

Umweltforschungsplan
Des Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz und Reaktorsicherheit

Förderkennzeichen 201 42 257

Verbesserung der Ozonprognose

Schlussbericht

von
Dr. Wolfgang Enke
Frank Schneider

Meteo-Research

Dr. Wolfgang Enke
Am Wiesengrund 30
14532 Stahnsdorf

IM AUFTRAG
DES UMWELTBUNDESAMTES

August 2003

| | | |
|---|---------------------------------|----------------------------------|
| 1. Berichtsnummer UBA-FB | 2. | 3. |
| 4. Titel des Berichtes Verbesserung der Ozonprognose | | |
| 5. Autor(en), Name(n), Vorname(n) Dr. Enke, Wolfgang Schneider, Frank | 8. Abschlussdatum 29.08.2003 | 9. Veröffentlichungsdatum |
| 6. Durchführende Institution (Name, Anschrift) Meteo-Research Am Wiesengrund 30 14532 Stahnsdorf | 10 UFOPLAN-Nr. 201 42 257 | 11. Seitenzahl 93 |
| 7. Fördernde Institution (Name, Anschrift) Umweltbundesamt Postfach 33 00 22 14191 Berlin | 12. Literaturangaben 54 | 13. Tabellen und Diagramme 16 |
| 15. Zusätzliche Angaben | 14. Abbildungen 15 | |
| 16. Zusammenfassung Auch wenn Ozon in den letzten Jahren nicht mehr so stark im Blickpunkt der Öffentlichkeit steht wie noch vor 5 bis 10 Jahren, ist die Problematik erhöhter Ozonwerte, besonders unter dem Eindruck des Sommers 2003, noch immer aktuell. Dieser Problematik sollen die aktuellen Richtlinien der Europäischen Union und die Gesetze und Verordnungen des Bundes und der Länder Rechnung tragen. In dieser Arbeit wird ein neu entwickeltes Verfahren zur Ozonprognose vorgestellt. Es handelt sich hierbei um eine Kombinationsvorhersage, deren Grundlagen statistischer Natur sind. Basierend auf den Ergebnissen der numerischen Wettervorhersage des GMF-Modells des Deutschen Wetterdienstes (DWD) und den in Deutschland gemessenen Immissionswerten der Jahre 1997-2002 wurden fünf Vorhersagemodule entwickelt: eine wetterlagenbasierte Klassifikation mit nachfolgender Regression, ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression, Analoge Fälle mit nachfolgender Regression, eine Wahrscheinlichkeit vorhersage für Schwellenwerte und eine multiple Regression für die 8-Stunden-Mittelwert-Maximumprognose. Diese Module funktionieren alle nach dem Prinzip der sogenannten Perfekten Prognose. Als abschließender Schritt werden die einzelnen Ergebnisse mittels Regression zu einer Vorhersage kombiniert. Nach der vollautomatischen Ausführung aller Module liegt damit eine stationsbezogene 1-Stunden-Maximumprognose und eine 8-Stunden-Mittelwert-Maximumprognose für das Gebiet Deutschland für den Bearbeitungstag und die zwei nachfolgenden Tage vor. | | |
| 17. Schlagwörter Ozonvorhersage, Wetterlagen, Trajektorien, Analoge Fälle, Schwellenwertvorhersage | | |
| 18. Preis | 19. | 20. |

| | | |
|--|-----------------------------------|-----------------------------------|
| 1. Report No. UBA-FB | 2. | 3. |
| 4. Report Title Improvement of the ozone forecast | | |
| 5. Autor(s), Family Name(s), First Name(s) Dr. Enke, Wolfgang Schneider, Frank | 8. Report Date 29.08.2003 | 9. Publication Date |
| 6. Performing Organisation (Name, Address) Meteo-Research Am Wiesengrund 30 14532 Stahnsdorf | 10 UfoPLAN-Ref. No. 201 42 257 | 11. No. Of pages 93 |
| 7. Funding Agency (Name, Address) Umweltbundesamt (Federal Environmental Agency) Postfach 33 00 22 14191 Berlin | 12. No. Of Reference 54 | 13. No. Of Tables, Diagrams 16 |
| | | 14. No. of Figures 15 |
| 15. Supplementary Notes | | |
| 16. Abstract Although ozone is not in public focus as 5 to 10 years ago, high ozone concentrations, especially under the impression of the summer 2003, are still a problem. The EU legacy and the German national legislation are trying to cope with the problem. This work presents a new method for ozone forecasting. It is based on statistic procedures. Two datasets – a numerical weather forecast from the German Weather Service and emission data from Germany (covering 1997-2002) - were used to develop five procedures. These are: a weather pattern based classification with subsequent regression, an isobaric trajectory model with subsequent regression, analogs with subsequent regression, a probability forecast for threshold values and a 8-hour-mean maximum forecast by multiple regression. All modules are based on perfect prog mechanisms. The final step is a combination by regression. In the end of the fully automated forecast procedure a daily 1-hour and 8-hour-mean maximum forecast for the present day and the next two days is available. | | |
| 17. Keywords ozone forecast, weather pattern, trajectories, analogs, probability forecast for threshold values | | |
| 18. Price | 19. | 20. |

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Erläuterung der Abkürzungen, Maßeinheiten, Symbole | 7 |
| 1.1 | <i>Bei der Messung des Ozons verwendete Einheiten (aus: Promet [14], Seite 2)</i> | 9 |
| 2 | Einleitung | 10 |
| 2.1 | <i>Einführung</i> | 11 |
| 2.1.1 | Vorgaben des Umweltbundesamtes | 11 |
| 2.1.2 | Mindestanforderungen an das Prognosesystem | 12 |
| 2.1.3 | Aufbau der Untersuchung | 13 |
| 2.2 | <i>Faktoren der Ozonbelastung</i> | 15 |
| 2.2.1 | Ozonbildung | 15 |
| 2.2.2 | Horizontaler Ozontransport | 18 |
| 2.2.3 | Vertikale Ozondurchmischung | 18 |
| 2.2.4 | Ozonabbau | 19 |
| 2.2.5 | Fazit | 20 |
| 2.3 | <i>Statistische Routinen</i> | 20 |
| 2.3.1 | Methodische Grundlagen | 21 |
| 2.3.2 | Screeningmethoden in der Arbeit | 25 |
| 2.3.3 | Prüfmaße | 28 |
| 2.3.4 | Zyklische Schwankungen - Jahres- und Tagesgang | 31 |
| 2.4 | <i>Ozonprognoseverfahren</i> | 32 |
| 2.4.1 | Eine kurze Einführung zu numerischen Modellen | 33 |
| 2.4.2 | Statistische Ozonprognosemodelle im Überblick | 34 |
| 2.4.3 | Einfluss der Wettervorhersage auf die Ozonprognose | 42 |
| 3 | Hauptteil | 43 |
| 3.1 | <i>Weiterentwicklung der am UBA laufenden Routine</i> | 43 |
| 3.2 | <i>Eine wetterlagenbasierte Klassifikation mit nachfolgender Regression</i> | 43 |
| 3.2.1 | Einführung und Zielsetzung | 43 |
| 3.2.2 | Historische Entwicklung | 44 |
| 3.2.3 | Methode zur Bestimmung von Ozonwetterlagen | 46 |
| 3.2.4 | Ergebnisse bei der Ableitung von Ozonwetterlagen | 54 |
| 3.2.5 | Eine stationsbezogene Screening-Analyse | 56 |
| 3.2.6 | Ergebnisse der stationsbezogenen Prognose | 57 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3.3 | <i>Ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression</i> | 61 |
| 3.3.1 | Einführung und Zielsetzung | 61 |
| 3.3.2 | Konstruktion von atmosphärischen Trajektorien | 61 |
| 3.3.3 | Ozondaten vom europäischen Umland | 64 |
| 3.3.4 | Eine Ozonprognose auf der Basis von Trajektorien | 65 |
| 3.4 | <i>Analoge Fälle mit nachfolgender Regression (AFREG)</i> | 68 |
| 3.4.1 | Einführung und Zielsetzung | 68 |
| 3.4.2 | Methode | 69 |
| 3.5 | <i>Die finalen Ozonprognosen</i> | 75 |
| 3.5.1 | Einführung und Zielsetzung | 75 |
| 3.5.2 | Die Prognose des Tagesmaximums | 76 |
| 3.5.3 | Die Schwellenwertvorhersage | 79 |
| 4 | Zusammenfassung | 83 |
| 4.1 | <i>Anmerkungen zum Kapitel 3.2</i> | 83 |
| 4.2 | <i>Anmerkungen zum Kapitel 3.3</i> | 84 |
| 4.3 | <i>Anmerkungen zum Kapitel 3.4</i> | 85 |
| 4.4 | <i>Anmerkungen zum Kapitel 3.5</i> | 86 |
| 4.5 | <i>Was bleibt zu tun?</i> | 87 |
| 5 | Literaturverzeichnis | 88 |

1 Erläuterung der Abkürzungen, Maßeinheiten, Symbole

- **AFREG** Analoge Fälle und Regression
- **AN** Teilprognose Analoge Fälle
- β Glättungskonstante bei der selbstlernenden Biaseleminierung
- **B** Berg; Klasse beim Ozonregime
- **BUWAL** Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft
- **CART** Classification and Regression Tree
- **CAT** Catline
- **D** Distanzmaß
- **DAL** Datenaustausch der Länder
- **DDR** Deutsche Demokratische Republik
- **DWD** Deutscher Wetterdienst
- **GCM** globales Klimamodell (engl. Global Circulation Model)
- **EEA** European Environment Agency
- **EIN** eingetroffene Ereignisse
- **EM** Europa-Modell; ehemaliges Wettervorhersagemodell des DWD
- **EU** Europäische-Union
- **F** Fuzzifizierungsexponent
- **FAR** false alarm rate
- **GP** Geopotential
- **GM** Global-Modell; ehemaliges Wettervorhersagemodell des DWD
- **GME** Kürzel für das Numerische Wettervorhersagemodell des DWD; Entstanden aus der Kombination der Kürzel des alten Global-Modells (GM) und des Europa-Modells (EM)
- **HD** horizontale Differenzen
- **HSS** Heidike skill score
- λ Wellenlänge des Lichts
- **L** Links

- **M** Mitte
- **N** Nord
- **NCAR** National Center for Atmospheric Research in Bolder (USA)
- **NMVOC** non-methan volatile organic compounds
- **NO** chemisches Symbol für Stickstoffmonoxid
- **NO₂** chemisches Symbol für Stickstoffdioxid
- **NO_x** Zusammenfassung von Stickstoffmonoxid und Stickstoffdioxid
- **O** Ost
- **O** chemisches Symbol für atomaren Sauerstoff
- **O₂** chemisches Symbol für molekularen Sauerstoff
- **O₃** chemisches Symbol für Ozon
- **POD** probability of detection
- **R** Rechts
- **R** Regressionslinie
- **R** rural; Klasse beim Ozonregime
- **RH** Relative Humidity, relative Luftfeuchte
- **RMSD** Root Mean Squared Distance
- **RMSE** Root Mean Squared Error
- **RT** relative Topografie
- **RV** Reduktion der Varianz
- **S** Spread
- **S** Süd
- **S** Straße; Klasse beim Ozonregime
- σ Standardabweichung
- **TD** Temperatur Differenz
- **TP** Temperatur
- **TR** Teilprognose Trajektorien
- **TSS** true skill statistik
- **U1..3** urban; Klassen beim Ozonregime

- **UBA** Umweltbundesamt
- **US** United States, Vereinigte Staaten von Amerika
- **UTC** Universal Time Coordinated
- **VOC** volatile organic compounds
- **VOR** Vorticity
- **VOR** vorhergesagte Ereignisse
- **W** West
- **WE** Teilprognose Alte Regression (Autor Wolfgang Enke)
- **WL** Teilprognose Wetterlagen

1.1 Bei der Messung des Ozons verwendete Einheiten (aus: Promet [14], Seite 2)

Bei der Angabe der Ozonkonzentration werden unterschiedliche Maßeinheiten verwendet. Die dominierenden (international üblichen) sind nachfolgend aufgeführt:

1. Ozonpartialdruck p , in nbar (ozone partial pressure)
 - Anmerkung: 1 nbar $\hat{=}$ 0,1 mPa
2. Ozonpartialdichte ρ in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (ozone density)
3. Volumenmischungsverhältnis X_3 in ppb(v) (volume mixing ratio)
 - Anmerkung: ppb bedeutet parts per billion, 10^9
 - $2\mu\text{g}/\text{m}^3 \approx 1\text{ppb(v)}$
4. Massenmischungsverhältnis m^3 in $\mu\text{g}/\text{g}$ (mass mixing ratio)
5. Dobson-Einheit DU (Dobson unit)
 - Integrierter Gesamtozongehalt der Atmosphäre, dargestellt in einer Ozonsäule reduziert auf Normalbedingungen ($T_0 = 273 \text{ K}$, $p_0 = 1013 \text{ hPa}$)
 - 1 cm Ozonsäule entspricht 10^3 DU, d.h. die Höhe einer Ozonsäule von 3~mm entspricht 300 DU
 - Manchmal ist auch die Bezeichnung milli-atmo-centimeter (m-atm-cm) in Gebrauch

2 Einleitung

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 Teilespekt 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 Ländernetze² 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.

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

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

2.1 Einführung

2.1.1 Vorgaben des Umweltbundesamtes

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),
- 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 vorgegebenen Ausschnitt.

³ DAL - Datenaustauschzentrale der Länder

Drei Prognoseergebnisse soll die Routine bereitstellen:

- ein stationsbezogenes Tagesmaximum von Ozon
- ein stationsbezogenes Tagesmaximums des gleitenden 8h-Mittels
- und eine regionale Prognose der Wahrscheinlichkeit der Überschreitung von vorgegebenen Ozonschwellenwerten.

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. Eine Beschreibung der Handhabung des Programmpaketes und einzelner Teilaufgaben erfolgt in speziellen Handblättern.

2.1.2 Mindestanforderungen an das Prognosesystem

Im Promet Heft Photosmog II [16] postulierte Jacobsen [39] die Mindestanforderungen für operationelle Modellsysteme. Diese Forderungen lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- die Rechenzeit soll kurz sein; die Mindestanforderung dabei ist, dass am Nachmittag die Prognoseergebnisse für den Folgetag vorliegen

- die Modelle müssen an einer Vielzahl von Wetterlagen getestet sein, nach Möglichkeit soll eine ausgedehnte prä - operationelle Testphase dem Einsatz vorangehen
- eine Routineprüfung muss im System implementiert werden
- die routinemäßige Versorgung mit den Eingangsdaten muss sichergestellt sein

2.1.3 Aufbau der Untersuchung

Die Bearbeitung erfolgte in mehreren Teilschritten. Diese waren bestimmt 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 **Einleitung**. Am Anfang steht die Frage nach den **Faktoren der Ozonbelastung** (Kapitel 2.2). 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.

Die Arbeit soll den Aufbau eines statistischen Modellsystems beschreiben. Bevor dieses möglich ist, muss einiges zu **Statistischen Routinen** (Kapitel 2.3) 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 2.4 **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**. 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 Datenprüf routinen die vor der Entwicklung der eingesetzten Methoden genutzt werden, auch operationell am UBA Anwendung finden. Die Routinen sind in [22] erläutert. Die nächsten vier Kapitel beschreiben die hier neu entwickelten Methoden für die Ozonprognose. Begonnen wird im Kapitel 3.1 mit einer kurzen Erläuterung der **Weiterentwick-**

⁴ Einleitung, Hauptteil sowie Zusammenfassung

lung der am UBA laufenden Routine. Das Kapitel 3.2 **Eine wetterlagenbasierte Klassifikation mit nachfolgender Regression** 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.

Im Kapitel **Ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression** (Kapitel 3.3) 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 3.4 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 3.5 (**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 Bericht mit dem Kapitel 4 **Zusammenfassung**. 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.

2.2 Faktoren der Ozonbelastung

Die an einem Ort aktuell gemessene Ozonkonzentration ist das Resultat verschiedener chemischer und physikalischer, in jedem Fall dynamischer, Prozesse die einerseits zu einem Ozonaufbau, andererseits auch zur Zerstörung von Ozon führen. Obwohl diese Prozesse in der Natur parallel ablaufen und sich gegenseitig beeinflussen, wurde in der vorliegenden Arbeit eine Untergliederung in vier Teilprozesse vorgenommen. Diese sind:

- Ozonbildung (Abschnitt 2.2.1)
- horizontaler Ozontransport (Abschnitt 2.2.2)
- vertikale Ozondurchmischung (Abschnitt 2.2.3) und
- Ozonabbau (Abschnitt 2.2.4).

Die folgenden Ausführungen sind im Wesentlichen eine Zusammenfassung zweier Publikationen [12], [42].

2.2.1 Ozonbildung

Zum Aufbau von Ozon ist eine Reihe von chemischen Reaktionen notwendig. Die Ozonbildung ist eine Addition von freiem atomarem Sauerstoff an molekularen Sauerstoff. In der planetaren Grenzschicht ist Stickstoffdioxid (NO_2) die Hauptquelle für leicht abspaltbare Sauerstoffatome.



Die Photolyse in Gleichung (1) tritt bei Einstrahlung von Licht der Wellenlängen $\lambda \leq 410\text{nm}$ auf. Der so gebildete atomare Sauerstoff O reagiert sofort, mit dem in ausreichender Menge vorhandenen molekularen Sauerstoff, zu Ozon.



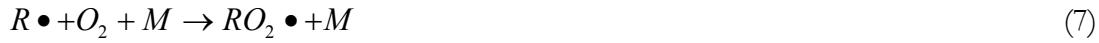
Ozon ist somit ein sekundärer Luftschaadstoff. Das gebildete Ozon wird durch das emittierte und in der Atmosphäre vorhandene Stickstoffmonoxid (NO) wieder zu molekularem Sauerstoff abgebaut.



Die Reaktionen (1), (2) und (3) stellen in der Summe den Gleichgewichtszyklus für Ozon dar. Nach einer Einstellzeit sind die Konzentrationen konstant. Damit eine zusätzliche Ozonbildung einsetzt, muss dieser Nullzyklus gestört werden. Es werden Radikale benötigt, um ständig NO in NO₂ zu überführen. Dieses kann über folgende Reaktionskette ablaufen (Graedel et al. [35]):



Hierbei stellt R die chemische Notation für jedes organische Fragment dar, dass nur Kohlenstoff und Wasserstoff enthält (z.B. C₂H₅ und C₃H₇).



Hierbei kennzeichnet M Luftmoleküle, üblicherweise Molekularer Stickstoff oder Sauerstoff.



Mit einem Ozonmolekül werden entsprechend den Gleichungen (4) bis (8) zwei NO-Moleküle in NO₂ überführt.

Somit stellen Stickoxidverbindungen (NO und NO₂, zusammen NO_x) und flüchtige Kohlenwasserstoffverbindungen (VOC) die wichtigsten Vorläuferstoffe dar, die unter der Voraussetzung zur Ozonbildung beitragen, dass ausreichende Strahlung eines bestimmten Wellenlängenbereiches vorhanden ist. Dieser zunächst relativ einfach erscheinende Vorgang, *je mehr NO_x und VOC, desto mehr Ozon*, wird erheblich durch die Tatsache kompliziert, dass Ozonbildung und -abbau durch das Verhältnis der beiden Vorläuferstoffe zueinander bestimmt werden: die Ozonbildung ist entweder NO_x- oder VOC-limitiert. Ist in einer Region (zum Beispiel in einem Ballungsraum) ein Überangebot an NO_x (NO) vorhanden, überwiegt der Ozonabbau. Werden jedoch in dieser Region größere Mengen VOC zum Beispiel durch petrochemische Anlagen emittiert, ist die Ozonbildung der überwiegende Effekt. Die Ozonkonzentration in diesem Gebiet ist somit VOC-limitiert. Ist dagegen in einem Gebiet (zum Beispiel in einem ländlichen Gebiet) kaum NO_x (NO₂) vorhanden, finden Ozonbildungsprozesse nur in geringen Umfang statt, auch wenn die VOC-Konzentration in diesem Gebiet durch biogene Emissionen (Isoprene, Terpene) recht hoch sein kann. Die Ozonbildung in diesem Gebiet ist dann NO_x-limitiert.

Hier raus kann abgeleitet werden, dass die Ozonkonzentration in Großstädten und Ballungsräumen *VOC*-limitiert und in ländlichen Regionen NO_x -limitiert sein sollte. In der Bundesrepublik Deutschland trifft diese vereinfachte Differenzierung großräumig nicht zu. Aufgrund der Lage der ländlichen Regionen im Lee zahlreicher Großstädte und Ballungsräume und der relativ hohen Kfz-Dichte auch in ländlichen Regionen, ist die Ozonkonzentration in Deutschland überwiegend *VOC*-limitiert. Dies lässt sich unter anderem auch daran erkennen, dass mit dem Rückgang der Kfz-Emissionen an Wochenenden eine Erhöhung der Ozonkonzentration einhergeht. Dieser *Wochenendeffekt* ist nicht nur in den Großstädten und Ballungsräumen zu beobachten, sondern, auf der Basis der Messergebnisse, auch in den ländlichen Regionen Deutschlands bis hin zu höheren Bergen.

Eine weitere Quelle des Ozons ist der Zustrom aus der freien Troposphäre. Zum Beispiel veranschaulichen Messungen an der Station Jungfraujoch (3580 m ü. NN) in der Schweiz (siehe Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft Bern (BUWAL) [12]) die in der oberen Troposphäre vorherrschenden Ozonverhältnisse. Der Jahresmittelwert liegt dort bei 70 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ⁵. Der Austausch zwischen freier Troposphäre und Grenzschicht wird durch die Intensität der atmosphärischen Vertikalbewegungen bestimmt. Ein Grund für die in der Troposphäre vorliegenden höheren Ozonkonzentrationen sind unter anderem Zuströme aus der Stratosphäre. Diese ist durch die dort auftretenden Photolysereaktionen von UV-Licht mit molekularem Sauerstoff ein Ort der Ozonproduktion. Besonders starke Vermischungen der stratosphärischen und troposphärischen Luftmassen treten bei Tropopausenfaltungen auf.

Die an einem Ort gemessenen Ozonkonzentrationen sind nicht allein durch die lokalen Ozonbildungsprozesse erklärbar. Diese verursachen nur die Spitzenwerte der Ozonbelastung. Laut BUWAL [12] kann an einem hochsommerlichen Schönwettertag die zwischen 8 und 18 Uhr produzierte Ozonmenge zu folgenden Konzentrationszunahmen führen:

- **20-40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$** im ländlichen schweizerischen Mittelland
- **30-60 $\mu\text{g}/\text{m}^3$** im Lee der großen schweizerischen Städte
- **50-150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$** im Lee von Millionenstädten (z.B. Berlin)

⁵ Die Angabe in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ist temperatur- und druckabhängig. Das Volumen ist dafür auf eine Temperatur von 293 K und einen Druck von 1013 hPa zu normieren[25].

2.2.1.1 Photolyse

Viele der oben beschriebenen Prozesse werden unter dem Begriff Photolyse zusammengefasst. Unter dem Begriff Photolyse werden chemische Umsetzungen verstanden, die durch das Zusammenspiel von solarer Strahlung mit atmosphärischen Gasen und Aerosolpartikeln ablaufen.

Entsprechend Gleichung (9) zerfällt dabei ein Molekül (A) durch die einwirkende Strahlung in mehrere Teile (B, C).



Zur Modellierung der photochemischen Abläufe und Prozesse ist die genaue Kenntnis der Reaktionsprozesse und -geschwindigkeiten von großer Bedeutung.

2.2.2 Horizontaler Ozontransport

Während der Ozonbildungsprozesse wird die Luftmasse transportiert. Somit ist der Ort der Vorläuferstoffemission nicht mehr mit dem Ort der maximalen Ozonbildung identisch.

In der Publikation [12] wird eine typische Distanz von 10 bis 50 km zwischen Emissionsort und dem Ort der maximalen Ozonkonzentration angegeben. Entscheidender Faktor ist hier neben der Windgeschwindigkeit die Konzentration der Vorläuferstoffe. Je höher die Konzentration der Vorläuferstoffe am Ort der Quelle, desto weiter entfernt von der Quelle erfolgt die maximale Ozonbildung. Grund dafür ist die notwendige Verdünnung, bis zu einem optimalen Konzentrationsbereich der Vorläufersubstanzen für die optimale Ozonbildung. Bedingt durch eine mittlere Lebensdauer des Ozons von einigen Tagen, sind großräumige Transporte (500 - 1000 km)⁶ möglich [52]. Neben dem Transport von Ozon treten auch Transporte von Ozonvorläuferstoffen auf, die nicht vernachlässigt werden dürfen.

2.2.3 Vertikale Ozondurchmischung

Der vertikale Transport von Ozon ist ein wichtiger Prozess, der vor allem für den typischen Tagesgang der Ozonbelastung verantwortlich ist. Wichtig ist dabei die Ausbildung einer Mischungszone (*mixing layer*). Diese entsteht innerhalb der Grenzschicht, welche eine Folge der bodennahen Flüsse, hervorgerufen durch die solare Aufheizung und die Rei-

⁶ Da die Ozondeposition über Wasserflächen vernachlässigbar ist gering ist und Ozon im Winter schlechter abgebaut wird, sind besonders über Wasser und im Winter noch größere Transportwege möglich.

bungsturbulenz, ist. Innerhalb der Mischungszone sind die Ozonkonzentrationen am späten Nachmittag in etwa gleich. Nachdem mit Abnahme der Einstrahlung die Ozonproduktion zum Erliegen kommt, setzt in den bodennahen Schichten der Ozonabbau ein. Da die bodennahen Schichten sich infolge der negativen Strahlungsbilanz⁷ abkühlen, entsteht in der Nacht eine Bodeninversion. Somit sind die Reste der Mischungszone vom Tag von der Bodenschicht entkoppelt. Der Abbau von Ozon findet aber in der Hauptsache in der bodennahen Schicht statt. Der Rest der Mischungszone, der sich oberhalb der Bodenschicht befindet, wird Reservoirsschicht genannt. In ihr bleiben die Vortagskonzentrationen des Ozons erhalten [7]. Im Gegensatz dazu, wird das Ozon in der Bodenschicht oft vollständig abgebaut.

Wird am folgenden Morgen durch Konvektion und/oder Turbulenz die Bodeninversion aufgelöst und die Reservoirsschicht mit der Bodenschicht vermischt, steigen die Ozonkonzentrationen am Boden rasch. Dieser Anstieg ist somit eine Folge der Vortagsozonkonzentrationen. Erst später wird die Ozonneubildung die entscheidende Komponente für die zu beobachtende Ozonzunahme. Die Ozonkonzentration der Reservoirsschicht ist damit die Sockelkonzentration, auf deren Basis eine Vorhersage für die nachmittägliche maximale Ozonkonzentration durchgeführt werden könnte, sofern diese bekannt wäre. Dieser hier idealisiert beschriebene Prozess gilt aber nur bei ruhigen Strahlungswetter.

2.2.4 Ozonabbau

Neben dem Abbau von Ozon infolge der in der Gleichung (3) beschriebenen Reaktionen wird Ozon fast ausschließlich durch trockene Deposition aus der Atmosphäre entnommen. Trockene Deposition bedeutet hier den Abbau von Ozon durch chemische Reaktionen mit Materialien an der Erdoberfläche. Hierzu zählen auch Pflanzen. Grund dafür ist die stark oxidierende Wirkung von Ozon. Somit ist die Deposition abhängig von Art und Ausmaß der Reaktionsfläche. Die Ozondeposition über Wasserflächen ist vernachlässigbar gering. Trotz der im Verhältnis zum Gesamtvolumen der Luftmasse geringen Reaktionsfläche ist die Deposition als ein effizienter Prozess für die Ozonreduzierung anzusehen. So gibt die

⁷ Im Tagesgang der Strahlungsbilanz tritt in Abhängigkeit von der kurzweligen Einstrahlung ein Wechsel von zum Boden und in Richtung Atmosphäre gerichteter Nettoflüsse auf. In den Nachtstunden überwiegt die langwellige Ausstrahlung in Richtung Atmosphäre.

BUWAL-Publikation eine Reduktion um 10 - 20 % pro Tag an. Die Depositionsprozesse sind direkt proportional zur Ozonkonzentration. Sie sind damit einer der limitierenden Faktoren für maximale Ozonkonzentrationen.

In der Nähe von Stickstoffmonoxidquellen treten geringere Ozonwerte auf als in der Umgebung. Grund dafür ist eine andere Gleichgewichtskonzentration der Stoffe in den Reaktionen der Gleichungen (1), (2) und (3).

2.2.5 Fazit

Nach der Betrachtung der vorangehenden Abschnitte ist eine Schlussfolgerung zwingend. Die meteorologischen Bedingungen können nur einen Teil der Variabilität der Ozonkonzentrationen erklären.

Weiterhin kann eine einfache Vorhersage, nur basierend auf linearer Regression, nicht alle Prozesse die zur lokalen Ozonänderung führen, abbilden. Besser ist dies durch eine vorrausgehende Klassifikation zu erreichen. Auch ist die Betrachtung der Prozesse an einem Ort allein nicht ausreichend. Die aktuelle Ozonkonzentration ist die Summe der Entwicklungen der Vortage und von vielen Prozessen abhängig, die in Raum und Zeit eingebettet sind. Somit sind großräumige und mehrtägige Betrachtungen für die Beschreibung der Ozonkonzentration an einem Ort notwendig. Dies zeigt die Grenzen einer statistischen Ozonprognose. Bei den einzelnen später vorgestellten Methoden wurde versucht, eine optimale Kombination aus meteorologischen Parametern und vorangegangenen Ozonverhältnissen zu finden und durch die Kombination mehrerer Methoden, auch die Grenzen der einzelnen zu überwinden.

2.3 Statistische Routinen

Das Kapitel stellt die Methoden vor, die eine Basis für die nachfolgenden Kapitel bilden. Begonnen wird mit dem Abschnitt **Methodische Grundlagen** über die methodischen Grundlagen für die Entwicklung von Regressionsmodellen. Der Abschnitt geht darauf ein, auf welche Arbeitsschritte geachtet werden muss, damit eine spätere Nutzung des entwickelten Modells erfolgreich ist. Nachdem erklärt worden ist, was alles bedacht werden muss, werden im Abschnitt **Screeningmethoden in der Arbeit** die zwei Vorgehensweisen vorgestellt mit denen die Entwicklung durchgeführt wurde. Im Abschnitt **Prüfmaße** wer-

den die Prüfmaße vorgestellt, mit denen die Güte der Entwicklung und die Vorhersageleistung kontrolliert wurden.

Ein weiterer wichtiger Punkt ist die Bereinigung der Eingangsdaten von Jahres- und Tagesgang. Im Abschnitt **Zyklische Schwankungen – Jahres- und Tagesgang** werden daher Beispielverläufe dargestellt und die Entfernung von Jahres- und Tagesgang aus den Zeitreihen erläutert.

2.3.1 Methodische Grundlagen

Das Hauptproblem der hier genutzten Statistik ist die Suche nach stabilen und erwartungstreuen Parametern für die Regressionsmodelle. Durch die vorgegebenen Randbedingungen ist das nicht ganz einfach. Das Ziel dabei ist, aus den Daten eine möglichst optimale Zahl an potentiellen Prädiktoren zu finden. Mit diesen soll dann ein Modell mit möglichst optimaler Kompliziertheit entwickelt werden [19].

Damit das gewählte Modell nicht zur Schwachstelle der gesamten Arbeit wird, müssen eine Vielzahl von Stabilitätskriterien eingehalten werden. Im Folgenden wird eine Übersicht an Anforderungen aus einer ausgewählten Gruppe von Publikationen dargestellt [19], [4], [53]. Alle drei Autoren stellen sehr hohe Anforderungen, die bei der Entwicklung eines statistischen Prognosesystems eingehalten werden müssen. Somit ist bei Einhaltung der Kriterien mit einem stabilen und erwartungstreuen Modell zu rechnen.

2.3.1.1 Auswahl der Prädiktoren

Üblicherweise ist eine große Anzahl von Prädiktoren vorhanden. So stehen zum Beispiel für jeden Gitterpunkt der hier genutzten Wetterprognose des DWD 60 Parameter zur Verfügung. Im ersten Schritt muss diese Anzahl reduziert werden. Ein Grund dafür ist die Gefahr des Overfittings. Dieses kann dann auftreten, wenn das Verhältnis der Anzahl der Fälle im Entwicklungskollektiv zu der Anzahl der Prädiktoren ungünstig ist.

Ist beispielsweise die Anzahl der Fälle gleich zwei und die Zahl der Prädiktoren eins, so ist eine perfekte lineare Regression möglich. Dabei ist es völlig unerheblich ob zwischen den Prädiktoren und dem Prädiktanden ein Zusammenhang besteht oder nicht. Wie im Beispiel 6.5 von [53] auf Seite 185ff. dargestellt, gilt dieses für jede Kombination, bei der die Anzahl der Fälle gleich der Anzahl der Prädiktoren plus eins ist. Daraus können mehrere Lehren gezogen werden:

- es sollten nur physikalisch begründbare Prädiktoren für die Regression herangezogen werden,
- jede Regression muss an einem unabhängigen Kollektiv getestet werden
- und die Anzahl der Fälle soll in einem sinnvollen Verhältnis zu der Anzahl der Prädiktoren stehen.

2.3.1.2 Screening-Regressions-Analyse

Die Auswahl der Prädiktoren erfolgt üblicherweise in Form einer Screening-Regressions-Analyse. Am bekanntesten ist hier die *forward selection* oder *stepwise regression*. Hierbei werden schrittweise erst einer, dann jeweils einen Prädiktoren hinzunehmend, der beste bzw. die beste Kombination an Prädiktoren gesucht. Ist dieser bzw. sind diese gefunden, so wird im nächsten Schritt die jeweils beste Kombination der gefundenen Prädiktoren mit einem neu hinzugefügten geprüft.

Alternativ dazu kann die *backward elimination* genutzt werden. Diese ist analog zur *forward selection* nur mit einer umgekehrten Arbeitsrichtung. Beginnend mit allen Prädiktoren wird schrittweise immer der schlechteste Prädiktor herausgenommen.

Mit dem Screening wird der Beitrag der einzelnen Prädiktoren für die zu entwickelnde Routine untersucht. Hierbei ist auch die Erwartungstreue ein wichtiger Aspekt. Unter Erwartungstreue wird verstanden, dass die bei der Entwicklung auftretenden statistischen Zusammenhänge zwischen Prädiktand und Prädiktor auch bei unabhängigen Daten weiterhin Bestand haben. Dieses wird mit der Crossvalidation kontrolliert. Am Ende der Screening-Analyse werden nur noch die Prädiktoren genutzt, die einen hohen Beitrag bei der Berechnung liefern. Alle anderen Prädiktoren wurden durch die Screening-Analyse herausgenommen. Erfolgt eine multiple Regression mit allen Prädiktoren im Block, fehlt diese Information und die Erwartungstreue ist nicht mehr gegeben.

2.3.1.3 Abbruchkriterien

Beide oben genannten Methoden benötigen ein Abbruchkriterium. Eine solche Regel soll bestimmen, nach der Hinzunahme welches Prädiktors das Screeningverfahren beendet wird. Dazu werden Prüfmaße herangezogen, mit denen die Güte der Regressionsfunktion geprüft wird. Bei der *forward selection* wird dann abgebrochen, wenn sich die Qualität der Vorhersage nur noch weniger als eine vorgegebene Schranke verbessert oder sogar schlech-

ter ist. Umgekehrt wird bei der *backward elimination* aufgehört, wenn die Qualität der Vorhersage stärker abnimmt.

Theoretisch können unendlich viele Prädiktoren gewählt werden. Es muss aber mit jeder Hinzunahme eines weiteren Prädiktoren mit einer erhöhten Wahrscheinlichkeit für ein Overfitting gerechnet werden.

Daher sollten [53] zu Folge nicht mehr als zwölf Prädiktoren gewählt werden. Auch sollte möglichst eine Mindestanzahl von 50 Fällen je Prädiktor eingehalten werden.

2.3.1.4 Crossvalidation

Eine der Lehren, aus der oben genannten Problematik des Overfittings, ist die Notwendigkeit der Prüfung der abgeleiteten Regressionsfunktion an einem unabhängigen Kollektiv. Diese erfolgt durch die Crossvalidation.

Die simpelste Form ist die Herausnahme eines Wertepaars bei der Erstellung der Regressionsfunktion und die Prüfung der Funktion an genau diesem Wertepaar. Dieses erfolgt dann im Rotationsprinzip für jeden einzelnen Fall. Neben der Möglichkeit einen Fall gegen die Gesamtheit zu prüfen, ist es auch möglich eine Gruppe von Fällen (bis zur Hälfte des gesamten Kollektives) herauszunehmen und diese als Prüfkollektiv zu nutzen. Auch dann wird mit dem Rotationsprinzip gearbeitet. Das heißt es wird wechselseitig an einem Kollektiv entwickelt und am anderen getestet und dann umgekehrt. Damit mögliche Trends im Kollektiv keinen Einfluss haben, sollte in einem vorbereitenden Schritt das Datenkollektiv vom Trend bereinigt werden. Es muss festgestellt werden, dass fast immer die Qualität der Vorhersage im Prüfkollektiv schlechter ist, als im Entwicklungskollektiv. Überschreitet der Unterschied zwischen den Ergebnissen eine vorgegebene Schwelle, so sind die gefundenen Regressionsfunktionen als nicht nutzbar anzusehen!

Neben der bisher beschriebenen einfachen Crossvalidierung wurde bei der Entwicklung der Routinen eine weitergehende Crossvalidierung genutzt. Hierbei werden die gefundenen Regressionsfunktionen an einem für die Entwicklung nicht genutzten Zeitraum getestet. Nur wenn die Prüfergebnisse für diesen unabhängigen Zeitraum nicht deutlich schlechter sind als die Ergebnisse im Entwicklungszeitraum, wurden die ermittelten Korrelationen genutzt. Dieses in der Arbeit genutzte Prinzip wird doppelte Crossvalidation genannt.

2.3.1.5 Eine Selbstlernende Bias-Eliminierung

Für den Fall von vollständig bekannten und korrekten Relationen sowie Eingangsdaten ohne systematischen Fehler, müssten biasfreie Prognosen erzeugt werden können. In der Realität kann der Bias jedoch je nach Witterungsabschnitt recht beachtlich sein. Bei der Prognose von Immissionskonzentrationen sind neben den sich ändernden Relationen (siehe Abbildung 1) oft auch externe Störungen (z.B. die Qualität der Wettervorhersage) die Ursache für diese Fehler.

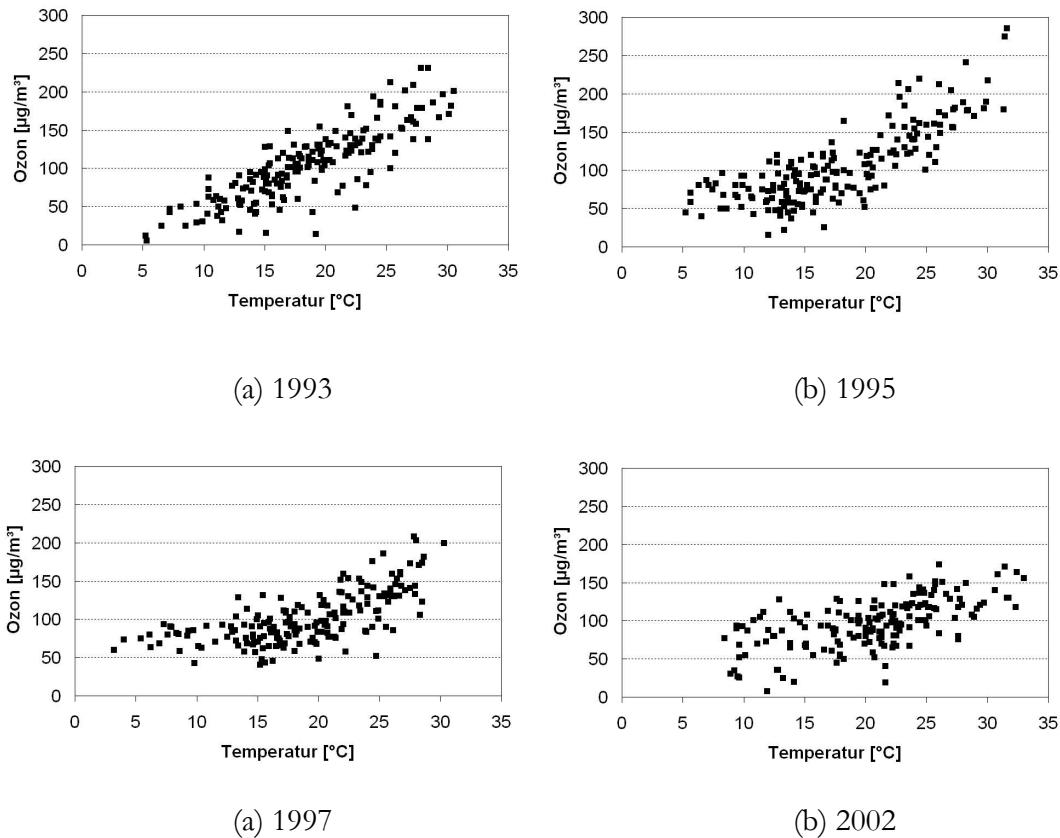


Abbildung 1: Vergleich der Korrelation zwischen Tagesmaxima Ozonkonzentration und Tagesmaxima Temperatur an der Station Wiesloch (DEBW010), genutzt wurde jeweils der Zeitraum April bis September

Eine Möglichkeit solche Fehler zu korrigieren beschreibt Balzer [3].

$$Cor_{neu} = Cor_{alt} + \beta \times (Bias_{aktuell} - Cor_{alt}) \quad (10)$$

Jede Prognose wird dann um den Korrekturwert Cor geändert. $Bias_{aktuell}$ ist der bei der letzten Prognose (am Vortag) aufgetretene Bias. Die Glättungskonstante β beschreibt den Grad der Anpassung an die aktuellsten Daten. Bei kleinem β lernt das System langsam bei

großem schneller. Die Bestimmung des Wertes von β muss subjektiv mittels probieren erfolgen, da es keinen mathematischen Algorithmus dafür gibt. Die Ermittlung des Korrekturwertes erfolgt für jede Station und wird täglich entsprechend Gleichung (10) neu angepasst.

2.3.2 Screeningmethoden in der Arbeit

Bei der Suche nach der besten Kombination von Prädiktoren für die Regression wurden zwei alternative Screeningverfahren angewendet. Das sind die *stufenweise einfache lineare Regression* und die *multiple lineare Regression*. Mit beiden Wegen sind in etwa gleiche Ergebnisse bei der Regressionsfunktionsentwicklung zu erwarten. Die stufenweise einfache lineare Regression liefert dann die gleichen Ergebnisse wie die multiple lineare Regression, wenn sie mit einer sehr großen Zahl an Schritten, unter möglicher mehrfacher Verwendung der Prädiktoren, erfolgt ist.

2.3.2.1 Stufenweise einfache lineare Regression

Das im Folgenden vorgestellte Verfahren ist in der Literatur unter dem Begriff Restverfahren nach bekannt.

Begonnen wird mit der Suche nach dem besten linearen Prädiktor. Dieser zeichnet sich dadurch aus, dass er den größten RV⁸-Wert, berechnet aus dem Vorhersagefehler der Referenzvorhersage (in dieser Arbeit wurde die Persistenz als Referenzprognose genutzt) und dem Vorhersagefehler der Regressionsfunktion, hat. Unter Nutzung der Regressionskoeffizienten dieses Prädiktors, wird eine Reihe der Residuen, aus der Differenz eingetroffene Werte zur Vorhersage, ermittelt. Jene ist die Ausgangsreihe für die nächste Iteration. Bei dieser wird der beste Prädiktor zur Vorhersage der vorliegenden Residuenreihe gesucht. Auch hier wird äquivalent zum ersten Schritt der berechnete RV-Wert als Richtmaß herangezogen. Je nach Höhe der vorgegebenen maximalen Prädiktorenanzahl wird diese Iteration entsprechend oft wiederholt.

Damit die Prädiktorenlselektion erwartungstreu ist, wurde die H-Methode angewendet. Hierfür wird das Datenkollektiv in zwei Teile aufgeteilt (z.B. Daten mit einer geraden Feldnummer als Teil A und die anderen als Teil B). Im nächsten Schritt wird der Datenkollek-

⁸ Reduktion der Varianz

tivteil A als Entwicklungskollektiv angesehen und die dafür gefundenen Koeffizienten am Datenkollektivteil B (Testkollektiv) getestet. Anstelle der Standardabweichung selbst wurden jetzt die Teilsummen für die Berechnung der Standardabweichung bzw. des RMSE gespeichert

Danach wurden Entwicklungs- und Testkollektiv ausgetauscht. Auch hierfür wurden die Teilsummen berechnet. Durch die Nutzung der Teilsummen ist es möglich, beide Standardabweichungen zu mitteln. Der Prädiktor, bei dem der höchste mittlere RV gefunden wurde, wird für die Ermittlung der Residuenreihe und die darauf folgenden Schritte verwendet. Neben einem guten mittleren RV müssen beide Teilsummen in etwa gleich groß sein, damit die Erwartungstreue erfüllt ist. Beendet wurde die Prädiktorelektion wenn

- die maximale Anzahl der Prädiktoren erreicht wurde oder
- die Steigerung der Vorhersageleistung kleiner war als ein vorgegebener Schwellenwert (zum Beispiel $\Delta RV \leq 0,5\%$).

2.3.2.2 Multiple lineare Regression

Alternativ zu der schrittweisen Regressionsanalyse, bei der jedem weiteren Prädiktor die Residuenreihe angeboten wird, kann die multiple lineare Regression genutzt werden. Wird bei dieser mehr als ein Prädiktor verwendet, muss die Residuenreihe nicht mehr berechnet werden. Einen Berechnungsansatz liefert die Publikation von [18]. Die dort beschriebene Methode hat neben der Entwicklung von multiplen linearen Regressionsfunktionen noch einige andere im Folgenden vorgestellte Spezifikationen. Die Entwicklung beginnt mit dem datensatzweisen auffüllen (Prädiktand plus n Prädiktoren) einer Summenmatrix.

$$S = \begin{pmatrix} \sum x_0 & \sum x_1 & \sum x_2 & \dots & \sum x_n \\ \sum x_0 x_0 & \sum x_0 x_1 & \sum x_0 x_2 & \dots & \sum x_0 x_n \\ \sum x_1 x_0 & \sum x_1 x_1 & \sum x_1 x_2 & \dots & \sum x_1 x_n \\ \sum x_2 x_0 & \sum x_2 x_1 & \sum x_2 x_2 & \dots & \sum x_2 x_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & & \sum x_m x_n \end{pmatrix} \quad (11)$$

Dabei stellt der Index 0 den Prädiktanden dar. Alle weiteren Indizes (1 .. n,m) sind die Prädiktoren. Die Anzahl der Prädiktoren und damit die Größe der Matrix ist variabel.

Es kann in der Summenmatrix ein ständiger Informationsaustausch durchgeführt werden. Dazu muss ein Verfallswert eingeführt werden. Dabei bedeutet ein Wert von 100, dass ab

dem 101sten zu lernenden Datensatz erst $\frac{1}{100}$ der Summenmatrix gelöscht wird und dann

nach der aktuelle Datensatz hinzugefügt wird. Somit wird eine Anpassung der Regression an Änderungen im Datenkollektiv erreicht.

$$\sum_{n,m} (x_n, x_m)^T = \sum_{n,m} (x_n, x_m)^{T-1} - \frac{1}{a} \sum_{n,m} (x_n, x_m)^{T-1} + (x_n, x_m)^T \quad (12)$$

n, m = Ordnungsindizes der Prädiktoren;

$T, T-1$ als Kennzeichen für den Speicherinhalt vom Tag bzw. Vortag und

a als Lernintervall in Tagen (Verfallswert).

Bei der Nutzung zur Berechnung der multiplen linearen Regressionsfunktionen muss der Verfallswert größer sein als die Anzahl der Trainingsfälle. Dadurch wird kein Informationsaustausch durchgeführt. Nachdem die Summenmatrix *trainiert* wurde, kann sie für die Bestimmung der Koeffizienten genutzt werden. Dabei werden mehrere Schritte durchlaufen. Basierend auf der Formel (13) wird aus der Summenmatrix die Covarianzmatrix erzeugt. Hierbei können die einzelnen Koeffizienten an- bzw. ausgeschaltet werden. Zum Ausschalten muss der entsprechende Feldwert Null und der Diagonalwert auf Eins gesetzt werden.

$$C_{n,m} = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ni} x_{mi} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ni} \sum_{i=1}^N x_{mi}}{N-1} \quad (13)$$

Mit der oben erzeugten Covarianzmatrix wird zuerst die einfache Korrelation zwischen dem Prädiktanden und den Prädiktoren berechnet. Im zweiten Schritt wird die multiple Korrelation errechnet. Vorher erfolgt eine Prüfung darauf, welche Prädiktoren für die Regression signifikant sind. Unterschreitet die Korrelation eines der Prädiktoren einen Grenzwert, so wird der Prädiktor aus der Covarianzmatrix gestrichen. Die zum Vergleich genutzten Größen werden nach den Gleichungen (14) und (15), die aus [50] entnommen wurden, berechnet:

$$t = \frac{|r|}{\sqrt{1-r^2}} \times \sqrt{n-2} \quad (14)$$

mit r als Korrelationskoeffizienten und n als die Anzahl der Fälle.

$$t_{0,05} \approx 1,96 + \frac{2,44}{n-1} \quad (15)$$

gültig für $n \geq 3$, $t_{0,05}$ ist die Schranke mit 5% Irrtumswahrscheinlichkeit.

Wenn $t < t_{0,05}$, dann wird auch dieser Prädiktor abgeschaltet. Dieses erfolgt durch Nullsetzung der entsprechenden Spalte und Zeile. Der Schnittpunkt beider wird auf Eins gesetzt. Für den Fall, dass ein Prädiktor in Bezug auf einen anderen eine höhere Korrelation als 0,95 aufweist (Interkorrelation), löscht die vorliegende Routine den Prädiktor mit der kleineren Korrelation zum Prädiktanden.

Zur Berechnung der Koeffizienten der multiplen Regressionsgleichung wird ein in [50] beschriebenes Verfahren eingesetzt. Hierzu werden unter Nutzung der Determinantenberechnung die einzelnen Koeffizienten ermittelt.

Ein Vorteil der beschriebenen Methode ist die Robustheit gegenüber Datenausfällen. Fehlt einer der Prädiktoren, so wird dieser bei der Koeffizientenberechnung abgeschaltet. Das Modul berechnet dann die Koeffizienten so, dass eine Vorhersage ohne den fehlenden Prädiktoren möglich ist. Dadurch ist eine Verschlechterung der Vorhersageleistung zu erwarten. Die Prädiktorenselktion wurde auch hier beendet, wenn:

- die maximale Anzahl der Prädiktoren erreicht wurde oder
- die Steigerung der Vorhersageleistung kleiner war als ein vorgegebener Schwellenwert (zum Beispiel $\Delta RV \leq 0,5\%$).

2.3.3 Prüfmaße

In der Arbeit werden in der Hauptsache drei Prüfmaße genutzt. Das ist der RMSE, der Bias und der RV-Wert. Zur Einschätzung der Vorhersagegüte wird in der Literatur eine umfangreiche Anzahl an Prüfgrößen beschrieben. Durch die Quadrierung der Fehler ist der RMSE besonders großen Fehlvorhersagen gegenüber empfindlich. Dieses ist auf dem Gebiet der Ozonprognose sehr wichtig.

2.3.3.1 RMSE - Root Mean Squared Error

Eine wesentliche Größe zur Einschätzung der Qualität einer Prognose ist der Root Mean Squared Error. Er gibt die Streuung der prognostizierten Datenreihe als Differenz zu den tatsächlich eingetretenen Werten an. Somit ist der RMSE ein Fehlerbewertungsmaß. Im

Gegensatz zur Standardabweichung ist der RMSE nicht mittelwertbereinigt und damit ein strengeres Prüfmaß.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n R_i^2} \quad (16)$$

mit R = vorhergesagter Wert - registrierter Wert
und n = Anzahl der Prognosen.

2.3.3.2 Bias

Mit dem Prüfmaß Bias können systematische Fehler aufgedeckt werden. Treten einseitige Verzerrungen zwischen Prognose und Wirklichkeit auf, so zeigt sie der Bias an.

$$Bias = \sum_{i=1}^n \frac{R_i}{n} \quad (17)$$

mit R = vorhergesagter Wert - registrierter Wert
und n = Anzahl der Prognosen.

2.3.3.3 RV - Reduktion der Varianz

Von einer neuen Vorhersage wird gefordert, dass sie besser/genauer ist als andere schon bekannte Prognoseroutinen. Hierzu muss ein Vergleich erfolgen. Der RV ist eine Größe, die zwei Fehlermaße miteinander vergleicht.

$$RV_{RMSE} = 1 - \frac{RMSE_V^2}{RMSE_R^2} \quad (18)$$

mit $RMSE_V$ = RSME der Vorhersagereihe

$RMSE_R$ = RSME der Referenzreihe.

Möglich ist auch ein Berechnungsansatz über die Standardabweichung.

$$RV_{RMSE} = 1 - \frac{\sigma_V^2}{\sigma_R^2} \quad (19)$$

mit σ_V = Standardabweichung der Vorhersagereihe

σ_R = Standardabweichung der Referenzreihe.

Bei einem $Bias = 0$ sind RV_{RMSE} und RV_{sigma} gleich. Ist der Bias ungleich Null so berechnet der RV_{RMSE} ein strengeres Prüfmaß da er nicht mittelwertbereinigt ist. Nur ein perfektes

Vorhersageverfahren mit $RMSE_V=0$ ergibt $RV=100\%$. Ein positiver RV zeigt eine Verbesserung der Vorhersageleistung an. Hierbei ist ein vom Untersuchungskollektiv abhängiger Mindestwert zu überschreiten. Damit der RV signifikant größer als Null ist, wird ein mit $\alpha=5\%$, nach Gleichung (20) zu berechnender, in Abbildung 2 dargestellter Mindestwert gefordert [6].

$$RV_{Min} \approx \frac{186}{(N-2)^{0,415}} \quad (20)$$

mit N als Stichprobenumfang.

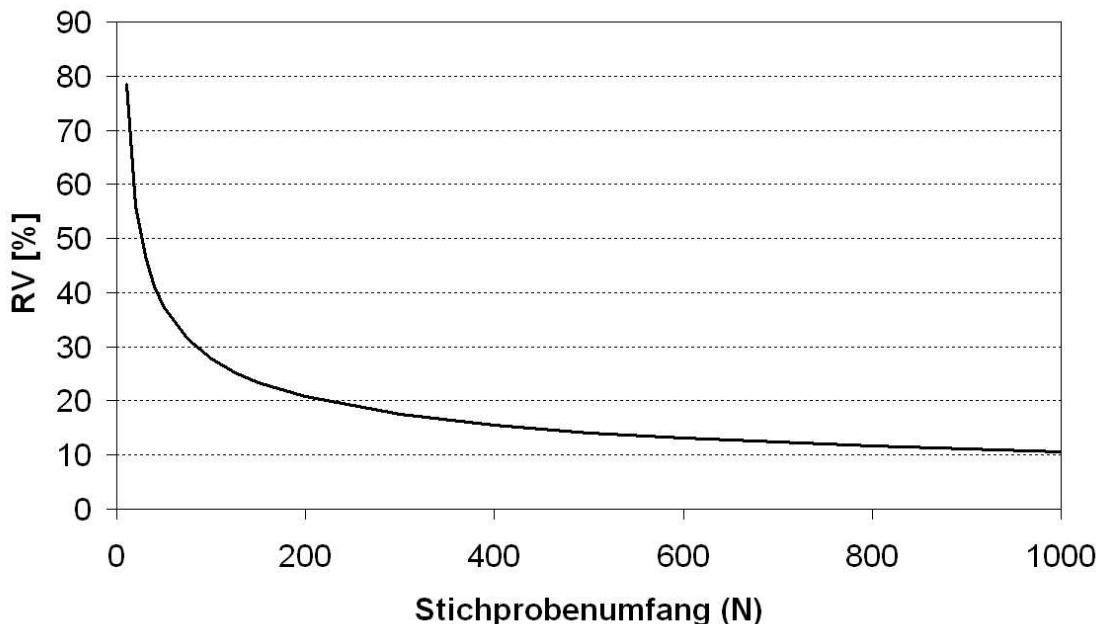


Abbildung 2: Mindest - RV in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang nach Gleichung (20)

Negative RV-Werte weisen darauf hin, dass eine Verbesserung der Vorhersageleistung, mit dem aktuellen Prognoseansatz, nicht gegeben ist. Als Referenz wurde in dieser Arbeit die Persistenzvorhersage genutzt.

Die beiden statistischen Kenngrößen RMSE und RV haben jeweils Vor- und Nachteile. Der RMSE ist ein Maß der Vorhersagegüte. Mit ihm allein ist aber keine Wichtung der Qualitätsunterschiede zweier Prognosen möglich. Die vergleichende Vorhersageleistung kann durch den RV dargestellt werden. Er ist aber immer ein Relativmaß zur Vorhersageleistung der Referenzprognose.

2.3.3.4 Prüfmaße für Binärereignisse

Eine weitere Prüfmöglichkeit sind kategorische Prüfmaße. Dazu müssen die zu prüfenden Ereignisse binarisiert werden. Es wird dann zwischen eingetroffen (1) und nicht eingetroffen (0) und danach ob das Ereignis so vorhergesagt wurde unterschieden. Als erster Schritt muss dafür eine 2×2 Prüfmatrix aufgestellt werden (siehe Tabelle: 1).

Tabelle 1: 2×2 Prüfmatrix für Binärereignisse; EIN für eingetroffene Ereignisse und VOR für vorhergesagte Ereignisse

| | | EIN | | |
|-----|---|----------|---|----------|
| | | 0 | 1 | Σ |
| VOR | 0 | a | b | g |
| | 1 | c | d | h |
| | | Σ | e | f |
| | | | | N |

Mit dieser Prüfmatrix können dann mehrere Prüfgrößen berechnet werden.

- TSS = true skill statistic = $\frac{d}{f} - \frac{c}{e}$; (ideal = 100% = 1) (21)

- HSS = Heidke skill score = $\frac{2 \times (a \times b - b \times c)}{(a + c) \times (c + d) + (a + b) \times (b + d)}$; (ideal = 1) (22)

- POD = probability of detection = $\frac{d}{f}$; (ideal = 100% = 1) (23)

- FAR = false alarm rate = $\frac{c}{h}$; (ideal = 0%) (24)

- Bias = $\frac{h}{f}$; (ideal = 1) (25)

Eine genaue Beschreibung dieser Größen und was sie unterscheidet ist in [53] zu finden.

Ein Einsatzfeld für diese Prüfmaße ist die Arbeit mit Schwellenwerten.

2.3.4 Zyklische Schwankungen - Jahres- und Tagesgang

Viele Zeitreihen, wie auch Ozonreihen, weisen einen signifikanten Jahres- und Tagesgang auf. Möchte man solche Zeitreihen statistisch bearbeiten, so ist es sinnvoll, diesen zu ent-

fernen. Hierzu wurde aus dem vorliegenden Datenarchiv der mittlere Jahres- und Tagesgang für jede Station berechnet.

Je nach Aufgabengebiet sind für jede Stunde in jedem Monat die mittleren (oder die maximalen) Ozonwerte ermittelt worden. Die vorliegende Zeitreihe dieser Mittelwerte wurde dann mittels einer Cubic-Spline-Interpolation auf Tagesbasis geglättet. Die vorliegenden Jahres- und Tagesgänge können dann zur Zeitreihenanalyse genutzt werden. Nach der Anwendung auf die Originalzeitreihe erhält man eine neue Zeitreihe, die die Abweichung des jeweiligen Messwerts vom Jahres- und Tagesgang aufzeigt.

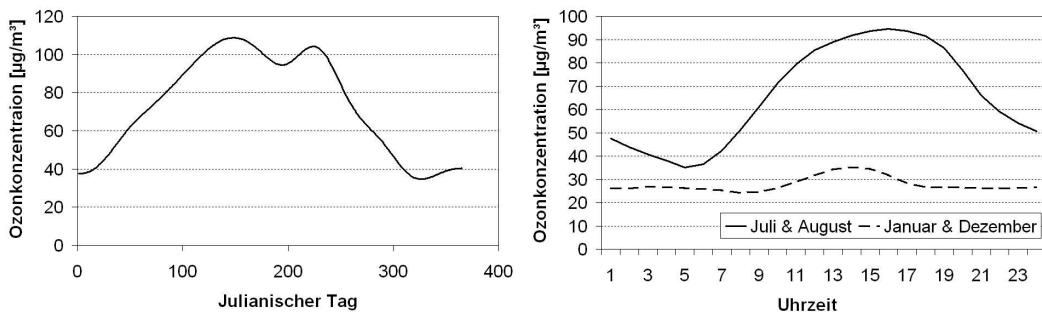


Abbildung 3: Darstellung des über sechs Jahre (1997-2002) gemittelten Jahresganges der Tagesmaxima der Ozonkonzentration und der über jeweils zwei Monate gemittelten Tagesgänge der Ozonkonzentration an der Station Burg (DEBB001)

Die Entfernung der zyklischen Schwankungen hat einen entscheidenden Vorteil. Wird anstatt der Ozonkonzentration die Abweichung vom Jahresgang als Prädiktand gewählt, so tritt eine deutliche Verbesserung der Vorhersageleistung ein. Daher wird in den nachfolgenden Routinen fast immer die Abweichung vom Jahresgang prognostiziert und dann der vom Tag abhängende Jahresgangswert aufaddiert.

2.4 Ozonprognoseverfahren

Die Gesamtheit der Ozonprognosesysteme kann vereinfacht in zwei Teile getrennt werden. Einerseits die numerischen Modelle, die in dieser Arbeit nur kurz im Abschnitt **Eine kurze Einführung zu numerischen Modellen** einführend erläutert werden, andererseits die statistischen Modelle. Da das hier entwickelte Prognosesystem ein statistisches Modell ist, wird im Abschnitt **Statistische Ozonprognosemodelle im Überblick** eine kurze Einführung zu anderen statistischen Ozonprognosesystemen gegeben. Die Auflistung erhebt nicht den Anspruch auf Vollständigkeit. Im Abschnitt **Einfluss der Wettervorhersage auf die**

Ozonprognose wird darauf eingegangen, welchen Einfluss das Wetter auf die Prognosegenauigkeit hat.

2.4.1 Eine kurze Einführung zu numerischen Modellen

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 Luftpaktes 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 nutzten 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 2 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 [51]. Diese Arbeit beinhaltet auch einen Modellvergleich anhand von 300 Stationen im Deutschen Bundesgebiet, der im Sommer 1999 durchgeführt wurde.

Tabelle 2: Vergleich von Modellcharakteristika

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

2.4.2 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, Neuronale Netze, statistische Trajektorienmodelle und auf der Zeitreihenanalyse 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.

2.4.2.1 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. 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 et al. [33] 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 [11]. 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.

Edder et al. [17] 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 et al. [48] 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 (26) konnte eine Vorhersage für den Folgetag berechnet werden.

$$O_{3_{\text{Prog}}} = K + A \times O_{3_{\text{vt}}} + B \times T_{\text{vt}}^3 + C \times T_{\text{Prog}}^3 \quad (26)$$

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 [36] 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 27).

$$O_{3_{\text{Prog}}} = K + A \times O_{3_{\text{vt}}} + B \times T_{\text{vt}} + C \times T_{\text{Prog}} \quad (27)$$

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 $< 23^{\circ}\text{C}$) und warme Tage (Maximumtemperatur $\geq 23^{\circ}\text{C}$) wesentlich zur Verbesserung der Vorhersage beiträgt. Im nächsten Schritt konnte eine klassen- und stationsspezifische 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 kurzwellige 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 [21].

Vergleich der Ergebnisse

In Tabelle 3 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 dem Jahr 2001 ist bezogen auf den RMSE, eine Ver-

schlechterung 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. Seit 2000 nimmt die Persistenzneigung jedoch ab. So ist ein Vergleich des Jahres 2001 mit dem Jahr 1996, aufgrund ähnlichen Persistenzverhaltens, sinnvoller als mit dem Jahr 2000.

Tabelle 3: Entwicklung der Vorhersageleistung für die Jahre 1994 bis 2001; für die Jahre 1997 und 1998 wurden am Umweltbundesamt zwar Prognosen erstellt, eine Prüfung der Vorhersagegüte erfolgte allerdings nicht

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

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 et al. [51] 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. $11\text{--}12 \text{ ppb}$ ($22\text{--}24 \mu\text{g}/\text{m}^3$) 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.

2.4.2.2 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) regierend, 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 *(Artifical) Neural Networks* nachgebildet.

In der Arbeit von Gardner et al. [31] 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 et al. [32] sowie für Ozon Gardner et al. [33]. 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 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) für die fünf untersuchten Stationen in Großbritannien. Die Vorhersagegüte der bedingten Regression lag für denselben Untersuchungszeitraum bei 8 bis 9 ppb (16 bis 18 $\mu\text{g}/\text{m}^3$).

In der Untersuchung von Yi et al. [54] 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.

2.4.2.3 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 3.3 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 Zusammenhangs zwischen Trajektorien und Konzentrationen von Luftsabstoffen wurde z.B. von Stohl et al. [49] durchgeführt.

2.4.2.4 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 herröhrt. Dann aber können auch die einfachen Regressionsmodelle verwendet werden und eine geringfügig niedrigere Erklärungskraft in Kauf genommen werden.

2.4.2.5 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 Rechnenaufwandes, ausreichend groß ist. Dies wird für die hier betrachtete Aufgabe nicht vermutet.

Die Methoden der bedingten Regression werden im Prognosemodul Wetterlagen genutzt (Kapitel 3.2). Die drei anderen Methoden nutzen einfache Regressionsansätze (Kapitel 3.3 bis 3.5). Das Kapitel 3.3 zeigt eine Weiterentwicklung statistischer Trajektorienmodelle.

Im Artikel von Schlink et al. [46] 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 stoping mit der *cost function* sum of squared error brachte die besten Ergebnisse im Vergleich Schlink et al. [46]. Als Gütemaß werden der mittlere absolute Fehler (MAE⁹) 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 Ergebnisse¹⁰, nicht mehr möglich.

⁹ englisch **Mean Absolute Error**

¹⁰ Der Artikel wurde im Juli 2003 veröffentlicht.

2.4.3 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 et al. [10]¹¹ und Alapaty et al. [1]¹² sollen hier stellvertretend für Untersuchungen genannt werden, die diesen Einfluss quantifizieren. So kommen Biswas et al. [10] zu dem Ergebnis, dass Unsicherheiten von bis zu 20 % im Ozonprognoseergebnis durch Fehler in der Wettervorhersage entstehen können. Alapaty et al. [1] 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 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.

¹¹ Untersucht wurden drei Ozonepisoden im Sommer 1995

¹² Untersucht wurde eine Ozonepisode im Zeitraum 29.7. - 5.8.1988

3 Hauptteil

Die Bearbeitung des Forschungsprojektes verlief in mehreren Teilschritten. Begonnen wurde mit der **Weiterentwicklung der am UBA laufenden Routine**. Nachdem die Weiterentwicklung abgeschlossen wurde, begannen der Aufbau und die Entwicklung von neuen Methoden zur Vorhersage der Tagesmaxima der Ozonkonzentration. Insgesamt wurden drei selbstständig lauffähige Teilprognosen und zwei zusammenfassende Endprognosen entwickelt. Diese werden in den Abschnitten 3.2 bis 3.6 vorgestellt.

3.1 Weiterentwicklung der am UBA laufenden Routine

Bis zum Frühjahr 2002 erfolgte einerseits eine Aktualisierung der Regressionsgleichungen, andererseits wurde der Vorhersagehorizont um einen Tag auf drei Tage erweitert. Als Drittes wurde eine Prognose des gleitenden achtstündigen Mittels für die drei Vorhersagehorizonte entwickelt. Diese wurde in der Saison 2002 nur intern erprobt und wurde ab 2003 auch veröffentlicht. Die methodischen Grundlagen entsprechen der bisher am UBA eingesetzten Routine.

3.2 Eine wetterlagenbasierte Klassifikation mit nachfolgender Regression

3.2.1 Einführung und Zielsetzung

Seit vielen Jahrzehnten werden Wetterlagen für die Einteilung der synoptischen Situation eines Tages genutzt. Der folgende Unterabschnitt 3.2.2 beschäftigt sich mit der Definition von Wetterlagen und deren historischer Entwicklung. Danach wird die hier genutzte Methode zur Ableitung von Wetterlagen beschrieben und deren Unterschiede zu den anderen Klassifikationen aufgezeigt (Unterabschnitt 3.2.3). Mit den vorhandenen Daten konnten die mittleren Felder für alle Klassen bestimmt werden. Nach der Durchführung der Diskriminanzanalyse konnte beschrieben werden, welche Felder den entscheidenden Einfluss auf die Wiedererkennung haben (Unterabschnitt 3.2.4). Nachdem ein jeder Tag in einer Region einer Wetterlage zugeordnet wurde, wurde für jede Station innerhalb der Region eine Screening-Regressions-Analyse durchgeführt. Dieses erfolgte mit dem Ziel, die best-

mögliche Vorhersage der maximalen Ozonkonzentration zu erreichen (Unterabschnitt 3.2.5).

Die Erfahrungen von Eder et al. [17] und Spichtinger et al. [48] zeigen, dass es möglich ist, die großräumige meteorologische Situation eines Tages als Prädiktor für die Ozonsituation heranzuziehen. Eder et al. [17] nutzen die *principal-components analysis* mit nachgeschalteter Clusteranalyse zur Einteilung der Tage. Alternativ nutzen Spichtinger et al. [48] die Zuordnung der Tage zu Großwetterlagen. Mit der Entwicklung einer neuen Wetterlagenklassifikation für Ozonsituationen sollen die Erfahrungen der beiden oben genannten Arbeitsgruppen weiterentwickelt werden. Die neue Klassifikation soll erlauben, eine bestmöglich angepasste nachgeordnete Regressionsanalyse durchführen zu können. Es besteht die Hoffnung, somit im gesamten Spektrum der möglichen Ozonwerte eine gute Vorhersageleistung zu erzielen.

3.2.2 Historische Entwicklung

Die deutsche Sprache unterscheidet die Begriffe *Wetter* und *Witterung*. Hierbei bezeichnet der Begriff Wetter den unmittelbar wahrnehmbaren Zustand der Atmosphäre oder auch die hervorstechenden Merkmale einiger Stunden, bis zu einem Tag. Die Witterung bezieht sich dagegen auf längere Zeiträume mit typischen Wetterzuständen. Beide Begriffe beziehen sich auf das Geschehen an einem Ort. Der Begriff der *Großwetterlage* ist an die Definition der Witterung angelehnt. Beide beziehen sich auf ein atmosphärisches Geschehen mehrerer Tage. Im Gegensatz zur Witterung betrachtet eine Großwetterlage aber größere Gebiete, zum Beispiel den Raum Europa Baur [8].

Unter Großwetterlage verstehen wir heute die mittlere Luftdruckverteilung (am Boden) über einem größeren Gebiet (etwa von der Größe Europas mit angrenzenden Meeresteilen) während eines Zeitraumes, in welchem die Luftdruckverteilung und die Steuerung (d. h. die Bahnen aufeinander folgender 24stündiger Drucksteig- und -fallgebiete) im wesentlichen unverändert blieben. (Zitat Baur)

Die Grundlagen der Wetterlagenforschung sind in der Hauptsache von Baur gelegt worden. Die Hauptaufgabe in der Anfangszeit der Großwetterforschung von Baur war das Suchen nach der tatsächlichen Existenz solcher Großwetterlagen und der Möglichkeit, diese zu klassifizieren. Er war dabei nicht der Erste. Wie Baur in seinem Buch [8] schreibt, fanden solche Versuche auch schon vorher statt (Hoffmeyer 1878 und Teisserenc de Bort 1883). Die im Zitat erwähnte mittlere Luftdruckverteilung am Boden stimmt für die aktuel-

len Wetterlagenklassifikationen so nicht mehr. Bei den heutigen Großwetterlagen werden die Geopotentialflächen im 1000 und 500 hPa Druckniveau genutzt. Dittmann [13] nutzt beispielsweise neben den Druckfeldern auch die Windrichtung und Informationen zur Luftfeuchte. Auch sind heute Wetterlagenklassifikationen für kleinere Gebiete üblich (Hutfilter [30]).

3.2.2.1 Einteilung der Wetterlagen

Heutzutage können Wetterlagen nach zwei Methoden definiert werden. Das sind zum Ersten die *subjektiven* Wetterlagen, zu welchen auch die Großwetterlagen nach Baur gehören und zum Zweiten die *objektiven* Wetterlagen.

Die subjektiven Wetterlagen werden von Wissenschaftlern (z.B. Synoptikern) durch vergleichende Betrachtung klassifiziert. Inhomogenitäten sind somit sehr wahrscheinlich. Im Gegensatz dazu werden objektive Wetterlagen nach vorgegebenen Algorithmen klassifiziert.

3.2.2.2 Beispiele für Wetterlagenklassifikationen

In den vergangenen Jahrzehnten ist eine große Anzahl von Wetterlagenklassifikationen entwickelt worden. Die Bekanntesten sind hierbei die Großwetterlagen von Baur. Diese wurden weitergeführt und überarbeitet von Hess [37] bis hin zu Gerstengarbe [34].

Für Deutschland wurde vom Deutschen Wetterdienst (Dittmann [13]) eine neue Klassifikation entwickelt. In der Doktorarbeit von Hutfilter [30] wird eine für den Alpenraum geltende Klassifikation vorgestellt. In dieser Arbeit ist auch ein Vergleich zwischen mehreren multivariaten statistischen Methoden zu finden. Eine Übersicht über weitere Klassifikationen ist in der Arbeit von Bissolli [9] gegeben.

Neben den oben aufgezählten und in Bissolli [9] aufgelisteten Klassifikationen, werden auch von Enke und Mitarbeitern seit vielen Jahren objektive Wetterlagenklassifikationen entwickelt. Ausgehend von der Entwicklung von 10 Wetterlagen je Jahreszeit, zur Erklärung der für den europäischen Raum wesentlichen synoptischen Muster Enke [24], wurden für den Raum Sachsen zwei Klassifikationen entwickelt, die die mittleren Temperatur- und Feuchteverhältnisse, jeweils bis in zu zehn Klassen pro Jahreszeit, auftrennen.

3.2.2.3 Nutzen von Wetterlagen

Wetterlagen sind eine Möglichkeit, innerhalb der ausgewählten Bearbeitungsperiode, alle Tage z.B. anhand ihrer synoptischen Struktur in Klassen einzuteilen. Für die Betrachtung von realen Wetterereignissen sind dafür (unter Umständen) auch subjektive Verfahren nutzbar. Wenn die Wetterlagen im Rahmen des statistischen Downscalings von Wetter- oder Klimasimulationen genutzt werden sollen, sind subjektive Verfahren nicht mehr nutzbar. Gleiches gilt auch für automatisierte Prognoseverfahren, wie die hier vorgestellte Ozonprognosemethode.

3.2.2.4 Der Unterschied zwischen Wetterlagen und Ozonwetterlagen

Der in der meteorologischen Gemeinschaft bekannte Begriff Wetterlage bezieht sich auf die Einteilung von großräumigen meteorologischen Situationen in Klassen. Jeder Wetterlage können meteorologische Parameter zugeordnet werden. Der Begriff Ozonwetterlage lehnt sich an diese Vorstellung an. Im Gegensatz zu den bekannten Wetterlagen sind die Ozonwetterlagen für die mittleren Ozonverhältnisse optimiert. Die Idee dabei ist, dass bei bestimmten atmosphärischen Situationen die Ozonverhältnisse ähnlich sind.

3.2.3 Methode zur Bestimmung von Ozonwetterlagen

Grundlage für die hier genutzte Methode zur Bestimmung von Wetterlagen ist das Vorliegen einer Einstiegsklassifikation einzelner Tage. Diese Klassifikation auf Basis der gemessenen Ozonkonzentrationen wird im Unterabschnitt 3.2.3.1 vorgestellt. Daneben ist das Vorhandensein eines Archivs numerischer Analysen meteorologischer Felder (Unterabschnitt 3.2.3.2) notwendig. Für die nächsten Schritte werden gemittelte Felder aller Klassen (Unterabschnitt 3.2.3.3) als Vergleichsgrundlage benötigt. Danach können mittels Screeing-Diskriminanz-Analyse, aus dem Angebot potentieller Felder (Tabelle 4), die für die Objektivierung der Wetterlagen geeigneten Felder selektiert werden (Unterabschnitt 3.2.3.4). Die im Folgenden beschriebene Methode kann als eine Weiterentwicklung der Wetterlagenklassifikationen nach Enke angesehen werden.

3.2.3.1 Die Clusterung der Tage entsprechend der Ozonsituation

Das Umweltbundesamt (UBA) hat für die Arbeit sein Datenarchiv der in Deutschland gemessenen Ozondaten zur Verfügung gestellt. Basierend auf diesem Datensatz wurde für

jeden Tag und für jede Station das Maximum der stündlichen Mittelwerte im Zeitraum von 6 bis 20 Uhr ermittelt.

Ausgehend davon, dass sich die Ozonsituation in den einzelnen Teilen Deutschlands unterscheiden kann, wurde Deutschland in drei Regionen unterteilt. Grundlage hierfür sind die Informationen der Stationsdatenbank des UBA. Als Erstes wurde Deutschland in eine Nord- und eine Südregion aufgeteilt. Hierbei liegt die Grenze bei $\geq 50^{\circ}18' N$ (geografischer Breite) für die Zuordnung in die Nordregion. Diese wurde im Weiteren in eine Ost- und eine Westregion unterteilt. Hierbei liegt die Grenze bei $\geq 11^{\circ} O$ (geografischer Länge) für die Zuordnung zur Ostregion (Abbildung: 4).

Innerhalb der drei Regionen wurden dann die Ozonmaxima eines Tages der Größe nach sortiert. Im nächsten Schritt wurden die 10 höchsten Tagesmaxima innerhalb der Region gemittelt. Die Anzahl 10 ist das bestmögliche Ergebnis von Versuchen und Abschätzungen. Diese hatten zur Aufgabe eine optimale Anzahl zu finden, die einen Kompromiss zwischen der Angabe des repräsentativen regionalen Ozonmaximums¹³ und der Sicherheit nicht nur ein Einzelereignis zu betrachten, bildet. Der Mittelwert der 10 höchsten Messwerte stellt dann den charakteristischen Wert des Tages für die Region dar. Nach der Vorgabe der Klassenzahl (5) und der Grenzen ($0 < K1 \leq 100$, $100 < K2 \leq 120$, $120 < K3 \leq 150$, $150 < K4 \leq 180$, $180 < K5 [\mu\text{g}/\text{m}^3]$) zwischen den Klassen, kann jeder Tag einer Klasse zugeordnet werden.

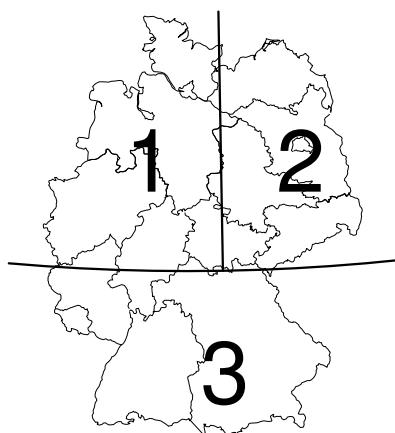


Abbildung 4: Darstellung der 3 Regionen der Ozonwetterlagenklassen

¹³ Die Nutzung der höchsten Werte der Region ergab gegenüber der Nutzung mittleren Situation der Region bessere Ergebnisse bei der nachfolgenden stationsbezogenen Prognose.

3.2.3.2 Die meteorologischen Felder des DWD

Vom Deutschen Wetterdienst (DWD) wurden für diese Arbeit Datensätze vom Output numerischer Wetterprognosemodelle¹⁴ zur Verfügung gestellt. Diese Datensätze umspannen ein Gebiet von 10° W bis 29°45' O (geografischer Länge) und 40 bis 70° N (geografischer Breite), mit einer Auflösung von 0,75°. Für den Zeitraum vom 1.1.1997 bis 10.1.2002 liegen die diagnostischen Daten (Analysen) zu den Zeitpunkten 0, 6, 12, 18 Uhr UTC vor. Ab dem 11.1.2002 ist es eine Analyse von 0 Uhr UTC und die Prognosen für 0 UTC +6, +12, +18, +24, +30, +36, +42, +48, +54, +60 und +66 Stunden. Der Datensatz umfasst insgesamt bis zu 49 unterschiedliche Parameter.

Aus dem vorliegenden Archiv wurden die Geopotential-Felder in 1000, 850, 700 und 500 hPa, die Temperatur-Felder in 850 und 500 hPa und die Felder der relativen Feuchte in 850 und 500 hPa des 12 Uhr UTC Termins gewählt. Diese Felder wurden im nächsten Schritt auf ein annähernd äquidistantes Gitter¹⁵ interpoliert (siehe Abbildung 5). Die Wettersituation des 12 UTC Termins repräsentiert am besten die beobachteten Wettererscheinungen des jeweiligen Tages. Aus diesen acht ausgewählten Feldern wurden weitere zwölf, daraus abgeleitete Felder, berechnet. Dieses sind die horizontalen Geopotentialdifferenzen (HD) in N-S und W-O Richtung in 850 und 500 hPa, die Vorticity (VOR) in 1000, 850, 700 und 500 hPa, die Schichtdicke zwischen 1000 hPa und jeweils 850, 700 und 500 hPa und die Temperaturdifferenz (TD) zwischen den Druckflächen 850 und 500 hPa. In der Summe waren somit 20 meteorologische Felder verfügbar. In den Gleichungen (28), (29) und (30) sind die Formeln zur Berechnung der horizontalen Geopotentialdifferenzen und der Vorticity ζ angegeben. $GP_{i,j}$ bezeichnet das Geopotential am jeweiligen Gitterpunkt im zu bearbeitenden Druckniveau.

$$HD1_{i,j} = GP_{i-1,j} - GP_{i+1,j} \quad (28)$$

$$HD2_{i,j} = GP_{i,j-1} - GP_{i,j+1} \quad (29)$$

$$\zeta = \vec{k} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{v} \quad (30)$$

¹⁴ Im Zeitraum 1997 bis Dezember 1999 liefen das GM- und EMD-Modell im operationellen Dienst des DWD. Im Dezember 1999 wurden beide Modelle vom GME-Modell abgelöst.

¹⁵ Nach der Interpolation der Daten auf ein äquidistantes Gitter, können alle Werte auf dem Gitter mit gleicher Gewichtung genutzt werden.

Die als potentielle Klassifikatoren zur Verfügung stehenden Felder sind in Tabelle 4 aufgelistet.

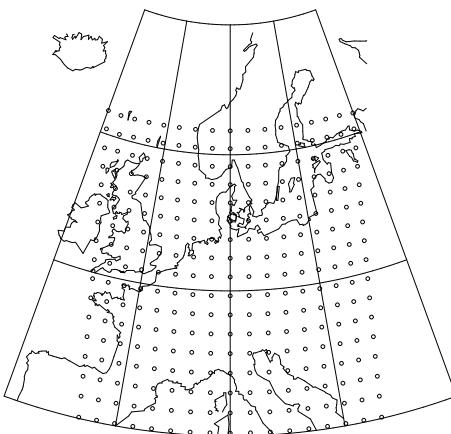


Abbildung 5: Gitterpunkte des äquidistanten Gitters; die Konstruktion erfolgte von einem Zentralpunkt aus (51° N Breite und 10° O Länge) mit einem Gitterpunktsabstand von ca. 150 km

Tabelle 4: Liste der potentiellen Prädiktorenfelder

| Nr. | Feld | Kürzel |
|-----|---|-------------|
| 1 | Geopotential 1000 hPa | GP 1000 |
| 2 | Geopotential 850 hPa | GP 850 |
| 3 | Geopotential 700 hPa | GP 700 |
| 4 | Geopotential 500 hPa | GP 500 |
| 5 | Temperatur 850 hPa | TP 850 |
| 6 | Temperatur 500 hPa | TP 500 |
| 7 | relative Feuchte 850 hPa | RH 850 |
| 8 | relative Feuchte 500 hPa | RH 500 |
| 9 | horizontale Geopotentialdifferenzen N-S 850 hPa | HD1 850 |
| 10 | horizontale Geopotentialdifferenzen W-O 850 hPa | HD2 850 |
| 11 | horizontale Geopotentialdifferenzen N-S 500 hPa | HD1 500 |
| 12 | horizontale Geopotentialdifferenzen W-O 500 hPa | HD2 500 |
| 13 | Vorticity 1000 hPa | VOR 1000 |
| 14 | Vorticity 850 hPa | VOR 850 |
| 15 | Vorticity 700 hPa | VOR 700 |
| 16 | Vorticity 500 hPa | VOR 500 |
| 17 | Schichtdicke 1000/850 hPa | RT 1000/850 |
| 18 | Schichtdicke 1000/700 hPa | RT 1000/700 |
| 19 | Schichtdicke 1000/500 hPa | RT 1000/500 |
| 20 | Temperatur-Differenz 850 - 500 hPa | TD 850-500 |

3.2.3.3 Die Mittlung der Felder

Mit den zwei genannten Datenarchiven (vgl. Unterabschnitte 3.2.3.1, 3.2.3.2) wurden, getrennt für jede Klasse, die mittleren Felder berechnet. Das heißt zum Beispiel, dass für jede Ozonklasse, in jeder der drei Regionen alle Tage mit der Klasse 1 gemittelt wurden. Am Ende sind für jede Ozonklasse in jeder Region 20 mittlere meteorologische Felder vorhanden. Beispielsweise können drei der 20 mittleren Felder der Region 1 in Abbildung 6 betrachtet werden.

Diese mittleren Felder sind der Ausgangspunkt für die Objektivierung. Sie können als die Musterozonwetterlagen angesehen werden. Bei der Wiedererkennung werden diese Felder als Bezugspunkt herangezogen.

3.2.3.4 Objektivierungsverfahren

Die Grundfrage der Objektivierung ist, wie die Ähnlichkeit zwischen vorgegebenen Mustern (hier der jeweils aktuelle Tag in Bezug auf die gemittelten Felder) bestimmt werden kann. Die Ähnlichkeit bzw. Unähnlichkeit wird über ein Distanzmaß beschrieben. Hierfür gibt es eine große Anzahl von Ansätzen.

In Enke [24] wird ein normalisiertes euklidisches Distanzmaß D beschrieben (Gleichung (31)). Mit Hilfe dieses Maßes ist es möglich, die Distanzen zwischen Feldern zu berechnen; im konkreten Fall zwischen mittleren Druckmustern oder daraus abgeleiteten Feldern (Tab. 4) und aktuellen (d.h. täglichen) Feldern. Die kleinste Distanz zeigt an, zu welcher Klasse der jeweilige Tag gehört.

$$D = \frac{\sum_{i=1}^m (|dp_i - d_i|)}{\sum_{i=1}^m \max(|dp_i|, |d_i|)} \quad (31)$$

wo dp_i = der Gitterpunktswert eines gegebenen Feldes (wetterlagenspezifische gemittelte Felder) und d_i = der Gitterpunktswert des Vergleichsfeldes (des aktuellen Feldes) ist. In Gleichung 31 ist eine Normierung der unterschiedlichen Ausgangsfelder durch die Division durch $\sum_{i=1}^m \max(|dp_i|, |d_i|)$ eingearbeitet, so dass beliebige Ausgangsfelder zur Diskriminierung verwendet werden können.

Für die hier vorliegende Klassifizierung wurde nicht die Gleichung (31) sondern der RMSD (Root Mean Squared Distance) als Distanzmaß genutzt (siehe Gleichung (33)). Der RMSD hat gegenüber der obigen Methode den Vorteil, dass durch die Quadrierung der Gitterpunktsabstände große Differenzen stärker gewichtet werden¹⁶. Durch diese Änderung musste die in Gleichung (32) implizite Normierung der Felder durch eine vorgeschaltete Normierung ersetzt werden.

Die Normierung

Die Skalen der meteorologischen Felder, die für die Klassifikation potentiell zur Verfügung stehen, haben sehr unterschiedliche Größenordnungen. So haben zum Beispiel die Werte des Geopotentialfeldes in 500 hPa die Größenordnung von 10^3 , während die Vorticity eine Größenordnung von 10^1 hat. Damit die Felder vergleichbar werden, müssen sie normiert werden. Hierzu wird für das jeweilige Feld Mittelwert \bar{x} und Spread S (Distanz zwischen Minimum und Maximum) berechnet. Zur Normierung werden die mittelwertbereinigten Gitterwerte durch den Spread dividiert (Gleichung (32)).

$$x_{n_{i,j}} = \frac{x_{i,j} - \bar{x}}{S} \quad (32)$$

Screeningprozedur zur Selektion der verwendeten Felder

Nach der Normierung aller Felder mittels Gleichung (32) wurde eine Screening-Diskriminanz-Analyse durchgeführt. Für jeden Tag wurden die Differenzen zwischen den mittleren Feldern und den Feldern des aktuellen Tages (für jeden Gitterpunkt) berechnet und daraus das Distanzmaß D nach Gleichung (33) bestimmt.

$$D = RMSD = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n R_i^2} \quad (33)$$

Hierin ist R_i die Differenz zwischen den normierten mittleren Vergleichsfeldern und den Feldern des zu diskriminierenden Tages an den Gitterpunkten und n die Anzahl der Gitterpunkte. Wird für mehr als ein Feld das Distanzmaß berechnet, werden die einzelnen Distanzmaße der Felder addiert. Dieses ist durch die vorgeschaltete Normierung möglich.

¹⁶ Dieses entspricht somit dem verwendeten Fehlermaß RMSE.

Der jeweilige Tag wird der Klasse zugeordnet, die das geringste Distanzmaß aufweist. Danach wird geprüft, ob die Zuordnung mit der Originalklassifikation übereinstimmt. Im ersten Schritt wird jedes Feld aus Tabelle 4 einzeln genutzt. Das Feld, das die beste Wiedererkennungsrate hat, wurde als erster Diskriminatior ausgewählt.

Im zweiten Schritt wurde das Feld gesucht, welches in Kombination mit dem ersten Diskriminatior (meteorologischen Feld) die beste Wiedererkennungsrate aufweist. Die Screening-Prozedur wurde solange durchgeführt, bis entweder eine vorgegebene maximale Anzahl von vier Feldern erreicht wurde oder sich die Wiedererkennungsrate nur weniger als ein vorgegebenes Maß verbessert hat.

Die endgültige Zuordnung der Einzeltage zu den Wetterlagen

Mit der oben beschriebenen Screening-Prozedur wurde für jede Jahreszeit eine Kombination an Feldern gefunden, mit der im nächsten Schritt die endgültige Zuordnung durchgeführt wurde. Hierbei wurden für jeden Tag die aufsummierten Distanzen (Gleichung (33)), der maximal vier gewählten Felder, zwischen den normierten mittleren Feldern und den normierten Feldern des zu untersuchenden Tages berechnet. Jeder Tag wurde der Wetterlagenklasse zugeordnet, die die geringste euklidische Distanz aufwies.

3.2.3.5 Die Fuzzifizierung

Die bisher vorgestellte Methode der objektiven Wetterlagen Klassifikation führt mit Hilfe des Distanzmaßes RMSD eine eindeutige Zuordnung der Wettersituation eines jeden Tages zu einer konkreten Ozonklasse durch. Diese Vorgehensweise hat sowohl Vor- als auch Nachteile. Durch die Zuordnung kann für jeden Tag eine eindeutige Aussage getroffen werden. Andererseits ist die Wettersituation eines Tages immer ein Gemisch aus verschiedenen Wetterlagen. Deshalb führt eine eindeutige Zuordnung zu einer bestimmten Klasse zu Ungenauigkeiten bei deren Anwendung. Es erweist sich als sinnvoll, zusätzlich eine unscharfe Zuordnung der Wetterlagen vorzunehmen.

Zu diesem Zweck wird die Zuordnung jedes Tages zu einer Klasse nicht eindeutig gewählt, sondern es wird der approximierte prozentuale Anteil der Wetterlagen an dem jeweiligen zu klassifizierenden Tag berechnet. Im ersten Schritt wird für jeden Tag, zu jeder Wetterlagenklasse das Distanzmaß (D) berechnet (Gleichung (33)). Aus allen Distanzmaßen eines Tages wird das Maximum bestimmt.

$$D_{\max} = \max(D_i); \text{ für } i=1, n \text{ mit } n = \text{Klassenanzahl} \quad (34)$$

Im nächsten Schritt wird die Summe der Differenzen der einzelnen Distanzmaße zum Maximum ermittelt.

$$D_{\text{sum}} = \sum_{i=1}^n (D_{\max} - D_i); \text{ mit } n = \text{Klassenanzahl} \quad (35)$$

Mit D_{\max} und D_{sum} und einem Fuzzifizierungsexponenten F erfolgt eine Normierung der einzelnen Distanzmaße.

$$D_{\text{nor}_i} = \left(\frac{D_{\max} - D_i}{D_{\text{sum}}} \right)^F; \text{ für } i=1, n \text{ mit } n = \text{Klassenanzahl} \quad (36)$$

Der Fuzzifizierungsexponent F ist dabei ein Maß für die Zuordnungsschärfe. Je größer er gewählt wird, umso eindeutiger wird die Zuordnung zur dominierenden Klasse. Mit $F \rightarrow \infty$ steigt der Anteil der dominierenden Klasse auf 100%. Die Berechnung des prozentualen Anteils r_i der Klassen zur untersuchten Wetterlage erfolgt nach Gleichung (37) und (38). In der Arbeit wurde F gleich 6 gesetzt.

$$D_{\text{sum}_{\text{nor}}} = \sum_{i=1}^n D_{\text{nor}_i}; \text{ mit } n = \text{Klassenanzahl} \quad (37)$$

$$r_i = \frac{D_{\text{nor}_i}}{D_{\text{sum}_{\text{nor}}}} \times 100\%; \text{ für } i=1, n \text{ mit } n = \text{Klassenanzahl} \quad (38)$$

3.2.3.6 Unterschiede zu anderen Klassifikationen

Jede Klassifikation wurde mit einer bestimmten Absicht entwickelt. Baur suchte zum Beispiel nach einer Möglichkeit, die Vorhersageleistungen bei der Kurz-, Mittel- und Langfristprognose zu verbessern. Bei den neueren Klassifikationen steht meist die Nutzung für das statistische Downscalen von Klimasimulationen (GCM) im Vordergrund [24, 13, 30].

Wird entgegen der üblichen Einteilung der Wettersituation im Allgemeinen eine Einteilung für einzelne Wetterelemente durchgeführt (z.B.: Temperaturregime, für die Temperaturverhältnisse und das Feuchteregime für die Niederschlags- und Luftfeuchteverhältnisse), so ist die Klassifikation für andere Elemente nicht nutzbar! Einschränkend muss auch erwähnt werden, dass keine Klassifikation eine perfekte Auf trennung zwischen den Klassen erreichen kann. Zur Verbesserung der primären Klassifikation wird hier nachträglich eine klassenspezifische Regression durchgeführt. Um den Ozonwert für einen Tag in der ge-

wählten Region genauer vorherzusagen, nutzt man durch eine Screening-Regressions-Analyse gefundene Korrelationen. Dieser Ozonwert wird dann für die endgültige Einordnung des Tages in eine Klasse genutzt.

3.2.4 Ergebnisse bei der Ableitung von Ozonwetterlagen

Mit den oben genannten Vorgaben konnte nun die Diskriminanz-Analyse durchgeführt werden. Das Qualitätskriterium war die bestmögliche Anpassung an die vorgegebene Clusterung. In allen Regionen wurden die gleichen Felder selektiert. Dieses sind die relative Feuchte in 850 hPa (7), die Schichtdicke 1000/850 hPa (17) und die Vorticity in 1000 hPa (13).

In der Abbildung 5 werden drei atmosphärische Felder für alle Klassen, beispielhaft an der Region 1, dargestellt. Dadurch lassen sich die Unterschiede zwischen den Klassen gut erläutern. Eine kleine Anmerkung zu der Darstellung ist nötig. Die Isolinienbilder zeigen, auf ein Rechteckformat verzerrte, Felddarstellungen der 9 x 9 inneren Gitterpunkte der Abbildung X. Diese wurden via Glättung (Tiefpassfilter) aus den 11 x 11 inneren Gitterpunkten der mittleren Felder berechnet.

Die relative Feuchte nimmt von der Klasse 1 (niedrige Ozonwerte) zur Klasse 5 (sehr hohe Ozonwerte) ab. Das ist mit den Ergebnissen früherer Untersuchungen vergleichbar. Auch die Zunahme der Schichtdicke von Klasse 1 zu Klasse 5 ist durch die physikalische Erklärung der Schichtdicke als eine direkt proportionale Größe zur Temperatur sehr einfach in Verbindung zu den Ozonwerten zu bringen. Schwieriger ist die Interpretation der Informationen des Vorticityfeldes. Dort nehmen die Werte von Klasse 1 (positive Werte) zu Klasse 5 (negative Werte) ab. Das bedeutet, dass bei Klasse 1 aufsteigende Vertikalbewegungen stattfinden, während bei Klasse 5 absinkende Vertikalbewegungen vorherrschend sind. In Analogie zu den Vertikalbewegungen bei Hoch- und Tiefdruckgebieten, sind diese Bewegungen gut verständlich. Die Informationen aller drei Felder sind als Komplex für die Zuordnung zu einer Klasse entscheidend.

Wie aus Tabelle 5 ersichtlich, können über die einfache Wetterlagenklassifikation zwischen 42 und 50 % der Tage richtig zugeordnet werden. Mit einer erlaubten Fehlklassifikation vom \pm einer Klasse sind es zwischen 86 und 88 %.

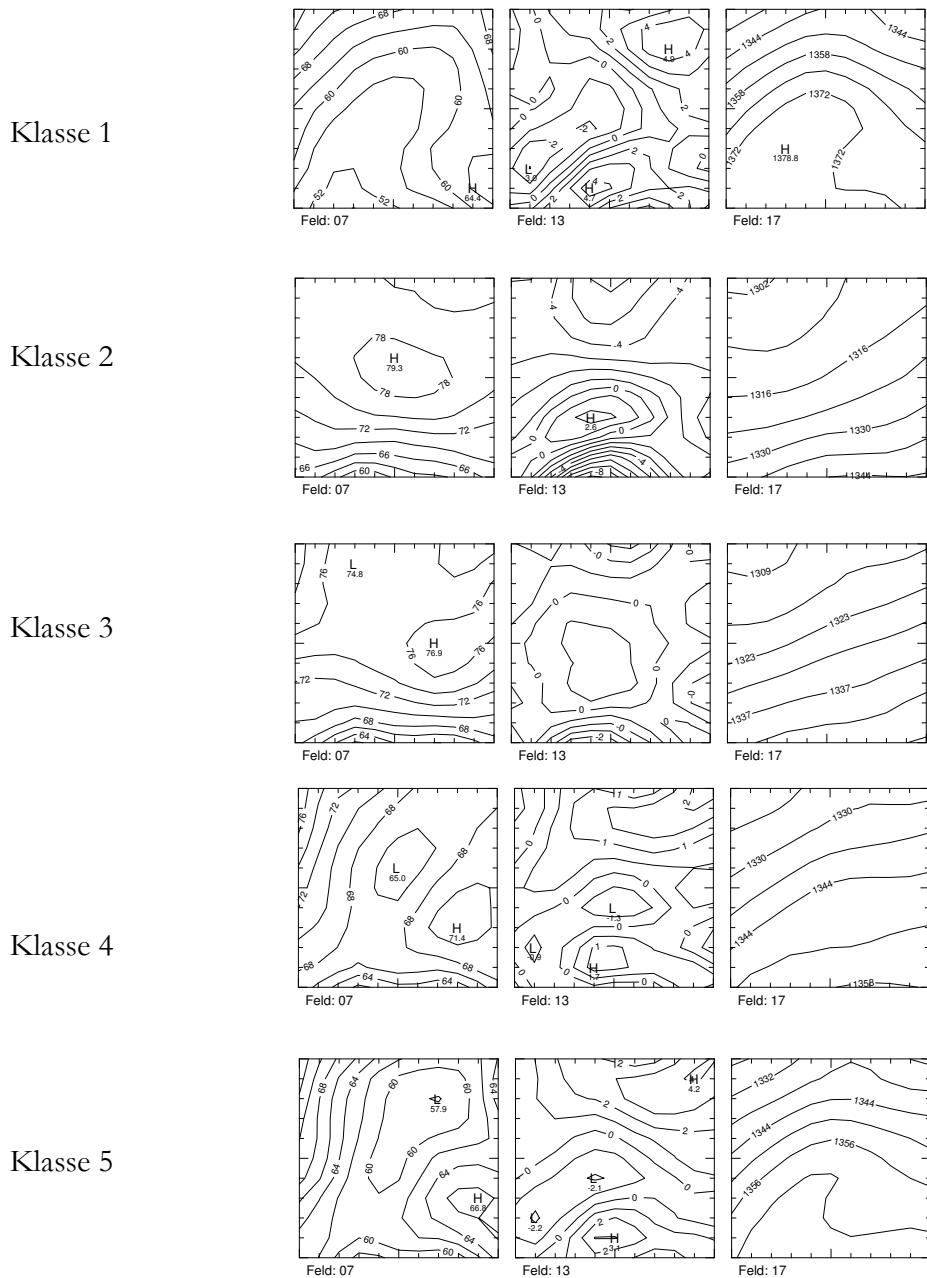


Abbildung 6: Vergleich der Musterozonwetterlagen der Region 1; dargestellt sind die drei zur Wiedererkennung selektierten Felder: relative Feuchte 950 hPa (Feld 7), Vorticity 1000 hPa (Feld 13) und Schichtdicke 1000/850 hPa (Feld 17) (Monate Mai bis August)

Tabelle 5: Übersicht zu den gewählten Feldern und die Qualität der Anpassung (für die Feldkürzel siehe Tabelle 4). Die Trefferquote zeigt, wie viel Prozent der Tage richtig klassifiziert wurden (direkt) bzw. an wie viel Prozent der Tage bei einer Zuordnung mit einem Fehler von \pm einer Klasse richtig klassifiziert wurde (indirekt). Dabei bezieht sich der Bereich WL auf die reine Ozonwetterlagenklassifikation und der Bereich Reg auf die Klassifikation mit nachgeordneter multipler Regression.

| Region | Felder | Trefferquote WL | | Trefferquote Reg | |
|--------|-----------|-----------------|----------|------------------|----------|
| | | direkt | indirekt | direkt | indirekt |
| 1 | 7, 17, 13 | 42% | 88% | 59% | 98% |
| 2 | 7, 17, 13 | 50% | 88% | 61% | 99% |
| 3 | 7, 17, 13 | 42% | 86% | 62% | 99% |

Dieser vorläufigen Klassifikation wird dann eine Regression für jede Region und Klasse nachgeschaltet. Eine Screening-Regressions-Analyse musste dafür aus einem Pool von 59 potentiellen Prädiktoren die besten Prädiktorenkombinationen wählen. Diese Prädiktoren sind die innerhalb der jeweiligen Region gemittelten Gitterpunktsvorhersagen des GME-Modells des Deutschen Wetterdienstes und der Vortagswert der Maxima der Ozonkonzentration (die Persistenz). Neben diesen 59 Prädiktoren wurde die fuzzifizierte Wahrscheinlichkeit, der durch die Wetterlagenbestimmung gewählten Klasse, als möglicher Prädiktor zugelassen. Die Screening-Regressions-Analyse wählte als Prädiktoren die Temperatur in 2 m Höhe, die Taupunktstemperatur, die relative Topografie 850/1000 hPa und die prozentuale Wahrscheinlichkeit der bestimmenden Wetterlage (Gleichung (38)) aus. Die Optimierung erfolgte in Richtung der Minimierung des Vorhersagefehlers des regionalen Ozonwertes.

Mit dieser gefundenen multiplen Regression wird für jede Region ein Vorhersagewert berechnet. Anhand dieses Wertes erfolgte die entgültige Einordnung des jeweiligen Tages in eine Ozonklasse. Hierdurch konnte die Wiedererkennung auf 59, 61 und 62% in den Regionen bei der genauen Zuordnung und auf 98-99% bei einer erlaubten Fehlklassifikation von \pm einer Klasse gesteigert werden.

3.2.5 Eine stationsbezogene Screening-Analyse

Ziel der Arbeit ist eine stationsbezogene Vorhersage der maximalen Ozonkonzentrationen für die Zeithorizonte aktueller Tag, 1. und 2. Folgetag. Mit dem Aufbau einer Ozonklassifikation für drei Regionen konnte eine bedingte Regressions-Analyse (*stratified regression technique*) durchgeführt werden. Mit Hilfe einer Screening-Regressions-Analyse wurde der potentiell mögliche Satz von Prädiktoren auf zehn Prädiktoren reduziert. Aus diesen konnten dann in einer zweiten Screeningprozedur die besten Prädiktoren, maximal 4 je Klasse, für

die stationsbezogene Vorhersage gewählt werden. Für diese Prädiktoren wurde im Folgenden für die Jahre 1997, 1998, 2000 und 2001 die Screening-Regressions-Analyse durchgeführt.

Tabelle 6: Reduzierte Liste der möglichen Prädiktoren für die stationsbezogene Vorhersage

| Nr. | Name / Beschreibung | |
|-----|--|------------------------------|
| 1 | Persistenz | [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] |
| 5 | Temperatur (2m), 12 UTC | [K] |
| 8 | Temperatur (2m), Tagesmaximum | [K] |
| 14 | kurzw. Strahlungsbilanz (TAO) | [W/m ²] |
| 27 | rel. Feuchte in 850 hPa, 12 UTC | [%] |
| 28 | rel. Feuchte in 950 hPa, 12 UTC | [%] |
| 44 | pot. Temperatur in 950 hPa, 12 UTC | [K] |
| 46 | Auslösetemperatur, 12 UTC | [K] |
| 58 | Differenz Temperatur (2m) 12 UTC Gestern - Heute | [K] |
| 60 | regionale Prognose Ozonmaximum | [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] |

3.2.6 Ergebnisse der stationsbezogenen Prognose

Die abgeleiteten Regressionsfunktionen konnten am Jahr 2002 getestet werden. Die Ergebnisse sind in der Tabelle 7 aufgelistet. Zum Vergleich wurden in Tabelle 8 die Ergebnisse des im Jahre 2002 am UBA eingesetzten Ozonprognosesystems aufgelistet.

Erkennbar ist, dass das hier vorgestellte System eine Verbesserung der Vorhersageleistung mit sich bringt. Dies gilt sowohl für die Prüfung ohne Schwellenwert (allen Prognosen werden geprüft) als auch für die schwellenwertabhängige Prüfung (wenn Prognose oder Messung den Schwellenwert überschreitet). Systembedingt unterscheidet sich die Anzahl der Fälle bei beiden Prognosen und daher ist der RMSE der Persistenzvorhersage nicht exakt gleich. Grund dafür ist eine Änderung der Stationsliste, für die die Prognose durchgeführt wurde. Einige Stationen wurden im Jahr 2002 geschlossen und sind daher nicht mehr in der neuen Prognosenliste, dafür wurden einige neue Stationen in die Prognosenliste aufgenommen.

In der letzten Spalte wird die Anzahl der Fälle in Prozent dargestellt. So treten an mehr als einem Viertel der Tage Werte mit über 120 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ auf, aber nur an ca. 0,8 % der Tage Werte mit über 180 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. Die prozentualen Angaben beziehen sich auf die Summe aller Tage der einzelnen Stationen. Es muss angemerkt werden, dass die Vorhersageleistung (darge-

stellt durch den RV) sich bei der am UBA eingesetzten Routine im Jahr 2002 deutlich gegenüber den Vorjahren verschlechtert hat.

Die Entwicklung erfolgte anhand der Daten für den ersten Tag. Eine spezielle Anpassung für die Vorhersage der beiden Folgetage wurde nicht durchgeführt. Vielmehr wird der Idee gefolgt, dass die Vorhersage des aktuellen Tages die beste Information für den aktuellen Tag liefert und daher als Persistenz für den Folgetag genutzt werden kann. So wird dann auch die Vorhersage für den 1. Folgetag als Persistenzwert für den 2. Folgetag genutzt. Erkennbar ist, dass die wetterlagenbasierte Prognose eine deutliche Verbesserung der langfristigen Kurzfristprognose (2. Folgetag) erbringt.

Tabelle 7: Verifikation der Vorhersageleistung der stationsbezogenen Ozonvorhersage gemittelt über alle Stationen (321); die Daten beziehen sich auf die Monate Mai bis Juli 2002; Ergebnisse der bedingten Regression nach der regionalen Ozonwetterlagenbestimmung (WL)

| Schwellenwert | ohne | | | | | | |
|---------------|----------------------------------|-------|-----------|-------|----------|------|------|
| | | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| aktueller Tag | | 1.0 | 17.0 | -0.4 | 29.0 | 65.5 | 100 |
| 1. Folgetag | | 2.9 | 20.3 | -0.6 | 36.3 | 68.7 | 100 |
| 2. Folgetag | | 3.6 | 21.2 | -1.1 | 39.2 | 70.8 | 100 |
| Schwellenwert | 120 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | | | | | | |
| | | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| | | -5.8 | 21.8 | -14.0 | 33.7 | 58.1 | 25.7 |
| aktueller Tag | | -6.3 | 25.1 | -25.2 | 44.6 | 68.3 | 26.5 |
| 1. Folgetag | | -2.8 | 25.7 | -29.6 | 49.6 | 73.2 | 28.5 |
| Schwellenwert | 150 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | | | | | | |
| | | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| | | -10.3 | 27.7 | -22.4 | 39.6 | 51.1 | 6.3 |
| aktueller Tag | | -10.8 | 30.6 | -44.0 | 56.5 | 70.7 | 6.7 |
| 1. Folgetag | | -7.6 | 31.6 | -53.5 | 65.7 | 76.9 | 7.0 |
| Schwellenwert | 180 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | | | | | | |
| | | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| | | -20.6 | 33.5 | -40.9 | 54.7 | 62.3 | 0.8 |
| aktueller Tag | | -26.7 | 38.4 | -78.8 | 86.4 | 80.3 | 0.8 |
| 1. Folgetag | | -26.0 | 45.4 | -90.9 | 99.2 | 79.0 | 0.8 |

Bei den hohen Schwellenwerten tritt mit jeder höheren Prüfschwelle ein steigender negativer Bias auf. Dieser lässt sich folgendermaßen erklären. Bei der Entwicklung erfolgte eine Optimierung auf die mittleren Bedingungen innerhalb der Ozonwetterlagenklasse. Extremereignisse werden dadurch geglättet. Somit ist die Vorhersage seltener Ereignisse am obe-

ren Rand einer Klasse sehr schwierig. Nachteilig wirkt sich dabei die geringe Zahl an Fällen aus. Von den ca. 30000 (100%) untersuchten Fällen sind nur 240 (0,8%) in der höchsten Schwellenwertklasse. Einzelne Unterschätzungen können sich daher deutlich auswirken.

Tabelle 8: Verifikation der Vorhersageleistung der stationsbezogenen Ozonvorhersage gemittelt über alle Stationen (329); die Daten beziehen sich auf die Monate Mai bis Juli 2002; Ergebnisse des im Jahr 2002 am UBA eingesetzten Prognosesystems (WE)

| Schwellenwert | Schwellenwert | ohne | | | | | |
|---------------|---------------|-------|-----------|-------|----------|------|------|
| | | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| aktueller Tag | 120 [µg/m³] | 1.4 | 22.4 | 0.8 | 31.4 | 49.4 | 100 |
| 1. Folgetag | | 3.1 | 25.3 | 0.9 | 36.8 | 52.6 | 100 |
| 2. Folgetag | | 3.0 | 24.9 | 0.2 | 39.0 | 59.3 | 100 |
| Schwellenwert | 150 [µg/m³] | | | | | | |
| aktueller Tag | | -4.0 | 25.3 | -13.0 | 35.5 | 48.9 | 24.6 |
| 1. Folgetag | | -6.3 | 29.7 | -23.7 | 44.8 | 56.0 | 25.1 |
| 2. Folgetag | | -6.6 | 28.4 | -28.2 | 49.7 | 67.4 | 25.8 |
| Schwellenwert | 180 [µg/m³] | | | | | | |
| aktueller Tag | | -8.7 | 29.8 | -22.8 | 40.2 | 45.2 | 6.2 |
| 1. Folgetag | | -11.3 | 34.3 | -45.6 | 57.4 | 64.3 | 6.2 |
| 2. Folgetag | | -15.4 | 37.1 | -52.7 | 65.9 | 68.3 | 6.1 |
| Schwellenwert | 180 [µg/m³] | | | | | | |
| aktueller Tag | | -15.1 | 36.4 | -35.8 | 52.8 | 52.4 | 0.8 |
| 1. Folgetag | | -19.6 | 42.5 | -77.3 | 84.7 | 74.8 | 0.8 |
| 2. Folgetag | | -42.8 | 56.4 | -92.7 | 102.7 | 69.8 | 0.7 |

Beim direkten Vergleich der neuen wetterlagenbasierten Methode mit der im Jahr 2002 am UBA eingesetzten Methode ergibt sich folgendes Bild bei der Berechnung ohne Schwellenwerte:

$$RV = 1 - \frac{RMSE_{WL}^2}{RMSE_{WE}^2} = 1 - \frac{17,0^2}{22,4^2} = 42,5\%$$

beim Schwellenwert 120 [µg/m³] ist der RV = 25,8%, beim Schwellenwert 150 [µg/m³] ist der RV = 13,5% und beim Schwellenwert 180 [µg/m³] ist der RV=15,3%. Somit ist die Steigerung der Vorhersageleistung außer beim Schwellenwert 180 [µg/m³] signifikant (siehe Gleichung (20) und Abbildung 2). Beim Schwellenwert 180 [µg/m³] müsste der RV auf-

grund der geringen Anzahl der Fälle (240) mindestens 19,2% betragen, um mit $\alpha = 5\%$ signifikant zu sein.

In der Abbildung 7 werden die Vorhersageleistung (RMSE) der Prognose und der Persistenz gegenübergestellt. Die Abbildungen können wie folgt interpretiert werden. Je linearer die Punktfolge entlang der 1:1 Geraden verläuft umso höher ist der Zusammenhang zwischen Prognoseleistung und Persistenz. Je weiter die Punktfolge von der 1:1 Geraden nach links entfernt ist, umso höher ist der Einfluss anderer Parameter. Weiterhin zeigt eine Verschiebung der Punktfolge nach oben eine höhere Vorhersageleistung.

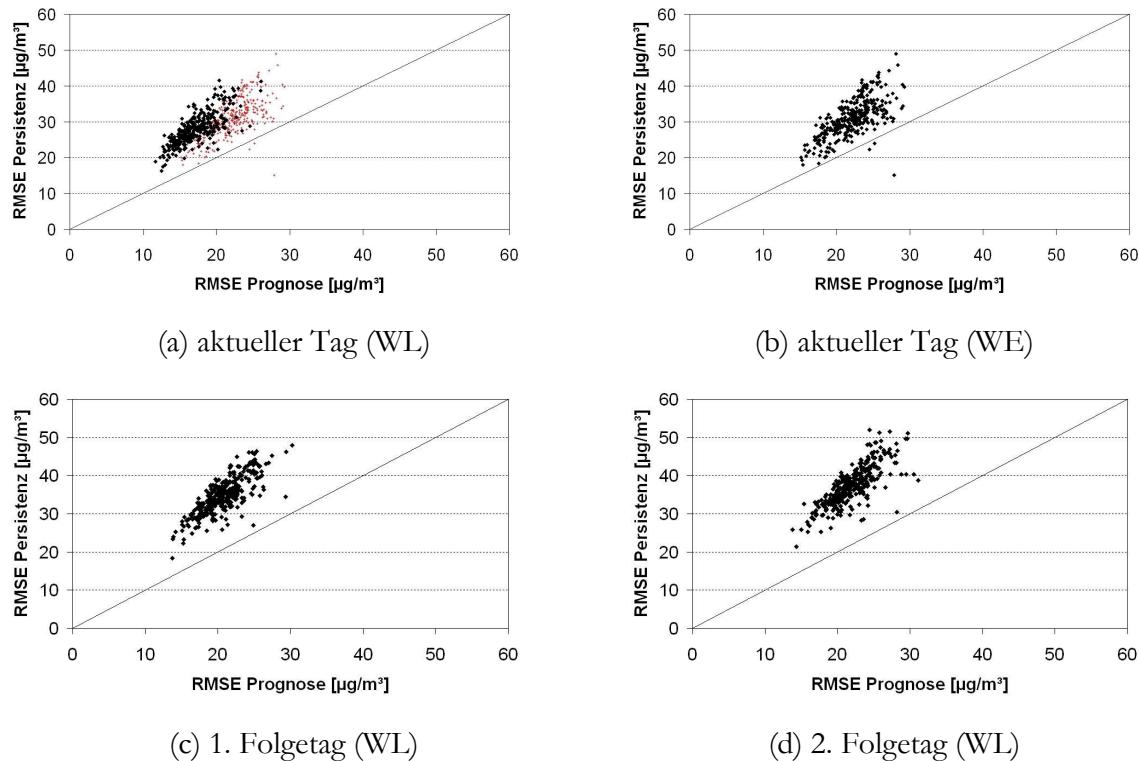


Abbildung 7: Gegenüberstellung der Vorhersageleistung (RMSE) der Prognose und der Persistenz für alle Stationen für den Zeitraum 1.5.2002 - 31.7.2002. Für den aktuellen Tag die Routinen WL und WE und für die beiden Folgetage nur die Routine WL. Zur Verdeutlichung der Unterschiede zwischen den beiden Prognosen wurden in der Teilabbildung (a) als kleine rote Kreuze die Ergebnisse der alten Routine eingefügt. Die Auswertung erfolgte unabhängig vom Schwellenwert.

Wie aus der Abbildung 7a ersichtlich, besteht weiterhin ein sehr starker Zusammenhang zwischen der Erhaltungsneigung (Persistenz) und der Vorhersageleistung der wetterlagenbasierten Routine (WL) an den Stationen. Somit ist die Vorhersageleistung, die durch die Routine erreicht werden kann, durch die auftretende Persistenz limitiert. Beim Vergleich

der Abbildungen 7a und 7b zeigt sich aber eine deutlich verringerte Abhängigkeit der wetterlagenbasierten Prognoseroutine (WL) gegenüber der alten Routine (WE).

3.3 Ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression

3.3.1 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 Luftpunkte in einem strömenden Kontinuum. Trajektorien von Luftpunkten 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 et al. [43] oder die großräumigen Belastungen durch Transporte nachgewiesen werden Rodhe [45]. Der advektive Transport von Luftmassen und der darin enthaltenen Schadstoffe ist eine wichtige Komponente für die Prognose von Ozonwerten [49]. Die Kenntnis über die Herkunft der vor Ort auftretenden Luftmassen ist essenziell. Im Abschnitt 3.3.2 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.

3.3.2 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 Stromli-

nie. Eine Stromlinie stellt die Bewegung vieler Teilchen zu einem Zeitpunkt (*Momentaufnahme*) dar. Bei der Konstruktion von Trajektorien treten vor allen zwei Hauptschwierigkeiten auf:

- 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. Isentrope Trajektorien stellen den möglichen Weg besser dar. Die Berechnung erfordert aber mehr Dateninput und ist deutlich aufwendiger. Die hier angewandte Methode nutzt den Lufdruck als Vertikalkomponente. Sie basiert auf den Flächen gleichen Lufdruckes.

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 berechnet werden. Die geostrophische Windgeschwindigkeit berechnet sich dafür entsprechend Gleichung (39).

$$\vec{v}_g = -\frac{1}{f} \bar{\nabla}_p \Phi \times \vec{k} \quad (39)$$

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:

$$f = 2 \cdot \omega \cdot \sin \phi \quad (40)$$

dabei ist $\omega = 0,00007292 \text{ s}^{-1}$. 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).

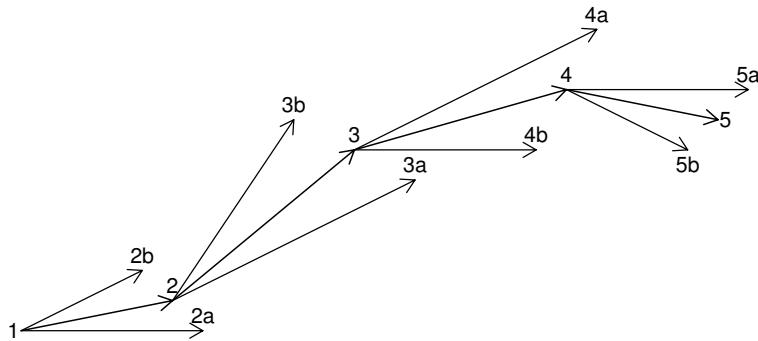


Abbildung 8: Dargestellt wird hier die schematische Verlagerung von Punkt 1 nach Punkt 5 (Vorwärtsstrajektorie). Der Pfeil mit dem Index a stellt den Wind am Anfang des Zeitschrittes und der Pfeil mit dem Index b den Wind am Ende des Zeitschrittes dar. Die resultierende mittlere Verlagerung wird ohne Indizes dargestellt.

Laut der Arbeit von Seibert [47] 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 Rückwärtsstrajektorien berechnet. Hierbei werden die Windverhältnisse am Endpunkt der Trajektorie genutzt um den Ursprungsort der Massenpunkte zu ermitteln.

3.3.3 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.

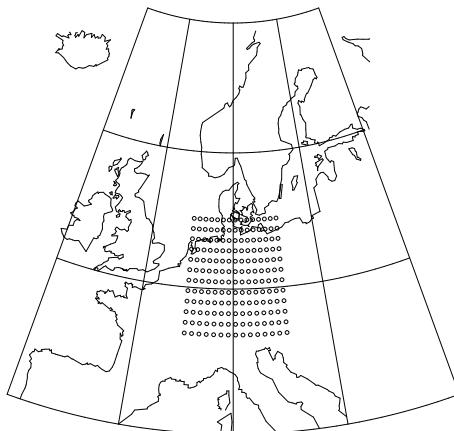


Abbildung 9: Übersicht über das Gebiet der Endpunkte der Rückwärtstrajektorien

Infolge der EU-Gesetzgebung [25] erfolgt in allen EU-Ländern eine sehr ähnliche Überwachung der bodennahen Luftgüte. Dieses gilt auch für die osteuropäischen Beitrittskandidaten. Entsprechend einer Ratsentscheidung der EU [27]¹⁷ sind die Mitgliedsländer angehalten, ihre Messwerte der EU zur 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.

¹⁷ Die Ratsentscheidung zum Datenaustausch vom 27. Januar 1997 wurde durch die Entscheidung der EU-Kommission vom 17. Oktober 2001 geändert [26]. Die Änderungen beziehen sich auf die Anhänge.

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.

3.3.3.1 Die Aufbereitung der EU-Daten

Im ersten Schritt wurden die Stationen mit Hilfe des Klassifikationsverfahrens von Flemming [28, 29] 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 [28] zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Enke et al. [23]. 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 Bodenozonverhältnisse 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.

3.3.4 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 9 aufgelisteten Prädiktoren zur Selektion angeboten.

Tabelle 9: 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.

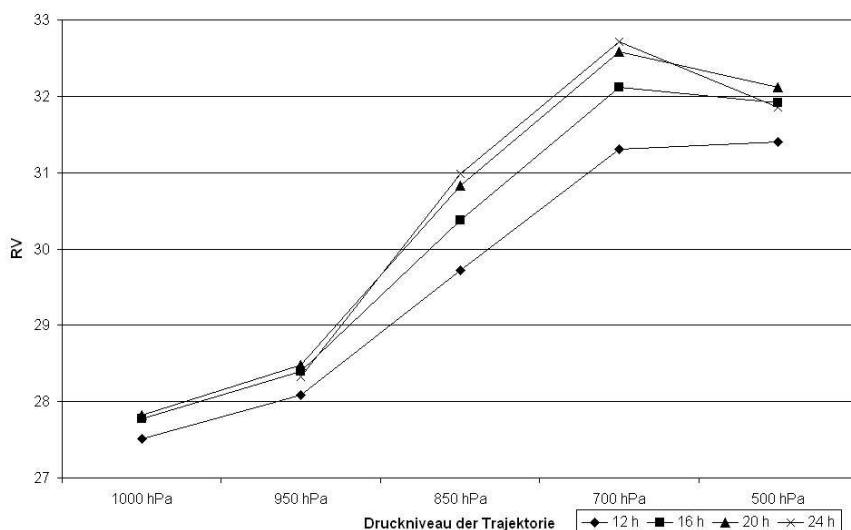


Abbildung 10: Vergleich der Vorhersagegüte für die 5 Druckniveaus und die 4 Zeithorizonte; Vorhersagegüte als mittlerer RV über die 180 Trajektorienendpunkte

Die Screening-Analyse selektierte als beste Kombination die Variante mit einer 24stündigen Rückwärtsstrajektorie, 12 UTC aktueller Tag zu 12 UTC Vortag, auf der Druckfläche 700 hPa (siehe Abbildung 10). 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 schlechterer 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 Tabelle 6 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 10 zeigen sehr deutlich ein Problem. Die Prognosegleichungen sind optimiert worden für die Prognose ohne Schwellenwerte. Eine erfolgversprechende 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.

Tabelle 10: 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 |
| 1. Folgetag | | -1.9 | 20.1 | -0.2 | 36.0 | 68.7 | 100 |
| 2. Folgetag | | -1.1 | 21.1 | -0.6 | 39.1 | 71.0 | 100 |
| 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 | 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 |

3.4 Analogie Fälle mit nachfolgender Regression (AFREG)

3.4.1 Einführung und Zielsetzung

Im Jahre 1890 arbeitete der Hamburger Meteorologe Seemann an einer Objektivierung der Wettervorhersage auf der Grundlage der Mustererkennung. Hierzu stellte er einen Katalog der ersten 10 Jahre der Wetterkarten (1876-1885) auf. Jeder Wetterlage wurde eine Zahlenkombination, die aus drei Luftdruckunterschieden (von Hamburg in Richtung NW, SW und NO) berechnet werden konnte, zugeordnet.

Um aus einem europäischen Wetterbild das kommende Wetter annähernd vorausbestimmen zu können, ist nichts geeigneter als der Anhalt, den ein früherer ähnlicher Zustand im Luftmeer über Europa uns bietet. Es ist daher wünschenswert, einen solchen Zustand aus der verflossenen Zeit, soweit die Wetterkarten zurückreichen, in leichter und übersichtlicher Art, wie aus einem Lexikon, entnehmen zu können.

So einfach und großartig die Idee auch war, Erfolg stellte sich nicht ein. Mitte der 60er-Jahre begannen Wissenschaftler unterschiedlicher Wetterdienste mit Experimenten einer *objektiven* (besser: algorithmisierten) *statistisch-dynamischen*, Wettervorhersage. Hierzu zählen Maede vom Meteorologischen Dienst der DDR, Lönnqvist vom Schwedischen Meteorologischen und Hydrologischen Institut (Loennqvist [41]) und Klein vom US Wetter Büro (Klein [40]). Grundlage für den Erfolg dieser Experimente waren die Einführung von Höhenwetterkarten durch Scherhag und die Ergebnisse der numerischen Wettervorhersagen. Dabei zeigte sich, dass bei ähnlichen Bodenwetterlagen durchaus sehr verschiedene Höhenwetterlagen herrschen können.

Ende der 60er- und Anfang der 70er-Jahre wurde ein Grundmodell zur statistischen Interpretation beim Meteorologischen Dienst der DDR entwickelt [2]. Dieses Modell wurde im Routinedienst sehr erfolgreich eingesetzt. Es wurde auch in den Routinedienst des Deutschen Wetterdienstes übernommen. Ein Einsatzbeispiel im Bereich der operativen Immisionsprognose zeigt Balzer [3].

Wie im Kapitel 3.2 dargelegt, gibt es einen Zusammenhang zwischen den meteorologischen Verhältnissen am jeweiligen Tag und den auftretenden Ozonwerten. Wenn es möglich ist, das Entwicklungskollektiv dynamisch entsprechend dem vorherzusagenden Tag einzuschränken, so sollte sich die Vorhersagequalität verbessern. Vorteil bei der dynamischen Anpassung der Regression ist auch, dass Veränderungen in der Korrelation zwischen den meteorologischen Bedingungen und Ozon erfasst werden können.

3.4.2 Methode

Damit die Methode nutzbar ist, müssen die folgenden Fragen beantwortet werden. Was ist Ähnlichkeit? Wie kann diese bestimmt werden? Die entscheidenden Antworten sind schon im Kapitel 3.2 gegeben worden. Somit kann an dieser Stelle auf die dort beschriebene Distanzmaßmethode zurückgegriffen werden.

3.4.2.1 Unterschiede zwischen einer Wetterlagenklasse und analogen Fällen

Wenn die gleichen Methoden wie bei der Wetterlagenklassifikation genutzt werden, so ist es notwendig, den Unterschied zwischen Wetterlagen und analogen Fällen zu erklären. Bei der Zuordnung eines Tages zu einer Wetterlage wird der Tag mit den mittleren Wetterla-

genmustern verglichen. Nach der Berechnung der Distanzmaße wird der Tag der Klasse zugeordnet, zu der er die geringste Distanz hat. So kann es passieren, dass zwei relativ ähnliche Tage zwei unterschiedlichen Klassen zugeordnet werden. Das Konzept der analogen Fälle geht weg von der für die Wetterlagen genutzten statischen Zuordnung, hin zu einer dynamischen Zuordnung. Für jeden zu untersuchenden Tag wird zu jedem Tag im Archiv das Distanzmaß berechnet. Nach einer Sortierung der Größe nach kann gesagt werden, welcher der im Archiv liegenden Tage der ähnlichste Tag ist. Weiterhin kann der zweitähnlichste Tag usw. benannt werden.

Ein wichtiger Aspekt darf nicht unerwähnt bleiben. Es erfolgt eine Suche nach ähnlichen Tagen, nicht nach identischen! Die Suche nach identischen Tagen wäre sehr wahrscheinlich nicht von Erfolg gekrönt. Analog zu Fingerabdrücken ist es sehr unwahrscheinlich, zwei identische Tage zu finden.

3.4.2.2 Daten

Das hier zur Verfügung stehende Datenarchiv wurde schon in den Unterabschnitten 3.2.3.1 und 3.2.3.2 beschrieben. Für die Selektion der ähnlichen Tage wurden die meteorologischen Felder wieder in annähernd äquidistante Felder transformiert (für die dazu gehörenden Gitterpunkte siehe Abbildung 5). Während bei den Wetterlagen die Normierung anhand der mittleren Felder erfolgte, werden hier die Normierungsparameter aus den Feldern des aktuellen Tages berechnet.

3.4.2.3 Suche nach den Feld - Prädiktoren

Als nächstes musste geklärt werden, welche Felder für die Berechnung des Distanzmaßes herangezogen werden können. Diese wurden wiederum durch eine Screening-Analyse ermittelt. Parallel dazu wurde untersucht, wie viele analoge Tage für die optimale Vorhersage genutzt werden sollten. Der Idee der analogen Fälle folgend, sollen die Verhältnisse am ähnlichsten Tag oder an den ähnlichsten Tagen als Vorhersage für den aktuellen Tag genutzt werden. Daher musste die Frage beantwortet werden, ob der ähnlichste Tag dafür ausreicht oder aber, ob mehrere ähnliche Tage notwendig sind.

Die Suche wurde wie folgt durchgeführt: für jeden Tag wurden die Distanzmaße zu den Archivtagen bestimmt. Als Erstes wurde nur der ähnlichste Tag genutzt. Die maximale Ozonkonzentration der jeweiligen Station am ähnlichsten Tag wurde als Vorhersage für die

aktuelle Ozonkonzentration genutzt. Bei der ersten Iteration wurde diese Vorhersage für jedes Feld, für mehrere Jahre durchgeführt. Am Ende wurde geprüft, bei welchem Feld, gemittelt über alle Stationen, die größte Vorhersageleistung auftritt. Anstelle des ähnlichsten Tages wurden als nächste Schritte die gemittelten Ozonwerte der ähnlichsten fünf Tage als Vorhersage genutzt. Dieses erfolgte auch für 10, 20, 30 und 50 Tage. Im nächsten Schritt wurde zu dem jeweils besten Feld ein zweites hinzugenommen. Die Screening-Analyse konnte drei Felder auswählen.

Als Optimum erwies sich die Wahl der Felder 7, 13 und 17 (siehe Tabelle 4). Diese entsprechen denen die zur Trennung der Wetterlagen genutzt werden. Folgt man den oben genannten Überlegungen, so ist das auch nicht überraschend.

3.4.2.4 Die bedingte Regressionsanalyse

Alternativ zu dem Mittelwert der Ozonwerte der ähnlichsten Tage als Vorhersage, kann auch eine Regression über einzelne Parameter der ähnlichsten Tage erfolgen. Hierzu konnte wiederum eine Screening-Analyse die besten Prädiktoren aus der Tabelle 6 auswählen. Zur Vereinheitlichung wurden dann die besten zwei Orts-Prädiktoren (Maximum der Ozonkonzentration des Vortages und die 12 UTC Temperatur am nächstliegenden DWD Gitterpunkt) für alle Stationen genutzt. Anhand der ähnlichsten Tage und der dort auftretenen Maxima der Ozonkonzentrationen, Vortageswerte der Maxima der Ozonkonzentration und der 12 UTC Temperatur kann für jeden Tag einzeln eine neue Regressionsfunktion trainiert werden. Mit dem Vortagsmaximum der Ozonmessung und der für den aktuellen Tag vorhergesagten Temperatur, kann dann die Ozonprognose berechnet werden. Dies wird für jede Station durchgeführt. Für die Prognose der Folgetage werden die prognostizierten Ozonkonzentrationen als Persistenz genutzt. Weiterhin erwies es sich als sinnvoll, nicht nur den ähnlichsten Tag zu nutzen, sondern die ähnlichsten 30 Tage (siehe Tabelle 11). Die Unterschiede bei dem RMSE der Persistenz in Tabelle 11 ergeben sich dadurch, dass es für jede der Untersuchungen eine andere Anzahl an Tagen gab, für die eine Prognose möglich war. So mussten bei den Untersuchungen an mindestens 50 % der analogen Tage auch Ozonkonzentrationen an der jeweiligen Station gemessen worden sein. Waren weniger Tage mit gemessenen Ozonkonzentrationen vorhanden, wurde keine Prognose erstellt.

Tabelle 11: Vergleich der Rechnung mit unterschiedlicher Anzahl an ähnlichen Tagen, Vorhersageleistung gemittelt über alle Stationen (~ 330)

| Tag | RMSE Prog | RMSE Per | RV | hline |
|-----|-----------|----------|------|-------|
| 10 | 21.0 | 28.7 | 46.6 | |
| 20 | 19.8 | 29.1 | 53.9 | |
| 30 | 19.1 | 29.0 | 56.9 | |
| 50 | 19.4 | 29.0 | 55.1 | |

Auch bei dieser Prognose erfolgte nur eine Optimierung über alle Tage. Die Ergebnisse für die Prüfung ohne Schwellenwert (allen Prognosen werden geprüft) als auch für die schwellenwertabhängige Prüfung (wenn Prognose oder Messung den Schwellenwert überschreitet) ist in Tabelle 12 zu finden. Der Bias der Tage mit Schwellenwerten $> 150 \mu\text{g}/\text{m}^3$, ist so hoch, dass eine weitergehende Nutzung nicht mehr zu empfehlen ist. Die Ursache ist in der geringen Häufigkeit von Tagen mit hohen Ozonkonzentrationen zu finden. Nicht an allen Tagen mit ähnlicher großräumiger Wetterlage (z.B. Hochdruckgebiet) treten gleichhohe Ozonwerte auf. Insbesondere bei an Tagen mit hohen Ozonwerten hat die Vortagessituation einen großen Einfluss. Die nachgeordnete Regression schafft es nicht diesen Einfluss im ausreichenden Maße einzubringen. Bei einer weiteren Verwendung (Kapitel 3.5) muss dieser Umstand beachtet werden.

Tabelle 12: Verifikation der Vorhersageleistung der stationsbezogenen Ozonvorhersage gemittelt über alle Stationen (330); die Daten beziehen sich auf die Monate Mai bis Juli 2002; Ergebnisse der AFREG-Methode (AN)

| Schwellenwert | ohne | | | | | | |
|---------------|----------------------------------|-------|-----------|-------|----------|------|------|
| | | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| aktueller Tag | 1.7 | 19.1 | -0.2 | 29.0 | 56.9 | 100 | |
| 1. Folgetag | 1.6 | 24.2 | -0.2 | 36.1 | 55.2 | 100 | |
| 2. Folgetag | 1.8 | 25.3 | -0.6 | 39.2 | 58.3 | 100 | |
| Schwellenwert | 120 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | | | | | | |
| Schwellenwert | 120 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| | | -7.0 | 24.2 | -14.5 | 34.2 | 49.9 | 26.5 |
| aktueller Tag | 1.6 | 24.2 | -0.2 | 36.1 | 55.2 | 100 | |
| 1. Folgetag | -13.1 | 33.3 | -19.6 | 46.7 | 49.2 | 26.8 | |
| 2. Folgetag | -13.1 | 34.2 | 24.0 | 51.6 | 56.1 | 28.3 | |
| Schwellenwert | 150 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | | | | | | |
| Schwellenwert | 150 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| | | -15.2 | 30.8 | -22.7 | 40.7 | 42.4 | 6.1 |
| aktueller Tag | 1.6 | 24.2 | -0.2 | 36.1 | 55.2 | 100 | |
| 1. Folgetag | -32.1 | 48.6 | -40.7 | 62.2 | 39 | 5.6 | |
| 2. Folgetag | -38.8 | 50.2 | -55.2 | 71.5 | 50.7 | 5.4 | |
| Schwellenwert | 180 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | | | | | | |
| Schwellenwert | 180 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| | | -26.6 | 40.2 | -38.8 | 53.1 | 42.7 | 0.8 |
| aktueller Tag | 1.6 | 24.2 | -0.2 | 36.1 | 55.2 | 100 | |
| 1. Folgetag | -60.2 | 71.5 | -72.1 | 88.0 | 34.0 | 0.7 | |
| 2. Folgetag | -70.2 | 76.8 | -96.5 | 103.6 | 45.0 | 0.7 | |

3.4.2.5 Robuste Regression mit Hilfe der Catline

Bei der Arbeit mit gemessenen Datenreihen sind durch Messfehler bedingte Ausreißer, trotz Datenvierlidierung, nicht auszuschließen. Demzufolge kann vermutet werden, dass im Kollektiv der 30 ähnlichsten Tage Tage enthalten sein können, die nicht wirklich zueinander ähnlich sind. Werden diese *fehlerbehafteten* Werte für Regressionen auf der Basis der Methode der kleinsten Quadrate genutzt, so haben diese Werte einen starken verfälschenden Einfluss.

Daher ergibt sich die Notwendigkeit, alternativ zur Regression mit der Methode der kleinsten Quadrate, über robuste Methoden zur Regression nachzudenken. Eine neue und in der Theorie sehr schlichte Methode ist die Catline nach Hubert et al. [38]. Sie ist durch ihren theoretischen Ansatz unempfindlich gegen jegliche Art von Ausreißern.

Die Vorgehensweise ist wie folgt: Als erstes werden die Werte entsprechend dem x-Wert sortiert. Die sortierte Reihe wird in drei gleichgroße Teile zerlegt (Linker (L), Mittlerer (M) und Rechter (R) Teil). Grob gesagt hat die Catline die Eigenschaft, dass die Anzahl der positiven Residuen in L gleich der Anzahl der negativen Residuen in M ist. Die negativen Residuen in M sind wiederum gleich den positiven Residuen in R. Das ganze gilt auch umgekehrt. Die Größe des einzelnen Abstandes ist dabei unbedeutend. Die dafür genutzte Routine ist unter <http://win-www.uia.ac.be/u/statis> unter der Bezeichnung *deepest regression*, zu finden.

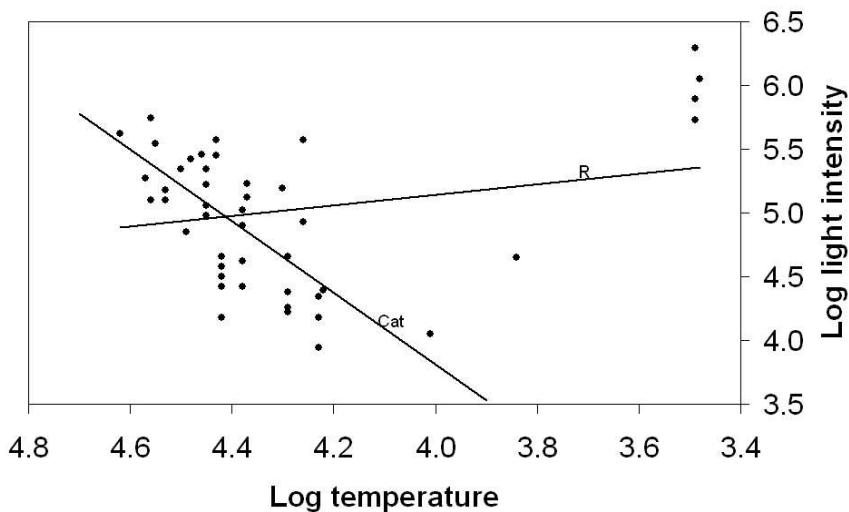


Abbildung 11: Herzsprung-Russel-Diagramm eines Sternenclusters in Richtung der Sternengruppe Cygnus, analysiert mit der Catline (Cat) und der einfachen linearen Regression (R)

Am Beispiel der Abbildung 11 kann der Vorteil der Methode gut dargestellt werden. Die Trendlinie (R) ist eindeutig von den vier Ausreißern beeinflusst. Die Catline (Cat) ist gegen diese Einflüsse unempfindlicher. Einen solchen Vorteil hat die Methode aber nur bei Kollektiven, die eindeutig bzw. sehr wahrscheinlich Ausreißer haben. Ansonsten liefert die Methode der kleinsten Quadrate bessere Ergebnisse bei der Entwicklung von Regressionsfunktionen.

Die Nutzung der Catline-Methode im Rahmen der Entwicklung zeigt damit gleich zwei Ergebnisse. Gibt es in den Kollektiven der 30 ähnlichsten Tage Ausreißer und wenn ja, sind dann die Vorhersagen mit robusten Regressionsmethoden besser?

Die Antwort ist kurz. Der Einsatz der robusten Regressionsmethode bringt keine Verbesserung, sondern eine leichte Verschlechterung der Vorhersageergebnisse (siehe Tabelle 13).

In Anlehnung an das oben gesagte heißt das: in den Kollektiven der 30 ähnlichsten Tage sind wahrscheinlich keine Ausreißer vorhanden.

Tabelle 13: Vergleich der Ergebnisse der Methode der kleinsten Quadrate mit Catline, Vorhersageleistung gemittelt über alle Stationen (330)

| Schwelle | Methode der kleinsten Quadrate | | | Catline | | |
|------------------------------|--------------------------------|----------|------|-----------|----------|------|
| | RMSE Prog | RMSE Per | RV | RMSE Prog | RMSE Per | RV |
| ohne | 19.1 | 29.0 | 56.9 | 19.2 | 29.0 | 56.7 |
| 120 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ | 24.2 | 34.2 | 49.9 | 24.3 | 34.2 | 49.6 |
| 150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ | 30.8 | 40.7 | 42.4 | 31.0 | 40.7 | 41.9 |
| 180 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ | 40.2 | 53.0 | 42.7 | 40.5 | 53.0 | 41.7 |

Eine Möglichkeit täglich zu kontrollieren, wie ähnlich die genutzten Fälle sind und daraus ein Gütemaß abzuleiten, ist die Berechnung des mittleren Distanzmaßes aller genutzten Fälle. Je höher das mittlere Distanzmaß, desto unähnlicher sind die genutzten Fälle und umgekehrt.

3.5 Die finalen Ozonprognosen

3.5.1 Einführung und Zielsetzung

Nach der Berechnung der drei Teilprognosen und unter Hinzunahme der alten Regressionsroutine kann mit den finalen Prognosen begonnen werden. Diese sind:

- eine stationsbezogene Tagesmaximumvorhersage und
- eine Prognose der Wahrscheinlichkeit der Überschreitung von Schwellenwerten .

Wie aus der Wetterprognose bekannt, erzielen kombinierte Prognosen oft bessere Ergebnisse als Einzelprognosen. In dieser Arbeit wurden in den vorhergehenden Kapiteln drei voneinander unabhängige Prognosemodelle vorgestellt. Weiterhin wurde im Unterabschnitt **Ozonprognosen am Umweltbundesamt** die bis ins Jahr 2002 am UBA laufende Methode kurz beschrieben. Die Idee der Finalprognose für das Maximum der Ozonkonzentration ist, eine Regression zu entwickeln, die unter Zuhilfenahme der vier Teilprognosen eine kombinierte Prognose berechnet

Die zweite Aufgabenstellung ist die Prognose von möglichen Schwellenwertüberschreitungen. Die Einzel- und auch die später vorgestellte Kombinationsprognose liefern einen konkreten Wert für jede Station. Weiterführender und durch die bekannte Fehlerstreuung der Prognose aussagekräftiger ist eine Aussage über die Wahrscheinlichkeit der Überschreitung

von Schwellenwerten. So ist es möglich, dass die Stationsprognose knapp unter einem Schwellenwert liegt. Damit ist es sehr wahrscheinlich, dass eine Schwellenwertüberschreitung auftreten kann. Abschnitt 3.5.3 zeigt eine Möglichkeit eine solche Prognose durchzuführen.

3.5.2 Die Prognose des Tagesmaximums

Das Training der Regressionsfunktion erfolgte mit dem eingetroffenen Ozonwert¹⁸ als Prädiktand und den vier Teilprognosen als Prädiktoren. Die Finale Prognose ist dann das Ergebnis der folgenden Gleichung:

$$O_{3_{\text{prog}}} = A + B \times WL + C \times WE + D \times AN + E \times TR \quad (41)$$

mit A als additive Konstante; B, C, D und E als Koeffizienten und den Teilprognosen WL (Ozonwetterlagen), WE (Alte Regression), AN (Analogie) und TR (Trajektorien).

Die additive Konstante A und die vier Koeffizienten B, C, D und E werden für jede Station einzeln bestimmt. In Tabelle 14 werden beispielhaft für die Station Potsdam-Centrum/Hebelstraße (DEBB021) und die Station Stuttgart Bad Cannstatt (DEBW013) die Koeffizienten aufgelistet.

Tabelle 14: Koeffizienten und additive Konstante bei der Finalprognose für die Stationen Potsdam-Zentrum (DEBB021) und Stuttgart Bad Cannstatt (DEBW013)

| Station | A | B | C | D | E |
|---------|---------|-------|-------|-------|-------|
| DEBB021 | -17,892 | 0,404 | 0,481 | 0,032 | 0,208 |
| DEBW013 | -12,205 | 0,661 | 0,190 | 0,141 | 0,112 |

Mit diesen Koeffizienten ist festgelegt, welche Teilprognose wie viel Einfluss auf die Finalprognose hat. Die Teilprognosen WL und WE haben immer den größten Einfluss. Die Entwicklung dieser Parameter erfolgte an den Jahren 2000 und 2001. Am Jahr 2002 kann dann getestet werden, wie gut die finale Prognose ist.

Zur Verbesserung der Prognoseleistung und Maximierung der Anzahl der Stationen mit Prognose wurden noch zwei weitere Schritte hinzugefügt.

1. Wird in der Region in der die Station liegt die Ozonwetterlage 4 oder 5 erreicht, so erfolgt die Regression nur mit den Teilprognosen WL und WE , da diese bei höheren Ozonwerten bessere Prognosen liefern.

¹⁸ Tagesmaximum an der Station

2. Sind bei einer Station nicht mindestens zwei Teilprognosen vorhanden, so wird keine Kombinationsprognose berechnet, sondern eine einzelne Teilprognose als Endprognose genutzt. Dabei gilt folgende Rangfolge 1. WL, 2. WE, 3. AN und 4. TR.

Dadurch ist es möglich, für 333 Stationen eine Tagesmaximumprognose zu liefern. In der Datei in der die Finalprognosen für die weitere Verwendung gespeichert werden, wird in Form eines Kürzels vermerkt, welche Prognose genutzt wurde. Ein Vorteil der Methode ist es, dass einzelne Ausreißer geglättet werden. Somit ist diese Prognose als stabiler anzusehen, als die Teilprognosen. In Tabelle 15 sind die Verifikationsergebnisse aufgelistet. Hier erfolgte sowohl eine Prüfung ohne Schwellenwert (allen Prognosen werden geprüft) als auch eine schwellenwertabhängige Prüfung (wenn Prognose oder Messung den Schwellenwert überschreitet).

Tabelle 5: Verifikation der Vorhersageleistung der stationsbezogenen Ozonvorhersage gemittelt über alle Stationen (333); die Daten beziehen sich auf die Monate Mai bis Juli 2002; Ergebnisse der Finalen Ozonprognose (KP)

| Schwellenwert | ohne | | | | | |
|---------------|----------------------------------|-----------|-------|----------|------|------|
| | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| aktueller Tag | -1.5 | 16.9 | -0.2 | 29.0 | 66.1 | 100 |
| 1. Folgetag | 0.0 | 19.6 | -0.2 | 36.0 | 70.4 | 100 |
| 2. Folgetag | 0.5 | 20.6 | -0.5 | 39.1 | 72.3 | 100 |
| Schwellenwert | 120 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | | | | | |
| Schwellenwert | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| | -7.9 | 22.5 | -13.6 | 33.4 | 57.7 | 24.9 |
| aktueller Tag | -9.5 | 26.0 | -24.0 | 44.6 | 65.9 | 25.4 |
| 1. Folgetag | -6.9 | 26.8 | -28.0 | 50.0 | 71.3 | 26.8 |
| Schwellenwert | 150 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | | | | | |
| Schwellenwert | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| | -10.8 | 28.6 | -22.3 | 39.3 | 47.1 | 6.2 |
| aktueller Tag | -13.1 | 32.3 | -44.7 | 56.9 | 67.9 | 6.4 |
| 1. Folgetag | -12.0 | 33.6 | -54.6 | 66.3 | 74.3 | 6.5 |
| Schwellenwert | 180 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] | | | | | |
| Schwellenwert | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Per | RV | % |
| | -18.4 | 35.5 | -37.3 | 54.1 | 57.0 | 0.9 |
| aktueller Tag | -23.0 | 42.1 | -76.6 | 88.4 | 75.1 | 0.8 |
| 1. Folgetag | -32.0 | 47.9 | -89.2 | 98.9 | 76.5 | 0.8 |

Beim Vergleich mit den Tabellen 7 (WL), 8 (WE), 10 (TR) und 12 (AN) ist folgender Schluss möglich. Ohne Schwellenwert ist die Kombinationsprognose im Jahr 2002 etwas besser als die Teilprognose WL und deutlich besser als die anderen Teilprognosen. Bei den Schwellenwerten 120, 150 und 180 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ist die Teilprognose WL etwas besser als die finale Prognose. Beide sind deutlich besser als die anderen Teilprognosen. Trotzdem ist es zu empfehlen nicht die Teilprognose WL als Finalprognose zu nutzen. Mit nur einem Jahr als Prüfung, sind die Unterschiede noch zu klein. Hier ist es empfehlenswerter, die stabilere Kombinationsprognose zu nutzen.

3.5.2.1 Erfahrungen beim operationellen Einsatz im Frühsommer 2003

Am 7. April 2003 begann der operative Einsatz des entwickelten Prognosesystems am Umweltbundesamt. Mit der Umstellung auf eine frühsommerliche Hochdrucklage (Mitte Mai) wurde erkennbar, dass in dieser Saison die Qualität der Prognose schlechter ist als in den Vorjahren. Diese Verschlechterung der Vorhersagequalität trat sowohl bei dem als Backup laufenden alten Prognosesystem, als auch bei der hier vorgestellten neuen Prognoseroutine auf. Daraus lassen sich zwei mögliche Ursachen ableiten: entweder ist die Eingangsdatenqualität gesunken oder die Korrelationen haben sich geändert. Systematische Untersuchungen lassen vermuten, dass der Fehler bei den Eingangsdaten zu suchen ist.

Da es nicht möglich war ein Korrektursystem für die Eingangsdaten zu erstellen, musste auf die im Unterabschnitt 2.3.1.5 beschriebene nachträgliche Biaskorrektur der Prognoseergebnisse zurückgegriffen werden.

In einer Sensitivitätsstudie wurde untersucht welche Glättungskonstante β (Gleichung (10)) die optimale Anpassung erbringt. Entgegen den Erfahrungen von Balzer [3] erwies sich ein etwas höherer Wert¹⁹ von $\beta = 0,15$ als sinnvoll. Der Einsatz erfolgt für jede Station einzeln. Bei jeder der vier Teilprognosen und bei der Kombinationsprognose erfolgt seit dem 24. Juni 2003 der Einsatz der selbstlernenden Biaseliminierung. Das hat zusätzlich den Vorteil, dass bei sich ändernden Korrelationen eine teilweise Anpassung durch die Biaskorrektur möglich ist. In einem weiteren Schritt wurde geprüft, welchen Einfluss diese Biaskorrektur auf die Prognoseergebnisse im Jahr 2002 hat. Dabei wurde festgestellt, dass bei

¹⁹ Balzer [3] empfiehlt nach eigenen Experimenten ein β von 0,01 bis 0,1. Er weist aber darauf hin, dass in anderen Bereichen auch Werte bis 0,2 genutzt werden.}

der wetterlagenbasierten Prognose und bei den Analogen Fällen nur minimale Veränderungen der Prognosequalität auftreten. Bei der Prognose auf der Basis von Trajektorien sind bei der Prüfung ohne Schwellenwert und bei der Prüfung des Schwellenwertes $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$ Verbesserungen erkennbar (siehe Tabelle 16).

Tabelle 16: Vergleich der Ergebnisse mit und ohne Biaskorrektur bei der auf Trajektorien basierten Prognose für das Jahr 2002

| Schwelle | Ohne Korrektur | | Mit Biaskorrektur | |
|------------------------------|----------------|-----------|-------------------|-----------|
| | Bias | RMSE Prog | Bias | RMSE Prog |
| ohne | -2,3 | 19,0 | -1,2 | 17,7 |
| $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$ | -14,0 | 25,2 | -11,8 | 22,9 |

3.5.3 Die Schwellenwertvorhersage

Eine weitere wichtige Aufgabe ist die Vorhersage der Wahrscheinlichkeit einer Schwellenwertüberschreitung. Im Rahmen der Arbeit wurden die Schwellen 150, 180, 210 und $240 \mu\text{g}/\text{m}^3$ auf ihre Vorhersagbarkeit untersucht. Weiterhin wurde geprüft, ob eine stationsweite Vorhersage möglich ist oder nur regionale Aussagen.

3.5.3.1 Methode

Damit eine Vorhersage von Schwellenwerten möglich ist, mussten die Tagesmaxima der Ozonkonzentrationen schwellenwertabhängig binarisiert werden. Dabei wird bei erreichen bzw. überschreiten des Schwellenwertes die 1 gewählt, ansonsten die 0. Der Prädiktand der Regression ist dann dieser binarisierte Wert. Wird in einer Region mehr als eine Station betrachtet, so wird aus den binarisierten Werten der zur Region gehörigen Stationen der prozentuale Anteil der Stationen mit Überschreitungen berechnet. Überschreiten fünf von 20 Stationen in der Region den Schwellenwert so hat der regionale Prädiktand den Wert 0,25. Als Prädiktoren werden die vier Teilprognosen genutzt.

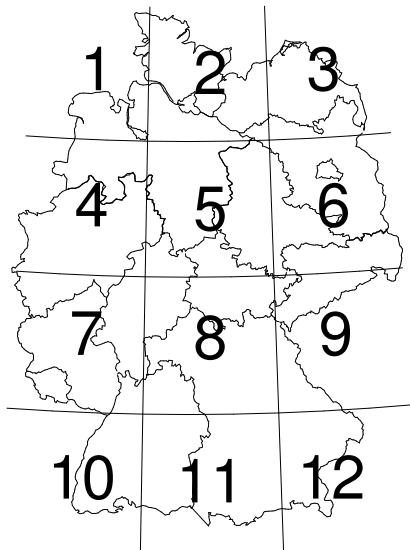


Abbildung 12: Schematische Darstellung der 12 Regionen

Nach Voruntersuchungen muss folgendes Ergebnis festgestellt werden. Eine Vorhersage von Wahrscheinlichkeiten der Überschreitung von Schwellenwerten auf Stationsbasis ist nicht möglich! Es kann keine erwartungstreue Vorhersagefunktion entwickelt werden, da die Überschreitungswahrscheinlichkeiten der einzelnen Stationen zu gering sind. Regionale Vorhersagen sind für die Schwellen 150 und 180 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ möglich. Hierbei wurde das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland in zwölf Regionen unterteilt. Die Grenzen der Regionen sind die Längenkreise 9°O und 12°O und die Breitenkreise 49°N, 51°N und 53°N. Die Regionen sind in Abbildung 12, in Bezug auf die 16 Bundesländer, dargestellt. Die Stationsanzahl in den Regionen liegt zwischen 6 (in Region 12) und 63 (in Region 7). Durchschnittlich sind 29 Stationen in jeder Region.

3.5.3.2 Optimierung

In Abbildung 13 werden für drei Schwellenwerte (150, 180 und 210 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) die eingetretenen Überschreitungen den, durch die Regressionsanalyse ermittelten, prognostizierten Wahrscheinlichkeiten der Region 7 gegenübergestellt. Im Teilbild 13a ist bei der prognostizierten Reihe im Vergleich zur Messreihe, ein ähnliches Signalverhalten zu sehen.

Höhere Werte in der prognostizierten Reihe treten nur dann auf, wenn in der Messreihe Werte ungleich Null vorhanden sind. Die Signalstärke ist aber generell geringer. In Abhängigkeit vom Schwellenwert ändert sich das Signal - Rausch - Verhältnis. Während es im

Teilbild (a) (Schwelle $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$) noch sehr gut trennbar ist, ist die Trennung im Teilbild (c) (Schwelle $210 \mu\text{g}/\text{m}^3$) nicht mehr möglich. Neben den Signalen ist ein Grundrauschen bei der Prognose vorhanden. Es muss daher eine Schranke gefunden werden, bis zu der die Prognoseroutine dieses Rauschen gleich Null setzt.

Hierbei kann eine Optimierung angewandt werden. Es muss ein Optimum zwischen der Wahrscheinlichkeit der Erkennung (*probability of detection*) und der Fehlalarmrate (*false alarm rate*) gefunden werden. Beides sind Prüfgrößen von Binärereignissen. Als erster Schritt muss dafür eine 2×2 Prüfmatrix aufgestellt werden (siehe Tabelle: 1); im selben Unterabschnitt werden auch der TSS und HSS erklärt.

Im nächsten Schritt wird die Schranke zwischen Signal- und Rauschbereich schrittweise (0,01) von null auf 0,5 erhöht. Für jeden Schritt werden die Prüfgrößen aus Unterabschnitt 2.3.3.4 berechnet. Die bildhafte Darstellung der Prüfergebnisse erfolgt in der Abbildung 14.

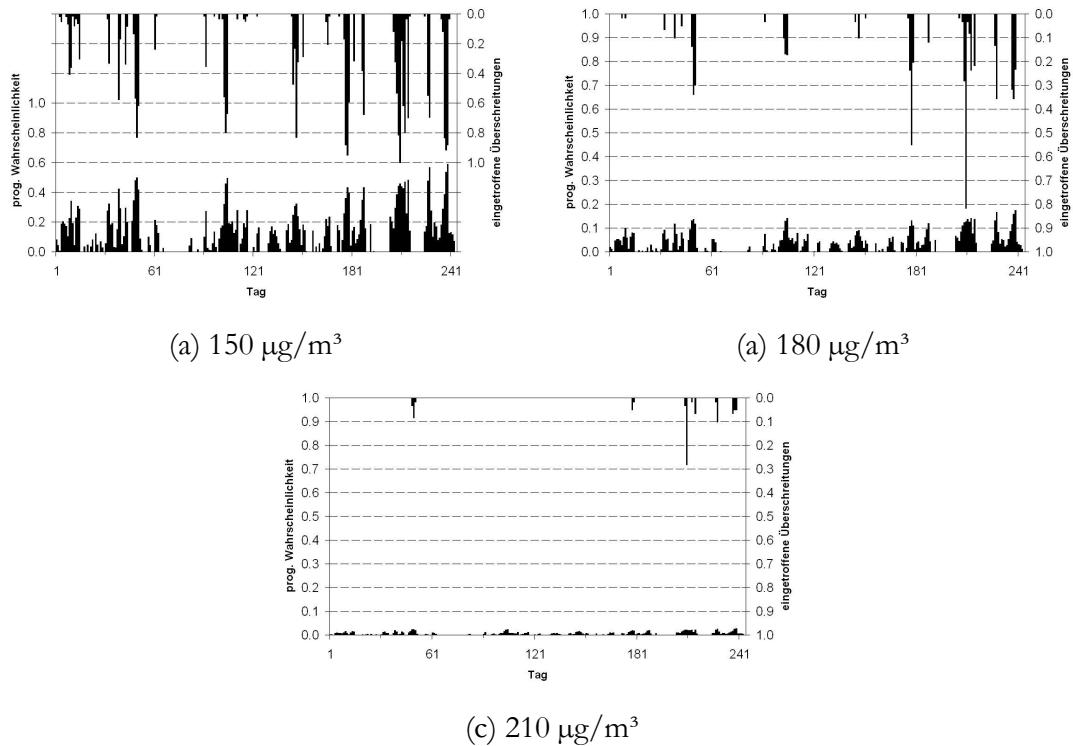


Abbildung 13: Vergleich der eingetroffenen relativen Häufigkeiten der Überschreitungen mit den prognostizierten Wahrscheinlichkeiten; zur besseren Gegenüberstellung beider Werte, werden die eingetroffenen Überschreitungen auf der zweiten Y-Achse invers dargestellt; im obersten Diagramm wurde zur besseren Trennung beider Teile eine Skala bis 1,6 gewählt; in jedem Diagramm werden jeweils die Monate Mai bis August 2000 und 2001 hintereinander dargestellt; am Beispiel der Region 7.

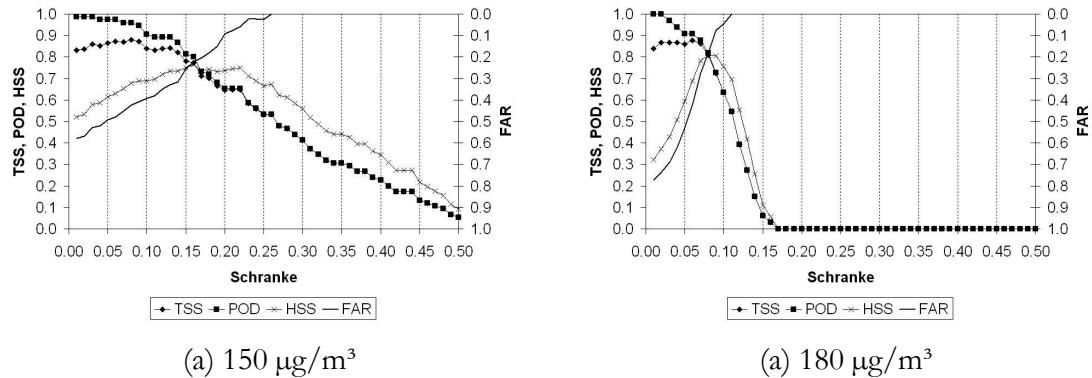


Abbildung 14: Darstellung der Ergebnisse der Schrankenuntersuchung; der Parameter FAR wird auf der 2. Y-Achse mit inverser Achse dargestellt; am Beispiel der Region 7, für den Entwicklungszeitraum 2000-2001.

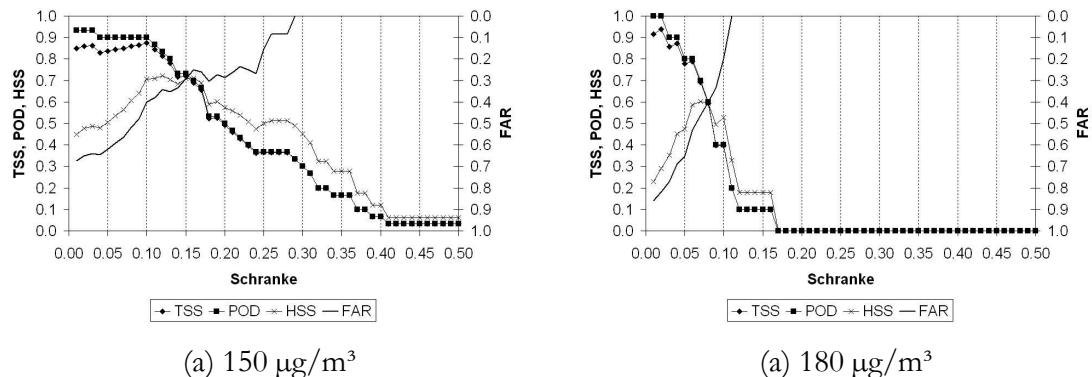


Abbildung 15: Darstellung der Ergebnisse der Schrankenuntersuchung; der Parameter FAR wird auf der 2. Y-Achse mit inverser Achse dargestellt; am Beispiel der Region 7, für das Testjahr 2002.

Die optimale Schranke kann direkt aus den Diagrammen abgelesen werden. Beide werden für jede Region einzeln bestimmt. Sie liegt in der Region 7 beim Schwellenwert $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bei $\sim 0,17$ und beim Schwellenwert $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ bei $\sim 0,08$. Diese Schranken können nun an dem Jahr 2002 getestet werden. Hierbei zeigt sich, dass die guten Ergebnisse bei der Entwicklung [HSS 0,74 (0,81) bei $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ($180 \mu\text{g}/\text{m}^3$)] nicht mehr erreicht werden [HSS 0,65 (0,57) bei $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ($180 \mu\text{g}/\text{m}^3$)]. Dieses gilt nicht nur für die Region 7. Auch in allen anderen Regionen tritt diese Verschlechterung auf. Die Abbildung 15 zeigt, dass die gefundenen Schranken auch für das Jahr 2002 gelten.

4 Zusammenfassung

Auch wenn Ozon in den letzten Jahren nicht mehr so stark im Blickpunkt der Öffentlichkeit steht wie noch vor 5 bis 10 Jahren, ist die Problematik erhöhter Ozonwerte, besonders unter dem Eindruck des Sommers 2003, noch immer aktuell. Dieser Problematik sollen die aktuellen Richtlinien der Europäischen Union und die Gesetze und Verordnungen des Bundes und der Länder Rechnung tragen.

In dieser Arbeit wird ein neuentwickeltes Verfahren zur Ozonprognose vorgestellt. Es handelt sich hierbei um eine Kombinationsvorhersage, deren Grundlagen statistischer Natur sind. Basierend auf den Ergebnissen der numerischen Wettervorhersage des GME-Modells des Deutschen Wetterdienstes (DWD) und den in Deutschland gemessenen Immissionswerten der Jahre 1997-2002 wurden fünf Vorhersagemodule entwickelt,

- eine wetterlagenbasierte Klassifikation mit nachfolgender Regression,
- ein isobares Trajektorienmodell mit nachfolgender Regression,
- Analoge Fälle mit nachfolgender Regression und
- eine Wahrscheinlichkeitsvorhersage für Schwellenwerte
- eine multiple Regression für die 8-Stunden-Mittelwert-Maximumprognose

Diese Module funktionieren alle nach dem Prinzip der sogenannten Perfekten Prognose. Als abschließender Schritt werden die einzelnen Ergebnisse mittels Regression zu einer Vorhersage kombiniert. Nach der vollautomatischen Ausführung aller Module liegt damit eine stationsbezogene 1-Stunden-Maximumprognose und eine 8-Stunden-Mittelwert-Maximumprognose für das Gebiet Deutschland für den Bearbeitungstag und die zwei nachfolgenden Tage vor.

4.1 Anmerkungen zum Kapitel 3.2

Die in diese Methode gesetzten Erwartungen wurden voll erfüllt. Es ist möglich, basierend auf den großräumigen meteorologischen Bedingungen eine Einteilung der Tage in Ozonwetterlagenklassen durchzuführen. Dadurch kann eine speziell auf diese Situation angepasste Regressionsfunktion zur Vorhersage genutzt werden. Die Ergebnisse in den Tabel-

len 7 und 8 zeigen, dass diese Vorhersage deutliche Verbesserungen gegenüber der bisher am UBA eingesetzten Methode bringt.

Ein entscheidender Vorteil der Methode ist, dass für die Klassifikation die großräumigen meteorologischen Bedingungen ausschlaggebend sind. Mit der stationsbezogenen Regression werden im zweiten Schritt die stationsspezifischen Eigenschaften (z.B. Verkehrs- oder Berglage) in die Prognose einbezogen.

Ein Nachteil ist auch weiterhin in den Regressionsbeziehungen enthalten. Sie beinhalten die Korrelationen der Jahre 1997 bis 2001 und sind damit statisch. Im Unterabschnitt 2.3.2.2 ist eine Möglichkeit der Dynamisierung der Korrelationen beschrieben. Die Umsetzung war im vorgegebenen Zeitrahmen nicht möglich. Damit eine Umsetzung möglich ist, müssen umfangreiche Untersuchungen, mit dem Ziel einen oder mehrere Adoptionszeiträume zu ermitteln, durchgeführt werden. Aus früheren Untersuchungen [18] ist bekannt, dass eine Aufteilung in zwei Summenmatrizen sinnvoll sein könnte, beispielsweise in eine Summenmatrix mit einem kurzen Adoptionszeitraum von einigen Tagen und eine weitere mit einem deutlich längeren Adoptionszeitraum von mindestens 100 Tagen. Das entscheidende Problem dabei ist, dass eine Regel gefunden werden muss, wann zwischen den beiden Summenmatrizen gewechselt wird. Eine Idee wäre, die Vorhersage mit der Summenmatrix mit dem kurzen Adoptionszeitraum zu starten. Somit kann der Beginn einer Ozonepisode gut erfasst werden. Erkennt die Regel zum Wechseln zwischen beiden Summenmatrizen das ein Wetterumschwung und damit ein Ende der Ozonepisode in Aussicht ist, wird für einige Tage auf die Summenmatrix mit dem langen Adoptionszeitraum umgeschaltet. Wie schon angesprochen wäre eine Untersuchung dieser Problematik eine Möglichkeit, eine Verbesserung der Prognoseleistungen zu erreichen. Es muss aber auch darauf hingewiesen werden, dass mit der Dynamisierung auch Fehler wahrscheinlicher werden, denn trotz aller Kontrollen können problematische Werte in die Summenmatrix aufgenommen werden.

4.2 Anmerkungen zum Kapitel 3.3

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 Luftpäckte, keine Steigerung der Prognoseleistung zur Folge hat. Wichtiger für die Prognoseleis-

tung sind die Wegstrecke sowie die mittleren Temperatur- und Luftfeuchteverhältnisse auf der Rückwärtstrajektorie.

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 höhenaufgelösten räumlichen und zeitlichen Dimension, könnten realistischere Trajektorien erzeugen.

4.3 Anmerkungen zum Kapitel 3.4

Die Erwartungen sind erfüllt worden. Mit der Methode der Analogen Fälle ist es möglich, eine gute Vorhersagequalität zu erreichen. Nachteilig wirkt sich aus, dass bei Tagen mit hohen gemessenen Ozonkonzentrationen eine deutliche Unterschätzung der Ozonverhältnisse auftritt. Bei einer weiteren Nutzung der Prognoseergebnisse sollte dies einbezogen werden.

Bei Kontrollrechnungen zeigte sich, dass der Einsatz dieser Routine besonders in den Monaten September bis April erfolgversprechend ist. In diesen Monaten treten nur sehr selten hohe Ozonkonzentrationen auf, womit sich der Nachteil dieser Methode relativiert. Somit kann auch für Monate, für die bisher keine Prognose gerechnet wurde, der Bevölkerung eine Vorhersage zur Verfügung gestellt werden. Durch die üblicherweise sehr niedrigen Ozonkonzentrationen ist das Interesse der Bevölkerung für Prognosen in diesen Monaten meist aber sehr gering. Die anderen in dieser Arbeit vorgestellten Routinen können diese

Aufgabe nicht erfüllen, da sie anhand der Sommermonate Mai bis August optimiert worden sind.

Der entscheidende Vorteil der AFREG-Routine ist die dynamische Anpassung der Regressionsroutinen an die analogen Tage. Damit ist diese Routine noch in mehreren Jahren ohne Anpassung der Regressionsfunktionen einsetzbar. Der Nachteil des großen negativen Bias bei hohen Ozonkonzentrationen limitiert den möglichen Einsatz jedoch deutlich.

4.4 Anmerkungen zum Kapitel 3.5

Mit der Entwicklung einer abschließenden Kombinationsprognose steht jetzt eine stabile und erwartungstreue Prognose für alle Stationen zur Verfügung. Die Vorhersageleistung ist signifikant besser als die der Referenzprognose (Persistenz). Das die Kombinationsprognose nur knapp besser ist als die beste Einzelprognose (wetterlagenbasierte Klassifikation mit nachfolgender Regression) zeigt, dass mit dem genutzten Ansatz ein Optimum bei der Prognoseleistung erreicht worden ist.

Die eingetretenen Probleme im Frühsommer 2003 zeigen aber auch die Schwierigkeiten von operationellen Prognosen. Bevor aber eine endgültige Vorverurteilung der Eingangsdaten vorgenommen wird, müssen deutlich detailliertere Untersuchungen mit den am Ende des Jahres verfügbaren korrigierten Daten der Ozonmessungen und den analysierten (diagnostischen) Wetterdaten durchgeführt werden.

Mit dem hier entwickelten Modul zur Vorhersage der Wahrscheinlichkeit der Überschreitung von Schwellenwerten steht dem Endnutzer ein neues Werkzeug für die Einschätzung der möglichen Ozonsituation zur Verfügung. Leider war es nicht möglich, Prognosen für die Schwellenwerte 210 und 240 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ zu entwickeln. Diese Werte werden nur noch an sehr wenigen Tagen im Jahr erreicht. Diese Tage zeichnen sich durch hohe prognostizierte Werte beim Schwellenwert 180 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ aus. Somit ist hilfsweise eine Prognose darüber möglich.

4.5 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 erfolgversprechend ist,
- zu untersuchen, ob der Einsatz von isentropen Trajektorien die trajektorienbasierte Prognose verbessert,
- die Weiterverfolgung der Idee einer Vorhersage unter Annahme eines photostationären 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 obengenannten Ansätze stellen dabei nur die ersten Schritte dar.

Nachdem im Sommer 2003 entgegen dem bisherigen Trend wieder verstärkt erhöhte Ozonwerte aufgetreten sind, sollten nach entgültiger Bestätigung der Messwerte die Regressionsgleichungen mit den Daten des Sommers 2003 neu abgeleitet werden.

5 Literaturverzeichnis

- [1] Alapaty, K et al.: Sensitivity of Regional Oxidant Model Prediction to Prognostic and Diagnostic Meteorological Fields. *Journal of Applied Meteorology* (1995) 34 S. 1787-1801
- [2] Balzer, K.: Über die automatische Interpretation von Vorhersagekarten am NMC Potsdam – ein Erfahrungsbericht. *Zeitschrift für Meteorologie* (1984) 34 S. 3-13
- [3] Balzer, K.: Eine selbstlernende, optimale Mensch-Maschine-Kombination von operativen Immissionsprognosen. *Zeitschrift für Meteorologie* (1986) 36 S. 127-133
- [4] Balzer, K.: Statistische Vorhersage seltener Ereignisse und die Macht des Zufalls. *Zeitschrift für Meteorologie* (1989) 39 S. 30-35
- [5] Balzer, K.: Automatische Wettervorhersage mittels statistischer Interpretation. *Promet* (1995) 4, S. 110–118
- [6] Balzer, K.: Mindest RV. Beitrag zum Langfristprognoseseminar beim gemeinsamen Seminar am Institut für Meteorologie der FU Berlin (1997)
- [7] Baumbach, G. ; Vogt, U. ; Glaser, K.: Einfluss bodennaher Sperrsichten auf das Ozonaufkommen in Stadtgebieten. *Promet* (2002) 1/2 S. 68–75
- [8] Baur, F.: Einführung in die Grosswetterkunde. Dieterichsche Verlagsbuchhandlung (1948)
- [9] Bissolli, P.; Dittmann, E.: The objective weather type classification of the German Weather Service and its possibilities of application to environmental and meteorological investigations. *Meteorologische Zeitung* (2001) 10 S. 253–260
- [10] Biswas, J. ; Rao, S. T.: Uncertainties in Episodic Ozone Modelling Stemming from Uncertainties in the Meteorological Fields. *Journal of Applied Meteorology* (2001) 40 S. 117–136

- [11]Burrows, R. W. ; Benjamin, M. ; Beauchamp, S. ; Lord, E. R. ; McCollor, D.; Thomson, B.: CART Decision-Tree Statistical Analysis and Prediction of Summer Season Maximum Surface Ozone for the Vancouver, Montreal and Atlantic Regions of Canada. *Journal of Applied Meteorology* (1995) 34 S. 1848–1862
- [12]BUWAL: Troposphärisches Ozon - aktuelle Forschungsergebnisse und ihre Konsequenzen für die Luftreinhaltung. *Schriftenreihe Umwelt* (1996) 277 S. 1–39
- [13]Dittmann, E. ; Barth, S. ; Lang, J. ; Müller-Westermeier, G.: Objektive Wetterlagenklassifikation. *Berichte des Deutschen Wetterdienstes*. Bd. 197: Offenbach am Main : Deutscher Wetterdienst (1995)
- [14]DWD: Ozon I. Promet (1986) 4, Deutscher Wetterdienst
- [15]DWD: Photosmog I. Promet (2000) 3/4, Deutscher Wetterdienst
- [16]DWD: Photosmog II. Promet (2002) 1/2, Deutscher Wetterdienst
- [17]Eder, B. K. ; Davis, J. M. ; Bloomfield, P.: An Automated Classification Scheme Designed to Better Elucidate the Dependence of Ozone on Meteorology. *Journal of Applied Meteorology* (1994) 33 S. 1182–1199
- [18]Enke, W.: Ein adaptives Regressionsmodell - lernende, lineare, multiple Regression. *Zeitschrift für Meteorologie* (1984) 34 Nr. 2 S. 66–74
- [19]Enke, W.: Ein erwartungstreues lineares Selbstorganisationsmodell. *Zeitschrift für Meteorologie* (1988) 34 Nr. 5 S. 308–314
- [20]Enke, W.: Analyse historischer Datenreihen und Entwicklung einer Methode zur Quasi-Wetterbereinigten Trendanalyse von Bodennahem Ozon / Umweltbundesamt, Förderkennzeichen 297 42 848. (2001) – Forschungsbericht
- [21]Enke, W.: Analyse historischer Datenreihen und Entwicklung einer Methode zur Quasi-Wetterbereinigten Trendanalyse von Bodennahem Ozon; Teilprojekt: Entwicklung und Implementierung einer operationellen Ozonprognose / Umweltbundesamt, Förderkennzeichen 297 42 848. (2001) Forschungsbericht

- [22]Enke, W.: Verbesserung der bundesweiten Immissionsdaten durch Entwicklung und Anwendung einer Operationellen Methode zur Validierung und Korrektur kontinuierlich ermittelter Immissionswerte nach einheitlichen objektiven Kriterien / Umweltbundesamt, Förderkennzeichen 200 42 264. (2002) – Forschungsbericht
- [23]Enke, W. ; Seewöster, J. ; Heiermeier, J.: Erfassung und Beschreibung der Immissions-Meßzeitreihen in Deutschland, Teil I Kategorisierung der Ozonstationen / Umweltbundesamt . Förderkennzeichen 204 02 841.(1998) – Forschungsbericht
- [24]Enke, W.; Spekat, A.: Downscaling Climate Model Outputs Into Local and Regional Weather Elements by Classification and Regression. In: Climate Research (1997) 8 S. 195–207
- [25]EU: Richtlinie 2002/3/EG Des Europäischen Parlaments und des Rates vom 12. Februar 2002 über den Ozongehalt der Luft. In: Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften L 67 (DE) (2002), S. 14–30
- [26]EU-Kommission: Entscheidung der Kommission zur Änderung der Anhänge der Entscheidung 97/101/EG des Rates zur Schaffung eines Austausches von Informationen und Daten aus den Netzen und Einzelstationen zur Messung der Luftverschmutzungen in den Mitgliedstaaten 2001/752/EG / EU Kommission. (2001)
- [27]EU-Rat: Entscheidung des Rates zur Schaffung eines Austausches von Informationen und Daten aus den Netzen und Einzelstationen zur Messung der Luftverschmutzungen in den Mitgliedsstaaten 97/101/EG / EU-Rat.
- [28]Hoffmann, J. D.: Klimatische Auswertung von Zeitreihen für Ozon, NO₂, NO, SO₂ und TSP (PM10) in Deutschland für die Jahre 1994-1999 und Charakterisierung der Messstationen nach Immissionsregimes mit einem Clusterverfahren, In: Entwicklung eines Beurteilungssystems für das Zusammenspiel von Meldung und Modellrechnungen für die Bundeseinheitliche Umsetzung der EU-Rahmenrichtlinie Luftqualität und ihrer Tochterrichtlinien / FU Berlin und Umweltbundesamt Förderkennzeichen 299 43 246 (2002). – Forschungsbericht

- [29]Flemming, J.D.: Immissionsfelder aus Beobachtung, Modellierung und Deren Kombination, Freie Universität Berlin, Institut für Meteorologie, Diss., (2003)
- [30]Fuentes Hutfilter, U.: Statistisch-dynamische Regionalisierung auf der Basis einer Klassifikation synoptischer Entwicklungen, Fakultät für Physik der Ludwig-Maximilians-Universität München, Diss. (1998)
- [31]Gardner, M. W.; Dorling, S. R.: Artificial Neural Networks (the Multilayer Perceptron) - a Review of Applications in the Atmospheric Sciences. *Atmospheric Environment* (1998), 32 Nr. 14/15, S. 2627–2636
- [32]Gardner, M. W. ; Dorling, S. R.: Neural network modelling and prediction of hourly NO_x and NO_2 concentrations in urban air in London. *Atmospheric Environment* (1999) 33 S. 709–719
- [33]Gardner, M. W.; Dorling, S. R.: Statistical surface ozone models: an improved methodology to account for non-linear behaviour. In: *Atmospheric Environment* (2000) 34 S. 21–34
- [34]Gerstengarbe, F.-W. ; Werner, P.C.; Rüge, U.: Katalog der Großwetterlagen Europas 1881-1998 nach P. Hess und H. Brezowsky. Berichte des Deutschen Wetterdienstes. Bd. 113 (5. Auflage): Offenbach, Potsdam : Deutscher Wetterdienst, Potsdam-Inst. f. Klimafolgenforschung (1999)
- [35]Graedel, T. E. ; Crutzen, P. J.: *Atmospheric Change: An Earth System Perspektive*. W. H. Freeman and Company (1993)
- [36]Grosch ; Schmidt: Entwicklung eines Verfahrens zur Vorhersage von Sommersmog unter Verwendung von Immissionsmessungen / Umweltbundesamt, Luftreinhalteplan. (1994) Förderkennzeichen 10402668. – Forschungsbericht
- [37]Hess, P. ; Brezowsky, H.: Katalog der Großwetterlagen Europas. Berichte Des Deutschen Wetterdienstes in der US Zone. Bd. 33: Deutscher Wetterdienst (1952)
- [38]Hubert, M.; Rousseeuw, P.J.: The Catline for Deep Regression. In: *Journal of Multivariate Analysis* (1998) 66 S. 270–296
- [39]Jacobsen, I.: Erfordernisse für eine operationelle Ozonprognose und gegenwärtiger Stand. *Promet* (2002) 1/2 S. 41–51
- [40]Klein, W.-H.: Objective Forecast of Surface Temperature from One to Three Days Advance. *Journal of Applied Meteorology* (1966) 5 S. 137–147

- [41]Lönnqvist, O.: Über die automatische Interpretation Von Vorhersagekarten. Zeitschrift für Meteorologie (1971) 22 S. 54–59
- [42]Poppe, D. ; Zimmermann, J.: Chemische Ozonbildung in der Planetarischen Grenzschicht. Promet (2000) 3/4 S. 90–96
- [43]Reimer, E. ; Langematz, U. ; Hollan, E. Trajektorienbestimmung zum Reaktorunfall in Tschernobyl. Beilage zur Berliner Wetterkarte 9/87 SO 2/87 vom 22.1.1987. (1987)
- [44]Reimer, E. ; Wiegand, G. ; Flemming, J.D. ; Dlabka, M. ; Enke, W. ; Berendorf, K. ; Weiß, W. ; Stern, R.: Erstellung einer Ozon-Kurzfristprognose für das Smogfrühwarnsystem / Umweltbundesamt. Förderkennzeichen 295 43 817. (2000) – Forschungsbericht
- [45]Rodhe, H.: Some Aspects of the Use of Air Trajectories for the Computation of Large-Scale Dispersion and Fallout Patterns. Adv. Geophys. (1974) 18B S. 95–109
- [46]Schlink, U.; Dorling, S.; Pelikan, G.; Cawley, G.; Junninen, H.; Greig, A.; Foxall, R.; Eben, K.; Chatterton, T.; Vondracek, J.; Richter, M.; Dostal, M.; Bertucco, L.; Kolehmainen, M.; Doyle, M.: A rigorous inter-comparison of groundlevel ozone predictions. Atmospheric Environment (2003) 37 S. 3237–3253
- [47]Seibert, P.: Convergence and Accuracy of Numerical Methods for Trajectory Calculations. Journal of Applied Meteorology (1993) 32 S. 558–566
- [48]Spichtinger, N. ; Winterhalter, W. ; Fabian, P.: Ozone and Grosswetterlagen: Analysis for the Munich Metropolitan Area. Environmental Science and Pollution Research (1996) 3 Nr. 3, S. 145–152
- [49]Stohl, A.; Scheifinger, H.: A weather pattern classification by trajectory clustering. Meteorologische Zeitschrift (1994) 6 S. 333–336
- [50]Taubenheim, J.: Statistische Auswertung geophysikalischer und meteorologischer Daten. Leipzig : Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G. (1969)

- [51] Tilmes, S. ; Brandt, J. ; Flato, F. ; Bergström, R. ; Flemming, J. ; Langner, J. ; Christensen, J. H. ; Frohn, L. M. ; Hov, O. ; Jacobsen, I. ; Reimer, E. ; Stern, R.; Zimmermann, J.: Comparison of Five Eulerian Air Pollution Forecasting Systems for the Summer of 1999 Using the German Ozone Monitoring Data. In: *Journal of Atmospheric Chemistry* (2002) 42 S. 91–121
- [52] Vogel, H.; Memmersheimer, M.; Reimer, E.; Winkler, P.; Fiedler, F.: Typischer zeitlicher Verlauf von Photosmog-Episoden. *Promet* (2000) 3/4 S. 112–119
- [53] Wilks, D.S.: *Statistical Methods in the Atmospheric Sciences*. Academic Press (1995)
- [54] Yi, J.; Prybutok, V. R.: A Neural Network Model Forcasting for Prediktion of Daily Maximum Ozone Concentration in an Industrialized Urban Area. *Environmental Pollution* (1996) 92 Nr. 3, S. 349–357