

UMWELTFORSCHUNGSPLAN DES
BUNDEMINISTERIUMS FÜR UMWELT,
NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT
- Wasserwirtschaft -

Forschungsbericht 298 22 244
UBA-FB 000204



Methoden der Trendabschätzung zur Überprüfung von Reduktionszielen im Gewässerschutz

von

PD Dr. habil. Steffen Uhlig
Prof. Dr. Peter Kuhbier

Institut für Statistik und Ökonometrie
Freie Universität Berlin

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

Diese TEXTE-Veröffentlichung kann bezogen werden bei
Vorauszahlung von DM 20,-- (10,26 Euro)
durch Post- bzw. Banküberweisung,
Verrechnungsscheck oder Zahlkarte auf das

Konto Nummer 4327 65 - 104 bei der
Postbank Berlin (BLZ 10010010)
Fa. Werbung und Vertrieb,
Ahornstraße 1-2,
10787 Berlin

Parallel zur Überweisung richten Sie bitte
eine schriftliche Bestellung mit Nennung
der **Texte-Nummer** sowie des **Namens**
und der **Anschrift des Bestellers** an die
Firma Werbung und Vertrieb.

Der Herausgeber übernimmt keine Gewähr
für die Richtigkeit, die Genauigkeit und
Vollständigkeit der Angaben sowie für
die Beachtung privater Rechte Dritter.
Die in der Studie geäußerten Ansichten
und Meinungen müssen nicht mit denen des
Herausgebers übereinstimmen.

Herausgeber: Umweltbundesamt
Postfach 33 00 22
14191 Berlin
Tel.: 030/8903-0
Telex: 183 756
Telefax: 030/8903 2285
Internet: <http://www.umweltbundesamt.de>

Redaktion: Fachgebiete II 3.2
Dr. Heike Herata

Berlin, November 2001

1.(Berichtsnummer)	2.	3.
Titel des Berichts: Methoden der Trendabschätzung zur Überprüfung von Reduktionszielen im Gewässerschutz		
5. Autoren: Uhlig, Steffen Kuhbier, Peter	8.Abschlussdatum: 30.04.2000	
	9. Veröffentlichungsdatum: 02.05.2001	
	10. UFOPLAN-Nr.: 298 22 244	
6. Durchführende Institution: Institut für Statistik und Ökonometrie Freie Universität Berlin Garystr. 21 14195 Berlin	11. Seitenzahl: 81 (zuzüglich 113 Seiten im Anhang)	
	12. Literaturangaben: 19	
	13. Tabellen und Diagramme: 22 (zuzüglich 57 Tabellen und Diagramme im Anhang)	
7. Fördernde Institution: Umweltbundesamt, Bismarckplatz 1, 14191 Berlin	14. Abbildungen: 49 Abbildungen im Anhang	
15. Zusätzliche Angaben		
16. Kurzfassung:		
Flussfrachten sind in hohem Maße - je nach Substanz – von der Durchflussrate und anderen klimatischen Faktoren abhängig, und um zu verhindern, dass klimatische Einflüsse die Nachweisbarkeit von zeitlichen Trends in diesen Eintragsdaten verschlechtern, ist eine Adjustierung der Messdaten erforderlich. Gegenstand des Vorhabens ist daher ein Konzept für die Adjustierung und Trendanalyse dieser Eintragsdaten. Das Konzept ist wie folgt strukturiert: Auf der Basis monatlicher oder vierzehntägiger Messdaten werden monatliche bzw. vierzehntägige adjustierte Frachten unter Verwendung einer dynamisch angepassten Konzentrations-Durchfluss-Funktion berechnet. Die adjustierte Jahresfracht ergibt sich dann mittels Durchschnittsbildung aus den monatlichen bzw. vierzehntägigen adjustierten Frachten. Auf Basis dieser Jahreswerte wird schließlich unter Verwendung des LOESS-Trendeschätzverfahrens eine Trendanalyse durchgeführt. Abschließend wird im Rahmen einer Power-Analyse die Trendsensitivität des Verfahrens überprüft. Neun Adjustierungsmethoden wurden an sieben Parametern (NO₃-N, NH₄-N, P_{total}, PO₄-P, Cd, Pb und Schwebstoffkonzentration) getestet, die vierzehntägig im Rhein bei Lobith und monatlich in der Ems bei Herbrum bestimmt wurden. Für den Rhein ermöglicht die Verwendung adjustierter		

Frachten anstelle nicht-adjustierter Werte eine erhebliche Verbesserung der Trendsensitivität bei $\text{NO}_3\text{-N}$, P_{total} und Schwebstoffgehalt, während bei den anderen Parametern nur kleine Unterschiede festgestellt werden konnten. Hingegen führt die Verwendung von jährlichen Konzentrationsmittelwerten zu einer Verringerung der Trendsensitivität. Für die Ems ermöglichen adjustierte Frachten und jährliche Konzentrationsmittelwerte gegenüber nichtadjustierte Frachten für alle Nährstoffe eine höhere Trendsensitivität.

Generell bestätigen die durchgeführten Auswertungen die Praktikabilität der hier entwickelten Adjustierungskonzeption, wobei jedoch keine Methode für alle Flüsse und Substanzen als optimal erscheint. Zur Adjustierung von Nährstoffen erscheint eine auf einem lokalen Regressionsmodell mit reziproker Durchflussrate basierende Methode zweckmäßig und ermöglicht im Vergleich zur OSPAR-Fracht eine wesentliche Verbesserung der Trendsensitivität. Bei den untersuchten Schwermetallen werden geringere Vorteile ermittelt, wobei jedoch zu vermuten ist, dass dies zumindest zum Teil durch chemisch-analytische Probleme verursacht wird.

17. Schlagwörter: Fracht; Adjustierung; Trend; Monitoring; Statistischer Test

18. Preis

19.

20.

1.(Report No.)	2.	3.
Report title: Trend methods for the assessment of effectiveness of reduction measures in the water system.		
5. Authors: Uhlig, Steffen Kuhbier, Peter	8. Report date: 30.04.2000	
	9. Publication date: 02.05.2001	
	10. UFOPLAN Ref.No: 298 22 244	
6. Performing Organisation: Institut für Statistik und Ökonometrie Freie Universität Berlin Garystr. 21 14195 Berlin	11. No of Pages: 81 (plus 113 in the annexes)	
	12. No of References: 19	
	13. No of Tables, Diagrams: 22 (plus 57 in the annexes)	
7. Sponsoring Agency Umweltbundesamt, Bismarckplatz 1, 14191 Berlin	14. No of Figures: 45 in the annexes	
15. Supplementary Notes		
16. Abstract: Riverine inputs are highly depending substance-specifically on flow rate and other climatic factors. In order to prevent that climatic influences deteriorate the trend detectability, an appropriate adjustment of the measurement data is necessary. Subject of the research project is therefore a concept for the adjustment and trend analysis of these input data. The basic concept for adjustment and trend analysis of riverine inputs is as follows: After providing monthly or biweekly data, monthly or biweekly adjusted loads are calculated with an adjustment procedure based on a dynamically specified concentration-flow function. Then the annual adjusted load is obtained by averaging the monthly or biweekly adjusted data. In the next step a trend analysis of the annual adjusted load is performed, using the LOESS smoother or the test of Mann-Kendall. Finally a power analysis is performed in order to assess the trend sensitivity of the method. Nine adjustment methods were tested at seven parameters (NO ₃ -N, NH ₄ -N, P _{total} , PO ₄ -P, Cd, Pb and suspended matter) measured biweekly in the Rhine River (Lobith) and monthly in the Ems River (Herbrum). For the Rhine River, the use of adjusted loads instead of the OSPAR load increases trend detectability considerably for nitrate, total P and suspended matter, whereas for the other substances only small differences can be observed. Using concentration mean values reduces the		

power substantially. For the Ems River the use of adjusted loads or concentration mean values instead of the OSPAR load increases trend detectability for all nutrients.

The investigations confirm that in general all adjustment methods are applicable, but there is no method which is optimal for every river and every substance. For the adjustment of nutrient loads a method based on a local regression model with reciprocal flow rate allows considerable improvement of the trend sensitivity and seems to therefore to be reasonable. For heavy metals only small advantages by adjusted load could be observed, although this might be due to chemical-analytical problems.

17. Keywords: Load; Adjustment; Trend; Monitoring; Statistical Test

18. Price

19.

20.

Inhaltsverzeichnis

INHALTSVERZEICHNIS	6
ABBILDUNGSVERZEICHNIS.....	8
GRÖSSENVERZEICHNIS.....	9
ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS	14
1 EINLEITUNG.....	16
1.1 ZIELSETZUNG	16
1.2 PLANUNG UND ABLAUF DES VORHABENS.....	19
1.2.1 Projektbesprechungen mit den Bundesländern	19
1.2.2 Diskussionen in ICES-WGSAEM und OSPAR-INPUT.....	21
2 FRACHTBERECHNUNG NACH OSPAR-INPUT	22
3 KONZEPTION FÜR FRACHTADJUSTIERUNG UND TRENDANALYSE...25	
4 BEREITSTELLUNG DER ROHDATEN	27
5 ADJUSTIERUNG DER FRACHTEN	28
5.1 ZUR STRUKTUR DER CQ-FUNKTION	28
5.2 NICHTPARAMETRISCHE GLÄTTUNG NACH STALNACKE (METHODE N).....	31
5.2.1 Der Vorschlag von Stalnacke	31
5.2.2 Ein erweitertes nichtparametrisches Modell	32
5.3 ANWENDUNG DES SCHÄTZVERFAHRENS VON HEBBEL (METHODE H).....	33
5.4 LOKALE REGRESSION MIT SAISON (METHODE L1).....	34
5.5 LOKALE REGRESSION MIT SAISON UND VERZÖGERTEM DURCHFLUSSEFFEKT (METHODE L2)	35
5.6 LOKALE REGRESSION MIT TEMPERATUR UND VERZÖGERTEM DURCHFLUSSEFFEKT (METHODE L3)	36
5.7 LOKALE REGRESSION MIT SAISON, TEMPERATUR UND VERZÖGERTEM DURCHFLUSSEFFEKT (METHODE L4)	36
5.8 SCHÄTZUNG MITTELS SPLINES (METHODE S1).....	37
5.9 SCHÄTZUNG MITTELS LOKALER SPLINES (METHODE S2)	38

5.10 EINBEZIEHUNG EINER NICHTLINEAREN KOMPONENTE IN DIE FRACHT-DURCHFLUSS-BEZIEHUNG	38
5.11 DER ADJUSTIERUNGSSCHRITT	41
5.12 ALTERNATIVE ADJUSTIERUNGSVERFAHREN	42
5.12.1 Erweiterung der TRANSPOS-Methode (Methode BC)	42
5.12.2 Normierung der OSPAR-Fracht auf das Langzeitmittel des Durchflusses (Methode AO)	44
6 AGGREGATION DER ADJUSTIERTEN FRACHTEN	46
7 TRENDANALYSE	47
7.1 VISUELLE DARSTELLUNG DER DATEN DURCH EINE TRENDLINIE	48
7.2 STATISTISCHER TRENDTEST	50
7.3 BESTIMMUNG DER LINEAREN TRENDKOMPONENTE	51
7.4 VERGLEICH MIT EINEM REFERENZNIVEAU	52
8 POWERFUNKTION	53
8.1 ZIELSETZUNG	53
8.2 MESSUNG DER TRENDSENSITIVITÄT	53
8.3 INTERPRETATION	54
9 BEWERTUNG DER ERGEBNISSE	56
9.1 ANALYSE DER ADJUSTIERTEN JAHRESFRACHTEN	56
9.1.1 Ergebnisse für die Ems bei Herbrum	58
9.1.2 Ergebnisse für den Rhein bei Lobith	61
9.2 VARIABILITÄT DER ADJUSTIERTEN JAHRESFRACHTEN	64
9.3 AUSWAHL EINER PRAKTIKABLEN ADJUSTIERUNGSMETHODE	72
10 EMPFEHLUNGEN	75
11 ZUSAMMENFASSUNG	77
LITERATURVERZEICHNIS	79
DANKSAGUNG	81

ANLAGE A
ANLAGE B
ANLAGE C

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1:	Durchfluss und Nitrat-Fracht (OSPAR) bei Lobith	17
Abbildung 2.2:	NO ₃ -N bei Lobith: OSPAR-Fracht 1955- 1995	18
Abbildung 3.1:	Konzeptionelle Vorgehensweise zur Adjustierung und Trendanalyse	19
Abbildung 5.1:	NO ₃ -N bei Lobith/Rhein 1955-1995	22
Abbildung 5.2:	P _{total} bei Lobith/Rhein 1973-1995	23
Abbildung 5.3:	Cd bei Lobith/Rhein 1982-1995	24
Abbildung 5.4:	Pb bei Lobith/Rhein 1982-1995	24
Abbildung 5.5:	Sechs Typen einer Konzentrations-Durchfluss- bzw. Fracht-Durchfluss- Beziehung nach Behrendt [1993]	34
Abbildung 7.1	LOESS-Trend bei einer Zeitreihe mit einem stark abweichendem Wert	42
Abbildung 7.2	Robustifizierter LOESS-Trend bei einer Zeitreihe mit einem stark abweichendem Wert	43
Abbildung 9.1	P _{Total} bei Herbrum. Multiplikativ adjustierte Frachten	50
Abbildung 9.2	P _{Total} bei Herbrum. Trend der adjustierten Frachten	51
Abbildung 9.3	P _{Total} bei Herbrum. Konzentrationsmittelwerte und LOESS-Trend	51
Abbildung 9.4	Mittlerer Durchfluss bei Herbrum 1982-1997	52
Abbildung 9.5	Mittlerer Durchfluss bei Lobith 1955-1995	55

Größenverzeichnis

α	Modellparameter für den Einfluss des reziproken Durchfluss auf die Konzentration bzw. für den konstanten Anteil der LQ-Funktion
α_i	Modellparameter für den konstanten Anteil der LQ-Funktion (für Jahr i)
$\hat{\alpha}_i$	Schätzwert für α_i
α_j	Modellparameter für den konstanten Anteil der LQ-Funktion (für Saison j)
α_{ij}	Modellparameter für den konstanten Anteil der LQ-Funktion (für Saison j und Jahr i)
β	Modellparameter für den konstanten Anteil der CQ-Funktion bzw. für den durchflussabhängigen Anteil der LQ-Funktion
$\hat{\beta}$	Schätzwert für β
β_i	Modellparameter für den durchflussabhängigen Anteil der LQ-Funktion (für Jahr i)
$\hat{\beta}_i$	Schätzwert für β_i
β_{ij}	Modellparameter für den durchflussabhängigen Anteil der LQ-Funktion
δ	Modellparameter für den linearen zeitlichen Trend
$\varepsilon_t = \varepsilon_{ij}$	Fehlerterm
ε	Vektor der Fehlerterme
γ	Modellparameter für den Einfluss des reziproken Durchfluss des Vortages auf die Konzentration
$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$	Modellparameter der Saisonkomponente
γ_{ij}	Modellparameter für eine exponentielle LQ-Funktion
λ	Modellparameter für den nichtlinearen Anteil der CQ-Funktion
λ_1, λ_2	Vorgabeparameter für Methode N

λ_{ij}	Adjustierungsfaktor
η	Modellparameter für den Temperatureffekt
ρ	Korrelationskoeffizient zwischen den Jahresdurchflüssen
σ	Standardabweichung
σ^2	Varianz
σ_{rel}	relative Standardabweichung
AIC	AIC-Kriterium zur Bewertung der Modellanpassung
ALPHA	Irrtumswahrscheinlichkeit für einen Trendtest
$B(Q)$	CQ-Modell in vektorieller Darstellung
C	Vektor der Konzentrationsmesswerte
$c(q)=c_{ij}(q_{ij})$	CQ-Funktion
$c_{ij} = c_t$	Konzentrationsmesswert (mg/l bei Nährstoffen, $\mu\text{g/l}$ bei Schwermetallen) zum Zeitpunkt $t=t_{ij}$
c_{ij}^*	Der aus Punktquellen gespeiste Anteil der Konzentration
c_{ij}^+	Der aus der geogenen Grundbelastung gespeiste Anteil der Konzentration
Cov	Kovarianzoperator
d	Modellparameter einer nichtlinearen Fracht-Durchfluss-Funktion
df	Anzahl der Freiheitsgrade
$E[]$	Erwartungswertoperator
$f(q;s) = f_i(q,s)$	Ausgleichskurve im TRANSPOS-Modell, abhängig vom Durchfluss q , von Saison s und vom betrachteten Teilintervall i
$F_{T_{n-df}, \delta}$	Verteilungsfunktion der nicht-zentralen t-Verteilung
i	Jahresindex. Im TRANSPOS-Modell: Index des betrachteten Zeitintervalls.
j	Werteindex oder Probenindex innerhalb des Jahres (Saisonindex)

k_i	Lagekoeffizient im TRANSPOS-Modell
k_i^*	Lagekoeffizient im erweiterten TRANSPOS-Modell
L	Frachtwert
L_a	Vektor der adjustierten Jahresfrachten
L_i	Jahresfracht im Jahr i (t/a bei Nährstoffen, kg/a bei Schwermetallen)
$L_{i,a}$	Adjustierte Jahresfracht im Jahr i (t/a bei Nährstoffen, kg/a bei Schwermetallen)
$L_{i,est}$	Mittlere Jahresfracht im Jahr i
$L_{i,mean}$	Geschätzte Jahresfracht im Jahr i
$L_{i,a}^*$	Aus Punktquellen gespeiste Fracht im Jahr i
$L_{i,a}^+$	Geogener Anteil der adjustierten Fracht im Jahr i
$L_{i,OSPAR}$	Jahresfracht nach OSPAR im Jahr i (t/a bei Nährstoffen, kg/a bei Schwermetallen)
L_{ij}	Fracht pro Sekunde (Transport) zum Zeitpunkt t_{ij} (g/s bei Nährstoffen, mg/s bei Schwermetallen)
$L_{ij,a}$	Adjustierte Fracht pro Sekunde (Transport) zum Zeitpunkt t_{ij} (g/s bei Nährstoffen, mg/s bei Schwermetallen)
$L_{ij,e}$	Geschätzte Fracht pro Sekunde (Transport) zum Zeitpunkt t_{ij} (g/s bei Nährstoffen, mg/s bei Schwermetallen)
$L_{ij,m}$	Mittlere Fracht pro Sekunde (Transport) zum Zeitpunkt t_{ij} (g/s bei Nährstoffen, mg/s bei Schwermetallen)
m	Zeitdauer eines Jahres (ausgedrückt in der Einheit der Messzeiten)
M	Anzahl der Perioden (Messungen) im Jahr
MQ	Langjähriges Mittel des Durchflusses (m ³ /s)
$N=n$	Stichprobenumfang
Q	Durchfluss (m ³ /s)

$q_{0ij} = q_{0j} = q_{0t}$	Langjähriges Monatsmittel des Durchflusses für den Zeitpunkt $t=t_{ij}$ (m^3/s).
$q_{ij} = q_t$	Durchfluss (m^3/s) zum Zeitpunkt $t=t_{ij}$
q_{t-1}	Durchfluss (m^3/s) zum Zeitpunkt $t-1$ (Vortag)
q_{ij-1}	Durchfluss (m^3/s) zum Zeitpunkt $t=t_{ij-1}$
$\overline{q^2}$	Mittelwert der quadrierten Durchflusswerte
$\overline{q}_i$	Durchschnittlicher Durchfluss im Jahr i (m^3/s)
p	Modellparameter für den Durchflusseffekt im Simulationsmodell
ρ	Autokorrelationskoeffizient
RSS	Residualquadratsumme
s	Saison im TRANSPOS-Modell
$s(q)=s(q_t)$	Spline-Funktion
$s(q_{0t})$	Spline-Funktion für $q=q_{0t}$
$S(Q)$	Vektorielle Darstellung des von den Konzentrationen unabhängigen Anteils der additiv adjustierten Jahresfrachten
$s_i(q_{ij})$	Jahresspezifische Spline-Funktion
$S(\alpha, \beta)$	Schätzfunktional bei Methode N
saïson	Saisonanteil der CQ-Funktion
SIGMA	Vorgabeparameter für das Hebbel-Modell
S_{Ratio}	Quotient aus der Standardabweichung für die adjustierte Fracht und der Standardabweichung der OSPAR-Fracht
s_{RES}	Residualstandardabweichung
s_t	Saisonkomponente im Hebbel-Modell
t	Messzeitpunkt
T	Im Adjustierungsschritt: Anzahl der Jahre. Bei der Berechnung der Power-

	Funktion: Teststatistik für einen linearen Trend
$t_1, \dots, t_n$	Messzeitpunkte der gemessenen Proben
t_{ij}	Zeitpunkt der Probenahme bei der j -ten Probe im i -ten Jahr
$t_{n-df, 1-\alpha}$	Quantil der t-Verteilung mit $n-df$ Freiheitsgraden
u_t	Trendkomponente im Hebbel-Modell
u_i	Zufallsvariable im Simulationsmodell
v_{ij}	Zufallsvariable im Simulationsmodell
W	Smoother-Matrix
w_{ij}	Zufallsvariable im Simulationsmodell
w_t	Wassertemperatur zum Zeitpunkt t
x	Im Rahmen der Trendanalyse: Jahresindex. Im Rahmen des Hebbel-Modells: Spaltenvektor der Reziprokwerte der Durchflüsse
y	Jahreswert (Fracht oder Konzentration)
y_i	Jahreswert im Jahr i
z	Vektor der durchflusskorrigierten Konzentrationswerte im Hebbel-Modell
$\hat{z}$	Schätzvektor für z
z_t	Durchflusskorrigierte Konzentration im Hebbel-Modell

Abkürzungsverzeichnis

4.INK	Vierte Internationale Nordseeschutzkonferenz
A0	Normierung der OSPAR-Fracht auf das Langzeitmittel des Durchflusses (Abschnitt 5.12.2)
BC	Erweiterung der TRANSPOS-Methode (Abschnitt 5.12.1)
Cd	Cadmium
CQ-Funktion	Konzentration-Durchfluss-Funktion
CSV	EXCEL-kompatibles Dateiformat
H	Schätzverfahren von Hebbel (Abschnitt 5.3)
HARP-NUT	OSPAR-Guidelines for Harmonised Quantification and Reporting Procedures for Nutrients
HELCOM	Helsinki-Kommission
ICES	International Council for the Exploration of the Sea
ICES-ACME	ICES Advisory Committee of Marine Environment
ICES-WGSAEM	ICES Working Group on Statistical Aspects of Environmental Monitoring
ID	Identifikationsnummer
IKSR	Internationale Kommission zum Schutze des Rheins
INPUT	Working Group on Inputs to the Marine Environment
L1	Lokale Regression mit Saison (Abschnitt 5.4)
L2	Lokale Regression mit Saison und verzögertem Durchflusseffekt (Abschnitt 5.5)
L3	Lokale Regression mit Temperatur und verzögertem Durchflusseffekt (Abschnitt 5.6)
L4	Lokale Regression mit Saison, Temperatur und verzögertem Durchflusseffekt (Abschnitt 5.7)
L5	Lokale Regression mit Einbeziehung einer nichtlinearen Komponente in die LQ-Funktion
LOESS	Glättungsverfahren nach Cleveland
LQ-Funktion	Fracht-Durchfluss-Funktion
N	Nichtparametrische Glättung nach Stalnacke (Abschnitt 5.2)

NH ₄ -N	Ammonium-Stickstoff
NO ₃ -N	Nitrat-Stickstoff
OSPAR	Oslo-Paris-Kommission
OSPAR-Fracht	Jahresfracht gemäß der von OSPAR festgelegten Rechenvorschrift
OSPAR-INPUT	OSPAR Working Group on Inputs to the Marine Environment
Pb	Blei
PO ₄ -P	Ortho-Phosphat
P _{total}	Gesamt-Phosphor
S1	Schätzung mittels Splines (Abschnitt 5.8)
S2	Schätzung mittels lokaler Splines (Abschnitt 5.9)
TRANSPOS	Frachtberechnungsmethode nach Brunswig
UBA	Umweltbundesamt
VBV	Verallgemeinertes Berliner Verfahren
WMF	Windows-Meta-File
Y1	Methode zur Berechnung adjustierter Frachten auf Basis der Jahresstichprobe mittel linearer LQ-Funktion
Y2	Methode zur Berechnung adjustierter Frachten auf Basis der Jahresstichprobe mittel nichtlinearer LQ-Funktion

1 Einleitung

1.1 Zielsetzung

Das Ziel des Vorhabens besteht darin, eine Methodik zur quantitativen Abschätzung eines statistisch gesicherten Trends für die gewässerseitigen Einträge in die Nord- und Ostsee zu entwickeln. Diese Trendabschätzungsmethodik soll es ermöglichen festzustellen, ob die im Wassereinzugsgebiet ergriffenen Maßnahmen zur Verringerung der Stoffeinträge an der Quelle auch eine Verbesserung der Gewässerqualität sowie eine Reduzierung des Eintrags in die Nord- und Ostsee zur Folge haben.

Im Rahmen internationaler Vereinbarungen (zum Beispiel OSPAR, HELCOM, 4.INK, IKSIR) bestehen Verpflichtungen für Deutschland, die Einträge prioritärer Stoffe in die Gewässer zu vermindern. So war im Rahmen der zweiten internationalen Nordseeschutzkonferenz 1987 entschieden worden, Maßnahmen zur Reduzierung des Eintrags von Nährstoffen und persistenten, toxischen Substanzen zu ergreifen, wobei eine Reduzierung um 50% im Zeitraum von 1985 bis 1995 angestrebt worden war. Für Stoffe, für die dieses Ziel nicht erreicht worden ist, wurde auf der vierten Nordseeschutzkonferenz beschlossen, das Reduktionsziel bis 2000 aufrechtzuerhalten.

Ein quantitativer Nachweis, dass sich auf Grund der Maßnahmen im Einzugsgebiet (Reduktionen an den Quellen) auch der Eintrag über die Flüsse in die Meere verringert hat, steht noch aus. Dieses Problem soll im Rahmen der Arbeitsgruppe „Working Group on Inputs to the Marine Environment (INPUT)“ sowohl innerhalb der OSPAR-Kommission als auch der Helsinki-Kommission gelöst werden. Allerdings geht dies nicht ohne Entwicklung einer statistisch gesicherten Trendabschätzungsmethodik für die Flusseinträge. Trendabschätzungen zur Überprüfung von Reduktionszielen anhand von Flussfrachten sind problematisch, da Frachten aus Konzentrations- und Durchflussdaten berechnete Werte darstellen. So kann es bei der Ermittlung von Reduktionsraten für Flussfrachten allein auf Grund der Schwankungen des Gewässerdurchflusses zur Erhöhung der Frachten in zwei ausgewählten Jahren kommen, obwohl Reduktionsmaßnahmen im Gewässereinzugsgebiet durchgeführt worden sind. Dies erklärt sich daraus, dass in Nassjahren mit hohen Durchflüssen tendenziell höhere Einträge in die Meere erfolgen als in Trockenjahren mit niedrigen Durchflüssen. Deshalb sind bei der Erarbeitung einer solchen Trendabschätzungsmethodik

nicht nur die Frachten allein, sondern vor allem der Durchfluss, die Konzentration und Temperatur in die Betrachtung mit einzubeziehen.

Mit Hilfe einer statistisch abgesicherten Trendabschätzungsmethodik könnte eine einheitliche Bewertung der seit mehreren Jahren im Rahmen der OSPAR-Kommission, der Helsinki-Kommission sowie der Flussgebietskommissionen gesammelten Flusseintragsdaten erfolgen. Damit würde auch Deutschland in die Lage versetzt werden zu überprüfen, ob die bereits eingeleiteten Maßnahmen zur Erfüllung der internationalen Minderungsziele ausreichen oder ob weitere Maßnahmen im Einzugsgebiet erforderlich sind, um den Eintrag in die Meere wirksam zu verringern.

Zur Entwicklung einer Methodik zur quantitativen Abschätzung eines statistisch gesicherten Trends für die Flusseinträge in die Nord- und Ostsee wurde ein gemeinsamer Workshop von OSPAR-INPUT und ICES-WGSAEM (ICES: International Council for the Exploration of the Sea; WGSAEM: Working Group on Statistical Aspects of Environmental Monitoring) im März 1997 in Kopenhagen durchgeführt. Die Niederlande wurden daraufhin beauftragt, die weitere Ausarbeitung der statistischen Methodik auf Basis der Ergebnisse dieses Workshops vorzunehmen. Das Ergebnis dieser Arbeiten bestand im wesentlichen in einem Softwareprogramm („Trend-y-tector“) zur Analyse jährlicher Daten, welches 1998 bei OSPAR-INPUT vorgestellt wurde. OSPAR-INPUT hat daraufhin beschlossen, dass weitere Untersuchungen insbesondere hinsichtlich:

- der Einbeziehung geeigneter Adjustierungsmethoden zur Kompensation der Effekte der klimatischen Variabilität (z.B. Durchfluss, Temperatur, Niederschlag),
- der Einbeziehung einer Powerfunktion sowie
- der Berücksichtigung von monatlichen Daten

erforderlich sind. In der Folge wurde von OSPAR 1998 beschlossen, ICES mit der Fortsetzung der entsprechenden Untersuchung von statistischen Methoden zu beauftragen. Da jedoch bislang keine wissenschaftlich abgesicherte Methodik zur Adjustierung monatlicher oder jährlicher Messdaten zur Kompensation der Effekte der klimatischen Variabilität vorliegt, wurde vom Umwelt-

bundesamt das hier dargestellte FuE-Vorhaben mit dem Ziel initiiert, eine statistische Konzeption zu entwickeln, die eine

1. Adjustierung der auf der Basis der OSPAR-Flussmessstationen ermittelten Flussfrachten bezüglich Temperatur, Schwebstoffgehalt, Abfluss u.a. ermöglicht,
2. Ermittlung zeitlicher Trends in diesen Parametern auf Wochen-, Monats- oder Jahresbasis unter Verwendung unterschiedlicher robuster und nichtparametrischer Verfahren ermöglicht,
3. Bewertung der Qualität der Daten auf der Grundlage der Powerfunktion ermöglicht.

Diese Konzeption sollte unmittelbar auf den im ICES erarbeiteten Ergebnissen, auf den im gemeinsamen ICES/OSPAR Workshop (Kopenhagen 1997) sowie in OSPAR-INPUT (Schwerin 1998) diskutierten Resultaten aufbauen. Weiterhin sollte die Daten- und Programmstruktur einer Software erarbeitet werden, welche die neu entwickelten statistischen Protokolle auch für Routinezwecke abrufbar macht. Dabei sollte eine flexible, modulare Struktur implementiert werden, so dass Änderungen und Erweiterungen der Software in Abhängigkeit von den Forschungsergebnissen in einfacher Weise möglich sind. Parallel zu dem methodischen Teil erfolgt die Entwicklung der Software, d.h. zunächst der Definition der Datenstruktur und der grundlegenden Funktionen und Menüs.

1.2 Planung und Ablauf des Vorhabens

Um eine breite Akzeptanz der Ergebnisse sicherzustellen, wurde eine enge nationale und internationale Kooperation angestrebt. Im Rahmen von Projektbesprechungen wurden Adjustierungskonzepte sowie konkrete Vorschläge zur Festlegung der Adjustierungsparameter in Zusammenarbeit mit den Bundesländern diskutiert. Die internationale Kooperation wurde durch die Mitarbeit eines der beiden Projektleiter in ICES-WGSAEM und ICES-ACME (Advisory Committee of Marine Environment) sowie durch die Diskussion der Ergebnisse in der OSPAR-INPUT-Arbeitsgruppe sichergestellt.

1.2.1 Projektbesprechungen mit den Bundesländern

Am 4. Juni 1998 fand im UBA eine erste Besprechung zur gemeinsamen inhaltlichen Abstimmung über das FuE-Vorhaben mit den betreffenden Bundesländern statt. Dabei wurden folgende Ansätze vorgestellt und diskutiert:

- Der von den Niederlanden bei OSPAR-INPUT eingebrachte Vorschlag einer Trendanalyse nichtadjustierter Jahresfrachten mittels des sogenannten Trend-y-Tector.
- Ein loglineares Regressionsmodell unter Einbeziehung verzögerter Durchflüsse, entwickelt von Bjerkeng, Norwegen.
- Das für ökonomische Zeitreihen von Heiler und Hebbel entwickelte VBV (Verallgemeinertes Berliner Verfahren).
- Das von Brunswig entwickelte Kieler Verfahren zur Frachtberechnung mittels einer CQ-Funktion, die auf der Basis der gemessenen Konzentration und dem dazu gehörigen Durchfluss aufgestellt wird.
- Die von Behrendt entwickelte Fenstermethode, in der die Frachten in drei Durchflussbereiche unterteilt werden. Die drei Durchflussbereiche können dann getrennt einer Trendanalyse unterzogen werden. Dabei gibt der Niedrigwasserbereich den Verlauf der Fracht wieder, die hauptsächlich durch Punktquellen verursacht wird. Demgegenüber wird der Verlauf der Frachten im Hochwasserbereich maßgeblich durch die diffusen Quellen geprägt.

Es zeigte sich Übereinstimmung darüber, dass zur Ermittlung eines statistisch abgesicherten Trends von Frachten eine Adjustierung mittels geeigneter CQ-Funktion notwendig ist. Die adjustierten Datenreihen sollten anschließend einer statistischen Trendanalyse unterzogen werden, wobei ein statistischer Ansatz gewählt werden sollte, mit dem ein monotoner Trend nachgewiesen werden kann. Am 1. Oktober 1998 fand im UBA die zweite Projektbesprechung statt. Auf dieser Besprechung stellte der Forschungsnehmer einen konzeptionellen Vorschlag zur Herangehensweise bei der Trendabschätzung von Frachten sowie die ersten Untersuchungsergebnisse zu den verschiedenen Ansätzen zur Adjustierung und Trendanalyse von Frachten vor.

Die Sitzungsteilnehmer stimmten zu, dass die Adjustierung anhand der Rohdaten durchgeführt werden soll, und anschließend aus den adjustierten Daten eine Jahresfracht berechnet wird, die dann einer Trendanalyse unterzogen wird (siehe Abb. 3.1). Einigkeit bestand auch darin, dass vor allem folgende Ansätze für die Adjustierung vergleichend analysiert werden sollten:

- Modellierung der CQ-Funktion gemäss der Vorgehensweise von Brunswig
- Berücksichtigung verzögerter Durchflüsse gemäß des Ansatzes von Bjerkeng, wobei jedoch eine additive und keine loglineare Parametrisierung der CQ-Funktion verwendet werden sollte
- VBV-Verfahren mit exogenen Einflussgrößen
- Das von P. Stalnacke zur Adjustierung von Nährstofffrachten entwickelte, auf einer nichtparametrischen Glättung basierende Verfahren
- Einbeziehung der Temperatur als Substitut für den Saisoneffekt
- Berechnung der Jahresfracht unter Bezug auf den langjährigen mittleren Durchfluss.

In der dritten bzw. vierten Sitzung am 3. März 1999 bzw. am 30. Juni 1999 wurden die genannten Ansätze anhand der Untersuchungsergebnisse für die Messstellen Lobith (Rhein) und Herbrum (Ems) für die Parameter $\text{NO}_3\text{-N}$, P_{total} , $\text{PO}_4\text{-P}$, Cd, Pb und dem Schwebstoffgehalt diskutiert.

Zusätzlich dazu sollte eine alternative Verfahrensweise getestet werden, bei der die Trendanalyse und die Adjustierung nicht separat in aufeinanderfolgenden Schritten, sondern in einem kombinierten Verfahren durchgeführt werden.

Weitergehende Auswertungen zu den genannten Parametern sowie zur $\text{NH}_4\text{-N}$ -Fracht wurden in der fünften Sitzung am 14. Oktober 1999 diskutiert, u.a. zur Trendanalyse und zur Powerfunktion, sowie zur Anzahl der benötigten Messjahre, um ein bestimmtes Verfahren anwenden zu können.

Gegenstand der letzten Sitzung am 24. Februar 2000 war schließlich die Diskussion des Kieler Verfahrens von Brunswig sowie eine abschließende Bewertung der entwickelten Methodik. Es zeigte sich, dass keines der untersuchten Verfahren für alle Parameter gleichermaßen „optimal“ ist, sondern dass jedes der Verfahren seine spezifischen Vor- und Nachteile hat. Somit konnte in der Sitzung noch keine abschließende Beurteilung und Bewertung vorgenommen werden.

1.2.2 Diskussionen in ICES-WGSAEM und OSPAR-INPUT

Sowohl ICES-WGSAEM 1999 (März 1999) als auch ICES-WGSAEM 2000 (März 2000) haben die diversen Adjustierungsverfahren intensiv diskutiert. Diskussion und Ergebnisse dieser Treffen wurden ausführlich in den Jahresberichten dieser Arbeitsgruppe dokumentiert. ICES-ACME hat diese Berichte ebenfalls diskutiert und die wichtigsten Ergebnisse für seine Jahresberichte 1999 und 2000 in überarbeiteter Form übernommen.

Schwerpunkt der Arbeiten von ICES-WGSAEM 1999 war die Frage, wie adjustierte Frachten interpretiert werden können, während ICES-WGSAEM 2000 primär die statistischen Eigenschaften untersucht hat. Beteiligt war der Forschungsnehmer auch an den Sitzungen von OSPAR-INPUT 1998 in Schwerin und London, bei denen die Anforderungen an die Trendanalyse und das grundsätzliche Vorgehen diskutiert worden sind.

2 Frachtberechnung nach OSPAR-INPUT

Die Jahresfracht ist die Stoffmasse, die innerhalb eines Jahres durch den Fließquerschnitt eines Flusses transportiert wird. Sie ergibt sich durch Integration bzw. Summation des Transports, d.h. des Produkts von Durchfluss und Konzentration, über das gesamte Messjahr. Eine Übersicht über verschiedene Methoden zur Berechnung der Jahresfracht gibt Keller et al. (1997). Um die Jahresfracht gemäß der von OSPAR-INPUT festgelegten Rechenvorschrift zu bestimmen, benötigt man die in regelmäßigen Abständen gemessenen Konzentrations- und Durchflusswerte, sowie den durchschnittlichen Durchfluss. Bezeichnet c_{ij} die in der j -ten Probe, $j=1, \dots, m$, im Jahr i , gemessene Konzentration und q_{ij} den zugehörigen Durchflusswert, so ergibt sich die Jahresfracht nach OSPAR-INPUT im Jahr i gemäß der Formel

$$L_{OSPAR,i} = 31,5576 \frac{\bar{q}_i}{\sum_{j=1}^m q_{ij}} \sum_{j=1}^m c_{ij} q_{ij} ,$$

mit dem durchschnittlichen Durchfluss $\bar{q}_i$ im Jahr i (m^3/s). Die Einheit der so ermittelten Jahresfracht entspricht

- t/a, wenn für die Konzentrationen die Maßeinheit mg/l verwendet wird
- kg/a, wenn für die Konzentrationen die Maßeinheit $\mu\text{g/l}$ verwendet wird.

Der Faktor 31,5576 ergibt sich aus

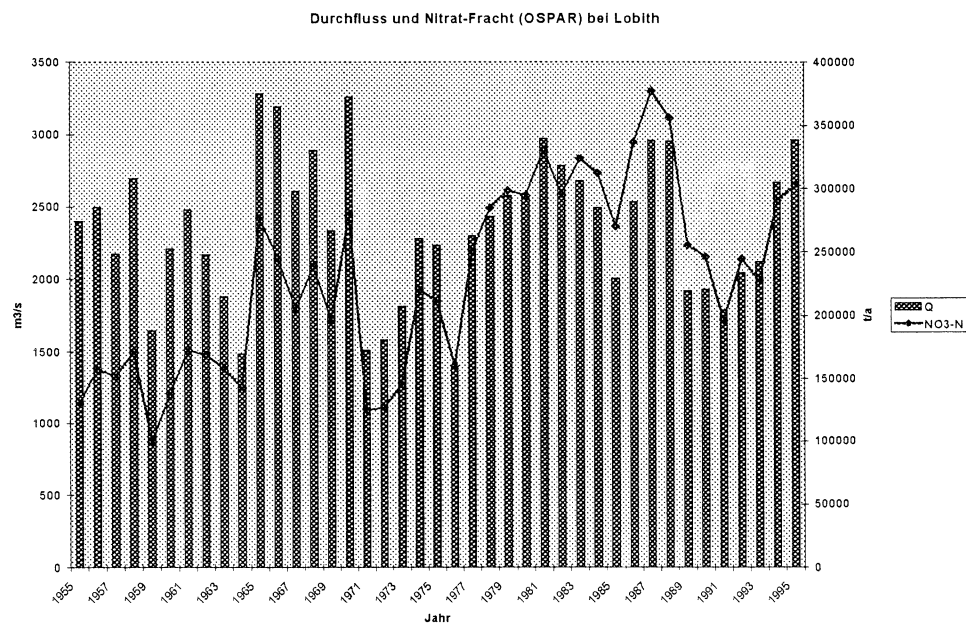
$$\left[\frac{\text{t}}{\text{a}} \right] = 10^9 \left[\frac{\text{mg}}{\text{a}} \right] = \frac{10^9}{365,25 \cdot 24 \cdot 3600} \left[\frac{\text{mg}}{\text{s}} \right] = \frac{10^9}{31,5576 \cdot 10^6} \left[\frac{\text{mg}}{\text{l}} \cdot \frac{\text{l}}{\text{s}} \right] = \frac{1}{31,5576} \left[\frac{\text{mg}}{\text{l}} \right] \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right].$$

Die gemäß der oben dargestellten „OSPAR-Formel“ berechnete Jahresfracht ist somit das durchflusskorrigierte und auf den Jahreswert umgerechnete arithmetische Mittel der „gemessenen“ Transportwerte $c_{ij} q_{ij}$. Weil im englischen Sprachgebrauch auch für den Begriff des Transports der Terminus Fracht („load“) verwendet wird, wird – um Missverständnisse zu vermeiden – im folgenden nur noch der Begriff der Fracht verwendet. An der verwendeten Zeiteinheit lässt sich jedoch ablesen, ob es sich um eine Jahresfracht (t/a bzw. kg/a) oder um einen Transport (g/s bzw. mg/s) handelt.

Flussfrachten unterliegen je nach Substanz mehr oder minder starken klimatischen Einflüssen wie Niederschlag, Durchfluss und Temperatur. Augenfällig ist die Abhängigkeit der OSPAR-Frachten vom Durchfluss beispielsweise für Nitrat ($\text{NO}_3\text{-N}$) bei Lobith / Rhein. Abb. 2.1 zeigt die jährlichen mittleren Durchflüsse $\bar{q}_i$ und die zugehörigen OSPAR-Frachten $L_{\text{OSPAR},i}$ für die Jahre 1955-1995. Dabei ist festzuhalten, dass sich auch mit anderen Frachtberechnungsformeln und insbesondere ohne Verwendung der Gewichtung auf den durchschnittlichen Durchfluss $\bar{q}_i$, eine ähnlich stark ausgeprägte Form der Durchflussabhängigkeit ergibt.

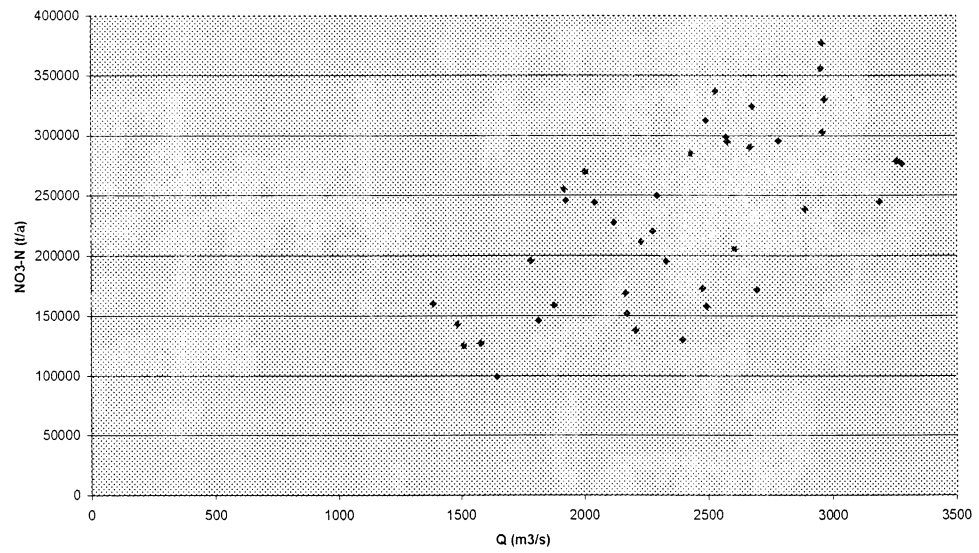
Noch deutlicher wird der Zusammenhang zwischen Durchfluss und Fracht im Streudiagramm, dargestellt in Abb. 2.2. Trotz erheblicher zeitlicher Veränderungen in der jährlichen Fracht zeigt sich eine nahezu proportionale Beziehung.

Abb.2.1



Dies bedeutet, dass die Überprüfung anthropogen verursachter Veränderungen in den Frachten durch starke Schwankungen des mittleren jährlichen Durchflusses wesentlich erschwert wird.

Abb. 2.2

NO₃-N bei Lobith: OSPAR-Fracht 1955-1995

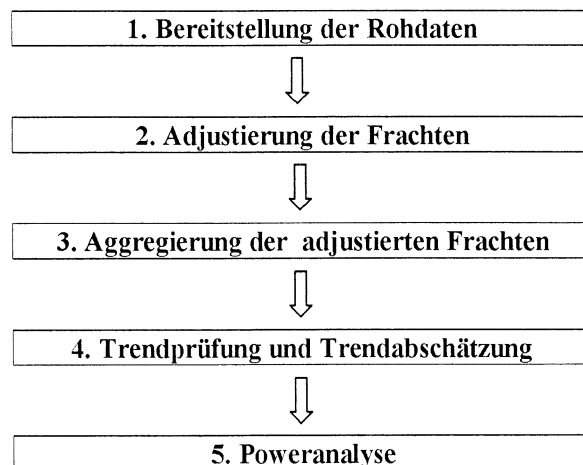
3 Konzeption für Frachtadjustierung und Trendanalyse

Um zu verhindern, dass durch Schwankungen der Durchflussmenge die Nachweisbarkeit zeitlicher Trends in den Jahresfrachten verschlechtert wird, erscheint eine Adjustierung, in der die Eintragsdaten auf ein „durchschnittliches“ (langjähriges) Durchflussniveau umgerechnet werden, unumgänglich. Dabei ist festzuhalten, dass sich nicht nur die Trendsensitivität verschlechtert, sondern dass unter Umständen durch meteorologische Zyklen Schwankungen der Durchflussmenge verursacht werden, die ihrerseits artifizielle Trends in den Frachtwerten induzieren, die selbst dann beobachtet werden, wenn keinerlei anthropogene Trends vorhanden sind. Daher muss speziell bei kürzeren Reihen damit gerechnet werden, dass statistische Trendtests in unzulässiger Weise das vorgegebene Signifikanzniveau überschreiten.

Gemäß der Festlegung von OSPAR-INPUT 1999 (Abb. 3.1) erfolgt die Adjustierung auf der Basis der Rohdaten. Die adjustierten Frachten sind dann zu Jahresfrachten zusammenzufassen, bevor die Trendanalyse auf der Basis der adjustierten Jahresfrachten erfolgt. Abschließend ist im Rahmen einer Power-Analyse die Trendsensitivität des Verfahrens zu überprüfen. Letzteres ist besonders dann bedeutsam, wenn kein Trend festgestellt werden konnte.

Abb.3.1

Konzeptionelle Vorgehensweise zur Adjustierung und Trendanalyse



Gemäß der in Abb. 3.1 beschriebenen konzeptionellen Vorgehensweise erfolgt die Erfassung zeitlicher Trends nicht auf der Grundlage der einzelnen Messwerte, sondern auf Basis von Jahreswerten. Die Verwendung von Jahreswerten anstelle von Einzelwerten hat den Nachteil einer theoretisch geringeren Effizienz (Power) zur Schätzung und Identifizierung eines Trends. Dem steht der Vorteil einer einfacheren Handhabung und einer einfacheren statistischen Methodik gegenüber. Zu beachten ist dabei, dass aufgrund der großen Zahl der auszuwertenden Messreihen ein automatisches Verfahren benötigt wird, so dass für die Trendanalyse eine individuelle Anpassung eines komplexen zeitreihenanalytischen Modells nicht möglich erscheint. Bei Betrachtung von monatlich bzw. im 2-Wochen-Rhythmus erhobenen Messreihen erweist sich die Berücksichtigung der Autokorrelation unumgänglich, so dass eine aufwendige individuelle Zeitreihenanalyse unumgänglich ist. Hingegen erscheint bei Jahreswerten die Autokorrelation in erster Näherung vernachlässigbar, so dass sich das trendanalytische Verfahren wesentlich vereinfacht und leichter vereinheitlichen lässt.

Ein weiterer Vorteil des in Abb. 3.1 skizzierten Verfahrens besteht darin, dass das bereits für nichtadjustierte Jahresfrachten beschlossene Trendanalyseverfahren (OSPAR-INPUT 2000) ohne Änderung auch für adjustierte Frachten eingesetzt werden kann. Dadurch ist gewährleistet, dass die Akzeptanz der Adjustierung nicht wieder in Frage gestellt wird, weil das bereits beschlossene Trendanalyseverfahren wieder korrigiert werden müsste oder je nach Frachtreihe ein anderes Verfahren eingesetzt werden muss. Weil ein und dasselbe Trendberechnungsverfahren sowohl für adjustierte Frachten eingesetzt werden kann, als auch für nichtadjustierte Frachtreihen, die auf der Basis von nur einer Messung pro Jahr ermittelt wurden, ist eine gute Vergleichbarkeit der Ergebnisse gewährleistet.

4 Bereitstellung der Rohdaten

Die Berechnung der Frachten erfordert im Rahmen der hier verwendeten Konzeption eine Messreihe der in regelmäßigen Zeitintervallen – monatlich oder kürzer - gemessenen Konzentrationen. Es empfiehlt sich, einheitliche Maßeinheiten zu verwenden, z.B. mg/l für Nährstoffe und $\mu\text{g/l}$ für Schwermetalle. Zur Vorbereitung von Adjustierung und Trendanalyse sind zunächst alle Konzentrationsmessungen unter der Nachweis- bzw. Bestimmungsgrenze durch geeignete Substitutwerte zu ersetzen. Eine oft akzeptierte Vorgehensweise besteht darin, hierfür 50% der jeweiligen Nachweis- bzw. Bestimmungsgrenze einzusetzen. Es ist allerdings zu beachten, dass diese Vorgehensweise artifizielle Trends verursachen kann, wenn im Zeitablauf durch den analytischen Fortschritt die Nachweis- und Bestimmungsgrenzen reduziert wurden. Zu allen Messwerten wird weiterhin der jeweilige Durchflusswert, in der Maßeinheit m^3/s , sowie das Datum der Probenahme benötigt. Erforderlich sind auch die langjährigen Monatsmittelwerte des Durchflusses, ebenfalls in der Einheit m^3/s . Sofern diese nicht direkt zur Verfügung stehen, sollten aus der langjährigen täglichen Durchflussreihe die jeweiligen Monatmittel gebildet werden, wobei ein Zeitraum von 15-30 Jahren empfohlen wird.

Je nach Adjustierungsmethode werden noch weitere Angaben benötigt. So erfordern die im folgenden Kapitel in den Abschnitten 5.5-5.7 vorgestellten Adjustierungsmethoden (basierend auf lokaler Regression mit verzögertem Durchflusseffekt) zusätzlich die Durchflusswerte der den Konzentrationsmessungen vorangehenden Tage, und bei den in den Abschnitten 5.6 und 5.7 beschriebenen Methoden werden außerdem die jeweiligen Wassertemperaturen benötigt. Weiterhin muss bei der in Abschnitt 5.2 dargestellten Methode (basierend auf nichtparametrischer Glättung) für jeden Monat genau ein Messwert verfügbar sein. Liegen daher die Messungen im 2-Wochenrhythmus vor, sind für jeden Monat die Mittelwerte der hierfür jeweils vorliegenden Durchfluss- und Konzentrationswerte zu bestimmen.

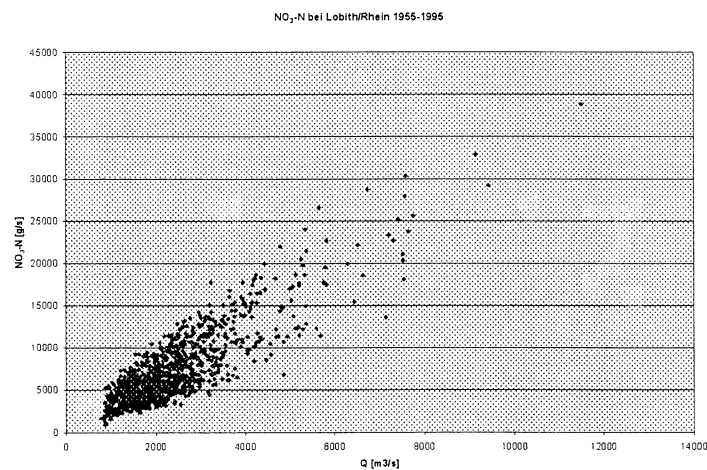
Die in diesem Vorhaben untersuchten Methoden wurden an insgesamt 7 Parametern ($\text{NO}_3\text{-N}$, $\text{NH}_4\text{-N}$, P_{total} , $\text{PO}_4\text{-P}$, Cd, Pb und Schwebstoffkonzentration), gemessen im Rhein bei Lobith und in der Ems bei Herbrum, überprüft. Die Messungen im Rhein wurden im 2-Wochen-Abstand durchgeführt, während die Emsdaten monatlich erhoben wurden.

5 Adjustierung der Frachten

5.1 Zur Struktur der CQ-Funktion

Bevor die eigentliche Adjustierung der Frachten vorgenommen wird, stellt sich zunächst die Frage, wie die hierzu benötigte CQ-Funktion (Konzentration-Durchfluss-Funktion) bzw. die zugehörige LQ-Funktion (Fracht-Durchfluss-Funktion) festgelegt werden soll. Für viele Parameter gilt ein monotoner Zusammenhang zwischen Durchfluss und Fracht, wie anhand der folgenden Abbildungen deutlich wird.

Abb. 5.1



In Abb. 5.1 sind die Frachtwerte $L_t = c_t q_t$ für alle im 2-Wochen-Rhythmus vorgenommenen Einzelmessungen 1955-1995 von $\text{NO}_3\text{-N}$ bei Lobith/Rhein dargestellt, für die offenbar in guter Näherung ein linearer Zusammenhang hergestellt werden kann.

Abb. 5.2

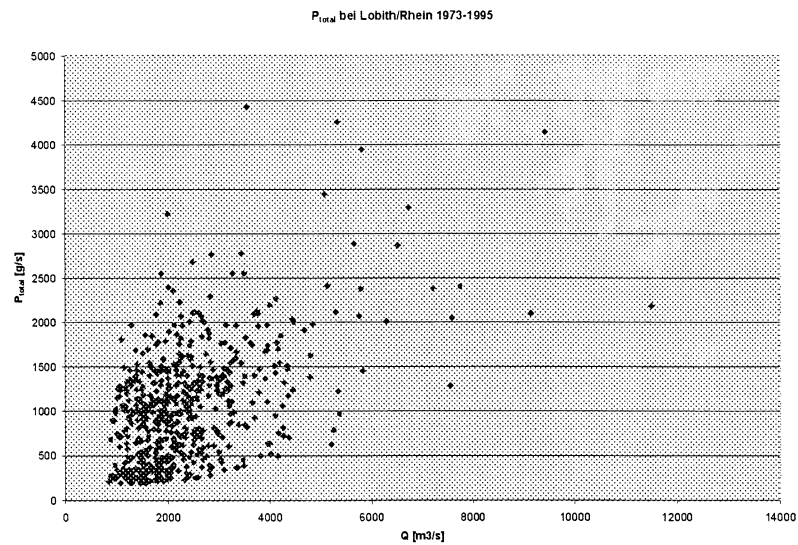


Abb. 5.2 zeigt die entsprechenden Ergebnisse für P_{total} . In beiden Fällen bietet es sich ebenfalls an, den Zusammenhang zwischen Durchfluss und Fracht linear zu approximieren. Allerdings ist dieser Zusammenhang weitaus schwächer ausgeprägt, und für die statistische Analyse erschwerend ist zusätzlich die starke Heteroskedastie, d.h. die vom Durchfluss abhängige Streuung der Frachten. Ähnliche Darstellungen erhält man bei anderen Flüssen und anderen Nährstoffparametern, während für Schwermetalle eine Modellierung schwieriger erscheint: Abb. 5.3 und 5.4 zeigen die Fracht-Durchfluss-Diagramme für Cadmium und Blei.

Abb. 5.3

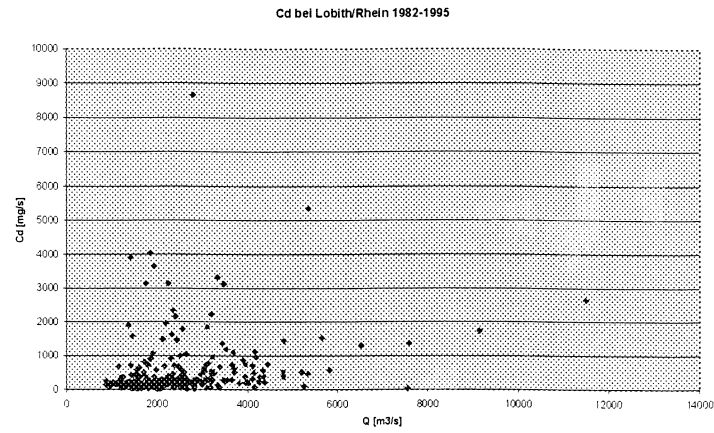
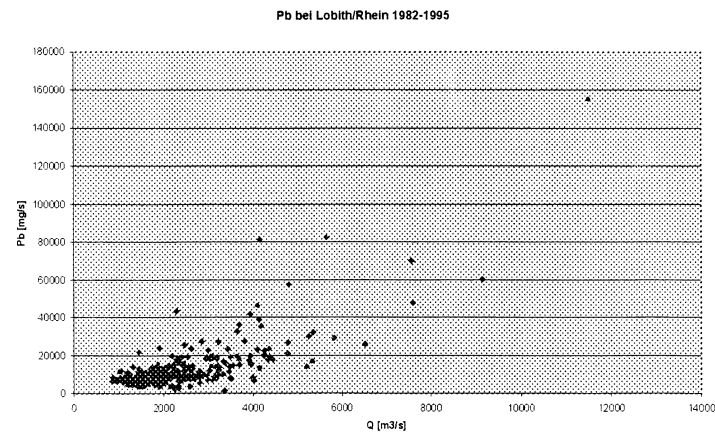


Abb. 5.4



Für die beiden Schwermetalle ist der Zusammenhang zwischen Durchfluss und Fracht nur schwach ausgeprägt, so dass hier vermutet werden kann, dass für die Fracht dieser Substanzen noch andere Einflussfaktoren wesentlich sind.

Gleichwohl spricht in allen dargestellten Fällen nichts gegen die Annahme, dass die LQ-Funktion (Fracht-Durchfluss-Funktion) in erster Näherung linear ist, und gleichbedeutend hiermit ist die

Annahme, dass die CQ-Funktion (Konzentrations-Durchfluss-Funktion) in erster Näherung durch eine lineare Funktion des Reziprokwertes des Durchflusses ($1/Q$) beschrieben werden kann. Diese lineare Beziehung zwischen Durchfluss und Fracht ist die Grundlage der in den folgenden Abschnitten 5.2-5.7 beschriebenen statistischen Methoden, die sich bezüglich der Einbeziehung weiterer Einflussgrößen und in der Behandlung der Saisonalität unterscheiden. Nichtlineare Beziehungen zwischen Durchfluss und Fracht werden danach in den Abschnitten 5.8 und 5.9 berücksichtigt.

5.2 Nichtparametrische Glättung nach Stalnacke (Methode N)

5.2.1 Der Vorschlag von Stalnacke

Nach einem Vorschlag von Stalnacke (1996; siehe auch OSPAR-Guidelines for Harmonised Quantification and Reporting Procedures for Nutrients - HARP-NUT – Guideline Number 7: Quantification of the Total Riverine Load of Nutrients, 2000) wird die Fracht linear modelliert gemäß

$$L_{ij} = \alpha_j + \beta_{ij} q_{ij} + \varepsilon_{ij},$$

wobei L_{ij} = Fracht in Jahr i und Saison j
 q_{ij} = Durchfluss in Jahr i und Saison j .

$$i=1,\dots,T$$

$$j=1,\dots,M$$

Der Index i kennzeichnet das Jahr der Messung, während j für die Saison steht. Das Stalnacke-Modell erfordert ein festes Zeitraster, d.h. der Saisonindex j bezieht sich auf einen festen Monat im Jahr. Dies macht es erforderlich, bei der Datenaufbereitung zunächst alle Messwerte in das vorgegebene Raster einzuordnen.

Die Einsatzmöglichkeiten dieses Modells erscheinen jedoch beschränkt, da nur der Proportional-Parameter β , nicht jedoch der konstante Anteil α vom Index i abhängig ist, d.h. dieser - in erster Näherung durch die Punktquellen bestimmte - Frachtanteil beinhaltet zwar eine Saisonkomponente, wird jedoch über die Jahre als zeitlich konstant unterstellt. Zumindest bei erheblichen Reduzierungen der Einträge von Punktquellen erscheint diese Annahme als nicht adäquat, so dass daraus erhebliche Verzerrungen der adjustierten Fracht resultieren können. Daher wird im Rahmen der vorliegenden Untersuchung ein erweitertes nichtparametrisches Modell betrachtet.

5.2.2 Ein erweitertes nichtparametrisches Modell

In Erweiterung des Vorschlags von Stalnacke wird folgendes Modell betrachtet:

$$L_{ij} = \alpha_{ij} + \beta_{ij}q_{ij} + \varepsilon_{ij}.$$

Der Unterschied zum Vorschlag von Stalnacke besteht darin, dass nicht nur β_{ij} , sondern auch α_{ij} vom Jahr i abhängig ist. Die beiden Modellparameter α_{ij} und β_{ij} lassen sich nichtparametrisch schätzen durch Minimieren des folgenden Ausdrucks:

$$\begin{aligned} S(\alpha, \beta) = & \sum_{i,j} (L_{ij} - \alpha_{ij} - \beta_{ij}q_{ij})^2 + \lambda_1 \sum_{i,j} \left(\alpha_{ij} - \frac{\alpha_{i+1,j} + \alpha_{i-1,j}}{2} \right)^2 + \lambda_2 \sum_{i,j} \left(\alpha_{ij} - \frac{\alpha_{i,j+1} + \alpha_{i,j-1}}{2} \right)^2, \\ & + \lambda_1 \overline{q^2} \sum_{i,j} \left(\beta_{ij} - \frac{\beta_{i+1,j} + \beta_{i-1,j}}{2} \right)^2 + \lambda_2 \overline{q^2} \sum_{i,j} \left(\beta_{ij} - \frac{\beta_{i,j+1} + \beta_{i,j-1}}{2} \right)^2 \end{aligned}$$

wobei $\overline{q^2} = \frac{1}{N} \sum_{ij} q_{ij}^2$ das arithmetische Mittel der quadrierten Durchflüsse bezeichnet.

Die Penalty-Parameter λ_1, λ_2 müssen in geeigneter Weise vorgegeben werden, wobei mit der Festlegung $\lambda_1 = \lambda_2$ sichergestellt wird, dass saisonale Veränderungen der Parameter dasselbe Gewicht erhalten wie die Veränderungen von Jahr zu Jahr.

Um einen gewünschten Grad der Anpassung der Funktion zu erhalten, wird die Zahl der verallgemeinerten Freiheitsgrade nach Hastie und Tibshirani (1990) vorgegeben, die sich als Äquivalent der Anzahl der zugrundeliegenden Parameter deuten lässt.

Diese auf dem erweiterten nichtparametrischen Modell basierende Methode wird als Methode N bezeichnet. Der Vorteil dieser Methode besteht naturgemäß in der sehr flexiblen Modellierung der Saisonfigur, die selbst bei extremen ausgeprägten Saisonspitzen noch eine brauchbare Anpassung der Saisonfigur ermöglicht. Nachteilig ist der Umstand, dass die Rohdaten monatsweise bereitgestellt werden müssen, und dass die erforderlichen Berechnungen selbst auf sehr leistungsfähigen Rechnern sehr zeitaufwendig sind. Zu beachten ist auch, dass die Festlegung der Vorgabeparameter (Anzahl der Freiheitsgrade) sorgfältig erfolgen muss, um nicht im Falle einer ungünstigen Datenlage (fehlende Daten o.ä.) eine fehlerhafte Modellierung zu verursachen (overfitting). Bei Zeitreihen, die einen Zeitraum von mehr als 20 Jahren umfassen, empfiehlt sich aus Gründen der limitierten Rechenkapazität eine lokale Anwendung des Verfahrens mit einem festen Zeitfenster.

5.3 Anwendung des Schätzverfahrens von Hebbel (Methode H)

Nach dem Ansatz von Hebbel (1992) zur Zerlegung von Zeitreihen in Trend, Saison und exogene Effekte liegt es nahe, zur Erfassung der Konzentrations-Durchfluss-Beziehung folgendes Modell zu betrachten:

$$c_t = u_t + s_t + \alpha / q_t + \varepsilon_t$$

wobei

c_t = Konzentration zum Zeitpunkt t

L_t = Fracht zum Zeitpunkt t

q_t = Durchfluss zum Zeitpunkt t

u_t = Trendkomponente,

s_t = Saisonkomponente

α = Wirkung des reziproken Durchflusses auf die Konzentration (zeitlich konstant)

Die Messzeitpunkte $t_1, \dots, t_n$ im betrachteten Messzeitraum sind im Gegensatz zu dem von Stalnacke vorgeschlagenen Modell nicht notwendigerweise äquidistant.

Die Ermittlung der Parameter für dieses Modell basiert auf der Minimierung eines Glattheitsmaßes, welches über einen geeignet festgelegten Trend-Saison-Differentialoperator definiert ist. Bezüglich der Details sei auf den Anhang sowie auf den Abschnitt *VB Glättungsverfahren* in Hebbel (1997) verwiesen. Bei den hier vorgestellten Berechnungen wurde dieses Verfahren unter Verwendung eines linearen Trends mit einer Saisonkomponente zweiter Ordnung verwendet. Abhängig ist das Verfahren von einem Glättungsparameter SIGMA, der nicht explizit in die CQ-Funktion, sondern in dem oben genannten Trend-Saison-Differentialoperator eingeht. In Ermangelung anderer Festlegungen wurde entschieden, diesen Glättungsparameter SIGMA so festzulegen, dass die Zahl der verallgemeinerten Freiheitsgrade bei 12 liegt.

Es ist zu beachten, dass der Parameter β , der den vom Durchfluss unabhängigen Anteil der Fracht beschreibt, im Modell konstant ist. Um dennoch eine flexible Anpassung an veränderte CQ-Funktionen zu gewährleisten, wird das Modell lokal verwendet, d.h. die Schätzung erfolgt separat für jeden einzelnen Zeitpunkt auf der Basis aller Daten innerhalb eines gleitenden Zeitfensters. In den Auswertungen hat sich ein Zeitfenster von 7 Jahren als günstig erwiesen, wobei am Anfang und am Ende der Zeitreihe jeweils die ersten bzw. letzten sieben Jahre einbezogen werden, während im mittleren Bereich der Zeitreihe das Zeitfenster genau so festgelegt wird, dass der betrachtete Zeitpunkt genau in der Mitte des Zeitfensters liegt. Im Falle fehlender Werte wird das Zeitfenster entsprechend ausgedehnt, so dass – im Falle von Monatsdaten – das Zeitfenster genau $7 \times 12 + 1 = 85$ Einzelwerte umfasst.

5.4 Lokale Regression mit Saison (Methode L1)

Wählt man bei dem im vorigen Abschnitt beschriebenen Ansatz von Hebbel den Vorgabewert von sechs Freiheitsgraden, so ist die Schätzung der Adjustierungsparameter gleichwertig zu einer Regressionsschätzung auf Basis des folgenden linearen Modells:

$$c_t = \frac{\alpha}{q_t} + \beta + \delta + \text{season} + \varepsilon_t,$$

wobei

$$season := \gamma_1 \sin \frac{2\pi t}{m} + \gamma_2 \cos \frac{2\pi t}{m} + \gamma_3 \sin \frac{2\pi t}{2m} + \gamma_4 \cos \frac{2\pi t}{2m}$$

für die Saisonkomponente steht. Dabei bezeichnet m die Länge des Jahres, ausgedrückt in der bei den Zeitpunkten t verwendeten Maßeinheit. Hinzuweisen ist darauf, dass nach diesem Modell die Konzentration einem linearen Trend unterliegt, während der Effekt des Durchflusses auf die Konzentration zeitlich konstant ist. Zweckmäßigerweise wird dieses Modell ebenso wie das Verfahren von Hebbel auf der Basis eines gleitenden Zeitfensters mit einer Länge von 7 Jahren eingesetzt. Im Falle fehlender Werte wird das Zeitfenster entsprechend ausgedehnt, so dass – im Falle von Monatsdaten – das Zeitfenster genau $7 \times 12 + 1 = 85$ Einzelwerte umfasst.

Methode L1 ist naturgemäß eng mit Methode H verwandt und liefert in der Regel ähnliche Resultate. Der Vorteil von Methode L1 besteht darin, dass der Rechenaufwand sehr viel geringer ist und aufgrund der sehr einfachen Modellstruktur ein sehr robustes Verhalten auch bei einer schlechten Datenlage gewährleistet ist.

5.5 Lokale Regression mit Saison und verzögertem Durchflusseffekt (Methode L2)

Die CQ-Funktion ist vielfach nicht nur vom aktuellen, sondern auch von früheren Durchflüssen abhängig, wobei die Erfahrung zeigt, dass bei zunehmendem Durchfluss mit höheren Konzentrationen, bei abnehmenden Durchflüssen jedoch mit geringeren Konzentrationen zu rechnen ist. So ist es naheliegend, das im vorigen Abschnitt beschriebene Modell um einen verzögerten Durchflusseffekt wie folgt zu erweitern:

$$c_t = \frac{\alpha}{q_t} + \frac{\gamma}{q_{t-1}} + \beta + \delta t + season + \varepsilon_t$$

wobei q_{t-1} den am Vortag gemessenen Durchfluss bezeichnet und $season$ wie im vorigen Abschnitt definiert ist. Dabei ist zu beachten, dass am Tag $t-1$ zwar ein Durchflusswert, in der Regel jedoch

kein Konzentrationswert vorliegt, denn typischerweise werden die Konzentrationsmessungen näherungsweise im 2-Wochen-Rhythmus oder monatlich durchgeführt.

Es hat sich als günstig erwiesen, aufgrund der höheren Anzahl von Parametern und der dadurch etwas geringeren Stabilität der Schätzwerte die Fensterbreite bei der Regressionsschätzung von 7 auf 8 Jahre zu erweitern. Dies bedeutet, dass eine höhere Flexibilität bei der Modellanpassung durch eine etwas geringere zeitliche Flexibilität erkaufte wird.

5.6 Lokale Regression mit Temperatur und verzögertem Durchflusseffekt (Methode L3)

Um eine möglichst einfache Modellierung der CQ-Funktion zu erhalten, liegt der Gedanke nahe, die Saison-Modellierung durch einen Temperatureffekt zu ersetzen, der möglicherweise einen ähnlichen Jahresgang aufweist. So ergibt sich in Abänderung des in Abschnitt 5.5 beschriebenen Modells folgende CQ-Funktion:

$$c_t = \frac{\alpha}{q_t} + \frac{\gamma}{q_{t-1}} + \beta + \delta t + \eta w_t + \varepsilon_t$$

wobei w_t die Wassertemperatur am Tag t bezeichnet. Die Parameterschätzung erfolgt für dieses Modell ebenso wie für Methode L1 auf der Basis eines gleitenden Zeitfensters, wobei aufgrund des bei Voruntersuchungen festgestellten instabileren Verhaltens der Schätzfunktion ein auf acht Jahre verlängertes Zeitfenster gewählt wird.

5.7 Lokale Regression mit Saison, Temperatur und verzögertem Durchflusseffekt (Methode L4)

Kombiniert man die beiden in Abschnitt 5.5 und 5.6 beschriebenen Modelle, ergibt sich die folgende CQ-Funktion:

$$c_t = \frac{\alpha}{q_t} + \frac{\gamma}{q_{t-1}} + \beta + \delta t + \eta w_t + \text{season} + \varepsilon_t$$

wobei w_t wiederum die Wassertemperatur am Tag t bezeichnet. Die Parameterschätzung erfolgt für dieses Modell auf der Basis eines gleitenden Zeitfensters wiederum mit einer Länge von acht Jahren.

5.8 Schätzung mittels Splines (Methode S1)

Die oben beschriebenen Verfahren setzen voraus, dass die Durchfluss-Fracht-Beziehung näherungsweise linear ist. Für Parameter, bei denen diese Näherung nicht gerechtfertigt ist, bietet sich eine flexible Anpassung der CQ-Funktion über einen kubischen Spline an. Die Berechnung dieses kubischen Splines kann als lineare Glättung aufgefasst werden, wobei der Glättungsparameter über die Freiheitsgrade, d.h. die Spur der linearen Abbildung festgelegt wird (gemäss der Vorgehensweise von Hastie und Tibshirani). Für die Spur wird ein Wert von ca. 4 vorgegeben. Bezeichnet s die Splinefunktion, so kann die CQ-Funktion dargestellt werden als

$$c_t = s(q_t) + \varepsilon_t$$

Bei Methode S1 wird unterstellt, dass der Spline auf der Basis aller verfügbaren Messwerte ermittelt wird, d.h. es wird eine globale, trendunabhängige Abhängigkeit zwischen Durchfluss und Konzentration unterstellt. Zweckmäßig ist eine solche Annahme sicherlich nicht für die Betrachtung langer Reihen, doch für kurze Reihen, die nicht länger als 7 oder 8 Jahre sind, erscheint die Annahme einer statischen CQ-Funktion zur Frachtadjustierung als einfaches und praktikables Verfahren. Für die multiplikativ adjustierte Fracht zum Zeitpunkt t ergibt sich die Gestalt

$$L_{t,a} = \frac{s(q_{0t})q_{0t}}{s(q_t)q_t} L_t,$$

d.h. für die Adjustierung entscheidend ist neben dem Verhältnis von aktuellem Durchfluss q_t und langjährigem Durchflussmittelwert q_{0t} das Verhältnis zwischen den Splinewerten an der Stellen q_t und q_{0t} .

5.9 Schätzung mittels lokaler Splines (Methode S2)

Um zeitliche Trends besser abbilden zu können, ist es naheliegend, die Splineberechnung nicht global durchzuführen, sondern hierzu wie bei den Methoden L1 bis L4 eine Fenstertechnik zu verwenden. Da keine weiteren Parameter zu berücksichtigen sind, kann ein kleineres Datenfenster verwendet werden. In Methode S2 wurde daher zur Splineberechnung ein Fenster mit einer Länge von drei Jahren verwendet.

5.10 Einbeziehung einer nichtlinearen Komponente in die Fracht-Durchfluss-Beziehung

Eine Alternative zur Modellierung der CQ-Funktion mittels kubischer Splines besteht in der Verwendung der parametrischen CQ-Funktion

$$c(q) = \beta + \alpha/q + \lambda q^d,$$

worin β , α , λ und d die unbekannten, zu schätzenden Modellparameter bezeichnen.

Eine Grundvoraussetzung für die Existenz eines validen Schätzverfahren besteht darin, dass die Modellgleichung bezüglich der unbekannten Parameter identifizierbar ist, d.h. für jeden möglichen Funktionsverlauf $c(q)$ darf es nur eine mögliche Parameterkombination geben. Diese Forderung nach Identifizierbarkeit ist mit diesem Modell nicht gewährleistet, denn bei $d=0$ ist die Festlegung von α und λ nicht mehr eindeutig. Ein aus statistischer Sicht grundsätzlich akzeptabler Ausweg besteht darin, für den Parameter d eine untere Schranke vorzugeben, die nicht unterschritten werden soll, z.B. den Wert 0.5. Zumindest einige Schätzverfahren sind in der Lage, solche Restriktionen im Schätzalgorithmus zu berücksichtigen. Andererseits stellt sich die Frage nach der Interpretierbarkeit der Ergebnisse, wenn sich im Schätzverfahren für d tatsächlich der

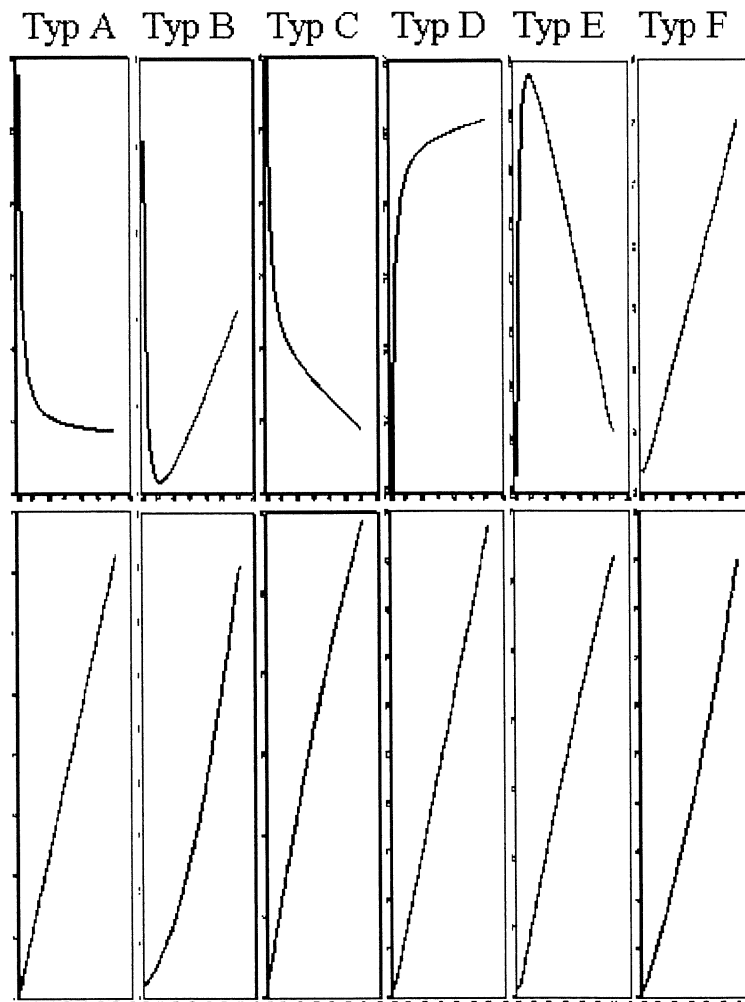
Wert der Untergrenze ergibt. Man wird sich dann den Einwand gefallen lassen müssen, dass mit einer anderen Untergrenze ein anderer Wert ermittelt worden wäre, und nur dann, wenn tatsächlich aus hydrologischer Sicht gute Gründe für eine bestimmte Untergrenze vorliegen, ist ihre Verwendung gerechtfertigt.

Wenn aus den oben genannten Gründen auf eine Schätzung des Parameters d verzichtet werden muss, bleibt noch der Ausweg, von vornherein den Parameter d nach hydrologischen Gesichtspunkten festzulegen und nur die Parameter α , β und λ zu schätzen. Dabei ist darauf hinzuweisen, dass selbst in einer solcherart eingeschränkten Modellklasse hinreichend flexible Anpassungen der Konzentrations-Durchfluss-Beziehung möglich sind. In Abb. 5.5 sind sechs Konzentrations-Durchfluss-Beziehungen (obere Reihe) sowie die zugehörigen Fracht-Durchfluss-Beziehungen (untere Reihe) wiedergegeben, die auf der Grundlage des obigen Modells für $d=1$ und verschiedene Parameterkombinationen von α , β , und γ ermittelt wurden. Diese Beziehungen entsprechen näherungsweise den von Behrendt (1993) beschriebenen sechs Typen einer Konzentrations-Durchfluss- bzw. Fracht-Durchfluss-Beziehung. Ergänzt man das Modell um einen linearen Trend sowie eine Saisonkomponente zweiter Ordnung, erhält man die CQ-Funktion

$$c_t = \frac{\alpha}{q_t} + \lambda q_t + \beta + \delta t + \textit{season} + \varepsilon_t$$

wobei *season* wie in Abschnitt 5.4 definiert ist. Dieses Verfahren wurde versuchsweise an einigen Parametern erprobt. Dabei zeigte sich, dass in der Regel nur geringe Unterschiede zu den Ergebnissen von Methode L1 festzustellen waren. Auf weitergehende Untersuchungen musste aus Kapazitätsgründen verzichtet werden.

Abb. 5.5: Sechs Typen einer Konzentrations-Durchfluss- bzw. Fracht-Durchfluss-Beziehung nach Behrendt [1993]. Obere Reihe CQ-Funktionen, untere Reihe zugehörige LQ-Funktionen.



5.11 Der Adjustierungsschritt

c_{ij} sei die gemessene Konzentration bei Probe j des Jahres i , q_{ij} sei der zugehörige Durchfluss und

$$L_{ij} = c_{ij} q_{ij}$$

sei die *gemessene Fracht*. Gegeben sei weiterhin die mit einem der beschriebenen Verfahren N, H, L1-L4, S1 oder S2 ermittelte CQ-Funktion $c_{ij}(q_{ij})$, welche die Konzentration in Abhängigkeit vom Durchfluss und möglicherweise weiteren Variablen beschreibt. Dann ist zunächst zu überprüfen, dass statistisch unzulässige Extrapolationen der CQ-Funktion auf einen Konzentrationsbereich, der unterhalb bzw. oberhalb des durch die Messwerte aufgespannten Intervalls liegt, nicht vorliegen. Andernfalls ist eine entsprechende Begrenzung der CQ-Funktion bzw. der LQ-Funktion vorzunehmen.

Die CQ-Funktion wird verwendet, um die *geschätzte Fracht* (die LQ-Funktion)

$$L_{ije} = c_{ij}(q_{ij}) q_{ij},$$

sowie die *mittlere Fracht*

$$L_{ijm} = c_{ij}(q_{0ij}) q_{0ij},$$

zu ermitteln. Dabei bezeichnet q_{0ij} das zugehörige langjährige Monatsmittel des Durchflusses, ausgedrückt in der Einheit m^3/s .

Aus gemessener Fracht, geschätzter Fracht und mittlerer Fracht wird schließlich die (multiplikativ) *adjustierte Fracht* berechnet, gemäß

$$\text{Adjustierte Fracht} = \text{Gemessene Fracht} \times \text{Mittlere Fracht} / \text{Geschätzte Fracht}.$$

Formal lässt sich die adjustierte Fracht darstellen durch

$$L_{ija} = \frac{L_{ijm}}{L_{ije}} L_{ij} = \frac{c_{ij}}{c_{ij} \left(\frac{L_{ij}}{L_{ije}} \right)} L_{ijm},$$

d.h. die adjustierte Fracht ergibt sich aus der gemessenen Fracht durch Multiplikation mit dem Faktor $\frac{L_{ijm}}{L_{ije}}$. Um zu verhindern, dass nie zu vermeidende Schätzfehler eine Verzerrung des Adjustierungsfaktors verursachen, sollte dieser nach oben und unten begrenzt werden. Dies ist allerdings nur dann relevant, wenn in einem Monat die Durchflussrate extrem hoch oder extrem niedrig ist und dann der relative Schätzfehler naturgemäß sehr groß wird. Mit dem begrenzenden Faktor 3 ergibt sich formal $L_{ija} = \lambda_{ij} L_{ij}$ mit dem Adjustierungsfaktor

$$\lambda_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{3} & \text{falls } \frac{L_{ijm}}{L_{ije}} < \frac{1}{3} \\ 3 & \text{falls } \frac{L_{ijm}}{L_{ije}} > 3 \\ \frac{L_{ijm}}{L_{ije}} & \text{sonst} \end{cases}.$$

Alternativ kann der Adjustierungsfaktor auch bestimmt werden durch das Verhältnis zwischen der mittleren und der geschätzten Jahresfracht $\left(\sum_j L_{ijm} \right) / \left(\sum_j L_{ije} \right)$.

5.12 Alternative Adjustierungsverfahren

5.12.1 Erweiterung der TRANSPOS-Methode (Methode BC)

Die im folgenden diskutierten Berechnungen wurden von Herrn Brunswig, Kiel, mit Hilfe des TRANSPOS-Programms durchgeführt. Dabei handelt es sich um ein halbautomatisches Berechnungsverfahren für reale und normierte Jahresfrachten.

Gemäss der mit TRANSPOS üblicherweise praktizierten Vorgehensweise werden normierte Frachten wie folgt ermittelt (siehe auch Brunswig 1994). Zunächst wird das Wertekollektiv (c_{ij} ,

q_{ij}) der gesamten Messreihe (i =Jahresindex, j =Werteindex innerhalb des Jahres) im CQ-Diagramm geplottet, und es wird die über den Gesamtzeitraum gemittelte Ausgleichskurve $c = f(q;s)$ mit einem halbautomatischen Verfahren angepasst. Dabei bezeichnet s die jeweilige Saison. Diese „Mutter-CQ-Funktion“ aller Messdaten dient als Bezugskurve zur Separation einzelner Teilintervalle, deren Messpunkte nicht durch die Bezugskurve angemessen repräsentiert werden. Hierzu wird für jedes Jahr i ein gemittelter Lagekoeffizient

$$k_i = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \frac{c_{ij}}{f(q_{ij}, s_{ij})}$$

berechnet um zu ermitteln, welche Jahre zur Berechnung der CQ-Funktion zusammengefasst werden können. Bei der Summenbildung werden jeweils alle Messwerte eines hydrologischen Jahres berücksichtigt. In einem zweiten Durchgang werden die CQ-Funktionen der Teilintervalle berechnet. Die Berechnung der abflussnormierten Jahresfrachten erfolgt unter Verwendung der CQ-Funktion der Teilintervalle, bei deren Erstellung die Messwerte des Jahres j enthalten sind, mit jeweils derselben definierten Langzeitverteilung der Durchflusswerte (Langzeithydrograph). Unterschiede im normierten Frachtwert, der auf den tatsächlichen Abflusswerten des Bezugszeitraums gründet, kommen somit allein aufgrund der verschiedenen CQ-Funktionen der Teilintervalle zustande. Sie entsprechen unterschiedlichen dynamischen Gleichgewichtslagen im Emissions-/Immissions-System.

Da allen Jahren des jeweiligen Teilintervalls immer derselbe normierte Jahresfrachtwert zugeordnet wird, ist es nicht möglich, diese normierten Frachtwerte gemäss der in Kapitel 3 skizzierte grundsätzliche Vorgehensweise nachfolgend noch einer Trendanalyse basierend auf Jahreswerten zu unterziehen.

Um individuelle Schwankungen von Jahr zu Jahr in den abflussnormierten Jahresfrachten sichtbar zu machen, wurden in Anlehnung an das Konzept der multiplikativen Adjustierung die gemittelten Lagekoeffizienten erneut berechnet, wobei nun anstelle der zusammenfassenden CQ-Funktion die CQ-Funktionen der Teilintervalle $f_i(q,s)$ verwendet wurden:

$$k_i^* = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \frac{c_{ij}}{f_i(q_{ij}, s_{ij})}.$$

Multipliziert man diesen Lagekoeffizienten mit den gemäss TRANSPOS abflussnormierten Frachten, ergibt sich ein Frachtwert, der in den Ergebnisdarstellungen mit der Kennung BC bezeichnet wird. Dieser Frachtwert unterliegt zufälligen Schwankungen von Jahr zu Jahr, so dass eine Trendanalyse auf Basis dieses Wertes (mit Einschränkungen) als zulässig erscheint.

5.12.2 Normierung der OSPAR-Fracht auf das Langzeitmittel des Durchflusses (Methode AO)

Ist die jährliche Fracht näherungsweise proportional zum Durchfluss, liegt es nahe, die folgende Frachtformel für einen auf das langjährige Mittel des Durchflusses normierten Jahresfrachtwert zu verwenden:

$$L_i = 31,5576 \frac{MQ}{\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m q_{ij}} \sum_{j=1}^m c_{ij} q_{ij}.$$

Darin bezeichnet MQ den langjährigen mittleren Durchfluss (m³/s). Die Einheit der so ermittelten Jahresfracht entspricht

- t/a wenn für die Konzentrationen die Maßeinheit mg/l verwendet wird
- kg/a wenn für die Konzentrationen die Maßeinheit µg/l verwendet wird.

Diese Methode wird im folgenden als A0 bezeichnet. Der Vorteil dieses Verfahrens besteht darin, dass es sehr einfach ist und dass die daraus ermittelten Jahresfrachten nur von den Daten der zugehörigen Jahresstichprobe abhängig sind. Weiterhin ist nicht – wie im Falle von Abschnitt 4.2 - davon auszugehen, dass die Autokorrelation in der Reihe der jährlichen Durchflüsse erhebliche Autokorrelationen in den ermittelten Jahresfrachten induzieren.

Ein wesentlicher Nachteil des Verfahrens besteht allerdings darin, dass seine Anwendung nur in jenen Fällen ratsam ist, in denen Fracht und Durchfluss näherungsweise proportional sind. Andernfalls ist mit einer erheblichen Überadjustierung zu rechnen.

6 Aggregation der adjustierten Frachten

Nachdem für jeden Messzeitpunkt t_{ij} , für den Konzentrationswerte c_{ij} vorhanden sind, die zugehörige adjustierte Fracht L_{ija} ermittelt worden ist, erhält man durch die Bildung des arithmetischen Mittelwertes die mittleren adjustierte Fracht im Jahr i und durch Hochrechnung auf den Jahreswert die adjustierte Jahresfracht L_{ia} :

$$L_{ia} = \frac{31,5576}{m} \sum_{j=1}^m L_{ija}$$

Die Einheit der so ermittelten Jahresfracht entspricht

- t/a wenn für die Konzentrationen die Maßeinheit mg/l verwendet wird
- kg/a wenn für die Konzentrationen die Maßeinheit $\mu\text{g/l}$ verwendet wird.

Dabei wird unterstellt, dass die zugrundeliegenden Durchflusswerte in der Maßeinheit m^3/s bestimmt werden.

Die Mittelwertbildung erfolgt über alle in dem betreffenden Kalenderjahr verfügbaren Werte. Dabei ist eine gleichmäßige Abdeckung des betrachteten Zeitraums zu gewährleisten, d.h. es wird vorausgesetzt, dass die Messungen in gleichen Zeitabständen erfolgen und keine längeren Perioden ausgelassen werden.

7 Trendanalyse

Das zur Trendanalyse von adjustierten und nichtadjustierten Jahreswerten zur Verfügung stehende statistische Instrumentarium ist vielfältig. Beispielsweise lassen sich neben einfachen linearen Regressionsanalysen der nichtparametrische Trendtest von Mann-Kendall sowie nichtparametrische Glättungsverfahren einsetzen. Das Für und Wider dieser Verfahren hat in der Vergangenheit zu einigen Kontroversen geführt. Vergleicht man die unterschiedlichen Verfahren zur Trendanalyse, so wird schnell deutlich, dass jedes dieser Verfahren seine spezifischen Vor- und Nachteile hat. Die Eignung eines Verfahrens ist nicht nur von der statistischen Verteilung der Daten abhängig zu machen, sondern auch vom angestrebten Zweck der Trendanalyse. Hierfür lassen sich die folgenden vier Funktionen einer Trendanalyse von Jahreswerten unterscheiden:

Visuelle Darstellung der Daten durch eine Trendlinie	Eine visuelle Darstellung beispielsweise mittels einer Trendlinie dient einerseits zur Zusammenfassung der Einzelwerte und andererseits zur Aufdeckung von Anomalien, z.B. von Ausreißern.
Statistischer Trendtest	Ein statistischer Trendtest dient zur Überprüfung der Frage, ob von einem statistisch gesicherten Trend ausgegangen werden kann. Ist dies nicht der Fall, spricht nichts gegen die Anfangsvermutung, dass es sich bei den beobachteten Schwankungen nur um zufällige Veränderungen handelt, die nicht durch einen systematischen Trend verursacht sind. Nur wenn ein statistisch gesicherter Trend vorliegt, erscheint aus statistischer Sicht eine weitergehende statistische Auswertung der Zeitreihe als zweckmäßig.
Erfassung der linearen Trendkomponente	Die lineare Trendkomponente ermöglicht die Erfassung der prozentualen Reduktion der Einträge in einem vorgegebenen Zeitraum.
Vergleich des gegenwärtigen Niveaus mit einem Referenzniveau oder dem Niveau eines früheren Zeitpunkts	Sofern ein Referenzwert oder ein Referenzzeitpunkt gegeben ist, kann im Rahmen der Trendanalyse geprüft werden, ob das aktuelle Niveau höher oder niedriger als der Referenzwert liegt oder ob sich seit dem Referenzzeitpunkt eine Erhöhung oder Reduzierung ergeben hat.

In den folgenden Abschnitten werden die verschiedenen Funktionen und geeignete Analyseverfahren ausführlich diskutiert. Dabei wird unterstellt, dass eine Zeitreihe von Jahreswerten vorliegt, wobei es nicht von Belang ist, ob bzw. wie die Werte adjustiert wurden.

7.1 Visuelle Darstellung der Daten durch eine Trendlinie

Eine visuelle Trendlinie ermöglicht nicht nur eine Zusammenfassung der Daten, sondern erleichtert auch den visuellen Vergleich verschiedener Regionen oder Kontaminanten, wenn die zugehörigen Trendlinien innerhalb einer Grafik dargestellt werden. Anhand geeignet definierter Trendlinien lässt sich visuell entscheiden, ob es einen generellen Trend für verschiedene Regionen oder verschiedene Kontaminanten gibt, oder inwieweit spezifische Unterschiede vorliegen. Zusätzliche Informationen lassen sich durch die Einbeziehung von Konfidenz- und Vorhersagebereichen gewinnen.

Zur visuellen Darstellung eignen sich Glättungsverfahren, beispielsweise (kubische) Splines oder der sogenannte LOESS-Smoother, während eine einfache polynomiale Regression vielfach zu einer schlechten Modellanpassung führt. Der Auswahl eines Verfahrens sind letztlich kaum Grenzen gesetzt, denn es gibt kein statistisches Kriterium, welches in eindeutiger Weise ein bestimmtes Verfahren bevorzugt. Für die Erfassung von Trends in Biota empfiehlt ICES-WGSAEM den LOESS-Smoother, basierend auf einem Datenfenster von 7 Jahren, d.h. jeder Schätzwert basiert auf den Daten von jeweils sieben Jahren (des zugehörigen Jahres sowie der drei vorangegangenen und der drei nachfolgenden Jahre, wobei am Anfang und am Ende der Zeitreihe eine Modifikation des Datenfensters erforderlich ist). Dies ermöglicht für typische Monitoringzeitreihen in der Regel eine günstige Anpassung an den allgemeinen Trendverlauf.

Nicht für jeden Anwendungsfall ist der LOESS-Smoother oder der kubische Spline gleichermaßen geeignet. Wenn mit einzelnen sehr stark abweichenden Datenwerten (Jahreswerten) zu rechnen ist, stellt sich die Frage, ob diese mit ihrem vollen Gewicht in die Bestimmung der Trendlinie einbezogen werden sollen, oder ob ihr Einfluss mit einem geeigneten Robustifizierungsverfahren reduziert werden soll. Abbildung 7.1 zeigt für eine hypothetische Zeitreihe, die im Jahr $x=5$ einen stark abweichenden Einzelwert $y=9$ aufweist, eine mit einem LOESS-Smoother ermittelte Trendlinie. Offenbar 'zieht' der stark abweichende Einzelwert in $x=5$ die Trendlinie nach 'oben', so dass für die Jahre $x=3, 4, 6$ und 7 die Trendlinie oberhalb der jeweiligen Einzelwerte verläuft. Wenn ein Grund zu der Annahme besteht, dass der stark abweichende Einzelwert in Jahr $x=5$ nicht die realen Verhältnisse repräsentiert, sondern durch Messfehler verursacht wurde, liegt es nahe, durch eine geeignete Robustifizierung des Glättungsverfahrens den Einfluss dieses potentiellen

Ausreißers zu reduzieren. Dies kann durch eine iterative Anwendung eines gewichteten Glättungsverfahrens erfolgen, bei dem die Gewichte von der Größe der jeweiligen Residuen bestimmt sind. Die Wirkung eines solchen robustifizierten Glättungsverfahrens ist in Abbildung 7.2 verdeutlicht. Offenbar hat der Wert im Jahr $x=5$ nahezu keinen Einfluss mehr, so dass sich nun eine konvexe Form der Trendfunktion ergibt, die den übrigen Einzelwerten sehr gut angepasst ist.

Vor- und Nachteile einer Robustifizierung der Trendermittlung sind für jeden Anwendungsfall abzuwägen. Die zugrundeliegende Verteilung der Messfehler ist ebenso zu berücksichtigen wie die Frage nach dem jeweiligen spezifischen Zweck der Trendberechnungen. Bislang werden hauptsächlich nicht-robustifizierte Glättungsverfahren eingesetzt, was allerdings auch dadurch begründet ist, dass robustifizierte Glättungsverfahren in statistisch-methodischer Hinsicht nicht mehr so einfach zu handhaben sind und die Berechnung von Konfidenz- oder Vorhersageintervalle nicht geklärt ist.

Abb. 7.1

LOESS-Trend bei einer Zeitreihe mit einem stark abweichenden Wert

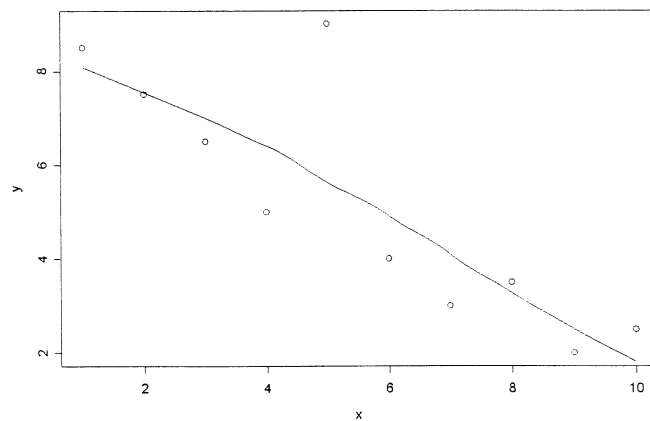
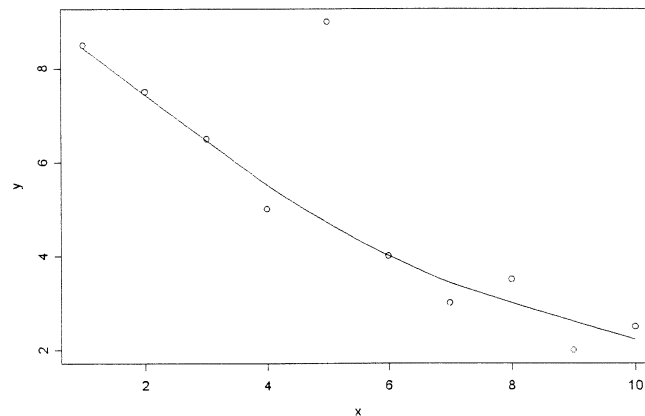


Abb. 7.2

Robustifizierter LOESS-Trend bei einer Zeitreihe mit einem stark abweichenden Wert



7.2 Statistischer Trendtest

Solange die Zeitreihe durch zufällige Schwankungen von Jahr zu Jahr dominiert wird und kein deutlicher Trend zu erkennen ist, ist die Ermittlung einer Trendlinie und daraus abgeleiteter Größen von zweifelhaftem Nutzen, wenn nicht nachgewiesen wird, dass sich im Trendverlauf reale Veränderungen zeigen. Die Überprüfung dieser Frage erfolgt mit Hilfe eines statistischen Trendtests. Ein solcher Test basiert auf der Anfangsvermutung (Nullhypothese), dass kein systematischer Trend vorliegt, und dass alle Schwankungen nur durch zufällige Veränderungen der Einzelwerte verursacht werden. Erst wenn durch einen geeigneten Trendtest zu einer vorgegebenen Irrtumswahrscheinlichkeit ALPHA (meist wird ALPHA mit 5% festgelegt) diese Anfangsvermutung widerlegt werden kann, kann der Trend als signifikant angesehen werden, d.h. als nachgewiesen gelten.

Die Auswahl eines geeigneten Trendtests ist von einer Reihe von Aspekten abhängig zu machen. Dies betrifft zunächst die Frage, welche Arten eines systematischen Trends von Interesse sind, also die Frage, ob nur lineare oder auch nichtlineare Trends zu berücksichtigen sind, und ob neben monotonen Trends auch nichtmonotone Trends in die Betrachtungen einzubeziehen sind. Weiter-

hin ist zu prüfen, ob die statistischen Verteilungsannahmen für den jeweiligen Trendtests erfüllt sind (z.B. Normalverteilung) und inwieweit der Test als robust angesehen werden kann. Nicht zuletzt sollte die jeweilige Power oder Trennschärfe eines Tests berücksichtigt werden, also die Wahrscheinlichkeit, mit der ein tatsächlich vorhandener Trend auch erkannt wird.

Sofern sowohl monotone als auch nichtmonotone Trends zu untersuchen sind, empfiehlt sich die Verwendung eines auf dem LOESS-Smoother basierenden Tests. Sofern jedoch nur monotone Trends erwartet werden, kann der Test von Mann und Kendall eingesetzt werden. Hierbei handelt es sich um ein nichtparametrisches Verfahren, welches auf die Voraussetzung der Normalverteilung verzichtet.

7.3 Bestimmung der linearen Trendkomponente

Neben dem allgemeinen (nichtlinearen) Trendverlauf besteht vielfach auch Interesse an dem linearen Trendanteil in einer vorgegebenen Zeitspanne. Ausgedrückt werden kann dieser lineare Anteil durch die (positive oder negative) Steigung der linearen Trendlinie oder als prozentualen Anstieg oder Rückgang. Zusätzlich ist die Angabe eines Konfidenzintervalls für den Steigungsparameter hilfreich.

Die Bestimmung des Steigungsparameters kann mittels einer linearen Regression erfolgen, mittels des LOESS-Smothers oder mittels der nichtparametrischen Methode von Theil, bei der zunächst für alle Jahre i und j mit $i > j$ und den zugehörigen Jahreswerten y_i, y_j die Differenzen $(y_i - y_j)/(i - j)$ ermittelt werden und hiervon der Median gebildet wird. Eine Robustifizierung der linearen Regressionsmethode bietet sich an, wenn mit Ausreißern aufgrund von Messfehlern zu rechnen ist. Man sollte sich dessen bewusst sein, dass speziell bei stark nichtlinearen Trendverläufen die verschiedenen Methoden zu sehr unterschiedlichen Ergebnissen führen können. Speziell bei längeren nichtmonotonen Zeitreihen kann der Einsatz der Theilslopes zu irreführenden Resultaten führen, und auch eine lineare Regression liefert bei langen Zeitreihen und stark nichtlinearen Trends nicht notwendigerweise ein plausibles Resultat. Daher empfiehlt sich bei langen Zeitreihen mit deutlich ausgeprägtem nichtlinearen Trend die Verwendung des LOESS-Smothers.

7.4 Vergleich mit einem Referenzniveau

Wenn ein Referenzwert oder ein Referenzzeitpunkt vorliegt, kann ein Vergleich mit dem gegenwärtigen Niveau vorgenommen werden. Hierzu bildet man die Differenz zwischen dem auf der Basis der Trendlinie geschätzten aktuellen Niveaus und dem Referenzwert bzw. dem geschätzten Niveau zum Referenzzeitpunkt. Um eine statistische Bewertung dieser Differenz vornehmen zu können, wird zusätzlich eine Abschätzung der Standardabweichung dieser Differenz oder eine Konfidenzschätzung benötigt. Zusätzlich kann ein statistischer Test vorgenommen werden, um zu überprüfen, ob die ermittelte Differenz signifikant von Null verschieden ist. Allerdings zeigen Simulationsrechnungen, dass die Trennschärfe eines solchen Tests vielfach unbefriedigend ist. Dies verweist auf den Umstand, dass die verwendeten Schätzmethoden vielfach hohe Schätzfehler verursachen. Verbesserungen der statistischen Methodik sind deshalb wünschenswert.

8 Powerfunktion

8.1 Zielsetzung

Die mit der OSPAR-Formel berechneten Jahresfrachten weisen Schwankungen von Jahr zu Jahr auf, die sich klassifizieren lassen in

- zufällige Schwankungen, die durch unterschiedliche Durchflüsse zu erklären sind;
- zufällige Schwankungen, die nicht allein durch unterschiedliche Durchflüsse zu erklären sind (z.B. anthropogen bedingte Einflüsse);
- zufällige Schwankungen, die durch Messfehler verursacht sind.

Hinzu kommt ein langfristiger systematischer Trend, von dem angenommen wird, dass er anthropogen bedingt ist (z.B. durch Emissionsminderungsmaßnahmen).

Der Sinn der Adjustierung besteht, wie oben ausgeführt, darin, die durch Durchflussschwankungen verursachten *zusätzlichen* Zufallsschwankungen der jährlichen Frachten zu eliminieren, um die Sensitivität des nachgeschalteten Trendanalyseverfahrens zu maximieren. Eine leistungsfähige Adjustierungsmethode zeichnet sich demzufolge dadurch aus, dass die adjustierten Jahresfrachten möglichst geringe Schwankungen von Jahr zu Jahr aufweisen, d.h. die Variabilität der Werte von Jahr zu Jahr sollte möglichst gering sein. Dabei muss selbstverständlich gewährleistet sein, dass die weiteren Komponenten der zufälligen Schwankungen nicht verfälscht werden dürfen, denn sonst ist keine statistisch „saubere“ Trendanalyse der adjustierten Jahresfrachten möglich.

8.2 Messung der Trendsensitivität

Um zu überprüfen, inwieweit eine Adjustierung zur Erhöhung der Trendsensitivität des Gesamtverfahrens beiträgt, wird ein einfach interpretierbarer Bewertungsmaßstab benötigt. Ein praktisch interpretierbarer Maßstab für die Trendsensitivität ist die Wahrscheinlichkeit, mit der ein hypothetischer Trend nach einer vorgegebenen Anzahl von Jahren statistisch signifikant wird. Als Funktion der Trendstärke wird diese Wahrscheinlichkeit mit dem Begriff der Power-Funktion bezeichnet.

Die Powerfunktion hängt einerseits ab vom erwarteten zeitlichen Trend, andererseits von der zu erwartenden Variabilität der Jahreswerte. Die Variabilität der Jahreswerte von Jahr zu Jahr kann nur prognostiziert werden, wobei man zweckmäßigerweise unterstellt, dass die Variabilität, wie sie sich in der Vergangenheit ergeben hat, auch zukünftig vorliegen wird. Dies ist die zentrale Annahme der sogenannten post-hoc Powerfunktion, bei der auf der Basis gewisser statistischer Modellannahmen die Wahrscheinlichkeit berechnet wird, dass ein gegebener Trend als statistisch signifikant identifiziert wird.

Die post-hoc Power wird unter der Annahme ermittelt, dass ein linearer Trend auf der Basis des LOESS-Smoother berechnet wird. Für die Berechnungen wurde die Dauer des Erhebungszeitraums mit $n=10$ Jahren unterstellt. Bestimmt ist die post-hoc Power durch die relative Standardabweichung der Jahresfrachten, wobei es sich empfiehlt, hierfür die Standardabweichung der relativen Residuen zu verwenden.

8.3 Interpretation

Die Powerfunktion lässt sich insbesondere zur Überprüfung der Eignung eines Monitoringsystems zur Erfassung von zeitlichen Trends einsetzen. Dies soll an einem Beispiel erläutert werden: Es sind Emissionsminderungsmaßnahmen geplant, die innerhalb eines Zeitraums von 10 Jahren zu einer Minderung der Einträge um 25% führen sollen, von 10000 t/a auf 7500 t/a. Im Idealfall geht man dann von einer linearen Minderung über den gesamten Zeitraum aus, d.h. von einer jährlichen Reduktion um 250 t/a.

Ob nach Ablauf der 10 Jahre auf der Basis des bestehenden Monitoringsystems der statistische Nachweis der Minderung (mit einem vorgegebenen Signifikanzniveau) möglich ist, kann anhand des zugehörigen Wertes der Powerfunktion abgelesen werden. Die Powerfunktion gibt die geschätzte Wahrscheinlichkeit dafür an, dass ein statistischer Nachweis der Eintragsreduzierung gelingt. Bei einem Wert der Powerfunktion von mehr als 0,9 kann davon ausgegangen werden, dass das bestehende Monitoringsystem gut geeignet ist, um zur Überprüfung des Erfolgs der Maßnahmen herangezogen zu werden. Bei Werten unterhalb von 0,9 ist es ratsam, das Monitoring-

system entweder durch ein modifiziertes Beprobungsverfahren oder durch geeignete statistische Methoden, z.B. durch Einsatz von Adjustierungsmethoden, zu verbessern, um zu verhindern, dass trotz erfolgreich durchgeführter Emissionsminderung der Nachweis der erzielten Reduktion misslingt.

Grundsätzlich ist die Powerfunktion vom angenommenen Trendverlauf im Beobachtungszeitraum abhängig, doch gilt bei Anwendung des auf dem Smoother basierenden Trend-Tests, dass die bei linearem Trendverlauf erzielten Ergebnisse näherungsweise auch bei nichtlinearem monotonen und ‚glatten‘ Trendverlauf gelten.

Hinzuweisen ist auch auf den Umstand, dass die Powerfunktion wesentlich von der Variabilität der Jahreswerte in der Vergangenheit abhängig ist. Da diese Variabilität selbst zufälligen Einflüssen unterliegt, ist auch davon auszugehen, dass auch die zukünftige Variabilität höher oder niedriger als unterstellt sein kann. Somit kann die Powerfunktion selbst nur als Schätzung angesehen werden, nicht jedoch als fixe, unveränderliche Größe. Diese Schätzung unterliegt außerdem um so größeren zufälligen Fehlern, je kürzer der Zeitraum ist. So wird empfohlen, auf möglichst lange Datenreihen zurückzugreifen oder die Powerfunktion für verschiedene mögliche Variabilitätswerte zu ermitteln, um den Einfluss dieser Variabilität auf das Ergebnis sichtbar zu machen.

9 Bewertung der Ergebnisse

9.1 Analyse der adjustierten Jahresfrachten

Die in diesem Vorhaben diskutierten Methoden

N = Nichtparametrische Glättung nach Stalnacke

H = Anwendung des Schätzverfahrens von Hebbel

L1 = Lokale Regression mit Saison

L2 = Lokale Regression mit Saison und verzögertem Durchflusseffekt

L3 = Lokale Regression mit Temperatur und verzögertem Durchflusseffekt

L4 = Lokale Regression mit Saison, Temperatur und verzögertem Durchflusseffekt

S1 = Schätzung mittels Splines

S2 = Schätzung mittels lokaler Splines

BC = Erweiterung der TRANSPOS-Methode (Brunswig)

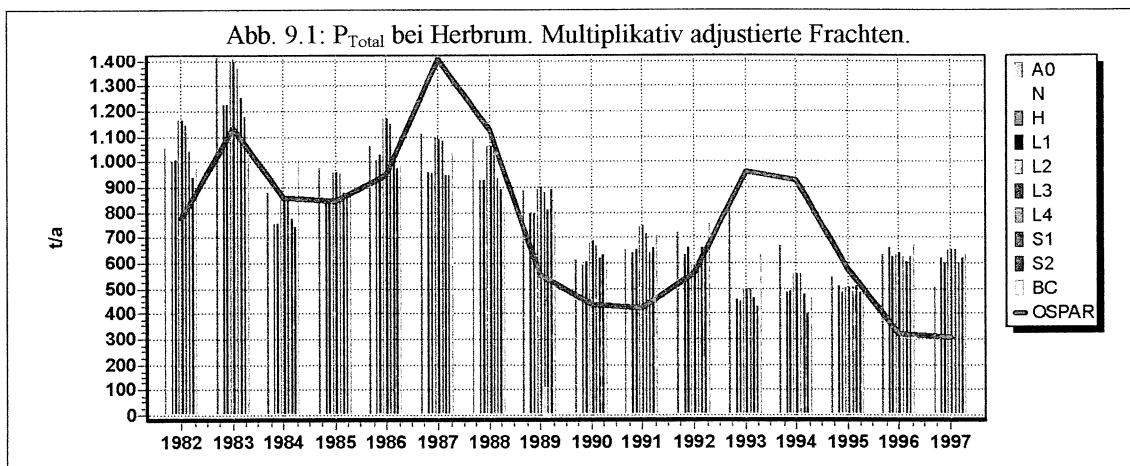
A0 = Normierung der OSPAR-Fracht auf das Langzeitmittel des Durchflusses

wurden anhand der Messreihen von Pb, Cd, P_{total} , $\text{PO}_4\text{-P}$, $\text{NH}_4\text{-N}$, $\text{NO}_3\text{-N}$ und Schwebstoffen im Rhein bei Lobith und in der Ems bei Herbrum überprüft. Die Messungen im Rhein wurden im 2-Wochen-Abstand durchgeführt, während die Emsdaten monatlich erhoben wurden. Neben beiden Reihen war zusätzlich die Temperaturreihe sowie die Reihe der täglichen Durchflüsse verfügbar.

Ziel der im folgenden vorgestellten Prüfung war die Erprobung der Methoden unter realen Einsatzbedingungen, d.h. mit sehr unterschiedlichen Zeitreihen, Werten in der Nähe der Bestimmungs- bzw. Nachweisgrenze, Werten mit nur einer signifikanten Stelle, Ausreißern u.ä. Dabei wurde bewusst darauf verzichtet, die Methoden individuell an einzelne Zeitreihen anzupassen, da dies auch in der Routine kaum möglich sein wird. Gemäss dieser Zielsetzung ist jener Methode der Vorzug zu geben, welche möglichst einfach ist und bei allen Parametern akzeptable Werte liefert. Auf eine Begrenzung des Adjustierungsfaktors nach oben oder unten wurde bei den Berechnungen verzichtet, zumal Überschreitungen der Grenzen nur in wenigen Fällen festgestellt werden konnte.

Die berechneten Jahresfrachten und die mittleren Jahreskonzentrationen sowie die zugehörigen LOESS-Trends sind in Anhang A grafisch wiedergegeben. Die dort für alle ausgewerteten Substanzen wiedergegebenen Grafiken werden im folgenden anhand der Ergebnisse für P_{Total} bei Herbrum erläutert:

Die Darstellung der multiplikativ adjustierten Frachten (Abb. 9.1) beinhaltet für jedes Jahr neun Balken, die sich – von links nach rechts - auf die adjustierten Jahresfrachten der Methoden A0, N, H, L1, L2, L3, L4, S1, S2 sowie BC beziehen. Die durchgezogene Linie repräsentiert die Jahresfrachten nach der OSPAR-Formel.



Die auf der Grundlage dieser Jahresfrachten ermittelten Trends sind in Abbildung 9.2 wiedergegeben. Die farbliche Zuordnung zu den Methoden entspricht der Darstellung in Abbildung 9.1, jedoch wurde in Abb. 9.2 die Form der Darstellung (Balken bzw. Linie) getauscht. Damit entsprechen die Balken dem berechneten Trend für die OSPAR-Fracht, während die durchgezogenen Linien den Trendverlauf für die verschiedenen Adjustierungsmethoden repräsentieren (LOESS-Trend). Teilweise sind die mit unterschiedlichen Methoden berechneten Trends nahezu deckungsgleich. Dabei stimmt die Reihenfolge der Überdeckung mit der Reihenfolge in der Legende überein, d.h. die Trendlinie für Methode A0 wird von den Trendlinien aller anderen Adjustierungsmethoden überdeckt, während die Trendlinie für die Methode BC alle übrigen Linien überdeckt.

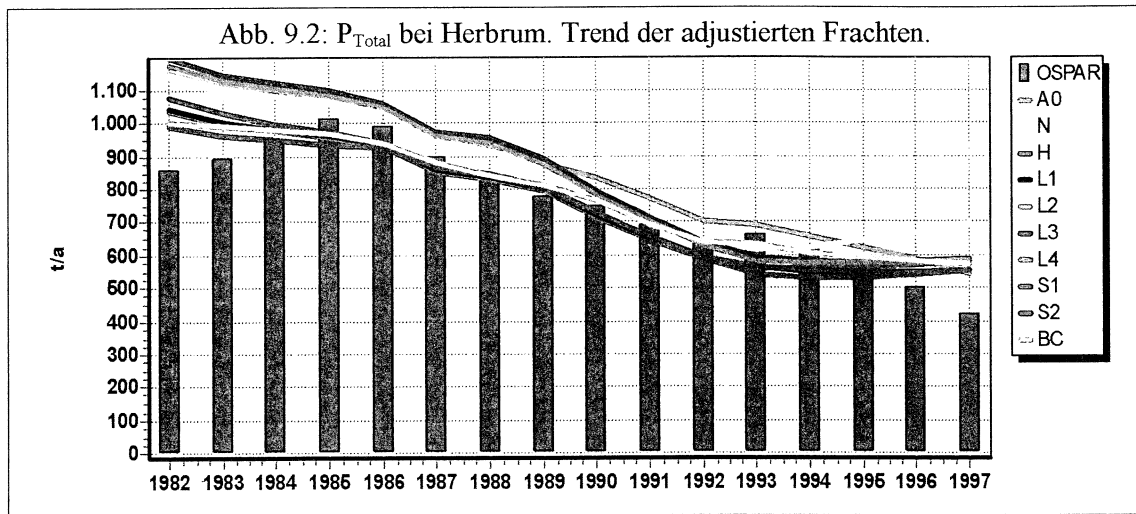
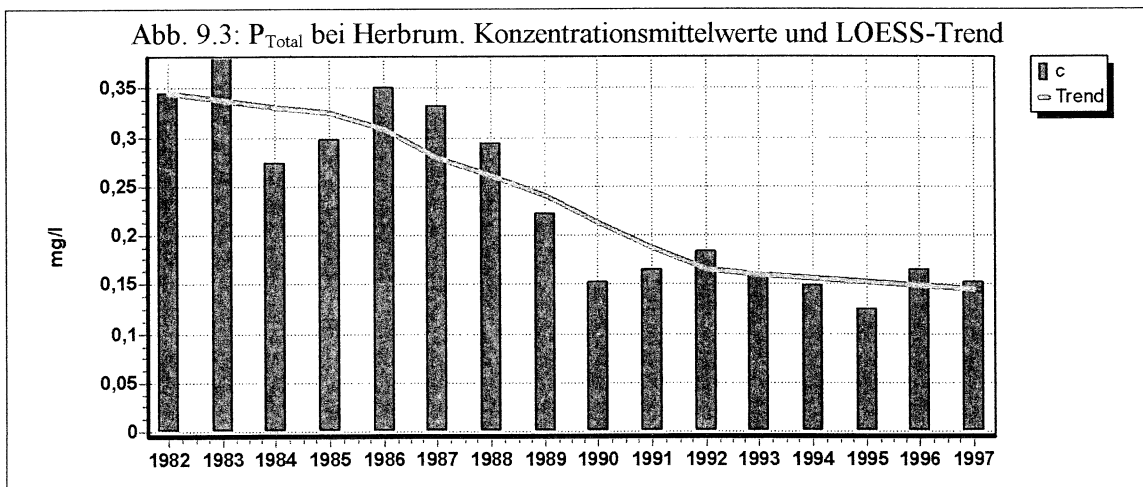


Abb. 9.3 beinhaltet das Jahresmittel der gemessenen Konzentrationen (Balken) sowie die daraus abgeleitete Trendlinie.



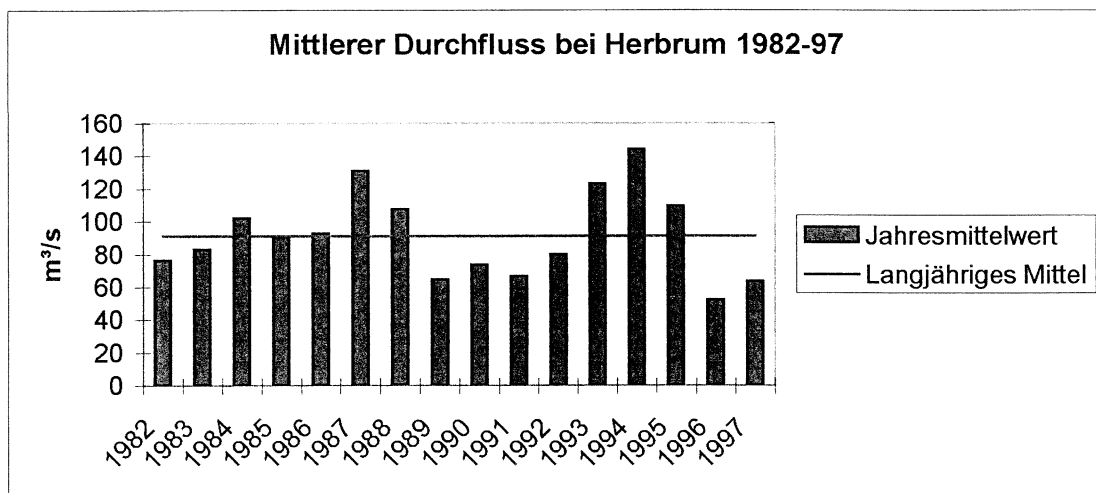
9.1.1 Ergebnisse für die Ems bei Herbrum

Pb bei Herbrum (Anhang A2)

Da die verfügbaren Daten nur einen Zeitraum von fünf Jahren umfassen, können die Mindestvor-
aussetzungen für eine Adjustierung nicht als erfüllt gelten. Dennoch zeigen die Ergebnisse eine

vergleichsweise gute Übereinstimmung für alle Adjustierungsmethoden, wenn man von der Methode A0 sowie der Methode N einmal absieht. Die letztgenannte Methode ermöglicht im vorliegenden Fall aufgrund der Kürze des betrachteten Zeitraums keine akzeptable Anpassung der LQ-Funktion. Bei allen Adjustierungsmethoden ebenso wie bei den Konzentrationsmittelwerten zeigen sich leicht aufwärts gerichtete Trends, während die OSPAR-Fracht im Zeitverlauf deutlich zurückgeht. Ursache hierfür sind die im betrachteten Zeitraum stark zurückgehenden Durchflussmengen (Abb. 9.4) sowie der zusätzlich wirksame Durchfluss-Gewichtungsfaktor in der OSPAR-Formel.

Abb. 9.4



Wäre die gemessene Konzentration bei allen Messungen im Zeitraum konstant gewesen, hätte sich zwischen 1993 und 1997 bei Anpassung einer linearen Regressionsgeraden ein Rückgang der OSPAR-Fracht um mehr als zwei Drittel (-67%) ergeben. Dies steht im Einklang mit der Feststellung, dass die Trendlinie für die OSPAR-Fracht bei Pb einen Rückgang um ca. 64% ausweist, während die gemessenen Konzentrationen leicht zugenommen haben. Dieses Ergebnis zeigt, dass die OSPAR-Frachten aufgrund der starken Durchflussschwankungen für Trendanalysen zumindest bei kurzen Zeitintervallen gänzlich ungeeignet sind.

Cd bei Herbrum (Anhang A3)

Ebenso wie bei Pb umfassen auch bei Cd die verfügbaren Daten nur einen Zeitraum von fünf Jahren. Angesichts dessen ist es nicht überraschend, dass jene Adjustierungsverfahren, welche be-

sonders aufwendig sind und demzufolge auch mehr Daten erforderlich machen, die ungünstigsten Eigenschaften aufweisen. Es handelt sich hierbei um die Methoden N, H und L4, die hinsichtlich der Anpassung der CQ- bzw. LQ-Funktion nicht befriedigen. Auch die Methode A0 liefert – aus strukturellen Gründen – keine akzeptablen Resultate. Somit verbleiben die Methoden L1, L2, L3, S1 und S2, welche wiederum vergleichsweise ähnliche Ergebnisse liefern. Bestimmt sind alle Ergebnisse durch einen drastischen Anstieg der Konzentrationen im Jahr 1997. Auch die OSPAR-Frachten weisen deshalb einen geringeren Rückgang auf, während umgekehrt die adjustierten Frachten durch einen stärker aufwärts gerichteten Trend bestimmt sind. Es ist allerdings festzuhalten, dass für diesen Trend einzig das Ergebnis aus dem Jahr 1997 verantwortlich ist, und dass kein statistisch signifikanter Trend nachgewiesen werden kann.

P_{total} bei Herbrum (Anhang A4)

Für P_{total} liegen bis auf die Methode A0 alle Adjustierungsverfahren relativ nahe beieinander und decken sich auch gut mit den Konzentrationsmittelwerten. Deutlich abweichende Resultate liefert wieder die OSPAR-Fracht, mit zwei Extremwerten in den Jahren 1987 und 1993/94. Die Ursache liegt wiederum in den in diesen Jahren stark erhöhten mittleren Durchflusswerten. Auffällig ist der Umstand, dass die adjustierten Frachten seit 1993 näherungsweise konstant geblieben sind, während bei der OSPAR-Fracht ein erheblicher Rückgang festzustellen ist, der aber wiederum nur den erhöhten Durchflusswerten in den Jahren 1993/94 geschuldet ist.

PO₄-P bei Herbrum (Anhang A5)

Auch für PO₄-P liegen bis auf die Methode A0 alle Adjustierungsverfahren relativ nahe beieinander und decken sich gut mit den Konzentrationsmittelwerten. Deutlich abweichende Resultate liefert wieder die OSPAR-Fracht, mit Extremwerten in den Jahren 1993/94. Die Ursache liegt wiederum in den in diesen Jahren stark erhöhten mittleren Durchflusswerten. Auffällig ist allerdings im Vergleich zu P_{total}, dass zwischen 1986 und 1987 ein sehr scharfer Rückgang der Frachten um mehr als 50% eingetreten ist, der bei den adjustierten Frachten noch stärker zutage tritt als bei der OSPAR-Fracht. Die aus den Trendlinien ermittelte prozentuale Reduktion der Frachten im Zeitraum 1986-95 liegt je nach Verfahren zwischen 26% und 45%, während bei Betrachtung der OSPAR-Frachten bzw. der Konzentrationsmittelwerte eine etwas höhere Reduktion ermittelt wird. Behrendt et al (1999) ermitteln eine emissionsseitige Reduktion aus punktuellen und diffusen Quellen im gesamten Einzugsgebiet von 50,1% (abflussbereinigt 45%).

NH₄-N bei Herbrum (Anhang A6)

Bei NH₄-N ist die OSPAR-Fracht des Jahres 1987 ein augenfälliger „Ausreißer“. Erklären lässt sich dieser Wert im wesentlichen durch ein Hochwasserereignis im Januar 1987: Die zugehörige NH₄-N-Konzentration im Januar des Jahres 1987 beträgt mit 2 mg/l das Dreifache des Jahresmittels, und der zugehörige Durchflusswert von 695 m³/s übersteigt das langjährige Mittel um das Siebenfache. Dieses Hochwasserereignis verursacht einen Anstieg der OSPAR-Fracht um mehr als 100%. Dies ist nicht als besonders ungewöhnlich einzustufen, da bei einem Hochwasserereignis je nach Höhe bis zu 90% der Jahresfracht in das Meer gelangen kann. Naturgemäß sind die adjustierten Frachten hiervon nur geringfügig betroffen. Bis auf die Methode A0 liegen alle Adjustierungsverfahren relativ nahe beieinander und decken sich auch gut mit den Konzentrationsmittelwerten. Für den Zeitraum von 1993 bis 1997 deuten die Trendlinien der adjustierten Frachten auf einen Rückgang von ca. 20-30% hin.

NO₃-N bei Herbrum (Anhang A7)

Bei NO₃-N liegen alle Adjustierungsverfahren vergleichsweise dicht beieinander, während wiederum die OSPAR-Fracht deutliche Abweichungen aufweist und erhebliche Schwankungen von Jahr zu Jahr. Es ist dem deutlichen Rückgang des mittleren Durchflusses von 1993 bis 1997 geschuldet, dass die Trendlinie der OSPAR-Fracht für den genannten Zeitraum eine Reduktion von mehr als 30% verheißt, während die Trendlinie der adjustierten Frachten sowie der mittleren Konzentrationen auf einen Rückgang von ca. 10% hindeuten.

Schwebstoffe bei Herbrum (Anhang A8)

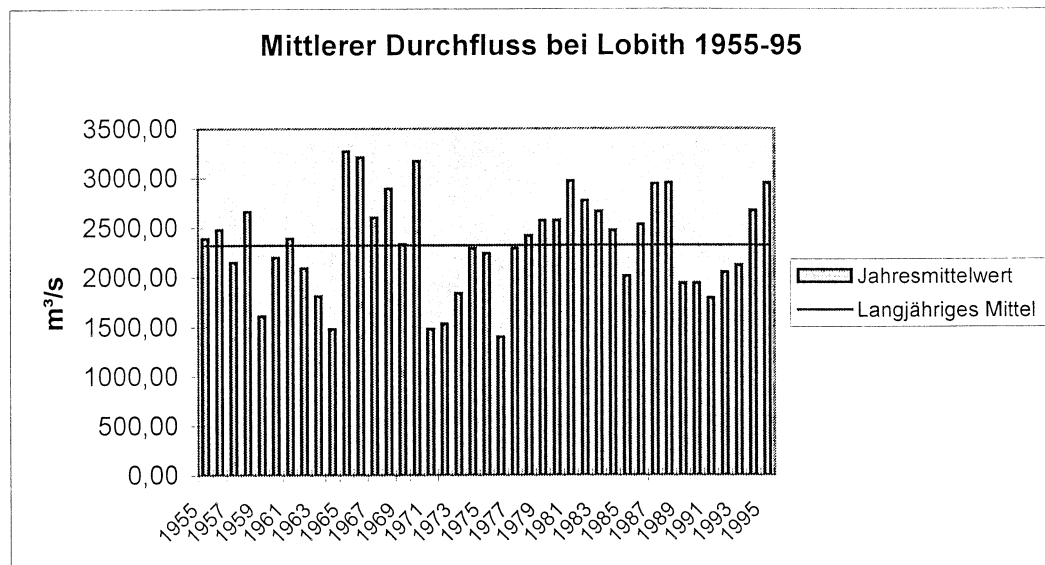
Bei den Schwebstoffen liegen bis auf die Methode A0 alle Adjustierungsverfahren dicht beieinander, während auch hier die OSPAR-Fracht deutliche Abweichungen aufweist. Ein deutlicher Trend ist nicht erkennbar.

9.1.2 Ergebnisse für den Rhein bei Lobith

Pb bei Lobith (Anhang A9)

Während die adjustierten Pb-Frachten ebenso wie die Konzentrationsmittelwerte seit 1991 einheitlich einen abwärts gerichteten Trend aufweisen, ist für die OSPAR-Fracht seit 1992 ein aufwärts gerichteter Trend erkennbar, der auf einen in den Jahren 1992-1995 ansteigenden mittleren Durchfluss zurückzuführen ist (Abb. 9.5).

Abb. 9.5



Cd bei Lobith (Anhang A10)

Im Verlauf der achtziger Jahre ist ein starker Rückgang der adjustierten Frachten um ca. 90% festzustellen, der von starken Schwankungen von Jahr zu Jahr begleitet wurde. Seit Beginn der neunziger Jahre ist ein weiterer leichter Rückgang der adjustierten Frachten festzustellen, wohingegen bei der OSPAR-Fracht seit 1993 wieder ein aufwärts gerichteter Trend erkennbar ist. Innerhalb der Gruppe der adjustierten Frachten zeigt sich bei den Methoden S1 und S2 ein abweichendes Verhalten, ebenso wie bei der halbautomatischen Methodik BC. Die Konzentrationsmittelwerte weisen grundsätzlich ein ähnliches Verhalten wie die adjustierten Frachten auf, doch fallen die jährlichen Schwankungen der Werte etwas größer aus, bedingt durch die fehlende Adjustierung der Konzentrationen.

P_{total} bei Lobith (Anhang A11)

Auch für P_{total} liegen bis auf die Methode A0 alle Adjustierungsverfahren relativ nahe beieinander und decken sich gut mit den Konzentrationsmittelwerten. Leicht abweichen-

de Resultate liefert die OSPAR-Fracht. Auffällig ist die bei Konzentrationsmittelwerten und der OSPAR-Fracht die deutlich größere Schwankungsbreite, die eine sichere Bestimmung des Trendverlaufs erschwert. Die geschätzte prozentuale Reduktion der Einträge im Zeitraum 1986-95 liegt bei allen Verfahren bei ca. 70%, was sich gut mit den von Behrendt et al. (1999) ermittelten emissionsseitigen Reduktionsraten der punktuellen und diffusen Quellen aus dem Rheineinzugsgebiet von 67,9% deckt.

PO₄-P bei Lobith (Anhang A12)

Auch für PO₄-P liegen bis auf die Methode A0 alle Adjustierungsverfahren relativ nahe beieinander und decken sich gut mit den Konzentrationsmittelwerten und auch mit den Ergebnissen für die OSPAR-Fracht, obgleich die Schwankungsbreite bei den adjustierten Frachten insgesamt etwas geringer ausfällt. Bei allen Verfahren ist ein Rückgang der Frachten seit 1985 von bis zu 80% augenfällig.

NH₄-N bei Lobith (Anhang A13)

Bei NH₄-N sind zwischen den untersuchten Methoden erhebliche Unterschiede festzustellen, wobei besonders die Jahre zwischen 1960 und 1975 einen sehr unruhigen Verlauf aufweisen, in denen speziell die Konzentrationsmittelwerte sehr starke Schwankungen aufweisen. Bis auf die OSPAR-Fracht weisen alle Trends am Ende der Zeitreihe im Jahr 1995 deutlich nach unten, wobei ein Rückgang seit 1986 von ca. 70% festgestellt werden kann.

NO₃-N bei Lobith (Anhang A14)

Bei NO₃-N liegen alle untersuchten adjustierten Frachten dicht beieinander und stimmen in ihrem Verlauf auch sehr gut mit den Konzentrationsmittelwerten überein. Hingegen weist die OSPAR-Fracht sehr starke Abweichungen auf, die sich unter anderem darin äußert, dass bis auf die OSPAR-Fracht alle Trends im Jahr 1995 nach unten weisen. Auffällig sind auch die sehr starken Schwankungen der OSPAR-Fracht von Jahr zu Jahr.

Schwebstoffe bei Lobith (Anhang A15)

Bei den Schwebstoffen liegen deutliche Unterschiede zwischen den Adjustierungsverfahren vor. Ein eindeutiger Trend ist nicht erkennbar. Dabei ist zu beachten, dass aufgrund der Kürze der Zeitreihe keine statistisch sicheren Ergebnisse zu erwarten sind.

9.2 Variabilität der adjustierten Jahresfrachten

Primäres Bewertungskriterium der verschiedenen Adjustierungsverfahren ist neben dem direkten Vergleich der adjustierten Frachtwerte untereinander die Variabilität der Jahresfrachtwerte. Aufgrund der über die langen Zeiträume sehr starken Niveauunterschiede erfolgt die Berechnung dieser Variabilität über die relative Abweichung der Jahreswerte vom jeweiligen LOESS-Trend. Tabelle 9.1 gibt eine Übersicht über die Standardabweichungen dieser relativen Abweichungen, in Prozentwerten (des jeweiligen Niveaus) ausgedrückt. Die Länge der Zeitreihen liegt zwischen 5 und 41 Jahren, wobei bei einer Länge von weniger als 10 Jahren zu beachten ist, dass die Standardabweichungen starken Zufallsschwankungen unterliegen.

Neben den Standardabweichungen selbst ist auch der Quotient S_{Ratio} aus der Standardabweichung für die adjustierte Fracht und der Standardabweichung der OSPAR-Fracht bedeutsam. So gilt für hinreichend lange Messreihen, dass bei gegebener Gesamtreduktion der Einträge durch Einsatz adjustierter Jahresfrachten der Untersuchungszeitraum um den Faktor S_{Ratio} verkürzt werden kann, um dieselbe Trendsensitivität zu erzielen, die ansonsten mit der OSPAR-Fracht erzielt werden würde. S_{Ratio} kann auch als jener Faktor aufgefasst werden, um den sich der Standardfehler der Trendschätzung reduziert, wenn anstelle einer nichtadjustierten Fracht eine adjustierte Fracht verwendet wird.

Tabelle 9.2 beinhaltet die Darstellung des Quotienten S_{Ratio} für alle in diesem Vorhaben behandelten Adjustierungsverfahren. Speziell für $\text{NO}_3\text{-N}$ ermöglicht eine Adjustierung eine sehr starke Verbesserung der Trendsensitivität, die ansonsten nur dann erreicht werden könnte, wenn die Länge des Messzeitraums um den Faktor 2,5 (Ems) oder den Faktor 4 (Rhein) vergrößert würde. Für die übrigen Nährstoffe fallen die Effizienzgewinne nicht so stark aus, doch ist auch hier mit einer Verringerung der Standardabweichung um 25-60% zu rechnen, wenn man einmal von $\text{NH}_4\text{-N}$ im Rhein absieht, bei dem speziell in den Jahren bis 1970 möglicherweise Sondereffekte wirksam geworden sind. Bei den Schwermetallen ist keine eindeutige Bewertung möglich, da für die Ems nur die Daten von fünf Jahren verwendet werden konnten. Für den Rhein jedoch ermöglicht eine Adjustierung bei Cd eine deutliche Reduzierung des Standardfehlers, während bei Pb keine positiven Effekte sichtbar sind. Eine eingehendere Untersuchung der Residuen zeigt, dass bei den Einzelwerten einige extrem abweichende Werte vorliegen, die im Rahmen der CQ-Funktion nicht

erklärt werden können, die jedoch einen erheblichen Einfluss auf die Variabilität der Jahresfrachten haben. In den beiden genannten Tabellen sind auch die Ergebnisse der mittels des TRANSPOS-Modells (BC) ermittelten CQ-Funktion eingetragen. Dabei ist festzuhalten, dass die mittels des TRANSPOS-Modells berechneten Frachten im Grundsatz einen Verlauf aufweisen, welcher dem der adjustierten Frachten ähnlich ist. Eine direkte Vergleichbarkeit der Ergebnisse ist allerdings nicht gewährleistet, da die Anpassung der CQ-Funktion im TRANSPOS-Modell nicht automatisch erfolgt.

Neben den oben genannten Kennwerten wird die Power zur Erfassung eines als relevant erachteten Trends herangezogen. Die Tabellen 9.3 und 9.4 zeigen jene Power-Werte zur Erfassung eines hypothetischen Trends, der im Verlauf von 10 Jahren zu einer Frachtreduktion von 20% bzw. 50% führt. Die Power wird auf der Basis der in Tabelle 9.1 dargestellten Standardabweichung der relativen Residuen berechnet.

Für den Rhein ermöglicht der Einsatz adjustierter Frachten im Vergleich zur OSPAR-Fracht eine erhebliche Verbesserung der Trendsensitivität für $\text{NO}_3\text{-N}$, P_{total} , $\text{PO}_4\text{-P}$, Cd und Schwebstoffe, während bei $\text{NH}_4\text{-N}$ nur geringfügige Unterschiede festzustellen sind und bei Pb eine leichte Verschlechterung der Trendsensitivität eintritt. Eine Verwendung der Konzentrationsmittelwerte hingegen verursacht eine beträchtliche Verschlechterung der Power. Nur bei $\text{NO}_3\text{-N}$ und Schwebstoffen ermöglicht die Verwendung der Konzentrationsmittelwerte im Vergleich zur OSPAR-Fracht eine Verbesserung.

Für die Ems verbessert der Einsatz adjustierter Frachten anstelle der OSPAR-Fracht die Trendsensitivität für alle Nährstoffe. Auch die Konzentrationsmittelwerte ermöglichen hier eine erhebliche Verbesserung der Trendsensitivität, wobei die erreichte Trendsensitivität im Rahmen dessen liegt, was auch mit adjustierten Frachten erreicht wird. Dies erklärt sich jedoch aus den starken saisonalen Schwankungen des Durchflusses bei der Ems: So ist das langjährige Monatsmittel des Durchflusses im Januar mehr als fünfmal so hoch wie im August. Somit ist die Variabilität der Frachtwerte (sowohl bezüglich der OSPAR- als auch der adjustierten Fracht) wesentlich durch die Variabilität der gemessenen Konzentrationen im Winterhalbjahr bestimmt. Weil die mittlere Jahreskonzentration durch alle Messungen gleichermaßen beeinflusst wird, ist hierfür mit erheblich geringeren Schwankungen zu rechnen. Weil jedoch im Falle starker Saisonalität der Trend-

verlauf der Konzentrationswerte nicht notwendigerweise den Trendverlauf in den Einträgen wiedergibt, erscheint die Verwendung der Konzentrationsmittelwerte für die Beurteilung der Effizienz der Reduktionsmaßnahmen nicht als ratsam.

Generell ist festzuhalten, dass ein sicherer Reduktionsnachweis (d.h. mit einer Power von mindestens 90%) bei einer Reduktion um 20% innerhalb von 10 Jahren nur bei $\text{NO}_3\text{-N}$ im Rhein und auch nur dann gewährleistet ist, wenn adjustierte Frachten verwendet werden. Bei einer Reduktion um 50% ist ein sicherer Reduktionsnachweis bei $\text{NO}_3\text{-N}$ und mit Abstrichen bei P_{total} , $\text{PO}_4\text{-P}$ und Pb (nur im Rhein) gewährleistet.¹ Bei Cd und $\text{NH}_4\text{-N}$ ist weder für die Ems noch für den Rhein selbst bei einer Reduktion um 50% ein sicherer Reduktionsnachweis gewährleistet. Für die Ems ist aufgrund der stark ausgeprägten Saisonalität des Durchflusses ein modifiziertes Beprobungskonzept mit erhöhter Probenahmefrequenz im Winter (und gegebenenfalls reduzierter Beprobung während der Sommermonate) ratsam, um die Nachweisbarkeit von Reduzierungsmaßnahmen zu verbessern. Die im Verlauf der Jahre 1985-95 für die verschiedenen Methoden berechneten Reduktionswerte sind in Tabelle 9.5 wiedergegeben. Beim Vergleich der Ergebnisse zeigt sich, dass in einer ganzen Reihe von Fällen die OSPAR-Fracht deutlich sowohl von den Ergebnissen für die mittlere Jahreskonzentration als auch von den adjustierten Frachten abweicht. Dass die Unterschiede nicht noch größer ausfallen, erklärt sich u.a. damit, dass die untersuchten Zeitreihen teilweise sehr lang sind.

¹ Generell ist der statistische Nachweis einer Reduktion dann wahrscheinlicher, wenn der zugrunde liegende Trend stärker ausgeprägt ist. Dies erklärt sich daraus, dass beim Reduktionsnachweis nur qualitativ geprüft wird, ob eine Reduktion vorliegt oder nicht. Die tatsächliche Reduktionsrate kann - mittels des LOESS-Smoother - nur abgeschätzt werden.

Tabelle 9.1: Standardabweichung der relativen Schwankungen von Jahr zu Jahr

Station	Parameter	Zeitreihe	Konzentration	OSPAR	A0	N	H	L1	L2	L3	L4	S1	S2	BC
Lobith	NO ₃ -N	55-95	6,6%	20,7%	6,6%	5,1%	5,2%	5,1%	4,9%	5,0%	5,0%	6,2%	6,4%	6,2%
Lobith	NH ₄ -N	55-95	24,0%	16,0%	23,4%	16,0%	15,9%	16,2%	15,3%	15,5%	15,1%	15,7%	17,0%	16,4%
Lobith	P _{total}	73-95	13,1%	11,7%	13,8%	8,7%	9,2%	8,9%	8,3%	8,9%	8,9%	9,7%	10,1%	8,8%
Lobith	PO ₄ -P	73-93	17,2%	20,4%	18,4%	13,8%	14,9%	14,1%	14,6%	14,4%	15,7%	17,7%	15,7%	12,6%
Lobith	Cd	82-95	29,1%	29,9%	28,6%	28,8%	24,9%	24,2%	24,0%	22,8%	24,1%	23,7%	31,1%	
Lobith	Pb	82-95	16,3%	14,2%	15,9%	15,5%	15,8%	15,0%	15,3%	15,3%	15,1%	17,1%	14,5%	17,8%
Lobith	Schwebstoffe	91-95	7,3%	22,2%	26,0%	75,6%	14,0%	9,5%	6,4%	7,2%	5,9%	9,7%	8,5%	
Herbrum	NO ₃ -N	82-97	8,6%	24,6%	13,7%	13,8%	9,4%	9,4%	9,3%	9,6%	9,6%	12,4%	14,6%	13,1%
Herbrum	NH ₄ -N	82-97	31,0%	55,3%	36,1%	25,3%	25,3%	32,9%	33,6%	34,3%	34,0%	27,3%	30,2%	
Herbrum	P _{total}	82-97	15,8%	37,6%	17,4%	16,8%	15,6%	15,8%	14,9%	14,9%	14,6%	14,4%	16,4%	14,4%
Herbrum	PO ₄ -P	84-97	30,7%	51,4%	34,4%	30,2%	27,1%	27,1%	26,6%	27,4%	26,9%	30,1%	26,5%	20,9%
Herbrum	Cd	93-97	78,5%	33,7%	25,5%	55,1%	39,6%	42,9%	46,9%	48,7%	58,2%	49,3%	50,0%	58,8%
Herbrum	Pb	93-97	7,3%	22,2%	26,0%	75,6%	14,0%	9,5%	6,4%	7,2%	5,9%	9,7%	8,5%	35,5%
Herbrum	Schwebstoffe	82-97	19,2%	31,8%	29,7%	20,1%	19,9%	20,6%	20,0%	20,4%	20,2%	19,3%	22,4%	26,2%

Tabelle 9.2: S_{Ratio} (Quotient aus Standardabweichung der adjustierten Fracht und Standardabweichung der OSPAR-Fracht)

Station	Parameter	Zeitreihe	$\sqrt{1-\rho^2}$	Konzentration	A0	N	H	L1	L2	L3	L4	S1	S2	BC
Lobith	NO ₃ -N	55-95	51,10%	31,88%	31,88%	24,64%	25,12%	24,64%	23,67%	24,15%	24,15%	29,95%	30,92%	29,95%
Lobith	NH ₄ -N	55-95	96,60%	150,00%	146,25%	100,00%	99,38%	101,25%	95,63%	96,88%	94,38%	98,13%	106,25%	102,50%
Lobith	P _{total}	73-95	81,50%	111,97%	117,95%	74,36%	78,63%	76,07%	70,94%	76,07%	76,07%	82,91%	86,32%	75,21%
Lobith	PO ₄ -P	73-93	95%	84,31%	90,20%	67,65%	73,04%	69,12%	71,57%	70,59%	76,96%	86,76%	76,96%	61,76%
Lobith	Cd	82-95	90%	97,32%	95,65%	96,32%	83,28%	80,94%	80,27%	76,25%	80,60%	79,26%	104,01%	
Lobith	Pb	82-95	95,50%	114,79%	111,97%	109,15%	111,27%	105,63%	107,75%	107,75%	106,34%	120,42%	102,11%	125,35%
Lobith	Schwebstoffe	91-95	98,40%	32,88%	117,12%	340,54%	63,06%	42,79%	28,83%	32,43%	26,58%	43,69%	38,29%	11,8%
Herbrum	NO ₃ -N	82-97	51,80%	34,96%	55,69%	56,10%	38,21%	38,21%	37,80%	39,02%	39,02%	50,41%	59,35%	53,25%
Herbrum	NH ₄ -N	82-97	70,60%	56,06%	65,28%	45,75%	45,75%	59,49%	60,76%	62,03%	61,48%	49,37%	54,61%	
Herbrum	P _{total}	82-97	62%	42,02%	46,28%	44,68%	41,49%	42,02%	39,63%	39,63%	38,83%	38,30%	43,62%	38,30%
Herbrum	PO ₄ -P	84-97	60,50%	59,73%	66,93%	58,75%	52,72%	52,72%	51,75%	53,31%	52,33%	58,56%	51,56%	20,9%
Herbrum	Cd	93-97	94,30%	232,94%	75,67%	163,50%	117,51%	127,30%	139,17%	144,51%	172,70%	146,29%	148,37%	58,8%
Herbrum	Pb	93-97	86,90%	32,88%	117,12%	340,54%	63,06%	42,79%	28,83%	32,43%	26,58%	43,69%	38,29%	159,91%
Herbrum	Schwebstoffe	82-97	85,40%	60,38%	93,40%	63,21%	62,58%	64,78%	62,89%	64,15%	63,52%	60,69%	70,44%	82,39%

Tabelle 9.3: Power bei 20 % Reduktion innerhalb von 10 Jahren

Station	Parameter	Zeitreihe	Konzentration	OSPAR	A0	N	ff	L1	L2	L3	L4	S1	S2
Lobith	NO ₃ -N	55-95	80%	20%	80%	94%	93%	94%	95%	95%	95%	84%	82%
Lobith	NH ₄ -N	55-95	17%	27%	17%	27%	27%	27%	29%	28%	29%	28%	25%
Lobith	P _{total}	73-95	35%	41%	33%	60%	66%	58%	63%	58%	58%	52%	49%
Lobith	PO ₄ -P	73-93	25%	20%	23%	33%	30%	32%	30%	31%	28%	28%	37%
Lobith	Cd	82-95	14%	14%	14%	14%	16%	17%	17%	18%	17%	17%	13%
Lobith	Pb	82-95	26%	31%	27%	28%	27%	29%	29%	29%	25%	31%	24%
Lobith	Schwebstoffe	91-95	33%	12%	16%	60%	24%	27%	24%	16%	12%	23%	78%
Herbrum	NO ₃ -N	82-97	61%	17%	33%	33%	54%	54%	55%	53%	53%	38%	30%
Herbrum	NH ₄ -N	82-97	13%	9%	12%	16%	16%	13%	12%	12%	12%	15%	14%
Herbrum	P _{total}	82-97	27%	11%	24%	25%	28%	27%	30%	30%	30%	31%	26%
Herbrum	PO ₄ -P	84-97	13%	9%	12%	14%	15%	15%	15%	15%	15%	14%	15%
Herbrum	Cd	93-97	8%	12%	16%	9%	11%	10%	10%	10%	9%	10%	9%
Herbrum	Pb	93-97	73%	18%	16%	7%	32%	53%	82%	74%	87%	52%	61%
Herbrum	Schwebstoffe	82-97	22%	13%	14%	21%	21%	20%	21%	20%	20%	21%	18%

Tabelle 9.4: Power bei 50 % Reduktion innerhalb von 10 Jahren

Station	Parameter	Zeitreihe	Konzentration	OSPAR	A0	N	H	I.1	I.2	I.3	I.4	S1	S2
Lobith	NO ₃ -N	55-95	100%	63%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%
Lobith	NH ₄ -N	55-95	53%	82%	54%	82%	82%	81%	85%	84%	86%	83%	78%
Lobith	P _{total}	73-95	93%	97%	91%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	99%	99%
Lobith	PO ₄ -P	73-93	77%	64%	72%	91%	87%	90%	88%	88%	83%	83%	95%
Lobith	Cd	82-95	41%	39%	42%	41%	50%	52%	53%	56%	52%	54%	37%
Lobith	Pb	82-95	81%	89%	82%	84%	86%	85%	85%	86%	77%	88%	75%
Lobith	Schwebstoffe	91-95	91%	32%	50%	100%	75%	81%	76%	48%	30%	73%	100%
Herbrum	NO ₃ -N	82-97	100%	51%	91%	91%	100%	100%	100%	100%	100%	95%	88%
Herbrum	NH ₄ -N	82-97	38%	18%	31%	49%	49%	35%	34%	33%	33%	45%	39%
Herbrum	P _{total}	82-97	83%	29%	76%	79%	84%	83%	87%	87%	88%	88%	80%
Herbrum	PO ₄ -P	84-97	38%	20%	33%	39%	45%	45%	46%	44%	45%	39%	46%
Herbrum	Cd	93-97	13%	34%	49%	19%	27%	25%	22%	21%	17%	21%	21%
Herbrum	Pb	93-97	100%	58%	48%	14%	90%	100%	100%	100%	100%	99%	100%
Herbrum	Schwebstoffe	82-97	69%	36%	40%	65%	66%	64%	66%	64%	65%	69%	58%

Tabelle 9.5: Geschätzte prozentuale Reduktion der Einträge 1986-95 (für PO₄-P bei Lobith: 1986-93)

Station	Parameter	Zeitreihe	Konzentration	QSPAR	A0	N	H	L1	L2	L3	L4	S1	S2	Emission ¹
Lobith	NO ₃ -N	55-95	22%	13%	19%	18%	25%	20%	20%	20%	20%	23%	20%	29,8%
Lobith	NH ₄ -N	55-95	72%	63%	66%	73%	43%	70%	71%	71%	71%	69%	68%	
Lobith	P _{total}	73-95	73%	65%	68%	70%	72%	71%	72%	70%	70%	70%	76%	67,9%
Lobith	PO ₄ -P	73-93	75%	84%	73%	77%	76%	78%	80%	81%	80%	78%	74%	
Lobith	Cd	82-95	85%	81%	83%	85%	87%	84%	83%	84%	83%	83%	93%	
Lobith	Pb	82-95	30%	14%	20%	29%	33%	30%	27%	27%	27%	32%	38%	
Lobith	Schwebstoffe	91-95												
Herbrum	NO ₃ -N	82-97	20%	34%	20%	5%	18%	14%	13%	13%	13%	7%	5%	5,5%
Herbrum	NH ₄ -N	82-97	46%	70%	63%	55%	55%	42%	45%	43%	44%	41%	51%	
Herbrum	P _{total}	82-97	48%	53%	43%	26%	45%	39%	39%	39%	39%	36%	36%	50,1%
Herbrum	PO ₄ -P	84-97	73%	71%	70%	64%	68%	68%	68%	67%	67%	70%	70%	
Herbrum	Cd	93-97												
Herbrum	Pb	93-97												
Herbrum	Schwebstoffe	82-97	-27%	-7%	-30%	-39%	-39%	-31%	-31%	-30%	-29%	-41%	-44%	

¹ Reduktionsraten für Einträge in die Flussgebiete Deutschlands zwischen den Zeiträumen 1983-1987 und 1993-1997 nach Behrendt et al (1999) für N_{Total} und P_{Total}.

9.3 Auswahl einer praktikablen Adjustierungsmethode

Zur Auswahl einer Adjustierungsmethode werden folgende Kriterien herangezogen:

- Einfachheit/Schnelligkeit des Algorithmus: Je einfacher der Algorithmus strukturiert ist und je schneller die Berechnung erfolgt, desto besser wird die Methode bewertet (Schulnoten). Abzüge gibt es, wenn eine Methode sehr schnelle Rechner oder sehr viel Speicherplatz erforderlich macht.
- Datenanforderungen: Bei geringen Anforderungen an die benötigten Daten wird die Methode höher bewertet (Schulnoten). Abzüge gibt es, wenn die Daten als Monatsdaten vorliegen müssen (Methode N) oder wenn zusätzliche Daten benötigt werden wie der Durchfluss des Vortages oder die Wassertemperatur (Methoden L2, L3 und L4)
- Robustheit unter ungünstigen Voraussetzungen (fehlende Daten, Ausreißer, kurze Datenreihen).
- Trendsensitivität bzw. Variabilität der Jahreswerte: Eine hohe Trendsensitivität ist dann gewährleistet, wenn die Variabilität der Jahreswerte möglichst klein ist. Hierzu wird der Mittelwert von S_{Ratio} über alle 14 Zeitreihen, d.h. sowohl über die sieben in der Ems gemessenen Parameter als auch über die sieben im Rhein gemessenen Parameter bestimmt (Tab. 9.2).
- Trendsensitivität bzw. Variabilität der Jahreswerte für die Nährstoffe: Um die Eignung der Adjustierungsmethoden speziell für Nährstofffrachten zu ermitteln, wird der Mittelwert von S_{Ratio} auch für die 8 Nährstoff-Zeitreihen ($\text{NO}_3\text{-N}$, $\text{NH}_4\text{-N}$, P_{total} und $\text{PO}_4\text{-P}$ jeweils für Rhein und Ems) bestimmt.

Bei den in Tab. 9.6 wiedergegebenen Bewertungsergebnissen handelt es sich, was Einfachheit, Datenanforderungen und Robustheit betrifft, um eine subjektive Bewertung der Autoren. Die halbautomatische Methodik BC konnte allerdings nicht berücksichtigt werden, da eine direkte Vergleichbarkeit aufgrund unterschiedlicher Jahresabgrenzungen und unterschiedlicher Länge der jeweils berücksichtigten Zeitreihen nicht gewährleistet ist. Hinzu kommt der Umstand, dass die Methode BC keine vollautomatische Berechnung zulässt, sondern manuelle Eingriffe des Auswertenden erforderlich macht.

Vergleicht man die Methoden anhand der Variabilität, so fällt zunächst die sehr hohe Variabilität der Jahresfrachten bei Methode N auf, die im Mittel die Variabilität der OSPAR-Frachten übertrifft. Dies erklärt sich daraus, dass Methode N sich nicht für sehr kurze Reihen mit einer Länge von nur fünf Jahren eignet und dann sehr instabil werden kann. Hingegen ermöglicht die Verwendung der Konzentrationsmittelwerte oder von Methode A0 deutlich bessere Resultate, doch bestätigen Ausnahmen die Regel, wie z.B. die Ergebnisse für $\text{NH}_4\text{-N}$ und P_{total} bei Lobith. Festzuhalten ist in diesem Zusammenhang, dass Methode A0 gegenüber den anderen Adjustierungsmethoden offenbar generell zu abweichenden Werten führt. Dies ist auch plausibel angesichts des Umstands, dass die Methode A0

- keine über die einzelnen Frachtwerte wirkende Adjustierungsmethode ist, sondern eine Normierung der Jahresfracht bewirkt, und
- der Normierung die implizite Annahme zugrunde liegt, dass Proportionalität zwischen Durchfluss und Fracht besteht, wohingegen bei allen anderen Methoden die Beziehung zwischen Fracht und Durchfluss empirisch aus den Daten selbst ermittelt wird.

Bezüglich der Variabilität erweisen sich die Methoden L1-L4 sowie die Methode H durchweg als günstig in dem Sinne, dass der Unterschied zur jeweils im Sinne der Variabilität besten Methode nicht sehr groß ist. Die Methode H ist allerdings rechentechnisch erheblich aufwendiger als L1-L4, wobei gefolgert werden kann, dass sich der höhere Rechenaufwand nicht auszahlt. Die Methoden L2-L4 haben den Nachteil, dass zusätzlich zu den Durchflusswerten des Messtages auch die Durchflusswerte des Vortages sowie bei den Methoden L3 und L4 auch die Wassertemperaturen erforderlich sind. Während sich die Einbeziehung der Wassertemperatur offenbar nicht auszahlt, führt die Berücksichtigung der Vortagesdurchflüsse bei Methode L2 zu einer weiteren leichten Verbesserung der Trendsensitivität. Nachteilig bei Methode L2 ist allerdings die im Vergleich zu Methode L1 etwas geringere Robustheit.

Tab. 9.6: Bewertung der Adjustierungsverfahren

Methode	Einfachheit	Datenanforderungen	Robustheit	Variabilität gesamt	Variabilität Nährstoffe
	<i>1=sehr gut, 2=gut, 3=befriedigend, 4=ausreichend, 5=mangelhaft</i>			<i>Variabilität der OSPAR- Fracht = 100%</i>	
Konzentrationsmittelwert	1	1	1	82%	71%
A0 (normiert auf langjähriges Durchflussmittel)	1	1	1	88%	78%
N (Stalnacke)	3	3	4	113%	59%
H (Hebbel)	4	1	3	68%	57%
L1 (mit Saison)	2	1	2	66%	58%
L2 (mit Durchfluss des Vortags und Saison)	2	2	3	64%	56%
L3 (mit Temperatur und Durchfluss des Vortags)	2	3	3	66%	58%
L4 (mit Temperatur, Vortagesdurchfluss und Saison)	2	3	4	67%	58%
S1 (Spline)	4	1	4	71%	62%
S2 (Spline lokal)	4	1	4	72%	64%

Es ist allerdings zu beachten, dass die genannten Schlussfolgerungen primär für Nährstoffe gelten. So kann aufgrund der sehr kurzen Zeitreihen für Pb und Cd keine abschließende Bewertung für die Schwermetallparameter vorgenommen werden, zumal nicht ausgeschlossen werden kann, dass die Schwermetalldaten durch Wechsel der Analysenmethode sowie spezifische analytische Probleme möglicherweise verfälscht sein können.

10 Empfehlungen

Zur Berechnung von anthropogenen Trends in Nährstofffrachten wird empfohlen, adjustierte Frachten versuchsweise auf breiter Basis anzuwenden. Dabei ist Methode L1 der Vorzug zu geben, wenn Einfachheit und Robustheit der Methodik primäre Auswahlkriterien sind. Für eingehendere Untersuchungen einzelner Flüsse zu Reduktionsmaßnahmen empfiehlt sich eine Adjustierung auf Basis eines spezifisch angepassten statistischen Modells. Insbesondere bei „schwierigen“ Parametern mit sehr variablen Abflüssen und extremen Durchflussereignissen, einer stark nicht-linearen LQ-Funktion, starken Auswaschungseffekten oder zeitlich abrupten Veränderungen der LQ-Funktion hat eine individuell angepasste Auswertung Vorteile gegenüber einem automatischen Verfahren.

Eine abschließende Empfehlung hinsichtlich einer Adjustierung von Schwermetallfrachten kann aufgrund der kurzen Reihen und wegen möglicher chemisch-analytischer Probleme noch nicht vorgenommen werden. Es wird jedoch vorgeschlagen, unter Einbeziehung neuerer Messreihen und weiterer Flussgebiete eine eingehende Untersuchung hinsichtlich der Möglichkeiten einer Adjustierung der Schwermetallfrachten vorzunehmen. Es wäre auch zu prüfen, ob möglicherweise eine zusätzliche Adjustierung bezüglich der Schwebstoffkonzentration zweckmäßig ist.

Generell sollte eine Trendanalyse nur dann erfolgen, wenn die Daten von mindestens sieben Jahren zur Verfügung stehen. Dies gilt nicht nur bei Verwendung adjustierter Frachten, sondern auch bei Verwendung von nichtadjustierten Frachten bzw. bei Verwendung von Konzentrationsmittelwerten, da nicht ausgeschlossen werden kann, dass scheinbare Trends durch meteorologische Zyklen verursacht werden.

Die Verwendung von Konzentrationsmittelwerten anstelle von nichtadjustierten Frachten (z.B. OSPAR-Fracht) ermöglicht gegenüber den nichtadjustierten Frachten im Mittel eine gewisse Verbesserung der Trendsensitivität, doch führt die Verwendung der Konzentrationen teilweise auch zu einer Verschlechterung der Power, so dass die Verwendung der Konzentrationsmittelwerte für die Trendanalyse nicht empfohlen werden kann.

Die Berechnung der aktuellen Jahresfracht sollte nicht auf Basis adjustierter Frachten erfolgen, sondern kann auch weiterhin anhand der OSPAR-Formel vorgenommen werden. Dabei ist allerdings zu beachten, dass speziell bei Flüssen mit stark ausgeprägter Saisonalität erhebliche Schätzfehler auftreten können. Es wird daher empfohlen, die Methodik zu überprüfen und unter Einbeziehung der CQ-Funktion (gemäss Methode L1 oder L2) und der täglichen Durchflussreihe so zu überarbeiten, dass die „tatsächliche“ Jahresfracht, d.h. die Menge eines Stoffes, die über die Flüsse in das Meer eingetragen werden, genauer bestimmt werden kann.

Bei stark ausgeprägter Saisonalität des Durchflusses ist ein modifiziertes Beprobungskonzept mit erhöhter Probenahmefrequenz in der Hochwasserperiode und gegebenenfalls reduzierter Beprobung während der Niedrigwasserperiode zu empfehlen, um die teilweise beträchtlichen Schätzfehler bei der Frachtbestimmung zu reduzieren und die Trendsensitivität zu erhöhen.

11 Zusammenfassung

Um zu verhindern, dass durch Schwankungen der Durchflussmenge die Nachweisbarkeit zeitlicher Trends in Flussfrachten wesentlich verschlechtert wird, erscheint eine Adjustierung, in der die Eintragsdaten auf ein „durchschnittliches“ Durchflussniveau umgerechnet werden, unumgänglich.

Gegenstand des Vorhabens war daher die Entwicklung einer Konzeption zur Adjustierung und Trendanalyse von Flussfrachten einschließlich der Überprüfung einer Reihe statistischer Methoden, wobei die Form der Frachtadjustierung im Mittelpunkt der Arbeiten stand. Gemäss dieser Konzeption erfolgt die Adjustierung auf der Basis der Rohdaten unter Verwendung einer dynamisch angepassten Konzentrations-Durchfluss-Funktion. Die adjustierten Frachten werden dann zu Jahresfrachten zusammengefasst, bevor die Trendanalyse auf der Basis dieser adjustierten Jahresfrachten erfolgt. Abschließend wird im Rahmen einer Power-Analyse die Trendsensitivität des Verfahrens überprüft.

Neun Adjustierungsmethoden wurden an sieben Parametern getestet ($\text{NO}_3\text{-N}$, $\text{NH}_4\text{-N}$, P_{total} , $\text{PO}_4\text{-P}$, Cd, Pb, und Schwebstoffgehalt), die vierzehntägig im Rhein bei Lobith und monatlich in der Ems bei Herbrum bestimmt wurden. Für den Rhein ermöglicht die Verwendung adjustierter Frachten anstelle nicht-adjustierter Werte eine erhebliche Verbesserung der Trendsensitivität für $\text{NO}_3\text{-N}$, P_{total} und den Schwebstoffgehalt, während bei den anderen Substanzen nur kleine Unterschiede festgestellt werden konnten. Hingegen führt die Verwendung von jährlichen Konzentrationsmittelwerten zu einer Verringerung der Trendsensitivität. Für die Ems ermöglichen adjustierte Frachten ebenso wie jährliche Konzentrationsmittelwerte gegenüber nicht-adjustierter Frachten durchweg eine höhere Trendsensitivität.

Generell bestätigen die durchgeführten Auswertungen die Praktikabilität der hier entwickelten Adjustierungskonzeption, wobei jedoch keine Methode für alle Flüsse und Substanzen als optimal erscheint. Zur Adjustierung von Nährstoffen erscheint eine auf einem lokalen Regressionsmodell mit reziproker Durchflussrate basierende Methode zweckmässig und ermöglicht im Vergleich zur OSPAR-Fracht eine wesentliche Verbesserung der Trendsensitivität. Bei den untersuchten Schwermetallen werden geringere Vorteile ermittelt, wobei jedoch zu vermuten ist, dass dies zu-

mindest zum Teil durch chemisch-analytische Probleme verursacht wird. Gegebenenfalls ist zur Adjustierung von Schwermetallfrachten der Einsatz komplexerer Regressionsmodelle erforderlich.

Zur Durchführung der umfangreichen Berechnungen wurde im Vorhaben die Datenbank-basierte Software *RTrend* entwickelt, mit der verschiedenste Adjustierungsmethoden realisiert und erprobt wurden.

Literaturverzeichnis

Behrendt, H. (1993) Separation of point and diffuse loads of pollutants using monitoring data of rivers. *Water, Science and Technology* 28: 165-175, 1993.

Behrendt, H., Huber, P., Opitz, D., Schmoll, O., Scholz, G., Uebe, R. et al (1999) Nährstoffbilanzierung der Flussgebiete Deutschlands. Umweltbundesamt, Berlin.

Brunswig, D. (1994) Belastung der Ostsee durch Schadstoffe, Band 6: Quantifizierung von Stofftransporten in Fließgewässern – Ansatz, Berechnung, Normierung und Trendanalyse mit dem Simulationsmodell TRANSPOS. Forschungsbericht des F+E-Vorhabens FKZ 102 04 355.

Cleveland, W.S. (1979) Robust locally-weighted regression and smoothing scatterplots. *Journal of the American Statistical Association* 74 829-836.

Fryer R.J. und Nicholson M.D. (1999) Using smoothers for comprehensive assessments of contaminant time series in marine biota. *ICES J. Mar. Sci.*, 56, 779-790.

Fryer R.J. und Nicholson M.D. (1999) Assessing Power of Trend Tests for Monotonic Trends. In ICES-WGSAEM Report 1999, Annex 4.

Hastie T.J und Tibshirani R.J. (1990) Generalized Additive Models. Chapman and Hall, London.

Hebbel, H. (1992) Trend und Saison im linearen Modell. In S. Schach und G. Trenkler: *Data Analysis and Statistical Inference*. Eul, 513-520

Hebbel, H. (1997) Verallgemeinertes Berliner Verfahren VBV. In K. Edel, K.-A. Schäffer und W. Stier: *Analyse saisonaler Zeitreihen*. Physica-Verlag, 83-93

ICES (1999) Report of the ICES ADVISORY COMMITTEE ON THE MARINE ENVIRONMENT 1999. Copenhagen.

Keller, M., Hilden, M. und Joost, M. (1997) Vergleich von Schätzmethoden für jährliche Stofffrachten am Beispiel des IKS-R-Meßprogrammes 1995. BfG-Bericht

Kendall, M.G. (1975) Rank Correlation Methods, 4th ed. Charles Griffin, London.

Maxwell, D. (1999) The Compound Mann-Kendall Test. In ICES-WGSAEM Report 1999, Annex 6.

Nicholson, M.D., Fryer R.J. und Maxwell D.L. (1997) Report of the ICES/OSPAR Workshop on the identification of statistical methods for temporal trends. Annex 9. A study of the power of various methods for detecting trends. ICESCM 1997/Env:11.

Nicholson, M.D., Fryer, R.J. und Maxwell, D. (1997) A study of the power of various methods for detecting trends. Report of the ICES/OSPAR, Workshop on the Identification of Statistical Methods for Trend Detection. ICES CM 1997/Env:11.

Nicholson, M.D., Fryer, R.J. und Maxwell, D. (1998) The influence of individual outlying observations on four methods of detecting trends. Report of the ICES Working Group on Statistical Aspects of Environmental Monitoring Report of the ICES/OSPAR. ICES CM 1998/E:8.

OSPAR Guidelines for Harmonised Quantification and Reporting Procedures for Nutrients - HARP-NUT – Guideline Number 7: Quantification of the Total Riverine Load of Nutrients, 2000

RIKZ (1999) Trend-y-tector.

Im Internet: <http://waterland.net/rikz/osparwg/trend-y-tector/index.htm>

Stalnacke, P. (1996) Nutrient Loads to the Baltic Sea. Linköping Universität, Schweden..

Uhlig, S (1999) Assessing Accuracy of Estimators for the Percentage of Reduction of the Contaminant Level. In ICES-WGSAEM Report 1999, Annex 5.

Danksagung

An dieser Stelle sei Frau Dr. Herata sowie Herrn Mehlhorn (UBA) für ihr großes Engagement für das Forschungsprojekt gedankt. Danken möchten wir auch den weiteren Mitgliedern des begleitenden Arbeitskreises für wertvolle Diskussionen und Anregungen, wobei insbesondere Herr Steffen (NLÖ), Herr Henneberg (ARGE Weser), Herr Brunswig (Gewässerschutz Kiel) sowie Herr Hilden (BfG) zu nennen sind. Wir danken dem IGB sowie der BfG für die Bereitstellung umfangreicher Messdaten des Rheins, der ARGE Elbe für Messdaten der Elbe, dem LANU für Messdaten der Trave und dem NLÖ für Messdaten der Ems.

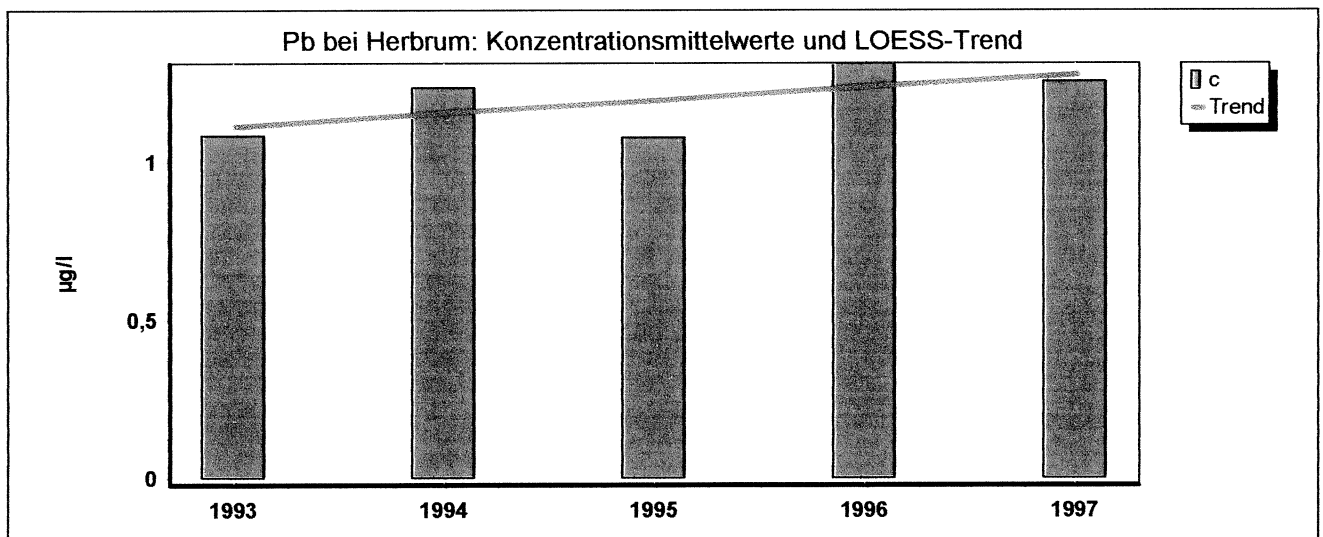
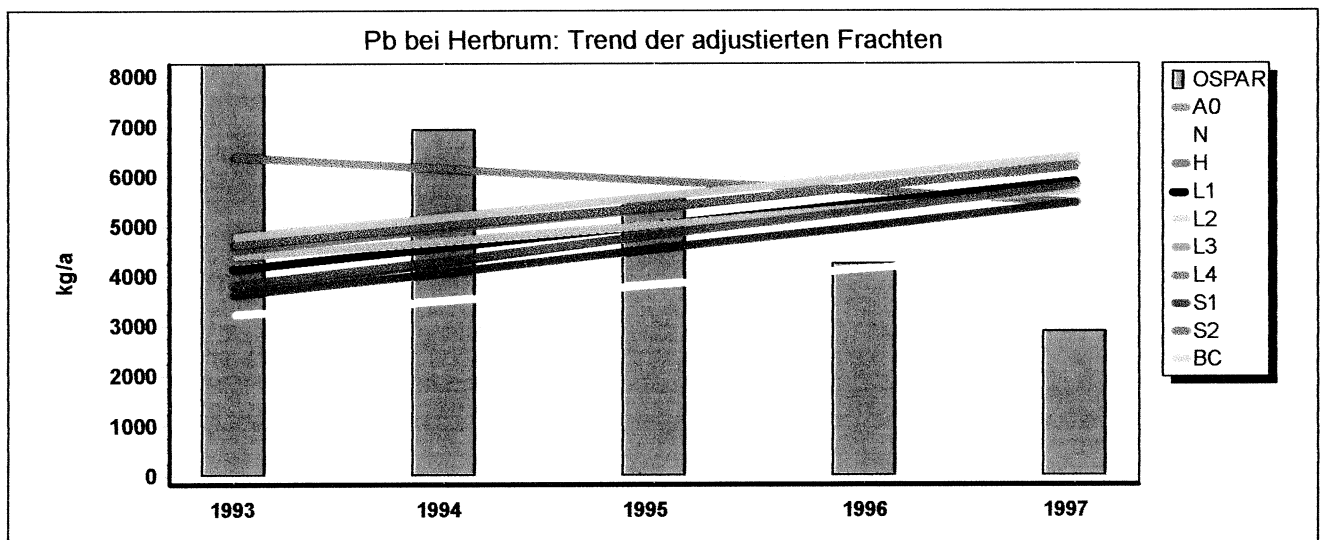
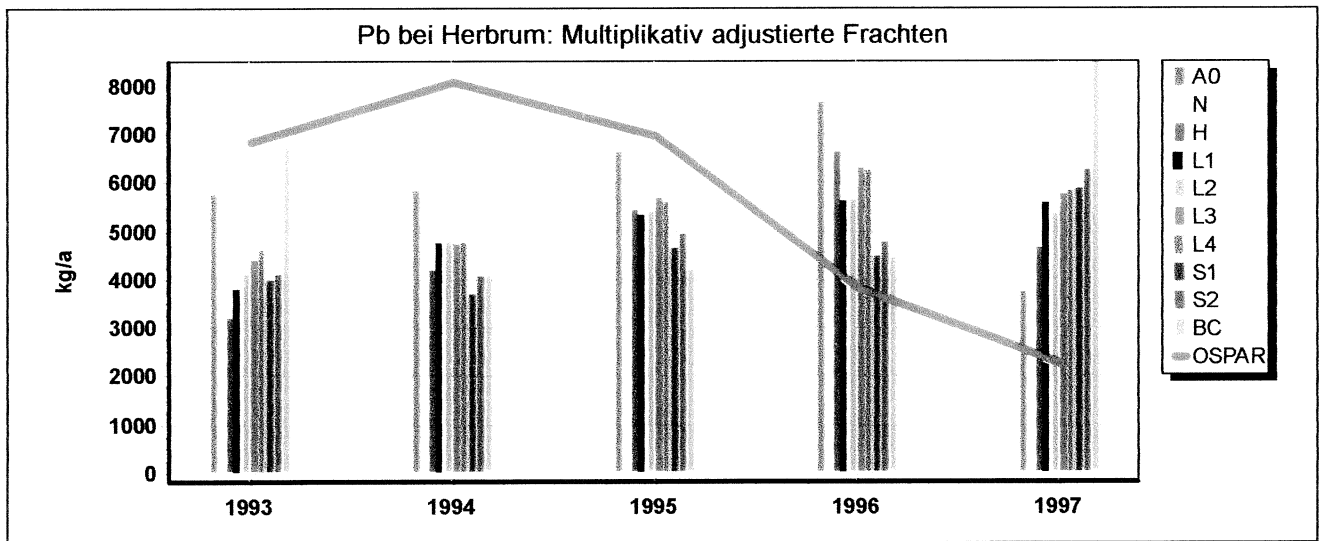
Zahlreiche Diskussionen mit weiteren ausgewiesenen Experten trugen zu den Ergebnissen des Projektes bei. So waren Diskussion mit Dr. Stalnacke (Norwegen) sehr hilfreich bei der Erarbeitung des Adjustierungskonzepts. Prof Dr. Hebbel (Universität Hamburg) unterstützte mit seinen Kommentaren die Implementierung des sogenannten Hebbelverfahrens. Um einen Vergleich der verschiedenen Methoden zu ermöglichen, führte Herr Brunswig parallel eine Auswertung nach dem von ihm entwickelten Frachtberechnungsverfahren TRANSPOS durch.

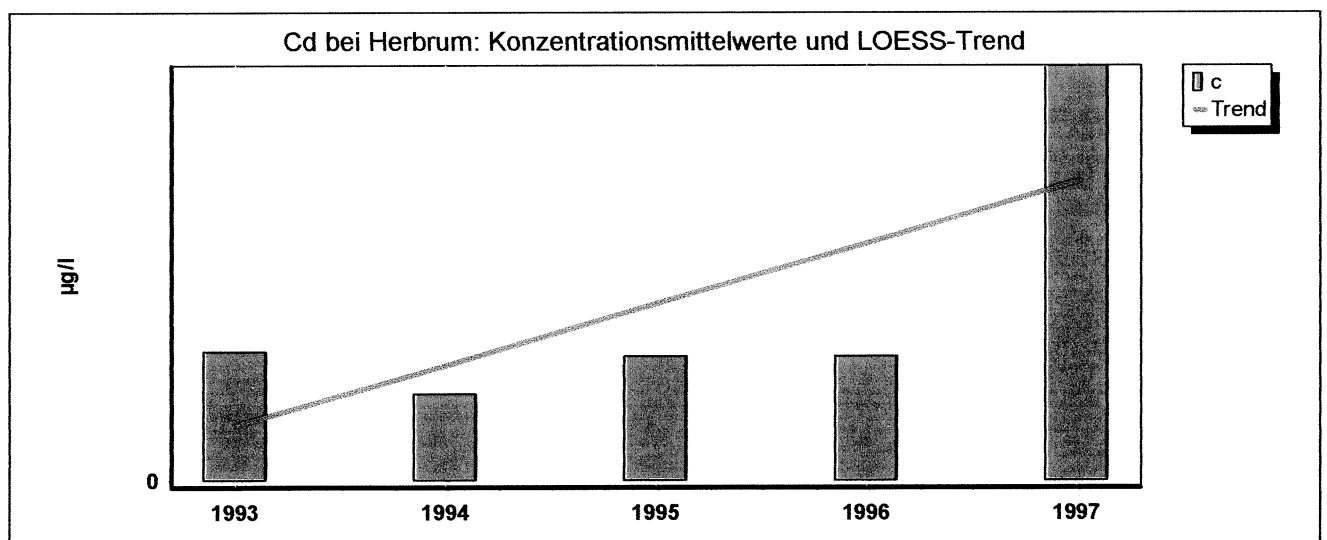
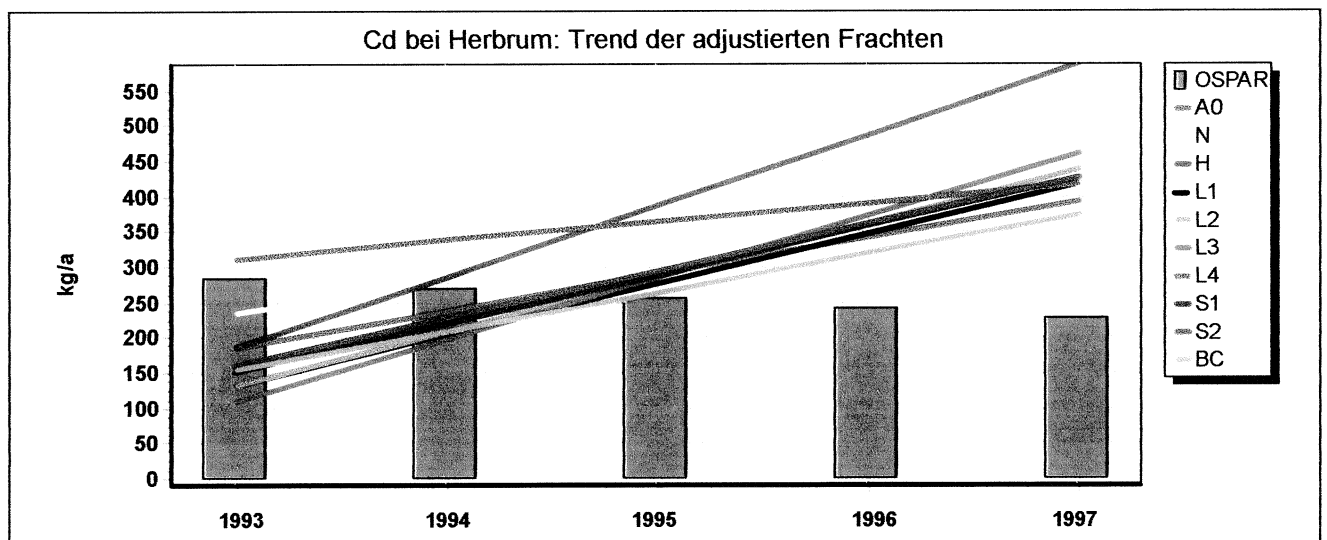
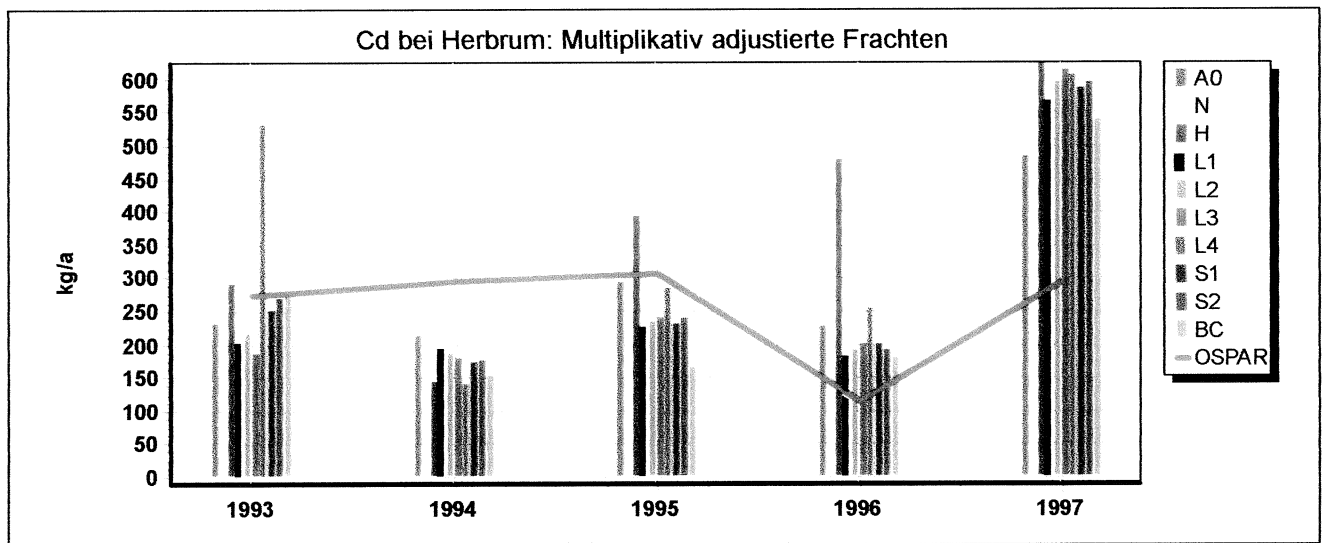
Nicht zuletzt intensive Diskussionen der Adjustierungskonzepte in der ICES-Arbeitsgruppe WGSaEM (Working Group on the Statistical Aspects of Environmental Monitoring) trugen dazu bei, ein tragfähiges und flexibles Adjustierungskonzept zu erarbeiten, wobei der besondere Dank Dr. Bjerkeng (NIVA, Oslo) sowie Dr. Fryer (FRS Marine Laboratory, Aberdeen) gilt.

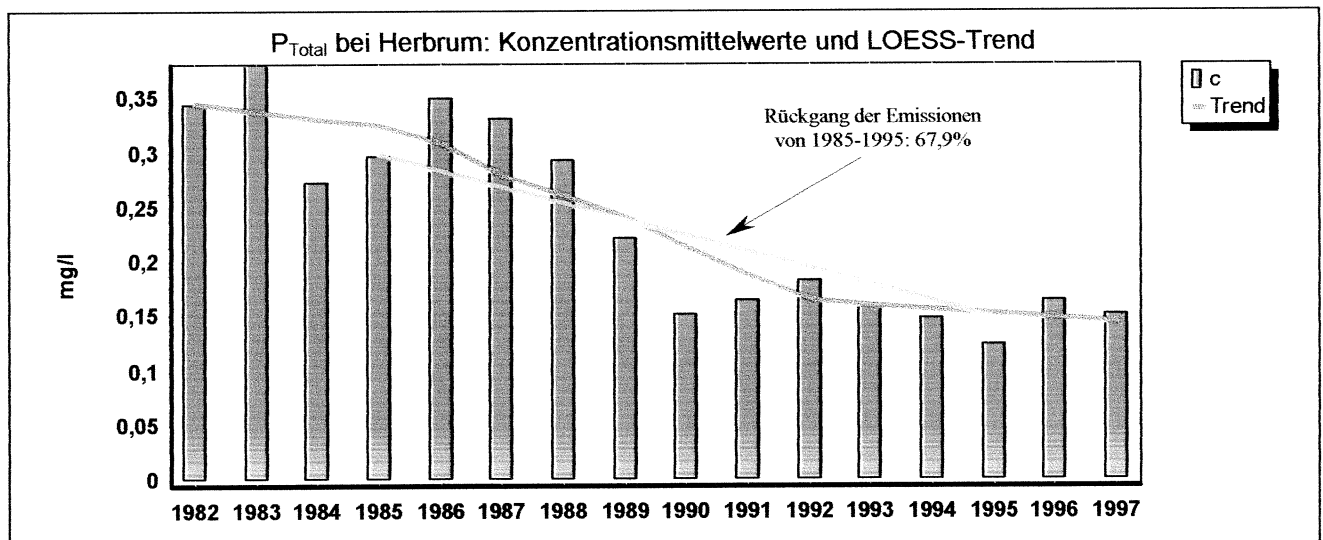
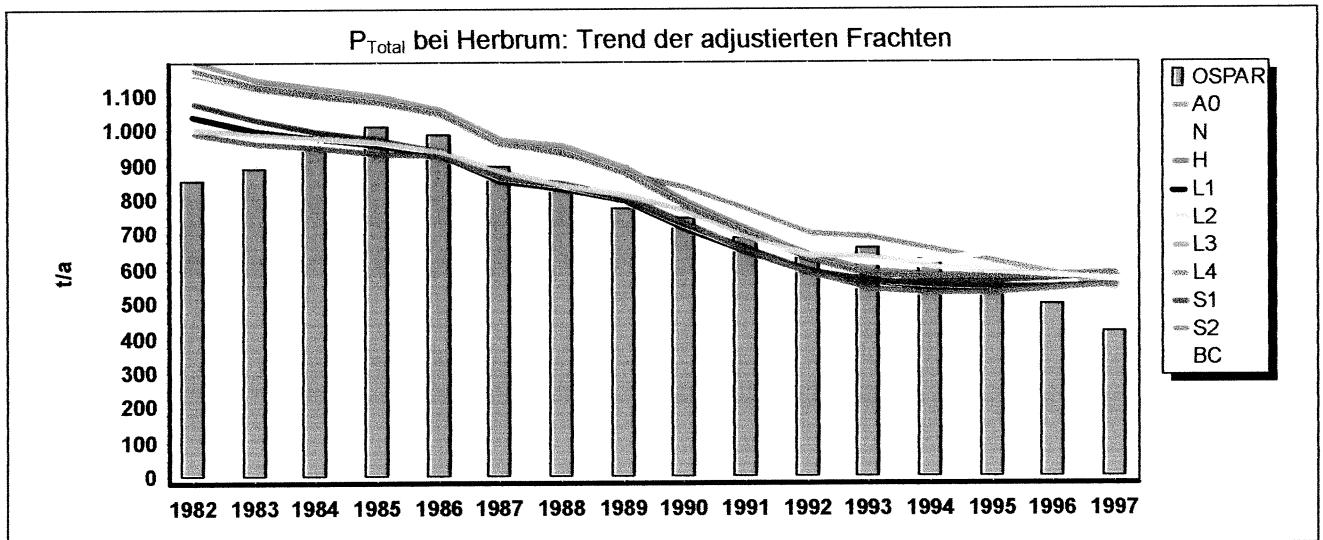
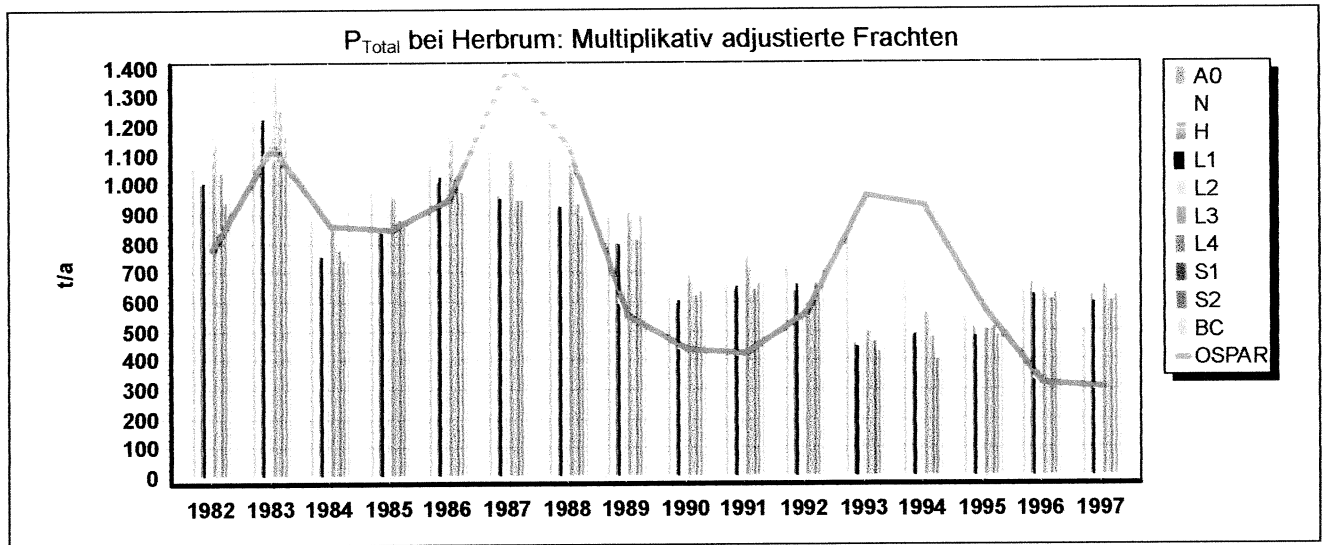
Anhang A

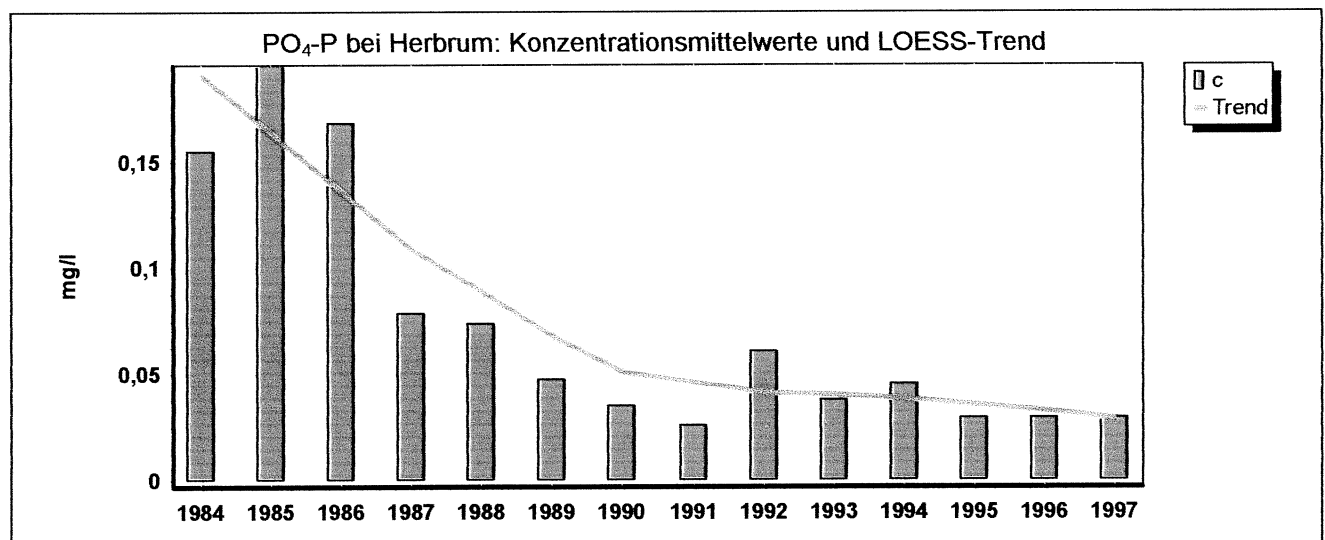
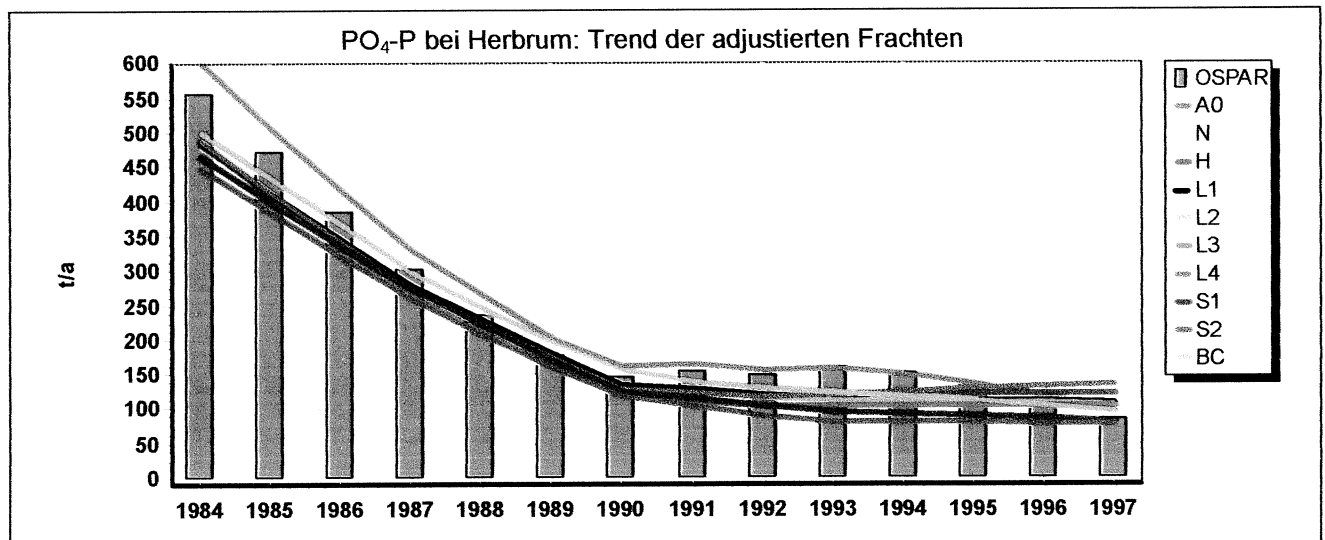
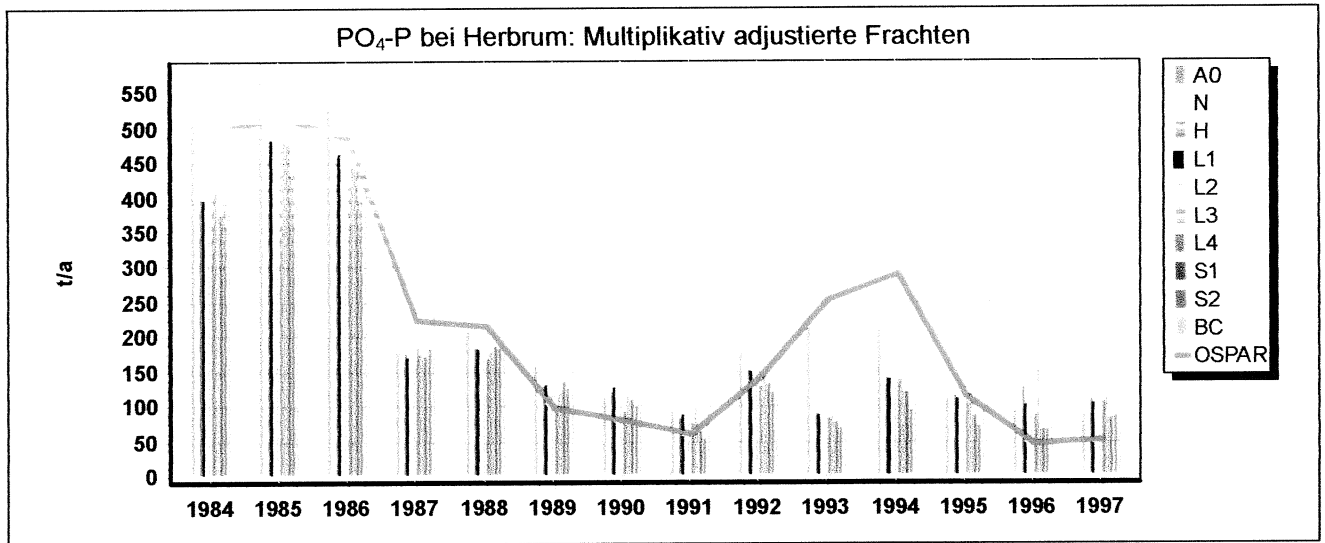
Frachten und Konzentrationsmittelwerte für die Parameter Pb, Cd, P_{total}, PO₄-P, NH₄-N, NO₃-N und Schwebstoffgehalt für die Flüsse Ems (Herbrum) und Rhein (Lobith).

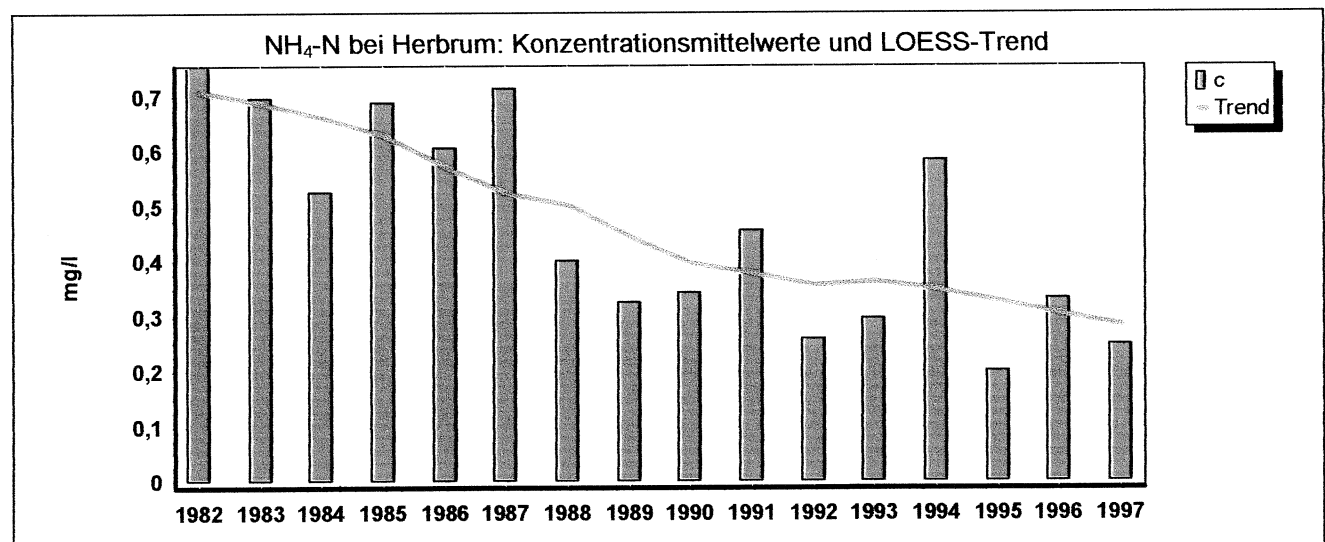
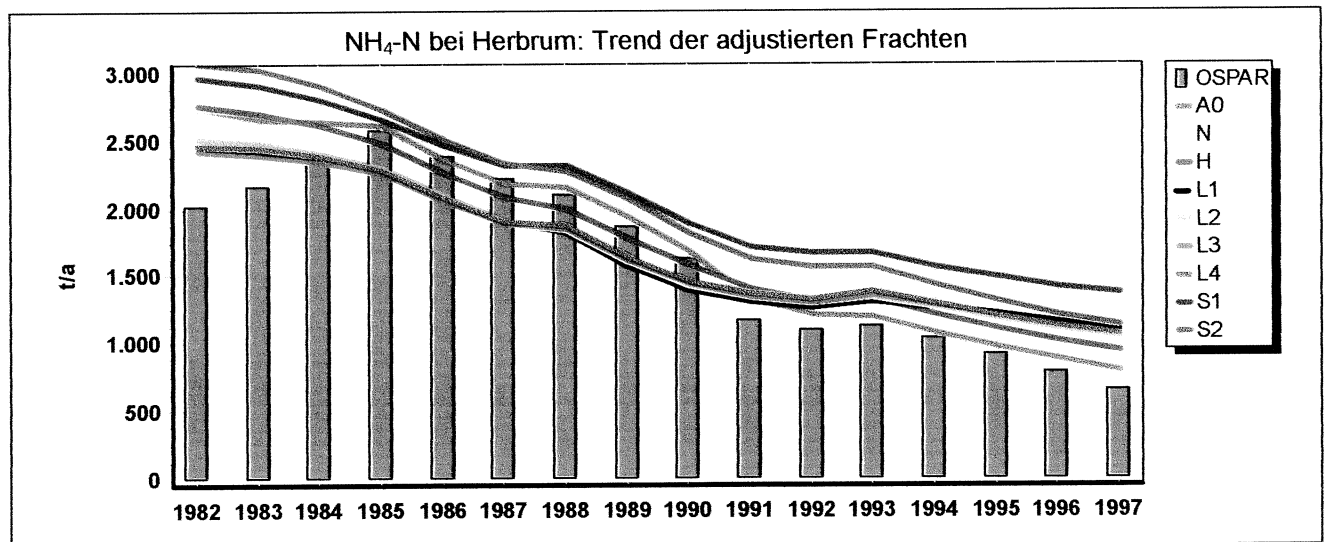
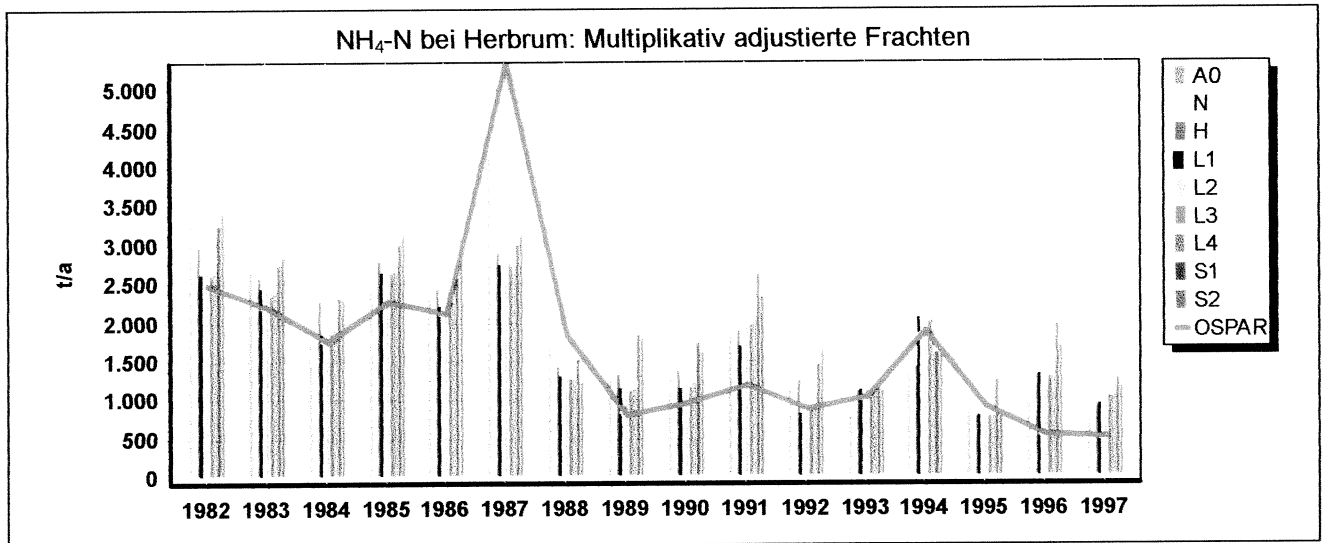
Pb bei Herbrum	A2
Cd bei Herbrum	A3
P _{total} bei Herbrum	A4
PO ₄ -P bei Herbrum	A5
NH ₄ -N bei Herbrum	A6
NO ₃ -N bei Herbrum	A7
Schwebstoffgehalt bei Herbrum	A8
Pb bei Lobith	A9
Cd bei Lobith	A10
P _{total} bei Lobith	A11
PO ₄ -P bei Lobith	A12
NH ₄ -N bei Lobith	A13
NO ₃ -N bei Lobith	A14
Schwebstoffgehalt bei Lobith	A15

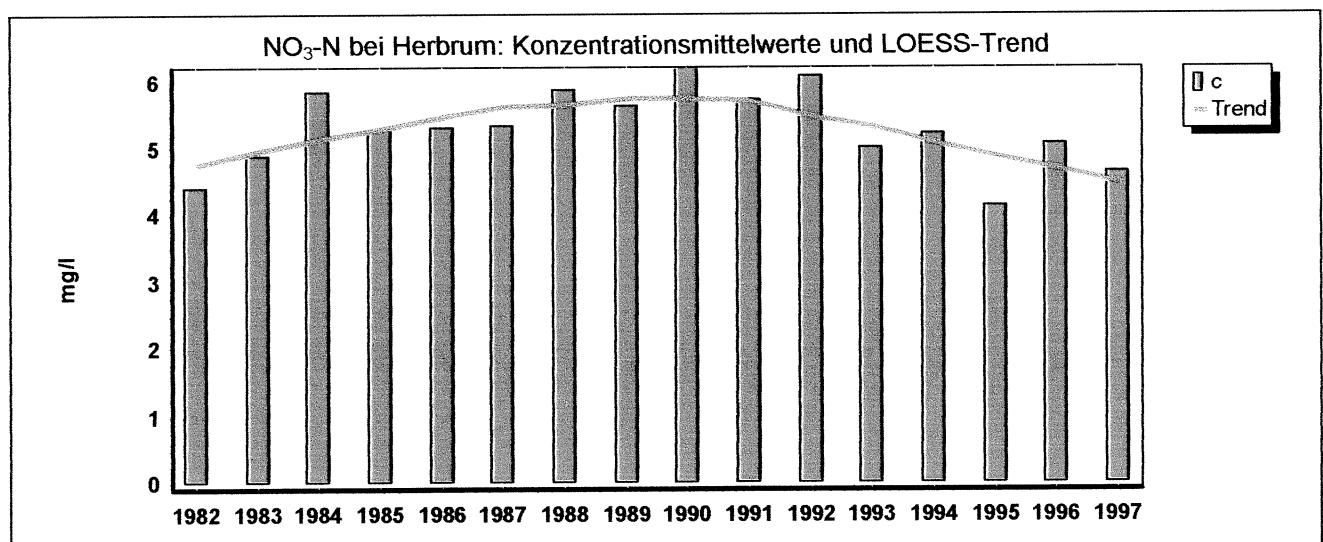
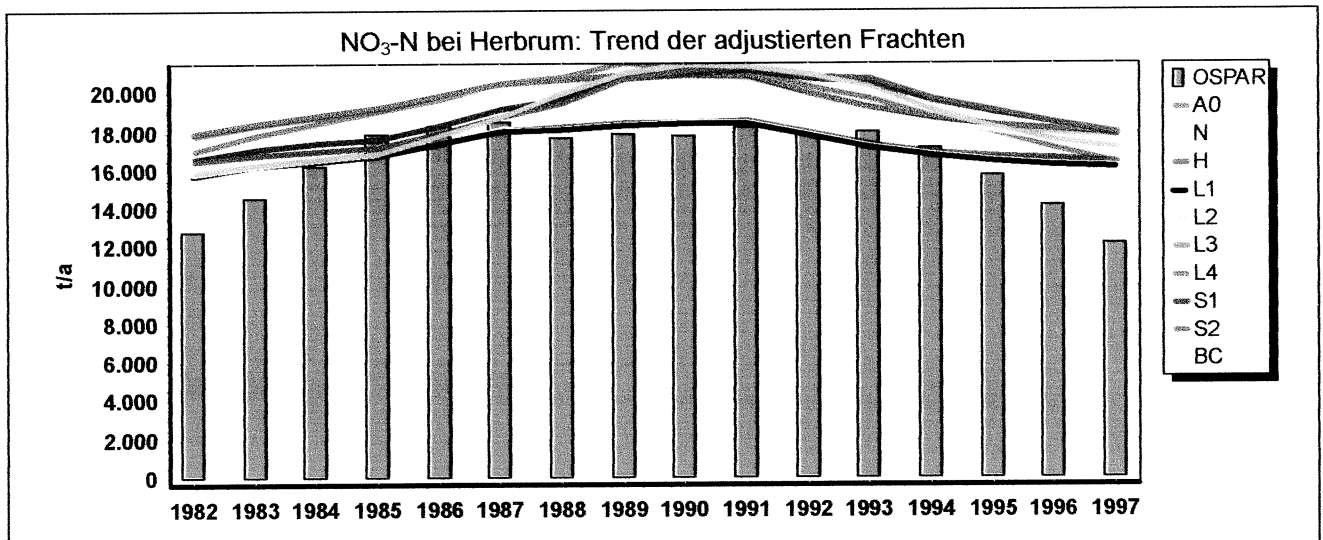
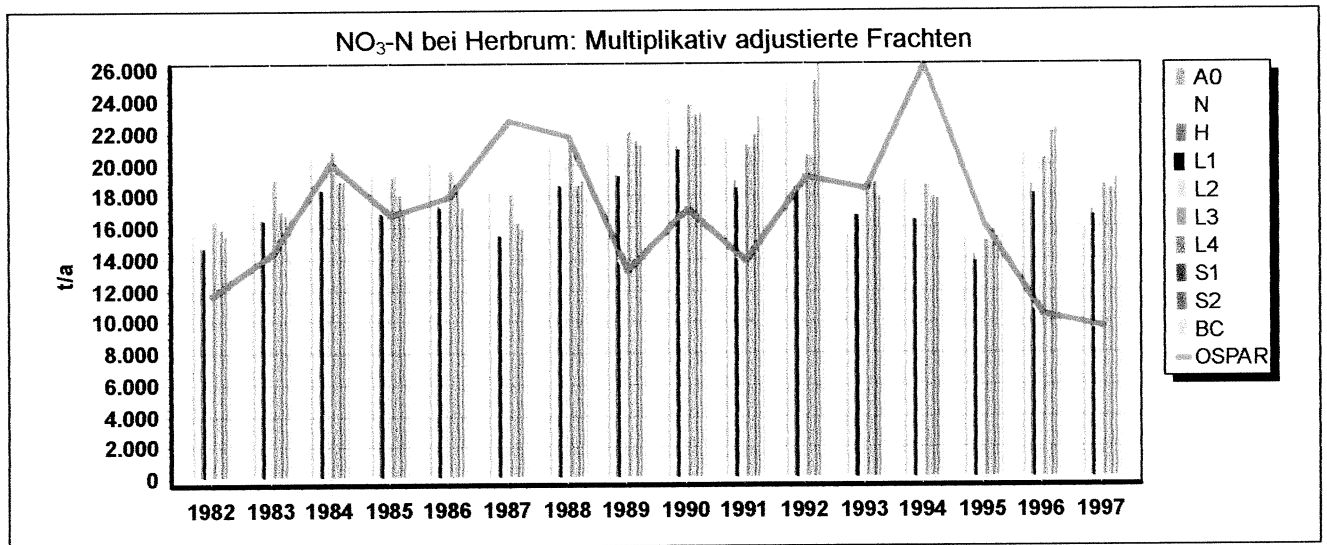


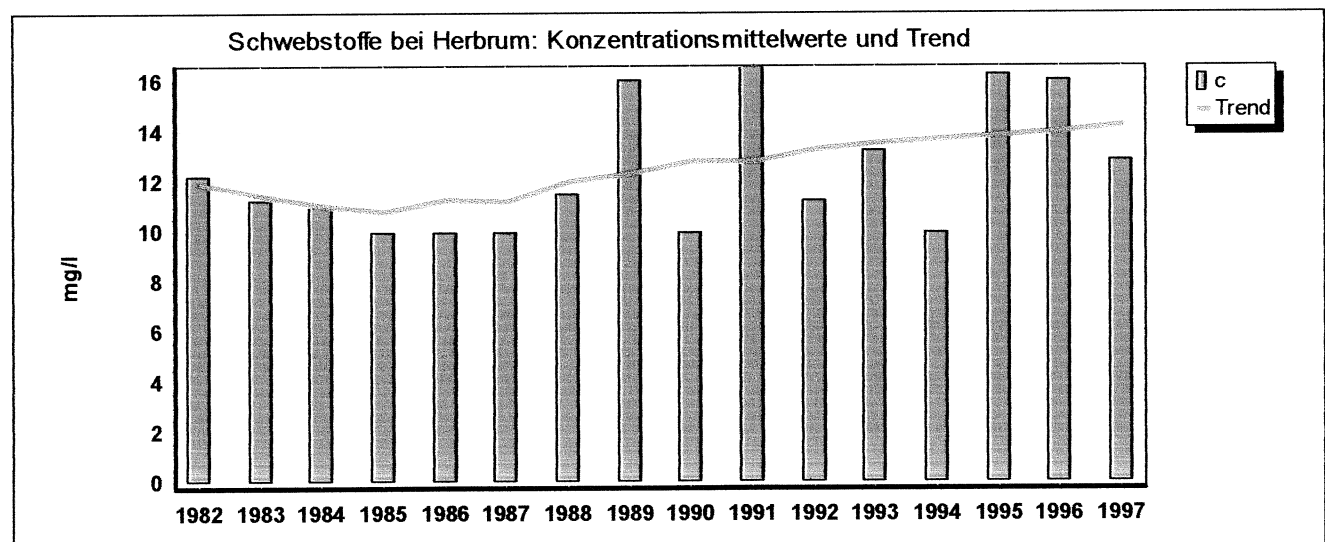
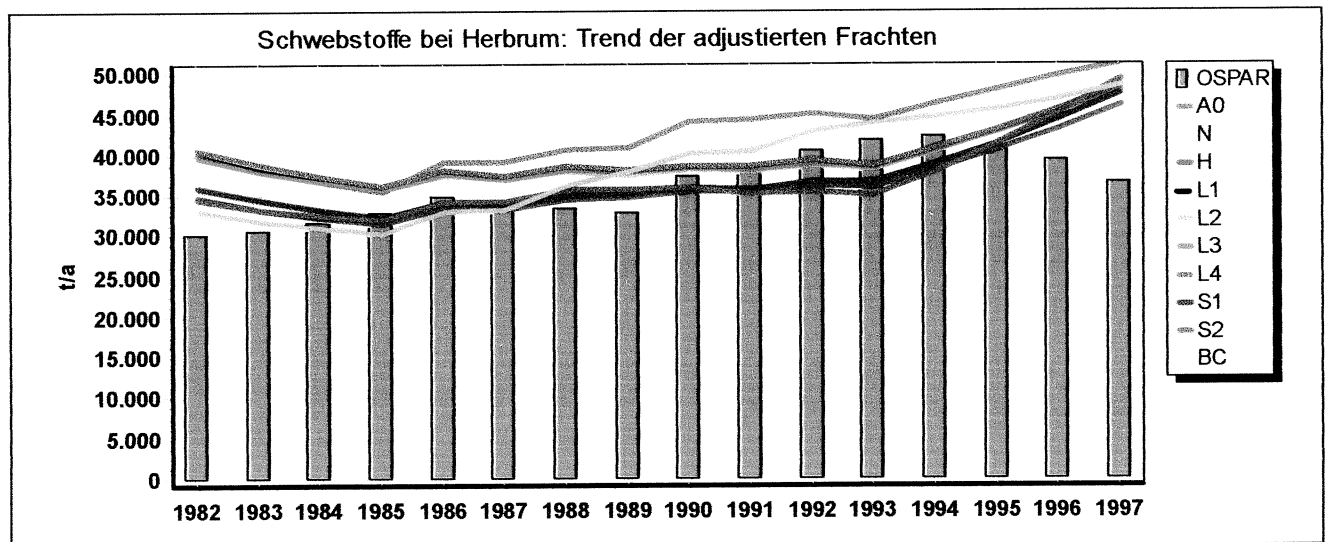
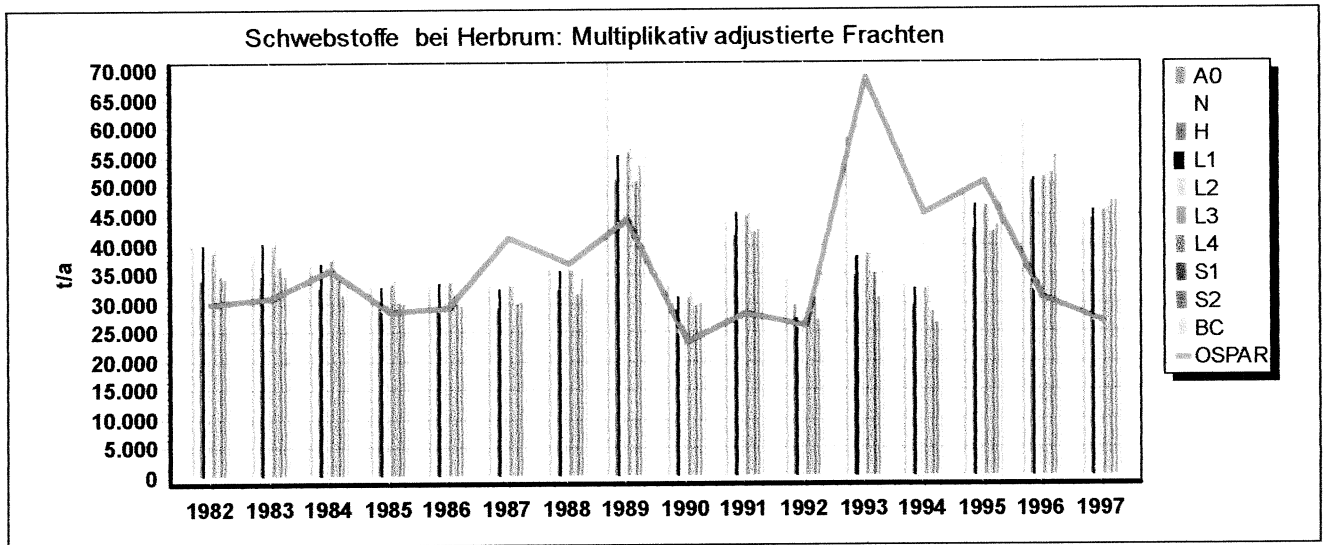


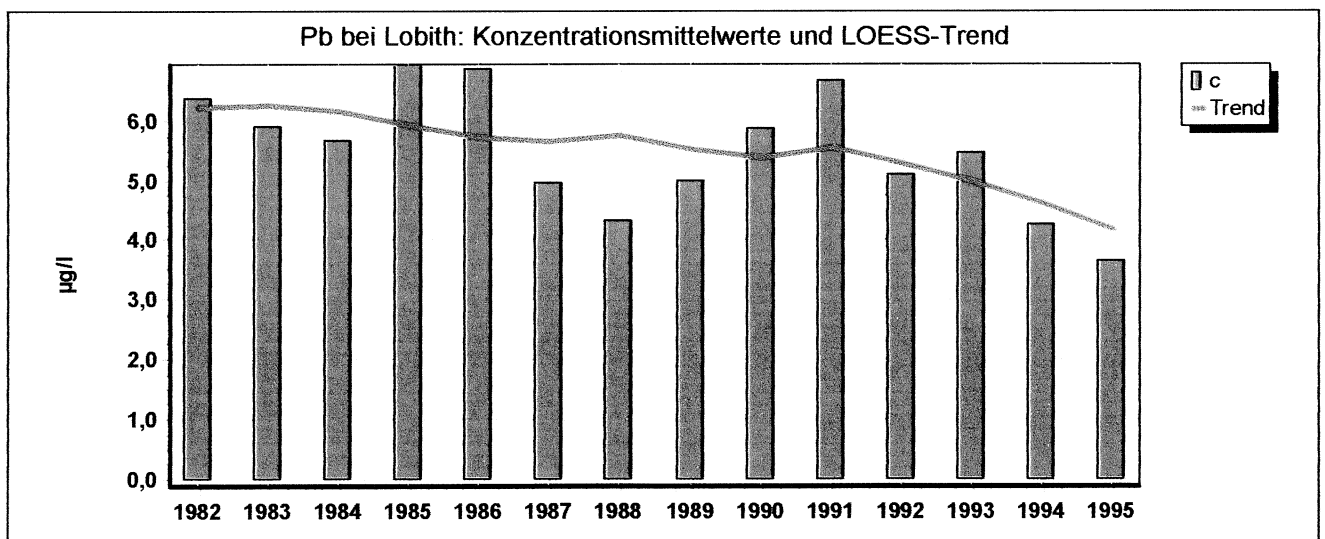
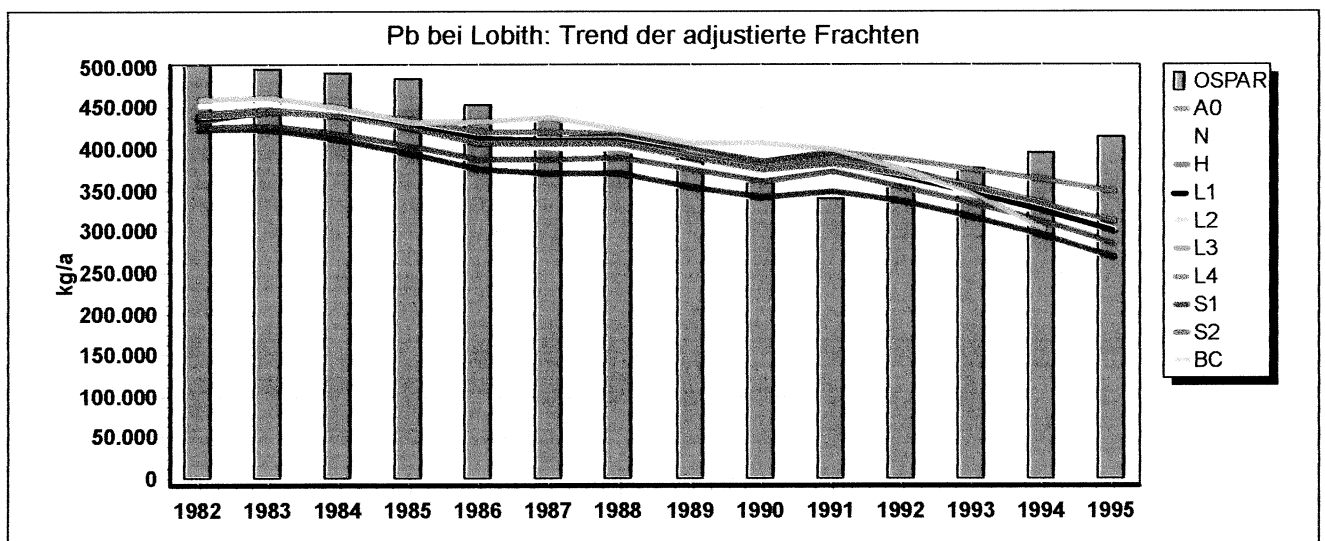
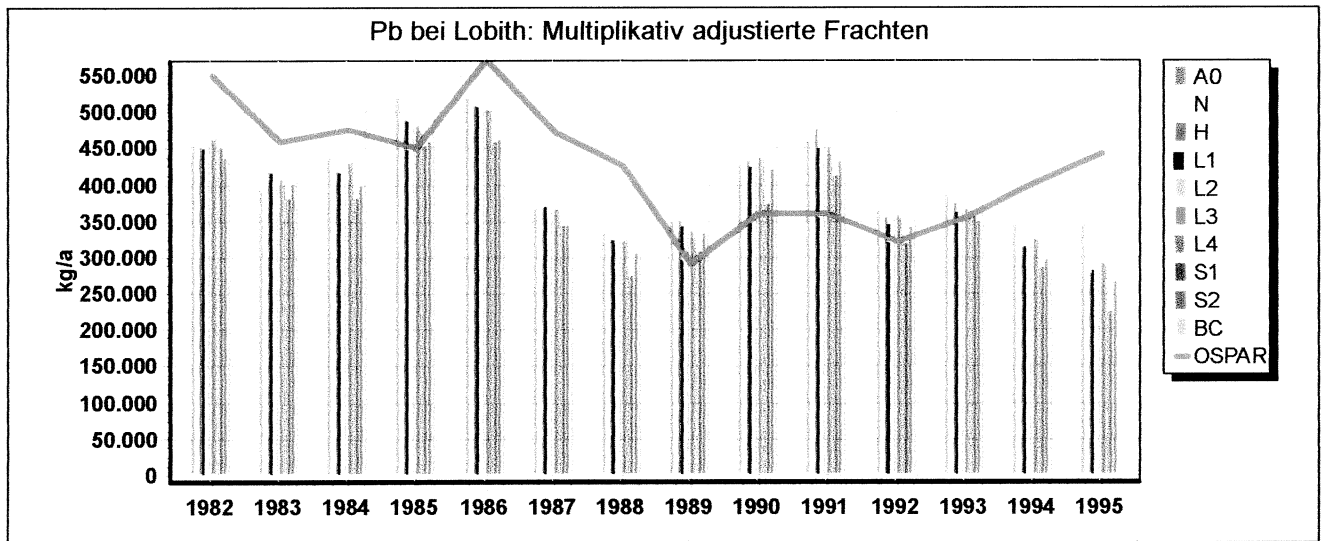


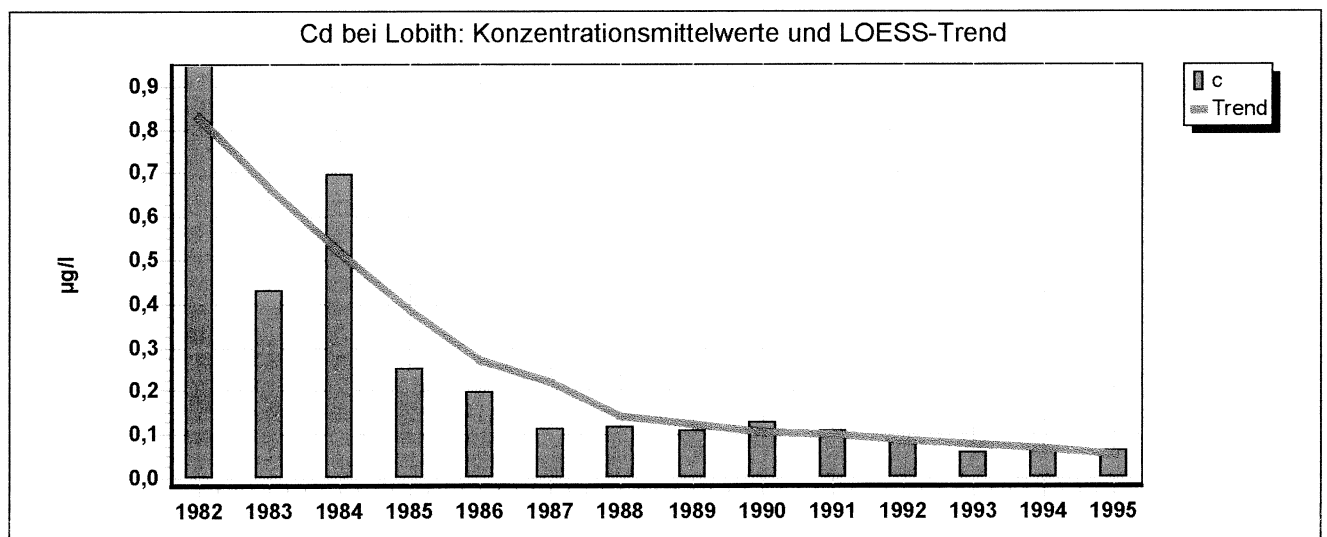
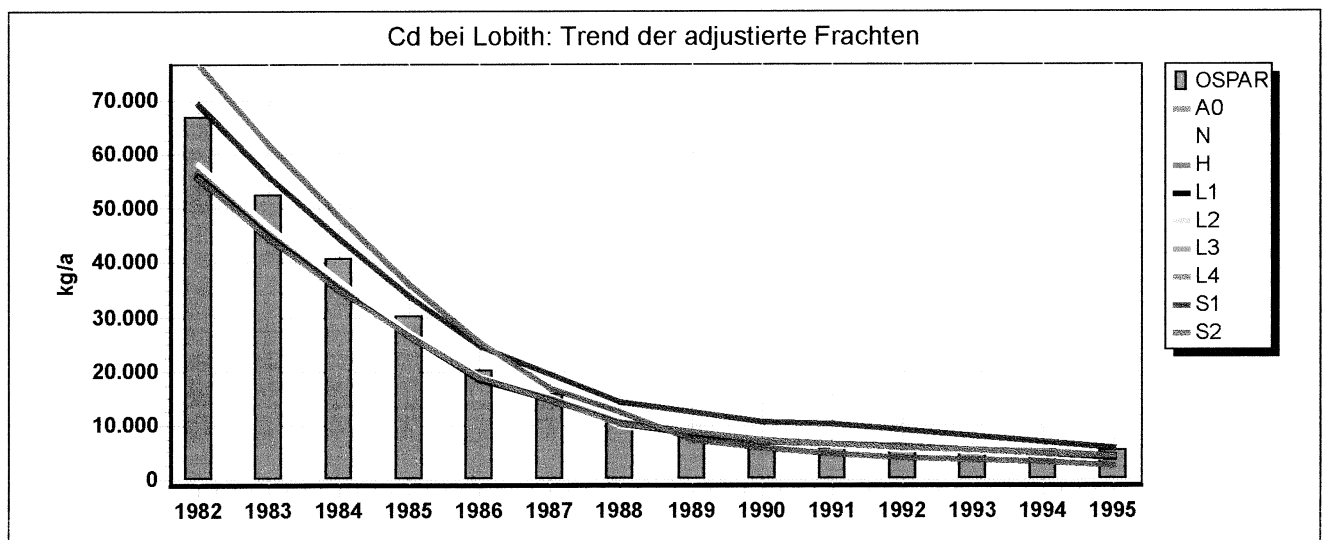
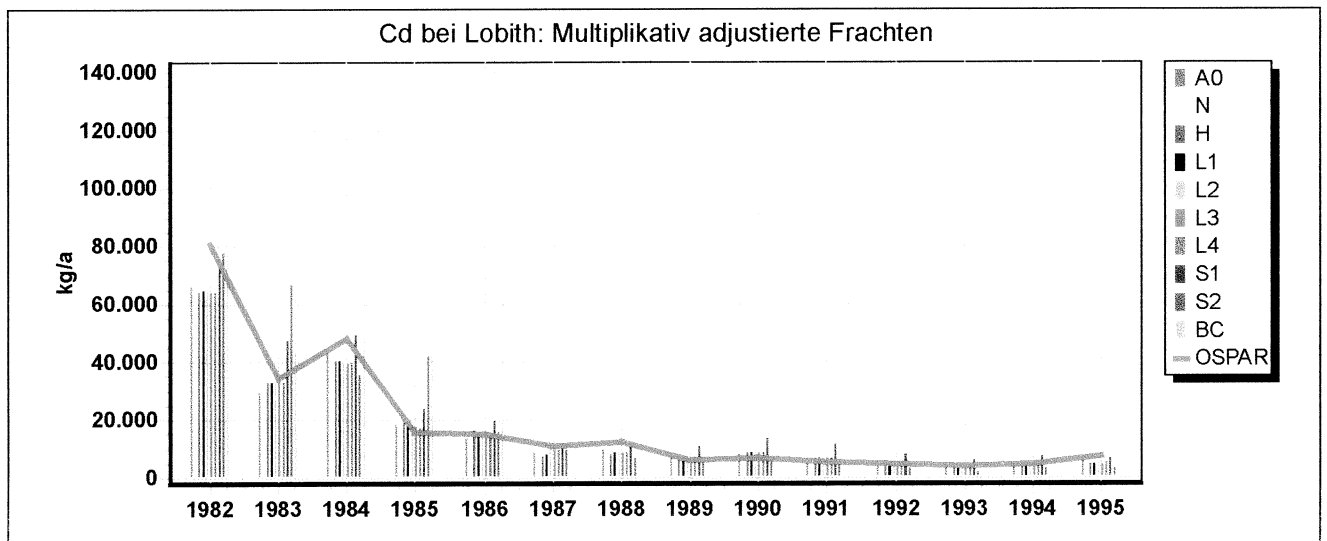


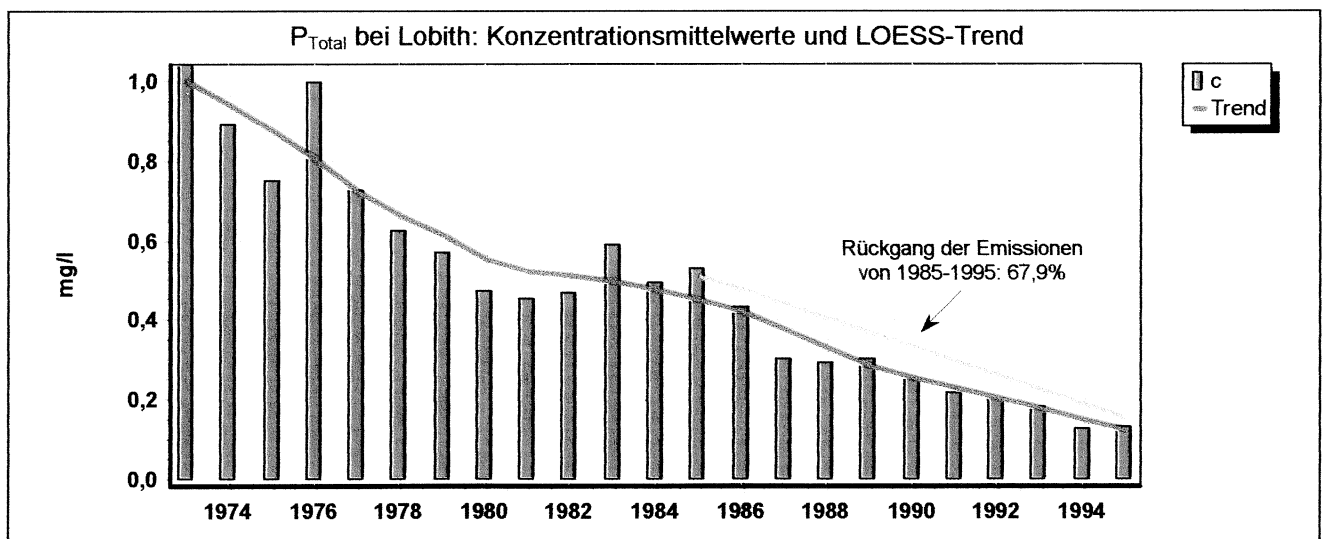
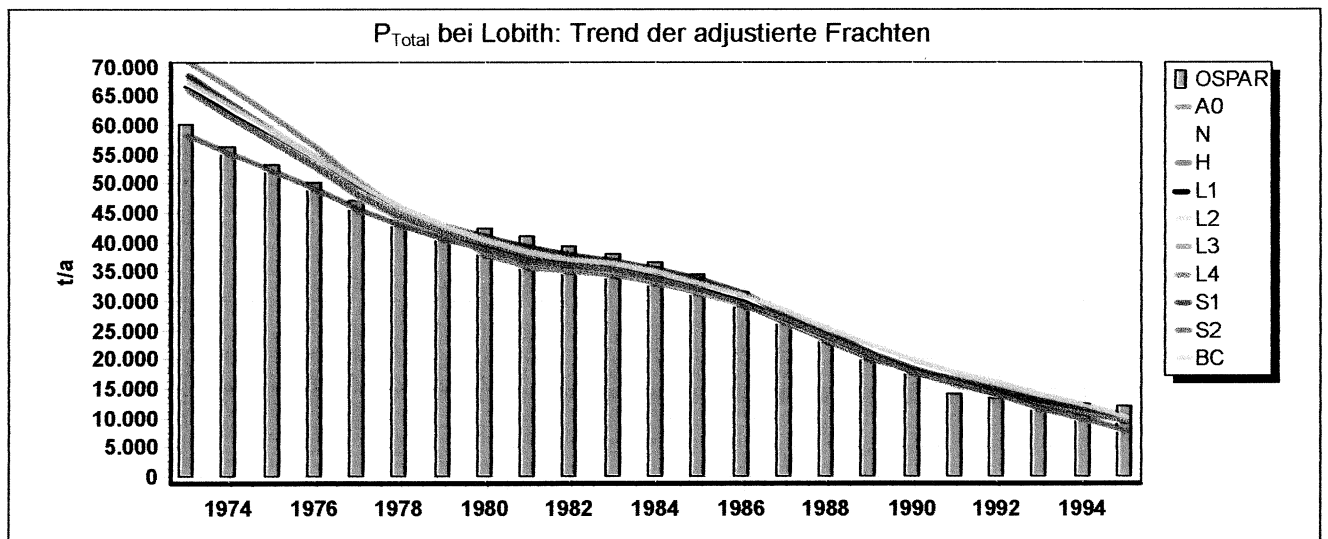
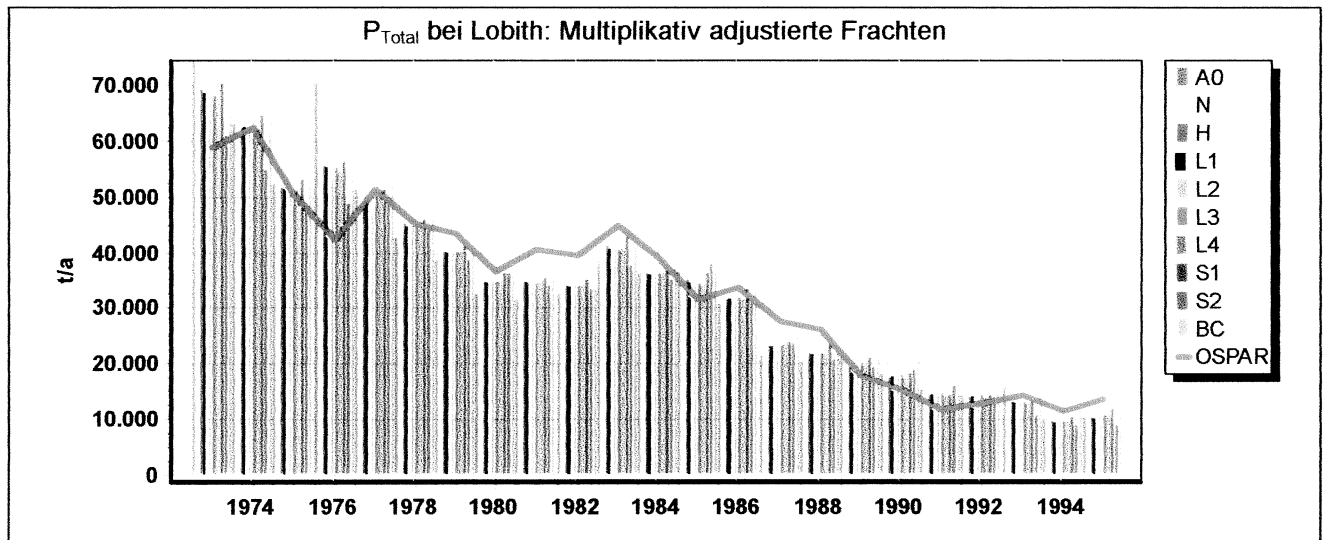


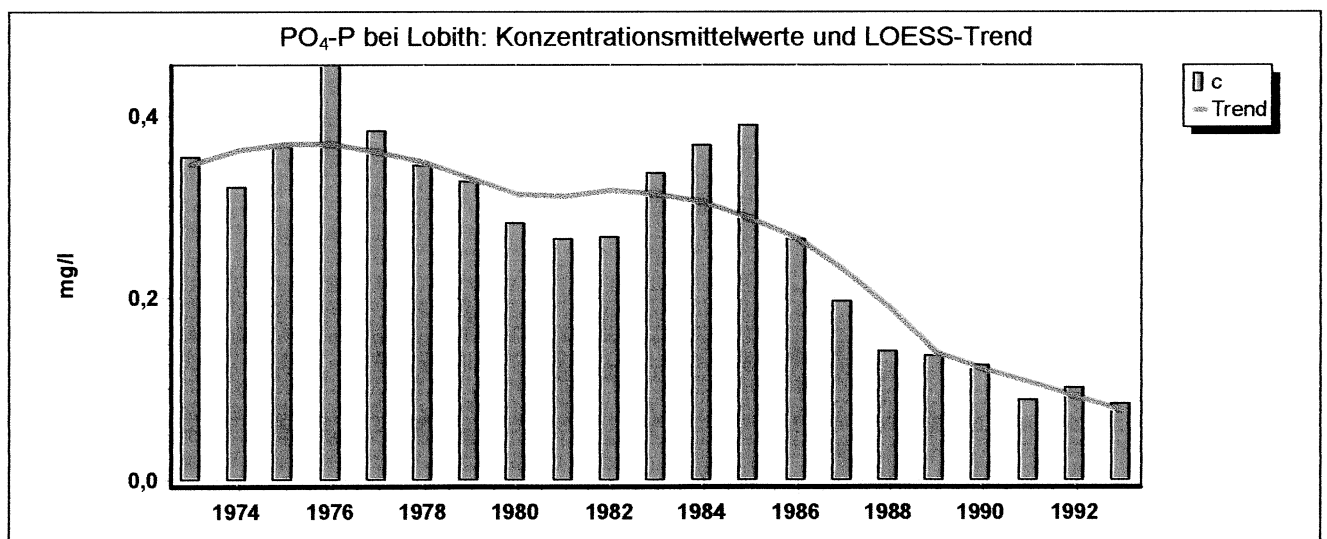
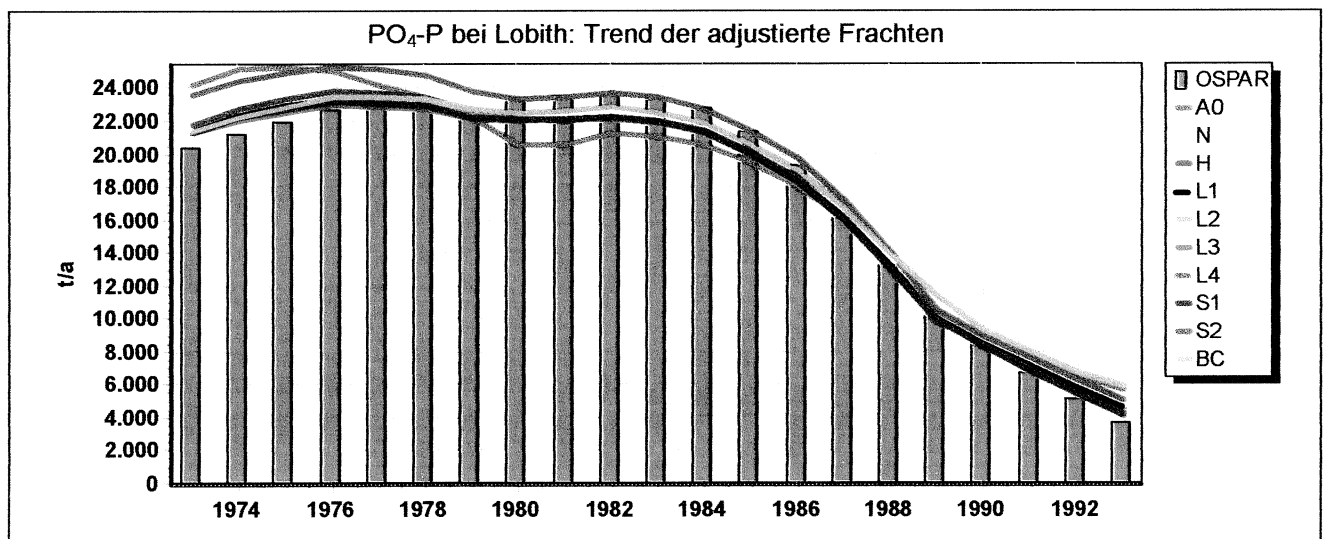
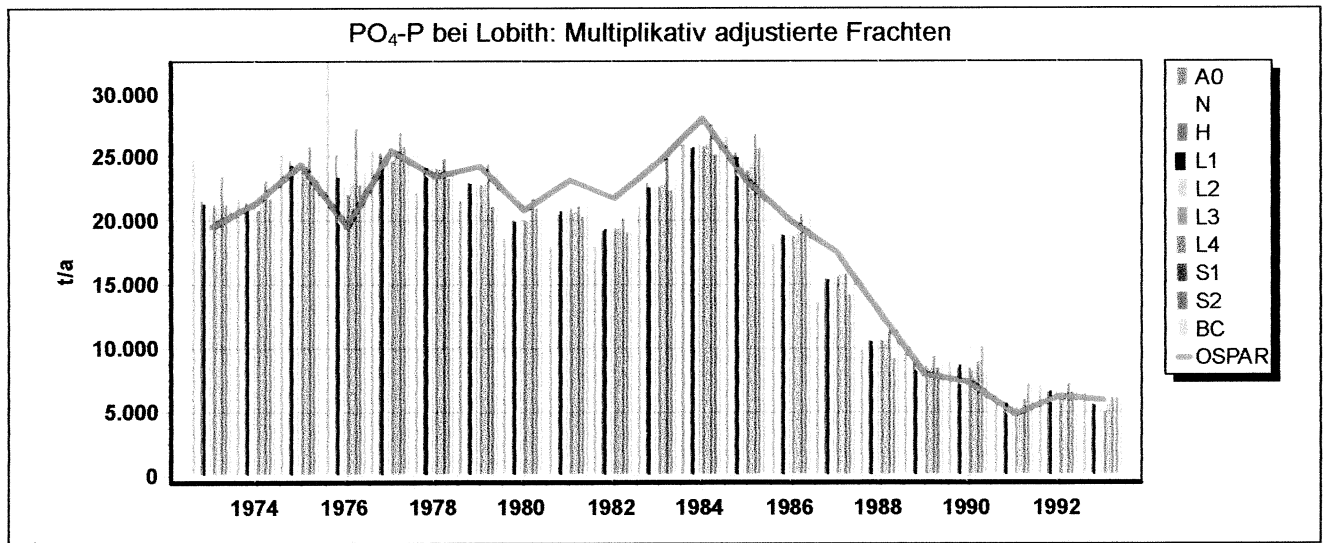


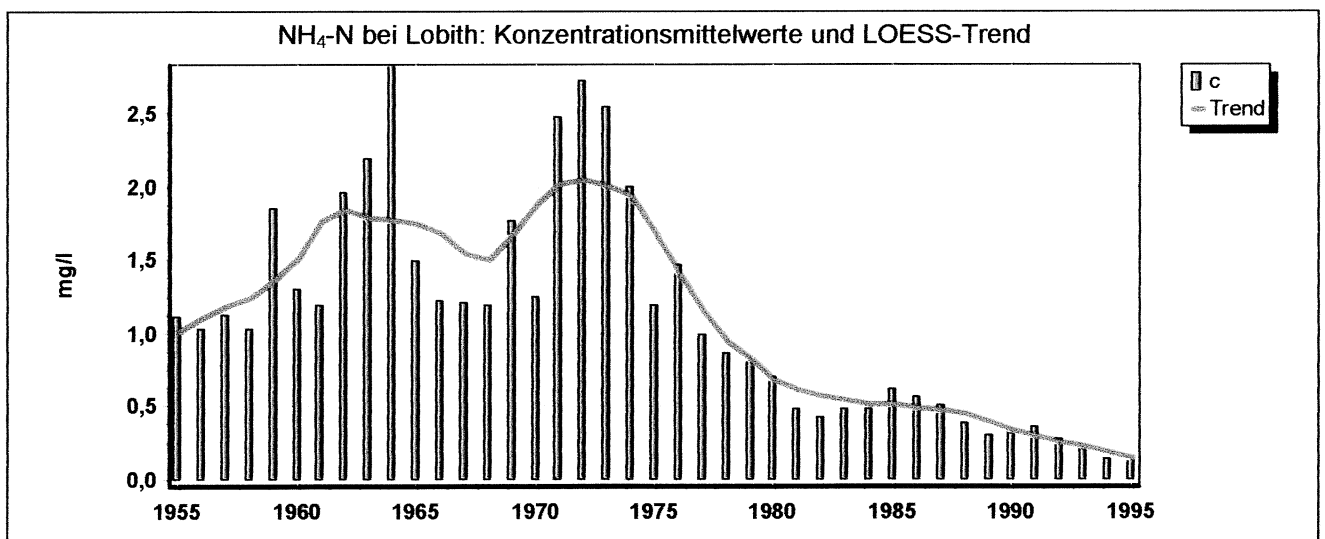
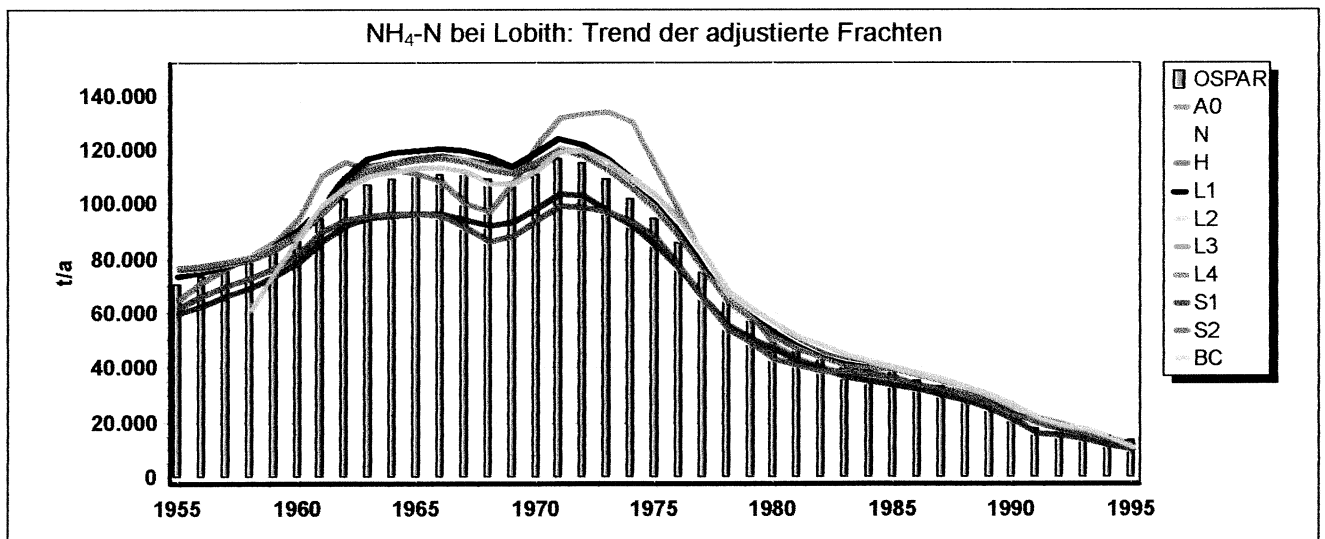
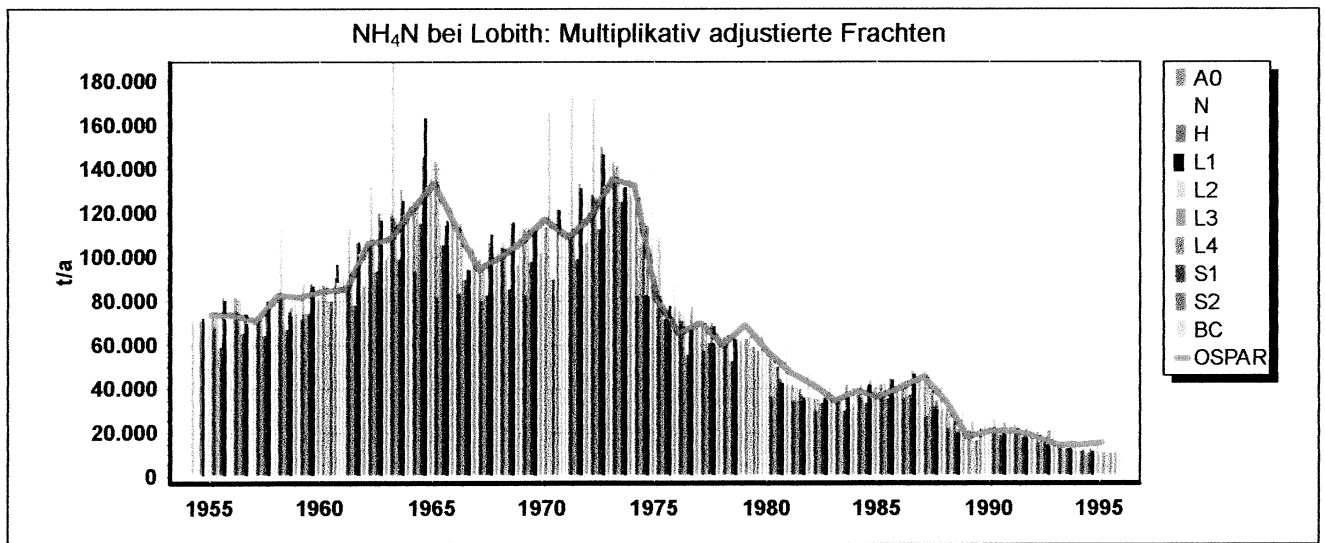


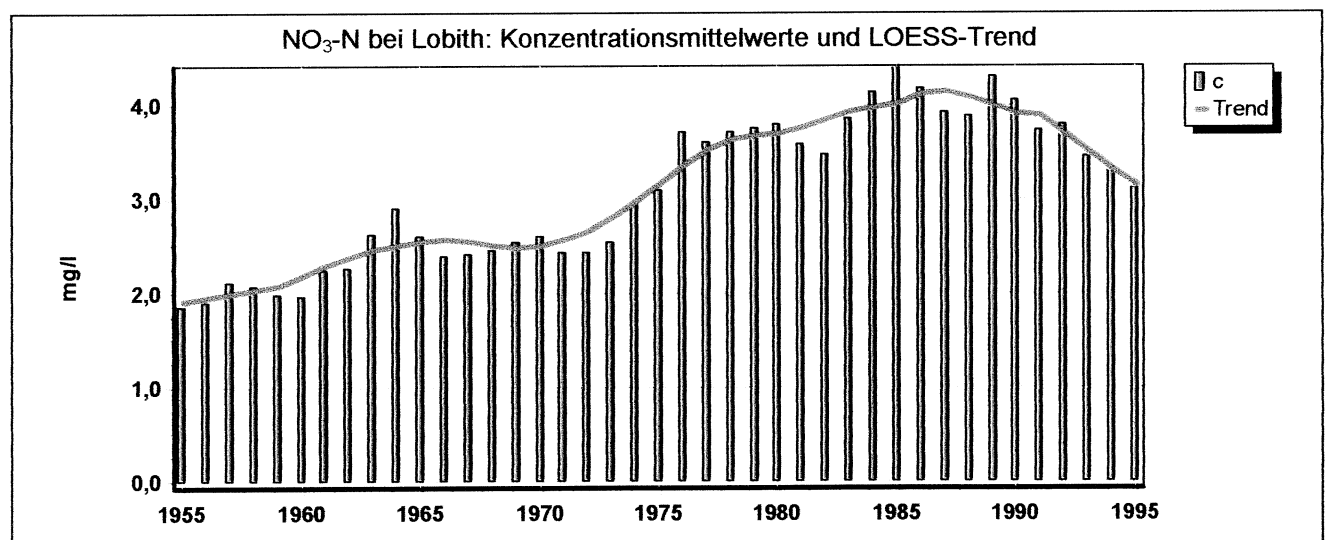
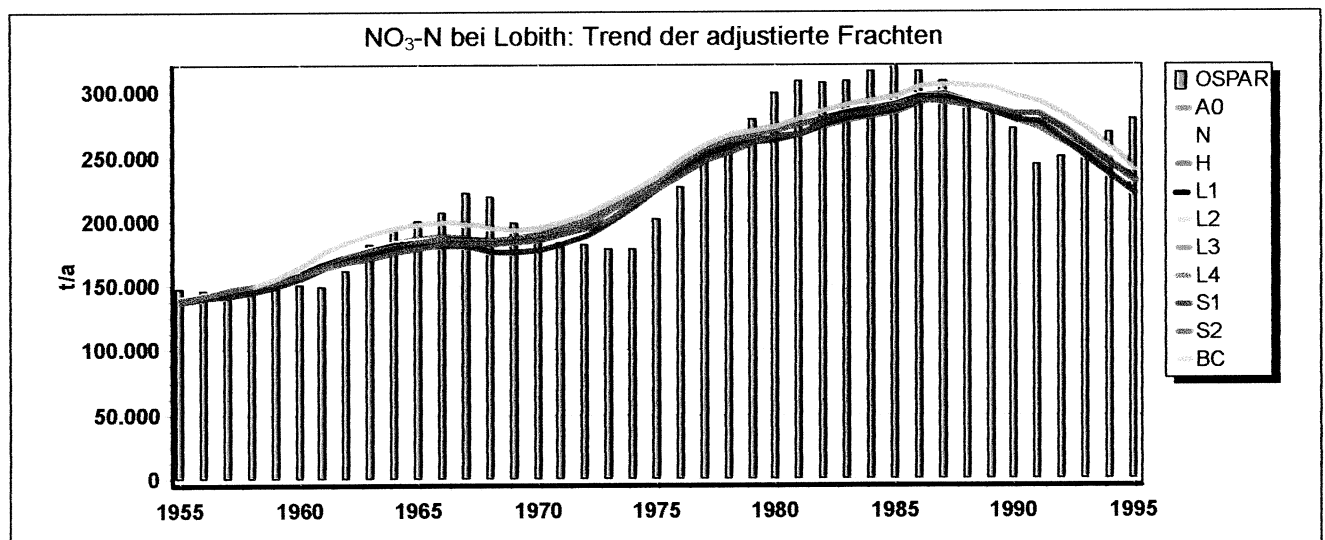
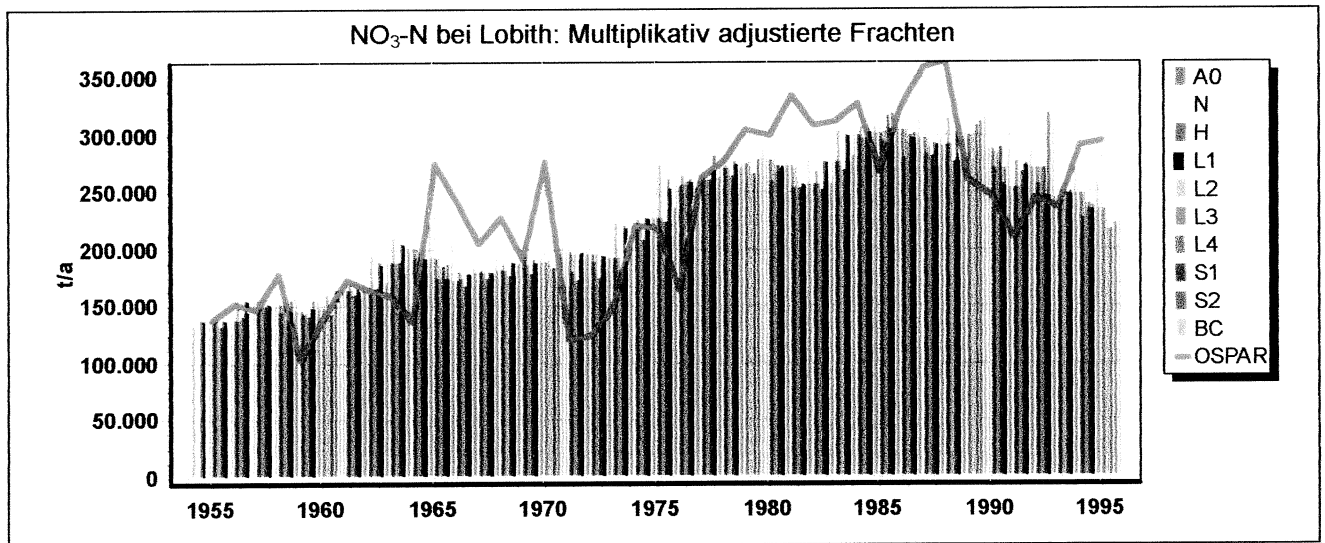


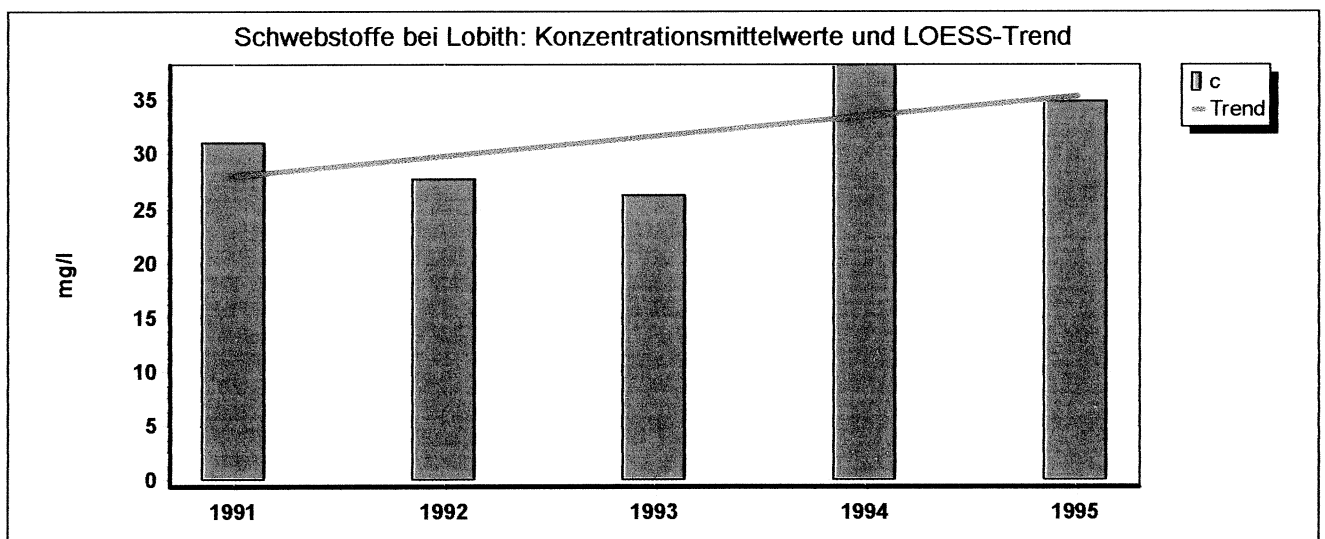
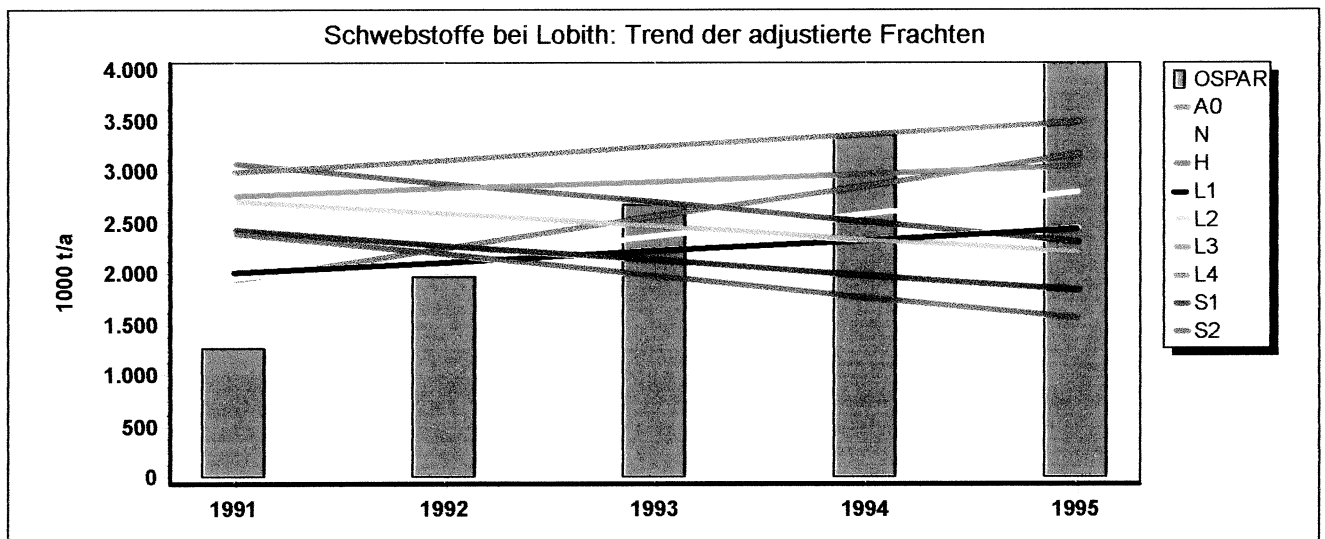
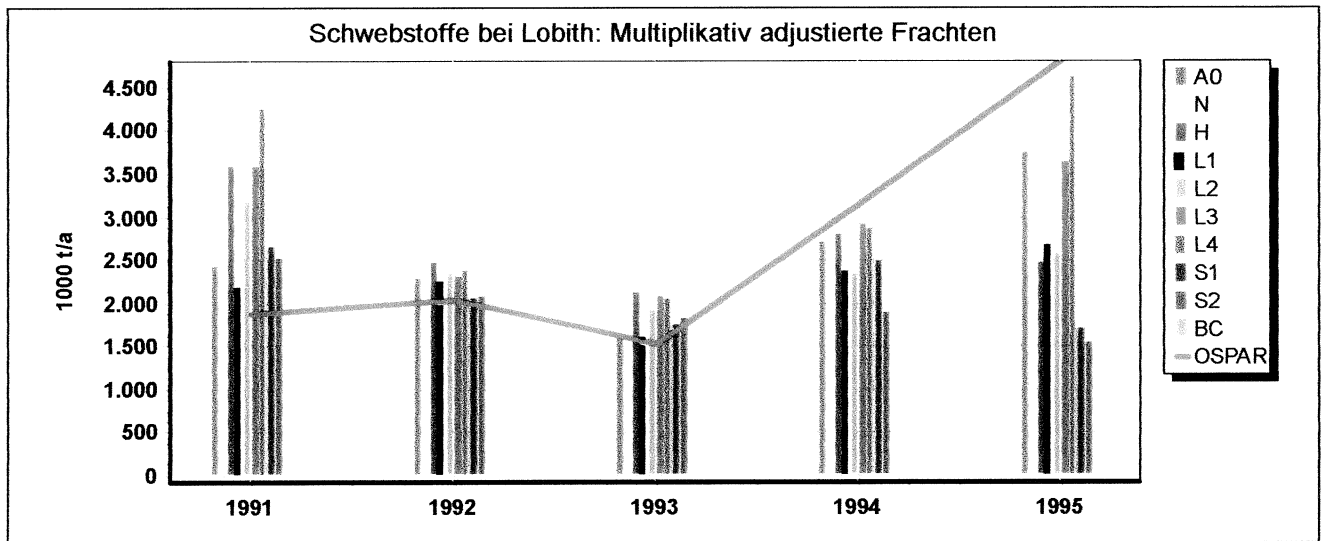












Anhang B

Ergänzungen und weitere Erläuterungen

Inhaltsverzeichnis

B 1 INTERPRETATION ADJUSTIERTER FRACHTEN.....	3
B 2 SCHÄTZMETHODEN	9
B 2.1 NICHTPARAMETRISCHE GLÄTTUNG NACH STALNACKE (METHODE N)	9
B 2.2 ANWENDUNG DES SCHÄTZVERFAHRENS VON HEBBEL (METHODE H).....	12
B 2.3 LOKALE REGRESSION MIT SAISON (METHODE L1)	15
B 2.4 LOKALE REGRESSION MIT SAISON UND VERZÖGERTEM DURCHFLUSSEFFEKT (METHODE L2)	16
B 2.5 LOKALE REGRESSION MIT TEMPERATUR UND VERZÖGERTEM DURCHFLUSSEFFEKT (METHODE L3)	17
B 2.6 LOKALE REGRESSION MIT SAISON, TEMPERATUR UND VERZÖGERTEM DURCHFLUSSEFFEKT (METHODE L4)	18
B 2.7 SCHÄTZUNG MITTELS SPLINES (METHODE S1)	19
B 2.8 SCHÄTZUNG MITTELS LOKALER SPLINES (METHODE S2).....	20
B 3 BERECHNUNG ADJUSTIERTER FRACHTEN AUF BASIS DER JAHRESSTICHPROBE.....	21
B 3.1 VERWENDUNG DES VORHERSAGEWERTES DER LQ-FUNKTION	21
B 3.2 VERGLEICH DER ERGEBNISSE	21
B 3.3 INTERPRETATION ALS ADDITIV ADJUSTIERTE FRACHTEN	22
B 3.4 SIND DIE MIT DEN METHODEN Y1 UND Y2 ERMITTELTEN ADJUSTIERTEN FRACHTEN UNKORRELIERT?.....	23
B 4 AUTOKOVARIANZ DER ADJUSTIERTEN JAHRESFRACHT	26
B 4.1 KOVARIANZEN DER ADJUSTIERTEN JAHRESFRACHTEN BEI LOBITH UND HERBRUM.....	28
B 4.2 ZUR ZULÄSSIGKEIT VON TRENDANALYSEN AUF DER BASIS ADJUSTIERTER JAHRESFRACHTEN.	30
B 4.3 AUTOKORRELATION DER OSPAR-FRACHT	31
B 5 DIE WIRKUNG VERZÖGERTER DURCHFLUSSEFFEKTE AUF DIE ADJUSTIERTE FRACHT	33
B 6 ZUR BERECHNUNG DER POWER-FUNKTION.....	36
B 7 RESIDUALANALYSEN.....	39
B 8 ZUR AUSWAHL EINES PRAKTIKABLEN ADJUSTIERUNGSMETHODE.....	45
B 9 ZUR INTERPRETATION DER KORRELATION ZWISCHEN DURCHFLUSS UND TRENDABWEICHUNGEN DER OSPAR-FRACHT	47
B 10 VERTRAUENSINTERVALLE FÜR ADJUSTIERTE JAHRESFRACHTEN.....	49

B 1 Interpretation adjustierter Frachten

In diesem Abschnitt wird das allgemeine Adjustierungskonzept im Detail diskutiert, wobei die Frage nach der Interpretation adjustierter Einträge im Vordergrund steht.

Die gemessenen Einträge setzen sich aus verschiedenen Anteilen zusammen, die durch verschiedene mehr oder weniger eindeutig bestimmte Quellen gespeist sind, neben geogenen Quellen insbesondere private Haushalte, Industriebetriebe und Landwirtschaft. Eine Adjustierung der Einträge sollte die unterschiedliche Natur dieser Quellen berücksichtigen. Wenn z.B. 80% der Fracht durch Punktquellen gespeist sind, deren Emission nicht von natürlichen Variablen abhängig ist, so erscheint nur bei dem verbleibenden Frachtanteil eine Adjustierung sinnvoll. Die Form einer solchen Adjustierung kann für Spezialfälle einfach angegeben werden.

Nur Punktquellen

Wenn nur Punktquellen vorliegen, deren Emission nicht durch natürliche Variablen bestimmt ist, erscheint keinerlei Adjustierung sinnvoll, d.h. in diesem Falle sollte die adjustierte Fracht L_{ija} mit der gemessenen Fracht L_{ij} übereinstimmen: $L_{ija} = L_{ij}$.

Nur geogene Grundbelastung

Wenn sich die Fracht nur aus der geogenen Grundbelastung speist, kann angenommen werden, dass die Konzentration nicht vom Durchfluss abhängig ist. Dann wird jedoch die gemessene Fracht L_{ij} proportional zum Durchfluss sein, so dass es nahe liegt, diese durch Multiplikation mit q_{0ij} / q_{ij} , auf das langjährige Mittel des Durchflusses q_{0ij} zu adjustieren, d.h. $L_{ija} = L_{ij} q_{0ij} / q_{ij}$.

Mischung aus Punktquellen und geogener Grundbelastung

Unterstellt man, dass z.B. 30% der Einträge aus Punktquellen und die übrigen 70% aus der geogenen Grundbelastung gespeist sind, sollte die aggregierte adjustierte Fracht der Summe der separat adjustierten Frachten entsprechen, d.h. $L_{ija} = 0.3 L_{ij} + 0.7 L_{ij} q_{0ij} / q_{ij} = (0.3 + 0.7 q_{0ij} / q_{ij}) L_{ij}$

Wenn die Prozentwerte bekannt sind, sind somit keine weiteren Berechnungen erforderlich. Andernfalls stellt sich die Frage, wie die genannten Prozentwerte ermittelt werden können. Hierzu kann die CQ-Funktion herangezogen werden. Diese hat unter den genannten Voraussetzungen die Gestalt

$$c_{ij}(q) = \frac{\alpha_{ij}}{q} + \beta_{ij},$$

so dass sich für die Frachtfunktion (LQ-Funktion) die Gestalt

$$c_{ij}(q)q = f_{ij}(q) = \alpha_{ij} + \beta_{ij}q$$

ergibt. Hierbei bezeichnet α_{ij} den auf Punktquellen entfallenden Frachtanteil und $\beta_{ij}q$ den auf geogene Quellen entfallenden Anteil. Damit ermittelt man den Prozentanteil der geogenen Grundbelastung auf

$$\frac{\beta_{ij}q}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q} \times 100\%,$$

während sich der Prozentanteil der Punktquellen aus

$$\frac{\alpha_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q} \times 100\%$$

berechnen lässt. Mit diesem Ansatz erhält man für die adjustierte Gesamtfracht

$$L_{ija} = \frac{\alpha_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q_{ij}} L_{ij} + \frac{\beta_{ij}q_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q_{ij}} L_{ij} \frac{q_{0j}}{q_{ij}} = \frac{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q_{0j}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q_{ij}} L_{ij} = \frac{L_{ijm}}{L_{ije}} L_{ij}.$$

Diese Formel bedeutet, dass sich die adjustierte Fracht aus der gemessenen Fracht durch Multiplikation mit dem Faktor $\frac{L_{ijm}}{L_{ije}}$ ergibt. Dies jedoch entspricht der im vorigen Abschnitt vorgestellten Definition multiplikativ adjustierter Frachten. Falls tatsächlich 70% der Fracht auf diffuse Quellen zurückgehen und 30% auf Punktquellen, entspricht der multiplikative Faktor dem Wert $(0.3 + 0.7 q_{0ij} / q_{ij})$.

Nichtlineare LQ-Funktion (Fracht-Durchfluss-Funktion)

Sofern für die Fracht das nichtlineare Modell

$$L_{ij} = f_{ij}(q_{ij}) = \gamma_{ij} q_{ij}^d$$

mit den Parametern γ_{ij} und d angenommen wird, ergibt sich eine natürliche Adjustierung, indem der aktuelle Durchfluss q_{ij} durch das langjährige Mittel q_{0ij} ersetzt wird. Wegen $\gamma_{ij} = \frac{L_{ij}}{q_{ij}^d}$ führt dies zu

$$L_{ija} = \gamma_{ij} q_{0ij}^d = \frac{q_{0ij}^d}{q_{ij}^d} L_{ij} = \frac{f(q_{0ij}^d)}{f(q_{ij}^d)} L_{ij}.$$

Dies bedeutet wiederum, dass sich die adjustierte Fracht durch Multiplikation aus der gemessenen Fracht mit dem Faktor aus geschätzter Fracht und mittlerer Fracht $\frac{L_{ijm}}{L_{ije}}$ ermitteln lässt, gemäss dem im vorigen Abschnitt vorgestellten Adjustierungskonzept.

Mischung aus Punktquellen, geogener Grundbelastung und Quellen mit nichtlinearer LQ-Funktion

Unterstellt man, dass z.B. 30% der Einträge aus Punktquellen, 50% aus der geogenen Grundbelastung und die restlichen 20% aus Quellen mit einer nichtlinearen LQ-Funktion gespeist sind, sollte die aggregierte adjustierte Fracht der Summe der separat adjustierten Frachten entsprechen, d.h

$$L_{ija} = 0.3 L_{ij} + 0.5 L_{ij} q_{0j} / q_{ij} + 0.2 L_{ij} (q_{0ij} / q_{ij})^d$$

Da die prozentualen Anteile der einzelnen Quellen in der Regel nicht bekannt sind, liegt es nahe, diese wie weiter oben aus der CQ- bzw. LQ-Funktion abzuleiten. Die LQ-Funktion hat unter den genannten Voraussetzungen die Gestalt

$$L_{ije} = c_{ij}(q)q = f_{ij}(q) = \alpha_{ij} + \beta_{ij}q + \gamma_{ij}q^d,$$

wobei α_{ij} den auf Punktquellen zurückgehenden Frachtanteil kennzeichnet, $\beta_{ij}q$ den Anteil der geogenen Grundbelastung und $\gamma_{ij}q^d$ die nichtlineare Komponente der Fracht. Damit ergeben sich für den prozentualen Anteil der Punktquellen

$$\frac{\alpha_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q + \gamma_{ij}q^d} \times 100\%,$$

für den Anteil der geogenen Grundbelastung

$$\frac{\beta_{ij}q}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q + \gamma_{ij}q^d} \times 100\%$$

und für den auf die nichtlineare Komponente entfallenden Anteil

$$\frac{\gamma_{ij}q^d}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q + \gamma_{ij}q^d} \times 100\%.$$

Fügt man die drei adjustierten Frachtanteile zusammen, ergibt sich die Gesamtfracht

$$\begin{aligned} L_{ija} &= \frac{\alpha_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q_{ij} + \gamma_{ij}q_{ij}^d} L_{ij} + \frac{\beta_{ij}q_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q_{ij} + \gamma_{ij}q_{ij}^d} L_{ij} \frac{q_{0ij}}{q_{ij}} + \frac{\gamma_{ij}q_{ij}^d}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q_{ij} + \gamma_{ij}q_{ij}^d} L_{ij} \left(\frac{q_{0ij}}{q_{ij}} \right)^d \\ &= \frac{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q_{0ij} + \gamma_{ij}q_{0ij}^d}{\alpha_{ij} + \beta_{ij}q_{ij} + \gamma_{ij}q_{ij}^d} L_{ij} = \frac{L_{ijm}}{L_{ije}} L_{ij}. \end{aligned}$$

Offenbar ist die nach diesem Ansatz ermittelte adjustierte Fracht wiederum in Übereinstimmung mit der Definition nach Abschnitt 2.2. Daher kann gefolgert werden, dass die dortige Definition in Übereinstimmung steht mit dem hier vorgestellten Adjustierungskonzept, bei dem eine natürliche Adjustierung entsprechend der unterschiedlichen Quellen vorgenommen wird.

Interpretation aggregierter adjustierter Frachten

Die jährliche adjustierte Fracht ergibt sich durch Summierung bzw. Mittelung über die einzelnen adjustierten Frachtwerten. Es soll nun der Frage nachgegangen werden, wie der ermittelte Jahreswert interpretiert werden kann. Hierzu soll der Einfachheit halber eine lineare LQ-Funktion (zur Erfassung von Punktquellen und geogener Grundbelastung) unterstellt werden. Wenn in Jahr i insgesamt n Proben analysiert werden, ergibt sich die adjustierte jährliche Fracht (gerechnet in Flusseinheiten, z.B. t/a) gemäss

$$\begin{aligned} L_{ia} &= \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} L_{ija} = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \left(\frac{\alpha_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij} q_{ij}} L_{ij} + \frac{\beta_{ij} q_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij} q_{ij}} L_{ij} \frac{q_{0ij}}{q_{ij}} \right) \\ &= \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \left(\frac{\alpha_{ij} c_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij} q_{ij}} q_{ij} + \frac{\beta_{ij} q_{ij} c_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij} q_{ij}} q_{0ij} \right). \end{aligned}$$

Die beiden Komponenten dieses Ausdrucks lassen sich wie folgt interpretieren: $c_{ij}^* := \frac{\alpha_{ij} c_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij} q_{ij}}$

bezeichnet jene Konzentration, welche sich aus Punktquellen herleiten lässt, während

$c_{ij}^+ := \frac{\beta_{ij} q_{ij} c_{ij}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij} q_{ij}}$ die aus der geogenen Grundbelastung abgeleitete Konzentration darstellt.

Aggregiert man beide Komponenten jeweils separat, ergibt sich

$$L_{ia} = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} (c_{ij}^* q_{ij} + c_{ij}^+ q_{0ij}) = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} c_{ij}^* q_{ij} + \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} c_{ij}^+ q_{0ij} = L_{i,a}^* + L_{i,a}^+,$$

wobei

$$L_{ia}^* = \frac{1}{n_i} \sum_j c_{ij}^* q_{ij} = \left(\sum_j \frac{q_{ij}}{q_i} c_{ij}^* \right) q_i, \quad (\text{Frachtanteil der Punktquellen})$$

$$L_{ia}^+ = \frac{1}{n_i} \sum_j c_{ij}^+ q_{0ij} = \left(\sum_j \frac{q_{0ij}}{q_{0i}} c_{ij}^+ \right) q_{0i}, \quad (\text{adjustierte Fracht der geogenen Quellen})$$

$$q_i := \frac{1}{n_i} \sum_j q_{ij} \quad (\text{mittlerer Durchfluss im laufenden Jahr})$$

$$q_{0i} := \frac{1}{n_i} \sum_j q_{0ij} \quad (\text{langjähriger Durchflussmittelwert}).$$

Offenbar lassen sich beide Komponenten der adjustierten Jahresfracht jeweils als Produkt aus Durchfluss und durchflussgewichteten Konzentrationen darstellen, wobei die Differenz zur „gemessenen“ Jahresfracht durch

$$L_i - L_{ia} = \left(\sum_j \frac{q_{ij}}{q_i} c_{ij}^+ \right) q_i - \left(\sum_j \frac{q_{0ij}}{q_{0i}} c_{ij}^+ \right) q_{0i} \quad ,$$

gegeben ist, d.h. die Differenz ergibt sich, indem im Frachtanteil der geogenen Grundbelastung der tatsächliche Durchfluss durch sein langjähriges Mittel ersetzt wird.

B 2 Schätzmethoden

Die in Kapitel 5 bereits vorgestellten Schätzverfahren werden im folgenden im Detail diskutiert. Dabei wird aus Gründen der Übersichtlichkeit die in Kapitel 5 erfolgte Darstellung teilweise wiederholt.

B 2.1 Nichtparametrische Glättung nach Stalnacke (Methode N)

B 2.1.1 Der Vorschlag von Stalnacke

Nach einem Vorschlag von Stalnacke (1996; siehe auch HARP-Guidelines 7, 2000) wird die Fracht linear modelliert gemäß

$$L_{ij} = \alpha_j + \beta_{ij} q_{ij} + \varepsilon_{ij},$$

wobei L_{ij} = Fracht in Jahr i und Saison j
 q_{ij} = Durchfluss in Jahr i und Saison j .

$$i = 1, \dots, T$$

$$j = 1, \dots, M$$

Der Index i kennzeichnet das Jahr der Messung, während j für die Saison steht. Das Stalnacke-Modell erfordert ein festes Zeitraster, d.h. der Saisonindex j bezieht sich auf einen festen Monat oder ein festes Quartal im Jahr. Dies macht es erforderlich, bei der Datenaufbereitung zunächst alle Messwerte in das vorgegebene Raster einzuordnen.

Die Schätzung der Parameter erfolgt nichtparametrisch durch Minimierung des Ausdrucks

$$S(\alpha, \beta) = \sum_{i,j} (L_{ij} - \alpha_j - \beta_{ij} q_{ij})^2 + \lambda_1 \sum_{i,j} \left(\beta_{ij} - \frac{\beta_{i+1,j} + \beta_{i-1,j}}{2} \right)^2 + \lambda_2 \sum_{i,j} \left(\beta_{ij} - \frac{\beta_{i,j+1} + \beta_{i,j-1}}{2} \right)^2$$

Die Summen werden jeweils über alle N Indexpaare i, j gebildet, für die Summanden verfügbar sind. Dabei wird

$$\begin{aligned}\beta_{i,0} &= \beta_{i-1,M} \\ \beta_{i,M+1} &= \beta_{i+1,1}\end{aligned}$$

gesetzt.

Der erste Summand ist die Summe der quadrierten Residuen, während die beiden übrigen Summanden als Glattheitsfunktionale für den Parameter β fungieren: Der zweite Summand quantifiziert nichtlineare Abweichungen von Jahr zu Jahr, während der dritte Summand die nichtlinearen Abweichungen innerhalb des Jahres misst. Weiterhin sind λ_1, λ_2 die sogenannten Penalty-Parameter, welche festlegen, wie stark die zeitliche Veränderung der Parameter sein darf. Zu ihrer Festlegung wird von Stalnacke das Verfahren der Kreuzvalidierung empfohlen.

Die Einsatzmöglichkeiten dieses Modells erscheinen jedoch beschränkt, da nur der Proportional-Parameter β , nicht jedoch der konstante Anteil α vom Index i abhängig ist, d.h. dieser - in erster Näherung durch die Punktquellen bestimmte - Frachtanteil beinhaltet zwar eine Saisonkomponente, wird jedoch über die Jahre als zeitlich konstant unterstellt. Zumindest bei erheblichen Reduzierungen der Einträge von Punktquellen erscheint diese Annahme als nicht adäquat, und gemäss der Überlegungen in den obigen Abschnitten können bei Verwendung des Modells erhebliche Verzerrungen der adjustierten Fracht resultieren.

B 2.1.2 Ein erweitertes nichtparametrisches Modell

In Erweiterung des Vorschlags von Stalnacke wird folgendes Modell betrachtet:

$$L_{ij} = \alpha_{ij} + \beta_{ij} q_{ij} + \varepsilon_{ij}$$

wobei L_{ij} = Fracht in Jahr i und Saison j
 q_{ij} = Durchfluss in Jahr i und Saison j

$$i=1, \dots, T$$

$$j=1,\dots,M$$

Der Unterschied zum Vorschlag von Stalnacke besteht darin, dass nicht nur β_{ij} , sondern auch α_{ij} vom Jahr i abhängig ist. Die beiden Modellparameter α_{ij} und β_{ij} lassen sich nichtparametrisch schätzen durch Minimieren des folgenden Ausdrucks:

$$\begin{aligned} S(\alpha, \beta) = & \sum_{i,j} (L_{ij} - \alpha_{ij} - \beta_{ij} q_{ij})^2 + \lambda_1 \sum_{i,j} \left(\alpha_{ij} - \frac{\alpha_{i+1,j} + \alpha_{i-1,j}}{2} \right)^2 + \lambda_2 \sum_{i,j} \left(\alpha_{ij} - \frac{\alpha_{i,j+1} + \alpha_{i,j-1}}{2} \right)^2, \\ & + \lambda_1 \overline{q^2} \sum_{i,j} \left(\beta_{ij} - \frac{\beta_{i+1,j} + \beta_{i-1,j}}{2} \right)^2 + \lambda_2 \overline{q^2} \sum_{i,j} \left(\beta_{ij} - \frac{\beta_{i,j+1} + \beta_{i,j-1}}{2} \right)^2 \end{aligned}$$

wobei $\overline{q^2} = \frac{1}{N} \sum_{ij} q_{ij}^2$ das arithmetische Mittel der quadrierten Durchflüsse bezeichnet. Je nach

Bedarf kann das zugrundeliegende Modell noch um weitere Parameter erweitert werden (zum Beispiel um einen quadratischen Term), doch hat sich gezeigt, dass dies in der Regel nicht zu deutlichen Verbesserungen der Modellanpassung führt.

Der zu minimierende Ausdruck $S(\alpha, \beta)$ kann als eine quadratische Form bezüglich eines Vektors aufgefasst werden, der linear in α und β ist. Falls die quadratische Form positiv definit ist (dies ist der Fall, wenn nicht allzu viele Beobachtungen fehlen), gibt es ein eindeutiges Minimum, und man kann leicht nachweisen, dass die Schätzer für α und β linear in den Frachten L_{ij} sind.

Die Penalty-Parameter λ_1, λ_2 müssen in geeigneter Weise vorgegeben werden, wobei zum Beispiel die Methodik der Kreuzvalidierung herangezogen werden kann. Die Anwendung dieser Methodik hat jedoch nicht immer zu befriedigenden Resultaten geführt, so dass hierauf verzichtet wird. Sinnvolle Resultate konnten mit folgender Festlegung erhalten werden:

$$\lambda_1 = \lambda_2$$

Diese Festlegung bedeutet, dass saisonale Veränderungen der Parameter dasselbe Gewicht erhalten wie die Veränderungen von Jahr zu Jahr.

Um einen gewünschten Grad der Anpassung der Funktion zu erhalten, liegt es nahe, die Zahl der verallgemeinerten Freiheitsgrade nach Hastie und Tibshirani (1990) zu bestimmen. Diese Zahl

lässt sich als Äquivalent der Anzahl der zugrundeliegenden Parameter deuten und entspricht der Spur der Smoothematrix, d.h. jener Matrix, welche die lineare Abbildung des Vektors der beobachteten Frachten L_{ij} auf den Vektor der geschätzten Frachten $\hat{L}_{ij} = \hat{\alpha}_{ij} + \hat{\beta}_{ij} q_{ij}$ beschreibt. Die Spur der Smoothematrix hängt in nichtlinearer Weise von $\lambda_1 = \lambda_2$ ab, so dass eine iterative Vorgehensweise erforderlich ist, um für eine vorgegebene Anzahl von Freiheitsgraden den zugehörigen Wert $\lambda_1 = \lambda_2$ zu finden.

Für den Vorgabewert der Spur wurden je nach Länge der Zeitreihe mit 5-15 Freiheitsgraden befriedigende Anpassungen erzielt. Bei sehr langen Zeitreihen über einen Zeitraum von mehr als 20 Jahren empfiehlt sich die lokale Anwendung des Berechnungsverfahrens, bei dem zu jedem Zeitpunkt nur jene Daten berücksichtigt werden, die in einem vorgegebenen Zeitfenster um den betreffenden Zeitpunkt liegen.

Mit dem verwendeten Modell ergibt sich die multiplikativ adjustierte Fracht gemäss Kapitel 1 zu

$$L_{ij,a} = \frac{\alpha_{ij} + \beta_{ij} q_{0j}}{\alpha_{ij} + \beta_{ij} q_{ij}} L_{ij} = \frac{\frac{\alpha_{ij}}{\beta_{ij}} + q_{0j}}{\frac{\alpha_{ij}}{\beta_{ij}} + q_{ij}} L_{ij} ,$$

d.h. die Adjustierung ist nicht direkt von den beiden Modellparametern α_{ij} und β_{ij} abhängig, sondern nur von deren Quotient α_{ij} / β_{ij} .

B 2.2 Anwendung des Schätzverfahrens von Hebbel (Methode H)

Nach dem Ansatz von Hebbel (1992) zur Zerlegung von Zeitreihen in Trend, Saison und exogene Effekte liegt es nahe, zur Erfassung der Konzentrations-Durchfluss-Beziehung folgendes Modell zu betrachten:

$$c_t = u_t + s_t + \beta / q_t + \varepsilon_t$$

bzw. gleichwertig hierzu

$$L_t = q_t \times (u_t + s_t + \beta / q_t + \varepsilon_t)$$

wobei

c_t = Konzentration zum Zeitpunkt t

L_t = Fracht/Transport zum Zeitpunkt t

q_t = Durchfluss zum Zeitpunkt t

u_t = Trendkomponente,

s_t = Saisonkomponente

β = Wirkung des Durchflusses auf die Konzentration (zeitlich konstant)

Die Messzeitpunkte $t_1, \dots, t_n$ im betrachteten Messzeitraum sind im Gegensatz zu dem von Stalnacke vorgeschlagenen Modell nicht notwendigerweise äquidistant.

Eine Alternative zu obigem Modell besteht darin, Trend und Saison nicht bezüglich der Konzentration, sondern bezüglich der Fracht zu definieren und das Modell

$$L_t = u_t + s_t + \beta \times q_t + \varepsilon_t$$

zu betrachten, doch in versuchsweise durchgeführten Berechnungen waren die hierfür ermittelten Schätzungen nicht befriedigend, so dass im folgenden nur das zuerst genannte Modell verwendet wird.

Die Ermittlung der Parameter für dieses Modell basiert auf der Minimierung eines Glattheitsmaßes, welches über einen geeignet festgelegten Trend-Saison-Differentialoperator definiert ist. Es kann auf den Fall ohne exogene Variablen wie folgt zurückgeführt werden. Man unterstellt zunächst den Parameter β als bekannt, bestimmt $z_t = L_t / q_t - \beta / q_t$ und ermittelt Trend- und Saisonfigur für das Modell

$$z_t = u_t + s_t + \varepsilon_t$$

Aufgrund der Linearität des Glättungsverfahrens gibt es eine Smoothematrix W , welche die lineare Beziehung zwischen den Größen z_t und der daraus abgeleiteten glatten Komponente beschreibt. In Vektorschreibweise lässt sich diese Beziehung darstellen als Vektorgleichung

$\hat{z} = Wz$, wobei z und $\hat{z}$ die Vektoren bezeichnen, die aus den einzelnen Größen z_t bzw. der Schätzung von z_t gebildet werden.

Wenn man nun umgekehrt die Trendfigur $u+s$ als bekannt voraussetzt, ergibt sich die Schätzung von β

wie im Falle eines einfachen Kleinste-Quadrate-Ansatzes für $v_t = L_t/q_t - (u_t + s_t)$ im Modell

$$v_t = \beta \times q_t + \varepsilon_t,$$

und durch Kombination der beiden Partiallösungen erhält man

$$\hat{z} = W(c - x' \hat{\beta})$$

$$\text{mit } \hat{\beta} = (x'(I - W)x)^{-1} x'(I - W)c,$$

wobei c den Vektor aller Konzentrationswerte $c_t = L_t/q_t$ bezeichnet und x den Spaltenvektor aller zugehörigen Reziprokwerte $1/q_t$ der Durchflüsse.

Die Bestimmung der Smoothematrix W erfolgt nach dem in Hebbel (1997) beschriebenen Verfahren, bei dem die Glattheit von Trend- und Saisonfigur durch einen Glattheitsparameter SIGMA gesteuert wird. Bezüglich der Details dieses Verfahrens sei auf den Abschnitt *VB Glättungsverfahren* in Hebbel (1997) verwiesen. Bei den hier vorgestellten Berechnungen wurde dieses Verfahren unter Verwendung eines linearen Trends mit einer Saisonkomponente zweiter Ordnung verwendet. Der Glättungsparameter SIGMA steht in direktem Zusammenhang zu der Zahl der verallgemeinerten Freiheitsgraden, die durch die Spur von W bestimmt ist. Diese Zahl wurde mit Werten von 12 Freiheitsgraden vorgegeben. Dies bedeutet, dass zusätzlich zu den 6 Freiheitsgraden, die für das zugrundeliegende Regressionsmodell erforderlich sind, 6 Freiheitsgrade für den nichtparametrischen Anteil zur Verfügung stehen. Es wurden Vergleichsrechnungen auch mit einer höheren Anzahl von Freiheitsgraden durchgeführt, doch hat sich gezeigt, dass die dadurch verbesserte Modellanpassung nicht zu wesentlichen Veränderungen bei den adjustierten Frachten führt.

Dabei ist zu beachten, dass der Parameter β , der den vom Durchfluss unabhängigen Anteil der Fracht beschreibt, im Modell konstant ist. Um dennoch eine flexible Anpassung an veränderte CQ-Beziehungen zu gewährleisten, wird das Modell lokal verwendet, d.h. die Schätzung erfolgt separat für jeden einzelnen Zeitpunkt auf der Basis aller Daten innerhalb eines gleitenden Zeitfensters. In den Auswertungen hat sich ein Zeitfenster von 7 Jahren als günstig erwiesen, wobei

am Anfang und am Ende der Zeitreihe jeweils die ersten bzw. letzten sieben Jahre einbezogen werden, während im mittleren Bereich der Zeitreihe das Zeitfenster genau so festgelegt wird, dass der betrachtete Zeitpunkt genau in der Mitte des Zeitfensters liegt.

Mit dem verwendeten Modell ergibt sich die multiplikativ adjustierte Fracht zum Zeitpunkt t zu

$$L_{t,a} = \frac{\beta + (u_t + s_t)q_{0t}}{\beta + (u_t + s_t)q_t} L_t = \frac{\frac{\beta}{u_t + s_t} + q_{0t}}{\frac{\beta}{u_t + s_t} + q_t} L_t ,$$

wobei q_{0t} das langjährige Monatsmittel des Durchflusses für den zum Zeitpunkt t gehörigen Monat bezeichnet. Festzuhalten bleibt, dass die Adjustierung nur von dem Quotienten $\beta/(u_t + s_t)$ abhängig ist.

B 2.3 Lokale Regression mit Saison (Methode L1)

Wählt man bei dem im vorigen Abschnitt beschriebenen Ansatz von Hebbel den Vorgabewert von sechs Freiheitsgraden, so ist die Schätzung der Adjustierungsparameter gleichwertig zu einer Regressionsschätzung auf Basis des folgenden linearen Modells:

$$c_t = \frac{\alpha}{q_t} + \beta + \delta t + \text{season} + \varepsilon_t ,$$

wobei

$$\text{season} := \gamma_1 \sin \frac{2\pi t}{m} + \gamma_2 \cos \frac{2\pi t}{m} + \gamma_3 \sin \frac{2\pi t}{2m} + \gamma_4 \cos \frac{2\pi t}{2m}$$

für die Saisonkomponente steht. Dabei bezeichnet m die Länge des Jahres, ausgedrückt in der bei den Zeitpunkten t verwendeten Maßeinheit. Hinzuweisen ist darauf, dass nach diesem Modell die Konzentration einem linearen Trend unterliegt, während der Effekt des Durchflusses auf die Kon-

zentration zeitlich konstant ist. Zweckmäßigerweise wird dieses Modell ebenso wie das Verfahren von Hebbel auf der Basis eines gleitenden Zeitfensters mit einer Länge von 7 Jahren eingesetzt.

Für die multiplikativ adjustierte Fracht zum Zeitpunkt t ergibt sich

$$L_{t,a} = \frac{\alpha + (\beta + \delta t + \textit{season})q_{0t}}{\alpha + (\beta + \delta t + \textit{season})q_t} L_t$$

$$= \frac{\alpha / (\beta + \delta t + \textit{season}) + q_{0t}}{\alpha / (\beta + \delta t + \textit{season}) + q_t} L_t$$

wobei q_{0t} wiederum das langjährige Monatsmittel des Durchflusses für den zum Zeitpunkt t gehörigen Monat bezeichnet.

B 2.4 Lokale Regression mit Saison und verzögertem Durchflusseffekt (Methode L2)

Die CQ-Beziehung ist vielfach nicht nur vom aktuellen, sondern auch von früheren Durchflüssen abhängig, wobei die Erfahrung zeigt, dass bei zunehmendem Durchfluss mit höheren Konzentrationen, bei abnehmenden Durchflüssen jedoch mit geringeren Konzentrationen zu rechnen ist. So ist es naheliegend, das im vorigen Abschnitt beschriebene Modell um einen verzögerten Durchflusseffekt wie folgt zu erweitern:

$$c_t = \frac{\alpha}{q_t} + \frac{\gamma}{q_{t-1}} + \beta + \delta t + \textit{season} + \varepsilon_t$$

wobei q_{t-1} den am Vortag gemessenen Durchfluss bezeichnet und *season* wie im vorigen Abschnitt definiert ist. Dabei ist zu beachten, dass am Tag $t-1$ zwar ein Durchflusswert, in der Regel jedoch kein Messwert vorliegt, denn typischerweise werden die Messungen näherungsweise im 2-Wochen-Rhythmus oder monatlich durchgeführt.

Es hat sich als günstig erwiesen, aufgrund der höheren Anzahl von Parametern und der dadurch etwas geringeren Stabilität der Schätzwerte die Fensterbreite bei der Regressionsschätzung von 7 auf 8 Jahre zu erweitern. Dies bedeutet, dass eine höhere Flexibilität bei der Modellanpassung durch eine etwas geringere zeitliche Flexibilität erkaufte wird.

Für die multiplikativ adjustierte Fracht zum Zeitpunkt t ergibt sich

$$L_{t,a} = \frac{\alpha + \gamma + (\beta + \delta t + \text{season})q_{0t}}{\alpha + \gamma \frac{q_t}{q_{t-1}} + (\beta + \delta t + \text{season})q_t} L_t$$

$$= \frac{(\alpha + \gamma)/(\beta + \delta t + \text{season}) + q_{0t}}{\left(\alpha + \gamma \frac{q_t}{q_{t-1}}\right)/(\beta + \delta t + \text{season}) + q_t} L_t$$

wobei q_{0t} wiederum das langjährige Monatsmittel des Durchflusses für den zum Zeitpunkt t gehörigen Monat bezeichnet.

Damit hängt die adjustierte Fracht einerseits ab von $\beta + \delta t + \text{season}$, d.h. von Trend und Saison der Konzentrationszeitreihe, andererseits von den Parametern α und γ . Zu bemerken ist noch, dass der Parameter γ typischerweise positiv sein sollte, denn dann ergibt sich bei Anschwellen des Stromes eine zusätzliche Reduzierung der adjustierten Fracht, während ein Zurückgehen des Stromes zu einer leichten Erhöhung der adjustierten Fracht beiträgt.

B 2.5 Lokale Regression mit Temperatur und verzögertem Durchflusseffekt (Methode L3)

Um eine möglichst einfache Modellierung der CQ-Beziehung zu erhalten, liegt der Gedanke nahe, die Saison-Modellierung durch einen Temperatureffekt zu ersetzen, der möglicherweise einen ähnlichen Jahresgang aufweist. So ergibt sich in Abänderung des im vorigen Abschnitt beschriebenen Modells folgende CQ-Beziehung:

$$c_t = \frac{\alpha}{q_t} + \frac{\gamma}{q_{t-1}} + \beta + \delta t + \eta w_t + \varepsilon_t$$

wobei w_t die Wassertemperatur am Tag t bezeichnet. Die Parameterschätzung erfolgt für dieses Modell ebenso wie für Methode L1 auf der Basis eines gleitenden Zeitfensters, wobei aufgrund des bei Voruntersuchungen festgestellten instabileren Verhaltens der Schätzfunktion ein auf acht Jahre verlängertes Zeitfenster gewählt wird.

Für die multiplikativ adjustierte Fracht zum Zeitpunkt t ergibt sich die Gestalt

$$L_{t,a} = \frac{\alpha + \gamma + (\beta + \delta t + \eta w_t) q_{0t}}{\alpha + \gamma \frac{q_t}{q_{t-1}} + (\beta + \delta t + \eta w_t) q_t} L_t ,$$

d.h. die adjustierte Fracht hängt ab von den Parametern α , γ und dem Ausdruck $\beta + \delta t + \eta w_t$.

B 2.6 Lokale Regression mit Saison, Temperatur und verzögertem Durchflusseffekt (Methode L4)

Kombiniert man die beiden in den vorigen Abschnitten beschriebenen Modelle, ergibt sich die folgende CQ-Beziehung:

$$c_t = \frac{\alpha}{q_t} + \frac{\gamma}{q_{t-1}} + \beta + \delta t + \eta w_t + \gamma_{1ij} \sin \frac{2\pi t_{ij}}{m} + \gamma_{2ij} \cos \frac{2\pi t_{ij}}{m} + \gamma_{3ij} \sin \frac{2\pi t_{ij}}{2m} + \gamma_{4ij} \cos \frac{2\pi t_{ij}}{2m} + \varepsilon_{ij}$$

wobei w_t wiederum die Wassertemperatur am Tag t bezeichnet. Die Parameterschätzung erfolgt für dieses Modell auf der Basis eines gleitenden Zeitfensters wiederum mit einer Länge von acht Jahren.

Für die multiplikativ adjustierte Fracht zum Zeitpunkt t ergibt sich die Gestalt

$$L_{t,a} = \frac{\alpha + \gamma + (\beta + \delta t + \eta w_t + \text{season})q_{0t}}{\alpha + \gamma \frac{q_t}{q_{t-1}} + (\beta + \delta t + \eta w_t + \text{season})q_t} L_t$$

wobei der Saisonterm wie oben definiert ist.

B 2.7 Schätzung mittels Splines (Methode S1)

Die oben beschriebenen Verfahren setzen voraus, dass die Durchfluss-Fracht-Beziehung näherungsweise linear ist. Für Parameter, bei denen diese Näherung nicht gerechtfertigt ist, bietet sich eine flexible Anpassung der CQ-Beziehung über einen kubischen Spline an. Die Berechnung dieses kubischen Splines kann als lineare Glättung aufgefasst werden, wobei der Glättungsparameter über die Freiheitsgrade, d.h. die Spur der linearen Abbildung festgelegt wird (gemäss der Vorgehensweise von Hastie und Tibshirani). Für die Spur wird ein Wert von ca. 4 vorgegeben. Bezeichnet $s(\cdot)$ die Splinefunktion, so kann die CQ-Beziehung dargestellt werden als

$$c_t = s(q_t) + \varepsilon_t$$

Bei Methode S1 wird unterstellt, dass der Spline auf der Basis aller verfügbaren Messwerte ermittelt wird, d.h. es wird eine globale, trendunabhängige Abhängigkeit zwischen Durchfluss und Konzentration unterstellt. Zweckmäßig ist eine solche Annahme sicherlich nicht für die Betrachtung langer Reihen, doch für kurze Reihen, die nicht länger als 7 oder 8 Jahre sind, erscheint die Annahme einer statischen CQ-Beziehung zur Frachtadjustierung als einfaches und praktikables Verfahren.

Für die multiplikativ adjustierte Fracht zum Zeitpunkt t ergibt sich die Gestalt

$$L_{t,a} = \frac{s(q_{0t})q_{0t}}{s(q_t)q_t} L_t ,$$

d.h. für die Adjustierung entscheidend ist neben dem Verhältnis von aktuellem Durchfluss q_t und langjährigem Durchflussmittelwert q_{0t} das Verhältnis zwischen den Splinewerten an der Stellen q_t und q_{0t} .

B 2.8 Schätzung mittels lokaler Splines (Methode S2)

Um zeitliche Trends besser abbilden zu können, ist es naheliegend, die Splineberechnung nicht global durchzuführen, sondern hierzu wie bei den Methoden L1 bis L4 eine Fenstertechnik zu verwenden. Da keine weiteren Parameter zu berücksichtigen sind, kann ein kleineres Datenfenster verwendet werden. In Methode S2 wurde daher zur Splineberechnung ein Fenster mit einer Länge von drei Jahren verwendet.

B 3 Berechnung adjustierter Frachten auf Basis der Jahresstichprobe

B 3.1 Verwendung des Vorhersagewertes der LQ-Funktion

Eine einfache Alternative zu den in Kapitel 5 bzw. in Anhang B2 beschriebenen Methoden besteht darin, die LQ-Funktion jahresweise nur auf Basis der Daten des betreffenden Jahres zu bestimmen und dann den Vorhersagewert dieser LQ-Funktion für den langjährigen mittleren Durchfluss als adjustierte Fracht zu verwenden. Diese Vorgehensweise wurde durch die Arbeitsgruppe WGSaEM diskutiert und anhand der $\text{NO}_3\text{-N}$ - und der P_{Total} -Frachtreihen für Lobith/Rhein und Herbrum/Ems erprobt.

Im folgenden bezeichnet L_{ij} bzw. q_{ij} Fracht und Durchfluss der j -ten Stichprobe im Jahr i und q_0 bezeichnet den langjährigen Durchflussmittelwert über alle Monate. Zwei LQ-Funktionen wurden unter der Voraussetzung Gamma-verteilter Fehler angepasst:

Y1: $L_{ij} = \alpha_i + \beta_i q_{ij} + \varepsilon_{ij}$, $j=1, \dots, m$, mit dem zugehörigen adjustierten Frachtwert $\hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_i q_0$.

Y2: $L_{ij} = s_i(q_{ij}) + \varepsilon_{ij}$, $j=1, \dots, m$, mit dem zugehörigen adjustierten Frachtwert $s_i(q_0)$.

B 3.2 Vergleich der Ergebnisse

Zum Vergleich der Ergebnisse mit den in Kapitel 5 beschriebenen Adjustierungsverfahren wurde ein LOESS-Smoother der Frachtwerte auf der Basis eines 8 Jahre umfassenden Zeitfensters ermittelt und daraus die Residualstandardabweichung berechnet. Die Ergebnisse (in t/a) sind in der folgenden Tabelle wiedergegeben:

Tab. B 3.1: Residualstandardabweichungen der Jahreswerte im Vergleich

	Lobith		Herbrum	
	NO ₃ -N	P _{Total}	NO ₃ -N	P _{Total}
OSPAR	37412	3544	3586	226
Y1	12808	3241	2879	152
Y2	13002	2757	2083	152
L1	9076	2545	1300	115

Bei den Ergebnissen von L1 wurde zusätzlich eine sich (allerdings nur geringfügig auswirkende) Niveaurektur berücksichtigt, um die Ergebnisse besser vergleichen zu können. Offenbar erweist sich die Methode L1 bezüglich der Schwankungen der Frachten von Jahr zu Jahr gegenüber den Methoden Y1 und Y2 als deutlich überlegen. Dennoch ermöglicht bereits die Methode Y2 gegenüber der OSPAR-Fracht eine erhebliche Reduzierung der Schwankungen.

B 3.3 Interpretation als additiv adjustierte Frachten

Im direkten Vergleich der Ergebnisse der Methoden L1 sowie Y1 und Y2 zeigte sich eine starke Ähnlichkeit. Dies erklärt sich daraus, dass die gemäss Y1 und Y2 berechneten Frachtwerte als additiv adjustierte Frachten interpretiert werden können: Für die additiv adjustierte Fracht auf Basis des Modells

$$L_{ij} = \alpha_i + \beta_i q_{ij} + \varepsilon_{ij}, j=1, \dots, m$$

erhält man

$$\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m L_{ija} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (L_{ij} - L_{ije} + L_{ijm}) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (L_{ij} - (\hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_i q_{ij}) + (\hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_i q_0)) = \hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_i q_0,$$

denn

$$\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m L_{ij} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (\hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_i q_{ij}).$$

Für die adjustierte Fracht auf Basis des Modells

$$L_{ij} = s_i(q_{ij}) + \varepsilon_{ij}, j=1, \dots, m,$$

ergibt sich mit analoger Argumentation

$$\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m L_{ija} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (L_{ij} - L_{ije} + L_{ijm}) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (L_{ij} - s_i(q_{ij}) + s_i(q_0)) = s_i(q_0).$$

Daraus folgt, dass die mit den Methoden Y1 und Y2 ermittelten Frachtwerte als additiv adjustierte Frachten auf Basis eines linearen LQ-Modells bzw. eines Spline-Modells aufgefasst werden können.

B 3.4 Sind die mit den Methoden Y1 und Y2 ermittelten adjustierten Frachten unkorreliert?

Die Methoden Y1 und Y2 zeichnen sich dadurch aus, dass die daraus ermittelten Jahresfrachten nur von den Daten der zugehörigen Jahresstichprobe abhängig sind. Damit ist gewährleistet, dass die Jahresfrachten stochastisch unabhängig sind, wenn dies auch für die zugehörigen Durchfluss- und Konzentrationswerte gilt. Andernfalls kann jedoch die real bestehende Autokorrelation der jährlichen Durchflüsse eine erhebliche Autokorrelation in den adjustierten Jahresfrachten induzieren, wie das folgende hypothetische Beispiel illustriert.

Um dieses Beispiel direkt nachvollziehen zu können, wird angenommen, dass in jedem Jahr nur zwei Messungen durchgeführt werden, dass keine Messfehler auftreten, und dass die LQ-Beziehung im Winter die Gestalt

$$L = \alpha_w + \beta_w q$$

und im Sommer die Form

$$L = \alpha_s + \beta_s q$$

aufweist. Dabei wird angenommen, dass diese LQ-Beziehung über die Jahre konstant bleibt, so dass auch die adjustierte Fracht konstant bleiben müsste. Weiterhin bezeichnet q_{is} den Sommerdurchfluss und q_{iw} den Winterdurchfluss im Jahr i . Dann errechnen sich die Koeffizienten der angepassten LQ-Beziehung

$$L_{ij} = \alpha_i + \beta_i q_{ij} + \varepsilon_{ij}$$

aus den Gleichungen

$$\alpha_i + \beta_i q_{iw} = \alpha_w + \beta_w q_{iw}$$

$$\alpha_i + \beta_i q_{is} = \alpha_s + \beta_s q_{is}$$

Grafisch erhält man die angepasste LQ-Beziehung, indem man die beiden Punkte (q_{iw} , $\alpha_w + \beta_w q_{iw}$) und (q_{is} , $\alpha_s + \beta_s q_{is}$) durch eine Gerade verbindet. In der folgenden Abbildung wurde unterstellt, dass die LQ-Beziehung im Winter die Gestalt

$$L = 0,8 + 0,2 q$$

und im Sommer die Form

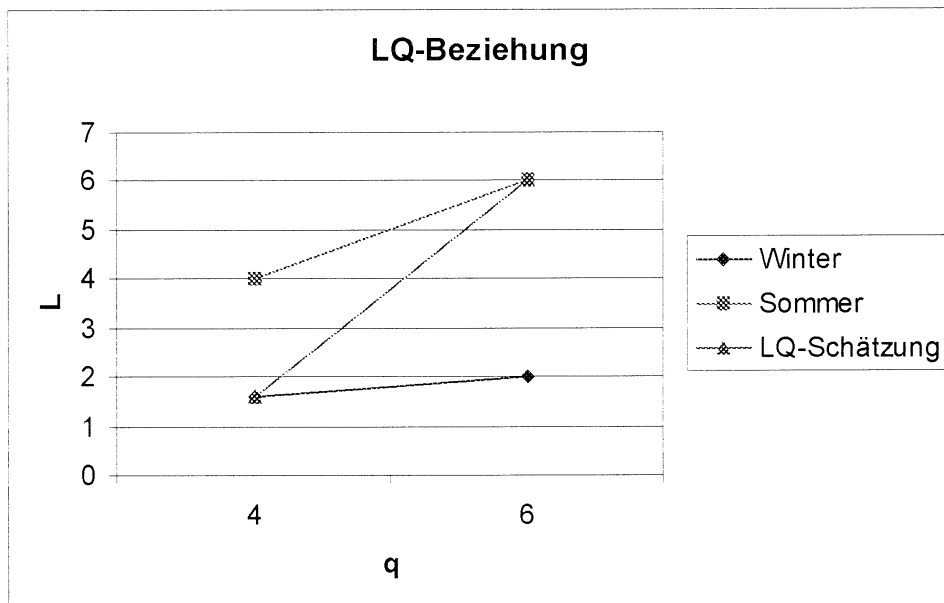
$$L = q$$

aufweist. Weiterhin wird unterstellt, dass es sich um ein besonders feuchtes Jahr handelt mit den Durchflüssen $q_{iw} = 4$ und $q_{is} = 6$. Daraus ergibt sich für die angepasste LQ-Beziehung

$$L = -7,2 + 2,2 q$$

Wird weiterhin angenommen, dass der langjährige Durchflussmittelwert bei $q_0 = 3$ liegt, erhält man für den adjustierten Frachtwert $\alpha_i + \beta_i q_0 = -0,6$.

Abb. B 3.1: Saisonale Schwankungen der LQ-Beziehung können Autokorrelation in den mit den Methoden Y1 oder Y2 adjustierten Frachten induzieren.



Ändert sich nur der Sommerdurchfluss auf $q_{is} = 3$, wird die Steigung der angepassten LQ-Beziehung negativ, und für die adjustierte Fracht ergibt sich der Wert 3.

Dieses einfache Beispiel zeigt, dass aufgrund saisonaler Schwankungen der LQ-Beziehung durch zufällige Schwankungen der Durchflüsse erhebliche Schwankungen der adjustierten Fracht selbst dann induziert werden können, wenn weitere zufällige Schwankungen der Konzentration ausgeschlossen sind. Daraus folgt weiterhin, dass die Autokorrelation der Durchflussreihe eine erhebliche Autokorrelation in der adjustierten Frachtreihe induzieren kann.

Die Verwendung der Methoden Y1 und Y2 kann somit nur für den Fall empfohlen werden, dass keine saisonalen Schwankungen in der CQ- bzw. LQ-Beziehung festgestellt werden können. Andernfalls ist eine angemessene Saisonanpassung erforderlich, um die oben beschriebenen Effekte zu vermeiden.

B 4 Autokovarianz der adjustierten Jahresfracht

Zur statistischen Beurteilung der adjustierten Jahresfracht bedeutsam ist neben dem Erwartungswert insbesondere die Kovarianzmatrix der Frachtreihe. So sollte die Adjustierung gewährleisten, dass die Varianz der Frachtwerte möglichst gering und ihre Kovarianzen möglichst vernachlässigbar sind. Letzteres ist erforderlich, um die adjustierten Jahresfrachten einer Trendanalyse unterziehen zu können.

Die folgenden Berechnungen beziehen sich auf additiv adjustierte Frachten, die als Näherung für multiplikativ adjustierte Frachten aufgefasst werden können und rechentechnisch leichter als die ersteren behandelt werden können. Da die in Kapitel 2 beschriebenen Schätzer linear in den gemessenen Konzentrationen sind, kann man leicht zeigen, dass auch die additiv adjustierte Jahresfracht eine lineare Funktion der Konzentrationsmesswerte ist, d.h. der Vektor $L_a = (L_{1a}, L_{2a}, \dots, L_{Ia})'$ der additiv adjustierten Jahresfrachten $L_{ia} = L_i - L_{ie} + L_{im}$ besitzt die Darstellung

$$L_a = S(Q)C$$

mit einer $(I \times N)$ -Matrix $S(Q)$, die von den Durchflüssen q_t , nicht aber von den Konzentrationen c_t abhängig ist, während $C = (c_{t_1}, c_{t_2}, \dots, c_{t_N})'$ einen $(N \times 1)$ -Vektor bezeichnet, dessen Komponenten die Konzentrationsmesswerte c_{t_i} sind.

Beachtet man nun, dass C ebenfalls von der Durchflussreihe abhängig ist, liegt es nahe, das folgende lineare Modell zu unterstellen:

$$C = B(Q) + \varepsilon,$$

mit $\text{Cov}(\varepsilon) = \sigma^2 I_N$ und der Einheitsmatrix I_N . Unter der Annahme, dass der Zufallsvektor ε vom Zufallsvektor der Durchflüssen $Q = (q_t)$ stochastisch unabhängig ist, ergibt sich

$$\text{Cov}(L_a) = E[L_a L_a'] - E[L_a] E[L_a'] \quad \text{mit}$$

$$E[L_a] = E[S(Q)C] = E[S(Q) B(Q)] \quad \text{und}$$

$$\begin{aligned} E[L_a L_a'] &= E[S(Q) C C' S(Q)'] = E[S(Q) B(Q) B(Q)' S(Q)'] + E[S(Q) \varepsilon \varepsilon' S(Q)'] \\ &= E[S(Q) B(Q) B(Q)' S(Q)'] + \sigma^2 E[S(Q) S(Q)']. \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\text{Cov}(L_a) = \sigma^2 E[S(Q) S(Q)'] + \text{Cov}(S(Q) B(Q)).$$

Es bleibt festzuhalten, dass diese Gleichung die stochastische Unabhängigkeit und näherungsweise Homoskedastie des Fehlerterms ε , sowie dessen Unabhängigkeit von der Durchflussreihe voraussetzt. Bei groben Abweichungen von diesen Voraussetzungen ist eine Modifikation der Gleichung erforderlich.

Sofern das verwendete statistische Modell aus Kapitel 3 als zutreffend angesehen werden kann, entspricht der Ausdruck $S(Q)B(Q)$ für die Regressionsschätzer L1-L4 exakt und für die übrigen Verfahren zumindest näherungsweise dem Vektor der geschätzten mittleren Jahresfrachten L_{im} , d.h.

$$S(Q) B(Q) = L_{im}.$$

Diese geschätzten mittleren Jahresfrachten sind von den langjährigen Monatsmitteln der Durchflüsse bestimmt, so dass die Zufallsschwankungen der Durchflüsse selbst nur indirekt über die Schätzung der CQ-Beziehung wirksam werden. Dies bedeutet jedoch, dass $\text{Cov}(S(Q) B(Q))$ zumindest um eine Größenordnung kleiner sein muss als die durch ε induzierte Kovarianzmatrix $\sigma^2 E[S(Q) S(Q)']$. Somit kann $\text{Cov}(S(Q) B(Q))$ in erster Näherung vernachlässigt werden und es gilt approximativ

$$\text{Cov}(L_a) = \sigma^2 E[S(Q) S(Q)']$$

Man beachte, dass (Q) in diesem Ausdruck den stochastischen Prozess der Durchflussreihe repräsentiert, so dass $S(Q)$ eine Zufallsmatrix bezeichnet. Für jede feste Realisation (q) dieses stochastischen Prozesses kann die Matrix $S(q)$ berechnet werden, und damit erhält man die bedingte Kovarianzmatrix

$$\text{Cov}(L_a | (q)) = \sigma^2 S(q) S(q)'$$

für die gegebene Durchflussreihe (q). Diese Kovarianzmatrix wurde für verschiedene Schätzverfahren und verschiedene Durchflussreihen berechnet. Dabei zeigten sich nur geringe Unterschiede zwischen den Schätzverfahren und deutlichere Unterschiede je nach verwendeter Durchflussreihe. Jedoch waren in allen Fällen nur geringe Korrelationen festzustellen. Mittelung der bedingten Kovarianzmatrix $\text{Cov}(L_a|q)$ über beliebig viele Realisationen (q) dieses Prozesses liefert asymptotisch die gesuchte Kovarianzmatrix $\text{Cov}(L_a)$.

B 4.1 Kovarianzen der adjustierten Jahresfrachten bei Lobith und Herbrum

Unter der Voraussetzung eines 10 Jahre umfassenden Messzeitraums und unter Verwendung der Durchflussreihe des Rheins bei Lobith 1973-1995 ergab sich bei Methode L1 unter der Annahme vierzehntägiger Messungen und unter Zugrundelegung der Maßeinheit m^3/s die folgende, noch mit dem Faktor $10000 \times \sigma^2$ zu multiplizierende Kovarianzmatrix der adjustierten Jahresfrachten:

27.7	1.0	0.8	0.4	0.2	-0.0	-0.2	-0.1	-0.2	-0.1
1.0	28.2	0.2	0.2	0.0	-0.1	-0.2	-0.1	-0.0	-0.1
0.8	0.2	28.8	-0.4	-0.1	0.1	-0.1	-0.1	-0.0	-0.0
0.4	0.2	-0.4	29.5	-0.5	-0.1	0.3	0.1	-0.2	-0.3
0.2	0.0	-0.1	-0.5	29.6	-0.5	0.0	0.2	-0.0	-0.0
-0.0	-0.1	0.1	-0.1	-0.5	29.1	-0.3	0.1	0.4	0.2
-0.2	-0.2	-0.1	0.3	0.0	-0.3	28.2	0.0	0.5	0.7
-0.1	-0.1	-0.1	0.1	0.2	0.1	0.0	27.7	0.5	1.2
-0.2	-0.0	-0.0	-0.2	-0.0	0.4	0.5	0.5	28.8	1.0
-0.1	-0.1	-0.0	-0.3	-0.0	0.2	0.7	1.2	1.0	28.8

Die zugehörige Korrelationsmatrix zeigt eine sehr leichte negative Korrelation in der Mitte der Reihe und eine sehr leichte positive Korrelation an den Rändern, doch selbst dort liegen die Werte nicht höher als ca. 3,5%. Da der mittlere langjährige Durchfluss bei ca. $2320 \text{ m}^3/\text{s}$ liegt, erhält man für die relative Standardabweichung der adjustierten Jahresfracht den Wert

$$\sigma_{rel} \frac{\sqrt{28 \times 10000}}{2320} = 0,228 \sigma_{rel},$$

wobei σ_{rel} die relative Standardabweichung der Konzentrationsmesswerte bezeichnet. σ_{rel} kann geschätzt werden mittels der zugehörigen relativen Residualstandardabweichung.

Unter der Annahme monatlicher Messungen, ansonsten aber identischer Voraussetzungen wie oben, ergibt sich folgende, wiederum mit dem Faktor $10000 \times \sigma^2$ zu multiplizierende Kovarianzmatrix der adjustierten Jahresfrachten:

59.5	2.3	1.9	0.8	0.3	-0.1	-0.5	-0.2	-0.4	-0.4
2.3	60.7	0.5	0.5	0.1	-0.2	-0.4	-0.3	-0.2	-0.3
1.9	0.5	61.9	-0.8	-0.0	0.3	-0.2	-0.3	-0.2	-0.1
0.8	0.5	-0.8	63.4	-1.1	0.0	0.7	0.3	-0.4	-0.5
0.3	0.1	-0.0	-1.1	63.7	-1.0	0.1	0.4	0.0	0.0
-0.1	-0.2	0.3	0.0	-1.0	62.8	-0.6	0.4	0.9	0.5
-0.5	-0.4	-0.2	0.7	0.1	-0.6	60.9	0.1	1.2	1.8
-0.2	-0.3	-0.3	0.3	0.4	0.4	0.1	60.0	1.3	2.7
-0.4	-0.2	-0.2	-0.4	0.0	0.9	1.2	1.3	62.1	2.4
-0.4	-0.3	-0.1	-0.5	0.0	0.5	1.8	2.7	2.4	62.2

Die Korrelationsstruktur dieser Kovarianzmatrix ist der Struktur der oben gezeigten Matrix sehr ähnlich. Auch an den Rändern liegt die Korrelation nicht höher als 4% und ist somit vernachlässigbar. Hingegen erhält man für die Varianz mit ca. $10000 \times \sigma^2 \times 61 \text{ [(m}^3/\text{s})^2]$ einen erwartungsgemäß wesentlich höheren Wert, so dass sich für die relative Standardabweichung der adjustierten Jahresfracht der Wert

$$\sigma_{rel} \frac{\sqrt{61 \times 10000}}{2320} = 0,337 \sigma_{rel},$$

ergibt. Für Ems/Herbrum ergab sich für den Zeitraum 1980-1997 bei 1-monatiger Beprobung folgende, noch mit dem Faktor $100 \times \sigma^2$ zu multiplizierende Kovarianzmatrix:

13.06	-0.26	0.04	0.01	-0.06	-0.02	0.03	0.02	-0.06	-0.05
-0.26	12.56	0.02	0.10	0.10	-0.03	-0.05	-0.00	0.02	-0.04
0.04	0.02	11.74	0.06	0.17	0.18	0.08	-0.08	0.00	0.03
0.01	0.10	0.06	11.64	0.10	0.21	0.22	-0.06	-0.13	-0.07
-0.06	0.10	0.17	0.10	11.38	0.11	0.14	0.11	-0.02	0.00
-0.02	-0.03	0.18	0.21	0.11	11.75	-0.08	-0.01	0.27	0.09
0.03	-0.05	0.08	0.22	0.14	-0.08	13.77	-0.42	0.21	0.30
0.02	-0.00	-0.08	-0.06	0.11	-0.01	-0.42	14.40	-0.07	0.42
-0.06	0.02	0.00	-0.13	-0.02	0.27	0.21	-0.07	13.09	0.39
-0.05	-0.04	0.03	-0.07	0.00	0.09	0.30	0.42	0.39	12.63

Damit liegen die ermittelten Korrelationen noch deutlich unterhalb der für den Rhein ermittelten Werte. Dies erklärt sich aus der größeren Schwankungsbreite der Durchflusswerte, die einen geringeren Schätzfehler für die CQ-Beziehung ermöglichen.

Da der mittlere langjährige Durchfluss bei ca. $93 \text{ m}^3/\text{s}$ liegt, erhält man für die relative Standardabweichung der adjustierten Jahresfracht den Wert

$$\sigma_{rel} \frac{\sqrt{13 \times 100}}{93} = 0,388 \sigma_{rel},$$

d.h. im Vergleich zum Rhein liegt die relative Streuung der adjustierten Fracht trotz des geringeren Schätzfehlers der CQ-Beziehung deutlich höher. Dies erklärt sich aus der wesentlich stärker ausgeprägten Saisonalität der Durchflussreihe, welche dazu führt, dass die Jahresfracht bei Herbrum durch die Einträge während der Wintermonate dominiert wird, so dass sich der Stichprobenfehler stärker auswirken kann.

B 4.2 Zur Zulässigkeit von Trendanalysen auf der Basis adjustierter Jahresfrachten

Damit die Reihe der adjustierten Jahresfrachten zur Trendanalyse im Sinne von Kapitel 2 herangezogen werden kann, ist sicherzustellen, dass diese Reihe näherungsweise als unkorreliert angesehen werden kann, bzw. dass durch die Adjustierung keine deutliche Korrelation induziert wird.

Im vorigen Abschnitt wurde die Kovarianzmatrix für 10-jährige Frachtreihen unter verschiedenen Voraussetzungen berechnet. Dabei zeigte sich, dass die Korrelation zwischen adjustierten Jahresfrachten 4% nicht übersteigt. In einer Simulationsstudie auf der Basis dieser Kovarianzmatrizen wurde überprüft, mit welchen Auswirkungen bezüglich des Fehlers erster Art bei der Erfassung linearer Trends zu rechnen ist. Dabei zeigte sich, dass bei Methode L1 die Wahrscheinlichkeit für einen Fehler erster Art bei einem formalen Signifikanzniveau von 5% geringfügig auf den Wert 5,5% bzw. 5,6% für Rhein/Lobith (mit vierzehntägiger bzw. monatlicher Beprobung) und auf 5,4% für Ems/Herbrum (mit 1-monatiger Beprobung) erhöht. Dieser leichte Anstieg der Fehlerwahrscheinlichkeit ist in der Praxis kaum nachweisbar und ist deshalb als vernachlässigbar anzusehen.

Die Berechnungen setzen voraus, dass die Annahmen des zugrundeliegenden statistischen Modells erfüllt sind. Jedoch kann auch bei Modellabweichungen, etwa bei leichten Abweichungen von der Linearität der LQ-Beziehung, in der Regel davon ausgegangen werden, dass die resultierende Autokorrelation vernachlässigbar bleibt. Eine Ausnahme gilt für den Fall, dass die Komponenten des Fehlerterms ε autokorreliert sind. In diesem Falle ist auch die nichtadjustierte Jahres-

fracht autokorreliert, und diese Autokorrelation überträgt sich auf die adjustierte Jahresfracht. Ein Beispiel verdeutlicht diesen Zusammenhang:

Unterstellt man monatliche Messungen bei Lobith und gilt zunächst die Annahme der Unkorreliertheit des Fehlerterms ε , liegt bei einer Stichprobenlänge von 10 Jahren die durch den Fehlerterm ε induzierte mittlere Varianz der nichtadjustierten Fracht im i -ten Jahr L_i bei $631.000 \times \sigma^2$. Unter denselben Annahmen hat die mittlere Varianz des zur Berechnung der adjustierten Fracht $L_{i,a}$ verwendeten Korrekturterms $L_{i,a} - L_i = -L_{i,est} + L_{i,mean}$ den Wert $28.000 \times \sigma^2$ (bei Verwendung von Modell L1). Dies bedeutet, dass die Streuung der adjustierten Fracht im wesentlichen durch die Varianz der nichtadjustierten Fracht bestimmt ist, denn letztere ist um den Faktor 22 größer als die Varianz des Korrekturterms.

Unterstellt man nun für den Fehlerterm ε einen autoregressiven Prozess erster Ordnung mit $\rho=0,8$ (in keinem der durchgerechneten Modelle konnte eine auch nur annähernd ähnlich starke Autokorrelation festgestellt werden), so steigt die Varianz der nichtadjustierten Jahresfracht an auf $3.150.000 \times \sigma^2$, während die Varianz des Korrekturterms einen weniger starken Anstieg auf $71410 \times \sigma^2$ aufweist. In diesem Falle ist die Streuung der nichtadjustierten Fracht sogar um den Faktor 44 größer als die Varianz des Korrekturterms.

Qualitativ ähnlich Resultate wurden auch für andere Fehlerprozesse festgestellt. Es kann gefolgert werden, dass durch den Fehlerterm ε induzierte Autokorrelationen bei nichtadjustierten und adjustierten Jahresfrachten in der gleichen Größenordnung liegen. Da in der Praxis bei der Trendbestimmung auf der Basis von nicht-adjustierten Jahresfrachten die serielle Korrelation außer Acht gelassen wird, erscheint diese Vorgehensweise auch für die adjustierten Jahresfrachten zulässig.

B 4.3 Autokorrelation der OSPAR-Fracht

Wie oben ausgeführt, liegt die durch den Fehlerterm ε induzierte Kovarianzstruktur bei adjustierten und nichtadjustierten Frachtreihen in derselben Größenordnung. Nichtadjustierte Frachtwerte werden jedoch zusätzlich durch Schwankungen der Durchflussreihe beeinflusst, so dass die Kovarianzmatrix dieser Frachtwerte zusätzlich durch die Autokorrelation der Durchflussreihe belastet ist. Selbst wenn der Fehlerterm ε keine Autokorrelation aufweist, induziert die Autokorrela-

tion der Durchflussreihe bei ausgeprägter LQ-Funktion eine qualitativ gleichartige Autokorrelation in der Frachtreihe. Für den Rhein wurde ermittelt, dass bei Verwendung der OSPAR-Fracht aufgrund dieser Korrelation mit einer Erhöhung der Wahrscheinlichkeit für einen Fehler erster Art von dem formal vorgegebenen Wert 5% auf bis zu 17% zu rechnen ist. Mit dem letztgenannten Wert ist insbesondere dann zu rechnen, wenn die Konzentration nahezu durchflußunabhängig ist (wie dies zum Beispiel für Nitrat im Rhein der Fall ist) und wenn die durch den Fehlerterm ε verursachten Schwankungen klein sind im Vergleich zu den Schwankungen der jährlichen Durchflusswerte.

B 5 Die Wirkung verzögerter Durchflusseffekte auf die adjustierte Fracht

Das Ziel der Adjustierung besteht darin, die durch klimatische Schwankungen verursachte Variabilität der jährlichen Frachten zu reduzieren. Dabei stellt sich die Frage, welche Folgen die Aggregation der einzelnen Frachtwerte hat, wenn die CQ-Beziehung von verzögerten Durchflusseffekten abhängig ist.

Um ein besseres Verständnis von solchen Effekten zu erhalten, wurde eine einfache Simulationsstudie durchgeführt. Darin wurde angenommen, dass tägliche Messwerte verfügbar sind.

Um die Ergebnisse dieser Studie leicht interpretieren zu können, wurde für die Abflussreihe folgendes (unrealistisches) Modell vorausgesetzt:

$$q_{ij} = 6 + u_i + v_{ij},$$

wobei u_i und v_{ij} stochastisch unabhängige Zufallsvariablen bezeichnen, welche die zufälligen Schwankungen innerhalb und zwischen den Jahren beschreiben. Für die Fracht wurde folgendes Modell implementiert:

$$L_{ij} = 4 + q_{ij} + p \cdot q_{i,j-1} + w_{ij}$$

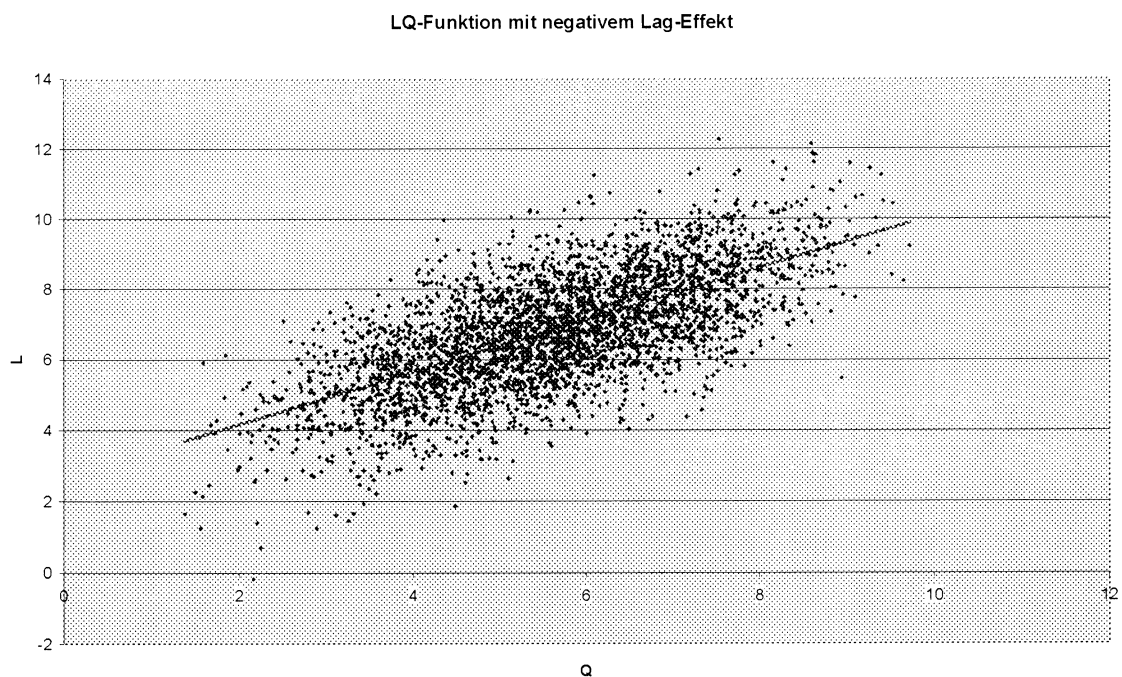
Darin bezeichnet p den verzögerten Durchflusseffekt des Durchflusses vom vorangegangenen Tag. Alle Zufallsvariablen u_i , v_{ij} und w_{ij} sind stochastisch unabhängig und standardnormalverteilt. Damit ist die mittlere Fracht über die Jahre konstant.

Die Simulationsstudie wurde für einen Zeitraum von 10 Jahren und verschiedene Werte von p durchgeführt. Die Modellparameter wurden mittels eines einfachen linearen Regressionsansatzes bestimmt und daraus die multiplikativ adjustierte Fracht berechnet. Dieser Ansatz führte bei Fehlen verzögerter Durchflusseffekte ($p=0$) zu einer substantiellen Reduktion der Variabilität von Jahr zu Jahr. Hingegen führte diese Methode bei sehr starken verzögerten Durchflusseffekten zu

einer deutlichen Überadjustierung für negative Werte von p , und zu Unteradjustierung im Falle positiver Werte von p .

Die folgende Abbildung zeigt für $p=-0,5$ die in der Simulation ermittelten 3650 Durchfluss-Fracht-Werte.

Abb. B 5.1: LQ-Funktion mit negativem Lag-Effekt



Die durchgezogene Gerade repräsentiert die lineare LQ-Funktion, welche durch Verwendung einer einfachen linearen Regression ermittelt wurde, ohne den Lag-Effekt zu berücksichtigen (Typ I). Würde man die LQ-Beziehung auf der Basis der Jahreswerte ermitteln, würde sich eine deutlich flachere LQ-Beziehung (Typ II) ergeben. Die Folge ist eine deutliche Überadjustierung der jährlichen adjustierten Fracht (Typ I), wie der folgenden Abbildung entnommen werden kann.

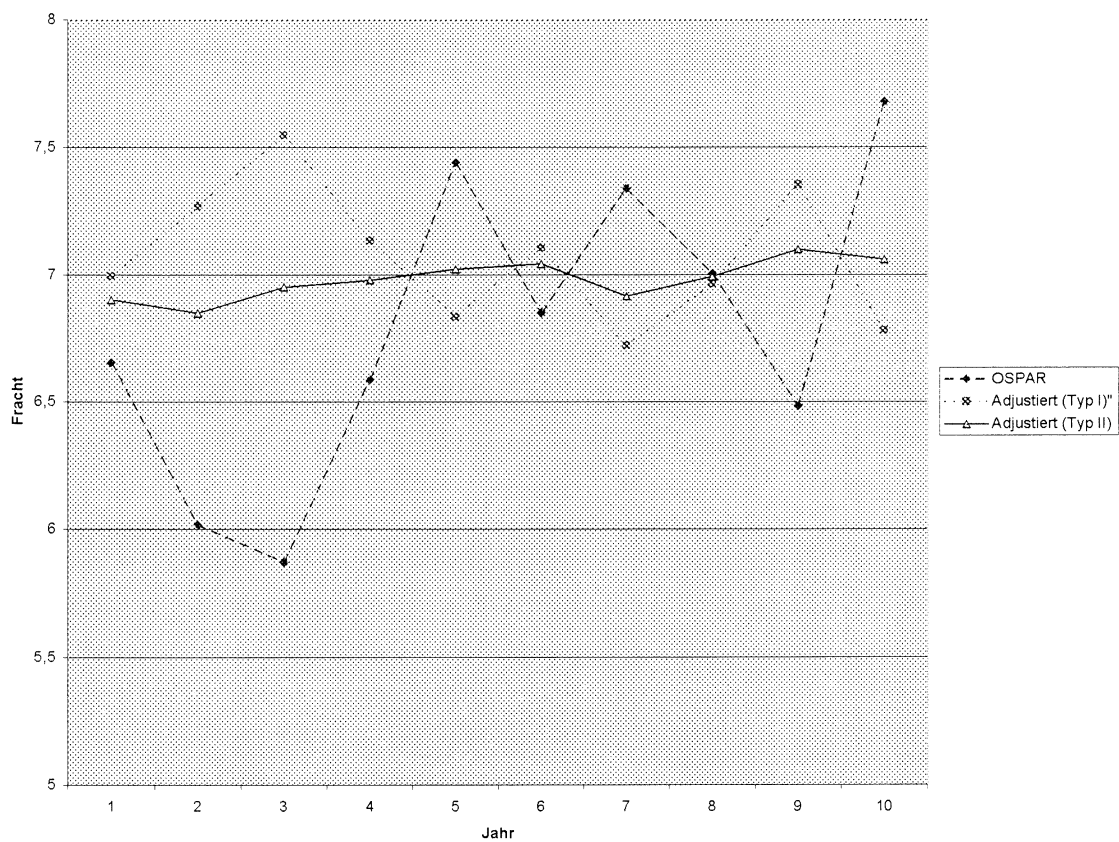
Wenn im Regressionsmodell auch der Lag-Effekt berücksichtigt wird, ergibt sich eine deutlich bessere Anpassung (Typ II).

Es kann gefolgert werden, dass verzögerte Durchflusseffekte eine deutliche Überadjustierung verursachen können, wodurch die varianzreduzierende Wirkung der Adjustierung zumindest teilwei-

se aufgehoben wird. Auch eine Unteradjustierung kann auftreten, wenn der Parameter p positiv wird. In beiden Fällen wirkt sich die Nichtbeachtung des Lag-Effektes varianzerhöhend aus. Somit wird empfohlen, mögliche verzögerte Durchflusseffekte durch Berechnung der Kreuzkorrelation zwischen der Residuenreihe und der Reihe der täglichen Durchflüsse zu überprüfen. Im Falle deutlicher Korrelation sollte das statistische Modell entsprechend erweitert werden.

Abb. B 5.2

Jahresfracht im Falle negativer Lag-Effekte



B 6 Zur Berechnung der Power-Funktion

Die post-hoc Power wird unter der Annahme ermittelt, dass ein linearer Trend auf der Basis des LOESS-Smoother berechnet wird. Die zugehörige Teststatistik hat die Gestalt

$$T = b / (c \cdot s_{RES}) \quad \text{wobei}$$

b = mit einfacher linearer Regression ermittelter Steigungskoeffizient

c = Konstante, und

$$s_{RES} = \sqrt{\frac{1}{n - df} RSS} = \text{Residualstandardabweichung}.$$

RSS bezeichnet die Quadratsumme der Residuen auf der Basis des LOESS-Smoother (unter Verwendung des üblichen 7-Jahre-Fensters), df bezeichnet die Spur der zugehörigen Smoother-matrix und n die Anzahl der Jahre. Die Konstante c lässt sich berechnen zu

$$c = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \left(i - \frac{n+1}{2} \right)^2},$$

c repräsentiert die Varianz des Schätzers für den Steigungskoeffizienten β unter der Annahme, dass die Varianz der zugrundeliegenden (adjustierten) Jahresfrachten bei 1 liegt. Die Steigung b und die Residualstandardabweichung s_{RES} sind dimensionsabhängig, so dass für Vergleichszwecke

- der relative Steigungskoeffizient $b_{rel} = b / \text{Level}$ sowie
- die relative Residualstandardabweichung s_{RES} / Level

herangezogen wird. Level steht hierbei jeweils für die mittlere Fracht im Untersuchungszeitraum. Offenbar kann die Teststatistik auch anhand dieser Parameter ermittelt werden.

Unter der Annahme stochastisch unabhängiger und identisch normalverteilter Fehlerterme mit der Varianz σ^2 ist die Teststatistik T approximativ nicht-zentral t-verteilt mit $(n-df)$ Freiheitsgraden und dem Nichtzentralitätsparameter

$$\delta = \frac{\beta}{\sigma} \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(i - \frac{n+1}{2} \right)^2}.$$

Sofern kein Trend vorliegt, d.h. $\beta=0$, verschwindet der Nichtzentralitätsparameter und T ist t-verteilt mit $(n-df)$ Freiheitsgraden. Für die statistische Prüfung der Hypothesen

$$H_0: \beta = 0$$

$$H_1: \beta < 0$$

kann somit die Nullhypothese H_0 zum Signifikanzniveau α dann abgelehnt werden, wenn die Teststatistik das α -Quantil der t-Verteilung unterschreitet, d.h. wenn $T < -t_{n-df, 1-\alpha}$. Die Wahrscheinlichkeit der Ablehnung der Nullhypothese ergibt sich zu

$$p = F_{T_{n-df, \delta}} \left(-t_{n-df, 1-\alpha} \right),$$

wobei $F_{T_{n-df, \delta}}$ die Verteilungsfunktion der nicht-zentralen t-Verteilung bezeichnet.

Für die Berechnungen wurde die Dauer des Erhebungszeitraums mit $n=10$ Jahren unterstellt. Für den Nichtzentralitätsparameter ergibt sich in diesem Falle bei einem Frachtrückgang um insgesamt 20% der Wert

$$\delta = \frac{-0,02}{s_{\text{Res}} / \text{Level}} \sqrt{82,5} = \frac{-0,02}{s_{\text{Res}} / \text{Level}} 9,083$$

und bei einem Rückgang um 50% der Wert

$$\delta = \frac{-0,05}{s_{\text{Res}} / \text{Level}} \sqrt{82,5} = \frac{-0,05}{s_{\text{Res}} / \text{Level}} 9,083$$

Für die relative Residualstandardabweichung werden die Daten vergangener Jahre eingetragen. Dabei ist festzuhalten, dass bei starken Niveauveränderungen im Zeitablauf anstelle der relativen Residualstandardabweichung auch die Standardabweichung der relativen Residuen verwendet werden kann. Dies verhindert bei starken Niveauunterschieden eine deutliche Überschätzung der tatsächlichen relativen Streuung.

Der hier verwendete Ansatz basiert auf der Annahme der Normalverteilung. Wenn die zufälligen Schwankungen der Frachtwerte nicht als normalverteilt angesehen werden kann, müsste ein Konzept zur Bestimmung der Power-Funktion entwickelt werden, welches auch dann anwendbar ist, wenn die genannten statistischen Modellvoraussetzungen nicht zutreffen. Eine denkbare Möglichkeit hierzu ergibt sich aus dem Bootstrap-Ansatz. Die Grundlage dieses Ansatzes besteht darin, dass nicht ein theoretisches Verteilungsmodell, sondern die empirische Verteilung der Daten verwendet wird, um die interessierenden Parameter zu bestimmen. Auf eine Ausformulierung dieses Ansatzes wird hier verzichtet, da die Annahme der Normalverteilung zumindest näherungsweise aufgrund des bei Zentralen Grenzwertsatzes als gerechtfertigt erscheint: Die adjustierte bzw. nichtadjustierte Jahresfracht lässt sich als das arithmetische (gewichtete) Mittel von einzelnen Frachtwerten auffassen. Weiterhin lässt die Anwendung eines Bootstrap-Ansatzes befürchten, dass der statistische Schätzfehler bei der Ermittlung der Powerfunktion bei Anwendung eines Bootstrap-Ansatzes weitaus größer ist, als bei Annahme der Normalverteilung.

B 7 Residualanalysen

Nahezu alle in diesem Vorhaben diskutierte Adjustierungsmethoden basieren auf verschiedenen statistischen Schätzverfahren. Zur Bewertung dieser Schätzverfahren können die Residuen, d.h. die Differenzen r_t zwischen Messwert und Schätzwert herangezogen werden.

Im günstigsten Fall weisen die Residuen weder systematische Trends noch Strukturbrüche auf, ihre Varianz ist näherungsweise konstant und Autokorrelation ist nicht nachweisbar.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist jedoch nicht primär die Bestimmung eines möglichst günstigen statistischen Modells für einen einzelnen Parameter, sondern die Erarbeitung eines praktikablen Verfahrens zur Adjustierung, wobei dieses Verfahren nicht nur für einzelne Parameter oder einzelne Flüsse einsetzbar sein sollte, sondern unter unterschiedlichsten Voraussetzungen in automatisierter Weise verwendbar bleiben muss. Daher dient die Residualanalyse in diesem Zusammenhang nur zur begleitenden Kommentierung der einzelnen Verfahren und zur Erfassung grober Modellfehler. Die eigentliche Bewertung der Schätzverfahren muss jedoch auf der Basis der adjustierten Frachten erfolgen. Dabei wird zugunsten von möglichst ‚robusten‘ und ‚einfachen‘ Verfahren bewusst in Kauf genommen, dass die statistische Modellanpassung nicht ‚optimal‘ ist. Hinzu kommt der empirische Befund, dass selbst vergleichsweise grobe Abweichungen von dem zugrundeliegenden statistischen Modell in der Regel nur sehr geringe Auswirkungen auf die adjustierten Jahresfrachten hat.

Folgende Techniken der Residualanalyse können herangezogen werden: Um mögliche Ausreißer zu entdecken, erfolgt die Betrachtung der Reihe der Konzentrationswerte, der Durchflussreihe sowie der Residualreihe selbst. Zur Überprüfung möglicher Abhängigkeiten der Residualvarianz vom Niveau werden die Darstellung der Residuen in Abhängigkeit von den Schätzwerten wiedergegeben. Weiterhin erfolgt die Darstellung der Residuen in Abhängigkeit vom Durchfluss, um den Durchflusseffekt zu überprüfen. Zur Überprüfung der statistischen Verteilung werden die Residuen außerdem im Histogramm visuell überprüft. Zur Erfassung zeitlicher Abhängigkeiten erfolgt die Darstellung der Residualkorrelationen sowie die Berechnung der Durbin-Watson-Statistik. Bedeutsam sind ferner die Kreuzkorrelationen der Residualreihe mit der Durchflussreihe, die in der Regel nicht nur für die Messtage, sondern täglich verfügbar ist. Zum numerischen Vergleich

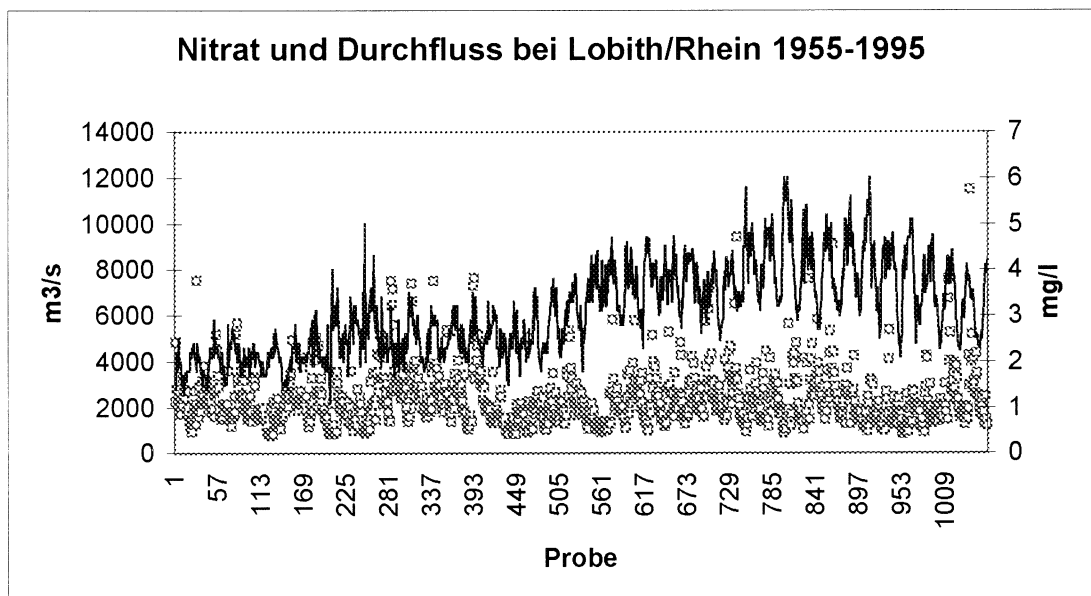
verschiedener Schätzverfahren wird neben der Residualstandardabweichung s_{Res} sowie dem prozentualen Anteil der erklärten Varianz an der Gesamtvarianz ein modifiziertes AIC-Kriterium verwendet:

$$AIC = \ln s_{Res}^2 + 2 \frac{df}{N},$$

wobei für df die Spur der Schätzmatrix (Projektionsmatrix) eingesetzt wird. Für die lokal berechneten Schätzer wird für df das arithmetische Mittel aller lokal ermittelten Schätzmatrizen verwendet, während für N die zugehörige Fensterlänge eingetragen wird.

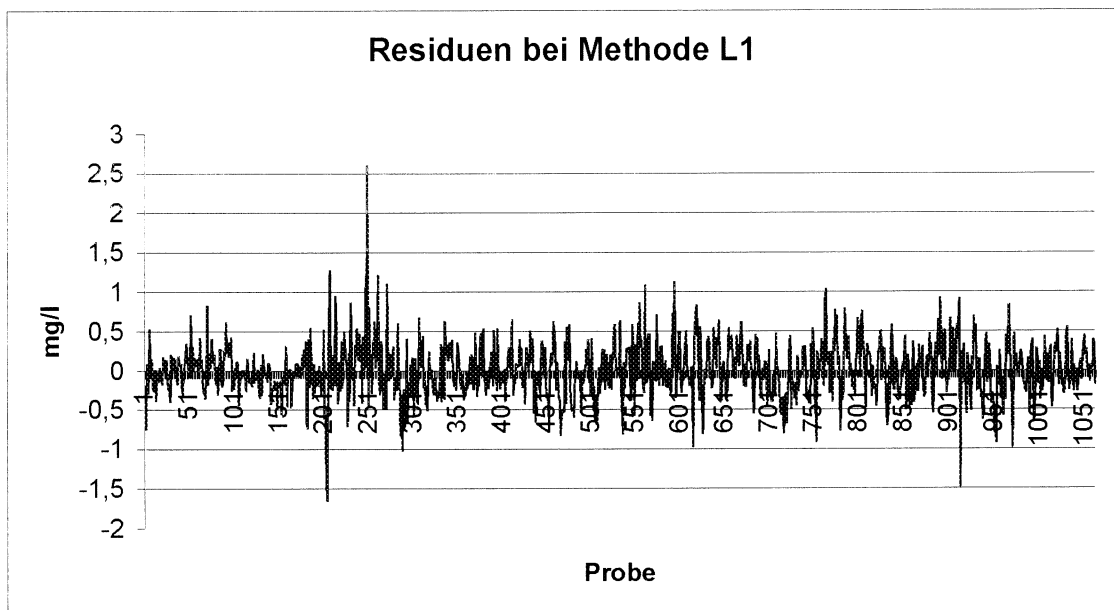
Die folgende Darstellung beinhaltet eine exemplarische Residualanalyse für die Ergebnisse der Methoden L1 und N für $\text{NO}_3\text{-N}$ bei Lobith. Zur Aufdeckung möglicher Ausreißer ist der Verlauf der im Rhein bei Lobith 1955-1995 im 2-Wochen-Rhythmus gemessenen $\text{NO}_3\text{-N}$ -Konzentrationen [mg/l] (durchgezogene Linie) sowie die zugehörigen Durchflusswerte (Quadrate) in Abb. B 7.1 wiedergegeben.

Abb. B 7.1



Deutlich erkennbar ist ein saisonaler Verlauf der Konzentrationswerte im Jahresverlauf. Eine Modellanpassung auf der Basis von Methode L1 liefert folgenden Residuenplot:

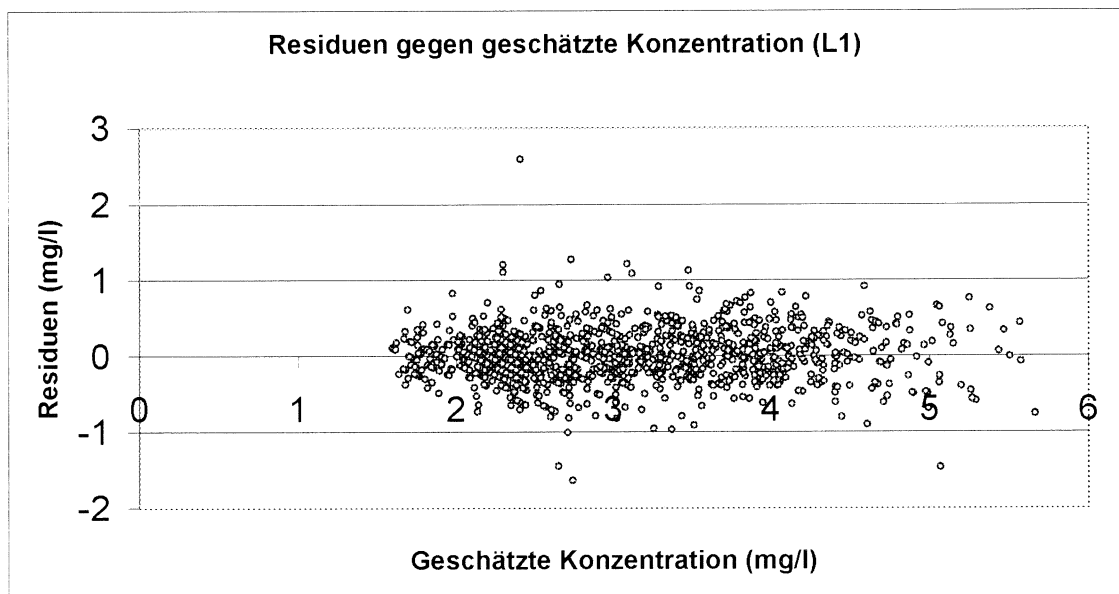
Abb. B 7.2



Bis auf wenige Ausnahmen bewegen sich die Abweichungen zwischen Messwert und Modell auf Werte unterhalb von 1 mg/l. Das verwendete Modell erklärt 86,6% der Gesamtvarianz, und die Residualstandardabweichung beläuft sich auf 0,35mg/l. Daraus ergibt sich für den Indikator AIC der Wert $-2,04$.

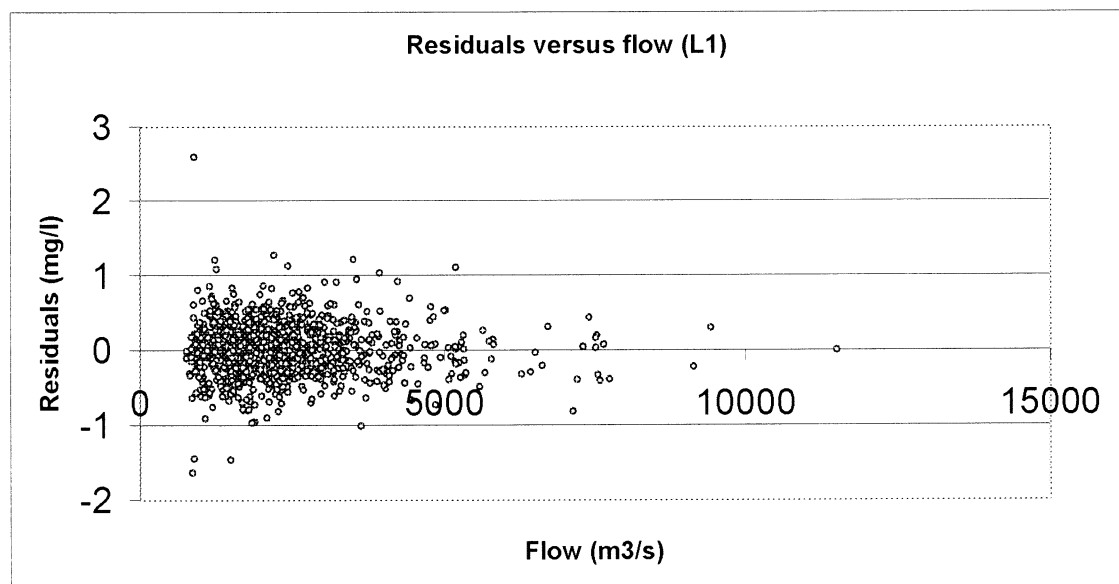
Zur Überprüfung auf Heteroskedastie werden die Residuen gegen die geschätzten Konzentrationswerte geplottet. Dabei zeigt sich keine auffällige Abhängigkeit zwischen dem geschätzten Konzentrationsniveau und der Streuung:

Abb. B 7.3



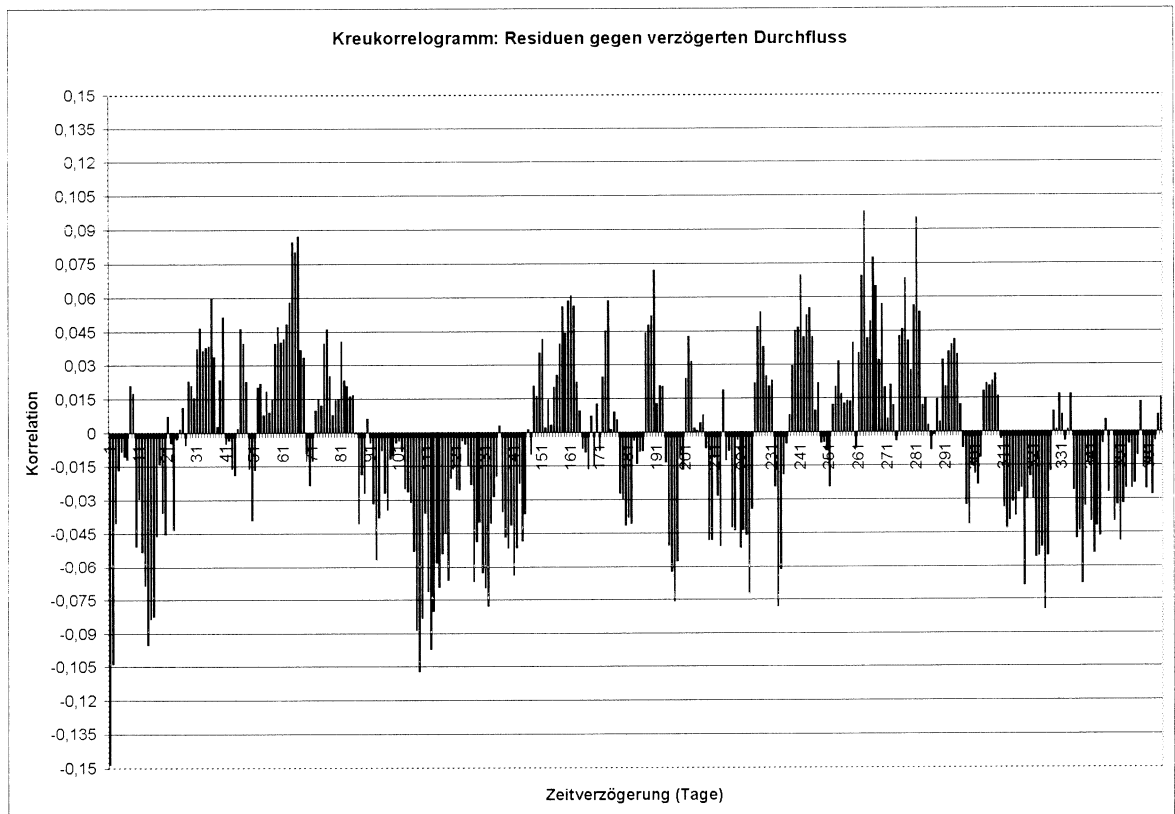
Auch bei der Überprüfung der linearen Beziehung der LQ-Beziehung mittels des Plots der Residuen gegen den Durchfluss zeigen sich keine systematischen Abweichungen:

Abb. B 7.4



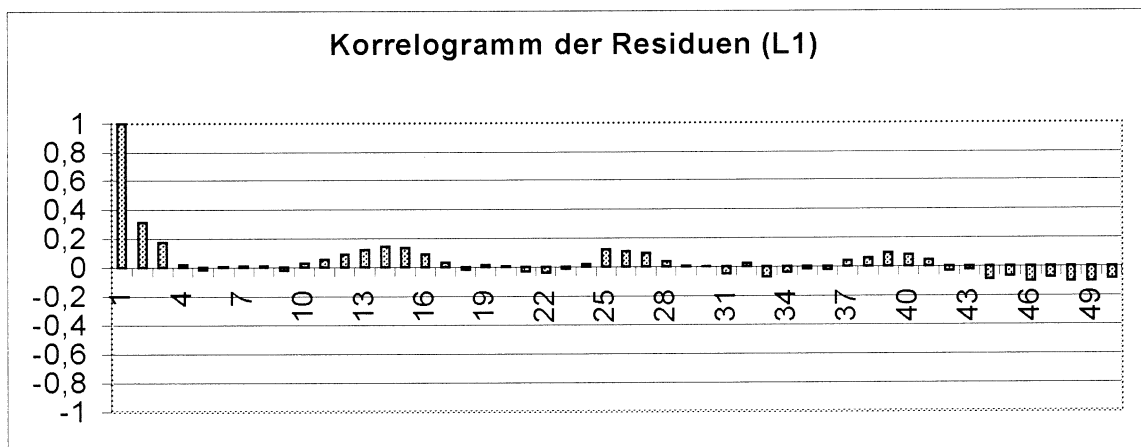
Auch zeigt die Überprüfung der linearen Beziehung zwischen Residuen und den verzögerten Durchflüssen mittels des Kreuzkorrelogramms keine klare Abhängigkeitsstruktur, zumal die Größenordnung der Korrelation den Wert 0,1 nicht übersteigt.

Abb. B 7.5



Hingegen ist in der Residualreihe deutliche Autokorrelation feststellbar. So hat die Durbin-Watson-Statistik den Wert 1,37, und die geschätzte Autokorrelation erster Ordnung liegt bei 0,31. Folgende Abbildung zeigt die Autokorrelationsfunktion bis zur Ordnung 49.

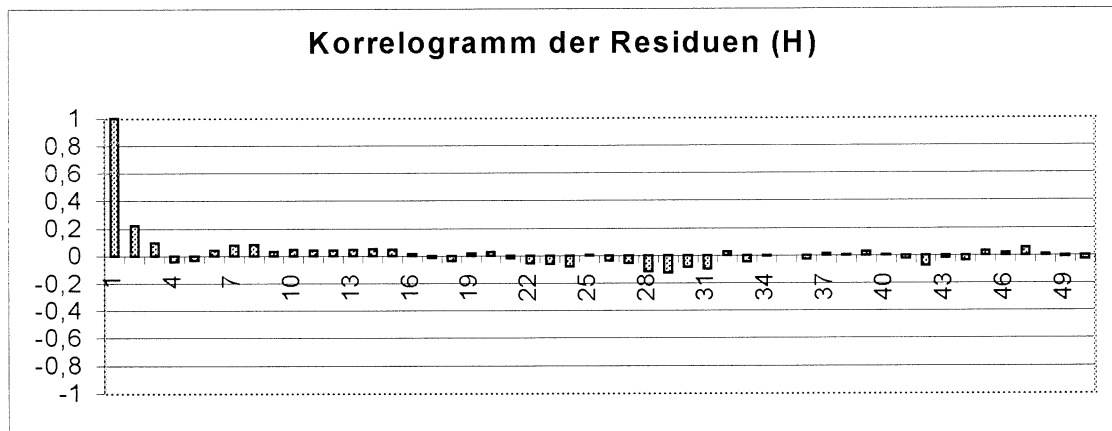
Abb. B 7.6



Es ist davon auszugehen, dass das Modell L1 keine optimale Anpassung an die Daten ermöglicht, da den Residuen offenbar kein White-Noise-Prozess zugrunde liegt.

Eine bessere Anpassung ergibt sich in Erweiterung der Methode L1 durch Einbeziehung einer Saisonkomponente höherer Ordnung sowie durch ein auf 5 Jahre verkürztes Zeitfenster. Ebenfalls bessere Resultate erzielt man beispielsweise mit Methode H. Mit Methode H lässt sich 88,6% der Gesamtvarianz erklären, und die Residualstandardabweichung beläuft sich auf 0,32mg/l. Daraus ergibt sich für den Indikator AIC der Wert $-2,13$, so dass bei Verwendung des AIC-Kriteriums der Methode H gegenüber Methode L1 der Vorzug zu geben wäre. Die bessere Modellanpassung bestätigt ein Plot des Korrelogramms:

Abb. B 7.7



Bis auf eine leichte Autokorrelation erster Ordnung mit einem Wert von 0,22 (Durbin-Watson-Statistik = 1,55) ist nun keine auffällige Korrelation mehr festzustellen. Es ist festzuhalten, dass eine noch bessere Modellanpassung erreicht werden kann, indem

- die Fensterbreite verringert wird,
- die Anzahl der dem Modell zugrundeliegenden Freiheitsgrade erhöht wird (durch Reduzierung des Gewichts des Glattheitsmasses),
- die Modellordnung für Trend und Saison vergrößert werden.

Gleichwohl ist die unterschiedliche Güte der Modellanpassung für die daraus ermittelten adjustierten Jahresfrachten kaum relevant. Denn beim Vergleich der mittels der Methoden L1 und H ermittelten Jahreswerte zeigt sich, dass die mittlere Abweichung in grafischen Darstellungen kaum sichtbar ist und im arithmetischen Mittel bei nur 0,3% liegt. Diese Abweichung ist vernachlässigbar im Vergleich zu jenen Abweichungen, die durch Messfehler verursacht sind. Außerdem ist die mittlere Abweichung zu den OSPAR-Frachten um den Faktor 50 größer. Ähnliche Feststellungen ergeben sich beim Vergleich mit anderen Methoden und bei anderen gemessenen Parametern.

B 8 Zur Auswahl eines praktikablen Adjustierungsmethode

Um ein Adjustierungsverfahren auszuwählen, ist zunächst zu beachten, dass die Adjustierung selbst nicht einheitlich für jeden Parameter oder auch nur zeitlich unabhängig vorgenommen werden kann, sondern dass innerhalb der Adjustierung zeitliche Effekte und Saisonalität zu berücksichtigen sind. Damit ergibt sich die Notwendigkeit, die Adjustierungsparameter datenabhängig unter Verwendung geeigneter Schätzverfahren zu ermitteln. Hierzu wurden im vorliegenden Vorhaben mehrere teilweise sehr aufwendige Schätzverfahren erprobt und implementiert. Es stellte sich heraus, dass die Unterschiede der resultierenden Frachtwerte in der Regel klein sind. Dennoch sind teilweise beträchtliche Unterschiede bezüglich der Modellanpassung festzustellen, d.h. je nach Methode weisen die Residuen eine größere oder geringere Streuung auf und folgen einem white-noise Prozess mehr oder weniger.

Es ist grundsätzlich nicht möglich, ein unter allen Umständen optimales Modell festzulegen, bei dem die Residuen homogen, normalverteilt und unkorreliert sind. Eine besondere Schwierigkeit ergibt sich aus dem Umstand, dass einzelne Hochwasser (Jahrhunderthochwasser) erhebliche Auswirkungen auf die Fracht haben, die Ermittlung der CQ-Beziehung aufgrund der Seltenheit einer solchen Situation dann jedoch praktisch nicht möglich ist. Schließlich ist das Problem einer Abhängigkeit der CQ-Funktion von früheren Durchflüssen zu beachten. Wie in Abschnitt B 5 diskutiert, führt eine solche Abhängigkeit unter Umständen zu einer Über- bzw. Unteradjustierung der Frachten, so dass das eigentliche Ziel einer Verbesserung der Nachweisbarkeit von Trends dadurch wieder in Frage gestellt ist.

Die bei einigen Parametern festgestellten Anpassungsprobleme lassen sich nicht zuletzt darauf zurückführen, dass die Grundannahmen der verwendeten statistischen Modelle nicht immer befriedigend erfüllt sind. So sind die Anpassungsprobleme bei Pb möglicherweise auf Ausreißerwerte sowie auf eine starke Heteroskedastie (Inhomogenität der Varianz) zurückzuführen. Diese Modellabweichungen führen nicht zu systematischen Verzerrungen, sondern zu einem erhöhten Zufallsfehler. Es ist davon auszugehen, dass zumindest das Problem der Heteroskedastie geringer ausfallen würde, wenn die statistischen Verfahren auf die logarithmierten Konzentrationen angewandt worden wären, doch wäre in diesem Falle auch die additive Modellstruktur nicht erhalten geblieben. Dies war jedoch eine wesentliche Vorgabe, dass im zugrundeliegenden statistischen Modell die Fracht durch interpretierbare und den verschiedenen Eintragswegen zuordenbare

Komponenten additiv erklärt wird. Eine andere Möglichkeit hätte theoretisch darin bestanden, ein dynamisches TBS-Modell (Transform Both Sides; Carroll/Ruppert [1988]) zu entwickeln und zu implementieren, doch hätte dies den Umfang des Projektes gesprengt.

Um die von Parameter zu Parameter sehr unterschiedlichen statistischen Verteilungen angemessen berücksichtigen zu können, wäre insbesondere bei schwierigen Parametern eine maßgeschneiderte Modellanpassung erforderlich. Eine ganze Reihe von statistischen Parametern zur Beurteilung einer solchen Modellanpassung stehen zur Verfügung, wie in Abschnitt B 7 beschrieben. Somit bietet sich anstelle der Festlegung eines Protokolls zur einheitlichen Vorgehensweise für eine Anzahl definierter Eintragsparameter zur Adjustierung folgende Vorgehensweise an:

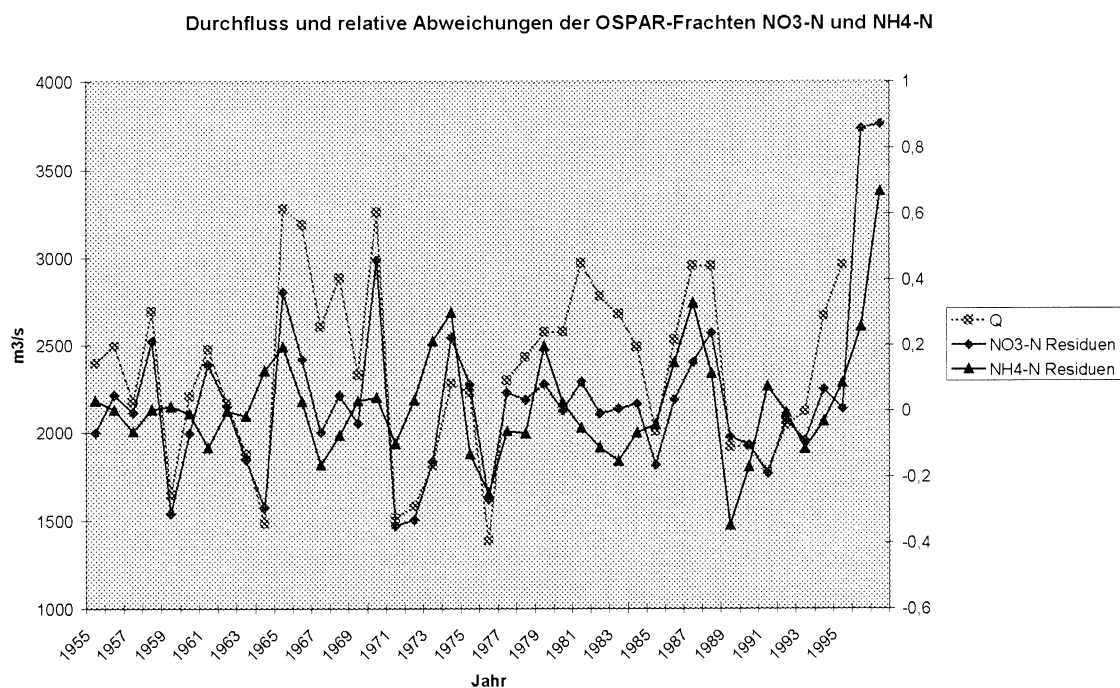
1. Anwendung von Methode L1
2. Überprüfung der Residuen auf serielle Korrelation mittels des Tests von Durbin und Watson, und bei starken Modellabweichungen Anwendung von Methode H
3. Überprüfung des Zusammenhangs zwischen Durchfluss und Residuen, und bei stark nichtlinearem Einfluss des Durchfluss auf die Fracht Einbeziehung einer nichtlinearen Komponente (Methode L5),
4. Überprüfung der Korrelation zwischen Residuen und verzögertem Durchfluss, und bei starker Wirkung des Vortagesdurchflusses Verwendung von Methode L2.

Sofern auch mit den Methoden L2, L5 oder H keine befriedigende Anpassung möglich erscheint, liegt es nahe, das Modell in geeigneter Weise zu erweitern, z.B. durch Einbeziehung weiterer Variablen. Bei Feststellung von starker Heteroskedastie sollte an den Einsatz von loglinearen Modellen gedacht werden. Bei starker Autokorrelation liegt es hingegen nahe, entweder Saisonterme höherer Ordnung einzuführen, neben einem linearen auch einen quadratischen Trend einzuführen oder die Intervalllänge zu verkürzen.

B 9 Zur Interpretation der Korrelation zwischen Durchfluss und Trendabweichungen der OSPAR-Fracht

Hintergrund der je nach Parameter und Fluss sehr differenzierten Ergebnisse ist der Umstand, dass der Zusammenhang zwischen Durchfluss und OSPAR-Fracht sehr unterschiedlich sein kann. Eine grobe Näherung hierfür erhält man aus dem Korrelationskoeffizienten ρ zwischen den Jahresdurchflüssen und den relativen Abweichungen der OSPAR-Frachten vom zugehörigen LOESS-Smoother. Abbildung B 9.1 zeigt die Durchflusswerte sowie die letztgenannten Abweichungen für $\text{NH}_4\text{-N}$ und $\text{NO}_3\text{-N}$ bei Lobith im Zeitablauf. Es fällt auf, dass die relativen Abweichungen der $\text{NO}_3\text{-N}$ -Fracht gut mit den Durchflussschwankungen korrelieren, während der Zusammenhang zur $\text{NH}_4\text{-N}$ -Fracht speziell in den Jahren bis 1970 weitaus geringer ist.

Abb. B 9.1



Für $\text{NH}_4\text{-N}$ beträgt der Korrelationskoeffizient 26%, während bei $\text{NO}_3\text{-N}$ ein Wert von 86% ermittelt wird. Unterstellt man ein einfaches lineares Modell zur Erklärung der relativen Abweichungen der OSPAR-Frachten vom LOESS-Smoother durch die Durchflusswerte, so ergibt sich für den Anteil der nicht erklärten Varianz an der Gesamtvarianz der Wert $1-\rho^2$, d.h. für $\text{NH}_4\text{-N}$ $(1-0,26^2)=93\%$ und für $\text{NO}_3\text{-N}$ $(1-0,86^2)=26\%$. Dies bedeutet, dass auf Basis des linearen Mo-

dells der Quotient aus Residualstandardabweichung und gesamter Standardabweichung bei $\sqrt{1 - \rho^2}$ liegt. Für $\text{NH}_4\text{-N}$ ermöglicht somit die Einbeziehung der Durchflussreihe eine Reduzierung der Standardabweichung um $1 - \sqrt{1 - \rho^2} = 1 - \sqrt{1 - 0,26^2} = 3,4\%$, während bei $\text{NO}_3\text{-N}$ eine Reduzierung um 49% möglich erscheint. Damit entspricht der Wert $\sqrt{1 - \rho^2}$ inhaltlich dem Quotienten S_{Ratio} . Da der erstgenannte Wert jedoch nur auf Jahresdaten basiert, ist davon auszugehen, dass das auf Einzelmessungen basierende Adjustierungskonzept (je nach verwendetem statistischen Modell) tendenziell kleinere Werte für S_{Ratio} liefert. Allerdings ist die Form der Berechnung eine völlig andere, und deshalb ist $\sqrt{1 - \rho^2}$ nur ein sehr grobes Maß dafür, welche relative Verbesserung der Trendsensitivität durch Verwendung adjustierter Frachten erzielt werden kann. Gleichwohl zeigen die Ergebnisse einen gewissen Zusammenhang zwischen $\sqrt{1 - \rho^2}$ und S_{Ratio} , so dass $\sqrt{1 - \rho^2}$ als einfacher Indikator auf Basis der Jahresdaten verwendet werden kann, um die Zweckmäßigkeit einer Adjustierung zu überprüfen.

Angesichts des beträchtlichen rechnerischen Aufwands erscheint eine Adjustierung nur dann als zweckmäßig, wenn $\sqrt{1 - \rho^2}$ unter 0,9 liegt, d.h. wenn eine Reduzierung der Standardabweichung um mindestens 10% möglich erscheint. Für die $\text{NH}_4\text{-N}$ -Fracht bei Lobith wäre demzufolge eine Adjustierung nicht erforderlich, wohl aber für die $\text{NH}_4\text{-N}$ -Fracht bei Herbrum.

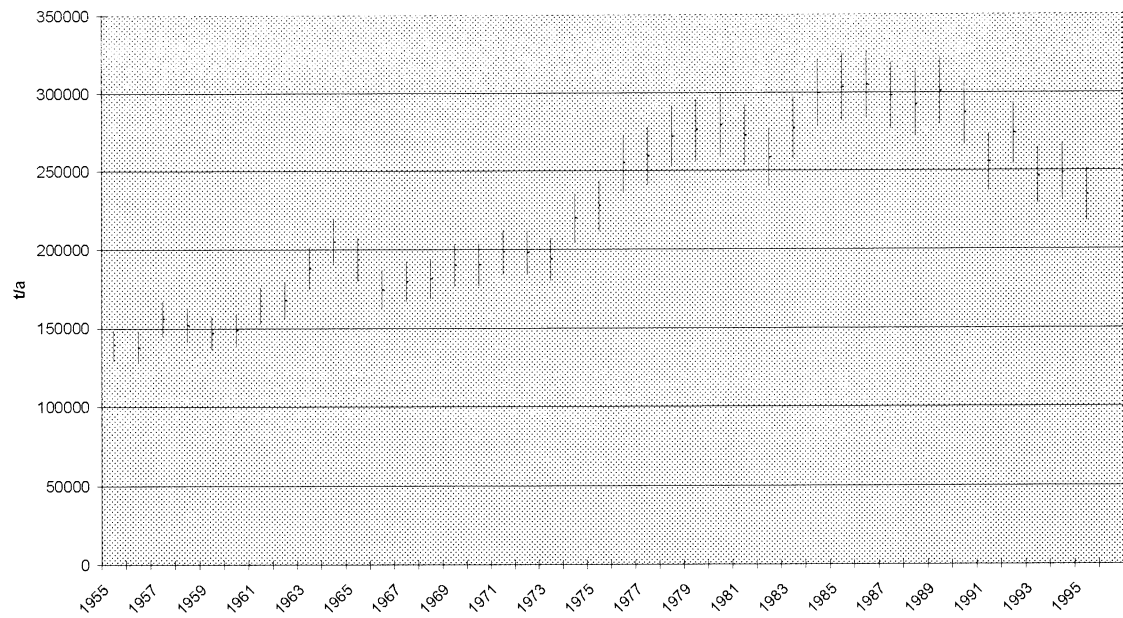
B 10 Vertrauensintervalle für adjustierte Jahresfrachten

Zweck adjustierter Jahresfrachten ist primär, eine Basis für eine verbesserte Trendanalyse bereitzustellen. Gleichwohl lassen sich adjustierte Jahresfrachten auch verwenden, um direkte Effekte und anthropogene Schwankungen der Frachten abzulesen. Sinnvoll ist dies zumindest dann, wenn die durch Messunsicherheiten verursachten zufälligen Abweichungen nicht zu groß sind. Somit liegt es nahe, neben der Darstellung der adjustierten Frachtwerte auch ein Konfidenzintervall einzutragen, um sprunghafte und nachhaltig wirksame Veränderungen des Eintragsniveaus sehr schnell erfassen zu können. Die Grundlage einer solchen Berechnung wurde in Kapitel 5 beschrieben. Bei der Berechnung sollte berücksichtigt werden, dass die Residuen autokorreliert sind, da selbst eine geringe Autokorrelation zu einer Vergrößerung des Schätzfehlers beitragen kann.

Die in Abb. B 10.1 dargestellten approximativen Konfidenzintervalle für die adjustierten $\text{NO}_3\text{-N}$ -Frachten bei Lobith zeigen deutlich für die Jahre 1973 bis 1976 einen sprunghaften Anstieg, da für diese Jahre die Konfidenzintervalle nicht mehr überlappen.¹

¹ Gegen eine solche Lesart ließe sich aus statistischer Sicht einwenden, dass bereits dann eine signifikante Veränderung vorliegt, wenn der Abstand zwischen den beiden Jahreswerten größer ist die Länge des Konfidenzintervalls, geteilt durch $\sqrt{2}$. Andererseits ist das Problem des multiplen Testens zu beachten, so dass eine Korrektur der kritischen Werte in genau der umgekehrten Richtung und in derselben Größenordnung erfolgen müsste. Aus diesem Grund wird das hier verwendete Entscheidungskriterium empfohlen.

Abb. B 10.1

Adjustierte Fracht NO₃-N bei Lobith mit Konfidenzintervall

Trendanalyse und Adjustierung von Flusseinträgen

RTrend

Programm zur Datenhaltung, Trendanalyse und Adjustierung von Frachtdaten

Dokumentation

RTrend

Dokumentation

Mai 2001

Version: 2.0.0.18

Für WINDOWS 9x und WINDOWS NT

Softwareentwicklung: quo data GmbH

Programmierer: Dipl.-Ing. Norbert Schick
Dipl.-Phys. Andre Fränzel
Dipl.-Math. Dirk Anke

C 1. Inhaltsverzeichnis

C 1. INHALTSVERZEICHNIS	3
C 2. ALLGEMEINES	4
C 2.1. Grundlagen	4
C 2.2. Allgemeine Hinweise zur Bearbeitung der Datenbank	5
C 3. BESCHREIBUNG DER MENÜSTRUKTUR	8
C 3.1. Menü Data	8
C 3.2. Menü Reports	21
C 3.3. Menü Calculate	26
ANLAGE 1 : DATENBANKSTRUKTUR	36
ANLAGE 2: PROGRAMMSTRUKTUR DES PROGRAMMES RTREND	37
ANLAGE 3: SCREENSHOTS FÜR DIE VERSCHIEDENEN ADJUSTIERUNGSMETHODEN	38

C 2. Allgemeines

C 2.1. Grundlagen

Das Programm RTrend ist für die Datenhaltung und statistische Analyse von Frachtdaten in Flüssen bestimmt.

Die Daten werden in einer Datenbank im Format PARADOX 7.0 gespeichert. Diese 23 Einzeltabellen umfassende Datenbank hat ihren Ausgangspunkt in der NILU-Datenbank von Ter Krognen. Zahlreiche Einzeltabellen lassen die flexible und leicht erweiterbare Speicherung der verschiedensten Angaben, die für eine Auswertung relevant sind, zu. Die Struktur der Datenbank und die Felder der einzelnen Tabellen sind aus Anhang 1 ersichtlich.

Das Programm ist in der Sprache DELPHI Version 4.02 mit den Modulen TeeChart Version 4.1 Pro und QuickReport Version 3.05 geschrieben. Die programmtechnische Struktur ist in Anhang 2 dargestellt.

Als Sprache für das Programm wurde Englisch gewählt. Einzelne deutsche Aufschriften sind auf die Verwendung eines deutschsprachigen Betriebssystems auf dem Zielrechner zurückzuführen.

Eine Paradox-Datenbank besteht aus einer oder mehreren Dateien (Tabellen), die in einem gemeinsamen Verzeichnis gespeichert werden. Zum Ansprechen der Datenbank wird ein Datenbankname(Alias) vergeben, der immer auf ein bestimmtes Datenbankverzeichnis verweist. Das Programm RTrend nutzt für den Zugriff auf seine Datenbank den Aliasnamen „Trend“. Standardmäßig wird nach der Installation das Datenbankverzeichnis *\Programmverzeichnis\Tabellen* verwendet, es ist jedoch möglich, über den entsprechenden Menüpunkt das Verzeichnis zu ändern.

Das Programm realisiert folgende prinzipielle Funktionen, die über Menüs aufgerufen werden:

Menü Data: Eingabe und Änderung von Daten sowie Import von Daten aus Fremdformaten

Menü Reports: Anzeige von Daten in Tabellen und Grafiken für ausgewählte Merkmale (mehrere Komponenten für eine Station, eine Komponente für mehrere Stationen usw.).

Menü Calculate: Erstellung der Basisdaten für die Trendberechnung und die Trendberechnung selbst.

Menü Options: Voreinstellung z.B. für die Formatierung von Werten.

Menü Info: Info Dialog.

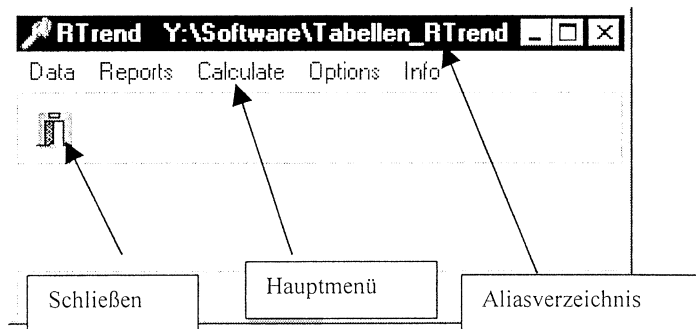


Bild 1: Hauptformular

C 2.2. Allgemeine Hinweise zur Bearbeitung der Datenbank

Die Eingabe und Änderung der Daten in die Datenbank erfolgt über die entsprechenden Fenster, im Allgemeinen wird dabei die Bearbeitung über eine Navigatorleiste gesteuert:

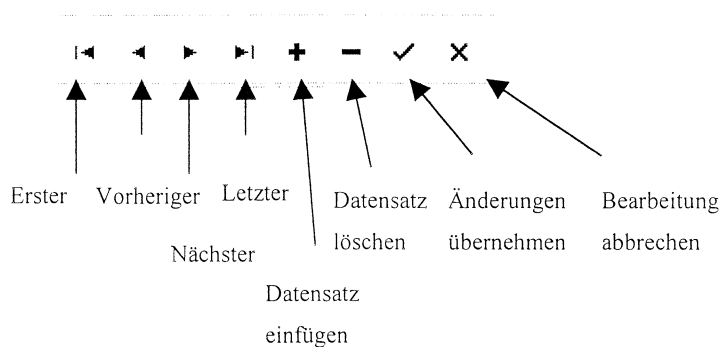
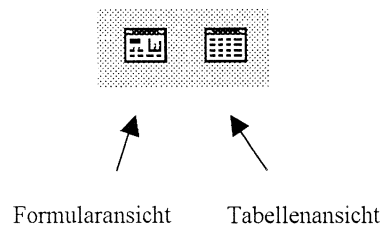


Bild 2: Navigationsleiste für Datenbanktabellen

Kann eine bestimmte Operation mit der Navigatorleiste nicht ausgeführt werden, ist die dazugehörige Schaltfläche deaktiviert (grau dargestellt). Jede Eingabe und Änderung eines Datensatzes ist mit der Schaltfläche „Änderungen übernehmen“ abzuschließen. Dadurch wird der Datensatz gespeichert. Eine Speicherung des Datensatzes erfolgt automatisch, wenn nach einer Eingabe oder Änderung zu einem neuen Datensatz gewechselt wird.

Achtung: Eine Änderung der Daten lässt sich nach der Speicherung nicht mehr rückgängig machen!

Je nach Eingabe-/Änderungserfordernissen lässt sich die Anzeige/Bearbeitung der Daten in Formularen oder Tabellen realisieren. Dazu ist die entsprechende Schaltfläche im Fenster zu betätigen:



Startdate

In den meisten Eingabefeldern und -tabellen ist ein Feld Startdate vorhanden. Dieses Feld muss immer ausgefüllt sein. Zweck des Feldes ist eine zukünftige History-Funktion, die jedoch noch nicht implementiert ist. Daher ist ein Datumswert für das Programm zum gegenwärtigen Zeitpunkt zwar erforderlich, jedoch mit Ausnahme der Daten für die Messwerterfassung ohne Bedeutung.

Datumsangaben

Datumsangaben sind grundsätzlich vierstellig einzugeben, um das „Jahrtausend-“ Problem zu vermeiden (01.01.99 entspricht 01.01.2099!).

Tabellendarstellungen

Entspricht die Spaltenbreite in einer Tabelle nicht den Anforderungen, so kann diese wie unter Excel mit der Maus geändert werden. Der Mauszeiger ist im Spaltenkopf auf die rechte Trennlinie der zu ändernden Spalte zu positionieren, der Zeiger ändert sich in einen Doppel-

pfeil. Nach Drücken der linken Maustaste kann durch Verschieben der Maus die Spaltenbreite geändert werden.

In der Tabellendarstellung einiger Fenster ist es möglich, eine spaltenweise Sortierung vorzunehmen. Dazu ist die Maus auf den jeweiligen Spaltenkopf zu positionieren und die linke Maustaste zu drücken.

C 3. Beschreibung der Menüstruktur

C 3.1. Menü Data

C 3.1.1. Main tables

Im Fenster *Edit main tables* werden die wichtigsten Stammdaten bearbeitet. Dabei wird unterschieden nach:

- Nation
- Project
- Person
- Roles
- Organisation
- Station

Bei der Eingabe ist vorzugsweise die obige Reihenfolge einzuhalten. So können Daten zur Station nur eingegeben werden, wenn eine Nation und eine Organisation definiert sind. Nachträgliche Änderungen von Schlüsselfeldern (die im weiteren noch benannt werden), sind zu vermeiden, zumindest sollte zuvor eine Datensicherung vorgenommen werden.

Nation

Das Fenster *Nation* ermöglicht die Eingabe und Änderung aller für ein Land spezifischen Daten, die auch für eine Berichterstattung notwendig sind. Der ISO C2 – Code ist ein Schlüsselfeld und sollte nachträglich nicht verändert werden, da er als Identifikationsmerkmal in untergeordneten Tabellen verwendet wird und eine Aktualisierung der Tabellen derzeit nicht vorgesehen ist.

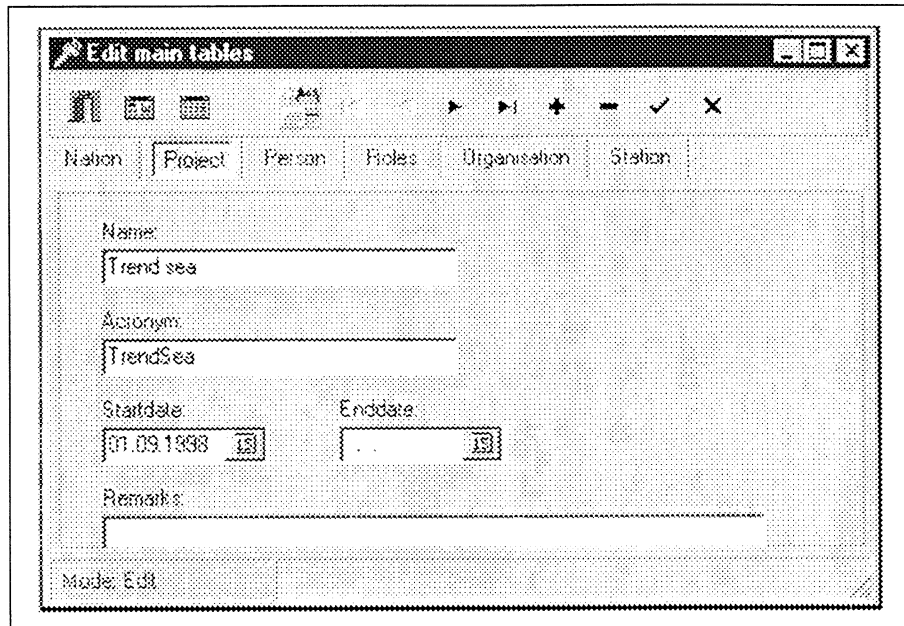
The screenshot shows a window titled "Edit main tables" with a tabbed interface. The "Nation" tab is selected. The form contains the following fields:

- Name:
- ISO:
- ISO C2:
- ISO C3:
- ISO n:
- Start date:
- End date:
- Remarks:
- Mode:

Bild 3: Bearbeitungsformular Tabelle NN_Nations

Projekt

Für eine Zuordnung der Daten zu verschiedenen Projekten wird die Tabelle Projekte verwendet. Es ist mindestens ein Projekt erforderlich, damit die Daten richtig zugeordnet werden können. Schlüsselfeld ist das Feld „Acronym“.



The screenshot shows a window titled "Edit main tables" with a toolbar and several tabs: Nation, Project, Person, Files, Organisation, and Station. The "Project" tab is selected. The form contains the following fields:

- Name: Trend sea
- Acronym: TrendSea
- Startdate: 01.09.1998
- Enddate: ..
- Remarks: (empty)

The status bar at the bottom indicates "Mode: Edit".

Bild 4: Bearbeitungsformular Tabelle PR_Project

Person

Die Personen-Tabelle enthält die möglichen Angaben zur Personenidentifikation (Verantwortlicher/Ansprechpartner/Berichterstatter) in den Tabellen Organisation, Station und Data Sets. Es wird ein internes Schlüsselfeld verwendet, so dass Änderungen aller Angaben möglich sind.

The screenshot shows a software window titled "Edit main tables" with a standard Windows-style title bar (minimize, maximize, close buttons). Below the title bar is a toolbar with icons for a table, a calendar, a list, and navigation arrows. A tabbed interface is present with tabs for "Nation", "Project", "Person" (which is the active tab), "Roles", "Organisation", and "Station". The main area of the window contains a form with the following fields:

- Title:
- Address...:
- First name:
- Last name:

At the bottom left of the form area, there is a label "Mode: Browse".

Bild 5: Bearbeitungsformular Tabelle PS_Person

Roles

Die Tabelle ist für Erweiterungen vorgesehen und wird zur Zeit nicht benutzt.

The screenshot shows a window titled "Edit main tables" with a standard Windows-style title bar. Below the title bar is a toolbar with several icons. A tabbed interface is present with tabs for "Nation", "Project", "Person", "Roles", "Organisation", and "Station". The "Roles" tab is currently selected. The main area of the window contains the following fields:

- A dropdown menu labeled "Roles".
- Three text input fields labeled "Project", "Person", and "Organisation".
- Two date input fields labeled "Start date" and "End date".
- Two date input fields labeled "Create date" and "Revolve date".

At the bottom left of the window, there is a button labeled "Mode: Browse".

Bild 6: Bearbeitungsformular Tabelle RR_Roles

Organisation

Hier erfolgt die Eingabe und Änderung aller für die nationalen Messnetzbetreiber (Organisation) erforderlichen Daten. Zwingend notwendig ist die Angabe des Namens, der Nation, der fortlaufenden Sequenznummer (Seq. No), des Startdatums und des Typs. Als Schlüsselfeld wird die Sequenznummer verwendet, die nicht nachträglich geändert werden sollte.

The screenshot shows a software window titled "Edit main tables" with a standard Windows-style title bar. Below the title bar is a toolbar with various icons. The main area of the window is divided into tabs: "Nation", "Project", "Person", "Role", "Organization" (which is selected), and "Station". The "Organization" tab contains several input fields and a text area. The fields are arranged as follows:

Name	Nation	Seq.No	Typ
Umweltbundesamt	Deutschland	1	Labo

Code	Start date	End date
DEIL	08.10.1998	..

Below these fields are two more input areas: "Org.-Acronym" (a long text box) and "Adresse" (a smaller text box). At the bottom of the form is a "Data originator" field. In the bottom left corner, there is a "Mode" dropdown menu currently set to "Browse".

Bild 7: Bearbeitungsformular Tabelle OR_Organisation

Station

In diesem Formular erfolgt die Eingabe und Änderung aller Daten zur Messstation. Zwingend notwendig ist der Name, die Organisation, die Sequenznummer und das Startdatum. Aus dem über die Organisation ermittelten Nationencode (zum Beispiel DE) und der Sequenznummer wird ein Stationscode (zum Beispiel DE0001) gebildet, der für die Identifikation der Station in allen Tabellen verwendet wird. Dieser Stationscode kann vom Nutzer nicht direkt geändert werden.

The screenshot shows a software window titled "Edit main tables" with a standard Windows-style title bar. Below the title bar is a toolbar with several icons. A tabbed interface is present, with tabs for "Nation", "Project", "Person", "Roles", "Organisation", and "Station". The "Station" tab is currently selected. The form contains the following fields and controls:

- Name:** A text input field containing "Herbrum".
- Organisation:** A dropdown menu showing "Umweltbundesamt".
- Seq.No:** A text input field containing "40".
- Country:** A dropdown menu showing "NDS".
- Startdate:** A date picker showing a date in the format "dd.mm.yyyy".
- Enddate:** A date picker showing a date in the format "dd.mm.yyyy".
- Typ:** A dropdown menu showing "fixed point station".
- Longitude:** A text input field.
- Latitude:** A text input field.
- Altitude:** A text input field.
- Remarks:** A large text area for additional notes.
- Mode:** A dropdown menu currently set to "Browse".

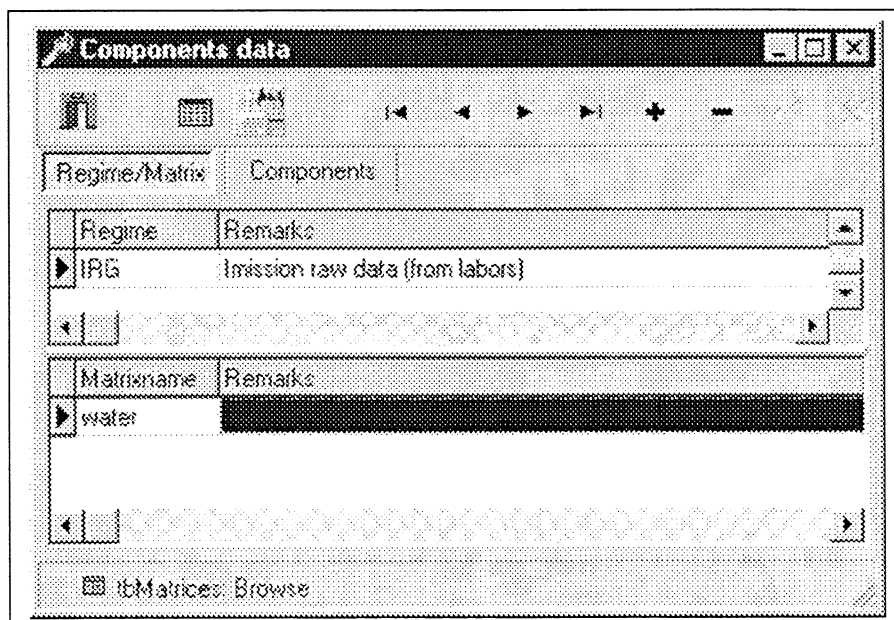
Bild 8: Bearbeitungsformular Tabelle EB_Station

C 3.1.2. Menü *Component tables*

Unter *Component tables* werden Daten zum Regime, den Matrices und den Komponenten eingegeben. In der Datenbank sind die durch NILU definierten Regimes, Matrix-Daten und Komponenten bereits vorhanden. Die Erweiterung mit Daten für alle drei Datenbereiche ist ohne Probleme möglich.

Regimes/matrices

Mit den Angaben von Regime und Matrix können die verwendeten Komponenten verschiedenen Kategorien zugeordnet werden. Das Regime spezifiziert die Art der Daten (Immissionswert, Emissionswerte...). Die Matrix gibt die Herkunft der Daten (Wasser, Sediment ...) an. Matrixname und Regimecode sind Schlüsselfelder.



The screenshot shows a window titled "Components data" with a toolbar and two tabs: "Regime/Matrix" and "Components". The "Regime/Matrix" tab is active, displaying two tables. The first table has columns "Regime" and "Remarks" and contains one row with "IRE" and "Immission raw data (from labors)". The second table has columns "Matrixname" and "Remarks" and contains one row with "water". Below the tables is a "Matrices Browse" button.

Regime	Remarks
IRE	Immission raw data (from labors)

Matrixname	Remarks
water	

Matrices Browse

Bild 9: Bearbeitungsformular Tabelle EM_Matrices und RE_Regimes

Components

Eine Komponente wird eindeutig definiert über den Matrixnamen, Regime und Namen. Die Eingabe für diese Felder ist zwingend notwendig. Weiterhin ist die Angabe der „Caption“ erforderlich, da in vielen Fällen dieses Feld zur Benennung der Komponente verwendet wird (Diagrammbeschriftungen, Überschriften usw.). Optional sind die anderen Felder, jedoch sollte zumindest auf die Angabe einer Maßeinheit nicht verzichtet werden.

The screenshot shows a window titled "Component data" with a toolbar containing icons for file operations (open, save, print, etc.) and navigation (back, forward, etc.). The window is divided into two tabs: "Regime/Matrix" and "Components". The "Components" tab is active, showing a form with the following fields:

Caption	Other name	Unit	
CD		µg/l	
Name	Regime	Matrixname	
CD	Immission raw data (from labors)	water	
min. clean	max. clean	max. polluted	Valence
Systemname	Format	Airbase No.	EMEP No.
Remarks			

At the bottom left, there is a "Browse" button next to the text "sqlComponents.Browse".

Bild 10: Bearbeitungsformular Tabelle EC_Components

C 3.1.3. Instruments tables

Dieses Menü dient der Eingabe der Daten für die Beschreibung der Feldinstrumenttypen (Instrument typ) und einer allgemeinen Beschreibung der Feldinstrumente (Field instrument). Da die Tabellen voneinander abhängig sind, muss auch hier eine festgelegte Reihenfolge eingehalten werden.

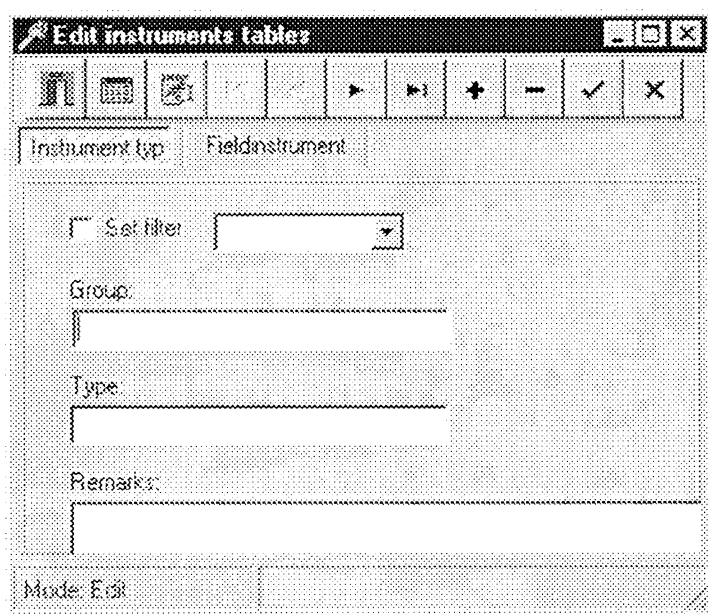


Bild 10: Bearbeitungsformular Tabelle FT_Instrument_Types

C 3.1.4. Datasets/datavalue

Zugriff auf die Messwerte erhält man unter dem Menü *Datasets/datavalue*. In der Tabelle DS_DATA_SETS werden die Stammdaten (Station, Organisation, Komponenten) mit den dazugehörigen Messwerten verbunden. Die Messwerte sind getrennt nach Komponenten in verschiedenen Tabellen gespeichert. Die Tabellennamen entsprechen den Komponentennamen mit dem Vorsatz 'DV_'.

Unter diesem Menüpunkt lassen sich die Datensätze der Tabelle DS_DATA_SETS und die zugeordneten Wertetabellen bearbeiten.

Da es über die Listenfenster leicht zu ungewollten Änderungen der Datasets kommen kann, wurde die Funktion zum automatischen Bearbeiten deaktiviert. Um in den Bearbeitungsmodus zu kommen, ist die entsprechende Schaltfläche im Datenbanknavigator zu drücken. Die Umschaltung in einen permanenten Auto Edit-Modus wird mit der Funktionstaste F9 vorgenommen. Diese Vorgehensweise gilt ausschließlich für die Tabelle DS_DATA_SETS.

Es gibt drei Ansichten:

- Edit* Eingabe der Daten in Formularform. Es wird jeweils nur ein Datensatz angezeigt.
- Show table* Tabellendarstellung der Datasets. Es werden nur die Datasets angezeigt, eine Bearbeitung der Daten ist nicht möglich.
- Data value* Anzeige und Bearbeitung der Messwerte für den ausgewählten Dataset.

Bild 11: Bearbeitungsformular Tabelle DS_Data_Sets

Auf die Wiedergabe der Tabellendarstellung wird hier verzichtet.

C 3.1.5. Import EXCEL file as CSV

Für den Import von Messwerten steht ein flexibles Import-Modul zur Verfügung. Die Daten müssen als ASCII-Text im CSV-Format (comma separated values) verfügbar sein. Die Werte

innerhalb einer Zeile sind mit einem Semikolon oder Komma getrennt. Ein solches File lässt sich leicht mit der ‘Speichern Unter’-Funktion in Excel erzeugen. Als Dateityp ist dabei das CSV-Format zu wählen.

Nach der Auswahl und dem Einlesen der zu importierenden Datei sollten die Vorgabewerte für verschiedene Datenfelder eingegeben werden. Insbesondere die Auswahl des Regimes und der Matrix ist wichtig, da in Abhängigkeit davon die Komponenten im Menü bereitgestellt werden. Anschließend sind die einzelnen Tabellenspalten den Datenbankfeldern zuzuordnen. Dazu ist mit der Maus auf den Kopf der jeweiligen Tabellenspalte zu klicken. Es erscheint ein Popup-Menü, aus dem die Datenbankfelder ausgewählt werden können. Die verfügbaren Komponenten sind in dem Popup-Untermenü *Components* aufgelistet.

Für den Import sind die Felder *Stations-ID* (EB_SEQNO), *Startzeit* (DV_STARTTIME) und *Endzeit* (DV_ENDTIME) erforderlich. Ist keine Spalte mit der *Stations-ID* vorhanden, muss eine Vorgabestation (Listenfeld *Station*) ausgewählt und der Steuerknopf *Station* aktiviert werden. Weitere Angaben, die vorhanden sein müssen, sind:

Projektbezeichnung	(Listenfeld <i>Project</i>)
Instrumentengruppe	(Listenfeld <i>Group</i>)
Instrumententyp	(Listenfeld <i>Instr. type</i>)
Instrumentenname	(Listenfeld <i>Instrument</i>)

Bei der Auswahl ist zu beachten, dass die gewählten Angaben denen vorhandener Datasets entsprechen, damit die Importdaten auch diesen Datasets zugeordnet werden. Daten mit gleichem Projektnamen, gleicher Station, gleicher Komponente, jedoch unterschiedlicher Instrumentenzuordnung werden in unterschiedliche Datasets geschrieben, und sind damit nicht als ein Dataset auswertbar.

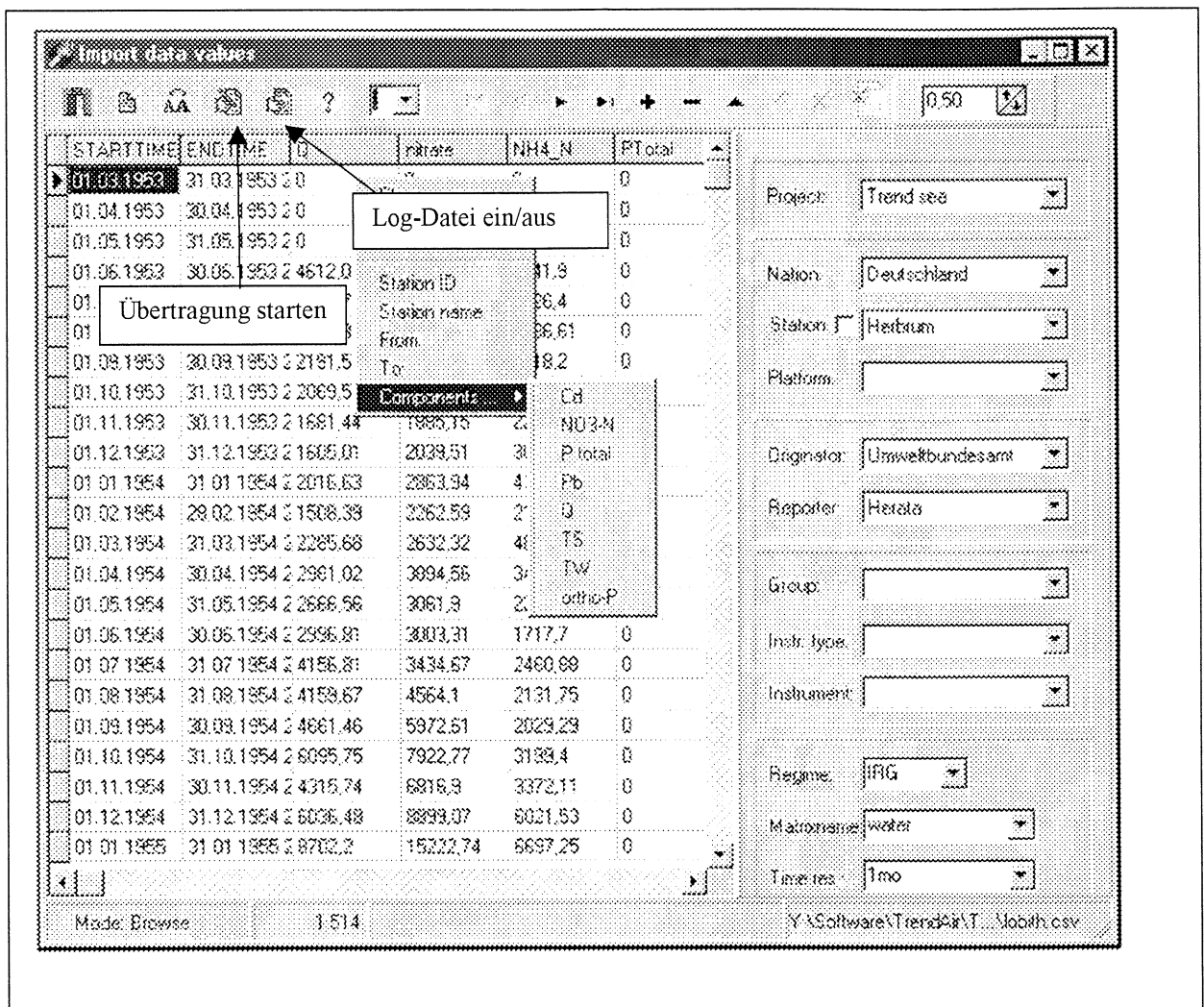


Bild 12: Import CSV-Dateien

Bevor die Daten in die Datenbank übertragen werden, sind alle Zeilen zu löschen, die keine gültigen Messdaten enthalten. Das betrifft insbesondere die Kopfzeilen. Weiterhin ist zu beachten, dass alle getätigten Änderungen nicht in die Ausgangsdatei zurück geschrieben werden, sondern nur temporären Charakter haben! Schließlich ist der Faktor für die Substitution von Messungen unterhalb der Nachweis- bzw. Bestimmungsgrenze zu kontrollieren bzw. anzupassen. Voreingestellt wurde dieser Faktor mit dem Wert 0.5.

Anschließend ist mit der Schaltfläche *Übertragung starten* die Übertragung der Messwertdaten in die Datenbank zu starten. Die erfolgten Änderungen innerhalb der Datenbank und eventuelle Fehler können in der Logdatei, die mit der Schaltfläche *Log-Datei ein/aus* angezeigt wird, eingesehen werden. Im allgemeinen sollte anschließend die Log-Datei gelöscht werden (Bestätigung der Abfrage beim erneuten Anklicken der Schaltfläche *Log-Datei ein/aus*).

C 3.2. Menü Reports

C 3.2.1. Components

Über das Fenster *Components* lassen sich die Messwerte von bis zu zehn Komponenten für eine Station als Liniendiagramm grafisch darstellen. Es können jeweils nur Komponenten einer Regime/Matrix-Kombination parallel dargestellt werden.

Neben der Auswahl der Station und der Komponenten ist die Vorgabe eines bestimmten Zeitintervalls erforderlich.

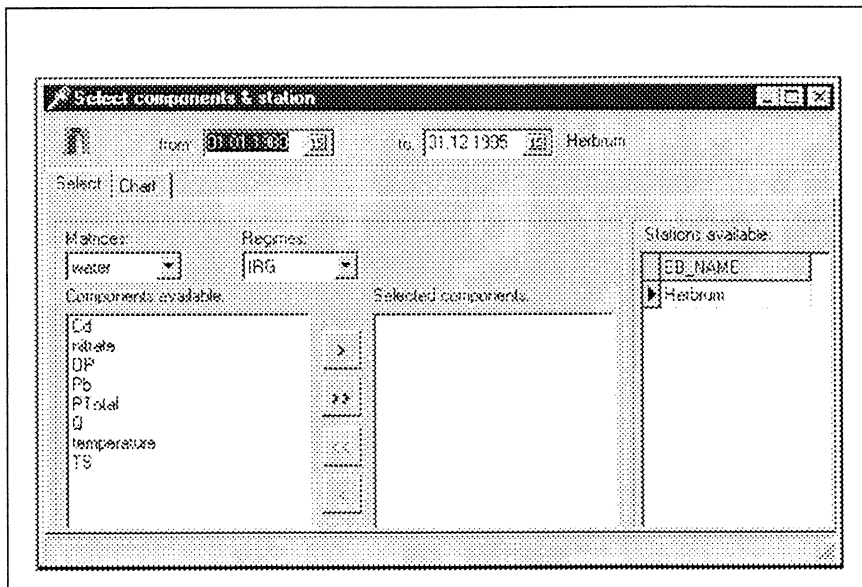


Bild 13: Auswahl der Daten für Diagrammdarstellung

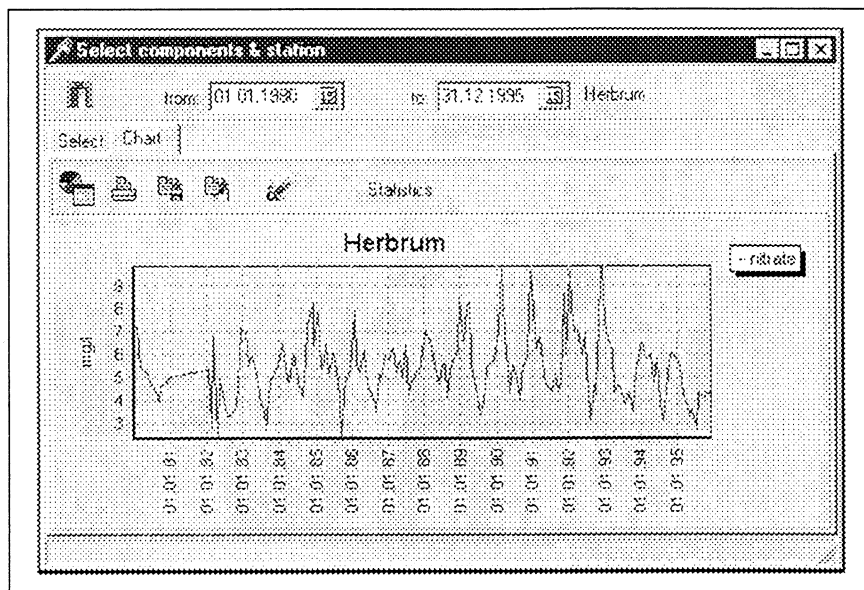


Bild 14: Diagramm für eine Station und mehrere Komponenten

Die Grafiken können gedruckt, als WMF-Datei gespeichert und als WMF-Datei in die Zwischenlage kopiert werden.

Bei der Ausgabe auf einen Monocolor-Drucker (schwarz-weiß) kann mit der Schaltfläche *Farbdruck ein/aus* die farbige Darstellung der Reihen unterdrückt werden. Um eine Unterscheidung der Linien im Ausdruck zu realisieren, empfiehlt es sich, über den Diagrammeditor die Punktdarstellung für die Linien-Reihen einzuschalten und für jede Reihe eine andere Punktart zu wählen. Alternativ ist auch die Wahl unterschiedlicher Linienstile möglich, die jedoch auf einigen Druckern – je nach verwendetem Druckertreiber - nicht richtig wiedergegeben werden. Bei Problemen empfiehlt sich der Einsatz von aktuellen Druckertreibern.

Mit der Schaltfläche *Statistics* werden die Häufigkeitsverteilung sowie wichtige Perzentile der Daten aufgerufen. Die Anzahl der Klassen, die Klassenbreite sowie das Klassenminimum kann frei festgelegt werden:

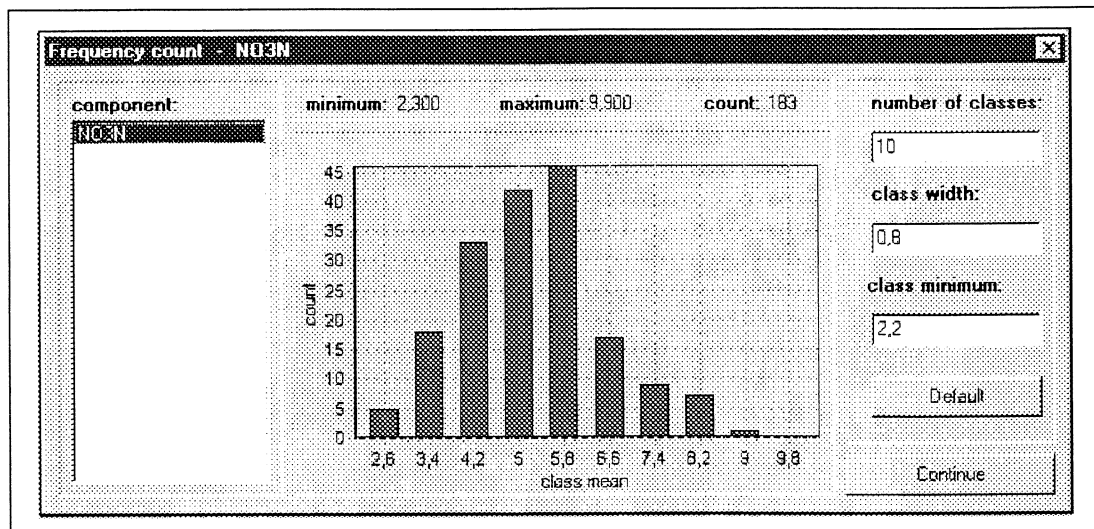


Bild 15: Statistische Angaben zu den ausgewählten Daten Teil 1

Klickt man auf *Continue*, wird ein Excel-konformes Arbeitsblatt aufgerufen, welches neben den Messwerten selbst die Häufigkeitsverteilung sowie folgende deskriptive Kennwerte beinhaltet:

- Minimum
- Maximum
- Arithmetisches Mittel
- Geometrisches Mittel, d.h. n-te Wurzel des Produkts der n Messwerte
- Empirische absolute Varianz
- Empirische relative Varianz
- Empirische p-Quantile (Perzentile) für p=2%, 3%, 5%, 25%, 50%, 90%, 95%, 97%, 98%

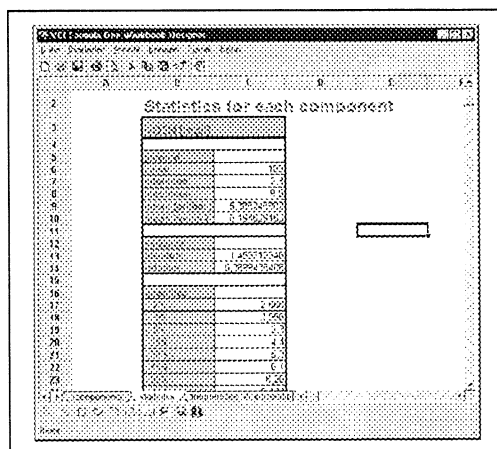


Bild 16: Statistische Angaben zu den ausgewählten Daten Teil 2

C 3.2.2. Stations

Analog zur grafischen Darstellung einer Station mit maximal 10 Komponenten werden mit diesem Menüpunkt die Messwerte einer Komponente für maximal 10 Stationen grafisch dargestellt.

C 3.2.3. Components & 4 stations

Das Menü *Reports/Components & 4 stations* ermöglicht die Darstellung von vier unterschiedlichen Stationen für eine gemeinsame Menge von Komponenten in vier Diagrammen. Das Diagramm 1 (Station 1) ist immer aktiviert.

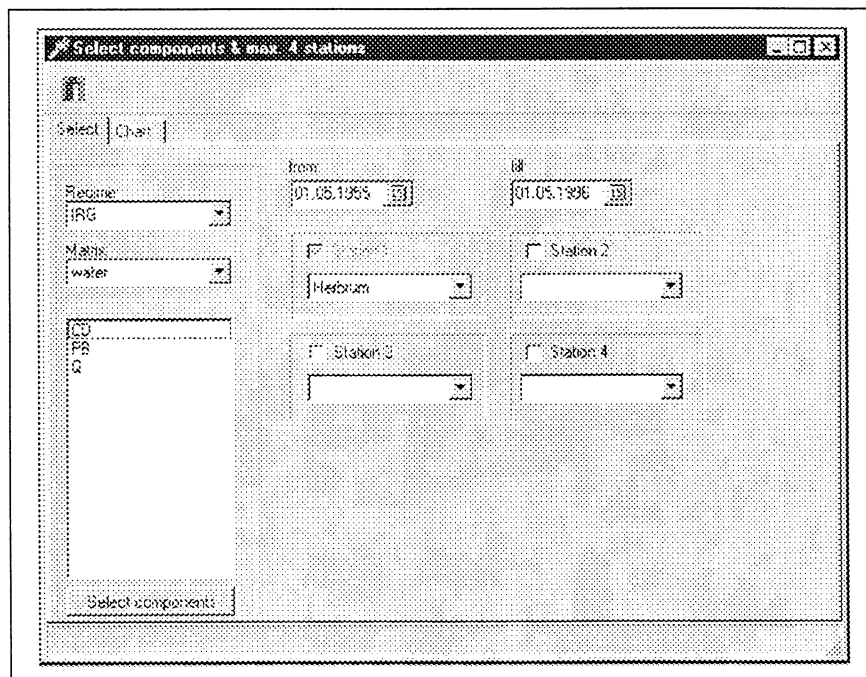


Bild 17: Auswahl der Daten für die Diagrammansicht

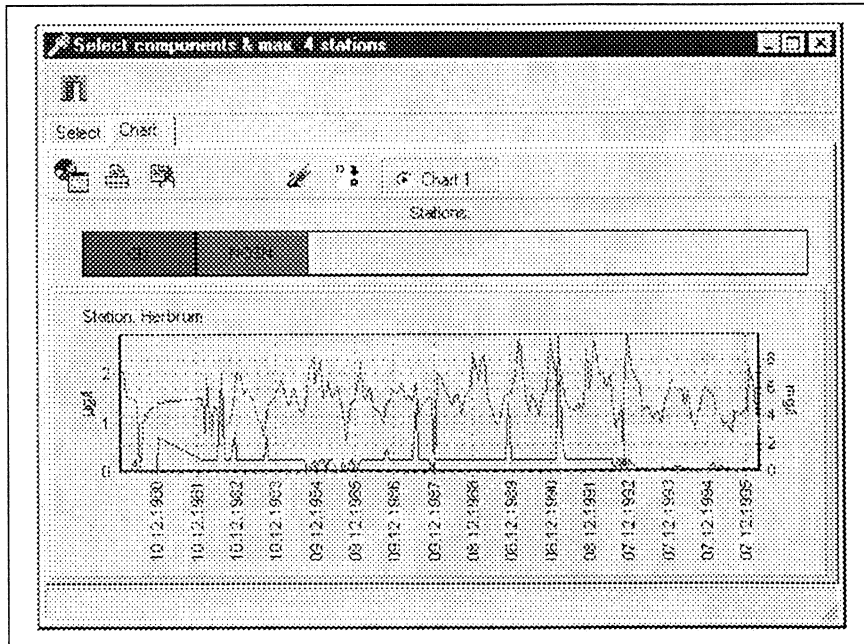


Bild 18: Diagrammansicht

Die Aktivierung der einzelnen Diagramme erfolgt durch Aktivieren des zugeordneten Steuerknopfes.

C 3.3. Menü *Calculate*

Das Menü *Calculate* gestattet die Aggregation von nichtadjustierten Tages- und Monatsfrachten, die Adjustierung der Werte sowie die Durchführung von Trendanalysen. Die Berechnung nichtadjustierter Frachtwerte erfolgt im Menü *Calculate / Make database*. Gleichzeitig dient dieses Menü zur Erstellung einer Reihe von temporären Datenbanktabellen, welche wiederum die Grundlage der Adjustierung und Trendanalyse darstellen. Adjustierung und Trendanalyse erfolgen dann im Menü *Calculate / Adjustment*.

C 3.3.1. *Make database*

In diesem Menü wird die Auswahl der Komponenten, des Zeitraumes, der Station und der zeitlichen Auflösung vorgenommen. Die Komponenten sind zu unterscheiden in:

- Basisgröße (Base value), in der Regel die Durchflussmenge.
- Adjustierungsfaktoren (Adjust components) für die weitere Verarbeitung in freien Berechnungsformeln der Trendberechnung, z.B. ebenfalls die Durchflussmenge. Die Eintragung der Adjustierungsfaktoren ist optional und nur erforderlich, wenn eine Adjustierung vorgenommen werden soll.
- Eintragsparameter, für welche die Frachten (Loads) ermittelt werden sollen. Das Programm gestattet die Auswahl mehrerer Parameter, jedoch ist es für eine detaillierte statistische Analyse ratsam, nur einen Parameter einzubeziehen. So erfolgt die Residualanalyse aus Speicherplatzgründen nur für den ersten der eingetragenen Parameter.

Nach Eintragung dieser Werte benötigt man noch den Anfangs- und Endzeitpunkt für die Berechnungen sowie die zeitliche Auflösung, auf welche die Frachten umgerechnet werden sollen. Schließlich sind unter *Base mean* die langjährigen Monatsmittel der Durchflusswerte verfügbar. Voraussetzung ist, dass die Daten in die Tabelle *MV_MeanValue* eingetragen wurden. Fehlen diese Werte, wird beim Öffnen des Formulars und beim Wechsel der Messstation eine Fehlermeldung ausgegeben.

Nach dem Öffnen des Fensters sind die Einstellungen eingetragen, die beim letzten Schließen des Fensters eingestellt waren. Andere bereits verfügbare Selektionen können über das Listenfenster abgerufen werden. Es ist zu beachten, dass beim Wechsel der Angaben im unteren Teil des Fenster (Stationsname, Adjustierungsfaktoren usw.) keine Änderung des Selektionsnamens vorgenommen wird. Es kann also vorkommen, dass zum Beispiel eine vorhandene Selektion Lobith_Cd im Listenfenster sichtbar ist und die Auswahl für Herbrum mit der Komponente Pb vorgenommen wird.

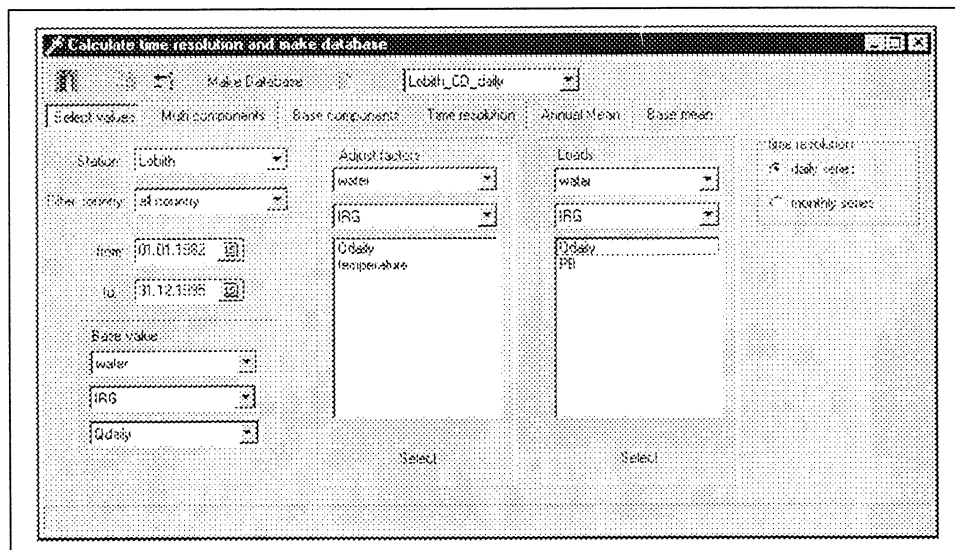
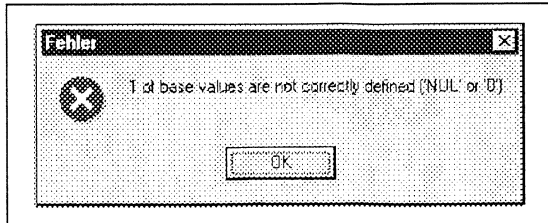


Bild 19: Auswahl der Daten für die Aggregation

Nach der Auswahl der Basisgröße, der Frachtkomponenten und gegebenenfalls der Adjustierungsfaktoren werden durch Drücken der Schaltfläche *Make Database* drei Tabellen erstellt, in denen die verfügbaren Werte in die vorgegebene zeitliche Auflösung aggregiert werden.

Nachvollziehen lassen sich die Umrechnungen anhand der Tabellen *Multi components*, *Base components* und *Time resolution*. Die Tabelle *Multi components* enthält die Originaldaten der Konzentrationen, die für die Adjustierungsfaktoren und die Berechnung der Frachten erforderlich sind. In *Base components* sind die auf die zeitliche Auflösung der Basiskomponente aggregierten Konzentrationswerte eingetragen. *Time resolution* enthält die endgültigen, tages- oder monatsweise aggregierten Werte (Basiskomponenten, Frachten, Adjustierungsfaktoren).

Da das Fehlen von Durchflusswerten (base) oder dem langjährigen Monatsmittel des Durchflusses (base mean) in den weiteren Adjustierungsberechnungen Fehler verursachen kann, wird mit einer Warnung darauf hingewiesen:



Bei fehlenden Werten ist die Funktion *Compress* für die Adjustierung im Menü *Calculate/Adjustment* zu benutzen, um nur jene Messungen zu berücksichtigen, bei denen sowohl der Durchflusswert als auch der Konzentrationswert vorliegt.

Ist die Berechnung beendet, müssen die Ergebnisse für die weitere Bearbeitung in einer Selektion gespeichert werden. Das erfolgt entweder mit der Schaltfläche *Save components* oder beim Schließen des Fenster durch Bestätigung der Abfrage *Last selection save*. Wird eine erneute Berechnung mittels *Make database* vorgenommen, ohne dass die Ergebnisse gespeichert sind, sind vorhergehenden Daten nicht mehr verfügbar. Nicht mehr erforderliche Selektionen können mit der Schaltfläche *Delete* gelöscht werden.

Nach Abschluss der Berechnungen steht unter *Annual Mean* die Tabelle der ermittelten Jahreswerte bereit.

Year	Run off (Gday)	Load			
		Base	Mean	OSPARLoad	FlowCorrected
1973.000	1813.890	1776.538	606.873	619.633	785.961
1974.000	2278.795	2280.763	683.131	682.838	869.129
1975.000	2329.795	2146.462	747.315	775.258	901.303
1976.000	1385.549	1344.846	603.373	621.636	1013.037
1977.000	2386.192	2181.154	769.254	809.826	871.449
1978.000	2431.200	2530.520	774.381	743.582	703.637
1979.000	2673.753	2518.889	751.356	768.334	866.849
1980.000	2670.770	2636.615	1.61.170	661.213	681.379
1981.000	2868.216	2808.269	728.380	736.062	975.382
1982.000	2783.553	2670.445	681.432	689.449	569.876
1983.000	2679.719	2762.462	808.377	779.235	688.441

Bild 20: Tabelle Annual mean

In der zweiten Spalte dieser Tabelle ist die für das jeweilige Jahr ermittelte durchschnittliche Durchflussmenge eingetragen. Im Unterschied dazu enthält die dritte Spalte die durchschnittliche Durchflussmenge jener Tage des Jahres, an denen Konzentrationsmessungen vorgenommen wurden. Die durch Mittelung des Produkts der Konzentrationswerte mit den Durchflusswerten berechnete Jahresfracht ist in der Spalte *Mean* eingetragen, während in der Spalte *OSPARLoad* die gemäß der OSPAR-Formel ermittelte Fracht dargestellt ist. Diese beinhaltet die bezüglich der gesamten Durchflussmenge des Jahres gewichtete Fracht. In der letzten Spalte *Flow corrected* ist die Fracht auf das langjährige Mittel (Base mean - Werte) der Durchflussmenge umgerechnet.

C 3.3.2. *Adjustment*

Dieses Menü dient zur Adjustierung und Trendberechnung der Jahresfrachten anhand einer Reihe unterschiedlicher Verfahren. Nach Öffnen des Menüs hat das Fenster etwa die folgende Gestalt:

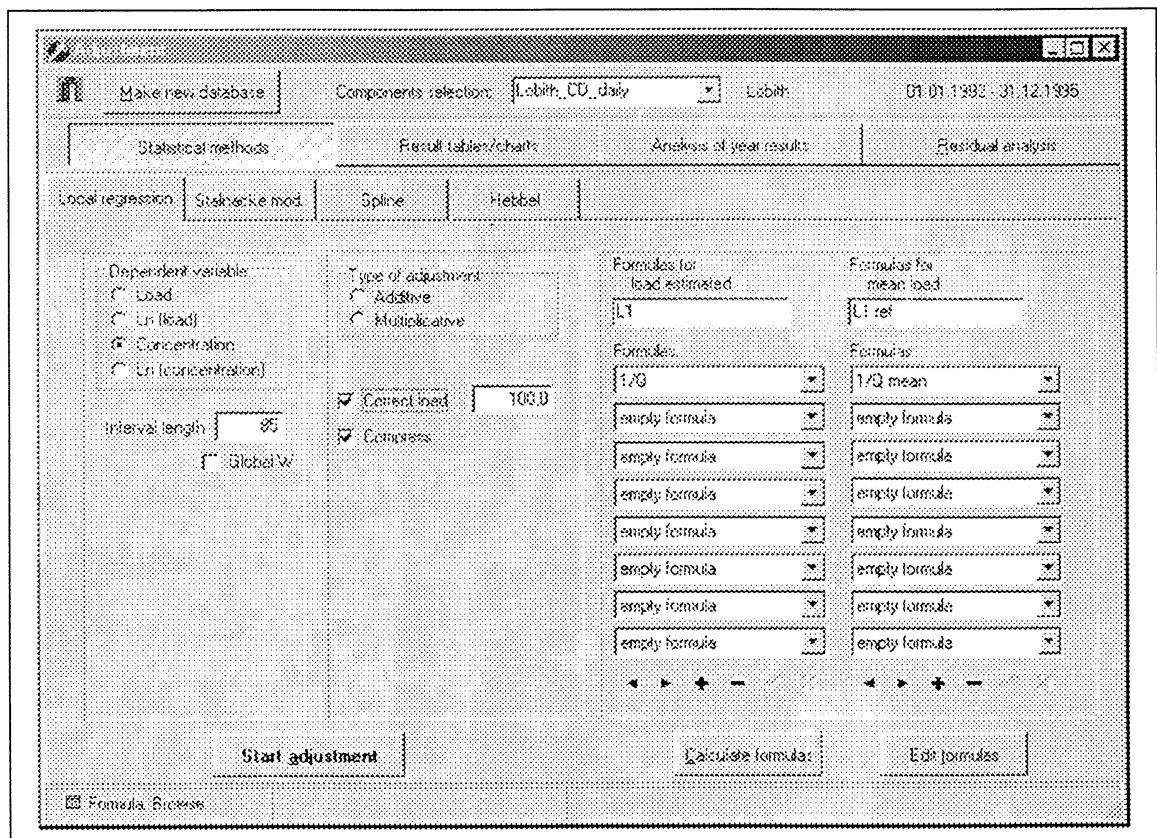


Bild 21: Festlegung der Methode und der Parameter für die Adjustierung

Im vorliegenden Fall wurde die Menüseite *Local regression* aktiviert, womit die Methoden L1, L2, L3 und L4 realisiert werden können. Die hierfür beschriebene Vorgehensweise gilt in ähnlicher Weise jedoch auch für die drei anderen Menüseiten, so dass auf eine Darstellung im Detail verzichtet werden kann.

Bevor eine Berechnung durchgeführt werden kann, sind zunächst die Formeln für die Adjustierungsfaktoren festzulegen. Hierzu klickt man auf *Edit formulas*, um eine Übersicht der verfügbaren Formeln sichtbar zu machen:

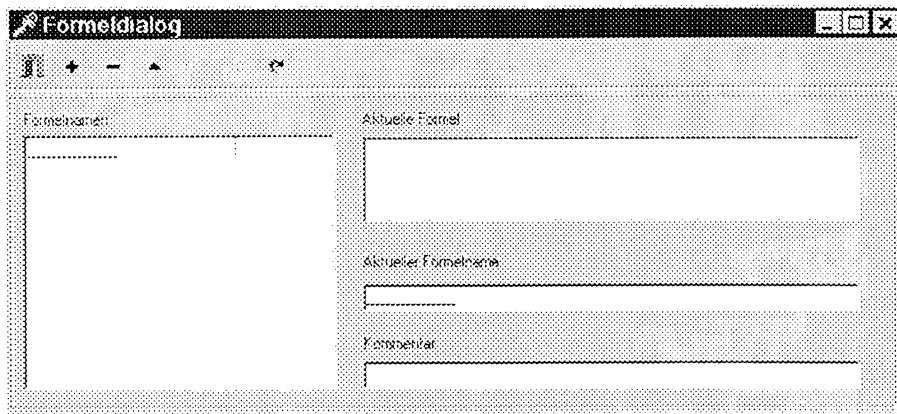


Bild 22: Auswahl Formeln und Aufruf Formeleditor

Die Formeln sind in einer Datenbank gespeichert und lassen sich hinzufügen, löschen und bearbeiten. Klickt man auf die Schaltfläche +, öffnet sich ein Formelgenerator:

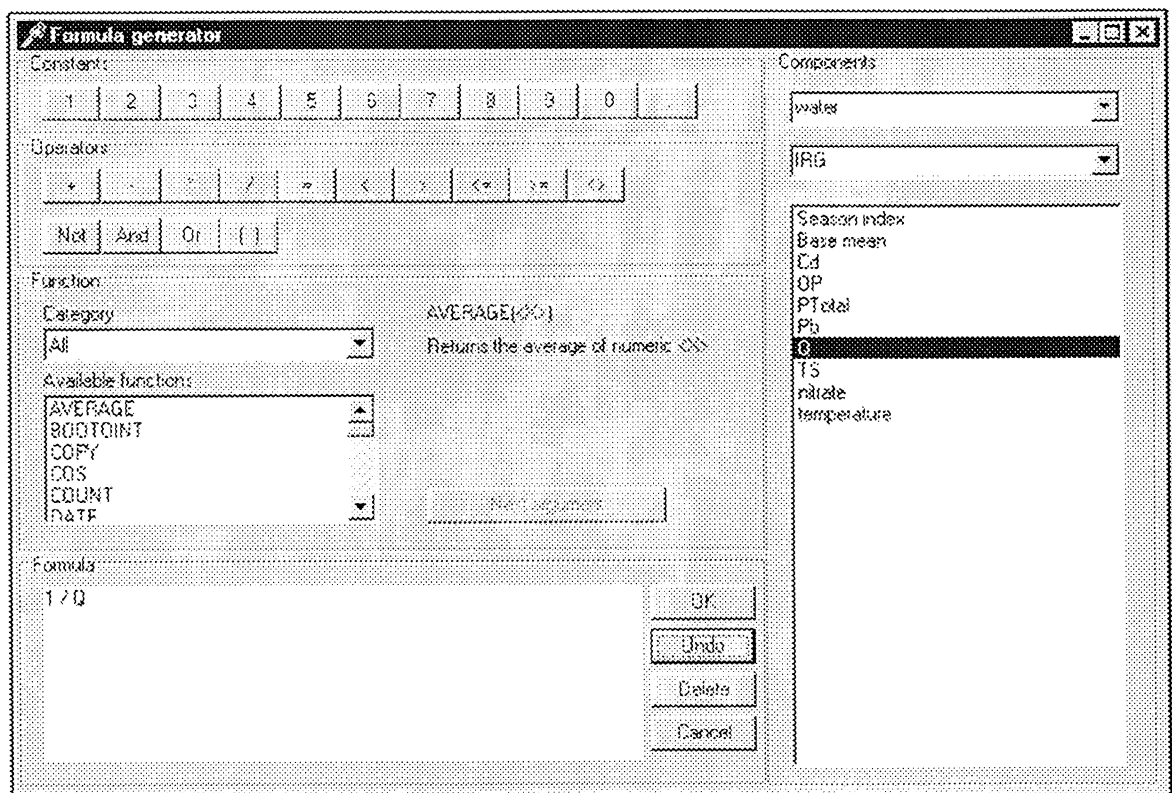


Bild 23. Formelgenerator

Mit diesem Formelgenerator lassen sich schrittweise auch sehr komplexe Formeln realisieren. So sind einfache arithmetische Operationen, trigonometrische Operationen und Lag-

Operationen möglich. Letztere erlauben die Einbeziehung verzögerter Effekte, wie sie bei Methode L2, L3 und L4 Anwendung finden.

Bei der Erstellung der Formeln ist zu beachten, dass für eine Adjustierung neben jeder Formel, welche die Durchflussmenge enthält, auch eine gleichartige Formel zu erstellen ist, welche anstelle des aktuellen Durchflusses das langjährige Monatsmittel beinhaltet. Auf letzteres kann über das Feld *Base mean* zugegriffen werden. Als Beispiel sei hier die für die Methode L1 benötigte Formel genannt. Sie lautet – je nach Bezeichnung des Durchflusses in der Datenbank (Q oder Qdaily) – „1/Q“ oder „1/Qdaily“. Die entsprechende Referenzformel für das langjährige Monatsmittel lautet „1/*Base mean*“. Es sei darauf verwiesen, dass die Verwendung der Formeln umfassende Kenntnisse hinsichtlich ihrer statistischen Wirksamkeit voraussetzt. So kommt es bei fehlerhafter Eingabe von Formeln oder im Falle falscher Festlegungen der Datenmenge leicht zu einer Fehlermeldung des Programms.

Zur Berechnung wird im folgenden Schritt die Datenmenge, die bearbeitet werden soll, ausgewählt. Dies betrifft jene Tabellen, die unter dem Menüpunkt *Make database* erstellt und unter einem speziellen Namen gespeichert wurden. Die Auswahl erfolgt über das Listenfenster *Component selection* im oberen Bereich des Fensters, das die Namen aller verfügbaren Datenmengen enthält. Zur Information werden neben dem Listenfenster die Station und der Zeitraum, die dieser Datenmenge zugrunde liegen, angezeigt.

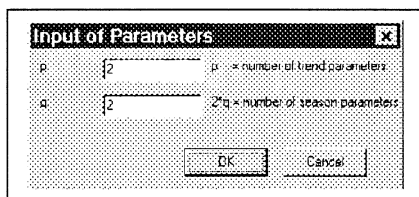
Die für die Adjustierung benötigten Formeln werden in die beiden Spalten *Formulas Load estimated* und *Formulas load mean* eingetragen. Für verschiedene Methoden wurde bereits ein Formelsatz vorgegeben, so dass dieser nur noch ausgewählt werden muss. Beispielsweise sind für die Methode L1 die Formeln *L1* und *L1ref* zu aktivieren. In der ersten Spalte *Formulas Load estimated* ist die Formel *L1* auszuwählen, während in der zweiten Spalte *Formulas Load mean* die Formel *L1ref* ausgewählt wird. Die Adjustierungsformeln lassen sich in analoger Weise auch in den übrigen Menüseiten *Stalnacke mod.*, *Spline* und *Hebbel* eintragen. Allerdings sollten bei diesen Menüseiten nicht mehr als jeweils zwei Formeln eingesetzt werden. Für *Spline* ist aus prinzipiellen Gründen nur eine Formel möglich.

Mit der Schaltfläche *Calculate* werden die Werte für die gegebenen Formeln berechnet und in die Tabelle *TIMERESOLUTION.DB* eingetragen. Die Anzeige dieser Tabelle findet man auf

der Registerseite *Result tables/charts*. Zwingend erforderlich ist der Aufruf von *Calculate* jedoch nicht.

Im nächsten Schritt ist die Form der Adjustierung (multiplikativ oder additiv) sowie die den Formeln zugrundeliegende abhängige Variable festzulegen. Schließlich ist die Fensterbreite für die jeweils zu berücksichtigenden Daten auszuwählen. Sollen die Berechnungen jeweils auf Basis eines laufenden Datenfensters durchgeführt werden, welches die Daten eines Zeitraumes von 7 Jahren umfasst, wird bei Monatsdaten der Wert 85 eingetragen, bei 2-wöchigen Daten der Wert 183.

Die Adjustierung wird gestartet durch *Start adjustment*. Daraufhin öffnet sich zunächst ein Fenster, in welchem die Anzahl der Trend- und Saisonparameter festgelegt werden muss. Für die Methoden L1, L2 und L4 belässt man beide Variablen p und q auf dem Wert „2“. Es muss nur die Schaltfläche *OK* angeklickt werden, um die Berechnung fortzusetzen.



Für die Methoden L3 (ohne Saisonmodellierung) belässt man die Variable p auf dem Wert „2“ und setzt die Variable q auf „0“.

Wenn in einem der zur Berechnung herangezogenen Datenfelder ein Wert fehlt oder wenn eine statistisch nicht zulässige Formel verwendet wurde, erfolgt eine Fehlermeldung. Sofern Werte fehlen, kann die Option *Compress* zur Eliminierung all jener Datensätze verwendet werden, in denen Werte fehlen. Bildschirmansichten für die verschiedenen Methoden sind in Anlage 3 dargestellt.

Die Ergebnisse der Trendabschätzung sind auf der Seite *Result Tables/chart* in Form von Tabellen darstellbar. Die Darstellung einfacher Diagramme der Ergebnisse jeweils einer Adjustierungsmethode ist über ein manuell zu steuerndes Diagrammodul möglich. Zur Erstellung professioneller Präsentationsgrafiken ist die Diagrammfunktion allerdings nicht geeignet, zumal es aus Gründen der Datenbankarchitektur nicht möglich ist, mehrere Adjustierungsmethoden auf demselben Diagramm anzuzeigen.

STARTTIME	ENDTIME	Qdaily	CD	EstimatedLoad	AdjustedLoad	Deposition	1	2	3	4
							1	2	3	4
							Inf	Inf	Inf	Inf
25.01.1982	26.01.1982	3186,000	2230,200	1609,503	2092,089	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
22.02.1982	23.02.1982	2556,000	1789,200	1053,843	2189,478	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
20.03.1982	21.03.1982	3096,000	1857,600	1227,581	1663,293	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
13.04.1982	14.04.1982	2341,000	2341,000	1073,031	2427,230	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
14.06.1982	15.06.1982	2421,000	1452,600	1992,956	1411,285	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
12.07.1982	13.07.1982	2319,000	1623,300	2452,423	1424,883	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
09.08.1982	10.08.1982	2396,000	2156,400	3055,901	1530,715	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
06.09.1982	07.09.1982	1745,000	3141,000	2431,392	2877,485	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
04.10.1982	05.10.1982	1440,000	1584,000	2032,534	1858,088	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
01.11.1982	02.11.1982	2242,000	3139,800	3197,649	2598,035	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
29.11.1982	30.11.1982	2181,000	1962,900	2770,232	1666,186	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
27.12.1982	28.12.1982	5353,000	5353,000	5280,510	2982,065	-456,233	0,000	1,132	-0,0	
24.01.1983	25.01.1983	3328,000	3328,000	2632,783	2946,413	-456,233	0,000	1,132	-0,0	

Bild 24: Ergebnistabellen

Die Auswahl der Tabellen erfolgt über ein Listenfenster. Mit der Schaltfläche *Report* können die Daten in einem speziellen Report ausgegeben werden. Passt das Ergebnis nicht auf ein Blatt A4 quer, erscheint die Fehlermeldung „Tabellenzeilen zu lang“. In diesem Fall müssen die einzelnen Spalten manuell so verkleinert werden, bis eine Ausgabe möglich ist. Die Daten der jeweils angezeigten Tabelle können in einem einfachen Diagramm dargestellt werden. Hierzu ist die Schaltfläche *Diagramm* zu aktivieren.

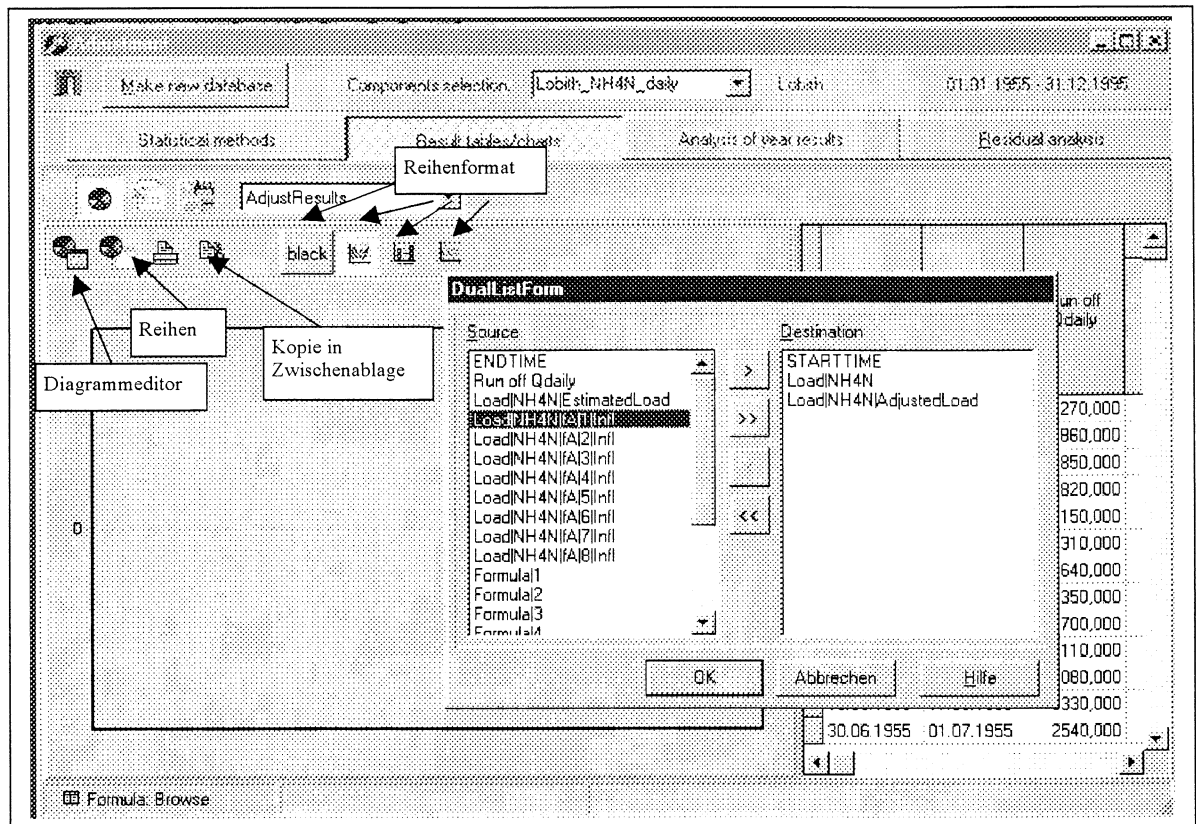
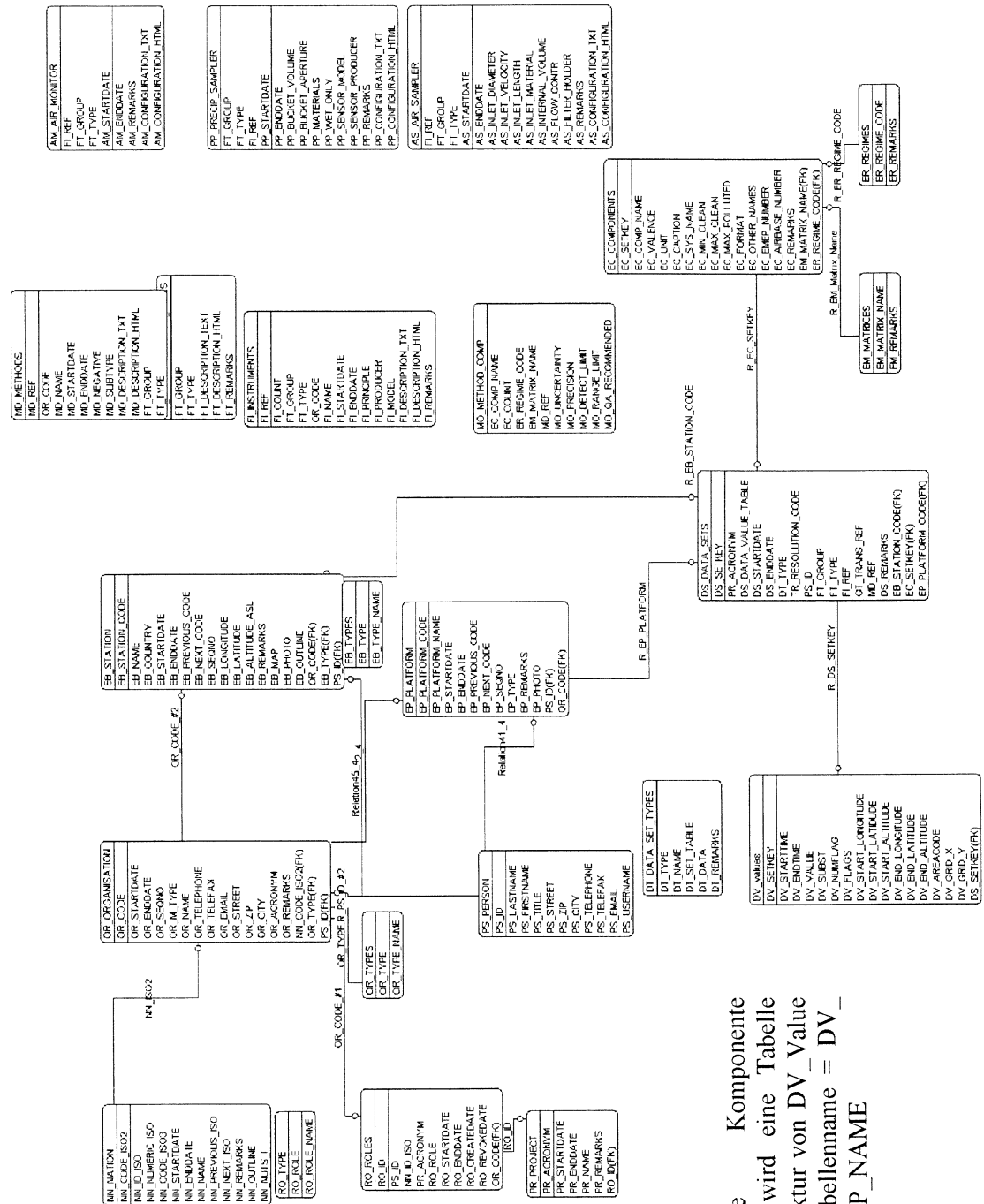


Bild 25: Auswahl Reihen für Diagramm

Durch Anklicken auf die Schaltfläche *Reihen* wird ein Dialogfenster zur Auswahl der anzuzeigenden Reihen geöffnet. Im Fenster *Source* markiert man die gewünschten Datensätze und klickt auf den nach rechts zeigenden Pfeil. Dadurch werden die Spalten in das Fenster *Destination* befördert. Der in der obersten Zeile dieses Fensters befindliche Datensatz wird auf der „x-Achse“ abgebildet, während die übrigen Datensätze auf der „y-Achse“ dargestellt werden. Für eine Darstellung im Zeitablauf ist daher – wie im Bild – als erster Datensatz *STARTTIME* auszuwählen. Mit einer Reihe weiterer Schaltflächen können die Reihen insgesamt eingestellt werden (Umschaltung in Schwarz-Weiß-Darstellung, Liniendiagramm / Balkendiagramm).

Nach Abschluss der Berechnungen lassen sich die Ergebnisse der Residualanalyse durch Anklicken der Schaltfläche *Residual analysis* sichtbar machen, während die auf Jahresdaten basierende Trendanalyse durch Anklicken der Schaltfläche *Analysis of year results* aktiviert wird.

Anlage 1 : Datenbankstruktur



Für jede Komponente (Parameter) wird eine Tabelle mit der Struktur von DV_Value angelegt. Tabellenname = DV_ + 'EC COMP NAME

Anlage 2: Programmstruktur des Programmes RTrend

Das Programm ist in folgende Einheiten aufgeteilt:

About.pas	Histogramm1.pas
AdjustAndTablesRiv.pas	Import_Access.pas
Adjustierung_FormularRiv.pas	Import_ExcelEintrag.pas
Adressen.pas	Import_ExcelMean.pas
CancelDialog.pas	Main.pas
ComponentCombinationRiver.pas	MakeDB.pas
ConvertError.pas	Makedb1.pas
DataBase_Tool.pas	MakeDS_Combination.pas
Descript.pas	MakeInstrTypeDB.pas
dmInstruments.pas	nsUtils.pas
DM_Components.pas	Progress.dfm
DM_DataValue.pas	Progress.pas
DM_MainTable.pas	QD_Matrizen.pas
EditComponents.pas	QR2CONST.PAS
EditConverts.pas	QRGridFormular.dfm
EditDataset.pas	QRGridFormular.pas
EditFormeln.pas	Select4Stations.pas
EditInstruments.pas	SelectComponent1.pas
EditMainTables.pas	SelectMulti.pas
EditMeanValues.pas	SelectStation.pas
EditOrganiType.pas	SelectStation1.pas
Einstellungen.pas	SelectStationQR1.pas
EvalFormula.pas	SplineAdjustNeu.pas
excel.pas	StatusTableScan.PAS
ExcelForm.pas	TableOperation.pas
Exceltabs.pas	trend.inc
filter2.pas	Trend01.vts
Formelgenerator.pas	Trend02.vts
FUNKTIO.DLL	Trend03.vts
GeneralMessage.pas	Trends_01_1.vts
Grid.pas	VersionsInfo.pas

Anlage 3: Screenshots für die verschiedenen Adjustierungsmethoden

Auf den folgenden Seiten sind die Menüeinstellungen für die verschiedenen Adjustierungsmethoden dargestellt. Bei allen Methoden ist die Festlegung der Intervalllänge zu beachten, die sich nach der zeitlichen Auflösung der vorliegenden Daten richtet. Wenn zum Beispiel gemäß Methode L1 ein Zeitfenster von 7 Jahren verwendet wird, entspricht dies bei Monatsdaten einer Intervalllänge von $7 \times 12 + 1 = 85$, und bei Zweiwochenwerten einer Intervalllänge von $7 \times 26 + 1 = 183$.

Weiterhin zu beachten ist die Möglichkeit, dass für alle Methoden ein Limit für den Adjustierungsfaktor gemäß Abschnitt 5.11 eingetragen werden kann (correct load). Dieses Limit ist frei wählbar, und in den Screenshots wurde der Wert 100 verwendet.

Lineare Regression mit Saison (Methode L1)

Make new database Components selection: **Lobith_OP_daily** Lobith 31.01.1973 - 31.12.1993

Statistical methods Result tables/charts Analysis of year results Residual analysis

Local regression **Statistische mod** Spläne Hebbel

Dependent variable:
☒ Load
☐ Ln (load)
☐ Concentration
☐ Ln (concentration)

Type of adjustment:
☐ Additive
☒ Multiplicative

Interval length: **85**
☐ Global W

☒ Current load **100.0**
☒ Compress

Formulas for load estimated:
 L1
 1/Q daily
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula

Formulas for mean load:
 L1 ref
 1/Q mean
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula

Start adjustment Calculate formulas Edit formulas

☒ Formula Browse

Input of Parameters

p **2** p = number of trend parameters

q **2** 2^q = number of season parameters

OK Cancel

Calculating Parameters...

State: **Ready**

Start reading input tables!
 545 data records found!
 461 time intervals will be processed!
 Start writing output tables!

Time elapsed: 00:01:42

Cancel Continue

Lineare Regression mit Saison und verzögertem Durchflusseffekt (Methode L2)

Make new database Components selection: **Lotath_NH4N_daily** Label: 01.01.1955 - 31.12.1995

Statistical method: **Local regression** | Backtrack mod. | Spline | Hebbel

Dependent variable:
☐ Load
☐ Ln(load)
☒ Concentration
☐ Ln(concentration)

Interval length: **85**
☐ Global W

Type of adjustment:
☒ Addition
☐ Multiplicative

☒ Correct load: **100.0**
☒ Compress

Formulas for load estimated: **L2**
 Formula:
 1/Q daily
 1/Q lag1
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula

Formulas for mean load: **L2 test**
 Formula:
 1/Q mean
 1/Q mean
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula
 empty formula

Start adjustment | Calculate formulas | Edit formulas

Formula browser

Input of Parameters

p: **2** p = number of trend parameters
 q: **2** 2*q = number of season parameters

OK | Cancel

Calculating Parameters...

State: **Ready**
 Progress: **100%**

Start reading input tables !
 1065 data records found !
 981 time intervals will be processed !
 Start writing output tables !

Time elapsed: **00:01:05**

Cancel | **Continue**

Lineare Regression mit Temperatur und verzögertem Durchflusseffekt (Methode L3)

The screenshot shows the main window of the RTrend V. 2.0 software. The 'Local regression' tab is selected. The 'Components selection' dropdown is set to 'Lobith_NH4M_daily'. The date range is '01.01.1995 - 31.12.1995'. The 'Statistical methods' section includes 'Local regression', 'Stackack mod.', 'Spline', and 'Hebber'. The 'Dependent variable' section has radio buttons for 'Load', 'Ln(load)', 'Concentration', and 'Ln(concentration)'. The 'Type of adjustment' section has radio buttons for 'Additive' and 'Multiplicative'. The 'Interval length' is set to '85' and 'Global W' is checked. The 'Correct load' checkbox is checked with a value of '100.0'. The 'Compress' checkbox is checked. The 'Formulas for load estimated' section shows 'L3' selected. The 'Formulas for mean load' section shows 'L3 ref' selected. The 'Formulas' section contains two columns of dropdown menus, each with 'empty formula' selected. The 'Start adjustment' button is visible at the bottom.

The 'Input of Parameters' dialog box is shown. It contains two input fields: 'p' with the value '2' and 'q' with the value '0'. The text 'p = number of trend parameters' is next to the 'p' field, and '2*q = number of season parameters' is next to the 'q' field. The 'OK' and 'Cancel' buttons are at the bottom.

The 'Calculating Parameters...' dialog box is shown. The 'State' is 'Ready'. The text 'Calculating parameters...' is displayed. The progress bar is at 0%. The text 'Start reading input tables!', '1065 data records found!', '981 time intervals will be processed!', and 'Start writing output tables!' is shown. The 'Time elapsed' is '00:01:01'. The 'Cancel' and 'Continue' buttons are at the bottom.

Lineare Regression mit Saison, Temperatur und verzögertem Durchflusseffekt (Methode L4)

Make new database Components selection: Lobith_NH4M_daily Lobith 01/01/1955 - 31/12/1995

Statistical methods: Local regression Statistical method: Local regression

Dependent variable: ☒ Load ☐ Ln (load) ☒ Concentration ☐ Ln (concentration)

Interval length: 05 ☐ Global W

Type of adjustment: ☐ Addition ☒ Multiplicative

☒ Correct load 100.0 ☒ Compress

Formulas for load estimated: L4

Formulas for mean load: L2 ref

Formulas: 1/Q daily 1/Q log1 1 empty formula empty formula empty formula empty formula empty formula empty formula

Formulas: 1/Q mean 1/Q mean empty formula empty formula empty formula empty formula empty formula empty formula

Start adjustment Calculate formulas Edit formulas

☒ Formula, Reverse

Input of Parameters

p: 2 p = number of trend parameters

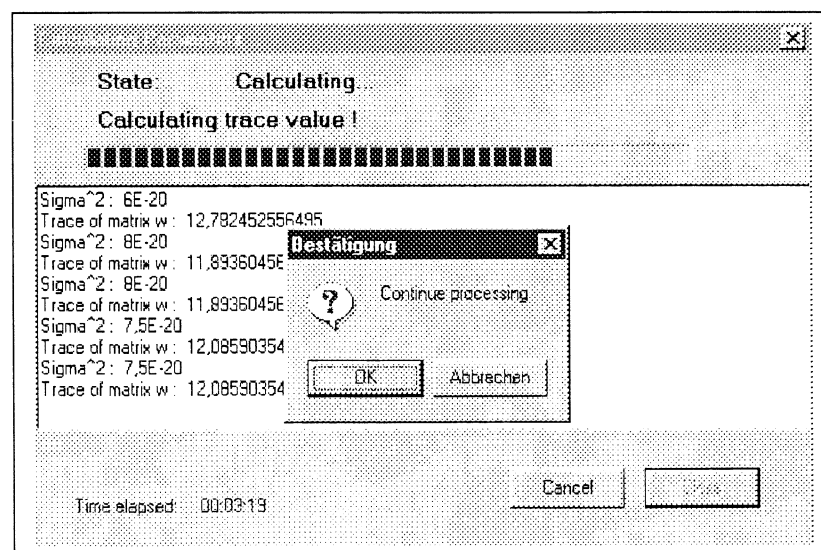
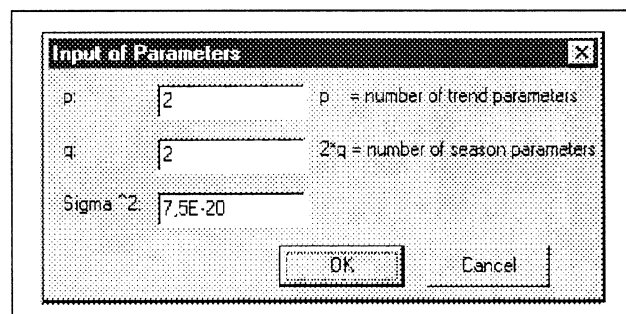
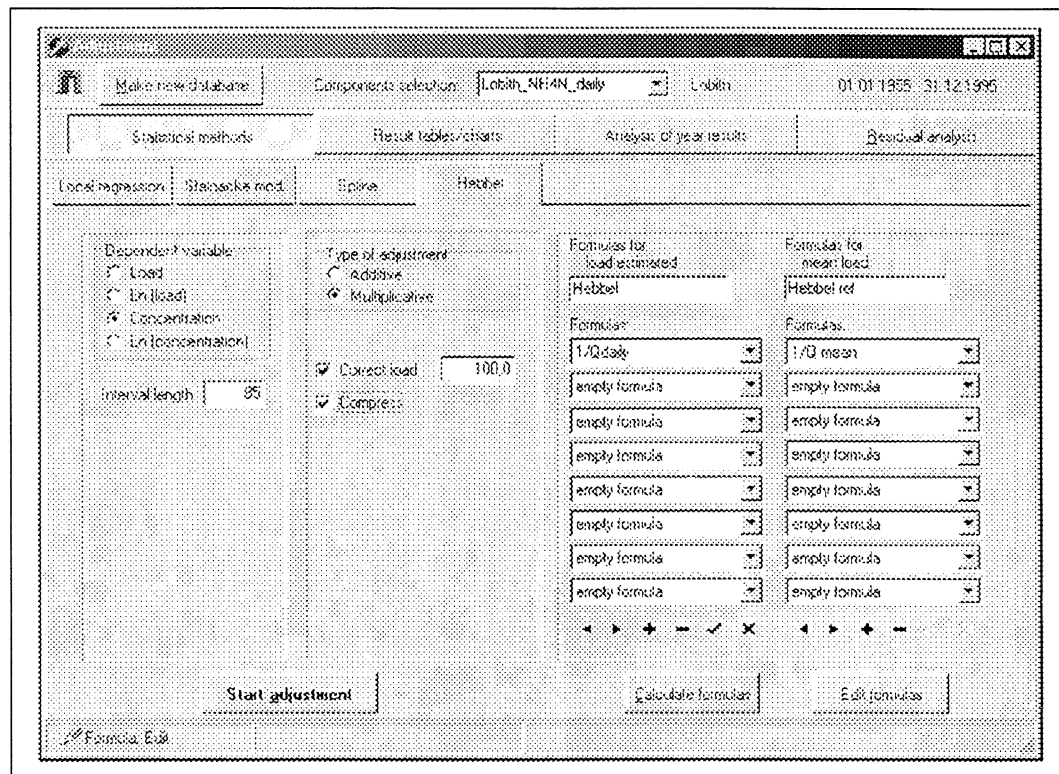
q: 2 2*q = number of season parameters

OK Cancel

Time elapsed: 00:01:41

Cancel Continue

Anwendung des Schätzverfahrens von Hebbel (Methode H)



Sigma muss so festgelegt werden, dass die vorgegebene Zahl der 12 Freiheitsgrade (trace of matrix) annähernd erreicht wird. Solange dieses Kriterium noch nicht erfüllt ist, ist auf *Abbrechen* zu klicken und ein neuer Wert zu wählen. Je kleiner Sigma gewählt wird, desto größer ist die Zahl der Freiheitsgrade.

Nichtparametrische Glättung nach Stalnacke (Methode N):

The screenshot shows the 'Statistical methods' tab in the RTrend V. 2.0 software. The 'Stalnacke mod.' method is selected. The interface includes the following fields and options:

- Components selection:** Lob9th_NH4N
- Period:** 01.01.1999 - 31.12.1999
- Statistical methods:** Local regression, Stalnacke mod. (selected), Splines, Herzel
- Dependent variable:**
 - ☐ Load
 - ☐ Ln (load)
 - ☒ Concentration
 - ☐ Ln (concentration)
- Interval length:** 163
- Type of adjustment:**
 - ☐ Additive
 - ☒ Multiplicative
- Correct load:** ☒ 100.0
- Compress:** ☐
- Degrees of freedom:** 5
- Gamma:** 0.10
- Lambda:** 0.00
- Season:** ☐ **Trend:** ☒
- Formulas for load estimated:**
 - N
 - Formulas: 1, 0, empty formula, empty formula, empty formula, empty formula, empty formula, empty formula
- Formulas for mean load:**
 - N rel
 - Formulas: 1, QMean, empty formula, empty formula, empty formula, empty formula, empty formula, empty formula
- Buttons:** Start adjustment, Calculate formulas, Edit formulas
- Formula browser:** Formula browser

The screenshot shows the 'Calculating Parameters ...' dialog box. It displays the state of the calculation and the progress of processing groups.

State: ready!

Processing group: group 40, group 41, group 42

Processing group 40!
Evaluating vector Beta for group 40!

Processing group 41!
Evaluating vector Beta for group 41!

Processing group 42!
Evaluating vector Beta for group 42!

Start writing outputtable!

Time elapsed: 00:00:48

Buttons: Cancel, Continue

Bei Methode N müssen die Daten monatlich vorliegen. Dies setzt voraus, dass im Gegensatz zu allen anderen Methoden bei der Erstellung der temporären Datenbasis mittels *Make Database* die Option *monthly* anstelle von *daily* zu verwenden ist.

Schätzung mittels Splines (Methode S1)

Der Parameter Lambda sollte (durch systematisches Probieren) so festgelegt werden, dass die Spur der Glättungsmatrix den Wert 4 annimmt.

The screenshot displays the RTrend V. 2.0 software interface. At the top, the 'Components selection' dropdown is set to 'Lobith_FBE_daily', and the date range is '01.01.1982 - 31.12.1995'. The 'Statistical methods' tab is active, and within it, the 'Spline' sub-tab is selected. The 'Dependent variable' section has 'Concentration' selected. The 'Type of adjustment' section has 'Multiplicative' selected. The 'Interval length' is set to '70'. The 'Correct load' checkbox is checked, and the 'Compress' checkbox is also checked. The 'Lambda' parameter is set to '10'. The 'Formulas for load estimated' and 'Formulas for mean load' sections each contain a list of formula inputs, with the first input in each set being 'Qdate' and 'QMean' respectively. The 'Start adjustment' button is visible at the bottom left, and the 'Calculate formulas' and 'Edit formulas' buttons are at the bottom right.

Statistical methods	Result tables/charts	Analysis of year results	Residual analysis
Local regression	Spline	Heboel	

Dependent variable:
☐ Load
☐ Ln (load)
☒ Concentration
☐ Ln (concentration)

Interval length: 70
☐ Local

Type of adjustment:
☐ Additive
☒ Multiplicative

☒ Correct load: 100,0
☒ Compress

Lambda: 10

Formulas for load estimated:
Qdate
empty formula
empty formula
empty formula
empty formula
empty formula
empty formula
empty formula

Formulas for mean load:
QMean
empty formula
empty formula
empty formula
empty formula
empty formula
empty formula
empty formula

Start adjustment

Calculate formulas

Edit formulas

Formula: Edit

Schätzung mittels lokaler Splines (Methode S2)

Der Parameter Lambda sollte (durch systematisches Probieren) so festgelegt werden, dass die Spur der Glättungsmatrix den Wert 4 annimmt. Die Intervalllänge, ausgedrückt in der Anzahl aufeinanderfolgender Messzeitpunkte, ist so festzulegen, dass sich ein Zeitraum von 3 Jahren ergibt. Bei 2-wöchigen Messungen und 26 Messungen pro Jahr ergibt sich somit eine Intervalllänge von 78.

The screenshot displays the RTrend V. 2.0 software interface. At the top, there is a 'Make new database' button and a 'Components selection' dropdown set to 'Lotah_PB_daily'. The date range is '01.01.1982 - 31.12.1995'. Below this, there are four tabs: 'Statistical methods', 'Result tables/charts', 'Analysis of year results', and 'Residual analysis'. The 'Statistical methods' tab is active, showing four sub-tabs: 'Local regression', 'Statistical model', 'Spline', and 'Hedberg'. The 'Spline' sub-tab is selected.

Under the 'Spline' sub-tab, there are several configuration options:

- Dependent variable:** Radio buttons for 'Load', 'Ln(load)', 'Concentration', and 'Ln(concentration)'. 'Concentration' is selected.
- Type of adjustment:** Radio buttons for 'Additive' and 'Multiplicative'. 'Multiplicative' is selected.
- Interval length:** A text box containing '78'.
- Correct load:** A checked checkbox.
- Compress:** A checked checkbox.
- Lambda:** A text box containing '10'.

On the right side, there are two columns of formula selection:

- Formulas for load estimated:** A dropdown menu showing 'Gdaily'.
- Formulas for mean load:** A dropdown menu showing 'GMean'.

Below these, there are two columns of 'empty formula' dropdowns, each with a set of navigation buttons (left, right, plus, minus, check, cross) at the bottom.

At the bottom of the interface, there are three buttons: 'Start adjustment', 'Calculate formulas', and 'Edit formulas'. A 'Formula list' button is also visible in the bottom left corner.