

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 |