

Kapitel 5

Ozonprognoseverfahren

Die Gesamtheit der Ozonprognosesysteme kann vereinfacht in zwei Teile getrennt werden. Einerseits die numerischen Modelle, die in dieser Arbeit nur kurz im Abschnitt 5.1 einführend erläutert werden, andererseits die statistischen Modelle. Da das hier entwickelte Prognosesystem ein statistisches Modell ist, wird im Abschnitt 5.2 eine kurze Einführung zu anderen statistischen Ozonprognosesystemen gegeben. Die Auflistung erhebt nicht den Anspruch auf Vollständigkeit. Im Abschnitt 5.3 wird darauf eingegangen, welchen Einfluss das Wetter auf die Prognosegüte hat.

Die Entwicklung von kombinierten numerischen und statistischen Modellen tritt in der letzten Zeit immer häufiger auf. Hierzu zählen zum Beispiel das Modell der Freien Universität Berlin [Reimer u. a. 2000] und auch [Sahm u. a. 2000].

5.1 Eine kurze Einführung zu numerischen Modellen

Der folgende Abschnitt basiert im wesentlichen auf den Aussagen von [Fleming 2003b] und [Reimer u. a. 2000]. Bei numerischen Ozonprognosen handelt es sich um den Versuch, die Immissionen durch die numerische Simulation der verursachenden Prozesse zu berechnen. Hierfür können Chemie-Transport-Modelle verwendet werden. Mit ihnen wird die Ausbreitung, Deposition und chemische Umwandlung von Luftbeimengungen simuliert. Vier Sätze von Eingangsdaten werden dafür benötigt:

- Angaben über die Emission, zum Beispiel aus Emissionskatastern,
- Angaben über die meteorologische Situation,
- Angaben über die Landnutzung und
- Angaben zu den Randbedingungen.

Alle Datensätze müssen in entsprechender zeitlicher und räumlicher Auflösung vorliegen. Hierbei können die Prognosemodelle einen Lagrangeschen oder Eulerschen Ansatz verfolgen.

Ein Beispiel für einen Lagrangeschen Ansatz ist ein Trajektorienmodell, das für ausgewählte Orte die chemischen Prozesse des eintreffenden Luftpaketes auf dem Transportweg berechnet. Modelle mit Eulerscher Darstellung verwenden Gitterboxen. Damit simulieren die Modelle hauptsächlich Immissionen welche auf Prozessen beruhen, die sich auf der durch die Gitterboxgröße erfassbaren Skala befinden. Dies gilt auch für Modelle mit Lagrangeschen Ansatz. Diese nutzen zum Beispiel auf Gitternetzen vorliegende meteorologische Eingangsfelder. Prozesse auf einer kleineren Skala werden durch Parametrisierungen erfasst. Dies ist insbesondere dann kritisch, wenn kleinskalige Prozesse die aufgelöste Skala beeinflussen. Aufgrund der notwendigen Vereinfachungen, einschließlich der mathematischen Approximation, ist es prinzipiell nicht möglich ein Modell zu entwickeln, das die Differenz zwischen den Messungen und den Modellvorhersagen auf ein *weißes Rauschen* reduziert.

Ein Gitterboxmodell liefert auf eine Box gemittelte Konzentrationen, deren Ergebnis damit stark von der gewählten Auflösung abhängt. Die berechneten Konzentrationen entsprechen damit nicht unbedingt der Konzentration an einem Punkt. Dies ist einer der Nachteile von numerischen Modellen gegenüber statistischen Modellen. Eine Auflistung der Unterschiede ist in Tabelle 5.1 zu finden. Nachteile von Bedeutung sind:

- dass Punktvorhersagen nicht möglich sind (diese sind wichtig für den direkten Vergleich von Vorhersage und den in den Medien verbreiteten Messwerten)
- und der hohe Rechenaufwand.

Ein wichtiger Parameter ist die für den jeweiligen Modellbetreiber verfügbare Rechnerkapazität und die hierdurch bedingte räumliche Auflösung.

Einen Vergleich von verschiedenen in Europa genutzten Modellen liefert die Arbeit von [Tilmes u. a. 2002]. Diese Arbeit beinhaltet auch einen Modellvergleich anhand von 300 Stationen im Deutschen Bundesgebiet, der im Sommer 1999 durchgeführt wurde. Einen Vergleich von zwei in den östlichen Teilen der Vereinigten Staaten genutzten Modelle zeigt die Arbeit von [Sistla u. a. 2001].

5.2 Statistische Ozonprognosemodelle im Überblick

Tabelle 5.1. Vergleich von Modellcharakteristika [Flemming 2003b]

statistisches Regressionsmodell	eulersches Ausbreitungsmodell
Ergebnis	
- Ozonkonzentration für einen Punkt	- Feldverteilung von flächengemittelten Ozonkonzentrationen
Eingangsdaten	
- Prädiktorvariable (z.B. Temperatur, Wind, Ozon des Vortages)	- meteorologische Datenfelder - Emission, Landnutzung - Anfangs- und Randwerte
Vorhersagegüte	
- gut für einige Tage	- abhängig von den Eingabedaten und der Modellstruktur
- keine Langfristprognose	- Langfristprognose möglich
- problematisch bei hohen Ozonkonzentrationen (seltene Ereignisse)	- keine sehr gute Übereinstimmung mit Stationsmessungen
Hauptanwendungsgebiet	
- Ozonvorhersage (Kurzfrist)	- Forschung - Langzeitrechnung - Szenariorechnung
Aufwand	
- gering	- hoch

5.2 Statistische Ozonprognosemodelle im Überblick

Dadurch dass die Statistik eine lange Tradition in der Meteorologie und Klimatologie hat und relativ geringe Anforderungen an die Rechentechnik stellt, sind statistische Prognosemodelle sehr verbreitet. Zu den am häufigsten genutzten Modellen gehören lineare, nichtlineare und multiple Regressionsmodelle (Unterabschnitt 5.2.1), Neuronale Netze (Unterabschnitt 5.2.2), statistische Trajektorienmodelle (Unterabschnitt 5.2.3) und auf der Zeitreihenanalyse (Unterabschnitt 5.2.4) beruhende Modelle. In den nachfolgenden Abschnitten werden einige dieser Modelle vorgestellt. Diese Aufzählung stellt einen sehr kurzen Überblick über typische Methoden dar. In der Statistik sind bei weitem mehr Methoden im Einsatz, diese alle aufzuzählen ist hier nicht möglich. Sofern die Autoren in den Artikeln Angaben zur Prognosegüte oder -leistung machen, sind diese in der jeweiligen Form in den Text eingefügt worden.

5.2.1 Regressionsmodelle

Regressionsmodelle sind die am einfachsten anzuwendenden und am besten interpretierbaren Methoden zur Vorhersage von Ozon. Dadurch, dass schon früh die Zusammenhänge zwischen Ozonkonzentrationen und der Tagesmaximumtemperatur, der solaren Einstrahlung, der relativen Feuchte und einigen anderen Parametern bekannt waren, konnten mit diesem Wissen schnell Prognosesysteme aufgebaut werden.

Bedingte Regressionsmodelle

Eine deutliche Verbesserung der Vorhersagegüte bringen bedingte Regressionsmodelle (*stratified regression technique*). Hierfür werden die Datenkollektive vorher mit Hilfe von Regressionsbäumen in Klassen bzw. Gruppen aufgeteilt. Ziel einer solchen Aufteilung ist es, das Datenkollektiv so aufzuteilen, dass die Daten innerhalb einer Klasse sich ähnlich sind und die Klassen untereinander so unähnlich wie möglich sind. Wird danach für jede Klasse eine eigene Regressionsfunktion entwickelt, so kann diese an die für die Klasse typischen Eigenschaften angepasst werden.

Der Oberbegriff ist CART, was für *Classification and Regression Trees* steht. In dem Buch *Classification and Regression Trees* von [Breiman u. a. 1984] wird diese Möglichkeit des Aufbaues von Entscheidungsbäumen detailliert beschrieben. Eine sehr simple Methode ist zum Beispiel eine Trennung in Temperaturklassen. Die Aufteilung wird dabei meist binär durchgeführt. Das heißt, an den endständigen Punkten des Baumes (Blatt) wird geprüft, ob durch eine weitere Aufteilung in zwei Klassen die Informationen des betrachteten Blattes, in Abhängigkeit von einem Prädiktor, noch verfeinert werden können.

In der Arbeit von [Gardner und Dorling 2000] wird zum Beispiel ein Baum mit insgesamt 35 Entscheidungsmöglichkeiten für die Station Bristol dargestellt. Für fünf Stationen in Großbritannien wurde in dieser Arbeit ein solcher Regressionsbaum aufgebaut. Beim Test an einem unabhängigen Kollektiv wurde ein mittlerer RMSE von 8 bis 9 ppb (16 bis 18 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) ermittelt.

Ein anderes Beispiel für die Anwendung der CART-Methode liefern [Burrows u. a. 1995]. Ziel war eine Vorhersage darüber, ob an einem Tag die Grenze von 80 ppb (160 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) überschritten wird oder nicht. Die Entwicklung erfolgte für die Regionen Vancouver, Montreal und die Atlantikregion Kanadas. Etwa 66 % der Vorhersagen durch das Modell waren in einem Test an unabhängigen Daten richtig, bei einer Grundwahrscheinlichkeit von 2 bis 8% für eine Überschreitung des Schwellenwertes.

Feister und Balzer untersuchen in ihrem Artikel [Feister und Balzer 1991] für fünf Stationen im Nordosten Deutschlands die Beziehungen zwischen Ozonkonzentrationen und meteorologischen Parametern. Auch hier wird die bedingte Regressionsanalyse genutzt. Da diese Untersuchung das Ziel hatte, mögliche

5.2 Statistische Ozonprognosemodelle im Überblick

Zusammenhänge zwischen Ozon und den meteorologischen Bedingungen zu beschreiben, erfolgte kein Einsatz als operatives Modell. Bei allen Stationen war die Persistenz der wichtigste Prädiktor. Als zweitbesten Prädiktor zeigte sich die relative tägliche Sonnenscheindauer. Die tägliche Sonnenscheindauer enthält implizit zwei Parameter, die die Ozonbildung maßgeblich beeinflussen. Das sind die Strahlung und die Temperatur. Weitere Prädiktoren erwiesen sich nicht als sinnvoll.

[Eder u. a. 1994] nutzten eine *principal-components analysis* für die Einteilung der großräumigen meteorologischen Situation im Osten der Vereinigten Staaten von Amerika und führten dann eine Clusteranalyse durch. Dadurch werden sieben Klassen meteorologischer Situationen erstellt. Bei einer nachgeordneten Regression werden für die Station Birmingham (Alabama) Prognoseergebnisse mit einem RMSE von 12,8 bzw. 13,9 ppb (25,6 bis 27,8 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) erreicht.

[Spichtinger u. a. 1996] untersuchten den Zusammenhang zwischen Ozon und Großwetterlagen am Beispiel der Region München. Dafür wurden die 30 Klassen der Großwetterlagen zu 4 Gruppen zusammengefasst. Sie konnten zeigen, dass Ozonepisoden in der Hauptsache bei bestimmten Wetterlagen auftreten. Zwei Nutzungsvorschläge werden gemacht:

- eine Prognose auf Basis von Wetterlagen während Ozonepisoden im Sommer
- und die Nutzung von Wetterlagen zur Elimination der Wettereinflüsse bei der Kalkulation langfristiger Trends.

Ozonprognosen am Umweltbundesamt

Seit dem Sommer 1994 werden am Umweltbundesamt Ozonprognosen berechnet. Alle gehören zu den Regressionsmodellen. Die Entwicklung erfolgte dabei in vier Schritten.

Das Jahr 1994 Bedingt durch einen noch sehr beschränkten Datenaustausch unter Routinebedingungen und durch eine zu der Zeit noch nicht so leistungsfähige Rechnertechnik, war eine Vorhersage nur für wenige Stationen (25) möglich. Entsprechend Gleichung 5.1 konnte eine Vorhersage für den Folgetag berechnet werden.

$$O_{3_{Prog}} = K + A \times O_{3_{vt}} + B \times T_{vt}^3 + C \times T_{Prog}^3 \quad (5.1)$$

Dabei sind K , A , B , C die Regressionskoeffizienten, T die prognostizierte Temperatur ($Prog$) bzw. die vom Vortag (vt) und O_3 die Ozonkonzentration vom Vortag bzw. die Prognose. Diese Prognose wurde von Grosch und Schmidt [Grosch und Schmidt 1994] entwickelt.

Die Jahre 1995 bis 1999 Zunehmend standen mehr Stationen für die Analyse zur Verfügung, ihre Zahl konnte auf 110 erhöht werden. Für die neuen Stationen wurde geprüft, inwiefern die alte Methode übernommen werden konnte. Das Prinzip der multiplen Regression blieb erhalten. Für einige Stationen war aber eine Übertragung, dahingehend das die dritte Potenz der Temperatur genutzt wurde, nicht erfolgreich. Daher wurde für diese Stationen die Regressionsfunktion etwas abgewandelt (siehe Gleichung 5.2).

$$O_{3_{Prog}} = K + A \times O_{3_{vt}} + B \times T_{vt} + C \times T_{Prog} \quad (5.2)$$

Die Jahre 2000 und 2001 Im Jahr 1999 wurde die Ozonprognose komplett überarbeitet. Die Zahl der bearbeiteten Stationen stieg auf über 300. Durch den Deutschen Wetterdienst (DWD) wurden tägliche Wetterprognosedaten in Gitternetzform für ganz Deutschland bereitgestellt. Diese Prognosen, wie auch die Ozondaten, lagen für die Jahre 1992 bis 1998 vor. Im ersten Schritt wurde eine Klassifikation der Tage vorgenommen. Es zeigte sich, dass eine Unterteilung in kalte (Maximumtemperatur $< 23^{\circ}C$) und warme Tage (Maximumtemperatur $\geq 23^{\circ}C$) wesentlich zur Verbesserung der Vorhersage beiträgt. Im nächsten Schritt konnte eine klassen- und stationspezifische Selektion der Prädiktoren durchgeführt werden. Zur Vermeidung von räumlichen Diskontinuitäten wurde nach Simulationsrechnungen die Zahl der Prädiktoren auf fünf reduziert. Das sind die Persistenz des Ozonmaximums, das prognostizierte Temperaturmaximum, die kurzweilige Strahlungsbilanz, die relative Feuchte in 850 hPa und die Änderung des prognostizierten Temperaturmaximums im Vergleich zum Vortag. Die meteorologischen Parameter wurden für jede Station vom nächstliegenden Gitterpunkt der DWD-Vorhersage übernommen. Die Vorhersage wurde gegen 9 Uhr Sommerzeit für den aktuellen Tag und den Folgetag berechnet. Die Entwicklung der Routine erfolgte durch [Enke 2001b].

Das Jahr 2002 Für das Jahr 2002 erfolgte einerseits eine Aktualisierung der Regressionsgleichungen, andererseits wurde der Vorhersagehorizont um einen Tag erweitert. Als Drittes wurde eine Prognose des gleitenden achtstündigen Mittels erstellt. Diese wurde in der Saison 2002 nur intern erprobt und wird ab 2003 auch veröffentlicht.

Vergleich der Ergebnisse In Tabelle 5.2 werden die Prognoseleistungen der vier oben beschriebenen Routinen für die Prognose des laufenden Tages aufgelistet. Von 1994 bis 2000 ist eine stetige Verbesserung der Vorhersageleistung sichtbar. In den Jahren 2001 und besonders im Jahr 2002 ist, bezogen auf den RMSE, eine Verschlechterung erkennbar. Dieses ist relativ einfach erklärbar. Alle genutzten Modelle können als erweiterte Persistenzmodelle beschrieben werden. Das heißt, ein Großteil der Vorhersageleistung basiert auf dem Persistenzverhalten.

5.2 Statistische Ozonprognosemodelle im Überblick

Seit 2000 nimmt die Persistenzneigung jedoch ab. So ist ein Vergleich des Jahres 2002 mit dem Jahr 1995, aufgrund ähnlichen Persistenzverhaltens, sinnvoller als mit dem Jahr 2000.

Tabelle 5.2. Entwicklung der Vorhersageleistung für die Jahre 1994 bis 2002; für die Jahre 1997 und 1998 wurden am Umweltbundesamt zwar Prognosen erstellt, eine Prüfung der Vorhersagegüte erfolgte allerdings nicht.

Jahr	RMSE Prognose	RMSE Persistenz	RV
1994	28,0 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35,7 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	35 %
1995	26,1 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	31,0 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	30 %
1996	21,1 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	28,7 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	42 %
1999	18,4 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	25,5 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	41 %
2000	18,3 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	26,1 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	51 %
2001	18,5 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	28,0 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	56 %
2002	22,4 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	31,4 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	49 %

Die Auflistung der am UBA genutzten Prognosesysteme zeigt mehrere interessante Aspekte der Entwicklungen der letzten Jahre auf. Obwohl sich die Methode kaum änderte, denn es wurden immer multiple Regressionsfunktionen genutzt, konnte trotz deutlicher Erhöhung der Stationsanzahl eine Verbesserung der Prognoseleistung erreicht werden. Ein Vergleich mit den Ergebnissen von numerischen Modellen in [Tilmes u. a. 2002] zeigt, dass mit diesen einfachen statistischen Modellen im Jahr 1999 eine bessere Vorhersageleistung, mit einem mittleren RMSE von $18,4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ gegenüber einem mittleren RMSE von ca. 11-12 ppb ($22 - 24 \mu\text{g}/\text{m}^3$) bei den besten numerischen Modellen, erreicht wurde. Andererseits ist die Abhängigkeit von der Persistenz immer noch sehr hoch. Diese Ergebnisse stimmen mit der allgemeinen Entwicklung statistischer Ozonprognoseroutinen überein.

5.2.2 Neuronale Netze

In den letzten Jahren wurden verstärkt neuronale Netze zur Untersuchung von komplexen Problemen, wie auch zur Vorhersage von auf diesen komplexen Zusammenhängen beruhenden Zielgrößen, genutzt. Dieses war erst durch eine breite Verfügbarkeit von hohen Rechnerkapazitäten möglich. Daher ist es nicht verwunderlich, dass im Bereich der Ozonproblematik verstärkt neuronale Netze genutzt werden.

Eine detaillierte Erläuterung, was neuronale Netze sind und wie diese trainiert werden, kann hier nicht gegeben werden. Der Name neuronale Netze stammt aus der Biologie. Gemeint sind dabei Neuronen (Nervenzellen) von Organismen.

Die Arbeitsweise ist dabei wie folgt: Auf einem schwellenwertabhängigen äußeren Reiz (Input) reagierend, wird ein Signal an das Gehirn geschickt. Im Gehirn erfolgt dann die Auslösung einer reizabhängigen Reaktion (Output). Bevor diese Reaktion erfolgen kann, muss das Gehirn darauf trainiert werden, welcher Reiz wie verursacht wird und welche Reaktion darauf sinnvoll ist. Dieser Prozeß wird von den (*Artificial*) *Neural Networks* nachgebildet.

In der Arbeit von [Gardner und Dorling 1998] wird ein kurzer Überblick gegeben, woran gedacht werden muss, wenn neuronale Netze genutzt werden sollen. In zwei weiteren Arbeiten beschreiben die Autoren die Nutzung von neuronalen Netzen für die Vorhersage von NO_x und NO_2 [Gardner und Dorling 1999] sowie für Ozon [Gardner und Dorling 2000]. Sie attestieren der Methode einen geringen Vorteil gegenüber der bedingten Regression, unter der Bedingung, dass besonders auf eine stabile Entwicklung mit unabhängigen Testkollektiven geachtet wird. Zum Beispiel erreichen die neuronalen Netze eine Vorhersagegüte (RMSE) von 6,5 bis 8,5 ppb (13 bis 17 $\mu g/m^3$) für die fünf untersuchten Stationen in Großbritannien. Die Vorhersagegüte der bedingten Regression lag für denselben Untersuchungszeitraum bei 8 bis 9 ppb (16 bis 18 $\mu g/m^3$).

In der Untersuchung von [Yi und Prybutok 1996] werden ein neuronales Netzwerk, ein Regressionsmodell und ein ARIMA (Autoregressive-Integrated-Moving-Average) Modell verglichen. Dabei schneidet das neuronale Netz am besten ab. Es hat den entscheidenden Vorteil einer zusätzlichen Mustererkennung.

Ein weiteres Beispiel für die Anwendung neuronaler Netze für die Ozonprognose ist das System PROZON, welches für das Land Brandenburg entwickelt wurde [INCO 1993, INCO 1994]. Trainiert an den Daten der Jahre 1991 und 1992, ermöglicht die entwickelte Methode die Vorhersage für acht Stationen. Zwei Prognosehorizonte können abgedeckt werden, am Vormittag erfolgt eine Vorhersage für den Nachmittag und am Nachmittag für den Folgetag. Als Vorhersageleistung wird ein RV-Maß von 67% für die Nachmittagsprognose und von 46% für die Folgetagsprognose angegeben.

Im Artikel von [Ballester u. a. 2001] wird eine weitere Anwendung neuronaler Netze beschrieben. Im Gegensatz zu den bisher beschriebenen, werden hier keine feste Neuroneninformationen genutzt. Hier wird zum Anfang ein Trainingshorizont festgelegt (120 Tage). Nachdem das Netz mit dieser Anzahl an Tagen gefüllt worden ist, kann die Vorhersage wie folgt beginnen:

1. Prognose für den Folgetag
2. Löschen des ersten Trainingstages
3. Neues Training mit den verbliebenen Trainingstagen und den Beobachtungswerten des letzten Vorhersagetages

Die Abarbeitung erfolgt iterativ und somit kann eine ständige Aktualisierung der Informationen im neuronalen Netz erfolgen. Für die Prognose werden dann

5.2 Statistische Ozonprognosemodelle im Überblick

die Informationen der letzten 120 Tage genutzt. Eine Vorhersage wird für jede Stunde des Tages vorgenommen. Als Qualitätskriterium wurde der RMSE gewählt. Hier wurden Werte zwischen 10 und 15 ppb (20 bis 30 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) erreicht.

5.2.3 Statistische Trajektorienmodelle

Bei der Betrachtung lokaler Ozonbedingungen dürfen überregionale Einflüsse nicht unberücksichtigt bleiben. Ein Hilfsmittel dafür sind Trajektorien. Eine Einführung zu Trajektorien ist im Kapitel 8 zu finden. Nach der Berechnung der Trajektorien wird bei den statistischen Trajektorienmodellen oft nur noch eine an die Clusteranalyse angelehnte Einteilung der Ursprungsorte vorgenommen. Die lokale Ozonkonzentration wird dann als Funktion des Ursprungsortes, einiger Trajektorieninformationen und einiger weiterer Prädiktoren berechnet. Eine Analyse des Zusammenhanges zwischen Trajektorien und Konzentrationen von Luftschadstoffen wurde z.B. von [Stohl und Scheifinger 1994] durchgeführt.

5.2.4 Zeitreihenmodelle

Einen weiteren methodischen Ansatz zur Prognose liefern zeitreihenanalytische Modelle. Während bei der Regression zeitgleiche Ausprägungen zweier oder mehrerer Variablen betrachtet werden, liegt der Schwerpunkt bei der Betrachtung der Zeitreihen auf den Zusammenhängen zeitlich aufeinanderfolgender Messwerte zunächst in einer Zeitreihe (univariate Modelle). Nach der Eliminierung systematischer Schwankungen wie Trend, Konjunktur und Saison untersuchen diese Box-Jenkins-Modelle die in den zurückbleibenden Reihen enthaltenen *moving averages* (MA, gleitende Durchschnitte) und/oder *autoregressive* (AR) Anteile, die eine Modellierung und damit einen Erklärungsanteil an den Schwankungen haben können. Dies sind die sogenannten saisonalen, integrierten AR- und MA-Modelle, kurz SARIMA. Die univariaten Modelle basieren auf der Annahme, dass die zurückbleibende Reihe (nach Entfernung der AR- und MA-Anteile) eine reine Residuenreihe darstellt und dem *weißen Rauschen* gleichgestellt werden kann. Das erfordert, dass die Lageparameter wie Mittelwert und Standardabweichung für alle Abschnitte der Residuenreihe gleich sind.

Das ist jedoch bei Ozon nicht der Fall. Neben den systematischen Schwankungen und den MA- und AR-Anteilen (endogene Variablen) sind Ozonreihen durch exogene Variablen beeinflusst. Das heißt, die Variabilität der univariaten Residuenreihe kann durch das Einbeziehen dieser äußeren Einflussgrößen zusätzlich erklärt werden. Diese multivariaten Zeitreihen heißen Transfer-Funktions-Modelle und sind sehr rechenaufwendig. Eine Vereinfachung dieser Modelle führt zu den etwas weniger rechenaufwendigen ARMAX-Modellen.

Während Regressionsmodelle auf den Zusammenhängen zwischen zwei oder mehr zeitgleichen Variablen und die univariaten Box-Jenkins-Modelle (SARIMA) auf

den Zusammenhängen zwischen aufeinanderfolgenden Werten einer Variablen beruhen, suchen die multivariaten Transfer-Funktions- und ARMAX-Modelle nach beiden (endogen und exogenen) Zusammenhängen zwischen mehreren Variablen. Somit sollten diese multivariaten Zeitreihenmodelle eine größere Erklärungskraft als die Regressionsmodelle einerseits und die SARIMA-Modelle andererseits besitzen, da sie gewissermaßen die Kombination aus beiden Modellgruppen darstellen.

Es bleibt allerdings die Frage, ob der erheblich erhöhte Rechenaufwand einen Zugewinn an Erklärungskraft rechtfertigt, der möglicherweise nur geringfügig größer ist als jener der Regressionsmodelle. Auf jeden Fall übersteigen Transfer-Funktions-Modelle (auch ARMAX) und Regressionsmodelle die Erklärungskraft von SARIMA-Modellen deutlich. Das lässt letztlich die Folgerung zu, dass auch die Erklärungskraft der Transfer-Funktions-Modelle im Wesentlichen von der Analyse gleichzeitiger Merkmale zweier oder mehrerer Variablen herrührt. Dann aber können auch die einfachen Regressionsmodelle verwendet werden und eine geringfügig niedrigere Erklärungskraft in Kauf genommen werden. [Lacombe 2003, Storm 1995, Schönwiese 2000]

In den Arbeiten von [Schlink und Volta 2000] und [Damon und Guillas 2001] werden einige Kombinationen von Ozonzeitreihen mit meteorologischen Parametern vorgestellt. Hierbei erreichen [Damon und Guillas 2001] einen RMSE von 15,5 bis 23,0 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für die Station B ethune (Frankreich).

5.2.5 Einschätzung der Methoden für die weitere Nutzung

Zwei der oben beschriebenen Methoden (neuronale Netze und Zeitreihenmodelle) werden in dieser Arbeit nicht genutzt. Die neuronalen Netze haben zwei Nachteile. Zum Ersten ist die Gefahr des Overfittings sehr hoch und zweitens sind die inneren Zusammenhänge so gut wie nicht interpretierbar. Zeitreihenmodelle machen nur Sinn wenn die Hoffnung besteht, dass der oben genannte minimale Vorteil, trotz deutlich erhöhten Rechenaufwandes, ausreichend groß ist. Dies wird für die hier betrachtete Aufgabe nicht vermutet.

Die Methoden der bedingten Regression werden im Prognosemodul Wetterlagen genutzt (Kapitel 7). Die drei anderen Methoden nutzen einfache Regressionsansätze (Kapitel 8 bis 10). Das Kapitel 8 zeigt eine Weiterentwicklung statistischer Trajektorienmodelle.

5.3 Einfluss der Wettervorhersage auf die Ozonprognose

Im Artikel von [Schlink u. a. 2003] wird ein Vergleich von 15 Methoden zur Prognose von Ozon vorgestellt. Neben einem reinen Persistenzmodell und einer einfachen linearen Regression, werden in der Hauptsache Zeitreihenmodelle mit neuronalen Netzen verglichen. Getestet wurde an 10 Ozonmessstationen in Europa. Die Autoren bescheinigen hierbei den neuronalen Netzen die beste Prognoseleistung. Erreicht werden konnte die hohe Qualität nur dadurch, dass *regularisation schemes* angewandt wurden. Eine Kombination des *regularisation scheme* Early stopping mit der *cost function* sum of squared error brachte die besten Ergebnisse im Vergleich [Schlink u. a. 2003]. Als Gütemaß werden der mittlere absolute Fehler (MAE¹) und der Success Index genutzt. Im Vorgriff auf die Ergebnisse der Arbeit kann festgestellt werden, dass die hier entwickelten Routinen in der Vorhersagequalität den besten Routinen im Artikel ebenbürtig sind. Eine Einarbeitung von neuronalen Netzen mit den obengenannten Lernmechanismen war, aufgrund des fortgeschrittenen Stadiums der Arbeit bei bekannt werden der Ergebnisse², nicht mehr möglich.

5.3 Einfluss der Wettervorhersage auf die Ozonprognose

Die in dieser Arbeit vorgestellten Prognosemodelle basieren auf zwei Eingangsdatensätzen. Das sind die numerischen Wettervorhersagen vom Deutschen Wetterdienst und die Messergebnisse der Luftgütemessnetze der Bundesländer. Während die Fehlergröße bei der Messung der Luftgüte in den letzten Jahren in etwa stabil geblieben ist, ist eine deutliche Verbesserung der Prognoseleistung bei den Wettervorhersagen eingetreten. Trotzdem ist es möglich, dass, wenn die prognostizierten meteorologischen Parameter sich deutlich von den eingetroffenen unterscheiden, sich auch die prognostizierten Ozonkonzentrationen deutlich von den eingetroffenen Konzentrationen unterscheiden.

Daher ist es wichtig daran zu erinnern, dass die Güte der Wetterprognose einen entscheidenden Einfluss auf die Prognosegüte von Ozonvorhersagen hat! Die Arbeiten von [Biswas und Rao 2001]³ und [Alapaty u. a. 1995]⁴ sollen hier stellvertretend für Untersuchungen genannt werden, die diesen Einfluss quantifizieren. So kommen [Biswas und Rao 2001] zu dem Ergebnis, dass Unsicherheiten von bis zu 20 % im Ozonprognoseergebnis durch Fehler in der Wettervorhersage entstehen können. [Alapaty u. a. 1995] zeigen, dass Fehlvorhersagen im Bereich von 15 bis -10 ppb (30 bis -20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) bei Gebietsmitteln und im Bereich 95 bis -92 ppb (190 bis - 184 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) bei stationsbezogenen Ozonvorhersagen möglich sind. Bei beiden Artikeln wurden die Ergebnisse von numerischen Ozonprognosemodellen

¹englisch **M**ean **A**bsolute **E**rror

²Der Artikel wurde im Juli 2003 veröffentlicht.

³Untersucht wurden drei Ozonepisoden im Sommer 1995

⁴Untersucht wurde eine Ozonepisode im Zeitraum 29.7. - 5.8.1988.

untersucht, die einmal mit prognostischen und zum anderen mit diagnostischen meteorologischen Feldern angetrieben wurden. Durch den in der vorliegenden Arbeit genutzten Perfekt-Prog Ansatz wirkt sich jede Verbesserung der Güte bei den Wettervorhersagen direkt in einer Verbesserung der Ozonprognosegüte aus.