

Kapitel 11

Diskussion und Ausblick

Zum Abschluss der Arbeit steht die Aufgabe, das Erreichte zusammenzufassen (Abschnitt 11.1). Ein wichtiger Aspekt dabei ist die Frage, welches die neuen Anteile sind und in welcher Art diese wichtig für die wissenschaftliche Gemeinschaft sind (Abschnitt 11.2). Abgerundet wird das Kapitel mit der Beantwortung der Fragen welche Schlussfolgerungen aus der Arbeit zu ziehen sind (Abschnitt 11.3) und wo Probleme unbeantwortet blieben oder auch weiterer Forschungsbedarf gesehen wird (Abschnitt 11.4).

11.1 Was wurde erreicht?

Das Ziel dieser Arbeit, die Entwicklung eines Ozonprognosesystems zur Kurzfristvorhersage von punktuellen Ozonkonzentrationen für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland wurde erreicht. Wie aus den Verifikationstabellen ersichtlich, ist die Vorhersageleistung signifikant besser als die der bisher am Umweltbundesamt eingesetzten Prognoseroutine.

Die Prognoseroutine umfasst drei Neuentwickelte und eine alte Teilroutine. Im Kapitel 7 wurde **eine wetterlagenbasierte Klassifikation mit nachfolgender Regression** vorgestellt. Die Entwicklung erfolgte hierfür in zwei Teilschritten. Der erste Schritt war die Entwicklung einer an das Ozonregime angepassten Wetterlagenklassifikation für drei Regionen in Deutschland. Diese umfassen je fünf Klassen, welche anhand der Wettersituation von 12 UTC klassifiziert werden. Entscheidend für diese Klassifikation ist die großräumige meteorologische Situation bei der relativen Feuchte in 950 hPa, der Schichtdicke 1000/850 hPa und der Vorticity in 1000 hPa. Zur Verbesserung der Klassifikation wird nachfolgend für jede der drei Regionen eine Ozonkonzentration berechnet. Für den Fall das die Ozonkonzentration zu einer anderen Klasse, als durch die Klassifikation bestimmt, gehört, wird der Tag der Klasse zugeordnet, zu der die Ozonkonzentration gehört.

Der zweite Schritt war die Ableitung der stationsspezifischen Regressionsfunktionen. Die Entwicklung der Regressionsfunktionen erfolgte spezifisch für jede Klasse der Ozonwetterlagen. Somit wurden für jede Station fünf klassenspezifische Regressionsfunktionen bereitgestellt. Entsprechend der Ozonwetterlage erfolgt dann die Prognose mit der dazugehörigen Regressionsgleichung.

Im Anhang E (**Ein Anwendungsbeispiel für die Neuentwickelte Methode der Wetterlagenentwicklung**) wird der Einsatz der Neuentwickelten Methode für den Aufbau einer objektiven Klassifikation der Großwetterlagen nach Hess & Brezowsky vorgestellt. Somit ist es nun möglich, die seit vielen Jahren genutzte Klassifikation auch für Klimasimulationsoutputs anzuwenden.

Im Kapitel 8 wird der Aufbau **eines isobaren Trajektorienmodelles mit nachfolgender Regression** beschrieben. Zu Beginn des Projektes wurden in diese Prognoseroutine viele Erwartungen gesteckt. Die Idee zu diesem Vorgehen war durch das Vorhandensein zweier Datensätze (europaweite Ozonkonzentrationen und großräumige Wetterinformationen) gestärkt worden. Leider war die Suche nach einem Modellansatz, der die Verlagerung der Ozonkonzentrationen beinhaltet, nicht erfolgreich. Aber auch ohne die Verlagerung der Ozonkonzentrationen waren, wie aus den Tabellen 8.2 und 10.3 ersichtlich, gute Prognoseergebnisse möglich. Dieses gilt aber nur für die schwellenwertunabhängige Prüfung und den Schwellenwert $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Für Tage mit hohen Ozonkonzentrationen reicht die Prognoseleistung nicht aus.

Die dritte Neuentwickelte Teilroutine ist die Methode der **Analogen Fälle mit nachfolgender Regression** (Kapitel 9). Sie basiert auf der in der Wettervorhersage des DWD bekannten Methode AFREG. Dabei wird jeder Tag mit den im Archiv vorliegenden Tagen verglichen. Die 30 ähnlichsten Tage werden zur weiteren Bearbeitung herangezogen. Mit den dort vorhandenen Korrelationen zwischen der 12 UTC Temperatur, der Ozonpersistenz und der maximalen Ozonkonzentration kann eine Regressionsfunktion für den aktuellen Tag bestimmt werden. Eine Vorhersage ist für alle Stationen möglich, bei denen an mindestens 15 der ähnlichen Tage Ozonkonzentrationen vorhanden sind. Mit dieser Methode werden für jeden Tag neu die Prognosegleichungen berechnet. Damit tritt bei dieser Routine keine Alterung der Regressionsgleichungen auf.

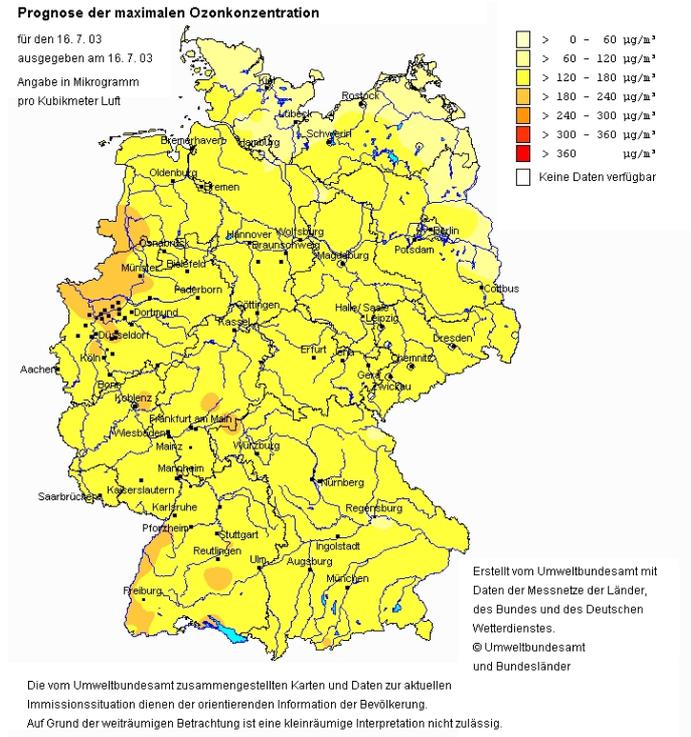
Mit den drei Neuentwickelten und der einen alten Teilroutine konnten die **Finalen Ozonprognosen** (Kapitel 10) aufgebaut werden. Diese beinhalten zwei Zielgrößen. Einerseits eine stationsweise Kombinationsprognose und andererseits eine regionale Prognose der Wahrscheinlichkeit der Schwellenwertüberschreitung. Beide zusammen geben dem Bearbeiter der Ozonprognose und dem Betrachter ein umfassendes Bild über die mögliche Ozonsituation des aktuellen Tages und der zwei nachfolgenden Tage.

11.1 Was wurde erreicht?

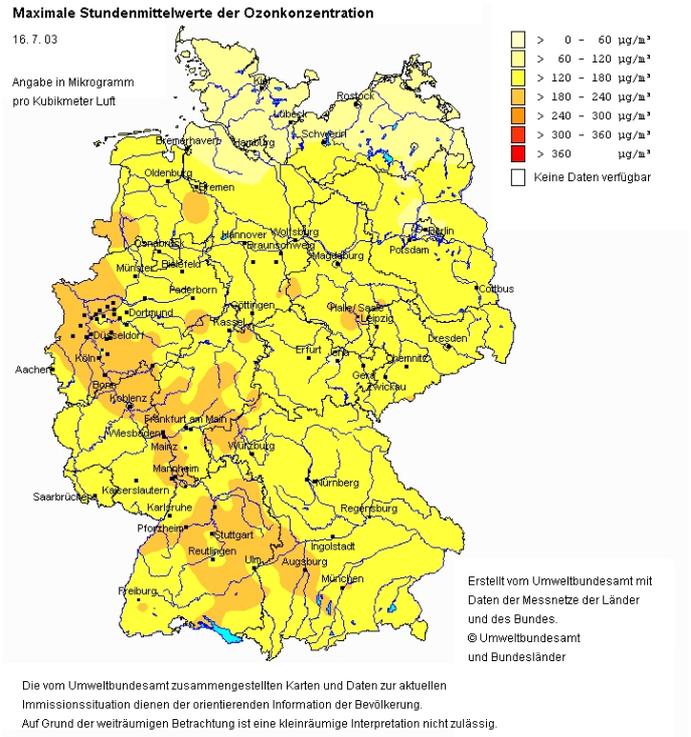
Im Abschnitt 1.3 werden Mindestanforderungen an ein Prognosesystem aufgestellt. Die für das UBA umgesetzte Variante erfüllt alle der folgenden vier Vorgaben:

1.
 - gegen 9:15 Uhr morgens wird mit den Vortagsozonkonzentrationen und dem 0 UTC Prognoselauf des DWD die Prognose für den aktuellen Tag und die beiden Folgetage gerechnet,
 - die Rechenzeit beträgt unter fünf Minuten,
2.
 - die Entwicklung erfolgte crossvalidiert mit den Jahren 1997 bis 2001 und wurde am Jahr 2002 getestet,
 - seit dem 7. April 2003 laufen das alte und das neue Prognosesystem im Parallelbetrieb am UBA,
3. jeden Tag wird die Vortagsprognose und innerhalb von Mai bis September auch die Prognoseleistung in der Saison geprüft und
4. ein von der Lippke & Wagner GmbH entwickeltes Programmpaket ist für die Datenvorsorgung und die nachträgliche Datenaufbereitung zuständig.

Am Ende des Ablaufs der Routine liegen in einer Datei die stationsweisen Prognosen für den aktuellen Tag und die zwei Folgetage vor. Ein Programmpaket der Lippke & Wagner GmbH bereitet diese grafisch auf. Entsprechend den Vorgaben der Messnetzbetreiber werden die Stationsinformationen als Punkt oder flächenhaft interpoliert dargestellt (Abbildung 11.1). Die Web-Präsentation der Ergebnisse erfolgt unter <http://www.env-it.de/luftdaten/start.fwd> .



(a) Prognose



(b) Messung

Abbildung 11.1. Beispiel für die grafische Aufbereitung der Prognoseergebnisse (a) und deren Vergleich mit den gemessenen Ozonkonzentrationen (b) vom 16. Juli 2003

11.2 Was ist neu?

Tabelle 11.1. Verifikation der Vorhersageleistung der stationsbezogenen Ozonvorhersage gemittelt über alle Stationen (293) für den 16. Juli 2003, die grafische Darstellung der Prognose und der eingetroffenen Werte erfolgte in Abbildung 11.1

Schwellenwert:	ohne				
Bias	RMSE Prog	RMSE Per	RV	%	
aktueller Tag	-8.4	20.3	32.8	61.7	100.0
Schwellenwert:	120 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]				
Bias	RMSE Prog	RMSE Per	RV	%	
aktueller Tag	-9.6	21.0	34.2	62.2	91.1
Schwellenwert:	150 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]				
Bias	RMSE Prog	RMSE Per	RV	%	
aktueller Tag	-11.7	22.7	36.8	62.1	70.3
Schwellenwert:	180 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]				
Bias	RMSE Prog	RMSE Per	RV	%	
aktueller Tag	-16.2	28.2	42.4	55.7	30.0

11.2 Was ist neu?

Eine Zusammenstellung der in der Arbeit vorgestellten neuen Entwicklungen gibt die folgende Auflistung:

- Aufbau einer algorithmisierten realtime Datenprüfung und deren Einarbeitung in die Entwicklung sowie deren Einsatz in den operationellen Betrieb der Ozonprognose
- Entwicklung und Ableitung einer ozonspezifischen Wetterlagenklassifikation für drei Regionen in Deutschland
- Objektivierung der Großwetterlagen nach Hess & Brezowsky
- Entwicklung einer trajektorienbasierten Prognose, die auch die Ozonsituation der umliegenden Länder berücksichtigt; von einem operationellen Einsatz wurde abgesehen, da die Prognosequalität unter der der Vergleichsprognosen liegt
- Übertragung der AFREG-Methode auf den Einsatz im Bereich der stationsbasierten Ozonprognose
- Aufbau einer stationsweisen Kombinationsprognose
- Entwicklung einer schwellenwertbezogenen regionalen Wahrscheinlichkeitsprognose

Eine wichtige Neuerung ist die Datenprüfung bei den Ozondaten vor der Entwicklung und im operationellen Einsatz. Damit kann auf objektivem Wege ein wichtiges Problem statistischer Modelle deutlich in seiner Bedeutung reduziert werden. Die Entwicklung und der operative Einsatz aller Teilroutinen zur Prognose können dadurch als deutlich erwartungstreuer angesehen werden. Die Routine ist auch für die tägliche Arbeit mit den Messdaten anderer Luftschadstoffe (NO_2 , SO_2 und PM_{10}) von Bedeutung. Auch deren Daten können realtime geprüft werden.

Mit der Entwicklung und Ableitung der ozonspezifischen Wetterlagen ist einerseits eine neue Möglichkeit für die Einschätzung der Ozonsituation eines Tages vorhanden und andererseits eine gute Grundlage für eine Klassifikation geschaffen worden. Dieses zeigt die hohe Vorhersagegüte der darauf basierenden Teilprognose. Das die Methode zur Ableitung der Wetterlagen auch bei anderen Klassifikationen Erfolg versprechend ist zeigt Anhang E. Die dort vorgestellten objektiven Großwetterlagen nach Hess & Brezowsky stellen eine weitere Neuerung dar und ermöglichen deren Einsatz in der Klimaforschung.

Die Entwicklung einer trajektorenbasierten Prognose, die auch die Ozonsituation der umliegenden Länder berücksichtigt, ist neu. Da die Prognosegüte aber deutlich unter der der Vergleichsprognosen lag, wurde von einem Einsatz abgesehen. Wichtig ist hierbei die Erkenntnis, dass entweder ein deutlich komplizierterer Ansatz bei der Verlagerung (chemische Reaktionen beim Transport) oder aber eine Einbeziehung aller drei Komponenten der chemischen Gleichgewichtsreaktion (NO_2 , NO und O_3) versucht werden muss, um auf diesem Wege bessere Ergebnisse zu erzielen.

Der Einsatz der AFREG-Methode erfolgte bisher in der Hauptsache zur Prognose von meteorologischen Parametern, wie Temperatur und Sonnenscheindauer. Im Bereich der Immissionsprognose wurde sie auch für die SO_2 Vorhersage eingesetzt. Der erfolgreiche operative Einsatz zur Ozonprognose für über 300 Stationen zeigt das Potential das in der Methode steckt.

Mit der schwellenwertbezogenen regionalen Wahrscheinlichkeitsprognose wird dem Nutzer der Ozonprognose ein weiteres wichtiges Werkzeug zur Verfügung gestellt. Er kann damit abschätzen, ob eine Überschreitung von Schwellenwerten wahrscheinlich ist und gegebenenfalls eine Warnung aussprechen.

11.3 Praktische Schlussfolgerungen

Die Ergebnisse der Datenprüfung zeigen, dass insbesondere im Bereich der Ozonmessung sehr oft Fehler auftreten. Ohne die vorherige Prüfung der Eingangsdaten kann der Aufbau einer erwartungstreuen Prognose sehr schwierig sein.

Das sehr gute Ergebnis der wetterlagenbasierten Prognose zeigt, dass eine vorangestellte Stratifikation (Klassifikation) der Ozonsituation und eine nachgeordnete Regression das Optimum bei der Prognose darstellen. Die Einbindung

11.4 Was bleibt zu tun?

der Ozonkonzentrationen die auf dem Weg entlang der Trajektorie der Luftpakete auftreten, ist mit den hier vorgestellten Methoden nur wenig Erfolg versprechend. Hier muss eine andere Lösung angestrebt werden.

Die mit der AFREG-Methode vorgestellte Dynamisierung der Korrelationen sollte wenn möglich auch bei den anderen Methoden, zum Beispiel in der Form der adaptiven Regression (Unterabschnitt 4.2.2), eingeführt werden. Dieses wird insbesondere durch die Erfahrungen vom Frühsommer 2003 bestätigt.

11.4 Was bleibt zu tun?

In der Arbeit wurden an einigen Stellen schon Vorschläge für weitergehende Untersuchungen gemacht. An dieser Stelle sollen diese noch einmal zusammengefasst werden. Es wäre demnach sinnvoll:

- eine Untersuchung des Einflusses der Güte der Wettervorhersage auf die Prognoseleistung (insbesondere im Frühsommer 2003) durchzuführen,
- in einer Untersuchung zu prüfen, ob ein Einsatz von neuronalen Netzen im operationellen Dienst Erfolg versprechend ist,
- zu untersuchen, ob der Einsatz von isentropen Trajektorien die trajektorienbasierte Prognose verbessert,
- die Weiterverfolgung der Idee einer Vorhersage unter Annahme eines photo-stationären Gleichgewichts (Vorhersage von NO_2 , NO und O_3) zu betreiben und
- dynamische Korrelationen mittels einer adaptiven Regression einzuarbeiten.

Weiterhin ist auch die Verfolgung anderer Ideen sinnvoll. Es sollte geprüft werden:

- ob der Aufbau von einem numerischen Modell mit Modelloutputstatistik die Stärken beider Systeme (Numerik und Statistik) zusammenführen kann,
- wie sich das schwächer werdende Persistenzverhalten weiterentwickelt und warum, und
- ob die Änderung der Korrelationen zwischen den meteorologischen Parametern und den Ozonkonzentrationen voranschreitet.

Prinzipiell sollten weitere Anstrengungen unternommen werden, die zu einer Reduktion des negativen Bias bei hohen Schwellenwerten führen. Die oben genannten Ansätze stellen dabei nur die ersten Schritte dar.

11.5 Ergebnisse beim ersten operativen Einsatz im Jahr 2003

Dieser Abschnitt wurde auf Grund einer Bitte der Promotionskommission nach der Disputation eingefügt. Er zeigt die Ergebnisse der Kombinationsprognose im Sommer 2003. Der Sommer 2003 war im Gegensatz zu den sieben vorangegangenen Jahren durch ein deutlich erhöhtes Aufkommen an Schwellenwertüberschreitungen (180 und $240 \mu\text{g}/\text{m}^3$) geprägt (siehe Abbildung 11.2). Ursache dafür war ein sehr warmer und trockener Sommer mit einer sehr hohen Lebensdauer der Hochdruckgebiete. So dauerte die bedeutendste Ozonepisode vom 1. bis zum 14. August (Hoch Michalea). Der in dieser Zeit erreichte Spitzenwert war eine 1-Stunden-Mittelwert Konzentration von $334 \mu\text{g}/\text{m}^3$ an der Station Hürth.

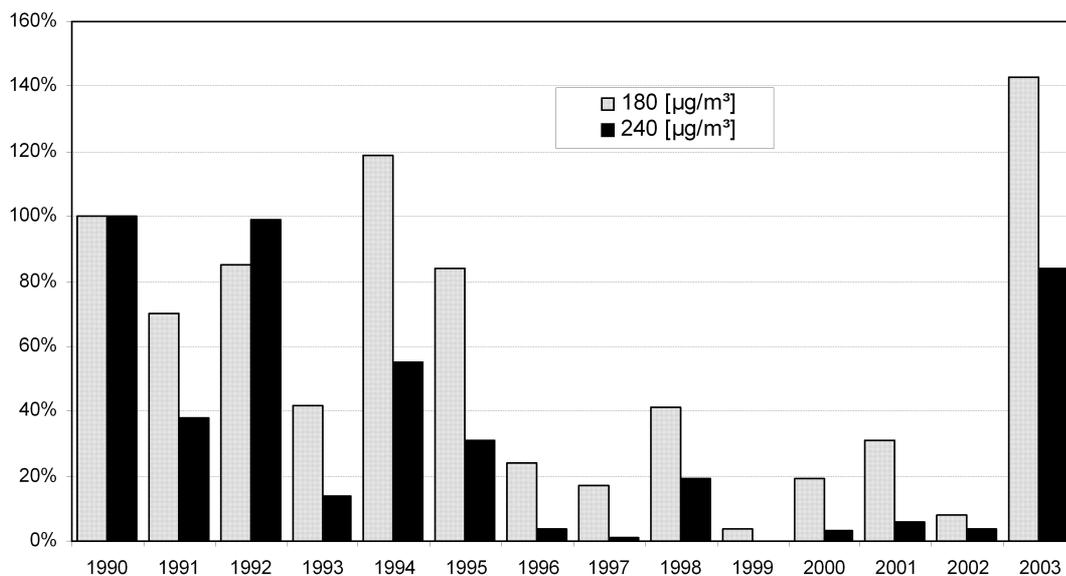


Abbildung 11.2. Prozentuale Anzahl der Überschreitungsstunden relativ zum Jahr 1990 und zu der Anzahl der jeweils betriebenen Messstationen. [Umweltbundesamt 2003]

In der letzten Spalte der Tabelle 11.2 sind die prozentualen Anteile der jeweiligen Schwellenwerte aufgelistet. Im Vergleich mit Tabelle 7.4 oder auch 10.2 sind die deutliche Erhöhung der Fälle mit Überschreitungen ersichtlich. So hat sich die Anzahl der Fälle im Schwellenwertbereich $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$ verdoppelt und im Bereich $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ um den Faktor acht erhöht. Im Entwicklungszeitraum 1997 bis 2002 traten Werte über $240 \mu\text{g}/\text{m}^3$ nur sehr selten auf. Eine deutliche Erhöhung dieser Extremwerte bringt auch eine erhöhte Gefahr einer Fehlvorhersage mit sich.

11.5 Ergebnisse beim ersten operativen Einsatz im Jahr 2003

Somit hat sich das Jahr 2003, in dem das vorgestellte System am Umweltbundesamt im operationellen Betrieb lief, als ein Jahr mit besonderer Schwierigkeit herausgestellt.

Die in 2003 erreichten guten Prognoseergebnisse wurden durch die hohe Erwartungstreue begünstigt. Anderenfalls wären solche gute Ergebnisse in einem Wertebereich der außerhalb des Entwicklungsbereiches des Verfahrens liegt nicht möglich gewesen. Das System lieferte Prognosen mit Spitzenwerten von $280 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Dieser Wert liegt zwar noch deutlich unterhalb des gemessenen Spitzenwertes von $334 \mu\text{g}/\text{m}^3$, überschreitet aber andererseits auch deutlich die im Entwicklungszeitraum aufgetretenen Höchstwerte.

Tabelle 11.2. Verifikation der Vorhersageleistung der stationsbezogenen Ozonvorhersage gemittelt über alle Stationen; die Daten beziehen sich auf die Monate April bis August 2003; Ergebnisse der Kombinationsprognose

Schwellenwert:		ohne				
	Bias	RMSE Prog	RMSE Per	RV	%	
aktueller Tag	-2.6	19.7	27.9	50.4	100.0	
1. Folgetag	-3.2	23.9	34.3	51.4	100.0	
2. Folgetag	-3.2	25.0	35.2	49.7	100.0	
Schwellenwert:		120 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]				
	Bias	RMSE Prog	RMSE Per	RV	%	
aktueller Tag	-4.2	23.1	29.5	39.0	50.2	
1. Folgetag	-6.2	28.7	37.4	40.8	52.5	
2. Folgetag	-5.5	29.9	38.8	40.7	53.8	
Schwellenwert:		150 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]				
	Bias	RMSE Prog	RMSE Per	RV	%	
aktueller Tag	-5.7	27.1	32.7	31.3	18.7	
1. Folgetag	-9.1	34.5	42.3	33.3	19.9	
2. Folgetag	-7.0	36.1	44.9	35.2	20.6	
Schwellenwert:		180 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]				
	Bias	RMSE Prog	RMSE Per	RV	%	
aktueller Tag	-6.2	31.9	38.4	30.7	5.4	
1. Folgetag	-11.9	41.4	49.7	30.7	6.2	
2. Folgetag	-7.7	41.2	51.1	34.9	6.6	

Abschließend kann gesagt werden, dass das Prognosesystem im Jahr 2003 seine Feuertaufe erfolgreich bestanden hat. Für weitere Informationen zur Ozonsituation im Sommer 2003 ist [Umweltbundesamt 2003] eine reichhaltige Quelle an Informationen.

