

Kapitel 8

Ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression

8.1 Einführung und Zielsetzung

Eine Trajektorie ist der Weg, den ein Partikel oder Luftteilchen innerhalb eines Zeitraumes beschreibt. Die Trajektorie von Körpern, wie z.B. einem Ballon, ist relativ einfach, mittels geeigneter Messgeräte, feststellbar. Dieses gilt nicht für Luftpartikel in einem strömenden Kontinuum. Trajektorien von Luftpartikeln können nur indirekt bestimmt werden. Hierfür können Messdaten von Radiosonden (Luftdruck, Temperatur, Feuchte und Horizontalwind) genutzt werden. Alternativ können auch feinauflösende Ergebnisse der numerischen Wettermodelle die notwendigen Eingangsdaten liefern.

Die Konstruktion atmosphärischer Trajektorien ist ein wertvolles Mittel zum Verständnis der großräumigen Zirkulation und dem darin eingebetteten Transport von Schadstoffen. So kann zum Beispiel die Lage der Quellen (Emittenten) von Schadstoffen ermittelt [Reimer u. a. 1987] oder die großräumigen Belastungen durch Transporte nachgewiesen werden [Rodhe 1974]. Der advektive Transport von Luftmassen und der darin enthaltenen Schadstoffe ist eine wichtige Komponente für die Prognose von Ozonwerten [Stohl und Kromp-Kolb 1994, Uno u. a. 1984, Stedman und Williams 1992, Varey u. a. 1988, Stedel 1988]. Die Kenntnis über die Herkunft der vor Ort auftretenden Luftmassen ist essenziell. Im Kapitel 8.2 werden die Konstruktion von Trajektorien und deren Nutzung beschrieben.

Aus der Erfahrung ist bekannt, dass die lokale Ozonsituation das Resultat von lokalen und großräumigen Luftverunreinigungen und den meteorologischen Bedingungen ist. Damit besteht die Hoffnung, dass mit dem Wissen über die Ozonkonzentrationen und den atmosphärischen Verhältnissen auf dem Weg der Luftmasse zum betrachteten Ort, die Prognoseleistung verbessert werden kann.

8.2 Konstruktion von atmosphärischen Trajektorien

Zuerst steht die Frage: was ist eine atmosphärische Trajektorie? Sie ist definitionsgemäß zu jedem Zeitpunkt die Tangente zum Windvektor. Dabei beschreibt sie die Bahn eines Teilchens innerhalb eines Zeitraumes. Dieses steht im Gegensatz zur Definition einer Stromlinie. Eine Stromlinie stellt die Bewegung vieler Teilchen zu einem Zeitpunkt (*Momentaufnahme*) dar. Bei der Konstruktion von Trajektorien treten vor allen zwei Hauptschwierigkeiten auf [Danielsen 1961, Danielsen 1974]:

- die zeitliche und räumliche Auflösung der Ausgangsdaten ist oft nicht ausreichend und
- eine Aussage über die tatsächliche Bahn ist nur für einen Massenpunkt möglich.

Zur vollständigen Konstruktion einer Trajektorie wird auch die Vertikalgeschwindigkeit benötigt. Diese ist mit Radiosonden nicht messbar. Sie kann aber in numerischen Modellen ermittelt werden. Vereinfachend kann die dreidimensionale Bewegung durch spezielle Koordinatensysteme zweidimensional approximiert werden. Es wird dann angenommen, dass die Bewegung auf einer Fläche mit konstanter Vertikalkoordinate erfolgt. Andere Vertikalbewegungen werden explizit vernachlässigt. Als Vertikalkoordinaten werden atmosphärische Zustandsgrößen genutzt, die eine eindeutige Zuordnung zur geometrischen Höhe z haben. Aus den Datenlagen bieten sich zwei Verfahren an. Zum Ersten Flächen konstanten Druckes (*isobare Trajektorien*), zum Zweiten ein *isentropes* Koordinatensystem bei dem die Vertikalkoordinate die potenzielle Temperatur ist. Voraussetzung dafür ist die Approximation, dass adiabatische Luftbewegungen vorherrschen. Isobare und isentrope Trajektorien können erheblich voneinander differieren [Danielsen 1961]. Isentrope Trajektorien stellen den möglichen Weg besser dar. Die Berechnung erfordert aber mehr Dateninput und ist deutlich aufwendiger. Die hier angewandte Methode nutzt den Luftdruck als Vertikalkomponente. Sie basiert auf den Flächen gleichen Luftdruckes. Als Grundlage kann das Kapitel *Kinematics of quasi-horizontal motion* in [Petterssen 1956] angesehen werden. Dort wird die Konstruktion von zweidimensionalen semi-Lagrangeschen Trajektorien beschrieben. Nachteil dieser Methode ist die systembedingte Vernachlässigung der vertikalen Komponente der Bewegungen in der Atmosphäre.

Zur Konstruktion wird das Windfeld für das zu bearbeitende Gebiet benötigt. Für die vorliegende Bearbeitung sind im 6-stündigen Abstand Geopotentialfelder der Hauptdruckflächen vorhanden. Unter Annahme einer vereinfachten Windapproximation auf Basis des geostrophischen Windes, kann daraus das Windfeld

8.2 Konstruktion von atmosphärischen Trajektorien

berechnet werden. Die geostrophische Windgeschwindigkeit berechnet sich dafür entsprechend Gleichung 8.1.

$$\vec{V}_g = -\frac{1}{f} \vec{\nabla}_p \Phi \times \vec{k} \quad (8.1)$$

mit \vec{V}_g als geostrophischer Windvektor, f dem Coriolisparameter, Φ dem Geopotential und \vec{k} dem k-Vektor. Der Coriolisparameter wurde in Abhängigkeit von der geografischen Breite ϕ wie folgt berechnet:

$$f = 2\omega \sin \phi \quad (8.2)$$

dabei ist $\omega = 0,00007292s^{-1}$. Systembedingt kann nur mit diskreten Zeitschritten gerechnet werden. Für jeden Zeitschritt wird die Verlagerungsrichtung und -geschwindigkeit zu Beginn und am Ende des Zeitschrittes berechnet und dann gemittelt. Unter Zuhilfenahme beider Werte wird dann das Luftpaket entsprechend der Zeitschrittlänge verlagert. Die neue Position errechnet sich aus dem Startpunkt und der Verlagerung durch die am Startpunkt vorherrschende mittlere Luftbewegung (siehe Abbildung: 8.1).

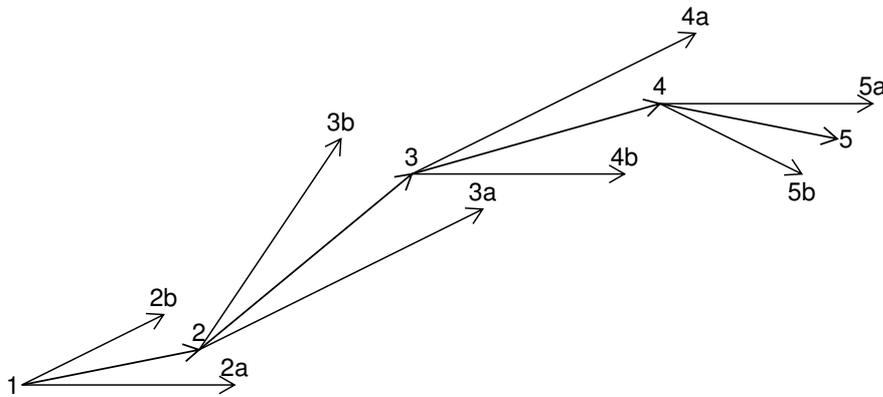


Abbildung 8.1. Dargestellt wird hier die schematische Verlagerung von Punkt 1 nach Punkt 5 (Vorwärtstrajektorie). Der Pfeil mit dem Index a stellt den Wind am Anfang des Zeitschrittes und der Pfeil mit dem Index b den Wind am Ende des Zeitschrittes dar. Die resultierende mittlere Verlagerung wird ohne Indizes dargestellt.

Laut der Arbeit von [Seibert 1993] sollte der Zeitschritt nicht größer als 30 min sein. Dieses ist darin begründet, dass bei größeren Zeitschritten die Trajektorie nicht mehr annähernd parallel zu den Isohypsen verläuft. Da die vorliegenden Modelloutputs des GME-Modells eine Schrittweite von 6 Stunden haben, wurden die vorliegenden Felder entsprechend linear auf den Zeitschritt von 30 min interpoliert. Der genutzte Datensatz hat eine räumliche Auflösung von $0,75^\circ$ (geografischer Breite und Länge). Dieses ist ein zu grobes Raster für die Berechnung

von Trajektorien bei dem vorgegebenen Zeitschritt. Daher wurde die Auflösung bilinear auf $0,25^\circ$ erhöht.

Im Rahmen der Entwicklung wurden die Trajektorien für die Druckflächen 1000, 950, 850, 700 und 500 hPa berechnet. In den nächsten Schritten musste ermittelt werden, bei welcher Druckfläche die Verlagerung die besten Vorhersageergebnisse bringt. Es wurden entgegen der Darstellung in Abbildung 8.1 Rückwärtstrajektorien berechnet. Hierbei werden die Windverhältnisse am Endpunkt der Trajektorie genutzt um den Ursprungsort der Massenpunkte zu ermitteln.

8.3 Ozondaten vom europäischen Umland

Die Verlagerung der Luftpakete allein hilft noch nicht bei der Ozonprognose. Es muss auch etwas über die Eigenschaften des Luftpaketes in Bezug auf die Luftqualität bekannt sein. Diese Eigenschaften werden entscheidend von dessen Ursprungsort beeinflusst. Somit ist es notwendig, etwas über die dort vorherrschende Luftqualität zu wissen. Diese Ursprungsorte liegen aber nicht nur in Deutschland.

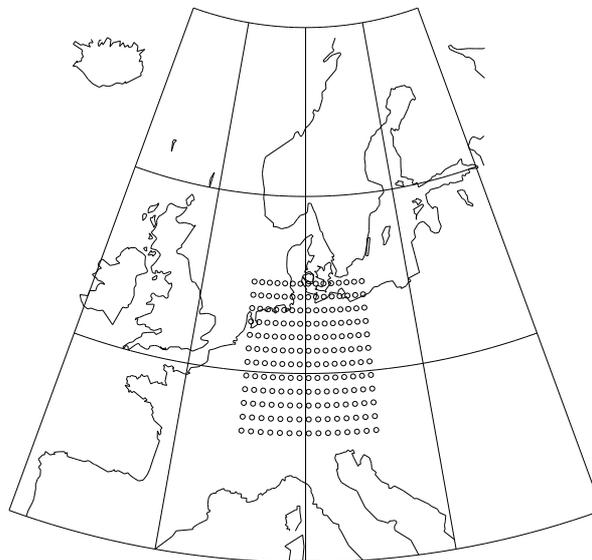


Abbildung 8.2. Übersicht über das Gebiet der Endpunkte der Rückwärtstrajektorien

Infolge der EU-Gesetzgebung [EU 2002] erfolgt in allen EU-Ländern eine sehr ähnliche Überwachung der bodennahen Luftgüte. Dieses gilt auch für die osteuropäischen Beitrittskandidaten. Entsprechend einer Ratsentscheidung der EU [EU-Rat 1997]¹ sind die Mitgliedsländer angehalten, ihre Messwerte der EU zur

¹Die Ratsentscheidung zum Datenaustausch vom 27. Januar 1997 wurde durch die Entscheidung der EU-Kommission vom 17. Oktober 2001 geändert [EU-Kommission 2001]. Die Änderungen beziehen sich auf die Anhänge.

8.3 Ozondaten vom europäischen Umland

Verfügung zu stellen. Im Auftrage der EU sammelt das European Topic Centre on Air and Climate Change als Unterorganisation der European Environment Agency (EEA) die Luftqualitätsdaten in einer Datenbank. Leider war es der EEA nicht möglich, diese Daten direkt zur Verfügung zu stellen. Somit war nur der indirekte Weg, über einen vom Internet aus zugänglichen Datenbankserver, möglich (<http://bettie.rivm.nl/etcaq/appletstar.html>).

Die Oberfläche war nicht für einen einfachen kompletten Zugriff gedacht und der dazugehörige Datenserver war sehr instabil. Die Stationsinformationen konnten nicht im Zusammenhang mit den Messwerten abgerufen werden. Somit kann nicht ausgeschlossen werden, dass einige Zuordnungsfehler aufgetreten sind.

Weiterhin ist die Vollständigkeit der Daten nicht nachprüfbar. Bis Ende 2002 waren in dem zugänglichen Teil der Datenbank die Ozondaten der Jahre 1998 - 2000 archiviert, dieses aber nicht für alle Mitgliedsländer und teils nur mit einer geringen Flächenabdeckung der Territorien (z.B. sind für Italien nur Daten des Jahres 2000 vorhanden). Insgesamt umfasst der Datensatz für Ozon 1277 Stationen. Es sind aber nicht für jede Station stündliche Daten vorhanden.

8.3.1 Die Aufbereitung der EU-Daten

Im ersten Schritt wurden die Stationen mit Hilfe des Klassifikationsverfahrens von Flemming [Flemming 2002, Flemming 2003a] einem Immissionsregime zugeordnet. Die Klassifikation beruht auf einem Maß für die mittlere Belastung und für die Ausprägung des Tagesganges. Es werden als Regime *Berg (B)*, *Land (R)*, *Vorstadt (U1)*, *Stadt (U2)*, *Stadt verkehrsnah (U3)* und *Straße (S)* unterschieden. Untersuchungen von [Flemming 2002] zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von [Enke u. a. 1998]. Daneben wurde für jede Station ein Jahresgang der mittleren Tagesmaxima berechnet.

Unter Zuhilfenahme beider oben genannter Informationen konnten im zweiten Schritt die Stationswerte auf ein Gitternetz interpoliert werden. Hierbei wurden nur die ländlichen (R) und städtischen (U1, U2, U3) Stationen genutzt und nur die Abweichung des täglichen Maximums vom Jahresgang übertragen. Die Nutzung von Berg- und Verkehrsstationen erwies sich als nicht sinnvoll, da diese Daten nicht für flächenhafte Aussagen über die Bodenozoneverhältnisse nutzbar sind. Da nicht für jeden Gitterpunkt Daten vorhanden waren, wurden im nächsten Schritt die Gitterdaten interpoliert. Somit ist für jeden Tag, für jeden Gitterpunkt eine Aussage über die Abweichung vom Jahresgang möglich.

8.4 Eine Ozonprognose auf der Basis von Trajektorien

Mit den in den obigen Abschnitten vorgestellten Trajektorienberechnungen, den auf Gitterpunktsbasis vorliegenden Ozondaten für Europa und den Analysen der Wettersituationen kann ein Modell für eine Prognose von Ozonwerten aufgebaut werden. Ziel ist eine stationsbezogene Prognose. Grundlage dafür ist die Idee einer formalen Verknüpfung der atmosphärischen Verlagerung, dargestellt durch die Trajektorien und den maximalen Ozonkonzentrationen am Boden bzw. meteorologischen Parametern am Boden bzw. in 950 hPa. In einem ersten Schritt wurden der Screeningroutine die in Tabelle 8.1 aufgelisteten Prädiktoren zur Selektion angeboten.

Tabelle 8.1. Liste der Prädiktoren für die trajektorienbezogene Ozonprognose

Name / Beschreibung	
Wegstrecke	[km]
Mittlere Abweichung vom Jahresgang der maximalen Ozonkonzentration	[$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Mittlere Temperatur in 2m Höhe entlang der Trajektorie	[K]
Mittlere relative Luftfeuchte in 950 hPa entlang der Trajektorie	[%]

Die mittlere Abweichung der maximalen Ozonkonzentration vom Jahresgang, die mittlere Temperatur und die relative Feuchte wurde dafür wie folgt berechnet: Für jede der Trajektorien lagen bis zu 24 Punkte der geografischen Position, mit je einer Stunde Abstand vor. Die Werte aller Punkte wurden entlang der Trajektorie gemittelt. Hierbei wurden jeweils die Werte des Vortages genutzt. Für die Berechnung der Wegstrecke wurden die Abstände der einzelnen Punkte zueinander aufsummiert. Parallel dazu wurde getestet, wie viele Stunden zurück die Trajektorie gehen sollte und auf welcher Druckfläche.

Die Screening-Analyse selektierte als beste Kombination die Variante mit einer 24stündigen Rückwärtstrajektorie, 12 UTC aktueller Tag zu 12 UTC Vortag, auf der Druckfläche 700 hPa (siehe Abbildung 8.3). Die besten Prädiktoren sind dabei die Wegstrecke, die mittlere relative Feuchte in 950 hPa und die mittlere Temperatur in 2m Höhe. Die Information über die mittlere Abweichung vom Jahresgang der maximalen Ozonkonzentration entlang der Wegstrecke erwies sich bei fast allen Stationen als schlechtester Prädiktor. Wichtig ist hier die Anmerkung, dass sich die Prognosegüte zwischen den drei besten Druckflächen (850, 700 und 500 hPa) nicht signifikant unterscheidet.

Die erzielte Vorhersagegüte übertraf zwar die der Persistenzvorhersage, erreichte aber bei weitem nicht die Güte der anderen Prognosen. Daher musste über die Hinzunahme anderer Prädiktoren nachgedacht werden. In Anlehnung an die Ergebnisse der wetterlagenbasierten Prognose wurden die Prädiktoren der

8.4 Eine Ozonprognose auf der Basis von Trajektorien

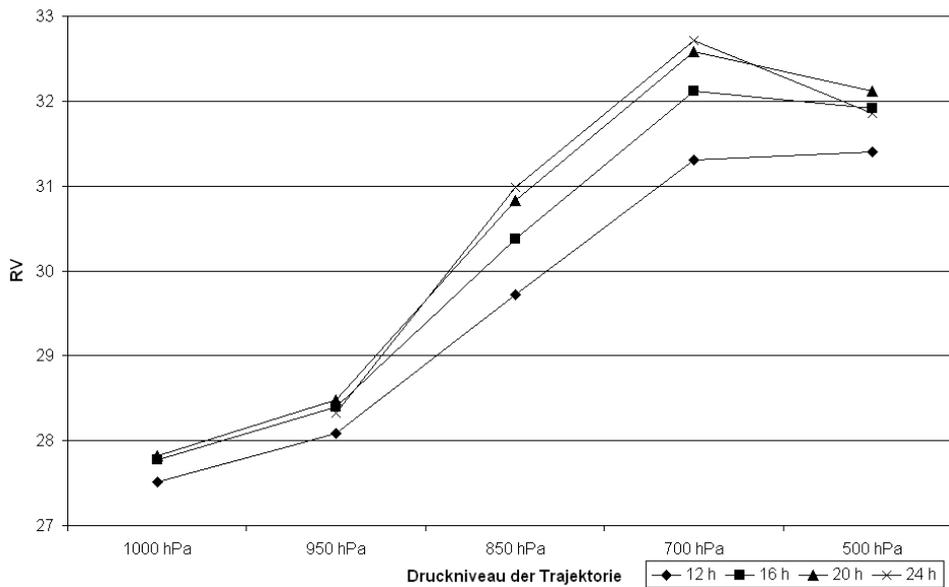


Abbildung 8.3. Vergleich der Vorhersagegüte für die 5 Druckniveaus und die 4 Zeithorizonte; Vorhersagegüte als mittlerer RV über die 180 Trajektorienendpunkte

Tabelle 7.3 als mögliche Prädiktoren zugelassen.

Die neue Selektion bestätigte teilweise die Ergebnisse der vorherigen Selektion, nur die Zusammenstellung der Prädiktoren änderte sich. Der beste Prädiktor ist nun die prognostizierte Temperatur (12 UTC) in 2 m Höhe am nächstliegenden Gitterpunkt der DWD-Prognose, gefolgt von der relativen Feuchte in 950 hPa (12 UTC), der Wegstrecke und der mittleren relativen Feuchte entlang des Weges.

Die Ergebnisse in Tabelle 8.2 zeigen sehr deutlich ein Problem. Die Prognosegleichungen sind optimiert worden für die Prognose ohne Schwellenwerte. Eine erfolversprechende mögliche Klassifikation, als Zwischenschritt vor der Regression, wurde nicht gefunden. Wird aber schwellenwertabhängig geprüft, so treten bei den Schwellenwerten mit geringer Eintrittswahrscheinlichkeit große Vorhersagefehler auf. Dies muss bei weitergehender Nutzung der Prognosen beachtet werden! Bei der Vorhersageprüfung ohne Schwellenwert weist die trajektorienbezogene Prognose gegenüber der bisher am UBA genutzten Prognose einen RV von 28,1 % auf. Bei allen schwellenwertbezogenen Prüfungen kann nicht von einer Verbesserung gesprochen werden.

Ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression

Tabelle 8.2. Verifikation der Vorhersageleistung der stationsbezogenen Ozonvorhersage gemittelt über alle Stationen (332); die Daten beziehen sich auf die Monate Mai bis Juli 2002; Ergebnisse des trajektorienbezogenen Prognosesystems (TR)

Schwellenwert:		ohne					
	Bias	RMSE	Prog	Bias	RMSE Per	RV	%
aktueller Tag	-2.3	19.0		-0.2	29.0	57.2	100.0
1. Folgetag	-1.9	20.1		-0.2	36.0	68.7	100.0
2. Folgetag	-1.1	21.1		-0.6	39.1	71.0	100.0
Schwellenwert:		120 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]					
	Bias	RMSE	Prog	Bias	RMSE Per	RV	%
aktueller Tag	-14.0	25.2		-16.9	32.1	38.1	24.3
1. Folgetag	-15.1	27.1		-29.4	44.2	62.8	24.4
2. Folgetag	-10.8	27.2		-31.7	50.1	70.5	26.1
Schwellenwert:		150 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]					
	Bias	RMSE	Prog	Bias	RMSE Per	RV	%
aktueller Tag	-28.8	36.3		-27.8	39.5	15.7	5.3
1. Folgetag	-29.2	37.9		-49.2	58.9	58.6	5.3
2. Folgetag	-24.3	37.7		-57.9	67.7	69.0	5.7
Schwellenwert:		180 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]					
	Bias	RMSE	Prog	Bias	RMSE Per	RV	%
aktueller Tag	-54.6	57.8		-45.9	55.7	-7.7	0.7
1. Folgetag	-56.2	59.6		-81.5	88.6	54.7	0.7
2. Folgetag	-58.6	62.7		-98.8	104.1	63.7	0.7

8.5 Zusammenfassung und Diskussion

Die in die Methode gesetzten Hoffnungen sind nicht erfüllt worden. In der Analyse zeigte sich, dass das Wissen über die Ozonverhältnisse am Boden, entlang des Weges der Luftpakete, keine Steigerung der Prognoseleistung zur Folge hat. Wichtiger für die Prognoseleistung sind die Wegstrecke sowie die mittleren Temperatur- und Luftfeuchteverhältnisse auf der Rückwärtstrajektorie. Die operationelle Prognose kann in drei Teilschritten erfolgen:

- Berechnung der 24h Rückwärtstrajektorien in 700 hPa
- Berechnung der Wegstrecke und der mittleren Temperatur- und Luftfeuchteverhältnisse (in 2m Höhe bzw. im 950 hPa Druckniveau) auf der Rückwärtstrajektorie (formale Kopplung mit den Rückwärtstrajektorien in 700 hPa)
- eine stationsweise Prognose mit den Trajektorienparametern und den lokalen meteorologischen Parametern Temperatur und relative Feuchte in 950 hPa (beide von 12 UTC)

8.5 Zusammenfassung und Diskussion

Zusammenfassend ist bei drei Aspekten eine nähere Betrachtung nötig:

- warum wird die Verlagerung in 700 hPa selektiert,
- warum ist der Beitrag der verlagerten Ozonkonzentrationen so gering und
- wie könnte die Vorhersageleistung noch verbessert werden?

Warum wird die Verlagerung in 700 hPa selektiert? Das Ergebnis (Nutzung der Druckfläche 700 hPa) steht im Widerspruch zu anderen Erfahrungen (z.B. geben [Stohl und Kromp-Kolb 1994] und [Smith und Hunt 1978] die Druckfläche 850 hPa an). Da diese Auswahl auf einer Screening-Analyse basiert, sind nur Vermutungen über den Grund möglich. Aus der meteorologischen Erfahrung über die Standardatmosphäre ist bekannt, dass der Wind auf den Druckflächen 700 und 850 hPa geostrophisch approxiiert werden kann, da sich beide oberhalb der Ekman-Schicht befinden. Damit unterscheidet sich der Wind nur wenig in der Windrichtung. Ein weiterer kleiner Unterschied kann bei der Windgeschwindigkeit auftreten. Dies beides ist der Grund für eine leicht anders verlaufende Trajektorie. Möglich ist auch die Erklärung darüber, dass der Wind in der die Druckfläche 850 hPa noch stark von dem Relief beeinflusst wird. Somit approximiert eine geostrophische Windannahme den Transport in bergigen Regionen noch nicht ausreichend gut. Interessant ist dabei der Aspekt, dass die Reservoirschicht als Teil der Grenzschicht nur selten bis in die Höhe der Druckfläche 700 hPa (ca. 3000m) hinaufreicht. Es muss aber nochmals darauf hingewiesen werden, dass sich die Ergebnisse bei den einzelnen Druckflächen nicht signifikant unterscheiden.

Warum ist der Beitrag der verlagerten Ozonkonzentrationen so gering? Einerseits ist es wahrscheinlich, dass die Verlagerung der Ozonkonzentrationen allein nicht aussagekräftig genug ist. Zwar ist über die indirekte Nutzung über eine Regression schon ein Veränderungsfaktor eingebaut, es ist aber trotzdem möglich, dass mit solchen einfachen Mitteln eine Approximation der chemischen Reaktionen auf dem Weg überhaupt nicht möglich ist. Andererseits zeigen aber auch die Ergebnisse von Versuchen mit numerischen Modellen, dass nur eine geringe Steigerung der Vorhersageleistung mit der Initialisierung durch Bodenozonfelder des Vortages möglich ist [Flemming 1996].

Auch ist eine Überlegung darüber nötig, wie groß der Einfluss des herantransportierten Ozons am Tagesmaximum der Ozonkonzentration ist. Der Einfluss auf die mittleren Verhältnisse ist unbestritten. Die Ozonepisoden treten aber bei schwachwindigen Lagen auf. Bei diesen Lagen überwiegt, aufgrund der damit oft in Verbindung stehenden Hochdruckwetterlagen, die lokale Ozonbildung. Diesen Schluss lassen Untersuchungen einer Ozonepisode im Sommer 2002 zu. Dort traten auf kleinstem Gebiet am Boden sehr große Unterschiede bei den Ozonkonzentrationen auf.

Ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression

Wie könnte die Vorhersageleistung noch verbessert werden? Eine Möglichkeit könnte die zusätzliche Einbeziehung der anderen zwei am Gleichgewichtszyklus beteiligten Stoffe NO und NO_2 sein. Soll dieses in eine Mehrtagsprognose integriert werden, so müssen auch NO und NO_2 mit prognostiziert werden. Auch muss über eine Möglichkeit der Klassifikation vor der Regression nachgedacht werden. Ob dabei der Herkunftsort der Trajektorien oder andere Parameter besser geeignet sind, muss in einer weiteren Untersuchung geklärt werden.

Ein wichtiger Aspekt ist die Güte der Trajektorienbestimmung. Der hier gewählte Ansatz ist sehr schlicht. Es stellt sich die Frage, inwiefern ein Einsatz von isentropen Trajektorien für die formale Kopplung zwischen Bodenozonkonzentrationen und der Verlagerung innerhalb der Atmosphäre Verbesserungen bringen könnte? Eine mögliche Fehlerquelle stellt die zeitliche und räumliche Interpolation vor der Berechnung dar. Prognosen meteorologischer Felder mit einer entsprechend höheraufgelösten räumlichen und zeitlichen Dimension, könnten realistischere Trajektorien erzeugen.