

**Entwicklung und Anwendungen
eines adjungierten
globalen Zirkulationsmodells**

Simon Blessing

Diplomarbeit im Fach Meteorologie

vorgelegt im Februar 2000
dem Fachbereich für Geowissenschaften der
Universität Hamburg

Zusammenfassung

Adjungierte Modelle werden in der Meteorologie zunehmend benutzt. Typische Anwendungen sind Datenassimilation, das Einstellen optimaler Modellparameter, Sensitivitätsanalysen und die Bestimmung singularer Vektoren. Die vorliegende Arbeit dokumentiert die Erzeugung eines adjungierten, auf den primitiven Gleichungen basierenden Modells der globalen atmosphärischen Zirkulation mit einem adjungierten Modellcompiler (TAMC). Es werden zwei verschiedene Anwendungsmöglichkeiten untersucht: Die Berechnung optimaler Störungen eines gegebenen Grundzustandes und die Bestimmung eines diabatischen Antriebes zur Anpassung des Modellklimas an eine Vorgabe.

Das erste Anwendungsbeispiel ist die Berechnung von optimalen Störungen eines zonalsymmetrischen, balancierten Grundzustandes mit Hilfe des adjungierten und tangent-linearen Modells. Es werden die optimalen Störungen über verschiedene Zeiträume präsentiert und die Energieterme untersucht. Über sehr kurze Zeiträume dominiert meteorologischer Lärm, während die singulären Vektoren über längere Zeiträume Ähnlichkeit mit normalen Moden zeigen. Das Phänomen der Anregung unphysikalischer Moden wird diskutiert.

Im zweiten Anwendungsbeispiel wird der Einsatz des adjungierten Modells zur Bestimmung eines diabatischen Antriebes für das PUMA untersucht. Damit kann das PUMA innerhalb gewisser Grenzen auf vorgegebene Klimate aus der Natur oder komplexeren Modellen eingestellt und diese isoliert studiert werden. Das Ziel ist dabei nicht die Simulation einer vorgegebenen Trajektorie sondern das Erreichen eines bestimmten Temperaturmittelfeldes. Ein entsprechender neuartiger Algorithmus wird vorgeschlagen und erprobt. Die bereits ermutigenden Ergebnisse werden mit einem adaptiven Nudgingverfahren verglichen. Daraus ergeben sich weitere Verbesserungsvorschläge für den Algorithmus.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Das adjungierte Modell	5
2.1	Definition des adjungierten Operators	5
2.1.1	Das tangent-lineare Modell	6
2.1.2	Das adjungierte Modell	7
2.2	Erzeugung des adjungierten Modellcodes	8
2.2.1	Das PUMA	9
2.2.2	Struktur des adjungierten Modellcodes	11
2.3	Gebrauch des adjungierten Modells	14
2.3.1	Singuläre Vektoren	14
2.3.2	Ableitung einer Kostenfunktion	15
3	Anwendung: Optimale Störungen	17
3.1	Grundzustand, Norm, Lanczosalgorithmus und Eigensystem	17
3.2	Struktur der optimalen Störungen	21
3.3	Wachstum der optimalen Störung	26
3.4	Folgerungen	35
4	Anwendung: Klimaassimilation durch optimierten Antrieb	41
4.1	Adaptives Nudging	41
4.2	Gradientengestützte Optimierung	42
4.2.1	Linearer Fall	42
4.2.2	Nichtlinearer Fall	44
4.3	Vergleich der Methoden	45
4.3.1	Experimente	45
4.3.2	Ergebnisse	47
4.4	Folgerungen	57
5	Diskussion und Ausblick	63
	Danksagung	65
	Literatur	67

Kapitel 1

Einleitung

Adjungierte Modelle werden zunehmend im Bereich der numerischen Behandlung von Problemen der Strömungsdynamik verwendet. In der Meteorologie, der Ozeanographie und der Klimaforschung, aber auch in anderen Bereichen (z. B. Iollo und Salas 1999, Li und Yeh 1998) helfen sie, zahlreiche Fragestellungen auf direkte und effiziente Art anzugehen (Errico 1997). Typische Anwendungen sind Datenassimilation, das Abstimmen von Modellparametern, Sensitivitätsanalysen und die Bestimmung der in gegebener Zeit am schnellsten wachsenden Störung über singuläre Vektoren. Navon und Zou (1991) schreiben Marchuk (1974) und Penenko und Obraztsov (1976) die erste Anwendung der adjungierten Methode in der Meteorologie zu.

Realisiert man, daß ein numerisches Modell der atmosphärischen Zirkulation typischerweise in der Größenordnung von 10^5 Zeilen Programmcode enthält, so wird deutlich, daß die Erstellung der hierzu erforderlichen tangent-linearen und adjungierten Modelle bis vor relativ kurzer Zeit eine sehr aufwendige Aufgabe war. Zu ihrer Bewältigung werden im wesentlichen zwei alternative Wege beschritten. Der eine besteht in der analytischen Herleitung des adjungierten Modells aus den Modellgleichungen und der anschließenden Diskretisierung und Implementierung als Programmcode, der andere in der direkten Herleitung des tangent-linearen und adjungierten Modells aus dem Programmcode des bestehenden numerischen Modells nach wenigen, einfachen Prinzipien (Navon und Zou 1991, Talagrand 1991, Giering und Kaminski 1998). Erstere Herangehensweise birgt den Nachteil der schlechten Automatisierbarkeit und einer gewissen Inkonsistenz, da sich die Operation der Adjungierens streng genommen nicht mit der Operation der Diskretisierung vertauschen läßt. Die zweite Methode dagegen ist inzwischen automatisiert und es existieren für verschiedene Programmiersprachen leistungsfähige adjungierte Modellcompiler (z. B. ADIFOR: Bischof *et al.* 1994, Odysée: Rostaing 1993 *et al.*, TAMC: Giering und Kaminski 1999 u.a.). Sirkes und Tziperman (1997) zeigen, daß ein Nachteil dieser Methode darin besteht, daß sich Schwächen des numerischen Verfahrens des Vorwärtsmodells im adjungierten Modell widerspiegeln, wo sie bei der Berechnung von Sensitivitäten zu

unphysikalischen Ergebnissen führen können. Eine dritte Strategie benutzt das sogenannte Überladen von Operatoren in Sprachen wie Fortran 90 und C++ (e.g. IMAS: Rhodin *et al.* 1996) und ist mit der Zwischenspeicherung großer Datenmengen verbunden sowie numerisch wenig effizient.

Im Bereich der numerischen Wettervorhersage werden optimale Störungen, die sich mit Hilfe des adjungierten Modells berechnen lassen, zur Konstruktion von Ensembles genutzt. Diese dienen der Schätzung der Verteilung von Vorhersagen und liefern so eine Einschätzung des Vorhersagefehlers (Epstein 1996, operationeller Einsatz am ECMWF). Wegen der großen Anzahl der Freiheitsgrade liegt es nahe, diejenigen Störungen des Anfangszustandes auszuwählen, die über den Vorhersagezeitraum das größte Wachstum zeigen. Optimale Störungen werden über den Anfangszeitraum berechnet, in dem das Fehlerwachstum annähernd linearer Dynamik folgt (Buizza *et al.* 1993). Im Rahmen der Stabilitätstheorie des linearisierten Systems $\dot{\mathbf{x}} = A\mathbf{x}$ stehen sie zwischen den Störungen mit stärkstem Anfangswachstum ($t \rightarrow 0$), die sich beispielsweise durch Eigenanalyse der Matrix $(A + A^T)$ gewinnen lassen, und den nach unendlicher Zeit dominierenden Störungen ($t \rightarrow \infty$), die sich als die Eigenvektoren von A zum Eigenwert mit maximalem Realteil ergeben (Farrel und Ioannou 1996, Buizza und Palmer 1995). Einen anderen Ansatz zur Prognose des Vorhersagefehlers eines Atmosphärenmodells mit den primitiven Gleichungen, aber ebenfalls unter Einsatz des adjungierten Modells, verfolgt Bouteloup (1997). Eckert (1998) betrachtet die maximalen Wachstumsraten von singulären Vektoren in einem mit einer stark vereinfachten Atmosphäre gekoppelten Ozeanmodell zur Abschätzung der Vorhersagbarkeit des El Niño-Phänomens im Südpazifik. Störungen mit neutralem Wachstum dagegen können bei der Identifikation von Regimen bedeutsam sein, da sie im linearen Fall im Phasenraum parallel zur Verbindungslinie quasi-stationärer Lösungen verlaufen. Die Projektion der Phasenraumtrajektorie des Modells auf einen so aufgespannten Unterraum macht bevorzugte Regime sichtbar (vgl. Marshall und Molteni 1993, Molteni 1996). Oortwijn (1998) benutzt Sensitivitäten in einem quasigeostrophischen Atmosphärenmodell zur Identifikation von Störungen, die einen Regimewechsel herbeiführen, während Sensitivitätsuntersuchungen wie auch singuläre Vektoren Palmer *et al.* (1998) dazu dienen, Beobachtungen zu lokalisieren, die den Fehler numerischer Wettervorhersagen verringern. Der Einfluß der Einbeziehung der Feuchte in die Berechnung optimaler Störungen in einem Atmosphärenmodell mit den primitiven Gleichungen ist Gegenstand der Untersuchung in Ehrendorfer *et al.* (1999).

Bei der Modellierung natürlicher Prozesse stellt sich oft das Problem, den Zustand des Modells möglichst nahe an den des modellierten Systems zu bringen. Dies ist beispielsweise bei der numerischen Wettervorhersage der Fall, wo Beobachtungsdaten in das Vorhersagemodell einfließen und den Modellzustand möglichst in Richtung größerer Realitätsnähe beeinflussen sollen. Für diesen Vorgang der Datenassimilation werden neben Nudgingverfahren und Kalmanfiltern adjungierte Modelle verwandt (siehe Verweise in Courtier *et al.* 1993). Die adjungierte

Methode ermöglicht insbesondere die Verwendung von sowohl räumlich als auch zeitlich irregulären Beobachtungsdaten sowie unkonventioneller Typen von Beobachtungen. Beispielsweise verwenden Kuo *et al.* (1996) ein nichthydrostatisches mesoskaliges Modell und das adjungierte zur Assimilation von vertikal integriertem Wasserdampfgehalt aus Messungen der Phasenverschiebung des Radiosignals von Satelliten des Global Positioning System (GPS).

Ein ähnliches Problem stellt sich in der Klimasimulation; hier steht allerdings nicht die räumlich und zeitlich präzise Simulation des Wetterablaufes im Vordergrund, sondern die Rekonstruktion bzw. Prognose klimatischer Größen wie Mittelwerten von Temperatur, Wind und Niederschlag, aber auch der Bandbreite der Schwankungen und der Häufigkeit extremer Ereignisse. Die Anpassung eines Modells an ein vorgegebenes Klima stellt eine besondere Herausforderung dar. Durchlaufen Vorgabe und Modell eine ähnliche Abfolge von Zuständen, so ergibt sich daraus durch das Anwachsen des Vorhersagefehlers nicht zwingend eine Übereinstimmung für alle Zeiten. Ebenso wenig läßt sich erwarten, daß die simulierten Mittelwerte mit der Vorgabe über lange Zeit übereinstimmen, da über eine etwaige Ähnlichkeit der internen Variabilität auf langen Zeitskalen bestenfalls Annahmen getroffen werden können. Dazu analog ist der Versuch, ein Modell reduzierter Komplexität an das Klima eines Modells mit einer deutlich höheren Anzahl von Freiheitsgraden anzupassen. Dies ist wünschenswert, um beispielsweise eine Abschätzung über den Zusammenhang von Modellkomplexität und interner Variabilität zu gewinnen und die beteiligten Mechanismen zu studieren.

Durch die einfache Parameterisierung der diabatischen Terme ist das PUMA (Portable University Model of the Atmosphere) für prinzipielle Untersuchungen dieser Art gut geeignet. Lunkeit *et al.* (1998) untersuchen die Sensitivität von Stormtracks im PUMA bezüglich einer Veränderung der Baroklinität. Sie verwenden dabei ein adaptives Nudgingverfahren, um über die Anpassung der diabatischen Parameterisierung das Winterklima des gekoppelten ECHAM2/OPYC-Modells nachzubilden.

Die vorliegende Arbeit besteht im Wesentlichen aus drei im folgenden vorgestellten Teilen. Zunächst wird die Erstellung des adjungierten globalen atmosphärischen Zirkulationsmodells PUMA mit Hilfe des Tangent linear and Adjoint Model Compilers (TAMC, Giering 1999) dokumentiert. Das PUMA ist ein vereinfachtes Modell der globalen atmosphärischen Zirkulation, das mit den primitiven Gleichungen rechnet. Es basiert auf dem Mehrschichten-Spektralmodell von Hoskins und Simmons (1975) (vgl. Fraedrich *et al.* 1998). Die diabatischen und die Reibungsterme sind durch einen linearen Ansatz parameterisiert. Es wird in der vorliegenden Arbeit mit der Auflösung T21 und fünf Schichten in der vertikalen verwendet. Der Rest der Arbeit beschäftigt sich mit zwei verschiedenen Anwendungsbeispielen des adjungierten PUMA: der Berechnung schnellstwachsender Störungen und der Bestimmung eines diabatischen Antriebes.

Die erste der vorgestellten Anwendungen dieser Arbeit ist die Berechnung opti-

maler Störungen im PUMA. Der gewählte Grundzustand ist ein thermisch balancierter Jet in den mittleren Breiten. Dieser hochidealisierte Zustand hat keinerlei Meridionalzirkulation und bleibt daher bei reibungsfreier Rechnung im Modell unverändert. Die daraus resultierende modale Struktur der optimalen Störung ermöglicht einen Vergleich mit den in einem verwandten Modell bereits für einen solchen Grundzustand untersuchten normalen Moden (Simmons und Hoskins 1978). Mit Hilfe des adjungierten Modells werden Störungen dieses Zustandes gefunden, die in ihrer totalen Energie jeweils nach bestimmter Integrationszeit das größte Wachstum zeigen. Die dabei ausgelösten Wellenphänomene werden dargestellt und in ihrer Energetik untersucht.

Als weitere Anwendung des adjungierten Modells wird ein Verfahren zur Assimilation eines vorgegebenen Mitteltemperaturfeldes in das PUMA über die Wahl geeigneter Parameter des diabatischen Antriebes entwickelt und mit dem von Lunkeit *et al.* (1998) verwendeten Ansatz verglichen. Das adjungierte Modell liefert dabei den Gradienten einer Kostenfunktion bezüglich der Parameter des diabatischen Antriebes. Ziel ist eine universellere Einsetzbarkeit und schnellere Konvergenz durch die Berücksichtigung von Information aus dem Gradienten. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse geben Aufschluß über Verbesserungsmöglichkeiten und ermutigen zu einer weiteren Verfolgung dieses Ansatzes.

Die Dokumentation der Erstellung des adjungierten PUMA erfolgt in Kapitel 2. Die optimalen Störungen werden in Kapitel 3 behandelt. Kapitel 4 enthält die Darstellung des Verfahrens zur Assimilation eines vorgegebenen Klimas in das PUMA. Die Arbeit schließt mit einer Diskussion und dem Ausblick auf weitere Untersuchungen in Kapitel 5.

Kapitel 2

Das adjungierte Modell

In diesem Kapitel wird der Begriff des adjungierten Modells erläutert. Dies geschieht zunächst abstrakt anhand der mathematischen Definition des adjungierten Operators. Davon ausgehend wird die erforderliche Linearisierung beschrieben und die Übertragung auf ein Modell mit Zeitschrittverfahren gezeigt. Der nachfolgende Abschnitt zeigt die Erzeugung von adjungiertem Fortran 90-Programmcode; das in der Arbeit verwendete Modell PUMA wird vorgestellt und die Schritte zur Erzeugung des adjungierten Modells erläutert. Im letzten Abschnitt des Kapitels werden im Hinblick auf die beiden in den anschließenden Kapiteln präsentierten Anwendungen zwei unterschiedliche Ansätze zum Gebrauch des adjungierten Modells vorgestellt.

2.1 Definition des adjungierten Operators

Zu jedem linearen Abbildungsoperator A zwischen zwei Räumen mit Skalarprodukt (\cdot, \cdot) , sog. Hilberträumen, gibt es genau einen adjungierten Operator A^* mit der Eigenschaft

$$(x, Ay) = (A^*x, y). \quad (2.1)$$

Der mathematische Hintergrund findet sich beispielsweise in Young (1988, S. 76ff.), oder auch in Courant und Hilbert (1962, S. 234ff.). Die Definition des adjungierten Operators ist abhängig vom gewählten Skalarprodukt. Es sei $\langle \cdot, \cdot \rangle$ das euklidische Skalarprodukt (wie auch im Folgenden) in einem reellen Vektorraum endlicher Dimension und A ein linearer Operator, der zwischen solchen Räumen abbildet. Dann ist die Matrix A^* gleich A^T , der Transponierten von A , da

$$\begin{aligned} \langle x, Ay \rangle &= \sum_i \left(x_i \sum_j a_{ij} y_j \right) \\ &= \sum_{i,j} x_i a_{ij} y_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_j \left(y_j \sum_i x_i a_{ij} \right) \\
&= \langle A^T x, y \rangle
\end{aligned} \tag{2.2}$$

gilt.

2.1.1 Das tangent-lineare Modell

Ein linearisiertes Modell bezieht sich im allgemeinen auf einen konstanten Grundzustand. Beim tangent-linearen Modell dagegen handelt es sich um die Linearisierung des Modells bezüglich einer Modelltrajektorie. Betrachtet man das Modell als Verkettung von Operatoren, die den Zustand jeweils um einen Zeitschritt voranbringen, so entspricht das tangent-lineare Modell einer Verkettung der Jacobimatrizen dieser Operatoren gemäß der Kettenregel der Differentiation. Sie sind damit abhängig vom vorgegebenen momentanen Zustand.

Sei das Modell \mathcal{M} eine Abbildung eines Anfangszustandes X auf einen Endzustand oder Modellergebnis Y (dies kann z. B. auch ein Skalar sein; vgl. Abschnitt 2.3.2) gemäß

$$\begin{aligned}
\mathcal{M} : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R}^m \\
X &\longmapsto Y.
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Die Taylorentwicklung mit Abbruch nach dem ersten Glied ergibt

$$\mathcal{M}(X) \approx \mathcal{M}(X^0) + \left. \frac{\partial \mathcal{M}(X)}{\partial X} \right|_{X=X^0} (X - X^0). \tag{2.4}$$

Die Angabe $|_{X=X^0}$ legt bei dieser Formulierung mit dem Modell als Abbildung eines Anfangszustandes auf ein Ergebnis lediglich den Anfangswert der Modelltrajektorie fest; ihr weiterer Verlauf ist durch die Dynamik des Modells vorge-schrieben. Die Jacobimatrix von \mathcal{M} ist der tangent-lineare Modelloperator A .

$$A|_{X=X^0} = \left. \frac{\partial \mathcal{M}(X)}{\partial X} \right|_{X=X^0} \tag{2.5}$$

$$\delta Y = A|_{X=X^0} \delta X \tag{2.6}$$

Er ist die lineare Abbildung, die die Störung δX des Anfangszustandes X^0 auf die Störung δY des Modellergebnisses $Y = \mathcal{M}(X^0)$ abbildet. Stellt man \mathcal{M} als Verkettung von K differenzierbaren Funktionen oder Modellschritten gemäß

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_K \circ \dots \circ \mathcal{M}_1 \tag{2.7}$$

mit den Einzelschritten

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_l : \mathbb{R}^{n_{l-1}} &\longrightarrow \mathbb{R}^{n_l}; \quad (l = 1, \dots, K) \\
Z_{l-1} &\longmapsto Z_l
\end{aligned} \tag{2.8}$$

und den von X^0 abhängigen, oben als Trajektorie bezeichneten Zwischenergebnissen

$$Z_l^0 := \mathcal{M}_l \circ \dots \circ \mathcal{M}_1(X^0); \quad (1 \leq l \leq K) \quad (2.9)$$

dar, so ergibt sich für den tangent-linearen Operator A nach der Kettenregel

$$\begin{aligned} A|_{X=X^0} &\stackrel{(2.5)}{=} \left. \frac{\partial \mathcal{M}(X)}{\partial X} \right|_{X=X^0} \\ &= \left. \frac{\partial \mathcal{M}_K(Z_{K-1})}{\partial Z_{K-1}} \right|_{Z_{K-1}=Z_{K-1}^0} \cdot \dots \cdot \left. \frac{\partial \mathcal{M}_1(X)}{\partial X} \right|_{X=X^0}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Der untere Index bezieht sich jeweils auf die Zeitebene, der obere auf die Trajektorie, bezüglich welcher die Linearisierung erfolgt. Das tangent-lineare Modell berechnet also die lineare Entwicklung einer Störung des Anfangszustandes bezüglich der i. allg. nichtlinearen Entwicklung des ungestörten Zustandes.

2.1.2 Das adjungierte Modell

Das adjungierte Modell ist genau genommen adjungiert zum tangent-linearen Modell. In Matrixrepräsentation entspricht es den in umgekehrter Reihenfolge verketteten transponierten Jacobimatrizen der Zeitschritte des tangent-linearen Modells. Für den adjungierten Operator A^* gilt

$$\begin{aligned} A^*|_{X=X^0} &\stackrel{(2.1, 2.2)}{=} A^T|_{X=X^0} \\ &\stackrel{(2.5)}{=} \left(\left. \frac{\partial \mathcal{M}(X)}{\partial X} \right|_{X=X^0} \right)^T \\ &\stackrel{(2.10)}{=} \left(\left. \frac{\partial \mathcal{M}_1(X)}{\partial X} \right|_{X=X^0} \right)^T \cdot \dots \cdot \left(\left. \frac{\partial \mathcal{M}_K(Z_{K-1})}{\partial Z_{K-1}} \right|_{Z_{K-1}=Z_{K-1}^0} \right)^T. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Wie das tangent-lineare Modell bezieht sich auch das adjungierte Modell auf eine Trajektorie. Das Argument δY^* wird jedoch von einer späteren auf eine frühere Zeitebene abgebildet.

$$\delta X^* = A^*|_{X=X^0} \delta Y^* \quad (2.12)$$

Das Ergebnis δX^* ist die Sensitivität des Modells bezüglich der entsprechenden Eingangsvariable. Die Bedeutung ist eng mit der jeweiligen Anwendung verknüpft (vgl. Abschnitt 2.3).

2.2 Erzeugung des adjungierten Modellcodes

Die Zergliederung des Modells in Zeitschritte läßt sich weiterführen bis auf die Zergliederung in einzelne Rechenoperationen. Dieses Prinzip stellt die Basis für die automatische Erzeugung von adjungiertem Modellcode dar, wie sie beispielsweise vom für diese Arbeit verwendeten TAMC (Tangent linear and Adjoint Model Compiler, Giering (1999)) durchgeführt wird. Eine detaillierte Erläuterung findet sich in Giering und Kaminski (1996). Das folgende Beispiel zeigt die Anwendung auf eine einzelne Zuweisung aus einem in Fortran 90 programmierten Modell zum Zeitschritt l :

$$Z = X * \text{SIN}(Y**2)$$

Anders notiert lautet die Operation:

$$\begin{pmatrix} z \\ y \\ x \end{pmatrix}_l = \begin{pmatrix} x \sin y^2 \\ y \\ x \end{pmatrix}_{l-1}. \quad (2.13)$$

Mit der Jacobimatrix

$$\begin{aligned} A_l &:= \frac{\partial Z_l}{\partial Z_{l-1}} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial z_l}{\partial z_{l-1}} & \frac{\partial z_l}{\partial y_{l-1}} & \frac{\partial z_l}{\partial x_{l-1}} \\ \frac{\partial y_l}{\partial z_{l-1}} & \frac{\partial y_l}{\partial y_{l-1}} & \frac{\partial y_l}{\partial x_{l-1}} \\ \frac{\partial x_l}{\partial z_{l-1}} & \frac{\partial x_l}{\partial y_{l-1}} & \frac{\partial x_l}{\partial x_{l-1}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.14)$$

lautet die linearisierte Version:

$$\begin{pmatrix} \delta z \\ \delta y \\ \delta x \end{pmatrix}_l = \begin{pmatrix} 0 & 2xy \cos y^2 & \sin y^2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{l-1} \begin{pmatrix} \delta z \\ \delta y \\ \delta x \end{pmatrix}_{l-1}. \quad (2.15)$$

Der untere Index gibt dabei jeweils die Zeitebene an. Die Beziehung zwischen den adjungierten Variablen δZ_l^* und δZ_{l-1}^* stellt die adjungierte Jacobimatrix A_l^* her:

$$\begin{pmatrix} \delta z^* \\ \delta y^* \\ \delta x^* \end{pmatrix}_l = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2xy \cos y^2 & 1 & 0 \\ \sin y^2 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{l-1} \begin{pmatrix} \delta z^* \\ \delta y^* \\ \delta x^* \end{pmatrix}_{l-1}. \quad (2.16)$$

In Fortran 90-Programmcode übersetzt ergibt sich:

```
ADY = ADZ * 2 * X * Y * COS( Y**2 ) + ADY
ADX = ADZ * SIN( Y**2 ) + ADX
ADZ = 0.
```

Die Berechnung von ADZ muß zuletzt erfolgen, da bei der Berechnung von ADY noch das ADZ der vorherigen Zeitebene einfließt. Wie schon aus Gleichung (2.11) ersichtlich, benötigt das adjungierte Modell Zwischenergebnisse aus dem ursprünglichen Modell (im Beispiel X und Y). Das ist auch schon beim tangentlinearen Modell der Fall (vgl. Gl. 2.10), sie werden aber im Gegensatz zu diesem in umgekehrter zeitlicher Reihenfolge benötigt, so daß sie nicht oder nur mit großem Aufwand parallel vom Modell berechnet werden können. Die in dieser Arbeit verwendete Strategie zur Lösung des Problems ist, die entsprechenden Werte in einem vorhergehenden Lauf des PUMA zu erzeugen und dem adjungierten Lauf in einer Datei zur Verfügung zu stellen.

2.2.1 Das PUMA

Das in dieser Arbeit verwendete globale Atmosphärenmodell PUMA (Portable University Model of the Atmosphere) basiert auf dem Mehrschichten-Spektralmodell von Hoskins und Simmons (1975). Eine ausführliche Beschreibung findet sich in Fraedrich *et al.* (1998). Das Modell löst die primitiven Gleichungen in Sigma-Koordinaten mit einem semi-impliziten Zeitschema. Die Experimente in dieser Arbeit werden mit einer Auflösung von 21 Wellen in der Horizontalen und 5 Sigmaflächen in der Vertikalen durchgeführt. Die diabatischen und dissipativen Prozesse werden durch lineare Terme parameterisiert. In der hier verwendeten Version sind keine Gleichungen für den Wasserdampf enthalten. Die simulierte Physik entspricht daher der eines adiabatischen, hydrostatischen, perfekten Gases auf einem rotierenden Aquaplaneten. Bisherige Untersuchungen mit dem PUMA behandeln die Simulation von Stormtracks über den diabatischen Antrieb und ihre Dynamik (Frisius 1995, Frisius *et al.* 1998), ihre Sensitivität bezüglich der Baroklinität des mittleren Zustands (Bauer 1996 und Lunkeit *et al.* 1998), die Interaktion zweier Stormtracks (Franzke 1998), den Einfluß von Anomalien der Meeresoberflächentemperatur (Walter 1999), nichtlineare Systemanalyse der Zirkulation der mittleren Breiten (Müller 1999) und den Einfluß des Antriebs auf die Struktur der Hadleyzelle im zweidimensionalen Modell (Bornemann 1999).

Modellgleichungen: Die dimensionslosen, prognostischen Gleichungen lauten im einzelnen:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\vec{k} \cdot \nabla \times \left(\eta \vec{k} \times \vec{v} + \dot{\sigma} \frac{\partial \vec{v}}{\partial \sigma} \right) - \frac{\eta - f}{\tau_F} + K \nabla^8 (\eta - f), \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial t} &= -\nabla \cdot \left(\eta \vec{k} \times \vec{v} + \dot{\sigma} \frac{\partial \vec{v}}{\partial \sigma} + RT \nabla (\ln \pi) \right) \\ &\quad - \nabla^2 \left(\frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{v} + \phi \right) - \frac{\mathcal{D}}{\tau_F} + K \nabla^8 \mathcal{D}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla \mathcal{T} - \dot{\sigma} \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \sigma} + \frac{RT}{c_P} \frac{\omega}{p} + \frac{\mathcal{T}_R - \mathcal{T}}{\tau_R} + K \nabla^8 \mathcal{T}, \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial (\ln \pi)}{\partial t} = -\hat{v} \cdot \nabla (\ln \pi) - \hat{\mathcal{D}}, \quad (2.20)$$

mit dem horizontalen Windvektor $\vec{v} = (u, v)$, der absoluten Vorticity η , dem Coriolisparameter f , der horizontalen Divergenz \mathcal{D} , der Temperatur \mathcal{T} , dem Geopotential ϕ , dem Druck p , dem Bodendruck π , der Vertikalkoordinate $\sigma = \frac{p}{\pi}$, der vertikalen Sigmageschwindigkeit $\dot{\sigma}$, der vertikalen Druckgeschwindigkeit ω , der Gaskonstanten R , der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p , und der Zeit t ; \vec{k} ist der Einheitsvektor senkrecht zur Oberfläche, ∇ ist der horizontale Gradient-Operator und $(\hat{\cdot})$ ist der vertikale Mittelungsoperator; τ_R und τ_F beschreiben die konstanten Relaxationszeiten für die Newtonsche Abkühlung und der Rayleigh-Reibung. Der Parameter K kontrolliert die Hyperdiffusion. Weiter berechnet das Modell folgende diagnostische Gleichungen:

$$\vec{v} = \vec{k} \times \nabla (\nabla^{-2} (\eta - f)) + \nabla (\nabla^{-2} \mathcal{D}), \quad (2.21)$$

$$\dot{\sigma} = - \int_0^\sigma (\mathcal{D} - \hat{\mathcal{D}}) d\sigma - \int_0^\sigma (\vec{v} - \hat{v}) \cdot \nabla (\ln \pi) d\sigma, \quad (2.22)$$

$$\omega = p \left(\frac{\dot{\sigma}}{\sigma} + (\vec{v} - \hat{v}) \cdot \nabla (\ln \pi) - \hat{\mathcal{D}} \right), \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial (\ln \sigma)} = -R\mathcal{T}, \quad (2.24)$$

wobei der inverse Laplace-Operator ∇^{-2} unter Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen auf der Kugel berechnet wird. Zur Entdimensionierung der Gleichungen werden folgende Skalen verwendet: als Längenmaß der Erdradius a , als Zeitmaß der Kehrwert der Winkelgeschwindigkeit der Erdrotation Ω^{-1} , als Temperaturmaß $\frac{a^2 \Omega^2}{R}$, und zur Entdimensionierung des Druckes wird $p_0 = 1013,25$ hPa gesetzt.

Numerisches Verfahren: Das Modell verwendet die spektrale Transformationsmethode. Eine Variable Q wird dabei als Folge von Kugelflächenfunktionen dargestellt:

$$Q(\lambda, \mu) = \sum_{n,m} Q_n^m P_n^m(\mu) e^{im\lambda}, \quad (2.25)$$

mit der totalen Wellenzahl n und der zonalen Wellenzahl m , wobei $m \leq n$; die $P_n^m(\mu)$ sind die assoziierten Legendrepolynome. Zu jedem Zeitschritt des Modells erfolgt eine Transformation von Q nach Q_n^m und zurück. Lineare Terme der Modellgleichungen werden im Spektralraum berechnet, nichtlineare Terme (wie z. B. das Produkt $\eta \vec{k} \times \vec{v}$) dagegen im Gitterpunktraum. Für die Transformation verwendet das Modell eine eigene schnelle Fouriertransformation (FFT) und Integration mit Gaußquadratur.

In der Vertikalen wird ein finite Differenzen-Verfahren verwendet. Die Tendenzen von Temperatur, Divergenz und Bodendruck werden ab dem ersten Zeitschritt durch ein semi-implizites Verfahren mit einem leap-frog-Zeitschritt behandelt. Die Vorticitygleichung wird mit zentrierten Differenzen gelöst. Zur Filterung hochfrequenter Schwerewellen und zum Ausgleich der Nachteile des leap-frog-Verfahrens wird ein Roberts/Asselin-Filter verwendet, der eine gewichtete Mittelung zwischen den verschiedenen Zeitebenen durchführt.

2.2.2 Struktur des adjungierten Modellcodes

Vorüberlegungen: Die meisten der beschriebenen Schritte zu Erzeugung des adjungierten PUMA werden von TAMC übernommen; dies setzt allerdings voraus, daß der Modellcode entsprechend vorbereitet wird. Insbesondere lohnt es sich, Unterprogramme mit den unten aufgelisteten Eigenschaften gesondert zu behandeln, da dies zu effizienterem Programmcode führen kann:

- **Lineare Unterprogramme**
Ist ein Unterprogramm linear bezüglich seiner Argumente, erübrigt sich die Erstellung einer tangent-linearen Version. Das Unterprogramm wird im tangent-linearen Modell dann zweimal aufgerufen; zunächst mit den tangent-linearen Variablen, dann mit den regulären Modellvariablen als Argumenten.
Im PUMA ist dies bei den Routinen zur Transformation zwischen Gitterpunktraum und Fourierkoeffizienten, bei den Routinen zur Projektion der Fourierkoeffizienten auf die Legendrepolynome und bei der Routine zur Berechnung der Tendenzen der Fall.
- **Selbstadjungierte Unterprogramme**
Ist ein Unterprogramm selbstadjungiert, d.h., es operiert auf seinen Argumenten wie eine symmetrische Matrix, so läßt es sich ohne weitere Transformation im adjungierten Modell verwenden, wo es auf den adjungierten Variablen operiert.
- **Paarweise adjungierte lineare Unterprogramme**
Stellt ein Unterprogramm die adjungierte Operation zu einem anderen dar, wie es im PUMA bei den Routinen zur schnellen Fouriertransformation (FFT), abgesehen von der Skalierung, der Fall ist, so läßt es sich ebenfalls direkt in das adjungierte Modell übernehmen.

Der TAMC stellt die Möglichkeit zur Verfügung, Unterprogramme mit den obengenannten Eigenschaften zu markieren und unverändert aus dem tangent-linearen bzw. adjungierten Modellcode aufzurufen.

Aktive und passive Variablen: Der Erzeugung des tangent-linearen und des adjungierten Modellcodes geht eine Variablenabhängigkeitsanalyse voraus. Die

Argumente und das Ergebnis des Modells werden in einer als Interface dienenden Routine definiert. Davon ausgehend werden die aktiven und passiven Variablen bestimmt. Eine Variable ist aktiv, wenn sie direkt oder indirekt von den Argumenten abhängt und Einfluß auf das Modellergebnis hat. Viele Berechnungen, die beispielsweise lediglich der Modelldiagnostik dienen, werden auf diese Weise aus der Analyse ausgeschlossen. Passive Variablen sind unabhängig von den Argumenten, haben aber Einfluß auf das Ergebnis des tangent-linearen Modells. Sie enthalten z.B. den Referenzzustand der Linearisierung, also die Trajektorie des regulären Modells.

Variablen vom ganzzahligen Typ werden vom TAMC dabei nicht berücksichtigt; haben sie Einfluß auf die Berechnung der anderen aktiven Variablen, wie z.B. als Index eines Vektors oder eines Feldes, so müssen sie explizit von einem Schleifenindex abhängen um dennoch berücksichtigt zu werden und keinen fehlerhaften Code zu erzeugen.

Kontrollstrukturen: Logische Strukturen wie Unterprogrammaufrufe, Schleifen und Bedingungen werden vom TAMC erkannt und berücksichtigt. Hängt eine bedingte Anweisung jedoch von einer aktiven Variable ab, so stellt sie im Zweifel eine Unstetigkeit dar und ist nicht differenzierbar, d.h. es kann kein tangent-linearer oder adjungierter Modellcode erzeugt werden. Dieses Problem tritt typischerweise in Routinen zur Parameterisierung physikalischer Prozesse auf, wie z.B. bei der Berechnung von Wolkenwasser (vgl. Mahfouf 1999). Die verwendete Version des PUMA enthält keine solche Anweisung.

Der TAMC ist in der Lage, zahlreiche intrinsische Funktionen zu differenzieren; Für eine aktuelle Übersicht und detailliertere Information sei auf das Benutzerhandbuch (Giering 1999) verwiesen.

Zeitschritturnkehr und Trajektorie: Im wesentlichen besteht ein Zeitschritt des PUMA aus vier Teilen:

- Transformation der Variablen in den Gitterpunktsraum,
- Berechnung der nichtlinearen Terme im Gitterpunktsraum,
- Transformation in den Spektralraum,
- Berechnung der linearen Terme im Spektralraum.

Das tangent-lineare Modell behält diese Ordnung bei, nur daß vor jeder Anweisung des regulären Modells die entsprechende linearisierte Anweisung ausgeführt wird. Die Berechnung der regulären Modellwerte ist zur Bereitstellung der Trajektorie erforderlich, bezüglich der die Linearisierung erfolgt (passive Variablen). Im adjungierten Modell kehrt sich diese Reihenfolge um; die Bereitstellung der

passiven Variablen ist entsprechend schwieriger. Hier muß im Einzelfall abgewogen werden zwischen dem vorherigen Abspeichern der erforderlichen Werte oder einer unter Umständen aufwendigen Neuberechnung, die jedoch Speicherplatz spart und die Behandlung mancher Probleme dadurch vielleicht erst möglich macht. Beide Möglichkeiten sowie Mischformen (z. B. „Checkpointing“, vgl. Griewank 1992) werden vom TAMC unterstützt. In dieser Arbeit wird durchgehend die erste Variante verwendet, bei der die Felder der prognostischen Variablen in einem Vorwärtsschritt berechnet und für jeden Zeitschritt abgespeichert werden. Dieses Vorgehen bietet sich insbesondere für die Anwendung in Kapitel 3 an, da hier vor jedem Lauf des adjungierten Modells ein Lauf des tangent-linearen Modells erforderlich ist. Die dabei berechnete Trajektorie wird für den anschließenden Lauf des adjungierten Modells gespeichert, so daß keine Neuberechnung erforderlich ist.

Überprüfung des adjungierten Modellcodes: Nach der Erzeugung des tangent-linearen und des adjungierten Modellcodes empfiehlt sich eine Überprüfung. Dazu bietet sich im Fall eines skalaren Modellergebnisses Y der Vergleich mit finiten Differenzen sowie der Test grundlegender Eigenschaften des adjungierten Operators an. Zur Berechnung der finiten Differenzen wird nacheinander jedes Element x_i des Vektors X mit einem ε gestört und der Quotient aus der Differenz des gestörten und eines ungestörten Referenzlaufes $(Y^\varepsilon - Y^0)/\varepsilon \approx \partial Y/\partial x_i$ gebildet. Für kleine ε sollte das Ergebnis nur geringfügig vom mit dem adjungierten Modell berechneten Gradienten $(A^* \mathbf{1})_i = \partial Y/\partial x_i$ abweichen. Dabei ergibt sich für den in dieser Arbeit verwendeten Code für einzelne Zeitschritte sehr gute Übereinstimmung. Für Gradienten, die über mehrere Zeitschritte berechnet werden, nimmt sie im Rahmen der Maschinengenauigkeit ab. Der so überprüfte Code wird mit dem adjungierten Code für ein nichtskalares Modellergebnis Y verglichen, da sie sich in der Mehrzahl der Anweisungen gleichen. Desweiteren wird die Eigenschaft aus Gleichung (2.1) für beliebige Vektoren X und Y getestet. Die Bedingung ist bis auf Maschinengenauigkeit erfüllt. Navon und Zou (1991) schlagen den fast äquivalenten Test $\langle Ax, Ax \rangle \stackrel{?}{=} \langle x, A^*Ax \rangle$ vor. Alle Modellläufe dieser Arbeit werden mit einer Genauigkeit von acht Byte pro Gleitkommazahl durchgeführt.

2.3 Gebrauch des adjungierten Modells

In diesem Abschnitt werden die technisch-mathematischen Grundlagen für die beiden speziellen Anwendungen in den Kapiteln 3 und 4 erläutert. Es wird insbesondere auf die unterschiedliche Bedeutung des adjungierten Modells eingegangen.

2.3.1 Singuläre Vektoren

Bei der Anwendung in Kapitel 3 werden die Modellfelder von Vorticity ζ , Divergenz \mathcal{D} , Logarithmus des Bodendrucks $\ln p_s$ und Temperatur \mathcal{T} als Vektor X zusammengefaßt. Sie stellen das Argument des Modelloperators dar, der sie auf einen Vektor Y gleicher Dimension zu einem späteren Zeitpunkt T abbildet. Das tangent-lineare Modell A berechnet in diesem Fall das lineare Wachstum einer Anfangsstörung δX relativ zur nichtlinearen Entwicklung des Modellzustandes. Wählt man eine geeignete Norm $\|\cdot\|$, die etwa die kinetische oder auch die Gesamtenergie der Störung angibt (zur Wahl der Norm siehe auch Palmer *et al.* 1998), so gibt es ein zugehöriges Skalarprodukt mit der Eigenschaft $(\cdot, \cdot) = \|\cdot\|^2$. Für das tangent-lineare Wachstum σ^2 der Energie der Störung gilt damit folgende Gleichung:

$$\sigma^2 = \frac{(A\delta X, A\delta X)}{(\delta X, \delta X)} \quad (2.26)$$

Der bezüglich dem Skalarprodukt (\cdot, \cdot) zu A adjungierte Operator A^* ermöglicht es, entsprechend der Definition (2.1), die Gleichung (2.26) umzuschreiben:

$$\sigma^2 = \frac{(A^*A\delta X, \delta X)}{(\delta X, \delta X)}. \quad (2.27)$$

Daraus folgt, daß die im Sinne der gewählten Norm in der Zeit T am stärksten wachsende Störung von X der Eigenvektor der Matrix A^*A mit dem größten Eigenwert ist.

Läßt sich (\cdot, \cdot) unter Einführung der metrischen Matrix M mit Hilfe des euklidischen Skalarproduktes als $\langle \cdot, M\cdot \rangle$ darstellen, so berechnet sich der adjungierte Operator A^* zu A wie folgt:

$$\begin{aligned} (\cdot, A\cdot) &= \langle \cdot, MA\cdot \rangle \\ &= \langle A^T M^T \cdot, \cdot \rangle \\ \Rightarrow A^* &= A^T M^T. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Die Eigenwerte der Matrix A^*A sind das Quadrat der „singular values“ von $M^{1/2}A$; die Eigenvektoren von A^*A sind die singulären Vektoren von $M^{1/2}A$ (vgl. hierzu Young 1988, S. 204ff. und Golub und van Loan 1983). Eine weitergehende Einbindung in die Stabilitätstheorie findet sich in Farrel und Ioannou (1996); ein entsprechender technischer Ansatz wird in Buizza *et al.* (1993), Palmer *et al.* (1998) und Eckert (1998) behandelt.

2.3.2 Ableitung einer Kostenfunktion

Kostenfunktionen spielen in Problemen der Datenassimilation eine zentrale Rolle. Es handelt sich dabei im allgemeinen um skalare Funktionen, die den Abstand von Modellfeldern zu gemessenen Feldern angeben und deren Minimierung daher gleichbedeutend mit der Lösung der Assimilationsaufgabe ist. Grundsätzliche Überlegungen dazu finden sich in Navon (1997).

Im vorliegenden Fall geht es, anders als bei der herkömmlichen Assimilation eines Zustandes oder einer Modelltrajektorie (vgl. Talagrand 1991, Navon und Zou 1991) um die Assimilation eines Modellmitteltemperaturfeldes über die Wahl eines geeigneten Relaxationstemperaturfeldes, also die Anpassung des Modellklimas an eine Vorgabe. Das Modellmitteltemperaturfeld $\bar{\mathcal{T}}$ und die Kostenfunktion J sind hier wie folgt definiert:

$$\bar{\mathcal{T}} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \mathcal{T}(t) \quad (2.29)$$

$$J = \sum_{\lambda, \phi, \sigma} w(\phi) (\bar{\mathcal{T}} - \mathcal{T}_Z)^2 \quad (2.30)$$

Die skalarwertige Funktion J ist der quadratische Abstand des Modellmitteltemperaturfeldes $\bar{\mathcal{T}}$ zum angestrebten Klima \mathcal{T}_Z , gewichtet mit den breitenabhängigen gaußschen Gewichten w . Da das Modell auf äquidistanten Sigmaflächen rechnet, ist eine näherungsweise Massengewichtung in der Vertikalen implizit enthalten. Die Berechnung der Kostenfunktion J ist der letzten Schritt des Vorwärtsmodelles, so daß diese bei fest gewählter Integrationszeit und vorgegebenem Anfangszustand als Funktion $J(\mathcal{T}_R)$ des Relaxationstemperaturfeldes \mathcal{T}_R aufgefaßt werden kann. Als Modell wird hier also die Abbildung des Relaxationstemperaturfeldes auf die Kostenfunktion betrachtet. Für eine rationelle Minimierung dieser Funktion ist die Kenntnis der Ableitung nach den Komponenten von \mathcal{T}_R hilfreich. Die Berechnung dieser Gradienten aus finiten Differenzen ist allerdings aufgrund der großen Zahl der Parameter eine sehr umfangreiche Aufgabe.

Eine Alternative bietet die Verwendung des adjungierten Modells. Die Jacobi-matrix A des Modells hat die Gestalt $1 \times n$ (wobei n die Anzahl der Parameter angibt). Ihre Einträge sind die gesuchten Gradienten:

$$\delta J = A \delta \mathcal{T}_R \quad (2.31)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial J}{\partial \mathcal{T}_{R_1}} \\ \vdots \\ \frac{\partial J}{\partial \mathcal{T}_{R_n}} \end{pmatrix} \delta \mathcal{T}_R \quad (2.32)$$

Der tangent-lineare Modelloperator berechnet die Multiplikation dieser Matrix mit dem n -Vektor der Störungen der Parameter und hat die erste Näherung der resultierenden Störung der Kostenfunktion zum Ergebnis.

Der zugehörige adjungierte Modelloperator berechnet dagegen die Multiplikation eines Skalars mit der transponierten $(n \times 1)$ Matrix A^* :

$$A^* \cdot 1 = \left(\frac{\partial J}{\partial \mathcal{T}_{R_1}}, \dots, \frac{\partial J}{\partial \mathcal{T}_{R_n}} \right) \quad (2.33)$$

Das Resultat ist, bei Multiplikation mit 1, der Vektor der gesuchten Ableitungen. Das adjungierte Modell ermöglicht damit eine sehr effiziente Berechnung des Gradienten einer Kostenfunktion J bezüglich ihrer Parameter, dem Relaxationstemperaturfeld \mathcal{T}_R . Die in Kapitel 4 verwendeten Ableitungen werden auf diese Weise berechnet.

Kapitel 3

Anwendung: Optimale Störungen

In diesem Kapitel wird das adjungierte Modell dazu verwendet, die über einen bestimmten Zeitraum am schnellsten wachsende Störung eines gegebenen Grundstromes zu finden. Dabei wird im wesentlichen der in Abschnitt 2.3.1 behandelte Ansatz verwandt. Um die Ergebnisse einfacher interpretierbar zu machen, wird eine stationärer Grundstrom gewählt, wie er auch von Frisius (persönliche Mitteilung) verwendet wird. Das führt zu einer modalen Struktur der optimalen Störungen und stellt einen Spezialfall dar, in dem die als singuläre Vektoren berechneten optimalen Störungen für große Zeiten in normale Moden übergehen (vgl. Buizza und Palmer 1995). Für die Gewinnung des Eigensystems wird der Lanczosalgorithmus verwendet. Die Ergebnisse werden vorgestellt und die Entwicklung der gewonnenen optimalen Störung im Modell untersucht. Das Kapitel schließt mit einer Zusammenfassung der Ergebnisse.

3.1 Grundzustand, Norm, Lanczosalgorithmus und Eigensystem

Die Konstruktion des verwendeten Grundzustandes geht von einem vorgegebenen meridionalen zonal- und hemisphärensymmetrischen Temperaturgradienten aus. Über die hydrostatische Gleichung wird der meridionale Geopotentialgradient berechnet, woraus sich der Zonalwind ergibt. Die Divergenz wird auf Null und der Bodendruck konstant gesetzt. Auf diese Weise ist gewährleistet, daß der Meridionalwind verschwindet und der Zustand erhalten bleibt. Alle Experimente in diesem Kapitel werden außerdem ohne diabatischen Antrieb und ohne ohne Bodenreibung gerechnet. Abbildung 3.1 zeigt die zonalsymmetrischen Felder von Zonal- und Meridionalwind, Temperatur und Bodendruck. Der Temperaturgradient ist so gewählt, daß der Zonalwindes außerhalb von 20 und 70°N bzw. 20 und 70°S verschwindet. Das Maximum liegt bei etwa 42° mit 55 m/s aufgrund der thermischen Windbedingung in der obersten Modellschicht; in der untersten Modellschicht ist die maximale Windgeschwindigkeit 5 m/s.

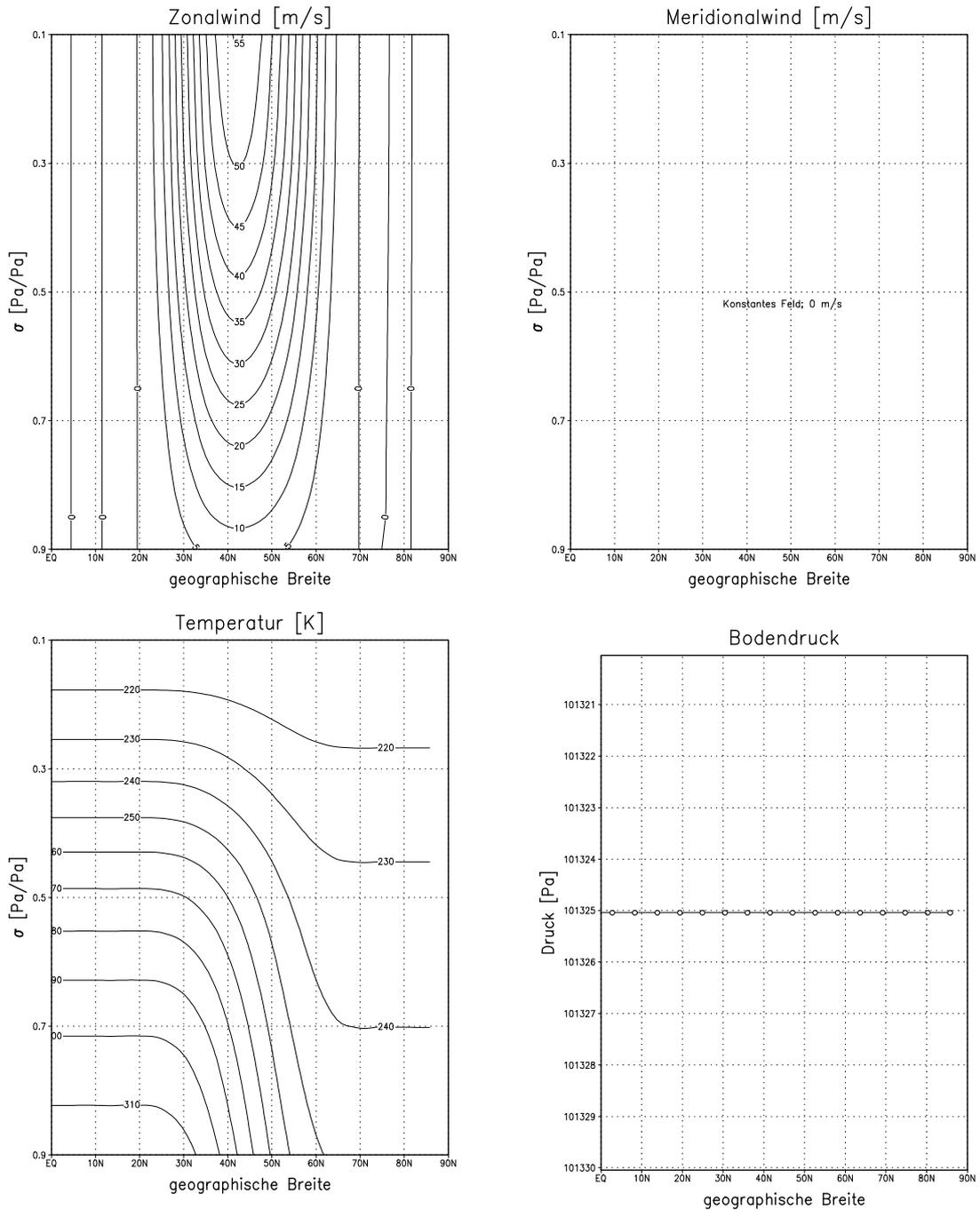


Abbildung 3.1: Zonalmittel des Zonal- und Meridionalwindes, der Temperatur und des Bodendruckes des balancierten Grundzustandes für die Nordhalbkugel. Die Vertikalkoordinate gibt die σ -Fläche an (außer beim Bodendruck). Der Meridionalwind verschwindet, der Bodendruck ist konstant und der meridionale Temperaturgradient erhält die Zonalströmung aufrecht. Dieser Zustand bleibt im Modell auch bei langen Integrationszeiten unverändert.

Normwahl: Um alle für das Modell relevanten physikalischen Größen in die Norm einzubeziehen, wird die totale Energie gewählt, wie sie in Palmer *et al.* (1998) definiert wird. Zur Berechnung wird der Vektor der Störungen in seine Komponenten, Vorticity ζ , Divergenz \mathcal{D} , Temperatur \mathcal{T} und Logarithmus des Bodendruckes $\ln \pi$, aufgespalten. Über die Beziehung $\|\cdot\|^2 = \langle \cdot, M \cdot \rangle$ (vgl. Abschnitt 2.3.1) sind damit die Koeffizienten der metrischen Matrix M festgelegt.

$$\delta X = (\delta\zeta, \delta\mathcal{D}, \delta\mathcal{T}, \delta\ln \pi) \quad (3.1)$$

$$\|\delta X\|^2 = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \phi, \sigma} w(\phi) \left(\delta u^2 + \delta v^2 + R_{Luft} T_r (\delta \ln \pi)^2 + \frac{c_p}{T_r} \delta \mathcal{T}^2 \right) \quad (3.2)$$

Der Zonalwind u und der Meridionalwind v berechnen sich aus Vorticity und Divergenz; R_{Luft} ist die Gaskonstante für trockene Luft ($287.0 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$), c_p die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck ($1004 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$) und T_r eine Referenztemperatur, deren Wert zu 250 K gewählt wird.

Lanczosalgorithmus und Eigensystem: Die Matrix A^*A ist durch das tangent-lineare und das adjungierte Modell nicht explizit gegeben. Die entsprechenden Programme verhalten sich wie ein reeller, symmetrischer Matrixoperator; der Zugriff auf einzelne Einträge ist jedoch nur indirekt möglich. Um dennoch das Eigensystem dieser verknüpften Operatoren berechnen zu können, wird der Lanczosalgorithmus (Lanczos 1950), vgl. auch Opfer 1994 und Golub und van Loan 1983) in einer modifizierten Form von (Parlett und Scott 1979) verwandt, bei der die Bestimmung des Eigensystems Teil des Algorithmus ist. Die damit gewonnenen Ergebnisse sind denen der im Folgenden dargestellten Version in ihrer Genauigkeit und Robustheit überlegen. In seiner einfachsten Form berechnet der Algorithmus iterativ eine Folge von tridiagonalen Matrizen T_j , $j = 1, 2, \dots, n$ aus einem reellen, symmetrischen Operator B , deren extreme Eigenwerte die des Operators approximieren. Der Rang der Tridiagonalmatrizen wächst mit jedem Iterationsschritt. Gleichzeitig werden die Spalten q_j einer orthogonalen Matrix Q berechnet, für die gilt:

$$Q^T B Q = T_n \quad (3.3)$$

$$\Leftrightarrow B Q = Q T_n \quad (3.4)$$

Es sei

$$T_n = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ 0 & \cdots & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Aus Gleichung (3.3) folgt durch beidseitige Multiplikation mit dem j -ten Einheitsvektor

$$\alpha_j = q_j^T B q_j, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (3.6)$$

Aus dem Vergleich der j -ten Spalten von Gleichung (3.4) folgt

$$\begin{aligned} B q_j &= \beta_{j-1} q_{j-1} + \alpha_j q_j + \beta_j q_{j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, n \text{ mit} \\ \beta_0 q_0 &= \beta_n q_{n+1} = 0. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Sei

$$r_j := (B - \alpha_j I) q_j - \beta_{j-1} q_{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (3.8)$$

so läßt sich Gleichung (3.7) in der einfacheren Form $r_j = \beta_j q_{j+1}$, $j = 1, 2, \dots, n$, $r_n = 0$ schreiben. Da Q orthogonal ist, haben die q_j die Länge Eins und es folgt $\|r_j\|_2 = \beta_j$ ($\|\cdot\|_2$ sei die euklidische Norm). Dies gestattet die Wahl

$$\beta_j = \|r_j\|_2. \quad (3.9)$$

Durch Auflösen von Gleichung (3.7) nach q_{j+1} ergibt sich die Iterationsformel

$$q_{j+1} = \frac{r_j}{\beta_j} \text{ für } \beta_j \neq 0, j = 1, 2, \dots, n-1. \quad (3.10)$$

Die einfachste Form des Algorithmus ist damit beschrieben:

- Initialisierung:

- q_1 beliebig mit $\|q_1\|_2 = 1$,
- α_1 nach Gleichung (3.6),
- $r_1 = (B - \alpha_1 I) q_1$,
- $\beta_1 = \|r_1\|_2$.

- Iteration:

- $q_{j+1} = r_j / \beta_j$,
- α_{j+1} nach Gleichung (3.6),
- r_{j+1} nach Gleichung (3.8),
- β_{j+1} nach Gleichung (3.9).

Der Algorithmus approximiert die extremen Eigenwerte schon nach wenigen Iterationen, reagiert jedoch sensibel auf den Startvektor q_1 .

Rücktransformation: Das Eigensystem der gewonnenen Tridiagonalmatrix T_j ist leicht zu bestimmen und durch Multiplikation mit der Matrix Q auf das System von $B = A^*A$ zurückzuführen, da gilt:

$$\begin{aligned} T_j x_i &= \lambda x_i \\ \Rightarrow Q T_j x_i &= Q \lambda x_i \\ \stackrel{(3.4)}{\Leftrightarrow} B(Q x_i) &= \lambda_i(Q x_i). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Bei der Berechnung der Wachstumsraten σ_i^2 nach Gleichung (2.27) müssen die Eigenwerte λ_i von T_j gemäß

$$\sigma_i^2 = \lambda_i \frac{\langle x_i, x_i \rangle}{\langle x_i, M x_i \rangle} \quad (3.12)$$

umgerechnet werden, wobei x_i der zu λ_i gehörige Eigenvektor von A^*A ist, um dem Wechsel des Skalarproduktes Rechnung zu tragen. Der Vektor x_i mit der größten Wachstumsrate σ_i^2 stellt die optimale Störung des tangential-linearen Operators A dar.

3.2 Struktur der optimalen Störungen

Die so berechneten optimalen Störungen bilden Paare. Durch die zonale Periodizität haben jeweils die um 90 Grad in der Phase verschobenen Muster die gleiche Wachstumsrate. Die hemisphärensymmetrische Störungen haben eine geringfügig andere Wachstumsrate als ihre hemisphärisch antisymmetrischen Entsprechungen. Die anderen anwachsenden Störungen mit den kleineren Wachstumsraten zeigen nahezu dieselbe Struktur, jedoch mit unterschiedlicher zonaler Wellenzahl. Diese Ordnung ist eine direkte Folge der Symmetrie des Grundzustandes. Es wird im folgenden jeweils die optimale Störung über 1, 12, 24 und 36 Zeitschritte behandelt (Abbildungen 3.2 bis 3.5). Wegen der hemisphärischen Symmetrie werden jeweils nur Zonal- und Meridionalschnitte auf der Nordhalbkugel gezeigt; die Zonalschnitte sind zudem wegen der Zonalsymmetrie auf das Intervall 0°E bis 60°E begrenzt. Aufgrund des approximativen Charakters des verwendeten Algorithmus treten insbesondere von der hemisphärischen Symmetrie Abweichungen auf. Diese sind jedoch auf die Amplitude beschränkt.

Die optimale Störung über einen Zeitschritt (Abb. 3.2) hat die zonale Wellenzahl Elf. Sie ist durch ihre geringe Amplitude in den untersten drei Modellflächen gekennzeichnet. Fast alle Störungsgrößen haben ihre Maxima nahe dem Maximum des Jets bei 45°N in den obersten beiden Modellschichten. Wegen der geringen

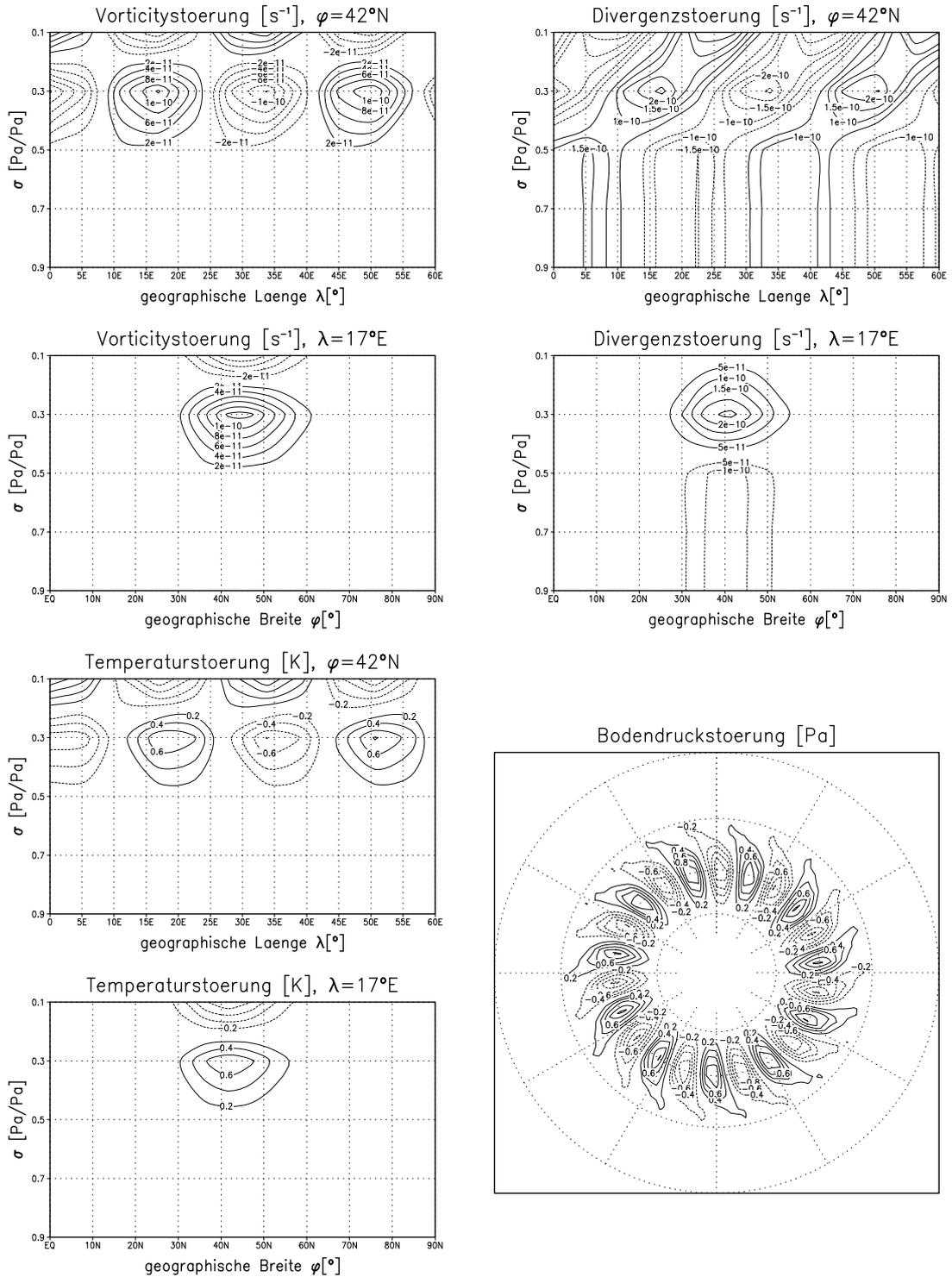


Abbildung 3.2: Optimale Störung über einen Zeitschritt (entspr. 1 h) mit $\sigma^2 = 1, 12$. Vorticity, Divergenz und Temperatur jeweils als Zonal- und Meridionalschnitte, sowie Bodendruck in polarstereographischer Projektion. Negative Konturen gestrichelt.

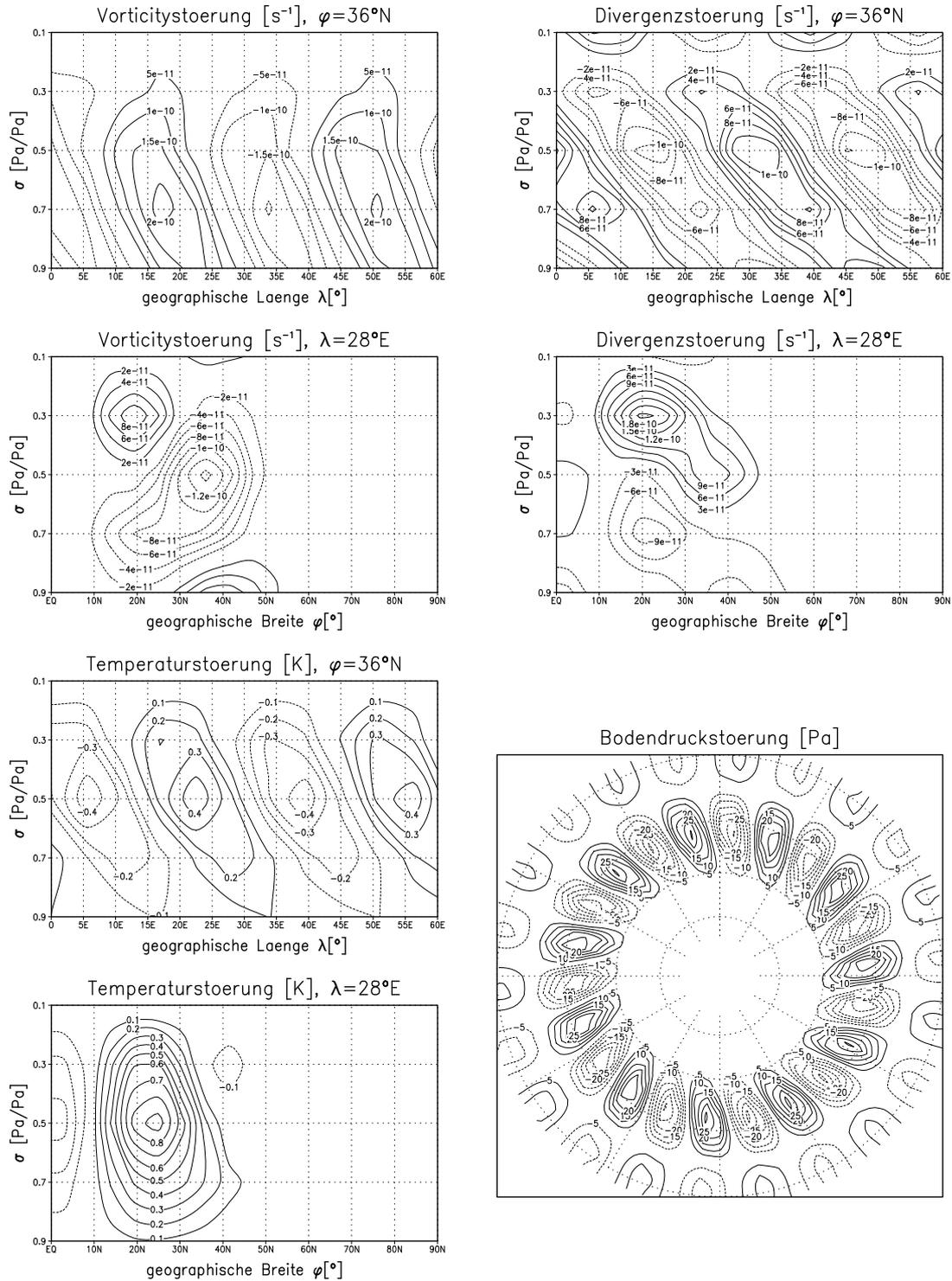


Abbildung 3.3: Optimale Störung über zwölf Zeitschritte (entspr. 12 h) mit $\sigma^2 = 14, 8$. Vorticity, Divergenz und Temperatur jeweils als Zonal- und Meridionalschnitte, sowie Bodendruck in polarstereographischer Projektion. Negative Konturen gestrichelt.

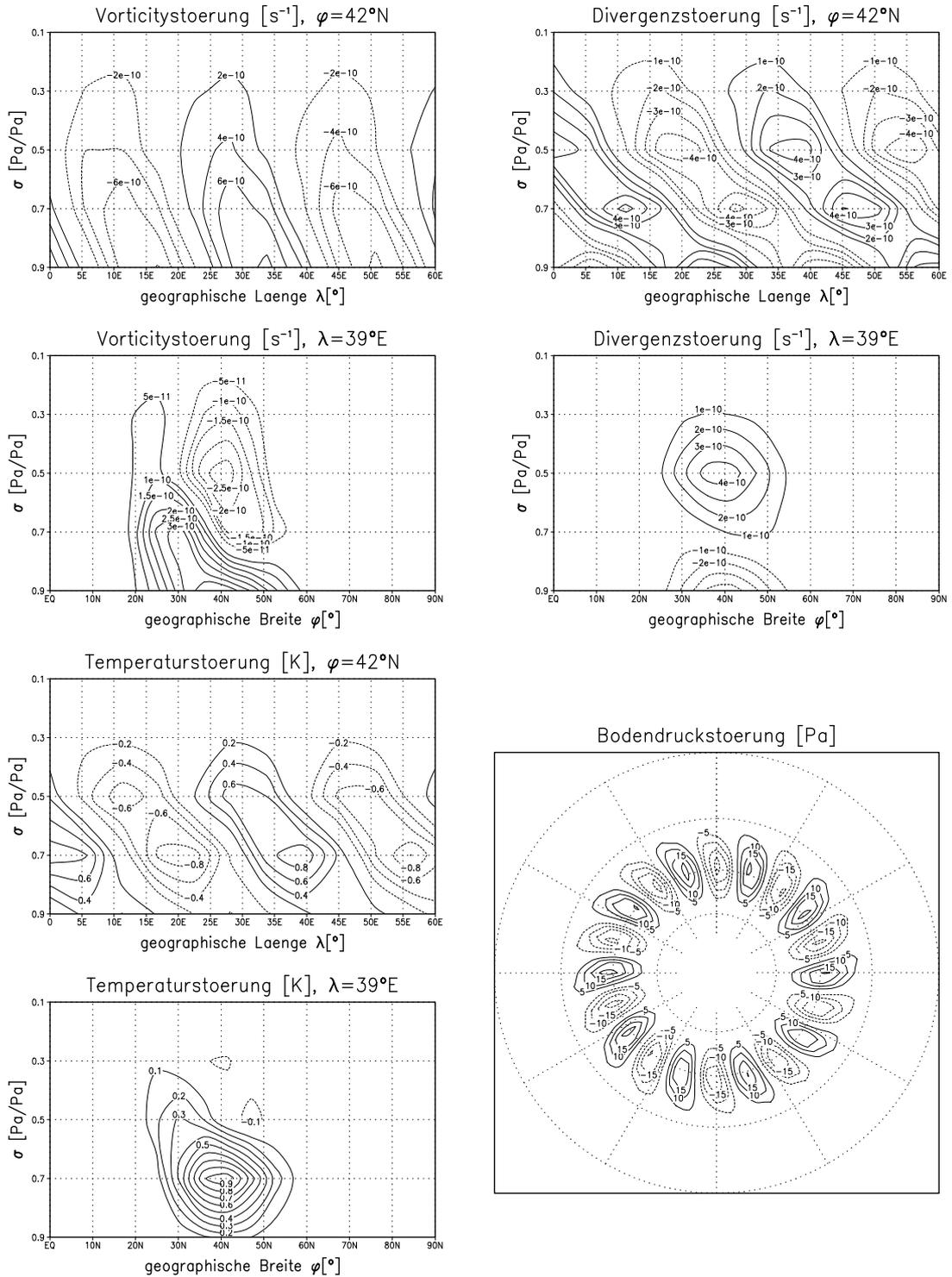


Abbildung 3.4: Optimale Störung über 24 Zeitschritte (entspr. 24 h) mit $\sigma^2 = 37,5$. Vorticity, Divergenz und Temperatur jeweils als Zonal- und Meridionalschnitte, sowie Bodendruck in polarstereographischer Projektion. Negative Konturen gestrichelt.

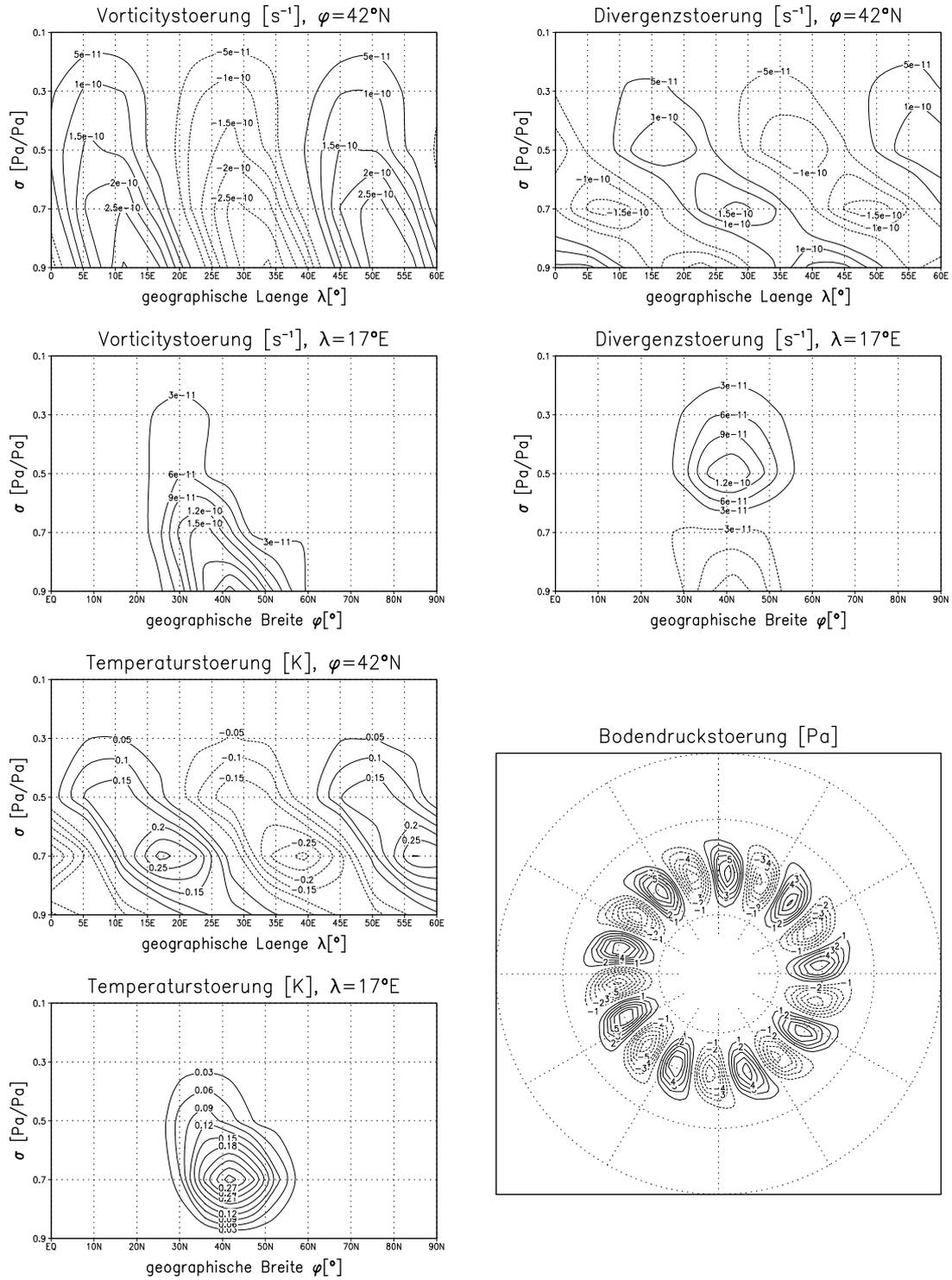


Abbildung 3.5: Optimale Störung über 36 Zeitschritte (entspr. 36 h) mit $\sigma^2 = 158$. Vorticity, Divergenz und Temperatur jeweils als Zonal- und Meridionalschnitte, sowie Bodendruck in polarstereographischer Projektion. Negative Konturen gestrichelt.

vertikalen Auflösung ist nicht zu entscheiden, in welche Richtung die Temperaturstörung geneigt ist; sie ist in den übereinanderliegenden Modellschichten um 180° Phasenverschoben. Die Störungen des Windfeldes wie auch die des Bodendruckes sind sehr klein. Die Bodendruckstörungen zeigen eine leichte NW-SE-Neigung. Vorticity- und Divergenzstörung sind von etwa gleicher Größenordnung, so daß die Ausbreitung von Schwerewellen zu erwarten ist. Dies gilt auch für die anderen drei untersuchten Fälle

Für maximales Wachstum über zwölf Stunden ergibt sich die in Abbildung 3.3 gezeigte Störung. Die Maxima der Temperatur- und der Divergenzstörung befinden sich in der mittleren Modellschicht am äquatorwärtigen Rand des Jets; sie zeigen eine deutliche Westwärtsneigung mit der Höhe. Die Maxima der Vorticitystörungen befinden sich in der dazu benachbarten zweituntersten Modellschicht. Auch sie ist mit der Höhe gegen den Grundstrom geneigt. Die Bodendruckstörung ist wie oben leicht NW-SE-wärts geneigt und hat ihr Maximum ebenfalls am äquatorseitigen Rand des Jet. Am Äquator selber tritt eine gegenpolige Struktur mit gleicher zonaler Wellenzahl aber deutlich geringerer Amplitude auf. Die optimalen Störungen über 24 und 36 Stunden (Abb. 3.4 und 3.5) zeigen große Ähnlichkeit. Wichtigster Unterschied ist die zonale Wellenzahl: Für den ersten Fall ist sie Zehn, für den anderen Neun. Die Maxima der Temperatur- und der Divergenzstörung liegen in der zweituntersten Modellschicht. Deutlich ist eine Westwärtsneigung und eine schwächere Südwärtsneigung der Temperaturstörung mit der Höhe zu sehen. Die Divergenzstörung ist in zonaler Richtung ebenso geneigt, wie die Temperaturstörung. Das Maximum der Vorticitystörung befindet sich in der untersten Modellschicht; ihre vertikale Neigung ist geringer als die der anderen Felder. Die Bodendruckstörung ist wie in den anderen Fällen leicht NW-SE-wärts ausgerichtet.

3.3 Wachstum der optimalen Störung

Zur Untersuchung der durch die optimale Störung ausgelösten dynamischen Entwicklung wird ein Modellauf über 96 Zeitschritte (entspricht vier Tagen) mit gestörtem Grundstrom durchgeführt. Die Amplitude der Störung wird dabei so gewählt, wie in den Abbildungen 3.2 bis 3.5 gezeigt, d.h. mit einer auf einer auf 1 K renormierten maximalen Temperaturstörung (die maximale Bodendruckstörung ist dabei kleiner als 1 hPa).

Das Wachstum bezüglich der gewählten totale Energienorm ist in den Abbildungen 3.6 und 3.7 sowohl für die Entwicklung im tangent-linearen Modell als auch im PUMA dargestellt. Diese ist jeweils maximal für den geforderten Zeitpunkt, und zwar sowohl im tangent-linearen wie im nichtlinearen Modell. Im Fall der optimalen Störung über zwölf und eine Stunden ist deutlich zu sehen, daß das anfängliche dominierende Wachstum auf Kosten der späteren Entwicklung geschieht.

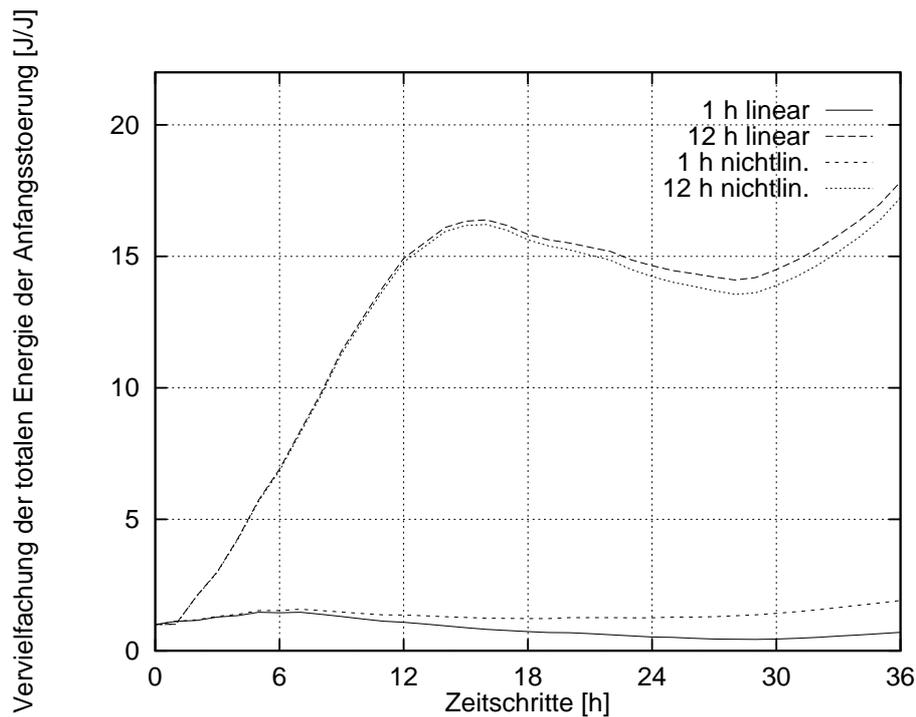


Abbildung 3.6: Entwicklung der über eine und zwölf Stunden optimalen Störungen im tangent-linearen und im nichtlinearen Modell. Dargestellt ist das Verhältnis der totalen Energienorm (Gleichung (3.2)) zur totalen Energie der Anfangsstörung.

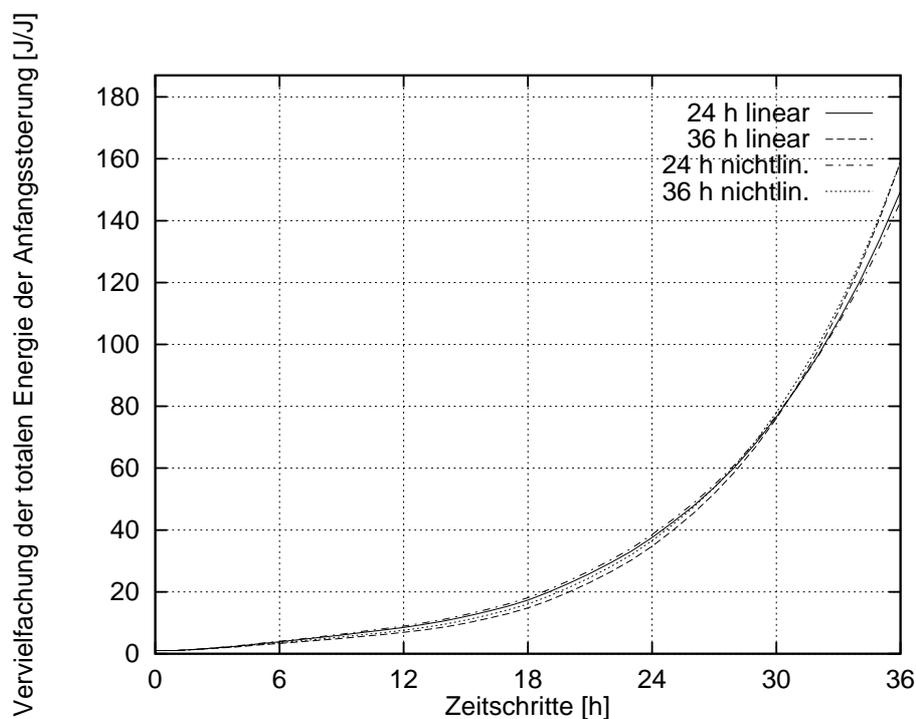


Abbildung 3.7: Entwicklung der über 24 h und 36 h optimalen Störungen im tangent-linearen und im nichtlinearen Modell. Dargestellt ist das Verhältnis der totalen Energienorm (Gleichung (3.2)) zur totalen Energie der Anfangsstörung.

Bodendruck: Das Hovmöllerdiagramm des Bodendruckes bei 47°N in Abbildung 3.8 zeigt, daß die erste Entwicklung zunächst über drei Zeitschritte stationär ist, die Störung dann nahezu verschwindet, um dann sehr schnell mit einer Geschwindigkeit von etwa 120 ms^{-1} ostwärts zu wandern. Schließlich verändert die Störung ihre Struktur soweit, daß die Entwicklung einer regelmäßigen Welle ausgelöst wird, die sich mit einer Geschwindigkeit von etwa 16 ms^{-1} ostwärts verlagert (zonale Windgeschwindigkeit der mittleren Modellschicht ca. 37 ms^{-1} , mittlerer Massentransport ca. 34 ms^{-1}). Das Courant-Friedrich-Lewy(CFL)-Kriterium ergibt eine maximale im Modell darstellbare Geschwindigkeit von ca. 118 ms^{-1} ($\Delta x/\Delta t$) bei 47°N . Es ist eher zweifelhaft, ob die anfängliche Entwicklung eine physikalische Entsprechung hat. Die hohe Geschwindigkeit und die Vorzeichenänderungen innerhalb eines Zeitschrittes bei $t = 6\text{ h}$ und $t = 15\text{ h}$ deuten auf einen numerischen Artefakt hin. Im Bereich der schnellen Ostwärtsverlagerung treten $2\Delta t$ -Wellen auf, die eine typische Erscheinung im Zusammenhang mit dem numerischen leap-frog-Verfahren sind. Ab $t = 15$ ist die Periode jedoch $3\Delta t$ und diese Störung wird allmählich herausgedämpft. Die Entwicklung der horizontalen Struktur im Bereich der ersten 20 Zeitschritte ist geprägt von instantanen unsystematischen Änderungen in Form und meridionaler Ausdehnung. Das Hovmöllerdiagramm für die über zwölf Stunden optimale Störung (Abb. 3.9) zeigt ein ähnliches Verhalten. Nach den ersten drei Zeitschritten ohne Wanderung der Bodendruckstörung bewegt sich die Störung mit ca. 100 ms^{-1} ostwärts. Zu den Zeitschritten 8, 10 und 12 scheint eine um 180° Phasenverschobene Welle aufzutreten, die allerdings nicht von einer Welle zu unterscheiden ist, die sich mit der nach dem CFL-Kriterium maximal möglichen Geschwindigkeit bewegt. Auch in diesem Fall zeigt das Bodendruckfeld in den ersten 20 Stunden sprunghafte Veränderungen von Zeitschritt zu Zeitschritt, bis sich schließlich eine gebogene nach WNW geöffnete Form einstellt, die mit etwa 16 ms^{-1} bzw. ostwärts wandert.

Für die optimalen Störungen über 24 und 36 Stunden stellt sich die Entwicklung deutlich geordneter dar. Das Wachstum einer baroklinen Welle beginnt bereits innerhalb des Zeitraumes des optimalen Wachstums. In beiden Fällen bewegt sich eine Störung innerhalb der ersten sechs Zeitschritte ostwärts, klingt dann aber ab, während luvseitig die Entwicklung der baroklinen Welle einsetzt. Diese ist zunächst noch von schwachen Oszillationen überlagert, die dann aber wie in den obigen Fällen dissipieren.

Flüsse: In der Abbildung 3.12 sind die Verteilung der kinetischen Energie der Störung sowie vertikaler und horizontaler Impuls- und Wärmefluß als zonale Mittel für die Nordhalbkugel aufgetragen. Betrachtet werden die optimale Störung über 24 Stunden sowie die über 36 Stunden, jeweils gemittelt über diesen Zeitraum. Bei der Verteilung der kinetischen Energie reproduzieren beide die von Simmons und Hoskins (1978) in einem Experiment mit ähnlichem Grundstrom

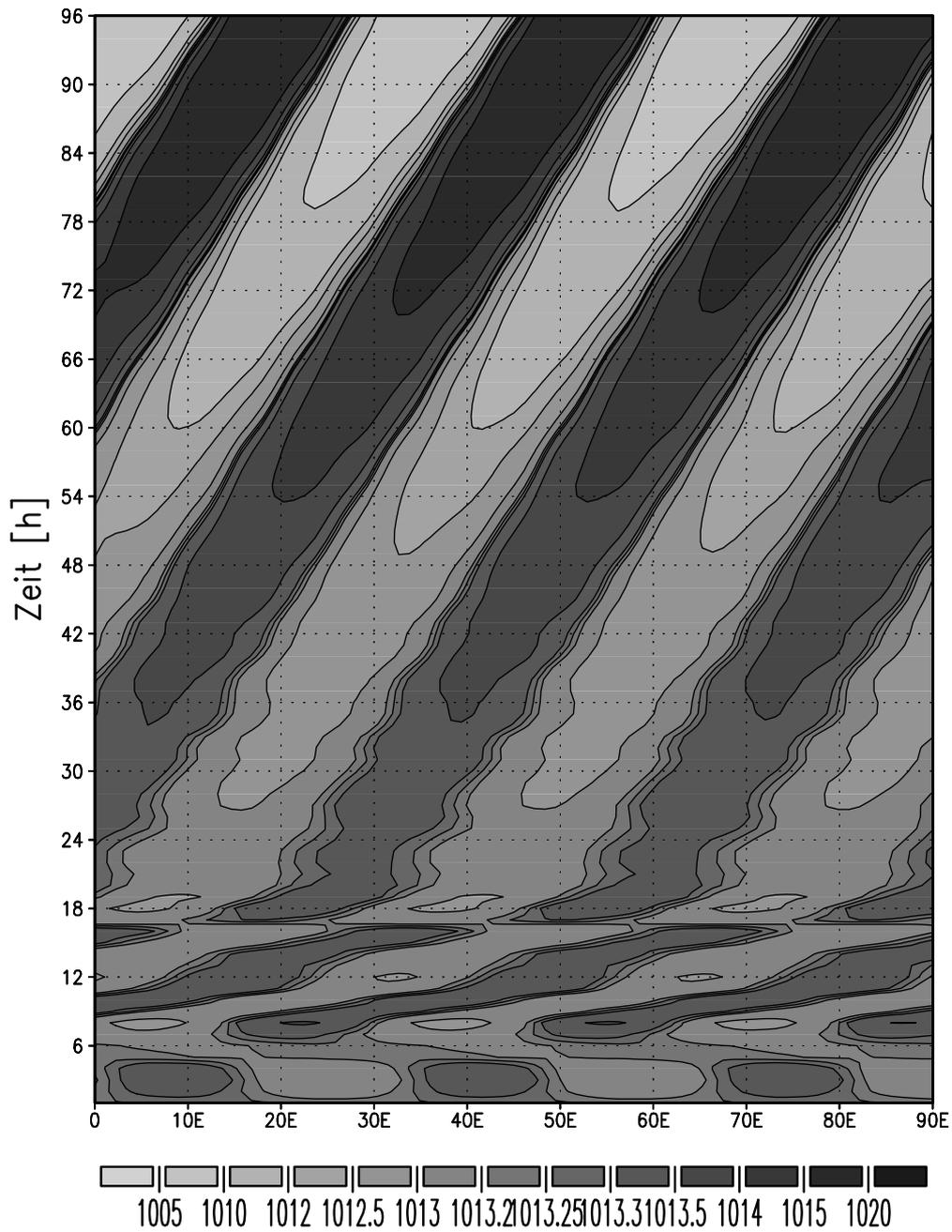


Abbildung 3.8: Hovmöllerdiagramm des Bodendruckes in [hPa] bei 47°N bei Störung mit der optimalen Störung über eine Stunde. Isolinien nicht äquidistant.

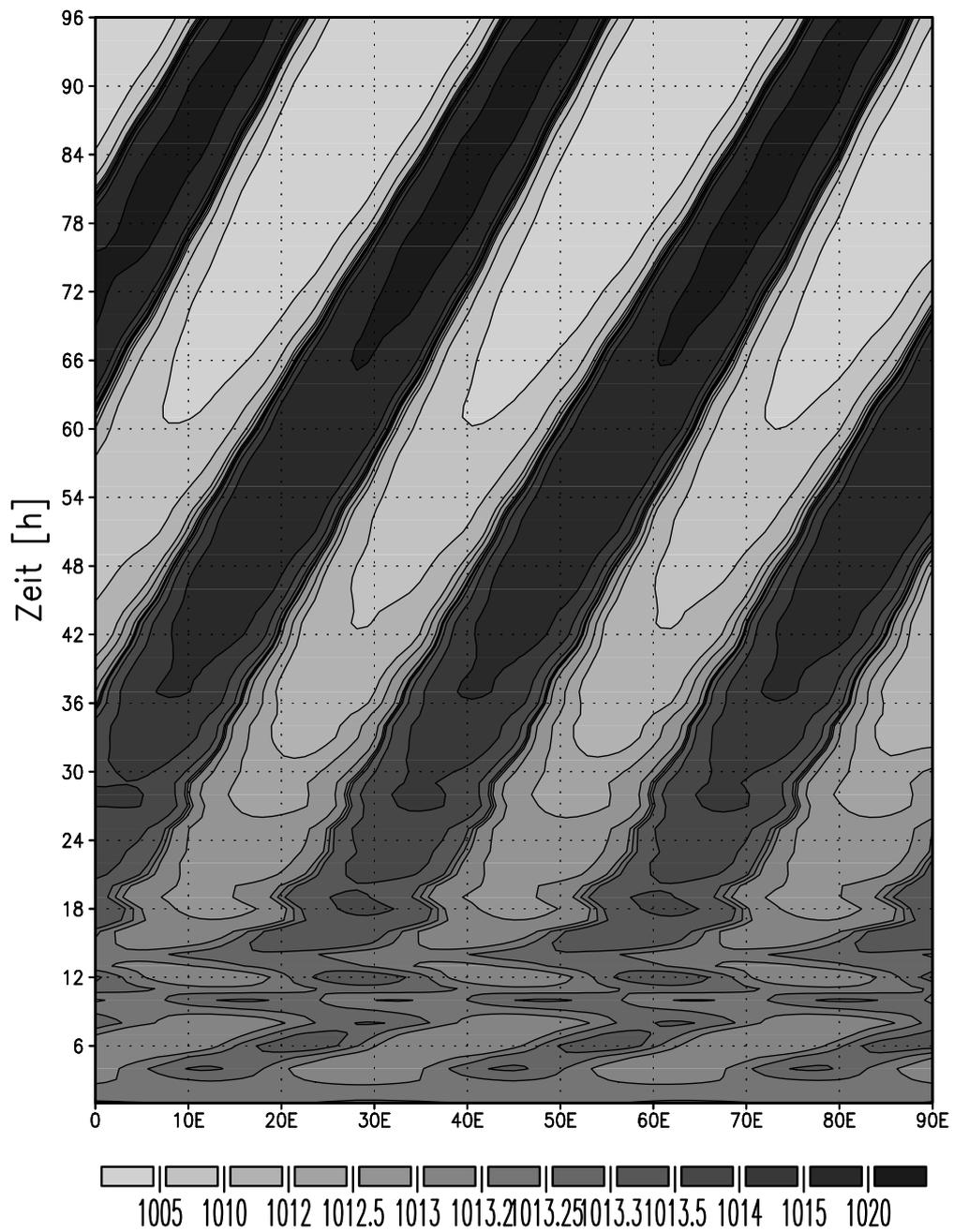


Abbildung 3.9: Hovmöllerdiagramm des Bodendruckes in [hPa] bei 47°N bei Störung mit der optimalen Störung über zwölf Stunden. Isolinien nicht äquidistant.

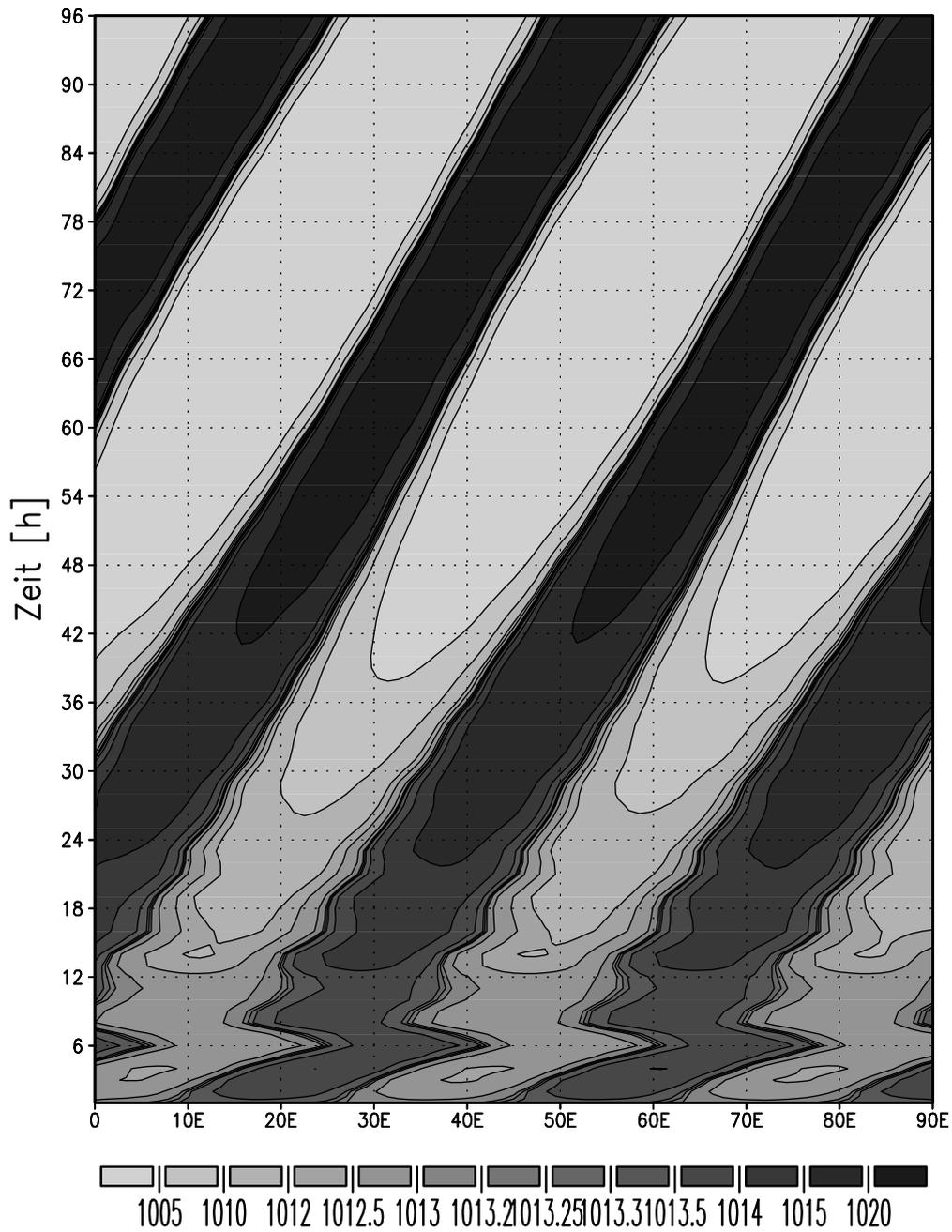


Abbildung 3.10: Hovmöllerdiagramm des Bodendruckes in [hPa] bei 47°N bei Störung mit der optimalen Störung über 24 Stunden. Isolinien nicht äquidistant.

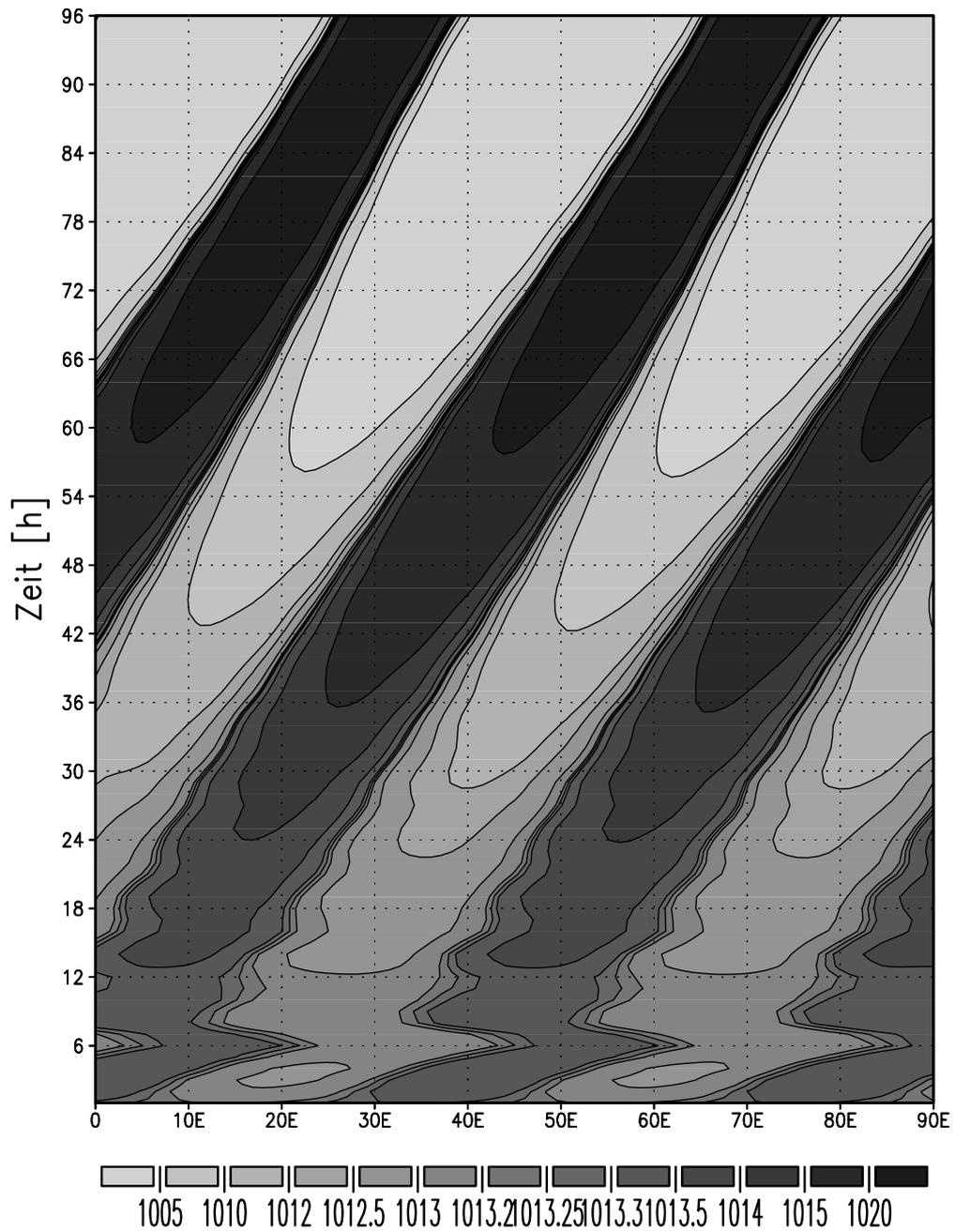


Abbildung 3.11: Hovmöllerdiagramm des Bodendruckes in [hPa] bei 47°N bei Störung mit der optimalen Störung über 36 Stunden. Isolinien nicht äquidistant.

und normalen Moden als Störungen gefundenen Verteilung. Sie verwenden dazu ein Vorläufermodell des PUMA mit einer Auflösung von T42 und 14 Schichten in der Vertikalen. Das Maximum ist bei 300 hPa nahe dem Zentrum des Jets, während sich am Boden etwas äquatorwärts von ersten ein schwächeres lokales Maximum befindet. Durch die unterschiedlichen Mittelungszeiten und Wellenzahlen ist der Vergleich allerdings nur bedingt aussagekräftig. Der vertikale Impulsfluß ist in der Untersuchung der Wellenzahl-Sechs-Störung von Simmons und Hoskins im Gegensatz zum hier betrachteten Fall aufwärts und polwärts gerichtet. Für die Wellenzahl Neun finden sie allerdings in Übereinstimmung mit den hier präsentierten Ergebnissen äquatorwärtigen Impulsfluß. Die Richtung der Wärme Flüsse der normalen Mode Sechs ist aufwärts und polwärts und gleicht damit den optimalen Störungen. Allerdings verschwindet der vertikale Wärme fluß der optimalen Störungen nicht am Boden, was eine Folge der geringen Auflösung von nur fünf Schichten sein mag. Im Vergleich untereinander zeigt sich, daß sowohl horizontaler Impuls- als auch Wärme fluß der optimalen Störung über 24 Stunden neben dem Bodenmaximum noch ein zweites lokales Maximum in der mittleren Modellschicht aufweisen, das bei der optimalen Störung über 36 Stunden nicht auftritt. Die durchgehend kleineren Amplituden der optimalen Störung über 36 Stunden sind Resultat der durch den Algorithmus bedingten hemisphärischen Asymmetrie und nicht meteorologisch zu interpretieren.

Energetik: In Abbildung 3.13 ist die Entwicklung der Energie der dominanten zonalen Wellenzahl Elf für die optimale Störung über einen Zeitschritt dargestellt. Dabei werden für die verschiedenen Energieterme die Definitionen nach Ulbrich und Speth (1991) verwendet. Das Anwachsen der totalen Energie im ersten Zeitschritt ist deutlich sichtbar, in den folgenden sechs Zeitschritten wird verfügbare potentielle Energie der Störung in kinetische Energie der Störung umgewandelt, wodurch kein weiteres Wachstum entsteht. Die Störung verliert danach an Energie.

Abbildung 3.14 zeigt die entsprechende Darstellung für die optimale Störung über 12 Stunden. Diese verliert im ersten Zeitschritt sogar an Energie, wächst dann aber an, wobei ständig verfügbare potentielle Energie der Störung in kinetische Energie der Störung umgewandelt wird; diese geht zum Teil wieder an den Grundstrom verloren, wächst aber insgesamt an. Nach etwa 15 Stunden schwächt sich das Wachstum ab.

Die Abbildungen 3.15 und 3.16 zeigen die Entwicklung der Energieterme der dominanten Wellenzahl Zehn bzw. Neun für die optimale Störung über 24 bzw. 36 Stunden. Die Entwicklung steigert sich in beiden Fällen monoton; der Grundstrom speist sowohl die kinetische als auch die verfügbare potentielle Energie der Störung, die ihrerseits in kinetische Energie der Störung umgewandelt wird. Nach 36 Stunden erreicht die optimale Störung über 36 Stunden einen Wert von $KT+AT$ von lediglich $0,77 \text{ Jm}^{-2}\text{Pa}^{-1}$, während die optimale Störung über 24 Stunden bereits einen Wert von $1,1 \text{ Jm}^{-2}\text{Pa}^{-1}$ erreicht hat. Der maximale Wert

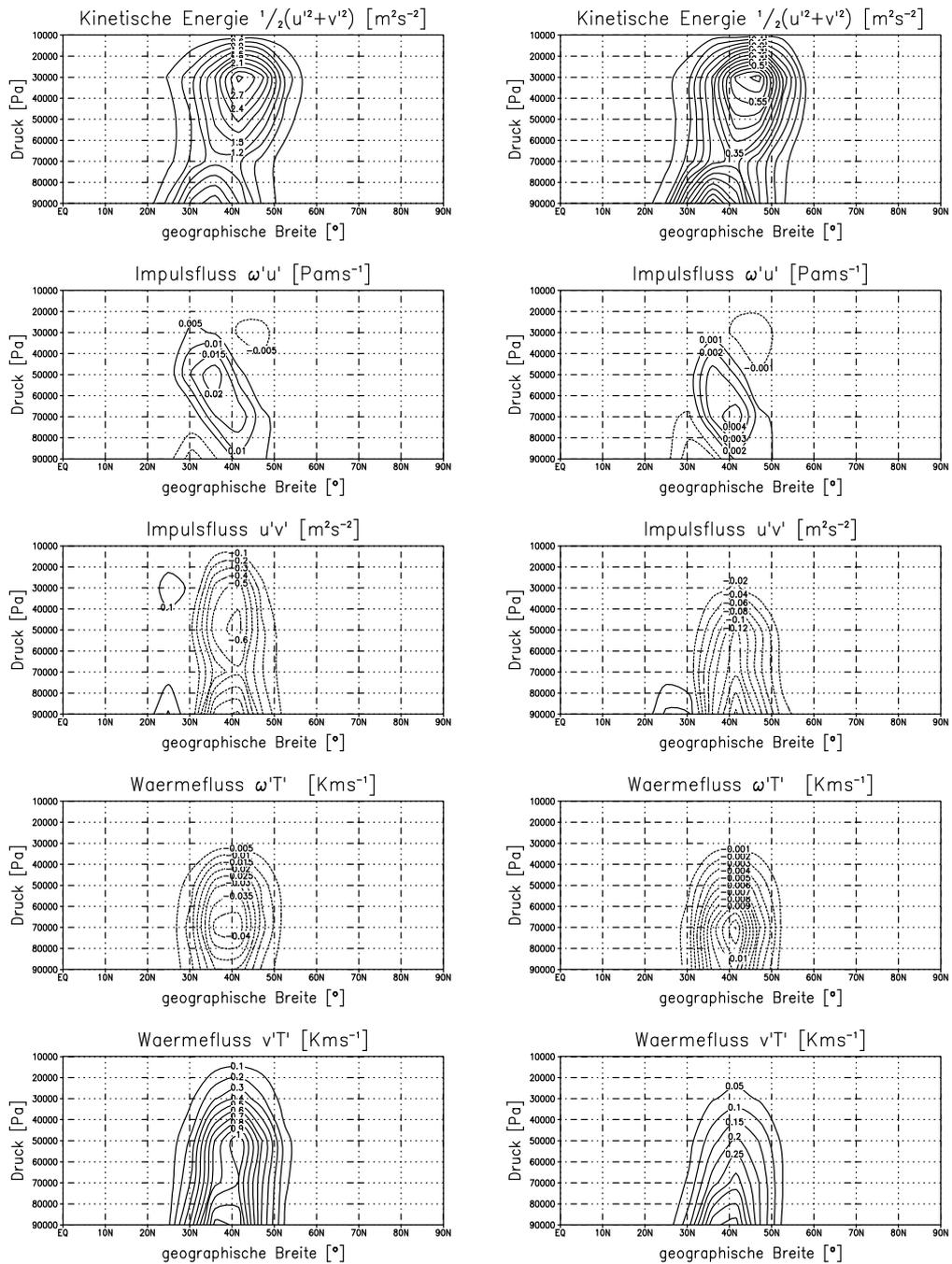


Abbildung 3.12: Zonal gemittelte Flußgrößen für die optimale Störung über 24 bzw. 36 Zeitschritte. In der linken Spalte für die optimale Störung über 24 Stunden, rechts über 36 Stunden.

von $AT+KT$ während der Entwicklung beträgt allerdings $10,8 \text{ JK}^{-1}$ für die optimale Störung über 36 Stunden und wird später erreicht als der für die über 24 Stunden ($7,3 \text{ Jm}^{-2}\text{Pa}^{-1}$), so daß trotz der anderen Bewertung durch die Berechnung der totalen Energie der Störung nach Ulbrich und Speth die Charakteristik einer langsameren aber kräftigeren Entwicklung der Störung mit der Wellenzahl Neun deutlich wird.

3.4 Folgerungen

Die gefundenen Störungen über 24 und 36 Stunden lösen innerhalb dieser Zeit gezielt barokline Wellen aus, deren Eigenschaften bezüglich der Impuls und Wärme-flüsse Übereinstimmung mit den von Simmons und Hoskins (1978) beschriebenen wachsenden normalen Moden zeigen. Maximales Wachstum über kürzere Zeit scheint im Modell mit der Entwicklung von Schwerewellen und barotropen Störungen einherzugehen. Durch die hohe Ausbreitungsgeschwindigkeit mancher der auftretenden Wellenphänomene ist es nicht ausgeschlossen, daß die Numerik des Modells Einfluß auf die Art und Struktur der optimalen Störungen über kurze Zeit nimmt, so daß sie zwar innerhalb der numerischen Modellierung ein korrektes Ergebnis darstellen, im Rahmen der physikalischen Modellierung aber fehlerhaft sind. Experimente mit variiertem Modellzeitschritt könnten helfen, den Effekt genauer abzuschätzen.

Die optimalen Störungen über 24 und 36 Stunden zeigen bereits gewisse Ähnlichkeit mit den von Simmons und Hoskins (1978) für einen vergleichbaren Grundstrom untersuchten normalen Moden. Detailliertere Betrachtungen der Unterschiede wären wünschenswert, überschreiten jedoch den Rahmen dieser Arbeit.

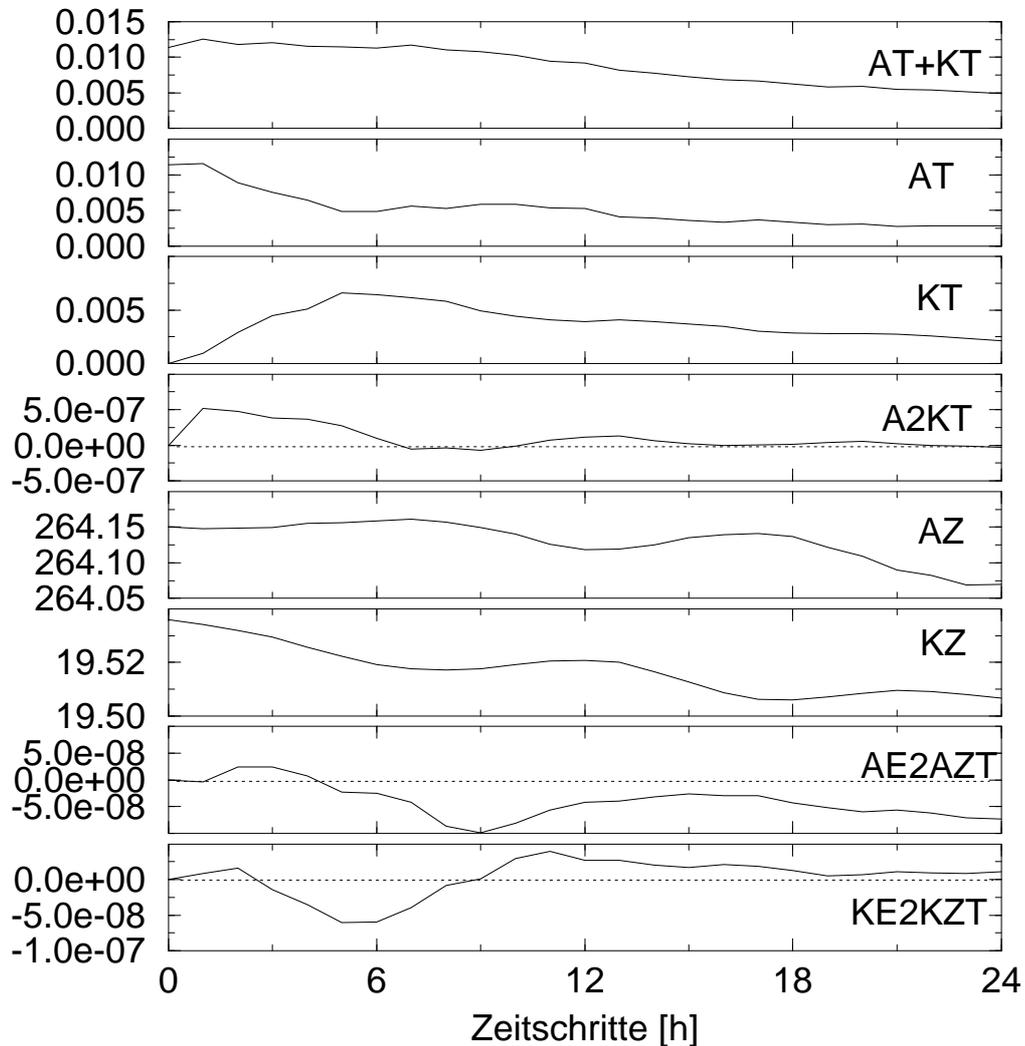


Abbildung 3.13: Entwicklung der Energierme der dominanten zonalen Wellenzahl Elf in $\text{Jm}^{-2}\text{Pa}^{-1}$ bzw. Wm^{-2} (Umwandlungsterme) bei Störung des Grundzustandes mit der optimalen Störung über einen Zeitschritt. Die Terme AZ und KZ beziehen sich auf die zonale Wellenzahl Null. Ein Modellzeitschritt entspricht einer Stunde. Die Diagramme zeigen im einzelnen: AT+KT: Summe aus transienter verfügbarer potentieller Energie und transienter kinetischer Energie, AT: transiente verfügbare potentielle Energie, KT: transiente kinetische Energie, A2KT: Umwandlung von AT in KT, AZ: zonal verfügbare potentielle Energie, KZ: zonale kinetische Energie, AE2AZT: Umwandlung verfügbarer potentielle Energie der Störung in zonal verfügbare transiente Energie, KE2KZT: Umwandlung von kinetischer Energie der Störung in zonale kinetische Energie.

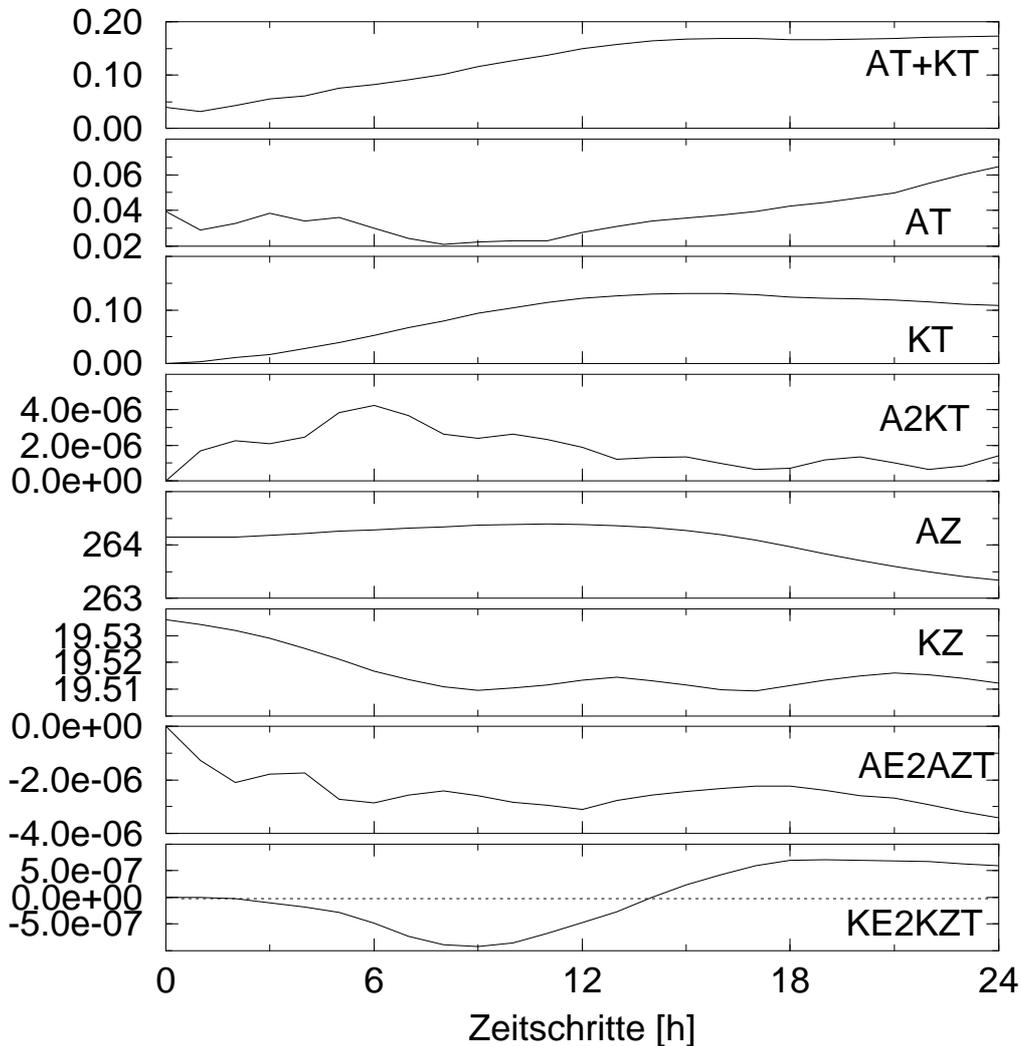


Abbildung 3.14: Entwicklung der Energierterme der dominanten zonalen Wellenzahl Elf in $\text{Jm}^{-2}\text{Pa}^{-1}$ bzw. Wm^{-2} (Umwandlungsterme) bei Störung des Grundzustandes mit der optimalen Störung über zwölf Zeitschritte. Die Terme AZ und KZ beziehen sich auf die zonale Wellenzahl Null. Ein Modellzeitschritt entspricht einer Stunde. Die Diagramme zeigen im einzelnen: AT+KT: Summe aus transienter verfügbarer potentieller Energie und transienter kinetischer Energie, AT: transiente verfügbare potentielle Energie, KT: transiente kinetische Energie, A2KT: Umwandlung von AT in KT, AZ: zonal verfügbare potentielle Energie, KZ: zonale kinetische Energie, AE2AZT: Umwandlung verfügbarer potentielle Energie der Störung in zonal verfügbare transiente Energie, KE2KZT: Umwandlung von kinetischer Energie der Störung in zonale kinetische Energie.

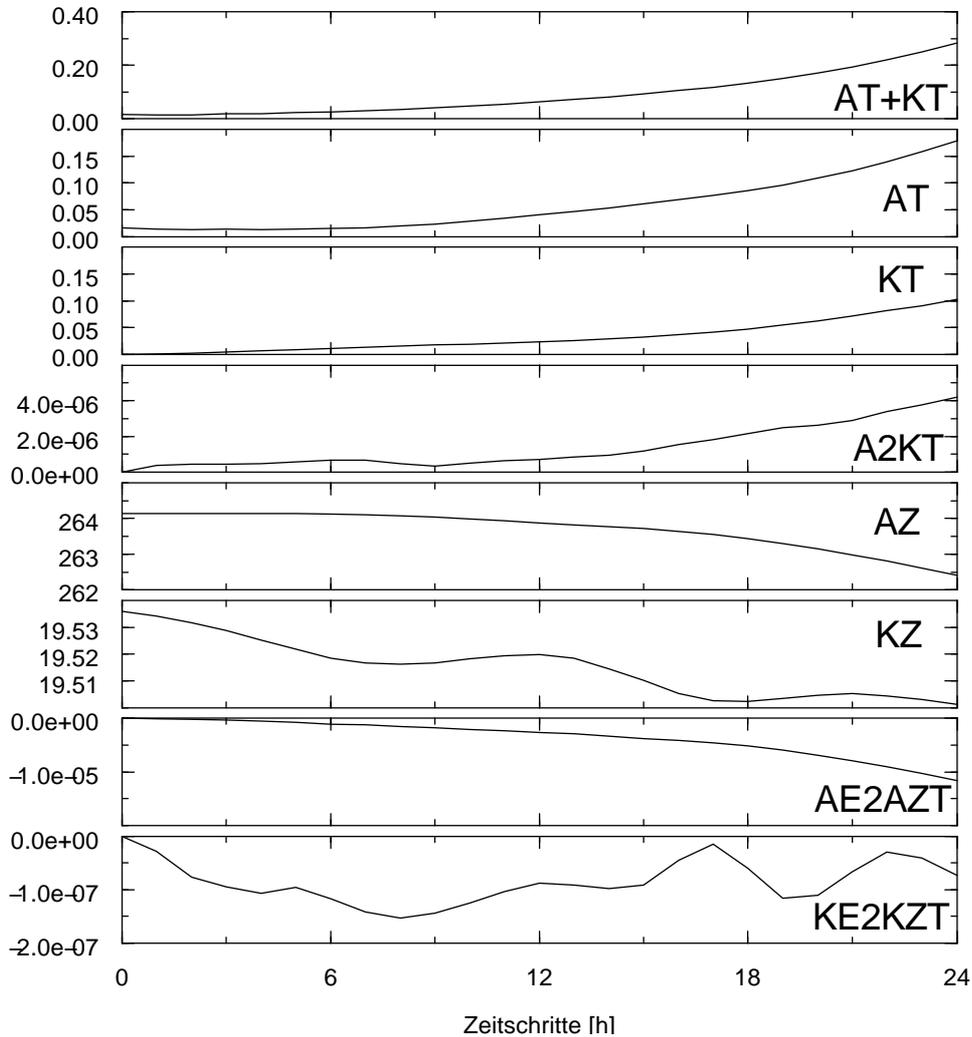


Abbildung 3.15: Entwicklung der Energierterme der dominanten zonalen Wellenzahl Zehn in $\text{Jm}^{-2}\text{Pa}^{-1}$ bzw. Wm^{-2} (Umwandlungsterme) bei Störung des Grundzustandes mit der optimalen Störung über 24 Zeitschritte. Die Terme AZ und KZ beziehen sich auf die zonale Wellenzahl Null. Ein Modellzeitschritt entspricht einer Stunde. Die Diagramme zeigen im einzelnen: AT+KT: Summe aus transienter verfügbarer potentieller Energie und transienter kinetischer Energie, AT: transiente verfügbare potentielle Energie, KT: transiente kinetische Energie, A2KT: Umwandlung von AT in KT, AZ: zonal verfügbare potentielle Energie, KZ: zonale kinetische Energie, AE2AZT: Umwandlung verfügbarer potentielle Energie der Störung in zonal verfügbare transiente Energie, KE2KZT: Umwandlung von kinetischer Energie der Störung in zonale kinetische Energie.

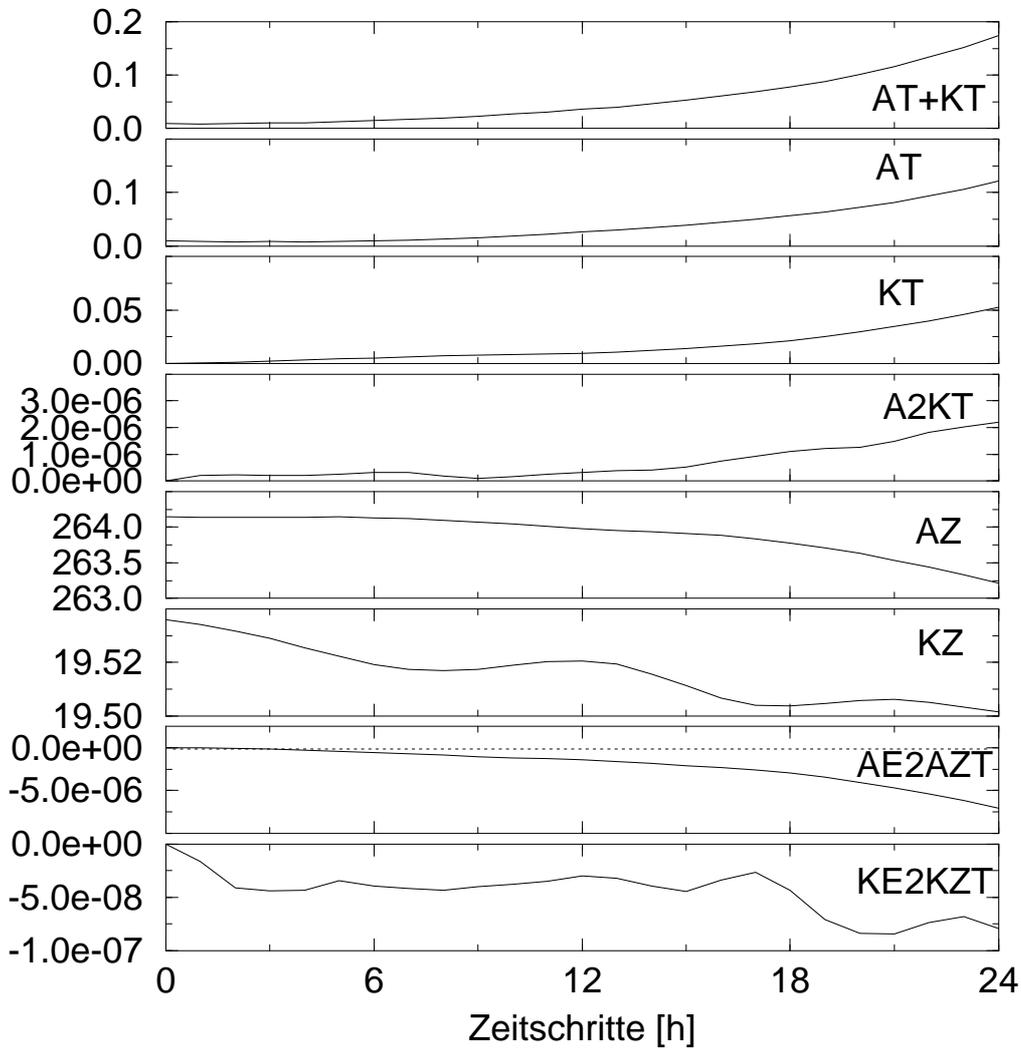


Abbildung 3.16: Entwicklung der Energieterme der dominanten zonalen Wellenzahl Neun in $\text{Jm}^{-2}\text{Pa}^{-1}$ bzw. Wm^{-2} (Umwandlungsterme) bei Störung des Grundzustandes mit der optimalen Störung über 36 Zeitschritte. Die Terme AZ und KZ beziehen sich auf die zonale Wellenzahl Null. Ein Modellzeitschritt entspricht einer Stunde. Die Diagramme zeigen im einzelnen: AT+KT: Summe aus transienter verfügbarer potentieller Energie und transienter kinetischer Energie, AT: transiente verfügbare potentielle Energie, KT: transiente kinetische Energie, A2KT: Umwandlung von AT in KT, AZ: zonal verfügbare potentielle Energie, KZ: zonale kinetische Energie, AE2AZT: Umwandlung verfügbarer potentielle Energie der Störung in zonal verfügbare transiente Energie, KE2KZT: Umwandlung von kinetischer Energie der Störung in zonale kinetische Energie.

Kapitel 4

Anwendung: Klimaassimilation durch optimierten Antrieb

In diesem Kapitel geht es um die Anwendung des adjungierten Modells zur Anpassung des Modellklimas an eine Vorgabe durch optimale Wahl der Parameter der diabatischen Heizung. Anders als bei der herkömmlichen Assimilation wird dabei nicht die Modelltrajektorie, sondern eine statistische Größe, das Temperaturmittelfeld des Modells, an eine Vorgabe angepaßt. Der erste Abschnitt gibt eine Motivation und stellt kurz ein bewährtes adaptives Nudgingverfahren aus Bauer (1996) bzw. Lunkeit *et al.* (1998) vor; die Herleitung des Ansatzes unter Verwendung des adjungierten Modells ist Inhalt des nachfolgenden Abschnitts. Es schließt sich ein Vergleich der Ergebnisse beider Verfahren an. Das Kapitel endet mit einer Diskussion und einem Ausblick auf weitere Verbesserungen des Verfahrens.

4.1 Adaptives Nudging

Es ist wünschenswert, das PUMA auf vorgegebene Klimate einzustellen, um aus der Natur oder komplexeren Modellen entnommene Szenarien isoliert zu untersuchen und eine Identifikation der zugrundeliegenden Mechanismen zu erleichtern. Dies ist innerhalb der Grenzen des Modells durch geeignete Wahl des diabatischen Antriebs möglich. Die Parameterisierung der diabatischen Prozesse erfolgt im PUMA über das Relaxationstemperaturfeld \mathcal{T}_R im Newtonschen Abkühlungsterm der Temperaturtendenzgleichung (2.19):

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} = \dots + \frac{\mathcal{T}_R - \mathcal{T}}{\tau_R} + \dots \quad (4.1)$$

Wegen des Advektionsterms in der Temperaturgleichung ist die gesuchte Relaxationstemperatur nicht identisch mit der zeitlich gemittelten Temperatur. Die entsprechenden Felder des Referenzlaufes in Abbildung 4.2 zeigen deutlich die Unterschiede.

Bauer (1996) und Lunkeit *et al.* (1998) verwenden folgendes adaptive Nudging-verfahren:

$$\mathcal{T}_R^{n+1} := \mathcal{T}_R^n + \frac{(\mathcal{T}_Z - \mathcal{T})}{\tau_A}. \quad (4.2)$$

Die Relaxationstemperatur \mathcal{T}_R wird zu jedem Zeitschritt n mit der Abweichung des momentanen Modelltemperaturfeldes \mathcal{T} vom angestrebten Klima \mathcal{T}_Z korrigiert. Diese Korrektur wird mit der Zeitkonstanten τ_A gedämpft, so daß sich die Relaxationstemperatur nach einer Übergangsphase um den gesuchten Antrieb einschwingt.

Nimmt man für die restlichen Terme der Temperaturtendenzgleichung Konstanz und Unabhängigkeit von \mathcal{T} an, ergibt sich folgende Schwingungsgleichung:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{T}}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau_R} \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} + \frac{\mathcal{T}}{\tau_R \tau_A} = \frac{\mathcal{T}_Z}{\tau_R \tau_A}. \quad (4.3)$$

Ihre stationäre Lösung ist $\mathcal{T} = \mathcal{T}_Z$; der aperiodische Grenzfall tritt für $\tau_A = 4\tau_R$ ein. Trotz der Annahme konstanter Advektion führt das Verfahren zu brauchbaren Ergebnissen, wenn auch die erforderlichen Integrationszeiten verhältnismäßig lang sind. Bei Verwendung einer Orographie ist die Konvergenz jedoch sehr schlecht (Lunkeit, persönliche Mitteilung). Es erscheint daher sinnvoll, Information über die Advektion bei der Berechnung der neuen Relaxationstemperatur einfließen zu lassen. Ein solches Verfahren könnte schneller konvergieren und universeller einsetzbar sein.

4.2 Gradientengestützte Optimierung

Die Auffassung des Problems als ein Optimierungsproblem mit der Relaxationstemperatur \mathcal{T}_R als Vektor freier Parameter, dem Abstand des Modellklimas $\bar{\mathcal{T}}$ zur Vorgabe \mathcal{T}_Z als zu optimierender Kostenfunktion J und Anwendung des adjungierten Modells, wie in Abschnitt 2.3.2 dargestellt, liefert den Gradienten der Kostenfunktion bezüglich des Relaxationstemperaturfeldes. Im Folgenden wird zunächst an einem linearisierten Beispiel die Bedeutung der Gradienteninformation bei der Lösung des Mittelwertassimilationsproblems demonstriert. Danach folgt die Betrachtung des nichtlinearen Falls und die Entwicklung des gradientengestützten Verfahrens.

4.2.1 Linearer Fall

Nimmt man für die Advektion lineare Abhängigkeit von \mathcal{T} an, so läßt sich die Temperaturtendenzgleichung in der folgenden Form schreiben:

$$\dot{\mathcal{T}} = A\mathcal{T} + \frac{1}{\tau_R} \mathcal{T}_R. \quad (4.4)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung lautet:

$$\mathcal{T}(t) = e^{At}\mathcal{T}_0 - \frac{1}{\tau_R}A^{-1}\mathcal{T}_R. \quad (4.5)$$

Für den Gradient der Kostenfunktion $J = \sum_{\lambda,\phi,\sigma} w(\phi) (\bar{\mathcal{T}} - \mathcal{T}_Z)^2$ ergibt sich in diesem Fall:

$$\begin{aligned} \mathbf{g} &= \frac{\partial J}{\partial \mathcal{T}_R} \\ &= 2\frac{1}{\tau_R}A^{-1T} \left(\frac{1}{\tau_R}A^{-1}\mathcal{T}_R + \mathcal{T}_Z \right). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Für die Hessematrix H erhält man:

$$\begin{aligned} H &= \left(\frac{\partial^2 J}{\partial \mathcal{T}_{R_i} \partial \mathcal{T}_{R_j}} \right) \\ &= 2\frac{1}{\tau_R^2}A^{-1T}A^{-1}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

so daß sich für die Richtung des konjugierten Gradienten \mathbf{p} folgendes berechnet:

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= -H^{-1}\mathbf{g} \\ &= - \left(\frac{\partial^2 J}{\partial \mathcal{T}_{R_i} \partial \mathcal{T}_{R_j}} \right)^{-1} \frac{\partial J}{\partial \mathcal{T}_R} \\ &= -(\mathcal{T}_R + \tau_R A \mathcal{T}_Z). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Die neue Relaxationstemperatur \mathcal{T}_R^{n+1} wird in Richtung des konjugierten Gradienten \mathbf{p} gesucht; der Skalar α ist dabei zunächst frei wählbar:

$$\mathcal{T}_R^{n+1} := \mathcal{T}_R^n + \alpha \mathbf{p} \quad (4.9)$$

Setzt man α zu Eins, so ergibt sich für die neue Relaxationstemperatur:

$$\mathcal{T}_R^{n+1} := -\tau_R A \mathcal{T}_Z. \quad (4.10)$$

Der Mittelwert der Temperatur $\bar{\mathcal{T}}$ folgt aus Gleichung (4.5):

$$\bar{\mathcal{T}}(\mathcal{T}_R) = -\frac{1}{\tau_R}A^{-1}\mathcal{T}_R \quad (4.11)$$

$$\stackrel{(4.10)}{\Rightarrow} \bar{\mathcal{T}}(\mathcal{T}_R^{n+1}) = \mathcal{T}_Z, \quad (4.12)$$

woraus sich durch Einsetzen der optimierten Relaxationstemperatur die Zieltemperatur als neue Mitteltemperatur ergibt. Für diesen einfachen Fall ist die Optimierung damit abgeschlossen.

4.2.2 Nichtlinearer Fall

Das Auffinden der Lösung in einem Schritt, wie im linearen Fall, ist im nichtlinearen Fall Konvergenz nicht zu erwarten. Der Nutzen des Gradienten für die Optimierung sinkt mit der Länge des Zeitraumes, über den die Kostenfunktion berechnet wird, da die Nichtlinearität ihrer Abhängigkeit von den Parametern zunimmt. Vorversuche mit dem folgenden Verfahren

$$\mathcal{T}_R^{n+1} := \{\mathcal{T}_R^n + \alpha \mathbf{p} \mid J(\mathcal{T}_R^n + \alpha \mathbf{p}) = \min\}, \quad (4.13)$$

bei denen verschiedene Mittelungszeiträume T für die Berechnung von \bar{T} getestet werden, stützen diese Vermutung. Auf der anderen Seite soll die angepaßte Mitteltemperatur über einen möglichst großen Zeitraum gebildet werden und unabhängig vom Modellzustand zu Anfang des Optimierungszeitraumes sein. Dies legt eine Kombination mit dem in Abschnitt 4.1 vorgestellten Verfahren nahe. Es wird daher ein mehrschrittiges Verfahren gewählt, bei dem statt der Mitteltemperatur die momentane Temperatur in die Kostenfunktion eingeht. Damit hat die Kostenfunktion die Form:

$$J_2 = \sum_{\lambda, \phi, \sigma} w(\phi) (\mathcal{T} - \mathcal{T}_Z)^2. \quad (4.14)$$

Für den linearisierten Fall gibt es keinen Unterschied im Konvergenzverhalten der Optimierung, da die Ableitungen von J_2 mit denen von J identisch sind. Das Verfahren wird dann ausgehend vom Modellzustand am Ende des letzten Optimierungsschrittes wiederholt, wobei die in jedem dieser Schritte gewonnene Relaxationstemperatur zu einem bestimmten Bruchteil zur Korrektur der Anfangsschätzung dient. Dies soll die in der Kostenfunktion nicht erfolgte Mittelung kompensieren und gleichzeitig den aktuellen Optimierungsschritt höher gewichten als die Schritte zu Anfang der Optimierung. Abbildung 4.1 zeigt schematisch den Verlauf dieses geschachtelten mehrschrittigen Verfahrens. Die Minimierung der Kostenfunktion führt in diesem Verfahren nicht mehr zur Lösung der Assimilationsaufgabe, abgesehen von dem Spezialfall einer Lösung, für die \mathcal{T} gegen einen festen Wert strebt, da dann \mathcal{T} gegen \bar{T} geht. Im oben gezeigten linearen Fall existiert für bestimmte A eine solche Lösung (wenn $\limsup_{t \rightarrow \infty} e^{At}$ existiert), im allgemeinen Fall gilt dies jedoch nicht.

Durch die Ausführung jeweils eines einzelnen Optimierungsschrittes und der vor dem nächsten Schritt durchgeführten zeitlichen Fortentwicklung des Modellzustandes wird dieses Problem umgangen. Eine zusätzliche Maßnahme in diesem Sinne ist die gewichtete Summierung der alten und des jeweils neuen Optimierungsergebnisses. Formel (4.2) hat damit bei diesem Verfahren die Form:

$$\mathcal{T}_R^{n+1} := \mathcal{T}_R^n + \frac{\mathcal{T}_{\text{NAG}} - \mathcal{T}_R^n}{\tau_B}. \quad (4.15)$$

Der Wert von \mathcal{T}_{NAG} ist die Stelle des minimalen $J_2 = J_2(\mathcal{T}_R^n + \alpha \mathbf{p})$ in Richtung des approximierten konjugierten Gradienten \mathbf{p} ($\approx -H^{-1}\mathbf{g}$) im Parameterraum. Er

wird mit der NAG-Bibliotheksroutine `e04dg` berechnet, die die Implementierung einer quasi-Newton'schen konjugierten Gradientenmethode darstellt (NAG 1991 und darin enthaltene Verweise). Die Länge des Optimierungsschrittes ist hierbei von der Lage des Minimums von J_2 in Richtung des konjugierten Gradienten abhängig.

4.3 Vergleich der Methoden

4.3.1 Experimente

Den Experimenten mit beiden Verfahren liegen Daten aus einer mehrjährigen Simulation mit dem PUMA zugrunde, die die Rolle des zu assimilierenden Klimas übernehmen. Damit ist die Existenz einer exakten Lösung sichergestellt, die darüberhinaus genau bekannt ist. Es wird auf diese Weise ausgeschlossen,

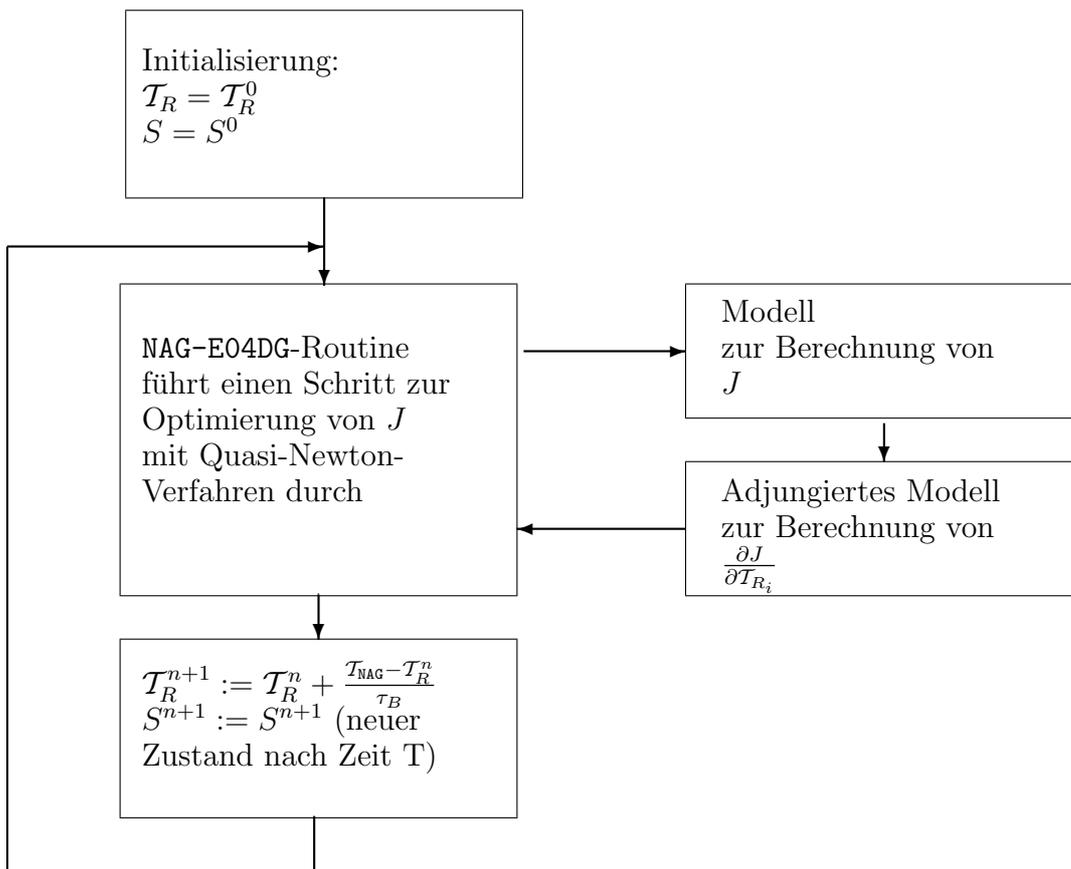


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des Programmflusses zur Assimilation des Relaxationstemperaturfeldes unter Verwendung der Gradienteninformation aus dem adjungierten Modell.

daß die Assimilation durch im PUMA nicht darstellbare Phänomene behindert wird. Ein weiterer Vorteil ist, daß sich der objektive Fortschritt der Optimierung über die Annäherung an diese Lösung verfolgen läßt. Die Eindeutigkeit der Lösung ist dadurch jedoch nicht gewährleistet.

Zieltemperatur: Die Simulation entspricht Experiment mit einem Stormtrack aus der Arbeit von Frisius (1995). Dabei wird einer zonalsymmetrischen, vom Äquator zum Pol abnehmenden Relaxationstemperatur eine Dipolstruktur überlagert. Sie ist damit definiert durch:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_R(\lambda, \phi, \sigma) = & \mathcal{T}_0(\sigma) + f(\sigma) \left(\frac{1}{2} \Delta \mathcal{T}_{NS} \sin \phi + \Delta \mathcal{T}_{EP} \left(\frac{1}{3} - \sin^2 \phi \right) \right) \\ & + f(\sigma) \sum_{j=1}^2 A_j \exp \left(-d_{\lambda,j} \cos^2 \phi (\lambda - \lambda_j)^2 - d_{\phi,j} (\phi - \phi_j)^2 \right). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Die Temperaturdifferenz zwischen Äquator und den Polen ist gegeben durch $\Delta \mathcal{T}_{EP}$, die zwischen Nord- und Südpol durch $\Delta \mathcal{T}_{NS}$. Unter der Summe steht der Index j für den Wärme- bzw. Kältepol des Dipols, A_j für ihre Amplitude, $d_{\lambda,j}$ und $d_{\phi,j}$ bestimmen die zonale und meridionale Ausdehnung und λ_j und ϕ_j sind ihre Koordinaten. Die vertikale Struktur wird durch \mathcal{T}_0 und f bestimmt, die gegeben sind durch:

$$\mathcal{T}_0(\sigma) = \mathcal{T}_g - \frac{1}{2} \frac{d\mathcal{T}_R}{dz} (z_{tr} + z(\sigma)) + \sqrt{\left(\frac{1}{2} \frac{d\mathcal{T}_R}{dz} (z(\sigma) - z_{tr}) \right)^2 + \Delta \mathcal{T}_{tr}^2}, \quad (4.17)$$

$$f(\sigma) = \begin{cases} \sin \left(\frac{\pi}{2} \frac{\sigma - \sigma_{tr}}{1 - \sigma_{tr}} \right) & \text{für } \sigma \leq \sigma_{tr} \\ 0 & \text{für } \sigma > \sigma_{tr} \end{cases}, \quad (4.18)$$

mit der Bodentemperatur \mathcal{T}_g , dem vertikalen Temperaturgradienten in der Troposphäre $d\mathcal{T}_R/dz$, der geopotentiellen Tropopausenhöhe z_{tr} und der geopotentiellen Höhe z_σ von σ . Der Parameter $\Delta \mathcal{T}_{tr}$ glättet die Unstetigkeit an der Tropopause. Folgende Werte werden in Übereinstimmung mit Frisius (1995) verwendet:

$$\begin{array}{lll} \mathcal{T}_g = 288 \text{ K} & d\mathcal{T}_R/dz = 0,0065 \text{ Km}^{-1} & z_{tr} = 12.000 \text{ m} \\ \Delta \mathcal{T}_{tr} = 2 \text{ K} & \Delta \mathcal{T}_{NS} = 0 \text{ K} & \Delta \mathcal{T}_{EP} = 70 \text{ K} \\ A_1 = 50 \text{ K} & \phi_1 = 40^\circ \text{ N} & \lambda_1 = 55^\circ \text{ E} \\ A_2 = -50 \text{ K} & \phi_2 = 50^\circ \text{ N} & \lambda_2 = 90^\circ \text{ E} \end{array}$$

Die Zeitkonstante der Newtonschen Abkühlung ist auf den verwendeten fünf Schichten folgendermaßen gewählt:

σ	[Pa/Pa]	0,1	0,3	0,5	0,7	0,9
τ_R	[d]	5	10	30	30	30

Die Zeitkonstante der Rayleigh-Reibung ist in der untersten Modellfläche ein Tag, in allen anderen Niveaus ist die Reibung abgeschaltet. Das Modell wird von einem ruhenden Grundzustand aus gestartet. Aus den Temperaturdaten dieser Simulation wird nach angemessener Einschwingzeit ein zehnjähriges Mittel berechnet. Es stellt das Zieltemperaturfeld \mathcal{T}_Z des internen Assimilationsexperimentes dar. Die Relaxationstemperatur und das Zehnjahresmittel des Modelltemperaturfeldes sind in Abbildung 4.2 dargestellt.

Startwerte: Beide Verfahren starten von einem beliebig gewählten Modellzustand des Kontrolllaufes. Die Anfangsschätzung der Relaxationstemperatur \mathcal{T}_R^0 ist zonalsymmetrisch und entspricht der Definition in Formel (4.16) ohne die überlagerte Dipolstruktur. Ihr Abstand zur Relaxationstemperatur des Referenzlaufes, gemessen mit der in Gleichung (2.30) definierten Kostenfunktion, hat den Wert $2,89 \cdot 10^{-2}$ in dimensionslosen Einheiten. Für das Nudgingverfahren wird die Zeitkonstante τ_A , wie durch Gleichung (4.3) nahegelegt, zu 120 Tagen gewählt. Für die Zeitkonstante τ_B des anderen Verfahrens werden verschiedene Werte erprobt.

4.3.2 Ergebnisse

Verlauf der Optimierung: Abbildung 4.3 zeigt den Verlauf der Optimierung für verschiedene Zeitkonstanten. Dargestellt ist der Abstand der teilloptimierten Relaxationstemperatur \mathcal{T}_R^n zur Relaxationstemperatur des Kontrolllaufes. Als Abstandsmaß wird eine zur Kostenfunktion (Gleichung 2.30) analoge Funktion verwendet. Die Entwicklung der Kostenfunktion selber während der Optimierung ist in Abbildung 4.4 dargestellt. Als Referenz ist jeweils der Verlauf der entsprechenden Größe des adaptiven Nudgingverfahrens mit aufgetragen. Der für das eigentliche Verfahren nicht benötigte Wert der Kostenfunktion wird zusätzlich berechnet.

Der Wert der Kostenfunktion zu Beginn der Optimierung ist bei allen Verfahren $6,7 \cdot 10^{-3}$. Auffällig ist die schnelle Abnahme der Kostenfunktion bei der gradientengestützten Optimierung im Gegensatz zu der starken Fluktuation auf hohem Niveau beim adaptiven Nudgingverfahren. Die zeitweiligen Zunahmen der Kostenfunktion sind durch die dynamische Weiterentwicklung des Modellzustandes, wie bei der Beschreibung des Algorithmus dargestellt, bedingt. Die Zunahme des Abstandes zwischen \mathcal{T}_R^n und der gesuchten Relaxationstemperatur (Abb. 4.3) deuten jedoch auf eine Schwäche des Algorithmus hin, der anscheinend ein sekundäres, lokales Minimum der Kostenfunktion anstrebt. Dadurch ist es möglich, daß der Abstand zur bekannten Lösung zunimmt, ohne daß sich der Wert der Kostenfunktion vergrößert.

Die Wahl der Zeitkonstante ist nach unten wie nach oben begrenzt. Ein zu kleiner Wert würde in einer zu schnellen und extremen Änderung des Relaxationstemperaturfeldes führen und dadurch die Stabilität des numerischen Verfahrens gefährden. Außerdem müßte sich die Dynamik erst geraume Zeit an den neuen

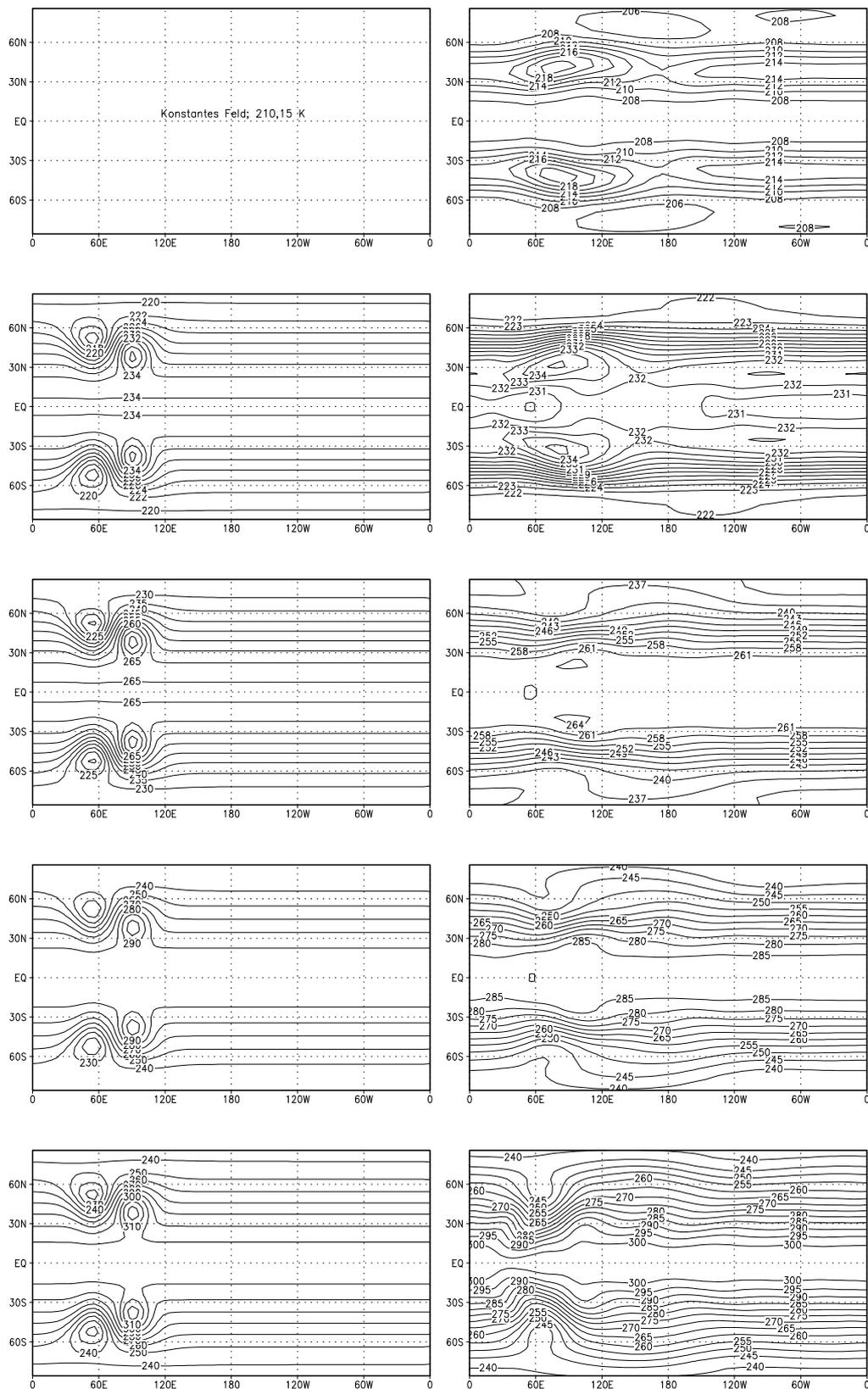


Abbildung 4.2: Dipolrelaxationstemperatur (linke Spalte) und resultierende Mitteltemperatur des Kontrolllaufes (rechte Spalte) in den fünf Modellschichten (oberste Schicht oben).

Antrieb anpassen, bevor ein weiterer Optimierungsschritt unternommen werden könnte. Ein zu großer Wert würde die Lösung unnötig verzögern. Ein Verlust der Konvergenz durch Abklingen der durch die Dipolstruktur verursachten Dynamik ist jedoch nicht zu befürchten; Versuche, bei denen das Modell von einer ruhenden Atmosphäre aus startet, zeigen, daß der Algorithmus in der Lage ist, die zur Auffindung der Teillösung nötige Dynamik entstehen zu lassen. Der Versuch mit der Zeitkonstanten $\tau_B = 12000$ zeigt auf einer größeren Zeitlichen Skala jedoch dasselbe Verhalten wie der mit dem Wert $\tau_B = 1200$ bzw. $\tau_B = 2400$.

Mittel: In diesem Abschnitt werden die zu den in Abbildung 4.3 markierten Punkten a) bis c) gehörigen Relaxationstemperaturfelder betrachtet; unter d) wird das Ergebnis des fortgesetzten Laufes mit dem adaptiven Nudgingverfahren gezeigt. Mit den jeweiligen Relaxationstemperaturfeldern wird außerdem eine zweijährige Simulation durchgeführt. Das erste Jahr dient dem Einschwingen des Modells ('spinup'), aus den halbtäglichen Temperaturdaten des zweiten Jahres werden die mittleren Felder berechnet und mit dem Zieltemperaturfeld aus dem Kontrolllauf verglichen.

- a) Die zum Minimum der Optimierung mit der Zeitkonstanten $\tau_B = 1200$ gehörende Relaxationstemperatur und die resultierende Jahresmitteltemperatur aus dem Simulationslauf sind in Abbildung 4.5 für die verschiedenen Modellschichten dargestellt. Der Wert der Abstandsfunktion beträgt für diese Relaxationstemperatur $1,56 \cdot 10^{-2}$. In den obersten drei Modellschichten sind weder Lage noch Amplitude der Dipolstruktur getroffen. In den untersten beiden Schichten dagegen ist die Dipolstruktur deutlich zu erkennen und auch die Amplitude nähert sich der des Kontrolllaufes (Abbildung 4.2) an. Die deutliche äquatoriale Asymmetrie ist durch die Asymmetrie des atmosphärischen Zustandes in der Initialisierung bedingt. Dies ist ein Hinweis auf die Sensitivität des Algorithmus bezüglich des Ausgangszustandes. Die resultierende Jahresmitteltemperatur zeigt in allen Modellschichten ähnliche Strukturen und Amplituden wie die Zieltemperatur. Im Detail sind jedoch noch Unterschiede zu erkennen. Der Abstand zum Zieltemperaturfeld beträgt $2,86 \cdot 10^{-3}$.
- b) Abbildung 4.6 zeigt die zum Punkt b) in Abbildung 4.3 gehörende Relaxationstemperatur und das resultierende Mittel der Temperatur. Der Abstand der Relaxationstemperatur zur Relaxationstemperatur des Kontrolllaufes beträgt $5,94 \cdot 10^{-2}$, der Abstand der Mitteltemperatur zum Zieltemperaturfeld $4,62 \cdot 10^{-3}$ und ist damit um den Faktor 1,6 größer als im obigen Fall. Die Dipolstruktur ist in den untersten beiden Modellschichten fast noch besser getroffen als im Fall a). In der zweitobersten Schicht wird ein Dipol gefunden, der jedoch in der Amplitude deutlich zu stark ist (ca. 20 K). In der mittleren und obersten Modellschicht treten Temperaturpole auf, die keine Entsprechung in der Relaxationstemperatur des

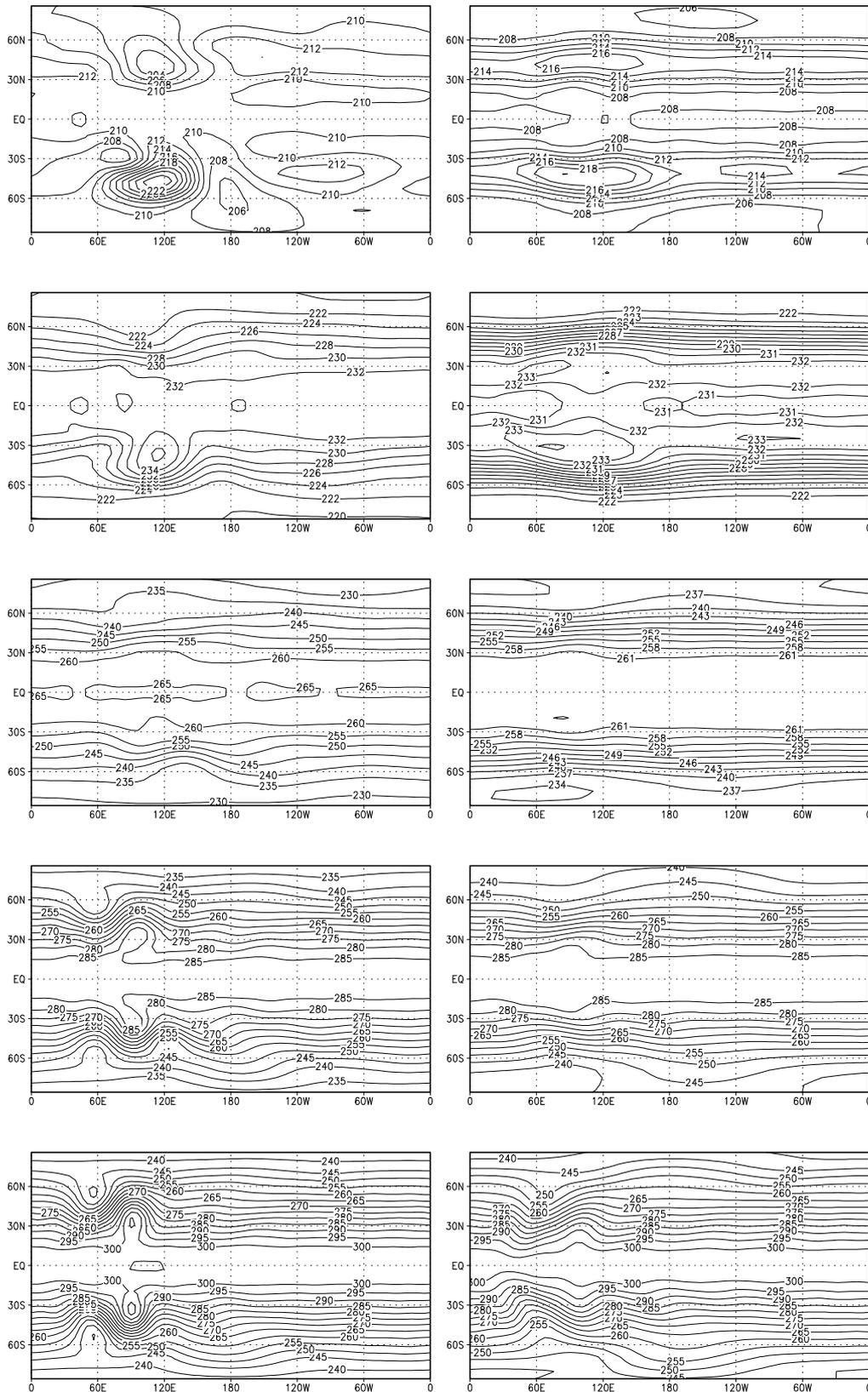


Abbildung 4.5: Fall a): Relaxationstemperatur aus dem gradientengestützten Verfahren (linke Spalte) und resultierende Jahresmitteltemperatur (rechte Spalte) in den fünf Modellschichten (oberste Schicht oben).

Kontrolllaufes haben. Diese sind wahrscheinlich für die den im Vergleich zu Fall a) größeren Abstand verantwortlich. Die Felder der mittleren Temperatur zeigen ähnlich gute strukturelle Übereinstimmung wie im Fall a). Berücksichtigt man, daß der Abstand dieser Relaxationstemperatur zu der des Kontrolllaufes größer ist, als der des zonalsymmetrischen Startfeldes, so läßt sich die verhältnismäßig gute Reproduktion der Mitteltemperatur des Kontrolllaufes als ein Hinweis auf die Existenz von lokalen Nebenminima der Kostenfunktion deuten.

- c) Zum Vergleich mit a) ist in der Abbildung 4.7 für den entsprechenden Abstand zwischen teilloptimaler Lösung und gesuchter Lösung ($1,53 \cdot 10^{-2}$) die Relaxationstemperatur und resultierende Jahresmitteltemperatur aus dem adaptiven Nudgingverfahren dargestellt. Ähnlich wie beim gradientengestützten Verfahren ist die in den obersten drei Modellschichten gefundene Struktur der Relaxationstemperatur deutlich anders als die der im Kontrolllauf verwendeten. Die untersten beiden Schichten dagegen reproduzieren sowohl Lage als auch Amplitude der Dipolstruktur, wobei wieder die unterste Schicht am besten getroffen ist. Anders als beim gradientengestützten Verfahren mit $\tau_B = 1200$ ist die gefundene Relaxationstemperatur nahezu äquatorsymmetrisch. Dies dokumentiert die Unterschiedlichkeit der Annäherung beider Verfahren an die Lösung.

Die resultierende Jahresmitteltemperatur zeigt in allen Modellschichten eine deutlich bessere Übereinstimmung in Struktur und Amplitude mit der Zieltemperatur als das gradientengestützte Verfahren aus a) mit $\tau_B = 1200$. Der Wert der Abstandsfunktion bezüglich des Zieltemperaturfeldes beträgt $7,83 \cdot 10^{-4}$. Diese sehr geringen Abweichungen sind in Anbetracht der deutlichen Unterschiede in den Relaxationstemperaturen bemerkenswert.

- d) Die Fortsetzung des adaptiven Nudgingverfahrens führt zu einer weiteren Annäherung an die gesuchte Lösung. Diese wird jedoch immer langsamer bis das Verfahren stagniert. Die in diesem Bereich gefundene Lösung des fortgesetzten adaptiven Nudgingverfahrens und die resultierende Jahresmitteltemperatur sind in der Abbildung 4.8 zu sehen. Im Unterschied zu dem oben vorgestellten Zwischenergebnis ist hier in fast allen Modellschichten die gesuchte Lösung zu erkennen; lediglich in der obersten Schicht sind noch deutliche Abweichungen der Struktur zu sehen. Der Abstand zur Relaxationstemperatur des Kontrolllaufes beträgt $3,28 \cdot 10^{-3}$. Die resultierende Jahresmitteltemperatur zeigt entsprechend nur sehr geringe Abweichungen von der Zieltemperatur. Der Wert der Abstandsfunktion ist $2,23 \cdot 10^{-4}$.

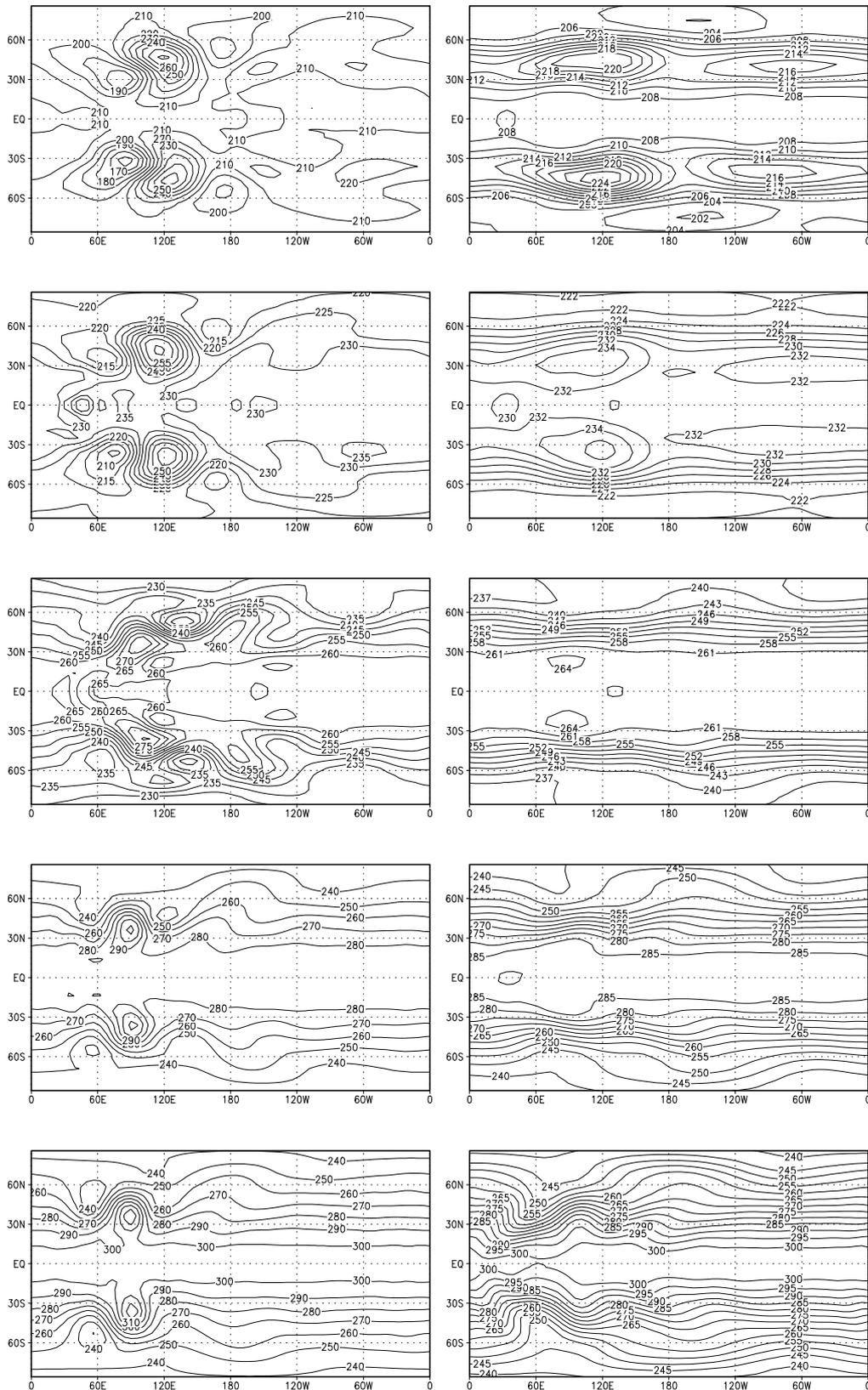


Abbildung 4.6: Fall b): Relaxationstemperatur aus dem gradientengestützten Verfahren (linke Spalte) bei maximalem Abstand zur gesuchten Lösung und resultierende Jahresmitteltemperatur (rechte Spalte) in den fünf Modellschichten (oberste Schicht oben).

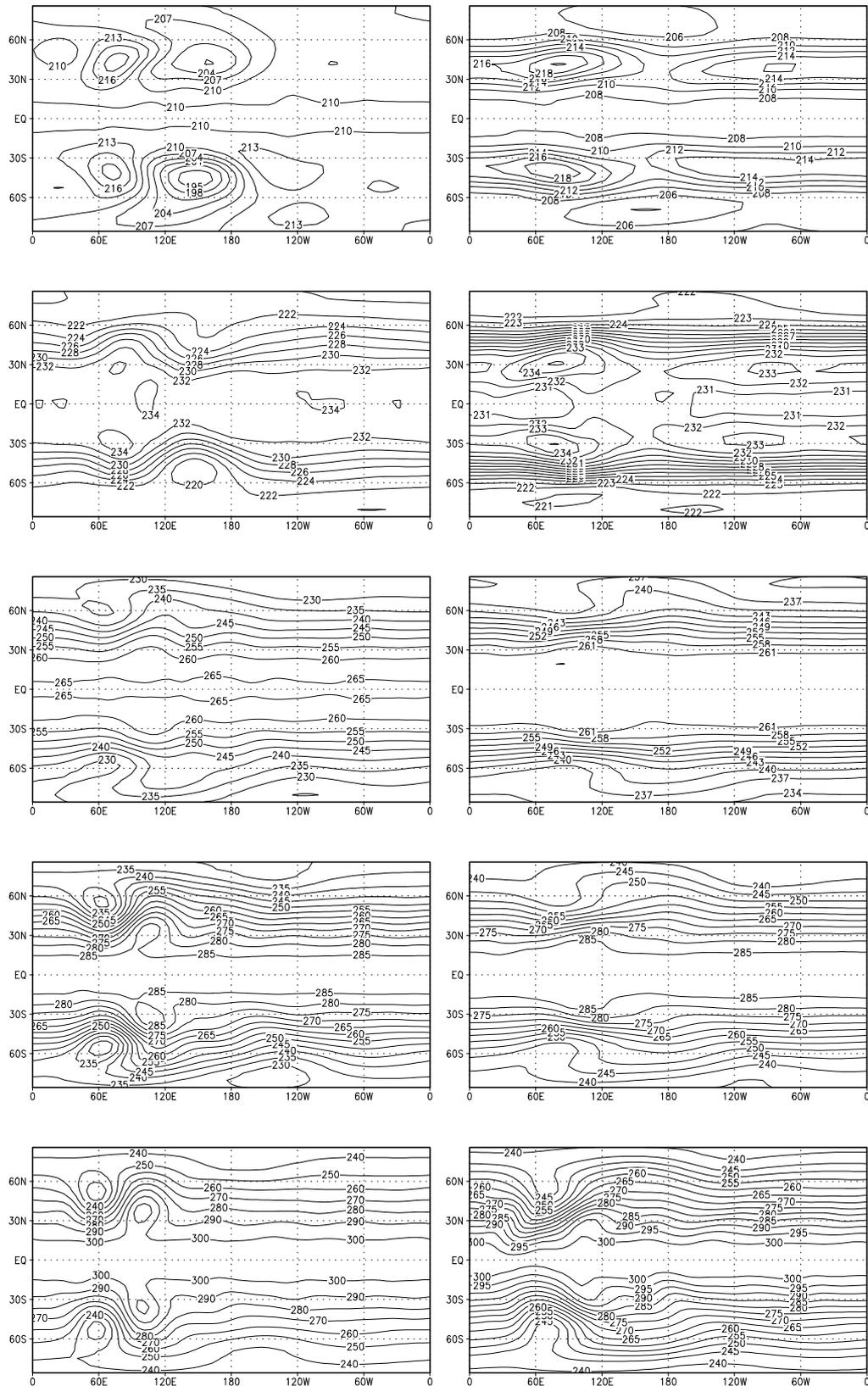


Abbildung 4.7: Fall c): Teiloptimierte Relaxationstemperatur aus dem adaptiven Nudgingverfahren (linke Spalte) und resultierende Jahresmitteltemperatur (rechte Spalte) in den fünf Modellschichten (oberste Schicht oben).

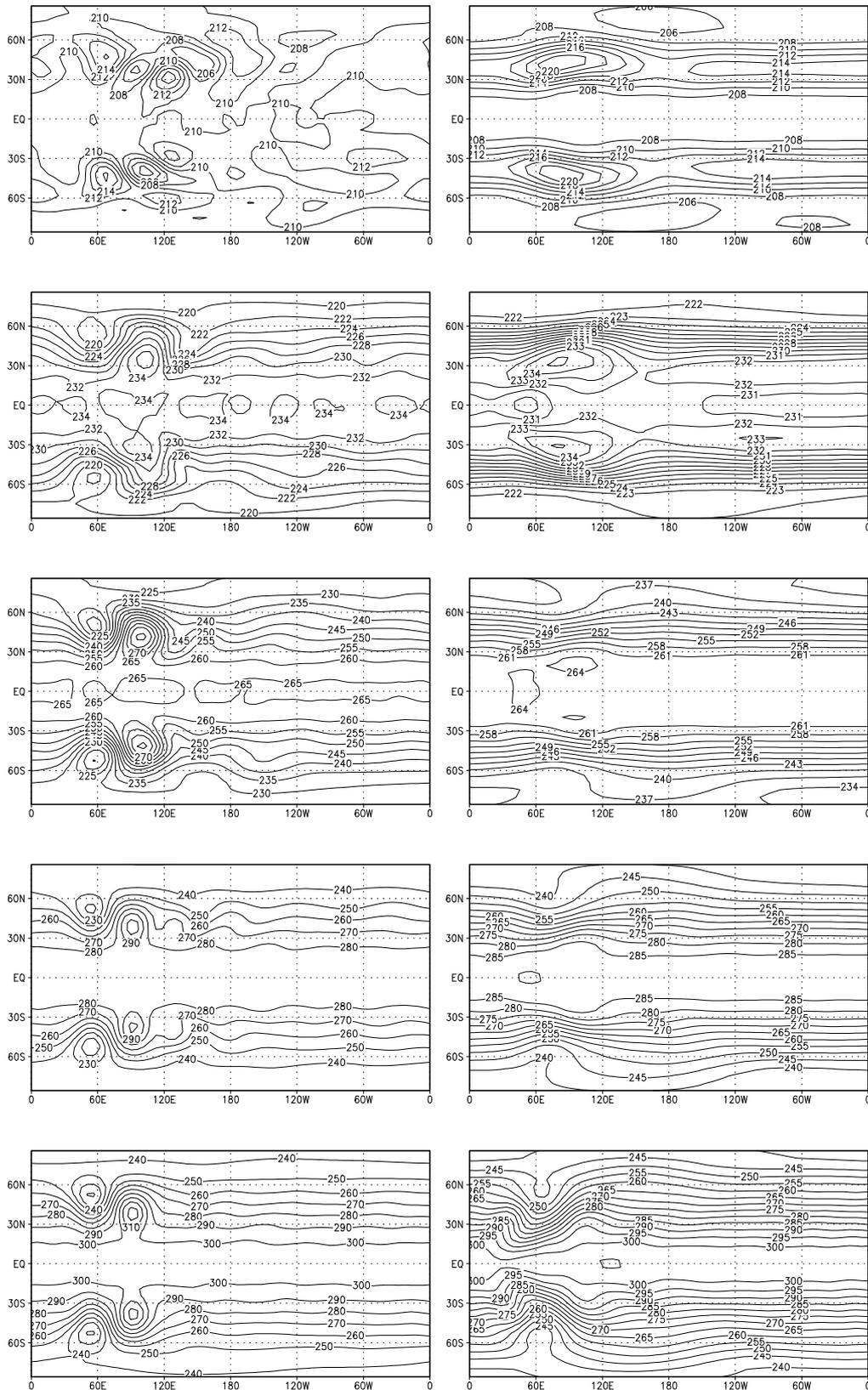


Abbildung 4.8: Fall d): Relaxationstemperatur aus dem fortgesetzten adaptiven Nudgingverfahren (linke Spalte) und resultierende Jahresmitteltemperatur (rechte Spalte) in den fünf Modellschichten (oberste Schicht oben).

Varianz: Um zu untersuchen, inwieweit die verschiedenen Lösungen die Varianz des Kontrolllaufes reproduzieren, wird die folgende Autokorrelationsfunktion berechnet:

$$r(l) = \frac{\sum_{t=1}^{T-l} (\mathcal{T}(t) - \bar{\mathcal{T}})(\mathcal{T}(t+l) - \bar{\mathcal{T}})}{\sum_{t=1}^{T-l} (\mathcal{T}(t) - \bar{\mathcal{T}})^2}, \quad (4.19)$$

wobei es sich bei dem Produkt der beiden Klammern unter der Summe um das euklidische Skalarprodukt handelt.

Abbildung 4.9 zeigt diese Autokorrelationsfunktion für halbtägliche globale Temperaturfelder des Kontrolllaufes auf der Basis einer zweijährigen Zeitreihe. Der Nenner von Gleichung (4.19) geteilt durch die Anzahl der Gitterpunkte ist ein Maß für die Varianz. Für den Kontrolllauf hat sie den Wert $5,49 \text{ K}^2$. Den Wert $1/e$ wird nach etwa 80 Stunden, der Abfall auf Null nach etwa 17 Tagen erreicht. Es ist eine leichte Periodizität mit einer Länge von acht Tagen sichtbar. Das Maximum nach circa 60 Tagen ist zwar nicht sehr ausgeprägt, steht aber möglicherweise im Zusammenhang mit dem von Frisius (1995) und Franzke (1998) bei ihren Untersuchungen mit dem PUMA im Spektrum der Zeitreihe der ersten EOF-Koeffizienten der vertikal gemittelten Stromfunktion beobachteten Maximum der Varianz bei 50 Tagen. Für die vier untersuchten Fälle ergibt die Berechnung der Autokorrelationsfunktion folgendes:

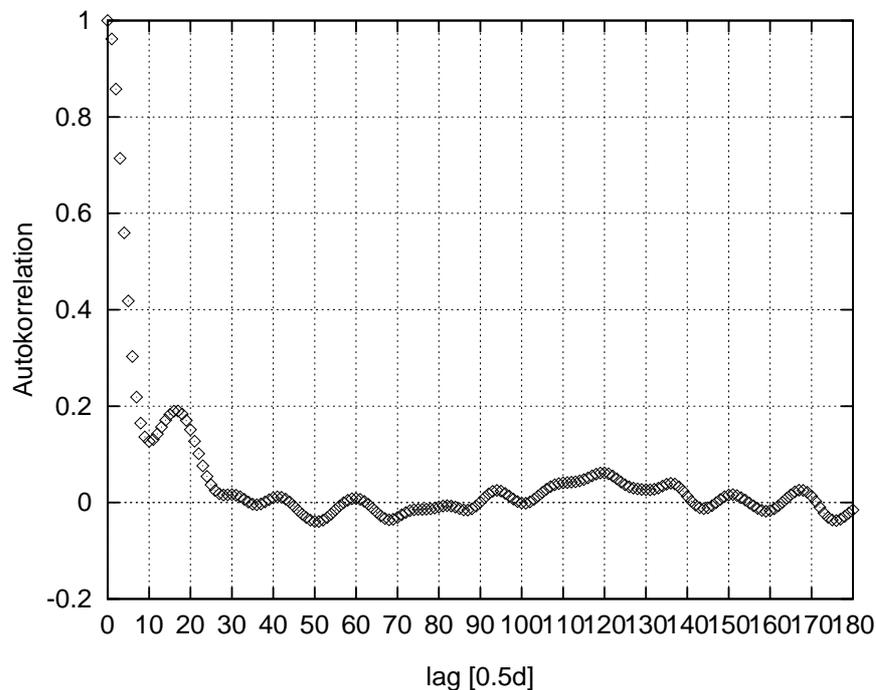


Abbildung 4.9: Kontrolllauf: Autokorrelationsfunktion halbtäglicher globaler Temperaturfelder auf der Basis einer zweijährigen Zeitreihe.

- a) Abbildung 4.10 zeigt die Autokorrelation für die teilloptimale Lösung des gradientengestützten Verfahrens mit $\tau_B = 1200$. Die Varianz beträgt $4,00 \text{ K}^2$ und ist damit deutlich niedriger als die des Kontrolllaufes. Der Verlauf der Autokorrelationsfunktion deutet eine deutlich andere Charakteristik der Zirkulation an. Der Abfall auf $1/e$ erfolgt wie oben nach circa 80 Stunden, Null wird jedoch in weniger als fünf Tagen erreicht. Eine Periodizität von neun Tagen ist deutlich sichtbar, klingt aber weniger stark ab.
- b) Abbildung 4.11 zeigt die Autokorrelationsfunktion für den Fall des Maximalen Abstandes zwischen gesuchter und gefundener Relaxationstemperatur des gradientengestützten Verfahrens. Die Varianz beträgt $2,97 \text{ K}^2$, was das Minimum der hier vorgestellten Fälle darstellt. Der Abfall der Autokorrelationsfunktion auf $1/e$ erfolgt nach etwa 70 Stunden, Null wird nach 16 Tagen erreicht. Es sind eine kurze Periode von etwa sechs Tagen und eine lange von circa 70 Tagen sichtbar. Beide sind deutlich ausgeprägt, auch treten in diesem Fall die größten negativen Korrelationen auf, was auf eine regelhaftere, strukturiertere Zirkulation als im Kontrolllauf hindeutet.
- c) Die zu a) entsprechende Relaxationstemperatur aus dem adaptiven Nudgingverfahren erzeugt eine Varianz von $5,16 \text{ K}^2$ und die in Abbildung 4.12 dargestellte Autokorrelationsfunktion. Die gute Reproduktion der Varianz steht möglicherweise im Zusammenhang mit der im Vergleich zum gradientengestützten Verfahren mit $\tau_B = 1200$ besseren Reproduktion der Mitteltemperatur. Die $1/e$ -Zeit und die kurze Periode sind wie beim Kontrolllauf, der Abfall auf Null erfolgt jedoch erst nach 20 Tagen. Die lange Periode ist nicht zu sehen.
- d) Die vom Ergebnis des fortgesetzten adaptiven Nudgingverfahrens erzeugte Varianz ist $5,14 \text{ K}^2$; die Autokorrelationsfunktion zeigt Abbildung 4.13. Sie stimmt von den gezeigten Fällen bis auf die nicht vorhandene 60-Tages Periode am besten mit dem Kontrolllauf überein.

4.4 Folgerungen

Die Tabelle 4.1 faßt noch einmal Ergebnisse der verschiedenen Experimente zusammen. Auffällig sind die vergleichsweise niedrigen Varianzen in den Ergebnissen des gradientengestützten Verfahrens. Es ist denkbar, daß durch die modifizierte Kostenfunktion J_2 , in der die Mitteltemperatur durch den Momentanwert ersetzt ist, die Modelldynamik unterdrückt wird, um die momentanen Abweichungen von der Zieltemperatur zu minimieren. Die Temperatur $\overline{T}_{\text{NAG}}$ ist so berechnet, daß sie, als Relaxationstemperatur verwendet, im nächsten Modellschritt die Modelltemperatur näher an die Zieltemperatur führt. Dies ist zwar

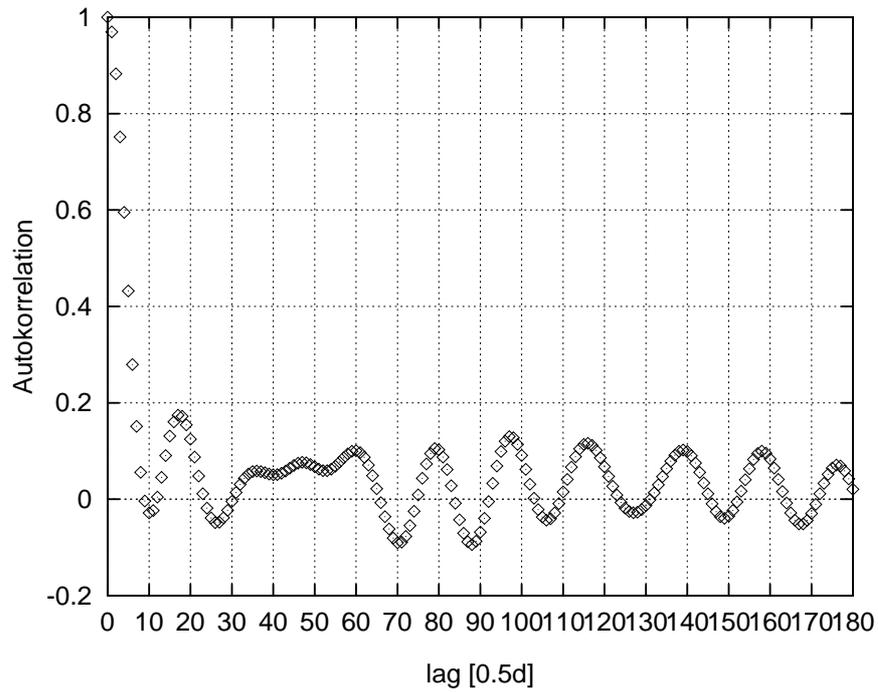


Abbildung 4.10: Fall a): Autokorrelationsfunktion halbtäglicher globaler Temperaturfelder mit Relaxationstemperatur aus dem gradientengestützten Verfahren mit $\tau_B = 1200$ nach 1620 Optimierungsschritten auf der Basis einer einjährigen Zeitreihe.

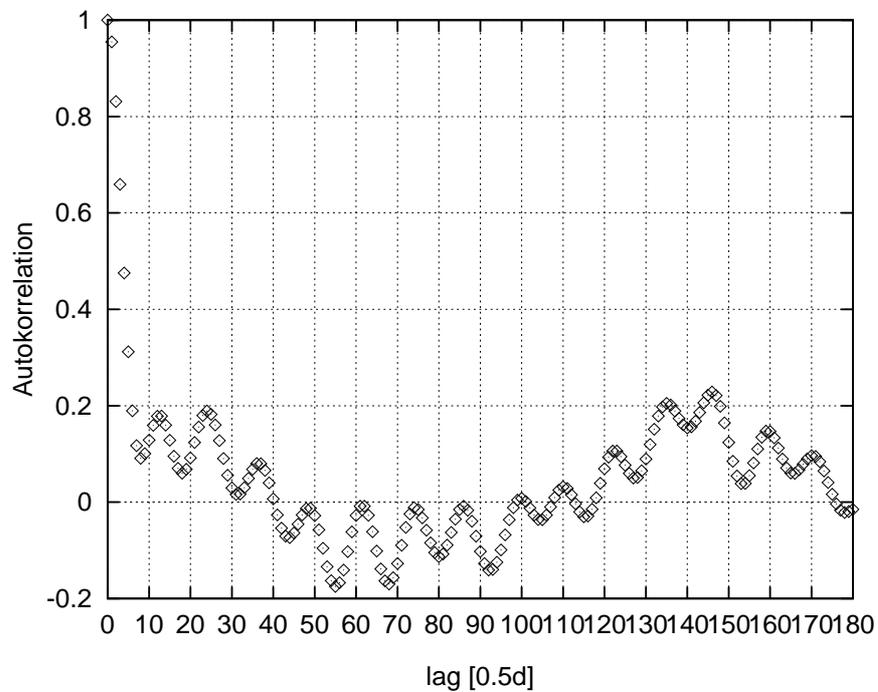


Abbildung 4.11: Fall b): Autokorrelationsfunktion halbtäglicher globaler Temperaturfelder mit Relaxationstemperatur aus dem gradientengestützten Verfahren mit $\tau_B = 1200$ nach 10800 Optimierungsschritten auf der Basis einer einjährigen Zeitreihe.

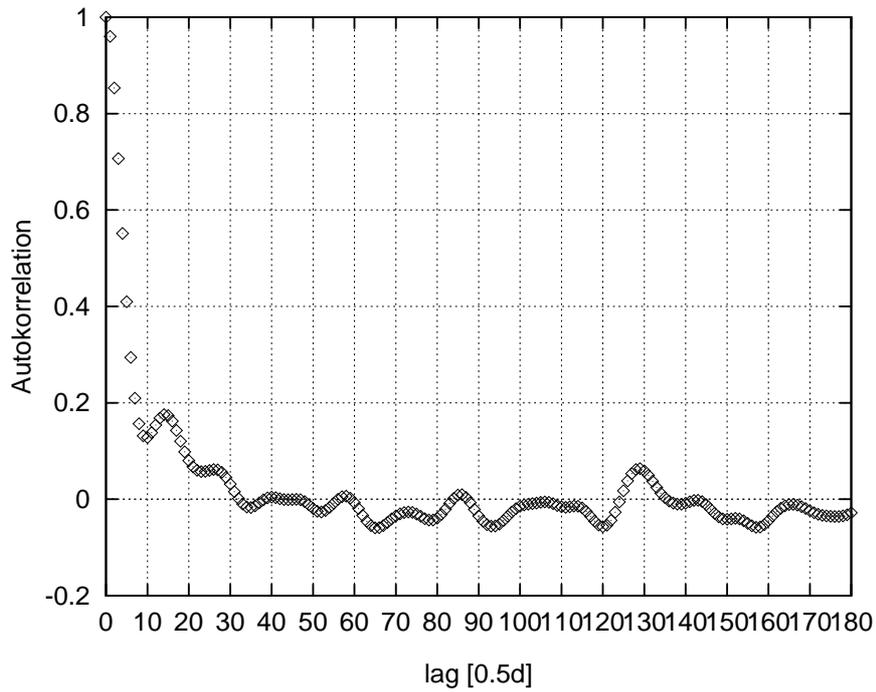


Abbildung 4.12: Fall c): Autokorrelationsfunktion halbtäglicher globaler Temperaturfelder mit teLOPTIMISierter Relaxationstemperatur aus dem adaptiven Nudgingverfahren auf der Basis einer einjährigen Zeitreihe.

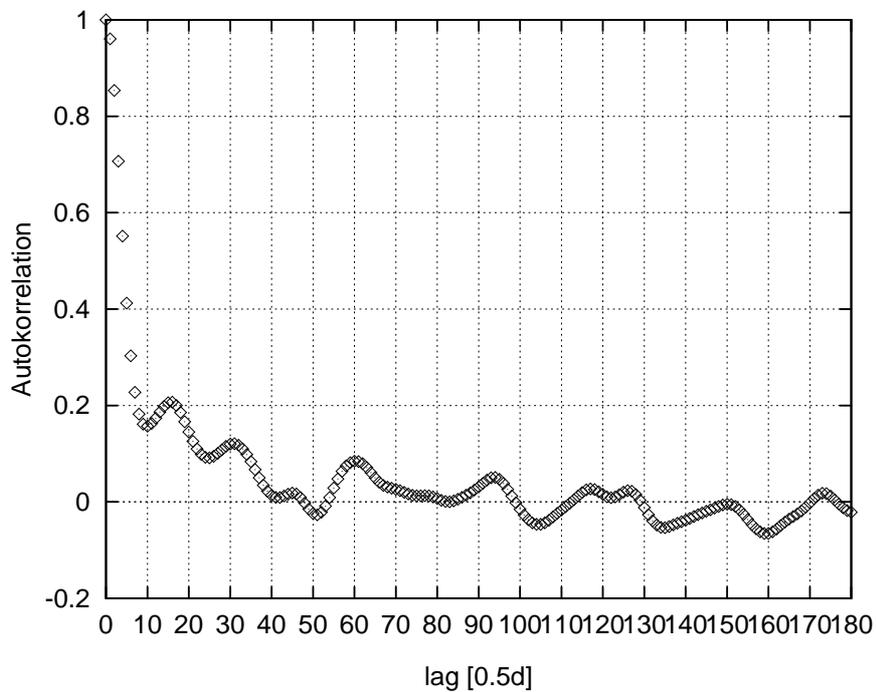


Abbildung 4.13: Fall d): Autokorrelationsfunktion halbtäglicher globaler Temperaturfelder mit Relaxationstemperatur aus dem fortgesetzten adaptiven Nudgingverfahren auf der Basis einer einjährigen Zeitreihe.

auch beim adaptiven Nudgingverfahren der Fall, der Verlauf der Kostenfunktion für das gradientengestützten Verfahren in Abbildung 4.4 zeigt allerdings, daß die Modelltemperatur während der Optimierung der Zieltemperatur sehr ähnlich ist. Die Minimierung von J_2 gelingt also tatsächlich bis zu einem gewissen Grad. Entsprechend reproduzieren die mit den untersuchten Lösungen simulierten Mitteltemperaturen zwar viele Strukturen der Zieltemperatur, die Varianz in diesen Läufe ist aber deutlich geringer als die des Kontrolllaufes.

Da die Zieltemperatur an sich keinen stabilen Modellzustand darstellt, ist es nicht möglich, eine Relaxationstemperatur zu finden, die J_2 zu Null werden ließe. Die Relaxationstemperatur \mathcal{T}_R^n wird daher im Bereich eines relativen Minimums von J_2 gehalten, ohne einem eindeutigen Wert zuzustreben. In Abbildung 4.14 sind die Ordinaten der Abbildungen 4.3 und 4.4 für das gradientengestützte Verfahren und für das adaptive Nudgingverfahren gegeneinander aufgetragen. Dies läßt sich als eine Art Phasenraumdarstellung der Trajektorie der Optimierungsverfahren interpretieren. Das eben beschriebene Verhalten des gradientengestützten Verfahrens ist deutlich zu erkennen. Das adaptive Nudgingverfahren versucht zwar ebenfalls die momentane Modelltemperatur über die Veränderung der Relaxationstemperatur an die Zieltemperatur anzupassen (vgl. Gleichung (4.2)), dies geschieht jedoch ohne die Berücksichtigung der momentanen Advektion. Es führt daher, wie in Abbildung 4.14 zu sehen, nicht zu einer nachhaltigen Minimierung der Kostenfunktion J_2 ; die Kostenfunktion J dagegen wird minimiert, wie die resultierenden Mitteltemperaturen aus den Simulationsläufen zeigen.

Weitere Versuche, bei denen die Schrittlänge der gradientengestützten Optimierung analog zum adaptiven Nudgingverfahren vom Abstand $\|\mathcal{T} - \mathcal{T}_Z\|$ bestimmt wird, ergeben keine erkennbare Verbesserung. Das eigentliche Problem des sehr gezielten Ansteuerns eines nicht erreichbaren Zustandes und der damit einhergehenden Unterdrückung der Varianz bleibt davon unangetastet. Das erfolgreich Abschneiden des adaptiven Nudgingverfahrens scheint unter anderem

	$\ \mathcal{T}_R^n - \mathcal{T}_R\ ^2$	$J = \ \bar{\mathcal{T}} - \mathcal{T}_Z\ ^2$	$\sum_{t=1}^{T-1} (\mathcal{T}(t) - \bar{\mathcal{T}})^2$
a)	$1,56 \cdot 10^{-2}$	$2,86 \cdot 10^{-3}$	4,00 K ²
b)	$5,94 \cdot 10^{-2}$	$4,62 \cdot 10^{-3}$	2,97 K ²
c)	$1,53 \cdot 10^{-2}$	$7,83 \cdot 10^{-4}$	5,16 K ²
d)	$3,28 \cdot 10^{-3}$	$2,23 \cdot 10^{-4}$	5,14 K ²

Tabelle 4.1: Vergleich der Abstände der Relaxationstemperatur und der Mitteltemperatur zu denen des Kontrolllaufes ($\|\mathcal{T}_R^n - \mathcal{T}_R\|^2$ und $J = \|\bar{\mathcal{T}} - \mathcal{T}_Z\|^2$) sowie die Varianz der erzeugten Felder ($\sum_{t=1}^{T-1} (\mathcal{T}(t) - \bar{\mathcal{T}})^2$) für die Fälle a), b): gradientengestütztes Verfahren; c), d): adaptives Nudgingverfahren. Die Varianz des Kontrolllaufes ist 5,49 K².

das Ergebnis der vergleichsweise hohen Varianz der Modelltemperatur während der Optimierung zu sein.

Das vorgestellte Konzept eines gradientengestützten Verfahrens zur Assimilation eines Temperaturmittelwertes in ein vereinfachtes GCM hat sich in den Untersuchungen nur zum Teil bestätigt. Das Verfahren ist in der Lage, Struktur und Amplitude des Relaxationstemperaturfeldes des Kontrolllaufes in den untersten Modellschichten wiederzufinden. Eine Schwäche ist das uneindeutige Konvergenzverhalten, so daß das Verfahren in seiner vorgestellten Form nicht zufriedenstellend funktioniert. Die Modifikation der Kostenfunktion führt zu dem ab einer bestimmten Annäherung paradoxen Versuch, die Modelltemperatur auf dem Wert der Zieltemperatur konstant zu halten. Dies wird durch die in Analogie zum adaptiven Nudgingverfahren getroffenen Maßnahmen (gewichtetes Update, Weiterlaufen des Modells) nicht ausreichend kompensiert.

Weitere Untersuchungen zum besseren Verständnis der Problematik sind denkbar. Künftige Verbesserung des Verfahrens könnten an der Kostenfunktion

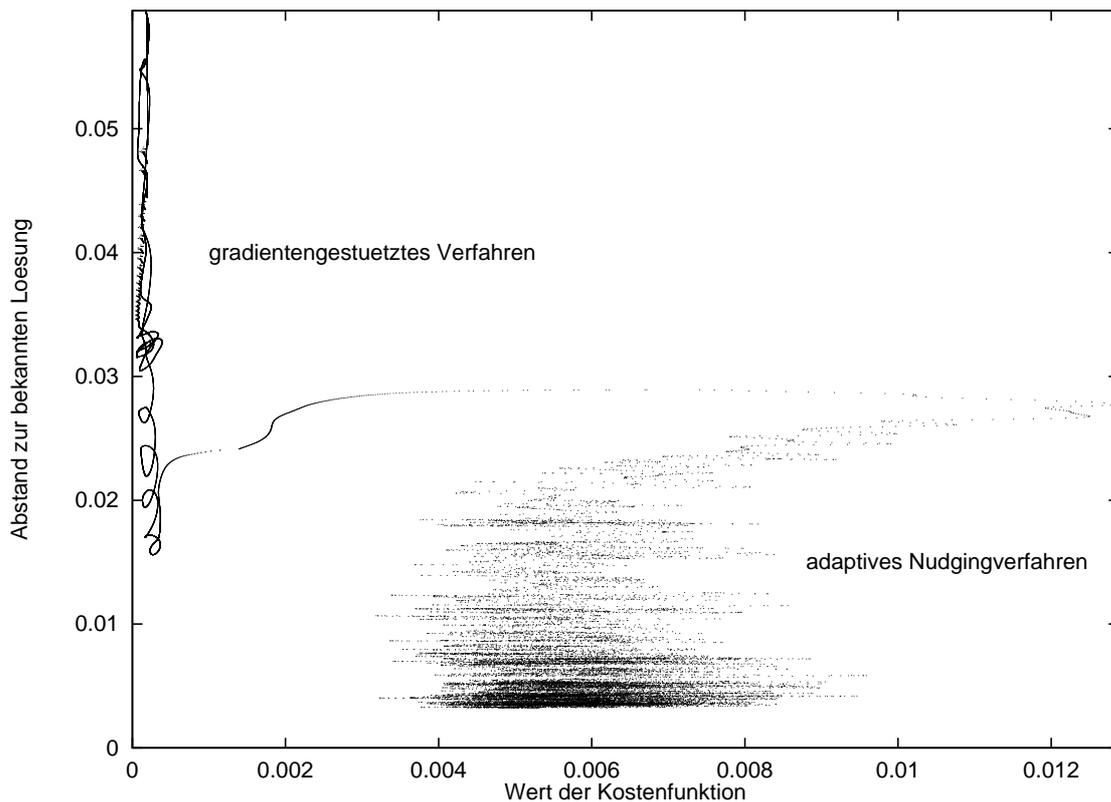


Abbildung 4.14: Wert der Kostenfunktion J_2 gegen den Abstand der Relaxationstemperatur zur bekannten Lösung aus dem Kontrolllauf für das gradientengestützte Verfahren mit $\tau_B = 1200$ und das adaptive Nudgingverfahren; Beide Verfahren starten auf der rechten Seite in der Mitte.

ansetzen. Ermutigend ist die anfängliche recht schnelle Konvergenz. Hier stellt die Kostenfunktion J_2 (Abstand \mathcal{T} zu \mathcal{T}_Z), dadurch daß sie in einem Schritt zu berechnen und die Abhängigkeit von der Relaxationstemperatur linear ist, eine gute Wahl dar. Für den Bereich sehr nahe an der Lösung ist dagegen aus den folgenden Gründen die Kostenfunktion J (Abstand $\bar{\mathcal{T}}$ zu \mathcal{T}_Z) besser geeignet: Zum einen kann sie in diesem Bereich ebenfalls als nahezu linear bezüglich der Relaxationstemperatur angenommen werden, zum anderen ist ihre Minimierung gleichbedeutend mit der Lösung der Assimilationsaufgabe, da sie im Gegensatz zu J_2 den Mittelwert der Temperatur berücksichtigt. Beide Kostenfunktionen lassen sich durch die Variation des Zeitraumes T , über den die Mitteltemperatur berechnet wird, ineinander überführen, so daß es sich anbietet, mit $T = 1$ (was J_2 entspricht) beginnend, bei zunehmender Annäherung an die Lösung den Wert von T zu erhöhen. In welchem Maße dieses geschehen muß, um zu einer effektiven Optimierung zu führen, bleibt zu untersuchen.

Kapitel 5

Diskussion und Ausblick

Das adjungierte Modell: Die Arbeit dokumentiert die erfolgreiche Anwendung des TAMC zur Erzeugung eines adjungierten numerischen Modells der globalen atmosphärischen Zirkulation. Nach der Vorbereitung des Codes kann dieses mit dem gesamten Programm in einem Durchgang geschehen, so daß die Schnittstellen zwischen den Unterprogrammen automatisch generiert werden. Den wichtigsten Schritt in der Vorbereitung des Codes stellt in der vorliegenden Arbeit die Umformulierung ganzzahliger Indexberechnungen dar, da diese vom TAMC nur bei expliziter Abhängigkeit von einem Schleifenindex korrekt berücksichtigt werden. Der vom TAMC erzeugte adjungierte Code bietet wenig Ansatzpunkte für Optimierungen und ist daher als effizient zu bezeichnen. Durch die Speicherung der Trajektorie des Vorwärtslaufes liegt die Laufzeit des adjungierten Programmcodes nicht wesentlich über der des regulären PUMA; Giering und Kaminski (1998a) geben für den Laufzeitunterschied in Abhängigkeit vom erforderlichen Aufwand für die Trajektorienberechnung den Faktor 1-3 an. Die bewußte Einfachheit der physikalischen Parameterisierungen im PUMA führt zur Abwesenheit von Unstetigkeiten und erleichtert damit die Formulierung des adjungierten Modells. Das modulare Konzept bietet es aber an, die bereits existierenden Erweiterungen für Strahlung (Zender, in Vorbereitung), Feuchte (Hilti, in Vorbereitung) und Biome (Micheels, in Vorbereitung) in das adjungierte Modell mit einzubeziehen, um so die Sensitivität der Wechselwirkungen des dynamischen Kerns mit den anderen Prozessen gezielt untersuchen zu können.

Optimale Störungen: Es werden die optimalen Störungen bezüglich einer totalen Energienorm über 1, 12, 24 und 36 Stunden für einen zonalsymmetrischen Jet in den mittleren Breiten berechnet und untersucht. Die Ergebnisse für 24 und 36 Stunden zeigen eine modale Struktur mit der Wellenzahl Zehn bzw. Neun. Sie führen im Modell zur Entwicklung einer baroklinen Welle. Im Rahmen der Vergleichbarkeit besteht weitgehende Ähnlichkeit der von normalen Moden ausgelösten Entwicklung (Simmons und Hoskins 1978). Das Auftreten von Schwerewellen bei der Berechnung der optimalen Störungen über kürzere

Zeiten ist wahrscheinlich mit der Numerik des PUMA gekoppelt. Der gewählte Weg zur Erzeugung des adjungierten Modells führt dazu, daß nicht nur die Sensitivität der Modellgleichungen, sondern auch durch die Diskretisierung bedingte Effekte berücksichtigt werden (vgl. Sirkes und Tziperman 1997). Die Art der Repräsentation von Schwerewellen im PUMA macht diese Ergebnisse für eine meteorologische Interpretation weitgehend unbrauchbar. Weitere Experimente mit variiertem Zeitschritt könnten jedoch helfen, den Effekt besser einzugrenzen. Denkbar wäre auch die möglicherweise gewichtete Einbeziehung mehrerer Zeitebenen in die Norm zur Bewertung des Wachstums. Das würde dazu führen, daß hochfrequente Fluktuationen nicht als Wachstum bewertet werden und damit eine Art spektrale Auswahl der durch die optimalen Störungen ausgelösten Wellenphänomene ermöglichen.

Klimaassimilation durch optimierten Antrieb: Die Untersuchung des erweiterten Verfahrens zur Anpassung des PUMA an ein vorgegebenes Klima über die Parameterisierung des diabatischen Antriebes zeigt die prinzipielle Einsetzbarkeit des adjungierten Modells. Die starke Nichtlinearität der Abhängigkeit der Mitteltemperatur von den Parametern macht allerdings Maßnahmen erforderlich, die von der formalen Lösung eines Optimierungsproblems abweichen. Der untersuchte Ansatz verwendet die Ergebnisse der Optimierung bezüglich einer modifizierten Kostenfunktion zu einer kleinschrittigen Veränderung der Parameter. Dies hat den weiteren Vorteil, daß nicht nach jedem Optimierungsschritt ein langwieriges Einschwingen des Modells erforderlich ist. Die gefundenen Ergebnisse ermutigen zu einer weitergehenden Untersuchung des verfolgten Ansatzes. Wenn auch das Verfahren in der gezeigten Form keinen Vorteil in der Genauigkeit bietet, so ist doch zu erwarten, daß die bestehenden Schwächen durch gezielte Maßnahmen zu beheben sind. Insbesondere die schrittweise Rückführung der modifizierten Kostenfunktion auf die Form, deren Minimierung nicht nur näherungsweise zur Lösung des Assimilierungsproblems führt, stellt eine solche Möglichkeit zur Weiterentwicklung dar.

Das beschriebene Verfahren könnte in einer verbesserten Form dazu dienen, Klimaszenarien aus komplexeren Modellen im PUMA zu untersuchen und beispielsweise die Variabilität der jeweiligen Modellklimate zu vergleichen. Problematisch bleibt dabei die nicht gesicherte Eindeutigkeit einer in diesem Zusammenhang nur näherungsweise möglichen Klimaanpassung. Auch bleibt zu untersuchen, ob die Anpassung der Mitteltemperatur mit einer Anpassung der Dynamik einhergeht.

Dank gebührt

Dr. Larry und Prof. Fraedrich, Dr. Kaminski, Dr. Giering, Dr. Frisius,
Dr. *in spe* Christian I., Dipl.-Met. David, Dipl.-Ing. *in spe* Bettina, Evelina,
Diana, la Dra. Maïke y los bandoleros (esp. Don Juan), Mathias,
Jan und Thomas, Dr. Whiting und natürlich den Dres. Blessing,

sowie vielen anderen mehr,

für die jeweilige, sehr verschiedenartige Unterstützung während meines
Studiums und dieser Arbeit.

Literaturverzeichnis

- Bauer, S., 1996: Untersuchung einer anthropogenen Klimaänderung mit einem vereinfachten globalen atmosphärischen Zirkulationsmodell. Diplomarbeit, Meteor. Institut, Universität Hamburg, 70 S.
- Bischof, C., P. Khademi, A. Maurer, und A. Carle, 1996: ADIFOR 2.0: Automatic differentiation of Fortran 77 programs. *IEEE Comp. Sci. & Eng.*, **3**, 18–32.
- Bornemann, M., 1999: Untersuchungen der Struktur der Hadley-Zelle anhand von Sensitivitätsstudien. Diplomarbeit, Meteor. Institut, Universität Hamburg, 85 S.
- Bouteloup, Y., 1997: Forecast of operational forecast skill with the adjoint of a primitive equation model. *Mon. Wea. Rev.*, **125**, 2984–2997.
- Buizza, R. und T. Palmer, 1995: The singular-vector structure of the atmospheric global circulation. *J. Atmos. Sci.*, **52**, 1434–1456.
- Buizza, R., J. Tribbia, F. Molteni, und T. Palmer, 1993: Computation of optimal unstable structures for a numerical weather prediction model. *Tellus*, **45A**, 388–407.
- Courant, R. und D. Hilbert, 1962: *Methods of Mathematical Physics*, Bd. ii. Interscience Publishers, 830 S.
- Courtier, P., 1993: Important literature on the use of adjoint, variational methods and the kalman filter in meteorology. *Tellus*, **45A**, 342–357.
- Eckert, C., 1998: *On Predictability Limits of ENSO*. Dissertation, Meteor. Institut, Universität Hamburg, Bundesstraße 55, 20146 Hamburg, Germany, 76 S.
- Ehrendorfer, M., R. M. Errico, und K. D. Raeder, 1999: Singular-vector perturbation growth in a primitive equation model with moist physics. *J. Atmos. Sci.*, **56**, 1627–1648.
- Epstein, B. F., 1969: Stochastic dynamic prediction. *Tellus*, **21**, 739–759.

- Errico, R. M., 1997: What is an adjoint model? *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **78**, 2577–2591.
- Farrel, B. F. und P. J. Ioannou, 1996: Generalized stability theory. part i: Autonomous operators. *J. Atmos. Sci.*, **53**, 2025 – 2040.
- Fraedrich, K., E. Kirk, und F. Lunkeit, 1998: Portable University Model of the Atmosphere. Technical Report **16**, DKRZ, 37 S.
- Franzke, C., 1998: Variabilität zweier Stromtracks in einem vereinfachten atmosphärenmodell. Diplomarbeit, Meteor. Institut, Universität Hamburg, 75 S.
- Frisius, T., 1995: Simulation eines Stormtracks in einem vereinfachten globalen atmosphärischen Zirkulationsmodell. Diplomarbeit, Meteor. Institut, Universität Hamburg, 73 S.
- Frisius, T., F. Lunkeit, K. Fraedrich, und I. James, 1998: Storm-track organization and variability in a simplified global circulation model. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **124**, 1019–1043.
- Giering, R., 1999: *Tangent linear and Adjoint Model Compiler, Users manual 1.4*. [<http://puddle.mit.edu/~ralf/tamc>].
- Giering, R. und T. Kaminski, 1996: Recipes for adjoint code construction. Technical Report **212**, Max-Planck-Institut für Meteorologie.
- Giering, R. und T. Kaminski, 1998a: Comparison of automatically generated code for evaluation of first and second order derivatives to hand written code from the Minpack-2 collection. *Automatic Differentiation for adjoint code generation*, Faure, C., Hrsg., Bd. 3555. INRIA.
- Giering, R. und T. Kaminski, 1998b: Recipes for adjoint code construction. *ACM Trans. On Math. Software*, **24**, 437–474.
- Golub, G. H. und C. E. van Loan, 1983: *Matrix Computations*. North Oxford Academic Publ. Co. Ltd.
- Griewank, A., 1992: Achieving logarithmic growth of temporal and spatial complexity in reverse automatic differentiation. *Optimization Methods and Software*, **1**, 35–54.
- Hoskins, B. J. und A. J. Simmons, 1975: A multi-layer spectral model and the semi-implicit method. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **101**, 637–655.
- Iollo, A. und M. D. Salas, 1999: Optimum transsonic airfoils based on the euler equations. *Computers & Fluids*, **28**(4-5), 653–674.

- Kuo, Y., X. Zou, und Y. Guo, 1996: Variational assimilation of precipitable water using a nonhydrostatic mesoscale adjoint model. 1. Moisture retrieval and sensitivity experiments. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 122–147.
- Lanczos, C., 1950: An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *J. Res. National Bureau of Standards*, **45**, 246–263.
- Li, B. und T.-C. J. Yeh, 1998: Sensitivity and moment analyses of head in variably saturated regimes. *Advances in Water Resources*, **21**(6), 447–485.
- Lunkeit, F., K. Fraedrich, und S. E. Bauer, 1998: Storm tracks in a warmer climate: sensitivity studies with a simplified global circulation model. *Climate Dynamics*, Bd. 14. Springer-Verlag, 813–826.
- Mahfouf, J.-F., 1999: Influence of physical processes on the tangent-linear approximation. *Tellus*, **51A**, 147–166.
- Marchuk, G. I., 1974: *Numerical Solution of Problems in Atmospheric and Oceanic Dynamics*. Gidrometeoizdat, Leningrad. (Auf Russisch).
- Marshall, J. und F. Molteni, 1993: Toward a dynamical understanding of planetary-scale flow regimes. *J. Atmos. Sci.*, **50**, 1792–1818.
- Molteni, F., 1996a: On the dynamics of planetary flow regimes. part i: The role of high-frequency transients. *J. Atmos. Sci.*, **53**, 1950–1971.
- Molteni, F., 1996b: On the dynamics of planetary flow regimes. part ii: Results from a hierarchy of orographically forced models. *J. Atmos. Sci.*, **53**, 1972–1992.
- Müller, W., 1999: Eine nichtlineare Systemanalyse der atmosphärischen Zirkulation der mittleren Breiten in idealisierten Modellexperimenten. Diplomarbeit, Meteor. Institut, Universität Hamburg, 106 S.
- NAG, 1991: *NAG Fortran Library Manual, Mark 15*. Numerical Algorithms Group.
- Navon, I. M., 1997: Practical and theoretical aspects of adjoint parameter estimation and identifiability in meteorology and oceanography. *Dyn. Atmos. Oceans*, **27**, 55–79.
- Navon, I. M. und X. Zou, 1991: Application of the adjoint model in meteorology. *Automatic Differentiation of Algorithms: Theory, Implementation, and Application*, Griewank, A. und Corlies, G., Hrsg.. SIAM, 202–207.

- Oortwijn, J., 1998: Predictability of the onset of blocking and strong zonal flow regimes. *J. Atmos. Sci.*, **55**, 973–994.
- Opfer, G., 1994: *Numerische Mathematik für Anfänger*. Vieweg, 295 S.
- Palmer, T. N., R. Gelaro, J. Barkmeijer, und R. Buizza, 1998: Singular vectors, metrics, and adaptive observations. *J. Atmos. Sci.*, **55**, 633–653.
- Parlett, B. N. und D. S. Scott, 1979: The lanczos algorithm with selective orthogonolization. *Mathematics of Computation*, **33**, 217–238.
- Penenko, V. V. und N. N. Obraztsov, 1976: A variational initialization method for the fields of the meteorological elements. *Meteorol. Gidrol. (Soviet Meteorol. Hydrol.)*, **11**, 1–11. (Englische Übersetzung).
- Rhodin, A., U. Callies, und D. P. Eppel, 1996: *IMAS – Integrated Modeling and Analysis System*. GKSS-Forschungszentrum Geesthacht GmbH, 99 S.
- Rostaing, N., S. Dalmas, und A. Galligo, 1993: Automatic differentiation in Odyssee. *Tellus*, **45A**, 558–568.
- Simmons, A. J. und B. J. Hoskins, 1978: The life cycles of some nonlinear baroclinic waves. *J. Atmos. Sci.*, **35**, 414–432.
- Sirkes, Z. und E. Tziperman, 1997: Finite difference of adjoint or adjoint of finite difference? *Mon. Wea. Rev.*, **125**, 3373–3378.
- Talagrand, O., 1991: The use of adjoint equations in numerical modeling of the atmospheric circulation. *Automatic Differentiation of Algorithms: Theory, Implementation, and Application*, Griewank, A. und Corlies, G., Hrsg.. SIAM, 169–180.
- Ulbrich, U. und P. Speth, 1991: The global energy cycle of stationary and transient atmospheric waves. Results from ECMWF analyses. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **45**, 125–138.
- Walter, K., 1999: Der Einfluß von SST-Anomalien in mittleren Breiten auf die atmosphärische Zirkulation: Idealisierte Modellexperimente. Diplomarbeit, Meteor. Institut, Universität Hamburg, 129 S.
- Young, N., 1988: *An introduction to Hilbert space*. Cambridge University Press, 239 S.

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Arbeit unter Verwendung der angegebenen Literaturquellen selbständig angefertigt habe.

Hamburg, den 10. Januar 2008