

Immissionsfelder aus Beobachtung, Modellierung und deren Kombination

Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades
Vorgelegt am Fachbereich Geowissenschaften
der Freien Universität Berlin

von

Johannes Flemming

2003

1. Gutachter: Prof. Dr. H.-J. Lange
2. Gutachter: Prof. Dr. P.J.H. Bultjes

Tag der Disputation: 6.2.2003

Abstract

”Observed and modelled ground level concentration fields and their combination”

The subject of the thesis are the ground level concentrations of O₃, NO₂, NO, PM₁₀ and SO₂. The methodological approach of the work is comparing and combining concentration data of two different information sources: 1) the observation of about 300 operational air quality monitoring sites in Germany and 2) simulations of the Chemical Transport Model REM/Calgrid with a horizontal resolution of about 25*25 km². The thesis contains contributions for a comprehensive air quality climatology and model evaluation, statistical analysis (i.e. interpolation), covariance modelling and data assimilation. Air quality assessment according to the EU-framework directive has been a practical motivation of the work. The results are preconditions for a scale dependent assessment and mapping of the air quality standards.

In the first step the concentration time series were classified by means of a hierarchical clustering in to air quality regimes for each species separately. Depending on the species, the regimes can be labelled as “mountain”, ”rural”, “suburban”, “urban”, “polluted urban”, “street” and “severe polluted street” or as five levels of pollution for PM₁₀ and SO₂. The knowledge of the regimes is vital for model evaluation and data assimilation because the majority of the observation is located in polluted areas having a small spatial representativeness. A regime based climatology of both the observed and modelled data gives an overview of typical and maximum concentrations levels and the daily, weekly, annual and interannual variability. Moreover the comparison of the classification for different years and species is a tool to detect trends and special properties of the measurement strategy.

The main part of the thesis is dedicated to statistical analysis of the concentration data by means of optimum interpolation (OI). OI can be considered as passive data assimilation. The analysed fields are an optimal combination of the observations and the model data according to their error statistics. The estimation of the errors statistics, i.e. the bias, the observation error variance and the covariance of the background error, is the main problem of the analysis. The statistical moments were estimated from samples of empirical space time values by covariance modelling. Three different covariance models were developed: a standard homogeneous covariance model (CM A) from instantaneous spatial data and two climatic inhomogeneous CMs (B and C) from filtered space time data for every hour of the day. CM B is a combination of homogenous CMs for different air quality regimes. CM C is based on the EOF expansion of the empirical covariance matrix. The observation error is considered as an spatially uncorrelated component of the measurement. Its variance is estimated by means of a covariance model, which extrapolates the variance of the smooth spatially correlated part to the measurement location. In the homogenous case A one value of the observation error variance is obtained for all stations at a given time. In the climatic case individual values for each stations are derived for the hours of the day.

All covariance models were applied for the analysis of hourly concentration fields in 2001. The analysis performance of the three CM has been tested by means of cross validation: The difference between the measurement and the interpolated values from

surrounding stations is checked. The RMSE of this difference is of about the same size as the observation error for all approaches.

Besides the passive assimilation two active schemes have been tested. One is active Optimum Interpolation based on CM A for a model run, i.e. the modelled field for every hour is replaced by the analysed field. The other is a test run of the Kalman-Filter, which is a complex 4D data assimilation technique. The empirical covariances were compared with the covariance calculated by the Kalman-Filter. This comparison could be important for an improvement of the Kalman-Filter performance.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	5
1.1	Motivation	5
1.2	Inhaltsübersicht.....	6
1.3	Vorstellung der betrachteten Spurenstoffe	7
1.4	Datenquellen.....	9
1.4.1	Die Beobachtungen.....	9
1.4.2	Modellierung	11
1.4.3	Statistische Parameter von Immissionszeitreihen.....	13
1.5	Exkurs: Repräsentativität der Immissionsbeobachtung.....	15
2	Die Klassifikation von Immissionsregimes.....	17
2.1	Methodik der Klassifikation von Immissionsmessstationen	17
2.2	Bisherige Klassifikationen der Immissionsregimes in Deutschland	18
2.2.1	Vergleich der verschiedenen Klassifikationen	19
2.2.2	Notwendigkeit einer neuen Klassifikation.....	20
2.3	Ein Clusterverfahren zur Kategorisierung des Immissionsregimes.....	21
2.3.1	Clusterverfahren	21
2.3.1.1	Hierarchische Clusterbildung	22
2.3.1.2	Clusterbildungsmethode	23
2.3.1.3	Zugehörigkeitsfunktion und deren nachträgliche Bestimmung.....	24
2.3.2	Strategie der Clusterung von Parametern der Immission	25
2.3.2.1	Definition der Objekte und Auswahl der Variablen	26
2.3.2.2	Anzahl der Cluster bzw. der Regimes	28
2.3.2.3	Skalierung, Transformation und Clusterbildungsmethode	29
2.3.2.4	Test von Stabilität und Homogenität	30
2.3.2.5	Einheitliche Klassifikation und Methodik des Vergleichs	32
3	Klimatologie der Immissionsregimes von Beobachtung und Modellierung ..	34
3.1	Methodik der Darstellung.....	34
3.2	Regimes der Ozonimmission.....	35
3.3	Vergleich mit der UBA-Klassifikation für die Ozon-Regimes	38
3.4	Regimes der NO ₂ -Immission	39
3.5	Regimes der NO-Immission	42
3.6	Regimes der SO ₂ -Immission.....	46
3.7	Regimes der PM10-Immission	49
3.8	Vergleich der Regimes und Mediane verschiedener Stoffe	51
3.9	Zeitliche Variabilität.....	56
3.9.1	Tages-, Wochen- und Jahresgang.....	57
3.9.2	Zwischenjährliche Variabilität.....	64

4	Methodik der Analyse und Datenassimilation.....	67
4.1	Problemstellung.....	67
4.2	Zielstellung.....	69
4.3	Literaturüberblick.....	69
4.3.1	Anwendungsgebiete.....	70
4.3.2	Interpolation von Messwerten.....	70
4.3.2.1	Homogene statistische Ansätze.....	71
4.3.2.2	Raum-Zeit-Zusammenhänge.....	71
4.3.2.3	Inhomogene Kovarianzmodellierung.....	72
4.3.3	Datenassimilation.....	73
4.3.3.1	Einfache Ansätze.....	74
4.3.3.2	Variationsansätze.....	75
4.3.3.3	Kalman-Filter-Ansätze.....	76
4.4	Räumliche Zufallsprozesse.....	77
4.4.1	Beschreibung räumlicher Zufallsprozesse.....	78
4.4.1.1	Statistisch motivierte Skalentrennung.....	79
4.4.1.2	Homogenität und Isotropie.....	80
4.4.1.3	Interpolation.....	81
4.4.2	Raum-Zeit-Prozesse.....	82
4.4.2.1	Schätzung der räumlichen Momente aus Zeitreihen.....	83
4.4.2.2	Ergodizität von Zeitreihen.....	84
4.5	Theorie der statistischen Analyse und Datenassimilation.....	85
4.5.1	Grundprinzip.....	85
4.5.2	Definition der Fehlermaße.....	86
4.5.3	Beobachtungsoperator.....	88
4.5.4	Analyse durch Varianzminimierung – Optimale Interpolation.....	89
4.5.5	Vereinfachung und Diskussion der Analysegleichungen.....	90
4.5.6	Variationsansätze.....	92
4.5.7	Kalman-Filter.....	93
4.5.8	RRSQRT-Ansatz für Kalman-Filter.....	95
5	Kovarianzmodellierung der Immissionsfelder	98
5.1	Kovarianzmodelle für räumliche Prozesse.....	98
5.1.1	Besonderheiten der Kovarianzmodellierung von Immissionsdaten.....	101
5.1.2	Datenbasis für die empirischen Kovarianzmodelle.....	105
5.1.3	Drei Kovarianzmodelle (A, B und C) für Immissionsdaten.....	106
5.2	Die Schätzung der empirischen Kovarianzmodelle.....	107
5.2.1	Schätzung homogener terminbezogener Kovarianzwerte.....	107
5.2.2	Schätzung klimatischer Kovarianzwerte.....	109
5.2.2.1	Filterung der zeitlichen Periodizität und Persistenz.....	109
5.2.2.2	Diskussion der Filterung am Beispiel.....	110
5.2.2.3	Schätzung stationspaarbezogener Kovarianzwerte.....	112
5.2.3	Analytische Form des parametrischen Kovarianzmodells.....	112
5.2.4	Approximation des parametrischen Kovarianzmodells.....	114
5.2.5	Nichtparametrisches inhomogenes Kovarianzmodell aus EOFs.....	115
5.2.5.1	Matrixapproximation durch SVD.....	116

5.2.5.2	Auf SVD basierendes inhomogenes Kovarianzmodell C.....	116
5.2.5.3	SVD für numerische Stabilität.....	118
5.2.6	Schätzung der Beobachtungsfehlervarianz.....	118
5.3	Diskussion der Ergebnisse der Kovarianzmodellierung.....	120
5.3.1	Der Beobachtungsfehler	121
5.3.1.1	Der stationsbezogene Beobachtungsfehler	121
5.3.1.2	Der homogene terminbezogene Beobachtungsfehler	124
5.3.2	Der Bias	126
5.3.3	Die Varianz des „glatten“ Feldes.....	131
5.3.3.1	Varianz von Modell, Beobachtung und Beobachtungsinkrement ...	131
5.3.3.2	Rausch-Signal-Verhältnis	132
5.3.4	Räumliche Strukturen der Kovarianzmodelle A, B und C	134
5.3.4.1	Homogene Anisotropie (KM A).....	134
5.3.4.2	Kovarianz für verschiedene Immissionsregimes (KM B)	137
5.3.4.3	Die Eigenvektoren der Kovarianzmatrix (KM C)	138
5.3.5	Alternative dynamische Kovarianzmodelle.....	142
6	Analyse und Datenassimilation der Immissionsfelder	145
6.1	Verschiedene statistische Analyseverfahren der Immission.....	145
6.1.1	Transformation der Variablen.....	146
6.1.2	Biaskorrektur	147
6.1.3	Beobachtungsfehler und räumliche Kovarianz.....	147
6.1.4	Auflösung, Interpolation von Gitterboxmittelwerten	148
6.1.5	Auswahl der beeinflussenden Stationen	148
6.1.6	Iterative Analyse.....	149
6.1.7	Aktive Datenassimilation mit Optimaler Interpolation	149
6.2	Methoden zur Beurteilung der Verfahrensgüte	150
6.2.1	Die theoretische Analysefehlervarianz.....	150
6.2.2	Der cross-validation-Analysefehler	151
6.3	Die analysierten Immissionsfelder aus Beobachtung und Modellrechnung für 2001 153	
6.4	Aktive Datenassimilation mit Optimaler Interpolation	162
7	Zusammenfassung und Ausblick	164
7.1	Was wurde gemacht?.....	164
7.2	Was ist neu?.....	166
7.3	Was sind praktische Schlussfolgerungen?.....	167
7.4	Was bleibt zu tun?	168
	Symbole.....	170
	Literaturverzeichnis	173
	Danksagung.....	183