

AUSLEIH EXEMPLAR

Umweltforschungszentrum GmbH
Bibliothek
Permoserstraße 15
04318 Leipzig



UFZ-Bericht

UFZ-Bericht • UFZ-Bericht • UFZ-Bericht • UFZ-Bericht

Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH

Nr. 4/1994

Sektion

Expositions- und Epidemiologie

Modellierung und Kürzestfristvorhersage von Sommersmog-situationen

Abschlußbericht zum Forschungsprojekt

Prognose extremer Umweltereignisse

Forschungsbericht FE 65201

gefördert durch das Staatsministerium für
Wissenschaft und Kunst des Freistaates Sachsen
(Förderkennzeichen 7541.82 - UFZ/9)

Band I

95

1100

F/E

Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ)



00033978

Nr. 4/1994

Sektion
Expositionsforschung und Epidemiologie

Modellierung und Kürzestfristvorhersage von Sommersmogsituationen

Abschlußbericht zum Forschungsprojekt
Prognose extremer Umweltereignisse

Forschungsbericht FE 65201

gefördert durch das Staatsministerium für
Wissenschaft und Kunst des Freistaates Sachsen
(Förderkennzeichen 7541.82 - UFZ/9)

Band I

Abschlußbericht
Band I

**Modellierung und Kurzestfristvorhersage
von Sommersmogsituationen**

Forschungsprojekt:

Prognose extremer Umweltereignisse

durchführende Institution:

UFZ-Umweltforschungszentrum
Leipzig-Halle GmbH
Sektion Expositionsforschung und
Epidemiologie

Uwe Schlink
Matthias Richter
Olf Herbarth

Verwaltungsbegleitung:

Staatsministerium für Wissenschaft und
Kunst des Freistaates Sachsen

Dr. Gerd Uhlmann

gefördert durch das Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst des Freistaates Sachsen

Inhalt

	Seite
Inhalt	1
Einleitung	3
<u>1. Grundlagen</u>	5
1.1. Entstehung des Photosmogs	6
1.2. Darstellung der durch Photosmog hervorgerufenen Expositionssituationen	10
1.3. Medizinischer Hintergrund	18
1.4. Administrative Erfordernisse	22
1.5. Grundlagen zu Prognosemodellen	25
 <u>2. Meßdaten</u>	28
2.1. Meßdatengewinnung	29
2.2. Box-Cox-Transformation	37
2.3. Fourieranalyse	45
2.4. Autokorrelationsanalyse	66
 <u>3. Zeitreihenmodellierung</u>	70
3.1. Stochastische Modelle	71
3.2. ARIMA-Modelle	73
3.3. Komponentenmodell	79
3.4. Zustandsraummodelle	84
 <u>4. Trendextrapolation</u>	87
4.1. Inter- und Extrapolationsverhalten beim Kalman-Filter	88
4.2. Trendfunktion	94
4.3. Phasenraumbild	96
4.4. Lokale harmonische Approximation	101
4.5. Parameterschätzung	103
4.6. Modifizierte Trendextrapolation	108

	Seite
<u>5. Prediktoren</u>	110
5.1. Was kann von einem Prognosealgorithmus erwartet werden?	111
5.2. Analyse der gemessenen Zeitreihen	114
5.3. Schlußfolgerungen	119
5.4. Definition des Prediktionsproblems	124
5.5. Faktische Prediktoren	130
5.6. Prognostizierter Prediktor	142
 <u>6. Diskussion</u>	 146
6.1. Fehlerquellen und Grenzen der univariaten Trendextrapolation	147
6.2. Ziel der Immissionsprognose: Ein Warnsystem	154
 Schlußbemerkungen	 155
 Literaturverzeichnis	 158
 <u>Anhänge</u>	

Einleitung

In alten Kurprospekten wurde die "gesunde ozonreiche" Luft der Umgebungswälder angepriesen. Der äußerst reaktionsfreudige und deshalb sehr instabile Spurenstoff der Atmosphäre, das Ozon, ist in den letzten Jahren jedoch zunehmend in die Diskussion gekommen.

Einerseits spielt das Ozon in der Stratosphäre die Rolle eines Schutzschildes gegen die lebensbedrohende energiereiche Komponente der solaren Strahlung. Im Zusammenhang damit wird die Ausweitung des sogenannten Ozonlochs intensiv untersucht und diskutiert.

Andererseits ist das Ozon auch in der bodennahen Troposphäre für die Gesundheit des Menschen von Bedeutung. Aufgrund seiner Reaktivität wirkt es in sehr geringen Dosen reinigend und beseitigt z.B. in Innenräumen schlechte Gerüche. Jedoch mindestens ab Konzentrationen von $360 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (1-Stunden-Mittel) wirkt es toxisch. Solch hohe Ozonkonzentrationen entstehen in der Troposphäre beispielsweise durch den Ozoneintrag aus der Stratosphäre oder auch durch elektrische Entladungen in der Atmosphäre. 1954 schätzte VASSY (1954) 10fach höhere Ozondichten während eines Gewitters ab, als sie gewöhnlich in der Troposphäre vorzufinden sind.

Mehr als die Hälfte des troposphärischen Ozons entsteht jedoch aus einer natürlichen photochemischen Reaktion, die zunehmend anthropogen beeinflusst wird. Obwohl sich die Photochemie als außerordentlich komplex erwiesen hat, so daß sie einer verbalen Beschreibung nur unvollkommen zugänglich ist und viele Einzelprozesse noch einer Aufklärung bedürfen, lassen sich doch die wesentlichen Zusammenhänge erkennen. Eine zentrale Stellung nimmt das NO_x ein. Die Hauptquellen von NO_x stellen Verbrennungsprozesse verschiedenster Art dar. Vorrangig sind Explosionsmotoren, also Emissionen des KFZ-Verkehrs, Großkesselanlagen, aber auch Waldbrände zu nennen. Die antropogene Belastung durch Stickstoffoxide erfolgt gewöhnlich durch NO und beschränkt sich auf die planetare Grenzschicht der Atmosphäre, wobei im wesentlichen urbane Gebiete betroffen sind.

Hier haben Sommersmogsituationen in den letzten Jahren verstärkt an Bedeutung gewonnen. Wie auch im Fall von Wintersmog können solche Situationen während Inversionswetterlagen besonders stark ausgeprägt sein. In Verbindung mit intensiver Sonneneinstrahlung kommt es zur Bildung von Photo- oder Sommersmog, der durch eine erhöhte Oxydantienkonzentration, z.B. Ozon, gekennzeichnet ist. Erstmals wurde eine solche Situation in Los Angeles beobachtet, weshalb dieser Smogtyp auch die Bezeichnung Los Angeles-Smog erhielt, im Unterschied zum Wintersmog oder London-Smog.

Lange Zeit wurde davon ausgegangen, daß das Problem des photochemischen Smogs nur südliche Breiten betrifft. Zahlreiche Messungen belegen jedoch, daß auch in den mittleren und höheren Breiten die Strahlungsenergie ausreicht, um bei Vorhandensein von Sommersmog bedingenden Primärprodukten, wie Stickoxiden und Kohlenwasserstoffen und entsprechenden meteorologischen Bedingungen, die Bildung von Photooxydantien zu ermöglichen.

Es ist also auch in unseren Breiten mit Smogsituationen vom Los Angeles - Typ zu rechnen. Die den Smog kennzeichnenden Komponenten sind von z. T. erheblicher gesundheitlicher Relevanz. Daher sollten geeignete Schutzmöglichkeiten bestehen, die im Sinne der Prävention gesundheitliche Gefährdungen verhindern.

Zu diesen zählen:

- Die Verminderung der Konzentration von Oxydantien oder deren Vorläuferprodukte.
- Die Vermeidung des Kontaktes mit der beladenen Atmosphäre

Maßnahmen zur Reduzierung sind schwierig und unter den gegebenen Randbedingungen, wie Individualverkehr mit z. B. Verkehrsleitsystemen, auch nur in geringem Umfang durchsetzbar. Um die Gesundheit zu schützen, bleibt die Möglichkeit, Risikogruppen rechtzeitig über zu erwartende Sommersmogsituationen in Kenntnis zu setzen.

1. Grundlagen

1.1. Entstehung des Photosmogs

- Entstehung und Herkunft der Bestandteile des photochemischen Smogs -

Eine wesentliche Komponente des photochemischen Smogs ist das Ozon. Troposphärisches Ozon stammt nur zu einem kleinen Prozentsatz aus der Stratosphäre. Der größte Teil des im menschlichen Atmungsraum vorhandenen Ozons wird in diesem Raum selbst, das heißt in der Troposphäre, gebildet. Ozon ist also ein sekundärer Schadstoff. Eine wirksame Prophylaxe vor Sommersmog setzt das Wissen um seine Quellen, die atmosphärischen Umwandlungen, die Deposition, die Durchmischung und die Zirkulation voraus.

In der Grundsicht der Atmosphäre wird Ozon trocken deponiert ($2\text{O}_3 + \text{Wand} \rightarrow 3\text{O}_2 + \text{Wand}$), während die Stickstoffoxide vornehmlich nach Umwandlung in HNO_3 feucht deponiert werden. Die Ozondichte der urbanen Grundsicht wird wesentlich durch meteorologische Parameter beeinflusst, die zu markanten Episoden führen. Inversionsschichten oder Hochdruckwetterlagen können Schadstoffe bis zur Smogstufe ansammeln. In Stadtgebieten kommen die NO_x - Konzentrationen in die Größenordnung der Ozonkonzentration.

Zur Illustration der Konzentrationsverhältnisse sind in Abb. 1-1 bis 1-3 die an der Station Dresden-Postplatz 1993 gemessenen Jahresverläufe von O_3 , NO und NO_2 aufgezeichnet.

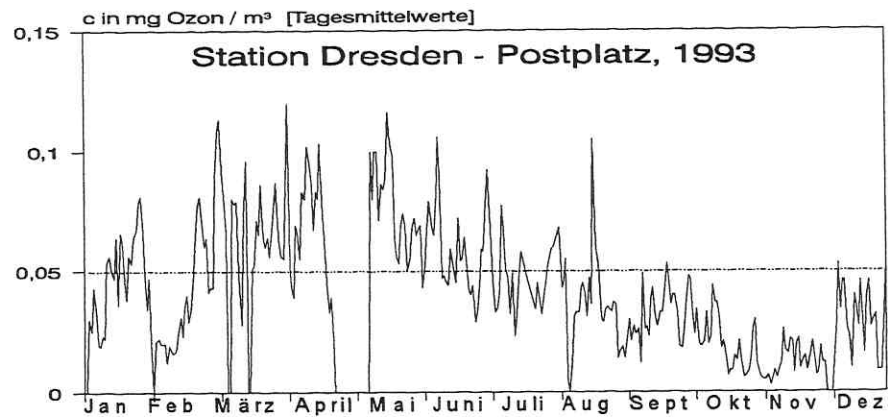


Abb. 1-1: Verlauf der Ozonkonzentration an der Meßstelle Dresden-Postplatz 1993



Abb. 1-2: Verlauf der NO-Konzentration an der Meßstelle Dresden-Postplatz 1993

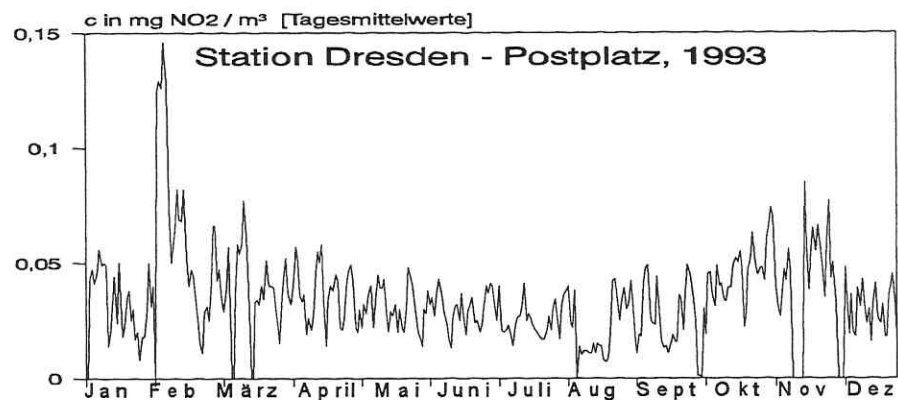


Abb. 1-3: Verlauf der NO₂ - Konzentration an der Meßstelle Dresden-Postplatz 1993

Die Reaktionsabläufe bei der Photosmogentstehung sind sehr komplex und stark von den Bedingungen, die üblicherweise chemische Reaktionen beeinflussen, abhängig. Zu solchen beeinflussenden Faktoren gehört die Energiebereitstellung, z. B. in Form von Strahlungs- bzw. Wärmeenergie. Bezogen auf die Troposphäre bedeutet dies, daß die zu erwartenden Reaktionen von der Tages- und Jahreszeit abhängig sind. Zusammengefaßt lassen sich die Reaktionen wie folgt nach FELLEBERG (1992) darstellen.



Bemerkung:

NO₂ ist nachts stabil und wird unter dem Einfluß von Sonnenlicht in NO und reaktiven Sauerstoff gespalten. Die Reaktion 2 verläuft nur unter der Anwesenheit eines Stoßpartners.

Im Regelfall stellt sich ein Gleichgewicht zwischen Ozon und den Ausgangsprodukten ein, so daß eine Anreicherung von Ozon nahezu ausgeschlossen ist. Dieses Gleichgewicht, der sogenannte photostationäre Zustand (PARLAR et al. (1991)), setzt jedoch das Vorhandensein von NO voraus.

Bemerkung:

Angemerkt sei in diesem Zusammenhang noch das Problem der Entstehung der Peroxyradikale, da diese Substanzklasse wie auch Ozon und Stickoxide erhebliche gesundheitliche Bedeutung besitzt. Peroxyradikale entstehen dann, wenn aus Kraftfahrzeugabgasen stammende Alkane und Alkene zur Bildung von organischen Radikalen führen, die dann ihrerseits mit Luftsauerstoff zu Peroxyradikalen reagieren. Das Peroxyacetylnitrat ($\text{CH}_3\text{COO}_2\text{NO}_2$) ist der bekannteste Vertreter dieser Radikalgruppe.

Neben diesen an Reaktionspartner geknüpften Voraussetzungen spielen die Reaktionsbedingungen eine dominierende Rolle. Die Radikalbildung und damit auch die Ozonbildung ist energieabhängig. Das heißt, parallel zur Strahlungsintensität der Sonne im Tages- und im Jahresgang erfolgt eine davon abhängige Ozonbildung bzw. -vernichtung. Das Verhältnis von Bildung zu Zerstörung hängt wesentlich von der Entfernung vom Primärproduktemittenten (NO) ab. Daraus ergibt sich ein entfernungsabhängiges Verhältnis NO zu NO_2 zu O_3 .

Aus diesem wiederum folgt, daß abhängig vom Vorhandensein entsprechender Reaktionspartner und -bedingungen vollkommen unterschiedliche räumliche und zeitliche Belastungssituationen, ausgehend vom Emissionsereignis und -ort, entstehen können. Die Darstellung dieser Sachverhalte zeigt, daß stets eine Reihe von Voraussetzungen insbesondere in Form der Existenz möglicher Reaktionspartner und -bedingungen gegeben sein muß, um photochemischen Smog zu bilden.

1.2. Darstellung der durch Photosmog hervorgerufenen Expositionssituationen

In den Abbn. 1-1, 1-4, 1-7, 1-10 sind typische Jahresgänge des Ozons an verschiedenen Meßstationen dargestellt. Dabei wurde die Belastung durch den Tagesmittelwert der Ozonkonzentration charakterisiert.

Um die Höhe der Belastung zu beurteilen, ist es erforderlich, einen Richtwert heranzuziehen. In Tab. 1-1 sind die in der BImSchVO und der VDI 2310 genannten Schwellenwerte für die Ozonkonzentration in der Luft aufgeführt. Sie unterscheiden sich hinsichtlich ihrer Ziel- und Zwecksetzung und der bei der Messung zugrunde gelegten Mittelungszeit. Letzteres stellt ein ernsthaftes Problem für die Vergleichbarkeit von Schwellenwerten dar. Von LARSEN et al. (1991) wurde eine empirisch gefundene, näherungsweise gültige Beziehung zwischen der Mittelungszeit τ und der während τ gemessenen Konzentration c_τ angegeben:

$$\tau \cdot c_\tau^{1,32} = \text{const.}$$

Diese Beziehung erlaubt die Umrechnung der Schwellenwerte. Die Ergebnisse sind in Tab. 1-1 in Kleindruck angegeben. Wenn diese Übertragung einer Schwelle auf eine andere Mittelungszeit auch sehr ungenau ist, so ergibt sich doch für jede Spalte die gleiche Rangordnung der Schwellenwerte. Die zuerst angeführte Schwelle ist am "weichsten", die letzte in der Tabelle die "härteste".

Für das 24-Stunden-Mittel ist zum Schutz der menschlichen Gesundheit somit eine Schwelle von ca. 50 µg Ozon / m³ anzusetzen (entspricht 110 µg / m³ beim 8-Stunden-Mittel).

Tabelle 1-1: Schwellenwerte der Ozonbelastung in µg/m³ für verschiedene Mittelungszeiten (Fettdruck) und deren Umrechnung (Kleindruck).

	0,5 Std.	1 Std.	8 Std.	24 Std.
Schutz der menschlichen Gesundheit	900	530	110	48
Schutz der Vegetation	338	200	41	18
Schutz der Vegetation	1220	722	149	65
Unterrichtung der Bevölkerung	304	180	37	16
Auslösung des Warnsystems	608	360	74	32
MIK-Wert nach VDI 2310	120	71	15	6

Diese Schwelle läßt in den Abb. die Zeiten kritischer Belastung erkennen. Auffällig ist dabei die erhöhte Ozonimmission in den Monaten April bis August. Bei der Station mit der größten Verkehrsbelastung, Leipzig-Hbf., ist der Jahresgang weniger ausgeprägt.

Dagegen steigt bei den Stationen UFZ-Leipzig, Pirna und Fichtelberg, deren Abstand von den Verkehrswegen größer ist, die Ozonkonzentration im Sommer am höchsten. Diese Effekte sind durch das bereits eingangs erläuterte Zusammenspiel von O₃, NO, und NO₂ unter dem Einfluß der Strahlung bedingt.

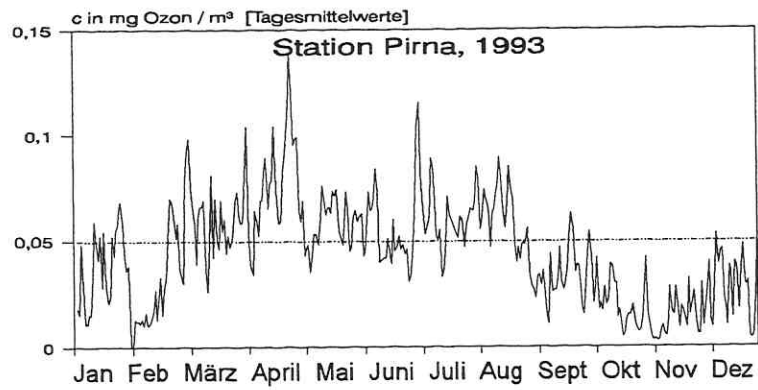


Abb. 1-4: Verlauf der Ozonkonzentration an der Meßstelle Pirna 1993

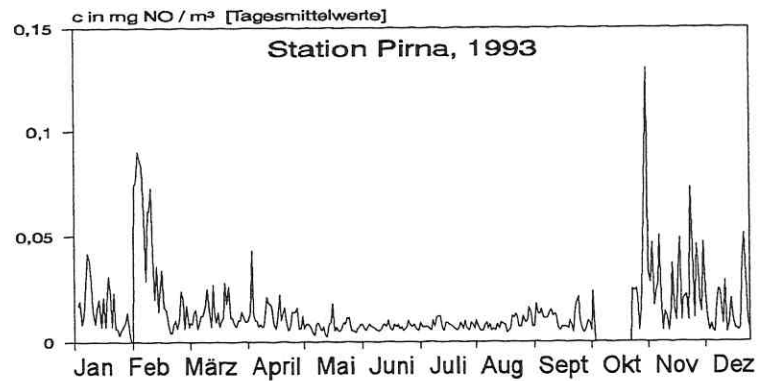


Abb. 1-5: Verlauf der NO-Konzentration an der Meßstelle Pirna 1993

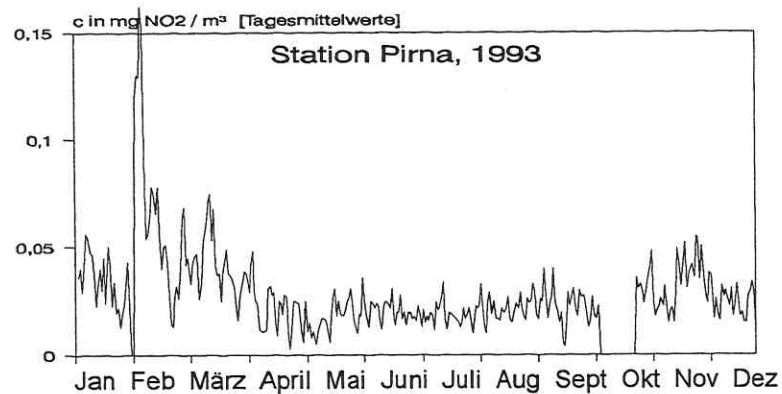


Abb. 1-6: Verlauf der NO₂-Konzentration an der Meßstelle Pirna 1993

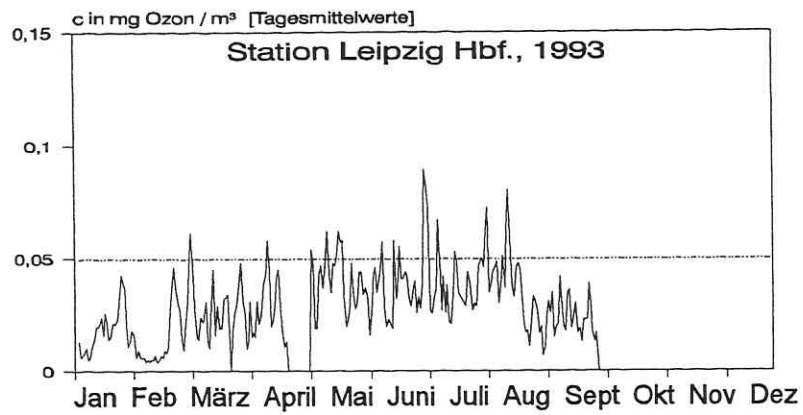


Abb. 1-7: Verlauf der Ozonkonzentration an der Meßstelle Leipzig-Hbf. 1993

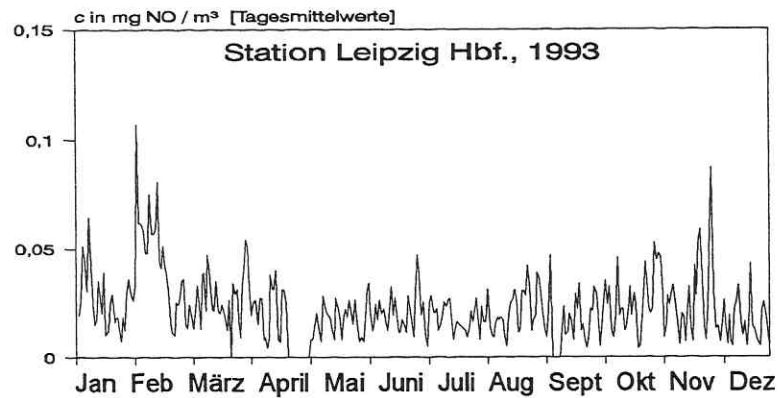


Abb. 1-8: Verlauf der NO-Konzentration an der Meßstelle Leipzig-Hbf. 1993

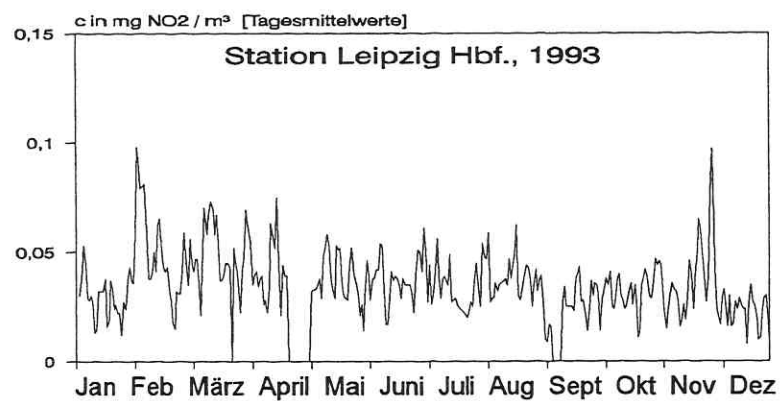


Abb. 1-9: Verlauf der NO₂-Konzentration an der Meßstelle Leipzig-Hbf. 1993

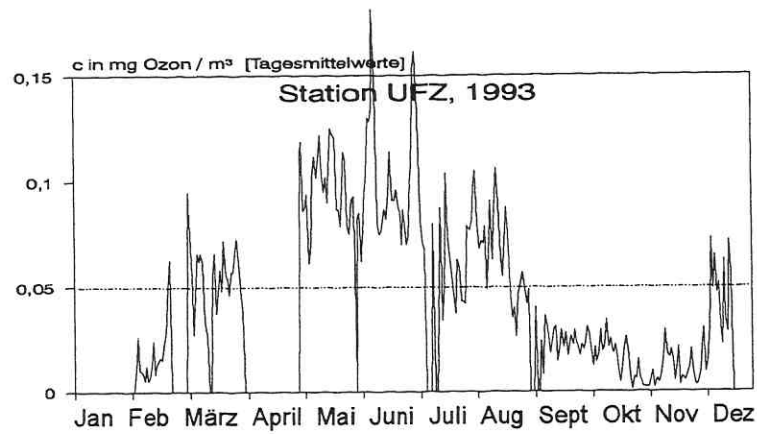


Abb. 1-10: Verlauf der Ozonkonzentration an der Meßstelle UFZ-Leipzig 1993

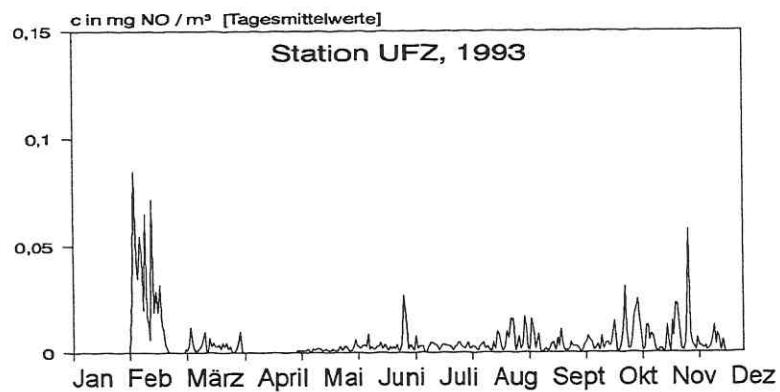


Abb. 1-11: Verlauf der NO-Konzentration an der Meßstelle UFZ-Leipzig 1993

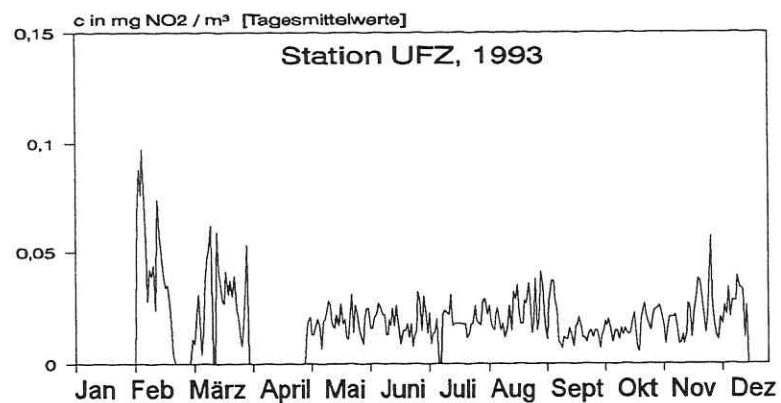


Abb. 1-12: Verlauf der NO₂-Konzentration an der Meßstelle UFZ-Leipzig 1993

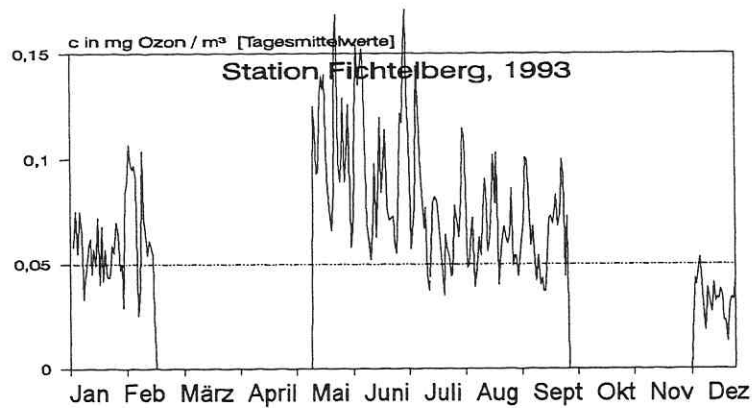


Abb. 1-13: Verlauf der Ozonkonzentration an der Meßstelle Fichtelberg 1993

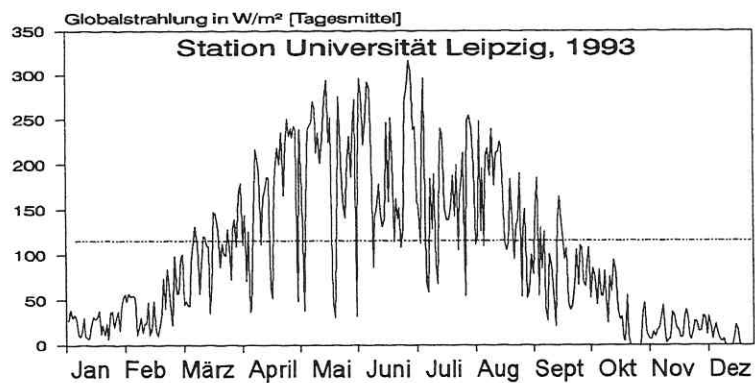


Abb. 1-14: Jahresverlauf (Tagesmittelwerte) der Globalstrahlung an der Station Universität-Leipzig 1993 (aus MÜLLER (1994))

Auffällig ist die im Februar 1993 vergleichsweise niedrige Ozonkonzentration bei andererseits erhöhten Niveaus der NO- und der NO₂ - Konzentration, die besonders an den verkehrsbeeinflussten Stationen registrierbar war. Sie läßt sich durch die häufiger auftretenden Inversionswetterlagen in diesem Monat erklären. Bei einer Inversion ist der vertikale Austausch stark eingeschränkt, so daß es zu einer Anreicherung der emittierten Schadstoffe in den bodennahen Schichten kommt.

Das sehr reaktive Ozon wird von den somit in der Troposphäre konzentrierter vorliegenden Schadgasen, insbesondere dem NO der Fahrzeugabgase zersetzt (vgl. Abb. 1-8). Die photochemische Neubildung von Ozon ist dagegen wegen der relativ schwachen Sonneneinstrahlung im Februar (vgl. Abb. 1-7) weniger ausgeprägt, als im Sommer.

An der Station Fichtelberg bleibt aufgrund der Abwesenheit von Verkehrsemissionen das Niveau der Ozonkonzentration erhalten. Die These vom Vorliegen eingeschränkter Austauschbedingungen im Februar 1993 wird auch durch den Jahresverlauf der SO₂ - Konzentration (Abb. 1-15) gestützt, die sich zu dieser Zeit ebenfalls stark anreichert und den MIK-Wert von 0,3 mg SO₂ / m³ überschreitet.

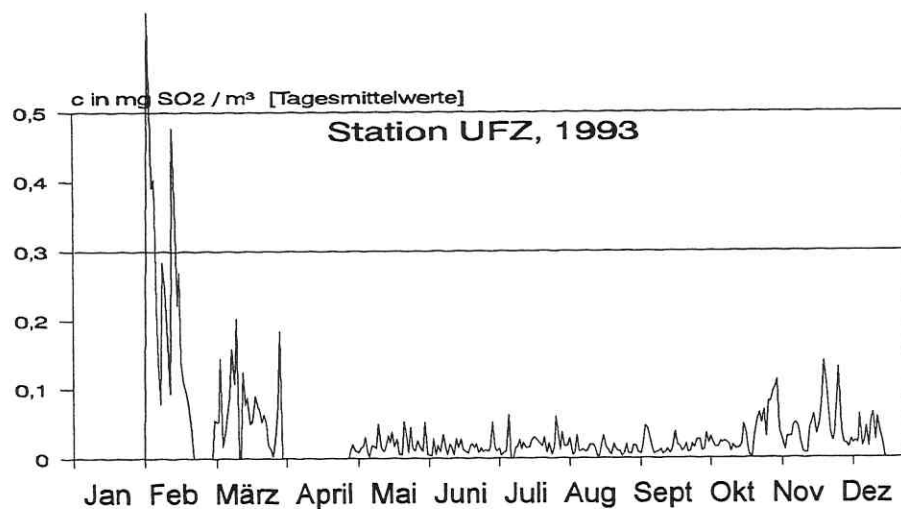


Abb. 1-15: Verlauf der SO₂-Konzentration an der Meßstelle UFZ-Leipzig 1993

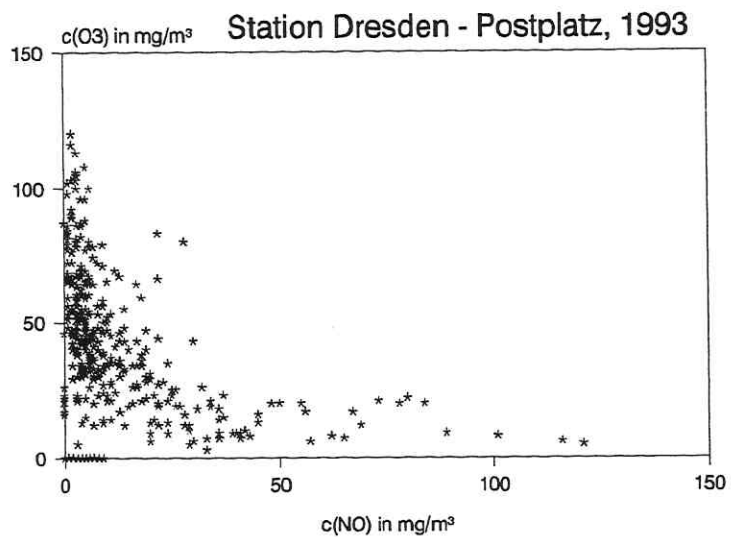


Abb. 1-16: Zusammenhang zwischen den Tagesmittelwerten der NO- und der Ozonkonzentration an der Station Dresden-Postplatz 1993

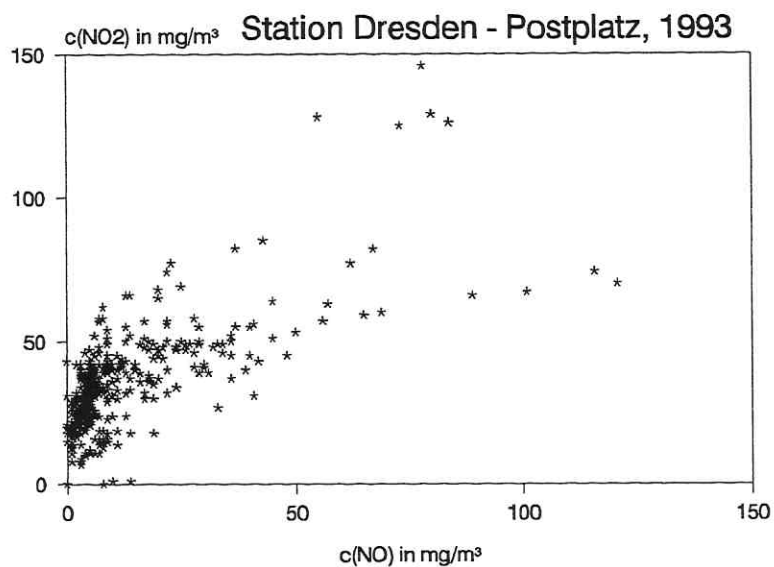


Abb. 1-17: Zusammenhang zwischen den Tagesmittelwerten der NO- und der NO_2 -Konzentration an der Station Dresden-Postplatz 1993

1.3. Medizinischer Hintergrund

Die Smogverordnung, die es zur Zeit nur zu Fragen des Wintersmogs gibt, zielt darauf ab, Risiken gesundheitlicher Beeinflussungen zu minimieren. Die inzwischen diskutierten Schwellenwerte für Sommersmog verfolgen die gleiche Zielsetzung. Die Intensität einer möglichen Sommersmogsituation wird zum Teil an der für Sommersmog typischen Sekundärkomponente Ozon gemessen. Da für das entwickelte Prognosemodell die Frage der Basiswerte, d. h. ab wann die Stellung einer Prognose sinnvoll, und der Schwellenwerte von Bedeutung ist, ist es notwendig, mögliche Schwellenwerte an dieser Stelle zu diskutieren. Auf die medizinischen Hintergründe wird dabei nicht im einzelnen eingegangen.

Zunächst ist festzuhalten, daß Ozon Lungenödeme verursachen und die Lungenclearance beeinflussen kann. Letzteres verläuft über eine Störung des metachronen Cilienschlages. Ab $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$ sind gesundheitliche Beeinträchtigungen bei Risikopersonen mit Herz-Kreislaferkrankungen, akuten und chronischen Atemwegserkrankungen zu erwarten. Zu beobachten sind Befindlichkeitsstörungen, die ihre Ursache in Schleimhautveränderungen, Tränenreiz und Verengung der Atemwege haben. Eine verminderte Infektabwehr infolge einer Immunsuppression wird angenommen.

Tabelle 1-2: Wirkungsspektrum des Ozons auf den Menschen

> 40 µg/m³	= Geruchsschwelle
> 200 µg/m³	= Subjektive Beeinträchtigung (Tränen-, Atemreiz, Kopfschmerz)
> 160 - 300 µg/m³	= Veränderung der Lungenfunktion (bei Schulkindern und Erwachsenen) Zunahme der Atemminutenvolumen, Atemwiderstand (Verengung der Atemwege)
> 240 - 300 µg/m³	= Zunahme der Häufigkeit von Asthmaanfällen
> 240 - 740 µg/m³	= Reduzierung der physischen Leistungsfähigkeit (bei 1 - 3stündiger Exposition)
> 800 µg/m³	= Entzündliche Gewebsreaktionen (bei 2stündiger Exposition)
2000 µg/m³	= Bewußtlosigkeit, Lungenbluten, Lungenödem

Welche Schwellenwerte für Ozon sind nun akzeptiert?

In der Verordnung über die Immissionswerte - 22. BImSchV - vom 26. 10. 93 ist bezüglich Ozon folgendes geregelt:

§ 1a Schwellenwerte Ozon

Die im Anhang I der Richtlinie 92/72/EWG des Rates der Europäischen Gemeinschaften über die Luftverschmutzung durch Ozon vom 21. September 1992 (ABl. EG Nr. L, 297 S. 1) genannten Schwellenwerte für die Ozonkonzentration in der Luft bedeuten im Sinne dieser Verordnung:

1. Der Schwellenwert für den Gesundheitsschutz, der zum Schutz der menschlichen Gesundheit im Fall länger andauernder Verschmutzungsfälle nicht überschritten werden sollte, beträgt $110 \mu\text{g}/\text{m}^3$ während acht Stunden. Der Mittelwert über acht Stunden ist gleitend ohne Überlappung, er wird viermal täglich (0.00 - 9.00 Uhr, 8.00 - 17.00 Uhr, 16.00 - 1.00 Uhr, 12.00 - 21.00 Uhr) ermittelt.
2. Die Schwellenwerte für den Schutz der Vegetation, bei deren Überschreitung die Vegetation beeinträchtigt werden kann, betragen $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$ als Mittelwert während einer Stunde und $65 \mu\text{g}/\text{m}^3$ als Mittelwert während 24 Stunden.
3. Der Schwellenwert für die Unterrichtung der Bevölkerung, bei dessen Überschreitung es bei besonders empfindlichen Gruppen der Bevölkerung im Falle einer kurzen Exposition begrenzte und vorübergehende gesundheitliche Auswirkungen gibt, beträgt $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ als Mittelwert während einer Stunde.
4. Der Schwellenwert für die Auslösung des Warnsystems, bei dessen Überschreiten im Falle einer kurzen Exposition eine Gefahr für die menschliche Gesundheit besteht, beträgt $360 \mu\text{g}/\text{m}^3$ als Mittelwert während einer Stunde.

Allgemein wird angenommen, daß bei Werten unterhalb von $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$ Luft keine nachteiligen Wirkungen beim Menschen entstehen. Bei Erreichen oder Überschreiten eines Wertes von $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ Luft im 1-Stunden-Mittel sollen der Bevölkerung Verhaltensempfehlungen gegeben werden. Ab $360 \mu\text{g}/\text{m}^3$ Luft wird dann kategorisch von einer lang andauernden und anstrengenden Tätigkeit im Freien abgeraten.

Die WHO empfiehlt in ihren "Air Quality Guidelines for Europe" (1987) ein 1-Stunden-Mittel im Bereich von 150 - 200 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (USA 235 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ bei einer absoluten Überschreitungshäufigkeit von maximal einem Mal im Jahr). Zusätzlich wird ein 8-Stunden-Schwellenwert von 100 - 120 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ diskutiert, um potentielle, negative akute und chronische Effekte zu verhindern. Das heißt, daß bei Einhaltung des o. g. 1-Stunden-Mittels von 180 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ der angestrebte Schutz noch nicht erreicht wird, sondern erst auch bei Einhaltung des zuletzt genannten Zusatzkriteriums.

Diskutiert wird die Einführung eines Ozon-Smog-Schwellenwertes im 1h-Mittel (BECK & SCHMIDT (1992)) von 70 - 80 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ als Warngrenze von 120 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ als Innenraumwert, der dem MIK-Wert entspricht, und als MIK-Wert auch für Risikopersonen negative Einflüsse ausschließt.

Der Vollständigkeit halber sei der MAK-Wert von 200 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (8stündige Exposition) bei 40 Stunden Wochenarbeitszeit genannt (BMA).

Der VDI schlägt als Jahresmittelwert und als 24-Stunden-Mittelwert 50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ und als 30-Minuten-Grenzwert 150 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ vor.

1.4. Administrative Erfordernisse

Unter der Regie der Länder werden gemäß der TA-Luft Messungen zur Kontrolle der Außenluftbelastung in sog. Untersuchungsgebieten bzw. smoggefährdeten Gebieten (im Sinne von wintersmoggefährdet) durchgeführt. Entsprechend den Regelungen in den Verwaltungsvorschriften (VwV) sind an diesen Meßstationen u. a. auch Ozon und Stickoxid (Stickstoffdioxid) zu erfassen. Die zeitliche Auflösung der Messung beträgt für alle gasförmigen Komponenten 30 min. Die Messungen selbst erfolgen mit automatisch arbeitenden Meßgeräten. Auch ohne derzeit gültige Mustersmogverordnung für Sommersmog sind bei Erreichen der beiden genannten Schwellenwerte von $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ im 1-Stunden- bzw. $110 \mu\text{g}/\text{m}^3$ im 8-Stunden-Mittel entsprechende Informationen an die Bevölkerung auszugeben.

Aus den dargelegten Sachverhalten geht hervor, daß eine Meldung über die Belastung der Atmosphäre mit Ozon dann erfolgt, wenn der kritische Zustand erreicht ist.

Sind aber die $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ im 1-Stunden-Mittel erreicht, so kann es jedoch bei Risikopersonen bereits zu einer Veränderung der Lungenfunktion und zu sonstigen subjektiv beeinträchtigenden Reaktionen gekommen sein. Aus diesem Grund erscheint es notwendig, bereits vor Erreichen der kritischen Situation eine Information über die Eintrittswahrscheinlichkeit eines Sommersmogereignisses vorherzusagen. Das gibt Risikopersonen die Möglichkeit, ihr Verhalten auf die Situation abzustimmen. Dabei ist es zunächst unerheblich, wie der konkrete Konzentrationsverlauf in futura sein wird. Entscheidend ist, sowohl unter dem Blickwinkel der Prävention, d. h. des Schutzes der Gesundheit der Bevölkerung oder ausgewählter Risikogruppen, als auch unter dem Blickwinkel einzuleitender emissionsmindernder Vorkehrungen, folgende Fragen zu beantworten:

- a) Besteht eine überzufällig hohe Wahrscheinlichkeit, daß innerhalb der folgenden 12 Stunden ein medizinisch relevanter Schwellenwert erreicht oder überschritten wird. Sollte eine derartige überzufällig hohe Wahrscheinlichkeit vorausgesagt werden, so wäre es wünschenswert zu beantworten,
- b) wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, daß diese Überschreitung des medizinisch relevanten Schwellenwertes eine kritische Zeit andauert. Diese kritische Zeit wird durch die Expositions-Dosis-Wirkungs-Beziehung bestimmt.

Geht man davon aus, daß die in der 22. BImSchV aufgeführten Schwellenwerte der medizinischen Relevanz des Problems Rechnung tragen, so sind in Folge an einem Prognosealgorithmus verschiedene Randbedingungen aus administrativer Sicht geknüpft.

- a) Das Prognosemodell sollte ohne externe Inputs auskommen, d. h. ausschließlich auf den Immissionsdaten beruhen. Extern ermittelte Inputs führen zu Zeitkonstanten im Algorithmus, die die Prognosezeit in der Regel überschreiten.
- b) Die Zeitauflösung der durch die Landesämter kontinuierlich betriebenen Datenerhebung und -verdichtung beträgt 30 min. Daher sollte der Prognosealgorithmus auf den 30-Minuten-Mittelwerten basieren.

- c) Um die Zahl der Randparameter (Prediktoren) für einen Algorithmus so gering wie möglich zu halten, sollte das Modell universell, d. h. insbesondere weitgehend unabhängig vom Ort der Messung, einsetzbar sein. Das schließt nicht aus, daß die Prediktoren quantitativ differieren. Es bedeutet aber, daß solche Prediktoren extrahiert werden sollten, die allgemeingültig sind für verschiedene Regionalstrukturen.

1.5. Grundlagen zu Prognosemodellen

MODELLANSÄTZE				
Deterministisch			Statistisch	
PHYSIK	ADAPTION		ZEIT-REIHEN	KLASSIFIKATION
- Meteorologie	- meteorologische Typisierung		- Wiener	- Analogie
- Boxmodell			- ARIMA	- Cluster
- Ausbreitung			- Monte Carlo	- Diskriminanz

Wesentliche Voraussetzungen eines deterministischen Ansatzes ist die Kenntnis sehr vieler (möglichst aller) Einflußfaktoren, die auf das Immissionsgeschehen wirken. Daher sind ausschließlich auf physikalischer bzw. meteorologischer Basis beruhende Modelle hier einzuordnen. Die bekanntesten Modelle lassen sich unter dem Begriff Ausbreitungsmodell zusammenfassen. Im Regelfall werden diese zur Prognose der Schadstoffverteilung bei bekannter Emission und bekannten oder mit Sicherheit prognostizierten Ausbreitungsbedingungen eingesetzt. Wesentliche Einflußfaktoren sind hierbei neben der Emission die Windgeschwindigkeit, die Turbulenz, die Bewölkung, die Sonnenstrahlung, die Stabilitätsparameter der unteren Troposphäre. Man unterscheidet:

1. Das Gauß-Modell (SCHULTZ (1986); TA Luft (1993)), das unter vereinfachten orographischen Bedingungen eine Lösung der Diffusionsgleichung versucht,

2. das Lagrange-Modell (SCHULTZ (1986), BECKER (1985)), bei dem über eine Monte-Carlo-Simulation zum Weg der Moleküle die Schadstoffkonzentration errechnet wird,
3. das Trajektorienmodell (BECKER (1985)), mit dem insbesondere der zeitlichen Veränderung einer großräumigen Situation Rechnung getragen wird,
4. das Euler-Modell, das ebenfalls wie das Gauß-Modell von der Diffusionsgleichung ausgeht, aber weniger Vereinfachungen vornimmt, wodurch ein sehr hoher Rechenaufwand entsteht.

Gemeinsam ist diesen Modellansätzen, daß das Windfeld bekannt sein muß. Im Regelfall erhält man eine nur gering zeitaufgelöste Aussage über die zu erwartende Emissionssituation.

Aufgrund der Vielzahl der notwendigen Modell-Inputs erscheinen diese Modelle für die Prognose kurzfristig zu erwartender Immissionsänderungen nicht geeignet. Eine Ausnahme hierbei bilden sehr vereinfachte sog. Störfallmodelle, bei denen allerdings die Emission von einer ganz konkreten Quelle ausgeht und dann auch bekannt ist. Der Vorteil der Modelle liegt jedoch in einer flächenbezogenen Aussage zum Immissionszustand der Atmosphäre.

Wesentlich kritischer als die Kenntnis zu den meteorologischen Daten (faktisch oder prognostiziert) ist die vorausgesetzte Kenntnis der Emissionsdaten zu bewerten. Gerade für den Fall der Sommersmogssituation, deren Ursache im wesentlichen der Kraftfahrzeugverkehr ist, ist eine zeitabhängige und ortsbezogene Kenntnis zu den Quellen nahezu unmöglich.

Der statistische Modellansatz besteht allgemein in einer Reduktion des Problems auf eine auf statistischer Basis beruhende Extrapolation einer Zeitserie unter Beachtung von Ereigniseintrittswahrscheinlichkeiten in der Vergangenheit.

Der Idealfall liegt dann vor, wenn die Prognose ausschließlich auf den unmittelbar gemessenen Daten oder auf Informationen beruht, die die Zeitserie der unmittelbar gemessenen Daten enthält und die in entsprechend kurzer Zeit extrahiert werden können.

Die Kausalkette Emission, Transmission, Immission läuft im Endpunkt Immission aus. Das heißt, daß die gesamte Information der Kausalkette in den Immissionsdaten integral enthalten ist. Letztendlich bedeutet dies, daß auch alle Informationen über Emission, Meteorologie, Orographie oder urbane Struktureigenschaften in die Immissionsdaten einfließen. Dieser Sachverhalt ist Grundgedanke dafür, ein Modell aufzubauen, welches zunächst ausschließlich auf den genannten Immissionsdaten selbst beruht. Damit werden auch die an das Modell aus medizinischer und administrativer Sicht gestellten Forderungen, die in Pkt. 1.4. genannt sind, berücksichtigt.

Inwieweit gemischte Modellansätze als Verbindung von statistischen und deterministischen Ansätzen Güteverbesserungen in der Voraussage bringen, sofern überhaupt statistische Modellansätze geeignet sind, werden die Modellierungsversuche zeigen.

Die folgenden Punkte beinhalten die grundlegenden Forschungen zur Zeitreihenanalyse. Diese ist eine wesentliche Voraussetzung für eine Prognose, d.h. die Vorhersage zu erwartender Immissionskonzentrationen aus der Beobachtung der vorangegangenen Zeitreihe. Aus der Zeitreihenanalyse werden Aussagen zu evtl. anwendbaren stochastischen Modellen sowie zum daraus abzuleitenden Prognoseverfahren getroffen.

2. Meßdaten

2.1. Meßdatengewinnung

Die hier dokumentierten Untersuchungen erfolgten an Meßreihen aus Halbstundenmittelwerten der Konzentration von Ozon, Stickstoffmonoxid und Stickstoffdioxid. Diese Daten wurden mit Hilfe automatischer Meßstationen des Landesamtes für Umwelt und Geologie in Sachsen kontinuierlich registriert. Ihre Lage ist in Abb. 2-1 markiert worden. Tabelle 2-1 zeigt eine Liste der verfügbaren Maßdaten.

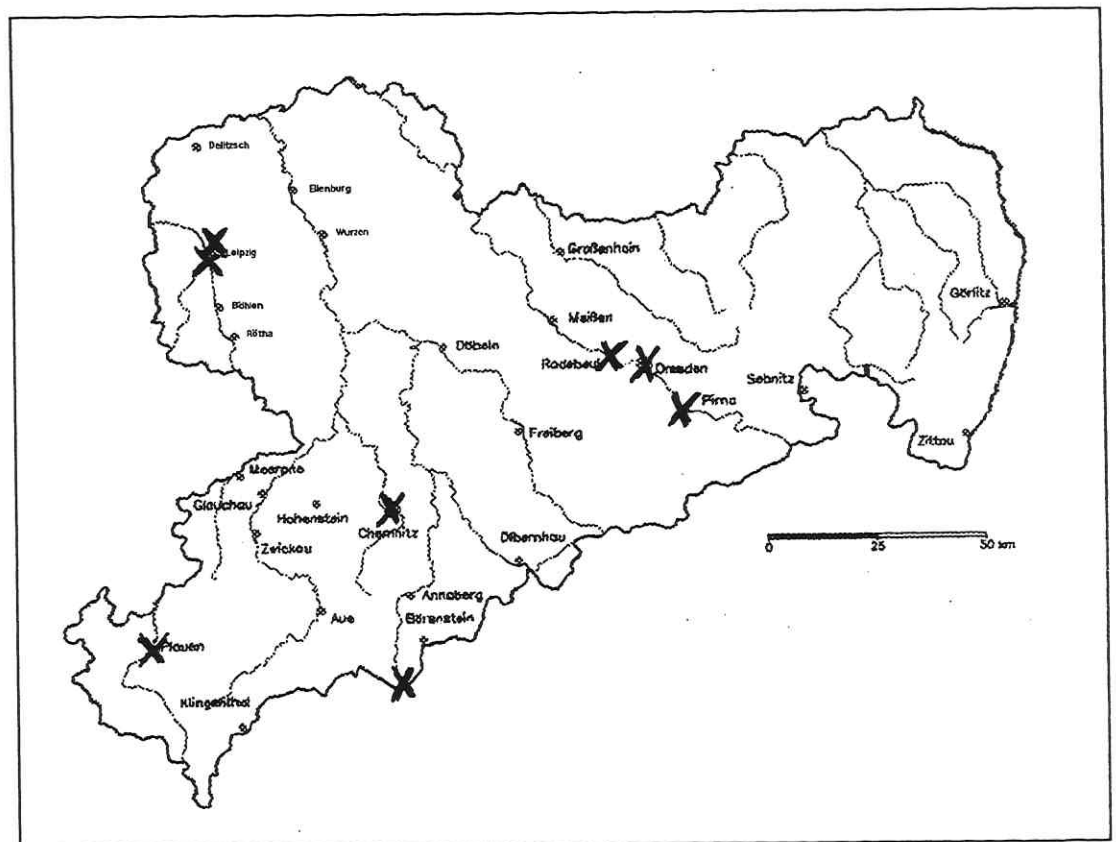


Abb. 2-1: Lage der Meßstationen für Ozon im Freistaat Sachsen

Tab. 2-1: Verfügbarkeit der Daten von Ozon, Stickstoffmon- und Stickstoffdioxid als Zeitreihen von 30-Minuten-Mittelwerten

Station	Nr.	Intervall
=====		
Gebiet Chemnitz:		
Chemnitz-Mitte	234330	01.92-06.94
Plauen	233008	04.93-06.94
Fichtelberg	230000	01.93-06.94
Gebiet Dresden:		
Dresden-Postplatz	190447	10.91-06.94
Wahnsdf.-Radebeul	190000	02.93-06.94
Zittau-Ost	255550	10.91-06.94
Pirna	245857	01.91-06.94
Gebiet Leipzig:		
UFZ-Haus 6	600000	02.93-05.94
Leipzig-Hbf	182123	10.91-06.94

Die Meßstationen repräsentieren einerseits stark vom Verkehr beeinflusste innerstädtische Regionen, wie z.B. in Leipzig-Hauptbahnhof. Andererseits liegen auch Daten von antropogen nur sehr schwach beeinflussten und belasteten ländlichen Gebieten vor. Als Beispiel sei die Station am Fichtelberg angeführt. Alle weiteren Standorte lassen sich zwischen diesen beiden Extrema einordnen. Damit ist es möglich, bei der Untersuchung der Meßreihen die Einflüsse der konkreten Standortbedingungen zu diskutieren.

In diesem Zusammenhang ist auch die Frage zu klären, ob ein Prognosealgorithmus generell gültig ist, oder auf bestimmte Stationen zugeschnitten sein muß.

Eine erhöhte Belastungssituation lag beispielsweise vom 25.6. bis 4.7.1993 vor. Da die in diesem Zeitabschnitt gemessene Konzentrationsreihe im weiteren sehr häufig zur Anwendung kommt, ist sie in Abb. 2-2 dargestellt und im Anhang F protokolliert worden. Zur leichteren Bezugnahme soll sie als OZON-Reihe bezeichnet werden.

Eine rein visuelle Einschätzung des Konzentrationsverlaufs läßt bereits seine wesentlichen Eigenschaften erkennen:

- Die O₃-Konzentration variiert in irregulärer Weise, was auf den Einfluß von turbulenten Luftbewegungen hindeutet. Dieses quasi zufällige Verhalten unterscheidet den Immissionsverlauf von streng deterministischen Vorgängen und macht die Anwendung stochastischer Modellierungsverfahren möglich und erforderlich.
- Man kann optisch einen mittleren Konzentrationsverlauf ausmachen. Dieser ist offenbar am 2. und 3.7. höher, als an den anderen Tagen. Die Möglichkeit, einen solchen statistisch stabilen Mittelwert zu finden, beweist, daß die Immissionsreihe jedoch nicht absolut irregulär und zufällig ist.
- Darüber hinaus variiert die Konzentration nicht beliebig, sondern nur über einen bestimmten Wertebereich. Greift man aus der Meßreihe Werte heraus, die zeitlich hinreichend weit auseinanderliegen, so daß keine Korrelation mehr zwischen ihnen besteht, dann kann man dieses Kollektiv unabhängiger Werte auf seine Häufigkeitsverteilung untersuchen und bekommt damit eine Schätzung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Meßwerte (vgl. SCHLINK (1990), (1993)). Es zeigt sich, daß Null eine natürliche und feste Grenze ist; negative Werte existieren nicht. Eine obere Schranke gibt es für die O₃-Konzentrationen ebenfalls: Sie können zwar beliebig, aber nicht unendlich groß werden.

Der Variations- oder Streubereich der Meßwerte verändert sich dabei im Laufe der Zeit. Beispielsweise sind der 2. und 3.7. auch durch eine vergrößerte Streubreite gekennzeichnet.

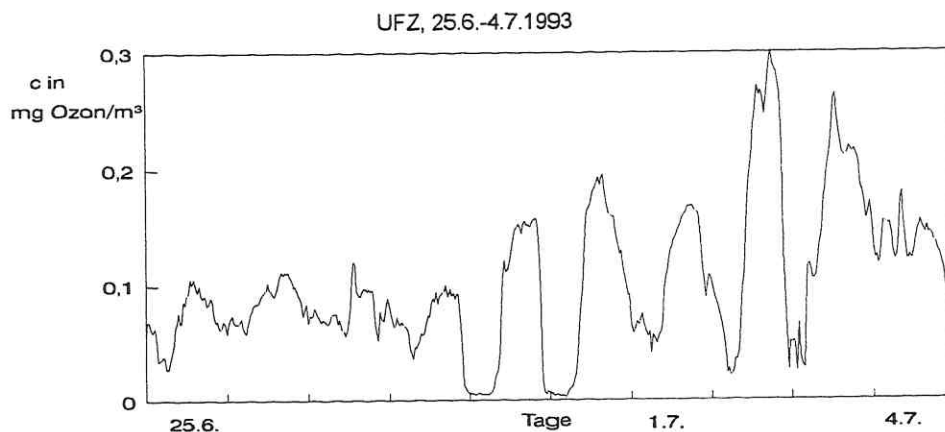


Abb. 2-2: Die Meßreihe OZON für UFZ-Leipzig während einer erhöhten Belastungssituation

- Die Variation der Immissionsreihe vollzieht sich in einem deutlich erkennbaren Rhythmus. Mittlere Tagesgänge des Bodenozone zeigen ein morgendliches Minimum und ein spätnachmittägliches Maximum, so daß sich ein Tageszyklus ergibt. Die Amplitude wächst drastisch an Sonnenscheintagen sowie in den Sommermonaten. Regentage sind durch einen sehr flachen Tagesgang gekennzeichnet. Auf die in den Immissionsreihen enthaltenen periodischen Strukturen wird im Abschnitt 2.3. noch detaillierter eingegangen.

Die in der Zeit vom 25.6. bis 4.7.93 parallel zum Ozon gemessenen NO- und NO₂-Konzentrationen sind in den Abbn. 2-3 und 2-4 aufgezeichnet.

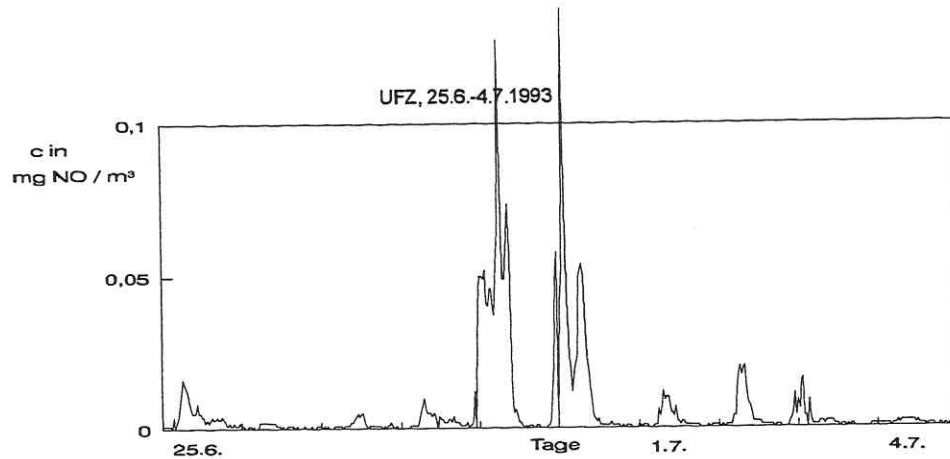


Abb. 2-3: Verlauf der NO-Konzentration an der Meßstelle UFZ-Leipzig vom 25.6.-4.7.93

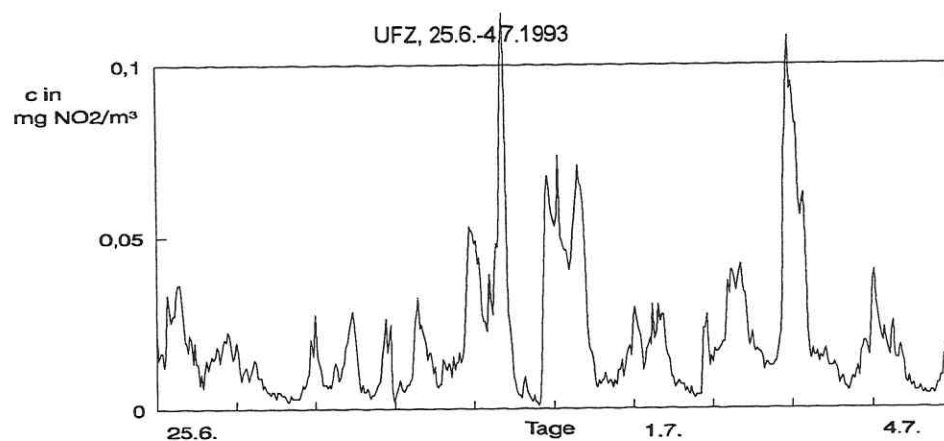


Abb. 2-4: Verlauf der NO₂-Konzentration an der Meßstelle UFZ-Leipzig vom 25.6.-4.7.93

Typische Tagesverläufe der Konzentration sind in den Abbn. 2-5...8 anhand der 3-Minuten-Mittelwerte aufgezeichnet. Charakteristisch für ein Tagesprofil in den Sommermonaten ist der mit der Sonneneinstrahlung verbundene Anstieg ab ca. 10 Uhr.

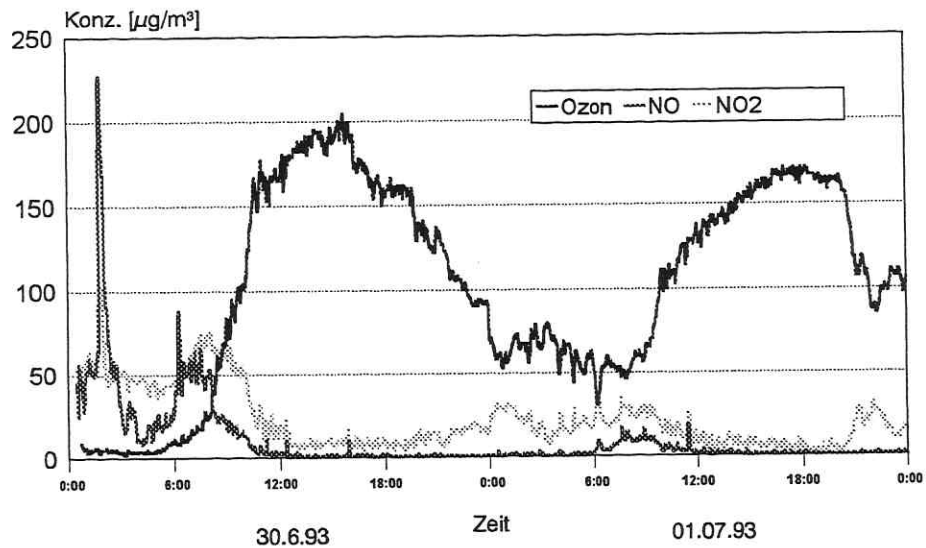


Abb. 2-5: Typische Tagesverläufe der Konzentration (3-Minuten-Mittelwerte) von O_3 , NO und NO_2 an der Meßstelle UFZ-Leipzig

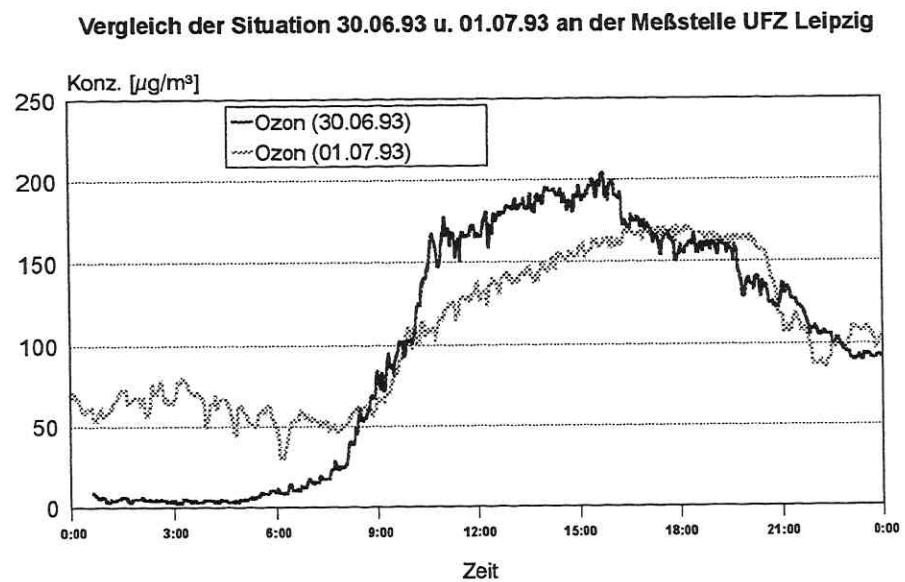


Abb. 2-6: Vergleich der Tagesverläufe (3-Minuten-Mittelwerte) von O_3 an der Meßstelle UFZ-Leipzig

Vergleich der Situation 30.06.93 u. 01.07.93 an der Meßstelle UFZ Leipzig

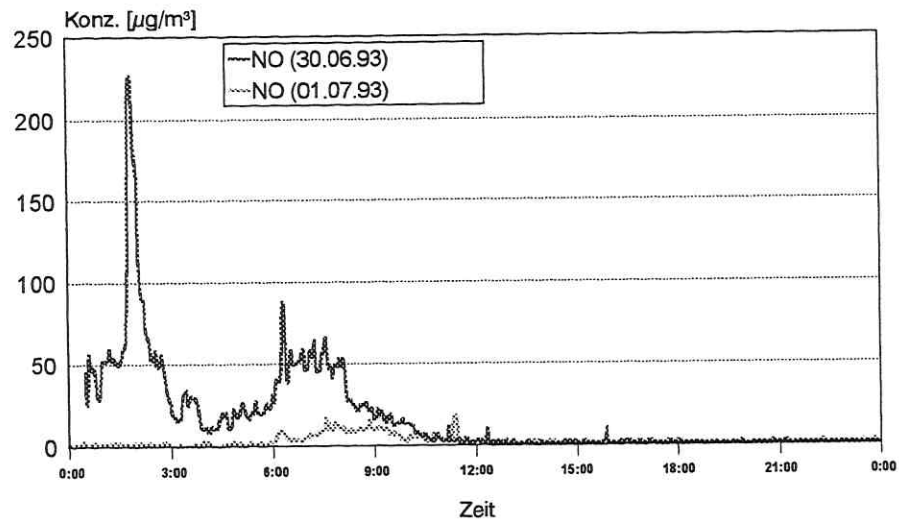


Abb. 2-7: Vergleich der Tagesverläufe (3-Minuten-Mittelwerte) von NO an der Meßstelle UFZ-Leipzig

Vergleich der Situation 30.06.93 u. 01.07.93 an der Meßstelle UFZ Leipzig

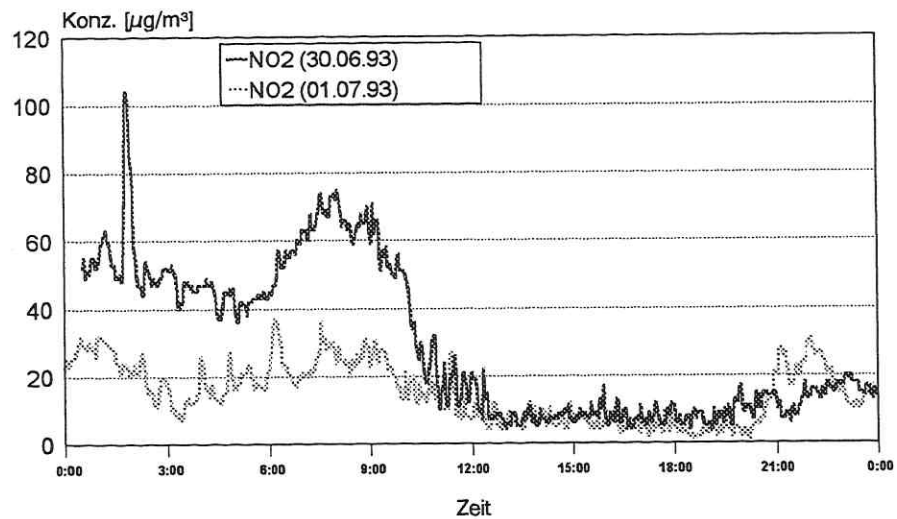


Abb. 2-8: Vergleich der Tagesverläufe (3-Minuten-Mittelwerte) von NO₂ an der Meßstelle UFZ-Leipzig

Bisher wurde ein visueller Eindruck von den Charakteristika der Immissionsreihen gewonnen. In den folgenden Abschnitten soll nun mit Hilfe des Periodogramms und der Autokorrelationsfunktion eine exakte Charakterisierung der Meßdaten erfolgen.

Eine Zeitreihenanalyse sollte jedoch an die wichtige Voraussetzung der Stationarität der Meßreihe gebunden sein.

Bei der statistischen Bearbeitung von Zeitreihen wird nämlich stets davon ausgegangen, daß es sich um Realisierungen stochastischer Prozesse handelt. Die für die Bearbeitung notwendigen theoretischen Beziehungen lassen sich im allgemeinen nur unter der Voraussetzung stationärer stochastischer Prozesse ableiten, so daß die Berechnung entsprechender statistischer Kenngrößen ausschließlich für stationäre Zeitreihen sinnvoll ist. Was man unter Stationarität versteht, ist im Anhang A (speziell Definition (A-5)) dargelegt. Bei der Zeitreihenmodellierung ist es in Spezialfällen möglich, auch instationäres Verhalten in das Modell einzubeziehen. Darauf soll jedoch später an den geeigneten Stellen eingegangen werden.

2.2. Box - Cox -Transformation

Im vorhergehenden Abschnitt wurde das Verhalten einer Immissionsreihe verbal charakterisiert. Dabei konnten ein mittlerer Konzentrationsverlauf und eine Streubreite zur Beschreibung verwendet werden. Da für beide statistischen Kenngrößen eine Zeitabhängigkeit zu erkennen war, handelt es sich um eine zeitabhängige Mittelwertfunktion m_t . Auch die Standardabweichung s_t ist eine **Zeitfunktion**, deren Argumente die diskreten Zeitpunkte $t = \dots, -1, 0, 1, 2, \dots$ sind.

Bemerkung (2-1): Über diese heuristische Definition soll hier nicht hinausgegangen werden. Eine exakte Formulierung müßte auf einem zugrundeliegenden stochastischen Prozeß aufbauen und viele Realisierungen v dieses Prozesses zu einem Ensemble zusammenfassen. m_t wäre dann das zu jedem Zeitpunkt gebildete Ensembledittel

$$m_t = \frac{1}{v} \sum_{\substack{\text{alle } v \text{ Realisierungen} \\ \text{des Ensembles}}} z_t$$

und s_t die dazugehörige Standardabweichung.

$$s_t = \sqrt{\frac{1}{v-1} \sum_{\substack{\text{alle } v \text{ Realisierungen} \\ \text{des Ensembles}}} (z_t - m_t)^2}$$

m_t und s_t sind Schätzungen für die Erwartungswertfunktion μ_t und die Varianzfunktion σ_t des stochastischen Prozesses. Das Ensembledittel ist sehr genau von der Mittelung über die Zeit bei der Betrachtung einer einzigen Realisierung (zeitliches Mittel) zu unterscheiden. □

Für die statistische Auswertung von Meßreihen muß im allgemeinen die Stationarität des zugrundeliegenden stochastischen Prozesses vorausgesetzt werden (zur Stationarität vgl. Anhang A). In den für die Praxis relevanten Fällen kann man sich jedoch mit schwacher Stationarität begnügen, was bedeutet, daß der Erwartungswert und die Varianz des stochastischen Prozesses zeitunabhängig sind, die Meßreihe also einen zeitlich konstanten Mittelwert $m_t = \text{const.}$ und eine zeitlich konstante Streuung $s_t = \text{const.}$ aufweist.

Bei den hier vorliegenden Daten variiert der Meßwert umso mehr, je größer er ist. Dies läßt sich bereits am Verlaufsbild der Immissionsreihe OZON (Abb. 2-9) visuell erkennen. Die Maxima und Minima der Kurve sind unterschiedlich ausgeprägt: Ein hoher Immissionswert ist auch mit stärkeren Fluktuationen verbunden, als ein niedriger.

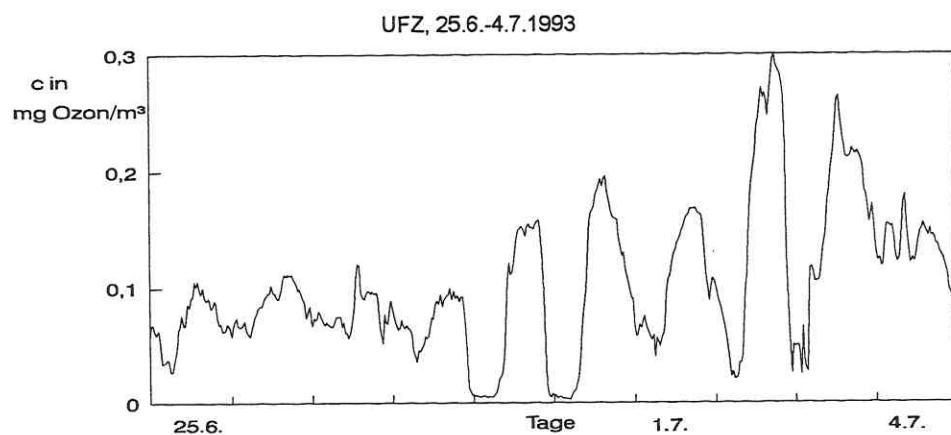


Abb. 2-9: Meßreihe OZON

Zur Beseitigung dieser zeitlichen Veränderung der Streuung geht man von folgender Überlegung aus:

Wenn allgemein zwischen der Varianz der Meßwerte $\text{var}(z_t) = \sigma_t^2$ und deren Erwartungswert μ_t der Zusammenhang

$$\text{var}(z_t) = \mu_t^c, \quad (2-1)$$

mit einer beliebigen Konstanten c , besteht, dann läßt sich durch eine nichtlineare Transformation der z_t eine Stabilisierung der Varianz erreichen. Die verbreitetste ist die logarithmische Transformation. Eine umfassendere Klasse von Transformationen für positive Meßwerte sind die Box-Cox-Transformationen (Box & Cox (1964)) mit dem Transformationsparameter θ :

$$u_t = F(z_t) = \begin{cases} (z_t^\theta - 1) / \theta & \text{für } \theta \neq 0 \\ \ln(z_t) & \text{für } \theta = 0 \end{cases} \quad (2-2)$$

Die Festlegung von $u_t = \ln(z_t)$ für $\theta = 0$ ist wegen $\lim ((z_t^\theta - 1) / \theta) \rightarrow \ln(z_t)$ für $\theta \rightarrow 0$ auch sinnvoll. Eine Methode zur Schätzung von θ wird von Box & Cox (1964) angegeben.

Man kann θ aber auch näherungsweise aus der Bedingung

$$\text{var}(u_t) = \text{const.}$$

bestimmen. Die Annahme (2-1) lautet für die Schätzwerte s_t und m_t : $s_t^2 = \text{var}(z_t) = m_t^c$ (SCHLITTGEN & STREITBERG (1991)). Für die Box-Cox-Transformation $u = F(z)$ führt dies auf die Beziehung:

$$\begin{aligned} \text{var}(u) &= \text{var}(F(z)) \\ &= (du/dz)^2 |_{m_t} \text{var}(z) \\ &= (m_t^{\theta-1})^2 m_t^c \\ &= \text{const.} = k^2 \end{aligned} \quad (2-3)$$

Wegen $m_t^C = s_t^2$ folgt somit

$$s_t = k m_t^{1-\theta} \quad (2-4)$$

formulierbar als

$$\ln s_t = \ln k + (1-\theta) \ln m_t. \quad (2-5)$$

Die Näherung besteht nun darin, daß man die Ensemblemittel m_t und s_t durch Zeitmittelung schätzt. Man bildet also aus gleichlangen Abschnitten der gemessenen Reihe jeweils Mittelwert und Standardabweichung. Für diese muß sich bei Auftragung in doppelt-logarithmischem Maßstab der Parameter θ aus dem Anstieg bestimmen lassen. Fehlwerte sind auszuschließen.

Allerdings ist mit dieser Methode lediglich eine grobe Abschätzung möglich. Man kann damit nur entscheiden, ob $\theta = -0.5, 0, 0.5, 1$ oder 2 gewählt werden sollte. Schließlich ist auf die Prüfung der Voraussetzung für die benutzte Näherung, nämlich die Ersetzbarkeit der Ensemblemittelung durch die Zeitmittelung, die als Ergodizität der Zeitreihe bezeichnet wird, verzichtet worden.

Für eine solche Abschätzung wurde die Meßreihe eines Jahres (UFZ Leipzig 1993) in Abschnitte von jeweils zwei Tagen zerlegt und für diese Abschnitte die Logarithmen von Mittelwert m und Standardabweichung s bestimmt. Eine lineare Regression führte auf einen Anstieg von $\approx 0,73 = 1 - \theta$ (vgl. Abb. 2-10).

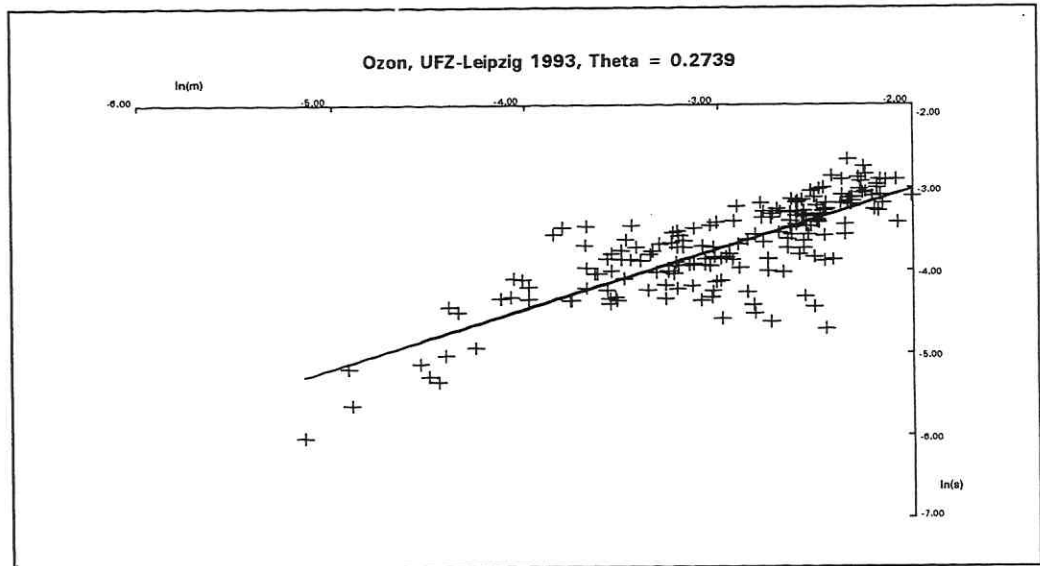


Abb. 2-10: Logarithmus der Standardabweichungen s und Logarithmus der Mittelwerte m aus Abschnitten von jeweils 96 Meßwerten der O_3 -Meßreihe von UFZ Leipzig 1993 und deren Regressionsgerade.

Der Transformationsparameter liegt damit bei $\theta \approx 0,27$. Für die weitere Verarbeitung wurde deshalb in ausreichender Näherung $\theta = 1/4$ gesetzt.

Die Anwendung der Box-Cox-Transformation auf die Datenreihe OZON in Abb. 2-9 ergibt den in Abb. 2-11 gezeigten Verlauf. Ein visueller Vergleich der Konturen der Maxima und Minima läßt die Veränderungen im Verhalten der Varianz erkennen.

UFZ Leipzig, 25.6.-4.7.1993

transformierte Daten

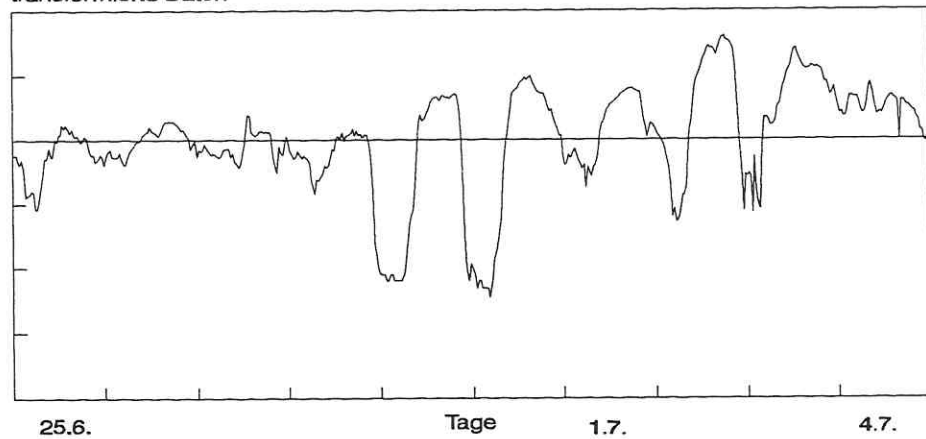


Abb. 2-11: Transformierte OZON Daten der Abb. 2-9

Die Überprüfung der Transformationsparameter bei den Meßreihen der Schadstoffe NO und NO₂ ergab ähnliche Resultate (vgl. Abbn. 2-12, 2-13). Die Ergebnisse sind in Tab. 2-2 zusammengefaßt.

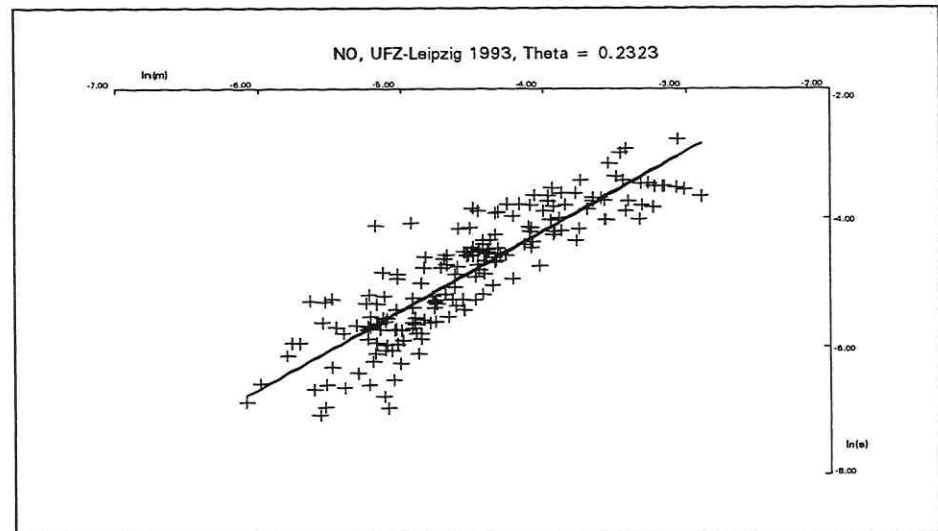


Abb. 2-12: Logarithmus der Standardabweichungen s und Logarithmus der Mittelwerte m aus Abschnitten von jeweils 96 Meßwerten der NO-Meßreihe von UFZ Leipzig 1993 und deren Regressionsgerade.

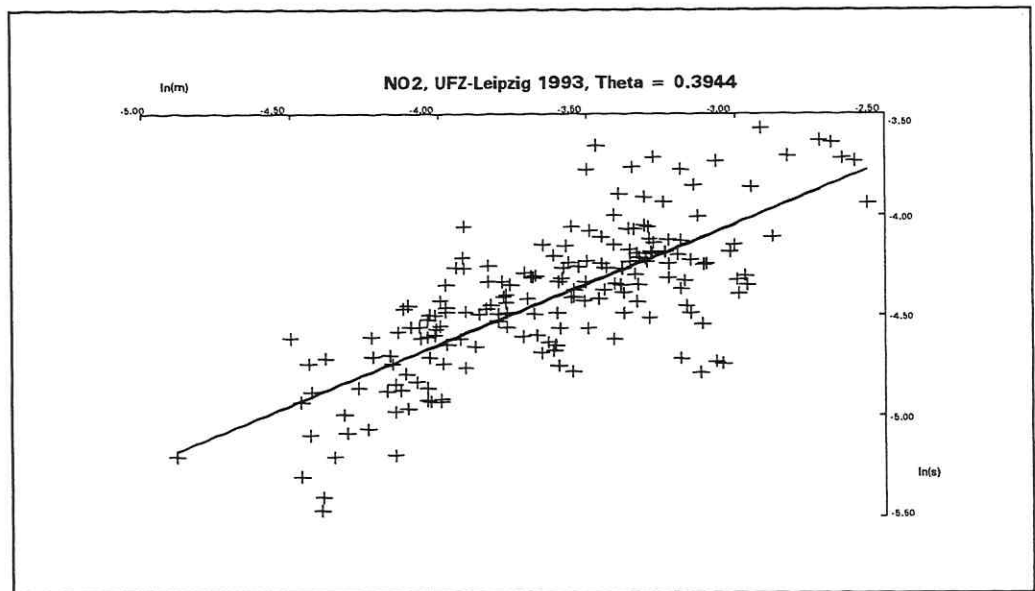


Abb. 2-13: Logarithmus der Standardabweichungen s und Logarithmus der Mittelwerte m aus Abschnitten von jeweils 96 Meßwerten der NO_2 -Meßreihe von UFZ Leipzig 1993 und deren Regressionsgerade.

Für die weiteren Analysen ist außer einer stabilen Varianz auch noch ein stationärer, d.h., zeitlich konstanter Erwartungswert erforderlich. Um dies zu erreichen, wurde in diesem Teil der Studie stets von einem linearen Trendanteil ausgegangen und dieser eliminiert. In den folgenden Abschnitten fand dies neben der Box-Cox-Transformation stets Berücksichtigung, auch wenn es nicht an allen Stellen explizit erwähnt ist.

Tabelle 2-2: Transformationsparameter θ am Beispiel der O_3 -, NO - und der NO_2 -Jahresreihen der Station UFZ Leipzig

	O_3	NO	NO_2
θ	0,27	0,23	0,39

Die hier und im folgenden dargelegten Untersuchungen führen auf das Ergebnis, daß gerade die niederfrequenten Anteile der Reihe die Smogepisoden charakterisieren. Bei der Modellierung im nächsten Teil des Forschungsberichtes wird der Begriff "Trend" deshalb weiter gefaßt:

Er beinhaltet nicht nur lineare sondern auch niederfrequente Anteile.

Im Laufe der hier geführten Untersuchungen kristallisiert sich der Parameter "zeitliche Veränderung des Erwartungswertes", also der Trend der Meßreihe, als wesentlicher Ausgangspunkt für eine Immissionsprognose heraus.

2.3. Fourieranalyse

Die Meßdaten werden zunächst mit Hilfe der Fourieranalyse systematisch auf das Vorhandensein periodischer Strukturen untersucht. Ausgangspunkt ist wieder die in Abb. 2-14 gezeigte OZON-Reihe. Sie enthält 480 Halbstundenmittelwerte.

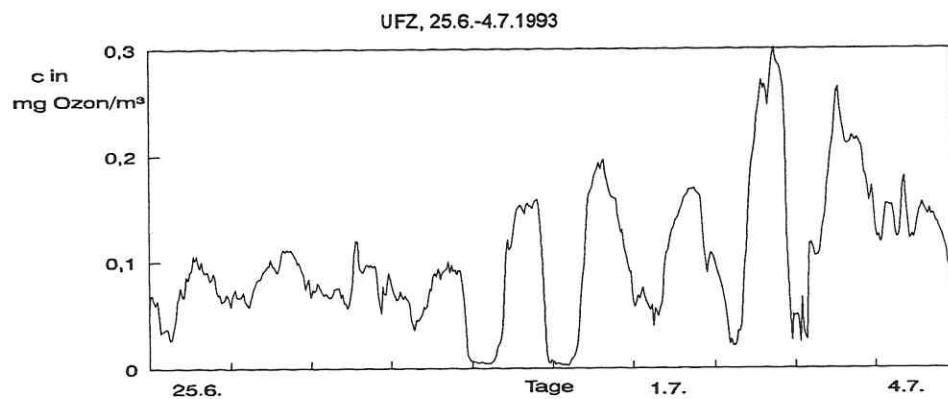


Abb. 2-14: O₃-Konzentrationsreihe OZON für UFZ Leipzig

Das Frequenzspektrum einer Reihe wird durch ihr Periodogramm geschätzt. Die Grundlagen und Formeln dazu sind im Anhang A angegeben.

Für die Fourieranalyse sind sinusförmige Verläufe am geeignetsten. Um diese zu erhalten, sind die Meßdaten zu transformieren. Die dafür verwendete Box-Cox-Transformation wurde bereits im Abschnitt 2.2. diskutiert.

Prinzipiell sollte vor einer Spektralanalyse auch der (lineare) Trend entfernt werden, damit andere langperiodische Effekte nicht verdeckt werden.

Das von den transformierten Daten ermittelte Periodogramm zeigt Abb. 2-15.

Der Beobachtungsabstand der Meßwerte beträgt 0,5 h, so daß die Frequenzen in $1/(0,5h) = 2 \cdot h^{-1}$ angegeben sind.

Die Peaks im Periodogramm lassen sich als Intensitäten (oder Energien) interpretieren, mit denen die einzelnen Frequenzen besetzt sind. Da hier **Halbstunden**mittelwerte zugrunde liegen, charakterisiert z.B. eine Periodizität von 48 Meßwerten den 24-Stunden-Rhythmus. Je nachdem, ob hohe oder tiefe Frequenzen vorherrschen, ist die Reihe "rauh" oder "glatt".

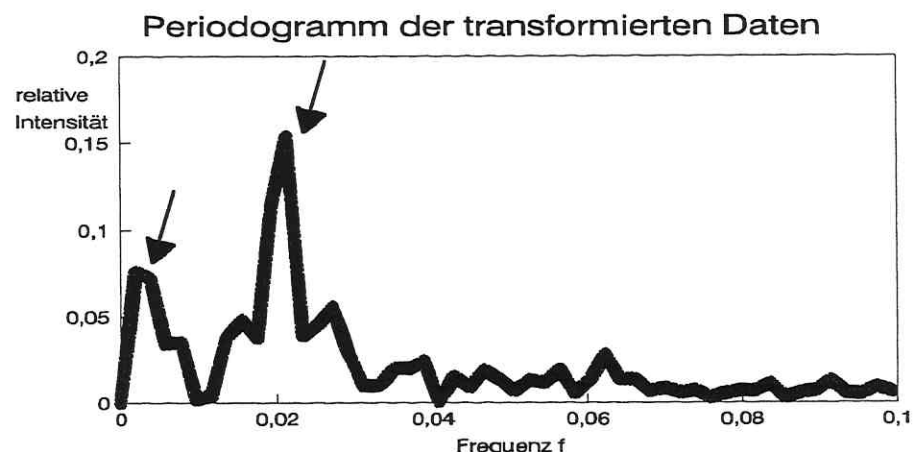


Abb. 2-15: Periodogramm der OZON-Daten von Abb. 2-14. Periode=1/f. Markante Peaks liegen bei $f \approx 0,0029$ und $0,0208$ vor (durch Pfeile markiert). Dies entspricht Perioden von 168 (=7 Tage) und 24 Stunden.

Bemerkung (2-2): Durch die bei der Periodogrammberechnung verwendete Fouriertransformation wird die Meßreihe eindeutig vom Zeit- in den Frequenzbereich transformiert. Das Periodogramm trifft dann eine Aussage über die Glattheit einer Meßreihe. Die dazu analoge Aussage im Zeitbereich ist durch die Autokorrelationsfunktion (vgl. Abschnitt 2.4.) gegeben. Hier ist die Glattheit mit der Durbin-Watson-Statistik meßbar (BOX & JENKINS (1976)). Das Periodogramm kann man auch als Fourier-Transformierte der Autokorrelationsfunktion darstellen (SCHLITTGEN & STREITBERG (1991)). □

Das Periodogramm läßt sich aber auch mit einer visuellen Methode auf die Existenz periodischer Strukturen untersuchen: Man verwendet dazu das kumulative Periodogramm, welches eine Schätzung der Spektralverteilungsfunktion ist (Abb. 2-16). Da die theoretische Spektraldichte für einen unstrukturierten Rauschprozeß konstant ist, ist ihre Verteilung und dieser entsprechend das kumulative Periodogramm durch einen konstanten linearen Anstieg bestimmt. Abweichungen von dieser Linie zeigen Abweichungen vom weißen Rauschen deutlicher als das Periodogramm selbst an. Darauf baut ein Test von DURBIN (1969) über das Vorliegen von weißem Rauschen auf.

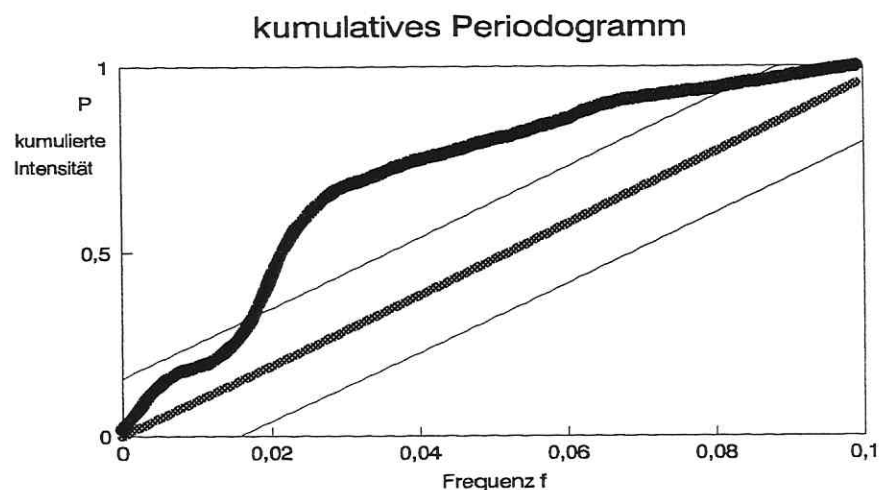


Abb. 2-16: Kumulative Darstellung des Periodogramms aus Abb. 2-15. Die Gerade wäre der Verlauf des kumulativen Periodogramms bei weißem Rauschen. Die Parallelen kennzeichnen das 95%-Konfidenzintervall.

Das kumulative Periodogramm (Abb. 2-16) weist darauf hin, daß es sich bei den Daten der Abb. 2-14 nicht um weißes Rauschen handelt, sondern daß sie periodische Strukturen enthalten.

Der Vertrauensbereich c , der für das weiße Rauschen gültigen Geraden $P = \text{const.} \cdot f \pm c$, wird nach der von STEPHENS (1970) angegebenen (empirisch gefundenen) Formel

$$c = \frac{\sqrt{-\frac{1}{2} \ln \frac{\alpha}{2}}}{\sqrt{M-1 + 0.2 + \frac{0.68}{\sqrt{M-1}}}} - \frac{0.4}{M-1}$$

mit $M = \text{int}(N/2)$ und der statistischen Sicherheit von $(1-\alpha)$ berechnet.

Die Spektralanalyse erfordert die Beachtung zweier weiterer Tatsachen:

1) Da nur Perioden eingehen, die ganz in die Gesamtlänge N der Zeitreihe hineinpassen, gibt es eine Diskretisierung der Frequenzachse: $f_i = i/N$. So kann es vorkommen, daß eine wesentliche Frequenz der Reihe mit keiner der Fourierfrequenzen f_i übereinstimmt. Sie würde sich dann in den nächstgelegenen Fourierfrequenzen bemerkbar machen. Das vom Periodogramm gezeigte Bild enthält dann einen Peak endlicher Breite. Dieser durch die Endlichkeit der untersuchten Reihe bewirkte Effekt wird als "Durchsickern" (Leakage) bezeichnet.

2) Die Fourieranalyse schätzt aus N Datenpunkten N Koeffizienten. Jeder Wert des Periodogramms baut auf nur 2 Koeffizienten auf. Zwar ist er von jedem anderen Punkt des Periodogramms unabhängig, dafür besitzt er jedoch eine sehr große Varianz. Einzelne Punkte im Periodogramm enthalten also einen hohen Rauschanteil und sind somit sehr unsicher (SCHLITTGEN & STREITBERG (1991)).

Deshalb wird das Periodogramm in der Regel geglättet. Dies verkleinert die Varianz der Werte (auf Kosten von Auflösung und Bias). Das geglättete Periodogramm ist ein Schätzer für die Spektraldichte (vgl. Anhang A).

Die Glättungsprozeduren bei Periodogrammen heißen "Fenster" (windows). Sie mitteln symmetrisch die in einem Fenster festgelegter Breite (Faustregel: ca. 10...20% der Datenbreite) enthaltenen Werte mit festgelegten Gewichten. Es ist also für eine Glättung ein Fenstertyp sowie die (ungerade) **Breite** zu wählen.

Als Beispiel wurde das Periodogramm aus Abb. 2-15 mit einem Tukey-Hamming(5)-Fenster geglättet und in Abb. 2-17 dargestellt. Die Gewichte berechnen sich beim Tukey-Hamming-Fenster zu $w_j = 0.54 + 0.46 \cdot \cos(\pi j/p)$, wobei $j = 0, 1, 2, \dots, p$ und $p = \text{int}(\text{span}/2)$, hier mit der Fensterbreite $\text{span} = 5$ ist (SPSS Manual (1987)). Anschließend werden die Gewichte auf die Summe 1 normiert.

Das geglättete Periodogramm (Abb. 2-17) zeigt ebenfalls die zwei wesentliche Perioden an:

168 und 24 Stunden.

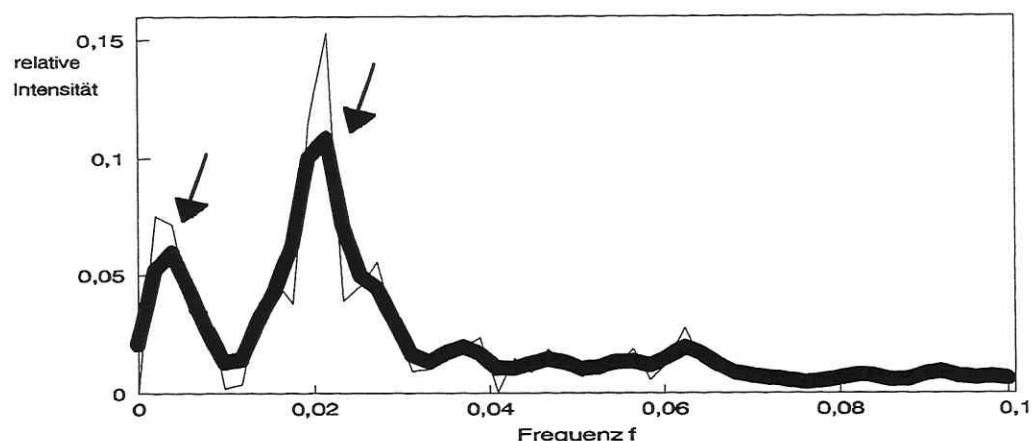


Abb. 2-17: Periodogramm aus Abb. 2-15 (dünne Linie) mit einem Tukey-Hamming(5)-Fenster geglättet (dicke Linie).

Enthält eine Zeitreihe einen sehr dominanten Zyklus, so ist es sinnvoll, durch Differenzbildung eine Saisonbereinigung vorzunehmen. Dadurch können im Periodogramm Verdeckungserscheinungen durch den dominanten Peak vermieden werden und andere Strukturen deutlicher hervortreten.

Das Vorliegen eines 24-Stunden-Rhythmus (Periode 48) ergibt sich bei der O₃-Immission aus den meteorologischen Einflüssen, speziell dem Tagesrhythmus der Sonneneinstrahlung. Deshalb soll im folgenden mittels Differenzbildung über 48 Meßwerte eine Saisonbereinigung vorgenommen werden. Die Differenzenreihe ist in Abb. 2-18 widergegeben.

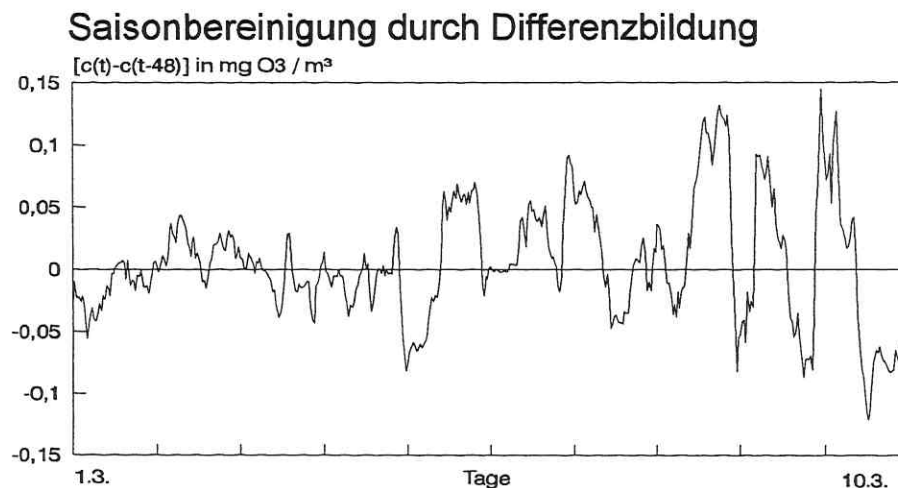


Abb. 2-18: Durch Differenzbildung über 48 Werte saisonbereinigte OZON-Daten

Daraus erhält man das in Abb. 2-19 gezeigte Periodogramm.

Die 24stündige Periodizität ist verschwunden. Dadurch lassen sich jetzt die Perioden von 168 Stunden ($f=0.0029$) und die im Periodogramm der Originaldaten nur angedeuteten Perioden von 33 Stunden ($f=0.015$) und ca. 18 Stunden ($f=0.027$) deutlicher nachweisen.

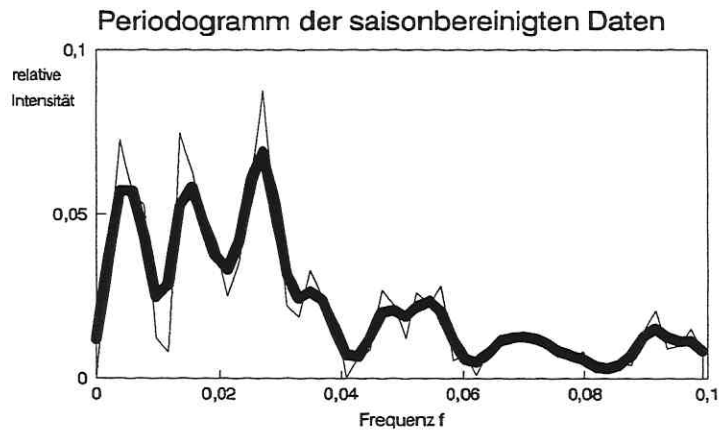


Abb. 2-19: Periodogramm (dünne Linie) der Daten von Abb. 2-18 und mit Tukey-Hamming(5)-Fenster geglättetes Periodogramm (dicke Linie).

Bisher wurden die Periodogramme nur im Bereich $f < 0.1$, d.h. Periode $> 1/f$ ($= 10$ Meßwerte $\cong 5$ Stunden), also für die langwelligen Zyklen aufgezeichnet.

Betrachtet man das vollständige und das kumulative (normierte) Periodogramm in Abb. 2-20, so zeigt sich aber, daß in der Differenzenreihe (Abb. 2-18) verstärkt langwellige Schwingungen enthalten sind ($f < 0.1$, d.h. Periode > 5 Stunden), die bereits in Abb. 2-19 genauer bestimmt wurden.

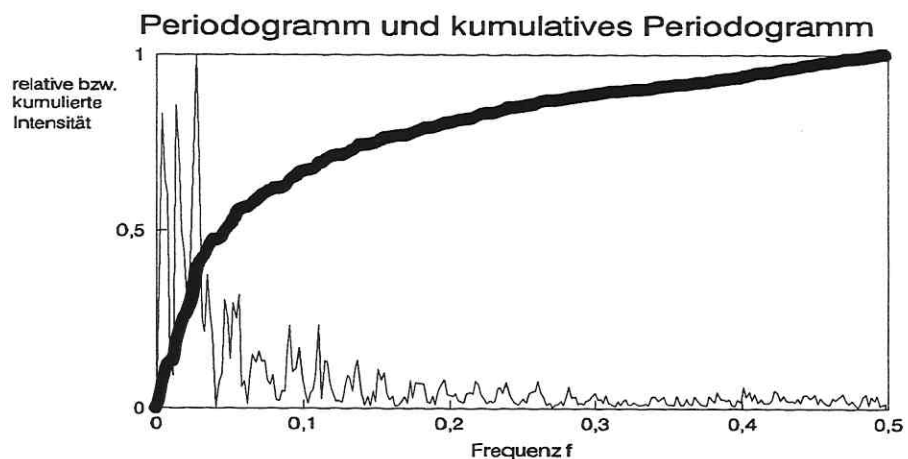


Abb. 2-20: Periodogramm (dünne Linie) und kumulatives Periodogramm (dicke Linie) der Daten von Abb. 2-18

In diesem Frequenzbereich von 0 ... 0.1 treten also offenbar die wesentlichsten Unterschiede zum weißen Rauschen auf. Somit ist es berechtigt, die Spektraluntersuchungen auf diesen Bereich zu konzentrieren.

Für die hier betrachtete Reihe OZON wurde neben der Tagesschwungung ein dominanter Zyklus von 336 Std. (≈ 7 Tage) gefunden. Er beschreibt offenbar den Ablauf der hier untersuchten Episode. Es ist nunmehr die Frage zu beantworten, ob dies ein charakteristischer Zyklus für Smogepisoden ist.

Zur Aufklärung dieser Frage wurde eine Vielzahl von Abschnitten der von den Meßstationen des Freistaates Sachsen vorliegenden Datenreihen der Ozonkonzentration untersucht, was zu folgendem Ergebnis führte:

Die dominanten Periodizitäten verändern sich im Laufe der Zeit. Zur Beschreibung des Verlaufs von Immissionsdaten ist ein festes Frequenzspektrum nicht ausreichend. Vielmehr muß man von einer Zeitabhängigkeit der einzelnen Fourierkoeffizienten und damit von einem zeitlich veränderlichen Spektrum ausgehen.

Um dieses Verhalten anschaulich zu machen, wird zu einem Zeitabschnitt fester Breite (10 Tage) das Periodogramm sowie das saisonbereinigte Periodogramm in Abb. 2-21 wiedergegeben. Durch kontinuierliches Weiterrücken dieses Ausschnitts um jeweils einen Tag lassen sich die Veränderungen im Periodogramm dann gut beobachten.

Beispielsweise kann man aus Abb. 2-21 erkennen, wie sich im Verlaufe des Weiterrückens des Beobachtungsfensters vom 25.6. bis zum 28.6. die Peaks im Periodogramm verändern:

Die dominante langwellige Periode (α) von ca. 336 Stunden (7 Tage) wird intensiver. Dabei verkleinert sich ihre Frequenz geringfügig, so daß sich die Periode auf 264 Stunden (11 Tage) verlängert (β). Als triviale Periode (γ) ist die 24-h-Schwingung ($f \approx 0.02$) in unterschiedlich starkem Maße stets enthalten.

Durch die saisonbereinigende Differenzbildung wurde die 24stündige Periode entfernt. Dies ist aus dem Vergleich von mittlerem und oberem Periodogramm gut ablesbar. Die Schwingungen mit Periodenlängen über 24 Stunden sind bei den weiteren Untersuchungen von speziellem Interesse, da sie die Entwicklung von Smogepisoden beschreiben.

Mit der Länge des Beobachtungsfensters ist natürlich auch die Länge der größten meßbaren Periode sowie der Stützstellenabstand im Periodogramm festgelegt. Man muß also mit einer für den Anwendungszweck geeigneten Fensterbreite arbeiten. Da Smogepisoden in der Regel 1 bis 7 Tage andauern, wurde hier für die Beobachtung jeweils eine Dekade herangezogen.

Das so für einen Zeitabschnitt von 10 Tagen berechnete Periodogramm läßt die langfristigen Veränderungen der spektralen Anteile besonders gut erkennen, wenn man es für aufeinanderfolgende Dekaden räumlich hintereinander aufzeichnet. Über der so gebildeten Frequenz - Zeit - Ebene erhebt sich dann eine Gebirgsfläche, deren Höhe die Intensität einer bestimmten Frequenz während einer bestimmten Dekade repräsentiert.

Die Höhenliniendarstellung solcher Spektrogramme ist in den Abb. 2-22...28 aufgezeichnet.

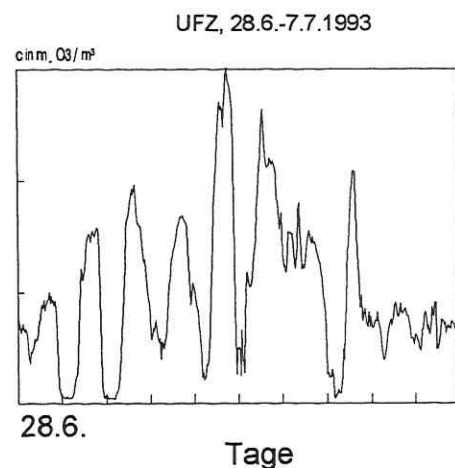
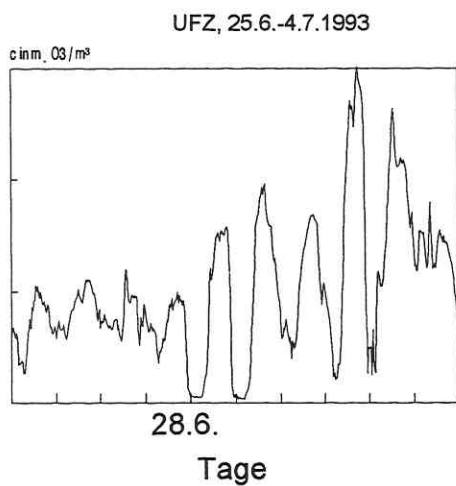
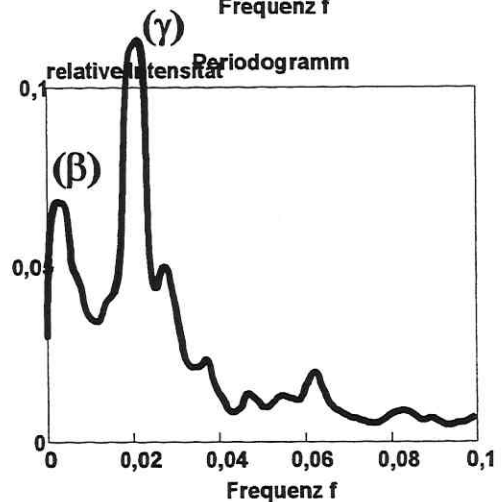
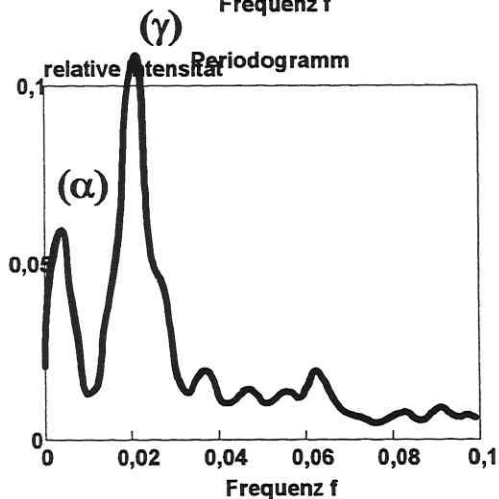
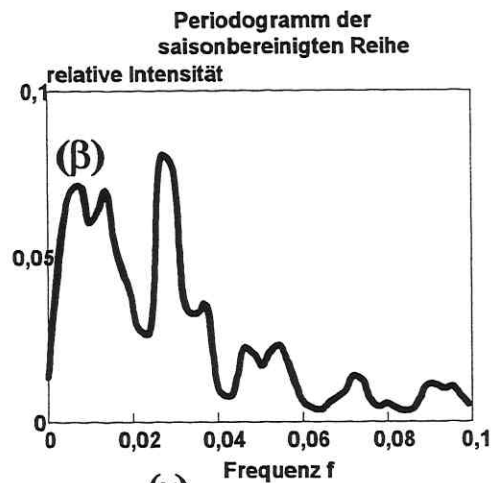
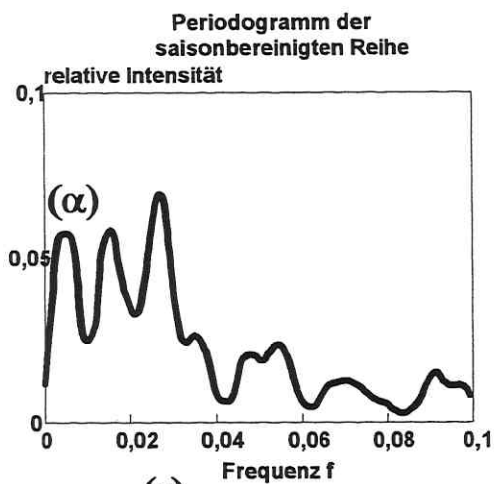


Abb. 2-21: Verschiedene Abschnitte der O₃-Immissionsreihe der Station UFZ Leipzig, 1993 mit dazugehörigem Periodogramm (unten: Zeitreihe z_t ; mitte: aus der unten dargestellten Dekade berechnetes Periodogramm $I(f)$; oben: Periodogramm $I(f)$ der saisonbereinigten Reihe)

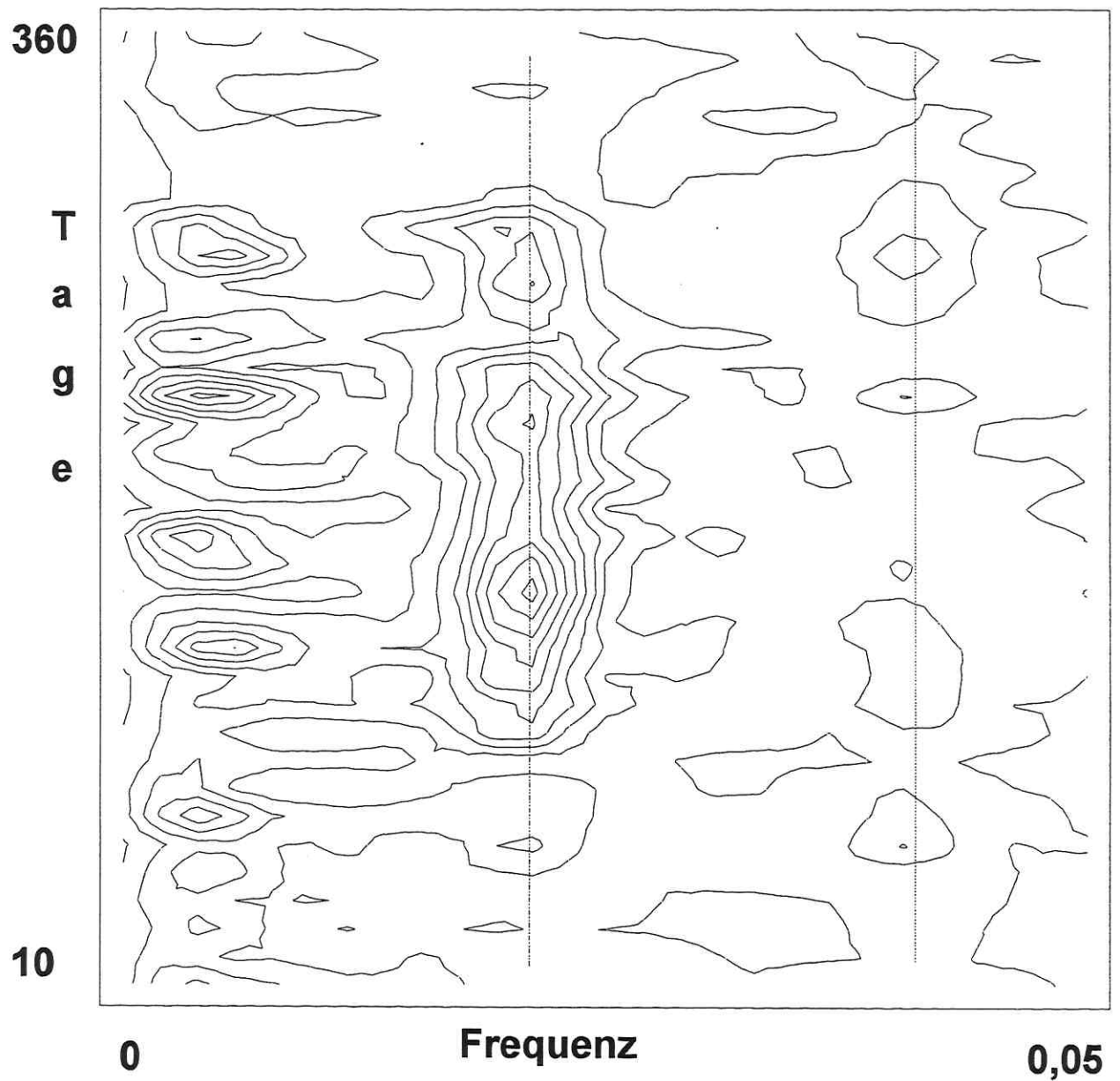


Abb. 2-22: Höhenlinien des Spektrogramms für die Ozonmeßreihe von Pirna 1992; die einzelnen Periodogramme wurden jeweils aus Meßreihenabschnitten von 10 Tagen berechnet und anschließend mit einem Tukey-Hamming(5)-Window geglättet.

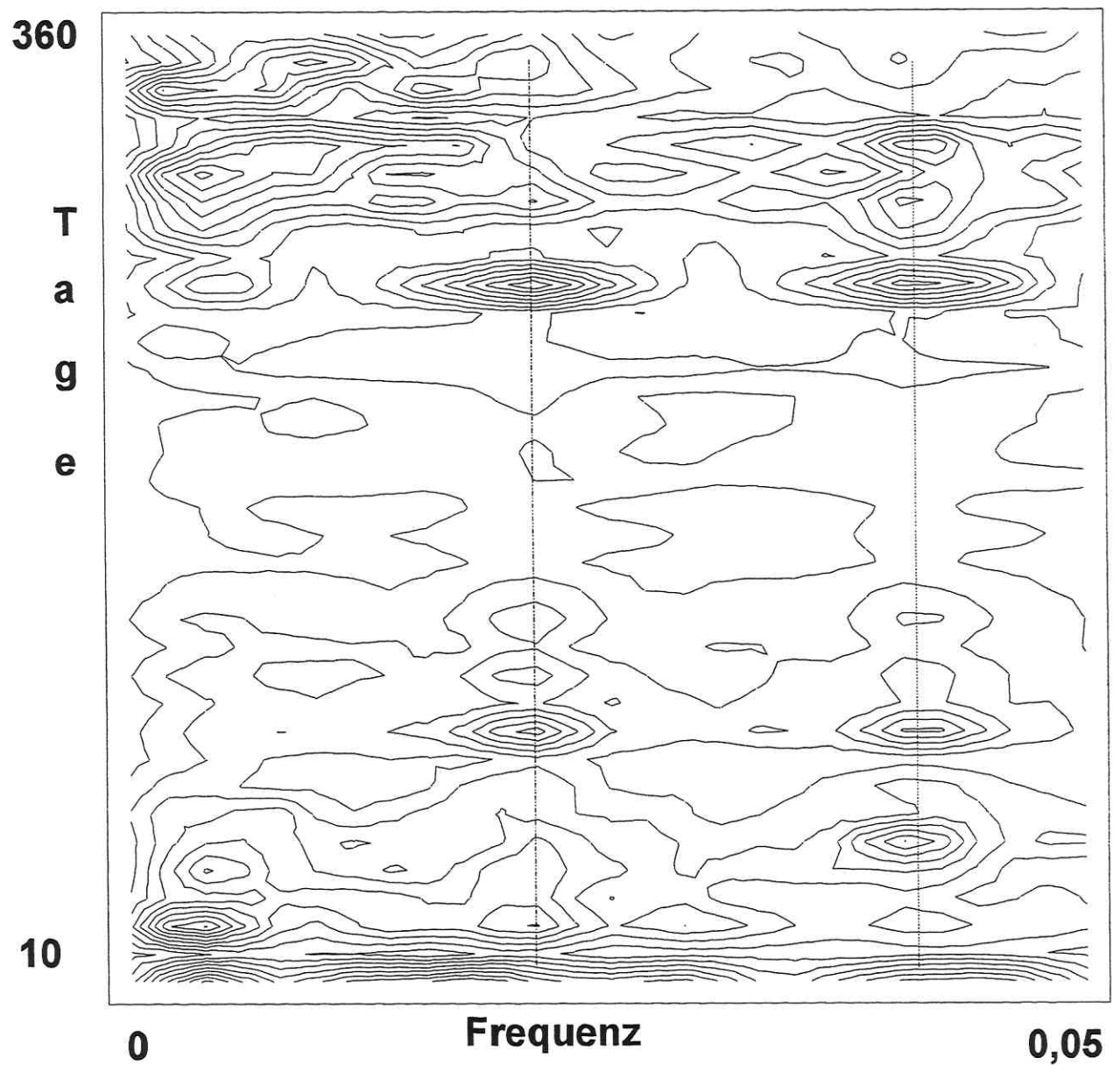


Abb. 2-23: Höhenlinien des Spektrogramms für die NO-Meßreihe von Pirna 1992; die einzelnen Periodogramme wurden jeweils aus Meßreihenabschnitten von 10 Tagen berechnet und anschließend mit einem Tukey-Hamming(5)-Window geglättet.

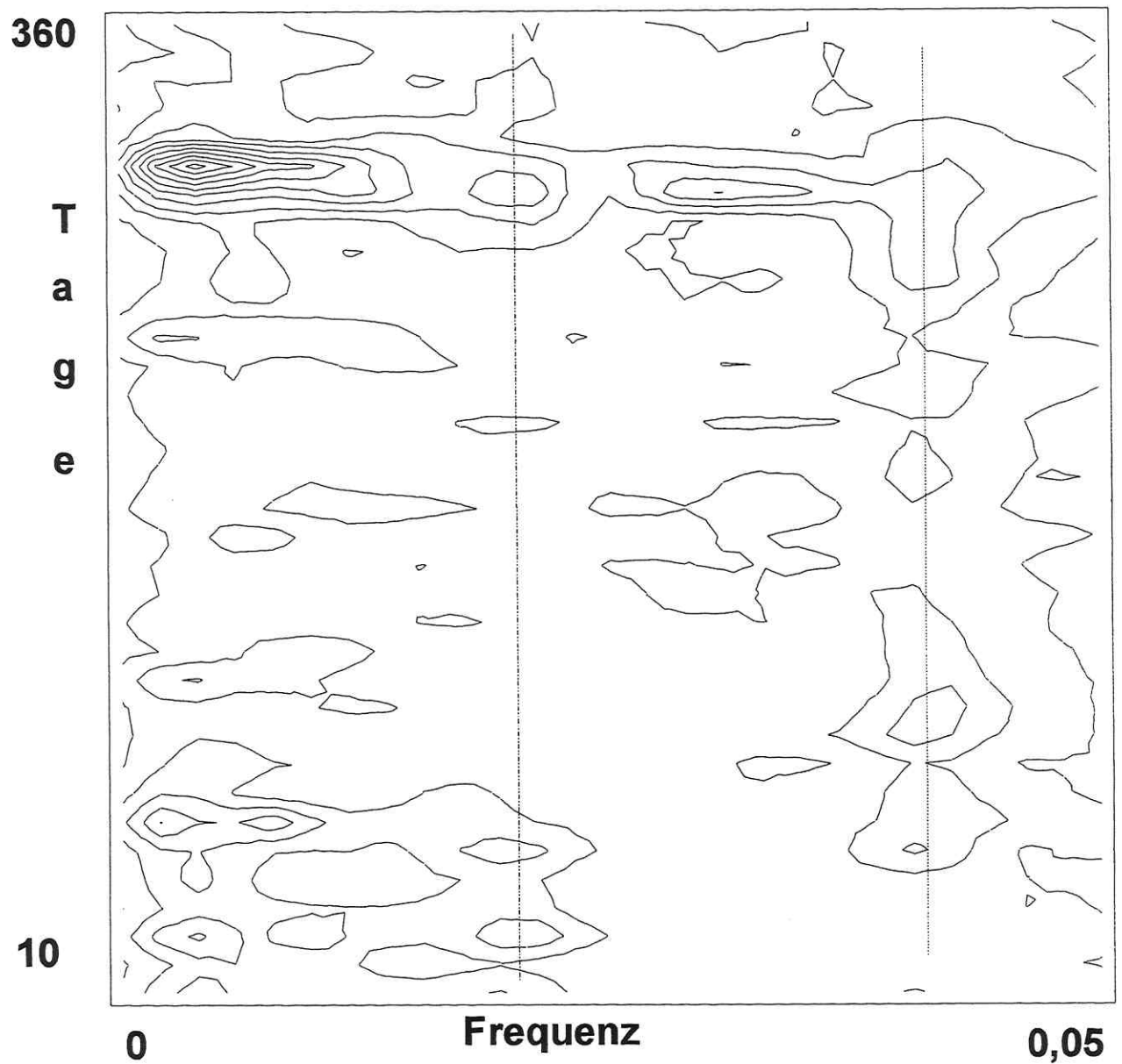


Abb. 2-24: Höhenlinien des Spektrogramms für die NO_2 -Meßreihe von Pirna 1992; die einzelnen Periodogramme wurden jeweils aus Meßreihenabschnitten von 10 Tagen berechnet und anschließend mit einem Tukey-Hamming(5)-Window geglättet.

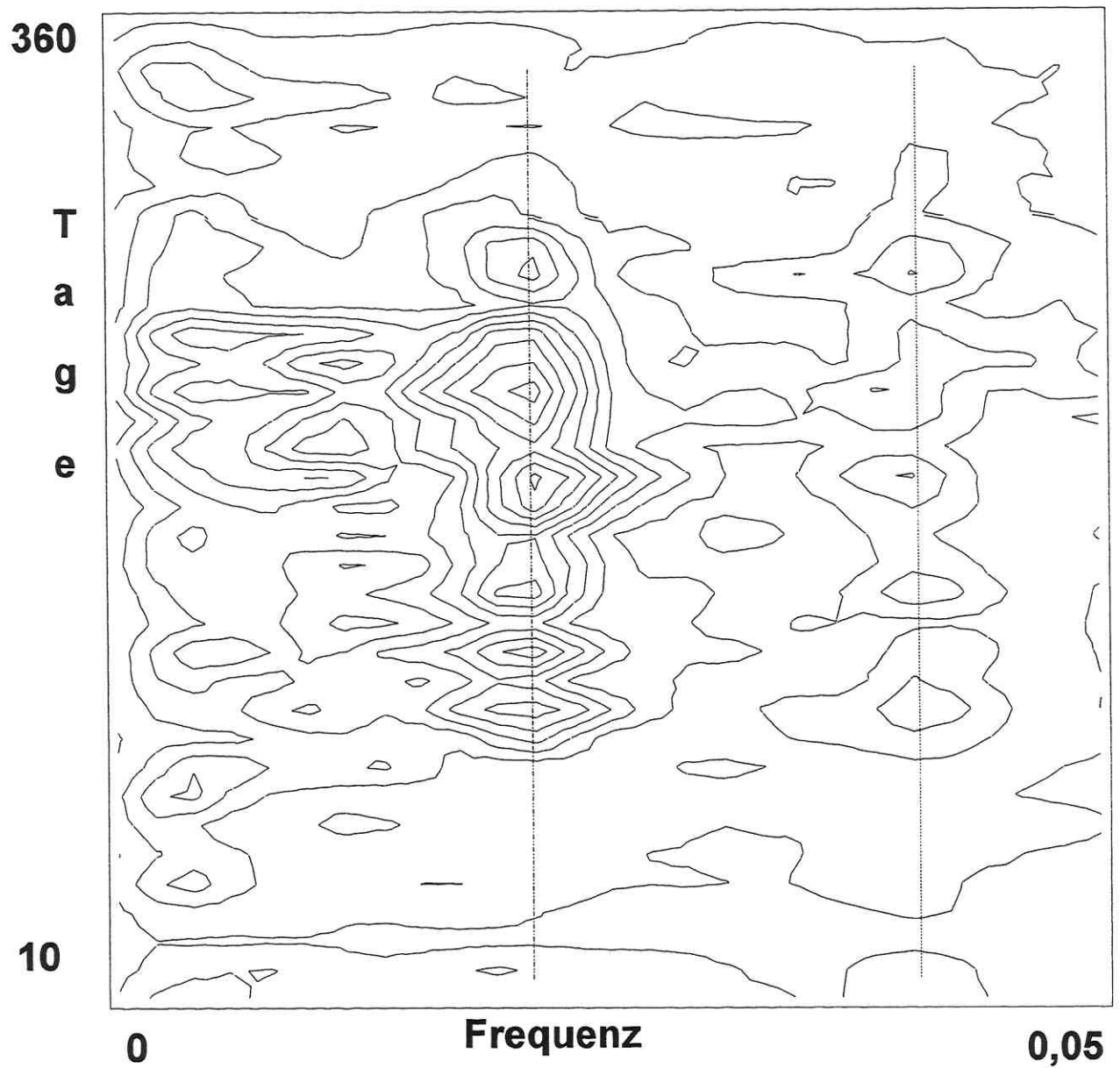


Abb. 2-25: Höhenlinien des Spektrogramms für die Ozonmeßreihe von Leipzig Hbf 1992; die einzelnen Periodogramme wurden jeweils aus Meßreihenabschnitten von 10 Tagen berechnet und anschließend mit einem Tukey-Hamming(5)-Window geglättet.

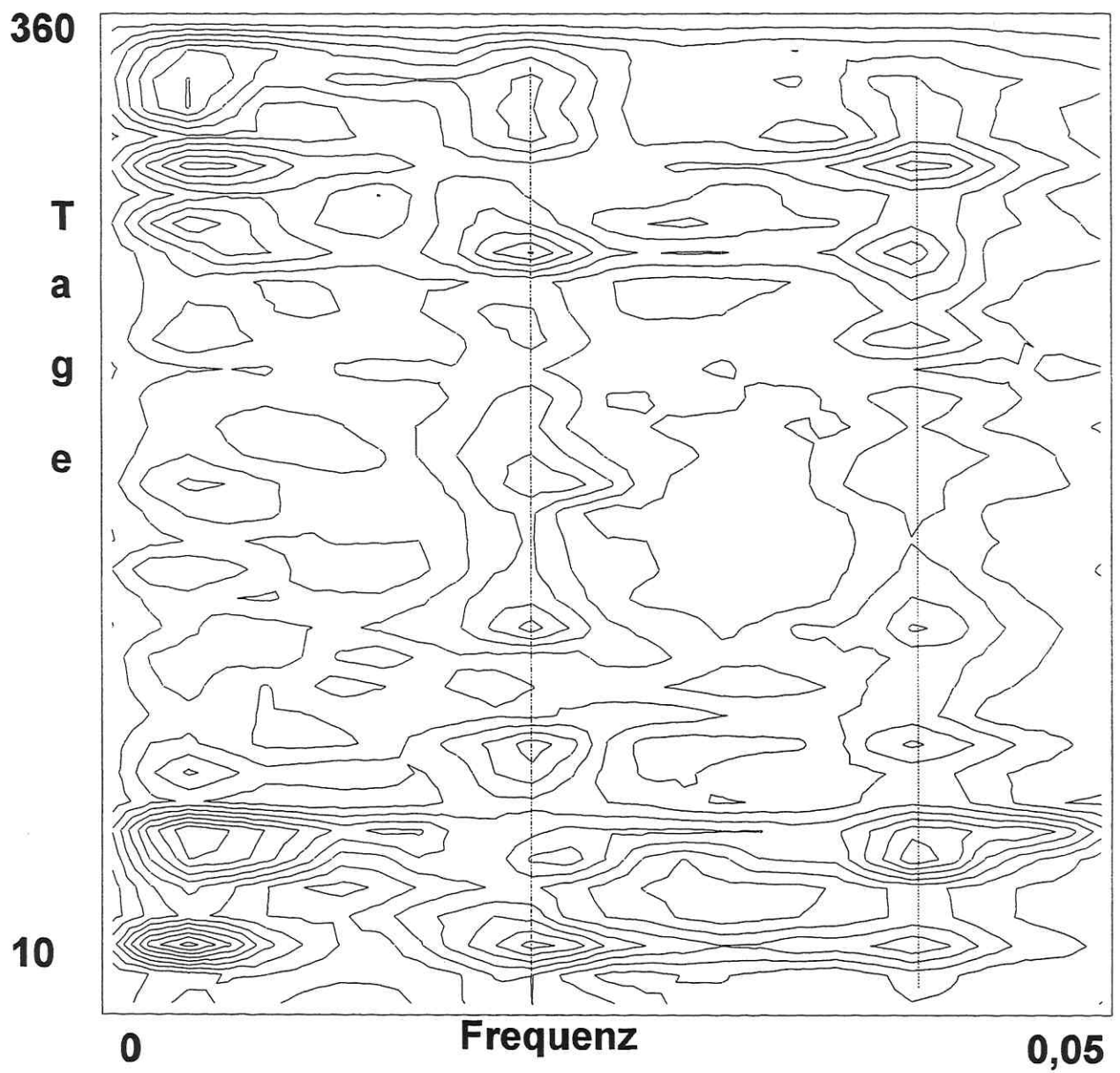


Abb. 2-26: Höhenlinien des Spektrogramms für die NO-Meßreihe von Leipzig Hbf 1992; die einzelnen Periodogramme wurden jeweils aus Meßreihenabschnitten von 10 Tagen berechnet und anschließend mit einem Tukey-Hamming(5)-Window geglättet.

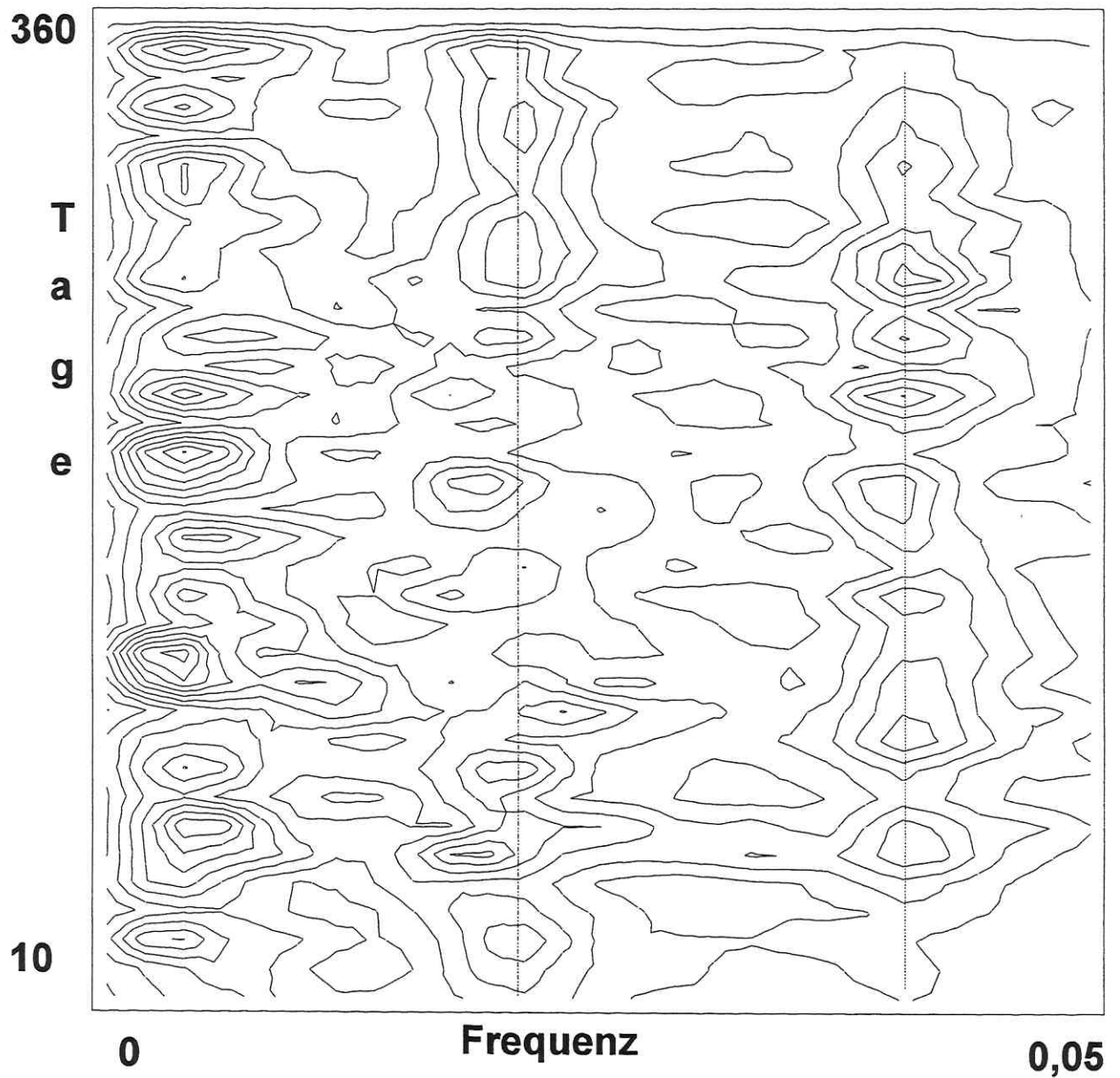


Abb. 2-27: Höhenlinien des Spektrogramms für die NO_2 -Meßreihe von Leipzig Hbf 1992; die einzelnen Periodogramme wurden jeweils aus Meßreihenabschnitten von 10 Tagen berechnet und anschließend mit einem Tukey-Hamming(5)-Window geglättet.

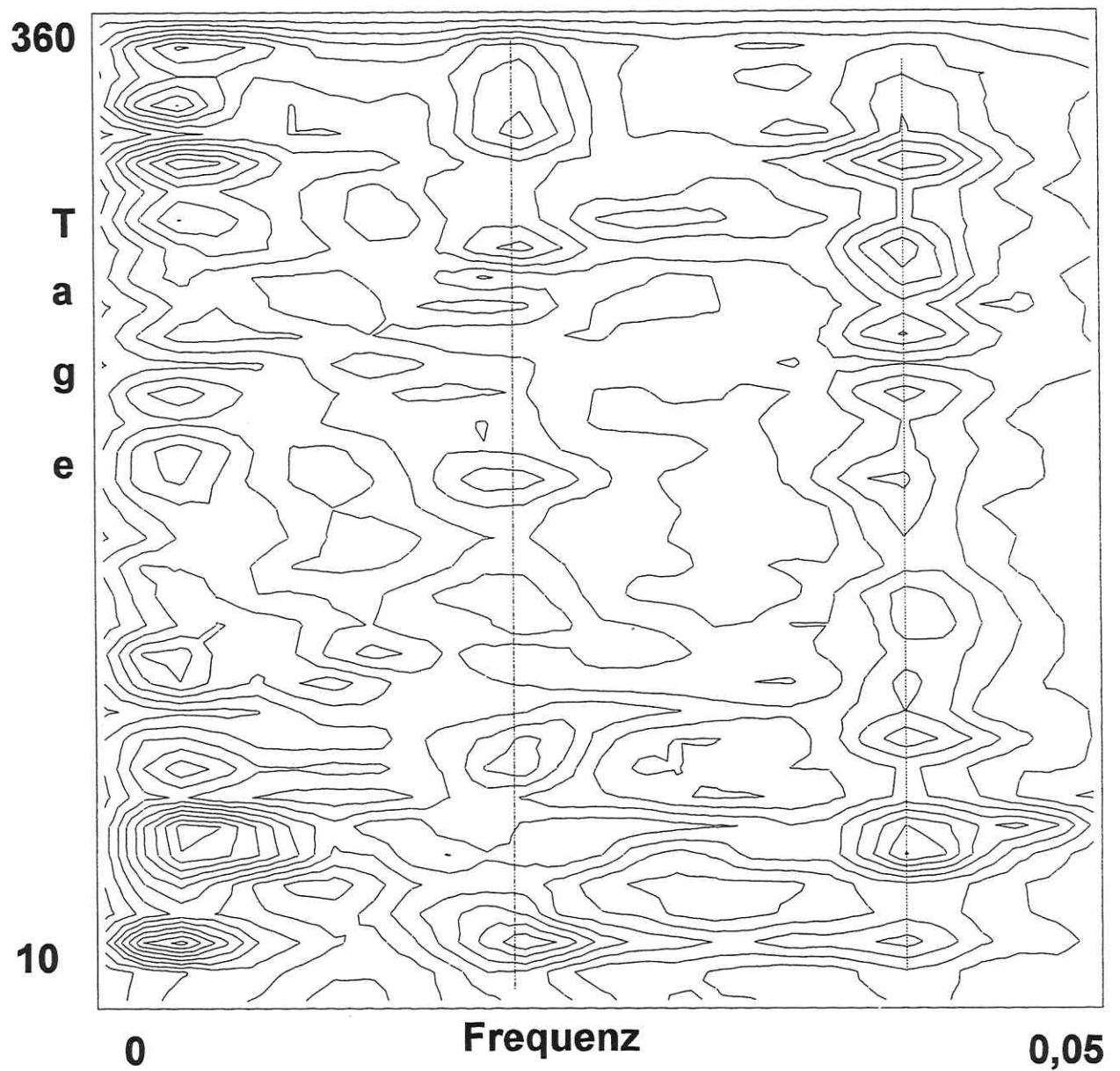


Abb. 2-28: Höhenlinien des Spektrogramms für die NO_x -Meßreihe von Leipzig Hbf 1992; die einzelnen Periodogramme wurden jeweils aus Meßreihenabschnitten von 10 Tagen berechnet und anschließend mit einem Tukey-Hamming(5)-Window geglättet.

An den Spektrogrammen des Ozonkonzentrationsverlaufs ist die erhöhte Aktivität während der Jahresmitte, also in den Sommermonaten deutlich erkennbar. Die durch eine Strich-Punkt-Linie gekennzeichneten Gipfel entsprechen der 24 Stunden Periode. Die dominanten Zyklen des Konzentrationsverlaufs sind also die Tageszyklen. Sie bleiben in ihrer Frequenz stabil und weisen in ihrer Intensität einen Jahresgang auf.

Daneben gibt es jedoch noch lokale Maxima bei sehr niedrigen Frequenzen unterschiedlicher Größe. Diese zeigen sich in den Spektrogrammen (Abb. 2-22...28) als lokalisierte Gebilde, die einander ablösen. Sie sind durch Periodenlängen von über einem Tag charakterisiert.

Wie lassen sich diese Vorgänge interpretieren?

Wodurch könnten sie kausal bedingt sein?

Was für ein phänomenologisches Verhalten ist zu erwarten?

Beispielsweise dauern Sommersmogeperioden etwa 1 bis 7 Tage an (vgl. Einleitung). Somit könnte man die niederfrequenten Vorgänge in der Meßreihe mit den Episoden identifizieren.

Wesentlich für das Zustandekommen von Smogepisoden ist das Zusammenspiel von Schadstoffemission und UV-Strahlung bei Vorliegen von austauscharmen meteorologischen Bedingungen. Zur Charakterisierung des Luftaustausches läßt sich der Wind heranziehen.

Bei gegebener Emissions- und Strahlungsstärke wird die Anreicherung von Ozon in den bodennahen Schichten der Troposphäre in ihrer Dynamik somit von der Windgeschwindigkeit bestimmt. Diese weist im allgemeinen keine festen Periodizitäten auf.

Bemerkung (2-3): Da Änderungen von Schadstoffkonzentrationen wesentlich durch den Transport von Luft und damit durch den Wind hervorgerufen werden, ist ein Vergleich mit dem Frequenzspektrum der Windgeschwindigkeit (STULL (1989)) interessant. Das Windspektrum enthält drei typische Bereiche (vgl. Abb. 2-29):

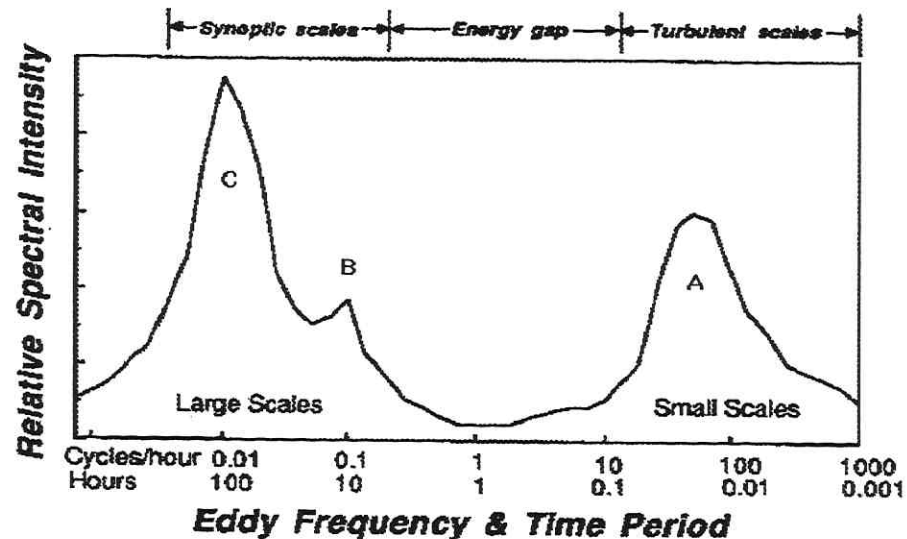


Abb. 2-29: Schematisches Spektrum der Windgeschwindigkeit in Bodennähe; aus einer Studie von Van der HOVEN (1957)

- Mikroskalige Erscheinungen (A) bei Periodendauern von 10 s bis 10 min, die vorwiegend Turbulenzen darstellen.
- Einen Peak (B) bei der 24-Stunden-Periode, der den Windanstieg am Tag und das Abflauen während der Nacht repräsentiert.
- Veränderungen mit einer Periodendauer in der Umgebung von 100 Stunden, die mit dem Durchgang von Fronten und Wettersystemen verbunden sind, also den Zyklus der Rossby-Wellen zeigen. Dieser Bereich (C) des Spektrums ist der synoptische Skalenbereich.

Die Korrespondenz zwischen den Bereichen des Windspektrums und des Konzentrationsspektrums war zu erwarten. Sie erlaubt die Identifikation der im Zeitablauf auftretenden Phänomene der Immissionsreihe.

Darüber hinaus ist sie auch für die gesamte Zielstellung dieser Studie interessant. Schließlich bietet sie an, die Prognosealgorithmen für die Windvorhersage auf die Immissionsprognose zu übertragen. Für den mikroskaligen Bereich wird dies auch in Form einer stochastischen Zeitreihenmodellierung realisiert.

Die Phänomene der synoptischen Skala stellen jedoch großräumige (≈ 1000 km) Wirbelerscheinungen dar, die von der Synoptik explizit behandelt und deterministisch vorhergesagt werden können. Die Grundlagen dazu wurden von BJERKNES (1919) und BERGERON (1928) gelegt.

Aus bereits an anderen Stellen genannten Gründen soll aber hier der univariate Ansatz verfolgt werden, d.h. allein Eigenschaften der Immissionsreihe werden für eine Vorhersage herangezogen. Für die Prognose ist es dann extrem wichtig, die niederfrequenten Vorgänge des synoptischen Skalenbereichs mit ihrer veränderlichen Frequenz modellieren zu können.□

Die bei den Periodogrammuntersuchungen der O₃-Konzentrationsreihe gefundenen Eigenschaften sollen abschließend zusammengefaßt werden:

- 1) Die unterschiedlich stark ausgeprägte Tagesperiode ist permanent vorhanden und kann durch Differenzbildung aus der Reihe entfernt werden.
- 2) Die Zyklen mit kurzer Periodendauer (unter 24 Stunden) kann man als vorwiegend stochastische Effekte auffassen, die lediglich für die sehr kurzfristige Entwicklung wichtig sind. Diese Zyklen sind äußerst instabil.

3) Für die Untersuchung von Smogepisoden erscheinen Zeitverläufe mit Perioden größer als die Tagesperiode interessant. Betrachtet man die Entwicklung des Periodogramms bei weiterrückendem Beobachtungsfenster, so lassen sich aber auch in diesem niederfrequenten Bereich keine stabilen Perioden erkennen. Vielmehr werden beispielsweise im Laufe der Zeit Dreitageszyklen durch Fünftageszyklen abgelöst, es gibt also "wandernde Peaks", d.h., das Spektrum ist zeitabhängig.

Bemerkung (2-4): Bei allen hier durchgeführten Untersuchungen wurden konventionelle Techniken der Spektralanalyse angewendet. Welchen Einfluß dabei die Abtastlänge, also die Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Meßwerten sowie die Gesamtlänge der untersuchten Zeitreihe auf die Schätzung des Spektrums des realen Immissionsverlaufs haben, ist an den entsprechenden Stellen diskutiert worden.

In den letzten Jahren sind Techniken entwickelt worden, die durch die Verwendung eines parametrischen Modells den Einfluß der genannten Meßbedingungen auf die Schätzung verringern. Hier ist besonders die von BURG (1967) entwickelte Maximum Entropie Spektral Analyse zu erwähnen (vgl. auch OLBERG & RAKOCZI (1984)). Eine präzise Untersuchung von Immissionsreihen mit dieser Analysentechnik könnte bisher noch verborgene Rhythmen entdecken. Diese spezielle Problematik kann hier jedoch nicht weiter verfolgt werden.□

Die hier gefundenen Resultate bilden die Grundlage für die Konstruktion eines Komponentenmodells der Immissionsreihe. Im nächsten Abschnitt soll jedoch erst noch ein weiteres Charakteristikum der Immissionszeitreihen diskutiert werden: Ihre Autokorreliertheit.

2.4. Autokorrelationsanalyse

Der Ausgangspunkt für die Beschäftigung mit der Kurzzeitprognose von Immissionszeitreihen war deren Autokorreliertheit (HERBARTH (1984)).

Der autokorrelative Zusammenhang der Meßdaten soll hier am Beispiel der Reihe OZON demonstriert werden. In den Anhängen A und B sind die zur Berechnung der Autokorrelation erforderlichen Beziehungen aufgeführt.

Nach Box-Cox-Transformation und Elimination linearer Trendanteile ergeben sich das in Abb. 2-30 dargestellte Korrelogramm (ACF) und die in Abb. 2-31 wiedergegebene partielle Autokorrelationsfunktion (PACF).

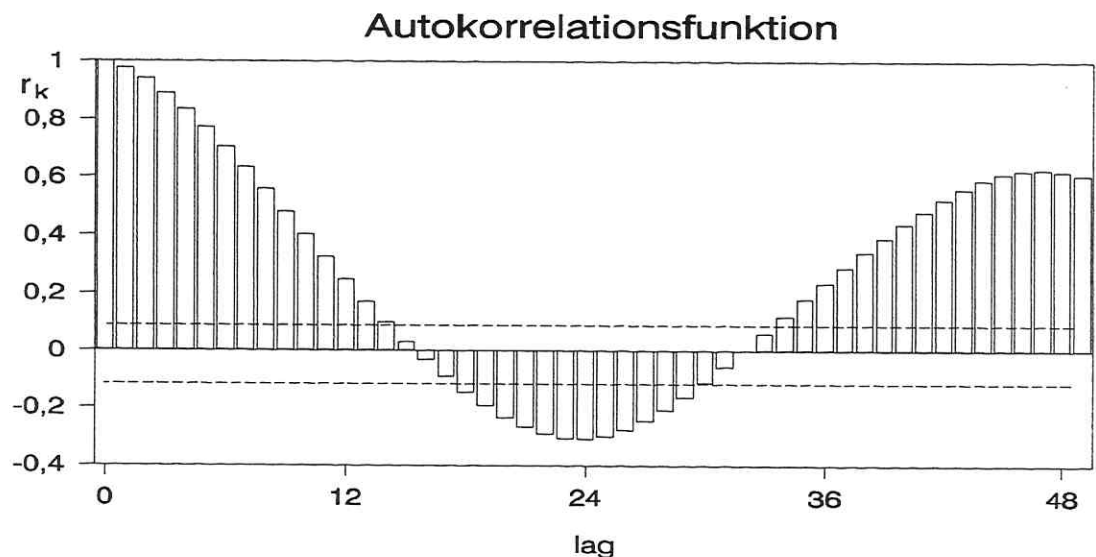


Abb. 2-30: Korrelogramm der OZON-Datenreihe von Abb. 2-14; die gestrichelte Linie markiert das Konfidenzintervall für verschwindende Autokorrelation

Bei der Festlegung der Konfidenzgrenzen für das Korrelogramm geht man von der Annahme einer Reihe aus aufeinanderfolgenden unabhängigen Zufallszahlen (weißes Rauschen) aus. Für große N sind deren empirische Autokorrelationen $r_1, r_2, \dots, r_k$ näherungsweise unabhängige normalverteilte Zufallsvariable mit demselben Erwartungswert ($-1/N$) und derselben Varianz ($1/N$). In das Korrelogramm kann dementsprechend ein Konfidenzband eingezeichnet werden, in dem für jedes $k > 0$ die Konfidenzgrenzen $-1/N \pm 1,96/\sqrt{N}$ zum 95% Konfidenzniveau betragen (SCHLITTGEN & STREITBERG (1991)). Alle Abweichungen von diesem Konfidenzband deuten darauf hin, daß sich die betrachtete Reihe vom weißen Rauschen unterscheidet.

Das Korrelogramm enthält wesentliche Informationen über Abhängigkeiten zwischen den Meßwerten zu verschiedenen Zeitpunkten innerhalb der Reihe. Die bereits bei der Fourieranalyse gefundene Tagesperiode zeigt sich auch hier in einer erhöhten Abhängigkeit von Zeitpunkten im Abstand von 48 Halbstundenschritten ($\text{lag}=48$).

Der erste Wert der ACF zum lag 0 ist aufgrund der Normierung eins. Der Wert zum lag 1 beträgt ≈ 0.9 . Diese Korrelation von 0.9 zwischen zwei direkt aufeinanderfolgenden Meßpunkten wäre im Sinne einer Korrelationsanalyse dahingehend zu interpretieren, daß das Bestimmtheitsmaß $B = r^2 \cdot 100\%$ hier 81% beträgt. Das Bestimmtheitsmaß B drückt aus, welcher Anteil der Varianz der Meßreihe mit dem Regressionsmodell (hier aus der um einen Zeitschritt verschobenen Meßreihe) erklärt werden kann (vgl. SCHÖNWIESE (1992)).

Die Korrelationsanalyse setzt aber u.a. voraus, daß die untersuchten Stichproben voneinander unabhängig sind. Dies ist natürlich nicht der Fall. Eine solche Interpretation kann somit bei Autokorrelationsuntersuchungen nicht angewendet werden. Durch die Autokorrelationskoeffizienten $r_k > 0$ ($k=1, 2, \dots$) wird ja gerade die Abhängigkeit zwischen den Meßwerten ausgedrückt.

Diese Abhängigkeit führt zu einer Erhaltungsneigung, auch Persistenz genannt. Erst bei lag = 12 gerät r_k in den Konfidenzbereich verschwindender Autokorrelation (vgl. Abb. 2-30), ist also vom weißen Rauschen nicht mehr zu unterscheiden. Das Persistenzintervall für die OZON-Reihe beträgt somit 6 Stunden und drückt aus, daß ein Meßwert die Information der letzten 6 Stunden bis zum Meßzeitpunkt beinhaltet.

Die hier feststellbare starke Autokorreliertheit und damit starke Persistenz von Immissionsreihen weckt Hoffnungen auf ihre Verwendbarkeit für Vorhersagen. Dazu ist es erforderlich, die von Box & Jenkins (1971) entwickelten Modelle anzupassen. Bei der Identifikation eines geeigneten ARIMA(p,d,q)-Modells verwendet man neben der ACF auch noch die in Abb. 2-31 gezeigte partielle Autokorrelationsfunktion (PACF).

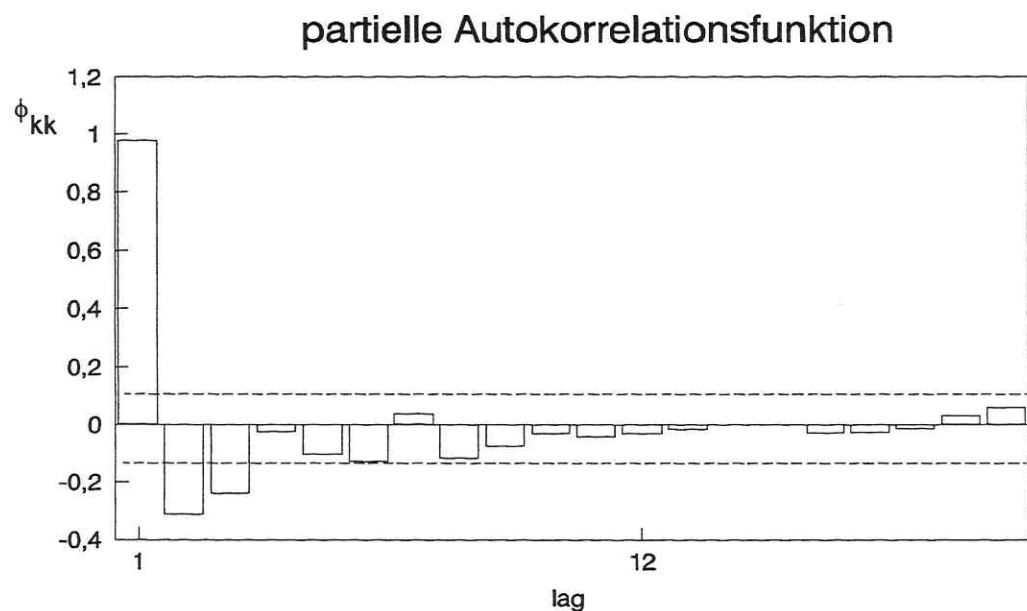


Abb. 2-31: Partielle Autokorrelationsfunktion der OZON-Datenreihe von Abb. 2-14; die gestrichelte Linie markiert das Konfidenzintervall für verschwindende partielle Autokorrelation

Die Beurteilung des Verlaufs von ACF und PACF erfolgt unter Berücksichtigung der eingezeichneten Konfidenzgrenzen.

Der Vertrauensbereich in Abb. 2-31 ist bereits unter der Annahme eines $AR(p)$ -Prozesses eingezeichnet worden. Dafür gilt nämlich (Schlittgen & Streitberg (1991)), daß die partiellen Autokorrelationen der Ordnung $> p$ asymptotisch unabhängig normalverteilt sind, mit dem Erwartungswert 0 und der Varianz $1/N$. Also hat ein 95%-Konfidenzintervall die Grenzen $\pm 2\sqrt{1/N}$.

Im folgenden wird nun die Autokorreliertheit der O_3 -Reihen zur Anpassung von $AR(p)$ -Modellen verwendet.

3. Zeitreihenmodellierung

3.1. Stochastische Modelle

Um Immissionsmodelle aufzustellen, muß man prinzipiell von dem Gesamtsystem "Atmosphäre" ausgehen. Die gemessenen Konzentrationen eines Luftschadstoffs stellen dabei Realisierungen eines Merkmals dieses Systems dar.

Das zeitliche Verhalten von Systemen (z.B. physikalischen, ökologischen, ökonomischen, technischen, medizinischen, etc.) kann mit Hilfe der Systemtheorie nach einheitlichen mathematischen Methoden beschrieben werden. Nach DIN 66201 wird unter einem System eine abgegrenzte Anordnung von aufeinander einwirkenden Gebilden verstanden. Mit Prozeß bezeichnet man die Umformung und/oder den Transport von Materie, Energie und/oder Information. Das Verhalten eines Systems ergibt sich aus dem Verhalten seiner Prozesse.

Die Gewinnung der mathematischen Modelle von Prozessen und die Darstellung des zeitlichen Verhaltens aufgrund gemessener Signale bezeichnet man als Prozeßanalyse bzw. Prozeßidentifikation (ISERMANN (1974)).

Bei der Untersuchung von Prozessen und Systemen sind solche mit örtlich konzentrierten Parametern und solche mit verteilten Parametern zu unterscheiden. Letztere sind sowohl von der Zeit als auch vom Ort abhängig und werden deshalb durch partielle Differentialgleichungen beschrieben. Im Zusammenhang mit Immissionsdaten gibt es dazu Arbeiten von OMATU & SEINFELD (1981, 1982, 1983, 1987).

Einfacher zu untersuchen sind Systeme mit konzentrierten Parametern, bei denen man zur mathematischen Behandlung die Zustandsgrößen als in einem Punkt konzentriert betrachten darf. Sie werden durch gewöhnliche Differentialgleichungen beschrieben.

Das hier betrachtete System Atmosphäre liefert die Immissionsdaten also als Output. Input sind Klima- und Emissionsdaten. Für die angestrebte Modellierung des Immissionsverlaufs sollte jedoch ein minimaler Aufwand betrieben werden. Da die Registrierung aller Emissionsdaten äußerst aufwendig wäre, beschränkt sich die vorliegende Untersuchung darauf, nur den Verlauf des Ausgangssignals, also der gemessenen Immissionswerte zu modellieren. Es ist also lediglich ein Signalprozeß zu untersuchen.

Der als System-Output gemessene Immissionswert wird hier außerdem als repräsentativ für ein bestimmtes räumliches Gebiet betrachtet, so daß von einer Ortsabhängigkeit der Zustandsgrößen abgesehen werden kann. Alle innerhalb des Systems enthaltenen funktionalen Zusammenhänge, also auch die meteorologischen, stecken zwar letztlich summarisch im Output, gehen aber im Detail nicht in die phänomenologischen Modellgleichungen ein.

Bei dem zu analysierenden Signal handelt es sich um ein stochastisches Signal, welches vom Zufall abhängt. Es kann deshalb nicht exakt beschrieben werden und führt nicht zu einem deterministischen Modell. Meßbare stochastische Signale sind jedoch nicht völlig regellos, sondern besitzen innere Zusammenhänge, die dann in dem identifizierten stochastischen Modell zum Ausdruck kommen.

Wegen des zufälligen Charakters lassen sich ähnliche Signalverläufe, die aus statistisch identischen Signalquellen entstehen, zu einem Ensemble (Familie) zusammenfassen. Dieses Ensemble wird durch einen stochastischen Prozeß repräsentiert. Ein einziger Signalverlauf ist eine Realisierung des stochastischen Prozesses.

Der Signalverlauf wird bei dem hier diskutierten Immissionsproblem in Form der aufeinanderfolgenden zeitdiskreten Halbstundenmittelwerte der O₃-Konzentration angegeben. Es handelt sich also um eine Zeitreihe.

Derartige Immissionszeitreihen wurden bereits von (HERBARTH (1982)) im Hinblick auf eine ARIMA-Modellierung (BOX & JENKINS (1971)) untersucht. Dabei erwies sich eine Kombination von harmonischem und autoregressivem Modell als optimal. Die hier realisierte Modellkonstruktion setzt diesen Weg konsequent fort.

Zu diesem Zweck beginnt der nächste Abschnitt mit den einfachsten Modellierungsversuchen nach der ARIMA-Methode. Später wird dann zum komplexeren Komponentenmodell übergegangen.

3.2. ARIMA-Modelle

Ziel dieses Abschnitts ist es, zu untersuchen, welche Prognosemöglichkeiten man mit den ARIMA-Modellen hat, die auf der im Teil 2, Abschnitt 4 festgestellten Autokorreliertheit der Immissionsreihe aufbauen.

Das ARIMA-Modell nach Box & Jenkins (1970) vereinigt das Modell der gleitenden Mittel (MA, engl.: moving average) mit dem autoregressiven Modell (AR). Mit dem Backshiftoperator B ($Bz_t := z_{t-1}$) und den Polynomen $\Phi_p(B)$ und $\Theta_q(B)$ besitzt dieses Modell die Darstellung (Grundlagen s. Anhang B)

$$\Phi_p(B) \nabla^d z_t = \Theta_q(B) \alpha_t. \quad (3-1)$$

Die Zeitreihe z_t geht also aus einem gefilterten weißen Rauschen α_t hervor.

Bevor man sich über eine Prognose Gedanken macht, ist es zunächst erforderlich, ein Modell an die Meßreihe anzupassen. Die Identifikation eines geeigneten Modells, also das Festlegen der Ordnungen der Polynome $\Phi_p(B)$ und $\Theta_q(B)$ und das Schätzen der Parameter erfolgt unter Nutzung der Autokorrelationsfunktion (ACF) und der partiellen Autokorrelationsfunktion (PACF) (vgl. BOX & JENKINS (1970)).

Beispielhaft soll dies an zwei Tagen der Reihe OZON (1. und 2.7.93, UFZ-Leipzig) demonstriert werden. In den Abbn. 3-1..4 sind die Originaldaten, sowie (nach varianzstabilisierender Box-Cox-Transformation) die ACF und PACF wiedergegeben. Am Verhalten von ACF und PACF ist erkennbar, daß sich ein AR(2)-Modell anpassen läßt.

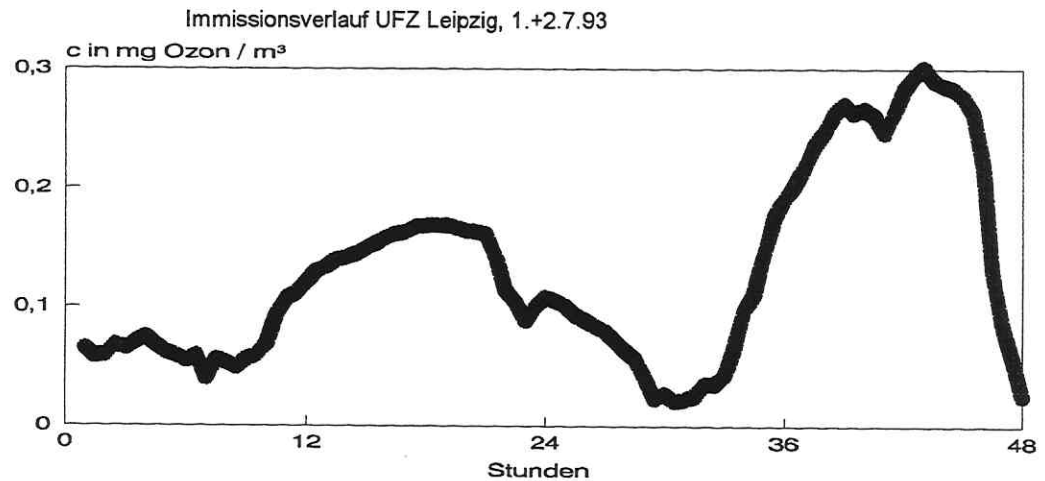


Abb. 3-1: Zwei Tage der OZON-Reihe

Bemerkung (3-1): Eine korrekte Identifikation erfordert noch den Vergleich mit anderen denkbaren Modellen anhand eines Kriteriums (Akaike Information Criterion (AKAIKE (1970)): $AIC := \ln \sigma_{\alpha}^2 + 2p/N$; σ_{α}^2 =Varianz der Residuenreihe α_t , p =Ordnung des AR-Modell-Polynoms Φ , N =Anzahl der Meßwerte der Originalreihe), welches minimal sein muß. Auch dieser Vergleich favorisiert das AR(2)-Modell ($AIC=-4,35$) dicht gefolgt vom AR(1)-Modell ($AIC=-4,30$). □

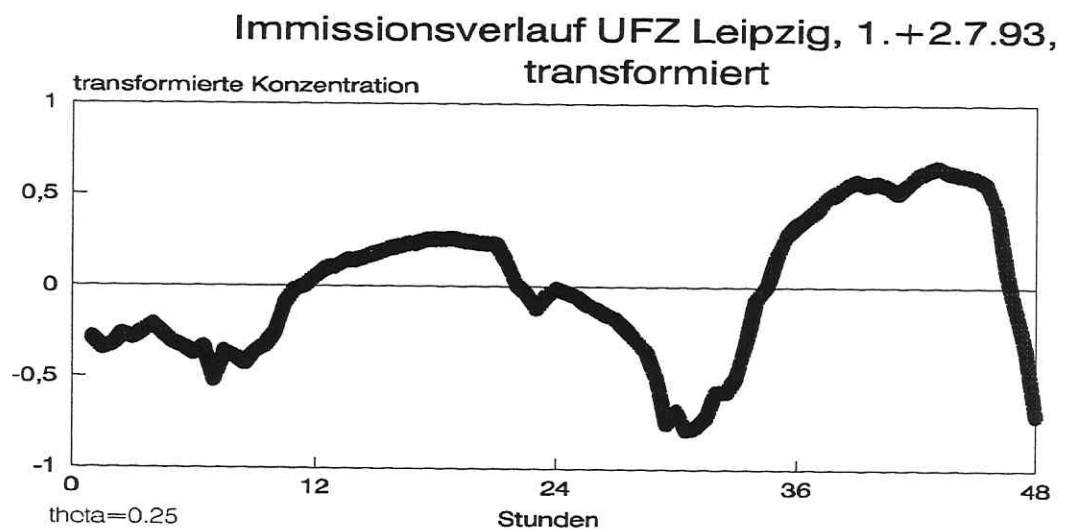


Abb. 3-2: Daten aus Abb. 3-1 nach Box-Cox-Transformation und Elimination des Mittelwertes.

Die Schätzung der Parameter ergibt:

$$\phi_1 = 1.37; \quad \phi_2 = -0.43.$$

Bemerkung (3-2): Nach den Schätzformeln von (BOX & JENKINS (1970)) berechnen sich beim AR(2)-Modell ϕ_1 und ϕ_2 entsprechend den Yule-Walker-Gleichungen aus den Autokorrelationskoeffizienten r_1 und r_2 zu

$$\phi_1 = r_1(1-r_2)/(1-r_1^2) \quad \text{und} \quad \phi_2 = (r_2-r_1^2)/(1-r_1^2). \square$$

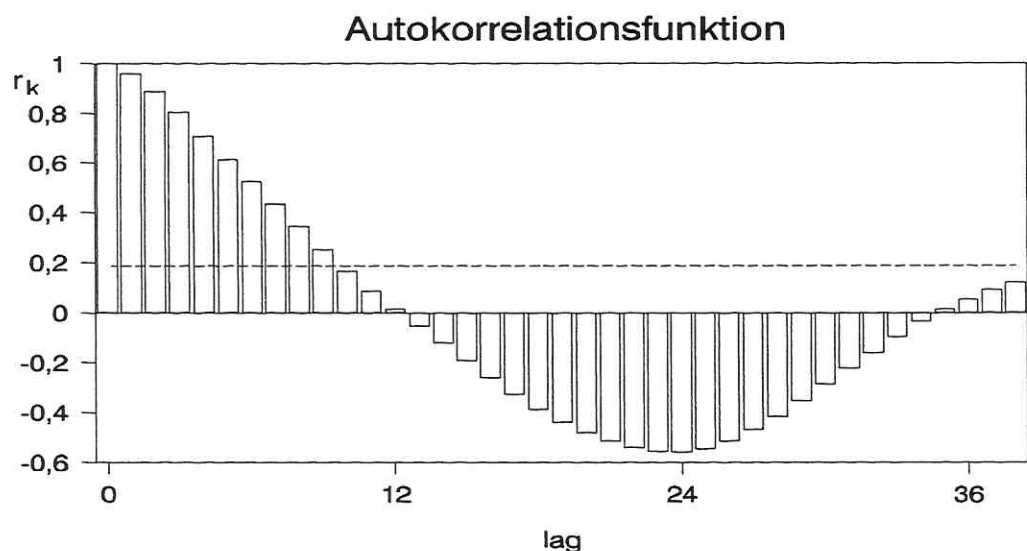


Abb. 3-3: Autokorrelationsfunktion der varianzstabilisierten Daten von Abb. 3-2

Somit kann die in Abb. 3-1 gezeigte Meßreihe nach Elimination ($z_t \rightarrow z_t - m$) ihres Mittelwertes m mit dem AR(2)-Modell

$$(1 - 1.37 B + 0.43 B^2) z_t = \alpha_t \quad (3-2)$$

modelliert werden. Gemäß Anhang C berechnet sich dann die Prognose $^*z_t(l)$ ab dem Zeitpunkt t für einen l Zeitschritte voraus liegenden Wert aus:

$$\begin{aligned}
 {}^*z_t(1) &= 1.37 z_t - 0.43 z_{t-1} \\
 {}^*z_t(2) &= 1.37 {}^*z_t(1) - 0.43 z_t \\
 &\dots \\
 {}^*z_t(l) &= 1.37 {}^*z_t(l-1) - 0.43 {}^*z_t(l-2).
 \end{aligned}
 \tag{3-3}$$

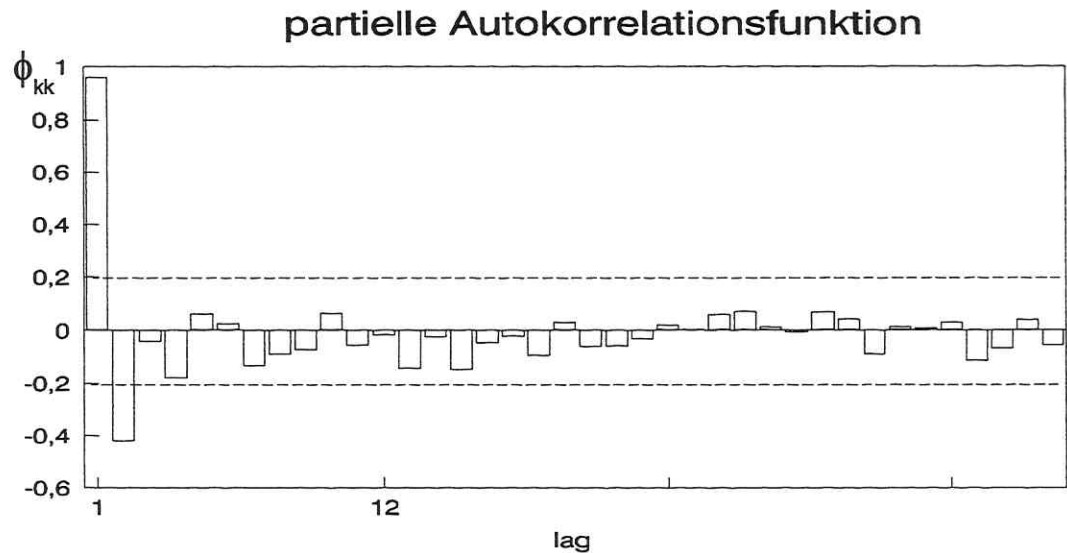


Abb. 3-4: Partielle Autokorrelationsfunktion der varianzstabilisierten Daten von Abb. 3-2

In Abb. 3-5 sind zwei solche Prognosen zu sehen, die zu verschiedenen Zeitpunkten erstellt wurden. Bei günstiger Wahl des Prognosezeitpunktes (hier die Prognose nach 42 Stunden) wird der künftige Verlauf der Meßkurve im wesentlichen vorhergesagt, was Abb. 3-5 deutlich erkennen läßt. Andererseits liegt die zweite Prognose (nach 32 Std.) völlig daneben.

Beide Prognosen spiegeln letztendlich lediglich das exponentielle Abklingverhalten in Richtung auf den Mittelwert wider, welches durch die Prognosegleichungen rekursiv ausgedrückt wird.

Wird nun die Prognose zu einem Zeitpunkt gestartet, an dem in der Meßreihe ein solches Abklingen einsetzt, so kommt es zu einer adäquaten Vorhersage. Eine derartig günstige Situation wird sich aber nur zufällig ergeben. Im allgemeinen kann die AR(2)-Prognose das Verhalten der Immissionsreihe nicht vorhersagen.

Vor dem Prognosepunkt ist in Abb. 3-5 der Wert der Prognosekurve aus den letzten beiden Meßwerten stets neu berechnet worden (vgl. erste Prognoseformel). Dieses rekursive Verfahren legt nahe, sich auf eine Prognose für den nächsten Wert zu beschränken.

Dann kann man unter Nutzung aller bisher erfolgten Messungen (bzw. der letzten 48) ständig fortlaufend neu die Parameter ϕ_1 und ϕ_2 schätzen und einen Prognosewert angeben.

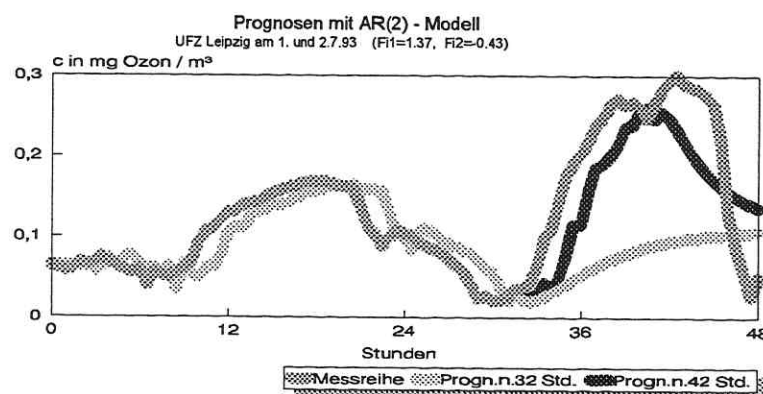


Abb. 3-5: Prognosen mit einem angepaßten AR(2)-Modell, die zu zwei ver- schiedenen Zeitpunkten gestartet wurden.

Eine derartige Prognose ist in Abb. 3-6 gezeigt. Auch sie liefert wenig Informationen, da sie der gedämpften und zeitverschobenen Meßkurve entspricht.

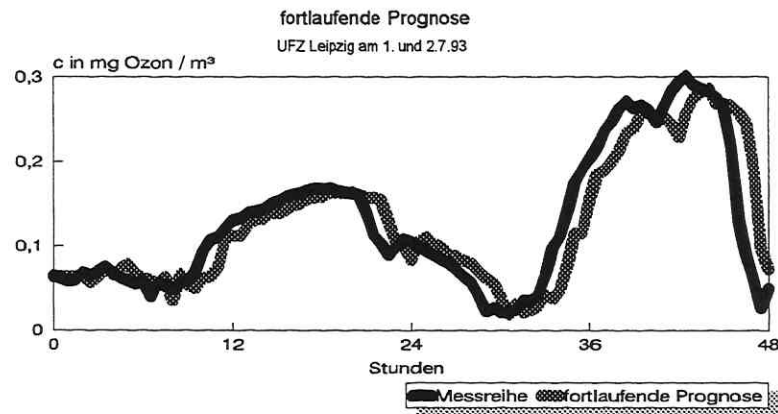


Abb. 3-6: Fortlaufend neu erstellte Prognose

Abschließend läßt sich feststellen, daß ein reines ARIMA-Modell die gegebenen Immissionszeitreihen nicht so zufriedenstellend abbildet, daß damit eine adäquate Vorhersage des Reihenverlaufs möglich scheint. Da eine periodische Struktur erkennbar ist, bieten sich Versuche mit saisonalen Modellen oder eine vorherige Abtrennung harmonischer Komponenten (Fourieranalyse) an. Auf einer solchen Zerlegung im spektralen Bereich beruht das im nächsten Abschnitt konstruierte Komponentenmodell.

3.3. Komponentenmodell

Bisher wurden die Möglichkeiten der Modellierung und Prognose von O₃-Immissionsdaten mit ARIMA-Modellen untersucht. Die Grundlage war dabei der autokorrelative Zusammenhang der Meßreihe. Weitere Eigenschaften, wie z.B. das Vorhandensein periodischer Strukturen, waren bestenfalls implizit im Modell enthalten. Auch die Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes der Reihe, also ihr instationäres Verhalten ist bisher nicht explizit einbezogen worden.

An dieser Stelle soll nun ein Modelltyp eingeführt werden, der es erlaubt, die in der Immissionsreihe enthaltenen Phänomene explizit zu behandeln. Es zeigte sich im Ergebnis der Untersuchungen des spektralen Verhaltens von O₃-Serien $\{z_t\}$ mit Hilfe des Periodogramms im Teil 1, Abschnitt 3, daß es günstig ist, $\{z_t\}$ durch Zerlegung in das folgende **Komponentenmodell** aufzuspalten:

$$z_t = F^{-1} (T_t + S1_t + R_t) \quad (3-15)$$

Mit F^{-1} soll die varianzstabilisierende Transformation (siehe Teil 2, Abschnitt 2) symbolisiert werden. Die Komponenten weisen zwei wesentliche Eigenschaften auf:

Zum einen ist die Komponentenzerlegung eine Aufspaltung im spektralen Bereich. Das bedeutet aufgrund der Orthogonalität von Fouriertermen, daß die resultierenden Komponenten voneinander unabhängig sind. Man kann also jede Komponente für sich betrachten. Wechselwirkungen gibt es nicht. Wie gut die Zerlegung ist, wird natürlich von der Durchlaßcharakteristik des verwendeten Filters bestimmt (vgl. Anhang C und D). Dementsprechend fällt dann auch die Unabhängigkeit der Teilreihen aus.

Zum anderen bildet jede Komponente einen anderen in der Meßreihe enthaltenen phänomenologischen Effekt ab. Die Modellbestandteile verhalten sich also ganz verschieden und müssen deshalb selbst auch wieder mit Modellen unterschiedlicher Struktur beschrieben werden:

Die aufgeführten Komponenten lassen sich durch Transformation und anschließende Filterung aus der Meßreihe extrahieren. Eine Erläuterung des dazu verwendeten Filteralgorithmus folgt im nächsten Abschnitt. In Abb. 3-11 wird das Vorgehen an der Reihe OZON verdeutlicht.

Die Trendkomponente $\{T_t\}$ beschreibt die niederfrequentesten Veränderungen der Immissionskonzentration (Frequenz $< 1/24h$). Die Abschneidefrequenz des Glättungsfilters (vgl. Anh. D) wurde gerade so gewählt, daß die Trendkomponente die Tagesperiode noch nicht enthält. Die Güte der Glättung läßt sich durch Betrachten der Ableitung der Trendfunktion beurteilen, die eine leichte Wellenbewegung des Trends deutlicher als dieser selbst sichtbar macht und die vom Kalman-Algorithmus automatisch mitgeliefert wird.

Der Trend von O₃-Daten ist eine nichtperiodische Funktion, die das instationäre Verhalten des Erwartungswertes beschreibt. Er wird im Teil 4, Abschnitt 2 noch genauer analysiert. Da sich Smogepisoden sowie das Niveau der Immission ausschließlich in der Trendfunktion zeigen, ist diese von besonderem Interesse. Wegen der Unabhängigkeit von den anderen Komponenten kann man sich also bei weiteren Untersuchungen von Smogepisoden allein auf den Trend konzentrieren, was im Teil 4 erfolgt.

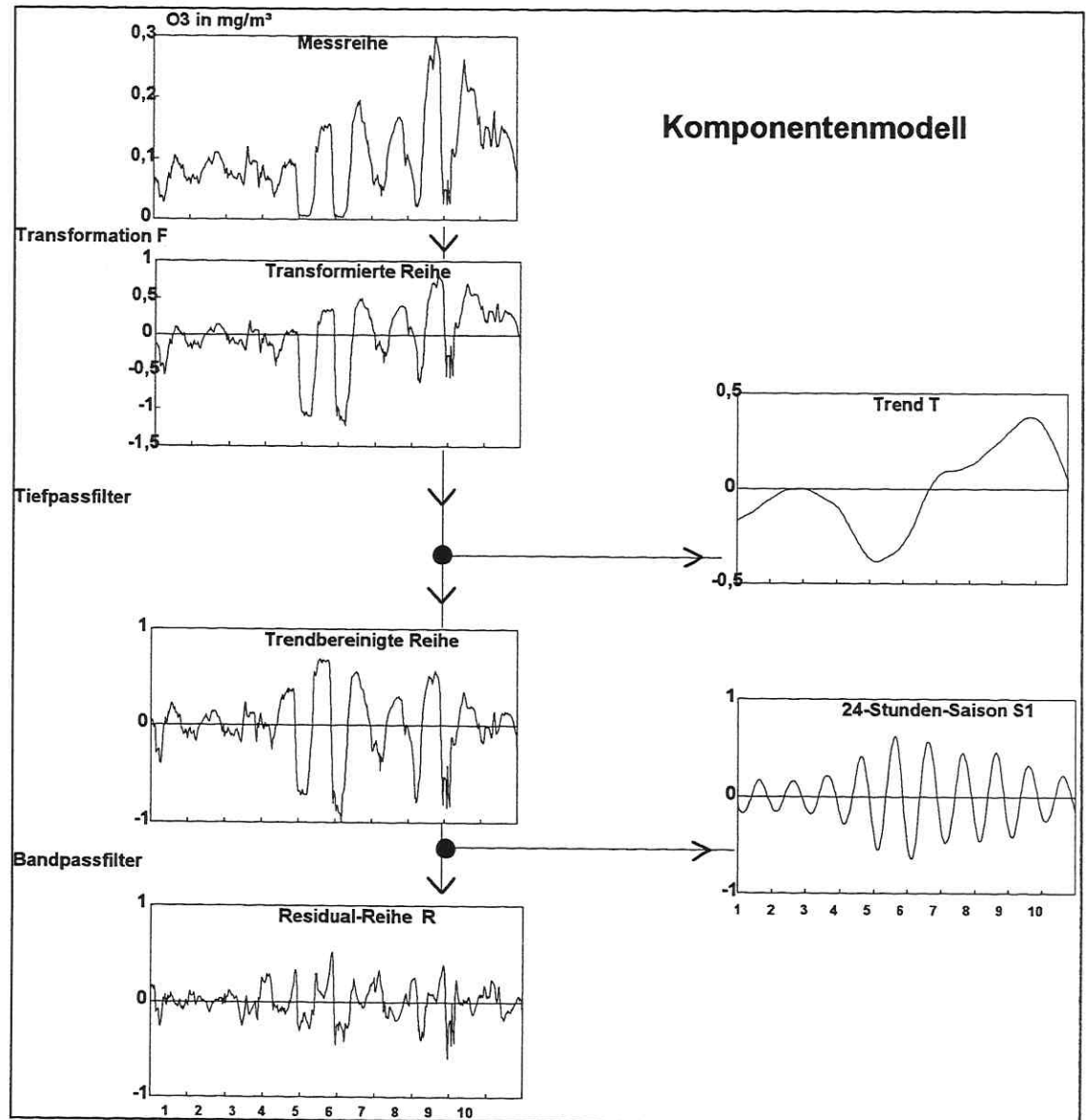


Abb. 3-11: Darstellung der aus der Reihe OZON mit dem Kalman-Filter extrahierten Komponenten ($NVR(\text{Trend}) = 0.00001$, $NVR(S1) = NVR(S2) = 0.001$)

Die Saisonkomponente $\{S1_t\}$ gibt den Tagesrhythmus der Sonneneinstrahlung wider. Da dieser letztendlich astronomisch festgelegt ist, handelt es sich um eine stabile Periodizität, die mit einer harmonischen Regression modelliert werden kann.

Die Restkomponente $\{R_t\}$ trägt der Tatsache Rechnung, daß es sich um einen stochastisch beeinflussten Prozeß handelt. Sie kann mit einem Markov-Prozeß AR(1) modelliert werden.

Mit diesem Komponentenmodell wird man den in der O₃-Immissionsreihe enthaltenen unterschiedlichen Phänomenen gerecht. Durch ihre Isolierung werden sie einer ihrem Charakter entsprechenden weiteren Modellierung zugänglich gemacht.

Bemerkung (3-4): Bei Zeitreihen von Lufttemperaturen im Abstand von 6 Stunden findet ESSENWANGER (1980) ähnliche Ergebnisse. Die Reihen lassen sich in drei Komponenten zerlegen: Weißes (oder rotes) Rauschen, Zyklen und Quasi-Zyklen. Die Quasi-Zyklen sind dabei durch eine feste Periode aber zeitabhängige Amplitude und Phasenlage charakterisiert. Er kann einige dieser Quasi-Zyklen mit synoptisch-skaligen Phänomenen in Verbindung bringen.□

Eine Zerlegung der Reihe in Komponenten bringt Vorteile für die Interpretation und die Vorhersage, da jede Komponente eine eigene Charakteristik und Dynamik aufweist. So kann man den Trend als Ergebnis der permanenten Einwirkung äußerer Kräfte auffassen, beispielsweise als Widerspiegelung von Schadstoffemission und Großwetterlage. Die Periodizitäten können den Schwingungen des untersuchten physikalischen Systems (hier der Atmosphäre) zugeordnet werden.

Bei der Anwendung solcher Komponentenmodelle sollte jedoch nicht vergessen werden, daß die Existenz der Komponenten und ihre additive Überlagerung nicht a priori gegeben, sondern lediglich eine Erfahrungstatsache ist, die sich aus der Analyse umfangreichen Datenmaterials ergibt und auch für die Zukunft immer wieder neu verifiziert werden muß.

Zur Interpretation des Verhaltens der Trendkomponente und der Amplitude der Tagessaison wird der zur gleichen Zeit gemessene Verlauf der Globalstrahlung an der Klimastation Schkeuditz herangezogen.

Der Globalstrahlungsmessung liegen 10-Minuten-Mittelwerte zugrunde. Durch den Einfluß der Bewölkung wird die direkte Sonneneinstrahlung zeitweise ausgeblendet, so daß es zu sprunghaften Änderungen des 10-Minuten-Werts kommt. Die Reihe der Halbstundenmittel wurde dann aus den 10-Minuten-Mittelwerten berechnet und zeigt den in Abb. 3-12 dargestellten Verlauf.

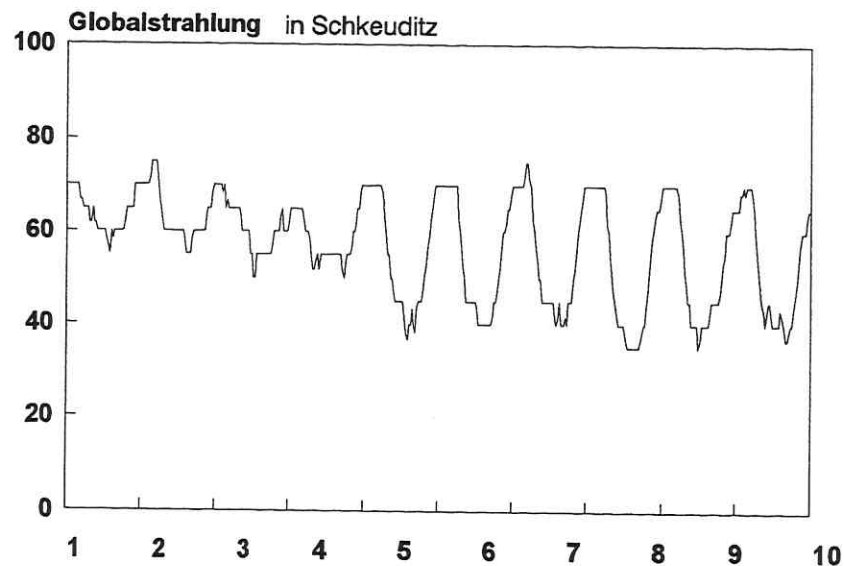


Abb. 3-12: Verlauf der Halbstundenmittel der Globalstrahlung an der Klimastation Schkeuditz in der Zeit vom 25.6.-4.7.93 (aus MÜLLER (1994))

Bemerkenswert ist die am 5. Tag (29.6.93) einsetzende stärkere Ausprägung des Tagesrhythmus, die mit einer größeren Sonnenscheindauer verbunden ist. Damit eng verbunden ist im Konzentrationsverlauf des Ozons eine verstärkte Tagesrhythmik und ein Anstieg der Trendkomponente (vgl. Abb. 3-11).

3.4. Zustandsraummodelle

Für die Zerlegung einer gemessenen Immissionsreihe in die im Abschnitt 3.3. beschriebenen Komponenten muß man sich geeigneter Filteralgorithmen bedienen. Das bedeutet, daß die Filter in der Lage sein müssen, die bei den Untersuchungen im Teil 2, Abschnitt 3 gefundenen Spektralbereiche möglichst sauber voneinander zu trennen.

Interessanterweise ergibt sich ein für diesen Zweck sehr nützlicher Filteralgorithmus aus einer Modellierungsaufgabe der Regelungstechnik, bei der es um die Schätzung einer nicht meßbaren Zustandsgröße geht. Das Modell wird als Zustandsraummodell bezeichnet. Fundamentale Arbeiten dazu wurden von Kalman geleistet (vgl. KALMAN & BUCY (1961)), obwohl die statistischen Grundlagen bereits von PLACKETT (1950) formuliert wurden.

"Zustandsraum" meint eine Modelldarstellung in Form einer oder mehrerer Bewegungsgleichungen der unbekannten Zustandsgröße und die zusätzliche Angabe einer Beobachtungsgleichung nach der die Zustandsgröße mit der gemessenen Beobachtungsgröße zusammenhängt. Sowohl Zustands- als auch Beobachtungsgleichung enthalten dabei in der Regel stochastische Einflüsse, z.B. Rauschterme (μ und η).

Das lineare Zustandsraummodell für den vektoriellen Zustand $\mathbf{x}_t$ lautet dann:

$$\text{Beobachtungsgleichung} \quad z_t = \mathbf{H}(t-1) \mathbf{x}_t + \mu_t \quad (3-16)$$

$$\text{Zustandsgleichung} \quad \mathbf{x}_t = \mathbf{F}(t-1) \mathbf{x}_{t-1} + \mathbf{G}(t-1) \eta_{t-1} \quad (3-17)$$

$$\text{wobei } \mathbf{x}_t = (y_t \ x_t \ \dots)^T \text{ ist.} \quad (3-18)$$

Die Schätzung des unbekannten Zustandes $\mathbf{x}_t$, der hier die Komponenten des Modells aus Abschnitt 3 zusammenfaßt, aus der gemessenen Beobachtungsgröße z_t erfolgt mit einem rekursiven Verfahren.

Die multidisziplinäre Anwendung der Zustandsraummodellierung hat zu einer sehr uneinheitlichen Terminologie geführt. Während die ingenieur-technische Literatur, deren Terminologie hier benutzt werden soll, vom "Kalman-Filter" spricht, bevorzugen Statistiker oft die Bezeichnungen "Bayes'sche Vorhersage" oder "Dynamisches Lineares Modell" (HARRISON & STEVENS (1976), FILDES (1983)) oder "Lineare Dynamische Regression" (DUNCAN & HORN (1972)).

Die komplette Komponentenerlegung des Abschnitts 3 benötigt eine Kombination verschiedener Filter. Dazu muß ein Kalman-Filter verwendet werden, daß auf einem Zustandsraummodell (3-16) + (3-17) mit folgender Struktur basiert.

Beobachtungsgleichung $z_t = T_t + S1_t + S2_t + R_t$

$$= T_t + 11\theta_t \cos(2\pi f_1) + 21\theta_t \sin(2\pi f_1) + R_t, \quad (3-19)$$

was sich auch schreiben läßt als

$$z_t = \mathbf{H}(t-1) \mathbf{x}_t + \mu_t \quad (3-20)$$

mit

$$\mathbf{x}_t = (T_t \ D_t \ 11\theta_t \ 21\theta_t)^T, \quad (3-21)$$

$$\mathbf{H}(t-1) = (1 \ 0 \ \cos(2\pi f_1) \ \sin(2\pi f_1)), \quad (3-22)$$

$$\mu_t = R_t, \quad (3-23)$$

und

$$\text{Zustandsgleichung} \quad \mathbf{x}_t = \mathbf{F} \mathbf{x}_{t-1} + \mathbf{G} \boldsymbol{\eta}_{t-1} \quad (3-24)$$

mit

$$\boldsymbol{\eta}_t = (0 \quad T\eta_t \quad 11\eta_t \quad 21\eta_t)^T \quad (3-25)$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad G_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i=j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad (3-26)$$

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \text{NVR}(T) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \text{NVR}(1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \text{NVR}(1) \end{pmatrix} = \text{cov}(\boldsymbol{\eta}). \quad (3-27)$$

Dabei wurde als Glättungsstärke für den Trend $\text{NVR}(T) = 0.00001$ und für den periodischen Anteil $\text{NVR}(1) = 0.01$ gewählt. Eine detaillierte Beschreibung der Zustandsraummodelle und der darauf aufbauenden Filteralgorithmen ist im Anhang D nachzulesen.

Dem Trend liegt also ein IRW-Modell und den Saisonkomponenten ein DHR-Modell zugrunde.

4. Trendextrapolation

4.1. Interpolations- und Extrapolationsverhalten beim Kalman-Filter

Im vorigen Abschnitt wurde die Meßreihe in unabhängige Komponenten mit verschiedenen typischen Eigenschaften zerlegt, was einer Aufspaltung im Spektralbereich entspricht. Die Auftrennung der Reihe geschah mit einem Kalman-Filter. Diese Herangehensweise verfolgt die Aufgabenstellung der Modellierung einer Reihe. Für die Modellbildung ist es dabei wichtig, ein Kalman-Filter und damit ein Zustandsraummodell (welches im Anhang D erläutert wird) mit geeignetem spektralen Filterverhalten zu wählen.

Die in der vorliegenden Studie untersuchte Fragestellung soll jedoch primär die der Prognose einer Zeitserie sein. Sicher ist auch gerade in diesem Fall ein adäquates Modell für den Reihenverlauf wichtig, mit dem dann eine Extrapolation vorgenommen werden kann. Das für die Komponentenzerlegung verwendete Kalman-Filter stellt bereits ein solches Modell dar, das durch eine vorgegebene Zustandsgleichung definiert ist (vgl. Anhang D).

Da jedoch der Vorhersagebereich dadurch charakterisiert ist, daß keine Meßwerte vorliegen, ist zu fragen, wie das Modell in diesem Fall reagiert. Eine analoge Problematik wie bei der Vorhersage, also der Extrapolation, liegt bei der Interpolation von Meßlücken, die durch Fehlwerte entstanden sind, vor. Dabei ist eine Interpolation gewissermaßen eine "Lückenschließung" von zwei Seiten her, eine Extrapolation dagegen ein von einer Seite ausgehendes Verfahren.

Ein gegebenes Kalman-Filter besitzt also wegen des zugrunde liegenden Zustandsraummodells neben seinem *spektralen Durchlaßverhalten*, welches beispielhaft im Anhang D erläutert wird, noch ein typisches *Interpolations- und Extrapolationsverhalten*. Letzteres wird bei innerhalb oder außerhalb der Meßreihe vorliegenden Fehlwerten wirksam.

Für die Anpassung des Modells wird natürlich ausschließlich der Bereich der vorliegenden Meßdaten und deren Frequenzspektrum genutzt. Für das Prognose-Verhalten eines Kalman-Filters sind aber seine Interpolations- und Extrapolationseigenschaften wichtiger, als seine spektralen Eigenschaften! Die Modellanpassung erfolgt auf der Basis des spektralen Verhaltens, die Prognose mit dem Modell nutzt dann aber dessen Interpolations- und Extrapolationsverhalten. Diese Erkenntnis drückt ein **Dilemma der Zeitreihenprognose** aus und verdeutlicht, warum man streng zwischen Modellierung und Prognose unterscheiden sollte.

Methoden zur Zeitreihenmodellierung sind in der Vergangenheit intensiv entwickelt worden und in einschlägigen Softwarepaketen verfügbar (z.B. SAS, SPSS, microCAPTAIN). Wie obige Diskussion zeigt, ist jedoch die Anwendung der damit gefundenen Modelle für eine Prognose zu hinterfragen.

Dieser 3. Teil soll deshalb die bei der Prognose mit dem Kalman-Filter auftretenden Effekte transparent machen und zu ersten Vorschlägen für eine Verbesserung des Prognosealgorithmus führen. Damit wird jetzt über die Anwendung bekannter Algorithmen hinausgegangen und eine methodische Weiterentwicklung vorgenommen. Wegen ihrer Bedeutung für die Smogepisoden sollen die auftretenden Fragen speziell an der Trendkomponente der Meßreihe diskutiert werden.

Anhand der übersichtlichen Zustandsraumdarstellung des dem Kalman-Filter zugrunde liegenden Modells lassen sich bereits theoretische Schlüsse über das Verhalten bei Fehlwerten ziehen. Dazu soll das Interpolationsverhalten an folgenden Beispielen betrachtet werden:

Beispiel (4-1): Die Zustandsraumdarstellung des verwendeten Trendmodells (integrated random walk)

$$\begin{array}{lll}
 \text{Beobachtungsgleichung} & z_t = y_t + \mu_t & \mu_t = \text{weißes Beobachtungsrauschen} \\
 & & (4-1) \\
 \text{Zustandsgleichungen} & y_t = y_{t-1} + x_{t-1} & (\text{IRW-Modell}) \\
 & x_t = x_{t-1} + \eta_t & \eta_t = \text{weißes Rauschen}
 \end{array}$$

Der Kalman-Filteralgorithmus für dieses IRW-Trendmodell soll kurz mit IRWSMOOTH bezeichnet werden. Er schätzt aus der beobachteten Meßreihe $\{z_t\}$ den Verlauf des Zustandes $\{y_t\}$, also der Trendkomponente. In den Bereichen, in denen keine Information über die Beobachtungsgröße z_t vorliegt (Fehlwerte), muß man davon ausgehen, daß sich der Zustand entsprechend seiner Modellgleichung in ungestörter Weise entwickelt. D.h., die Zustandsgleichung gilt unverändert, jedoch ist für η_t dessen Erwartungswert $E[\eta_t] = 0$ zu verwenden.

$$\begin{array}{ll}
 \text{Damit ergeben sich aus (4-1) die Zustandsgleichungen} & y_t = y_{t-1} + x_{t-1} \\
 & x_t = x_{t-1}
 \end{array} \quad (4-2)$$

Der Zustand y_t ist also in Bereichen mit Fehlwerten durch einen *konstanten Zuwachs* x_t gekennzeichnet, der Filteralgorithmus versucht die Reihe y_t *linear* zu interpolieren bzw. extrapolieren.

Für den Fall einer Interpolation ist dies in der Abb. 4-1 dargestellt. Eine unterschiedlich starke Glättung, die mit dem NVR eingestellt wird (s. Anhang D), wirkt sich bei der Interpolation in verschiedenen großen Anstiegen aus. Da die Filterung bei einer Interpolation zweiseitig ist, versucht der Algorithmus in beiden Richtungen die Reihe mit jeweils konstantem Anstieg fortzusetzen. Natürlich muß dann im mittleren Bereich ein Übergang gefunden werden.

Es ist erkennbar, daß das Ergebnis der Interpolation von der Wahl der Glättungsstärke (NVR) abhängt. Natürlich spielt auch die Breite des Bereiches der Fehlwerte eine Rolle.□

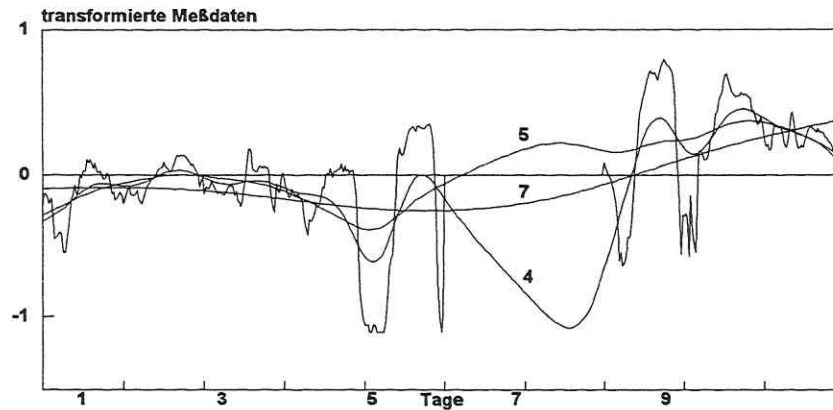


Abb. 4-1: Verlauf der transformierten OZON-Reihe mit Fehlern an den Tagen 6 und 7, die mit IRWSMOOTH bei verschiedenen NVR interpoliert wurden ($-\log(\text{NVR})=4, 5, 7$).

Beispiel (4-2): Ein alternatives Trendmodell (double integrated random walk)

Natürlich könnte man anstelle des IRW-Modells auch ein DIRW-Modell (s. Anhang D) für den Trend verwenden. Im Spektralbereich hätte das entsprechende Kalman-Filter, welches ebenfalls ein Tiefpaß ist, eine andere Abschneidefrequenz, so daß zur Abtrennung derselben Trendfunktion wie beim IRW-Glätter ein entsprechend anderer NVR-Wert gewählt werden müßte. Der Vergleich beider Modelle soll anhand von Abb. 4-2 diskutiert werden:

Wählt man für jedes der beiden Filter eine passende Glättungsstärke (z.B. $\text{NVR} = 10^{-5}$ für IRWSMOOTH und 10^{-7} für DIRWSMOOTH), so lassen sich sehr ähnliche Filterergebnisse erzielen: Mit beiden Methoden erhält man nahezu gleich verlaufende Trendfunktionen, jedoch nur solange Meßdaten vorliegen!.

Deutliche Unterschiede kann man dagegen im **Interpolationsbereich** der Abb. 4-2 erkennen: Da hier für die Zustandsgleichungen des DIRW-Modells gilt:

$$\begin{aligned} y_t &= y_{t-1} + x_{t-1} \\ x_t &= x_{t-1} + w_{t-1} \\ w_t &= w_{t-1}, \end{aligned} \tag{4-3}$$

versucht also der entsprechende Filteralgorithmus (DIRWSMOOTH) die zweite Differenz w_t der Zustandswerte y_t konstant zu halten. Die Reihe wird also nicht linear, wie beim IRW-Modell, sondern parabelförmig fortgesetzt. Dies führt zu sehr verschiedenem Interpolations- und natürlich analog auch verschiedenem Extrapolationsverhalten (vgl. Abb. 4-2).□

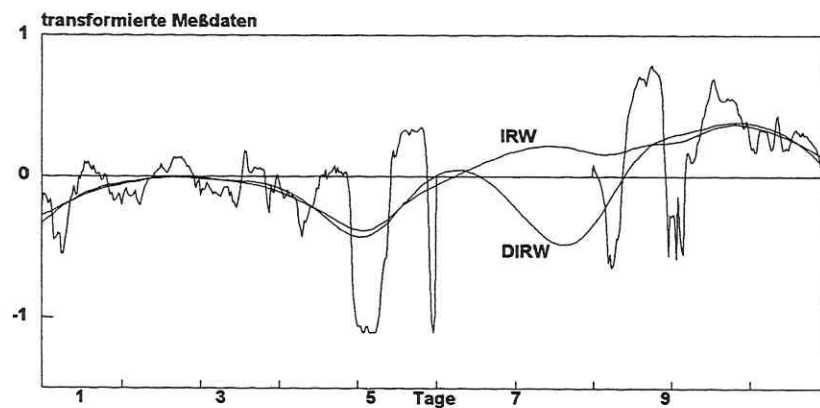


Abb. 4-2: Verlauf der transformierten OZON-Reihe mit Fehlern an den Tagen 6 und 7, die mit IRWSMOOTH bzw. DIRWSMOOTH interpoliert wurden (NVR = 0,00001 bzw. 0,0000001).

Beispiel (4-3): Die Zustandsraumdarstellung des Periodenmodells (dynamic harmonic regression)

Beobachtungsgleichung	$z_t = a_t \cos(\omega t) + b_t \sin(\omega t) + \mu_t$	(4-4)
Zustandsgleichungen	$a_t = a_{t-1} + \eta_1 t$ $b_t = b_{t-1} + \eta_2 t$	

(RW-Modelle)

Die Beobachtungsgleichung ist die Gleichung einer harmonischen Regression. Durch das Zulassen der Zeitabhängigkeit der Regressionskoeffizienten a_t und b_t , die entsprechend ihrer Zustandsgleichungen als random walk (RW) modelliert wird, filtert der dazugehörige Kalman-Algorithmus (DHR) nicht nur exakt eine Frequenz (ω) aus der Meßreihe heraus (wie dies eine "normale" harmonische Regression mit konstanten Parametern a und b tun würde), sondern ein um ω gelegenes Frequenzband, dessen Breite durch die Glättungsstärke $NVR = \text{cov}(\varepsilon_1)/\text{cov}(\mu) = \text{cov}(\varepsilon_2)/\text{cov}(\mu)$ bestimmt wird (NG et al. (1990)).

Die Zustandsgleichungen lassen erkennen, daß bei Fehlwerten die Koeffizienten a und b konstant gehalten werden, d.h., das Filter für das Periodenmodell setzt die Periode ($1/\omega$) mit konstanter Amplitude fort.□

Die Untersuchungen zum Interpolations- und Extrapolationsverhalten des Kalman-Algorithmus zeigen an den Beispielen 4-1 bis 4-3, daß die Wahl des zugrundeliegenden Zustandsraummodells eine sehr wesentliche Rolle spielt. Es ist also bei der Verwendung des Kalman-Filters für die **Prognose** nicht nur auf das aus einem Modellansatz resultierende spektrale Filterverhalten zu achten (wie dies bei der Zeitreihenmodellierung wesentlich ist), sondern auch auf das Verhalten bei Vorliegen von Fehlwerten.

So steckt beispielsweise in einer Prognose von Immissionsreihen mit dem Periodenmodell der dynamischen harmonischen Regression (DHR) die Annahme, daß die betrachtete Periodizität in der nahen Zukunft stabil und mit konstanter Amplitude erhalten bleibt.

Die Prognose des Trends einer Immissionsreihe mit dem integrated random walk Modell (IRW) geht hingegen davon aus, daß sich der Trend vom Prognosepunkt aus linear extrapolieren läßt. Wie der nachfolgende Abschnitt zeigen wird, ist jedoch ein solcher Verlauf für die Trendfunktion absolut untypisch. Aus diesem Grunde erscheint eine Trendprognose mit dem IRWSMOOTH-Algorithmus unzweckmäßig. Die Anwendung dieses Filters liegt offenbar mehr im Bereich der Modellierung, wo es zur Abtrennung des niederfrequenten Anteils einer Zeitreihe sehr geeignet ist.

4.2. Trendfunktion

Die Untersuchungen zum Interpolations- und Extrapolationsverhalten von Filtern speziell für die Trendkomponente werfen die Frage nach charakteristischen Eigenschaften dieser Komponente auf. Erst mit Kenntnis dieser typischen Eigenschaften ist man in der Lage, einen adäquaten Modellansatz zu machen, der dann nicht nur für eine Modellierung, sondern auch für eine Extrapolation des Trends genutzt werden kann.

Man könnte befürchten, daß der in IRWSMOOTH bereits enthaltene Modellansatz bei der Glättung in irgendeiner Weise der Trendkomponente aufgeprägt wird. Dies ist jedoch nicht der Fall. Das Filter wirkt lediglich als Tiefpaß, so daß man davon ausgehen kann, daß die Trendfunktion ein reales Charakteristikum der Meßreihe ist. Das verwendete Zustandsraummodell kommt ausschließlich in Bereichen mit Fehlwerten zum Tragen.

Eine aus einer Immissionsmeßreihe extrahierte Trendfunktion soll in Abb. 4-3 genauer betrachtet werden.

Die Tatsache, daß visuell keinerlei Tagesperiode erkennbar ist, läßt vermuten, daß der Tiefpaß aus den Originaldaten wirklich nur den interessierenden Frequenzbereich herausgefiltert hat. Zur Kontrolle wurde die vom Kalman-Algorithmus automatisch mit berechnete Ableitung der Trendfunktion betrachtet. Durch das Differenzieren würden kleine Schwankungen deutlicher hervortreten. Aber auch die Ableitungsfunktion zeigt visuell keine Tagesperiode, was obige Vermutung bestätigt.

Charakteristisch ist nun, daß es in dieser Trendkomponente keine festen Periodizitäten gibt. Einsetzende Schwingungsvorgänge lösen sich später wieder auf und man stellt außerdem bei genauer Betrachtung fest, daß sich die Periodenlänge im Laufe der Zeit ändert.

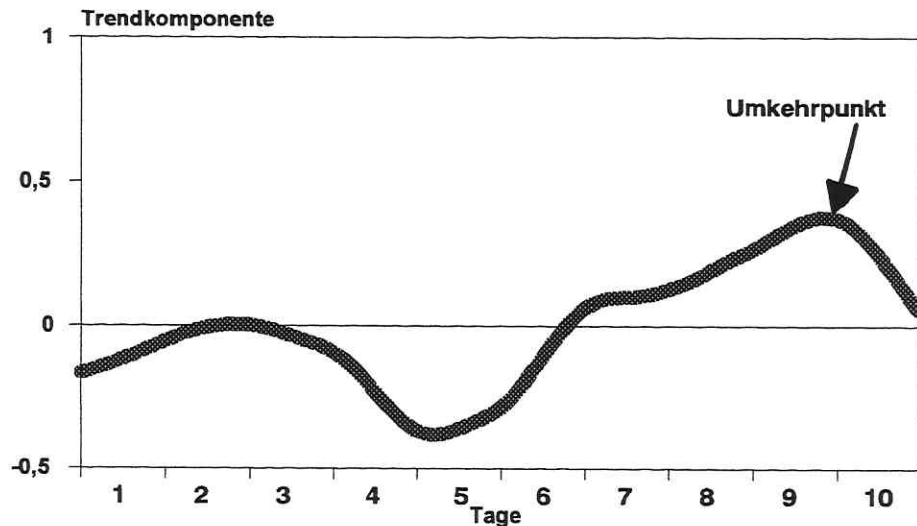


Abb. 4-3: Mit IRWSMOOTH berechnete Trendfunktion für die an der Meßstelle UFZ-Leipzig vom 25.6.-4.7.93 gemessene OZON-Reihe (transformiert).

Das einzig Typische am Immissions-Trend ist sein glatter Verlauf und die Tatsache, daß er über einen längeren Zeitbereich nicht instationär wird. Das alternierende Auftreten von Umkehrpunkten, an denen die Richtung des Trendverlaufs umkehrt, verhindert ein beliebig weites Entfernen vom Ausgangsniveau.

Bemerkung (4-1): Im Teil 2, Abschnitt 3 wurden die Skalenbereiche des Frequenzspektrums prozeßorientiert diskutiert. Dabei konnte die Trendkomponente mit den Phänomenen des synoptischen Skalenbereiches identifiziert werden. Die Umkehrpunkte im Trend entstehen also durch den Zustrom neuer Luftmassen.□

4.3. Das Phasenraumbild

Für die graphische Darstellung der Trendfunktion bietet sich aber auf Grund der Tatsache, daß das Kalman-Filter neben dem geglätteten Trend T_t auch dessen Ableitung $D_t = T_t'$ liefert noch eine weitere Möglichkeit an. Es läßt sich die Trendbewegung in dem aus Trend und Ableitung aufgespannten Phasenraum wiedergeben. Abb. 4-5 zeigt ein solches Phasenraumbild für die Trendfunktion der Ozondaten des Jahres 1993 der Station UFZ-Leipzig.

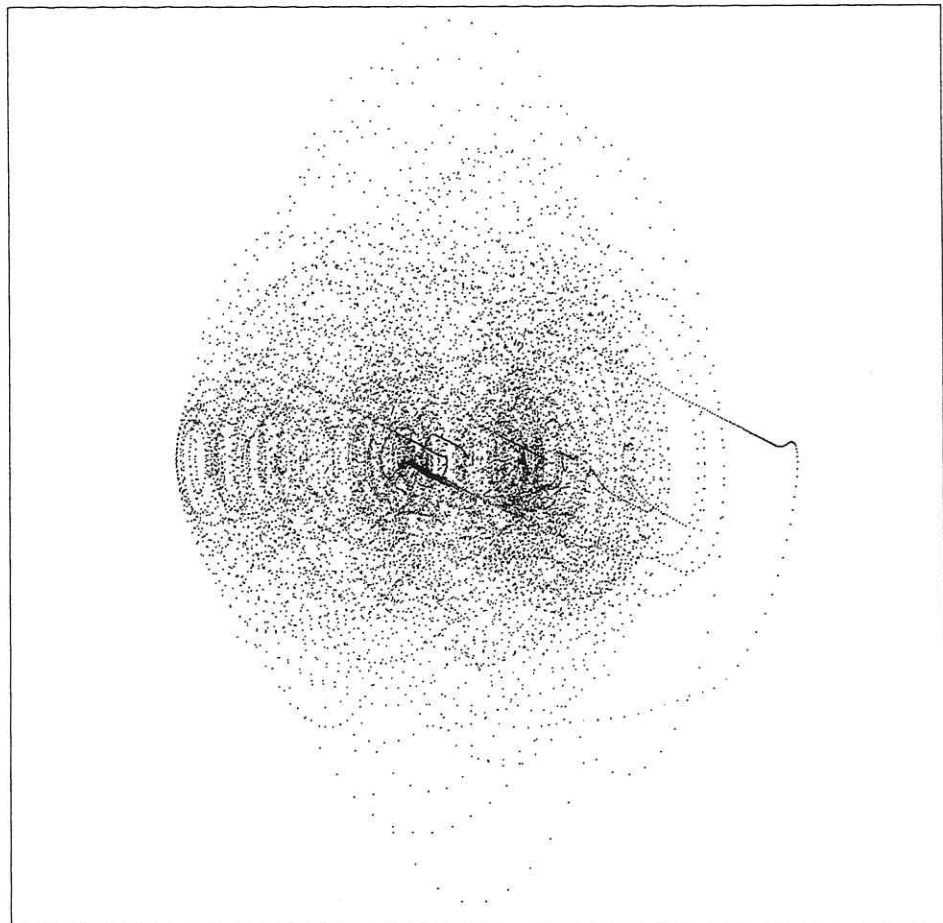


Abb. 4-5: Phasenraumbild für die Trendfunktion T und deren Ableitung T' zu den 1993 im UFZ-Leipzig gemessenen Ozondaten.

Um die Bewegung der Phasenraumtrajektorie genauer zu analysieren, ist sie in Abb. 4-6 für die 10 Tage der OZON-Reihe dargestellt. Ausgangspunkt für eine Phasenraumdarstellung sind die Trendkomponente T und deren Ableitung T' , die in ihrem zeitlichen Verlauf links oben und unten aufgezeichnet sind. Verwendet man dann T als Abszisse und T' als Ordinate, so entsteht das rechts unten befindliche Phasenraumbild mit dem typischen Trajektorienverlauf.

Diese Bahn erinnert an eine Hyperzykloide, die ein auf dem Umfang einer Ellipse gelegener Punkt beschreibt, wenn die Ellipse gleichzeitig mit einer Winkelgeschwindigkeit Ω rotiert und ihr Mittelpunkt entlang der Abszissenachse eine Translation erfährt.

Insgesamt wird am Phasenraumbild deutlich, daß es sich beim Trend und seiner Ableitung keinesfalls um unabhängige stochastische Prozesse handelt. Denn nur durch einen funktionalen Zusammenhang beider kann eine solche stetige Bahn entstehen.

Daraus leitet sich die Grundidee für eine neue Prognosemethode ab: Man geht davon aus, daß das typische Phasenraumverhalten der Trajektorie zeitlich invariant bleibt und nutzt es für eine Extrapolation. Dazu muß der Zusammenhang zwischen T und T' , nämlich die o.g. Hyperzykloidenbewegung mathematisch formuliert werden.

Für die Bewegung der Trendfunktion T_t und ihrer Ableitung T_t' entlang einer Hyperzykloide im Phasenraum gilt folgende Bewegungsgleichung:

$$T_t = c(t) - a(t) \cos(\Omega(t) t - t_0(t)) \quad (4-5)$$

$$T_t' = \Omega(t) a(t) \sin(\Omega(t) t - t_0(t)) \quad (4-6)$$

Dieses Modell (4-5)+(4-6) soll als Hyperzykloidenmodell der Phasenraumtrajektorie der Trendkomponente bezeichnet werden.

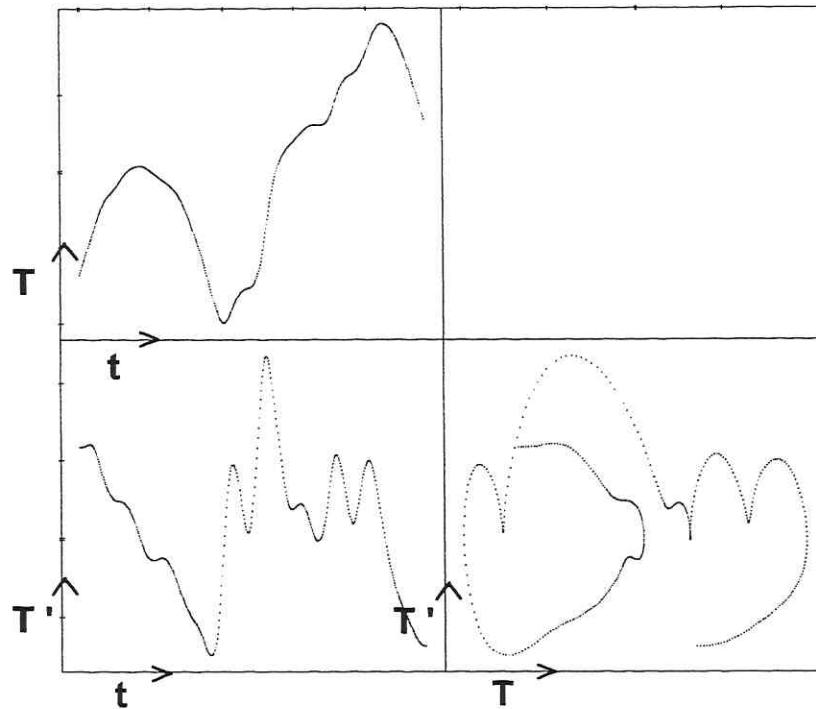


Abb. 4-6: Phasenraumtrajektorie (rechts unten) der Trendfunktion der OZON-Reihe; zur Illustration der Entstehung der Phasentrajektorie sind die Trendreihe T und ihre Ableitung T' im Zeitverlauf (t) links oben und links unten mit angegeben.

In den Beziehungen (4-5)+(4-6) kommt der Zusammenhang beider Funktionen zum Ausdruck: T'_t ist wirklich die Ableitung der Trendfunktion. Die Zeitabhängigkeit der Parameter $c(t)$, $a(t)$, $\Omega(t)$ und $t_0(t)$ wird als sehr schwach angenommen.

$$\frac{1}{c} \frac{dc}{dt}, \frac{1}{a} \frac{da}{dt}, \frac{1}{\Omega} \frac{d\Omega}{dt}, \frac{1}{t_0} \frac{dt_0}{dt} \ll \Omega \quad (4-7)$$

D.h., sie sind zwar nicht konstant und müssen für jedes Stück der Trajektorie neu bestimmt werden, im Bereich der Prognose können sie jedoch mit hinreichender Genauigkeit als konstant betrachtet werden.

Aber wie sieht denn nun beispielsweise eine IRWSMOOTH-Extrapolation bzw. -Interpolation im Phasenraum aus?

Eine solche Interpolation wurde ja bereits für die OZON-Reihe mit einem Bereich von Fehlwerten an den Tagen 6 und 7 in Abb. 4-1 gezeigt. Wie dies für die Trendkomponente und deren Ableitung im Phasenraum aussieht, verdeutlicht Abb. 4-7. Der Bereich der Interpolation ist verstärkt gezeichnet. Da dieses Filter ein Konstanthalten des Anstiegs bewirkt, zeigt die Phasenraumtrajektorie hier einen nahezu waagerechten Verlauf.

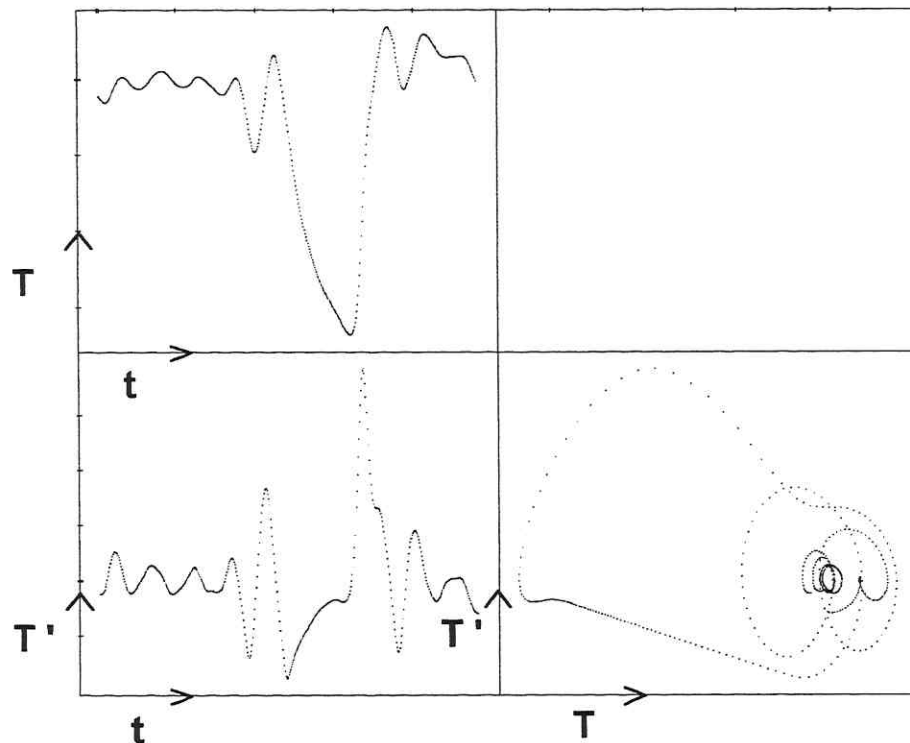


Abb. 4-7: Phasenraumtrajektorie (rechts unten) der Trendfunktion der OZON-Reihe mit Fehlwerten an den Tagen 6 und 7 ($NVR=0.001$); zur Illustration der Entstehung der Phasentrajektorie sind die Trendreihe und ihre Ableitung im Zeitverlauf links oben und links unten mit angegeben.

Das von der üblichen kreisenden Bewegung abweichende Verhalten der Trajektorie im Interpolationsbereich, wo sich der Ordinatenwert nur wenig ändert, ist deutlich zu erkennen. Die Interpolation ignoriert also die Verlaufseigenschaften der Phasenraumkurve vollkommen.

Ein Trendverlauf nach dem Hyperzykloidenmodell würde dann wie folgt aussehen:

$$T_t = c - a \cos(\Omega t - t_0), \quad (4-8)$$

Verwendet man diese Funktion zur Extrapolation, so bringt dies eine Erhöhung der Genauigkeit gegenüber der linearen Trendprognose $T_t \sim t$ des IRWSMOOTH-Filters. Denn wenn man für kleine Zeiten ($t \ll 1/\Omega$) diese modifizierte Trendprognose entwickelt, dann ergibt sich

$$T_t \approx c - a\{1 - \Omega t + \dots\} - t_0 = c - a - t_0 + a \Omega t + \dots, \quad (4-9)$$

was die lineare Prognose als zweiten Term der Taylorreihe enthält.

4.4. Lokale harmonische Approximation

Das Hyperzykloidenmodell im Phasenraum bedeutet, die Trendfunktion durch eine harmonische Oszillation zu modellieren. Die Parameter dieses Modells sind jedoch selbst wieder zeitabhängig, so daß die geschätzten Werte nur lokal gültig sind. Diese Eigenschaft entspricht dem gefundenen Spektralverhalten für die Trendkomponente: Es ereignen sich einzelne Episoden, deren Periode jedoch nicht konstant ist; das Spektrum ist zeitabhängig.

Durch eine lokale harmonische Approximation ist man in der Lage, ein solches zeitabhängiges Spektrum zu modellieren. Das gefundene Modell läßt sich für Extrapolationen jedoch nur bis zu einem bestimmten Prognosehorizont verwenden. Darüber hinaus ist mit so starken Änderungen der Parameter $c(t)$, $a(t)$, $\Omega(t)$ und $t_0(t)$ zu rechnen, daß der Trendverlauf nicht mehr adäquat wiedergegeben wird.

Bemerkung (4-1): Was läßt sich über die Größe dieses Prognosehorizontes aussagen?

Da die Trendfunktion gerade durch das Herausfiltern extrem niederfrequenter Anteile aus der Meßreihe entstanden ist, enthält sie auch nur Schwingungen mit Periodenlängen, die größer als ein Tag sind. Für kürzere Zeiten kann der Trend also als nahezu linear betrachtet und auch so (z.B. mit IRWSMOOTH) extrapoliert werden. Eine Trendprognose über einen Tag ist aber für den angestrebten Zweck einer Kurzzeitprognose absolut ausreichend.

Darüber hinaus wird mit der lokalen harmonischen Approximation eine lokal dominante Periode des Trends, die die gerade ablaufende Episode beschreibt, durch Ω modelliert. Somit werden Veränderungen der Parameter c , a , Ω und t_0 länger als $1/\Omega$ dauern (vgl. Formel (4-7)). Bei einer Smogepisode von beispielsweise 2 Tagen würde der Prognosehorizont nach lokaler harmonischer Approximation sogar mindestens 2 Tage betragen. Einschränkend ist jedoch zu bemerken, daß $1/\Omega$ nur ein Schätzwert für die Dauer der Episode ist und die Gültigkeit des Hyperzykloidenmodells voraussetzt.□

Ein Algorithmus für die Anwendung einer lokalen harmonischen Approximation zur Verbesserung der Trendprognose hätte also folgendermaßen auszusehen:

- 1) Die Meßreihe (sie enthalte keine Fehlwerte) wird nach der Transformation der Daten mit einem Kalman-Filter in ein Komponentenmodell zerlegt. Für die weiteren Schritte sind die Trendfunktion und die am Prognosepunkt vorliegenden Werte der Amplituden der Saisonkomponenten wichtig.
- 2) An die Trendkomponente wird fortlaufend lokal eine harmonische Schwingung angepaßt, d.h. für $T_t = c - a \cos(\Omega t - t_0)$ sind die Parameter c , a , Ω und t_0 zu schätzen.
- 3) Die für eine Umgebung des Prognosepunktes gültigen Parameterwerte werden verwendet, um die Trendkomponente mit der Funktion $T_t = c - a \cos(\Omega t - t_0)$ zu extrapolieren.
- 4) Aus dem extrapolierten Trend und den mit konstanten Amplituden fortgesetzten Saisonkomponenten wird die Prognosereihe zusammengesetzt.

4.5. Parameterschätzung

Um erst einmal prinzipiell die Arbeitsweise einer solchen lokalen harmonischen Approximation mit variabler Frequenz Ω zu testen und zu sehen, ob sie sich für die interessierenden Prognosezwecke eignet, wurde hier eine Schätzung der Parameter c , a , Ω und t_0 aus vier Meßpunkten vorgenommen. Dabei muß man sich jedoch immer der folgenden Probleme bewußt sein und versuchen, zwischen den sehr gegensätzlichen Anforderungen einen praktikablen Kompromiß zu finden:

- Wegen der lokalen Gültigkeit des Parametersatzes wäre es natürlich optimal, für jeden Punkt eine Schätzung zu besitzen. Dies würde auch eine Analyse des Zeitverlaufs der Parameter ermöglichen, welche weitere interessante Aspekte aufzeigen könnte.
- Zur Schätzung von vier Unbekannten benötigt man jedoch vier Gleichungen und damit vier Punkte (Stützstellen) der Meßreihe.
- Da es sich, wie schon erwähnt, um sehr langperiodische Veränderungen handelt, ist Ω entsprechend klein. Um die bei der Schätzung von Ω auftretenden numerischen Ungenauigkeiten möglichst klein zu halten, wäre es günstiger, den Abstand zwischen den Stützstellen möglichst groß zu wählen.
- Dies steht jedoch im Widerspruch zur Zeitabhängigkeit von Ω , die eine möglichst punktuelle Schätzung erfordert.
- Die Schätzgleichung für Ω (wird noch in Formel (4-15) angegeben und) ist wegen der Winkelfunktionen nichtlinear und somit schwer lösbar.

Die günstigste Lösung wäre eine rekursive Schätzung von Ω mit einem Filteralgorithmus. Da es sich aber um eine nichtlineare Schätzgleichung handelt, ist dazu die Entwicklung eines geeigneten nichtlinearen Filters erforderlich - die linearen Kalman-Filter versagen hier.

Für die verwendeten vier Stützstellen lassen sich dann mit dem Hyperzykloidenmodell (4-8) folgende vier Gleichungen aufschreiben:

$$\begin{aligned} T_i &= c - a \cos(\Omega i - t_0) \\ &= c - a \{ \cos(t_0) \cos(\Omega i) + \sin(t_0) \sin(\Omega i) \}, \quad \text{für } i=0, 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (4-10)$$

Zur Eliminierung von c und a werden zweckmäßigerweise die Verhältnisse gebildet:

$$v_2 = (T_2 - T_0) / (T_1 - T_0) \quad (4-11)$$

$$v_3 = (T_3 - T_0) / (T_1 - T_0), \quad (4-12)$$

was auf

$$v_2 = [1 - \cos(2\Omega) - \tau \sin(2\Omega)] / [1 - \cos(\Omega) - \tau \sin(\Omega)] \quad (4-13)$$

$$v_3 = [1 - \cos(3\Omega) - \tau \sin(3\Omega)] / [1 - \cos(\Omega) - \tau \sin(\Omega)] \quad (4-14)$$

mit $\tau = \tan(t_0)$ führt.

Entfernt man noch τ , so erhält man als nichtlineare Bestimmungsgleichung für Ω :

$$\begin{aligned} [1 - \cos(2\Omega) - v_2 (1 - \cos(\Omega))] [\sin(3\Omega) - v_3 \sin(\Omega)] = \\ [1 - \cos(3\Omega) - v_3 (1 - \cos(\Omega))] [\sin(2\Omega) - v_2 \sin(\Omega)] \end{aligned} \quad (4-15)$$

Um eine Lösung für diese Gleichung in Abhängigkeit von v_2 und v_3 zu finden, werden die Winkelfunktionen bis zur 5. Ordnung in Ω in eine Taylorreihe entwickelt. Dieses Vorgehen ist auch begründet, da, wie bereits diskutiert, zu erwarten ist, daß Ω sehr kleine Werte annehmen wird ($\Omega \ll 1/(i \cdot 0.5h)$).

$$\frac{[1-(1 - 4\Omega^2/2 + 16\Omega^4/24) - v_2 (1-(1 - \Omega^2/2 + \Omega^4/24))]}{[(3\Omega - 27\Omega^3/6) - v_3 (\Omega - \Omega^3/6)]} \approx$$

$$\frac{[1-(1 - 9\Omega^2/2 + 81\Omega^4/24) - v_3 (1-(1 - \Omega^2/2 + \Omega^4/24))]}{[(2\Omega - 8\Omega^3/6) - v_2 (\Omega - \Omega^3/6)]}$$

Durch Zusammenfassen von Termen bis zur 5. Ordnung in Ω folgt:

$$\begin{aligned} \Omega^5 \{ (2 - v_2) (81 - v_3)/24 - (3 - v_3) (16 - v_2)/24 + \\ (9 - v_3) (8 - v_2)/12 - (27 - v_3) (4 - v_2)/12 \} + \\ \Omega^3 \{ (3 - v_3) (4 - v_2)/2 - (2 - v_2) (9 - v_3)/2 \} = 0 \end{aligned} \quad (4-16)$$

Wegen $\Omega \neq 0$ führt dies auf:

$$\Omega^2 = 4 (v_3 + 3(1 - v_2)) / (v_3 + 7(1 - v_2)). \quad (4-17)$$

Damit ist eine Bestimmungsgleichung für Ω gefunden.

Für ein Zahlenbeispiel werden wieder die OZON-Daten herangezogen. Die Datenreihe der Tage 1, 2 und 3 soll die Basis für eine Prognose des 4. Tages sein. Dazu wird sie mit dem oben beschriebenen Kalman-Filter in Komponenten zerlegt. Aus vier Punkten mit einem Abstand von jeweils 2 Stunden wird Ω fortlaufend aus der Trendkomponente berechnet. Die dabei entstehenden Werte sind in Tabelle 4-1 angegeben.

Da die Phasenraumtrajektorie natürlich nicht exakt einer Hyperzykloide folgt, ändert sich der Ω -Wert entlang dieser Trajektorie. Solange die Kurve in der Phasenebene konvex gekrümmt ist, erhält man stets einen positiven Wert für Ω . Ist die Trajektorie jedoch sehr schwach gekrümmt und fast eine Gerade, so wird Ω sehr klein. Verläuft andererseits die Phasenraumkurve in einem bestimmten Abschnitt konkav (vgl. Abb. 4-6), dann läßt sich eine Ellipsenbahn überhaupt nicht anpassen und es wird $\Omega^2 < 0$. Dies ist an den in Tabelle 4-1 mit einem "?" markierten Stellen der Fall.

Tabelle 4-1: Fortlaufend aus der Trendkomponente geschätzte Frequenz Ω der lokalen harmonischen Approximation für die Tage 1, 2 und 3 der OZON-Reihe; Zahlenangaben in $1000 \cdot \Omega$.

Nr.	4. Tag	5. Tag	6. Tag
1	?	12	51
2	?	18	52
3	?	24	52
4	?	28	50
5	?	32	48
6	?	35	46
7	?	37	43
8	?	39	41
9	?	40	40
10	?	41	39
11	?	41	39
12	?	41	40
13	?	40	41
14	?	40	41
15	?	40	41
16	?	40	41
17	?	40	40
18	?	40	40
19	14	41	40
20	24	40	41
21	30	38	42
22	33	35	44
23	35	31	46
24	35	25	47
25	33	16	47
26	31	?	45
27	29	?	42
28	28	?	37
29	26	?	30
30	25	?	21
31	24	?	9
32	23	?	?
33	21	?	?
34	18	?	9
35	16	?	17
36	13	25	21
37	11	41	22
38	10	54	21
39	9	64	18
40	9	75	15
41	8	91	14
42	7	132	14
43	5	?	16
44	?	?	19
45	?	?	21
46	?	35	21
47	?	44	19
48	3	49	12

Da sich die Trajektorie jedoch global gesehen "um ein Zentrum wickelt" (vgl. Abb. 4-5), muß ihr überwiegender Verlauf konvex sein.

Für die Extrapolation wird ein mittlerer Wert aus den letzten Ω -Daten verwendet. Im hier angegebenen Beispiel beträgt dieser $\Omega_{\text{mittel}} \approx 0.056$.

Die Parameter c , a und t_0 lassen sich nun sehr komfortabel über eine lineare Regression der Trendwerte T_t gegen $\cos(\Omega t)$ und $\sin(\Omega t)$ bestimmen

$$T_t = \xi_0 + \xi_1 \cos(\Omega t) + \xi_2 \sin(\Omega t), \quad (4-18)$$

denn nach dem Hyperzykloidenmodell (4-8) gilt

$$T_t = c - a \cos(t_0) \cos(\Omega t) - a \sin(t_0) \sin(\Omega t). \quad (4-19)$$

Damit erhält man aus den Regressionskoeffizienten ξ_0 , ξ_1 , ξ_2 :

$$t_0 = \arctan(\xi_2/\xi_1) \quad (4-20)$$

$$a = -\xi_1/\cos(t_0) \quad (4-21)$$

$$c = \xi_0 \quad (4-22)$$

4.6. Modifizierte Trendextrapolation

Wie die Extrapolation mit einer solchen harmonischen Funktion im Phasenraum für das hier betrachtete Beispiel aussieht, zeigt Abb. 4-8. Die Regression zur Schätzung der Parameter c , a und t_0 basierte dabei nur auf dem Trendverlauf der letzten 24 Stunden (dicke Linie). Für den dargestellten Fall ergab sich $c = -1.89$, $a = -0.042$ und $t_0 = -0.12$. Anschließend wurde der Trend entlang der gestrichelt gezeichneten Ellipsenbahn fortgesetzt. Der Schnittpunkt zwischen Trend-Trajektorie und Extrapolationsellipse wurde als Anschlußpunkt verwendet.

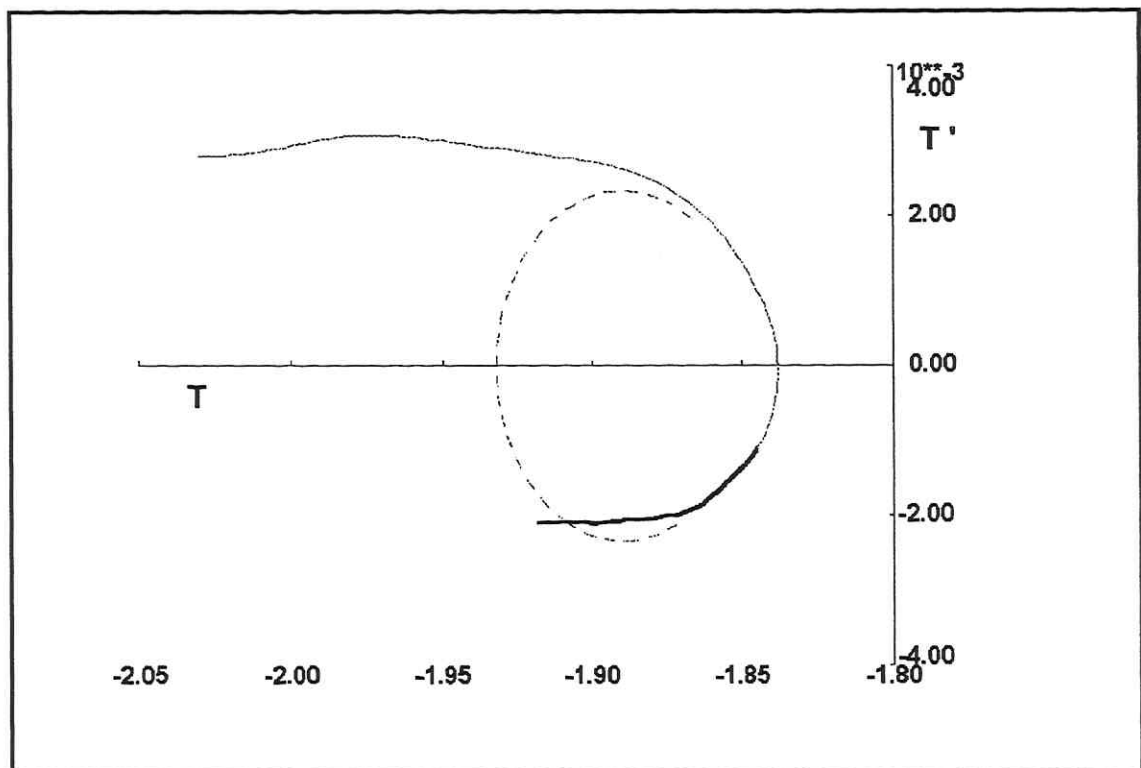


Abb. 4-8: Phasenraumbild für eine Extrapolation der Trendfunktion nach dem Hyperzykloidenmodell.

Mit dieser harmonischen Trendextrapolation ergibt sich eine von der linearen Extrapolation deutlich unterschiedliche Prognose des Reihenverlaufs für den 4. Tag, die in Abb. 4-9 gezeigt ist. Dabei ist die Gesamtprognose wieder aus den einzelnen Komponenten (Trend und Saisonalitäten) zusammengesetzt worden.

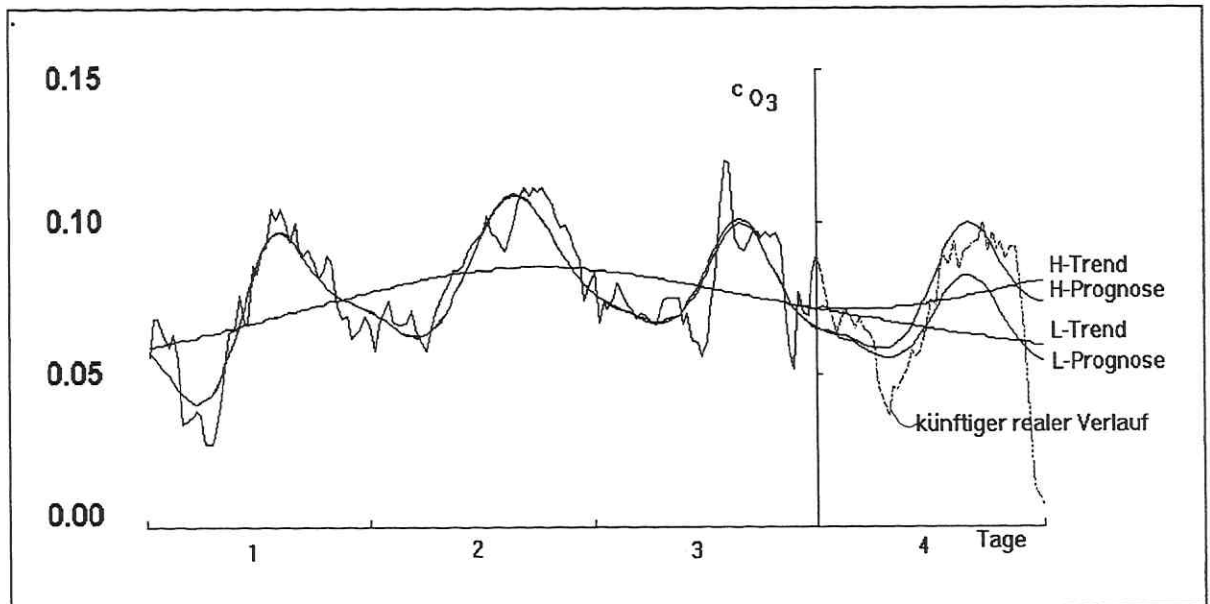


Abb. 4-9: Vergleich zwischen linearer "L" und lokaler harmonischer "H" Trendextrapolation am Beispiel der Tage 1, 2, 3 und 4 der OZON-Reihe.

Rein visuell kommt man an dem in Abb. 4-9 dargestellten Beispiel zu der Einschätzung, daß eine durch lokale harmonische Approximation modifizierte Extrapolation der Trendkomponente die im Nachhinein gemessene Datenreihe adäquater beschreibt, als bei linearer Trendextrapolation.

Wie wirkungsvoll die hier entwickelte Methode bei der Vorhersage von Smogsituationen arbeitet, muß jedoch erst noch an einer Vielzahl von Prognosefällen statistisch untersucht werden. Dies geschieht im Teil 4. Voraussetzung für eine solche Statistik ist dabei die klare Festlegung, welche Immissionssituationen für eine Vorhersage überhaupt interessant sind.

5. Prediktoren

5.1. Was kann von einem Prognosealgorithmus erwartet werden?

Als Arbeitsgrundlage für Entwicklung und Test einer geeigneten Prognosestrategie standen die Zeitserien der Halbstundenmittelwerte für Ozon und die Stickoxide zur Verfügung, wie sie vom Landesamt für Umwelt und Geologie des Freistaates Sachsen gemessen wurden. Darüber hinaus hat das Umweltforschungszentrum auch eigene Immissionsmessungen betrieben, nicht nur um zusätzliche Daten an ausgewählten Standorten zur Verfügung zu haben, sondern um auch zeitlich höher aufgelöste Reihen betrachten zu können, die von den Immissionsmeßstationen der Länder nicht archiviert wurden.

Am Anfang der Überlegungen muß die Analyse der Daten stehen. Es ist zu klären, wie häufig in der Vergangenheit Ereignisse mit hohen Ozonkonzentrationen auftraten und welche Spitzenwerte dabei überhaupt erreicht wurden. Ebenso wichtig ist die Frage nach der Dynamik, die in den Phasen des Sommersmoges herrscht und welche Zusammenhänge zwischen den einzelnen Episoden bestehen.

Auf einige Erkenntnisse, die bei der Modellierung des Wintersmoges gesammelt wurden, kann zurückgegriffen werden. Andererseits existieren markante Unterschiede.

Die Zeitkonstante für Entstehung und Abbau von Ozonkonzentrationen sind viel kleiner, als es beim SO₂ der Fall ist.

Für Wintersmogsituationen sind Wetterlagen mit geringem Luftmassenaustausch typisch (niedrige Inversionsuntergrenzen und geringe Windgeschwindigkeiten). Oft reichern sich erst über mehrere Tage kritische Schadstoffkonzentrationen an. Sommersmog setzt dies nicht voraus.

Hohe Ozonkonzentrationen werden am Tag innerhalb kürzester Zeit erreicht, wenn die Sonne mit hoher Intensität strahlt. Die räumlich Ausdehnung kann groß sein.

Ozon als die Leitkomponente des Sommersmoges ist ein sehr reaktives Gas, was schnell in chemische Verbindungen mit anderen Stoffen aufgebraucht wird, andererseits bei deren Photolyse wieder entsteht. Eine wichtige Rolle spielen die Stickoxide, deren Konzentrationsverlauf bei einer Sommersmogeepisode mit zu betrachten sind.

Beim Sommersmog ist der Aktionszeitraum der "Helltag". Ein 24-h-Mittelwert besitzt nicht mehr die gesundheitliche Relevanz, wie sie vom Wintersmog her bekannt ist. Eher ist es berechtigt, unter Umständen 2 Smogepisoden pro Tag zu definieren. Unter bestimmten meteorologischen Voraussetzungen führt in den Sommermonaten eine hohe Sonneneinstrahlung am zeitigen Vormittag zur vorübergehenden Abschirmung, die sich nachmittags wieder auflöst. So können zwei Abschnitte mit hoher Strahlungsintensität entstehen.

Damit sind auch die Grenzen bezüglich des Vorhersagezeitraumes erkennbar. Ein statistisches Modell, welches unter anderem die Autokorreliertheit einer Zeitserie als Information nutzt, wird grundsätzlich an den Zeitraum eines unabhängigen Ereignisses gebunden sein. Wenn also, wie oben ausgeführt, sogar zwei Abschnitte hoher Ozonkonzentration pro Tag auftreten können, wären sie beispielsweise mit einer Vorhersagezeit von 4 h prinzipiell noch prognostizierbar.

Die andere entscheidende Frage ist, was prognostiziert werden soll. Es existieren mehrere Grenz- und Richtwerte, deren Einhaltung zum Schutz des Menschen vor Belastungen durch Ozon empfohlen werden. In die Gruppe der Mittelwerte mit großer Mittelungsbreite gehört der Schwellwert

$$x_{8h} = 0,11 \text{ mg/m}^3$$

in die Gruppe derjenigen mit kleiner Mittelungsbreite

$x_{1h} = 0,18 \text{ mg/m}^3$ (Schwellwert für die Unterrichtung der Bevölkerung)

$x_{1h} = 0,36 \text{ mg/m}^3$ (Schwellwert für die Auslösung des Warnsystems)

Daneben gibt es noch die WHO-Empfehlung von $x_{1h} = 0,15 \dots 0,20 \text{ mg/m}^3$.

Schließlich sei der MIK-Wert mit $x_{0,5h} = 0,12 \text{ mg/m}^3$ genannt.

Das 0,5-h-Mittel stellt auch gleichzeitig die Auflösungsgrenze der von den Betreibern der Immissionsüberwachungssysteme registrierten Zeitserien aller Schadstoffkomponenten dar und wird deshalb oft ohne weiteren Zusatz als Istwert bezeichnet.

Sucht man nun alle bezüglich erhöhter Ozonkonzentration betrachtenswerten Episoden und markiert außerdem noch diejenigen, wo darüberhinaus einer der genannten Schwellwerte überschritten wird, so lassen sich zwei Ereignisgruppen bilden. Die eine Gruppe enthält alle Abschnitte der Zeitserie, die zum Zeitpunkt t_1 einem bestimmten Startereignis genügen, in die 2. Gruppe sind dann solche einzuordnen, die im weiteren Verlauf bei t_2 ein Zielereignis erfüllen. Da es sich um getrennte Episoden handeln soll, gilt per Definition $t_2 > t_1$.

Es sollte gelingen, signifikante Merkmale zu finden, in denen sich beide Gruppen ab t_1 unterscheiden. Für einen geeigneten Prognosealgorithmus wären das dann Prediktoren, die es unterstützen, zum Zeitpunkt t_1 den Zeitpunkt t_2 vorausszusagen, bzw. den Schluß erlauben, ob innerhalb einer Zeitspanne das Zielereignis eintritt oder nicht.

5.2. Analyse der gemessenen Zeitserien

Um die Ergebnisse der Recherche besser vergleichen zu können, mußten die Zeitserien nach folgenden einheitlichen Kriterien durchmustert werden.

Als Auswahlkriterium für einen Abschnitt als Episode mit erhöhter Ozonkonzentration und damit Startkriterium wurde $x_{1h} = 0,10 \text{ mg/m}^3$ gewählt. Dies erwies sich nach einigen Vorversuchen als genügend kleine Schwelle, um möglichst viele Episoden als Testbasis zu erhalten, die sich aber vom allgemeinen Konzentrationsniveau schon genügend abheben. Naturgemäß hat ein Startereignis mit kleiner Mittelungsbreite den größeren Abstand zum Zielereignis. Halbstunden- und Stundenmittelwerte besitzen als Schwellen vergleichbare Eigenschaften. Da letztere weniger stark von technisch bedingten "missing values" beeinflusst werden, haben wir uns bei allen Versuchen mit Schwellen kleiner Mittelungsbreite für den x_{1h} -Wert entschieden.

Als Intervalllänge für zu registrierende Episoden wurde immer 72 gewählt, und zwar 48 Meßwerte vor dem Zeitpunkt $x_{1h} \geq$ Startereignis und 23 Werte danach. Abschnitte dieser Größe beinhalten ausreichend Meßwerte, um die Konzentrationsverläufe studieren zu können.

Episoden gelten als beendet und grenzen sich damit untereinander ab, wenn für mindestens 4 Stunden das verwendete Zielkriterium einer der unmittelbar zu vergleichenden Tests nicht mehr erreicht wird.

Im Anhang F sind die Analysen der vorhandenen Zeitreihen unter Auswahl folgender Ereignisschwellen enthalten:

	Startschwelle	Zielschwelle
Listensatz 1		
Spalte 1	$x_{1h} = 0,10 \text{ mg/m}^3$	$x_{8h} = 0,11 \text{ mg/m}^3$
Spalte 2	$x_{1h} = 0,10 \text{ mg/m}^3$	$x_{1h} = 0,18 \text{ mg/m}^3$
Listensatz 2		
Spalte 1	$x_{1h} = 0,12 \text{ mg/m}^3$	$x_{1h} = 0,18 \text{ mg/m}^3$
Spalte 2	$x_{1h} = 0,13 \text{ mg/m}^3$	$x_{1h} = 0,18 \text{ mg/m}^3$
Listensatz 3		
Spalte 1	$x_{1h} = 0,14 \text{ mg/m}^3$	$x_{1h} = 0,18 \text{ mg/m}^3$
Spalte 2	$x_{1h} = 0,15 \text{ mg/m}^3$	$x_{1h} = 0,18 \text{ mg/m}^3$

Das Eintreffen des sogenannten Zielereignisses wird in der im Anhang F gegebenen Liste mit (*) gekennzeichnet, wenn es spätestens 12 Stunden nach dem Startereignis erfolgt.

Die Tabellen 5-1...3 enthalten eine Übersicht über die nach obigen Kriterien analysierten Daten.

Tab. 5-1: Episoden mit Startkriterium $M2 \geq 0,1 \text{ mg/m}^3$

1. Zielkrit.: $M16 \geq 0,11 \text{ mg/m}^3$ 2. Zielkrit.: $M2 \geq 0,18 \text{ mg/m}^3$

Meßstelle	Zeitraum	Anz. der Messwerte	Verfügbarkeit	Zahl der Episoden mit $M2 \geq 0,1 \text{ mg/m}^3$ (Startkrit.)	Zahl der Überschrtg. von $M16 = 0,11 \text{ mg/m}^3$ (1. Zielkrit.)	Anteil der Episoden mit erfülltem 1. Zielkrit.	Zeitdifferenz zwischen Start- u. 1. Zielkrit.	Zahl der Überschrtg. von $M2 = 0,18 \text{ mg/m}^3$ (2. Zielkrit.)	Anteil der Episoden mit erfülltem 2. Zielkrit.	Zeitdifferenz zwischen Start- u. 2. Zielkrit.
Leipzig-UFZ	02/93-09/94	21674	74,4%	186	118	63,4%	4,6h	27	14,5%	3,3h
Leipzig-Hbf	10/91-06/94	40909	84,9%	92	18	19,6%	5,6h	1	1,1%	5,5h
Dresden-Postplatz	10/91-06/94	43412	90,1%	227	113	49,8%	4,9h	6	2,6%	5,3h
Wahnsdorf/Radebeul	02/93-06/94	22420	90,7%	129	33	25,6%	5,2h	0		
Pirna	01/91-06/94	57975	94,6%	502	271	54,0%	4,7h	42	8,4%	3,9h
Zittau-Ost	10/91-06/94	43048	89,3%	306	193	63,1%	4,6h	16	5,2%	5,0h
Chemnitz-Mitte	01/92-06/94	37101	84,4%	284	136	47,9%	4,9h	16	5,6%	4,4h
Plauen	04/93-06/94	20536	93,8%	100	40	40,0%	5,7h	2	2,0%	4,3h
Fichtelberg	01/93-06/94	16093	61,4%	135	45	33,3%	6,7h	0		

Tab. 5-2: Prognose mit Zielkriterium $M2 \geq 0,18 \text{ mg/m}^3$

1. Startkrit.: $M2 \geq 0,12 \text{ mg/m}^3$ 2. Startkrit.: $M2 \geq 0,13 \text{ mg/m}^3$

Meßstelle	Zeitraum	Zahl der Episoden mit $M2 \geq 0,12 \text{ mg/m}^3$ (1. Startkrit.)	Zahl der Überschr'tg. von $M2 = 0,18 \text{ mg/m}^3$ (Zielkrit.)	Anteil der Episoden mit erfülltem Zielkrit.	Zeitdifferenz zwischen 1. Start- u. Zielkrit.	Zahl der Episoden mit $M2 \geq 0,13 \text{ mg/m}^3$ (2. Startkrit.)	Zahl der Überschr'tg. von $M2 = 0,18 \text{ mg/m}^3$ (Zielkrit.)	Anteil der Episoden mit erfülltem Zielkrit.	Zeitdifferenz zwischen 2. Start- u. Zielkrit.
Leipzig-UFZ	02/93-09/94	154	39	25,3%	2,8h	133	41	30,8%	2,9h
Leipzig-Hbf	10/91-06/94	38	1	2,6%	4,5h	18	1	5,6%	4,0h
Dresden-Postplatz	10/91-06/94	143	6	4,2%	3,9h	96	6	6,3%	3,4h
Wahnsdorf/Radebeul	02/93-06/94	46	2	4,3%	4,0h	32	2	6,3%	2,8h
Pirna	01/91-06/94	342	45	13,2%	3,2h	259	43	16,6%	2,8h
Zittau-Ost	10/91-06/94	228	22	9,6%	4,7h	181	20	11,0%	4,4h
Chemnitz-Mitte	01/92-06/94	173	17	9,8%	3,9h	131	19	14,5%	4,2h
Plauen	04/93-06/94	42	2	4,8%	3,8h	28	2	7,1%	3,3h
Fichtelberg	01/93-06/94	83	4	4,8%	9,0h	65	7	10,8%	7,9h

Tab. 5-3: Prognose mit Zielkriterium $M2 \geq 0,18 \text{ mg/m}^3$

1. Startkrit.: $M2 \geq 0,14 \text{ mg/m}^3$ 2. Startkrit.: $M2 \geq 0,15 \text{ mg/m}^3$

Meßstelle	Zeitraum	Zahl der Episoden mit $M2 \geq 0,14 \text{ mg/m}^3$ (1. Startkrit.)	Zahl der Überschr'tg. von $M2 = 0,18 \text{ mg/m}^3$ (Zielkrit.)	Anteil der Episoden mit erfülltem Zielkrit.	Zeitdifferenz zwischen 1. Start- u. Zielkrit.	Zahl der Episoden mit $M2 \geq 0,15 \text{ mg/m}^3$ (2. Startkrit.)	Zahl der Überschr'tg. von $M2 = 0,18 \text{ mg/m}^3$ (Zielkrit.)	Anteil der Episoden mit erfülltem Zielkrit.	Zeitdifferenz zwischen 2. Start- u. Zielkrit.
Leipzig-UFZ	02/93-09/94	106	41	38,7%	2,3h	89	39	43,8%	1,8h
Leipzig-Hbf	10/91-06/94	11	1	9,1%	4,0h	5	2	40,0%	2,3h
Dresden-Postplatz	10/91-06/94	64	7	10,9%	3,0h	41	6	14,6%	2,2h
Wahnsdorf/Radebeul	02/93-06/94	22	2	9,1%	2,3h	11	3	27,3%	5,2h
Pirna	01/91-06/94	193	43	22,3%	2,3h	147	43	29,3%	2,0h
Zittau-Ost	10/91-06/94	121	19	15,7%	4,1h	94	22	23,4%	3,8h
Chemnitz-Mitte	01/92-06/94	88	17	19,3%	3,2h	58	17	29,3%	2,7h
Plauen	04/93-06/94	11	2	18,2%	3,3h	6	2	33,3%	2,8h
Fichtelberg	01/93-06/94	42	9	21,4%	7,1h	32	10	31,3%	6,3h

5.3. Schlußfolgerungen

Das Ergebnis aus Listensatz 1, Spalte 1 zeigt, daß die nach dem gewählten Startkriterium gefundenen Episoden relativ oft auch das Zielereignis, einen auf dem 8-h-Mittel basierenden Schwellwert, erreichen. Für 5 von 9 Meßstationen lag der Anteil bei etwa 48% - 63%. Betrachtet man nur die Sommermonate Mai bis August, so beträgt dieser Anteil an der Meßstation Zittau-Ost sogar 75%. D. h. an Sommertagen, an denen einmal eine mäßige hohe Ozonkonzentration registriert wurde, blieb diese Situation auch oft über einen längeren Zeitraum erhalten. Für ein Vorhersageprogramm wäre das also kein sonderlich interessantes Prognoseziel (vgl. Abb. 5-1, die auf den Daten von Tab. 5-1 basiert).

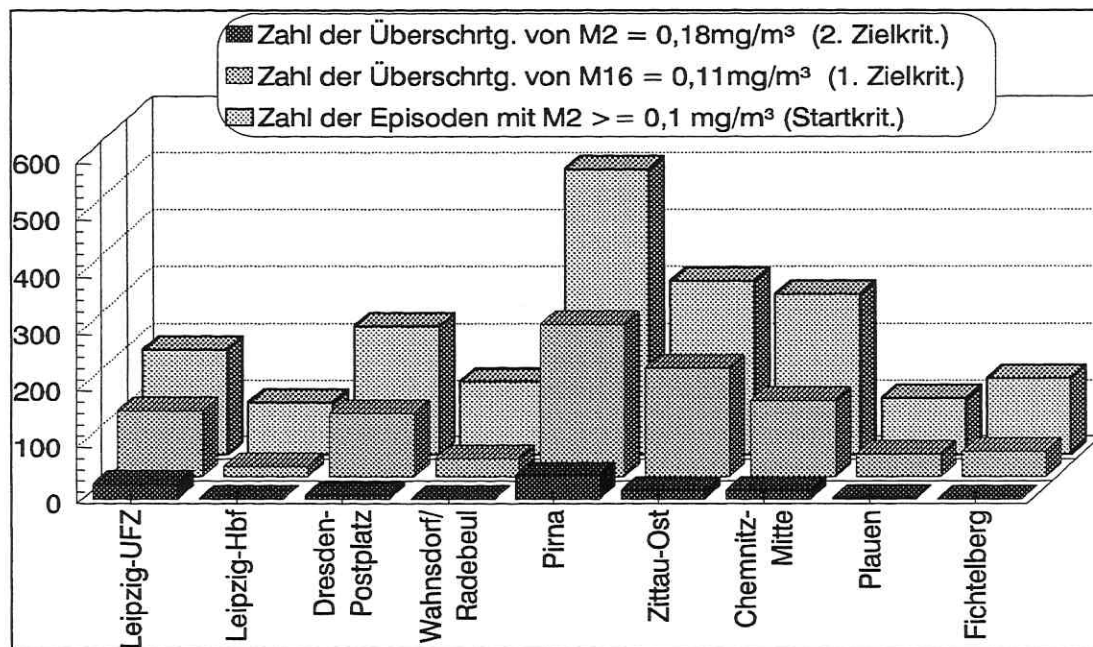


Abb. 5-1: Episoden mit $M2 \geq 0,1 \text{ mg/m}^3$ bzw. $M16 \geq 0,11 \text{ mg/m}^3$

Auf eine andere Erscheinung soll hier noch aufmerksam gemacht werden. Die Zahl der registrierten Episoden, ganz besonders aber die Zahl derjenigen, die das Zielereignis erfüllen, ist bei den anderen 4 Meßstationen deutlich geringer. Die größten Unterschiede bestehen zur Station Leipzig-Hbf. Der Anteil der mit (*) markierten Episoden beträgt in dieser Gruppe nur etwa 20% - 40%. Auch die Zahl der gefundenen Abschnitte mit erhöhter Ozonkonzentration an sich ist dort wesentlich kleiner (vgl. Listensatz 1 im Anhang F).

Betrachtet man wieder nur die Sommermonate, so lassen zwischen 16 - 24 in der einen gegenüber 8 - 15 Episoden pro Monat in der anderen Gruppe ausweisen. Noch deutlicher fällt der Unterschied bei der Zahl der Fälle mit erfülltem Zielkriterium aus. Hier stehen in den Sommermonaten 9 - 14 Fälle pro Monat in der einen Gruppe Fallzahlen von <2 - <6 in der anderen gegenüber.

Erklären lassen sich diese Unterschiede nur teilweise. Für die Station Leipzig - Hbf ist die außerordentlich starke Exponiertheit gegenüber dem Verkehr am Hauptbahnhofsvorplatz eine Besonderheit gegenüber allen anderen Meßstandorten. Das von den Verbrennungsmotoren der Kraftfahrzeuge emittierte NO reagiert sehr schnell mit vorhandenem Ozon.

Es ist bekannt, daß die Verkehrsmeßstationen aus diesem Grunde bezüglich Ozon weniger ausgeprägte Spitzenwerte registrieren. Diese Tatsache wirkt sich offensichtlich auch auf die Häufigkeit aus, mit der die angesetzten Schwellwerte überschritten wurden. In geringerem Maße ist diese Erklärung auch für die Meßstation in Plauen zutreffend. Nach dem gesagten müßte man aber besonders hohe Spitzenwerte bei den Stationen Wahnsdorf-Radebeul und am Fichtelberg, die dem Fahrzeugverkehr am wenigsten ausgesetzt sind, erwarten. Das Gegenteil ist aber der Fall. Es muß vermutet werden, daß die Unterschiede durch die Meßmethodik zustande kommen.

Im Listensatz 1, Spalte 2 sind die gleichen Start- und Randkriterien benutzt wurden, aber das Zielkriterium ist jetzt $x_{1h} = 0,18 \text{ mg/m}^3$. Mit (*) sind damit diejenigen Episoden markiert, welche das für Sachsen festgelegte Kriterium für die Information der Bevölkerung bezüglich hoher Ozonbelastung erfüllen. Es fällt sofort auf, daß diese Fälle, gemessen an der Gesamtzahl der aufgelisteten Episoden einen sehr kleinen Anteil darstellen. Ach hier kann man die Einteilung in zwei Gruppen aufrechterhalten. Der Anteil beträgt einmal zwischen >5% und <15%, im anderen Fall etwa 1% - <3%.

Im Unterschied zu den Ergebnissen der Spalte1 ordnen sich in die Gruppe mit höherem Anteil 4 von 9 Meßstationen ein. Die Meßstation Dresden-Postplatz registrierte hier nur weniger als 3% solche Episoden und ist diesbezüglich mit der Station in Plauen vergleichbar. In Wahnsdorf-Radebeul und am Fichtelberg wurden im angegebenen Untersuchungszeitraum keine Situationen mit $x_{1h} = 0,18 \text{ mg/m}^3$ oder mehr gefunden. Die Spanne zwischen den Zeiten t_1 und t_2 beträgt in der Regel etwas mehr als 4 h, dem nach früherer Abschätzung überhaupt realisierbaren Prognosezeitraum. Bezogen auf die Ausgangssituation zum Zeitpunkt t_1 mit $x_{1h} \geq 0,10 \text{ mg/m}^3$ wird das Zielereignis noch relativ selten erreicht. Für eine sichere Prognose scheint ein höherer Schwellwert als Startkriterium geeigneter zu sein. Das Zielereignis selbst sollte Prognoseziel bleiben, da es auch mit den Forderungen des Gesetzgeber korrespondiert.

Die weitere Datenanalyse hatte das Ziel, ein geeigneteres Startkriterium zu finden, ohne den Prognosezeitraum zu stark zu verkleinern. In den Listensätzen 2 und 3 sind die Ergebnisse der Analyse protokolliert, wenn man das Startereignis schrittweise von $0,12 \text{ mg/m}^3$ bis $0,15 \text{ mg/m}^3$ erhöht (siehe Abb. 5-2).

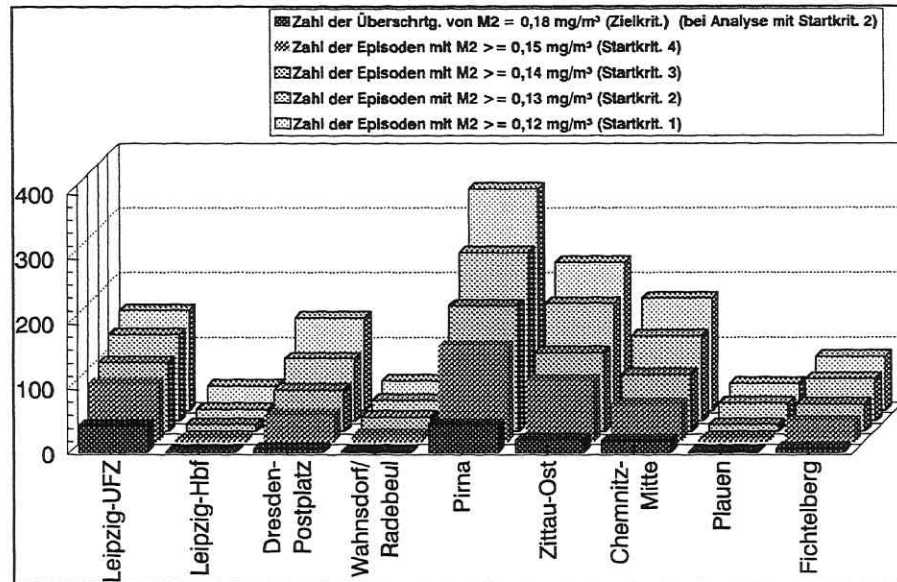


Abb. 5-2: Zahl der Episoden in Abhängigkeit vom Auswahlkriterium

Erwartungsgemäß wird dann der Anteil der markierten Episoden an der Gesamtzahl immer größer, was aber andererseits, wie in Abb. 5-3 dargestellt, den Prognosezeitraum verkleinert.

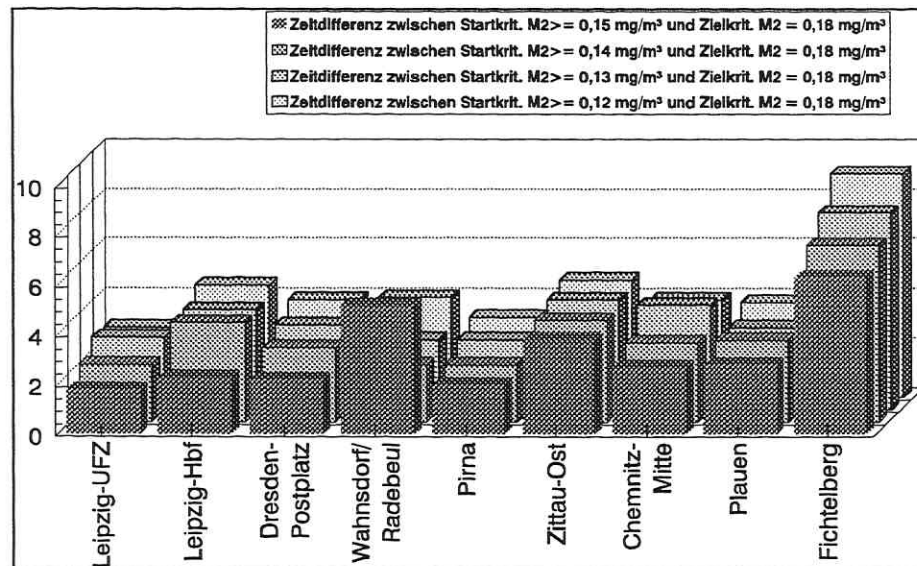


Abb. 5-3: Vorhersagezeit in Abhängigkeit vom Auswahlkriterium

Die Startschwelle $x_{1h} = 0,13 \text{ mg/m}^3$ scheint einen geeigneten Kompromiß darzustellen. Die im Listensatz 2, Spalte 2 dokumentierten Episoden werden deshalb als Testmenge für die Entwicklung eines Prognosealgorithmus ausgewählt.

5.4. Definition des Prediktionsproblems

Die in den Abschnitten 2 und 3 besprochene Untersuchung führte auf die für eine Beurteilung der Ozonbelastung wesentlichen Schwellen:

- Überschreitung von $0,13 \text{ mg/m}^3$ durch das gleitende Mittel x_{1h} für den Start eines Prognosealgorithmus und
- Überschreitung von $0,18 \text{ mg/m}^3$ durch das gleitende Mittel x_{1h} als Zielkriterium für eine Überschreitungssituation

Mit Hilfe dieser beiden Kriterien werden folgende Begriffe festgelegt:

Definition (5-1): Ein **Nullfall** ist eine Immissionssituation, in deren Verlauf stets $x_{1h} < 0,13 \text{ mg/m}^3$ ist. Da diese Situationen für eine Vorwarnung nicht von Interesse sind, bleiben sie im weiteren unberücksichtigt.□

Definition (5-2): Ein **Pseudofall** ist eine Immissionssituation, in deren Verlauf x_{1h} die Schwelle $0,13 \text{ mg/m}^3$ überschreitet, aber stets $x_{1h} < 0,18 \text{ mg/m}^3$ ist.□

Definition (5-3): Ein **Überschreitungsfall** ist eine Immissionssituation, in deren Verlauf x_{1h} die Schwelle $0,13 \text{ mg/m}^3$ überschreitet und innerhalb der folgenden 12 Stunden ebenfalls die Schwelle $0,18 \text{ mg/m}^3$ überschreitet.□

Definition (5-4): Der **Prognosepunkt** ist der Zeitpunkt t_0 , an dem $x_{1h} = 0,13 \text{ mg/m}^3$ ist.□

Definition (5-5): Die **Prognoseaufgabe** besteht darin, für eine gegebene Immissionssituation am Prognosepunkt eine Wahrscheinlichkeitsaussage über das künftige Eintreten eines Überschreitungsfalls (bzw. Pseudofalls) zu machen.□

Die Wahrscheinlichkeitsaussage für die Prognose ist also aus dem Immissionsverlauf vor dem Prognosepunkt zu gewinnen. Um ein Bild über den gesamten Konzentrationsverlauf der verschiedenen Situationen zu bekommen, wurden für die Meßstelle UFZ-Leipzig von 1992 bis 1994 alle Pseudo- und alle Überschreitungsfälle herausgesucht und in den Abbn. 5-1 und 5-2 dargestellt. Der interessierende Zeitbereich umfaßt 24 Stunden vor und 12 Stunden nach dem Prognosepunkt. Anhang F enthält eine Liste dieser hier untersuchten Situationen.

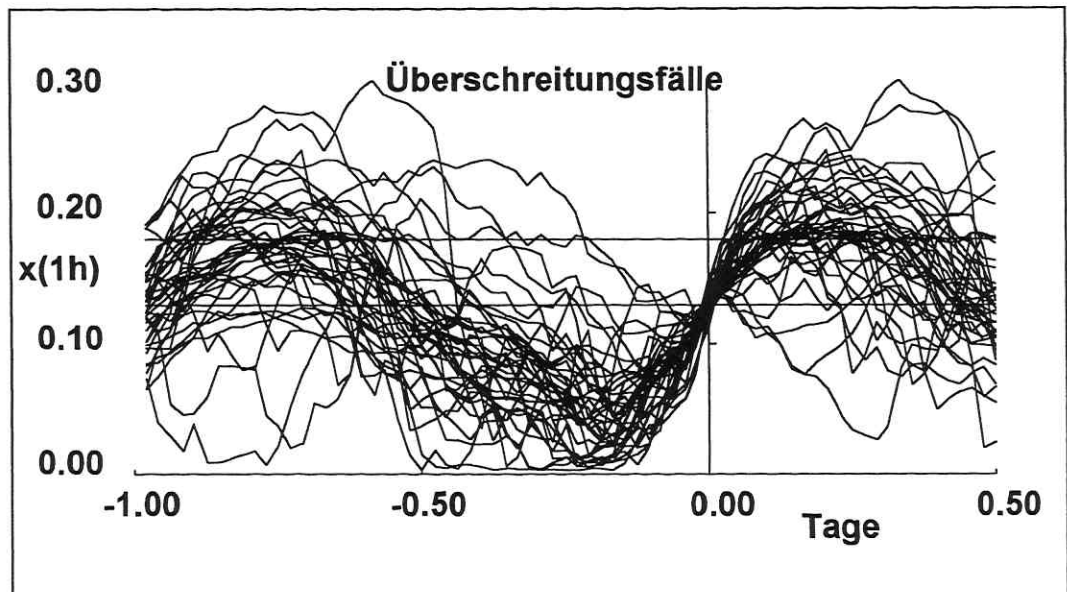


Abb. 5-1: Das gleitende 1-Stunden-Mittel der 40 Überschreitungsfälle an der Meßstelle UFZ Leipzig in der Zeit von 1992 bis 1994

Entsprechend der Prognoseaufgabe sind nun vor dem Prognosepunkt ($t < t_0 = 0$) geeignete Parameter zu finden, aus denen sich die Wahrscheinlichkeit dafür bestimmen läßt, daß sich die vorliegende Situation zu einem späteren Überschreitungsfall entwickelt.

Definition (5-6): Ein **Prediktor** ist ein Parameter, der aus dem Verlauf der Meßreihe bis zum Prognosepunkt gewonnen wird und mit dessen Hilfe eine Vorhersage über das Verhalten der Reihe nach dem Prognosepunkt möglich ist.□

Solche Parameter können zum einen geeignete Verlaufseigenschaften der Meßreihe sein. Es handelt sich dann um faktische Prediktoren. Andererseits ist es auch möglich, ein Zeitreihenmodell anzupassen und mit diesem Modell Parameter vorherzusagen. Diese sollen prognostizierte Prediktoren heißen.

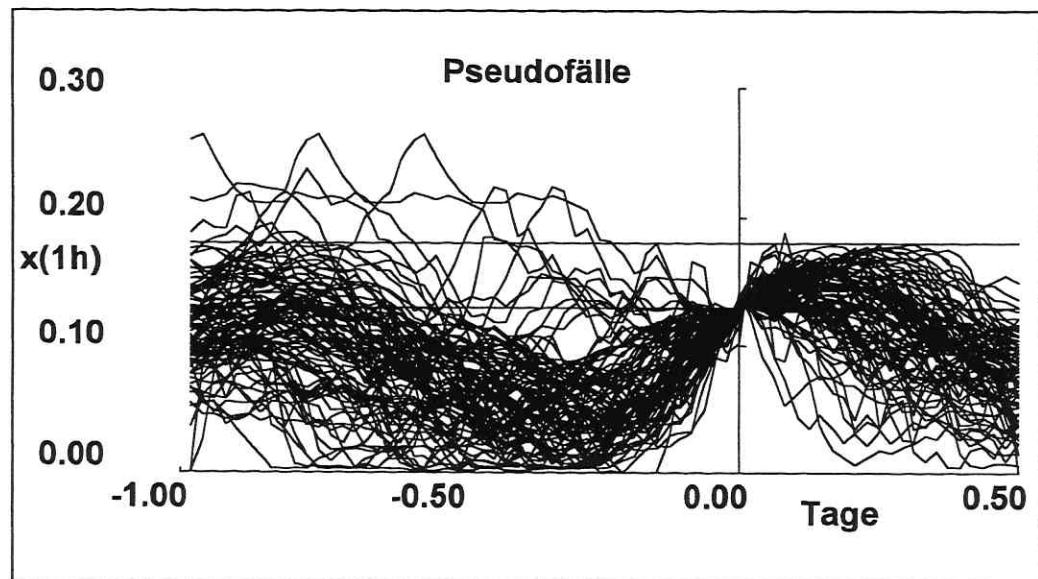


Abb. 5-2: Das gleitende 1-Stunden-Mittel der 91 Pseudofälle an der Meßstelle UFZ-Leipzig in der Zeit von 1992 bis 1994

Für die Prognoseaufgabe ist lediglich die Identifizierung einer Situation als Überschreitungs- oder Pseudofall wesentlich. Deshalb kann man jeweils alle Überschreitungs- und alle Pseudofälle zu einer Menge zusammenfassen, die mit **U** und **P** bezeichnet werden.

Bemerkung (5-1): Nicht mehr einzelne Reihenverläufe, sondern diese bezüglich der Grenzwertüberschreitung zusammengefaßten Mengen sind jetzt der Untersuchungsgegenstand des 5. Teils. Mit statistischen Methoden wird versucht, Parameter (Kenngrößen) zu finden, durch die sich die Mengen charakterisieren und unterscheiden lassen. Da die Parameter bereits vor Kenntnis der Zuordnung einer Situation zu einer dieser Mengen bestimmt werden sollen, sind sie Prediktoren.□

Durch einen Prediktor wird nun eine Berechnungsvorschrift gegeben, die jedem einzelnen Fall eine reelle Zahl zuordnet. Eine Einteilung dieser Prediktorwerte in z.B. zwei Klassen bewirkt im allgemeinen eine Aufteilung aller Fälle und somit der Mengen **P** und **U** in der in Abb. 5-3 illustrierten Art.

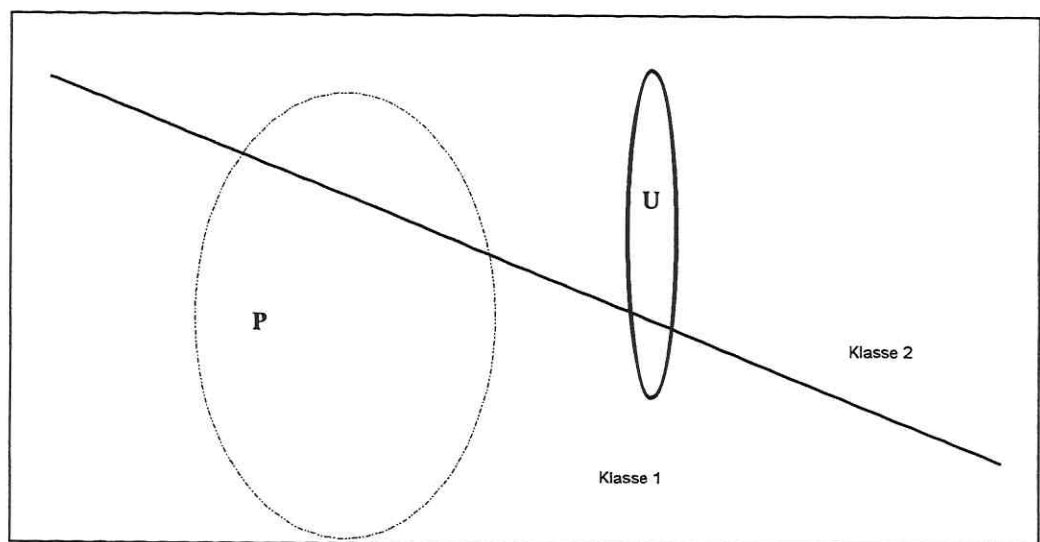


Abb. 5-3: Aufteilung der Mengen **P** und **U** durch zwei Klassen eines Prediktors

Da mit dem Prediktor der Typ eines vorliegenden Falles vorhergesagt werden soll, ist er so zu konstruieren, daß er die beiden Mengen bestmöglich unterscheidbar macht. In Abb. 5-4 ist gezeigt, wie durch einen idealen Prediktor mit zwei Klassen die Pseudo- von den Überschreitungsfällen getrennt werden: Alle in Klasse 1 liegenden Fälle sind Pseudofälle. Befindet sich dagegen ein Fall in Klasse 2, so stellt er eine Überschreitungssituation dar.

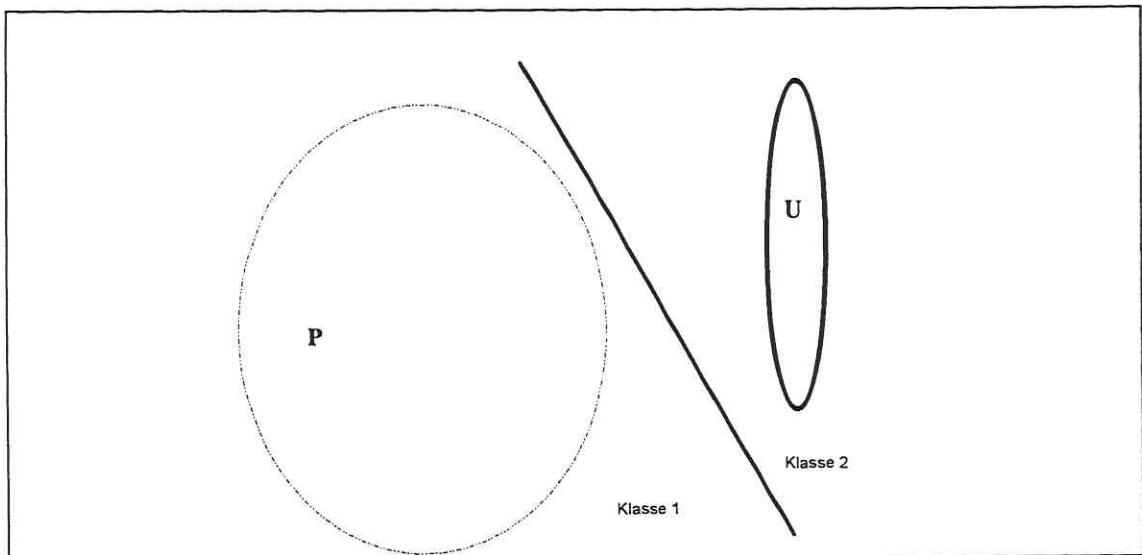


Abb. 5-4: Aufteilung der Mengen **P** und **U** durch zwei Klassen eines idealen Prediktors

Im allgemeinen wird man dieses Ideal nicht erreichen können. Durch Verwendung mehrerer Klassen und weiterer Prediktoren werden beide Mengen weiter aufgespalten. Bei zwei Prediktoren und vier Klassen könnte dies folgendermaßen aussehen (Abb. 5-5):

Prediktor π_1 bildet 4 Klassen, die durch die dicken Linien voneinander getrennt werden. Jede dieser Klassen wird durch den Prediktor π_2 (dünne Linien) wieder in 4 Klassen aufgespalten. Die Anzahl aller in einem herausgegriffenen Klassenbereich (k_1, k_2) gelegenen Fälle ist dunkel markiert und mit $N[P|k]$ bzw. $N[U|k]$ bezeichnet.

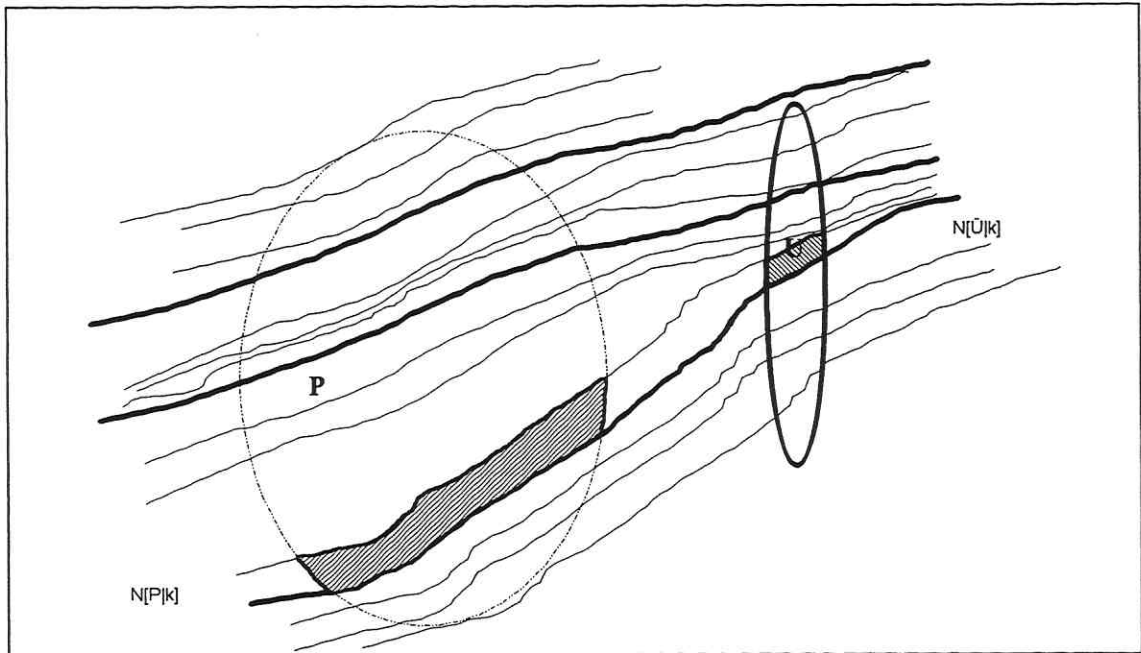


Abb. 5-5: Schematische Veranschaulichung der Aufteilung der Mengen **P** und **U** durch zwei Prediktoren zu je vier Klassen.

Allgemein lassen sich die p Prediktoren π_i ($i=1,\dots,p$) zu dem Vektor $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1 \pi_2 \pi_3 \dots \pi_p)^T$ zusammenfassen, ebenso die Klassen $\mathbf{k} = (k_1 k_2 k_3 \dots k_p)^T$ für diese Prediktoren. Es bezeichne weiterhin N die Anzahl aller betrachteten Fälle und $N[P|k]$ bzw. $N[\ddot{U}|k]$ die Anzahl aller Pseudo- bzw. Überschreitungsfälle in dem Klassenbereich k .

Die Wahrscheinlichkeit, daß sich für einen konkreten Fall der Prediktorenvektor $\boldsymbol{\pi}$ in $\mathbf{k}$ befindet berechnet sich dann zu

$$P(\mathbf{k}) = (N[P|k] + N[\ddot{U}|k]) / N. \quad (5-1)$$

5.5. Faktische Prediktoren

Sommersmogsituationen entstehen beim gleichzeitigen Auftreten von austauscharmer Wetterlage, intensiver UV-Strahlung und ungeminderter Schadstoffemission. Sie sind also alle durch ähnliche Auslösebedingungen charakterisiert. Davon ausgehend kann man vermuten, daß es durch die übereinstimmenden Entwicklungsbedingungen bei den Überschreitungs-fällen im Vorfeld zu Konzentrationsverläufen kommt, die einander sehr ähnlich sind und sich von denen der Pseudofälle unterscheiden.

Diese Vermutung läßt sich formulieren als

Arbeitshypothese: Für die Mengen **U** und **P** existieren Prediktoren, mit denen sich die beiden Mengen trennen lassen.□

Sind diese Prediktoren gefunden, so ist damit die Arbeitshypothese bestätigt und eine Prognose realisierbar. Es ist also nach für eine Vorhersage effizienten Parametern des Konzentrationsverlaufs zu suchen. Dazu wird aus allen in Abb. 5-1 dargestellten Überschreitungs-fällen der Station UFZ-Leipzig im Zeitraum von 1992 bis 1994, also allen 40 in **U** enthaltenen Elementen durch arithmetische Mittelung ein mittlerer Konzentrationsverlauf gebildet. Der Streubereich läßt sich zu jedem Zeitpunkt (verteilungsfrei) durch das 0,1- bzw. 0,9-Perzentil charakterisieren. Bei den 91 Pseudofällen wird analog vorgegangen.

Das Ergebnis zeigt Abb. 5-6. An dieser Darstellung läßt sich ablesen, worin sich der mittlere Pseudo- vom mittleren Überschreitungsfall im Bereich vor t_0 anders verhält. Zum Zeitpunkt t_0-1h liegt der mittlere Wert der Überschreitungs-fälle unter dem der Pseudofälle. Deshalb soll das Halbstundenmittel der Ozonkonzentration zum Zeitpunkt t_0-1h als erster Prediktor verwendet und mit PO3 bezeichnet werden.

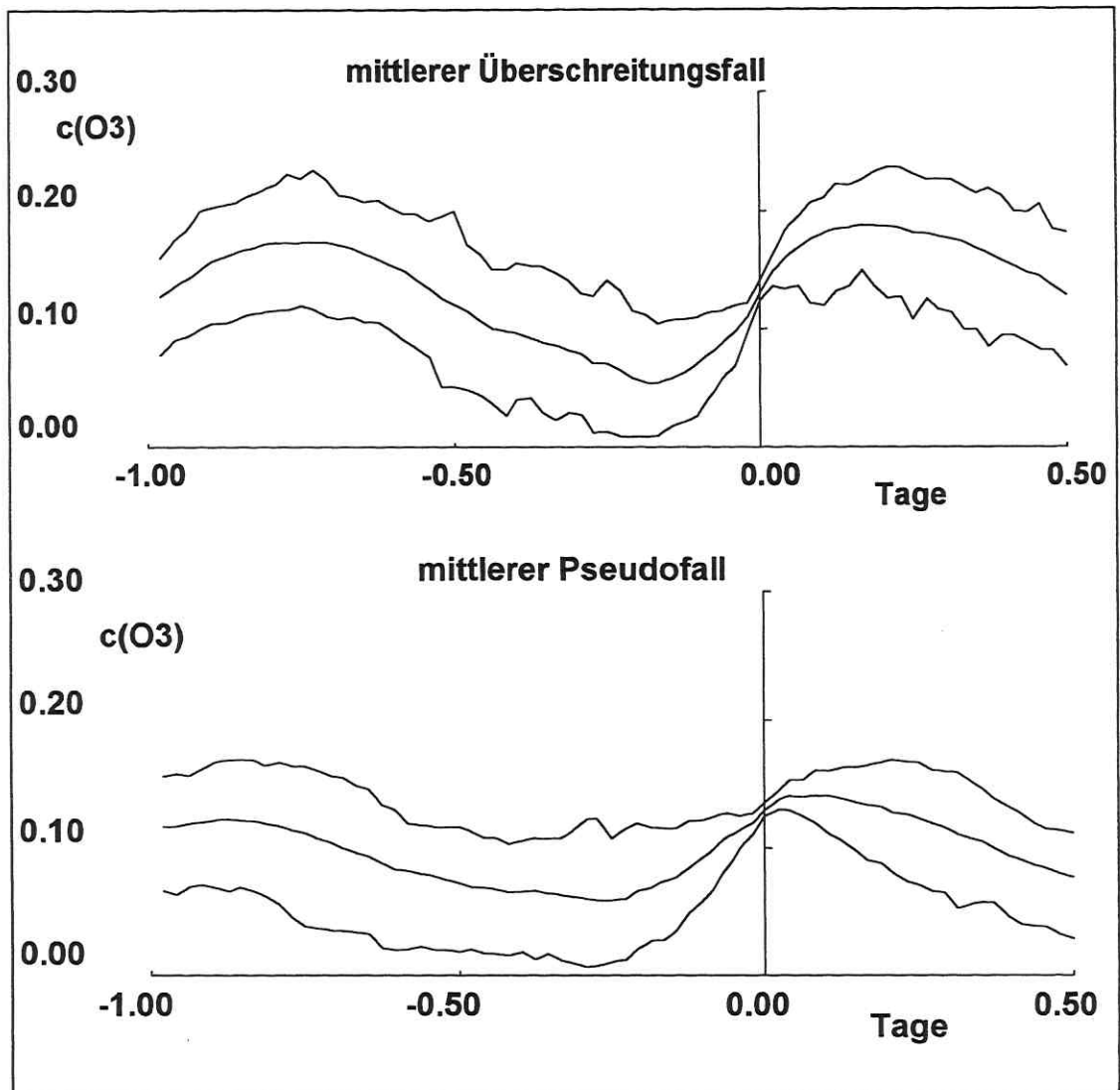


Abb. 5-6: Mittlere Verläufe der Ozonkonzentration zu den in den Abbn. 5-1 und 5-2 gezeigten Fällen (0,1-Perzentil, Mittelwert, 0,9-Perzentil)

Die Streubereiche für diesen Prediktor im Pseudo- und im Überschreitungsfall überschneiden sich jedoch (wie Abb. 5-6 zeigt), so daß keine eindeutige Aussage entsteht. Deshalb wird nach einem weiteren Prediktor gesucht.

Zu diesem Zweck wird auf die parallel zum Ozon gemessenen Reihen der NO- und der NO₂-Konzentration zurückgegriffen (vgl. Abb.5-7...10). Für die statistische Auswertung dieser Daten wurden wieder mittlere Fälle gebildet.

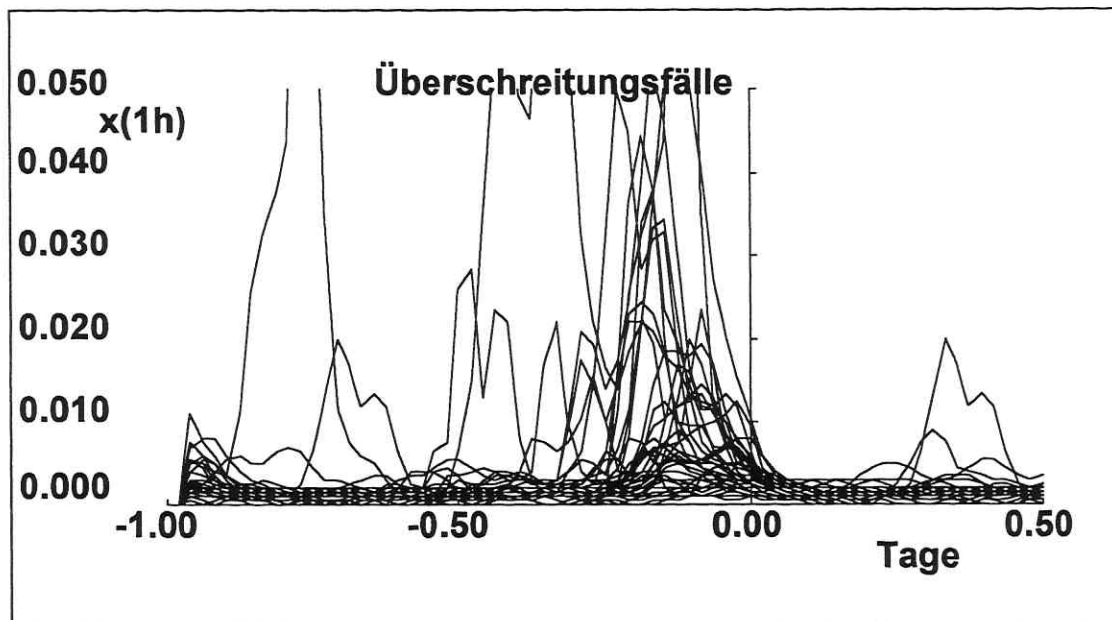


Abb. 5-7: Der Verlauf des gleitenden 1-Stunden-Mittels der NO-Konzentration der 40 Überschreitungsfälle an der Meßstelle UFZ Leipzig in der Zeit von 1992 bis 1994

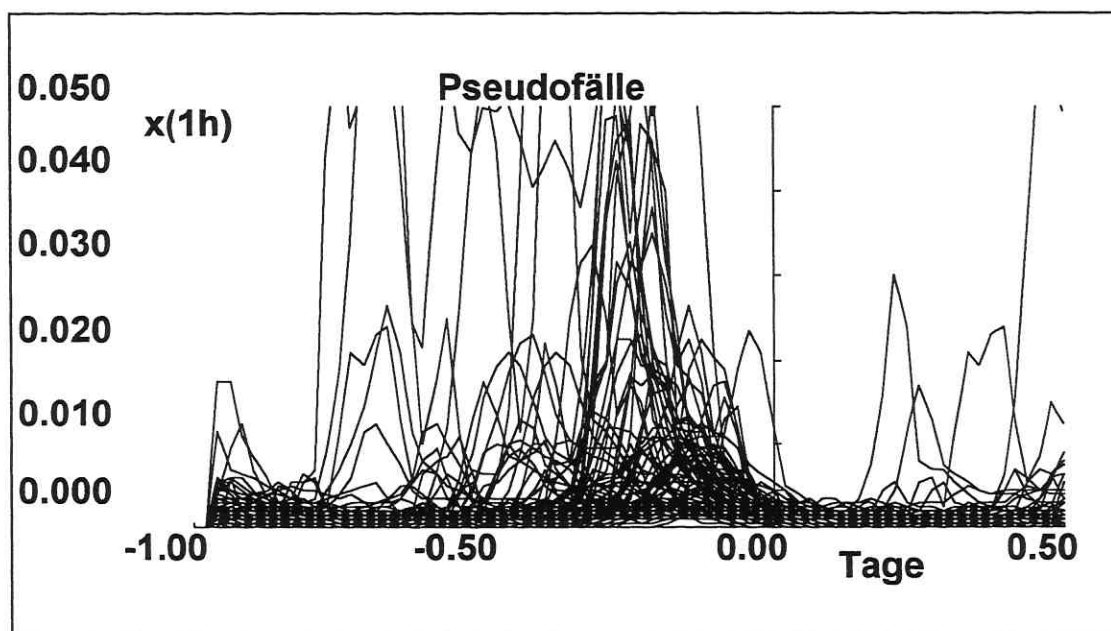


Abb. 5-8: Der Verlauf des gleitenden 1-Stunden-Mittels der NO-Konzentration der 91 Pseudofälle an der Meßstelle UFZ Leipzig in der Zeit von 1992 bis 1994

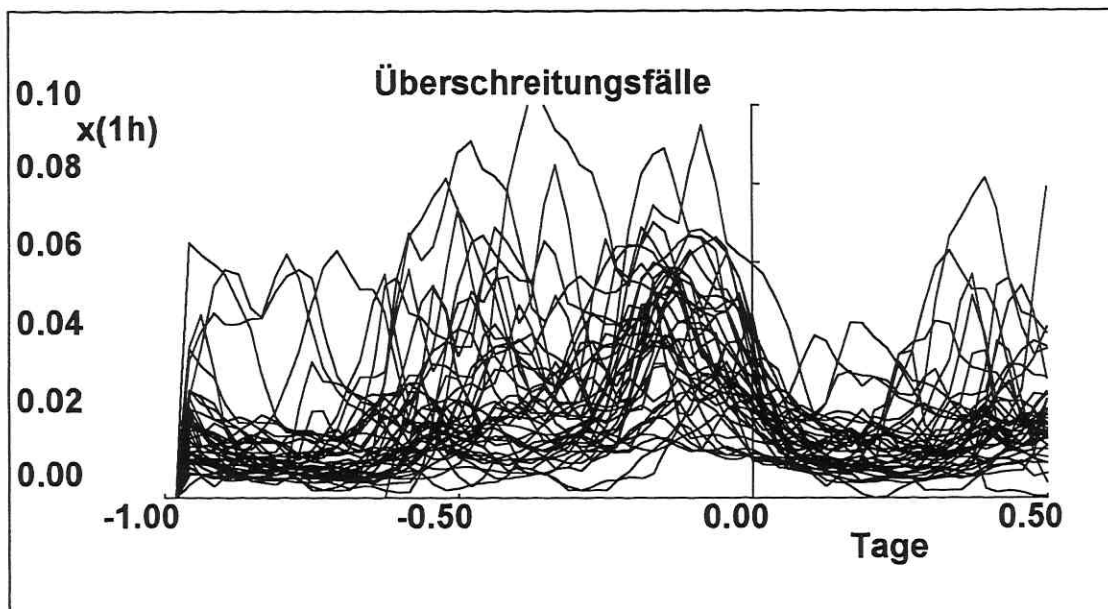


Abb. 5-9: Der Verlauf des gleitenden 1-Stunden-Mittels der NO₂-Konzentration der 40 Überschreitungsfälle an der Meßstelle UFZ Leipzig in der Zeit von 1992 bis 1994

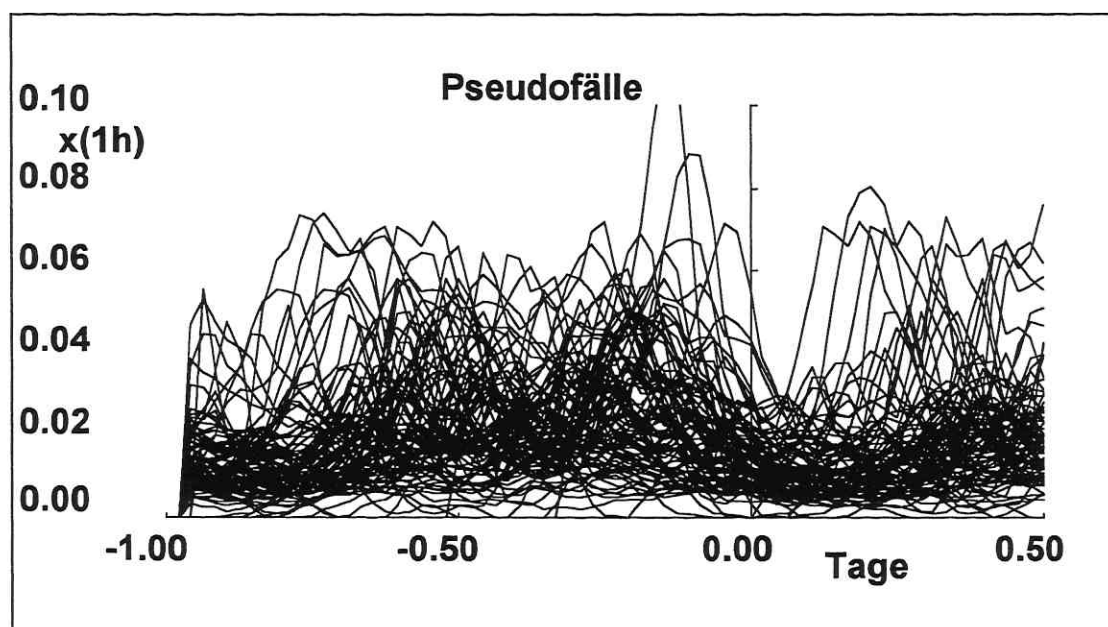


Abb. 5-10: Der Verlauf des gleitenden 1-Stunden-Mittels der NO₂-Konzentration der 91 Pseudofälle an der Meßstelle UFZ Leipzig in der Zeit von 1992 bis 1994

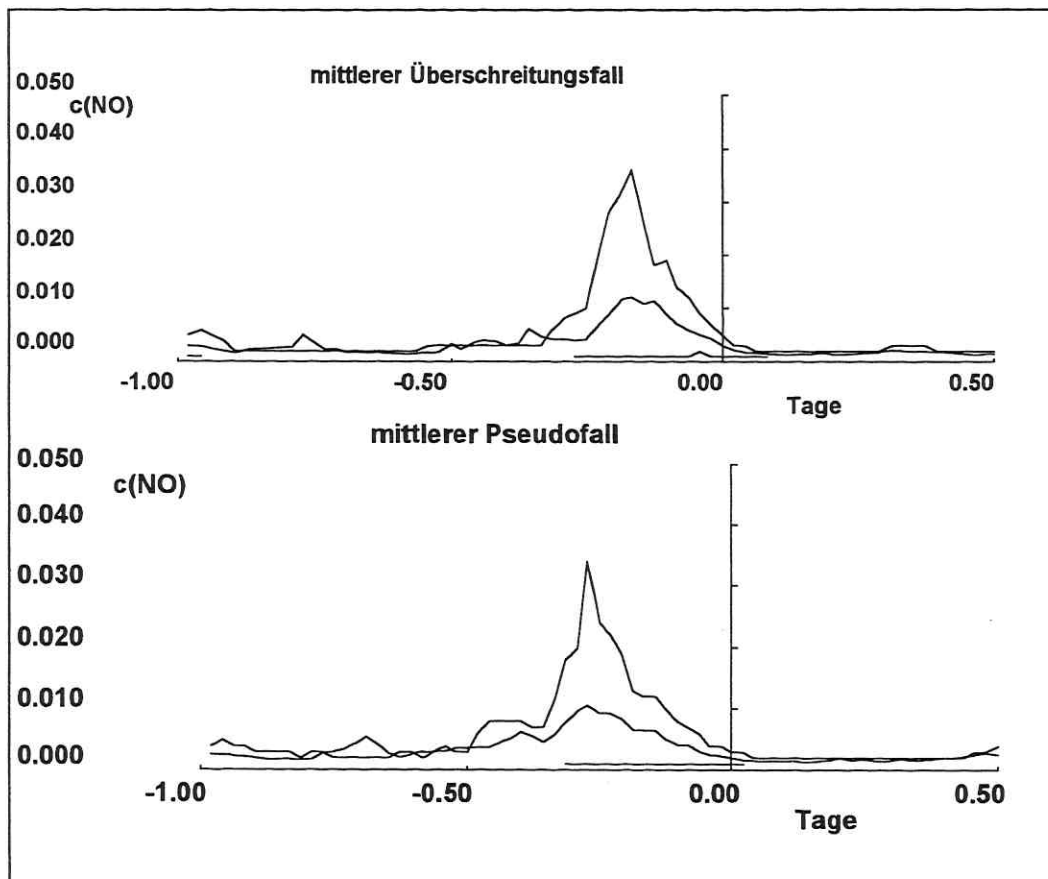


Abb. 5-11: Mittlerer NO-Verlauf zu den in den Abbn. 5-7 und 8 gezeigten Fällen (0,1-Perzentil, Mittelwert, 0,9-Perzentil)

An den Abbn. 5-9 und 5-10 läßt sich ablesen, daß am Prognosepunkt die NO_2 -Konzentration der Pseudofälle unter der der Überschreitungsfälle liegt. Damit ist ein zweiter Prediktor zur Trennung der Mengen **U** und **P** gefunden. Er soll mit PNO_2 bezeichnet werden.

Im Ergebnis der Datenanalyse stehen somit die beiden für eine Vorhersage relevanten Prediktoren PO_3 und PNO_2 . Mit diesen Parametern läßt sich eine Prediktorenebene aufspannen.

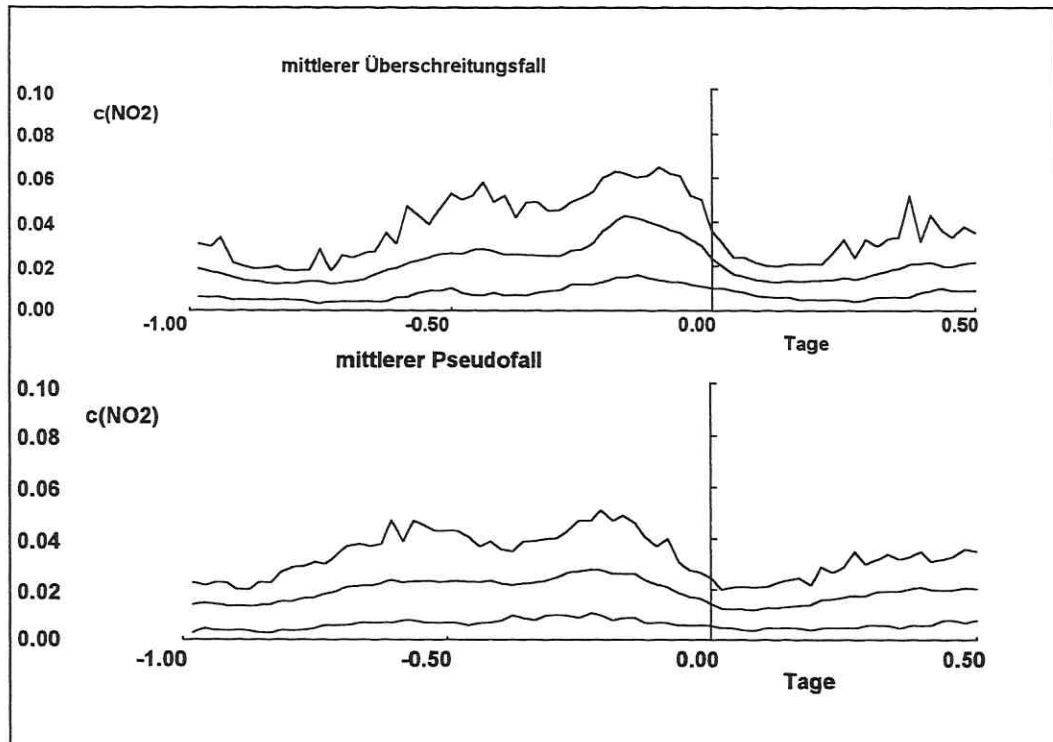


Abb. 5-12: Mittlerer NO₂-Verlauf zu den in den Abbn. 5-9 und 5-10 gezeigten Fällen (0,1-Perzentil, Mittelwert, 0,9-Perzentil)

Zur Interpretation der Verhältnisse in der Prediktorenebene soll auf die eingangs (in Abschnitt 4) gemachten Überlegungen zurückgegriffen werden. Dort wurden die Prediktorwerte in zwei Klassen eingeteilt, um damit eine Zuordnung zu den Mengen **U** und **P** zu bekommen (vgl. Abb. 5-3).

In Abb. 5-13 sind nun die Überschreitungsfälle durch Kreise und die Pseudofälle durch Punkte markiert worden. Sie bilden die Mengen **U** und **P**. Beide Mengen überlappen und durchdringen sich so stark, daß eine einfache Trennung durch Bildung von zwei Klassen nicht möglich ist. Dies hätte nur bei einer Lokalisierung beider Mengen in separaten Bereichen der Prediktorenebene, also einer Clusterbildung funktioniert.

Um eventuell doch bestehende Unterschiede in der Lage von **U** und **P** herauszuarbeiten, wird jeder Prediktorbereich in vier Klassen eingeteilt (vgl. Abb. 5-13). Die Klassengrenzen sind willkürlich festgelegt worden und orientieren sich an Mittelwert und Streubereich.

Für die so entstehenden Klassenbereiche **k** lassen sich folgende statistischen Angaben machen:

- die Anzahl der in **k** liegenden Überschreitungs- und Pseudofälle ($N[\ddot{U}|k]$ und $N[P|k]$),

- die Wahrscheinlichkeit, einen Fall in dem Bereich **k** zu finden

$$P(k) = (N[\ddot{U}|k] + N[P|k]) / (\sum_k (N[\ddot{U}|k] + N[P|k])) \quad (5-2)$$

- die Wahrscheinlichkeit, daß ein in **k** befindlicher Fall ein Überschreitungsfall ist

$$P(\ddot{U}|k) = N[\ddot{U}|k] / (N[\ddot{U}|k] + N[P|k]) \quad (5-3)$$

- die Wahrscheinlichkeit, daß ein Überschreitungsfall in den Bereich **k** fällt

$$P(k|\ddot{U}) = (P(k) \cdot P(\ddot{U}|k)) / (\sum_k (P(k) \cdot P(\ddot{U}|k))) \quad (5-4)$$

- die a priori Treffsicherheit, welche sich aus $\max(P(\ddot{U}|k), (1-P(\ddot{U}|k)))$ abschätzen läßt.

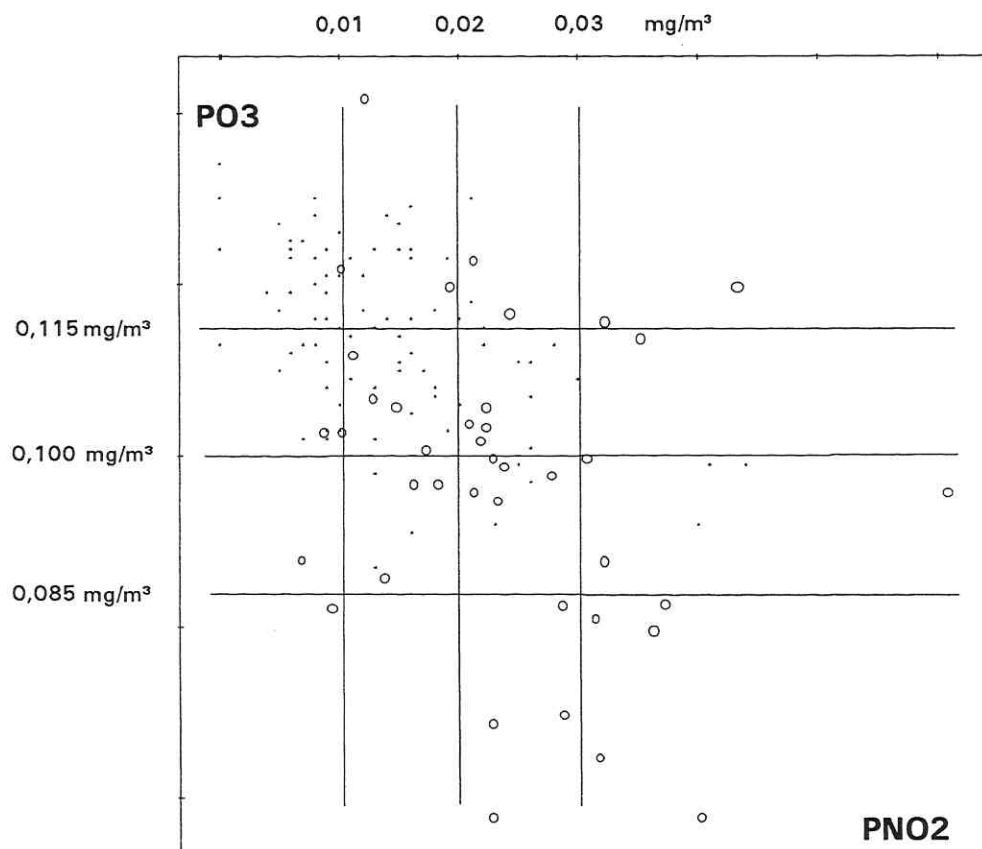


Abb. 5-13: Prediktorenebene für die Prediktoren $PO3(t_0-1h)$ und $PNO2(t_0)$. Die Pseudofälle sind durch Punkte, die Überschreitungsfälle durch Kreise markiert

Liegen nämlich für einen gegebenen Fall die Werte der Prediktoren, also der Prediktorenvektor $\pi = (\pi_1 \ \pi_2 \ \pi_3 \ \dots \ \pi_p)^T$, in dem Klassenbereich k und ist $P(\ddot{U}|k) > 0.5$, so wird dieser Fall mit der Wahrscheinlichkeit von $P(\ddot{U}|k)$ ein Überschreitungsfall. Ist dagegen $P(\ddot{U}|k) \leq 0.5$, dann wird es mit der Wahrscheinlichkeit $(1-P(\ddot{U}|k))$ einen Pseudofall geben.

Diese Wahrscheinlichkeiten geben also gewissermaßen eine a priori Treffsicherheit der Prognose dadurch an, daß sie ausdrücken, welcher Anteil der früheren Fälle mit der gemachten Prognose in Einklang steht, sich also zur Erklärung der Prognose heranziehen läßt.

Die a priori Treffsicherheit ist umso größer, je näher $P(\ddot{U}|k)$ bei 0 oder 1 liegt, d.h. je dominanter die Pseudo- oder die Überschreitungsfälle im Klassenbereich k sind.

Für die Prediktorenebene der Abb. 5-13 sind die statistischen Angaben in Tab. 5-4 zusammengefaßt. Die beiden Klassenbereiche, in denen $P(\ddot{U}|k) > 0.5$ gilt, also ein Überschreitungsfall vorhergesagt würde, sind durch Umrahmung der Wahrscheinlichkeitsangabe hervorgehoben worden.

Dabei fällt auf, daß es Bereiche gibt, in denen sich die Angaben auf nur einen Überschreitungsfall gründen. Die Aussage in diesen Bereichen kann also nicht besonders sicher sein. Aus diesem Grunde soll im weiteren die a priori Treffsicherheit TS mit der Belegungswahrscheinlichkeit $P(k)$ gewichtet werden:

$$TS(k) = P(k) \cdot \max(P(\ddot{U}|k), (1-P(\ddot{U}|k))). \quad (5-5)$$

$$TS_{total} = \sum_k TS(k) \quad (5-6)$$

ist dann die totale a priori Treffsicherheit dieser Vorhersagemethode.

Tabelle 5-4:

**Grenzbedingungen, Wahrscheinlichkeiten
und a priori Treffsicherheiten
für die Prognose mit den Prediktoren PNO₂(to) [in mg/m³]
und PO₃(to-1h) [in mg/m³]**

PO ₃ \ PNO ₂	< 0,01 N(P)(N(Ü))	0,01 ... 0,02	0,02 ... 0,03	> 0,03
> 0,115	22(1)	18(2)	2(2)	0(2)
0,1 ... 0,115	16(2)	16(4)	8(4)	0(1)
0,085 ... 0,1	0(1)	3(3)	3(5)	3(3)
< 0,085	0(1)	0(0)	0(4)	0(5)

P(k)	0,176	0,153	0,03	0,015
	0,137	0,153	0,092	0,008
	0,008	0,046	0,061	0,046
	0,008	0	0,03	0,038

P(Ü k)	0,043	0,1	0,5	1
	0,11	0,2	0,33	1
	1	0,5	0,625	0,5
	1	0,5	1	1

P(k Ü)	0,025	0,05	0,05	0,05
	0,05	0,1	0,1	0,025
	0,025	0,075	0,125	0,075
	0,025		0,1	0,125

a priori TS(k)	0,17	0,14	0,015	0,015
	0,12	0,12	0,06	0,008
	0,008	0,02	0,04	0,02
	0,008		0,03	0,04

Die Diskussion der Vorhersage soll am Beispiel des Klassenbereiches k_{33} ($0.085 \text{ mg/m}^3 < \text{PO}_3 \leq 0.1 \text{ mg/m}^3$ und $0.02 \text{ mg/m}^3 < \text{PNO}_2 \leq 0.03 \text{ mg/m}^3$) geführt werden:

Liegt für einen neuen Fall der Prediktorenvektor $\pi = (\text{PO}_3 \text{ PNO}_2)^T$ in k_{33} , dann lautet wegen $P(\ddot{U}|k_{33}) = 0.625$ die Prognose auf "Überschreitungsfall". Diese Prognose basiert auf den 5 in k_{33} bereits realisierten Überschreitungsfällen, welche 3.8% aller Fälle sind. Bei anderen Klassenbereichen lautet die Prognose auf "Pseudofall". Alle weiteren Überlegungen gehen analog.

Betrachtet man die Prognosen für alle Klassenbereiche, dann werden sie entsprechend der totalen a priori Treffsicherheit, der Summe aller $\text{TS}(\mathbf{k})$ durch 82% aller Fälle bestimmt.

Vor besonderem Interesse für die Smogwarnung sind natürlich die Überschreitungssituationen. Solche Situationen sind seltene Ereignisse. Beispielsweise waren unter den an der Station UFZ-Leipzig von 1992-1994 insgesamt auftretenden 131 Prognosefällen (siehe Anhang F) 30% Überschreitungsfälle. Spektakuläre Trefferraten lassen sich bei der Vorhersage solcher seltenen Ereignisse nicht erwarten. Dafür liegt diese Aufgabe dem Grenzbereich objektiv möglicher Vorhersagbarkeit zu nahe.

In solchen Fällen ist es schwer, allein mit Trefferraten z.B. die Prognose selbst nur eines seltenen Ereignisses angemessen zu würdigen; denn sowohl nach täglicher Erfahrung, als auch gemäß der Informationstheorie (z.B. KLAUS (1969)) besitzt die Kenntnis vom Eintreten eines Ereignisses einen umso größeren Wert, je unwahrscheinlicher es ist (BALZER (1989)). Auch wenn die Güte der in diesem 5. Teil vorgeschlagenen Prognosealgorithmen mit Hilfe ihrer Treffsicherheit bei der Vorhersage von Überschreitungssituationen charakterisiert wird, sollte der genannte Aspekt bei der Beurteilung nicht vergessen werden.

Prinzipiell wäre auch zur Abschätzung der Güte eines Vorhersagealgorithmus eine a posteriori Treffsicherheit, die das Ergebnis einer neuen Realisierung mit ihrer zuvor gestellten Prognose vergleicht, zu bestimmen. Das bedeutet, daß man grundsätzlich zwischen den Daten zur **Kalibrierung** des Modells und den Daten zur **Validierung** der gestellten Prognose unterscheiden sollte.

Bei der Validierung entsteht dann die a posteriori Treffsicherheit, die den Anteil der richtig vorhergesagten Fälle unter den Validierungsdaten beschreibt. Sie ist im allgemeinen kleiner, als die a priori Treffsicherheit.

Bei den hier getesteten faktischen Prediktoren handelt es sich um sehr einfache Kenngrößen. Welche Ergebnisse ein mit Hilfe der im Teil 3 erläuterten Zeitreihenmodellierung bestimmter prognostizierter Prediktor liefert, soll im folgenden Abschnitt untersucht werden.

5.6. Prognostizierter Prediktor

Bis jetzt wurden Prediktoren behandelt, die in der faktischen Zeitreihe selbst enthalten sind. Nun können Prediktoren aber auch Parameter sein, die selbst erst das Ergebnis prognostischer Überlegungen sind. Dazu wird an die gemessenen Daten ein Zeitreihenmodell angepaßt und mit diesem Modell eine Extrapolation durchgeführt.

Als Prediktor soll hier die Zeitspanne Δt verwendet werden, die vom Prognosepunkt $t=0$ bis zu der mit dem Modell vorhergesagten Überschreitung vergeht (vgl. Abb. 5-13). Ein Überschreitungsfall wird dann vorhergesagt, wenn das sich aus der Zeitreihenprognose ergebende $\Delta t < 12$ Std. ist. Diese Festlegung orientiert sich an der Definition (5-3) des Überschreitungsfalls, bei dem die zwischen dem Prognosepunkt ($M1 = 0,13 \text{ mg/m}^3$) und dem "Überschreitungspunkt" ($M1 = 0,18 \text{ mg/m}^3$) vergehende Zeit weniger als 12 Stunden betragen soll.

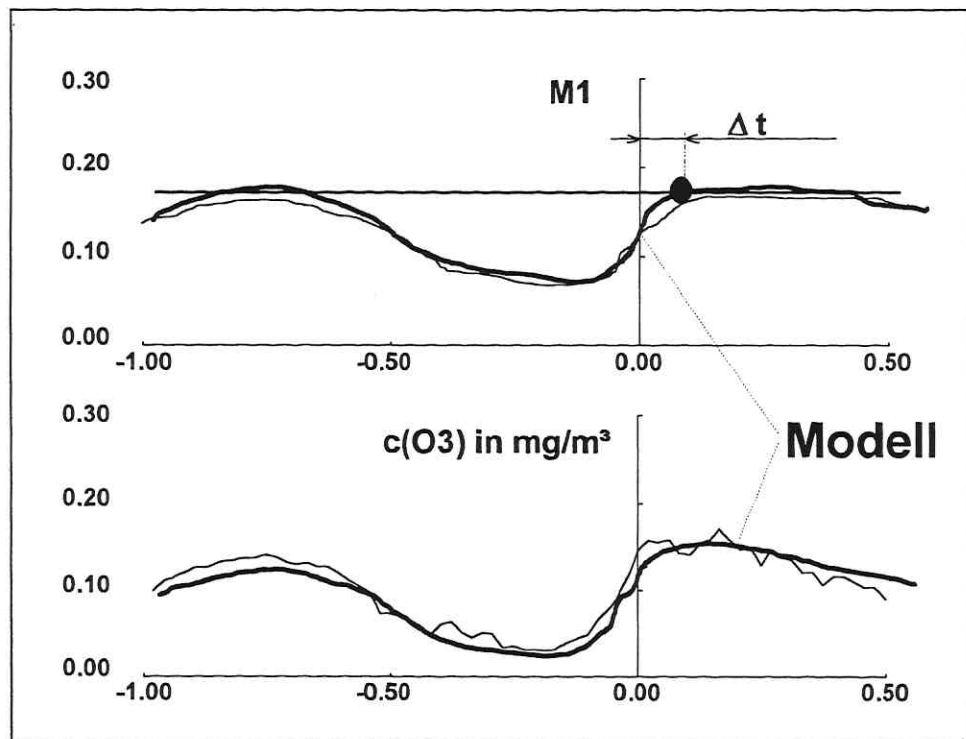


Abb. 5-13: Der prognostizierte Prediktor Δt im Falle einer Beispielsituation; die modellierte Zeitreihe ist durch eine dicke Linie markiert.

Im Teil 3, Abschnitt 4 ist für die Immissionsreihe bereits ein Komponentenmodell aufgestellt worden. Damit ist man nun in der Lage, den Verlauf der Meßreihe für eine gewisse Zeit vorherzusagen. Aus dieser Zeitreihenprognose läßt sich dann auch der voraussichtliche Zeitpunkt für eine Schwellwertüberschreitung durch M1 bestimmen, so daß der prognostizierte Prediktor Δt berechnet werden kann. Für die Untersuchung wurden die Prognosesituationen der Station UFZ-Leipzig von 1992 bis 1994 verwendet, ein Abschnitt von einem Tag vor $t=0$ zugrunde gelegt und daraus die Zeitreihenprognose für den folgenden Tag berechnet.

In den Abbn. 5-14 und 5-15 wurden für die Pseudo- und die Überschreitungsfälle die Histogramme von Δt aufgezeichnet. Die Fälle, in denen die Extrapolation des Modells an dem auf $t=0$ folgenden Tag zu keiner Überschreitung der Schwelle 0.18 mg/m^3 durch M1 kommt, sind im rechten Histogrammteil gesondert dargestellt.

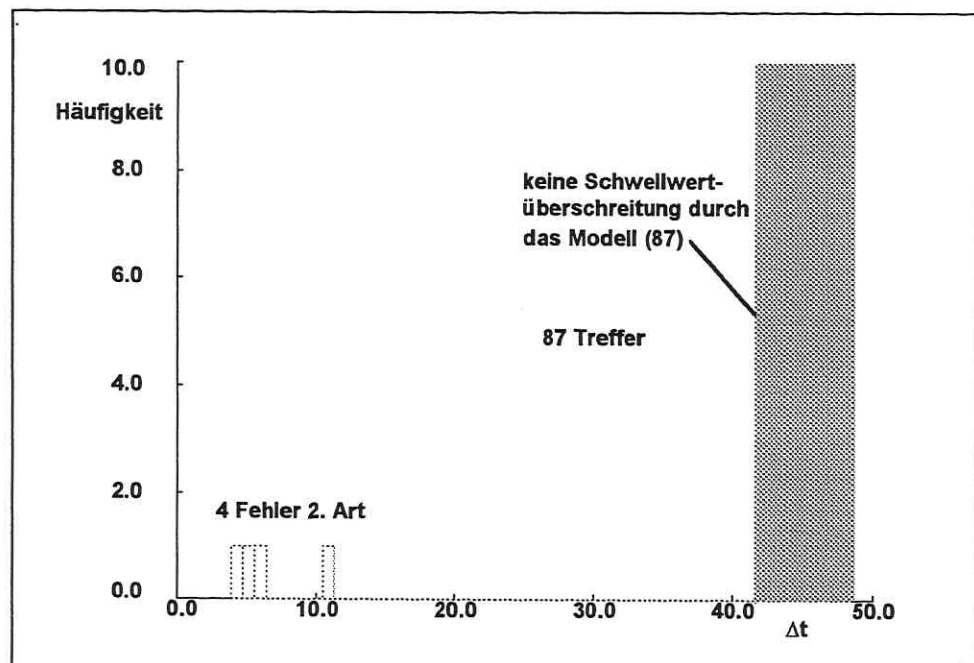


Abb. 5-14: Histogramm für den prognostizierten Prediktor Δt aller Pseudofälle (Fallzahlen in Klammern angegeben)

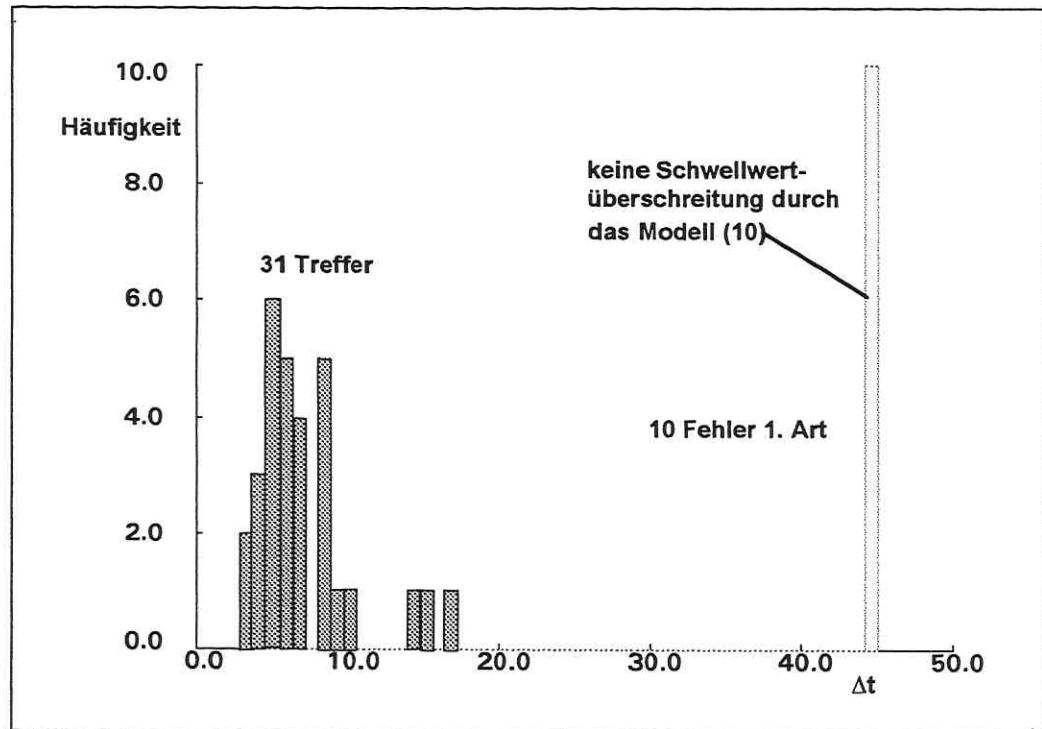


Abb. 5-15: Histogramm für den prognostizierten Prediktor Δt aller Überschreitungsfälle (Fallzahlen in Klammern angegeben)

Um aus dem prognostizierten Prediktor Δt eine Vorhersage ableiten zu können, wird wieder eine Klassenteilung des Wertebereichs von Δt eingeführt. Und zwar in Orientierung an der Definition (5-3) des Überschreitungsfalls die Klassen

$$k_1 = \{ 0 < \Delta t \leq 24 \} \text{ und } k_2 = \{ \Delta t > 24 \}. \quad (5-7)$$

Für $\Delta t \in k_1$ wird dann ein Überschreitungsfall und für $\Delta t \in k_2$ ein Pseudofall vorhergesagt.

Die grau eingefärbten Balken geben jeweils die richtig prognostizierten Fälle an, also die Treffer. Ein Treffer liegt vor,

- wenn $\Delta t \leq 24$ Halbstundenschritte vorhergesagt wurde und dann auch ein Überschreitungsfall eintrat, oder

- wenn es innerhalb der auf $t=0$ folgenden 12 Stunden nicht zu einer Überschreitung kam, d.h., wenn das Modell $\Delta t > 24$ Halbstundenschritte vorhergesagt hatte und dann auch ein Pseudofall eintrat.

Daneben gibt es aber auch zwei Arten der Fehlprognose, die sich aufgliedern in

- Fehler 1. Art, wenn ein Pseudofall prognostiziert wurde ($\Delta t > 24$ Halbstundenschritte), jedoch real ein Überschreitungsfall eintrat, und
- Fehler 2. Art, wenn ein Überschreitungsfall vorhergesagt wurde ($\Delta t \leq 24$ Halbstundenschritte), tatsächlich aber ein Pseudofall realisiert wurde.

Die weißen Balken repräsentieren die Fehlprognosen. Ein Prediktor mit 100% Treffsicherheit hätte also jeweils lediglich die Δt -Werte in den grauen Balken geliefert.

Welche Güte hat nun die Vorhersage mit dem Prediktor Δt ?

Die besonders interessierende Prognose eines Überschreitungsfalls ($\Delta t \in k_1$) wurde bei diesen insgesamt 131 Fällen $4+31 = 35$ mal gestellt. Davon erwiesen sich 31 Fälle als Treffer, das bedeutet eine Treffsicherheit von 89%.

Da Δt ein prognostizierter Prediktor ist, das Modell also an den vor dem Prognosepunkt t_0 gelegenen Meßdaten kalibriert und mit den auf t_0 folgenden Meßdaten validiert wird, ist die berechnete Treffsicherheit bereits eine a posteriori gültige Kenngröße.

Das im Teil 4, Abschnitt 6 beschriebene Verfahren zur modifizierten Trendextrapolation läßt sich in analoger Weise zur Bestimmung des prognostizierten Prediktors Δt anwenden. Die mit dieser Methode erzielte Prognosegüte bleibt jedoch hinter den damit verbundenen Erwartungen zurück. Die Gründe dafür werden im Teil 6 analysiert.

6. Diskussion

6.1. Fehlerquellen und Grenzen der univariaten Trendextrapolation

Die bei der Zeitreihenmodellierung im Teil 3 eingeführte Abstraktion, die Prognoseaufgabe lediglich als univariate Problemstellung zu formulieren, hat natürlich ihre Konsequenzen. Der Prognosegüte sind damit prinzipielle Schranken gesetzt. Hier soll anhand der vorgeschlagenen Vorhersagealgorithmen verdeutlicht werden, an welchen Stellen und durch welche Effekte sie in ihrem Prognosehorizont begrenzt werden. Den Ausgangspunkt bildet dabei eine Analyse der Fehlprognosen bei der Trendextrapolation.

Zuvor soll jedoch eine interessante Eigenschaft der Trendkomponente diskutiert werden. Im Teil 2, Abschnitt 4 wurde die Autokorrelation der Immissionsreihe analysiert. Die Autokorreliertheit, also die Persistenzeigenschaft der O₃-Reihe war ein Motiv für die Beschäftigung mit Algorithmen der univariaten Kurzestfristprognose. Bei der Zeitreihenmodellierung im 2. Teil wurde dann aber festgestellt, daß die Nutzung der Autokorrelation allein keine zufriedenstellenden Prognoseergebnisse bringt.

Die Persistenz beschreibt gewissermaßen die "Trägheit" der Schadstoffkonzentration des atmosphärischen Systems. Ihre Gegenspieler sind äußere Einflußgrößen, wie der Luftmassenstrom, eine verstärkte oder reduzierte Emission sowie eine veränderte Sonneneinstrahlung, die Veränderung der Luftschichtung, etc., die die Einstellung eines stabilen Gleichgewichtszustandes stören.

Es ist nun bemerkenswert, daß dieser Widerspruch bei der Komponentenzerlegung der Meßreihe primär an die Trendkomponente "vererbt" wird und sich dort drastisch verschärfte. Zur Verdeutlichung dieses Tatbestandes betrachte man die in Abb. 6-1 vergleichend dargestellten Autokorrelationsfunktionen der OZON-Reihe und deren Trendkomponente.

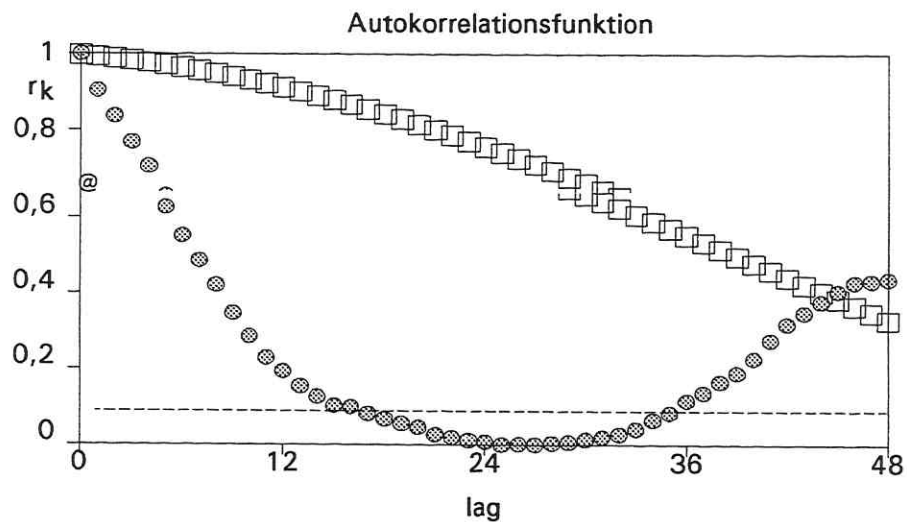


Abb. 6-1: Autokorrelationsfunktion der OZON-Reihe (Punkte) und ACF der Trendkomponente der OZON-Reihe (Kästchen)

Der Trend zeigt für Zeitabstände unter 24 Stunden eine stärkere Erhaltungsneigung, als die Meßdaten selbst. Andererseits war im Teil 4, Abschnitt 2 herausgearbeitet worden, daß gerade der Trendverlauf auf Wetteränderungen der synoptischen Scale reagiert. Da die saisonalen und die Restkomponente (Teil 3, Abschnitt 5) bis auf wenige Ausnahmen (auf die später noch kurz eingegangen wird) zeitlich relativ unverändert bleiben, muß sich eine Änderung des Immissionszustandes logischerweise vorrangig in der Trendkomponente ausdrücken. Dabei sind jedoch Zeiten von 24 Stunden und mehr charakteristisch.

Prägnanter ausgedrückt wird der Trend durch zwei widersprüchliche Phänomene bestimmt: Die Persistenz einerseits und die Wechselwirkung mit anderen atmosphärischen Vorgängen andererseits. Dies ist nur auf der Ebene von verschiedenen Zeitscales möglich!

Aufgrund dieser besonderen Bedeutung des Trends wurden zwei Methoden der Extrapolation vorgeschlagen: Die lineare, welche durch das Zustandsraummodell bereits automatisch vom für die Trendextraktion verwendeten Kalman-Algorithmus realisiert wird und eine harmonische mit lokal angepaßter Frequenz, welche aus dem Verhalten der Phasenraumtrajektorie des Trends entwickelt worden war.

Wie diese beiden Extrapolationen bei verschiedenen Verlaufstypen des Trends arbeiten, ist an den Beispielen in Abb. 6-2 vergleichend dargestellt.

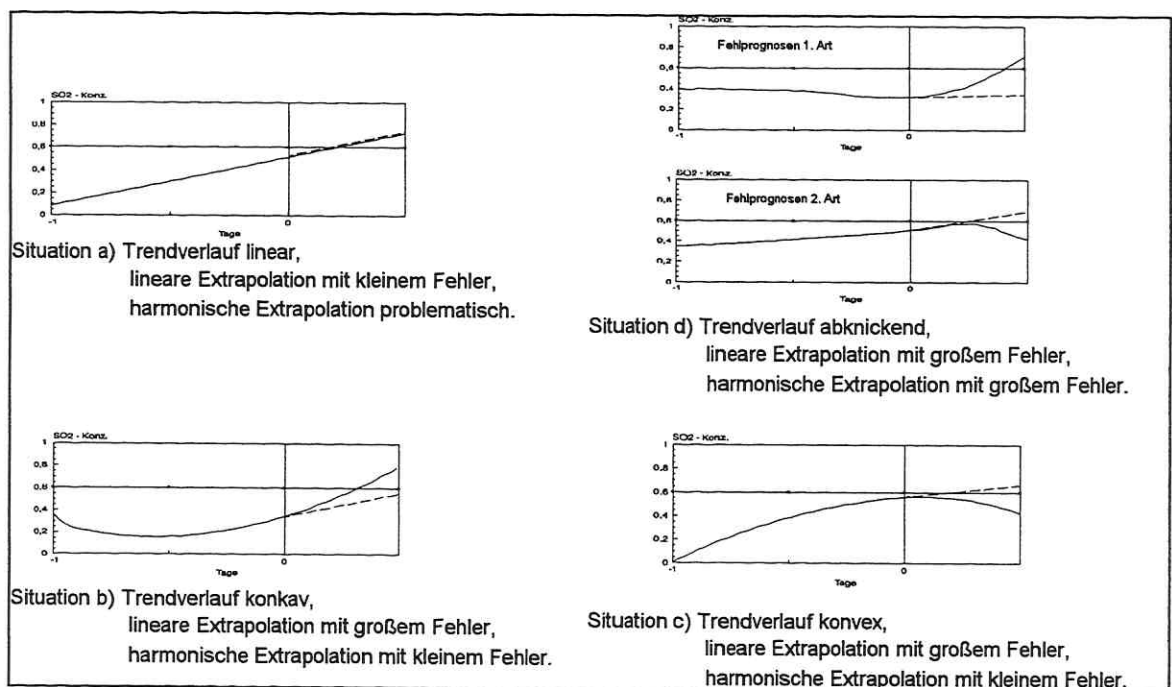


Abb. 6-2: Vergleich von linearer (gestrichelt) und lokaler harmonischer (durchgezogene Linie) Trendextrapolation ($t > 0$) anhand ausgewählter Beispielsituationen.

Die Situation a) läßt sich mit einer linearen Trendextrapolation vorhersagen. Darüberhinaus kann der nahezu lineare Verlauf auch durch ein Stück einer Schwingung mit sehr großer Periode approximiert werden. Prinzipiell ist deshalb auch die harmonische Extrapolation anwendbar. Es entstehen lediglich numerische Probleme, da die Frequenz der anzupassenden Winkelfunktion äußerst klein wird.

Bemerkung (6-1): So waren die Schwierigkeiten bei der Schätzung sehr kleiner Frequenzen durch den in Teil 3, Abschnitt 5 vorgeschlagenen Algorithmus der lokalen harmonischen Extrapolation eine Ursache für die unvermutet geringe Verbesserung der Prognosegüte gegenüber der linearen Trendextrapolation. Im Abschnitt Parameterschätzung wurde bereits auf die Problematik der nichtlinearen Schätzgleichung hingewiesen. Ein optimales Verfahren würde die Extrapolation gleich mit in die Filterung einbeziehen, wie dies bei der linearen Extrapolation durch das Kalman-Filter geschieht.

Inwieweit hier die nichtlinearen Filteralgorithmen nach STRATONOVICH (1960) und KUSHNER (1964) (vgl. auch KREBS (1980)) nützlich sind, ein Optimum an Information aus dem Trendverlauf verfügbar zu machen, ist eine interessante Fragestellung, die jedoch über den Rahmen dieser Arbeit hinausgeht.□

Im Vergleich zu a) ist die harmonische Extrapolation der linearen in den Beispielen b) und c) bei konkavem oder konvexem Trendverlauf mit nahezu konstanter Schwingungsdauer deutlich überlegen. Wird die atmosphärische Situation im Bsp. a) durch konstante Immissionsbedingungen (beispielsweise konstanter Schadstoffausstoß) bestimmt, so liegen den Beispielen b) und c) mit einer festen Periode schwingende Änderungen der Immissionsbedingungen zugrunde.

Bei etwa der Hälfte aller Prognosesituationen bleibt jedoch die Schwingfrequenz des Trends selbst in der kurzen Zeitspanne von etwa zwei Tagen nicht konstant, was oft zu einem Umkehrpunkt der Trendkurve im zu prognostizierenden Zeitbereich führt (Bsp. d)).

Hier versagen natürlich univariate Techniken und so kommt es zu den im Abschnitt 5.6. erstellten Fehlprognosen 1. und 2. Art. An dieser Stelle läßt sich die Prognosegüte nur durch die Berücksichtigung des kausalen Zusammenspiels der atmosphärischen Zustandsgrößen verbessern. Solche Situationen sind univariat prinzipiell nicht vorhersagbar - eine multivariate Betrachtung wird unerlässlich.

Bemerkung (6-2): Die in Abb. 6-2 aufgezählten Situationen sind natürlich Idealisierungen, die zur Diskussion der Vorhersagemethode vorgenommen werden mußten. Reale Situationen sind Übergangsformen zwischen diesen. Ein optimaler Prognosealgorithmus sollte möglichst viele Verlaufsformen des Trends adäquat verarbeiten können.□

Bemerkung (6-3): Die Betrachtung konkreter Fälle von Fehlprognosen zeigt eine weitere Fehlerursache, die jedoch bereits durch Verbesserung des univariaten Modells beseitigt werden könnte: In einigen wenigen Situationen entsteht ein Überschreitungsfall durch eine Veränderung der Amplituden der Saisonkomponenten. Das im Komponentenmodell verwendete Saisonmodell (DHR) extrapoliert jedoch den periodischen Verlauf mit konstanter Amplitude. Es ließe sich also vermutlich auch durch eine Modifizierung des Prognosealgorithmus für den periodischen Anteil eine Steigerung der Treffsicherheit erreichen. Beispielsweise könnte man die RW-Modellierung der zeitabhängigen Amplituden durch ein IRW-Modell (siehe Anhang D) ersetzen. Letzteres würde die prognostizierte Amplitude zeitproportional verändern.□

Abschließend sollen noch einige Sachverhalte über die Unterschiede der lokalen harmonischen Trendextrapolation zu zwei bekannten Filteralgorithmen (der DHR- und der SIRW-Methode) angemerkt werden.

Bemerkung (6-4): Der von Young et al. (1991) angegebene Algorithmus zur dynamischen harmonischen Regression (DHR, siehe Anhang D), der die Zeitabhängigkeit der Frequenz zuläßt, wurde hier zwar für die Modellierung und Extrapolation der saisonalen Anteile der Meßreihe verwendet, jedoch nicht für die Trendprognose. Die Gründe dafür sind folgende:

Ein mit dem DHR-Modell konstruiertes Kalman-Filter extrahiert alle in einem bestimmten Frequenzband gelegenen Schwingungen aus der Meßreihe. Im Gegensatz dazu wird bei der *statischen* harmonischen Regression nur genau die Schwingung einer festen Frequenz aus der Meßreihe herausgefiltert.

Dabei gehen beiden Verfahren von der Vorgabe einer festen Frequenz aus. Die Ausdehnung auf ein Frequenzband, dessen Breite vom gewählten NVR abhängt, läßt dann beim DHR-Algorithmus eine gewisse Zeitabhängigkeit der Frequenz zu. Diese Zeitabhängigkeit wird jedoch nur bei der Modellierung, nicht aber bei der Prognose wirksam. Das DHR-Modell extrapoliert nämlich den Reihenverlauf in gleicher Weise, wie ein statisches harmonisches Modell: Mit einer Schwingung konstanter Amplitude und der in der Zustandsgleichung (bzw. Regressionsgleichung) festgelegten Frequenz.

Für die Trendextrapolation muß man deshalb von einer etwas anderen Sachlage ausgehen. Das Verhalten der Trendfunktion läßt sich nicht durch eine typische Periodizität, die im Laufe der Zeit stärker oder schwächer ausgeprägt ist, charakterisieren. Vielmehr ändert sich die Periode der Trendbewegung ständig und variiert über einen relativ großen Bereich. Alle dabei vorkommenden Frequenzen sind völlig gleichberechtigt. Die Dominanz einer bestimmten Schwingung ist bestenfalls lokal vorhanden. Wollte man für die Modellierung dieses Verhaltens die dynamische harmonische Regression verwenden, so hätte man eine sehr große Bandbreite zu wählen (NVR groß) und käme bei der Festlegung der charakteristischen Periode in große Schwierigkeiten. Für welchen Wert sollte man sich entscheiden?

Es liegt also nahe, die Periode lokal stets neu zu schätzen, wie dies in dem in Teil 4, Abschnitt 6 realisierten Verfahren getan wurde.□

Bemerkung (6-5): Die Isolierung der Trendfunktion $T_t = y_t$ erfolgte im Rahmen des Komponentenmodells entsprechend einem integrated random walk Ansatz in der Zustandsraumdarstellung. Dieser Ansatz ist verallgemeinerbar, indem ein zusätzlicher Parameter α eingeführt wird:

$$\begin{array}{llll} \text{Zustandsgleichung} & y_t = \alpha y_{t-1} + x_{t-1} & (\text{SIRW-Modell}) & (6-1) \\ & x_t = x_{t-1} + \eta_t & \eta_t = \text{weißes Rauschen} & \end{array}$$

Aus diesem smoothed integrated random walk Modell (SIRW) ergibt sich dann für $\alpha = 1$ als Spezialfall das IRW- und für $\alpha = 0$ das random walk Modell (RW). Hätte man nun ein Extrapolationsverhalten entsprechend der oben beschriebenen lokalen harmonische Approximation auch mit einem SIRW-Ansatz erzielen können?

Für die Prognose nimmt die SIRW Zustandsgleichung die Form

$$\begin{aligned} y_t &= \alpha y_{t-1} + x_{t-1} \\ x_t &= x_{t-1} \end{aligned} \quad (6-2)$$

an. x_t wird also konstant gehalten, so daß $y_t - \alpha y_{t-1} = \text{const.}$ ist. Wie man sieht, bestimmt sich die Ableitung (korrekter: die Differenzenreihe) der Trendfunktion y_t nun nicht mehr zu x_t , sondern aus

$$\begin{aligned} y_t - y_{t-1} &= \text{const.} - (\alpha - 1) y_{t-1} = \text{const.} - (1 - 1/\alpha) (y(t) - \text{const.}) \\ &= \text{const.} - \beta (y(t) - \text{const.}) \end{aligned} \quad (6-3)$$

mit $\beta = (1 - 1/\alpha)$, $-\infty < \beta \leq 0$.

Im Falle der lokalen harmonischen Trendextrapolation gilt dagegen lokal die Beziehung

$$y_t = c - a \cos(\Omega t - t_0) \quad (6-4)$$

und damit

$$\begin{aligned} y_t - y_{t-1} &= a \{ \cos(\Omega t - t_0 - \Omega) - \cos(\Omega t - t_0) \} \\ &= a \{ \cos(\Omega t - t_0) \cos(\Omega) + \sin(\Omega t - t_0) \sin(\Omega) - \cos(\Omega t - t_0) \} \end{aligned} \quad (6-5)$$

Wird dieser Ausdruck für kleine Ω entwickelt, so erhält man in niedrigster Ordnung

$$y_t - y_{t-1} = -(\Omega^2 a/2) \cos(\Omega t - t_0) = -\Omega^2/2 (y_t - c). \quad (6-6)$$

Vergleicht man diesen Ausdruck mit (6-3), so läßt sich erkennen, daß im Falle kleiner Ω die SIRW-Extrapolation ein Spezialfall der lokalen harmonischen Extrapolation ist. $\square$

6.2. Ziel der Immissionsprognose: Ein Warnsystem

In hochbelasteten industriellen Ballungsgebieten sind zur Feststellung von Sommersmogsituationen seit einigen Jahren Überwachungssysteme mit automatischen Meßgeräten installiert worden. Beispielhaft dafür sei das Meßnetz im Freistaat Sachsen genannt. Mit einem solchen Kontrollsystem registriert man jedoch eine Smogsituation erst, wenn der kritische Zustand erreicht oder bereits vorüber ist (HERBARTH (1983)).

Zur Abwendung von smogbedingten Schäden ist es erforderlich, Emissionssenkungen sowie präventive Verhaltensweisen der Bevölkerung bereits im Vorfeld zu veranlassen. Damit stellt sich die Frage nach einem Warnsystem. Der Begriff des Warnsystems meint allgemein einen Algorithmus, der die Möglichkeit der Entstehung einer kritischen Situation zu einem Zeitpunkt, zu dem die Kriterien den kritischen Bereich noch nicht erreicht haben, signalisiert.

Kritische Situationen sind nicht der Normalzustand, sie sind seltene Ereignisse. Praktisch läßt sich diese Feststellung durch die geringe Anzahl von Überschreitungsfällen (vgl. Anhang F) belegen. Dabei hatte man bereits eine Vorauswahl von prognosewürdigen Situationen mit erhöhtem Immissionsniveau getroffen und die Vielzahl der Nullfälle völlig unberücksichtigt gelassen.

Wie sich in Teil 5, Abschnitt 3 herausstellte, lassen sich Überschreitungsfälle mit einer Treffsicherheit von 89% vorhersagen. Ein automatisches Vorwarnsystem, welches im on-line-Betrieb (z.B. direkt am PC, der die Meßdaten aufnimmt) aus den einlaufenden Immissionsdaten eine Warnmeldung ableitet, ist damit realisierbar. In diesem Sinne kann die im Teil 5, Abschnitt 2 gemachte Arbeitshypothese bestätigt werden.

Schluß

In der vorliegenden Untersuchung wurden speziell die Immissionsdaten der Meßstationen des Freistaates Sachsen mit dem Ziel der Erstellung eines Algorithmus für die Kurzzeitprognose von Überschreitungssituationen bei Sommersmog analysiert. Die Prognosestellung sollte allein anhand der in der Vergangenheit registrierten Halbstundenwerte der Ozonkonzentration, also univariat erfolgen.

Zur Stabilisierung der Varianz der Meßreihe wurde die Transformation

$$u_t = F(z_t) = 4(\sqrt[4]{z_t} - 1)$$

gefunden. Zwar besitzt die Meßreihe eine Autokorreliertheit, jedoch ist diese Eigenschaft zur Konstruktion eines aussagekräftigen Vorhersagealgorithmus nicht ausreichend.

Wie die Fourieranalyse zeigt, gibt es drei wesentliche und voneinander unabhängige Spektralbereiche: Den hochfrequenten Bereich (Periode < 12 Stunden) der instabilen Irregularitäten, den saisonalen Anteil mit der Perioden von 24 Stunden und den niederfrequenten Bereich (Periode > 24 Stunden). Letzterer wird nach einer Zerlegung der Meßreihe in Komponenten als Trendkomponente (oder kurz Trend) bezeichnet. Für die Komponentenzerlegung wird ein Kalman-Filter verwendet. Es stellt sich heraus, daß Smogepisoden am deutlichsten durch die Trendkomponente beschrieben werden. Deshalb wird diese genauer untersucht. In der Phasenraumdarstellung zeigen sich dann charakteristische Trajektorienverläufe des Trends.

Die Feststellung, daß Modellierung und Extrapolation zwei unterschiedliche Aspekte des Kalman-Algorithmus sind, ist Anlaß, das Inter- und Extrapolationsverhalten des Kalman-Filters für den Trend zu untersuchen. Beim Vergleich dieses Verhaltens mit dem Verhalten der Trendtrajektorie im Phasenraum zeigt sich die Möglichkeit einer modifizierten Trendvorhersage.

Diese wird als lokale harmonische Trendextrapolation bezeichnet. Die Schätzgleichung der dafür erforderlichen Parameter ist jedoch nichtlinear. Sie kann nur näherungsweise gelöst werden. Bei der Anwendung dieser Methode auf konkrete Prognosefälle bleibt die Güte dieser Vorhersagen deshalb hinter dem erwarteten Maß zurück.

Bei den 131 für die Station UFZ-Leipzig registrierten Sommersmog-Prognosesituationen des Meßzeitraumes 1992 bis 1994, die definierten Bedingungen entsprechen, wurden zwei sehr einfache Kenngrößen ausgewählt und faktische Prediktoren genannt. Mit ihnen ist bereits eine Wahrscheinlichkeitsaussage über eine künftige Schwellwertüberschreitung der O₃-Konzentration möglich. Die Seltenheit von Überschreitungssituationen bedingt generell eine niedrige Treffsicherheit der Vorhersagen. Durch die Anwendung der in den Teilen 3 und 4 entwickelten Algorithmen für die Zeitreihenprognose zur Bestimmung eines prognostizierten Prediktors kann jedoch eine Treffsicherheit von 89% erreicht werden. Wodurch Fehlprognosen zustande kommen, war an ausgewählten Situationen im Teil 6 zu diskutieren. Hier zeigen sich auch die Grenzen des univariaten Herangehens.

Die hier dokumentierten Untersuchungen haben verdeutlicht, daß man die in der Variabilität der Immissionsreihe enthaltenen Phänomene für die Konstruktion eines on-line arbeitenden Algorithmus zur Smogvorwarnung nutzen kann. Ein Vorschlag für einen solchen Algorithmus wurde in Teil 5 angegeben und Modifikationen zum Zwecke der Erhöhung der Treffsicherheit sowie seine prinzipiellen Grenzen diskutiert.

Der Prognosealgorithmus geht von einer Zeitreihenmodellierung der Immissionsreihe aus. Man kann erwarten, daß die in den Algorithmus einbezogenen Phänomene, wie Tagessaisonalität und die Widerspiegelung von Smogereignissen durch den Trendverlauf vom konkreten Meßstandort nicht abhängen. Damit ist eine gewisse Universalität des Warnsystems garantiert. Eine Anpassung an die örtlichen Gegebenheiten, wie orografische Situation oder Emissionsstruktur der Region ist somit nicht erforderlich.

Die weitere Forschungsarbeit sollte einerseits den Aspekt der multivariaten Zeitreihenmodellierung einbeziehen, d.h. die Abhängigkeiten von weiteren Umwelttoxinen, insbesondere den Stickoxiden, meteorologischen Zustandsgrößen und der Emissionsstärke zur Steigerung der Prognosegüte ausnutzen.

Andererseits haben die vorliegenden Untersuchungen auch deutlich gemacht, daß Immissionsreihen ein zeitlich veränderliches Spektrum aufweisen. Man bezeichnet dies auch als evolutionäres Spektrum. Von PRIESTLEY (1965) und (1981) und HAMPE (1982) wurde eine Theorie dieser Erscheinungen erarbeitet. Dabei geht es auch um die Schätzung des jeweils **lokal** gültigen Spektrums, wie das folgende Zitat von PRIESTLEY (1981) zeigt:

In "the case of more general types of non-stationary processes, we are led to the notion of a continuously changing spectrum, or more precisely, a time-dependent spectrum. Clearly, in such cases we could never hope to estimate the spectrum at a particular instant of time, but if we assume that the spectrum is changing smoothly over time then, by using estimates which involve only local functions of the data, we may attempt to estimate some form of "average" spectrum of the process in the neighbourhood of any particular time instant. We therefore consider the class of non-stationary processes whose statistical characteristics are changing "smoothly" over time."

Die Anwendung lokaler Spektralschätzer und daraus abgeleiteter Prognosemethoden auf Immissionsdaten erscheinen deshalb erfolgversprechend.

Literaturverzeichnis

Akaike, H (1970): Statistical predictor identification; *Annals of the Institute of Statist. Math.* **22**, S. 203.

Balzer, K (1984): Gegenwärtige Grenzen der Vorhersagbarkeit und Gibt es einen Trend der Prognosegüte?; *Abh. Met. Dienst d. DDR*, Nr. 133, S. 37.

Balzer, K (1986): Eine selbstlernende, optimale Mensch-Maschine-Kombination von operativen Immissionsprognosen; *Z. Meteorol.* **36**, Nr. 2, S. 127-133.

Balzer, K (1989): Statistische Vorhersage seltener, extremer meteorologischer Erscheinungen; *Abh. Met. Dienst d. DDR*, Nr. 141, S. 115-118.

Bandemer, H (1989): *Einführung in die Fuzzy-Methoden: Theorie und Anwendungen unscharfer Mengen*, Akademie Verlag.

Beck, EG und Schmidt, P (1992): *Hygiene Präventivmedizin*, Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart.

Becker (1985): *Atmosphärische Spurenstoffe und ihr physikalisch-chemisches Verhalten*, Springer Verlag, Berlin.

Bergeron, T (1928): Über die dreidimensional verknüpfende Wetteranalyse, I. Teil; *Geof. Publ.* **5**, Nr. 6.

Bjerknes, J (1919): On the structure of moving cyclones; *Geof. Publ.* **1**, Nr. 2.

BMA (1987): *EMAK-Werte-Liste im Bundesarbeitsblatt 10/1987*,
ABekanntmachung des Bundesministeriums für Arbeit vom 10.09.87 -
III b 4-35125-5.

Box, GEP und Cox, DR (1964): An analysis of transformations;
J R Statist Soc B 26, S. 211-252.

Box, GEP und Jenkins, GM (1970): *Time series analysis -
forecasting and control*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey,
Revised Edition 1976.

Box, GEP und Pierce, DA (1970): Distribution of residual
autocorrelations in autoregressive - integrated moving average time
series models, Revised Edition 1976; *J. Am. Stat. Ass.* 65, Nr. 332, S.
1509-1525.

Bredel, H und Herbarth, O (1987): Methodische Untersuchungen zur
optimalen Beschreibung der Raum-Zeit-Struktur des Immissionsfeldes
kommunaler Ballungsgebiete - Ermittlung der räumlichen
Immissionsverteilung;
Z. gesamte Hyg. 33, Nr. 8, S. 370-372.

Burg, JP (1967): Maximum Entropy Spectral Analysis, *Unpubl. paper
presented at the 37th Meeting of Soc. Explor. Geophys.*,
Oklahoma City.

Doob, JL (1953): *Stochastic Processes*, Wiley, New York.

Duncan, DB und Horn, SD (1972): Linear dynamic recursive
estimation from the viewpoint of regression analysis;
J Amer Statist Ass 67, S. 815-821.

Durbin, J (1969): Tests of serial correlation in regression analysis
based on the periodogram of least-squares residuals;
Biometrika 56, S. 1-15.

- Enke, W** (1986): Ein modernes Verfahren zur Aufstellung statistischer Prognosealgorithmen als Einheit von Cluster-, Diskriminanz- und Regressionsanalyse; *Z. Meteorol.* **36**, Nr. 2, S. 117-122.
- Essenwanger, OM** (1980): On red noise and quasi-periodicity in the time series of atmospheric temperature; *Statistical Climatology - Developments in Atmospheric Sciences* **13**, S. 165.
- Fellenberg, G** (1992): *Chemie der Umweltbelastungen*, Teubner, Stuttgart.
- Fildes, R** (1983): An evaluation of Bayesian forecasting; *J Forecasting* **2**, S. 137.
- Gottwald** (1991): *GRealisierung eines Lagrange-Simulationsmodells zur Ausbreitungsrechnung*, HMI-B495, Hahn-Meitner-Institut, Berlin.
- Hamming, RW** (1973): *Numerical Methods for Scientists and Engineers*, McGraw-Hill.
- Hampe, JF** (1982): *Zur Theorie und Anwendung der Schätzung zeitabhängiger Spektren*, Haag und Herchen, Frankfurt am Main.
- Harrison, PJ und Stevens, CF** (1976): Bayesian forecasting (with discussion); *J Roy Statist Soc B* **38**, S. 205-247.
- Heller, WD et al.** (1978): *Stochastische Systeme*, de Gruyter, Berlin.
- Herbarth, O** (1982): Zeitreihenanalyse und Prognose lufthygienischer Konzentrationsreihen; *Z. gesamte Hyg.* **28**, Nr. 7, S. 508-09.
- Herbarth, O** (1993): Smogprognosen - eine Hilfe für die Medizin; *Mitteilungen Deutsche Meteorologische Gesellschaft e. V.*, Nr. 4, S. 17-20.

- Herbarth, O und Bredel, H** (1983): Automatische Immissionsüberwachung und Immissionsprognose; *Z. gesamte Hyg.* **29**, Nr. 9, S. 533.
- Herbarth, O und Bredel, H** (1987): Methodische Untersuchungen zur optimalen Beschreibung der Raum-Zeit-Struktur des Immissionsfeldes kommunaler Ballungsgebiete - Ermittlung der zeitlichen Immissionsverteilung; *Z. gesamte Hyg.* **33**, Nr. 9, S. 442-43.
- Herbarth, O und Bredel, H** (1990): Methodical aspects of finding threshold values for air protection using epidemiologic studies; *Zbl. Hyg.* **190**, S. 335-343.
- Ho, Yu-Chi** (1962): On the stochastic approximation method and optimal filtering theory; *Journal of mathematical analysis and applications* **6**, S. 152.
- Höschele, K** (1966): Der zeitliche Verlauf und die örtliche Verteilung der SO₂-Konzentration in einem Stadtgebiet mit einer Analyse der Einflußgrößen; *Meteorologische Rundschau* **19**, Nr. 1, S. 14-22.
- Horn, K; Pinigin, M; Dörre, W; Hammje, K und Knauer, A** (1989): *Grundlagen der Lufthygiene*, VEB Verlag Volk und Gesundheit, Berlin.
- Hoven, I Van der** (1957): Power spectrum of horizontal wind speed in the frequency range from 0.0007 to 900 cycles per hour; *J. Meteor.* **14**, S. 160.
- Isermann, R** (1974): *Prozeßidentifikation*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.
- Jost, D** (1993): *Die neue TA Luft*, WEKA Fachverlag für technische Führungskräfte GmbH.
- Kalman, RE** (1960): A new approach to linear filtering and prediction problems; *Journal of Basic Engineering* **82**, S. 35.

- Kalman, RE und Bucy, RS** (1961): New results in linear filtering and prediction theory; *Trans. ASME, Series D* **83**, S. 95-108.
- Kendall, M und Ord, JK** (1993): *Time Series*, Edward Arnold.
- Klaus, G** (1969): *Wörterbuch der Kybernetik*, Dietz Verlag, Berlin.
- Krebs, V** (1980): *Nichtlineare Filterung*, R. Oldenbourg Verlag München Wien.
- Kushner, HJ** (1964): On the dynamical equations of conditional probability density functions, with applications to optimal stochastic control theory; *J. Math. Anal. Appl.* **8**, S. 332-344.
- Kushner, HJ** (1967): Approximations to optimal nonlinear filters; *IEEE Trans. on Autom. Control* **AC-12**, S. 546-556.
- Kushner, HJ** (1967): Dynamical equations for optimal nonlinear filtering; *J. Differential Equations* **3**, S. 179-190.
- Leipzig** (1991): Umweltbericht der Stadt Leipzig 1991; *Rat der Stadt Leipzig, Dezernat für Umweltschutz und Sport*.
- Müller, U** (1994): Beziehungen zwischen urbanen Flächennutzungsstrukturen und klimatischen Verhältnissen am Beispiel der Stadtregion Leipzig; *Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, Unveröffentlichter Zwischenbericht (1.1.94)*.
- Ng, CN und Young, PC** (1990): Recursive estimation and forecasting of non-stationary time series; *Journal of Forecasting* **9**, S. 173-204.
- Norton, JP** (1975): Optimal smoothing in the identification of linear time-varying systems; *Proceedings Instn. Elect. Engrs.* **122**, Nr. 6, S. 663.

- Olberg, M und Rakoczi, F** (1984): *Informationstheorie in Meteorologie und Geophysik*, Akademie-Verlag, Berlin.
- Omatu, S und Seinfeld, JH** (1981): Filtering and smoothing for linear discrete-time distributed parameter systems based on Wiener-Hopf theory with application to estimation of air pollution; *IEEE Transactions SMC-11*, Nr. 12, S. 785-801.
- Omatu, S und Seinfeld, JH** (Apr. 1982): Estimation of atmospheric species concentrations from remote sensing data; *IEEE Transactions on geoscience and remote sensing GE-20*, Nr. 2, S. 142-53.
- Omatu, S und Seinfeld, JH** (1983): Optimization of sensor and actuator locations in a distributed parameter system; *Journal of the Franklin Institute* 315, Nr. 5/6, S. 407-21.
- Omatu, S und Seinfeld, JH** (1987): Optimal estimators for distributed-parameter systems with time-averaged pointwise measurements; *Int. J. Control* 45, Nr. 6, S. 1963-74.
- Parlar, H und Angerhofer, D** (1991): *Chemische Ökotoxikologie*, Springer-Lehrbuch.
- Peil, J** (1985): Verfahren der lokalen Approximation zur nichtparametrischen Schätzung unbekannter stetiger Funktionen aus Meßdaten; *Gegenbaurs morph Jahrb* 131, Nr. 3, S. 367.
- Plackett, RL** (1950): Some theorems in least squares; *Biometrika* 37, S. 149-157.
- Priestley, MB** (1965): Evolutionary spectra and non-stationary processes; *J. R. Statist. Soc. B* 27, S. 204.
- Priestley, MB** (1981): *Spectral Analysis and Time Series*, Vol. 1 and 2, Academic Press, London.

- Schlink, U** (1990): Zur rechnergestützten Auswertung von Immissionsmeßdaten; *Z. gesamte Hyg.* **36**, Nr. 1, S. 149-157.
- Schlink, U** (1993): Die Definition der Immissionskenngrößen nach Bundesrecht und DDR-Recht;
Staub - Reinhaltung der Luft **53**, Nr. 4, S. 139-141.
- Schlittgen, R und Streitberg, BHJ** (1991): *Zeitreihenanalyse*, R. Oldenbourg Verlag GmbH, München Wien.
- Schönwiese, C-D** (1992): *Praktische Statistik für Meteorologen und Geowissenschaftler*, Gebr. Borntraeger, Berlin Stuttgart.
- Schultz** (1986): *Grundzüge der Schadstoffausbreitung in der Atmosphäre*, TÜV Rheinland, Köln.
- SPSS** (1987): SPSS/PC + Trends, Dokumentation der Erweiterung des SPSS für Zeitreihenanalyse und -prognose; *SPSS Inc.*.
- Verordnung der Sächsischen Staatsregierung und des Sächsischen Staatsministeriums für Umwelt und Landesentwicklung zur Verhinderung schädlicher Umwelteinwirkungen bei austauscharmen Wetterlagen** (1991): *Smog-Verordnung*, Bd. Nr. 31, Sächsisches Gesetz- und Verordnungsblatt 9. Dez. 1991, S. 390.
- Stephens, MA** (1970): Use of the Kolmogorov-Smirnov, Cramer-von Mises and related statistics without extensive tables;
J R Statist Soc B **32**, S. 115-122.
- Stratonovich, RL** (1966): A new form of representing stochastic integrals and equations; *J. SIAM Control* **4**, S. 362-371.
- Stull, RB** (1989): *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*, Kluwer Academic Publishers.
- VDI**: *VDI 2310*, VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf .

Vereinsbank, Bayerische (1989): *Oft verwendet - kurz erklärt*, München.

Wiegand, G; Weigelt, M und Stahl, H (1987): Methoden zur Bewertung der Luftqualität, Teil A: Zeitreihenanalyse von Immissionsmessungen; Teil B: Extremwertuntersuchungen von Schadstoffkonzentrationen; *Bundesminister für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, Forschungsbericht 1 04 02 440, Luftreinhaltung* .

WHO (1987): *OAir Quality Guidelines for Europe*, WHO Regional Publications, European Series No. 23.

Young, P und Benner, S (1991): *microCAPTAIN 2; User handbook, first edition*, Centre for Research on Environmental Systems, Institute of Environmental and Biological Sciences, Lancaster University.

Young, PC; Ng, C und Armitage, P (1989): A systems approach to recursive economic forecasting and seasonal adjustment; *Computers Math. Applic.* 18, Nr. 6/7, S. 481-501.

Young, PC; Ng, CN; Lane, K und Parker, D (1991): Recursive forecasting, smoothing and seasonal adjustment of non-stationary environmental data; *Journal of Forecasting* 10, S. 57-89.