

Entwicklung und Anwendung statistischer
Methoden zur Kurzfristvorhersage von
Ozonkonzentrationen in der Bundesrepublik
Deutschland

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt am Fachbereich Geowissenschaften
der Freien Universität Berlin

durch Dipl.-Hydrol. Frank Schneider

Juli 2003

Gutachter

1. Gutachter: Prof. Dr. Manfred Geb (Freie Universität Berlin)
2. Gutachter: Prof. Dr. Peter J. H. Bultjes (TNO - MEP Apeldoorn)

Tag der Disputation: 11. November 2003

Zusammenfassung

Auch wenn Ozon in den letzten Jahren nicht mehr so stark im Blickpunkt der Öffentlichkeit stand wie noch vor 5 bis 10 Jahren, ist die Problematik erhöhter Ozonwerte noch immer aktuell. Dieser Problematik sollen die aktuellen Richtlinien der Europäischen Union und die Gesetze und Verordnungen des Bundes und der Länder Rechnung tragen.

In dieser Arbeit wird ein neuentwickeltes Verfahren zur regionalen Kurzfristozonprognose vorgestellt. Es handelt sich hierbei um eine Kombinationsvorhersage, deren Grundlagen statistischer Natur sind. Basierend auf den Ergebnissen der numerischen Wettervorhersage des GME-Modells des Deutschen Wetterdienstes (DWD) und den in Deutschland gemessenen Immissionswerten der Jahre 1997-2002 wurden vier Vorhersagemodule entwickelt: eine wetterlagenbasierte Klassifikation mit nachfolgender Regression, ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression, Analoge Fälle mit nachfolgender Regression und eine Wahrscheinlichkeitsvorhersage für Schwellenwerte.

Diese Module funktionieren alle nach dem Prinzip der Perfekten Prognose. Als abschließender Schritt werden die einzelnen Ergebnisse mittels Regression zu einer Vorhersage kombiniert. Nach der vollautomatischen Ausführung aller Module liegt damit eine stationsbezogene Maximumprognose für das Gebiet Deutschland, für den Bearbeitungstag und die zwei nachfolgenden Tage vor. Besonderes Augenmerk wurde darauf gelegt, dass die Methode auch bei hohen Ozonwerten eine stabile und verlässliche Prognose liefert.

abstract

Although ozone is not in public focus as 5 to 10 years ago, high ozone concentrations are still a problem. The EU legacy and the German national legislation are trying to cope with the problem. This work presents a new method for ozone forecasting. It is based on statistic procedures. Two datasets - a numerical weather forecast from the German Weather Service and concentration data from Germany (covering 1997-2002) - were used to develop four procedures. These are: a weather pattern based classification with subsequent regression, an isobaric trajectory model with subsequent regression, analogs with subsequent regression and a probability forecast for threshold values. All modules are based on perfect prog mechanisms. The final step is a combination by regression. In the end of the fully automated forecast procedure a daily 1-hour maximum forecast for the present day and the next two days is available.

Danksagung

An dieser Stelle möchte meinen Dank meinen Betreuern Prof. Dr. Manfred Geb und Prof. Dr. Peter Builtjes aussprechen. Sie halfen mir durch gute Anregungen und kritische Fragen das Thema umfassend zu bearbeiten. Prof. Dr. Manfred Geb half mir, mein Verständnis für die meteorologischen Zusammenhänge zu erweitern. In vielen Gesprächen gab mir Prof. Dr. Peter Builtjes das Verständnis zur Einbettung der Probleme und Ergebnisse in die Forschungsergebnisse der numerischen Modellierung.

Meinem Mentor, Dr. Wolfgang Enke, möchte ich für die ausdauernde Unterstützung bei der Bearbeitung des Themenkomplexes meinen Dank aussprechen. Ohne seinen umfangreichen Erfahrungsschatz wären eine so kurze Bearbeitungszeit und eine so schnelle operationelle Umsetzung nicht möglich gewesen.

Dem Leiter des Fachgebietes II 6.2 des Umweltbundesamtes, Dr. Wolf-Dieter Garber und seinen MitarbeiterInnen Berndt Kahra, Susanne Grittner, Ute Dauert, Angela Weikinn, Rainer Lacombe und Wolfgang Bräuninger, möchte ich für die unproblematische Zusammenarbeit und die vielen anregenden Gespräche und Diskussionen danken. Mit der schnellen Integration der Ergebnisse in den operativen Dienst des Fachgebietes wurde eine wichtige Motivationsquelle geschaffen.

PD Dr. Peter Névir möchte ich für die vielen Anregungen und Tipps bei theoretischen Aspekten der Meteorologie danken. Dr. Johannes Flemming half mir in vielen Gesprächen, die Zusammenhänge in der Luftchemie und bei der numerischen Modellierung zu verstehen.

Danken möchte ich auch Dr. Thomas Deutschländer, der mir insbesondere zum Ende der Arbeit in vielen Diskussionen mit Rat und Tat zur Seite stand.

Der abschließende Dank gilt meiner Freundin Ute Kreienkamp.

Danke !

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Einführung in die Problemstellung	1
1.2	Zusammenarbeit mit dem Umweltbundesamt	2
1.3	Mindestanforderungen an das Prognosesystem	3
1.4	Aufbau der Untersuchung	4
I	Grundlagen	7
2	Faktoren der Ozonbelastung	9
2.1	Ozonbildung	9
2.2	Horizontaler Ozontransport	12
2.3	Vertikale Ozondurchmischung	12
2.4	Ozonabbau	13
2.5	Fazit	14
3	Analyse der zeitlichen Entwicklung von Luftverunreinigungen mit dem Schwerpunkt Ozon	15
3.1	Entwicklung der Luftverunreinigungen in den letzten Jahrzehnten	15
3.2	Biogene Quellen von Ozonvorläuferstoffen	17
3.3	Typischer zeitlicher Verlauf von Photosmog-Episoden	18
3.3.1	Typische Tagesgänge während Photosmog-Episoden	18
3.3.2	Vertikale Austauschvorgänge	18
3.3.3	Andauer von Ozonepisoden	20
3.3.4	Änderung der Ozonverhältnisse am Beispiel der Station Wiesloch (Baden-Württemberg)	20
4	Statistische Routinen	23
4.1	Methodische Grundlagen	23
4.1.1	Auswahl der Prädiktoren	24
4.1.2	Screening-Regressions-Analyse	24
4.1.3	Abbruchkriterien	25
4.1.4	Crossvalidation	25

4.1.5	Eine Selbstlernende Bias-Eliminierung	26
4.2	Screeningmethoden in der Arbeit	26
4.2.1	Stufenweise einfache lineare Regression	26
4.2.2	Multiple lineare Regression	27
4.3	Prüfmaße	30
4.3.1	RMSE - Root Mean Squared Error	30
4.3.2	Bias	30
4.3.3	RV - Reduktion der Varianz	30
4.3.4	Prüfmaße für Binäreignisse	32
4.4	Zyklische Schwankungen - Jahres- und Tagesgang	33
5	Ozonprognoseverfahren	35
5.1	Eine kurze Einführung zu numerischen Modellen	35
5.2	Statistische Ozonprognosemodelle im Überblick	37
5.2.1	Regressionsmodelle	38
5.2.2	Neuronale Netze	41
5.2.3	Statistische Trajektorienmodelle	43
5.2.4	Zeitreihenmodelle	43
5.2.5	Einschätzung der Methoden für die weitere Nutzung	44
5.3	Einfluss der Wettervorhersage auf die Ozonprognose	45
6	Datenprüfung	47
6.1	Methodik zur Suche nach unplausiblen Einzelwerten	48
6.1.1	Statistische Parameter	48
6.1.2	Die Prüfschranken	49
6.1.3	Der Ablauf der Prüfung	50
6.2	Methodik zur Suche nach systematischen Fehlern	53
6.3	Auffüllen von Datenlücken	54
6.4	Pro und Contra zur Datenveränderung	54
II	Angewandte Methoden und Ergebnisse	57
7	Eine wetterlagenbasierte Klassifikation mit nachfolgender Regression	59
7.1	Einführung und Zielsetzung	59
7.2	Historische Entwicklung	60
7.2.1	Einteilung der Wetterlagen	60
7.2.2	Beispiele für Wetterlagenklassifikationen	61
7.2.3	Nutzen von Wetterlagen	61
7.2.4	Der Unterschied zwischen Wetterlagen und Ozonwetterlagen	61
7.3	Methode zur Bestimmung von Ozonwetterlagen	62
7.3.1	Die Clusterung der Tage entsprechend der Ozonsituation	62

INHALTSVERZEICHNIS

7.3.2	Die meteorologischen Felder des DWD	63
7.3.3	Die Mittlung der Felder	65
7.3.4	Objektivierungsverfahren	65
7.3.5	Die Fuzzifizierung	67
7.3.6	Unterschiede zu anderen Klassifikationen	68
7.4	Ergebnisse bei der Ableitung von Ozonwetterlagen	69
7.5	Eine stationsbezogene Screening-Analyse	71
7.6	Ergebnisse der stationsbezogenen Prognose	72
7.7	Zusammenfassung und Diskussion	76
8	Ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression	79
8.1	Einführung und Zielsetzung	79
8.2	Konstruktion von atmosphärischen Trajektorien	80
8.3	Ozondaten vom europäischen Umland	82
8.3.1	Die Aufbereitung der EU-Daten	83
8.4	Eine Ozonprognose auf der Basis von Trajektorien	84
8.5	Zusammenfassung und Diskussion	86
9	Analoge Fälle mit nachfolgender Regression (AFREG)	89
9.1	Einführung und Zielsetzung	89
9.2	Methode	90
9.2.1	Unterschiede zwischen einer Wetterlagenklasse und analo- gen Fällen	90
9.2.2	Daten	90
9.2.3	Suche nach den Feld - Prädiktoren	91
9.2.4	Die bedingte Regressionsanalyse	91
9.2.5	Robuste Regression mit Hilfe der Catline	93
9.3	Zusammenfassung und Diskussion	95
10	Die finalen Ozonprognosen	97
10.1	Einführung und Zielsetzung	97
10.2	Die Prognose des Tagesmaximums	98
10.2.1	Erfahrungen beim operationellen Einsatz im Frühsommer 2003	100
10.3	Die Schwellenwertvorhersage	101
10.3.1	Methode	101
10.3.2	Optimierung	102
10.4	Zusammenfassung und Diskussion	104
11	Diskussion und Ausblick	107
11.1	Was wurde erreicht?	107
11.2	Was ist neu?	111
11.3	Praktische Schlussfolgerungen	112

11.4 Was bleibt zu tun?	113
11.5 Ergebnisse beim ersten operativen Einsatz im Jahr 2003	114
III Anhänge	I
A Abkürzungsverzeichnis	III
B Literaturverzeichnis	IX
C Abbildungsverzeichnis	XIX
D Tabellenverzeichnis	XXIII
E Ein Anwendungsbeispiel für die neuentwickelte Methode der Wetterlagenentwicklung	XXVII
E.1 Übersicht zu den gewählten Feldern	XXVIII
E.2 Zeitreihen der Wetterlagenklassifikation	XXIX
E.3 Statistische Untersuchungen	XXXI
F Tabellen	XXXV