het doen van voorspellingen daar veel eenvoudiger. Over het algemeen lijkt de chemische weersvoorspelling daar niet zo bijster nuttig, maar dit is zeker wel het geval tijdens het optreden van het ozongat of bijvoorbeeld voor teams die PSC's onderzoeken met behulp van balloncampagnes. Met de mogelijke dreiging van kleine ozongaten boven Europa in de komende decennia zal deze chemische voorspelling zeker van groot nut zijn.

BASCOE publiceert op haar website <http://bascoe.oma.be> dagelijks tien-daagse voorspellingen voor zowel de totale ozonkolom als voor PSC's, actieve chloor ( $\text{ClO}_x$ ) en ozon in de lage stratosfeer. Als afsluiting van dit artikel zullen we de precisie van deze voorspellingen illustreren. In figuur 3 wordt links een voorspelling getoond van de ozonwaarden op 20 km hoogte voor 5 maart 2004 om 12 h UT. Deze voorspelling is gedaan vanuit de atmosferische toestand op 1 maart 2004 om 0 h UT. Nadat de observaties op 5 maart 2004 ter beschikking waren, is er een assimilatie gedaan voor deze dag. Het resultaat hiervan om 12 h UT is op de rechtse kaart te zien. Dit is dus de best mogelijke weergave van de werkelijke situatie op deze dag. Nu kan men de voorspelling



Figuur 3. Chemische weersvoorspelling. Links de voorspelde ozonwaarden op 20 km hoogte voor 5 maart 2004 om 12 h UT, gedaan vanop 1 maart 2004, 0 h UT. Rechts het resultaat van de assimilatie van de MIPAS observaties van 5 maart 2004.

met deze situatie vergelijken. Op een enkel detail na (bijvoorbeeld, de ozonwaarden boven centraal Rusland zijn te laag voorspeld) komt de algemene structuur van voorspelling vrij goed overeen met de uiteindelijke analyse. Dit toont aan dat de kwaliteit van de BASCOE voorspellingen na vijf dagen nog zeer acceptabel is.

### De toekomst

Het BASCOE systeem heeft aangetoond dat chemische data-assimilatie mogelijk is en dat we over afzienbare tijd misschien wel een rubriek "chemisch weer" in het weerbericht kunnen terugvinden. Hiervoor zullen modellen en observaties nog verbeterd moeten worden om een nauwkeurige beschrijving van de turbulente troposfeer te bekomen. Het verhaal van BASCOE maakt echter ook duidelijk dat er voor operationele assimilatie en voorspelling een operationele toevoer van gegevens moet zijn. Het jammerlijk uitvallen van het instrument

MIPAS op Envisat in maart 2004 betekende meteen het einde voor het operationele BASCOE. Voorlopig is het wachten op nieuwe instrumenten op andere satellieten die in staat zullen zijn om operationeel, dit wil zeggen binnen de 24 uur, gedetailleerde meetresultaten vrij te geven.

Los daarvan maakt BASCOE deel uit van een evolutie om uitgebreide gegevensbanken van geassimileerde velden aan te leggen. Onderzoekers kunnen dan beroep doen op deze geassimileerde gegevens, die voor vele eindgebruikers tal van voordelen hebben op de pure waarnemingsgegevens enerzijds of op de modelvelden anderzijds. Men heeft globale informatie ter beschikking die representatief is voor de situatie zoals die door de sporadische observaties is vastgelegd.

*De toestand van de stratosfeer en in het bijzonder de ozonlaag zoals berekend door BASCOE is dagelijks te volgen op de website <http://bascoe.oma.be>.*

### WAARNEMEN



"Waarnemen — Inleiding tot de praktische sterrenkunde" (ISBN 90-73061-18-0) door Stijn De Jonge en Didier Van Hellemont is een uitgave van de Vereniging voor Sterrenkunde vzw. U krijgt het boekje thuis gestuurd na storting van 7.25 EUR op rekeningnummer 000-1600462-59 van VVS-publicaties.