
Benutzeranleitung

FLADIS

IVU Umwelt GmbH, August 2012

Inhalt

1	Übersicht FLADIS	1-1
1.1	Das Programmsystem FLADIS.....	1-2
2	Interpolationsverfahren	2-1
2.1	Übersicht Interpolation.....	2-2
2.1.1	Shepard – Verfahren.....	2-2
2.1.2	Radiale Basisfunktions – Methoden.....	2-4
2.1.3	Hardy’s Multiquadriken	2-5
2.1.4	Duchons Thin Plate Spline.....	2-7
2.1.5	Franke.....	2-8
2.1.6	Interpolation nach Triangulierung.....	2-11
2.1.7	Beier/Doppelfeld – Verfahren.....	2-12
2.1.8	Optimale Interpolation	2-13
2.1.9	Literatur.....	2-17
3	Modellansätze.....	3-1
3.1	Bilanzierungsmodell	3-2
3.1.1	Beschreibung	3-2
3.1.2	Einbringen von Ferntransportsituationen - Regressionsanalyse	3-3
3.1.3	Bilanzierung ohne Höhenmodell	3-4
3.2	Lineares Modell	3-5
3.3	Externes Modell.....	3-5
3.4	Kombination aus Modell und Interpolation.....	3-7
3.4.1	Mittelwertbildung von gewichteten Interpolationen.....	3-7
4	Datenassimilation.....	4-1
4.1	Beschreibung.....	4-2
5	Delta Methode.....	5-1
5.1	Beschreibung.....	5-2
5.2	Literatur	5-4
6	Datenformate	6-1

6.1	Allgemeines	6-2
6.2	Rezeptorreihen im ASCII Format.....	6-2
6.2.1	Messgrößenbeschreibung	6-3
6.2.2	Stationsbeschreibungsdatei	6-3
6.3	LASAT – Format.....	6-4
6.4	REM – CALGRID Binärformat	6-5
6.5	NetCDF – Format	6-6
6.6	Meteorologiefeld (FU Berlin).....	6-7
7	Einheitliche Emissions Schnittstelle	7-1
7.1	Emissionskataster als Eingangsdaten	7-2
7.2	Einheitliche Emissions – Schnittstelle (EES)	7-2
7.3	Definition des Formats der Emissionskatasterdaten (EKA)	7-3
7.3.1	Allgemein	7-3
7.3.2	Punktquellen	7-4
7.3.3	Linienquellen.....	7-4
7.3.4	Flächenquellen.....	7-4
7.4	Ablauf der EES	7-5
7.4.1	Summation der Emissionskataster (Gitterweite)	7-5
7.4.2	Clusterung	7-8
7.4.3	Erzeugung der zeitaufgelösten Emissionscluster.....	7-10
7.4.4	Format der Ganglinien	7-12
7.4.5	Einbringen der Quellschöhe	7-13
7.4.6	Ablegen der Clusterdateien	7-13
8	Kreuzvalidierung	8-1
8.1	Beschreibung Kreuzvalidierung	8-2
8.2	Anwendungsbeispiel.....	8-3
9	Datenmanagement	9-1
9.1	Begriffsdefinitionen	9-2
9.2	Allgemeines	9-2
9.3	Beschreibung der Meta Informationen.....	9-3
10	Benutzung.....	10-1
10.1	Einleitung.....	10-2

10.2	Programmfenster	10-3
10.3	Menü Datei	10-4
10.3.1	Projekt-Datei neu	10-4
10.3.2	Projekt-Datei öffnen	10-4
10.3.3	Projekt-Datei speichern.....	10-4
10.3.4	Projekt-Datei speichern unter	10-5
10.3.5	Batch Datei bearbeiten	10-5
10.3.6	Ausführen Batch Datei	10-6
10.3.7	Datenbank verwalten	10-6
10.3.7.1	Verbinden	10-7
10.3.7.2	Root Directory	10-7
10.3.7.3	Datenbank Info.....	10-8
10.3.7.4	Synchronisierung Datensätze	10-8
10.3.7.5	Synchronisierung Meta Informationen	10-10
10.3.8	Datensatz.....	10-11
10.3.8.1	Erzeugen	10-12
10.3.8.2	Hinzufügen.....	10-15
10.3.8.3	Auswählen	10-16
10.3.8.4	Voreinstellungen	10-19
10.3.9	<Datei>.fpr	10-20
10.3.10	Beenden	10-20
10.4	Menü Vorgaben	10-21
10.4.1	Umgebungsdateien.....	10-22
10.4.1.1	Umgebungsdateien: Messwerte.....	10-22
10.4.1.2	Umgebungsdateien: Stationsdaten	10-23
10.4.1.3	Umgebungsdateien: DHM.....	10-25
10.4.1.4	Umgebungsdateien: Ausgabe.....	10-26
10.4.2	Datenformat	10-27
10.4.3	Zeitauswahl.....	10-29
10.4.3.1	Zeitauswahl: Zeitbereich	10-29
10.4.3.2	Zeitauswahl: Zeitbezug	10-30
10.4.3.3	Zeitauswahl: Unterbrechungen	10-31
10.4.3.4	Zeitauswahl: Stichprobe.....	10-32
10.4.4	Messgröße und Umrechnung	10-33

10.4.5	Meteorologiefeld	10-34
10.4.6	Perzentilwertberechnung	10-35
10.4.7	EU – Grenzwerte	10-36
10.4.8	Fehlermeldungen	10-38
10.4.9	Datenprüfung	10-39
10.4.9.1	Dialog Datenprüfung	10-39
10.4.9.2	Dialog Kreuzvalidierung	10-40
10.5	Menü Modell	10-43
10.5.1	Gitterweite.....	10-44
10.5.2	Ausschnitt	10-45
10.5.3	Interpolation	10-46
10.5.3.1	Einstellungen Shepard – Verfahren	10-47
10.5.3.2	Einstellungen Hardy – Verfahren	10-48
10.5.3.3	Einstellungen Duchon – Verfahren	10-49
10.5.3.4	Einstellungen Franke – Verfahren.....	10-50
10.5.3.5	Einstellungen Triangulierung	10-51
10.5.3.6	Einstellungen Beier/Doppelfeld – Verfahren	10-51
10.5.3.7	Einstellungen Optimale Interpolation	10-52
10.5.3.8	Zweischritt – Verfahren	10-55
10.5.4	Modelle: Allgemein.....	10-56
10.5.4.1	Modelle: Bilanzmodell	10-58
10.5.4.2	Modelle: Externes Modell.....	10-60
10.5.4.3	Modelle: Depositionsmodell	10-63
10.5.4.4	Modelle: Datenassimilation	10-64
10.6	Menü Ausgabe	10-65
10.6.1	Ausgabe: Allgemein	10-66
10.6.1.1	Stützstellen	10-67
10.6.1.2	Gitterdaten	10-68
10.6.1.3	Logdatei	10-69
10.6.2	Ausgabe: GIF – Einstellungen	10-71
10.6.2.1	GIF Einstellungen: Mittelwerte	10-71
10.6.2.2	GIF Einstellungen: Perzentile	10-76
10.6.3	Ausgabe: GIF Geodaten Überlagerung	10-76
10.6.4	Ausgabe: ArcInfo GeoFile.....	10-78

10.6.5	Ausgabe: GIF mit Darstellung der Meteorologie	10-79
10.6.6	Ausgabe: GIF mit Darstellung der Messwerte	10-80
10.7	Menü EES	10-82
10.7.1	Einstellungen EES	10-83
10.7.2	EES: Ausgabe.....	10-85
10.8	Menü Delta	10-86
10.8.1	Allgemein	10-87
10.8.2	Basisjahr	10-88
10.8.3	Prognosejahr	10-90
10.9	Menü Grafik	10-91
10.9.1	Grafik: Darstellen	10-92
10.9.1.1	Grafik	10-93
10.9.1.2	Einstellungen	10-94
10.9.1.3	Zoom.....	10-97
10.9.2	Grafik: Voreinstellungen.....	10-98
10.10	Menü Auswertung	10-99
10.10.1	FLADIS Raster laden	10-99
10.10.2	Berechnung	10-100
10.11	Menü Ansicht	10-102
10.11.1	Symbolleiste	10-102
10.11.2	Statusleiste	10-103
10.11.3	Messung Fenster	10-103
10.11.4	Modell Fenster	10-103
10.12	Menü Hilfe.....	10-103
10.12.1	Standard	10-104
10.12.2	Info.....	10-105
10.12.3	Kontextbezogene Hilfe.....	10-105
11	Externe Software	11-1
11.1	NetCDF-Software	11-2

1 Übersicht FLADIS

1.1 Das Programmsystem FLADIS

FLADIS ist ein Programmsystem zur flächenhaften Darstellung der Immissionssituation in einem vorgegebenen Gebiet. Die Grundfunktionalität besteht darin, Punktmessdaten durch reine Interpolation oder durch Kopplung der Interpolationsergebnisse mit einem Modellhintergrund in die Fläche zu übertragen. Punktmessdaten sind dabei in erster Linie Luftschadstoffe wie z.B. Benzol, NO₂, PM₁₀ oder O₃, es können aber auch meteorologische Daten wie Temperatur, Druck oder Windrichtung und –geschwindigkeit visualisiert werden. Daneben stellt FLADIS eine Reihe von Werkzeugen zur Verfügung, um die eingelesenen Daten zu analysieren und zu verarbeiten.

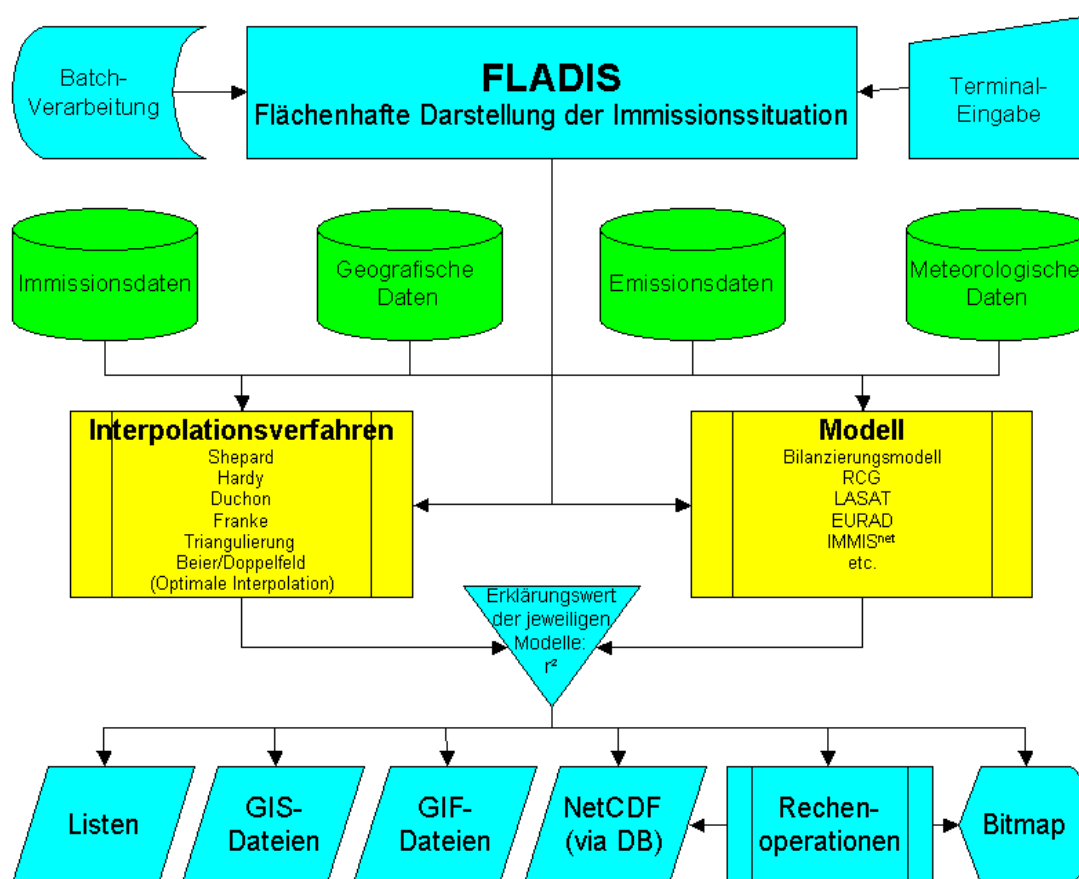


Abb. 1: Flussdiagramm FLADIS

Abb. 1 zeigt das Ablaufschema von FLADIS. Für jeden Zeitschritt, für den Daten vorliegen, wird wahlweise eine reine Interpolation oder eine gewichtete Kopplung der Interpolationsergebnisse mit Modellergebnissen durchgeführt. Es stehen zur Zeit sieben verschiedene Interpolationsverfahren zur Verfügung, die in **Kapitel 2** näher erläutert werden. Modellergebnisse können sowohl von internen als auch von externen Modellen bezogen werden. Als interne Modelle sind ein Bilanzierungsansatz und ein

lineares statistisches Verfahren implementiert. Externe Modelle wie z.B. REM-CALGRID, LASAT, EURAD oder IMMIS^{net} können über definierte Schnittstellen angebunden werden. Interne Modelle, die Einbindung externer Modelle und die Kopplung von Modell und Interpolation werden in **Kapitel 3** beschrieben.

Eingangsdaten für FLADIS sind je nach Darstellungsverfahren (mit oder ohne Modellhintergrund, mit internem Modell, mit externem Modell etc.) Immissionsdaten, geografische Daten, Emissionsdaten, meteorologische Daten und/oder Modelldaten. Die Emissionsstruktur der einzelnen Schadstoffe kann über eine einheitliche Emissionsschnittstelle (EES) direkt aus Emissionskatastern verarbeitet werden (**Kapitel 7**). Ein statistisches Depositionsmodell erlaubt die Abschätzung und Darstellung der Deposition von Nitrat (**Kapitel 10.5.4.3**).

Da FLADIS das Immissionsfeld in der gleichen zeitlichen Auflösung wie die vorliegenden Daten interpolieren kann, stehen alle in der EU-Rahmenrichtlinie 96/62/EG aufgeführten Kenngrößen wie Stundenmittel, Tagesmittel, Jahresmittel und Überschreitungshäufigkeiten sowie deren Unsicherheiten zur Verfügung. Die Auswertungen werden in FLADIS gemäß der aktuellen Tochterrichtlinien vorgenommen (**Kapitel 10.4.7**).

Werden interpolierte Messdaten und Modelldaten miteinander kombiniert, so stellt FLADIS die Option zur Verfügung, vor der Kopplung eine Datenassimilation für die Modelldaten durchzuführen, d.h., die Modelldaten gegen die Messdaten zu ziehen (**Kapitel 4**). Dies erweist sich insbesondere bei großen Differenzen zwischen Messung und Modell als sinnvoll. Als Assimilationsverfahren wird in FLADIS die Optimale Interpolation (OI) eingesetzt, ein geostatistisches Verfahren, das Modellwerte auf der Basis von Messwerten räumlich differenziert in Abhängigkeit von Struktur und Einflussbereich der Messdaten korrigiert (**Kapitel 2.1.8**). Die OI kann in FLADIS auch als Interpolationsverfahren verwendet werden.

Die flächenhafte Darstellung der Immissionsbelastung zukünftiger Jahre kann in FLADIS mit Hilfe der Delta-Methode (**Kapitel 5**) berechnet werden. Diese beruht auf der Annahme, dass die mittlere Änderung der Konzentrationen zwischen den Modellrechnungen für ein Basisjahr und ein Prognosejahr verwendet werden kann, um die mittlere Änderung der Messwerte über den gleichen Zeitraum zu prognostizieren. Auf diese Weise wird die Struktur der Messwerte des Basisjahrs in die Modellprognose integriert.

Mit der in FLADIS implementierten Kreuzvalidierung (**Kapitel 8**) kann die räumliche Prognosefähigkeit des ausgewählten Darstellungsverfahrens untersucht werden, d.h. wie gut das Verfahren bei gegebener Datenbasis in der Lage ist, Bereiche ohne Messwerte wiederzugeben. Gleichzeitig liefern die Ergebnisse der Kreuzvalidierung Anhaltspunkte für die Optimierung von Messnetzen.

Die Ausgabe der Ergebnisse erfolgt in FLADIS in Form von Listen, als Karten für verschieden GIS-Systeme (z.B. ArcGIS, MapInfo) und als GIF-Dateien. Die Ergebnisse

des jeweils zuletzt durchgeführten FLADIS-Laufs können zudem direkt in FLADIS dargestellt (**Kapitel 10.9**) und für einfache Rechenoperationen (z. B. Bildung relativer Differenzen) in FLADIS weiterverwendet werden (**Kapitel 10.10**).

Die Verwaltung und Verwendung großer Mengen von Modell- und Ergebnisdaten wird in FLADIS durch ein Datenmanagementsystem unterstützt (**Kapitel 9**). Meta-Informationen (**Kapitel 9.3**) der zu verwendenden Datensätze werden in einer Datenbank abgelegt, die Datensätze selbst liegen in einem oder mehreren Verzeichnissen im LAN (local area network). Wird das Datenmanagementsystem genutzt, so können z. B. die Ergebnisse des jeweils zuletzt durchgeführten FLADIS-Laufs oder einer in FLADIS durchgeführten Rechenoperation (**Kapitel 10.10**) im NetCDF-Format abgespeichert und die zugehörigen Meta-Informationen in die Datenbank eingetragen werden. Diese Vorgehensweise erlaubt einen schnellen und übersichtlichen Zugriff auf die Ergebnisse bereits durchgeführter FLADIS-Läufe, die über die Datenbank wieder in FLADIS geladen, erneut grafisch dargestellt oder für weitere Rechenoperationen verwendet werden können.

2 Interpolationsverfahren

2.1 Übersicht Interpolation

Für die Lösung des Interpolationsproblems gibt es verschiedene Ansätze. (siehe auch:[Hos89])

Als Beispiele seien genannt:

- i) inverse Abstands-Wichtungs-Methoden (z.B. Shepard, ISDW)
- ii) radiale Basisfunktions-Methoden (z.B. Hardy, Duchon, Franke)
- iii) Finite-Element-Methoden (z.B. Interpolation nach Triangulierung)

Die Verfahren werden noch unterschieden in *global* - alle Stützstellen (x_i, y_i, f_i) werden zur Berechnung des Funktionswertes F an einer beliebigen Stelle (x, y) benutzt, oder *lokal* - nur Stützstellen innerhalb eines abgrenzten Bereichs um (x, y) werden benutzt.

In diesem Kapitel werden die im Programm FLADIS implementierten Interpolationsverfahren vorgestellt.

2.1.1 Shepard – Verfahren

Verfahren dieses Typs werden auch als *Inverse-Abstands-Wichtungs-Methode* bezeichnet und sind im Prinzip Verallgemeinerungen von Shepard's Grundidee (siehe auch:[She68]):

$$F(x, y) = \sum_{i=0}^N w_i(x) f_i$$

Die sogenannten Gewichtsfunktionen w_i werden dabei so konstruiert, dass der Einfluss eines Stützpunktes f_i mit zunehmender Entfernung vom Interpolationspunkt $F(x, y)$ abnimmt (siehe Abbildung).

Eine häufige Wahl für die Gewichtsfunktionen ist:

$$w_i(x, y) = \frac{\frac{1}{d_i^\mu}(x, y)}{\sum_{i=0}^N \frac{1}{d_i^\mu}(x, y)}$$

mit dem euklidischen Abstand

$$d_i(x, y) = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$$

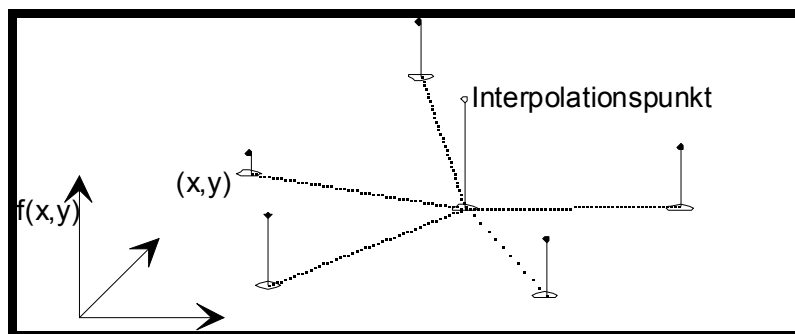


Abb. 2: Globales Shepard-Verfahren

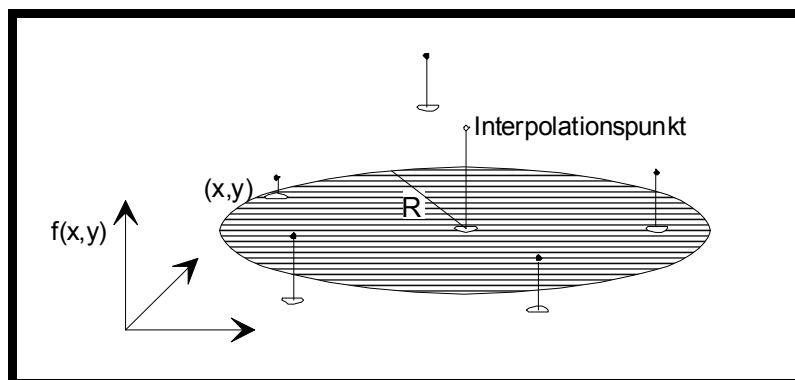


Abb. 3: Franke-Little-Gewichte

Vorteil:

Einfache Berechnung, da keine Lösung von Gleichungssystemen notwendig ist.

Nachteil:

$F(x, y)$ ist für $0 < \mu \leq 1$ unstetig in der ersten Ableitung an den Stützpunkten, d.h. die Interpolationsfläche hat Spitzen in den Stützpunkten. Für $\mu > 1$ ist die Tangentialebene an den Stützstellen horizontal.

Darüber hinaus hat $F(x, y)$ globalen Charakter, d.h. die Änderung eines Datenpunktes beeinflusst die gesamte Interpolationsfläche und erfordert eine komplette Neuberechnung.

Dieses globale Verhalten lässt sich durch die Verwendung der sogenannten *Franke-Little-Gewichtsfunktion* (siehe:[Fra82]):

$$w_i(x, y) = \frac{\sigma_i^\mu}{\sum_{i=0}^N \sigma_i^{\mu y}}$$

mit

$$\sigma_i = \begin{cases} \frac{R - d_i(x, y)}{R^* d_i(x, y)} & \text{wenn } \sigma_i > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

in eine lokale Methode umwandeln. Bei der Bestimmung eines Punktes werden nur diejenigen Datenpunkte herangezogen, die in einem Kreis mit Radius R und Mittelpunkt (x, y) liegen (siehe Abbildung). Der Parameter R ist dabei sorgfältig zu wählen.

2.1.2 Radiale Basisfunktions – Methoden

Die Gruppe der radialen Basisfunktions-Methoden lässt sich durch folgende Formel charakterisieren:

$$F(x, y) = \sum_{i=1}^N a_i R_i(x, y) + p_m(x, y)$$

Die R_i sind dabei radiale Funktionen des Abstandes $d_i(x, y)$ des Punktes (x_i, y_i) zum Interpolationspunkt (x, y) . Das Polynom p_m vom Grade m wird benötigt, um eine polynominale Genauigkeit vom entsprechendem Grad zu erreichen.

Die einzelnen Verfahren unterscheiden sich in der Wahl der Basisfunktionen R_i . Die Koeffizienten a_i werden durch das Lösen eines linearen Gleichungssystems ermittelt:

$$\sum_{i=1}^N a_i p_m(x_i, y_i) = 0$$

Diese Gleichung lässt sich physikalisch deuten als Gleichgewichtsbedingung (Summe aller Kräfte bzw. Momente gleich Null; (siehe auch:[Fra85]). In den folgenden Kapiteln werden drei radiale Basisfunktions-Methoden vorgestellt.

2.1.3 Hardy's Multiquadriken

In dieser Methode wird eine quadratische Form als Basisfunktion gewählt (siehe auch:[Har90]):

$$R_i(x, y) = [d_i(x, y)^2 + R^2]^\mu$$

Zunächst ist die Wahl von R und μ frei. Wählt man $\mu = 0.5$ so erhält man die Gleichung eines Rotationshyperboloids. Dieser Wert wird allgemein in der Literatur verwendet.

Die optimale Wahl des Parameter R^2 ist ein offenes Problem (siehe auch:[Carl 91]). Die Wahl ist relativ unabhängig von der Anzahl und der Verteilung der Stützpunkte und hängt stark von den Messwerten f_i ab. Eine gute Näherung (*Foley-Näherung* (siehe auch:[Fol87]) ist gegeben durch:

$$R^2 = \frac{I}{(I + 120V)^2}$$

Dazu werden die Daten zuerst skaliert:

$$\begin{aligned}\tilde{x}_i &= (x_i - x_{\min}) / (x_{\max} - x_{\min}) \\ \tilde{y}_i &= (y_i - y_{\min}) / (y_{\max} - y_{\min}) \\ \tilde{f}_i &= (f_i - f_{\min}) / (f_{\max} - f_{\min})\end{aligned}$$

für $i = 1, \dots, n$.

Mit der Methode der kleinsten Quadrate wird dann ein quadratisches Polynom $q(\tilde{x}, \tilde{y})$ berechnet. Mit der Varianz

$$V = \frac{\sum_{i=1}^n [\tilde{f}_i - q(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i)]^2}{n}$$

Die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung dieses Interpolationsproblems mit radialen Basisfunktionen ist gesichert.

Vorteil:

Das Verfahren liefert bei richtiger Wahl von r^2 und μ gute Interpolationsflächen.

Nachteil:

Das Gleichungssystem wächst mit der Anzahl der Datenpunkte. Bei größeren Datenmengen (> 100) verschlechtert sich die Kondition des Gleichungssystems zunehmend. Die Interpolationsfläche weist ein globales Verhalten auf.

Bemerkung:

Die Implementation in FLADIS erlaubt μ aus $\{-1, 1\}$; dies ist i.allg. ausreichend.

2.1.4 Duchons Thin Plate Spline

Für viele Anwendungen ist es sinnvoll, minimale Energiezustände anzustreben bzw. zu simulieren. Die sogenannten *Thin Plate Splines* (TPS) sind Lösungen des Variationsproblems minimaler Biegeenergie einer dünnen, unendlich ausgedehnten, elastischen Platte, die in den Stützpunkten aufliegt. Die radialen Basisfunktionen

$$R(x, y) = d_i^2(x, y) * \log d_i(x, y)$$

der Lösung des Variationsproblems sind die Fundamentallösungen einer Laplace-Differentialgleichung.

Mit diesen Basisfunktionen erhält man die Interpolationsfunktion

$$F(x, y) = \sum_{j=1}^N \alpha_j R_j(x, y) + a_1 + a_2 x + a_3 y.$$

Die letzten drei Terme gewährleisten (ähnlich der Multiquadriken Methode) die Reproduktion einer Ebene. Höhere Polynomgrade sind i.allg. nicht sinnvoll. Die $n + 3$ Koeffizienten μ_j, a_1, a_2 und a_3 werden durch Lösung des folgenden Gleichungssystems bestimmt:

$$F(x_i, y_i) = \sum_{j=1}^N \alpha_j P_j(x_i, y_i) + a_1 + a_2 x + a_3 y = f_i \quad i = 1, \dots, n$$

Und

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j = 0$$

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j x_j = 0$$

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j y_j = 0$$

Duchon benutzte daneben auch die Basisfunktion

$$R(x, y) = d_i^3(x, y).$$

Vorteil:

physikalische Deutung der Interpolationsfläche.

Nachteile:

Gleichungssystem wächst mit der Anzahl der Datenpunkte. Die Interpolationsfläche weist ein globales Verhalten auf.

2.1.5 Franke

Franke's TPS Methode (siehe:[Fra80]) hat lokalen Charakter.

$$F(x, y) = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N w_{ij}(x, y) q_{ij}(x, y)$$

Die $w_{ij}(x, y)$ sind wiederum Gewichtsfunktionen und die $q_{ij}(x, y)$ sind lokal approximierende Funktionen.

Die Gewichtsfunktionen werden aus der kubischen Hermitefunktion

$$h_0(t) := 1 - 3t^2 + 2t^3$$

durch folgende Überlegungen gewonnen:

(1)

Zerlege das Parametergebiet in Regionen $R_{ij} = [a_{i-1}, a_{i+1}] \times [b_{j-1}, b_{j+1}]$ in Abhängigkeit von der Verteilung der Daten ($i = 1, \dots, M$; $j = 1, \dots, N$; NPPR = number of points per region).

(2)

Konstruiere Gewichtsfunktionen, die

$$w_{ij}(x, y) \geq 0 \quad \text{und} \quad \sum_{ij} w_{ij}(x, y) = 1$$

erfüllen durch:

$$w_1(x) = \begin{cases} 1 & x < a_1 \\ h_0 \frac{x a_1}{a_2 a_1} & a_1 \leq x < a_2 \\ 0 & x \geq a_2 \end{cases}$$

$$w_i(x) = \begin{cases} 0 & x < a_{i1} \\ 1 w_{i1}(x) & a_{i1} \leq x < a_i \\ h_0 \frac{x a_i}{a_{i+1} a_i} & a_i \leq x < a_{i+1} \\ 0 & x \geq a_{i+1} \end{cases}$$

$$i = 2, \dots, M1$$

$$w_M(x) = \begin{cases} 0 & x < a_{M1} \\ 1 w_{M1}(x) & a_{M1} \leq x < a_M \\ 1 & x \geq a_M \end{cases}$$

Analog werden die Gewichtsfunktionen $w_1(y), \dots, w_N(y)$ konstruiert. Die gewünschten bivariaten Gewichtsfunktionen $w_{ij}(x, y)$ ergeben sich durch Multiplikation der entsprechenden univariaten Funktionen

$$w_{ij}(x, y) = w_i(x) w_j(y).$$

Die Funktionen $w_{ij}(x, y)$ bilden eine Zerlegung der Eins und haben lokale Trägereigenschaften.

Die lokal approximierenden Funktionen $q_{ij}(x, y)$ werden der Theorie der TPS entnommen und lassen sich durch folgenden Algorithmus ermitteln:

(1)

Stelle die Menge der zu interpolierenden Daten zusammen, die zu R_{ij} gehören.

(2)

Bestimme die Koeffizienten a_i, a_1, a_2 und a_3 für

$$q_{ij}(x, y) = \sum_{i \in R_{ij}} \alpha_i d_i^2(x, y) \log d_i(x, y) + a_1 + a_2 x + a_3 y$$

aus den Koeffizientengleichungen:

$$q_{ij}(x_k, y_k) = f_k$$

für $k = 1, \dots, n$ und den Randbedingungen:

$$\begin{aligned} \sum_{k \in R_{ij}} \alpha_k &= 0 \\ \sum_{k \in R_{ij}} \alpha_k x_k &= 0 \\ \sum_{k \in R_{ij}} \alpha_k y_k &= 0 \end{aligned}$$

Je lokaler die Funktion $F(x, y)$ sein soll, desto kleiner muss NPPR gewählt werden. Je kleiner allerdings NPPR ist, desto weniger glatt ist die resultierende Fläche. Ist den gegebenen Datenpunkten anzusehen, dass starke Gradienten unvermeidbar sind, so ist eine lokalere Form zu empfehlen und NPPR klein zu wählen.

Vorteil:

lokaler Charakter, daher auch für größere Datenmengen geeignet.

Nachteil:

die Wahl des besten Wertes für NPPR ist nur subjektiv möglich.

2.1.6 Interpolation nach Triangulierung

Eine Variante der Interpolation mit sehr lokalem Charakter bietet die Interpolation nach einer Triangulierung. Eine Menge von Dreiecken bildet genau dann eine Triangulierung einer gegebenen Datenpunktmenge, falls gilt:

- i) Nur die Datenpunkte bilden die Eckpunkte der Dreiecke.
- ii) Der Durchschnitt des Inneren aller Dreiecke ist leer (die Dreiecke überlappen nicht)
- iii) Die Vereinigung aller Dreiecke ergibt die konvexe Hülle aller Punkte (es gibt keine Löcher zwischen den Dreiecken)

Eine Triangulierung für mehr als vier Datenpunkte ist nicht mehr eindeutig, so dass man mittels eines ausgewählten Verfahren eine optimale Triangulierung finden muss. Im Programm FLADIS wird eine Delaunay Triangulierung basierend auf Voronoi-Diagrammen benutzt (siehe auch: [Abra91]). Der Algorithmus sieht folgendermaßen aus:

- 1) Starte mit einer Triangulation von 4 Punkten, in deren Dreiecken die Datenpunkte liegen.
- 2) Bestimme alle Dreiecke, in deren Umkreis der neu einzufügende Punkt liegt.
- 3) Ersetze diese Dreiecke durch Dreiecke, die aus dem neuen Datenpunkt und je einer äußeren Kante der zu ersetzenden Dreiecke bestehen.
- 4) Wiederhole Schritt 2 und 3 bis alle Datenpunkte trianguliert sind.
- 5) Entferne die Dreiecke, die mindestens einen der 4 Startpunkte als Eckpunkt besitzen.

Auf den so berechneten Teilflächen der Datenpunkte kann dann interpoliert werden. Dazu gibt es eine Reihe von Interpolationsschemata, z. B. einfaches lineares Interpolieren auf der Dreiecksfläche, Bezier-Flächen oder Coon'sche Flächen. Die beiden letzteren Verfahren erzeugen "glattere" Flächen an den Übergangsstellen der Dreiecke.

Im Programm FLADIS ist die Methode des linearen Interpolierens installiert. Dazu wird über einem Interpolationspunkt das Lot berechnet und im zweiten Schritt der Durchstoßpunkt des Lotes durch die Dreiecksfläche ermittelt. Für die Interpolationspunkte außerhalb der konvexen Hülle ist folgendermaßen extrapoliert worden: Auf den Punkten der konvexen Hülle sind horizontale Senkrechten zu den jeweiligen Kanten gebildet worden; so ergeben sich unendlich ausgedehnte Rechtecke und Dreiecke; für Interpolationspunkte in den Dreiecken wird der z-Wert auf den Wert des entsprechenden Datenpunktes gesetzt und für die Interpolationspunkte unter einem Rechteck entsprechend der Methode für die Punkte innerhalb der konvexen Hülle verfahren.

2.1.7 Beier/Doppelfeld – Verfahren

Für das Bundesland Nordrhein-Westfalen ist ein Interpolationsverfahren von Herrn Beier und Herrn Doppelfeld entwickelt worden (siehe [Beier2000]). Dieses Verfahren ist als weiteres Interpolationsverfahren in FLADIS implementiert worden. Für die Verwendung dieses Verfahrens muss in der Stationsbeschreibungsdatei für die Mess-Stationen eine Klassifizierung angegeben werden gemäß der folgenden Liste:

Tabelle 1: Klassifizierung der Stationen für das Beier/Doppelfeld-Verfahren mit Vorschlag für Einflussradien nach Literatur

Zeichen	Beschreibung	Radius
U	Messorte im urbanen Hintergrund	10 km
T	Verkehrsnahe Messorte	1 km
I	Industriennahe Messorte	2 km
R	Ländliche Messorte	20 km

Das Ergebnis der Interpolation ist neben den Flächenwerten der Mittelwerte die Angabe eines Fehlers. Dieser Fehler kann über die GIS-Ausgabe mit ausgegeben werden. Bei der Auswertung für einzelne Zeitschritte ist zu beachten, dass für jeden Zeitschritt mindestens eine Station vom Typ R (ländliche Station) vorhanden sein muss. Gibt es keinen Messwert für eine derartige Station, wird eine entsprechende Warnung ausgegeben und die Berechnung mit dem folgenden Zeitschritt fortgesetzt.

2.1.8 Optimale Interpolation

Die in den vorigen Kapiteln beschriebenen Interpolationsverfahren können grundsätzlich beliebig ohne Modellergebnisse als reine Interpolation oder mit Modellergebnissen gekoppelt (**Kapitel 3.4**) verwendet werden. Über eine Voreinstellung in FLADIS kann gewährleistet werden, dass auch bei Kombination des Interpolationsergebnisses mit einem Modellergebnis die gemessenen Werte in der flächenhaften Darstellung an den Messorten erhalten bleiben (**Kapitel 10.5.4**).

Das Verfahren der Optimalen Interpolation (OI) bildet hiervon eine Ausnahme. Es ist kein Interpolationsverfahren im eigentlichen Sinne, sondern kommt aus dem Bereich der Geostatistik und wurde ursprünglich von Gandin in die Meteorologie eingeführt [Ga65], um Beobachtungswerte in Modellrechnungen einfließen zu lassen (**Kapitel 4**). Die OI liefert daher nur sinnvolle Ergebnisse in Kombination mit einem Modellhintergrund. Sie beruht auf der Theorie der Prognose stochastischer Prozesse und erlaubt es, die räumlichen Beziehungen der Messwerte untereinander zu quantifizieren. Gleichzeitig kann ein möglicher Beobachtungsfehler an den Stationen berücksichtigt werden (**Kapitel 10.5.3.7**). Aus diesen Gründen ist die Wiedergabe stützstellen-treuer Werte zwar gegebenenfalls möglich, im Allgemeinen jedoch weder zu erwarten noch vom Verfahren zu gewährleisten. Ziel der Optimalen Interpolation ist es vielmehr, die Modellergebnisse gegen die Messdaten zu ziehen und die mittleren Feldstrukturen der gesuchten Größe in der Skala des Interpolationsrasters wiederzugeben. Während bei einer Kombination von Interpolations- und Modellergebnissen, wie sie in **Kapitel 3.4** beschrieben ist, die Wichtung einheitlich für das gesamte Feld durchgeführt wird, korrigiert die OI die Modellwerte räumlich differenziert in Abhängigkeit von Struktur und Einflussbereich des Messdaten.

Die Grundgleichungen der Optimalen Interpolation beruhen auf einer Minimum-Varianz-Schätzung und gehen von einem linearen Ansatz aus [Fle2003]):

$$\mathbf{x}_A = \mathbf{x}_B + \mathbf{K}(\mathbf{y} - H(\mathbf{x}_B))$$

Dabei setzt sich das Ergebnisfeld \mathbf{x}_A der OI an allen Gitterpunkten zusammen aus dem Modellhintergrund \mathbf{x}_B und den gewichteten Beobachtungsinkrementen $(\mathbf{y} - H(\mathbf{x}_B))$. Als Beobachtungsinkrement wird die Differenz zwischen einem Messwert im Beobachtungsvektor \mathbf{y} und dem entsprechenden Modellwert aus dem mit dem Beobachtungsoperator H in den Raum der Beobachtungen transformierten Modellfeld \mathbf{x}_B bezeichnet. Die in FLADIS implementierte OI verwendet den Modellwert derjenigen Gitterzelle, in der der jeweilige Messort liegt. Der solcherart linearisierte Beobachtungsoperator wird im Folgenden \mathbf{H} genannt und ergibt sich aus einer Taylorreihen-Entwicklung von H für \mathbf{x}_B .

Das Gleichungssystem für die Gewichte \mathbf{K} wird aus der Minimierung der Gesamtvarianz des Analysefehlers gewonnen [Fle2003]:

$$\mathbf{K} = (\mathbf{HB})^T (\mathbf{HBH}^T + \mathbf{R})^{-1}$$

Der Analysefehler \mathbf{e}_A gibt die Abweichung zwischen dem Ergebnisfeld der OI, \mathbf{x}_A , und dem wahren, unbekannten Feld \mathbf{x}_{true} wieder:

$$\mathbf{e}_A = \mathbf{x}_A - \mathbf{x}_{true}$$

Das Feld \mathbf{x}_A wird im Rahmen einer Datenassimilation ([Kapitel 4](#)) auch als „Analyse“ bezeichnet. Entsprechend werden der Modell- und der Beobachtungsfehler definiert:

$$\mathbf{e}_B = \mathbf{x}_B - \mathbf{x}_{true} \quad \text{Modellfehler}$$

$$\mathbf{e}_O = \mathbf{y} - H(\mathbf{x}_{true}) \quad \text{Beobachtungsfehler}$$

Da \mathbf{x}_{true} unbekannt ist, sind auch Modell- und Beobachtungsfehler unbekannt. Als Lösungsansatz wird daher davon ausgegangen, dass diese Fehler als Gauß'sche Zufallsprozesse behandelbar sind und damit durch einen Erwartungswert und eine räumliche Kovarianzfunktion ausreichend beschrieben werden können. Die Matrix \mathbf{B} zur Bestimmung der Gewichte \mathbf{K} enthält die Diskretisierung der Kovarianzfunktion auf der Basis der Modellfehler, die Matrix \mathbf{R} die entsprechenden Werte auf der Basis der Beobachtungsfehler. Dabei werden die Beobachtungsfehler als unkorreliert angenommen, so dass sich \mathbf{R} als Diagonalmatrix ergibt. Beide Matrizen sind symmetrisch und positiv definit. Mit Hilfe des Beobachtungsoperators \mathbf{H} wird die Matrix \mathbf{B} in den Beobachtungsraum transformiert, \mathbf{HBH}^T entspricht dann der Kovarianzmatrix zwischen den Orten der Beobachtung, \mathbf{HB} der Kovarianzmatrix zwischen den Beobachtungsorten und den Punkten des Interpolationsrasters und $\mathbf{HBH}^T + \mathbf{R}$ der Kovarianzmatrix der Beobachtungsinkremente. Der beschriebene Weg zur Bestimmung der Matrix \mathbf{K} ist unter folgenden Voraussetzungen gültig:

- Es existiert kein Bias zwischen den Beobachtungen und dem Modellfeld.
- Es existiert keine Korrelation (Kovarianz) zwischen den Fehlern von Modell und Beobachtungen.
- Es existiert ein linearisierter Beobachtungsoperator \mathbf{H} , der auf die Kovarianzmatrix des Modellfehlers \mathbf{B} anwendbar ist.

Für die Optimale Interpolation wird das zugrunde liegende Gleichungssystem weiter vereinfacht, indem jeweils für nur einen Punkt J des Interpolationsrasters eine Interpolation durchgeführt wird, die eine Auswahl von nur n_J Beobachtungswerten y_i verwendet:

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

Für die Bestimmung der Gewichte k_{ji} ist nun nur noch die Lösung eines Gleichungssystems n_J -ter Ordnung erforderlich:

$$\begin{bmatrix} b_{11} + r_{11} & \cdots & b_{n_J 1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{1n_J} & \cdots & b_{n_J n_J} + r_{n_J n_J} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_{j1} \\ \vdots \\ k_{jn_J} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{j1} \\ \vdots \\ b_{jn_J} \end{bmatrix}$$

Dabei entspricht b_{ii} der Varianz des Modellfehlers und r_{ii} der Varianz der Beobachtungsfehler am Beobachtungsort i und b_{ij} ($i \neq j$) der Kovarianz des Modellfehlers zwischen den Beobachtungsorten i und j , während die b_{ji} die Kovarianzen des Modellfehlers zwischen den Beobachtungsorten i und dem Gitterpunkt J enthalten. Die in FLADIS implementierte OI verwendet nach [Fle2003] die n_J dem Gitterpunkt J nächsten Stationen und setzt $n_J = 8$.

Die für die Berechnung benötigten Kovarianzen werden mit Hilfe eines Kovarianzmodells ermittelt. In FLADIS wird dazu ein empirisches homogenes parametrisches terminbezogenes Kovarianzmodell eingesetzt. Die empirischen Kovarianzwerte werden terminbezogen, d.h. aus rein räumlichen Daten für einen Zeitpunkt, wahlweise mit der klassischen Momentenmethode oder nach Cressie [Cre93] geschätzt (**Kapitel 10.5.3.7**). Als Datenbasis für die Schätzung dienen die Beobachtungsinkremente. Anschließend werden die Schätzwerte durch eine analytische Funktion approximiert, um sicher zu stellen, dass die Kovarianzfunktion positiv definit ist und für große Abstände gegen Null konvergiert. Hierzu stellt FLADIS eine exponentielle, eine Gauß'sche und eine sphärische Funktion zur Verfügung.

Für bodennahe Immissionsfelder ist die Annahme homogener statistischer Eigenschaften der Modellfelder und Beobachtungen, wie sie vom Kovarianzmodell in der zuvor beschriebenen Form verlangt werden, häufig nicht gerechtfertigt. Immissionsfelder sind sehr inhomogen, und Messungen finden vorrangig in belasteten Gebieten statt und sind dann nur sehr kleinräumig repräsentativ. Die in FLADIS verwendete OI beruht daher auf der Arbeit von Flemming [Fle2003], die die Besonderheiten von Immissionsdaten berücksichtigt. Flemming erfasst unter anderem die Repräsentativität von Messungen, indem er die Stationen auf der Grundlage eines hierarchischen Clusterverfahrens klassifiziert [Fle2005] und ihnen einen Einflussradius zuweist. Auf diese Weise wird der Einfluss derjenigen Messstationen reguliert, die gehäuft in belasteten Gebieten liegen und dazu dienen, kleinräumige Spitzenkonzentrationen zu erfassen. Messungen im Einflussbereich stark befahrener Straßen fließen nicht in die OI-Berechnung ein, da solche Messungen in der Regel aus dem Immissionsniveau der umliegenden Stationen herausfallen. Ähnlich dem Beier/Doppelfeld-Verfahren

(Kapitel 2.1.7) muss daher in der Stationsbeschreibungsdatei für die Messstationen eine Klassifizierung gemäß Tabelle 2 angegeben werden:

Tabelle 2: Klassifizierung der Stationen nach Flemming [Fle2005] für die Optimale Interpolation in FLADIS

Zeichen	Beschreibung
E	Verkehr extrem (nur NO, NO ₂)
T	Verkehr
P	Stadt belastet, Industrie
U	Stadt
V	Vorstadt
R	Land
B	Berg / Küste (nur Ozon)

Die in FLADIS implementierte OI benötigt pro Zeitschritt mindestens 8 Messwerte. Andernfalls wird eine entsprechende Warnung ausgegeben und die Berechnung mit dem folgenden Zeitschritt fortgesetzt.

Das Verfahren der Optimalen Interpolation verlangt Biasfreiheit zwischen Messung und Modell. Diese Forderung ist im Allgemeinen nicht zu erfüllen, es muss daher eine Biaskorrektur durchgeführt werden. Der Bias zwischen Messung und Modell entspricht der Abweichung der Erwartungswerte. Seine korrekte Bestimmung ist jedoch problematisch, da die Ermittlung eines räumlich variablen Bias aufwändig ist. Wird er hingegen homogen als Erwartungswert aller Beobachtungsinkremente ohne Berücksichtigung der Stationsdichte angesetzt, so wird er vorrangig von den hochbelasteten Stationen beeinflusst. In FLADIS wird daher als Kompromiss ein homogener Bias angenommen, der wahlweise aus dem Mittelwert der Beobachtungsinkremente aller Stationen, aller Land- und Vorstadtstationen oder nur aller Landstationen bestimmt werden kann (Kapitel 10.5.3.7). Es wird empfohlen, für die Biaskorrektur nur Stationen mit einem großen Repräsentationsbereich, d.h. nur Land- oder Land- und Vorstadtstationen zu verwenden, um den dominanten Einfluss kleinräumig gültiger Spitzenkonzentrationen zu beseitigen [Fle2003]. Zur Korrektur wird der gewählte Bias vor der Analyse von den Beobachtungsinkrementen subtrahiert und abschließend wieder addiert.

FLADIS ermöglicht weiterhin die Transformation der Eingangsdaten mit dem Logarithmus (Kapitel 10.5.3.7), um die Immissionsdaten in eine annähernd normalverteilte Form zu bringen. Dies ist für die Schätzung der empirischen Kovarianzwerte mit der Momentenmethode von Bedeutung. Allerdings erhalten niedrigere Werte durch die logarithmische Transformation ein höheres Gewicht. Da die OI auf der Grundlage der Beobachtungsinkremente durchgeführt wird, kann nach Flemming die Verwendung der nicht transformierten Daten gerechtfertigt werden [Fle2003].

2.1.9 Literatur

- [Abra91] Abramowski, S.; Müller, H.: Geometrisches Modellieren, BI Wissenschaftsverlag, 1991
- [Beier2000] Beier, Reinhold: Validität von Umweltdaten, in "Handbuch der Umweltwissenschaften" Kap. V-1.2, Hrsg.: Otto Fränzle, Felix Müller und Winfried Schröder, Ecomed Verlagsgesellschaft, Landsberg am Lech, 6. Erg. Lfg. 7/2000.
- [Carl91] Carlson, R.E.; Foley, T.A.: The Parameter r^2 in multiquadratic interpolation; Comp. Math. Applic.; Vol.21, No.9, 1991
- [Cre93] Cressie, N.: Statistics for Spatial Data; John Wiley & Sons, New York, 1993.
- [Fle2003] Flemming, J.: Immissionsfelder aus Beobachtung, Modellierung und deren Kombination; Dissertation, Freie Universität Berlin, Fachbereich Geowissenschaften, <http://www.diss.fu-berlin.de/2003/71>, 2003
- [Fle2005] Flemming, J., Stern, R., Yamartino, R.J.: A new air quality regime classification scheme for O₃, NO₂, SO₂ and PM₁₀ observation sites; Atmospheric Environment 39, 6121 – 6129, 2005.
- [Fol87] Foley, T.A.: Interpolation and approximation of 3d and 4d scattered data; Comp. Math. Applic.; Vol.13, No.8, 1987
- [Fra80] Franke, R.; Nielson, G.: Smooth interpolation of large sets of scattered data; Inter. J. for Meth. in Eng.; Vol.8, No.4, 1980
- [Fra82a] Franke, R.: Smooth interpolation of scattered data by local thin plate splines, Comp. Math. Appl., Vol.8, No. 4, 1982
- [Fra82b] Franke, R.: Scattered data interpolation: Tests of some methods, Math. of Comp., Vol.18, No.157, 1982
- [Fra85] Franke, R.: Thin plate splines with tension; in Barnhill, R. E.; Böhm, W. (ed): Surface in CAGD '84; North Holland; 1985
- [Har90] Hardy, R.L.: Theory and application of the multiquadratic-biharmonic method, Comp. Math. Appl., Vol.19, No.8/9, 1990
- [Hos89] J.Hoschek, D. Lasser; Grundlagen der geometrischen Datenverarbeitung; B.G. Teubner Stuttgart 1989
- [Isaa89] Isaaks, H. E.; Mohan Srivastava, R.; An Introduction to Applied Geostatistics; Oxford University Press; 1989

- [She68] Shepard, D.: A two dimensional interpolation function for irregular spaced data; ACM National Conference; 1968

3 Modellansätze

3.1 Bilanzierungsmodell

Um zusätzliche Informationen (Orografie, Meteorologie, Emissionsstruktur) für die flächenhafte Darstellung von inerten Schadstoffen zu nutzen, ist ein sog. Bilanzierungsmodell entwickelt worden.

3.1.1 Beschreibung

Aus den Messwerten für Windrichtung und -geschwindigkeit werden für jede Halbstunde Mittelwerte gebildet. Unter der Annahme der Konstanz des Windes wird von jedem Emissionscluster ausgehend eine Schadstoffwolke berechnet. Zur einfacheren Berechnung wird das Koordinatensystem so gedreht, dass die x-Richtung in Richtung des Windes zeigt. Die Berechnung der Konzentration c_i an einem transformierten Punkt (x', y') berechnet sich nach folgender Formel:

$$c_i(x', y') = \frac{Q_i}{2 * \pi * v_{Wind} * \sigma_y(x') * \sigma_z} * \exp \frac{y'^2}{2 * \sigma_y(x')^2} * \left(\exp \frac{(h_D - h_Q)^2}{2 * \sigma_z^2} \right) * \exp \frac{t}{T}$$

Q_i	Quellstärke eines Belastungsgebietes i errechnet aus der Emission eines Gebietes gleichverteilt auf die Halbstunden eines Jahres
v_{Wind}	Windgeschwindigkeit
$\sigma_y(x')$	horizontaler Streuparameter = $2 * x' / v_{Wind}$
σ_z	vertikaler Streuparameter
h_D	Durchmischungshöhe
h_Q	Quellhöhe
t	Zeit = Abstand Punkt-Quelle dividiert durch v_{Wind}
T	Lebensdauer des Schadstoffes

Abb. 4: Beschreibung der Variablen

Die Immission an einem Punkt (x', y') bedingt durch alle Belastungsgebiete ergibt sich durch Addition der Immissionen der einzelnen Gebiete:

Mit diesem Ansatz werden Immissionswerte an den Punkten der Messstellen $\{x_i, y_i\}$ ermittelt. Der Mittelwert dieser errechneten Werte wird mit den gemessenen verglichen und daraus ein Normierungsfaktor bestimmt.

3.1.2 Einbringen von Ferntransportsituationen - Regressionsanalyse

Das Bilanzierungsmodell in FLADIS benutzt als Grundlage das Gaußsche Ausbreitungsmodell. Durch dieses Modell werden bodennahe Konzentrationen immer höher sein als Konzentrationen an höher gelegenen Punkten, d.h. ein Phänomen wie Ferntransport (FT) wird nicht berücksichtigt .

FT äußert sich z. B. in der Tatsache, dass die Abnahme der Schadstoffkonzentration mit der Höhe nicht konsequent vorhanden ist. So gibt es im Extremfall Situationen, in denen in Berg-Messstationen erheblich höhere Konzentrationen gemessen werden, als in Talstationen.

Um den Ferntransport von Schadstoffen besser abzubilden, wird die Durchmischungshöhe in Abhängigkeit der Steigung der Regression von Messwert gegen Höhe errechnet. Bei einer negativen Steigung wird die Durchmischungshöhe auf den minimalen Wert gesetzt (Standard: $H = 100$ m).

Im Wertebereich der Steigung zwischen $m = -0,01$ und $m = 0.0$ wird die Durchmischungshöhe in Abhängigkeit vom Wert der Steigung bis zum maximalen Wert erhöht. Ab dem Steigungswert $m = 0.0$ wird die Durchmischungshöhe auf den maximalen Wert gesetzt. Der maximale Wert liegt 50 m über der maximalen Höhe des gesamten Gebiets.

Die größte Verbesserung der Korrelation erhält man, wenn die Durchmischungshöhe durch eine Funktion dritten Grades (kubische Anpassung) aus der Steigung berechnet wird (siehe Abbildung).

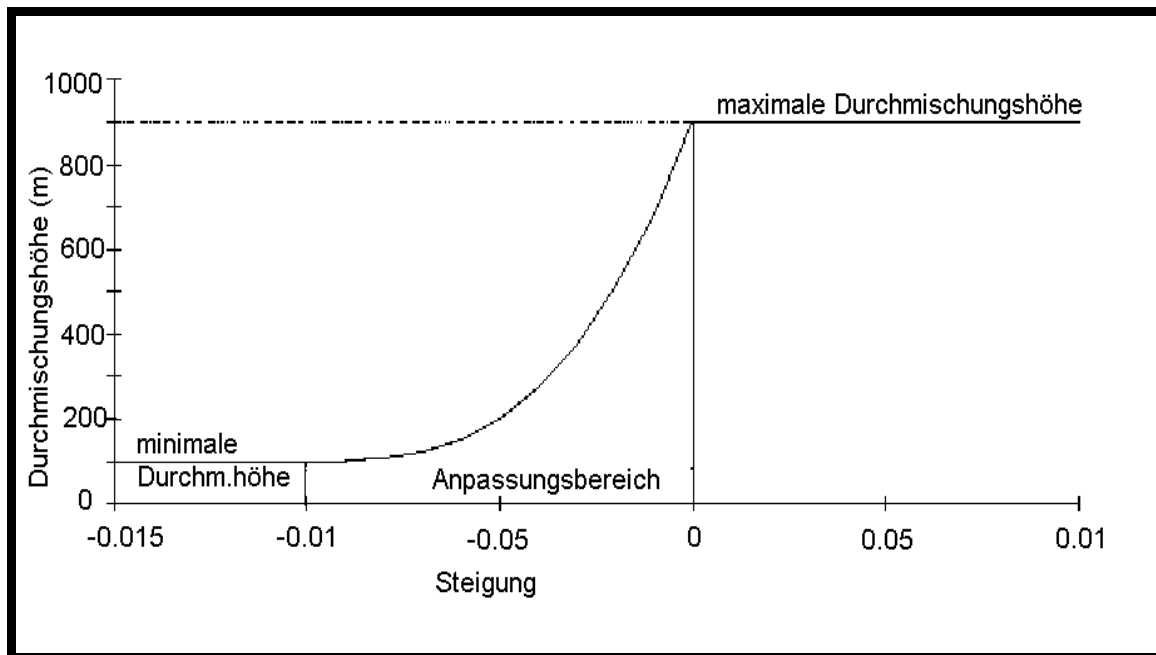


Abb. 5: Kubische Anpassungsfunktion der Durchmischungshöhe in Abhängigkeit von der Steigung der Regressionsgerade (Messwert gegen Höhe der Mess-Station)

3.1.3 Bilanzierung ohne Höhenmodell

Um den Einfluss der Emissionsstruktur bei diesem Verfahren in Zusammenhang mit der meteorologischen Situation unabhängig vom Höhenmodell zu bestimmen, ist es möglich, die Höhenangabe für das Gebiet und für die Mess-Stationen auf einen festen Wert zu setzen.

Dabei wird die Höhe des gesamten Gebiets auf den minimalen Wert des DHM gesetzt. Genauso wird die Höhe der einzelnen Mess-Stationen auf diesen Wert festgelegt. Die Höhe der Emissionscluster bleibt aber unverändert.

3.2 Lineares Modell

Als alternatives Verfahren und zur flächenhaften Darstellung der Ozonimmission, welche die Orografie mit berücksichtigt, ist ein sogenanntes lineares Modell entwickelt worden.

Das lineare Modell berechnet für eine ausgewählte Halbstunde (Index l) die Steigung m_l und den Achsenabschnitt b_l einer Regressionsgerade der Konzentrationmessungen gegen die Höhe der jeweiligen Mess-Station. Durch Berechnung des t-Wertes wird geprüft, ob die Regression signifikant ist. Bei vorhandener Signifikanz berechnen sich die Immissionswerte c_l der Gitterpunkte (x_i, y_i) in Abhängigkeit von der Höhe $h_{i,j}$ gemäß:

$$c_l(x_i, y_j) = m_l * h_{i,j} + b_l$$

Mit diesem Ansatz werden Modellwerte für die Positionen der Mess-Stationen berechnet. Ausgehend vom Mittelwert der Messwerte in einer Halbstunde wird der Achsenabschnitt b_l um einen Betrag erhöht, bzw. vermindert, so dass der Mittelwert der Modellwerte einer Halbstunde gleich dem der Messwerte ist.

3.3 Externes Modell

Alternativ zu den internen Modellen können externe Modelldaten von FLADIS eingelesen werden. Zur Verfügung stehen zur Zeit Schnittstellen für ein rezeptorbezogenes Format, welches analog zum Messdatenformat pro Rezeptor- oder Modellgitterpunkt eine Datei mit den Daten der Zeitreihe für diesen Punkt benötigt, für das vom Ausbreitungsmodell LASAT (ab Version 3.0) ausgegebene Format, für das vom Programmsystem REM-CALGRID ausgegebenen Binär-Format sowie für das NetCDF-Format. Die Datenformate werden in **Kapitel 6** beschrieben. Das folgende Schema zeigt den Ablauf bei der Benutzung von externen Modelldaten.

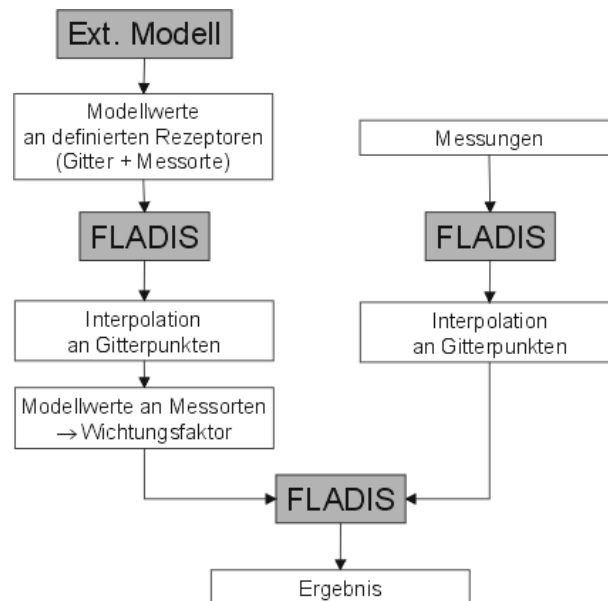


Abb. 6: Einbindung von externen Modelldaten in FLADIS

Mit dem externen Modell werden Modelldaten für jeden zu untersuchenden Zeitschritt für vordefinierte Rezeptoren (Gitterpunkte des Modells, ggf. plus Orte der Messstationen) erzeugt. FLADIS liest die Daten des externen Modells ein und interpoliert diese mit Hilfe einer Delaunay-Triangulation und nachfolgender linearer Interpolation auf die Gitterpunkte des FLADIS-internen Rasters (siehe auch [Kapitel 2.1.6](#)).

Bei der Interpolation von Messdaten werden die beiden Schritte Triangulation und Interpolation für jeden Zeitschritt durchgeführt, da nicht zu jedem Zeitschritt alle Messdaten an allen Stationsorten vorliegen. Dieses Vorgehen führt bei der hohen Anzahl der Datenpunkte eines Modellfeldes zu unbefriedigenden Rechenzeiten. Aus diesem Grund wird beim Einlesen externer Modelldaten die Triangulierung nur einmal im ersten Zeitschritt durchgeführt und dann im Speicher abgelegt. Zusätzlich wird im ersten Zeitschritt für jeden Gitterpunkt des FLADIS-internen Rasters bestimmt und abgespeichert, in welchem Dreieck der Triangulation er liegt und was seine lokalen Koordinaten bezogen auf dieses Dreieck sind. Auf diese Weise braucht zu allen folgenden Zeitpunkten nur noch die lineare Interpolation auf Basis der lokalen Koordinaten durchgeführt zu werden. Dies führt zu erheblich niedrigeren Rechenzeiten.

Aus dem Interpolationsergebnis der Modelldaten wird für jede Messstation der Wert der jeweiligen Gitterzelle, in der sich die Messstation befindet, ausgelesen und mit dem gemessenen Wert verglichen. Daraus wird gemäß [Kapitel 3.4](#) ein Wichtungsfaktor bestimmt, über den die interpolierten Modellwerte mit dem interpolierten Feld der Messungen kombiniert werden.

3.4 Kombination aus Modell und Interpolation

Um eine flächenhafte Darstellung zu erstellen, wird für jeden ausgewählten Zeitpunkt eine Interpolation (F_I) und eine Berechnung der Immission nach dem benutzten Modell (F_B) durchgeführt. Die Bestimmung des endgültigen Wertes F_E an jeder Stelle (x,y) des betreffenden Interpolationsgebietes wird nach folgender Formel vorgenommen:

$$F_E(x,y) = (1-\alpha) * F_I(x,y) + \alpha * F_B(x,y)$$

Der Wichtungsfaktor α ist der Erklärungswert des Bilanzierungsmodells für den betreffenden Zeitschritt. Für eine positive Korrelation r ergibt er sich als das Quadrat des Korrelationskoeffizienten.

Zur Bestimmung des Anteils eines Modells bei der Berechnung der flächenhaften Konzentrationen wird in FLADIS der Korrelationskoeffizient zwischen den gemessenen Konzentrationen und den mit dem verwendeten Modell bestimmten Konzentrationen an den Mess-Stationen benutzt. Der Korrelationskoeffizient alleine sagt aber nichts darüber aus, ob der Zusammenhang zwischen den Modellwerten und den Messungen signifikant ist. Deshalb ist zusätzlich ein Signifikanztest in die Berechnung integriert worden. Der implementierte Signifikanztest ist der sog. T-Test oder Student-Test. Der T-Test beruht auf der Verteilung der geschätzten Koeffizienten, er testet, ob der Unsicherheitsbereich um die Koeffizienten den Nullpunkt überdeckt. Nur wenn dieser Test eine Signifikanz zeigt, wird der berechnete Korrelationskoeffizient als Wichtungsfaktor benutzt. Die Korrelation ist per Definition signifikant bei einer Irrtumswahrscheinlichkeit von 5 %.

3.4.1 Mittelwertbildung von gewichteten Interpolationen

Eine einfache und gebräuchliche Methode zur flächenhaften Darstellung von zeitlichen Mittelwerten besteht darin, zuerst die Messwerte über den ausgewählten Zeitabschnitt zu mitteln und auf den resultierenden Datensatz ein geeignetes Interpolationsverfahren anzuwenden (z.B. Shepard-Verfahren).

In FLADIS ist eine fortgeschrittene Methode implementiert. Für eine ausgewählte, gleichverteilte Stichprobe von Halbstunden aus dem interessierenden Zeitintervall wird eine mit dem Bilanzierungsmodell gewichtete Interpolation durchgeführt. Dadurch erhält man für jeden Gitterpunkt einen Halbstundenwert, der dann über das entsprechende Zeitintervall gemittelt wird.



Durch dieses Verfahren kann auch für Zeitintervalle das jeweilige Modell genutzt werden. Außerdem heben sich bei der Mittelung spezifische Besonderheiten des ausgewählten Interpolationsverfahrens heraus.

4 Datenassimilation

4.1 Beschreibung

Das Verfahren der Datenassimilation wird eingesetzt, um Beobachtungen in Modellrechnungen einfließen zu lassen und Modellfelder gegen Messwerte zu ziehen. Die Kombination von Modellfeld und Beobachtungen wird auch als Analyse bezeichnet. Man spricht von passiver Datenassimilation, wenn die analysierten Felder nicht in der Modellrechnung weiterverwendet werden, und von aktiver Datenassimilation, wenn die Analyse das Modellfeld während eines Modelllaufs ersetzt und somit die assimilierten Beobachtungen die weitere Modellrechnung beeinflussen. Die aktive Datenassimilation ist z.B. routinemäßiger Bestandteil der numerischen Wettervorhersage in der Meteorologie.

FLADIS stellt eine passive Datenassimilation zur Verfügung, um bestehende Modellergebnisse an Beobachtungen anzupassen und die gegebenenfalls auftretenden Differenzen zwischen Messung und Modell zu reduzieren, bevor die eigentliche Interpolation vorgenommen wird. Als Assimilationsverfahren wird die Optimale Interpolation (OI) eingesetzt ([Kapitel 2.1.8](#)), die damit innerhalb von FLADIS zwei Funktionen übernimmt, die der Datenassimilation und die der eigentlichen Interpolation. Abb. 7 beschreibt den Ablauf von FLADIS mit Datenassimilation. Die Modelldaten werden im ersten Schritt durch einen OI-Lauf an die Messdaten herangezogen. Das Ergebnisfeld dient dann im zweiten Schritt als Modellfeld für die eigentliche Interpolation mit Modellhintergrund. Zur Interpolation kann unter allen in FLADIS implementierten Verfahren frei gewählt werden. Die Parameter der OI lassen sich für Datenassimilation und Interpolation jeweils getrennt festlegen.

Eine Mehrfachanwendung der OI, d.h. ein oder mehrere Assimilationsschritte und ein Interpolationsschritt, ist grundsätzlich möglich und eine iterative Datenassimilation in der Meteorologie auch durchaus üblich. Sie kann jedoch für bodennahe Immissionsfelder, die im Allgemeinen weniger glatt sind als meteorologische Felder, problematisch werden, wenn keine eindeutige Kovarianzkurve mehr bestimmt werden kann. Es wird daher empfohlen, nur einen Assimilationsschritt mit der OI durchzuführen und für die folgende Interpolation eines der anderen Interpolationsverfahren, gekoppelt mit dem Ergebnisfeld der Datenassimilation als Modellhintergrund, zu wählen.

Große Differenzen zwischen den Erwartungswerten von Messungen und Modell können dazu führen, dass die homogene Biaskorrektur der OI ([Kapitel 2.1.8](#)) Nullwerte in weiten Bereichen des Modellgebiets einführt und so die Modellstruktur und damit die darin enthaltenen Zusatzinformationen (Orographie, Meteorologie, Emissionsstruktur) zerstört. Betroffen sind insbesondere ländliche Gebiete mit niedrigeren Konzentrationswerten und häufig geringer Messdichte, für die die Modellstruktur ein Informationsgewinn bedeutet und die deshalb im Ergebnisfeld der Datenassimilation erhalten bleiben sollte. Die Biaskorrektur der OI kann daher alternativ auf das Umfeld der Messstationen beschränkt werden, das durch den Einflussbereich der approximierten Kovarianzfunktion definiert wird. Der Korrekturwert wird dabei über die Kovarianzfunktion skaliert, so dass er mit wachsendem Abstand von der nächsten Station

gegen Null geht. Auf diese Weise wird die Modellstruktur abseits der Stationen erhalten, während sie im Stationsbereich weiterhin gegen die Messungen gezogen wird.

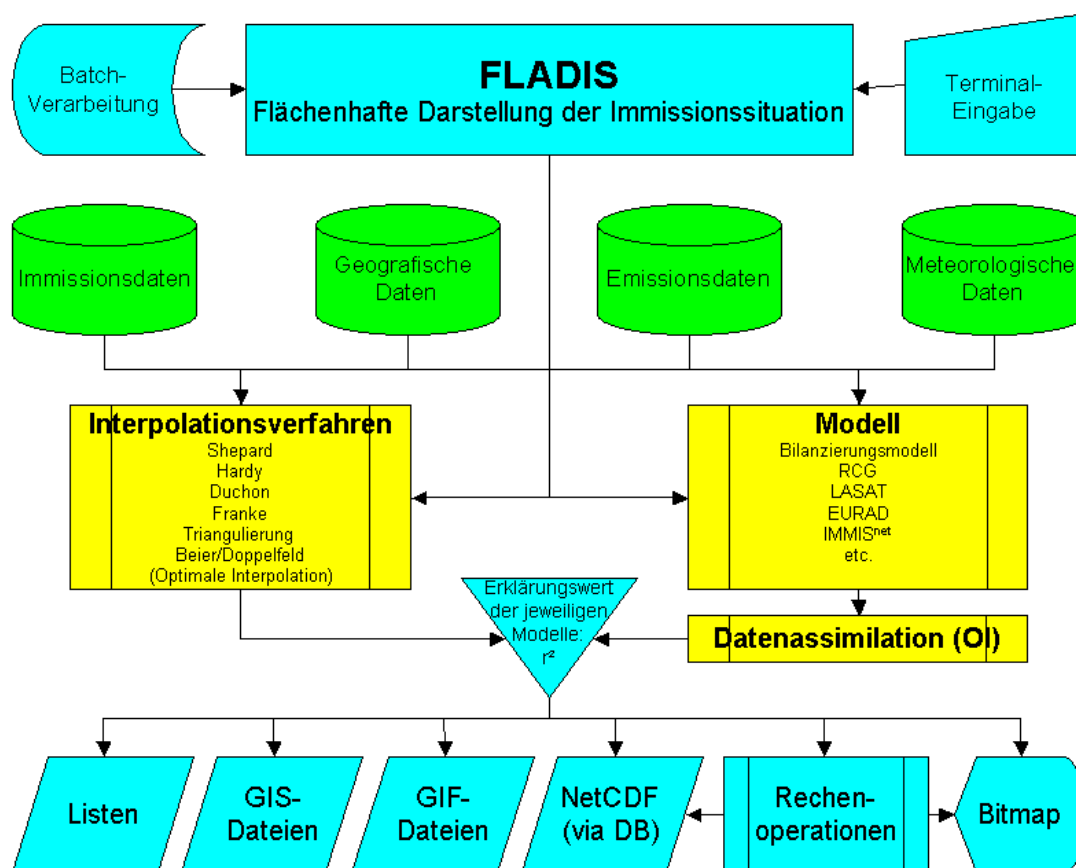


Abb. 7: Flussdiagramm FLADIS mit Datenassimilation.

Vergleiche der Ergebnisse von Interpolationen mit Modellhintergrund ohne und mit Datenassimilation haben gezeigt, dass durch die Assimilation eine wesentlich höhere Übereinstimmung von Modellhintergrund und Messdaten unter Beibehaltung der Modellstrukturen erzielt wird. Dies führt zu einem höheren Erklärungswert der Modelldaten bezüglich der Messdaten und damit bei einer Kopplung von Mess- und Modellwerten im Sinne einer Interpolation zu einem höheren Anteil des Modellhintergrunds am Darstellungsergebnis. Der erhöhte Modellanteil nach Datenassimilation kann zu einer leichten Verschlechterung der Kennwerte einer Regressionsanalyse über die Mess- und Modellwerte an den Messstationen führen, da die Modelldaten an den Stationspunkten auch nach Assimilation die Beobachtungen nicht in der Güte wiedergeben können wie die Messwerte selbst. Eine Kreuzvalidierung der verschiedenen Ansätze zeigt, dass der Einsatz der Datenassimilation signifikant die räumliche Prognosefähigkeit des Darstellungsverfahrens verbessert.



5 Delta Methode

5.1 Beschreibung

Die in FLADIS implementierte Delta-Methode nach Stern [Ste2006] dient dazu, Messreihen eines Basisjahrs mit Hilfe von Modellprognoserechnungen so zu modifizieren, dass sie eine Beschreibung und flächenhafte Darstellung der zukünftigen Immissionssituation in einem Modellgebiet erlauben. Dazu werden im ersten Schritt die für das Prognosejahr zu erwartenden Messwerte für jeden Einzelwert der zugrunde liegenden Basismessreihe mit der Delta-Methode bestimmt. Die so prognostizierten Messwerte werden im zweiten Schritt wie eine herkömmliche Messreihe ohne oder mit Modellhintergrund des Prognosejahres in die Fläche interpoliert.

Grundlage der Delta-Methode sind Modellrechnungen für ein zurückliegendes Basis- und ein Prognosejahr. Die Abschätzung zukünftiger Messwerte an den Stationsorten durch Modellprognosen beruht auf der Überlegung, dass trotz lokaler zeitlicher und räumlicher Abweichungen zwischen Messung und Modell davon auszugehen ist, dass die wesentlichen ablaufenden physikalischen und chemischen Prozesse vom Modell hinreichend genau erfasst werden und daher die berechnete Immissionsänderung, die sich zwischen den Modellrechnungen für ein Basisjahr und für ein Prognosejahr ergibt, zur Prognose der mittleren Änderung der Messwerte an den Stationsorten herangezogen werden kann.

Dazu wird zunächst aus den Einzelwerten der Konzentrationen des Basislaufs eine klassifizierte Häufigkeitsverteilung gebildet. Anschließend wird jeder Klasse des Basislaufs eine klassenspezifische mittlere Änderung zugeordnet, die sich berechnet als Mittelwert aller Änderungen, die die dieser Klasse zugehörigen Einzelwerte des Basislaufs in der Modellprognose erfahren. Hat eine Klasse nur wenige (< 5) oder gar keine Einträge, so wird die mittlere Änderung der nächstniedrigeren Konzentrationsklasse verwendet, um große Sprünge zwischen den mittleren Änderungen aufeinanderfolgender Klassen zu reduzieren und Lücken zu vermeiden. Der Zeit- und Ortsbezug der Einzelwerte wird durch die Klassifizierung und Zuordnung klassenspezifischer mittlerer Änderungen aufgegeben.

Die zu erwartenden Messwerte können nun abgeschätzt werden, indem zu jedem einzelnen Messwert des Basisjahrs die berechnete klassenspezifische Änderung für diesen Wert addiert wird. Messwerte, die höher als der höchste Wert sind, werden nur um die der höchsten Klasse zugeordneten Änderung modifiziert. Die prognostizierte Messwertverteilung erhält damit die räumliche und zeitliche Struktur der Basismesswertverteilung, das Konzentrationsniveau jeder einzelnen Messung ist aber um den Betrag verändert, der durch die Prognoserechnung vorgegeben wird. Wird die prognostizierte Messwertverteilung nun in Kombination mit dem Modellhintergrund des Prognosejahres interpoliert, so fließt diese Struktur auch in die flächenhafte Darstellung ein.

Abb. 8 zeigt beispielhaft die aus Modelldaten für ein Basisjahr 2008 und ein Prognosejahr 2010 ermittelten klassenspezifischen mittleren Änderungen für die klassifizierten $\text{PM}_{2,5}$ -Konzentrationswerte der Basismodellrechnung 2008. Die Modellrechnungen sowohl für 2008 als auch für 2010 beruhen in diesem Beispiel auf meteorologischen Daten für das Jahr 2008.

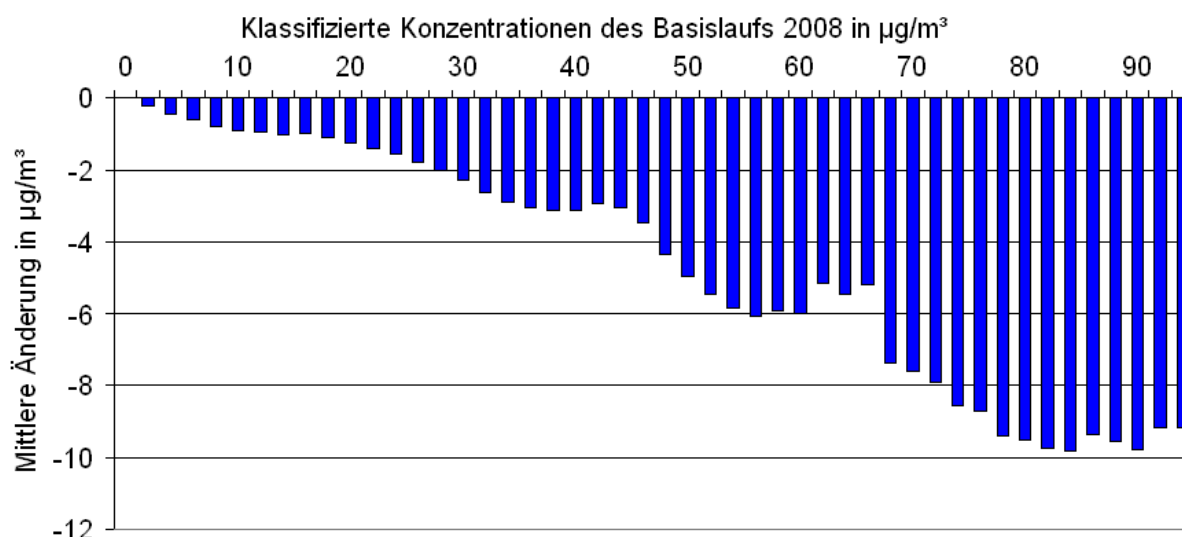


Abb. 8: Mittlere Änderung der klassifizierten $\text{PM}_{2,5}$ -Konzentrationen eines Basisjahrs 2008 als Folge von Modellprognoserechnungen für 2010. Klassenbreite der zugrunde liegenden Häufigkeitsverteilung ist $2 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

Bei der Interpretation der Prognoseergebnisse ist zu berücksichtigen, dass insbesondere die prognostizierten Messwerte nur generalisierte Aussagen erlauben, da durch die Bildung der klassifizierten Häufigkeitsverteilung und durch die Zuordnung der klassenspezifischen mittleren Änderungen der Zeit- und Ortsbezug der Einzelwerte aufgegeben wird und so auch nicht wieder herzustellen ist. Möglich sind beispielsweise Untersuchungen hinsichtlich der Grenzwertüberschreitungen von Jahres- oder Tagesmittelwerten.

Ein weiterer wichtiger Punkt bei der Anwendung der Delta-Methode ist die räumliche und die zeitliche Skala. Für Stationen beispielsweise im städtischen Umfeld sollte die Ermittlung der klassenspezifischen mittleren Änderungen auf der Basis von Modellrechnungen auf der urbanen Skala erfolgen, die dem Repräsentativitätsbereich solcher Stationen entspricht. Bei der Betrachtung kürzerer Zeiträume als ein Jahr (Episoden) muss darauf geachtet werden, dass die Datenbasis, auf deren Grundlage die klassenspezifischen mittleren Änderungen berechnet werden, ausreichend ist. Gegebenenfalls müssen auch für eine Episode die Modellrechnungen über ein Jahr zur Klassifizierung herangezogen werden. Weiterhin steht noch die Überprüfung der Frage offen, inwieweit die ermittelten klassenspezifischen mittleren Änderungen der Konzentrationen von den meteorologischen Bedingungen des Basisjahrs abhängen [Ste2006].

5.2 Literatur

- [Ste2006] Stern, R.: Großräumige PM₁₀-Ausbreitungsmodellierung: Abschätzung der gegenwärtigen Immissionsbelastung in Europa und Prognose bis 2010; in: "Feinstaub und Stickstoffdioxid. Wirkung – Quellen – Luftreinhaltepläne – Minderungsmaßnahmen", Hrsg.: DIN Deutsches Institut für Normung e.V., KRdL Kommission Reinhaltung der Luft im VDI und DIN; Beuth Verlag GmbH Berlin Wien Zürich; 85-102, 2006.



6 Datenformate

6.1 Allgemeines

Die Datenformate der einzelnen Eingangsdaten sind spezifisch für die jeweiligen Benutzer und können in Absprache mit dem Anwender beliebig angepasst werden.

6.2 Rezeptorreihen im ASCII Format

Sowohl Mess- als auch externe Modelldaten können von FLADIS als Rezeptorreihen im ASCII-Format eingelesen werden. In beiden Fällen muss für jeden Rezeptorpunkt (Messstation oder Gitterpunkt des Modellrasters) eine Datei mit den Daten der Zeitreihe für diesen Punkt vorliegen. Zudem werden eine Datei zur Beschreibung der Messgrößen ([Kapitel 6.2.1](#)) und eine Stationsbeschreibungsdatei ([Kapitel 6.2.2](#)) benötigt.

Die Dateien der Rezeptorreihen werden üblicherweise nach einem vorzugebenden Schema benannt, da sich FLADIS den Dateinamen beim Einlesen automatisch zusammensetzt. Beispielsweise können Stationscode, Bezugsjahr und Schadstoff zu xxxx2004NO2.csv kombiniert werden. Dabei steht xxxx für den Code des jeweiligen Rezeptorpunkts, wie er in der Stationsbeschreibungsdatei abgelegt ist.

Das Format der Rezeptorreihen wird für FLADIS mit Hilfe des Dialogs "Datenformat" ([Kapitel 10.4.2](#)) beschrieben. Dabei wird die zeitliche Auflösung der Daten (Zeitschritt) vorgegeben. Die Angabe erfolgt in Minuten. Damit nicht versehentlich Zeitreihen mit einer falsch eingestellten zeitlichen Auflösung ausgewertet werden, muss diese Auflösung in den Zeitreihen vermerkt sein. Sie wird in der Kopfzeile (Header) der Dateien in folgendem Format angegeben:

#TSmmmmmm

mit m = Anzahl der Minuten rechtsbündig (fehlende Stellen mit 0 auffüllen!) Beispiel: #TS00060 steht für eine zeitliche Auflösung von 60 Minuten bzw. 1 Stunde.

Befindet sich keine Eintragung in der Kopfzeile, die mit "#TS" beginnt, wird von FLADIS angenommen, dass die Zeitreihe in einer **Standard-Zeitauflösung** vorliegt (i. Allg. 30 Minuten).

Es wird empfohlen, einen Test durchzuführen, ob die Zeitreihen von FLADIS richtig verarbeitet werden. Dabei kann man z. B. eine Auswertung mit FLADIS für die ersten und die letzten Werte einer Zeitreihe vornehmen und die ausgegebenen Werte für die einzelnen Stationen mit den realisierten (gemessenen) Werten der Zeitreihen vergleichen.

6.2.1 Messgrößenbeschreibung

Die Steuerdatei ist im ASCII-Format und folgendermaßen aufgebaut:

Zeilen, die mit einem "!" beginnen, werden überlesen (Kommentarzeile)

- Spalte 1: 1: Daten werden mit FLADIS ausgewertet
 0: Werte dienen zur internen Berechnung (z.B. meteorologische Messwerte)
- Spalte 2: Kürzel für den Dateinamen der Messdaten
- Spalte 3: Text für Auswahldialog
- Spalte 4: Code für Windrichtung – 100
 Code für Windgeschwindigkeit – 101
 sonst – 0

Werte mit "0" in der ersten Spalte müssen am Ende stehen.

!Messgroessentabelle			
1	so2	SO2	0
1	no_	NO	0
1	no2	NO2	0
1	o3_	O3	0
1	par	Partikel	0
1	nox	Nox	0
0	dd_	Windrichtung	100
0	ff_	Windgeschwindigkeit	101

Abb. 9: Beispiel für eine Messgrößenbeschreibungsdatei

Diese Datei wird eingelesen, wenn über den Menübefehl "Messgröße und Umrechnung" ([Kapitel 10.4.4](#)) ein Schadstoff ausgewählt wird oder Einstellungen im Dialog "Grenzwerte der EU-Rahmenrichtlinie" ([Kapitel 10.4.7](#)) vorgenommen werden.

6.2.2 Stationsbeschreibungsdatei

In der Stationsbeschreibungsdatei werden die zu berücksichtigenden Stationen bzw. Rezeptorpunkte beschrieben. Die Spalten haben dabei folgende Bedeutung:

- Spalte 1: "Code" der Station (z. B. Stationscode oder eine Rasternummer), aus dem sich FLADIS automatisch den Dateinamen der zugehörigen Zeitreihe zusammensetzt
- Spalten 2 und 3: beschreiben die Lage der Station in kartesischen oder geografischen Koordinaten
- Spalte 4: beschreibt die Höhe der Station in Meter über Normalnull
- Spalte 5: beschreibt den Radius der Station in Meter, der beim Beier/Doppelfeld-Verfahren ([Kapitel 2.1.7](#)) benutzt wird (sonst ohne Bedeutung)
- Spalte 6: beschreibt die Art der Station (z. B. für das Beier/Doppelfeld-Verfahren ([Kapitel 2.1.7](#)) oder die Optimale Interpolation ([Kapitel 2.1.8](#)))
- Spalte 7: wird von FLADIS nicht verwendet und kann frei belegt werden

Code	Rechtswert	Hochwert	Höhe	Radius	Art	Station
020	4530840	5650370	185	20000	R	Altenburg
044	4466150	5654830	165	20000	R	Apolda
012	4425950	5634040	275	20000	R	Arnstadt
013	4405500	5664570	185	20000	R	Bad Langensalza
005	4375410	5632440	265	20000	R	Bad Salzungen
010	4385160	5606730	450	20000	R	Dreißigacker
014	4405940	5613920	499	20000	R	Zella-Mehlis Liebkn.PI

Abb. 10: Beispiel für eine Stationsbeschreibungsdatei

6.3 LASAT – Format

FLADIS stellt eine Schnittstelle für das Einlesen von Modellergebnissen von Ausbreitungsrechnungen mit dem Programm LASAT Version 3.0 zur Verfügung. Es werden Daten eingelesen, die im LASAT-Binärformat komprimiert (*.dmnb.gz) oder unkomprimiert (*.dmnb) vorliegen und eine externe Header-Datei im ASCII-Format (*.dmna) haben. Sollen komprimierte Binärdateien verarbeitet werden, so ist darauf zu achten, dass das Kompressionsprogramm gzip (GNU zip) im FLADIS-Installationsverzeichnis liegt. Für die Beschreibung der Messgrößen ist unabhängig von der *.dmna-Datei wie bei den Rezeptorreihen im ASCII-Format eine Messgrößenbeschreibungsdatei ([Kapitel 6.2.1](#)) erforderlich.

Die LASAT-Daten können Konzentrationswerte (keine Dosiswerte!) oder Konzentrationswerte und zugehörigen Stichprobenfehler für einen oder mehrere Schadstoffe

und für einen oder mehrere Level (vertikale Schichten) enthalten. Der LASAT-Datensatz ist demnach vierdimensional (zwei Raumrichtungen, vertikale Schichten und Schadstoffe). Für jeden Zeitschritt erzeugt LASAT einen eigenen Datensatz, bestehend aus *.dmna- und *.dmnb- bzw. *.dmnb.gz-Datei. Die Namensgebung erfolgt üblicherweise in der Form

cnnnnali.dmna (.dmnb, .dmnb.gz),

wobei *nnnn* der vierstellige Index des Ausgabeintervalls ist, *l* der Netzlevel und *i* der Netzindex. Wird in FLADIS eine Zeitreihe von LASAT-Ergebnissen eingelesen und verarbeitet, so benötigt FLADIS den Namen der externen Header-Datei des ersten einzulesenden LASAT-Datensatzes als Beschreibungsdatei für die Modellrezeptoren (**Kapitel 10.5.4.2**).

Es wird davon ausgegangen, dass die LASAT-Datensätze keinen absoluten räumlichen Bezug haben. Dieser kann hergestellt werden, indem in FLADIS ein Ausschnitt (**Kapitel 10.5.2**) gesetzt wird mit den Koordinaten des Mittelpunkts der linken unteren und der rechten oberen Rasterzelle des LASAT-Modellgebiets.

Hinweise zur Nutzung des LASAT-Formats:

- Es wird von FLADIS zur Zeit nicht überprüft, ob die Angaben zu Start- und Enddatum in FLADIS (**Kapitel 10.4.3**) mit dem Zeitstempel der angegebenen Modell-Dateien übereinstimmen. Bei der Angabe der externen Header-Datei ist daher mit Sorgfalt zu arbeiten.
- LASAT-Daten werden zur Zeit direkt, d. h. ohne Triangulierung und Interpolation auf ein FLADIS-internes Raster eingelesen. Demnach entspricht das LASAT-Raster inklusive seiner Gitterauflösung dem FLADIS-Raster.
- Die Koordinaten des LASAT-Rasters müssen ganzzahlig sein.

Die LASAT-Schnittstelle ist nicht in der FLADIS Basisversion enthalten.

6.4 REM – CALGRID Binärformat

FLADIS liest die Ausgabe des REM-CALGRID-Programmsystems im Binärformat ein. Benötigt wird neben der Binärdatei eine externe Header-Datei *.ctl, die den Header-Dateien des Grafikpakets GrADS entspricht (<http://www.iges.org/grads/>). FLADIS entnimmt der *.ctl-Datei z. B. Informationen über die räumlichen und zeitlichen Dimensionen der Modelldaten.

Abb. 11 zeigt ein Beispiel einer externen Header-Datei. Beschrieben wird der Inhalt einer Binärdatei, deren Name nach "DSET" angegeben wird. Die Binärdatei enthält Modelldaten des Stoffs NO₂ für ein Modellfeld mit 54 x 66 Modellwerten pro Zeitschritt und insgesamt 8760 Zeitschritte. In vertikaler Richtung existiert nur ein Level

(zur Zeit Default in FLADIS). Der Mittelpunkt der linken unteren Gitterbox des Modellfelds liegt bei 3.875 Grad Länge und 46.9375 Grad Breite, die räumliche Gitterauflösung beträgt 0.25 Grad in longitudinaler und 0.125 Grad in latitudinaler Richtung. Die Werte starten am 01.01.2006, 01:00 Uhr, und sie haben eine zeitliche Auflösung von einer Stunde. Wichtig für Dateien im Binär-Format des REM-CALGRID-Modells ist das Kontrollwort "OPTIONS BYTESWAPPED". Es wird davon ausgegangen, dass die Modelldaten auf einer Big Endian Plattform erstellt wurden. Entsprechend wird die Reihenfolge der Bytes beim Einlesen der Daten von FLADIS getauscht.

```
DSET ^CONC67_TNO2003_M2006_EBI_L32_54X66_TDVN_IPL20NEWB_MH60_NO2.gco
TITLE REM-CALGRID: RUN1 NEW TNO-Emissions TNO2000
OPTIONS BYTESWAPPED
UNDEF -99.9
XDEF 54 LINEAR 3.8750000 0.2500000
YDEF 66 LINEAR 46.9375000 0.1250000
ZDEF 1 LEVELS 1
TDEF 8760 LINEAR 01Z01JAN2006 1HR
VARS 1
NO2 1 99 MICROGR/M3
ENDVARS
```

Abb. 11: Header-Datei für Modelldaten im Binär-Format des REM-CALGRID-Modells.

FLADIS benötigt einige zusätzliche Information zum Datenformat, die unter Modelle: Externes Modell: Einstellungen ([Kapitel 10.5.4.2](#)) anzugeben sind. Zum einen sind dies Angaben zum Fehlwert und zum Zeitschritt, die der externen Header-Datei (Abb. 11) entnommen werden können, zum andern ist dies die Anzahl der Bytes pro Wert (Default-Wert: "4"). Alle anderen Angaben zum Datenformat sind auf "0" zu setzen.

FLADIS geht bei seinen Berechnungen von einem kartesischen Koordinatensystem aus. Liegen die Modelldaten wie im Beispiel in Abb. 11 in einem geographischen Koordinatensystem vor, so übernimmt FLADIS die Transformation der Daten von den geographischen Koordinaten nach UTM ([Kapitel 10.5.4.2](#)).

6.5 NetCDF – Format

FLADIS liest Dateien im NetCDF-Format ein. Grundsätzlich enthalten NetCDF-Dateien bereits alle Header-Informationen, so dass von Seiten des Dateiformats zunächst keine externe Header-Datei erforderlich ist. FLADIS entnimmt allerdings analog zur Schnittstelle zum Binärformat des REM-CALGRID-Modells ([Kapitel 6.4](#)) der externen Header-Datei z. B. Informationen über die räumlichen und zeitlichen Dimensionen der Modelldaten. Insofern benötigen auch die NetCDF-Dateien für FLADIS eine externe Header-Datei *.ctl, die den Header-Dateien des Grafikpakets GrADS entspricht (<http://www.iges.org/grads/>).

Abb. 12 zeigt ein Beispiel einer externen Header-Datei. Beschrieben wird der Inhalt einer Binärdatei, deren Name nach "DSET" angegeben wird. Die Binärdatei enthält

Modelldaten des Stoffs Ozon für ein Modellfeld mit 54 x 66 Modellwerten pro Zeitschritt und insgesamt 8760 Zeitschritte. In vertikaler Richtung existiert nur ein Level (zur Zeit Default in FLADIS). Der Mittelpunkt der linken unteren Gitterbox des Modellfelds liegt bei 3.875 Grad Länge und 46.9375 Grad Breite, die räumliche Gitterauflösung beträgt 0.25 Grad in longitudinaler und 0.125 Grad in latitudinaler Richtung. Die Werte starten am 01.01.2006, 01:00 Uhr, und sie haben eine zeitliche Auflösung von einer Stunde. Die NetCDF-Datei enthält, wie unter VARS angegeben, neben den Konzentrationswerten zudem die longitudinalen und latitudinalen Koordinaten (jeweils als Vektor, da es sich um ein regelmäßiges Gitter handelt).

```
DSET TNO2003_DEU_M2006_RCG_O3.nc
TITLE REM-CALGRID: RUN1 NEW TNO-Emissions TNO2000
DTYPE netcdf
UNDEF -99.9
XDEF 54 LINEAR 3.8750000 0.2500000
YDEF 66 LINEAR 46.9375000 0.1250000
ZDEF 1 LEVELS 1
TDEF 8760 LINEAR 01Z01JAN2006 1HR
VARS 3
longitude=>lon 0 x LONGITUDE [degree_east]
latitude=>lat 0 y LATITUDE [degree_north]
Ozone=>o3 0 t,z,y,x OZONE one level [ug/m3]
ENDVARS
```

Abb. 12: Header-Datei für Modelldaten im NetCDF-Format.

FLADIS benötigt einige zusätzliche Information zum Datenformat, die unter Modelle: Externes Modell: Einstellungen ([Kapitel 10.5.4.2](#)) anzugeben sind. Es sind Angaben zum Fehlwert und zum Zeitschritt, die der externen Header-Datei (Abb. 12) entnommen werden können. Alle anderen Angaben zum Datenformat sind auf "0" zu setzen.

FLADIS geht bei seinen Berechnungen von einem kartesischen Koordinatensystem aus. Liegen die Modelldaten wie im Beispiel in Abb. 12 in einem geographischen Koordinatensystem vor, so übernimmt FLADIS die Transformation der Daten von den geographischen Koordinaten nach UTM ([Kapitel 10.5.4.2](#)).

Die NetCDF-Schnittstelle ist nicht in der FLADIS Basisversion enthalten.

6.6 Meteorologiefeld (FU Berlin)

An der FU Berlin wird ein meteorologisches Modell eingesetzt, das die interessierenden Größen wie Windrichtung, Windgeschwindigkeit, relative Feuchte und Temperatur online in einer räumlichen Auflösung bis zu 1 km und in einer zeitlichen Auflösung von 3 Stunden ermittelt. Das Modell liefert die Felder in verschiedenen Höhenschichten. Das Modell läuft online, d. h., man kann das Feld meteorologischer Daten unmittelbar nach Ablauf der 3 Stunden erhalten.

Die aktuellen meteorologischen Daten stehen auf einem FTP-Server der FU Berlin für registrierte Benutzer zur Verfügung. Für registrierte Benutzer wird bei Bedarf am Ende des Kalenderjahres eine CD mit den meteorologischen Daten des ganzen Jahres kostenfrei angefertigt.

Folgende meteorologischen Informationen sind als dreidimensionales Feld abgelegt:

- × atmosphärischer Druck in hPa
- × Temperatur in ° Kelvin
- × u-Komponente des Windes in m/s (in x-Richtung)
- × v-Komponente des Windes in m/s (in y-Richtung)
- × w-Komponente des Windes in m/s (in z-Richtung)
- × relative Feuchte in %

Folgende meteorologischen Informationen sind als zweidimensionales Feld abgelegt:

- × Schubspannungsgeschwindigkeit (u^*) in m/s
- × konvektive Skalierungsgeschwindigkeit (w^*) in m/s
- × Monin-Obukhov-Länge in m
- × Mischungsschichthöhe in m

Das horizontale Feld hat eine Gitterweite von 1000 m. In der Vertikalen sind folgende Punkte definiert: 2 m, 12 m, 35 m, 75 m, 150 m, 350 m, 750 m, 1500 m.

Die Windkomponenten werden in Windgeschwindigkeit (in m/s) und Windrichtung (in ° meteorologisches Koordinatensystem) extrahiert.

Folgende 8 meteorologische Größen sind extrahierbar:

Komp	Meteorologische Größe
1	atmosphärischer Druck in hPa
2	Temperatur in ° Kelvin
3	Wind als Geschwindigkeit (m/s) und Richtung (° meteorologisch)
4	relative Feuchte in %
5	Schubspannungsgeschwindigkeit (u^*) in m/s (nur Boden)
6	konvektive Skalierungsgeschwindigkeit (w^*) in m/s (nur Boden)
7	Monin-Obukhov-Länge in m (nur Boden)
8	Mischungsschichthöhe in m (nur Boden)



7 Einheitliche Emissions Schnittstelle

7.1 Emissionskataster als Eingangsdaten

In FLADIS können Emissionskataster (EKA) in einer beliebigen Auflösung integriert werden.

Die E-Kataster können in den folgenden verschiedenen räumliche Auflösungen vorliegen:

- Punktquellen (Großemittenten)
- Linienquellen (Hauptverkehrsstraßen)
- Flächenquellen (Industrie, Hausbrand, Nebenstraßen)

Zusätzlich können für die verschiedenen Emittenten

- Tages-,
- Wochen- und
- Jahresgänge

angegeben werden. Diese Ganglinien können vom Benutzer editiert werden.

7.2 Einheitliche Emissions – Schnittstelle (EES)

Die entwickelte einheitliche Emissionsschnittstelle (EES) fasst die verschiedenen räumlich aufgelösten Daten zusammen, so dass eine Weiterverarbeitung in FLADIS möglich ist. Dabei wird, je nach Emittent, eine unterschiedliche zeitliche Variabilität der Emittentengruppen und eine unterschiedliche räumliche Höhe der einzelnen Emittenten berücksichtigt.

Die EES ist als Vorschaltprogramm zu FLADIS konzipiert worden und kann jederzeit um zusätzliche Emissionskataster erweitert werden.

7.3 Definition des Formats der Emissionskatasterdaten (EKA)

Die Emissionskatasterdaten (EKA) müssen in einem ASCII-Format in Tabellenform vorliegen. Als Datentrennzeichen ist ein “;” (Semikolon) vorgeschrieben.

Für die drei Emissionstypen Punkt-, Linien- und Flächenquellen werden die, in den folgenden Unterkapiteln beschriebenen Formate, vorausgesetzt:

7.3.1 Allgemein

Kommentarzeilen:

Kommentarzeilen beginnen mit einem “!”

(Kommentarzeilen werden von FLADIS überlesen)

Dateikopf:

Alle Kopfzeilen beginnen mit einem “#”.

Der Dateikopf definiert in welcher geometrischen Form die Emissionsdaten vorliegen und damit die **spezifische Einleseroutine**:

#Punkt	-	Punktquelle
#Linie	-	Linienquelle
#Flaeche	-	Flächenquelle

Angabe des Emittenten:

Die Angabe des Emittenten in der Titelzeile muss in der gleichen Form erfolgen, wie es im Dialog "Einstellungen EES" (**Kapitel 10.7.1**) angegeben ist.

Einheit:

Die Einheit von Längeneinheiten inkl. geographischer Koordinaten ist Meter (m)

Die Einheiten von Emissionsmengen ist kg/Jahr

Zeichen:

Bei der jeweiligen Spaltenbeschreibung dürfen keine Leerzeichen, Sonderzeichen und Umlaute verwendet werden.

7.3.2 Punktquellen

- Die erste Zeile definiert die Spalten (Spaltentitel):Rechtswert; Hochwert; Austrittshöhe; (Schadstoffe)
- Die Reihenfolge der ersten drei Spalten ist fest
- Die Reihenfolge der Emissionen wird durch die Titelzeile definiert und ist beliebig erweiterbar.

7.3.3 Linienquellen

- Die erste Zeile definiert die Spalten (Spaltentitel):Rechtswert Anfang; Hochwert Anfang; Rechtswert Ende; Hochwert Ende; (Schadstoffe)
- Die Reihenfolge der ersten vier Spalten ist fest
- Die Reihenfolge der Emissionen wird durch die Titelzeile definiert und ist beliebig erweiterbar.

7.3.4 Flächenquellen

- Die Rastergröße bei Flächenquellen wird beim Start der EES in FLADIS vorgegeben. Sie ist damit für alle verwendeten Flächenquellen verbindlich!
- Die erste Zeile definiert die Spalten (Spaltentitel):Rechtswert; Hochwert; (Schadstoffe)
- Die Reihenfolge der ersten zwei Spalten ist fest und beschreibt die linke untere Ecke des Rasterquadrates

- Die Reihenfolge der Emissionen wird durch die Titelzeile definiert und ist beliebig erweiterbar.

7.4 Ablauf der EES

Der programmtechnische Aufbau der EES ist als Ablaufschema in der Abbildung bei „Summation der Emissionskataster“ dargestellt. Die EES greift dabei zweimal auf die eingelesenen Daten für die einzelnen Emissionskataster zurück. Dazwischen wird der Datenumfang der Emissionsdaten durch eine Clusterung reduziert.

Die Informationen über die zu verarbeitenden Emissionskataster werden aus einer Steuerdatei gelesen:

Inhalt der Datei	Beschreibung
!Flächenquellen Verkehr	Kommentarzeile durch “!” gekennzeichnet
#Quelle	Dieser Eintrag definiert, daß zwei Quelldefinitionsdateien folgen
f:\fladis97\eka\flaechqu.txt	Pfad der EKA-Datei
f:\fladis97\eka\verkehr.tag	Pfad der zugehörigen Tagesgangdatei
!Punktquellen Industrie	Kommentarzeile
#Quelle	s.o.
f:\fladis97\eka\punktquelle.txt	Pfad der EKA-Datei
f:\fladis97\eka\industrie.tag	Pfad der zugehörigen Tagesgangdatei

Abb. 13: Steuerdatei zur Beschreibung der verwendeten Emissionskataster

7.4.1 Summation der Emissionskataster (Gitterweite)

Im ersten Durchlauf werden die einzelnen Kataster in ein Gesamtkataster für einen Schadstoff aufsummiert. Dabei wird als Grundeinheit ein quadratisches Gitter vorgegeben. Die Vorgabe der Gitterauflösung geschieht in der FLADIS-Steuerdatei und muss der Auflösung von allen Flächenemissionskatastern entsprechen!

Die einzelnen Punktquellen werden dem jeweiligen Gitterelement zugeordnet. Bei Linienquellen wird der Anteil der Emissionen einer Linie entsprechend dem Längensanteil der Linie dem jeweiligen Gitterelement zugeordnet.

Das Ergebnis der Katasterzusammenfassung ist ein quadratisches Gitter mit den aufsummierten Emissionen aller berücksichtigter Emissionskataster. Dieses summierte Gesamtemissionskataster kann im ArcInfo-Generate-Format oder im MapInfo MIF-Format ausgegeben werden.

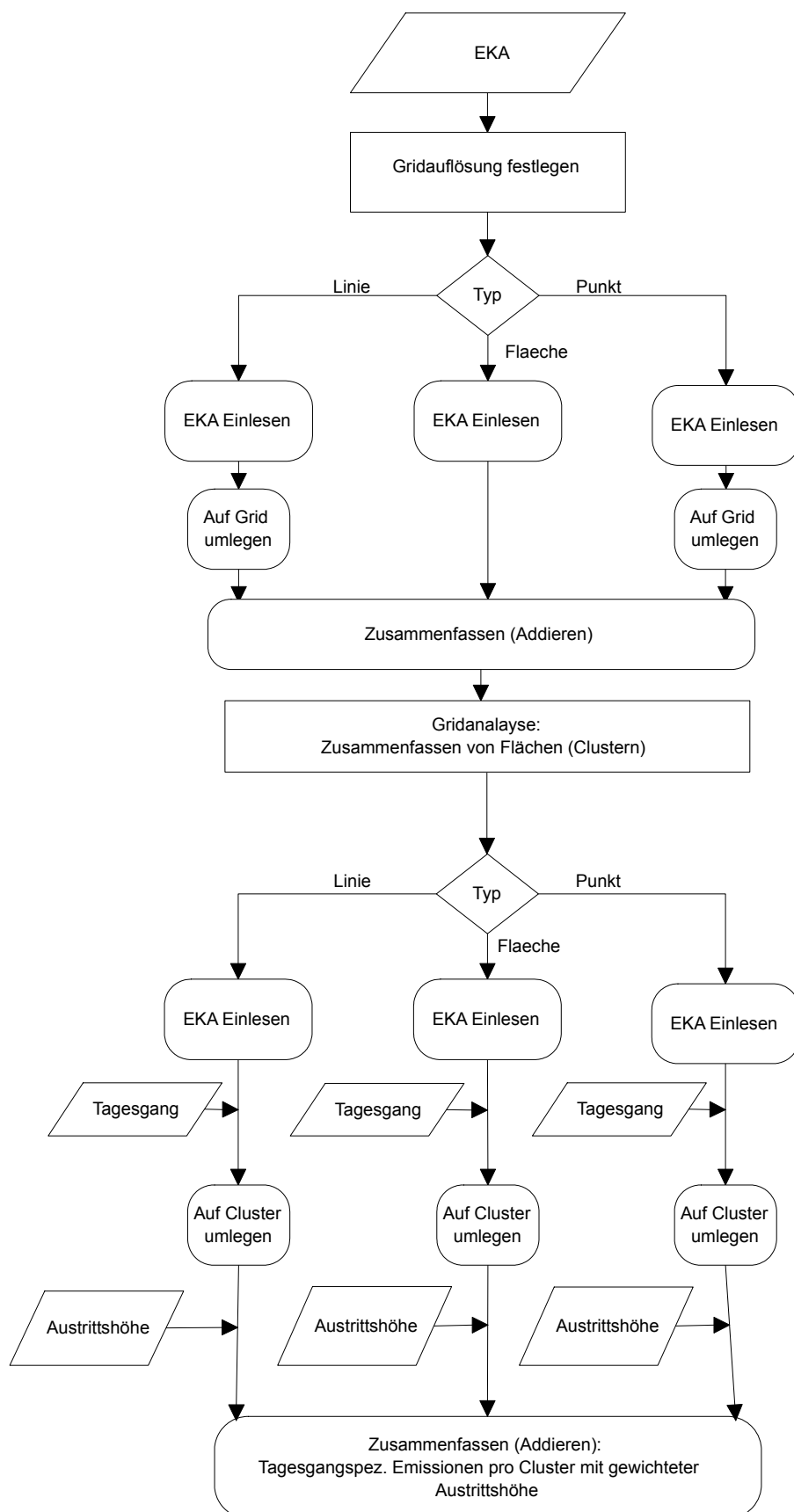


Abb. 14: Flussdiagramm der "Einheitlichen Emissionsschnittstelle"(EES)

7.4.2 Clusterung

Das summarische Emissionskataster muss in seiner Datenmenge zur Weiterverarbeitung im Bilanzierungsmodell von FLADIS weiter reduziert werden. Dazu werden Emissionsgitterflächen nach dem im folgenden beschriebenen Verfahren zusammengefasst:

10	15	D ₁₀	10	5
15	C ₅₀	B ₅₀	C ₆₅	45
D ₅	B ₆₀	A ₁₀₀	B ₇₀	D ₃₅
15	C ₄₀	B ₄₅	C ₄₀	25
5	15	D ₂₅	25	10

Abb. 15: Verfahren der Clusterung

i.	Identifizierung der Gitterfläche mit maximaler Emission A, $E_{\max}=100$ (1. Cluster)
ii.	Mittelwertbildung μ_1 der Emission der direkt an diese Fläche grenzenden Gitterflächen B ($\mu_1 = 56,25$)
iii.	Wenn Mittelwert μ_1 minimal $CC_{\text{Bsp.}} = 20\% E_{\max}$ ist, werden die Flächen B dem 1. Cluster zugeordnet. Wenn nicht wird das Verfahren mit dem nächsthöchsten Wert nach A bei Schritt ii. wiederholt.
iv.	Als nächstes wird der Mittelwert der Flächen C gebildet ($\mu_2=48,75$)
v.	Wenn Mittelwert μ_2 minimal $CC_{\text{Bsp.}} = 20\% E_{\max}$ ist, werden die Flächen C dem 1. Cluster zugeordnet. Wenn nicht wird das Verfahren mit dem nächsthöchsten Wert nach A bei Schritt ii. wiederholt.
vi.	Als nächstes wird der Mittelwert der Flächen D μ_3 gebildet ($\mu_3 = 18,75$). Da dieser Wert unter 20% des Wertes von A liegt, wird das Verfahren mit dem nächsthöchsten Wert nach A bei Schritt ii. neu gestartet.
vii.	Diese Verfahren wird solange durchgeführt bis der zentrale Wert A einen definierten Wert unter dem Maximalwert aller Gitterflächen unterschreitet (UG).
viii.	Die bis zum Schritt vii. noch nicht berücksichtigten Flächen werden in einem eigenen Cluster zusammengefaßt.

Abb. 16: Beschreibung des Verfahrens

Die Anzahl der nach diesem Verfahren gebildeten Cluster und der dadurch zusammengefassten Flächen hängt zum einen davon ab, bis zu welcher unteren Grenze (UG) die Clusterung erfolgen soll und zum anderen, wie stark der Mittelwert der das Zentrum A umliegenden Flächen vom Emissionswert der Fläche A abweichen darf (Cluster Cut - CC). Beim Suchen nach sinnvollen Vorgaben von UG und CC muss einerseits berücksichtigt werden, dass ein möglichst großer Teil der lokal aufgelösten Emissionen in das Bilanzierungsmodell einfließen soll und andererseits die Anzahl der Cluster nicht zu groß sein darf, damit die Rechenzeit in einem vertretbarem Rahmen bleibt. Aus Gründen der Rechenzeit wird vorgeschlagen, maximal 300 Cluster zu bilden. Die gebildeten Cluster werden flächentreu in Kreise umgewandelt.

7.4.3 Erzeugung der zeitaufgelösten Emissionscluster

Im folgenden Verfahrensschritt werden zeitaufgelöste Emissionscluster erstellt. Damit steht in FLADIS für jeden Zeitpunkt eine spezifische Emissionsgrundlage zur Verfügung. Bei der Zeitauflösung werden Tagesgänge in der Auflösung Stunden getrennt für Werktags, Samstags und Sonntags, Wochengänge in der Auflösung Wochentagen und Jahresgang in der Auflösung von Monaten berücksichtigt.

Für die Emittentengruppen Verkehr wurden Tagesgänge und ein Wochengang aus dem UBA-Emissionsmodell Mobilev entnommen. In Mobilev wird kein Jahresgang angegeben. Die Erweiterung um einen Jahresgang ist aber möglich. Die Ganglinien sind in der Abbildung dargestellt.

Die Ganglinien für die Quellgruppe Industrie wurden einer Studie der TNO entnommen. Die Ganglinien sind in der Abbildung dargestellt.

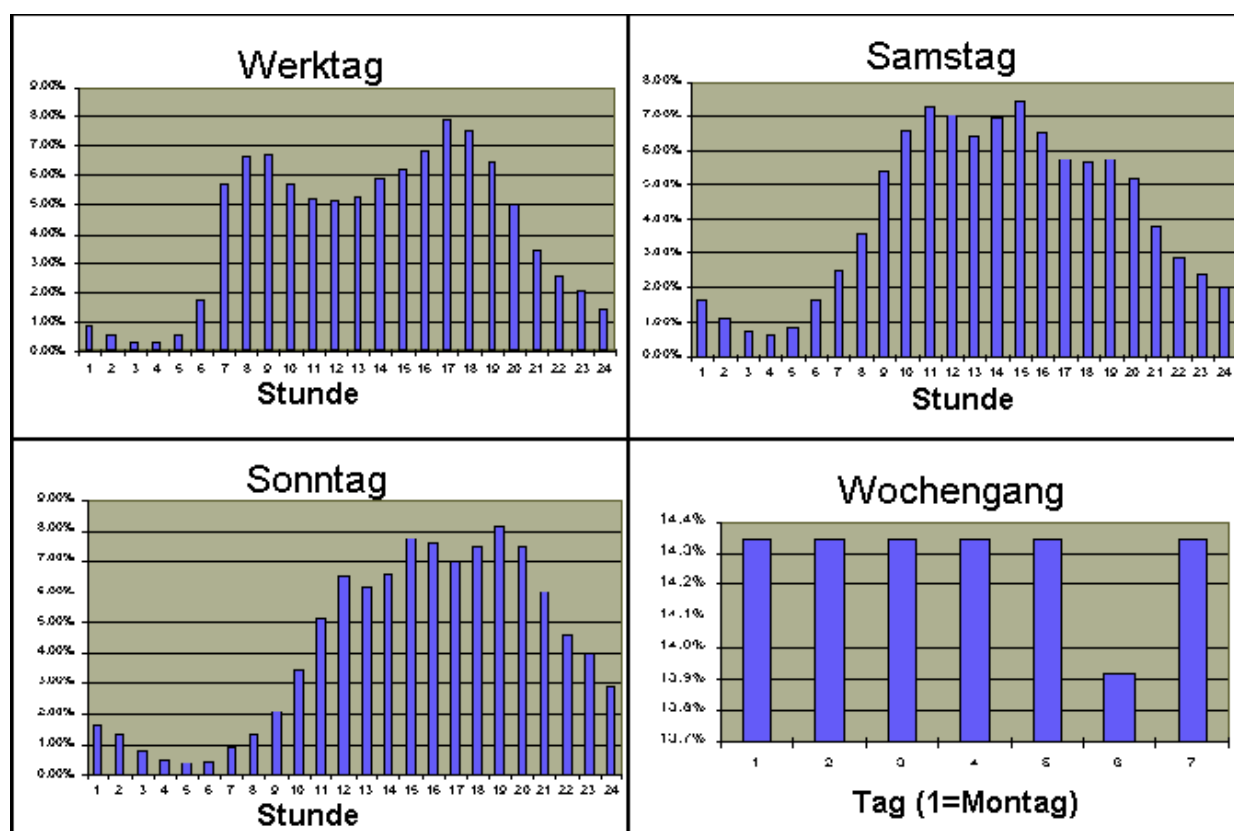


Abb. 17: Ganglinien für die Quellgruppe Verkehr

Die Ganglinien für die Quellgruppe Industrie wurden einer Studie der TNO entnommen. Die Ganglinien sind in der Abbildung dargestellt.

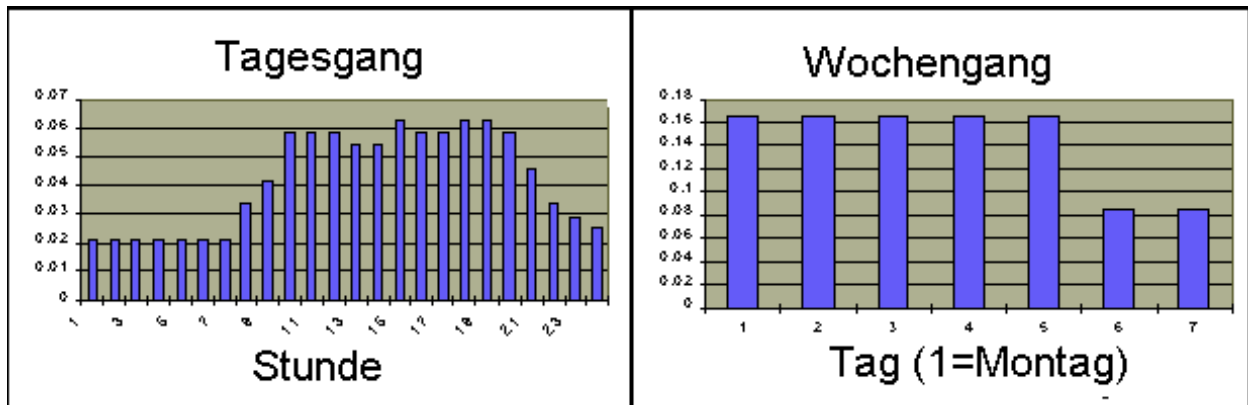


Abb. 18: Ganglinien Quellgruppe Industrie

7.4.4 Format der Ganglinien

Die Ganglinien werden als ASCII-Dateien vorgegeben und haben folgendes Format:

Inhalt der Datei	Beschreibung
!Ganglinien Verkehr	Kommentarzeile durch "!" gekennzeichnet
#Werktag	Kopf für Tagesgang Werktag
1 0.0087 2 0.0053 ... 24 0.0147	Tagesgangwert in der Auflösung Stunden Summe über 24 Stunden muß den Wert 1 ergeben
#Samstag	Kopf für Tagesgang Samstag
1 0.0162 2 0.0112 ... 24 0.0205	Tagesgangwert in der Auflösung Stunden Summe über 24 Stunden muß den Wert 1 ergeben
#Sonntag	Kopf für Tagesgang Sonntag
1 0.016 2 0.0135 ... 24 0.0291	Tagesgangwert in der Auflösung Stunden Summe über 24 Stunden muß den Wert 1 ergeben
#Wochengang	Kopf für Wochengang
1 0.1435 ... 7 0.1434	Wochengangwerte in der Auflösung Tage 1- entspricht Montag; 7- entspricht Sonntag Summe über 7 Tage muß den Wert 1 ergeben
#Jahresgang	Kopf für Jahresgang
1 0.0834 ... 12 0.0834	Jahresgangwerte in der Auflösung Monate 1- entspricht Januar Summe über 12 Monate muß den Wert 1 ergeben

Abb. 19: Steuerdatei : Format der Gangliniendatei (Bsp.: "Verkehr.tag")

7.4.5 Einbringen der Quellhöhe

Bei der zeitaufgelösten Zusammenfassung der einzelnen Emissionskataster wird die Emittentenhöhe folgendermaßen berücksichtigt. Für jeden zu berechnenden Zeitpunkt wird die Quellhöhe mit der entsprechenden durch die Ganglinien ermittelten Emissionsmenge multipliziert. Die so gebildeten Produkte der einzelnen Quellen, die einem Cluster zugeordnet sind, werden addiert. Als gewichtete Quellhöhe des Clusters wird der Quotient aus dieser Summe und der Gesamtemission des Clusters gebildet.

7.4.6 Ablegen der Clusterdateien

Die durch die EES erzeugten zeitaufgelösten Clusterdateien werden für die weitere Benutzung in FLADIS im Binärformat nach Schadstoffen getrennt abgelegt. Für einen Schadstoff muss dafür ein eigener Ordner angelegt werden, dessen Pfad in der Batchdatei vorgegeben wird.

Die einzelnen Clusterdateien werden folgendermaßen bezeichnet:

“cl” HHDDMM .” clu”

mit

H	Stunde am Tag (zweistellig)
D	Tag in der Woche (1- Montag, zweistellig)
M	Monat im Jahr (zweistellig)

Zusätzlich wird in dem Schadstoffordner vom Programm eine Datei abgelegt mit der Bezeichnung “cluster.inf”. Diese Datei wird von FLADIS gelesen und definiert die Anzahl der Cluster und damit die Anzahl der im Bilanz-Modell zu berücksichtigenden Emittenten.

In der Clusterdatei werden für jeden Cluster die Informationen über den geographischen Mittelpunkt, die Emissionsmenge, die gewichtete Emittentenhöhe und den Radius des Clusters abgelegt.



8 Kreuzvalidierung

8.1 Beschreibung Kreuzvalidierung

Mit Hilfe des statistischen Verfahrens der Kreuzvalidierung ermöglicht FLADIS zum einen Aussagen über die Güte der berechneten flächenhaften Darstellung. Zum anderen liefert es Angaben zum Einfluss einzelner Stationen auf die flächenhafte Darstellung und unterstützt so die Optimierung des in die Berechnung eingeflossenen Messnetzes.

In FLADIS ist das "leave-one-out"-Verfahren zur Kreuzvalidierung implementiert. Die angewendete Methodik entspricht der VDI Richtlinie 4280 Blatt 5 "Ermittlung der Unsicherheit räumlicher Beurteilungen der Luftqualität" (Kommission Reinhaltung der Luft im VDI und DIN, 2009).

Das "leave-one-out"-Verfahren beruht darauf, dass für jeden betrachteten Zeitschritt reihum jede Station aus dem Datensatz ausgeschlossen und der Wert an ihrer Stelle durch das jeweilige Interpolationsverfahren bestimmt wird (Abb. 20). Aus der Differenz zwischen dem Wert, den das Modell an der Stelle der ausgelassenen Station errechnet, und dem Messwert der ausgelassenen Station wird über alle Zeitschritte die mittlere relative Abweichung (MRA) und die Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers (RMSE, root mean square error) berechnet. Je größer die mittlere relative Abweichung an einem Stationsort, desto größer ist der Einfluss der Station auf die flächenhafte Darstellung.

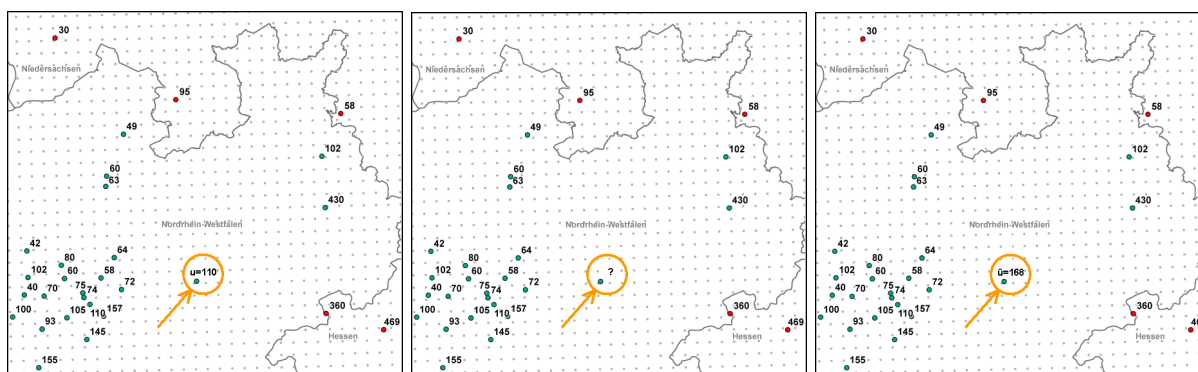


Abb. 20: Vorgehensweise Kreuzvalidierung: Stationswert aus Datensatz entfernen, Wert an der Stelle berechnen, berechneten Wert mit Messwert vergleichen.

8.2 Anwendungsbeispiel

Im Folgenden wird eine Anwendung der Kreuzvalidierung durch IVU Umwelt im Rahmen einer Auswertung gemäß der Rahmenrichtlinie 96/62/EG für die HLUG im Jahre 1999 (siehe z. B. HLFU, 1996 und FLADIS, 2000a) beschrieben.

Die benutzten Daten waren halbstündige NO₂-Messungen aus dem Messnetz des Hessischen Landesamtes für Umwelt und Geologie (HLUG). Verwendet wurden Zeitreihen der Monate Januar, Mai, September und des ganzen Jahres 1998, die eine zeitliche Belegung von mindestens 90% aufweisen.

Als Interpolationsverfahren wurde bei dieser Untersuchung eine lineare Interpolation auf einer Delauney-Triangulierung ausgewählt, weil dieses Verfahren ohne zusätzliche Parameter auskommt. Zusätzlich wurde als ergänzendes Modell das jeweilige halbstündliche Optimum aus "linearem Modellansatz" oder "Bilanzierungsmodell" ausgewählt, bei dem gewährleistet war, dass die gemessenen Werte im Ergebnis der Flächenschätzung erhalten bleiben (Modelloptimum mit Stützstellentreue).

Die Ergebnisse der Kreuzvalidierung sind in Tabelle 3 aufgelistet.

Im Januar sind alle Fehlermaße z. T. deutlich niedriger als in den anderen Monaten. Eine Ursache dafür ist die höhere Anzahl von Stationen und das insgesamt höhere Niveau der NO₂-Konzentration. Durch die Verwendung des Modells kann die Qualität der Schätzung deutlich verbessert werden.

Tabelle 3: Wurzel aus der mittleren quadratischen Abweichung (Root Mean Squared Error RMSE) und mittlere relative absolute Abweichung (MRA) bei der Kreuzvalidierung der NO₂-Messungen.

	Ohne Modell		Mit Modell	
	RMSE (µg/m³)	MRA (%)	RMSE (µg/m³)	MRA (%)
Jahr 1998	12.3	44.2	10.7	34.8
Januar 1998	9.8	26.7	8.3	23.4
Mai 1998	14.8	71.4	12.1	61.3
September 1998	12.5	52.6	10.7	50.5

Bei dieser Kreuzvalidierung wurde nicht alleine die Qualität des Verfahrens bewertet, sondern auch die Struktur des Messnetzes.

Die Bedeutung einzelner Stationen bei der Ermittlung der Unsicherheitsmaße wird aus Abb. 21 und Abb. 22 ersichtlich.

Fällt z. B. im Mai 1998 die Station 650 (Königstein) aus, würde die Schätzung den (nicht-)gemessenen Wert um fast 270 % überschätzen. Tendenziell werden gemes-

sene Werte eher überschätzt. Dieses Ergebnis ist aber natürlich sehr stark von der Lage und der Auswahl der verwendeten Stationen abhängig. Eine lokale Aussage, wie z. B. "Die Unsicherheit der Schätzung an der Station Königstein ist groß", ist nicht gerechtfertigt, da ja gerade das Vorhandensein dieser Station den lokalen Fehler minimiert. Das Gegenteil ist der Fall: Eine große Unsicherheit der Interpolation wird durch die Station Königstein beseitigt.

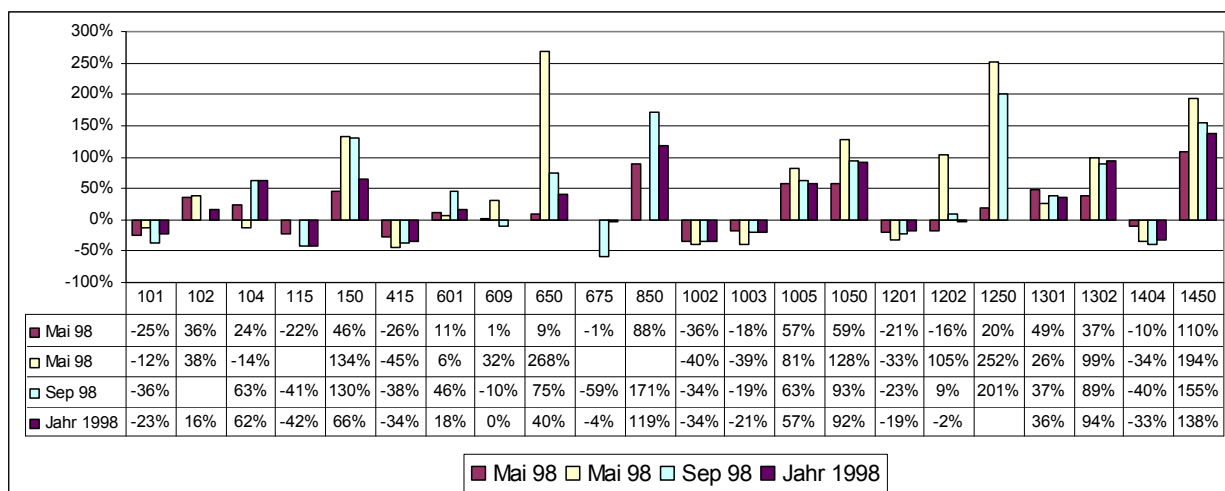


Abb. 21: Relative Abweichung der Schätzung der mittleren NO₂-Konzentrationen von der Messung an den einzelnen Stationen. Es sind nur Stationen mit Beträgen der Abweichung größer als 30 % dargestellt.

Rel. Abweichung in %
bei Kreuzvalidierung

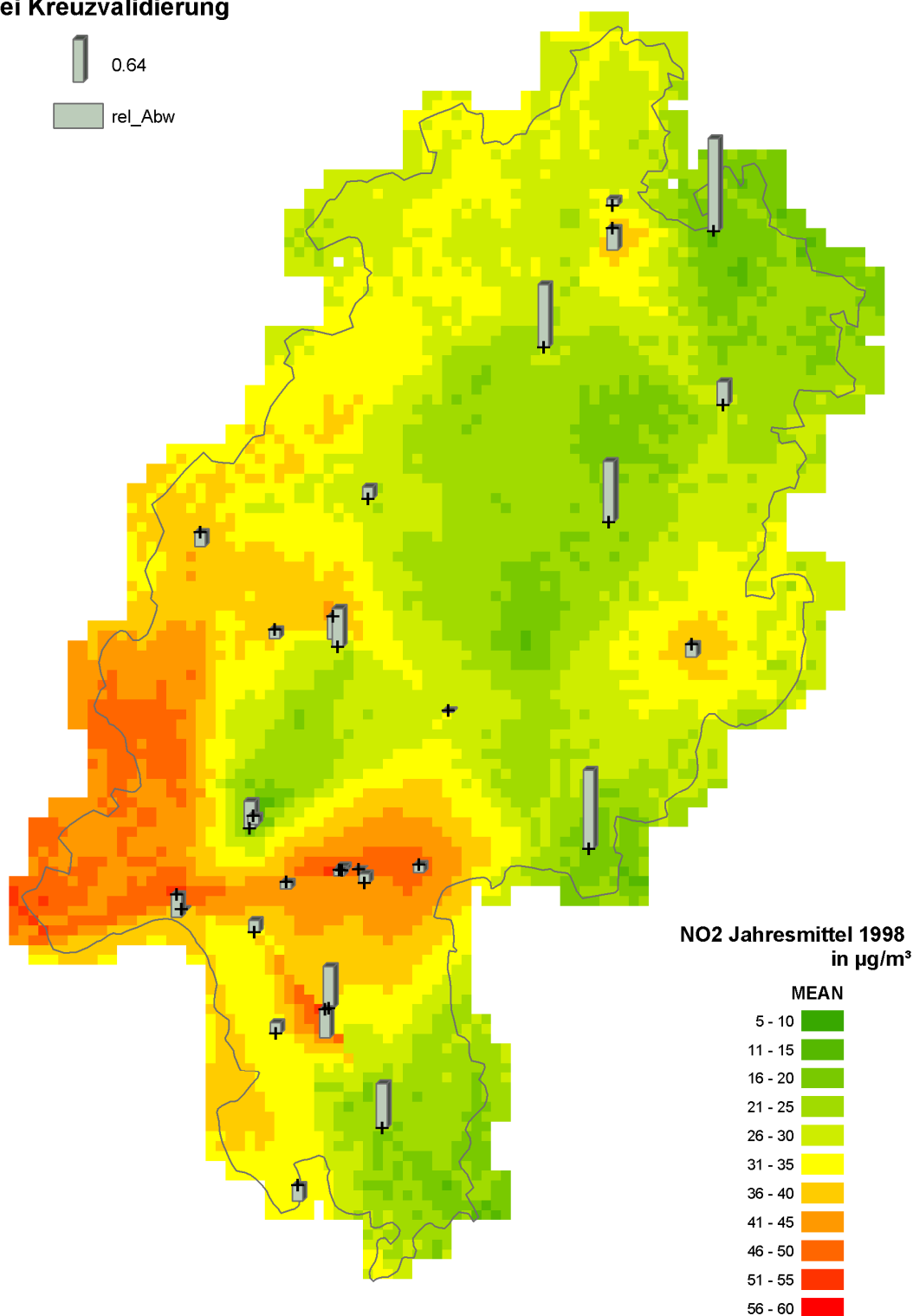


Abb. 22: Darstellung der relativen Abweichung der Jahresmittelwerte der NO₂-Konzentrationen der Schätzung von der Messung an den Orten der Stationen für das Jahr 1998 (positive Werte "nach oben"). Näheres siehe Text.



9 Datenmanagement

9.1 Begriffsdefinitionen

FLADIS-Raster: Externe Modelldaten liegen in unterschiedlichen Auflösungen und Koordinatensystemen vor. Werden externe Modelldaten in FLADIS eingelesen, so findet in der Regel eine Interpolation der Modelldaten auf ein internes Raster mit vorzuzugender Auflösung statt. Dieses Raster wird im Folgenden als FLADIS-Raster bezeichnet.

Datensatz: Datei, die die Ergebnisse einer externen Modellrechnung enthält, oder aber die Ergebnisse einer Darstellung bzw. Auswertung mit FLADIS; ggf. gehört zu dieser Datei eine externe Header-Datei.

Modelldaten: Ergebnisdateien externer Modellrechnungen (z. B. REM-CALGRID, LASAT,...).

FLADIS-Daten: Ergebnisdateien der Darstellung und Auswertung mit FLADIS, liegen im FLADIS-Raster vor.

Meta-Informationen: Für jeden Datensatz werden Meta-Informationen definiert, wie z. B. Szenario-ID, zugehöriger Pfad, Erstelldatum, Ersteller, Koordinatensystem, räumliche Auflösung oder betrachteter Stoff. Für eine ausführliche Beschreibung der Meta-Informationen siehe [Kapitel 9.3](#).

Datenarchiv: Die zu verwaltenden Dateien, d. h. die Menge der Datensätze; diese liegen im LAN (local area network) in einem oder mehreren Verzeichnissen vor.

Root Directory: Alle Verzeichnisse, die zum Datenarchiv gehören, d. h. die Datensätze enthalten, deren Meta-Informationen in der Datenbank abgelegt sind, müssen unter einem gemeinsamen Wurzelverzeichnis liegen, dem so genannten Root Directory.

FLADIS-Datenbank: Datenbank, die die Meta-Informationen der im Datenarchiv abgelegten Datensätze enthält, nicht aber die Datensätze selbst.

Der Zugriff von FLADIS auf das Datenarchiv erfolgt über die FLADIS-Datenbank entweder lokal oder über ein LAN (local area network).

9.2 Allgemeines

Die Verwaltung und Verwendung großer Mengen von Modell- und Ergebnisdaten wird in FLADIS durch ein Datenmanagementsystem unterstützt. Dazu sind in FLADIS

Funktionalitäten zur Verwaltung ([Kapitel 10.3.7](#)) und Nutzung ([Kapitel 10.3.8](#)) einer Datenbank implementiert. Die FLADIS-Datenbank enthält Meta-Informationen von Datensätzen wie in [Kapitel 9.3](#) aufgeführt. Die Datensätze selbst werden in einem oder mehreren Verzeichnissen im LAN (local area network) abgelegt (Abb. 23). Alle Verzeichnisse, die Datensätze enthalten, müssen dabei unter einem gemeinsamen Wurzelverzeichnis liegen, dem so genannten Root Directory ([Kapitel 9.1](#)). Dies ermöglicht die Nutzung einer Datenbank beispielsweise von verschiedenen Projektpartnern innerhalb des jeweils eigenen LANs.

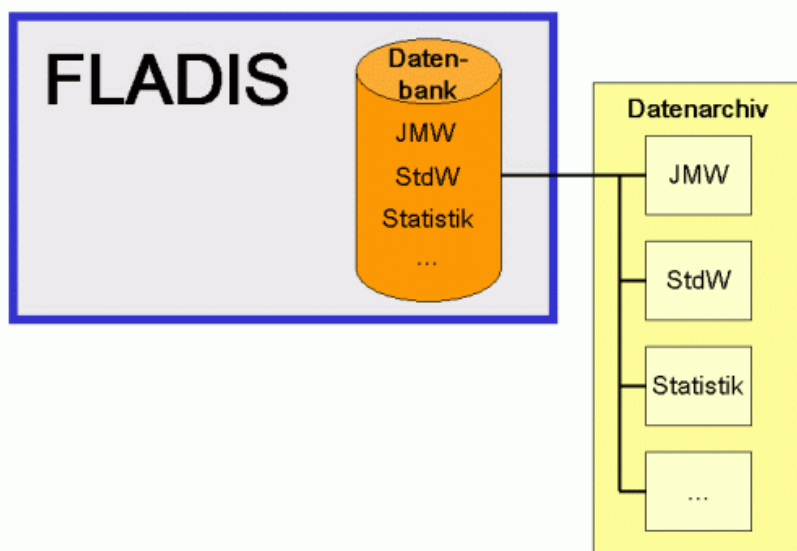


Abb. 23: Schema Datenverwaltung mit der FLADIS Datenbank.

Wird das Datenmanagementsystem genutzt, so können zum einen die Meta-Informationen externer Modelldaten in der Datenbank abgelegt werden. Zum anderen können die Ergebnisse des jeweils zuletzt durchgeführten FLADIS-Laufs (z. B. Jahresmittelwerte und Auswertung nach EU-Richtlinie) oder einer in FLADIS durchgeführten Rechenoperation ([Kapitel 10.10](#)) im NetCDF-Format abgespeichert und die zugehörigen Meta-Informationen ebenfalls in der Datenbank eingetragen werden. Diese Vorgehensweise erlaubt einen schnellen und übersichtlichen Zugriff auf externe Modellergebnisse und auf die Ergebnisse bereits durchgeführter FLADIS-Läufe, die über die Datenbank wieder in FLADIS geladen, erneut grafisch dargestellt ([Kapitel 10.9](#)) oder für weitere Rechenoperationen verwendet werden können.

Das Datenmanagementsystem ist nicht in der FLADIS Basisversion enthalten.

9.3 Beschreibung der Meta Informationen

Die Meta-Informationen eines Datensatzes (Tabelle 4) werden zum großen Teil aus der zugehörigen externen Header-Datei (*.ctl) ausgelesen. Einige Felder werden intern abgefragt (z. B. die Dateigröße der Daten-Datei) oder belegt (z. B. die daten-

bankinterne ID). Die restlichen Felder müssen mit Hilfe der entsprechenden Dialoge (**Kapitel 10.3.8**) ausgefüllt werden.

Jeder Datensatz wird durch eine Szenario-ID charakterisiert. Diese setzt sich aus den folgenden Bestandteilen zusammen:

Stoff_Szenariotyp_Nummer_GebietJahr_ModellMeteo_F

Stoff: einer der Namen aus der Speziesliste

Szenariotyp: eins der Szenarios aus HS, RS, SS

Nummer: fortlaufende Nummer

Gebiet: eins der Gebiete aus EU, DG, DF, DH, BE, RG, RM, MU

Jahr: z. B. 03 (2003), 05 (2005), 06 (2006)

Modell: eins der Modelle aus R, L, M

Meteo: einer der meteorologischen Treiber aus T, L, C

F: Ergebnis einer FLADIS-Rechnung, FLADIS-Raster

also z. B. NO₂_HS_001_DF03_RT_F: Stoff NO₂, Hypothetisches Szenario Nr. 001, Gebiet Deutschland fein, Referenzjahr 2003, Modell REM-CALGRID, meteorologischer Treiber TRAMPER, mit FLADIS ausgewertet (d. h., aus den Stundenwerten der REM-CALGRID-Rechnung wurden der Jahresmittelwert sowie die EU-Kenngrößen zu NO₂ berechnet).

Die in Tabelle 4 aufgeführte Parent-ID 1 und 2 werden bei Bedarf intern vergeben. Meta-Informationen von Datensätzen, die extern (d. h. von externen Modellen wie z. B. REM-CALGRID) erzeugt wurden, haben keine Parent-ID (bzw. ggf. die Parent-ID "0"). Werden jedoch in FLADIS neue Datensätze aus bestehenden Datensätzen erzeugt und deren Meta-Informationen in der Datenbank abgelegt, so erhalten diese ein oder zwei Parent-IDs. Werden beispielsweise aus den REM-CALGRID-Modelldaten die Stundenwerte eines Jahres eingelesen und daraus in FLADIS der Jahresmittelwert berechnet und als eigener Datensatz abgespeichert, so erhält dieser Datensatz eine Parent-ID, nämlich die datenbankinterne ID (gemäß Tabelle 4) der eingelesenen REM-CALGRID-Modelldaten mit den Stundenwerten. Auf diese Weise ist nachvollziehbar, aufgrund welcher Ursprungsdaten der neu erzeugte Datensatz entstanden ist. Wird in FLADIS eine Auswertung mit zwei Feldern vorgenommen (z. B. Bildung einer Differenz zwischen diesen beiden Feldern, siehe **Kapitel 10.10**), so erhält das Ergebnis, so es denn abgespeichert wird, zwei Parent-IDs, nämlich die IDs der der Auswertung zu Grunde liegenden Felder.

Tabelle 4: FLADIS Datenbank-Felder

Name	DB-Feld	Typ	Beschreibung
ID	ID	Zahl	Datenbankinterne ID, eindeutig
Szenario-ID	SzenID	Text	Szenario-ID
Daten	DataPath	Text	Pfad und Name der Daten-Datei
Header-Datei	CtlPath	Text	Pfad und Name der Header-Datei
Dateigröße	FileSize	Zahl	Dateigröße der Daten-Datei in kB
Modell	CreatMod	Zahl	zu Grunde liegendes Modell
Meteorologie	CreatMet	Zahl	zu Grunde liegende Meteorologie
Datenformat	DataFormat	Zahl	Datenformat (z. B. NetCDF, FU Binär)
Szenariotyp	SzenTyp	Zahl	Szenariotyp (HS, SS, RS)
Szenario-Nr.	SzenNr	Text	Szenarionummer
Parent-ID 1	ParentID1	Zahl	Verknüpfung (Quelle)
Parent-ID 2	ParentID2	Zahl	Verknüpfung (Quelle)
Erstelldatum	CreatDate	Datum	Erstelldatum der Daten-Datei
Ersteller	Author	Text	Ersteller der Daten-Datei
Projekt-Datei	FprPath	Text	Pfad und Name der FLADIS-Projektdatei
Kommentar	FComment	Text	Freier Text, optional
Koordinatensystem	CoordSys	Zahl	Koordinatensystem der Daten-Datei
Referenzellipsoid	RefEllipsoid	Zahl	Referenzellipsoid der Daten-Datei
Horiz. Auflösung in X	HorResX	Zahl	Horizontale Auflösung in X-Richtung
Horiz. Auflösung in Y	HorResY	Zahl	Horizontale Auflösung in Y-Richtung
Untere linke Zelle in X	BBox_X1	Zahl	X-Koordinate des Mittelpunkts der linken unteren Zelle
Untere linke Zelle in Y	BBox_Y1	Zahl	Y-Koordinate des Mittelpunkts der linken unteren Zelle
Anzahl Zellen in X	BBox_nX	Zahl	Anzahl Zellen in X-Richtung
Anzahl Zellen in Y	BBox_nY	Zahl	Anzahl Zellen in Y-Richtung
Gebietsbezeichnung	Region	Zahl	Modellgebiet
Vertikale Schicht Nr.	Level	Zahl	Vertikale Schicht, per Default = 1
Zeitschritt	TStep	Zahl	Zeitliche Auflösung der Modelldaten
Startdatum	TPeriodStart	Datum	Beginn des betrachteten Zeitraums
Enddatum	TPeriodEnd	Datum	Ende des betrachteten Zeitraums
Stoffname	VarName	Zahl	Größe, Schadstoff
Bezug	VarRef	Zahl	Bezug (JMW, SMW, statistische Größen...)
Einheit	VarUnit	Zahl	Einheit
Variablentyp	VarType	Zahl	Variablentyp, per Default = skalar
Fehlwert	VarUndef	Zahl	Fehlwert
Root Directory	RootDir	Text	Root Directory des zur Datenbank gehörenden Datenarchivs
Berechnungstiefe	CalcDepth	Zahl	Berechnungstiefe der FLADIS-Datenfelder (interner Wert)
Beschreibung	CalcDesc	Text	Systematisierte Beschreibung der FLADIS-Datenfelder





10 Benutzung

10.1 Einleitung



Abb. 24: Anwendungsfenster von FLADIS

Das Programm FLADIS wird über ein Menü gesteuert. Mit der Auswahl von Menübefehlen werden Voreinstellungen für einen Rechenlauf von FLADIS festgelegt. In dieser Hilfe werden die Funktionalitäten der einzelnen Menüpunkte beschrieben.

a)

Die **Symbolleiste** ermöglicht Ihnen den schnellen Zugriff auf die wichtigsten Einstellungen von FLADIS:

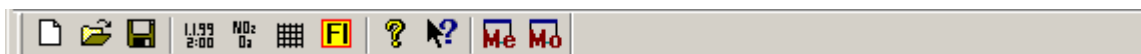


Abb. 25: Symbolleiste von FLADIS

b)

Die **Kontextbezogene Hilfe** ermöglicht den schnellen Zugriff auf die Online-Hilfe, die Ihnen die Funktion und Anwendung der einzelnen Knöpfe und Menüpunkte genauer erläutert.



Abb. 26: Kontext-Hilfe-Knopf

c)

Am Fußende des Anwendungsfensters befindet sich die **Statusleiste**. Sie gibt Auskunft über die Funktion des Knopfes oder Menüpunktes, auf dem der Mauszeiger im Moment steht.



Abb. 27: Statusleiste

d)

FLADIS wird im Menü Modell oder von der Symbolleiste aus gestartet.



Abb. 28: FLADIS Startknopf

10.2 Programmfenster

Nach dem Start öffnet sich das Programmfenster von FLADIS mit einem Standbild z. B. des jeweiligen Untersuchungsgebiets. Dieses Bild verschwindet, sobald man in FLADIS die linke Maustaste verwendet. Im Programmfenster werden alle Aktionen, die vom Anwender durch Menübefehle erfolgen, protokolliert.

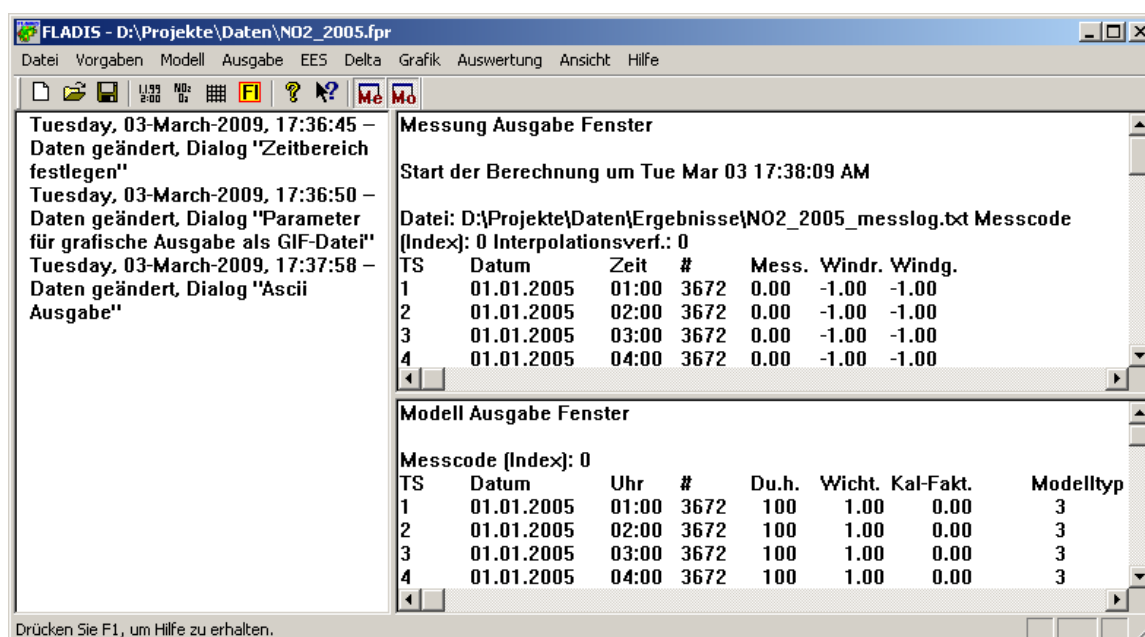


Abb. 29: Programmfenster, Ausgabefenster für Messung und Modell

Zusätzlich können während der Berechnung Daten zu den Messwerten und den Modellwerten ausgegeben werden. Die Ausgabe kann entweder über das Menü „Ansicht“, Menüpunkt "Messung Fenster" bzw. "Modell Fenster", oder über die Schaltflächen „Me“ bzw. „Mo“ in der Funktionsleiste aus- bzw. eingeschaltet werden.

10.3 Menü Datei

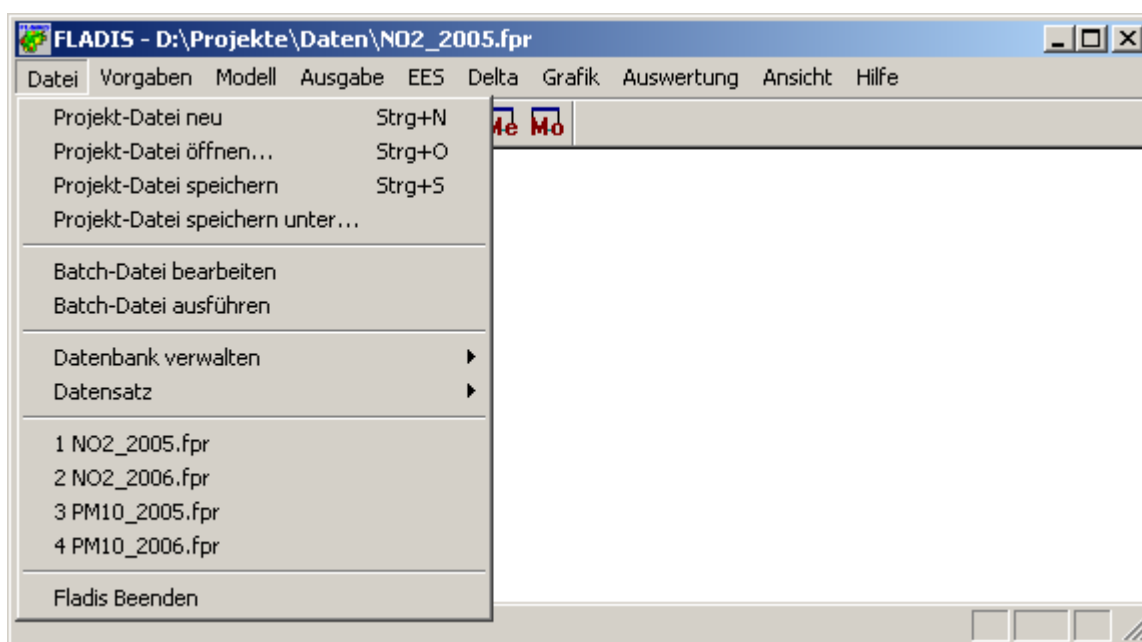


Abb. 30: Menü Datei

10.3.1 Projekt-Datei neu

Erstellt ein neues FLADIS-Projekt mit einer FLADIS-Projektdatei (*.fpr).

10.3.2 Projekt-Datei öffnen

Öffnet eine bereits vorhandene FLADIS-Projektdatei (*.fpr).

10.3.3 Projekt-Datei speichern

Speichert die aktuelle FLADIS-Projektdatei (*.fpr).

10.3.4 Projekt-Datei speichern unter

Speichert die aktuelle FLADIS-Projektdatei (*.fpr) unter einem vorzugebenden Namen.

10.3.5 Batch Datei bearbeiten

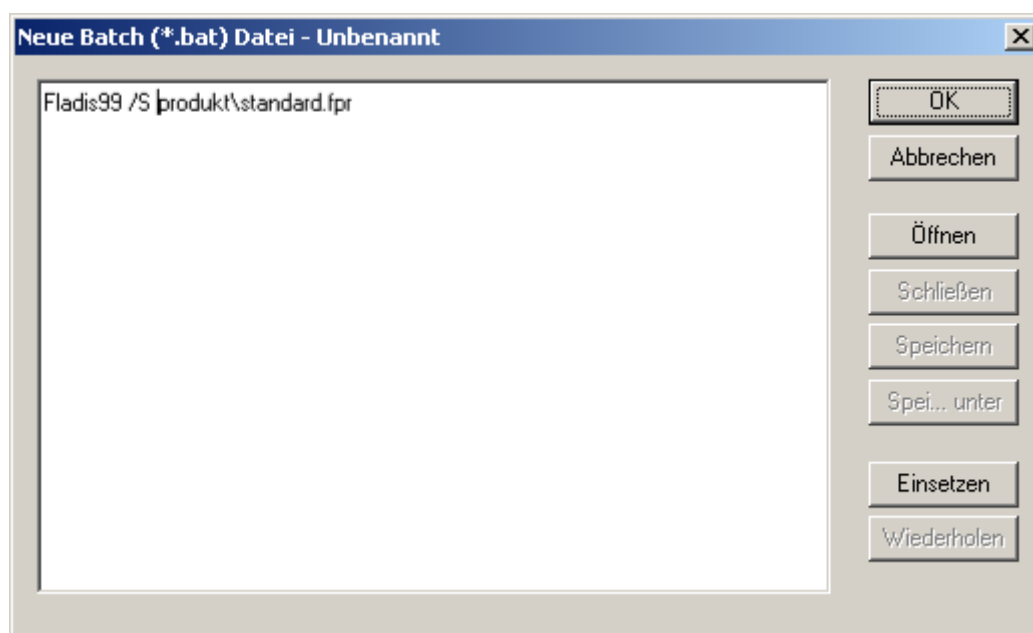


Abb. 31: Dialog zur Batchbearbeitung

Mit Hilfe des obigen Dialogs kann eine Batch-Datei erstellt bzw. bearbeitet werden, die mit Hilfe des Menübefehls „Ausführen der Batch-Datei“ (**Kapitel 10.3.6**) gestartet werden kann. Die Batch-Datei kann auch aus einer „MS-DOS Eingabeaufforderung“ gestartet werden.

Über die Schaltflächen "Öffnen" und "Schließen" können bestehende Batch-Dateien in das Bearbeitungsfenster geladen und wieder daraus entfernt werden. Änderungen, die im Bearbeitungsfenster vorgenommen wurden, können abgespeichert werden.

Mit der Schaltfläche "Einsetzen" können FLADIS-Projektdateien (*.fpr), die mit der Batch-Datei abgearbeitet werden sollen, in das Bearbeitungsfenster geladen werden. In der FLADIS Basisversion öffnet sich nach Anklicken der Schaltfläche "Einsetzen" ein Dialog, in dem die zu ladende Projektdaten ausgewählt werden kann. Wird das Datenmanagement (**Kapitel 9**) genutzt, so öffnet sich nach Auswählen der Schaltfläche "Einsetzen" der Auswahldialog der FLADIS-Datenbank (**Kapitel 10.3.8.3**), über den die Projektdaten des gewünschten Datensatzes geladen werden kann.

10.3.6 Ausführen Batch Datei

Mit diesem Befehl wird die über den Menüpunkt „Batch Datei bearbeiten“ ([Kapitel 10.3.5](#)) erstellte Batch-Datei gestartet.

10.3.7 Datenbank verwalten

Die Funktionalität "Datenbank verwalten" gehört zum FLADIS-Modul "Datenmanagement" ([Kapitel 9](#)) und ist nicht in der FLADIS Basisversion enthalten.

FLADIS braucht für seine Arbeit mit der Datenbank grundsätzlich zwei Informationen: Pfad und Namen der zu verwendenden FLADIS Datenbank sowie die Pfadangabe für das Root Directory ([Kapitel 9.1](#)).

Diese Angaben werden in FLADIS intern gespeichert, d. h. sie bleiben zwischen den Aufrufen des Programms FLADIS erhalten. Wird das Datenmanagement verwendet, so zeigt FLADIS bei Programmstart an, welche FLADIS-Datenbank und welches Root Directory ihm aktuell bekannt sind (Abb. 32).

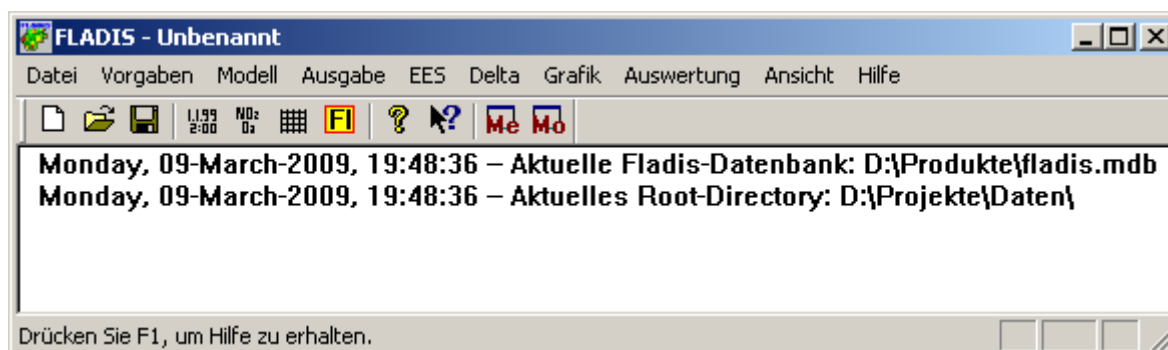


Abb. 32: Anzeige von aktueller FLADIS-Datenbank und zugehörigem Root Directory.

Sollen diese Informationen geändert werden, weil z. B. eine andere FLADIS-Datenbank verwendet werden soll oder das Root Directory sich geändert hat, so kann dies über den Menüpunkt "Datei -> Datenbank verwalten -> Verbinden" bzw. "Datei -> Datenbank -> Root Directory" vorgenommen werden. Über "Datei -> Datenbank verwalten -> Datenbank Info" kann die aktuell mit FLADIS verbundene Datenbank sowie das Root Directory, das in dieser Datenbank aktuell eingestellt ist, jederzeit angezeigt werden (Abb. 33).

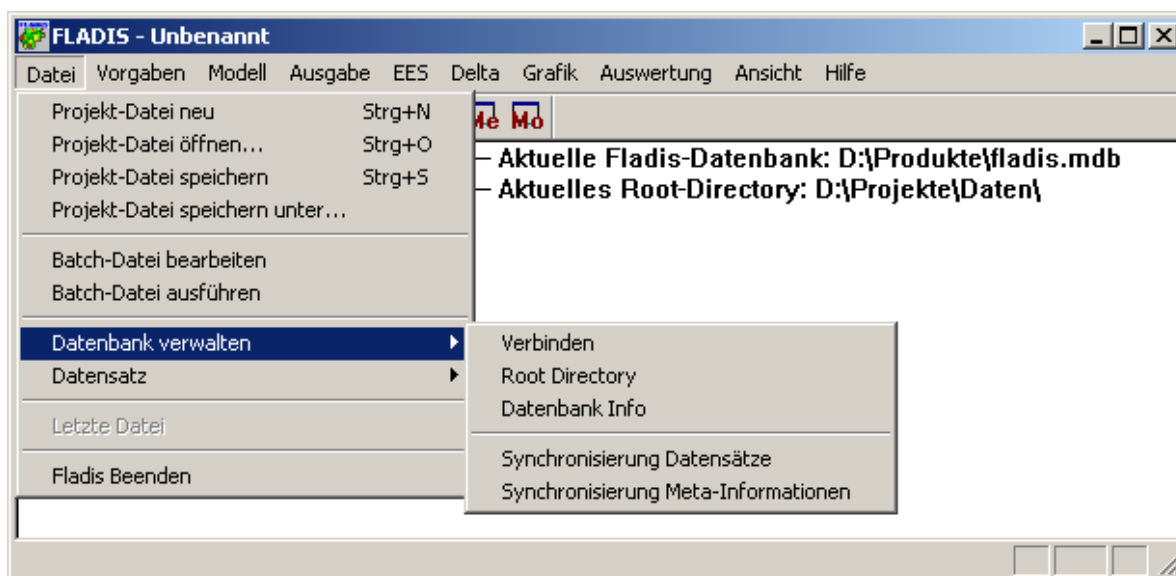


Abb. 33: Menü Datei -> Datenbank verwalten.

Um die in einer FLADIS Datenbank abgelegten Informationen mit dem tatsächlichen Datenbestand im Datenarchiv abgleichen zu können, wurden zwei Synchronisierungsfunktionen implementiert (Abb. 33). Zum einen kann abgefragt werden, ob für alle in der Datenbank eingetragenen Meta-Informationen die zugehörigen Datensätze im Datenarchiv vorhanden sind ("Datei -> Datenbank verwalten -> Synchronisierung Datensätze"). Zum anderen ist es möglich, die eingetragenen Meta-Informationen selbst mit den aktuellen Meta-Informationen der zugehörigen Datensätze im Datenarchiv zu vergleichen ("Datei -> Datenbank verwalten -> Synchronisierung Meta-Informationen").

10.3.7.1 Verbinden

Durch Anwählen von "Datei -> Datenbank verwalten -> Verbinden" öffnet sich ein Dialog, in dem die gewünschte FLADIS Datenbank (*.mdb), mit der FLADIS verbunden werden soll, ausgewählt werden kann.

10.3.7.2 Root Directory

Durch Anwählen von "Datei -> Datenbank verwalten -> Root Directory" öffnet sich ein Dialog, der das aktuell bekannte Root Directory anzeigt. Mit "Verzeichnis" kann ein anderes Root Directory gesetzt werden. Es wird in der aktuellen FLADIS-Datenbank eingetragen und ist dann auch in FLADIS bekannt.

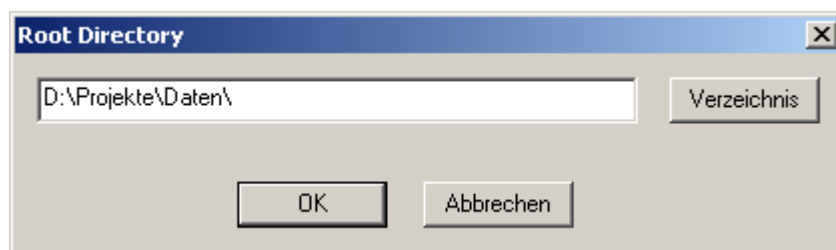


Abb. 34: Dialog Root Directory.

10.3.7.3 Datenbank Info

Mit "Datei -> Datenbank verwalten -> Datenbank Info" wird die aktuell mit FLADIS verbundene Datenbank sowie das Root Directory, das in dieser Datenbank aktuell eingestellt ist, angezeigt. Änderungen dieser Einträge sind in diesem Dialog nicht möglich.

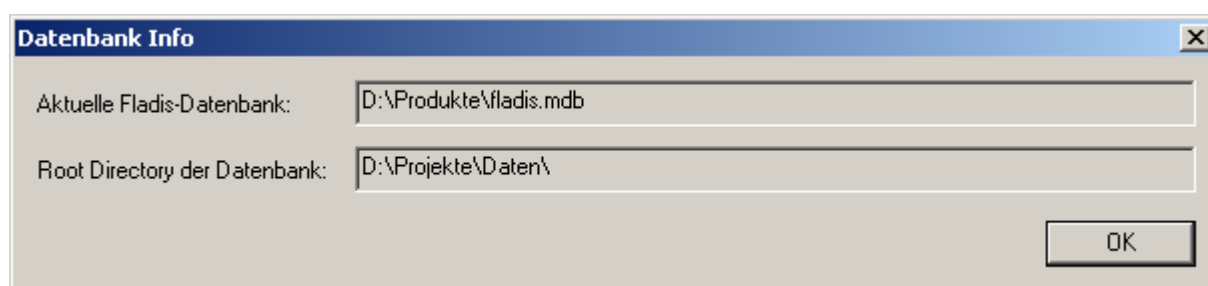


Abb. 35: Dialog Datenbank Info.

10.3.7.4 Synchronisierung Datensätze

Wird abgefragt, ob für alle in der Datenbank eingetragenen Meta-Informationen die zugehörigen Datensätze im Datenarchiv vorhanden sind, so wird das Ergebnis in einem Dialog als Tabelle angezeigt (Abb. 36). Mit ID, Szenario-ID, Bezug und Beschreibung sind Datenbankeinträge, denen kein Datensatz im Datenarchiv zugeordnet werden kann, eindeutig und auch inhaltlich identifizierbar. In der Fußzeile des Dialogs ist die Anzahl der Datenbankeinträge, zu denen kein Datensatz gefunden wurde, angegeben. Hinweis: es ist möglich, dass sich mehrere Datenbankeinträge auf ein und denselben Datensatz beziehen, und zwar dann, wenn mit FLADIS für einen Stoff nicht nur der Jahresmittelwert, sondern auch die EU-Kenngrößen berechnet wurden.

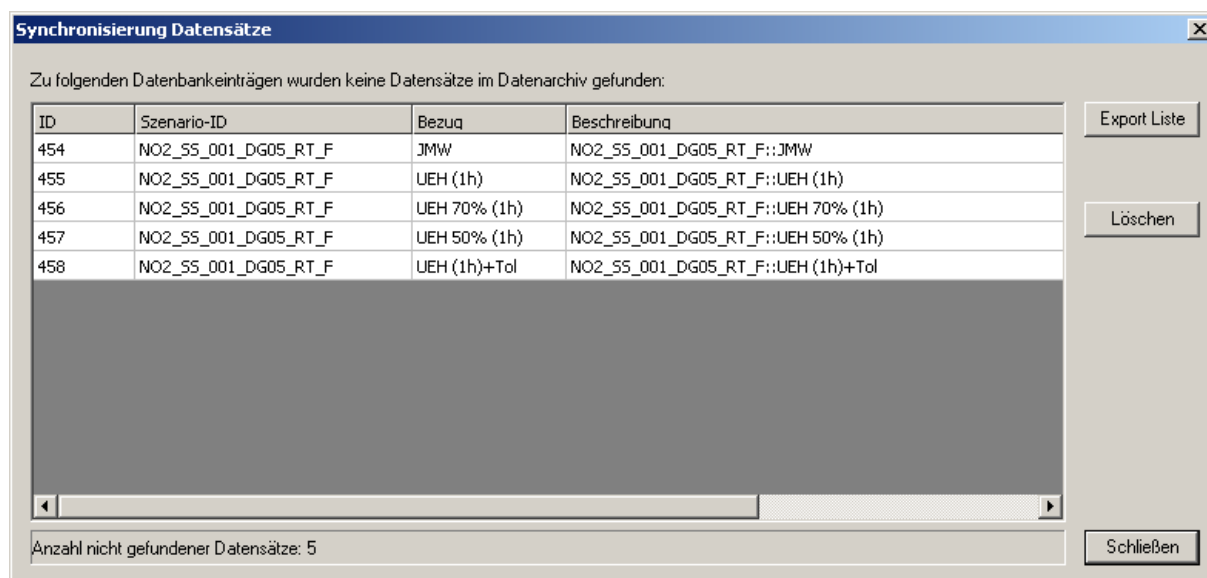


Abb. 36: Ergebnis der Aktion "Datei -> Datenbank verwalten -> Synchronisierung Datensätze".

Die Tabelleneinträge können nach jeder beliebigen Spalte durch Klicken auf den Spaltenkopf sortiert werden (Abb. 37).

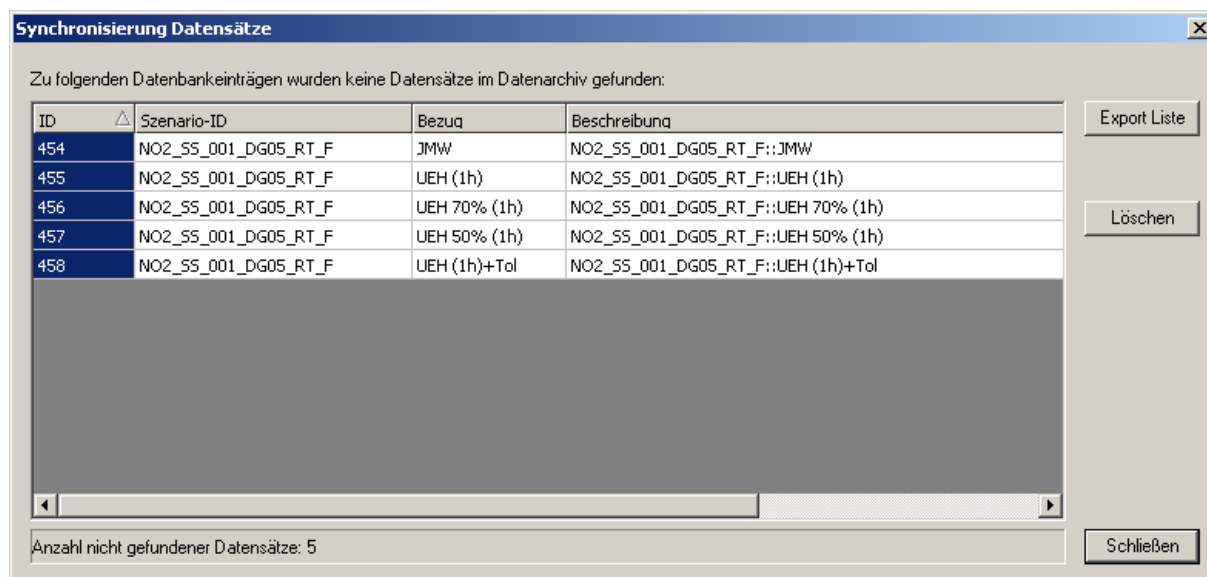


Abb. 37: Sortieren der Tabelleneinträge nach einer beliebigen Spalte.

Mit der Maus und den Tasten SHIFT oder CTRL kann eine beliebige Anzahl und Kombination von Tabelleneinträgen markiert werden (Abb. 38). Die markierten Tabelleneinträge können mit "Export Liste" in eine ASCII-Datei exportiert werden. Weiterhin besteht mit "Löschen" die Möglichkeit, die ausgewählten Datenbankeinträge zu löschen. Dabei werden die zu löschenden Datenbankeinträge auf eventuelle Verknüpfungen mit anderen Datenbankeinträgen (Parent IDs) untersucht.

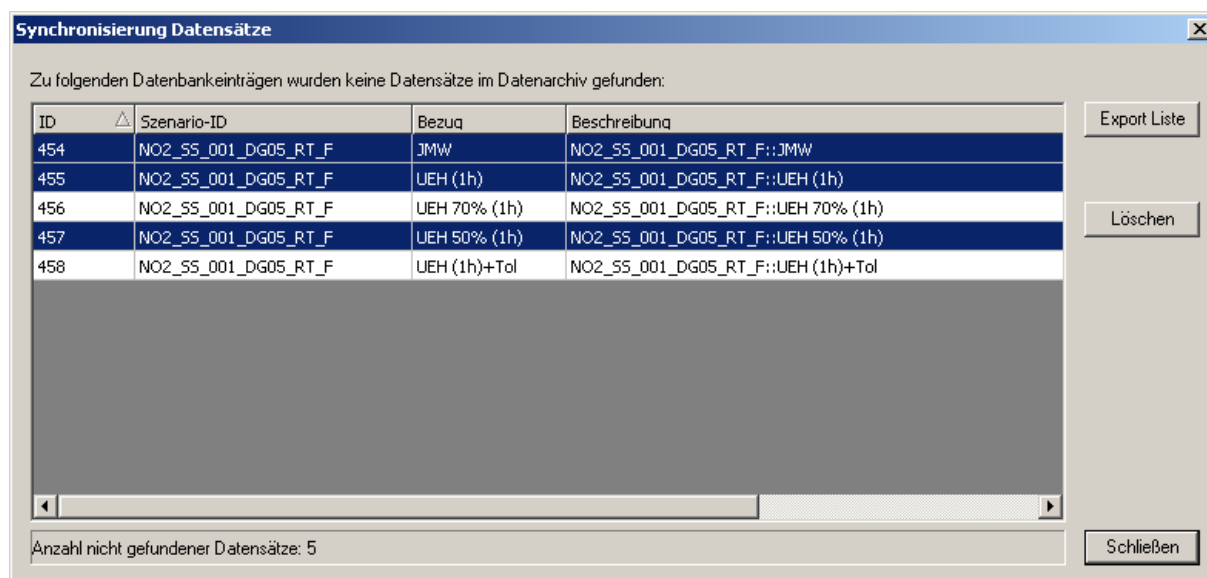


Abb. 38: Auswählen von beliebigen Tabelleneinträgen.

Die exportierte ASCII-Datei zeigt zusätzlich zu ID, Szenario-ID, Bezug und Beschreibung noch den in der Datenbank abgelegten Pfad zu den Header-Dateien der Datensätze, die nicht mehr gefunden wurden (Abb. 39).

ID	Szenario-ID	Bezug	Beschreibung	Pfad Header-Datei
454	NO2_SS_001_DG05_RT_F	JMW	NO2_SS_001_DG05_RT_F::JMW	D:\Projekte\Daten\JMW\NO2_SS_001_DG05_RT_JMW.ct1
455	NO2_SS_001_DG05_RT_F	UEH (1h)	NO2_SS_001_DG05_RT_F::UEH (1h)	D:\Projekte\Daten\JMW\NO2_SS_001_DG05_RT_JMW.ct1
456	NO2_SS_001_DG05_RT_F	UEH 70% (1h)	NO2_SS_001_DG05_RT_F::UEH 70% (1h)	D:\Projekte\Daten\JMW\NO2_SS_001_DG05_RT_JMW.ct1
457	NO2_SS_001_DG05_RT_F	UEH 50% (1h)	NO2_SS_001_DG05_RT_F::UEH 50% (1h)	D:\Projekte\Daten\JMW\NO2_SS_001_DG05_RT_JMW.ct1
458	NO2_SS_001_DG05_RT_F	UEH (1h)+Tol	NO2_SS_001_DG05_RT_F::UEH (1h)+Tol	D:\Projekte\Daten\JMW\NO2_SS_001_DG05_RT_JMW.ct1

Abb. 39: Beispiel einer exportierten Liste.

10.3.7.5 Synchronisierung Meta Informationen

Werden die eingetragenen Meta-Informationen selbst mit den aktuellen Meta-Informationen der zugehörigen Datensätze im Datenarchiv zu vergleichen, so wird das Ergebnis ebenfalls in einem Dialog als Tabelle angezeigt (Abbildung 13). Es bestehen die gleichen Optionen wie bei der Ergebnis-Tabelle zur Synchronisierung der Datensätze ([Kapitel 10.3.7.4](#)).

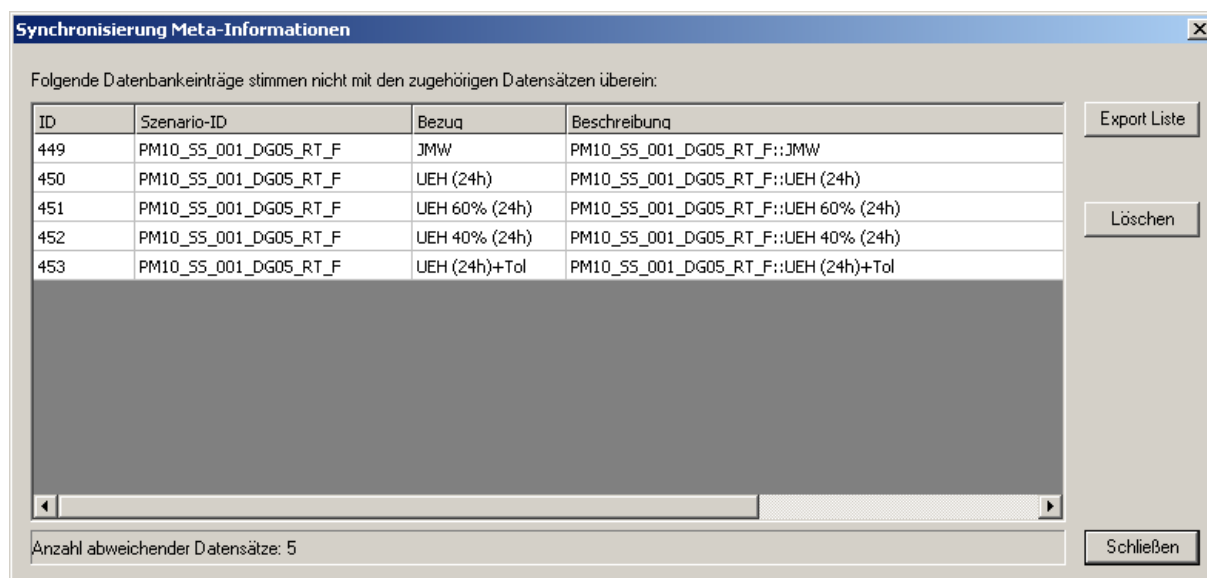


Abb. 40: Ergebnis der Aktion "Datei -> Datenbank verwalten -> Synchronisierung Meta-Informationen".

Da bei der Synchronisierung nicht nur alle Datensätze, sondern alle Meta-Informationen zu allen Datensätzen abgefragt werden, kann die Synchronisierung je nach Größe der Datenbank einige Zeit dauern. Darauf wird vor Beginn der Synchronisierung hingewiesen (Abb. 41).

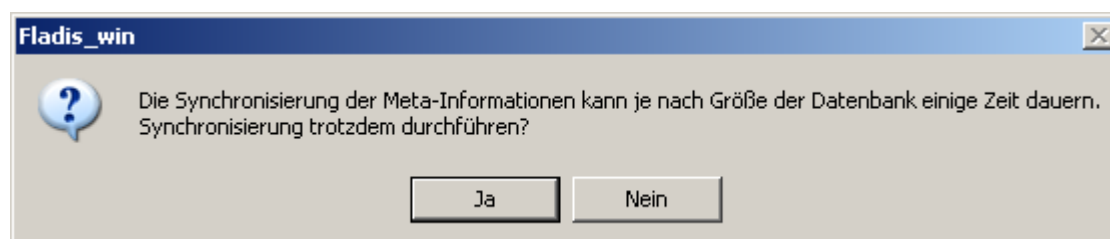


Abb. 41: Sicherheitsabfrage vor dem Synchronisieren der Meta-Informationen.

10.3.8 Datensatz

Die Funktionalität "Datensatz" gehört zum FLADIS-Modul "Datenmanagement" (**Kapitel 9**) und ist nicht in der FLADIS Basisversion enthalten.

Über den Menüpunkt "Datei -> Datensatz" lassen sich Datenbankeinträge vornehmen, Datenbankeinträge auswählen und verwenden sowie neue Datensätze mit zugehörigem Datenbankeintrag erzeugen. Das Erzeugen von Datenbankeinträgen kann mit Hilfe von Voreinstellungen unterstützt werden (Abb. 42).

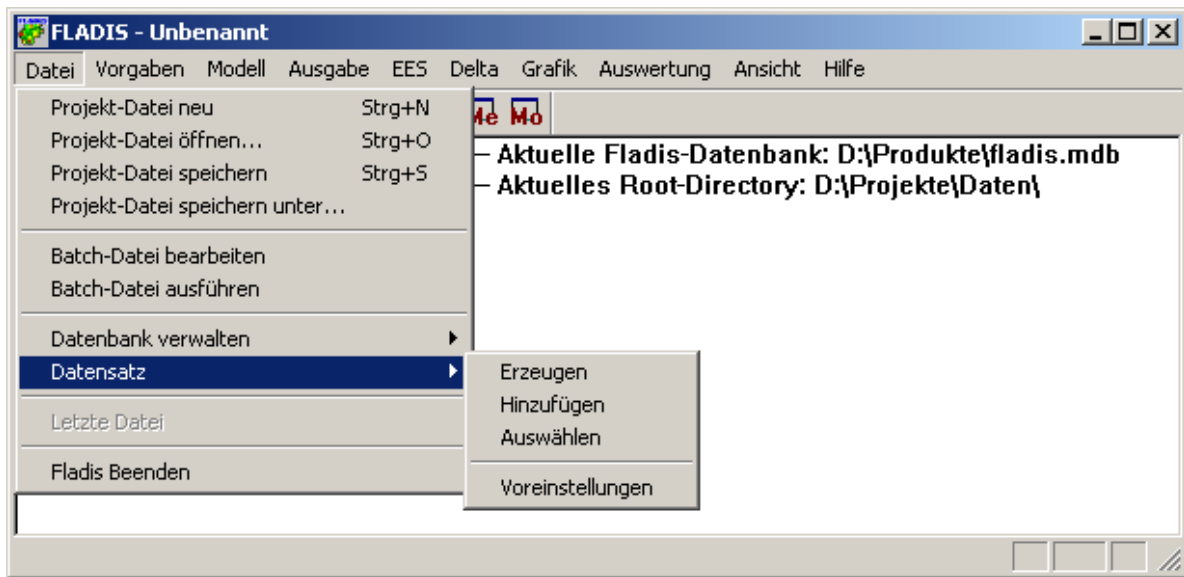


Abb. 42: Menü Datei -> Datensatz.

10.3.8.1 Erzeugen

Wurde für einen externen Modelldatensatz (z. B. REM-CALGRID) mit Hilfe einer FLADIS-Projektdatei (*.fpr) eine FLADIS-Rechnung durchgeführt, oder wurde mit zwei bestehenden FLADIS-Datensätzen eine Auswertung (**Kapitel 10.10**) vorgenommen, so liegt das Ergebnis in FLADIS im FLADIS-Raster vor.

Es kann über "Datei -> Datensatz -> Erzeugen" als Datei im NetCDF-Datenformat abgespeichert werden. Nach Anwählen von "Datei -> Datensatz -> Erzeugen" erscheint zunächst ein Dialog, in dem ein Name für die externe Header-Datei (*.ctl) des zu erzeugenden Datensatzes abgefragt wird. Danach erscheint ein Wizard, der die bisher bekannten, intern erstellten Angaben für die Meta-Informationen des zu erzeugenden Datensatzes in nicht editierbaren Feldern zeigt. Dieser Wizard umfasst drei Seiten, die im Folgenden dargestellt sind.

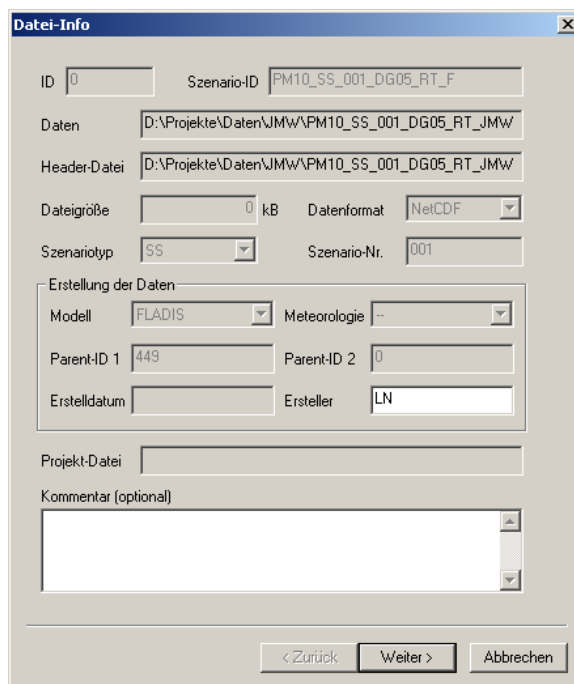


Abb. 43: Wizard Datei -> Datensatz -> Erzeugen, Datei-Info.

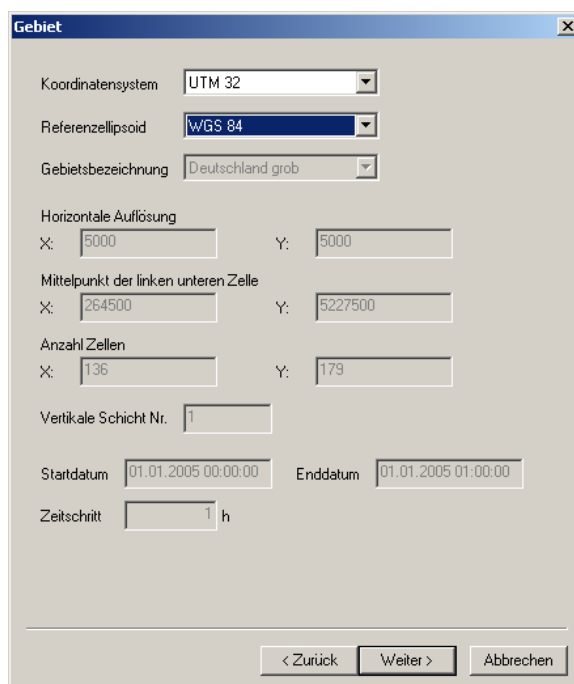


Abb. 44: Wizard Datei -> Datensatz -> Erzeugen, Gebiet.

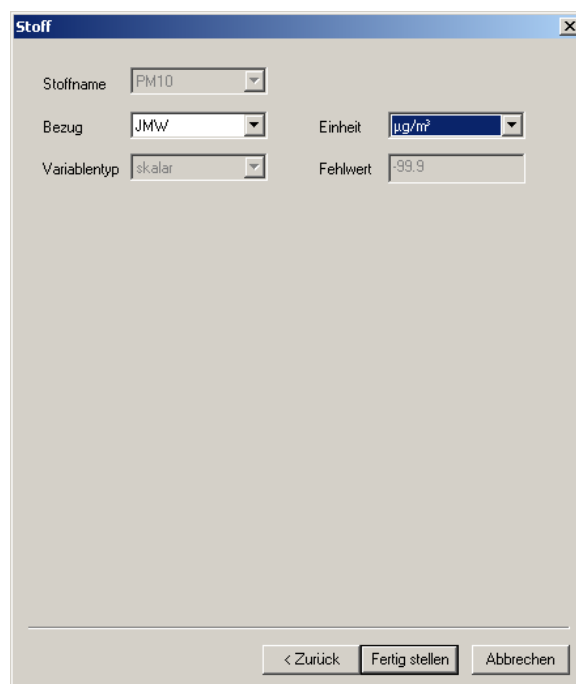


Abb. 45: Wizard Datei -> Datensatz -> Erzeugen, Stoff.

Einige Meta-Informationen können nicht automatisch bestimmt werden und müssen von Hand eingegeben werden. Auf der ersten Seite des Wizards ist dies der Ersteller der Daten-Datei und optional ein Kommentar. Auf der zweiten Seite müssen das Koordinatensystem und das Referenzellipsoid vorgegeben werden. Wurde der abzuspeichernde Datensatz durch einen FLADIS-Rechenlauf erzeugt, so können Koordinatensystem und Referenzellipsoid den Einstellungen der *.fpr-Projektdatei des Rechenlaufs entnommen werden (bzw. dem Menü Modell -> Modell -> Externes Modell). Ist der abzuspeichernde Datensatz hingegen das Ergebnis einer Rechenoperation mit zwei bereits bestehenden FLADIS-Rastern, so entsprechen Koordinatensystem und Referenzellipsoid den Vorgaben der bereits bestehenden Raster. Auf der dritten Seite wird der Bezug des aufzunehmenden Datensatzes abgefragt sowie seine Einheit. Mögliche Bezugsgrößen stehen in der folgenden Tabelle.

Tabelle 10: Liste der Bezugsgrößen.

Name	Beschreibung
JMW	Jahresmittelwert
TMW	Tagesmittelwert
SMW	Stundenmittelwert
UEH (1h)	Grenzwert (Überschreitungshäufigkeit des 1h Grenzwerts)
UEH (1h)+Tol	Toleranzmarge (UEH des 1h Grenzwerts + Toleranz)
UEH 50% (1h)	Untere Beurteilungsschwelle (UEH v. 50 des 1h-Grenzwerts)
UEH 70% (1h)	Obere Beurteilungsschwelle (UEH v. 70 des 1h-Grenzwerts)
UEH (24h)	Grenzwert (Überschreitungshäufigkeit des 24h Grenzwerts)
UEH (24h)+Tol	Toleranzmarge (UEH des 24h Grenzwerts + Toleranz)
UEH 40% (24h)	Untere Beurteilungsschwelle (UEH v. 40 des 1h-Grenzwerts)
UEH 50% (24h)	Untere Beurteilungsschwelle (UEH v. 50 des 1h-Grenzwerts)
UEH 60% (24h)	Obere Beurteilungsschwelle (UEH v. 60 des 1h-Grenzwerts)
UEH 70% (24h)	Obere Beurteilungsschwelle (UEH v. 70 des 1h-Grenzwerts)
AVE (1h) Max	Höchster Stundenmittelwert
AVE (8h) Max	Höchster gleitender 8h-Mittelwert
AVE (8h) Limit	Grenzwert 8h-Mittelwert (UEH in Tagen)
AOT40 ges	AOT40 akkumuliert ohne Zeitbeschränkung
AOT40 Mai-Jul	AOT40 akkumuliert von Mai bis Juli
AOT40 Apr-Sep	AOT40 akkumuliert von April bis September
Info (UEH)	Informationsschwelle (Überschreitungshäufigkeit)
Alarm (UEH)	Alarmschwelle (Überschreitungshäufigkeit)
MaxTag (Jahr)	Tag des höchsten Werts im Jahr
MaxStd (Tag)	Stunde des höchsten Werts am Tag
MaxTag (Monat)	Tag des höchsten Werts im Monat
MaxMonat	Monat des höchsten Werts
MaxJahr	Jahr des höchsten Werts
Perzentil	Perzentil
Sonstiges	Sonstiges

Mit dem Knopf "Fertig stellen" auf der letzten Seite des Wizards wird das aktuell in FLADIS vorliegende FLADIS-Raster im NetCDF-Format inklusive zugehöriger externer Header-Datei (*.ctl) geschrieben und ein entsprechender Eintrag in der FLADIS Datenbank vorgenommen.

10.3.8.2 Hinzufügen

Für die Ergebnisdateien externer Modelle (z. B. REM-CALGRID) können über "Datei -> Datensatz -> Hinzufügen" Datenbankeinträge vorgenommen werden. Es erscheint ein Dialog, in dem die externe Header-Datei (*.ctl) des aufzunehmenden Datensatzes abgefragt wird.

Jeder Datensatz kann genau einmal mit einem Eintrag in die Datenbank aufgenommen werden. FLADIS überprüft vor dem Einfügen, ob für den aufzunehmenden Datensatz schon ein Datenbankeintrag existiert. Ist dies der Fall, so gibt FLADIS eine Fehlermeldung aus, und es wird kein Eintrag vorgenommen.

Existiert bisher kein Datenbankeintrag, so erscheint ein Wizard analog **Kapitel 10.3.8.1**, der die aus der externen Header-Datei ausgelesenen sowie intern erstellten Angaben für die Meta-Informationen des aufzunehmenden Datensatzes in nicht editierbaren Feldern zeigt. Die nicht automatisch bestimmbareren Meta-Informationen müssen von Hand eingegeben werden (siehe dazu auch **Kapitel 10.3.8.1**).

Mit dem Knopf "Fertig stellen" auf der letzten Seite des Wizards wird der Eintrag in der FLADIS Datenbank vorgenommen.

10.3.8.3 Auswählen

Sollen Datensätze mit einem oder mehreren Merkmalen in der FLADIS Datenbank gesucht werden, so stellt FLADISview hierfür unter "Datei -> Datensatz -> Auswählen" eine Auswahlmaske zur Verfügung (Abb. 46). Die Auswahlmaske bietet eine Reihe von Feldern aus den Meta-Informationen an, nach denen Datensätze gesucht werden können. Dafür werden einfach die gewünschten Felder ausgefüllt, entweder per Eintippen oder mit Hilfe der Dropdown-Menüs. Wird kein Feld ausgefüllt, so werden alle in der FLADIS Datenbank vorhandenen Einträge ausgewählt.

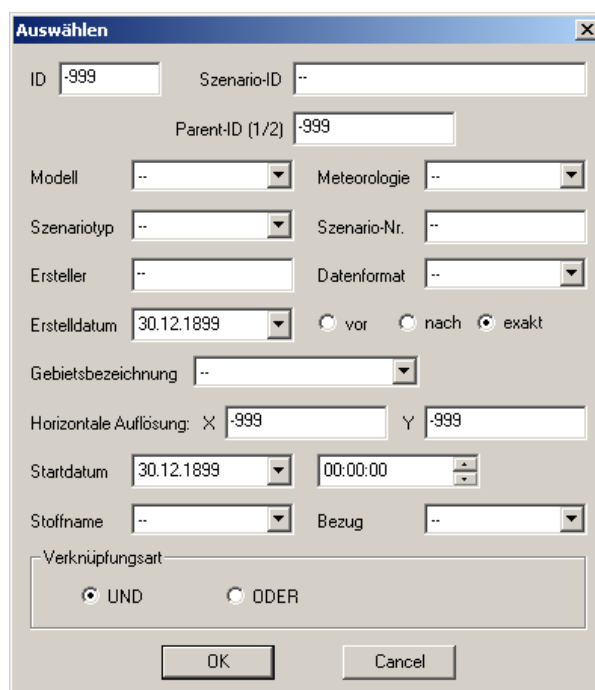
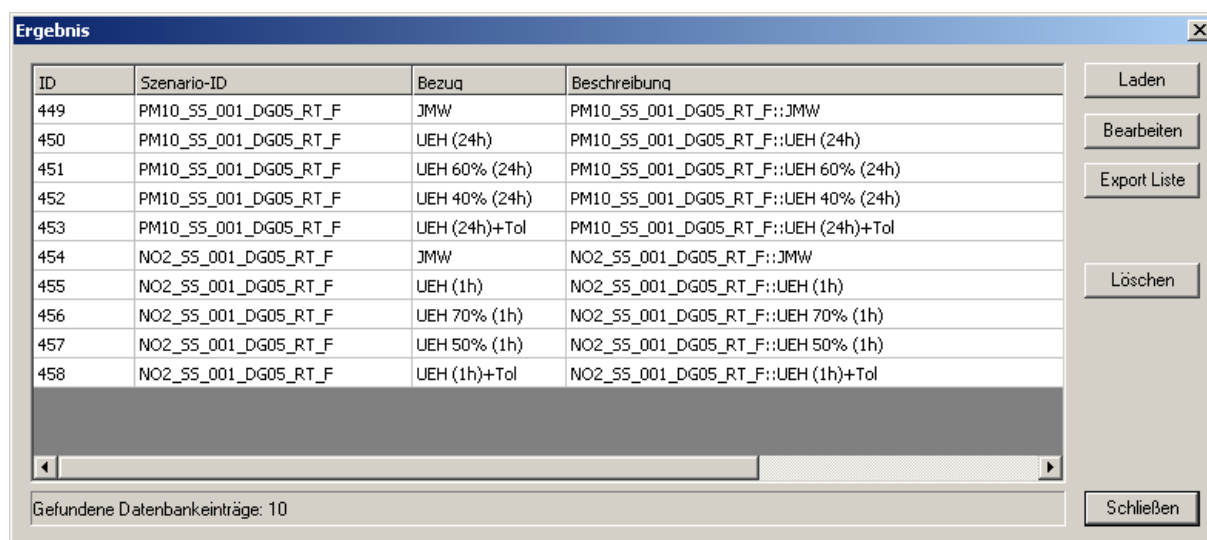


Abb. 46: Auswahlmaske für die Vorgabe von Suchkriterien.

Das Ergebnis der Auswahl zeigt FLADIS in einem Dialog als Tabelle an (Abb. 47). Die Liste zeigt ID, Szenario-ID, Bezug und Beschreibung für jeden gefundenen Datenbankeintrag an und in der Fußzeile des Dialogs die Anzahl der gefundenen Datenbankeinträge. Die angezeigten Einträge können spaltenweise durch Mausklick auf die Kopfzeile sortiert werden.



ID	Szenario-ID	Bezug	Beschreibung
449	PM10_SS_001_DG05_RT_F	JMW	PM10_SS_001_DG05_RT_F::JMW
450	PM10_SS_001_DG05_RT_F	UEH (24h)	PM10_SS_001_DG05_RT_F::UEH (24h)
451	PM10_SS_001_DG05_RT_F	UEH 60% (24h)	PM10_SS_001_DG05_RT_F::UEH 60% (24h)
452	PM10_SS_001_DG05_RT_F	UEH 40% (24h)	PM10_SS_001_DG05_RT_F::UEH 40% (24h)
453	PM10_SS_001_DG05_RT_F	UEH (24h)+Tol	PM10_SS_001_DG05_RT_F::UEH (24h)+Tol
454	NO2_SS_001_DG05_RT_F	JMW	NO2_SS_001_DG05_RT_F::JMW
455	NO2_SS_001_DG05_RT_F	UEH (1h)	NO2_SS_001_DG05_RT_F::UEH (1h)
456	NO2_SS_001_DG05_RT_F	UEH 70% (1h)	NO2_SS_001_DG05_RT_F::UEH 70% (1h)
457	NO2_SS_001_DG05_RT_F	UEH 50% (1h)	NO2_SS_001_DG05_RT_F::UEH 50% (1h)
458	NO2_SS_001_DG05_RT_F	UEH (1h)+Tol	NO2_SS_001_DG05_RT_F::UEH (1h)+Tol

Gefundene Datenbankeinträge: 10

Abb. 47: Ergebnis einer Suche in der Datenbank.

Der Ergebnis-Dialog bietet außer der Liste der gefundenen Datenbankeinträge vier weitere Funktionalitäten für die FLADIS Datenbank und ist damit die Zentrale für das Arbeiten mit den in der Datenbank abgelegten Meta-Informationen und den damit verbundenen Datensätzen:

- Laden
- Bearbeiten
- Export Liste
- Löschen

Laden

Wird durch Mausklick ein Eintrag in der Liste der gefundenen Datenbankeinträge ausgewählt, so wird der damit verbundene Datensatz in FLADIS geladen. FLADIS erkennt hierbei, ob es sich um externe Modelldaten (z. B. REM-CALGRID) handelt oder um das Ergebnis einer früheren FLADIS-Rechnung, das bereits im FLADIS-Raster vorliegt.

Handelt es sich um externe Modelldaten, so lädt FLADIS eine FLADIS-Projektdatei (*.fpr), und bevor weitere Schritte in FLADIS unternommen werden (z. B. grafische Darstellung ([Kapitel 10.9](#)) oder Auswertung ([Kapitel 10.10](#))), muss zunächst eine FLADIS-Rechnung durchgeführt werden. Dies geht über das Menü "Modell -> FLADIS starten" oder den entsprechenden Speedbutton in der Symbolleiste.

Die dazu notwendige Projektdatei (*.fpr) erzeugt FLADIS automatisch auf Basis der Meta-Informationen in der Datenbank und von Default-Werten, wenn der ausgewählte externe Datensatz das erste Mal in FLADIS geladen wird. Der Pfad der Projektdatei wird ebenfalls automatisch in die in der FLADIS-Datenbank abgelegten Meta-Informationen eingetragen. Die Einstellungen in der Projektdatei können bei Bedarf mit Hilfe der FLADIS-Menüs "Vorgaben" ([Kapitel 10.4](#)), "Modell" ([Kapitel 10.5](#)) und "Ausgabe" ([Kapitel 10.6](#)) geändert und abgespeichert werden.

Wird ein externer Modelldatensatz ein zweites oder drittes Mal geladen, so wird diejenige Projektdatei (*.fpr) verwendet, deren Pfad in den zugehörigen Meta-Informationen abgelegt ist. Auch jetzt muss erst wieder eine FLADIS-Rechnung durchgeführt werden, bevor weitere Schritte (Grafik, Auswertung) in FLADIS unternommen werden können.

Handelt es sich bei dem ausgewählten Datensatz bereits um das Ergebnis einer FLADIS-Rechnung, das dementsprechend im FLADIS-Raster vorliegt, so steht dies direkt nach dem Laden weiteren Anwendungsschritten (Grafik, Auswertung) zur Verfügung, ohne dass vorher eine erneute FLADIS-Rechnung durchgeführt werden muss.

Bearbeiten

Hier wird für den durch Mausklick aus der Liste der gefundenen Datenbankeinträge ausgewählten Eintrag ein Dialog geöffnet, der analog zu dem Wizard in [Kapitel 10.3.8.1](#) drei Seiten anbietet, über die die editierbaren Felder der Meta-Informationen bearbeitet und in der FLADIS-Datenbank abgespeichert werden können. Gleichzeitig dient dieser Dialog dazu, die für einen Datensatz eingetragenen Meta-Informationen nachzuschlagen.

Export Liste

Diese Funktion erlaubt den Export einer Auswahlliste als ASCII-Datei. Analog zur Beschreibung in [Kapitel 10.3.7.4](#) können mit Hilfe der Maus und den Tasten SHIFT bzw. STRG/CTRL ein oder mehrere Einträge aus der Liste der gefundenen Datenbankeinträge ausgewählt werden. Mit "Export Liste" werden für die ausgewählten Einträge ID, Szenario-ID, Bezug und Beschreibung sowie der Pfad der zugehörigen externen Header-Datei (*.ctl) in eine ASCII-Datei ausgegeben. Ein Beispiel einer exportierten Liste zeigt Abb. 39.

Löschen

Hiermit werden die ausgewählten Datenbankeinträge unwiderruflich gelöscht – nicht jedoch die zugehörigen Datensätze und Header-Dateien (*.ctl) im Datenarchiv! Wie bei "Export Liste" können mit Hilfe der Maus und den Tasten SHIFT bzw. STRG/CTRL ein oder mehrere Einträge aus der Liste der gefundenen Datenbankeinträge ausgewählt werden. FLADIS überprüft vor dem Löschen zunächst, ob für die zu löschenden Datenbankeinträge Abhängigkeiten innerhalb der Datenbank beste-

hen, d. h. ob eine ID der zu löschenden Einträge als Parent-ID 1 und/oder ParentID 2 (**Kapitel 9.3**) in einem der anderen Einträge der Datenbank zu finden ist.

Ist dies der Fall, so zeigt FLADIS eine Liste aller IDs, für die Abhängigkeiten gefunden wurden, sowie die Anzahl dieser Abhängigkeiten (Abb. 48). Auch diese Liste lässt sich spaltenweise durch Mausklick auf die jeweilige Kopfzeile sortieren. Der Löschvorgang kann an dieser Stelle abgebrochen werden. Wird er fortgeführt, so setzt FLADIS all jene Parent-IDs 1 und 2 zu Null, die den zu löschenden IDs entsprechen, und löscht dann die ausgewählten Einträge in der FLADIS Datenbank.

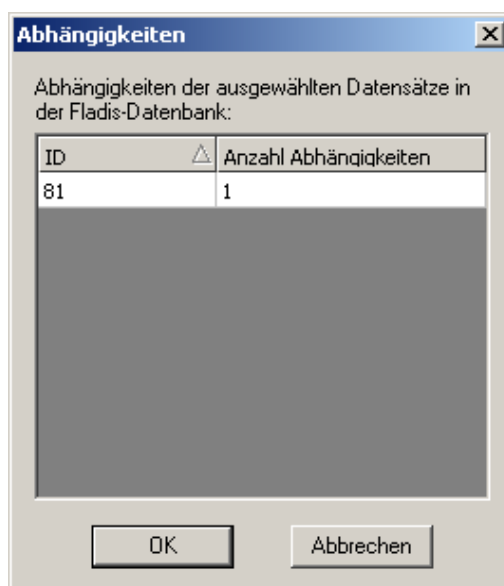


Abb. 48: Anzeige der Abhängigkeiten von zu löschenden Datenbankeinträgen.

10.3.8.4 Voreinstellungen

Beim Erzeugen oder Hinzufügen von Daten über "Datei -> Datensatz -> Erzeugen" bzw. "Datei -> Datensatz -> Hinzufügen" werden vom Wizard fünf Einstellungen abgefragt (**Kapitel 10.3.8.1**). Sollen mehrere Datensätze hintereinander erzeugt oder hinzugefügt werden, die die immer gleichen Einstellungen erfordern, so können diese unter "Datei -> Datensatz -> Voreinstellungen" getrennt für "Erzeugen" und "Hinzufügen" vordefiniert werden (Abb. 49). Sie sind dann beim Abarbeiten des Wizards jeweils gesetzt.

Die Voreinstellungen werden wie der Pfad zur FLADIS Datenbank in FLADIS intern gespeichert, d. h. sie bleiben zwischen den Aufrufen von FLADIS erhalten.

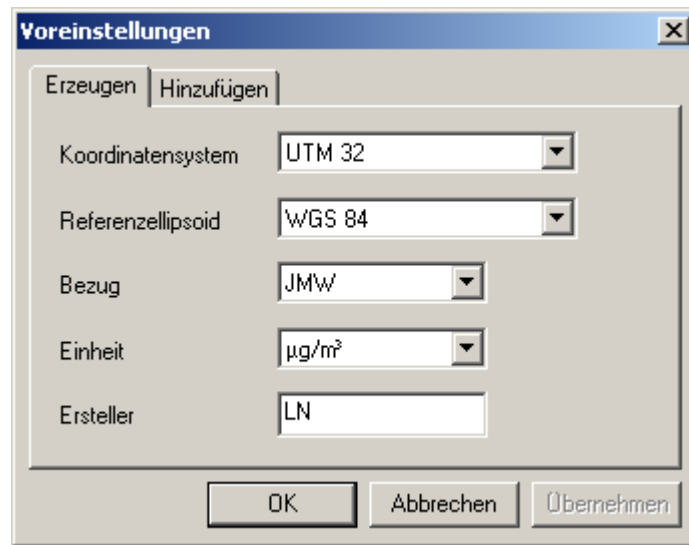


Abb. 49: Dialog Voreinstellungen.

10.3.9 <Datei>.fpr

Das Programm zeigt Ihnen hier die zuletzt benutzten FLADIS-Projekte an (z.B.: das Projekt 'Datei.fpr'). Zum Öffnen einfach anwählen.

10.3.10 Beenden

FLADIS wird beendet.

10.4 Menü Vorgaben

Unter diesem Menü werden die Umgebungsvariablen und andere Vorgaben gesetzt.

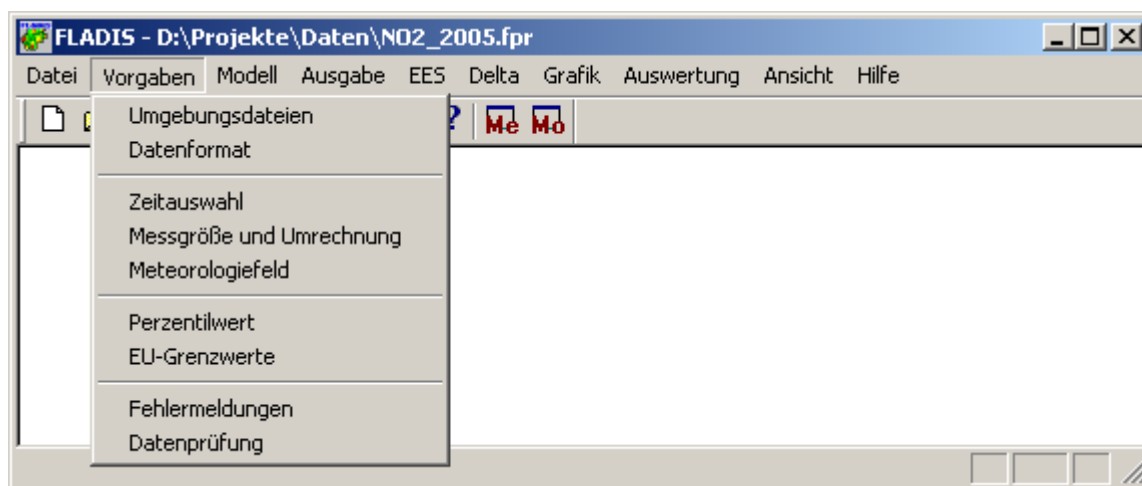


Abb. 50: Menü Vorgaben

Umgebungsdateien:	Öffnet den Dialog „Struktur der Umgebung“ mit den Reitern "Messwerte", "DHM" und "Ausgabe"
Datenformat:	Öffnet den Dialog „Datenformat“
Zeitauswahl:	Öffnet den Dialog „Zeitauswahl“ mit den Reitern "Zeitbereich", "Unterbrechungen" und "Stichprobe"
Messgröße und Umrechnung:	Öffnet den Dialog „Messgröße“
Meteorologiefeld:	Öffnet den Dialog „Meteodarstellung im Raster“
Perzentilwert:	Öffnet den Dialog „Perzentilwertberechnung“
EU-Grenzwerte:	Öffnet den Dialog "Grenzwerte der EU-Rahmenrichtlinie"
Fehlermeldungen:	Aktiviert bzw. deaktiviert die Ausgabe von bestimmten Fehlern bzw. Statusmeldungen als Dialog
Datenprüfung:	Öffnet den Dialog "Datenprüfung"

10.4.1 Umgebungsdateien

Im Dialog "Umgebungsdateien" können die Pfad und Dateinamen für die verschiedenen Input-Dateien, die FLADIS zur Berechnung und Ausgabe der Ergebnisse benötigt, eingestellt werden.

10.4.1.1 Umgebungsdateien: Messwerte

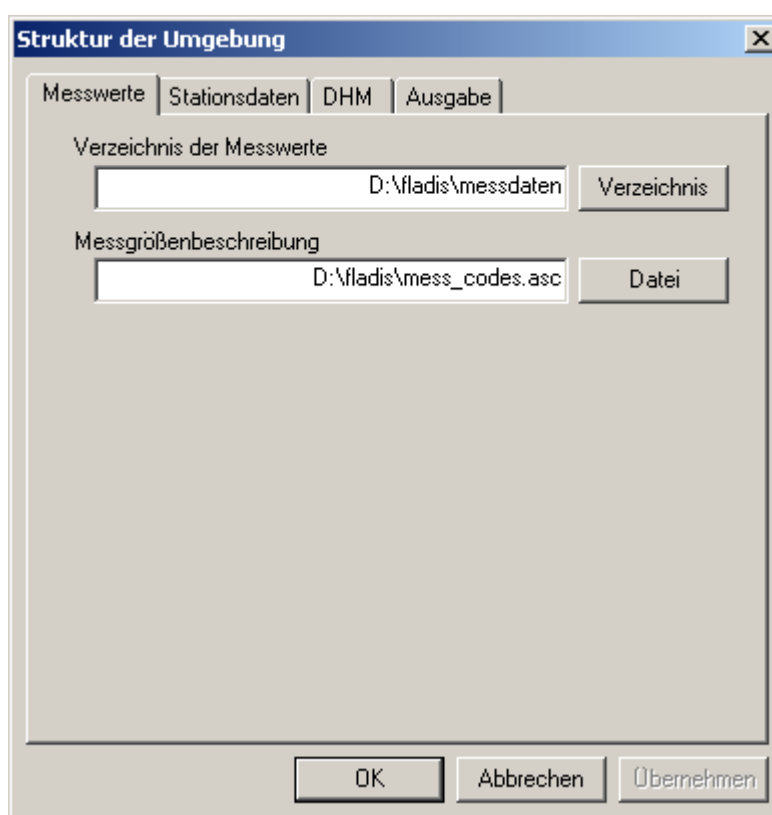


Abb. 51: Dialog Struktur der Umgebung - Messwerte

Verzeichnis der Messwerte: Pfad, in dem die Dateien mit den Messwerten stehen.

Messgrößenbeschreibung: Pfad zur Datei, die die Messgrößenbeschreibung enthält. Dies kann eine Datei gemäß [Kapitel 6.2.1](#) sein oder eine Header-Datei *.ctl gemäß [Kapitel 6.4](#) bzw. [6.5](#). Hinweis: Wird eine Messgrößenbeschreibungsdatei verwendet und gleichzeitig als externes Modell Modelldaten im REM-CALGRID Binärformat, so ist darauf zu achten, dass die Messgrößen in der Beschreibungsdatei und in den Modelldaten in der gleichen Reihenfolge vorliegen!

10.4.1.2 Umgebungsdateien: Stationsdaten

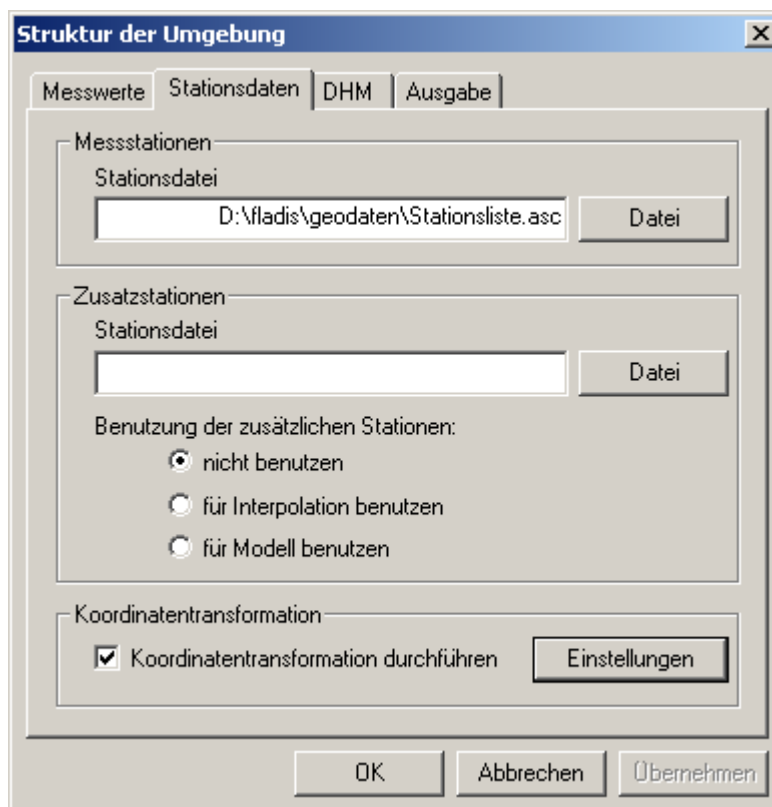


Abb. 52: Dialog Struktur der Umgebung - Stationsdaten

Stationsdatei: Pfad und Dateiname für die Definitionsdatei der Stationen.

Zusatzstationen: Zur Berücksichtigung von zusätzlichen Messstationen in FLADIS (z. B. von Stationen, die außerhalb des Untersuchungsgebiets liegen).

Stationsdatei: Pfad und Dateiname für die Definitionsdatei der Zusatzstationen. Das Format dieser Datei entspricht dem Format der Stationsbeschreibungsdatei.

Benutzung: Mit der Auswahl „Benutzung der zusätzlichen Stationen“ wird festgelegt, wie die „Zusatzstationen“ in FLADIS benutzt werden. Mit der Auswahl „für Interpolation benutzen“ werden die Stationen nur bei der Interpolation der Messwerte berücksichtigt, mit der Auswahl „für Modell benutzen“ werden die Stationen auch bei der Auswertung mit dem jeweiligen Modell berücksichtigt.

Koordinatentransformation: Die Lage der Station kann in der Stationsdatei in geografischen oder kartesischen Koordinaten angegeben werden. Werden geografische Koordinaten verwendet, führt

FLADIS beim Einlesen eine Koordinatentransformation von geografischen Koordinaten nach UTM durch. Dazu ist das entsprechende Kästchen zu aktivieren. Über die zugehörige Schaltfläche „Einstellungen“ erscheint ein Dialog, der die Vorgabe des Ausgangs- und des Zielkoordinatensystems erlaubt sowie die Angabe der zugehörigen Parameter (Abb. 53).

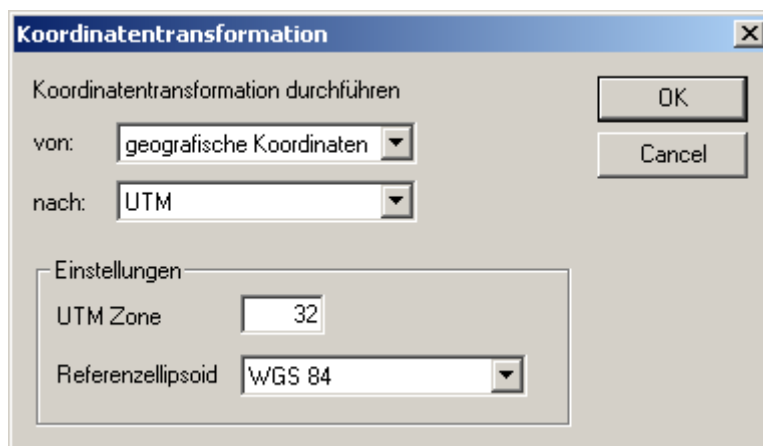


Abb. 53: Dialog Koordinatentransformation

10.4.1.3 Umgebungsdateien: DHM

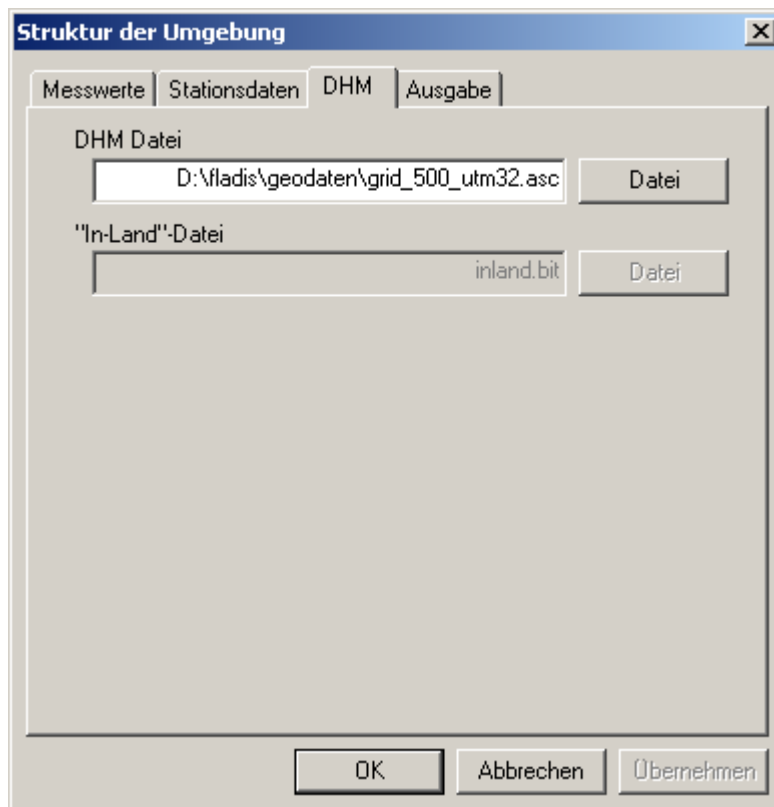


Abb. 54: Dialog Struktur der Umgebung - DHM

- DHM Datei:** Pfad und Name der Datei, die das Höhenmodell enthält. Bei entsprechender Kompilierung des Programms kann als DHM ein ASCII-GRID Format (erzeugt mit ArcView oder ArcGIS) angegeben werden. Die folgende Angabe zur "In-Land"-Datei ist dann nicht notwendig
- "In-Land"-Datei:** Pfad und Name der Datei, die das logische Feld zur Identifizierung "Punkt in Land" enthält.

10.4.1.4 Umgebungsdateien: Ausgabe

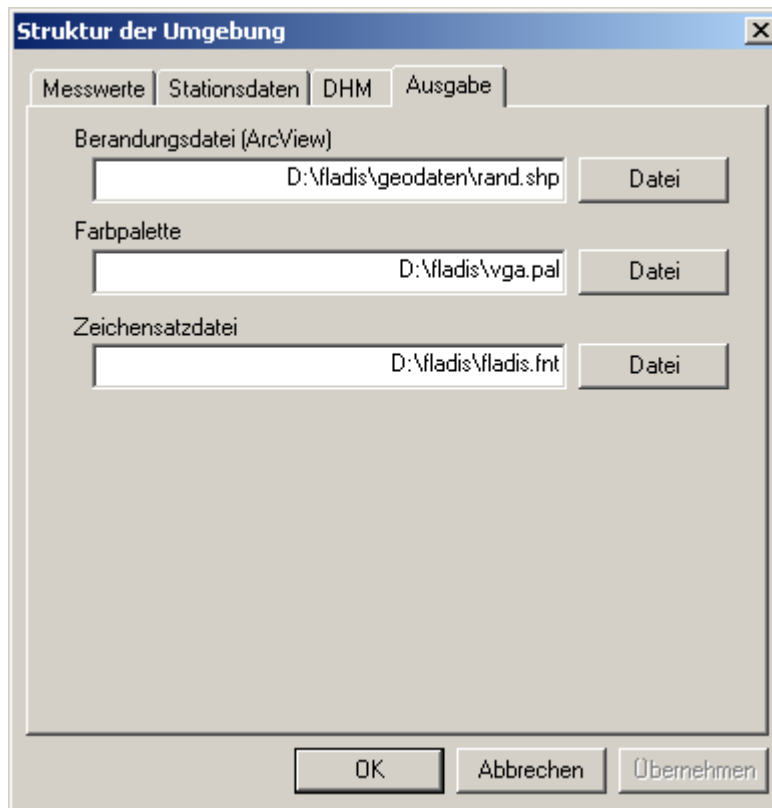


Abb. 55: Dialog Struktur der Umgebung - Ausgabe

Pfade zu Dateien, die für die Formatierung von Ausgabedateien verwendet werden.

Berandungsdatei: Pfad und Dateiname für den Linienzug der Landesumrandung (nur im ArcView-/ArcGIS-Format). Wird nicht mehr unterstützt.

Farbpalette: Angabe von Pfad und Dateinamen der Farbpalette für die GIF-Erstellung.

Zeichensatzdatei: Angabe von Pfad und Dateinamen mit den Zeichensätzen zur GIF-Erstellung.

10.4.2 Datenformat

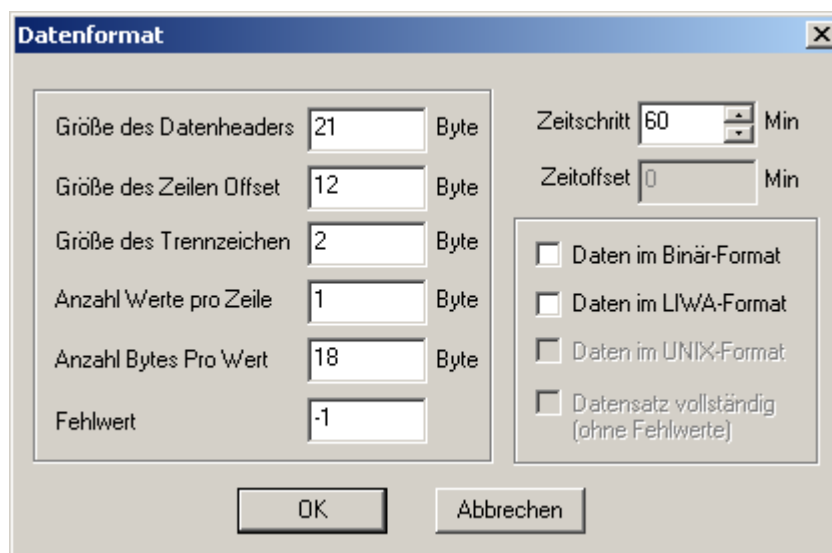


Abb. 56: Dialog Datenformat

Zur Beschreibung der Messwertedateien können in diesem Dialog folgende Größen spezifiziert werden:

- Größe des Dateiheders
- Größe des Zeilen Offset
- Größe des Trennzeichen
- Anzahl Werte pro Zeile
- Anzahl Bytes pro Wert
- Fehlwertbezeichner

Zeitschritt: Spezifiziert den zeitlichen Abstand, in dem die Daten vorliegen (siehe auch **Kapitel 6.2**).

Zeitoffset: Dieses Feld wird zur Zeit nicht verwendet.

Daten im Binär-Format: Das Kästchen muss markiert werden, wenn die Daten im Binär-Format vorliegen.

Daten im LIWA-Format: Das Kästchen muss markiert werden, wenn die Daten im LIWA-Format vorliegen.



- Daten im UNIX-Format: Das Kästchen muss markiert werden, wenn die Daten im UNIX-Format vorliegen.
- Datensatz vollständig: Das Kästchen muss markiert werden, wenn die Daten vollständig sind (z. B. fehlwertersetzt).

10.4.3 Zeitauswahl

Im Dialog "Zeitauswahl" wird der Zeitbereich, für den gerechnet werden soll, spezifiziert. Weiterhin können Unterbrechungszeitbereiche innerhalb des Berechnungszeitraumes angegeben werden, für die keine Berechnung stattfindet.

10.4.3.1 Zeitauswahl: Zeitbereich

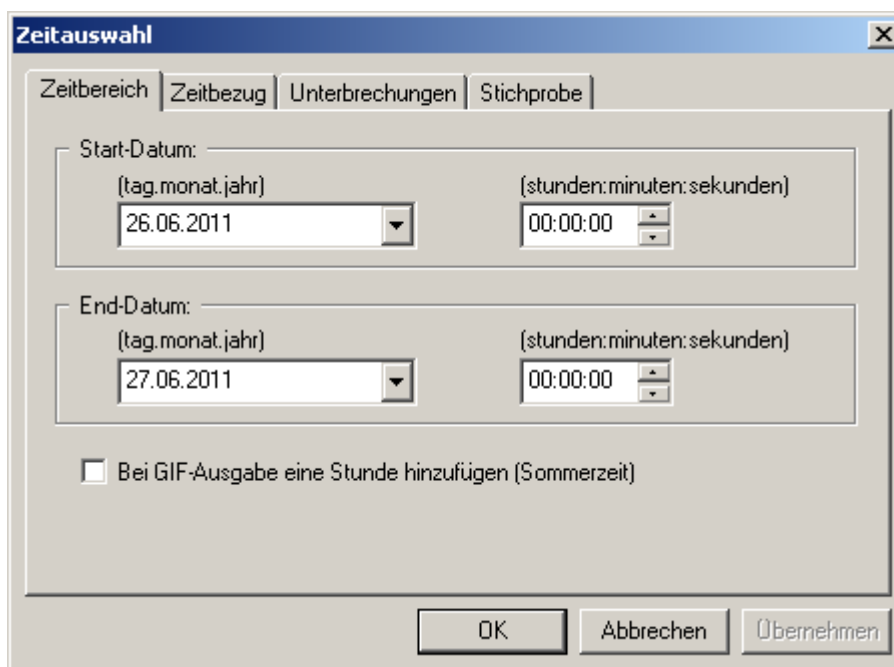


Abb. 57: Dialog Zeitauswahl - Zeitbereich

In diesem Dialog wird der Zeitraum festgelegt, für den die Berechnungen erfolgen sollen. Dazu wählen Sie bitte das **Startdatum** inklusive dem **Zeitpunkt**, sowie das **Enddatum** und den zugehörigen **Zeitpunkt**. Es lassen sich nur Zeitpunkte einstellen, die aufgrund des gewählten Zeitschritts im Dialog "Datenformat" ([Kapitel 10.4.2](#)) möglich sind.

Die Auswahl des Datums erfolgt durch Eingeben des Datums oder im **Kalender**, der sich durch Klicken auf die Pfeiltaste im Datumsfeld öffnet. Im Kalender kann mit Hilfe der Pfeiltasten bzw. durch Klicken auf Monat oder Jahreszahl das gewünschte Datum eingestellt werden.

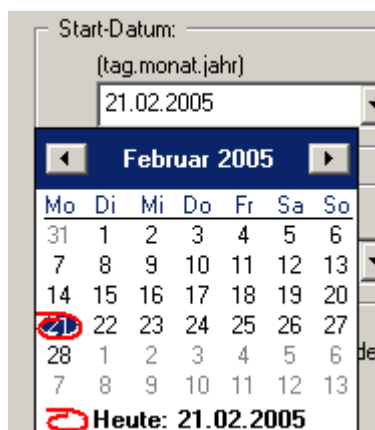


Abb. 58: Kalender

10.4.3.2 Zeitauswahl: Zeitbezug

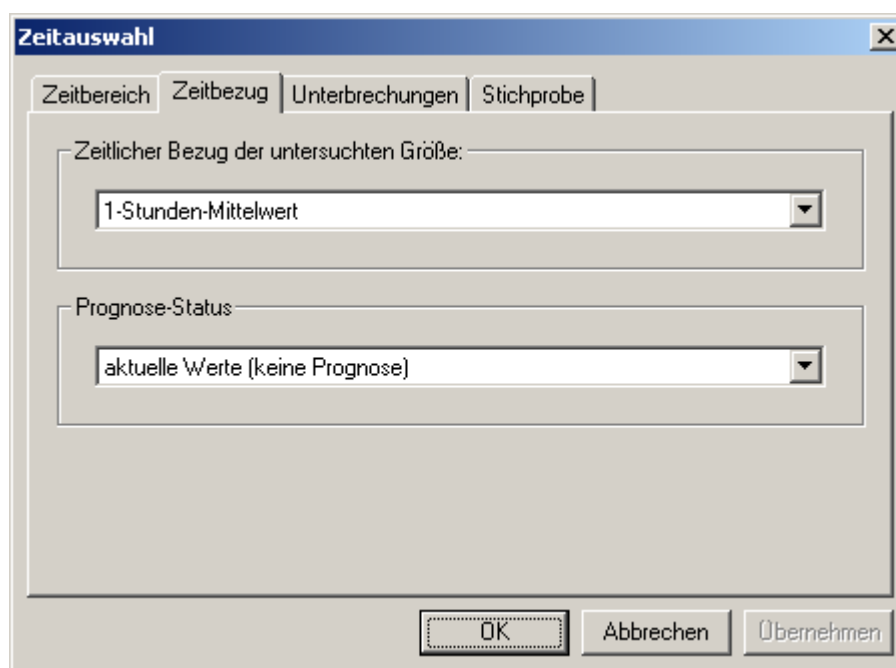


Abb. 59: Dialog Zeitauswahl – Zeitbezug

In diesem Dialog kann der zeitliche Bezug und der Prognosestatus der eingelesenen Daten gesetzt werden. Diese Informationen können bei der Erstellung der GIF-Ausgabe verwendet werden. Als zeitlicher Bezug kann zur Zeit vorgegeben werden:

- 1-Stunden-Mittelwert
- 8-Stunden-Mittelwert
- Tagesmaximum des 1-Stunden-Mittelwerts

- Tagesmaximum des 8-Stunden-Mittelwerts
- Tagesmittelwert

Als Prognose-Status kann zur Zeit vorgegeben werden:

- aktuelle Werte (keine Prognose)
- Prognose heute
- Prognose morgen
- Prognose übermorgen

Der Dialog „Zeitbezug“ ist nicht Bestandteil der FLADIS Basisversion.

10.4.3.3 Zeitauswahl: Unterbrechungen

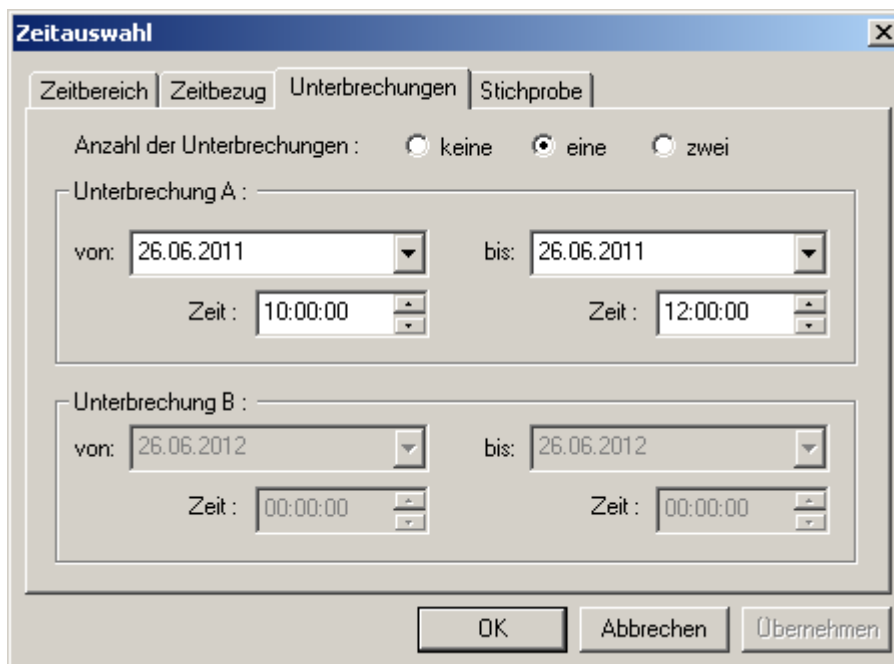


Abb. 60: Dialog Zeitauswahl - Unterbrechungen

Im Dialog „Unterbrechungen“ wird die **Anzahl der Unterbrechungen** sowie deren Dauer festgelegt. Die angegebenen Unterbrechungszeiträume werden bei den Berechnungen von FLADIS **nicht** berücksichtigt.

Die Angabe der Zeiträume für die Unterbrechungen erfolgen analog zu dem Dialog „Zeitauswahl: Zeitbereich“ ([Kapitel 10.4.3.1](#)).

10.4.3.4 Zeitauswahl: Stichprobe

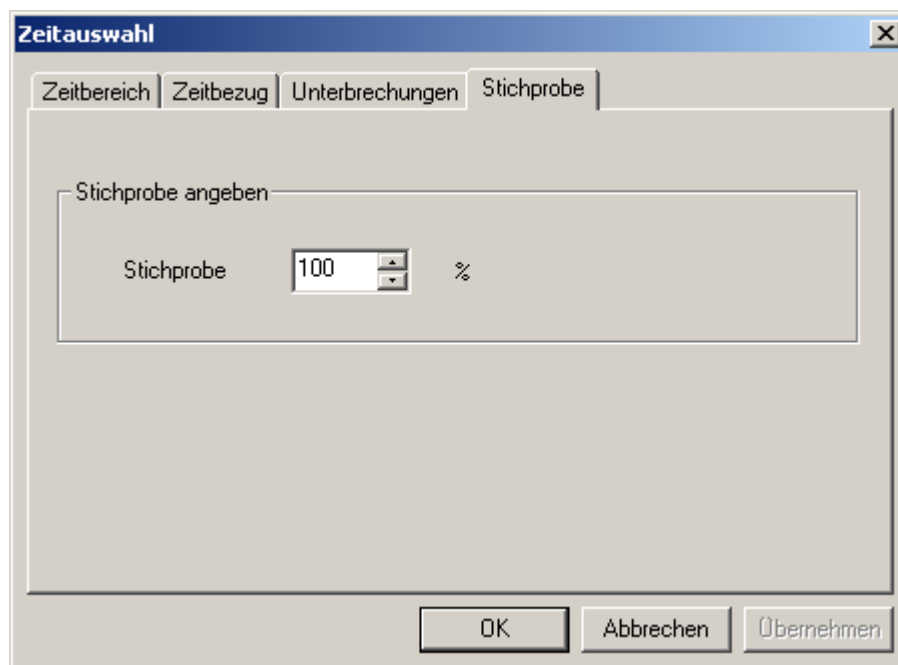


Abb. 61: Dialog Zeitauswahl - Stichprobe

Mit Hilfe dieses Dialogs kann festgelegt werden, ob die Werte zu allen Zeitpunkten im eingestellten Zeitraum zur Berechnung herangezogen werden (Stichprobe 100 %). Alternativ kann eine Stichprobe kleiner als 100 % eingestellt werden. Mittels eines Zufallsgenerators wird von FLADIS dann nur ein entsprechender Teil der Zeitpunkte zur Berechnung herangezogen.

10.4.4 Messgröße und Umrechnung

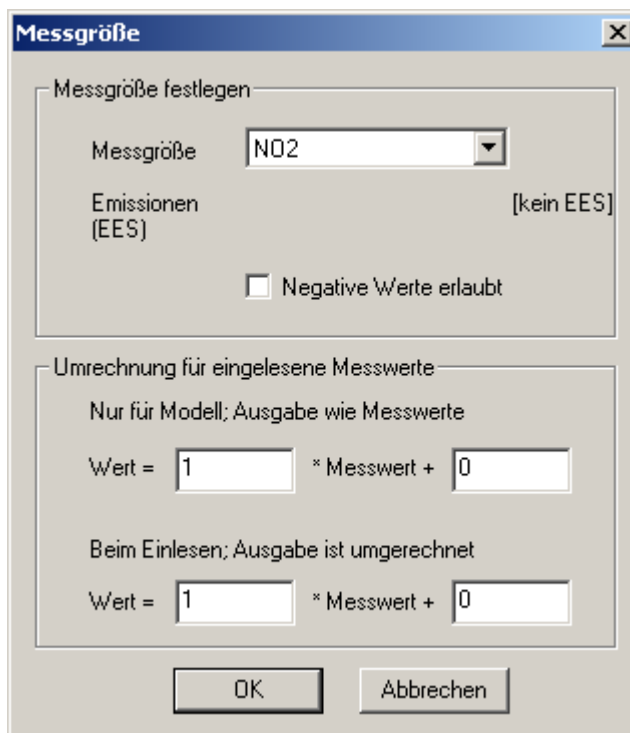


Abb. 62: Dialog Messgröße und Umrechnung

In diesem Dialog wird die Messgröße ausgewählt, für die FLADIS die Berechnungen durchführen soll. Drücken Sie dazu auf die Pfeiltaste und wählen Sie die gewünschte Messgröße aus.

Weiterhin können die eingelesenen Werte linear transformiert werden. Dabei werden zwei Varianten unterschieden. In der ersten Variante werden die eingelesenen Werte nur für die Benutzung im Modell transformiert. Die Ausgabe der Flächenwerte ist untransformiert. In der zweiten Variante werden die eingelesenen Werte sofort und endgültig transformiert. Die Ausgabe der Flächenwerte findet in transformierter Form statt.

10.4.5 Meteorologiefeld

Über eine Schnittstellenroutine in FLADIS können meteorologische Daten, die von der FU Berlin als Rasterdaten in 1 km Auflösung und 8 vertikalen Schichten in dreistündlicher Auflösung bereitgestellt werden, eingelesen und als GIF-Bilder visualisiert werden. Die dazu notwendigen Einstellungen können im Dialog "Meteorologiefeld – Meteodarstellung im Raster" vorgenommen werden.

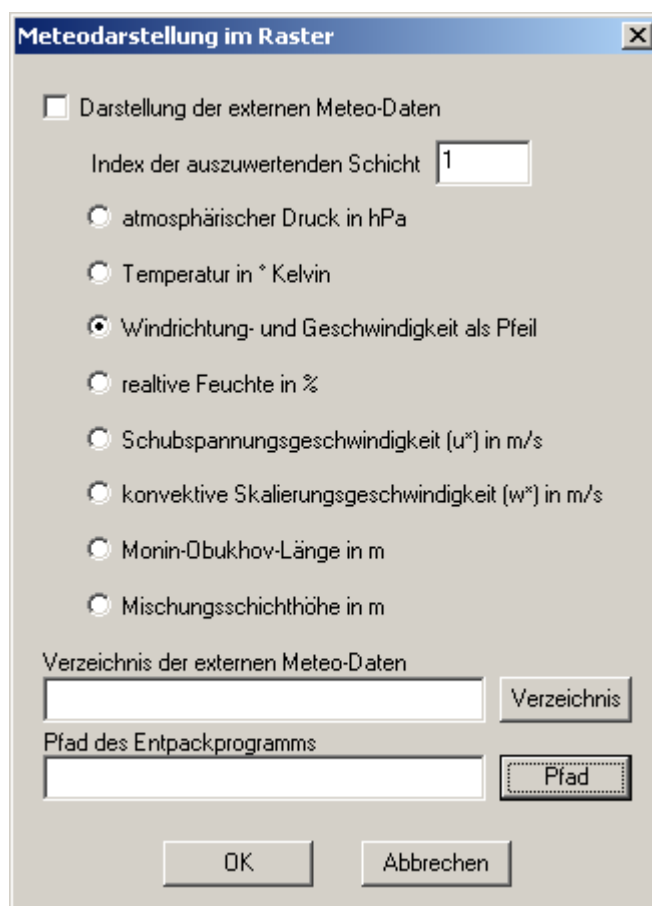


Abb. 63 Darstellung des Meteorologiefeldes

Die Schnittstelle extrahiert für einen Zeitschritt und einen Ausschnitt aus dem zur Verfügung stehenden Feld die Daten für die angegebene meteorologische Variable ([Kapitel 6.6](#)).

Die Einstellungen für die Darstellung von Windpfeilen wird im Dialog "Meteo-Darstellung" vorgenommen ([Kapitel 10.6.5](#)).

10.4.6 Perzentilwertberechnung

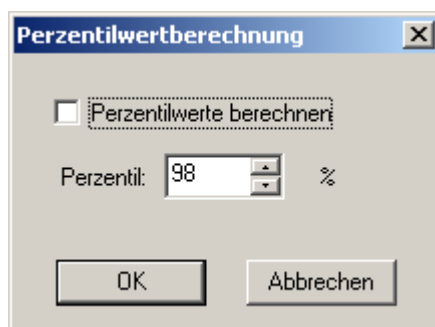


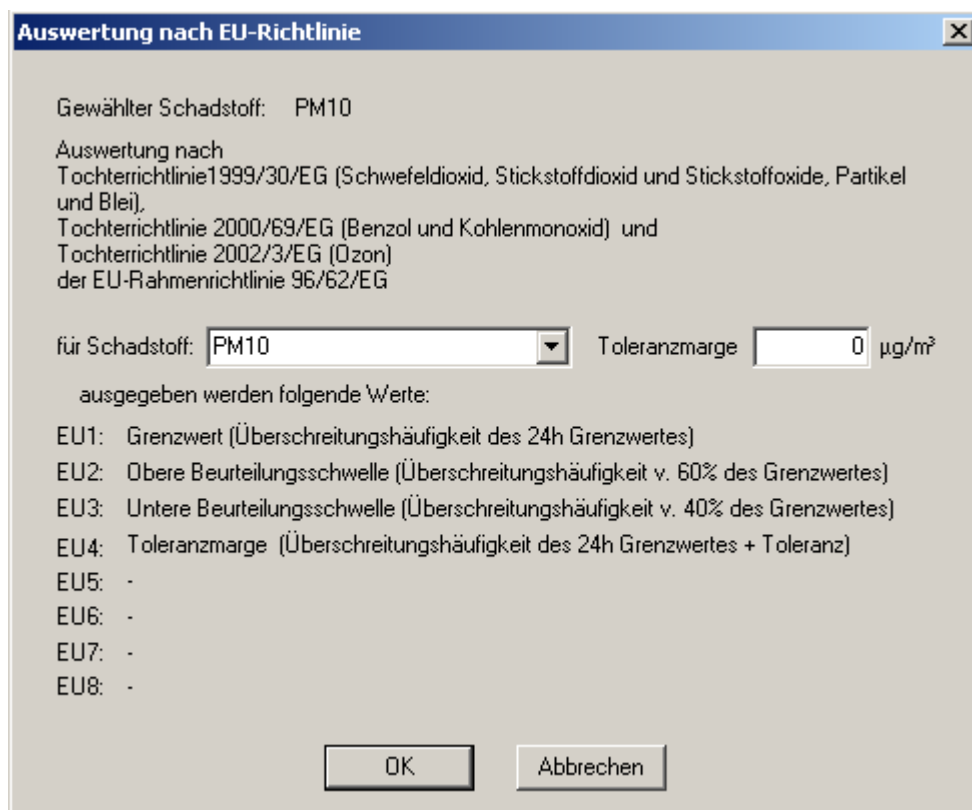
Abb. 64: Dialog Perzentilwertberechnung

Mit Hilfe dieses Dialogs wird festgelegt, ob eine Berechnung von Perzentilwerten erfolgen soll (**Perzentilwert berechnen**). Die Angabe des zu berechnenden Perzentilwertes erfolgt im entsprechenden Feld. Der Wertebereich liegt zwischen 95 % und 99 %.

Es ist zu beachten, dass bei der Perzentilwertberechnung **genügend Arbeitsspeicher** zur Verfügung stehen muss. Bei einer Gitterauflösung von 1000 m benötigt das Programm für Niedersachsen bei der Berechnung des Jahres-98 %-Perzentils einen Arbeitsspeicher von ca. 140 MB.

10.4.7 EU – Grenzwerte

In diesem Dialog können Einstellungen vorgenommen werden für Berechnungen gemäß der EU-Luftqualitätsrahmenrichtlinie.



Auswertung nach EU-Richtlinie

Gewählter Schadstoff: PM10

Auswertung nach
Tochterrichtlinie 1999/30/EG (Schwefeldioxid, Stickstoffdioxid und Stickstoffoxide, Partikel und Blei),
Tochterrichtlinie 2000/69/EG (Benzol und Kohlenmonoxid) und
Tochterrichtlinie 2002/3/EG (Ozon)
der EU-Rahmenrichtlinie 96/62/EG

für Schadstoff: Toleranzmarge µg/m³

ausgegeben werden folgende Werte:

EU1: Grenzwert (Überschreitungshäufigkeit des 24h Grenzwertes)
EU2: Obere Beurteilungsschwelle (Überschreitungshäufigkeit v. 60% des Grenzwertes)
EU3: Untere Beurteilungsschwelle (Überschreitungshäufigkeit v. 40% des Grenzwertes)
EU4: Toleranzmarge (Überschreitungshäufigkeit des 24h Grenzwertes + Toleranz)
EU5: -
EU6: -
EU7: -
EU8: -

OK Abbrechen

Abb. 65: Dialog Grenzwerte der EU-Rahmenrichtlinie

Der Dialog "Grenzwerte der EU-Rahmenrichtlinie" zeigt in der ersten Zeile, welche Messgröße im Dialog "Messgröße und Umrechnung" ([Kapitel 10.4.4](#)) ausgewählt wurde. Dann gibt der Dialog die Möglichkeit, einen Schadstoff anzugeben, für den die Auswertung gemäß der EU-Rahmenrichtlinie 96/62/EG durchgeführt werden soll. Für die Kenngrößen, die die entsprechenden Richtlinien fordern, sind maximal 8 Felder EU1 bis EU8 zur Ablage vorgesehen. Welche Kenngrößen in welchem der 8 Felder abgelegt werden, ist vom gewählten Schadstoff abhängig und wird unter dem Auswahlmenu für den Schadstoff genauer erläutert. Es kann außerdem eine Toleranzmarge angegeben werden, die auf die Grenzwerte aufaddiert werden soll. Ist die Berücksichtigung einer Toleranzmarge vorgesehen, wird der sich ergebende Wert in einem der 8 Felder abgelegt.

Die 8 Felder mit den EU-Kenngrößen werden in den jeweiligen Ausgabedateien ausgegeben, für die im Dialog "Ausgabe Allgemein" (**Kapitel 10.6.1**) das Kästchen "EU" aktiviert wurde.

Auswertungen können für die Schadstoffe SO₂, PM₁₀, NO₂, O₃, CO und für Niederschlag vorgenommen werden. Folgende Kenngrößen werden dabei gespeichert.

SO ₂	EU1:	Grenzwert (Überschreitungshäufigkeit des 1h Grenzwertes)
	EU2:	Grenzwert (Überschreitungshäufigkeit des 24h Grenzwertes)
	EU3:	Obere Beurteilungsschwelle (Überschreitungshäufigkeit v. 60% des 24h-Grenzwertes)
	EU4:	Untere Beurteilungsschwelle (Überschreitungshäufigkeit v. 40% des 24h-Grenzwertes)
	EU5:	Toleranzmarge (Überschreitungshäufigkeit des 1h Grenzwertes + Toleranz)
CO	EU1:	Höchster gleitender 8-Stunden Mittelwert
	EU2:	Tag (des höchsten Wertes) im Jahr
	EU3:	Stunde (des höchsten Wertes) am Tag
	EU4:	Tag (des höchsten Wertes) im Monat
	EU5:	Monat (des höchsten Wertes)
	EU6:	Jahr (des höchsten Wertes)
NO ₂	EU1:	Grenzwert (Überschreitungshäufigkeit des 1h Grenzwertes)
	EU2:	Obere Beurteilungsschwelle (Überschreitungshäufigkeit v. 70% des Grenzwertes)
	EU3:	Untere Beurteilungsschwelle (Überschreitungshäufigkeit v. 50% des Grenzwertes)
	EU4:	Toleranzmarge (Überschreitungshäufigkeit des 1h Grenzwertes + Toleranz)
PM ₁₀	EU1:	Grenzwert (Überschreitungshäufigkeit des 24h Grenzwertes)
	EU2:	Obere Beurteilungsschwelle (Überschreitungshäufigkeit v. 60% des Grenzwertes)
	EU3:	Untere Beurteilungsschwelle (Überschreitungshäufigkeit v. 40% des Grenzwertes)
	EU4:	Toleranzmarge (Überschreitungshäufigkeit des 24h Grenzwertes + Toleranz)
O ₃	EU1:	Höchster Stundenmittelwert
	EU2:	Informationsschwelle (Überschreitungshäufigkeit)
	EU3:	Alarmschwelle (Überschreitungshäufigkeit)
	EU4:	Höchster gleitender 8-Stundenmittelwert
	EU5:	Grenzwert 8-Stundenmittelwert (Überschreitungshäufigkeit in Tagen)
	EU6:	AOT40 akkumuliert ohne Zeitbeschränkung
	EU7:	AOT40 akkumuliert vom Mai bis Juli
	EU8:	AOT40 akkumuliert von April bis September
Niederschlag	EU1:	Anzahl Tage mit Niederschlag > 1 mm
	EU2:	Anzahl Tage mit Niederschlag > 0.1 mm

10.4.8 Fehlermeldungen

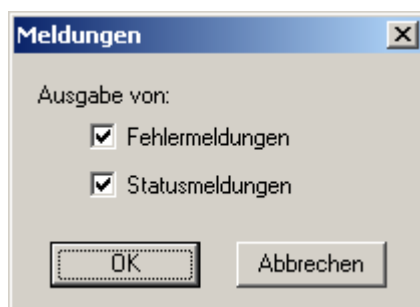


Abb. 66: Dialog Meldungen

Durch den Aufruf dieses Menübefehls öffnet sich der Dialog "Meldungen".

Fehlermeldungen

Mit der Deaktivierung von "Fehlermeldungen" werden Fehlermeldungen, die den Ablauf von FLADIS unterbrechen, unterdrückt. In der entsprechenden Log-Datei für Fehlermeldungen werden die Fehler aber protokolliert. Sind während des Rechenlaufs Fehler aufgetreten, erscheint eine entsprechende Meldung am Ende des Rechenlaufs.

Statusmeldungen

Durch die Deaktivierung der Schaltfläche "Statusmeldungen" werden alle Statusmeldungen von FLADIS unterdrückt. Diese Eigenschaft kann genutzt werden, wenn FLADIS im Hintergrund z. B. im Online-Betrieb genutzt werden soll.

10.4.9 Datenprüfung

10.4.9.1 Dialog Datenprüfung

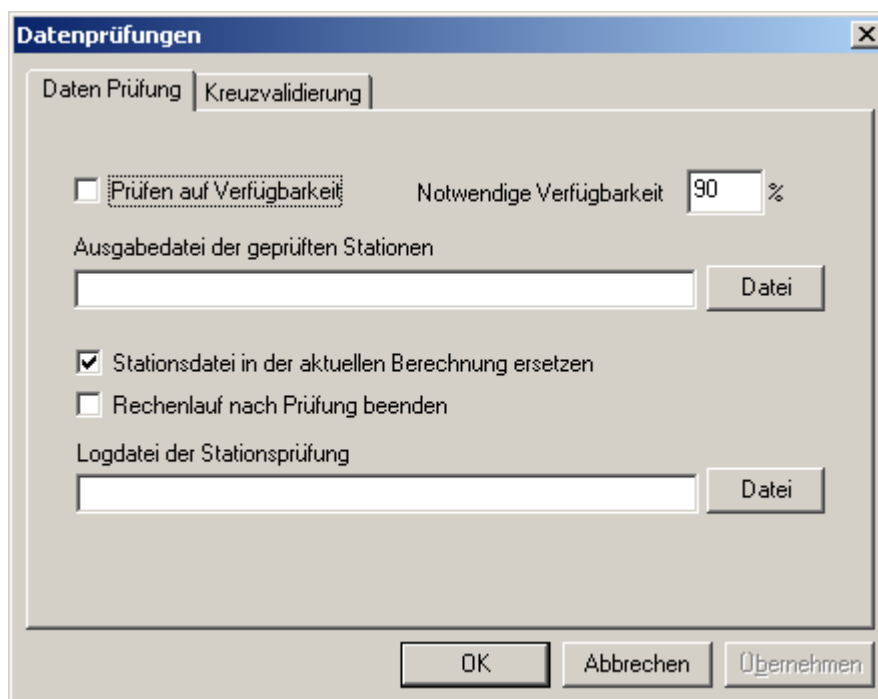


Abb. 67: Dialog Datenprüfung

Gemäß der EU Luftqualitätsrahmenrichtlinie 96/62/EG müssen zur Beurteilung verwendete Messzeitreihen eine definierte Vollständigkeit haben. Die Einstellungen für die Überprüfung der entsprechenden Verfügbarkeit der in FLADIS verwendeten Messzeitreihen können mittels des Dialogs „Datenprüfung“ unter dem Reiter „Daten Prüfung“ vorgenommen werden.

Prüfen auf Verfügbarkeit: Die Prüfung wird aktiviert/deaktiviert.

Notwendige Verfügbarkeit: Der Grad der notwendigen Verfügbarkeit wird in Prozent angegeben.

Ausgabedatei der geprüften Stationen: Pfadangabe für die Dateien, die FLADIS für die Stationen mit ausreichender Verfügbarkeit im Format der Stationsliste ([Kapitel 6.2.2](#)) erzeugt.

Stationsdatei in der aktuellen Berechnung ersetzen: Die Aktivierung veranlasst FLADIS, den oben angegebenen Pfad in den Dialog "Umgebungsdateien: Messwerte", Feld „Stationsdatei“ (**Kapitel 10.4.1.1**) zu übertragen.

Rechenlauf nach Prüfung beenden: Bei Aktivierung werden keine weiteren der eingestellten Berechnungen durchgeführt.

10.4.9.2 Dialog Kreuzvalidierung

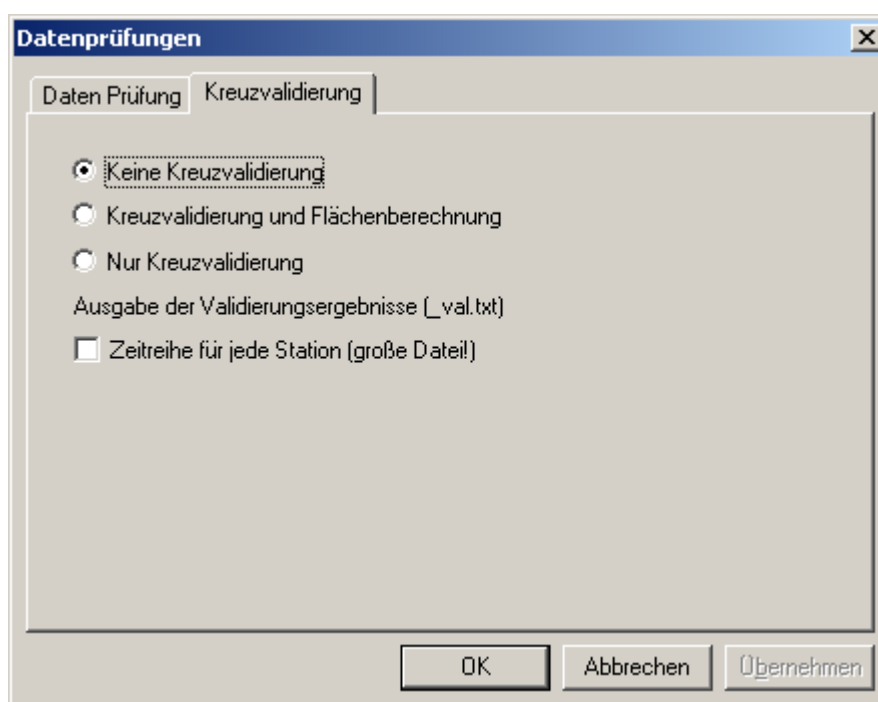


Abb. 68: Dialog Kreuzvalidierung

Im Dialog „Datenprüfung“, Reiter „Kreuzvalidierung“ kann das Verfahren der Kreuzvalidierung (**Kapitel 8**) aktiviert werden.

Keine Kreuzvalidierung: Kreuzvalidierung ist deaktiviert.

Kreuzvalidierung und Flächenberechnung: Die Kreuzvalidierung wird mit gleichzeitiger Flächenberechnung durchgeführt.

Nur Kreuzvalidierung: Es wird ausschließlich eine Kreuzvalidierung durchgeführt.

Wenn eine Kreuzvalidierung durchgeführt wird, erzeugt FLADIS eine Datei, in der die Validierungsergebnisse ausgegeben werden (*_valid.txt).

Zeitreihe für jede Station: Außer der Standardausgabe wird bei Aktivierung des Kästchens ein erweiterter Export erzeugt.

Die Standard-Exportdatei *_valid.txt hat folgendes Format:

Spalte 1	Nummer des Zeitschrittes
Spalte 2 und 3	Datum und Uhrzeit des Zeitschrittes
Spalte 4	Anzahl der Messwerte für diesen Zeitschritt
Spalte 5	Angabe der Standardabweichung (MSE)
Spalte 6	Angabe der mittleren relativen Abweichung (MRA)

Kreuzvalidierung							
Zeitschritt	Datum	Uhrzeit	Anz. Mes.	MSE	MRA		
1	01.01.2000	03:00	5	25.552934	0.508562		
2	01.01.2000	06:00	5	27.282190	0.506865		
3	01.01.2000	09:00	5	15.305725	0.583715		
4	01.01.2000	12:00	5	20.511739	0.647838		
5	01.01.2000	15:00	5	37.308003	0.653353		
.							
.							
Code	x	y	Hoehe	Anz.	Messung	Kreuzvalid.	rel. Abw.
1302	3519600	5660600	225	248	34.125000	49.279798	0.444097
1403	3533600	5689600	167	248	77.173387	67.190787	-0.129353
1404	3533600	5685000	152	248	121.915323	47.423841	-0.611010
1450	3554100	5684450	608	233	18.729614	55.985011	1.989117
1501	3518560	5691820	460	248	96.322581	36.029808	-0.625946
RMSQ: 21.312637		MRA: 0.158313					

Abb. 69 Beispiel einer Standardausgabe einer Kreuzvalidierung

Die erweiterte Exportdatei hat folgendes Format:

Spalte 1	Stationscode
Spalte 2	Nummer des Zeitschrittes
Spalte 3 und 4	Datum und Uhrzeit des Zeitschrittes
Spalte 5	Wert der Messung an dieser Station
Spalte 6	Wert der Schätzung an dieser Station

Kreuzvalidierung							
Code	Zeitschritt	Datum	Uhrzeit	Messung	Schaetzung		
1302	1	01.01.2000	03:00	34.000000	33.232381		
1403	1	01.01.2000	03:00	38.000000	37.098502		
1404	1	01.01.2000	03:00	62.000000	34.312020		
1450	1	01.01.2000	03:00	15.000000	33.294082		
1501	1	01.01.2000	03:00	56.000000	9.502015		
1302	2	01.01.2000	06:00	27.000000	9.494945		
1403	2	01.01.2000	06:00	31.000000	27.361948		
1404	2	01.01.2000	06:00	62.000000	18.777642		
1450	2	01.01.2000	06:00	18.000000	23.884424		
1501	2	01.01.2000	06:00	52.000000	13.281423		
1302	3	01.01.2000	09:00	22.000000	0.654386		
1403	3	01.01.2000	09:00	22.000000	5.166979		
1404	3	01.01.2000	09:00	31.000000	19.409700		
1450	3	01.01.2000	09:00	15.000000	16.385065		
1501	3	01.01.2000	09:00	24.000000	6.792826		
.							
.							
1302	247	31.01.2000	21:00	19.000000	27.764502		
1403	247	31.01.2000	21:00	89.000000	84.156056		
1404	247	31.01.2000	21:00	216.000000	42.245399		
1450	247	31.01.2000	21:00	19.000000	40.630084		
1501	247	31.01.2000	21:00	97.000000	41.157243		
1302	248	01.02.2000	00:00	12.000000	32.947421		
1403	248	01.02.2000	00:00	34.000000	60.454056		
1404	248	01.02.2000	00:00	63.000000	35.270796		
1450	248	01.02.2000	00:00	13.000000	49.982175		
1501	248	01.02.2000	00:00	80.000000	37.666653		
.							
.							
Code	x	y	Hoehe	Anz.	Messung	Kreuzvalid.	rel. Abw.
1302	3519600	5660600	225	248	34.125000	49.279798	0.444097
1403	3533600	5689600	167	248	77.173387	67.190787	-0.129353
1404	3533600	5685000	152	248	121.915323	47.423841	-0.611010
1450	3554100	5684450	608	233	18.729614	55.985011	1.989117
1501	3518560	5691820	460	248	96.322581	36.029808	-0.625946
RMSQ: 46.693649		MRA: 0.759905					

Abb. 70 Beispiel eines erweiterten Exports der Ergebnisse der Kreuzvalidierung

Am Ende beider Dateien steht eine Zusammenfassung für jede Stationen, gemittelt über alle Zeitschritte:

Spalte 1	Stationscode
Spalte 2 und 3	x,y-Koordinaten der Station
Spalte 4	Höhe der Station
Spalte 5	Anzahl der Messungen im untersuchten Zeitraum
Spalte 6	Mittelwert der Messung an dieser Station
Spalte 7	Mittelwert der Schätzung (Kreuzvalidierung)
Spalte 8	Angabe der mittleren relativen Abweichung

Die Fußzeile enthält die Zusammenfassung über alle Stationen und alle Zeitschritte:

RMSQ	Standardabweichung
MRA	Mittlere relative Abweichung

10.5 Menü Modell

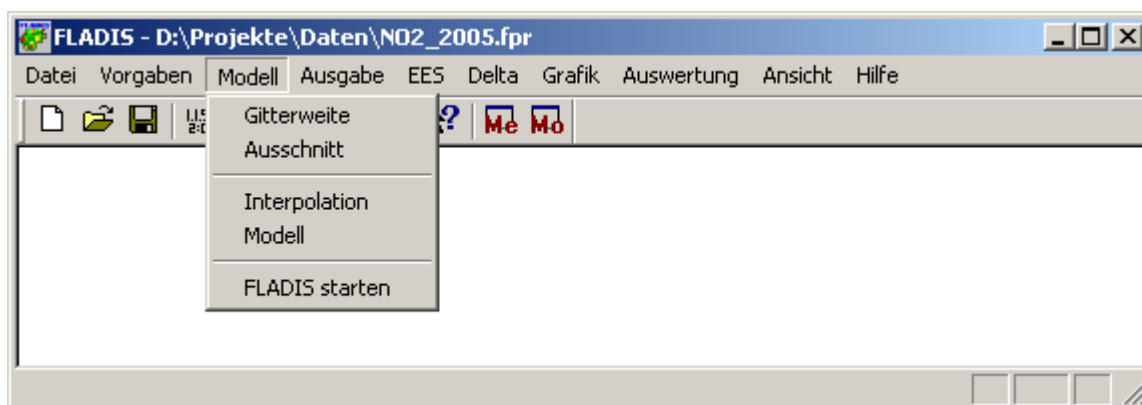


Abb. 71: Menü Modell

Unter diesem Menü befinden sich die Einstellungen für die Interpolationsverfahren von FLADIS.

Gitterweite: Öffnet den Dialog „Gitterweite“

Ausschnitt: Öffnet den Dialog „Ausschnitt“

Interpolation: Öffnet den Dialog „Interpolation“

Modell: Öffnet den Dialog „Modelle“ mit den Reitern „Modell - Allgemein“, „Datenassimilation“, „Bilanzmodell“, „Externes Modell“ und „Depositionsmodell“

FLADIS starten: Dieser Menüpunkt steht nicht zur Verfügung, wenn eine EES aufgebaut werden soll.

Eine eingehende Beschreibung der einzelnen Interpolationsverfahren befindet sich im Handbuch unter "Interpolationsverfahren" (**Kapitel 2**).

10.5.1 Gitterweite



Abb. 72: Dialog Gitterweite

- Gitterweite:** Angabe der Gitterweite des darzustellenden Interpolationsgitters. Der Minimalwert ist durch die Auflösung des DHM definiert. Je geringer die Gitterweite, desto höher die Rechenzeiten.
- Offset X/Y:** Mit der Angabe eines Offsets kann der Ursprung des Gitters verschoben werden.

10.5.2 Ausschnitt

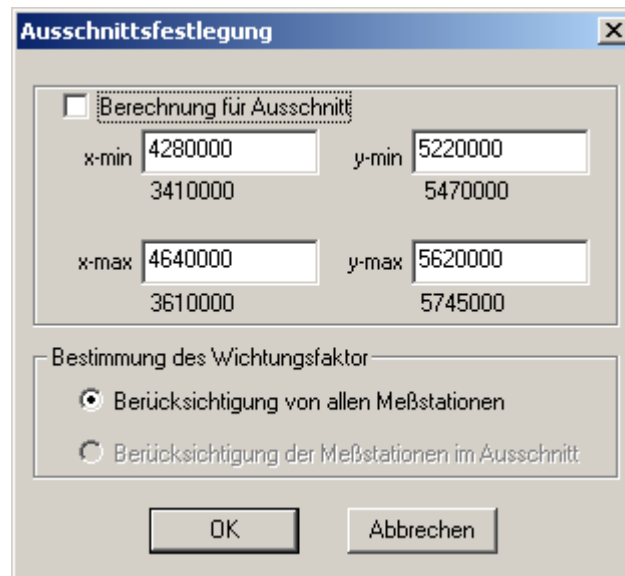


Abb. 73: Dialog Ausschnittsfestlegung

FLADIS rechnet für ein Gebiet, das durch vorhandene Höheninformation aus dem digitalen Höhenmodell (DHM) bestimmt ist. Die Berechnungen können aber auch nur für einen Ausschnitt, der innerhalb dieses Gebietes liegt, durchgeführt werden.

Berechnung für Ausschnitt: Berechnungen werden nur für einen Ausschnitt durchgeführt. Der Ausschnitt kann über die entsprechenden Rechts- und Hochwerte festgelegt werden.

10.5.3 Interpolation

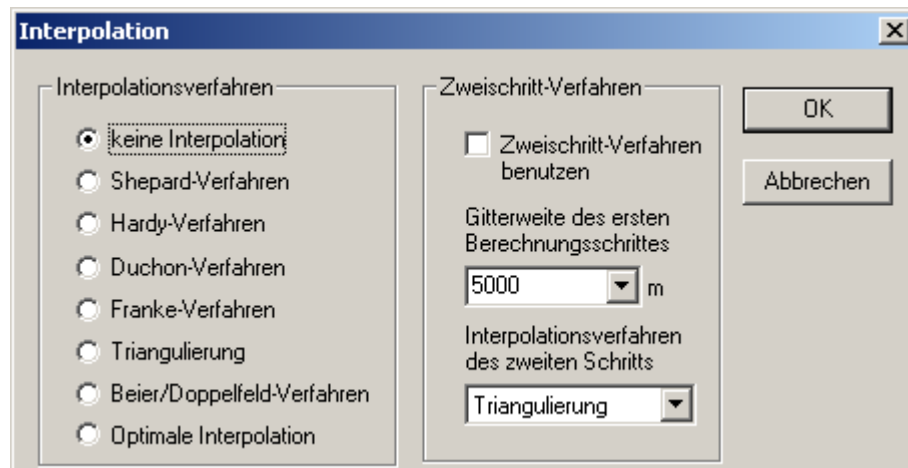


Abb. 74: Dialog Interpolation

Im Dialog "Interpolation" kann das gewünschte Interpolationsverfahren ([Kapitel 10.5.3.1 bis 10.5.3.7](#)) ausgewählt werden. Weiterhin können die Parameter für das Zweischritt-Verfahren ([Kapitel 10.5.3.8](#)) eingestellt werden. Wenn zu dem gewählten Interpolationsverfahren nähere Angaben erforderlich sind, wird der Dialog ausgeklappt und zeigt erweiterte Optionen. Die Einstellungsmöglichkeiten zu den einzelnen Interpolationsverfahren und zum Zweischritt-Verfahren sind in den folgenden Unterkapiteln näher erläutert.

10.5.3.1 Einstellungen Shepard – Verfahren

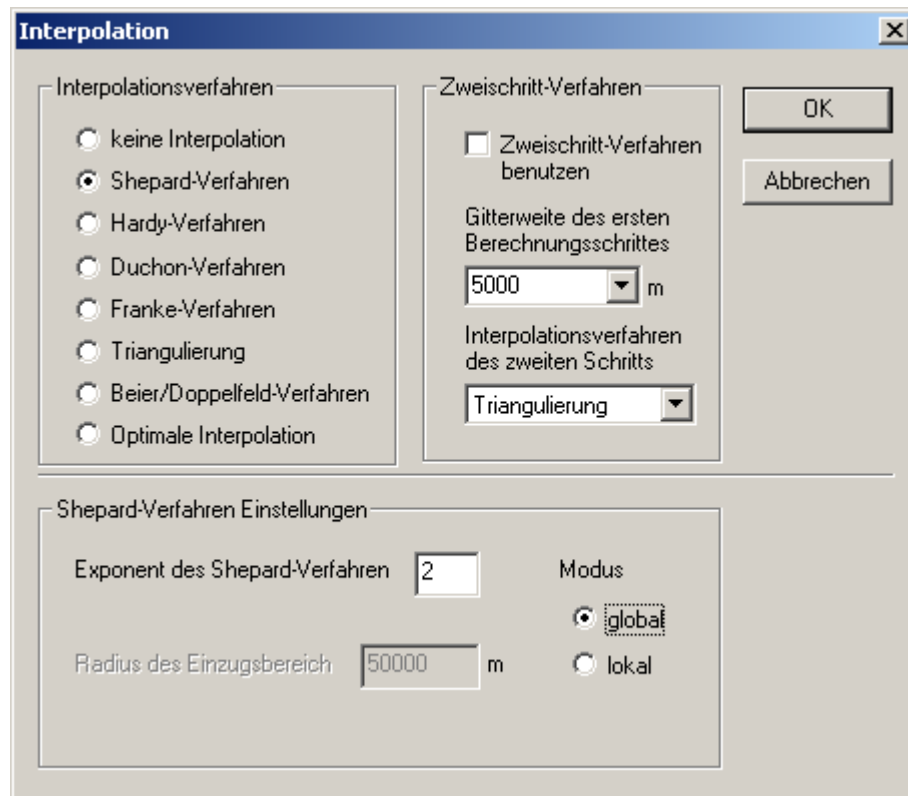


Abb. 75: Dialog Shepard-Verfahren

Das Shepard-Verfahren ist ein sog. Inverses Abstandswichtungsverfahren. Mit der Angabe des **Exponenten** wird bestimmt, mit welcher Art die Abstandswichtung gerechnet werden soll.

Der **Modus** legt fest, ob zur Berechnung der Interpolationswerte alle Stationen berücksichtigt werden sollen (**global**) oder ob nur Stationen in einem anzugeben Radius herangezogen werden sollen (**lokal**). Der Radius des Einzugsbereich muss so gewählt werden, dass möglichst mehrere Stationen berücksichtigt werden.

(Beschreibung siehe [Kapitel 2.1.1.](#))

10.5.3.2 Einstellungen Hardy – Verfahren

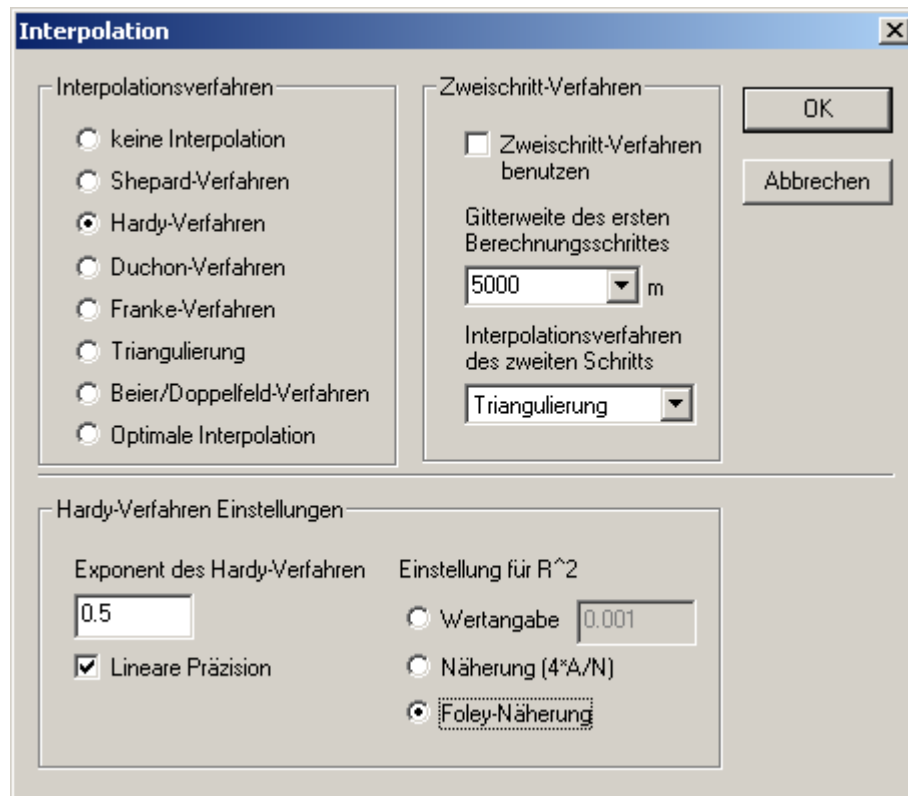


Abb. 76: Dialog Hardy-Verfahren

Das Hardy-Verfahren gehört zur Gruppe der Radialen Basisfunktionsmethoden. Beim Hardy-Verfahren wird eine quadratische Form als Basisfunktion gewählt. Der Exponent kann aus dem Intervall $[-1 .. +1]$ ausgewählt werden.

Über die Auswahl des Feldes **Lineare Präzision** kann vorgegeben werden, dass das Verfahren in dem Fall, bei dem die Stützstellen in einer Ebene liegen, auch eine ebene Fläche interpoliert wird.

In der Auswahl **Einstellung für R^2** kann zwischen drei verschiedenen Methoden ausgewählt werden, wobei die Foley-Näherung am gebräuchlichsten ist.

(Beschreibung siehe [Kapitel 2.1.3.](#))

10.5.3.3 Einstellungen Duchon – Verfahren

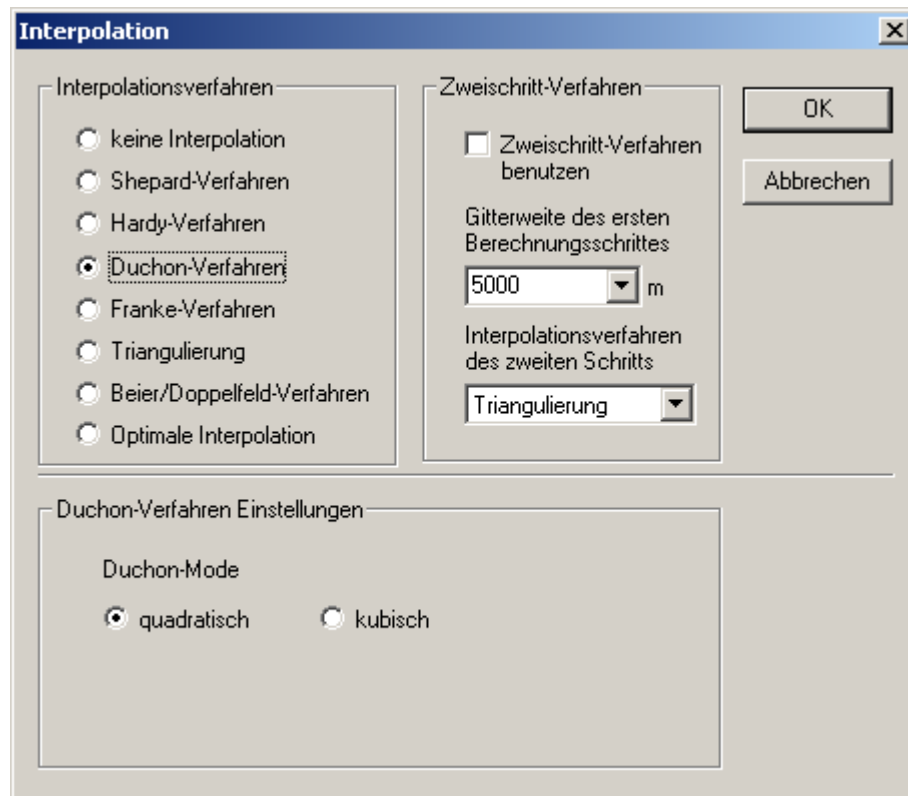


Abb. 77: Dialog Duchon-Verfahren

Das Duchon-Verfahren beschreibt eine Lösung, die sich ergibt, wenn man eine unendlich ausgedehnte elastische Platte an den Stützstellen befestigt. Deshalb wird das Verfahren auch Thin Plate Spline (TPS) genannt.

Man kann zwischen der Möglichkeit einer quadratischen und einer kubischen Basisfunktion wählen.

(Beschreibung siehe [Kapitel 2.1.4.](#))

10.5.3.4 Einstellungen Franke – Verfahren

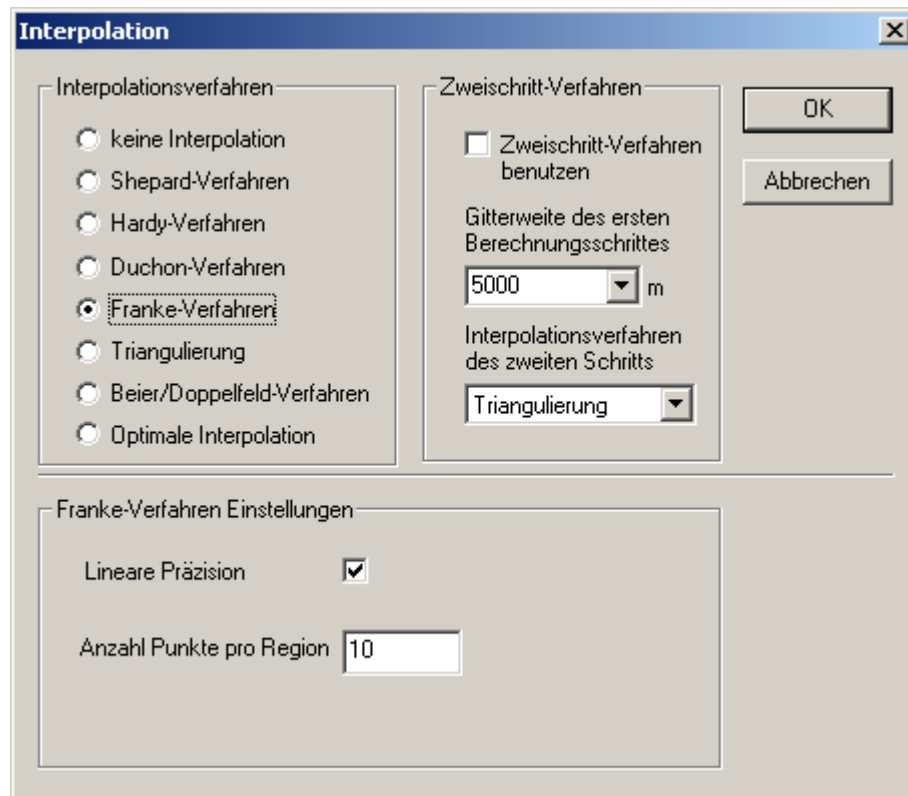


Abb. 78: Dialog Franke-Verfahren

Das Franke-Verfahren hat lokalen Charakter, was durch die **Anzahl der Punkte pro Region**, die innerhalb einer lokalen Region liegen, angegeben wird. Über die Auswahl des Feldes **Lineare Präzision** kann vorgegeben werden, dass das Verfahren in dem Fall, bei dem die Stützstellen in einer Ebene liegen, auch eine ebene Fläche interpoliert wird.

(Beschreibung siehe [Kapitel 2.1.5.](#))

10.5.3.5 Einstellungen Triangulierung

Um das Triangulierungsverfahren (Beschreibung siehe [Kapitel 2.1.6](#)) zu benutzen, wählen Sie im Dialog Interpolation als Interpolationsverfahren "Triangulierung". Es müssen keine weiteren Einstellungen vorgenommen werden.

(Beschreibung siehe [Kapitel 2.1.6](#).)

10.5.3.6 Einstellungen Beier/Doppelfeld – Verfahren

Um das Beier/Doppelfeld-Verfahren zu benutzen, wählen Sie im Dialog Interpolation als Interpolationsverfahren " Beier/Doppelfeld-Verfahren". Es müssen keine weiteren Einstellungen vorgenommen werden.

(Beschreibung siehe [Kapitel 2.1.7](#).)

10.5.3.7 Einstellungen Optimale Interpolation

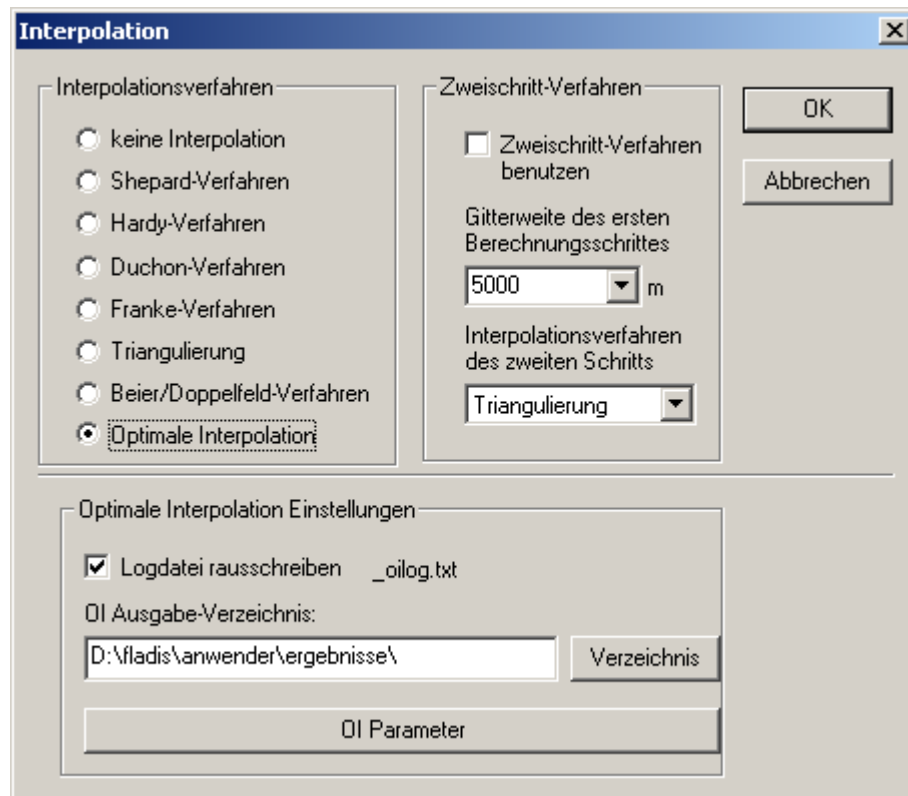


Abb. 79: Dialog Optimale Interpolation

Die Optimale Interpolation ist, wie in ([Kapitel 2.1.8](#)) beschrieben, kein Interpolationsverfahren im eigentlichen Sinne, d.h. sie zielt nicht auf die Wiedergabe stützstellen-treuer Werte, sondern auf die Beschreibung der mittleren Feldstrukturen der darzustellenden Größe in der Skala des Interpolationsrasters. Das Verfahren kommt aus dem Bereich der Geostatistik und wird häufig verwendet, um Beobachtungswerte in Modellrechnungen einfließen zu lassen (Datenassimilation).

Im entsprechenden Dialog (Abb. 79) kann zunächst der Pfad für eine Logdatei vorgegeben werden, in die für jeden Zeitschritt statistische Parameter (Mittelwert, Varianz, Standardabweichung der Messwerte, Parameter der empirischen Varianz und der verwendeten Kovarianzfunktion) geschrieben werden. Diese Datei kann, wenn gleichzeitig eine Kreuzvalidierung durchgeführt wird, bei 8760 Zeitschritten (ein Jahr in Stundenschritten) rund 150MB groß werden.

Die Parameter für die Optimale Interpolation lassen sich nach Anklicken der Schaltfläche "OI Parameter" im Dialog Optimale Interpolation (Abb. 79) einstellen.

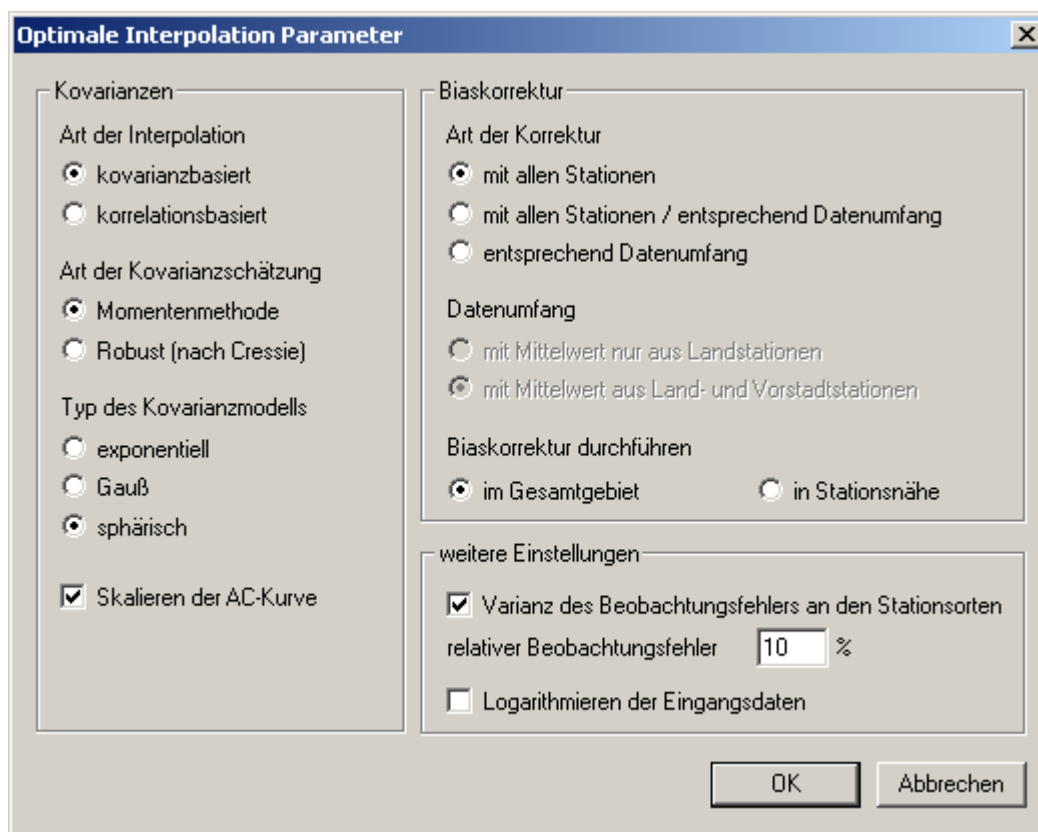


Abb. 80: Dialog Optimale Interpolation Parameter

Es öffnet sich der Dialog "Optimale Interpolation Parameter" (Abb. 80). Auf der linken Seite kann die Kovarianzmodellierung gesteuert werden, auf der rechten Seite finden sich die Parameter zur Biaskorrektur sowie weitere Einstellungen.

Die räumliche Interpolation findet bei dem in FLADIS implementierten Verfahren der Optimalen Interpolation auf der Grundlage eines empirisch geschätzten Kovarianzmodells statt ([Kapitel 2.1.8](#)). Die Interpolationsgleichungen können dabei wahlweise auf Kovarianzen oder Korrelationen basieren. Für die Bestimmung der empirischen Kovarianzwerte stehen die klassische Momentenmethode und eine gegenüber Ausreißern und Abweichungen von der Normalverteilung robustere Schätzung nach Cressie zur Verfügung. Die die Schätzwerte approximierende Kovarianzfunktion kann exponentiell, Gauß'schen oder sphärischen Typs sein. Sie kann für Stationen mit geringer Repräsentativität (z.B. im Einflussbereich stark befahrener Straßen mit kleinräumigen Spitzenkonzentrationen) durch Setzen des Häkchens skaliert werden.

Um die von dem Verfahren der Optimalen Interpolation verlangte Biasfreiheit zu approximieren, empfiehlt es sich, eine Biaskorrektur durchzuführen ([Kapitel 2.1.8](#)). Der Bias wird vor der Analyse von den Beobachtungsinkrementen an den Stationsorten subtrahiert und abschließend wieder addiert. Für diese beiden Schritte kann der Da-

tenumfang zur Biasbestimmung im rechten oberen Feld des Dialogs getrennt gewählt werden, es können jeweils die Beobachtungsinkremente aller Stationen, aller Land- und Vorstadtstationen oder nur aller Landstationen herangezogen werden. Der Bias kann wahlweise homogen im Gesamtgebiet oder nur in Stationsnähe korrigiert werden. Letzteres wird bei der Anwendung der OI im Rahmen der Datenassimilation empfohlen (**Kapitel 4**).

Weiterhin kann ein Beobachtungsfehler an den Stationsorten berücksichtigt werden. Die für die Optimale Interpolation benötigte Varianz des Beobachtungsfehlers Var_{Mess} wird in FLADIS berechnet als

$$Var_{Mess} = MAX(1.1 * Var_{Back}, Var_{Back} + (relobserr * Messwert)^2)$$

mit Var_{Back} als Varianz des Backgroundfehlers am Stationsort, $relobserr$ als relativem Beobachtungsfehler an den Stationsorten und $Messwert$ als dem jeweiligen Messwert an den Stationsorten. Der Wert für $relobserr$ kann ebenfalls im Dialog vorgegeben werden.

Das Logarithmieren der Eingangsdaten bewirkt, dass die Kovarianzmodellierung und die Analyse in der logtransformierten Größe durchgeführt wird, anschließend wird in die eigentliche Größe zurücktransformiert.

(Beschreibung siehe **Kapitel 2.1.8.**)

10.5.3.8 Zweischnitt – Verfahren

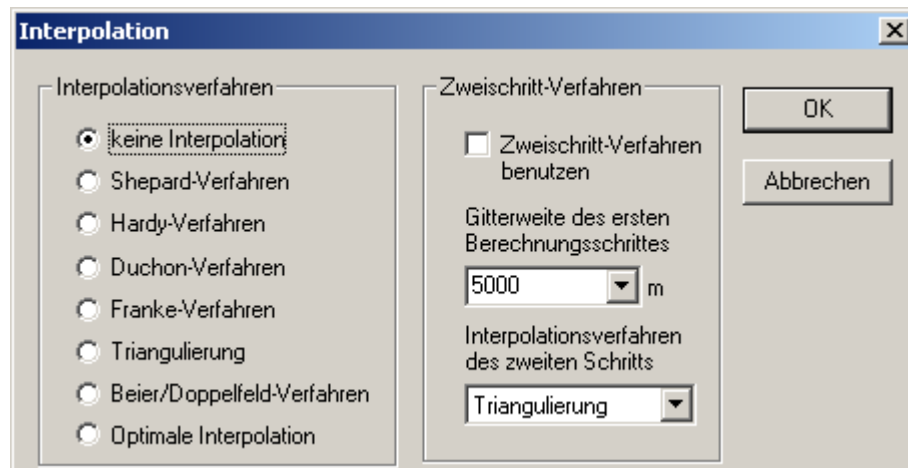


Abb. 81: Dialog Zweischnitt-Verfahren

Bei dem Zweischnitt-Verfahren wird im ersten Schritt eine Interpolation und das ausgewählte Modell mit einer gröberen Auflösung (**Gitterweite des Zweischnitt-Verfahrens** - im Beispiel 5 km) angewendet.

Das anzuwendende **Interpolationsverfahren** wird in der entsprechenden Liste ausgewählt. Im zweiten Schritt wird das Ergebnis des ersten Schritts mit einem feinerem Gitter nach interpoliert. Die Gitterweite und das Verfahren des zweiten Interpolationsschritts ist entsprechend der allgemeinen Einstellungen definiert. Der Vorteil des Zweischnitt-Verfahrens liegt in einem geringeren Rechenzeitbedarf bei der Benutzung eines rechenintensiven Modells.

10.5.4 Modelle: Allgemein

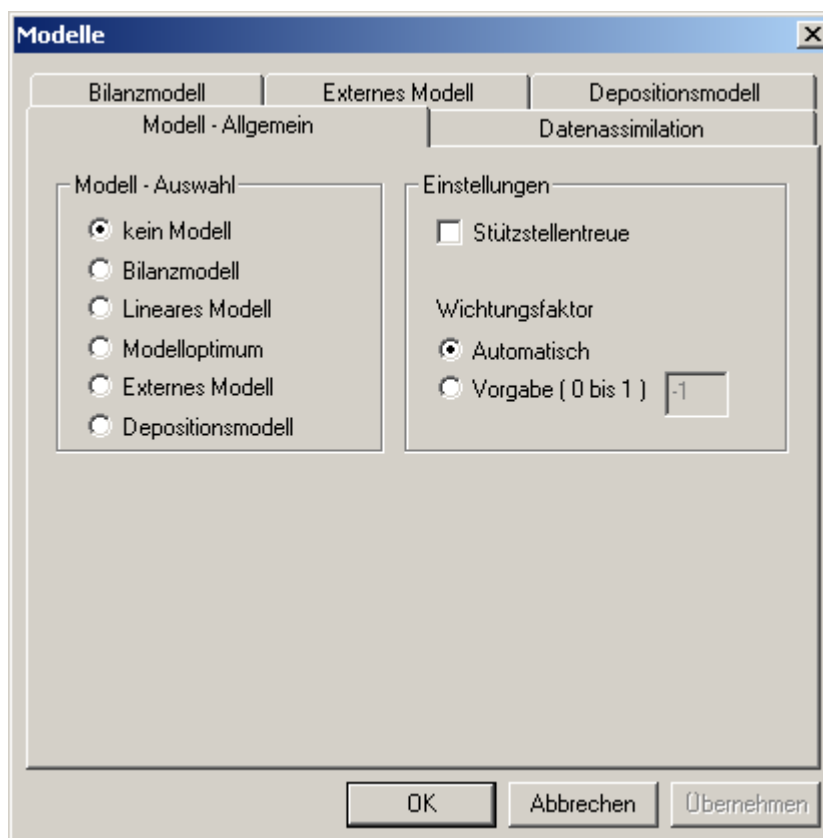


Abb. 82: Dialog Modelle – Modell Allgemein

In diesem Dialog werden die verschiedenen Modelleinstellungen bei der Berechnung vorgegeben.

Wird die Schaltfläche "kein Modell" ausgewählt, wird eine reine Interpolation der Messwerte erstellt.

In den anderen Fällen kann über die Auswahl **Wichtungsfaktor** angegeben werden, ob die Modellwerte mit einem durch FLADIS bestimmten Wichtungsfaktor (**Automatisch**) oder mit einem festen Anteil bis 100 % = 1 (**Vorgabe**) den Interpolationswerten zugemischt werden. Bei einer Vorgabe von einem festen Anteil von 100 % = 1 werden nur noch die Modellwerte verwendet.

Mit der Auswahl „Bilanzmodell“ legen Sie fest, dass das Bilanzmodell verwendet werden soll. (Beschreibung siehe [Kapitel 3.1.](#))

Mit der Auswahl „Lineares Modell“ legen Sie fest, dass das lineare Modell verwendet werden soll. (Beschreibung siehe [Kapitel 3.2.](#))

Mit der Auswahl „Modelloptimum“ bestimmt FLADIS für jeden Zeitpunkt die Korrelation für das Bilanzmodell mit den eingestellten Parametern und dem Linearen Modell. Für die weitere Berechnung wird das Modell mit dem höheren Korrelationskoeffizienten verwendet.

Mit der Auswahl „Externes Modell“ legen Sie fest, dass externe Modelldaten verwendet werden sollen. (Beschreibung siehe [Kapitel 3.3.](#))

Mit der Auswahl „Depositionsmodell“ legen Sie fest, dass das Depositionsmodell von FLADIS verwendet werden soll ([Kapitel 10.5.4.3.](#)).

Im "Modell Ausgabe Fenster" ([Kapitel 10.2](#)) wird für jeden Zeitschritt angegeben, welches Modell verwendet wurde. Dabei steht

- 1 für die Verwendung des Linearen Modells,
- 2 für die Verwendung des Bilanzmodells,
- 3 für die Verwendung externer Modelldaten,
- 4 für die Verwendung des Depositionsmodells und
- 0 dafür, dass kein Modell verwendet wurde.

Mit der Aktivierung der Einstellung "Stützstellentreue" wird FLADIS nach der Benutzung eines Modellansatzes dazu gezwungen, die Messwerte (Stützstellen) in der flächenhaften Darstellung wiederzugeben. Dazu wird auf das Ergebnisfeld aus Interpolation und Modell ein interpoliertes Differenzfeld addiert, das aus den Differenzen zwischen gemessenem Wert und dem kombinierten Modell-/Messwert gebildet wird.

10.5.4.1 Modelle: Bilanzmodell

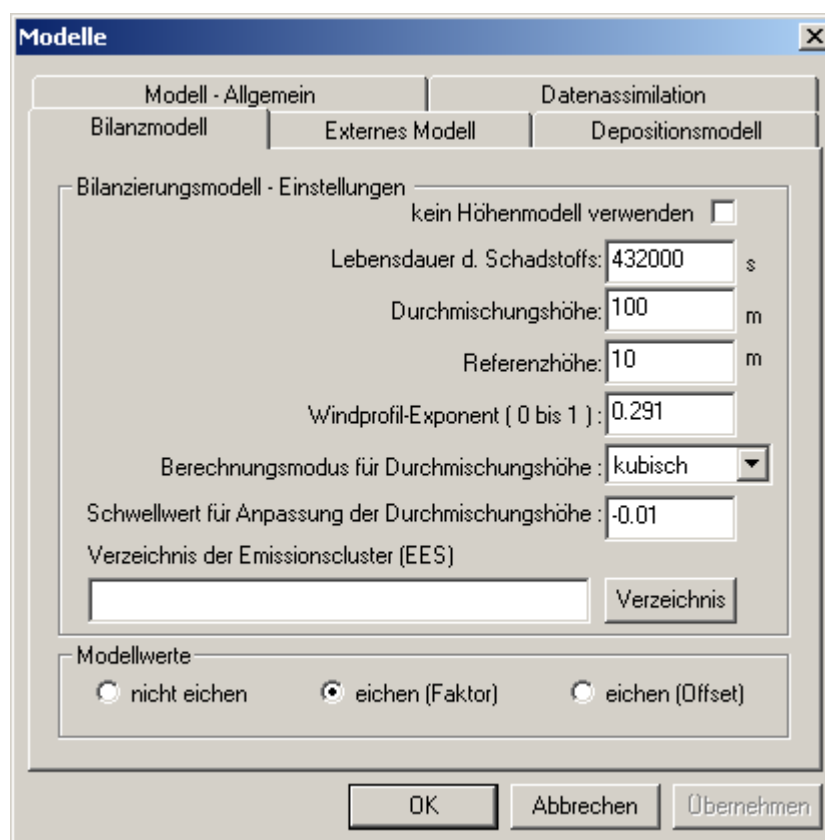


Abb. 83: Dialog Modelle - Bilanzmodell

Das Bilanzmodell kann nur für inerte Schadstoffe angewendet werden. Die folgenden Bilanzierungs-Einstellungen haben folgende Bedeutung:

kein Höhenmodell verwenden: Diese Schaltfläche markieren, wenn man bei der Anwendung des Bilanzierungsmodell die Orografie nicht berücksichtigen will.

Lebensdauer d. Schadstoffs: Angabe in Sekunden zur Berücksichtigung des chemischen Abbaus der Substanz analog zur Deposition von Schwebeteilchen.

Durchmischungshöhe: Standardwert der Durchmischungshöhe in Meter

Referenzhöhe: Höhe des Anemometers zur Windmessung

Windprofilexponent: Exponent zur Berechnung der Transportgeschwindigkeit gemäß TA-Luft

Berechnungsmodus: Modus zur Anpassung der Durchmischungshöhe

Schwellwert für ... : Schwellwert bei der Regressionsanalyse für die Anpassung der Durchmischungshöhe.

Verzeichnis der EES: Verzeichnis der Emissionscluster

Modellwerte nicht eichen: Die berechneten Modellwerte werden nicht geeicht.

Modellwerte eichen (Faktor): Die berechneten Modellwerte werden durch Multiplikation mit einem Faktor so geeicht, dass die durch Interpolation gewonnenen Daten an den Orten der Messungen den selben Mittelwert aufweisen wie die gemessenen Werte.

Modellwerte eichen (Offset): Die berechneten Modellwerte werden durch Addition eines Offsets so geeicht, dass die durch Interpolation gewonnenen Daten an den Orten der Messungen den selben Mittelwert aufweisen wie die gemessenen Werte.

(Beschreibung siehe [Kapitel 3.1.](#))

10.5.4.2 Modelle: Externes Modell

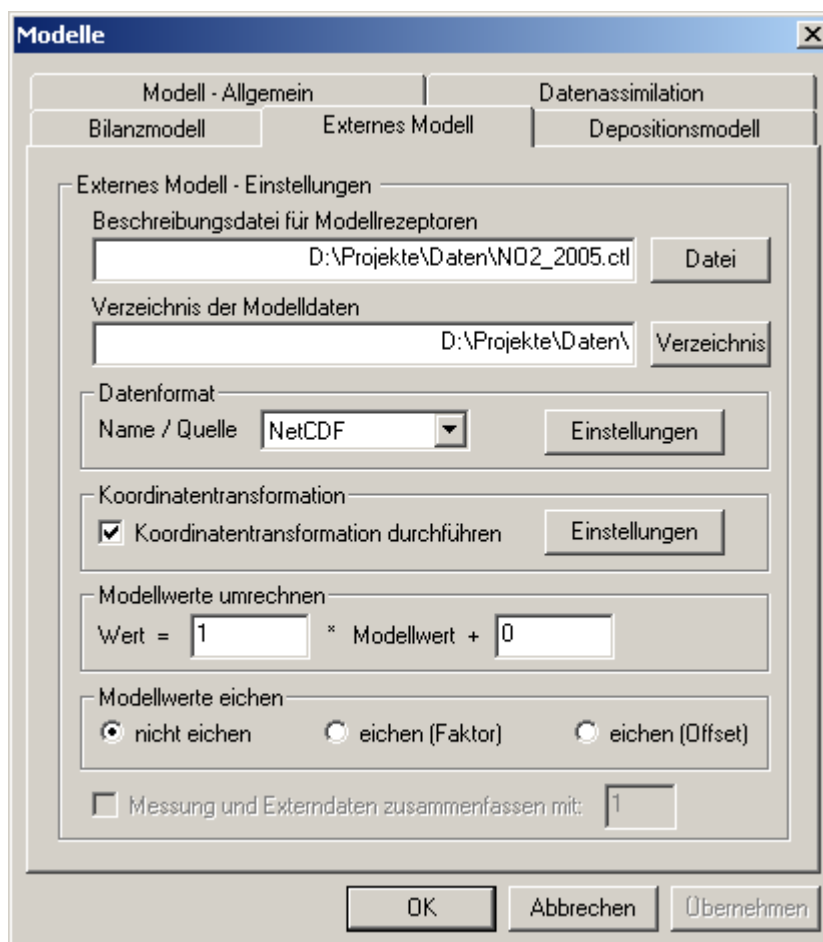


Abb. 84: Dialog Modelle - Externes Modell

In diesem Dialog werden die Einstellungen für die Verarbeitung von externen Modelldaten vorgenommen.

Beschreibungsdatei für Modellrezeptoren: In dieses Feld muss der Pfad und Name der Beschreibungsdatei der Modellrezeptoren eingegeben werden. Je nach Art der externen Modelldaten ([Kapitel 3.3](#)) ist dies eine Stationsbeschreibungsdatei für Rezeptorreihen im ASCII-Format, eine LASAT-Headerdatei (*.dmna) oder eine Headerdatei im *.ctl-Format ([Kapitel 6](#)).

Verzeichnis der Modelldaten: In diesem Feld muss das Verzeichnis angegeben werden, in dem sich die Modelldaten befinden.

Datenformat: Über das Dropdown-Menü kann zunächst das Format der externen Modelldaten angegeben werden. Über die zugehörige Schaltfläche „Einstellungen“ erscheint dann für die Rezeptorreihen im ASCII-Format, das REM-CALGRID Binärformat und das NetCDF-Format analog zur Beschreibung der Messwertdateien der Dialog „Datenformat“ ([Kapitel 10.4.2](#)), der entsprechend auszufüllen ist. Für das REM-CALGRID Format bzw. das NetCDF-Format beachten Sie bitte die Hinweise zum Ausfüllen des Dialogs in [Kapitel 6.4](#) bzw [Kapitel 6.5](#).

Liegen die externen Modelldaten im LASAT-Format vor, so erscheint über die Schaltfläche „Einstellungen“ der Dialog „LASAT Vorgaben“ (Abb. 85). Hier können einzulesender Stoff und Höhengschicht sowie Zeitschritt und Fehlwert spezifiziert werden. Zeitschritt ist dabei nicht der Zeitschritt der LASAT-Rechnung, sondern der zeitliche Rythmus, in dem die LASAT-Ausgabedateien vorliegen.

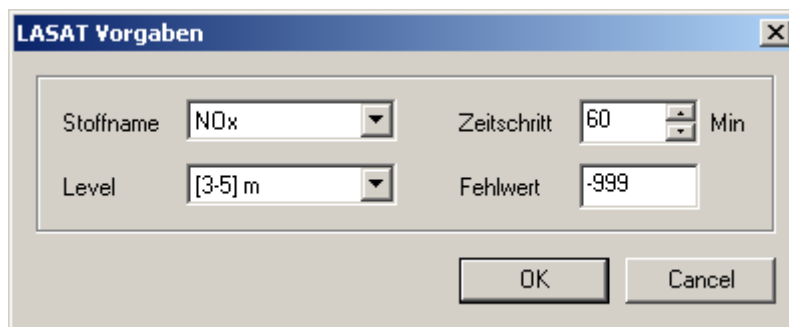


Abb. 85: Dialog LASAT Vorgaben

Koordinatentransformation: Für Daten, die im REM-CALGRID Binärformat oder im NetCDF-Format vorliegen, kann FLADIS beim Einlesen eine Koordinatentransformation von geografischen Koordinaten nach UTM durchführen. Dazu ist das entsprechende Kästchen zu aktivieren. Über die zugehörige Schaltfläche „Einstellungen“ erscheint ein Dialog, der die Vorgabe des Ausgangs- und des Zielkoordinatensystems erlaubt sowie die Angabe der zugehörigen Parameter (Abb. 86).

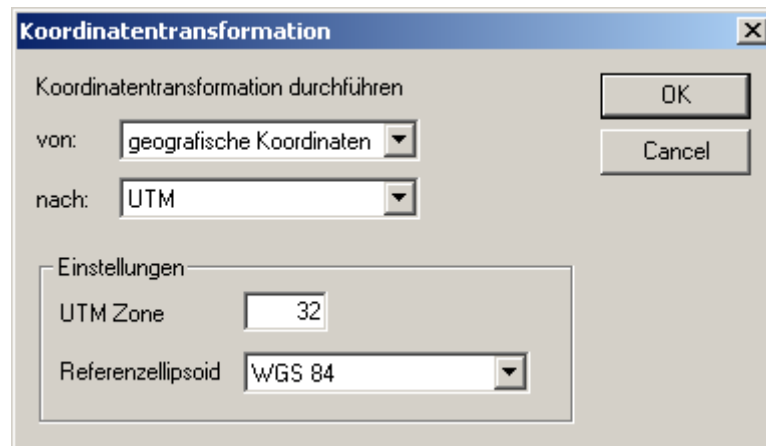


Abb. 86 Dialog Koordinatentransformation

Modellwerte umrechnen: Lineare Transformation der eingelesenen Modellwerte, z. B. für die Umrechnung der Einheit der zu untersuchenden Stoffgröße.

Modellwerte nicht eichen: Die eingelesenen Modellwerte werden nicht geeicht.

Modellwerte eichen (Faktor): Die eingelesenen Modellwerte werden durch Multiplikation mit einem Faktor so geeicht, dass die durch Interpolation gewonnenen Daten an den Orten der Messungen den selben Mittelwert aufweisen wie die gemessenen Werte.

Modellwerte eichen (Offset): Die eingelesenen Modellwerte werden durch Addition eines Offsets so geeicht, dass die durch Interpolation gewonnenen Daten an den Orten der Messungen den selben Mittelwert aufweisen wie die gemessenen Werte.

Eine Schema des Ablaufs der Verwendung von externen Modelldaten finden Sie in **Kapitel 3.3**.

10.5.4.3 Modelle: Depositionsmodell

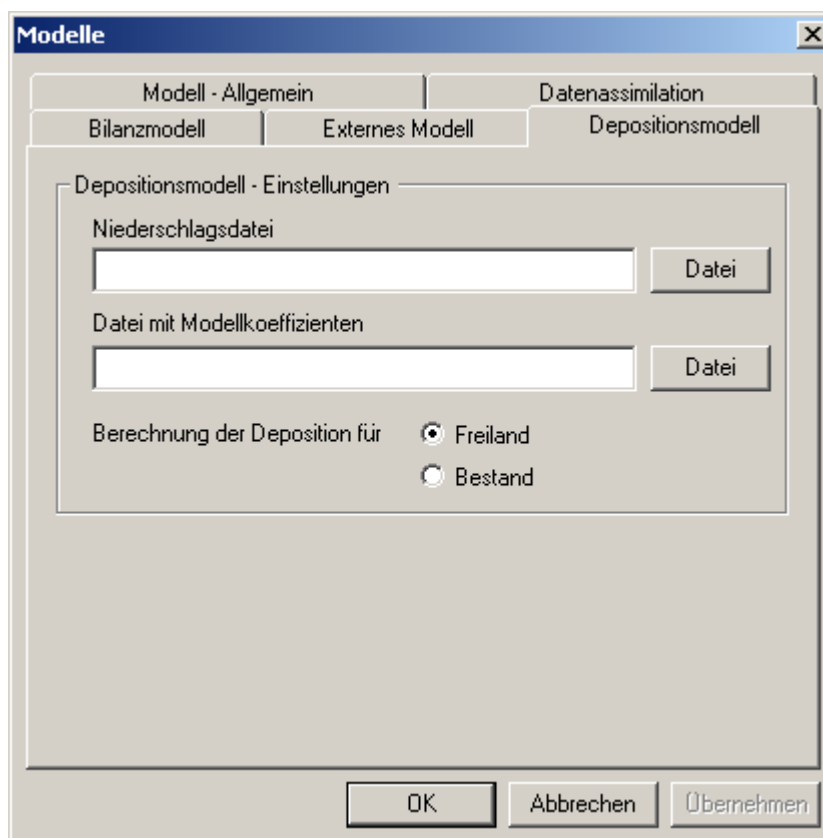


Abb. 87: Dialog Modelle - Depositionsmodell

In diesem Dialog werden die Einstellungen für das Depositionsmodell vorgenommen.

Für FLADIS wurde ein statistisches Modell für die Nitrat-Depositionen entwickelt, das es erlaubt, die Nitrat-Depositionen auch an den Stellen Hessens abzuschätzen, an denen nicht gemessen wird.

Benutzte Einflussgrößen auf die Nitrat-Depositionen sind der langjährige Niederschlag vom DWD, Niederschlagsmessungen, die z. B. im Rahmen eines Depositionsmessprogramms anfielen, sowie die Höhe der Messstationen. Weiterhin verwendet werden die rasterförmig vorhandenen lokalen NO_2 -Konzentrationen aus den FLADIS-Berechnungen für gasförmige Schadstoffe.

Das Depositionsmodell ist nicht in der Basisversion von FLADIS enthalten.

10.5.4.4 Modelle: Datenassimilation

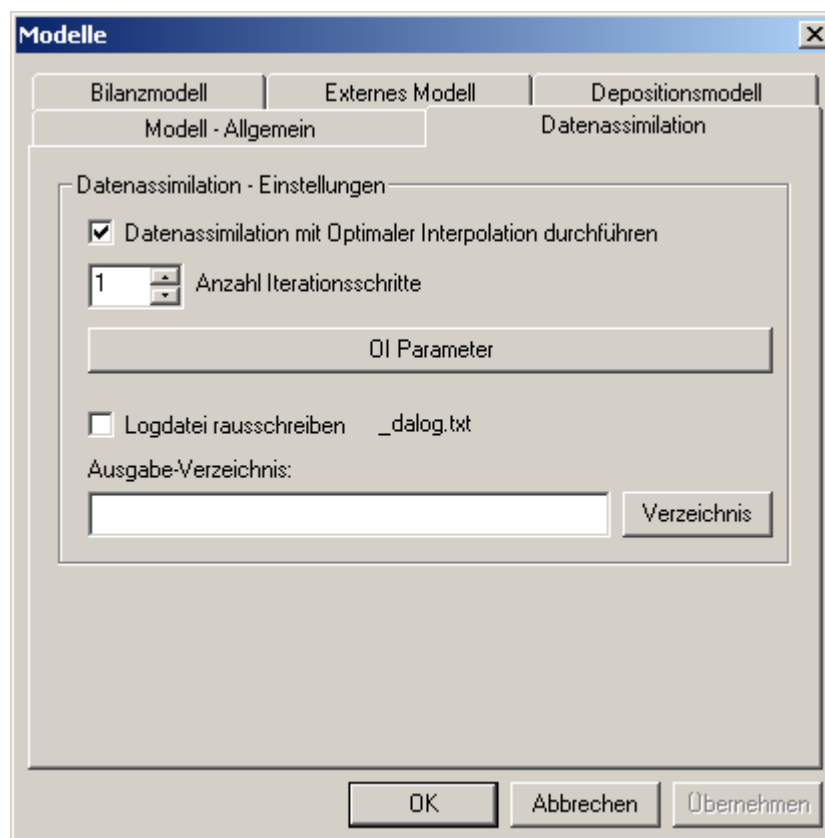


Abb. 88: Dialog Modelle – Datenassimilation

In diesem Dialog werden die Einstellungen für die Datenassimilation vorgenommen. Er ist zur Zeit nur aktiv, wenn gleichzeitig im Dialog „Modelle: Modell – Allgemein“ das externe Modell ausgewählt ist.

Bei Setzen des Häkchens wird eine Datenassimilation mit dem Verfahren der Optimalen Interpolation (OI) vorgenommen. Die Anzahl der Iterationsschritte gibt an, wie oft die OI durchgeführt werden soll. Das zur Zeit einstellbare Maximum beträgt 10 Iterationsschritte, es wird jedoch empfohlen, nur einen Iterationsschritt vorzunehmen ([Kapitel 4](#)).

Die Parameter der OI zur Datenassimilation sind hier getrennt von denen der OI zur Interpolation vorzugeben. Für eine Beschreibung der einzelnen Parameter siehe [Kapitel 10.5.3.7](#).

Die Ausgabe der OI (statistische Parameter für jeden Zeitschritt) kann in eine Log-Datei rausgeschrieben werden, für die ein Pfad einzutragen ist.

10.6 Menü Ausgabe

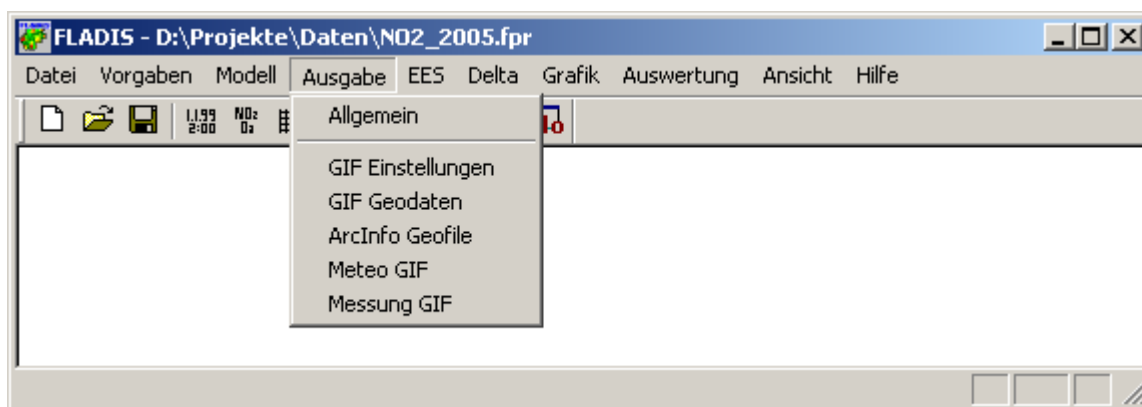


Abb. 89: Menü Ausgabe

Im Menü Ausgabe werden die Einstellungen über die zu erstellenden Ausgabedateien vorgenommen.

- | | |
|--------------------|--|
| Allgemein: | Dialog zur Auswahl der Ausgabedateien im ASCII-Format und in den GIS-Formaten. Möglichkeit zur Aktivierung des Schreibens von Log-Dateien. |
| GIF Einstellungen: | Dialog zur Spezifizierung der Ergebnisausgabe (Mittelwerte und Perzentile) als Grafik im GIF-Format. |
| GIF Geodaten: | Überlagerungen der Ergebnisse mit Geo-Informationen in der GIF-Ausgabe. |
| ArcInfo Geofile: | Aktivierung der Ausgabe einer ArcInfo-Geodatei. |
| Meteo GIF: | Aktivierung der Ausgabe von Winddaten im GIF-Format. |
| Messung GIF: | Aktivierung der Ausgabe von Messdaten im GIF-Format. |

10.6.1 Ausgabe: Allgemein

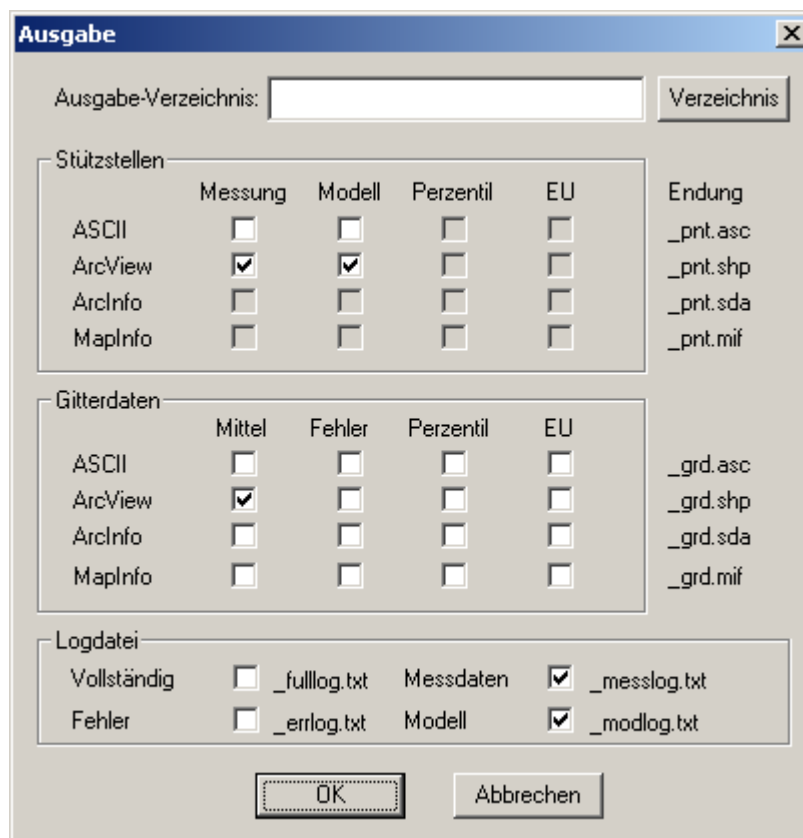


Abb. 90: Dialog Ausgabe allgemein

FLADIS kann die Ergebnisausgabe im ASCII-Format und in den Dateiformaten der geographischen Informationssysteme ArcView bzw. ArcGIS, ArcInfo und MapInfo erzeugen. In diesem Dialog wird angegeben, welche Ausgabedateien erzeugt werden sollen. Mit der Anwahl des jeweiligen Auswahlfeldes wird die Ausgabe aktiviert. Es erscheint eine entsprechende Markierung. Außerdem kann die Ausgabe von Logdateien aktiviert werden.

Alle Ausgabedateien werden in ein Ausgabe-Verzeichnis geschrieben. Der Name und der Pfad des Ausgabe-Verzeichnisses kann durch den Benutzer vorgegeben werden. Durch die Betätigung der Schaltfläche „**Verzeichnis**“ öffnet sich ein Verzeichnisauswahldialog.

Die Namen der einzelnen Ausgabedateien sind zusammengesetzt aus dem FLADIS-Projektnamen und einer Endung, wie sie im Dialog spezifiziert ist. Die Bedeutung der Ausgabedateien wird in den folgenden Kapiteln erläutert.

10.6.1.1 Stützstellen

ASCII

In der Datei mit der Endung `_pnt.asc` werden die gemittelten Daten des Rechenlaufs ausgegeben. Es werden für jede Station, für die Messdaten vorlagen, spaltenweise folgende Werte angegeben: Code der jeweiligen Station, Rechts- und Hochwert der Station, geographische Höhe, Art der Station gemäß Tabelle 1 (Beier/Doppelfeld-Verfahren) bzw. Tabelle 2 (Optimale Interpolation), Radius der Station gemäß Tabelle 1 (Beier/Doppelfeld-Verfahren, sonst nicht relevant), Anzahl der Messwerte im betrachteten Zeitraum, Mittelwert der Messwerte über den betrachteten Zeitraum und Mittelwert der von FLADIS an den Stationsorten berechneten Werte über den betrachteten Zeitraum.

Zum Abschluss wird der Mittelwert der benutzten Wichtungsfaktoren über den betrachteten Zeitraum ausgegeben. Wurden für die FLADIS-Rechnung nur Mess- und keine Modellwerte verwendet (oder lagen Mess- und Modellwerte soweit auseinander, dass zu keinem Zeitschritt eine signifikante Korrelation zwischen Messwerten und Modell festgestellt werden konnte), so ist der Mittelwert der benutzten Wichtungsfaktoren Null.

Gemittelte Daten des Rechenlaufs								
Code	x	y	Höhe	Art	Radius	Anz.	Mess	Modell
0101	2593500	5718500	60	U	10000	7791	36.24	32.97
0102	2592200	5724000	80	U	10000	6612	28.25	28.62
0104	2601200	5712400	75	I	2000	6466	32.11	33.09
0150	2604200	5707600	110	I	2000	7518	30.61	30.90
0402	2594500	5702000	105	U	10000	7076	30.60	29.71
0601	2567800	5710600	40	I	2000	7491	35.14	34.76
0605	2567300	5697300	153	U	10000	7533	33.78	31.23
0606	2568200	5707400	47	I	2000	7219	35.98	35.26
0609	2576600	5711600	40	U	10000	7754	34.71	33.94
0610	2584100	5697300	93	U	10000	7318	27.58	27.61
0650	2585000	5711100	70	U	10000	7399	31.33	31.85
0675	2578200	5718900	102	U	10000	7057	29.46	30.52
0850	2577700	5730000	42	U	10000	6802	29.66	28.58
1001	2553200	5694800	30	U	10000	7663	33.44	33.80
...								
...								
Mittelwert der benutzten Wichtungsfaktoren: 0.646588								

Abb. 91: Beispiel für ASCII-Ausgabe `dateiname_pnt.asc`

ArcView

In der Datei mit der Endung `_pnt.shp` werden die für die ASCII-Ausgabe `_pnt.asc` beschriebenen Daten als Punkt-Shape für ArcView / ArcGIS ausgegeben.

10.6.1.2 Gitterdaten

FLADIS erzeugt auf Anforderung ein Grid im angegebenen Format. Es werden die Koordinaten der Gitterpunkte und die zugehörigen berechneten Werte ausgegeben:

- **Mittelwert:** Ist diese Option aktiviert, werden in einer Spalte die über den betrachteten Zeitraum gemittelten Werte für alle Gitterzellen ausgegeben.
- **Fehler:** Ist diese Option aktiviert, werden in einer Spalte die Fehler ausgegeben.
- **Perzentil:** Ist diese Option aktiviert, werden in einer Spalte die Perzentilwerte ausgegeben. Die Vorgaben für die Perzentilwertberechnung können im Dialog "Perzentilwertberechnung" ([Kapitel 10.4.6](#)) eingestellt werden.
- **EU:** Ist diese Option aktiviert, werden in acht Spalten (EU1 bis EU8) statistische Kenngrößen entsprechend der EU-Richtlinie ausgegeben. Die Vorgaben für die Auswertung entsprechend der EU-Richtlinie können im Dialog "EU-Grenzwerte" ([Kapitel 10.4.7](#)) eingestellt werden.

Die folgende Abbildung zeigt beispielhaft eine ASCII-Ausgabedatei für Gitterdaten mit den Spalten Rechtswert, Hochwert und Mittelwert.

RW	HW	IM	
3484980.000000	5472980.000000	5.612227	
3485980.000000	5472980.000000	5.578169	
3486980.000000	5472980.000000	5.544798	
3487980.000000	5472980.000000	5.512289	
3488980.000000	5472980.000000	5.480794	
3489980.000000	5472980.000000	5.450676	
3490980.000000	5472980.000000	5.422074	
3491980.000000	5472980.000000	5.396393	
3484980.000000	5473980.000000	5.612384	
3485980.000000	5473980.000000	5.576571	
3486980.000000	5473980.000000	5.541591	
3487980.000000	5473980.000000	5.507617	
3488980.000000	5473980.000000	5.474803	
3489980.000000	5473980.000000	5.443296	
3490980.000000	5473980.000000	5.413479	
3491980.000000	5473980.000000	5.386558	
3484980.000000	5474980.000000	5.610005	
3485980.000000	5474980.000000	5.572401	
3486980.000000	5474980.000000	5.535780	
...			
...			

Abb. 92: Beispiel für ASCII-Ausgabe *dateiname_grd.asc*

10.6.1.3 Logdatei

FLADIS schreibt verschiedene Log-Dateien. Mit der Anwahl eines Auswahlfeldes wird die Ausgabe der jeweiligen Log-Dateien aktiviert. Es erscheint eine entsprechende Markierung.

Die Datei *_errlog.txt enthält die Fehlermeldungen, die während eines FLADIS-Rechenlaufs auftreten können. Die Datei *_fulllog.txt enthält die FLADIS-Statusmeldungen. Eine Datei *_messlog.txt ist beispielhaft in Abb. 93 dargestellt. Sie gibt Start- und Endzeitpunkt der FLADIS-Rechnung an sowie den Namen der Datei und den Messcode des untersuchten Schadstoffs. Darauf folgend werden für jeden berechneten Zeitschritt spaltenweise Informationen zu den Messwerten ausgegeben. Die erste Spalte gibt den Zeitschritt im Jahr an, die zweite das Datum, die dritte die Uhrzeit, die vierte die Anzahl der Messwerte für diesen Zeitschritt, die fünfte den Mittelwert aller Messwerte für diesen Zeitschritt, und die letzten beiden Spalten geben, wenn vorhanden, die mittlere Windrichtung und –geschwindigkeit an, sonst den Wert „-1.00“.

Start der Berechnung um Tue Jun 13 16:06:58 AM							
Datei: D:\fladis\results\no2_tri_messlog.txt Messcode (Index): 0							
TS	Datum	Zeit	#	Mess.	Windr.	Windg.	
1	01.01.2002	01:00	36	38.72	-1.00	-1.00	
2	01.01.2002	02:00	36	35.28	-1.00	-1.00	
3	01.01.2002	03:00	37	30.70	-1.00	-1.00	
4	01.01.2002	04:00	39	28.19	-1.00	-1.00	
5	01.01.2002	05:00	36	28.49	-1.00	-1.00	
6	01.01.2002	06:00	36	28.31	-1.00	-1.00	
...							
...							
8757	31.12.2002	21:00	28	17.71	-1.00	-1.00	
8758	31.12.2002	22:00	29	18.67	-1.00	-1.00	
8759	31.12.2002	23:00	30	17.60	-1.00	-1.00	
8760	01.01.2003	00:00	31	18.31	-1.00	-1.00	
Ende der Berechnung um Tue Jun 13 17:40:03 AM							

Abb. 93: Beispiel für Ausgabe *dateiname_messlog.txt*

Abb. 94 zeigt beispielhaft eine Datei *_modlog.txt. Auch hier wird noch einmal der Messcode des untersuchten Schadstoffs angegeben, danach für jeden berechneten Zeitschritt spaltenweise Informationen zu der Modellrechnung. Die erste Spalte gibt den Zeitschritt im Jahr an, die zweite das Datum, die dritte die Uhrzeit, die vierte die Anzahl der Messwerte für diesen Zeitschritt, die fünfte die Durchmischungshöhe (nur wichtig für Bilanzmodell), die sechste den Wichtungsfaktor, der den Anteil von Mess- und Modelldaten an der Darstellung angibt, die siebte den Kalibrierungsfaktor zur Eichung der Modellwerte (nur bei Bilanzmodell, siehe [Kapitel 10.5.4.1](#)), und die letzte den Modelltyp gemäß [Kapitel 10.5.4](#).

Messcode (Index): 0							
TS	Datum	Uhr	#	Du.h.	Wicht.	Kal-Fakt.	Modelltyp
1	01.01.2002	01:00	36	100	0.83	0.00	3
2	01.01.2002	02:00	36	100	0.78	0.00	3
3	01.01.2002	03:00	37	100	0.68	0.00	3
4	01.01.2002	04:00	39	100	0.73	0.00	3
5	01.01.2002	05:00	36	100	0.48	0.00	3
6	01.01.2002	06:00	36	100	0.74	0.00	3
...							
...							
8757	31.12.2002	21:00	28	100	0.63	0.00	3
8758	31.12.2002	22:00	29	100	0.90	0.00	3
8759	31.12.2002	23:00	30	100	0.93	0.00	3
8760	01.01.2003	00:00	31	100	0.94	0.00	3

Abb. 94: Beispiel für Ausgabe dateiname_modlog.txt

10.6.2 Ausgabe: GIF – Einstellungen

Über diesen Dialog werden die Parameter für die Erzeugung von GIF-Bildern angegeben. Die Erzeugung von GIF-Bildern kann sowohl für die berechneten Mittelwerte (Standard) als auch für die berechneten Perzentilwerte erfolgen.

10.6.2.1 GIF Einstellungen: Mittelwerte

Für die Einstellungen zur Erzeugung von GIF-Bildern sind zwei verschiedene Dialoge in FLADIS implementiert, ein Standard-Dialog und ein erweiterter Dialog. Der erweiterte Dialog ist nicht Bestandteil der FLADIS Basisversion.

Standard-Dialog

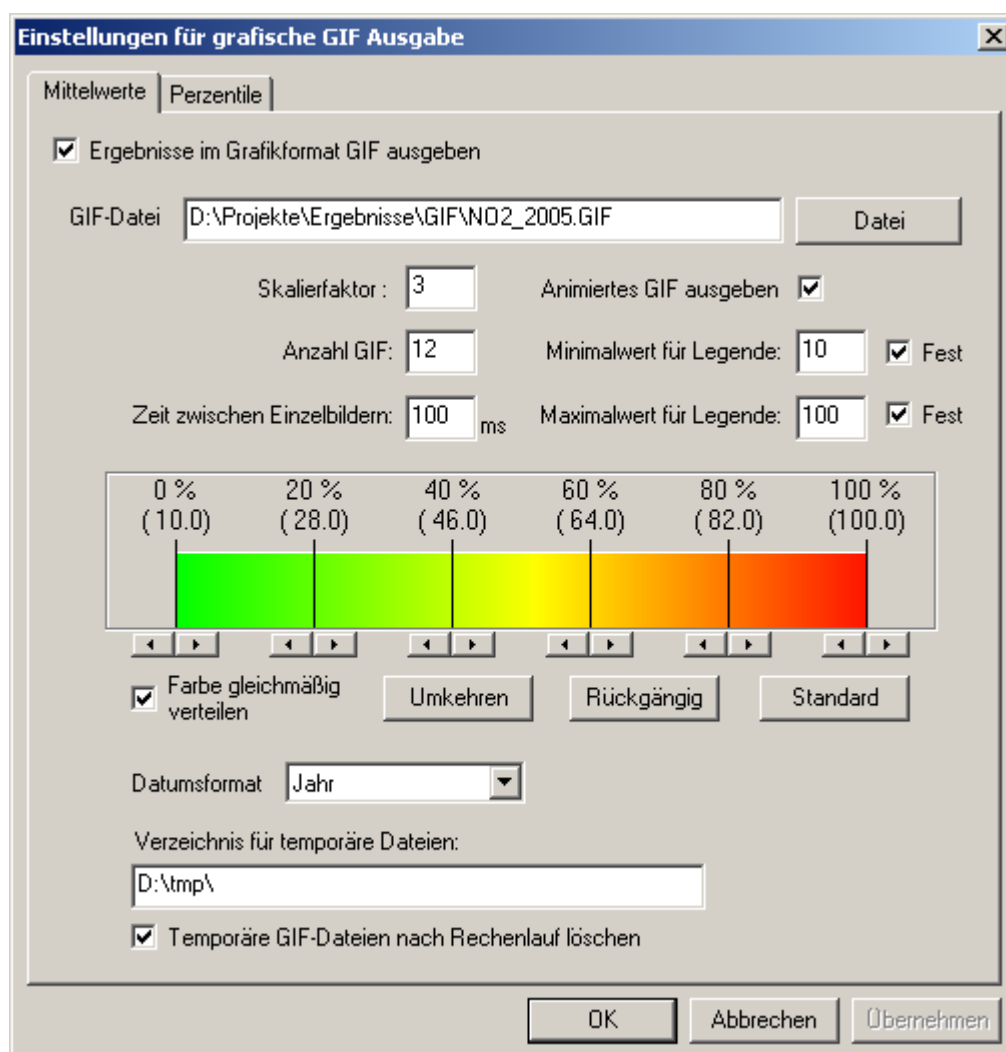


Abb. 95: Dialog Einstellungen für grafische GIF-Ausgabe – Mittelwerte (Standard)

Über diesen Dialog werden die Parameter für die Erzeugung von GIF-Bildern angegeben. Die Erzeugung wird mittels der Schaltfläche **„Ergebnisse im Grafikformat GIF ausgeben“** angeschaltet. Der Pfad und der Name der **„GIF-Datei“** wird im entsprechenden Feld eingegeben. Mit der Angabe eines ganzzahligen Wertes im Feld **„Skalierfaktor“** kann angegeben werden, wie viel Bildpixel einen Gitterpunkt des Interpolationsgrids repräsentieren.

Mit der **„Anzahl GIF“** wird eingestellt, in wie vielen Einzelbildern der ausgewählte Zeitraum dargestellt werden soll. Dabei darf die Anzahl der GIF nicht größer als die Anzahl der berechneten Zeitschritte sein. Bei nicht animierten Bildern werden entsprechend der eingegebenen Anzahl GIF-Dateien erzeugt. Dabei werden die Dateien fortlaufend nummeriert.

Wird das Feld **„Animiertes GIF ausgeben“** aktiviert, wird eine einzige Datei im sogenannten „Animated-GIF-Format“ erzeugt. In dieser Datei wird der ausgewählte Zeitraum in „Anzahl GIF“ Einzelbilder zerlegt, die in einer Art Film dargestellt werden, der z. B. mit einem Internet-Browser betrachtbar ist. Die Zeitdauer für die Darstellung eines Zeitschritts wird im Feld **„Zeit zwischen Einzelbildern“** angegeben.

Die Einstellungen zur Bildlegende erfolgen über die Felder **„Minimalwert für Legende“** und **„Maximalwert für Legende“**. Hier kann das Minimum bzw. Maximum des betrachteten Zeitraums angegeben werden. Wird ein Häkchen im Feld **„Fest“** hinter den Minimal- oder Maximalwert gesetzt, so wird der jeweilige Wert in der Darstellung auf jeden Fall eingehalten. Wird nur z. B. ein Maximalwert vorgegeben, ohne dass das Häkchen **„Fest“** gesetzt wird, so versteht sich der vorgegebene Wert als Minimum für den Maximalwert. Ist das tatsächliche Maximum im darzustellenden Feld kleiner, so ist der Maximalwert gleich dem vorgegebenen Wert. Ist das tatsächliche Maximum hingegen größer, so ist der Maximalwert gleich dem tatsächlichen Maximum. Die Legende wird als eigene Datei erzeugt und erhält den gleichen Dateinamen wie die GIF-Datei mit dem Zusatz **„_leg“**.

Neben den Parametern für die GIF-Erzeugung kann eine individuell vorgegebene Farbwertzuordnung eingestellt werden. Die Schaltfläche **„Umkehren“** kehrt die Farbverteilung um. Die Schaltfläche **„Undo“** stellt die Farbverteilung auf den Ausgangszustand zurück. Die Schaltfläche **„Standard“** stellt die Farbverteilung auf den Zustand ein, wie in der Datei **„Farbpalette“** angegeben. Mit der Aktivierung des Dialogelements **„Farbe gleichmäßig verteilen“** erfolgt die Farbverschiebung über das gesamte Datenspektrum (0 % - 100 %). Bei Deaktivierung dieses Elements erfolgt die Farbverschiebung nur im jeweiligen Intervall.

Mit dem Dropdown-Menü **„Datumsformat“** kann ausgewählt werden, in welchem Format das Datum in der Fußzeile der GIF-Ausgabe dargestellt wird. Bei **„kein Datum“** wird die Fläche in der Hintergrundfarbe aufgefüllt. **„Jahr“** zeigt nur das Bezugsjahr der für die FLADIS-Rechnung verwendeten Daten an und empfiehlt sich z. B. für die Darstellung von Jahresmittelwerten. **„Datum“** zeigt das Datum im Format DD.MM.YYYY an und **„Datum + Uhrzeit“** Datum und Uhrzeit in der Form DD.MM.YYYY HH:MM.

Die Erzeugung der GIF-Bilder geschieht erst am Ende eines Rechenlaufs. Deshalb werden die Informationen für die Erzeugung in temporären Dateien gespeichert. Dafür muss ein „**Verzeichnis für temporäre Dateien**“ angegeben werden, das existieren muss. Über die Schaltfläche „**Temporäre GIF-Dateien ...**“ kann angegeben werden, dass diese temporären Dateien nach dem Rechenlauf gelöscht werden.

Erweiterter Dialog

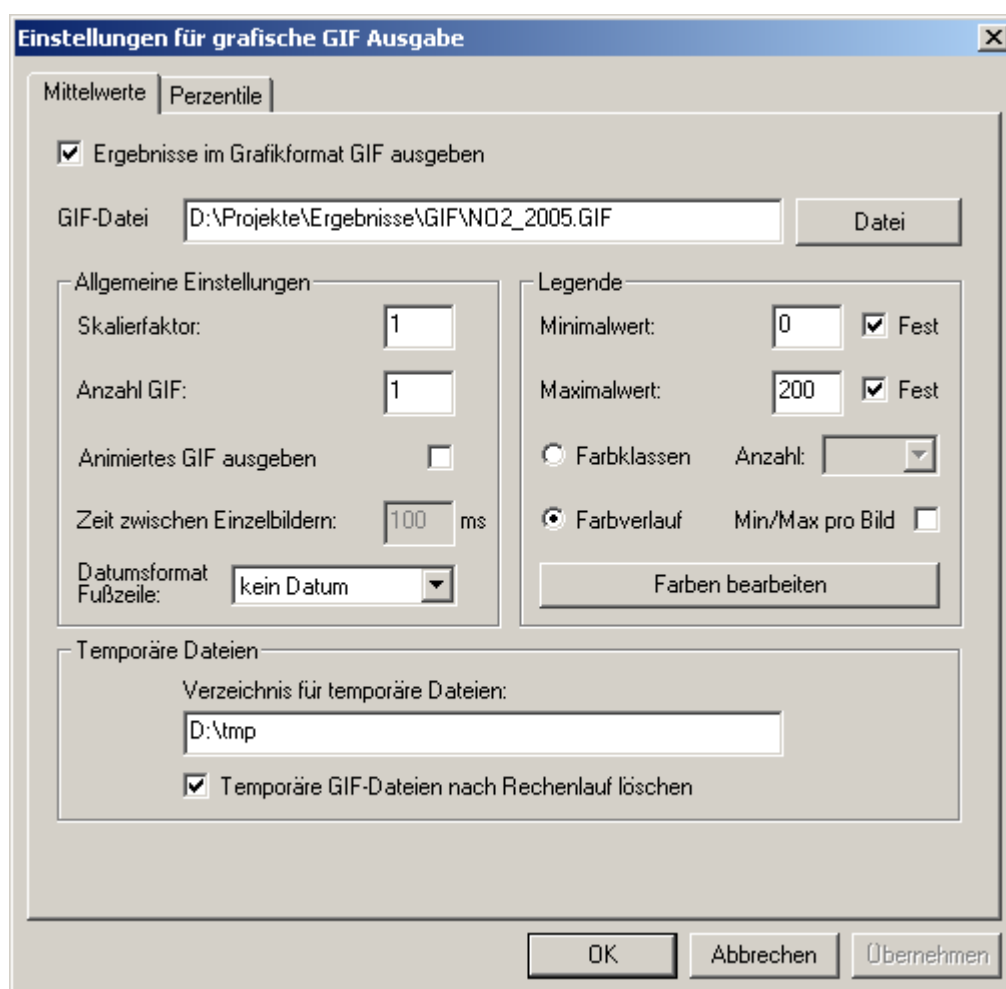


Abb. 96: Dialog Einstellungen für grafische GIF-Ausgabe – Mittelwerte (Erweitert)

Der erweiterte Dialog für die Einstellungen der grafischen GIF-Ausgabe der mit FLADIS berechneten Mittelwert enthält im Wesentlichen alle Merkmale des Standard-Dialogs. Für die Beschreibung der einzelnen Felder wird daher auf die Beschreibung des Standard-Dialogs verwiesen. Die Funktion zur Ausgabe animierter GIFs ist hier deaktiviert.

Im Unterschied zum Standard-Dialog kann im erweiterten Dialog die Darstellungsmethodik ausgewählt werden. Neben der aus dem Standard-Dialog bekannten **Farbver-**

lauf-Darstellung können auch **Farbklassen** verwendet werden. Die **Anzahl** der Farbklassen kann vorgegeben werden. Über die Schaltfläche „**Farben bearbeiten**“ lässt sich ein Dialog öffnen, in dem die einzelnen Farben und Klassengrenzen bearbeitet werden können (Abb. 97).

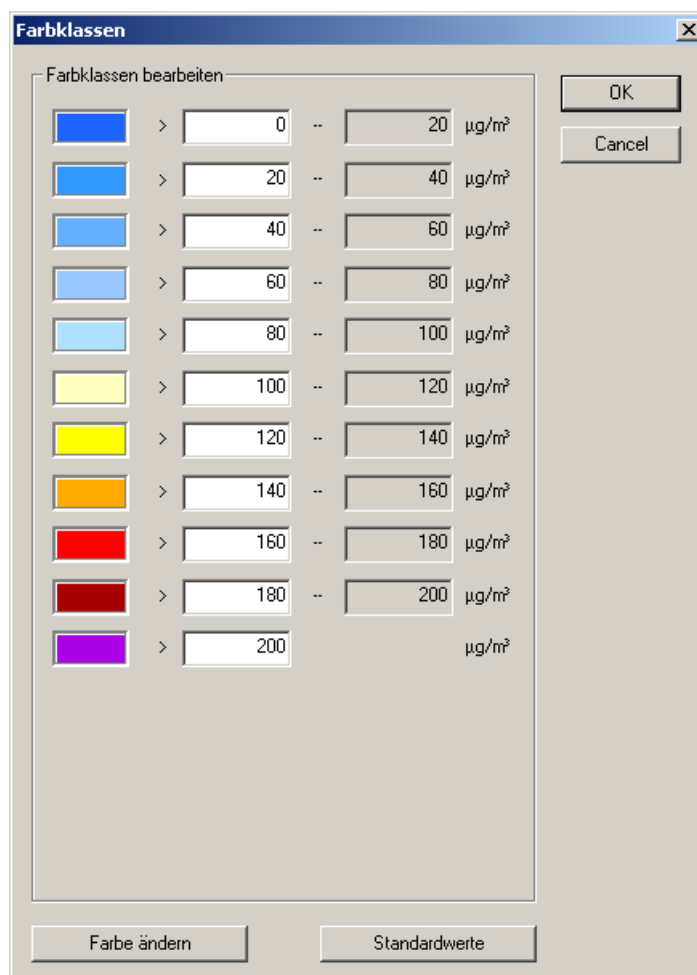


Abb. 97: Dialog Farbklassen

Wird der Dialog geöffnet, so werden die Farben der Klassen mit Hilfe der geladenen Farbpalette ([Kapitel 10.4.1.4](#)) initialisiert. Ist keine Farbpalette angegeben, erscheint eine Warnung. Jede Farbe kann einzeln geändert werden, entweder durch einen Doppelklick auf das Farbfeld oder durch einfaches Anwählen des Farbfeldes und die Schaltfläche „Farbe ändern“. Die Klassengrenzen werden von Hand in die editierbaren Felder eingegeben, die Einheit ändert sich in Abhängigkeit vom betrachteten Schadstoff.

Wird als Darstellungsmethodik der Farbverlauf gewählt, dann wird durch Aktivierung des Feldes „**Min/Max pro Bild**“ erreicht, dass sich der Wertebereich, über den die Farbskala verläuft, für jedes innerhalb des Rechenlaufes erzeugte GIF-Bild an das jeweilige Minimum und Maximum anpasst. Wird das Feld nicht aktiviert, gilt die für den Standard-Dialog beschriebene Logik der Felder „**Minimalwert für Legende**“ und

„**Maximalwert für Legende**“ in Kombination mit dem Feld „**Fest**“. Über die Schaltfläche „**Farben bearbeiten**“ lässt sich ein Dialog öffnen, in dem der Farbverlauf bearbeitet werden kann (Abb. 98).

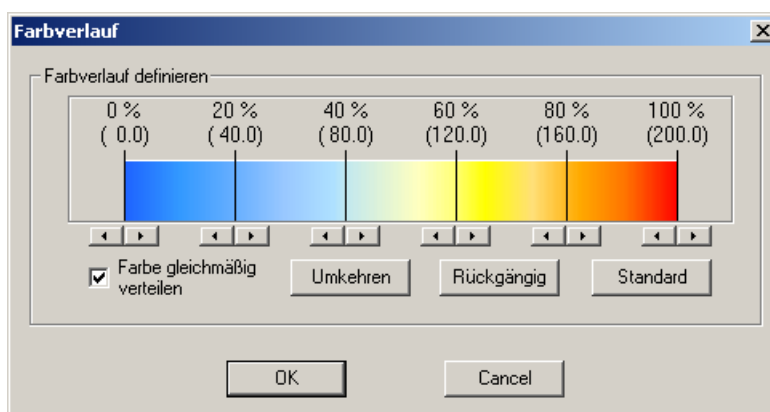


Abb. 98: Dialog Farbverlauf

Der Farbverlauf wird in der geladenen Farbpalette definiert ([Kapitel 10.4.1.4](#)). Die Schaltfläche „**Umkehren**“ kehrt die Farbverteilung um. Die Schaltfläche „**Undo**“ stellt die Farbverteilung auf den Ausgangszustand zurück. Die Schaltfläche „**Standard**“ stellt die Farbverteilung auf den Zustand ein, wie in der Datei „Farbpalette“ angegeben. Mit der Aktivierung des Dialogelements „**Farbe gleichmäßig verteilen**“ erfolgt die Farbverschiebung über das gesamte Datenspektrum (0 % - 100 %). Bei Deaktivierung dieses Elements erfolgt die Farbverschiebung nur im jeweiligen Intervall.

10.6.2.2 GIF Einstellungen: Perzentile

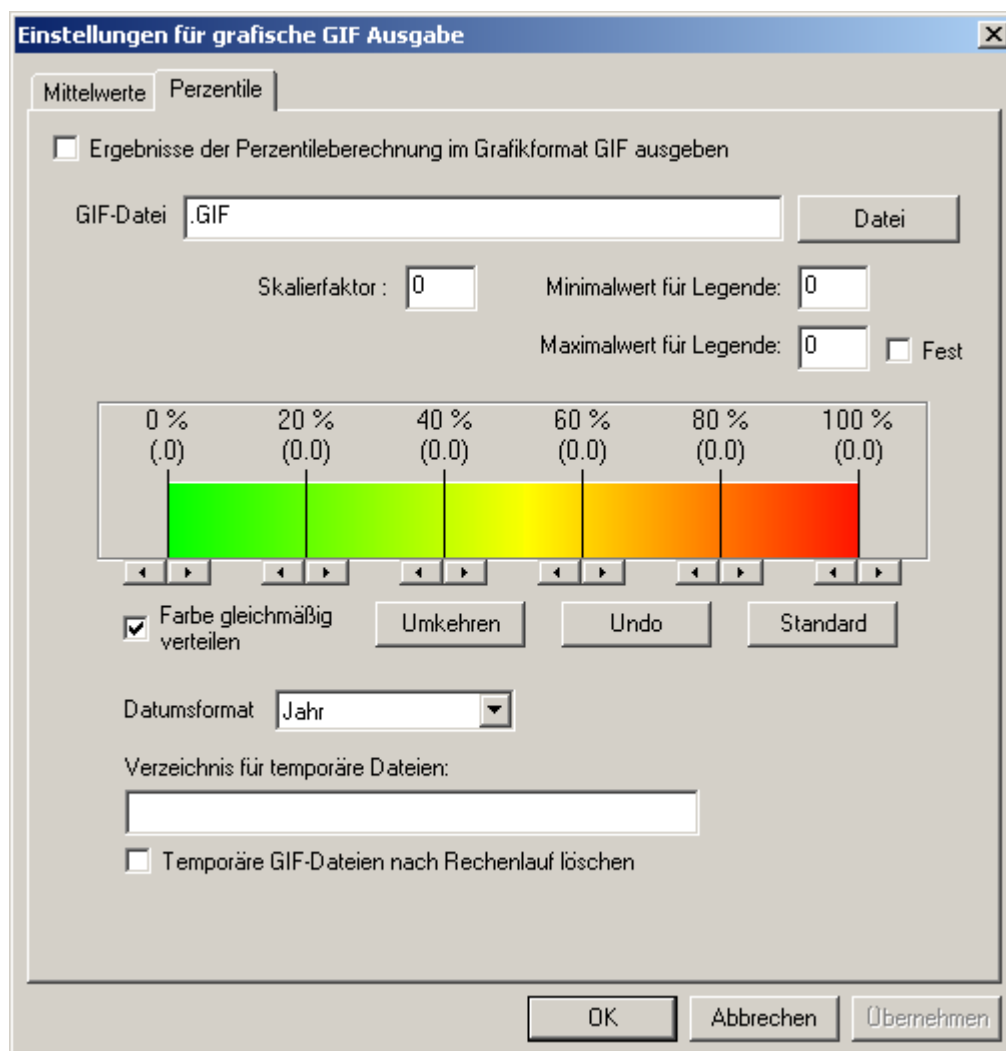


Abb. 99: Dialog GIF: Perzentil

Die Erzeugung von GIF-Bildern für die berechneten Perzentilwerte erfolgt analog zu den berechneten Mittelwerten. Eine Ausgabe von mehreren Bildern oder einem animierten GIF ist nicht möglich.

10.6.3 Ausgabe: GIF Geodaten Überlagerung

Mit Hilfe dieses Menübefehls können Einstellungen vorgenommen werden, um in den GIF-Bildern zusätzliche geografische Daten (z.B. Grenzen, Flüsse, Städte) darzustellen. Es öffnet sich der Dialog "Geodaten in Darstellung".

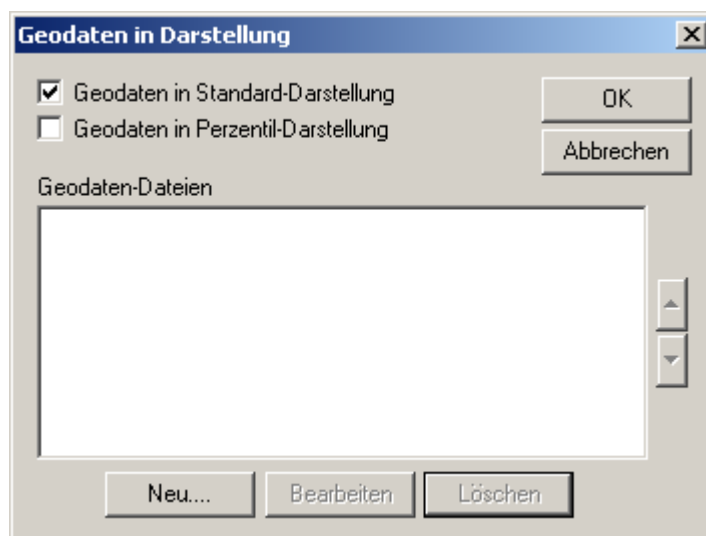


Abb. 100: Dialog Geodaten im GIF

Dieser Dialog zeigt im Feld "Geodaten-Dateien" an, welche zusätzlichen Geodaten in die GIF-Bilder integriert werden können. Über die Auswahl "Geodaten in Standard-Darstellung" werden diese Daten im Standard-GIF (Mittelwerte) dargestellt. Dabei ist darauf zu achten, dass bei den Einstellungen für die einzelnen Geodaten angegeben werden kann, ob die Bilder im Standard-GIF dargestellt werden sollen oder nicht. Analoges gilt für die Einstellung "Geodaten in Perzentil-Darstellung".

Markiert man eine einzelne Zeile, sind alle Schaltflächen aktiv. Über die rechts liegenden Pfeiltasten kann die Reihenfolge in der Liste verändert werden. FLADIS fügt die Geodaten in der Reihenfolge dem Bild hinzu, wie sie in der Liste stehen. Über die Schaltfläche "Löschen" wird die Datei aus der Liste entfernt. Über den Befehl "Neu" können zusätzliche Geodaten hinzugefügt werden. Es öffnet sich der Dialog „Einstellungen für Geodaten-Datei“. Dieser Dialog wird ebenfalls geöffnet, wenn die Schaltfläche "Bearbeiten" betätigt wird.

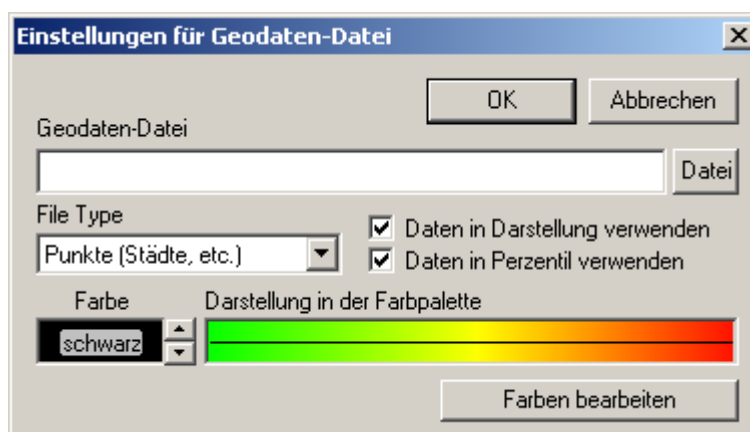


Abb. 101: Dialog Einstellungen für Geodaten-Datei

Im Dialog "Einstellungen für Geodaten-Datei" kann über die Schaltfläche "Datei" der Pfad zu einer Geodaten-Datei angegeben werden. Über die Auswahl "Polylinie" oder "Punkte" wird angegeben, um welche Art der Geodaten es sich handelt.

Mit den Schaltflächen "Daten in Darstellung verwenden" und "Daten in Perzentil verwenden" kann für jede Geodaten-Datei angegeben werden, in welcher GIF-Ausgabe (Mittelwertdarstellung oder Perzentildarstellung) die Daten gezeichnet werden sollen.

Über die Pfeiltasten im Bereich "Farbe" kann die Farbe vorgegeben werden, in der die Geodaten gezeichnet werden sollen. Dabei kann eine von 10 Farben sowie Schwarz oder Weiß ausgewählt werden. Über die rechtsstehende „Darstellung in der Farbpalette“ erhält man einen Eindruck, wie diese Farbe vor der ausgewählten Farbpalette aussieht.

Mittels der Schaltfläche "Farben bearbeiten" können die 10 für die Geodaten zur Verfügung stehenden Farben bearbeitet werden. Diese 10 Farben werden in FLADIS am Ende der Farbpalette abgelegt. Schwarz und Weiß werden am Anfang definiert. Demnach stehen für die Farbpalette selbst nur noch 243 Farben zur Verfügung (**Kapitel 10.4.1.4**).

10.6.4 Ausgabe: ArcInfo GeoFile

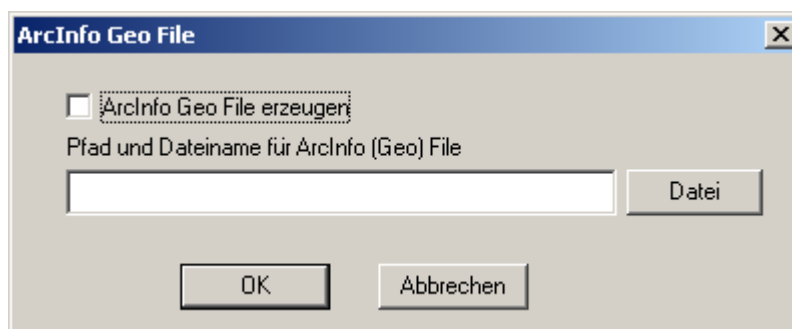


Abb. 102: Dialog GIS: ArcInfo

Für ArcInfo können die geographischen Informationen in die Geo-Datei geschrieben werden, die über den „GENERATE“-Befehl in ArcInfo eingelesen wird. Über den oben dargestellten Dialog wird vorgegeben, ob diese Datei erzeugt werden soll.

10.6.5 Ausgabe: GIF mit Darstellung der Meteorologie

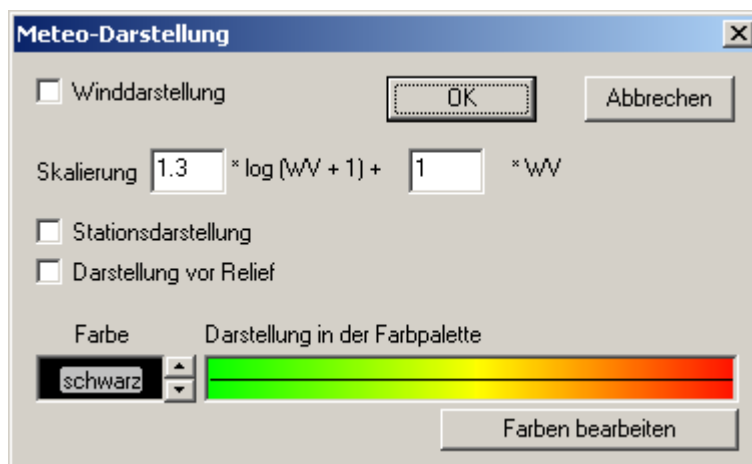


Abb. 103: Dialog Meteo-Darstellung

Winddarstellung	Aktiviert die Darstellung des Windfeldes in der GIF-Ausgabe.
Skalierung	Bestimmt die Skalierung der Windpfeile (WV = Windgeschwindigkeit).
Stationsdarstellung	Die Stationen werden in der Grafik dargestellt.
Darstellung vor Relief	Die Reliefdarstellung des Höhenmodells bildet den Hintergrund der Grafik.
Farbe	Definiert die Farbe der Pfeile. Zur Information ist nebenstehend die verwendete Farbpalette dargestellt.

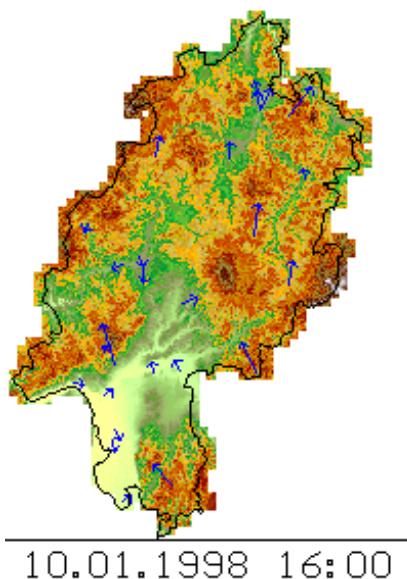


Abb. 104: Beispiel einer Meteo-Darstellung vor Höhenrelief

10.6.6 Ausgabe: GIF mit Darstellung der Messwerte



Abb. 105: Dialog Darstellung der Messwerte im GIF

Darstellung der Messwerte Aktiviert die Darstellung der Messwerte in der GIF-Ausgabe.

Farbige Kreise Die Stationen werden als farbige Kreise dargestellt. Für die Klassifizierung der Messwerte wird die Einstellung der GIF-Legende verwendet. Die Größe der farbigen Kreise kann angegeben werden, und es kann vorgegeben werden, ob eine Konturlinie um die Stationskreise

gezeichnet werden soll. Die Konturlinie erhält die in der Schaltfläche „Farbe“ definierte Farbe.

Skalierte Kreise

Die Station wird als Kreis dargestellt. Die Größe des Kreises entspricht dabei dem Messwert.

Farbe

Definiert die Farbe der Stationen für skalierte Kreise bzw. der Konturlinie für farbige Kreise. Zur Information ist nebenstehend die verwendete Farbpalette dargestellt.

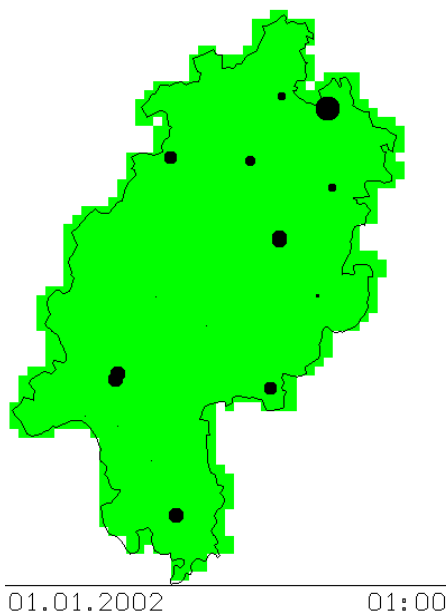


Abb. 106: Beispiel für eine Messwertdarstellung, skalierte Kreise

10.7 Menü EES



Abb. 107: Menü EES

Im Menü EES werden die Einstellungen zur Aufbau der Einheitlichen Emissions-schnittstelle und die Angaben zu den zu erstellenden Ausgabedateien vorgenommen.

Einstellung: Der Dialog "Einstellungen für Einheitliche Emissions-Schnittstelle" wird aufgerufen.

Ausgabe: Der Dialog "Ausgabe für Einheitliche Emissions-Schnittstelle" wird aufgerufen.

EES starten: Dieser Menüpunkt steht zur Verfügung, wenn im Dialog "Einstellungen für Einheitliche Emissions-Schnittstelle" der Punkt "EES aufbauen" aktiviert ist. Der Menüpunkt "FLADIS starten" ist dann deaktiviert.

10.7.1 Einstellungen EES

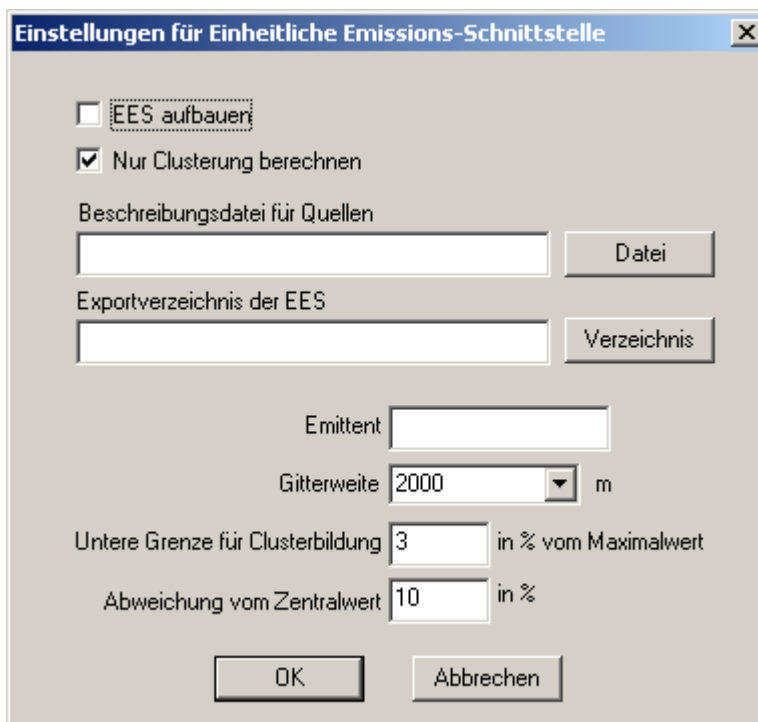


Abb. 108: Dialog Einstellungen EES

In diesem Dialog können Einstellungen zur Einheitlichen Emissionsschnittstelle (**Kapitel 7**) vorgenommen werden.

Der Aufbau der EES muss für jeden Emittenten getrennt erfolgen.

Über das Auswahlfeld „**Nur Clusterung berechnen**“ kann die optimale Einstellung der Clusterung gesucht werden, ohne dass die EES-Dateien erzeugt werden. Die Information über die erstellte Clusterung wird in einem eigenen Dialog ausgegeben (als Beispiel siehe Abb. 109) Die Anzahl der gebildeten Cluster bestimmt die Rechenzeit bei der Anwendung des Bilanzierungsmodells, da jeder Cluster als Quellterm in die Ausbreitungsrechnung eingeht.

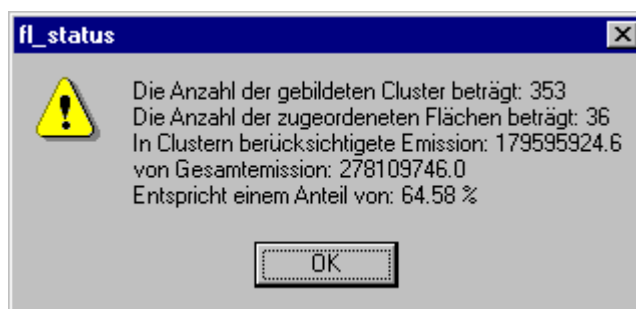


Abb. 109: Information zur Clusterung

Im Feld „**Beschreibungsdatei für Quellen**“ wird die entsprechende Datei eingetragen, die die verwendeten Emissionskatasterdaten (EKA-Daten) beschreibt. Im Feld „**Exportverzeichnis der EES**“ wird das Verzeichnis angegeben, in das die zeitaufgelösten Cluster geschrieben werden. Das Verzeichnis muss existieren. Dieses Verzeichnis entspricht demjenigen, welches unter dem Menüpunkt „**Umgebung – Dateistruktur**“ angegeben werden muss. Im Auswahlfeld „**Emittent**“ wird eingestellt, welcher Schadstoff aus den EKA-Daten ausgelesen werden soll. Im Feld „**Gitterweite**“ wird die Auflösung des summierten EKA ausgewählt. Die beiden folgenden Eingabefelder „**Untere Grenze ...**“ und „**Abweichung vom Zentralwert**“ sind Parameter für die Erzeugung der Clusterung (zur Bedeutung dieser Werte siehe [Kapitel 7](#)).

10.7.2 EES: Ausgabe

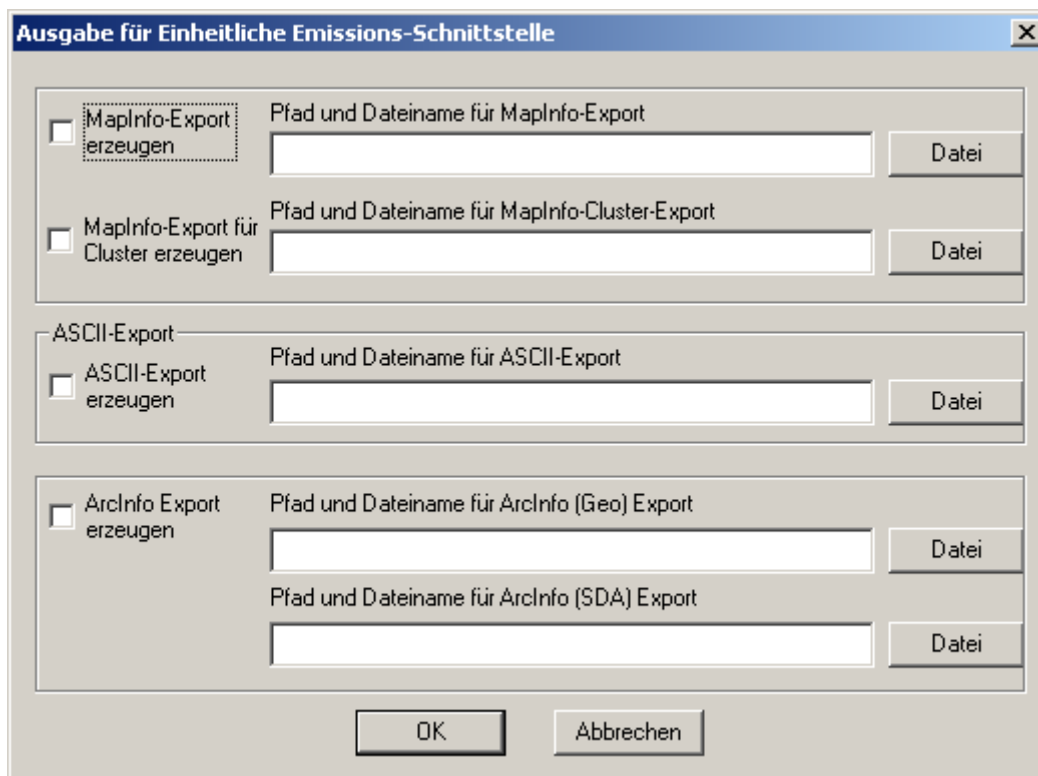


Abb. 110: Dialog EES-Ausgabe

Über den Dialog „**Ausgabe für Einheitliche Emissionsschnittstelle**“ kann der Export im ASCII-Format und für MapInfo bzw. ArcInfo eingestellt werden. Die ausgegebenen Daten stellen das summierte Emissionskataster in der eingestellten Auflösung dar. Mittels dieser Ausgabefunktion können somit Emissionskataster von verschiedenen Quellgruppen in unterschiedlicher geometrischer Form (Linie, Punkt, Fläche) in einem Kataster zusammengefasst werden.

10.8 Menü Delta



Abb. 111: Menü Delta

Im Menü Delta werden die Einstellungen zur Delta-Methode ([Kapitel 5](#)) vorgenommen.

Allgemein: Der Dialog "DeltaMethode - Allgemein" wird aufgerufen.

Basisjahr: Der Dialog "DeltaMethode - Basisjahr" wird aufgerufen.

Prognosejahr: Der Dialog "DeltaMethode - Prognosejahr" wird aufgerufen.

Die Delta-Methode ist nicht in der FLADIS Basisversion enthalten.

10.8.1 Allgemein

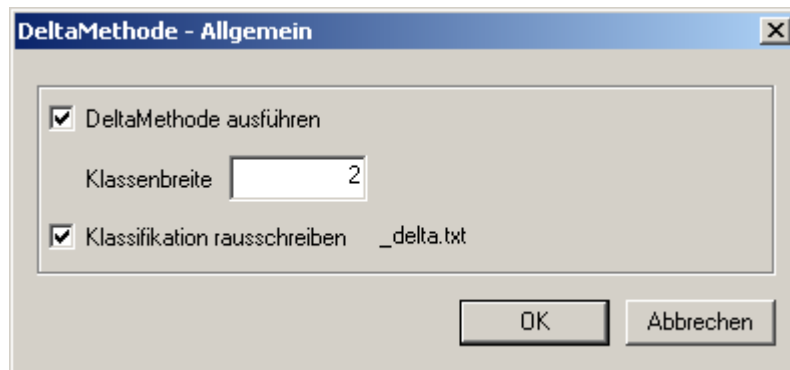


Abb. 112: Dialog Delta-Methode Allgemein

In diesem Dialog werden die allgemeinen Einstellungen für die Delta-Methode vorgenommen.

DeltaMethode ausführen: Durch Setzen des Häkchens wird die Delta-Methode ausgeführt.

Klassenbreite: Die Klassenbreite für die Bildung der klassifizierte Häufigkeitsverteilung des Basislaufs (**Kapitel 5**) ist in der Einheit der Konzentrationswerte des Basislaufs anzugeben.

Klassifikation rausschreiben: Schreibt die Klassenmittelwerte und die jeweils zugehörige mittlere Änderung der klassifizierten Konzentrationen (**Kapitel 5**) in eine ASCII-Datei.

10.8.2 Basisjahr

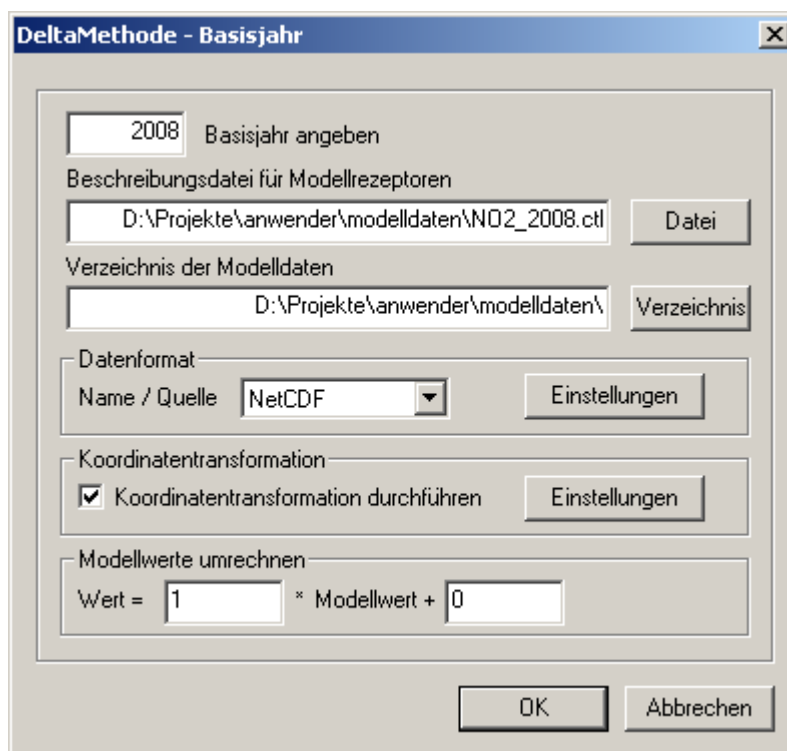


Abb. 113: Dialog Delta-Methode Basisjahr

In diesem Dialog werden die Einstellungen für das Basisjahr der Delta-Methode vorgenommen.

Basisjahr angeben: Wird mit der Delta-Methode gerechnet, so ist im Dialog „Vorgaben: Zeitauswahl“ ([Kapitel 10.4.3](#)) der Zeitbereich des Prognosejahres vorzugeben, da hierfür auch die nachfolgenden Berechnungen (z.B. Datenassimilation, Interpolation, etc.) vorgenommen werden. Entsprechend wird im Dialog „DeltaMethode – Basisjahr“ die Angabe des Basisjahrs benötigt. Der Zeitbereich des Basisjahrs entspricht – bis auf die Jahreszahl – dem des Prognosejahrs.

Beschreibungsdatei für Modellrezeptoren: In dieses Feld muss der Pfad und Name der Beschreibungsdatei der Modellrezeptoren eingegeben werden. Je nach Art der externen Modelldaten ([Kapitel 3.3](#)) ist dies eine Stationsbeschreibungsdatei für Rezeptorreihen im ASCII-Format, eine LASAT-Headerdatei (*.dmna) oder eine Headerdatei im *.ctl-Format ([Kapitel 6](#)).

Verzeichnis der Modelldaten: In diesem Feld muss das Verzeichnis angegeben werden, in dem sich die Modelldaten des Basisjahrs befinden.

Datenformat: Über das Dropdown-Menü kann zunächst das Format der Modelldaten des Basisjahrs angegeben werden. Über die zugehörige Schaltfläche „Einstellungen“ erscheint dann für die Rezeptorreihen im ASCII-Format, das REM-CALGRID Binärformat und das NetCDF-Format analog zur Beschreibung der Messwertdateien der Dialog „Datenformat“ ([Kapitel 10.4.2](#)), der entsprechend auszufüllen ist. Für das REM-CALGRID Format bzw. das NetCDF-Format beachten Sie bitte die Hinweise zum Ausfüllen des Dialogs in [Kapitel 6.4](#) bzw. [Kapitel 6.5](#)).

Liegen die Modelldaten des Basisjahrs im LASAT-Format vor, so erscheint über die Schaltfläche „Einstellungen“ der Dialog „LASAT Vorgaben“ (Abb. 114). Hier können einzulesender Stoff und Höhenschicht sowie Zeitschritt und Fehlwert spezifiziert werden. Zeitschritt ist dabei nicht der Zeitschritt der LASAT-Rechnung, sondern der zeitliche Rythmus, in dem die LASAT-Ausgabedateien vorliegen.

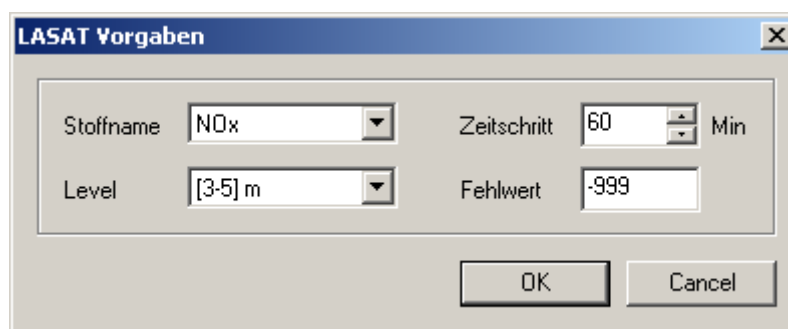


Abb. 114: Dialog LASAT Vorgaben

Koordinatentransformation: Für Daten, die im REM-CALGRID Binärformat oder im NetCDF-Format vorliegen, kann FLADIS beim Einlesen eine Koordinatentransformation von geografischen Koordinaten nach UTM durchführen. Dazu ist das entsprechende Kästchen zu aktivieren. Über die zugehörige Schaltfläche „Einstellungen“ erscheint ein Dialog, der die Vorgabe des Ausgangs- und des Zielkoordinatensystems erlaubt sowie die Angabe der zugehörigen Parameter (Abb. 115).

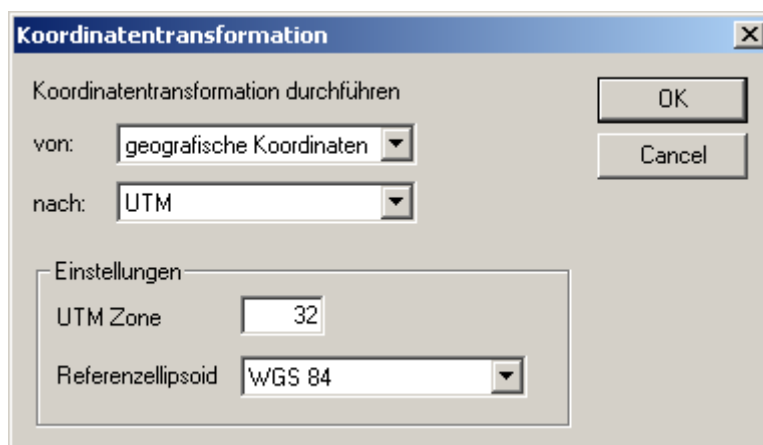


Abb. 115 Dialog Koordinatentransformation

Modellwerte umrechnen: Lineare Transformation der eingelesenen Modellwerte, z. B. für Umrechnung der Einheit der zu untersuchenden Stoffgröße.

10.8.3 Prognosejahr

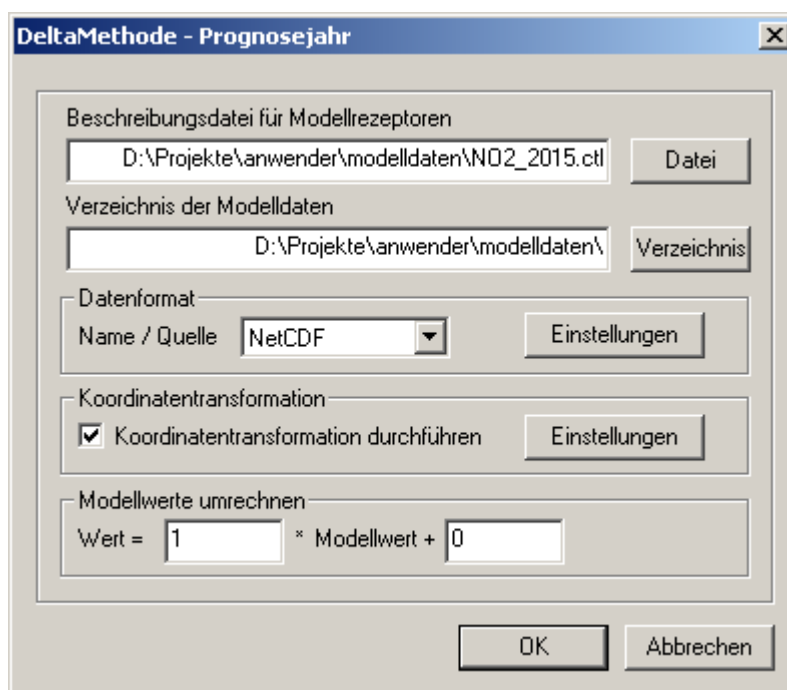


Abb. 116: Dialog Delta-Methode Prognosejahr

In diesem Dialog werden die Einstellungen für das Prognosejahr der Delta-Methode vorgenommen. Der Zeitbereich des Prognosejahres ist identisch mit dem, der im Dialog „Vorgaben: Zeitauswahl“ ([Kapitel 10.4.3](#)) vorgegeben wurde.

Beschreibungsdatei für Modellrezeptoren: In dieses Feld muss der Pfad und Name der Beschreibungsdatei der Modellrezeptoren eingegeben werden. Je nach Art der externen Modelldaten ([Kapitel 3.3](#)) ist dies eine Stationsbeschreibungsdatei für Rezeptorreihen im ASCII-Format, eine LASAT-Headerdatei (*.dmna) oder eine Headerdatei im *.ctl-Format ([Kapitel 6](#)).

Verzeichnis der Modelldaten: In diesem Feld muss das Verzeichnis angegeben werden, in dem sich die Modelldaten des Prognosejahrs befinden. Wird die flächenhafte Darstellung des Prognosejahrs in der Folge durch eine Interpolation gekoppelt mit Modelldaten berechnet, so entsprechen die hier anzugebenden Modelldaten denen im Dialog „Modelle: Externes Modell“ ([Kapitel 10.5.4.2](#)).

Datenformat: Für das Format der Modelldaten des Prognosejahrs bestehen die gleichen Einstellmöglichkeiten wie für das Basisjahr ([Kapitel 10.8.2](#)).

Koordinatentransformation: Für die Koordinatentransformation der Modelldaten des Prognosejahrs bestehen die gleichen Einstellmöglichkeiten wie für das Basisjahr ([Kapitel 10.8.2](#)).

Modellwerte umrechnen: Lineare Transformation der eingelesenen Modellwerte, z.B. für Umrechnung der Einheit der zu untersuchenden Stoffgröße.

Eine Eichung ist ebenso wie eine Datenassimilation weder für die hier noch für die im Dialog „DeltaMethode – Basisjahr“ anzugebenden Modelldaten vorgesehen. Beides wäre nur für die Daten des Basisjahrs durchführbar, da für das Prognosejahr keine Messwerte zur Verfügung stehen bzw. erst in der Folge durch die Delta-Methode prognostiziert werden. Eine Eichung oder Datenassimilation nur des Basisjahrs führt zu Inkonsistenzen in den Annahmen bezüglich der Modelldaten beider Jahre.

10.9 Menü Grafik

In FLADIS kann über den Menüpunkt "Grafik -> Darstellen" das Ergebnis eines FLADIS-Rechenlaufs, ein aus der Datenbank geladenes FLADIS-Raster ([Kapitel 9](#)) oder auch das Ergebnis einer Auswertung mit FLADIS ([Kapitel 10.10](#)) grafisch dar-

gestellt werden. Ähnlich wie bei einem Taschenrechner wird dasjenige FLADIS-Raster angezeigt, das sich gerade "im Speicher" befindet, d. h. das letzte aus der Datenbank geladene oder mit Hilfe eines FLADIS-Rechenlaufs oder einer FLADIS-Auswertung erzeugte Feld. Welches dieses ist, wird in der Titelzeile von FLADIS angegeben.

Die Grafik-Funktionalität ist nicht in der FLADIS Basisversion enthalten.

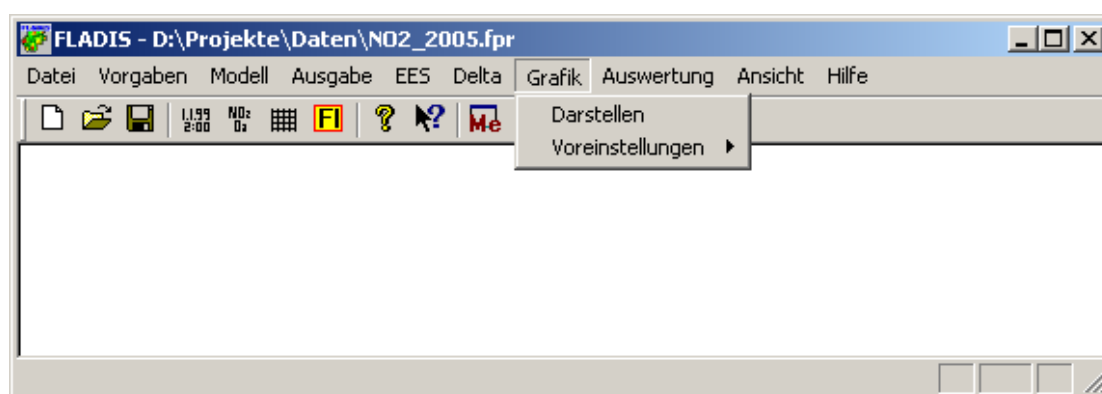


Abb. 117: Menü Grafik.

10.9.1 Grafik: Darstellen

Durch Anwählen von "Grafik -> Darstellen" erscheint ein Dialog, der das "im Speicher" befindliche FLADIS-Raster zeigt, die zugehörige Legende und den Mittelwert sowie den minimalen und maximalen Wert des abgebildeten Feldes (Abb. 118).

Die Titelzeile des Dialogs enthält die Beschreibung des angezeigten Feldes, nach einer Auswertung auch den Rechenweg, aus dem das Feld entstanden ist. Eine eigene Menüleiste stellt Funktionen bereit, die in den folgenden Kapiteln beschrieben werden. Unterhalb der Legende und der Minimal- und Maximalwerte sind drei Schaltflächen angeordnet, die ein Zoomen über verschiedene Zoomstufen erlauben, wobei "Fit" bewirkt, dass das gesamte Bild im Grafikfenster des Dialogs dargestellt wird. Ist das Bild größer als das Grafikfenster, erscheinen Scrollbalken an den Seiten. In der Fußzeile wird der aktuelle Zoomfaktor angegeben.

Der Dialog kann über die Buttons in der Titelleiste minimiert, wieder hergestellt oder beendet werden. Er kann geöffnet oder minimiert bleiben, während weitere Operationen (z. B. ein neuer FLADIS-Rechenlauf, Laden eines neuen FLADIS-Rasters, Durchführen einer weiteren Auswertung) in FLADIS ausgeführt werden, so dass dann das Ergebnis der neuen Operation neben dem Ergebnis der alten Operation grafisch dargestellt und verglichen werden kann. Jedes Anwählen von "Grafik -> Darstellen" erzeugt einen neuen Dialog mit dem aktuell in FLADIS geladenen FLADIS-Raster. Die Dialoge haben nebeneinander Bestand und lassen sich in beliebiger Reihenfolge öffnen, minimieren und schließen.

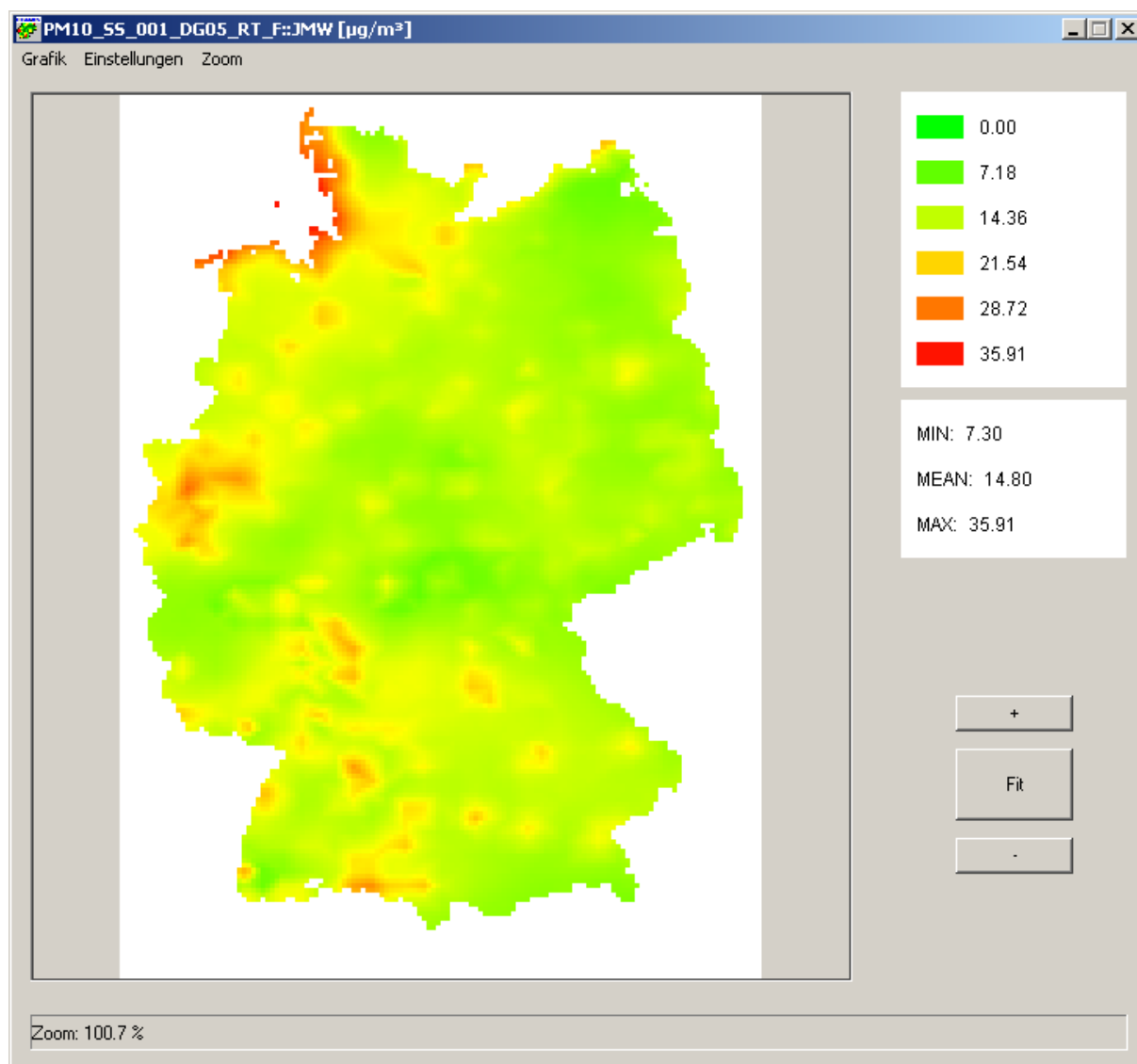


Abb. 118: Grafik-Dialog.

10.9.1.1 Grafik

Über den Menüpunkt "Grafik -> Speichern unter..." des Dialogs kann die dargestellte Grafik als Bitmap-Datei abgespeichert werden. Die Bitmap-Datei stellt unabhängig vom aktuellen Zoomzustand die komplette Grafik mit der Legende, dem Mittelwert, Minimal- und Maximalwert sowie dem in der Titelzeile angegebenen Text dar.

Über den Menüpunkt "Grafik -> Beenden" kann der Dialog geschlossen werden.

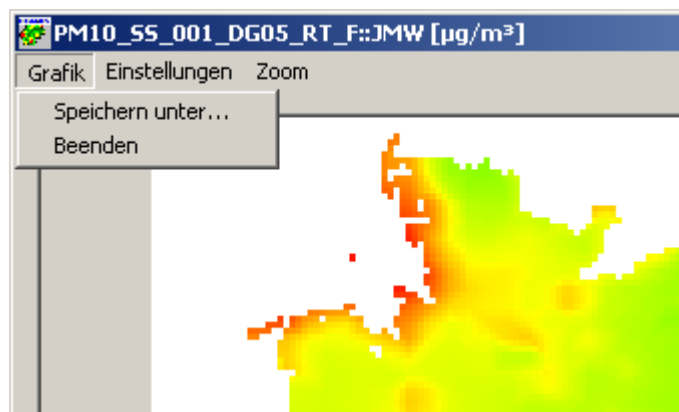


Abb. 119: Grafik-Menü Grafik.

10.9.1.2 Einstellungen

Wird über "Grafik -> Darstellen" ein Grafik-Dialog geöffnet, so erfolgt die erste Darstellung des FLADIS-Rasters auf der Basis von Default-Einstellungen. Diese können im Grafik-Dialog unter dem Menüpunkt "Einstellungen" explizit für dieses Dialogfenster angepasst werden. Andere Einstellungen in anderen Grafik-Dialogen haben keinen Einfluss darauf und umgekehrt. Sollen bestimmte Einstellungen für alle zu öffnenden Grafik-Dialoge gelten, so können diese im Hauptfenster von FLADIS unter "Grafik -> Voreinstellungen" vorgenommen werden ([Kapitel 10.9.2](#)).

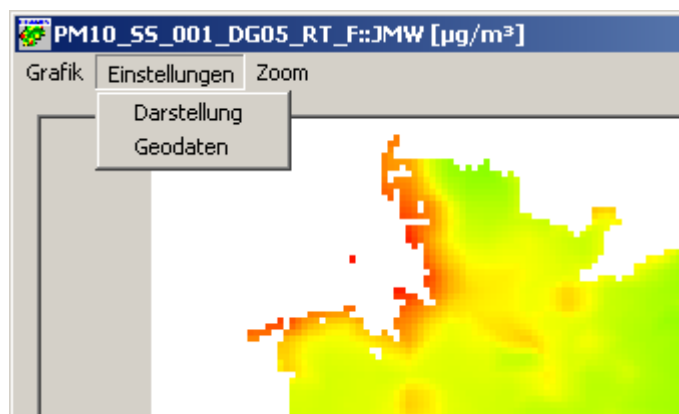


Abb. 120: Grafik-Menü Einstellungen.

Darstellung

Durch Anwählen des Grafik-Menüpunkts "Einstellungen -> Darstellung" öffnet sich ein Dialog, in dem die Legende und der Farbverlauf eingestellt werden können (Abb. 121).

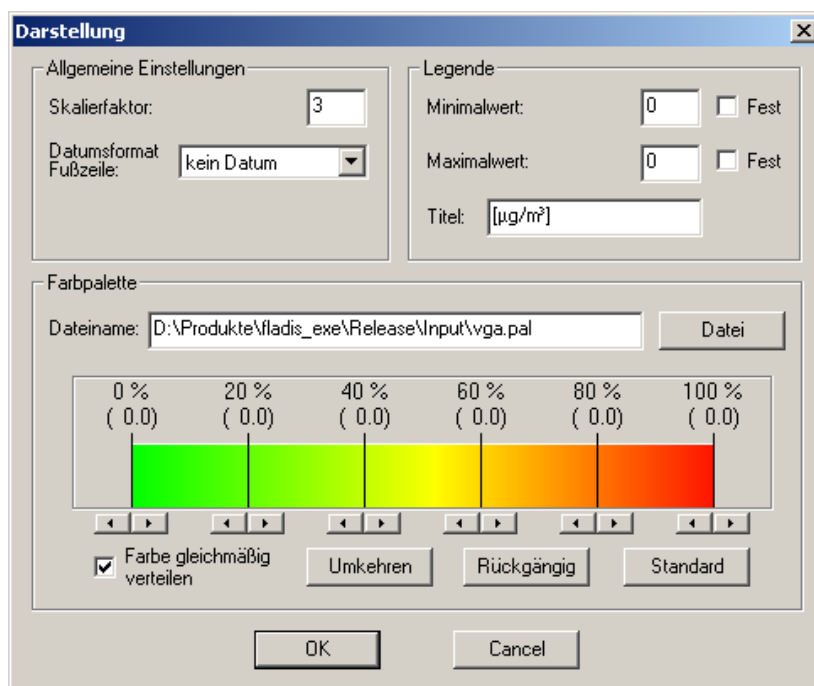


Abb. 121: Dialog Darstellung

Die **allgemeinen Einstellungen** erlauben über den Skalierfaktor eine Steuerung der physikalischen Größe der darzustellenden Grafik. Der Skalierfaktor gibt an, mit wieviel Pixeln jede Gitterzelle (und damit jeder Farbwert) des FLADIS-Rasters dargestellt werden soll. Dies macht sich bei der Darstellung im Dialog außer über den Zoomfaktor kaum bemerkbar. Wird die Grafik jedoch als Bitmap-Datei abgespeichert, so errechnet sich hieraus die Größe des Bitmaps. In der Fußzeile der Grafik kann ein Datum (z. B. das Bezugsjahr der Daten im FLADIS-Raster) eingeblendet werden.

Für die **Legende** kann ein Minimal- und ein Maximalwert vorgegeben werden. Wird ein Häkchen im Feld "Fest" hinter den Minimal- oder Maximalwert gesetzt, so wird der jeweilige Wert in der Darstellung auf jeden Fall eingehalten. Wird nur z. B. ein Maximalwert vorgegeben, ohne dass das Häkchen "Fest" gesetzt wird, so versteht sich der vorgegebene Wert als Minimum für den Maximalwert. Ist das tatsächliche Maximum im darzustellenden Feld kleiner, so ist der Maximalwert gleich dem vorgegebenen Wert. Ist das tatsächliche Maximum hingegen größer, so ist der Maximalwert gleich dem tatsächlichen Maximum. Die Legende kann mit einem Titel (maximal 20 Zeichen) versehen werden.

Es besteht die Möglichkeit, unterschiedliche **Farbpaletten** in FLADIS zu laden. Dies können wie abgebildet kontinuierliche Farbverläufe sein oder aber Abfolgen von Farbblöcken. Der Farbverlauf der geladenen Palette wird im Dialog angezeigt, die sechs gekennzeichneten Stellen geben an, welche Farben in der Legende zu sehen sind. Mit den Pfeiltasten können Verschiebungen im Farbverlauf eingestellt werden. Über die Schaltfläche "Umkehren" kann der Farbverlauf invertiert werden.

Geodaten

Die Darstellung eines FLADIS-Rasters kann mit Geodaten wie Ländergrenzen oder Beschriftungen versehen werden. Für die in der FLADIS-Datenbank definierten Modellgebiet ([Kapitel 9.3](#)) liegen Ländergrenzen in entsprechenden Dateien vor. Sie können über untenstehenden Dialog geladen und ihre Darstellung bearbeitet werden. Für die Darstellung in der Grafik muss das Häkchen "Geodaten in Standard-Darstellung" gesetzt sein. Werden Geodaten dargestellt, so kann der Aufbau der Grafik einige Sekunden dauern.



Abb. 122: Dialog Geodaten

Um die Darstellung der Ländergrenzen zu bearbeiten, wird die entsprechende Datei im Übersichtsfenster "Geodaten-Dateien" angeklickt und dann die Schaltfläche "Bearbeiten" angewählt. Es erscheint ein Dialog (Abb. 123), in dem der Dateityp und die Farbe der darzustellenden Objekte ausgewählt werden können. Als Dateityp können Polylinien (Grenzen, Flüsse etc.), Punkte (z. B. Städte) und Text angegeben werden. Als Farbe lässt sich eine von 10 Farben sowie Schwarz und Weiß mit den Pfeiltasten auswählen, in der Darstellung vor der Farbpalette lässt sich die Wirkung überprüfen.

Über die Schaltfläche "Farben bearbeiten" können für die 10 Farbeinträge eigene Farben definiert werden. Dazu wird eine der Farben "Cust 1" bis "Cust 10" angeklickt und mit der Schaltfläche "Farbe ändern" der Farbwert gesetzt (Abb. 124).

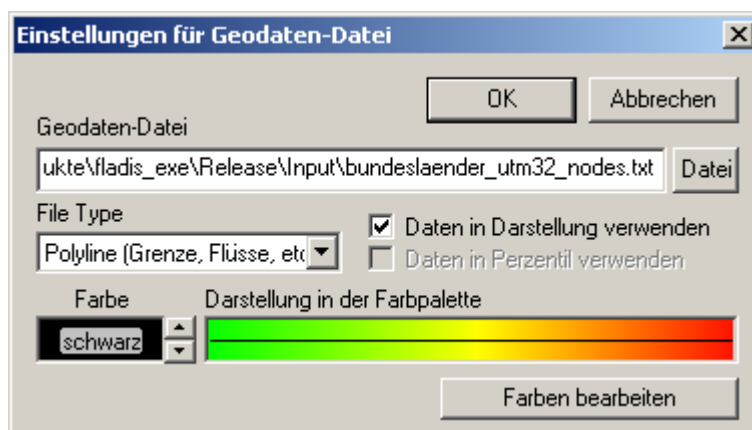


Abb. 123: Dialog Geodaten Einstellungen

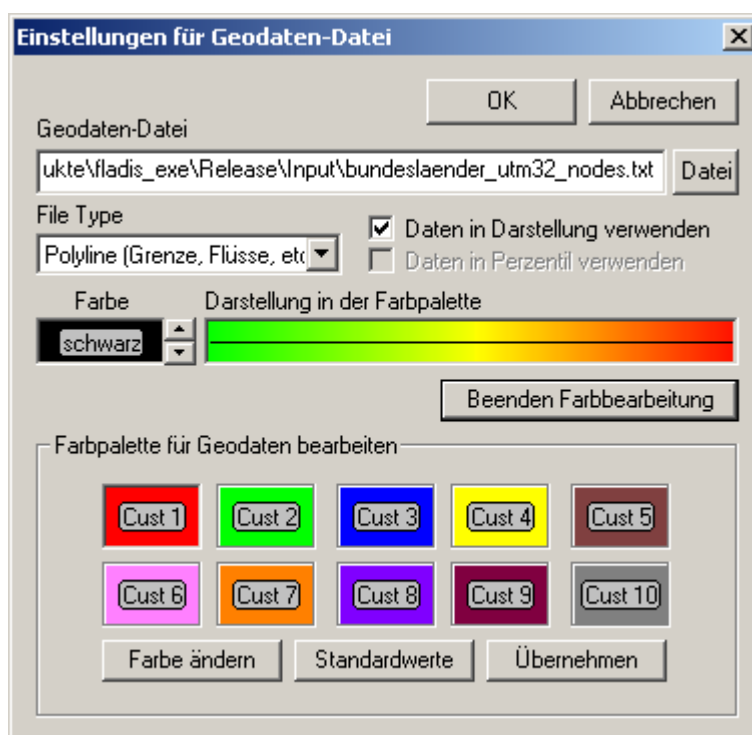


Abb. 124: Dialog Geodaten Einstellungen mit Farbpalette

10.9.1.3 Zoom

Über den Menüpunkt "Zoom" des Grafik-Dialogs können die einzelnen Zoomstufen direkt angesprungen werden.

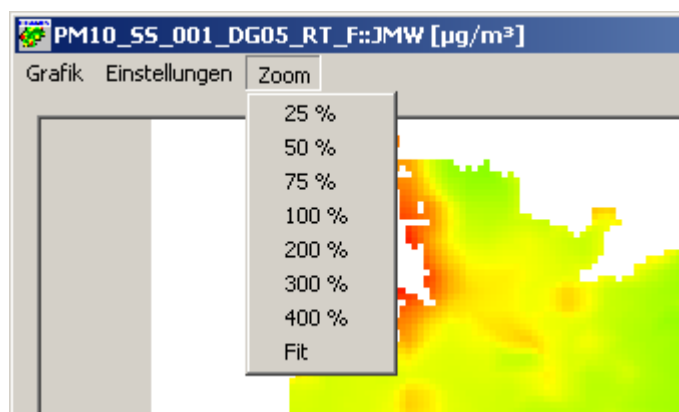


Abb. 125: Grafik-Menü Zoom

10.9.2 Grafik: Voreinstellungen

Sollen für eine Reihe von Grafiken identische Grafik-Einstellungen gelten, die von den Standardeinstellungen abweichen, so können die in [Kapitel 10.9.1.2](#) beschriebenen Einstellungen über den Menüpunkt "Grafik -> Voreinstellungen" im Programmfenster vorgenommen werden. Beispielsweise kann ein Maximalwert für die Legende gesetzt werden, der für alle folgenden Grafiken gelten soll, oder aber die Landesgrenzen sollen in allen folgenden Grafiken angezeigt werden.

Die Voreinstellungen bleiben so lange erhalten, bis sie geändert werden oder FLADIS geschlossen wird. Werden die Grafik-Einstellungen in einem geöffneten Grafik-Dialog geändert, so hat dies keinen Einfluss auf die Voreinstellungen.



Abb. 126: Menü Grafik -> Voreinstellungen

10.10 Menü Auswertung

FLADIS ermöglicht unter dem Menüpunkt "Auswertung -> Berechnung" das Durchführen einfacher Rechenoperationen mit zwei Feldern. Diese Felder können mit den Ergebnissen eines gerade durchgeführten FLADIS-Rechenlaufs oder mit FLADIS-Rastern aus der Datenbank belegt werden.

Die Auswertungs-Funktionalität ist nicht in der FLADIS Basisversion enthalten.

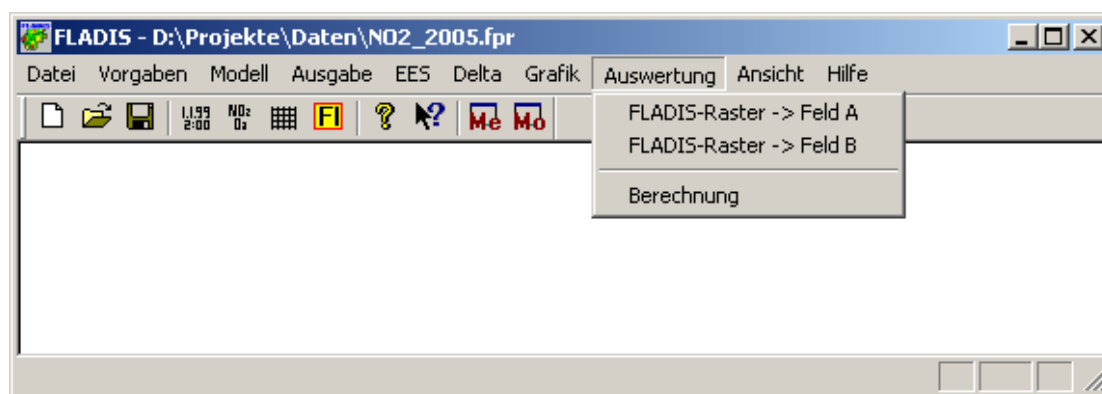


Abb. 127: Menü Auswertung

10.10.1 FLADIS Raster laden

Über die Menüpunkte "Auswertung -> FLADIS-Raster -> Feld A" und "Auswertung -> FLADIS-Raster -> Feld B" können die beiden Felder, mit denen die nachfolgende Rechenoperation durchgeführt werden soll, belegt werden. Dabei wird dasjenige FLADIS-Raster, das sich gerade "im Speicher" befindet (und dessen Beschreibung in der Titelseite des Programmfensters angezeigt wird), in das entsprechende Feld geladen.

Im Gegensatz zur grafischen Darstellung in FLADIS ([Kapitel 10.9](#)) können aus Konsistenzgründen in der Datenhaltung nur FLADIS-Raster nach Feld A oder Feld B geladen werden, die das Ergebnis eines gerade durchgeführten FLADIS-Rechenlaufs sind oder aus der Datenbank ([Kapitel 9](#)) geladen wurden. Das Ergebnis einer Rechenoperation liegt zwar im Speicher vor und kann im Grafik-Dialog angezeigt werden. Es kann jedoch nicht direkt wieder nach Feld A oder Feld B geladen werden. Wird eine FLADIS-Datenbank verwendet ([Kapitel 9](#)), so kann das Ergebnis der Rechenoperation in der Datenbank abgelegt ([Kapitel 10.3.8.1](#)) und von dort erneut in FLADIS geladen werden, um für eine weitere Rechenoperation zur Verfügung zu stehen.

Die in Feld A und Feld B abgelegten FLADIS-Raster bleiben so lange erhalten, bis sie mit einem neuen FLADIS-Raster belegt werden oder FLADIS geschlossen wird.

10.10.2 Berechnung

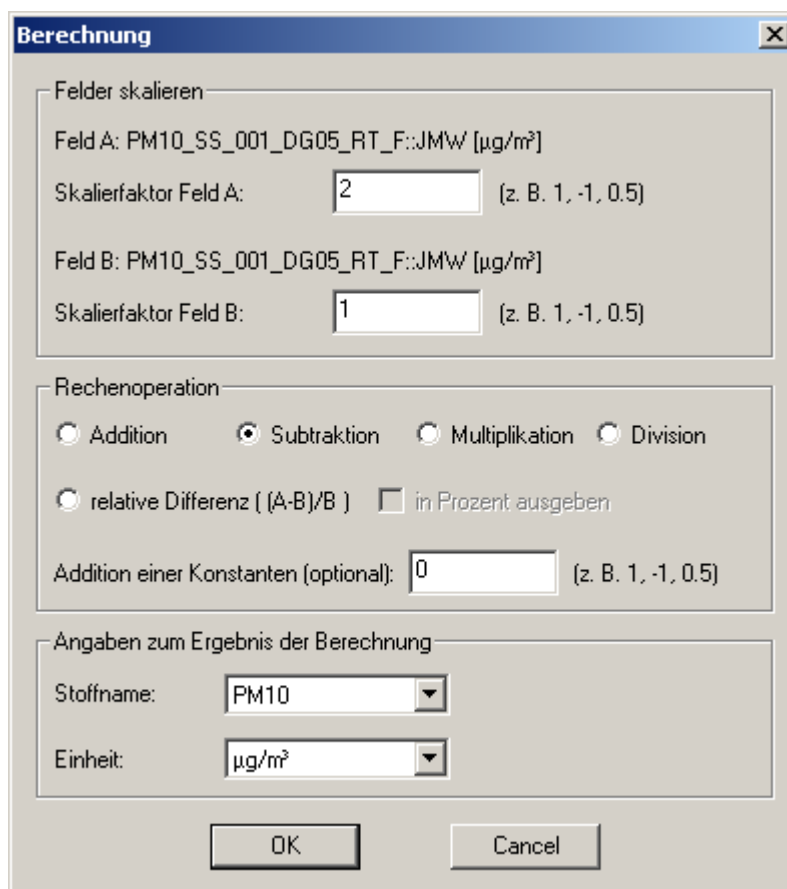
Eine Auswertung, d. h. eine Rechenoperation in FLADIS, folgt dem Muster

$$\text{Ergebnis} = (a * \text{Feld A}) + (b * \text{Feld B}) + c$$

und kann grundsätzlich mit zwei Feldern durchgeführt werden ([Kapitel 10.10.1](#)). Durch Anwählen von "Auswertung -> Berechnung" öffnet sich ein Dialog, in dem die durchzuführende Rechenoperation definiert werden kann (Abb. 128). Im Bereich "Felder skalieren" des Dialogs werden die nach Feld A bzw. nach Feld B geladenen Felder aufgelistet, beide Felder können hier getrennt voneinander mit einem skalaren Vorfaktor (a, b in der oben angegebenen Gleichung) versehen werden.

Im Feld "Rechenoperation" kann angegeben werden, welcher Art die Verknüpfung zwischen "a * Feld A" und "b * Feld B" sein soll, und im Feld "Addition einer Konstanten" kann der Wert einer zusätzlich zu berücksichtigenden Konstanten (c in der oben angegebenen Gleichung) vorgegeben werden. Bei der Rechenoperation wird Feld A immer zuerst verwendet, also z. B. "a * Feld A - b * Feld B". Neben den vier Grundrechenarten kann auch eine relative Differenz berechnet und, falls gewünscht, in Prozent ausgegeben werden.

Dem Ergebnis der Berechnung wird ein Default-Stoffname ("CALC" für "calculated") und eine Default-Einheit zugewiesen. Die Default-Werte können mit den beiden Dropdown-Menüs im Bereich "Angaben zum Ergebnis der Berechnung" geändert werden. Dies empfiehlt sich insbesondere, wenn das Ergebnis im Anschluss an die Berechnung in der Datenbank abgelegt werden soll ([Kapitel 10.3.8.1](#)).



Berechnung

Felder skalieren

Feld A: PM10_SS_001_DG05_RT_F::JMW [µg/m³]
Skalierfaktor Feld A: 2 (z. B. 1, -1, 0.5)

Feld B: PM10_SS_001_DG05_RT_F::JMW [µg/m³]
Skalierfaktor Feld B: 1 (z. B. 1, -1, 0.5)

Rechenoperation

☐ Addition ☒ Subtraktion ☐ Multiplikation ☐ Division

☒ relative Differenz ((A-B)/B) ☐ in Prozent ausgeben

Addition einer Konstanten (optional): 0 (z. B. 1, -1, 0.5)

Angaben zum Ergebnis der Berechnung

Stoffname: PM10

Einheit: µg/m³

OK Cancel

Abb. 128: Dialog Berechnung

Durch Anwählen von "OK" im Dialog "Berechnung" wird die Rechenoperation ausgeführt. Ihr Ergebnis befindet sich danach "im Speicher" und kann genutzt werden, um

- mit dem Menüpunkt "Grafik -> Darstellen" grafisch dargestellt zu werden (**Kapitel 10.9.1**).
- mit dem Menüpunkt "Datei -> Datensatz -> Erzeugen" im NetCDF-Datenformat als FLADIS-Raster abgespeichert und in die FLADIS-Datenbank eingetragen zu werden (**Kapitel 10.3.8.1**).

10.11 Menü Ansicht



Abb. 129: Menü Ansicht

Symbolleiste: Schalten Sie hier durch Anwählen des Menüpunktes „Symbolleiste“ die FLADIS – Symbolleiste ein bzw. aus.

Statusleiste: Schalten Sie hier durch Anwählen des Menüpunktes „Statusleiste“ die FLADIS – Statusleiste ein bzw. aus.

Messung Fenster: Schalten Sie hier durch Anwählen des Menüpunktes „Messung Fenster“ die Anzeige des Fensters mit den Messdaten ein bzw. aus.

Modell Fenster: Schalten Sie hier durch Anwählen des Menüpunktes „Modell Fenster“ die Anzeige des Fensters mit den Modellergebnissen ein bzw. aus.

Ein Häkchen am jeweiligen Menüpunkt zeigt Ihnen an, ob die zugehörige Funktion aktiviert ist.

10.11.1 Symbolleiste

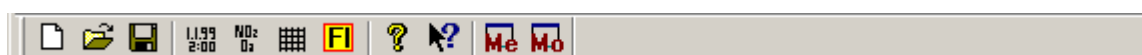


Abb. 130: Symbolleiste

Die Symbolleiste ermöglicht Ihnen den schnellen Zugriff auf die wichtigsten Einstellungen von FLADIS.

10.11.2 Statusleiste



Abb. 131: Statusleiste

Die Statusleiste gibt kurze Auskunft über die Funktion des angewählten Menüpunktes.

10.11.3 Messung Fenster

Während der laufenden Berechnung werden hier die Messdaten angezeigt.

10.11.4 Modell Fenster

Während der laufenden Berechnung werden hier Informationen zum Modell angezeigt.

10.12 Menü Hilfe

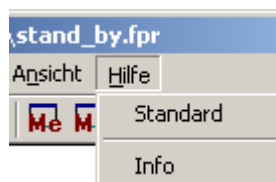


Abb. 132: Menü Hilfe

Standard: Wählen Sie diesen Menüpunkt, um die Standardhilfe zu bestimmten Themen aufzurufen.

Info: Wählen Sie diesen Menüpunkt, um Informationen über FLADIS zu erhalten (z.B. Versionsnummer).

Kontextbezogene Hilfe: Wählen Sie das entsprechende Symbol (**Kapitel 10.12.3**) aus der Symbolleiste, um zu bestimmten Menüpunkten und Knöpfen mehr zu erfahren.

10.12.1 Standard

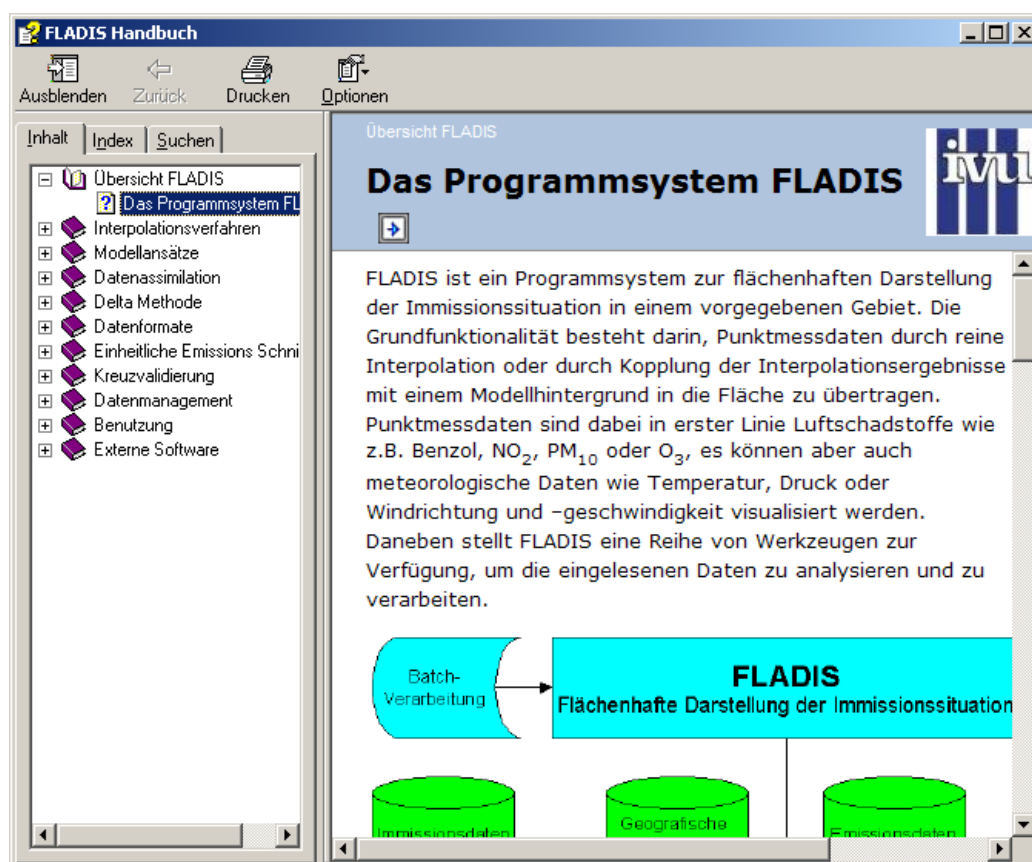


Abb. 133: FLADIS Online-Hilfe

Dieser Menüpunkt öffnet die Standard-Hilfe zu FLADIS. Anhand der Optionen Inhalt, Index und Suchen finden Sie bequem Erklärungen und Erläuterungen zur Benutzung von FLADIS.

10.12.2 Info



Abb. 134: FLADIS Information

Unter diesem Menüpunkt bzw. unter dem in Abb. 134 dargestellten Symbol aus der Symbolleiste (**Kapitel 10.11.1**) befinden sich die Versionsnummern der einzelnen FLADIS Programmteile.

10.12.3 Kontextbezogene Hilfe



Abb. 135: Kontext-Hilfe-Knopf

Die **Kontextbezogene Hilfe** ermöglicht Ihnen den schnellen Zugriff auf die Hilfe zu einzelnen Knöpfen und Menüpunkten.

Funktionsweise:

- Anwählen des Knopfes „Kontexthilfe“
 - > es erscheint ein Fragezeichen neben dem Mauszeiger.
- Klicken Sie mit der Maus auf einen Menüpunkt oder Knopf, zu dem Sie die Online-Hilfe wünschen
 - > es öffnet sich die Online-Hilfe mit dem entsprechenden Hilfe-Thema.



11 Externe Software

11.1 NetCDF-Software

Die Software FLADIS der IVU Umwelt GmbH verwendet Datenformat, Schnittstellen und Bibliotheken der NetCDF-Software.

Quelle: <http://www.unidata.ucar.edu/software/netcdf/index.html>

Die NetCDF-Software unterliegt

Copyright 1993-2012 University Corporation for Atmospheric Research/Unidata.

Quelle: <http://www.unidata.ucar.edu/software/netcdf/copyright.html>

Für die NetCDF-Software gilt die folgende Bestimmung:

THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY UCAR/UNIDATA "AS IS" AND ANY EXPRESS OR IMPLIED WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE ARE DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL UCAR/UNIDATA BE LIABLE FOR ANY SPECIAL, INDIRECT OR CONSEQUENTIAL DAMAGES OR ANY DAMAGES WHATSOEVER RESULTING FROM LOSS OF USE, DATA OR PROFITS, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, NEGLIGENCE OR OTHER TORTIOUS ACTION, ARISING OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE ACCESS, USE OR PERFORMANCE OF THIS SOFTWARE.