Kapitel 1

Einführung

1.1 Einführung in die Problemstellung

Die Verschmutzung der Umwelt durch den Menschen ist nicht neu. Schon vor tausenden von Jahren verursachte die Verhüttung von Erzen Luftverschmutzungen. Dieses war so lange relativ unproblematisch, wie die Erde sehr dünn besiedelt war. Mit der Bevölkerungszunahme und der zunehmenden Industrialisierung wurde die Aufnahmekapazität der Umwelt zunehmend überfordert. Es traten unter anderem deutliche anthropogen verursachte Änderungen der atmosphärischen Zusammensetzung auf.

Der Mensch atmet jeden Tag mehrere Kubikmeter Luft. Somit hat die Frage nach der Zusammensetzung der Luft eine hohe Bedeutung. In dieser Arbeit wird ein Teilaspekt der Luftverschmutzung bearbeitet. Es ist die Konzentration von Ozon in der bodennahen Atmosphäre. Es ist unbestritten, dass die heute während einiger beobachteter Ozonepisoden auftretenden Ozonkonzentrationen negative Auswirkungen auf den Menschen und seine Umwelt haben.

Seit Mitte der 90er Jahre besteht daher der Wunsch der Bevölkerung, unterstrichen durch einen gesetzlichen Auftrag, eine Vorhersage der möglichen Ozonkonzentrationen für die nächsten Tage zu erhalten¹. Ziel dieser Arbeit ist es ein Ozonprognosesystem zu entwickeln, womit dieser Wunsch erfüllt werden kann. Dieses soll auf Grundlage der Statistik erfolgen. Es wird sich versprochen, dass ein solches System auf die lokalen Eigenheiten der Messstandorte der Ländermessnetze² eingeht. Dies ist wichtig, da die lokalen Informationen zur aktuellen Ozonsituation in den Medien auf den Messwerten der Messnetze beruhen. Die Ozonkonzentrationen, für die sich die Bevölkerung in der Hauptsache interessiert, treten nur im Sommerhalbjahr auf. Daher kann eine Optimierung für den Zeitraum der Sommermonate erfolgen.

¹Der Forderung nach Bereitstellung von Ozonprognosen kommen zur Zeit mehrere Institutionen zum Beispiel das Umweltbundesamt, dafür zuständige Behörden in einigen Bundesländern und Universitäten nach.

²Die Ländernetze sollen Informationen zu den direkten Belastungen für den Menschen liefern. Dazu gibt es länderspezifische Methoden der Herangehensweise.

1.2 Zusammenarbeit mit dem Umweltbundesamt

Wesentliche Teile der Arbeit wurden initiiert durch ein Forschungsvorhaben des Umweltbundesamtes (UBA). Das Umweltbundesamt hatte den Wunsch, sein Prognosesystem zur Information der Bevölkerung, zu aktualisieren. Dieses soll mit dem hier vorgestellten System erfolgen. Somit soll diese Arbeit zwei Ziele verfolgen:

- die Untersuchung welche Vorhersageleistung mit dem aktuellen Stand der Wissenschaft im Bereich der statistischen Ozonprognose möglich ist
- und die Umsetzung in ein operationell lauffähiges Programmpaket.

Das Umweltbundesamt hat dafür einige grundlegende Bedingungen vorgegeben:

- Es dürfen in der Hauptsache nur Verfahren gewählt werden, die auf statistischen Methoden beruhen,
- das fertige Programmpaket muss auf dem im Umweltbundesamt zur Verfügung stehenden Rechnersystem vollautomatisch lauffähig sein,
- neben der eigentlichen Prognose muss das Programmpaket eine Datenprüfung und eine Archivierung der zur Prognose genutzten Daten vornehmen.
- die Prognose soll stationsweise, das heißt für alle operativ messenden Ozonmessstellen (Bedingung: die Messung erfolgt seit mindestens 2 Jahren), erfolgen
- die Prognose sollte inklusive aller dafür notwendigen Operationen nicht mehr als 5-10 Minuten Rechenzeit benötigen.

Für die Arbeit standen zwei Datenquellen bereit:

- die gemessenen Ozondaten des Vortages (im weiteren DAL-Daten³ genannt; die Daten der 16 Messnetze der Bundesländer sowie des Messnetzes des UBA werden routinemäßig im UBA gesammelt.)
- und die vom Deutschen Wetterdienst (DWD) berechneten Wetterprognosen für einen vorgegeben Ausschnitt.

 $^{^3\}mathrm{DAL}$ - \mathbf{D} aten \mathbf{a} ustauschzentrale der \mathbf{L} änder

1.3 Mindestanforderungen an das Prognosesystem

Zwei Prognoseergebnisse soll die Routine bereitstellen:

- eine stationsbezogene Tagesmaximumprognose
- und eine regionale Prognose der Wahrscheinlichkeit der Überschreitung von vorgegebenen Schwellenwerten.

Die Zusammenarbeit mit dem Umweltbundesamt stellt an das zu entwickelnde Prognosesystem hohe Anforderungen. Damit das System operationell für mehrere hundert Stationen einsetzbar ist, darf nicht nur eine Optimierung an einigen ausgewählten Ozonepisoden erfolgen. Es muss ein robustes und erwartungstreues System entwickelt werden, das für jede meteorologische Situation eine bestmögliche Prognose liefert. Somit muss neben der Suche nach dem optimalen Modell auch die Suche nach der optimalen Methode zur Sicherung der Erwartungstreue erfolgen. Nachdem diese gefunden worden sind, muss im Anschluss an die Modellentwicklung der Aufbau eines Programmpaketes erfolgen, das dann am UBA installiert werden kann.

Durch die Zusammenarbeit mit dem Umweltbundesamt war es möglich, sehr aktuelle Datensätze von Ozonkonzentrationsmessungen zu nutzen. So standen dem Autor der Arbeit täglich die vorläufigen Daten aller 17 Messnetze zur Verfügung. Dies ist ein großer Vorteil, da sich die Korrelationen zwischen der großräumigen meteorologischen Situation und den lokalen Ozonkonzentrationen in den letzten Jahren geändert haben. Somit kann erwartet werden, dass die abgeleiteten Prognosebeziehungen noch einige Zeit gültig sind.

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der Beschreibung der Methoden, die auf eine Tauglichkeit als Prognosemodell für die Tagesmaxima der Ozonkonzentration untersucht wurden. Am Ende einzelner Kapitel wird nur kurz darauf eingegangen, welche Methode für den Einsatz am UBA geeignet ist.

1.3 Mindestanforderungen an das Prognosesystem

Im Promet Heft Photosmog II [DWD 2002] postulierte [Jacobsen 2002] die Mindestanforderungen für operationelle Modellsysteme. Diese Forderungen lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- 1. die Rechenzeit soll kurz sein; die Mindestanforderung dabei ist, dass am Nachmittag die Prognoseergebnisse für den Folgetag vorliegen
- 2. die Modelle müssen an einer Vielzahl von Wetterlagen getestet sein, nach Möglichkeit soll eine ausgedehnte prä-operationelle Testphase dem Einsatz vorangehen
- 3. eine Routineprüfung muss im System implementiert werden
- 4. die routinemäßige Versorgung mit den Eingangsdaten muss sichergestellt sein

Aufbau der Untersuchung 1.4

Die Bearbeitung erfolgte in mehreren Teilschritten. Diese waren bestimmend für den Aufbau dieser Arbeit. Zur besseren Trennung von Grundlagen- und Methodenkapiteln wurde die Arbeit in drei Teile⁴ aufgegliedert. Begonnen wird mit dem Teil I **Grundlagen**. Am Anfang steht die Frage nach den **Faktoren der** Ozonbelastung (Kapitel 2). Hier wird darauf eingegangen wie Ozon in der Troposphäre entsteht, es in der Atmosphäre transportiert und verteilt wird und welche Mechanismen für den Abbau zuständig sind.

Im nächsten Kapitel wird eine Analyse der zeitlichen Entwicklung von Luftverunreinigungen mit dem Schwerpunkt Ozon durchgeführt (Kapitel 3). Dabei wird ein Bogen, ausgehend von der Entwicklung der Luftverunreinigungen in den letzten Jahrzehnten über den typischen zeitlichen Verlauf von Ozonepisoden bis hin zu den Veränderungen der Ozonverhältnisse am Beispiel einiger Jahre, gespannt.

Die Arbeit soll den Aufbau eines statistischen Modellsystems beschreiben. Bevor dieses möglich ist, muss einiges zu **Statistischen Routinen** (Kapitel 4) gesagt werden. Dabei sind Aussagen dazu nötig, welche Routinen genutzt und welche Prüfmaße eingesetzt werden.

Bevor an die Entwicklung einer neuen Methode herangegangen werden kann, ist es wichtig, schon bestehendes kritisch zu betrachten. Dies erfolgt im Kapitel 5 Ozonprognoseverfahren. So sind sehr oft in den Beschreibungen der Systeme auch Anregungen für neue Ideen oder kritische Anmerkungen zu den Möglichkeiten und Grenzen der Modelle zu finden.

Ein wichtiger Aspekt bei der Modellentwicklung ist die **Datenprüfung** (Kapitel 6). Nur nach einer gründlichen Datenprüfung kann eine robuste und erwartungstreue Entwicklung erfolgen. Wichtig dabei ist der Aspekt, dass nicht nur die Daten für die Entwicklung geprüft werden, sondern auch die für die operationelle Prognose genutzten Daten. Dies ist dadurch gewährleistet, dass Datenprüfroutinen die vor der Entwicklung der eingesetzten Methoden genutzt werden, auch operationell am UBA Anwendung finden. Mit diesem Kapitel wird der Teil Grundlagen beendet.

Die nächsten vier Kapitel beschreiben die hier neuentwickelten Methoden für die Ozonprognose. Sie sind im Teil II Angewandte Methoden und Ergebnisse zusammengefasst. Begonnen wird mit dem Kapitel 7 über Eine wetterlagenbasierte Klassifikation mit nachfolgender Regression. Es beschreibt die Neuentwicklung einer ozonspezifischen Wetterlagenklassifikation und deren Einsatz in einer bedingten Regressionsanalyse. Mit der Nutzung der Wetterlagen werden im Gegensatz zu den üblicherweise genutzten Klassifikationsgründen, wie die lokale Temperatur, großräumige Betrachtungen der meteorologischen Situation in die Regressionsanalyse einbezogen. Das die zugrundeliegende Methode nicht nur für Ozonwetterlagen nutzbar ist, zeigt Anhang E. Hier wird eine Methode zur Objektivierung der Wetterlagen nach Hess & Brezowsky vorgestellt.

 $[\]overline{^{4}\text{Grundlagen, Angewandte Methoden und Ergebnisse sowie Anhang}}$

1.4 Aufbau der Untersuchung

Im Kapitel Ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression (Kapitel 8) wird untersucht, wie der großräumige Transport von Ozon und die großräumige meteorologische Situation in ein Vorhersagemodul eingebunden werden können. Hierfür wird eine formale Verbindung zwischen den großräumigen Verlagerungen auf der Basis von isobaren und geostrophischen Trajektorien und den Bodenozonkonzentrationen des Vortages aufgebaut. Weiterhin wird die Verlagerung von meteorologischen Parametern untersucht.

Im Kapitel 9 wird die Entwicklung der Methode Analoge Fälle mit nachfolgender Regression (AFREG) beschrieben. Die beiden in den vorigen Kapiteln beschriebenen Methoden haben einen systembedingten Nachteil. Nach der Fertigstellung der Routinen stehen die Regressionsfunktionen fest. Treten Änderungen bei den Korrelationen auf, so müssen die Regressionsfunktionen neu abgeleitet werden. Die Methode Analoge Fälle und Regression hat diese systematische Einschränkung nicht. Die Regressionsfunktionen werden täglich auf Grundlage der Analogen Tage neu berechnet.

Da es nicht sinnvoll ist, der Bevölkerung mehrere Einzelprognosen zur Verfügung zu stellen, wird in Kapitel 10 (**Die finalen Ozonprognosen**) eine Kombinationsprognose vorgestellt. Analog zu den Erfahrungen aus der meteorologischen Forschung wird davon ausgegangen, dass eine Kombination mehrerer guter Prognosen noch eine Verbesserung der Vorhersageleistung bringt. In diesem Kapitel wird auch ein Schwellenwertprognosesystem beschrieben.

Abgerundet wird der Teil **Methoden** mit dem Kapitel 11 **Diskussion und Ausblick**. Hier werden alle vorangegangenen Kapitel noch einmal kritisch betrachtet und über die Möglichkeiten weiterer Entwicklungen oder neuer noch zu untersuchender Methoden nachgedacht. Dieses ist insbesondere deshalb wichtig, da während der Bearbeitung der Arbeit einige Dinge aufgefallen sind, bei denen eine weitergehende Betrachtung aus Sicht des Autors sinnvoll wäre.

Teil I Grundlagen